

國立交通大學

土木工程學系

博士論文

智慧型可適性計算平台之發展及其於地下水
水流、熱流與污染傳輸耦合模擬之應用

**Development of Intelligent and Adaptive
Computation Framework and its
Application on the Simulation of
Groundwater Flow Coupled with Heat and
Pollutant Transport**

研究生：蔡瑞彬

指導教授：張良正 博士

中華民國九十九年十月

智慧型可適性計算平台之發展及其於地下水流、熱流與污染
傳輸耦合模擬之應用

Development of Intelligent and Adaptive Computation Framework and its
Application on the Simulation of Groundwater Flow Coupled with Heat
and Pollutant Transport

研究生：蔡瑞彬
指導教授：張良正

Student : Jui-Pin Tsai
Advisor : Liang-Cheng Chang

國立交通大學
土木工程學系
博士論文

A Thesis
Submitted to Department of Civil Engineering
College of Engineering
National Chiao Tung University
in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of
PhD
in

Civil Engineering

October 2010

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十九年十月

智慧型可適性計算平台之發展及其於地下水流、熱流與污染 傳輸耦合模擬之應用

研究生：蔡瑞彬

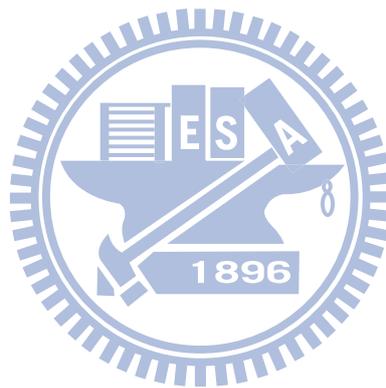
指導教授：張良正 教授

摘要

為了解決傳統數值模式不易擴充及人工智慧方法難與數值模式深入整合等兩大問題，本研究提出一新的計算架構，智慧型可適性計算平台，突破傳統數值模式之開發方法，建立一系統化、自動化之數值建模平台，應用此系統所開發之模式，可隨著需求逐步增加模式模擬能力，並整合人工智慧方法於模擬模式核心，而使模式具有類「人工智慧」能力，如可以因應環境變化調整自身模擬範疇等。模式開發上分為兩階段進行，第一階段為開發一具可擴充性之建模系統，稱為可適性計算平台(ACF)，以 ACF 所開發之模式可容易的新增或修改模式所計算之方程式，第二階段再將 ACF 與人工智慧進行整合，而成為智慧型可適性計算平台(IACF)，其中在人工智慧的部分本研究整合了專家系統(expert system)及類神經網路(ANN)。

本研究將發展完成之計算平台應用於發展地下水流、熱流及污染物傳輸耦合模擬模式，為檢驗模式之正確性與適用性，本研究設計數個簡例，再應用 IACF 所發展模式與 Tough2 及 HST3D 兩模式進行模擬驗證。其中 Tough2 與 HST3D 以不同之方程式描述地下水流、熱流及污染傳輸問題之運動機制，由於 IACF 平台之擴充彈性，本研究可在短時間內完成與此兩模式之比較驗證。驗證結果顯示，IACF 所發展模式與前述既有模式之模擬結果，具有高度一致性，此亦可證明了應用 IACF 建模相較於傳統建模方式更有效率。本研究亦將專家

系統與 ANN 整合入以 IACF 所發展之模式中，由模擬結果顯示，考量專家系統之判斷規則，可因應環境變化而自動調整計算模擬，有效提高模擬效率。系統並成功的將類神經網路實作於地下水流模組中，證明了 IACF 具有與不同人工智慧方法整合之彈性。前述模擬驗證結果顯示了以 IACF 發展模式，可容易的修改模式所計算之方程式或新增原模式未考量之方程式，因此可提升模式之開發效率，協助研究者致力於問題本身機制之探討，減少程式開發或修改所費之時間與精力。



Development of Intelligent and Adaptive Computation Framework and its Application to the Simulation of Groundwater Flow Coupled with Heat and Pollutant Transport

Student : Jui-Pin Tsai

Advisor : Dr. Liang-Cheng Chang

Department of Civil Engineering
National Chiao Tung University

Abstract

Difficult to modify or extend the computational functions of a numerical model and incapable of integrating artificial intelligent methods into the computation kernel are two important issues in the conventional numerical model development and maintenance. Therefore, this study proposed a novel numerical model framework to improve the numerical model developing efficiency. One can easily modify or increase the computational functions of a numerical model developed by the proposed framework. Furthermore, the model can integrate artificial intelligent methods into the computational kernel. The whole framework is denominated as intelligent adaptive computation framework (IACF) and its development was divided into two steps. The first step was to develop an adaptive computation framework (ACF). The ACF can facilitate the development of a model with the flexibility of adding new functions to simulate new modeling mechanisms easily. The second step is to integrate artificial intelligent methods, expert system and artificial neural network, into ACF and completed the IACF.

After developing the IACF, this study applied the IACF to develop a simulation model for solving groundwater flow coupled with heat and pollutant transport problem. To examine the accuracy of the simulation model, the model simulation results of several hypothesis cases were compared with those of Tough2 and HST3D. The Tough2 and HST3D

have applied different equations to describe the flow, heat and pollutant transport problem. The IACF made the model comparison became possible within a limited time. The simulation results showed good consistence among the three models. The situation not only verified the model accuracy but also, on the other hand, demonstrated the capability of IACF to improve model development efficiency. A rule based expert system and ANN model were integrated into the simulation model. Simulation results show that the model can adjust the computations according to the system states and effectively improve the computation efficiency by activating the expert system. The embedding of ANN model was also successfully verified and that demonstrate the flexibility of IACF to integrate various artificial intelligent methods. The flexibility of modifying an existed function or adding a new function in a developed model by using IACF can increase the model development efficiency and facilitate researchers focus more on the problem mechanism instead of program coding and modification.



謝 誌

感謝吾師張良正教授對於本論文的細心指導及求學階段中對學生待人接物與學問研究的啟發，使得學生在各方面皆能有所成長。承蒙口試委員海洋大學李光敦教授、台灣大學李天浩教授、中央大學蔡武廷教授、交通大學單信瑜教授、洪士林教授及吳宗信教授、中州技術學院蕭金財教授、成功大學詹錢登教授細心認真指正拙文，並於口試期間提出相當寶貴的意見，使本文更加完備，在此謹致衷心謝意。

在研究室方面，由衷的感謝陳宇文學長在論文及程式上的協助與指導，讓我在博士班就學期間獲益良多，葉明生學長值得效法的實事求是態度，何智超學長帶有顏色的幽默、陳鴻輝學長圓融的處世態度以及 NAPL 小組的革命情感，接著感謝弼舜在我最緊急的時候伸出援手，讓我論文得以及時完成，還有各位可愛的學、弟妹：浚瑋、昀柏、婉茹、怡釗、柏成、昱維、偽善、阿牛、瀚聖、佑誠、阿海、韋圻、雲直、阜峻、冠宇、小瑜、阿布、深惠等，有你們的陪伴，讓我增添許多研究室的美好回憶。

最後非常感謝我的家人對我的全力支持，在這漫長的六年時光內，替我加油打氣，以及感謝我的女友賢柔對我始終如一，一路與我患難與共。僅將此研究獻給我最愛的家人及週遭支持、關心我的人。

目錄

摘要.....	I
Abstract.....	III
謝 誌.....	V
表目錄.....	IX
圖目錄.....	XII
符號使用對照清單	XVI
第一章 前言.....	1
1.1 研究動機.....	1
1.2 研究目的.....	3
1.3 文獻回顧.....	4
第二章 系統架構與研究流程.....	12
2.1 傳統建模流程與可適性計算架構建模流程說明.....	12
2.2 系統概念架構.....	18
2.3 研究流程.....	20
第三章 可適性計算平台建置.....	22
3.1 可適性計算平台程式架構.....	22



3.2 可適性計算平台之基本求解原理說明	25
3.3 主控協調層建置	27
3.4 計算核心子系統建置	33
3.5 方程式集合分析模組建置	47
3.6 應用模組儲存容器	62
3.7 變數與參數資料結構	63
第四章 地下水流、熱流及污染物傳輸模式建置	74
4.1 數學模式說明	75
4.2 數值離散說明	113
第五章 可適性計算平台模式驗證	122
5.1 暫態垂向二維地下水流、熱流及污染傳輸耦合模擬驗證(一)	123
5.2 暫態垂向二維地下水流、熱流及污染傳輸耦合模擬驗證(二)	132
第六章 智慧型可適性計算平台建置	149
6.1 智慧型可適性計算說明	151
6.2 智慧型可適性計算簡例	152
6.3 智慧型可適性計算平台系統架構及開發流程說明	154



6.4 智慧型可適性計算成果說明及驗證	171
第七章 結論與建議	185
7.1 結論	185
7.2 建議	186
參考文獻.....	188
附錄 A Voronoi Diagram 與 CGAL 函式庫	
附錄 B 總水頭計算公式推導	
附錄 C 土壤壓密係數與傳統儲水係數之相關推導	
附錄 D 細胞自動機	
附錄 E Voronoi Diagram 與可適性計算應用於熱流及污染傳輸 之擴散計算	
附錄 F 水之熱動力性質公式說明	

表目錄

表 3.1 圖 3.7(B)之節點、相鄰節點、相鄰連結與相鄰邊界虛擬點對應表.....	44
表 3.2 簡例之變數方程式關係矩陣.....	51
表 3.3 節點與局部參數隸屬關係對應表.....	71
表 4-1A 地下水流變數與方程式關係矩陣.....	88
表 4-2 地下水流變數列表及自變數與應變數統計表.....	89
表 4-3 地下水流函式求解順序表.....	90
表 4-4A 參考 TOUGH2 所建模式熱流傳輸變數與方程式關係矩陣.....	99
表 4-4B 參考 HST3D 所建模式之熱流傳輸變數與方程式關係矩陣.....	100
表 4-5A 參考 TOUGH2 之熱流傳輸變數列表及自變數與應變數統計表.....	101
表 4-5B 參考 HST3D 之熱流傳輸變數列表及自變數與應變數統計表.....	102
表 4-6 熱流傳輸函式求解順序表.....	103
表 4-7A 參考 TOUGH2 所建模式之溶質傳輸變數與方程式關係矩陣.....	109
表 4-7B 參考 HST3D 所建模式之溶質傳輸變數與方程式關係矩陣.....	110
表 4-8A 參考 TOUGH2 所建模式之溶質傳輸變數列表及自變數與應變	

數統計表	111
表 4-8B 參考 HST3D 所建模式之溶質傳輸變數列表及自變數與應變	
數統計表	112
表 4-6 溶質傳輸函式求解順序表	113
表 5.2 地下水流模擬局部參數設定表	125
表 5.3 地下水流模擬全域參數設定表	125
表 5.4 熱流模擬局部參數設定表	127
表 5.5 污染傳輸模擬局部參數設定表	128
表 5.6 案例一模擬初期及模擬結束時，ACF 與 TOUGH2 之最大相對誤	
差百分比整理表	132
表 5.7 地下水流模擬局部參數設定表	134
表 5.8 熱流模擬局部參數設定表	135
表 5.9 污染傳輸模擬局部參數設定表	135
表 5.20 案例二模擬初期及模擬結束時，ACF 與 HST3D 之最大相對誤	
差百分比整理表	140
表 5.21 案例三模擬初期及模擬結束時，ACF 與 HST3D 之最大相對誤	
差百分比整理表	144
表 5.22 案例二與案例三之 PECLLET NUMBER 計算結果.....	146
表 6.1 智慧型可適性計算與可適性計算之模擬結果分析表	174

表 6.2 ANN 訓練及驗證資料之範圍說明表.....	182
表 6.3 ANN 訓練過程表.....	182
表 6.4 模擬結果最大誤差百分比整理表.....	183



圖目錄

圖 1 「傳統數值模擬方法」開發流程圖	3
圖 2.1 「可適性計算架構建模流程」與傳統建模流程之比較圖	17
圖 2.2 可適性計算架構建模流程圖	18
圖 2.3 智慧型可適性計算概念架構圖	20
圖 2.4 研究流程圖	21
圖 3.1 可適性計算平台之系統示意圖	24
圖 3.3 可適性計算平台擴散與傳流迭代流程圖	30
圖 3.4 可適性計算架構擴散項外迭代模組流程圖	33
圖 3.5 可適性計算架構擴散項內迭代流程圖	36
圖 3.6 可適性計算架構資訊同步示意圖	38
圖 3.7(a)凡諾依圖與 Delaunay Triangle 示意圖	43
圖 3.7(b)凡諾依圖之網格架構圖	43
圖 3.8 材質與網格分布示意圖	45
圖 3.9 材質與網格分布示意圖	46
圖 3.10 源匯點與網格配置示意圖	47
圖 3.11 方程式相依關係圖	49
圖 3.12 應用樹狀搜尋法於方程式解路徑分析示意圖	54

圖 3.13 樹狀搜尋法分析邏輯流程圖	59
圖 3.14 方程式樹示意圖	60
圖 3.15 多應用模組方程式集合分析流程圖	62
圖 3.16 資料儲存結構示意圖	64
圖 3.17 節點變數資料結構與函數運作關係圖	65
圖 3.18 連結變數資料結構與函數運作關係圖	66
圖 3.19 邊界穿越點變數資料結構圖	67
圖 3.20 空間變數或參數示意圖	71
圖 3.21 局部參數與隸屬節點關係示意圖	72
圖 3.22 插入式 (Plug In) 數值模式建構系統	73
圖 5.1 案例一之模擬區域及空間切割示意圖	126
圖 5.3 熱流傳輸模擬驗證—溫度場分布	130
圖 5.5 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布	131
圖 5.7 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布	132
圖 5.9 熱流模擬驗證—溫度場分布	137
圖 5.10 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布	138
圖 5.11 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布	138
圖 5.13 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布	139
圖 5.14 壓力水頭模擬驗證—壓力水頭分布	141

圖 5.16 污染物傳輸模擬驗證－濃度場分布	142
圖 5.18 熱流模擬驗證－溫度場分布	143
圖 5.20 案例二有無考量延散機制之污染傳輸模擬結果比較	147
圖 5.22 案例三有無考量延散機制之污染傳輸模擬結果比較	148
圖 6.1a 初始時刻污染物與熱流分佈圖	153
圖 6.1b 第二個時刻初之污染物與熱流分佈圖	153
圖 6.2 智慧型可適性計算架構圖	155
圖 6.3 專家系統與計算元溝通示意圖	160
圖 6.4 倒傳遞類神經網路架構	163
圖 6.5 以神經網路建置方程式示意圖	165
圖 6.6(a) 計算元推論法則示意圖	169
圖 6.6(b) 計算元狀態分析推論鏈	170
圖 6.7 IACF 於時刻 9000 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖	173
圖 6.8 IACF 於時刻 2700 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖	176
圖 6.9 IACF 於時刻 27900 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖	177
圖 6.10 IACF 於時刻 31500 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖	177
圖 6.11 計算元狀態分析模組推論過程示意圖	178

圖 6.12 ANN 與方程式(4-3A)之計算密度比較圖183

圖 6.13 地下水流模擬驗證－壓力場分布184

圖 6.14 熱流傳輸模擬驗證－溫度場分布184



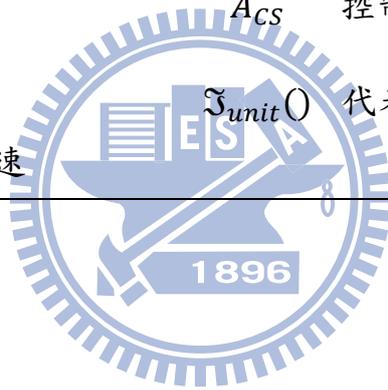
符號使用對照清單

符號使用對照表

符號	對照含意	符號	對照含意
α'	土壤壓密係數	α_L	縱向延散性
α_T	橫向延散性	α_{SE}	溶質膨脹係數
α_{van}	Van Genuchten 公式參數	β_{van}	Van Genuchten 公式參數
μ_{pw}	純水黏滯係數	μ_{wl}	溶液黏滯係數
ϕ_l	水流之單位質量熱容量	ϕ_s	土體之單位質量熱容量
ρ_{wl}	溶液密度	ρ_{pw}	純水密度
ρ_{pw^0}	常溫常壓下之純水密度	ρ_s	土體密度
ρ_b	鹽水濃度	ρ_{b^0}	參考鹽水濃度
θ_r	殘餘含水量	θ_s	飽和含水量
θ_e	有效含水量		
C_l	溶液中之溶質濃度(重量百分濃度)	C_{lmax}	濃度最大值
C_{lmin}	濃度最小值		機械延散係數張量
D^H	熱延散張量	D^*	水動力延散係數張量
g	重力加速度	ζ	位置水頭
h	總水頭	z	位置高程
\dot{H}	熱穿越量	\dot{h}_{dif}	單位面積擴散項熱穿越量
\dot{h}_{adv}	單位面積對流項熱穿越量	$K_{H,eq}$	等效熱傳導係數
$K_{H,l}$	水流熱傳導係數	$K_{H,s}$	土體熱傳導係數
K_{wl}	溶液之實際水力傳導係數	K_{wr}	相對水力傳導係數
K_{ws}	土壤之飽和水力傳導係數		
\dot{M}_{cl}	溶質穿越流率	\dot{M}_{wl}	水流質量流率
$\dot{m}_{cl,dif}$	單位面積擴散項溶質穿越流率	$\dot{m}_{cl,adv}$	單位面積對流項溶質穿越流率
\dot{m}_{wl}	單位面積水流質量流率	n	土壤孔隙率

接下頁

符號	對照含意	符號	對照含意
\hat{n}	流線之正交方向	n^o	常壓下之土壤孔隙率
P	壓力	P_{bar}	以 bar 為單位之壓力數值
p	壓力水頭	p_{cm}	以 cm 為單位之壓力水頭數值
p^o	常壓之壓力水頭數值	P_{bar}^{sat}	飽和蒸汽壓力
q_{cl}	抽注溶質質量	q_H	抽注熱容量
q_{wl}	抽注水質量	\hat{s}	流線方向
S_d	飽和度	$S_{H,l}$	溶液比熱
$S_{H,s}$	土體比熱	T_c	攝氏溫度
T_k	絕對溫度	T_f	華氏溫度
V_n	達西流速在 \hat{n} 方向之分量	V_s	達西流速在 \hat{s} 方向之分量
\vec{V}_{darcy}	達西流速	A_{CS}	控制表面
V_{CV}	控制體積	$\mathfrak{S}_{unit}()$	代表單位轉換運算子
V_{cell}	網格內平均流速		



第一章 緒論

1.1 研究動機

隨著電腦科技的長足進步，電腦數值模式之計算能力亦愈趨強大，並已成為科學與工程領域不可或缺的研究與設計工具。數值模式最大的好處之一為其可重複利用及可操作性，因此可節省大量人力與物力，加速研究分析的進行。惟隨著數值模式的日趨複雜，其開發與維護的複雜度亦快數增加，而需大量的資源投入。造成此種現象的原因，除了問題本身難度增加外，傳統上數值模式開發的缺乏彈性亦為其主要因素之一。

傳統上數值模式之開發流程如圖 1 所示，一般而言可分為 4 個階段：

1. 概念模式階段(Conceptual model)：對所探討的問題，定義其涵蓋範圍，進行必要的簡化與假設並對其基本現象進行描述。
2. 數學定義階段(Mathematical formulation)：基於前述之概念模式，進一步以量化的數學式定義問題，通常包含兩個步驟：
 - a. 對於問題中之各種基本現象或行為以一個或多個數學式（包括變數及方程式）描述之。
 - b. 將前述多個變數及方程式以人為方式推導整合為數目較少之變數及控制方程式，較普遍的為偏微分方程式(PDE)。

3. 數值離散階段(Numerical discretization)：定義空間格點，將原時空上連續之解函數以時空上不連續之離散型變數近似，再選用適當的數值方法，如有限差分法 (FDM)，有限元素法 (FEM)，有限體積法 (FVM)，邊界元素法(BEM)及有限解析法 (FAM) 等，將前述之控制方程式(組)，進行空間及時間上之數值積分推導，而將原來之控制方程式(組)表達成空間格點上之離散型代數方程式。
4. 程式開發階段(Program development)：前述離散型代數方程式各變數之數值，目前常以計算機(電腦)計算，因此需進行相關程式的開發，主要有兩大部份；先將所有空間格點上之離散型代數方程式，組合成矩陣方程式，此矩陣方程式描述了所有空間格點上離散變數彼此間之時空關係。前述之矩陣方程式，仍需再以適當之矩陣解法求解各變數之數值。

基於上述建構流程所開發之數值模式本研究在後續文章中稱之為「傳統數值模式」。由前述開發流程可知，傳統數值模式之開發乃環環相扣，若欲加入一原模式未考量之變量或現象，則須加入描述此行為之規則（方程式），如此則須重新推導並修正原問題之控制方程式、數值解及矩陣方程式，相關電腦程式亦需要重新修改，修改工作往往相當繁複，亦即前述開發流程雖然定義清楚問題明確，然而卻難以修改，因此限制了原模式擴充或修正的彈性。因此，傳統數值模式，只能模擬其原先控制方程式所描述之現象，而無法擴充本身之模擬功能，且由於缺乏擴充或修正之彈性，而不易與人工智慧方法結合。

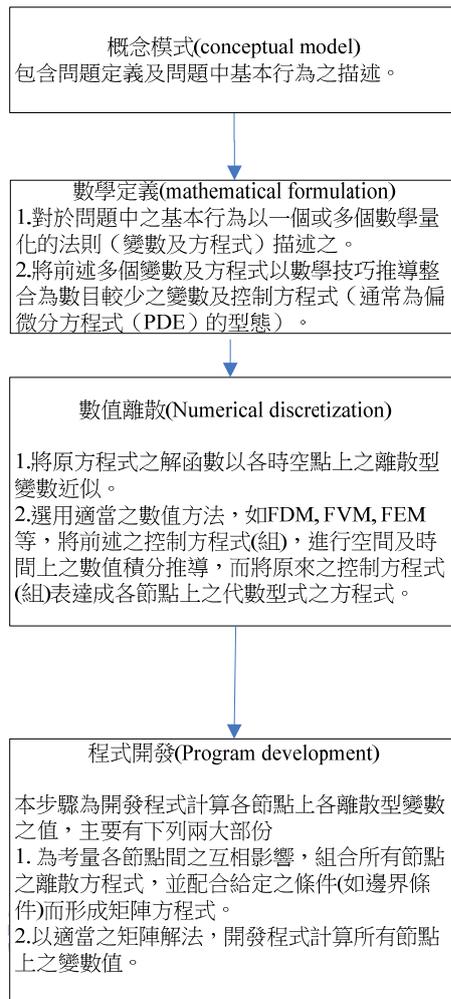


圖 1 「傳統數值模擬方法」開發流程圖

1.2 研究目的

本研究旨在提出一個新的數值建模方法與實作架構，以解決傳統數值建模費時費力與所開發之計算模擬軟體，難以更新、擴充及累積計算功能的問題，並將數值模式進一步結合人工智慧，使其成為具有調適能力之智慧型計算模擬系統。

1.3 文獻回顧

由前述研究目的可看出本研究包含數值建模方式的突破及人工智慧方法在數值模擬上的應用等兩大層面的議題，以下將分別就此兩層面進行相關研究的探討。

1.3.1 數值建模方式的改進

在各種建立模式的方法中，以微分方程式建模的方式歷史最為悠久，已有三百多年的歷史，使用微分方程式建模的好處是在推導微分方程式的相關技巧已發展成熟，然而在求解解析解的過程皆需靠人力來進行所有的計算且只有少數的微分方程式有Closed-form solution，其求解相當不易。近幾十年來數值計算蓬勃發展，研究學者紛紛利用數值方法求解微分方程式，尤其在偏微分方程式(PDE)之求解方面，成效卓著，因此數值方法已被認定是數學不可或缺的一部份，但若使用數值計算求解一個問題，則至少必須經過三個步驟：(1)將物理行為轉化為微分方程式(2)使用適當的數值離散方式將這些微分方程式進行時間與空間的離散，如有限差分法(3)撰寫數值程式

Toffoli(1984)[1]。 Toffoli(1984)[1]認為以上述三個步驟建立數值模式是一個迂迴而不直接的方法。此外，周成虎等(1999)[2]亦認為雖然以偏微分方程式(PDE)可靈活的進行複雜數學公式運算，得到精確的定

量解，但當使用電腦解決PDE 問題時，由於電腦的運算是架構於離散基礎上，因此PDE必須對算式本身進行時空離散化，將其展開成冪次方程式並可能忽略較高階之項次，建立差分方程式，或採用其他轉換方式，建立離散結構來表示其連續變化量。這些轉換過程不僅是繁複的，甚至有可能是無法解決的。但最重要的是在這個過程中，PDE也失去了它最重要的特性—精確性、連續性。Ioannis(1997)[3]亦說明使用偏微分方程式(PDE)建立模式時，若考慮過多複雜的因子時，則會大幅增加使用PDE 描述其行為的困難度，無法完整的描述問題中之所有行為，如海洋中之油污傳輸(宋鴻均，2005) [4]。

不少國內外學者為了試圖解決上述以傳統偏微分建模搭配數值方法求解之種種問題或限制，因此嘗試以細胞自動機建立數值模型(Cellular Automata)(金傳春等人, 2007[5]；Machta, J., 2006[6]；宋鴻均, 2005[4]；Fox, 2003[7]；Batterman, 2002[8]；Toffoli and Margolus, 1990[9]；Morgan and Morrison, 1999[10]；Papatzacos, 1989[11])。Toffoli and Margolus (1990)[9]指出CA乃直接將巨觀現象背後之基本局部互動行為(Basic local interaction) 轉換為CA規則，以此建模即可演化產生原巨觀現象，因此無須推導微分方程式，故不需進行數值離散。在建立數學模式方面，CA僅需將所有運動機制轉換為CA之規則即可，因此相較於PDE更易於對原物理系統進行建模 (Toffoli,1984[1]；

Omohundro, 1984[12])。宋鴻均(2005)[4]選擇CA建立一海洋油污傳輸模式，其研究指出若選擇以PDE方式建模，則須先建立足以描述該問題之偏微分方程式，而其問題囊括之現象十分複雜，若要全部加入考量則其PDE推導將十分困難，而透過細胞自動機強大的適應性，可較PDE 更方便的加入邊界、風、流、岸邊附著等影響因子，成功達成對油污染現象的模擬。金傳春等人(2007)[5]以CA建立流行病傳染模式，該研究亦指出與PDE建模方式相比，細胞自動機模型結構簡潔靈活，計算方式簡單且，模擬過程直觀，易於分析。陳宇文(2009)[13]發展一數值計算平台，嘗試直接以方程式集合取代傳統偏微分方程式進行求解，雖其模式成功進行地下水流、熱流與污染傳輸模擬，但其模擬結果未經驗證，且其在方程式之計算順序分析上亦只能考量單一物理量問題，當需考量求解多物理量耦合問題時，除需求得各物理量之方程式求解順序外，仍需物理量間之變數傳遞關係，該研究並未提及此部份之解決方法，此外，該研究在方程式分析上乃利用人工分析，未建立自動化分析功能，故該研究仍有相當改善空間。

由前述研究可知，許多研究皆試圖破除以偏微分方程式建模的方式，使得模式得以同時考量更完整的機制，以較偏微分方程式簡易的方式建模，惟這些研究皆只致力於如何解決對當下已定義好的問題更有效率的建模，而未進一步考量如何將原先開發好的模式，更容易的

進行擴充修正。例如以前述CA之應用研究為例，當模式開發者要在原模式加入新的機制時，模式開發者除了增加描述該機制之方程式外，還須調整該模式各方程式之計算順序及其對應之程式結構；若需增加考量其他物理量，則模式開發者除了需增加描述該物理量之多條方程式外，還需人工分析耦合求解時，物理量間變數如何互相傳遞，而這些皆需以人工方式進行，亦即問題若有任何修正，則皆仍然要如傳統建模方式般耗費相當人力進程式修改。總之，前述研究並未考量如何建立一個一般化的建模流程或平台，使得模式可以漸進、有效率且系統化的增加模擬機制。

1.3.2 人工智慧方法在數值模擬的應用

此部份又可分為兩大類，一類為人工智慧方法與模式乃是互相結合的型態，此種方式人工智慧方法與數值模式乃共同存在互相輔助，另一類為直接以人工智慧方法取代數值模式的角色進行模擬。兩者以往皆已有相當的研究成果。

在數值模式結合人工智慧方面，其常用的人工智慧方法有專家系統及啟發式演算法等。專家系統與數值模式的結合方式，通常為兩層式架構，外層為專家系統之交談式介面(Interactive interface)，其常為輔助使用者挑選符合問題的數值模式、輔助建立數值模式或進行參數

檢定等(Uzel et al., 1988[14]; Abbott, 1991[15]; Chau and Chen, 2001[16]; Chau and Albermani, 2002[17], 2003[18]; Chau, 2004[19]; Kim, 2007[20])，如Uzel[14] 等人(1988)建立之專家系統可以輔助與訓練使用者建立計算流體力學模式(PHOENICS)，並對於後續模擬結果進行解釋；Chau and Chen(2001)[16]建立之專家系統可輔助海岸水量與水質等相關模式建置並可協助所建置模式進行參數檢定；Kim等人(2007)[20]使用專家系統(Expert system for calibration of HSPF, HSPEXP)協助檢定水文模式(Hydrologic Simulation Program Fortran, HSPF)；Madsen等人(2002) [21]應用專家系統幫助檢定降雨逕流模式；Chau(2003[21], 2004[23])使用專家系統協助檢定海岸及其相關模式；陳韋圻(2008)[24]應用專家系統於地下水流模式，同時檢定水力傳導係數(K值)及儲水係數(Sy值)；王雲直(2010)[25]應用專家系統檢定濁水溪沖積扇地下水模式。

啟發式演算法與數值模式之結合，通常亦為兩層式架構，其底層為數值模式，外層為啟發式演算法，而啟發式演算法一般皆作為最佳化工具(Optimization tools) (Haddadet al., 2006[26])。啟發式演算法如基因演算法(Genetic Algorithm)、模擬退火演算法(Simulated Annealing)、禁忌搜尋法(Tabu Search)、蟻群演算法(Ant Algorithm)及蜜蜂演算法(Honey Bees Algorithm)等，目前已被廣泛的應用於科學、

工程及商務等各領域中(McKinney and Lin, 1994[27]; Gen and Cheng, 1997; Wardlaw and Bhaktikul, 1999[28]; Castanedo et al., 2006[29])。在地下水相關研究領域中，啟發式演算法與地下水模式結合之應用包括地下水參數檢定(Zheng and Wang, 1996[30]; Abbaspour et al., 2001[31]; Lin et al., 2001[32]; Tsai et al., 2003[33])、地下水管理 (McKinney et al., 1994[27]; Bhallamudi et al., 2003[34]; Chu and Chang, 2009[35])、地下水復育(Ahlfeld et al., 1998[36]; Guan and Aral, 2004[37]; Chan et al., 2000[38], 2005[39]; Espinoza et al., 2005[40])及地下水污染源推求等 (Datta and Chakrabarty , 2003[41]; Chang, and Yeh, 2005[42]; Singh and Datta, 2006[43] ;Dhar and Datta, 2007[44])。

前述人工智慧與數值模式整合方面的研究，專家系統與啟發式演算法大都位於數值模式外層，並未將人工智慧整合入數值模式之核心運算中，因此並未實質增加數值數式本身的模擬或其他能力，無法使數值模式易具有自我調適等類似「智慧」的能力。

在以人工智慧方法直接進行的模擬方面，則以類神經網路為代表。神經網路因計算快速及具有建構非線性模型能力之優點，往往作為取代數值模式之工具。通常作法之一乃藉由數值模式之輸入、輸出及相關參數等資料進行神經網路訓練，取得原數值模式之特性並取代之，以利後續加值應用(Malekmohamadi et al., 2008[45];Chu and Chang,

2009[46]; Ioannis, et al., 2010[47])，在此數值建模將只是一個過程。

Malekmohamadi 等人(2008)應用類神經網路取代波傳數值模式

(Numerical wave model)，可藉由風速預測波高。Chu與Chang(2009)[46]

應用類神經網路代替地下水數值模式並結合微分動態規劃模式優選

動態地下水操作策略及成本最小化問題；Ioannis 等人(2010)[47]以類

神經網路取代地下水數值模式並結合微分進化演算法(Differential

evolution algorithm)求解一區域不違反安全出水量前提下之最大抽水

量問題，黃浚瑋(2008)[48]應用類神經網路代替地下水數值模式並結

合遺傳演算法優選地表地下聯合營運之操作策略。另一種情況則直接

以觀測資料，對未釐清的物理、化學或生物行為，透過類神經網路學

習模擬其行為特性Chau(2006)[49]。Coppola (2003)[50] 和Nayak

(2006)[51]分別採用坦帕灣、孟加拉灣當地地下水含水層實際水文資

料來訓練類神經網路，並以訓練好之類神經網路來進行水位連續預測，

完成訓練之類神經網路即為具當地代表性之地下水模式。

為了解決前述文獻所指出的模式擴充不易及雖然與人工智慧方法整合但模式仍不具智慧功能等兩大問題，本研究提出一新的計算架構，突破傳統數值模式的開發方式，建立一系統化、自動化之數值建模平台，其中包括發展一分析方程式之方法以及建置一個具可擴充方程式之建模系統。此方程式分析方法，乃可分析多條方程式之一致性

及計算順序，包括多物理量問題變數之傳遞關係，其為使系統具有可擴充性的核心機制，應用此可擴充模擬功能的系統所開發之模式，可隨著需求逐步增加模式模擬能力。並在此基礎下將人工智慧方法如專家系統與類神經網路等，整合入模擬模式核心，而使模式具有「人工智慧」能力，如可以因應環境變化調整自身模擬範疇等。



第二章 系統架構與研究流程

為了突破傳統數值建模之限制，本研究提出一新型態之計算架構，稱為「可適性計算架構」，而此新計算架構的提出，乃是源自於對傳統數值建模的重新思考，因此本章在說明新計算架構之前，將仍先以數值建模發展流程的觀點來比較說明傳統方式與本研究的差異，接著再說明支持本研究新的模式發展型態，所需系統平台之資訊系統架構。

2.1 傳統建模流程與可適性計算架構建模流程說明

圖 2.1 為「可適性計算架構」與傳統數值模式建構流程之差異比較，由圖可知本研究與傳統方式差異甚大，是整個開發流程的改變。圖

2.2 則經整理後本研究提出之數值模式建立流程。圖 2.1 之說明如下：

1. 概念模式(Conceptual model):此階段乃在定義問題及其中之基本行為描述，因此兩者必須相同。
2. 數學定義(Mathematical formulation)：此階段又可分為兩大步驟，首先為以各種基本方程式描述第一階段所定義問題中的各種變量之變化行為，以正確量化描述問題，此本研究與傳統方式皆相同。而本研究將與傳統方式不同之處為，本研究

將保留前述之基本方程式組，並以其做為後續計算之基礎而不採用如傳統方式般，將前述所得之多條方程式進行人為的整合推導，以盡量減少方程式及變數之數目。傳統方法的好處為最後待解的方程式與變數數目較少。傳統上認為方程式及變數愈少對後續解題將愈有利，惟以本研究的觀點而言，此種推導與簡化需以人力為之而無法自動化或程序化，因此傳統方法若欲考慮新的現象或變量而需新增或修改前述之基本方程式時，則需人為重新推導，而此點將先天上限制了後續所開發之模式擴充模擬功能的可能。本研究為維持後續增減方程式的彈性，將不再對前述多條基本方程式進行進一步整合。如此本研究後續將需處理較多的方程式與變數，惟由於各方程式並未再經人為整合推導，將可維持其原先較基本而簡單的型式，而不像傳統方式般，雖然最後面對的方程式數目較少，惟這些方程式已經人為整合後所得，其型式將較為複雜。傳統方法常需面對二階以上之微分方程式，惟本研究的方法，所處理的方程式絕少高於一階微分方程式。方程式的複雜度亦將直接影響下一步驟數值離散之難易，一階微分以下之方程式可以很簡單的方式進行離散，若是二階微分以上之方程式則其數值離散之難度將大為提高。除了不進行

方程式整合外，為維持將來增減方程式的彈性，這些基本方程式將來亦不採同時聯立求解，而是依變數間之相互關係循序逐條求解，如未來若有方程式的增減，則只需重新定義方程式計算順序即可。爰此，本研究將在第三章提出方程式分析的實作方式，以檢驗方程式與變數關係的一致性，同時決定方程式之計算順序。

3. 數值離散(Numerical discretization)：在此步驟傳統方法由於常需面對較高階的微分方程式，因此需要複雜的數值離散方法，如有限元素法(Finite Element Method, FEM)，有限差分法(Finite Difference Method, FDM)等皆是。本研究由於絕少面對一階以上之微分式，因此只需簡單的一階差分，即可對原方程組進行離散化。另外，為維持增減方程式的彈性，本研究為了更易於進行離散化，並建議以凡諾依多邊形進行空間格網之定義。
4. 程式開發 (Program development)：延續步驟 3，傳統方式為照顧各節點間之互相影響，必需將所有節點上之離散方程式與變數，再組合成矩陣方程式，接著發展各種不同矩陣解法之計算程式，對所組成的矩陣方程式，計算其數值解。本研究將不若傳統數值方法組合所有節點上的變數形成矩陣方程

式，反之，本研究將以單一節點上之多條離散方程式為主進行計算，搭配方程式分析後所得方程式計算順序，再以各節點互相交換資訊並配合疊代計算的方式，求得整個問題中所有節點的解。

圖 2.1 中之數學模式建立乃以飽和地下水問題為例，圖中所描述之方程式為一維穩態的地下水流相關方程式， K 為水力傳導係數，假設為常數， v 為達西速度， h 為總水頭，若以傳統數值方式建模則需將其推導成偏微分方程式，其形式為一 Laplace 形式之偏微分方程式，之後再選用適當數值方法(如有限差分法)對此偏微分方程式進行時空離散，得到所有節點之離散方程式後再建立矩陣方程式，選擇適當之矩陣解法後即可撰寫數值程式進行求解。若使用者欲建立一未飽和地下水流問題，則 K 為水頭之函數($K=f(h)$)，其偏微分方程式則需重新修正，原本為 Laplace 形式之偏微分方程式改為式(2.1)，其形式為一非線性偏微分方程式，實務上經常會再以式(2.1)為基礎，進一步假設與推導而得常用之理查方程式(Richard Equation)。因其偏微分方程式已經修正，故在數值離散與數值模式兩個部分皆需進行大幅修改，由此可知，即便使用者僅需改變一條方程式，卻需進行整個模式的重新開發。反觀本研究所提出之開發流程，因直接採用方程式集合進行求解，修改一條方程式僅需調整方程式之求解順序，以及針

對該方程式再進行離散並撰寫其之程式碼即可完成模式修改，此即本研究所提之「模式擴充性」。此外，就數學模式本身的特性而言，傳統數值方法則需將相關方程式全部整合入守恆方程式中再推導得控制程式，使控制方程式中只有待解變數及相關參數，因此若要抽換或增減任何一條方程式必定要重新推導偏微分控制方程式，並大幅修正整個數值模式。而本研究無需整合相關方程式，只需將各方程式計算後之值代入守恆方程式中，因此方程式可依使用者需求進行抽換或增減，如前述水力傳導係數 K 的修正即是，故本研究在模式之修正或擴充上較傳統數值模式更具彈性。

$$\frac{\partial f(h)}{\partial x} \cdot \frac{\partial h}{\partial x} + f(h) \frac{\partial^2 h}{\partial x^2}$$



(2.1)

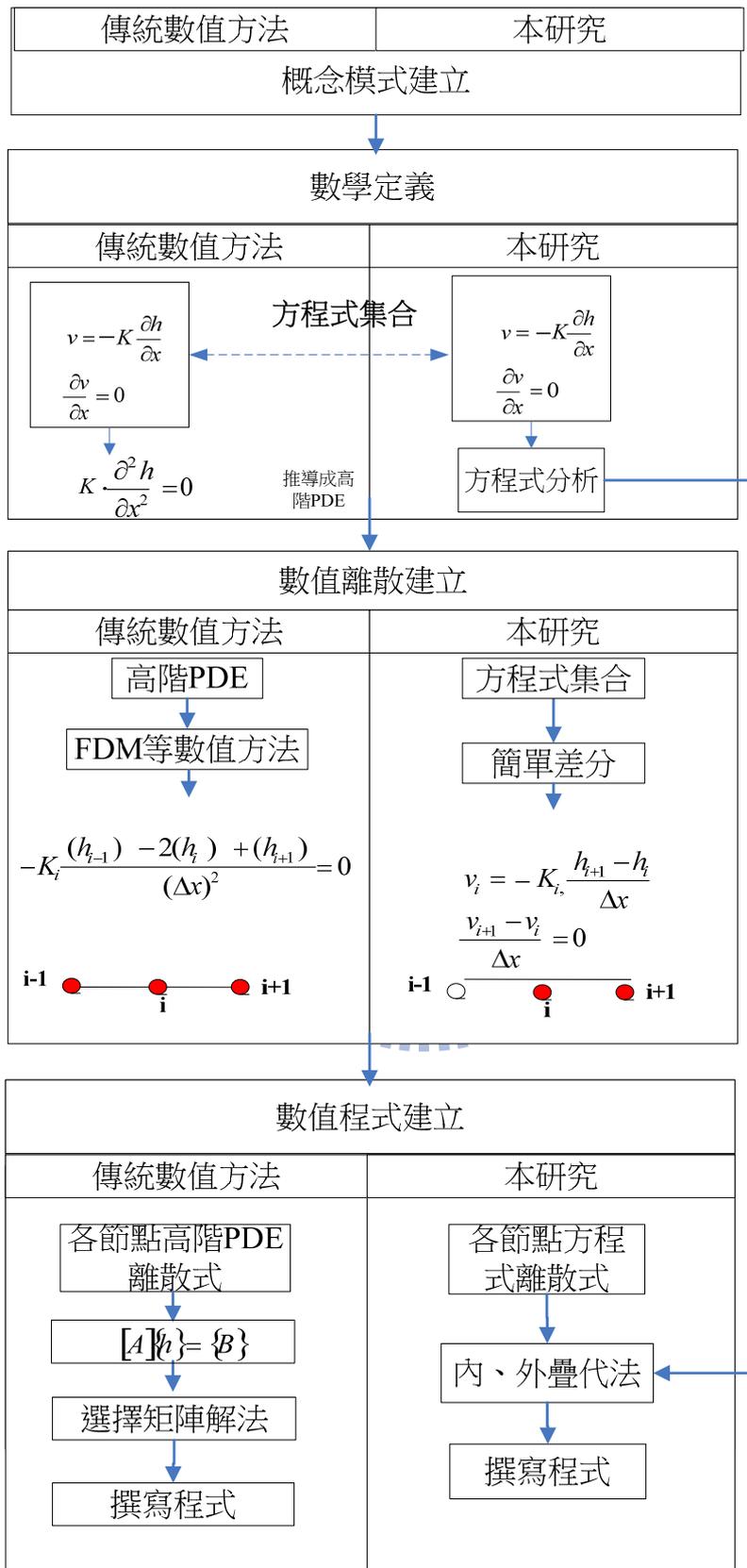


圖 2.1 「可適性計算架構建模流程」與傳統建模流程之比較圖



圖 2.2 可適性計算架構建模流程圖

2.2 系統概念架構

傳統上數值計算皆需在待求變量(變數)所在的空間上，畫分格網，且將各變數的值表達在各格點上，惟最後仍以矩陣的方式整體計算，換句話說，各格點的意義主要是空間上的座標及其對應的變數。而本研究主要的計算皆在格點上，因此可將格點代表的意義擴充，各格點不僅具有空間座標及變數，亦為一個具有獨立運算能力的個體，本研

究將其名為「計算元」。本系統為一兩層式架構，包括「主控協調層」以及「計算層」。為了使數值模式具有智慧，本研究將可適性計算架構與人工智慧結合，稱之為「智慧型可適性計算架構」（圖 2.3）。進一步說明如下：

- a. 計算層：本研究計算層由計算元組成，各計算元與其鄰近計算元的相鄰關係，亦如以往由格網定義，計算元的功能為最底層的數值計算，各計算元皆為獨立計算，其計算方式乃直接計算多條分散的方程式，本研究將此多條分散的方程式稱之為「方程式集合」。另外，本研究輔以「多應用模組方程式集合分析工具」，用以分析方程式集合是否可解以及決定方程式計算順序，使得各計算元可容易的以人工輔助的方式增加或改變計算能力，此亦為本研究所提「可適性」之意義，此部分將於第三章進一步說明。
- b. 主控協調層：本研究主控協調層由「協調委員」組成，「協調委員」可視為另一種計算元，惟其位階乃位於計算層之上，如圖 2.3 所示。各協調委員皆有其職責，如調整系統資源分配或調整計算元之計算行為等；相較於計算層之主要功能為計算求解，主控協調層之主要功能為監督及分析所有計算元之計算狀態，並依分析結果適時調整其計算行為。主控協調層亦可結合專家系統與機器學習等人工智慧方法增強其功能。

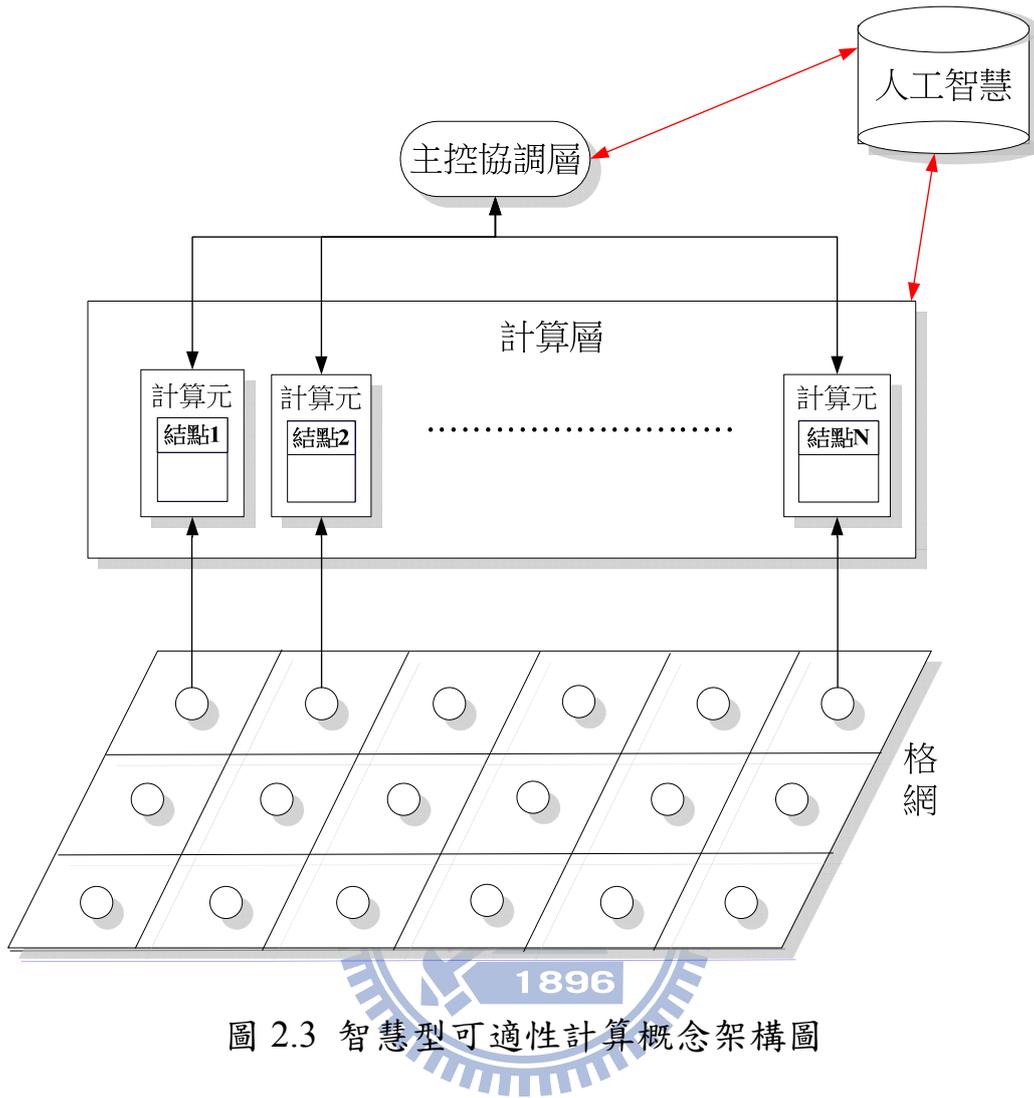


圖 2.3 智慧型可適性計算概念架構圖

2.3 研究流程

本研究之研究流程圖如圖 2.4 所示，首先為開發智慧型可適性計算平台，此部分本研究將其分為兩階段進行，第一階段先開發可適性計算平台，第二階段再開發智慧型可適性計算平台。接著為應用前述步驟所開發之兩種平台開發地下水流、熱流傳輸與污染質傳輸之耦合求解數值模式。最後再以伯克利勞倫斯國家實驗室(Lawrence Berkeley National Laboratory) 研發之 Tough2 以及美國地質調查局(USGS)所開

發之 HST3D 計算模擬軟體進行驗證。

可適性計算平台建置的部分將於第三章說明，智慧型可適性計算平台的建置將於第六章說明。本研究開發數值模式之方式為將描述問題所需之方程式儲存於計算平台上即可完成建模，而本研究應用前述計算平台所開發之地下水流、熱流傳輸與污染質傳輸模式所需之方程式集合將於第四章進行說明。可適性計算平台所開發之數值模式將於第五章進行驗證，而智慧型可適性算平台所發展之數值模式將於第六章說明。



圖 2.4 研究流程圖

第三章 可適性計算平台建置

依據前述第二章所提系統架構(如第二章之圖 2.3)可知，系統包含三大部分，分別為計算層、主控協調層及人工智慧，其中計算層及主控協調層之實作本研究稱之為可適性計算平台，本章將說明如何實作此計算平台，另外，人工智慧的實作將於第六章說明。

3.1 可適性計算平台程式架構

可適性計算平台之程式系統圖如圖 3.1 所示，包括計算層與主控協調層。計算層可再細分為「核心計算子系統」、「應用模組容器」以及「方程式集合分析模組」。

主控協調層之位階乃在計算層之上，其內包含數個協調委員，協調委員數量並無限制，可依模式開發者需求擴充協調委員數目。各協調委員皆有其職責，如調整系統資源分配或調整計算元之計算行為等；目前可適性計算平台所建置之協調委員主要任務為負責跨計算元間之相關迭代計算。

在計算層的部分，「核心計算子系統」為計算平台之主要計算工具，包括數個通用化之模組，如空間離散模組、擴散項內迭代模組、資訊同步模組，傳流項計算模組，方程式計算順序設定及儲存容器、材質參數儲存容器、邊界條件設定與儲存容器及源匯項設定與儲存容器。

「應用模組儲存容器」為預留之資料夾以儲存應用本平台於特定問題時，開發者所需建立之方程式集合。本研究共建置了「地下水流」、「熱流傳輸」及「溶質傳輸」三個應用模組，各自儲存相對應之方程式集合，將於第四章中說明。「方程式集合分析模組」主要目的為輔助模式開發者能有效率地建立數學模式。本研究解題乃以描述原問題之多條方程式直接求解，而不需再推導成一整合型態之偏微分方程式(PDE)，因此需以「方程式集合分析模組」驗證各應用模組之方程式集合是否可解，以及定義方程式之求解順序，當多個應用模組須同時求解時，需再提供不同應用模組間變數之傳遞資訊，此部分將於 3.5 節中詳細說明。由圖 3.1 可知，此分析工具連結「核心計算子系統」與「應用模組容器」兩子系統，為系統關鍵模組。「方程式集合分析模組」在讀取各應用模組之資訊後，接著產生變數-方程式關係矩陣，並以此關係矩陣進行後續分析，若各應用模組之方程式集合皆可解，則可得各應用模組之方程式集合求解順序，之後再將方程式集合求解順序儲存於核心計算子系統之「方程式計算順序設定及儲存容器」中。在「主控協調層」與「計算層」外層有一殼層(shell)將此兩子系統包圍，此殼層之職責為模式輸入與輸出之處理介面。

3.2 節將對可適性計算平台之基本計算原理進行說明，以方便後續對各子系統實作之進一步之說明。3.3 節將進一步說明主控協調層。

3.4 節說明「核心計算子系統」。3.5 節說明「方程式集合分析模組」。
 「應用模組容器」將於 3.6 節說明。3.7 節則說明可適性計算平台之
 「變數與參數資料結構」。

