

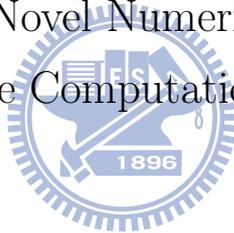
國立交通大學

土木工程研究所

博士論文

新型態數值模擬之研發 — 可適性計算

The Development of Novel Numerical Simulation Platform —  
Adaptive Computation Framework



研究生：陳宇文

指導教授：張良正 教授

中華民國九十九年一月

# 新型態數值模擬之研發 — 可適性計算

## The Development of Novel Numerical Simulation Platform — Adaptive Computation Framework

研究生： 陳宇文  
指導教授： 張良正 教授

Student : Yu-Wen Chen  
Advisor : Liang-Cheng Chang

國立交通大學  
土木工程研究所  
博士論文

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

Jan 2010

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十九年一月

# 新型態數值模擬之研發 — 可適性計算

研究生：陳宇文

指導教授：張良正 教授

國立交通大學土木工程研究所博士班

## 摘要

隨著資訊科技的快速發展，數值模擬模式之計算能力大幅提昇，因此已被廣泛應用在各工程領域中，且其重要性日趨顯著。數值模式之開發一般包含四大步驟，分別為「概念模式描述」、「數學模式定義」、「數值離散推導」與「電腦程式開發」四個階段，任一數值模式之開發均需經歷上述四個階段，因此使得更新或擴充一個既存數值模式之問題範疇，則需重頭至尾歷經上述四個步驟，使得修改工作變得極為複雜且耗時，限制了既存數值模式模擬範疇擴充與更新的彈性。有鑑於此，本研究提出全新的數值建模方法 — 「可適性計算架構」，突破傳統的數值建模方式的限制，使得應用「可適性計算架構」開發的數值模式，具有容易擴充與更新模擬功能之特點。

「可適性計算架構」並非只是一般的數值方法 (如有限元素法或有限差分法等)，而是一種數值建模方法。與傳統建模方法作比較，可適性計算架構從「數學模式定義」開始著手，直接從分散之多條基礎的數學方程式(組)直接進行離散，而不需額外以數學推導與假設進行整合。此外，為了可以處理多條基礎方程式之計算，且檢驗基礎方程組之定義完備性，本研究提出「一致性分析」檢驗多條方程式之相依關係，並決定彼此間之求解順序。在「數值離散推導」方面，本研究採簡單差分法處理微分運算子，且相較於傳統計算方式，本研究毋須建立矩陣方程式，以各節點直接運算。此外，本研究以「Voronoi Diagram」作為空間切割法，網格形狀極具彈性，可適應不同的空間型態。在「電腦程式開發」階段，相較於傳統之矩陣解法，本研究提出「內、外迭代」流程負責求得符合邊界條件與初始條件之解，惟仍維持各格點計算上的獨立性。本計算架構相較於與傳統方式，雖然整體開發方式不同，惟若在「數學模式定義」階段之初，選取相同之數學方程組，則本計算架構與傳統方法所解的為相同之問題，且本計算架構毋須額外之數學推導與假設，除了可以節省開發模式之心力外，在概念上更貼近原始定義之問題。

在案例驗證上，本研究以可適性計算架構建立「地下水流」、「熱流傳輸」與「溶質傳輸」三個子問題之模擬，並建立五個模擬案例進行驗證，證實本計算架構之正確性與彈性。藉由案例實作上證實，應用「可適性計算架構」建立之模式，如欲擴張模式模擬能力，新增其他運動機制，僅需撰寫替換或增加之方程式，證實「可適性計算架構」的擴充能力。因此，應用「可適性計算架構」開發數值模式可以大幅減輕模式開發的負擔，使得工程師或研究人員可以更加專注於問題本質上，而非工具或模式開發上。



# The Development of Novel Numerical Simulation Platform — Adaptive Computation Framework

Student : Yu-Wen Chen

Advisor : Dr. Liang-Cheng Chang

Institute of Civil Engineering  
National Chiao Tung University

## Abstract

This study proposed a innovative methodology for developing numerical simulation models that overwhelm conventional developing process and greatly increase the efficiency of model development. The advancement of information technology (IT) have significantly improved the computational capability of numerical model, thus increased the importance of numerical simulation in various engineering analysis. The conventional process of numerical model development consists four steps that includes “conceptual model description”, “mathematical model definition”, “numerical model derivation” and “computer program development”. Once a numerical model has developed, one still has to repeat the four steps to modify the code even if only part of the original problem was modified with the conventional model developing process. The modification process is always complicated and time consuming. Hence, the traditional development process is lack of flexibility and difficult to update the computing functionalities of an existed numerical model. Therefore, to resolve these model developing issues, the Adaptive Computation Framework (ACF), a novel methodology to develop numerical simulation method, is proposed in this study. By using the proposed ACF method, a new computing function is easy to add into a existing model, i.e. a numerical model can grow with new computing functions.

The ACF is much more than just a new numerical scheme such as the finite element (FEM) or finite difference method (FDM). At the “mathematical model definition” step, the ACF define a problem by the set of originally fundamental equations without further artificial combination and simplification to get a more compact set of PDEs. An ”equation consistence analysis” is proposed in this step to ensure the consistence of these fundamental equations and variables, and also determine the sequence to solve the equations. In the “numerical model derivation” step, instead of applying complicated numerical scheme such as FEM or FDM, only simple difference method is needed to discretize the

equations and the “Voronoi Diagram” is proposed as the gridding method for spatial discretization. In the “computation program development” step, instead of solving a matrix equation, a general iteration method consists of inner and outer iteration is proposed to compute the solutions at each grids.

To demo the effectivity of the proposed methodology, three different groundwater numerical models, “groundwater flow only”, “groundwater flow with heat transport” and “groundwater flow with head and solute transport”, are developed by using ACF. Five different cases are examined to verify the correctness and the flexibility of ACF. The cases studies demonstrated that, using the ACF method, a model computing functions can be extended by only adding the required equations and thus increase the model computing capability with minimum coding effort. By using the ACF, engineers or scientists can get relief from the time consuming model redeveloping process, thus can focus more on the problem analysis instead of tool (model) development.



## 謝誌

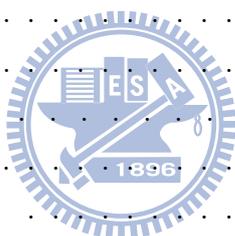
這本論文能夠完成，能夠完成這個學位，首先要感謝我的指導教授 - 張良正教授，這些年對我的細心指導，使我可以更加廣泛的想法與角度去面這個浩瀚的知識之海。其次，也要感謝葉高次教授、楊德良教授、黃良雄教授、李天浩教授、賴明治教授、葉弘德教授與單信瑜教授諸位口試委員對於這本論文的指教，您的指教使得本論文更加完備，特此由衷感謝。

另外，博士班的八年間，有輝哥、生哥、小貓、阿彬與曉萍你們的陪伴，一起辛苦一起嘴砲，共同度過漫長的研究生涯。薛哥、華哥、小健、浚偉、小蘇、阿釗、瀚聖、阿牛、牛奶車、阿海、冠宇、雲直、阜峻、阿布、小瑜、阿卡、深惠，族繁不及備載 (待得久認識的人就多了)，有你們的陪伴日子變得精采許多。最後要感謝一直陪伴在我身旁的親人與小慧，有了你們的支持，才讓我有勇氣完成這個學位，感謝你們。



# 目錄

中文摘要	ii
英文摘要	iv
誌謝	vi
目錄	vii
圖目錄	ix
表目錄	xii
符號使用對照清單	xv
第一章 緒論	1
1.1 緣起與目的	1
1.2 文獻回顧	2
1.3 研究步驟	5
第二章 研究理論與方法	6
2.1 數值模式開發流程	6
2.1.1 概念模式階段概述	6
2.1.2 數學模式階段概述	6
2.1.3 數值離散階段概述	9
2.1.4 電腦程式階段概述	10
2.2 可適性計算架構	12
2.2.1 可適性計算架構概述	12
2.2.2 「可適性計算架構」之數學模式階段	16
2.2.3 「可適性計算架構」之數值離散階段	19
2.2.3.1 Voronoi Diagram 空間離散模組	19
2.2.3.2 方程式離散方法	21
2.2.4 「可適性計算架構」之電腦程式階段	25
2.2.4.1 通用數值解法	25
2.2.4.2 材質參數與分布	30
2.2.4.3 變數與參數資料結構	30
2.2.4.4 邊界條件	35
2.2.4.5 源匯項	35
2.3 可適性計算架構核心平台開發	37



第三章 「可適性計算架構」應用模組開發 . . . . .	38
3.1 數學模式階段 . . . . .	38
3.1.1 地下水流子問題 . . . . .	38
3.1.1.1 建立分散型控制方程組 . . . . .	38
3.1.1.2 方程式一致性分析 . . . . .	43
3.1.2 熱流傳輸子問題 . . . . .	46
3.1.2.1 建立分散型控制方程組 . . . . .	46
3.1.2.2 方程式一致性分析 . . . . .	49
3.1.3 溶質傳輸子問題 . . . . .	51
3.1.3.1 建立分散型控制方程組 . . . . .	51
3.1.3.2 方程式一致性分析 . . . . .	54
3.2 數值離散階段 . . . . .	56
3.2.1 地下水流子問題 . . . . .	56
3.2.2 熱流傳輸子問題 . . . . .	57
3.2.3 溶質傳輸子問題 . . . . .	58
3.3 電腦程式階段 . . . . .	59
3.3.1 地下水流子問題 . . . . .	59
3.3.1.1 變數宣告與設定 . . . . .	59
3.3.1.2 局部參數宣告與設定 . . . . .	60
3.3.1.3 全域參數宣告與設定 . . . . .	60
3.3.2 熱流傳輸子問題 . . . . .	61
3.3.2.1 變數宣告與設定 . . . . .	61
3.3.2.2 局部參數宣告與設定 . . . . .	61
3.3.3 溶質傳輸子問題 . . . . .	62
3.3.3.1 變數宣告與設定 . . . . .	62
3.3.3.2 局部參數宣告與設定 . . . . .	63
3.3.3.3 全域參數宣告與設定 . . . . .	63
3.3.4 資訊同步項目設定 . . . . .	63
第四章 案例結果與驗證 . . . . .	65
4.1 穩態垂向二維地下水流非耦合模擬 . . . . .	65
4.2 非穩態垂向二維地下水流非耦合模擬 . . . . .	68
4.3 非穩態垂向二維地下水流與熱流傳輸耦合模擬(注入熱水案例) . . . . .	71
4.4 非穩態垂向二維地下水流與熱流傳輸耦合模擬(地下熱源環境注入常溫水流案例) . . . . .	76
4.5 非穩態垂向二維地下水流、熱流傳輸與溶質傳輸耦合模擬 . . . . .	82
第五章 結論與建議 . . . . .	94
5.1 結論 . . . . .	94
5.2 建議 . . . . .	95
參考文獻 . . . . .	98
附錄A Delaunay Triangulation 與 Voronoi Diagram . . . . .	99

附錄B	總水頭計算公式推導 . . . . .	102
附錄C	土壤壓密係數與傳統儲水係數之相關推導 . . . . .	105
附錄D	細胞自動機 . . . . .	109
附錄E	Voronoi Diagram 與可適性計算應用於溶質傳輸之擴散計算 . . . . .	112



# 圖目錄

1-1	方程式新增與刪除示意圖	2
1-2	「可適性計算架構」研究流程圖	5
2-1	可適性計算架構與傳統開發架構比較圖	13
2-2	「可適性計算架構」系統架構與運算流程圖	15
2-3	Voronoi Diagram 與 Delaunay Triangle 示意圖	20
2-4	Voronoi Diagram 網格架構圖	21
2-5	可適性計算架構內迭代流程圖	26
2-6	可適性計算架構資訊同步示意圖	27
2-7	可適性計算架構外迭代流程圖	28
2-8	可適性計算架構時間控制流程圖	29
2-9	材質與網格分布示意圖	30
2-10	資料儲存結構圖	31
2-11	節點變數資料結構與函數運作關係圖	31
2-12	連結變數資料結構與函數運作關係圖	32
2-13	空間變數或參數推估示意圖	34
2-14	局部參數與節點隸屬關係示意圖	34
2-15	邊界條件與網格配置示意圖	36
2-16	源匯點與網格配置示意圖	36
4-1	穩態垂向二維地下水流模擬圖	66
4-2	模擬網格圖	67
4-3	總水頭分布等值圖(穩態)	67
4-4	水流流向圖(穩態)	68
4-5	非穩態垂向二維地下水流模擬圖	69
4-6	總水頭分布等值圖( $time = 900s = 0.25hr$ )	69
4-7	抽注水井總水頭隨時間變化圖	70
4-8	水流流向圖( $time = 900s = 0.25hr$ )	70
4-9	非穩態垂向二維熱流傳輸模擬圖(注入熱水案例)	71
4-10	溫度分布等值圖( $time = 3,600s = 1hr$ )	72
4-11	溫度分布等值圖( $time = 86,400s = 24hr$ )	72

4-12 熱流傳輸流向圖( $time = 3,600s = 1hr$ ) . . . . .	73
4-13 抽注水井總水頭隨時間變化圖(不同案例) . . . . .	74
4-14 抽注水井溫度隨時間變化圖 . . . . .	74
4-15 溫度、水流密度與黏滯係數變化關係圖 . . . . .	75
4-16 抽注水井黏滯係數隨時間變化圖 . . . . .	75
4-17 抽注水井水力傳導係數隨時間變化圖 . . . . .	76
4-18 非穩態垂向二維熱流傳輸模擬圖(注入常溫水流案例) . . . . .	77
4-19 溫度分布等值圖( $time = 0s = 0hr$ ) . . . . .	78
4-20 溫度分布等值圖( $time = 3,600s = 1hr$ ) . . . . .	78
4-21 溫度分布等值圖( $time = 86,400s = 24hr$ ) . . . . .	79
4-22 溫度分布等值圖( $time = 172,800s = 48hr$ ) . . . . .	79
4-23 抽水井溫度隨時間變化圖(不同案例) . . . . .	80
4-24 抽水井總水頭隨時間變化圖(不同案例) . . . . .	81
4-25 抽水井溫度隨時間變化圖(不同抽水量) . . . . .	81
4-26 抽水井總水頭隨時間變化圖(不同抽水量) . . . . .	82
4-27 相對吸附係數隨溫度變化圖 . . . . .	83
4-28 非穩態垂向二維溶質傳輸模擬圖 . . . . .	83
4-29 濃度分布等值圖( $time = 0s = 0hr$ ) . . . . .	84
4-30 濃度分布等值圖( $time = 3600s = 1hr$ ) . . . . .	85
4-31 濃度分布等值圖( $time = 86,400s = 24hr$ ) . . . . .	85
4-32 濃度分布等值圖( $time = 172,800s = 48hr$ ) . . . . .	86
4-33 水流流向圖( $time = 172,800s = 48hr$ ) . . . . .	86
4-34 抽水井濃度變化圖 (比較案例: $case02$ 、 $case02a$ 與 $case02b$ ) . . . . .	87
4-35 溶液中系統總溶質質量變化圖 (比較案例: $case02$ 、 $case02a$ 與 $case02b$ ) . . . . .	88
4-36 溶質移除率變化圖 (比較案例: $case02$ 、 $case02a$ 與 $case02b$ ) . . . . .	89
4-37 抽水井濃度變化圖 (比較案例: $case02a$ 與 $case03$ ) . . . . .	90
4-38 溶液中系統總溶質質量變化圖 (比較案例: $case02a$ 與 $case03$ ) . . . . .	90
4-39 溶質移除率變化圖 (比較案例: $case02a$ 與 $case03$ ) . . . . .	91
4-40 吸附係數對控制體積內吸附溶質質量百分比變化圖 . . . . .	92
4-41 莫耳濃度對 Jones-Dole 方程式第二項與第三項變化圖 . . . . .	92
4-42 莫耳濃度對 $\Delta\mu_r$ 變化圖 . . . . .	93
A-1 Delaunay triangulation 與 其外接圓 . . . . .	99
A-2 Delaunay triangulation 與 Voronoi Diagram . . . . .	100
B-1 控制體積垂向受力示意圖 . . . . .	102
C-1 水流密度變化曲線圖( $25^\circ\text{C}$ 常溫) . . . . .	105
D-1 von Neumann形式細胞結構圖 . . . . .	110
D-2 Moore形式細胞結構圖 . . . . .	110

D-3 Hexagonal形式細胞結構圖 . . . . . 111

E-1 Voronoi Diagram 與 Delaunay Triangle 示意圖 . . . . . 113



# 表目錄

1	符號使用對照表 . . . . .	xv
2-1	變數與方程式關係矩陣 . . . . .	17
2-2	變數、方程式與求解步驟表(步驟一) . . . . .	17
2-3	變數、方程式與求解步驟表(步驟二) . . . . .	17
2-4	變數、方程式與求解步驟表(步驟三) . . . . .	18
2-5	變數、方程式與求解步驟表(步驟四) . . . . .	18
2-6	變數與方程式關係矩陣(範例二) . . . . .	19
2-7	節點、相鄰節點、相鄰連結與相鄰邊界虛擬點對應表 . . . . .	20
2-8	節點與局部參數隸屬關係對應表 . . . . .	33
3-1	地下水流變數與方程式關係矩陣 . . . . .	43
3-2	地下水流變數列表及自變數與應變數統計表 . . . . .	44
3-3	地下水流函式求解順序表 . . . . .	44
3-4	熱流傳輸變數與方程式關係矩陣 . . . . .	49
3-5	熱流傳輸變數列表及自變數與應變數統計表 . . . . .	49
3-6	熱流傳輸函式求解順序表 . . . . .	50
3-7	溶質傳輸變數與方程式關係矩陣 . . . . .	54
3-8	溶質傳輸變數列表及自變數與應變數統計表 . . . . .	55
3-9	溶質傳輸函式求解順序表 . . . . .	55
3-10	地下水流子問題變數宣告與設定表 . . . . .	59
3-11	地下水流子問題局部參數宣告與設定表 . . . . .	60
3-12	地下水流全域參數宣告與設定表 . . . . .	60
3-13	熱流傳輸子問題變數宣告與設定表 . . . . .	61
3-14	熱流傳輸子問題局部參數宣告與設定表 . . . . .	62
3-15	溶質傳輸子問題變數宣告與設定表 . . . . .	62
3-16	溶質傳輸子問題局部參數宣告與設定表 . . . . .	63
3-17	溶質傳輸全域參數宣告與設定表 . . . . .	63
3-18	資訊同步列表 . . . . .	64
4-1	非耦合地下水流模擬局部參數設定表 . . . . .	65
4-2	非耦合地下水流模擬全域參數設定表 . . . . .	66

4-3	熱流傳輸子問題局部參數設定表 . . . . .	71
4-4	溶質傳輸子問題局部參數設定表 . . . . .	82
4-5	溶質傳輸子問題全域參數設定表 . . . . .	82
4-6	案例設定比較表 . . . . .	87



# 符號使用對照清單

表 1: 符號使用對照表

符號	對照含意	符號	對照含意
$\alpha'$	土壤壓密係數	$\alpha_L$	縱向延散性
$\alpha_T$	橫向延散性	$\alpha_{SE}$	溶質膨脹係數
$\alpha_{van}$	van Genuchten 公式參數	$\beta_{van}$	van Genuchten 公式參數
$\mu_{pw}$	純水黏滯係數	$\Delta\mu_r$	溶液相對黏滯係數改變量
$\mu_{wl}$	溶液黏滯係數		
$\phi_l$	水流之單位質量熱容量	$\phi_s$	土體之單位質量熱容量
$\psi$	張力，即負壓力		
$\rho_{wl}$	溶液密度	$\rho_{pw}$	純水密度
$\rho_{pw}^{\circ}$	常溫常壓下之純水密度	$\rho_s$	土體密度
$\rho_{wl}$	溶液密度		
$\theta_r$	殘餘含水量	$\theta_s$	飽和含水量
$\theta_e$	有效含水量		
$a$	Jones-Dole 方程式之參數A	$b$	Jones-Dole 方程式之參數B
$c_1^{sorb}$	等溫吸附溫差轉換係數(一次項)	$c_2^{sorb}$	等溫吸附溫差轉換係數(二次項)
$C_l$	溶液中之溶質濃度(質量濃度)	$C_s$	吸附於土體之溶質濃度(質量濃度)
$C_{ml}$	溶液中之溶質濃度(莫耳濃度)		
$D$	延散係數張量	$D^*$	擴散係數
$g$	重力加速度	$\zeta$	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

續接下頁

表 1 – 承接上頁

符號	對照含意	符號	對照含意
$\dot{h}_{adv}$	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
$K_{sorb,d}$	吸附係數	$K_{sorb,d}^{\circ}$	常溫吸附係數
$K_{wl}$	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		
$M_r$	溶質之分子量	$\dot{M}_{cl}$	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
$\hat{n}$	流線之正交方向	$n$	土壤孔隙率
$n^{\circ}$	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
$p^{\circ}$	常壓之壓力水頭數值		
$q_{cl}$	抽注溶質質量		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
$V_n$	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	$\mathbf{A}_{CS}$	控制表面
$\mathbf{V}_{CV}$	控制體積	$\mathfrak{S}_{unit}()$	代表單位轉換運算子



# 第一章 緒論

## 1.1 緣起與目的

在土木、水利或其他相關工程領域中，數值模式之應用範圍已不斷擴展。相較於實體實驗而言，應用數值模式進行工程規劃，在成本上、彈性上與速度上之優勢。除此之外，數值模式亦可結合最佳化理論，進行最佳化規劃管理之探討，例如地下水最佳管理模式 [1, 2] 或污染整治模式 [3] 等，因此數值模式之重要性日趨顯著。

Bear 等人 [4] 指出數值模式之開發必須經歷四大步驟，分別為「概念模式描述」、「數學模式定義」、「數值離散推導」與「電腦程式開發」四個階段。首先，在「概念模式描述」階段則對於待解問題以定性的方式來描述變化機制；其次在「數學模式定義」階段則將前述之變化機制一一以定量的數學方程式予以描述，透過數學推導技巧與部分假設，將這些數學方程式組合為一條控制方程式，多數的控制方程式多為偏微分方程式 (Partial Differential Equation, PDE)，例如地下水流方程式、污染傳輸方程式等；接著在「數值離散推導」階段則透過有限差分法 (Finite Different Method, FDM)、有限元素法 (Finite Element Method, FEM) 或有限體積法 (Finite Volume Method, FVM) 等數值方法，將前述之控制方程式進行離散化，轉化為離散方程式，多數之數值方法均是將連續型態之研究區域切割成有限個節點，因此離散方程式即描述節點數值與周遭相鄰節點數值之函數關係，由於每一節點即代表一條等號方程式，故常見作法是將這些等號方程式轉化為矩陣方程式，並選用適合之矩陣解法 (matrix solver) 求解之，例如高斯消去法等；最後在「電腦程式開發」階段則是將前述所建立之矩陣方程式與選定之矩陣解法以電腦語言描述之，撰寫成為可執行之電腦程式。

綜觀前述步驟，若今欲加入一原問題未考量之行爲，則須加入描述此行爲之法則 (控制方程式)，如此則須重新推導並修正原問題之控制方程式，控制方程式離散化、矩陣方程式與數值程式撰寫等動作均需要重新修改，修改工作往往相當繁複，也因此限制了原模式擴充或修正的彈性。

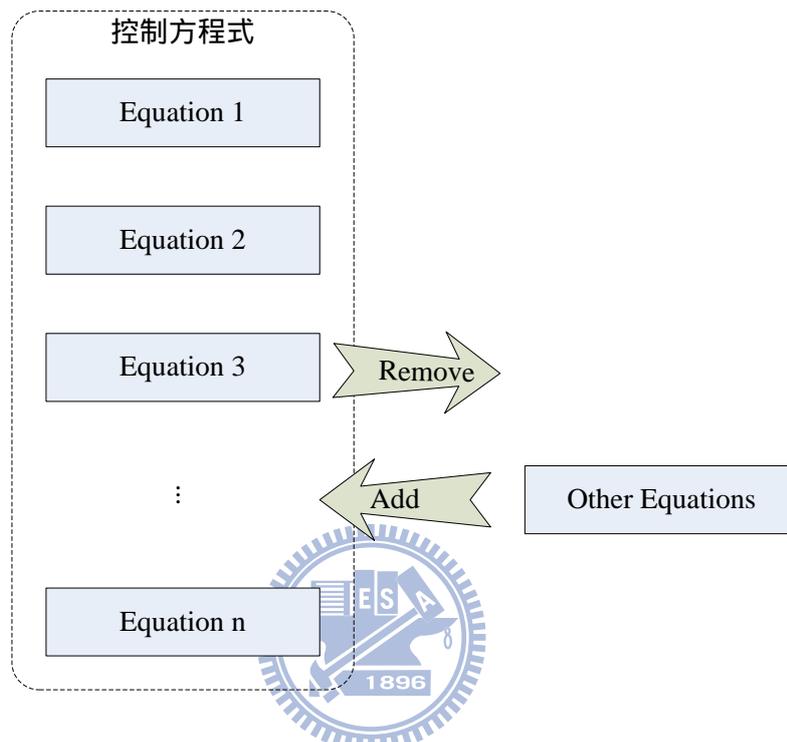


圖 1-1: 方程式新增與刪除示意圖

本研究目的在提出新的數值模擬架構，突破傳統的數值建模方式，使所開發的模擬模式，其描述變化機制之方程式可自由的新增與刪除 (如圖 1-1 所示)，以期在未來並更進一步發展成具備自我學習及演進的智慧型計算模擬系統。

## 1.2 文獻回顧

傳統上，偏微分方程式的求解方法可以分為兩大類，包含解析解法與數值解法，解析解法必須應用許多數學推導技巧，例如：變數分離法、Lapalce 轉換等數學技巧，搭配邊界條件或初始條件方可求解。在求解上有許多限制，其邊界形狀往往僅可適用於矩形或圓形邊界，且其偏微分方程式之型態也僅侷限於線性偏微分方程式或少數特定型態之非線性偏微分方程式，故對於工程上之應用有所限制。在數值解法上，則藉由各式數值方法對

偏微分方程式進行數值離散，後續可以矩陣解法 (matrix solver) 來進行求解，相較於解析解法，數值解法在邊界形狀或方程式型態之侷限較低。

為使減輕工程師或研究人員於問題求解之負擔，可藉由許多輔助工具取代大部分的求解工作，使其可著重心力於問題本質之上，此類之輔助工具包含：Mathematica 與 PDE2D 等，以下分別說明兩者的差異。Mathematica 是一種數學領域的輔助軟體，其內建大量之數學解法資料庫，因此對於求解特定型態的偏微分方程式 (PDEs) 即為方便。使用者需選擇適合之方程式型態，並依據需求計算對應之係數即可，例如線性之二階偏微分方程式(如式 (1-1) 所示)，其中  $a$ 、 $b$ 、 $c$ 、 $d$ 、 $e$ 、 $f$  與  $g$  均為方程式中的係數，如係數  $a$  與  $c$  若為 1 時，而其他係數為 0 時，方程式即代表卡氏座標系統之 Laplace 方程式。如改變係數數值，亦可表現其他形式之方程式，如波浪方程式與熱傳方程式等。但對於工程應用而言，控制方程式多半需要做大幅簡化重整，或甚至無法轉變成所需之特定形式，有其應用上的限制。

$$a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + fu = g \quad (1-1)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad (1-2)$$

PDE2D [5] 則是一套通用化之數值模擬軟體，針對特定類型之偏微分方程式，應用有限元素法進行求解。Gribb 與 Sewell [6] 比較應用 PDE2D 建立未飽和層地下水流與傳輸模式，與自行開發撰寫模式之差異，其證明通用化程式碼 (general purpose computer code) 除可大幅簡化開發者之開發工作外，在精度上仍可與客製化程式碼 (special purpose computer code) 並駕齊驅。Lalegname 等人 [7] 則以 PDE2D 建立彈性體之動態斷裂模式 (dynamic crack model)。

綜觀前述輔助工具，顯示此類輔助開發工具具有工程應用上之實用性。然前述輔助工具僅能求解特定類型之偏微分方程式，例如前述 Laplace 方程式或波浪方程式等，而無法直接利用守恆定律與其他相關之輔助定律來求解，必須透過繁雜的數學技巧與推導去簡化成前述之特定型態，也因此限制了模式擴充與修正的彈性。

近年來在水利方面的數值模式，已有許多研究將細胞自動機 (Cellular Automata, CA) 理論應用於地表水流模擬之建立 [8, 9, 10, 11]。在地下水流方面，細胞自動機亦被應用於地下水數值模式之建立 [12, 13, 14, 15]。

上述研究中，細胞自動機是以細胞規則 (Rules) 描述待解問題之變化機制，方能掌握待解問題之現象與特性。部分研究之細胞規則沿用傳統數值模擬之控制方程式型態，將守恆方程式與相關輔助方程式整合成傳統形式之控制方程式，再以此作為細胞規則，如 Mendicino 等人 [14] 與 Folino 等人 [13] 則是以結合連續方程式與達西公式建立離散之未飽和非穩態地下水流方程式；另一部分研究之細胞規則是直接採用守恆方程式與相關輔助方程式，作為待解問題的細胞規則，在此以一組循序的細胞規則來描述待解問題，這些細胞規則必須依據一定之順序求解，Parsons 與 Fonstad [8] 則採連續方程式與漫寧公式作為細胞規則。前述兩類細胞規則型態，第二型態之細胞規則是直接採基本的守恆方程式與相關輔助方程式，雖可以省略在重組與整合所耗費之心力，但是仍須藉由使用者依據各細胞規則的變數相依關係，藉以決定各細胞規則的求解順序，是否可利用演算法來取代理人所扮演之角色？

除此之外，由於細胞自動機理論中需定義細胞的空間結構 (Neighborhood)，常見的空間結構都是規則結構，對於不規則形狀邊界之問題而言，較難以準確描述。過去，凡諾伊圖 (Voronoi Diagram) 之概念已廣泛應用於水利相關領域中，最早之應用實例即為水文中慣用之徐昇氏多邊形，近年來更進一步作為數值模擬中的空間格網 [16, 17, 18]，由於 Voronoi Diagram 之獨特性質，因此無論是 Eulerian 類、Lagrange 類或兩者混合之數值方法均可適用。

因此，本研究將參考細胞自動機直接以基本的守恆方程式與相關輔助方程式作為控制方程式，結合 Voronoi Diagram 作為空間切割原則，並以「方程式一致性分析」檢驗與決定守恆方程式與相關輔助方程式之一致性與求解順序，以此建立「可適性計算架構」平台，作為數值模式開發之輔助工具。此外，本研究將進一步以「可適性計算架構」建構應用模組，分別為「地下水流」、「地下水流與熱流」及「地下水流、熱流與溶質傳輸」，藉由「可適性計算架構」開發步驟，展現本架構開發上之便利性。

### 1.3 研究步驟

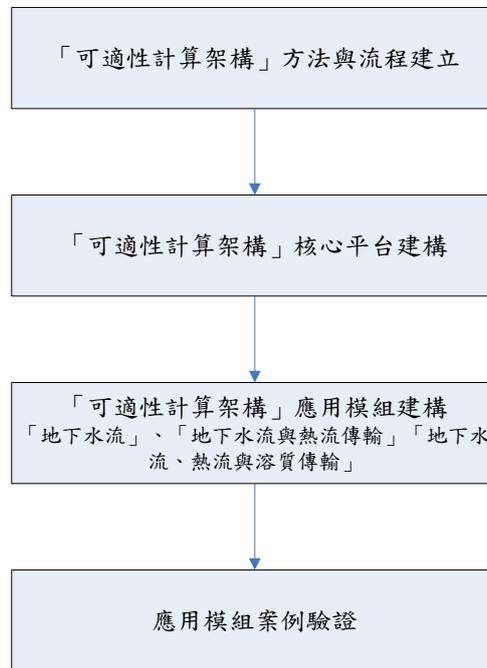


圖 1-2: 「可適性計算架構」研究流程圖

圖 1-2 為本研究之研究流程圖，其中主要分為四大階段，第一階段是「可適性計算架構」的方法與流程建立，將於 2.2 節進一步說明，在此進一步說明「可適性計算架構」的系統架構、方法與流程；第二階段則進行「可適性計算架構」核心平台之建構，於 2.3 節進一步說明；第三階段則依據需求選擇特定問題開發數值模式，在此稱為「可適性計算架構」之應用模組建立，本研究分別以「地下水流」、「地下水流與熱流」及「地下水流、熱流與溶質傳輸」三個漸進式問題建構數值模式，將於第 3 章進一步說明。最後，第四階段則以應用案例驗證檢驗模式之正確性與精確性，將於第 4 章進一步說明。

## 第二章 研究理論與方法

### 2.1 數值模式開發流程

Bear 與 Verruijt [4]指出數值模式在其開發之四大階段，後續將從 2.1.1 至 2.1.4 小節，依續進一步描述。

#### 2.1.1 概念模式階段概述

針對問題建構其概念模式，由於實際問題往往過為複雜，因此在概念模式描述中藉由一些的假設與定義，盡可能去近似實際環境與問題，在概念模式描述中是以文字的方式定性描述這些假設與定義。如以地下水流問題為例，概念模式描述的假設與定義包含下列項目 ( Bear and Verruijt, 1987 [4] )：

1. 地下水流的質量守恆。
2. 研究區域的邊界幾何形狀的描述。
3. 含水層特性的描述(均質/非均質與等向/非等向)。
4. 水流特性的描述(可壓縮/不可壓縮)。
5. 溶質濃度或溫度變化對水流密度與黏滯度之描述。
6. 源匯流項(sink or source)的描述。
7. 研究區域初始條件的描述。
8. 研究區域邊界條件的描述。



#### 2.1.2 數學模式階段概述

第二個階段便是建構問題之數學模式定義，在此以定量之數學方程式來取代前述定性之文字敘述，這些數學方程式如下所示：

1. 研究區域的邊界幾何形狀的數學定義。
2. 描述特定物理量守恆不減的守恆方程式。

3. 描述特定物理量移動或流動的流動方程式 (flux equations)，其流動量受問題之狀態變數之影響。
4. 定義其他相關變數之組成方程式(constitutive equations)。
5. 以定量的方式描述研究區域的初始條件。
6. 以定量的方式描述研究區域的邊界條件。

$$\frac{DB}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} \rho b dV_{CV} + \oint_{CS} \rho b \vec{V} \cdot \hat{n} dA_{CS} = \frac{\partial B}{\partial t} + \dot{B} = 0 \quad (2-1)$$

其中物理量之守恆方程式，即可以流體力學中雷諾傳輸定律(如式 (2-1) 所示)表示之，式中小寫變數  $b$  可代表任意物理量，其為物理量之內涵性質 (intensive property)，代表在單位質量下之物理量特性；大寫變數  $B$  則代表相同物理量之外展性質 (extensive property)，其與內涵性質之關係可由式 (2-2) 轉換；變數  $t$  代表時間；變數  $\hat{n}$  代表正交於控制表面之單位向量，其方向指往控制體積外部。

$$B = \int_{CV} \rho b dV_{CV} \quad (2-2)$$

如無源匯流項之條件下，亦即物理量  $B$  必須守恆，對  $B$  之全微分亦必須等於 0。式 (2-1) 中包含兩大項，第一項則代表控制體積內該物理量 ( $B$ ) 隨時間之變化率，第二項則是控制表面上該物理量之穿越率 ( $\dot{B}$ )，亦即控制體積內的變化率與控制表面的穿越率之和必須為零。如果進多出少時，由於正交向量  $\hat{n}$  之緣故，表面穿越率之數值為負，亦即內部變化率為正，顯示內部該物理量之數量隨時間增加；反之，則表面穿越率為正，亦即內部變化率為負。如以地下水流為例，其為地下水之質量守恆問題，因此變數  $B$  又可表示為地下水質量 ( $M_{wl}$ )，因此第一項即代表水流質量之變化率，第二項則代表水流質量之穿越率，後續公式均以符號  $M_{wl}$  取代前述之符號  $B$ 。因此綜合第一項與第二項，即代表控制體積內部的蓄水變化率應等於穿越控制表面之水流質量穿越率。

前述式 (2-1) 的第二項描述物理量之在控制表面之穿越率，流動方程式 (flux equations) 即是用以定量地定義穿越率，其為問題狀態變數之函式。如以地下水流問題為例，多採用達西公式 (如式 (2-3) 所示) 描述地下水之流動流速，狀態變數 (總水頭,  $h$ ) 即為達西公式之自變數，流速為水頭梯度與水力傳導係數之乘積。乘上穿越面積 ( $A_{CS}$ ) 與密度 ( $\rho$ ) 即代表穿越控制表面之地下水流質量穿越率(如式 (2-4) 所示)，式 (2-3) 與 (2-4) 即為地下水流問題之流動方程式 (flux equations)。

$$\vec{V}_{darcy} = -K \nabla h \quad (2-3)$$

$$\dot{M}_{wl} = \rho \vec{V}_{darcy} \cdot \hat{n} A_{CS} \quad (2-4)$$

另外，方程式中尚未定義的其他變數數值，則需藉由組成方程式 (constitutive equations) 去定量定義。在飽和水平二維拘限含水層問題中，多孔介質之儲水量受到總水頭變化之影響，其儲水機制分別與土壤及水之壓縮性有關，式 (2-5) 以密度 ( $\rho$ )、儲水係數 ( $s_s$ ) 乘上總水頭隨時間之變化率及面積 ( $A_{cell}$ )，描述控制體積內之儲水質量變化率。其中  $A_{cell}$  代表水平二維之控制體積。如在未飽和層之模擬問題中，多孔介質之含水量受到張力 ( $\psi = -h$ ，亦即負壓力) 之影響，其需進一步以土壤特性曲線來描述控制體積內的含水量變化，例如以 van Genuchten 經驗式來描述。

$$\frac{\partial M_{wl}}{\partial t} = \rho s_s \frac{\partial h}{\partial t} A_{cell} \quad (2-5)$$

前述流程將產生守恆方程式、流動方程式與組成方程式等多條方程式，其已經可充分描述問題之運動機制，因此可視為問題之控制方程式。然傳統上在數學模式建置時，必須將前述由多條方程式所組合之控制方程式，藉由數學推導過程，整合為一條偏微分方程式，這些數學推導過程是盡量在不違背原始定義下，利用少許假設與數學推導技巧進行簡化與整合，因此整合前與整合後之方程式特性應完全相同或極為相似，故兩者均可代表原始問題之控制方程式，在此將整合前之多條方程式稱為「分散型之控制方程式」，而整合後之一條偏微分方程式則稱為「整合型之控制方程式」。

如以水平二維之等向均質拘限含水層問題為例，式 (2-1)、(2-3)、(2-4) 與 (2-5) 為問題之分散型控制方程式，假設水流密度不變，藉由數學推導即可將數條方程式整合為式 (2-6)，其中變數  $T$  代表流通係數，其為水力傳導係數 ( $K$ ) 乘上含水層厚度。

$$T \nabla^2 h = s_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2-6)$$

傳統上，習慣採用整合式之控制方程式，因為當經過整理簡化後，使得問題之控制方程式與熱傳、波動與 Laplace 三大類偏微分方程式相似時，傳統上即有許多解法可以進行求解，這些方法大致可以分類為解析解與數值解兩大分類，以前述式 (2-6) 為例，其函數型別為 Poisson 方程式(式 (2-7))。

$$\nabla^2 u(x, y, z) = f(x, y, z) \quad (2-7)$$

如進出控制表面之水量平衡，亦即控制內之水量不隨時間變化，其等號左方為 0，亦即為穩態形式之地下水流方程式(如式 (2-8))，其函數型別即退化為 Laplace 方程式(式 (2-9))。

$$T \nabla^2 h = 0 \quad (2-8)$$

$$\nabla^2 u(x, y, z) = 0 \quad (2-9)$$

上述問題為飽和水平二維拘限含水層問題，所組成之方程式數量僅有少數幾條，可以簡單地組合成整合型控制方程式。然目前數值模式所探討之問題越趨複雜，未必可成功地組合成整合型控制方程式，亦或是必須引入更多之假設與簡化動作，使得所得之整合型控制方程式與原始問題略有差異。

