

Явные и неявные схемы моделирования термического разложения газогидратов*

А.А.КАЛИНКИН

Институт Вычислительной Математики и Математической Геофизики СО РАН

e-mail: alexander.a.kalinkin@gmail.com

В.Н.ЩЕРБАКОВ

Новосибирский Государственный Университет

e-mail: viktor.scherbakov@gmail.com

В данной работе двухтемпературная модель применяется при моделировании термического разложения газогидратов. Одна температура приписывается осадочной породе (каркасу), вторая – системе “вода/лед”. В уравнения состояния вводятся условия Стефана в так называемой энтальпийной постановке.

Для решения этой задачи используется явная схема, которая, однако, дает сильное ограничение на шаг по времени, т.к. он зависит практически линейно от интенсивности теплообмена между средами. Для того чтобы попытаться ослабить зависимость от ньютоновского теплообмена, в данной работе была предложена явно-неявная схема, которая оказалась значительно лучше в смысле ограничения на шаг по времени только при большой интенсивности теплообмена между средами. Для явной схемы аналитически получено условие на шаг по времени, для явно-неявной схемы выдвинута гипотеза, каким должен быть шаг по времени. Так же приводится ряд экспериментов, сравнивающих решение по обеим схемам.

Введение

В настоящее время все большее внимание уделяется исследованию газогидратов - клатратному соединению газа с водой. С целью изучения физических характеристик гидратосодержащей среды недавно была разработана экспериментальная установка, воспроизводящая образование газогидратов [1]. Установка представляет собой цилиндр, заполненный смесью минеральной составляющей со льдом и в поровом пространстве растворенным в воде метаном, при определенных условиях преобразуется в газогидрат. В указанную смесь вводится игольчатый зонд с постоянным источником тепла и датчиком температуры, что позволяет следить за тепловой обстановкой в гидратосодержащей среде. Для определения параметров установки, которая могла бы применяться в реальных условиях глубоких водоемов, представляется целесообразным осуществить математическое моделирование процесса формирования температурного поля игольчатого зонда, внедренного в образец, содержащий гидраты метана.

Рассматривается модель, в которой не учитывается влияние газа, возникающего в процессе разложения газогидрата, так что в дальнейшем мы отождествляем термины «газогидрат» и «лед». Описанная выше смесь минерального наполнителя и льда представляет собой сложную гетерогенную систему, гомогенизация которой осуществляется использованием двухтемпературной модели, когда каждой точке среды приписывается две темпе-

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (10-01-00102а)

ратуры: температура осадочной породы (в дальнейшем для краткости «каркаса») и температуры системы «вода/лед», между которыми осуществляется ньютоновский (по линейному закону) теплообмен с некоторой эффективной интенсивностью. Далее, для описания фазового перехода в среде «вода/лед», используется нелинейное условие Стефана в энтальпийной формулировке [2]. Аппроксимация системы осуществляется на основе метода конечных элементов [3], что является вполне естественным для энтальпийной постановки. Кроме того, осуществляется логарифмическая замена переменных, повышающая устойчивость расчетов в окрестности игольчатого зонда. Отметим, что по численному решению задачи Стефана, как в классической, так и в энтальпийной постановке имеется огромная литература. Значительно меньше работ посвящено собственно моделированию процессов теплопереноса в газогидратных месторождениях.

Данная работа посвящена реализации явной и явно-неявной схемы для вышеуказанной модели, изучению влияния ньютоновского теплообмена на шаг по времени и рассмотрению какая из схем является предпочтительней в смысле ограничения на шаг по времени.

Перечень условных обозначений

Индексы i, w, s обозначают лед, воду и каркас соответственно.

t, r — текущее время и радиальная компонента

δ, R — радиус зонда и цилиндра, заполненного газогидратом

T_j — температура j -ой фазы, $j = i, w, s$

T_f, T_R — температура фазового перехода и температура внешней оболочки цилиндра

m — пористость каркаса

ρ_j, λ_j — плотность и коэффициент теплоемкости j -ой фазы, $j = i, w, s$

c_j — удельная теплоемкость при постоянном давлении j -ой фазы $j = i, w, s$

α — интенсивность теплообмена между средами каркас — вода/лед

L — удельная теплота фазового перехода

Q — удельная мощность источника тепла

1. Постановка задачи

В предположении осевой симметрии и независимости тепловой обстановки от координаты вдоль оси игольчатого зонда рассмотрим одномерную задачу в полярной системе координат. Задача решается в области $0 < t < \infty, \delta < r < R$

