

以分離運算子解一維移流延散方程式之
數值參數準確性分析

**Acceptable Ranges of Numerical Parameters on
Solving One-Dimensional Advection/Dispersion
Equation by a Split-Operator Scheme**

逢甲大學水利工程學系
副教授

許少華

Shaohua Marko Hsu

逢甲大學土木及水利工程研究所
碩士班研究生

林伯聰

Bor Tsong Lin

逢甲大學土木及水利工程研究所
碩士

倪春發

Chuen Fa Ni

摘 要

以有限差分數值方法模擬污染物的傳輸現象，存在著模擬結果有嚴重的數值延散誤差，尤其是當濃度梯度大的情況。這個問題雖已被前人克服，然而通常需要較複雜的數值方法 (Li, et al, 1992)。本文以分離運算子觀念 (Split Operator) 將污染物的傳輸視為在同一個時段中，移流與延散過程乃先後發生，如此可將傳輸方程式拆為移流過程與延散過程而分別以基本的數值方法求解，在適當的參數條件下仍可令數值結果符合物理過程。本文以單網格 Holly-Preissmann 特性線法來模擬污染物的移流傳輸過程，以 Crank-Nicolson 有限差分法模擬延散傳輸過程。為能掌握數值模式的準確性與參數範圍，本文以標準試例中高斯分佈與階梯分佈兩種初始濃度型態來測試，改變主要參數的大小來估測模式的準確性。所得的結果，顯示模擬的瓶頸乃在移流過程，因此在可蘭數數值為 1 時，模式模擬結果可達最高的精度。在可蘭數小於 1 以空間軸差分之模擬結果優於可蘭數大於 1 以時間軸差分之模擬結果。物理上延散效應的存在，反而使得數值模擬較容易，可蘭數的適用範圍也可因而擴大。然而若以相同的數值 Peclet 數 (移流/延散 比例) 而言，模式解析度 (網格數) 的增加又要比延散效應的存在更能改善精度。

關鍵詞：移流，延散，一維，分離運算子。

ABSTRACT

Originated from split-operator concept, the one-dimensional advection/ dispersion

equation describing distribution of concentration is solved in two steps. In the first step, only advection process is considered. The second step is within the same time interval, in which dispersion operator is performed on the advected resulting distribution. Holly-Preissmann scheme, a method of characteristic line, is adopted in the advection step. Crank-Nicolson scheme, a finite difference method, is used in the dispersion step. Benchmark problems with initial distributions of continuous Gaussian as well as discontinuous step shapes are tested. Accepted ranges of numerical parameters such as Crout numbers, Peclet numbers, and grid sizes are investigated in different circumstances. Since advection is found to be the bottle-neck process, Courant number is best to be kept as near 1.0 as possible. Cases with Courant number less than 1.0 performs better than that larger than 1.0, which implies that time-line interpolation is less accurate. Existing of physical dispersion (lower the Peclet numbers) actually improves computation effort and, therefore, increases the acceptable range of numerical parameters. Refinement of grid is found to be even effective than lower the Peclet numbers.

Keywords: Advection, Dispersion, One-dimensional, Split Operator, Holly-Preissmann, Characteristics, Crank-Nicolson.

一、前言

針對地下水污染物的傳輸與擴散問題，近年來因高速計算工具的發達以及各種商用軟體的進步，而使研究者可以模擬或預測更複雜的自然狀況。然而套裝程式時常誇張其功能，隱晦其數值缺陷；又以彩色的動畫繪圖功能令使用者完全信賴其結果。軟體使用者首應瞭解的是各個軟體所使用的數值方法及其限制與有效參數的範圍，否則數值計算的誤差可能遠超過使用者的想像。

本文中所針對之一維污染物傳輸方程式，在整個流場流速與延散係數為常數的條件下，為一線性拋物線偏微分方程式 (Genevieve, 1993)，且存在著解析解。若以一般常用的有限差分方法直接求解，當 Δt 太大、或速度、濃度梯度較大時會產生模擬的數值結果無法正確表現物理傳輸情形 (Cunge, et al, 1980; Anderson et al, 1984)，Miller 與 Ralidean (1993) 以分離運算子 (Split Operator) 觀念，將傳輸方程式中的移流項與延散視為兩個物理過程先後發生於同一個時間間距中，如此便可將移流項及延散項拆開求

解，依照兩種不同的傳輸方程式，分別以合適的數值方法求解，可以改善傳統模式所受到時間間距及速度或濃度梯度的限制 (Cunge, et al, 1980)。且在高速計算工具發達的今日，運用分離運算子方法演算已不需耗費大量時間，故模式中以分離運算子觀念分離移流延散過程，再以發展成熟的數值方法各別求解。如此的好處是毋須針對特定的方程式發展新的數值方法，然而該注意的是分離運算子能成立的假設範圍。

本文僅就一維污染物傳輸的數值問題，探討一特定數值方法中數值參數的影響及其適用範圍。利用 Split Operator 觀念將移流延散方程式分成移流過程延散過程求解，其中移流過程採用 Holly-Preissmann 特性線法 (Holly, et al, 1977; Cunge, et al, 1980) 來模擬，此一方法的優點在於演算過程中其數值的擴散誤差非常的小，因此不會因為數值計算過程而產生了比實際物理現象還要大的數值擴散。此一數值方法中可蘭數為最重要的參數，許少華與倪春發 (1996) 驗證得知，在純移流傳輸的模擬中，當可蘭數小於 4 所得的結果甚佳。為了瞭解模式於可蘭數較大情況下表現如何，故於驗證例中加入了大於 4 的可蘭數條

件，來比較其模擬之結果差異。對於延散過程則以 Crank-Nicolson 數值方法模擬擴散傳輸，此法無條件穩定收斂且可達二階精確度 (Gerald et al, 1994; Anderson et al, 1984)，常用於求解擴散型方程式。於模式中配合可蘭數等參數的變化，測試其與 Holly-Preissmann 特性線法配合使用的結果是否理想。