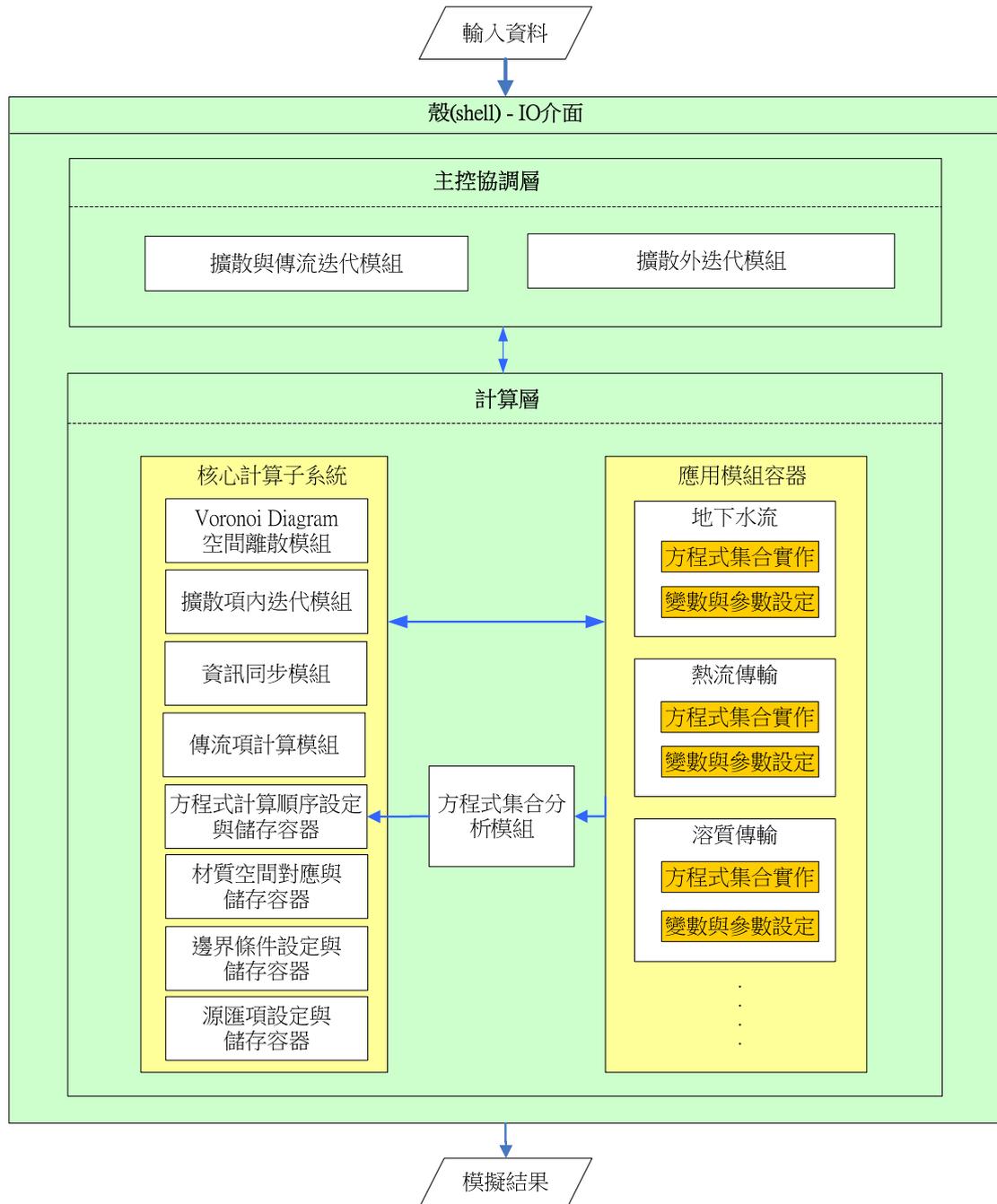


圖 3.1 可適性計算平台之系統示意圖

3.2 可適性計算平台之基本求解原理說明

在前述第二章之 2.1 節中已說明了本研究之模式開發流程與傳統方法之差異，由第二章圖 2.1 可知，本研究在建立數值模式時，乃以方程式集合進行計算而非以傳統偏微分方程式進行建模，其計算流程為先將各方程式進行時空離散後，再依方程式分析結果決定求解順序，之後以內外迭代法進行求解。在方程式分析的部分，本研究參考樹狀搜尋法建立一分析方程式求解順序之演算法，此部分於 3.5 節說明。此外，內外迭代之流程概念說明如圖 3.2 所示，首先為步驟(1)，本研究在求解時乃以單一計算元為基本計算單位，各計算元獨立求解方程式集合，在求解時先假設由相鄰計算元取得之資訊為真值，目標函數設定為守恆方程式之誤差最小，之後再利用最佳化方法迭代求解該計算元之狀態變數，此單一計算元進行最佳化求解之步驟稱為「內迭代」，其詳細說明參見 3.4.1 節。當所有計算元皆完成內迭代計算後，接著需判斷各計算元在數值上是否已達穩定狀態，在步驟(2)處，本研究設置「外迭代」步驟分析所有計算元是否皆已達到收斂狀態，分析方法為比較各計算元前後兩次內迭代狀態變數之差值是否小於一預設門檻值，若所有計算元皆已收斂，本研究稱之為「外迭代收斂」，此部分說明詳見 3.3.2 節。當系統達到外迭代收斂狀態時即可進入下一時刻計算，若未達到外迭代收斂，所有計算元需重新啟動進行內迭代

計算，在計算之前，各計算元需先接步驟(4)，重新取得相鄰計算元內迭代後之資訊，而啟動所有計算元進行內迭代計算之步驟本研究稱之為「外迭代計算」。

此內外迭代方法不同於傳統數值方法之顯示法或隱式法，在一計算元進行內迭代計算時，本研究先取得其相鄰計算元內迭代前之資訊進行計算，此方式近似於顯示法，但之後若需重新進行外迭代計算時，本研究則先重新取得相鄰計算元內迭代後之資訊再進行計算，此方式則近似隱式法，然若以一標準顯示法之定義，乃指在計算該計算元之狀態變數時，直接取用上一時刻之資訊進行計算不需迭代，而隱式法乃直接取當下計算中之資訊進行計算；本研究在各時刻之第一次外迭代計算時雖以上一時刻之資訊作為初始值，但在後續外迭代計算進行時，則會更新相鄰計算元之資訊，故此內外迭代法並非傳統之顯示法，而較近似於隱式法。

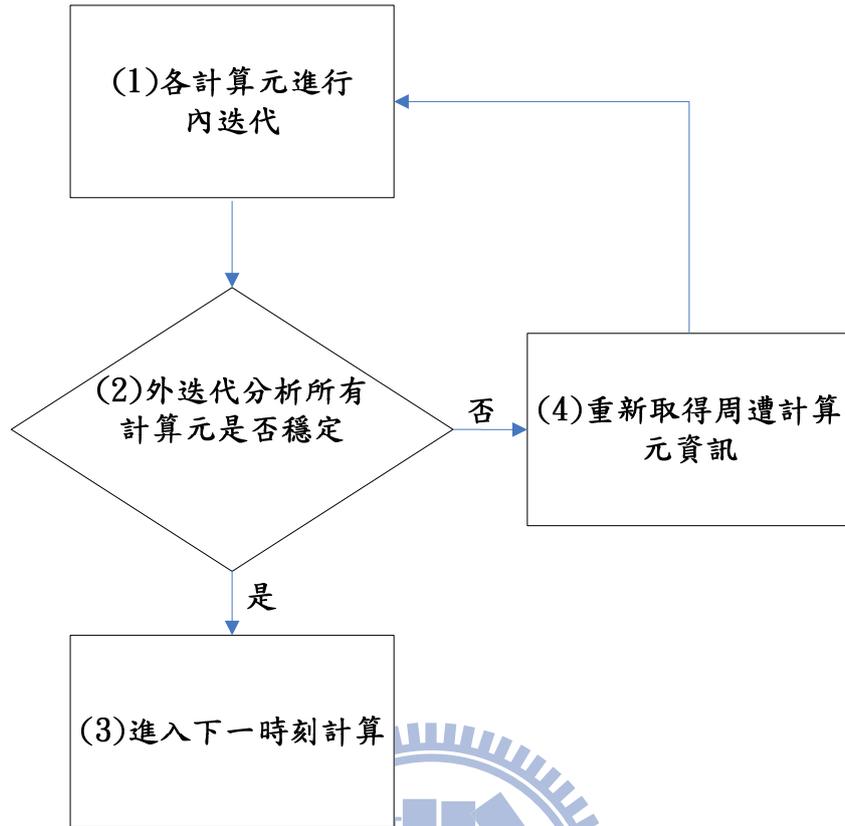


圖 3.2 本研究之內外迭代流程概念說明圖

3.3 主控協調層建置

對流體型態之物理量進行守恆方程式計算時，控制體積之邊界流通量可分為擴散型(diffusion)及傳流型(advection)之流通量，為了數值計算之穩定與方便，本研究將前述 3.2 節之內外迭代求解概念再加以改進，將其分為擴散項與傳流項之計算，在後續實例應用時，本研究將考量熱流與污染物等物理量。前述擴散項之計算流程，仍應用原先 3.2 節所定義之外迭代流程，本研究將之稱為擴散項外迭代模組，並將於 3.3.2 節說明，至於傳流項計算之說明請參閱 3.4.3 節。本研究先

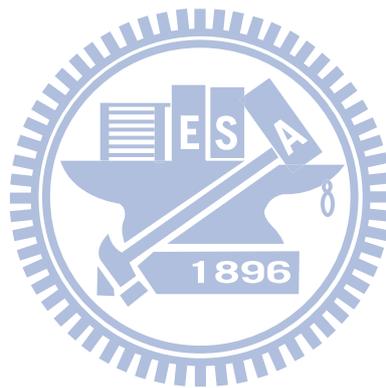
將擴散項與傳流項分開計算，此兩項再互相迭代求解，而控制此運算程序之模組，本研究稱之為擴散與傳流迭代模組，此部分將於底下

3.3.1 節說明。

3.3.1 擴散與傳流迭代模組

本節將說明本研究如何計算傳流項與擴散項，計算流程如圖 3.3 所示。起始時間設定為 $t = t_{str}$ ，第一個步驟為進行擴散項計算，包括水流流場與熱流及污染物擴散項之計算，完成擴散項外迭代計算後，第二個步驟為以水流流場進行熱流及污染物傳流項之計算，此部分由傳流項計算模組負責計算，之後即得到考量擴散與傳流兩種機制的熱流及污染物場分布。但在計算熱流及污染物之傳流項時，所採用之水流流場仍是先前未考量傳流作用之熱流及污染物影響下所得之流場，故在傳流項計算模組計算完後，需以新的熱流及污染物場重新計算水流流場，意即再重新啟動外迭代計算流程，本研究目前此外迭代模組只啟動水流流場計算，此步驟對應於流程圖之步驟“水流擴散外迭代 2”，而在計算水流流場時，水流之相關變數設定皆回到時刻初之值。當得到新的水流流場時，熱流及污染物在傳流項的部分則需再作修正，因此需重新啟動傳流項計算模組重算傳流項，當以此新的流場重新計算熱流及污染物之傳流項時，熱流及污染物之相關變數皆須回復到首次

完成擴散項計算後之值。為判斷擴散與傳流迭代是否完成，本研究設置一「擴散與傳流迭代指標」，其計算方式為將各計算元之狀態變數在前後兩次迭代之差值除以初始條件中狀態變數之最大值，若所有計算元上之狀態變數指標皆小於 10^{-5} 即視為收斂，完成一個時刻之計算，接著檢查是否抵達最終時刻 (t_{end})，如未滿足則時刻遞增 ($t = t + \Delta t$)，執行下一個時刻之模擬；反之，則完成暫態模擬。



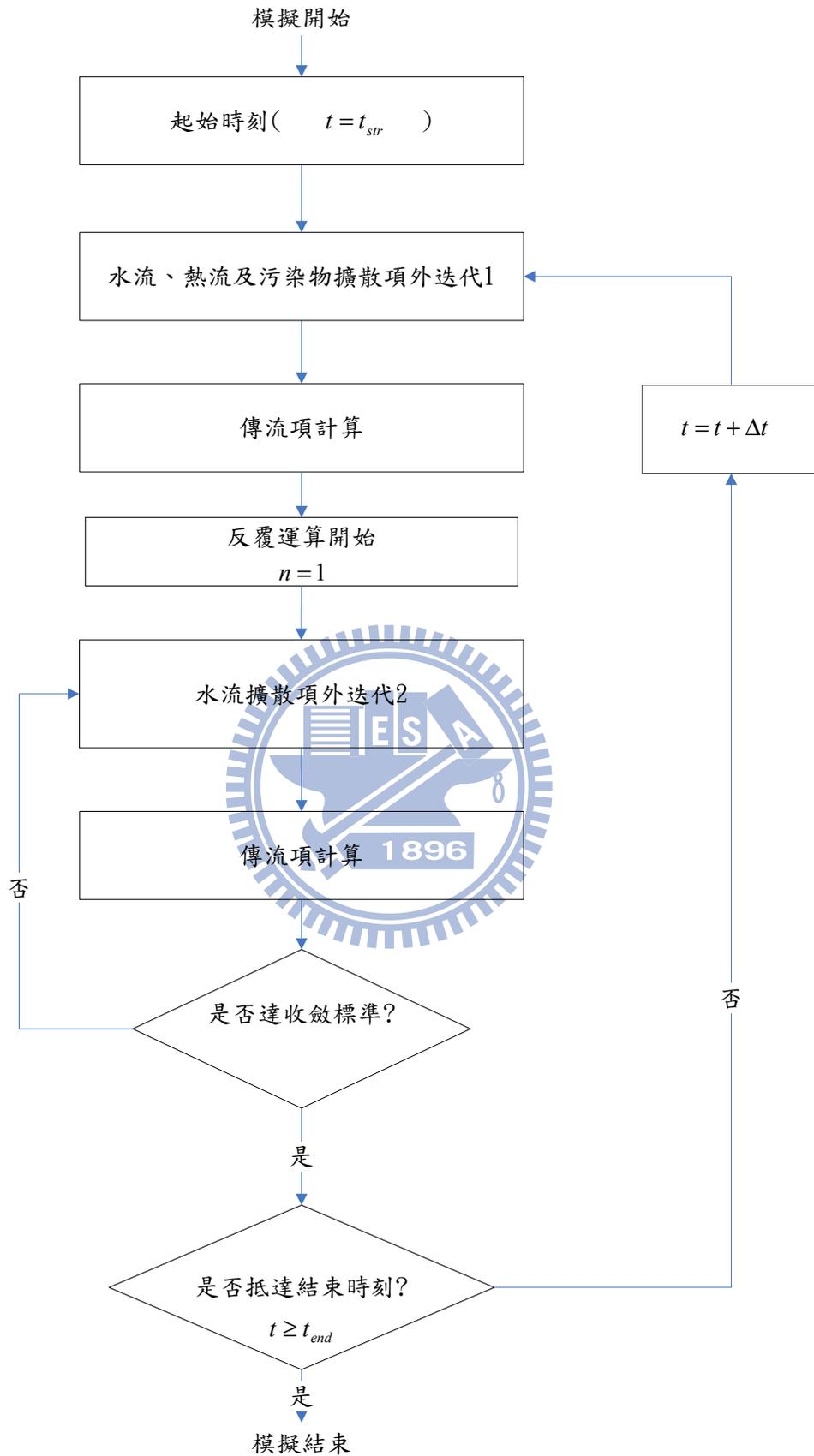


圖 3.3 可適性計算平台擴散與傳流迭代流程圖

3.3.2 擴散項外迭代模組

本研究在求解問題時，將擴散項與傳流項分開計算，其中水流、熱流及污染物之擴散項計算皆為擴散項外迭代模組所掌控。當開始擴散項外迭代計算時，此模組會先讓所有計算元取得相鄰計算元之資訊，如相鄰計算元之水頭、溫度及污染物濃度等資訊，接著擴散項外迭代模組啟動各計算元進行方程式集合之求解。本研究採用最佳化方法做為各計算元求解方程式集合之工具，此以最佳化方法求解方程式集合之步驟本研究稱為擴散項內迭代，詳細說明請見 3.4.1 節。因各計算元皆使用最佳化方法求解各自負責的方程式集合，因此在計算開始時，所有計算元皆須先給定待解變數一初始猜值，再進行最佳化計算，而在所有計算元皆完成第一次最佳化計算求解後(即完成擴散項內迭代計算)，所有計算元之待解變數皆已改變，此時擴散項外迭代模組則會檢驗各計算元之待解變數變化幅度，若所有計算元的變化幅度皆小於設定的收斂標準則此擴散項外迭代收斂；若有一計算元之待解變數變化幅度超過收斂標準，則外迭代重新啟動各計算元，在各計算元取得相鄰計算元最新資訊後，重新進行擴散項內迭代。前述變化幅度之衡量，為計算元之狀態變數在前後兩次外迭代之差值，除以所有計算元中初始狀態變數之最大值。擴散項外迭代模組將如此重複執行上述步驟，直至所有計算元在前後兩次外迭代後之待解變數變化幅度皆小

於收斂標準。

上述擴散項外迭代模組之執行流程為處理單一應用模組計算時之處理方式，若需同時求解多個應用模組之耦合問題時，各計算元則須計算多個應用模組之方程式集合，各方程式集合求解方式仍為擴散項內迭代，在求解程序上則為依序進行各應用模組方程式集合之求解，因此在所有應用模組皆完成擴散項內迭代計算後，計算元內部之各應用模組待解變數皆已改變，此時計算元需將內部各應用模組之最新資訊整合，此單一計算元內部應用模組間之資訊更新，本研究稱之為資訊同步，詳細說明請見 3.4.2 節，資訊更新後各應用模組再重新啟動擴散項內迭代計算，如此往復直至收斂為止。而擴散項外迭代模組在檢驗耦合問題時，則須檢驗所有計算元各應用模組之待解變數，若有一計算元之任一應用模組的待解變數變化量超過外迭代收斂標準，則須重新啟動所有計算元全面重新進行擴散項內迭代，而此時各計算元無論是相鄰計算元之資訊或是內部各應用模組之資訊皆已更新至最新狀態。上述步驟之執行流程請見圖 3.4。

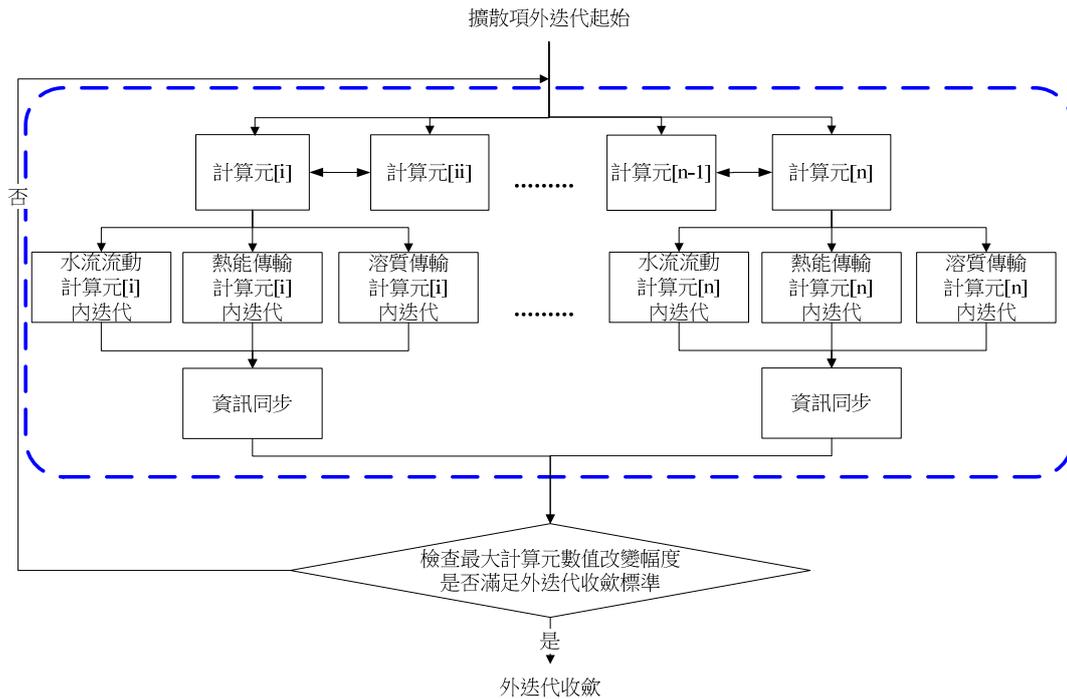


圖 3.4 可適性計算架構擴散項外迭代模組流程圖

3.4 計算核心子系統建置

本研究所建立之核心計算模組包括空間離散模組、擴散項內迭代模組、資訊同步模組、傳流項計算模組以及方程式計算順序設定及儲存容器、材質參數儲存容器、邊界條件設定與儲存容器及源匯項設定與儲存容器等四個儲存容器，如圖 3.1 所示，以下將分為八個小節進行說明。

3.4.1 擴散項內迭代模組

相較於傳統數值方法，本研究不採用整合式之控制方程式，而改採

用分散式之方程式集合。本研究可直接以分散之各條方程式進行計算。每次擴散項內迭代運算，均是針對單一節點進行運算，其中待解變數為 x_i ，在假設周遭節點之變數數值為正確值之前提下，應用牛頓法等最佳化方法，求解符合守恆定律之 x_i 數值。

在 3.4 節中以「方程式集合分析模組」決定各方程式之計算順序，守恆形式之雷諾傳輸定律必為最終計算之方程式，如式(4-31) 為守恆方程式之離散型態(請詳閱第四章 4.2 節數值離散說明)，為符合守恆之概念，其等號右方必為 0，因此錯誤的 x_i 數值代入式(4-31)其等號右方則不為 0，意即不會守恆，該數值則以誤差值 (ε_i)代表之。本研究在此以最佳化方法搜尋正確之數值(x_i^*)，式(3-1)為目標函數，是以誤差值之平方最小為目標。其中，變數 f_i^t 代表控制體積內某物理量之外顯性質，而 Γ_i^t 則代表穿越控制體積之穿越率，兩者均為決策變數 x_i 之函數。

$$\min Z_i = \varepsilon_i^2 = \left\{ (f_i^{t+\Delta t} - f_i^t) V_{CV} + [\omega \Gamma_i^{t+\Delta t} + (1-\omega) \Gamma_i^t] \times \Delta t \right\}^2 = 0 \quad (3-1)$$

圖 3.5 為擴散項內迭代執行流程圖，圖中之變數($x_i^{(n)}$)代表問題於節點 i 上第 n 次迭代之計算變數數值，其以牛頓法進行修正(如式(3-2)所示)。 $x_i^{(0)}$ 為變數 x_i 之初始解，首先以 $x_i^{(0)}$ 進行第一次擴散項內迭代計算，意即將 $x_i^{(0)}$ 代入方程式集合中計算，透過守恆方程式，可以算出在節點 i

上變數數值($x_i^{(0)}$)對應之目標函數值(Z_i)。接著再透過差分方式，進一步計算該目標函數之一階微分值(Z_i')。最後，判斷是否已經滿足收斂標準，若尚未收斂則依據微分值修改變數數值(式(3-2a))，反覆執行此一動作，直至完全滿足擴散項內迭代收斂標準為止，所得之變數($x_i^{(n)}$)即為正確之數值(x_i^*)。

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} - \frac{Z_i}{Z_i'} \quad (3-2a)$$

$$\begin{cases} Z_i' \leq C \\ Z_i \leq Z^c \\ \text{Max_iter} = 30 \end{cases} \quad (3-2b)$$

在擴散項內迭代之收斂條件方面，收斂條件共有三種，滿足其一即停止擴散項內迭代演算，如式(3-2b)所示。首先是守恆誤差之一階微分值趨近於零($Z_i' \leq C$)，程式處理上則以取一極小數值作為門檻值；其次則是守恆誤差本身小於設定之擴散項內迭代收斂標準($Z_i \leq Z^c$)；最後，為避免在鄰近最佳解時，因一階微分值趨於和緩，修正幅度極小，導致迭代次數過大之問題，本研究則訂定迭代次數之最大限量，本研究在此先設定為 30 次，亦即擴散項內迭代次數若大於 30 則視為收斂。在實際運算上，若計算線性問題，擴散項內迭代流程可於一次迭代即找得最佳解；若計算非線性問題，則視問題之非線性程度而有不同之收斂效果，在本研究訂定之三個問題中，均可於數次至十數次

間達到收斂。

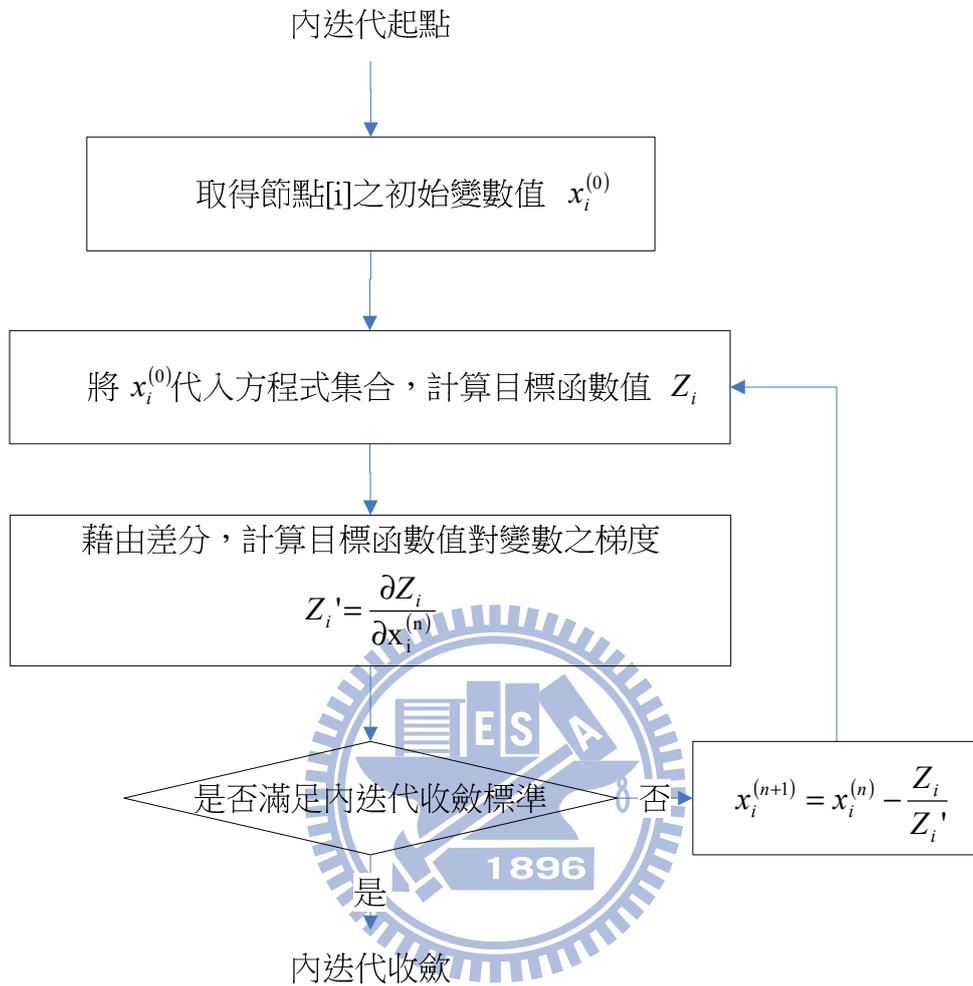


圖 3.5 可適性計算架構擴散項內迭代流程圖

3.4.2 資訊同步模組

如整體模擬問題包含數個物理量問題，不同物理量問題間可能需使用相同變數，而這些變數只在某些特定物理量進行計算，因此在進行多物理量問題之耦合計算時，方程式與變數定義不完整的物理量問題，需先由這些特定物理量問題取得各自計算時所需變數之值，才能進行

後續迭代計算，此取得各自計算時所需變數值之步驟，本研究稱為資訊同步，其相關事宜由資訊同步模組負責處理。在本研究中，定義一物理量問題所需求解之方程式集合儲存於「應用模組」中，因此底下文章將以應用模組為單位代表一物理量問題之方程式集合。

圖 3.6 為資訊同步模組之示意圖，其中包含三個不同之應用模組，分別為應用模組 A、應用模組 B 與應用模組 C，各自有本身之待解變數及應由其它模組給定之變數，為簡化計算流程，本研究採各模組先各自計算再交換更新變數值的方式迭代計算。如在應用模組 A 中， V_A^{a1} 、 V_A^{a2} 與 V_A^{a3} 為應用模組 A 之待解變數，並需提供給應用模組 B 與應用模組 C 之使用，為簡化計算流程，A、B 及 C 模組先各自計算，再藉由資訊同步模組來將數值複製到應用模組 B 與 C；相同地，應用模組 A 中需要由其他模組提供之變數如 V_B^{b1} 、 V_B^{b2} 、 V_B^{b3} 與 V_C^{c4} 等四個變數，亦藉由資訊同步模組複製至模組 A，資訊同步模組同步資訊後，接著再重複各模組之計算，如此往復計算直至收斂為止。如以地下水流與熱流問題耦合求解為例，地下水流問題需要溫度變數以計算水流密度與黏滯係數之變化，而熱流問題則需水流速度進行傳流項之計算。在開始計算時，兩問題先取得對方之初始資訊各自進行內迭代計算，當兩問題都收斂後再更新彼此資訊，如熱流問題重新取得地下水流問題之水流流速，地下水流問題重新取得熱流問題之溫度，之後再重新各自

計算，亦即在各次外迭代計算前，各計算元皆會更新自己計算之所有物理量問題所需變數資訊，再進行計算。

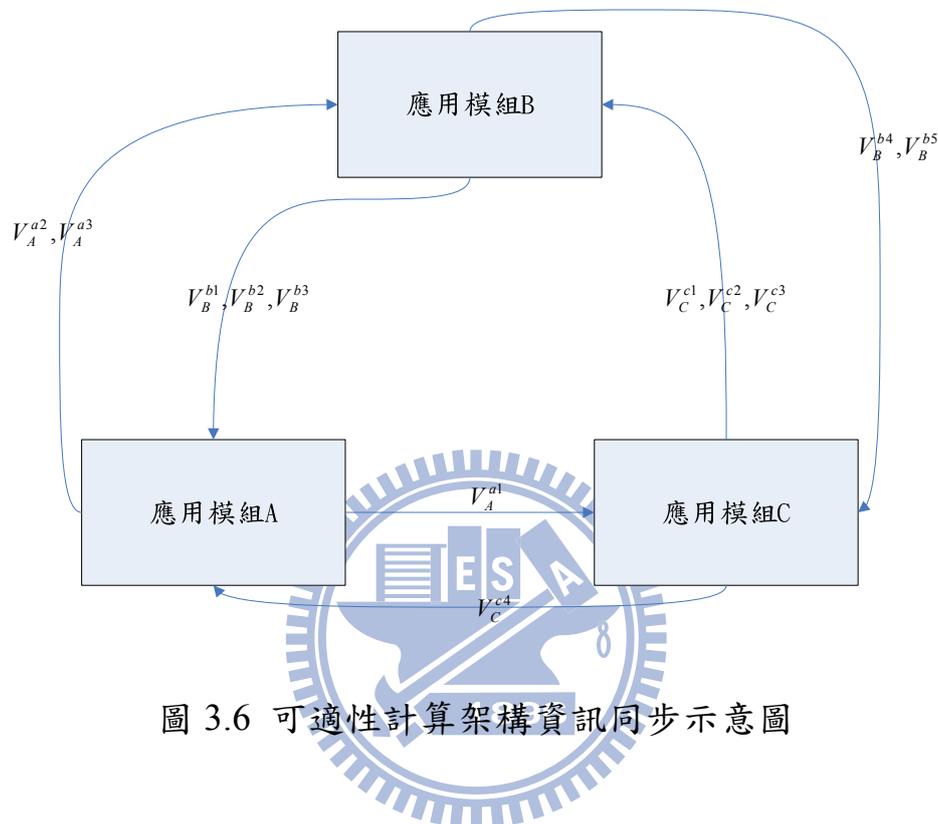


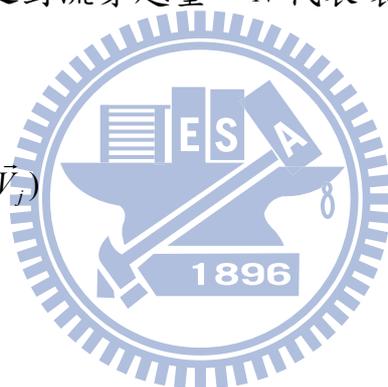
圖 3.6 可適性計算架構資訊同步示意圖

3.4.3 傳流項計算模組

傳統上，應用有限元素法或有限差分法等 Eulerian 方法求解溶質傳輸或熱流傳輸等問題時，當對流項效應較大時，純以 Eulerian 類方法求解往往不易收斂，在此參考傳統方法結合質點追蹤 (Particle Tracking Method) 等 Lagrange 類方法，分別求解擴散項與對流項，本研究稱此對流項之求取方法為傳流項計算模組。擴散項計算之擴散項內迭代與外迭代，僅計算擴散項部分而將對流項忽略不計，等擴散項計算收斂後，再以傳流項計算模組計算對流項部份，並需往復迭代

計算。式(3-3)用以示意說明對流項之計算，其中 v_i 則為對應之待解變數， S_i 代表計算控制體積 i 內之物理量總量，為待解變數 v_i 之函數， S_i^{PT} 則是受到對流項影響後控制體積之物理量總量，而 $\dot{S}_{adv,j}$ 則是代表控制表面 j 之對流項穿越量，其中 \bar{v}_j 則代表控制表面上的待解變數數值，其應以控制表面兩端的數值之平均，仍為待解變數 v_i 之函數， \bar{V}_j 則代表水流之流動速度，假設其不為待解變數 v_i 之函數，應先給定。如以溶質傳輸為例， S_i 即代表控制體積內的溶質總質量， v_i 則代表溶液濃度，而 $\dot{S}_{adv,j}$ 則是溶質之對流穿越量， N 代表環繞計算節點 i 之控制表面數。

$$\begin{aligned}
 S_i^{PT} &= S_i(v_i) + \sum_{j=1}^N \dot{S}_{adv,j}(\bar{v}_j, \bar{V}_j) \\
 S_i &= f(v_i) \\
 \dot{S}_{adv,j} &= g(\bar{v}_j, \bar{V}_j)
 \end{aligned}
 \tag{3-3}$$



式(3-3)僅可計算受對流項影響後控制體積內之物理量總量，仍須透過式(3-4)或(3-5)求得問題之待解變數。式(3-4)是直接以逆運算子將物理量總量轉換為待解變數，因此在實作上不同問題除了需要運算子 f 外，尚需要實作逆運算子 f^{-1} ，且對於非線性之運算子 f 而言，其逆運算子較難推導。而式(3-5)則是以最佳化演算法求得最接近之待解變數，對不同問題而言，可直接沿用已定義之運算子 f 作為問題中的等號限制式，再以最佳化演算法求解。

$$v_i^{PT} = f^{-1}(S_i^{PT}) \quad (3-4)$$

$$\begin{aligned} \min_{v_i^*} Z &= (S_i^{PT} - S_i^*)^2 \\ s, t \\ S_i^* &= f(v_i^*) \end{aligned} \quad (3-5)$$

3.4.4 方程式計算順序設定及儲存容器

方程式集合分析模組完成分析後，會將各種應用問題耦合求解時所需方程式集合及求解順序儲存於本儲存容器中，一種耦合問題即對應一組方程式集合及其求解順序。在使用者決定模擬問題後，即能以對應於該模擬問題之方程式集合進行計算，且所有計算元皆計算相同之方程式集合。

3.4.5 空間離散模組

空間切割在數值模擬問題中，為必要的一個步驟，必須將連續之模擬區域切割成有限區塊之計算節點或計算格網。不同數值方法均有其不同之切割方法，以最常見的有限差分法(FDM)為例，其空間離散方法為矩形網格。本研究採用凡諾依圖 (Voronoi Diagram)作為切割演算法，並以 Delaunay Triangulation 訂定計算節點與相鄰節點之關係 (Delaunay Triangulation 與凡諾依圖之細部說明請詳見附錄 A)，使得空間網格切割上具備更大之彈性。凡諾依圖的最大特性，在於兩個相

鄰計算節點之連線必與對應之穿越邊界正交，如此將便於後續邊界穿越量之計算。

圖 3.7(a)為凡諾依圖、Delaunay Triangle、相鄰節點與連結之示意圖，其中 N_i 、 N_A 、 N_B 與 N_C 為計算節點，取最相鄰的三個節點依序繪成三角形，由計算節點群所構成之三角形稱為 Delaunay Triangle，其與凡諾依圖為對偶圖形。圖上之 $N_iN_A N_B$ 三角形即為 Delaunay Triangle，該三角形各邊中垂線交點(V_2)為三角形之外心，將不同三角形之外心所連區塊即為凡諾依圖，圖上之 $V_1V_2V_3$ 區塊即為 N_i 代表之凡諾依圖。

「可適性計算平台」將凡諾依圖演算法內建於架構中，模式開發者應用「可適性計算平台」開發數值模式，在空間離散上僅需在模擬區域配置計算節點(此計算節點位置即為計算元所在位置)，「可適性計算平台」會依據輸入之計算節點與整體模擬區域邊界，決定計算節點間的相鄰關係，以及計算節點對應之控制區塊，該控制區塊即代表該計算節點之控制體積。

圖 3.7(b)是在模擬區域上規則地等間距配置九個計算節點，透過凡諾依圖演算法可矩形之規則格網，圖上 N_0 、 N_1 至 N_8 代表配置之九個計算節點，包圍計算節點之實線區塊即為該計算節點之控制體積 (Voronoi Diagram)，兩相鄰控制體積共用一個內部控制表面，並以一

個長虛線穿越該內部控制表面，並串連兩個計算節點的連結可與控制表面相交稱為控制表面穿越點，舉例說明： L_0 代表其中一連結，串連計算節點 N_0 與 N_1 ，與對應之控制表面相交於一控制表面穿越點，可以標註其為 $L_{0,1}$ ，圖上 L_0 至 L_{11} 合計共有 12 個內部相控制表面。此外，所有控制體積涵蓋整個模擬區域，因此外圍之控制表面即為模擬區域之邊界，並可各自定義一個邊界穿越點，圖上共有 BN_0 、 BN_1 至 BN_{11} ，合計共有 12 個邊界穿越點。如以計算節點 N_0 為例，其對應之控制體積為四方形，因此有四個環繞之控制表面，其中兩個為內部控制表面，分別為 L_0 與 L_2 ，另外兩個則為邊界控制表面，其上之邊界穿越點分別為 BN_0 與 BN_{11} ，邊界條件是設定於邊界穿越點上。圖中符號 V_0 至 V_{15} 為各控制體積(Voronoi Diagram)之角點。

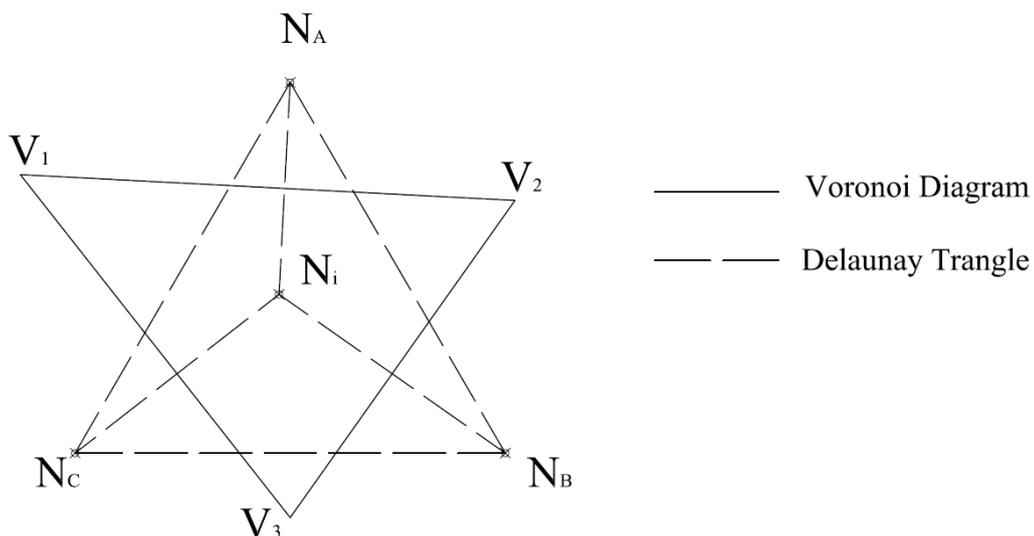


圖 3.7(a) 凡諾依圖與 Delaunay Triangle 示意圖

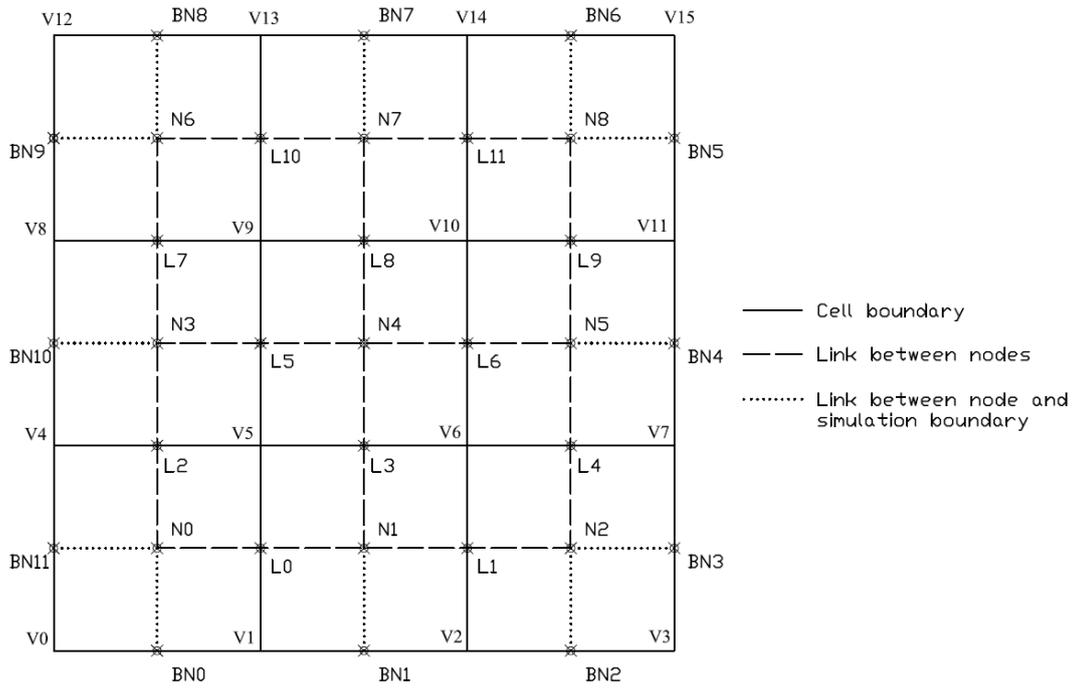


圖 3.7(b) 凡諾依圖之網格架構圖



表 3.1 圖 3.7(b)之節點、相鄰節點、相鄰連結與相鄰邊界虛擬點對應

表

節點	相鄰節點	相鄰連結	相鄰邊界虛擬點
N_0	N_1 與 N_3	L_0 與 L_2	BN_0 與 BN_{11}
N_1	N_0 、 N_2 與 N_4	L_0 、 L_1 與 L_3	BN_1
N_2	N_1 與 N_5	L_1 與 L_4	BN_2 與 BN_3
N_3	N_0 、 N_4 與 N_6	L_2 、 L_5 與 L_7	BN_{10}
N_4	N_1 、 N_3 、 N_5 與 N_7	L_3 、 L_5 、 L_6 與 L_8	
N_5	N_2 、 N_4 與 N_8	L_4 、 L_6 與 L_9	BN_4
N_6	N_3 與 N_7	L_7 與 L_{10}	BN_8 與 BN_9
N_7	N_4 、 N_6 與 N_8	L_8 、 L_{10} 與 L_{11}	BN_7
N_8	N_5 與 N_7	L_9 與 L_{11}	BN_5 與 BN_6

3.4.6 材質參數儲存容器

空間上各種物理量的變化常受到承載此物理量的介質特性的影響，而此介質的特性常以各種參數代表之，本研究統稱為材質參數。以水流、熱流及溶質傳輸為例，其分布會受到多孔介質之水文地質參數影響，圖 3.8 為土壤材質與網格分布示意圖，圖面上虛線描繪出不同材質區塊，實線描繪出網格，以圖 3.8 為例，圖上共分三種不同之土壤材質，包含 Material #1、#2 與 #3 三區，因此不同網格都應隸屬於對應的材質區塊。圖上顯示，節點 N_0 與 N_1 位於材質區塊 #2 中，而節點 N_2 則位於材質區塊 #3 中，藉由空間幾何關係之判定可知節點與材質區塊之對應關係。

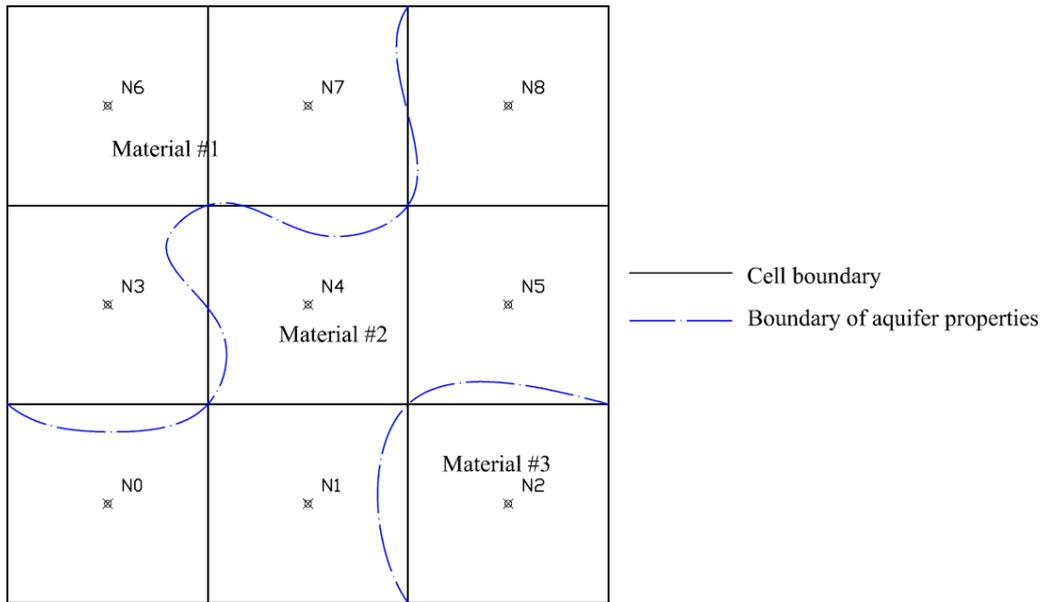


圖 3.8 材質與網格分布示意圖

3.4.7 邊界條件設定與儲存容器

圖 3.9 為邊界條件與網格配置示意圖，其中粗線為設定之邊界條件，圖上共有七個線段，包含 \overline{AB} 、 \overline{BC} 、 \overline{CD} 、 \overline{DE} 、 \overline{EF} 、 \overline{FG} 與 \overline{GA} ，線段上各自之邊界條件，分別可為 BC #1、#2、#3、#4、#5、#6 與 #7。由 3.4.1 節之可適性計算架構網格結構得，從節點往模擬邊界之垂直投影稱為「邊界穿越點」，各邊界穿越點對應之邊界條件，以 BN_0 為例，在空間上位於線段 \overline{AB} 上，因此其對應之邊界條件為 BC #1。

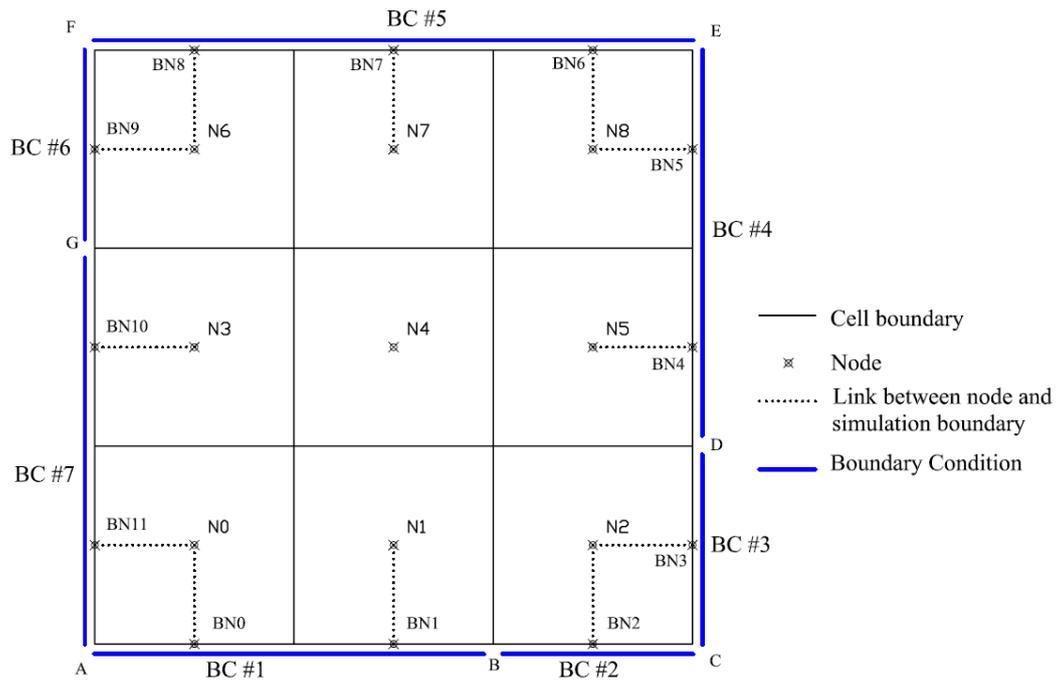


圖 3.9 材質與網格分布示意圖

3.4.8 源匯項設定與儲存容器

圖 3.10 為源匯點與網格配置示意圖，實線則為網格之控制體積，網格中央是其計算節點，圖上有三個源匯點，分別為 Source #1、#2 與 #3，分別位於計算節點 N_0 、 N_4 與 N_6 之控制體積內部。

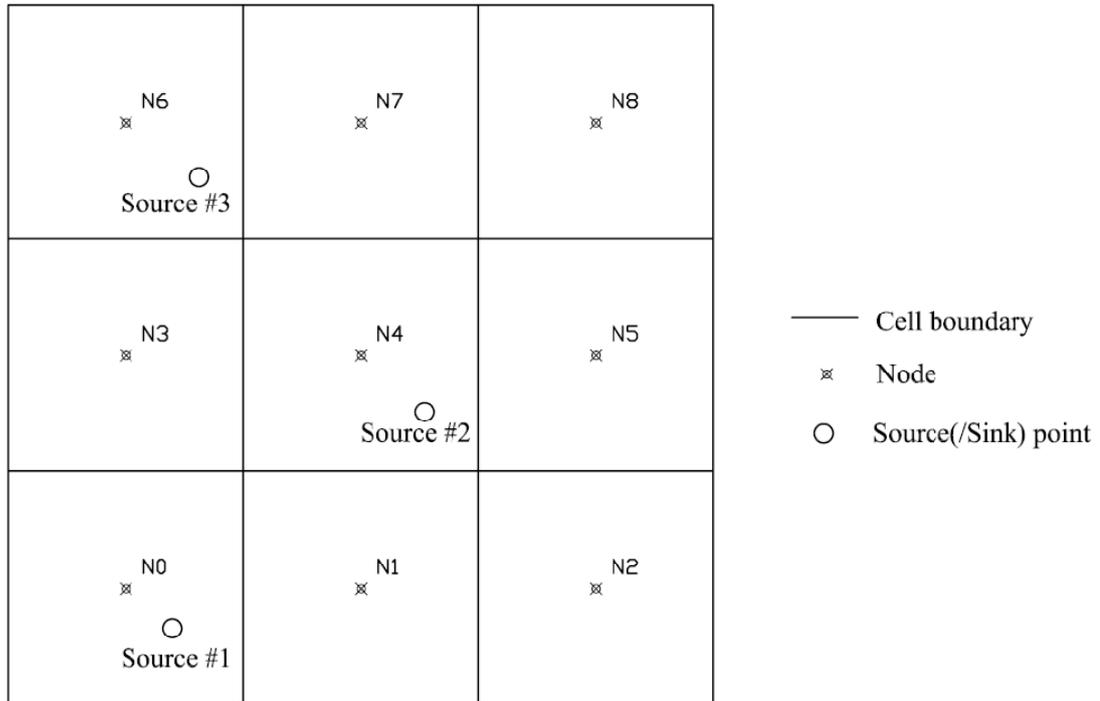


圖 3.10 源匯點與網格配置示意圖

3.5 方程式集合分析模組建置

為了檢驗分析應用模組中，各應用模組的方程式集合所定義之變數與方程式關係是否完整(well-defined)、及定義方程式集合之求解順序以及同時求解多個應用模組時，橫跨應用模組間之變數傳遞關係，本研究建置方程式集合分析模組進行分析。分析結果將儲存於核心計算模組之「方程式計算順序設定與儲存容器」中。以下將依序說明分析單一應用模組之方程式集合之分析概念、分析方法以及多應用模組之方程式集合分析方法。