Для удобства будем использовать приведенные температуры $\theta_j = T_j - T_f$. При этом $\theta_f = 0$. Пусть $\theta_w > 0, \theta_i < 0$. Введем ряд обозначений для теплофизических параметров, зависящих от температуры θ :

$$\lambda(\theta) = \begin{cases} \lambda_i, & \theta \leq 0 \\ \lambda_w, & \theta > 0 \end{cases}$$

Кроме того, положим

$$\rho_i = \rho_w = \rho$$

Введем энтальпию $H(\theta)$, определяемую следующим образом [2]:

$$H(\theta) = \begin{cases} c_i \theta - L, & \theta < 0 \\ c_w, & \theta > 0 \end{cases} \quad (1)$$

Как хорошо известно [4], задача о фазовом переходе (для рассматриваемой постановки) имеет вид следующего интегрального тождества:

$$\begin{aligned} \rho \int_0^{t_K} \int_\delta^R H(\theta) \frac{\partial \psi}{\partial t} r dr dt - \int_0^{t_K} \int_\delta^R \lambda(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial r} \frac{\partial \psi}{\partial r} r dr dt + \frac{\alpha}{m} \int_0^{t_K} \int_\delta^R (\theta_s - \theta) \psi r dr dt = \\ = -\rho \int_\delta^R H(\theta_R) \psi(0, r) r dr, \end{aligned} \quad (2)$$

где $\psi(t, r)$ произвольная гладкая функция такая, что $\psi(t_K, r) = 0$ и $\psi(t, R) = 0$.

2. Исследование разностных схем

2.1. Вычислительный алгоритм явной схемы

В основе вычислительного алгоритма лежит аппроксимация интегрального тождества (2) по методу конечных элементов. С целью более точного описания тепловой обстановки в окрестности игольчатого зонда имеет смысл использовать неравномерную по радиусу сетку со сгущением при $r \rightarrow \delta$. Простой способ осуществить такое сгущение — это перейти к логарифмическим координатам. Введем преобразование $x = \ln(r/\delta)$, при этом для функции $f(r)$ будем использовать обозначение $f(r) = f(e^x \delta) = \tilde{f}(x)$.

Проинтегрируем уравнение (2) после замены переменных по времени на интервале $[t_n, t_{n+1}]$, $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, с использованием квадратур, соответствующих явной схеме:

$$\frac{\rho \delta^2}{\Delta t} \int_0^l (H^{n+1} - H^n) \tilde{\varphi} e^{2x} dx + \int_0^l \lambda(\theta^n) \frac{\partial \theta^n}{\partial x} \frac{d\tilde{\varphi}}{dx} + \delta^2 \frac{\alpha}{m} \int_0^l (\theta^n - \theta_s^n) \tilde{\varphi} e^{2x} dx = 0 \quad (3)$$

$$\frac{c_s \rho_s \delta^2}{\Delta t} \int_0^l (\theta_s^{n+1} - \theta_s^n) \tilde{\varphi} e^{2x} dx + \lambda_s \int_0^l \frac{\partial \theta_s^n}{\partial x} \frac{d\tilde{\varphi}}{dx} + \delta^2 \frac{\alpha}{1-m} \int_0^l (\theta_s^n - \theta^n) \tilde{\varphi} e^{2x} dx = \frac{Q}{2\pi} \tilde{\varphi}(0), \quad (4)$$

где

$$\theta^{n+1} = \begin{cases} (H^{n+1} + L)/c_i, & H^{n+1} < -L \\ 0, & -L \leq H^{n+1} \leq 0, \\ H^{n+1}/c_w, & H^{n+1} > 0 \end{cases} \quad (5)$$

$n = 0, \dots, N$.