二、問題分析

假設溶液態污染物於土壤中受地下水流作用而移動，且不產生化學生成或生物分解過程，利用質量平衡原則考慮移流 (Advection) 延散 (Dispersion) 及吸附所產生之阻滯等作用，其三維污染物傳輸控制方程式如下 (Bear 與 Verruijt, 1990)：

$$\frac{\partial(\theta\bar{C})}{\partial t} = -\nabla \left[\theta(\bar{C}\bar{V} - \bar{D}\nabla\bar{C}) \right] - f \quad \text{.....(1)}$$

式中 θ 為土壤含水量 [L^3/L^3]； \bar{D} 為延散係數 [L^2/T] 張量； \bar{C} 為液相污染物平均濃度 [M/L^3]； t 為時間 [T]； \bar{V} 為孔隙之真實平均流速 [L/T]，乃一空間向量； f 為單位時間內單位土體脫離液相的污染物質質量 [M/TL^3]。

若污染物僅在一維傳輸 (如管柱實驗) 則 (1) 式可簡化如下：

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = -\frac{\partial(Cq_d)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial x} \right) - f \quad \text{.....(2)}$$

式中 q_d 為達西流速 [L/T]； D 為 X 向之一維延散係數 [L^2/T]； C 則為流向橫切面上的平均濃度 [M/L^3]； X 為傳輸方向 [L]。

(2) 式若在飽和條件下 (θ =常數)、延散係數 D 為常數、無吸附作用 ($f=0$) 且於均勻等速流況下可簡化成：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad \text{.....(3)}$$

式中 U 為一維真實流速 (或孔隙平均流速) [L/T]。(3) 式乃最基本之一維傳輸延散方程式，於自然界之污染物傳輸無論是河海、地下水或是空氣污染傳輸於上述的條件下皆可簡化至 (3) 式，因 U 與 D 皆設為常數，(3) 式屬一線性偏微分方程式，在適當條件下存在有解析解，因此本文乃以 (3) 式為研討的對象。

三、數值方法

傳輸方程式中之移流項 (或稱傳流項) 乃屬一階雙曲線型偏微分方程，延散項則為二階拋物線型偏微分方程，即傳輸方程式乃一混合型的偏微分方程式。若直接將移流項與延散項合併以差分式加以求解，會產生無法接受的數值誤差，此乃數值計算界所皆知之事實。為求解法之簡易，可用分離運算子 (Split-Operator) 觀念將移流項 (4 式) 與延散項 (5 式) 視為於同一 Δt 中前後發生的過程而分開求解，以避免使用更艱深的數值求解方法。

$$\text{第一步：移流過程} \quad \frac{\partial C^{imp}}{\partial t} = -U \frac{\partial C^{old}}{\partial x} \quad \text{.....(4)}$$

$$\text{第二步：延散過程} \quad \frac{\partial C^{new}}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C^{imp}}{\partial x^2} \quad \text{.....(5)}$$

(三) 移流過程以 Holly-Preissmann (H-P) 特性線法求解

H-P 特性線法 (Holly-Preissmann, 1977) 相較於傳統特性線法之不同處，在於 H-P 法於空間內插採用兩點間的三次式內插而不採線性內插或多點高次內插。為了使此法能應用於可蘭數

(Courant number = $\frac{U\Delta t}{\Delta x}$) $Cr \geq 1$ 之情況，在 $Cr \geq 1$ 時作了修正，改採時間軸的三次內插。

a. $Cr \geq 1$ 之情況

若沿著特性線 $\left(\frac{dx}{dt} = U\right)$ 軌跡，則 (4) 式的偏微分方程式可簡化成變數 C 之全微分方程式： $\frac{DC}{Dt} = 0$ ，即沿著特性線 C 並不隨時間改變。

由圖一，可知 $C_i^* = C_\xi^n$ 。

若採用 $i-1$ 與 i 點間的時間軸三次式內插來表達 C_ξ^n 之值則

$$C_i^* = C_\xi^n = a_1 C_{i-1}^n + a_2 C_i^n + a_3 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i-1}^n + a_4 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i^n \dots (6)$$

(6) 式之內差方式，需先估計各點之 $\frac{\partial C}{\partial x}$ 值，在此仍以特性線觀念求之，而不以差分式估計，將 (4) 式對 X 偏微分可得

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial t}\right) + \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) + U \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) = 0 \dots (7)$$

整理得

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) + U \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) = -\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) \dots (8)$$

沿著 $\left(\frac{dx}{dt} = U\right)$ 的特性線，可得

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) = -\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right) \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right) \quad (9)$$

$\frac{\partial C}{\partial x}$ 由兩邊格點上之已知值作三次式內插

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_\xi^n = b_1 C_{i-1}^n + b_2 C_i^n + b_3 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i-1}^n + b_4 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i^n \dots (10)$$

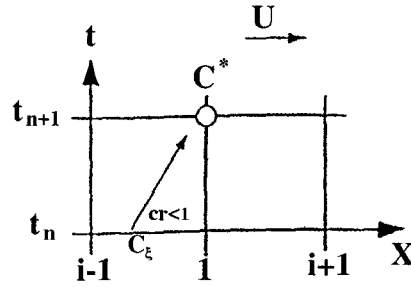


圖 1 空間軸內差之特性線示意圖

再沿特性線作積分，即由 (9) 式積分可得下一時刻每個格點上的 $\frac{\partial C}{\partial x}$ 值如下

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i^* = \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_\xi^n - \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_{ave} \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{old} dt \dots (11)$$

網格如示意圖 1，由 $i-1$ 與 i 兩個端點上的 C 值與 $\frac{\partial C}{\partial x}$ 值邊界條件可推導得內插曲線之係數（許少華、倪春發，1996）如下：

$$\begin{cases} a_1 = Cr^2(3-2Cr) & b_1 = 6Cr(Cr-1)/\Delta x \\ a_2 = 1-a_1 & b_2 = -b_1 \\ a_3 = Cr^2(1-Cr)\Delta x & b_3 = Cr(3Cr-2) \\ a_4 = -Cr(1-Cr)^2\Delta x & b_4 = (Cr-1)(3Cr-1) \end{cases}$$

b. $Cr > 1$ 之情況

可在時間軸 t_n 與 t_{n+1} 兩點間作內插，如圖 2。

$$C_i^* = C_i^n = a_1 C_{i-1}^n + a_2 C_i^n + a_3 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i-1}^n + a_4 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i^n \quad (12)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i-1}^n = b_1 C_{i-1}^n + b_2 C_i^n + b_3 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_{i-1}^n + b_4 \left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)_i^n \quad (13)$$