### 2.1.3 數值離散階段概述

「數值離散推導」階段是將「數學模式定義」階段建立的控制方程式進行離散，這些控制方程式在研究區域內多為連續，首先將連續的研究區域切割為多個且數量有限的節點，藉由各式數值方法，建立各個節點彼此之分布關係；其次，將這些分布關係化成矩陣方程式。可選用的數值方法包含：有限差分法、有限元素法或有限體積法等等。

$$T \left( \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} \right) = s_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2-10)$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x^2} \simeq \alpha \frac{h_{i+1,j}^{t+1} - 2h_{i,j}^{t+1} + h_{i-1,j}^{t+1}}{\Delta x^2} + (1-\alpha) \frac{h_{i+1,j}^t - 2h_{i,j}^t + h_{i-1,j}^t}{\Delta x^2} \quad (2-11)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} \simeq \frac{h_{i,j}^{t+1} - h_{i,j}^t}{\Delta t} \quad (2-12)$$

將式 (2-6) 以二維卡氏座標 (2D Cartesian Coordinate) 進行推導可得式 (2-10)。若應用有限差分法建立離散方程式 [19]，則分別需對空間上與時間上進行離散動作，式 (2-11) 與 (2-12) 分別為空間上在  $x$  方向與時間上之差分式，其中  $\alpha$  為離散過程由使用者訂定之參數，如其數值等於 0，代表方程式之空間離散由時刻  $t$  之水位所控制，即為顯示法 (Explicit Form)；反之如其數值等於 1，則代表方程式之空間離散全由時刻  $t+1$  之水位所控制，即為完全隱示法 (Fully Implicit Form)；如其數值等於 0.5，則表示空間離散則同時受到  $t$  時刻與  $t+1$  時刻之水位之影響，且兩者之影響力相當。而  $y$  方向之差分式亦可以相同方式建立。

綜合式 (2-10) 至 (2-12) 可得非穩態地下水流之離散方程式，如在一個由  $n$  個規則格網所構成之空間上，其可表示為矩陣形式 (式 (2-13))，其中將水位變數依據時刻作區分，時刻  $t+1$  置放於等號左方，而時刻  $t$  則置放於等號右方，矩陣  $[A]_{n \times n}$  與  $[B]_{n \times n}$  為式中的係數矩陣，由前述離散方程式定義。由於時刻  $t$  之數值為已知值，因此可以簡化寫為另

一係數矩陣  $\{C\}_{n \times 1}$ 。

$$[A]_{n \times n} \times \{h^{t+1}\}_{n \times 1} = [B]_{n \times n} \times \{h^t\}_{n \times 1} = \{C\}_{n \times 1} \quad (2-13)$$

由於前述作法 (傳統作法) 是以整合式之控制方程式進行離散，若欲新增或刪除部分方程式 (如圖 1-1 所示)，重組後之整合式控制方程式可能大為不同，也使得其離散方程式亦需重新推導建立，而不能僅針對新增部分來處理。

#### 2.1.4 電腦程式階段概述

「電腦程式開發」階段是將「數值離散推導」階段建立之離散方程式(如式 (??))，應用 Fortran、C、C++、Matlab 或其他程式語言撰寫成電腦程式，使得電腦程式有能力依據設定之邊界條件與相關參數，自動建立對應之係數矩陣  $[A]$  與  $\{B\}$ 。除此之外，在此階段亦需依據前述決定之矩陣解法，自行撰寫或應用數值函式庫建立矩陣解法，使電腦程式有能力求得滿足式 (2-13) 之真解  $\{h\}^*$ 。

「電腦程式開發」階段簡單地說就是以電腦程式語言，教導電腦依據「數值離散推導」所建構之方式，取代人腦自動化地執行計算解答。一言蔽之，就是將原本規劃的事物，寫成電腦程式，但實際上實作上有許多需要注意的地方，這便進入軟體工程的範疇。

軟體工程起源於後1960年代，因當時計算機計算能力大幅提昇，因此所使用之軟體亦相對變得複雜，因此當軟體經過時間之變遷與修改，系統越趨難以維護，依據當時的經驗歸納出下列結論：

1. 軟體系統的開發不可等閒視之，想到哪裡就寫到哪裡，毫無結構章法。需要以「工程」的嚴謹方法，區分階段，按步就班的實施。
2. 維護與開發同等重要，必須以「生命週期」的觀念來看待一個系統。「開發」僅是生命週期的一個階段，而「維護」則是生命週期中另一個重要的階段。如果開發時不兼顧日後「維護」所可能產生的問題，則系統可能很快就會走到其生命的終點。
3. 採用結構化分析設計方法，不論在系統分析、系統設計或程式設計階段，都應該恪遵「結構化」的方法。因為結構化的系統分析方法，可以讓設計者較完整且較有效率的捕捉使用者的需求。對於使用者，則可以較清楚的瞭解設計者對系統的設計藍圖。至於結構化的系統設計及程式設計技巧則較能保證最終成品及其文件的「嚴謹性」、「易讀性」、「可靠性」及「可維護性」。
4. 建立程式標準化，不止在方法上採用「結構化」的標準。在成品的規格上也應設法建立出標準。例如「程式」，就可以試著將各種不同功能的程式加以歸納分類出數類標準。在撰寫程式時必須遵守標準不得逾越。對於經常會在不同程式中重複使用的程式模組，則可以加以搜集整理成爲共用的「標準程式模組庫」。使能在撰寫程式時，可

以直接選擇套用。如此不但可以提高程式設計的生產力，保證程式品質，對於日後的程式維護也將因為大家都採用同一標準而更為易行。

5. 建立系統標準化，不止是在程式設計上可以採用標準程式模組的觀念。在系統設計上，也同樣可以採用「標準系統模組」的觀念。

由於數值模式之電腦程式雖與軟體工程中所述之軟體類型不同，但其也屬於一種特定功能之軟體。因此對於數值模式之程式實作而言，當數值模式所探討之問題日益複雜時，如不善加規劃，程式碼必定如同千層麵般地糾結一起，使得後續維護與更新越顯困難。此外，對於不同問題之數值模式而言，雖然因應不同問題而有不同之控制方程式，但是仍有許多相同之功能，因此應該建立「標準程式模組」庫，統一呼叫使用。



## 2.2 可適性計算架構

可適性計算架構為本研究所提出，藉此突破傳統數值建模之限制，使得數值模式之運動機制可自由的新增與刪除（如圖 1-1 所示），以下將進一步描述。

### 2.2.1 可適性計算架構概述

圖 2-1 為「傳統數值方法」與「可適性計算架構」在開發上之差異比較圖，其中亦依據前述數值模式開發之四大階段進行描述。在「概念模式描述」階段，是以文字定性地描述問題之特性與變化機制，在此「可適性計算架構」與「傳統數值方法」一致。

在「數學模式定義」階段，由於整合型控制方程式之推導整合，會耗費模式開發者大量心力，為了使描述問題之變化機制可自由地新增與刪除，在此「可適性計算架構」省略整合型控制方程式之推導整合，直接以分散型控制方程式進行計算。傳統上，整合型控制方程式之推導整合雖然耗費模式開發者的大量心力，但是可以藉此減少變數與方程式的數量，並可一併檢查分散型控制方程式是否完整定義。在「可適性計算架構」中，為達到相同之作用，在此以「方程式一致性分析（詳見 2.2.2 小節）」取代傳統之推導整合動作，其可解析並檢驗分散型控制方程組之完整性，並依據變數相依關係決定各方程式之求解順序（如圖 2-1 所示）。

在數值離散階段，傳統方法是以整合型控制方程式進行數值離散，並針對模擬空間定義空間離散的方式，最後再以矩陣解法進行求解。本研究在此以 Voronoi Diagram 進行空間切割，即水文領域中常見之徐昇氏多邊形，詳細內容將於 2.2.3.1 小節進一步說明。在方程式離散。在數值離散方面，則直接針對分散型控制方程式，依據各方程式中之運算子類型，以對應之離散方式取代，例如：微分運算子則以簡單差分取代，將於 2.2.3.2 小節進一步說明。在數值解法方面，可適性計算架構之通用數值解法包含四大步驟，分別為「內迭代流程」、「資訊同步流程」、「外迭代流程」、「Particle Tracking 流程」與「時間控制流程」，將於 2.2.4.1 小節進一步說明。

在電腦程式階段，傳統方法則是將前述之整合型離散方程式與矩陣解法，以適合之程式語言撰寫為電腦程式。本研究在此則以分散型離散方程式以電腦語言撰寫實作，其中以物件導向觀念，將計算變數、局部參數與全域參數封裝，並提供儲存與取得之相關函式，使用者在實作撰寫離散方程式時，運算時可利用相關函式取得所需變數、參數之數值，並在運算結束後儲存於對應之變數位置。此外，節點對應局部參數、材質、邊界條件與源匯項等之對應關係，模式開發者亦無需耗費心力於前述項目之對應關係上。

圖 2-2 為「可適性計算架構」的系統架構與運算流程圖，其中可以區分為「核心平台」與「應用模組」兩塊，於前述第 1.3 章提及必須先完成「核心平台」，其次在應用「核心平台」建立各式各樣的應用領域，即為「應用模組」。

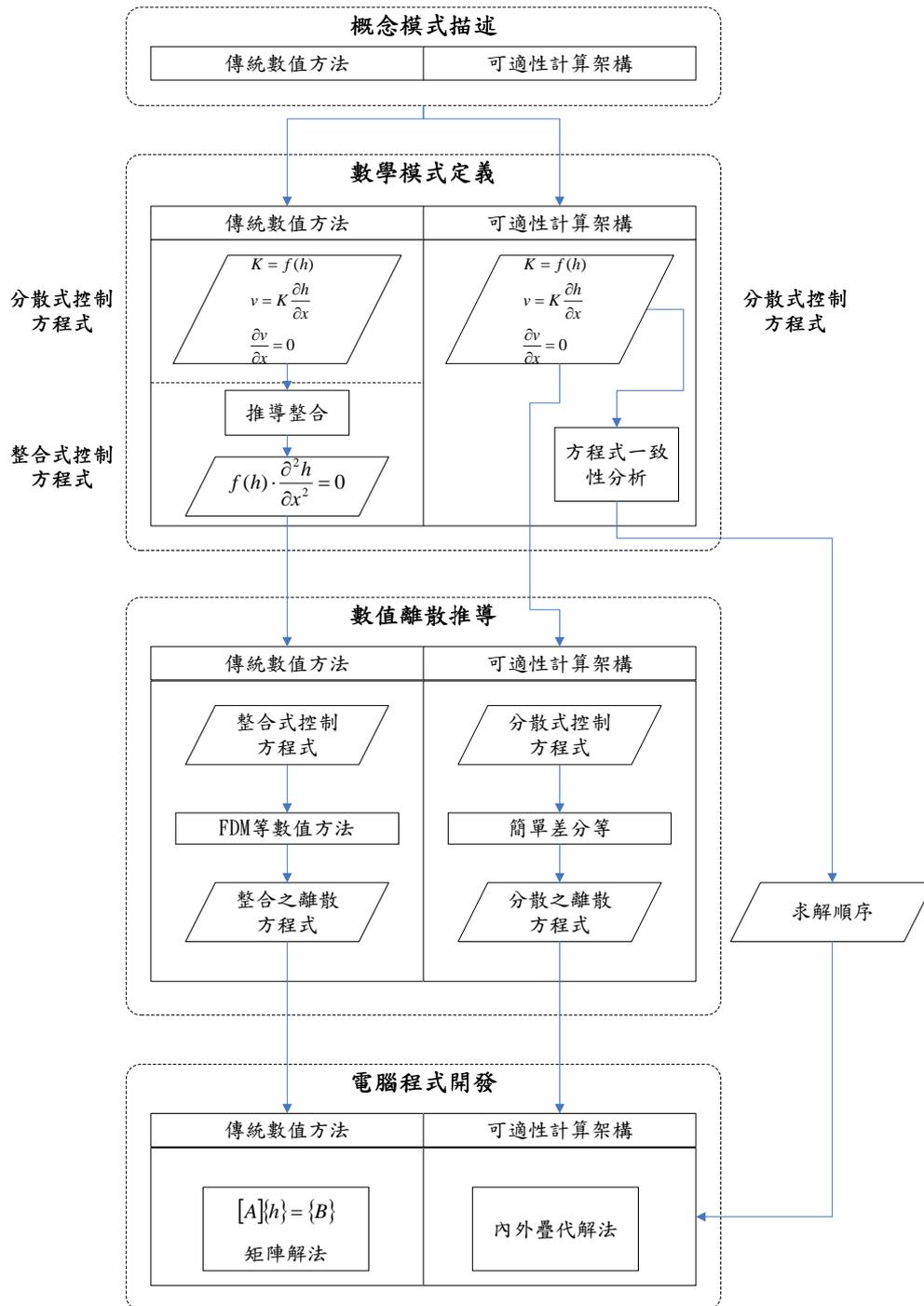


圖 2-1: 可適性計算架構與傳統開發架構比較圖

其中，「核心平台」又可細分為 Voronoi Diagram 空間離散模組、通用數值解法、方程式計算順序設定與儲存容器、材質空間對應與儲存容器、邊界條件設定與儲存容器、源匯項設定與儲存容器與方程式一致性分析模組等七大模組，對於不同應用問題而言，可分類為共通之部分與非共通之部分，核心平台即為不同應用問題間共通之部分。而應用模組則是建構不同應用問題間非共通之部分，包含各問題之分散式控制方程式與變數等。圖上將「核心平台」與「應用模組」，以殼層 (shell) 包起，在此殼層負責處理模式輸入與輸出相關之設定。

此外，「方程式一致性分析」亦隸屬於「核心平台」之模組，其用以決定分散式控制方程式之求解順序，在圖上則位於殼層之外，其代表方程式求解順序之決定可以離線 (off-line) 進行運算，亦即對於不同設定但方程式組相同之模式而言，可應用先前之分析結果。當完成一致性分析後，可將方程式組之計算順序記錄於「方程式計算順序設定與儲存容器」中。

另外，在「應用模組」方面，模式開發者則依據問題之「概念模式描述」至「電腦程式開發」之流程，建構不同應用問題之次模組，本研究以「地下水流」、「熱流傳輸」與「溶質傳輸」三個子問題建立應用模組，其中實作包含三個子問題之「分散型控制方程式實作」與「變數與參數設定」兩者，細部描述將於第 3 章進一步描述。



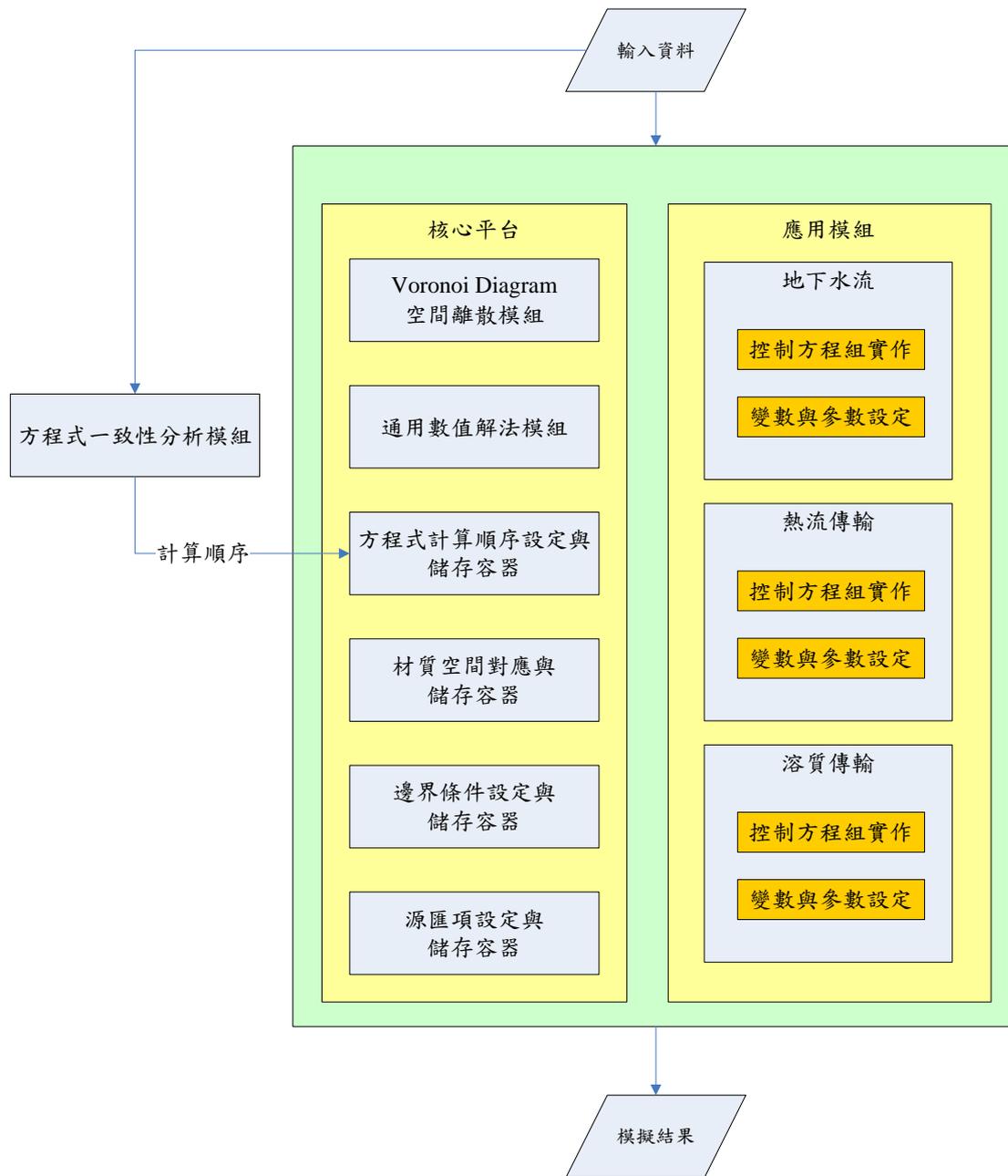


圖 2-2: 「可適性計算架構」系統架構與運算流程圖

## 2.2.2 「可適性計算架構」之數學模式階段

為提高描述問題變化機制之刪減與新增彈性，「可適性計算架構」採用分散式之控制方程組來取代傳統常用之整合型之控制方程式。然傳統重組與整合之動作雖耗費開發者之心力，但同時亦檢驗了問題定義之完整性，因此本研究在此以「方程式一致性分析 (Equation Consistency Analysis)」，檢驗分散式之控制方程式是否足夠完整描述模式之運動機制，亦或是有重複描述之疑慮。此外，方程式一致性分析除可以檢驗方程式的完整性外，亦可依據變數之間的相依特性決定方程組之求解順序。假設式 (2-14) 至 (2-18) 為某問題之控制方程組。

$$\frac{DB}{Dt} = f_a(V_1, V_2, V_3) = 0 \quad (2-14)$$

$$V_1 = f_b(V_5) \quad (2-15)$$

$$V_2 = f_c(V_4) \quad (2-16)$$

$$V_3 = f_d(V_2) \quad (2-17)$$

$$V_4 = f_e(V_5) \quad (2-18)$$

其中式 (2-14) 為該問題之守恆方程式，可用其描述質量守恆、動量守恆或能量守恆等，假設待描述之物理量(前述之質量、動量或能量)為變數  $B$ ，為描述「守恆」特性，則以變數  $B$  之對時間  $t$  之全微分為零來表示 ( $DB/Dt = 0$ )。本例假設變數  $B$  可由另外的三個變數所組成 ( $V_1$ 、 $V_2$  與  $V_3$ )，因此式 (2-14) 即為變數  $V_1$ 、 $V_2$  與  $V_3$  之函式，亦可稱這三個變數即是式 (2-14) 之自變數 (Independent Variable)。

此外，假設這三個變數又可被其他變數進一步描述，如式 (2-15) 至 (2-18) 所述，其進一步描述該物理量的運動與變化。方程式中等號左方之變數屬於該式之應變數 (Dependent Variable)，其數值是以等號右方之自變數，透過函式計算而得。綜合式 (2-14) 至 (2-18)，其中共包含五條方程式與五個變數。

傳統上，必須將前述多條之分散型控制方程式，藉由數學推導技巧與些許假設，整合成方程式數目與變數數目較少，但型態較為複雜之偏微分方程式。如以本範例進行說明，在此則簡化為一條方程式與一個變數 ( $V_5$ )，如式 (2-19) 所示。如欲可解，則變數數量與方程式數量必須一致方為可解，在傳統的推導過程中，模式開發者即可檢驗是否完整定義、是否有重複定義等問題。

$$f_a\{f_b(V_5), f_c[f_e(V_5)], f_d\{f_c[f_e(V_5)]\}\} = 0 \quad (2-19)$$

目前由於數值模式之應用領域越來越廣泛，因此問題之變化機制亦越來越複雜，如欲藉由人力來檢驗並建立整合式控制方程式，則顯得越來越難以掌握。因此為了盡可能讓此一階段能以電腦自動分析檢驗，本研究以「方程式一致性分析」取代傳統之人力推導步

驟，以矩陣形式來呈現變數與方程式之關係，藉此檢驗變數與方程式是否充分定義，並決定求解之先後順序。表 2-1 為本範例之變數與方程式關係矩陣，各欄代表不同方程式，各列則代表不同變數，各方程式與各變數之關係可以列為三種：「-」、「I」與「D」，「-」代表於該方程式與該變數無關係；「I」代表自變數 (Independent Variable)，意即該變數為該方程式之自變數；「D」則代表應變數 (Dependent Variable)，意即該變數為該方程式之應變數，亦即會由該方程式計算出數值。

表 2-1: 變數與方程式關係矩陣

	(2-14)	(2-15)	(2-16)	(2-17)	(2-18)	Num(I)	Num(D)
$V_1$	I	D	-	-	-	1	1
$V_2$	I	-	D	I	-	2	1
$V_3$	I	-	-	D	-	1	1
$V_4$	-	-	I	-	D	1	1
$V_5$	-	I	-	-	I	2	0

表 2-2: 變數、方程式與求解步驟表(步驟一)

	(2-14)	(2-15)	(2-16)	(2-17)	(2-18)	
$V_1$	I	D	-	-	-	
$V_2$	I	-	D	I	-	
$V_3$	I	-	-	D	-	
$V_4$	-	-	I	-	D	
$V_5$	-	*	-	-	*	kn1
		fg1			fg1	

表 2-3: 變數、方程式與求解步驟表(步驟二)

	(2-14)	(2-15)	(2-16)	(2-17)	(2-18)	
$V_1$	*	*	-	-	-	kn2
$V_2$	I	-	D	I	-	
$V_3$	I	-	-	D	-	
$V_4$	-	-	*	-	*	kn2
$V_5$	-	*	-	-	*	kn1
		fg1	fg2		fg1	

表格中亦分別計算各變數位於各方程式中，屬於自變數的數目與應變數的數目，方程式中的應變數符號表示，在這方程式中會依據自變數的數值來決定該變數的數值，因此應變數的數量如果為 0，顯示控制方程組中並無任何一個方程式可以決定該變數數值，因此其需要藉由其他方式來決定，在此範例中變數  $V_5$  之應變數數量即為 0，其可為問題中的待解變數，亦或從其他問題類別決定其數值；如應變數數量為 1，顯示可找到一條方程式來決定該變數數值；如應變數數量大於 1，顯示有多條相同類型之方程式來決定該變數數值，有重複定義之虞，故應擇一進行運算即可。

表 2-4: 變數、方程式與求解步驟表(步驟三)

	(2-14)	(2-15)	(2-16)	(2-17)	(2-18)	
$V_1$	*	*	-	-	-	kn2
$V_2$	*	-	*	*	-	kn3
$V_3$	I	-	-	D	-	
$V_4$	-	-	*	-	*	kn2
$V_5$	-	*	-	-	*	kn1
		fg1	fg2	fg3	fg1	

表 2-5: 變數、方程式與求解步驟表(步驟四)

	(2-14)	(2-15)	(2-16)	(2-17)	(2-18)	
$V_1$	*	*	-	-	-	kn2
$V_2$	*	-	*	*	-	kn3
$V_3$	*	-	-	*	-	kn4
$V_4$	-	-	*	-	*	kn2
$V_5$	-	*	-	-	*	kn1
	fg4	fg1	fg2	fg3	fg1	

表 2-2 為一致性分析之第一步驟，藉由表 2-1 可知變數  $V_5$  必須藉由其他方式給定數值，因此可以由此開始計算起，將其標註為kn1(known 1)，代表第一組轉變為已知值的變數，故將該變數原為「I」或「D」之符號改為「\*」。觀察各方程式是否已無自變數「I」，在本步驟發現式 (2-15) 與 (2-18) 已不存在自變數符號「I」，故兩方程式標註為fg1(function group 1)，表示為第一組計算之方程式。完成兩方程式計算後，兩方程式所屬之應變數  $V_1$  與  $V_4$  亦將變為已知值。

表 2-3 為一致性分析之第二步驟，將前一步驟決定之已知值標註為kn2，代表第二組轉變為已知值的變數，故將該變數原為「I」或「D」之符號改為「\*」。觀察各方程式是否已無自變數「I」，在本步驟發現式 (2-16) 已不存在自變數符號「I」，故將之標註為fg2，表示為第二組計算之方程式。完成方程式計算後，所屬之應變數  $V_2$  將變為已知值。

表 2-4 為一致性分析之第三步驟，將前一步驟決定之已知值標註為kn3，代表第三組轉變為已知值的變數，故將該變數原為「I」或「D」之符號改為「\*」。觀察各方程式是否已無自變數「I」，在本步驟發現式 (2-17) 已不存在自變數符號「I」，故將之標註為fg3，表示為第三組計算之方程式。完成方程式計算後，所屬之應變數  $V_3$  將變為已知值。

表 2-5 為一致性分析之第四步驟，將前一步驟決定之已知值標註為kn4，代表第三組轉變為已知值的變數，故將該變數原為「I」或「D」之符號改為「\*」。觀察各方程式是否已無自變數「I」，在本步驟發現式 (2-14) 已不存在自變數符號「I」，故將之標註為fg4，表示為第四組計算之方程式。故綜合前述結果，方程式之求解順序亦可決定。

此外，如果將式 (2-20) 加入原本之控制方程組(式 (2-14) 至 (2-18) )中，將此視為範例二，表 2-6 即為範例二的關係矩陣，從應變數的統計數量上來看，變數  $V_4$  之數量變為 2，意即前述之重複定義，而兩個應變數符號「D」屬於式 (2-18) 與 (2-20)，顯示兩方程式之效用重複，需透過模式開發者選擇較適當之方程式進行運算。

$$V_4 = f_f(V_5) \quad (2-20)$$

表 2-6: 變數與方程式關係矩陣(範例二)

	(2-14)	(2-15)	(2-16)	(2-17)	(2-18)	(2-20)	Num(I)	Num(D)
$V_1$	I	D	-	-	-	-	1	1
$V_2$	I	-	D	I	-	-	2	1
$V_3$	I	-	-	D	-	-	1	1
$V_4$	-	-	I	-	D	D	1	2
$V_5$	-	I	-	-	I	I	3	0

綜合上述，方程式一致性分析藉由檢驗各變數之自變數屬性與應變數屬性，藉由兩者之數量檢驗方程式組是否完整描述，足以求解。此外，藉由屬性差異與相依關係，進一步定義求解順序。

### 2.2.3 「可適性計算架構」之數值離散階段

在數值離散階段，「可適性計算架構」可以進一步細分為「Voronoi Diagram 空間離散模組 (2.2.3.1 小節)」與「方程式離散方法 (2.2.3.2 小節)」二個部分。

#### 2.2.3.1 Voronoi Diagram 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。本研究雖以細胞自動機作為基本概念，但在空間切割上並不採細胞自動機之規則網格限制，在此採用 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 Voronoi Diagram 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。Voronoi Diagram 的最大特性，在於相鄰計算節點之連線必與對應之穿越邊界呈正交，後續計算邊界穿越量時較為簡單。

圖 2-3 為 Voronoi Diagram、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 Voronoi Diagram 為對偶圖形。圖上之  $N_i$ 、 $N_A$  與  $N_B$  三角形即為 Delaunay Triangle，該三角形各邊中垂線交點 ( $V_2$ )

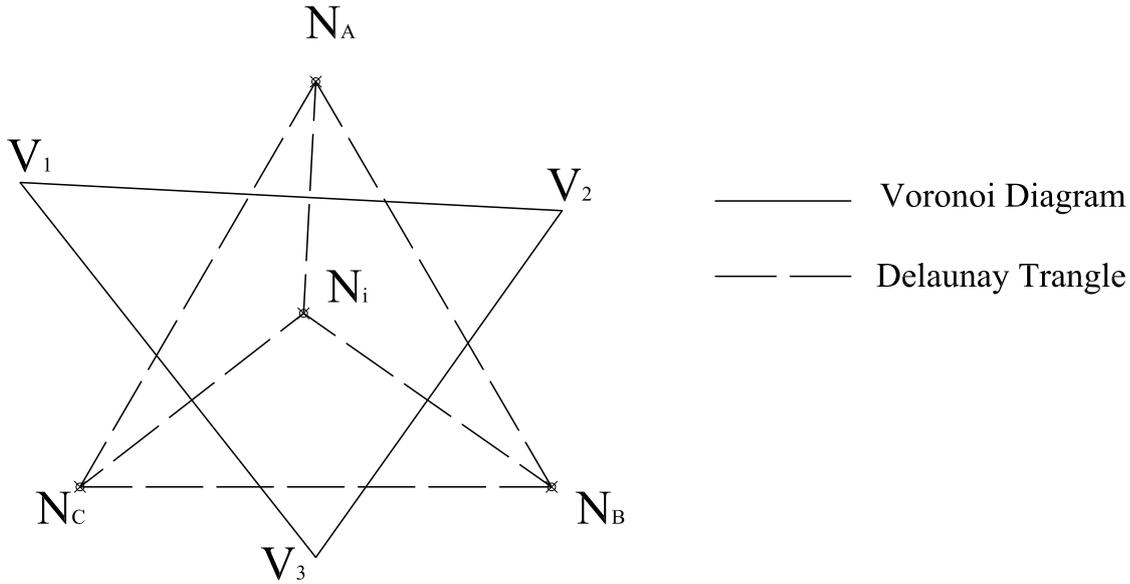


圖 2-3: Voronoi Diagram 與 Delaunay Triangle 示意圖

為三角形之外心，將不同三角形之外心所連區塊即為 Voronoi Diagram。圖上之  $V_1$ 、 $V_2$  與  $V_3$  區塊即為 Voronoi Diagram。

「可適性計算架構」將 Voronoi Diagram 演算法內建於架構中，模式開發者應用「可適性計算架構」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，「可適性計算架構」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。

表 2-7: 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 $BN_6$

圖 2-4 是在模擬區域上規則地等間距配置九個計算節點，透過 Voronoi Diagram 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，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，舉例說明： $L_0$  代表其中一個長虛線，串連計算節點  $N_0$  與  $N_1$ ，亦可代表該內部控制表面與長虛線之交點。由於長

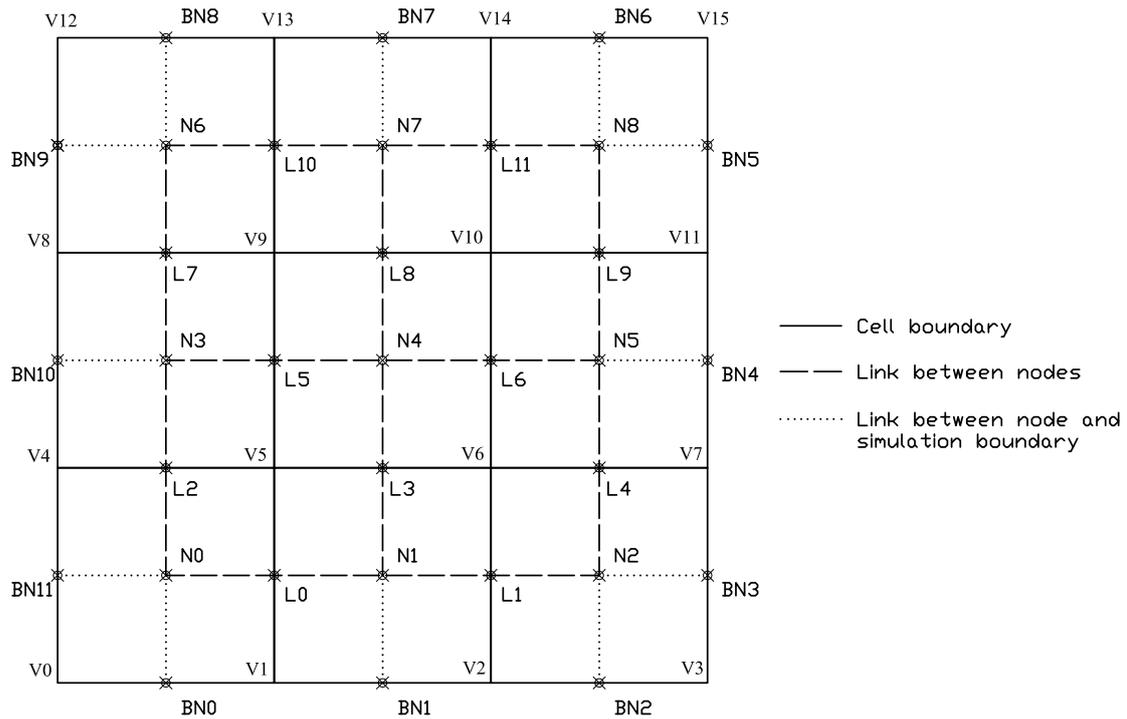


圖 2-4: Voronoi Diagram 網格架構圖

虛線串連節點  $N_0$  與  $N_1$ ，因此又可以標註為  $L_{0,1}$ 。圖上  $L_0$ 、 $L_1$  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，由計算節點出發，繪製一條短虛線垂直於外圍控制表面，短虛線稱為邊界虛擬點，圖上共有  $BN_0$ 、 $BN_1$  至  $BN_{11}$ ，合計共有12個邊界虛擬點。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  $L_2$ ，另外兩個則為外圍控制表面，分別為  $BN_0$  與  $BN_{11}$ 。由於邊界虛擬點為位於邊界上，因此邊界條件是設定於邊界虛擬點上。圖中符號  $V_0$  至  $V_{15}$  為控制體積之角點，為控制體積轉折之處。

### 2.2.3.2 方程式離散方法

在方程式的離散上，可以依據方程式中所包含的運算子進行分類，分類包含微分運算子、一般積分運算子與守恆方程式之離散三種類型。

圖 2-3 為應用 Voronoi Diagram 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。

- 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 (2-21) 是針對  $i\vec{B}$  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 ( $|\vec{iB}|$ )。

$$\frac{\partial f}{\partial \vec{iB}} \approx \frac{f_B - f_i}{|\vec{iB}|} \quad (2-21)$$

- 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  $\alpha$  之定積分，其中數值  $f_i$  為變數  $\alpha$  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  $C_i^{SPS}$  為梯形積分權重。

$$\int_b^a f_i(\alpha) d\alpha \approx \left[ \sum_{j=0}^N C_j^{SPS} f_i(b + j\Delta\alpha) \right] \times \Delta\alpha \quad (2-22)$$

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

- 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 (2-23) 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 (2-23) 等號左方第一項)、控制表面項(式 (2-23) 等號左方第二項)與源匯流項(式 (2-23) 等號左方第三項)。

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \left( \frac{D}{D\tau} \left( \int_{CV_i} f dV_{CV} \right) \right) d\tau = 0 \quad (2-23) \\ \Rightarrow & \int_t^{t+\Delta t} \left( \int_{CV_i} \frac{\partial f}{\partial \tau} dV_{CV} \right) d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \left( \oint_{CS_i} (\vec{V} \cdot \hat{n}) f dA_{CS} \right) d\tau \\ & - \int_t^{t+\Delta t} q d\tau = 0 \end{aligned}$$

控制體積項(式 (2-23) 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，因此可套用微積分公式(如式 (2-24) 所示)，綜合兩者即可針對控制體積項進行離散(如式 (2-25) 所示)。

$$\int_b^a \frac{\partial x}{\partial y} dy = x(a) - x(b) \quad (2-24)$$

$$\int_{CV_i} \left( \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial f}{\partial \tau} d\tau \right) d\mathbf{V}_{CV} \simeq (f_i^{t+\Delta t} - f_i^t) \mathbf{V}_{CV_i} \quad (2-25)$$

控制表面項(式 (2-23) 等號左方第二項)在空間上須針對控制表面進行環積分。本研究以多邊形來做為二維控制體積之形狀，因此可由多個直線組成環狀之控制表面。此外，本研究假設穿越各直線上的數值(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 (2-26) 所示，其中  $\alpha_i$  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  $\alpha_i = (i\bar{A}, i\bar{B}, i\bar{C})$ 。

$$\begin{aligned} \oint_{CS_i} (\vec{V} \cdot \hat{n}) f d\mathbf{A}_{CS} &\simeq \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} [(\vec{V}_j \cdot \hat{n}_j) f_j \mathbf{A}_{CS,j}] = \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j) \\ &= (\vec{V}_{i\bar{A}} \cdot \hat{n}_{i\bar{A}}) f_{i\bar{A}} \mathbf{A}_{CS,i\bar{A}} + (\vec{V}_{i\bar{B}} \cdot \hat{n}_{i\bar{B}}) f_{i\bar{B}} \mathbf{A}_{CS,i\bar{B}} + (\vec{V}_{i\bar{C}} \cdot \hat{n}_{i\bar{C}}) f_{i\bar{C}} \mathbf{A}_{CS,i\bar{C}} \\ &= g_{i\bar{A}} + g_{i\bar{B}} + g_{i\bar{C}} \end{aligned} \quad (2-26)$$

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公式(式 (2-24))。在此以加權形式之梯形積分進行計算，其形式如式 (2-27) 所示，其中  $\omega$  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。

$$\int_t^{t+\Delta t} \left[ \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j) \right] d\tau = \left[ \omega \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j^{t+\Delta t}) + (1 - \omega) \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} (g_j^t) \right] \times \Delta t \quad (2-27)$$

在源匯項之時間積分項，亦可採用式 (2-27) 透過  $\omega$  之梯形積分離散方法，因此結合式 (2-25) 與(2-27)，並考量源匯項之時間離散，雷諾傳輸定律之離散可以改寫如式 (2-28) 所示。

$$(f_i^{t+\Delta t} - f_i^t) \mathbf{V}_{CV} + [\omega \Gamma_i^{t+\Delta t} + (1 - \omega) \Gamma_i^t] \times \Delta t = 0 \quad (2-28)$$

$$\begin{aligned}\Gamma_i^t &= -q_i^t + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} g_j^t \\ &= -q_i^t + (g_{iA}^t + g_{iB}^t + g_{iC}^t)\end{aligned}$$



## 2.2.4 「可適性計算架構」之電腦程式階段

在電腦程式階段，是將前述建立之離散控制方程組以電腦語言撰寫實作，在本節中將說明「可適性計算架構」在計算節點之各種物理量變數與土壤材質之分布上，其儲存資料結構形式，以物件導向之概念封裝，並提供取得與儲存之函式介面，模式開發者在實作上首先利用輸出之函式介面取得變數或參數數值，其次依據實作之離散控制方程組計算後，最後再利用輸入之函式介面儲存變數數值，以下將進一步說明。

### 2.2.4.1 通用數值解法

前述研究目的在於使描述變化機制之方程式可自由的新增與刪除，為達到此一目的，對於不同之變化機制問題而言，在數值求解方面則以無需調整為目標，故此以內迭代流程、資訊同步流程、外迭代流程、Particle Tracking 流程與時間控制流程進行求解，以下將進一步說明：

#### 2.2.4.1.1 內迭代流程

相較於傳統數值方法，本研究不採用整合式之控制方程式，而改採用分散式之控制方程式。本研究可直接以分散之各條方程式進行計算，在此沿襲細胞自動機之觀念，假設各運算節點數值僅與周遭相鄰節點有關，因此計算上可獨立運算。每次內迭代運算，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，應用最陡坡降法等之最佳化方法，求解符合守恆定律之  $x_i$  數值。

