

SPECIAL ISSUE

ANNUAL REPORT

of

**THE INSTITUTE OF PHYSICS
ACADEMIA SINICA**

VOLUME 17

JUNE 1988

**COMMEMORATION OF THE 60TH
ANNIVERSARY OF ACADEMIA SINICA**

THE INSTITUTE OF PHYSICS, ACADEMIA SINICA

TAIPEI, TAIWAN, REPUBLIC OF CHINA

中央研究院物理研究所集刊

發行人 (Publisher)

林爾康 (E. K. Lin)

執行編輯 (Executive Editor)

楊維邦 (W. K. Yeung)

中央研究院物理研究所集刊

第十七卷

中央研究院物理研究所印行

CONTENTS 目錄

ARTICLES

物理學的性質、簡史和哲學.....	吳大猷	1
Isospin Breaking Effects on the $\Delta 1 = (3/2)K \rightarrow \pi\pi$ Amplitudes	Hai-Yang Cheng	55
Interaction and Geometrical Factors for a Sublattice-Dilute Potts Model: Finite-size Effects	Chin-Kun Hu and Y.-S. Lin	67
Comment on "Nonuniversal Critical Dynamics in Monte Carlo Simulations"	Chin-Kou Hu	79
The Structure of ^{154}Gd via the β -decay of ^{154}Eu Nucleus	L. L. Kiang, G. C. Kiang, P. K. Teng, G. C. Jon, T. H. Yuan and Y. M. Hsu	83
Interstitial Donor Impurities in Silicon	L. T. Ho	101
Electrical Resistivity and Magnetization Studies of NdFeB System ..	Y. D. Yao and S. U. Jen	107
Study on Flow Distribution and Pulse Shape—A Model for Pulse Feeling in Chinese Medicine	W. B. Chen and J. I. Horng, M. K. Wu and E. E. Anderson	117
Numerical Computations on Interaction of Waves with Large Submerged Structures	W.-K. Wang, Y. Y. Lo, Y. Chiang and T. C. Chen	123
Numerical Solution of Flow Over a Rearward Facing Step	Robert R. Hwang and Hen-Cheng Fan	289
空氣品質移動監測站之設置理論.....	Lai-Chen Chien and Yang-You Niu	139
寬板靜電集塵器之性能模式.....	梁文傑、林宗富	171
空氣品質固定監測網的設置理論與應用.....	梁文傑、呂永正	203

The Annual Report is published annually by the Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei Taiwan, 115, Republic of China.

物理學的本質、簡史和哲學

海面溫度遙測的水汽訂正問題.....曾忠一、朱曙光 239
 河口流場傳輸及污染質擴散的數值研究.....楊文昌、黃榮鑑 267

ABSTRACT

Boson Pair-Breaking States in Nuclei Hsi-Tseng Chen, P. W. Richardson, L. L. Kiang 308
 Y. Tzeng, P. K. Teng, G. C. Kiang, C. W. Wang, S. F. Tsai, E. K. Lin and A. Arima 308
 Relativistic Enhancement of the Magnetic Spin-Orbit Contributions to Nuclear Coulomb Energies
 Yiharn Tzeng and Chun Wa Wong 309
 A Study of the Reaction (π^+ , π^+ P) in ^{12}C and ^6Li . J. R. Hurd, J. S. Boswell, R. C. Minehart
 L. B. Rees, Y. Tzeng, H. J. Ziock and K. O. H. Ziock 310
 Contributions of Two-Gluon Exchange Diagrams to the NN Spin-Orbit Interaction . . Y. Tzeng 311
 Diffusion and Conductivity of Sodium Impurity in Silicon and Germanium L. T. Ho 312
 Diffusion and Conductivity of Potassium Impurity in Silicon and Germanium L. T. Ho 313
 Infrared Absorption Spectroscopy of Chemical Impurities in Semiconductors L. T. Ho 314
 Laser Raman Study of Solid Carbon Tetrachloride W. S. Tse and S. J. Lin 315
 Hydrodynamical Theory of the Lo-Phonon-Plasmon Dispersion in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$
 C. P. Chang, C. S. Fang, W. S. Tse and K. F. Pai 316
 The Raman Spectra and Crystal Structure of Crystalline SnBr
 Wan-Sun Tse and Nai-Tsung Liang 317
 A thermal and Raman Investigation of the Phase Transitions in Zinc Perchlorate Hexahydrate
 K. F. Pai, Y. C. Chen, J. S. Hwang, W. S. Tse and C. S. Fang 318
 Investigations on the Biological Corrosion of Condenser Tubes by Scanning Auger Microprobe
 Techniques J. R. Chen, S. D. Chyou, S. I. Lew, C. J. Huang, C. S. Fang and W. S. Tse 319
 Re/Ir/W and Os/Ir/W Alloy Coatings on Impregnated Tungsten Cathodes
 C. S. Fang, W. S. Tse and C. E. Maloney 321
 Numerical Study on Flow Transport and Pollutant Diffusion at River Mouths
 W. C. Yang and Robert R. Hwang 323
 Particle-Particle Ring Diagrams in ^{16}O and Skyrme Effective Interactions
 Yiharn Tzeng and T. T. S. Kuo 324

吳大猷

中央研究院

(1988年一月)

節一 物理學的本質——古典動力學
 二 電磁學
 三 相對論
 四 對稱性、變換、不變性
 五 氣體運動論、熱力學、統計力學
 六 量子假設
 七 量子力學—波動力學
 八 矩陣力學
 九 量子力學的物理意義
 十 量子力學的哲學問題
 十一 場的觀念
 十二 總結

本文是想為對各部門物理已熟稔的讀者，作一個「擇要」的溫習，著重各重要進展的本質、新觀念、新假設、新理論的意義、物理學的精神、目標等。由於本文範圍過廣，舉引文獻，實極不便；一般基礎知識，可參閱筆者的「理論物理」第四至第七冊（聯經出版公司）。

物理學的性質、簡史和哲學

「科學」有幾個「面」，一個是我們通常所熟習，應用的「知識」部分；一個是科學重大發展的歷程；一個是有關科學體系的性質，理論的精神，大體是科學家對這些問題的觀點等。這些研究，可稱之為「科學哲學」，是一般科學者所不常觸及的。

作科學哲學的研討，是需要在上列的前二部分有甚深入的了解和知識。茲以物理學為具體的例子闡述此點。

研討物理學的哲學，尤其量子力學所引致的哲學問題，是需要了解古典物理學各部門的基礎、發展、結構；重要的現象和實驗、理論的性質；每重大發展的背景，如相對論的意義、量子概念的由來；量子的出發點，量子的統一；發展的歷程——先有數學形式的建立再繼以完整的體系；電場、磁場的企圖；愛因斯坦對「萬有引力」與電磁場的統一企圖；近年的大統一的研究；至此才能研討量子的原因。但如對這些沒有廣且深的知識，亦正是物理學，則有如盲人摸象，或人亦云，是無大意義的。

近來偶見一些談及科學哲學的文，間或引用某些作家們的見解。這些科學家們很少是科學創作或研究者；大多多是敘述科學思想的。筆者以為探求科學哲學的正途，是由科學本身的「第一手資料」，如前段所述。在本文中，筆者以物理學為例，略述物理學的性質，簡史和哲學的問題。

一、物理學的性質——動力學

全部物理學的性質，可以「古典動力學」說明之。古典力學不僅是物理學中最早建立的部門；它包涵的祇有物理學中最基本的三個觀念——時、空和質量，其它物理部門則需要更多的觀念，如電磁學的「電」；「磁」；熱力學的「溫度」等。

物理學研究的對象乃自然現象——這包括自然界的和在實驗室中人為的物理現象。

物理學的性質、簡史和哲學

人類由最原始的經驗，便有時間（的久暫）和空間（的距離）的觀念；由之便進而構成速度（率）的觀念，以描述物體的運動。由日、月、年的週而復始，人們便構成有「週期性」的觀念，及現象的規律性。

十七世紀初，伽里利奧由物體（在斜坡板上）的運動的實驗觀察，歸納得後來成為牛頓第一運動定律的前驅。牛頓更清楚的引入加速度，動量的觀念；由實驗觀察和思考，提出他的三個運動定律。

所謂「定律」，乃若干個物理概念間的一個關係。定律有純屬經驗性的，最簡單的例如謂「每一週年中有三百六十五又四分之一日」。定律亦有基於經驗的強烈信念而為所有經驗所支持的（例如熱力學第二定律，見後文。）

十七世紀初，刻卜勒由天文學家的觀測記錄的分析，獲得行星運動的三個定律。這些是純經驗性的定律。

到此，我們可以引入「物理的理論」觀念了。通常我們要「解釋」或「了解」某事物。在物理學中，我們亦用這兩個術語，但和日常的意義不同。在物理學中，所謂「解釋」或「了解」，是意謂對某一（新的）現象，或某一個經驗所得的「定律」，從已有（清楚的）概念和已有的定律去「解釋」，「了解」它。從物理學的觀點，要「了解」或「解釋」刻卜勒的行星運動定律，是作一些假設（即關於若干物理概念的關係的假設），或引入新的概念，涵蓋了刻卜勒的三個定律，換言之，可以較少數目的假設，涵蓋許多原立無關的定律（如刻卜勒的三個定律。）

上面簡述的「解釋」、「了解」在物理學中的意義，亦是物理學的「理論」的意義；物理學家有一個不言而喻的共同目標，即不斷的擴展探研的領域，企圖「了解」新的現象（按上述的意義）；必要時，引入新的概念和新的假設（理論）；不斷的企求以「最簡單」的假設，最小數目的概念，「解釋」或「了解」有已知的現象。簡言之，這便是物理學的精神——或可稱之「哲學」。

由「理論」中的假設（概念間的關係，表以數學形式），藉邏輯（數學乃邏輯工具之一）方法，可導出新的（概念的）關係，和經驗結果証驗（有時需作新的實驗度量作証驗）。如理論導致結論，與經驗結果不符，則必須修改理論的假設，甚或全部放棄該理論。

上述之作「假設」，初無規律可循。在物理學的發展史中，各重要理論，有可溯源於前此已知原理的啟示的，有可溯源於某些信念或「原則」的，有可來自物理學家的創新靈感的，但「創新」性的假設的共特點，乃它們不可能由已知

煩長的故事。此節將綜結古典力學的性質。

(一) 古典物理學中，毫無猶疑的採用了「絕對的時間」(或稱宇宙普遍性時間，或「數學的時間」)。其實在牛頓時，亦祇知有歐氏幾何的空間，別無選擇。「絕對的時間」亦是幾千年來人類所知所想像的唯一時間。

(二) 一個物體(抽象化為一個粒子)的位置和動量，二者是以為當然的。可以同時量定，且原則上是可以無限準確量定的。這是一個基本觀點；牛頓的運動方程式是二次微分方程式，這個基本第二運動定律，即包含這個觀點；如位置與動量同時確定，則運動方程式不能求解，變成空洞無意義了。故在古典力學中，我們採「位置與動量」為運動態的定義。

(三) 第二定律是微分方程式的形式；一個物體的運動態，是時空座標的連續函數，由一開始條件(即在某時 t 的位置 r ，動量 p)，按著微分方程式果式確定的展開。故我們說按古典力學，運動是連續的，遵守「因果律」的。 (注意：在物理學中，「因果律」的定義是：由一個開始條件，必得一個確定的發展，並沒有人性或神性元素在內。)

(四) 由牛頓的第一、二定律，即可得力學能(動能及位能)的守恆定律。後來能的概念，推廣到熱能，化學能等，成為「能的守恆定律」。在化學中，有「質量守恆定律」。但這兩個定律的「統一」，則有俟狹義相對論。

(五) 伽里利與牛頓的力學原理(第一、第二運動定律)，隱涵著一個基本性的限制，即他們的「運動」，是指相對一個「慣性座標」而言。何謂慣性座標呢？我們有完全在對轉行的座標(亦並非指一個座標，而實係無數的座標，以等速作相對運動的座標)；但這一定律對任何速度作相對運動的座標(或一般的物理)定(或一般的物理)出發點。

(六) 牛頓的萬有引力，涵有一個基本假設，即兩個物體間有「超距」的且「立刻」的作用。這兩個觀念，後漸為「場」的觀念取代；但「場」的觀念，一直到十九世紀法拉第，馬克斯威爾後才真正清楚的建立。(見下節)

牛頓的古典力學，成為古典物理學的基石，且二百餘年，始在「時」、「量」等基本概念上，先後經狹義相對論(1905年)，廣義相對論(1915年)，量子力學(1925-7年)的修改。故物理學的進展，不僅隨著新現象新觀察而不斷

的原理，定律，以邏輯法得來的；因為凡可以由邏輯法導出的，嚴格言之，都不算是「新」的理論也。「新」的假設的重要點，是「新」！

說到這裡，數十年前胡適先生，屢以「大膽假設，小心求證」八個字寫給向他索墨寶的朋友。胡先生未深研科學，但他對科學真諦的認識，遠深於談科學哲學者們。(見下文。)

牛頓由刻卜勒的行星運動三定律，月球的繞地球運行，蘋果的落地的觀察，作一個「大膽的假設」——萬有引力。由這「萬有引力」假設，按牛頓的運動定律(第二定律之運動方程式)，不僅可「解釋」刻卜勒的行星三定律，且可由導出的結果，預算出尚未發現的行星的存在；此後更隱示第九個行星(冥王星)的存在。這些是「小心求證」的一些例子。

由於「萬有引力」假設，已證明其有廣面的有效性，故已被提升為「定律」的地位。我們常常稱之為「萬年不變的定律」。但它的「假設」性質，我們不宜忘記。尤其是愛因斯坦的廣義相對論時，以四維時空的幾何性質與物質分布的關係，取代了牛頓的萬有引力的假設，可提醒我們這假設的性質。

上面曾申述在物理學中，「解釋」一詞的意義。在他的「原理」名著中，牛頓待觀的現象，牛頓的哲學，如問物體為何有質量，則科學家所持的態度，是超以說學的範圍，可說是「玄學」。

上面簡略的申述了「動力學」的構成和性質。它是由現象的觀察，構成原始的等概念(理論)；由物體運動速度、加速度、質量、力、動量、動能等假設(理論)；由觀察、實驗、歸納的結論(「解釋」)若干的現象，實驗發展過程的假設(理論)；由理論導出結論，與其他科學的性質亦如是。

上面曾申述了「動力學」的構成和性質。它是由現象的觀察，構成原始的等概念(理論)；由物體運動速度、加速度、質量、力、動量、動能等假設(理論)；由觀察、實驗、歸納的結論(「解釋」)若干的現象，實驗發展過程的假設(理論)；由理論導出結論，與其他科學的性質亦如是。

相對論：涵蓋大部的電磁光的現象。

1902-3年，羅倫茲求下述的「數學問題」之解：

求兩座標系 S, S' 的 $(x, y, z, t), (x', y', z', t')$ 間的變換，使馬克斯威爾之電磁場方程式不變。這個變換為

$$x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, y' = y, z' = z, ct' = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}(ct - \frac{v}{c}x),$$

為 S' 沿 x, x' 方向的相對速度，這個「羅倫茲變換」簡單的解答所有上述的 Michelson, Trouton, Noble, Bradley, Airy, Fizeau 等實驗的結果。它是狹義相對論的數學式，包涵了相對論的所有物理內涵。

三、相對論

第一節曾謂伽利利奧，牛頓動力學（運動定律），適用於「慣性座標」，設 S 為一慣性座標 (x, t) ， S' 為一以等速 v 對 S 在 x 方向運行的座標，則在 S' 的座標 (x', t') 為

$$x' = x - vt, t' = t.$$

由此得見在 S' 中，牛頓的運動方程式形式，和在 S 的相同，故 S' 亦一慣性座標，由此我們得一相對論原理：

「力學定律，在所有慣性座標皆相同」

由此，物理學家便推展到下一問題：

「電磁定律，在所有慣性座標皆相同？」

1881年，Michelson 按馬克斯威爾 1879 年的建議，企圖以實驗看看地球以高速度的繞日運行，是否影響在地面上的光的傳播。

1902年 Trouton, 1903年 Noble 亦作電磁性的實驗，看看地面的運行是否有影響。這些實驗的結果，皆是「負」性的，換言之「不能由在地面所作的實驗來鑑定地球是否在高速度運行中。」

註 但亦有其它的觀察和實驗，如有關星光的：Bradley (1727), Airy (1871)；有關流水中的光的進行的：Fizeau (1851) 等，顯示不同結論，但它們在相對論中，都可獲圓滿的解釋的，茲不詳述。

這些實驗，顯示指向一個相對論原理：

「電磁定律，在各以等速作相對運動的座標皆相同」

問題是：此變換式中有兩個時間 t 和 t' ，而按牛頓，我們祇有一個「時」——即所謂「絕對的時」；故 t' 的意義不明，隨之，羅倫茲變換的意義亦不明。

按牛頓的觀點，「時」是「絕對的」；「時」的流逝，是和任何事物無關的；故和物體長度的量定，當然是無關的；換言之，「時」和「空」是各自獨立無關的。愛因斯坦現在指出，在物理學上，「絕對的時」是沒有確切的意義的；量一個動的物體的長度，是和「時間」有密切不可分的關聯的。

愛因斯坦的基本性貢獻，是提出一個新的觀點，即他要求物理學中任何一個概念，都應有在度量上的意義，換言之，在物理學中，任何一個概念，包括「時」、「空」、「時空」這基礎性的概念，都應和「長度」的長短，例如一個觀察者，他應由他的觀義如何量定在甲、乙兩地發生的兩事項 A、B 的時距，然後說 A、B 兩事項是「同時」的，然後根據上述甲、乙兩地「同時」的「校正」使它們的物體的「長度」的度量，不再各自獨立無關的，而是互相關聯的。

為略申述這觀點，我們可舉下例，我們試問如何量一輛以等速 v 橫過我們面前的一列火車。我們立刻想到將英尺放在地面（與車軌平行），同時的記錄車頭和尾端在尺上的位置。但問題是：兩地點的「同時」是甚麼意義呢？為答這問題，我們可將兩地的鐘「校正」，使它們「同步」，例如在甲地的鐘 $t_{甲}$ ，向乙地放出一光訊號。設光訊號抵乙地時乙的鐘為 $t_{乙}$ ，光抵乙時即為一鏡反射回甲；茲將乙鐘校正

$$t_{乙} = \frac{1}{2}(t_{甲} + t'_{甲}).$$

如兩地按此「校正」的鐘，則兩地兩事「同時」發生的意義為

$$t_{甲} = t_{乙}$$

故量一行動中的車的長度，是按兩端所在點的鐘「同時」($t_{甲} = t_{乙}$) 記錄其尺上的位置。

由這個簡單的例子，首先我們知道量「長度」和「時」已不是各自獨立無關了。

現在看「相對性原理」。按這原理，所有的慣性座標，皆居完全相等的立場；每一座標系皆各用同一方法，將在各地的鐘，對他自己「校正，同步」了。由於各項，如按座標系甲的同步鐘是「同時」的，對座標系乙的同步鐘則非同時的；換言之「同時性」是沒有絕對意義的。由此即得見：量一個物體的長度，各慣性座標雖皆「同時」的讀物體兩端所在處的尺上刻度，但他的「同時」既不，所得的長度也不。

上述的分析，現在看來，顯明極了，但在愛因斯坦前，人們祇有「絕對時」的觀念，從來未作這樣的分析。

至於相對論的相對原理，則非愛因斯坦首創；伽里利與，牛頓的力學，即涵有了相對原理；即在電磁現象上，Poincaré，早在1899-1904年已指出相對論的原理。Michelson的實驗(1881, 1887年)很強烈的隱示地球的運行，不影響光的傳播。愛因斯坦在後來的回憶中，以為他(1905年時)的思索，是源自「對稱性」的信念，不是來自Michelson實驗的負性結果(雖然他顯然的知道這工作)。

在1905年愛因斯坦的文中，他清楚的將相對論原理，分作二點：

- (1) 物理定律，在所有慣性座標系間的變換下，皆有不變性。
- (2) 在所有慣性座標系中，光速皆為同一恆值c。

我們在此務須注意(2)係一個基本"假設"，並不包括於(1)之內。上述的度量的校正時機，即需根據(2)的假設的。愛因斯坦由上述「時」，「空」的度量的意義，及此二相對論原理，即可導出羅倫茲變換中兩個時間 t 與 t' 之謎，乃有清楚的意義。這是羅倫茲變換的數學形式而我們仍稱「愛因斯坦的相對論」之故也。

相對論在科學哲學上，有極重大的貢獻。愛因斯坦首次的提出一個觀點，以在物理學(甚至可說自人類文明開始以來)的「時」、「空」的概念)指出，絕對牛頓的「絕對同時性」，是沒有確切的意義的。他對物理學中所用的概念的定義上的一個「新」的觀點(在一九二五年海森堡初創接受量子力學的觀點，即是愛因斯坦的觀點(雖則後來愛因斯坦不能接受量子的哲學態度，當於第一節講牛頓萬有引力假設時，曾提及愛因斯坦在廣義相對論中的「萬有引力理論」。這個理論和許多「現象性」(phenomenological)的理論迥異。大物理學家(如E. P. Wigner)曾說：狹義相對論如1905年愛因斯坦不提出的，如沒終有別人提出的，則可說不會有別人想到的。這個理論是對物理學的「革命」性的假設；本文將試略述它的觀點。

狹義相對論，係限於以等速作相對運動的座標系間的物理定律之不變性。廣義相對論乃係將這相對速度(加速度)作相對運動的座標系。

由通俗文獻中所學的「電梯」的考慮，我們很容易了解在一個座標系中所感到的一切勿以這即加速運動！他們發現這些極基本的精確實驗所証的「發現」，並成為他的單擺的觀察；他們的結果，却涵有極大的意義，卻是待我們須加階段計算，確是遵守「等速」的；但在準確的非線性理論中，則有微差的。]

愛因斯坦的次一步，乃係將「萬有引力」，表以座標系的任意(加速度)變換。在狹義相對論中，我們已知我們所器的是時，空的四維「pseudo歐氏」空間(仍是"平"的空間四維空間的問題，愛因斯坦提出的幾何性質的問題。

按牛頓力學定律，一個物體如不受外力，則將靜止或以等速作直線運動。茲各行星繞日球作橢圓軌道的運行，則行星必受有外力。牛頓乃作「萬有引力」的假設。愛因斯坦指出橢圓軌道是橢圓曲線。但「歐氏空間」是數學的（或抽象的）空間；在這個空間，行星的軌道是橢圓曲線。描述物體運動的問題：描述物體運動的幾何性質，應由沒有理的物質（能一動量）的分佈性質決定；這是調它是 x, y, z, t 四維的 Riemann 空間，它的幾何性質乃由度規張量 $g_{\mu\nu}(x_1, x_2, x_3, x_4)$ 函數

$$ds^2 = g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu$$

決定，而 $g_{\mu\nu}$ 則由宇宙的物質分佈決定。這個黎曼空間是「曲的空間」。在這空間中兩點間的「直線」係 geodesic 線。愛因斯坦的新理論的基本假設是：一個物體的運動乃沿由 $g_{\mu\nu}$ 所定的四維曲的空間的 geodesic 線，無所謂（牛頓的）「萬有引力」！但為方便計，下文（文獻中亦然）將仍用「萬有引力」的名詞。

下表簡示牛頓的理論和愛因斯坦理論的對照：

牛頓理論	愛因斯坦理論
歐氏三維空間 (x, y, z) 絕對時 t	黎曼四維空間 (x, y, z, t)
三維空間的直線	四維空間的 geodesic
萬有引力，勢函數 V	$g_{\mu\nu}$ (度規張量, 10個函數)
運動定律 (方程式)	geodesic 方程式
行星軌道乃三維空間的曲線 (橢圓)	四維空間的「直線」(geodesic)
萬有引力定律 (反平方定律)	愛因斯坦定律: $g_{\mu\nu}$ 由物質分佈決定的 (假設) 方程式

由這新理論，可導出它和牛頓理論在三個情形下的微小差異。實驗觀察的結果，皆支持這個新理論。（這三項結果，乃所謂「水星近日點之變折」。故愛因斯坦的「光的萬有引力紅移」及「星光彎折」而已。（注意：文獻中常有誤解的理論，並非牛頓理論的「幾何化」，這是容易引致誤解的）。

由於愛因斯坦理論的基本觀念的創新特異，它的數學工具（微分幾何）對一般物理學者的生疏，及這理論的結果與牛頓理論的差別極為微小，故當 Eddington 氏 (1919年) 宣佈日全蝕觀察結果支持愛氏理論而使它名揚世界，大多數物理學家對之多持「萬不可測」，「深不可測」，「敬而遠之」的態度。又 1920, 30, 40, 50 年代物理學界所謂「主流」研究全力於「引力場與電磁場的統一化」的企圖，但未有成（見下文第十一節），愛氏引力場的重要進展，一為愛氏 (與 Infeld 氏) 證明場的方程式本身已包涵了物體運動 (時空) 軌跡，無需作初時的 geodesic 假設；另一為由「引力場」的「Schwarzschild 球面」問題的探討，Oppenheimer 與 Volkof 開拓一新領域，於 1960 年代，引致「黑洞」的理論 (J. A. Wheeler 等) 此黑洞理論，使由愛氏「引力論」，一個純粹的數學推論至成為宇宙結構的一個基本性問題。近卅年來關於這部門的研究論文，數以千計。雖則在天文觀察上，「黑洞」之存在仍祇有間接的證明，但此理論的重要性無疑。

(1) 狹義相對論乃關於各以等速作相對運動的座標對描述物理現象所使用的時空的關係；換言之，他們用四維的「準歐克里幾何」時空空間；各座標間的關係乃羅倫茲變換；電磁場以四維場向量 A_1, A_2, A_3, A_4 表之。這個場經量子化得成「光子場」；光子場的量子化粒子即光子；它的自旋角動量為 $h/2\pi$ 。

(2) 廣義相對論乃關於以任意速度相對運動的座標對描述物理現象所使用的時空關係。他們的時空座標變換，乃任意的而不是羅倫茲變換，它們的空間是四維的 (非歐氏) 黎曼空間。物理量乃表以四維張量 (包括向量)。

在愛因斯坦的「引力」理論中，與牛頓的引力場相當的乃度規張量 $g_{\mu\nu}$ 函數。在量子場論中，它的量子化粒子稱為「引力子」graviton；它的自旋角動量為 $2h/2\pi$ 。自 1960 年代，即有人作探測此「引力子」的存在觀的觀察實驗，但似尚未有確証。

(3) 愛因斯坦的廣義相對論及他的「萬有引力論」在研討物理的極大領域(宇宙)問題, 極為重要, 亦猶量子力學在研討物理的極小領域(原子, 次原子)的問題然。

愛因斯坦的「萬有引力」理論的創建, 和狹義相對論及量子力學的均不同; 它的確有如胡適所調出自「大膽假設」, 然後求觀察的証驗! 不若狹義相對論提出之前, 已有若干觀察結果亟待解釋; 不若量子力學公設形式的建立, 乃由若干經驗「引導」或「強迫」出來的(見下文第六至十節)。

由這些觀點, 愛因斯坦的理論, 乃物理學史上最美麗的理论之一。

四、對稱性、變換、不變性

前文(第一節)曾談及物理學發展有「化繁為簡」的趨向、(第三節)曾講相對性原理, 可表為「物理定律在某座標變換下不變」的形式。這些都是一個普遍性的原理的特例子; 這普遍性的原理是一個物理系統中的「對稱性」, 和物理定律的形式在某些「變換」下有不變性的關係。

這個「對稱性」和「不變性」間的關係, 並非物理學的新發展, 而是早即知道的。最淺顯的例子, 是

(一) 一個在空間有圓心對稱性的物理系統, (即空間各方向的性質皆相同), 故如將座標繞圓心轉移, 對運動方程式的形式將無影響。但由這個顯然的結果, 可得另一個重要的結果, 即這個系統的「角動量守恆」是也。

這個「圓心對稱性和角動量守恆」的密切關係的例子之一, 是刻卜勒的第二定律。

(二) 如一物體, 它的空間在某方向 x 有均勻性(即座標 x 與 $x+a$ 兩點的性質相同), 則座標在 x 方向作平移時, 運動方程式不變, 由此即得物體在 x 方向之動量守恆性。

上舉的例子, 是來自物理系統的對稱性的座標變換。但在古典力學中, 有更廣義的座標變換(所謂正則變換的), 使運動方程式的數學形式不變的。在這些「正則變換」下, 有許多「不變量」。這部門的理論, 成為古典力學最美麗且

極重要的部分。

「變換」和「不變性」在物理學上發揮它的重要性, 最早的例子, 可能是相對論。狹義相對論的全部內涵, 可以下式表出:

「物理定律(的數學形式)在羅倫茲變換下不變」。相對論引入四維時空, 定義以羅倫茲變換為四維的變換定律, 更定義張量。如是, 則凡物理定律的「萬有引力」理論)之張量分析者, 亦同此故: 凡物理定律可表以張量方程式(偏微分方程式)者, 在四維空向座標變換(這是定義向張量的變換)下, 方程式的形式不變。

「變換」和「不變性」的觀念和重要性, 不限於「座標」的變換。另一種變換, 見諸電磁場的「勢」函數。

馬克斯威爾的電磁場方程式, 如用向量勢 A 和純量勢 ϕ

$$E = -\mu_0 \frac{\partial A}{\partial t} - \nabla\phi, \quad H = \text{curl } A, \quad (\text{mksa 制}) \quad (4-1)$$

則取下式

$$\square A = -\mu_0 j, \quad \square\phi = -\frac{1}{\epsilon_0} \rho, \quad \mu_0 \epsilon_0 = \frac{1}{c^2} \quad (4-2)$$

$$\square = \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

如作一個 H. Weyl (1918, 1929) 稱為規範 (gauge) 變換如下

$$A \rightarrow A - \nabla\chi, \quad \phi \rightarrow \phi + \frac{1}{c} \frac{\partial\chi}{\partial t} \quad (4-3)$$

$$\chi = \chi(x, y, z, ct), \quad \square\chi = 0$$

則上列的 A, ϕ 兩方程式不變, 且所謂羅倫茲條件

$$\text{div } A + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0 \quad (4-4)$$

亦不變。這個變換（稱為「規範變換」），甚為重要；它的推廣為其它的「場」和量子力學，在近年來研究基本粒子和各種相互作用上，極為重要。

五、氣體運動論，熱力學，統計力學

第一節 略述力學的内涵：它祇三個基本概念——時、空、和質量。在物理學另一領域的現象——電磁，光——則需加入電、磁兩個基本概念。此外另一領域的現象——巨觀物體的特性——又需引入一新觀念——溫度的觀念。

研討巨觀物體特性，有兩個不同的出發觀點。一是純巨觀的觀點，即熱力學；我們祇用巨觀性質變數如溫度、壓力等，若若干所謂熱力函數如焔、內能等，而完全不問其分子的成分。在熱力學中，變換其形式，而不變其總值。這是所謂「第一定律」（宇宙的「能」祇可傳遞或有自然現象過程，祇有使一個稱之為「焔」。這是所謂「第二定律」。增加，而永不能使其減少。第一定律「永恆機器」的不可逆性；這便排除了許許多多的「永恆機器」或「永恆反應」的可能性。第二定律則在「第一定律」所允许的過程中，再進一步的排除「永恆反應」的可能性。

這兩個定律的性質是很特殊的。第一定律的根源是最早來源，是由經驗歸納開始，而由人們的信念而形成的。它的根源是人們的堅強信念，但它最後的來源，亦是根據物理學家們目前為止，還未曾發現這反定律的經驗。第二定律的根源，亦是根據物理學家們目前為止，還未曾發現這反定律的經驗。這反定律的根源，亦是根據物理學家們目前為止，還未曾發現這反定律的經驗。這反定律的根源，亦是根據物理學家們目前為止，還未曾發現這反定律的經驗。

熱力學是一部結構很特殊的科學。它祇由這兩個很普遍的性質的定律函數間的關係出發，應用於於範圍甚廣的結核問題。由於這兩個定律的結論（其形式為若個熱力函數間的關係），於於範圍甚廣的結核問題。由於這兩個定律的結論（其形式為若個熱力函數間的關係），於於範圍甚廣的結核問題。由於這兩個定律的結論（其形式為若個熱力函數間的關係），於於範圍甚廣的結核問題。

一結果：在熱力平衡的氣體，他的溫度、體積、壓力三變數之間，必有一個函數關係 $f(T, v, p) = 0$ ，但卻不能得該函數的形式，換言之，即簡單如 $p v = RT$ 的式亦不能獲得。我們知道，這個氣體方程序（或稱定律），由最粗淺形式的氣體運動論即可簡易獲得之。另一個例子是理想氣體的（恆體積）比熱：熱力學祇可告訴我們內能是溫度的函數，而不能得知函數的形式。由氣體運動論則很容易的得 $C_v = (3/2) R$ 。

這些限制，是來自熱力學的基本性質（如上述。）在熱力學中，溫度是一個巨觀的觀念，和力學無關，更和「分子」的平均動能無關。引入力學的觀念和分子結構，是氣體運動論的事。

從歷史上說，氣體的分子理論，卻早於熱力學，雖然分子的真實存在，直到十九世紀末季，仍為許多大物理學家，大化學家所懷疑的。故「氣體運動論」初時是一個基於假設的理論，但用了力學的概念，加上一個假設——「溫度」和「分子」的平均動能」兩個不相關的概念的「認同」，便很輕易的獲得「理想氣體」的「定律 $p v = RT$ 」。這理論所得的結果較熱力學為豐富，是因為它作了較多的假設！

關於上面最後所指出的一點，我們務需作較詳的闡述。在氣體運動論中，我們所處理的，是極大數目10的23次方的分子的運動。我們假設各分子遵守力學的運動定律作運動。顯然我們無法真正去計算這許多分子的運動。故必須引入一個「取平均值的觀念和方法。我們必須引入「機率性」的觀念和數學計算，以代替按力學的運動方程的正確計算。

以一個氣體為例。在熱力平衡態下（這所謂「熱力平衡」本身亦是一個不簡單的觀念，我們暫不解釋它），分子的速率，有一個分佈：速率甚小的分子數甚少；速率甚大的分子數亦甚少；大多數的分子的速率，介乎兩極端值之間。由氣體運動論，可以由若干假設，導得分子速率的分佈函數（所謂馬克斯威爾速率分佈定律）：

$$F(m, v, T) dv = N \int F(m, v, T) dv = N \quad (5-1)$$

謂N個分子中，其速率在v與v+dv之間者的數為F(m, v, T)dv，T乃溫度，m乃分子的質量，積分之上下限為0與∞，由上式，我們得見(1/N) Fdv 乃在N個分子中任意取一分子時，其速率在v與v+dv之間的機率。此分佈函數F(m, v, T)的正確式可由許多不同的假設求得（馬克斯威爾的假設，或波爾茲曼的假設），但他們的結果都相同。

實驗結果所強力支持。

這是一個很具體、平凡的研究問題，卻未想到它引發了物理學的一個基本的大革命。理論物理學家旋即發現，且無疑的證明：根據古典物理的定律所得的分布函數（所謂 Rayleigh-Jeans 定律），顯然的與實驗結果不符。

為得一與實驗結果相符的分布公式，一九〇〇年底，德國物理學家普朗克 (Max Planck) (很勉強的) 創一個古典物理所不允許的假設：物體的「振盪子」的放射及吸收輻射，非連續的，而係以一整個單位 e 放射或吸收的，且這「單位」 e 是與輻射的頻率 ν 成比例的，即 $e = h\nu$ ，此 h 係一普通常數。由此假設，普朗克獲得一個黑體輻射的光譜分布公式，竟與最精確的實驗結果完全吻合。普朗克與實驗結果的比較，可得 h 常數，且是和古典物理的觀念相左的。這正是有如胡適之先生所說的「大膽假設」了。

一九〇五年，愛因斯坦更作了一個更大膽的假設，謂電磁波不僅在物體吸收及放射時是以不連續的「單位」(quantum) 進行，即使是在空中傳播時，亦有「粒子性」(如槍彈) 的性質，「粒子」的能 E 與波的頻率 ν 成正比，「粒子」的動量 p 則如下式：

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (6-1)$$

λ 為波長， h 為普朗克常數。愛因斯坦提出三個例子，可以驗證他的假設：電磁波同時有粒子(質點)的性質，粒子的力學特性如「能」和「動量」，和波的特性如「頻率」、「波長」的關係如上二方程式。一個例子是光電現象。他的光電效應關係為

$$\text{光電子動能 } E = h\nu - \epsilon. \quad (6-2)$$

式中的 $h\nu$ 為「光子」之能， e 係使光電子脫離金屬面所需的能。此關係為準確的實驗所證實，這予愛因斯坦的支持。稍後此假設又由 Compton 效应的實驗獲得極強的支持。因此，電磁波有時有粒子的性質，已無可疑。惟困難乃是：由繞射、偏極等現象中，「波」和「粒子」二者是不相同的。上面的兩無疑義的左方是粒子的特性，右方是波的特性。這在觀念上是「不通」的。

至此，古典物理乃面臨一極大的困難：一方面，普朗克和愛因斯坦的理論，卻是違背古典物理的基本觀念的，但在另一方面，他們的「不可解」的理論，卻為

在述量子論的更多發展之前，我們試略看普朗克和愛因斯坦的「大膽假設」的過程。

普朗克是理論物理學家，為古典熱力學大師，於一九〇〇年時為四十二歲，初不喜波爾茲曼的統計力學。當其分析黑體輻射光譜分布的實驗結果時，利用 Rayleigh-Jeans 定律僅於光譜之長波端有效，而 Wien (理論) 定律，而統於短波長有效的經驗結果，以嘗試性的插入「光子」觀念，是來自統計力學對輻射的強烈信心。愛因斯坦的中插法獲得他的新理論分布定律，而統力學是基於某些暗示，由於「靈機」而作的大膽假設。

量子論的猛速重大發展，終於引發量子力學的創立，乃它在原子物理的研究

的初葉。原理解論，由來甚久。我們不必遠溯古希臘的德謨克里脫；十八到十九世紀間的英國化學家多爾頓已創了原子論，使化學的若干基本定律，可得簡單清楚的瞭解，難則使所有科學家完全接受原子、分子的真實性的證明，仍有待第廿世紀的初葉。

第十九世紀的末季，由於氣體導電現象的實驗研究，引致電子的發現 (湯木遜，一八六九年)，使物理學家知「原子」並非不可再分解的基本粒子。隨之，原子的結構問題，乃成物理學家亟欲研究的問題之一。一九一二年，拉塞福由 α 粒子被原子的正電荷，外有帶負電荷的電子。為瞭解這個原子的模型，物理學家即知道按古典物理的定律 (力學、電磁學的定律)，有這模型的原子是不能穩定存在的。

一九一三年波爾不顧古典物理的根深柢固的觀念和「穩定態的條件」，這「條件」創一個革命性的理論，引入「穩定態」的觀念和「穩定態的條件」，這「條件」自然能由古典物理所創的波爾的 h 常數的出現，這「條件」的連續性 (在波爾的理論中，藉這「條件」選出 (古典物理) 不連續的穩定態。 (在波爾的理論中，須遵守古典電磁定律去放射能。) 這假設顯然是不能為 E_a 躍遷所允許的。此外波爾又作一基本假設，謂如電子由 a 穩定態 (其能為 E_a) 躍遷到 b 穩定態 (其能 E_b 低於 E_a)，則原子放射出輻射，其頻率 ν 為

於一九一三年（波爾創其理論）至一九二〇年代，由於原子光譜的研究（多電子光譜及 Zeeman 效應等），物理學家不僅發現波爾理論除了氫原子外，對其它任何問題都不適用，且漸漸的深信波爾理論是很深的，基礎性的；他們的觀念和包含有量子概念的（為古典物理學的）假設，是一個沒有邏輯一致性的系統；（雖則波爾提出所謂「相應原理」，企圖使他的理論與古典物理學間的，在使量子的困難點下，有「相應的關係」，但仍不能從根本上去排除他的理論的困難點。）物理學家開始從全新的出發點，以新的觀念，尋求新的方向，來處理原子領域的問題。

一九二四至二六幾年中，物理學界出現一個科學發展史所罕有的現象：差不多是同時的，在不同國家，幾個都很年輕的物理學家，各自獨立的，從不同的觀點，用不同的數學工具，從事一個新的理論的尋求，卻殊途同歸的，獲得目前稱為「量子力學」的物理理論系統。

七、量子力學

法國的德布洛衣 L. de Broglie (1892-1987) 於一九二三年，四年由（狹義）相對論觀點考慮一個質點的運動出發，創建一個理論，以為一個質量為 m ，能為 E ，動量為 P 的粒子（以速度 v 對靜止的觀察者運行時）有一個「週期性」的「波」的性質，其頻率 ν 及波長 λ ，為

$$\nu = \frac{E}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad (7-1)$$

此波的「相速度」為 $\mu = \nu \lambda$ ，其「群速度」按定義

$$\frac{1}{v_g} = \frac{d}{dv} \left(\frac{1}{\lambda} \right),$$

$$\text{茲乃為 } v_g = \frac{dE}{dp} = \frac{c^2 p}{E} = v \quad (7-2)$$

$$(6-3)$$

$$v = \frac{1}{h}(E_a - E_b)$$

波爾的理論可準確的計算出氫原子的光譜線的頻率，和實際所量定的吻合，獲得驚人的成功。但它的成功，不限於光譜。它的「穩定態」的假定，由德國物理學家 J. Franck 以電子撞擊（汞）原子的實驗，獲得支持。

穩定態觀念乃古典物理所沒有的。波爾在其原來的理論中，祇考慮電子的正圓形軌道，他定義穩定態的條件為

$$\text{電子的角動量 } mva = n \frac{h}{2\pi}$$

ν ， a 為電子的速率和軌道的半徑， h 為普朗克常數， n 係一整數 1, 2, 3, ...。這個關係，旋為 Sommerfeld 氏（按古典力學的考慮）推廣至電子在三維空間運動時的情形：

$$J_i = \oint P_i dq_i = n_i h, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6-4)$$

q, q 為共軛（廣義）動量及座標。由這穩定態條件，亦獲與波爾（原用圓形軌道特例）完全相同的結果。不僅此也，由這推廣的條件，可導致軌道面在空間方向的「量子化」結論。這個結論，旋為 Stern, Gerlach 二氏的實驗所證實。

波爾的假設，謂電子在穩定態時，上式中之 J 量不變；但在某情形下，電子由一穩定態躍遷至另一穩定態，即 J_i 由 $n_i h$ 變為 $m_i h$ 。此假設亦古典物理（電磁學）所不能解的。惟物理學家由 $n_i h$ 變為 $m_i h$ 的啟示，即上式中之 $J_i = \oint P_i dq_i$ 乃所謂運動中的「不變量」，在微小且極徐慢的外來擾動下，其值不變。這個特性，使「 J_i （在穩定態）不變，但一變即不作微小或連續之變，而作不連續的變」的假定，似微「有理」也。總之，波爾理論，以「極大膽的假設」，經許多的「求證」，是驚人的成功的。

波爾理論的氫原子上面的成功。很自然的使物理學家企圖推廣它到原子週期表中的次一不知如何可處理的困難，即：基本上不知如何建立氫原子的「量子化條件」（即穩定態的條件）；如作任何近似法計算，則所得結果，和實驗相差甚遠，與氫原子的完全吻合（準確至 10 的八次方分之一）大異。至若其它更複雜的原子，則波爾理論更無法應用。

換言之，此「德布洛衣波」的群速，適與粒子的速度 v 相同。

德布洛衣的創意，誠是「不可解」的；他的基本假設

$$v = \frac{E}{h}, \quad \lambda = \frac{h}{p} \quad (7-3)$$

雖在數學形式上和愛因斯坦的光子理論式子

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda} \quad (7-4)$$

相同，但兩個理論是完全獨立「無關」的：前者是假設「粒子」有「波」性；後者則假設電磁波有粒子性。

德布洛衣的新奇創意的首個「成功」的測驗，便是下述的問題：按前節所述的「穩定態條件」（或稱「量子化條件」）

$$\oint p \, dq = nh, \quad (7-5)$$

如現用德布洛衣的 $\lambda = h/p$ 假設，則此條件成為

$$2\pi a = n\lambda \quad (7-6)$$

此乃係「駐波」的條件也。

但「德布洛衣波」的假設，旋由「電子的繞射」的發現，獲得極強力的支持。（一九二八年，Davisson-Germer 及 G.P. Thomson 等的實驗，顯示電子有「波」的性質；動量為 p 的電子的「繞射」現象，相當一波長符合 $\lambda = h/p$ 式的「波」），這理論之不能「嗤之以鼻」，已無疑義了。但此「波」（德布洛衣稱之為「物質波」）究是什麼的「波」，是仍未明的。顯然的，它不是物理學中已知的波，如電磁波、水波、彈性波等。

物理學的發展，有時是循曲折途徑的。德布洛衣於一九二三年、四年間於法國科學院的周刊中陸續發表他的思索，於一九二四年冬刊出他的博士論文；Langévin（法物理學家）寄給愛因斯坦；愛氏時正推廣 Bose 的統計法於氣體分子，認德布洛衣的創意極為重要。時在瑞士 Zurich 大學之奧國物理學家薛略丁格 (E. Schrödinger, 1887-1961) 由愛因斯坦的文章，引起對德布洛衣理論的注意和興趣。

薛氏在問「物質波」究竟是什麼「波」之前，先問該「波」所遵守的方程式。這不是物理學進展的正常程序，但後來看出這是「焉知非福」的大幸事。薛氏由（愛爾蘭數學家）漢彌爾頓 (Fermat 原理) 和粒子在力場中運動的定律（漢彌爾頓原理）光線傳播的情形，所謂最小作用原理）二者間的相似性出發；更由「物理光學」的「光波」薛氏作一個類比的考慮：由粒子的運動方程式（光線）的方程式的關係，薛氏獲得所謂「薛略丁格方程式」（不含時變數的方程式）。

我們務須著重者，是上述的薛氏思索路徑，並無邏輯上的必然性；類比性的考慮，是與邏輯無關的。故薛略丁格方程式，不是可由任何古典物理中已知印象，引導出來的，而是完全新的理論假設。（關於這一點，許多書都始人以一印象，薛氏方程式是「導出來」。這是極嚴重的錯誤。）

薛略丁格方程式的首項大成就，是將波爾理論定義穩定態條件（亦稱量子化條件），代以一個微分方程式的「本徵值」的問題。換言之，我們無需作波爾的量的純數學性的假定了。按這新理論，任何原子的穩定態，皆成爲一個本徵值的問題；波爾理論之不知如何處理氫以外的原子的基本性困難，已不復存在了。

薛略丁格於一九二六年一月至六月間，在數篇連續文章中，便將所謂「波動方程式」的主要數學部份，全部發展出來，為物理學家所普遍接受。惟薛氏下方程式的函數 ψ 的物理想義的問題，則遠較薛氏一個如雲狀的展開的電子，則 $|\psi|^2$ 乃爲一個解釋，祇能應用於一個電子（或多個）空間的函數，而不能代表「密度」。

此基本性的問題，乃為波恩 (M. Born, 1882-1970) 於一九二六年六月所解答。波恩創議，謂當電子的「態」為 ψ 時， $|\psi|^2 dx dy dz$ 乃電子位置在 (x, y, z) 點之 $dx dy dz$ 空間中之機率。我們務須注意下二點：(一) ψ 函數代表一個系統的「態」；此函數祇有座標 x, y, z 而無其共軛動量 P_x, P_y, P_z 的變數，此與古典力學中一粒子運動之座標及量子的基本性質的 (見第一節) 不同。此點是有極深遠的涵義，牽及量子的基本方程式 (相當於古典力學中的牛頓量學方程式) 亦如古典力學的微分方程式。然 $|\psi|^2$ 本身是一個機率函數；(故觀之，似亦如古典力學的「因果性」) 而非座標的變遷，換言之，量子力學薛丁格方程式所決定的，是「機率」，而期望的結果為：
：如量某一物理量 Q ，可期望的結果為

$$\langle Q \rangle = \int \psi^* Q \psi dx dy dz,$$

但一般的情形下，不告訴我們確定的結果。

波恩的這個機率性假設，旋為物理學者所接受，而成為量子力學中一個基本的假設。

在古典物理學中，我們亦常引入「機率」的觀念 (見第五節)，但古典物理學的基礎是有決定性的古力學的引用乃為實際上的方便而非基本上所必須的。在量子的力學中，這些句語的意義，下文再闡述之。我們或先要問量子的「決定性」以作這樣的假設。答案是：必須作此假設，才能使量學成為一無矛盾的理論系統。

物理學家亦從哲學觀點不能接受這個機率假設的，其最重要的為愛因斯坦。下文將更詳論這點。

量子力學新理論的次一重大發展，是一九二七年夏，海森堡提出的「測不準原理」。這項發展，從根的動搖了全部的古典物理學。

上文已述過愛因斯坦的光子假設，謂頻率、波長為 ν 、 λ 的電磁波，有粒子性，其能和動量 E 、 p 為：

$$E = h\nu, \quad p = h/\lambda \quad (7-8)$$

又德布洛依的「物質波」假設，謂一能、動量為 E 、 p 的粒子，有「波」的性質，其頻率、波長 ν 、 λ 為：

$$\nu = E/h, \quad \lambda = h/p \quad (7-9)$$

我們曾著重此二理論的「不可解」性。但它們皆有極強的實驗的支持，遍使物理學家接受上二「愛因斯坦-德布洛依關係」。

由這兩個假設，海森堡證明無論用如何精密的方法同時的去量定一個質點的位置 (座標 x) 和其沿 x 的方向的動量 (P_x)，二者的差誤值 Δx 、 ΔP_x ，不可能使它們任意的減小，而務須受下關係的限制：

$$\Delta x \Delta P_x \geq h \quad (7-10)$$

換言之，如測定位置無限的準確 (即 Δx 趨於零)，則 x 的共軛動量 P_x 將完全不能測定 (ΔP_x 之值，可由正 ∞ 至負 ∞ ，亦即 ΔP_x 將為無限值 ∞)。這正是所謂「測不準原理」；它是愛因斯坦-德布洛依關係的必然結論，如信該二關係，則無從逃避這測不準原理。

按此，則古典力學的以天經地義的 x 、 P_x 有同時無限準確的測定的可能性，而這正是量學所不容許的！故古典力學的以「座標及共軛動量」為運動態 (或祇有動量)，而不能同時有座標和共軛動量變數的原因；按測不準原理，古典力學是從根即不能成立的！

由愛因斯坦-德布洛依關係導出測不準原理，細想一下，實在亦非完全意外的事；由該兩個按古典物理學的問題是：我們應如何的去量定一個質點的位置，是很自然的事！故我們力學的問題是：在述來的「量學」的整個內部結構，按哥本赫根的一個觀點的發展，和綜合的「量學」，是一個內部矛盾的體系，可以答覆任何「公設性」的問題。目前「量學」，是一部「已完整」的體系，可以答覆任何「有意義」的問題的體系。這觀點正是愛因斯坦始終不意的焦點。後文將詳述之。

我們務必回述在薛略丁格一九二六年創展他的波動力學之前，在一九二五年夏，海森堡創始的「矩陣力學」。

海森堡 (W. Heisenberg, 1901-1976) 的出發點，是以波爾的理論，雖在氫原子獲得「完全的成功」，但它的基本性質是雜湊了古典的力學和與它矛盾的新假設而得的；它用了「電子軌道半徑」，「電子轉動的頻率」等概念，都是不能觀察得到的，而這些頻率的資料（如光譜線的頻率）；海森堡想建立一個「理論」，或「數學的結構」，其中祇引用可觀察得到的概念，如波爾理論中的光譜線的強度、速率等。海森堡的這個觀點，是來自愛因斯坦在狹義相對論中對的電子軌道、速率等概念的「空」概念的求的。

原子的光譜頻率，不是如古典理論的 $\nu, 2\nu, 3\nu, \dots, n\nu, \dots$ 等，而按光譜分析，是符合一個所謂Ritz氏「組合原理」，即每一光譜頻率，可與兩個「項」數值之「差」，故有下關係：

$$\nu_{nm} = T_n - T_m, \quad \nu_{nk} = (T_n - T_k) + (T_k - T_m) = \nu_{nk} + \nu_{km} \quad (8-1)$$

由這個「二維性」的頻率表，海森堡試着建立一個數學結構，可表電子的座標 q ，動量 p 等時間函數，和這些函數的運算規則。他將論文發前寄給 H. Born 氏，Born 指出海森堡的數學結構，實在是代數中已有而物理學家所不甚常見的矩陣代數。在兩個月中，他和海森堡（用通訊方式）和一位年輕數學物理學家 P. Jordan 即將海森堡的初意，發展成了完整的數學體系，（稱為「量子力學」亦另稱為矩陣力學）這是一九二五年秋的事。他們先用此新方法計算諧振子的能態，獲得下式

$$E = (n + \frac{1}{2})h\nu, \quad n = \text{整數} \quad (8-2)$$

此結果和補朗克的理論所得的 $E = nh\nu$ 式，有一極重要的差別，後來為光譜實驗所證實。

這個矩陣力學的計算，較（波動力學的微分方程式）為繁複。但 W. Pauli 氏旋即以此法計算氫原子的能態，其結果和波爾理論所得相同。從這個理論的出發點和它的數學結構的新奇性觀之，這些結果是驚人的。但無容諱言的，

這個理論的意義，是殊不顯明的；最難懂的，是在這個理論中，所有的物理量如座標 q ，動量 p ，都是矩陣，而矩陣的乘法，是不遵守「交換規律」的，即一般的情形下， $pq \neq qp$ ，故問題是：如 $pq \neq qp$ 不相等，則 $pq - qp$ 應等於什麼？Born 由古典力學的「作用變數」 J （見第6-4式）的啟示，作了一個基本假設，謂 p, q 兩矩陣遵守下面的「交換規律」：

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} \cdot E \quad (8-3)$$

此式中之 E 為一「單位矩陣」，即在主對角線上之值為 1，其他處皆為零。我們初甚難想像在物理學中，兩物理量的乘積 pq ，和 qp 不相等，而遵守上式關係。但在一九二六年三月，薛略丁格在他展開他的波動力學期間中，發現他的方程式，可由古典力學的漢彌爾頓原理——雅可比方程式，將其動量 p 代以一微分算符

$$p_x = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \text{餘類推} \quad (8-4)$$

而由此即得的算符方程式

$$p_x x - x p_x = \frac{h}{2\pi i} (x \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial x}) = \frac{h}{2\pi i} \quad (8-5)$$

正與矩陣力學的基本假設 (8-3) 式相同！薛略丁格由是指出「波動力學」和「矩陣力學」兩個理論，出發點不同，基本假設的思索來源途徑不同，數學的形式不同，實在是數學上相同的兩個不同表示方式而已。經此發展後，一切問題的計算皆以波動力學為之。

一九二五年夏，海森堡曾被邀至英國劍橋大學作演講，但未講及他將寫的矩陣力學的第一篇文章。稍後，波爾將海森堡的文的校對版寄劍橋的 R.H. Fowler 後者以之給研究生 P.A.M. Dirac 讀，該文中尚未用「矩陣」之字，蓋「矩陣」仍有待 Born, Heisenberg, Jordan 的稍後共同作的文，始出現也。惟 Dirac 由海森堡文獲一啟示，想起古典力學中的 Poisson 括弧式，由此獨立的發展一個用「非交換性算符」的數學結構；他的理論，乃較矩陣力學及波動力學更為普

Special Issue of Annual Report of the Institute of Physics, Academia Sinica, Vol. 17, 1988
Commemoration of the 60th Anniversary of Academia Sinica

適性的體係，可稱為「量子力學」；它包括了波動力學和矩陣力學為兩個特別的形式。

Dirac (1902-1984) 於一九二六—七一年間，在量子力學基本理論上更有一重重要的貢獻，即量子力學的「變換理論」是也。在此理論，P. Jordan 亦有獨立的貢獻。此變換理論，乃量子力學中一極基礎性的一部。

時至一九二七年秋（海森堡之測不準原理已出），量子力學的數學體系已大致完成，餘下的卻是它的物理的意義和它在物理學的哲學上所引致的問題。

九、量子力學的物理意義

我們先綜述由「量子」觀念所引致的困擾問題：

(一) 愛因斯坦和德布洛依的關係（見7-8, 7-9式）

$$E \pm h\nu, \quad p \pm h/\lambda \quad (9-1)$$

(二) 由此關係，引致測不準原理 (7-10)

$$\Delta x \Delta p_x > h \quad (9-2)$$

(三) 在矩陣力學中，物理量皆為矩陣，遵守「非交換乘法」規律

$$PQ - QP \neq 0 \quad (9-3)$$

(四) 在波動力學中，物理量皆為算符，例如：

$$x \text{ 為 } x, \quad \text{則 } P_x \text{ 為 } \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (9-4)$$

(見8-4)

(五) 在「矩陣」及「波動」力學中，「座標 x 」與其「共軛動量 P_x 」遵守下列基本假設 (8-3)

$$P_x x - x P_x = \frac{h}{2\pi i} 1 \quad (9-5)$$

(六) 在「機率假設」(7-7) 下，則由 (9-5) 關係，即得測不準原理 (9-2) 的較準確形式如下

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi} \quad (9-6)$$

第(一)項，「電磁波有粒子性」，「和粒子有波性」的假設，按古典物理上，它們在觀念上即是「不通」的。由它們而引致測不準原理，亦是按古典物理上不可解的。波爾對這些困難，提出一個觀點：簡略的說，波爾認為愛因斯坦和德布洛依的「波」與「粒子」關係，是表示這兩個觀念，由於它們從巨觀經驗構成的，本身上即有了限制；這限制（或不適用）在原子領域中即出現之方式，即是 $E = h\nu$, $p = h/\lambda$ 兩個「不通」的關係。同理，古典力學中的座標 x 和共軛動量 P_x ，亦係從巨觀經驗構成的觀念；它們在原子（微觀）領域中即不適用，這不適用性，即以測不準關係表達出來。波爾的「互補原理」，是將「波」與「粒子」兩個觀念，視為「互相輔補」，而不是「彼此排斥」的。

一九二七年秋，在歐洲有兩次的物理學大師們的討論會，海森堡的測不準原理和波爾的互補原理，當然是討論目標。多數的物理學家似別無選擇的接受這些觀點，唯一的例外，是愛因斯坦；他不肯信測不準原理，亦不肯接受機率性的基本假設。關於愛因斯坦的觀點（或哲學），將於下節中作較詳的研討。

量子力學的數學基礎，漸漸的由物理學家如 Dirac, Jordan, 數學家如 Hilbert, von Neumann 等建立起來。到了一九二八年前後，「量子力學」已漸由初期的各別創立探索性的形式，可綜合成一個公設式的完整邏輯體系。茲將量子力學以淺易的形式表之如下，以便作較有條理的討論。

甲、互補原理性部分

公設一、一個物理系統的「態」，係以一無限維的線性空間之一向量表之

註一、如以 $|a\rangle$ (稱為 ket) 表一向量，乘以任何常數 $\pm C$ ，皆代表同一「態」。 $|a\rangle$ 之改變，代表「態」之改變。

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} 1 \quad (9-11)$$

- 註一、此關係加上機率性公設（下文），引致測不準關係。
- 註二、由上註觀點，此交換關係可視為愛因斯坦-德布洛依關係之數學式。
- 註三、交換關係乃互補原理的數學式。
- 註四、「交換關係」公設，實乃係量子力學的「基本原理」，第一、第二公設係「定義」性的，為建立一非古典性交換關係的準備步驟。

乙、機率性部分

公設四、如知物理系統之態為 $ket |a\rangle$ ，作物理量 Q 之度量，則期望值為 $\langle a|Q|a\rangle$ (9-12)

- 註一、此公設將前三個公設與物理度量量聯起來；對實驗度量的結果作了一個理論的敘述，故此公設是為量子力學的主要物理內涵。
- 註二、設系統之態為 $|a\rangle$ 。茲量 Q 。按 (9-12)，及 (9-9) (9-10) 各關係，即得度量 Q 之期望值

$$\langle Q \rangle = \langle a|Q|a \rangle = \int_k \langle a|q_k \rangle |^2 q_k \quad (9-13)$$

此式度量 Q 之結果，所有之本徵值 q_k ，均可各按其機率 $|\langle a|q_k \rangle|^2$ 出現；換言之，量子力學一般言之，不能預告度量的結果的確定值；祇能告訴我們各可能值 q_k 的出現機率。這是對一個「原子」而言，非由極大數目的「原子」而引入的機率觀念。這是和古典物理的基本不同處。

註三、按公設三 (9-11) 及公設四 (9-12)，H. Weyl 導出

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{h}{4\pi}$$

註二、此無限維空間，乃一抽象空間（稱為 Hilbert 空間。）

公設二、凡物理量，皆表以線性自伴算符。此算符作用於 $|a\rangle$ ，使 $|a\rangle$ 改變。

註一、使 Q 為自伴算符， q_k 為一數值， $|q_k\rangle$ 為一 ket。如

$$Q|q_k\rangle = q_k|q_k\rangle \quad (9-7)$$

換言之， Q 作用於 $|q_k\rangle$ ，不改變 $|q_k\rangle$ 之態，則此 q_k 謂為 Q 之本徵值，此 $|q_k\rangle$ 為屬於 q_k 之本徵函數。

註二、「自伴」算符之本徵值為正實數。

註三、屬於 Q 的兩個不相等之本徵值 q_j, q_k 之本徵向量是直交的，即

$$\langle q_j|q_k\rangle = \delta_{jk} \quad (9-8)$$

註四、線性算符及線性空間，保障「態」之重疊原理。

註五、可選任何物理量 Q 之本徵 $ket |q_k\rangle$ 為空間之基本向量，這些本徵 $|q_k\rangle$ 構成一「完全集」，一任何向量 $|a\rangle$ 可按 $|q_k\rangle$ 展開

$$|a\rangle = \sum_k |q_k\rangle \langle q_k|a\rangle, \quad \langle a| = \sum_k \langle a|q_k\rangle \langle q_k| \quad (9-9)$$

$$\sum_k \langle a|q_k\rangle \langle q_k|a\rangle = \sum_k \langle a|q_k\rangle |^2 = 1 \quad (9-10)$$

註六、選擇 Q 之本徵 $ket |q_k\rangle$ 為基本 ket，和變換至另一以 R 之本徵 $ket |r_j\rangle$ 為基本 ket 的關係，引入「表現的變換」的觀念。

註七、在上述變換中，保持算符之自伴性的條件，引入么正變換的觀念。

註八、變換理論加上（下文公設四）機率性公設，使量子力學成為一完整體系。

公設三、座標 q 及其共軛動量 p 及之自伴算符，遵守下交換關係

Special Issue of Annual Report of the Institute of Physics, Academia Sinica, Vol. 17, 1988
Commemoration of the 60th Anniversary of Academia Sinica

故交換關係 (9-11)，亦猶愛因斯坦—德布洛依關係，和測不準原理，有不可分割的關係。

註四、或問何以必須引入基本性的機率假設。我們不能作一個絕對性完全的答案，因為它是一個「公設」——是量子力學系統的基本出發點之一部分；但我們至少可以說：由「公設三」已知兩個共軛量（按古典物理的意義）是不可能同時有共同的本徵 ket，則由公設四所引致的測不準關係 (9-13)，最少是與「公設三」不相矛盾的。

公設五、物理系統的態的變遷，遵守下方程式：

$$-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} |a, t\rangle = H |a, t\rangle \quad (9-14)$$

(或作下形式

$$-\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, t) = H \psi(q, t)$$

此乃薛略丁格方程式。

註一、此方程式乃量子力學的基本假設之一，不能由古典物理學導得的。

註二、此方程式乃物理系統的態的定律，其地位有如古典力學中的牛頓運動方程式。

註三、此方程式乃一微分方程式，故由 $\psi(t)$ 的一個開始值 $\psi(t_0)$ ，此式完全決定了未來時 ψ 的值。惟 $|\psi|^2$ 祇是機率，而不是實驗觀察的結果關係。故薛略丁格方程式，對「機率」而言是一個「決定性」的「因果關係」，但不是古典物理中的因果性。

註四、H 函數中含位能 V。古典力學及電動力學中所出現者非位能（或勢能）本身而係它們的導數， ∇V , $\text{curl } A$, $\nabla \Phi$ 等。這是量子力學和古典物理的重大不同處。由此引致所謂 Bohm-Aharonov 效應。

上舉的五個公設，係一般性的。如物理系統中含有完全相同（不可辨別）的粒子，則關於態 ket（或 ψ 函數）對兩粒子的對調之對稱性（如 $\psi(1,2) =$

(2,1), $\psi(1,2) = -\psi(2,1)$) 問題，從經驗可得 Pauli 原理和它的推廣原理如下式：

公設六、對自旋（角動量）為半整數的粒子，在兩粒子對調時，態 ket（或 ψ 函數）有反對稱性；對自旋為整數的粒子，則為（正）對稱性。

註一、此「公設」實係經驗性質，不能和其他的公設居同等地位的。

由上述各公設的「註」，可以看見量子力學的「定義」，「假設」，和由它們引致的結論。量子力學表成這樣的形式，是想將它建立成一個演繹性的體系：由這公設系統，導出結論，和實驗結果比較驗證。這是科學探用於原子的精神和方法。於一九二六年量子力學迅速的成功，多源自於原子的分子物理在領域。雖謂創立的大成功，似或「不足為異」，但六十年來，量子力學在原子核、基本粒子及固態物理各領域，尚未發現有「失敗」的情形，顯示其非侷限於原子物理的一個特殊理論。

十、量子力學的「哲學」問題

前數章已略述量子力學的起源，發展過程，創新觀點及觀念，至完整的邏輯系統的建立；我們亦曾略述各基本假設（公設）的性質和它們的邏輯完整性；亦曾述波爾的「互補原理」的哲學觀點。目前之量子力學，它的內在邏輯完整性，似乎是無人質疑的了；但它的哲學觀點，則尚未達到普遍的情形。一個大數目物理學家所採的，是所謂哥本哈根派哲學，這是以波爾、海森堡、厄立等為主要大師的；由各不盡相同的觀點，本派受哥本哈根派的觀點者，有愛因斯坦、德布洛依、蒲朗克、薛略丁格等。在哲學觀點上的討論或爭議，以愛因斯坦與波爾之討論最著稱。