其中之係數如下（Yang，1990）

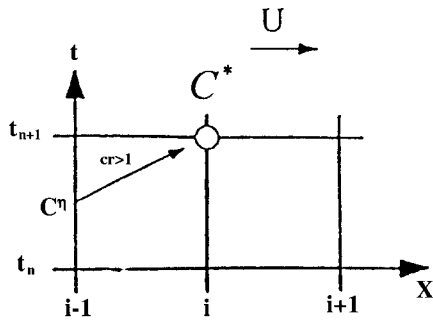


圖 2 時間軸內差之特性線示意圖

$$\begin{cases} a_1 = \frac{1}{Cr^2} \left(3 - 2 \frac{1}{Cr} \right) \\ a_2 = 1 - a_1 \\ a_3 = \frac{1}{Cr^2} \left(1 - \frac{1}{Cr} \right) \Delta t \\ a_4 = \frac{1}{Cr} \left(1 - \frac{1}{Cr} \right)^2 \Delta t \end{cases} \quad \begin{cases} b_1 = 6 \frac{1}{Cr} \left(\frac{1}{Cr} - 1 \right) / \Delta t \\ b_2 = -b_1 \\ b_3 = \frac{1}{Cr} \left(3 \frac{1}{Cr} - 2 \right) \\ b_4 = \left(\frac{1}{Cr} - 1 \right) \left(3 \frac{1}{Cr} - 1 \right) \end{cases}$$

將 (4) 式對 t 偏微得

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) + U \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) = - \frac{\partial U}{\partial t} \frac{\partial C}{\partial x} \quad \dots\dots\dots(14)$$

沿特性線 $\left(\frac{dx}{dt} = U \right)$ ，可得

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) = - \frac{\partial U}{\partial t} \frac{\partial C}{\partial x} \quad \dots\dots\dots(15)$$

由 (15) 式再沿特性線積分

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_i^* = \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{i-1}^n - \int_{t_i}^{t_i + \frac{\Delta x}{U}} \left(\frac{\partial U}{\partial t} \right)_{old} \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)_{old} dt \quad \dots\dots(16)$$

在時間軸上作內插，因 C_{i-1}^n 與 $\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)_{i-1}^n$ 需先求得，故而需由傳輸之上游解起。若採空間軸之內插則無此限制。

(二) 延散過程以 Crank-Nicolson 差分法求解

將 (5) 式以 Crank-Nicolson 數值方法 (Gerald & Wheatley, 1994) 作差分式展開求解

$$\frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\Delta t} = \frac{D^n}{2} \left[\left(\frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right) + \left(\frac{C_{i+1}^{n+1} - 2C_i^{n+1} + C_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \right) \right] \quad \dots\dots\dots(17)$$

此數值方法之時間與空間截去誤差皆為二階精確度。(17) 式展開之差分式為一三對角線矩陣，只需一次消去及一次反代即可解得 $n + 1$ 時刻的 C 值。同理，每一點之 $\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right)$ 或 $\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)$ 皆以 Crank-Nicolson 法求其因延散效應所改變之新值，提供下一 Δt 移流過程計算所需。

四、數值模式之驗證與誤差評量

數值方法的準確性直接影響了一個數值模式的優劣，而本模式之數值解受到可蘭數 Cr $\left(= \frac{U * \Delta t}{\Delta x} \right)$ 、Peclet 數 Pe $\left(= \frac{U * \Delta x}{D} \right)$ 及無因次擴散係數 D^* $\left(= \frac{D \Delta t}{(\Delta x)^2} = \frac{Cr}{Pe} \right)$ 幾個參數的影響最大，以下將就各個參數對於模式準確性的影響作一探討與分析。本文根據國際上的標準試例 (benchmark problem) (Baptista et al., 1988) 模擬一個長度為 12800 單位的一維流域，在一流速 U 為 0.5 的定速流況下經過無因次時間 9600 後之情況，初始污染物濃度分佈為高斯分佈與階梯分佈，以解析解與數值解加以比較，詳細條件如下：

(一) 高斯型分佈污染物模式

分佈尖峰值初始位置 (X_0) 為 2000，初始標準偏差 (σ_0) 為 264。

初始條件： $C(x, 0) = C_0(x)$ ；

$$\bullet x \bullet \rightarrow \infty \quad C(x, t) \rightarrow 0$$

$$C_0(x) = \exp \left(- \frac{(x - x_0)^2}{2 \sigma_0^2} \right) \quad \dots\dots\dots(18)$$

其解析解為：

$$C(x, t) = \frac{\sigma_0}{\sigma} \exp \left(- \frac{(x - \bar{x})^2}{2 \sigma^2} \right) \quad \dots\dots\dots(19)$$

其中 $\sigma^2 = \sigma_0^2 + 2Dt$; $\bar{x} = x_0 + \int_0^t u(\tau) d\tau$; $\tau = \sqrt{2Dt}$

(二) 階梯型分佈污染物模式

初始條件： $0 < x < \infty$ $C(x, 0) = 0$;
 $t > 0, x = 0$ $C(x, t) = 1$
 $t > 0, x \rightarrow \infty$ $C(x, t) \rightarrow 0$

其解析解為：

當 $D > 0$ 時，

$$C(x,t) = \frac{1}{2} \left(\operatorname{erfc} \left(\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left(\frac{ux}{D} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x+ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \right) \dots (20)$$

當 $D = 0$ 時， $C(x, t) = 1$ $x = ut$;
 $C(x, t) = 0$ $x > ut$

各種驗證例演算條件設定列如表 1 所示，可蘭數與網格間距及時間間距的關係如表 2 所示。由表一知，驗證例的設計乃控制可蘭數介於 0.05 至 20 之間，網格間距有 1、10 與 100 三種，而延散係數則有 0、0.5、5 與 50 四種情況，所衍生的其他參數範圍：Pe 數介於 0.001 至 ∞ ， Δt 介於 0.1 至 4000 之間，無因次擴散係數 D^* 不為 0 的情況則介於 0.0005 至 2000 之間。由表 2 知，當可蘭數愈大，網格愈粗時， Δt 則愈大，代表所需的計算量愈小。例如當 $Cr=0.05$ 、 $\Delta x=1$ 時，共有 12801 個點，計算 96000 個步驟。當 $Cr=4$ ， $\Delta x=100$ 時，僅有 129 個網點，僅需計算 12 個步驟。本文皆以雙精確度為之以減小累積誤差。