3.5.1 單應用模組方程式集合分析

3.5.1-1 方程式與變數分析概念說明

方程式定義了其應變數與自變數之關係，本研究以此為基礎，分析方程式集合。在各應用模組內所建置之方程式集合乃多條具有變數相依關係之方程式，因此分析方程式間之自變數與應變數關係即可得知此方程式集合之方程式與變數定義是否完整以及方程式之求解順序，底下以簡例進一步說明。

假設有多條方程式彼此之間存在變數相依關係，方程式定義如式(3-6)~(3-10)所示，(3-6)式為守恆方程式，如質量守恆、動量守恆或能量守恆方程式，(3-7)~(3-10)式為輔助方程式。由(3-6)式可知，若要求解守恆方程式則必須先求解變數 V_1 ， V_2 ， V_3 三個自變數，而要求解此三個自變數則須找出以此三個自變數為應變數之方程式，分別為式(3-7)、(3-8)及(3-9)，以此類推，則可整理出此五條方程式之變數相依關係，如圖 3.11 所示。因本研究使用最佳化方法求解方程式集合，因此在求解時須給定待解變數一初始猜值，若令 V_4 為待解變數，則 V_4 即為已知，詳細求解說明請見 3.4.1 節。接著可由方程式 f_e 求得變數 V_5 ，以及 V_2 ；求得 V_5 後，透過方程式 f_b 即可求得變數 V_1 ，而求得 V_2 後即可透過方程式 f_d 求得變數 V_3 ，由此可知此五條方程式皆為

可解，而依方程式間之變數相依關係可將方程式整理出三組關係，分別為 $(f_e \rightarrow f_b \rightarrow f_a)$ ， $(f_c \rightarrow f_a)$ ， $(f_c \rightarrow f_d \rightarrow f_a)$ ，方程式之求解順序為 $(f_e \rightarrow f_c \rightarrow f_b \rightarrow f_d \rightarrow f_a)$ ，其中， f_e 或 f_c 皆可為最先求解之方程式，因為 f_e 與 f_c 皆位於三組變數相依關係中的第一順位且其自變數即為待解變數且不為其他方程式之應變數，故兩者位於相同位階，兩者皆可為第一優先求解之方程式。

$$f_a(V_1, V_2, V_3) = 0 \quad (3-6)$$

$$V_1 = f_b(V_5) \quad (3-7)$$

$$V_2 = f_c(V_4) \quad (3-8)$$

$$V_3 = f_d(V_2) \quad (3-9)$$

$$V_5 = f_e(V_4) \quad (3-10)$$

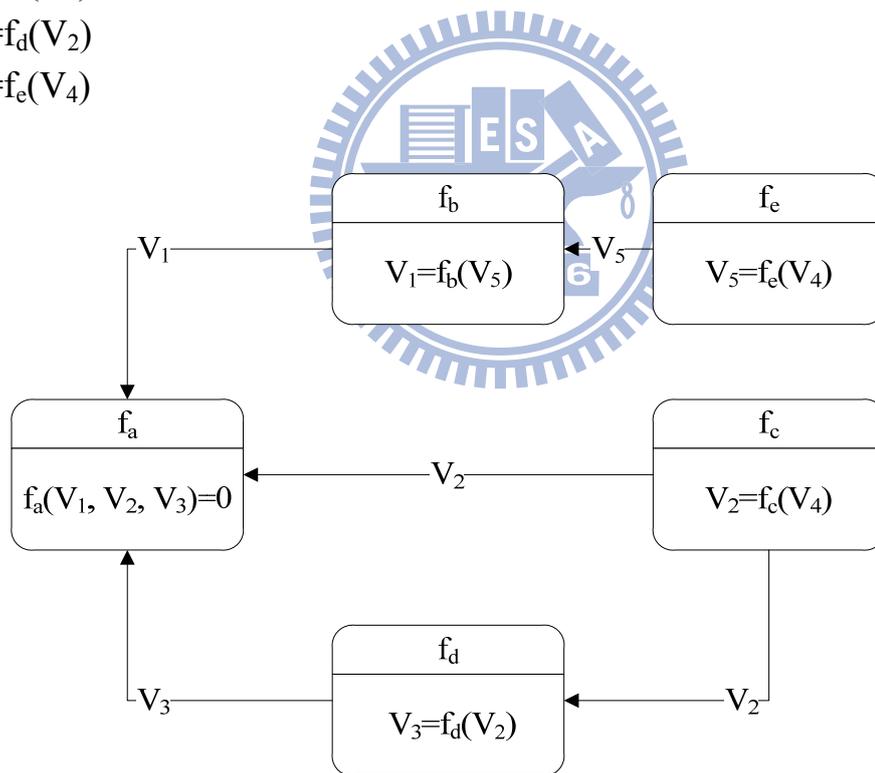


圖 3.11 方程式相依關係圖

3.5.1-2 單應用模組方程式集合分析說明

上述簡例只有五條方程式及五個變數，因此可容易的分析出方程式與變數之關係是否定義良好及方程式的求解順序。然當一問題之運動機制複雜時，則需以較多之方程式進行描述，若欲直接由方程式間之變數關係進行分析，則執行上會有其複雜度，因此本研究建立一「應用模組方程式集合分析演算法」，輔助分析方程式集合。此一演算法包含二個部份，第一個部份為建置方程式與變數關係矩陣，第二個部份為應用樹狀搜尋法分析方程式間之求解順序，以下將分別進行說明。

(1) 建置方程式與變數關係矩陣

為了有系統的整理變數與方程式之關係，本研究以矩陣的方式來描述方程式與變數間之關係，此矩陣之列為變數，行為方程式。假設七條方程式如式(3-11)~(3-17)所示，若將方程式與變數之關係整理成矩陣，可得矩陣如表 3.2 所示。矩陣中各個變數皆有其對應數值，其中 0 代表方程式未包括此變數，1 代表此變數為方程式之自變數，2 代表方程式之應變數，若以第二行為例，第二行代表方程式 f_b ，其自變數為 V_2 與 V_6 ，應變數為 V_3 。在此方程式集合中，方程式 f_a 為守恆方程式，而令變數 V_0 為待解變數(或稱待解變數)。

$$\text{error} = F_a(V_1, V_3, V_4, V_5) \quad (3-11)$$

$$V_3 = f_b(V_2, V_6) \quad (3-12)$$

$$f_c: V_5 = \text{constant} \quad (3-13)$$

$$V_4 = f_d(V_0) \quad (3-14)$$

$$V_1 = f_e(V_0) \quad (3-15)$$

$$V_2 = f_f(V_0) \quad (3-16)$$

$$f_g: V_6 = \text{constant} \quad (3-17)$$

表 3.2 簡例之變數方程式關係矩陣

方 程 式 變 數	f_a (第 0 行)	f_b (第 1 行)	f_c (第 2 行)	f_d (第 3 行)	f_e (第 4 行)	f_f (第 5 行)	f_g (第 6 行)
V_0 (第 0 列)	0	0	0	1	1	1	0
V_1 (第 1 列)	1	0	0	0	2	0	0
V_2 (第 2 列)	0	1	0	0	0	2	0
V_3 (第 3 列)	1	2	0	0	0	0	0
V_4 (第 4 列)	1	0	0	2	0	0	0
V_5 (第 5 列)	1	0	2	0	0	0	0
V_6 (第 6 列)	0	1	0	0	0	0	2
error	2	0	0	0	0	0	0

(2) 應用樹狀搜尋法(tree search)於方程式集合分析

將前一小節之方程式集合建立方程式變數關係矩陣後，可將此方程式集合中各個方程式與自變數或應變數之關係轉換為座標(列，行)，藉由此座標資訊，搭配樹狀搜尋法中之先深後廣(Depth-first)搜

尋方式，可在分析方程式集合上得到良好的效果，以下將說明以前述簡例為例，如何以樹狀搜尋法搜尋方程式之求解順序。首先，選擇守恆方程式所在行，以該行之應變數座標做為起點，亦即為搜尋樹之根節點(root node)。表 3.2 之守恆方程式所在行位為第 0 行，因本研究以最佳化方法求解方程式集合，其目標函數為使守恆方程式之誤差最小，故需在守恆方程式上增加上一誤差項，且該誤差項為應變數，因此該誤差項所在座標作即為根節點。接著搜尋第 0 行之自變數座標，亦即該行位上值為 1 之座標，分別為(1,0)，(3,0)，(4,0)，(5,0)四個節點。當同時搜尋到多個自變數或應變數時，回溯其上一個節點，此同時銜接多個自變數或應變數之節點本研究稱為「分枝節點(branch node)」。搜尋到四個自變數後，接著再搜尋位於此四個自變數所在列之應變數，並將之紀錄下來，搜尋應變數之原因為若此自變數為可解，則此自變數至少必為方程式集合中某一方程式之應變數。因為本研究採用樹狀搜尋中先深後廣的搜尋方式，因此會先搜尋完一條「分枝」(branch)後，再搜尋下一條分枝，因此在搜尋過程之說明上以搜尋節點(1,0)為例繼續說明。點(1,0)其所在列為第 1 列，而其同一列之應變數座標為(1,4)，亦即變數 V_1 為方程式 f_a 之自變數，亦為方程式 f_c 之應變數。接著搜尋位於此應變數所在行之自變數，並記錄其座標位置，搜尋此自變數之原因為若要求解此應變數則必須先求得該自變數，則

此方程式才為可解，該自變數座標為(0,4)。由於自變數 V_0 為待解變數，該自變數視為可解，因此可以確定變數 V_1 為可解，而(0,4)即為終端節點(terminal node)。整理變數 V_1 之應變數與自變數求解順序，以座標表示可得((1,0) \rightarrow (1,4) \rightarrow (0,4))，此即為一完整的「分枝」，本研究稱此關係為變數 V_1 之「求解路徑」。由以上邏輯類推，可得知如何求得變數 V_3 、變數 V_4 及變數 V_5 ，依上述變數求解過程整理為樹狀圖，如圖 3.12 所示。由於此搜尋樹以守恒方程式為起點往外搜尋，因此實際上的求解順序與解路徑相反，即必須由此搜尋樹的終端往根部的方向計算。另外，當一個方程式之應變數為可解，則此方程式必為可解，因此由解路徑末端往回尋找應變數所在位置，記錄應變數所在行，亦即記錄該應變數所在方程式，如此則可找出根部(root)底下四個自變數相關方程式求解順序。例如變數 V_3 之求解路徑上，因為在應變數所在位置 (3,1) 處出現分叉(如圖 3.12 所示)，代表該應變數需在兩個自變數皆為可解時，該應變數才為可解，因此首先求解之方程式為位於第 5 行之方程式 f_f ，以及位於第 6 行之方程式 f_g ，接著才能求解位於第 1 行之方程式 f_b 。由於本研究採用先深後廣的搜尋法，因此在分歧節點(3,1)時，會先往下搜尋(2,1)到(0,5)，接著回到(3,1)再往下搜尋(6,1)到 (6,6)。將守恒方程式所有自變數之求解路徑整理如下：

- V1: f_e
- V3: $\{f_f, f_g\} \rightarrow f_b$
- V4: f_d
- V5: f_c

得到守恒方程式各自變數之解路徑後即可整理出此簡例之方程式集

合求解順序:

第一階段: f_e, f_f, f_g, f_d, f_c

第二階段: f_b

第三階段: 守恒方程式

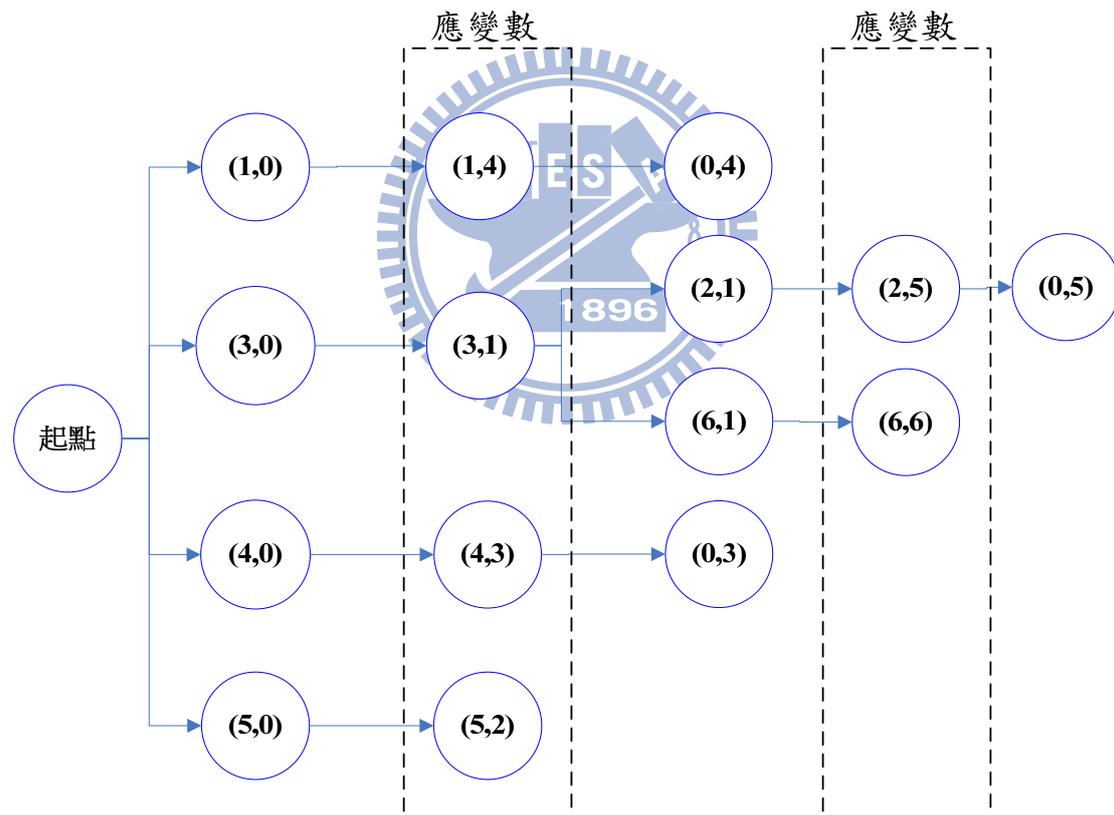


圖 3.12 應用樹狀搜尋法於方程式解路徑分析示意圖

前述簡例僅用於概念性說明本研究如何應用樹狀搜尋法分析方程式集合之方程式求解順序關係，以下將以圖 3.13 說明本研究樹狀搜

尋法之分析實作邏輯。

首先以守恆方程式所在行之應變數為起點(root)，接著於步驟(1)搜尋該行之自變數，若搜尋到多個自變數時，則記錄此多個自變數座標於「變數分歧位置儲存容器」，接著於步驟(2)時，若於步驟(1)中搜尋到多個自變數，則先取出位於變數分歧位置儲存容器中排列於最後之自變數，並記錄其座標於「解路徑儲存容器」，繼續往下搜尋；若只有一個自變數，則直接記錄該自變數座標於解路徑儲存容器中並往下搜尋。步驟三則為分析此解路徑是否已經到達終端節點 (Terminal node)，判斷依據分別為：

- (a)解路徑末端之變數為自變數，且該自變數為待解變數。
- (b)解路徑末端之變數為應變數且該應變數所在行只有應變數。
- (c)解路徑末端之變數為自變數，且該自變數不為待解變數，其所在列亦無應變數。

若符合狀況(a)，則因為待解變數在求解過程中視為已知，因此整個解路徑為可解；若符合狀況(b)，則因為該行只有一個應變數，其意義為該方程式之應變數等於常數，故該解路徑為可解；若為狀況(c)，則因為該自變數不為待解變數，且不為其他方程式之應變數，因此該自變數在方程式集合中無法求解，故此方程式集合定義不完整，需將此自變數輸出，讓使用者再重新檢視方程式集合。

由上述判斷依據可知，在步驟(a)與(c)中均會檢視自變數是否為待解變數，若是，則代表此解路徑可解並接步驟(7)，步驟(7)為刪除位於變數分歧位置儲存容器中，排列順序最後之變數座標，因為目前所搜尋之解路徑乃以分歧位置儲存容器中排列順序最後之分枝節點座標作為往下搜尋之“起點”，當完成解路徑搜尋後，代表已找到該分歧位置之解路徑，因此即可將該“起點”刪除，繼續往下一個分枝(解路徑)搜尋。若以圖 3.12 為例，座標位置(3, 1)即為分歧節點，而(3, 1)底下之(2, 1)與(6, 1)即為分歧位置，當搜尋完(6, 1)之分枝(解路徑)後，即將(6, 1)由分歧位置儲存容器中刪除，接著搜尋(2, 1)之解路徑。步驟(8)為判斷分歧位置儲存容器是否已空，若該容器中已無任何變數，則代表已搜尋完畢，完成所有解路徑搜尋。若分歧位置儲存容器未空，則接步驟(9)，由分枝節點坐標所對應到變數方程式矩陣之值是自變數或應變數來判斷接步驟(1)或(4)，若為自變數則接步驟(1)，若為應變數則接步驟(4)。回到步驟(3)，若此時解路徑未到達終端，則接步驟(4)，搜尋該自變數所在列之應變數，若搜尋到多個應變數時，則將此多個應變數之座標儲存於分歧位置儲存容器。於步驟(5)時，若於步驟(4)中搜尋到多個應變數，則先取出位於變數分歧位置儲存容器中排列於最後之應變數，並記錄其座標於「解路徑儲存容器」，繼續往下搜尋；另外當一自變數所在列同時有多個應變數

時，代表該自變數可有多種求解方式，此時該自變數與同列之應變數座標將另行儲存，以作為後續方程式求解順序分析之用；若只有一個應變數，則直接記錄該座標於解路徑儲存容器中並往下搜尋。接著於步驟(6)時，判斷是否已到達解路徑終端，若是，則接步驟(7)到(10)，若否則接步驟(1)；如此重複所有搜尋步驟，直到完成所有的解路徑搜尋。

待利用樹狀搜尋法求得所有的解路徑後，接著將所有解路徑整理為方程式之求解順序，以下說明分析方式：

由於此搜尋樹以守恆方程式為根部往下搜尋，因此當整理方程式求解順序時，則必須由此搜尋樹的尾端往根部整理。另外，當一個方程式之應變數為可解，則此方程式必為可解，由解路徑末端往回尋找應變數所在位置，記錄應變數所在行，亦即記錄該應變數所在方程式，如此則可找出整棵方程式樹，圖 3.14 即為上述簡例之方程式樹。之後將方程式樹中，各分枝終端節點(Terminal node)之方程式列為第一階段求解之方程式，若終端節點所在處之方程式出現於其他分枝中，若依然位於終端節點，則仍為第一階段求解；若該方程式所在位置不位於終端，則代表求解該方程式前必須先由其他方程式求解該方程式之自變數，之後該方程式才得以求解，同理，之後決定其他階段之方程式亦須遵守此原則。由圖 3.14 可知，簡例的第一階段求解方程式

為第 4, 5, 6, 3, 2 條方程式(亦即方程式 f_e, f_f, f_g, f_d, f_c)。第二階段為第 1 條方程式(即方程式 f_b)，最後階段為守恆方程式(即方程式 f_a)。

若在樹狀搜尋過程中，出現一自變數所在列同時有多個應變數時，則代表此自變數可有多種解法，亦即此自變數為多個方程式之應變數，在樹狀搜尋過程中本研究將此自變數與相關應變數位置另行儲存，所以在進行方程式求解順序分析時，可找出對應前述特定應變數之方程式(稱為特定方程式)，因一個變數在求解時只需用到一條方程式，因此當一個變數出現 n 條特定方程式時，則同一個應用模組內則會產生 n 組方程式集合。假設一自變數所在列有 3 個應變數，代表該自變數可有 3 種解法，但在求解一個變數時只需用到一條方程式，亦即以一條特定方程式搭配其他方程式即可求解問題，故在求解問題時，可以三種方程式集合進行求解。故將此三種方程式集合進行方程式求解順序分析後即可得到 3 組方程式集合之求解順序。

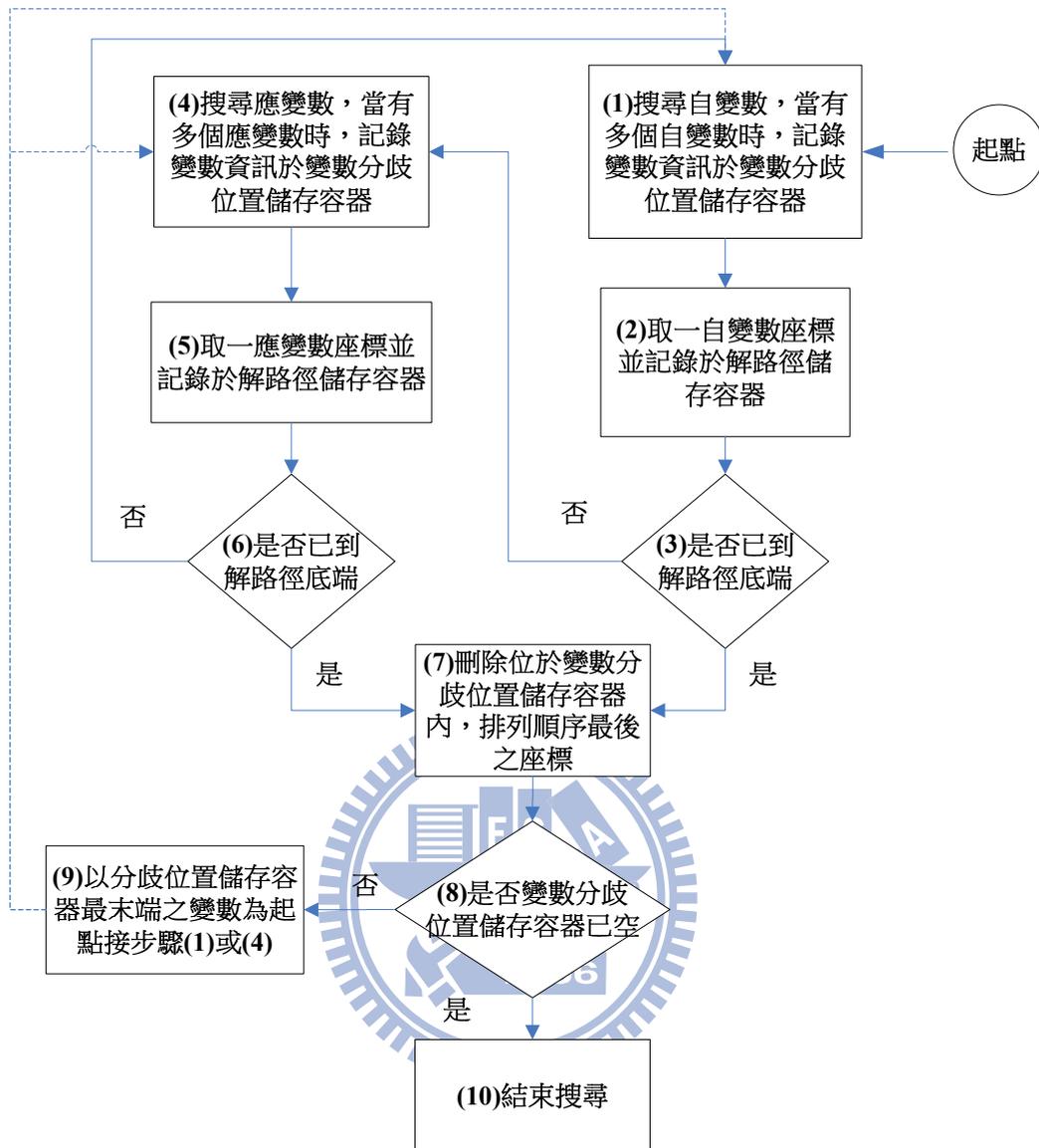


圖 3.13 樹狀搜尋法分析邏輯流程圖

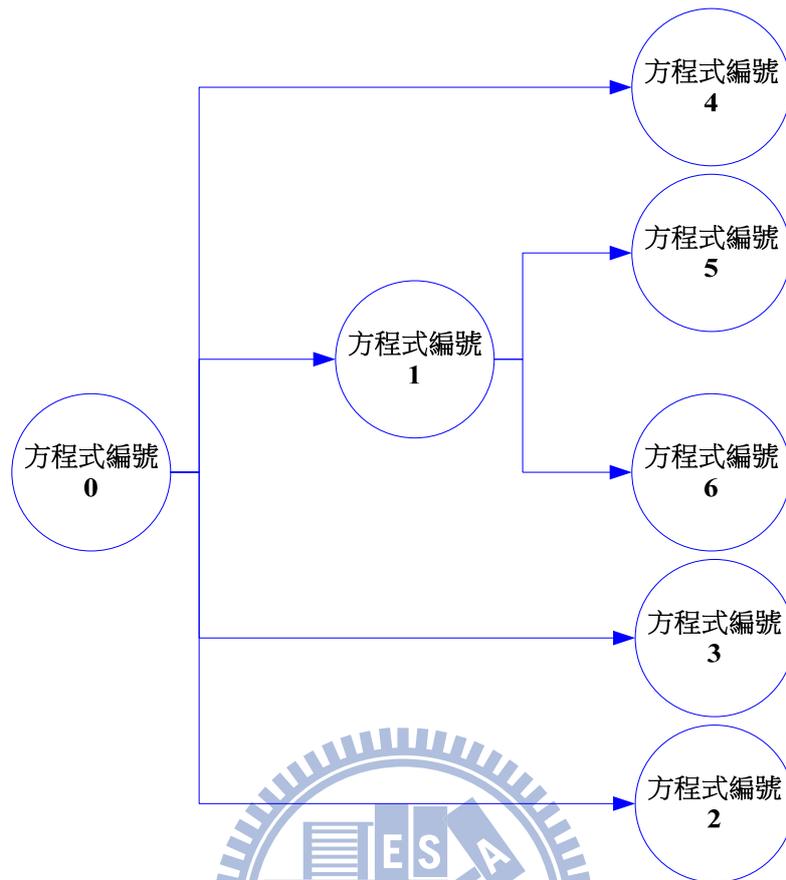


圖 3.14 方程式樹示意圖

3.5.2 多應用模組方程式集合分析

前述 3.5.1 節之方程式集合分析方法只適用於單應用模組，若要同時分析多個應用模組時，仍可以 3.5.1 節所提分析方法為核心，唯在變數方程式矩陣上，及跨模組之變數名稱定義上需再作處理，以下將詳細說明分析方法。

多應用模組之方程式集合分析流程圖如圖 3.15 所示，步驟(1)為選擇要進行分析的應用模組，亦可全部選擇，步驟(2)為建置各應用模組之方程式變數矩陣，建置方法同 3.5.1 節所述，接著步驟(3)為求得各應用模

組間之變數傳遞關係，此步驟為耦合(coupling)求解時所必須考量的步驟，此步驟之分析方法乃由各應用模組之變數名稱作為變數傳遞關係之分析關鍵，本研究所定義之變數名稱之原則為“應用模組代號+變數名稱”若同一個變數出現在不同應用模組，則只會有應用模組代號之差異，變數名稱則完全相同，因此當一個應用模組 A 中，發現一變數 V 無法求解時，即可搜尋其他應用模組之變數是否具有相同變數名稱，且該變數為應變數，假設有一模組 B 具有相同變數名稱之應變數 V，則該應用模組 A 之變數 V 成為可解，且可以定義變數傳遞方向為應用模組 B 傳遞變數 V 至應用模組 A。反之，若無法搜尋到其他應用模組中具有相同變數名稱之變數 V，則須輸出錯誤訊息，請使用者重新檢視該應用模組之方程式與變數定義是否完備。步驟(4)為修正應用模組之變數方程式矩陣，各個應用模組在步驟(2)中皆建立了各自的變數方程式矩陣，唯某些變數可能無法求解(自變數所在列無應變數存在)，此時該應用模組為定義不完全的情況，故其方程式集合應為無法求解，但透過步驟(3)分析其他應用模組之變數名稱後，若發現有相同變數名稱且該變數為應變數，則原應用模組之自變數則無需求解，改為由其他模組傳入，故此變數成為參數而不在是變數，故應將原應用模組之方程式變數矩陣中，該自變數所在列歸零，並記錄該變數之來源應用模組。在完成步驟(4)後，即可得到目前選定之應用模組在耦合求解的情況下，各應用模組之方程式變

數矩陣，接著再以 3.5.1 節所提之樹狀搜尋法分析各個應用模組，於步驟(6)即可求得各應用模組之方程式求解順序。

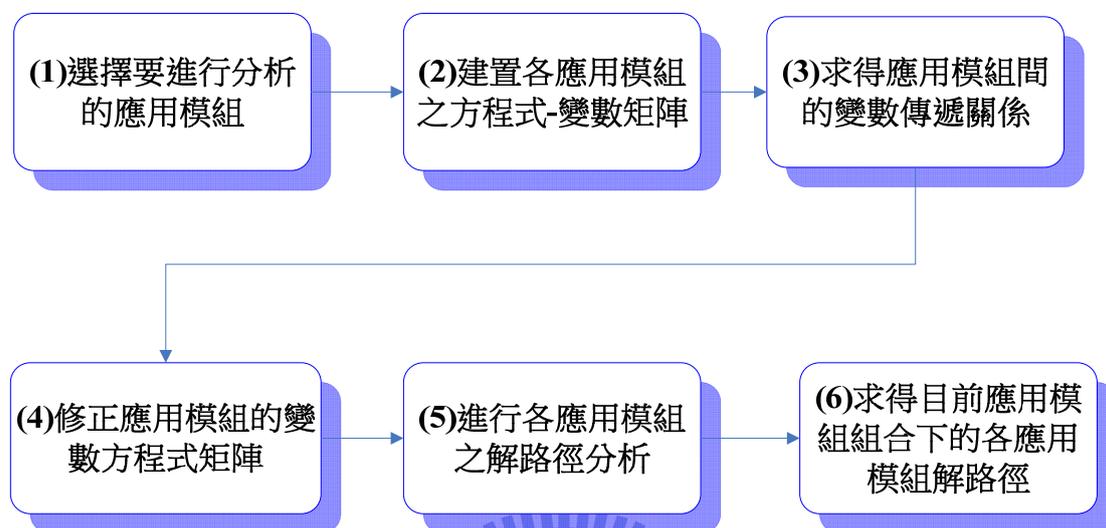


圖 3.15 多應用模組方程式集合分析流程圖

3.6 應用模組儲存容器

應用模組儲存容器為可適性計算平台預留之資料夾，作為儲存應用本平台於特定問題時，開發者所需建立之應用模組之方程式集合。應用模組之實質形式即為檔案，其內為開發者所撰寫之方程式集合程式碼。當模式開發者欲應用本平台求解問題時，需先將描述問題之方程式集合撰寫為程式碼並存放於該問題所屬之應用模組中，在將應用模組置於應用模組容器後，計算平台即可進行後續之計算求解，而應用模組的數量乃由開發者所決定，並無一定數量之限制。應用模組容器，使得模式開發者可以方便及有系統的將應用模組存放於本平台中，因

此本計算平台為一具可擴充性之計算平台。

3.7 變數與參數資料結構

「變數」、「局部參數」與「全域參數」為可適性計算架構中，皆為方程式之相關物理量，其中「變數」為方程式中待計算之變數，隨著變化過程而有不同之數值，「局部參數」與「全域參數」則為不隨模擬計算而逐步變化之物理量。此外，「局部參數」之涵蓋範圍僅侷限部分模擬區域，涵蓋範圍亦即前述 3.4.6 節所述之材質區塊，因此整體模擬區域可能必須由數組局部參數方可描述；與「局部參數」不同，「全域參數」之涵蓋範圍則包含整體模擬區域。

3.7.1 變數資料結構

在 3.4.5 小節中已經說明可適性計算架構中的格網組成元素，包含節點、連結與邊界穿越點三種，因此變數之儲存結構亦分為「節點」、「連結」與「邊界穿越點」三種，如圖 3.16 所示，運算時方程式會依據所需，分別從對應之位置取得自變數數值，再將方程式計算所得之應變數數值儲存於對應位置。從前述 3.4.5 小節可知，經過凡諾依圖運算分析後，整體格網之節點數目、連結數目、邊界穿越點數目與相互間之相鄰關係均已記錄下來，因此在變數儲存上亦可依據其數量分別對應至不同元素。

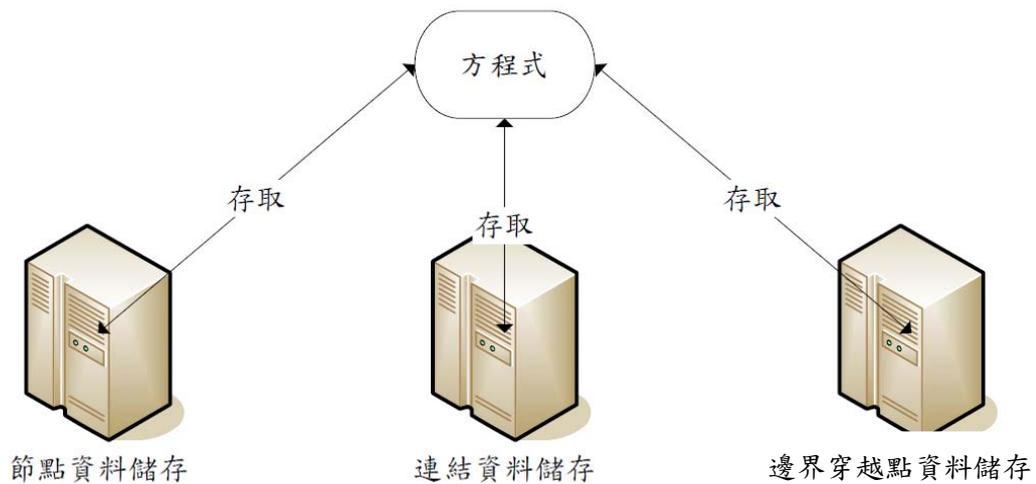


圖 3.16 資料儲存結構示意圖

此外，為完整計算一個問題，需要由許多不同物理量來描述問題本身。舉例說明：一個地下水流的問題中，可能同時需要壓力水頭、水力傳導係數、溶液密度、穿越水質量與總水頭等數個變數來組成地下水之控制方程式，因此資料結構上將建立一個二維矩陣，如圖 3-16 與圖 3-18 示，一個方塊代表一個矩陣值。在節點資料儲存中，該二維矩陣之大小為 $N \times O$ ， N 代表節點個數， O 則代表物理量變數個數；在連結資料儲存中，該二維矩陣之大小為 $M \times O$ ， M 則代表連結個數；在邊界穿越點資料儲存中，該二維矩陣之大小為 $B \times O$ ， B 則代表邊界穿越點個數。

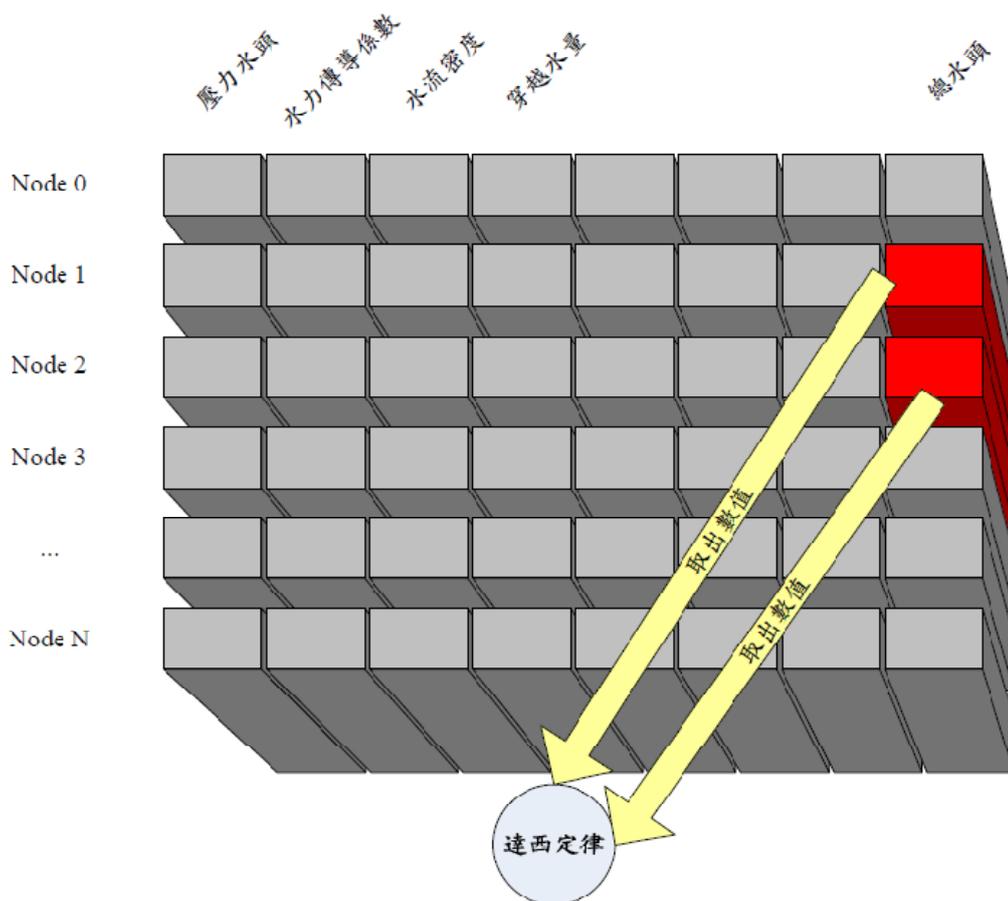


圖 3.17 節點變數資料結構與函數運作關係圖

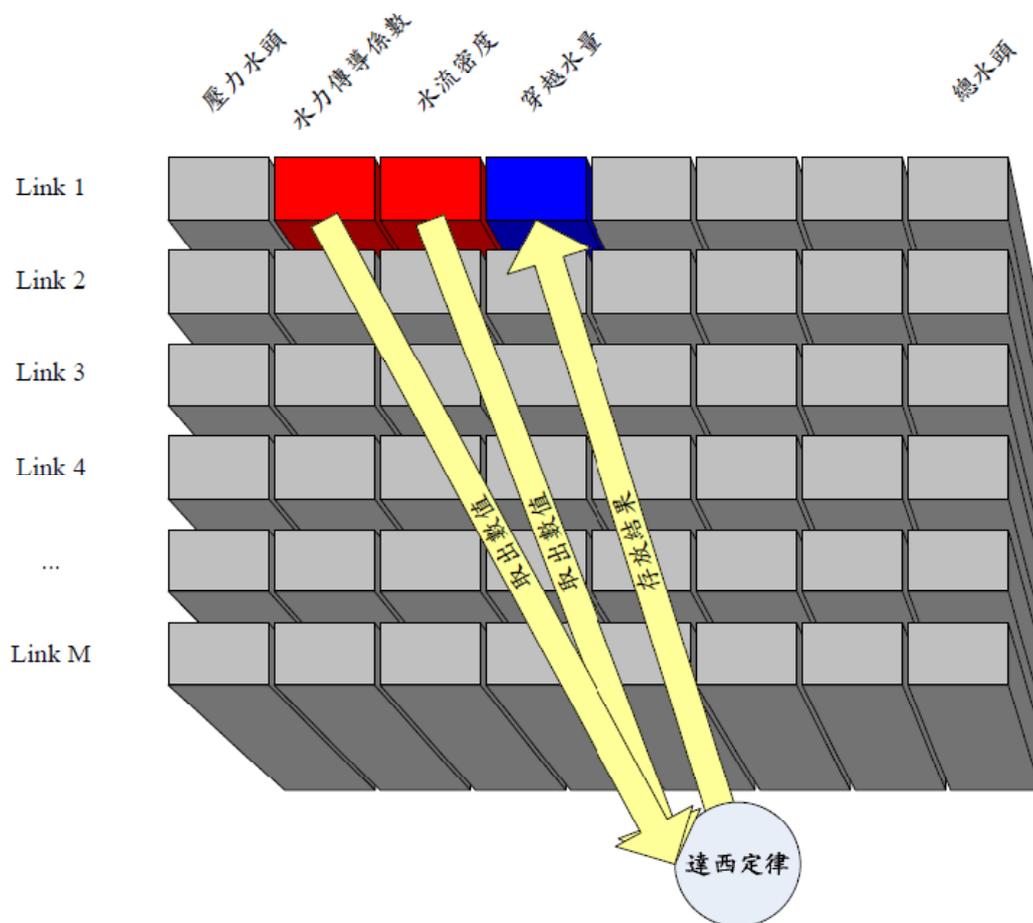


圖 3.18 連結變數資料結構與函數運作關係圖

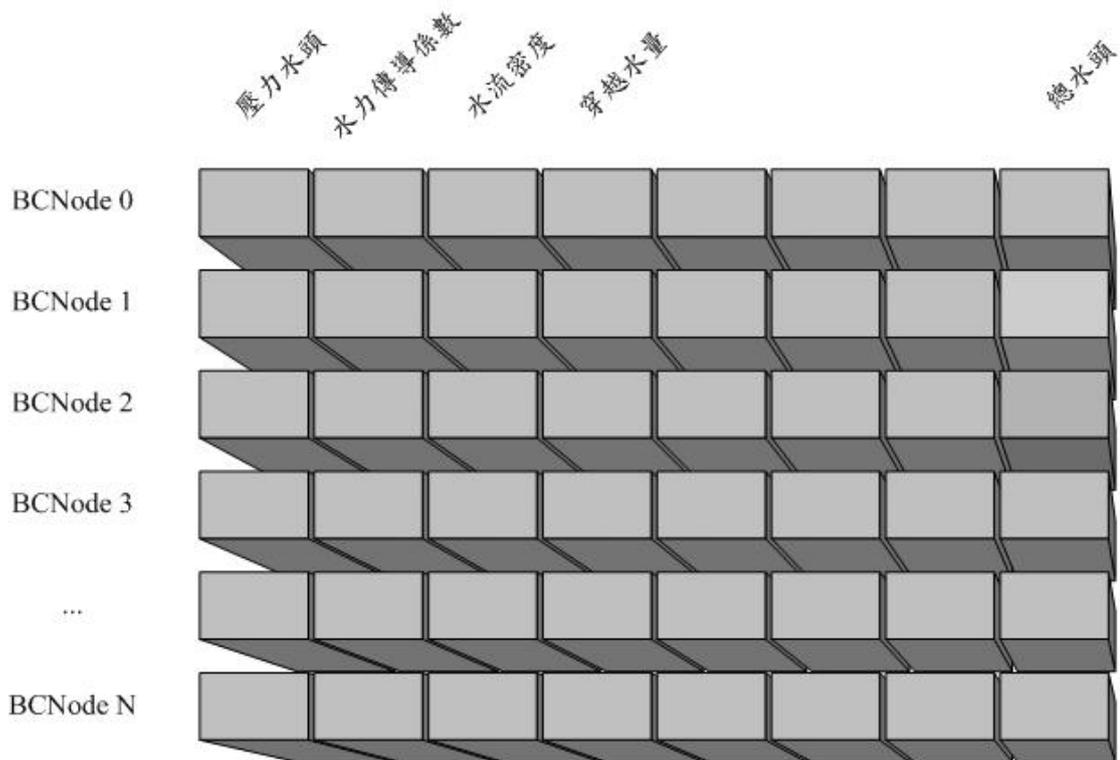


圖 3.19 邊界穿越點變數資料結構圖

式(3-18)為離散後之達西定律，為地下水流問題中重要的流通量計算方程式，若以達西定律為例，假設節點 N_1 與 N_2 為相鄰節點，串連兩節點的是連結 L_0 ，亦可稱之為連結 $L_{1,2}$ ，從圖 3-16 可知，方程式從節點 N_1 與 N_2 取出其總水頭 (h_1 與 h_2) 之數值。此外從圖 3-17 可知，方程式亦從連結資料上取出水力傳導係數 ($K_{1,2}$) 與溶液密度 ($\rho_{1,2}$)，經過方程式運算後，其應變數為穿越水量 ($m_{1,2}$)，亦透過相同之方式存放於連結資料中。而邊界穿越點之變數資料取得與儲存方式亦同節點變數。

$$\dot{m}_{ij} = -\rho_{ij} K_{ij} \frac{h_i - h_j}{|\vec{ij}|} \quad (3-18)$$

此外，部分暫態(Transient)問題同時考量時刻 t 與 $t+\Delta t$ 之綜合影響，因此所儲存之變數必須包含時刻 t 與 $t+\Delta t$ 兩者，以式(3-19)為例，其為地下水流之離散方程式，其在時刻 t 與 $t+\Delta t$ 之間之控制體積內部變化率需等於相同時段內的平均穿越率，因此在計算上需要取出時刻 t 與 $t+\Delta t$ 之總水頭(h_i^t 與 $h_i^{t+\Delta t}$)。

$$s \frac{h_i^{t+\Delta t} - h_i^t}{\Delta t} = K \left[\omega \frac{h_{i+1}^t + h_{i-1}^t - 2h_i^t}{\Delta x^2} + (1-\omega) \frac{h_{i+1}^{t+\Delta t} + h_{i-1}^{t+\Delta t} - 2h_i^{t+\Delta t}}{\Delta x^2} \right] \quad (3-19)$$

綜合前述說明，可適性計算架構之資料位置型別可分為「節點」、「連結」與「邊界穿越點」三種位置型別，分別與實際格網相互對應，各節點、連結或邊界穿越點均包含 O 個物理量變數，在時間上又分為時刻 t 與 $t+\Delta t$ 兩種，若以節點為例，實際矩陣可表示為一個三維矩陣，且其大小應為 $N \times O \times 2$ 。

3.7.1-1 變數空間推估

控制表面上之空間參數推估：前述 3.4.5 節說明了「可適性計算架構」之格網結構，其中包含了計算節點與對應之控制體積，此外相鄰控制節點會兩兩形成一個相鄰邊界，串連兩相鄰節點之連結可作為代表該相鄰邊界。此外，在 3.7.1 節亦說明了對應的資料結構，計算上

大部分的變數物理量多是先給定於節點類型變數，因此連結類型變數則需藉由兩端點數值來推估計算，圖 3.20 為空間變數或參數推估示意圖，圖上連結 L_0 之兩端節點分別為 N_0 與 N_1 ，推估方法如下列所示：

算數平均(Arithmetic mean)：算術平均為最常見之平均方法，因此如無前期研究之建議，多直接以算術平均進行推估。

$$x_{L0} = \frac{x_{N0} + x_{N1}}{2} \quad (3-20)$$

幾何平均 (Geometry mean)：

$$x_{L0} = \sqrt{x_{N0} \cdot x_{N1}} \quad (3-21)$$

調和平均 (Harmonic mean)：

$$\frac{1}{x_{L0}} = \frac{1/x_{N0} + 1/x_{N1}}{2} \quad (3-22)$$

上風法 (Upwind method)：某些特定物理量，其受到水流移動而隨之移動，此類物理量之空間推估則適合採用上風法，其透過水流的移動速度向量(\vec{V})，來判斷上風位置(upstream)，再直接取上風位置之數值作為推估結果。

$$x_{L0} = \begin{cases} x_{N0} & \text{for } \vec{V} \cdot \hat{i} > 0 \\ x_{N1} & \text{for } \vec{V} \cdot \hat{i} < 0 \end{cases} \quad (3-23)$$

- 局部參數資料結構：

在不同問題之控制方程式中，有許多物理量是不隨計算而改變，可在模擬之初直接設定為常數定值，又可稱為參數。然有部分參數之數值並非涵蓋整個模擬區域，不同區塊需設定為不同之參數值，因此稱之為「局部參數」。在許多飽和拘限之地下水流模式中，飽和水力傳導係數(K)與儲水係數(s_s)為模式中的局部參數，水文地質參數數值具備高度之不確定性與變異性，因此土壤材質之設定有其空間上之變異性，是故土壤材質屬於一種局部參數。



圖 3.21 為局部參數與節點隸屬關係示意圖，亦即局部參數之定義包含其對應之數值與涵蓋範圍，而計算節點與局部參數之隸屬關係則利用空間幾何進一步決定。圖上包含三組局部參數與十一個節點，圖上藉由箭號表示節點與局部參數之隸屬關係，可適性計算架構會自動記錄節點與局部參數之對應關係(如表 3.3 所示)，供後續計算時使用。每組局部參數中均包含多個物理量參數，參數的名稱與個數則與所探討的問題本質與控制方程式有關。

- 全域參數資料結構：

在控制方程式中，有部分參數之適用範圍涵蓋整個模擬區域，例如：重力加速度 (g) 或大氣壓力(p_0)等，因此全域參數之設定亦包含多

個物理量參數，全域參數的名稱與個數則視所探討的問題本質與控制方程式而定。

表 3.3 節點與局部參數隸屬關係對應表

局部參數 編號	節點編號
0	N_0 、 N_5 、 N_6
1	N_1 、 N_2 、 N_3 、 N_7
2	N_4 、 N_8 、 N_9 、 N_{10}

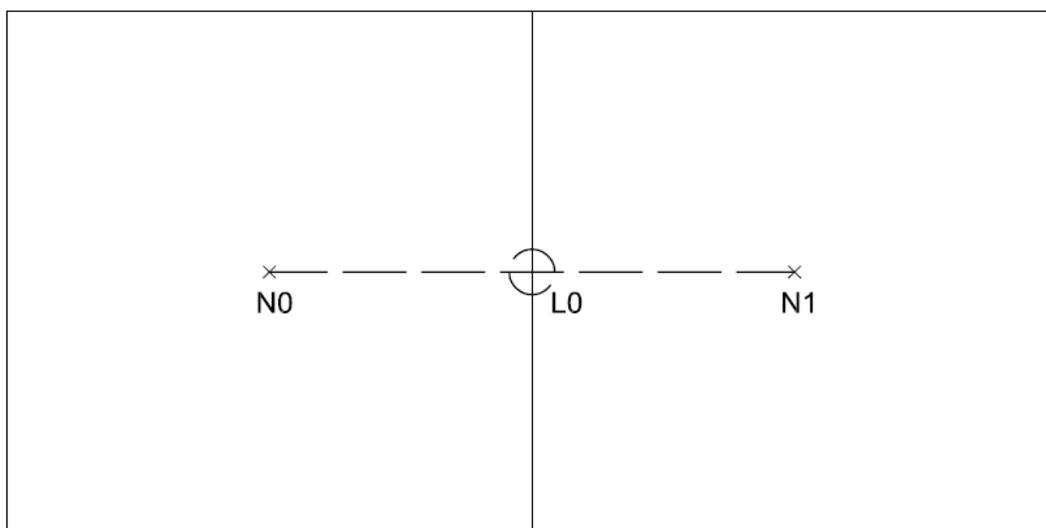


圖 3.20 空間變數或參數示意圖

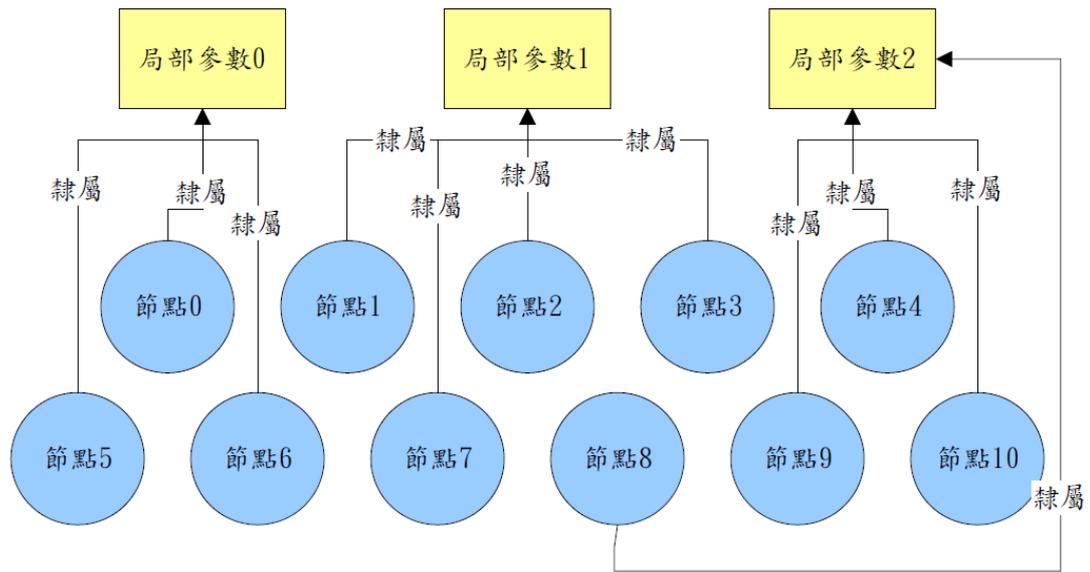


圖 3.21 局部參數與隸屬節點關係示意圖

當完成上述各模組之開發後，即完成可適性計算平台之建置，而應用本平台所開發之數值模式具有可彈性增減方程式之特點，因此應前述開發流程，經適當規劃可實作如目前瀏覽器上常應用之插入(Plug In) 型的數值模式建構系統(圖 3.22)，此亦為大幅超出傳統數值建模方法之處。

