数值解析基礎

- 3. 拡散方程式(1次元)
- 3. Diffusion Equation (1-Dimensional)

拡散方程式 有限体積法 境界条件 実装

拡散方程式 有限体積法

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。

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

c: 圧縮性 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

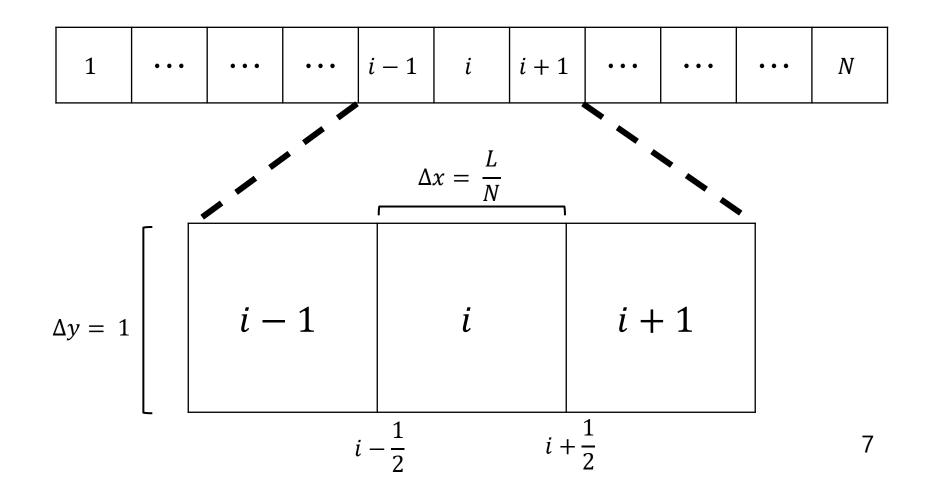
境界条件

P(0,0)と P(L,0) での条件

有限体積法

2.有限体積法(Finite Volume Method)

貯留層を N 個の検査体積(Control Volume)に分割する。



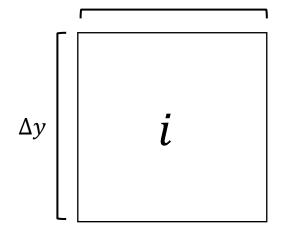
2. 有限体積法 (時間項の積分)

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

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

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

 Δx



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

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、

$$\iint_{CV_i} \frac{\partial}{\partial x} \cdot \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} dx dy = \int_{\partial CV_i} \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} d\vec{r}$$

検査体積での面積分

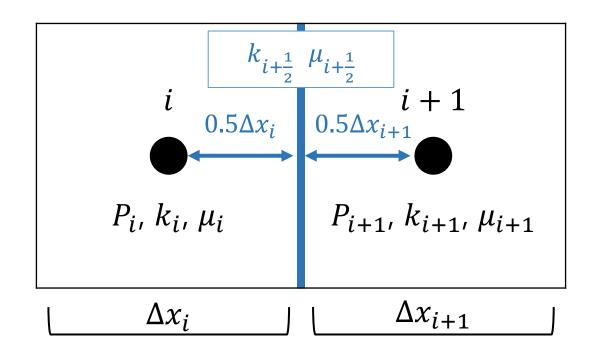


境界での線積分

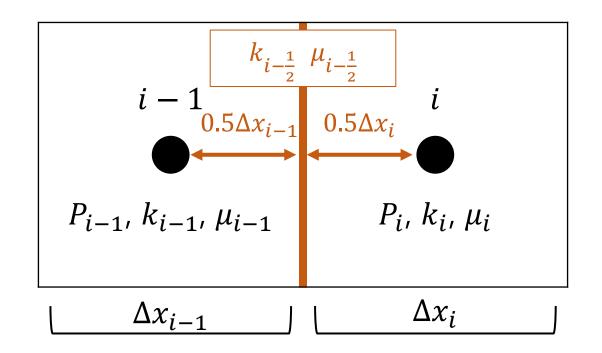
$$\int_{\partial CV_i} \frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x} d\vec{r} \qquad \Delta y \left[\begin{array}{c} i - 1 \\ i - \frac{1}{2} \end{array} \right] \frac{\lambda x}{i + \frac{1}{2}}$$

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

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



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



$k_{i+\frac{1}{2}} k_{i-\frac{1}{2}}$	k_i と k_{i+1} の調和平均
$\mu_{i+\frac{1}{2}} \ \mu_{i-\frac{1}{2}}$	液相の場合は一定としてOK

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、
$$\frac{k}{\mu} = \lambda$$
 とする

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Pⁿ

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)

$$P_i^{n+1} =$$
 解答

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

有限体積法 境界条件

3. 境界条件

両端の検査体積では何が起きるのか?

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

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

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

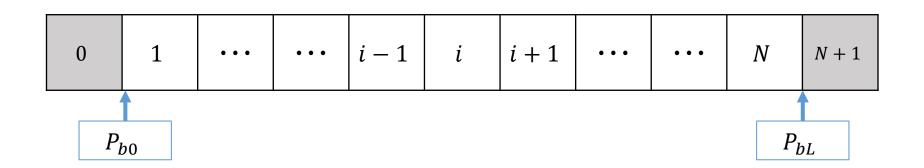
3-1

境界値を直接決める

3-2

境界値の勾配を決める

境界値を直接決める



境界での圧力値を P_{b0} , P_{bL} とする(物性値は等しいと仮定)。このとき、

$$P_{b0} = \frac{P_1 + P_0}{2} \qquad P_0 = 2P_{b0} - P_1$$

$$P_{bL} = \frac{P_{N+1} + P_N}{2} \qquad P_{N+1} = 2P_{bL} - P_N$$

境界値を直接決める

 $P_0 \cdot P_{N+1}$ の値は次のように置換できる

$$P_1^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_e P_2^n + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_w\right) P_1^n + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_w (2P_{b0} - P_1)$$

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

境界値を直接決める:ディレクレ条件

境界との勾配を決める

$$P_0$$
 と P_1 間の $\frac{k}{\mu} \frac{\partial P}{\partial x_{i+\frac{1}{2}}}$ **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

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

$$= P_1 - P_0 = 0$$

$$\Leftrightarrow P_1 = P_0$$

境界との勾配を決める: ノイマン条件

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

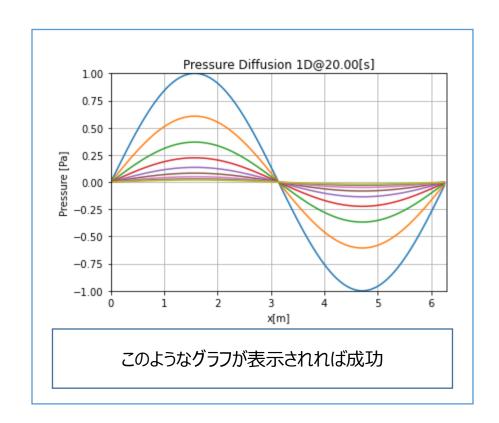
$$P_1^{n+1} = \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_e P_2^n + \left(1 - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_e - \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_w\right) P_1^n + \frac{\alpha}{(\Delta x)^2} \lambda_w P_1$$

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

有限体積法 実装

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 =
 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。
```



5. 補足

- ・ 陽解法の解の安定条件は?
- ・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, Explicit Method