非整数階微分を利用した地殻内流動の数値シミュレーション法開発

Numerical Simulation of non-Fickian Diffusion in a Fractured Porous Aquifer

○千葉 隆一 (東北大院・環境), Sergei FOMIN(California State Univ.),

Vladimir CHUGUNOV(Kazan State Univ.), 新堀 雄一 (東北大院・工), 正 橋田 俊之 (東北大院・工)

Ryuichi CHIBA, Fracture and Reliability Research Institute, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan

Sergei FOMIN, California State University, Chico, USA

Vladimir CHUGUNOV, Kazan State University, Kazan, Russia

Yuichi NIIBORI, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Sendai, Japan

Toshiyuki HASHIDA, Fracture and Reliability Research Institute, Graduate School of Engineering, Tohoku University, Japan

Key Words: Fractional derivative, Solute transport, Numerical simulation

緒言

現在, 一般的に利用されている流動モデルは Fick 則を基礎としているものが大半である. しかしながら, 岩体を対象とした解析では流動挙動の正確な予測が困難であるという指摘がなされている¹⁾. この原因は, Fick 則の前提が均質な媒体であり, 岩石のようにき裂が不規則に分布するために巨視的に見た場合不均質となる媒体には適さないことに由来するためであるとされている.

一方, そのような不均質媒体に対しては Fick 則によらない流動モデルを適用することで精度の良い流動予測が可能であることが報告されている²⁾. このとき, 方程式は非整数階微分を含んだ偏微分方程式として記述される. 非整数階微分とは微分の係数が整数以外にも拡張された微分であり, 19 世紀に提案された Riemann-Liouville の定義³⁾をはじめ現在までに複数提案されている. しかしながら, この非整数階微分を用いた移流拡散モデルは一次元数学モデルによる個々の現象の再現に留まり, 工学的に利用可能な流動予測手法ではない. そこで, 本研究では実用的な流動予測手法構築を目的として, 非整数階微分を利用した地殻内流動モデルの開発を行う.

非整数階微分を含む移流拡散方程式の数値計算

本研究では流動予測モデル構築にあたり, 非整数階微分を含んだ一次元移流拡散方程式の数値シミュレーションコード開発を行った. 一次元移流拡散モデルの概念図を Fig.1 に示す. これは多数のき裂により高い透水性を有する帯水層(斜線部分)と, その周辺に存在する透水性の低い岩石から構成されている. 物質は斜線部分の左端, $x=0$ から供給され, 帯水層内を x 方向に移動する. 帯水層内では x 方向への速度 v の流れによる物質輸送, x, y 方向それぞれへの拡散, および帯水層内部での吸着等が作用しているが, 特に移流による物質輸送が支配的である. 一方, 岩石部分では x, y 方向それぞれへの拡散が作用しているが, y 方向への拡散が支配的であるものとする.

このときの帯水層内での移流拡散方程式を式(1)³⁾に示す. 本研究では Caputo⁴⁾により定義された非整数階微分を用いた.

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} + b \frac{\partial^\gamma c}{\partial \tau^\gamma} = -v \frac{\partial c}{\partial x} + D \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial^\alpha c}{\partial y^\alpha} \right) + D \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^\alpha c}{\partial x^\alpha} \right) \quad (1)$$

Fig.1 Schematic diagram of a fractured porous aquifer.

式(1)中の c [ML^{-3}]は帯水層内での濃度, τ [T]は時間, v [LT^{-1}]は帯水層内での流速, D [$\text{L}^{1+\alpha}\text{T}^{-1}$]は帯水層での拡散係数である. 式中の α, γ は非整数階微分の微分係数であり, それぞれ 0 から 1 の間の値をとる.

式(1)を無次元化することで以下の式(2)が得られる.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + b \frac{\partial^\gamma C}{\partial t^\gamma} + \frac{\partial^\beta C}{\partial t^\beta} = -\frac{\partial C}{\partial X} + \frac{1}{Pe} \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial^\alpha C}{\partial X^\alpha} \right) \quad (2)$$

ここで Pe はペクレ数である. 微分係数 α, β, γ はそれぞれ x 方向への拡散, 帯水層から周囲の岩石への拡散, 帯水層における吸着などの影響に関連するパラメータとなっている.

本研究では数値シミュレーションに差分法を用いて計算を行っている. 式(2)の左辺第二項, 第三項および右辺第二項にある非整数階微分は以下のように二項定理を用いた方法で差分化が可能である.

$$\frac{\partial^\alpha f}{\partial x^\alpha} \approx \frac{1}{(\Delta x)^\alpha} \sum_{i=0}^{j+1} \frac{\Gamma(-\alpha+i)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(i+1)} f_{j-(i-1)} \quad (3)$$

本研究では Caputo の定義による非整数階微分であることを考慮し, 濃度 C を式(4)のように U で置換したうえで式(3)を適用し差分を行った.

$$U = C - C_0(t) \quad (4)$$

ここで, $C_0(t)$ は $X=0$ での濃度である. また, 右辺第一項の移流項には TVD スキーム⁵⁾を用いた. 以上より, 式(2)は以下のようなになる.

