ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОЙ НЕУСТОЙЧИВОСТИ В ЗЕМНОЙ КОРЕ МЕТОДОМ "ЧАСТИЦ-В-ЯЧЕЙКАХ"*

Ю.Н. ГРИГОРЬЕВ, А.Г. ГОРОБЧУК, М.П. ФЕДОРУК Институт вычислительных технологий СО РАН e-mail: al@ict.nsc.ru

На основе численного моделирования решается задача о тепловой конвекции в земной коре методом "частиц-в-ячейках". Показано, что при больших числах Рэлея и градиетах вязкости возникает восходящий конвективный поток, формирующий тепловую волну к поверхности Земли, характерную для эффекта диапиризма.

Введение

Моделирование конвективной неустойчивости в земной коре является одной из важнейших задач геофизики, которой посвящено значительное количество работ. Рассматривается двумерная математическая модель тепловой конвекции, в которой движение среды описывается уравнениями Стокса. Ввиду малости изменений плотности от температуры в уравнениях Стокса используется приближение Буссинеска. Распределение температуры находится из уравнения переноса тепла. Основную трудность при переходе от дифференциальных уравнений к их дискретной алгебраической аппроксимации представляет выбор численной модели, который оказывает существенное влияние на свойства численного алгоритма и архитектуру программы. При решении данных уравнений получили распространение как конечно-разностные методы, так и методы конечных элементов. Последние эффективны при численном решении в областях сложной формой. Однако при больших градиентах и значениях вязкости, а также больших числах Рэлея эти методы теряют устойчивость и требуют применения специальных формулировок исходных дифференциальных уравнений. Кроме того, эти методы характеризуются высокой трудоемкостью и большим объемом вычислений. Альтернативой здесь представляются методы "частиц-вячейках" [1], которые обладают очевидными преимуществами по сравнению с традиционными численными схемами. Несмотря на невысокую вычислительную точность, методы "частиц-в-ячейках" адекватно воспроизводят многие тонкие эффекты исходных математических моделей, которые оказываются недоступными для других численных схем. На двумерных и трехмерных нестационарных задачах эти методы обладают большим запасом устойчивости при больших градиентах вязкости и числах Рэлея, допускают быстрое продвижение по эволюционной переменной и легко адаптируются к компьютерам с параллельной архитектурой.

^{*}Работа выполнена при финансовой поддержке междисциплинарного интеграционного проекта СО РАН №2, Российского фонда фундаментальных исследований (проект №11-01-00064-а), президентской программы поддержки ведущих научных школ РФ (проект №НШ-6068.2010.9).

В настоящей работе рассматривается задача о тепловой конвекции в земной коре на основе метода "частиц-в-ячейках". Предложенный численный алгоритм позволяет проводить расчеты конвективных течений при числах Рэлея до 10⁷, больших градиентах вязкости и теплопроводности.

Математическая модель тепловой конвекции

Схематическое изображение эффекта диапиризма и основные геометрические размеры расчетной области представлены на рис. 1.



Рис. 1. Схематическое представление эффекта диапиризма: характерные геометрические размеры и границы расчетной области.

Математическая модель тепловой конвекции включает решение следующих уравнений: — уравнения Стокса, описывающие движения породы:

$$A\frac{\partial\sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial z} = \frac{\partial P}{\partial x},\tag{1}$$

$$A\frac{\partial\sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial\sigma_{zz}}{\partial z} = A\frac{\partial P}{\partial z} - \operatorname{Ra}\vartheta,\tag{2}$$

где компоненты тензора напряжений выражаются через компоненты тензора скоростей деформации:

$$\sigma_{xx} = 2\eta\varepsilon_{xx} = 2\eta A \frac{\partial v_x}{\partial x},$$

$$\sigma_{xz} = 2\eta\varepsilon_{xz} = \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} + A \frac{\partial v_z}{\partial x}\right)$$

$$\sigma_{zz} = 2\eta\varepsilon_{zz} = 2\eta \frac{\partial v_z}{\partial z};$$

0

– уравнение непрерывности:

$$A\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0; \tag{3}$$

- уравнение переноса тепла:

$$\rho c_p \left(\frac{\partial \vartheta}{\partial t} + v \cdot \nabla \vartheta \right) = A \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_z}{\partial z} + Q, \tag{4}$$

