مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی مخازن

حل عددی و تحلیلی معادلات جریان یک فازی و یک بعدی

به عنوان مقدمه‌ای بر شبیه‌سازی مخزن، ساده‌ترین معادلات جریان یک بعدی را برای یک جریان افقی در نظر خواهیم گرفت و حل عددی و تحلیلی فشار را به عنوان تابعی از مکان و زمان خواهیم دید. این معادلات با استفاده از معادله پیوستگی، دارسی، تعریف تراکم‌پذیری و فرض ثابت‌گرفتن نفوذپذیری و تخلخل بدست می‌آیند. اینها، ساده‌ترین معادلات در دسترس هستند که جریان گذرای سیال را در مخزن توصیف می‌کنند.

جریان خطی

ورقه افقی ساده متخلخلی را در نظر بگیرید که در لحظه اول همه جای آن دارای فشار P_0 است. فشار را در طرف چپ (در $x = 0$) در لحظه ($t = 0^+$) به مقدار P_L افزایش داده درحالی‌که طرف راست (در $x = L$) همان مقدار اولیه $P_R = P_0$ را داراست. سیستم در شکل زیر نشان داده شده‌است.

شکل ۱–هندسه سیستم (کنترل حجم) مثال یک‌بعدی.

معادله دیفرانسیل جزئی (PDE)

معادله حرکت سیال یک فازی، یک بعدی، افقی، در محیط متخلخلِ همگنِ(homogenous) همسانگرد(isotropic) و هم‌دما به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = \left(\frac{\phi \mu c}{k}\right)\frac{\partial P}{\partial t} \qquad (۱)$$

شرایط اولیه (Initial Condition):

$$@t \le 0 \quad or \quad t = 0; \quad \forall x: \quad P = P_0 = P_R$$

شرایط مرزی (Boundary Conditions):

$$\begin{cases} @x = 0 \ (\forall t \succ 0); P = P_L \\ @x = L \ (\forall t \succ 0); P = P_R \end{cases}$$

قوانین (قانون) حاکم که منجر به فرمولاسیون PDE حاضر شده‌است، متشکّل از قانون عام پیوستگی (بقای جرم) و قانون خاص دارسی می‌باشد. کمّیت مجهول همان فشار است که مطلوب حل، عملاً توزیع فشار (معادله جریان یا معادله هیدرولیکی) در زمان‌های مختلف است. با ترکیب قوانین عام وخاص، به معادله حاکم بالا یعنی رابطه (۱) (با فرض ϕ، μ، c، و k ثابت) رسیده‌ایم.

نکته ۱: با یک معادله (و نه دستگاه) PDE روبرو هستیم.

نکته ۲: مرزها با عبارت تساوی و خیلی رگولار (!) نمایش داده شده‌اند، فافهم!

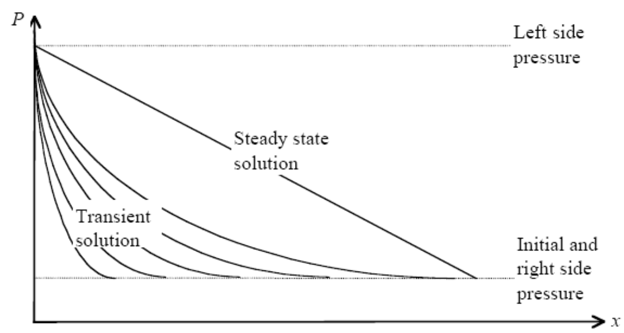
نکته ۳: یک فرق عمده معادلات PDE در مخازن با سایر معادلات PDE در زمینه‌های مهندسی شیمی، وجود نقاط یا مکان‌های تکینگی (singularity) می‌باشد. این مکان‌ها که تعبیر ریاضی تکینگی دارند، همان چاه‌های تزریق یا تولید هستند و موقع شرح روش حل عددی، باید آنها را مدّنظر قرار داشت.

جریان گذرا (پویا) و یکنواخت (پایا)

طرف راست معادله فوق وابستگی به زمان را نشان می‌دهد. در آن صورت جریان گذرا، یا به‌عبارتی وابسته به زمان است. اگر جریان به حالتی برسد که دیگر به زمان وابسته نباشد، جریان پایدار یا یکنواخت(steady-state) است، که بر این اساس، معادله به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\frac{d^2P}{dx^2}=0 \qquad (۲)$$

در شکل زیر(شکل ۲)، برای یک سیستمی که فشار اولیه در سمت راست و چپ آن برابر هستند، توزیع فشار در حالت گذرا و پایدار نشان داده شده‌است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با توجه به خصوصیات سیستم، فشار در همه سیستم در پاره‌ای از زمان افزایش می‌یابد (حالت گذرا). سرانجام با گذر زمان، توزیع فشار به صورت خط راست بین دو فشار ابتدا و انتهای سیستم تبدیل می‌شود (حالت پایدار یا یکنواخت).



شکل ۲- نوزیع فشار در زمانهای مختلف برای مثال مربوطه.

حل تحلیل معادله PDE خطی

حل تحلیلی گذرا برای معادله فوق به صورت زیر است:

$$P(x,t)=P_L+\left(P_R-P_L\right)\left[\frac{x}{L}+\frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\frac{1}{n}\exp\left(-\frac{n^2\pi^2}{L^2}\frac{k}{\phi\mu c}t\right)\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)\right)\right] \qquad (۳)$$

در برخی از کتب و منابع، معادله و جواب‌های PDE را به صورت بدون بُعد می‌نویسند تا روی تحلیل معادله، حساب اپراتوری و ساختار جواب متمرکز شوند، به طور مثال:

$$\overline{\mathrm{P}}\triangleq\theta=\frac{\mathrm{P}-\mathrm{P_L}}{\mathrm{P_R}-\mathrm{P_L}}\ ,\qquad \zeta\triangleq\frac{x}{L}\ ,\qquad \tau\triangleq t\frac{k}{\phi\mu c}$$

از جواب تحلیلی دیده می‌شود که با افزایش زمان، قسمت نمایی به صفر می‌رسد و حل به صورت زیر در می‌آید:

(۴)
$$P(x,t) = P_L + \left(P_R - P_L\right)\frac{x}{L}$$

که آن حل حالت یکنواخت سیستم است.

نکته ۴: از این حالت برای چک کردن نتایج استفاده می‌شود چون حل ODE ساده‌تر از PDE است.

نکته ۵: معادله PDE حاصله از نوع سهموی است ولی در حالت پایا از نوع بیضوی است. در شبیه‌سازی مخازن به‌ندرت به‌نوع هذلولوی برمی‌خوریم. این تقسیم‌بندی‌ها برای تشخیص روش حل یا تنظیم پارامترهای روش حل بدرد می‌خورد. در نرم‌افزارهای تجاری، این تنظیمات پشت صحنه انجام می‌شود و نیاز به دخالت کاربر ندارد.