關於量子力學的物理意義和哲學基礎的問題，前數節中已有片段的敘述（見第六至第九節。）為便於明瞭量子力學目前體系建立的歷程計，茲作一簡表如下

(一) 至第十九世紀末年，（時雖有氣體傳導、電子、X 射線、放射性等新研究發現，）物理學家多信（古典）物理，包括動力學、電磁學、熱力學、統計力學，已臻完整。該時研究問題之一，乃黑體輻射光譜的分布定律。物理學家旋發現由古典熱力學統計學所得的理論，顯然與實驗結果不符。一九〇〇年蒲朗克

「不得已」的作了一個「極大膽」的（按古典物理，是荒謬的）量子假設，獲得完全符合實驗結果的定律。

此後此定律，可由數不同的觀點（如Bose的新統計法）獲得，但最重要的，是後來可以證明：量子 $h\nu$ 的假設，是得補朗克定律（公式）的充分和必要條件。至此，物理學不能不接受一個和古典物理基本連續性的觀念革新的新觀念。此後量子論迅速的進展，不予抱保守態度的物理學家以喘息的機會。

(二) 一九〇五年，愛因斯坦創光子理論，謂電磁波有粒子特性，如下二關係：

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

此大膽的假設，旋得光電效應及Compton效應的支持。至此，物理學面臨有基本重要性的困擾：實驗的結果，竟顯示古典物理中互不相通的「波」和「粒子」的觀念，有混淆的情形。

(三) 同年，愛因斯坦在相對論中，指出「絕對時」和「絕對同時性」的無意義，不僅震撼了物理學界，且引致哲學家們的異議。

(四) 一九一三年，波爾的氫原子理論，明知違背古典電磁學定律，作了大膽的穩定態假設，完美的「解釋」了氫原子的整個光譜（線的頻率），又由此穩定態條件推廣所得的「空間方向的量子化」，亦為Stern-Gerlach的實驗所證實。此外Sommerfeld氏對波爾理論的微細修正，亦為實驗所證實。

至此古典物理在原子現象上，已呈千瘡百孔的情形。為緩和量子論與古典物理間的衝突性，波爾（一九一六年）提出所謂「相應原理」，指出在「量子數」值極大（它的變遷甚小）的極限情形下，量子論將趨近古典物理的結果。此原理頗有意義，但並不基本性的解答困難問題。

時至一九二〇年代，物理學家漸深信古典物理在原子領域的無效，及量子論經初期的大成功後，亦呈無力應付原子問題的情形。革命性的發展時機漸成熟。

(五) 一九二三，四年德布洛依由相對論一些觀點，又創議一大膽假設——物質粒子有波的特性；他的關係式 $v = E/h$ ， $\lambda = h/p$ ，形式上雖與愛因斯坦的相同，但意義則根本上不同。此假設旋為電子繞射的實驗所證實。

(六) 一九二六年初，在未明德布洛依的「波」之前，薛略丁格的相（由約九十年前，漢爾頓發現粒子力學運動軌道與光線軌道二者的方

似性的啟示）又作一大膽假設，創立「薛略丁格方程式」，使波爾的穩定態條件，今乃代以一求微分方程式的本徵值的純數學性問題，換言之，免去作違背古典物理的假設。數個月後，Born創機率性假設，使薛略丁格的數學結構，獲得物理的意義。此公設（見第九節公假四及註二）乃量子力學在基本上和古典物理大異之處之一。

(七) 稍前，一九二五年夏，海森堡由愛因斯坦對物理學中的概念須有其度量上的意義的要求，以之為出發點，創建矩陣力學，凡物理量皆表作矩陣，座標及其共軛動量假設遵守下式

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} E \quad (10-1)$$

此理論乃古典物理所「不可懂」的，但在簡諧振子，氫原子，對稱轉動體等問題的成功，則不容忽置不理！

(八) 一九二六年春，薛略丁格更指出他的「波動力學」與「矩陣力學」二者在數學上是相同的。這使兩個出發點，基本假設，數學工具皆不相同的理論，互得強力的支持！

較這兩個理論更為普遍性的（包涵不交換算符的）理論，同時的獨立的由Dirac建立起來，三者共稱為量子力學。

(九) 一九二七年夏，海森堡由愛因斯坦—德布洛依關係，指出測不準原理，使隱藏於愛因斯坦—德布洛依的量子—波關係的量子與古典物理衝突，很顯明的不可銳化。按這測不準原理，則古典力學的觀念，從根的推翻了：（一）根本的不可能同時的定一個粒子的位置 x 和動量 p_x ，（二）故根本的不可能連續的描述一個粒子的運行軌道，（三）故牛頓的第二定律運動方程式，亦根本不可能成立。

在量子力學中，一個粒子的「運動方程式」可由薛略丁格方程式及第(9-12)式得下方程式

$$\frac{d}{dt} \langle a | p | a \rangle = - \langle a | \nabla V | a \rangle$$

乃位能（注意此式與古典力學的運動方程式之相似處及基本不同處。）

翌年，H. Weyl 更指出由(10-1)關係及機率性公設(9-13)即亦可得測不準原理。

按數學家 von Neumann，目前的量子力學，不容有隱藏的變數的存在。故我們不能期望將量子力學的「內在的」，「根本的」機率性，可有如古典物理學中的機率性，建築在分子運動的決定性上然。

十一、場的概念

(一) 牛頓的萬有引力假設，是謂兩物體間的相互作用是「直接」的；這個所謂「超距作用」的觀念，旋為「場」的觀念所取代。按場的概念，一個物體，產生一個「引力場」於其四周空間的各處。例如一質量 M 之物體在座標原點，則在 r 點處，其引力場勢為

$$V(r) = -G \frac{M}{r}$$

一質量 m 的物體在 r 處所受之引力，乃由場所傳達，而非「超距作用」，

$$F(r) = -G \frac{Mm}{r^2} (= -m\nabla V)$$

(二) 在古典力學中，除了避免了「超距」的不容易了解的觀念外，在數學形式上可寫成拉卜拉士方程式，泊桑方程式的優點。但在運動方程式上和質量定上，則出現者乃場勢的微分導數而非場勢本身。(注意此點乃與量子力學不同處，見第五節公設五的註四)。

在電磁學中，實驗所量的乃電場 E ，磁場 B ；電磁場理論(馬克斯威爾方程式)亦表以 E, B 場。此兩個在三維空間的向量場，可於四維(時空)空間中，以一個向量場表之：

$$A_\mu = (A_x, A_y, A_z, \frac{1}{c}\phi), \quad \mu = 1, 2, 3, 4$$

$$E_x = -\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{\partial \phi}{\partial x}, \quad H = \text{curl } A \quad \text{見(4-1)式}$$

由此四維勢向量，可定義 $F_{\mu\nu}$ 電磁張量場，使所有電磁方程式，皆可表以張量形式的方程式，遵守相對論的原理。在靜電及靜磁現象的電場 E 及磁場 B 是各自獨立的它們的合併為一個電磁場 $A(A, \frac{1}{c}\phi)$ ，或

$$F_{\mu\nu} = \frac{\partial A_\nu}{\partial x_\mu} - \frac{\partial A_\mu}{\partial x_\nu}$$

的根據，是安培與法拉第實驗定律。這樣的「合併」，或「統一」，乃後來物理學發展的目標之一。

(三) 愛因斯坦於創建了「萬有引力的幾何化」理論後，即企圖建立理論，歸併電磁場於其「萬有引力場」理論之內。愛因斯坦的「萬有引力」理論，乃基於四維空間的黎曼幾何，其基本度規張量 $g_{\mu\nu}$ ， μ, ν 由 1 至 4，乃由物質動量的分佈決定，已無餘地以容納電磁場，故愛因斯坦未能達他的「統一場理論」的願望。由前述的三維空間兩個「電」和「磁」場，可在四維空間合併為一個「電磁場」的啟示，似統一萬有引力場與電磁場的企圖，或可於高一維度的空間達成之。一九二二年 Kaluza 及一九二六年 O.Klein，建議一個五維空間的理論，其基本度規張量假設為下形式

$$g_{\alpha\beta} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & A_1 & & & \\ & & A_2 & & \\ & & & A_3 & \\ & & & & A_4 \end{bmatrix} \begin{matrix} A_1 & A_2 & A_3 & A_4 \\ 9_{11} & 9_{12} & 9_{13} & 9_{14} \\ 9_{21} & 9_{22} & 9_{23} & 9_{24} \\ 9_{31} & 9_{32} & 9_{33} & 9_{34} \\ 9_{41} & 9_{42} & 9_{43} & 9_{44} \end{matrix}$$

其 A_1, A_2, A_3, A_4 為四維電磁勢， $g_{\mu\nu}$ 則係愛因斯坦的萬有引力理論中原有的度規張量。

(四) 場的量子化——場與粒子

第六節中已述愛因斯坦的光子理論及它的實驗證明。按電磁學，電磁場方程式可表以四維勢函數 A_x, A_y, A_z, ϕ 的方程式(見第四節(4-2)式)。我們的問題，乃是如何的由這古典物理的電磁場，獲得「光子」。

按前數節(尤其第九節)，在量子力學中，「粒子」的描述，是對粒子的座標 q 和其共軛動量 p 加以「量子化」的條件

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$$

現有一個「古典」的場，如電磁場，或向量 $A(A_x, A_y, A_z)$ 和純量場 ϕ 。我們的理論，是視這些場量 A, ϕ 為場的變數，故對它們加以類上式的量子化條件(

換言之，將 A_x, A_y, A_z, ϕ 等代以“算符”。這樣量子化的電磁場，即有粒子（光子）性，它的能 $E = h\nu$ ，它的動量 $p = h/\lambda$ 。

電磁場的量子化理論，始於 Dirac (1927)。這理論可謂是愛因斯坦的光子理論的數學形式。

我們應注意的，是下數點：

- (1) 馬克斯威爾的電磁場方程式，它本身即是遵守相對論原理（它是張量方程式的）。
- (2) 經量子化後，“場”有了“粒子”性，但粒子（光子）的數目是無限數的，不可數的，不守恆的。
- (3) 光子有能 E ，動量 p 外，還有角動量（自旋為一整 h ）。

(4) 在古典電磁理論中，電荷是電磁場的“源”；兩個電荷間的相互作用，是通過它們的電磁場為“媒介”。在量子場論中，兩個電荷的交換作用，乃通過光子的“媒介”。如用古典物理的術語，我們想像兩個電荷不斷的互相放出光子，及吸收光子。（一個個粗俗而略表此意的比喻，是兩個人藉不斷的互相通信以維持此的情感。）

上述的場的量子化理論，不限於古典電磁場；它可以推廣至其它的“場”。另一熟知的“古典”場，是萬有引力場。按德布洛衣，所謂“粒子”，亦有“波”性，而這“波”便是一種“場”。故“電子”亦有它的“場”；這個“場”亦可以“量子化”。

電子的“波方程”即薛略丁格方程，惟這方程式不符相對論原理的要求（在羅倫茲變換下的不變性）。早在 1926 年薛略丁格、德布洛衣、克萊因 (Klein) 及戈登 (Gordon) 都曾由相對論的能-動量關係獲得符合此要求的波方程式，但即知用此方程式於氫原子問題時，導致不確的結果。1928 年 Dirac 創立新的氫原子方程式，符合相對論的要求，自然地包含了自旋角動量 (1/2)，正確的氫原子的能態，預告正電子的存在。

Dirac 的理論，原來祇是為一個電子而設的，但它的“正電子理論”隱涵了一個滿充電子的“負能態”的“海”，換言之，“無限數的電子”。

欲處理這個“無限數的電子”的問題，一個自然的方法是“場”的方法：將 Dirac 電子方程式中的波函數視為算符（一如上文的將電磁場的 A, ϕ 勢函數視為算符然），對這些算符加上“量子化”條件形式與前式不同，

$$a_i a_j + a_j a_i = 0, a_i a_j + a_j a_i = 0, a_i a_j + a_j a_i = 0, a_i a_j + a_j a_i = 0$$

此處之 + 號，乃指自旋為半整數的 h 的粒子，如電子。 a_i, a_j 的意義不能於此敘述。

將電子的量子力學方程式的 ψ ，視為一個“古典場”，再度加以量子化，成為一個“電子場”，代表無限數的電子系統。這步驟稱為“二度量子化”。

由上的簡述，我們得見目前的“基本粒子”和“場”的理論的基本觀點：每種粒子，可視為一種“場”的量子化的“粒子”；“場”的對稱性（如對“規範變換”的對稱性；最簡單的例子，如電磁場的規範變換，見第四節），決定它的“粒子”的特性。

一個“純場”（例如祇有電磁場，沒有電荷在內）的量子化，是較簡單的問題；如有兩個相互作用同時存在，（例如電磁場中有電荷，在古典電磁學中沒有大問題），則在量化的場論中，有極大且基本的問題發生。在量子場論中，同時有電子場 (Dirac 方程式的 ψ 的量子化) 和電磁場 (馬克斯威爾方程式的量子化) 的相互作用，這個理論是所謂“量子電動力學”(QED)。這個理論的數學計算，自 1930 年代始，即出現有“無限大”的值的困難。到了 1940 年代中葉，才經朝永振一郎，許文格 (Schwinger)，范因曼 (Feynman) 等，建立一個“重歸一”的理論，用符合相對論要求的具體切步驟，將“無限大”的值從有意義的物理量分離開，而獲得與實驗結果吻合的結果（如“Lamb 移”，電子自旋磁迴率等）。從“實際”的觀點言，這“重歸一”的理論是成功的。Dirac 則以為是一個完全合理的理論，不應有“無限大”的存在；他以為“重歸一”的理論，宜視為是一個完全合理的初步形式。他自 1940 年代始，即企圖由古典物理中的動量場論，發展一個磁學的基本原理出發，將它們修改，希望在量子化後，可以獲得一個量場論，沒有“無限大”的量子出現的。他從未參與“重歸一”理論的發展工作；這是他對這個基本物理問題的“哲學”，亦猶愛因斯坦對量子力學的哲學觀點，即所謂“主流”的不同然。

(五) 基本粒子；統一場論

到了 1930 年代中葉，除了電子、質子、中子、微中子外，湯川秀樹創介的“場”到 1940 年代中葉， π 介子、果由宇宙線和實驗室中發現，故有這些粒子的“場”

以上略舉物理學的重要發展（不包括許多極重要的應用性物理）。由「極大」領域（宇宙結構）兩極極限。這兩部門物理的基礎理論的融合，乃物理學家所追求的。

先以狹義相對論言，狹義相對論已為物理學家所公認的是一個基本原理，它在物理學中的地位，或可以說和「能的守恆」定律同等。以量子力學言，雖有人持不盡相同的哲學態度，它本身邏輯上的完整性及它在所有應用上毫無例外的成功，則是無可質疑的，故物理學家亦皆認量子力學為物理學之一。惟問題乃是：此兩基石，不能互相融合。此點可由下舉情形見之：在相對論中， x, y, z, t 時空座標，乃居相同地位，一起作羅倫茲變換的；在量子力學中， x, y, z, p 座標乃係「變數」，表以（自伴）算符的，而 t 則仍保持其「古典」性； x 與 p 遵守基本關係

$$px - xp = \frac{h}{2\pi i}$$

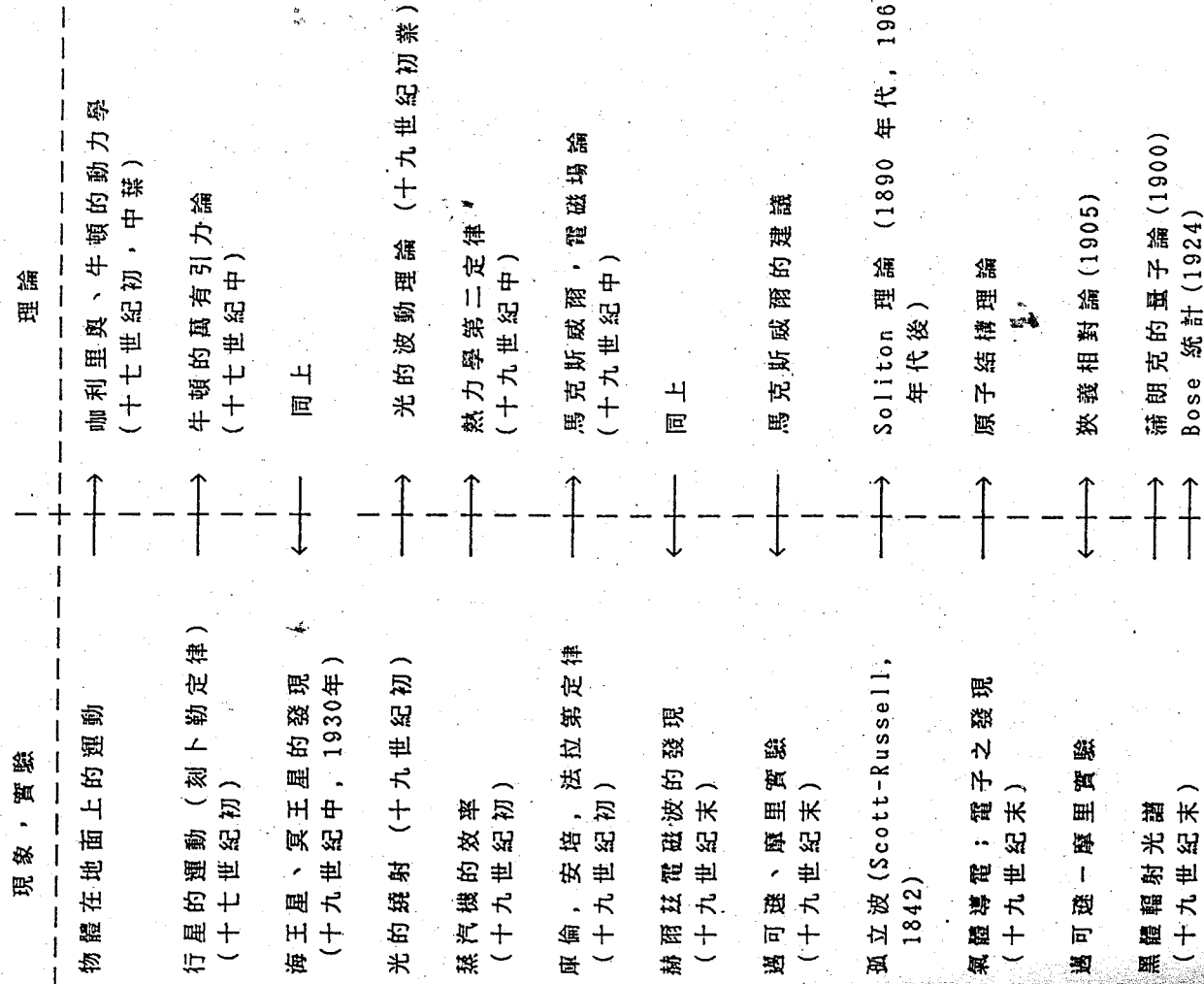
而 t 和它的「共軛」能 $-E$ 之間，量子力學中無

$$Et - tE = -\frac{h}{2\pi i}$$

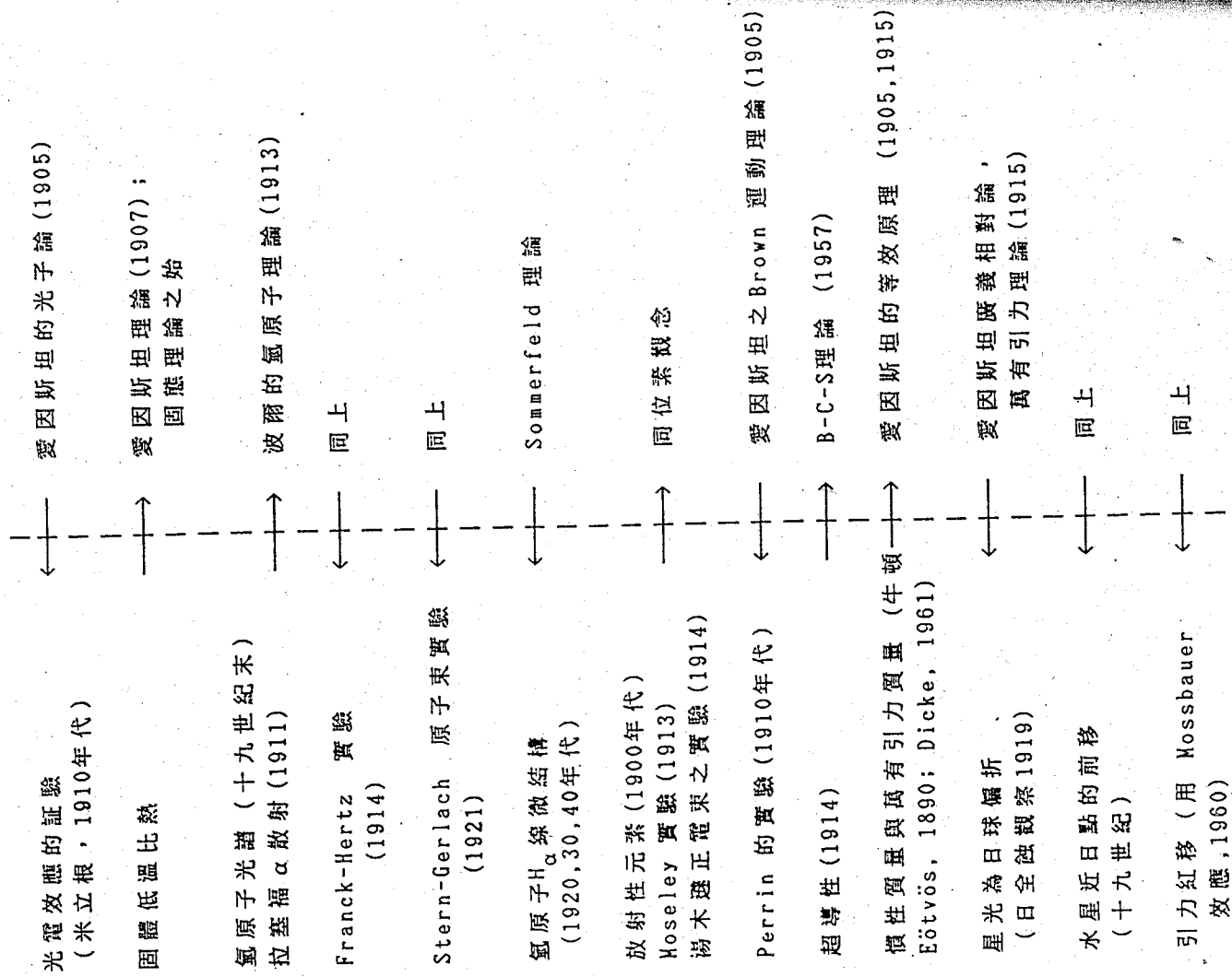
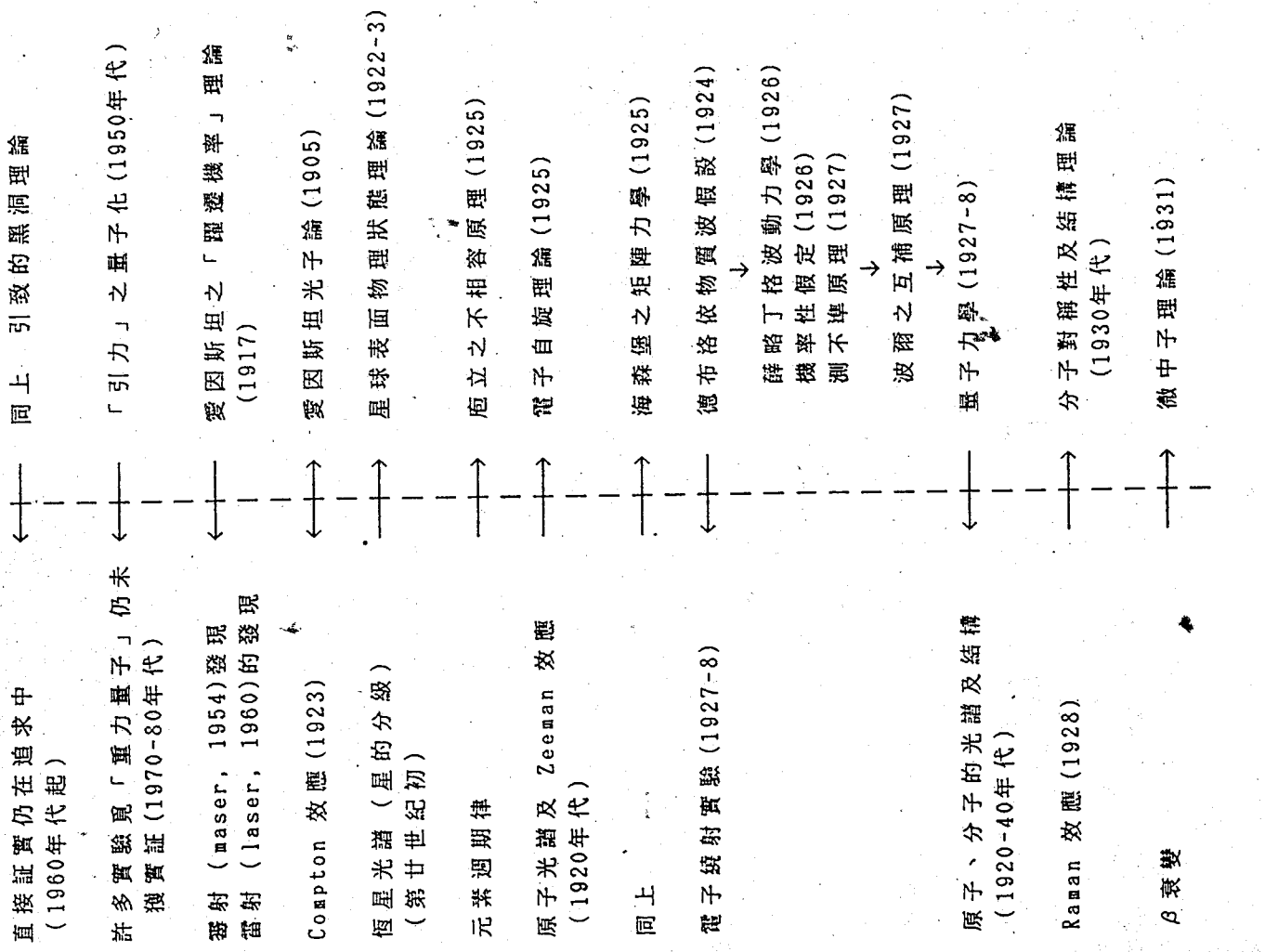
的交換關係也。在量子場理論中，場量和他的共軛變數，確遵守交換關係及不遵守變換，然座標 x, y, z, t 則皆視為古典性的「參數」而非算符，皆守量子化的交換關係的。這是目前量子場論的形式。雖則所有的理論結果，皆與實驗結果相符，故量子場論的方法，普遍為物理學家所採用，然有人（如 Pauli）以為量子力學與相對論的融合，恐是基本不可能的。這是一個基本問題，是仍待解決的。

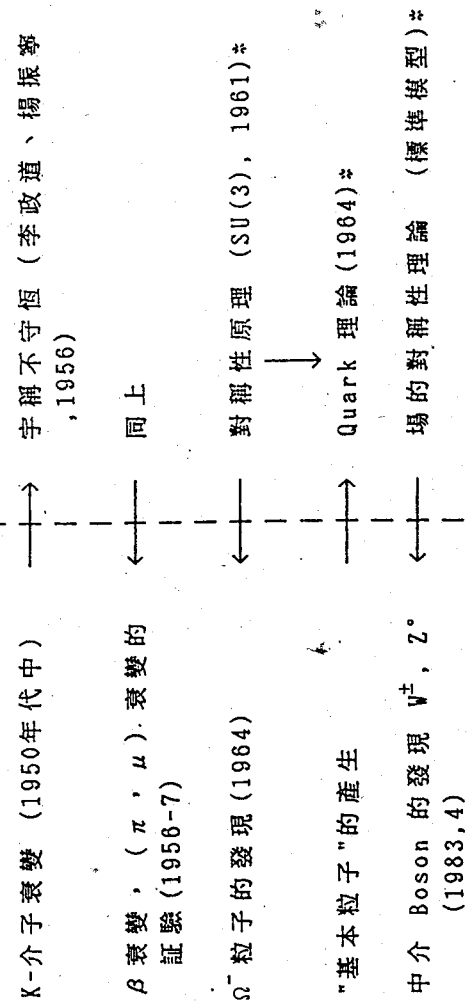
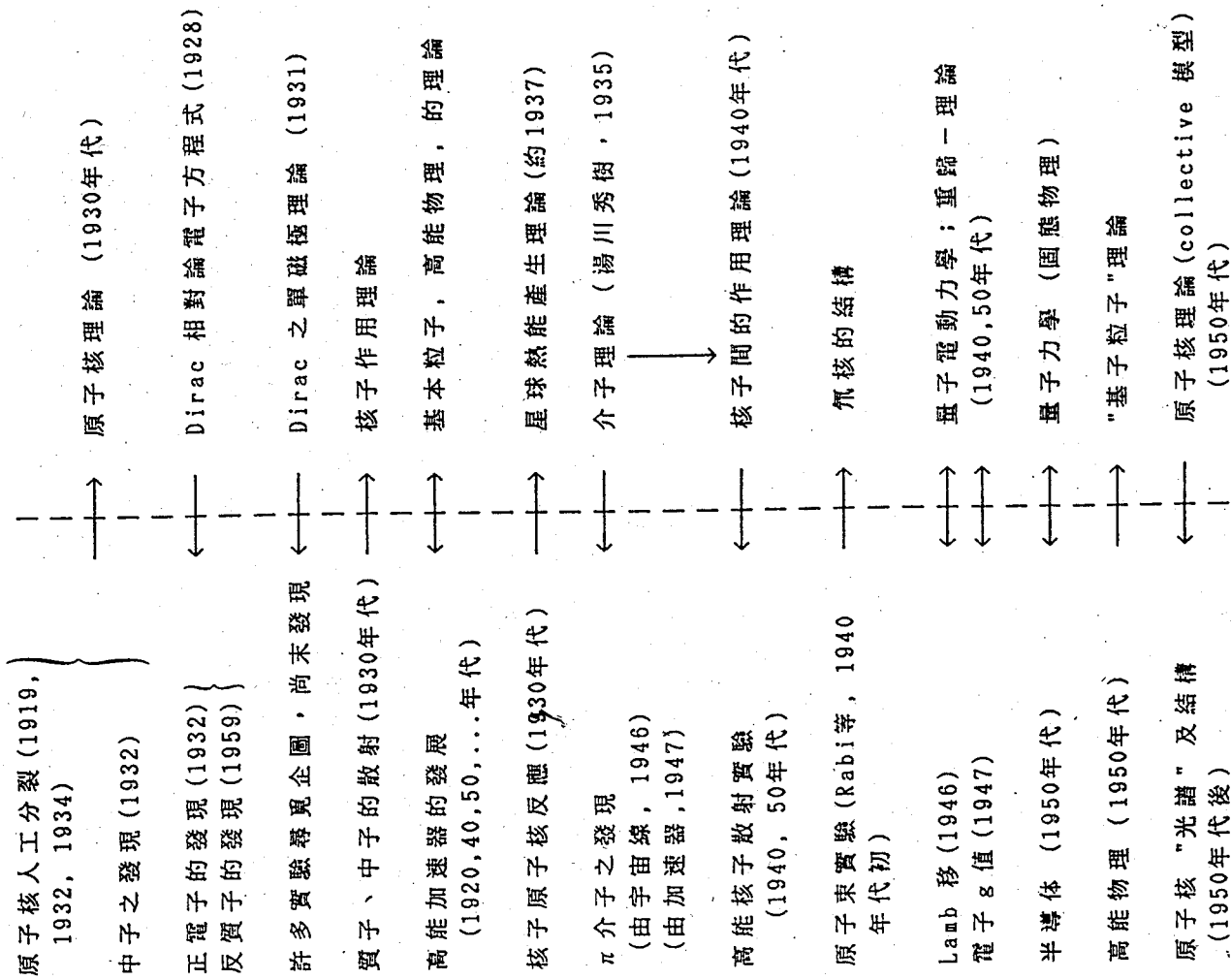
至廣義相對論與量子力學的互不相容問題，則更非本文所能闡述清楚的，不作此試圖了。

為本文之結，筆者將再替重：物理的進展，既非純由現象、實驗歸納而來，亦非純由理論演繹而來，而係由「實驗」與「理論」二者不斷反覆推論而來的。三百餘年來物理學的重大進展中，「實驗」（現象的觀察）與「理論」（觀念及假設的引入及演繹）的互為因果的關係，可以箭向表之如下。



Special Issue of Annual Report of the Institute of Physics, Academia Sinica, Vol. 17, 1988
Commemoration of the 60th Anniversary of Academia Sinica





* 近卅年來粒子物理的發展，可參閱顧東茂一文，中國物理學刊，第廿五卷第一期，1987年春。

ISOSPIN BREAKING EFFECTS ON THE $\Delta I = \frac{3}{2} K \rightarrow \pi\pi$ AMPLITUDES

Hai-Yang Cheng

Institute of Physics, Academia Sinica
Nankang, Taipei, Taiwan, Republic of China

Abstract

Without including isospin breaking effects, the experimental data of $K \rightarrow 2\pi$ yield $A_0/A_2 = (22.2 \pm 0.1)$ and $\delta_0 - \delta_2 = (56.5 \pm 3.0)^\circ$. The latter is substantially larger than the isospin phase shift difference determined from strong-interaction $\pi\pi$ scatterings; this seems to imply the importance of isospin violation. However, we show that effects of the π - η - η' mixing and the electromagnetic penguin contributions do not modify $\delta_0 - \delta_2$, but they account for about 17% of the observed $K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0$ amplitude.

I. Introduction

In the presence of final-state interactions, the isospin relations for $K \rightarrow 2\pi$ are given by

$$\begin{aligned} A(K^0 \rightarrow \pi^+\pi^-) &= A_0 e^{i\delta_0} + \frac{1}{\sqrt{2}} A_2 e^{i\delta_2} \\ A(K^0 \rightarrow \pi^0\pi^0) &= A_0 e^{i\delta_0} - \sqrt{2} A_2 e^{i\delta_2} \end{aligned} \quad (1)$$

$$A(K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0) = \frac{3}{2} A_2 e^{i\delta_2}$$

where A_0 and A_2 are isospin 0 and 2 amplitudes, respectively, δ_0 and δ_2 are S-wave $\pi\pi$ scattering phase shifts in these isospin states. Neglecting small CP violation, the ratio A_0/A_2 is determined to be [1]

$$\frac{A_0}{A_2} = 22.2 \pm 0.1 \quad (2)$$

from the experimental data [2]. Since $K \rightarrow 2\pi$ rates have been measured with a high accuracy, the $\pi\pi$ phase shift difference can be determined from the kaon data to be [1]

$$\delta_0 - \delta_2 = (56.5 \pm 3.0)^\circ \quad (3)$$

However, Eq. (3) is substantially larger than that determined from the analysis of strong-interaction $\pi\pi$ scattering data

$$\delta_0 - \delta_2 = \begin{cases} (41.4 \pm 8.1)^\circ & [3] \\ (29.2 \pm 3)^\circ & [4] \end{cases} \quad (4)$$

This implies that the $\Delta I = \frac{3}{2}$ amplitude A_2 extracted from $K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0$ and $K_0^0 \rightarrow \pi\pi$ may not be the same. It is thus evident that effects of isospin violation should be taken into consideration. The purpose of this paper is to discuss the isospin breaking effects on A_0/A_2 and $\delta_0 - \delta_2$.

There are three effects of isospin violation: the π^0 - η - η' mixing, the electromagnetic penguin contribution [5], and the electromagnetic final-state interactions. The first two effects on the CP-violating parameter ϵ'/ϵ have been addressed by several authors [6-9]. The contribution of the π^0 - η mixing to the $\Delta I = \frac{3}{2}$ amplitudes was considered in Ref. [10]. To begin with, we write the effective weak Hamiltonian as

$$H_w = H_w^{(0)} + H_{\text{emp}} \quad (5)$$

where H_{emp} is the effective Hamiltonian induced from the electromagnetic penguin diagram [5]

$$H_{\text{emp}} = -\frac{GE}{\sqrt{2}} c_1 c_3 s_1 (c_7 Q_7 + c_8 Q_8) \quad (6)$$

with

$$Q_7 = \bar{s}_\alpha \gamma_\mu (1 - \gamma_5) d_\alpha [u_\beta \gamma^\mu (1 - \gamma_5) u_\beta - \frac{1}{2} \bar{d}_\beta \gamma^\mu (1 - \gamma_5) d_\beta] - \frac{1}{2} \bar{s}_\beta \gamma^\mu (1 - \gamma_5) s_\beta \quad (7)$$

$$Q_8 = \bar{s}_\alpha \gamma_\mu (1 - \gamma_5) d_\beta [\bar{u}_\beta \gamma^\mu (1 - \gamma_5) u_\alpha - \frac{1}{2} \bar{d}_\beta \gamma^\mu (1 - \gamma_5) d_\alpha] - \frac{1}{2} \bar{s}_\beta \gamma^\mu (1 - \gamma_5) s_\alpha$$

and

$$c_7 = (0.037 - 0.067\tau)\alpha, \quad c_8 = (0.008 - 0.11\tau)\alpha \quad (8)$$

where $\tau = s_2^2 + (s_2 c_2 s_3 e^{-i\delta}/c_1 c_3)$, and α, β are color indices. The $K \rightarrow \pi\pi$ amplitudes then have the form

$$\begin{aligned} A(K^0 \rightarrow \pi^+\pi^-) &= A_0^{(0)} + \frac{1}{\sqrt{2}} A_2^{(0)} + A_{\text{emp}}^{+-} \\ A(K^0 \rightarrow \pi^0\pi^0) &= A_0^{(0)} - \sqrt{2} A_2^{(0)} + A_{\text{emp}}^{00} + A_{\pi\eta\eta}^{00} \\ A(K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0) &= \frac{3}{2} A_2^{(0)} + A_{\pi\eta\eta}^{+0} \end{aligned} \quad (9)$$

where the superscripts $+-, 00$, and $+0$ refer to $\pi^+\pi^-, \pi^0\pi^0$, and $\pi^+\pi^0$ final states, respectively, A_i is the amplitude due to H_w , and $A_{\pi\eta\eta}$ is the amplitude due to the π^0 - η - η' mixing. Comparing (9) with (1) we obtain

$$A_0 = A_0^{(0)} + \frac{2}{3} A_{\text{emp}}^{+-} + \frac{1}{3} A_{\text{emp}}^{00} + \frac{1}{3} A_{\pi\eta\eta}^{00} \quad (10)$$

$$A_2 = A_2^{(0)} + \frac{\sqrt{2}}{3} (A_{\text{emp}}^{+-} - A_{\text{emp}}^{00}) - \frac{\sqrt{2}}{3} A_{\pi\eta\eta} \quad (10)$$

$$A_2' = A_2^{(0)} + \frac{2}{3} A_{\pi\eta\eta}'$$

where A_2 and A_2' are the $\Delta I = \frac{3}{2}$ amplitudes determined from $K^0 \rightarrow \pi\pi$ and

$K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0$ decays, respectively.

To proceed, let us first concentrate on the $\pi^0\text{-}\eta\text{-}\eta'$ mixing. The contribution of the $\pi^0\text{-}\eta\text{-}\eta'$ mixing to the amplitude $A(K^+ \rightarrow \pi^+\pi^0)$ (Fig. 1a) is given by [6, 7]

$$A_{\pi\eta\eta}' = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{m_d - m_u}{m_s} \right) [(\cos\theta - \sqrt{2} \sin\theta) A(K^+ \rightarrow \pi^+\eta) + (\sin\theta + \sqrt{2} \cos\theta) \frac{m_\eta^2 - m_\pi^2}{m_{\eta'}^2 - m_\pi^2} A(K^+ \rightarrow \pi^+\eta')] \quad (11)$$

where θ is the $\eta_8 - \eta_0$ mixing angle, namely

$$\eta = \eta_8 \cos\theta - \eta_0 \sin\theta, \quad \eta' = \eta_8 \sin\theta + \eta_0 \cos\theta \quad (12)$$

Similarly, for the amplitude $A(K^0 \rightarrow \pi^0\pi^0)$ (see Fig. 1b)

$$A_{\pi\eta\eta}' = \frac{\sqrt{3}}{2} \left(\frac{m_d - m_u}{m_s} \right) [(\cos\theta - \sqrt{2} \sin\theta) A(K^0 \rightarrow \pi^0\eta) + (\sin\theta + \sqrt{2} \cos\theta) \frac{m_\eta^2 - m_\pi^2}{m_{\eta'}^2 - m_\pi^2} A(K^0 \rightarrow \pi^0\eta')] \quad (13)$$

To evaluate the $K \rightarrow \pi\eta(\eta')$ matrix elements, we note that the amplitude of $K \rightarrow \pi\eta(\eta')$ is purely $\Delta I = \frac{1}{2}$, so it is dominated by the octet $\Delta S = 1$ interactions.

The octet $\Delta S = 1$ effective chiral Lagrangian has the form

$$\mathcal{L}_{\text{eff}} = g_8 \text{Tr}(\lambda_6 \partial_\mu U \partial^\mu U^\dagger) \quad (14)$$

where U is a unitary matrix which describes the interactions of pseudo-Goldstone bosons. Expanding U up to the third order in the pseudoscalar octet fields, we obtain (for details, see chap. 6 of Ref. [11])

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{eff}} = & i \frac{4}{f_\pi^3} g_8 \left(-\sqrt{\frac{2}{3}} \pi^- \eta \partial^2 K^+ - \frac{1}{\sqrt{6}} K^+ \eta \partial^2 \pi^- + \frac{3}{\sqrt{2}} K^+ \pi^- \partial^2 \eta \right. \\ & + \frac{1}{\sqrt{3}} \pi^0 \eta \partial^2 K^0 + \frac{1}{\sqrt{12}} K^0 \eta \partial^2 \pi^0 - \frac{\sqrt{3}}{2} K^0 \pi^0 \partial^2 \eta \\ & \left. - \pi^+ \pi^- \partial^2 K^0 + K^0 \pi^+ \partial^2 \pi^- - \frac{1}{2} \pi^0 \pi^0 \partial^2 K^0 + \frac{1}{2} K^0 \pi^0 \partial^2 \pi^0 \right) \\ & + \frac{4}{f_\pi^3} (\partial_\mu \pi^- \partial^\mu K^+ - \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_\mu \pi^0 \partial^\mu K^0 - \frac{1}{\sqrt{6}} \partial_\mu K^0 \partial^\mu \eta) \quad (15) \end{aligned}$$

with $f_\pi = 130$ MeV being a decay constant. Since η is off-shell (i.e. $p_\eta^2 = m_\eta^2$), we find

$$A(K^0 \rightarrow \pi^0 \eta_8) = -\frac{1}{\sqrt{3}} A(K^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0)$$

$$A(K^+ \rightarrow \pi^+ \eta_8) = \frac{2}{\sqrt{3}} A(K^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0)$$

with

$$A(K^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0) = 4 g_8^* (m_K^2 - m_\pi^2) / f_\pi^3$$

One can also derive Eq. (16) from current algebra via the soft-pion theorem [11]

$$\begin{aligned} \langle \pi^{\alpha} \pi^{\beta} | H_w | K \rangle &= -i \frac{\sqrt{2}}{f_{\pi}} h \langle \pi^{\alpha} (p) | [F_s^{\beta}, H_w] | K(p) \rangle \\ &+ \langle \pi^{\beta} (p) | [F_s^{\alpha}, H_w] | K(p) \rangle \end{aligned} \quad (17)$$

where h is a continuation factor which takes care of the extrapolation from the unphysical soft-pion limit to the physical limit (see Chap. 6 of Ref. [11] for detailed discussions). From Eq. (17) it follows

$$\begin{aligned} \langle \pi^0 \eta_8 | H_w | K^0 \rangle &= -i \frac{\sqrt{2}}{f_{\pi}} h \left(\frac{1}{2} \langle \eta_8 | H_w | K^0 \rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} \langle \pi^0 | H_w | K^0 \rangle \right) \\ &= i \frac{\sqrt{2}}{f_{\pi}} h \langle \eta_8 | H_w | K^0 \rangle \end{aligned} \quad (18)$$

where use of the SU(3) relation $\langle \pi^0 | H_w | K^0 \rangle = \sqrt{3} \langle \eta_8 | H_w | K^0 \rangle$ has been made. Similarly

$$\langle \pi^0 \pi^0 | H_w | K^0 \rangle = i \frac{\sqrt{2}}{f_{\pi}} h \langle \pi^0 | H_w | K^0 \rangle \quad (19)$$

Thus it follows the first relation of Eq. (16). Since the chiral Lagrangian (14) does not apply to $K \rightarrow \pi \eta_0$, we may employ the low-energy theorem (17) to obtain

$$\frac{\langle \pi \eta_0 | H_w | K \rangle}{\langle \pi \eta_8 | H_w | K \rangle} = -\frac{1}{2} \frac{\langle \eta_0 | H_w | K \rangle}{\langle \eta_8 | H_w | K \rangle} \quad (20)$$

for both K^0 and K^+ . The matrix element $\langle \eta_0 | H_w | K \rangle$ is however not related to $\langle \pi^0 | H_w | K \rangle$ by SU(3) symmetry, so we define a complex parameter ρ [12]

$$\langle \eta_0 | H_w | K^0 \rangle \equiv -2 \frac{2}{\sqrt{3}} \rho \langle \pi^0 | H_w | K^0 \rangle \quad (21)$$

If the $\Delta I = \frac{1}{2}$ rule is totally responsible by the penguin mechanism, then $\rho = 1$ in

the valence quark model. Recently we have extracted the parameter ρ from the experimental results for $K_L \rightarrow 2\gamma$ [13]

$$\rho = 0.22 \pm 0.05 \quad \text{or} \quad \rho = 0.63 \pm 0.05 \quad (22)$$

The corresponding fraction of the $\Delta I = \frac{1}{2}$ amplitude due to the penguin interactions is 48% and 75%, respectively. We have argued that the solution $\rho = 0.22$ is more plausible. It has been shown that the perturbative penguin contributions account for at most 5% of the $\Delta I = \frac{1}{2}$ transition [11]. Including non-perturbative effects to the penguin diagram (e.g. soft-gluon effects in "eye" graphs [14]) will not likely enhance the penguin contribution up to 75% (i.e. $\rho = 0.63$).

Combining Eqs. (11), (12), (16), (20) and (21) we find

$$\begin{aligned} A_{\pi\eta\eta'}^{+-} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{m_d - m_u}{m_s} \right) [(\cos\theta - \sqrt{2} \sin\theta) (\cos\theta - \sqrt{2} \rho \sin\theta) \\ &+ (\sin\theta + \sqrt{2} \cos\theta) (\sin\theta + \sqrt{2} \rho \cos\theta)] \frac{m_{\eta'}^2 - m_{\pi}^2}{m_{\eta'}^2 - m_{\pi}^2} A(K^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0) \end{aligned} \quad (23)$$

Likewise,

$$A_{\pi\eta\eta'}^{00} = -\sqrt{2} A_{\pi\eta\eta'}^{+0} \quad (24)$$

Since $A(K^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0)$ and $A_2^{(0)}$ are of the same sign [cf. Eqs. (7, 21) of Ref. (11)], it is evident that the contribution of π^0 - η' mixing is constructive in both A_2 and A_2' .

We next turn to the electromagnetic penguin contributions. First, we note that under the Fierz transformation

$$O_8 \rightarrow -8 [(\bar{s}_L u_R) (\bar{u}_R d_L) - \frac{1}{2} (\bar{s}_L d_R) (\bar{d}_R d_L) - \frac{1}{2} (\bar{s}_L s_R) (\bar{s}_R d_L)] \quad (25)$$

Then in the vacuum insertion approximation

$$\langle \pi^+ \pi^- | O_8 | K^0 \rangle = -8 [\langle \pi^+ | \bar{u}_R d_L | 0 \rangle \langle \pi^- | \bar{s}_L u_R | K^0 \rangle$$

$$- \frac{1}{2} \langle \pi^+ \pi^- | \bar{d}_R d_L | 0 \rangle \langle 0 | \bar{s}_L d_R | K^0 \rangle] \quad (26)$$

The matrix elements of quark scalar and pseudoscalar densities are given in Eq. (12) of Ref. [15] or Eq. (4.25) of Ref. [11]. Substituting them into (26) gives

$$\langle \pi^+ \pi^- | O_8 | K^0 \rangle = i f_\pi v^2 \left(3 - 2 \frac{m_K^2}{\Lambda_X^2} - 4 \frac{m_\pi^2}{\Lambda_X^2} \right) \quad (27)$$

where $\Lambda_X = 2\pi f_\pi = 830$ MeV is the chiral symmetry breaking scale [16], and

$$v = \frac{m_{\pi^+}^2}{m_u + m_d} = \frac{m_K^2}{m_d + m_s} = \frac{m_{K^+}^2}{m_u + m_s} \quad (28)$$

The evaluation of the matrix element $\langle \pi^0 \pi^0 | O_8 | K^0 \rangle$ is precisely the same as that of the usual QCD penguin operator O_6 , namely (Eq. (5.13) of Ref. [11])

$$\langle \pi^0 \pi^0 | O_8 | K^0 \rangle = 2 i f_\pi v^2 \frac{m_K^2 - m_\pi^2}{\Lambda_X^2} \quad (29)$$

From Eqs. (6), (7), (27) and (29) we find

$$A_{\text{emp}}^{+-} = \frac{G_F}{\sqrt{2}} c_1 c_3 s_1 \left(\frac{1}{3} c_7 + c_8 \right) \left(3 + 2 \frac{m_K^2}{\Lambda_X^2} + 4 \frac{m_\pi^2}{\Lambda_X^2} \right) f_\pi v^2$$

$$A_{\text{emp}}^{00} = \frac{G_F}{\sqrt{2}} c_1 c_3 s_1 \left(\frac{1}{3} c_7 + c_8 \right) 2 \left(\frac{m_K^2 - m_\pi^2}{\Lambda_X^2} \right) f_\pi v^2 \quad (30)$$

where use has been made of $\langle \pi\pi | O_7 | K \rangle = \langle \pi\pi | O_8 | K \rangle / 3$. It is clear from Eqs. (30) and (8) that both contributions from O_7 and O_8 are comparable. [It should be stressed that the electromagnetic penguin contribution does not vanish in the all-neutral-particle process $K^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0$.]

Finally we come to the numerical estimate. Since $(g_8)_{\text{expt}} \cong 0.26 \times 10^{-8}$ m_K^2 [11] and $\theta \approx -20^\circ$ as implied by the $1/N_c$ approach [16] and by the recent

measurements of $\eta \rightarrow 2\gamma$, $\eta' \rightarrow 2\gamma$ rates, we obtain

$$A_{\pi\eta\eta'}^{+-} = 3 \times 10^{-9} \text{ GeV} \quad (31)$$

where we have taken $(m_d - m_u)/m_s = 0.022$ and $\rho = 0.22$. Because experimentally $A^{+0} = 1.219 \times 10^{-8}$ GeV, it is evident that 17% of the $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0$ amplitude is accounted for by the π^0 - η - η' mixing. The intrinsic $\Delta I = \frac{3}{2}$ amplitude is thus $A_2^{(0)} = 1.53 \times 10^{-8}$ GeV. As a consequence, the ratio of the intrinsic $\Delta I = \frac{1}{2}$ to $\frac{3}{2}$ amplitudes is enhanced,

$$\frac{A_0^{(0)}}{A_2^{(0)}} = 22.2 \rightarrow 26.6 \quad (32)$$

This imposes a further difficulty on the understanding of the $\Delta I = \frac{1}{2}$ rule. It is already very difficult to achieve an enhancement of the $\Delta I = \frac{1}{2}$ amplitude with a factor of 22 within the standard framework of the effective weak Hamiltonian (for a review of this problem, see Ref. [11]). The improved $\Delta I = \frac{1}{2}$ rule, Eq. (32), perhaps calls for a dramatic mechanism for generating an adequate $\Delta I = \frac{1}{2}$ enhancement.

To see the effect of isospin violation on the phase-shift difference $\delta_0 - \delta_2$, we first note that from Eqs. (8) and (30)

$$A_{\text{emp}}^{+-} - A_{\text{emp}}^{00} = 6.9 \times 10^{-11} \text{ GeV} \quad (33)$$

Therefore, the electromagnetic penguin contribution to A_2 is negligible because of the small fine-structure constant. (The next order chiral expansion m_K^2/Λ_X^2 is canceled out in Eq. (33). Consequently, the next to leading chiral corrections are negligible. However, the effect of electromagnetic penguin interactions on ϵ' can be comparable to that of the π - η - η' mixing [6-8].) It is also obvious from (10) and (24) that the π - η - η' mixing contributes the same amount to A_2 and A_2' . As a result, the $\Delta I = \frac{3}{2}$ amplitudes determined in $K^+ \rightarrow \pi^+ \pi^0$ and $K^0 \rightarrow \pi\pi$ are the same and hence Eq. (3) remains intact. Therefore, if the discrepancy between (3) and

(4) is real, it is most likely attributed to electromagnetic radiative corrections. Our above analysis does not affect the usual estimate of isospin breaking effects on ϵ'/ϵ except for the $\pi\text{-}\eta\text{'}$ contribution. Writing [6, 7]

$$\frac{\epsilon'}{\epsilon} = \left(\frac{\epsilon'}{\epsilon}\right)_0 (1 - \Omega_{\pi\eta\eta'} - \Omega_{\text{emp}}) \quad (34)$$

where $\Omega_{\pi\eta\eta'}$ and Ω_{emp} represent $\pi\text{-}\eta\text{'}$ mixing and the electromagnetic penguin contributions, respectively, we have

$$\Omega_{\pi\eta\eta'} = \frac{1}{3\sqrt{2}} \frac{1}{\omega} [(\cos\theta - \sqrt{2} \sin\theta) (\cos\theta - \sqrt{2} \rho \sin\theta) + (\sin\theta + \sqrt{2} \cos\theta) (\sin\theta + \sqrt{2} \rho \cos\theta)] \frac{m_\eta^2 - m_\pi^2}{m_{\eta'}^2 - m_\pi^2} \frac{m_d - m_u}{m_s} \quad (35)$$

with $\omega = 1/22.2$. Using $\rho = 0.22$ [Eq. (22)] we find $\Omega_{\pi\eta\eta'} = 0.17$, which is to be compared with the value 0.27 obtained in Ref. [7] for $\rho = 1$.

In conclusion, if isospin violation is not taken into consideration in $K \rightarrow 2\pi$ decays, the experimental data will imply a S-wave $\pi\pi$ phase-shift difference $\delta_0 - \delta_2 = (56.5 \pm 3.0)^\circ$, which is substantially larger than the experimental values $(41.4 \pm 8.1)^\circ$ and $(29.2 \pm 3)^\circ$. We have shown that the $\pi\text{-}\eta\text{'}$ mixing and the QED penguin operators cannot account for this discrepancy. Hence, if the discrepancy is real, it will be attributable to the electromagnetic radiative corrections. The effect of $\pi\text{-}\eta$ and $\pi\text{-}\eta\text{'}$ mixings however do enhance the relative magnitude of intrinsic $\Delta = \frac{1}{2}$ and $\frac{3}{2}$ amplitudes from 22.2 to 26.6. This poses a further difficulty in understanding the $\Delta I = \frac{1}{2}$ rule.

This work was supported by the National Science Council of the Republic of China.

References

1. A. N. Kamal, J. Phys. G12 (1986) L43.
2. Particle Data Group, Phys. Lett. 170B (1986) 1.
3. T. J. Devlin and J. O. Dickey, Rev. Mod. Phys. 51 (1979) 237.

4. N. N. Biswas et al., Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1378.
5. J. Bijnens and M. B. Wise, Phys. Lett. 137B (1984) 245.
6. J. Donoghue, E. Golowich, B. Holstein, and J. Trampetic, Phys. Lett. 179B (1986) 361.
7. A. J. Buras and J. M. Gerard, Phys. Lett. 192B (1987) 156.
8. S. R. Sharpe, Phys. Lett. 194B (1987) 551.
9. X. Q. Li, D. D. Wu, and Z. Q. Zhang, CERN-TH. 4793/87 (1987).
10. B. Holstein, Phys. Rev. D20 (1979) 1187 and references therein.
11. H. Y. Cheng, "Status of the $\Delta I = \frac{1}{2}$ Rule in Kaon Decay", IUHET-132 (1987).
12. J. Donoghue, E. Golowich, and B. Holstein, Phys. Lett. 135B (1984) 481.
13. L. L. Chau and H. Y. Cheng, Phys. Lett. 195B (1987) 275.
14. C. Bernard, T. Draper, G. Hockney, A. M. Rushton, and A. Soni, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 2770.
15. H. Y. Cheng, IUHET-126, to appear in Phys. Rev. D. (1987).
16. J. Gasser and H. Leutwyler, Nucl. Phys. B250 (1985) 465; J. Donoghue, B. Holstein, and Y. C. R. Lin, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 2766; G. Grunberg, Phys. Lett. 168B (1986) 141.
17. S. Weinberg, in "Festschrift for I. I. Rabi", edited by L. Motz (N. Y. Academy of Science, New York, 1977); J. Gasser and H. Leutwyler, Phys. Rep. 87 (1982) 77.

**INTERACTION AND GEOMETRICAL FACTORS FOR A
SUBLATTICE-DILUTE POTTS MODEL: FINITE-SIZE EFFECTS**

Chin-Kun Hu and Y. -S. Lin

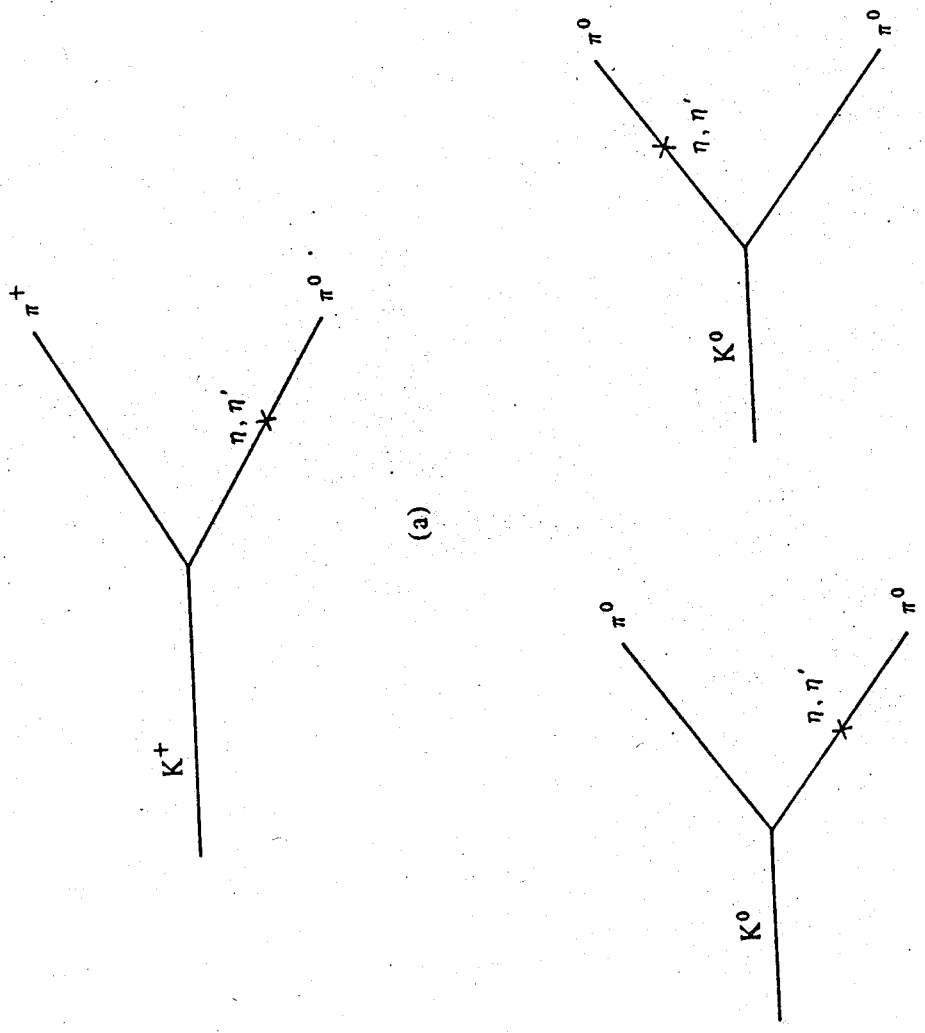
*Institute of Physics, Academia Sinica
Taipei, Taiwan 11529
R.O.C.*

Abstract

The connection between a sublattice-dilute q -state Potts model (SDQPM) and a q -state site-bond-correlated percolation model (QSBCPM) has been used to define an interaction factor $l(\Delta, K, x, y)$, a nonpercolating geometrical factor $g_f(q, x, y)$, and a percolating geometrical factor $g_p(q, x, y)$; where Δ is the normalized chemical potential, K is the normalized coupling constant, and x and y are normalized number of occupied bonds and sites, respectively. It has been proposed that the thermal properties of the SDQPM may be derived simply from lg_f and lg_p in the limit of very large number of lattice sites. In order to appreciate the effects of various factors on the geometrical properties of lg_f above the x - y plane, in this paper we plot l, g_f and lg_f for one-dimensional SDQPM with some typical values of N, Δ, K and q . We find that the average values of x and y , i.e. \bar{x} and \bar{y} , determined from the position of the peak of lg_f , approach their thermodynamic values very quickly.

I. Introduction

Using a new idea to define clusters for Ising-like spin models, Hu¹⁻¹³ has shown that the phase transitions of Ising-like spin¹⁻⁹ and other lattice¹⁰⁻¹¹ models are percolation transitions.¹⁴ In recent papers,⁵⁻⁷ Hu used the connection between the Ising-like spin model and the percolation problem to define the interaction factor l , the non-percolating geometrical factor g_f and the percolating geometrical factor g_p , where l is a simple function of its arguments, g_f and g_p depend only on the geometrical property of the system. With certain reasonable assumptions about the behavior of lg_f and lg_p , the free energy f , the internal energy U , and the specific heat of the spin model may be expressed in terms of magnitudes, positions and widths of the peaks for lg_f and lg_p . Such formulation is confirmed by exact



(a)

(b)

calculations for some one-dimensional systems, e.g. the sublattice-dilute q-state Potts model (SDQPM),⁶ and also provides geometrical explanations of the changeover from second-order to first-order phase transitions, and the finite-size scaling and broadening at first-order phase transitions of the spin model.⁷ Note that for one dimensional systems, only lg_f is important for the temperature $T > 0$.

Since the geometrical properties of lg_f (lg_p) is determined by both l and g_f (g_p), it is valuable to have the graphical representations of l , g_f (g_p), and lg_f (lg_p) for some typical values of parameters in their arguments, so that the effects of various factors on the geometrical property of lg_f (lg_p) may be clearly seen. Furthermore, it is also of interest to know how the geometrical properties of the peak approach their asymptotic values when the number of sites in the lattice, N , is increased from small values to large values. In this paper, we will study such problems for the one-dimensional sublattice-dilute q-state Potts model (SDQPM)⁶ for which an exact formula for g_f is available. For systems in higher dimensions, it is not easy to calculate g_f and g_p exactly for large values of N and one must apply certain approximate method, e.g. the Monte-Carlo simulations, to calculate the approximate geometrical factors. The data of finite-size effects in this paper are useful reference for systems in higher dimensions.

In this paper we will follow the notations and conventions of Ref. 6 in which the connection between a sublattice-dilute q-state Potts model (SDQPM) on a lattice G and a q-state site-bond correlated percolation model (QSBCPM) has been used to define an interaction $l(\Delta, K, x, y)$, a nonpercolating geometrical factor $g_f(q, x, y)$, and a percolating geometrical factor $g_p(q, x, y)$, where Δ is the normalized (by $k_B T$) chemical potential, K is the normalized coupling constant, and x and y are defined by the equations:

$$0 \leq x = v(G')/E \leq 1, \quad (1. a)$$

$$0 \leq y = e(G'')/E \leq 2. \quad (1. b)$$

In Eq. (1), $v(G')$ is the number of occupied sites in section graphs G' of G , $e(G'')$ is the number of occupied bonds in subgraphs G'' of G , and E is the total number of bonds in the A sublattice of G .

According to Ref. 6, $l(\Delta, K, x, y)$ and the $g_f(q, x, y)$ for the one-dimensional SDQPM are given respectively by

$$l(\Delta, K, x, y) = e^{\Delta E x} u^E y, \quad (2)$$

$$g_f(q, x, y) = C_{xE}^E C_{yE}^{2xE} q^{E+xE} \quad (3)$$

where

$$u = e^K - 1. \quad (4)$$

For the one-dimensional SDQPM with periodic boundary condition, E equals the total number of lattice sites, N_A , in the A sublattice and $N = E + N_A = 2E$.

The diagrams for the interaction factor $l(\Delta, K, x, y)$ are shown in Fig. 1, for $N = 40$ and several sets of the values for e^Δ and u . The diagrams for the geometrical factor $g_f(q, x, y)$ are shown in Fig. 2 and Fig. 3 for $q = 1$ and 2 respectively and $N = 20, 40$, and 50. The diagrams for the product $l(\Delta, K, x, y) g_f(q, x, y)$ are shown in Fig. 4 to Fig. 6 for $N = 40$, $e^\Delta = 10, 2, 0.5, 0.1$ and four combinations of values for q and u . Now we explain the convention used to draw the diagrams. Let us take Fig. 1a as an example. The x and y axes are always drawn in the southwest and the southeast directions, respectively. The origin of the coordinate system is the middle point of the leftest line as marked in Fig. 1a. The coordinates along the positive x -axis are $0, 2/N, 4/N, \dots, 1, 1+2/N$. The coordinates along the y -axis are $0, 2/N, 4/N, \dots, 1, 1+2/N, \dots, 2, 2+2/N$. The functions $l(\Delta, K, x, y)$ and $g_f(q, x, y)$ are not defined on the lines: $x = 1+2/N$ and $y = 2+2/N$ of the (x, y) plane. The functional values above these lines are set to be 0. We have included the lines $x = 1+2/N$ and $y = 2+2/N$ on the (x, y) plane, so that the functional values of $l(\Delta, K, x, y)$, $g_f(\Delta, K, x, y)$ and their products above the (x, y) plane may be clearly seen. The maxima in all diagrams have been normalized to the same value. The absolute maximum (AM) of a given diagram is explained in the caption of that diagram.