表一 所有測試例之演算條件

Case	Cr	Δx	D	Pe	$L/\Delta x$	D^*
I	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	1	0	∞	12800	0
II	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	10	0	∞	1280	0
III	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	100	0	∞	128	0
IV	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	1	0.5	1.0	12800	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20
V	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	10	0.5	10	1280	0.005,0.025,0.05,0.1,0.15,0.4,2.0
VI	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	100	0.5	100	128	0.0005,0.0025,0.005,0.01,0.015,0.04,0.2
VII	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	1	5.0	0.1	12800	0.5,2.5,5.0,10.0,15.0,40,200
VIII	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	10	5.0	1.0	1280	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,0,20
IX	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	100	5.0	10	128	0.005,0.025,0.05,0.1,0.15,0.4,2.0
X	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	1	50	0.01	12800	5,25,50,100,150,400,2000
X I	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	10	50	0.1	1280	0.5,2.5,5.0,10.0,15.0,40,200
X II	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,20	100	50	1.0	128	0.05,0.25,0.5,1.0,1.5,4,0,20

表 2 不同可蘭數與網格間距下之時間間距

Δt	Cr=0.05	Cr=0.25	Cr=0.5	Cr=1.0	Cr=1.5	Cr=4	Cr=20
$\Delta X = 1$	0.1	0.5	1.0	2.0	3.0	8.0	40.0
$\Delta X = 10$	1.0	5.0	10.0	20.0	30.0	80.0	400.0
$\Delta X = 100$	10.0	50.0	100.0	200.0	300.0	800.0	

五、結果分析與討論

為了量化數值模式模擬效果的準確性與優劣，對模式所進行的誤差分析，乃以辛普森積分法將濃度曲線的數值解與解析解差值取絕對值後再積分求出與 X 軸間之面積，作為絕對誤差。而相對誤差則是將絕對誤差除以解析解的積分值乘百分比而得。本文訂誤差小於 10% 時為可接受的誤差，而當誤差大於 10% 時數值模擬的結果

則為不可接受之誤差。而由於兩種濃度分佈相對誤差之分母不同，所以兩種相對誤差無法直接以其誤差來比較。以表 1 之設定，高斯分佈各例演算結果可繪如圖 3 至圖 14，由各圖之數值解與解析解比較，所計算的相對誤差列如表 3；階梯分佈各例演算結果可繪如圖 15 至圖 26，由各圖之數值解與解析解比較，所計算的相對誤差列如表 4。

表 3 初始濃度高斯分佈型各測試例相對誤差總表

		(單位：%)				
	D = 0	Pe	∞	∞	∞	
		ΔX	$\Delta X = 1$	$\Delta X = 10$	$\Delta X = 100$	
純 移 流 流 況	D = 0	Cr	0.05	0.05	0.46	5.37
			0.25	0.03	0.25	3.50
			0.5	0.00	0.01	2.25
			1.0	0.00	0.00	0.00
			1.5	0.10	1.01	9.99
			4	0.35	3.55	50.26
			20	1.97	24.60	
具 延 散 流 況	D = 0.5	Cr	Pe	1.0	10.0	100.0
			ΔX	$\Delta X = 1$	$\Delta X = 10$	$\Delta X = 100$
			0.05	0.04	0.40	4.57
			0.25	0.02	0.22	2.78
			0.5	0.01	0.01	1.56
			1.0	0.01	0.00	0.18
			1.5	0.09	0.89	8.84
	4	0.31	3.13	44.82		
	20	1.74	21.03			
	D = 5	Cr	Pe	0.1	1.0	10.0
			ΔX	$\Delta X = 1$	$\Delta X = 10$	$\Delta X = 100$
			0.05	0.08	0.21	2.13
			0.25	0.05	0.13	1.17
			0.5	0.03	0.01	0.35
1.0			0.01	0.00	0.40	
1.5			0.12	0.46	4.72	
4	0.19	1.63	21.49			
20	0.82	10.40				
D = 50	Cr	Pe	0.01	0.1	1.0	
		ΔX	$\Delta X = 1$	$\Delta X = 10$	$\Delta X = 100$	
		0.05	0.27	0.08	0.82	
		0.25	0.46	0.05	0.48	
		0.5	0.69	0.00	0.16	
		1.0	0.66	0.00	0.10	
		1.5	0.85	0.18	1.81	
4	0.66	0.63	6.15			
20	1.46	3.49				

表 4 初始濃度階梯分佈型各測試例相對誤差總表

(單位：%)

		Pe		∞	∞	∞
		ΔX	$\Delta X = 1$	$\Delta X = 10$	$\Delta X = 100$	
純 移 流 流 況	D = 0	Cr	0.05	0.63	0.61	2.16
			0.25	0.62	0.59	1.92
			0.5	0.60	0.54	1.59
			1.0	0.00	0.00	0.00
			1.5	0.66	0.66	2.02
			4	0.74	0.91	5.70
			20	1.08	4.04	
具 延 散 流 況	D = 0.5	Cr	0.05	0.03	0.09	1.03
			0.25	0.03	0.10	1.02
			0.5	0.02	0.11	1.09
			1.0	0.02	0.10	0.99
			1.5	0.01	0.05	0.85
			4	0.01	0.14	4.13
			20	0.12	2.46	
	D = 5	Cr	0.05	0.04	0.03	0.67
			0.25	0.02	0.02	0.76
			0.5	0.01	0.01	0.90
			1.0	0.01	0.02	0.84
			1.5	0.07	0.07	0.39
			4	0.07	0.25	1.66
			20	0.21	1.38	
	D = 50	Cr	0.05	1.45	0.02	0.33
			0.25	1.07	0.02	0.24
			0.5	0.42	0.04	0.14
			1.0	0.38	0.09	0.18
			1.5	0.48	0.14	0.69
			4	0.38	0.37	2.41
			20	1.19	1.68	