第四章 地下水流、熱流及污染物傳輸模式建置

由前述第三章之可適性計算平台系統圖可知，應用模組容器可儲存多個應用模組，而各應用模組內則存放描述各類問題運動機制之方程式集合。在本研究中，一完整的應用模組應具備三種方程式，包括守恆方程式、流通方程式及輔助方程式。守恆方程式乃指一控制體積內部某物理量之變化量，等於穿越控制表面總量之和，如質量守恆方程式、動量守恆方程式與能量守恆方程式。流通方程式則用來定義不同的穿越機制穿越控制表面之物理量值，此方程式亦即描述計算元間互動關係之方程式，本研究概稱為流通方程式(flux law)，如地下水流問題中之達西公式(Darcy's Law)，污染物傳輸問題之 Fick's Law。接著為輔助求解守恆方程式及流通方程式之變數而需再加入之方程式，本研究統稱為輔助方程式(auxiliary laws)。本章所說明之各應用模組皆包含上述三類方程式。

第一節將先說明地下水流、熱流及污染物傳輸三個應用模組之數學模式，本研究以 Tough2 V2.0(Pruess et al., 1999) 及 HST3D V2.0(Kipp, 1997)模式作為驗證對象，因此將以此兩模式應用之方程式作為參考依據建立方程式集合。在各應用模組之方程式集合中，部分方程式包含(a)式與(b)式，其中(a)式為參考 Tough2 所建立之方程式，(b)式為參

考 HST3D 所建立之方程式，其他未區分為(a)(b)兩式之方程式為兩者皆需使用之方程式。因本研究直接以方程式集合進行計算，故當與 Tough2 比較驗證時，則採用(a)式及其他共用方程式，與 HST3D 驗證時，僅需將(a)式抽換為(b)式即可與 HST3D 進行比較驗證。當以傳統數值方法建模時，若要將原模式中使用之(a)式抽換為(b)式，則需重新推導偏微分方程式，重新離散偏微分方程式，重新推導矩陣方程式即重新撰寫數值程式，十分耗費模式開發者心力，但本研究僅需將(a)式直接抽換為(b)式，再離散(b)式及撰寫(b)式之程式碼即可，此亦即本研究所提之「擴充性」。第二節說明各應用模組之方程式集合及如何進行時空離散，之後將可以此離散化之方程式集合應用於各計算元之數值計算。



4.1 數學模式說明

本節將詳細說明各應用模組所使用之方程式，以下分別對各個應用模組進行說明。

4.1.1 地下水流應用模組

在地下水流應用模組中，式(4-1)為守恆方程式，式(4-7)為流通方程式，其餘方程式皆屬輔助方程式，底下將詳細說明各條方程式。

4.1.1-1 建立地下水流方程式集合

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} n \rho_{wl} S_d dV_{CV} \right) d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{M}_{wl} d\tau - \int_t^{t+\Delta t} (q_{wl}(\tau)) d\tau = 0, \dot{M}_{wl} = \oint_{CS} \dot{m}_{wl} dA_{CS} \quad (4-1)$$

$$\begin{cases} P = \rho_{pw}^0 g p \\ P_{bar} = \mathfrak{S}_{unit}\{P, [ML^{-1}T^{-2}] = bar\} \end{cases} \quad (4-2)$$

$$\rho_{pw} = IAPWS_1997_Density(P, T_K) \quad (4-3a)$$

$$\rho_{pw} = \rho_{pw}^0 + \rho_{pw}^0 \beta_p (P - P^0) + \rho_{pw}^0 \beta_T (T_C - T_C^0) \quad (4-3b)$$

$$\begin{cases} \rho_{wl} = \frac{1}{\left(\frac{1-C_1}{\rho_{pw}} + \frac{C_1}{\rho_b} \right)} \\ \rho_b = \rho_b^0 \frac{\rho_{pw}}{\rho_{pw}^0} \end{cases} \quad (4-4a)$$

$$\begin{cases} \rho_{wl} = \rho_{pw} + \rho_{pw}^0 \beta_{C_1} (C_1 - C_1^0) \\ \rho_{pw}^0 \beta_{C_1} = \left. \frac{\rho_{wl}(C_{1max}) - \rho_{wl}(C_{1min})}{C_{1max} - C_{1min}} \right|_{P^0, T_C^0} \end{cases} \quad (4-4b)$$

$$\begin{cases} S_d = \frac{\theta_r}{\theta_s} + \theta_e \left(1 - \frac{\theta_r}{\theta_s} \right) \\ \theta_e = \begin{cases} \left\{ [1 + (\alpha_{van} p_{cm})^{\beta_{van}}]^{1-1/\beta_{van}} \right\}^{-1} & \text{for } p < 0 \\ 1 & \text{for } p \geq 0 \end{cases} \\ P_{cm} = \mathfrak{S}_{unit}\{p, [L] = cm\} \end{cases} \quad (4-5)$$

$$\begin{cases} K_{wl} = \frac{\mu_{pw}^0 \rho_{wl}}{\mu_{wl} \rho_{pw}^0} K_{ws} K_{wr}(p) \\ K_{wr} = \theta_e^{0.5} \left[1 - \left(1 - \theta_e^{\beta_{van}/(\beta_{van}-1)} \right)^{1-1/\beta_{van}} \right]^2 \end{cases} \quad (4-6)$$

$$\begin{cases} \dot{m}_{wl} = \rho_{wl} \vec{V}_{darcy} \\ \vec{V}_{darcy} = -K_{wl} \frac{\partial h}{\partial s} \vec{s} \end{cases} \quad (4-7)$$

$$h = p + \zeta = p + \frac{\left(\int_{z_0}^z \rho_{wl} g dz \right)}{\rho_{pw} g} \quad (4-8)$$

$$n = \begin{cases} n^\circ \exp[\alpha'(P - P^0)] & \text{for } p > 0 \\ n^\circ & \text{for } p \leq 0 \end{cases} \quad (4-9a)$$

$$n = \begin{cases} n^\circ + \alpha'(P - P^0) & \text{for } p > 0 \\ n^\circ & \text{for } p \leq 0 \end{cases} \quad (4-9b)$$

$$\mu_{pw} = \text{IAPWS_2008_Viscosity}(P, T_K) \quad (4-10a)$$

$$\begin{cases} \mu_{pw} = 243.18 \times 10^{-7} \cdot 10^{\left[\frac{247.8}{(T_K - 140)} \right]} \\ \quad [1 + (P_{bar} - P_{bar}^{sat}) 1.0467 \times 10^{-6} (T_K - 305)] \\ P_{bar}^{sat} = 22088 \exp \left[\frac{374.136 - T_C}{T_K} \sum_{i=1}^{i=8} A_i [0.65 - 0.01 T_K]^{i-1} \right] \end{cases} \quad (4-10b)$$

$$\mu_{wl} = \mu_{pw} \cdot (1 + \Delta\mu_r) \quad (4-11a)$$

$$\mu_{wl} = \quad (4-11b)$$

$$\mu_{pw} \left[1 - 1.87 \times 10^{-3} C_1^{0.5} + 2.18 \times 10^{-4} C_1^{2.5} + \left[(T_F)^{0.5} - 0.0135 T_F \right] \cdot \left[2.76 \times 10^{-3} C_1 - 3.44 \times 10^{-4} C_1^{1.5} \right] \right]$$

在地下水流的應用模組中，方程式集合是由水的質量守恆定律與相關輔助方程式所組成。式(4-1)乃是描述水的質量守恆之方程式，為基於雷諾傳輸定律所建立。其中下標 wl 代表隸屬於地下水流問題，n

代表土壤孔隙率(無因次), ρ_{wl} 代表溶液密度(因次為 $[ML^{-3}]$), S_d 則代表飽和度, V_{CV} 則代表控制體積(因次為 $[L^3]$), \dot{m}_{wl} 代表穿越水質量(因次為 $[ML^{-2}T^{-1}]$), A_{CS} 代表控制表面(因次為 $[L^2]$)。等號左方第一項代表在時刻 t 至時刻 $t + \Delta t$ 間控制體積內部的儲蓄水量變化(因次為 $[M]$), 等號左方第二項代表同時段內進出控制表面的穿越水量(因次為 $[M]$), 等號右方源匯流項(q_{wl})則代表同時段內注入水質量(因次為 $[M]$), 如其數值為負則代表抽出水質量。當穩態狀況下, 物理量不為時間(τ)之函式, 因此可將整體方程式之時間微分項同時去除, 且等號左方第一項具有時間(τ)之偏微分, 故其微分值為 0, 因此穩態形式之連續方程式可改寫為式 (4-12) 所示。

$$\oint_{CS} \dot{m}_{wl} dA_{CS} - q_{wl} = 0 \quad (4-12)$$

式(4-2)為壓力水頭與壓力之間的轉換計算, 大寫變數 P 代表壓力, 其因次為 $[ML^{-1}T^{-2}]$, 而小寫變數 p 則是代表壓力水頭, 其因次為 $[L]$, 壓力水頭是將壓力除以參考壓力及溫度下之純水密度 ρ_{pw}° 與重力加速度 (g)。此外, 如果壓力水頭單位取 m , 重力加速度單位為 m/s^2 , 而密度單位為 kg/m^3 , 所對應之壓力單位即為帕(Pa)。式中函式 \mathfrak{S}_{unit} 代表單位換算之轉換函式, $[ML^{-1}T^{-2}] = bar$ 表示將壓力 P 轉換單位為(bar), 因此如果原本之壓力單位為 (N/m^2) , 其轉換關係為 $1(bar) = 10^5 \left(\frac{N}{m^2} \right)$ 。式(4-3a)與式(4-3b)為計算純水之方程式, 為壓力

與溫度之函數。本研究為了與 Tough2 模式驗證比較，因此在與 Tough2 驗證時將使用與 Tough2 一致之方程式，故在水之熱動力性質計算上採用國際組織 International Association for the Properties of Water and Steam(以下簡稱 IAPWS)所公布之計算方程式，式(4-3a)中之 IAPWS_1997_Density 即為該組織所公佈計算水密度之方程式，對應於附錄 F 之式(F-1)，輸入溫度 T_K (單位為 K)與壓力值 P (單位為 Pa)即可由該式求取密度，詳細方程式說明詳見附錄 F。式(4-3b) 為本研究為了與 HST3D 模式比較， 因此在水之密度計算上採用與 HST3D 一致之方程式，其中 ρ_{pw}^0 為溶液在參考壓力 P^0 、參考溫度 T^0 及參考濃度 C_1^0 條件下之密度，因本方程式只求純水密度故設定參考濃度 C_1^0 之值為 0，另外 β_p 代表溶液壓縮係數， β_T 為溶液之膨脹係數。式(4-4a)乃參考 Tough2 之 EOS7 模組使用之方程式，用以計算溶液密度(ρ_{wl})受到溶液濃度變化(C_1)之影響，其中其因次是 $[MM^{-1}]$ ，是溶液中的溶質重與溶液重之比值，意即為重量百分濃度， ρ_b 為鹽水(Brine)之密度(鹽水重/鹽水體積)，其值在有限的溫度與壓力範圍內可由參考鹽水濃度 ρ_b^0 乘上水的密度除以參考壓力及溫度下水的密度 ρ_{pw}^0 近似(Potter et al., 1977; Finley and Reeves, 1982)。在參考鹽水密度 ρ_b^0 之設定上，本研究與 Tough2 之預設值一致，皆為 1185.1 kg/m^3 ，此密度為壓力 1bar、溫度 25°C 與鹽水濃度為 24.98% 時之密度。式(4-4b)為參考 HST3D 所

計算溶液密度之方程式，其中 β_{C_1} 則為溶液隨濃度變化之斜率， $\rho_{pw}^0 \beta_{C_1}$ 之計算方式為在 P^0 、 T^0 下之最大濃度時之溶液密度 $\rho_{wl}(C_{1max})$ 減去最小濃度時之溶液密度 $\rho_{wl}(C_{1min})$ 再除以最大濃度 C_{1max} 與最小濃度 C_{1min} 之差值，另外最小濃度 C_{1min} 通常為參考濃度 C_1^0 。在計算式(4-4b)時， $\rho_{wl}(C_{1max})$ 、 $\rho_{wl}(C_{1min})$ 、 C_{1min} 與 C_{1max} 須由使用者自行設定。由HST3D所採用之純水與溶液密度計算公式(如式(4-3b)與式(4-4b))可知，密度與壓力、溫度及濃度皆為線性相關，其使用手冊中亦提及若壓力變化為10bar時，溶液密度變化約為0.04%，若溫度變化約為100°C時，溶液密度變化約為4%，若濃度變化約為25%時，溶液密度變化約為20%。式(4-5)與(4-6)又可稱為土壤特性曲線方程式，分別用以計算土壤飽和度與水力傳導係數，在此採用 van Genuchten 所建議的經驗方程式， α_{van} 與 β_{van} 是 van Genuchten 經驗式中所需要的土壤參數，該方程式可以計算土壤張力與有效含水量(θ_e)之關係，原始形式僅描述張力階段，亦即水壓力為負之階段，然 Yeh 應用 van Genuchten 經驗方程式建立同時可模擬飽和與未飽和之數值模式(FEMWATER)，擴張定義有效含水量 (θ_e)於正壓時，其數值不變為1。另外，飽和含水量則是有效含水量 (θ_e)、飽和含水量(θ_s)與殘餘含水量(θ_r)之函數，其為線性函數。當有效含水量為1時，飽和度亦為1；若有效含水量極低，趨近於0或等於0時，飽和度等於殘餘

含水量與飽和含水量之比值。此外，水力傳導係數(K_{wl})為滲透係數(permeability, k_l)、密度 (ρ_{wl})與黏滯係數(μ_{wl})之函數關係(如下所示)，因為溶液密度與黏滯係數均與溶質濃度有關，在溶質濃度會變化的條件下，水力傳導係數數值需再藉由水流密度、水流黏滯係數、溶液密度與溶液黏滯係數之比值進行修正。

$$K_{wl} = \frac{k_l \rho_{wl} g}{\mu_{wl}}$$

式(4-7)則是應用達西流速 (Darcy's velocity) 計算穿越之水質量流率，其中達西流速(\vec{V}_{darcy})是水力傳導係數乘上水力梯度，其中 \vec{s} 可代表流線方向。其次，再將是達西流速(\vec{V}_{darcy})乘上溶液密度(ρ_{wl})即可計算穿越邊界之水質量流率。式(4-8)則是用以估算總水頭，總水頭(h)是壓力水頭(p)與位置水頭(ζ)之和，位置水頭之計算則是針對密度與重力加速度進行深度積分，變密度之總水頭推導過程詳見附錄 B。如果在定密度之條件下，可以假設 $\rho_l = \rho_f^\circ$ ，其可以重寫如式(4-13)所示，意即代表 $\zeta = z$ 。

$$h = p + z \quad (4-13)$$

式(4-9a)為 Tough2 用以估算土壤孔隙率變化之變化(Doughty and Pruess, 1992)[51]，為一指數型態之方程式，包含影響因素包含壓力與溫度兩個部份，其中 α' 為土壤之壓密係數，其數值隨土壤種類不同而改變， n° 為一大氣壓力下之土壤孔隙率。從方程式看來，當壓力為負壓時，實際土壤孔隙率不變，等同常壓下的孔隙率；反之，當壓力為

正壓時，隨著壓力增加，其孔隙率增大， α' 用以反應土體之壓縮性對儲水之影響。式(4-9b)為 HST3D 所採用之孔隙率計算方式，為一多項式形式之方程式，惟其只考慮壓力之影響而未考慮溫度變化所引起之孔隙率變化。

式(4-10a) 中之 IAPWS_2008_Viscosity 亦是使用國際組織 IAPWS 所公布之水的黏滯係數計算方程式，對應於附錄 F 之式(F-17)，輸入溫度 T_K (單位為 K)與壓力 P (單位為 Pa)即可求取黏滯係數，方程式詳細說明請見附錄 F。式(4-10b)乃是 HST3D 所採用之水的黏滯係數計算方程式，由 Hewlett-Packard (1985)所提出，式中 $P_{\text{bar}}^{\text{sat}}$ 代表一溫度下之飽和蒸汽壓， T_C 亦代表溫度，其單位為 $^{\circ}\text{C}$ ， T_K 之單位為 K，而係數 $A_1 \sim A_8$ 則分別為 -7.419242， -0.29721， -0.1155286， -0.008685635， 0.001094098， 0.00439993， 0.002520658， 0.0005218684； 其適用範圍為溫度介於 $0 \sim 300^{\circ}\text{C}$ 之間，壓力介於 $P_{\text{bar}}^{\text{sat}} \sim 8 \times 10^{-7} \text{Pa}$ 之間，而 $P_{\text{bar}}^{\text{sat}}$ 則介於 $0.0087 \sim 2.2 \times 10^{-7} \text{Pa}$ 之間。

式(4-11a)參考 Tough2 之 EOS7 模組，用以計算溶液黏滯係數(μ_{wl})受到溶液濃度(C_1)之影響，此公式乃由 Herbert et al. (1988)[52]所提出，主要適用於鹽水溶液，完整計算式如式(4-14)所示。式中 $\Delta\mu_r$ 由一多項式所構成，其係數 $V_1 \sim V_3$ 分別為 0.4819， -0.2774， 0.7814。式(4-11b)則為 HST3D 所採用之溶液的黏滯係數計算方程式，式中 μ_{pw} 乃使用

式(4-10b)計算之值， T_F 亦為溫度單位，其單位為 $^{\circ}F$ 。此方程式之適用範圍除了式(4-10b)所提及之溫度與壓力範圍外，其鹽水(Brine)濃度適用區間僅介於 0~25%之間。

$$\mu_{wl} = \mu_{pw} \cdot (1 + V_1 C_1 + V_2 C_1^2 + V_3 C_1^3) \quad (4-14)$$

$$\Delta\mu_r = V_1 C_1 + V_2 C_1^2 + V_3 C_1^3$$

綜合前述之多條方程式(如式(4-1)至(4-11)所示)，即為描述地下水流流動機制之所有方程式，相對於傳統慣用之整合式控制方程式(integrated governing equation)，本研究不進行方程式推導整合而直接採用方程式集合進行計算。

傳統數值模式開發方式並無法直接使用上述之分散式方程式，必須透過數學推導技巧，將分散式控制方程式變為整合式控制方程式。同時對式(4-1)等號左右方去除時間上的積分，其可改寫為如式(4-15)所示。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} \rho_{wl} S_d dV_{pm} + \oint_{CS} \dot{m}_{wl} dA_{CS} = q_{wl} \quad (4-15)$$

前述已經說明地下水流應用模組之方程式，後續將進一步說明本應用模組之邊界條件、源匯流項與初始條件之設定。

- 邊界條件：

1. Dirichlet 邊界條件(壓力)

$$\dot{M}_{wl} = \dot{m}_{wl}(h) \times A_b(x_b, z_b), h = \frac{P}{\rho g} + z,$$

$$P = P_{dp}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{dp}$$

2. Dirichlet 邊界條件(壓力水頭)

$$\dot{M}_{wl} = \dot{m}_{wl}(h) \times A_b(x_b, z_b), h = p + z,$$

$$p = p_{dp}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{dp}$$

3. Dirichlet 邊界條件(總水頭)

$$\dot{M}_{wl} = \dot{m}_{wl}(h) \times A_b(x_b, z_b), h = h_{dh}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{dh}$$

4. Neumann 邊界條件(單位面積水流穿越率)

$$\begin{aligned} \dot{M}_{wl} &= \dot{m}_{wl} \times A_b(x_b, z_b), \dot{m}_{wl} \\ &= \dot{m}_{wl,nm}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{nm} \end{aligned}$$

5. Neumann 邊界條件(水流穿越率)

$$\dot{M}_{wl} = \dot{M}_{wl,nm}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{nm}$$

在邊界條件部分，可以區分為 Dirichlet 與 Neumann 兩大類邊界條件，

無論是哪一類的邊界條件，其設定均是為了計算水流穿越率(\dot{M}_{wl})。

在 Dirichlet 邊界條件類型中，又可以進一步細分為設定壓力(P)、壓力水頭(p)與總水頭(h)兩種，設定壓力時需先將壓力轉換為壓力水頭，再加上位置水頭成為總水頭方能利用達西公式計算邊界之水流穿越

率；設定壓力水頭則須加上位置高程(z)將壓力水頭轉換為總水頭，才能以達西公式計算出邊界之水流穿越率。在 Neumann 邊界條件類型中，則可進一步細分為設定單位面積水流穿越率(\dot{m}_{wl})與水流穿越率(\dot{M}_{wl})兩者。其中， B_{dp} 、 B_{dh} 、 B_{nm} 與 B_{nM} 則分別代表上述四類邊界條件之應用範圍，因此整體邊界範圍B應等於 B_{dp} 、 B_{dh} 、 B_{nm} 與 B_{nM} 之和。

- 源匯流項：

1. 設定注水率

$$q_{wl} = \begin{cases} q_{wl,src}(x_{src}, z_{src}, t) & \text{contain a source / sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

在式(4-1)中等號右方即為源匯流項，其數值之給定則如上所示。其中，控制體積中若包含源匯流點 (source/sink) ，其數值應等於 $q_{wl,src}$ ，正值代表注入量，亦即代表源點 (source) ；負值即代表抽出量，亦即代表匯點 (sink) 。如控制體積中不包含源匯流點，其數值直接給定為 0 。

- 初始條件：

1. 設定壓力(P)

$$p = P_i(x, z)/(g\rho_{pw}^0) \quad \text{in } R_p$$

2. 設定壓力水頭(p)

$$p = p_i(x, z) \quad \text{in } R_p$$

3. 設定總水頭(h)

$$p = h_i(x, z) - z \quad \text{in } R_h$$

在初始條件方面，其初始條件之給定分為壓力形式、壓力水頭形式與總水頭形式三種，其中 R_p 、 R_p 與 R_h 分別代表壓力形式、壓力水頭形式與總水頭形式之給定範圍。由於狀態變數為壓力水頭 p ，因此實際給定時若給定壓力，則須再除以參考壓力及溫度下水的比重($g\rho_{pw}^0$)成為壓力水頭(p)，若給定總水頭則須扣除位置高程(z)，將其數值轉換為壓力水頭(p)。

4.1.1-2 方程式分析結果

表 4-1 為地下水流應用模組之變數與方程式關係矩陣，其中數字「1」代表自變數、數字「2」則代表應變數及數字「0」代表兩者沒有關係。前述方程式如(4-3)、(4-4)及(4-9)~(4-11)分為 a 與 b 兩式，主要是因為參考 Tough2 與 HST3D 而來，然因其應變數與自變數皆相同，只是公式型式不同，因此在方程式變數關係矩陣表示上直接以(4-3)、(4-4)、(4-9)~(4-11)表示之。另外變數 $\Delta\mu_r$ 僅在 Tough2 使用，且該變數為自變

數，因此當該變數之矩陣值(式(4-11)行，19列)為1時，表4-1則代表參考 Tough2 所建模式之方程式變數矩陣，若該變數之矩陣值為0，則表4-1則代表參考 HST3D 所建模式之方程式變數矩陣。表4-2則為本應用模組之變數列表及自變數與應變數統計表，如觀察應變數個數為0者，僅有 p 、 C_1 、 $\Delta\mu_r$ 與 T 之應變數數量為0，其中， p 為問題之狀態變數，因此透過數值解法即可求得。 C_1 、 $\Delta\mu_r$ 與 T 三個變數值則需由其他方式給定，本研究之應用案例為熱流傳輸及溶質傳輸耦合案例，則為透過方程式集合分析模組分析得知， C_1 可從該污染傳輸應用模組中取得， $\Delta\mu_r$ 則為參考 Tough2 建模所需變數，其值亦可由污染傳輸應用模組取得， T 則由熱流傳輸模組取得；假如為非耦合運算，則需視同參數直接給值。依據3.5節所述之「方程式分析模組」之分析結果，本應用模組之計算順序如表4-3所示。

表 4-1a 地下水流變數與方程式關係矩陣

		(4-1)	(4-2)	(4-3)	(4-4)	(4-5)	(4-6)	(4-7)	(4-8)	(4-9)	(4-10)	(4-11)
0	p	0	1	0	0	1	0	0	1	1	0	0
1	h	0	0	0	0	0	0	1	2	0	0	0
2	ζ	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0
3	P	0	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0
4	C_l	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
5	T	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0
6	n	1	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0
7	ρ_{pw}	0	0	2	1	0	0	0	0	0	1	0
8	ρ_{wl}	1	0	0	2	0	1	1	1	0	0	0
9	μ_{pw}	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	1
10	μ_{wl}	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	2
11	θ_e	0	0	0	0	2	1	0	0	0	0	0
12	S_d	1	0	0	0	2	0	0	0	0	0	0
13	K_{wl}	0	0	0	0	0	2	1	0	0	0	0
14	\dot{m}_{wl}	1	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
15	\dot{M}_{wl}	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	M_{wl}	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	q_{wl}	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	\vec{V}_{darcy}	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
19	$\Delta\mu_r$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1/0

表 4-2 地下水流變數列表及自變數與應變數統計表

項次	變數名稱	說明	自變數數量	應變數數量
0	p	壓力水頭	4	0
1	h	總水頭	1	1
2	ζ	位置水頭	0	1
3	P	壓力	1	1
4	C_l	溶液濃度	1	0
5	T	溫度	2	0
6	n	孔隙率	1	1
7	ρ_{pw}	水流密度	1	1
8	ρ_{wl}	溶液密度	4	1
9	μ_{pw}	水流黏滯係數	1	1
10	μ_{wl}	溶液黏滯係數	1	1
11	θ_e	有效含水量	1	1
12	S_d	飽和度	1	1
13	K_{wl}	水力傳導係數	1	1
14	\dot{m}_{wl}	單位面積水流質量流率	1	1
15	\dot{M}_{wl}	水流質量流率	0	1
16	M_{wl}	儲蓄水量	0	1
17	q_{wl}	注水質量	0	1
18	\vec{V}_{darcy}	達西流速	0	1
19	$\Delta\mu_r$	相對黏滯係數改變量	1/0	0

表 4-3 地下水流函式求解順序表

求解順序	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
方程式	(4-2)	(4-5)	(4-9)	(4-3)	(4-10)	(4-4)	(4-11)	(4-8)	(4-6)	(4-7)	(4-1)

4.1.2 熱流傳輸應用模組

在熱流傳輸應用模組中，式(4-16)為守恆方程式，式(4-17)及式(4-18)為流通方程式，其餘方程式皆屬輔助方程式，底下將詳細說明各條方程式。

4.1.2-1 建立方程式集合

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} H dV_{CV} \right\} d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{H} d\tau - \int_t^{t+\Delta t} q_H(\tau) d\tau = 0, \dot{H} = \quad (4-16a)$$

$$\phi_{CS} (\dot{h}_{dif} + \dot{h}_{adv}) dA_{CS}, H = nS_d \rho_{wl} \theta_1 + (1 - n^\circ) \rho_s \phi_s$$

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} H dV_{CV} \right\} d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{H} d\tau - \int_t^{t+\Delta t} q_H(\tau) d\tau = 0, \dot{H} = \quad (4-16b)$$

$$\phi_{CS} (\dot{h}_{dif} + \dot{h}_{adv}) dA_{CS}, H = nS_d \rho_{wl} \phi_1 + (1 - n^\circ) \rho_s \phi_s$$

$$\dot{h}_{dif} = -K_{H,eq} \frac{\partial T}{\partial s} \vec{s} \quad (4-17a)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \dot{h}_{dif} &= -K_{H,eq} \frac{\partial T}{\partial s} \vec{s} - D_{ss}^H \frac{\partial T}{\partial s} - D_{sn}^H \frac{\partial T}{\partial n} \\ D^H &= \rho_{wl} S_{H,l} D = \begin{bmatrix} D_{ss}^H & D_{sn}^H \\ D_{ns}^H & D_{nn}^H \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \rho_{wl} S_{H,l} D_{ss} & \rho_{wl} S_{H,l} D_{sn} \\ \rho_{wl} S_{H,l} D_{nn} & \rho_{wl} S_{H,l} D_{nn} \end{bmatrix} \end{aligned} \right. \quad (4-17b)$$

$$\dot{h}_{adv} = \dot{m}_{wl} h_1 \quad (4-18a)$$

$$\dot{h}_{adv} = \dot{m}_{wl} \phi_1 \quad (4-18b)$$

$$K_{H,eq} = nK_{H,l} + (1 - n^\circ)K_{H,s} \quad (4-19)$$

$$I_l = \text{IAPWS_1997_Internal_energy}(P, T_K) \quad (4-20a)$$

$$h_l = \text{IAPWS_1997_Enthalpy}(P, T_K) \quad (4-20b)$$

$$\phi_l = s_{H,l} \times T_C \quad (4-20c)$$

$$\phi_s = s_{H,s} \times T_C \quad (4-21)$$

$$D = \begin{bmatrix} D_{ss} & D_{sn} \\ D_{ns} & D_{nn} \end{bmatrix} \quad (4-22)$$

$$D_{ss} = \alpha_L \frac{V_s V_s}{|\vec{V}_{darcy}|} + \alpha_T \frac{V_n V_n}{|\vec{V}_{darcy}|}$$

$$D_{sn} = D_{ns} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_s V_n}{|\vec{V}_{darcy}|}$$

$$D_{nn} = \alpha_L \frac{V_n V_n}{|\vec{V}_{darcy}|} + \alpha_T \frac{V_s V_s}{|\vec{V}_{darcy}|}$$

$$\vec{V}_{darcy} = V_s \vec{s} + V_n \vec{n}$$



在熱能傳輸的應用模組中，主要的守恆方程式是基於熱能的能量守恆方程式。式(4-16a)及式(4-16b)是基於雷諾傳輸定律所建立，為能量守恆方程式，為了與 Tough2 比較驗證，因此將能量守恆式稍加修正，以與 Tough2 模式之能量守恆方程式一致，如式(4-16a)所示，而為了與 HST3D 模式比較驗證，因此亦將能量守恆方程式稍加修正，以與 HST3D 模式之能量守恆方程式一致，如式(4-16b)所示。

式(4-16a)為參考 Tough2 之能量守恆方程式所建立之守恆方程式，等號左方第一項代表控制體積內的熱能改變量，其中包含土壤上與水流上蘊藏的熱能， I_l 代表水流部分的比內能(specific internal energy)，

代表一控制體積內部所蘊藏之熱量，而 ϕ_s 代表土壤部分的單位質量熱能量，比內能乃由 IAPWS 所公佈之方程式所計算，如式(4-20a)，詳細說明詳見附錄 F 之式(F-2)。 ϕ_s 則為土壤比熱 $s_{H,s}$ 與溫度 T_C 之乘積，其中 T_C 之單位為 $^{\circ}\text{C}$ 。此外，由於土體結構雖會受到水壓力之影響，而造成土體結構可儲蓄更多水量，但在控制體積內的土體質量不隨壓力變化，故在此土體部分之質量估算則以一大氣壓下之土壤孔隙率(n°) 乘上同等條件下之土壤密度(ρ_s)，因此將土體質量再乘上土體之單位質量熱容量，即為控制體積內土體部分之熱容量。等號左方第二項則是控制表面的熱能穿越量， \dot{h}_{dif} 代表擴散部分的單位面積熱能流率，其運動機制是因溫度差所造成之熱能移動，式(4-17a)為 Tough2 之擴散項的計算方程式，該式又稱為傅立葉方程式 (Fourier's Law)，惟 Tough2 未考量熱的延散效應(thermal mechanical dispersion)。 \dot{h}_{adv} 則代表對流部分的單位面積熱能穿越量，其運動機制是藉由水流流動而帶動熱能傳遞，式(4-18a)為 Tough2 之對流項的計算方程式，其中 \dot{m}_{wl} 代表水流的單位面積穿越水質量流率， h_l 代表水流在該溫度壓力下之比焓，故對流項之估算是穿越之水質量流率乘上水流之比焓。式(4-16b) 為參考 HST3D 之能量守恆方程式所建立之方程式，式(4-16b)與式(4-16a)架構相近，惟其部分項次之計算方式仍有所不同。式(4-16b) 中，等號左邊第一項中計算控制體積內部水流的蘊藏熱量之計算方式，

由水流的單位質量熱容量 ϕ_1 乘以控制體積內水流質量，其中 ϕ_1 為水流的比熱 $s_{H,1}$ 乘上溫度 T_C ，如式(4-20c)所示。另外在 HST3D 部分，該模式在“擴散項” \dot{h}_{dif} 的計算部分，較 Tough2 多考量延散 (dispersion) 效應，因此 HST3D 之“擴散項”應改稱為熱水動力延散項(thermal hydrodynamic dispersion)，如式(4-17b)所示，為熱傳導(thermal conduction)與熱機械延散(thermal mechanical dispersion)兩種機制之和，式(4-17b)之推導詳見附錄 E。式(4-17b)中 D^H 稱為熱機械延散張量(thermal mechanical dispersion tensor)， D^H 為水流密度 ρ_{w1} 乘上水流比熱 $s_{H,1}$ 乘上機械延散張量 D (mechanical dispersion tensor)之乘積，單位為 $W/m^{\circ}C$ 。式(4-17b)中之 D 值由式(4-22)所求得，式(4-22)中 α_L 與 α_T 分別用來描述縱向與橫向之延散性，下標 s 代表正交於控制表面方向，下標 n 代表平行於控制表面方向。

式(4-19)為等效熱傳導係數之計算，在擴散運動機制中，土壤亦會隨著溫度差而傳遞熱能，在等效熱傳導係數的計算上是透過孔隙率(n)與非孔隙部分($1 - n$)來分配水流部分與土壤部分的熱傳導係數。式(4-20a)為參考 Tough2 應用 IAPWS 所公佈溫度、壓力與水流之比內能之轉換方程式；式(4-20b)亦為應用 IAPWS 所公佈之溫度、壓力與水流之比焓之轉換方程式；式(4-20c)則為溫度(T)與水流之單位質量熱容量(ϕ_1)之轉換方程式；式(4-21) 則是溫度(T)與土壤之單位質量熱容

量(ϕ_s)之轉換方程式。式(4-20a)與(4-20a)用於本研究與 Tough2 模式驗證時使用，式(4-20c)則為本研究與 HST3D 模試驗證時使用，式(4-21)則在兩種模式驗證時皆需使用。

前述已經說明熱能傳輸應用模組之控制方程式，後續將進一步說明本應用模組之邊界條件、源匯流項與初始條件之設定。

- 邊界條件：

1. Dirichlet 邊界條件(單位質量熱容量)

$$\dot{H} = [\dot{h}_{\text{dif}}(\phi_l) + \dot{h}_{\text{adv}}(\phi_l)] \times A_b, \phi_l = \phi_{l,d\phi}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{d\phi}$$

2. Dirichlet 邊界條件(溫度)

$$\dot{H} = [\dot{h}_{\text{dif}}(\phi_l) + \dot{h}_{\text{adv}}(\phi_l)] \times A_b, \phi_l = (T + 273.16) \times S_{H,l}$$

$$T = T_{dT}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{dT}$$

3. Neumann 邊界條件(單位面積熱流穿越率)

$$\dot{H} = \dot{h} \times A_b, \dot{h} = \dot{h}_{nh}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{nh}$$

4. Neumann 邊界條件(熱流穿越率)

$$\dot{H} = \dot{H}_{nH}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{nH}$$

在邊界條件部分，可以區分為 Dirichlet 與 Neumann 兩大類邊界條件，其中 Dirichlet 與 Neumann 分別為固定狀態變數(ϕ_l 或 T)與固定狀態

變數之一階微分值(例如： \dot{H})。在熱流問題之計算上，無論何種邊界條件，均是計算出邊界面之熱流穿越率(\dot{H})，然而熱流問題中的熱流穿越率則可進一步分為擴散項(diffusion)與對流項(advection)兩種所組成。在 Dirchlet 邊界條件類型中，又可以進一步細分為固定單位質量熱容量(ϕ_1)與溫度(T_C)兩類，由於狀態變數為單位質量熱容量 ϕ_1 ，如果給定之數值為溫度(T_C)，可以藉由流體比熱($s_{H,1}$)，將溫度(T_C)之數值轉換為(ϕ_1)再藉此進一步分別計算出擴散項與對流項之熱流穿越率。在 Neumann 分類中，則可進一步細分由單位面積熱能穿越率(\dot{h})、熱能穿越率(\dot{H})與擴散項單位面積熱能穿越率(\dot{h}_{dif})給定計算。其中 $B_{d\phi}$ 、 B_{dT} 、 B_{nh} 與 B_{nH} 則分別代表上述各類邊界條件之應用範圍，因此整體邊界範圍 B 應等於前述各類邊界面積之和。

- 源匯流項：

1. 設定熱能注入量

$$q_H = \begin{cases} q_{H,src}(x_{src}, z_{src}, t) & \text{contain a source / sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

2. 設定單位質量熱能

$$q_H = \begin{cases} q_{w1}\phi_1^{out} & \text{contain a source point} \\ q_{w1}\phi_1 & \text{contain a sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

3. 設定溫度

$$q_H = \begin{cases} q_{wl}(T_C^{\text{out}}) \times s_{H,l} & \text{contain a source point} \\ q_{wl}(T_C) \times s_{H,l} & \text{contain a sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

在式(4-16)中等號右方即為源匯流項，其數值之給定可分為設定熱能注入量、單位質量熱能與溫度三種。其中設定熱能注入量者，控制體積中若包含源匯流點 (source/sink)，其數值應等於 $q_{H,src}$ ，正值代表注入量，亦即代表源點 (source)；負值即代表抽出量，亦即代表匯點 (sink)。如控制體積中不包含源匯流點(source/sink)，其數值直接給定為 0。

設定單位質量熱能者，控制體積中若包含源匯流點 (source/sink)，其抽注入之熱能應等於單位質量熱能與水質量抽注率之乘積。由於水是熱能之載體，因此單位質量熱能之給定會受到抽水與注水方向之影響，抽水時其質量熱能應採用模擬區域內模擬之水流單位質量熱能 (ϕ_1) ；注入時其單位質量熱能應為外部注入的單位質量熱能 (ϕ_1^{out}) 。設定溫度者與設定單位質量熱能相似，但其必須透過比熱之轉換成單位質量熱能。

- 初始條件：

1. 設定單位質量熱能 (ϕ_1)

$$\phi_1 = \phi_{1,i}(x, z) \quad \text{in } R_\phi$$

2. 設定溫度(T_C)

$$\phi_1 = [T_C(x, z)] \times s_{H,l} \quad \text{in } R_T$$

在初始條件方面，其初始條件之給定分為單位質量熱容量形式與溫度形式兩種，其中 R_0 與 R_T 分別代表前述兩種初始條件給定形式之範圍。由於狀態變數為單位質量熱容量 ϕ_1 ，如果給定之數值為溫度 (T_C)，可以藉由流體比熱($s_{H,l}$)，將溫度(T_C)之數值轉換為(ϕ_1)。

4.1.2-2 方程式分析結果

表 4-4a 與 4-4b 為熱流傳輸應用模組之變數與方程式關係矩陣，表 4-4a 為參考 Tough2 所建模式所建立之變數方程式矩陣，表 4-4b 為參考 HST3D 所建立之變數方程式關係矩陣，其中數字「1」代表自變數、數字「2」則代表應變數，數字「0」代表變數與方程式兩者無關係。表 4-5a 與表 4-5b 則為本應用模組之變數列表及自變數與應變數統計表，如觀察自變數大於 0 且應變數個數為 0 者，在表 4-5a 中有 T 、 n 、 S_d 、 ρ_{wl} 、 \dot{m}_{wl} 、 q_{wl} 與 P 之應變數數量為 0，其中溫度 T 為問題之狀態變數，因此透過數值解法即可求得。本研究之應用案例為熱流傳輸及溶質傳輸耦合案例，透過方程式集合分析模組分析得知其餘六個變數均可由地下水流應用模組取得；如為非耦合運算，則需視同參數直接給定。同理，在表 4-5b 中有 T 、 n 、 S_d 、 ρ_{wl} 、 \dot{m}_{wl} 、 q_{wl} 、 P 與 V 之

應變數數量為 0，在求解前述耦合案例時，除了溫度由數值解法求得外，其餘七個變數透過方程式集合分析模組可知，皆可由地下水流應用模組取得，如為非耦合運算，則是為參數直接給值。依據 3.5 節所述之「方程式分析模組」之分析結果，可得本應用模組之計算順序如表 4-6 所示。



表 4-4a 參考 Tough2 所建模式熱流傳輸變數與方程式關係矩陣

	變數名稱	(4-16a)	(4-17a)	(4-18a)	(4-19)	(4-20a)	(4-20b)	(4-21)
0	ϕ_l	0	0	0	0	0	0	0
1	ϕ_s	1	0	0	0	0	0	2
2	I_l	1	0	0	0	2	0	0
3	h_l	0	0	1	0	0	2	0
4	T	0	1	0	0	1	1	1
5	n	1	0	0	1	0	0	0
6	S_d	1	0	0	0	0	0	0
7	ρ_{wl}	1	0	0	0	0	0	0
8	$K_{H,eq}$	0	1	0	2	0	0	0
9	\dot{m}_{wl}	0	0	1	0	0	0	0
10	\dot{h}_{adv}	1	0	2	0	0	0	0
11	\dot{h}_{dif}	1	2	0	0	0	0	0
12	\dot{H}	2	0	0	0	0	0	0
13	H	2	0	0	0	0	0	0
14	q_H	2	0	0	0	0	0	0
15	q_{wl}	1	0	0	0	0	0	0
16	P	0	0	0	0	1	1	0
17	D^H	0	0	0	0	0	0	0
18	D	0	0	0	0	0	0	0
19	V	0	0	0	0	0	0	0

表 4-4b 參考 HST3D 所建模式之熱流傳輸變數與方程式關係矩陣

	變數名稱	(4-16b)	(4-17b)	(4-18b)	(4-19)	(4-20c)	(4-21)	(4-22)
0	ϕ_l	1	0	1	0	2	0	0
1	ϕ_s	1	0	0	0	0	2	0
2	I_l	0	0	0	0	0	0	0
3	h_l	0	0	0	0	0	0	0
4	T	0	1	0	0	1	1	0
5	n	1	0	0	1	0	0	0
6	S_d	1	0	0	0	0	0	0
7	ρ_{wl}	1	1	0	0	0	0	0
8	$K_{H,eq}$	0	0	0	2	0	0	0
9	\dot{m}_{wl}	0	0	1	0	0	0	0
10	\dot{h}_{adv}	1	0	2	0	0	0	0
11	\dot{h}_{dif}	1	2	0	0	0	0	0
12	\dot{H}	2	0	0	0	0	0	0
13	H	2	0	0	0	0	0	0
14	q_H	2	0	0	0	0	0	0
15	q_{wl}	1	0	0	0	0	0	0
16	P	0	0	0	0	0	0	0
17	D^H	0	2	0	0	0	0	0
18	D	0	1	0	0	0	0	2
19	V	0	0	0	0	0	0	1

表 4-5a 參考 Tough2 之熱流傳輸變數列表及自變數與應變數統計表

項次	變數名稱	說明	自變數數量	應變數數量
0	ϕ_l	單位質量水流熱容量	0	0
1	ϕ_s	單位質量土壤熱容量	1	1
2	I_l	比內能	1	1
3	h_l	比焓	1	1
4	T	溫度(°C)	4	0
5	n	孔隙率	2	0
6	S_d	飽和度	1	0
7	ρ_{wl}	溶液密度	1	0
8	$K_{H,eq}$	等效熱傳導係數	1	1
9	\dot{m}_{wl}	單位面積穿越水質量流率	1	0
10	\dot{h}_{adv}	對流項單位面積穿越熱容量流率	1	1
11	\dot{h}_{dif}	擴散項單位面積穿越熱容量流率	1	1
12	\dot{H}	穿越熱容量流率	0	1
13	H	熱容量	0	1
14	q_H	抽熱容量	0	1
15	q_{wl}	注水質量	1	0
16	P	壓力	1	0
17	D^H	熱延散張量	0	0
18	D	延散張量	0	0
19	V	流速	0	0

表 4-5b 參考 HST3D 之熱流傳輸變數列表及自變數與應變數統計表

項次	變數名稱	說明	自變數數量	應變數數量
0	ϕ_l	單位質量水流熱容量	2	1
1	ϕ_s	單位質量土壤熱容量	1	1
2	I_l	比內能	0	0
3	h_l	比焓	0	0
4	T	溫度(°C)	3	0
5	n	孔隙率	2	0
6	S_d	飽和度	1	0
7	ρ_{wl}	溶液密度	2	0
8	$K_{H,eq}$	等效熱傳導係數	1	1
9	\dot{m}_{wl}	單位面積穿越水質量流率	1	0
10	\dot{h}_{adv}	對流項單位面積穿越熱容量流率	1	1
11	\dot{h}_{dif}	擴散項單位面積穿越熱容量流率	1	1
12	\dot{H}	穿越熱容量流率	0	1
13	H	熱容量	0	1
14	q_H	抽熱容量	0	1
15	q_{wl}	注水質量	1	0
16	P	壓力	1	0
17	D^H	熱水動力延散係數張量	0	1
18	D	延散係數張量	1	1
19	V	流速	1	0

表 4-6 熱流傳輸函式求解順序表

參考 Tough2 所建模式之方程式求解順序							
求解順序	1	2	3	4	5	6	7
方程式	(4-19)	(4-20a)	(4-20b)	(4-21)	(4-17a)	(4-18a)	(4-16a)
參考 HST3D 所建模式之方程式求解順序							
求解順序	1	2	3	4	5	6	7
方程式	(4-19)	(4-20c)	(4-21)	(4-22)	(4-17b)	(4-18b)	(4-16b)

4.1.3 污染傳輸應用模組

在污染傳輸應用模組中，式(4-24)為守恆方程式，式(4-25)及式(4-26)為流通方程式，其餘方程式皆屬輔助方程式，底下將詳細說明各條方程式。

4.1.3-1 建立分散型控制方程組

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} (M_{cl}) dV_{CV} \right\} d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{M}_{cl} d\tau - \int_t^{t+\Delta t} q_{cl}(\tau) d\tau = 0 \quad (4-24)$$

$$, M_{cl} = nS_d \rho_{wl} C_l, \dot{M}_{cl} = \oint_{CS} (\dot{m}_{cl,dif} + \dot{m}_{cl,adv}) dA_{CS}$$

$$\dot{m}_{cl,dif} = -D_{ss}^* \frac{\partial C_l}{\partial s} - D_{sn}^* \frac{\partial C_l}{\partial n} \quad (4-25)$$

$$\dot{m}_{cl,adv} = \dot{m}_{wl} C_l \quad (4-26)$$

$$\Delta \mu_r = A_1 C_l + A_2 C_l^2 + A_3 C_l^3 \quad (4-27)$$

$$D^* = D + n \cdot D_m \bar{I} = \begin{bmatrix} D_{ss}^* & D_{sn}^* \\ D_{ns}^* & D_{nn}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{ss+nD_m} & D_{sn} + nD_m \\ D_{nn+nD_m} & D_{nn} + nD_m \end{bmatrix} \quad (4-28)$$

在溶質傳輸的應用模組中，控制方程式是基於溶質的質量守恆方程式。式(4-24)是基於雷諾傳輸定律所建立，為質量守恆方程式。等號左方第一項代表控制體積內的溶質質量儲蓄改變量，其中 C_1 代表溶液濃度，其因次是 $[MM^{-1}]$ ，是溶液中的溶質重與溶液重之比值，此空間積分式代表控制體積內溶液部分的溶質質量。等號左方第二項則是控制表面的溶質穿越量， $\dot{m}_{cl,dif}$ 代表延散部分的單位面積溶質穿越量，因次是 $[ML^{-2}T^{-1}]$ ，其運動機制是因濃度梯度所造成之延散移動，式(4-25)為延散項的計算方程式，式(4-25)中同時包含 \vec{s} 與 \vec{n} 方向之濃度梯度，方程式之推導詳見附錄 E。因本研究採用 PetraSim 軟體作為 Tough2 之前後處理介面，但 PetraSim 未加入 Tough2 之延散計算模組，因此使用 PetraSim 時無法計算污染物因延散機制所造成的傳輸，故本研究在與 Tough2 驗證時，不考慮污染物延散機制；另外因為 HST3D 完整的考量延散機制，故本研究與 HST3D 驗證時，將考量延散機制。式(4-26) 為對流項的計算方程式，其中 $\dot{m}_{cl,adv}$ 代表對流部分的單位面積溶質穿越量，其運動機制是藉由水流流動所帶動之溶質量， \dot{m}_{wl} 則為水流的單位面積穿越水質量。

式(4-24)等號右方之 q_{cl} 代表溶質之注入質量，其因次為 $[MT^{-1}]$ ，其數值可直接由外界給定，式中 $q_{cl}(\tau)$ 為時間之函數。此外， q_{cl} 亦可

與注水質量(q_{wl})進行耦合計算，當注水質量(q_{wl})為負值時，則顯示水是從內部抽出，因此抽注時之濃度(C_1^*)即等於模擬區域內模擬之濃度(C_1)；當注水質量(q_{wl})為正值時，則顯示水是從外部注入，因此抽注時之濃度(C_1^*)，需給定從外部注入的濃度(C_1^{out})。

式(4-27)為參考 Tough2 之 EOS7 模組，用以計算溶液黏滯係數(μ_{wl})受到溶液濃度(C_1)之影響，此公式為 Herbert et al. (1988)[52]所提出，主要適用於鹽水溶液，式(4-27)只計算因濃度變化所引起之黏滯係數變化量，此數值將被傳入地下水流模式中之(4-11a 式)，用以計算地下水流模式之溶液黏滯係數。式中 $\Delta\mu_r$ 由一多項式所構成，其係數 $A_1\sim A_3$ 分別為 0.4819，-0.2774，0.7814。

Allen 與 Cherry(1979)[53]提出水動力延散 (hydrodynamic dispersion)，用以定義溶質傳播與稀釋(dilution)之過程，水動力延散可定義為分子擴散(molecular diffusion)與機械延散(mechanical dispersion)之總和。式(4-28)用以計算水動力延散係數張量 (hydrodynamic dispersion coefficient tensor) D^* ，其為分子擴散係數 D_m 與機械延散係數張量 D 之加總，式中 \bar{I} 為二維之單位矩陣，機械延散係數張量 D 詳見式(4-23)之說明。

前述已經說明溶質傳輸應用模組之控制方程式，後續將進一步說明本應用模組之邊界條件、源匯流項與初始條件之設定。

- 邊界條件：

1. Dirichlet 邊界條件(溶液濃度)

$$\dot{M}_{cl} = [\dot{m}_{cl,dif}(C_l) + \dot{m}_{cl,adv}(C_l)] \times A_b(x_b, z_b), C_l = C_{l,dC}(x_b, z_b, t) \text{ on } B_{dC}$$

2. Neumann 邊界條件(單位面積溶質穿越率)

$$\dot{M}_{cl} = \dot{m}_{cl} \times A_b(x_b, z_b), \dot{m}_{cl} = \dot{m}_{cl,nm} \text{ on } B_{nm}$$

3. Neumann 邊界條件(溶質穿越率)

$$\dot{M}_{cl} = \dot{M}_{cl,nM} \text{ on } B_{nM}$$

在邊界條件部分，可以區分為 Dirichlet 與 Neumann 兩大類邊界條件，分別固定狀態變數(C_l)與固定狀態變數之一階微分值(例如： \dot{M}_{cl})。在 Neumann 分類中，則可進一步細分由單位面積溶質穿越量 (\dot{m}_{cl}) 與溶質穿越率(\dot{M}_{cl}) 給定計算。其中， B_{dC} 、 B_{nm} 與 B_{nM} 則分別代表上述四類邊界條件之應用範圍，因此整體邊界範圍 B 應等於 B_{dC} 、 B_{nm} 與 B_{nM} 之和。

- 源匯流項：

1. 設定溶質注入量

$$q_{cl} = \begin{cases} q_{cl,src}(x_{src}, z_{src}, t) & \text{contain a source / sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

2. 設定溶質濃度

$$q_{cl} = \begin{cases} q_{wl}C_l^{out} / \rho_{wl} & \text{contain a source point} \\ q_{wl}C_l / \rho_{wl} & \text{contain a sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

在式(4-16)中等號右方即為源匯流項，其數值之給定可分為設定溶質注入量與溶質濃度兩種。其中設定溶質注入量者，控制體積中若包含源匯流點 (source/sink)，其數值應等於 $q_{cl,src}$ ，正值代表注入量，亦即代表源點 (source)；負值即代表抽出量，亦即代表匯點 (sink)。如控制體積中不包含源匯流點 (source/sink)，其數值直接給定為 0。

設定單位質量熱能者，控制體積中若包含源匯流點 (source/sink)，其抽注入之溶質質量應等於溶質濃度 (C_l)、溶液密度(ρ_{wl})與水質量注入率(q_{wl})之函數。由於水溶液是溶質之載體，因此溶質濃度之給定會受到抽水與注水方向之影響，抽水時其質量熱能量應採用模擬區域內模擬之溶質濃度(C_l)；注入時其單位質量熱能量應為外部注入的溶質濃度(C_l^{out})。

