数値解析入門

3. 拡散方程式（1次元）

3. Diffusion Equation (1-Dimensional)

3 スケジュール

	題材	日時・場所	所要時間
~~STEP 1~~	~~常微分方程式の時間積分~~	~~4/11, 10:30-~~ ~~W2 – 544~~	~~説明15分~~ ~~演習20~30分~~ ~~追加説明15分~~
~~STEP 2~~	~~1次元移流方程式~~	~~4/11, 13:00-~~ ~~W2 – 544~~	~~説明15分~~ ~~演習15分~~ ~~追加説明15分~~
STEP 3	1次元拡散方程式	4/12, 13:00- W2 – 544	説明30分 演習30分
Extra STEP	貯留層解析入門	4/12, 14:15- W2 – 544	説明25分 演習10分 M2研究紹介

コンテンツ

1	拡散方程式
2	有限体積法
3	境界条件
4	実装

コンテンツ

1. 拡散方程式

拡散（diffusion）：物理量が空間で散らばり、広がること

1次元の場合

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$k > 0$ は拡散定数とよばれる正の量で，より一般には

$$\frac{\partial C}{\partial t} = a\nabla^2 C$$

1.拡散方程式

長さ L の一様な貯留層における圧力 $P(x,t)$ の時間変化を考える。

$$\phi c \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$$

ϕ： 岩石の空隙率

c： 圧縮性

k： 岩石の浸透率

μ： 流体の粘度

※この偏微分方程式は境界条件と初期条件を与えれば解ける。

初期条件	$P(x,0)$ での圧力分布
境界条件	$P(0,0)$ と $P(L,0)$ での条件

コンテンツ

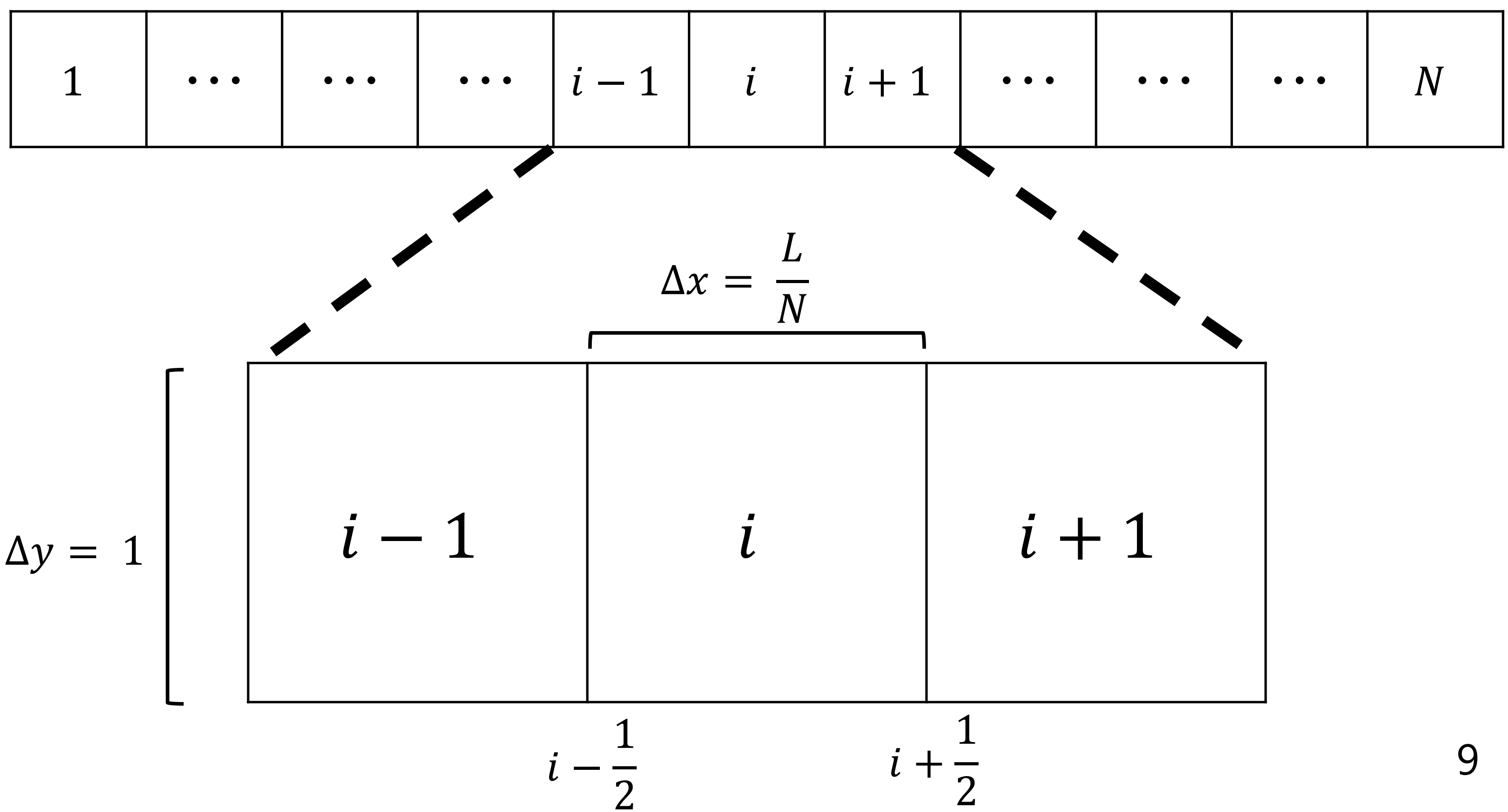
2. 有限体積法

差分法を実装した商用シミュレータ

- HydroTherm
- TOUGH2