在 2.2.2 小小節中以「方程式一致性分析」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之方程式，前述式 (2-28) 為守恆方程式之離散型態，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 (2-28) 其等號右方則不為 0，意即不守恆之意思，該數值則以誤差值 ( $\epsilon_i$ ) 代表之。因此本研究以最佳化方法搜尋正確之數值 ( $x_i^*$ )，式 (2-29) 為目標函數，是以誤差值之平方最小為目標。其中，變數  $f_i^t$  代表控制體積內於某物理量之外顯性質，而  $\Gamma_i^t$  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。

$$\min_{x_i} Z_i = \epsilon_i^2 = \left\{ (f_i^{t+\Delta t} - f_i^t) \mathbf{V}_{CV} + [\omega \Gamma_i^{t+\Delta t} + (1 - \omega) \Gamma_i^t] \times \Delta t \right\}^2 \quad (2-29)$$

圖 2-5 為內迭代執行流程圖，圖中之變數 ( $x_i^{(n)}$ ) 代表各問題於節點  $i$  上第  $n$  次迭代之計算變數數值，其以最陡坡降法進行修正 (如式 (2-30) 所示)。首先， $x_i^{(0)}$  為變數初始解，以初始解作為第一次內迭代計算。其次代入方程式集合中，透過各自之守恆方程式，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 (2-30))，反覆執行此一動作，直至完全滿足內迭代收

斂標準為止，所得之變數  $(x_i^{(n)})$  即為正確之數值  $(x_i^*)$ 。

$$x_i^{(n+1)} = x_i^{(n)} - \frac{Z_i'}{Z_i} \quad (2-30)$$

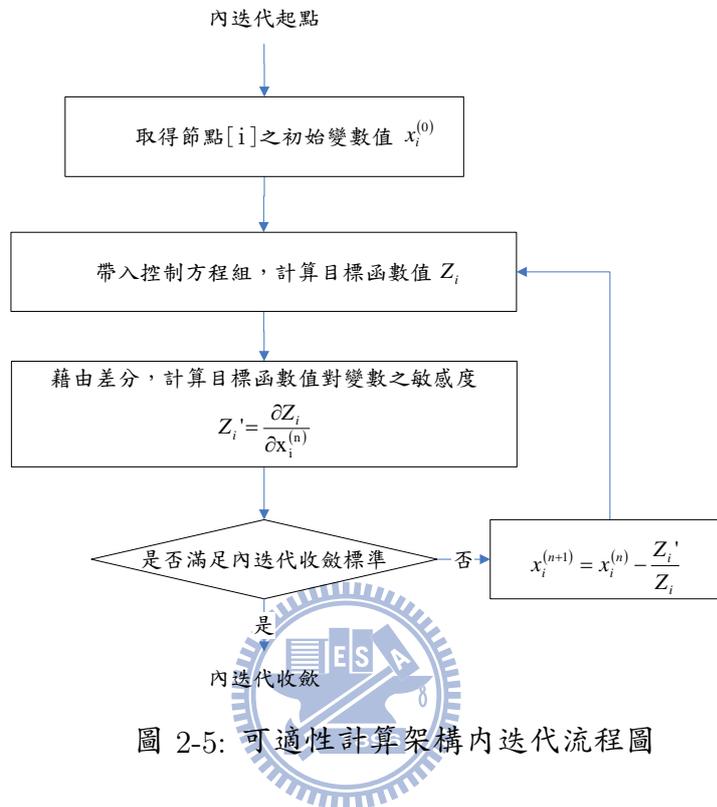


圖 2-5: 可適性計算架構內迭代流程圖

在內迭代之收斂條件方面，收斂條件共有三種，滿足其一即停止內迭代演算。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制量，本研究在此先設定為 30 次，亦即內迭代次數若大於 30 則視為收斂。在實際運算上，若控制方程式為線性問題，內迭代流程可於一次迭代即找得最佳解；若控制方程式為非線性問題，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。

#### 2.2.4.1.2 資訊同步流程

如整體模擬問題包含數個子問題，不同子問題間之變數互相溝通，資訊同步流程則是用來交換不同子問題之數值，圖 2-6 為資訊同步流程之示意圖，其中包含三個不同之子問題，分別為子問題 A、子問題 B 與子問題 C，在子問題 A 中， $V_A^{a1}$ 、 $V_A^{a2}$  與  $V_A^{a3}$  為子問題 A 之變數，其數值在計算過程中會決定，同樣在子問題 B 與子問題 C 亦可能使用到前述之變數，為避免重複運算，因此藉由資訊同步流程來將數值同步複製到子問題 B

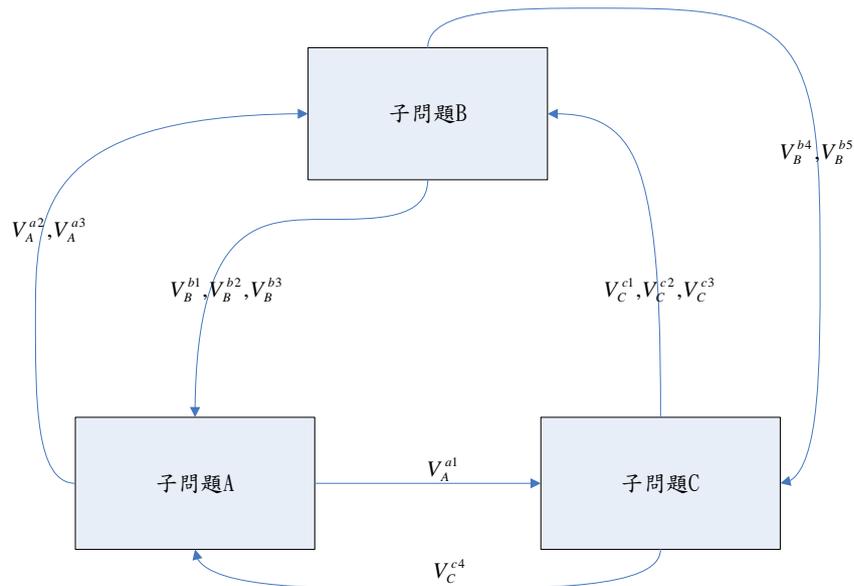


圖 2-6: 可適性計算架構資訊同步示意圖

與 C；相同地，子問題 A 中需要  $V_B^{b1}$ 、 $V_B^{b2}$ 、 $V_B^{b3}$  與  $V_C^{c4}$  四個變數，在此亦可藉由資訊同步流程來同步複製變數數值。

#### 2.2.4.1.3 外迭代流程



傳統數值方法是以整理後之離散方程式為基礎，將所有網格與各自對應的相鄰節點的關係組合製作成矩陣方程式，再以高斯消去法等矩陣解法求得符合邊界條件與控制機制之答案。本「可適性計算架構」並不進行離散方程式之整理與推導，因此亦不建立對應的矩陣方程式，在求解上則採用迭代方式進行求解，隨著迭代過程逐步將答案收斂至真解。

由於前述內迭代步驟假設相鄰節點之數值為正確，在外迭代流程之初期，此一假設與實際上並不符合，因此本研究應用外迭代流程反覆計算各計算節點之數值，其流程如圖 2-7 所示，反覆執行各節點之內迭代流程，每次外迭代流程均可將整體數值往真解逼近，各節點數值於兩次外迭代間之改變量將漸漸趨緩，即表示已經趨近真解。因此若其改變量小於訂定之外迭代收斂標準，則認定外迭代流程已經收斂。

對於多應用模組之耦合問題而言，在進行外迭代流程時，每個節點均需針對不同應用模組進行內迭代計算，並藉由資訊同步流程建立不同應用模組之耦合關係。在多應用模組之耦合問題中，外迭代流程之收斂則分別檢驗不同應用模組之數值改變量，當所有模組之改變量均符合外迭代收斂標準，方可稱為收斂。

#### 2.2.4.1.4 Particle Tracking 流程

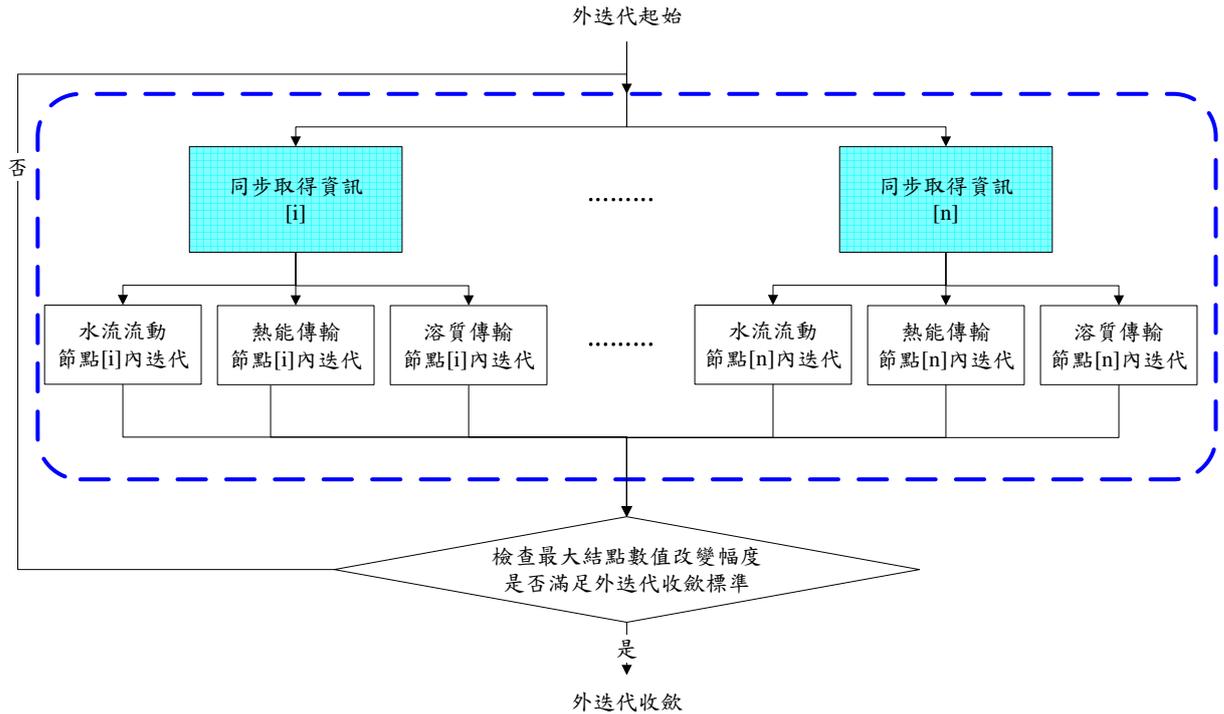


圖 2-7: 可適性計算架構外迭代流程圖

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，在此部分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。在內迭代與外迭代流程時，僅計算擴散項而將對流項忽略不計，等達到收斂後再以 Particle Tracking 流程計算對流項之影響。式 (2-31) 用以計算對流項影響後的系統變化，其中  $v_i$  則為對應之基本變數， $S_i$  代表計算控制體積  $i$  內藏之物理量總量，為基本變數  $v_i$  之函數， $S_i^{PT}$  則是受到對流項影響後之內藏物理量總量，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基本變數數值，其應以控制表面兩端的數值之平均，仍為基本變數  $v_i$  之函數， $\vec{V}_j$  則代表載體之流動速度，其不為基本變數  $v_i$  之函數，應由外界給定。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。

$$S_i^{PT} = S_i(v_i) + \sum_{j=1}^N \dot{S}_{adv,j}(\bar{v}_j, \vec{V}_j) \quad (2-31)$$

$$S_i = f(v_i)$$

$$\dot{S}_{adv,j} = g(\bar{v}_j, \vec{V}_j)$$

式 (2-31) 僅可計算受對流項影響後之內藏物理量總量，仍須透過式 (2-32) 或 (2-33) 將之轉換為問題之基本變數。式 (2-32) 是直接以逆運算子將內藏物理量總量轉換為基本變數，因此在實作上不同問題除了需要實作運算子  $f$  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 (2-33) 則是以最佳化演算法求得最接近之基本變數，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。

$$v_i^{PT} = f^{-1}(S_i^{PT}) \quad (2-32)$$

$$\min_{v_i^*} Z = (S_i^{PT} - S_i^*)^2 \quad (2-33)$$

s.t.

$$S_i^* = f(v_i^*)$$

#### 2.2.4.1.5 時間控制流程

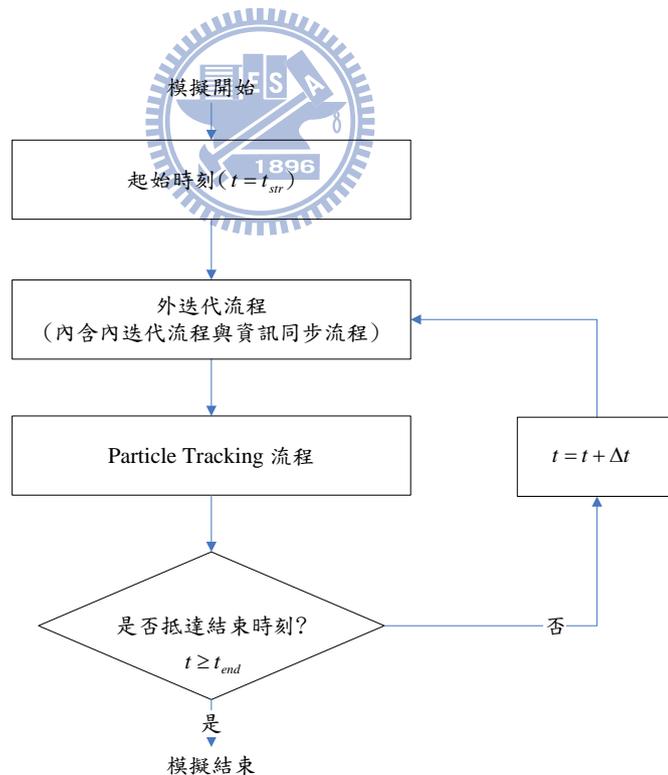


圖 2-8: 可適性計算架構時間控制流程圖

可適性計算架構之時間控制流程如圖 2-8 所示，起始時間設定為  $t = t_{str}$ ，當完成外迭代流程與 Particle Tracking 流程，即表示完成一個時刻之計算，即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。

#### 2.2.4.2 材質參數與分布

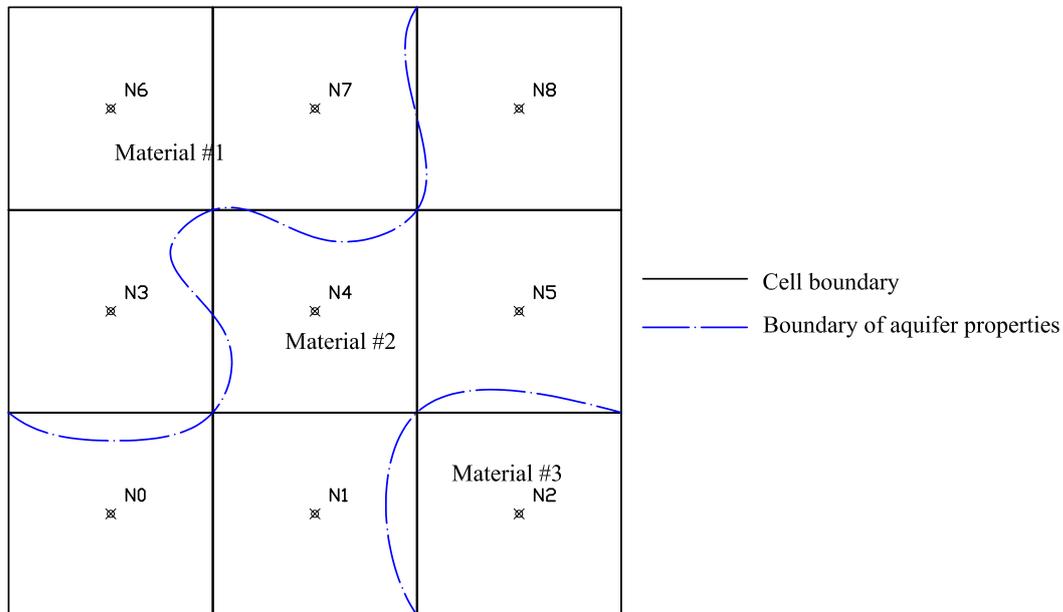


圖 2-9: 材質與網格分布示意圖

在許多問題裡面，水流、熱流或溶質傳輸會受到多孔介質之水文地質參數影響，圖 2-9 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 2-9 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。

#### 2.2.4.3 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，為完整描述整個計算問題之控制方程式之相關物理量，其中「變數」為控制方程式中可能會隨著計算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 2.2.3.1 小節所述之材質區塊，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。

##### 2.2.4.3.1 變數資料結構

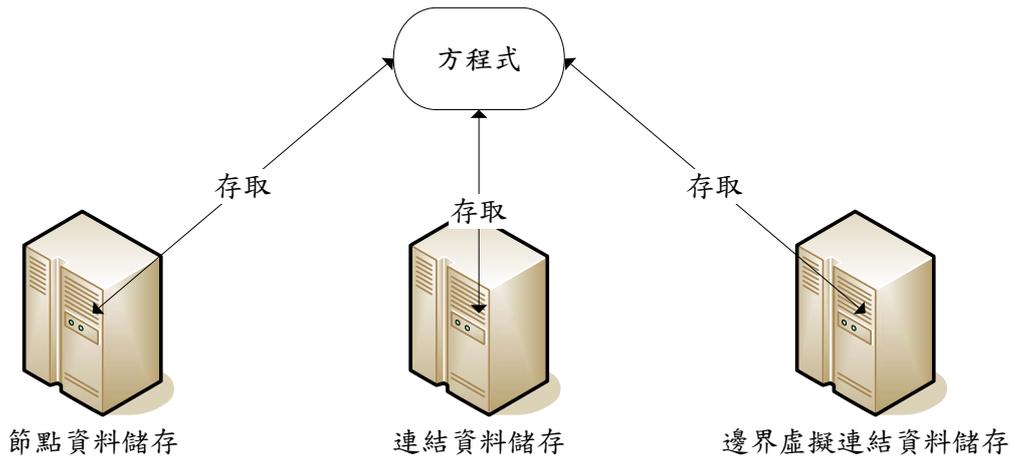


圖 2-10: 資料儲存結構圖

在 2.2.3.1 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、連結與邊界虛擬點三種，因此變數之儲存結構亦分為「節點」、「連結」與「邊界虛擬點」三種，如圖 2-10 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 2.2.3.1 小節可知，經過 Voronoi Diagram 運算分析後，整體格網之節點數目、連結數目、邊界虛擬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。

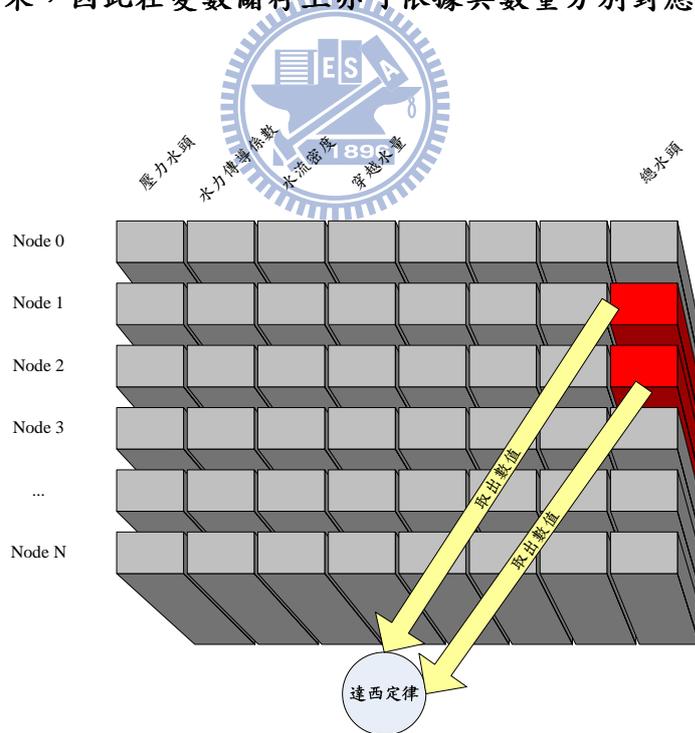


圖 2-11: 節點變數資料結構與函數運作關係圖

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流之控制方程式，因此資料結構上將建立一個二維矩

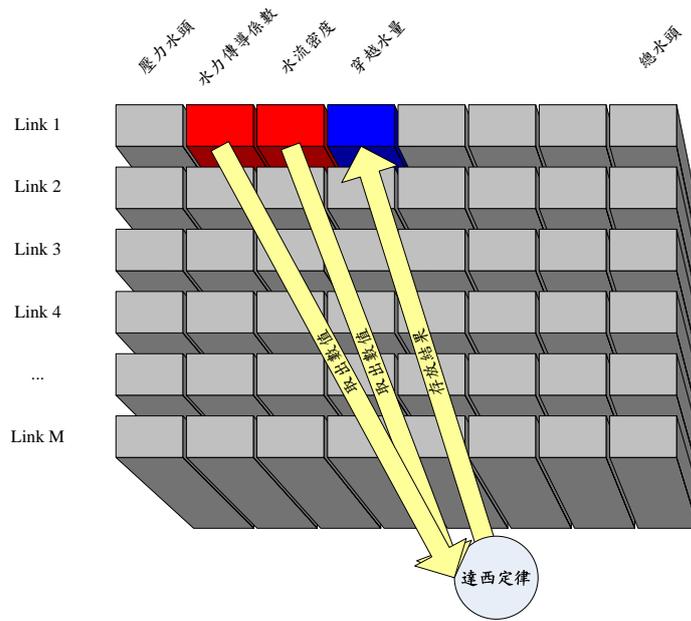


圖 2-12: 連結變數資料結構與函數運作關係圖

陣，如圖 2-11 與圖 2-12 所示。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；如在連結資料儲存中，該二維矩陣之大小為  $M \times O$ ， $M$  則代表連結個數。

式 (2-34) 為離散後之達西定律，屬於地下水流問題中重要的方程式，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 2-11 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 2-12 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 ( $\dot{m}_{1,2}$ )，亦透過相同之方式存放於連結資料中。

$$\dot{m}_{ij} = -\rho_{ij} K_{ij} \frac{h_i - h_j}{|ij|} \quad (2-34)$$

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 (2-35) 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  $h_i^{t+\Delta t}$ )。

$$s \frac{h_i^{t+\Delta t} - h_i^t}{\Delta t} = K \left[ \omega \frac{h_{i+1}^t + h_{i-1}^t - 2h_i^t}{\Delta x^2} + (1 - \omega) \frac{h_{i+1}^{t+\Delta t} + h_{i-1}^{t+\Delta t} - 2h_i^{t+\Delta t}}{\Delta x^2} \right] \quad (2-35)$$

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「邊界虛擬點」三種位置型別，分別與實際格網相互對應，各節點、連結或邊界虛擬點均包含  $O$  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  $N \times O \times 2$ 。

### 2.2.4.3.2 變數空間推估

控制表面上之空間參數推估：前述 2.2.3.1 小節說明了「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 2.2.4.3 小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 2-13 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：

1. 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。

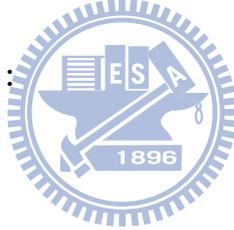
$$x_{L0} = \frac{x_{N0} + x_{N1}}{2} \quad (2-36)$$

2. 幾何平均 (Geometry mean)：

$$x_{L0} = \sqrt{x_{N0} \cdot x_{N1}} \quad (2-37)$$

3. 調和平均 (Harmonic mean)：

$$\frac{1}{x_{L0}} = \frac{1/x_{N0} + 1/x_{N1}}{2} \quad (2-38)$$



4. 上風法 (Upwind method)：某些特定物理量，其受到載體移動而隨之移動，此類物理量之空間推估則適合採用上風法，其透過載體的移動速度向量 ( $\vec{V}$ )，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。

$$x_{L0} = \begin{cases} x_{N0} & \text{for } \vec{V} \cdot \hat{i} > 0 \\ x_{N1} & \text{for } \vec{V} \cdot \hat{i} < 0 \end{cases} \quad (2-39)$$

#### ● 局部參數資料結構

表 2-8: 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	$N_5$ 、 $N_5$ 、 $N_6$
1	$N_1$ 、 $N_2$ 、 $N_3$ 、 $N_7$
2	$N_4$ 、 $N_8$ 、 $N_9$ 、 $N_{10}$

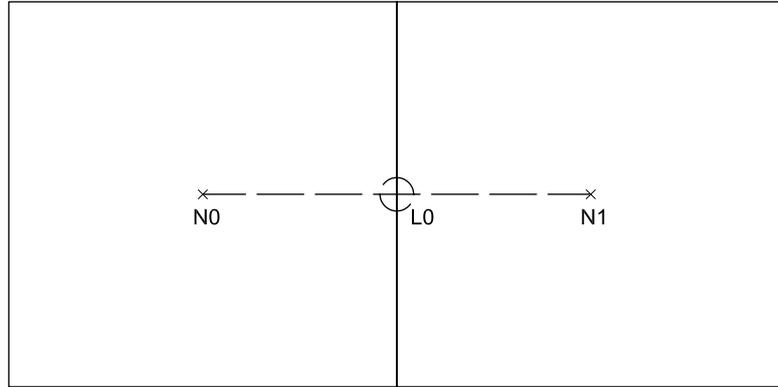


圖 2-13: 空間變數或參數推估示意圖

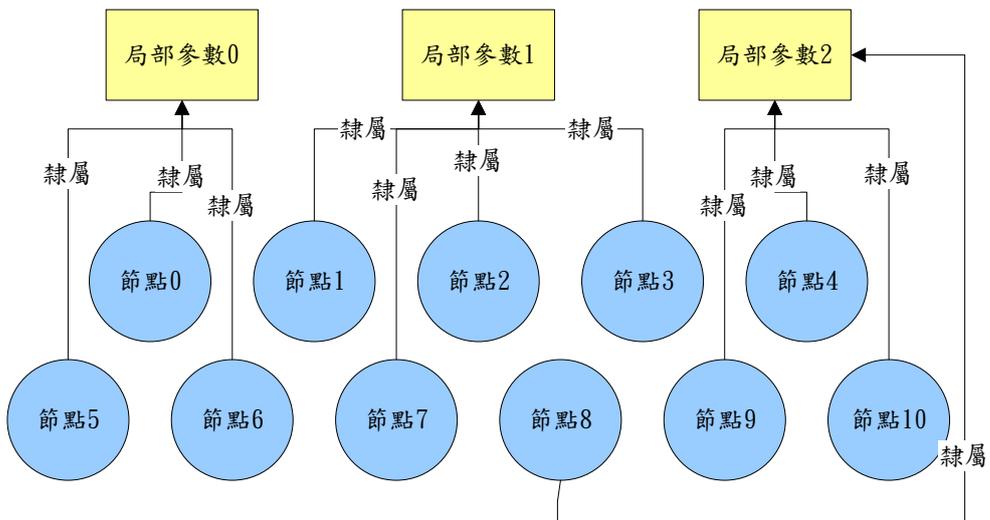


圖 2-14: 局部參數與節點隸屬關係示意圖

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 2-14 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 2-8 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。

#### 2.2.4.3.3 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。



#### 2.2.4.4 邊界條件

圖 2-15 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  $\overline{GA}$ ，可在線段上分別設定各自之邊界條件，分別為 BC #1、#2、#3、#4、#5、#6 與 #7。

2.2.3.1 小節指出可適性計算架構之網格結構，從節點往模擬邊界之垂直投影稱為「邊界虛擬點」，與前述邊界條件之涵蓋範圍以空間幾何進行分析，可以得知各邊界虛擬點對應之邊界條件。以邊界虛擬點  $BN_0$  為例，在空間幾何上位於線段  $\overline{AB}$  上，因此其對應之邊界條件為 BC #1。

#### 2.2.4.5 源匯項

圖 2-16 為源匯點與網格配置示意圖，虛線為模擬區域之邊界，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，藉由空間幾何分析源匯點與控制體積，可知三個源匯點分別位於計算節點  $N_0$ 、 $N_4$  與  $N_6$  之控制體積內部。

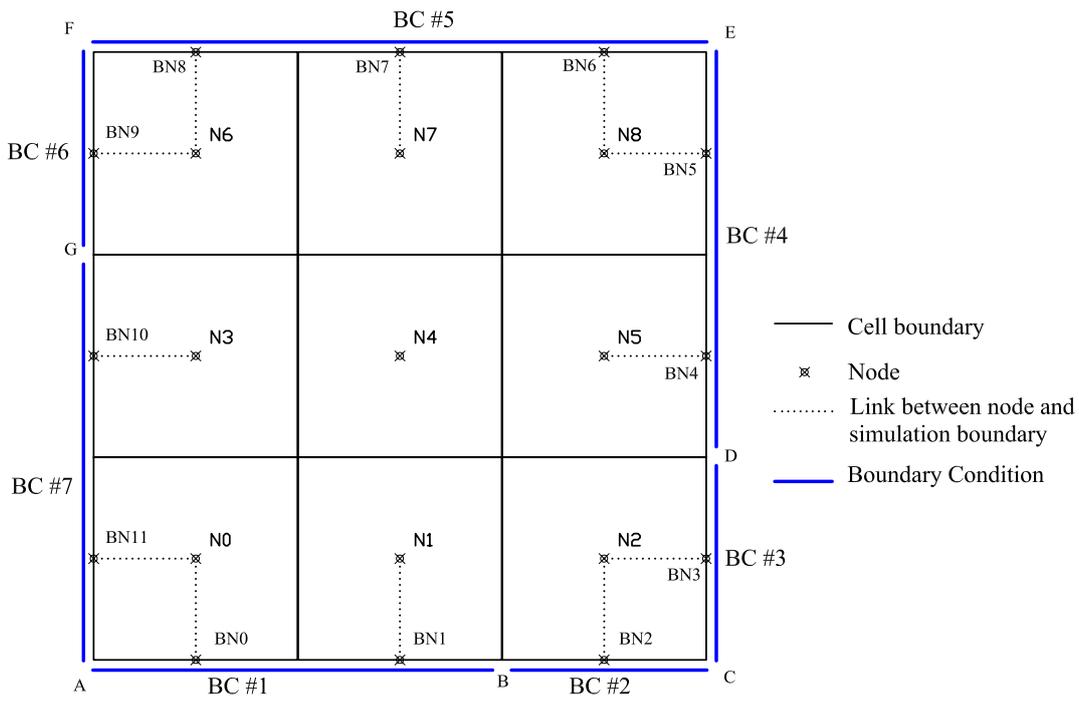


圖 2-15: 邊界條件與網格配置示意圖

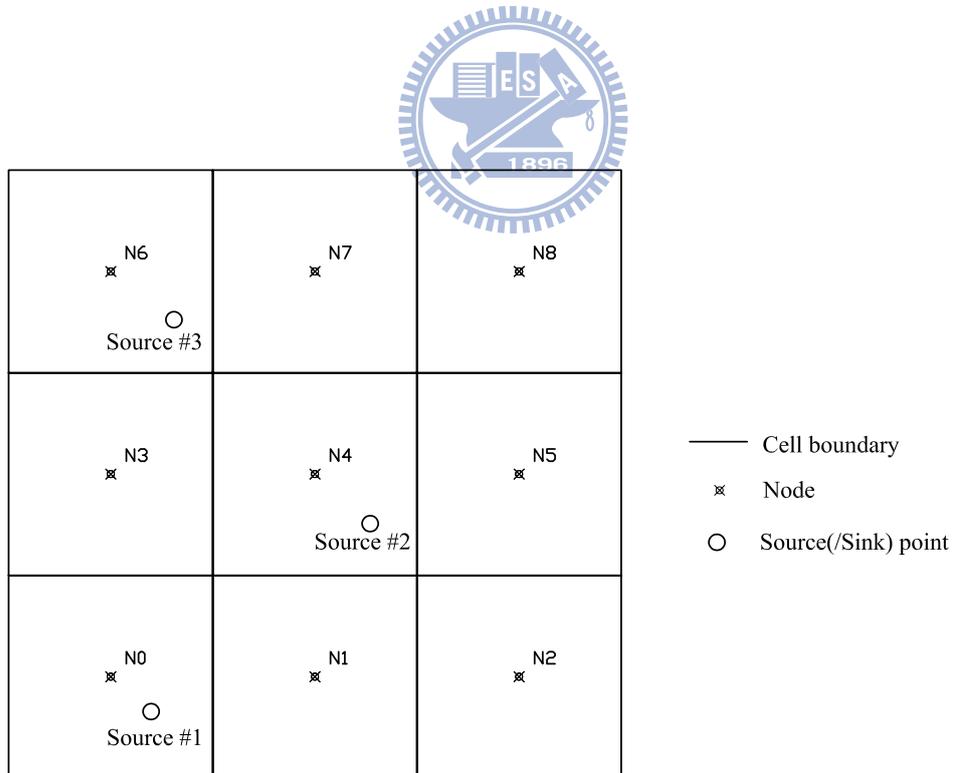


圖 2-16: 源匯點與網格配置示意圖

## 2.3 可適性計算架構核心平台開發

本研究以 Linux Fedora 11 (kernel = 2.6.30) 作為「可適性計算架構」開發環境之作業系統，程式語言為 C++，編譯器為 gcc-c++-4.4.1-2，系統硬體有 Intel Q9450 2.66G MHz 之 4 核心之中央處理器 (CPU) 與金士頓 DDR-1066 2.0GB × 2 之記憶體 (RAM)。

由於選用之程式語言為 C++，相較於傳統水利或土木工程領域常見之 Fortran 而言，本架構可利用 C++ 之物件導向特性 (Objected-Orientive) 與樣板 (template) 之語言特性。

在軟體開發部分，本架構除了自行開發部分，另外使用 STL、Boost 與 CGAL 三個函式庫，STL 與 Boost 為 C++ 之標準函式庫，而 CGAL 則是著名的圖形與空間相關之函式庫，在此用以計算 Voronoi Diagram 之形狀、尺寸與相鄰關係。由於所使用之外部函式庫均為開放且跨平台之函式庫，因此未來如有更大計算量之需求，可由目前之個人電腦移植至大型電腦或電腦叢集上。本研究在開發設計上，保留未來跨平台之彈性。



## 第三章 「可適性計算架構」應用模組開發

本研究在此以「可適性計算架構」建構應用模組，分別為「地下水流」、「地下水流與熱流」及「地下水流、熱流與溶質傳輸」三個漸進式問題，以下將以實際開發過程顯示傳統開發過程與應用「可適性計算架構」輔助開發之差異，開發過程包括「數學模式階段」、「數值離散階段」與「電腦程式階段」，「方程式一致性分析」為「可適性計算架構」之專有階段。

### 3.1 數學模式階段

以下各小節將會分別針對「地下水流」、「熱流傳輸」與「溶質傳輸」三個子問題進行數學模式之建立，地下水流子問題之數學模式將詳述於 3.1.1 小節，熱流傳輸子問題之數學模式將詳述於 3.1.2 小節，溶質傳輸子問題之數學模式將詳述於 3.1.3 小節。

#### 3.1.1 地下水流子問題

##### 3.1.1.1 建立分散型控制方程組

$$\int_t^{t+\Delta t} \left( \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} n \rho_{wl} S_d d\mathbf{V}_{CV} \right) d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{M}_{wl} d\tau \quad (3-1)$$
$$- \int_t^{t+\Delta t} (q_{wl}(\tau)) d\tau = 0, \dot{M}_{wl} = \oint_{CS} \dot{m}_{wl} d\mathbf{A}_{CS}$$

$$P = \rho_{pw}^{\circ} gP \quad (3-2)$$

$$\begin{cases} \rho_{pw} = \left[ V^{\circ}(T) - \frac{V^{\circ}(T)P_{bar}}{B(T)+A_1(T)P_{bar}+A_2(T)P_{bar}^2} \right]^{-1} \\ P_{bar} = \mathfrak{S}_{unit} \{P, [ML^{-1}T^{-2}] = bar\} \end{cases} \quad (3-3)$$

$$\begin{cases} \rho_{wl} = \rho_{pw} + \alpha_{SE} C_l \\ \alpha_{SE} = -0.0829 \times \ln (\Im \{C_l, [ML^{-3}] = mg \ l^{-1}\}) + 1.1415 \end{cases} \quad (3-4)$$

$$\begin{cases} S_d = \frac{\theta_r}{\theta_s} + \theta_e \left(1 - \frac{\theta_r}{\theta_s}\right) \\ \theta_e = \begin{cases} \left\{ \left[1 + (\alpha_{van} p_{cm})^{\beta_{van}}\right]^{1-1/\beta_{van}} \right\}^{-1} & \text{for } p < 0 \\ 1 & \text{for } p \geq 0 \end{cases} \\ p_{cm} = \Im_{unit} \{p, [L] = cm\} \end{cases} \quad (3-5)$$

$$\begin{cases} K_{wl} = \frac{\mu_{pw}^{\circ} \rho_{wl}}{\mu_{wl} \rho_{pw}^{\circ}} K_{ws} K_{wr} (p) \\ K_{wr} = \theta_e^{0.5} \left[1 - \left(1 - \theta_e^{\beta_{van}/(\beta_{van}-1)}\right)^{1-1/\beta_{van}}\right]^2 \end{cases} \quad (3-6)$$

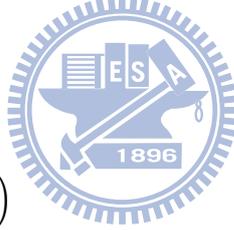
$$\begin{cases} \dot{m}_{wl} = \rho_{wl} \vec{V}_{darcy} \cdot \hat{s} \\ \vec{V}_{darcy} = -K_{wl} \frac{\partial h}{\partial s} \vec{s} \end{cases} \quad (3-7)$$

$$h = p + \zeta = p + \frac{\left(\int_{z_0}^z \rho_{wl} g \, dz\right)}{\rho_{pw}^{\circ} g} \quad (3-8)$$

$$n = \begin{cases} n^{\circ} \left[1 + \frac{\alpha'}{n^{\circ}} (p - p^{\circ})\right] & \text{for } p > 0 \\ n^{\circ} & \text{for } p \leq 0 \end{cases} \quad (3-9)$$

$$\mu_{pw} = \begin{cases} 1.787 \times 10^{-3} \cdot \exp((-0.03288 + 1.962 \times 10^{-4} T) T) & \text{for } 0^{\circ}C < T \leq 40^{\circ}C \\ 10^{-3} \cdot [1 + 0.015512 \cdot (T - 20)]^{-1.572} & \text{for } 40^{\circ}C < T \leq 100^{\circ}C \end{cases} \quad (3-10)$$

$$\mu_{wl} = \mu_{pw} \cdot (1 + \Delta\mu_r) \quad (3-11)$$



在地下水流的子問題中，控制方程式是以水質量守恆之雷諾傳輸定律與相關輔助方程式所組成。式 (3-1) 是基於雷諾傳輸定律所建立，可稱為連續方程式。其中下標  $wl$  代表隸屬於地下水問題， $n$  代表土壤孔隙率(無因次)， $\rho_{wl}$  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 ( $\tau$ ) 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 ( $\tau$ ) 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 (3-12) 所示。

$$\oint_{CS} \dot{m}_{wl} dA_{CS} - q_{wl} = 0 \quad (3-12)$$

式 (3-2) 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常溫常壓下之純水密度 ( $\rho_{pw}^{\circ}$ ) 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 (3-3) 與 (3-4) 為溶液密度之計算方程式，式 (3-3) 為壓力 ( $P$ ) 與溫度 ( $T$ ) 之函數，式中函式  $S_{unit}$  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  $1(bar) = 10^5(N/m^2)$ 。此外式(3-3) 中之  $V^{\circ}$ 、 $A_1$ 、 $A_2$  與  $B$  均為溫度之函數，為 Fine 與 Millero [20] 所提出之經驗公式。式 (3-4) 用以計算溶液密度 ( $\rho_{wl}$ ) 受到溶液濃度變化 ( $C_l$ ) 之影響[21]，其中  $\alpha_{SE}$  為溶質膨脹係數 (solute expansion coefficient)，顯示濃度之提昇會使得溶液密度隨之增加。此外， $\alpha_{SE}$  之數值可以經驗公式計算[21]，其為溶液濃度 ( $C_l$ ) 之函數。如所計算之模擬區域中不存在任何溶質，溶液溶質濃度 ( $C_l$ ) 即為 0，式中溶液密度 ( $\rho_l$ ) 即等於水流密度 ( $\rho_{pw}$ )。