From Fig. 1 we find that $l(\Delta, K, x, y)$ is a monotonic function of x and y and the position and the AM of $l(\Delta, K, x, y)$ depend on e^Δ and u . From Fig. 2 and 3 we find that the AM increases rapidly with N , the width of the peak decreases with N , and the position of the peak moves toward southwest corner of the (x, y) plane when q increases. Figure 4 is the product of Fig. 2b and $l(\Delta, K, x, y)$ for $u = 1$ and $\Delta = 10, 2, 0.5$, and 0.01 . In Fig. 4 we find that the peak moves from the point $x = 1, y = 1$ to the origin when Δ decreases from 10 to 0.1. Figures 5a - 5d are obtained from Fig. 4a to 4d by changing q from 1 to 2; we find that the peaks move toward smaller values of y . Figures 6a-6d are obtained from Figs. 5a - 5d by changing u from 1 to 2; we find that the peaks move toward larger values of y . Figures 4-5 give us some feeling about how q, Δ , and K influence the behavior of

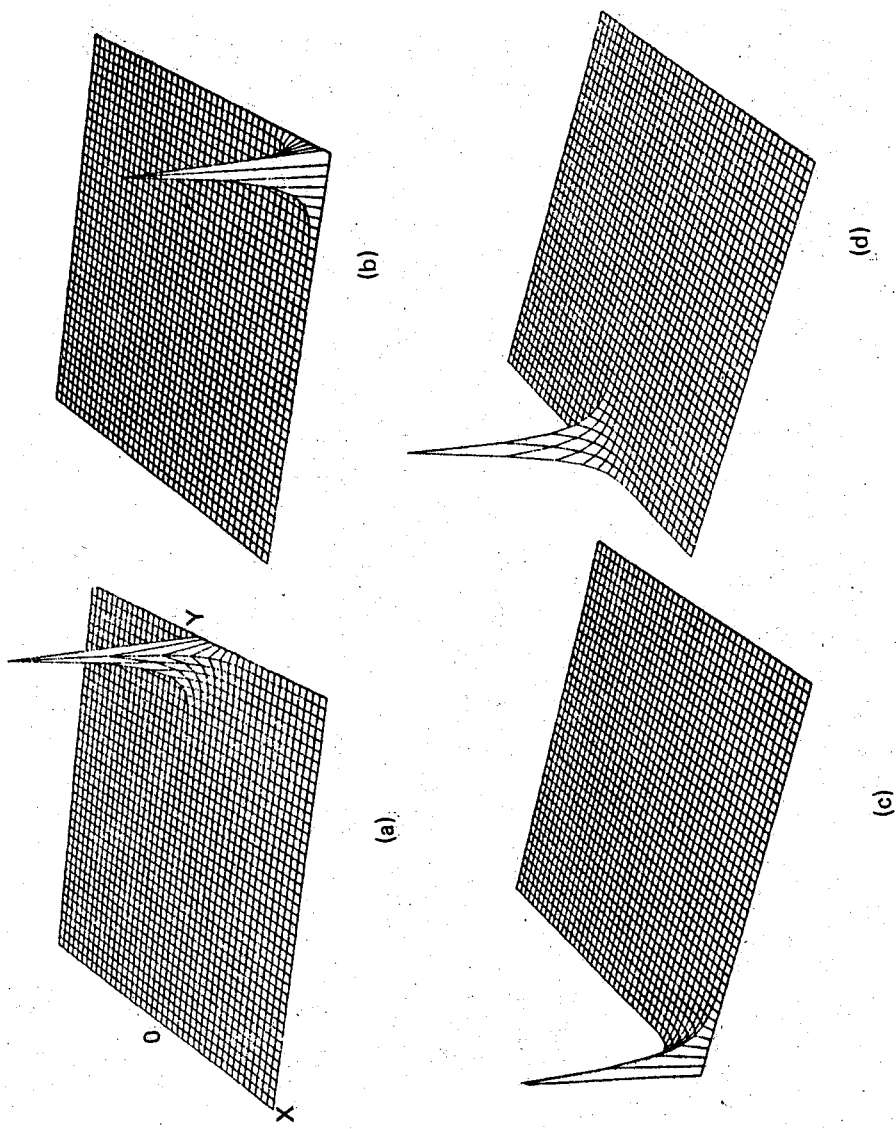


Fig. 1. The interaction factor $I(\Delta, k, x, y)$ for $N = 40$ and four sets of values for e^{Δ} and u .

- (a) $e^{\Delta} = 0.5, u = 2, \text{ and } AM = 1.10 \times 10^{12}$;
- (b) $e^{\Delta} = 2, u = 2, \text{ and } AM = 1.15 \times 10^{18}$;
- (c) $e^{\Delta} = 2, u = 0.5, \text{ and } AM = 1.05 \times 10^6$;
- (d) $e^{\Delta} = 0.5, u = 0.5, \text{ and } AM = 1$.

Note that AM is the absolute maximum for a given diagram. The convention for drawing the diagrams is shown in Fig. 1(a) and explained in the text.

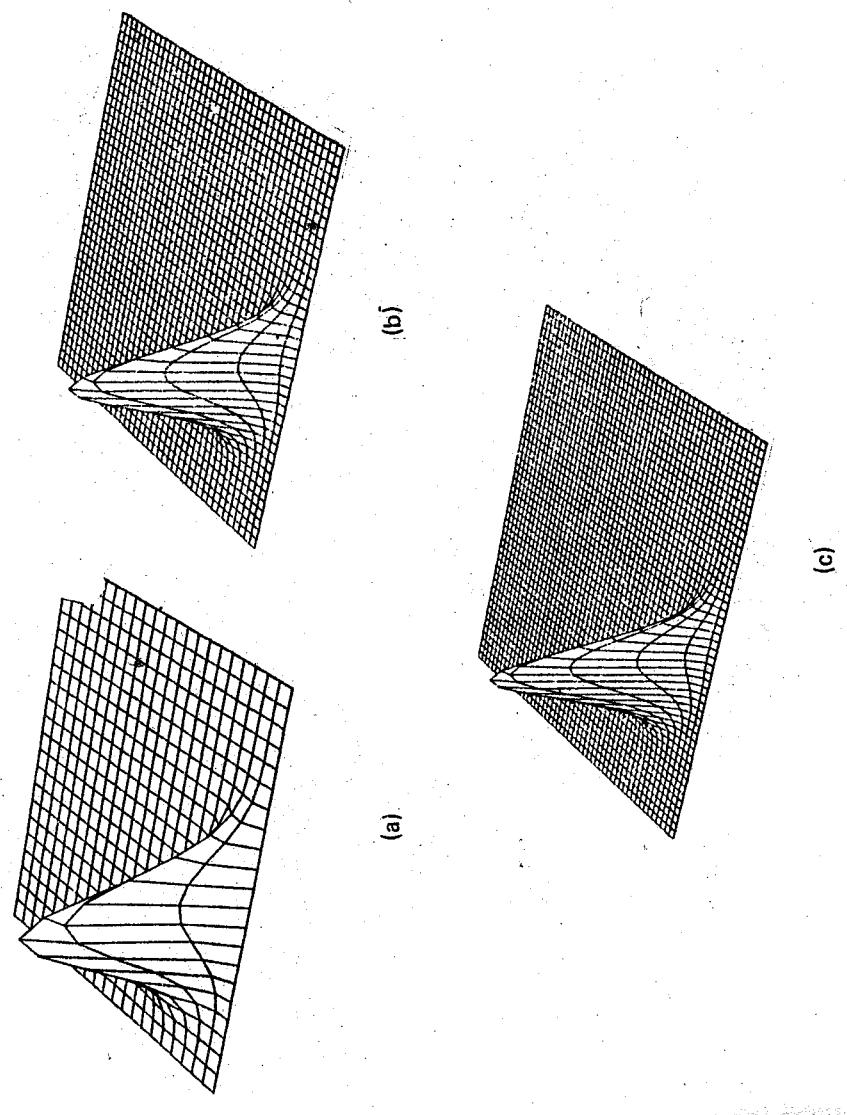


Fig. 2. The geometrical factor $gf(q, x, y)$ for $q = 1$ and

- (a) $N = 20$ with $AM = C_8^{10} C_8^{16} = 5.79 \times 10^5$,
- (b) $N = 40$ with $AM = C_{16}^{20} C_{16}^{32} = 2.91 \times 10^{12}$,
- (c) $N = 50$ with $AM = C_{20}^{25} C_{20}^{40} = 7.32 \times 10^{15}$.

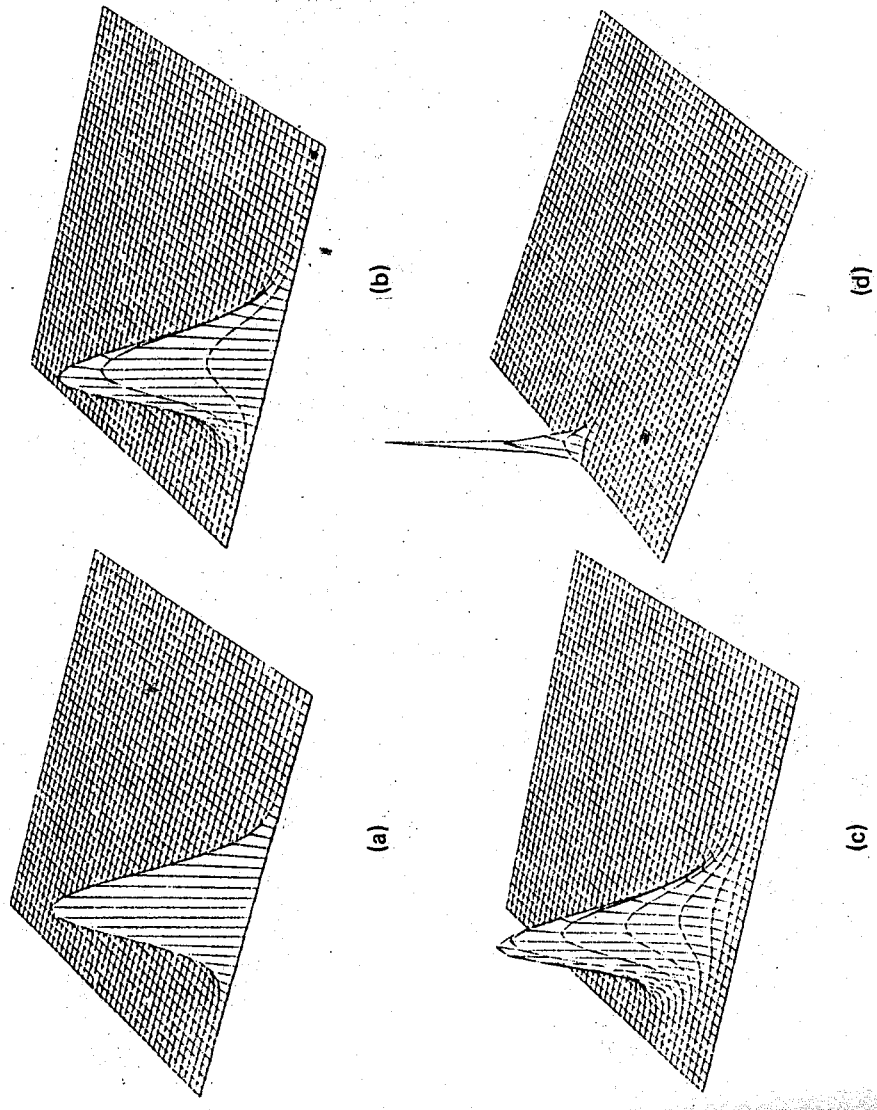


Fig. 4. The product $I(\Delta, K, x, y)g_f(q, x, y)$ for $N = 40, q = 1, u = 1$, and

- (a) $e^\Delta = 10$ with $AM = 9.96 \times 10^{97}$,
- (b) $e^\Delta = 2$ with $AM = 7.43 \times 10^{27}$,
- (c) $e^\Delta = 0.5$ with $AM = 5.36 \times 10^{14}$,
- (d) $e^\Delta = 0.01$ with $AM = 1$.

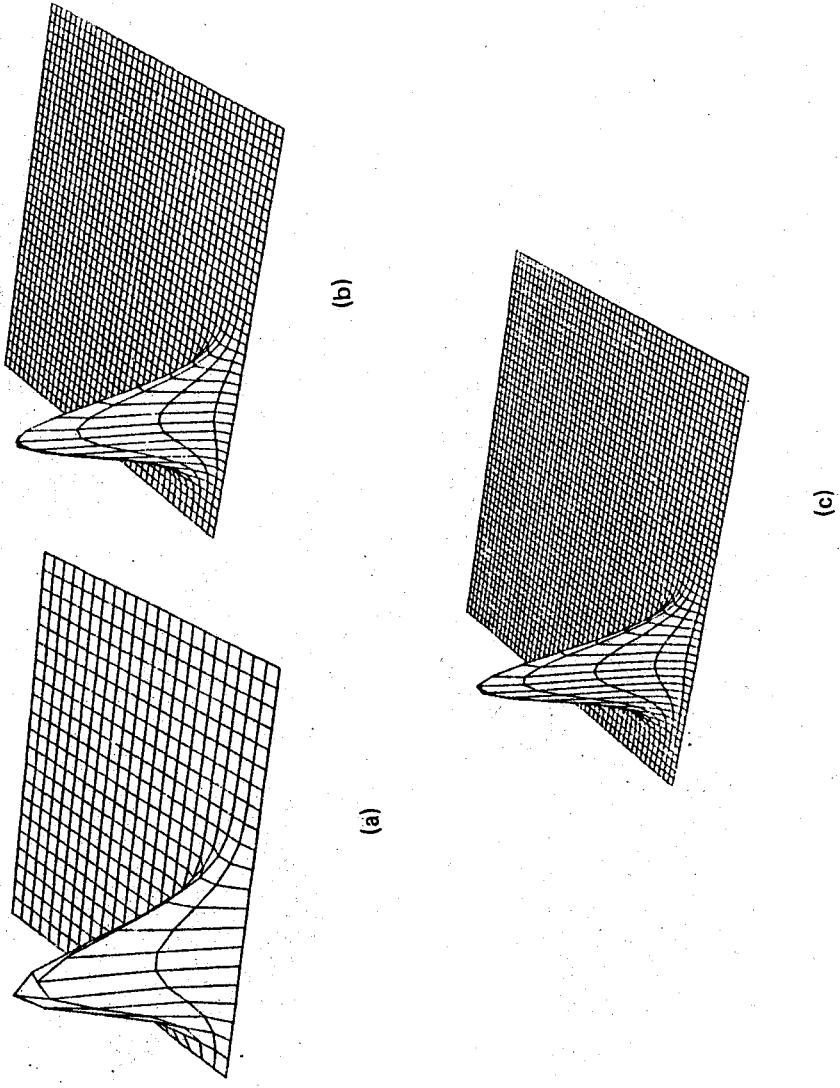


Fig. 3. The geometrical factor $g_f(q, x, y)$ for $q = 2$ and

- (a) $N = 20$ with $AM = C_8^{10} C_5^{16} q^{13} = 1.61 \times 10^9$,
- (b) $N = 40$ with $AM = 2.19 \times 10^{19}$,
- (c) $N = 50$ with $AM = 2.87 \times 10^{24}$.

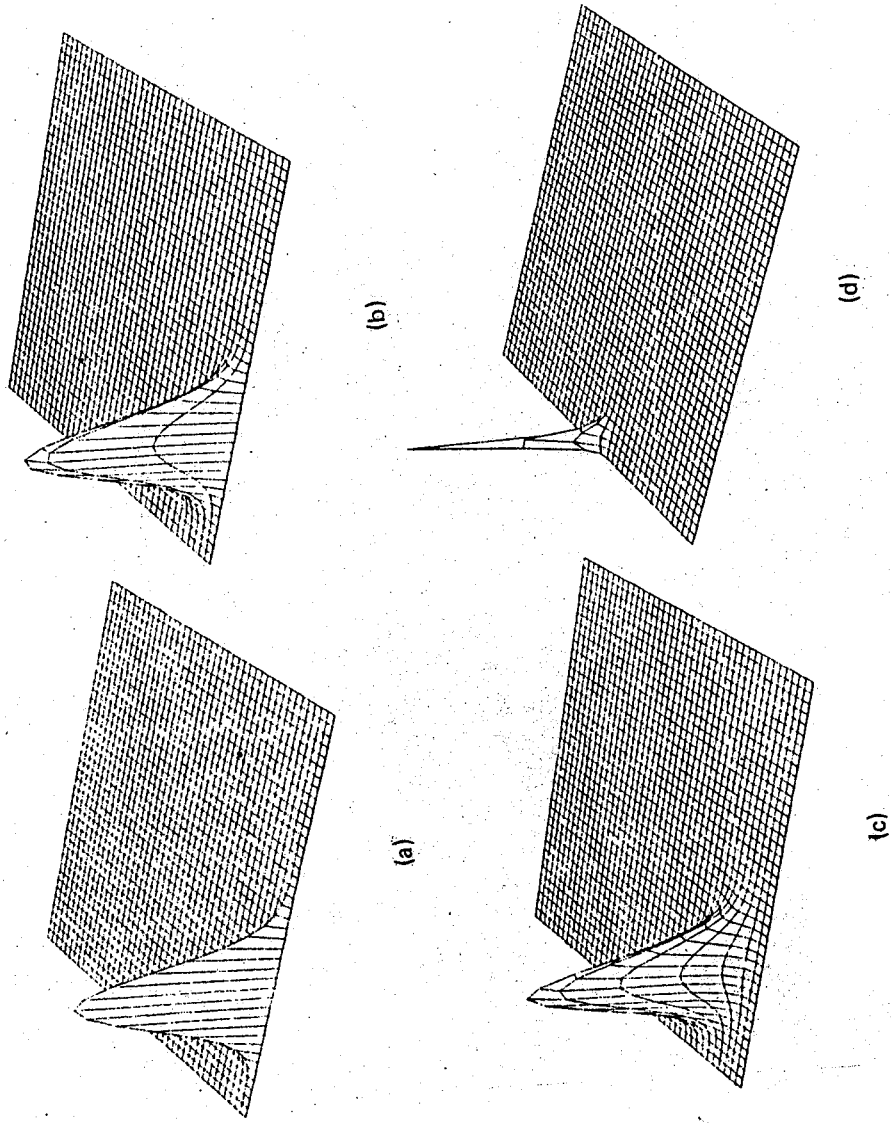


Fig. 5. The product $I(\Delta, K, x, y)g_f(q, x, y)$ for $N = 40, q = 2, u = 1$, and
 (a) $e^\Delta = 10$ with $AM = 1.17 \times 10^{1.05}$,
 (b) $e^\Delta = 2$ with $AM = 6.88 \times 10^{3.4}$,
 (c) $e^\Delta = 0.5$ with $AM = 9.85 \times 10^{2.1}$,
 (d) $e^\Delta = 0.01$ with $AM = 2^{2.0} = 1.05 \times 10^6$.

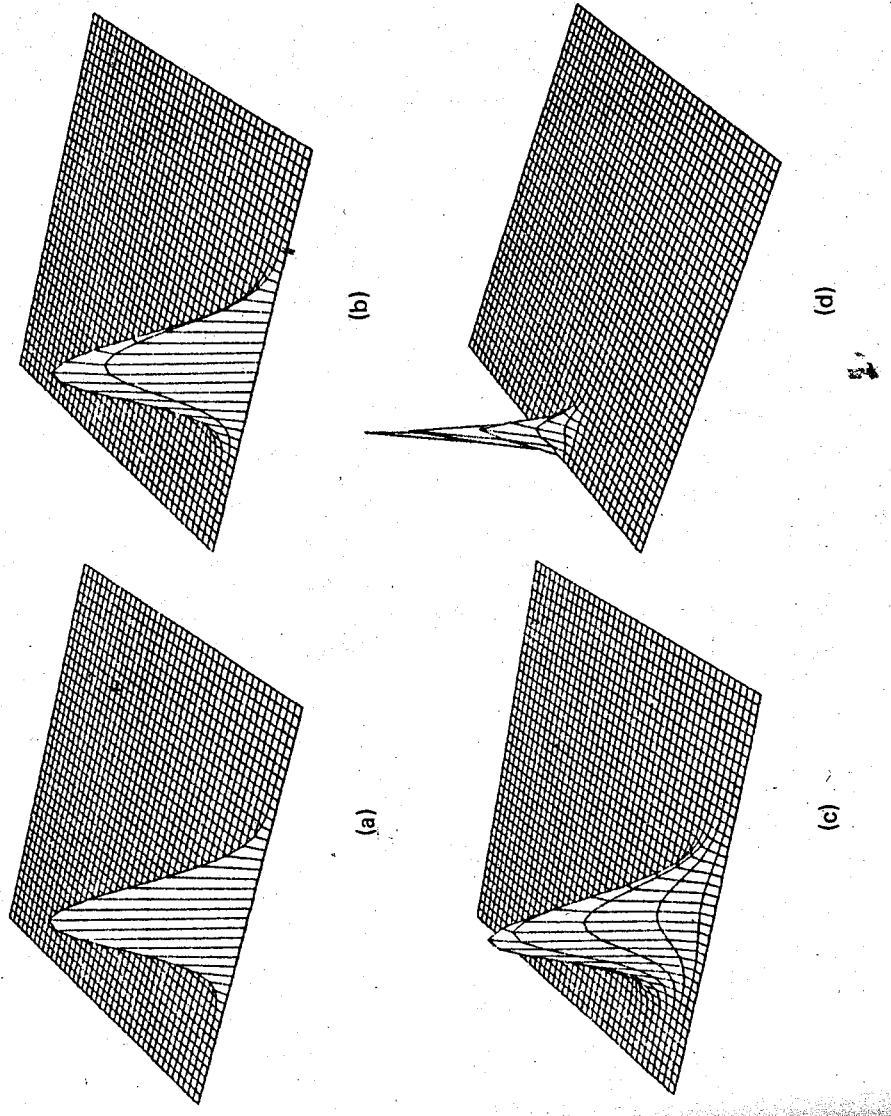


Fig. 6. The product $I(\Delta, K, x, y)g_f(q, x, y)$ for $N = 40, q = 2, u = 2$, and
 (a) $e^\Delta = 10$ with $AM = 1.10 \times 10^{1.10}$,
 (b) $e^\Delta = 2$ with $AM = 1.24 \times 10^{4.0}$,
 (c) $e^\Delta = 0.5$ with $AM = 5.97 \times 10^{2.6}$,
 (d) $e^\Delta = 0.01$ with $AM = 2^{2.0} = 1.05 \times 10^6$.

$I(\Delta, K, x, y) g_f(q, x, y)$.

In the very large N limit and $T > 0$, the free energy per site $f(F, q, \Delta, k)$, the average value of x , \bar{x} , and the average value of y , \bar{y} , for the one-dimensional SDQPM are given respectively by⁸

$$f(G, q, \Delta, K) = \frac{1}{2} \ln [q + e^{\Delta} (e^K + q - 1)^2], \quad (5)$$

$$\bar{x} = \frac{(e^K + q - 1)^2}{(e^K + q - 1)^2 + qe^{-\Delta}}, \quad (6)$$

$$\bar{y} = \frac{2(e^K - 1)(e^K + q - 1)}{(e^K + q - 1)^2 + qe^{-\Delta}}. \quad (7)$$

In the x - y plane, let (x_m, y_m) be the position of the peak for the product $I(\Delta, K, x, y) g_f(q, x, y)$. It has been proposed and then verified by Hu⁸ that x_m , y_m , and f_m approach respectively to x , y , and $f(G, q, \Delta, K)$ in the thermodynamic limit, where

$$f_m = \frac{1}{N} \ln [(\Delta, K, x_m, y_m) g_f(q, x_m, y_m)]. \quad (8)$$

In Fig. 7 we plot x_m , y_m , and f_m as a function of N . Figure 7 shows that x_m and y_m approach x and y very quickly.

This work was supported by the National Science Council of the Republic of China on Taiwan.

References

1. C. -K. Hu, *Physica* 119A, 609(1983). See page 613 in this reference.
2. C. -K. Hu, *Phys. Rev. B* 29, 5103(1984).
3. C. -K. Hu, *Phys. Rev. B* 29, 5109(1984).
4. (a) C. -K. Hu, *Çhin. J. Phys. (Taipei)* 22 (1), 1(1984); (b) 22 (4), 1(1984).
5. C. -K. Hu, *Chin. J. Phys. (Taipei)* 23 (1), 47 (1985).
6. C. -K. Hu, *Phys. Rev. B* 32, 7325(1985).
7. C. -K. Hu, *J. Phys. A* 19, 3067(1986).
8. C. -K. Hu, *Phys. Rev. B* 34, 6280(1986).

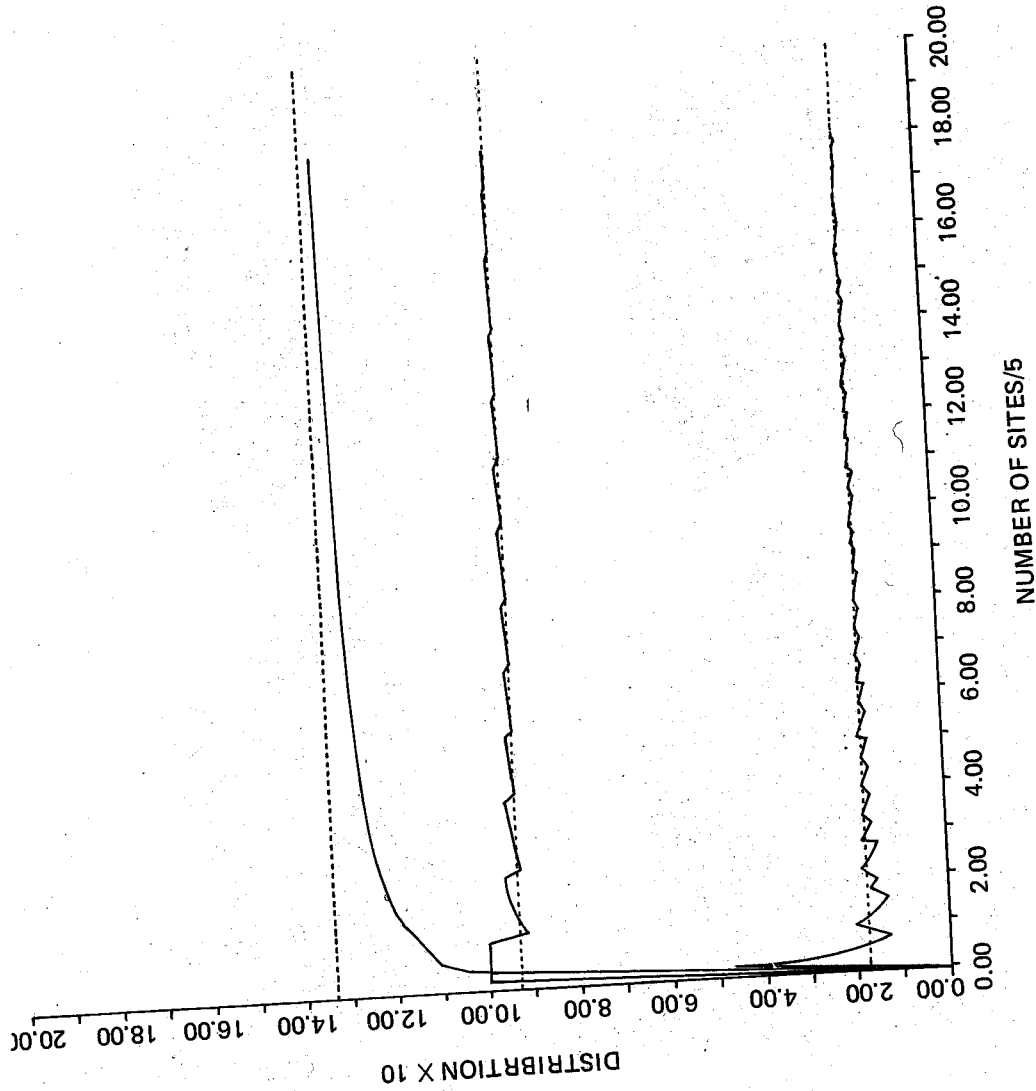


Fig. 7. The Solid curves from up to down positions represent respectively f_m , $\frac{1}{2}(x_m + 1)$, and $\frac{1}{2}y_m$ for $e^{\Delta}=2$, $u=0.5$ and $q=2$. The dotted lines from up to down positions represent respectively the corresponding f , $\frac{1}{2}(\bar{x} + \frac{1}{2})$, and $\frac{1}{2}\bar{y}$.

9. C. -K. Hu, Ann. Rep. Inst. Phys. Acad. Sin. (Taiwan) 16, 105(1986).
10. C. -K. Hu, J. Phys. A 16, L321 (1983).
11. C. -K. Hu, Annu. Rep. Inst. Phys. Acad. Sin. (Taiwan) 14, 7-12 (1984).
12. C. -K. Hu, in Proceedings of the 1986 Summer School on Statistical Mechanics, Taipei, edited by C. -K. HU (Inst. of Phys., Academia Sinica and Phys. Soc. of the R. O. C., Taipei, 1987) pp. 91-117.
13. C. -K. Hu, The History of Science Newsletter (Taipei) Suppl. Vol. 5, pp. 80-101 (1986) (in Chinese).
This paper gives a historical review of this and related developments.
14. See Also A. Coniglio and W. Klein, J. Phys. A 13, 2775 (1980); A. Coniglio, F. di Liberto, and G. Monroy, J. Phys. A 14, 3017(1981); G. F. Tuthill and W. Klein, J. Phys. A 15, L 377(1982); A. Coniglio and F. Peruggi, J. Phys. A 15, 1873(1982); M. Sweeny, Phys. Rev. B 27, 4445 (1983); M. Kaufman and D. Andelman, Phys. Rev. B 29, 4010(1984); T. A. Larsson, J. Phys. A. 19, 2383(1986).

COMMENT ON 'NONUNIVERSAL CRITICAL DYNAMICS IN MONTE CARLO SIMULATIONS'

Chin-Kun Hu

Institute of Physics, Academia Sinica
†Taipei, Taiwan 11529
R.O.C.

Abstract

It is pointed out that the clusters simulated by Swendsen and Wang are not the same as the clusters defined by Fisher and a simple method may be used to obtain the subgraph expansions for the partition functions of the Ising-like spin models.

Based on the subgraph expansion for the partition function of a q-state Potts model (QPM)¹, recently Swendsen and Wang² proposed a new Monte Carlo simulation method which violates dynamic universality at second-order phase transitions, producing unusually small values of the dynamic critical exponent. They referred to the percolation clusters produced in Sweeny's³ and their² Monte Carlo simulations as "Fisher droplet", and in the same sentence cited papers written by Fisher,⁴ Hu,⁵ Coniglio, Stanley and Klein.⁶ Although the clusters simulated by Sweeny,³ Swendsen and Wang² are the same as the clusters discussed by Hu,^{5,7} they are different⁵ from the clusters defined by Fisher,^{4,8} Coniglio, Stanley, and Klein.⁶ It has been found that the clusters defined by Fisher⁸ do not have the correct critical exponents^{9a} and Fisher's equation for the cluster-size distribution does not consistent with Monte Carlo data.^{9b} The terminology "Fisher droplet" has the danger of producing the misconception that the clusters defined by Fisher^{4,8} are the same as the clusters simulated by Sweeny,³ Swendsen and Wang,² although Fisher made the first (but unsuccessful) attempt to relate the "clusters" with critical phenomena.

To extend their simulation method to other systems, Swendsen and Wang² have pointed out that Kasteleyn and Fortuin's subgraph expansion method may be extended. However, the subgraph expansion method¹⁰ used by Hu⁵ may be more easily extended to other systems.¹¹⁻¹⁵ For example, the latter has been extended to obtain the percolation or cluster representations of a lattice model

of hydrogen-bonding,¹¹ a lattice model of sol-gel phase transitions,¹² an Ising model with multispin interactions,¹⁴ and an Ising model with antiferromagnetic interactions.¹⁵

Despite above comments, Swendsen and Wang's simulation method alone is

an important contribution to the numerical experiment of critical phenomena.

This work was supported by the National Science Council of the Republic of China (Taiwan).

References

1. P. W. Kasteleyn and C. M. Fortuin, *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.* **26s**, 11 (1969);
C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, *Physica (Utrecht)* **57**, 536 (1972).
2. R. H. Swendsen and J. -S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).
3. M. Sweeny, *Phys. Rev. B*, **27**, 4445 (1983).
4. M. E. Fisher, *Physics*, **3**, 255 (1967).
5. C. -K. Hu, *Phys. Rev. B* **29**, 5103, 5109 (1984).
6. A. Coniglio, H. E. Stanley, and W. Klein, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 518 (1979);
A. Coniglio and W. Klein, *J. Phys. A* **13**, 2775 (1980).
7. Hu also gave a brief discussion of the connection between the percolation and the Ising model on page 613 of C. -K. Hu, *Physics* **119A**, 609-614 (1983).
See also M. Kaufman and D. Andelman, *Phys. Rev. B* **29**, 4010 (1984) and T. A. Larsson, *J. Phys. A* **19**, 2383 (1986).
8. The spin version of Fisher's model has been given in M. E. Fisher, *J. Appl. Phys.* **38**, 981 (1967). See page 984 of this reference for Fisher's definition of clusters for the spin model.
9. a. M. F. Sykes and D. S. Gaunt, *J. Phys. A* **9**, 2131 (1976).
b. H. Müller-Krumbhaar, *Phys. Lett.* **48A**, 459 (1974).
10. The method has been applied to a zero-field QPM or a OPM with the external field coupled with one component of the Potts spins by R. J. Baxter in *J. Phys. C*, **6**, L445 (1973), S. B. Kelland in his unpublished Ph. D. thesis (1976), and F. Y. Wu in *J. Stat. Phys.* **18**, 115 (1978).
11. C. -K. Hu, *J. Phys.* **16**, L321 (1983).
12. C. -K. Hu, *Annu. Rep. Inst. Phys. Acad. Sin. (Taiwan)* **14**, 7-12 (1984).
13. C. -K. Hu, *Chin. J. Phys. (Taipei)* **22** (1), 1-12 and 22(4), 1-20 (1984); *Phys. Rev. B* **32**, 7325 (1985).
14. C. -K. Hu, *Chin. J. Phys.* **23** (1), 47 (1985).
15. C. -K. Hu, in Proceedings of the 1986 Summer School on Statistical Me-

THE STRUCTURE OF ^{154}Gd VIA THE β -DECAY OF ^{154}Eu NUCLEUS

L. L. Kiang, * G. C. Kiang, P. K. Teng, G. C. Jon, T. H. Yuan and Y. M. Hsu*
李 琳 江紀威 鄧炳坤 仲國慶 袁天竝 徐一民

Institute of Physics
Academia Sinica
Taipei, Taiwan
Republic of China

Department of Physics
National Tsing-Hua University Hsin-chu, Taiwan
Republic of China

Abstract

The excited states of ^{154}Gd populated by the β -decay of ^{154}Eu ($T_{1/2} = 8.5\text{y}$) have been investigated. The singles gamma-ray spectra have been obtained with a HPGe(105 cm^3)-NaI(Tl) (22.9 $\text{cm} \times 25.4$ cm annular) Compton suppression spectrometer. A total of 86 γ -transitions were observed in the experiments; their relative intensities and energies have been precisely measured.

The — directional correlation functions gated at 123 keV and 248 keV have been measured at $\theta = 90^\circ$ to $\theta = 180^\circ$, $\Delta\theta = 15^\circ$ step, with a HPGe(105 cm^3)-NaI(Tl) (7.6 $\text{cm} \times 7.6$ cm) coincidence circuit.

Ten directional correlation functions of the cascade γ -transitions have been analyzed. The deduced mixing ratios of multipolarities are presented.

The interacting boson model calculations by means of the NPBOS code of Otsuka are used for discussion. The energy levels and relative values of $B(E2)$ are calculated by using the boson surface-delta interaction (BSDI).

I. Introduction

Observations indicate that the excitation of the nuclei in the rare earth region have both of the vibrational and rotational character. For the nuclei with neutron number $N \leq 88$, the nuclear shape tends toward spherical, resulting in a vibrational character. At neutron number $N > 90$, static deformation sets in and the character

*This work is supported by National Science Council, R.O.C. under the Grant NSC75-M007a-11.

of these nuclei goes to rotational. The $Z = 64$, $N = 90$ even-even nucleus of ^{154}Gd is situated at the critical position between the deformed and the spherical nuclei [1-3]. It is believed that the study on the ^{154}Gd nucleus can provide sensitive tests of the applicability of the nuclear models in this region [4]. In the past years, very intensive studies on the ^{154}Gd nucleus already have been made, for example, the experimental studies of gamma-transitions by radioactivity, Coulomb excitation, charged particle induced nuclear reactions as well as the inelastic electron scattering [1-4]. Also there have extensive theoretical analyses for this nucleus, such as the band mixing model [5], the pairing-plus quadrupole model (PRO) [6], the dynamic deformation theory (DDT) [7], the interacting boson model (IBM) [8] and the IBM with boson surface-delta interaction (BSDI) [11, 12].

In this paper, we report the experimental studies on the gamma-transitions of ^{154}Gd populated by the gamma-decay of ^{154}Eu . A series measurements of singles gamma-spectra and γ - γ directional correlation functions have been made to check the gamma-transition energies and the well established decay scheme as well as the gamma-transition multipolarities. We also report the calculated energy levels and the reduced E2 transition probabilities B(E2) of this nucleus by the NPBOS code [20], and by the recently developed BSDI model for comparison and discussion.

II. Experimentals

2-1. Source Preparation

The ^{154}Gd sources were produced by the thermal neutron irradiation of enriched ^{153}Eu powder ($> 99.9\%$ ^{153}Eu) in the form of Eu_2O_3 at the Tsing-Hua reactor 1. The irradiation time was 8 min. In the neutron flux of 10^{12} neutron/cm²/s. In order to keep the source in point-like shape, 1 mg of the activated ^{154}Eu was put in the tip of a PVC tube with 1 mm inner diameter and sealed with wax. The source was allowed to decay for several months to let the 46 m. ^{154m}Eu or other short life impurities die off before measurements.

2-2. The Singles Gamma-ray Spectra

The singles gamma-ray spectra of ^{154}Eu were measured by a Compton suppression spectrometer. The main features of which include a 105 cm³ HPGe detector surrounded by a 6 cm thick 30 cm long annular NaI(Tl) crystal. The energy resolution of this system is about 3 keV for the 1332 keV ^{60}Co gamma-ray. In order to reduced the natural background, the measurements were carried out in a 3M x 4M x 2.5M shielding chamber [14]. The source was positioned at 15, 20 and

25 cm from the surface of the detector separately during the courses of measurements in order to identify the summing effect.

A CANBERRA CI-80 4096 multi-channel analyzer was used for data collecting and on-line display. Data were then transferred to a IBM PC for off-line analyses. The photopeak efficiency versus the gamma energies for the HPGe detector and the energy calibration have been measured previously in this laboratory [13].

2-3. The Coincidence Spectra and the Directional Correlation Measurements.

The gamma-gamma coincidence measurements were made with a conventional coincidence circuit. A 105 cm³ CANBERRA HPGe detector and a 7.6 cm x 7.6 cm NaI(Tl) crystal were used. The source-to-detector distance was kept to 15 cm for both of the two detectors. The signals of selected gamma-rays from the NaI(Tl) branch were in coincidence with those of HPGe branch to operate the time-to-pulse-height converter (TAC). Output from the TAC was then used to gate the linear signals of HPGe. Two coincidence spectra gated at 123.0 ± 20.0 keV and 248.0 ± 20.0 keV were measured.

The directional correlation measurements were carried out with the same system as mentioned above. The NaI(Tl) crystal was turnable around the source from $\theta = 90$ degree to $\theta = 180$ degree relative to the fixed HPGe detector. Ten correlation functions of 692.4 - 123.0 keV, 873.2 - 123.0 keV, 1004.8 - 123.0 keV, 1274.4 - 123.0 keV, 1596.3 - 123.0 keV, 444.4 - 248.0 keV, 625.2 - 248.0 keV, 756.9 - 248.0 keV, 892.4 - 248.0 keV and 1246.5 - 248.0 keV cascades were obtained.

In order to improve the accuracy, each run was measured three times. The measured data have been normalized and corrected by the known $4^+(2) 2^+(2) 0^+$ cascade transition in ^{60}Co for the geometrical errors.

III. Results

3-1. The Singles Spectra

Figure 1 shows the typical singles gamma-ray spectrum. In which more than 100 gamma-rays were observed. Some of them come from the impurities of the source. The gamma-ray energies were determined from a series of well-known gamma-rays in ^{133}Ba , ^{22}Na , ^{137}Cs , ^{54}Mn , ^{60}Co and some of the natural background (e.g. 1461 keV of ^{40}K). The energies, relative intensities of the gamma-rays extracted from the measured spectra together with the results obtained by Sharma et al. [3] and Riedinger et al. [15] are listed in Table 1. Most of the observed

gamma-peaks in the spectra were in agreement with the previous work [3, 15]. The decay scheme obtained from the analyses of the singles and coincidence spectra is shown in Fig. 2.

Figure 3 shows the typical HPGe-Nal (Tl) coincidence spectrum of ^{154}Gd gated at 248.0 ± 20.0 keV.

3-2. The $\gamma\text{-}\gamma$ directional Correlation Functions

The measured directional correlation functions of 692.4 – 123.0 keV, 873.2 – 123.0 keV, 1004.8 – 123.0 keV, 1274.4 – 123.0 keV, 1596.3 – 123.0 keV, 444.4 – 248.0 keV, 625.2 – 248.0 keV, 756.9 – 248.0 keV, 892.4 – 248.0 keV and 1246.5 – 248.0 keV cascade transitions are shown in Fig. 4. All of the data have been fitted to the angular correlation function,

$$W(\theta) = 1 + A_2 P_2(\cos\theta) + A_4 P_4(\cos\theta) \quad (1)$$

with least-square method. In which, P 's are the Legendre polynomials, and the values of the fitted directional correlation coefficients A_2 and A_4 for each said cascade transition are listed in Table 2a and 2b.

IV. Analysis and Discussion

The singles gamma-ray spectra were analyzed by a computer code SPAN-2 [17]. For each separated photopeak, a Gaussian plus a quadric background shape was fitted. Areas under various peaks were obtained simply summing up the counts and were corrected by the efficiencies of the spectrometer to obtain the relative intensities. The present gamma-ray intensities have been listed in Table 1. Except the gamma-rays come from the impurities, a total of 86 gamma-transitions were observed. Most of them are in agreement with those of Sharma et al. [3]. Together with the two coincidence spectra gated at 123.0 ± 20.0 keV and 248.0 ± 20.0 keV, a decay scheme of ^{154}Gd is proposed as shown in Fig. 2.

The $\gamma\text{-}\gamma$ directional correlation function coefficients A_2 and A_4 are evaluated from the least square fitting with the measured data and eq. (1). The attenuation coefficients G_λ , $\lambda = 2, 4$ in Table 2a and 2b, are obtained separately from the analyses of the known $4^+(248.0)2^+(123.0)0^+$ and $2^+(873.2)2^+(123.0)0^+$ cascades respectively which are known mixing ratios. The G_2 is 0.5 and G_4 is 0.435 in present work.

The multipole mixing ratio of each gamma-transition is defined as

$\delta = \langle I_f \| L' \| I_i \rangle / \langle I_f \| L \| I_i \rangle$, where $L' = L+1$, L is the angular momentum in the transition. The mixing ratio of the gamma-transitions may be obtained from the experimental values of A_2 , A_4 by the χ^2 -distribution method with the F-function of Ferentz and Rosenzweig [18]. In Table 3, we tabulated the δ values of the gamma-transitions, together with those of Girit et al. [10] and Gupta et al. [19]. In comparison with those values, it is found that there are slightly difference among them. However, the tendency is in general the same. The theoretical reduced mixing ratio,

$$\Delta(E2/M1) = \langle x I_f \| T(E2) \| x' I_i \rangle / \langle x I_f \| T(M1) \| x' I_i \rangle,$$

is related to experimental mixing ratio δ ($E2/M1$) by

$$\delta(E2/M1) = 0.832E \gamma \Delta(E2/M1),$$

where E_γ is in MeV and $\Delta(E2/M1)$ is in eb/μ_N . Following the formulation given by Arima and Iachello [8], $\Delta(E2/M1) = A f(I_i, I_f)$, where A is a constant and

$$f(I_i, I_f) = \begin{cases} 10[(2I_f - 1)(2I_f + 3)]^{-1/2} & I_i = I_f \\ 10[3I_f(I_f + 2)]^{-1/2} & I_i = I_f + 1 \\ 10[3(I_f - 1)(I_f + 1)]^{-1/2} & I_i = I_f - 1 \end{cases}$$

Girit et al. normalized their data with 1.004 MeV transition to obtain $A = 4.16 + 0.23 \text{ eb}/\mu_N$, and calculated the theoretical values of some gamma-transitions, except that of 963.5 keV, shown in Table 3. For the theoretical value of 963.5 keV we calculated as 5.2 ± 0.3 which is considerable close to the experimental's.

As mentioned in the introduction, the $N = 90$, $Z = 64$ ^{154}Gd nucleus exists at the edge of strong deformation. Hence, the study on the ^{154}Gd can provide sensitive tests of various nuclear models in this region. By setting the parameters of Q-Q interacting force $k = -0.07$, $N_\pi = 7$, $N_\nu = 4$ and $\alpha = 0.53$ we calculated the energy levels of ^{154}Gd as well as the $B(E2)$ for various E2 transitions in this nucleus by IBM-2 [20]. Only with s -, and d -boson, our calculations give pretty good results. Recently, Castanos et al. [22], and Lipas et al. [21] also did the IBM calculation for ^{154}Gd , they put one more g-boson in other than s - and d -boson; their results are very nice.

Extended the IBM, Chen et al. [11, 12] proposed BSDI model which includes the degree of freedom other than those of s-, d-boson such as g-boson or any other sort. By a set of dispersion equation [23], BSDI provides a straight method to calculate the reduced transition probabilities and the energy spectra without the much difficulties even increase the degree of freedom in the boson space. At present moment, several nuclei of more than two-boson as well as the ^{154}Gd nucleus have been calculated with very satisfied results. The details of the calculations will be published latter on.

The results of IBM-2 and BSDI calculations as well as those of experimentals are shown in Fig. 5 and Table 4.

References

1. N. Rud et al., Nuclear Phys. A167 (1971) 401.
2. R. Meyer, Phys. Rev. 170 (1968) 1089.
3. A. K. Sharma, et al., J. of Phys. Soc. of Japan 48 (1980) 1407.
4. F. W. Hersman, et al., Phys. Rev. C33 (1986) 1905.
5. G. E. Keller and E. F. Zganjar, Nucl. Phys. A153 (1970) 647.
6. K. Kumar and M. Baraneer, Nucl. Phys. A122 (1968) 273.
7. K. Kumar et al., Phys. Rev. C76 (1977) 1235.
8. A. Arima and F. Iachello, Ann. Phys. 99 (1976) 253. 111 (1978) 201. 123 (1979) 468.
9. For example, D. S. Chuu, Phys. Rev. C30 (1984) 1300.
10. C. Girit et al., J. Phys. G: Nucl. Phys. 9 (1983) 797.
11. H. T. Chen et al., J. Phys. G: Nucl. Phys. 12 (1986) L217.
12. H. T. Chen et al., Ann. Rept. Inst. of Phys., Academia Sinica, ROC. Vol. 16 (1986) pp. 81.
13. G. C. Jon et al., Ann. Rept. Inst. of Phys., Academia Sinica, ROC. Vol. 14 (1984) 17.
14. G. C. Kiang et al., Ann. Rept. Inst. of Phys., Academia Sinica ROC. Vol. 14 (1984) 277.
15. L. L. Riedinger et al., Phys. Rev. C2 (1970) 2358.
16. F. T. Avignone III and G. D. Frey, Rev. of Sci. Instr. 39 (1968) 1941.
17. G. C. Kiang et al., Ann. Rept. Inst. of Phys., Academia Sinica Vol. 5 (1975) pp. 65.
18. M. Ferentz and N. Rosenzweig, in "Alpha-, Beta- and Gamma-ray Spectroscopy" ed. by K. Siegbahn, (North Holland), 1965 pp. 1687.

19. J. B. Gupta et al., Z. Phys. A282 (1977) 179.
20. T. Otsuka and N. Yoshida, JAERI-M85-094, Japan Atomic Energy Research Institute.
21. P. O. Lipas et al., Physica Scripta 27 (1983) 8.
22. O. Castanos et al., Nucl. Phys. A379 (1982) 61.
23. R. W. Richardson, J. of Math. 9 (1968) 1327.

Table 1. (Continued)

No.	Relative Intensity	
	Present work	Sharma et al.
22.	—	0.01
23.	312.2	312.3
24.	315.3	0.02
25.	322.0	0.168
26.	329.5	0.023
27.	344.05	5.2
28.	—	346.7
29.	366.4	—
30.	370.7	0.224
31.	380.1	0.007
32.	397.1	0.006
33.	401.3	0.034
34.	—	0.58
35.	411.1	—
36.	444.4	444.54
37.	467.9	468.6
38.	478.3	478.2
39.	483.7	483.7
40.	506.7	—
41.	510.4	511.0
42.	518.0	518.0
43.	524.4	—
44.	532.8	532.9
45.	557.6	557.6
46.	564.3	—
47.	569.0	569.0
48.	582.0	582.04
49.	591.7	591.8

Table 1. The relative intensities of the gamma-rays observed in ^{154}Gd nucleus

No.	Relative Intensity	
	Present work	Sharma et al.
1.	58.0	—
2.	78.5	—
3.	86.6	—
4.	123.06	122.14
5.	131.57	131.5
6.	134.8	134.9
7.	145.07	146.0
8.	165.7	165.4
9.	180.7	180.7
10.	184.0	184.0
11.	188.2	188.3
12.	197.0	196.4
13.	232.0	232.0
14.	238.7	238.0
15.	247.94	247.92
16.	259.6	—
17.	267.6	267.6
18.	269.8	269.9
19.	295.7	—
20.	301.2	301.3
21.	305.1	305.2

Table 1. (Continued)

No.	E_r (KeV)		Relative Intensity		
	Present work	Sharma et al.	Present work	Sharma et al.	
79.	996.3	996.34	31.0	30.3 ± 0.65	29.4 ± 1.5
80.	1004.8	1004.74	54.84	51.4 ± 103	50.6 ± 2.5
81.	1046.4	1047.2	0.11	0.23 ± 0.10	—
82.	1052.6	—	0.054	—	(e)
83.	1085.7	—	2.46	—	(c)
84.	1112.0	—	2.7	—	(c)
85.	—	1118.3	—	0.37 ± 0.1	0.3 ± 0.08
86.	1128.4	1128.6	0.884	0.94 ± 0.08	0.79 ± 0.09
87.	1140.9	1140.8	0.75	0.73 ± 0.08	0.69 ± 0.10
88.	1160.1	1160.3	0.095	0.13 ± 0.10	0.10 ± 0.03
89.	1173.	—	60.	—	^{60}Co
90.	1187.	1188.2	0.31	0.29 ± 0.08	0.23 ± 0.05
91.	1212.9	—	—	—	—
93.	1230.4	—	—	—	(c)
94.	1241.6	1241.5	0.45	0.4 ± 0.05	0.3 ± 0.07
95.	1246.5	1246.15	2.51	2.48 ± 0.1	2.4 ± 0.22
96.	1274.4	1274.5	100.	100.	100.
97.	1290.0	1290.0	0.064	0.086 ± 0.002	0.086 ± 0.026
98.	1295.5	1295.2	0.061	0.026 ± 0.003	—
99.	1299.3	—	—	—	—
100.	1316.8	1316.7	< 0.001	0.053 ± 0.01	0.074 ± 0.029
101.	1332.	—	—	—	^{60}Co
102.	1400.0	—	0.012	—	—
103.	1408.06	1408.3	—	0.082 ± 0.01	—
104.	—	1414.4	—	0.004	—
105.	1418.5	1418.2	0.02	0.039	0.027 ± 0.016
106.	1448.8	—	0.019	—	^{115}Cd
107.	1461.6	—	1.3	—	(c)

Table 1. (Continued)

No.	E_r (KeV)		Relative Intensity		
	Present work	Sharma et al.	Present work	Sharma et al.	
50.	—	598.35	—	0.026	—
51.	602.8	602.8	0.15	0.1	(c)
52.	608.6	—	0.026	—	—
53.	613.3	613.4	0.27	0.25 ± 0.08	0.22 ± 0.0
54.	625.2	625.3	0.92	0.84 ± 0.05	0.89 ± 0.12
55.	641.24	—	0.04	—	—
56.	649.4	649.6	0.30	0.25 ± 0.08	0.28 ± 0.11
57.	664.7	664.6	0.030	0.072	—
58.	669.0	669.0	0.031	0.042	—
59.	676.6	676.6	0.53	0.52 ± 0.1	0.43 ± 0.11
60.	692.4	692.5	6.2	4.92 ± 0.1	4.97 ± 0.30
61.	715.8	715.9	0.27	0.61 ± 0.08	0.32 ± 0.13
62.	723.0	723.38	70.2	55.33 ± 1.06	60.1 ± 0.3
63.	756.9	756.8	14.6	12.62 ± 0.24	12.9 ± 0.6
64.	764.7	—	3.14	—	—
65.	778.9	—	—	—	(c)
66.	800.5	—	0.09	—	—
67.	815.6	815.53	1.63	1.47 ± 0.1	1.38 ± 0.18
68.	—	830.4	—	0.02	—
69.	845.5	845.45	1.39	1.58 ± 0.10	1.60 ± 0.2
70.	850.6	850.7	0.68	0.67 ± 0.08	0.60 ± 0.13
71.	873.2	873.28	35.7	34.47 ± 0.7	34.8 ± 1.7
72.	880.4	880.7	0.16	0.28 ± 0.18	0.20 ± 0.08
73.	892.4	892.78	1.1	1.43 ± 0.03	—
74.	904.1	904.11	2.74	2.49 ± 0.05	2.42 ± 0.07
75.	924.5	924.5	0.062	0.18 ± 0.10	0.19 ± 0.1
76.	963.5	—	—	—	—
77.	981.3	—	0.025	—	(c)

Table 2A. Gamma-gamma directional correlation coefficients for transitions in coincidence with the 123.1 keV $2^- \rightarrow 0$ ground-state transition.

Coincident gamma ray (keV)	Transition		$G_2 a_2$	$G_4 a_4$	Unperturbed	
	I_i	I_f			a_2	a_4
248.0	4^+	2^+	0.051*	0.007	0.102	0.016
692.4	2^+	2^+	-0.082	0.141	-0.165	0.325
873.2	2^+	2^+	0.01	0.140*	0.02	0.322
1004.8	3^+	2^+	-0.151	-0.026	-0.302	-0.060
1274.4	2^-	2^+	0.120	-0.003	0.240	-0.007
1596.5	2^-	2^+	0.0104	-0.0104	0.250*	-0.0239

a) G is the attenuation coefficients
b) * used to evaluate G

Table 2B. Gamma-gamma directional correlation coefficients for transitions in coincidence with the 248.0 keV $4^- \rightarrow 2^-$ states transition.

Coincident gamma ray (keV)	Transition		$G_2 a_2$	$G_4 a_4$	Unperturbed	
	I_i	I_f			a_2	a_4
444.4	2^+	4^+	0.115	0.03	0.230	0.070
625.5	2^+	4^+	0.10	0.043	0.20	0.100
756.3	3^+	4^+	0.061	-0.078	0.122	-0.173
893.2	4^+	4^+	-0.007	0.07	-0.014	0.161
1246.5	3^-	4^+	-0.081	-0.0043	-0.162	-0.100

Table 1. (Continued)

No.	(KeV)	Relative Intensity			
		Present work	Sharma et al.	Sharma et al.	Riedinger et al.
108.	1493.6	1.7	1.91 ± 0.08	1.88 ± 0.09	
109.	1509.1	0.009	—	—	
110.	1527.4	—	—	—	
111.	—	1531.4	0.018 ± 0.005	0.009 ± 0.005	
112.	1537.8	0.04	0.15 ± 0.01	0.15 ± 0.02	
113.	1596.3	4.4	4.81 ± 0.1	5.15 ± 0.26	
114.	1673.8	—	0.006 ± 0.001	—	

(a): ^{155}Eu ; (b): ^{152}Sm ; (c): ^{152}Eu ; (d): ^{110}Ag ; (e): ^{117}Cd
(f): ^{111}Ag

Table 3. A summary of the results for the multipole mixing ratios in ^{154}Gd

Transition Energy (keV)	Spin sequence $i_j - i_f$	Multipole mixing ratio				polarity
		Present	Girit	Gupta	Theor.	
444.4	$2^+ - 4^+$	0.05 ± 0.08	0.01 ± 0.08	0.01 ± 0.02		E2+M3
625.5	$2^+ - 4^+$	0.00 ± 0.04	0.02 ± 0.08	0.04 ± 0.03		E2+M3
692.4	$2^+ - 2^+$	7.6 ± 0.5	7.4 ± 10.6	7.7 ± 0.3	5.2 ± 0.3	M1+E2
			-3.0			
756.3	$3^+ - 4^+$	-7.6 ± 0.4	-9.0 ± 1.5	-6.1 ± 0.2	-3.9 ± 0.2	M1+E2
			-1.1			
873.2	$2^+ - 2^+$	-8.1 ± 0.5	-9.7 ± 1.0	-9.5 ± 0.8	-6.6 ± 0.4	M1+E2
				-0.6		
893.2	$4^+ - 4^+$	-3.8 ± 0.3		-4.0 ± 0.4	-3.5 ± 0.2	M1+E2
				-0.3		
1004.8	$3^+ - 2^+$	-8.7 ± 0.4	-7.2 ± 0.5	-7.8 ± 0.2	-7.1 ± 0.4	M1+E2
				-0.8		
1246.5	$3^- - 4^+$	-0.02 ± 0.03		0.00 ± 0.01		E1+M2
1274.4	$3^- - 2^+$	0.02 ± 0.03	0.02 ± 0.02			E1+M2
1596.5	$2^- - 2^+$	0.00 ± 0.01	0.01 ± 0.01	0.01 ± 0.01	0.01 ± 0.01	E1+M2

Table 4. B(E2) values obtained by different models and compared with the experimental results

$i_j - i_f$	E (MeV)	expt.	B(E2)			
			DDT Kumer ⁺	IBA van Isacker*	BSDI Present Work	theo.
$2_g - 0_g$	0.123	77.3(15)	77.2	77.3	83	
$4_g - 2_g$	0.248	117.8(39)	109.8	109.8	94	
$6_g - 4_g$	0.347	138.2(2)	134.4	119.0	97	
$8_g - 6_g$	0.493	152.6(83)	-	120.6	75.2	
$0\beta - 2_g$	0.558	25.8(35)	22	13.6	1.2	
$2\beta - 2_g$	0.692	4.0(2)	3.3	2.54	3.1	
$2\beta - 4_g$	0.445	11.9(8)	8.66	8.73	8.1	
$4\beta - 2_g$	0.925	0.35(8)	0.6	1.64	0.1	
$4\beta - 4_g$	0.677	3.8(6)	8.57	8.94	1.9	
$4\beta - 6_g$	0.995	0.27(10)	0.09	1.26	2.1	
$6\beta - 4_g$	0.648	3.3(10)	3.52	0.86	1.1	
$2\beta - 0_g$	0.135	49(16)	-	51	29	
$4\beta - 2_g$	0.232	122(35)	-	78	39	
$6\beta - 4_g$	0.318	111(43)	-	90	27	

⁺K. Kumer et al., Aust. J. Phys. 32 (1979) 307
^{*}P. van Isacker et al., Nucl. Phys. 380 (1982) 383

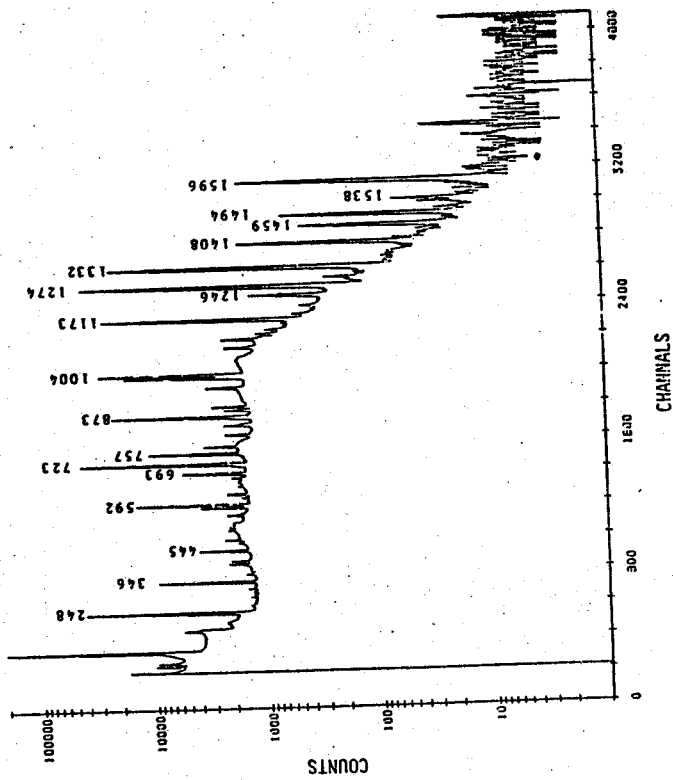


Figure 1. The typical gamma-ray spectrum of ^{154}Gd nucleus.

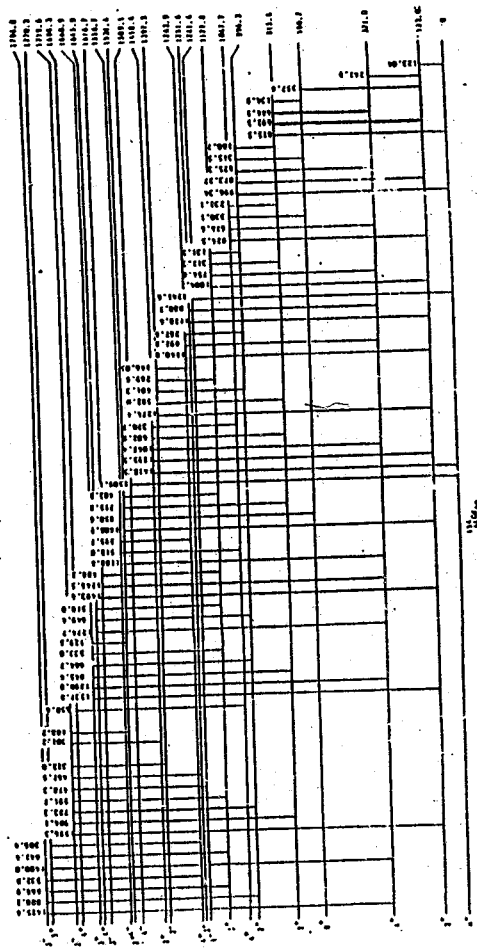


Figure 2. The Decay scheme of ^{154}Gd deduced from the gamma-ray singles and the coincidence spectra.

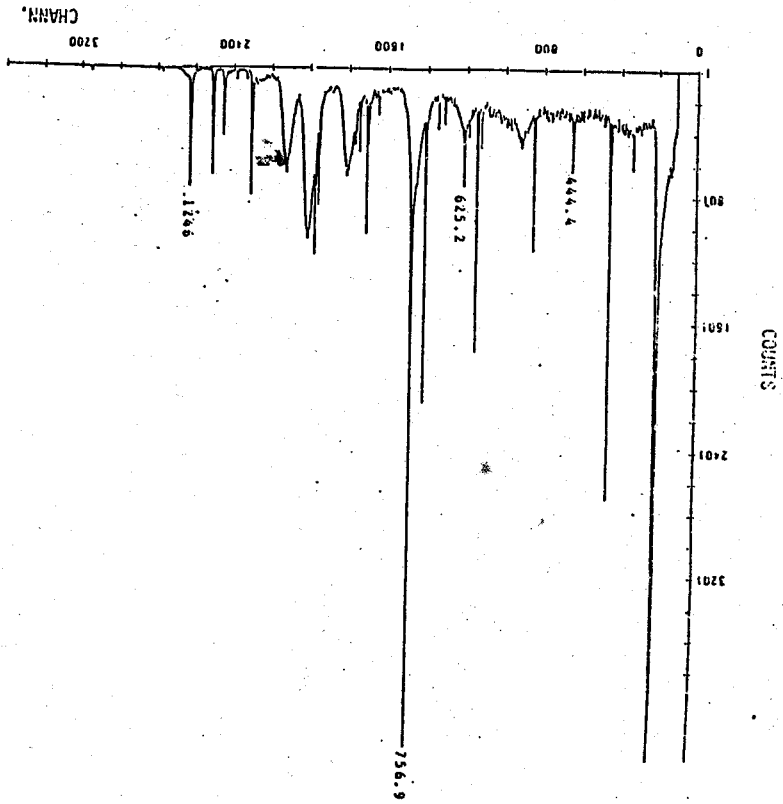
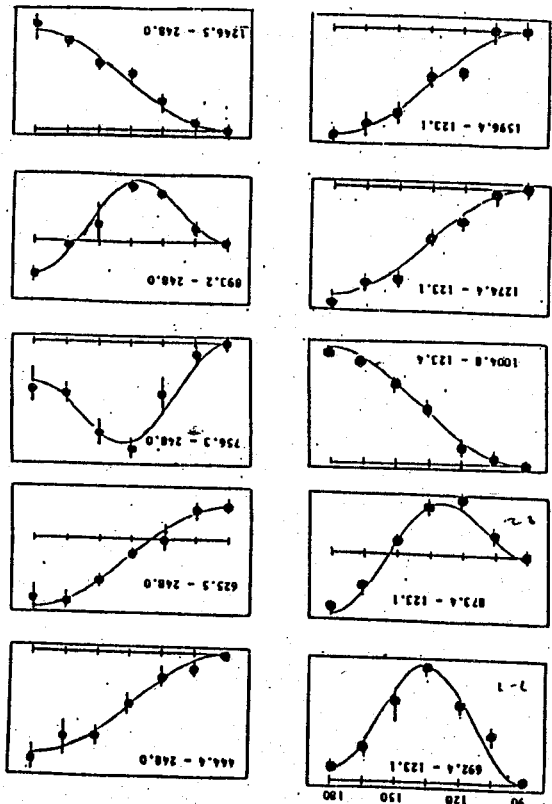


Figure 3. The coincidence spectrum of ^{154}Gd gated at 123.0 ± 20.0 KeV.