جریان شعاعی (معادله چاه‌آزمایی)

شکل دیگر معادله برای جریان مایع افقی و یک بعدی، معادله شعاعی است که به طور گسترده‌ای برای تفسیر داده‌های چاه‌آزمایی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این مورد، سطح جریان متناسب با r^2 است. معادله یک بعدی (شعاعی) جریان در مختصات استوانه به صورت زیر است:

(۵)
$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial P}{\partial r}\right) = \frac{\phi\mu c}{k}\frac{\partial P}{\partial t}$$

حل معادله برای یک مخزن بسیار بزرگ همگن $P\left(r \to \infty\right) = P_i$ و دبی ثابت q از چاهی با شعاع r_w به صورت زیر است:

(۶)
$$P = P_i + \frac{q\mu}{4\pi kh}Ei\left(-\frac{\phi\mu c r^2}{4kt}\right)$$

که در آن $Ei\left(-x\right) = -\int_x^\infty \frac{e^{-u}}{u}du$ به انتگرال نمایی معروف است. حل پایدار برای یک سیستم بی‌نهایت بزرگ وجود ندارد (!). زیرا تا زمانی که از چاه تولید می‌کنیم، فشار در طول سیستم کاهش خواهد یافت. البته اگر شرایط مرزی دیگری را استفاده کنیم، $P\left(r = r_w\right) = P_w$ و $P\left(r = r_e\right) = P_e$، می‌توانیم حل یکنواخت را بدست آوریم:

(۷)
$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial P}{\partial r}\right) = 0$$

با دو بار انتگرال‌گیری، حل یکنواخت به صورت $P = P_w + \left(P_e - P_w\right)\ln\left(r/r_w\right)/\ln\left(r_e/r_w\right)$ به‌دست می‌آید.

نکته ۶: فرمولاسیون و معادله PDE حاصله معروف به معادله تست چاه (چاه‌آزمایی) می‌باشد. حل تحلیلی آن در ترجمه و تفسیر رکوردهای (log) چاه‌آزمایی به‌کار می‌رود ولی در این مقال (شبیه‌سازی مخازن) از معادله چاه‌آزمایی برای محاسبه تکنیگی و لحاظ کردن چاه اعم از تزریق و تولید استفاده می‌شود.

حل عددی

حل تحلیلی برای حرکت سیال (سیالات) در محیط متخلخل بسیار محدود است و از آن در قضاوت کیفی، آنالیز حساسیت، اعتبار سنجی (محک) حل عددی، بررسی رفتار فانکشنال دستگاه PDE و پرکردن برخی حفرات ریاضی نظیر جریان چاه استفاده می‌شود. به دست آوردن حل تحلیلی فقط با فرضیات ساده شونده در هندسه مخزن، خواص سنگ و سیال و شرایط مرزی ممکن می‌باشد. برای اخذ نتایج دقیق‌تر ولی با بار اطلاعاتی کمتر، نیازمند روش‌های عددی هستیم. روش‌های عددی دستگاه PDE از نظر ریاضی به سه دسته کلی تقسیم می‌شوند (ولی از نظر مصداق و تنوع روش تقریباً ۱۳۸۰۰ روش داریم !):

- روش‌های مبتنی بر تقریب جبری مشتق (معروف به FDM، مثل FDM Explicit ، SOR ، Crank-Nicholson و...
- روش‌های مبتنی بر تقریب تابع جواب یا روش‌های مانده وزنی (Weighted Residual) مثل FEM، FVM، Collocation و....
- روش‌های مبتنی بر حل انتگرال مثل BEM، GEM و....

در ادامه فقط بر روی FDM متمرکز می‌شویم.

گسسته سازی

به عنوان مثال ساده‌ای، می‌خواهیم معادله خطی جریان را به صورت عددی با روش تقریب تفاضلات محدودِ استاندارد برای جملات $\frac{\partial P}{\partial t}$ و $\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}$ حل کنیم. ابتدا مختصات x به تعدادی شبکه بلوک، گسسته و مختصات زمان به تعدادی گام زمانی تقسیم می‌شود. سپس فشار برای هر بلوک به صورت عددی برای هر گام زمان حل می‌شود. به عبارت خلاصه هدف تمامی روشهای تفاضلی (دیفرنس)، تبدیل دیفرنسیال‌ها (مشتقات پیوسته) به دیفرنسها (مشتقات گسسته) می‌باشد، یعنی از یک (دستگاه) معادله دیفرنسیال (اعم از عادی یا پاره‌ای) شروع کرده و با روش‌های مقتضی تقریب‌زدن مشتقات (به‌صورت جبری) در نهایت به یک دستگاه جبری (در صورت گسسته‌سازی کامل) یا دستگاه معادلات دیفرنسیال عادی (در صورت گسسته‌سازی فقط مکان) که حل آن مانوس‌تر و آشناترست می‌رساند. علت تنوع و تکثر این روشها، اختلاف در نحوه تقریب، میزان دقت مشتقات پیوسته و درجه سازگاری مراتب مختلف مشتقات می‌باشد. برای گسسته‌سازی مراتبِ مختلفِ مشتقِ کمّیاتِ پیوسته، بالغ بر ۲۲ روش وجود دارد که هرکدام مزایا و معایب خود را چه از نظر دقت محاسباتی، مقاوم بودن به پخش خطای عددی و راحتی در پیاده‌سازی کامپیوتری (ایندکس‌گذاری تیپ) دارا می‌باشند. به هر حال دو روش ساده تیلور (آنالیز کلاسیک، تقریب تابع) و روش انتگرالی (با تعبیر و تفسیر فیزیکی) از همه رایج‌ترند. در این وجیزه به‌طور یکدست از روش بسط تیلور در معرفی انواع تقریب‌ها بهره‌گیری شده‌است.

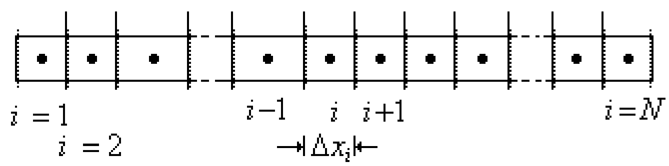
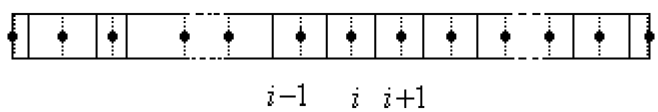
گسسته‌سازی مکان:

چون سیستم از نظر مکان یک‌بعدی است، لذا دامنه حل را گسسته می‌کنیم. دو روش برای گسسته‌سازی مکان متداول است. روش میان‌بلوکی (Block-Centered) و روش میان‌شبکه یا توزیعی نقطه‌ای (Mesh-Centered یا Point-

Distributed). (شکل ۳). برای بررسی نقاط اشتراک و مغایرت این دو رویکرد باید از سه مفهوم کلیدی مختصات یا محل گره‌ها (با نمایش دایره توپر)، سطوح یا مرزهای بلوکها (با نمایش خط توپر) و خط‌چین تقسیم‌بندی شبکه (با نمایش خط‌چین) استفاده کرد.