式 (3-5) 與 (3-6) 又可稱為土壤特性曲線公式，分別用以計算土壤飽和度與水力傳導係數，在此採用 van Genuchten [22] 所建議的經驗公式， $\alpha_{van}$  與  $\beta_{van}$  是 van Genuchten 經驗式中所需要的土壤參數，該公式可以計算土壤張力與有效含水量 ( $\theta_e$ ) 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 [23] 應用 van Genuchten 經驗公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 ( $\theta_e$ ) 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 ( $\theta_e$ )、飽和含水量 ( $\theta_s$ ) 與殘餘含水量 ( $\theta_r$ ) 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 ( $\rho_{wl}$ ) 與黏滯係數 ( $\mu_{wl}$ ) 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 (3-7) 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  $\hat{s}$  可代表流線方向，是達西流速 ( $\vec{V}_{darcy}$ ) 乘上溶液密度 ( $\rho_l$ )，接著再與流線方向 ( $\hat{s}$ ) 計算內積。如假設  $\hat{s}$  代表由控制體積內部正向往外之單位向量，該內積之正值代表水流離開控制體積；反之，則水流代表進入控制體積。式 (3-8) 則是用以估算總水頭，總水頭 ( $h$ ) 是壓力水頭 ( $p$ ) 與位置水頭 ( $\zeta$ ) 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。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 (3-13) 所示，意即代表  $\zeta = z$ 。

$$h = p + z \quad (3-13)$$

式 (3-9) 用以估算土壤孔隙率變化之變化，其中  $\alpha'$  為土壤之壓密係數，其數值隨土壤種類不同而改變， $n^\circ$  為一大氣壓力下之土壤孔隙率。從公式看來，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，用以反應土體之壓縮性對儲水之影響。

式 (3-10) 用以計算水流黏滯係數 ( $\mu_{pw}$ )，其適用範圍為攝氏  $0^\circ C$  至  $100^\circ C$  之間，其中  $40^\circ C$  以下關係式參考 Molson 等人之研究[24]， $40^\circ C$  以上關係式則由 Holzbecher 所建議[25]。

式 (3-11) 用以計算溶液黏滯係數 ( $\mu_{wl}$ ) 受到溶液濃度 ( $C_l$ ) 之影響，利用 Jones-Dole 方程式 [21] 計算而得(如式 (3-14) 所示)。式中參數  $a$  與  $b$  為 Jones-Dole 參數，不同種類溶質有其對應之數值，可由實驗室檢定而得。另外變數  $C_{ml}$  為莫耳濃度 (molar Concentration)，其因次為  $[mol L^{-3}]$ 。將由參數  $a$  與  $b$  及莫耳濃度所構成之多項式，即為相對黏滯係數改變量  $\Delta\mu_r$ 。

$$\mu_{wl} = \mu_{pw} \cdot \left(1 + aC_{ml}^{1/2} + bC_{ml}\right) \quad (3-14)$$

$$\Delta\mu_r = aC_{ml}^{1/2} + bC_{ml}$$

綜合前述之多條方程式(如式 (3-1) 至 (3-11) 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)，上述之方程式集合可以稱為分散式控制方程式(Separated governing equation)。

傳統數值模式開發方式並無法直接使用上述之分散式控制方程式，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 (3-1) 等號左右方去除時間

上的積分，其可改寫為如式 (3-15) 所示。

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{CV} \rho_{wl} S_d dV_{PM} + \oint_{CS} \dot{m}_{wl} d\mathbf{A}_{CS} = q_{wl} \quad (3-15)$$

前述已經說明地下水流子問題之控制方程式，後續將進一步說明本子問題之邊界條件、源匯流項與初始條件之設定。

● 邊界條件：

1. Dirichlet 邊界條件(壓力水頭)

$$\dot{M}_{wl} = \dot{m}_{wl}(h) \times \mathbf{A}_b(x_b, z_b), \quad h = p + z, \quad p = p_{dp}(x_b, z_b, t) \quad \text{on } B_{dp}$$

2. Dirichlet 邊界條件(總水頭)

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

3. Neumann 邊界條件(單位面積水流穿越率)

$$\dot{M}_{wl} = \dot{m}_{wl} \times \mathbf{A}_b(x_b, z_b), \quad \dot{m}_{wl} = \dot{m}_{wl, nm}(x_b, z_b, t) \quad \text{on } B_{nm}$$

4. Neumann 邊界條件(水流穿越率)

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

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水頭 ( $p$ ) 與總水頭 ( $h$ ) 兩種，設定壓力水頭與設定總水頭在計算上之差異，必須藉由加上位置高程 ( $z$ ) 將壓力水頭轉換為總水頭，方可進一步由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 (3-1) 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. 設定壓力水頭( $p$ )

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

2. 設定總水頭( $h$ )

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

在初始條件方面，其初始條件之給定分為壓力水頭形式與總水頭形式兩種，其中  $R_p$  與  $R_h$  分別代表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  $p$ ，因此實際給定仍須扣除位置高程 ( $z$ )，將其數值轉換為壓力水頭 ( $p$ )。

### 3.1.1.2 方程式一致性分析

表 3-1: 地下水流變數與方程式關係矩陣

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

表 3-2: 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	Num(I)	Num(D)
0	$p$	壓力水頭	4	0
1	$h$	總水頭	1	1
2	$\zeta$	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	$\rho_{pw}$	水流密度	1	1
8	$\rho_{wl}$	溶液密度	4	1
9	$\mu_{pw}$	水流黏滯係數	1	1
10	$\mu_{wl}$	溶液黏滯係數	1	1
11	$\theta_e$	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

表 3-3: 地下水流函式求解順序表

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

表 3-1 為地下水流子問題之變數與方程式關係矩陣，其中符號「I」代表自變數、符號「D」則代表應變數及符號「-」代表沒有關係。表 3-2 則為本子問題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  $p$ 、 $C_l$ 、 $\Delta\mu_r$  與  $T$  之應變數數量為 0，因此三個變數必須藉由其他方式給定其數值。 $p$  為問題之狀態變數，因此透過數值解法即可求得。另外，變數  $C_l$ 、 $\Delta\mu_r$  與  $T$  則需另行處理，如與熱流傳輸及溶質傳輸進行耦合運算，即可從該子問題中取得；如屬於非耦合運算，則需視同參數直接給定。依據 2.2.2 小節所述之「方程式一致性分析」步驟，本子問題之計算順序如表 3-3 所示。



### 3.1.2 熱流傳輸子問題

#### 3.1.2.1 建立分散型控制方程組

$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} [n S_d \rho_{wl} \phi_l + (1 - n^\circ) \rho_s \phi_s] d\mathbf{V}_{CV} \right\} d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{H} d\tau \quad (3-16)$$

$$- \int_t^{t+\Delta t} q_H(\tau) d\tau = 0, \quad \dot{H} = \oint_{CS} (\dot{h}_{dif} + \dot{h}_{adv}) d\mathbf{A}_{CS}$$

$$\dot{h}_{dif} = -K_{H,eq} \frac{\partial T}{\partial s} \vec{s} \quad (3-17)$$

$$\dot{h}_{adv} = \dot{m}_{wl} \phi_l \quad (3-18)$$

$$K_{H,eq} = n K_{H,l} + (1 - n^\circ) K_{H,s} \quad (3-19)$$

$$T = \frac{\phi_l}{s_{H,l}} - 273.16 \quad (3-20)$$



$$\phi_s = s_{H,s} (T + 273.16) \quad (3-21)$$

在熱能傳輸的子問題中，控制方程式是基於熱能的能量守恆方程式。式 (3-16) 是基於雷諾傳輸定律所建立，為能量守恆方程式。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， $\phi_l$  代表水流部分的單位質量熱能量，而  $\phi_s$  代表土壤部分的單位質量熱能量，其分別為水流比熱與土壤比熱與溫度之乘積，溫度單位為攝氏。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 ( $n^\circ$ ) 乘上同等條件下之土壤密度 ( $\rho_s$ )，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 (3-17) 為擴散項的計算方程式，該式又稱為傅立葉公式 (Fourier's Law)。而  $\dot{h}_{adv}$  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所帶動之熱量，式 (3-18) 為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，故對流項之估算是穿越之水質量流率乘上水流之單位質量熱能量。

式 (3-19) 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 (3-20) 是溫度 ( $T$ ) 與水流之單位質量熱容量 ( $\phi_l$ ) 之轉換公式；式 (3-21) 則是溫度 ( $T$ ) 與土壤之單位質量熱容量 ( $\phi_s$ ) 之轉換公式。

前述已經說明熱能傳輸子問題之控制方程式，後續將進一步說明本子問題之邊界條件、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)

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

2. Dirichlet 邊界條件(溫度)

$$\dot{H} = \left[ \dot{h}_{dif}(\phi_l) + \dot{h}_{adv}(\phi_l) \right] \times \mathbf{A}_b, \phi_l = (T + 273.16) \times s_{H,l},$$

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

3. Neumann 邊界條件(單位面積熱流穿越率)

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

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 ( $\phi_l$  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 Dirichlet 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 ( $\phi_l$ ) 與溫度 ( $T$ ) 兩類，由於狀態變數為單位質量熱容量  $\phi_l$ ，如果給定之數值為溫度 ( $T$ )，可以藉由流體比熱 ( $s_{H,l}$ )，將溫度 ( $T$ ) 之數值轉換為 ( $\phi_l$ )，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

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

3. 設定溫度

$$q_H = \begin{cases} q_{wl}(T^{out} + 273.16) \times s_{H,l} & \text{contain a source point} \\ q_{wl}(T + 273.17) \times s_{H,l} & \text{contain a sink point} \\ 0 & \text{elsewise} \end{cases}$$

在式 (3-16) 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，抽水時其質量熱能量應採用模擬區域內模擬之水流單位質量熱能量 ( $\phi_l$ )；注入時其單位質量熱能量應為外部注入的單位質量熱能量 ( $\phi_l^{out}$ )。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( $\phi_l$ )

$$\phi_l = \phi_{l,i}(x, z) \text{ in } R_\phi$$

2. 設定溫度( $T$ )

$$\phi_l = [T(x, z) + 273.16] \times s_{H,l} \text{ in } R_T$$

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  $R_\phi$  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  $\phi_l$ ，如果給定之數值為溫度 ( $T$ )，可以藉由流體比熱 ( $s_{H,l}$ )，將溫度 ( $T$ ) 之數值轉換為 ( $\phi_l$ )。

### 3.1.2.2 方程式一致性分析

表 3-4: 熱流傳輸變數與方程式關係矩陣

		(3-16)	(3-17)	(3-18)	(3-19)	(3-20)	(3-21)
0	$\phi_l$	I	-	I	-	I	-
1	$\phi_s$	I	-	-	-	-	D
2	$T$	-	I	-	-	D	I
3	$n$	I	-	-	I	-	-
4	$S_d$	I	-	-	-	-	-
5	$\rho_{wl}$	I	-	-	-	-	-
6	$K_{H,eq}$	-	I	-	D	-	-
7	$\dot{m}_{wl}$	-	-	I	-	-	-
8	$\dot{h}_{adv}$	I	-	D	-	-	-
9	$\dot{h}_{dif}$	I	D	-	-	-	-
10	$\dot{H}$	D	-	-	-	-	-
11	$H$	D	-	-	-	-	-
12	$q_H$	D	-	-	-	-	-
13	$q_{wl}$	I	-	-	-	-	-

表 3-5: 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	Num(I)	Num(D)
0	$\phi_l$	單位質量水流熱容量	3	0
1	$\phi_s$	單位質量土壤熱容量	1	1
2	$T$	溫度( $^{\circ}C$ )	2	1
3	$n$	孔隙率	2	0
4	$S_d$	飽和度	1	0
5	$\rho_{wl}$	溶液密度	1	0
6	$K_{H,eq}$	等效熱傳導係數	1	1
7	$\dot{m}_{wl}$	單位面積穿越水質量流率	1	0
8	$\dot{h}_{adv}$	對流項單位面積穿越熱容量流率	1	1
9	$\dot{h}_{dif}$	擴散項單位面積穿越熱容量流率	1	1
10	$\dot{H}$	穿越熱容量流率	0	1
11	$H$	熱容量	0	1
12	$q_H$	抽熱容量	0	1
13	$q_{wl}$	注水質量	1	0

表 3-4 為熱流傳輸子問題之變數與方程式關係矩陣，其中符號「I」代表自變數、符號「D」則代表應變數及符號「-」代表沒有關係。表 3-5 則為本子問題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，有  $\phi_l$ 、 $n$ 、 $S_d$ 、 $\rho_{wl}$ 、 $\dot{m}_{wl}$  與  $q_{wl}$  之

表 3-6: 熱流傳輸函式求解順序表

方程式	(3-16)	(3-17)	(3-18)	(3-19)	(3-20)	(3-21)
求解順序	6	5	1	2	3	4

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。 $\phi_l$  為問題之狀態變數，因此透過數值解法即可求得。另外，其他變數則需另行處理，如與水流流動進行耦合運算，即可從該子問題中取得；如屬於非耦合運算，則需視同參數直接給定。依據 2.2.2 小節所述之「方程式一致性分析」步驟，本子問題之計算順序如表 3-6 所示。



### 3.1.3 溶質傳輸子問題

#### 3.1.3.1 建立分散型控制方程組

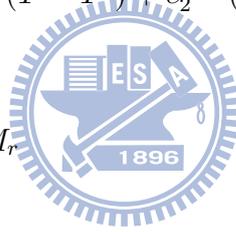
$$\int_t^{t+\Delta t} \left\{ \frac{\partial}{\partial \tau} \int_{CV} [nS_d C_l + (1 - n^\circ) \rho_s C_s] d\mathbf{V}_{CV} \right\} d\tau + \int_t^{t+\Delta t} \dot{M}_{cl} d\tau - \int_t^{t+\Delta t} q_{cl}(\tau) d\tau = 0, \quad \dot{M}_{cl} = \oint_{CS} (\dot{m}_{cl,dif} + \dot{m}_{cl,adv}) d\mathbf{A}_{CS} \quad (3-22)$$

$$\dot{m}_{cl,dif} = -n \cdot D_{ss} \frac{\partial C_l}{\partial s} - n \cdot D_{sn} \frac{\partial C_l}{\partial n} \quad (3-23)$$

$$\dot{m}_{cl,adv} = \dot{m}_{wl} C_l / \rho_{wl} \quad (3-24)$$

$$\begin{cases} C_s = K_{sorb,d} C_l \\ K_{sorb,d} = K_{sorb,d}^\circ \cdot [1 + c_1^{sorb} (T - T^\circ) + c_2^{sorb} (T - T^\circ)^2] \end{cases} \quad (3-25)$$

$$C_{ml} = \mathfrak{S}_{unit} \{C_l, [M] = g\} / M_r \quad (3-26)$$



$$\Delta \mu_r = a C_{ml}^{1/2} + b C_{ml} \quad (3-27)$$

$$D = \begin{bmatrix} D_{ss} & D_{sn} \\ D_{ns} & D_{nn} \end{bmatrix} \quad (3-28)$$

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

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

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

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

在溶質傳輸的子問題中，控制方程式是基於溶質的質量守恆方程式。式 (3-22) 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  $C_l$  代表溶液濃度，其因次是  $[ML^{-3}]$ ，是溶液中的溶質質量與溶液體積之比值； $C_s$  代表土體吸附濃度，其因次與  $C_l$  不同，為無因次，是吸附於土粒上的溶質質量與土粒質量之比值。因此空間積分式積分，兩者分別代表控制體積內溶液部分的溶質質量與吸附於土體上之溶質質量。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 (3-23) 為延散項的計算方程式，式 (3-23) 中同時包含  $\hat{s}$  與  $\hat{n}$  方向之濃度梯度，方程式之推導詳見附錄 E。而  $\dot{m}_{cl,adv}$  則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，式 (3-24) 為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。

式 (3-22) 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  $f_{cl}(\tau)$  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 ( $C_l^*$ ) 即等於模擬區域內模擬之濃度 ( $C_l$ )；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 ( $C_l^*$ )，需給定從外部注入的濃度 ( $C_l^{out}$ )。

式 (3-25) 用以計算吸附濃度 ( $C_s$ )，其為線性等溫關係式 (Linear isotherm) [26]，其中  $K_{sorb,d}$  代表在特定溫度下之吸附係數。吸附濃度 ( $C_s$ ) 與溶液濃度 ( $C_l$ ) 呈線性正比關係，亦即溶液中的溶質與吸附於土粒上的溶質在特定溫度下呈現某一特定比例。然而，此一比例會隨不同溫度而有不同之變化，在此以二階多項式來表示不同溫度之吸附係數轉換，其中  $K_{sorb,d}^{\circ}$  為常溫下之吸附係數，而  $c_1^{sorb}$  與  $c_2^{sorb}$  分別為二階多項式之一次項與二次項係數。

式 (3-26) 為莫耳濃度 ( $C_{ml}$ ) 之計算公式，其中  $\mathcal{S}_{unit}$  代表將質量濃度 ( $C_l$ ) 數值轉換為以克 ( $g$ ) 為單位之數值， $M_r$  為溶質之分子量，亦即單位溶劑內的溶質重量，除以溶質之分子量，即可換算為單位溶劑中的溶質莫耳數 ( $mol$ )。式 (3-27) 則是將相對莫耳濃度  $C_{ml}$  乘上 Jones-Dole 參數  $B$ ，計算出溶液之相對黏滯係數改變量，在無溶質傳輸案例中，其數值亦等於 0。

式 (3-28) 用以計算延散係數張量  $D$ ，由於溶質之延散特性會受到多孔介質本身結構以及水流方向之影響，延散係數 ( $D^*$ , free solution diffusion coefficient) 用以描述多孔介質之延散效應，而  $\alpha_L$  與  $\alpha_T$  則分別用來描述縱向與橫向之延散性。

前述已經說明溶質傳輸子問題之控制方程式，後續將進一步說明本子問題之邊界條件、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)

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

2. Neumann 邊界條件(單位面積溶質穿越率)

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

3. Neumann 邊界條件(溶質穿越率)

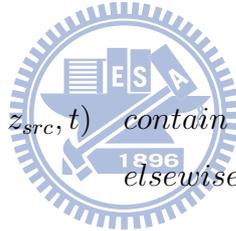
$$\dot{M}_{cl} = \dot{M}_{cl,nM} \text{ on } B_{nM}$$

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， $B_{dC}$ 、 $B_{cl,nm}$  與  $B_{cl,nM}$  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  $B_{dC}$ 、 $B_{cl,nm}$  與  $B_{cl,nM}$  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 (3-16) 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 ( $\rho_{wl}$ ) 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。

### 3.1.3.2 方程式一致性分析

表 3-7: 溶質傳輸變數與方程式關係矩陣

		(3-22)	(3-23)	(3-24)	(3-25)	(3-26)	(3-27)	(3-28)
0	$C_l$	I	I	I	I	I	-	-
1	$C_s$	I	-	-	D	-	-	-
2	$\dot{m}_{wl}$	-	-	I	-	-	-	-
3	$n$	I	I	-	-	-	-	-
4	$S_d$	I	-	-	-	-	-	-
5	$\rho_{wl}$	I	-	I	-	-	-	-
6	$\dot{m}_{cl,adv}$	I	-	D	-	-	-	-
7	$\dot{m}_{cl,dif}$	I	D	-	-	-	-	-
8	$\dot{M}_{cl}$	D	-	-	-	-	-	-
9	$M_{cl}$	D	-	-	-	-	-	-
10	$q_{cl}$	D	-	-	-	-	-	-
11	$q_{wl}$	I	-	-	-	-	-	-
12	$\dot{m}_{cl}$	D	-	-	-	-	-	-
13	$\vec{V}_{darcy}$	D	-	-	-	-	-	I
14	$C_{ml}$	I	-	-	-	D	I	-
15	$\Delta\mu_r$	-	-	-	-	-	D	-
16	$T$	-	-	-	I	-	-	-
17	$D$	-	I	-	-	-	-	D

表 3-7 為溶質傳輸子問題之變數與方程式關係矩陣，其中符號「I」代表自變數、符號「D」則代表應變數及符號「-」代表沒有關係。表 3-8 則為本子問題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，有  $C_l$ 、 $n$ 、 $S_d$ 、 $\rho_{wl}$ 、 $\dot{m}_{wl}$ 、 $q_{wl}$  與  $T$  之應變數數量為 0，因此七個變數必須藉由其他方式給定其數值。 $C_l$  為問題之狀態變數，因此透過數值解法即可求得。另外，其他變數則需另行處理，如與水流流動進行耦合運算，即可從該子問題中取得；如屬於非耦合運算，則需視同參數直接給定。依據 2.2.2 小節所述之「方程式一致性分析」步驟，本子問題之計算順序如表 3-9 所示。

表 3-8: 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	Num(I)	Num(D)
0	$C_l$	溶液濃度	5	0
1	$C_s$	土體吸附濃度	1	1
2	$\dot{m}_{wl}$	單位面積穿越水質量流率	1	0
3	$n$	孔隙率	2	0
4	$S_d$	飽和度	1	0
5	$\rho_{wl}$	溶液密度	2	0
6	$\dot{m}_{cl,adv}$	單位面積對流項溶質穿越質量流率	1	1
7	$\dot{m}_{cl,dif}$	單位面積延散項溶質穿越質量流率	1	1
8	$M_{cl}$	溶質穿越質量流率	0	1
9	$M_{cl}$	溶質質量	0	1
10	$q_{cl}$	溶質注入質量	0	1
11	$q_{wl}$	注水質量	1	0
12	$\dot{m}_{cl,i}^t$	單位面積溶質穿越流率	0	1
13	$\vec{V}_{darcy,i}^t$	水流流速	0	1
14	$C_{ml}$	莫耳濃度	1	1
15	$\Delta\mu_r$	溶液相對黏滯係數改變量	0	1
16	$T$	溫度	1	0
17	$D$	延散係數張量	1	1

表 3-9: 溶質傳輸函式求解順序表

方程式	(3-22)	(3-23)	(3-24)	(3-25)	(3-26)	(3-27)	(3-28)
求解順序	7	6	1	2	3	4	5

## 3.2 數值離散階段

以下各小節將會分別針對「地下水流」、「熱流傳輸」與「溶質傳輸」三個子問題進行數值離散，地下水流子問題之數值離散將詳述於3.2.1小節(頁56)，熱流傳輸子問題之數值離散將詳述於3.2.2小節(頁57)，溶質傳輸子問題之數值離散將詳述於3.2.3小節(頁58)。

### 3.2.1 地下水流子問題

前述 2.2.3.2 小節已經說明控制方程式之離散法則，在 3.1.1 小節則詳列地下水流子問題之控制方程式集合，其中式 (3-2)、(3-3)、(3-4)、(3-5)、(3-6)、(3-9)、(3-10) 與 (3-11) 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 (3-1) 為連續方程式，為水質量守恆之雷諾傳輸定律，依據式 (2-28) 可將其離散，其離散方程式如下所示：

$$\left( M_{wl,i}^{t+\Delta t} - M_{wl,i}^t \right) + \omega \left( -q_{wl,i}^{t+\Delta t} + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{M}_{wl,ij}^{t+\Delta t} \right) \times \Delta t \quad (3-29)$$

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

$$M_{wl,i}^t = n_i^t \rho_{wl,i}^t S_{d,i}^t \mathbf{V}_{CV,i} \quad (3-30)$$

$$\dot{M}_{wl,ij}^t = \dot{m}_{wl,ij}^t \mathbf{A}_{ij} \quad (3-31)$$

另外，式 (3-7) 為計算穿越水質量流率之計算公式，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 (2-21) 所示)，如式 (3-32) 所示。 $\bar{i}j$  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  $\bar{i}j$  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 (2-36) 所示)、幾何平均(如式 (2-37) 所示)、調和平均(如式 (2-38) 所示)與上風法(如式 (2-39) 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。

$$\dot{m}_{wl,ij}^t = -\rho_{wl,ij}^t K_{wl,ij} \frac{h_j^t - h_i^t}{|\bar{i}j|} \quad (3-32)$$

式 (3-8) 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 (2-22) 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 ( $\Delta z$ )，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 (3-8) 離散成式 (3-33)。其中  $N_i$  代表節點集合，涵蓋  $z$  至  $z_0$  之間的所有節點。

$$h = p + \zeta = p + \frac{\int_{z_0}^z \rho_{wl} g dz}{\rho_{pw} g} \simeq p_i^t + \frac{(\sum_{m \in N_i} C_m^{SPS} \rho_{wl,m}^t g) \times \Delta z}{\rho_{pw} g} \quad (3-33)$$

### 3.2.2 熱流傳輸子問題

$$\begin{aligned} (H_i^{t+\Delta t} - H_i^t) + \omega \left( -q_{H,i}^{t+\Delta t} + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{H}_{ij}^{t+\Delta t} \right) \times \Delta t \\ + (1 - \omega) \times \left( -q_{H,i}^t + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{H}_{ij}^t \right) \times \Delta t = 0 \end{aligned} \quad (3-34)$$

$$H_i^t = [n_i^t S_{d,i}^t \rho_{wl,i}^t \phi_{l,i}^t + (1 - n_i^t) \rho_{s,i} \phi_{s,i}^t] \mathbf{V}_{CV,i} \quad (3-35)$$

$$\dot{H}_{ij}^t = (\dot{h}_{dif,ij}^t + \dot{h}_{adv,ij}^t) \mathbf{A}_{ij} \quad (3-36)$$



$$\dot{h}_{dif,ij}^t = -K_{H,eq,ij} \frac{T_j^t - T_i^t}{|\bar{i}j|} \quad (3-37)$$

在熱流子問題中，式 (3-16) 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。(3-17) 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 (3-34) 至 (3-36) 為守恆方程式的離散式，其處理流程同式 (3-29) 一般。式 (3-37) 為擴散項之離散方程式。 $\bar{i}j$  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  $j$ 。

$$\dot{h}_{adv,ij}^t = \dot{m}_{wl,ij}^t \phi_{l,ij}^t = \begin{cases} \dot{m}_{wl,ij}^t \phi_{l,i}^t & \text{for } \dot{m}_{wl,ij}^t > 0 \\ \dot{m}_{wl,ij}^t \phi_{l,j}^t & \text{for } \dot{m}_{wl,ij}^t < 0 \end{cases} \quad (3-38)$$

式 (3-38) 為對流項之離散方程式，其中  $\dot{m}_{wl,ij}^t$  為水流質量流率，可由地下水流子問題估算； $\phi_{l,ij}^t$  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  $\bar{i}j$  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 (3-38) 以  $\dot{m}_{wl,ij}^t$  之正負號進行上風方向之判斷。

### 3.2.3 溶質傳輸子問題

$$\begin{aligned} \left( M_{cl,i}^{t+\Delta t} - M_{cl,i}^t \right) = & \omega \left( -q_{cl,i}^{t+\Delta t} + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{M}_{cl,ij}^{t+\Delta t} \right) \times \Delta t \\ & + (1 - \omega) \times \left( -q_{cl,i}^t + \sum_{j \in \alpha_i}^{Num_i} \dot{M}_{cl,ij}^t \right) \times \Delta t \end{aligned} \quad (3-39)$$

$$M_{cl,i}^t = [n_i^t S_{d,i}^t C_{l,i}^t + (1 - n_i^o) \rho_{s,i} C_{s,i}^t] \mathbf{V}_{CV,i} \quad (3-40)$$

$$\dot{M}_{cl,ij}^t = (\dot{m}_{cl,dif,ij}^t + \dot{m}_{cl,adv,ij}^t) \mathbf{A}_{ij} \quad (3-41)$$

在溶質傳輸子問題中，式 (3-22) 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 (3-23) 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 (3-39) 至 (3-41) 為守恆方程式的離散式，其處理流程同式 (3-29) 一般。式 (3-42) 為延散項之離散方程式。在第一項中， $\bar{i}j$  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  $j$ 。在第二項中，對於橫向濃度梯度之處理，可詳見附錄 E。

$$\dot{m}_{cl,dif,ij}^t = -n_i^t D_{ss,ij} \frac{C_{l,j}^t - C_{l,i}^t}{|\bar{i}j|} - n_i^t D_{sn,ij} \frac{\partial C_{l,ij}}{\partial n} \quad (3-42)$$

式 (3-43) 為對流項之離散方程式，其中  $\dot{m}_{wl,ij}^t$  為水流質量流率，可由地下水流子問題估算；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  $\bar{i}j$  之濃度 ( $C_{l,ij}^t$ ) 與密度 ( $\rho_{wl,ij}^t$ ) 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 (3-43) 以  $\dot{m}_{ij}^t$  之正負號進行上風方向之判斷。

$$\dot{m}_{cl,adv,ij}^t = \begin{cases} \dot{m}_{wl,ij}^t C_{l,i}^t / \rho_{wl,i}^t & \text{for } \dot{m}_{wl,ij}^t > 0 \\ \dot{m}_{wl,ij}^t C_{l,j}^t / \rho_{wl,j}^t & \text{for } \dot{m}_{wl,ij}^t < 0 \end{cases} \quad (3-43)$$

### 3.3 電腦程式階段

#### 3.3.1 地下水流子問題

本小節將針對地下水流問題之變數( 3.3.1.1 小節)、局部參數( 3.3.1.2 小節)與全域參數( 3.3.1.3 小節)之宣告與設定進行說明，後續程式撰寫實作即依據本小節內容進行開發。

##### 3.3.1.1 變數宣告與設定

前述於 2.2.3.1 與 2.2.4.3 小節已經分別說明可適性計算架構之網格結構與資料結構，其中指出資料分為節點形式、連結形式與邊界虛擬點形式三種，表 3-10 是以表3-2 為基礎所建立之變數宣告與設定表，各物理量又分為節點形式與連結形式兩種，節點形式之物理量下標標註為  $i$ ，表示位於控制體積  $i$  之物理量數值；而連結形式之物理量下標標註為  $ij$ ，表示位於控制體積  $i$  與控制體積  $j$  相鄰邊界之物理量數值。以壓力水頭為例，其符號分別為  $p_i^t$  與  $p_{ij}^t$ 。各變數編號以GV註記，G代表地下水流，V代表變數。節點形式與邊界虛擬點形式間的空間推估轉換，亦可參照節點形式與連結形式間的空間推估指標。

表 3-10: 地下水流子問題變數宣告與設定表

變數編號	節點位置變數	相鄰連結變數	空間推估指標
GV.0	$p_i^t$	$p_{ij}^t$	0
GV.1	$h_i^t$	$h_{ij}^t$	0
GV.2	$\zeta_i^t$	$\zeta_{ij}^t$	0
GV.3	$P_i^t$	$P_{ij}^t$	0
GV.4	$C_{l,i}^t$	$C_{l,ij}^t$	0
GV.5	$T_i^t$	$T_{ij}^t$	0
GV.6	$n_i^t$	$n_{ij}^t$	0
GV.7	$\rho_{pw,i}^t$	$\rho_{pw,ij}^t$	0
GV.8	$\rho_{wl,i}^t$	$\rho_{wl,ij}^t$	0
GV.9	$\mu_{pw,i}^t$	$\mu_{pw,ij}^t$	0
GV.10	$\mu_{wl,i}^t$	$\mu_{wl,ij}^t$	0
GV.11	$\theta_{e,i}^t$	$\theta_{e,ij}^t$	0
GV.12	$S_{d,i}^t$	$S_{d,ij}^t$	0
GV.13	$K_{wl,i}^t$	$K_{wl,ij}^t$	2
GV.14	$\dot{m}_{wl,i}^t$	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	-
GV.15	$\dot{M}_{wl,i}^t$	$\dot{M}_{wl,ij}^t$	-
GV.16	$M_{wl,i}^t$	$M_{wl,ij}^t$	0
GV.17	$q_{wl,i}^t$	$q_{wl,ij}^t$	0
GV.18	$\vec{V}_{darcy,i}^t$	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	-
GV.19	$C_{ml,i}^t$	$C_{ml,ij}^t$	0
GV.20	$\mu_{r,i}^t$	$\mu_{r,ij}^t$	0

空間推估指標：0代表算數平均；1代表幾何平均；2代表調和平均；3代表上風法；-代表不作空間推估

另外，表上亦記錄空間推估指標，根據 2.2.4.3 小節所述，各變數可以下列四種空間推估方法擇一使用，分別為算數平均(如式 (2-36) 所示)、幾何平均(如式 (2-37) 所示)、調和平均(如式 (2-38) 所示)與上風法(如式 (2-39) 所示)，在此選定較適合之推估方式。

### 3.3.1.2 局部參數宣告與設定

表 3-11: 地下水流子問題局部參數宣告與設定表

參數編號	節點位置參數	相鄰連結參數	空間推估指標
GLP.0	$n^{\circ}_i$	$n^{\circ}_{ij}$	0
GLP.1	$\alpha'_i$	$\alpha'_{ij}$	0
GLP.2	$\alpha_{van,i}$	$\alpha_{van,ij}$	0
GLP.3	$\beta_{van,i}$	$\beta_{van,ij}$	0
GLP.4	$K_{ws,i}$	$K_{ws,ij}$	0
GLP.5	$\theta_{s,i}$	$\theta_{s,ij}$	0
GLP.6	$\theta_{r,i}$	$\theta_{r,ij}$	0

空間推估指標：0代表算數平均；1代表幾何平均；2代表調和平均；3代表上風法

表 3-11 為本子問題之局部參數表，其中  $n^{\circ}$  代表在常壓下的孔隙率， $\alpha'$  則代表土壤壓密係數， $\alpha_{van}$  與  $\beta_{van}$  則分別代表 van Genuchten 經驗式之土壤參數， $K_{ws}$  則代表飽和條件下之水力傳導係數， $\theta_s$  與  $\theta_r$  則分別代表飽和含水量與殘餘含水量。各參數編號以 GLP 註記，G 代表地下水流，LP 代表局部參數。

### 3.3.1.3 全域參數宣告與設定



表 3-12: 地下水流全域參數宣告與設定表

項次	參數名稱	說明	備註
GGP.0	$p_0$	常壓	一大氣壓(1 atm)
GGP.1	$T_0$	常溫	25 °C(298 °K)
GGP.2	$\rho_{pw}^{\circ}$	常溫常壓水流密度	
GGP.3	$\mu_{pw}^{\circ}$	常溫常壓水流黏滯係數	
GGP.4	$g$	重力加速度	

表 3-12 為本子問題之全域參數列表。各參數編號以 GGP 註記，G 代表地下水流，GP 代表全域參數。

### 3.3.2 熱流傳輸子問題

本小節將針對熱流傳輸問題之變數( 3.3.2.1 小節)與局部參數( 3.3.2.2 小節)之宣告與設定進行說明，後續程式撰寫實作即依據本小節內容進行開發。

#### 3.3.2.1 變數宣告與設定

表 3-13: 熱流傳輸子問題變數宣告與設定表

變數編號	節點位置變數	相鄰連結變數	空間推估指標
HV.0	$\phi_{l,i}^t$	$\phi_{l,ij}^t$	3
HV.1	$\phi_{s,i}^t$	$\phi_{s,ij}^t$	0
HV.2	$T_i^t$	$T_{ij}^t$	0
HV.3	$n_i^t$	$n_{ij}^t$	0
HV.4	$S_{d,i}^t$	$S_{d,ij}^t$	0
HV.5	$\rho_{wl,i}^t$	$\rho_{wl,ij}^t$	0
HV.6	$K_{H,eq,i}^t$	$K_{H,eq,ij}^t$	2
HV.7	$\dot{m}_{wl,i}^t$	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	-
HV.8	$\dot{h}_{adv,i}^t$	$\dot{h}_{adv,ij}^t$	-
HV.9	$\dot{h}_{dif,i}^t$	$\dot{h}_{dif,ij}^t$	-
HV.10	$\dot{H}_i^t$	$\dot{H}_{ij}^t$	-
HV.11	$H_i^t$	$H_{ij}^t$	0
HV.12	$q_{H,i}^t$	$q_{H,ij}^t$	0
HV.13	$q_{wl,i}^t$	$q_{wl,ij}^t$	0
HV.14	$\vec{h}_i^t$	$\vec{h}_{ij}^t$	-
HV.15	$\vec{V}_{darcy,i}^t$	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	-

空間推估指標：0代表算數平均；1代表幾何平均；2代表調和平均；3代表上風法；-代表不作空間推估

前述於 2.2.3.1 與 2.2.4.3 小節已經分別說明可適性計算架構之網格結構與資料結構，其中指出資料分為節點形式、連結形式與邊界虛擬點形式三種，表 3-13 是以表3-5 為基礎所建立之變數宣告與設定表，各物理量又可分為節點形式與連結形式兩種，節點形式之物理量下標標註為  $i$ ，表示位於控制體積  $i$  之物理量數值；而連結形式之物理量下標標註為  $ij$ ，表示位於控制體積  $i$  與控制體積  $j$  相鄰邊界之物理量數值。各變數編號以 HV 註記，H 代表熱流傳輸，V 代表變數。

#### 3.3.2.2 局部參數宣告與設定

表 3-14 為本子問題之局部參數表，其中  $\rho_s$  代表土壤密度， $K_{H,l}$  與  $K_{H,s}$  分別代表溶液與土壤之熱傳導係數， $s_{H,l}$  與  $s_{H,s}$  則分別代表溶液與土壤之比熱， $n^\circ$  為一大氣壓力下之土體孔隙率。各參數編號以 HLP 註記，H 代表熱流傳輸，LP 代表局部參數。

表 3-14: 熱流傳輸子問題局部參數宣告與設定表

參數編號	節點位置參數	相鄰連結參數	空間推估指標
HLP.0	$\rho_{s,i}$	$\rho_{s,ij}$	0
HLP.1	$K_{H,l,i}$	$K_{H,l,ij}$	0
HLP.2	$K_{H,s,i}$	$K_{H,s,ij}$	0
HLP.3	$S_{H,l,i}$	$S_{H,l,ij}$	0
HLP.4	$S_{H,s,i}$	$S_{H,s,ij}$	0
HLP.5	$n_i^o$	$n_{ij}^o$	0

空間推估指標：0代表算數平均；1代表幾何平均；2代表調和平均；3代表上風法

### 3.3.3 溶質傳輸子問題

本小節將針對溶質傳輸問題之變數( 3.3.3.1 小節)、局部參數( 3.3.3.2 小節)與全域參數( 3.3.3.3 小節)之宣告與設定進行說明，後續程式撰寫實作即依據本小節內容進行開發。

#### 3.3.3.1 變數宣告與設定

表 3-15: 溶質傳輸子問題變數宣告與設定表

變數編號	節點位置變數	相鄰連結變數	空間推估指標
CV.0	$C_{l,i}^t$	$C_{l,ij}^t$	3
CV.1	$C_{s,i}^t$	$C_{s,ij}^t$	0
CV.2	$\dot{m}_{wl,i}^t$	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	-
CV.3	$n_i^t$	$n_{ij}^t$	0
CV.4	$S_{d,i}^t$	$S_{d,ij}^t$	0
CV.5	$\rho_{wl,i}^t$	$\rho_{wl,ij}^t$	0
CV.6	$\dot{m}_{cl,adv,i}^t$	$\dot{m}_{cl,adv,ij}^t$	-
CV.7	$\dot{m}_{cl,dif,i}^t$	$\dot{m}_{cl,dif,ij}^t$	-
CV.8	$M_{cl,i}^t$	$M_{cl,ij}^t$	-
CV.9	$M_{cl,i}^t$	$M_{cl,ij}^t$	0
CV.10	$q_{cl,i}^t$	$q_{cl,ij}^t$	0
CV.11	$q_{wl,i}^t$	$q_{wl,ij}^t$	0
CV.12	$\dot{m}_{cl,i}^t$	$\dot{m}_{cl,ij}^t$	-
CV.13	$\vec{V}_{darcy,i}^t$	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	-
CV.14	$C_{ml,i}^t$	$C_{ml,ij}^t$	0
CV.15	$\mu_{rl,i}^t$	$\mu_{rl,ij}^t$	0
CV.16	$T_i^t$	$T_{ij}^t$	0
CV.17	$D_i^t$	$D_{ij}^t$	2