Figure 4. The measured directional correlation functions for various cascades transition in ^{154}Gd nucleus.



INTERSTITIAL DONOR IMPURITIES IN SILICON**

L. T. Ho

Institute of Physics
Academia Sinica

Taipei, Taiwan, Republic of China

When a foreign atom enters into a semiconductor crystal like silicon, it will occupy either a substitutional or an interstitial position. From the previous studies, it is now well established that most impurity atoms are substitutional, i.e. in a site normally occupied by a silicon atom. In this situation, since four electrons are needed in order to complete the tetrahedral covalent bonds with the four nearest neighbouring atoms of the host in a silicon lattice, group V elements P, As, Sb, Bi and group VI element S are able to become donors whereas group III elements B, Al, Ga, In and group II element Be turn out to be acceptors.⁽¹⁾

Of the impurities which are interstitial rather than substitutional in silicon, only a few cases have been known. Lithium and magnesium are group I and group II elements, respectively. When diffused into silicon, the n-type characteristic of the crystal and the donor behaviour of these two impurities indicate that they have to be interstitial.^(2, 3)

Sodium is another group I element besides lithium. When diffused into silicon, it has been shown from the electrical measurement that it behaves like a donor rather than an acceptor.⁽⁴⁾ This behaviour can only be understood if sodium is interstitial rather than substitutional. Recently, we have measured its excitation spectrum. The purpose of this paper is to report for the first time the excitation spectrum associated with sodium impurity in silicon. Combining with the experimental result from electrical measurements, all the evidence strongly supports that sodium is indeed an interstitial donor in silicon.

*Work supported in part by the National Science Council, Republic of China.

†Presented at the Twelfth International Conference on Infrared and Millimeter Waves, Dec. 14-18, 1987, Lake Buena Vista, Florida, U.S.A.

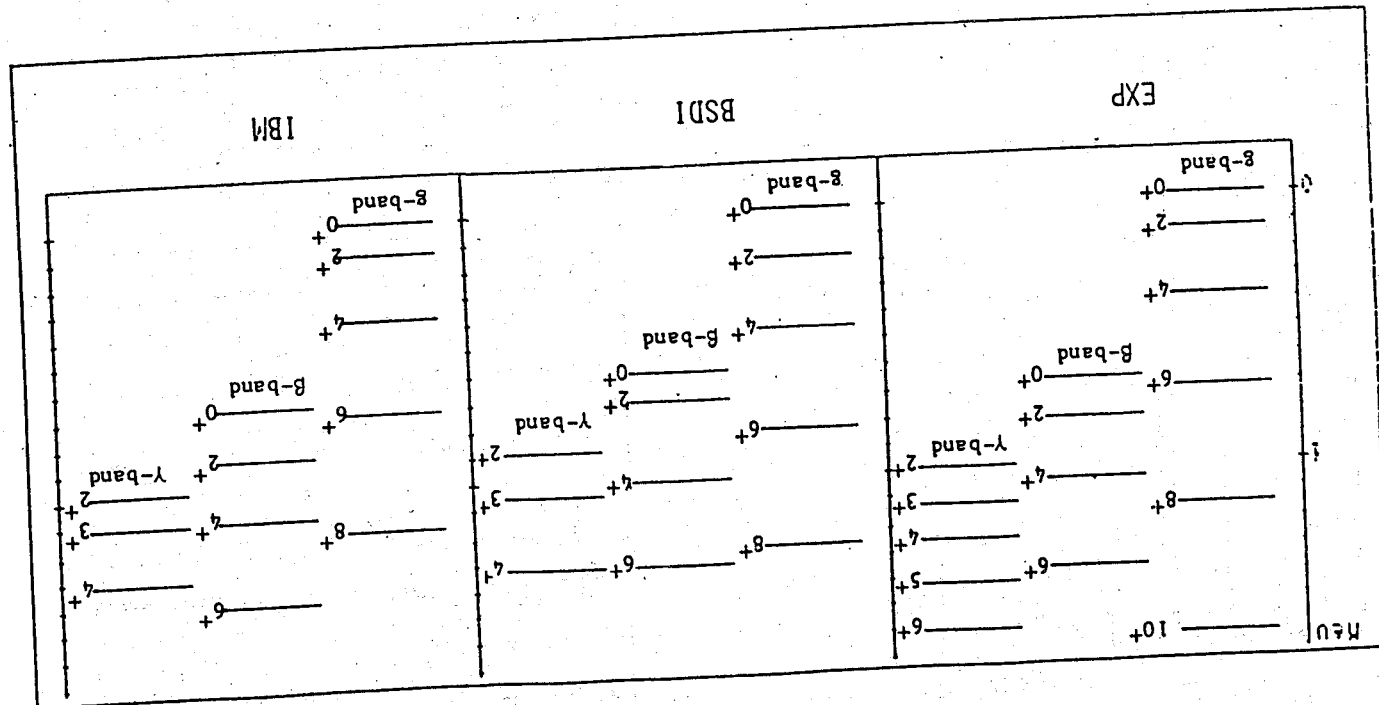


Figure 5. A comparison of the energy spectra obtained from IBM, BSDI calculations and experimental's.

5. C. Jagannath, Z. W. Grabowski and A. K. Ramdas, Phys. Rev. B23, 2082 (1981).
6. R. A. Faulkner, Phys. Rev. 184, 713 (1969).

Table 1 Spacings of Donor Excited States in Silicon (meV)

States	Na	As ⁽⁵⁾	Theory ⁽⁶⁾
2p _± - 2p ₀	5.11	5.10	5.11
3p ₀ - 2p _±	0.91	0.91	0.92
4p ₀ - 2p _±	3.08	3.09	* 3.07
3p _± - 2p _±	3.28	3.28	3.28
4p _± - 2p _±	4.20	4.21	4.21
4f _± - 2p _±	4.50	4.50	4.51
5p _± - 2p _±	4.93	4.94	4.96
6p _± - 2p _±	5.33		5.36

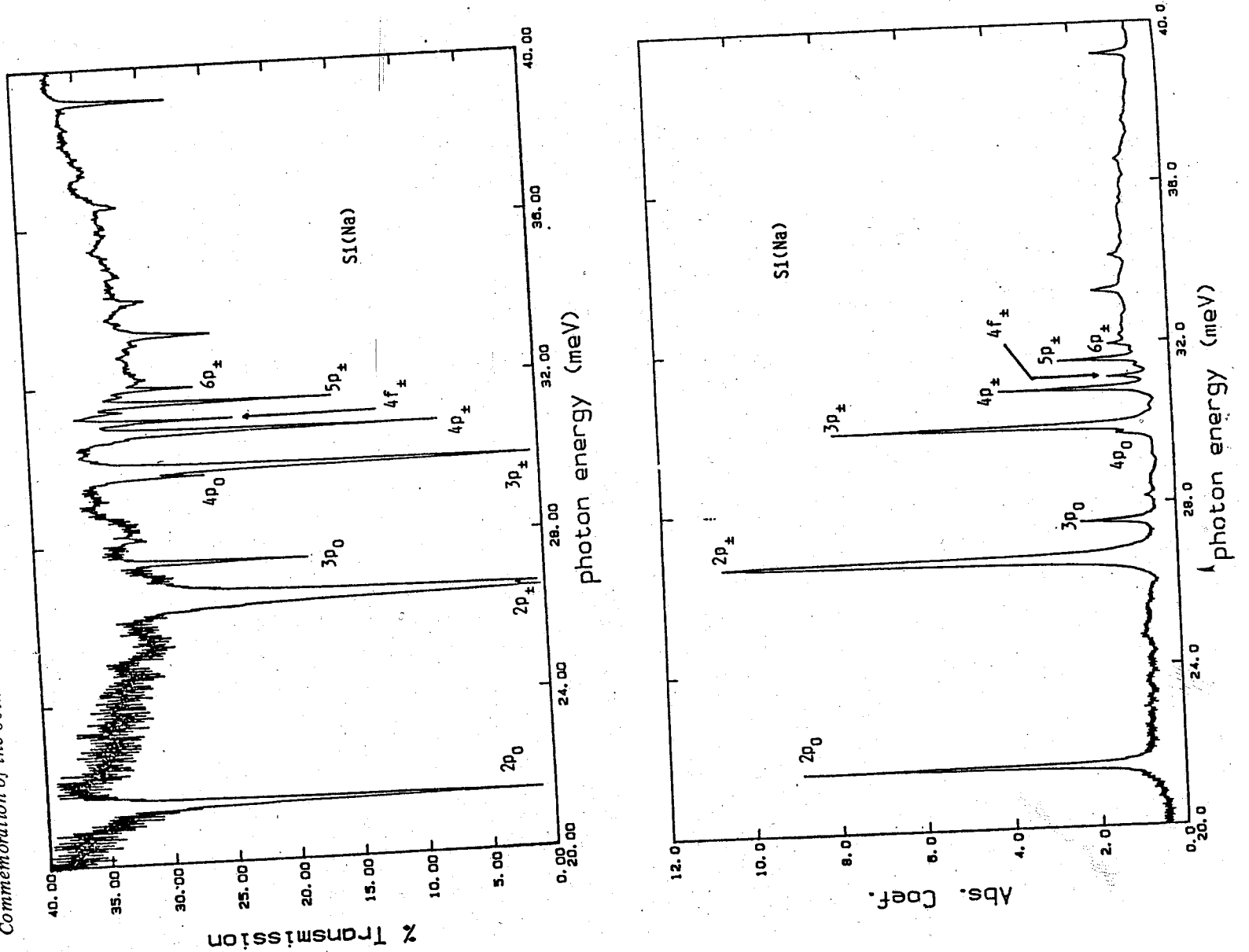
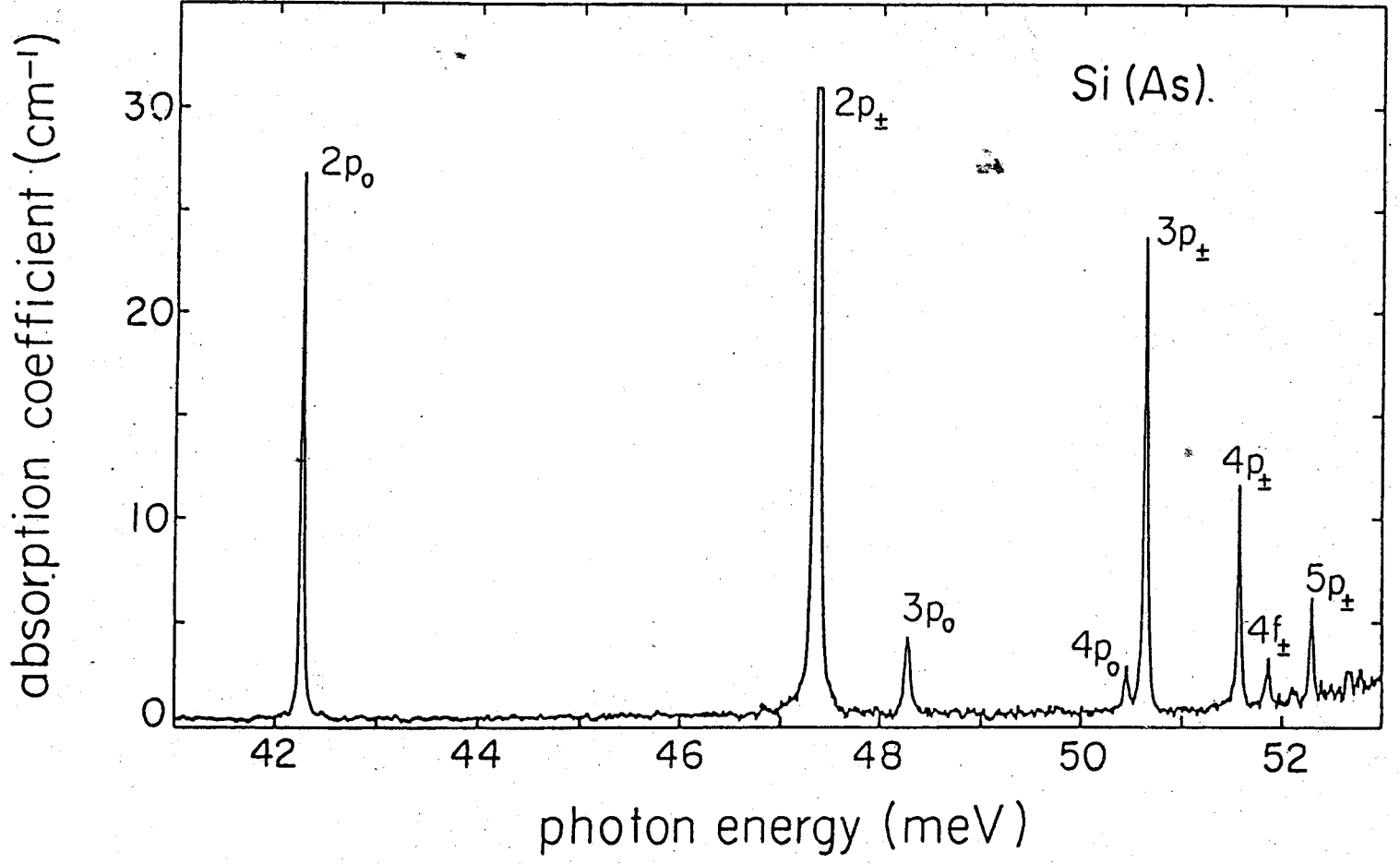
The excitation spectrum of sodium impurities in silicon is shown in Fig. 1 and Fig. 2 for both transmission and absorption measurements, respectively. The excitation spectrum for arsenic donors in silicon is shown in Fig. 3 for comparison.⁽⁵⁾ It is clear that the lines of the sodium and the arsenic spectra are strikingly similar, both in spacing and relative intensities. This can also be seen from Table 1 where the spacings between the excitation lines for the two impurities are compared. The labeling of the excitation lines for sodium impurity is based on this similarity. Being an interstitial donor is undoubted for sodium in silicon.

As an interstitial impurity, the donor electrons of sodium are expected to be the 3s valence electrons thus constituting hydrogen-like centers. When this electron is excited, the screening of the nuclear charge by the remaining core electrons should result in hydrogenic excited states. The higher the excited state the more accurate this description will be. The screening is expected to be particularly effective for the p-like final states in the 1s → np transitions. The situation is very similar to those of substitutional group V donors, which have been demonstrated to be solid-state analogues of the hydrogen atom. The remarkable similarity of the spacings between the excited states of sodium and those of the group V donors is thus explained. In the same manner, it is also clear as shown in Table 1 why the spacings observed in the excitation spectrum of sodium are strikingly close to those calculated for group V donors in the effective-mass theory.⁽⁶⁾

In conclusion, the donor characteristic of sodium impurities in silicon has been demonstrated, not only from electrical measurement but also from optical measurement. The experimental results lead us to believe that sodium does occupy an interstitial position in silicon. Though an interstitial impurity, its behaviour is very similar when compared with substitutional group V donors in silicon. The interstitial sodium donors can thus be regarded as solid-state analogues of the hydrogen atom as well.

References

1. See, for example, A. K. Ramdas and S. Rodriguez, Rep. Prog. Phys. 44, 1297 (1981).
2. R. L. Aggarwal, P. Fisher, V. Mourzine and A. K. Ramdas, Phys. Rev. 138, A882 (1965).
3. L. T. Ho and A. K. Ramdas, Phys. Rev. B5, 462 (1972).
4. L. T. Ho, Proceedings of the 18th International Conference on the Physics of Semiconductors (World Scientific, Singapore), 1193 (1986).



**ELECTRICAL RESISTIVITY AND MAGNETIZATION STUDIES
OF NdFeB SYSTEM**

Y. D. Yao and S. U. Jen

*Institute of Physics, Academia Sinica
Taipei, Taiwan
R.O.C.*

and

W. B. Chen and J. I. Horng

*Department of Physics, Tamkung University
Taipei, Taiwan
R.O.C.*

and

M. K. Wu and E. E. Anderson

*Department of Physics, University of Alabama
Huntsville, Alabama
U.S.A.*

Abstract

The electrical resistivity of two NdFeB alloys samples, $\text{Nd}_{15}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ and $\text{Nd}_5\text{Fe}_{62}\text{B}_{33}$, has been studied with increasing and decreasing temperatures between 4K and 1200K. The magnetization of these two samples was measured between 300K and 1000K. According to our experimental data, the α -Fe is manifestly precipitated above roughly 900K. The magnetic phase transition near 570K is identified by X-ray analysis due to the existence of the tetragonal $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ phase.

I. Introduction

Ternary Nd-Fe-B alloys are promising materials for applications in permanent magnets. (1, 2) This is mainly due to the interesting magnetic properties, specifically the high uniaxial anisotropy and the large magnetic moment of the $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ phase. (3) A structure determination showed that $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ is tetragonal with space group P_4/mnm . (2) From X-ray diffraction and high-field magnetic measurements on oriented powder samples, we know that the easy magnetization direction is parallel to the c axis. (4) Many investigations on the relation between the magnetic and the structural properties of NdFeB system have been reported. (1-4) In comparison, relatively little effort has been devoted to the relation between the electrical and the magnetic properties of NdFeB system. In an earlier publication (5) we have shown the electrical resistivity and specific heat characteristics of $\text{Nd}_5\text{Fe}_{62}\text{B}_{33}$ and $\text{Nd}_{1.5}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ with increasing from 300K to 700K; and the anomalous behavior near 570K has been analyzed.

In this paper we describe detailed investigation of two NdFeB samples on the electrical resistivity between 4K and 1200K and the magnetization properties between 300K and 1000K. The experimental results and their significance are described below.

II. Experimental Consideration

Two NdFeB alloys samples, $\text{Nd}_{1.5}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ and $\text{Nd}_5\text{Fe}_{62}\text{B}_{33}$ were prepared from commercially available elements of high purity Nd(99.9%), Fe(99.99%) and B(99.9%). The chemical analysis has been reported before (5). Samples were cut in the form of rectangular parallelepipeds. The typical dimensions of the samples were roughly $1 \times 2 \times 15 \text{ mm}^3$ for electrical resistivity study and $1 \times 1 \times 6 \text{ mm}^3$ for magnetization study.

Powder x-ray diffraction data were obtained by means of the Shimadzu Xd-3 diffractometer (CuK α radiation) equipped with a diffracted-beam crystal monochromator.

The electrical resistivity of these samples was measured by using the four-probe spot-welding technique. Temperatures between 4 and 300K were achieved in a Displex closed-cycle refrigerator, platinum and carbon glass resistance thermometers were used to determine the temperature; temperatures above 300K were obtained in a high-temperature furnace: two chromel-alumel thermocouples were taken to measure the temperature. Both furnace and refrigerator were evacuated. The de-

current which was supplied to the samples was kept constant to about one part in 10^5 . The electrical potentials were measured with a precision of $0.01 \mu\text{V}$. A vibrating-sample magnetometer was used to determine the magnetization.

III. Results and Discussion

Fig. 1 shows the electrical resistivity data of the $\text{Nd}_{1.5}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ and $\text{Nd}_5\text{Fe}_{62}\text{B}_{33}$ samples with increasing and decreasing temperatures between 4K and 1200K. For clarity not all the data are presented. The open circle and cross shown in the figure are associated with heating and cooling runs, respectively. It is clear from this figure that each resistivity curve approaches a constant value, called residual resistivity ρ_0 , near 4K. ρ_0 decreases after high temperature runs; this indicates that α -Fe is manifestly precipitated after the high temperature runs. The electrical resistivity of α -Fe [6] is much lower than that of the NdFeB system. According to the phase diagram studied by Buschow et al [7], the ternary Nd-Fe-B system is characterized by three ternary compounds, i.e. $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, NdFe_4B_4 and Nd_2FeB_3 . However, there is some doubt as to the true stoichiometry of the compound NdFe_4B_4 . For example, Braun et al [8] obtained from single-crystal x-ray study that the stoichiometry of this phase is $\text{Nd}_{1.1}\text{Fe}_4\text{B}_4$; and Sagawa et al [9] used electron probe micro-analysis to show that this compound is $\text{Nd}_2\text{Fe}_7\text{B}_6$. Anyway, our two Nd-Fe-B alloys samples are located among the three phases. This means that the amount of complicated phases will depend on the heating and cooling situations. The values of ρ_0 of the two Nd-Fe-B samples are shown in Table I. The well-defined knee around 1040K for the ρ vs T curves of decreasing temperature runs also indicates that the α -Fe is precipitated. The anomalous behavior of the electrical resistivity increasing from 800K to 1100K of the $\text{Nd}_{1.5}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ sample suggests that there exists some complicated structure change in this temperature range.

Fig. 2 shows the electrical resistivity and the first derivative of the electrical resistivity with respect to temperature as a function of temperature between 400K and 700K for the $\text{Nd}_{1.5}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ sample. The open circle and cross represent the electrical resistivity with increasing and decreasing temperature, respectively. Both curves show maximum and minimum behaviors. The $d\rho/dT$ vs T curves for both increasing and decreasing temperature runs are marked by open square and close square in Fig. 2, respectively. By comparing this two curves, the Curie temperature T_c must determine from the $d\rho/dT$ plots as the temperature at which $d\rho/dT$ shows a minimum. From both curves, we determined that the value of T_c for $\text{Nd}_{1.5}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ is $570 \pm 2\text{K}$. This is completely different from the λ -type anomaly of $d\rho/dT$ near

the Curie temperature as shown in the type 1 (or nickel-like) ferromagnet [10]; and this is not completely similar to that of type III ferromagnet [10, 11]. From the T_c definition of the type III ferromagnet, the Curie temperature is defined at $d\rho/dT = 0$; this is completely not suitable for our case. It is evident that in our case besides the spin-disorder scattering other electron-magnon and complicated electron-phonon interactions exist near this T_c . We call this behavior the inverse λ -type ferromagnet.

Fig. 3 shows the relative intensities vs 2θ from powder x-ray patterns for our two samples. The peaks are compared with that of the $Nd_2Fe_{14}B$ standard; these indexed peaks in Fig. 3 are peaks observed in the $Nd_2Fe_{14}B$ standard. It is clear that there exists a major tetragonal $Nd_2Fe_{14}B$ phase in the $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ sample; and this phase is minor in the $Nd_5Fe_{62}B_{33}$ sample.

We have observed the magnetic phase transitions and the α -Fe precipitation for the $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ and $Nd_5Fe_{62}B_{33}$ samples from the electrical resistivity studies between 4K and 1200K. It is very interesting to check these results from the magnetization study. Fig. 4 shows the magnetization study of a $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ sample in a fix applied magnetic field of 6 kG. Three runs have been taken for this sample. The sequence of these runs is indicated by arrows with number in the figure. The rate of increasing and decreasing temperatures is roughly 5K per minute. The Curie temperature for $Nd_2Fe_{14}B$ phase observed from the electrical resistivity measurements is associated with the abrupt drop of the magnetization near 570K for both runs 1 and 2. The precipitation of Fe-rich phase is observed by the increasing of magnetization of runs 1 and 2. From the heating curves of runs 1 and 2, it is manifested that the Fe-rich phase is precipitated above roughly 900K. Run 3 in Fig. 4 was taken after Runs 1 and 2; and the sample were annealed in vacuum at 1200K for 6 hours before measurements. The magnetic phase transition near 570K is completely disappeared. There is no deviation between increasing and decreasing curves; and the magnetization drops abrupt near 1000K. These behaviors indicate that the α -Fe phase with Curie temperature near 1040K has been precipitated; and the phases of this sample are quite stable with each other.

Fig. 5 shows the saturation magnetization of the $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ and $Nd_5Fe_{62}B_{33}$ samples. This saturation magnetization was obtained in an applied magnetic field of 9 kG (the limitation of our electromagnet) and with the sample parallel to the applied magnetic field to minimize the demagnetization factor. The rate of this measurement is roughly 1K per minute. The saturation magnetization of $Nd_5Fe_{62}B_{33}$ is monotonically decreasing with increasing temperature; and it drop quickly near 1000K. This indicates that Fe-rich phase is dominated and the phases

are quite stable. However, for $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ sample, the heating run of the saturation magnetization drops very fast near 570K; this is due to the magnetic phase transition of the $Nd_2Fe_{14}B$ phase.

The saturation magnetization above 650K for heating run is increased with increasing temperature. Again, this means that Fe-rich phase with increasing temperature. Again, this means that Fe-rich phase is formed. The cooling run shows that the $Nd_2Fe_{14}B$ phase disappears after a long time annealing at high temperatures.

In Conclusion, we have presented the experimental results of the electrical resistivity and magnetization studies on $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ and $Nd_5Fe_{62}B_{33}$ alloys between 4K and 1200K for ρ and between 300K and 1000K for M. A magnetic phase transition of inverse λ -type ferromagnet is observed near 570K in $Nd_{15}Fe_{77}B_8$ alloy sample, this is identified by the x-ray analysis due to the existence of the tetragonal $Nd_2Fe_{14}B$ phases. The α -Fe is manifestly precipitated above roughly 900K for both samples.

IV. Acknowledgement

The authors (Yao and Jen) are grateful to the National Science Council of R.O.C. for the financial support of this work under Contract # NSC76-0208-M001-32.

References

1. M. Sagawa, S. Fujimura, M. Togawa, H. Yamamoto and Y. Matsuura, *J. Appl. Phys.*, **55**, 2083 (1984).
2. J. F. Herbst, J. J. Croat, F. E. Pinkerton and W. B. Yelon, *Phys. Rev.* **29B**, 4176 (1984).
3. H. Yamamoto, Y. Matsuura, S. Fujimura and M. Sagawa, *Appl. Phys. Lett.*, **45**, 1141 (1984).
4. S. Sinnema, R. J. Radwanski, J. J. M. Franse, D. B. de Mooij and K. H. J. Buschow, *J. Magn. Mater.* **45**, 333 (1984).
5. S. U. Jen and Y. D. Yao, *J. Appl. Phys.* accepted (1987).
6. Y. D. Yao, T. Y. Yen and J. Y. Chen, *Phys. Stat. Sol.* **A98**, 285 (1986).
7. K. H. J. Buschow, D. B. de Mooij, J. L. C. Daams and H. M. van Noort, *J. Less-Comm. Met.* **115**, 357 (1986).
8. H. F. Braun, M. Pelizzone and K. Yvon, *Proceedings of the International Conference on Transition Metal Compounds*, Vol. IIB, p. 11 (1982).
9. M. Sagawa, S. Fujimura, H. Yamamoto, Y. Matsuura and K. Hiraga, *IEEE*

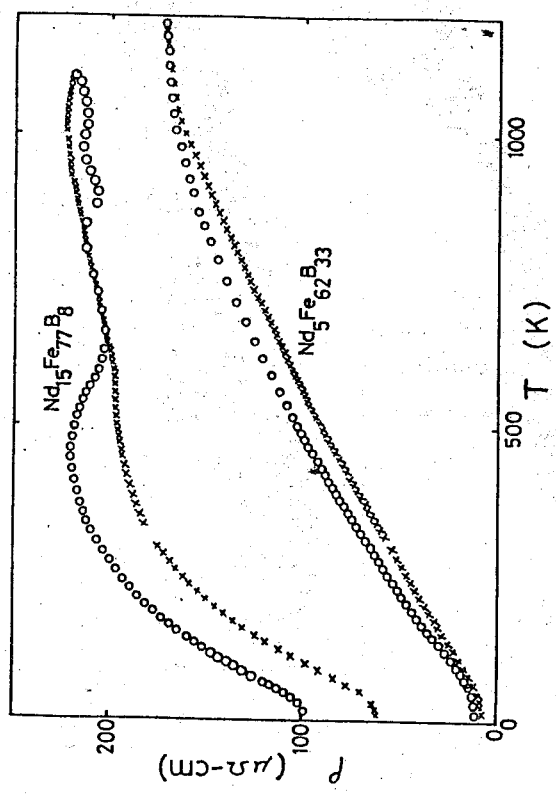


Figure 1.

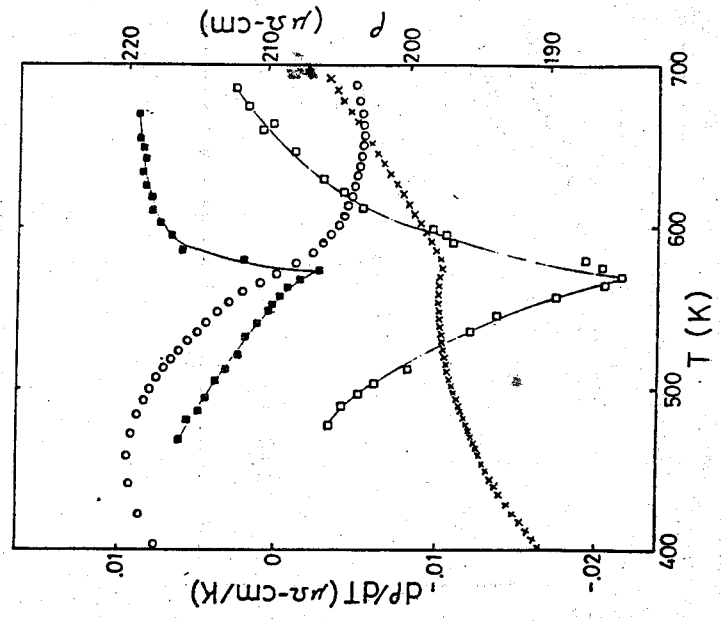


Figure 2.

Special Issue of Annual Report of the Institute of Physics, Academia Sinica, Vol. 17, 1988
Commemoration of the 60th Anniversary of Academia Sinica

- Trans. Magn. MAG-20, 1584 (1984).
- 10. D. J. W. Geldart and T. G. Richard, Phys. Rev. B12, 5175 (1975).
- 11. F. C. I. Mateg, F. J. Cadieu, S. Marcellia and R. D. Parks, Phys. Rev. Lett. 25, 1204 (1970).

Table 1. The residue resistivity ($\mu\Omega\text{-cm}$) of the $\text{Nd}_5\text{-Fe}_{62}\text{B}_{33}$ and $\text{Nd}_{15}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ samples.

	$\text{Nd}_5\text{Fe}_{62}\text{B}_{33}$ ρ_0 ($\mu\Omega\text{-cm}$)	$\text{Nd}_{15}\text{Fe}_{77}\text{B}_8$ ρ_0 ($\mu\Omega\text{-cm}$)
Heating Run	10.3	98.3
Cooling Run	7.8	62.1

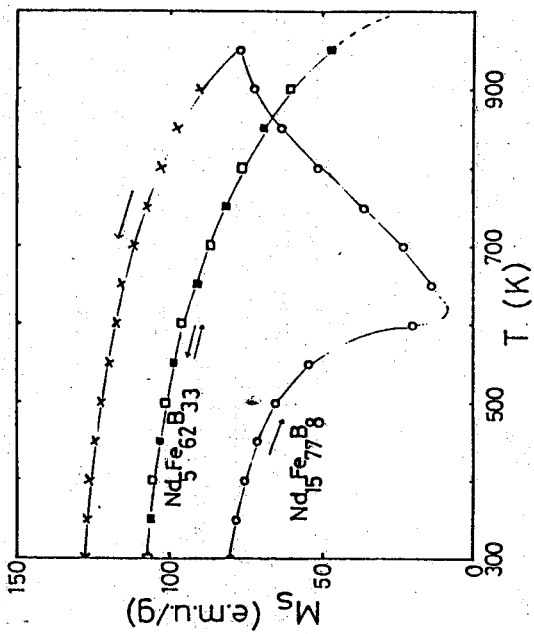


Figure 5.

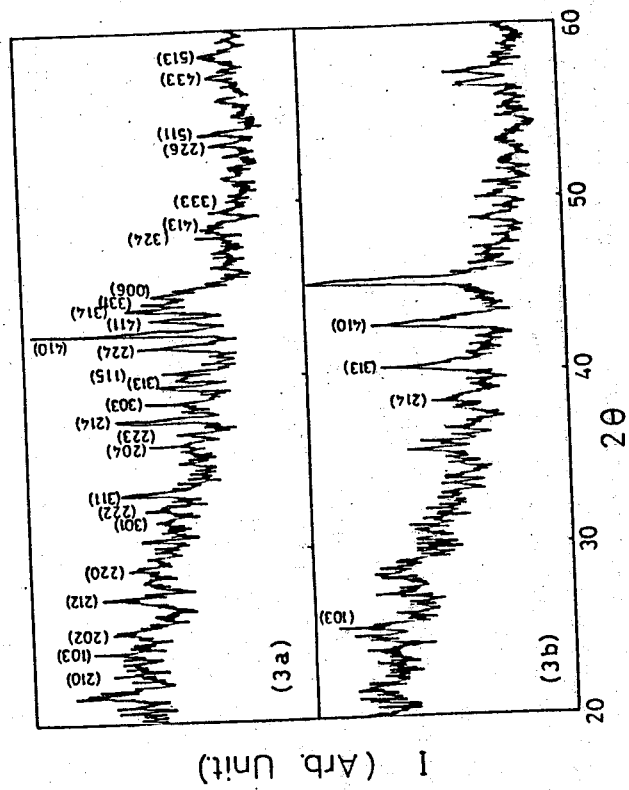


Figure 3.

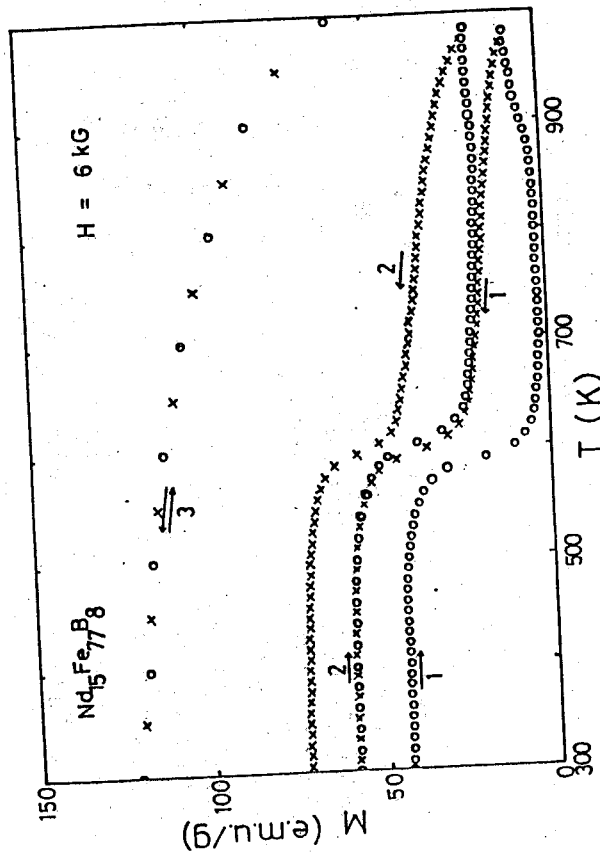


Figure 4.

**STUDY ON FLOW DISTRIBUTION AND PULSE SHAPE
—A MODEL FOR PULSE FEELING IN CHINESE MEDICINE**

W-K Wang, Y. Y. Lo, Y. Chiang and T. C. Chen

Biophysics Laboratory

Institute of Physics

Academia Sinica

Taipei, Taiwan, R.O.C.

Abstract

A simple circulation model was constructed to analyze the relation between flow distribution and pulse shape. The organ in trouble may change the blood flow through it, thus change the flow distribution in the main organs (five orbs), which may lead to the pulse feeling to be different as suggested by classical Chinese medicine.

I. Introduction

Traditional Chinese medicine consists essentially of three parts, acupuncture, herb medicine and pulse feeling. Among these, acupuncture is believed to date back to the first emperor known as the "Hung-ti nei-ching"⁽¹⁾ (The Yellow Emperor's Classic of Internal Medicine) before 2000 B.C.. For analgesic and curing therapeutics, acupuncture has come to the attention of Western medicine. While feeling the pulse seems just a metaphysical concept to the West, "Mo-ching" (The Pulse Classic) was the first systematized treatise on organ pulse lore and was authored by Wang Shu-ho⁽²⁾ [He was the first commentator of the "Shang-han lun" (Treatise on Cold Disorders, ascribed to Chang Chung-ching, 2nd century A.D.) tradition.]. The simple pulse diagnosis was integrated with the metaphysical concept of twelve energetically defined internal organs, the orbs, and by feeling the pulse at three positions over the radial arteries at both wrists, physician may tell what defect the patient has. Here came the idea of organ representation along the radial artery and each orb shown its state of energy at its defined place. For thousands of years the application of feeling the pulse for the Chinese physicians has been an empirical one, they do not know any physical basis behind such

diagnostic technic. In this report, we try to give some clue on the physical foundation of the pulse feeling diagnosis.

A very simple experimental model of circulation was built up and the purpose of this experiment was to investigate the variation of "Pulse shape" when the distribution of blood flow was changed.

In the cardiovascular system of human body, the heart is working like a pump to let blood flow through all parts of body. The main "internal organs" of Chinese medicine are the five Orbs ("wu tsang", the direct translation is the cardiac, hepatic, splenetic, pulmonary and renal orbs or by the functional interpretation, the aorta, liver, spleen & GI tract, lung and kidney). If there is an organ in trouble, the blood flow through it, the blood pressure across it as well as blood volume in each organ will be changed. In the West, many papers have discussed the relationships between blood flow and pressure changed in the circulation, such as Wiggers (1934)⁽³⁾, McDowall (1949)⁽⁴⁾, Whitcher (1969)⁽⁵⁾ and Geddes (1970)⁽⁶⁾, however it seems less research about the relationship between "pulse shape" and blood flow distribution in different parts of the body which include arteries, veins and organs. Actually, blood is richly distributed in these five orbs under basal conditions⁽⁷⁾⁽⁸⁾.

The blood circulation system can be viewed as a connection of several closed loops⁽⁸⁾. And the microcirculation of an organ may be replaced by a single equivalent impedance⁽⁹⁾, since we study the wave form in the larger arteries. In this experiment, a similar closed system which was composed of some elastic distensible tubes, elastic balloons, cannulas, clamps, electric pulse pump was connected together with pressure transducer and the oscilloscope to detect the pulse shape as shown in Fig. 1. There were five clamps tied respectively on the different diameter tubes, opened or closed as needed to get a different flow pattern which simulated the change of impedance in the microcirculation within the organs. We name them as 1#, 2#, 3#, 4# and 5#, clamp respectively (see Fig. 1).

The 1# loop was about 78 cm. long with 3 x 5 mm. diameter silicon tube (3 mm. internal diameter and 5 mm. external diameter), the 2# was about 49 cm. long with 3 x 5 mm. diameter, the 3# and 4# were the same in 23 cm. long with 2 x 4 mm. diameter, the 5# was about 34 cm. long with 2 x 3.2 mm. diameter, the 6# was about 84 cm. long with 3 x 5 mm. diameter. Both the central axes were about 30 cm. long. A small balloon was tied in the middle of each loop with exception of the 6#. These five balloons which represented the mainly organs-five orbs, permitted the fluid to flow in and out at the outlets. Moreover, a more significant pulse shape change was found, when these balloons were added. Distilled water was used as fluid flows through all the tubes and other factors were neglected to

simplify the model.

Operating the pulse pump in a constant frequency at about 0.6 Hz which also gave a constant shape for each pulse, the pressure, passed through the fixed point of the 6# loop, was measured by a linear pressure transducer (Validyne Model DP 103) and then converted into D.C. output signal by a digital indicator. The waveform was then shown in an oscilloscope (The E. G. G. Signal Averager, Model 4202) or a chart recorder.

Firstly, we opened all of the clamps to obtain a normal pulse shape for reference. Next, we closed only one clamp in sequence from 1# to 5# to give a series of the changed pulse shape. Any time when we opened all of the clamps and waited for a few seconds the pulse shape would return to the original contour, the results were illustrated in column 1, Fig. 2. If we closed all the clamps, then opened only one clamp in sequence from 1# to 5#, the results were illustrated in column 2, Fig. 2. In column 3 and column 4, we repeated these experiment with higher pumping frequency (about 1.2 Hz).

To further study the physical property of this simulated circulatory system, we repeated the procedure as described before, that was to open all the clamps, and closed only one in sequence, but this time we stopped the pump and gave a gentle strike at the center of each balloon. The results were shown in column 5, Fig. 2, then we closed all the clamps and opened only one in sequence, gave a gentle strike again. The results were shown in column 6, Fig. 2.

From these data, it is clear that each balloon (organ) has its own resonance frequency. Which will resonance with some specific frequencies of the pump (heart or aorta cavity) which causes the difference pulse shape when blood distribution is changed.

From these model we may also see that the blood flow has two components, one is equivalent to Direct Current in electrical current, which is from the Diastole pressure, and one is equivalent to Alternating Current in electrical current which is from the pulse. (The difference between Systole pressure and Diastole pressure).

According to Hemodynamics⁽⁹⁾, the impedance is a frequency dependent variable, it will change similar to a L-C circuits (inductance-capacitance) in electrical Alternating Current. Therefore when a tissue in trouble, no matter its elasticity, mass, volume, shape or resistance changes, it will all be reflected in the impedance change, since the impedance is controlling the blood flow rate, the blood flow into the organ will be changed. So is its resonance frequency, and the results will be shown up in the pulse shape.

If some air get into aorta cavity even if it does not block the coronary artery,

it will disturb all the resonance frequency in the artery therefore, the blood flow will come to a almost still, this may explain the lethal result of air get into circulatory system. This may also be the reason why Chinese medicine so emphasise on "Chi" which means gas, because the gas in any organ such as stomach will also disturb the harmonic frequency of the stomach. It will increase the impedance and cause blood flow disturbance which will lead to the shortage of oxygen and nutrient supply.

In conclusion, when a Chinese Doctor diagnoses you by pulse feeling, he is listening to the symphony play by your heart and organs. A wonderful harmony means healthy body, a poor harmony means some kind of trouble. By listening more carefully, he will be able to tell you, it is the violin, the piano, or the drum is in poor condition.

The authors wish to thank Dr. Leu-Fu Chang, Fluid mechanics laboratory Institute of Physics for his help on using facilities in this investigation. This work was partially supported by National Science Council R.O.C.

Reference

1. Veith, I.: "The Yellow Emperor's Classic of Internal Medicine" (New Edition), Berkeley and Los Angeles, Calif.: University of California Press, 1949.
2. Han Agren, M. D.: "A New Approach to Chinese Traditional Medicine". American Journal of Chinese Medicine, Vol. 3, No. 3, 1975.
3. Wiggers, C. J.: "Physiology in Health and Disease", Lea and Febiger, Philadelphia, 1934.
4. McDowall, R.T.S.: "An Artificial Circulation", J. Physiol. 1949.
5. Whitcher, C.: "Blood Pressure Measurement", in Bellville, J. W. and C. S. Weaver (Eds.): "Technique in Clinical Physiology", Macmillan, London, 1969.
6. Geddes, L. A.: "The Direct and Indirect Measurement of Blood Pressure", Year Book Med., Chicago, 1970.
7. Guyton A. C. Textbook of Medical Physiology 4th ed. Saunders Philadelphia, Pennsylvania, 1971.
8. Ganong, W. F.: "Review of Medical Physiology", 5th ed., Lange Med. Publ., Los Altos, California, 1971.
9. Noordergraaf, A.: "Hemodynamics" in Biological Engineering ed. H. P. Schwan, McGraw-Hill 1969.

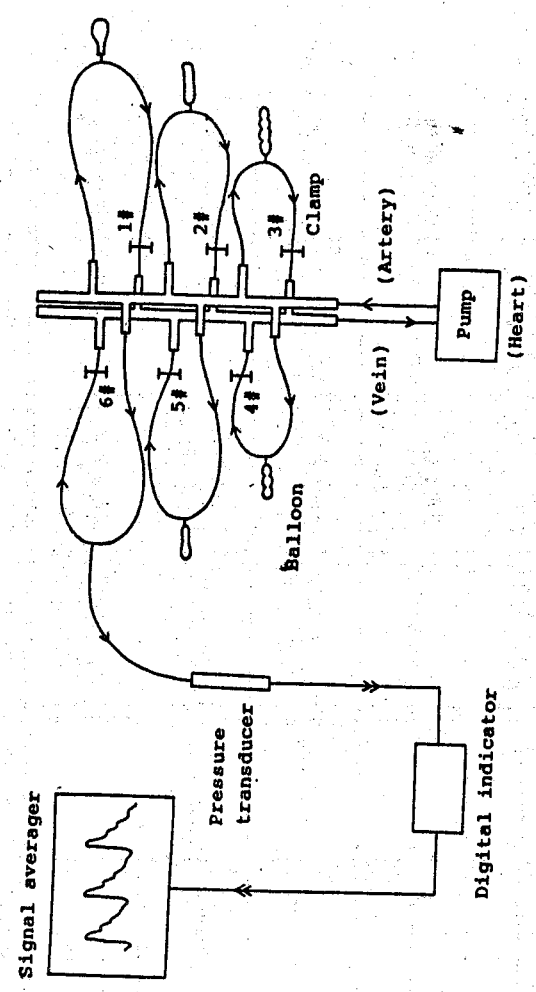


Figure 1. The modeling diagram of the circulatory system. The single arrow shows the fluid flow direction, the double arrow shows the direction of the electric signal.

NUMERICAL COMPUTATIONS ON INTERACTION OF WAVES WITH LARGE SUBMERGED STRUCTURES

by

Robert R. Hwang* and Hen-Cheng Fan**

Abstract

Finite-difference techniques based on boundary-fitted coordinates are used to study the interaction of waves with large fixed two-dimensional structures submerged in water of finite depth. The physical flow field is transformed to the curvilinear coordinate system in which the computational region is rectangular with a fixed square grid regardless of the movement of the free surface. The free surface of the flow is obtained in such that the transformation is computed simultaneously with the flow field for each time step. Wave forces and pressure are calculated from the velocity potential of the flow. Comparisons of the results for wave forces of two cases for submerged structures in water of finite depth with solutions obtained by other methods indicate that these finite-difference techniques can yield accurate results. To demonstrate the usefulness of the numerical approach, the problems of two submerged horizon-mounted cylinders in different spacings which do not have classical solutions are also analyzed.

1. Introduction

The great increase in the use of coastal works built for the purpose of oil drilling, submerged oil storage tanks and marine disposal for contaminations has led to the attention on the problem of dynamic forces exerted by water waves on submerged structures to many marine and civil engineers. Environmental loading has, therefore, become a predominant role in the design of offshore structures. Wave forces acting on submerged objects has been investigated for more than

* Professor of Department of Naval Architecture, National Taiwan University and Institute of Physics, Academia Sinica.
 ** Chung-Shan Institute of Science and Technology.

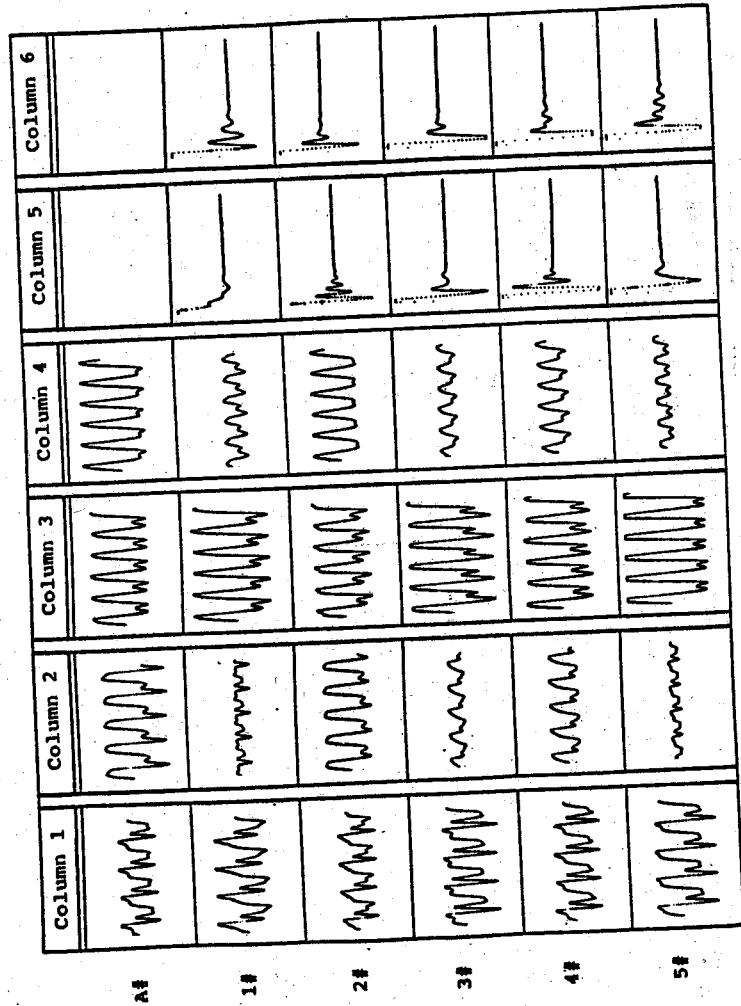


Figure 1. Records of pulse shape taken from the model of circulatory system in or close when need to change the flow pattern.

Fig. 1. with the effect of changes in flow pattern.
 A#: represents the reference pulse shape before changing the flow pattern.
 from the 1# to 5#: represent the corresponding clamps which open or close when need to change the flow pattern.
 from the column 1 to 6: represent the sequent change of flow pattern at different condition. Column 1,2 with pumping frequency at 0.6Hz, column 3,4 with pumping frequency at 1.2Hz, column 5,6 no operation of the pulse pumping and just give a gentle strike to generate the natural harmonic of the balloons (organs). In column 1, 3, 5 all clamps are opened with the exception of the assigned clamps.
 In column 2, 4, 6 all clamps are closed with the exception of the assigned clamps. The different pulse shape are clearly shown in each of the above small photographs.

three decades. As the object size is small compared to the length of the incident wave, the general problem of wave/structure interaction was simplified in that the presence of the object has no effect on the incident wave. The study of wave forces on such objects has come to be known as the Morison type equation (1), (2), (3). As the size of the object in relation to the wave length increases, the incident wave is scattered upon encountering a large object and, therefore, the assumption that the object does not affect the incident wave is violated. In such an analysis, the problem of wave/structure interaction must account for the effect of finite relative size as well as the free surface. For the parameter $H/2a$ in which H denotes the wave height and a indicates the characteristic dimension of the object to be small as referred to diffraction theory, viscous effects are neglected and the problem is set up in terms of a velocity potential.

The formulation of the wave/structure interaction as a boundary-value problem governed by Laplace's equation and subjected to the dynamic boundary condition and kinematic boundary condition on the free surface, the surface of body and the sea bottom is very straightforward, but obtaining the solution is, in general, difficult. A variety of numerical methods for solving the boundary-value problem have been developed. One of the approaches used is based on Green's function (4, 5, 6). It involves distributing sources over the surface of the object and using Green's theorem to obtain an integral equation for the potential over the boundary of the object. Various boundary integration techniques have also been applied to solve the boundary integral equation. Bai (7) and Vongvissesomjai and Hanif (8) use the finite element method to determine the velocity potential throughout the fluid domain. Chen and Mei (9), Zienkiewicz, et al (10), and Bird and Shepherd (11) have applied the boundary element method in solving the wave diffraction problems.

The numerical solution of wave/structure interaction problem for flow with a free surface is complicated in particular by the fact that the boundary of the calculation region on the free surface is deforming. This makes the accurate representation of boundary conditions on the free surface difficult. To treat such complex geometries with a rectangular finite-difference grid, Nichols and Hirst (12) have applied the marker-and-cell method with using finite-difference formula for unequal mesh spacing at the boundaries. In another approach, which is used in the present work, numerical transformations map arbitrary geometries into rectangular regions (13), (14). Haussling and Coleman (15) have used this approach to compute the two-dimensional unsteady potential flow generated by a circular cylinder in motion below a free water surface. The resulting boundary-fitted coordinate systems simplify the application of boundary conditions at curved

boundaries, and are particularly useful with time-dependent geometries such as those found with unsteady water-wave problems.

This study describes the application of boundary-fitted coordinates to the computation of unsteady potential flows generated by the interaction of waves with large fixed two-dimensional structures submerged in water of finite depth. The wave forces and pressures on the body are calculated from the velocity potential of the wave flow. Comparison of the results for wave forces with solution obtained by other methods indicates that these finite-difference techniques can yield accurate results.

II. Formulation of Problem

Consider that a circular cylinder is located in water of depth d with submergence h below a free surface as shown in figure 1. The undisturbed free surface is taken as the x -axis, and the instantaneous free surface will be specified by

$$y - Y(x, t) = 0 \quad (1)$$

The y -axis is positive upwards.

The incident wave of amplitude $H/2$ is progressing in the positive x -axis. The problem is formulated in two dimensions under the assumptions of that $H/2a$ is small enough so that viscous effects can be neglected and of that the fluid is incompressible. The wave/structure interaction problem can then be approached by way of potential flow theory. We seek a velocity potential, $\phi(x, y, t)$, which satisfies

$$\phi_{xx} + \phi_{yy} = 0 \quad (2)$$

$$\phi_x Y_x - \phi_y - Y_t = 0 \text{ on } y = Y(x, t) \quad (3)$$

$$gY + \phi_t + \frac{1}{2}(\phi_x^2 + \phi_y^2) = 0 \text{ on } y = Y(x, t) \quad (4)$$

$$\nabla\phi \cdot \vec{n} = 0 \text{ on } y = -d \text{ and on the body surface} \quad (5)$$

$$\phi_t + c\phi_x = (\phi_t)_t + c(\phi_t)_x \text{ at } x = \pm\infty \quad (6)$$

$$\phi = \phi_0, Y = Y_0 \text{ at } t = 0 \quad (7)$$

where the subscripts $x, y,$ and t denote differentiation, is the velocity potential for the incident wave, and c is the wave celerity. Equation (2) must hold for all time, t , and for all (x, y) in the fluid domain. Equation (4) is, of course, the dynamic condition on the free surface, and Eqs. (3), and (5) express the usual kinematic condition at a boundary of a perfect fluid. Equation (6) is the distant radiation condition (16) at infinite distance from the object. ϕ_0 and Y_0 are the initial conditions for the velocity potential and free surface of the incident wave.

The dynamic pressure, $p(x, y, t)$, on the structure can be computed from the Bernoulli equation without the hydrostatic term as

$$p = -\rho\phi_t - (\phi_x^2 + \phi_y^2)/2 \quad (8)$$

in which ρ is the density of the fluid. The force due to wave action is obtained from the integration of the dynamic pressure over the surface of the structure. The forces per unit length of the object are calculated in an x and y component form as

$$F_x = -\int_s p(x, y, t) dy = -\int_s p Y_\xi d\xi \quad (9a)$$

$$F_y = \int_s p(x, y, t) dx = \int_s p X_\xi d\xi \quad (9b)$$

III. The Transformation

To simplify the numerical solution of the problem, the time-dependent physical region (Figure 1), cut off suitably for upstream and downstream, is transformed to a time-dependent computational region which, as shown in Figure 2, is composed of rectangles. The body is mapped onto the split LE, the free surface onto AB, the bottom of the water onto IH, the upstream boundary onto AN and JI, and the downstream boundary onto BC and GH. The boundaries JKLMN and CDEFG represent cuts within the fluid.

As to transformations computed by Thompson et al (13), the curvilinear coordinates (ξ, η) are generated by solving an elliptic system of the form

$$\xi_{xx} + \xi_{yy} = P(\xi, \eta, t) \quad (10)$$

$$\eta_{xx} + \eta_{yy} = Q(\xi, \eta, t) \quad (11)$$

with appropriate boundary conditions. The source functions P and Q are specified in such that it allows coordinate lines to be attracted to specified lines and/or points in the domain or on the boundaries in making the numerical scheme to be efficient.

For computational purposes, the generating system of equations (10) and (11) is transformed to the computational plane by interchanging dependent and independent variables to yield

$$\alpha X_{\xi\xi} - 2\beta X_{\xi\eta} + \gamma X_{\eta\eta} = -J^2 (P X_\xi + Q X_\eta) \quad (13)$$

$$\alpha Y_{\xi\xi} - 2\beta Y_{\xi\eta} + \gamma Y_{\eta\eta} = -J^2 (P Y_\xi + Q Y_\eta) \quad (14)$$

where

$$\alpha = X_\eta^2 + Y_\eta^2, \quad \beta = X_\xi X_\eta + Y_\xi Y_\eta \quad (15)$$

$$\gamma = X_\xi^2 + Y_\xi^2, \quad J = X_\xi Y_\eta - X_\eta Y_\xi$$

The transformation can then be determined by solving Eqs. (13) and (14) subject to the following boundary conditions: The (x, y) -coordinates of the free surface are specified on AB as shown in Figure 2, the coordinates of the body are given on LE, the coordinates of the lower boundary are given on HI, and the upstream and downstream boundaries are specified on AN, JI, BC, and GH. Reentrant-type boundary conditions are applied on the cuts as follows: The (x, y) -coordinates on CD match those on GF; the boundary pairs MN and KJ, ML and KL, and DE and FE are similarly matched.

Figure 3 displays the results of the solution to Eqs. (13) and (14) in the physical plane. Lines of constant ξ extend between the upstream and downstream boundaries except where they intersect the body surface.

Since we desire to perform all computations in the transformed plane, where the mesh system consists of simple rectangles, the governing equations and boundary conditions must be transformed in such that ξ and η are the independent variables. Using the fully conservative form of the differential operators given by

$$f_x = \frac{1}{J} [(fy_\eta)_\xi - (fy_\xi)_\eta] \quad (16a)$$

$$f_y = \frac{1}{J} [-(fx_\eta)_\xi + (fx_\xi)_\eta] \quad (16b)$$

where f denotes some arbitrary function and J is the Jacobian defined in Eq. (15), Eq. (2) becomes

$$\alpha\phi_{\xi\xi} - 2\beta\phi_{\xi\eta} + \gamma\phi_{\eta\eta} = -J^2(P\phi_\xi + Q\phi_\eta) \quad (17)$$

The transformed boundary equations are

$$\begin{aligned} (Y_t)_{x=\text{constant}} &= [-Y_\eta\phi_\xi - Y_\xi\phi_\eta]/J \quad Y_\xi/x_\xi + (x_\xi\phi_\eta - x_\eta\phi_\xi)/J \\ \text{at } y = Y_Q & \quad (18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\phi_t)_{\xi, \eta=\text{constant}} &= -x_t(\phi_\xi y_\eta - \phi_\eta y_\xi)/J - y_t(\phi_\xi x_\eta - \phi_\eta x_\xi)/J - gY \\ & - [(y_\eta\phi_\xi - y_\xi\phi_\eta)^2 + (x_\xi\phi_\eta - x_\eta\phi_\xi)^2]/(2J^2) \\ \text{at } y = Y_Q & \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(b) On the surface of structure and the bottom of water } (y = \eta_1 \text{ and } y = \eta_b): \\ (\beta\phi_\xi - \gamma\phi_\eta)/(\gamma^{1/2}J) = 0 \quad (20) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(c) On the remote boundaries } (\xi = \xi_1 \text{ and } \xi = \xi_Q): \\ (\phi_t)_{\xi, \eta=\text{constant}} = x_t(y_\xi\phi_\eta - y_\eta\phi_\xi) - y_t(x_\xi\phi_\eta - x_\eta\phi_\xi) \\ - c(y_\eta\phi_\xi - y_\xi\phi_\eta)/J + F_1 \quad (21) \end{aligned}$$

where

$$F_1 = (\phi_1)_t + c(\phi_1)_x$$

Since the fluid region is not known in advance, Eqs. (13) and (14) which generate the transformation must be solved at each time in conjunction with the solution of the fluid flow problem (17)-(21).

IV. Numerical Solution

Numerical computations contain of both the transformation and flow problem solution. The first step in the computational procedure is to compute the transformation. Replacing by central difference formula, difference equations of (13) and (14) are solved by successive overrelaxation (SOR). Once convergence of the SOR point iteration is achieved, defining the x, y locations along lines of constant ξ and η , the spatial derivatives $x_\eta, y_\eta, x_\xi,$ and y_ξ , and the transformation coefficients $\alpha, \beta, \gamma,$ and J at each grid point are computed. These derivatives, scaled to the appropriate size, are then available as input to constitute a complete description of the mesh geometry. In this study, the inhomogeneous functions P and Q of the pair coordinate transformation equations to specify as zero are found to be sufficient in making the numerical scheme efficiently. So we set $P = 0$ and $Q = 0$.

Given the description of the mesh system, Eq. (17) for the velocity potential is also replaced by central difference formula and solved with SOR. Since the flow is in a time-dependent region in (x, y) -space, the surface elevation and the velocity potential on the surface at the advanced time level must be solved and are combined with the iterative solution for the velocity potential and the mesh point coordinates. A time advancement of the surface elevation and the potential on the surface according to Eqs. (18) and (19) is followed by an updating of the grid point coordinates with Eqs. (13) and (14) and then an adjustment of the potential below the surface according to Eq. (17) and finite-difference approximations to the boundary conditions. The new grid point distribution, flow field and the force acting on the structure are, therefore, computed simultaneously. The computation procedure is started with the initial estimates of the surface elevation and the velocity potential for the incident wave. The iterations for an advanced time step are halted when the convergence criteria of Y and ϕ from iteration to iteration are reached. The magnitude of the relative convergent criteria is usually on the order of 0.001.

V. Results and Discussion

Based on the boundary-fitted coordinate system of the finite-difference

approach, numerical solutions have been carried out for studying the wave interaction with large fixed two-dimensional structures submerged in water of finite depth. For cases of a submerged half (circular) cylinder resting on the bottom and a fully submerged circular cylinder, some other studies have been made before which can be used to calidate the results of this study. To illustrate the usefulness of the numerical technique, the case of two submerged horizontal cylinders mounted in various spacings are also investigated.

For convenience of analysis, numerical results are presented in the form of dimensionless plots. The normalized wave forces per unit length of cylinder [that is, the horizontal force $f_x = (F_x)_{\max}/(\rho g a a_0)$ and the vertical force $f_y = (F_y)_{\max}/(\rho g a a_0)$] are plotted against the dimensionless wave number, ka , for various values of the depth-to-radius ratio, d/a .

Half cylinder on the bottom. — Results for a half cylinder resting on the the ocean bottom are given in Figs. 4-7. Figs. 4 (a) and (b) show the computational coordinate system in the physical region and the computational domain respectively. Figs. 5 and 6 show the dimensionless horizontal and vertical wave forces, as functions of ka for the depth-to-radius ratio d/a equal to 4.0. In the comparison with other studies (17), it shows that the agreement is very good. A lower value of d/a results in a greater blockage of wave energy per unit length and hence larger forces on the cylinder. Fig. 7 shows the pressure distribution for $d/a = 4$ at different time steps. It indicates that the pressure variation is mainly dependent upon the position of the incident wave profile relative to that of the object.

Fully submerged horizontal cylinder. — Some studies for a fully submerged cylinder encountered with the wave interaction has been solved previously. Ogilvie (18) obtained a semiclosed-form solution for a fully submerged cylinder in infinitely deep water in which the wave forces as a function of ka and kh are presented. Based on a boundary element approach, Bird and Shepherd (11) solved the wave interaction with a submerged cylinder numerically in the finite depth of water. Since as $kd > \pi$, the effect of the water depth on the incident wave will be negligible. Fig. 8 shows the comparison of the present numerical solution with results of Ogilvie, and Bird and Shepherd for $d/a = 6$ and $ka = 2$. It can note that these results are seen to be the same. Fig. 9 shows the dimensionless wave forces f_x and f_y plotted against ka for $d/a = 6$ and $h/a = 4$ in comparing with the experimental results. The agreement between the experimental results and the numerical curves is good. It is noted that this agreement improves as ka decreases, where ka may be interpreted as the dimensionless wave steepness.

Two submerged cylinders mounted in a spacing S . — Numerical results for a

pair of horizontal cylinder submerged in a finite depth water are given in Figs. 10-13. Fig. 10 shows the water surface and the computational coordinate system in the physical region at different time steps. To illustrate the effect of the spacing of the two cylinders, the dimensionless wave forces, f_x and f_y , are plotted versus ka for $s/a = 1.0, 2.0$ and 3.0 . Fig. 11 shows the results of the upstream cylinder. The comparison with the case of individual cylinder is also made. It can note that the increase of the cylinder spacing will reduce the wave force, f_x , specially at small ka . To the downstream cylinder, the reduction of the wave force is inversely proportional to the increase of the cylinder spacing. It can be seen in Fig. 12. The effect of two cylinders on the vertical wave force is observed insignificant.

VI. Conclusions

A description of numerical method based on the boundary-fitted coordinate system has been presented to study the wave interaction with large submerged structures. The governing equation and the boundary conditions have been transformed in using the boundary-fitted coordinate approach which allows the user extensive control over the design of the computational mesh and the boundaries. Wave pressure and wave forces obtained from this study are found to compare well to the previous solutions for a bottom-seated horizontal half cylinder and a horizontal cylinder.