دو روش گسسته‌سازی اشاره شده، هر کدام معایب و مزایای خود را دارند که بیشتر در زمینه پیاده‌سازی کامپیوتر (از نظر اجرایی) و برخورد با شرایط مرزی (از نظر فرمولاسیون) با هم تفاوت دارند. آن‌چه که نزد مهندسین مخازن محبوبست روش میان‌بلوکی می‌باشد، در حالی‌که روش دیگر - یعنی میان‌شبکه‌ای- نه تنها برای برخی انواع شرایط مرزی، و هنگام پیاده‌سازی نسبت به روش میان‌بلوکی مناسبتر است بلکه از نظر پایداری حل هم سازگارتر می‌باشد.

به‌هرحال، در ادامه از روش Block-Centered استفاده خواهد شد.

	روش Block-Centered تعداد بلوکها و ایندکسها: N گستره ایندکس: $i=1,2,3,\cdots,N$
	روش Mesh-Centered تعداد بلوک‌ها: N تعداد ایندکس‌ها: $N+1$ گستره ایندکس: $i=0,1,2,3,\cdots,N$ یا $i=1,2,3,\cdots,N+1$

شکل ۳-دو روش ایندکس‌گذاری برای گسسته‌سازی.

تقریب سری تیلور :

تقریب سری تیلور برای هر تابعی را می‌توان بر حسب مقادیر همان تابع و مشتق‌های آن نوشت. در ادامه به سه فرم رایج بسط تیلور برای توابع یک‌متغیره می‌پردازیم:

$$f(x+h)=f(x)+\frac{h}{1!}f'(x)+\frac{h^2}{2!}f''(x)+\frac{h^3}{3!}f'''(x)+HOT \quad \text{(۸)(نمایش ریاضی)}$$

$$f(x)=f(x_\circ)+\frac{(x-x_\circ)}{1!}f'\big|_{x_\circ}+\frac{(x-x_\circ)^2}{2!}f''\big|_{x_\circ}+\frac{(x-x_\circ)^3}{3!}f'''\big|_{x_\circ}+HOT \quad \text{(۹)(نمایش چندجمله‌ای)}$$

$$f_{i+1}=f_i+\frac{h}{1!}f_i'+\frac{h^2}{2!}f_i''+\frac{h^3}{3!}f_i'''+HOT \quad \text{(۱۰)(نمایش ایندکسی)}$$

(اکرونیم HOT به‌مفهوم Higher Order Terms می‌باشد)

از بسط تیلور برای خطی‌سازی ژاکوبین، تشکیل فرم دوخطی (کوادراتیک یا مجذوری)، تقریب دقیق (لاگرانژین)، تشکیل جداول تفاضل، قضایای بهینه‌سازی و از همه مهم‌تر تقریب مراتب مختلف مشتق تابع برحسب مقادیر تابع در گره‌های مختلف استفاده می‌شود.

برای دستگرمی، ببینیم مشتق اول تابع در محل x (ایندکس i) به چند شکل به‌دست می‌آید. محض سهولت و سادگی فرض می‌کنیم فواصل گسسته متساوی‌الفاصله باشند یعنی h یا Δx ثابت است.

۱- معادله ۱۰ را در نظر گرفته و با بازآرایی f_i' را محاسبه می‌کنیم:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + R_i^f \quad or \quad f_i'^f = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} \tag{۱۱}$$

به‌طوریکه

$$R_i^f = -\frac{h^1}{2!} f_i'' - \frac{h^2}{3!} f_i'''$$

در معادله ۱۱، عبارت $\frac{f_{i+1} - f_i}{h}$ موسوم به تقریب تفاضلی (دیفرنس) پیشرو می‌باشد. وجه تسمیه پیشرو اینست که ما تقریب مشتق را در ایندکس i می‌خواهیم ولی علاوه بر مقدار تابع در همان ایندکس (f_i) نیاز به مقدار تابع در یک ایندکس جلوتر یا پیشرو (f_{i+1}) داریم. علت بالانویس f در جملات باقیمانده (نمایش داده‌شده با R_i^f) نیز به‌همین خاطرست و می‌گوییم این خطای برش (truncation) محلی است چون ایندکس دارد. در برخی کتب مرجع خطای محلی را با حرف کوچک o (به‌معنی محلی) و همراه با کوچکترین توان h یا Δx نمایش می‌دهند، یعنی

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_i}{h} + o(h) \tag{۱۲}$$

در اینصورت می‌گویند تقریب تفاضلی پیشرو از مرتبه اول صحیح (first-order correct) است، یعنی با نصف‌کردن گام‌ها، خطا نیز به‌طور خطی نصف می‌شود.

۲- معادله ۱۰ را در نظر گرفته ولی با $-h$ کارکنید، یعنی

$$f_{i-1} = f_i - \frac{h}{1!} f_i' + \frac{h^2}{2!} f_i'' - \frac{h^3}{3!} f_i''' + HOT \tag{۱۳}$$

حال با بازآرایی f_i' را محاسبه می‌کنیم:

$$f_i' = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} + R_i^b \quad or \quad f_i'^b = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} \tag{۱۴}$$

به‌طوریکه

$$R_i^b = \frac{h^1}{2!} f_i'' - \frac{h^2}{3!} f_i''' + \cdots$$

بدین ترتیب تقریب تفاضلی پسرو از f_i' خواهیم داشت. بالانویس b برای ترم باقیمانده به‌این خاطرست که معادله ۱۴ تقریب پسرو از f_i' را بدست داده‌است. این خطا نیز از مرتبه اول صحیح است.

۳- حال بسط تیلور پسرو، یعنی رابطه۱۳ را از بسط تیلور پیشرو یعنی رابطه۱۰ کم کنید و سپس بازآرایی کنید تا f_i' بدست آید:

$$f_i' = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} + R_i^c \quad or \quad f_i'^c = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} \tag{۱۵}$$

به‌طوریکه

$$R_i^c = -\frac{h^2}{3!} f_i''' - \frac{h^4}{5!} f_i^{IV} - \cdots$$

به تقریب جبری f_i' در رابطه ۱۵ می‌گویند تقریب تفاضلی میانی یا سانترال، چون از مقادیر تابع یکی قبل و یکی بعد استفاده می‌کند. همچنین به خطای محلی R_i^c توجه کنید که این‌دفعه صحیح از مرتبه دوم است چون کوچکترین توان آن ۲ می‌باشد. به‌عبارتی اگر h را نصف کنیم و از تقریب تفاضلی میانی استفاده کنیم آنگاه خطای برش عددی به ربع مقدار قبلی تقلیل می‌یابد نه نصف!

نکته ۷: دقت شود تقریب میانی، خود متوسط دو مشتق تفاضلی پیشرو و پسرو می‌باشد:

$$f_i'^{c}=\frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2h}=\frac{f_{i+1}-f_{i-1}+(f_i-f_i)}{2h}=\frac{1}{2}\left\{\frac{f_{i+1}-f_i}{h}+\frac{f_i-f_{i-1}}{h}\right\}=\frac{1}{2}\left(f_i'^{f}+f_i'^{b}\right)$$

به‌طور خلاصه، با استفاده از سری تیلور برای تابع فشار، با روش‌های گوناگونی، می‌توان تقریبی برای مشتقات موجود در معادله خطی جریان بدست آورد.