空間推估指標：0代表算數平均；1代表幾何平均；2代表調和平均；3代表上風法；-代表不作空間推估

前述於 2.2.3.1 與 2.2.4.3 小節已經分別說明可適性計算架構之網格結構與資料結構，其中指出資料分為節點形式、連結形式與邊界虛擬點形式三種，表 3-15 是以表3-8 為基礎所建立之變數宣告與設定表，各物理量又可分為節點形式與連結形式兩種，節點形式之物理量下標標註為  $i$ ，表示位於控制體積  $i$  之物理量數值；而連結形式之物理量下標標註

為  $ij$ ，表示位於控制體積  $i$  與控制體積  $j$  相鄰邊界之物理量數值。各變數編號以 CV 註記，C 代表溶質傳輸，V 代表變數。

### 3.3.3.2 局部參數宣告與設定

表 3-16: 溶質傳輸子問題局部參數宣告與設定表

參數編號	節點位置參數	相鄰連結參數	空間推估指標
CLP.0	$\rho_{s,i}$	$\rho_{s,ij}$	0
CLP.1	$D_i^*$	$D_{ij}^*$	0
CLP.2	$\alpha_{L,i}$	$\alpha_{L,ij}$	0
CLP.3	$\alpha_{T,i}$	$\alpha_{T,ij}$	0
CLP.4	$n_i^o$	$n_{ij}^o$	0

空間推估指標：0代表算數平均；1代表幾何平均；2代表調和平均；3代表上風法

表 3-16 為本子問題之局部參數表，其中  $\rho_s$  代表土壤密度， $D_i$  代表溶質傳輸之延散係數， $n_i^o$  為一大氣壓力下之土體孔隙率。各參數編號以 CLP 註記，C 代表溶質傳輸，LP 代表局部參數。

### 3.3.3.3 全域參數宣告與設定

表 3-17: 溶質傳輸全域參數宣告與設定表

項次	參數名稱	說明	備註
CGP.0	$K_{sorb,d}^o$	常溫吸附係數	
CGP.1	$c_1^{sorb}$	等溫吸附溫差轉換係數(一次項)	
CGP.2	$c_2^{sorb}$	等溫吸附溫差轉換係數(二次項)	
CGP.3	$M_r$	溶質分子量	
CGP.4	$b$	Jones Dole 方程式之參數 B	
CGP.5	$T^o$	常溫	

表 3-17 為本子問題之全域參數列表。各參數編號以 CGP 註記，C 代表溶質傳輸，GP 代表全域參數。

### 3.3.4 資訊同步項目設定

表 3-18 記錄不同子問題間之變數資訊同步設定，表上共記錄 15 項同步資訊，地下水流問題中未處理的變數尚有  $C_{l,i}^t$  與  $T_i^t$ ，其資訊屬於節點型式；熱流傳輸問題中未處理的變數尚有  $n_i^t$ 、 $S_{d,i}^t$ 、 $\rho_{wl,i}^t$ 、 $\dot{m}_{wl,ij}^t$  與  $q_{wl,i}^t$ ；溶質傳輸問題中未處理的變數尚有  $\dot{m}_{wl,ij}^t$ 、 $n_i^t$ 、 $S_{d,i}^t$ 、 $\rho_{wl,i}^t$ 、 $\rho_{wl,ij}^t$  與  $q_{wl,i}^t$ ，這些尚未處理之變數則需藉由「資訊同步流程」之處理。其中項次 0 至 1、項次 2 至 7 與項次 8 至 15，分別提供地下水流問題、熱流傳輸問題與溶質傳輸問題之數值決定，例如：溶液溶質濃度 ( $C_l$ ) 從變數編號位置 CV.0 同步至變數編號位置 GV.4，符號 GV.4 用於記錄水流流動子問題中變數編號 4 之變數，而 CV.0 則用於記錄溶質傳輸子問題中變數編號 0 之變數，顯示上述資訊同步流程是先由溶質傳輸子問題計算出溶液溶質濃度 ( $C_l$ )，再將資訊複製到水流流動子問題中。

表 3-18: 資訊同步列表

項次	變數	變數編號	同步方向	變數編號	位置編號	備註
0	$C_{l,i}^t$	CV.0	→	GV.4	0	(節點)
1	$\mu_{rl,i}^t$	CV.15	→	GV.20	0	(節點)
2	$T_i^t$	HV.2	→	GV.5	0	(節點)
3	$n_i^t$	GV.6	→	HV.3	0	(節點)
4	$S_{d,i}^t$	GV.12	→	HV.4	0	(節點)
5	$\rho_{wl,i}^t$	GV.8	→	HV.5	0	(節點)
6	$q_{wl,i}^t$	GV.17	→	HV.13	0	(節點)
7	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	GV.14	→	HV.7	1	(連結)
8	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	GV.14	→	HV.7	2	(邊界虛擬點)
9	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	GV.18	→	HV.15	1	(連結)
10	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	GV.18	→	HV.15	2	(邊界虛擬點)
11	$n_i^t$	GV.6	→	CV.3	0	(節點)
12	$S_{d,i}^t$	GV.12	→	CV.4	0	(節點)
13	$\rho_{wl,i}^t$	GV.8	→	CV.5	0	(節點)
14	$\rho_{wl,ij}^t$	GV.8	→	CV.5	1	(連結)
15	$\rho_{wl,ij}^t$	GV.8	→	CV.5	2	(邊界虛擬點)
16	$q_{wl,i}^t$	GV.17	→	CV.11	0	(節點)
17	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	GV.14	→	CV.2	1	(連結)
18	$\dot{m}_{wl,ij}^t$	GV.14	→	CV.2	2	(邊界虛擬點)
19	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	GV.18	→	CV.13	1	(連結)
20	$\vec{V}_{darcy,ij}^t$	GV.18	→	CV.13	2	(邊界虛擬點)
21	$T_i^t$	HV.2	→	CV.16	0	(節點)

## 第四章 案例結果與驗證

本研究提出五種不同範例檢驗模式之強健性與正確性，4.1 與 4.2 小節用以展示地下水流非耦合模擬，其中 4.1 小節為穩態案例，而 4.2 小節為非穩態案例。4.3 與 4.4 小節為水流與熱流耦合模擬，兩案例之水流部分設定均以 4.2 小節一致，在熱流部分兩案例則有不同之設定。最後，4.5 小節則以水流流動、熱流傳輸與溶質傳輸之耦合模擬，其中水流部分參考 4.2 小節，熱流部分則參考 4.3 小節。

### 4.1 穩態垂向二維地下水流非耦合模擬

從表 3-18 可知在地下水流子問題中，溶液濃度 ( $C_{l,i}^t$ ) 與溫度 ( $T_i^t$ ) 需透過其他子問題方可決定，因此在非耦合計算中則需另行給定，在此分別設定溫度與濃度為  $25(^{\circ}C)$  與  $0(kg/m^3)$ ，其函式為式 (4-1) 與 (4-2)，另外由於溶液濃度為 0，因此溶液之相對黏滯係數亦可設定為 0。兩公式之呼叫順序可加在其他函式之前(如表 3-3 所示)。

$$T_i^t = T^{\circ} = 25 (^{\circ}C) \quad (4-1)$$

$$C_{l,i}^t = 0 (kg/m^3), \mu_{r,i}^t = 0 \quad (4-2)$$

表 4-1: 非耦合地下水流模擬局部參數設定表

局部參數項次	局部參數	數值	單位
1	$n^{\circ}$	0.36	
	$\alpha'$	$10^{-4}$	$(m^{-1})$
	$\alpha_{van}$	0.005	$(cm^{-1})$
	$\beta_{van}$	1.09	
	$K_s$	$10^{-5}$	$(m/s)$
		$=0.864$	$(m/day)$
	$\theta_s$	0.36	
	$\theta_r$	0.070	

本案例為單一材質之均質案例，表 4-1 記錄土壤材質資訊，其中  $\alpha_{van}$ 、 $\beta_{van}$ 、 $\theta_s$  與  $\theta_r$  為 van Genuchten 土壤特性曲線[22]所需之參數，Carsel 與 Parrish [27]針對不同土壤材質提供上述參數數值，本案例假設土壤構成材質為 silt clay。常溫常壓孔隙率 ( $n^{\circ}$ ) 則假設等於飽和含水量 ( $\theta_s$ )。飽和水力傳導係數 ( $K_s$ ) 之給定則參考 silt clay 水力傳導

係數數值之分布範圍[28]。土壤壓密係數 ( $\alpha'$ ) 則假設為  $10^{-4} (m^{-1})$ ，其意味著當壓力水頭升高1公尺，土壤孔隙約增加  $10^{-4}$ 。

表 4-2: 非耦合地下水流模擬全域參數設定表

全域參數	數值設定	單位
$p^\circ$	0	(m)
$T^\circ$	25	( $^\circ C$ )
$\rho_f^\circ$	997.047	( $kg/m^3$ )
$\mu_f^\circ$	$0.8879 \times 10^{-3}$	( $N s/m^2$ )
$g$	9.81	( $m/s^2$ )
$b$	0	

表 4-2 記錄本案例之全域參數，其中常壓 ( $p^\circ$ ) 設定為 0 (m)，以錶壓力 (gage pressure) 來呈現。常溫 ( $T^\circ$ ) 設定為  $25(^\circ C)$ 。重力加速度設定為  $9.81(m/s^2)$ 。常溫常壓下的水流密度 ( $\rho_f^\circ$ ) 與黏滯係數 ( $\mu_f^\circ$ ) 則分別以式(3-3)與(3-10)，代入常溫與常壓數值計算所得。溶液與純水之黏滯係數轉換係數  $b$  設定為 0。

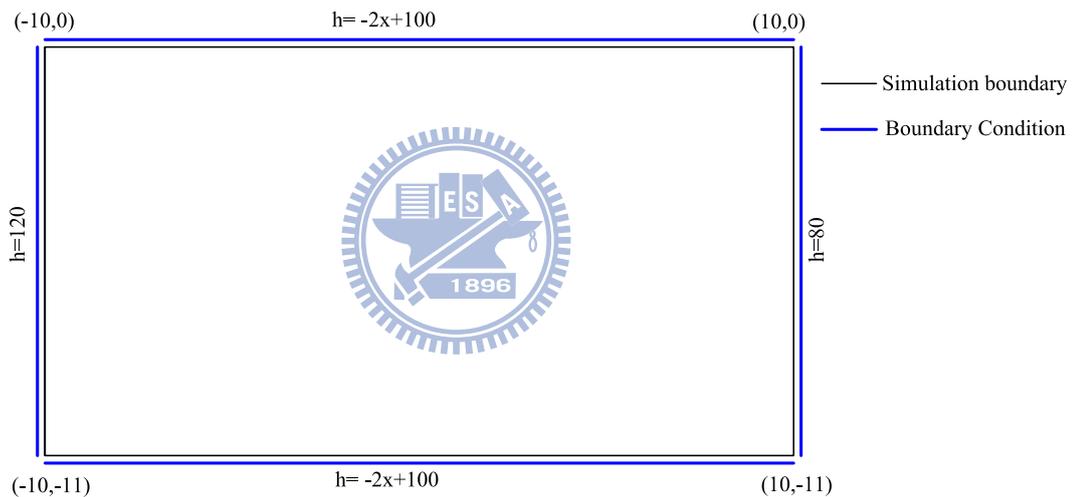


圖 4-1: 穩態垂向二維地下水流模擬圖

本案例為穩態之垂向二維地下水流案例，圖 4-1 為案例之模擬圖，模擬區域為  $20 \times 11 (m^2)$  的均質垂向二維平面，水文地質參數如表 4-1 與 4-2 所述。在邊界條件設定上，上下左右均為定總水頭邊界條件設定，其屬於 Dirichlet 邊界條件，左方設定為  $120(m)$  高，右方設定為  $80(m)$  高，上下兩方則以線性方程式 ( $h = -2x + 100$ ) 給定。

圖 4-2 為本案例之模擬網格圖，圖中紅色虛線代表控制表面，虛線包圍之區域即為控制體積，其中之數字即代表該控制體積之編號。本案例採用採用矩形之規則網格。圖 4-3 為本案例之總水頭分布等值圖，從圖面上來看，總水頭由左至右從  $120(m)$  逐步遞減至  $80(m)$ ，符合左右兩方之 Dirichlet 邊界條件設定。圖 4-4 為本案例之水流流向圖，水流由左往右流動，模擬結果符合預期。

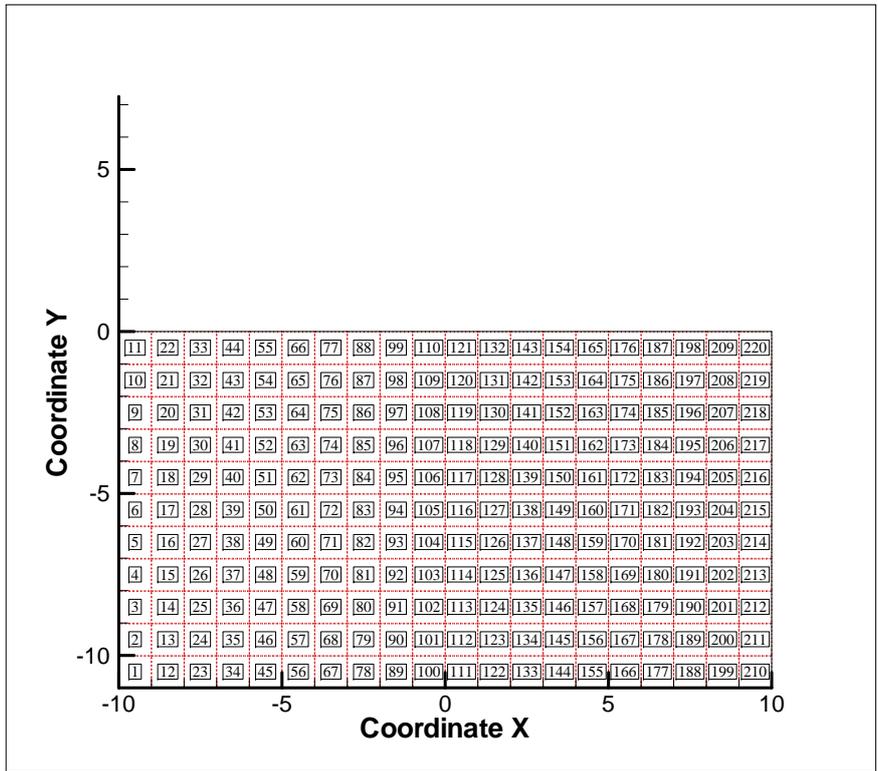


圖 4-2: 模擬網格圖

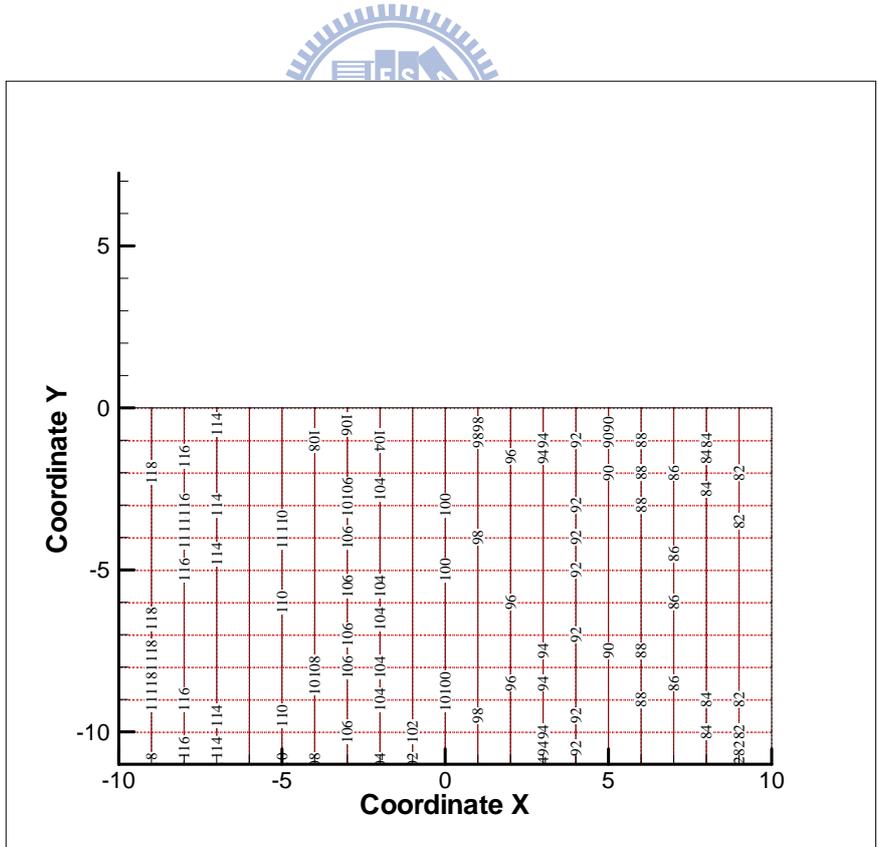


圖 4-3: 總水頭分布等值圖(穩態)

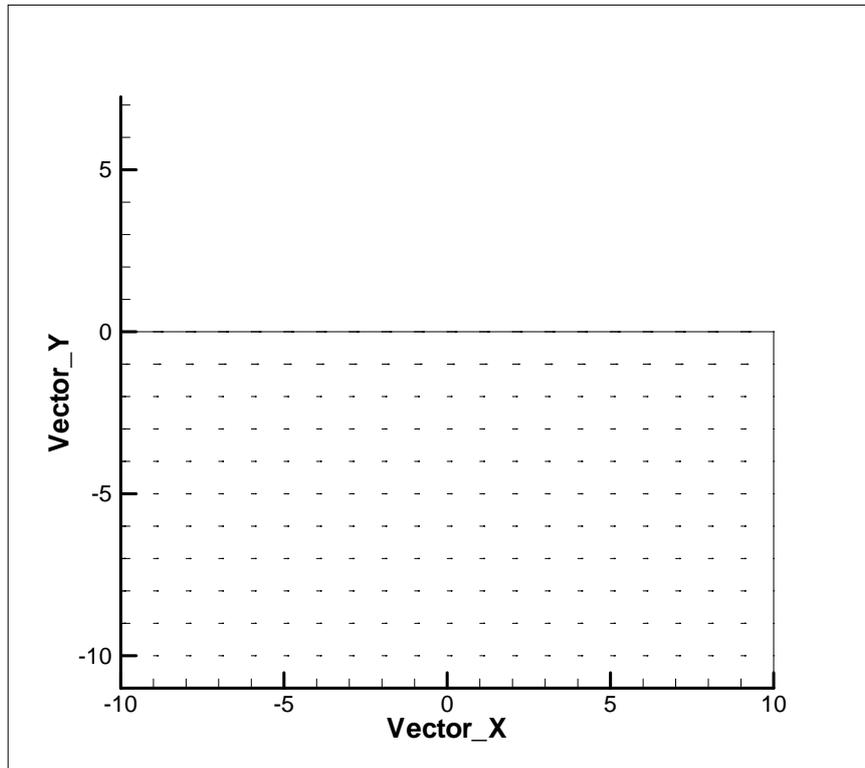


圖 4-4: 水流流向圖(穩態)

## 4.2 非穩態垂向二維地下水流非耦合模擬

本案例以 4.1 小節之無抽水穩態案例為基礎，進一步建立非穩態之垂向二維地下水流案例，圖 4-5 為案例模擬圖，其中邊界條件與水文地質參數沿用前述穩態案例。在初始條件方面，初始水位則以 4.1 小節之穩態模擬結果作為初始水位(如圖 4-3 所示)。另外，本案例中分別增加兩口水井，分別位於座標  $(-3.5, -5.5)$  與  $(3.5, -5.5)$  處(如圖 4-5 所示)，由於水流之邊界條件為左高右低，因此稱左方水井為上游井，右方水井為下游井，上游井設定為注入源點 (Source)，而下游井則設定為抽出之匯點 (Sink)，兩者均以連續型態進行抽注，其抽注水質量流率分別為  $0.2(kg/s)$  與  $-0.2(kg/s)$ ，亦等於  $2 \times 10^{-5} (cms)$  與  $-2 \times 10^{-5} (cms)$ ，正號數值表示注入，負號數值表示抽出。

模擬期距為  $900 (s)$ ，亦即等於  $15 (minutes)$ ，總模擬期距為  $432,000 (s)$ ，等於  $5 (days)$ ，合計共 480 個模擬時刻。單一時刻期距為 15 分鐘，故單一時刻之注入量或抽水量即為  $180 (kg)$ 。

圖 4-6 為模擬案例於啟動抽注行為後 900 秒 (即 15 分鐘) 之總水頭分布等值圖，可以發現於上游注入井處，水頭大幅提昇；相反地，在下游抽水井處，水頭則迅速下降。圖 4-7 為抽水井與注水井隨時間變化之水位變化圖，從圖面顯示約在第一個時刻，水位即漸趨近於穩定。圖 4-8 為本案例之水流流向圖，從圖面顯示左方注入井處，呈現向外放射狀之流線，而右方抽水井則是向內之流線，模擬結果符合預期。

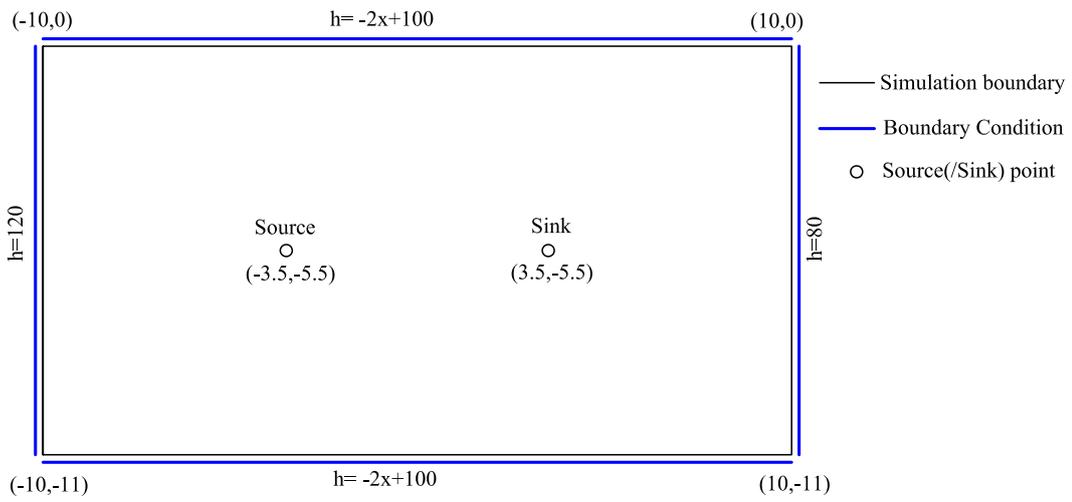


圖 4-5: 非穩態垂向二維地下水流模擬圖

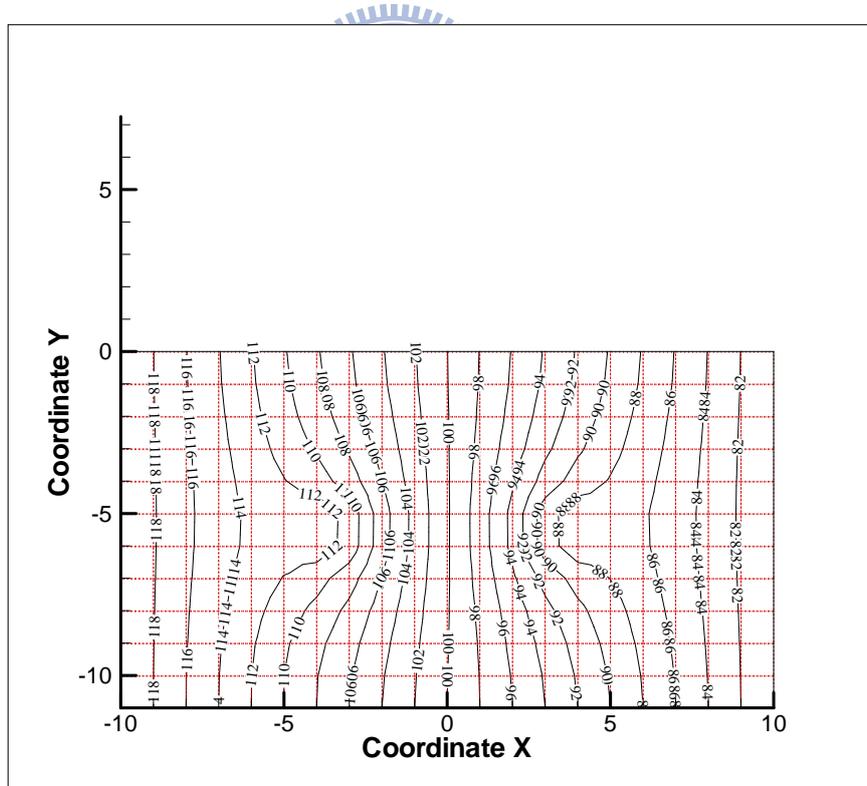


圖 4-6: 總水頭分布等值圖 (  $time = 900s = 0.25hr$  )

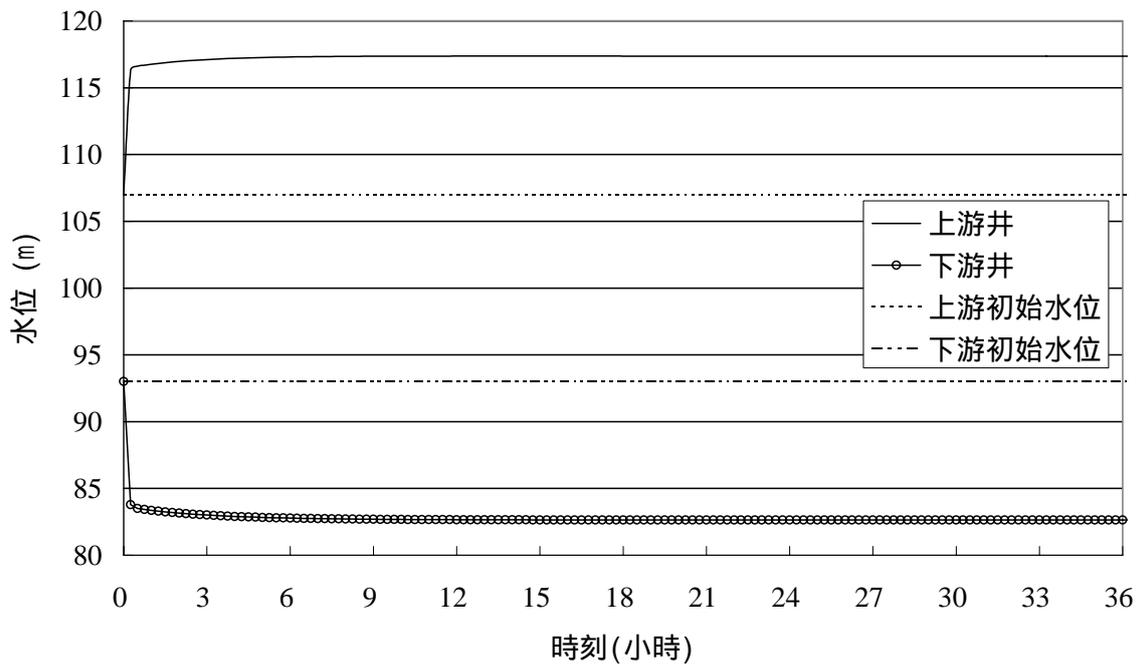


圖 4-7: 抽注水井總水頭隨時間變化圖

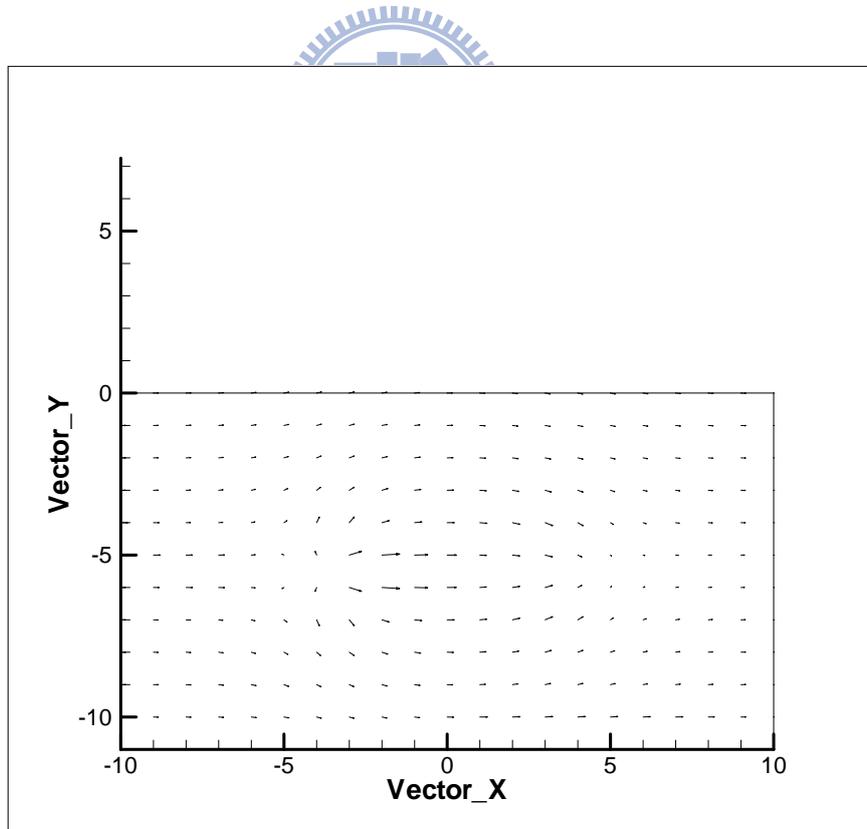


圖 4-8: 水流流向圖(  $time = 900s = 0.25hr$  )

### 4.3 非穩態垂向二維地下水流與熱流傳輸耦合模擬(注入熱水案例)

表 4-3: 熱流傳輸子問題局部參數設定表

局部參數項次	局部參數	數值	單位
1	$\rho_s$	2,323	$(kg/m^3)$
	$K_{H,l}$	0.556	$(J/s \cdot m \cdot ^\circ K)$
	$K_{H,s}$	2	$(J/s \cdot m \cdot ^\circ K)$
	$S_{H,l}$	4,179	$(J/kg \cdot ^\circ K)$
	$S_{H,s}$	710	$(J/kg \cdot ^\circ K)$

本案例為地下水流與熱流傳輸之耦合模擬案例，在地下水流部分則沿用 4.2 小節之設定，另外溫度上則以熱流傳輸模式計算之。在熱流傳輸部分之參數部分，則如表 4-3 所示，其為熱流傳輸子問題之局部參數設定表，其中土體密度 ( $\rho_s$ ) 設定為  $2,323 (kg/m^3)$ ，流體與土體之熱傳導係數則分別設定為  $0.556 (J/s \cdot m \cdot ^\circ K)$  與  $2 (J/s \cdot m \cdot ^\circ K)$ ，流體與土體之比熱則分別設定為  $4,179 (J/kg \cdot ^\circ K)$  與  $710 (J/kg \cdot ^\circ K)$ 。

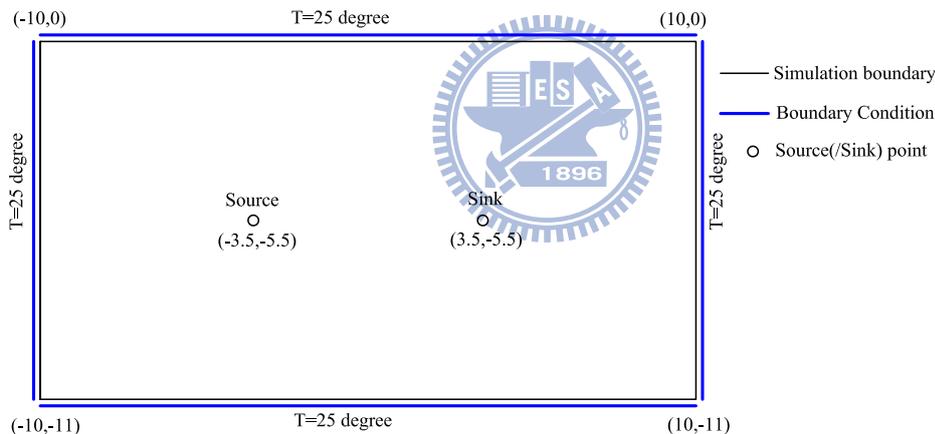


圖 4-9: 非穩態垂向二維熱流傳輸模擬圖(注入熱水案例)

在熱流傳輸的邊界條件上，四方皆設定為  $25 (^\circ C)$ ，為 Dirichlet 類型之邊界條件，在熱流傳輸之初始條件上，模擬區域之溫度皆設定為  $25 (^\circ C)$ ，與邊界條件一樣。在源匯點之設定上，設定注入水流之溫度為  $90 (^\circ C)$ ，亦即實際注入之熱量則需依據注入之水量進一步計算。

圖 4-10 與 4-11 分別為本案例在 1 與 24 小時之溫度分布等值圖，從圖 4-10 顯示，經過一小時之  $90 (^\circ C)$  熱水注入後，在上游井處溫度迅速由  $25 (^\circ C)$  提昇至  $40 (^\circ C)$  以上。經過 24 小時持續注入熱水後，則上游井處溫度持續升高。除此之外，由於背景水流為由

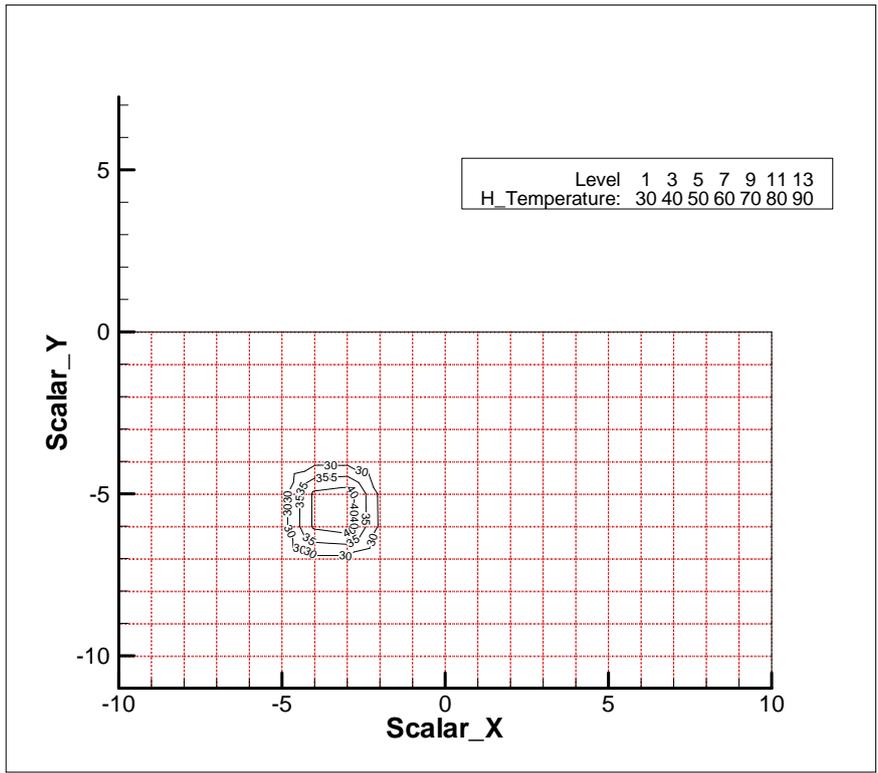


圖 4-10: 溫度分布等值圖(  $time = 3,600s = 1hr$  )

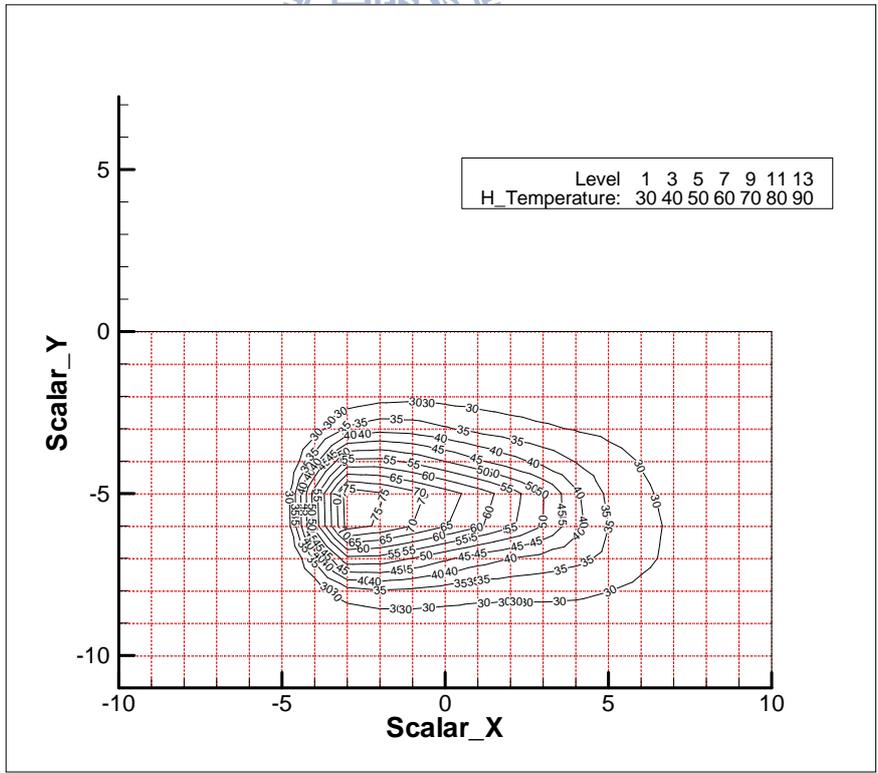


圖 4-11: 溫度分布等值圖(  $time = 86,400s = 24hr$  )

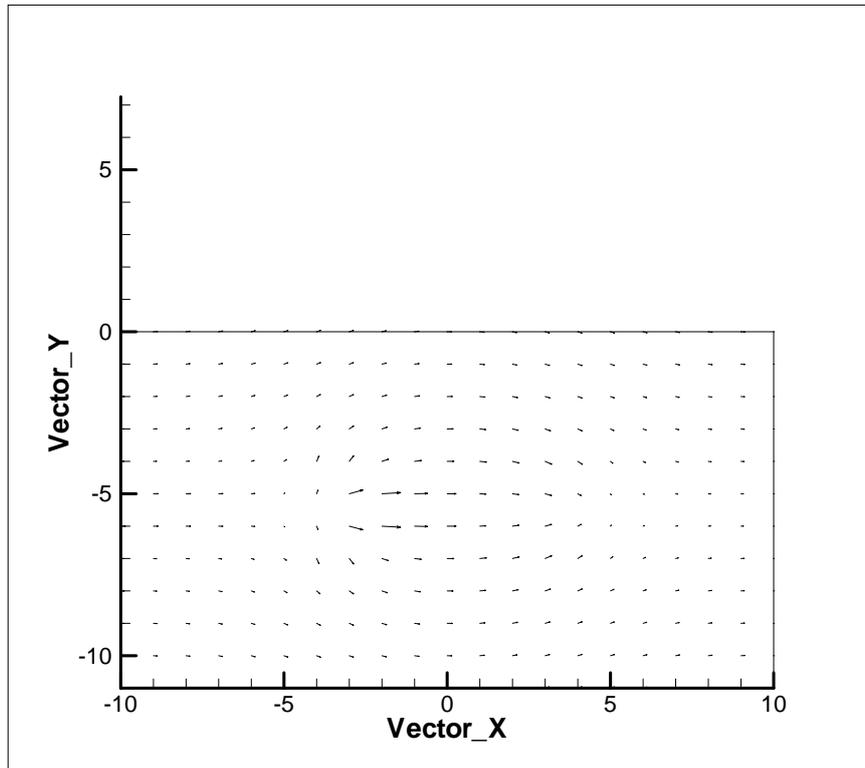


圖 4-12: 熱流傳輸流向圖 ( $time = 3,600s = 1hr$ )