2.2. Пространственная аппроксимация по методу конечных элементов

Пространственная аппроксимация осуществляется по методу конечных элементов на равномерной сетке с постоянным шагом $h = l/N$ и с использованием стандартных кусочно-линейных базисных функций-крышек. Отметим, что для переменной r сетка неравномерная, а базисные функции не являются кусочно-линейными. Каких-либо дополнительных пояснений здесь не требуется — все формулы соответствуют стандартному МКЭ [3]. Уравнения (3)–(5) в сеточном виде выглядят следующим образом:

$$\frac{m\rho}{\Delta t} (H_0^{n+1} - H_0^n) + \frac{m\lambda_{i/w}}{h} \text{Exp}_1(\theta_0^n - \theta_1^n) - \alpha(\theta_{s,0}^n - \theta_0^n) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{(1-m)c_s\rho_s}{\Delta t} (\theta_{s,0}^{n+1} - \theta_{s,0}^n) + \frac{(1-m)\lambda_s}{h} \text{Exp}_1(\theta_{s,0}^n - \theta_{s,1}^n) + \alpha(\theta_{s,0}^n - \theta_0^n) = \text{Exp}_1 \frac{Q}{2\pi} \quad (7)$$

$$\frac{m\rho}{\Delta t}(H_i^{n+1} - H_i^n) + \frac{m\lambda_{i/w}}{h} \text{Exp}_i(-\theta_{i-1}^n + 2\theta_i^n - \theta_{i+1}^n) - \alpha(\theta_{s,i}^n - \theta_i^n) = 0 \quad (8)$$

$$\frac{(1-m)c_s\rho_s}{\Delta t}(\theta_{s,i}^{n+1} - \theta_{s,i}^n) + \frac{(1-m)\lambda_s}{h} \text{Exp}_i(-\theta_{s,i-1}^n + 2\theta_{s,i}^n - \theta_{s,i+1}^n) + \alpha(\theta_{s,i}^n - \theta_i^n) = 0, \quad (9)$$

где $\text{Exp}_1 = \frac{2h}{e^{2(a+h)} - e^{2a}} - \frac{e^{2a}}{2}$, $\text{Exp}_i = \frac{2h}{e^{2(a+(i-2)h)} - 2e^{2(a+(i-1)h)} + e^{2(a+ih)}}$, где $a = \ln \delta$.

$$\theta_i^{n+1} = \begin{cases} (H_i^{n+1} + L)/c_i, & H_i^{n+1} < -L \\ 0, & -L \leq H_i^{n+1} \leq 0. \\ H_i^{n+1}/c_w, & H_i^{n+1} > 0 \end{cases} \quad (10)$$

2.3. Устойчивость явной схемы

Для явной схемы, описанной выше, доказано следующее

Утверждение. *Явная схема устойчива во второй норме при следующем условии на шаг по времени:*

$$\Delta t \leq \frac{2\min\{m\rho c_{i/w}, (1-m)c_s\rho_s\}}{10^6 \left[\frac{4\max\{(1-m)\lambda_s, m\lambda_{i/w}\}}{h^2} + \frac{2\alpha}{1250} \right]},$$

где h — шаг по пространству, причем $h \leq 0.1$.

Доказательство. Устойчивость доказывается с помощью очевидных выкладок через вторую норму оператора шага и оценки сверху/снизу на коэффициенты Exp_i : $\frac{1250}{h} \leq \text{Exp}_i \leq \frac{10^6}{h}$ (получается из разложения Exp_i в ряд Тейлора и оценки остаточного члена при условии, что шаг по пространству $h \leq 0.1$). Отметим, что Exp_i зависит от левой границы отрезка $a = \ln \delta$, и выше приведенные оценки получены при $a = \ln 10^{-3}$. \square

2.4. Вычислительный алгоритм явно-неявной схемы

Целью построения явно-неявной схемы является попытка ослабить зависимость величины шага по времени от интенсивности теплообмена α . Так же как и в явной схеме в основе вычислительного алгоритма лежит аппроксимация интегральных тождества (2) по методу конечных элементов. Так же осуществляется переход к логарифмическим координатам с целью более точного описания тепловой обстановки в окрестности игольчатого зонда. Только теперь получившиеся уравнения будем интегрировать на интервале $[t_n, t_{n+1}]$, $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, с помощью квадратур, соответствующих не явной, а явно-неявной схеме, с неявным ньютоновским теплообменом. После интегрирования получаем следующую систему уравнений:

$$\frac{\rho\delta^2}{\Delta t} \int_0^l (H^{n+1} - H^n) \tilde{\varphi} e^{2x} dx + \int_0^l \lambda(\theta^n) \frac{\partial \theta^n}{\partial x} \frac{d\tilde{\varphi}}{dx} + \delta^2 \frac{\alpha}{m} \int_0^l (\theta^{n+1} - \theta_s^{n+1}) \tilde{\varphi} e^{2x} dx = 0 \quad (11)$$

$$\frac{c_s\rho_s\delta^2}{\Delta t} \int_0^l (\theta_s^{n+1} - \theta_s^n) \tilde{\varphi} e^{2x} dx + \lambda_s \int_0^l \frac{\partial \theta_s^n}{\partial x} \frac{d\tilde{\varphi}}{dx} + \delta^2 \frac{\alpha}{1-m} \int_0^l (\theta_s^{n+1} - \theta^{n+1}) \tilde{\varphi} e^{2x} dx = \frac{Q}{2\pi} \tilde{\varphi}(0), \quad (12)$$

где

$$\theta^{n+1} = \begin{cases} (H^{n+1} + L)/c_i, & H^{n+1} < -L \\ 0, & -L \leq H^{n+1} \leq 0, \\ H^{n+1}/c_w, & H^{n+1} > 0 \end{cases} \quad (13)$$

$n = 0, \dots, N$.

2.5. Устойчивость явно- неявной схемы

Доказательство утверждения аналогичного явной схемы сопряжено с большими трудностями возникающих при неявной аппроксимации слагаемого отвечающего за ньютоновский теплообмен между различными средами. Основная трудность в том, что получившаяся схема является неявной. Тем не менее на данный момент вычислительные эксперименты и наработки позволяют сформулировать следующую:

Гипотеза. Предполагается, что явно-неявная схема устойчива при следующем условии на шаг по времени:

$$\Delta t \leq \frac{d_1}{\frac{d_2}{h^2} + d_3 \alpha},$$

где d_1, d_2, d_3 — некоторые постоянные, h — шаг по пространству.

3. Численный эксперимент

При проведении вычислительного эксперимента преследовалось две цели: продемонстрировать точность рассмотренной модели и проиллюстрировать влияние некоторых теплофизических параметров на динамику теплового поля в окрестности иглового зонда. Напомним, что в физическом эксперименте датчик температуры установлен на игольчатом зонде. Все приведенные ниже расчеты осуществлялись при следующих значениях физических параметров:

$\lambda_i = \lambda_w = 0.5$ Вт/м·К, $\lambda_s = 2.5$ Вт/м·К, $c_i \rho = 1.9 \cdot 10^6$ Дж/м³·К, $c_w \rho = 4.2 \cdot 10^6$ Дж/м³·К, $c_s \rho_s = 2.6 \cdot 10^6$ Дж/м³·К, $m = 0.3$, $\delta = 10^{-3}$ м, $R = 10^{-2}$ м, $l = \ln 10$, $T_R = -0.5$ °С, $L = 4.3 \cdot 10^5$ Дж/кг, $\alpha = 5 \cdot 10^6$ Вт/м³·К, $Q = 20$ Вт/м. Расчетное время $t_K = 300$ сек. Расчет производился на сетке $300 \times 5 \cdot 10^6$.

Рис.1. демонстрирует динамику температуры газогидрата (сплошная линия) и температуры каркаса (пунктирная линия) в зависимости от времени и физических параметров в точке $r = \delta$ (т.е. в окрестности игольчатого зонда). Можно заметить, что графики, полученные по явной схеме, практически совпадают с графиками полученными по явно-неявной схеме.

Видно, что газогидрат достаточно быстро нагревается до нулевой температуры и выходит на полочку (1), соответствующую фазовому переходу. Затем температура газогидрата