تقریب مشتقِ مرتبه دوم مکان :

در زمان ثابت، تابع فشار را در یک نقطه به صورت پیشرو (Forward) و پسرو (Backward) می‌توان بسط داد:

$$P\left(x+\Delta x,t\right)=P\left(x,t\right)+\frac{\Delta x}{1!}P'\left(x,t\right)+\frac{\left(\Delta x\right)^2}{2!}P''\left(x,t\right)+\frac{\left(\Delta x\right)^3}{3!}P'''\left(x,t\right)+.... \quad (۱۶)$$

$$P\left(x-\Delta x,t\right)=P\left(x,t\right)+\frac{\left(-\Delta x\right)}{1!}P'\left(x,t\right)+\frac{\left(-\Delta x\right)^2}{2!}P''\left(x,t\right)+\frac{\left(-\Delta x\right)^3}{3!}P'''\left(x,t\right)+.... \quad (۱۷)$$

با جمع کردن این دو عبارت و حل آن برای مشتق مرتبهِ دوم داریم:

$$P''\left(x,t\right)=\frac{P\left(x+\Delta x,t\right)-2P\left(x,t\right)+P\left(x-\Delta x,t\right)}{\left(\Delta x\right)^2}+\frac{\left(\Delta x\right)^2}{12}P''''\left(x,t\right)+.... \quad (۱۸)$$

با استفاده از سیستم اندیس‌گذاری و بالانویسی برای زمان، معادله فوق به صورت زیر تبدیل می شود:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_i^t=\frac{P_{i+1}^t-2P_i^t+P_{i-1}^t}{\left(\Delta x\right)^2}+O\left(\Delta x\right)^2 \quad (۱۹)$$

به این معادله تقریب مرکزی یا میانی (Central) مشتقِ مرتبه دوم گویند. بقیه جمله‌های بسط تیلور در عبارت $O\left(\Delta x^2\right)$ قرار داده شده‌است که نشان می‌دهد متناسب با Δx^2 اند. جمله $O\left(\Delta x^2\right)$ که گاهی اوقات به آن خطای گسسته‌سازی می‌گویند، که در اینجا از مرتبه دوم است، در حل عددی حذف می‌شود.

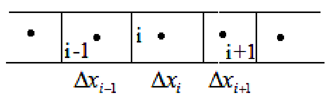
هر چه بلوک‌های ریزتری استفاده شود خطای کمتری با حذف $O\left(\Delta x^2\right)$ وارد جواب می‌شود. هرگامِ زمانی می‌تواند در بسط فوق مورد استفاده قرار گیرد. لذا، برای زمان‌های $t+\Delta t$ و $t+\Delta t/2$ معادله به صورت زیر تبدیل می‌شود (به ترتیب):

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_i^{t+\Delta t} = \frac{P_{i+1}^{t+\Delta t} - 2P_i^{t+\Delta t} + P_{i-1}^{t+\Delta t}}{\left(\Delta x\right)^2} + O\left(\Delta x\right)^2 \quad (۲۰)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_i^{t+\Delta t/2} = \frac{P_{i+1}^{t+\Delta t/2} - 2P_i^{t+\Delta t/2} + P_{i-1}^{t+\Delta t/2}}{\left(\Delta x\right)^2} + O\left(\Delta x\right)^2 \quad (۲۱)$$

گسسته‌سازی مکانی – بلوکهای شبکه با اندازه‌های متغیر

سیستمی به واقعیت نزدیک‌تر است که درآن طول بلوک‌ها متغیر است. اکثر شبیه‌سازی‌ها این‌گونه هستند. چنین شبکه‌ای در تغیرات شدید فشار و اشباع‌شدگی با تعریف بلوک‌های ریزتر در هندسه مخزن، جواب‌هایی دقیق‌تر به دست می‌دهد؛ برای مثال در همسایگی چاه‌های تولید یا تزریق. برای سیستم ساده یک بعدی، یک سیستم بلوکی با طول متغیر به صورت زیر است:



بسط سری تیلور(با نادیده گرفتن اندیس زمان، جهت سهولت و سادگی) به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$P_{i+1} = P_i + \frac{\left(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}\right)/2}{1!} P_i' + \frac{\left[\left(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}\right)/2\right]^2}{2!} P_i'' + \frac{\left[\left(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}\right)/2\right]^3}{3!} P_i''' + ... \quad (۲۲)$$

$$P_{i-1} = P_i + \frac{-\left(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}\right)/2}{1!} P_i' + \frac{\left[-\left(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}\right)/2\right]^2}{2!} P_i'' + \frac{\left[-\left(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}\right)/2\right]^3}{3!} P_i''' + ... \quad (۲۳)$$

که نتیجه می‌دهد:

$$P_i'' = 4\frac{2\left(\dfrac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i-1}}\right) P_{i+1} - 2P_i + 2\left(\dfrac{\Delta x_i + \Delta x_{i-1}}{2\Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \Delta x_{i-1}}\right) P_{i-1}}{\left(\Delta x_i + \Delta x_{i+1}\right)\left(\Delta x_i + \Delta x_{i-1}\right)} + O\left(\Delta x\right) \quad (۲۴)$$

یک تفاوت مهم در این حالت آن است جمله خطا از مرتبه اول شده است. این به خاطر متغیر بودن اندازه بلوک‌ها است.

گسسته‌سازی مکانی – جملات غیرخطی در مشتق دوم

جمله جریان در معادلات شبیه‌سازی به صورت $\frac{\partial}{\partial x}\left(f\left(x\right)\frac{\partial P}{\partial x}\right)$ است که در $f\left(x\right)$ نفوذپذیری، تحرک‌پذیری و مساحت سطح مقطع جریان منظور شده است. اگر عبارت داخل پرانتز را به‌صورت زیر تعریف کنیم،

$$g\left(x\right) \triangleq f\left(x\right)\frac{\partial P}{\partial x} \quad (۲۵)$$

آنگاه تقریب مشتق با استفاده از بسط تیلور سرراست است:

$$g_{i+1} = g_i + \frac{\Delta x_i}{1!} g_i' + \frac{\left[\Delta x_i\right]^2}{2!} g_i'' + \frac{\left[\Delta x_i\right]^3}{3!} g_i''' + ... \quad (۲۶)$$

(۲۷)

$$g_{i-1}=g_i+\frac{-\Delta x_i}{1!}g_i'+\frac{\left[-\Delta x_i\right]^2}{2!}g_i''+\frac{\left[-\Delta x_i\right]^3}{3!}g_i'''+....$$

با ترکیب عبارات بالا می‌توان به هدف تقریب $g'(x)$ رسید:

(۲۸)

$$g'(x)=\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i=\frac{\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_{i+1}-\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_{i-1}}{2\Delta x_i}+O\left(\Delta x^2\right)$$