References

1. Beckmann, H., and Thibodeaux, M. H., "Wave Force Coefficients for Offshore Pipelines," J. the Waterways and Harbors Div., ASCE, Vol. 88, WW2, 1962, pp. 125-138.
2. Grace, R. A., and Casciano, F. M., "Ocean Wave Forces on Subsurface Sphere," J. the Waterways and Harbors Div., ASCE, Vol. 95, WW3, 1969, pp. 291-317.
3. Garrison, C. J., et al., "Drag and Inertia Forces on a Cylinder in Periodic Flow," J. the Waterways, Port, Coastal and Ocean Div., ASCE, Vol. 103, WW2, 1977, pp. 193-204.
4. Garrison, C. J., and Chow, P. Y., "Wave Forces on Submerged Bodies," J. the Waterways, Harbors and Coastal Engineering Div., ASCE, Vol. 98, WW2, 1972, pp. 375-392.
5. Block, J. L., "Wave Forces on Vertical Axisymmetric Bodies," J. Fluid Mech., Vol. 67, 1975, pp. 369-382.

6. Naftzger, R. A., and Chakrabarti, S. K., "Scattering of Waves by Two-Dimensional circular Objects in Finite Water Depths," J. Ship Research, Vol. 23, No. 1, 1979, pp. 32-42.
7. Bai, K. J., "Diffusion of Oblique Waves by an Infinite Cylinder," J. Fluid Mech., Vol. 68, Part 3, 1975, pp. 513-535.
8. Vongvissomjai, S., and Hanif, M., "Wave Forces on Elliptical Cylinders by Finite Element Methods," Proc. of the 1st Intern. Conf. on Environ. Forces on Eng. Structures, Imperial College, London, England, July, 1979, pp. 219-235.
9. Chen, H. S., and Mei, C. C., "Oscillations and Wave Forces in a Man-Made Harbor in the Open Sea," Presented at the 10th Naval Hydrodynamics Symposium, MIT, Cambridge, Mass., June, 1974.
10. Zienkiewicz, O. C., et al., "The Coupling of the Finite Element Method and Boundary Solution Procedures," Intern. J. of Numerical Methods in Engineering, Vol. 11, 1977, pp. 355-376.
11. Bird, H. W. K., and Shepherd, R., "Wave Interaction with Large Submerged Structures," J. the Waterways. Port, Coastal and Ocean Div., Vol. 108, WW2, May, 1982, pp. 146-162.
12. Nichols, B. D., and Hirt, C. W., "Calculating Three-Dimensional Free Surface Flows in the Vicinity of Submerged and Exposed Structures," J. Comp. Phys., Vol. 12, 1973, pp. 234-246.
13. Thompson, J. F., et. al., "Solutions of the Navier-Stokes Equations in Various Flow Regimes on Fields Containing any Number of Arbitrary Bodies Using Boundary-Fitted Coordinate Systems." Lecture Notes in Physics, Vol. 59, 1976, pp. 421-450.
14. Hwang, R. R., et. al., "Time-Dependent Incompressible Viscous Flow past a Circular Cylinder," J. the Chinese Institute of Engineers, Vol. 9, No. 6, 1986, pp. 617-631.
15. Haussling, H. J. and Coleman, R. M., "Nonlinear Water Waves Generated by an Accelerated Circular Cylinder," J. Fluid Mech., Vol. 92, part 4, 1979, pp. 767-781.
16. Chapman, D. C., "Numerical Treatment of Cross-shelf Open Boundaries in a Barotropic Coastal Ocean Model," J. Phys. Oceanogr., Vol. 15, No. 8, 1975, pp. 1060-1075.
17. Naftzger, R. A. and Chakrabarti, S. K., "Scattering of Waves by Two-Dimensional Circular Obstacles in Finite Water Depths," J. Ship Research, Vol. 23, No. 1, 1979, pp. 32-42.
18. Ogilvie, t. F., "First and Second-Order Forces on a Cylinder Submerged Under a

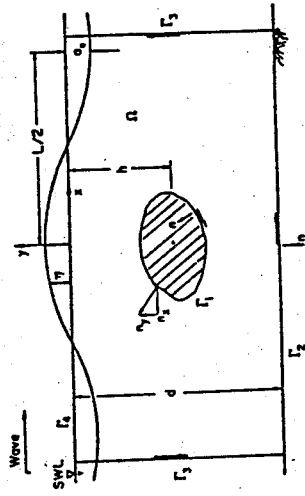


Figure 1. Definition sketch of the physical problem

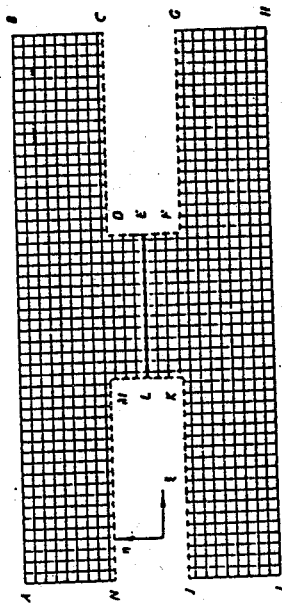


Figure 2. The computational region and coordinate system.

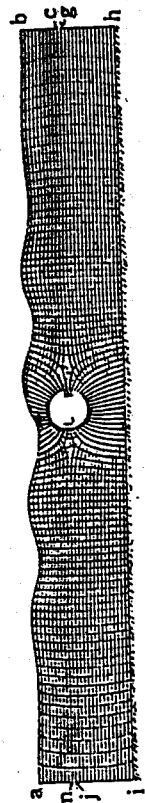


Figure 3. The computational coordinate system in physical space.

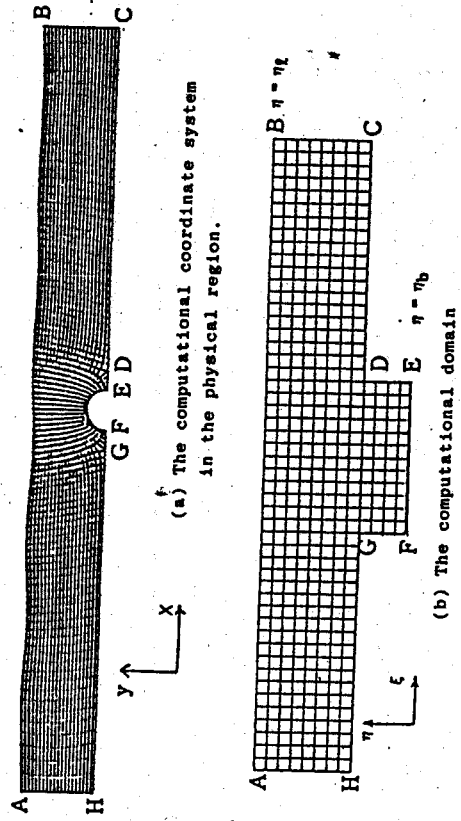


Figure 4. The application of the boundary-fitted coordinate system to bottom-seated half cylinder.

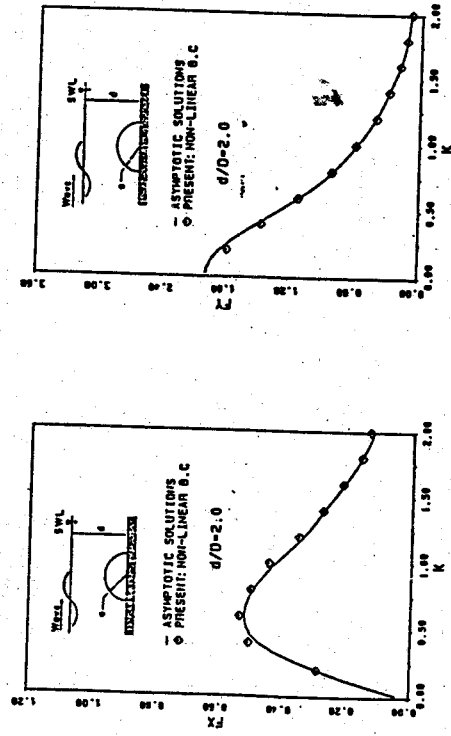


Figure 5. Dimensionless maximum horizontal force on bottom-seated half cylinder

Figure 6. Dimensionless maximum vertical force on bottom-seated half cylinder

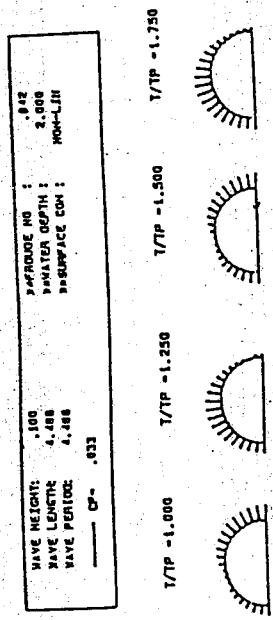


Figure 7. Pressure distribution on bottom-seated half cylinder

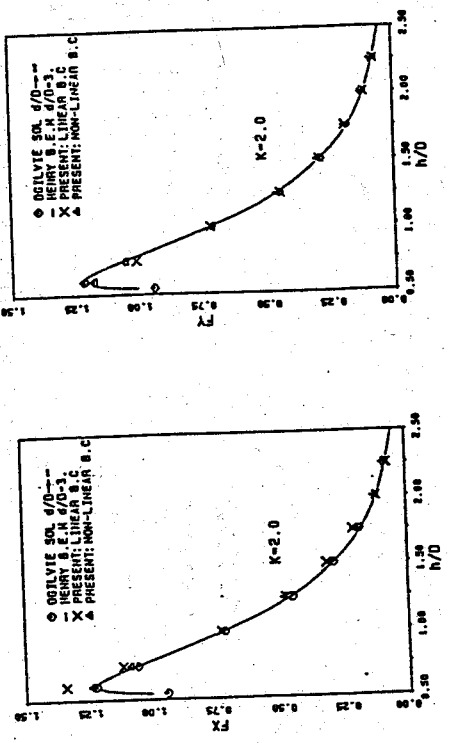


Figure 8. Dimensionless maximum forces for submerged horizontal cylinder at different depths

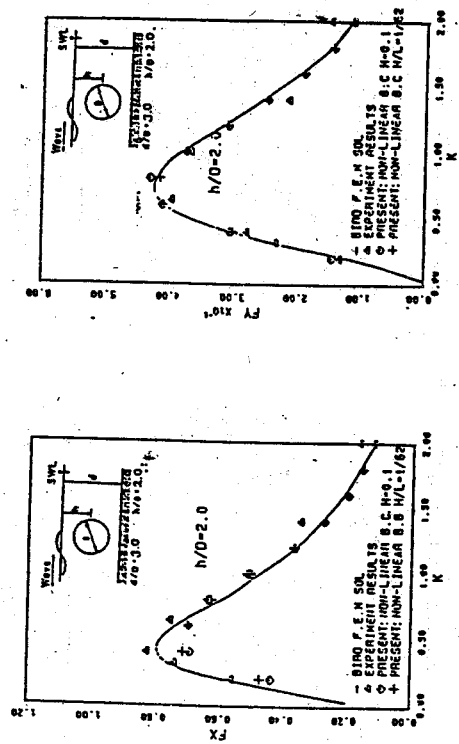


Figure 9. Dimensionless maximum forces on a submerged horizontal cylinder

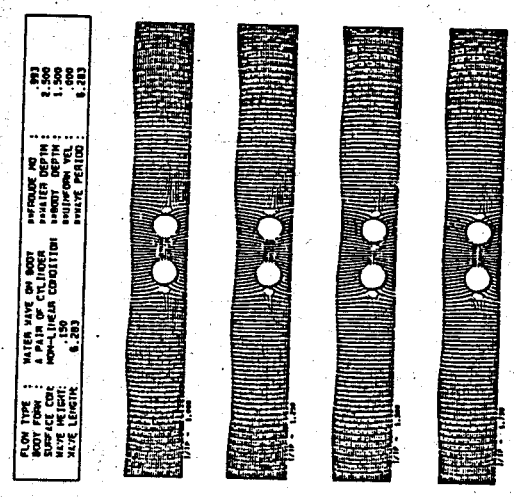


Figure 10. The computational coordinate system in physical space at different time steps.

空氣品質移動監測站之設置理論

梁文傑 林宗萬

中央研究院物理研究所暨國立台灣大學機械工程研究所

摘要

本文針對空氣品質監測提出兩種不同方式移動監測站設計模式。一為大型污染源之污染管制事件移動監測站之設計模式；另一為區域性空氣污染移動監測站之設計模式。並以高雄縣興達地區為例，比較兩者之異同，並討論兼顧局部及區域性污染監測目的的可行性。

大型點污染源之移動監測網設計方法係以全年中最常發生最大濃度地點為候選站址；以移動平均法計算各候選站址獲取最大濃度發生之累積次數，並考慮對候選站址之預報效率以求取候選站址之優先次序與最佳停留時間。

區域性移動監測網之設計方法，係以一年為期，停留時間為二週、三週、一月、三月、半年之移動平均，擷取移動平均時期之氣象資料進行計算，先求其風向、風速，穩定度三者之聯合頻率，再求污染濃度相關係數矩陣固有值及固有函數，然後利用污染濃度估計值誤差求值公式，求取增設第三站前後（即除了區域之外接圓上增設兩站外，再增設一站為原則），全部網路點上估計值誤差累計平均值，以增設第三站後誤差最小者之移動平均時間作為移動監測網之最佳停留時間設計。文中亦另考慮預報效率和移動損耗率至四天之情況，並作比較，求取最佳停留時間。

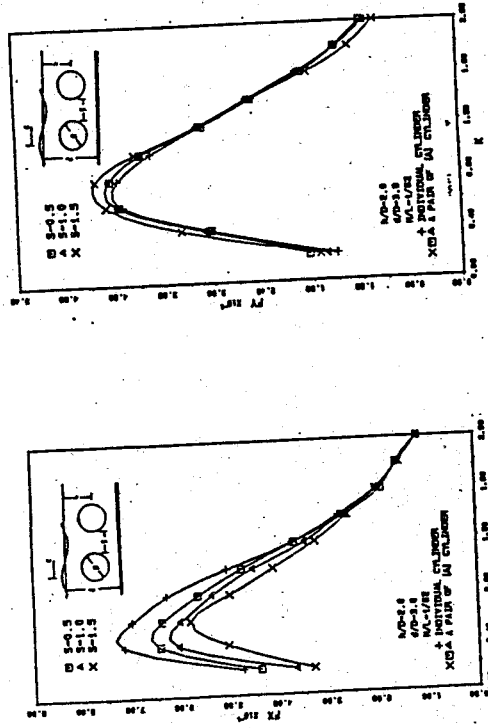


Figure 11. Dimensionless maximum forces of cylinder A for two submerged horizon-mounted cylinders at different spacings

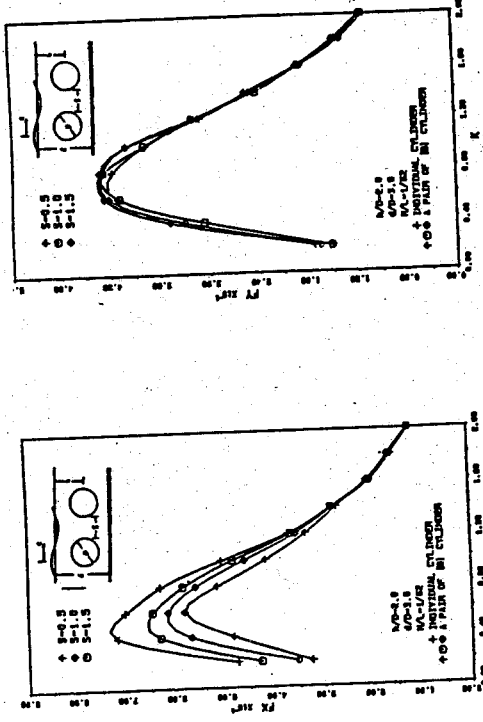


Figure 12. Dimensionless maximum forces of cylinder B for two submerged horizon-mounted cylinders at different spacings

Abstract

This paper provides two methods for local and regional air quality moving monitoring stations design. One is for air monitoring near point source. The other is for regional air quality survey. The principles are applied to the Sin-Ta Area.

For a large point source, the objective of monitoring is assigned to determine the occurrence of maximum concentration. The purpose of regional air quality survey is to obtain the distribution of pollutants of whole region.

The local air quality monitoring stations for a large point source are located at where the maximum concentration likely occurs. The regional air quality monitoring stations are located at the point where the error of estimation is largest. The best persistent time for a local air quality moving monitoring station to stay is obtained as the moving average time which the average of largest frequency of occurrence of maximum concentration for all stations is largest. The best persistent time for a regional one to stay is choosed as the time which the average of error of estimate for the moving average period after including a new station is least.

For local air quality monitoring, there are three stations needed in Sin-Ta area if the standard of SO_2 concentration is taken as 0.020 ppm. For regional air quality survey the paper also figures out the locations of ten station. The best persistent times for local and regional moving station are suggested for several cases.

壹、前言

空氣污染濃度，常受到污染源排放率之改變和氣象、地形等因素的影響，而產生時空變化，要瞭解區域內空氣污染濃度之分佈情形，作為環境品質管制之依據，需作廣泛的污染情況監測，設置高靈敏的分析儀器系統與測站。但考慮經費效用及監測的完整性，除在區域內設置空氣品質固定監測網之外，亦可考慮設置移動測站，利用預測模式與統計之方法，選擇移動方式和停留時間的長短，以佳化測站之監測效能。

本文依梁、林氏之研究(1982)，Noll(1977)和Smith(1979)等人之設計原理，美國環境保護協會EPA所定之設計準則規定(1975)，加上對排放條件各異的多點污染源修正法及各種簡化運算法，建立多點大型污染源之移動測站設計原理，探討缺乏固定測站時，移動測站的移動方式與停留時間。另依美國環境保護協會Buell和Caider(1975)之設計理論，建立區域性空氣品質移動測站之設計方法，並尋求移動測站最佳停留時間。

本文並以高雄縣興達地區為例，利用中央研究院物理研究所與台灣電力公司在興達火力發電廠附近，自民國七十二年十二月一日至民國七十三年十一月三十日之氣象和污染源等資料，運用大氣擴散模式及統計方法等電腦程式進行計算，再將結果資料作比較討論，以供有關機關設置監測站之參考。

貳、大型污染源管制事件移動測站設計原理

將一地區長期(一年或數年)氣象資料(包括風向、風速、穩定度)及空氣污染源資料(包括排放量、排放溫度、排放速度等)輸入電腦中，利用大氣擴散模式及 $X_{max} = aH^b$ 迴歸公式，可求得風向、風速、穩定度聯合頻率情況下之最大濃度發生位置 X_{max} ，最大濃度 C_{max} 及出現次數。然後濾除以下三種情況：①對本地區

不發生影響之情況，如興達地區風向 1 至 7 及風向 16 吹入海中者，可予濾除。②低於所要求的空氣品質標準者，如興達地區 SO₂ 之管制事件標準為 0.020 ppm。③出現次數太少者，依 Smith 之建議，每年出現次數低於 10 次者，可不考慮設站。經此過濾之後，各風向之 X_{max} (下風距離位置)，即可列為移動測站進駐地址。若地址中已設有固定測站者，則濾去不計。

移動測站之監測效率與地址預測之準確與否直接相關。由過去一段時期之氣象資料統計值，以時間序列預報模式或主觀預報等方法，可預報得本地區未來一段期間之氣象資料，但其預報效率常隨預報時間之長短而異。如圖一所示，令 X_i 為第 i 組第 i 次測定值， \bar{X}_i 為第 i 組的平均值， \bar{X} 為所有測定值 (共 N × M 個) 時平均值，且

$$d\mu_i = X\mu_i - \bar{X},$$

$$D\mu = \bar{X}\mu - \bar{X},$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{MN} \sum_{\mu=1}^N \sum_{i=1}^M d\mu^2,$$

$$\sigma_m^2 = \frac{1}{M} \sum_{\mu=1}^M D\mu^2,$$

式中 σ 為所有測定值的變異數， σ_m 為子集 μ 的平均值變異數。設各偏差 $d\mu_i$ 互不相關，則

$$\sigma_m = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$$

今因風速、風向、與穩定度分類時，風速 W_s 分六級，組間距 ΔW_s 分別為 1.5, 1.7, 2.0, 2.4, 2.7 與 3.1 m/s，風向 W_d 分 16 級，組間距 $\Delta W_d = 1$ ；穩定度 IS 分 6 級，組間距 $\Delta IS = 1$ 。若污染管制事件的風速、風向、與穩定度的分佈為高斯分佈，一年資料平均為 \bar{W}_s , \bar{W}_d , \bar{IS} ，因平均情況亦即最常發生情況，故

所期望的測站地址為 (\bar{W}_s , \bar{W}_d , \bar{IS})，此位置代表 ($\bar{W}_s \pm \frac{\Delta W_s}{2}$, $\bar{W}_d \pm \frac{1}{2}$, $\bar{IS} \pm \frac{1}{2}$) 所形成之空間，今令

$$\frac{\Delta W_s}{2\sigma_{s_i}} = n_{s_i},$$

$$\frac{\Delta W_d}{2\sigma_{d_i}} = n_{d_i},$$

$$\frac{\Delta IS}{2\sigma_{i_s i}} = n_{i_s i},$$

若機率函數為常態，則當 $n_s = n_d = n_{i_s i} = 1$ 時， $n_s \cdot n_d \cdot n_{i_s i} = 1$ 所形成的空間機率為 (0.67)³，即 0.3。當 n_s , n_d , $n_{i_s i} \approx 1$ 時，($\bar{W}_s \pm \frac{\Delta W_s}{2}$,

$\bar{W}_d \pm \frac{1}{2}$, $\bar{IS} \pm \frac{1}{2}$) 空間的機率為 $F_{w_s}(n_{s_i}) \cdot F_{w_d}(n_{d_i}) \cdot F_{i_s i}(n_{i_s i}) = F_i$ ，亦即當 N_i 增大時， σ_i 減小， n_i 與 F_i 增大，故預測較長時間的統計值，預報效率較高。此處， $F_{w_s}(n_{s_i})$ 為 n_{s_i} 的常態分佈機率函數 (normal probability function)，當 n_{s_i} 為 1 時 $F_{w_s}(1)$ 為 0.67。則移動測站在預測地址的停留時間與測站移動方式可以下列方式估算：

(1) 就各移動地址上，統計逐時聯合頻率情況之出現次數。

(2) 假設移動測站每移動一次，包括行程耗時，架設安排等製作耽誤，需耗費 0 至 4 天之偵測時間。

(3) 考慮各資料組時間為一天，兩天，三天，四天，五天，六天，一週，二週，三週，四週，一月，二月，三月，四月，五月，六月等情況，作移動平均並考慮預報效率和移動損耗，累計移動測站對污染管制事件的測中次數，依大小排列，即可獲得移動測站移動方式與最佳停留時間。

叁、區域性空氣品質移動監測網之設計方法

區域性空氣污染監測設計，乃運用擴散模式電腦程式，計算污染濃度相關係數矩陣之固有值和固有函數，使用線性內推公式之電腦程式，將估計值統計誤差最大值者，選擇為新測站，反覆進行，直至所需數目的測站均決定為止。此法可在設站經費有限時，藉擴散模式及統計方法，尋求整個區域之最佳測站設計，以瞭解區域內空氣品質濃度分佈的整個情況。

本文利用高斯煙流模式來計算空氣污染濃度，其公式為：

$$x(x, y, 0; H) = (Q/\pi\sigma_y\sigma_z u) \exp\left[-\frac{1}{2}\left[\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2 + \left(\frac{z}{\sigma_z}\right)^2\right]\right]$$

其中， (x, y) 為濃度值 $x(x, y, 0; H)$ 所量測點之座標， x 為自污染源之下風距離， y 為下風軸之橫向距離， Q 為污染源強度 (g/s)， H 為污染源之煙囪高度， u 為風速 (m/sec)， σ_y ， σ_z 為擴散係數，可由 Eimutis 和 Konick (1972) 公式求得。

將整個區域劃分一定數目的網格點，本文取 9×9 個網格點，再利用大氣擴散模式求取各點之污染濃度值，進而計算點與點間之互變異數和相關係數，相關係數依次序排列，即可得相關係數矩陣。一共可有 81×81 個相關係數。

若以 λ_i 表固有值 $i=1, \dots, K$ ， $(\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_k)$ ， $\psi_i(x, y)$ 表相對之固有函數，則相關係數函數可以表示為：

$$K(x, y; \xi, \eta) = \sum_{i=1}^K \lambda_i \psi_i(x, y) \psi_i(\xi, \eta)$$

其中， (x, y) ， (ξ, η) 為污染濃度相關之兩點， Σ 記號上之 K 值表統計上較重要的固有值和固有函數之個數，而固有函數只在 9×9 個網格點上才有。

(x_0, y_0) 處污染濃度估計值之最小平方誤差，可自各測站 (x_i, y_i) 作線性迴歸而求得，其公式為：

$$F = \bar{\epsilon}^2 = \sigma^2 \left(1 - \sum_{i,j} g_i a_{ij} g_j\right)$$

其中， a_{ij} 為第 i 和 j 測站間相關係數矩陣元素。 g_i 為第 i 個測站與 (x_0, y_0) 點間污染濃度之相關係數， (x_0, y_0) 為尋求極小值的起點。 σ^2 為污染濃度在 (x_0, y_0) 時之變異數， a_{ij} 為 $\{a_{ij}\}$ 逆矩陣之元素。

在前述污染濃度估計值之最小平方誤差式中， $F = \bar{\epsilon}^2 = \sigma^2 \left(1 - \sum_{i,j} g_i a_{ij} g_j\right)$ ，因當 $x_0 = x_i$ ， $y_0 = y_i$ 時 g_i 有跳動不連續，故雖 $g_i = g(x_i, y_i)$ ； x_0, y_0 應趨近於 $C_0^*(x_i, y_i)$ ，但是實際值為 $g_i = C_0^*(x_i, y_i) + A(x_i, y_i)$ 。所以，當 (x_0, y_0) 接近已設測站位置時， $F(x_0, y_0)$ 值並不是趨近 0。為了要使函數值為 0，則估計值誤差必須作以下之修正。

$$\text{令 } F_0 = 1 - \sum_{i,j} g_i a_{ij} g_j$$

$$\text{則 } F = \sigma^2 (F_0 - A / F_0)^2$$

可使 (x_0, y_0) 在接近已設測站位置時， F 為 0。

測站位置之最佳選擇係利用已設站之樣值作最小平方之線性迴歸，其估計值誤差最大者，即為理想之測站位置。由於估計值誤差介於已設站之零值和污染濃度變異數之間，所以得找已設站較遠處之最大者。理想之測站位置可找自：(a) 測站所建成之三角形之重心，(b) 圓周上測站之中點。整個研究區域設在圓內，圓上至少要加設至兩點，餘則採最大估計值誤差處，依為新設測站位置之地址。增設一站後，即以 $n+1$ 點重新計算估計值誤差；再定下另一站後，再以 $n+2$ 點計算估計值誤差，……，反覆進行，直至所需測站數目達到為止。

區域性移動監測網之移動方式，以一年為期，停留時間為二週、三週、一月、三月、半年之移動平均，擷取移動平均時期之氣象資料進行計算，先求其聯合頻率，再求污染濃度相關係數矩陣之固有值和固有函數，然後利用污染濃度估計值誤差求值公式，求取增設第三站前後（即除了區域之外接圓上增設兩站外，再增設一站為原則），全部網格點估計值誤差累計平均值，以增設第三站後誤差最小者之移動

平均時間作為移動監測網之最佳停留時間設計。

考慮移動損耗時，將估計值誤差累計平均值乘上移動損耗修正值，再予比較。若考慮預報效率時，則定義一個新的估計值誤差如下：

$$E = E_2 \cdot F + E_1 \cdot (1 - F)$$

其中，E 為新的估計值誤差， E_1 、 E_2 為增設第三個測站前後之全部網格點之累計誤差平均值。

肆、個案分析

A. 氣象與污染源排氣分析

本文所使用之資料時間為民國七十二年十二月一日至民國七十二年十一月三十一日。配合雲量之觀測，每日的氣象資料為 2, 5, 8, 9, 11, 14, 17, 20, 21, 23 時的觀測值。氣象資料的建立，採以下幾個原則：

1. 風向、風速部份，採台電公司興達電廠測候站的觀測資料。
2. 因興達電廠測候站的氣溫資料不全（缺七十二年七月資料），且無雲量的觀測，故採附近之中央氣象局台南測候站的同期氣溫、雲量觀測值為代表。
3. 興達電廠利用聲波雷達測定混合層高度，本文採各季平均的每日逐時值為各相對月份的代價值。

4. 利用 Turner 法，將上述資料輸入電腦程式中，求取穩定度。

5. 風向分為十六級，風速分為六級，穩定度分為六級，雲量採十分法（即 1/10 ~ 10/10 方法），混合層高度以公尺為單位。

興達火力發電廠位於高雄縣永安鄉，在台南市南方十八公里，距高雄市約四十公里。廠址北臨興達港，西瀕台灣海峽，東南方均為塩田、漁塢、養蚵場。廠區原是濱海淺灘及淤塞之內海，經從外海抽砂填築而成新生地，共可容八部機組建廠之用，台灣電力公司廠區面積最大的火力發電廠。交通運輸有自開道路銜街省公路並

空氣品質移動監測站之設置理論

臨近高雄港，器材運輸甚為方便。

電廠於民國六十七年開始建廠，原計劃係以燃油為主之電廠，但至六十八年開工，因石油價格節節上漲，改以燃煤為主之電廠。現有兩部機組，煙囪高 250 公尺，為雙筒鐵塔型，兩支煙道共同由一座四脚鋼架支撐。在鍋爐房與煙囪之間安裝有 99% 以上高效率之靜電集塵器各兩組。

煙道中的二氧化硫會有部份遺留在靜電集塵器上，加熱器與煙道上，但為保守估計，假設沒有上項滯留，則二氧化硫排放量可估算如下：

$$\text{二氧化硫排放量} = 2 \times \text{燃料用量} \times \text{燃料含硫份}$$

興達電廠以燃煤為主，依其環境保護資料（表一），兩煙囪之二氧化硫排放量各為

$$2 \times 209 \text{ton} / \text{hr} \times 1.83 \%$$

$$= 2 \times 209 \text{ton} / \text{hr} \times 1.83 \% \times 2000 \text{lb} / \text{ton} \times 453.6 \text{g} / \text{lb} / 3600 \text{sech}^{-1} \\ = 1927.65 \text{g} / \text{sec}$$

另依其環境保護資料，興達電廠排塵總量為 210 kg/hr，但靜電集塵器平均效率為 99%，所以兩支煙囪之懸浮顆粒之排放量各為：

$$210 \text{kg} / \text{hr} \times (1 - 99\%)$$

$$= 2.1 \text{kg} / \text{hr}$$

$$= 2.1 \times 1000 \text{g} / 3600 \text{sec}$$

$$= 0.583 \text{g} / \text{sec}$$

大氣擴散模式計算所需之排放源資料，如煙囪高度 (H_s)，煙囪內徑 (d)，排氣速度 (V_s)，排氣溫度 (T_s) 等，均列於表一。

本所曾統計民國七十年九月至七十二年八月台電公司在興達地區之興達、永安、文南、湖內、劉家、下茄定測站之二氧化硫與懸浮微粒之測定值，可供與模式值比較。

B. 大型點污染源移動測站設計結果與討論

在研究大氣擴散之前，需先訂定污染處理之對象，通常電廠廢氣排放管制之研究方面，均採二氧化硫和懸浮微粒為研究之對象。不過，依本所對興達地區污染物實測值之研究發現，二氧化硫濃度與興達電廠發電量呈相關性，但仍有其他因素造成高濃度值；而懸浮微粒的污染與電廠的相關性很小，主要係由其他污染源，如交通運輸、建築工程等因素所引起，故本文之研究对象採二氧化硫為監測對象。本文之設站方法中，在取捨濃度值時，需訂定污染管制事件空氣品質標準；另在求 X_{FR} 及 X_{BAC} 時，亦需有一個濃度曲線所要超過之空氣品質標準。興達電廠之煙囪高達 250 公尺，對興達地區所產生之 SO_2 污染濃度甚低，未超過中華民國環境空氣品質之限值。因此本文採梁氏 (1983) 對興達地區六測站所測得之 SO_2 濃度值之前 80% 程度值作為考慮設站之空氣品質標準。其步驟係利用統計方法先求得興達地區 SO_2 實測值之平均濃度為 0.014 ppm，標準差為 0.0068 ppm。再查數學統計表得前 80% 程度時之濃度值為 0.020 ppm，以此值作為本文考慮設站之污染事件空氣品質標準。

大型污染源移動測站設計，分兩部份來研究。一為已有固定測站時之移動測站設計；另一為缺乏固定測站時之移動測站設計。其設計結果分述如下：

一、已設有固定測站時之移動測站設計結果

(一) 不考慮預報效率之設計結果：

經統計，興達地區最大污染濃度超過 0.0050 ppm 者共有 10 個可能情況，其中前三者濃度值大於 0.020 ppm 可採為固定測站，餘 7 者選為移動測站，其風向和下風發生距離，即可定為移動測站站址，如表二，其分佈如圖二。統計聯合頻率出現次數，在移動測站站址作停留時間為 1 天，2 天，3 天，4 天，5 天，6 天，1 週，2 週，3 週，4 週，1 月，2 月，3 月，4 月，5 月，6 月 (NN) 之移動平均，作一年期之累加。另考慮移動損耗時間 (LT) 為 0 ~ 4 天之統計，即以移動損耗修正值 $BN = \frac{NN-LT}{NN}$ (若移動損耗時間大於

移動平均之時間單位，則令 $BN = 0$) 乘上前述之出現次數累加值作為各移動

空氣品質移動監測站之設置理論

平均時間單位和移動損耗情況之代表值，再依各移動損耗狀況，分別比較各移動平均時間單位之累加出現次數，依大小排列，得最佳停留時間之優先順序，其結果說明如下：

1. 移動損耗為零時

最佳停留時間優先順序為 1 天，2 天，3 天，4 天，5 天，6 天，1 週，2 週，3 週，4 週，1 月，2 月，3 月，4 月，5 月，6 月。

2. 移動損耗為 1 天時

最佳停留時間優先順序為 2 週，1 週，3 週，6 天，5 天，4 週，1 月，4 天，3 天，2 天，2 天，3 月，4 月，5 月，6 月，1 天。

3. 移動損耗為 2 天時：

最佳停留時間優先順序為 3 週，4 週，2 週，1 月，6 天，2 月，5 天，3 月，4 天，4 月，5 月，3 天，6 月，2 天，1 天。

4. 移動損耗為 3 天時：

最佳停留時間優先順序為 4 週，3 週，2 週，1 週，1 月，2 月，3 月，6 天，4 天，5 天，5 月，6 月，4 天，3 天，2 天，1 天。

5. 移動損耗為 4 天時：

最佳停留時間優先順序為 4 週，3 週，2 週，1 週，1 月，2 月，3 月，4 月，5 月，6 天，6 月，5 天，4 天，3 天，2 天，1 天。

(二) 考慮預報效率之設計結果：

本文以相對預報效率值代表預報效率修正值，首先統計興達地區氣象資料中風速、風向、穩定度每三小時時間單位之標準差 σ_z 值，分別為風速 2.1 m/s，風向 10.2，穩定度 0.99，再以 $\sigma_{zi} = \sigma_z / \sqrt{N_i}$ 公式，計算停留時間 (NN) 為 1 天，2 天，3 天，4 天，5 天，6 天，1 週，2 週，3 週，4 週，1 月，2 月，3 月，4 月，5 月，6 月，1 年之風速，風向，穩定度之標準差，本文中風速分六級，平均級間距 ΔWS 為 2.3 m/s；風向分 16 級，級間距 ΔWD 為 1；穩定度分 6 級，級間距 ΔIS 為 1，然後以 $\Delta WS / 2 \sigma_{si}$ 為

n_{si} , $\Delta W D / 2 \sigma_{si}$ 為 n_{di} , $\Delta I S / 2 \sigma_{si}$ 為 n_{si} , 分別求各不同停留時間之 N_{si} , N_{pi} , N_{isi} 值, 再將 σ_{si} , σ_{di} , σ_{isi} 查常態分佈 Z 值表, 可得風速、風向、穩定度之個別預報效率 $F_{ws}(N_{si})$, $F_{wd}(N_{di})$, $F_{is}(N_{isi})$; 再定義總預報效率 $F_i = F_{ws}(N_{si}) \cdot F_{wd}(N_{di}) \cdot F_{is}(N_{isi})$; 再定 1 年預報效率為 1, 則以各停留時間長度之預報效率與實際 1 年預報效率之比值, 作為相對預報效率, 將各不同停留時間平均時間單位與移動損耗之累加出現次數, 乘上相對預報效率, 即得考慮預報效率情況之移動測站設計, 依大小排列, 可得最佳停留時間之優先順序, 茲說明如下:

1. 移動損耗為零時:

最佳停留時間優先順序為: 2 月, 3 月, 1 月, 4 週, 4 月, 3 週, 2 週, 5 月, 1 週, 6 月, 6 天, 5 天, 4 天, 3 天, 2 天, 1 天。

2. 移動損耗為 1 天時:

最佳停留時間為: 2 月, 3 月, 1 月, 4 週, 4 月, 3 週, 5 月, 2 週, 6 月, 1 週, 6 天, 5 天, 4 天, 3 天, 2 天, 1 天。

3. 移動損耗為 2 天時:

最佳停留時間為: 2 月, 3 月, 1 月, 4 週, 4 月, 3 週, 5 月, 2 週, 6 月, 1 週, 6 天, 5 天, 4 天, 3 天, 2 天, 1 天。

4. 移動損耗為 3 天時:

最佳停留時間為: 2 月, 3 月, 1 月, 4 週, 4 月, 3 週, 5 月, 2 週, 6 天, 5 天, 4 天, 3 天, 2 天, 1 天。

5. 移動損耗為 4 天時:

最佳停留時間優先順序為: 2 月, 3 月, 1 月, 4 週, 4 月, 3 週, 5 月, 2 週, 6 月, 2 週, 1 週, 6 天, 5 天, 4 天, 3 天, 2 天, 1 天。

二、缺乏固定測站時之移動測站設計結果

本文採最大污染濃度超過 0.0050 ppm 之狀況作為設置移動測站之考慮標準。依大氣擴散模式電腦程式計算, 共有 10 項, 其風向和下風距離即選定為移

動測站站址, 其分佈圖如圖三。再統計興達地區全年氣象資料, 計算此十個移動測站站址上相對風速、風向、穩定度聯合頻率逐日出現次數。

(一) 不考慮預報效率時之設計

將上述統計結果之逐日 $C_{max} > 0.0050$ ppm 聯合頻率出現次數, 作停留時間為 1 天, 2 天, 3 天, 4 天, 5 天, 6 天, 1 週, 2 週, 3 週, 4 週, 1 月, 2 月, 3 月, 4 月, 5 月, 6 月為時間為單位之移動平均, 取同一時段之累計最大值為該時段之代表值, 作一年期之累加。另同前述, 考慮依移動損耗之修正, 依大小排列, 得最佳停留時間之優先順序, 茲說明如下:

1. 移動損耗為零時:

最佳停留時間之優先順序為: 1 天, 2 天, 3 天, 4 天, 5 天, 6 天, 1 週, 2 週, 3 週, 4 週, 1 月, 2 月, 3 月, 4 月, 5 月, 6 月。

2. 移動損耗為 1 天時:

最佳停留時間之優先順序為: 6 天, 1 週, 5 天, 2 週, 4 天, 3 週, 3 天, 4 週, 1 月, 2 天, 2 月, 3 月, 4 月, 5 月, 6 月, 1 天。

3. 移動損耗為 2 天時:

最佳停留時間之優先順序為: 2 週, 3 週, 4 週, 1 月, 1 週, 6 天, 5 天, 2 月, 4 天, 3 月, 4 月, 5 月, 6 月, 2 天, 1 天。

4. 移動損耗為 3 天時:

最佳停留時間之優先順序為: 3 週, 2 週, 4 週, 1 週, 1 月, 2 月, 6 天, 3 月, 5 天, 4 月, 5 月, 4 天, 6 月, 3 天, 2 天, 1 天。

5. 移動損耗為 4 天時:

最佳停留時間之優先順序為: 3 週, 4 週, 2 週, 1 週, 1 月, 2 月, 3 月, 4 月, 6 天, 5 月, 6 月, 5 天, 4 天, 3 天, 2 天, 1 天。

(二) 考慮預報效率之變化:

將前節計算所得之累加出現次數, 乘上同一時間單位之預報效率, 即得考慮預報效率情況之移動測站設計。乘上預報效率之累加出現次數依大小排列,

得最佳停留時間之優先順序，茲說明如下：

1. 移動損耗為零時：
最佳停留時間優先順序為：2月，1月，4週，3月，3週，4月，2週，5月，1週，6天，5天，4天，3月，3天，2天，1天。

2. 移動損耗為1天時：
最佳停留時間優先順序為：2月，1月，4週，3月，3週，4月，2週，5月，1週，6天，5天，4天，3天，2天，1天。

3. 移動損耗為2天時：
最佳停留時間優先順序為：2月，3月，1月，4週，4月，3週，2週，5月，6月，1週，6天，5天，4天，3天，2天，1天。

4. 移動損耗為3天時：
最佳停留時間優先順序為：2月，3月，1月，4週，4月，3週，5月，2月，6月，1週，6天，5天，4天，3天，2天，1天。

5. 移動損耗為4天時：
最佳停留時間優先順序為：2月，3月，1月，4週，4月，3週，5月，2週，6月，1週，6天，5天，4天，3天，2天，1天。

三、討論

(一)未考慮預報效率且無移動損耗時，最佳停留時間為1天，其次為2天，最差為6個月。停留時間愈短，結果愈好，如圖四。

(二)已設有固定測站且不考慮預報效率時，移動損耗為1天，2天，3天，4天之最佳停留時間分別為2週，3週，4週，4週。

(三)已設有固定測站且考慮預報效率時，移動損耗0至4天最佳停留時間均為2個月，次佳者均為3個月。

(四)缺乏固定測站且不考慮預報效率時，移動損耗1至4天之最佳停留時間分別為6天，2週，3週，3週。

(五)缺乏固定測站且考慮預報效率時，移動損耗1至4天之最佳停留時間均為2個

月。

(六)本文之移動損耗時間列在停留時間內，移動損耗之修正值為(停留時間-移動損耗時間)/停留時間，故停留時間小於或等於移動損耗時間時，其修正值均為0，累加出現次數亦為0。

(七)停留時間愈長，移動損耗之影響愈小(修正值愈大)；如圖五，同一停留時間情況下，移動損耗時間愈長，修正值愈小，累加出現次數愈小。

(八)預報效率方面，停留時間愈長，預報效率愈大，從停留時間為1天之效率為0.083，逐漸增至停留時間為6個月之預報效率0.938，如圖六。

(九)除移動消耗為零之情形外，其餘各種移動損耗情況的最佳停留時間；在未考慮預報效率時為1至4週；若考慮預報效率，則均為2個月。

C. 區域性空氣品質移動監測站之設計結果與討論

本文以高雄縣興達地區為研究對象，將整個區域劃分為 9×9 個測站網格點，各點間距為5公里，中心在興達電廠旁，避免採興達電廠為中心(因只有一個污染源，該點之變異數為零，影響程式中相關係數之計算)又此中心點與鄰近中央山脈距離為20公里(大、小崗山不列入考慮)，相當於四個網格距離。一共可得 81×81 個相關係數矩陣。風向分16級，各級所代表之角度分別為 $22.5^\circ, 45^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ, 112.5^\circ, 135^\circ, 157.5^\circ, 180^\circ, 202.5^\circ, 225^\circ, 247.5^\circ, 270^\circ, 292.5^\circ, 315^\circ, 337.5^\circ, 360^\circ$ ，風速分為6級，各級代表風速值為 $0.75 \text{ m/s}, 2.45 \text{ m/s}, 4.40 \text{ m/s}, 6.7 \text{ m/s}, 9.35 \text{ m/s}, 12.3 \text{ m/s}$ 。穩定度分6級，求得各級穩定度之代表混合層高度值，在穩定度1, 2, 3, 4, 5, 6級之平均混合層高度分別為562.3公尺，463.5公尺，403.4公尺，364.2公尺，325公尺，336.5公尺，另興達電廠煙囪為雙筒鐵塔型，兩支煙囪基本條件相同，本文只輸入一支煙囪資料，在程式中予以疊合計算。污染物 SO_2 之排放量為 3.844 g/sec ，座標值為(0.6, 1)，煙囪高250公尺，最低污染濃度底值為 $1.0 \times 10^{-20} \text{ ppm}$ 。

一、佳化新增測站之設計結果：

(一)考慮移動損耗但不考慮預報效率時，增設第三站後之估計誤差平均值統計如表

六，停留時間優先順序如表七，說明如下：

1. 移動損耗為零時：
最佳停留時間優先順序為：3月、半年、1月、2週、3週。
2. 移動損耗為1天時：
最佳停留時間優先順序為：3月、2週、6月、3週、1月。
3. 移動損耗為2天時：
最佳停留時間優先順序為：2週、3週、1月、3月、半年。
4. 移動損耗為3天時：
最佳停留時間優先順序為：2週、3週、1月、3月、半年。
5. 移動損耗為4天時：
最佳停留時間優先順序為：2週、3週、1月、3月、半年。

(二)考慮移動損耗，考慮預報效率時，增設第三站後之估計誤差平均值統計如表

八，停留時間優先順序如表九茲說明如下：

1. 移動損耗為零時：
最佳停留時間優先順序為：半年、3月、1月、3週、2週。
2. 移動損耗為1天時：
最佳停留時間優先順序為：半年、3月、1月、2週、3週。
3. 移動損耗為2天時：
最佳停留時間優先順序為：半年、3月、2週、1月、3週。
4. 移動損耗為3天時：
最佳停留時間優先順序為：半年、3月、2週、1月、3週。
5. 移動損耗為4天時：
最佳停留時間優先順序為：2週、半年、3月、3週、1月。

(三)討論：

1. 不考慮預報效率時，移動損耗為零或1天時，最佳停留時間為三月；移動

本文以電腦程式來設計測站，以固有值和固有函數來代表相關係數矩陣，另以已設或自定之數點作為基本設站位址進行計算。

本文以大型點源污染管制事件所設計之三個固定測站為基本測站，進行區域性監測網之設計。興建電廠座標(0.6, 1)，測站之座標為(0.6, 4.96)，(0.6, 3.6)，(5.7, -4.1)，此三者皆在凸多邊形之周界上。形成一個三角形，外接圓之圓心為(0.6, 1) (興達電廠)，半徑為19公里，圓上無測站。預定增設3站，估計值最大誤差之百分比低降為0.01，副程式中之期望絕對誤差為0.01，副程式中之迭代次數為5次。相關係數網格點共81點，X軸上基本座標為-20，-15，-10，-5，0，5，10，15，20；Y軸上之基本座標亦同。

佳化新設站結果必須考慮 濾除不在陸地上之測站情況，各佳化測站座標依序為(18.8, 6.46)，(6.1, -17.2)，(9.4, -1.3)，其分佈圖如圖七。

二、區域內增設第三站前後估計值誤差之統計與比較

本文以一年為期(即自七十二年十二月一日至七十三年十一月三十日止)，作停留時間為二週、三週、一月、三月，半年之移動平均，求取區域內全部網格點在增設第三站前後之估計值誤差統計。

將各停留時間之各移動平均時期之估計值誤差累加，並除以組數，得平均值，代表各停留時間之估計值誤差平均值，統計如表三，由此可知，各停留時間在增設第三站後之估計值皆比增設前來得小，此顯示此增設之第三站設置位置理想，具有實質意義。

三、最佳停留時間之選擇

以增設第三站後之估計值誤差平均值最小者之移動平均時間為最佳停留時間。考慮移動損耗時，將估計值誤差乘上移動損耗修正值(如表四)。考慮預報效率時，定義一新的誤差統計值：

$$E = E_2 \cdot F + E_1 \cdot (1 - F)$$

其中，①F為各停留時間之相對預報效率值，如表五， E_1 ， E_2 分別表增設第三站前、後估計值誤差之累加平均值，計算後再加以比較。

損耗為2天，3天或4天時，最佳停留時間為2週。

2. 考慮預報效率時，移動損耗為零，1天、2天、3天，最佳停留時間為半年；移動損耗為4天時，最佳停留時間為2週。

伍、結論與建議

依 Stalker 之研究，以 SO_2 之日平均濃度而言，每日方哩至少需有四個測站才能夠有足夠的代表性。此種監測站數目在經濟上幾不可能。因此，如何經濟有效地設置偵測網，在所需的信賴程度上，收集具有代表性的污染物濃度資料，是十分重要的。

本文針對空氣品質與氣象監測網之設計，提出兩種不同方式之設計理論，一為大型污染源管制事件監測網之設計，另一為區域性監測網之設計。兩者之目的不同，前者係評估超過污染管制標準之污染事件為目的，後者則為瞭解區域內空氣品質分佈情形為目的。文中個別提出移動測站之設計方法，探討已設有固定測站和缺乏固定測站兩種情形之移動測站設計，其中並考慮移動損耗和預報效率等因素之修正，利用移動平均等統計方法，尋求移動測站最佳停留時間之設計，並以高雄縣興達地區為對象，探討各種設計方法之結果。

污染管制事件移動測站之設計結果，已設固定測站且不考慮預報效率時，移動損耗為零時，以1天停留時間最佳，移動損耗為1至4天時，分別以2週，3週，4週，4週之停留時間為最佳；若考慮預報效率時，各種移動損耗情況，皆以2週之停留時間為最佳。在缺乏固定測站且不考慮預報效率時，移動損耗為0至4天時，停留時間分別為1天，6天，2週，3週，3週為最佳，若考慮預報效率時，不論何種移動損耗，其最佳停留時間皆為2週。

區域性移動監測網之設計方法，則以一年為期，停留時間為2週，3週，1月，3月，半年之移動平均，取移動平均時期之氣象資料進行計算，先求其聯合頻數，再求污染濃度相關係數矩陣之固有值和固有函數，然後利用污染濃度估計值誤

差求值公式，求取增設第三站前後（即除了區域之外接圓上增設兩站外，再增設一站為原則），全部網格格點估計值誤差累計平均值，以增設第三站後誤差最小者之移動平均時間作為移動監測網之最佳停留時間設計。

其設計結果在不考慮預報效率時，移動損耗為零或1天時，最佳停留時間為3個月；移動損耗為2天，3天或4天時，最佳停留時間為二週。考慮預報效率時，移動損耗為零，1天，2天，3天時，最佳停留時間為半年；移動損耗為4天時，最佳停留時間為2週。

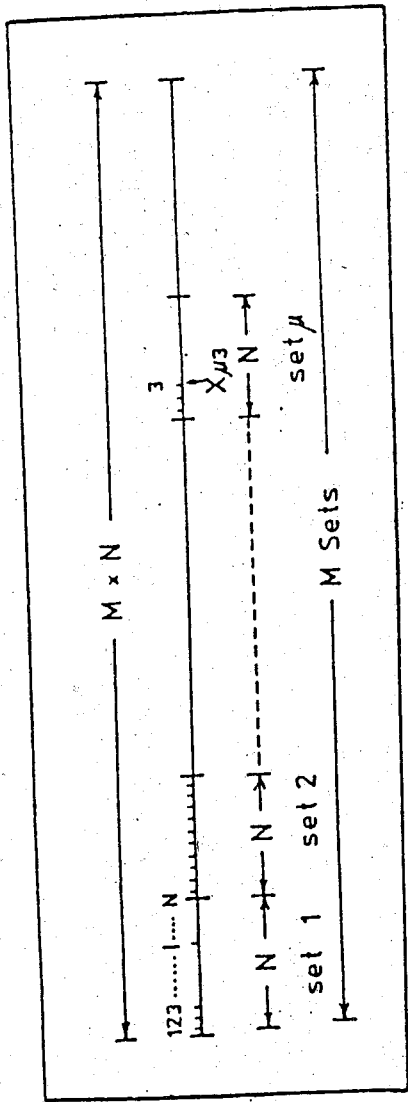
由上述結論，可得以下數點建議，供將來研究之參考：

- 一、考慮污染管制事件之監測工作時，只需利用污染管制事件監測網之設置方法來設計。
 - 二、欲瞭解地區之全面污染情況，則利用區域性監測網之設置方法來設計。
 - 三、若同時考慮污染管制事件監測與地區污染情況，可先使用污染管制事件監測網之設計原理求取產生較大濃度之測站為基本測站，再使用區域性監測網設置方法來增設其他測站。然後再作移動測站和最佳停留時間之設計。
- 本文所建議之考慮預報效率時，各種移動損耗情況之最佳停留時間，可供移動測站設置之參考，以在經費有限時，尋求最佳移動方式，以彌補固定測站監測工作之不足。

參考文獻

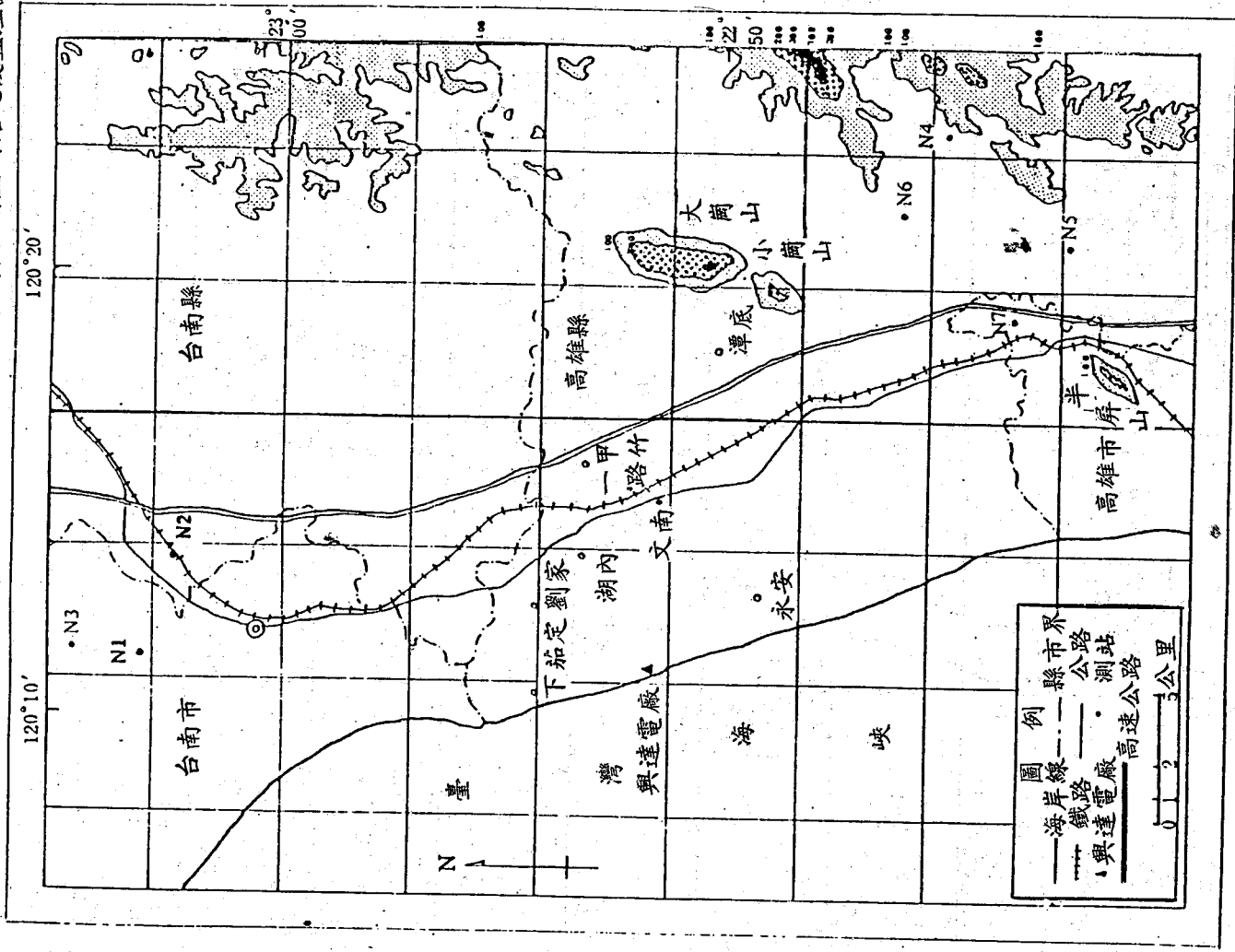
1. Abramowitz, M. and Stegun, I.A. (1964): "Handbook of Mathematical Functions", N.B.S. Applied Mathematics Series No. 55, Superintendent of Documents, U.S.G.P.O., Washington, D.C., xiv + 1046 pp.
2. Briggs, G.A. (1972): "Discussion Chimney Plumes in Neutral and Stable Surroundings", Atmos. Environ., Vol. 6, pp. 507-510.
3. Eimutis, E.C., and Konicck, M.G. (1972): "Derivations of continuous functions for the lateral and vertical atmospheric dispersion coefficients", Atmospheric Environment, Vol. 6, pp. 859-363.
4. Eugene C. Buell (1975) "Objective Procedures for Optimum Location of Air Pollution Observation Stations", Kaman Sciences Corporation, Colorado, U.S.A. pp. 218.
5. Flyger, H. et al, (1978), "Airborne Investigations of SO₂ Oxidation in the Plumes from Power Stations", Atmos Environ., Vol. 12, pp. 295-296.
6. Kenney, J.F. and Keeping, E.S. (1951), "Mathematics of Statistics, Part Two," D. Van Nostrand Co., Inc., New York, xii + 429 pp.
7. Miller, T.L. and K.E. Noll (1977): "Design of Air Monitoring Surveys Near Large Power Plants." pp. 121-142, in "Power Generation" ed. by K.E. Noll and W.T. Davis, Ann Arbor Science.
8. Noll, K.E. and T.L. Miller (1976): "Air Monitoring Survey Design", Ann Arbor Science, pp. 97-114.
9. Noll, K.E. et al. (1977): "An Objective Air Monitoring Site Selection Methodology for Large Point Sources", Atmos. Environ., Vol. 11, pp. 1051-1059.
10. Pasquill F. (1961): "The Estimation of the Dispersion of Windborne Material", Meteor Mag., 90, pp. 33-49.
11. Turner, D.B. (1970): Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates", PB-191482, U.S. Department of Health, Education and welfare, Cincinnati, Ohio.
12. U.S. Environmental Protection Agency (1977). "User's Manual for Single Source (CRSTER) Model", EPA-450/2-77-013, PB271360, U.S. EPA.
13. Wiener, N. (1949): "Extrapolation, Interpolation, and Smoothing of Stationary Time Series". The Technology Press and John Wiley & Sons, New York, ix + 163 pp.
14. Yamada, V.M. (1970): "Current Practices in Siting and Physical Design of

- Continuous Air Monitoring Stations", JAPCA, Vol. 20, No. 4, pp. 209-213.
15. 梁文傑、林劍信 (1982): "火力發電廠空氣品質監測系統之設置原理與應用", 中央研究院物理研究所集刊第十二卷, PP. 173 ~ 237。
 16. 梁文傑 (1983a): "興達火力發電廠廢氣排放對附近環境之影響之長期調查研究" FM-5, '中央研究院物理研究所研究報告', PP. 1 ~ 21。
 17. 梁文傑 (1983b): "興達火力發電廠廢氣排放對附近環境影響之長期調查研究 (煙氣追蹤實驗第一期報告) FM-8, 中央研究院物理研究所。PP. 15 ~ 21。
 18. 梁文傑 (1984): "興達火力發電廠廢氣排放對附近環境影響之長期調查研究 (煙氣追蹤實驗第二期報告) FM-10, 中央研究院物理研究所。PP. 1 ~ 27。
 19. 台灣電力公司火力發電工程處 (1980): "興達電廠建廠報告書", 台灣電力公司。PP. 1 ~ 26。
 20. 經濟部工業局 (1979): "中華民國台灣地區環境空氣品質標準", 環境污染防治法規彙編, 經濟部。PP. 1 ~ 20。

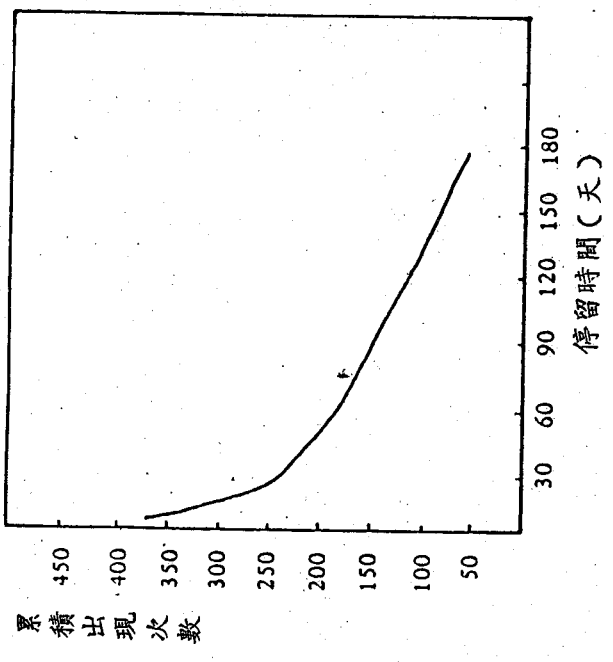


圖一 子集平均值標準偏差說明圖

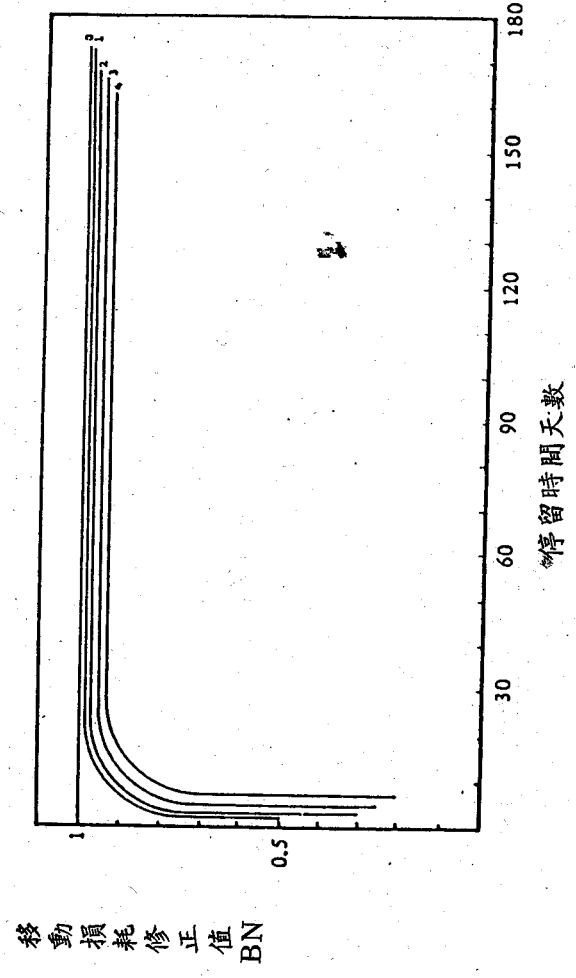
空氣品質移動監測站之設置理論



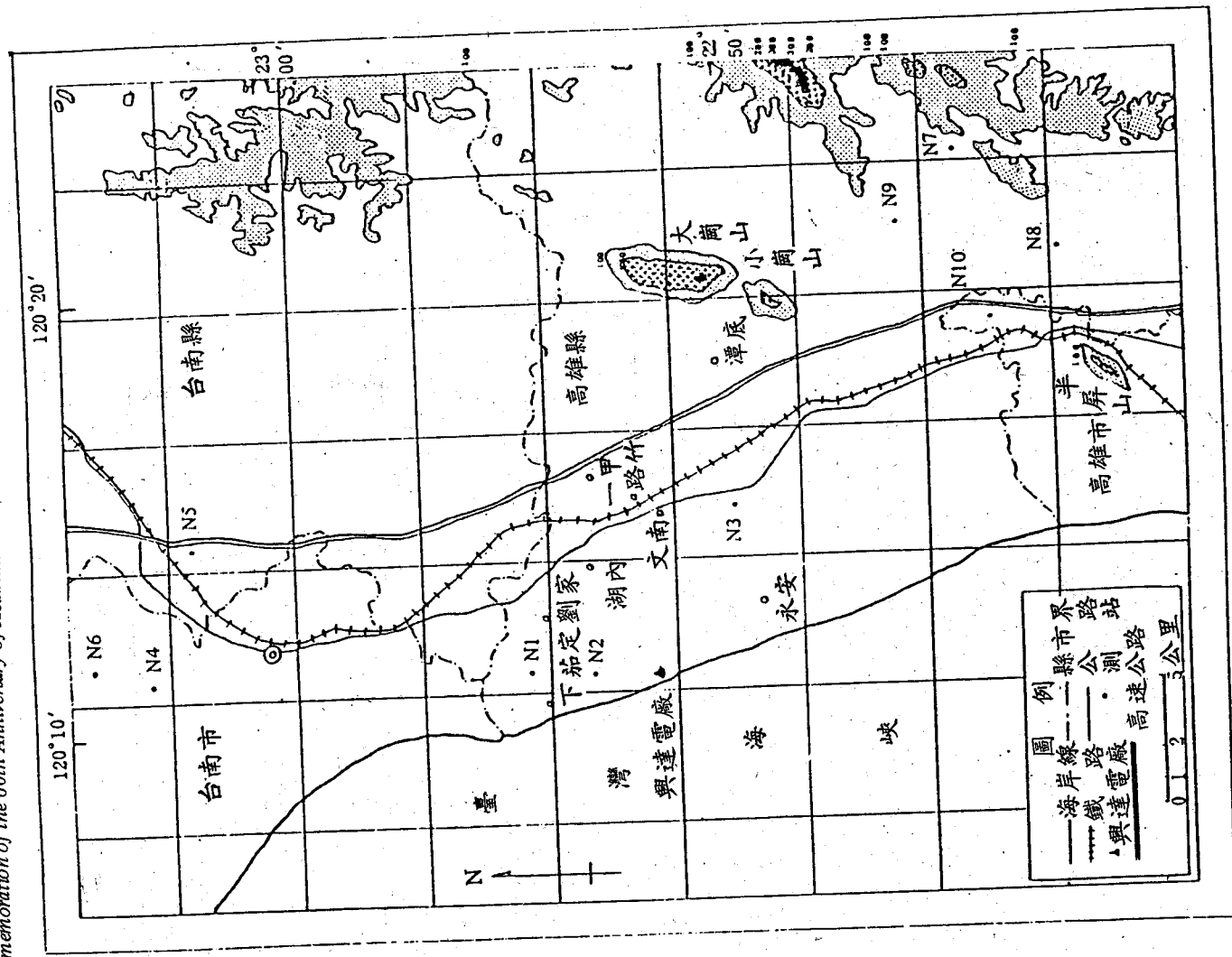
圖二 污染管制事件移動監測網設計在已設固定測站時，七個移動測站
 站址 (N₁ 至 N₇) 位置分佈圖 (等高線以公尺為單位)