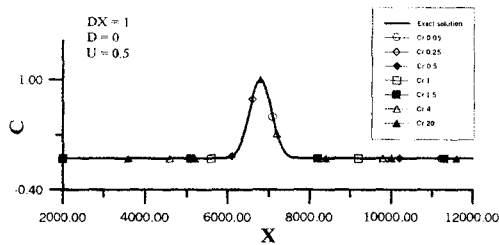


圖 3 測試例一高斯分佈模擬之結果

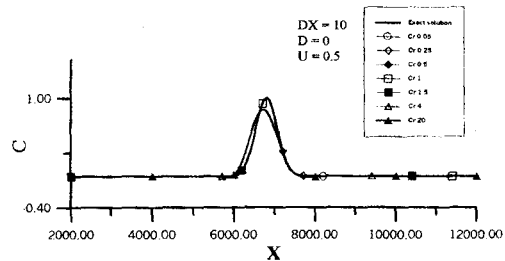


圖 4 測試例二高斯分佈模擬之結果

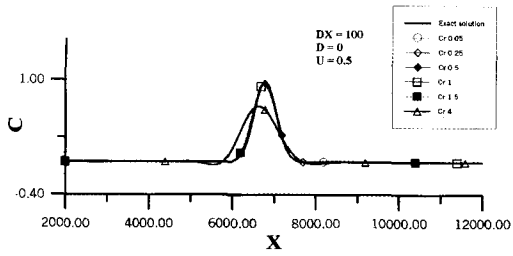


圖 5 測試例三高斯分佈模擬之結果

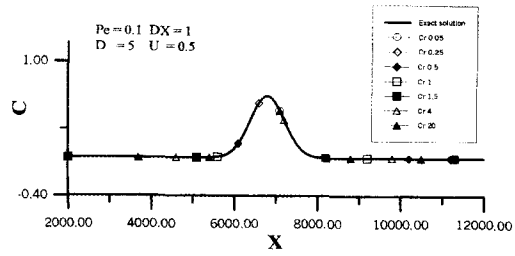


圖 9 測試例七高斯分佈模擬之結果

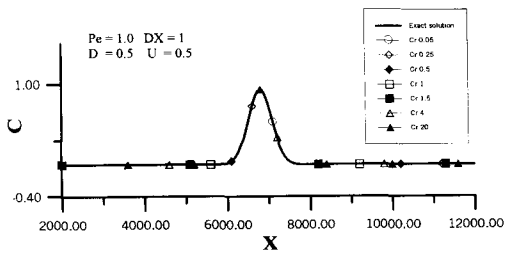


圖 6 測試例四高斯分佈模擬之結果

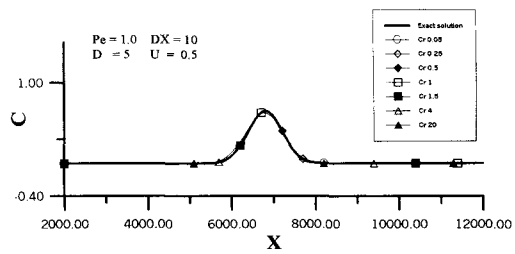


圖 10 測試例八高斯分佈模擬之結果

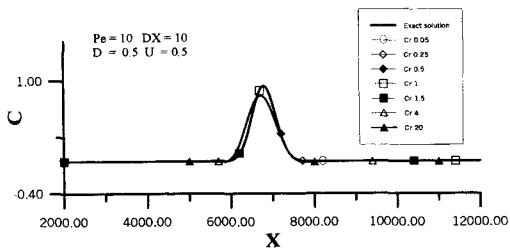


圖 7 測試例五高斯分佈模擬之結果

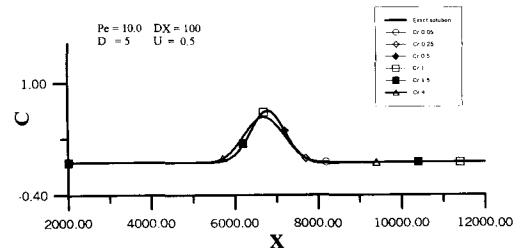


圖 11 測試例九高斯分佈模擬之結果

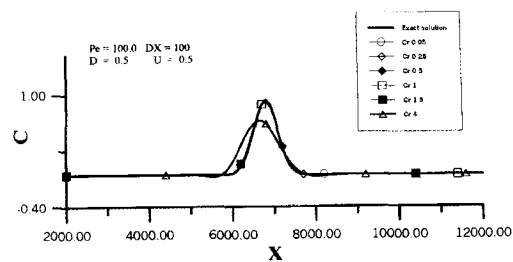


圖 8 測試例六高斯分佈模擬之結果

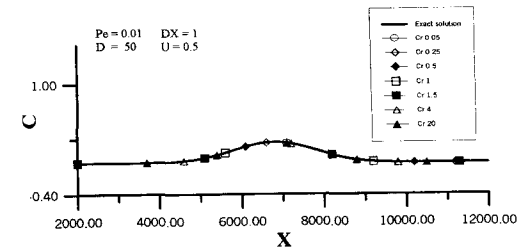


圖 12 測試例十高斯分佈模擬之結果

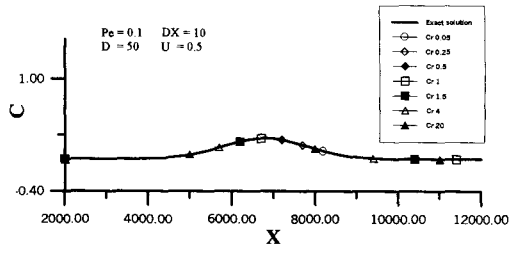


圖 13 測試例十一高斯分佈模擬之結果

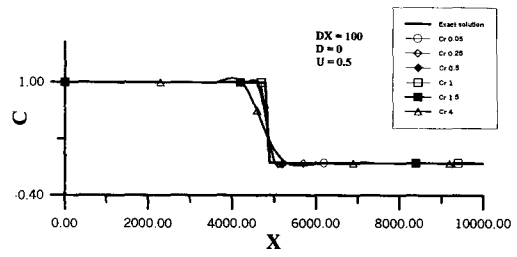


圖 17 測試例三階梯分佈模擬之結果

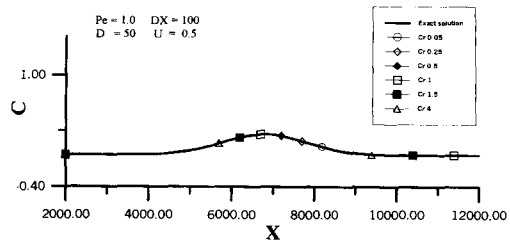


圖 14 測試例十二高斯分佈模擬之結果

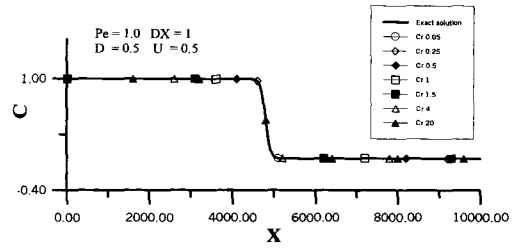


圖 18 測試例四階梯分佈模擬之結果