- 初始條件：

1. 設定溶質濃度(C_l)

$$C_l = C_{l,i}(x, z) \text{ in } R_C$$

在初始條件方面，其初始條件給定在溶質濃度上，其中 R_C 代表初始條件給定形式之範圍。

4.1.3-2 方程式分析結果

表 4-7a 與表 4-7b 為溶質傳輸應用模組之變數與方程式關係矩陣，表 4-7a 為參考 Tough2 所建模式所建立之變數方程式矩陣，表 4-7b 為參考 HST3D 所建立之變數方程式關係矩陣，其中數字「1」代表自變數、數字「2」則代表應變數，數字「0」代表變數與方程式兩者無關係。表 4-8a 為參考 Tough2 所建模式之變數列表及自變數與應變數統計表，如觀察應變數個數為 0 者，在有 C_1 、 n 、 S_d 、 ρ_{wl} 、 \dot{m}_{wl} 、 q_{wl} 之應變數數量為 0，因此六個變數必須藉由其他方式給定其數值。 C_1 為問題之狀態變數，因此透過數值解法即可求得。若與地下水流及熱流問題耦合求解，則 n 、 S_d 、 ρ_{wl} 、 \dot{m}_{wl} 與 q_{wl} 可由地下水流應用模組取得，若為非耦合運算，則需視同參數直接給定。表 4-8b 為參考 HST3D 所建模式之變數列表及自變數與應變數統計表，其應變數數量為 0 的變數較參考 Tough2 所建模式多出延散係數 D ，若與地下水流及熱流問題耦合求解，則因熱流應用模組已計算過，故可直接由熱流模組取得，若為非耦合運算，則需視同參數直接給定。由 3.5 小節所述之「方程

式集合分析模組」分析結果可得本應用模組之計算順序如表 4-9 所示。

表 4-7a 參考 Tough2 所建模式之溶質傳輸變數與方程式關係矩陣

	變數名稱	(4-24)	(4-25)	(4-26)	(4-27)	(4-28)
0	C_l	1	1	1	1	0
1	\dot{m}_{wl}	0	0	1	0	0
2	n	1	0	0	0	1
3	S_d	1	0	0	0	0
4	ρ_{wl}	1	0	0	0	0
5	$\dot{m}_{cl,adv}$	1	0	2	0	0
6	$\dot{m}_{cl,dif}$	1	2	0	0	0
7	\dot{M}_{cl}	2	0	0	0	0
8	M_{cl}	2	0	0	0	0
9	q_{cl}	2	0	0	0	0
10	q_{wl}	1	0	0	0	0
11	$\Delta\mu_r$	0	0	0	2	0
12	D	0	0	0	0	1
13	D^*	0	1	0	0	2

表 4-7b 參考 HST3D 所建模式之溶質傳輸變數與方程式關係矩陣

	變數名稱	(4-24)	(4-25)	(4-26)	(4-27)	(4-28)
0	C_l	1	1	1	0	0
1	\dot{m}_{wl}	0	0	1	0	0
2	n	1	0	0	0	1
3	S_d	1	0	0	0	0
4	ρ_{wl}	1	0	0	0	0
5	$\dot{m}_{cl,adv}$	1	0	2	0	0
6	$\dot{m}_{cl,dif}$	1	2	0	0	0
7	\dot{M}_{cl}	2	0	0	0	0
8	M_{cl}	2	0	0	0	0
9	q_{cl}	2	0	0	0	0
10	q_{wl}	1	0	0	0	0
11	$\Delta\mu_r$	0	0	0	0	0
12	D	0	0	0	0	1
13	D^*	0	1	0	0	2

表 4-8a 參考 Tough2 所建模式之溶質傳輸變數列表及自變數與應變

數統計表

項次	變數名稱	說明	自變數數量	應變數數量
0	C_l	溶液濃度	4	0
1	\dot{m}_{wl}	單位面積穿越水質量流率	1	0
2	n	孔隙率	2	0
3	S_d	飽和度	1	0
4	ρ_{wl}	溶液密度	1	0
5	$\dot{m}_{cl,adv}$	單位面積對流項溶質穿越質量流率	1	1
6	$\dot{m}_{cl,dif}$	單位面積延散項溶質穿越質量流率	1	1
7	\dot{M}_{cl}	溶質穿越質量流率	0	1
8	M_{cl}	溶質質量	0	1
9	q_{cl}	溶質注入質量	0	1
10	q_{wl}	注水質量	1	0
11	$\Delta\mu_r$	溶液相對黏滯係數改變量	0	1
12	D	延散係數張量	1	0
13	D^*	水動力延散係數張量	1	1

表 4-8b 參考 HST3D 所建模式之溶質傳輸變數列表及自變數與應變

數統計表

項次	變數名稱	說明	自變數數量	應變數數量
0	C_l	溶液濃度	3	0
1	\dot{m}_{wl}	單位面積穿越水質量流率	1	0
2	n	孔隙率	2	0
3	S_d	飽和度	1	0
4	ρ_{wl}	溶液密度	1	0
5	$\dot{m}_{cl,adv}$	單位面積對流項溶質穿越質量流率	1	1
6	$\dot{m}_{cl,dif}$	單位面積延散項溶質穿越質量流率	1	1
7	\dot{M}_{cl}	溶質穿越質量流率	0	1
8	M_{cl}	溶質質量	0	1
9	q_{cl}	溶質注入質量	0	1
10	q_{wl}	注水質量	1	0
11	$\Delta\mu_r$	溶液相對黏滯係數改變量	0	1
12	D	延散係數張量	1	0
13	D^*	水動力延散係數張量	1	1

表 4-6 溶質傳輸函式求解順序表

參考 Tough2 所建模式之方程式求解順序					
求解順序	1	2	3	4	5
方程式	(4-26)	(4-27)	(4-28)	(4-25)	(4-24)
參考 HST3D 所建模式之方程式求解順序					
求解順序	1	2	3	4	
方程式	(4-26)	(4-28)	(4-25)	(4-24)	

4.2 數值離散說明

在說明各應用模組如進行數值離散之前，先說明本研究數值離散之方法。以第三章之圖 3.7(a)為例，該圖為應用凡諾依圖所建立之模擬格網，這是一組不規則網格，圖上環繞計算結點 i 之相鄰結點分別為 A、B 與 C，而圖上虛線為中央結點與相鄰結點連結 iA 、 iB 與 iC ，實線則為虛線之中垂線，中垂線所形成之區域即為計算結點 i 之控制體積，以下離散方法均以此示意圖進行說明。

1. 微分運算子：方程式中如有對空間之微分運算子，在此以最簡單的差分方法進行離散。式(4-29)是針對 iB 方向之空間偏微分，其為節點 B 之數值(f_B)減去節點 i 之數值(f_i)，再除以兩點距離($|iB|$)。

$$\frac{\partial f}{\partial iB} \approx \frac{f_B - f_i}{|iB|} \quad (4-29)$$

2. 一般積分運算子：以下方程式對節點*i*之數值*f_i*進行變數α之定積分，其中數值*f_i*為變數α之函數，積分範圍由*b*積分至*a*。在此可將前述定積分式以梯形積分改寫近似，將連續曲線下的覆蓋面積切割成*N*個等間距之不連續梯形，其中*C_j^{SPS}*為梯形積分權重。

$$\int_b^a f_i(\alpha) d\alpha \approx \left[\sum_{j=0}^N C_j^{SPS} f_i(b + j\Delta\alpha) \right] \times \Delta\alpha \quad (4-30)$$

$$a = b + N\Delta\alpha, C_j^{SPS} = \begin{cases} 0.5 & \text{for } j = 0 \text{ or } N \\ 1.0 & \text{for } j \neq 0 \text{ or } N \end{cases}$$

3. 守恆方程式之離散：依據雷諾傳輸定律所建立之守恆方程式(如式(4-31)所示)，其針對計算節點*i*之特定物理量進行全微分，例如地下水流就是以水的質量為探討的物理量，熱流傳輸即是以熱能為探討的物理量，為了符合質量守恆與能量守恆之概念，該式必等於0。雷諾傳輸定律之全微分運算子可進一步推導拆解，由三個主要項目所組成：控制體積項(式(4-31)等號左方第一項)、控制表面項(式(4-31)等號左方第二項)與源匯流項(式(4-31)等號左方第三項)。

$$\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{D}{D\tau} \left(\int_{CV_i} f dV_{CV} \right) \right) d\tau = 0 \quad (4-31)$$

$$\Rightarrow \int_t^{t+\Delta t} \left(\int_{CV_i} \frac{\partial f}{\partial \tau} dV_{CV} \right) d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \left(\oint_{CS_i} (\vec{V} \cdot \hat{n}) f dA_{CS} \right) d\tau - \int_t^{t+\Delta t} q d\tau = 0$$

- a. 控制體積項(式(4-31)等號左方第一項)是指探討控制表面內部在

某一時段內之儲蓄變化量，因此在空間離散上假設控制體積內的數值(f)不變，因此空間積分可以將數值(f)乘上控制體積大小(V_{CV})即可。此外，在時間上由於同時存在微分運算子與定積分運算子，因此可套用微積分方程式(如式(4-32)所示)，綜合兩者即可針對控制體積項進行離散(如式(4-33)所示)。

$$\int_b^a \frac{\partial x}{\partial y} dy = x(a) - x(b) \quad (4-32)$$

$$\int_{CV_i} \left(\int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial f}{\partial \tau} d\tau \right) dV_{CV} \approx (f_i^{t+\Delta t} - f_i^t) V_{CV_i} \quad (4-33)$$

b. 控制表面項(式(4-31)等號左方第二項)在空間上須針對控制表面進行環積分。本研究以多邊形做為二維控制體積之形狀，因此可由多個直線線段組成環狀之控制表面。此外，本研究假設穿越各直線線段上的數值(即 $(\vec{V} \cdot \hat{n})f$)分布固定不變，因此對於控制表面之面積分可直接乘上該邊之穿越面積即可近似，而環繞控制體積之環積分則透過累加運算子($\sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i}$)即可計算。本項之離散式如式(4-34)所示，其中 α_i 代表環繞控制體積 i 之邊界集合， Num_i 則代表環繞控制體積 i 之邊界數目。環繞控制體積 i 之相鄰控制體積分別為A、B與C，故 $\alpha_i = (\overline{iA}, \overline{iB}, \overline{iC})$ 。

$$\oint_{CS_i} (\vec{V} \cdot \hat{n}) f dA_{CS} \approx \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} [(\vec{V}_j \cdot \hat{n}_j) f_j A_{CS,j}] = \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j) \quad (4-34)$$

$$= (V_{iA}^- \cdot \hat{n}_{iA}^-) f_{iA}^- A_{CS,iA}^- + (V_{iB}^- \cdot \hat{n}_{iB}^-) f_{iB}^- A_{CS,iB}^- + (V_{iC}^- \cdot \hat{n}_{iC}^-) f_{iC}^- A_{CS,iC}^-$$

$$= g_{iA} + g_{iB} + g_{iC}$$

另外，控制表面項也有時間積分因子，但其中並無時間之微分運算子可以對消，因此處理上無法使用微積分方程式(式(4-32))。在此以加權形式之梯形積分進行計算，其形式如式(4-35)所示，其中 ω 為加權權重，如其數值為 0，代表控制表面項是完全以時刻 t 進行運算，即傳統數值方法之顯示法；如其數值為 1，代表控制表面項是完全以時刻 $t + \Delta t$ 進行運算，即傳統數值方法之完全隱示法。

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[\sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j) \right] d\tau = \left[\omega \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j^{t+\Delta t}) + (1-\omega) \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j^t) \right] \times \Delta t \quad (4-35)$$

在源匯項之時間積分項，亦可採用式(4-35)透過加權形式之梯形積分離散方法，因此整合式(4-33)、(4-34)與(4-35)，並考量源匯項之時間離散，原(4-31)式(雷諾傳輸定律)之離散可以改寫如式(4-36)所示。

$$(f_i^{t+\Delta t} - f_i^t) V_{CV} + [\omega \Gamma_i^{t+\Delta t} + (1-\omega) \Gamma_i^t] \times \Delta t = 0 \quad (4-36)$$

$$\text{其中 } \Gamma_i^t = -q_i^t + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} g_j^t = -q_i^t + (g_{iA}^t + g_{iB}^t + g_{iC}^t)$$

4.2.1 地下水流應用模組

前述 4.2 小節開始時已經說明控制方程式之離散法則，在 4.1.1 小節則詳列地下水流應用模組之控制方程式集合，其中式(4-2)、(4-3)、(4-4)、(4-5)、(4-6)、(4-9)、(4-10)與(4-11)本身為顯示形式之方程式 (explicit form)，不存有微分或積分運算子，亦即將自變數代入即可直

接計算得出其應變數，因此在計算上無需藉由數值技巧特殊處理即可計算。式(4-1)為連續方程式，為水質量守恆之雷諾傳輸定律，依據式(3-19)可將其離散，其離散方程式如下所示：

$$\left(M_{wl,i}^{t+\Delta t} - M_{wl,i}^t \right) + \omega \left(-q_{wl,i}^{t+\Delta t} + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{M}_{wl,ij}^{t+\Delta t} \right) \times \Delta t \quad (4-37)$$

$$+ (1 - \omega) \times \left(-q_{wl,i}^t + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{M}_{wl,ij}^t \right) \times \Delta t = 0$$

$$M_{wl,i}^t = n_i^t \rho_{wl,i}^t S_{d,i}^t V_{CV,i} \quad (4-38)$$

$$\dot{M}_{wl,ij}^t = \dot{m}_{wl,ij}^t A_{ij} \quad (4-39)$$

另外，式(4-7)為計算穿越水質量流率之計算方程式，搭配達西定律進行計算，其中包含微分運算子，因此以簡單差分(simple difference)來離散微分運算子(如式(4-29)所示)，如式(4-40)所示。 \bar{ij} 代表格點 i 與格點 j 之直線距離，正值代表水流由格點 i 流向格點 j。此外， $K_{wl,ij}$ 代表線段 \bar{ij} 之等效水力傳導係數，其必須利用 $K_{wl,i}$ 與 $K_{wl,j}$ 來估算，估算方式包含算數平均(如式(3-20)所示)、幾何平均(如式(3-21)所示)、調和平均(如式(3-22)所示)與上風法(如式(3-23)所示)四種，可適性計算架構可在背景直接擇一進行推估。傳統上水力傳導係數 ($K_{wl,ij}$) 建

議以調和平均進行計算。另外，溶液密度 ($\rho_{wl,ij}$) 則可應用算數平均進行推估。

$$\dot{m}_{wl,ij}^t = -\rho_{wl,ij}^t K_{wl,ij} \frac{h_j^t - h_i^t}{|ij|} \quad (4-40)$$

式(4-8)內具有積分運算子，積分運算子可應用梯形積分法進行離散(如式(4-30)所示)，其將定積分區間切割成 N 段，故各段長度應符合 $z_1 = z_2 + N\Delta z$ ，梯形積分法將各段端點之函數值乘上梯形積分權重 ($M_{cl,i}^{SPS}$)再乘上各段長度(Δz)，如 i 等於 0 或 N 時，其權重值為 0.5 ，其他權重值則為 1 。因此利用前述辛普森積分法，可以將式(4-8)離散成式(4-41)。其中 N_i 代表節點集合，涵蓋 z 至 z_0 之間的所有節點。

$$h = p + \zeta = p + \frac{\int_{z_0}^z \rho_{wl} g dz}{\rho_{pw} g} \cong p_i^t + \frac{(\sum_{m \in N_i} C_m^{SPS} \rho_{pw,m}^t) \times \Delta z}{\rho_{pw} g} \quad (4-41)$$

4.2.2 熱流傳輸應用模組

$$\begin{aligned} (H_i^{t+\Delta t} - H_i^t) + \omega \left(-q_{H,i}^{t+\Delta t} + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{H}_{ij}^{t+\Delta t} \right) \times \Delta t + (1 - \omega) \\ \times \left(-q_{H,i}^t + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{H}_{ij}^t \right) \times \Delta t = 0 \end{aligned} \quad (4-42)$$

$$H_i^t = [n_i^t S_{d,i}^t \rho_{wl,i}^t \phi_i^t + (1 - n_i^t) \rho_{s,i}^t \phi_{s,i}^t] V_{CV,i} \quad (4-43)$$

$$\dot{H}_{ij}^t = (\dot{h}_{dif,ij}^t + \dot{h}_{adv,ij}^t) A_{ij} \quad (4-44)$$

$$\dot{h}_{dif,ij}^t = -K_{H,eq,ij} \frac{T_j^t - T_i^t}{|\bar{ij}|} \quad (4-45a)$$

$$\dot{h}_{dif,ij}^t = -K_{H,eq,ij} \frac{T_j^t - T_i^t}{|\bar{ij}|} - n_i^t D_{ss,ij} \frac{T_j^t - T_i^t}{|\bar{ij}|} - n_i^t D_{sn,ij} \frac{\partial T_{ij}}{\partial n} \quad (4-45b)$$

在熱流應用模組中，式(4-16)為藉由雷諾傳輸定律所建立的守恆方程式，其中具有積分運算子。(4-17)為擴散項之熱傳輸計算方程式，其中具有微分運算子，因此這兩個方程式必須要進行數值離散處理。式(4-42)至(4-44)為守恆方程式的離散式，其處理流程同式(4-37)一般。

式(4-45a)為擴散項之離散方程式。 \bar{ij} 代表格點 i 與格點 j 之直線距離，若 $\dot{h}_{dif,ij}^t$ 為正值代表熱流由格點 i 流向格點 j 。式(4-45b)為延散項之離散方程式。在第一項中之說明已於式(4-45a)說明中敘述，在第二項中，若為該項為正值則代表熱流由格點 i 流向格點 j 。在第三項中，對於橫向溫度梯度之處理，請詳見附錄 E。

$$\dot{h}_{adv,ij}^t = \dot{m}_{wl,ij}^t \phi_{l,ij}^t = \begin{cases} \dot{m}_{wl,ij}^t \phi_{l,i}^t & \text{for } \dot{m}_{wl,ij}^t > 0 \\ \dot{m}_{wl,ij}^t \phi_{l,j}^t & \text{for } \dot{m}_{wl,ij}^t < 0 \end{cases} \quad (4-46)$$

式(4-46)為對流項之離散方程式，其中 $\dot{m}_{wl,ij}^t$ 為水流質量流率，可由地下水流應用模組估算； $\phi_{l,ij}^t$ 為水流之單位質量熱容量，傳統數值

離散上，由於熱能對流是透過水流帶動，因此在線段 \bar{ij} 之單位質量熱容量之推估，建議以上風法進行推估，意即直接取水流流動之上風方位之單位質量熱容量數值，因此式(4-46)以 $\dot{m}_{wl,ij}^t$ 之正負號進行上風方向之判斷。

4.2.3 污染傳輸應用模組

$$(M_{cl,i}^{t+\Delta t} - M_{cl,i}^t) = \omega \left(-q_{cl,i}^{t+\Delta t} + \sum_{j \in \alpha_i} \dot{M}_{cl,ij}^{t+\Delta t} \right) \times \Delta t \quad (4-47)$$

$$+ (1 - \omega) \times \left(-q_{cl,i}^t + \sum_{j \in \alpha_i} \dot{M}_{cl,ij}^t \right) \times \Delta t$$

$$M_{cl,i}^t = (n_i^t S_{d,i}^t \rho_i^t C_{l,i}^t) V_{CV,i} \quad (4-48)$$

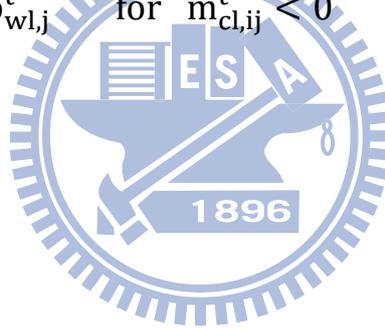
$$\dot{M}_{cl,ij}^t = (\dot{m}_{cl,dif,ij}^t + \dot{m}_{cl,adv,ij}^t) A_{ij} \quad (4-49)$$

在溶質傳輸應用模組中，式(4-22)為藉由雷諾傳輸定律所建立的守恆方程式，其中具有積分運算子。式(4-23)為延散項之溶質傳輸計算方程式，其中具有微分運算子，因此這兩個方程式必須要進行數值離散處理。式(4-47)至(4-49)為守恆方程式的離散式，其處理流程同式(4-37)一般。式(4-50)為延散項之離散方程式。在第一項中， \bar{ij} 代表格點 i 與格點 j 之直線距離，第一項為正值代表污染物由格點 i 流向格點 j 。在第二項中，對於橫向濃度梯度之處理，請詳見附錄 E。

$$\dot{m}_{cl,dif,ij}^t = -n_i^t D_{ss,ij} \frac{C_{l,j}^t - C_{l,i}^t}{|\bar{ij}|} - n_i^t D_{sn,ij} \frac{\partial C_{l,ij}}{\partial n} \quad (4-50)$$

式(4-51)為對流項之離散方程式，其中 $\dot{m}_{cl,ij}^t$ 為水流質量流率，可由地下水流應用模組估算；傳統數值離散上，由於溶質對流是透過水流帶動，因此在線段 \bar{ij} 之濃度($C_{l,ij}^t$)與密度($\rho_{wl,i}^t$)推估上，建議以上風法進行推估，意即直接取水流流動之上風方位之濃度數值，因此式(4-51)以 \dot{m}_{ij}^t 之正負號進行上風方向之判斷。

$$\dot{m}_{cl,adv,ij}^t = \begin{cases} \dot{m}_{cl,ij}^t C_{l,i}^t / \rho_{wl,i}^t & \text{for } \dot{m}_{cl,ij}^t > 0 \\ \dot{m}_{cl,ij}^t C_{l,j}^t / \rho_{wl,j}^t & \text{for } \dot{m}_{cl,ij}^t < 0 \end{cases} \quad (4-51)$$



第五章 可適性計算平台模式驗證

本研究目前共建置三個應用模組，分別為地下水流、熱流及污染物傳輸應用模組，各應用模組內之方程式集合已於第四章詳細說明，本研究於本章節將驗證以此三種應用模組所建立之模式，驗證之參考對象分別為伯克利勞倫斯國家實驗室(Lawrence Berkeley National Laboratory)所開發之 Tough2 V2.0(Pruess et al., 1999)以及美國地質調查局(USGS)所開發之 HST3D V2.0(Kipp, 1997)。本研究採用 PetraSim 軟體作為 Tough2 之前後處理介面，但 PetraSim 未加入 Tough2 之延散項計算模組(如 T2DM)，因此使用 PetraSim 時無法計算熱或污染物因延散機制所造成的傳輸，故本研究在與 Tough2 驗證時，雖考量熱流及污染物傳輸進行耦合模擬，但不考慮此兩物理量問題之延散機制，另外，因為 HST3D 完整的考量延散機制，故本研究與 HST3D 驗證時，將會考量延散機制。

本章共設計三個案例作為可適性算平台之驗證對象，如表 5.1 所示。案例 1 為地下水流、熱流及污染傳輸之耦合案例，驗證對象為 Tough2，不考慮延散機制。在與 HST3D 驗證時，同樣為考量地下水流、熱流及污染傳輸之耦合案例，但因其考量延散機制，且延散機制與流速直接相關，故本研究為探討流速與延散作用之關係，將案例分為一流速

慢(Peclet number <2)及一流速快(Peclet number >2)之案例，其中案例 2 之流場速度為案例 3 流場速度之 1/10。

表 5.1 驗證案例說明表

	驗證模式	延散機制	水流流速
案例一	Tough2	無	—
案例二	HST3D	有	慢
案例三	HST3D	有	快

5.1 暫態垂向二維地下水流、熱流及污染傳輸耦合模擬驗證(一)

在本小節中，可適性計算平台之驗證對象為 Tough2，求解問題為垂向二維地下水流、熱流及污染傳輸耦合問題，模式之設定說明如下：

本案例之模擬範圍為 9 公尺見方之正方形區域，模擬區域內之格網皆為一公尺見方之正方形格網，因此在模擬區域內共計 81 個格網，如圖 5.1 所示，Tough2 亦使用相同之格網設定。本案例之一個模擬時刻(Time step)為 900 秒，亦即為 15 分鐘，總共模擬 100 個時刻。各應用模組之參數設定如下所示。

(a)地下水流應用模組參數設定說明：

本案例為一單一材質之均質案例，假設材質參數為粉質黏土(silt

clay)，材質之參數設定如表 5.2 所示， n^0 代表常溫常壓下之孔隙率，給定其值為 0.36。 α' 為土壤之壓密係數，單位為 Pa^{-1} ，代表水壓每增加 1 Pa ，孔隙率約增加 1.0224×10^{-8} 。 K_{sat} 代表飽和水力傳導係數 (hydraulic conductivity)，其單位為 m/s 。

表 5.3 說明本案例之全域參數設定，其中參考壓力(p^0)為 $0(m)$ ，以錶壓力(gage pressure)表示。參考溫度(T_c^0)則為 $25^\circ C$ 。在參考溫度與壓力下，水的參考密度為 $997.048 \text{ Kg}/m^3$ ，水的參考黏滯係數為 $8.9 \times 10^{-4} \text{ N-s}/m^2$ 。參考鹽水密度設定為 $1185.1 \text{ Kg}/m^3$ ，其為在參考溫度與參考壓力下，鹽水濃度為 24.98% 時之密度。重力加速度 g 為 $9.81 \text{ m}/s^2$ ，

在邊界條件設定上，模擬區域四周邊界皆設為定壓力邊界條件 (Dirichlet condition)，設定壓力值為 100 公尺壓力水頭，在初始條件設定上，模擬區域內所有計算元皆設為總水頭 100 公尺，其初始壓力水頭 p 可由式(5.1)換算，式中 h_z 代表計算元的高程。另外，於圖 5.1 之 41 號計算元處，設置一注水井，其注水速率為 0.001 kg/s 。

$$p = 100 - h_z \quad (5.1)$$

表 5.2 地下水流模擬局部參數設定表

物理量	局部參數	數值	單位
地下水流	n^0	0.36	
	α'	1.0224×10^{-8}	Pa^{-1}
	α_s	0	$^{\circ}C^{-1}$
	K_{sat}	10^{-7}	m/s

表 5.3 地下水流模擬全域參數設定表

物理量	全域參數	數值	單位
地下水流	p^0	0	m
	T_c°	25	$^{\circ}C$
	ρ_f°	997.048	Kg/m^3
	μ_f°	0.00089	$N \cdot s/m^2$
	g	9.81	m/s^2
	ρ_b°	1185.1	Kg/m^3

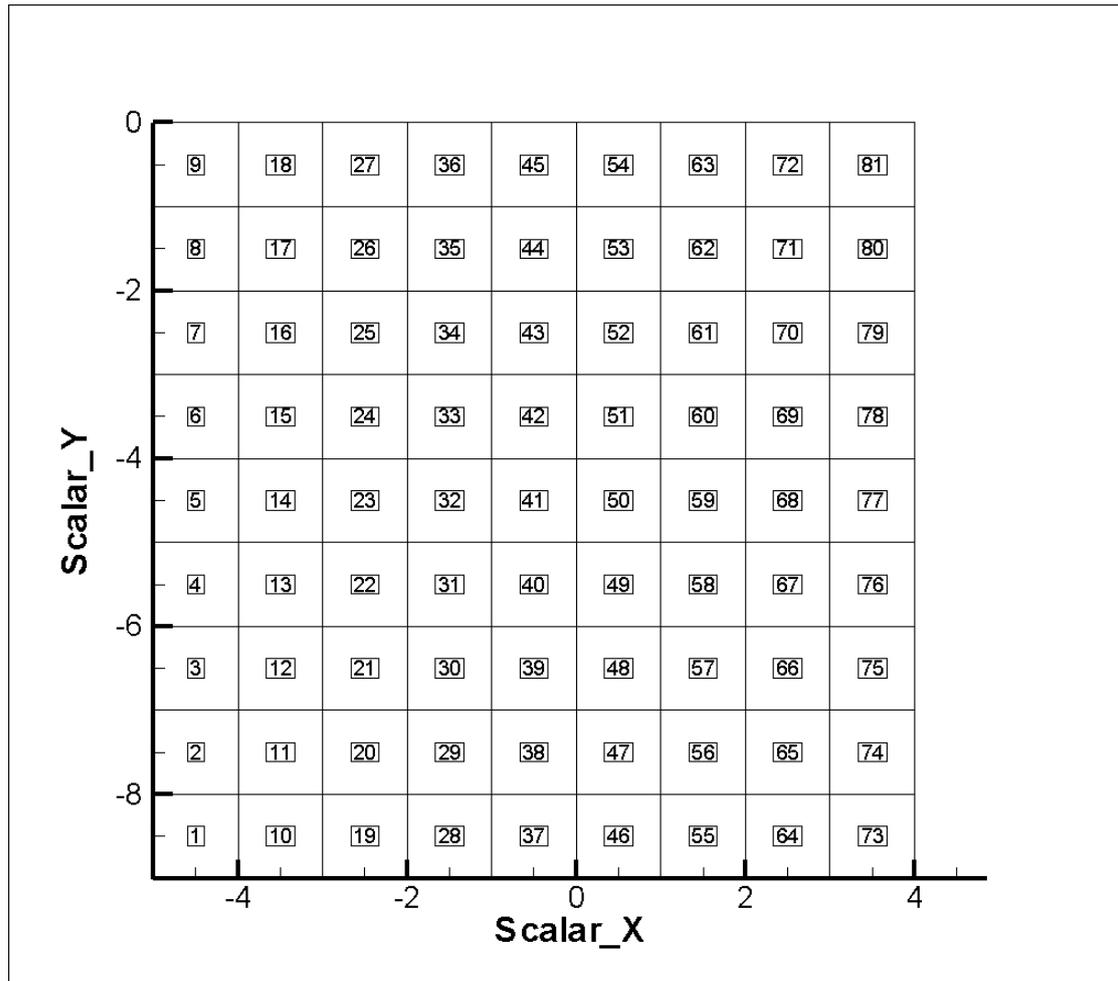


圖 5.1 案例一之模擬區域及空間切割示意圖

在本案例中，本研究在地下水流應用模組之方程式集合設定部分，關於水流密度、黏滯係數及孔隙率等變數計算乃參考 Tough2 所採用之相關方程式，如式(4-3)、式(4-4.a)、式(4-9.a)、式(4-10.a) 及式(4-11.a) 等五條方程式。地下水流模擬之外迭代收斂標準設定為 10^{-5} 。

(b) 熱流傳輸應用模組參數設定說明：

在熱流模擬設定上，四周邊界皆為定溫度邊界條件，設定溫度為攝氏 25 度，在初始條件設定上，全域皆設定為攝氏 25 度，另

外在局部參數設定上如表 5.4 所示，土體密度(ρ_s)設定為 2323(Kg/m^3)，流體與土體之熱傳導係數($K_{H,l}$ 與 $K_{H,S}$)則分別設為 0.556($J/s \cdot m^\circ C$)及 2($J/s \cdot m^\circ C$)，流體與土體之比熱($S_{H,l}$ 與 $S_{H,S}$)分別設為 4181($J/kg^\circ C$)及 710($J/kg^\circ C$)。另外，在熱源之注入設定方面，搭配前述地下水流問題所設定之注水井，將其注水溫度設定為攝氏溫度 90 度。全域參數之設定見表 5.3。熱流模擬之外迭代收斂標準設定為 10^{-5} 。

表 5.4 熱流模擬局部參數設定表

物理量	局部參數	數值	單位
熱流	ρ_s	2323	Kg/m^3
	$K_{H,l}$	0.556	$J/s \cdot m^\circ C$
	$K_{H,S}$	2	$J/s \cdot m^\circ C$
	$S_{H,l}$	4181	$J/kg^\circ C$
	$S_{H,S}$	710	$J/kg^\circ C$

(c) 污染傳輸應用模組參數設定說明：

在污染傳輸模擬設定上，四周邊界皆為定濃度邊界條件，設定濃度值為 0，在初始條件設定上，除編號為 41 號之計算元濃度值為

1%外，其餘計算元之初始濃度皆設定為 0，另外局部參數設定如表 5.5 所示，土體密度(ρ_s)設定為 $2323(Kg/m^3)$ ，分子擴散係數定為 $3.86 \times 10^{-7} J/s \cdot m^{\circ}C$ 。全域參數之設定見表 5.3。污染傳輸模擬之外迭代收斂標準設定為 10^{-5} 。

表 5.5 污染傳輸模擬局部參數設定表

物理量	局部參數	數值	單位
污染傳輸	ρ_s	2323	Kg/m^3
	D_m	3.86×10^{-7}	$J/s \cdot m^{\circ}C$

(d)驗證結果說明：

圖 5.2~圖 5.4 為案例一在 2700 秒之模擬結果，圖 5.5~圖 5.7 為模擬時刻在 90000 秒時之模擬結果，其中虛線為可適性計算平台之模擬結果，簡稱為 ACF，實線為 Tough2 之模擬結果。由圖 5.2~圖 5.4 可知，ACF 所計算之壓力水頭、溫度與濃度分布與 Tough2 之模擬結果一致。在地下水流部分，兩者之最大差值約 4 公分水頭高，在熱流部分，兩者之最大差值為 $0.01^{\circ}C$ ，在污染傳輸模擬部分，濃度(單位為重量百分濃度)之最大差值為 0.01%。若以各模擬問題設定之初始條件最大值作為正規化基準，結果如表 5.6 所示，表中分別顯示壓力、溫度與濃度之相對誤差。在模擬時間為 2700 秒時，ACF 與 Tough2 之最大

差值皆在 1% 以下，代表模擬結果十分相近。圖 5.5~圖 5.7 為模擬時刻在 90000 秒時之模擬結果，由圖可知兩模式之模擬結果一致。在地下水流部分，壓力水頭之最大差值仍為 4 公分水頭高，溫度相差最高為 0.9°C ，濃度之最大差值為 0.01%。仿照前述正規化方式，計算最大相對誤差百分比，結果如表 5.6 所示。由表 5.6 可知壓力水頭、溫度與濃度之最大相對誤差百分比皆在 1% 以下，模擬結果與 Tough2 幾乎一致。由模擬結果可知，本研究與 Tough2 之模擬結果非常接近，證明了本研究發展的各應用模組的正確性，及可適性計算平台之可行性。

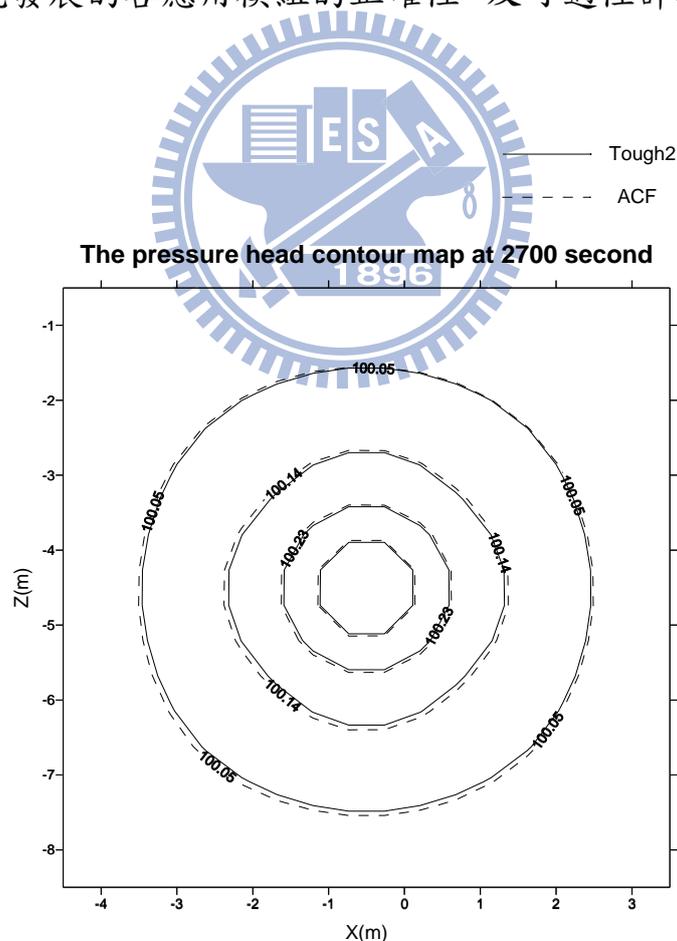


圖 5.2 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布

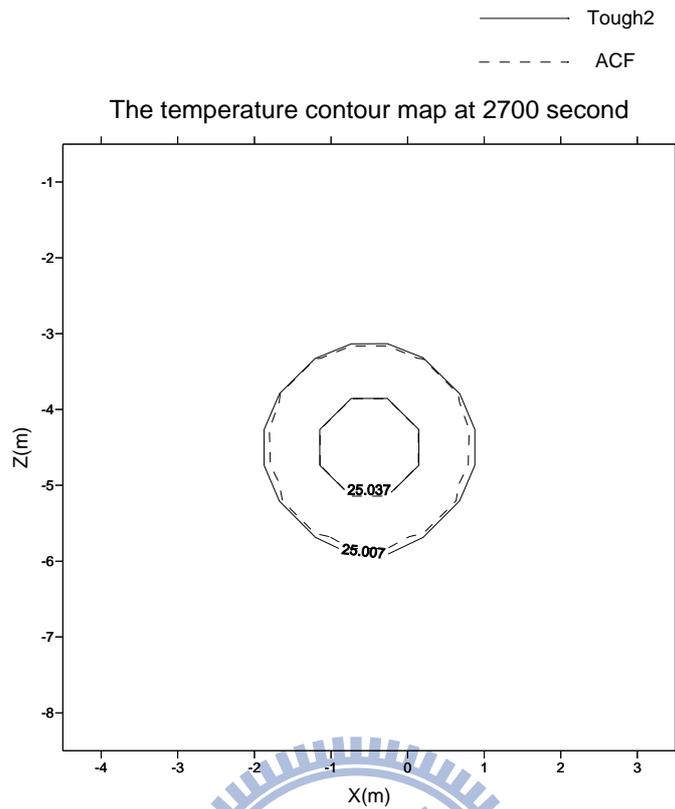


圖 5.3 熱流傳輸模擬驗證—溫度場分布

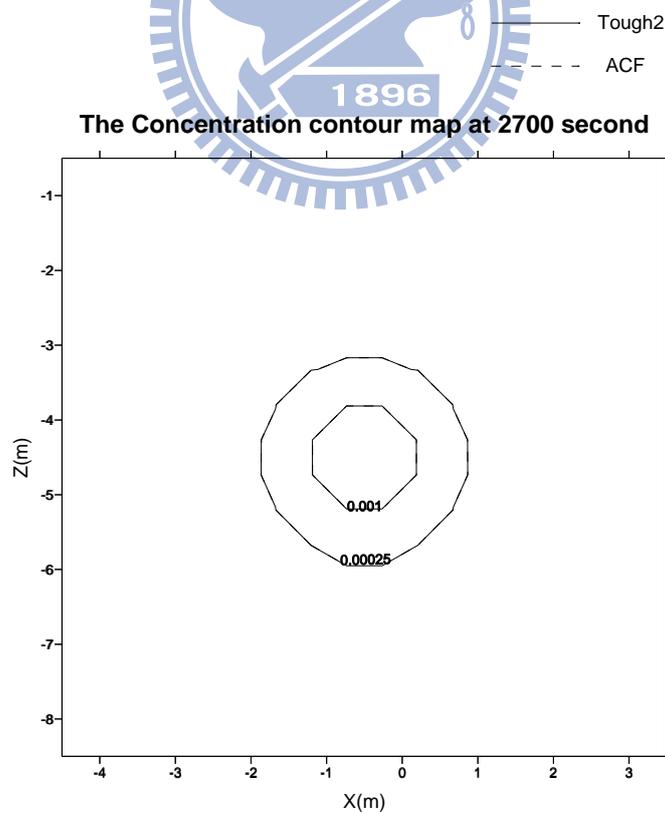


圖 5.4 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布

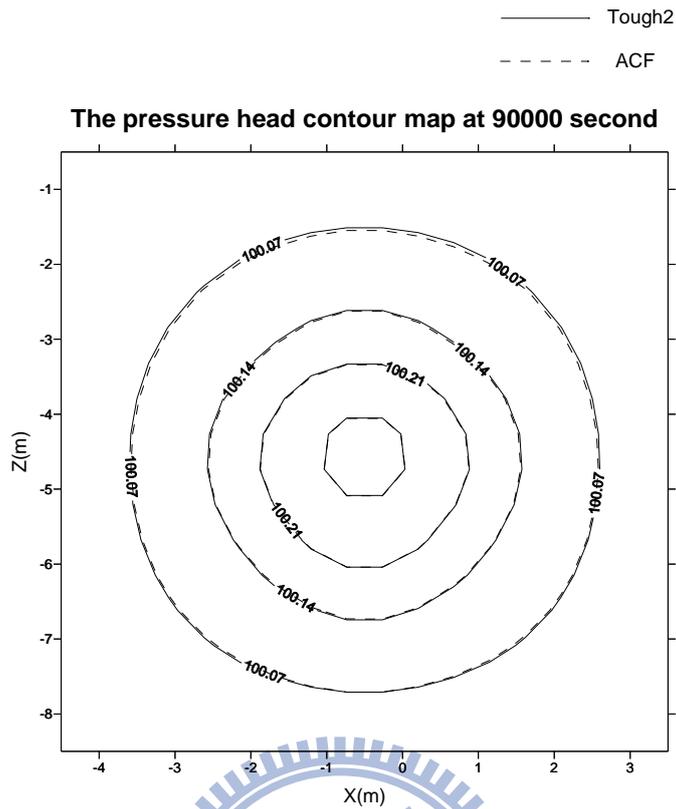


圖 5.5 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布

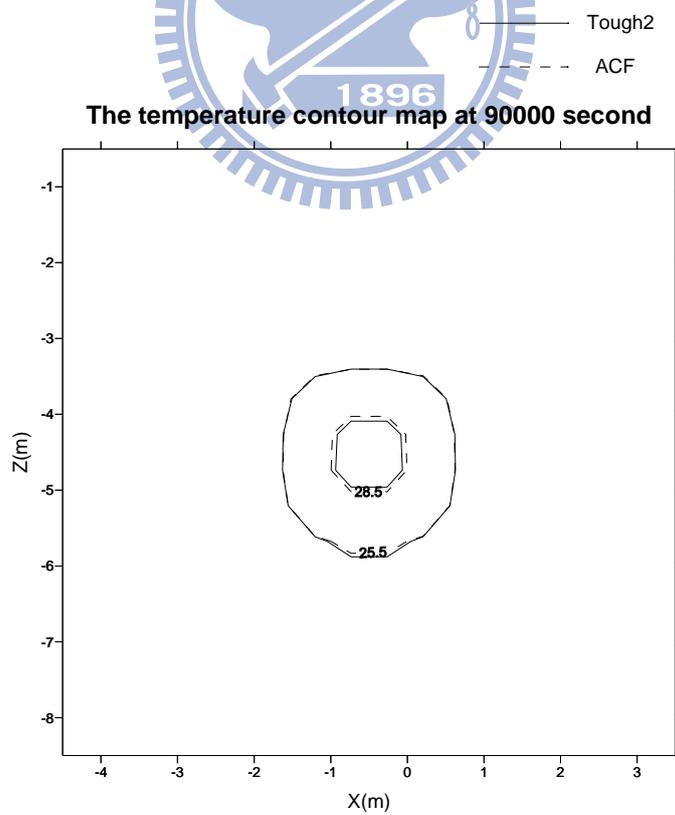


圖 5.6 熱流傳輸模擬驗證—溫度場分布

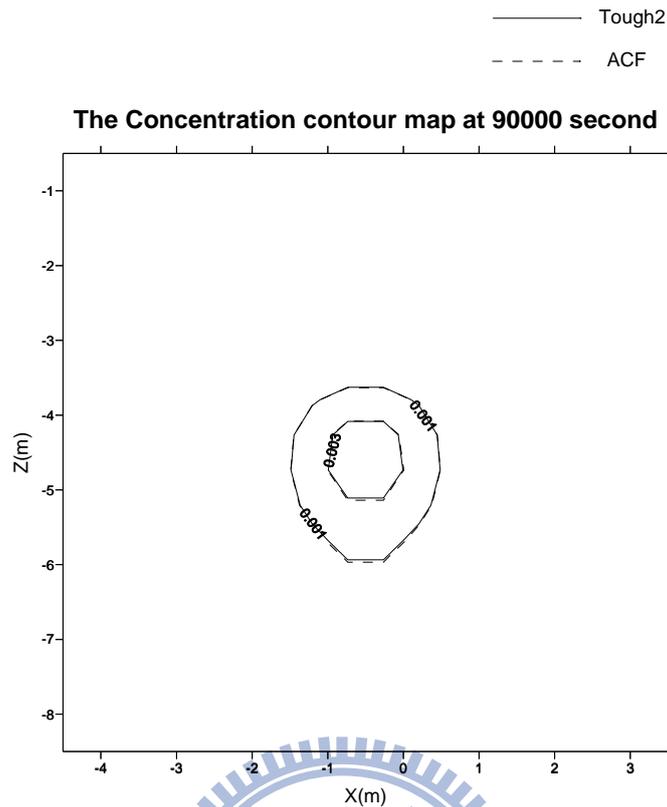


圖 5.7 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布

表 5.6 案例一模擬初期及模擬結束時，ACF 與 Tough2 之最大相對誤差百分比整理表

模擬時刻	壓力水頭	溫度	濃度
t = 2700 秒	0.043%	0.027%	1 %
t = 90000 秒	0.043%	2.887%	1 %

5.2 暫態垂向二維地下水流、熱流及污染傳輸耦合模擬驗證(二)

在本小節中，可適性計算平台之驗證對象為 HST3D，求解問題亦為垂向二維地下水流、熱流及污染傳輸耦合問題，另外本小節較 5.1 節多考量了延散機制(dispersion)，而延散現象又與流速直接相關，因

此為了測試延散機制所造成的效應，本小節設計了兩個案例，分別為案例二與案例三，案例三之飽和水力傳導係數為案例二之 10 倍。兩案例除模擬時刻間距及模擬期距外，其餘模式參數設定皆相同。首先於 5.2.1 節說明案例二，5.2.2 節說明案例三。

5.2.1 案例二模式設定及結果說明

本案例在模式之格網劃分、模擬時刻設定及模擬期距上皆與 5.1 節一致，以下說明各應用模組之參數設定。

(a) 地下水流、熱流及污染物傳輸應用模組參數設定

表 5.7 說明地下水流模擬之局部參數設定，除 5.1 節所提及之參數設定外，尚包括水的壓縮係數 β_p ，水的膨脹係數 β_T ，最大參考濃度 C_{max} 設為 25%，最小參考濃度 C_{min} 為 0。在參考溫度、參考壓力及最大參考濃度條件下，鹽水溶液所對應之密度 $\rho(C_{max})$ 設為 1185.1 Kg/m^3 ，另外因最小參考濃度設定為 0，因此其所對應之密度 $\rho(C_{min})$ 即為純水之密度 997.048 Kg/m^3 。在邊界條件設定上，在高程為 0 公尺之邊界上設為定壓力水頭 100.05m，其餘三個邊界皆設為定壓力水頭 100m，另外初始條件設定為壓力水頭 100m。此外，本案例並無注水。在熱流模擬設定上，表 5.8 為熱流模擬局部參數設定表，除已在 5.1 節說明過之局部參數外，再增加考量徑向延散度 α_L 及橫向延散度 α_T ， α_L 設定其值為 0.1， α_T 設定為 0.03。在初始條件設定上，模擬

區域內各節點皆給定為攝氏 25 度，另外本案例未注入熱源。在邊界條件設定上，除了在邊界位置(-1.5, 0)、(-0.5, 0)及(0.5, 0)處設定為攝氏 90 度外，其餘邊界部分皆設為攝氏 25 度。在污染物傳輸模擬設定上，局部參數設定見表 5.9，除 5.1 節已說明過之參數外，再增加考量徑向延散度 α_L 及橫向延散度 α_T ， α_L 設定其值為 0.1， α_T 設定為 0.03。在初始條件設定上，模擬區域內各節點皆給定為 0。在邊界條件設定上，除了在邊界位置(-1.5, 0)、(-0.5, 0)及(0.5, 0)處設定濃度為 10%外，其餘邊界部分之濃度皆設為 0。

表 5.7 地下水流模擬局部參數設定表

物理量	局部參數	數值	單位
地下水流	n^0	0.36	
	α'	1.0224×10^{-8}	Pa^{-1}
	α_s	0	$^{\circ}C^{-1}$
	K_{sat}	10^{-7}	m/s
	C_{max}	24.98%	
	C_{min}	0	
	$\rho(C_{max})$	1185.1	
	$\rho(C_{min})$	997.048	

表 5.8 熱流模擬局部參數設定表

物理量	局部參數	數值	單位
熱流	ρ_s	2323	Kg/m^3
	$K_{H,I}$	0.556	$J/s \cdot m^{\circ}C$
	$K_{H,S}$	2	$J/s \cdot m^{\circ}C$
	$S_{H,I}$	4181	$J/kg^{\circ}C$
	$S_{H,S}$	710	$J/kg^{\circ}C$
	α_L	0.1	
	α_T	0.03	

表 5.9 污染傳輸模擬局部參數設定表

物理量	局部參數	數值	單位
污染傳輸	ρ_s	2323	Kg/m^3
	D_m	3.86×10^{-7}	$J/s \cdot m^{\circ}C$
	α_L	0.1	
	α_T	0.03	

(b) 驗證結果說明

圖 5.8~圖 5.10 為案例二在 2700 秒之模擬結果，圖 5.11~圖 5.13 為模擬時刻在 90000 秒時之模擬結果，其中虛線為可適性計算平台之模擬結果，簡稱為 ACF，實線為 HST3D 之模擬結果。由圖 5.8~圖 5.10 可知，ACF 所計算之壓力水頭、溫度與濃度分布與 HST3D 之模擬結果一致。在地下水流部分，兩者之最大差值約 7 公分水頭高，在熱流部分，兩者之最大差值為 $0.016^{\circ}C$ ，在污染傳輸模擬部分，濃度(單位

為重量百分濃度)之最大差值為 $4.58 \times 10^{-4} \%$ 。若以各模擬問題設定之初始條件最大值作為正規化基準，結果如表 5.20 所示，表中分別顯示壓力、溫度與濃度之最大相對誤差。在模擬時間為 2700 秒時，ACF 與 HST3D 之最大相對誤差皆在 1% 以下，代表模擬結果十分相近。

圖 5.11~圖 5.13 為模擬時刻在 90000 秒時之模擬結果，由圖可知兩模式之模擬結果一致。在地下水流部分，壓力水頭之最大差值仍為 10.5 公分水頭高，溫度相差最高為 0.43°C ，濃度之最大差值為 $4 \times 10^{-3} \%$ 。

仿照前述正規化方式，計算最大相對誤差百分比，結果如表 5.20 所示。由表 5.20 可知壓力水頭與污染物濃度之最大相對誤差百分比仍低於 1%，與 HST3D 相當一致，溫度則為 1.36%，仍在一可接受範圍內。