همانطور که معلومست در طرف راست رابطه فوق با ایندکسهای $i+1$ و $i-1$ برای مشتق روبرو هستیم و با به‌کارگرفتن هر تقریب مشتقی حداقل با جملات $i+2$ و $i-2$ مواجه خواهیم شد و برای حالت کلی یعنی سایز بلوک متغیر با عبارات بسیار پیچیده و غیرمدیریت‌پذیر (به‌ویژه برای شرایط مرزی) روبرو خواهیم شد. لذا، یک چاره کار استفاده از نمایش ایندکسی میانی یعنی $i+1/2$ و $i-1/2$ می‌باشد. دقت شود که این استفاده (نمایش ایندکس میانی) ابزاریست و با بهره‌گیری از تمهیدات ریاضی دیگر این مشکل (ایندکسِ عدد صحیح ولی کسری!) را در پیاده‌سازی کامپیوتری نخواهیم داشت. بنابراین یک تقریب مرکزی برای مشتق مرتبه اول در نظر گرفته و دو بار برای جمله جریان به‌کار می‌بریم:

(۲۹)

$$\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_{i+1/2}=\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i+\frac{\Delta x_i/2}{1!}\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i+\frac{\left(\Delta x_i/2\right)^2}{1!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i+....$$

(۳۰)

$$\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_{i-1/2}=\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i+\frac{-\Delta x_i/2}{1!}\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i+\frac{\left(-\Delta x_i/2\right)^2}{1!}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i+....$$

که نتیجه می‌دهد:

(۳۱)

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i=\frac{\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_{i+1/2}-\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_{i-1/2}}{\Delta x_i}+O\left(\Delta x^2\right)$$

به طور مشابه، عبارات زیر را می‌توانیم به دست آوریم:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_{i+1/2}=\frac{P_{i+1}-P_i}{\left(\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)/2}+O\left(\Delta x\right)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_{i-1/2}=\frac{P_i-P_{i-1}}{\left(\Delta x_i+\Delta x_{i-1}\right)/2}+O\left(\Delta x\right)$$

همان‌طور که دیده می‌شود، به خاطر تفاوت در ابعاد بلوک، جمله خطا از مرتبه اول است. با واردکردن عبارات به دست‌آمده در معادله قبلی، تقریب زیر برای جمله جریان به دست می‌آید:

(۳۲)

$$\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\frac{\partial P}{\partial x}\right]_i=\frac{2f(x)_{i+1/2}\frac{\left(P_{i+1}-P_i\right)}{\left(\Delta x_i+\Delta x_{i+1}\right)}-2f(x)_{i-1/2}\frac{\left(P_i-P_{i-1}\right)}{\left(\Delta x_i+\Delta x_{i-1}\right)}}{\Delta x_i}+O\left(\Delta x\right)$$

بدین‌ترتیب کمّیات مجهول دستگاه نهایی (کمّیت فشار) دارای ایندکس عدد صحیح بوده و برای عبارات دارای ایندکس کسری باید به‌نحوی متوسط‌گیری کنیم.

تقریب مشتق زمان:

در هر مکان ثابت، تابع فشار را نسبت به زمان در جهت پیشرو می‌توان بسط داد:

$$P\left(x,t+\Delta t\right)=P\left(x,t\right)+\frac{\Delta t}{1!}\dot{P}\left(x,t\right)+\frac{\left(\Delta t\right)^2}{2!}\ddot{P}\left(x,t\right)+\frac{\left(\Delta t\right)^3}{3!}\dddot{P}\left(x,t\right)+.... \quad (۳۳)$$

که با حل آن برای مشتق مرتبه اول، عبارت زیر به دست می‌آید:

$$\dot{P}\left(x,t\right)=\frac{P\left(x,t+\Delta t\right)-P\left(x,t\right)}{\left(\Delta t\right)}+\frac{\left(\Delta t\right)^2}{2}\ddot{P}\left(x,t\right)+.... \quad (۳۴)$$

و با استفاده از سیستم اندیس‌گذاری داریم:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_i^t=\frac{P_i^{t+\Delta t}-P_i^t}{\left(\Delta t\right)}+O\left(\Delta t\right) \quad (۳۵)$$

در اینجا جمله خطا با $O\left(\Delta t\right)$ متناسب است، یعنی از مرتبه اول. در این مورد خطا با سرعت کمتری نسبت به جمله مرتبه دوم به صفر می‌رسد. عبارت بالا را تقریب پیشرو زمان گویند. بسط پسرو در زمان را دو گونه می‌توان نوشت:

$$P\left(x,t\right)=P\left(x,t+\Delta t\right)+\frac{-\Delta t}{1!}\dot{P}\left(x,t+\Delta t\right)+\frac{\left(-\Delta t\right)^2}{2!}\ddot{P}\left(x,t+\Delta t\right)+.... \quad (۳۶)$$

$$P\left(x,t-\Delta t\right)=P\left(x,t\right)+\frac{-\Delta t}{1!}\dot{P}\left(x,t\right)+\frac{\left(-\Delta t\right)^2}{2!}\ddot{P}\left(x,t\right)+\frac{\left(-\Delta t\right)^3}{3!}\dddot{P}\left(x,t\right)+.... \quad (۳۷)$$

معادله زیر از حل آنها برای مشتق مرتبه اول زمان به دست می‌آید (به‌ترتیب):

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_i^{t+\Delta t}=\frac{P_i^{t+\Delta t}-P_i^t}{\left(\Delta t\right)}+O\left(\Delta t\right) \quad (۳۸)$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_i^t=\frac{P_i^t-P_i^{t-\Delta t}}{\left(\Delta t\right)}+O\left(\Delta t\right) \quad (۳۹)$$

دقت شود برای تقریبهای تفاضلی در گسسته‌سازی زمانی به شکل دیگری و متفاوت با تقاریب تفاضلی مکانی عمل می‌کنیم، یعنی برای تقریب پسروی زمانی از رابطه ۳۶ استفاده می‌کنیم و نه رابطه ۳۷. علت اینست که در شکل نهایی دستگاه معادلات جبری بردار مجهولات عبارتند از کمیات دیفرنسیالی مجهول در لحظه بعدی! این کار هم طبیعیست و هم عقلایی، چون از شرایط اولیه (زمان صفر) شروع کرده و به‌طور غیربازگشت‌پذیر در طول زمان به جلو می‌رویم، لذا مناسب اینست که همیشه $t+\Delta t$ ببینیم و نه $t-\Delta t$.

نکته ۸: عبارت بالا (یعنی رابطه ۳۸) شبیه عبارت قبلی (یعنی رابطه ۳۵) است اما در این مورد، تقریب پسرو هست!، نحوه تشخیص در بالانویس عبارت سمت چپ هست، فافهم.