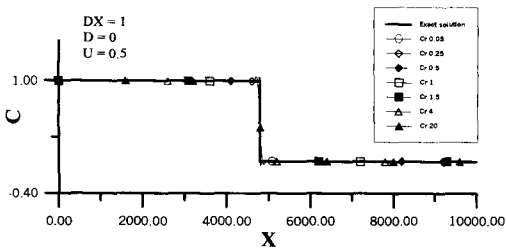


圖 15 測試例一階梯分佈模擬之結果

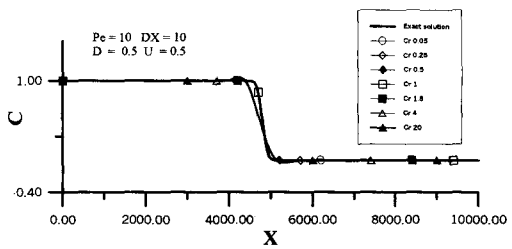


圖 19 測試例五階梯分佈模擬之結果

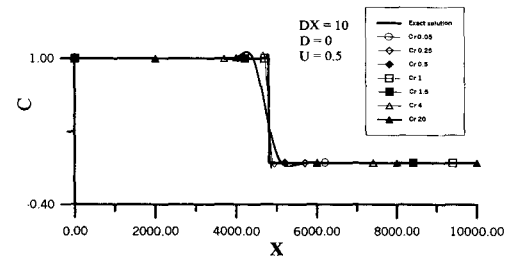


圖 16 測試例二階梯分佈模擬之結果

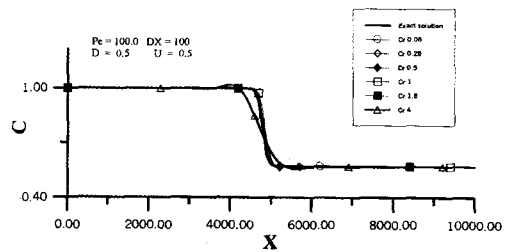


圖 20 測試例六階梯分佈模擬之結果

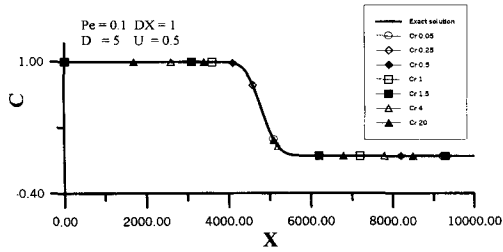


圖 21 測試例七階梯分佈模擬之結果

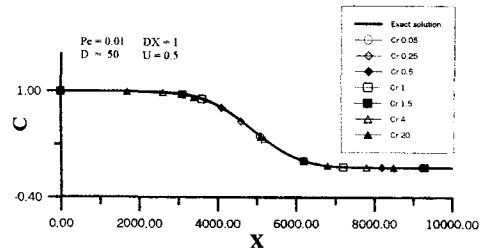


圖 24 測試例十階梯分佈模擬之結果

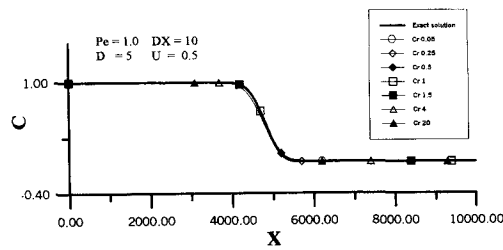


圖 22 測試例八階梯分佈模擬之結果

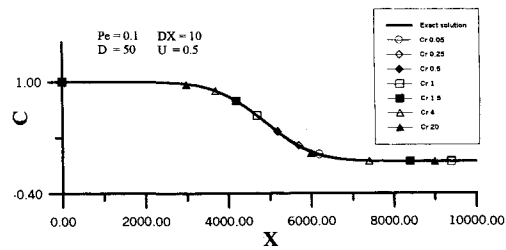


圖 25 測試例十一階梯分佈模擬之結果

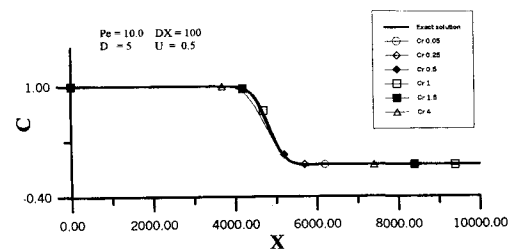


圖 23 測試例九階梯分佈模擬之結果

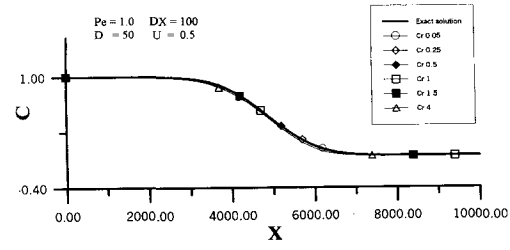


圖 26 測試例九階梯分佈模擬之結果

圖 3 至圖 5 為高斯分佈中 Case I、II、III 之結果。其延散係數均為零，亦即模擬純移流的傳輸狀況。此一組合主要探討網格間距大小對模擬效果的影響，故各 Case 之差別僅在於間距大小的不同。圖 3 之網格間距較小 ($\Delta X=1$)，模擬結果顯示當可蘭數(可蘭數為真實流速 U 與數值模式網格速度 $\frac{\Delta x}{\Delta t}$ 之比值)小於 20 以下時，此模式均可準確地演算出尖峰位置及濃度分佈狀況。於圖 4 $\Delta X=10$ 網格間距較大之情況下，發現當可蘭數大至 20 時，模式便無法正確反映