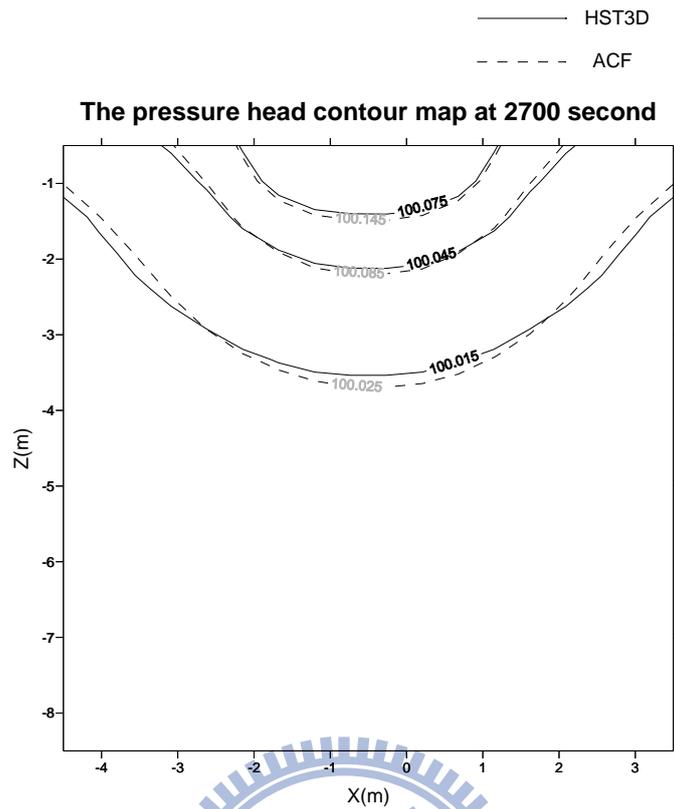


圖 5.8 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布

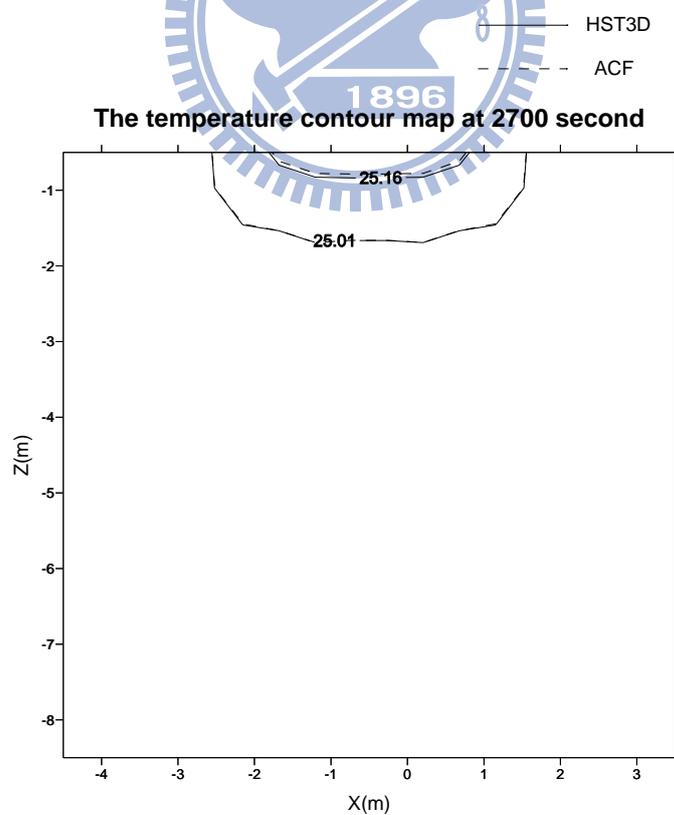


圖 5.9 熱流模擬驗證—溫度場分布

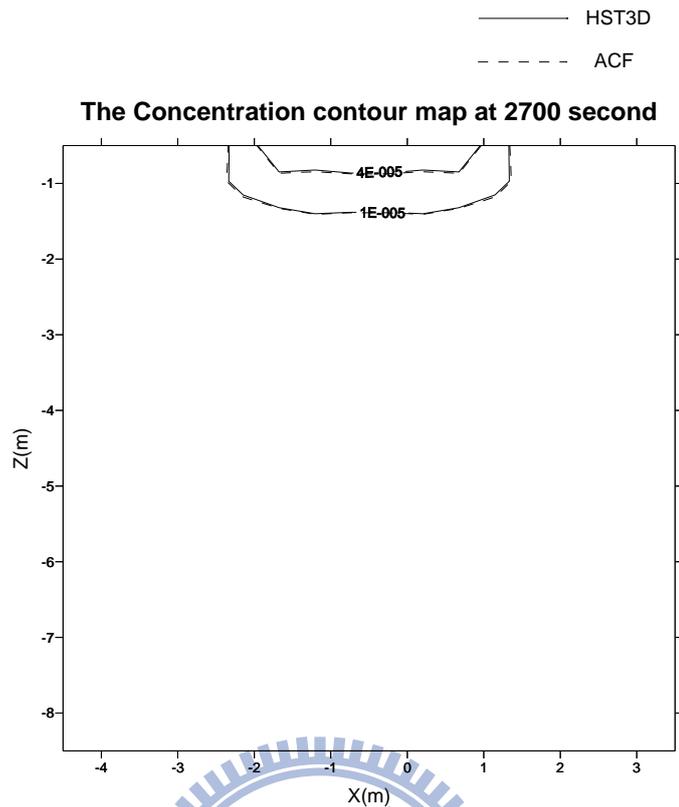


圖 5.10 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布

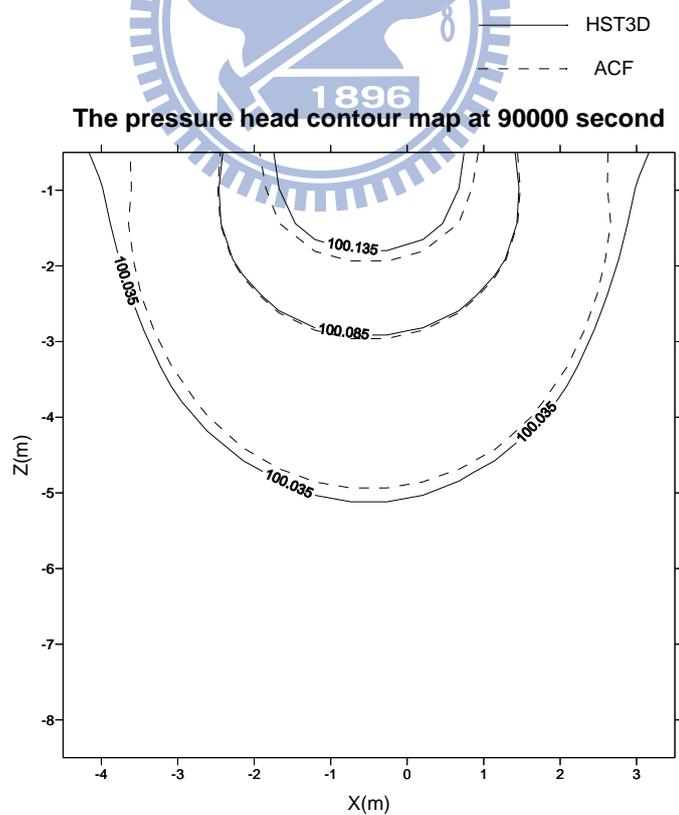


圖 5.11 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布

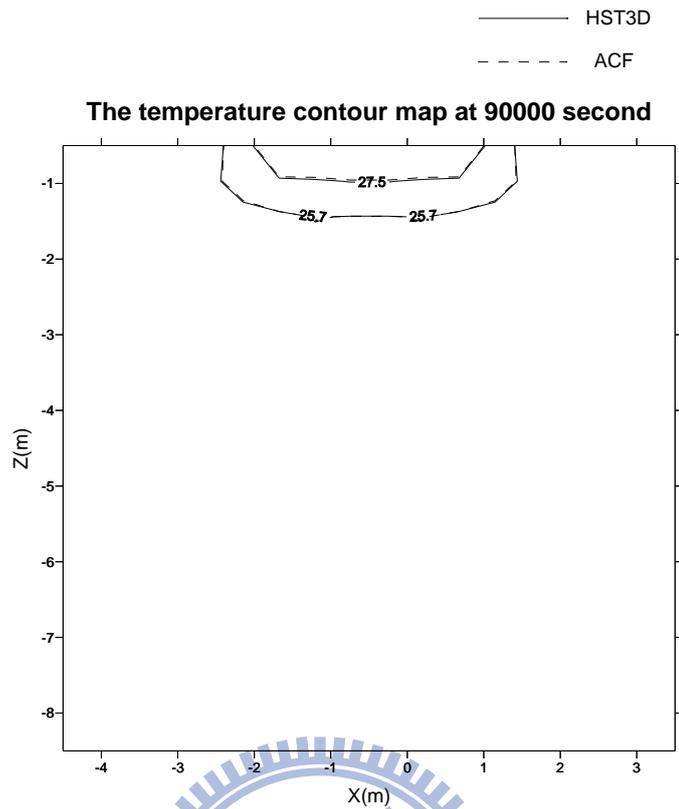


圖 5.12 熱流模擬驗證—溫度場分布

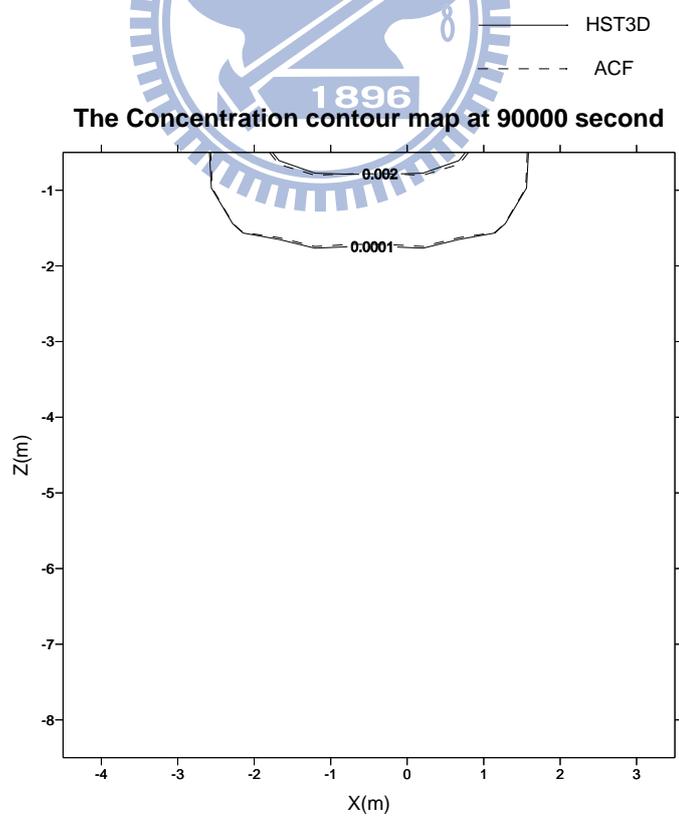


圖 5.13 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布

表 5.20 案例二模擬初期及模擬結束時，ACF 與 HST3D 之最大相對誤

差百分比整理表

模擬時刻	壓力水頭	溫度	濃度
t = 2700 秒	0.070%	0.063%	0.0045%
t = 90000 秒	0.105%	1.360%	0.067%

5.2.2 案例三模式設定及驗證結果說明

圖 5.14~圖 5.16 為案例三在 300 秒之模擬結果，圖 5.17~圖 5.19 為模擬時刻在 15000 秒時之模擬結果，其中虛線為可適性計算平台之模擬結果，簡稱為 ACF，實線為 Tough2 之模擬結果。由圖 5.8~圖 5.10 可知，ACF 所計算之壓力水頭、溫度與濃度分布與 HST3D 之模擬結果一致。在地下水流部分，兩者之最大差值為 7.1 公分水頭高，在熱流部分，兩者之最大差值為 0.025 °C，在污染傳輸模擬部分，濃度(單位為重量百分濃度)之最大差值為 $3.44 \times 10^{-4}\%$ 。若以各模擬問題設定之初始條件最大值作為正規化基準，結果如表 5.21 所示，表中分別顯示壓力、溫度與濃度之相對誤差。在模擬時間為 300 秒時，ACF 與 HST3D 之最大誤差百分比皆在 1% 以下，代表模擬結果十分相近。圖 5.17~圖 5.19 為模擬時刻在 15000 秒時之模擬結果，由圖可知兩模式之模擬結果一致。在地下水流部分，壓力水頭之最大差值仍為 7.5

公分水頭高，溫度相差最高為 0.8°C ，濃度之最大差值為 $6.179 \times 10^{-3}\%$ 。

仿照前述正規化方式，計算最大相對誤差百分比，結果如表 5.21 所

示。由表 5.21 可知壓力水頭與污染物濃度之最大相對誤差百分比仍

低於 1%，與 HST3D 相當一致，溫度則為 3.2%，仍在一可接受範圍

內。

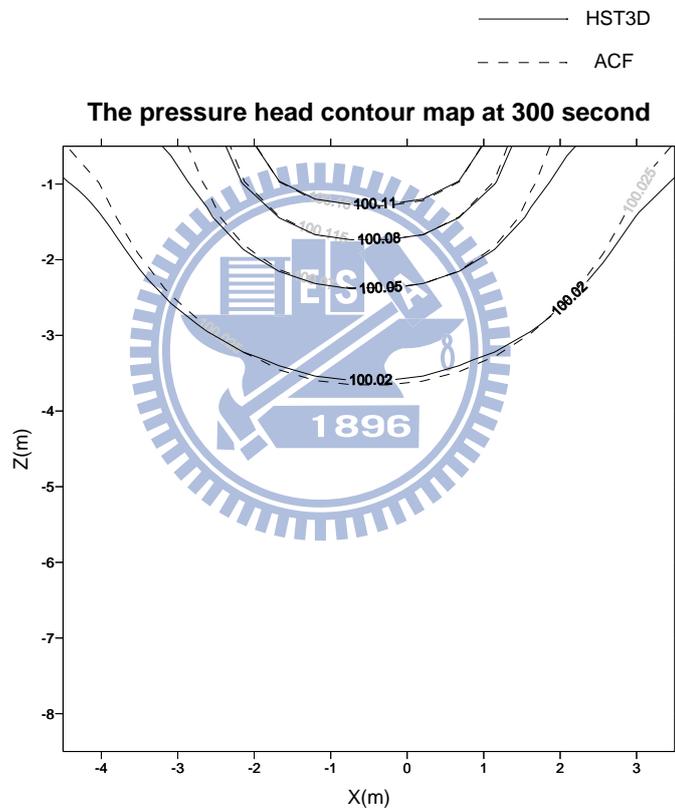


圖 5.14 壓力水頭模擬驗證—壓力水頭分布

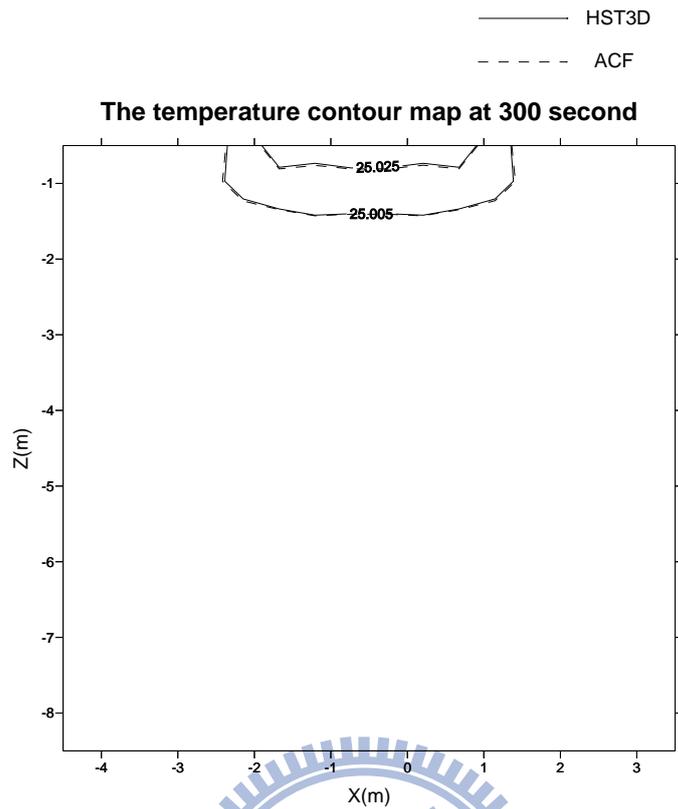


圖 5.15 熱流模擬驗證—溫度場分布

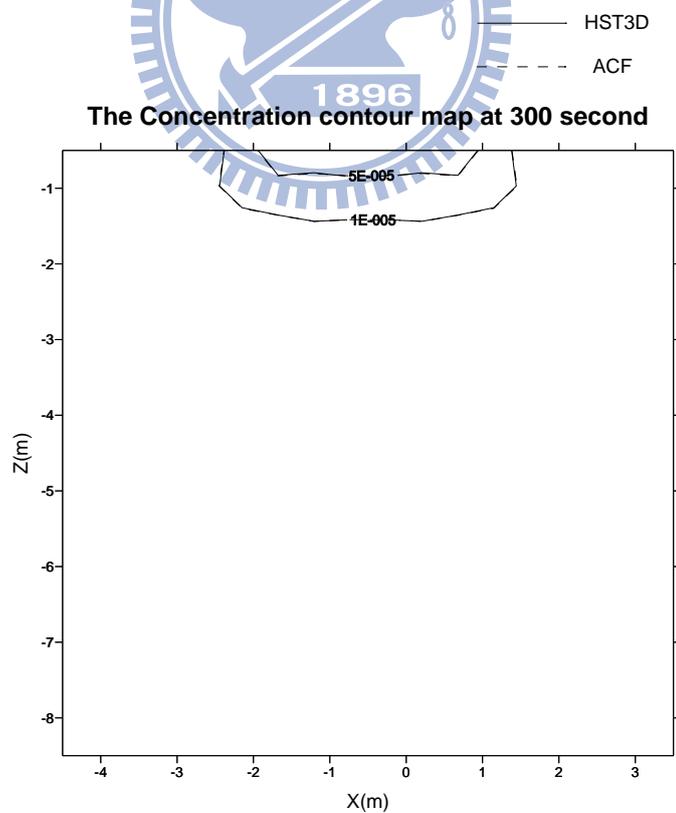


圖 5.16 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布

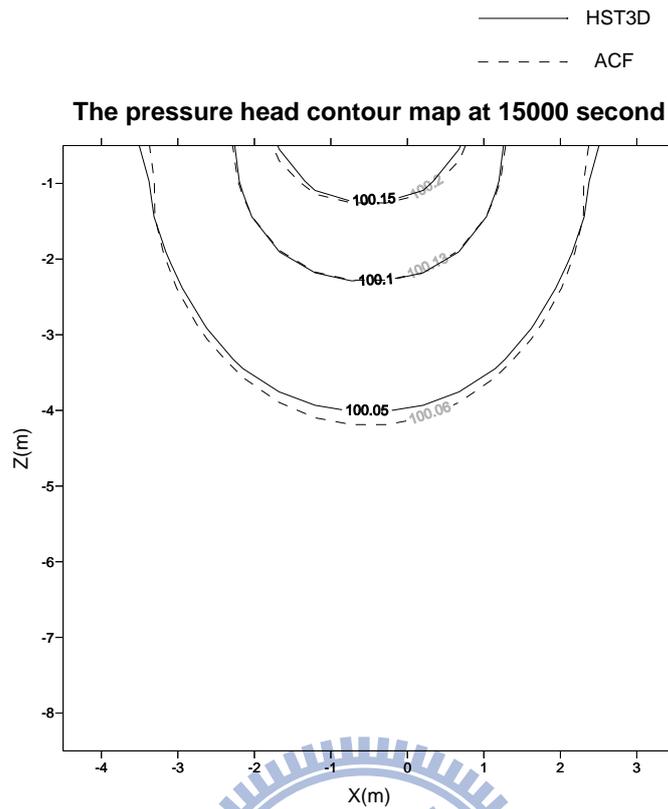


圖 5.17 地下水流模擬驗證—壓力水頭分布

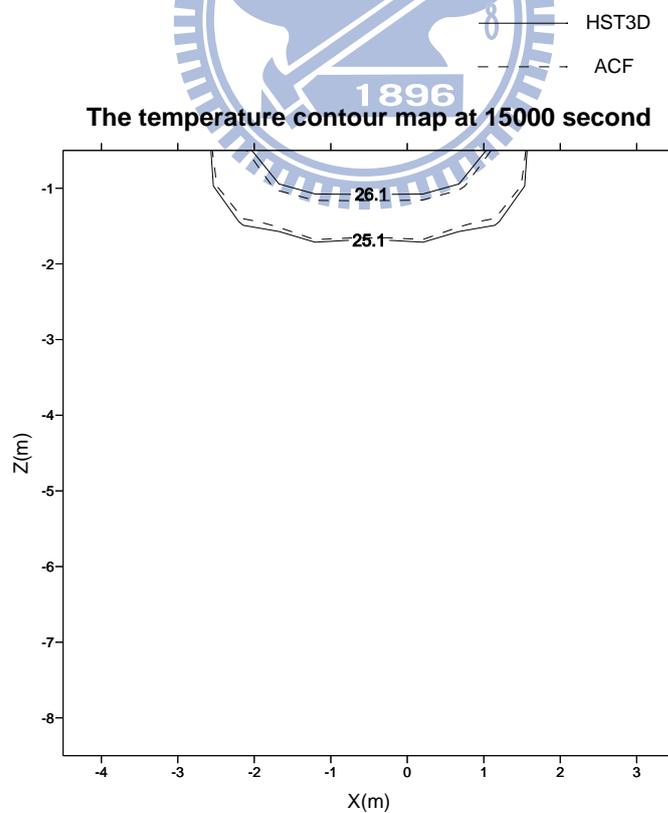


圖 5.18 熱流模擬驗證—溫度場分布

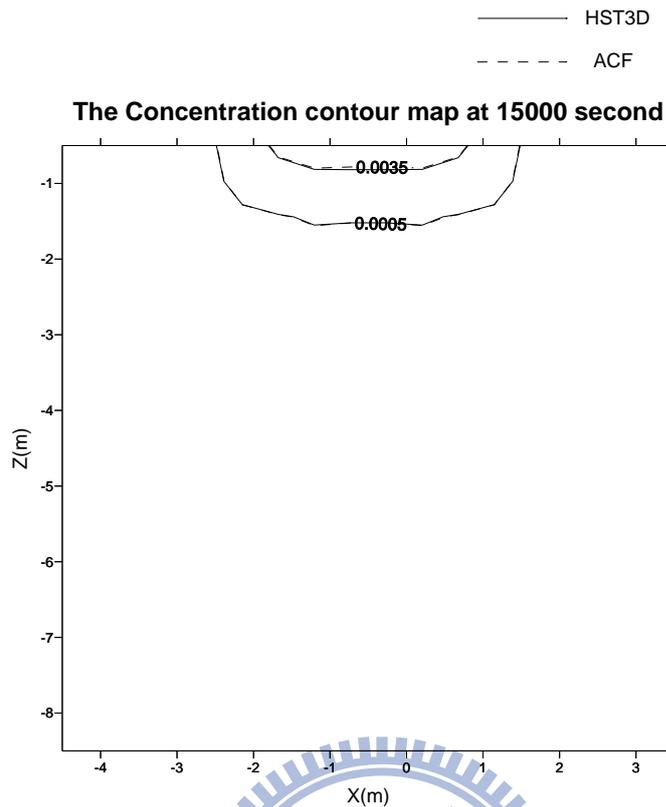


圖 5.19 污染物傳輸模擬驗證—濃度場分布

表 5.21 案例三模擬初期及模擬結束時，ACF 與 HST3D 之最大相對誤差百分比整理表

模擬時刻	壓力水頭	溫度	濃度
t=300 秒	0.071%	0.063%	0.0034%
t= 15000 秒	0.075%	3.20%	0.062%

5.2.3 案例二與案例三考量延散機制之比較

為探討延散機制之影響，本研究將案例二與案例三之延散係數設定為 0 再以 ACF 進行模擬，再分別與前述 5.2.1 節及 5.2.2 節考量延散機制之 ACF 模擬結果進行比較，比較結果如圖 5.20~圖 5.23 所示，

其中圖 5.20 與圖 5.21 為案例二之有無考量延散機制之濃度與溫度比較結果，圖 5.22 與圖 5.23 為案例三有無考量延散機制之濃度與溫度比較結果。案例二為流速較小之案例，流場平均流速約為 $3 \times 10^{-7}(\text{m/s})$ ，圖 5.20 與圖 5.21 為案例二在時刻為 2700 秒時之模擬結果，圖 5.20 代表有無考量延散機制之濃度比較圖，圖 5.21 則為有無考量延散機制之溫度比較圖，其中實線代表考量延散機制之模擬結果，虛線代表未考量延散機制之模擬結果。由圖 5.20 與圖 5.21 可知，在 2700 秒時，有無考量延散機制之濃度或溫度分布幾乎相同，在濃度比較上，兩者之最大相對誤差百分比為 0.0002%，在溫度比較上，兩者之最大相對誤差百分比為 0.02%。案例三之流場平均流速為案例二之 10 倍，其平均流速約為之 $3 \times 10^{-6}(\text{m/s})$ ，圖 5.22 與圖 5.23 則為案例三在時刻為 900 秒時之濃度與溫度比較結果。由圖 5.22 可知，濃度在 Z 軸方向稍有差異，代表考量延散之實線較代表無考量延散之虛線涵蓋範圍稍微向外擴張，兩者之濃度最大相對誤差百分比為 0.00077%。由圖 5.23 可知，溫度無論在 Z 軸或 X 軸方向其實線涵蓋範圍均較虛線稍微外擴，兩者之溫度最大相對誤差百分比為 0.09%。

綜合上述比較可知，隨著模擬區域之流速上升，延散之效用亦明顯增強，如案例二在時刻為 2700 秒時，溫度與濃度分布無論是否考量延散機制差異均不大，而案例三在時刻為 900 秒時，溫度與濃度分布

即已出現些微差異。表 5.22 為計算案例二與案例三之 peclet number 結果，由表可知，無論在熱流或污傳輸模擬，案例三之 peclet number 均大於 2，案例二之 peclet number 則為接近 2 或小於 2。因此在模擬熱流與污染物耦合案例時，當模擬問題之流場流速較快時(如 peclet number > 2)，則必需考量延散機制。

表 5.22 案例二與案例三之 peclet number 計算結果

	污染傳輸之 Peclet number	熱流傳輸之 Peclet number
案例二	1.74	2.25
案例三	6.77	22.5

Compare the Concentration contour map at 2700 second

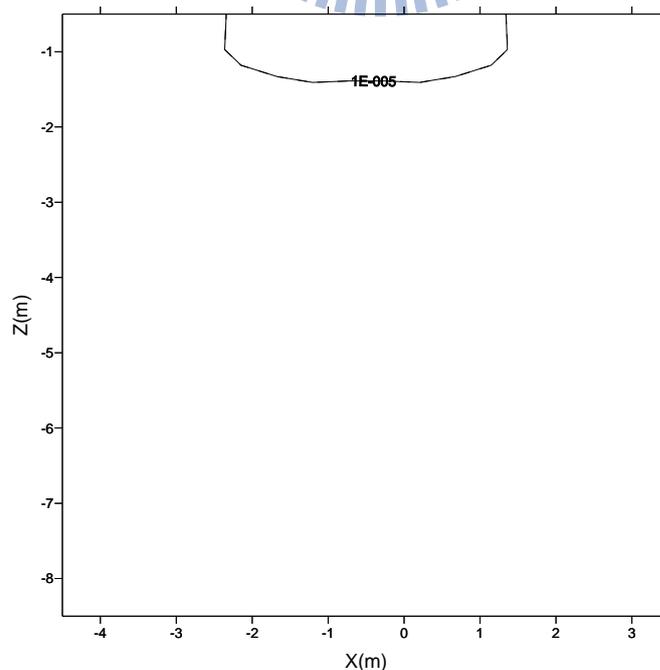


圖 5.20 案例二有無考量延散機制之污染傳輸模擬結果比較

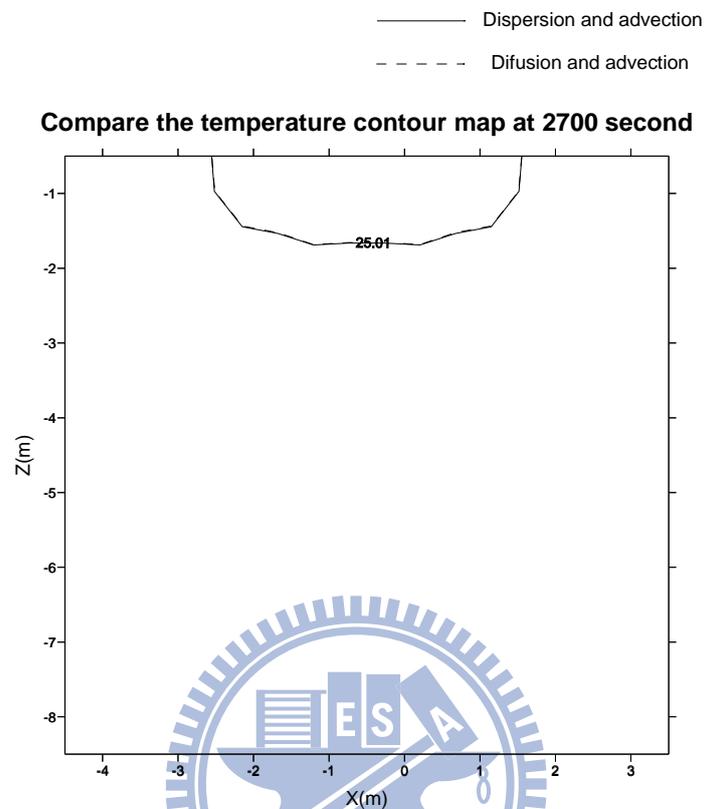


圖 5.21 案例二有無考量延散機制之熱流傳輸模擬結果比較

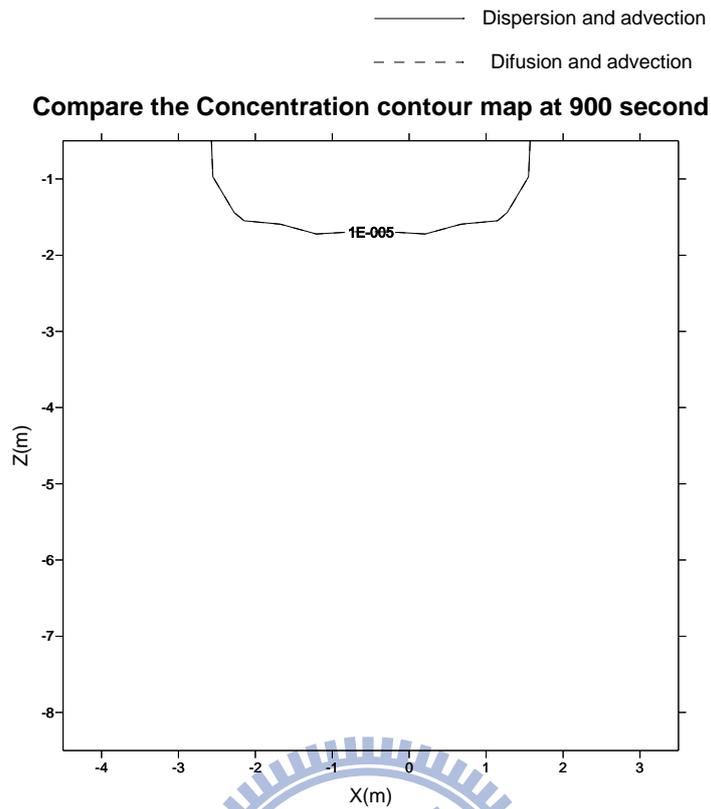


圖 5.22 案例三有無考量延散機制之污染傳輸模擬結果比較

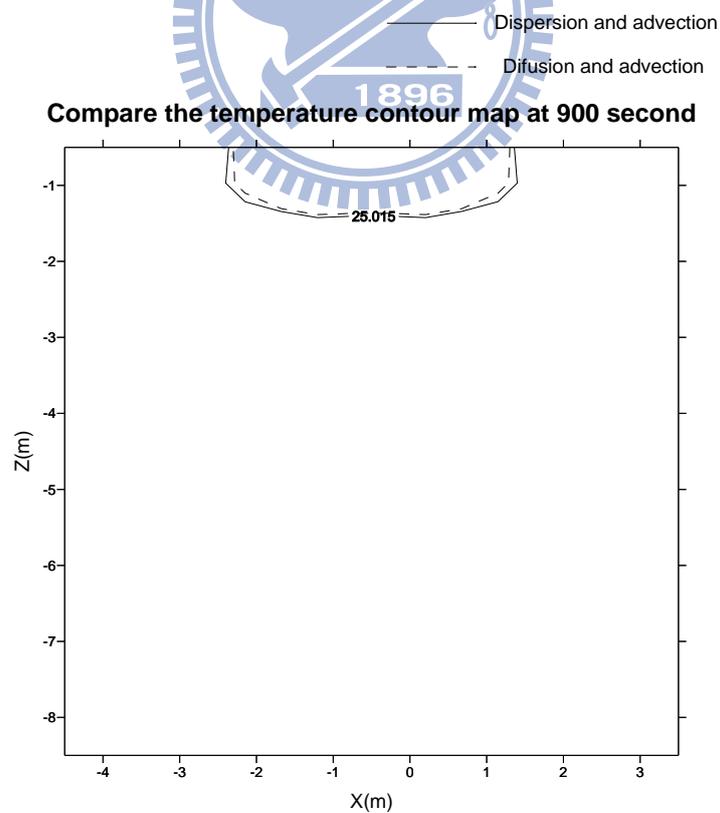


圖 5.23 案例三有無考量延散機制之熱流傳輸模擬結果比較

第六章 智慧型可適性計算平台建置

前述第三章所完成之可適性計算平台加入人工智慧即成為智慧型可適性計算平台，即完成第二章所提整個系統概念架構之實作。本章將建立人工智慧子系統，包括專家系統(Expert system)建置模組，類神經網路(Artificial neural network, ANN)建置模組；之後再整合入可適性計算平台中，模式開發者將可應用此模組開發出所需功能，如應用專家系統模組建立一模式參數檢定專家系統，本研究應用專家系統實作控制協調層之協調委員，建置方法將於 6.3 節中說明，後續研究可依模式開發者之發展需求再行擴充其他人工智慧子系統。以下分別說明本研究選擇類神經網路與專家系統之原因。

(1) 專家系統之選擇

專家系統依照知識表示法可分成許多種類，本研究選擇之專家系統為法則式專家系統(Rule-base Expert System)，乃以法則(Rules)作為知識表示法，其優點為可容易的將專家知識或經驗轉化為法則，充分的利用人類知識與經驗。轉化完成之法則將儲存於專家系統之知識庫(Knowledge Base)中，在使用這些法則時，則由專家系統中之推理機(Inference Engine)進行法則推論(Rule inference)，無須如傳統程序性程式語言所撰寫之法則需注意法則間先後次序之關係，也因為這個優點，

專家系統在法則之維護上或擴充上均較傳統程序性語言單純且具有彈性。另外，專家系統另一著稱之功能為可解釋性，因為專家系統在推論過程中，可將各法則之相關資訊依推論順序輸出，因此使用者即可藉由此資訊了解求得答案之邏輯推論關係。

本研究所建構之協調委員其主要功能為監督及分析所有計算元之計算狀態，並依分析結果適時調整其計算行為，故本研究採用法則式專家系統建置此協調委員，將分析計算元之計算狀態的方法轉化為法則，納入專家系統之知識庫中，建立「計算元計算狀態分析專家系統」，詳細建置過程將於 6.3 節中說明。若後續研究在計算元狀態分析時，要修正或新增分析邏輯，此時只需修正知識庫中相對應於該邏輯的法則或是將新增之邏輯轉化為法則再加入知識庫中即可；若未來後續研究需再增加其他協調委員，因本研究已建立專家系統建置介面，因此可考慮再以專家系統建置其他協調委員。

(2)類神經網路之選擇

若要涉獵一個全新的問題時，研究者往往僅能藉由實驗觀察其運動行為，之後由實驗所得數據進行迴歸分析，找出描述該行為之方程式，若此時若能提供一有效且簡單之迴歸工具，即能對該研究達到事半功倍之效，本研究目前在迴歸工具上選擇類神經網路(ANN)，主要原因為無論在線性或非線性迴歸上，ANN 均具良好之成效。

因為本研究在數值計算上不同於傳統數值方法，乃由各計算元獨立計算方程式集合，因此本研究可容易的將迴歸所得之類神經網路視為一條方程式，納入方程式集合中，之後可再搭配「方程式集合分析模組」進行分析，再應用本計算平台建立模擬模式。

為便於了解何謂智慧型可適性計算，6.1 節將先說明智慧型可適性計算之概念，接著在 6.2 節以一簡例補充說明，6.3 節說明如何建置人工智慧子系統及應用人工智慧建立控制協調委員，6.4 節將說明智慧型可適性計算之計算成果。

6.1 智慧型可適性計算說明



第三章所提可適性計算平台，可因應使用者需求，當模擬範疇需要改變時，使用者能立即調整計算平台的模擬內容，智慧型可適性計算乃是基於可適性計算之延伸，本研究嘗試結合人工智慧，企圖使計算元具有類似智慧的能力，在實作此概念時，本研究將人工智慧應用於建置主控協調層之協調委員，該協調委員之職責為監督分析計算元狀態，並依分析結果調整計算元之方程式集合，而計算元求解方程式集合之求解方法仍同第三章所述，如此，計算元將可因週遭環境變化而調整自身之方程式集合進行計算，展現出類似智慧之表現。

6.2 智慧型可適性計算簡例

上述 6.1 節之智慧型可適性計算說明中提及計算元會因應週遭環境改變而調整自身方程式集合，在此節以一簡例進行概念說明。假設一模擬區域，取其九個計算元所在區域，如圖 6.1a 所示，將此九個計算元進行編號，分別為 N0~N8，今假設有一污染物的鋒面由左上方往右下方傳輸，污染物初始分佈區域主要為計算元 N3，N6 與 N7 之涵蓋範圍，另一熱流鋒面由區域之右下方往左上方傳輸，熱流初始分佈區域主要為計算元 N2 之控制範圍。以 N6 與 N2 兩計算元為例，在初始時刻時，N6 計算元在區域左上方位置處，該位置有污染物存在，但其相鄰計算元皆無溫度變化，因此 N6 計算元僅須計算地下水流應用模組及污染物傳輸應用模組之方程式集合，同理，N2 計算元僅須計算地下水流及熱流應用模組之方程式集合。第一個時刻末(第二個時刻初)之污染物與熱流分佈如圖 6.1b 所示。在第二個時刻初時，因污染物持續往區域之右下方移動，此時 N2 計算元已察覺相鄰計算元皆有污染物濃度存在，雖然污染物尚未入侵 N2 計算元，但因 N2 計算元周遭計算元皆已存在污染物濃度，因此 N2 啟動污染物傳輸應用模組之方程式集合進行計算，同理，N6 計算元因周遭部份計算元已有溫度變化，故仍需啟動熱流應用模組之方程式集合進行計算。

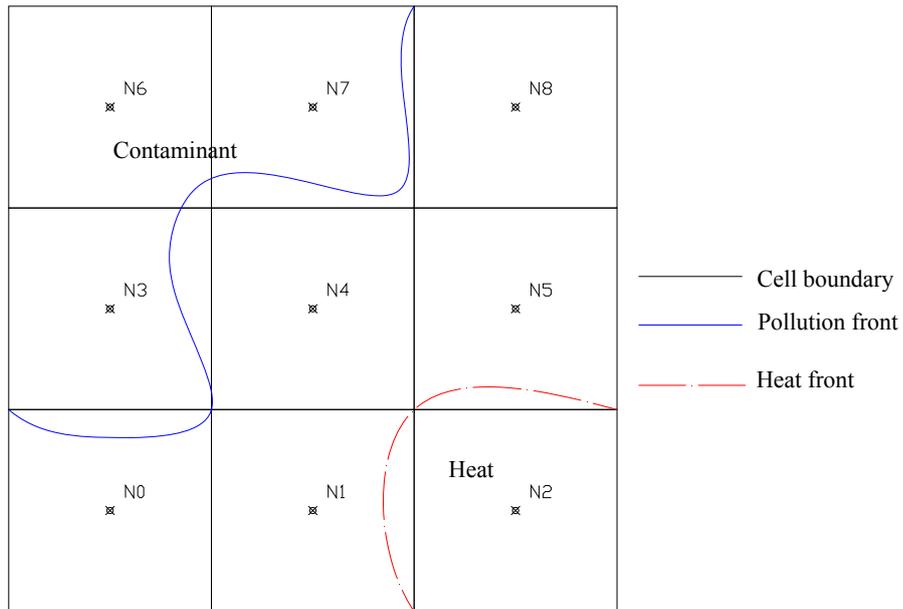


圖 6.1a 初始時刻污染物與熱流分佈圖

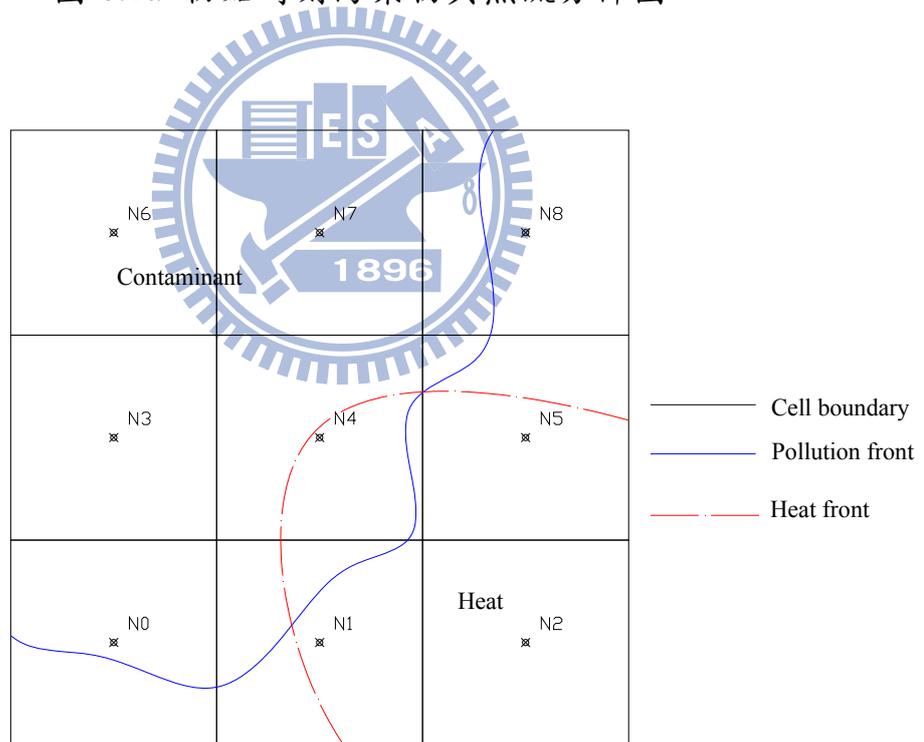


圖 6.1b 第二個時刻初之污染物與熱流分佈圖

6.3 智慧型可適性計算平台系統架構及開發流程說明

前述第二章之系統概念架構中，人工智慧建將於本小節實作，智慧型可適性計算平台架構如圖 6.2 所示，共分為可適性計算平台、主控協調層及人工智慧子系統三個部份。人工智慧子系統包括專家系統模組與類神經網路模組，專家系統模組在本研究中乃用於製作「計算元計算狀態分析模組」，而類神經網路模組則可應用於可適性計算平台之應用子系統中，建置各應用模組之方程式，詳細建置過程將於 6.3.1 節說明。前述「計算元計算狀態分析模組」，其主要職責為由各計算元之模擬結果分析計算元本身及周遭之狀態，再決定各計算元須計算之方程式集合並依計算順序儲存於各計算元之「方程式計算順序與設定儲存容器」，而第三章所建立之可適性計算平台，只能將「方程式集合分析模組」所分析應用模組之結果儲存於「方程式計算順序與設定儲存容器」，各計算元需計算所有應用模組，無法因應計算元周遭及自身之狀態變化自動調整計算元之所需計算之方程式集合，減少計算量。

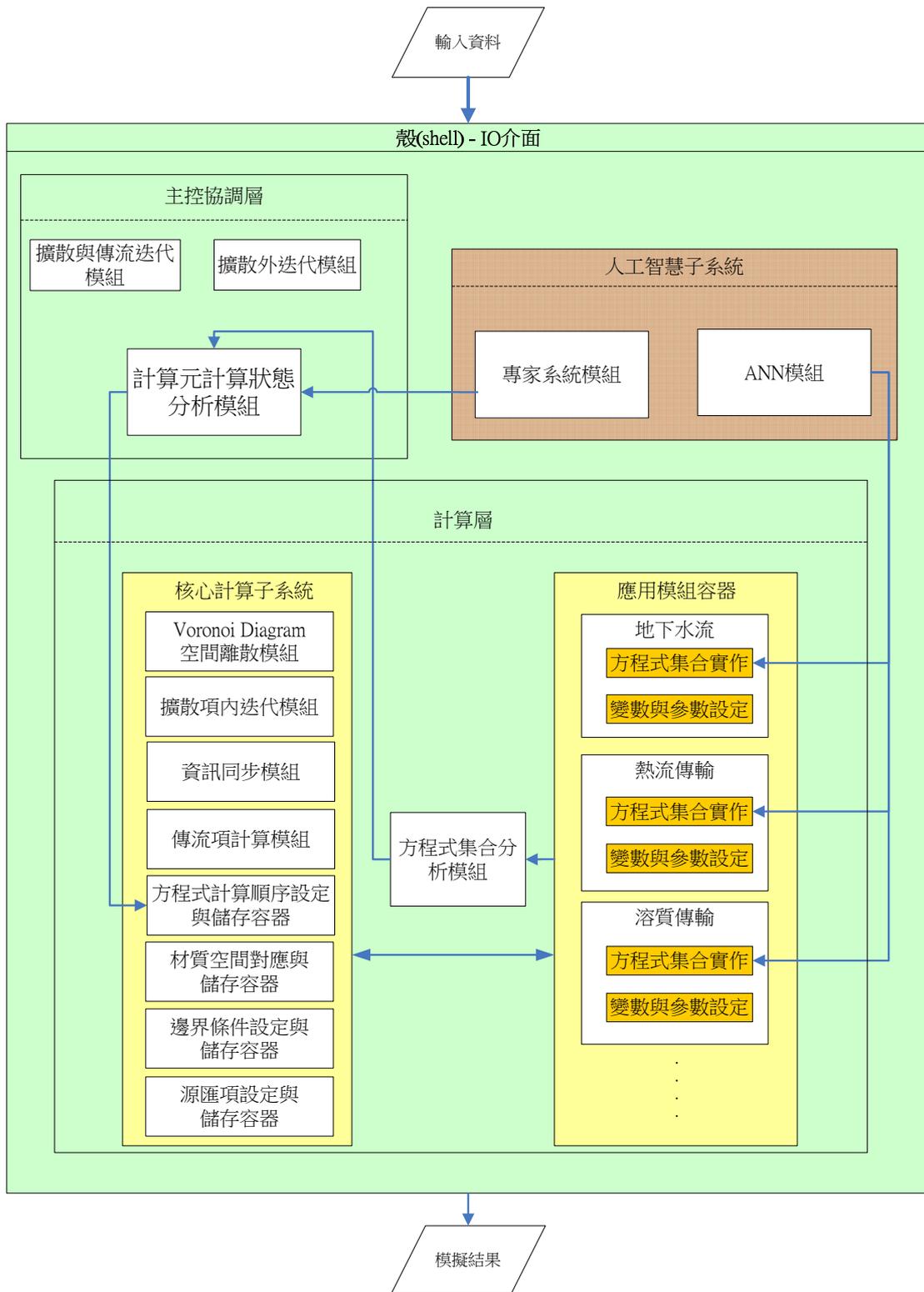


圖 6.2 智慧型可適性計算架構圖

6.3.1 人工智慧子系統

人工智慧子系統包括專家系統模組及類神經網路模組，專家系統模組將於 6.3.1-1 節說明，類神經網路模組於 6.3.2 節說明。

6.3.1-1 專家系統模組

本小節將簡介專家系統、專家系統軟體 CLIPS 以及如何建立專家系統模組。

I 專家系統簡介

程序性之程式語言，如 C 或 Fortran 語言，一般皆作為資料處理之用(如數字或陣列之處理)。然而人類常使用抽象及象徵性的方法處理複雜的問題，這種抽象及象徵性的方法往往不適用於程序性之程式語言。雖然抽象的資訊仍可用程序性之程式語言撰寫，但必須耗費大量的時間進程式編撰才足以描述這些抽象資訊，以轉換這些抽象資訊成為可以使用的格式。

近年來人工智慧領域的研究結果已經發展出可具體化抽象資訊的技術，這項技術可讓程式表達得更接近人類邏輯，且更利於程式的發展與日後之維護。專家系統即為上述的電腦程式之一，其具有能夠模仿人類專家解決複雜問題的能力。

Edward Feigenbaum 教授將專家系統定義為一個使用知識及推理過

程解決問題的智慧型電腦程式，且這樣的問題是需要大量專家知識才得以解決的問題。也就是說，專家系統是一個模仿具有決策能力之人類專家的電腦系統。

專家系統係由知識庫(Knowledge Base)及推理引擎(Inference Engine)等兩個主要元件所組成。專家系統依其知識表示法可分為許多種類，其中以法則(rules)的方式表示知識之專家系統稱為法則式專家系統(Rule-based Expert System)，為最常見的專家系統之一。法則式專家系統之法則儲存於知識庫，用來表示數組相對於給定情況的反應。每條法則皆由條件部分(conditional element)和動作部分(action element)所組成。條件部分為一系列的條件敘述，若這部份的敘述和事實(facts)相符，則執行(fire)此法則之動作部分。推理引擎會配對這些敘述與事實是否相符合，此過程稱為 patterns matching，每當法則的動作部分改變事實(facts)後，推理機便會再次執行 patterns matching 的動作，判斷哪些法則是可執行的，直到沒有任何條件部分的敘述符合事實為止。

專家系統相較於程序性程式(如:C或Fortran等)語言有很大的差異，首先專家系統解題的知識與推論機制是分開的，而程序性程式設計則通常會將資料與演算法交織在一起；此外在資料處理方面，專家系統偏向高度交談式處理，且其處理對象為知識，而程序性程式設計則為

批次順序處理，處理對象為資料；因此專家系統可以因知識抽換而改變系統功能及行為或是強化解題模式與能力，而程序性程式設計則需頻繁修改程式，相較之下專家系統適於應用在特定領域且維護和擴充會較為方便。另外專家系統相較程序性程式語言，具有提供解釋推論過程之能力，讓使用者可由推論過程理解求得答案之邏輯。

II CLIPS 簡介

CLIPS 是 C Language Integrated Production System 的縮寫，係由 NASA/Johnson Space Center 使用 C 程式語言所開發的專家系統開發工具(Expert system shell)，為 NASA 所開放的免費軟體。以 CLIPS 建置專家系統的主要步驟為將法則(rules)輸入知識庫(Knowledge Base)，另外因本研究將 CLIPS 嵌入智慧型計算平台中，因此對於 CLIPS 與計算平台間之資料交換須再作處理。

CLIPS 支援了三種不同的程式編撰方法，分別為以法則為基礎(Rule-based)、物件導向(Object-oriented)及程序導向(Procedural)，說明如下：

- (1) 以法則為基礎(Rule-based)：此種程式編撰方式允許了知識可以表示成啟發式的敘述，以指定對特定的情況做出動作。
- (2) 物件導向(Object-oriented)：此種程式編撰方式允許複雜的系統可以被拆解並模組化成數個元件，這些元件可以再用於建立其他的

系統或是其他元件，本研究即採取此種程式編撰方式。

(3) 程序導向(Procedural)：此種程式編撰方式則是類似程序性程式語言，如 C、Java 及 FORTRAN 等。

CLIPS 之推理鏈結法屬前式鏈結法(Forward chaining)，另外，CLIPS 亦可嵌入至別的程式語言，或是被當作子程式呼叫，因此易於與其他程式語言進行整合。

III 專家系統模組說明

CLIPS 對於嵌入 C 程式語言已有完備之溝通介面(I/O interface)，惟其溝通介面較為繁雜。本研究為了達到程式開發後之高度可重複利用性，在系統發展上乃以物件導向方式撰寫，因此為了與本研究開發系統之概念一致，以及簡化 CLIPS 之溝通介面，本研究將 CLIPS 製作為類別(Class)，對 CLIPS 進行封裝(Encapsulation)，並將其溝通介面(I/O interface)重新包裝，簡化為較簡單的函式，如此一來將能大幅簡化應用 CLIPS 之複雜度及提升程式開發之效率。因為本研究已完成將 CLIPS 封裝，在後續應用上僅需將 CLIPS 宣告為一成員物件，即可應用 CLIPS 建置專家系統。另外，在建立專家系統時，最重要的部份為建立法則，此部分乃由使用者自行建立，並儲存於 CLIPS 的輸入檔(或稱法則庫)，之後透過封裝後之 CLIPS 溝通介面讀入輸入檔即可使用該專家系統。而在撰寫專家系統之語法上，本研究採用

CLIPS 所提供之物件導向(Object-oriented) 語法撰寫專家系統，以便後續研究開發專家系統時可重複利用本研究所建立之專家系統。

因本研究以專家系統建置「計算元狀態分析模組」，故在此說明計算元與專家系統間之溝通過程，至於建立該模組之專家系統所需推論邏輯，將於 6.4 節說明。圖 6.3 為專家系統與計算元之溝通示意圖，對於專家系統而言，計算元之相關資訊為輸入(Input)，例如計算元求解問題之狀態變數，此部份資訊乃透過可適性計算平台之輸出介面所取得，之後再透過封裝後之專家系統輸入介面將資訊傳給專家系統。在專家系統針對該節點狀態完成推論分析後，專家系統透過輸出介面將資訊傳出，再透過可適性計算平台之輸入介面將資訊傳送給計算元，其中專家系統之傳出資訊為該計算元須計算之方程式集合。