где компоненты теплового потока:

$$q_x = \lambda A \frac{\partial \vartheta}{\partial x}, \ q_z = \lambda \frac{\partial \vartheta}{\partial z}$$

Здесь x, z – оси координат; σ_{ij} - тензор напряжений; ε_{ij} - тензор скоростей деформации; v_x, v_z – компоненты вектора скорости; η - коэффициент динамической вязкости; p – давление; ρ - плотность; c_p – теплоемкость при постоянном давлении; λ - коэффициент теплопроводности; ϑ – температура; Q – источники тепла. Координаты масштабированы на ширину L и глубину H области соответственно. Используемый в уравнениях, масштабный коэффициент равен отношению A = H/L. Скоростные переменные обезразмерены на характерную скорость χ/H , где χ - коэффициент температуропроводности. Остальные величины нормировались следующим образом: давление – на $H^2/\eta_0 \chi$; коэффициент динамической вязкости - на η_0 ; время - на H^2/χ ; плотность – на ρ_0 ; теплоемкость при постоянном давлении – на c_{p0} ; коэффициент теплопроводности – на λ_0 ; температура - на максимальное значение T_1 ; источники тепла – на $H^2/\lambda_0 T_0$. Значения $\rho_0, \eta_0, c_{p0}, \lambda_0$ вычислялись при минимальной температуре T_0 . Число Рэлея, характеризующее взаимодействие подъемных сил и сил вязкости, вычислялось как:

$$\mathrm{Ra} = \frac{\rho_0 g \alpha \Theta H^3}{\eta_0 \chi},$$

где $\Theta = T_1 - T_0$ - характерная разность температур, g – ускорение свободного падения, α - температурный коэффициент объемного расширения. Использовалось линейное уравнение состояния: $\rho = \rho_0 [1 - \alpha (T - T_0) + \beta (p - p_0)]$, где p, p_0 - давление на глубине и на поверхности соответственно, β - коэффициент изотермической сжимаемости. Давление, соответствующее механическому равновесию при постоянных температуре T и плотности ρ , меняется с глубиной по гидростатическому закону: $p = p_0 - \rho gz$.

На границах расчетной области для вектора скорости и температуры ставились следующие краевые условия:

$$\begin{split} \gamma_1, \gamma_3 : \quad & \frac{\partial v_x}{\partial z} = 0, \quad v_z = 0, \quad -A \frac{\partial \vartheta}{\partial x} = \operatorname{Nu}(1 - \vartheta), \quad 0 \le x < \frac{L_i}{L} \cup \frac{L_o}{L} < x \le 1, z = -H; \\ \gamma_2 : \quad & \frac{\partial v_x}{\partial z} = 0, \quad v_z = 0, \quad -A \frac{\partial \vartheta}{\partial x} = \frac{qH}{\lambda T_1} + \operatorname{Nu}(1 - \vartheta), \quad \frac{L_i}{L} \le x \le \frac{L_o}{L}, z = -H; \\ \gamma_4, \gamma_6 : \quad v_x = 0, \quad \frac{\partial v_z}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \vartheta}{\partial x} = 0, \quad x = 0 \cup x = L, -H < z < 0; \\ \gamma_5 : \quad v_x = 0, \quad v_z = 0, \quad \vartheta = \frac{T_1}{T_0}, \quad 0 \le x \le L, z = 0; \end{split}$$