左往右流動，因此熱能亦被水流往右帶動，如以  $30 (^{\circ}C)$  等值線視為熱水注入井之影響半徑，顯示影響範圍呈現橢圓形狀，約抵達到下游井位置。

圖 4-12 為 1 小時當時之熱能傳輸流向圖，從圖面之箭頭指出熱能流向與圖 4-8 之水流流向極為類似，顯示本案例主要受到對流項 (Advection) 之影響，高於擴散項 (Diffusion) 之影響。從設定參數觀察之，水流與土體之熱傳導係數分別為  $0.556$  與  $2 (J/s \cdot m^{\circ}K)$ ，因此兩者之等效熱傳導係數不會高於  $2 (J/s \cdot m^{\circ}K)$ ，本案例中網格長寬均設為 1 公尺，如假設兩網格之溫度差為  $50^{\circ}K$ ，則網格間之單位面積擴散項熱穿越率應小於  $100 J/s \cdot m^2$ 。而在對流項部分，如以案例背景水流粗估，背景水流之左右兩邊界水頭差為 40 公尺，兩端距離 22 公尺，水力傳導係數為  $10^{-5} (m/s)$ ，粗估水流流速約為  $1.8 \times 10^{-5} (m/s)$ ，而對流項之計算需再乘上密度 ( $1,000 kg/m^3$ )、比熱 ( $4,179$ ) 與水流溫度，如假設水流溫度為  $25^{\circ}C (= 298.16^{\circ}K)$ ，粗略估算下之單位面積對流項熱穿越率約為  $22,000 J/s \cdot m^2$ ，約大擴散項三個因次，因此熱流問題主要受到對流項之影響。

圖 4-13 為兩水井之總水頭隨時間變化圖，其中標註為  $GH$  表示為本案例之水流與熱流耦合模擬案例，標註為  $G$  者為前述水流獨立運算之非耦合模擬案例，從圖上顯示上游之注入井之兩案例水位僅有在第一時刻與初始時刻一樣，其後耦合案例之水位迅速下降，但仍高於初始水位；而下游之抽水井則約在 9 小時後才逐漸偏離非耦合案例之模擬水位，逐漸從最低水位抬昇，但其最終水位仍低於初始水位。由此可知，顯示耦合案例之水流流況，受到溫度變化影響極大。圖 4-14 為兩水井之溫度隨時間變化圖，上游井因為本身就是熱水之注入源，因此溫度迅速提昇，而下游井則在 12 小時後才開始提高其水流溫度。

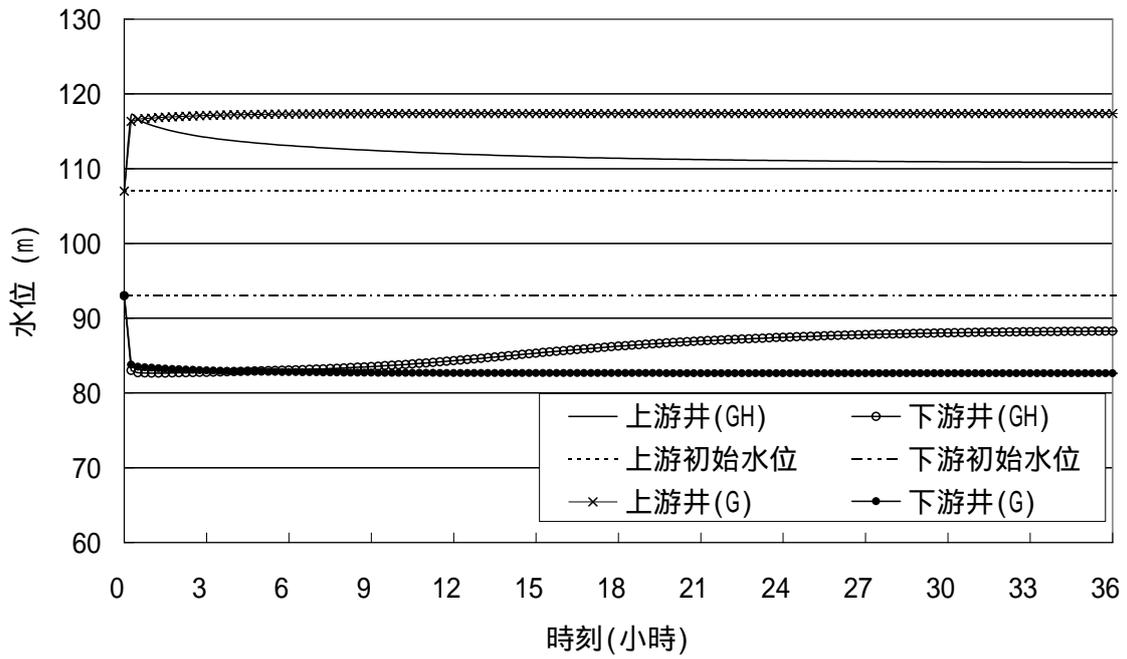


圖 4-13: 抽注水井總水頭隨時間變化圖(不同案例)

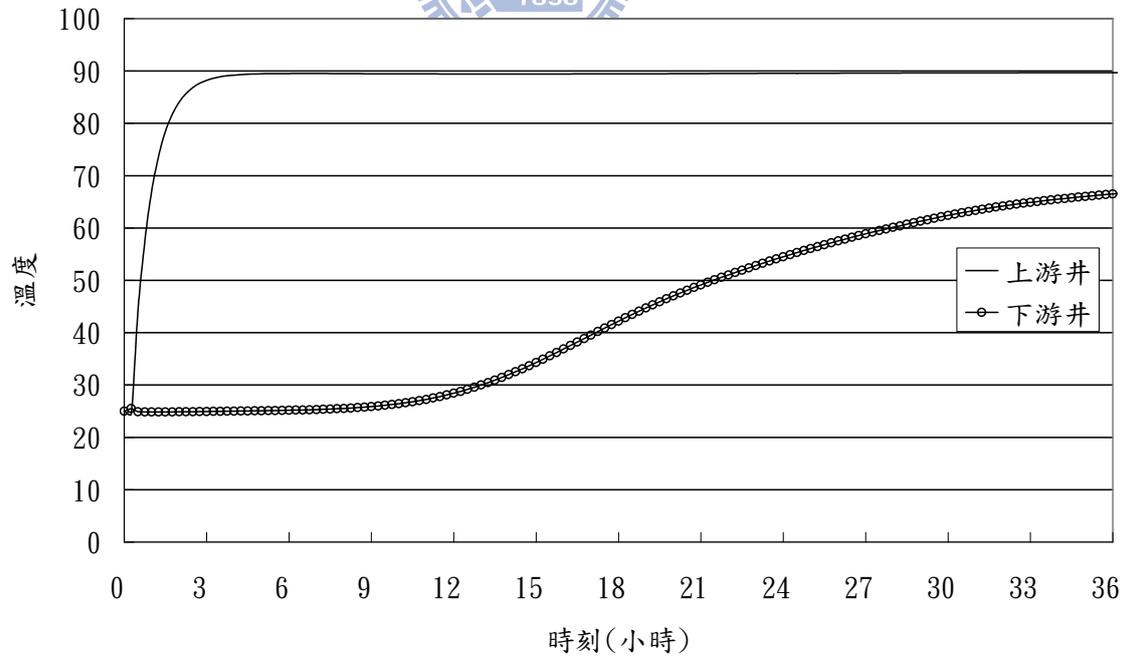


圖 4-14: 抽注水井溫度隨時間變化圖

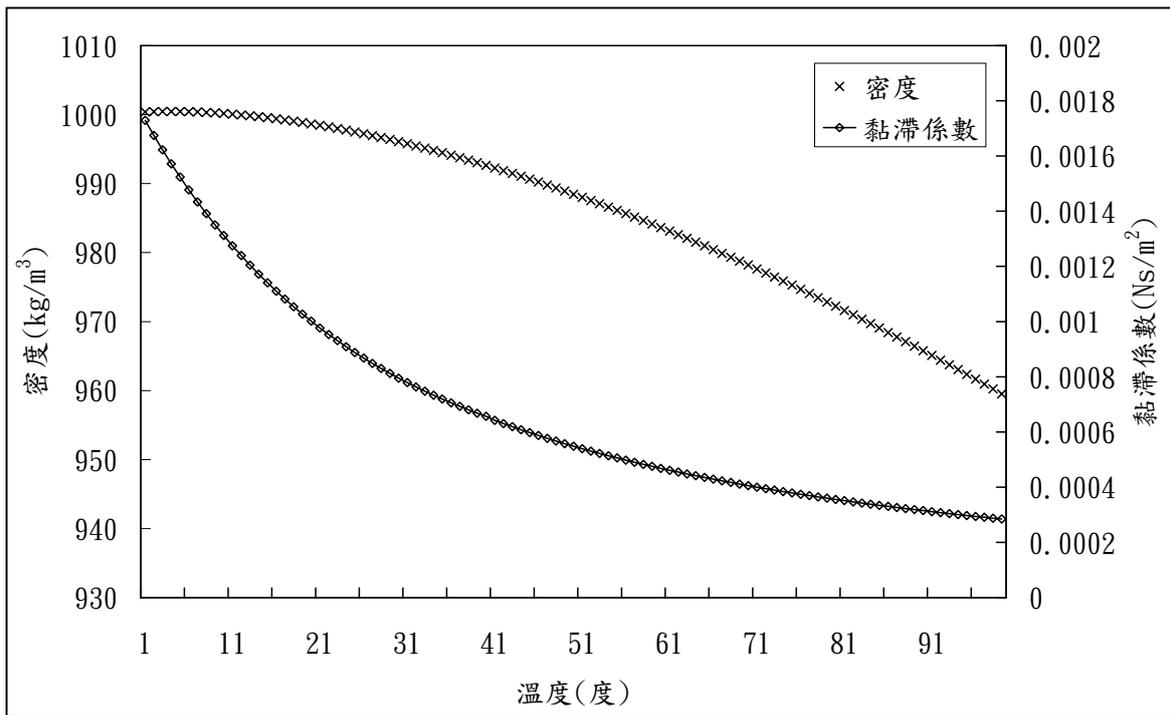


圖 4-15: 溫度、水流密度與黏滯係數變化關係圖

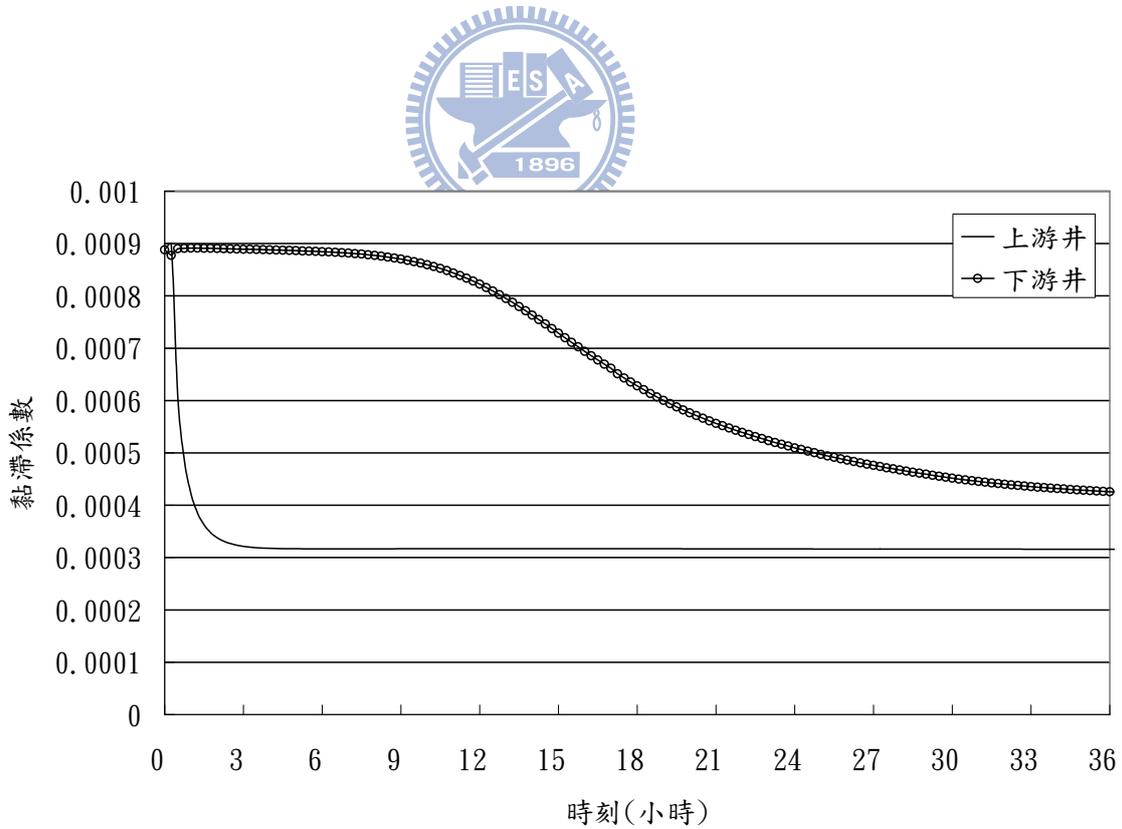


圖 4-16: 抽注水井黏滯係數隨時間變化圖

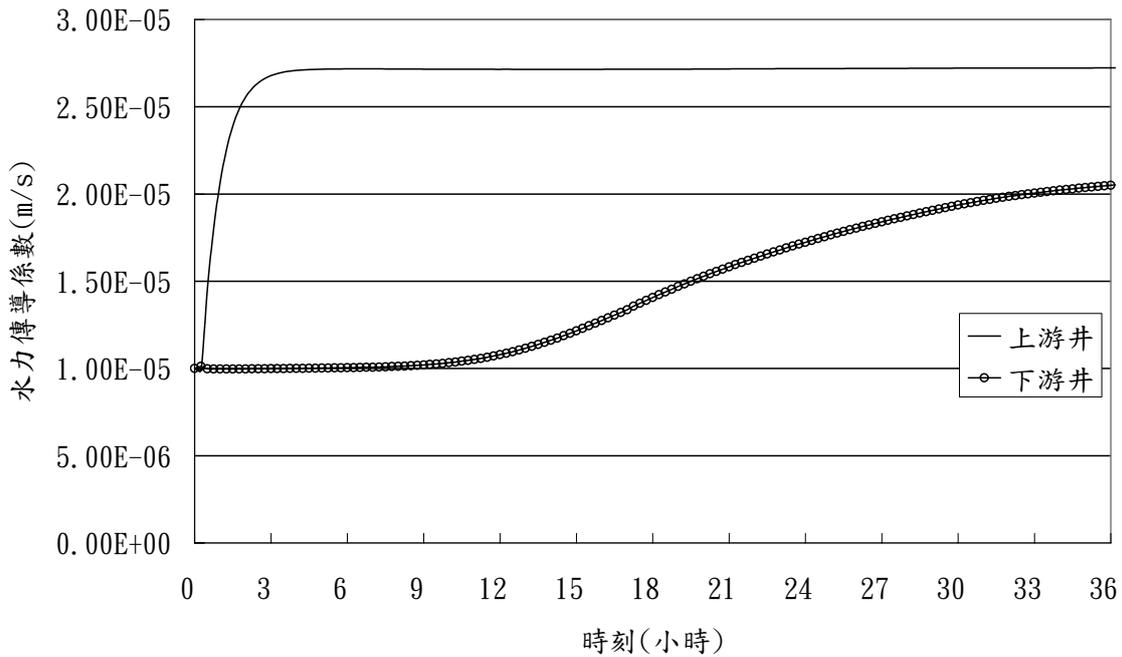


圖 4-17: 抽注水井水力傳導係數隨時間變化圖

如觀察溫度 ( $T$ ) 與水流密度 ( $\rho_l$ ) 及黏滯係數 ( $\mu_l$ ) 之變化關係(如圖 4-15 所示), 溫度變化範圍為 1 至 99 °C 之間, 水流密度約從 1,000 遞減至 940  $kg/m^3$ , 變化幅度不到一成, 而黏滯係數上則從  $1.8 \times 10^{-3}$  遞減至  $0.2 \times 10^{-3}$  ( $N \cdot s/m^2$ ), 變化幅度遠大於密度變化。圖 4-16 為兩水井之黏滯係數隨時間變化圖, 一天半後之黏滯係數不足初始條件之一半, 而黏滯係數在水流問題中會影響水力傳導係數之估算(詳見式 (3-6) 所示), 黏滯係數與水力傳導係數呈倒數關係, 使得水井附近之水力傳導係數大幅提高。因此當相同之抽注水源條件下, 較大之水力傳導係數, 會形成較小之水力梯度, 因此造成圖 4-13 中, 本案例在溫度升高後, 其總水頭會往初始水位靠近之現象。

#### 4.4 非穩態垂向二維地下水流與熱流傳輸耦合模擬(地下熱源環境注入常溫水流案例)

在本案例中, 水流部分仍舊維持 4.2 小節之設定, 上下左右均採 Dirichlet 邊界條件, 背景水流由左往右流動, 抽水率為 0.2( $kg/s$ )。在熱流部分則將下邊界改為 91 °C, 上邊界則仍然維持為 25 °C, 左右兩邊界則以線性方程式(式 (4-3))由上往下逐步遞增。熱流部分初始條件之設定亦沿用式 (4-3)。

$$T = -6y + 25 \quad (4-3)$$

本案例受到下方定溫熱源加熱中, 類似溫泉環境之熱流條件, 下游抽水井抽取溫泉之熱水, 上游注入井則用以等量常溫 (25 °C) 水源補充含水層水源, 藉由下方熱源持續加熱使得下游抽水井可以抽出溫泉水。但是過大之抽水量, 將可能使得溫泉溫度下降。

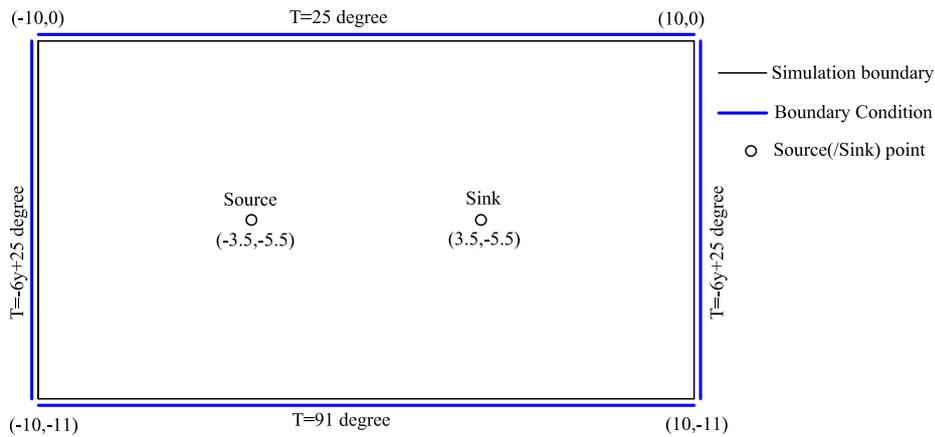


圖 4-18: 非穩態垂向二維熱流傳輸模擬圖(注入常溫水流案例)

圖 4-19、4-20、4-21 與 4-22 分別為本案例於初始時刻、第 1 小時、第 1 天與第 2 天之溫度分布等值圖，初始時刻之溫度分布以線性方式等間距往上遞減。而在初始時刻後，由於上游水井注入之水溫為  $25^{\circ}\text{C}$  常溫，因此該位置之溫度較低，注入水量隨著由左至右之背景水流逐漸往右流動，因此形成一個橢圓之低溫帶。



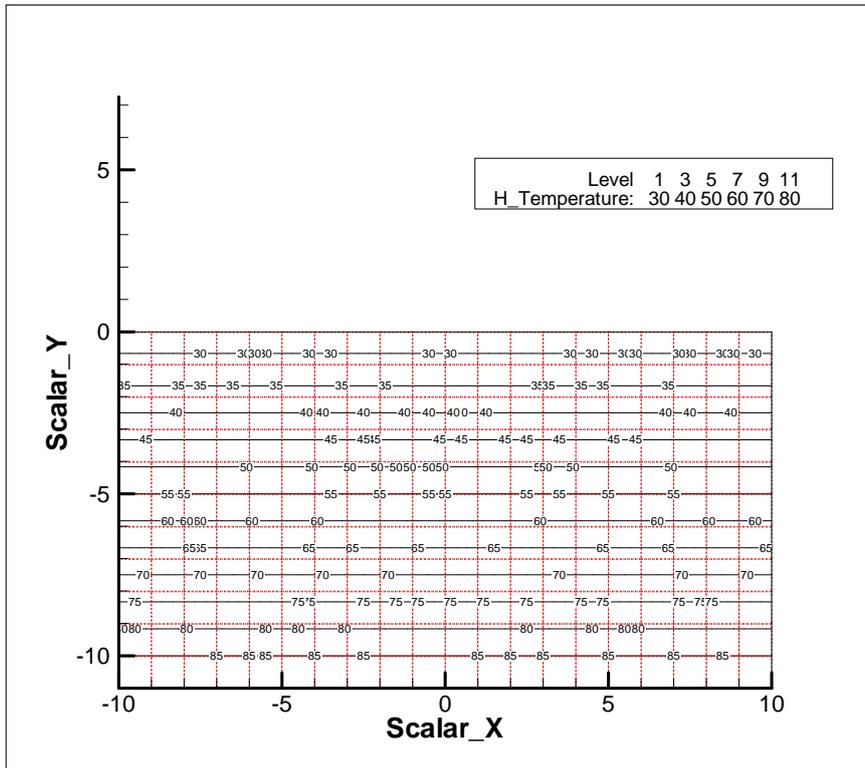


圖 4-19: 溫度分布等值圖 ( $time = 0s = 0hr$ )

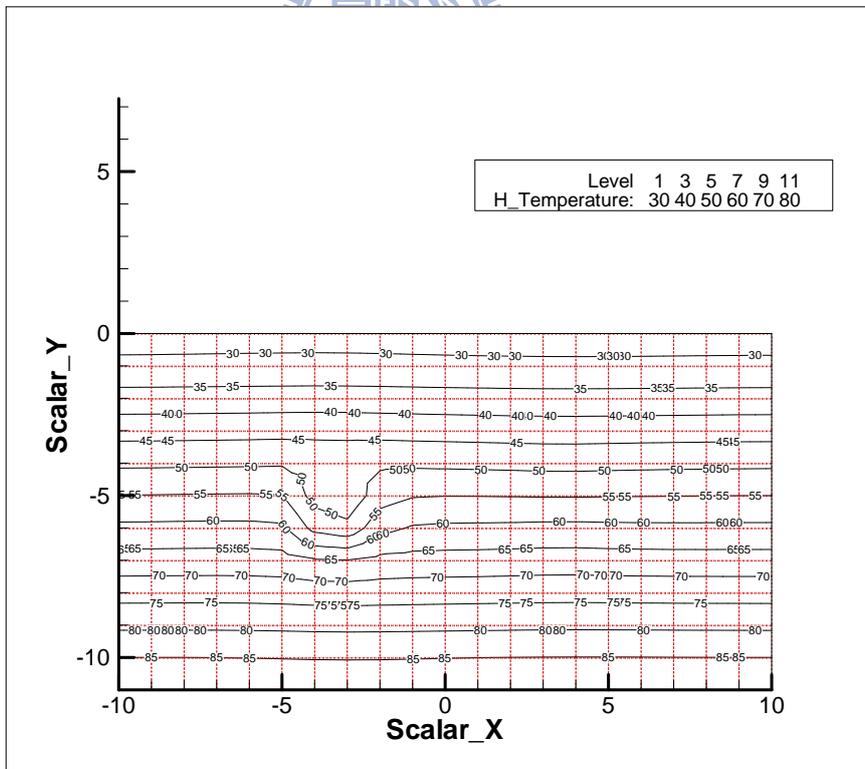


圖 4-20: 溫度分布等值圖 ( $time = 3,600s = 1hr$ )

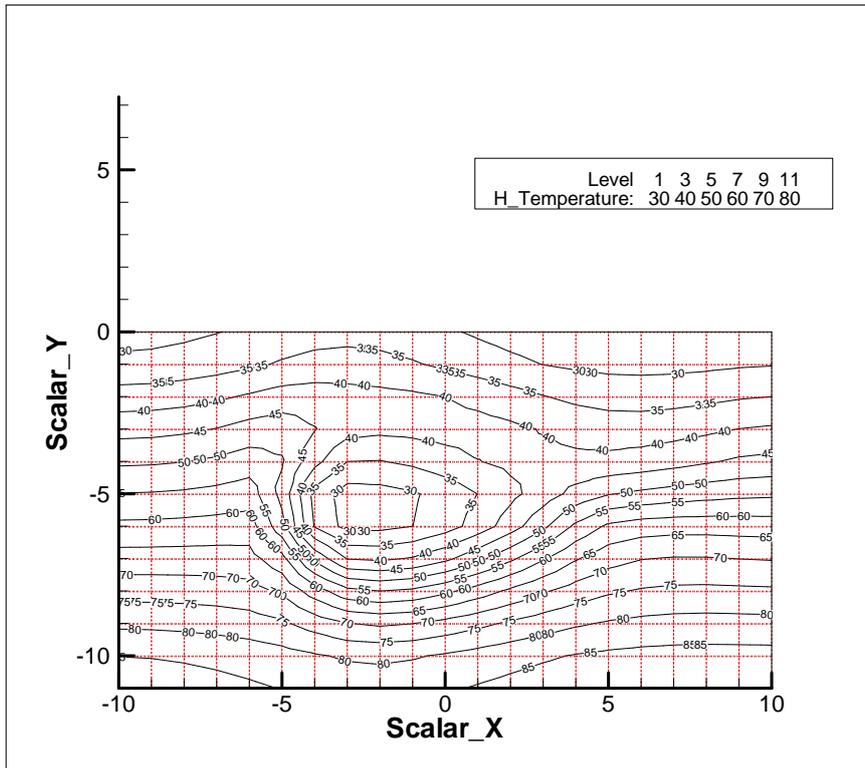


圖 4-21: 溫度分布等值圖(  $time = 86,400s = 24hr$  )

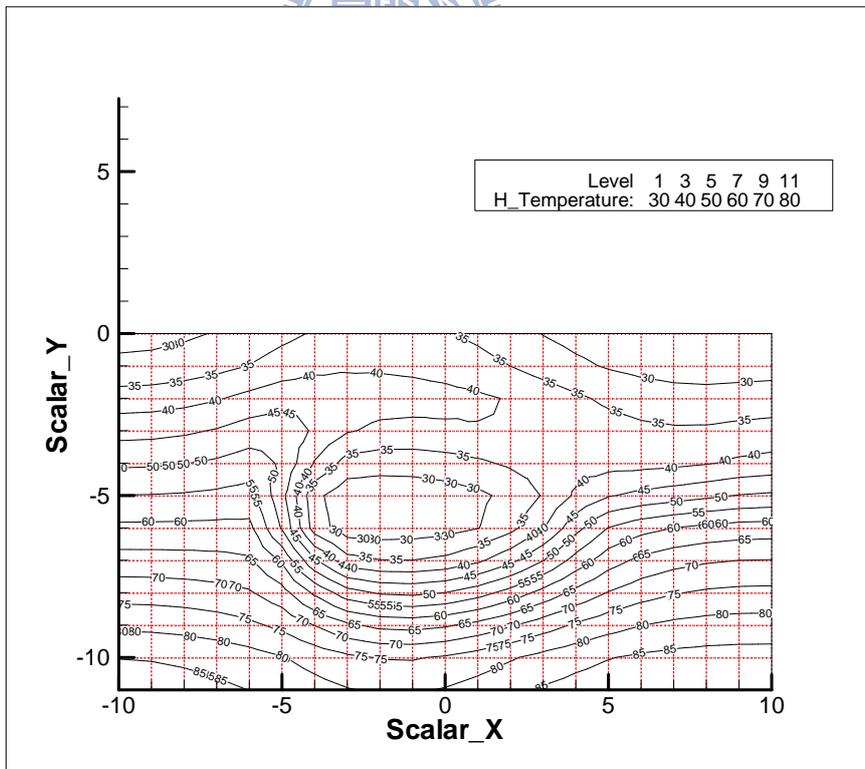


圖 4-22: 溫度分布等值圖(  $time = 172,800s = 48hr$  )

圖 4-23 與 4-24 以本案例之模擬結果，跟 4.2 與 4.3 小節之模擬結果作比較，圖上標註 *GS* 代表水流之非耦合案例，*GSH1* 與 *GSH2* 則是水流與熱流之耦合案例，其中 *GSH1* 則是 4.2 小節之模擬結果，*GSH2* 則是代表本案例。圖 4-23 為展示抽水井之溫度變化圖，由於 *GS* 案例為非耦合案例，因此溫度為  $25^{\circ}\text{C}$  定值，*GSH1* 案例之抽水井溫度是由  $25^{\circ}\text{C}$  逐步上升，而 *GSH2* 案例之抽水井溫度是由  $58^{\circ}\text{C}$  逐漸往下降低。

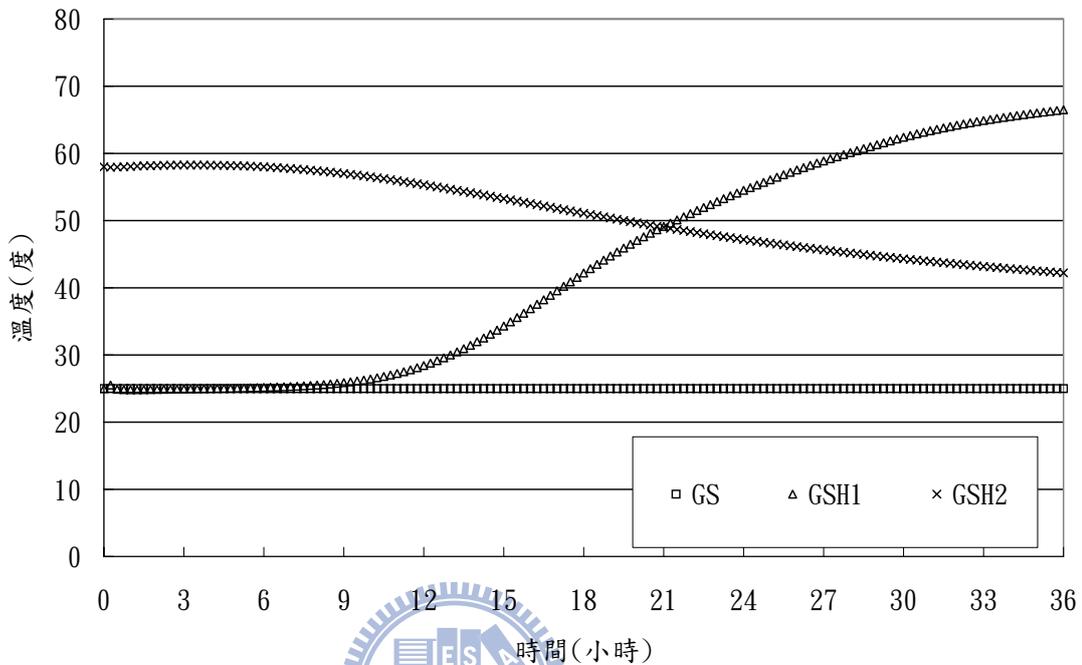


圖 4-23: 抽水井溫度隨時間變化圖(不同案例)

圖 4-24 則是比較三個案例的總水頭變化，圖中顯示不同熱流環境之設定，強烈影響黏滯係數之變化，進一步使得總水頭分布有極大之差異，以 0 至 36 小時期間，最大可差異 5 公尺以上，溫度越高者，其洩降幅度越小。

另外，本案例亦針對抽注水量進行敏感度分析，在此分別以  $0.2(\text{kg/s})$ 、 $0.1(\text{kg/s})$  與  $0.05(\text{kg/s})$  為案例之抽注水量進行模擬，圖 4-25 與 4-26 分別為抽水井在不同抽水率下之溫度與總水頭隨時間變化圖，從圖 4-25 中顯示，抽注水量越大者，抽水井的溫度下降越快，顯示雖然上游注入井補充等量之水源，但是下方熱源不足以提供足夠之熱量，因此抽出水量之溫度越來越低，可以模擬溫泉業者於週末期間旅客眾多時，溫泉溫度下降之狀況。圖 4-26 展示  $0.2(\text{kg/s})$ 、 $0.1(\text{kg/s})$  與  $0.05(\text{kg/s})$  不同抽水量之總水頭分布圖，其中三個案例均在第一個時刻有極大洩降量，接著再逐漸地下降直到趨於穩定為止。

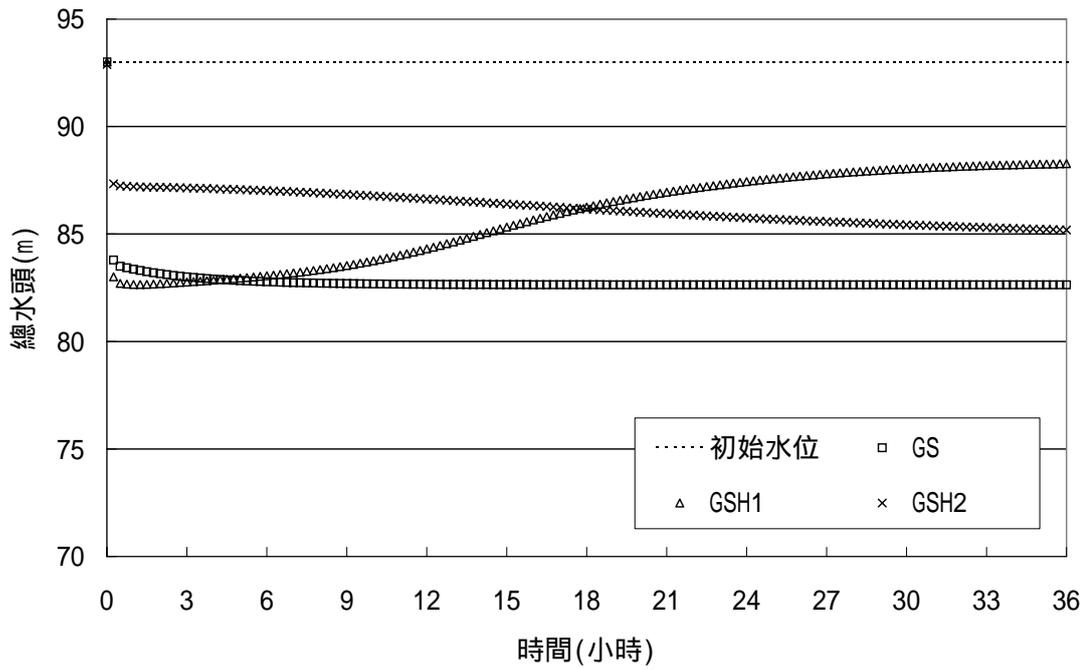


圖 4-24: 抽水井總水頭隨時間變化圖(不同案例)

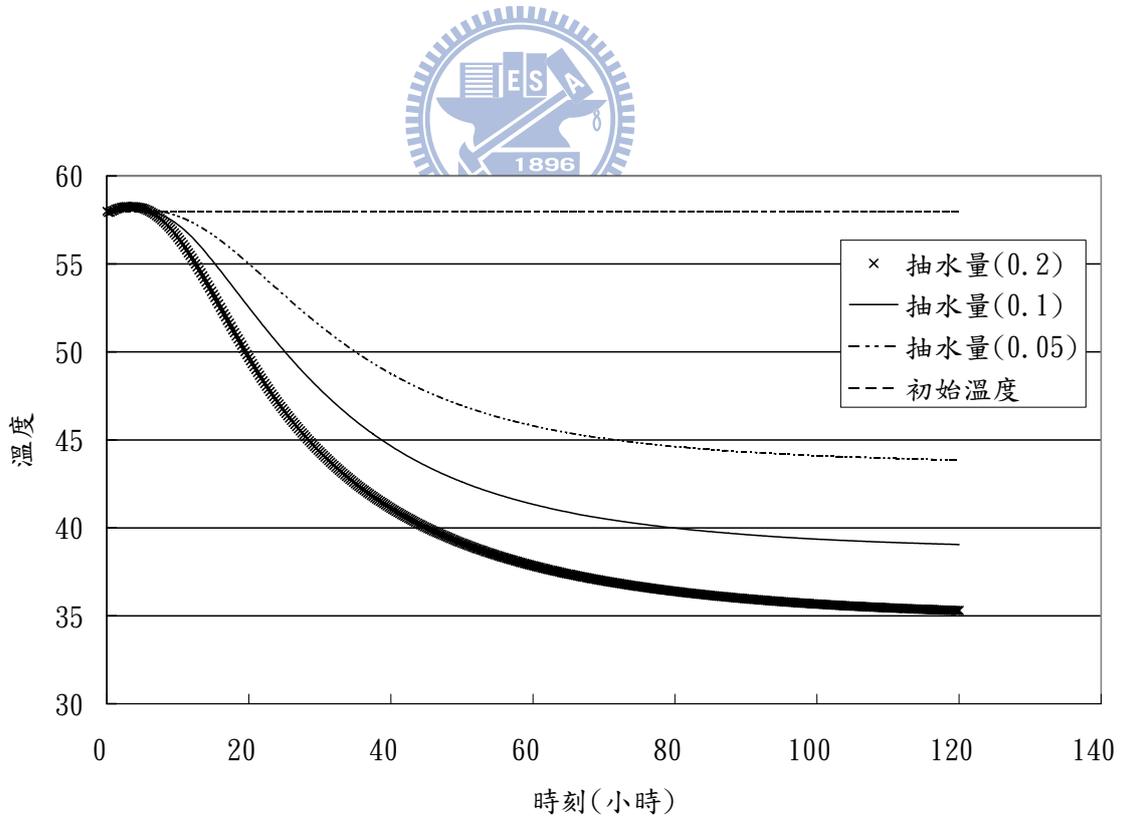


圖 4-25: 抽水井溫度隨時間變化圖(不同抽水量)

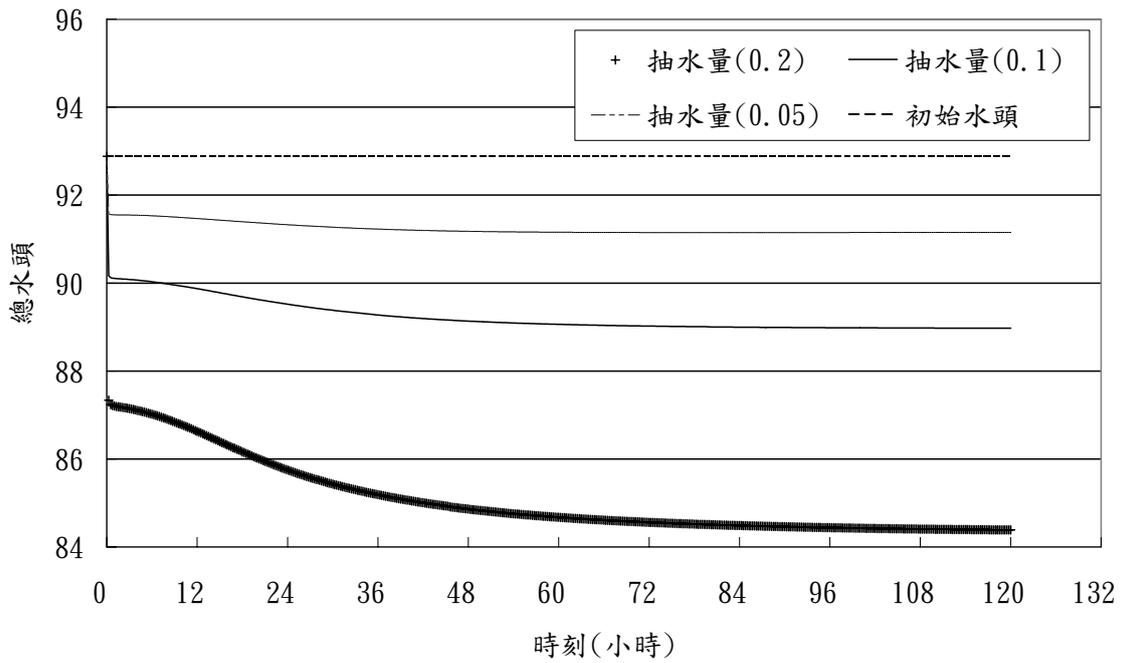


圖 4-26: 抽水井總水頭隨時間變化圖(不同抽水量)