برای تقریب تفاضلی میانی برای گسسته‌سازی زمان به این شکل عمل می‌کنیم: با گام $\Delta t/2$ برای زمان و استفاده از زمان تقریب پسرو و پیشرو عبارت جایگزین دیگری برای مشتق زمان بدست می‌آید:

$$P\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)=P\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)+\frac{\Delta t/2}{1!}\dot{P}\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)+\frac{\left(\Delta t/2\right)^2}{2!}\ddot{P}\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)+.... \quad (۴۰)$$

$$P\left(x,t\right)=P\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)+\frac{-\Delta t/2}{1!}\dot{P}\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)+\frac{\left(-\Delta t/2\right)^{2}}{2!}\ddot{P}\left(x,t+\frac{\Delta t}{2}\right)+.... \qquad (۴۱)$$

با ترکیب این دو عبارت، تقریب مرکزی برای مشتق زمان، با جمله خطای مرتبه دوم بدست می‌آید:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial t}\right)_{i}^{t+\Delta t/2}=\frac{P_{i}^{t+\Delta t}-P_{i}^{t}}{\left(\Delta t\right)}+O\left(\Delta t^{2}\right) \qquad (۴۲)$$

نکته ۹: عبارت بالا (یعنی رابطه ۴۲) شبیه عبارات قبلی (یعنی رابطه ۳۵ و ۳۸) است اما در این مورد، تقریب میانی هست!، بنابر این، مرحله تعیین‌کننده برای گسسته‌سازی کامل (یعنی مکان و زمان) تماما به بخش یا عبارات مشتمل بر مشتقات مکانی برمی‌گردد که آیا در لحظه t مشتق مکانی را تقریب می‌زنیم یا در $t+\Delta t$ یا $t+\Delta t/2$، فافهم.

معادله تفاضل صریح (Explicit)

با در نظر گرفتن زمان t و تقریب‌های تفاضل محدود فوق و جایگزینی آنها در معادله خطی جریان عبارت زیر، معادله تفاضل، به دست می‌آید:

$$\frac{P_{i+1}^{t}-2\mathrm{P}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{t}}+\mathrm{P}_{\mathrm{i}-1}^{\mathrm{t}}}{(\Delta \mathrm{x})^{2}}\approx\left(\frac{\phi\mu c}{\mathrm{k}}\right)\frac{\mathrm{P}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{t}+\Delta \mathrm{t}}-\mathrm{P}_{\mathrm{i}}^{\mathrm{t}}}{(\Delta \mathrm{t})} \quad , \quad i=2,3,\ldots,N-1 \qquad (۴۳)$$

برای راحتی جمله خطا از معادله بالا حذف شده‌است. همچنین رابطه تساوی با رابطه تقریب جایگزین شده‌است. باید توجه داشت که خطای وارد شده در حل عددی معادله جریان متناسب با Δt و Δx^2 است (به ترتیب).

شرایط مرزی (BC's)

نیروی رانش برای جریان از BC's حاصل می‌شود. اساساً دو نوع BC's وجود دارد. شرط فشار (شرط دیریلکه) و شرط دبی جریان (شرط نیومن).

نکته ۱۰: از دیدگاه ریاضی (حل معادلات پاره‌ای) با ۸ نوع ترکیبی شرای مرزی سروکار خواهیم داشت، ولی در اینجا محض سهولت به دو شرط اساسی آن می‌پردازیم.

شرط فشار:

وقتی فشار در مرزها معلوم شده باشد، در معادلات، فشار در دو طرف سیستم مشخص می‌شود. برای سیستم خطی توصیف شده، داریم:

$$P\left(x=0,t>0\right)=P_{L}$$
$$P\left(x=L,t>0\right)=P_{R}$$

و با استفاده از سیستم اندیس گذاری:

$$P_{i=1/2}^{t>0}=P_{L}$$
$$P_{i=N+1/2}^{t>0}=P_{R}$$

علت استفاده از $i=1/2$ و $i=N+1/2$ آن است که BC's به دو طرف انتهایی سیستم اعمال می‌شود. (اولی در طرف چپ بلوک اول $i=1/2$ و دومی در طرف راست بلوک آخر $i=N+1/2$). بنابراین BC's به طور مستقیم نمی‌توانند در معادله تفاضل جایگذاری شوند. البته با استفاده از سری تیلور می‌توان برای بلوک 1 و N معادلات جدیدی به دست آورد:

$$P\left(x_2,t\right)=P\left(x_1,t\right)+\frac{\Delta x}{1!}P'\left(x_1,t\right)+\frac{\left(\Delta x\right)^2}{2!}P''\left(x_1,t\right)+\frac{\left(\Delta x\right)^3}{3!}P'''\left(x_1,t\right)+....$$

$$P\left(x=0,t\right)=P\left(x_1,t\right)+\frac{\left(-\Delta x/2\right)}{1!}P'\left(x_1,t\right)+\frac{\left(-\Delta x/2\right)^2}{2!}P''\left(x_1,t\right)+\frac{\left(-\Delta x/2\right)^3}{3!}P'''\left(x_1,t\right)+....$$

که با ترکیب دو عبارت، تقریب مشتقِ مرتبه دوم در بلوک یک بدست می‌آید:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_1^t=\frac{P_2^t-3P_1^t+2P_L}{\frac{3}{4}\left(\Delta x\right)^2}+O\left(\Delta x\right)$$

یک عیب این روش آن است که جمله خطا برای این نوع فرمولاسیون از مرتبه یک یعنی متناسب با Δx است. با روشی مشابه برای بلوک N داریم:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_N^t=\frac{2P_R-3P_N^t+P_{N-1}^t}{\frac{3}{4}\left(\Delta x\right)^2}+O\left(\Delta x\right)$$

در مورد مخازن واقعی، شرایط مرزی فشار، در مورد فشار ته چاه P_{bh} یا فشار سر چاه P_{wh} برای چاه‌های تولید یا تزریق استفاده می‌شود.

نکته ۱۱: یک آلترناتیو دیگر برای رفع مشکل بالا، استفاده از بیلان جرم یعنی تعبیر فیزیکی می‌باشد. دقت شود این مشکل فقط برای گسسته‌سازی به روش Block-Centered برقرارست.

شرط مرزی دبی جریان:

متقابلاً، دبی جریان به سمت داخل یا خارجِ کناره‌های سیستم، می‌تواند معین شود. برای مثال دبی که از طرف چپ سیستم وارد می‌شود Q_L. با توجه به آنکه دبی می‌تواند با قانون دارسی محاسبه شود، داریم:

$$Q_L=-\frac{kA}{\mu}\left(\frac{\partial P}{\partial x}\right)_{x=0}$$

با استفاده از سری تیلور برای بلوک یک، و بسط مشتقِ فشار به عنوان تابع داریم:

$$P'\left(x_1+\Delta x/2,t\right)=P'\left(x_1,t\right)+\frac{\left(\Delta x/2\right)}{1!}P''\left(x_1,t\right)+\frac{\left(\Delta x/2\right)^2}{2!}P'''\left(x_1,t\right)+....$$

$$P'\left(x=0,t\right)=P'\left(x_1,t\right)+\frac{\left(-\Delta x/2\right)}{1!}P''\left(x_1,t\right)+\frac{\left(-\Delta x/2\right)^2}{2!}P'''\left(x_1,t\right)+....$$

با تفریق عبارت دوم از اول و حل آن برای مشتقِ مرتبه دوم، عبارت زیر برای بلوک ۱ به دست می‌آید:

$$P''(x_1,t)=\frac{P'(x_1+\Delta x/2,t)-P'(x=0,t)}{\Delta x}+O\left(\Delta x^2\right)$$