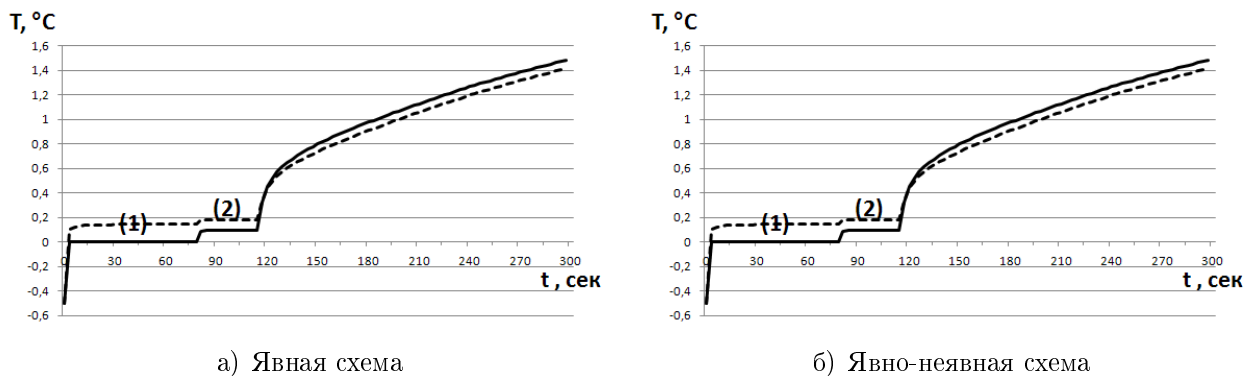


Рис. 1. Графики изменения температуры в зависимости от времени

выходит на полочку (2), которая, как предполагается, возникает из-за достаточно крупной сетки по пространству. И на самом деле при дроблении пространственной сетки полочка (2) уменьшается. Впоследствии начинается монотонный рост температуры. Для наглядности на обоих графиках приведена температура каркаса.

α	$5 \cdot 10^6$	$5 \cdot 10^7$	$5 \cdot 10^8$	$5 \cdot 10^9$	$5 \cdot 10^{10}$
Δt_{max} Явная схема	$1.15 \cdot 10^{-4}$	$1.15 \cdot 10^{-4}$	$1.14 \cdot 10^{-4}$	$0.91 \cdot 10^{-4}$	$0.36 \cdot 10^{-4}$
Δt_{max} Явно-неявная схема	$1.15 \cdot 10^{-4}$	$1.15 \cdot 10^{-4}$	$1.18 \cdot 10^{-4}$	$1.28 \cdot 10^{-4}$	$0.45 \cdot 10^{-4}$

Табл. 1. Величина максимального шага по времени, при котором схема устойчива полученного экспериментально ($h = 0.01$)

В таблице приведены значения экспериментально полученного максимального шага по времени в зависимости от интенсивности теплообмена α при фиксированном шаге по пространству $h = 0.01$ для явной и явно-неявной схем. Предполагалось, что явно-неявная схема будет иметь преимущество перед явной в смысле шага по времени, но, как видно из таблицы, явно-неявная схема ощутимого преимущества не дала. Резкое уменьшение шага по времени при переходе к $\alpha = 5 \cdot 10^{10}$ объясняется тем, что в оценке на шаг по времени начинает преобладать интенсивность теплообмена, а не, как было ранее, шаг по пространству.

Заключение

В данной работе построены явная и явно-неявная схемы термического разложения газогидратов, аналитически получено условие устойчивости для явной схемы и выдвинута гипотеза, каким должен быть шаг по времени в явно-неявной схеме. Так же приводятся графики зависимости температуры каркаса и газогидрата от времени, полученные по явной и явно-неявной схемам, и таблица экспериментально полученных чисел Куранта для обеих схем. Ожидалось, что явно-неявная схема даст улучшение относительно явной в смысле ослабления зависимости шага по времени от интенсивности ньютоновского теплообмена α , но как показывает численный эксперимент, улучшение, и то незначительное, происходит только при достаточно большой интенсивности теплообмена.

Список литературы

- [1] Дучков А.Д., Манаков А.Ю., Казанцев С.А., Пермяков М.Е., Огиенко. А.Г. Измерение теплопроводности синтетических образцов донных осадков, содержащих гидраты метана // Физика Земли, 2009, № 8, с. 42-50.
- [2] Мейрманов А.М.. Задача Стефана. Новосибирск: Наука, 1986.
- [3] ЛАЕВСКИЙ. Ю.М. Метод конечных элементов (основы теории, задачи). Новосибирск: Изд-во НГУ, 1999.
- [4] ЛАЕВСКИЙ Ю.М., КАЛИНКИН А.А. Двухтемпературная модель гидратосодержащей породы // Матем. моделирование, 22:4 (2010), с. 23-31.