峰值的位置而產生相位誤差，此時相對誤差值已達 25%。而圖 5 當網格間距更大 ($\Delta X=100$) 時，僅可蘭數為 1 的情況沒有明顯的誤差，而可蘭數為 4 之情況相對誤差值高達 50%，其他可蘭數情況仍達可接受之誤差，相對誤差值約在 0% 與 10% 之間。綜觀高斯分佈純移流情況演算結果顯示當網格間距愈小，於時間間距較大的演算情況下亦可得到令人滿意的結果，反之當網格間距愈大，欲得可接受之結果只能使用令可蘭數接近 1.0 的時間間距來模擬。

圖 6 至圖 8 為高斯分佈中 Case IV、V、VI 之結果，其延散係數均為 0.5 乃模擬低延散效應之傳輸狀況。在具有延散效果的傳輸中，於網格間距較小的圖 6 ($\Delta X=1$) 中發現可蘭數小於 20 時，與無延散效果時一樣，仍舊可得到準確的模擬結果。而當網格間距較大時，由圖 7 ($\Delta X=10$) 之情況得知可蘭數為 20 的模擬結果無法反映出正確的濃度分佈，與純移流情況的圖 4 比較，其相對誤差值由 25% 降至 20%。而網格間距更大的圖 8 ($\Delta X=100$)，可蘭數為 4 之情況誤差值高達 45%。同樣的比較圖 8 與純移流情況的圖 5，相對誤差的大小亦因具延散效應而有所改善，如可蘭數為 4 時相對誤差由 50% 降至 45%。由以上比較可知，延散效應的加入反而改善了數值計算所產生的相對誤差。如前述，當延散係數愈大則數值演算的效果愈佳，由可蘭數並無法反映出延散係數對模式的影響，於是以 Pe 數 $\frac{U * \Delta x}{D}$ 作為依據。由 Pe 數的大小可以表現出傳輸機制主要的控制作用，當 Pe 數愈大表示整個傳輸受到移流作用的影響較大，而當 Pe 數愈小表示整個傳輸受到延散作用的影響較大。因此取網格間距均為 10 的圖 7、圖 10 與圖 13 來討論，由表 1 可知各圖之 Pe 數為 10、1、0.1。比較發現當 Pe 數愈小時其誤差值愈小，以模擬效果最差的可蘭數 20 條件下而言，其相對累積誤差值由 21% 降至 10% 再降至 3.5%，每次可減少 50% 以上的誤差。由此可知，延散效果顯著時模式可做較佳的模擬而移流效應相對愈大時數值模擬反而困難。

圖 9 至圖 11 (Case VII、VIII、IX) 與圖 12 至圖 14 (Case X、X I、X II) 分別模擬延散係數為 5 及 50 的傳輸情形。同樣的，當以較小的網格間距 ($\Delta X=1$) 模擬時，均得到可接受的結果。而網格間距擴大為 10 的情況時，可蘭數小於等於 20 的條件下之誤差皆達可接受的範圍，此顯示當延散係數較高時，於較大的網格間距亦可得到準確的結果。而網格間距為 100 的情況下，圖 11 ($D = 5$) 中可蘭數為 4 與 20 的條件下，仍無法合乎相對誤差 10% 以內的要求，但於圖 14 ($D = 50$) 中，可蘭數為 4 的誤差情況已可接

受。

圖 15 至圖 17 為階梯分佈中 Case I、II、III 之純移流模擬結果。可以發現模擬之結果無法完整反應真實情況，原因乃是由於濃度曲線突降會造成數值模擬時因差分及內插所產生的數值震盪。由間距最小的圖 15 可以看出在突降前後的位置有些微的震盪曲線產生，但當可蘭數為 1 時可準確的模擬出階梯狀的傳輸結果且不會產生數值震盪。當網格間距放大 ($\Delta x = 10$) 後可蘭數為 4 的曲線數值震盪的範圍已向上游延伸至 X 座標 4300 左右，誤差值為 0.9%，而可蘭數為 1 的曲線依然準確。當距離再加大至 $\Delta x = 100$ ，數值的震盪區間亦跟著放大，可蘭數為 4 的曲線其前後震盪介於 X 座標 4000 至 6000 之間，而相對誤差則達 5.7%。若比較高斯分佈中同為純移流傳輸的圖 1 至圖 3 發現，模式不論在哪一種初始濃度分佈中，可蘭數的大小均關係著模式的準確性，當可蘭數為 1 時最為準確，而隨著可蘭數的放大而降低準確性。此說明了無論以時間軸或以空間軸做內插仍應考慮到特性線是否可以真實地捕捉住濃度的運移。

圖 18 至圖 26 為階梯分佈中 Case IV 至 X II 之模擬結果，均具有延散行為的傳輸，比較之後發現，當 Peclet 數愈小，誤差愈小且數值震盪亦趨於和緩。由圖 19、圖 22 與圖 25 三個網格間距相同， Pe 數漸減的情況可以明顯的看出，於圖 19 可蘭數為 20 的曲線，其數值震盪可清楚的看見，其範圍約在 X 座標點 4000 到 6000 之間，誤差值為 3%，而圖 22 中可蘭數為 20 的數值震盪已不明顯，其誤差值僅 1%，圖 25 中可蘭數為 20 的曲線已與解析解幾乎重合。濃度剖面分佈的陡降受到延散效應的影響而愈趨圓滑時，模式的數值震盪減小而增加了模擬的準確度；在比較 $Pe = 0.1、1$ 以及 10 各組模擬結果，取相同可蘭數為 20 比較可明顯的看出在相同的 Pe 數條件下因流速 U 固定，因此 Δx 及 D 可呈固定的比例關係，由圖形及相對誤差結果顯示，在階梯型的濃度分佈下，以 Holly-Preissmann 法與 Crank-Nicolson 法以 split operator 觀念解移流延散問題中，在相同 Pe 數條件，延散效應的增強對數值