где q – тепловой поток на нижней грани земной коры. Краевое условие на температуру на границе γ_2 при $L_i/L \leq x \leq L_o/L$ записывалось в виде баланса тепловых потоков, в котором рассматривалась теплоотдача горизонтальной плиты при естественной конвекции. Для числа Нуссельта, характеризующее интенсивность теплообмена, использовалась зависимость следующего вида: Nu = $0.54 \cdot \text{Ra}^{1/4}$. В задачах геофизики вязкость имеет существенные изменения в полосе малой толщины земной коры [2], [3]. Большие градиенты вязкости и большие числа Рэлея являются характерными особенностями данной задачи. Для твердых пород вязкость описывается экспоненциальной зависимостью от температуры вида (в Па·cek): $\eta = 10^{-6} \cdot \exp(2.6 \cdot 10^5/T)$, что требует специальных методов решения при рассмотрении задачи тепловой конвекции. Применение аппроксимационной формулы Франк-Каменецкого в виде степенной зависимости вязкости от температуры сохраняет высокий градиент вязкости, но несколько упрощает задачу [4]:

$$\eta = \eta_0 \left[-\ln\left(\frac{\eta_1}{\eta_0}\right) \times \frac{T - T_0}{T_1 - T_0} \right]$$

В модели использовались следующие значения параметров: L = 60 км, H = 30 км, $L_i = 25$ км, $L_o = 35$ км, $T_0 = 293$ К, $T_1 = 823$ К, $\rho_0 = 2800$ кг/м³, $p_0 = 10^5$ Па, $\lambda_0 = 3.5$ Вт/(м·К), $\chi = 10^{-6}$ м²/сек, $\alpha = 3 \cdot 10^{-5}$ 1/К, $\beta = 10^{-11}$ 1/Па, q = 0.03 Вт/м². В качестве начальных данных бралось линейное распределение температуры по глубине z. Уравнения (1)-(4) решались численным методом "частиц-в-ячейках" для Ra > 10⁶ и градиентов вязкости $\eta_1/\eta_0 < 10^{-3}$. Вычисления проводились на неравномерной прямоугольной сетке с числом узлов 101×51 .

Численный алгоритм "частиц-в-ячейках"

При построении численного алгоритма "частиц-в-ячейках" использовался универсальный подход, основанный на расщеплении исходных уравнений с выделением эволюционной задачи с гиперболическим (дивергентным) оператором [1].



Рис. 2. Схематическое изображение нерегулярной прямоугольной сетки для решения уравнений (1)-(4) на эйлеровом этапе. Локальные расчетные величины определены в соответствующих узлах сетки.

Эйлеров этап. Первоначально на неподвижной эйлеровой сетке решаются уравнения движения (1), (2) совместно с уравнением непрерывности (3). Расчеты поля течения и давления проводятся на смещенной (шахматной) сетке (см. рис. 2), наиболее подходящей для решения данных уравнений. Для каждой зависимой переменной используется своя сетка, при этом компоненты вектора скорости рассчитываются на сетках отличных от сетки, которая используется для всех других переменных. Здесь индексы (i + 1/2, j) и (i, j + 1/2)

[

5

обозначают горизонтальную и вертикальную узловые точки, соответствующие различным физическим параметрам в смещенной сетке. Для построения конечно-разностных аналогов уравнений (1), (2) в консервативной форме использовался метод контрольного объема первого порядка точности [4], сохраняющий вязкие напряжения между v_x – и v_z – узловыми точками. Для дискретизации производных от компонент тензора напряжений использовались конечные разности первого порядка точности. При этом компоненты тензора напряжений вычислялись в узлах, расположенных между парой v_x- и v_z- узловых точек. Для численной дискретизации компонент тензора скоростей деформаций использовались конечные разности первого порядка точности, наиболее подходящие для решения задач с резко изменяющимся значением вязкости. Полученные в результате аппроксимации уравнений (1), (2) их конечно-разностные аналоги записывались на смещенных сетках в виде систем линейных алгебраических уравнений с пятидиагональными матрицами, которые решались методом Гаусса. Решение уравнений (1)-(3) на смещенной сетке проводилось с применением алгоритма типа SIMPLE [5]. Из уравнений (1), (2) находились компоненты вектора скорости $v_{x_{i,j+1/2}}$ и $v_{z_{i+1/2,j}}$, соответственно, а из уравнения (3) – давление $p_{i-1/2,j-1/2}$.