## 4.5 非穩態垂向二維地下水流、熱流傳輸與溶質傳輸耦合模擬

表 4-4: 溶質傳輸子問題局部參數設定表

局部參數項次	局部參數	數值	單位
1	$\rho_s$	2,323	( $kg/m^3$ )
2	$D$	$1.6 \times 10^{-9}$	( $m^2/s$ )

表 4-5: 溶質傳輸子問題全域參數設定表

全域參數	數值設定	單位
$K_{sorb,d}^o$	$3.0 \times 10^{-6}$	( $m^3/kg$ )
$c_1^{sorb}$	-0.00769	
$c_2^{sorb}$	0	
$M_r$	58.4	( $g/mol$ )
$a$	0.000107517	( $m^{3/2}/mol^{1/2}$ )
$b$	0.000463	( $m^3/mol$ )
$T^o$	25	( $^o C$ )

本案例為地下水流、熱流傳輸與溶質傳輸三者之耦合模擬案例，在地下水流部分沿用 4.4 之設定，並無背景水流。而熱流部分則沿用 4.3 小節之設定，四方均是  $25^o C$  之定溫邊界條件，中央注入  $90^o C$  之熱水。表 4-4 與 4-5 分別展示本案例於溶質傳輸部分之局部與全域參數設定，本案例之模擬溶質設定為  $NaCl$ ，亦即鹽份之模擬，其分子量為 58.4，Jones-Dole 方程式之參數  $a$  與  $b$ ，則參考 Hammadi 與 Champeney [29]

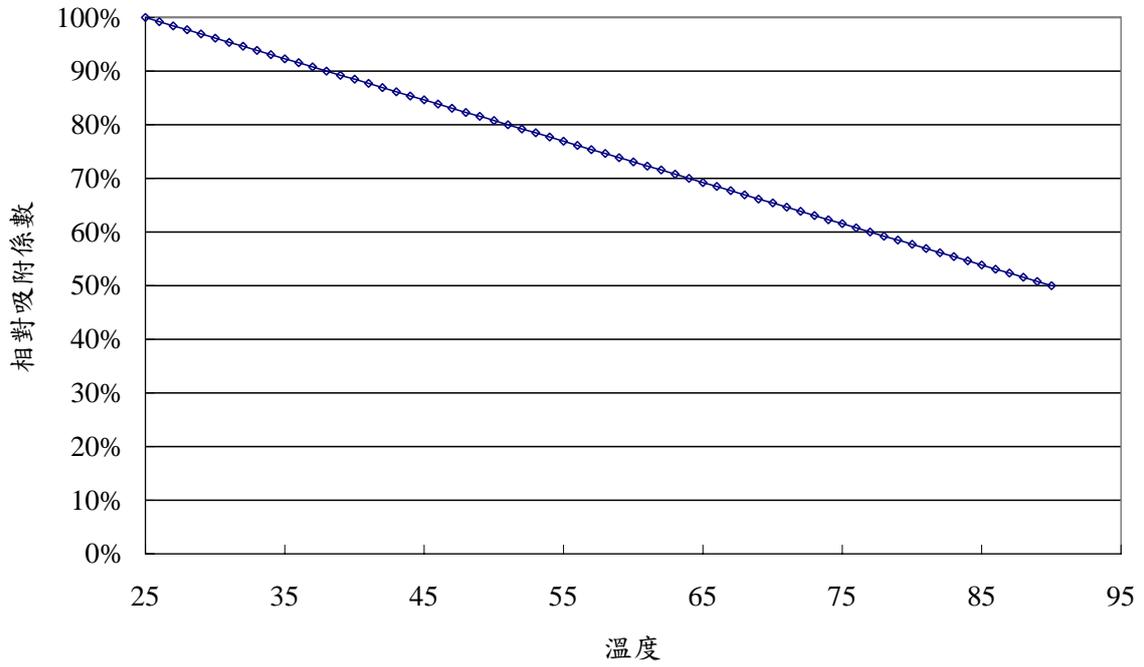


圖 4-27: 相對吸附係數隨溫度變化圖

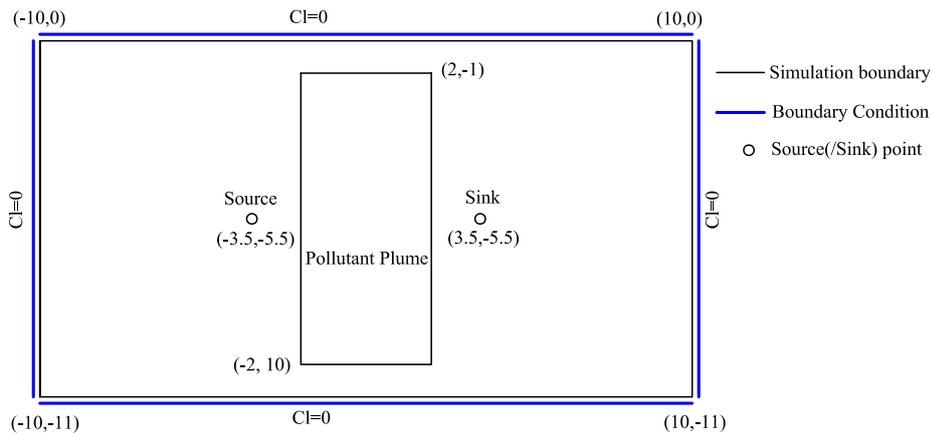


圖 4-28: 非穩態垂向二維溶質傳輸模擬圖

之研究。另外，由於溫度之提昇會使得原本吸附於土粒上之溶質溶解出，因此將會使等溫吸附係數  $K_{sorb,d}$  之數值降低，本研究在此假設初始常溫為  $25^{\circ}C$ ，如果溫度提昇至  $90^{\circ}C$ ，其吸附係數將線性降低至原本之一半，其數值變化如圖 4-27 所示，依此假設定  $C_1^{sorb}$  與  $C_2^{sorb}$ ，其數值分別為  $-0.00769$  與  $0$ 。在  $25^{\circ}C$  之  $K_{sorb,d}$  部分則參考 Graf 與 Therrien [21] 之研究，其數值取  $3.0 \times 10^{-6} (m^3/kg)$ ，如搭配前述  $C_1^{sorb}$  與  $C_2^{sorb}$ ， $90^{\circ}C$  時之吸附係數即為  $1.5 \times 10^{-6} (m^3/kg)$ 。圖 4-28 為溶質傳輸部分的模擬圖，其四方邊界條件均以 Dirichlet 邊界條件設定為無溶質存在，初始條件部分則在中央部分有一塊濃度為  $0.5 (kg/m^3)$  的污染團。透過左右兩端之抽注水井，可以進行污染整治。

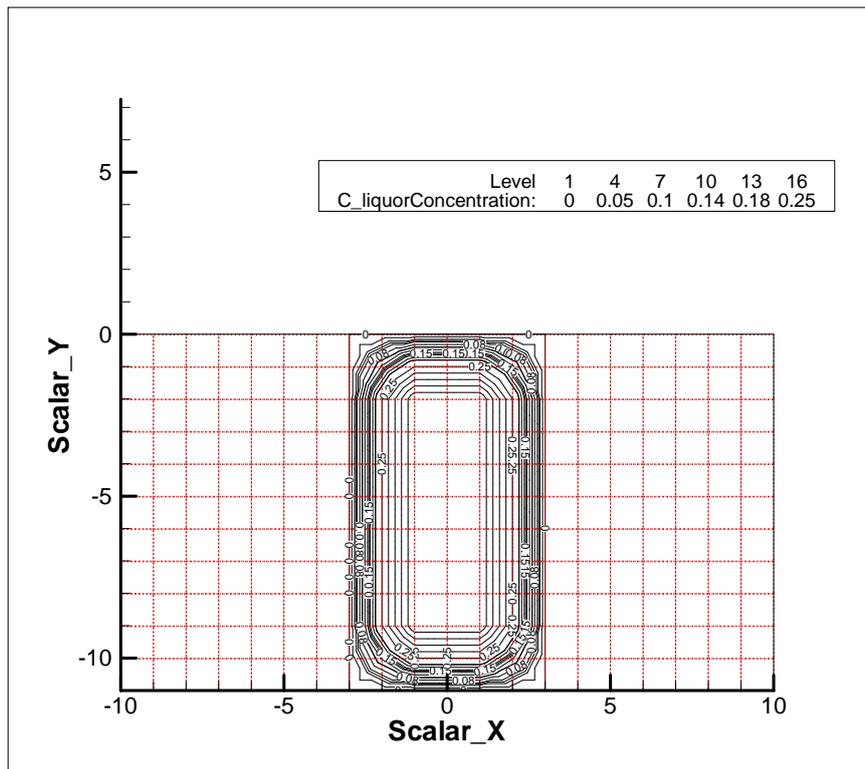


圖 4-29: 濃度分布等值圖(  $time = 0s = 0hr$  )

圖 4-29、4-30、4-31 與 4-32 分別為 0、1、24 與 48 小時的濃度分布圖，圖 4-29 亦為初始條件。相較於初始條件，圖 4-30 中由於受到右方抽水井與左方注水井之影響，因此溶質於中央部位逐漸往右方移動。在圖 4-31 與 4-32 中顯示 24 與 48 小時後則逐漸呈現菱角形狀，在菱角的兩端溶液濃度最高。圖 4-33 為水流流向圖，圖中的箭頭長度與流速呈正比關係，顯現除了抽注水井附近外，其餘地區的流速較小。上述菱角狀的濃度分布形狀，是受到水流流動之影響，順著流線流入抽水井中，上下兩端因為流動速度較低之關係，因此整治效果較差，存有較高之濃度。

從圖 4-29 至 4-32 已可以顯示本研究在溶質傳輸的模擬正確性。以下將應用前述案例為基礎，調動不同條件，探討不同條件對於模擬結果之差異，表 4-6 為各案例之說明比較表，其中案例編號 *case02* 即為前述之原案例，*case02a* 與 *case02b* 則取不同之  $25^{\circ}C$  之

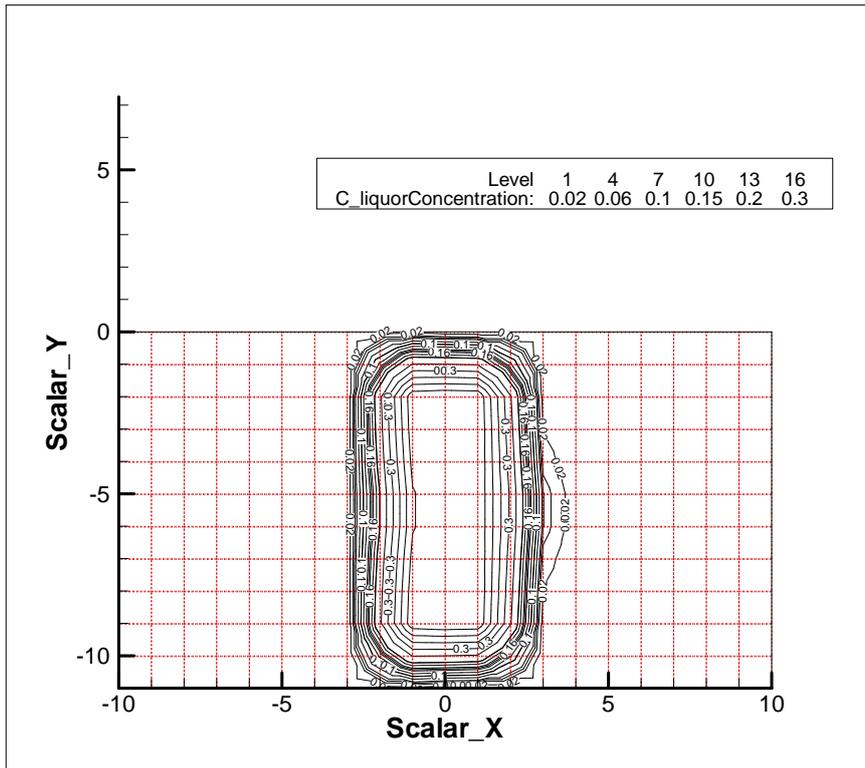


圖 4-30: 濃度分布等值圖(  $time = 3600s = 1hr$  )

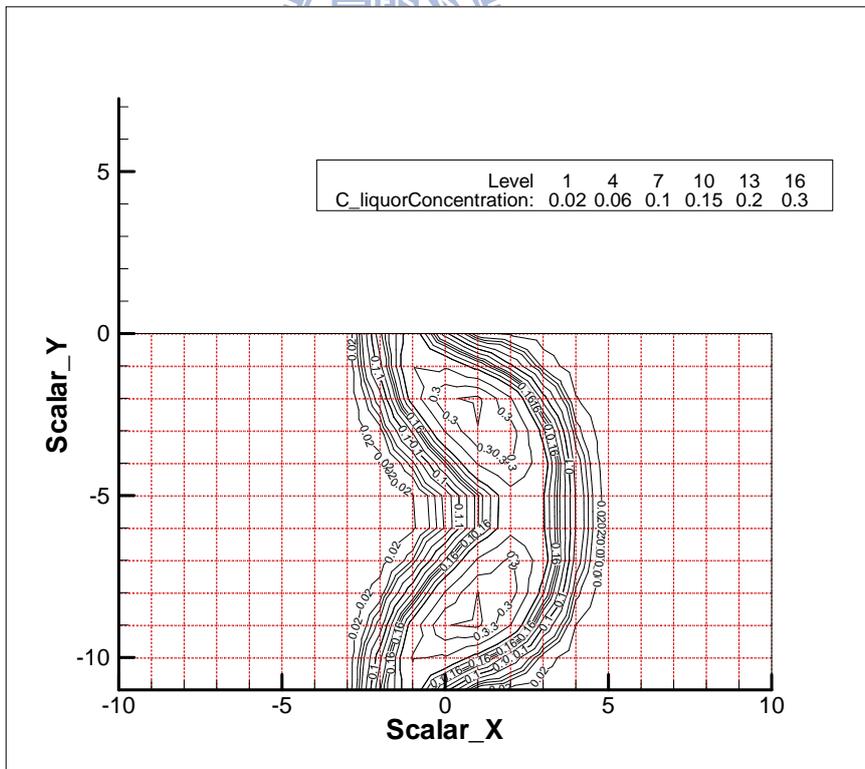


圖 4-31: 濃度分布等值圖(  $time = 86,400s = 24hr$  )

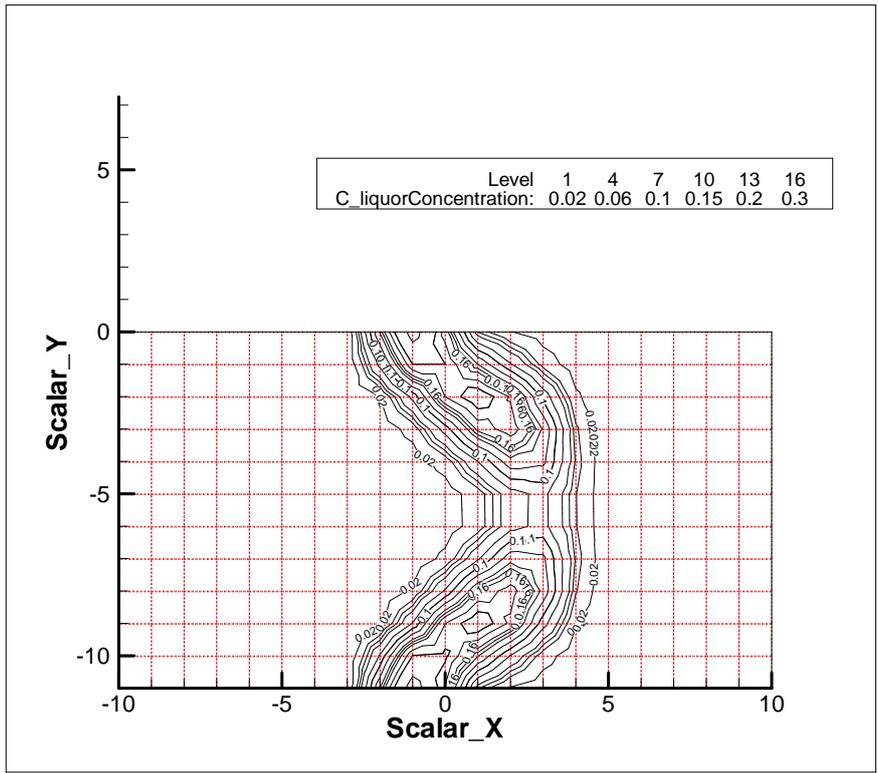


圖 4-32: 濃度分布等值圖(  $time = 172,800s = 48hr$  )

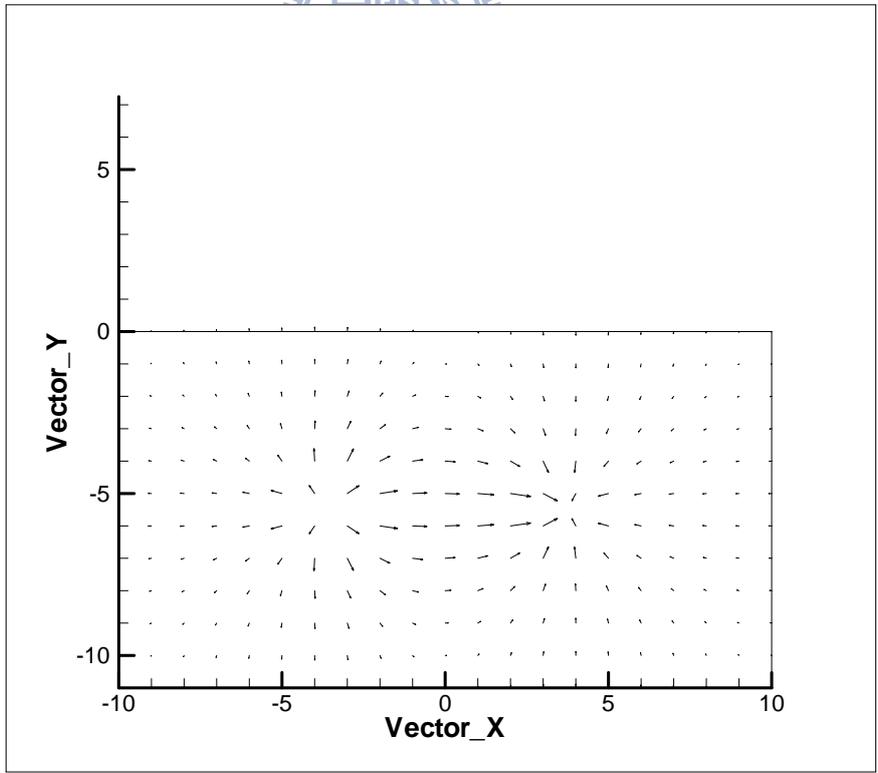


圖 4-33: 水流流向圖(  $time = 172,800s = 48hr$  )

表 4-6: 案例設定比較表

案例編號	$K_{sorb,d}^{\circ}$	注入水源溫度	備註
case02	$3 \times 10^{-6}$	注入 90°C 熱水	(原案例)
case02a	$3 \times 10^{-5}$	注入 90°C 熱水	
case02b	$1 \times 10^{-4}$	注入 90°C 熱水	
case03	$3 \times 10^{-5}$	注入 25°C 冷水	

初始吸附係數，藉此比較不同初始吸附係數對於模擬結果之影響。而 case03 則是 case02a 之實驗案例，其是以冷水注入，藉此比較溫度對於溶質吸附之運動變化。

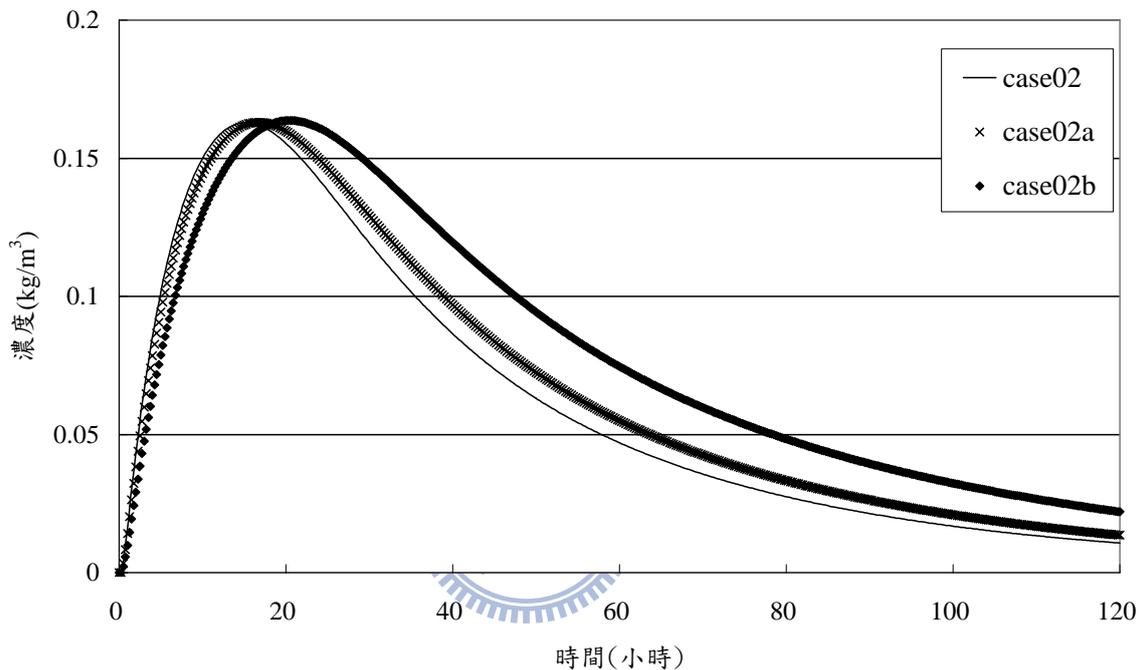


圖 4-34: 抽水井濃度變化圖 (比較案例: case02、case02a 與 case02b)

首先，針對 case02、case02a 與 case02b 進行不同初始吸附係數對於模擬結果的探討，案例 case02 之吸附係數最小，而案例 case02b 之吸附係數最大。圖 4-34 繪出不同案例於抽水井位置濃度之變化圖，由於污染團塊之位置是設定在抽水井與注水井中央，因此初期抽水井位置之濃度極低，但因為抽水井與注水井所造成之水流流動，因此會將團塊往抽水井位置搬移，其後因為抽水效果，所以逐步將溶質從系統抽出，而水井位置之濃度亦隨之下降。從圖 4-34 所示，三個案例之濃度變化均從初期之升高段，在 20 小時前後達到最高峰，其次再逐步下降，而以 case02 案例最快到達最高濃度，且最終濃度亦下降最快；反之，case02b 案例之最高濃度最晚達到，且最終濃度亦最高。顯示當吸附效果大時，假設流入相同之溶質質量，由於高吸附係數之關係，其必須分配更高之比例於土粒吸附上，因此溶液濃度之提昇較低，顯示抽注水井在高吸附係數案例中，抽注水影響效應較差。

圖 4-35 則是將整體系統中，所有網格之溶質質量隨時間之變化繪製於圖中，在圖中案例 *case02* 之總溶質質量下降幅度亦較其他兩個案例為快。圖 4-36 為系統溶質移除率變化圖，溶質移除率方程式如下所示，其中  $N$  代表計算節點數量，因此初始系統總溶質質量為分母，分子則是該時刻總溶質質量與初始溶質質量之差值，在圖中顯示，案例 *case02* 亦最快到達 90% 之移除率。

$$R_{Move}^t = \frac{\sum_{i=1}^N M_{cl,i}^0 - \sum_{i=1}^N M_{cl,i}^t}{\sum_{i=1}^N M_{cl,i}^0} \times 100 \%$$

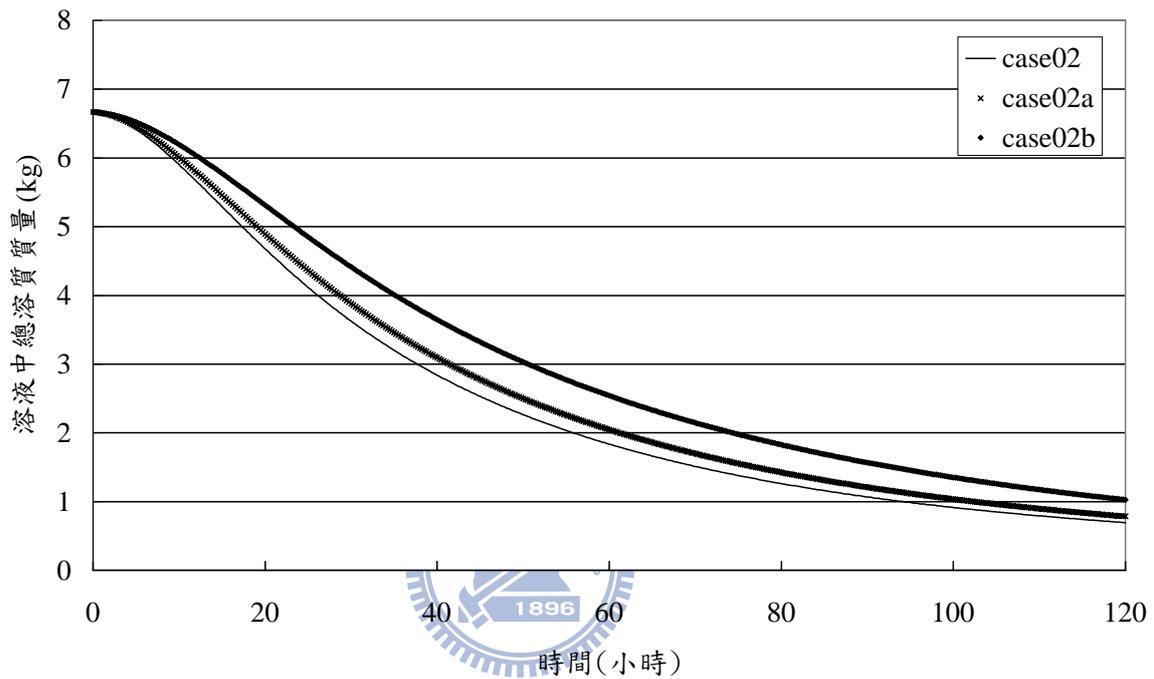


圖 4-35: 溶液中系統總溶質質量變化圖 (比較案例: *case02*、*case02a* 與 *case02b*)

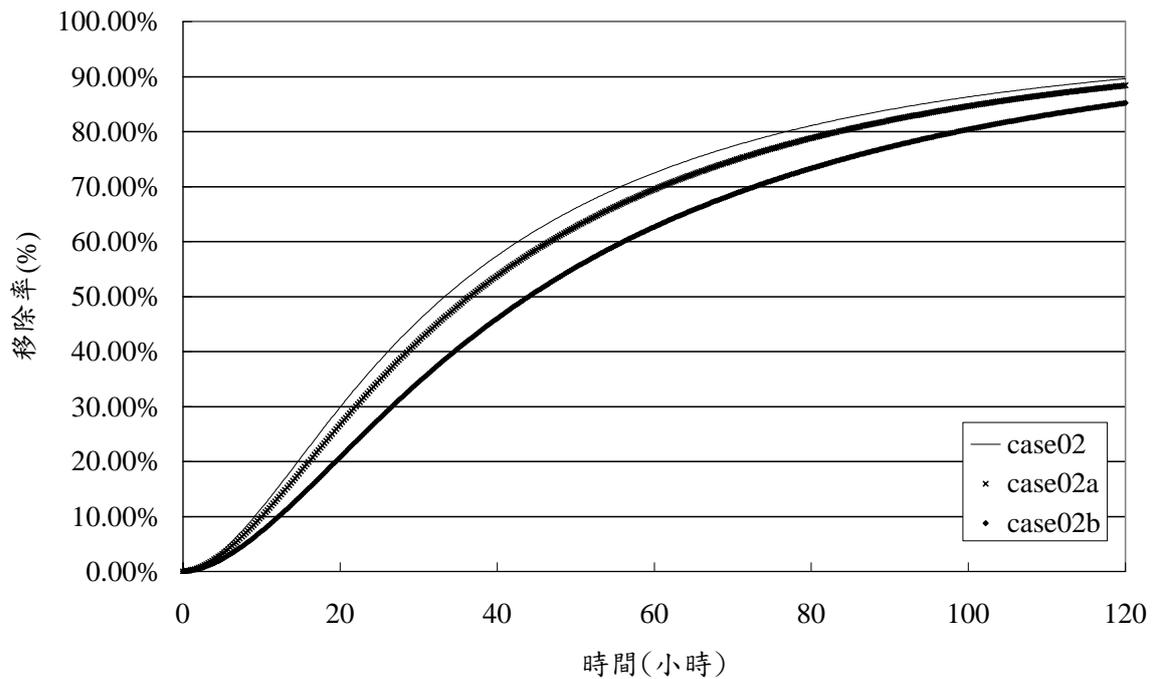


圖 4-36: 溶質移除率變化圖 (比較案例: *case02*、*case02a* 與 *case02b*)

案例 *case02a* 與 *case03* 則分別以  $90^{\circ}\text{C}$  與  $25^{\circ}\text{C}$  之水流注入水井，藉此表現不同溫度對於整治效果之差異。圖 4-37 為抽水井濃度變化圖，其中 *case02a* 為熱水案例，在 20 至 60 小時期間，其濃度相較於 *case03* 冷水案例為低，符合預期。然其變化幅度並不大，這是因為從案例設定，從  $25^{\circ}\text{C}$  升高至  $90^{\circ}\text{C}$  時，其吸附係數僅降低為原本之一半，相較於前述 *case02*、*case02a* 與 *case02b* 之變化幅度，本案例之變化幅度較小，因此模擬結果上之差異亦較小。在圖 4-38 與 4-39 則分別為比較案例之總溶質質量變化圖與溶質移除率變化圖，雖然變化幅度不大，但是亦可顯示熱水對於整治過程有較佳之結果。

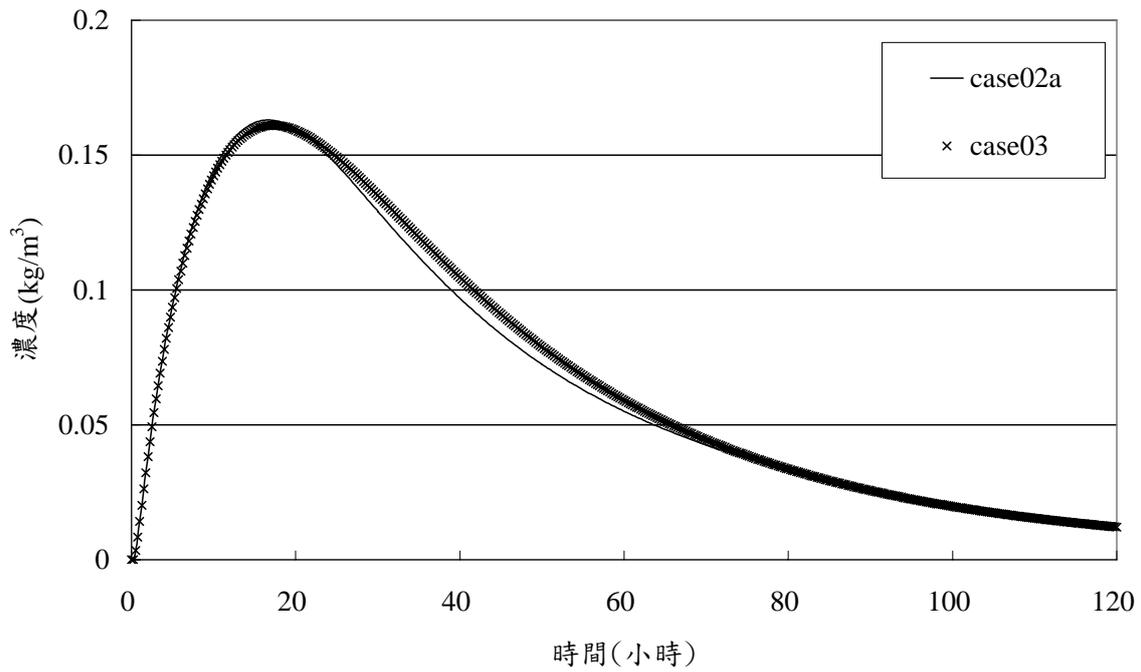


圖 4-37: 抽水井濃度變化圖 (比較案例: *case02a* 與 *case03*)

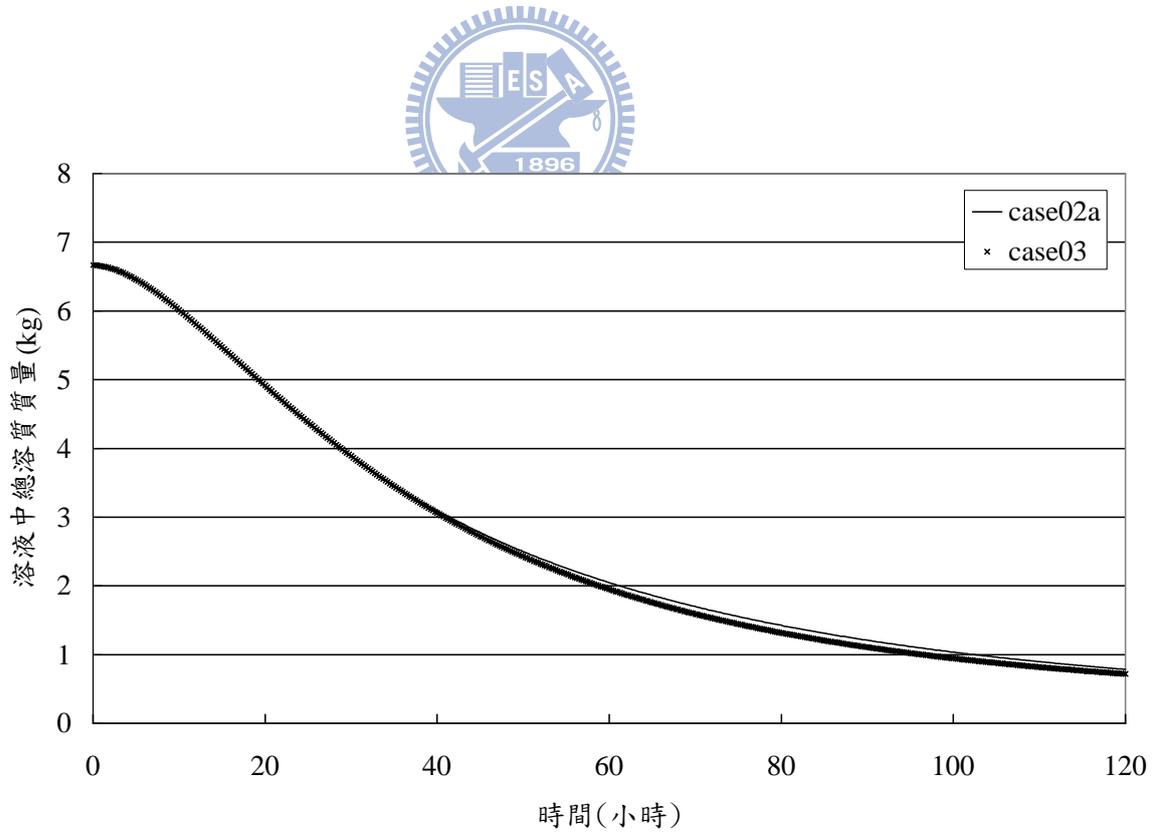


圖 4-38: 溶液中系統總溶質質量變化圖 (比較案例: *case02a* 與 *case03*)

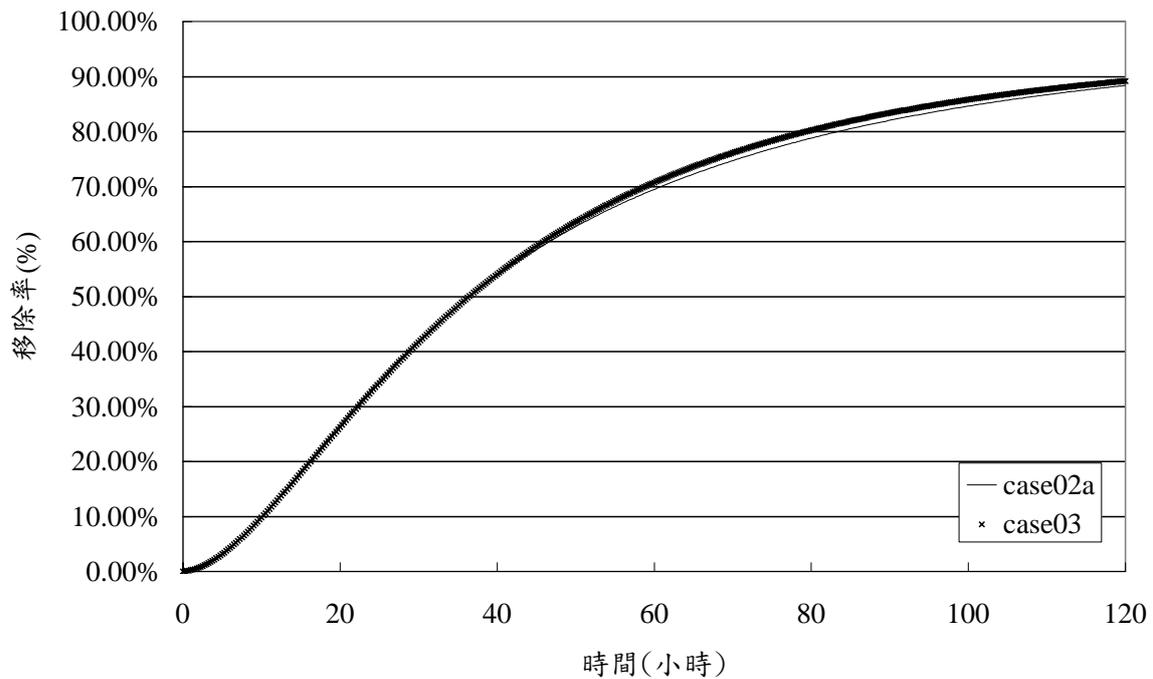


圖 4-39: 溶質移除率變化圖 (比較案例: case02a 與 case03)

以下將進一步探討吸附係數對於模擬之影響，圖 4-40 以控制體積內之吸附溶質質量對總溶質質量之相對質量百分比(如式 (4-4) 所示)，繪出吸附係數之影響變化圖，橫軸吸附係數以對數座標軸繪出。由圖面顯示，當吸附係數小於  $1.0 \times 10^{-5}$  時，吸附部分之溶質質量最多僅佔總溶質質量之 5%，因此在此範圍時，吸附係數對於模擬結果之參數敏感度極小；反之，當吸附係數大於  $1.0 \times 10^{-5}$  時，吸附部分之質量百分比則從 5% 迅速提昇至 30%，影響幅度極大。

$$R_s = \frac{(1 - n^o) \rho_s C_s}{n S_d C_l + (1 - n^o) \rho_s C_s} \times 100 \% \quad (4-4)$$