- tNavigator　(Rock Flow Dynamics社)
- ECLIPSE　(Schlumberger社)

2.有限体積法（**F**inite **V**olume **M**ethod）

貯留層を N 個の検査体積（**C**ontrol **V**olume）に分割する。

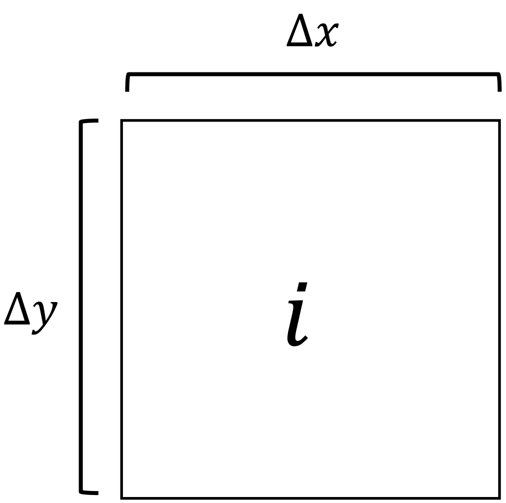


2. 有限体積法（時間項の積分）

$$\phi c \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$$

検査体積 i で、拡散方程式の左辺 $\phi c \frac{\partial P}{\partial t}$ を面積分

$$\iint \phi c \frac{\partial P}{\partial t} dxdy \cong \phi c \frac{P(t + \Delta t) - P(t)}{\Delta t} \Delta x \Delta y$$



$$= \phi c \frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{\Delta t} \Delta x \Delta y$$

2. 有限体積法（空間項の積分）

$$\phi c \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$$

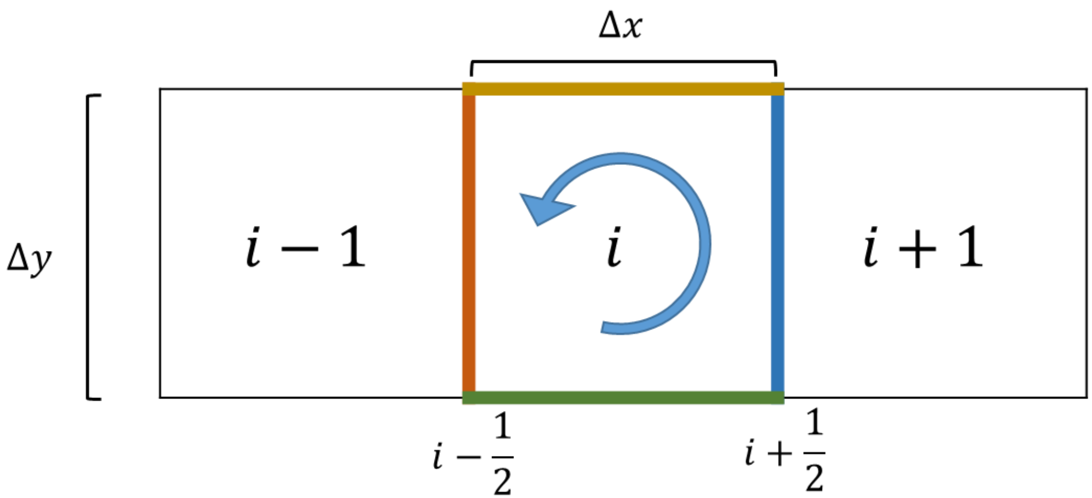
検査体積 i で、拡散方程式の右辺 $\frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$ を積分すると、**発散定理**より、

$$\iint_{CV_i} \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} dxdy \qquad = \qquad \int_{\partial CV_i} \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} \, d\vec{r}$$