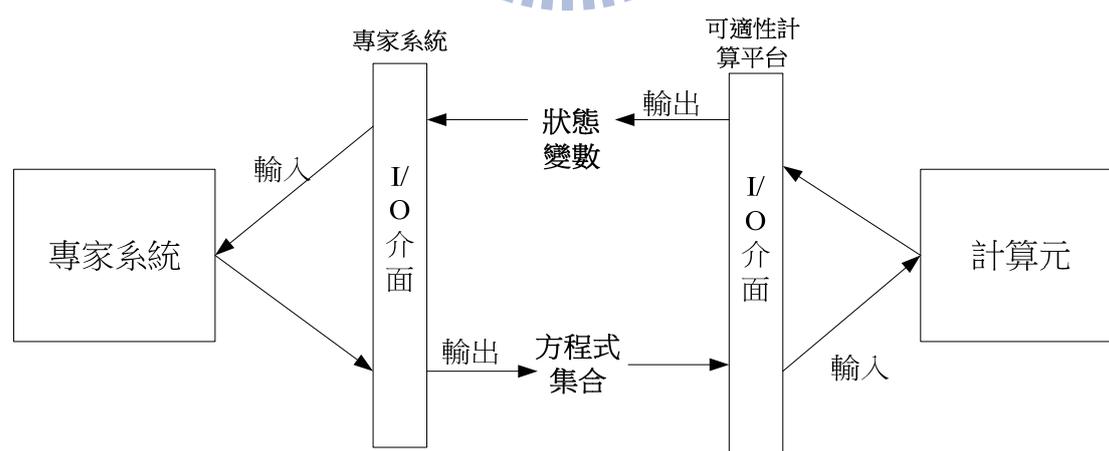


圖 6.3 專家系統與計算元溝通示意圖

6.3.1-2 類神經網路

本小節將簡介類神經網路、類神經網路 FANN(Fast Artificial Neural Network)以及如何建立類神經網路模組。

I 類神經網路簡介

傳統上常用統計學上的方法做為迴歸(Regression)之依據，這些方法頗具成效，然在面對許多複雜問題時，這些方法仍有所不足，主要是因為傳統統計學方法對於非線性系統及變數間有交互作用之系統較難適用。近年來類神經網路(Artificial neural network, ANN)已被視為非常有效之非線性模型建構工具。

類神經網路(Artificial Neural Network)是指模仿生物神經網路的資訊處理系統，其定義為：「類神經網路是一種計算系統，包括軟體與硬體，它使用大量簡單的相連人工神經元來模仿生物神經網路的能力。人工神經元是生物神經元的簡單模擬，它從外界環境或者其他人工神經元取得資訊，加以簡單的運算，再輸出其結果到外界環境或者其他人工神經元。」。

類神經網路是由許多個人工神經元與連結所組成，並可以組成各種網路模式，其中又以倒傳遞網路(Back-Propagation network, BPN)為應用最廣者，其屬於監督式學習網路(Supervised learning)的一種，主要為利用一組已知輸入值及輸出值來訓練網路，直到網路能找出近似

輸入及輸出值之轉換函數。一個 BPN 包含許多層，如輸入層(Input layer)、隱藏層(Hidden layer)及輸出層(Output layer)。輸入層之處理單元用以輸入外在的環境訊息，輸出層處理單元用以輸出訊息給外在環境，隱藏層之處理單元則提供神經網路供各神經元交互作用，與代表問題的內在結構處理能力。介於處理單元間訊息傳遞的路徑稱為連結(Connection)，每一個連結上有一個加權值 W_{ij} ，用以表示第*i*處理單元對第*j*個處理單元之影響強度。而各處理單元之輸出值與輸入值間的關係式，一般可用輸入值的加權乘積和之函數所表示，如式(6-1)所

示。

$$Y_j = f\left(\sum_i W_{ij} X_i - \theta_j\right)$$

(6-1)

其中

Y_j = 模仿生物神經元模型的輸出訊號。

f = 模仿生物神經元模型的轉換函數。

W_{ij} = 模仿生物神經元模型的神經節強度，又稱連結加權值。

X_i = 模仿生物神經元模型的輸入訊號。

θ_j = 模仿生物神經元模型的閾值或門限值。

BPN之架構如圖6.4所示，包括：

(1)輸入層：用以表現網路的輸入變數，其處理單元數目依問題而定。



本層之轉換函數為線性轉換函數，如 $f(x)=x$ 。

(2)隱藏層：用以表現輸入處理單元間的交互影響，其處理單元數目並無標準方法可以決定，經常需以試驗方式決定其最佳數目。使用非線性轉換函數。網路可以不只一層隱藏層，也可以沒有隱藏層。

(3)輸出層：用以表現網路的輸出變數，其處理單元數目依問題而定。

本層之轉換函數為非線性轉換函數。

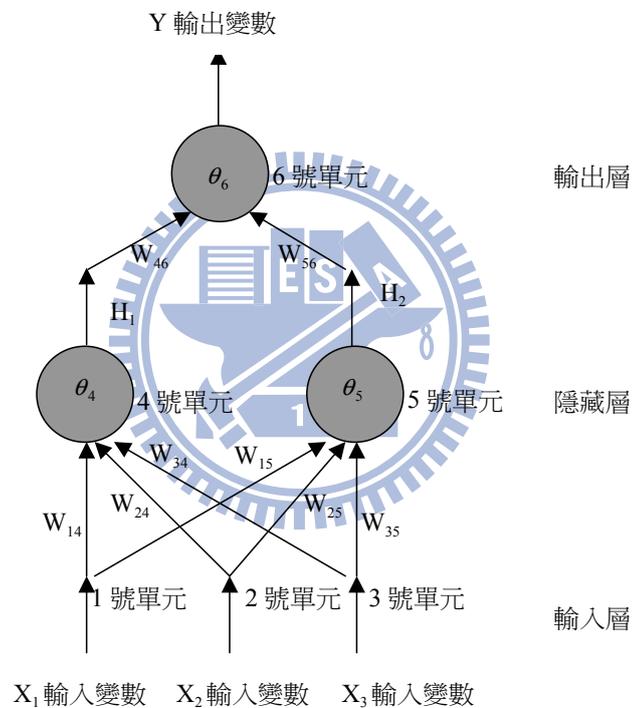


圖 6.4 倒傳遞類神經網路架構

BPN 訓練基本原理與迴歸分析一樣是最小化誤差平方和，而不同之處有：

(1)誤差函數的組成架構：誤差平方和不是迴歸係數的函數，而是連結加權值與閾值的函數。

(2)誤差函數最小化：因為類神經網路是非線性系統，無法同迴歸分析一樣用極值定理最小化誤差函數，進而推導出一組線性聯立方程式求解迴歸係數，而是使用優選法如最陡坡降法(Steepest Descent Method)等，以迭代的方式將誤差函數予以最小化，而解得連結加權值與閾值。

II FANN 簡介

本研究選用之類神經網路工具 FANN(Fast Artificial Neural Network)，屬於監督式(Supervised learning)學習神經網路，其學習演算法為倒傳遞(Back-Propagation)演算法，此工具之取得來源為 Fast Artificial Neural Network Library 之官方網站，為一免費軟體(Free open source software)，另外，該軟體以 C 語言撰寫而成，因此可容易的嵌入本研究所開發之系統中。

III 類神經網路模組說明

本研究採用之類神經網路軟體 FANN 乃由 C 語言撰寫而成，且其溝通介面(I/O interface)不但相較於前述專家系統 CLIPS 之溝通介面精簡許多，且其建置與執行步驟亦相當簡要，故本研究直接應用該軟體之溝通介面建置方程式，並將此軟體內嵌於可適性計算平台之應用模組中。

圖 6.5 說明以神經網路 FANN 建置方程式之概念，在使用 FANN

的介面建置方程式時，首先需完成神經網路的訓練，訓練完成之神經網路可視為一輸入檔，當需要使用此神經網路時再讀入即可，故此步驟為離線式(Off-line)作業。完成神經網路之訓練後，在建置方程式時，先讀入該神經網路，接著再以 FANN 之溝通介面(I/O interface)讀入該方程式所有考量之自變數，透過 FANN 之運算介面進行計算，最後透過 FANN 之溝通介面將應變數輸出。

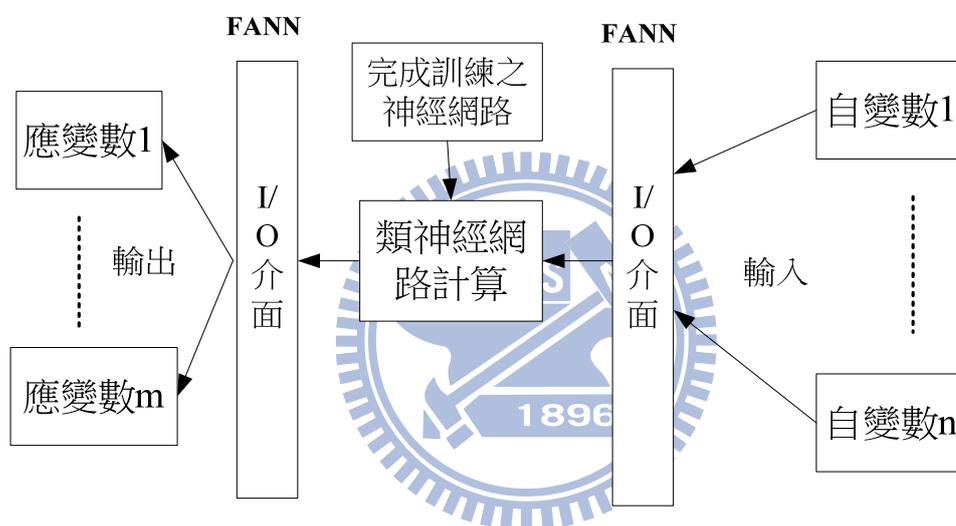


圖 6.5 以神經網路建置方程式示意圖

6.3.2 協調委員建置

本研究所建置之計算平台其計算方式為各計算元獨立求解各自之方程式集合，因此本研究利用此特點，搭配「計算元狀態分析模組」用以分析各計算元週遭環境變化情況，再調整其所計算之方程式，如此各計算元即可具有“適應環境”之能力。

計算元狀態分析模組之位階乃定位在第二章所定義之智慧型可適

性計算架構中之協調委員，其職責為監視及分析各個計算元的計算狀況及週遭環境變化，並依照分析結果調整各計算元之方程式集合。本研究在建立此協調委員時，因考量到此委員之工作內容多以邏輯方法分析計算元狀態，因此本研究採用專家系統建置此協調委員，其在建置過程上僅需將分析邏輯轉化為法則再輸入知識庫，建置步驟不但簡單且日後之維護及擴充亦較具彈性。以下將說明實作步驟及專家系統之推論流程。

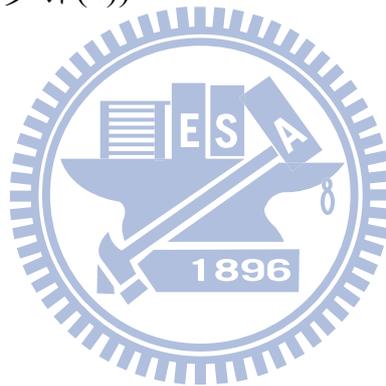
在專家系統之建置上，本研究透過 6.3.1-1 節之專家系統模組進行建置，計算元狀態分析之邏輯說明如下。

本研究在計算元狀態分析上共建立 6 條法則，作為專家系統之推論依據，圖 6.6(a)為法則之原則性說明圖，圖 6.6(b)說明專家系統之推論邏輯輸出。首先第一條法則為判斷系統目前之計算時刻，對應於分析步驟(a)~步驟(b)；第二條與第三條法則為判斷計算元所在位置是否存在源\沉流及源沉流之值是否持續變動，對應於步驟(1)與步驟(2)；法則四為判斷計算元本身之狀態是否持續變化，對應於步驟(5)；法則五為分析一計算元與相鄰計算元是否存在流通量，對應於步驟(6)，法則六則為分析一計算元之相鄰計算元是否已趨近穩定，對應於步驟(7)。步驟(3)、(4)與(8)為上述法則分析後之主要動作(action)，決定計算元是否啟動或停止計算。計算元狀態分析之推論邏輯詳細說明如

下：

法則(一)啟動後，首先會判斷目前運算時刻是否大於第二個時刻？因本研究在分析一計算元狀態時，乃取前兩個時刻之狀態變數做為分析依據，故本分析工具在第三個時刻起才需啟動；若目前計算時刻小於或等於第二個時刻，則啟動所有計算元進行計算(對應步驟(b))，且各計算元皆給定使用者所定義之問題範疇內，所有相關應用模組之方程式集合。若目前計算時刻已大於兩個時刻，則依照目前使用者所選用之應用模組，依序進行分析。接著法則(二)啟動，判斷計算元 i 所在位置是否存在源\沉流節點(Sink\Source point) (對應於步驟(1))，若是，啟動法則(三)，繼續分析判斷源\沉流節點的變動量是否大於門檻值(對應於步驟(2))，若是，則計算元 i 需計算此應用模組並給定方程式集合(對應於步驟(3)及步驟(4))，之後接著分析下一個應用模組；若計算元 i 位置上無源\沉流節點或是源\沉流節點的變動量小於門檻值，皆會使法則(四)啟動。法則(四)(對應於步驟(5))在於判斷計算元上之狀態變數前兩個時刻的改變量是否大於門檻值？若是，代表狀態變數仍持續變化，因此需繼續計算，故其動作(action)為啟動計算元 i 計算(步驟(3)及步驟(4))；若否，則啟動法則(五)。法則(五)(對應於步驟(6))在於判斷計算元 i 與左右鄰點間之狀態變數差值是否大於門檻值？若否，則代表此局部區域已經接近或達到穩態(Steady)，計算元間幾乎無流

通量，因此停止計算元 i 計算此應用模組，其狀態變數乃沿用上一時刻的值；若是，則啟動法則(六)(對應於步驟(7))。法則六主要在判斷計算元 i 之左右鄰點前兩個時刻之狀態變數變動量是否大於門檻值？若否，代表計算元 i 及左右鄰點於前兩個時刻之狀態變數改變幅度幾乎可忽略，代表此局部區域已趨近或達到穩態(Steady)，停止計算元 i 計算此應用模組(對應於步驟(8))，其狀態變數乃沿用上一時刻的值；若是，代表計算元 i 之左右鄰點仍持續變化，因此計算元 i 仍須繼續計算(對應於步驟(3)及步驟(4))。



法則一

If 時刻 > 2

Then 啟動計算原狀態分析

Else 給定各計算元所有方程式集合

法則二

If 計算元位於源沉流節點處 and 啟動計算元狀態分析

Then 啟動源沉流值之變動量分析

法則三
If 啟動源沉流值之變動量分析 and 源流流變動量大於門檻值

Then 啟動計算元進行計算

法則四

If 計算元最近兩個時刻之狀態變數變動量大於門檻值

Then 啟動計算元進行計算

法則五

If 計算元與周遭計算元之狀態變數差值大於門檻值之數目大於1

Then 啟動計算元進行計算

法則六

If 周遭計算元之最近兩個時刻之狀態變數變動量大於門檻值的數目大於1

Then 啟動計算元進行計算

Else 停止計算元計算

圖 6.6(a) 計算元推論法則示意圖

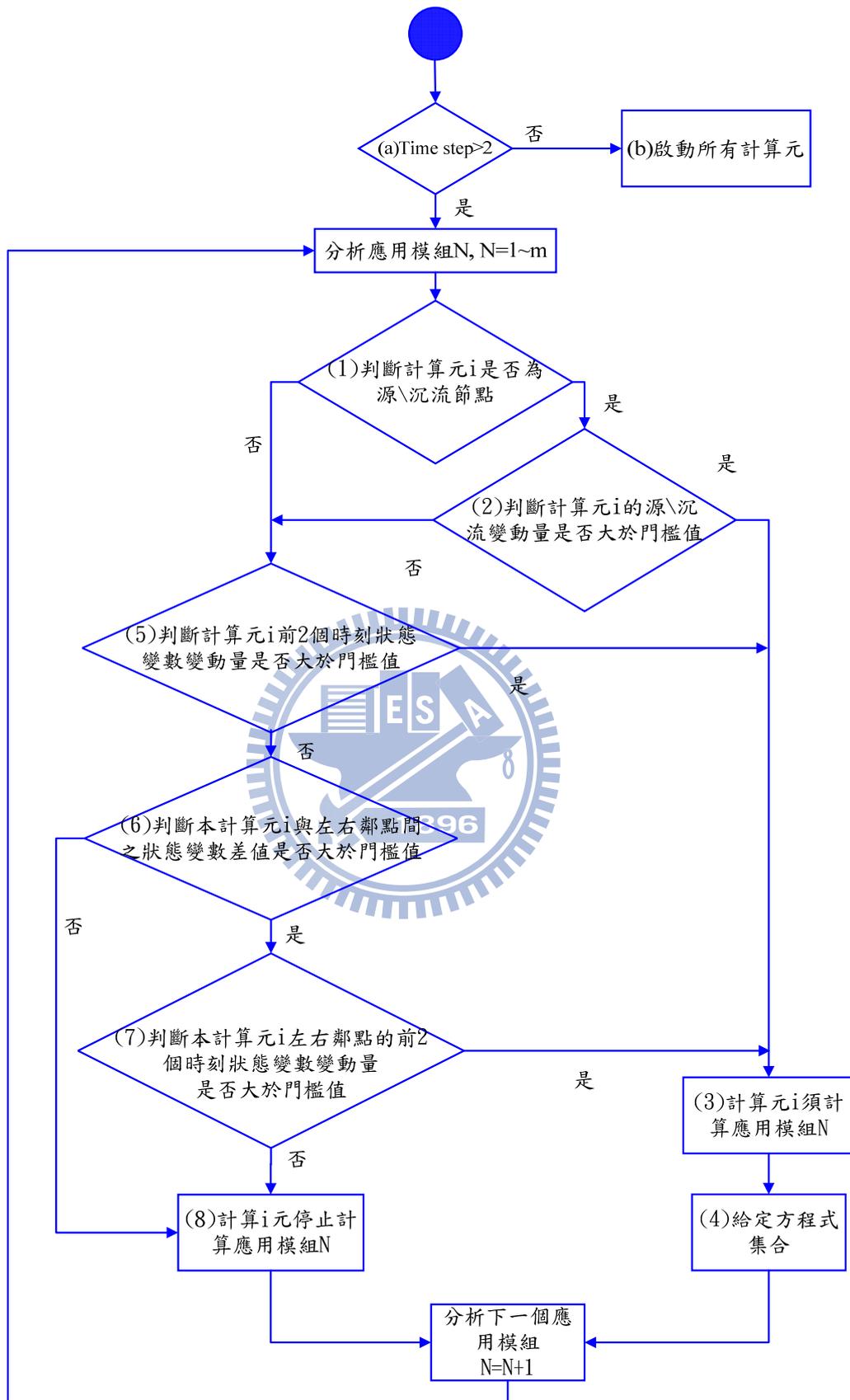


圖 6.6(b) 計算元狀態分析推論鏈

6.4 智慧型可適性計算成果說明及驗證

本節將說明應用智慧型可適性計算之成果，包括以專家系統所開發之計算元狀態分析模組重新進行第五章之案例模擬，並與第五章案例之結果進行比較分析，以及使用類神經網建立方程式進行數值模擬，並分析其模擬結果之正確性。6.4.1 節主要為檢驗與分析可適性計算架構與智慧型可適性計算架構兩者模擬結果，6.4.2 節為展現智慧型可適性計算架構之自我調適能力，並說明專家系統之推論過程，6.4.3 節說明以類神經網路作為方程式，並加入方程式集合進行模擬，之後再檢驗模擬結果之正確性。

6.4.1 智慧型可適性計算與可適性計算之模擬成果分析

在完成智慧型可適性計算平台(以下簡稱 IACF)之建置後，本研究將第五章之案例重新以智慧型可適性計算平台進行模擬，其中在計算元狀態分析模組之參數設定上，門檻值設為 10^{-5} ，而地下水流及熱流部分之狀態變數變動量值乃一正規化數值，其計算方式為計算元前後時刻之狀態變數差值除以初始條件中最大之狀態變數值，而污染物部分則為前後時刻狀態變數差值除以最大參考濃度 0.25(單位為重量百分濃度)，在與左右鄰居狀態變數差值之計算上，亦仿照前述方式進行正規化。表 6.1 說明 IACF 及可適性計算平台(以下簡稱 ACF)之模

擬結果與 Tough2 及 HST3D 模式之差異，由表中數據可知 ACF 與 IACF 之模擬結果與 Tough2 及 HST3D 模式之最大誤差百分比相同，而兩者之模擬時間相差約為 2~2.5 倍。由此結果可知，IACF 之計算準確度不但與可適性計算平台一致，其計算時間更較 ACF 大幅縮短，證明了 IACF 之正確性與實用性。而 IACF 在前述案例能大幅縮短計算時間之原因為本研究所設計熱及污染物進入系統之方式皆為點源的形式，如案例一在模擬區域中心注入熱及污染，案例二及案例三在模擬區域邊界注入熱及污染物，因此 IACF 只會啟動熱源或污染源四周計算元進行計算，而 ACF 則是無論任何情況皆啟動所有計算元計算，因此兩者之計算量將有顯著差異。此外，因本研究之案例二與案例三在模擬時刻結束時污染物及熱並未散布至所有計算元，因此 IACF 在計算量上一值持續占有優勢，故 IACF 與 ACF 在模擬結束後，兩者之最終計算時間差異甚大。若以案例二之污染傳輸模擬部分為例，案例二之流速為本研究三個案例中最小者，因此污染物之傳播將最為緩慢，ACF 與 IACF 所需計算之計算元數將有顯著差異。如圖 6.7 為在第 9000 秒時，有進行計算污染傳輸之計算元之分布圖，十字即代表啟動計算之計算元位置，方格網代表一計算元之涵蓋範圍，而斜線網格代表該網格之狀態變數變動量為大於等於 10^{-5} ，由圖可知三個計算元之濃度變動量大於門檻值(10^{-5})，故需啟動此三個計算元及與

此三個計算元相鄰之計算元進行計算，因此在進入時刻 9000 秒計算污染傳輸部分時，IACF 僅需啟動 19 個計算元計算污染傳輸，而 ACF 則會啟動全部計算元進行計算。

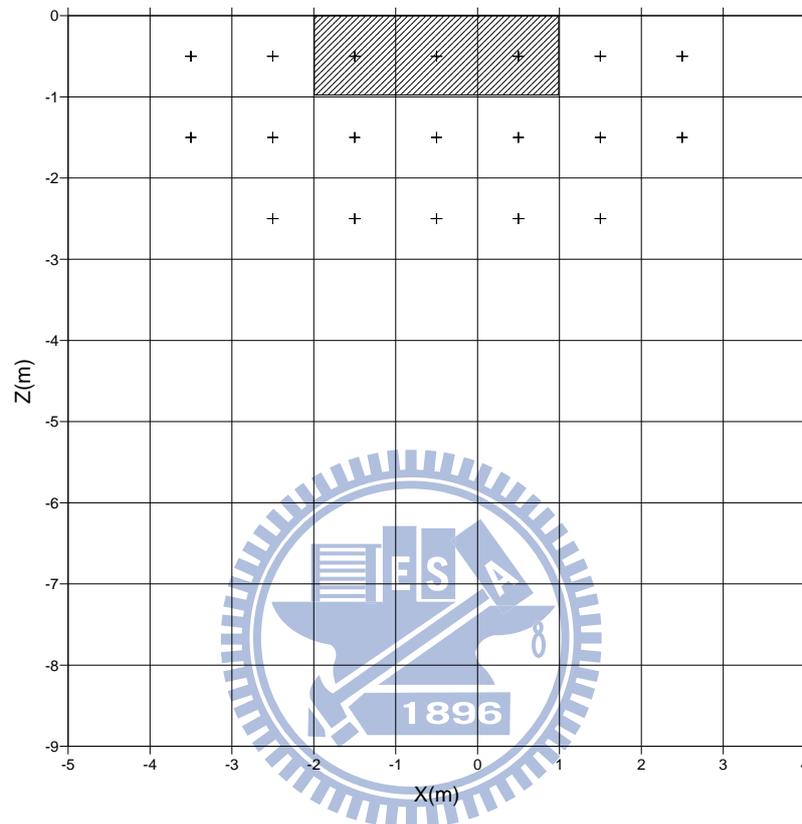


圖 6.7 IACF 於時刻 9000 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖

表 6.1 智慧型可適性計算與可適性計算之模擬結果分析表

		時刻末 壓力最 大差值	時刻末 溫度最 大差值	時刻末 濃度最 大差值	計算時 間(秒)	節省時 間百分 比
案例 一	IACF	0.04%	2.89%	1%	18352	54%
	ACF	0.04%	2.89%	1%	40396	
案例 二	IACF	0.11%	1.36%	0.07%	31697	52%
	ACF	0.11%	1.36%	0.07%	66650	
案例 三	IACF	0.08%	3.20%	0.06%	42286	60%
	ACF	0.08%	3.20%	0.06%	107654	

6.4.2 智慧型可適性算平台模擬說明

本節將以一案例說明智慧型可適性平台在模擬過程中如何調整各計算元之方程式集合。本節案例之設定大致與案例一相同，僅對地下流及污染傳輸部份之設定進行部分調整。在地下水流部分，調整注水速率至0.05kg/s，飽和水力傳導係數調整為 10^{-6} m/s，在污染傳輸部分則將41號計算元的初始濃度調整為0.05%，另外增加污染物注入源，注入時刻為第30個時刻，(27000秒~27900秒)，注入濃度為1%。本案例之模擬期距為31500秒，模擬時刻間隔為900秒。另外，門檻值設定為 10^{-4} ，使得計算元關閉與啟動之現象更為明顯。圖6.8~圖6.10為IACF啟動計算污染傳輸之計算元分布圖，圖6.11為時刻2700秒時，計算元

狀態分析模組之推論過程示意圖。圖6.8為在2700秒時，IACF啟動計算污染傳輸之計算元分布圖，斜線格網代表該格網之狀態變數變動量超過門檻值，於此2700秒時共21個計算元進行計算。由圖6.11之計算元狀態分析過程可知，當「檢視狀態變數變動量」之法則啟動後(fired)，即判斷出計算元41號因時刻一與時刻二之狀態變數變動量大於門檻值 10^{-4} ，因此需啟動計算。而其相鄰計算元如51號計算元，當「檢視狀態變數變動量」啟動後，判斷出其前兩個時刻狀態變數變動量小於門檻值，接著「左右鄰居差值判斷」法則啟動需檢視該計算元是否為穩態狀態，但因其左邊相鄰計算元即為41號計算元，其為污染物注入點，兩者差值超過門檻值，因此50號計算元只與周圍三個計算元之差值小於門檻值，故「趨近穩態判斷」規則啟動，分析其周遭計算元前兩個時刻狀態變數差值是否小於門檻值，因41號計算元前兩個時刻變動量超過門檻值，代表50號計算元周遭計算元處於非穩態狀態，故50號計算元需啟動計算，同理，因41號計算元持續變動中，故除了50號計算元之外，41號計算元周遭其他三個計算元亦需啟動計算，以點狀格網表示。59號計算元位於50號計算元之右邊，參照上述推論過程，59號計算元由「趨近穩態判斷」規則判斷後，可知其四周之狀態變數前兩時刻差值均小於門檻值，其四周已趨近於穩態，故59號計算元被判定為停止計算。由計算元狀態分析模組所輸出之推論過程可知，

在時刻2700秒時需計算之計算元為41號以及41號之上、下、左、右四個計算元，共5個計算元需被啟動。而本研究為降低計算誤差發生之風險，在保守穩健的原則下，將位於需啟動之計算元九宮格範圍內之所有計算元皆啟動計算，因此IACF於時刻2700秒計算時，共啟動了21個計算元進行計算。之後在第9000秒後，所有計算元皆已停止計算，直到27000秒時，污染物濃度為1%之污染源開始有注入，41計算元需重新新開啟計算，其相鄰九宮格之計算元亦一同開啟，最後在31500秒時，隨著污染物之傳輸，計算元持續開啟，最後共開啟了37個計算元。

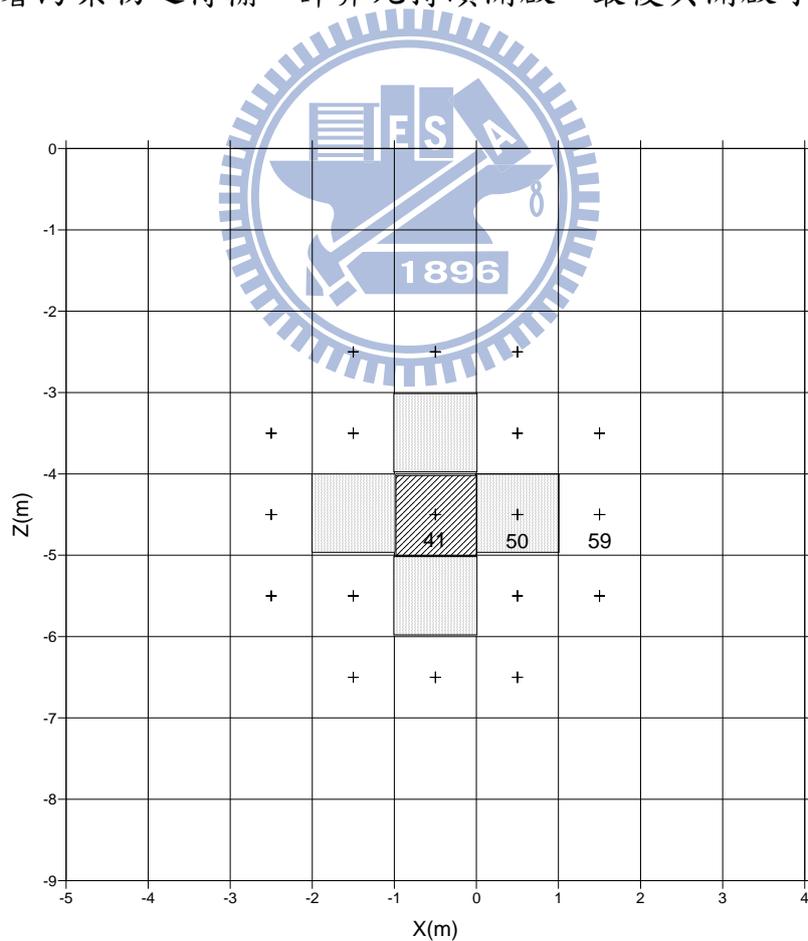


圖 6.8 IACF 於時刻 2700 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖

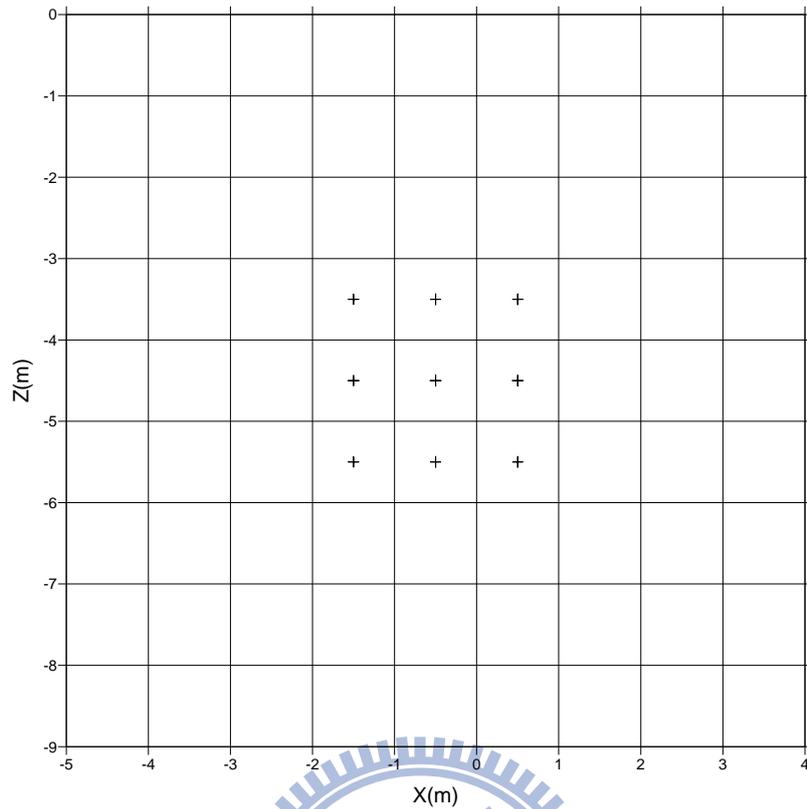


圖 6.9 IACF 於時刻 27900 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖

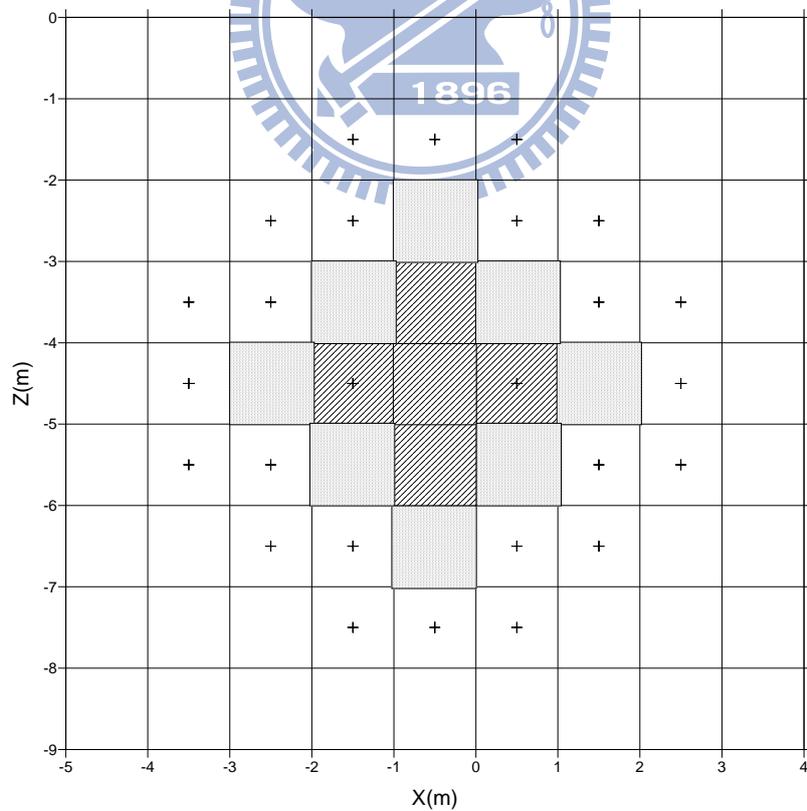


圖 6.10 IACF 於時刻 31500 秒時，啟動計算污染傳輸之計算元分布圖

```

T = 2700秒
Nodeno = 41
start
Rule: 判斷是否有Source
物理量編號2， status:0
Rule: 檢視狀態變數變動量
物理量編號2， 前後時刻比值 > 1.0e-04， status: 1
end

Nodeno = 50
start
Rule: 判斷是否有Source
物理量編號2， status:0
Rule: 檢視狀態變數變動量
物理量編號2， nodeno= 50， 前後時刻比值 < 1.0e-04， status: 0
Rule: 左右鄰居差值判斷
物理量編號2；相鄰節點數: 4， 節點值與周圍幾個節點相同: 3， status: 1
Rule: steady判斷
物理量編號2；相鄰節點數: 4， 1個週遭節點值前後時刻差值>1.0e-04 : status: 1
end

Nodeno = 59
start
Rule: 判斷是否有Source
物理量編號2， status:0
Rule: 檢視狀態變數變動量
物理量編號2， nodeno= 59， 前後時刻比值 <1.0e-04， status: 0
Rule: 左右鄰居差值判斷
物理量編號2；相鄰節點數: 4， 節點值與周圍幾個節點相同: 3， status=1
Rule: steady判斷
物理量編號2；相鄰節點數: 4， 0 個週遭節點值前後時刻差值>1.0e-04 : status: 0
end

```

圖 6.11 計算元狀態分析模組推論過程示意圖

6.4.3 以 ANN 建立方程式之模擬成果

前述文章曾提及以本計算平台所發展之模式具有容易新增或修改方程式之彈性，此外本研究所需之方程式並不限定其函數型態，只需

應變數與自變數間之對應關係即可加入方程式集合中進行計算，為證明此點，本小節將以 ANN 模式代替方程式，再將 ANN 加入方程式集合中進行模擬。

在 ANN 模式建立方面，本研究欲建立能描述純水之溫度、壓力與密度之 ANN 模式，並將 ANN 加入地下水流方程式集合中，再建立一地下水流與熱流之耦合模式，並與 Tough2 模式比較驗證，如此將可說明只要求得應變數與自變數之對應關係，無論變數間之函數型態為何，皆可以加入方程式集合中，並以此方程式集合建立模式。本節先假設水之密度與壓力及溫度之關係為未知，企圖以 ANN 學習三個變數間之關係式。在建立 ANN 之訓練及驗證資料上，本研究採用第四章之方程式(4-3a)產生 ANN 所需資料，該方程式為 Tough2 所採用之方程式，其輸入變數為溫度及壓力，輸出變數為水之密度，因此在建立 ANN 模式時，亦以溫度與壓力為輸入變數，密度為輸出變數。訓練及驗證資料範圍如表 6.2 所示。其中壓力之輸入資料間隔為 5000Pa，資料之起始壓力為 20000Pa，溫度之資料輸入間隔為 3°C，起始溫度為 0°C，兩變數之資料組合共 16467 筆輸入資料，但於此資料區間內，在某些溫度與壓力下，水會轉變為水蒸氣，因本研究只探討液態水，故此時應將該資料剔除，將這些例外資料排除後，共有 16387 筆輸入資料。在驗證資料方面，壓力之資料維持相同的間隔，

僅起始壓力調整為 35000Pa，溫度之資料間隔則增加一倍，間隔為 1.5 °C，排除水蒸氣之資料後，資料筆數共 32776 筆。

在進行 ANN 模式建模之前，須先將輸入資料與輸出資料進行正規化，此乃因神經元所用之轉換函數值域為固定，如本研究使用 FANN 軟體中內建之轉換函數為 $\tanh(x)$ 形式之函數，其值域在 -1 與 1 之間。輸出變數之正規化如式(6-1)所示，輸入變數之正規化如(6-2)所示，式(6-1)中 Y_{\min} 與 Y_{\max} 分別為正規化前輸出變數之最小值與最大值， D_{\max} 與 D_{\min} 為正規化後輸出變數之最大值與最小值， Y 為正規化前輸出變數之值， y 為正規化後輸出變數之值。式(6-2)中 μ 為正規化前輸入變數的平均值， σ 為正規化前輸入變數之標準差， k 為正規化參數，本研究設定其值為 1.96， X 為正規化前輸入變數之值， x 為正規化後輸入變數之值。在正規化變數到轉換函數值域區間後，即可進行 ANN 模式之訓練。本研究採用之神經網路為三層式架構，包括輸出層、隱藏層及輸入層。為避免 ANN 過度學習，因此隱藏層之節點數與最大訓練數不可過大，經由試誤方式得知，在 5 個隱藏節點數及訓練次數為 400 次之設定條件下，訓練結果為最佳，試誤過程如表 6.3 所示。

$$y = \frac{Y - Y_{\min}}{Y_{\max} - Y_{\min}} (D_{\max} - D_{\min}) + D_{\min} \quad (6-1)$$

$$x = \frac{X - \mu}{k\sigma} \quad (6-2)$$

圖 6.10 為 ANN 與方程式(4-3a)所計算之密度比較圖，其計算之溫度

範圍為攝氏 25~99 度，壓力固定為 978104Pa，最大誤差發生在攝氏 88 度，兩者密度差值為 0.78 kg / m^3 ，若以方程式(4-3a)為比較基準，則其誤差比率約為 0.81%，此誤差在本研究所設定之應用案例中為可接受之範圍，如以案例一為例，在注水點周圍之達西流速約為 10^{-6} m / s ，若直接以最大誤差 0.78 kg / m^3 進行穿越量估算，其一時刻(900 秒)內邊界穿越量之誤差量約為 0.007 公斤，而一控制體積內之系統儲水質量約為 370 公斤，故此一誤差量對系統而言約佔系統的 0.00189%，對於水頭之計算影響尚在可接受範圍內。

在完成類神經網路之訓練後，本研究將 ANN 加入方程式集合中，並進行地下水流與熱流傳輸耦合模擬，再與 Tough2 進行驗證比較。地下水流與熱流模式之參數設定、邊界條件、初始條件等設定皆同案例一，此外模擬期距為 9000 秒，模擬時刻間距為 900 秒。模擬結果如圖 6.13 及 6.14 所示，圖 6.13 與圖 6.14 代表模擬時刻為 9000 秒時，溫度與濃度之模擬結果，虛線為 IACF 之模擬結果，實線為 Tough2 之模擬結果，由圖 6.13 及 6.14 之壓力水頭及溫度分布可知，IACF 與 Tough2 之模擬結果一致。在地下水流部分，兩者之最大差值約 4.1 公分水頭高，在熱流部分，兩者之最大差值為 $0.0034 \text{ }^\circ\text{C}$ ，若以各模擬問題設定之初始條件最大值作為正規化基準，結果如表 6.4 所示，ACF 與 Tough2 之最大差值皆在 1% 以下，代表模擬結果十分相近。

由此可知本節所建立之 ANN 模式在本研究所設定範圍內能成功的學習到第四章方程式式(4.3a)之特性，且亦證明了以類神經網路實作方程式集合之可行性，亦證明了本計算平台建模之彈性，只需求得應變數與自變數之對應關係，即可以加入方程式集合中，並以此方程式集合建立模式。

表 6.2 ANN 訓練及驗證資料之範圍說明表

	壓力(Pa)	溫度(°C)	純水密度 (kg / m ³)
範圍	$2 \times 10^4 \sim 2.5 \times 10^6$	0~99	960~1002

表 6.3 ANN 訓練過程表

	層數	隱藏層 節點數	最大訓 練循環 次數	步伐	測試 MSE
1	3	6	30000	0.95	0.000006
2	3	6	3000	0.95	0.000027
3	3	6	1000	0.95	0.000021
4	3	6	600	0.95	0.00002
5	3	6	500	0.95	0.000018
6	3	6	400	0.95	0.000011
7	3	6	350	0.95	0.000015
8	3	6	300	0.95	0.000057
9	3	6	30	0.95	0.009595
10	3	5	400	0.95	0.00001
11	3	5	500	0.95	0.000013
12	3	4	400	0.95	0.000015

表 6.4 模擬結果最大誤差百分比整理表

模擬時刻	壓力水頭	溫度(°C)
t=9000 秒	0.04%	0.014%

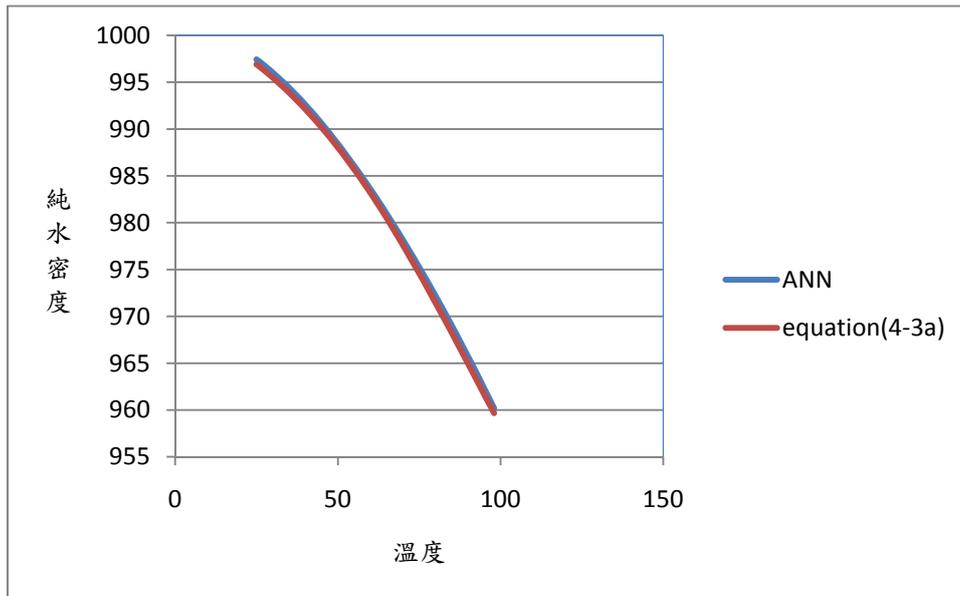


圖 6.12 ANN 與方程式(4-3a)之計算密度比較圖

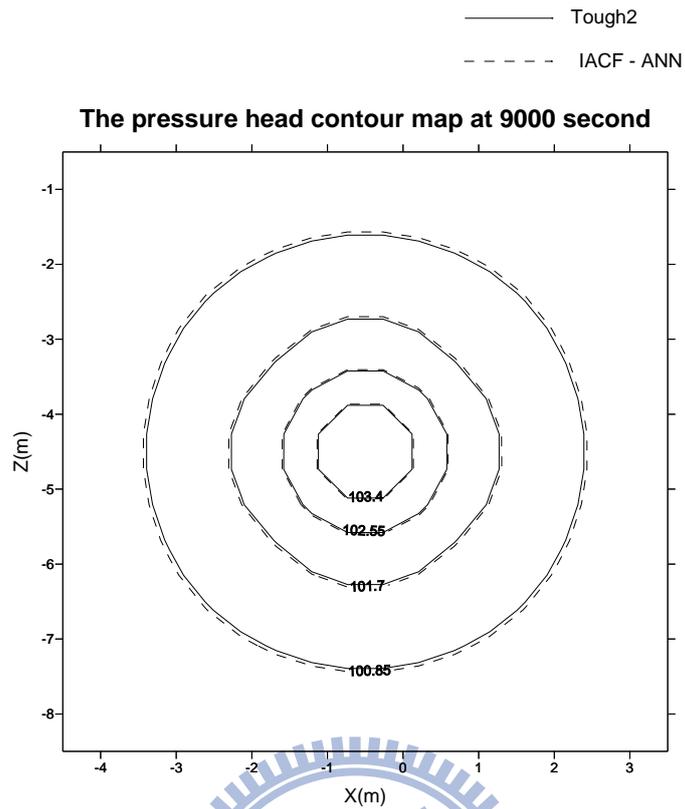


圖 6.13 地下水流模擬驗證—壓力場分布

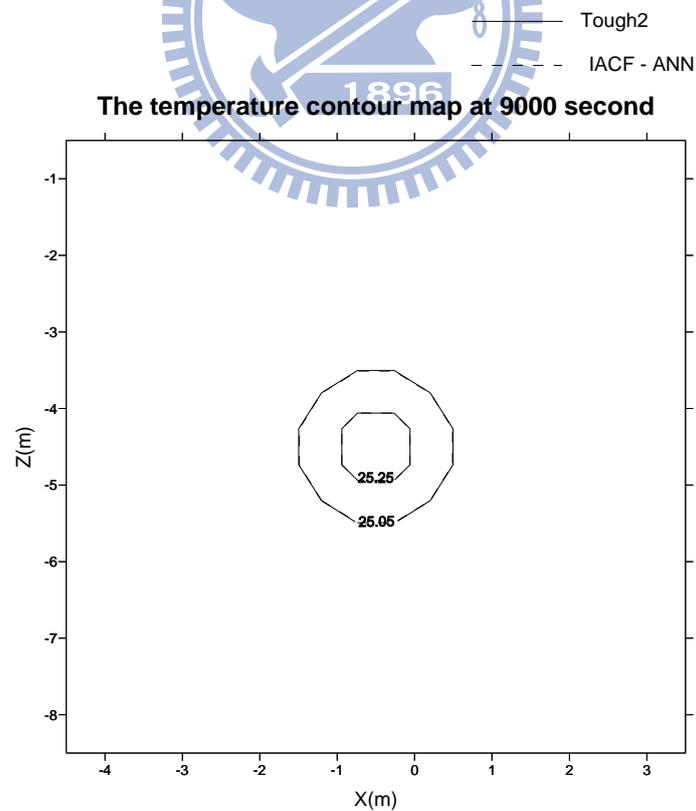


圖 6.14 熱流傳輸模擬驗證—溫度場分布

第七章 結論與建議

7.1 結論

1. 本研究發展出一新的數值建模平台，智慧型可適性計算平台，突破傳統數值模式不易擴充的限制，建立一系統化、自動化之數值建模平台，應用此系統所開發之模式，可隨著需求逐步增加模式模擬能力。此平台並整合人工智慧方法於系統核心，使模式可以因應變數變化調整計算元，降低計算量。
2. 本研究進一步應用可適性計算平台發展整合地下水流、熱流與污染傳輸之應用模式，並與既有之 Tough2 及 HST3D 進行案例驗證，模擬結果相當一致，顯示應用模式之正確性及平台之可行性。
3. 模擬結果進一步顯示，僅需以簡單之專家系統判斷規則，即可使模式因應變數變化而自動調整計算元，有效提高模擬效率，此顯示整合專家系統於數值模式計算核心之可行性及實效性。
4. 平台中所建立之方程式集合分析工具，可輔助使用者分析建模時所蒐集之方程式是否充分，加速應用模式之發展。由於此種特點，在有限的時間下，使本研究發展之應用模組同時與 Tough2 及 HST3D 模式進行驗證成為可能，蓋因 Tough2 與 HST3D 兩模式間相異之方程式共 11 條。若以傳統數值模式發展，則前述應用不同

方程式的情況，需從數學模式重新推導偏微分控制方程式，接著再修正數值程式，過程將繁複而耗時。

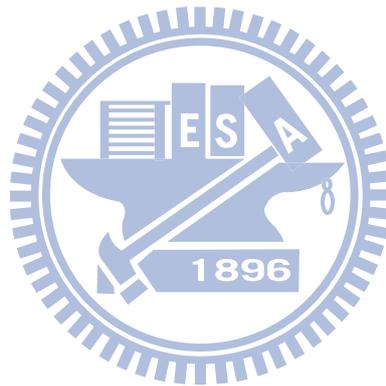
5. 本研究將類神經網路模式(ANN)加入方程式集合，並進行成功的模擬計算與驗證，證明了本計算平台建模之彈性，只需有應變數與自變數之函數對應關係，亦可以加入方程式集合中，而不一定要有顯示型態的方程式定義。
6. 在模擬驗證中，本研究亦檢討延散機制對熱流及污染傳輸模擬之影響，結果顯示，隨著流速的增加，延散機制的影響將會隨之上升，因此當模擬一流速較快之流場時(如 Peclet number > 2)，延散機制不應忽略。



7.2 建議

1. 本研究提出之智慧型可適性計算架構在計算效率上仍有改善空間，如原先內迭代之計算在多物理量耦合求解時，乃以多物理量進行迭代求解，建議未來可將多個物理量之方程式集合，同時進行最佳化計算，以同時求解多個物理量，如此應能較前述物理量間迭代求解的方式更有效率。另外，因本研究乃以計算元作為基本計算單位，此概念極易平行化，建議下一階段之模式開發可以朝平行計算發展，以解決需耗費大量計算時間之缺點。

2. 在熱流及污染物之傳流項計算上，建議未來可參考 Lagrange 法之數值解法(如質點追蹤法)進行求解，以解決計算高流速流場時收斂性之問題。
3. 本研究在智慧型演算法的整合上，雖然已驗證基本架構的可行性，惟在智慧型演算法的實作上仍有相當的研究空間，未來應思考如何加入適當的自動學習機制，使整個平台及發展的模式具有自我學習及自我改進的可能，從而在數值模擬的範疇下，更進一步接近人工智慧的目標。



參考文獻

1. T. Toffoli, Cellular automata as an alternative to (rather than an approximation of) differential equations in modeling physics. *Physica D*, 10, 117–127, 1984.
2. 周成虎，地理元胞自動機研究，北京：科學出版社，1999。
3. K. Ioannis. A model for the prediction of oil slick movement and spreading using cellular automata. *Environment International*, 23, No. 6, 839–850, 1997.
4. 宋鴻均，三維細胞自動機之研究-以海洋油污染擴散為例，中山大學碩士學位論文，2005。
5. 金傳春、吳俊霖、王玉純、陳培詩，流行病學特徵評估氣候變遷在傳染病流行之重要高危險區、流行趨向及其策略規劃，96年度「環保署/國科會空污防制科研合作計畫」，2007。
6. J. Machta, Complexity, Parallel Computation and Statistical Physics. *J. Machta, Complexity Journal*, 11(5), 46-64, 2006.
7. E. K. Fox. Models, Simulations, and ‘Computer Experiments’, in H. Radder, ed., *The Philosophy of Scientific Experimentation*, The University of Pittsburgh Press, Pittsburgh, 198–215, 2003
8. R. W. Batterman. *The Devil in the Details. Asymptotic Reasoning in Explanation, Reduction, and Emergence*, Oxford University Press, 2002. .
9. T. Toffoli and N. Margolus. Invertible cellular automata: A review, *Physica D* 45, 229-253, 1990.
10. M. Morgan and M. eds. Morrison. *Models as Mediators: Perspectives on Natural and Social Science*, Cambridge University Press, 1999.