حال با جایگزینی مشتق در $x=0$ با شرط مرزی داریم:

$$P''(x_1,t)=\frac{P'(x_1+\Delta x/2,t)-Q_L\dfrac{\mu}{kA}}{\Delta x}+O\left(\Delta x^2\right)$$

مشتق دیگر در عبارت فوق را می‌توان با تقریب مرکزی جایگزین کرد:

$$P'(x_1+\Delta x/2,t)=\frac{P(x_2,t)-P(x_1,t)}{\Delta x}+O\left(\Delta x^2\right)$$

بنابراین شکل نهایی مشتقِ مرتبه دوم برای بلوک اول با شرط مرزی فوق به صورت زیر در خواهد آمد:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_1^t=\frac{P_2^t-P_1^t}{\Delta x^2}+Q_L\frac{\mu}{kA\Delta x}+O\left(\Delta x\right)$$

مشابه آن، برای دبی ثابت در طرف راست سیستم، Q_R، داریم:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial x^2}\right)_N^t=\frac{P_N^t-P_{N-1}^t}{\Delta x^2}-Q_R\frac{\mu}{kA\Delta x}+O\left(\Delta x\right)$$

در یک مخزن واقعی، شرط دبی جریان، بیان کننده دبی تولید یا تزریق برای چاه‌ها است. یک مورد ویژه برای مرزهای بدون جریان(No flow boundary) است $(Q=0)$. این شرط در مرزهای با لایه‌های نفوذناپذیر و گسل‌ها، در مخزن می‌تواند دیده شود.

شرط اولیه (IC) :

شرط اولیه (فشار اولیه) برای سیستم افقی در طول سیستم، به صورت زیر معلوم می‌شود:

$$P_i^{t=0}=P_0 \qquad i=1,\dots,N$$

برای سیستم‌های غیرافقی، فشار هیدرواستاتیکی به عنوان فشار اولیه برای هر بلوک با توجه به سطح مبنا و چگالی سیالات محاسبه می‌شود.

حل معادله تفاضل:

با بدست‌آوردن معادله تفاضل و داشتن BC's و IC می‌توانیم آن را برای فشار حل کنیم. البته مطلب مهم زیر باید مورد توجه قرار گیرد. برای بدست آوردن تقریب تفاضل، از زمان t در سری تیلور استفاده شد. بدیهی است می‌توانستیم از زمان $t+\Delta t$ با همان عمومیت معادله، هم استفاده کنیم یا حتی از $t+\Delta t/2$. موارد اشاره شده، بحث خواهند شد. ابتدا از فرمولاسیون صریح استفاده می‌کنیم. برای راحتی جمله‌های خطا را حذف می‌کنیم.

فرمولاسیون صریح (Explicit)

معادله اشاره شده در صفحات قبل به این گونه است. به وسیله تقریبِ همه جملات در زمان t، ما می‌توانیم فشار متوسط هر بلوک را به طور صریح با حل معادلات تفاضل بدست آوریم. (در عبارت زیر شرایط مرزی به صورت فشار ثابت در مرزها در نظر گرفته شده‌اند. اگر شرایط برای دبی ثابت باشد، معادلات باید بر طبق آن اصلاح شوند).

$$P_1^{t+\Delta t} = P_1^t + \frac{4}{3}\left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right)\left(\frac{k}{\phi\mu c}\right)\left(P_2^t - 3P_1^t + 2P_L\right)$$

$$P_i^{t+\Delta t} = P_i^t + \left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right)\left(\frac{k}{\phi\mu c}\right)\left(P_{i+1}^t - 2P_i^t + P_{i-1}\right) \qquad i = 2,\dots,N-1$$

$$P_N^{t+\Delta t} = P_N^t + \frac{4}{3}\left(\frac{\Delta t}{\Delta x^2}\right)\left(\frac{k}{\phi\mu c}\right)\left(2P_R^t - 3P_N^t + P_{N-1}\right)$$

فرمولاسیون ضمنی:

در این روش همه جملات در زمان $t+\Delta t$ تقریب زده می‌شوند به غیر از مشتق زمان که باید بر حسب تفاضل پسرو تقریب زده شود:

$$\frac{P_2^{t+\Delta t} - 3P_1^{t+\Delta t} + 2P_L}{\frac{3}{4}\Delta x^2} = \left(\frac{\phi\mu c}{k}\right)\frac{P_i^{t+\Delta t} - P_i^t}{\Delta t} \qquad (i=1)$$

$$\frac{P_{i+1}^{t+\Delta t} - 2P_i^{t+\Delta t} + P_{i-1}^{t+\Delta t}}{\Delta x^2} = \left(\frac{\phi\mu c}{k}\right)\frac{P_i^{t+\Delta t} - P_i^t}{\Delta t} \qquad (i = 2,\dots..N-1)$$

$$\frac{2P_R^{t+\Delta t} - 3P_N^{t+\Delta t} + P_{N-1}^{t+\Delta t}}{\frac{3}{4}\Delta x^2} = \left(\frac{\phi\mu c}{k}\right)\frac{P_i^{t+\Delta t} - P_i^t}{\Delta t} \qquad (i=N)$$

در این مورد، ما N معادله با N مجهول (N تعداد بلوک‌ها است) داریم که باید همزمان حل شوند. به منظور سادگی معادلات به شکل زیر نوشته می‌شوند:

$$a_i P_{i-1}^{t+\Delta t} + b_i P_i^{t+\Delta t} + c_i P_{i+1}^{t+\Delta t} = d_i\,, \quad i = 1,....,N$$

$$\alpha = \left(\frac{\phi \mu c}{k}\right)\left(\frac{\Delta x^2}{\Delta t}\right)$$

$$a_1 = 0$$

$$a_i = 1, \quad i = 2,....,N$$

$$b_1 = b_N = -3 - \frac{3}{4}\alpha$$

$$b_i = -2 - \alpha, \quad i = 2,....,N-1$$

$$c_N = 0$$

$$c_i = 1, \quad i = 1,....,N-1$$

$$d_1 = -\frac{3}{4}\alpha P_1^t - 2P_L$$

$$d_i = -\frac{3}{4}\alpha P_i^t\,, \quad i = 2,....,N-1$$

$$d_N = -\frac{3}{4}\alpha P_N^t - 2P_R$$

دستگاه معادله خطی فوق را می‌توان برای فشار متوسط هر بلوک با روش حذفی گوس حل کرد.

فرمولاسیون Crank-Nicholson

همانطور که بیان شد، امکان نوشتن معادلات برای زمانی بین t و Δt وجود دارد. برای $t+\Delta t/2$ معادله تفاضل برای بلوک i به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{P_{i+1}^{t+\frac{\Delta t}{2}} - 2P_i^{t+\frac{\Delta t}{2}} + P_{i-1}^{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta x^2} = \left(\frac{\phi \mu c}{k}\right)\frac{P_i^{t+\frac{\Delta t}{2}} - P_i^t}{\Delta t}$$

با توجه به اینکه فشارها در t و Δt تعریف شده‌اند، معادله بالا را نمی‌توانیم در شکلی که هست حل کنیم. لذا طرف چپ را به طور متوسط روش صریح و ضمنی در نظر می‌گیریم:

$$\frac{1}{2}\left[\frac{P_{i+1}^t - 2P_i^t + P_{i-1}^t}{\Delta x^2} + \frac{P_{i+1}^{t+\Delta t} - 2P_i^{t+\Delta t} + P_{i-1}^{t+\Delta t}}{\Delta x^2}\right] = \left(\frac{\phi \mu c}{k}\right)\frac{P_i^{t+\Delta t} - P_i^t}{\Delta t}$$

دستگاه معادله خطی حاصله به طور همزمان مانند روش ضمنی حل می‌شود.