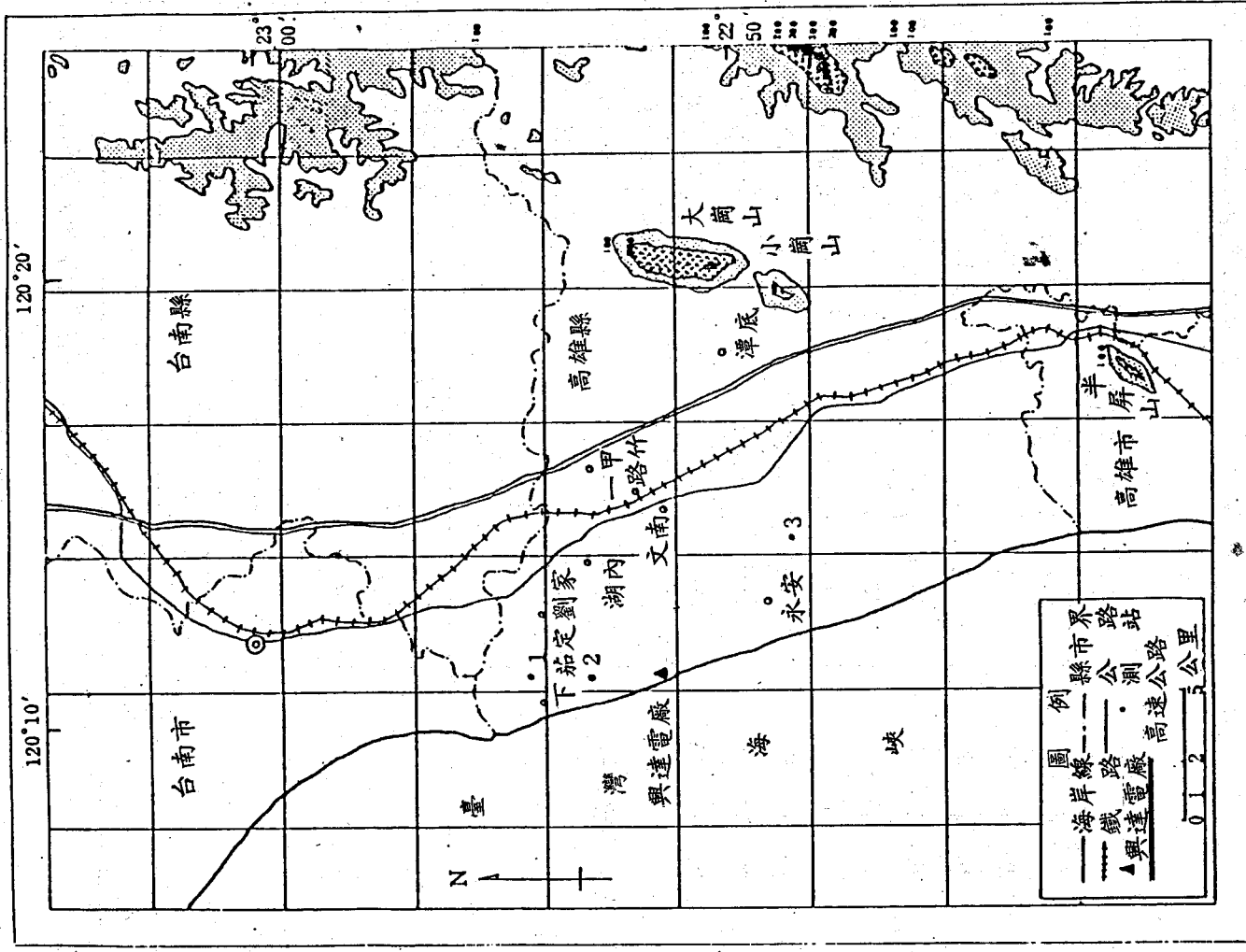
圖四 已設固定測站且不考慮預報效率和移動損耗時，累積出現數與停留時間關係圖



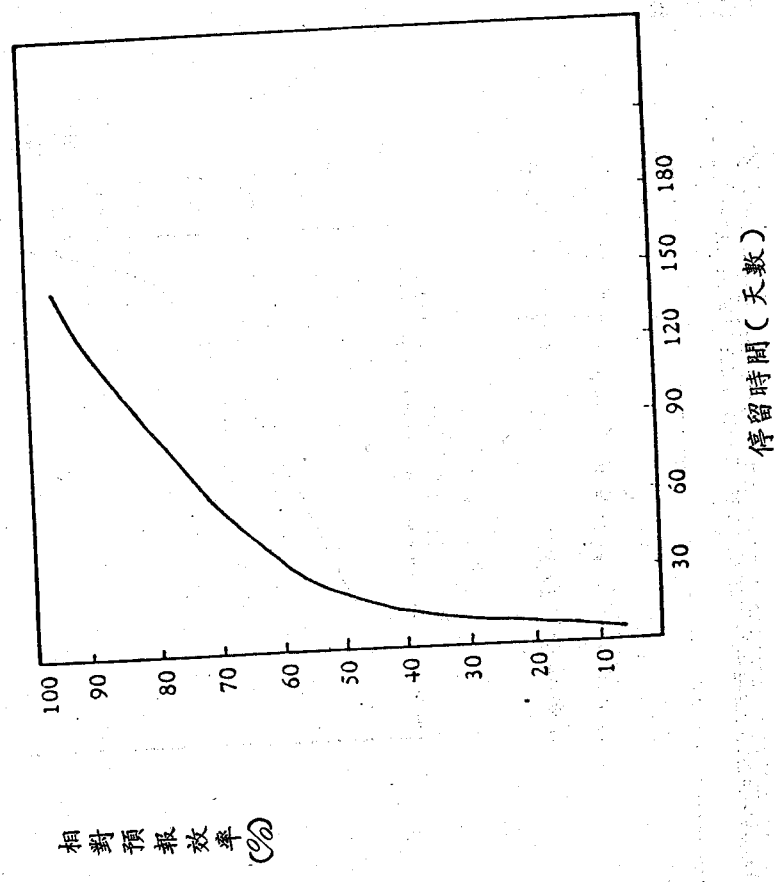
圖五 移動損耗修正值與停留時間關係圖。停留時間愈長，移動損耗影響愈小。圖內數字表移動損耗之天數(LT)



圖三 污染管制事件移動監測網設計在缺乏固定測站時，十個移動測站站址(N₁至N₁₀)位置圖(等高線以公尺為單位)



圖七 興達地區以污染管制事件三個固定測站為基本測站，所求得之三個移動測站站址位置圖。依順序 1, 2, 3 表示。



圖六 相對預報效率與停留時間關係圖

表一 興達發電廠環境保護工作一般資料表

項	目	資		料	備	註
		油	煤			
1. 容量 (MW)		50	0	煤		
2. 使用燃料		天然氣	煤			
3. 燃料耗率 (ton/hr)		110	209			
4. 燃料含硫量%		3.5	1.83			
燃料含氮量%		0.15	1.11			
5. 煙囪規範						
a 高度 (m)		250				
b 直徑 (m)		6.9				
c 結構材質		鐵塔支撐鋼製				雙筒鐵塔型
6. 建築物最大高度 (m)		137	143			設計值
7. 排氣溫度 (°C)		13.96	13.4			估計值
8. 排氣速度 (m/sec)		1,289,090	1,289,530			估計值
9. 排氣量 (Nm ³ /Hr)		1	4			估計值
10. 過剩空氣量 O ₂ %		2,187	1400			估計值
11. 排煙 SO ₂ 濃度 (ppm)		3.66	2.35			估計值
12. 排煙 SO ₂ 量 (ton/hr)		140	210			估計值
13. 排煙 NO ₂ 濃度 (ppm)			176			估計值
14. 排煙落塵含量 (mg/Nm ³)			210			估計值
15. 排煙總量 (kg/Hr)						Ep off 99.4 % S=0.8 %
16. 監視儀器		KIMOTO				
17. SO ₂ 於地上最高濃度出現地點 (m)						
18. SO ₂ 著地最高濃度 (ppm)						效率 97.1 % ~ 99.65 %
19. 高效率靜電集塵器						
20. 飛灰處理設備						
21. 底灰堆積場						

表二 污染管制事件已設固定測站時，七個移動測站站址資料表

編號	號	下風方向	下風距離 (km)
N 1		16	19.1
N 2		1	19.1
N 3		16	22.2
N 4		6	22.4
N 5		7	22.6
N 6		6	19.2
N 7		7	19.2

表三 各停留時間之累計誤差平均值

停留時間	二週			三週			一月			半年		
	二週	三週	一月	二週	三週	一月	二週	三週	一月	二週	三週	一月
設第三站前	22.85	22.74	22.15	22.85	22.74	22.15	22.85	22.74	22.15	22.85	22.74	22.15
設第三站後	15.67	15.77	15.58	15.67	15.77	15.58	15.67	15.77	15.58	15.67	15.77	15.58

表六 各停留時間和移動損耗情況下，不考慮預報效率之增設
 第三站後估計值誤差統計

停留時間 移動損耗天數	二週	三週	一月	三月	半年
0	15.67	15.77	15.58	15.01	15.02
1	14.85	14.98	15.05	14.83	14.93
2	13.48	14.19	14.54	14.66	14.84
3	12.38	13.56	14.02	14.50	14.72
4	11.13	12.77	13.49	14.33	14.67

表四 移動損耗修正 BN 值表， $BN = \frac{NN-LT}{NN}$

NN: 停留時間, LT: 移動損耗天數

停留時間 移動損耗天數	二週	三週	一月	三月	半年
0	1	1	1	1	1
1	0.93	0.95	0.966	0.988	0.994
2	0.86	0.90	0.933	0.977	0.988
3	0.79	0.86	0.9	0.966	0.98
4	0.71	0.81	0.866	0.955	0.977

表五 相對預報效率值表

停留時間	二週	三週	一月	三月	半年
相對預報效率 F (%)	40	45	55.5	82.7	93.8

表七 各停留時間及移動損耗天數情況下，不考慮預報效率時最佳停留時間優先順序表，以估計值誤差最小者為最佳停留時間

停留時間 移動損耗天數	順序	1	2	3	4	5
0		三月	半年	一月	二週	三週
1		三月	二週	半年	三週	一月
2		二週	三週	一月	三月	半年
3		二週	三週	一月	三月	半年
4		二週	三週	一月	三月	半年

寬板距靜電集塵器之性能模式

梁文傑 呂永正
中央研究院物理研究所
國立台灣大學機械工程學研究所

摘要

傳統的德氏方程式無法估計寬板距效應與擴散係數的影響等近來發現的非德氏現象。本文以紊流擴散模式計算靜電除塵器的除塵效率，並考慮擴散係數與寬板距效應對於除塵效率的影響。

計算電場分佈時考慮離子電荷與塵粒電荷對電場影響，並以塵粒位置之電場強度計算顆粒充電量。流場特性則以 $K \cdot \epsilon$ 雙方程式紊流模式計算。因不均匀電場強度造成極板處濃度值較低，使計算所得的集塵效率較傳統德氏效率為低。電場強度隨板間距增加而增強，但顆粒充電量則先增加後減少，由二者之消長，可定性估量最佳效率板間距。由質量通量增加率和板間距增加率相等之條件，可定量估量最佳效率板間距，與數值模擬結果比較最佳板間距相差在 9% 以內。考慮擴散係數對於收集效率的影響，發現大擴散係數使極板處有較高濃度值，對於收集效率有正面影響，此結果與實驗發現之非德氏現象相符。

壹、引言

電力式的空氣除塵裝置靜電除塵器是一種能處理大量廢氣而且具有高效率的空氣污染防治設備，利用加高壓於極板間的電極線，使極線周圍產生電暈現象，讓氣流中的塵粒帶電，荷電的塵粒受電場推動往極板方向移動，撞擊上收集板而被收集。

表八 各停留時間和移動損耗情況下，考慮預報效率時之增設第三站後估計值誤差統計

停留時間 移動損耗天數	二週	三週	一月	三月	半年	年
0	19.98	19.60	18.50	16.16	15.42	15.42
1	18.58	18.62	17.87	15.97	15.33	15.33
2	17.18	17.64	17.26	15.79	15.23	15.23
3	15.78	16.86	16.65	15.61	15.11	15.11
4	14.19	15.88	16.02	15.43	15.07	15.07

表九 各停留時間及移動損耗天數情況下，但考慮預報效率時最佳停留時間優先順序表。定義此時之估計值誤差 $E = E_2 \cdot F + E_1(1-F)$ ， E_1, E_2 為增設第三站前後之估計誤差， F 為預報效率。以估計值誤差最小者為最佳停留時間。

順序 移動損耗天數	1	2	3	4	5
0	半年	三月	一月	三週	二週
1	半年	三月	一月	二週	三週
2	半年	三月	二週	一月	三週
3	半年	三月	二週	一月	三週
4	二週	半年	三月	三週	一月

預測靜電除塵器的除塵效率，一般係利用德氏方程式 (Deutsch equation) 計算。然而，最近幾年發現很多非德氏現象 (non-Deutsch phenomena)。例如寬板距效應、紊流擴散係數等的影響，傳統的德氏方程式已無法預測此類效應。所謂寬板距效應，就是將靜電除塵器的板間距從 250 mm 提高到 600 mm 或者更大，除塵效率不但降低，甚至增加，並且在某板間距具有最大除塵效率，稱為寬板距效應。另外傳統的德氏方程式假設擴散係數為無窮大，無法評估有限擴散係數的影響。為了更進一步解釋這些現象，就需要發展更完善的理論。

首先麥克唐那⁽¹⁾ (Mc Donald, 1978) 等對平行板式除塵器內的電場性質，以數值方法來分析場內電壓，電場強度及空間電荷密度，並與實驗相比較，結果相當吻合。費德曼⁽²⁾ (Feldman) 及隆納⁽³⁾ (Leonard) 探討紊流擴散效應對顆粒濃度分佈及收集效率的影響。克普曼⁽⁴⁾ (Cooperman) 提出一個統一效率理論，嘗試以此理論解釋此一現象。

以上提及的報告，假設流速與紊流擴散係數為某一平均值，並且不考慮塵粒在場中的充電情形。近來梁與陳⁽⁵⁾ 以 $K - \epsilon$ 紊流模式計算紊流擴散係數及流速的分佈，並考慮離子電荷密度對於塵粒充電的影響。但是該研究仍然未考慮塵粒獲得電荷後對於電場分佈的影響。

本文中將以渠道式紊流場來模擬靜電除塵器內部的流場狀況，並且計算流速和擴散係數的分佈，考慮帶電塵粒對電場分佈的影響，以紊流擴散濃度方程式計算靜電除塵器的收集效率。此外，亦探討氣流流速、操作電壓及粒徑對收集效率的影響；寬板距靜電除塵器除塵效率與板間距的關係，亦為本文討論的重點，希望在平均電場強度不變的情況下，預測出最佳板間距，提供為設計上的參考。擴散係數對於濃度分佈及除塵效率的影響亦在本文討論範圍內。同時將紊流擴散的計算結果和傳統的側混模式做一比較。

貳、數學模式

本文所使用的靜電除塵器數學模式有：流場、濃度場、電場等三種數學模式。

一、統制方程式

1. 流場

靜電除塵器的流場型態可以二維渠道紊流來模擬，並且以 $K - \epsilon$ 紊流模式來解決紊流場的封合問題。本文對微有粗糙度的兩板渠道流作計算，且設其流場性質具對中心線對稱的特性。流場型態及計算區域如圖一。本文僅對穩定、不可壓縮及完全發展流區域作探討。根據質量平衡可得連續方程式及動量方程式為

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{\partial V}{\partial y} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} + (\bar{U} \cdot \nabla) \bar{U} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \nabla^2 \bar{U},$$

其中紊流的瞬時速度可由時間平均量及擾動量來表示

$$\bar{U} = (U + u', V + v'),$$

其中 U, V 為時間平均速度， u', v' 為速度擾動量，將 (1) 式取時間平均，且在穩定狀態、完全發展及不計順流向擴散效應的狀況下，可得順流向的動量方程式

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{u'v'} \right) = 0, \quad (2)$$

及垂直流向的動量方程式

$$-\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\overline{v'^2} \right) = 0. \quad (3)$$

將 (3) 式對 y 軸從 y 積分到 H 得

(4)

$$\frac{P}{\rho} + \frac{v^2}{2} = \frac{P_0}{\rho},$$

其中 $P_0 = P_0(x)$ ，為壓力在固體邊界上的值，又因流場為完全發展，得

$$\frac{\partial}{\partial x} (\overline{v'^2}) = 0.$$

將(4)式對 x 微分，得

$$\frac{dP}{dx} = \frac{dP_0}{dx} = \text{常數}.$$

將(5)代入(2)，再對 y 軸從 y 積分到 H ，得

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dP_0}{dx} (H-y) + \left(\nu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{u'v'} \right)_{\text{wall}}$$

$$- \left(\nu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{u'v'} \right) = 0.$$

在固體邊界上紊流不存在，故其剪應力純由分子的黏滯性所引起，即

$$-\nu \frac{\partial U}{\partial y} \Big|_{\text{wall}} = u_*^2,$$

其中 u_* 為摩擦速度表為

$$u_* = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}.$$

將(7)代入(6)，得

$$-\frac{1}{\rho} \frac{dP_0}{dx} (H-y) - u_*^2 - \left(\nu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{u'v'} \right) = 0$$

在中心線上有對稱性質，故得

$$\frac{\partial U}{\partial y} = \overline{u'v'} = 0.$$

所以(8)式在中心線上化為

$$u_*^2 = -\frac{H}{\rho} \frac{dP_0}{dx} \tag{9}$$

將(9)式代入(8)式，可得

$$-\overline{u'v'} = -\nu \frac{\partial U}{\partial y} - u_*^2 \frac{y}{H} \tag{10}$$

其中 $-\overline{u'v'}$ 為紊流雷諾應力。

故以(9)式代入(2)式得

$$\frac{u_*^2}{H} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{u'v'} \right) = 0 \tag{11}$$

其中未知數較方程式為多，故方程式(11)需再加上紊流模式來解決封合問題。

本文採用 $K-\epsilon$ 紊流模式⁽²⁾，其中 K 為紊流動能， ϵ 為紊流動能消散率，可分別表為

$$K = \frac{1}{2} \overline{u_i u_i}$$

$$\epsilon = \nu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$$

雙方程式紊流模式採梯度模型表示法，即採用渦旋黏滯/擴散係數觀念 (eddy viscosity/diffusivity)，將雷諾應力表為紊流黏滯係數 ν_t 及時間平均流速之梯度的關係式，即

$$-\overline{u_i u_j} = \nu_t \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right] - \frac{2}{3} k \delta_{ij} \tag{12}$$

其中 ν_t 以克-卜關係式 (Kolmogorov-Prandtl relation)

$$\nu_t = C'_{\mu} K^{1/2} \ell,$$

式中 ℓ 為大渦旋長度尺度。又 ϵ 可定義為⁽⁶⁾⁽⁷⁾

$$\epsilon = \frac{K^{3/2}}{\rho}$$

故 $K-\epsilon$ 模式之紊流黏滯係數及雷諾應力在此可分別表為

$$\nu_t = C_\mu \frac{K^2}{\epsilon} \quad (13)$$

$$-\overline{u'v'} = \nu_t \frac{\partial U}{\partial y} \quad (14)$$

$K-\epsilon$ 模式以兩個微分方程式來解 K 及 ϵ ，關係如下 (7)

$$\frac{\partial K}{\partial t} + U_i \frac{\partial K}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial K}{\partial x_i} \right) - \overline{u'_i v'_i} \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - \epsilon \quad (15)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial t} + U_i \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial x_i} \right) - C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{K} \overline{u'_i v'_i} \frac{\partial U_i}{\partial x_i} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{K} \quad (16)$$

同前述的基本假設，同時加分子的擴散效應，上二式可化成

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial K}{\partial y} \right] - \overline{u'v'} \frac{\partial U}{\partial y} - \epsilon = 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right] - C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{K} \overline{u'v'} \frac{\partial U}{\partial y} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{K} = 0 \quad (18)$$

式中

$$\sigma_k = 1.0,$$

$$\sigma_\epsilon = 1.3,$$

$$C_\mu = 0.09,$$

$$C_{\epsilon 1} = 1.44,$$

$$C_{\epsilon 2} = 1.92,$$

綜合上述諸方程式，流場統制方程式如下：

$$\frac{\partial U}{\partial y} = 0,$$

$$\frac{u_*^2}{H} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\nu \frac{\partial U}{\partial y} - \overline{u'v'} \right) = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial K}{\partial y} \right] - \overline{u'v'} \frac{\partial U}{\partial y} - \epsilon = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{\sigma_\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} \right] - C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{K} \overline{u'v'} \frac{\partial U}{\partial y} - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{K} = 0,$$

2. 濃度場

受穩定電場作用下的穩定狀態濃度方程式 (8) 為

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} (\tilde{U}\tilde{C}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tilde{V}\tilde{C}) + \frac{qC_c}{3\pi\mu d} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\tilde{E}_x\tilde{C}) \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial y} (\tilde{E}_y\tilde{C}) \right] - D \left(\frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial y^2} \right) = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

濃度 \tilde{C} 可仿動量方程式，得

$$\tilde{C} = C + c', \quad (20)$$

式中 C 為時間平均濃度， c' 為濃度的擾動量，則 (19) 式可化為

$$\begin{aligned} \underbrace{U \frac{\partial C}{\partial x} + V \frac{\partial C}{\partial y} + \frac{qC_c}{3\pi\mu d} \left[\frac{\partial}{\partial x} (\tilde{E}_x C) + \frac{\partial}{\partial y} (\tilde{E}_y C) \right]}_{\text{I}} \\ + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (\overline{u'c'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'c'})}_{\text{III}} - D \underbrace{\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right)}_{\text{IV}} = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

式中 I 為對流項， $V \frac{\partial C}{\partial y}$ 因完全發展流， $V=0$ 而消去。II 為電力推動項，在順流方向此項較對流項小很多，可將順流方向的電力效應略去。III 為紊流效應項，順流方向的此項效應較對流項小很多，故略去。IV 為分子擴散項，同上的因素則順流方向效應

略去，得

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{qC_c}{3\pi\mu d} \frac{\partial}{\partial y} (E_y C) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v'c'}) - D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = 0 \quad (24)$$

其中紊流擴散效應以 $K - \epsilon$ 模式之渦旋擴散係數配合非克擴散定律，得

$$\frac{\partial}{\partial y} \overline{v'c'} = - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu_t}{S_c} \frac{\partial C}{\partial y} \right] \quad (25)$$

式中 S_c 為紊流休密特常數。依斯巴汀的建議⁽⁹⁾，可設

$$S_c = 0.5$$

將(23)式代入(22)式，得

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{qC_c}{3\pi\mu d} \frac{\partial}{\partial y} (E_y C) = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{S_c} \frac{\partial C}{\partial y} \right] \quad (26)$$

式中 d 為顆粒粒徑， q 為顆粒充雷量， C_c 為吉林哈姆因子 (Cunningham correction factor)，其值為

$$C_c = 1 + \frac{2\lambda}{d} [1.257 + 0.4 \exp(-0.55/\lambda)] \quad (27)$$

此處

$$\lambda = \frac{\mu}{0.499 \rho V_0} \quad (28)$$

$$\tilde{V}_0 = \frac{8KT}{\sqrt{\mu m}}$$

式中 λ 為氣體分子之平均自由徑 (mean free path)， \tilde{V}_0 為離子之根的均方熱速度， K 為波茲曼常數， m 為離子質量。

3. 電場

A、電暈之產生

靜電除塵器依電暈電極線之極性區分，有兩種電暈形式，即負電性的 (negative) 和正電性的 (positive)。負電性電暈較正電性電暈穩定且具有高的電流

寬板距靜電集塵器之性能模式

和電場，得以提高除塵效率。因此，負電性電暈幾乎全使用在工業上的靜電除塵器，本文也以負電性電暈靜電除塵器為討論範圍。其缺點為負電性電暈會產生臭氣，若使用在空氣調節上，必須考慮到這個問題，一般在空氣調節使用的均是正電性電暈靜電除塵器。

當靜電除塵器中細小的電極線通以高壓直流電，線極和板極兩電極間會有電場存在，當外加電壓較電暈起動電壓低時，兩電極間僅有靜電場存在，若外加電壓較電暈起動電壓高時，電極線附近的電場足夠大到使釋出的自由電子撞擊氣體分子，而使氣體分子產生離子化。電極線附近的高電場內，自由電子和氣體分子每次碰撞能夠形成一帶正電的離子和另一自由電子，形成電暈現象。當離開電暈區後的自由電子繼續移向電極板 (正極)，此時的自由電子已損失部份能量，經撞擊中性的氣體分子後，附着於塵粒上，成為負離子，繼續向正極板移動，最後撞上正極板而被收集。

根據彼克氏 (Peek) 實驗，電暈之產生與電極線線的粗細有關，電暈的電場與電極線的半徑 a 之關係為⁽¹⁰⁾

$$E_c = 30f \left(\frac{T_0 P}{T P_0} + 0.03 \sqrt{\frac{T_0 P}{T P_0 a}} \right), \quad (29)$$

式中 P_0 與 T_0 分別為一大氣壓及 293°K， f 為電極線的粗糙程度，乾淨平滑的電極線 f 值為 1，一般實際上 f 值可以假設為 0.6。

產生電暈時的電壓稱電暈起動電壓，對於平行板式靜電除塵器可以下式估計其電暈起動電壓⁽¹¹⁾

$$V_c = a E_c \ell_n (D/a)$$

$$D = \frac{4Sx}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cosh(m\pi Sy/Sx) + 1}{\cosh(m\pi Sy/Sx) - 1}$$

式中 a 為極線半徑。電暈起動電壓不僅和電極線粗細有關，亦和極線間距，板極間距之大小有關。

B、電場

當電壓低於電暈起動電壓時，在線極和板極兩電極間沒有空間充電效應，此時在兩電極間任一點之電壓可由靜電學理論保角映射法求得⁽¹⁾

$$V(x, y) = V_0 \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} l_n \left[\frac{\cosh \pi (y - 2mSy)}{\cosh \pi (y - 2mSy)} \right] / 2Sx \right. \\ \left. - \frac{\cos(\pi x / 2Sx)}{\cos(\pi x / 2Sx)} \right\} \times \left\{ \sum_{m=-\infty}^{\infty} l_n \left[\frac{\cosh(\pi mSy)}{\cosh \pi mSy} \right] / Sx - \cos(\pi a / 2Sx) \right\}^{-1} \quad (31)$$

當電壓高於電暈起動電壓時，兩電極間會有空間充電效應，使得收集板處的電場強度增加，此時的總電場等於空間充電效應與靜電場之和。

對於穩定狀態無磁場效應下，根據電場理論和電流連續方程式可以求得

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho, \quad (32)$$

$$\nabla \cdot \vec{j} = 0, \quad (33)$$

且

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad (34)$$

$$\vec{E} = -\nabla V, \quad (35)$$

$$\vec{j} = \rho b \vec{E}, \quad (36)$$

式中 ρ 為空間電荷密度 (space charging density)， b 為帶電粒子的冰度， ϵ 為空氣的容許度。

將 (34) (35) 代入 (32) 式可得高斯方程式

$$\nabla^2 V = -\rho / \epsilon \quad (37)$$

再利用 (34) (35) (36) (37) 式可由 (33) 式求得電流連續方程式

$$\nabla \cdot \vec{j} = \nabla \cdot (\rho b \vec{E}) = \rho b \nabla \cdot \vec{E} + b \vec{E} \cdot \nabla \rho + \rho \vec{E} \cdot \nabla b \\ = \rho b (\rho / \epsilon) + b (-\nabla V) \cdot (\nabla \rho) + \rho (-\nabla V) \cdot \nabla b \\ = 0, \quad (38)$$

寬板距靜電集塵器之性能模式

$$\rho^2 = \epsilon (\nabla V) \cdot (\nabla \rho) + (\epsilon \rho / b) (\nabla V) \cdot (\nabla b) \quad (39)$$

平均板式靜電除塵器中，必須聯解 (37) 式與 (39) 式，以求得電場強度和電壓分佈。

C、顆粒充電

靜電除塵過程中，顆粒被收集前靠顆粒充電以獲得電荷是一重要步驟，顆粒所受作用力和顆粒充電量有關，因此除塵效率和顆粒充電有關。顆粒充電過程主要有兩種機制⁽¹²⁾，場充電和擴散充電。

(A) 場充電

在場充電機制內，離子被視為沿電場線移動，而電場線和顆粒表面相交，離子和顆粒表面碰撞，使顆粒充電，當達一段時間後，顆粒充電量飽和，此時顆粒前緣不再和電場線相交。依此理論，顆粒獲得的電荷量與顆粒粒徑，電場強度，離子密度，曝露時間，離子冰度，和顆粒介電常數有關。其關係式為

$$\frac{dq}{dt} = \frac{N_i b q s e}{4 \epsilon} \left(1 - \frac{q}{q_s} \right)^2 \quad (40)$$

積分上式，起始條件為 $t = 0$ 時 $q = 0$ ，得

$$q = \frac{q_s}{\frac{4 \epsilon}{N_i b e t} + 1} \quad (41)$$

式中離子密度 N_i 為 $\frac{\rho_{ion}}{e}$ ，顆粒飽和充電量為

$$q_s = \frac{3K}{K+2} \pi \epsilon d^2 E, \quad (42)$$

式中 E 為塵粒所在處附近的電場強度。

(B) 擴散充電

擴散充電機制和顆粒與離子間的碰撞有關，顆粒充電速率由顆粒和離子間的碰撞機率來決定。此充電機制在整個顆粒表面均有發生。依此理論，顆粒獲得的電

荷量與顆粒粒徑，離子密度，離子的根均方速度 (RMS thermal speed of ions)，氣體的絕對溫度，和停滯時間有關，其關係式為

$$\frac{dq}{dt} = N_i e \frac{\pi}{4} d^2 V \exp\left(-\frac{qe}{2\pi\epsilon dKT}\right) \quad (43)$$

上式積分後，起始條件為 $t=0$ 時， $q=0$ ，得

$$q = \frac{2\pi\epsilon KdT}{e} \ell_n \left(1 + \frac{e^2 N_i dt}{2\epsilon\sqrt{2m\pi KT}}\right) \quad (44)$$

式中 e 為電子基本電荷量， m 為離子質量， K 為波茲曼常數。當電場低或等於零時，顆粒粒徑較 $0.2 \mu\text{m}$ 小者，此理論足以預測顆粒充電。在本文中，顆粒粒徑大於 $5 \mu\text{m}$ 者用場充電預測，在 $5 \mu\text{m}$ 以下採場充電與擴散充電預測。

(C) 顆粒空間充電的影響

空間充電對靜電除塵器之電場會有顯著的影響，若塵粒濃度很高時，則顯著地影響電壓和電流的關係。顆粒得到電荷之後携有部份電流，其移動速度較離子慢，使有效冰度降低，故需要更高的電壓以增加帶電粒子的移動速度和離子密度。

帶電顆粒對於靜電除塵器電場的影響，可以利用有效冰度觀念來分析⁽¹³⁾，相同於清潔空氣電場模擬的方法 (僅考慮離子的效應)，以電流密度 j_p ，冰度和電荷密度之有效值 b_{eff} 與 ρ_{eff} 以求得含塵粒時的電場分佈。對於含有顆粒的氣體，其有效空間電荷密度 (effective space charging density) 可以下式表示：

$$\rho_{\text{eff}} = \rho_{\text{ion}} + \rho_{\text{pp}} \quad (45)$$

式中 ρ_{ion} 為離子空間電荷密度， ρ_{pp} 為顆粒空間電荷密度。有效電流密度為

$$j_{\text{eff}} = j_{\text{ion}} + j_{\text{pp}} \quad (46)$$

式中 j_{ion} 為離子之電流密度， j_{pp} 為顆粒之電流密度。因為 $j = \rho bE$ ，與 (45) 式一同代入 (46) 式再經整理之後可得有效冰度

$$b_{\text{eff}} = \frac{b_{\text{ion}}\rho_{\text{ion}} + b_{\text{pp}}\rho_{\text{pp}}}{\rho_{\text{ion}} + \rho_{\text{pp}}} \quad (47)$$

式中 b_{ion} 為離子冰度， b_{pp} 為顆粒冰度，其值為 $q/(3\pi\mu d)$ 。

寬板靜電集塵器之性能模式

若知道有效電流密度和有效冰度，則電場分佈和有效電荷密度均可用上述模擬僅有離子效應之電場的計算方法得到。有效電荷密度為離子電荷密度及顆粒電荷密度之和，而顆粒電荷密度和離子電荷密度互相關連，所以先在一定有效電荷密度下就離子電荷密度代至其收斂，然後再就有效冰度代至其收斂。

二、邊界條件

1. 紊流場之邊界條件

因考慮的流場為完全發展流，故其為常微分方程式所統制，因此不需入口條件。就濃度場而言，因本文探討的是靜電除塵器的狀況，故入口條件可給為均勻濃度進入，即

$$C_{\text{inlet}} = C_0 \quad (48)$$

因為流場、電場及濃度場在中心線有對稱的性質，對 Y 軸的梯度為零

$$\frac{\partial U}{\partial y} = \frac{\partial K}{\partial y} = \frac{\partial \epsilon}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (49)$$

$$E_y = 0 \quad (50)$$

在固體邊界上，因為 $K-\epsilon$ 模式不適用於低雷諾數 ($Re_T = \nu_t/\nu$) 的區域，所以在固體邊界函數 (wall function) 作為 $K-\epsilon$ 模式計算最近牆之點的流場性質，但此點需位於層流底層 (laminar sublayer) 之外。依 Rodi 等人的建議，邊界條件為

$$\frac{U_p}{u_*} = \frac{1}{K} \ell_n [E y^+], \quad (51)$$

$$\frac{K_p}{u_*^2} = \frac{1}{\sqrt{C_\mu}} \quad (52)$$

$$\frac{\epsilon_p}{u_*^3} = \frac{1}{K y_p} \quad (53)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0 \quad (54)$$

式中的“P”表最近牆的格點， y_p 為該格點至牆的距離。 u_* 為摩擦速度， K 為馮卡曼常數， E 為水力平滑面粗糙度因子，本文定為8.0。且

$$y^+ = y_p u_* / \nu \quad (55)$$

2. 電場之邊界條件

如圖2所示，其邊界條件為

$$(1) \text{在電極線附近(點A)}, \rho_w = \frac{2 S_x j_p \times 10^{-5}}{\pi b a f [30\delta + (\delta/a)^{1/2}]} \quad (56)$$

$$(2) \text{沿AB線上}, E_y = 0$$

$$(3) \text{在電極板上(CD線)}, V = 0$$

$$(4) \text{沿BC線和AD線}, E_x = 0$$

$$(5) \text{接近電極板附近}, \rho = j_p \left[- \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right) \cdot b \right]^{-1}$$

本研究所使用之數值方法，在紊流流場與濃度場方面採用Spalding與Patan-kar的控制體積法^(14,15)，電場方面則採用一般之有限差分法⁽¹⁾。數學模擬所使用之數據如下：

設計流速 = 0.5 ~ 2.0 m/sec

平均電場強度 = 2.5 ~ 5.0 kv/cm

極板長度 = 2.4 m

極板高度 = 9.144 m

半板間距 = 0.1 ~ 0.4 m

半線間距 = 0.1 ~ 0.4 m

電氣阻抗 = 2.0×10^{10} ohm-cm

離子泳度 = 2.2×10^{-4} m²/v-sec

入口濃度 = 5.0 g/m³

顆粒密度 = 2270 kg/m³

氣體溫度 = 463°K

氣體壓力 = 1.0 atm

極線半徑 = 0.00127 cm

極線粗糙度 = 0.6

顆粒介電常數 = 5.5

離子根均方熱速度 = 463 m/sec

空氣分子量 = 28.84 kg/kg-mole

氣體常數 = 0.082054 atm-m³/kg-mole-K

叁、結果與討論

在傳統的靜電除塵器設計上，都已經習慣使用Deutsch公式來預測它的效率，以做為尺寸設計上的參考。但是從Deutsch觀念中無法找到效率和板間距的關係，或者說我們無法找到游移速度(migration velocity)和板間距的關係，因此在使用變板間距，或者寬板間距(Widespacing type ESP，簡稱WESP)時，就無法再用Deutsch的觀念來作解釋。因此我們另以紊流擴散濃度方程式來預測靜電除塵器的效率，研討寬板距靜電除塵器的機制。

計算靜電除塵器的除塵效率需要許多輸入數據，如附錄A所錄，另外有些基本的參數值缺乏，所以依據經驗和一般使用的狀況下自行假設，可參見附錄B。

計算除塵效率前必須先計算電場分佈，故本文所使用的模式考慮空間顆粒電荷密度和電場之間互相影響，計算結果與貝氏和馬氏實驗結果相符⁽¹⁶⁾。由式(56)可看出在板處的電場強度隨著極線半徑減小而增強，同理若有效泳度值減小亦有相同效應。計算結果顯示有效泳度值隨著板間距增加而減少⁽¹⁷⁾，所以在板處的電場強度將隨著板間距增加而增強，此結果與米氏⁽¹⁶⁾(Misaka)所作實驗比較，結果十分相符。

顆粒的游移速度隨板間距增加及電場強度增強而變快，計算結果如圖3所示。

然而顆粒游移速度的增加卻受到顆粒充電量的減少而有所限制。由式(41)及式

(42)

$$q = \frac{q_s}{4\epsilon} \frac{1}{N_i \beta} + 1, \quad (41)$$

$$q_s = \frac{3K}{K+2} \pi \epsilon d^2 E, \quad (42)$$

先知道飽和充電量隨著電場強度增加而增加，但顆粒充電量因為有效冰度減小而降低。顆粒充電量與板間距的關係可參考圖3b。由游移速度的計算公式

$$W = \frac{qEC_0}{3\pi\mu d},$$

知式中的電場強度 E 隨著板間距增加而增加，游移速度 W 亦變快，但游移速度增加的趨勢卻因為顆粒充電量減少而漸趨緩慢，最後在某一板間距顆粒充電量的減少量大於電場強度的增加率，游移速度就開始降低。顆粒充電量和板間距的關係，從入口的顆粒總數和離子電荷數的比數亦能看出定性的趨勢。固定線極和板極之間的平均電場強度、氣體流速和顆粒濃度，當板間距增加，進入除塵器的塵粒總量也跟著增加；由於平均電場強度固定，操作電壓也隨著板間距增加而增加，此時電暈區的解離離子也會增加。若顆粒總數的增加率大於離子增加率，則顆粒充電量會減少；反之，若顆粒總數增加率小於離子增加率，則顆粒充電量增加。

靜電除塵器的除塵效率與顆粒游移速度有密切的關係，當游移速度隨著電場強度增強而增加的時候，除塵效率也跟著提高；當游移速度隨著顆粒充電量減少而變小的時候，除塵效率也跟著降低。在傳統上使用的Deutsch模式僅能考慮游移速度對效率的影響，致於紊流擴散模式所考慮的參數除了游移速度外，尚須考慮濃度梯度所造成的影響。由後面的計算可知，在收集板處的收集效率等於在板處的通量，即在板處的游移速度乘以該處的濃度值。所以我們研究除塵效率和板間距的關係，須從板處的通量和板間距的關係著手。或者說如果我們想找出在某些情況限制下的

寬板距靜電集塵器之性能模式

最佳板間距，應該從在板處的通量增加和板間距的增加率之比較上著手。

由前面的分析及圖3知顆粒游移速度會隨著板間距增加而增加到某一極大值，隨後的游移速度就開始降低速度，其中暗示著在極板處的通量值開始快速增加，然後逐漸減緩，最後由於游移速度變慢通量值出現減少的趨勢，這一點可由圖4看出。當通量值出現減少的趨勢時，我們預期在圖5會出現負增加率的比值。為解釋紊流擴散濃度方程式何以能夠預測出最佳板間距的性能，可參考圖5， y 軸為通量增加率比板間距增加率， x 軸為板間距。我們已經知道，當板間距由原來一小板寬增大到某一板寬時，在極板處的通量會隨著游移速度增加而增加，這個時候我們不能因為通量增加了就說收集效率增加，因為隨著板寬增加，進入集塵器的顆粒也要增加，祇要我們保持氣體流速不變。所以我們要預測集塵效率是否有增減，就要比較通量增加率比上板間距增加率的比值和板間距的關係，因為祇有當通量增加率（增加的收集量）大於板間距增加率（增加的人口量）時，才可以說集塵效率增加了。由圖5可知，在 y 軸等於1的地方， x 軸大約為0.15M，由 x 軸這一點往右，集塵效率開始降低，這個結論可由圖6得到證實。因此採用本文模式可以預測靜電除塵器的最佳板間距。

由後面的計算可知，紊流擴散模式所計算的效率值較Deutsch模式的計算值低，因為前者在板處的濃度值較平均濃度值小。紊流擴散模式的濃度分佈如圖7a所示。造成圖中濃度分佈的原因是由於電場強度不均勻，而且電場強度分佈的情形，如圖8，從極線至極板是呈漸增的趨勢，使得板處附近有較大的通量。顆粒越靠近極板通量越大，得到圖7a的濃度分佈結果。若假設空間各點的電場強度為常數，可得圖7b的濃度分佈曲線，濃度分佈的高低恰與圖7a相反，此種情況是因為各點電場強度相同，在中心線附近無法累積較高的濃度值。

圖9為濃度分佈與擴散係數的關係圖，圖中C曲線的濃度分佈已接近側混模式假設，擴散係數值為 $0.5 \text{ m}^2/\text{s}$ ，圖中A.B.C三條曲線都是代表除塵器中間位置的濃度分佈，比較三條曲線下的面積可看出效率值大小，其中擴散係數值越大者效率越大，此種結果又可與紊流擴散模式所得有較小效率值互相驗證。另外，擴散係

數由 0 (層流模式), 經有限擴散係數 (紊流模式), 到無限大擴散係數 (側混模式) 計算所得結果, 如圖 10 所示。其中擴散係數為 $0.5 \text{ m}^2/\text{s}$ 時, 濃度分佈已與側混模式相符。

本文模式計算的效率值和側混模式計算值比較結果如圖 11。圖中 Y 軸為效率值, X 軸為板間距, 圖中三條曲線, A 曲線為側混模式預測的效率曲線 (未經修正值), B 曲線亦是側混效率曲線 (經過考慮非理想狀況修正值), C 曲線為紊流擴散模式預測值。由圖中可以看出經過修正的側混模式效率值趨近於紊流擴散模式的效率值, 經過修正的 B 曲線, 它所考慮修正的非理想狀況有氣體流速不均勻分佈和氣體旁漏等二項因素, 其中的氣體流速不均勻分佈一項已在紊流擴散模式中考慮。文獻報告⁽⁴⁾⁽¹⁸⁾資料顯示, 靜電除塵器的效率實驗值通常較側混模式預估值為低, 此種趨勢和紊流擴散模式所預測的結果相符。從圖 12 可看出 Gooch 與 Mc Donald⁽¹⁸⁾的計算結果與實驗結果, 與本文所預測的趨勢相符。

以下我們探討有限紊流擴散係數對於除塵效率的影響, 並和德氏模式作一比較。
濃度方程式

$$U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{qC_c}{3\pi\mu d} \frac{\partial}{\partial y} [E_y C] = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{S_c} \frac{\partial C}{\partial y} \right]$$

由濃度方程式可知濃度場與氣體流速、顆粒粒徑、充電量及紊流擴散係數、電場強度有關, 式中

$$\frac{qC_c}{3\pi\mu d}$$

的因次單位為 $\text{m}^2/\text{V}\cdot\text{sec}$, 其意義為顆粒泳度 (mobility), 若將其乘上電場強度 E_y , 得

$$\frac{qE_y C_c}{3\pi\mu d}$$

為顆粒在垂直極板方向的游移速度, 以 W 代表之, 即令

$$W = \frac{qE_y C_c}{3\pi\mu d}$$

濃度方程式中的 $(\nu + \nu_t)/S_c$ 為擴散係數值, 以 D 代表之

$$D = \frac{\nu + \nu_t}{S_c}$$

由濃度方程式可看出在某斷面的收集效應是由電力推動項和紊流擴散項兩種效應所控制, 為了解析上的方便, 我們定義有效游移速度

$$W = W_E - \frac{D}{C} \frac{\partial C}{\partial y}, \quad (65)$$

式中 W_E 為電力項所造成顆粒移動的游移速度。

將濃度方程式中的電力推動項移到等號右邊, 得

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{-qC_c}{3\pi\mu d} \frac{\partial}{\partial y} (E_y C) + \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{S_c} \frac{\partial C}{\partial y} \right],$$

對 y 軸積分

$$\begin{aligned} \int_0^H U \frac{\partial C}{\partial x} dy &= \frac{-qC_c}{3\pi\mu d} \int_0^H \frac{\partial}{\partial y} (E_y C) dy + \int_0^H \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\nu + \nu_t}{S_c} \frac{\partial C}{\partial y} \right] dy \\ &= \frac{-qC_c}{3\pi\mu d} [(E_y C)_{y=H} - (E_y C)_{y=0}] \\ &= (W_E C)_{y=H} - (W_E C)_{y=0} \end{aligned}$$

在 $y=0$, $E_y=0$ (電場邊界條件), 所以在中心線處的游移速度 W 為零。所以

$$\int_0^H U \frac{\partial C}{\partial x} dy = W_E C|_{y=H}$$

上式中的 C 值應為電極板處的濃度值。傳統上使用的計算效率 Deutsch 模式, 其中假設各個斷面的濃度為均勻分佈, 且游移速度僅考慮電力作用, 故其在板處的通量為 $W_E \bar{C}$, \bar{C} 可視為不均勻濃度分佈中的平均值。又由圖 7a 知 $C < \bar{C}$, 故

$$W_E \bar{C} > W_E C,$$

亦能得到同樣的結論。

圖6顯示，在某固定的板間距，除塵效率將隨線間距增加而下降。因為除塵器總長不變，線間距增加，極線數目就相對減少，總平均電場強度也將降低，造成除塵效率降低。若氣體流速增加，使得顆粒滯留時間降低，充電量減少，除塵效率也降低，如圖13所示。顆粒大小也會影響除塵效率，主要是因為顆粒充電量所致。由式(42)可知，計算結果如圖14所示，但收集效率介於 $0.1\mu\text{m}$ 與 $1\mu\text{m}$ 間有最小值，與梁與陳⁽⁵⁾預測結果相符，這是因為吉林哈姆因子在小粒徑時變大的影響。

肆、結論與建議

本文以紊流擴散模式研究靜電除塵器的除塵機制，流場是以 $K-\epsilon$ 雙方程式紊流模式計算，電場則結合馬克斯威爾方程式及電流連續方程式以數值方法解析之，並以濃度場方程式計算濃度分佈為基礎，考慮顆粒空間充電和電場之間的互相影響。

根據G. Leonard⁽³⁾、G. Cooperman⁽⁴⁾等人的文獻資料，以紊流擴散模式計算所得的效率值較德氏模式為高。其主要原因乃上述作者假設除塵器內空間各點的顆粒游移速度皆為常數，並配合收集板處濃度梯度為零的邊界條件，由此所計算出的除塵效率值較德氏模式為高。然而在實際的情況，顆粒的游移速度不是常數，它隨著電場強度的不均勻而不同，而且愈靠近收集板處游移速度愈大。由於這個主要的差異，本文能夠得到較小的除塵效率，與實驗值較為相符。

考慮板間距變化對於效率值的影響，以通量增加率和板間距增加率的比值隨着板間距的變化曲線，討論出相對於Y軸為1的板間距，即為最佳板間距。

紊流擴散係數對於效率值的影響，從傳統的擴散係數值 $0.001\text{m}^2/\text{s}$ 到混合係數值⁽¹⁵⁾ (mixing coefficient) $1\text{m}^2/\text{s}$ 亦有計算結果和討論。在擴散係數值理

寬板距靜電集塵器之性能模式

論尚未完備之前，在此所做的計算，僅能提供為參考。

由於不均勻電場強度造成的逆向壓力和離子風所造成的二次流 (secondary flow)，對於除塵性能將有極大的影響，往後的研究者似可朝此方向發展。另外目前的紊流擴散模式僅適用於單一粒徑的計算，無法應用於實際上的塵粒大小分佈，此一問題亦是值得探討。

參考文獻

1. J. R. McDold, W. B. Smish, H. W. Spencer and L. E. Sparks, "A Mathematical model for calculating electrical condition in Wire duct electrostatic precipitator devices", J. of Applied physics, Vol. 48, No. 6, p. 2231-2243, 1977.
2. P. L. Feldman, K. S. Kumar and G. D. Coopreman, "Turbulence diffusion in electrostatic precipitators", AIChE Symposium Series, Vol. 73, No. 165, p. 120-130, 1977.
3. G. L. Leonard, M. Mitchner and S. A. Self, "Particle transport in electrostatic precipitators", Atmospheric Environment, Vol. 14, p. 1289-1299, 1980.
4. G. Cooperman, "A Unified efficiency theory for electrostatic precipitator", Atmospheric Environment, Vol. 18, p. 277-285, 1984.
5. W. J. Liang and M. F. Chen, "Turbulent model for the performance of an electrostatic precipitator", CSME, p. 1181-1189, 1986.
6. B. E. Launder and D. B. Spalding, "The numerical computation of turbulence flows", Comp. Method in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 3, p. 269-289, 1974.
7. W. Rodi, "Turbulence models and their application in a parallel-plate channel due to electrostatic charge, diffusion and gravitational effect", Powder Technology, Vol. 28, p. 229-234, 1981.
8. D. B. Ingham, "A note on the deposition of aerosol particles in a channel due to diffusion and electrical charge", J. Aerosol Science, Vol. 11, p. 517-520, 1980.
9. B. E. Launder D. B. Spalding, "Mathematical models of turbulence", Academic Press, London and New York, 1972.
10. S. Oglesby and G. B. Brnichols, "A Manual of Electrostatic Precipitator in Japan", Part I-Fundamentals, SRI, Birmingham Alabama, 1970.
11. G. Cooperman, "A New Current-Voltage Relation for Duct Precipitators Valid for Low and High Current Density", IEEE Trans. On Industry Application, Vol. IA-17, No. 2, p. 236-239, 1981.

12. M. Crawford, "Air Pollution Control Theory", McGraw Hill Book Co., New York, 1976.
13. R. B. Mosly, J. R. McDonald, and L. E. Sparks, "Theoretical Methods for Computing Electrical Conditions in Wire-Plate Electrostatic Precipitators", Environmental International, Vol. 6, p. 161-175, 1981.
14. S. V. Patankar and D. B. Spalding, "Heat and Mass transfer in boundary layers", Intext, London, 1970.
15. S. V. Patankar, "Numerical heat transfer and fluid flow", Hemisphere Publishing Co., 1980.
16. S. Masuda, "Present Status of Wide-Spacing Type Precipitator in Japan", Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, University of Tokyo, 7-3-1, Hongo, Bankyo-Ku, Tokyo, Japan 113.
17. W. J. Liang and T. H. Liao, "Optimal duct spacing of widespacing electrostatic precipitator", CSME, Vol. p. 1493-1207, 1986.
18. John P. Gooch and Jack R. McDonald, "Mathematical Modeling of Fine Particle Collection by Electrostatic Precipitation", Atmospheric Emission and Energy Source Pollution, Vol. 73, p. 146-158, 1977.

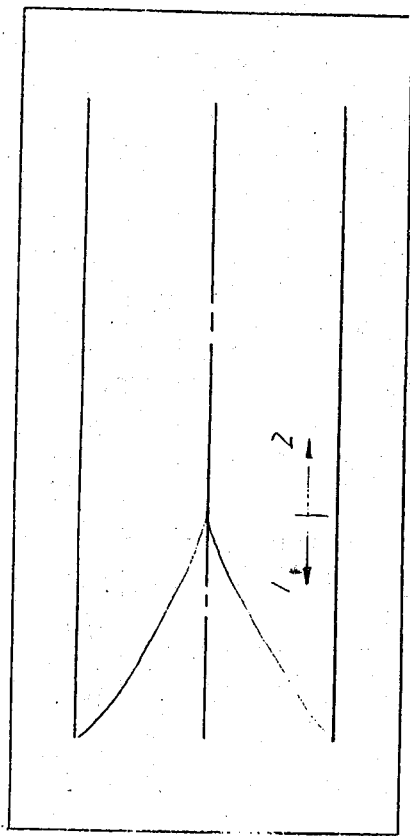
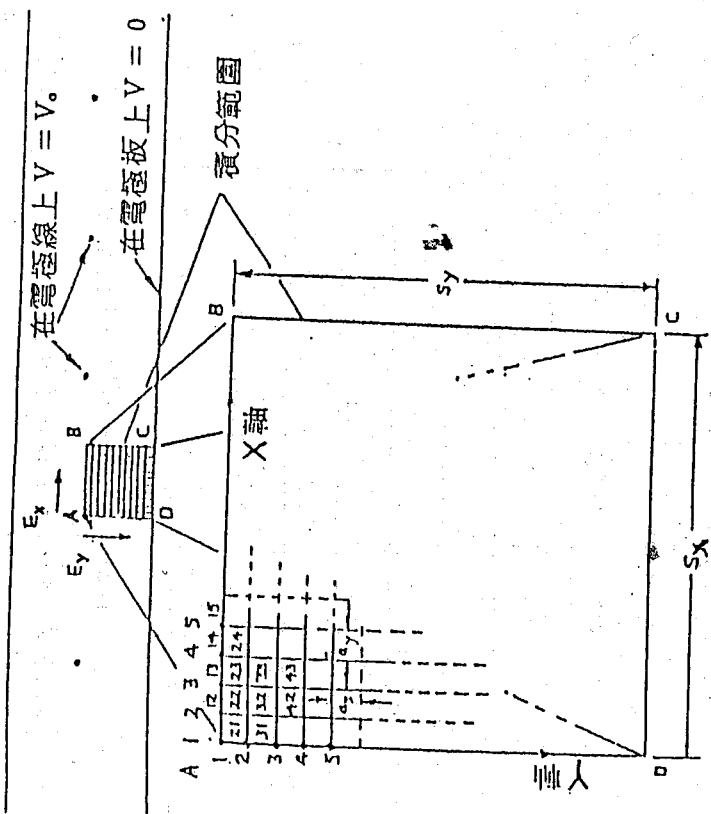


圖 1 二維渠流邊界層發展示意圖

1. 表進口區

2. 表完全發展區



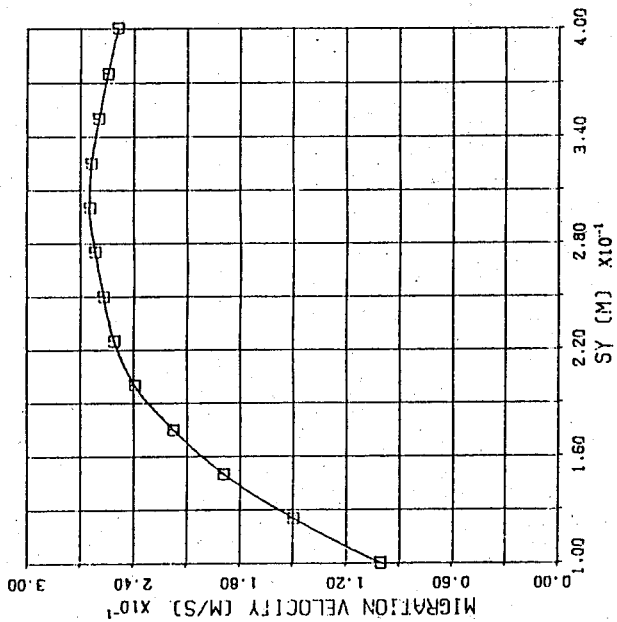


圖 3 a 游移速度和板間距的關係，SY = 半板間距

EA = 平均電場強度，SX = 極線半距

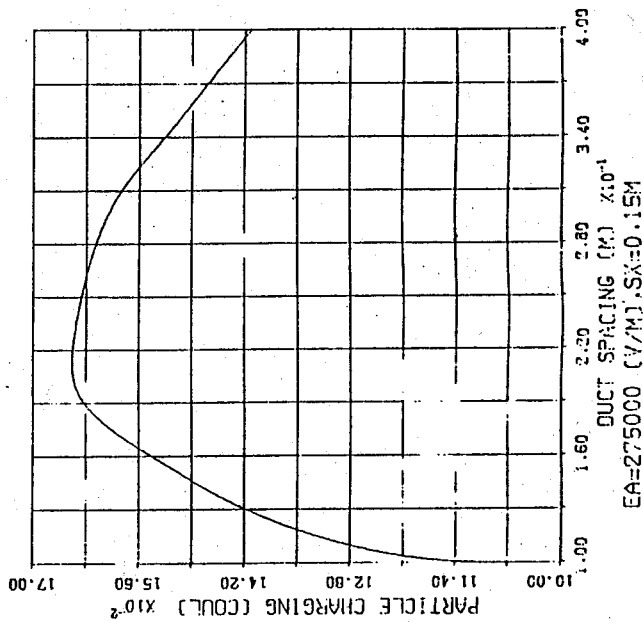


圖 3 b 顆粒充電與板間距的關係。

EA = 平均電場強度，SX = 極線半距。

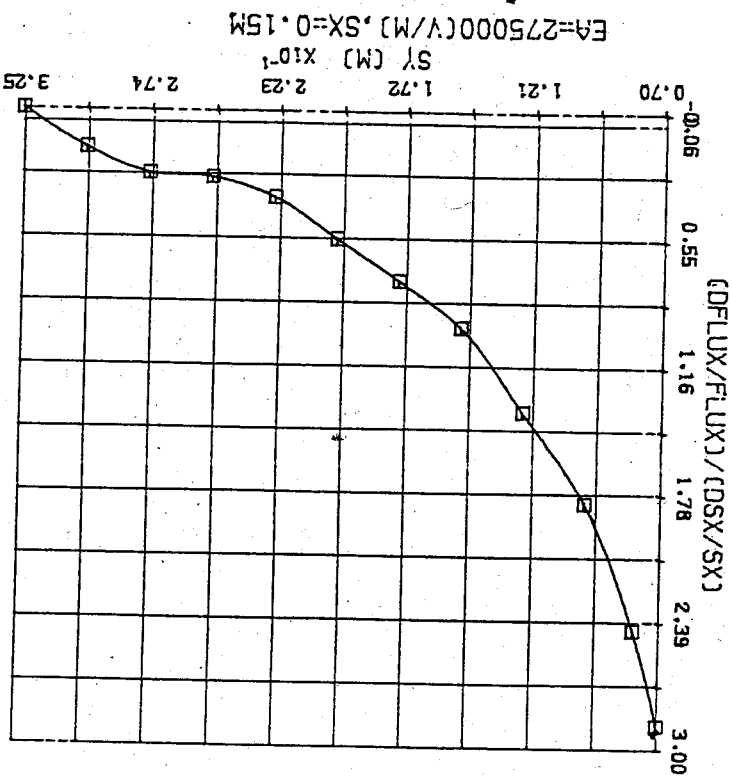


圖 5 通量增加率比板寬增加率與板寬的關係

EA = 平均電場強度，SX = 極線半距，SY = 半板間距。

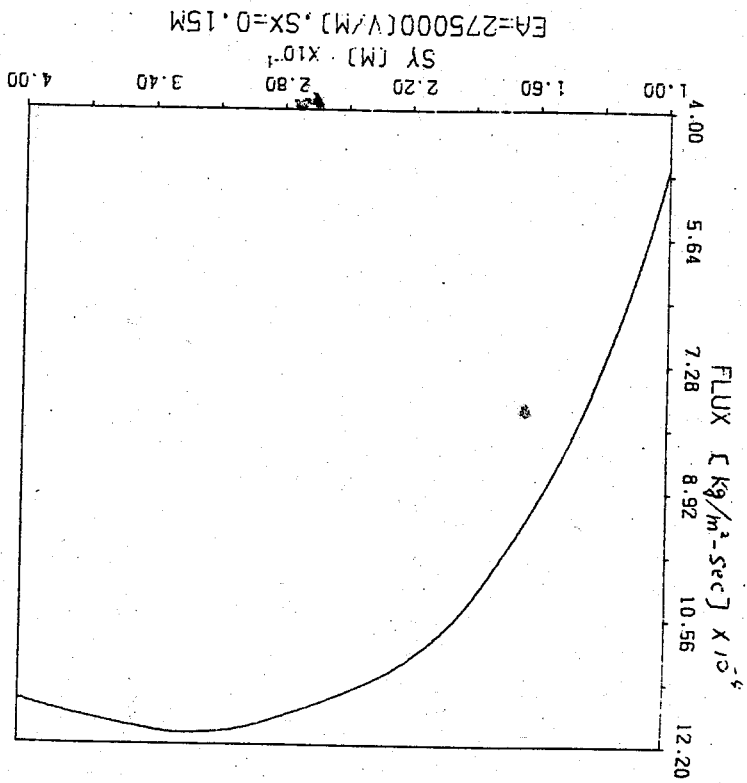


圖 4 通量和板間距的關係

EA = 平均電場強度，SX = 極線半距，SY = 半板間距。

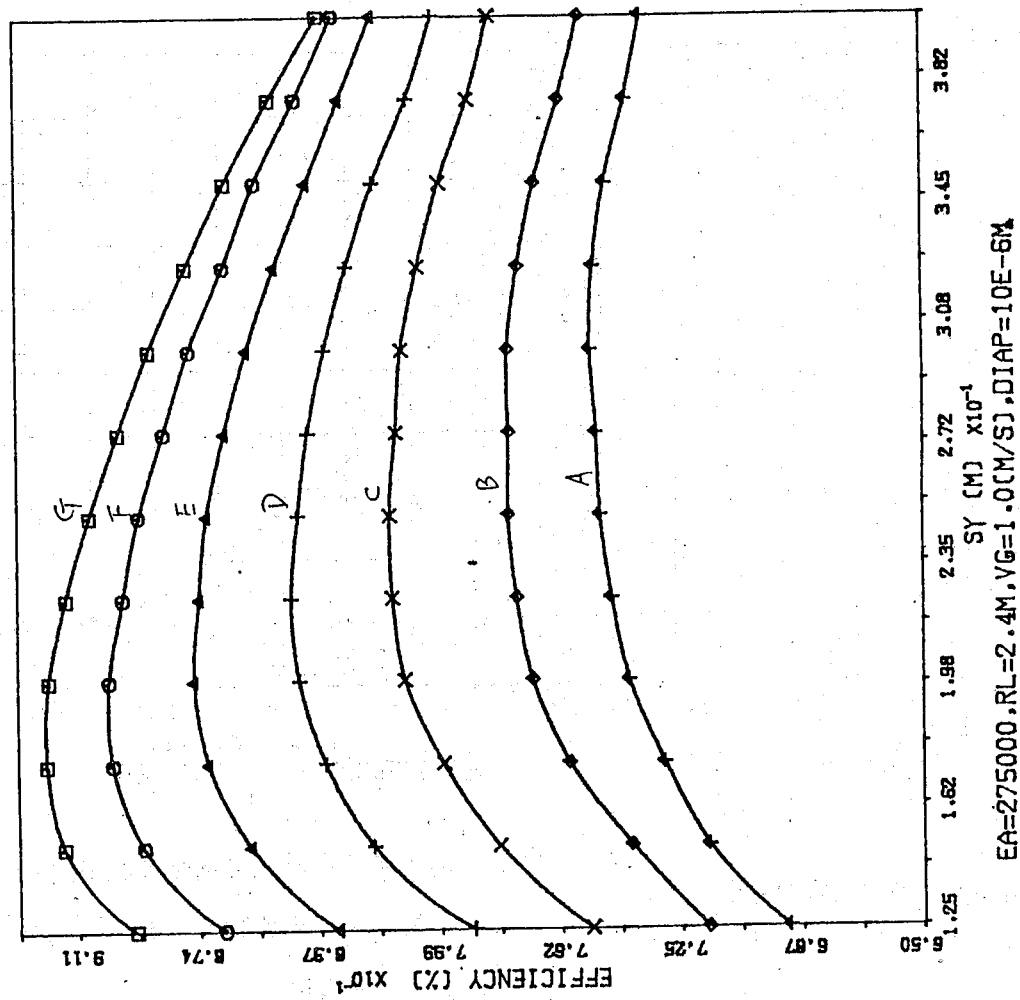


圖 6 除塵效率和板間距的關係

EA = 平均電場強度, SX = 極線半距,

SY = 半板間距。

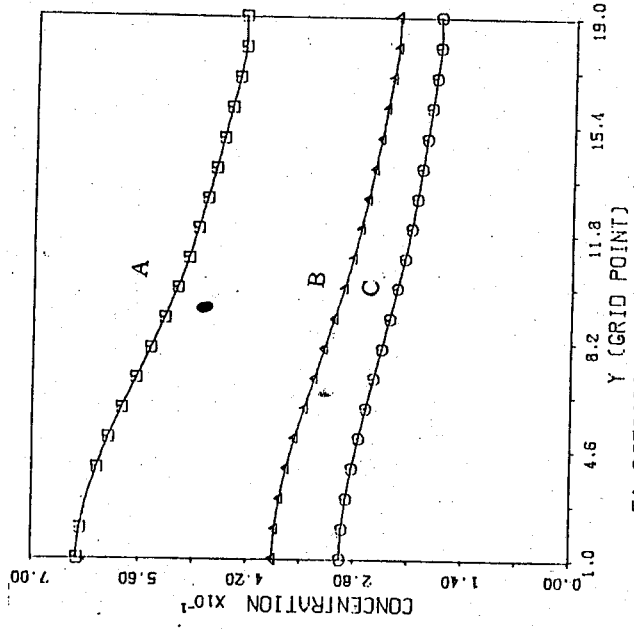


圖 7a 極線至極板間濃度分佈
A 為總長 1/8 處, B 為總長 1/2 處, C 為總長 7/8 處
EA = 平均電場強度, SX = 極線半距,
SY = 半板間距