検査体積での面積分 ⇒ 境界での線積分

2.有限体積法（境界での線積分）

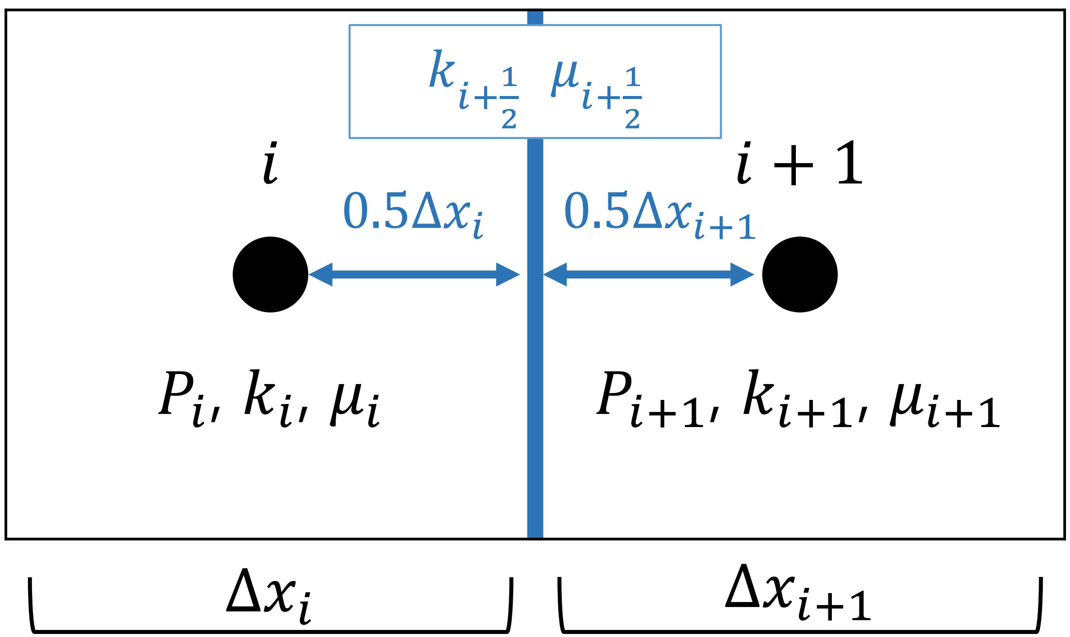
$$\int_{\partial CV_i} \frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x} \; d\vec{r}$$



$$= 0 \times \Delta x + \frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}_{i+\frac{1}{2}} \times \Delta y + 0 \times (-\Delta x) + \frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}_{i-\frac{1}{2}} \times (-\Delta y)$$