以下為濃度對於黏滯係數之探討，下式為 Jones Dole 方程式，用以計算濃度對於黏滯係數之影響，圖 4-41 中分別繪出 Jones Dole 方程式括弧中多項式之第二項與第三項，分別為參數  $a$  之影響部分與參數  $b$  之影響部分。由圖面所示，參數  $b$  所代表之第三項影響幅度遠大於參數  $a$  所代表之第二項。圖 4-42 則為相對黏滯係數改變量  $\Delta\mu_r$  之變化圖，亦為前述兩項之和，由圖上所示，溶質濃度變化至  $10 \text{ (mol/m}^3\text{)}$  時 (約為  $0.584 \text{ (kg/m}^3\text{)}$ )，其黏滯係數之影響幅度約只有 0.5%，在此顯示相較於熱流傳輸而言，溶質傳輸對於溶液之黏滯係數影響及小。

$$\mu_{wl} = \mu_{pw} \cdot \left( 1 + a C_{ml}^{1/2} + b C_{ml} \right)$$

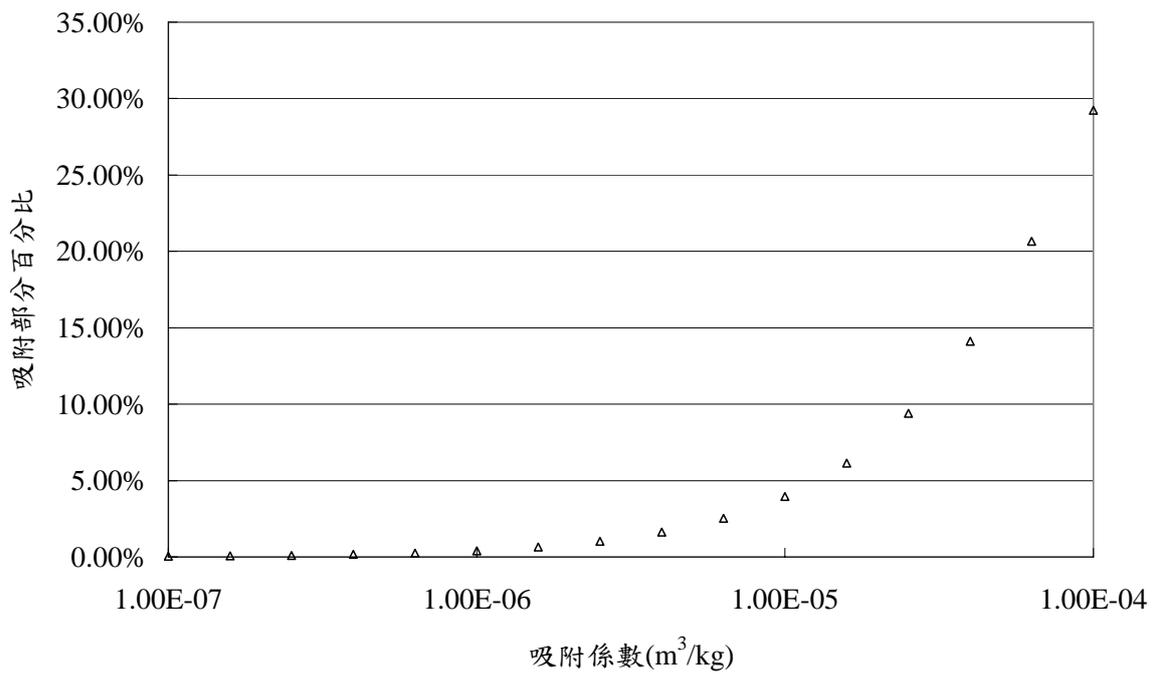


圖 4-40: 吸附係數對控制體積內吸附溶質質量百分比變化圖

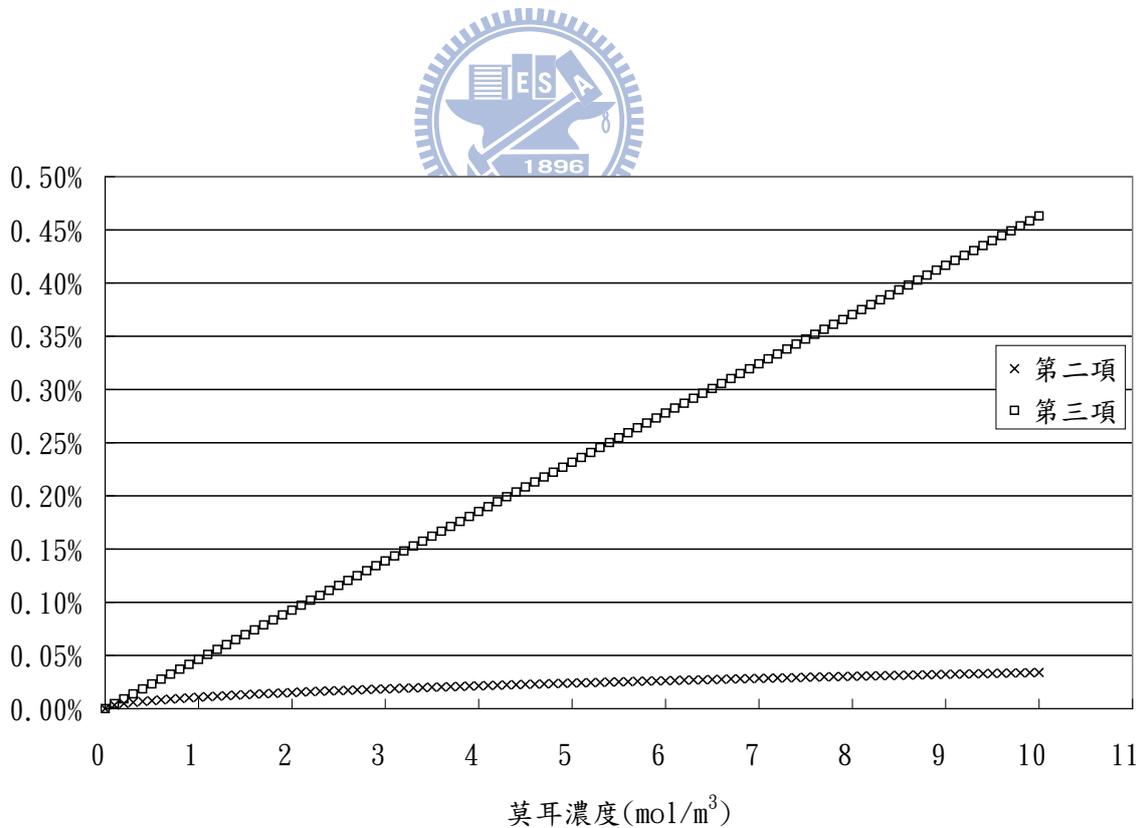


圖 4-41: 莫耳濃度對 Jones-Dole 方程式第二項與第三項變化圖

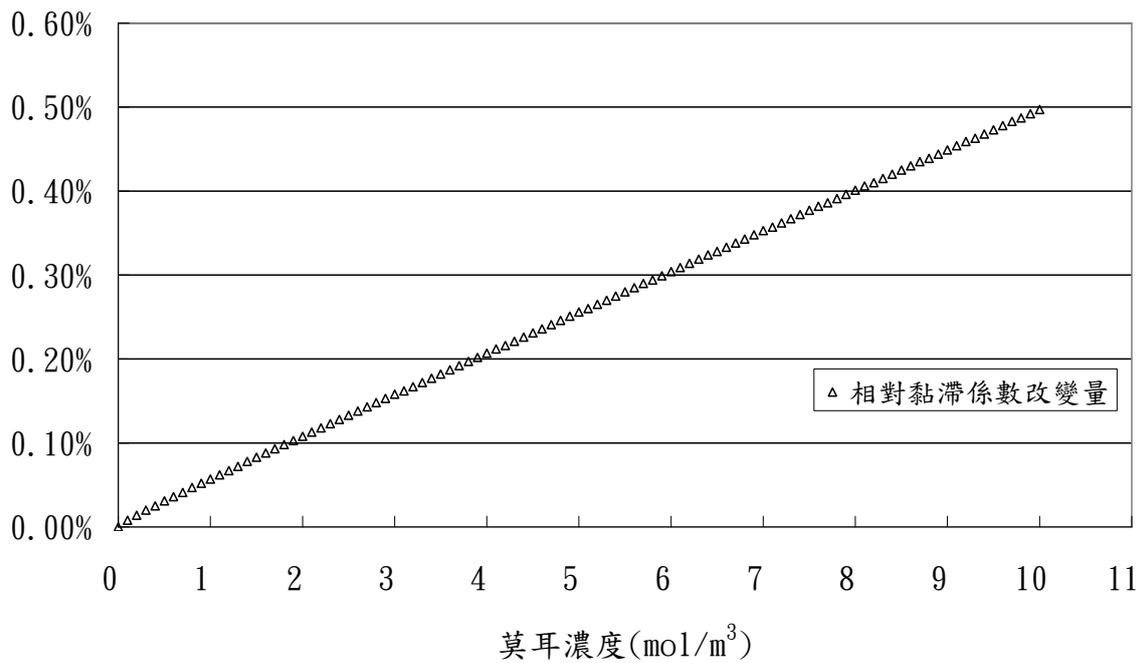


圖 4-42: 莫耳濃度對  $\Delta\mu_r$  變化圖

本案例使用線性之吸附計算公式(式 (4-5) 所示)，其為最簡單也是最常見的吸附公式，除此之外常見之吸附公式尚有 Freundlich 公式(式 (4-6) )與 Langmuir 公式(式 (4-7) )兩者，其中  $K_{sorb,f}$  與  $K_{sorb,l}$  則分別為 Freundlich 公式與 Langmuir 公式之吸附係數， $\bar{C}_s$  為最大吸附濃度。由於本計算架構直接以分散之多條方程式(組)進行計算，因此如欲小幅擴張模式模擬能力，改用其他非線性之吸附公式(式 (4-6) 或 (4-7) )，無需重新推導控制方程式，亦無需選用不同之數值解法，僅需撰寫並替換選定之公式，給定所需之參數，即可完成模式模擬能力之擴張。如欲大幅擴張模式模擬能力，增加更多之運動機制考量，則除了增加運動機制對應之控制方程式外，可應用「一致性分析」檢驗變數相依關係，決定方程式求解順序。

$$C_s = K_{sorb,d}C_l \quad (4-5)$$

$$C_s = K_{sorb,f}C_l^a \quad (4-6)$$

$$C_s = K_{sorb,l}\bar{C}_sC_l / (1 + K_{sorb,l}C_l) \quad (4-7)$$

## 第五章 結論與建議

### 5.1 結論

1. 本研究已成功完成「可適性計算架構」之核心平台，在進行數值模式開發時，可提昇數值模式開發效率，並使開發之模式具備高度可擴充性。
2. 本研究之「可適性計算架構」核心平台中，在「數學模式定義」階段，直接以問題原有之多條基本數學方程式進行問題描述，而不需如傳統方式般以數學推導或假設進行方程式整合，且爲了在維持增減方程式之彈性下，仍可以處理此多條方程式之計算，本研究提出「一致性分析」以檢驗此多條方程式及變數之一致性，並決定方程式之求解順序。
3. 「可適性計算架構」核心平台以 Voronoi Diagram 定義空間格網，除了簡化通量之離散定義外，其網格形狀極具彈性，可適用於不同的空間型態，因此本研究雖以簡單差分爲基礎，惟可避免傳統差分法因僅能應用矩形格網，導致難以描述不規則邊界之問題。
4. 在「電腦程式開發」階段，本研究以「內迭代」與「外迭代」求得各格點之解，而不如傳統方法般解所有格點所構成之矩陣方程式，以維持在增減方程式下仍不需人爲重新推導矩陣式之彈性。
5. 在應用模式開發之實作驗證方面，本研究應用「可適性計算架構」核心平台，建立「地下水流」、「地下水流與熱流傳輸」與「地下水流、熱流與溶質傳輸」等三個漸進式問題之模擬模式，並經由案例模擬結果，驗證本計算架構之正確性、可行性與彈性。
6. 各子問題之穩態與非穩態模擬，均能反應邊界條件與初始條件之設定，符合預期之結果，在「地下水流與熱流傳輸」之非穩態耦合模擬上，溫度變化會使得水流黏滯係數大幅變化，影響水力傳導係數與周遭之流況，因此在相同之條件下，可依溫度之變化，而產生不同之水位分布狀況。
7. 「地下水流、熱流與溶質傳輸」之非穩態耦合模擬，顯示溶質之吸附係數影響溶質移動能力，在相同之濃度梯度與水流流速下，吸附係數之大小會影響溶質濃度變化。

8. 本研究之「可適性計算架構」以原問題之多條數學方程式(組)為出發點，且在各步驟皆盡力維持增減方程式之彈性，因此如欲擴張模式模擬能力，僅需撰寫並替換選定之公式，給定所需之參數，即可完成模式模擬能力之擴張。其中，本研究更提出「方程式一致性分析」，以在增減方程式時檢驗整體方程式與變數之一致性，並決定出方程式之求解順序。

## 5.2 建議

1. 「可適性計算架構」是以節點運算為基礎，應用「內迭代」與「外迭代」等步驟進行求解，本質上具有可平行之特性，建議可實作為平行版本，藉此提昇計算速度，以符合目前計算機朝多核心發展之潮流。
2. 在應用領域方面，目前熱流傳輸部分仍侷限於  $0^{\circ}\text{C}$  至  $100^{\circ}\text{C}$  間的液態模擬，後續可進一步探討  $0^{\circ}\text{C}$  以下之固態模擬或  $100^{\circ}\text{C}$  以上之氣態模擬，對於冷凍工法等現地應用有更高之價值。
3. 在應用領域方面，目前溶質傳輸部分仍侷限於單一溶質之運動，在溶質相態上僅有溶液相與吸附相兩種。後續可進一步擴張為多溶質之模擬，並考量不同溶質間之化學反應，溶質相態上亦可進一步探討化合物之合成、結晶、沈澱與溶解等變化。



## 參考文獻

- [1] C. T. Hsiao and L. C. Chang. Dynamic optimal groundwater management with inclusion of fixed costs. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 128:57, 2002.
- [2] L. C. Chang, Y. W. Chen, and M. S. Yeh. Optimizing system capacity expansion schedules for groundwater supply. *Water Resources Research*, 45:W07407, JUL 10 2009.
- [3] L. C. Chang and C. T. Hsiao. Dynamic optimal ground water remediation including fixed and operation costs. *Ground Water*, 40(5):481–490, SEP-OCT 2002.
- [4] J. Bear and A. Verruijt. *Theory and applications of transport in porous media*. Reidel Dordrecht, 1987.
- [5] G. Sewell. Pde2d - easy-to-use software for general 2-dimensional partial-differential equations. *Advances in Engineering Software*, 17(2):105–112, 1993.
- [6] M. M. Gribb and G. Sewell. Solution of ground water flow problems with general purpose and special purpose computer codes. *Ground Water*, 36(2):366–372, MAR-APR 1998.
- [7] A. Lalegname, A. M. Saendig, and G. Sewell. Analytical and numerical treatment of a dynamic crack model. *International Journal of Fracture*, 152(2):97–125, AUG 2008.
- [8] E. Coppola, B. Tomassetti, L. Mariotti, M. Verdecchia, and G. Visconti. Cellular automata algorithms for drainage network extraction and rainfall data assimilation. *Hydrological Sciences Journal-Journal Des Sciences Hydrologiques*, 52(3):579–592, JUN 2007.
- [9] J. A. Parsons and M. A. Fonstad. A cellular automata model of surface water flow. *Hydrological Processes*, 21(16), 2007.
- [10] D. Dalponte, P. Rinaldi, G. Cazenave, E. Usunoff, L. Vives, M. Varni, M. Venere, and A. Clausse. A validated fast algorithm for simulation of flooding events in plains. *Hydrological Processes*, 21(8):1115–1124, APR 15 2007.
- [11] Pablo R. Rinaldi, Diego D. Dalponte, Marcelo J. Venere, and Alejandro Clausse. Cellular automata algorithm for simulation of surface flows in large plains. *Simulation Modelling Practice and Theory*, 15(3):315–327, MAR 2007.

- [12] S. Bandini, G. Mauri, G. Pavesi, and C. Simone. Parallel simulation of reaction–diffusion phenomena in percolation processes a model based on cellular automata. *Future Generation Computer Systems*, 17(6):679–688, 2001.
- [13] G. Folino, G. Mendicino, A. Senatore, G. Spezzano, and S. Straface. A model based on cellular automata for the parallel simulation of 3d unsaturated flow. *Parallel Computing*, 32(5-6):357–376, JUN 2006.
- [14] G. Mendicino, A. Senatore, G. Spezzano, and S. Straface. Three-dimensional unsaturated flow modeling using cellular automata. *Water Resources Research*, 42(11):W11419, NOV 2006.
- [15] E. Sidiropoulos and P. Tolikas. Genetic algorithms and cellular automata in aquifer management. *Applied Mathematical Modelling*, 32(4):617–640, 2008.
- [16] Lili Ju and Qiang Du. A finite volume method on general surfaces and its error estimates. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 352(2):645–668, APR 15 2009.
- [17] R. Ata, A. Soulaïmani, and F. Chinesta. The natural volume method (nvm): Presentation and application to shallow water inviscid flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 59(1):19–45, JAN 10 2009.
- [18] A. Iske and M. Kaser. Conservative semi-lagrangian advection on adaptive unstructured meshes. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 20(3):388–411, MAY 2004.
- [19] H. F. Wang and M. P. Anderson. *Introducing to groundwater modeling. Finite difference and finite element methods*. 1995.
- [20] R. A. Fine and F. J. Millero. The compressibility of water as a function of temperature and pressure. *Journal Chemical Physics*, 59:5529–5536, 1973.
- [21] T. Graf and R. Therrien. Coupled thermohaline groundwater flow and single-species reactive solute transport in fractured porous media. *Advances in Water Resources*, 30(4):742–771, 2007.
- [22] M. T. Vangenuchten. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5):892–898, 1980.
- [23] H. C. J. Lin, D. R. Richards, G. T. Yeh, J. R. Cheng, and H. P. Cheng. Femwater: A three-dimensional finite element computer model for simulating density-dependent flow and transport in variably saturated media. Technical Report A769723, JUL 1997.
- [24] J. W. Molson, E. O. Frind, and C. D. Palmer. Thermal energy storage in an unconfined aquifer 2. model development, validation, and application. *Water Resources Research*, 28(10):2857–2867, OCT 1992.

- [25] E. O. Holzbecher. *Modeling density-driven flow in porous media: principles, numerics, software*. Springer, 1998.
- [26] C. Zheng and G. D. Bennett. *Applied Contaminant Transport Modeling: Theory and Practice*. Van Nostrand Reinhold, Hoboken, NJ, 1995.
- [27] R. F. Carsel and R. S. Parrish. Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. *Water Resour.Res*, 24(5):755–769, 1988.
- [28] J. Bear. *Dynamics of fluids in porous media*. Dover, Mineola, NY, 1972.
- [29] A. Hammadi and D. C. Champeney. Ion-solvent interactions of some alkali halides in glycerol from density and viscosity data. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 43(6):1004–1008, NOV-DEC 1998.
- [30] B. Delaunay. Bulletin de l’académie des sciences de l’urss. *Class des Sciences Mathématiques et Naturelles VII Serie*, pages 793–800, 1934.
- [31] G. Voronoi. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. *J. reine angew. Math*, 133:97–178, 1907.
- [32] S. Fortune. A sweepline algorithm for voronoi diagrams. *Algorithmica*, 2(2):153–174, 1987.



# 附錄A Delaunay Triangulation 與 Voronoi Diagram

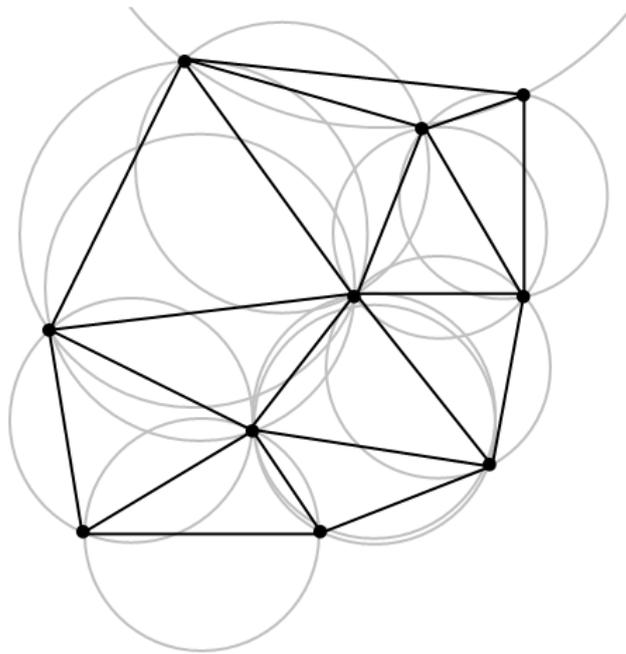


圖 A-1: Delaunay triangulation 與 其外接圓

Delaunay triangulation 是 Boris Delaunay 所提出 [30]，透過散佈於平面上一群平面點位資料 (sites or points)，以點位資料為基礎建立的三角形群，其中任意三角形頂點所繪出之外接圓內，均不包含其他點位，如圖 A-1 所示。

Voronoi Diagram 是 George Voronoi 所提出 [31]，可依據前述定義的三角形群 ( $DT(P)$ ) 進一步定義出各點之控制區塊。首先，先利用三角形群，計算出各三角形之外心。其次，如欲求取任意點位之控制區塊，即是應用該點位有關之相鄰三角形，以相鄰三角形之外心構成之多邊形即是控制區塊，如圖 A-2 所示。Voronoi Diagram 具備下列特性：

1. 各點位必對應一個控制區塊，區塊內之任何一點與該點位之距離，必定小於此點與其他點位之距離。

2. 控制區塊形狀必為凸包 (convex hulls) 。
3. 兩節點之連線必定正交於其控制區塊之邊，此邊稱為控制區塊鄰邊 (edge) 。
4. 控制區塊鄰邊 (edge) 之交點稱為角點 (vertex)，令任意角點為圓心，必可找到一圓通過相鄰點位，亦即為前述 Delaunay triangulation 所繪之外接圓 (如圖 A-1 所示)，該圓又可稱為空圓 (empty circle) 。
5. Delaunay Triangles 與 Voronoi diagram 為對偶圖形，如圖 A-2 所示，圖上實線為 Delaunay Triangles，虛線為 Voronoi Diagram 。

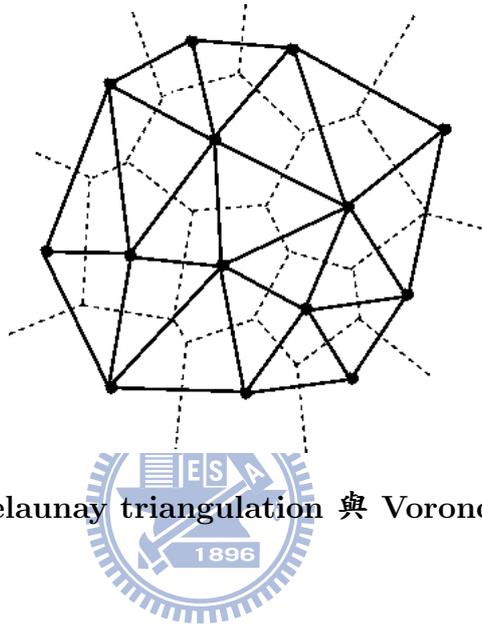


圖 A-2: Delaunay triangulation 與 Voronoi Diagram

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  $m$  個點位， $n$  為空間中點位數量，其數值應為  $2 \leq n \leq \infty$ 。其控制區塊可定義如式 (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 Voronoi Diagram 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，Voronoi Diagram 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 Voronoi Diagram 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 [32] 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 Voronoi Diagram 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 Voronoi Diagram 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  $P_l$  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。

$$-W - (P_u - P_l) = 0 \quad (\text{B-1})$$

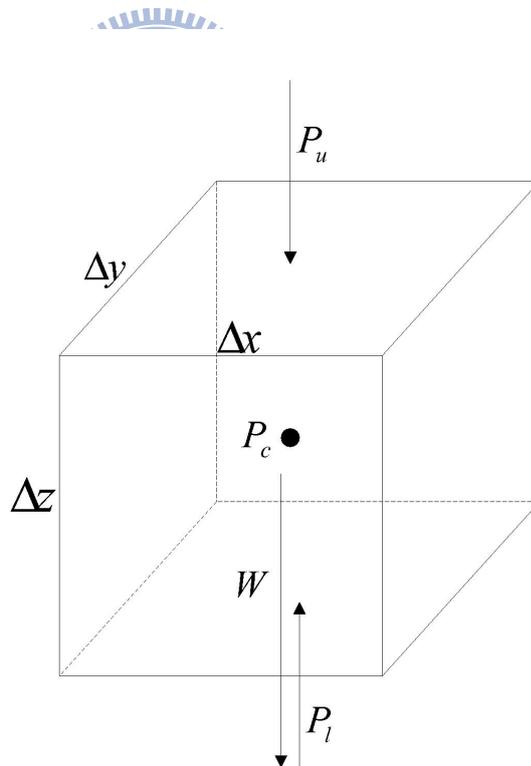


圖 B-1: 控制體積垂向受力示意圖

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  $\Delta x \Delta y$ ， $\Delta z$  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。

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

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

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  $c$  間的两項定積分值。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。

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

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

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  $\gamma_0$ 。

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

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，其為常見之地下水流總水頭計算型式。

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



## 附錄C 土壤壓密係數與傳統儲水係數之相關推導

$$\begin{cases} \rho_f = \left[ V^0(T) - \frac{V^0(T)P_{bar}}{B(T)+A_1(T)P_{bar}+A_2(T)P_{bar}^2} \right]^{-1} \\ P_{bar} = 10^{-5}P \end{cases} \quad (C-1)$$

$$\rho_l = \rho_f + a_1C + a_2C^2 + a_3C^3 \quad (C-2)$$

水流密度變化曲線

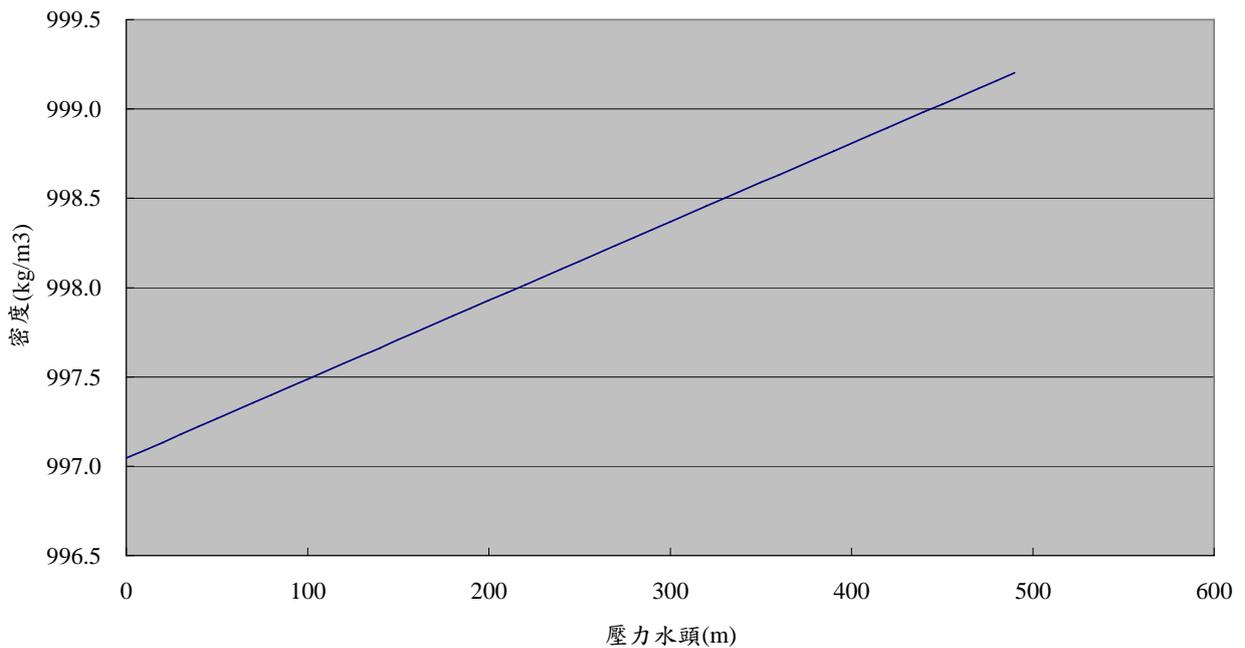


圖 C-1: 水流密度變化曲線圖( 25°C 常溫)

本研究採用式 (C-1) 與 (C-2) 為模式之水流密度變化方程式，式 (C-2) 為溶質濃度與溶液密度之轉換公式，但若在無溶質之環境中，該式不起任何作用。式 (C-1) 為 Fine 與 Millero [20]所提出之經驗轉換公式，可以描述不同溫度與壓力下的水流密度變化，其中  $A_1$ 、 $A_2$ 、 $B$  與  $V^0$  為溫度  $T$  之函數，函數如下所示，為多項式型態之函數。經驗式中的溫度 ( $T$ ) 單位為攝氏， $P_{bar}$  與  $P$  均代表壓力，差異在於兩者為不同之壓力單位， $P_{bar}$  之單位為巴 ( $bar$ )， $P$  之單位則為帕 ( $Pa$ )，因此對於地下水流問題慣用之水頭而言，則

需要先行轉換。

$$V^0 = \frac{1 + 18.159725 \times 10^{-3}T}{C_{V0}}$$

$$C_{V0} = 0.9998396 + 18.224944 \times 10^{-3}T - 7.92221 \times 10^{-6}T^2 \\ - 55.44846 \times 10^{-9}T^3 + 149.7562 \times 10^{-12}T^4 - 393.2952 \times 10^{-15}T^5$$

$$A_1 = 3.2891 - 2.391 \times 10^{-3}T + 2.8446 \times 10^{-4}T^2 - 2.82 \times 10^{-6}T^3 \\ + 8.477 \times 10^{-9}T^4$$

$$A_2 = 6.245 \times 10^{-5} - 3.913 \times 10^{-6}T - 3.499 \times 10^{-8}T^2 + 7.942 \times 10^{-10}T^3 \\ - 3.299 \times 10^{-12}T^4$$

$$B = 19654.32 + 149.037T - 2.21554T^2 + 1.0478 \times 10^{-2}T^3 \\ - 2.2789 \times 10^{-5}T^4$$

在無溶質傳輸的環境中，式(C-2)可以忽略不計，直接以式(C-1)計算。式(C-1)為壓力( $P$ )之函數，由於壓力水頭( $p$ )與壓力( $P$ )呈正比關係，其比值等於重力加速度( $g$ )與常溫下之水( $\rho_f^0$ )之乘積，該比值為定值，因此式(C-1)亦可視為壓力水頭( $p$ )之函數。圖C-1為25°C常溫下之水流密度變化圖，從圖面顯示壓力水頭由0(m)增加至500(m)，其密度約提昇約0.25%，且呈現線性形式。因此無溶質傳輸且無溫度變化下之密度變化方程式可以重寫近似為式(C-3)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。

$$\rho_f \simeq C_1 + C_2p \quad (C-3)$$

因此可以將水流密度之變化近似簡化為式(C-4)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， $\rho_0$ 代表攝氏25度下一大氣壓力之水流密度， $\beta'$ 代表水流的縮放係數，因此式(C-4)是水流密度之線性縮放公式。

$$\rho_f = \rho_0 \times [1 + \beta' (p - p_0)] \quad (C-4)$$

式(C-5)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， $\alpha'$ 代表土體之壓縮性，因此式(C-5)是土體孔隙率之線性縮放公式。

$$n = n_0 \times \left[ 1 + \frac{\alpha'}{n_0} (p - p_0) \right] \quad (C-5)$$

式(C-5)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-6)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。

$$S^t = (\rho_f n S_d)^t Vol_{C.M.} = (\rho_f n)^t Vol_{C.M.} \quad (C-6)$$

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-7)。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。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^t}{\partial t} &= Vol \frac{\partial (\rho_f n)^t}{\partial t} \quad (C-7) \\ &= \rho_0 n_0 Vol \times \frac{\partial \left\{ \left[ 1 + \frac{\alpha'}{n_0} (p - p_0) \right] \cdot [1 + \beta' (p - p_0)] \right\}}{\partial t} \\ &= \rho_0 Vol \times \frac{\partial \{ 1 + (\alpha' + n_0 \beta') u + \alpha' \beta' u^2 \}}{\partial t} \\ &= \rho_0 Vol \times \left\{ \frac{(\alpha' + n_0 \beta') \partial u}{\partial t} + \frac{\alpha' \beta' \partial u^2}{\partial t} \right\} \end{aligned}$$

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-8)所示。由於 $u = p - p_0$ ，且 $p_0$ 為常數，因此 $\partial u = \partial p$ 。

$$\begin{aligned} \frac{\partial S^t}{\partial t} &= \rho_f Vol \times (\alpha' + n_0 \beta') \times \frac{\partial u}{\partial t} \quad (C-8) \\ &= \rho_f Vol \times (\alpha' + n_0 \beta') \times \frac{\partial p}{\partial t} \end{aligned}$$

$s_s \frac{\partial S^t}{\partial t}$ 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-9)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-10)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-11)。觀察式(C-8)與(C-11)，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

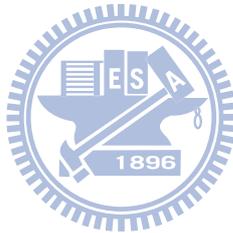
致。

$$s_s = \alpha + n\beta \quad (\text{C-9})$$

$$h = p + z \quad (\text{C-10})$$

$$\frac{\partial S^t}{\partial t} = \rho_0 Vol \times (\alpha + n\beta) \times \frac{\partial (p + z)}{\partial t} \quad (\text{C-11})$$

$$= \rho_0 Vol \times (\alpha + n\beta) \times \frac{\partial p}{\partial t}$$



## 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 NW 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 SE 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。

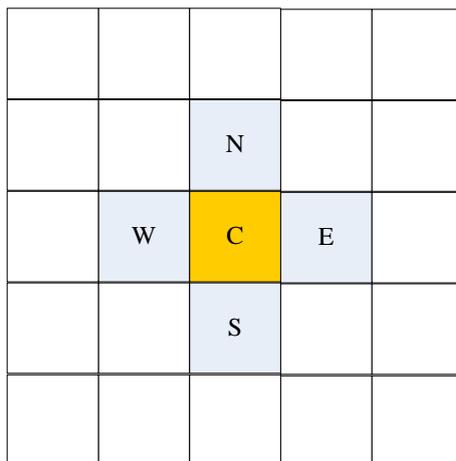


圖 D-1: von Neumann形式細胞結構圖

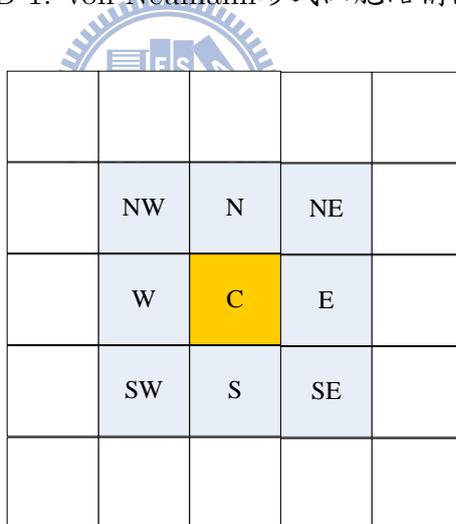


圖 D-2: Moore形式細胞結構圖

**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。

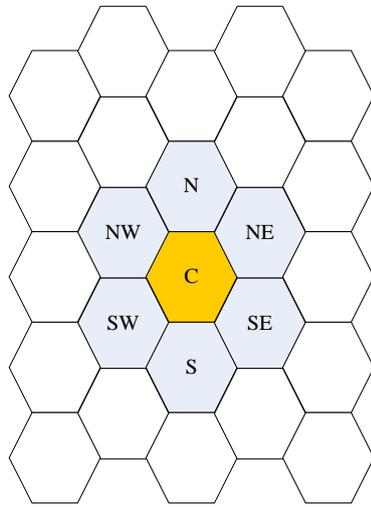


圖 D-3: Hexagonal形式細胞結構圖

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，因此細胞自動機的處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溶質傳輸之擴散計算

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。

$$\dot{m}_{cl,dif} = \begin{pmatrix} \dot{m}_{cl,dif,x} \\ \dot{m}_{cl,dif,y} \end{pmatrix} = -n \cdot \begin{pmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial C_l}{\partial x} \\ \frac{\partial C_l}{\partial y} \end{pmatrix} \quad (E-1)$$

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{V_x V_x}{|\vec{V}_{darcy}|} + \alpha_T \frac{V_y V_y}{|\vec{V}_{darcy}|} + D^*$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_x V_y}{|\vec{V}_{darcy}|} + D^*$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{V_y V_y}{|\vec{V}_{darcy}|} + \alpha_T \frac{V_x V_x}{|\vec{V}_{darcy}|} + D^*$$

$$\vec{V}_{darcy} = V_x \hat{x} + V_y \hat{y}$$

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

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 Voronoi Diagram 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  $\overline{V_1 V_2}$ 、 $\overline{V_2 V_3}$  與  $\overline{V_3 V_1}$  三邊進行計算。因此在計算  $\overline{V_1 V_2}$  之穿越擴散量時，令  $\hat{s}$  為  $\overline{N_i N_A}$  方向之單位向量，其正交向量  $\hat{n}$  即為  $\overline{V_1 V_2}$ ，其公式可改寫如式 (E-3) 所示。當變換不同面時，向

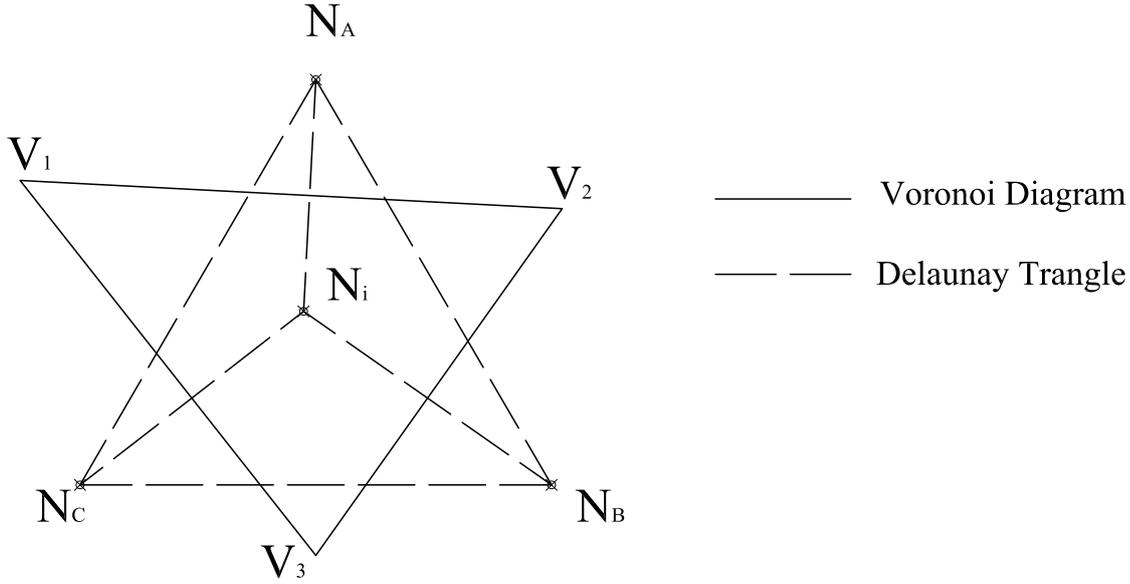


圖 E-1: Voronoi Diagram 與 Delaunay Triangle 示意圖

量  $\hat{s}$  與  $\hat{n}$  均需轉變。

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

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

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

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

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

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 Voronoi Diagram 之角點位置之數值。如以  $\overline{V_1 V_2}$  為穿越表面，分別利用三角形  $N_i N_A N_B$  與  $N_i N_A N_C$  推求  $V_1$  與  $V_2$  數值，最後再以兩數值差分計算  $\overline{V_1 V_2}$  之  $\frac{\partial V}{\partial n}$ 。如此，式 (E-3) 所需之  $\frac{\partial C_l}{\partial n}$  與  $V_n$  可以求得。

最後，在  $\dot{m}_{cl,dif}$  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)。

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