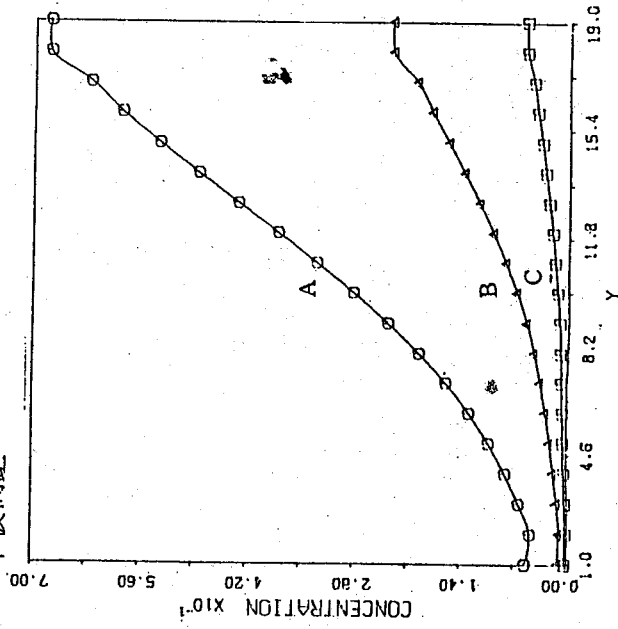


圖 7b 極線至極板間濃度分佈
假設空間各點的電場強度為常數。

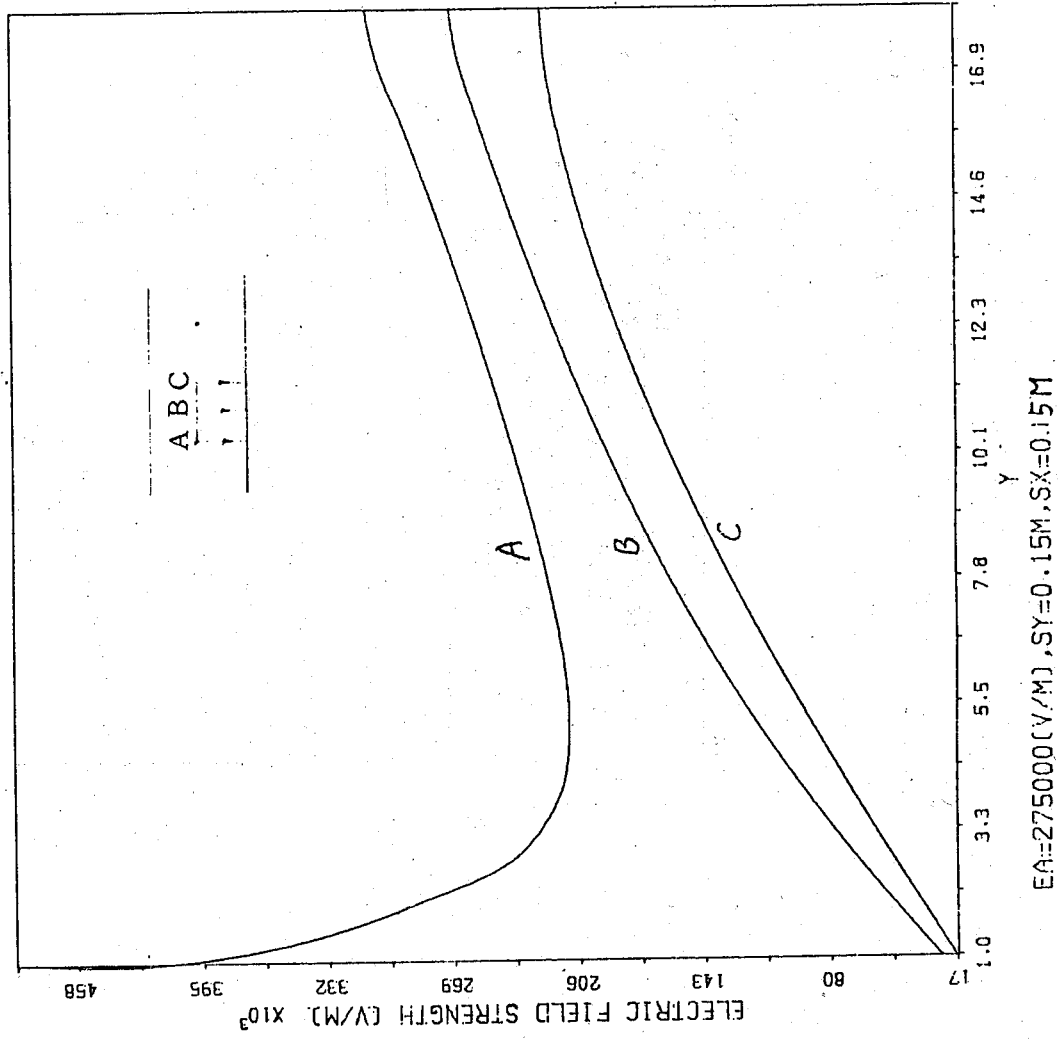
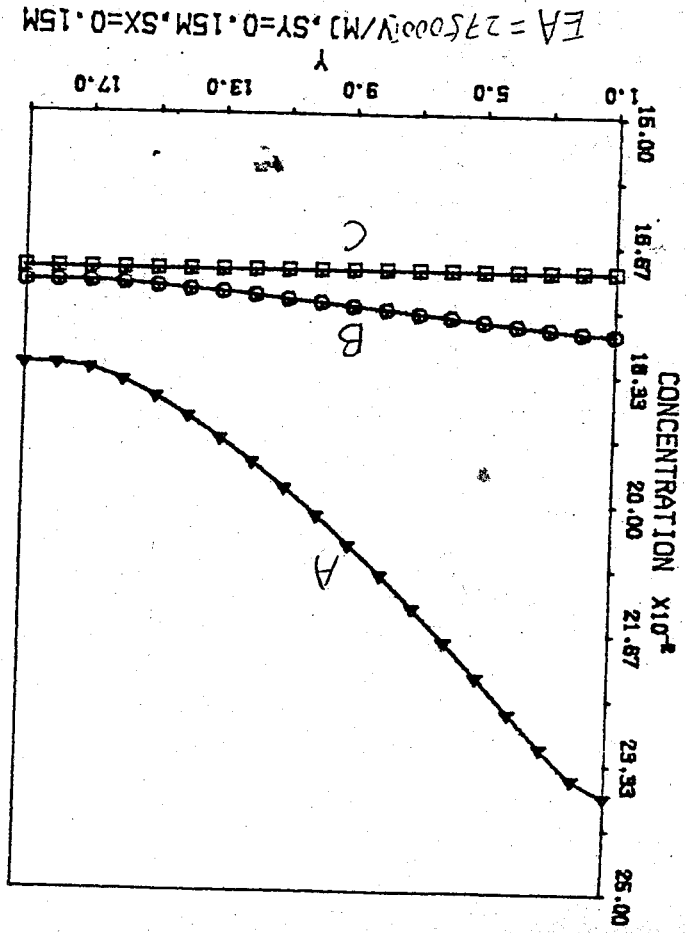
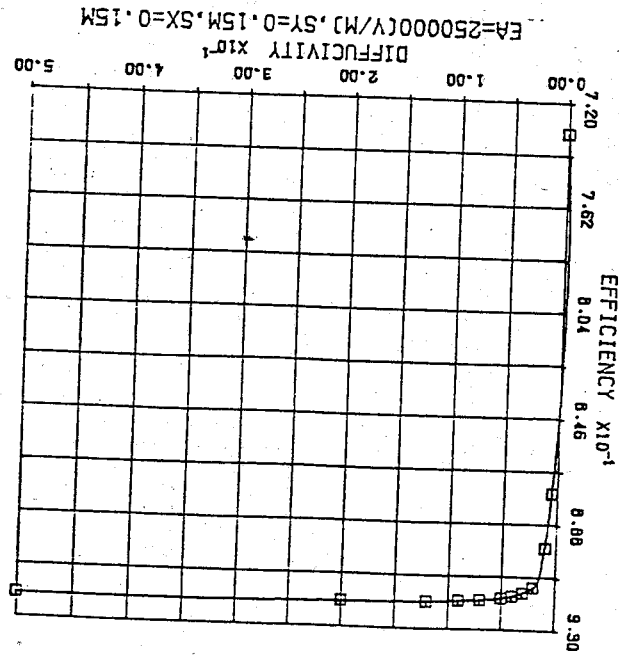
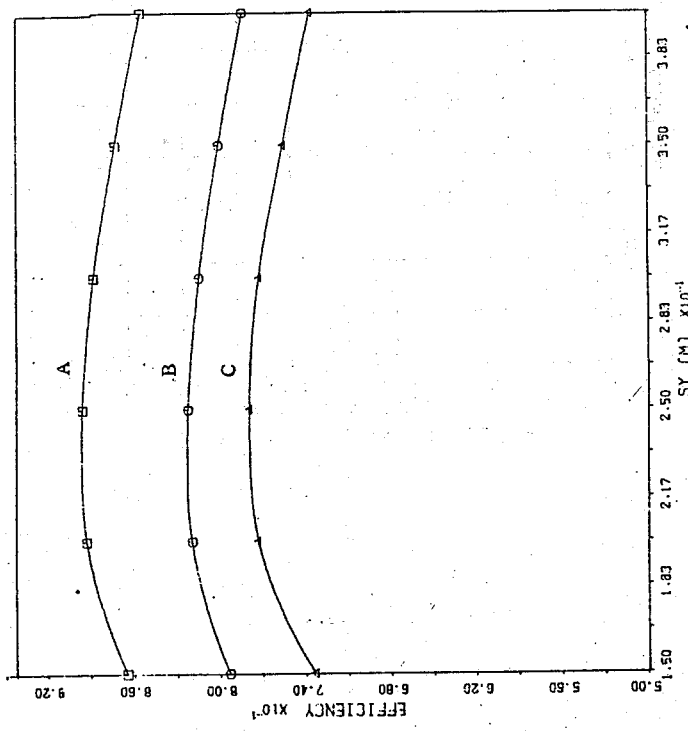
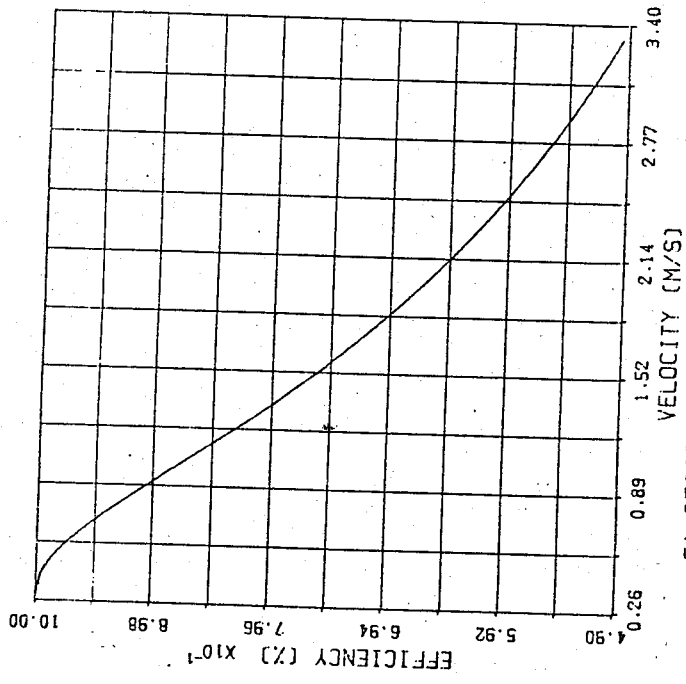
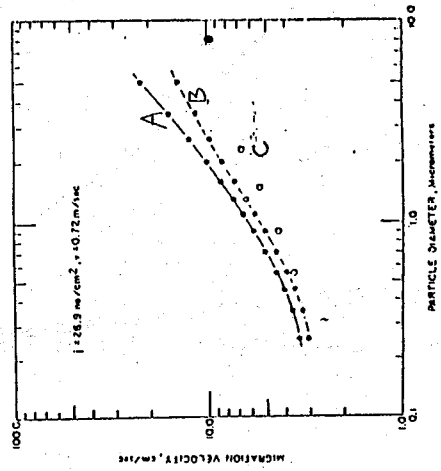


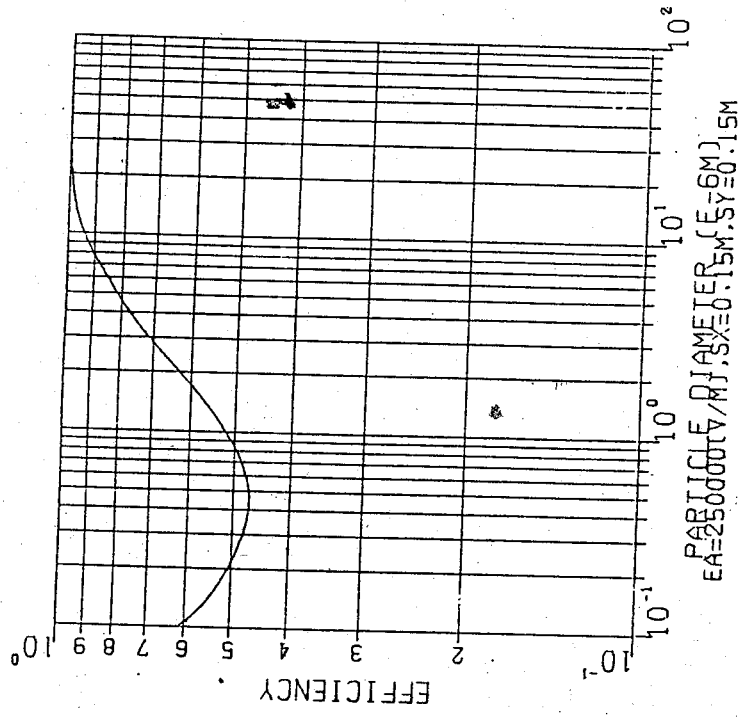
圖 8 沿板方向之電場分佈，EA = 平均電場強度
SY = 半板間距，SX = 極線半距。



EA=250000(V/M), YG=1.0(M/S), DIAP=10E-6M, SX=25M



EA=250000(V/M), SX=0.15M, SY=0.15M



EA=250000(V/M), SX=0.15M, SY=0.15M

空氣品質固定監測網的設置理論與應用

林宗嵩

中央研究院物理研究所

摘要

本文針對空氣品質監測提出兩種不同方式監測站設計模式。一為大型污染源之污染管制事件固定監測網之設計模式；另一為區域性空氣污染固定監測網之設計模式。

大型污染源之污染管制事件固定監測網之設計，係利用單點污染源大氣擴散模式 (CRSTER 模式) 與統計方法，以興建地區二氧化硫濃度之分佈為例，將地面氣象觀測值與污染資料輸入電腦程式，取台電公司興達測站 SO_2 濃度測定值之前 80 % 程度值為污染管制事件之空氣品質標準，並依 Smith 等人每年發生十次之最低設站標準，計算超管制事件和每年發生十次以上之風向、風速、穩定度等聯合頻率之發生次數和最大濃度發生之下風距離，再利用二項分配原理，考慮十六方位風向，三種最大地面濃度忍限值 (0.9 C_{max} , 0.8 C_{max} 及 0.7 C_{max}) 及四種可信賴區間 (0.5, 0.9, 0.95, 0.99) 等情況，來尋求設置測站之地點及數目。

區域性空氣品質固定監測網之設計，乃運用擴散模式，計算污染濃度相關係數矩陣之固有值和固有函數，使用線性內推公式之，將估計值之統計誤差最大者，選擇為新測站，反覆進行，直至所需數目之測站均決定為止，此法可在設站經費有限時，藉擴散模式及統計方法，尋求整個區域之最佳測站設計，以瞭解區域內空氣品質濃度分佈的整體情況。

Abstract

This paper provides two methods for local and regional air quality monitoring network design. One is for air monitoring near point source. The other is for regional air quality survey.

For a large point source, the objective of monitoring is assigned to determine the occurrence of maximum concentration. The purpose of regional air quality survey is to obtain the distribution of pollutants of whole region.

The local air quality monitoring stations are located at where the maximum concentration likely occurs. The regional air quality monitoring stations are located at the point which the error of estimate is largest.

壹、前言

空氣污染濃度，常受到污染源排放率之改變和氣象、地形等因素的影響，而產生時空變化。要瞭解區域內空氣污染濃度之分佈情形，通常使用監測或模式或兩者並用之方法來進行，而監測工作主要在測量空氣污染濃度、氣象因子和污染源強度。所得之氣象和污染源資料可用來校正輸入資料和所用之模式。因此設置高靈敏的分析儀器系統與測站係環境品質管制之依據。

以往監測站位置之選擇，大都以經驗判斷和定性規則來進行規劃，如 Leavitt (1957)、Yamada (1970)、Hamburg (1971)、Pooler (1974)、Ott (1977)，主要考慮測站離地高度，與附近建築物距離，人口與測站數目關係等。至 1960 年，Singer 開始以數值模式來從事監測網設計，判別某一污染物在某一固定位置之率定值 R (Rating)， R 值愈大者，愈不能作為監測站所在。Seinfeld (1972) 等人則利用空氣品質變化情形，進行監測網之設計。Houglund (1976)、Lee (1978)、Graves (1981)、Nakamori (1979) 等人則將都市區域，以網格系統區分，進而從事監測網之設計。以上研究大都針對區域性空氣品質之監測。對於大型點污染源（如火力發電廠），Noll (1976)、Noll (1977)、Noll 和 Miller (1977) 等人曾提出監測網之設計原則，對單一污染源和排放條件相同的多點污染源，利用統計方法佳化監測站的數目與位置，使重要污染事件得到最高監測效率，而 Smith (1979) 則提出符合多項準則的設計方法。美國環境保護協會 Buell 和 Calder (1975) 亦利用估測值最大誤差值等方法尋求區域性空氣污染測站佳化位置之設置方法。國內方面有梁、林氏 (1982) 針對火力發電廠提出空氣品質監測系統之設置原理。

空氣品質監測站之基本設站要求乃期望各測站所估測之空氣氣塊具有相當大的區域代表性，本文依梁、林氏之研究 (1982)，Noll (1977) 和 Smith (1979) 等人之設計原理，美國環境保護協會 EPA 所定之設計準則規定 (1975)，加上對排放

條件各異的多點污染源修正法及各種簡化運算法，建立多點大型污染源之固定監測網設計方法。另依美國環境保護協會 Buell 和 Calder (1975) 之設計理論，建立區域性空氣品質固定監測網之設計方法。期望在從事區域性空氣品質的監測工作時，能使用最短的時間，運用最少的經費，達成預定之目標。

貳、大氣擴散模式之選用

煙流擴散問題相當複雜，其擴散速率與量的大小，受到亂流強度、風速、浮力和穩定度等因素影響，很難以簡單的模式概括所有因素。一般而言，煙流之擴散與稀釋作用，與風速、風向及大氣熱力結構有關，而大氣熱力結構可由溫度、大氣穩定度及混合層高度來描述。因此，為確實模擬煙流在大氣中的擴散現象，一般模式所用的係數及標準偏差皆為風速、風向、溫度、大氣穩定度及混合層高度之函數。實際上，擴散之標準偏差依大氣穩定度來分類，其與下風距離之關係設定為常態分佈，本文為簡化計算及避免人為誤差，採用 Green (1980) 等人所做的漸近方程式，以近似 Turner (1970) 圖中之垂直及側向標準偏差值。

大氣擴散模式依評估時間長短、污染物種類、排放源型式及地形因素之不同，而有各種類別。本文所使用的大氣擴散模式，採單一污染源模式 (Single Source CRSTER Model)；以下簡稱為 CRSTER 模式) 為主體，並配合 Turner (1964) 與 Busse 和 Zimmerman (1973) 等人改良之大氣擴散模式修正而得。

CRSTER 模式是由美國 EPA 所發展出來的，用以評估鄉村及都市地區，在非平坦地形情況也適用的一種穩定狀態高斯煙流模式。可由下列方程式表示之
當 $H_e \leq L$ ，且 $\sigma_z \leq 1.6 L$ 時，

$$C(x, y, z, H_e) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \sum_{N=-\infty}^{N=+\infty} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{H_e + 2NL}{\sigma_z}\right)^2\right] \dots \dots \dots (1)$$

當 $H_e \leq L$ ，且 $\sigma_z > 1.6 L$ 時，

$$C(x, y, z, H_e) = \frac{Q}{\sqrt{2\pi} \sigma_y Lu} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \dots \dots \dots (2)$$

當 $H_e > L$ 時，

$$C(x, y, z, H_e) = 0 \dots \dots \dots (3)$$

式中，各變數之意義為：Q 表污染源的排放速率 (g/s)， σ_y 為高斯濃度分佈的水平標準差， σ_z 為高斯濃度分佈的垂直標準差，u 為風速 (m/s)，L 為混合層高度 (m)， H_e 為有效煙囪高度 (m)。而濃度 C 單位為 g/m^3 。而高斯煙柱中心線地面濃度公式為：

$$C(x, 0, 0, H_e) = \frac{Q}{\pi \sigma_y(x) \sigma_z(x) u} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{H_e^2}{\sigma_z^2(x)}\right] \dots \dots \dots (4)$$

由(1)、(2)二式可知，CRSTER 模式對於污染物在輸送過程中，可能產生的化學反應及沈降作用並未考慮。另 SO_2 和懸浮顆粒是火力發電廠排煙中，最主要的兩種空氣污染物質。其中懸浮顆粒常被認定為惰性物質，本文在計算其擴散分佈時，也保留這項觀點，不考慮懸浮顆粒有任何化學作用發生。而一般假定 SO_2 之衰變為一階反應，而衰減情形可由下式表示之 (EPA, 1978)：

$$D(X) = \exp\left(-\frac{0.692 X}{U_{He} T_{1/2}}\right) \dots \dots \dots (5)$$

式中，X 為下風距離， $T_{1/2}$ 為污染物之半生期 (half-life)， U_{He} 為有效煙囪高度處之平均風速。 $T_{1/2}$ 值往往因氣象、地點等因素而異。根據 Flyger (1978) 等人對燃油及燃煤兩種火力發電廠所做的實驗調查，發現前者之 $T_{1/2}$ 值為 30 分鐘，後者則為 90 分鐘。因本文個案研究中，興達發電廠 SO_2 主要排放量由燃煤所造成，而採用 $T_{1/2}$ 值為 90 分鐘，代入(5)式中，則成為：

$$D(x) = \exp\left(-\frac{0.692 X}{U_{He} \times 5.4}\right) \dots \dots \dots (6)$$

式中，X 之單位為公里。

叁、大型污染源管制事件固定監測網之設置原理

空氣污染程度常受到污染源排放率的改變和氣象、地形等因素的影響而產生時空變化。要瞭解區域內空氣污染程度的分佈情形以管制環境品質，需從事廣泛的污染情況監測，可在區域內設置固定空氣品質監測網，安裝靈敏的分析儀器系統。

對於大型污染源而言，為了瞭解其對周遭空氣品質的影響，進而研擬管制策略，設置良好的空氣品質監測網是十分必需的。

監測網的設置需利用過去的氣象資料，如風向、風速、氣溫、大氣穩定度，混合層高度等，配合選用之大氣擴散模式，及污染源排放資料，來進行計算，可得各種氣象條件下，可能發生之最大地面濃度值及其位置，和發生頻率，此濃度值可拿來與空氣品質管制事件之標準限值比較，以判定監測站址，再根據Noll等人所發展的理論，定出偵測潛勢區域(Potential Monitoring Zone)。另由計算所得之最大地區濃度值(Cmax)，根據偵測儀器所能代表之面積，即根據偵測目的與經濟條件之權衡，定義出由0.9 Cmax, 0.8 Cmax, 甚至0.7 Cmax 等濃度曲線所涵蓋的區域為單一測站之覆蓋面積(Coverage area of Station)，其與偵測潛勢區域面積之比值，則稱為單一測站之覆蓋比(The Coverage Ratio for one station, CRs)。

我們可以用二項分配(Binomial distribution)來描述，當一個測站設於單一測站之覆蓋面積內，其對過去各種氣象條件組合產生最大濃度之某一種聯合出現頻率(Joint Frequency of Occurrence)，在各種可信賴度(Confidence level)限制下，所能有效偵測之機率，則定義此項機率為達成預定結果之總覆蓋比(Total Coverage Ratio, CR_T)。因此，對於某一聯合出現頻率而言，所需要的測站數目(NN)，在某一可信賴區間內，即為CR_T與CRs之比值。

一、單一污染源空氣品質監測網之設計方法

Turner 在其“大氣擴散估算手冊”(1970)書中，曾描述在各種有效煙囪高度、混合層高度，A至F級穩定度下，正常化濃度(Normalized Concentration) CU/Q (單位為m⁻²)與下風距離X (單位為km)之關係，見圖一。

其中混合層影響部份，暫時不予考慮。(可能造成之誤差，容後再說明)，Turner 圖中，可訂出各有效煙囪高度所對應之CU/Q最大值，假設在風速U及排放強度Q保持一定下，所對應於橫軸之值，即發生最大地面濃度之所在(X_{max})，再將各CU/Q最大值，令為(CU/Q)_{max}，各乘以0.9後，劃線於0.9(CU/Q)_{max}之位置，由此可在曲線上交得兩點，分別對應於橫軸，交橫軸上兩點，各表示接近及遠離排放源，濃度為0.9 C_{max}之所在，分別以X₉₀⁻和X₉₀⁺表示(圖二)。同理，也可分別得到X₈₀⁻, X₈₀⁺和X₇₀⁻, X₇₀⁺各值。

由(圖二)可看出，各H_e值線上之X₉₀⁻, X_{max}, X₉₀⁺之連線，幾乎呈一直線，這種情況可和Turner(1970)中圖3-9(圖三)相互印證。由X₉₀⁺故X₉₀⁺與CU/Q之關係，同樣也可適用於X₉₀⁻或X₉₀⁺與X_{max}之關係，即在雙對數座標上，以橫軸表X_{max}值，而縱軸表X₉₀⁻, X₉₀⁺，二者之關係，可以一直線近似之。為便於計算機之作業，乃以X₉₀⁻ = aX_{max}^b或X₉₀⁺ = a'X_{max}^{b'}方式模擬，其中a, b, a', b'可利用最小二乘法求得，迴歸之結果列於(表一)。同理，可作0.8 C_{max}及0.7 C_{max}兩種情形。

其次考慮污染物在側向擴散的情形，其可由下式表示之：

$$C(x, y, 0; H) = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \exp\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{H_e}{\sigma_z}\right)^2\right] \dots \dots \dots (7)$$

設當C = 0.9 C_{max}時，y = Y₉₀/2，代入上式：

$$0.9C_{max} = \frac{Q}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp\left[-\frac{y_{90}^2}{2\sigma_y^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{H_0}{\sigma_z}\right)^2\right] \dots\dots\dots(9)$$

將(8)式以(4)式除之，則：

$$0.9 = \exp\left[-\frac{y_{90}^2}{8\sigma_y^2}\right] \dots\dots\dots(10)$$

或 $y_{90} = 0.92\sigma_y \dots\dots\dots(11)$

同理 $C = 0.8C_{max}$ 時， $y_{80} = 1.34\sigma_y \dots\dots\dots(12)$

$C = 0.7C_{max}$ 時， $y_{70} = 1.69\sigma_y \dots\dots\dots(13)$

(9)、(10)、(11)三式中之 σ_y 值，可根據 Green (1980) 對 σ_y 、 σ_z 所做的漸近方程式，

如(12)、(13)二式求之，

$$\sigma_y = \frac{WX}{\left[1 + \frac{X}{A}\right]^p} \dots\dots\dots(14)$$

$$\sigma_z = \frac{VX}{\left[1 + \frac{X}{A}\right]^q} \dots\dots\dots(15)$$

上二式中， W 、 V 、 A 、 p 、 q 皆為常數，隨大氣穩定度而異，而 y_{90} 、 y_{80} 、 y_{70} 與 X 之關係亦因之確定。
由 $0.9C_{max}$ 、 $0.8C_{max}$ 或 $0.7C_{max}$ 等濃度線所圍成之封閉平面，可利用橢圓公式求其面積，即

$$A_s = \frac{\pi}{4} (x_j^+ - x_j^-) y_j \dots\dots\dots(16)$$

此處， A_s 為單一測站覆蓋面積， j 為 90、80、70 三種情況。
若不考慮化學衰減及混合層之作用，將(12)、(13)二式代入(4)式中，則：

$$C(x, 0, 0, H_0) = \frac{Q\left(1 + \frac{X}{A}\right)^{p+q}}{\pi W V U X^2} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{H_0^2 \left(1 + \frac{X}{A}\right)^{2q}}{V^2 X^2}\right] \dots\dots\dots(17)$$

微分上式可得：

$$\left[(p+q-2)X - 2A \right] - \frac{H_0^2}{V^2 X^2} \left(1 + \frac{X}{A}\right)^{2q} \cdot \left[(q-1)X - A \right] = 0 \dots\dots\dots(18)$$

上式可用半間距法 (Interval-Halving method) 解 X ，再將 X 值代入(17)式，則可得 C_{max} 值。

若考慮化學衰減產生 (可用於 SO_2 濃度之計算)，但不考慮混合層之作用，將(12)、(13)二式代入(4)式，並併進(5)式，則

$$C(x, 0, 0, H_0) = \frac{Q\left(1 + \frac{X}{A}\right)^{p+q}}{\pi W V U X^2} \exp\left[-\frac{1}{2} \frac{H_0^2 \left(1 + \frac{X}{A}\right)^{2q}}{V^2 X^2}\right] \cdot \exp\left[-\frac{0.692X}{U T^{\frac{1}{2}}}\right] \dots\dots\dots(19)$$

將(8)式，對 X 微分，並令其結果為 0，則得到

$$\left[(p+q-2)X - 2A \right] - \frac{H_0^2}{V^2 X^2} \left(1 + \frac{X}{A}\right)^{2q} \left[(q-1)X - A \right] - \frac{0.692X}{U T^{\frac{1}{2}}} = 0 \dots\dots\dots(20)$$

再由半間距法解 X ，再代入(19)式，即得 C_{max} 值。

將風向分成十六方位或三十六方位兩種，穩定度為六級，風速亦分成六級。由過去之氣象資料，經計算並加以分類，找出某一氣象類別所能產生之最大地面濃度。與空氣品質管制事件標準值 (C_s) 相比較後，若 C_{max} 大於 C_s ，則在濃度剖面上定出 C_s 之位置，而可交得兩點 X_F 、 X_B (如圖四所示)，各表示接近和遠離污染源，濃度為 C_s 之所在，二者之間即表示發生濃度超過 C_s 之範圍。在本文中，模式

計算所用的座標系統，在水平方向，按風向之方位劃分，下風方向隨每一個輸入之資料與各方位之中心線重合，風向方位之劃分取十六方位。

所謂偵測潛勢區域 (A_p)，即指在下風方向以 X_F 、 X_B 為界，側向則以風向方位之邊界所包含之區域。若以十六方位區分之風向而言，

$$A_p = \frac{\pi (X_B^2 - X_F^2)}{16} \quad \dots\dots\dots(19)$$

以三十六方位區分之風向而言

$$A_p = \frac{\pi (X_B^2 - X_F^2)}{36} \quad \dots\dots\dots(20)$$

而單一測站之覆蓋比 (CR_s)，則為

$$CR_s = \frac{A_s}{A_p} \quad \dots\dots\dots(21)$$

上式中 A_s 與 A_p 之關係，如 (圖五) 所示。

假設由過去之氣象資料，可得在某一違反空氣品質管制事件標準限值之聯合出現頻率為每年 N 次。但對於單一測站所能涵蓋的面積而言，其必無法完全偵測所有可能之狀況，即 N 次都能夠被測中。若該測站只能有效地測得 n 次，我們可以利用二項分配的原理，來描述此一現象，即

$$B(n; N, P) = \frac{N!}{n! (N-n)!} P^n (1-P)^{N-n} \quad \dots\dots\dots(22)$$

其中， $n = 0, 1, 2, \dots, N$ ，機率 P 即為所稱之總覆蓋比 (Total Coverage Ratio, CR_T)。

雖然有一些情況，其濃度值超出標準限值，但發生的頻率甚低，就經濟觀點而言，殊不合理，為考慮成本效益，根據 Smith 等人 (1979) 之建議，測站之設置地點，至少需要每年有十次超過限值者才合算。

由二項分配之特性知，當 N 值很大時，發生一次成功之機率接近 0.5，在這種

空氣品質固定監測網的設置理論與應用
情況下可利用常態分佈來加以近似，這種程序稱為二項分配之常態近似 (Normal Approximation)，則可定義一統計量 Z ，

$$Z = \frac{n - NP}{\sqrt{NP(1-P)}} \quad \dots\dots\dots(23)$$

上式中 Z 表示一呈常態分配之隨機變數。當 $N \rightarrow \infty$ 時，其分佈函數如下式所示：

$$F(Z) = \int_{-\infty}^Z \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-1/2t^2} dt, \quad -\infty < Z < \infty \quad \dots\dots\dots(24)$$

我們可按需要，選取適當的可信賴區間 (Confidence Interval, β)，則可求得 $F(Z)$ 值，再查一般的統計圖表，即求得 Z 值，加以預先設定之 n 值及計算所得之 N 值，故未知數只有 P (即 CR_T 值)，將 Z ， n ， N 代入 (23) 式，即可解出 CR_T 值。

由前面之定義知，在某一特定氣象條件組合情況下所需之測站數目 (NN)，即為：

$$NN = \frac{CR_T}{CR_s} \quad \dots\dots\dots(25)$$

二、測站選址準則之修正

(1) 由平均時間增長影響單一測站覆蓋比 (CR_s) 之考慮

由 Y_{90} 、 Y_{80} 、 Y_{70} 之計算可知，其為 σ_y 之函數。由 Turner (1970) 中知水平及垂直擴散係數 σ_y 及 σ_z 值，只能代表採樣時間為 10 分鐘左右的結果。由於一般空氣品質標準限值常以一小時平均值、三小時值、八小時值，甚至二十四小時值表示 (Stern, 1968)，(Hino, 1968)，而本文計算濃度值，為能比較起見，是以小時平均值表示，故對於平均時間的增長，更有所修正。

根據 Hino (1968) 及 Pasquill (1974) 之研究，發現：

$$C_{max} \propto \tau^{-0.5} \quad \dots\dots\dots(26)$$

$$C_{max} \propto \left(\frac{\sigma_z}{\sigma_y} \right) \quad \dots\dots\dots(27)$$

在渦卷 (eddy) τ_y , τ_z 存在時間之限制下, 煙柱寬度 σ_y 、 σ_z 必隨採樣時間之增長而加大, 但在低層大氣中, 流體在垂直方向的運動受地表存在而受限, 經實驗證明可知, τ_z 遠小於 τ_y , 故由(26)、(27)二式, 可推知

$$\sigma_y \propto \tau_y^{0.5} \dots \dots \dots (28)$$

在各種平均時間與10分鐘相比, 所須乘入之修正係數, 如(表二)所示。在計算CR。時, 必須考慮此項修正, 否則造成測站數目(NN)值之誤差。

(2) 大氣擴散模式中混合層項運算之修正

根據Turner (1970)之研究, 當煙柱型態為集烟型(Trapping)時。必須考慮逆溫層的影響, 而大氣擴散模式為高斯煙柱標準式。由於該式為一無窮級數, 且當反射次數增加時, 標準式中之級數項收斂很快, 故Turner建議, 只需取反射次數(N)為3或4, 即可達到相當的準確度。

由於本文利用模式之主要目的是計算可能的 X_{max} 及 C_{max} 值, 取 $N=3$ 或4後之標準式, 仍嫌冗長而不使用。據Yamartino (1977)之研究, 當 σ_z 與混合層高度(L)之比值小或等於0.63時, 將標準式中, 取 $|N| \leq 1$ (即 $N=0, \pm 1$), 計算結果, 與原式比較, 誤差小或等於1.3%。另發現計算之誤差與 (H_0/L) 及 (σ_z/L) 值有很大的關連。由於利用最簡單的高斯模式(4)式導出求 X_{max} 之公式, 即(6)或(7)式, 在計算機作業而言, 因氣象資料繁鉅, 上述二式已算是相當耗時之計算, 故取 $|N| \leq 1$ 時, 對計算上而言, 仍嫌過長。

根據Pasquill (1976)之研究結果, 利用(4)式所得之濃度值, 在各種 (H_0/L) 及 (σ_z/L) 值條件下, 其與標準式計算結果之比值, 列於表三。本文利用(10)或(18)式, 初步計算 X_{max} 及 C_{max} 後, 根據每次計算所得之 (H_0/L) 及 (σ_z/L) 值, 再利用表三, 即可查出或利用內插法找出誤差值, 將計算所得之 C_{max} 值除以(4)式佔標準式之比例值, 即可修正未考慮混合層作用所造成的誤差。

(3) 利用圖形交疊法選取最佳之測站位置

空氣品質固定監測網的設置理論與應用

根據美國EPA的「空氣品質偵測網設計指引」(1975)所建議, 空氣品質偵測網之初步設計, 應以單獨一種污染物為對象, 然後再根據操作後所得的詳細資料, 加以研究改進, 將不適當的測站重新定位。這種做法, 比增加偵測站數目來得經濟, 同樣地, 也可達到所要求的成效。本文首先對二氧化硫(SO_2)單獨設計, 用來找偵測潛勢區域(A_p)的空氣品質限值为0.020 ppm。風向方位區分為十六方位。同時, 並以 SO_2 有化學衰減發生為考慮對象, 此外, 求 CR_T 時所取用的可信賴區間(β)為0.5、0.9、0.95、0.99等四種情形。

對火力發電廠排煙中, 另一種主要污染物懸浮顆粒之偵測網設計, 除了不考慮化學衰減情況, 及空氣品質限值另定之外, 其餘條件與對 SO_2 設計時相同。

為使偵測網具有多項功能, 能符合經濟、有效、適合多種污染物偵測之需要。我們可將上述各種情況組合之設計結果, 分別以相同比例作圖, 然後可依實際需求將其數張圖或全部重疊, 即可找出適合要求的空氣品質偵測網配置方式。

另根據Smith (1979)等人之建議, 若測站預定位置於(1)不易接近, (2)電力缺乏, (3)安全不足, (4)私人產業範圍等地點時, 則將設站之考慮刪除, 本文不擬作上述事項之考慮。

肆、區域性空氣品質固定監測網的設計原理

區域性空氣污染固定監測網之設計, 乃運用擴散模式電腦程式, 計算污染濃度相關係數矩陣之固有值和固有函數, 使用線性內推公式之電腦程式, 將估計值統計誤差最大者, 選擇為新測站, 反覆進行, 直至所需數目的測站均決定為止。此法可在設站經費有限時, 藉擴散模式及統計方法, 尋求整個區域之最佳測站設計, 以瞭解區域內空氣品質濃度分佈的整個情況。本文採美國環境保護協會Buell和Calder

(1975) 的設計理論為基礎來研究。

本文利用高斯煙流模式來計算空氣污染濃度，其公式為：

$$\chi(x, y, 0; H) = (Q / \pi \sigma_y \sigma_z u) \exp \left[-\frac{1}{2} \left[\left(\frac{y}{\sigma_y} \right)^2 + \left(\frac{H}{\sigma_z} \right)^2 \right] \right]$$

其中， (x, y) 為濃度值 $\chi(x, y, 0; H)$ 所量測點之座標， x 為自污染源之下風距離， y 為下風軸之橫向距離， Q 為污染源強度 (g/s)， H 為污染源之煙囪高度， u 為風速 (m/sec)， σ_y ， σ_z 為擴散係數，可由 Eimutis 和 Konick (1972) 公式求得。

將整個區域劃分一定數目之網格點，本文取 9×9 個網格點，再利用大氣擴散模式求取各點之污染濃度值，進而計算點與點間之互變異數和相關係數，相關係數依次序排列，即可得相關係數矩陣。一共可有 81×81 個相關係數。

若以 λ_i 表固有值 $i=1, \dots, K$ ， $(\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_k)$ ， $\psi_i(x, y)$ 表相對之固有函數，則相關係數函數可以表示為：

$$K(x, y; \xi, \eta) = \sum_{i=1}^k \lambda_i \psi_i(x, y) \psi_i(\xi, \eta)$$

其中， (x, y) ， (ξ, η) 為污染濃度相關之兩點， Σ 記號上之 K 值表統計上較重要的固有值和固有函數之個數，而固有函數只在 9×9 個網格點上才有。

(x_0, y_0) 處污染濃度估計值之最小平方誤差，可自各測站 (x_i, y_i) 作線性迴歸而求得，其公式為：

$$F = \bar{e}^2 = \sigma^2 \left(1 - \sum_{i,j} g_i a_{ij} g_j \right)$$

其中， a_{ij} 為第 i 和 j 測站間相關係數矩陣元素。 g_i 為第 i 個測站與 (x_0, y_0) 點間污染濃度之相關係數， (x_0, y_0) 為尋求極小值的起點。 σ^2 為污染濃度在 (x_0, y_0) 時之變異數， a_{ij} 為 $\{a_{ij}\}$ 逆矩陣之元素。

在前述污染濃度估計值之最小平方誤差式中， $F = \bar{e}^2 = \sigma^2 \left(1 - \sum_{i,j} g_i a_{ij} g_j \right)$ ，因當 $x_0 = x_i$ ， $y_0 = y_i$ 時 g_i 有跳動不連續，故雖 $g_i = g(x_i, y_i; x_0, y_0)$

空氣品質固定監測網的設置理論與應用

應趨近於 $C_0^*(x_i, y_i)$ ，但是實際值為 $g_i = C_0^*(x_i, y_i) + A(x_i, y_i)$ ，所以，當 (x_0, y_0) 接近已設測站位置時， $F(x_0, y_0)$ 值並不是趨近 0。為了要使函數值為 0，則估計值誤差必須作以下之修正。

$$\text{令 } F_0^2 = 1 - \sum_{i,j} g_i a_{ij} g_j$$

$$\text{則 } F = \sigma^2 (F_0 - A/F_0)^2$$

可使 (x_0, y_0) 在接近已設測站位置時， F 為 0。

測站位置之最佳選擇係利用已設站之採樣值來作最小平方之線性迴歸，其估計值誤差最大者，即為理想之測站位置。增設一站後，即以 $n+1$ 點重新計算估計值誤差；再定下另一站後，再以 $n+2$ 點計算估計誤差，……，反覆進行，直至所需測站數目達到為止。

伍、個案分析

一、氣象與污染源排氣分析

本文所使用之資料時間為民國七十二年十二月一日至民國七十三年十一月三十日。配合雲量之觀測，每日的氣象資料為 2, 5, 8, 9, 11, 14, 17, 20, 21, 23 時的觀測值。氣象資料的建立，採以下幾個原則：

- (1) 風向、風速部份，採台電公司興達電廠測候站的觀測資料。
- (2) 因興達電廠測候站的氣溫資料不全（缺七十三年七月資料），且無雲量的觀測，故採臨近之中央氣象局台南測候站的同時期氣溫、雲量觀測值為代表。
- (3) 興達電廠利用聲波雷達測定混合層高度，本文採各季平均的每日逐時值為各相對月份的代價值。
- (4) 利用 Turner 法，將上述資料輸入電腦程式中，求取穩定度。
- (5) 風向分為十六級，風速分為六級，穩定度分為六級，雲量採十分法（即 1/10 ~ 10/10 方法），混合層高度以公尺為單位。

興達火力發電廠位於高雄縣永安鄉，在臺南市南方十八公里，距高雄市約四十公里。廠址北臨興達港，西瀕臺灣海峽，東南方均為塩田、漁塭、養蚵場。廠區原是濱海淺灘及淤塞之內海，經從外海抽砂填築而成新生地，共可容八部機組建廠之用，是臺灣電力公司廠區面積最大的火力發電廠。交通運輸有自開道路銜接省公路並臨近高雄港，器材運輸甚為方便。

電廠於民國六十七年開始建廠，原計劃係以燃油為主之電廠，但至六十八年間，因石油價格節節上漲，改以燃煤為主之電廠。現有兩部機組，煙囪高 250 公尺，為雙筒鐵塔型，兩支煙道共同由一座四脚鋼架支撐。在鍋爐房與煙囪之間安裝有 99% 以上高效率之靜電集塵器各兩組。

煙道中的二氧化硫會有部份遺留在靜電集塵器上，加熱器與煙道上，但為保守估計，假設沒有上項滯留，則二氧化硫排放量可估算如下：

二氧化硫排放量 = $2 \times \text{燃料用量} \times \text{燃料含硫份}$

興達電廠以燃煤為主，依其環境保護資料（如表四），兩煙囪之二氧化硫排放量各為

$$\begin{aligned} & 2 \times 209 \text{ ton/hr} \times 1.83\% \\ & = 2 \times 209 \text{ ton/hr} \times 1.83\% \times 2000 \text{ lb/ton} \times 453.6 \text{ g/lb} / 3600 \text{ sechr}^{-1} \\ & = 1927.65 \text{ g/sec} \end{aligned}$$

另依其環境保護資料，興達電廠排塵總量為 210 kg/hr，但靜電集塵器平均效率為 99%，所以兩支煙囪之懸浮顆粒之排放量各為：

$$\begin{aligned} & 210 \text{ kg/hr} \times (1 - 99\%) \\ & = 2.1 \text{ kg/hr} \\ & = 2.1 \times 1000 \text{ g} / 3600 \text{ sec} \\ & = 0.583 \text{ g/sec} \end{aligned}$$

大氣擴散模式計算所需之排放源資料，如煙囪高度 (Hs)，煙囪內徑 (d)，排氣速度 (Vs)，排氣溫度 (Ts) 等，均列於表四。

本所曾統計民國七十年九月至七十七年八月臺電公司在興達地區之興達、永安

、文南、湖內、劉家、下茄定測站之二氧化硫與懸浮微粒之測定值，可供與模式值比較，興建地區現有測站位置及相對距離。

二、污染管制事件固定監測網設計結果與討論

在研究大氣擴散之前，需先訂定污染處理之對象，通常電廠廢氣排放管制之研究方面，均採二氧化硫和懸浮微粒為研究之對象。不過，依本所對興達地區污染物測定值之研究發現，二氧化硫濃度與興達電廠發電量呈相關性，但仍有其他因素造成高濃度值；而懸浮微粒的污染與電廠的相關性很小，主要係由其他污染源，如交通運輸、建築工程等因素所引起，故本文之研究對象採二氧化硫為監測對象。

本文之設站方法中，在取捨濃度值時，需訂定污染管制事件空氣品質標準；另在求 X_{FRO} 及 X_{BAC} 時，亦需有一個濃度曲線所要超過之空氣品質標準。興達電廠之煙囪高達 250 公尺，對興達地區所產生之 SO_2 污染濃度甚低，未超過中華民國環境空氣品質之限值。因此本文採梁氏 (1983) 對興達地區六測站所得之 SO_2 濃度值之前 80% 程度值作為考慮設站之空氣品質標準。其步驟係利用統計方法先求得興達地區 SO_2 實測值之平均濃度為 0.014 ppm，標準差為 0.0068 ppm。再查數學統計表得前 80% 程度時之濃度值為 0.020 ppm，以此值作為本文考慮設站之污染事件空氣品質標準。

1. 結果

(1) 本文以最大濃度 0.020 ppm，發生次數大於 10 次/年之三種情況資料值，作為考慮設置固定測站之對象。測站設計先依 $X_{90} = aX_{max}^b$ 和 $X_{90} = a'X_{max}^{b'}$ 之迴歸方程式分別求出濃度為 $0.9C_{max}$ ， $0.8C_{max}$ ， $0.7C_{max}$ 之接近和遠離污染源之濃度位置所在，再依 Green 之漸近方程式求得水平和垂直擴散係數 σ_y ， σ_z ；再依 $y_{90} = 0.92\sigma_y$ ， $y_{80} = 1.34\sigma_y$ ， $y_{70} = 1.69\sigma_y$ 公式，求出 y_j 值，然後依 $As = \frac{\pi}{4} (X_j^+ - X_j^-) y_j$ ($j = 90, 80, 70$)，可得單一測站覆蓋面積 As 。接著，視空氣污染物濃度分佈為高斯分佈 (常態分佈)，利用高斯濃度公式來計算超過污染事件空氣品質標準 (C_s) 之濃度剖面，定出 C_s 之位置，用半開

距法 (Half-Intervening Method) 求得 X_F 及 X_B 點。可依此求得偵測潛勢區

$$A_p = \frac{\pi (X_B^2 - X_F^2)}{16}, \text{ 得單一測站覆蓋比 } CR_s = \frac{A_s}{A_p}。 \text{ 然後，依各種忍}$$

限值 (即 $0.9 C_{max}$, $0.8 C_{max}$ 及 $0.7 C_{max}$) 和總覆蓋比 (CR_T)，可信賴區間 (β) 0.5, 0.9, 0.95, 0.99 條件下之測站數目。

(2) 最大濃度發生位置為設站之理想位置，按發生次數和最大濃度值大小之順序，可定出設站之優先次序。

(3) 由表五可知， X_j, Y_j, A_s ($j=90, 80, 70$) 皆隨 j 值變小而增大，顯示忍限值愈小，單一測站之覆蓋面積 A_s 愈大。

(4) 穩定度 B 時之各種狀況，其 A_p 值為 10.56 和 4.08 km^2 皆比穩定度 C 時之 25.78 km^2 為小。但無論那一種情況， A_s 皆小於 A_p ，所以 CR_s 皆小於 1。又因 CR_T 永遠小於或等於 1，所以 CR_s 大於 CR_T 時，只需一個測站即可；若

CR_s 小於 CR_T 時，則需一個以上之測站。

(5) 風向 8 吹送之下風向之 A_p 區域有重疊疊合的情形，表示有氣象條件組合交互作用之現象，其設站位置需優先考慮。

2 討論

(1) 測站數目有限時，最佳空氣品質監測網之設計。

總覆蓋比與測站數目之關係為

$$CR_T = NN \cdot CR_s$$

故 $CR_s \geq CR_T$ 時， NN 為 1； $CR_s < CR_T$ 時，

$$NN \text{ 可能為 } 2, 3, \dots。 \text{ 又 } Z = \frac{n - NP}{\sqrt{NP(1-P)}}$$

若 n, Z 值固定， N 值愈大， CR_T (即 P 值) 愈小。此表示在能成功地偵測 n 次條件下，發生超過限值情形之次數 (N) 愈多，則達成偵測目的也愈簡單，所需測站數目也愈少，故 CR_T 可視為偵測難易程度之指標 (即愈難者， CR_T 值愈大。) 若令 NID 表 I 點所需站數， NIT 表累積設站數， NIR 表 I 點所設

站數，定義偵測效率值 P 為：

$$P = \frac{NIR}{NID}$$

P 之意義即為設置一站所能達成之偵測效率值。我們利用前述之計算與設計結果，討論 $\beta = 0.9, 0.95, 0.99$ ，各 C_{max} 條件下，偵測效率值 P 與累積設站數 NIT (ΣNIR) 之關係。如表五，圖六 A~C。我們可利用 P 與 NIT 之關係，在測站數目限制條件下，尋求最大的 P 值，獲得最佳效率下之偵測網設計。

(2) 有效偵測次數 n 大或等於 2 時之討論

前面所述之 n 皆為 1 之情況，其不同 β 值條件下， CR_T 與 N 之間的關係情形，如圖六 A~C。若 n 取為 2，即測站能測得兩次違反限值之狀況，其各 β 值情形下， CR_T 與 N 之關係情形如圖七。另外，亦可得 β 值固定，觀察 n 值與 CR_T 及 N 之關係，如圖八。由此，可依計算所得之 N 值，按要求選取 n 值，即可找出 CR_T 值，再依各種 C_{max} 忍限值所求得之 CR_s 值，求得所需之 NN 值。

三、區域性固定監測網之設計結果與討論

本文以高雄縣興達地區為研究對象，將整個區域劃分為 9×9 個測站網格點，各點間距為 5 公里，中心在興達電廠旁，避免採興達電廠為中心，因只有一個污染源，該點之變異數為零，影響程式中相關係數之計算，又此中心點與鄰近中央山脈距離為 20 公里 (大、小崗山不列入考慮)，相當於四個網格距離。一共可得 81×81 個相關係數矩陣。風向分 16 級，各級代表之角度分別為 $22.5^\circ, 45^\circ, 67.5^\circ, 90^\circ, 112.5^\circ, 135^\circ, 157.5^\circ, 180^\circ, 202.5^\circ, 225^\circ, 247.5^\circ, 270^\circ, 292.5^\circ, 315^\circ, 337.5^\circ, 360^\circ$ ，風速分為 6 級，各級代表風速值為 0.75 m/s ， 2.45 m/s ， 4.40 m/s ， 6.7 m/s ， 9.35 m/s ， 12.3 m/s 。穩定度分 6 級，求得各級穩定度之代表混合層高度值

在總定度 1, 2, 3, 4, 5, 6 級之平均混合層高度分別為 562.3 公尺,

463.5 公尺, 403.4 公尺, 364.2 公尺, 325 公尺, 336.5 公尺, 另興達電廠煙囪為雙筒鐵塔型, 兩支煙囪基本條件相同, 本文只輸入一支煙囪資料, 在程式中予以疊合計算。污染物 SO_2 之排放量為 3,844 g/sec, 座標值為 (0.6, 1), 煙囪高 250 公尺, 最低污染濃度底值為 1.0×10^{-20} ppm。

本文以電腦程式來設計測站, 以固有值和固有函數來代表相關係數矩陣, 另已設或自定之數點作為基本設站位址進行計算。本文利用以下二例求其結果如下:

1. 以大型點源污染管制事件所設計之三個固定測站為基本測站, 進行區域性監測網之設計。興達電廠座標 (0.6, 1) 測站之座標為 (0.6, 4.96), (0.6, 3.6), (5.7, -4.1), 此三者皆在凸多邊形之周界上。形成一個三角形, 外接圓之圓心為 (0.6, 1) (興達電廠), 半徑為 19 公里, 圓上無測站。預定增設 7 站, 估計值最大誤差之百分比低降為 0.01, 副程式中之期望絕對誤差為 0.01, 副程式中之迭代次數為 5 次。相關係數網格點共 81 點, X 軸上基本座標為 -20, -15, -10, -5, 0, 5, 10, 15, 20; Y 軸上之基本座標亦同。

佳化新設站結果必須考慮濾除不在陸地上之測站情況。各佳化測站座標依序為 (18.8, 6.46), (6.1, -17.2), (9.4, -1.3), (11.4, -4.2), (2.1, 0.0), (1.0, 2.4), (0.5, 2.9)。其分佈圖如圖九。

2. 以興達地區現有測站為基本測站之設計結果

興達電廠座標定為 (0.6, 1), 則現有測站之座標分別為文南 (6.5, 0.9), 永安 (3.2, -3.3), 湖內 (4.7, 4.1), 劉家 (2.8, 5.1), 下茄定 (1.0, 5.1)。以興達電廠為圓心, 半徑取 19 公里, 預定新設 5 站, 餘條件與前同。則佳化設站結果各新測站座標為 (17.44, 9.8), (9.4, -15.8), (2.3, 2.0), (1.4, 2.7), (1.1, 3.0)。其分佈圖如圖十。

陸、結論與建議

一、結論

依 Stalker 之研究, 以 SO_2 之日平均濃度而言, 每平方哩至少需有四個測站, 才能夠有足夠的代表性。此種測站數目在經濟上幾不可能。因此, 如何經濟有效地設置偵測網, 在所需的信賴程度上, 收集具有代表性的污染物濃度資料, 是十分重要的。

本文針對空氣品質與氣象監測網之設計, 提出兩種不同方式之設計理論, 一為大型污染源管制事件監測網之設計, 另一為區域性監測網之設計。兩者之目的不同, 前者係評估超過污染管制標準之污染事件為目的, 後者則為瞭解區域內空氣品質分佈情形為目的。

污染管制事件固定監測網之設計方法係以單點污染源模式 (Single Source CRSTER Model) 為主體, 配合污染物發生與污染源排放條件等因素之修正, 參酌風向、風速、大氣穩定度和混合層高度, 訂定單一測站所能代表區域之範圍三種地面濃度忍限值 ($0.9 C_{\max}$, $0.8 C_{\max}$, $0.7 C_{\max}$) 之等濃度線所圍成之區域。再利用模式計算結果與環境空氣品質管制限值比較, 算出各風速級條件下的偵測潛勢區域。根據以往氣象資料之計算及經濟上之權衡, 以二項分配偵測之行為, 設計所需之測站數目及位置。

區域性空氣品質固定監測網, 係運用大氣擴散模式及統計方法, 計算污染濃度相關係數矩陣之固有值和固有函數, 再使用線性內推之方法, 將估計值統計誤差最大者, 選擇為新測站, 反覆進行, 直至所需數目之測站均決定為止。此法可在有限經費下, 尋求整個區域之最佳測站設計, 以瞭解區域內空氣品質濃度分佈的整體情況。

二、建議

- (1) 考慮污染管制事件之監測工作時，只需利用污染管制事件監測網之設置方法來設計。
- (2) 欲瞭解地區之全面污染情況，則利用區域性監測網之設置方法來設計。
- (3) 若同時考慮污染管制事件監測與地區污染情況，可先使用污染管制事件監測網之設計原理來取產大濃度之測站為基本測站，再使用區域性監測網設置方法來增設其他測站。

誌謝

本研究蒙中央研究院物理研究所研究員梁文傑教授在理論與應用上的許多建議，於此表示感謝。研究期間，中央研究院的圖書及電腦的支援，以及許多同事的建議與討論，亦表謝意。

參考文獻

1. Busse, A. D. and J. R. Zimmerman. (1973): "User's Guide for the Climatological Dispersion Model", EPA-R4-73-024, U. S. EPA.
2. Flyger, H. et al, (1978), "Airborne Investigations of SO₂ Oxidation in the Plumes from Power Stations", Atmos. Environ., Vol. 12, pp. 295-296.
3. Graves, R. J. (1981): "Air Monitoring Network Design: Case Study", J. of ASCE, Environ Eng. Div., pp. 941-955.
4. Green, A. E. B. (1980): "Analytic Extensions of the Gaussian Plume Model." JAPCA, Vol. 30, No. 7, pp. 773-776.
5. Hamburg, F. C. (1971): "Some Basic Considerations in the Design of an Air Monitoring System".
6. Hougland, E. S. and N. T. Stephens (1976): "Air Pollutant Monitoring Siting by Analytical Techniques", JAPCA, Vol. 26, No. 1, pp. 51-53.