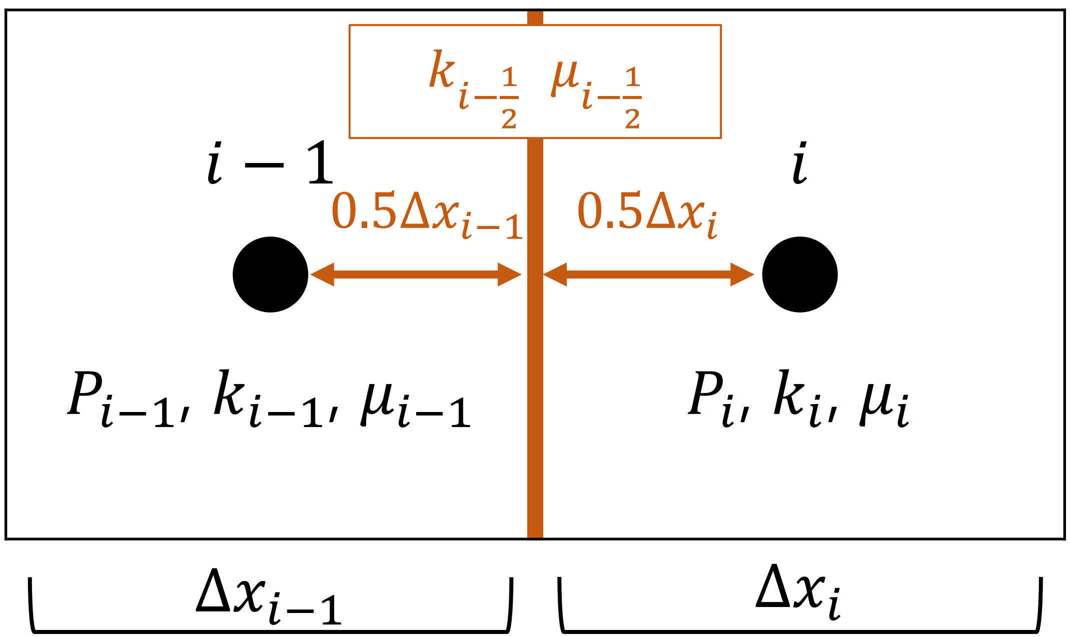
2.有限体積法（境界での線積分）

$$\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}_{i+\frac{1}{2}} \times \Delta y = \left.\frac{k}{\mu}\right|_{i+\frac{1}{2}} \frac{P_{i+1} - P_i}{0.5(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i)} \Delta y$$



2.有限体積法（境界での線積分）

$$\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}_{i-\frac{1}{2}} \times (-\Delta y) = \left.\frac{k}{\mu}\right|_{i-\frac{1}{2}} \frac{P_i - P_{i-1}}{0.5(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})}(-\Delta y)$$



2.有限体積法（境界での線積分）

$k_{i+\frac{1}{2}}$ $k_{i-\frac{1}{2}}$	k_i と $k_{i\pm1}$ の調和平均
$\mu_{i+\frac{1}{2}}$ $\mu_{i-\frac{1}{2}}$	今回は一定とする

Pythonの場合

```
>>> a=1;b=0;

>>> 2/(1/a + 1/b)

Traceback (most recent call last):
File "<stdin>", line 1, in <module>
ZeroDivisionError: division by zero
```

```
from scipy.stats import hmean
```

がおすすめ

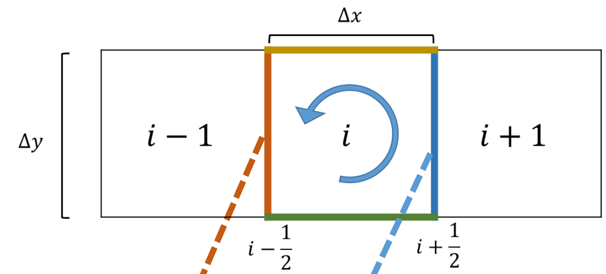
MATLABの場合

```
>> a = 1; b = 0;

>> 2/(1/a + 1/b)

ans = 0
```

以降、$\frac{k}{\mu} = \lambda$ とおく

2. 有限体積法（漸化式）

$$\phi c \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x}$$



$$\phi c \frac{P_i^{n+1} - P_i^n}{\Delta t} \Delta x_i \Delta y_i = \lambda_{i+\frac{1}{2}} \frac{P_{i+1} - P_i}{0.5(\Delta x_{i+1} + \Delta x_i)} \Delta y_i$$

$$- \lambda_{i-\frac{1}{2}} \frac{P_i - P_{i-1}}{0.5(\Delta x_i + \Delta x_{i-1})} \Delta y_i$$

【仮定】

- 貯留層を等分しているので $\Delta x_i = \Delta x_{i-1} = \Delta x_{i+1}$
- 貯留層の厚さは1とする（ $\Delta y_i = 1$ ）
- 右辺の圧力はすべてP^n

漸化式をP_i^{n+1}について整理しよう！

2. 有限体積法（漸化式）

$$P_i^{n+1} =$$

ただし、$\alpha = \frac{\Delta t}{\phi c}$ 、$\lambda_w = \lambda_{i-\frac{1}{2}}$ 、$\lambda_e = \lambda_{i+\frac{1}{2}}$

2. 有限体積法（漸化式）

$$P_i^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e P_{i+1}^n$$

$$+\left(1-\frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e-\frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right)P_i^n$$

$$+\frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w P_{i-1}^n$$

解の安定条件は、$1-\frac{\frac{\Delta t}{\phi c}}{(\Delta x)^2}\lambda_e-\frac{\frac{\Delta t}{\phi c}}{(\Delta x)^2}\lambda_w \geq 0$

コンテンツ

3. 境界条件

両端の検査体積では何が起きるのか?