解準確性的提升並不如縮小網格間距後準確度提升的效果好，此原則亦適用於高斯分佈情況。

由以上各圖所顯示的結果可看出，在相同的網格間距與延散係數下，可蘭數的大小左右著模式演算的準確度。當可蘭數大於 1 則愈大模式愈無法模擬出正確的傳輸情形，而愈接近 1 則模式的準確性越高。若網格間距愈小，在可接受誤差中所能選擇的可蘭數範圍就愈大，而網格間距愈大則所能選用的可蘭數範圍縮小至 1 附近。

當延散係數相同且網格間距相同的情況下，可發現當可蘭數為 1 時其誤差值最小，不論可蘭數是由 1 增加或由 1 減少均會造成誤差值的增加，但由 1 減少的可蘭數條件群所模擬出的結果其誤差值小於由 1 增加的可蘭數條件群所模擬出的結果。以延散係數 5 網格間距 10 為例，可蘭數小於 1 所得之誤差值為 0.21%、0.12%、0.01% 而大於 1 所得之誤差值為 0.46%、1.63%、10.40%，由上列誤差值可看出可蘭數小於 1 所得之最大誤差 0.21% 仍小於可蘭數大於 1 之最小誤差 0.46%。此一差別主要是來自於當可蘭數小於 1 時，本文模式是採用空間軸差分得來，而當可蘭數大於 1 時則是由時間軸差分而得，因時間軸差分需求出下一時間之位置來進行差分，已多了一倍的估計次數而不如空間軸差分是在兩個已知的點上內差來的準確。

六、結論

本文以 Holly-Preissmann 特性線法以及 Crank-Nicolson 差分法來求解一維移流延散方程式，假設移流與延散兩階段順序發生在同一個時段中，並以同一數值網格內的空間軸或時間軸做內插。以高斯分佈及階梯分佈兩種濃度分佈進行測試，歸納以上討論可獲得結論如下：

1. 當濃度呈階梯分佈有較大濃度坡降時，需注意將可蘭數控制於 1 附近，若需用較大的可蘭數應考慮是否可以正確的反應污染物的運移。當濃度為高斯型有連續緩變坡時，則可蘭數的範圍可較大。
2. 由網格間距大小的測試發現，當網格間距愈小就算是使用較大的時間間距依舊可以

獲得令人滿意的結果。

3. 不同可蘭數的模擬顯示，可蘭數小於 1 時所模擬之結果比可蘭數大於 1 所得結果準確，由此可知以空間軸差分演算比時間軸差分演算準確。
4. 比較純移流與移流延散兩種傳輸得知，當延散效應加入傳輸模擬時改善了數值計算所產生的相對誤差。此乃因數值延散的效應被淡化所致。
5. 比較不同延散效果對模式的影響得知，當 Peclet 數值愈小時模式所產生的相對誤差愈小，亦即延散效果愈強模式愈準確。
6. 比較網格間距與延散係數對模式的影響發現，改變網格間距與改變延散係數對模式而言，以改變網格間距的影響較為顯著。

綜合以上的結論，證實此數值模式在適當的網格間距與參數控制範圍下（如 $0.5 \leq \text{可蘭數} \leq 1$ ）可精確地模擬一維污染物移流延散的傳輸機制。當污染物濃度的空間分佈變化較大，且延散係數較小時可蘭數需盡量控制於 1 附近，取較小的網格間距並注意數值震盪的產生。當濃度的空間分佈較平緩，或延散作用較大時可蘭數的選擇較具彈性，配合網格間距的大小可選擇合適的可蘭數，當網格間距愈小可選用的可蘭數範圍愈大（如 $0.05 \leq \text{可蘭數} \leq 4$ ）。以 Pentium II 的速度，以上測試例皆在數分鐘以內執行完畢，此也說明了此一數值方法的可行性。

七、參考文獻

1. Anderson, D. A., John C. Tannehill, and Richard H. Pletcher, (1984), "Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer", mcgraw hell, new york, U.S.A.
2. Baptista, A., Gresho, P., and Adams, E., "Reference Problems for the Convection-Diffusion Forum", VII Int'l Conference on Comp. Meth. In Water Resources Cambridge, Mass., U.S.A., 1988.
3. Bear, J., and Verruijt, A., (1990), "Modeling Groundwater Flow and Pollution", D. Reidel.

- Co. pp.123-195.
4. Cunge, J. A., Holly, F. M., and Verwey, Jr A., (1980) "Practical Aspects of Computational River Hydraulics", pp.320-332, Iowa institute of hydraulic research, Iowa, U.S.A.
 5. Gerald, C. F., and Wheatley, P. O.,(1994),"The Crank-Nicolson Method", Applied Numerical Analysis, pp.628-pp.630, addison wesley, New York, U.S.A.
 6. Holly, F. M., and Preissmann, A., (1977), "Accurate Calculation of Transport in Two Dimensions", Journal of the Hydraulics Division, ASCE, Vol. 103, No. HY11, pp.1259-1277, prentice, Toront, Canada.
 7. Li, S. G., Ruan, F., and Mclaughlin, D. (1992), "A Space - Time Accurate Method for Solving Solute Transport Problems", Water Resource Research, vol. 28, No. 9, pp.2297-2306.
 8. Miller, C.T., and Rabideau, A.J., (1993) "Development of Split-Operator, Petrov-Galerkin Methods to Simulate Transport and Diffusion Problems", Water Resour. Res., Vol.29, NO. 7, pp.2227-2240.
 9. Segol, G., (1993), "Classic Groundwater Simulations"
 10. Yang, J. C., and Hsu, E.L, (1990), "Time-line Interpolation for Solution of the Dispersion Equation", Journal of Hydraulic Research, Vol. 28, No.4, pp.503-520.
 11. 許少華，倪春發（1996），一維移流傳輸方程式之解法比較，逢甲學報，第二十九期，第 133—144 頁
 12. 倪春發（1996），污染物於淺層土之非平衡吸附傳輸模式，逢甲大學土木及水利研究所碩士論文。

收稿日期：民國 87 年 10 月 23 日

修正日期：民國 87 年 11 月 19 日

接受日期：民國 87 年 11 月 23 日