بحث در روش‌های فرمولاسیون

به طور بدیهی استفاده از روش صریح ساده‌تر از روش ضمنی است. چه آنکه عبارت صریحی برای بدست آوردن مستقیم فشار بدست می‌آید. مرتبه خطای گسسته‌سازی برای هر دو روش یکی است. حال آنکه مقدار عملیات ریاضی مورد نظر برای روش صریح کمتر است. اگر چه برای حالت یک بعدی این مطلب ممکن است چندان مهم نباشد، اما برای

موردهای 2D و 3D با افزایش تعداد بلوک‌ها، زمان محاسباتی برای هر گام زمانی برای دو روش بسیار متفاوت است. در هر صورت روش صریح به ندرت استفاده می‌شود. این روش برای گام‌های زمانی بزرگ ناپایدار است.

با استفاده از روش آنالیز پایداری von Neumann نشان داده می‌شود که روش صریح برای پایداری نیاز به شرط زیر دارد:

$$\Delta t \le \frac{1}{2}\left(\frac{\phi\mu c}{k}\right)\Delta x^2$$

این شرط نشان می‌دهد که گام زمانی Δt بوسیله خواص سیال - سنگ و اندازه بلوکِ شبکه محدود می‌شود. این محدودیت با کوچکترین مقدار Δt برای یک بلوک خاص شدیدتر می‌شود.(یعنی آنکه Δt برای هر بلوک با توجه به رابطه فوق مقدار خاصی است و در این میان برای پایداری حل، Δt باید برابر با کوچکترین مقدار انتخاب شود.)

کاربرد روش آنالیز پایداری von Neumann نشان می‌دهد که روش ضمنی برای همه گام‌های زمانی بدون شرط پایدار است. در روش ضمنی، عملیات محاسباتی بیشتر برای هر گام زمانی مورد نیاز است که به طور معمول با افزایش Δt این مسئله را می‌توان تا حدی جبران کرد. البته Δt بزرگتر، منجر به خطای محاسباتی بیشتر هم می‌شود. بنابراین در هر حل عددی، باید بررسی شود که میزان خطای محاسباتی در حد قابل قبولی باشد.

آنالیز پایداری

آنالیز پایداری برای روش صریح

معادله تفاضل صریح به صورت زیر هم نوشته می‌شود:

$$\frac{P(x+\Delta x,t)-2P(x,t)+P(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}=\alpha\frac{P(x,t+\Delta t)-P(x,t)}{\Delta t}$$

که

$$\alpha=\frac{\phi\mu c}{k}$$

در روش آنالیز پایداری von Neumann، فرض می‌شود که اگر $P(x,t)$ جوابی از معادله فوق باشد آنگاه $P(x,t)+\varepsilon(x,t)$، به عنوان اغتشاش در تابع فشار، نیز جوابی از معادله است. بنابراین، رابطه فوق به صورت زیر تبدیل می‌شود:

$$\frac{\varepsilon(x+\Delta x,t)-2\varepsilon(x,t)+\varepsilon(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}=\alpha\frac{\varepsilon(x,t+\Delta t)-\varepsilon(x,t)}{\Delta t}$$

فرض می‌شود که این تابع خطا به صورت $\varepsilon(x,t)=\psi(x,t)e^{i\beta x}$ باشد که در آن $i=\sqrt{-1}$.

بنابراین:

$$\varepsilon(x+\Delta x,t)=\psi(t)e^{i\beta(x+\Delta x)}$$
$$\varepsilon(x-\Delta x,t)=\psi(t)e^{i\beta(x-\Delta x)}$$
$$\varepsilon(x,t+\Delta t)=\psi(t+\Delta t)e^{i\beta x}$$

با جاگذاری و ساده‌سازی و استفاده از تساوی زیر

$$e^{i\beta\Delta x}+e^{-i\beta\Delta x}-2=-4\sin\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)$$

عبارت زیر به دست می‌آید:

$$\frac{\psi(t+\Delta t)}{\psi(t)}=\left[1-\frac{4\Delta t}{\alpha\Delta x^2}\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)\right]$$

می‌توان نسبت $\psi(t+\Delta t)/\psi(t)$ را به عنوان نسبت افزایش خطا در افزایش زمان به اندازه Δt، تفسیر کرد. آشکارا، اگر این نسبت از یک بزرگتر باشد حل ناپایدار است. پس، عبارت زیر به عنوان معیار پایداری در نظرگرفته می‌شود:

$$\left|\frac{\psi(t+\Delta t)}{\psi(t)}\right|\le 1$$

یا

$$\left|1-\frac{4\Delta t}{\alpha\Delta x^2}\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)\right|\le 1$$

به دلیل آنکه

$$1\ge\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)\ge 0$$

شرط پایداری به قرار زیر می‌شود:

$$\frac{4\Delta t}{\alpha\Delta x^2}-1\le 1$$

یا

$$\Delta t\le\frac{1}{2}\left(\frac{\varphi\mu c}{k}\right)\Delta x^2$$

آنالیز پایداری برای روش ضمنی

شکل ضمنی معادله تفاصل به گونه زیر است:

$$\frac{P(x+\Delta x,t)-2P(x,t)+P(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}=\alpha\frac{P(x,t+\Delta t)-P(x,t)}{\Delta t}$$

به مثابه روش فوق، معادله زیر برای جمله خطا به دست می‌آید:

$$\frac{\varepsilon(x+\Delta x,t)-2\varepsilon(x,t)+\varepsilon(x-\Delta x,t)}{(\Delta x)^2}=\alpha\frac{\varepsilon(x,t+\Delta t)-\varepsilon(x,t)}{\Delta t}$$

بار دیگر با فرض $\varepsilon(x,t)=\psi(x,t)e^{i\beta x}$، عبارت زیر برای نسبت خطا به دست می‌آید:

$$\frac{\psi(t+\Delta t)}{\psi(t)}=\frac{1}{1+\frac{4\Delta t}{\alpha\Delta x^2}\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)}$$

با توجه به معیار پایداری، شرط پایداری به شکل زیر تبدیل می‌شود:

$$1+\frac{4\Delta t}{\alpha\Delta x^2}\sin^2\left(\frac{\beta\Delta x}{2}\right)\geq 1$$

که همیشه درست است. در نهایت، شرط پایداری به شکل زیر ساده می‌شود:

$$\Delta t\leq\infty$$

آنالیز پایداری برای روش Crank – Nicholson

کاربرد روش آنالیز پایداری von Neumann نشان می‌دهد که روش Crank-Nicholson برای همه گام‌های زمانی، مانند روش ضمنی بدون شرط پایدار است.