После динамических уравнений решается уравнение переноса тепла без конвективных членов. Для уравнения (4) использовалась неявная консервативная конечно-разностная схема [4], где исходное уравнение записывалось в виде производных от тепловых потоков. Эти производные аппроксимировались конечными разностями первого порядка точности. Компоненты теплового потока q_x , q_z рассчитывались в смещенных узлах разностной сетки, расположенных между узлами основной сетки. Источники тепла брались с предыдущего временного слоя. Для численной аппроксимации температурных градиентов использовались конечные разности первого порядка точности, наиболее подходящие для решения задач с резко изменяющимся коэффициентом теплопроводности. В результате в основной сетке получена система линейных алгебраических уравнений с пятидиагональной матрицей, которая решалась методом Гаусса.

Лагранжев этап. Температура (количество тепла) переносится лагранжевыми частицами. Их первоначальное распределение выбирается в соответствии с предполагаемым профилем температуры. Перед началом лагранжева этапа выполнялась интерполяция температурных изменений, найденных в узлах эйлеровой сетки, в местоположение частиц, для которых определялись новые значения температур. Перемещение частиц в соответствии с ранее рассчитанным полем течения вычислялось на основе явной схемы первого порядка точности. По окончанию лагранжева этапа значение температуры интерполируется с частиц в узлы эйлеровой сетки. Для интерполяции применялась схема PIC. Для определения местоположения частицы в соответствующей ячейки сетки использовался двумерный бисекционный метод.

Предложенный алгоритм позволяет проводить расчеты конвективных течений при высоких числах Рэлея (до 10⁷), больших градиентах вязкости и теплопроводности. Численный алгоритм полностью консервативен по напряжениям и тепловым потокам с учетом существенных изменений вязкости, теплопроводности и высоких градиентов температуры.

Результаты и их обсуждение

Рассматривалось влияние числа Рэлея и начальных условий на эволюцию конвективного движения в земной коре. Структура течения имеет вид восходящего струйного потока, в граничных сдвиговых слоях которого образуются интенсивные вихри, закрученные в направлении потока. С удалением от центра потока расположены вихри меньшей интенсивности, которые с увеличением числа Рэлея вытесняют основные вихри вверх и способствуют формированию системы более мелких вихрей. Распределение температуры имеет вид, характерный для эффекта диапиризма, при котором горячий температурный фронт проникает в более холодные слои земной коры. Интенсивность проникновения и форма диапира определяются числом Рэлея, и в меньшей степени отношением вязкостей η_1/η_0 . Плотность понижается на фронте тепловой волны и повторяет форму диапира.

Решение задачи о конвективной неустойчивости в земной коре показало, что при больших числах Рэлея и градиетах вязкости возникает восходящий конвективный поток, формирующий тепловую волну к поверхности Земли, характерную для эффекта диапиризма. Для детального решения данной задачи, в частности, в двух компонентой постановке "гранит – расплавленный базальт" представляется перспективным использование метода "частиц-в-ячейках" на многопроцессорных вычислительных системах.

Список литературы

- [1] ГРИГОРЬЕВ Ю.Н., ВШИВКОВ В.А., ФЕДОРУК М.П. Численное моделирование методами "частиц-в-ячейках". Новосибирск: Из-во СО РАН, 2004.
- [2] BITTNER D., SCHMELING H. Numerical modeling of melting processes and induced diapirism in the lower crust // Geophys. J. Int. 1995. Vol. 123. P. 59–70.
- [3] GERYA T.V., YUEN D.A. Robust characteristics method for modelling multiphase visco-elastoplastic thermo-mechanical problems // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 2007. Vol. 163. P. 83-105.
- [4] GERYA T.V., YUEN D.A. Characteristics-based marker-in-cell method with conservative finitedifferences schemes for modeling geological flows // Physics of the Earth and Planetary Interiors. 2003. Vol. 140. P. 293–318.
- [5] ПАТАНКАР С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. Пер. с англ. под ред. В.Д. Виленского. М.: Энергоатомиздат, 1984.