11. P. Paul. Cellular automaton Model for fluid flow in porous media, *Complex Systems*, Volume 3(1989), 383-405, 1989.
12. S. Omohundro. Modeling cellular automata with partial differential equations, *Physica D* 10, 128-134, 1984.
13. 陳宇文，新型態數值模擬之研發－可適性計算，交通大學博士學位論文，2010。
14. A. R. Uzel, R.J. Edwards, B.L. Button. A study into the feasibility of an intelligent knowledge based system (IKBS) in computational fluid mechanics (CFM). *Engineering Application of Artificial Intelligence* 1 (3), 187–193, 1988.
15. M. B. Abbot. *Hydroinformatics: Information Technology and the Aquatic Environment*. Avebury Technical, Aldershot, 1991.
16. K. W. Chau and W. Chen. An example of expert system on numerical modeling system in coastal processes. *Advances in Engineering Software* 32 (9), 695–703, 2001.
17. K. W. Chau and F. Albermani. Expert system application on preliminary design of liquid retaining structures. *Expert Systems with Applications* 22 (2), 169–178, 2002.
18. K. W. Chau and F. Albermani. Knowledge-based system on optimum design of liquid retaining structures with genetic algorithms. *Journal of Structural Engineering, ASCE* 129 (10), 1312–1321, 2003.
19. K. W. Chau. Intelligent manipulation of calibration parameters in numerical modeling. *Advances in Environmental Research*, 8, p. 467–476, 2004.
20. S. M. Kim, B. L. Benham, K. M. Brannan, R. W. Zeckoski, J. Doherty, 2007. Comparison of hydrologic calibration of HSPF using automatic and manual methods, *WATER RESOURCES RESEARCH*, VOL. 43, W01402, doi:10.1029/2006WR004883.

21. H. Madsen, G. Wilson and H. C. Ammentorp. Comparison of different automated strategies for calibration of rainfall run-off models. *Journal of Hydrology*, 261(1-4), 48-59, 2002.
22. K. W. Chau. Manipulation of numerical coastal flow and water quality models. *Environmental Modelling and Software* 18 (2), 99–108, 2003.
23. K. W. Chau. Selection and calibration of numerical modeling in flow and water quality. *Environmental Modeling and Assessment*, 9, p. 169–178, 2004.
24. 陳韋圻，應用專家系統於地下水模式自動化參數檢定之研究，交通大學碩士學位論文，2008。
25. 王雲直，應用專家系統於地下水模式自動化參數檢定之研究—以濁水溪沖積扇為例，交通大學碩士學位論文，2010。
26. B. H. Omid, A. Abbas, and M. A. Marino. Honey-Bees Mating Optimization (HBMO) Algorithm : A New Heuristic Approach for Water Resources Optimization. *Water Resources Management*, (2006) 20: 661–680, DOI: 10.1007/s11269-005-9001-3, 2006.
27. D. C. McKinney and M.D. Lin. Genetic algorithm solution of groundwater management models. *Water Resources Research*, 30(8), 1897-1906, 1994.
28. R. Wardlaw and K. Bhaktikul. Application of a genetic algorithm for water application of a genetic algorithm for water. *Irrig and Drain*. 50: 159–170, DOI: 10.1002/ird.9, 2001.
29. F. Castanedo, M. A. Patricio, J. M. Molina. Evolutionary Computation Technique Applied to HSPF Model Calibration of a Spanish Watershed. *Intelligent Data Engineering and Automated*

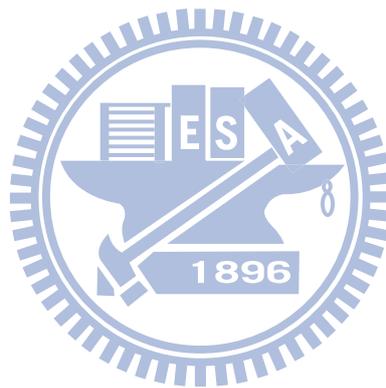
- Learning – IDEAL 2006, Volume 4224/2006, 216-223(Proceedings), 2006.
30. C. Zheng and P. Wang. Parameter structure identification using tabu search and simulated annealing. *Advances in Water Resources*, 19(4), 215-224, 1996.
 31. K. C. Abbaspour and R. Schulin, and M. T. van Genuchten, Estimating unsaturated soil hydraulic parameters using ant colony optimization. *Adv. Water Resour.* 24(8), 827–933, 2001.
 32. Y. P. LIN, Y. C. TAN, and S. Rouhani. Identifying spatial characteristics of transmissivity using simulated annealing and kriging method. *Environmental Geology* 41: 200-208, 2001.
 33. F. T. C. Tsai, N. Z. Sun, and W. W. G. Yeh. A Combinatorial Optimization Scheme for Parameter Structure Identification in Ground Water Modeling. *Ground Water* Vol. 41, No. 2, 156-169, 2003.
 34. S. M. Bhallamudi, S. V. N. Rao, B. S. Thandaveswara, and V. Srinivasulu. Optimal groundwater management in deltaic regions using simulated annealing and neural networks. *Water Resources Management*, 17(6), 409-428, 2003.
 35. H. J. Chu and L.C. Chang. Applying particle swarm optimization on the parameter estimation of the nonlinear Muskingum model. *ASCE's Journal of Hydrologic Engineering* Vol. 14, No. 9, 1024–1027, (technical note), 2009.
 36. D. P. Ahlfeld, J. M. Mulvey, G. F. Pinder, and, E. F. Wood. Contaminated Groundwater Remediation Design Using Simulation, Optimization, and Sensitivity Theory 1. Model Development. *Water Resources Research*, 24(3), 431-441, 1998.

37. J. Guan and M. M. Aral. Optimal design of groundwater remediation systems using fuzzy set theory. *Water Resources Research*, 40(1), 015181-0151820, 2004.
38. A. B. Chan Hilton and T. B. Culver. Constraint handling for genetic algorithms in optimal remediation design. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 126(3), 128-137, 2000.
39. A. B. Chan Hilton and T. B. Culver. Groundwater remediation design under uncertainty using genetic algorithms. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 131(1), 25-34, 2005.
40. F. P. Espinoza, B. S. Minsker, and D. E. Goldberg. Adaptive hybrid genetic algorithm for groundwater remediation design. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 131(1), 14-24, 2005.
41. B. Datta and D. Chakrabarty. Optimal Identification of Unknown Pollution Sources Using Linked Optimization Simulation Methodology, Proc. of Symposium on Advances in Geotechnical Engg. (SAGE 2003), I.I.T. Kanpur India, 368-379, 2003.
42. T. H. Chang, and H. D. Yeh, Combining tabu search and simulated annealing for identifying three-dimensional groundwater contaminant source. M. S. thesis, NCTU, 2005.
43. R. M. Singh and B. Datta. Identification of groundwater pollution sources Using GA-based linked simulation optimization model. *Journal of Hydrologic Engineering*, 11(2), 101-109, 2006.
44. A. Dhar and B. Datta. Multiobjective Design of Dynamic Monitoring Networks for Detection of Groundwater Pollution, to appear in *Journal of Water Resources Planning and Management*, American Society of Civil Engineers (ASCE), 2007.
45. I. Malekmohamadi, R. Ghiassi and M.J. Yazdanpanah, Wave hindcasting by coupling numerical model and artificial neural networks. *Ocean Engineering*, Volume 35, Issues 3-4, 417-425, 2008.

46. H. J. Chu and L.C. Chang. Optimal control algorithm and neural network for dynamic groundwater management, *Hydrol. Process.* 23, 2765–2773, 2009.
47. K. N. Ioannis, S. Maria, P. P. Maria and P. K. George. Groundwater Numerical Modeling and Environmental Design Using Artificial Neural Networks and Differential Evolution, *Lecture Notes in Computer Science*, Volume 5178/2010, 34-41, 2010.
48. 張良正、陳宇文、朱宏杰、黃浚璋，遺傳演算法與類神經網路於地表地下聯合營運之應用，*農業工程學報*，Vol.54，No.2，81-93，2008.
49. K. W. Chau. A review on integration of artificial intelligence into water quality modeling. *Marine Pollution Bulletin* 52, 726–733, 2006.
50. E. J. Coppola, F. Szidarosky, M. Poulton, and E. Charles. Artificial Neural Network Approach for Predicting Transient Water Levels in a Multilayered Groundwater System under Variable State , Pumping and Climate Conditions. *J. of Hydrologic Engineering* Vol.8, No.6, pp.348-360, 2003.
51. P. C. Nayak, Y. R. S. RAO and K. P. SUDHEER. Groundwater Level Forecasting in a Shallow Aquifer Using Artificial Neural Network Approach, *Water Resources Management* (2006) 20: 77-90, DOI: 10.1007/s11269-006-4007-z, 2006.
52. C. Doughty and K. Pruess. A Similarity Solution for Two-Phase Water, Air and Heat Flow near a Linear Heat Source in a Porous Medium. *J. of Geophys. Res.*, 97 (B2), 1821-1838, 1992.
53. A. W. Herbert, C. P. Jackson, and D. A. Lever. Coupled Groundwater Flow and Solute Transport with Fluid Density Strongly

Dependent Upon Concentration. *Water Resources Research*, 24 (10), 1781-1795, 1988.

54. F. R. Allen, and J. A. Cherry., *Groundwater*. Englewood Cliffs, NJ. :Prentice Hall, 604 PP, 1979.



附錄 A Voronoi Diagram 與 CGAL 函式庫

Voronoi Diagram 是透過散佈於平面上一群平面點位資料 (sites or points) ，以點位資料為基礎所切割出來的圖形，其圖形如圖 A-1 所示。

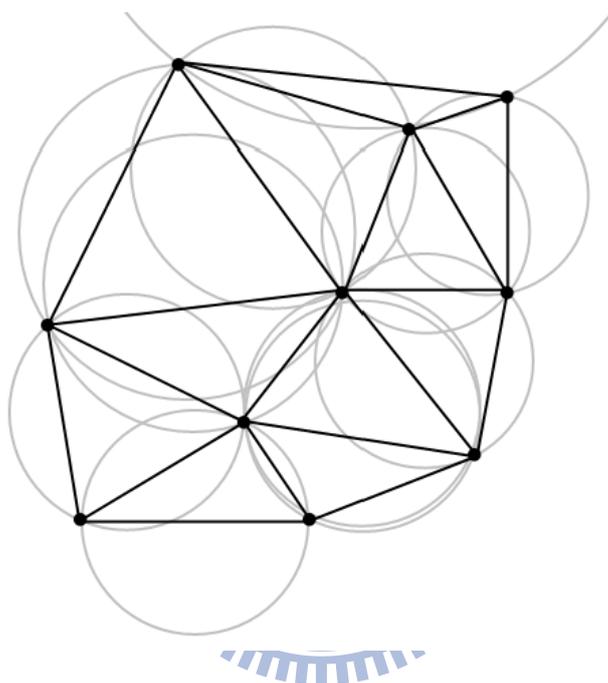


圖 A-1 Delaunay triangulation 與其外接圓

Voronoi Diagram 具備下列特性：

1. 各點 (sites or points) 必對應一個控制區塊 (cell) ，區塊內之任何一點與該節點之距離，必定小於此點與其他節點之距離。
2. 控制區塊形狀必為凸包 (convex hull) 。
3. 兩節點之連線必定正交於其控制區塊 (cells) 之邊，此邊稱為控制區塊邊 (edge) 。
4. 控制區塊邊 (edge) 之交接點稱為角點 (vertex) ，令任意角點為圓

心，必可找到一圓通過相鄰之節點(如圖 A-2 所示)，該圓稱為空圓 (empty circle)。

5. 將任意空圓上之所有節點連線，可以繪製成三角形，其稱為 Delaunay Triangles，其與 Voronoi diagram 為對偶圖形，如圖 A-3 所示，圖上實線為 Delaunay Triangles，虛線為 Voronoi Diagram。

數學定義：若給定一組點位資料($N = \{N_1, N_2, N_3, \dots, N_m\}$)，其中 N_m 為第 m 個節點， n 為空間中節點數量，其數值應為 $2 \leq n \leq \infty$ 。其控制區塊 (Voronoi Diagram) 可定義如式(A-1) 所述：

$$V(N_i) = \{D: \|D - N_i\| \leq \|D - N_j\| \text{ for } \forall j \neq i\} \quad (\text{A-1})$$

式 (A-1) 所述描述了凡諾依圖最重要的特性，就是控制區塊內的任何點必定與其對應之點位距離最近。代表該點位在空間上，比任何其他點位更能代表該區塊。因此在水利或氣象領域中，凡諾依圖被應用於將點位形式之雨量資料推估集水區內之總降雨量，在水利領用即為所謂的徐昇氏法 (Thiessen method)。在數值運算上，由於兩節點連線必正交於其控制區塊鄰邊，因此對於穿越流量之估算上，無須進行角度轉換之向量計算。

目前已經發展許多計算凡諾依圖的演算法，如 half plane intersection

法、Divine and Conquer 法與 Fortune's Algorithm 法等等，其中以 Steve Fortune ()提出之掃線演算法，由於其計算複雜度為 $O(n \log n)$ ，較其他演算法為低，為建構凡諾依圖最有效率的演算法之一。

在程式實作上，本研究採用 CGAL (Computational Geometry Algorithm Library) 建立凡諾依圖之計算，其是計算空間幾何上極具可信度的函式庫，其中包含了許多圖形的資料結構、建構圖形的演算法、格網產生與處理與圖形分析等功能。CGAL 為 Geometry Factory 所開發的開放原始碼專案，其目的為 C++ 環境，提供有效率並且可信賴的空間計算演算法。目前已經被廣泛應用於電腦繪圖、科學視算、設計模擬、格網生成、數值方法與微生物模擬等各領域上。



附錄 B 總水頭計算公式推導

圖 B-1 為控制體積在垂直方向之各項受力示意圖，其中 W 為控制體積本身所受之重力， P_u 與 P_i 則分別為上下兩方所受之壓力。由於本研究為地下水流問題，地下水流流速極小，因此地下水流速之加速度(意即其一階導函數)亦極小，因此可以假設控制體積因速度變化所受之衝量可忽略不計。此外，在地下水問題中，控制體積亦可假設不隨時間移動。因此依據雷諾傳輸定律所建立之力平衡方程式，可以撰寫為式 (B-1)。式中假設由於地下水流雖有流動，但流動速度極小，因此對於流動速度變化所造成之動量變化可以忽略不計。

$$-W - (P_u - P_i) = 0 \quad (B-1)$$

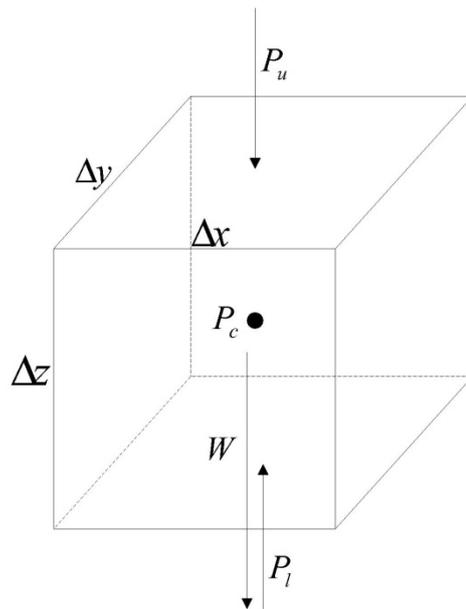


圖 B-1 控制體積垂向受力示意圖

由於控制體積所受之重力為密度、重力加速度與體積的乘積(式 (B-2))，式 (B-3) 與 (B-4) 則表示中心位置的壓力與上下兩方壓力的關係，帶入式 (B-1) 中再同乘負號，即可以改寫為式 (B-5)。

$$W = \rho g \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{B-2})$$

$$P_u = P_c + \frac{\partial P}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} \quad (\text{B-3})$$

$$P_l = P_c - \frac{\partial P}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} \quad (\text{B-4})$$

$$\rho g \Delta x \Delta y \Delta z + \left[\left(P_c + \frac{\partial P}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} \right) - \left(P_c - \frac{\partial P}{\partial z} \frac{\Delta z}{2} \right) \right] \Delta x \Delta y = 0 \quad (\text{B-5})$$

重新整理式 (B-5)，可以將 P_c 對消，重新寫成式 (B-6)。若將方程式左右兩方同除 $\Delta x \Delta y$ ， Δz 部分則改寫為 Z_u 與 Z_l 間的垂向積分，方程式可以改寫為式 (B-7)。其中第二項的變數 z 之積分運算子與微分運算子將互相抵銷，可進一步改寫。

$$\Delta x \Delta y \Delta z \left(\rho g + \frac{\partial P}{\partial z} \right) = \Delta x \Delta y \Delta z \left(\gamma + \frac{\partial P}{\partial z} \right) = 0 \quad (\text{B-6})$$

$$\int_{z_l}^{z_u} \gamma dz + \int_{z_l}^{z_u} \frac{\partial P}{\partial z} dz = \int_{z_l}^{z_u} \gamma dz + P(z_u) - P(z_l) = 0 \quad (\text{B-7})$$

式 (B-8) 為微積分中的積分恆等式，意即 a 至 b 間的定積分，可以拆成 a 至 c 間的與 b 至 c 間的兩項定積分值。因此式 (B-7) 可

以進一步拆成式 (B-9) ，其中 Z_0 代表基準高程，基本上可以選擇海拔高程。

$$\int_b^a f dx = \int_c^a f dx - \int_c^b f dx \quad (B-8)$$

$$\left[\int_{z_0}^{z_u} \gamma dz + P(z_u) \right] - \left[\int_{z_0}^{z_l} \gamma dz + P(z_l) \right] = 0 \quad (B-9)$$

式 (B-9) 大致上可以區分為兩項，前項代表 Z_u 位置之數值，而後項則代表 Z_l 位置之數值，其因次與壓力相等。因此若欲將壓力轉換為長度形式之壓力水頭，則需除上特定溫度下之水比重 γ_0 。

$$h_u = \frac{1}{\gamma_0} \int_{z_0}^{z_u} \gamma dz + \frac{P(z_u)}{\gamma_0} \quad (B-10)$$

若於變密度條件下，位置水頭之估算則需對水流比重進行垂向積分，總水頭則為估算之位置水頭與壓力水頭之和，如式(B-10)所示。若於定密度條件下，方程式可以進一步推導簡化為式(B-11)，即位置水頭為位置高程差，總水頭為位置高程差與壓力水頭之和，其為常見之地下水總水頭計算型式。

$$h_u = (z_u - z_0) + \frac{P(z_u)}{\gamma_0} \quad (B-11)$$

附錄 C 土壤壓密係數與傳統儲水係數之相關推導

在無溶質傳輸且無溫度變化下之密度變化方程式可以寫成近似為式(C-1)中 C_1 與 C_2 之線性函數。其中 C_1 與 C_2 分別為線性方程式之常數係數。

$$\rho_f \simeq C_1 + C_2 p \quad (C-1)$$

因此可以將水流密度之變化近似簡化為式(C-2)之形式，其中 p_0 代表一大氣壓力下之壓力水頭，錶壓力形式即為 0， ρ_0 代表攝氏 25 度下一大氣壓力之水流密度， β' 代表水流的縮放係數，因此式(C-2)是水流密度之線性縮放公式。

$$\rho_f = \rho_0 \times [1 + \beta'(p - p_0)] \quad (C-2)$$

式(C-3)為模式採用之土體孔隙率變化方程式，用以描述拘限含水層因應壓力水頭變化之蓄水空間變化，其中 n_0 代表一大氣壓力下該土層之原始孔隙率， α' 則代表土體之壓縮性，因此式(C-3)是土體孔隙率之線性縮放公式。

$$n = n_0 \times \left[1 + \frac{\alpha'}{n_0} (p - p_0) \right] \quad (C-3)$$

式(C-3)為本模式描述控制體積內蓄水質量之方程式，其中因此若式(C-4)則為蓄水質量隨時間之變化率，其中 S_d 代表飽和度，其變化範圍為 0 至 1 之間，由於本問題鎖定為拘限含水層，因此其數值為常數 1， Vol 則代表控制體積之體積大小。

$$S^t = (\rho_f n S_d)^t Vol_{C.M.} = (\rho_f n)^t Vol_{C.M.} \quad (C-4)$$

綜合式(C-4)、(C-5)與(C-6)，可將蓄水質量之時間變化率重寫為式(C-5)。

令 帶入式中，並進一步將兩個一次多項式進一步相乘推導，可以組合為一個二次多項式，其中 $u = p - p_0$ ， p_0 為一大氣壓力下之壓力水頭，因此為常數。再透過偏微分運算子進一步拆解，可將常數項移除，並搬移至偏微分運算外部。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^t}{\partial t} &= Vol \frac{\partial (\rho_f n)^t}{\partial t} \\ &= \rho_0 n_0 Vol \times \frac{\partial \left\{ \left[1 + \frac{\alpha'}{n_0} (p - p_0) \right] \cdot [1 + \beta' (p - p_0)] \right\}}{\partial t} \\ &= \rho_0 Vol \times \frac{\partial \{ 1 + (\alpha' + n_0 \beta') u + \alpha' \beta' u^2 \}}{\partial t} \\ &= \rho_0 Vol \times \left\{ \frac{(\alpha' + n_0 \beta') \partial u}{\partial t} + \frac{\alpha' \beta' \partial u^2}{\partial t} \right\} \end{aligned} \quad (C-5)$$

由於土體與水流之壓縮縮放係數均遠小於 1，因此兩者相乘下，則可忽略不計，因此本模式採用之方程式組合若在定溫條件與其他上述之簡化下，控制體積內的蓄水變化率如式(C-6)所示。由於 $u = p - p_0$ ，且 p_0 為常數，因此 $\partial u = \partial p$ 。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^t}{\partial t} &= \rho_f Vol \times (\alpha' + n_0 \beta') \times \frac{\partial u}{\partial t} \\ &= \rho_f Vol \times (\alpha' + n_0 \beta') \times \frac{\partial p}{\partial t} \end{aligned} \quad (C-6)$$

$S_s = \frac{\partial S^t}{\partial t}$ 為傳統拘限地下水流方程式在等號左方常見之形式，其代表控制體積內水體積之時間變化率，其中 S_s 為比出水率，代表拘限含水層因應壓力水頭變化，土體與水體因壓縮或膨脹所釋放出的水量，式(C-7)為比出水率、土體壓縮性與水流壓縮性三者之關係。此外，式(C-8)定義總水頭為壓力水頭與位置水頭之和。由於傳統方式是以水體積守恆建立概念模式，因此若欲轉換為水質量守恆，則需再乘上密度。此外傳統常見之控制方程式均為偏微分形式之方程式，在推導過程中已使其代表單位體積之變化率，因此若欲與本研究對應，則應乘上控制體積之大小，因此透過傳統方法所描述之控制體積內蓄水質量之時間變化率可以描寫為式(C-9)。觀察式(C-7)與(C-9)，兩者公式極為類似。因此顯示本模式所採用之方程式組合，在經過推導與簡化後，可與傳統拘限地下水流模式所採用之方法一致。

$$S_s = \alpha + n\beta \quad (C-7)$$

$$h = p + z \quad (C-8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^t}{\partial t} &= \rho_0 Vol \times (\alpha + n\beta) \times \frac{\partial(p + z)}{\partial t} \\ &= \rho_0 Vol \times (\alpha + n\beta) \times \frac{\partial p}{\partial t} \end{aligned} \quad (C-9)$$

附錄 D 細胞自動機

有鑑於傳統數值模式在開發上亟需開發者對於問題、離散方法與解題等動作進行微調，大量耗費人力而無法利用目前日益先進之計算機效能，以下以參考細胞自動機之概念來簡化解題流程。細胞自動機 (Cellular Automata，簡稱 CA) 最初由數學家 Ulam 與 Neumann 兩人於 1950 年代提出，細胞自動機是由一些具備特定規則的格子所組成，每個格子視為一個細胞 (Cell)。這些組成的細胞會按照一些局部規則 (Rule)，在離散的時間維度上進行細胞之轉變行為。細胞自動機中，最基本之元件為細胞，細胞狀態僅能從離散且有限的候選狀態中挑選，例如：生或死。一個細胞的狀態是由上一個時刻細胞本身與圍繞在周圍之細胞所決定，因此其轉變可視為對一個局部狀態進行更新，利用此細胞自動機之空間鄰近關係，可模擬空間中的自動演化過程。細胞自動機包含三個組成要素，在此依序詳述如下：

1. 細胞空間結構 (Neighborhood)：定義細胞所在之空間維度與細胞之相鄰關係。可以依據問題需求選擇適合之空間架構，包含一維、二維或三維。常見的二維細胞相鄰關係，包含 von Neumann 型 (圖 D-1)、Moore 型 (圖 D-2) 與 Hexagonal 型 (圖 D-3) 等。

- von Neumann 型 (圖 D-1)：von Neumann 相鄰關係是一種

矩形網格，細胞自身(圖面標示為 C) 僅與上、下、左與右四個細胞有關連，在圖面上分別標示為 N、S、W 與 E，周邊細胞與自身細胞如以數學方式描述可寫如下所示。

$$N = \left\{ \begin{array}{ccc} - & (0, 1) & - \\ (-1, 0) & (0, 0) & (1, 0) \\ - & (0, -1) & - \end{array} \right\}$$

- Moore 型(圖 D-2)：Moore 相鄰關係也是矩形網格，但在細胞自身與周遭細胞之定義上與 von Neumann 型式不同，其以周遭相鄰的八個細胞，除了 von Neumann 定義之 N、S、W 與 E 外，還包含 NE、SE、NW 與 SW 四個對角線細胞，其數學定義如下所示。

$$N = \left\{ \begin{array}{ccc} (-1, 1) & (0, 1) & (1, 1) \\ (-1, 0) & (0, 0) & (1, 0) \\ (-1, -1) & (0, -1) & (1, -1) \end{array} \right\}$$

- Hexagonal 型(圖 D-3)：Hexagonal 相鄰關係則並非矩形網格，其為六角形之網格，周邊之組成細胞包含 N、S、NE、SE、NW 與 SW 六個細胞。

2. 細胞狀態 (Status)：各細胞所能選擇之數量應是有限的或侷限的，且各時刻各細胞必有其對應之狀態。

3. 規則 (Rules) : 系統定義細胞狀態之轉換規則函數，所有細胞均使用相同之規則，但自身與周遭細胞之狀態不同，因此實際運作時，各細胞會有不一樣之狀態變化。

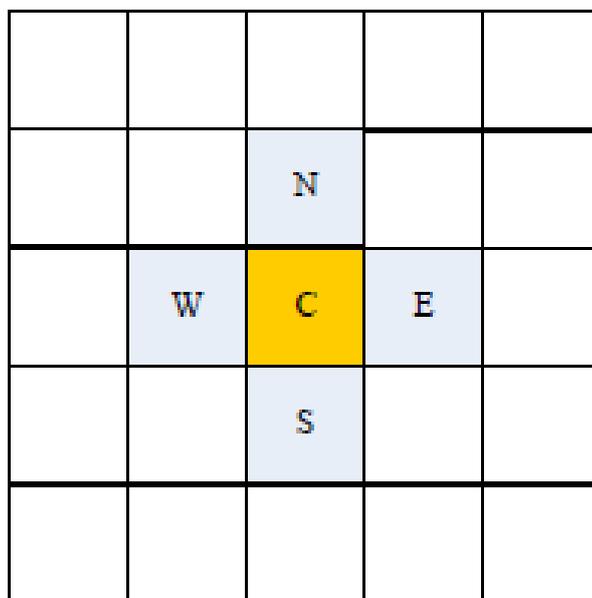


圖 D-1 von Neumann 形成細胞結構圖

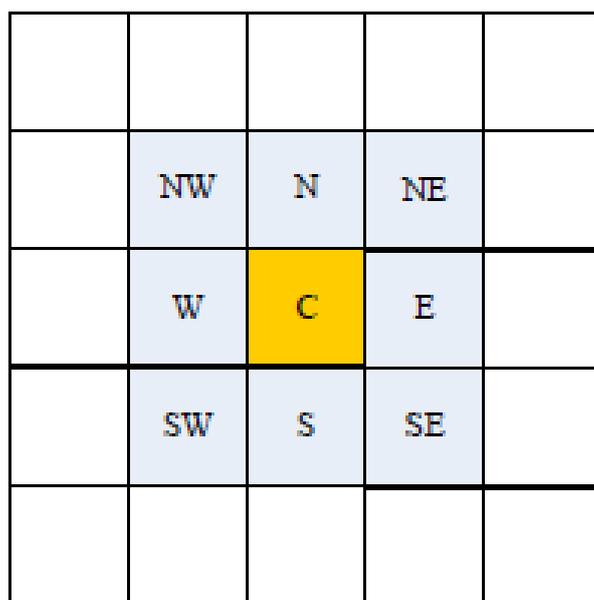


圖 D-2 Moore 形成細胞結構圖

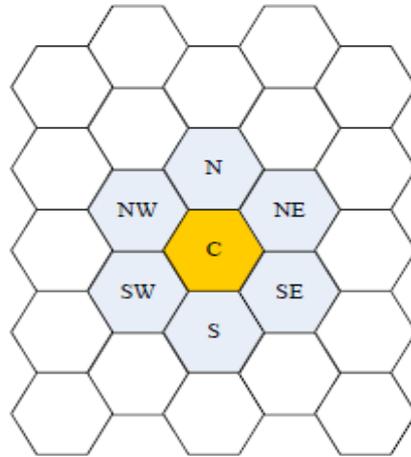


圖 D-3 Hexagonal 形式細胞結構圖

細胞自動機具有以下之特性：

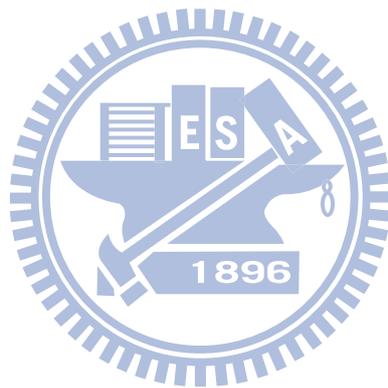
1. 同質性：

每個細胞的變化都依據相同的法則，亦即前述細胞自動機的規則，或可稱細胞自動機的轉換函數。許多將細胞自動機應用於數值計算之相關研究，則將控制方程式視為細胞自動機之規則。

2. 同步性：各細胞在時刻 $t + 1$ 的狀態變化被視為獨立行為，各細胞間的變化假設不相互影響，因此細胞自動機的处理可以是同步進行的，因此特別適合平行計算。

3. 時空局部性：各細胞在時刻 $t + 1$ 的狀態變化，僅取決於其周遭相鄰細胞，相鄰範圍則依據細胞空間結構而定(von Neumann、Moore 或 Hexagonal 型等)，其變化是受到相鄰細胞於時刻 t 的狀態而定，因此狀態之傳遞速度有其極限，此即為時空之局部性。

對於數值計算問題而言，前述之同步性與時空局部性即是以顯示型式 (explicit form) 來表示問題變化，因此如欲表示為隱示型式 (implicit form) ，亦即各細胞在時刻 $t + 1$ 之狀態會相互影響，則計算上需要透過迭代計算，則已超越傳統細胞自動機之時空局部性概念。



附錄 E Voronoi Diagram 與可適性計算應用於

熱流及污染傳輸之擴散計算

式 (E-1) 為傳統溶質傳輸之擴散項計算公式，傳統上均以 x 與 y 兩個正交軸作為系統座標軸，在計算上則僅計算兩個正交軸之擴散量即可。在計算上如果 x 與 y 軸並非所謂的主軸方向（主軸方向即為水流流動方向），對於 x 方向之擴散量會同時受到 x 方向之濃度梯度與 y 方向之濃度梯度之影響；相同地，對於 y 方向之擴散量亦會受到兩個方向之梯度影響。反之，如果座標軸即為所謂的主軸方向，公式可進一步簡化為式 (E-2)，使得各軸上之擴散量僅受到該軸方向之濃度梯度影響。

$$\dot{m}_{cl,dif} = \begin{pmatrix} \dot{m}_{cl,dif,x} \\ \dot{m}_{cl,dif,y} \end{pmatrix} = -n \cdot \begin{pmatrix} D_{xx}^* & D_{xy}^* \\ D_{yx}^* & D_{yy}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial x} \\ \frac{\partial C_1}{\partial y} \end{pmatrix}$$

(E-1)

$$D_{xx}^* = D_{xx} + D_m = \alpha_L \frac{V_{cell_x} V_{cell_x}}{|\vec{V}_{cell}|} + \alpha_T \frac{V_{cell_x} V_{cell_y}}{|\vec{V}_{cell}|} + D_m$$

$$D_{xy}^* = D_{yx} + D_m = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_{cell_x} V_{cell_y}}{|\vec{V}_{cell}|} + D_m$$

$$D_{yy}^* = D_{yy} + D_m = \alpha_L \frac{V_{cell_y} V_{cell_y}}{|\vec{V}_{cell}|} + \alpha_T \frac{V_{cell_x} V_{cell_x}}{|\vec{V}_{cell}|} + D_m$$

$$\vec{V}_{cell} = \frac{\vec{V}_{darcy}}{n} = V_{cell} \hat{x} + V_{cell} \hat{y}$$

$$\dot{m}_{cl,dif} = \begin{pmatrix} \dot{m}_{cl,dif,x} \\ \dot{m}_{cl,dif,y} \end{pmatrix} = -n \cdot \begin{pmatrix} D_{xx}^* & 0 \\ 0 & D_{yy}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial x} \\ \frac{\partial c_1}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (E-2)$$

在可適性計算架構中，需要計算控制體積各面之穿越擴散量，並不侷限於 x 軸方向與 y 軸方向。圖 E-1 為凡諾依圖與 Delaunay Triangle 之示意圖，角點 V_1 、 V_2 與 V_3 所構成之區塊即為計算節點 N_i 之控制體積，可適性計算架構需要針對 $\overline{V_1V_2}$ 、 $\overline{V_2V_3}$ 與 $\overline{V_3V_1}$ 三邊進行計算。因此在計算 $\overline{V_1V_2}$ 之穿越擴散量時，令 \hat{s} 為 $N_i N_A$ 方向之單位向量，其正交向量 \hat{n} 即為 $\overline{V_1V_2}$ ，其公式可改寫如式 (E-3) 所示。當變換不同面時，向量 \hat{s} 與 \hat{n} 均需轉變。

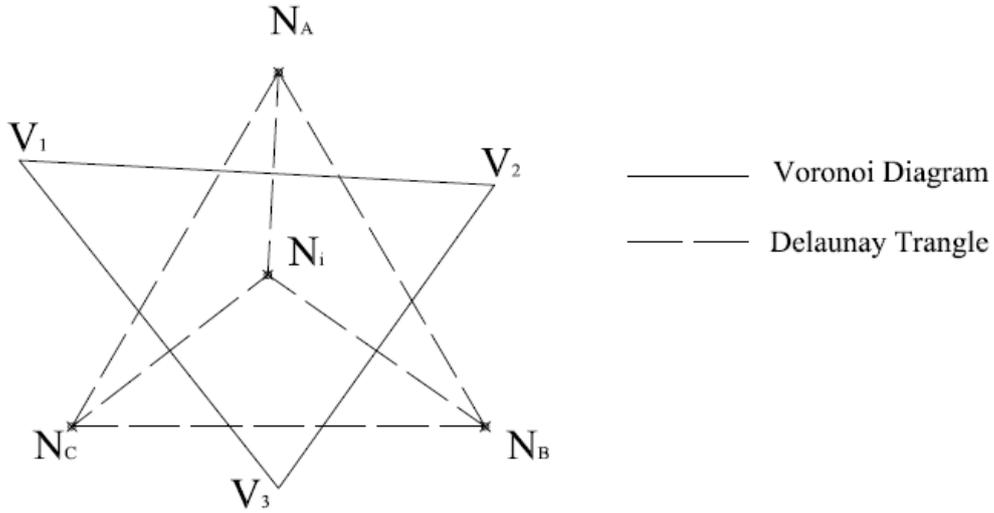


圖 E-1 凡諾依圖與 Delaunay Triangle 示意圖

$$\dot{m}_{cl,dif} = \left(\frac{\dot{m}_{cl,dif,s}}{\dot{m}_{cl,dif,n}} \right) = -n \cdot \begin{pmatrix} D_{ss}^* & D_{sn}^* \\ D_{ns}^* & D_{nn}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial s} \\ \frac{\partial C_1}{\partial n} \end{pmatrix} \quad (E-3)$$

$$D_{ss}^* = D_{ss} + D_m = \alpha_L \frac{V_{cell_s} V_{cell_s}}{|\vec{V}_{cell}|} + \alpha_T \frac{V_{cell_n} V_{cell_n}}{|\vec{V}_{cell}|} + D_m$$

$$\text{其中 } D_{ss} = \alpha_L \frac{V_{cell_s} V_{cell_s}}{|\vec{V}_{cell}|} + \alpha_T \frac{V_{cell_n} V_{cell_n}}{|\vec{V}_{cell}|}$$

$$D_{sn}^* = D_{ns}^* = D_{sn} + D_m = D_{ns} + D_m = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_{cell_s} V_{cell_n}}{|\vec{V}_{cell}|} + D_m$$

$$\text{其中 } D_{sn} = D_{ns} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_{cell_s} V_{cell_n}}{|\vec{V}_{cell}|}$$

$$D_{nn}^* = \alpha_L \frac{V_{cell_n} V_{cell_n}}{|\vec{V}_{cell}|} + \alpha_T \frac{V_{cell_s} V_{cell_s}}{|\vec{V}_{cell}|} + D_m$$

$$\text{其中 } D_{nn} = \alpha_L \frac{V_{cell_n} V_{cell_n}}{|\vec{V}_{cell}|} + \alpha_T \frac{V_{cell_s} V_{cell_s}}{|\vec{V}_{cell}|}$$

$$\vec{V}_{cell} = V_{cell_s} \vec{s} + V_{cell_n} \vec{n}$$

此外，在可適性計算中，數值主要儲存於計算節點 N_i 、 N_A 、 N_B 與 N_C 上，因此如欲計算各面特定變數 (V) 在 \hat{s} 方向之梯度 ($\frac{\partial V}{\partial s}$)，可直接以差分方式計算即可，然如欲計算在 \hat{n} 方向之梯度 ($\frac{\partial V}{\partial n}$)，則無數值可直接差分計算，因此需要進一步處理。

如將所推求之特定變數 (V) 視為第三個維度，任意三點即可構成三維世界中的一個平面，因此將 Delaunay Triangle 之組成成員構成一個平面，以此線性推求其外心，亦即為凡諾依圖之角點位置之數值。如以 $\overline{V_1V_2}$ 為穿越表面，分別利用三角形 $N_iN_AN_B$ 與 $N_iN_AN_C$ 推求 V_1 與 V_2 數值，最後再以兩數值差分計算 $\overline{V_1V_2}$ 之 $\frac{\partial V}{\partial n}$ 。如此，式 (E-3) 所需之 $\frac{\partial C_1}{\partial n}$ 與 V_n 可以求得。

最後，在 $m_{cl,dif}$ 計算上，亦可分為 \hat{s} 與 \hat{n} 兩個分量，由於 \hat{s} 正交於控制表面，因此可直接應用於穿越之進出總量計算上；反之， \hat{n} 方向由於與控制表面平行，在可適性計算架構中，無需使用，可直接改寫為式 (E-4)。

$$\dot{m}_{cl,dif} = -n \cdot \left(D_{ss} * \frac{\partial C_1}{\partial s} \right) - n \cdot \left(D_{sn} * \frac{\partial C_1}{\partial n} \right) \quad (E-4)$$

今若直接以達西流速進行計算延散張量 D，則(E-4)式可修正為式

(E-5)

$$\dot{m}_{cl,dif} = - \left(D_{ss} * \frac{\partial C_1}{\partial s} \right) - \left(D_{sn} * \frac{\partial C_1}{\partial n} \right) \quad (E-5)$$

同理，仿照上述步驟可得考量延散機制之熱流傳輸之熱水動力延散項

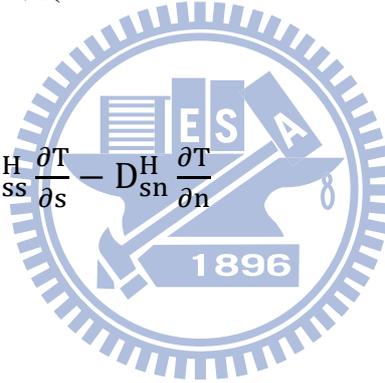
項(thermal hydrodynamic dispersion) \dot{h}_{dif} ，其為熱傳導(thermal

conduction)與熱機械延散(thermal mechanical dispersion)兩種機制之和，

如式(E-6)所示，

$$\dot{h}_{dif} = -K_{H,eq} \frac{\partial T}{\partial s} \vec{s} - D_{ss}^H \frac{\partial T}{\partial s} - D_{sn}^H \frac{\partial T}{\partial n} \quad (E-6)$$

其中 $D^H = \rho_{wl} s_{H,l} D$



附錄 F 水之熱動力性質公式說明

本研究為了以 Tough2 作為驗證對象，因此參照 Tough2 在水的熱動力性質計算上，使用國際組織 International Association for the Properties of Water and Steam 所公布之公式，作為方程式集合之成員方程式。該組織在西元 1997 年公布之熱動力性質公式，依照溫度與壓力範圍劃分為五區，如圖 F-1 所示。本研究目前研究範圍主要以液態水為研究對象，其坐落於圖 F-1 之第一區中，因此本研究乃採用第一區之公式為主，另外在判斷第一區之適用壓力範圍時需使用到飽和蒸汽壓，因此在公式說明時將僅說明第一區與第四區之公式。Tough2 所使用之熱動力性質公式包括密度，比內能 (Specific internal energy) ，比焓 (Specific enthalpy) ，黏滯係數 (viscosity) 及飽和蒸汽壓 (Saturated vapor pressure) ，本研究僅在此說明此五種熱動力性質之公式，其中黏滯係數於西元 2008 年已發佈更新版，將另行說明。

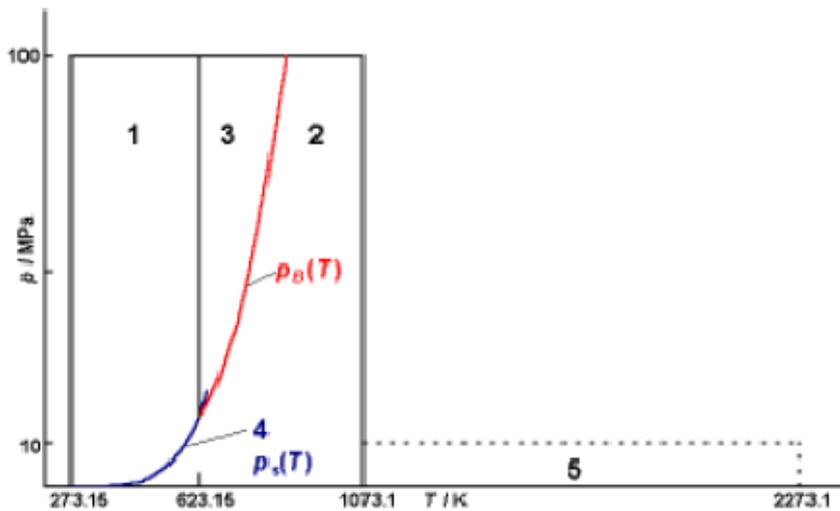


圖 F-1 水與水蒸氣之溫度壓力分區示意圖

公式所採用之符號說明如下所式：

符號說明

h ：比焓(Specific enthalpy)

I, J ：指數(Exponents)

n ：係數 (Coefficient)

p ：壓力(Pressure)

p_s ：飽和蒸汽壓(Saturation pressure)

R ：比氣體常數(Specific gas constant)， $R = 0.461\ 526\ \text{kJ}/(\text{kg K})$

T ：溫度(Temperature)

u ：比內能(Specific internal energy)

v ：比體積(Specific volume)

ρ ：密度(Density)



τ : 逆折算溫度(Inverse reduced temperature)

π : 折算壓力(Reduced pressure)

● 第一區之公式說明

本區之適用範圍為溫度介於 273.15K~623.15K 之間，壓力介於飽和蒸汽壓 $p_s(T)$ 及 100MPa 之間，其中飽和蒸汽壓 $p_s(T)$ 則為圖 F-1 中之第四區，亦即藍色線條位置處，其求取公式詳見第四區公式說明。第一區之公式如下所示：

1. 密度計算公式

比體積(Specific volume) : $v(p, T) = \pi \gamma_\pi \times \frac{RT}{p}$

$\rho = 1/v(p, T)$ (F-1)

2. 比內能計算公式

比內能(Specific internal energy) :

$\mu(p, T) = (\tau \gamma_\tau - \pi \gamma_\pi) \times RT$ (F-2)

3. 比焓計算公式

比焓(Specific enthalpy) : $h(p, T) = \tau \gamma_\tau \times RT$ (F-3)

上列三個方程式中的 π 、 γ_π 、 τ 、 γ_τ 可由下列四式求得：

$$\gamma_\pi = \left[\frac{\partial \gamma}{\partial \pi} \right]_\tau = \sum_{i=1}^{34} -n_i I_i (7.1 - \pi)^{(I_i-1)} (\tau - 1.222)^{J_i} \quad (F-4)$$

$$\gamma_\tau = \left[\frac{\partial \gamma}{\partial \tau} \right]_\pi = \sum_{i=1}^{34} n_i (7.1 - \pi)^{I_i} J_i (\tau - 1.222)^{(J_i-1)} \quad (F-5)$$

$$\tau = \frac{1386K}{T} \quad (F-6)$$

$$\pi = \frac{p}{16.53\text{MPa}} \quad (\text{F-7})$$

式(F-4)及(F-5)中之係數，詳見表 F-1。

表 F-1 γ 導數之係數與指數表

i	I_i	J_i	n_i
1	0	-2	0.146 329 712 131 67 E+00
2	0	-1	-0.845 481 871 691 14 E+00
3	0	0	-0.375 636 036 720 40 E+01
4	0	1	0.338 551 691 683 85 E+01
5	0	2	-0.957 919 633 878 72 E+00
6	0	3	0.157 720 385 132 28 E+00
7	0	4	-0.166 164 171 995 01 E-01
8	0	5	0.812 146 299 835 68 E-03
9	1	-9	0.283 190 801 238 04 E-03
10	1	-7	-0.607 063 015 658 74 E-03
11	1	-1	-0.189 900 682 184 19 E-01
12	1	0	-0.325 297 487 705 05 E-01
13	1	1	-0.218 417 171 754 14 E-01
14	1	3	-0.528 383 579 699 30 E-04
15	2	-3	-0.471 843 210 732 67 E-03
16	2	0	-0.300 017 807 930 26 E-03
17	2	1	0.476 613 939 069 87 E-04
18	2	3	-0.441 418 453 308 46 E-05
19	2	17	-0.726 949 962 975 94 E-15
20	3	-4	-0.316 796 448 450 54 E-04
21	3	0	-0.282 707 979 853 12 E-05
22	3	6	-0.852 051 281 201 03 E-09
23	4	-5	-0.224 252 819 080 00 E-05
24	4	-2	-0.651 712 228 956 01 E-06
25	4	10	-0.143 417 299 379 24 E-12
26	5	-8	-0.405 169 968 601 17 E-06
27	8	-11	-0.127 343 017 416 41 E-08
28	8	-6	-0.174 248 712 306 34 E-09
29	21	-29	-0.687 621 312 955 31 E-18
30	23	-31	0.144 783 078 285 21 E-19
31	29	-38	0.263 357 816 627 95 E-22
32	30	-39	-0.119 476 226 400 71 E-22
33	31	-40	0.182 280 945 814 04 E-23
34	32	-41	-0.935 370 872 924 58 E-25

● 第四區之公式說明

本區之適用範圍為溫度介於 273.15K~647.096K 之間，壓力介於 611.213Pa 及 100MPa 之間，飽和蒸汽壓之公式如下所示。

$$p_s(T) = \left[\frac{2C}{-B + (B^2 - 4AC)^{0.5}} \right]^4 \times 1\text{MPa} \quad (\text{F-7})$$

其中

$$A = \vartheta^2 + n_1\vartheta + n_2 \quad (\text{F-8})$$

$$B = n_3\vartheta^2 + n_4\vartheta + n_5 \quad (\text{F-9})$$

$$C = n_6\vartheta^2 + n_7\vartheta + n_8 \quad (\text{F-10})$$

$$\vartheta = \frac{T}{1K} + \frac{n_9}{\frac{T}{1K} - n_{10}} \quad (\text{F-11})$$

上述式(F-8)~(F-11)中，係數 $n_1 \sim n_{10}$ 詳見表 F-2。

表 F-2 飽和蒸汽壓公式之係數表

i	n_i
1	0.116 705 214 527 67 E+04
2	-0.724 213 167 032 06 E+06
3	-0.170 738 469 400 92 E+02
4	0.120 208 247 024 70 E+05
5	-0.323 255 503 223 33 E+07
6	0.149 151 086 135 30 E+02
7	-0.482 326 573 615 91 E+04
8	0.405 113 405 420 57 E+06
9	-0.238 555 575 678 49 E+00
10	0.650 175 348 447 98 E+03

● 黏滯係數公式說明

黏滯係數之適用範圍如式(F-12)~(F16)所示，其中 p_i 為水之固、液

及氣態三相共存時之壓力，若溫度為 273.16K，其值為 611.657Pa，而 $T_{m(p)}$ 則是水在一壓力 p 下，由固體融化為液體之溫度，若壓力小於 300 MPa 則其 $T_{m(p)}$ 介於 251.165 K~256.14K 之間，其估算方式詳見 International Association for the Properties of Water and Steam(2008) 公佈之報告 “Revised Release on the Pressure along the Melting and Sublimation Curves of Ordinary Water Substance”。而本研究之研究對象主要為液態水，且考量可能壓力範圍後，本研究採用之溫度壓力區間約落在式(F-13)所示之區間。

$$0 < p < p_t \text{ and } 273.16 \text{ K} \leq T \leq 1173.15 \text{ K} \quad (\text{F-12})$$

$$p_t \leq p \leq 300 \text{ MPa and } T_{m(p)} \leq T \leq 1173.15 \text{ K} \quad (\text{F-13})$$

$$300 \text{ MPa} < p \leq 350 \text{ MPa and } T_{m(p)} \leq T \leq 873.15 \text{ K} \quad (\text{F-14})$$

$$350 \text{ MPa} < p \leq 500 \text{ MPa and } T_{m(p)} \leq T \leq 433.15 \text{ K} \quad (\text{F-15})$$

$$500 \text{ MPa} < p \leq 1000 \text{ MPa and } T_{m(p)} \leq T \leq 373.15 \text{ K} \quad (\text{F-16})$$

黏滯係數之公式如式(F-17)所示，其中 $\bar{\mu}$ ， \bar{T} ， $\bar{\rho}$ 皆為無因次變數，分別為無因次黏滯係數，無因次溫度與無因次密度，其計算方式如式(F-18)~(F-20)所示。式(F-17)第一個因子 $\bar{\mu}_0(\bar{T})$ 之計算公式如式(F-21)所示，其係數 H_i 詳見表 F-3，第二個因子 $\bar{\mu}_1(\bar{T}, \bar{\rho})$ 之計算公式如式(F-22)所示，其係數 H_{ij} 詳見表 F-4，其中表內若有未列出之數值，其值皆為 0。第三個因子 $\bar{\mu}_2(\bar{T}, \bar{\rho})$ 因其計算公式過於複雜，因此採用報告建議值為 1，如式(F-23)所示。

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_0(\bar{T}) \times \bar{\mu}_1(\bar{T}, \bar{\rho}) \times \bar{\mu}_2(\bar{T}, \bar{\rho}) \quad (\text{F-17})$$

$$\bar{\mu} = \mu / (1 \times 10^{-6} \text{Pa} \cdot \text{s}) \quad (\text{F-18})$$

$$\bar{T} = T / (647.096 \text{K}) \quad (\text{F-19})$$

$$\bar{\rho} = \rho / (322 \text{Kg} \cdot \text{m}^{-3}) \quad (\text{F-20})$$

$$\bar{\mu}_0(\bar{T}) = \frac{100\sqrt{\bar{T}}}{\sum_{i=0}^{\bar{T}} H_i} \quad (\text{F-21})$$

$$\bar{\mu}_1(\bar{T}, \bar{\rho}) = \exp \left[\bar{\rho} \sum_{i=0}^5 \left(\frac{1}{\bar{T}} - 1 \right) \sum_{j=0}^6 H_{ij} (\bar{\rho} - 1)^j \right] \quad (\text{F-22})$$

$$\bar{\mu}_2(\bar{T}, \bar{\rho}) = 1 \quad (\text{F-23})$$

表 F-3 $\bar{\mu}_0(\bar{T})$ 之 H_i 係數表

i	H_i
0	1.67752
1	2.20462
2	0.6366564
3	-0.241605



表 F-4 $\bar{\mu}_1(\bar{T}, \bar{\rho})$ 之 H_{ij} 係數表

i	j	H_{ij}
0	0	5.20094×10^{-1}
1	0	8.50895×10^{-2}
2	0	-1.08374
3	0	-2.89555×10^{-1}
0	1	2.22531×10^{-1}
1	1	9.99115×10^{-1}
2	1	1.88797
3	1	1.26613
5	1	1.20573×10^{-1}
0	2	-2.81378×10^{-1}
1	2	-9.06851×10^{-1}
2	2	-7.72479×10^{-1}
3	2	-4.89837×10^{-1}
4	2	-2.57040×10^{-1}
0	3	1.61913×10^{-1}
1	3	2.57399×10^{-1}
0	4	-3.25372×10^{-2}
3	4	6.98452×10^{-2}
4	5	8.72102×10^{-3}
3	6	-4.35673×10^{-3}
5	6	-5.93264×10^{-4}