0	1	$\cdots$	$\cdots$	$i-1$	i	$i+1$	$\cdots$	$\cdots$	N	$N+1$

CV#1 $$P_1^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e P_2^n + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right) P_1^n + \boxed{\frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w P_0^n}$$

CV#N $$P_N^{n+1} = \boxed{\frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e P_{N+1}^n} + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right) P_N^n + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w P_{N-1}^n$$

存在しない値を参照

両端の検査体積には
特別な条件が必要

3. 境界条件

境界条件では**存在しない値をどう決めるか**がポイント

3-1	境界値を直接決める
3-2	境界値の勾配を決める

3-1 境界値を直接決める

0	1	$\cdots$	$\cdots$	$i-1$	i	$i+1$	$\cdots$	$\cdots$	N	$N+1$

P_{bL} P_{bR}

境界での圧力値を P_{bR} ，　P_{bL} とする($k_0 = k_1$，　$k_N = k_{N+1}$と仮定)。

このとき、

$$P_{bL} = \frac{P_1 + P_0}{2} \Rightarrow P_0 = 2P_{bL} - P_1$$

$$P_{bR} = \frac{P_{N+1} + P_N}{2} \Rightarrow P_{N+1} = 2P_{bR} - P_N$$

3-1 境界値を直接決める

P_0・P_{N+1} の値は次のように置換できる

$$P_1^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e P_2^n + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right) P_1^n \quad + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w (2P_{bL} - P_1)$$

$$P_N^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e (2P_{bR} - P_N) + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right) P_N^n \quad + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w P_{N-1}^n$$

境界値を直接決める：ディレクレ条件

3-2 境界との勾配を決める

P_0 と P_1 間の $\boldsymbol{\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}_{i+\frac{1}{2}}}$ **の値を決める。**この境界で一番多いのは

勾配を 0 にする境界条件

$$\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x}_{1-\frac{1}{2}} = \frac{k}{\mu}\frac{P_1 - P_0}{0.5(\Delta x_1 + \Delta x_0)} = 0$$

$$P_1 - P_0 = 0$$

$$P_1 = P_0$$

境界との勾配を決める：ノイマン条件

3-2 境界との勾配を決める

境界で $\frac{k}{\mu}\frac{\partial P}{\partial x} = 0$ の時、$P_1 = P_0$　また　$P_{N+1} = P_N$ だから

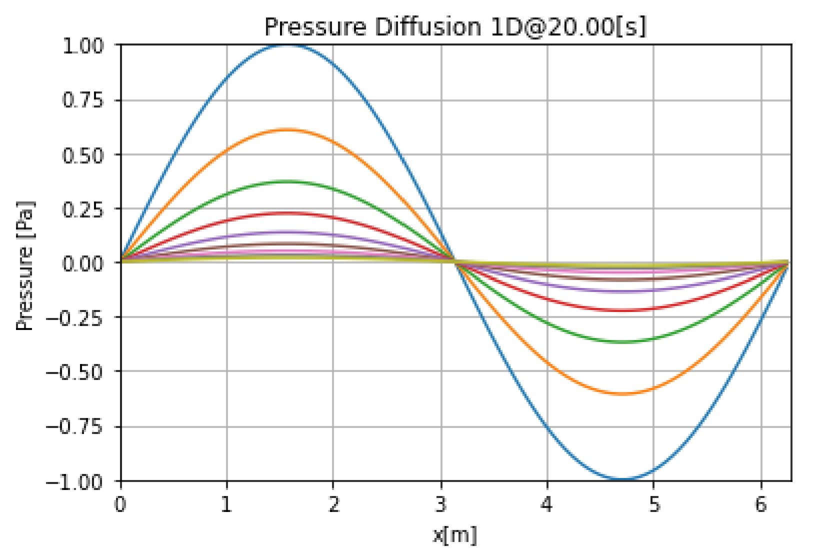
$$P_1^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e P_2^n + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right)P_1^n \quad + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w P_1$$

$$P_N^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e P_N + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w\right)P_N^n \quad + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2}\lambda_w P_{N-1}^n$$