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{1}{\Delta t} - \frac{b}{(\Delta t)^\gamma} G_1^\gamma - \frac{1}{(\Delta t)^\beta} G_1^\beta \right\} (U + C_0)_j^n \\
 & - \sum_{i=2}^{n+1} \left\{ \frac{b}{(\Delta t)^\gamma} G_i^\gamma + \frac{1}{(\Delta t)^\beta} G_i^\beta \right\} (U + C_0)_j^{n-(i-1)} \\
 & - \left\{ \frac{1}{\Delta t} + \frac{b}{(\Delta t)^\gamma} G_0^\gamma + \frac{1}{(\Delta t)^\beta} G_0^\beta \right\} \\
 & = \left\{ \frac{1}{\Delta t} + \frac{b}{(\Delta t)^\gamma} G_0^\gamma + \frac{1}{(\Delta t)^\beta} G_0^\beta \right\} U_j^{n+1} \\
 & + \frac{1}{\Delta X} (f_{j+1/2}^{n+1} - f_{j-1/2}^{n+1}) + \frac{1}{Pe} \frac{1}{(\Delta X)^{\alpha+1}} \sum_{i=2}^{j+1} G_i^\alpha U_{j-i+1}^{n+1}
 \end{aligned} \quad (5)$$

ここで,

$$\begin{aligned}
 G_i^\beta &= \frac{\Gamma(-\beta+i)}{\Gamma(-\beta)\Gamma(i+1)}, \quad G_i^\gamma = \frac{\Gamma(-\gamma+i)}{\Gamma(-\gamma)\Gamma(i+1)}, \\
 G_i^\alpha &= \frac{\Gamma(-(\alpha+1)+i)}{\Gamma(-(\alpha+1))\Gamma(i+1)}
 \end{aligned} \quad (6)$$

である.

計算結果

開発した計算コードの妥当性を評価するために解析的に得られた解との比較を行った. このときの計算条件は以下の通りである.

$$\begin{aligned}
 C(X, 0) &= C_0(t) = 1 \\
 C(0, X) &= 0 \\
 C(\infty, X) &\rightarrow 0
 \end{aligned} \quad (7)$$

計算結果を Fig.2 に示す. 解析解は線で, 計算結果は点で表されている. このとき, $Pe = 1$, $\alpha = 1$ である. Fig.2 から, 計算結果は解析解と良く一致していることが確認できる. 従って, 作成した計算コードは妥当なものであると考えられる. また, Fig.2 から確認できるように, γ が 0 近いほど濃度は全体的に減少する傾向が見られる. 一方, γ の変化に伴う濃度減少に比べて物質の到達距離の変化は小さく, 拡散距離への影響は小さいと考えられる.

Fig.2 Comparison of analytical and numerical solution ($t = 15$, $Pe = 1$, $\alpha = 1$).

Fig.3 Distribution of concentration with respect to the x -direction at $t=15$ for different values of α ($t = 15$, $b = 0$, $Pe = 1$, $\beta = 0.5$).

Fig. 3 は α を 0.3 から 1.0 まで変化させた場合での計算結果である. 計算条件は先ほどと同様に式(7)の通りである. Fig.3 から確認できるように, α が 0 に近づくほど $X=0$ 近傍での濃度は低下している. $X=10$ 以降では逆に α が 0 に近いほど濃度は高くなり, 拡散距離が伸びる結果となっている. Fig.2 と比較した場合, γ に比べて α の変化は拡散距離への影響が顕著なものとなっている.

結言

本研究では, 複雑な地殻内流動の予測手法構築を目的として非整数階微分を含んだ一次元移流拡散方程式の数値シミュレーションコードの開発を行った. 計算コードは二項定理と変数の置換を考慮することで Caputo の定義による非整数階微分の差分を可能とした. 計算結果と解析解を比較したところ両者は良い一致を見せ, 作成した計算コードの妥当性が示された. 微分係数 γ は 0 に近い程濃度が全体的に減少する事が確認された. 一方, α の場合は $X=0$ 近傍では γ と同様に濃度は減少するものの, 同時に拡散距離が拡大することが確認された.

参考文献

- 1). A. A. Keller et al., "Prediction of single phase transport parameters in a variable aperture fracture", *Geophys. Res. Lett.*, 22, 1995, pp.1425-1428.
- 2). D. A. Benson et al., "Application of a fractional advection-dispersion equation", *Water Resour. Res.*, 36, 2000, pp.1403-1412.
- 3). M. Caputo, "Linear Models of Dissipation whose Q is almost Frequency Independent-II", *Geophys. J. R. astr. Soc.*, 13, 1967, pp.529-539.
- 4). S. Fomin et al., "The effect of non-Fickian diffusion into surrounding rocks on contaminant transport in a fractured porous aquifer", *Proc. R. Soc. A*, 461, 2005, pp.2923-2939.
- 5). S. G. Samko et al., "Fractional Integrals and Derivatives: Theory and Applications", Gordon and Breach, London, 1993.
- 6). H. C. Yee, and A. Harten, *AIAA Journal*, 25, 1987, pp.266-274.