コンテンツ

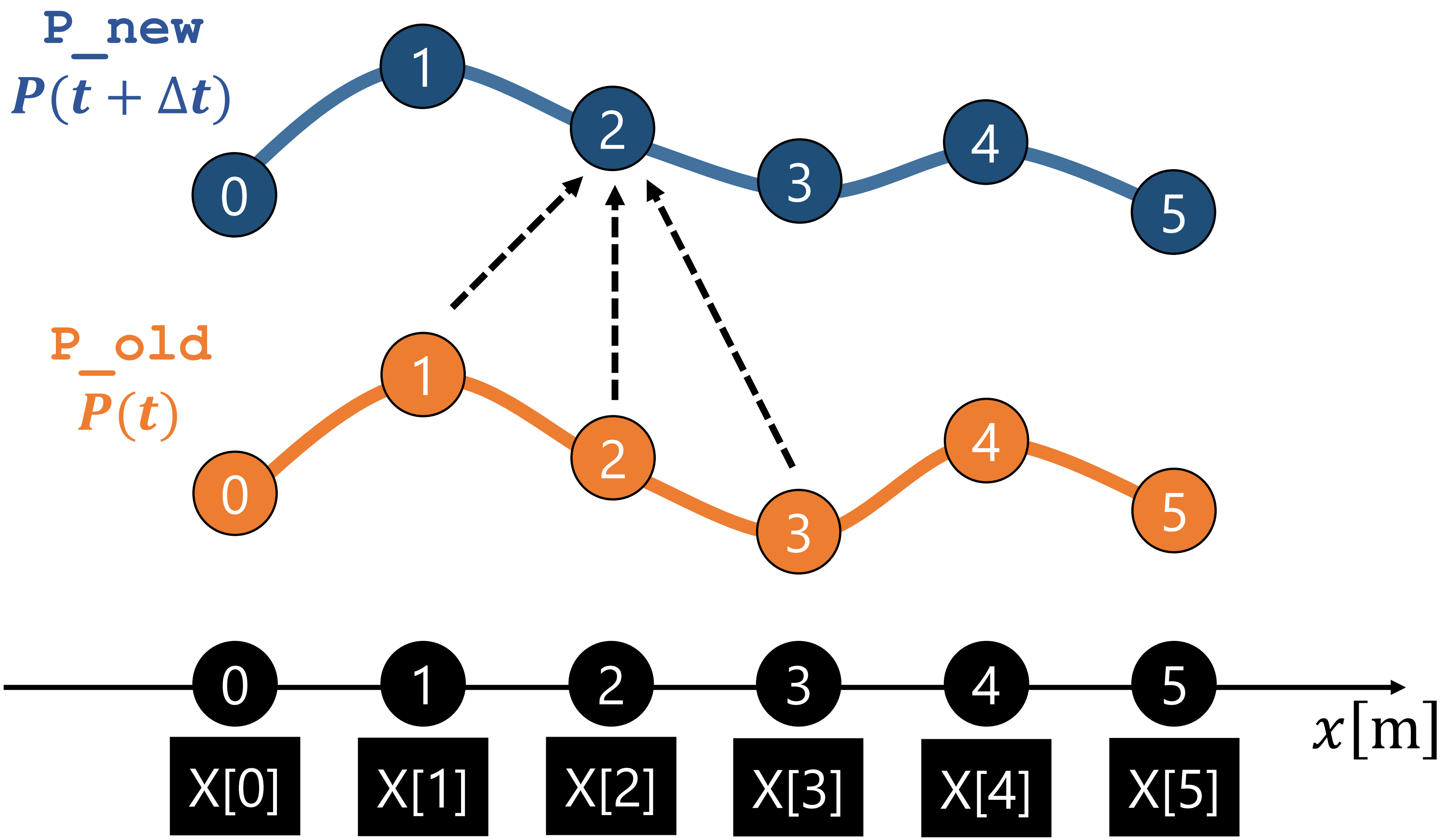
4. 実装

```
while 無限ループ:
  for 両端を除くCV:
    # 係数 (A, B, C) の決定
     # A = , B = , C =
     # P_new = A*P_old(i+1) + B*P_old(i) + C*P_old(i-1)
  if 境界条件@x = 0:
    # ディレクレ条件
    # ノイマン条件

  if 境界条件@x = L:
    # ディレクレ条件
    # ノイマン条件

  # 値のアップデート
   # P_old = P_new
   # t = t + dt
  if t >= tmax:
    whileループを抜ける。
```



このようなグラフが表示されれば成功

4. 実装



5. 補足

- 2つの境界条件の物理的な意味は？
- スライド #14 ~ #15の過程で、右辺の圧力をP^{n+1}とするとどうなる？また、それらの関係式はどう解く？

  →Hint：陰解法, Implicit Method