空氣品質固定監測網的設置理論與應用

7. Leavitt, J. M. et al. (1957): Design and Interim Meteorological Evaluation of a Community Network for Meteorological and Air Quality Measurements, JAPCA, Vol. 7, No. 3 pp. 211-215.
8. Lee, T. D. et al. (1978): "A Procedure for Air Monitoring Instrumentation Location", Management Science, Vol. 24, No. 14, pp. 1451-1461.
9. Nakamori, Y. et al. (1979): "Design of Air Pollutant Monitoring System by Spatial Sample Stratification", Atmos. Environ., Vol. 13, pp. 97-103.
10. Noll, K. E. and T. L. Miller (1976): "Air Monitoring Survey Design", Ann Arbor Science, pp. 97-114.
11. Noll, K. E. et al. (1977): "An Objective Air Monitoring Site Selection Methodology for Large Point Sources", Atmos. Environ., Vol. 11, pp. 1051-1059.
12. Ott, W. R. (1977): "Development of Criteria for Siting Air Monitoring Stations", JAPCA, Vol. 27, No. 6, pp. 543-547.
13. Pooler, F. Jr. (1974): "Network requirements for the St. Louis Regional Air Pollution Study", JAPCA, Vol. 24, No. 3, pp. 228-231.
14. Seinfeld, J. H. (1975): "Air Pollution: Physical and Chemical Fundamentals", pp. 260-302. McGraw-Hill, Inc.
15. Smith, D. G. and B. A. Egan. (1979): "Design of Monitoring Networks to Meet Multiple Criteria", JAPCA, Vol. 29, No. 7, pp. 710-714.
16. Turner, D. B. (1970): Workbook of Atmospheric Dispersion Estimates", PB-191482, U. S. Department of Health, Education and welfare, Cincinnati, Ohio.
17. Weber, E. (1970): "Contribution to the Residence Time of Sulfur Dioxide in a Polluted Atmosphere". J. of Geo. Research, Vol. 75, No. 15, pp. 2909-2914.
18. Yamartino, R. J. Jr. (1977): "A New Method for Computation Pollutant Concentrations in the Presence of Limited Vertical Mixing", JAPCA, Vol. 27, No. 5, pp. 467-468.
19. 梁文傑、林劍信 (1982): "火力發電廠空氣品質監測系統之設置原理與應用"，中央研究院物理研究所集刊第十二卷，PP. 173-237。
20. 梁文傑 (1983a): "興達火力發電廠廢氣排放對附近環境之影響之長程調查研究" FM-5，中央研究院物理研究所研究報告，PP. 1-21。
21. 梁文傑 (1983b): "興達火力發電廠廢氣排放對附近環境影響之長程調查研究 (煙氣追蹤實驗第一期報告) FM-8，中央研究院物理研究所。PP. 15-21。
22. 台灣電力公司火力發電工程處 (1980): "興達電廠建廠報告書"，台灣電力公司。PP. 1-26。
23. 經濟部工業局 (1979): "中華民國台灣地區環境空氣品質標準"，環境污染防治法規彙編，經濟部。PP. 1-20。

表一 $0.9C_{max}$ 時, X_{90}^- , X_{90}^+ 對 X_{max} 之迴歸常數

穩定度	A	B	C	D	E	F
X_{90}^-	a	0.8588	0.7978	0.7988	0.7741	0.7660
	b	1.0076	1.0183	0.9873	0.9609	0.9705
X_{90}^+	a	1.0931	1.2273	1.3297	1.3757	1.4631
	b	0.9000	0.9978	0.9985	0.0448	1.0298

註：迴歸方程式為 $X_{90}^+ = aX_{max}^b$ 或 $X_{90}^- = aX_{max}^b$

表二 平均時間超過 10 min 之 σ_y 修正值

平均時間 (hr)	修正值 (C.F.)
1	2.4
3	4.2
10	7.7

表三 (4)式中C值佔標準式C值之比例

H/L	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
σ_z/L	0.3	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.99	0.90	0.50
	0.4	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	0.98	0.92	0.78	0.50
	0.5	1.00	1.00	1.00	1.00	0.99	0.98	0.95	0.83	0.69	0.50
	0.6	0.99	0.99	0.99	0.98	0.98	0.94	0.90	0.84	0.75	0.64
	0.8	0.92	0.92	0.90	0.89	0.86	0.82	0.77	0.72	0.65	0.58
	1.0	0.79	0.78	0.77	0.76	0.73	0.70	0.67	0.63	0.59	0.54
	1.0	0.79	0.78	0.77	0.76	0.73	0.70	0.67	0.63	0.59	0.54

表四 興達發電廠環境保護工作一般資料表

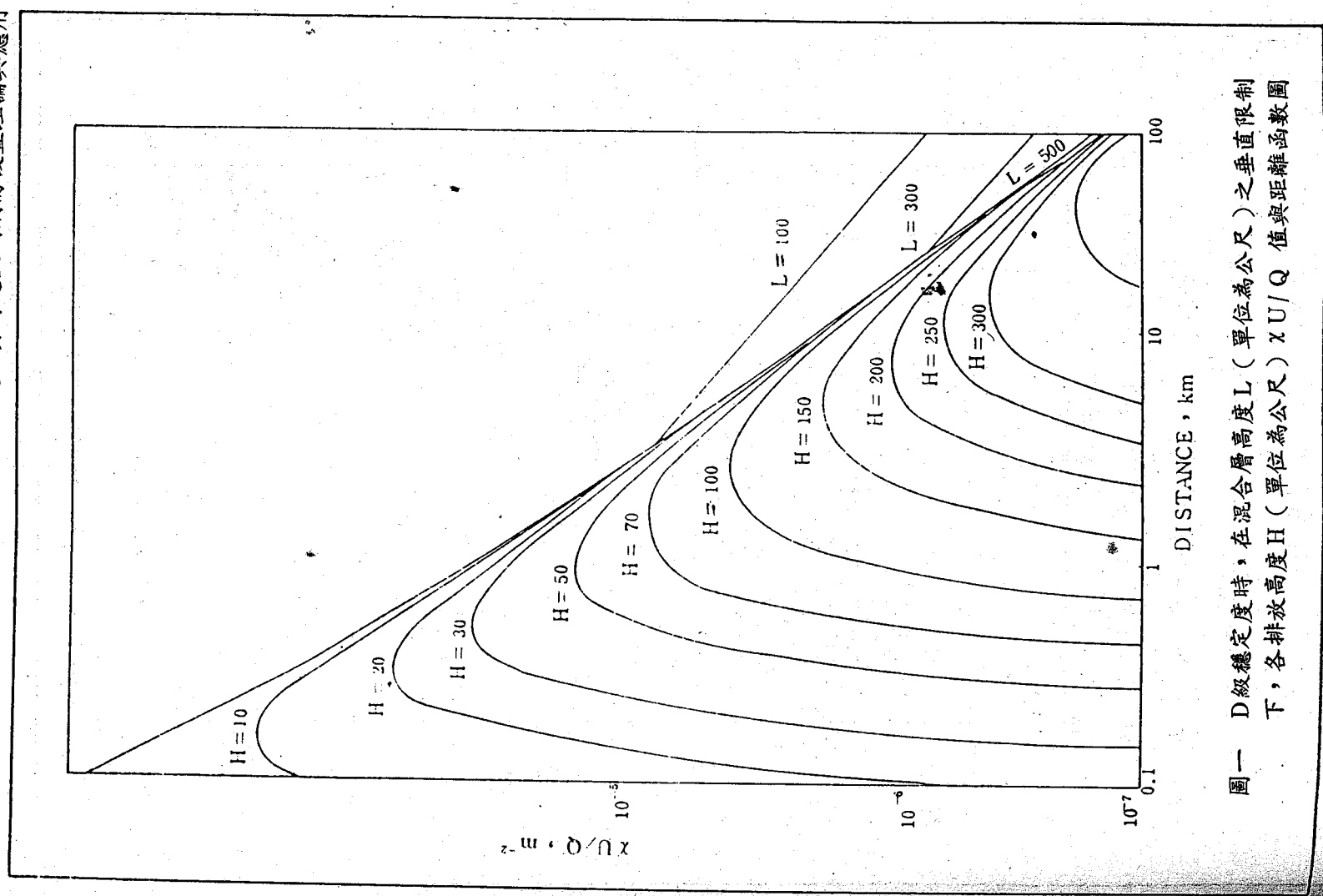
項目	資		料	備	註
	燃	油			
1. 容量 (MW)	500	煤			
2. 使用燃料	油	天然氣	煤		
3. 燃料消耗率 (ton/hr)	110		209		
4. 燃料含硫量 %	3.5		1.83		
4. 燃料含氮量 %	0.15		1.11		
5. 煙囪高度 (m)	250				
a 直徑 (m)	6.9				
c 結構材料	鐵塔支撐鋼製				雙筒鐵塔型
6. 建築物最大高度 (m)	71				
7. 排氣溫度 (°C)	137		143		值
8. 排氣速度 (m/sec)	13.96		13.4		值
9. 排氣量 (Nm ³ /Hr)	1,289,090		1,289,530		值
10. 剩餘空量 (O ₂ %)	1		4		計
11. 排煙 SO ₂ 濃度 (ppm)	2,187		1400		估
12. 排煙 SO ₂ 量 (ton/hr)	3.66		2.35		估
13. 排煙 NO ₂ 濃度 (ppm)	140		210		估
14. 排煙落塵含量 (mg/Nm ³)			176		估
15. 排煙總量 (kg/hr)			210		估
16. 監視儀器	KIMOTO				Ep off 99.4 S = 0.8 %
17. SO ₂ 於地上最高濃度出現地點 (m)					
18. SO ₂ 着地最高濃度 (ppm)					
19. 高效率靜電集塵器					
20. 飛灰處理設備					
21. 底灰堆積場					效率 97.1% ~ 99.65%
					設灰倉兩座 以沿海築堤填海形成新地

Special Issue of Annual Report of the Institute of Physics, Academia Sinica, Vol. 17, 1988
Commemoration of the 60th Anniversary of Academia Sinica

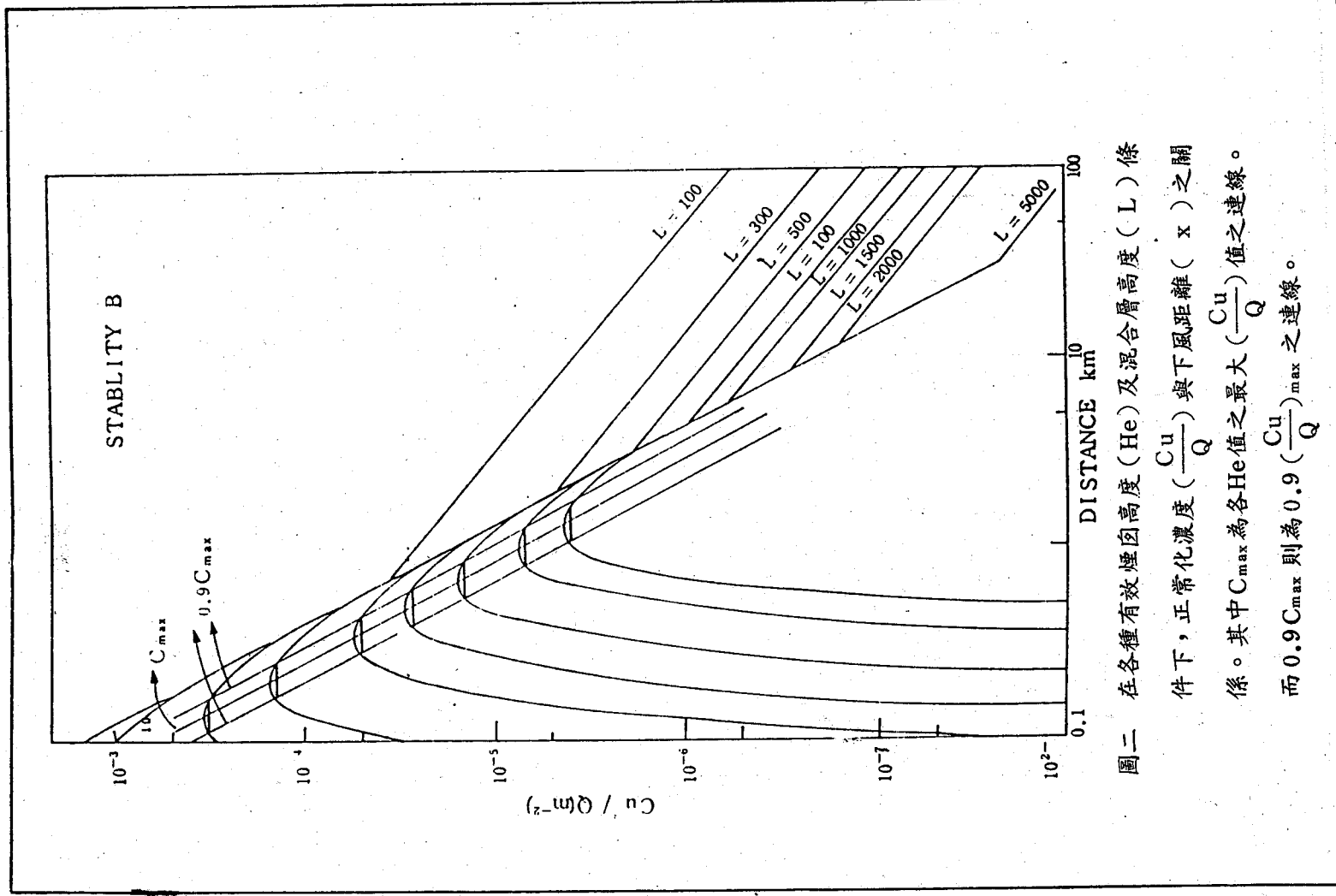
表五 興達電廠， SO_2 ， $\beta = 0.9$ ($\beta = 1 - \alpha$)， $0.9C_{max}$ ， P 值與NIT值比較表

設 站 優 先 順 序	NID	NIR	NIT = Σ NIR	$\frac{NIR}{NID}$	$P = \Sigma \left(\frac{NIR}{NID} \right)$
1	1	1	1	1	1
1	3	1	2	0.33	1.33
1	5	1	3	0.2	1.53

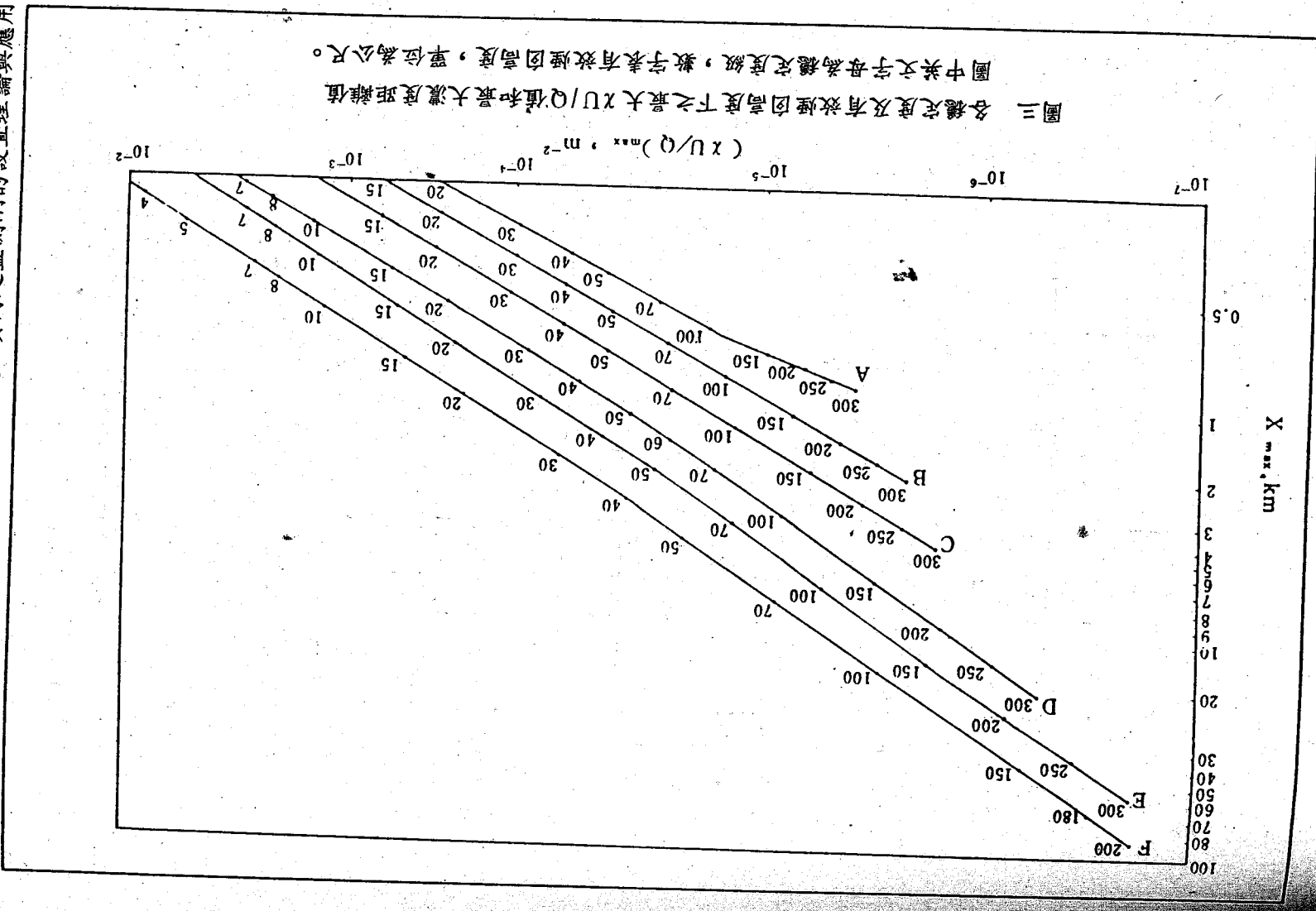
註(1) NID : I 點所需站數
(2) NIT : 總站數
(3) NIR : I 點所設站數



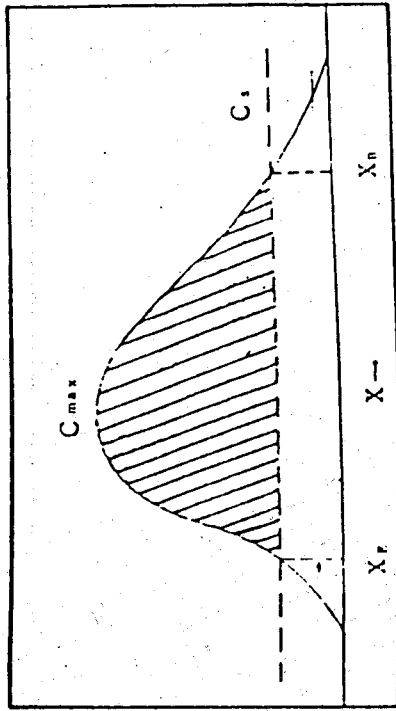
圖一 D級穩定度時，在混合層高度L (單位為公尺)之垂直限制下，各排放高度H (單位為公尺) $\times U/Q$ 值與距離函數圖



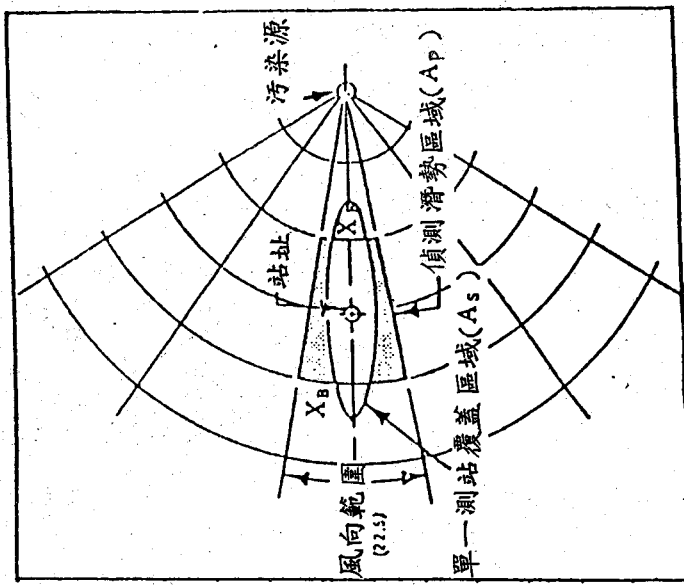
圖二 在各種有效煙囪高度 (He) 及混合層高度 (L) 條件下，正常化濃度 $(\frac{C_u}{Q})$ 與下風距離 (x) 之關係。其中 C_{max} 為各 He 值之最大 $(\frac{C_u}{Q})$ 值之連線。而 $0.9 C_{max}$ 則為 $0.9 (\frac{C_u}{Q})_{max}$ 之連線。



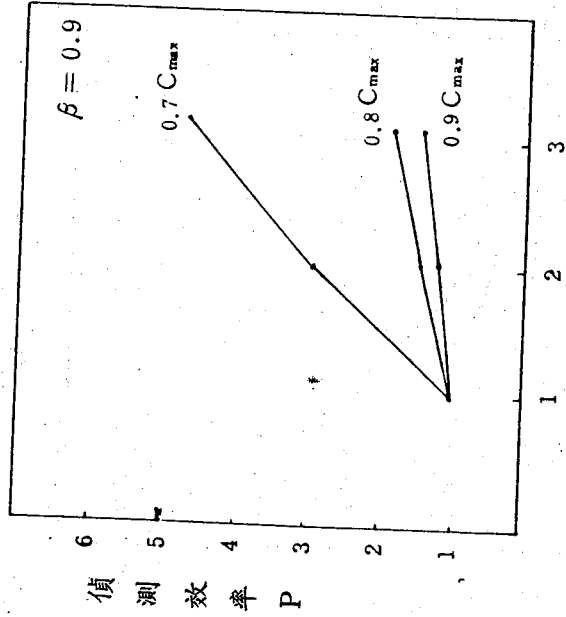
圖三 各種穩定度及有效煙囪高度下之最大 xU/Q 值和最大濃度距離值。圖中 A 字母為穩定度級，數字表有效煙囪高度，單位為公尺。



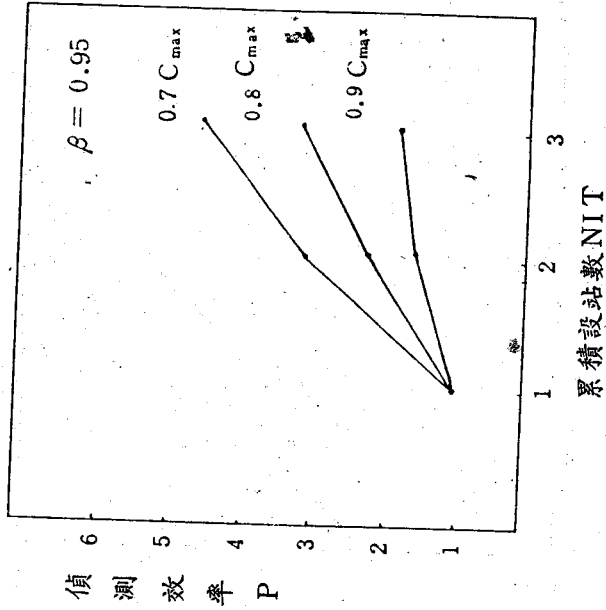
圖四 偵測潛勢區域 (斜線部份) 求法之示意圖, C_s 為空氣品質限值



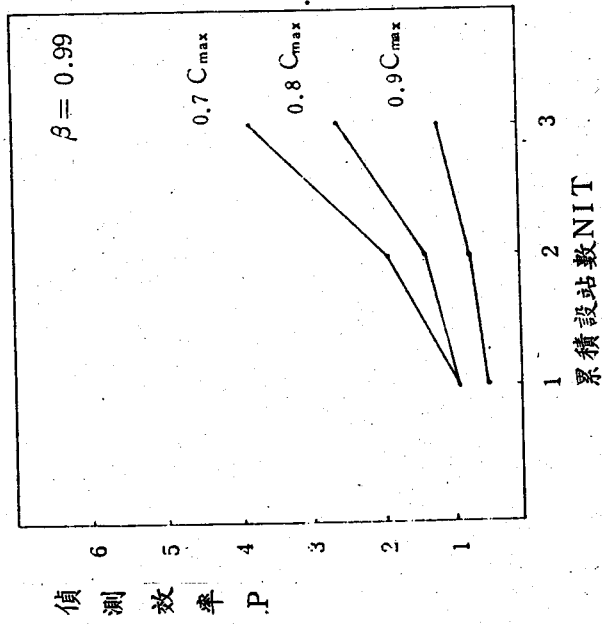
圖五 單一測站覆蓋面積 (A_s) 與偵測潛勢區域 (A_p) 關係之示意圖



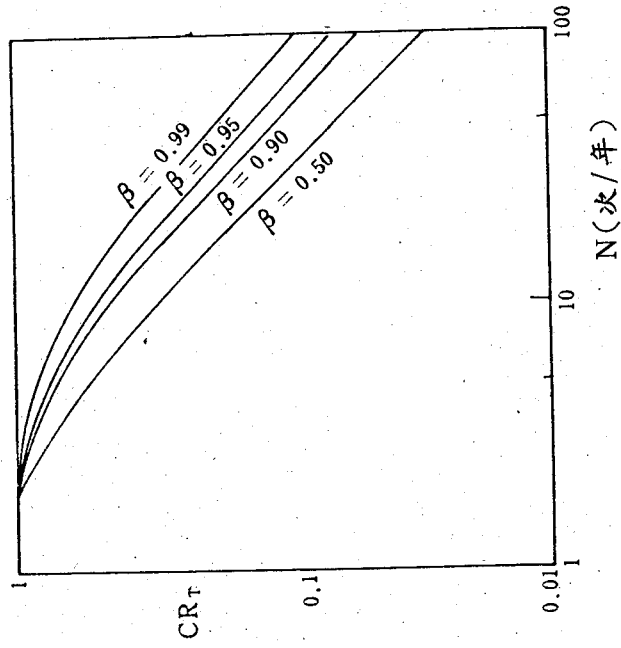
圖六 A $\beta = 0.9$ 時, 各 C_{max} 情況下, 偵測效率值 P 與累積設站數 NIT 比較圖



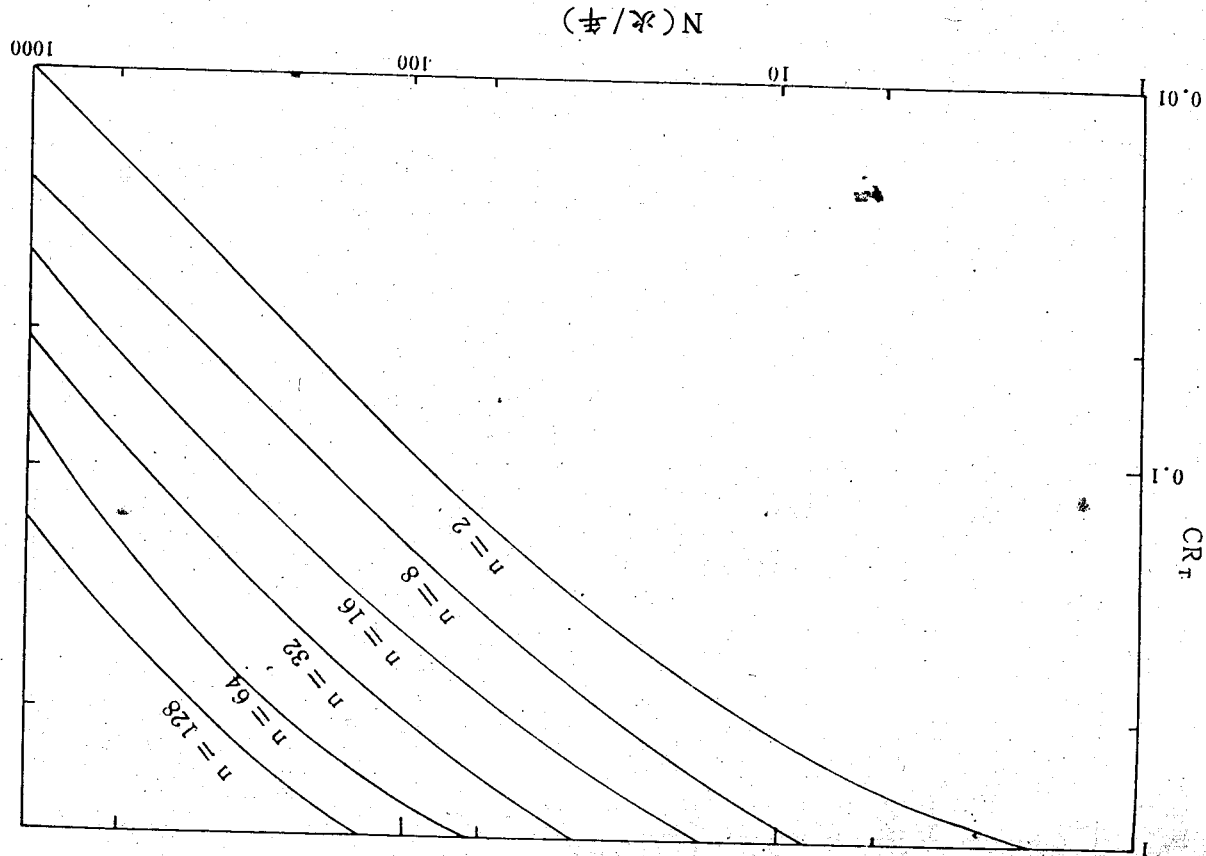
圖六 B $\beta = 0.95$ 時, 各 C_{max} 情況下, 偵測效率值 P 與累積設站數 NIT 比較圖



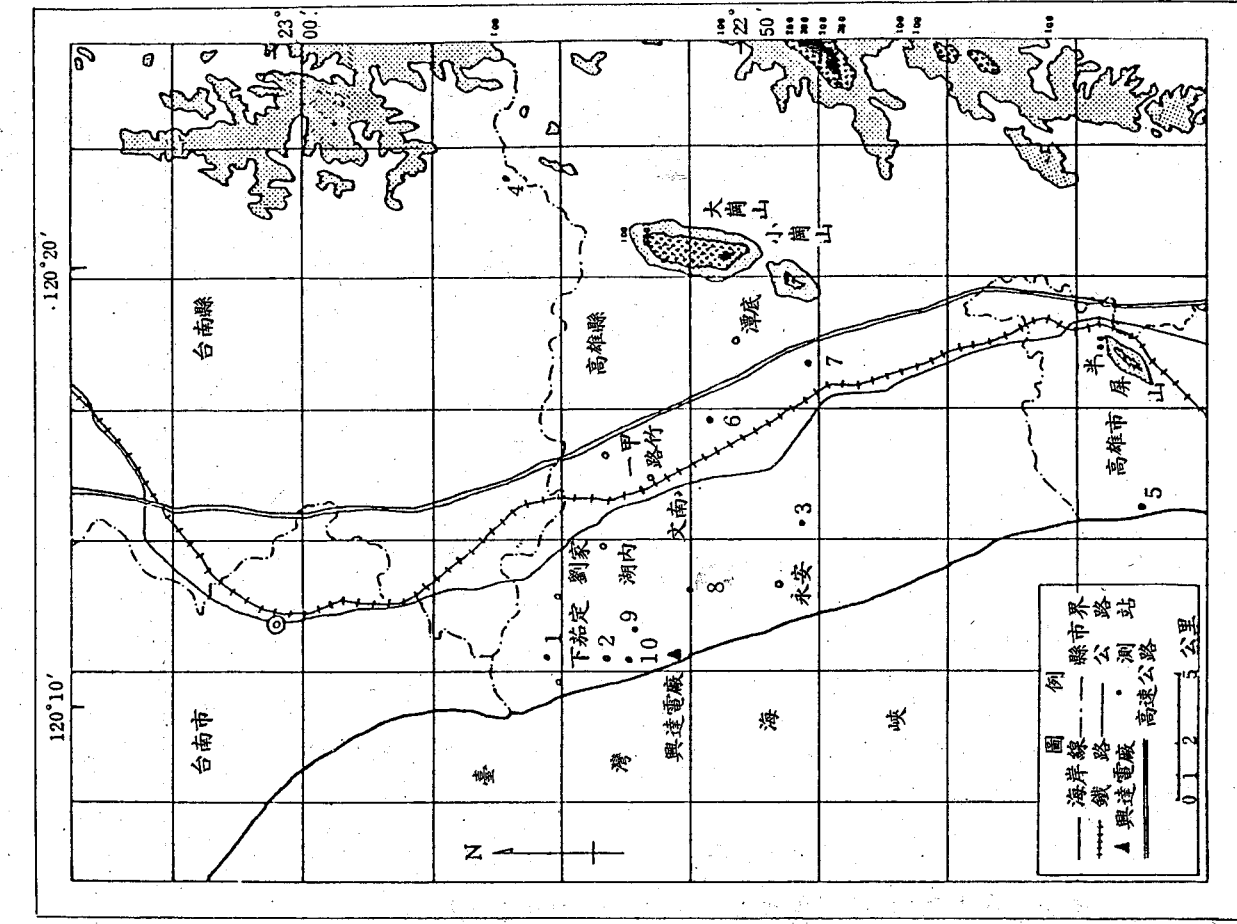
圖六 $\beta = 0.99$ 時，各 C_{max} 情況下，偵測效率值 P 與累積設站數 NIT 比較圖



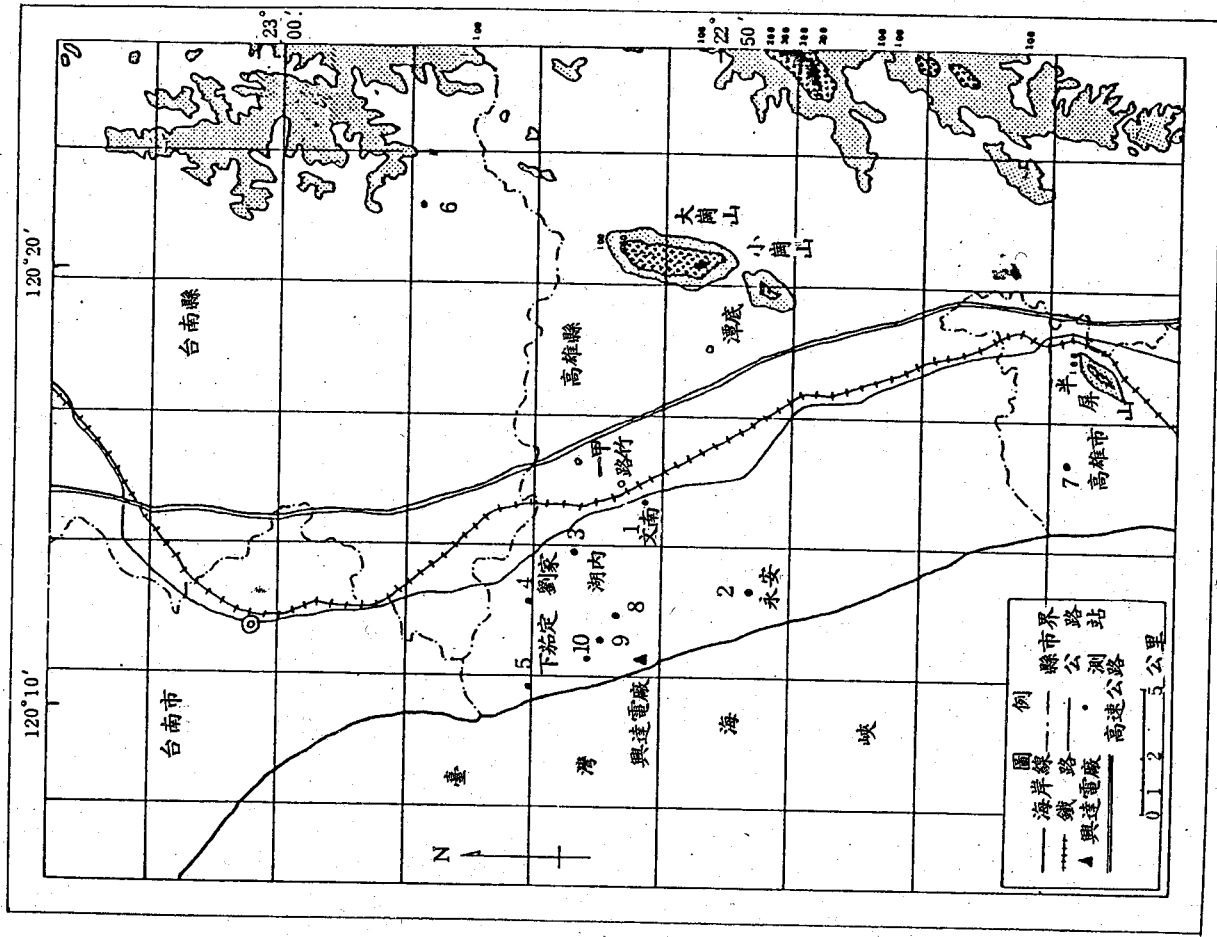
圖七 $n = 2$ 時，在不同 β 值下，N 與 CR_r 之關係



圖八 β 為 0.99 時，各種 n 值條件下，N 與 CR_r 之關係



圖九 以興達地區 $C_{max} > 0.020$ ppm 之三站為基本測站時，區域性固定監測網分佈圖，以1, 2, …, 10表示設站優先順序。



圖十 以興達地區現有測站為基本測站時之區域性固定監測網分佈圖，以1, 2, …, 10表示設站優先順序。

海面溫度遙測的水汽訂正問題

曾忠一

中央研究院物理研究所、國立台灣大學大氣科學系

朱曙光

中央氣象局衛星資料接收站

摘要

本文利用氣象衛星攜帶的極高分辨率輻射計所觀測到的紅外窗區頻道資料，經過水汽訂正後，決定我國附近海域的海面溫度。本文選擇我國附近九個氣象測站的探空資料來定義某一時刻或某一段期間內這個區域的平均大氣狀況，以便建立迴歸模式。研究結果表明，為求得較準確的海面溫度，可以每隔一星期或十天更新一次迴歸係數。本文使用前五天的探空資料建立迴歸模式，求出的衛星海面溫度與船測海面溫度比較，誤差在一度以內，兩者的分布型態也相當一致。

一、前言

根據多窗區頻道法的原理(曾忠一, 1983; 朱曙光與曾忠一, 1986)，海面溫度 T_s 可用各窗區頻道亮度溫度的線性組合表示：

$$T_s = A_0 + \sum_{i=1}^N A_i T_B(\nu_i) \quad (1)$$

其中 $T_B(\nu_i)$ 為第 i 頻道 ν_i 的亮度溫度， N 為窗區頻道個數。 A_0, A_1, \dots, A_N 是常數，和各頻道的水汽吸收係數有關，但通常把它們當做迴歸係數。也就是

海面溫度遙測的水汽訂正問題

曾忠一

中央研究院物理研究所、國立台灣大學大氣科學系

朱曙光

中央氣象局衛星資料接收站

摘要

本文利用氣象衛星攜帶的極高分辨率輻射計所觀測到的紅外窗區頻道資料，經過水汽訂正後，決定我國附近海域的海面溫度。本文選擇我國附近九個氣象測站的探空資料來定義某一時刻或某一段期間內這個區域的平均大氣狀況，以便建立迴歸模式。研究結果表明，為求得較準確的海面溫度，可以每隔一星期或十天更新一次迴歸係數。本文使用前五天的探空資料建立迴歸模式，求出的衛星海面溫度與船測海面溫度比較，誤差在一度以內，兩者的分布型態也相當一致。

一、前言

根據多窗區頻道法的原理(曾忠一, 1983; 朱曙光與曾忠一, 1986), 海面溫度 T_s 可用各窗區頻道亮度溫度的線性組合表示:

$$T_s = A_0 + \sum_{i=1}^N A_i T_B(\nu_i) \quad (1)$$

其中 $T_B(\nu_i)$ 為第 i 頻道 ν_i 的亮度溫度, N 為窗區頻道個數。 A_0, A_1, \dots, A_N 是常數, 和各頻道的水汽吸收係數有關, 但通常把它們當做迴歸係數。也就是

說，我們把(1)式當做迴歸方程，然後用大量的 $(T_s, T_B(v_i))$ 統計樣本來決定這些迴歸係數。迴歸係數決定出來以後，對某一定的一組亮度溫度觀測值，就可由(1)式計算出海面溫度。

上面說過，我們必須蒐集大量的海面溫度和對應的窗區頻道亮度溫度觀測值的統計資料，以便求出迴歸係數。可是在廣大的海洋中有船測海面溫度的地點很少。在另一方面，即使已經知道某一地點的海面溫度，要從極為龐大的衛星資料中找出對應的亮度溫度值也是相當麻煩而費力的事。因此必須尋求別的途徑，最方便的方法莫過於使用計算機製造出大量的衛星資料。只要給定海面溫度 T_s ，視角 θ ，氣溫和水汽垂直分布，再加上已知的水汽吸收特性，不難由輻射傳遞方程決定出衛星上觀測到的輻射強度(朱曙光與曾忠一, 1986)。對某一定的探空資料(即氣溫和水汽垂直分布)，我們可以變動 T_s 和 θ 得到大量的輻射強度，然後求出迴歸係數。

用上面的方法進行統計分析時，除了需要探空資料外，還需要一個計算輻射強度的程式。現在最常使用的程式是北美空軍地球物理實驗室發展出來的LOWTRAN-6 (Kneizys *et al.*, 1983)。這個程式可以計算出從波數 350 cm^{-1} 到 $40,000\text{ cm}^{-1}$ ，每隔 5 cm^{-1} 的大氣平均透射率和射出輻射強度。

利用上述方法求出的海面溫度，還要用船測海溫來比較，決定其準確度。因此，在求取衛星海溫時需使用三種資料，即探空資料、衛星資料及船測海溫資料。

本文的目的在於利用TIROS-N/NOAA系列衛星輻射計AVHRR所觀測到的紅外窗區頻道資料，經過水汽訂正後，決定我國附近海域的海面溫度，並與船測資料互相比較。本文選擇台灣附近9個氣象測站的探空資料來定義某一定時刻或某一段期間內這個區域的平均大氣狀況，以便於建立迴歸模式。這個迴歸模式當然只適用於這個時刻或這一段期間。假如使用這個區域全年的探空資料來建立迴歸模式，那麼這個模式可用來求全年的海面溫度。可是對某一天的衛星資料而言，求出的海面溫度未必準確。事實上，我們可以使用這一地區當天或前一天的探空資料來建立迴歸模式，以便得到更準確的衛星海溫。也就是說，我們可以每天更新水汽訂正模式中的迴歸係數。由於海溫變動很慢，在實際工作時可以每隔一星期或十天更新一次

迴歸係數。本文主要探討這個問題。

二、研究範圍與資料來源

本研究範圍選擇在北緯19度到29度，東經118度到128度間台灣附近的海域，如圖1所示。

本研究需用到三種不同類型的資料，即探空資料、衛星資料及船測海溫資料。

本研究使用中央氣象局提供的自民國74年10月1日到12月31日每日00Z及12Z的原始探空資料。在研究範圍內我們選擇9個測站來代表這個區域，測站的地理位置，如圖1所示。

另外，衛星資料是中央氣象局衛星站接收到NOAA-9號衛星輻射計AVHRR所觀測到的輻射強度資料。一共有五天的資料，分別為74年10月7日05Z，10月8日05Z，10月9日05Z，10月16日05Z及11月19日05Z。

船測海溫報告的來源有三種。一為解讀船舶報告海溫電碼所得到的資料。二為東京氣象廳印刷天氣圖的船測海溫資料。三為台灣水產試驗所漁船實測的海溫。因為水產試驗所的船測資料用漁場來表示地理位置，換算成經緯度會有誤差，所以只能當做參考。

三、研究方法

本研究整個模擬過程可大略的用圖2來表示。

在利用LOWTRAN-6程式套時，因為程式的限制，沒有水汽資料的探空層就無法使用。在探空資料中，通常對水汽的觀測最高只到250 mb左右，250 mb以上的高度採用LOWTRAN-6程式套中MODEL-1(熱帶大氣模式)的四層資料即17公里、50公里、70公里及100公里。

使用LOWTRAN-6程式中的子模式MODEL-7，將探空資料輸入，地表放射

率設為 1，臭氧濃度分布則採用熱帶模式 (MODEL-1) 的資料，便可模擬出地表及大氣向上的輻射強度。

NOAA-9 號衛星輻射計 AVHRR 只能分辨有限的帶寬 ($\bar{\nu} - \Delta\nu/2, \bar{\nu} + \Delta\nu/2$)，其中 $\bar{\nu}$ 為帶寬 $\Delta\nu$ 的中心波數，在模擬時需將儀器的反應函數考慮進去，否則會有誤差。因為 LOWTRAN-6 計算的輻射值是每 5 cm^{-1} 一個值，所以先將儀器反應函數作線性內插成 5 cm^{-1} 一個值，然後以這些值做為權重，來計算頻道的輻射強度。令 $\phi(\bar{\nu}, \nu)$ 為儀器反應函數，則頻道輻射計所測定出來的輻射強度為

$$I_{\bar{\nu}} = \int_{\Delta\nu} \phi(\bar{\nu}, \nu) I_{\nu} d\nu \quad (2)$$

用數值運算式表示為

$$I_{\bar{\nu}} = \sum_i \phi_i I_{\nu_i} \Delta\nu \quad (3)$$

NOAA-9 號衛星輻射計 AVHRR 第三、四、五頻道的儀器反應函數 $\phi(\bar{\nu}, \nu)$ 如圖 3(a)、3(b) 和 3(c) 所示。

輻射計觀測到的輻射強度和該頻道的亮度溫度間有如下的關係：

$$I_{\bar{\nu}} = \int_{\Delta\nu} B_{\nu}(T_B) \phi(\bar{\nu}, \nu) d\nu \quad (4)$$

(4) 式是關係 T_B 的積分方程，對已給定的 $I_{\bar{\nu}}$ 而言，很難求解 T_B ，我們可以下列的方法來求對應於 $I_{\bar{\nu}}$ 的亮度溫度 $T_B(\bar{\nu})$ 。首先變動 T_B 由 0°C 到 35°C ，用 (3) 式計算出大量的 $(T_B(\bar{\nu}), I_{\bar{\nu}})$ 資料，選擇一個適當的波數 ν_0 用下式由 $I_{\bar{\nu}}$ 決定對應的單頻亮度溫度 $T_B(\nu_0)$

$$T_B(\nu_0) = \frac{c_2 \nu_0}{\ln(c_1 \nu_0^3 / I_{\bar{\nu}} + 1)} \quad (5)$$

其中 c_1 和 c_2 分別稱為第一和第二輻射常數，其值分別為

$$c_1 = 1.191066 \times 10^{-5} \text{ mW/m}^2 \cdot \text{cm}^{-4} \cdot \text{sr}$$

$$c_2 = 1.438833 \text{ deg-cm}$$

最後再由大量的 $(T_B(\bar{\nu}), T_B(\nu_0))$ 資料建立下面的迴歸模式：

$$T_B(\bar{\nu}) = a + b T_B(\nu_0) \quad (6)$$

海面溫度遙測的水汽訂正問題

為找出最佳的 ν_0 ，我們變動 ν_0 得到不同的 a, b 值，然後計算其標準差和最大誤差，取其最小者為最佳的 ν_0 ，最後我們求出 NOAA-9 號衛星輻射計 AVHRR 第三、四、五頻道的最佳 ν_0 和 a, b 值如表 1 所示，這些值適用於 0°C 到 35°C 之間。本文中在求亮度溫度時，都使用表 1 所示的參數值。

表 1 NOAA-9 號衛星輻射計 AVHRR 三個頻道的 a, b 和 ν_0 值。
適用溫度範圍為 0°C 到 35°C

頻道	a ($^\circ\text{K}$)	b	ν_0 (cm^{-1})
3.7 μm	-1.98883	1.002003	2694.422
10.8 μm	-0.61135	1.001481	931.034
11.8 μm	-0.21553	1.000797	844.964

NOAA-9 號衛星輻射計 AVHRR 有三個紅外線頻道即第三、第四、第五頻道分別位於 3.7 μm ，10.8 μm 和 11.8 μm 處。因為第三頻道受陽光反射的影響很大，不能用來求取白天的海面溫度，所以白天的海面溫度通常由第四、第五頻道的亮度溫度決定，夜間才可用三個頻道來做水汽訂正。

如 (1) 式所示，我們求迴歸係數 A_0, A_i 時必須有大量的 $(T_s, T_B(\nu_i))$ 統計樣品，可用多組探空資料，對每組探空資料變動海面溫度 T_s ($T_s = T_0, T_0 \pm 1, T_0 \pm 2, T_0 \pm 3, T_0 \pm 4, T_0 \pm 5$ ，其中 T_0 為探空最底層的溫度)，然後輸入 LOWTRAN-6 程式套中，求出大量的 $(T_s, T_B(\nu_i))$ 的統計樣本，再做迴歸分析，便可得到水汽訂正的迴歸係數。

氣象局衛星站所提供的衛星資料，除了 NOAA-9 號衛星輻射計每個頻道的資料外，還包括資料的時間，衛星升交經度，升交時刻以及每個像元的地理經緯度。利用這些資料及衛星軌道參數 (表 2)，可由軌道衛星定位的原理 (曾氏與洪氏，1985)，求出衛星相對於每一個像元的天頂角 θ 。

表 2 NOAA-9 號衛星的軌道參數

周期(分鐘)	軌道傾斜角(度)	距地心高度(公里)
102.0846	98.95219	7229.969

假如衛星不在某一地點的正上方(天頂角 $\theta = 0$)，則該點放出的輻射強度，需經較長的光程才能到達衛星輻射計上，受到大氣中吸收氣體削弱較大，一般說來 $I_{\bar{\nu}}(\theta) \ll I_{\bar{\nu}}(0)$ ，這種現象稱為邊緣模糊效應。為考慮此效應我們可用下列非線性函數來表示：

$$I_{\bar{\nu}}(0) = I_{\bar{\nu}}(\theta) + (\alpha_1 + \alpha_2 I_{\bar{\nu}}(\theta))(\sec \theta - 1) + (\beta_1 + \beta_2 I_{\bar{\nu}}(\theta))(\sec \theta - 1)^2 \quad (7)$$

利用多組探空資料，對每組探空資料讓 $\sec \theta$ 等間距變動，由 $\sec \theta = 1 (\theta = 0^\circ)$ 到 $\sec \theta = 1.75 (\theta = 55.15^\circ)$ 每次 $\sec \theta$ 增加 0.025，然後輸入 LOWTRAN-6 程式套中，便可得到大量的統計樣本，以決定(7)式中的迴歸係數 $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$ 。這樣就可以把傾斜光路 ($\theta \neq 0$) 上的輻射強度換算為天頂處的輻射強度。

從海面溫度遙測的觀點來看，雲是雜訊，要如何濾除觀測區域內雲的影響是相當重要的。本研究對白天的衛星資料利用 NOAA-9 號上 AVHRR 輻射計的第一頻道(可見光)的反照率大小來辨認每個像元是否受到雲的影響。

四、研究結果

本研究使用下面 4 個統計量來表示兩組不同溫度間的關係

$$RMS = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta T_i)^2} \quad (8)$$

$$BIAS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta T_i \quad (9)$$

$$MDIF = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\Delta T_i| \quad (10)$$

$$SCA = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Delta T_i - BIAS)^2} \quad (11)$$

其中 ΔT_i 是兩組溫度資料的差， N 是樣本的個數。(8)式的統計量 RMS 就是均方根誤差，這個量和(10)式的平均誤差 MDIF 同樣是誤差的度量。BIAS 表示偏倚，另外 SCA 表示散布，相當於標準差。

由於 24 小時內氣象場之間的相關很大，故可用 24 小時前的探空資料來更新水汽與視角訂正中的迴歸係數，以便得到更準確的海面溫度值。我們研究這個方法的可行性。首先使用前 24 小時的探空資料，最大的問題是所產生的統計樣本不夠多，我們以 10 月 16 日前 1 天到 7 天的探空資料求出不同的水汽與視角訂正中的迴歸係數，如表 3、表 4、表 5 所示。然後用表 3、表 5 的係數及 10 月 16 日的衛星資料，得到不同的海面溫度推定值。表 6 表示其相互間 RMS 與 SCA 的大小。可以看出，使用 24 小時的探空資料產生的統計樣本已足夠多了，所以最大的 RMS 只有 0.117°C 。

對不同的衛星資料我們使用前 24 小時的探空資料及當天的探空資料求出水汽與視角訂正中的迴歸係數，如表 7 到表 12 所示。然後用衛星資料決定海面溫度，使用與衛星資料同一天和前一天迴歸係數求得的海面溫度差異如表 13 所示。由表 13 中可知，最大的 RMS 為 0.430，最大的 SCA 為 0.299，可見使用前 24 小時的探空資料建立水汽與視角訂正迴歸模式，是很可行的方法。

另外我們也使用 1 個月的探空資料求出水汽與視角訂正中的迴歸係數，其結果如表 14、表 15、表 16 所示。然後用這些係數推算出的海面溫度，與使用衛星資料當天的迴歸係數所求出的海面溫度間的差異如表 17 所示。由表可看出最大的 RMS 為 1.992°C ，最大的 SCA 為 0.471°C 。使用一個月的平均的探空剖面，對特別一天可能有較大的誤差。所以使用前 24 小時探空資料來更新水汽和視角訂正的迴歸係數，可以得到較準確的海溫值。

表3 使用75年10月16日前1天到7天探空資料所求出的二個頻道水汽訂正模式迴歸係數值

日數	A_0	A_1	A_2
1天	-27.00806	4.27052	-3.17827
2天	-22.31203	4.32733	-3.25117
3天	-23.67662	4.33122	-3.25030
4天	-25.03418	4.30458	-3.21895
5天	-26.57115	4.29286	-3.20195
6天	-26.99500	4.28395	-3.19158
7天	-26.35676	4.24725	-3.15698

表4 同表3，但為三個頻道

日數	A_0	A_1	A_2	A_3
1天	-11.97165	0.92067	1.39111	-1.26820
2天	-11.86292	0.94850	1.26864	-1.17364
3天	-14.33883	0.92549	1.31839	-1.19193
4天	-15.28362	0.94817	1.22559	-1.11846
5天	-15.97964	0.93641	1.26352	-1.14231
6天	-15.85190	0.96166	1.18308	-1.08748
7天	-15.26756	0.98555	1.10309	-1.03329

表5 使用75年10月16日前一天到7天探空資料所求出的四個訂正迴歸係數值

日數	α_1	α_2	β_1	β_2	道
1	0.01157	0.04395	0.00397	-0.01258	3
	16.40600	-0.10800	0.93832	-0.02027	4
	25.95032	-0.16992	-3.69209	0.01662	5
	0.00241	0.06221	0.00625	-0.01631	3
	29.94249	-0.20537	-5.18352	0.02847	4
	19.11582	-0.13450	1.40674	-0.02659	5
	-0.25014	35.16062	-8.97628	0.06051	3
	25.00332	-0.19105	-1.95831	0.00475	4
	0.05431	0.00656	0.00661	-0.01745	5
	-0.27500	38.10051	-10.25864	0.07081	3
	0.05284	0.00735	0.00695	-0.01812	4
	27.61010	-0.21580	-2.92046	0.01331	5
	0.01276	0.04280	0.00777	-0.02043	3
	31.85593	-0.25664	-5.28296	0.03516	4
	42.07950	-0.30921	-12.78684	0.09188	5
	-0.01169	0.04480	0.00766	-0.02009	3
	41.59950	-0.30512	-12.31613	0.08791	4
	31.14800	-0.24994	-4.79331	0.03064	5
	0.01086	0.04654	0.00871	-0.02213	3
	32.04542	-0.25851	-4.87936	0.03113	4
	42.87743	-0.31600	-12.75297	0.09137	5
7					0.21370E-04
					0.87000E-02
6					0.22460E-04
					0.18680E-01
					0.19300E-01
5					0.92000E-02
					0.22707E-04
					0.70700E-02
4					0.16630E-01
					0.23157E-04
					0.23713E-04
3					0.62800E-02
					0.15500E-01
					0.30700E-02
2					0.11250E-01
					0.23710E-04
					0.97800E-02
1					0.22400E-02
					0.26937E-04

表 6 使用表 3、表 5 的迴歸係數及 10 月 16 日衛星資料得到 7 組海溫推定值間的關係(上: RMS, 下: SCA)

日 數	1	2	3	4	5	6	7
1	0	0.093	0.117	0.090	0.083	0.072	0.061
2	0.062	0	0.036	0.039	0.060	0.066	0.100
3	0.066	0.022	0	0.034	0.057	0.069	0.112
4	0.054	0.039	0.023	0	0.025	0.035	0.079
5	0.059	0.059	0.041	0.020	0	0.014	0.059
6	0.054	0.062	0.047	0.025	0.009	0	0.047
7	0.061	0.074	0.059	0.037	0.020	0.014	0

表 7 使用前 24 小時的探空資料求出的二個頻道水汽訂正模式迴歸係數值

日 期	A_0	A_1	A_2
10月7日	-17.99667	4.13426	-3.07148
10月8日	-15.54123	3.95801	-2.90297
10月9日	-19.95099	3.85656	-2.78656
10月16日	-27.00806	4.27052	-3.17827
11月19日	-3.92155	3.39495	-2.37856

表 8 同表 7, 但為三個頻道

日 期	A_0	A_1	A_2	A_3
10月7日	-11.90174	0.97532	1.06661	-0.99752
10月8日	14.19225	1.02413	0.94955	-0.92160
10月9日	-13.38979	1.02768	0.96020	-0.93881
10月16日	-11.97165	0.92067	1.39111	-1.26820
11月19日	-7.86054	0.85383	1.26686	-1.08964

表 9 使用前 24 小時的探空資料求出的視角訂正迴歸係數值

日 期	頻 道	α_1	α_2	β_1	β_2	常 數
10月7日	3	-0.05976	0.18634	0.00913	-0.01602	0.13927E-04
10月7日	4	8.16874	-0.03185	37.28479	-0.39240	-0.22430E-01
10月7日	5	54.01719	-0.42850	-2.36838	-0.00330	0.10340E-01
10月8日	3	-0.00357	0.06826	0.01438	-0.03329	0.11654E-04
10月8日	4	31.94463	-0.26773	-1.39761	-0.00146	0.44300E-02
10月8日	5	47.79453	-0.36887	-12.76621	0.09344	0.16960E-01
10月9日	3	0.06521	0.00163	0.02096	-0.04582	0.81563E-05
10月9日	4	42.93065	-0.36341	-7.59058	0.05374	0.01081
10月9日	5	56.46494	-0.43240	-18.94927	0.14188	0.02478
10月16日	3	-0.00597	0.07949	0.00604	-0.01479	0.24023E-04
10月16日	4	16.44379	-0.10648	3.15922	-0.04399	0.00197
10月16日	5	27.42650	-0.18172	-2.85980	0.00751	0.96800E-02
11月19日	3	-0.01865	0.09401	0.00116	-0.00369	0.00116
11月19日	4	-14.14869	0.17294	1.41457	-0.01243	0.57616E-03
11月19日	5	-20.67582	0.21527	4.53420	-0.03986	-0.80411E-03

表 10 使用衛星資料當天的探空資料所求出的二個頻道水汽訂正模式迴歸係數值

日期	A_0	A_1	A_2
10月7日	-15.54123	3.95801	-2.90297
10月8日	-19.95099	3.85656	-2.78656
10月9日	-24.84462	4.04504	-2.95949
10月16日	-21.08753	4.32767	-3.25561
11月19日	-2.82314	3.46281	-2.45005

表 11 同表 10，但為三個頻道

日期	A_0	A_1	A_2	A_3
10月7日	-14.19225	1.02413	0.94955	-0.92160
10月8日	-13.38979	1.02768	0.96020	-0.93881
10月9日	-11.53051	1.10951	0.71756	-0.78411
10月16日	-12.69375	1.11439	0.71770	-0.78521
11月19日	-6.33497	0.59527	1.97297	-1.54287

表 12 使用衛星資料當天的探空資料求出的視角訂正迴歸係數值

日期	頻道	α_1	α_2	β_1	β_2	數
10月7日	3	-0.03327	0.14131	0.00708	-0.01425	0.18231E-04
	4	3.13595	0.02940	21.36709	-0.23290	-0.01500
	5	28.49538	-0.19306	6.51055	-0.08302	0.00170
10月8日	3	-0.05976	0.18634	0.00913	-0.01602	0.13927E-04
	4	8.16874	-0.03185	37.28479	-0.39240	-0.22430E-01
	5	54.01719	-0.42850	-2.36838	-0.00330	0.10340E-01
10月9日	3	-0.00357	0.06826	0.01438	-0.03329	0.11654E-04
	4	31.94463	-0.26773	-1.39761	-0.00146	0.44300E-02
	5	47.79453	-0.36887	-12.76621	0.09344	0.16960E-01
10月16日	3	0.01157	0.04395	0.00397	-0.01258	0.26037E-04
	4	16.40600	-0.10800	0.93832	-0.02027	0.22400E-02
	5	25.95032	-0.16992	-3.69209	0.01662	0.97800E-02
11月19日	3	-0.01659	0.09703	0.00172	-0.00536	0.15131E-04
	4	-12.41584	0.16428	6.80560	-0.07189	-0.00219
	5	-13.64526	0.16273	15.89085	-0.15186	-0.00664

表 13 使用與衛星資料同一天及前一天迴歸係數，所求出海面溫度的差異

日期	RMS	MDIF	SCA
10月7日	0.385	0.265	0.299
10月8日	0.430	0.385	0.234
10月9日	0.293	0.245	0.161
10月16日	0.132	0.113	0.069
11月19日	0.137	0.093	0.106

表 14 使用一個月探空資料所求出的二個頻道水汽訂正模式迴歸

月份	A_0	A_1	A_2
10	-19.76643	4.18108	-3.11285
11	-29.04122	3.88522	-2.78377

表 15 同表 14，但為三個頻道

月份	A_0	A_1	A_2	A_3
10	-10.59149	1.05525	0.86797	-0.88347
11	-17.64858	1.22009	0.29714	-0.45268

我們使用 10 月 8 日的衛星資料及前 24 小時探空資料所建立的視角和水汽訂正模式的迴歸係數來做討論。如果沒有做視角訂正所推定出來的海面溫度值線如圖 4 所示，與有做視角訂正的平均差異值如表 18 所示，差異隨地理位置的變化如圖 5 所示，差異最大 0.8°C ，這與衛星如何通過台灣附近海域（圖 6）有密切的關係。

另外，沒有做水汽訂正所推定出來的海面溫度值線如圖 7 所示，其與有做水汽訂正的平均差異如表 19 所示，差異隨地理位置的變化如圖 8，RMS 為 6.5，SCA 為 -6.4，最大的差異為 9°C 左右。由上面的結果可知，如果不做視角與水汽訂正所求出的海面溫度值會有誤差，尤其是水汽訂正更是重要。

表 16 使用一個四頻道的探空資料所求出的視角訂正模式迴歸係數值

參數	10			11		
	3	4	5	3	4	5
α_1	-0.00468	14.15572	25.78683	-0.04943	0.24796	39.13918
α_2	0.07933	-0.08414	-0.16874	0.17250	0.05723	-0.29090
β_1	0.00546	4.06954	-1.81983	0.00538	35.23382	10.30095
β_2	-0.01436	-0.05389	-0.00204	-0.00845	-0.37788	-0.12215
常數	0.22815E-04	0.24455E-03	0.00883	0.16430E-04	-0.02765	-0.95010E-01

對不同天的衛星資料，以24小時前的探空資料建立水汽與視角訂正模式，經過濾雲後所得到的海面溫度等值線圖如圖9到圖13所示，其中等值線較密的地區，為雲區所在位置。我們同時也求出10月7日到10月9日三天的海面溫度等值線圖，如圖14所示，與日本發佈東亞地區10月上旬（即10月1日到10月10日）平均的海面溫度等值線圖（圖15）及台灣水產試驗所發佈10月6日到10月5日五天的海面溫度等值線圖（圖16）比較，其溫度等值線形態很像，但不完全相同，這與所使用天數的不同有關。

另外我們使用與衛星資料同一天，同一個地點的船測資料與衛星推導的海面溫度做比較，我們使用五天的衛星資料，濾雲後可找到60組資料做比較，得到其RMS為0.837，SCA為0.818（表20），衛星推導海面溫度值與船測海面溫度

表17 使用一個月的迴歸係數及衛星當天的迴歸係數所求出海面溫度間的差異

日期	RMS	MDIF	SCA
10月7日	0.746	0.659	0.380
10月8日	1.259	1.217	0.322
10月9日	1.152	1.135	0.204
10月16日	0.602	0.599	0.062
11月19日	1.992	1.950	0.471

表18 74年10月8日做與不做視角訂正所推算出的海面溫度間的差異

RMS	BIAS	MDIF	SCA
0.385	-0.242	0.310	0.299

表19 74年10月8日做與不做水汽訂正所推算出的海面溫度差異

RMS	BIAS	MDIF	SCA
6.549	-6.422	6.422	1.284

值的關係如圖17所示。

表20 與船測資料同一天，同一地點的60組衛星海面溫度與船測海面溫度的差異

RMS	BIAS	MDIF	SCA
0.837	-0.178	0.703	0.818

五、結論與建議

根據本文的研究結果我們發現，假如使用當天的探空資料來建立迴歸模式，那麼由衛星資料求出的海面溫度與船測海面溫度相比，準確度很輕易的可以達到1度以內。假如使用前七天或十天以內的探空資料來建立迴歸模式，衛星海面溫度的準確度也毫無問題可以達到1度以內。可是若用三個月的探空資料來建立迴歸模式，則求出的衛星海面溫度就不一定能達到1度以內的準確度了。因此，就業務海面溫度發布的觀點來看，最恰當的方法是隨時更新迴歸模式，大約每隔一星期或十天更新一次迴歸模式，而不是一年中只建立1個或4個模式供一年或一季節求取海面溫度之用。

國外建立的海溫遙測迴歸模式顯然的並不適合我國附近海域，因為不同的地理區其大氣平均狀況和天氣形勢是截然不同的，迴歸係數也有所差異。也許可以委託國外顧問公司為我們建立一套完整的海溫遙測資料處理系統，讓我們的氣象人員可以每隔一星期更新迴歸係數，以便進行業務海面溫度發布工作。可是假如他們只求出幾個迴歸係數提供我們一再使用，這樣求出的衛星海面溫度就不一定準確了，在絕大多數的情況下誤差可達2度以上。

就我國現有的技術水平而言，建立上述的一套完整的海溫遙測資料處理系統是毫無問題的，只要有兩個專任人員，一部大型電子計算機以及各單位間的密切合作。從事這個工作最適當的業務單位還是中央氣象局，因為海溫遙測所需的資料，如探空資料和衛星資料等，都是由中央氣象局接收的。另外，海溫遙測最大的問題是未氣訂正，這正是氣象人員的專長之一。還有，就業務海面溫度遙測的觀點而言，氣象

八、附圖

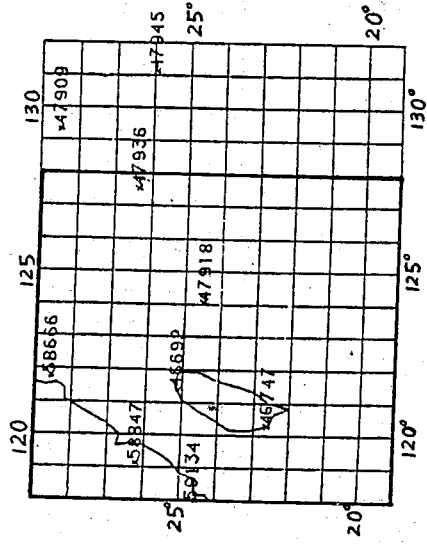


圖1 本文研究範圍，東西方向從118°E到128°E，南北方向從19°N到29°N，在這範圍內及附近區域有9個氣象測站。

衛星所提供的輻射強度資料是最有用的。其他的地球資源衛星，雖然能提供分辨率更高的輻射強度資料，但我國現在並無接收站，況且要達到業務化仍還有一段很長的路要走。因此，海溫遙測的研究和業務化是我國氣象界責無旁貸的工作。

六、致謝

中央研究院計算機中心對本計畫提供計算工作的協助，在此表達衷心的謝意。另外，中央氣象局提供本計畫所需的探空資料和衛星資料，台灣水產試驗所提供船測資料，在此一併致謝。最後，陳俊達執行電腦計算工作，著者深表謝意。本文是在農業委員會遙測科技計畫支持下完成的。

七、參考文獻

- 曾忠一，1983：大氣遙測原理與應用。中央氣象局出版，287頁。
- 朱曙光與曾忠一，1986：海面溫度衛星遙測中水汽訂正問題之研究（第一年計畫）。
- 中央氣象局，83頁。
- 曾忠一與洪理強，1985：繞極軌道衛星雲圖的定位。氣象預報與分析，第100期，60-72。
- Kneizys, F.X. et al., 1983: Atmospheric Transmittance/Radiance Computer code LOW TRAN-6. AFGL-TR-83-0187, Air Force Geophysics Laboratory, Hanscom AFB, Mass., North America, 200pp.

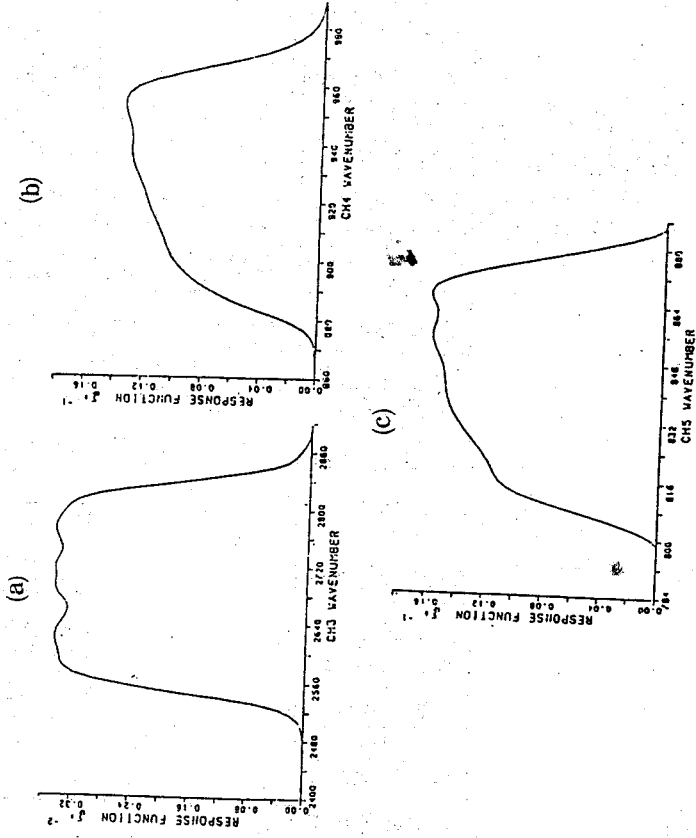


圖3 NOAA-9號衛星上攜帶的輻射計 AVHRR 第三(a)、第四(b)和第五(c)頻道的儀器反應函數。

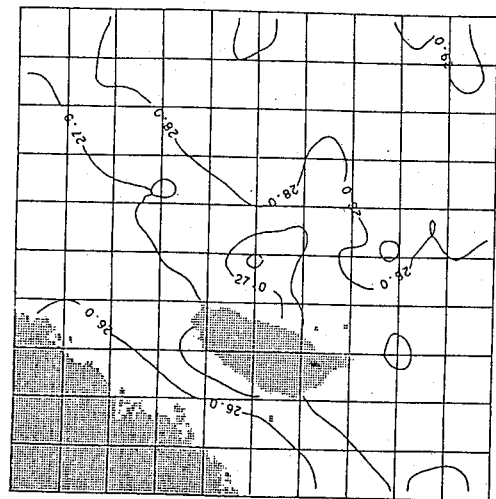


圖4 74年10月8日沒做視角訂正時求出的海面溫度分布。

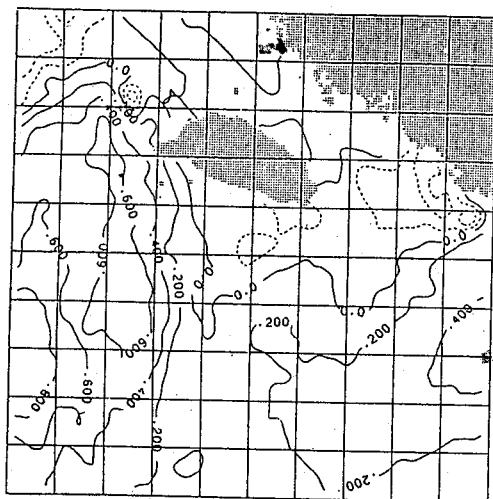


圖5 74年10月8日做與不做視角訂正所推算出來的海面溫度差值。

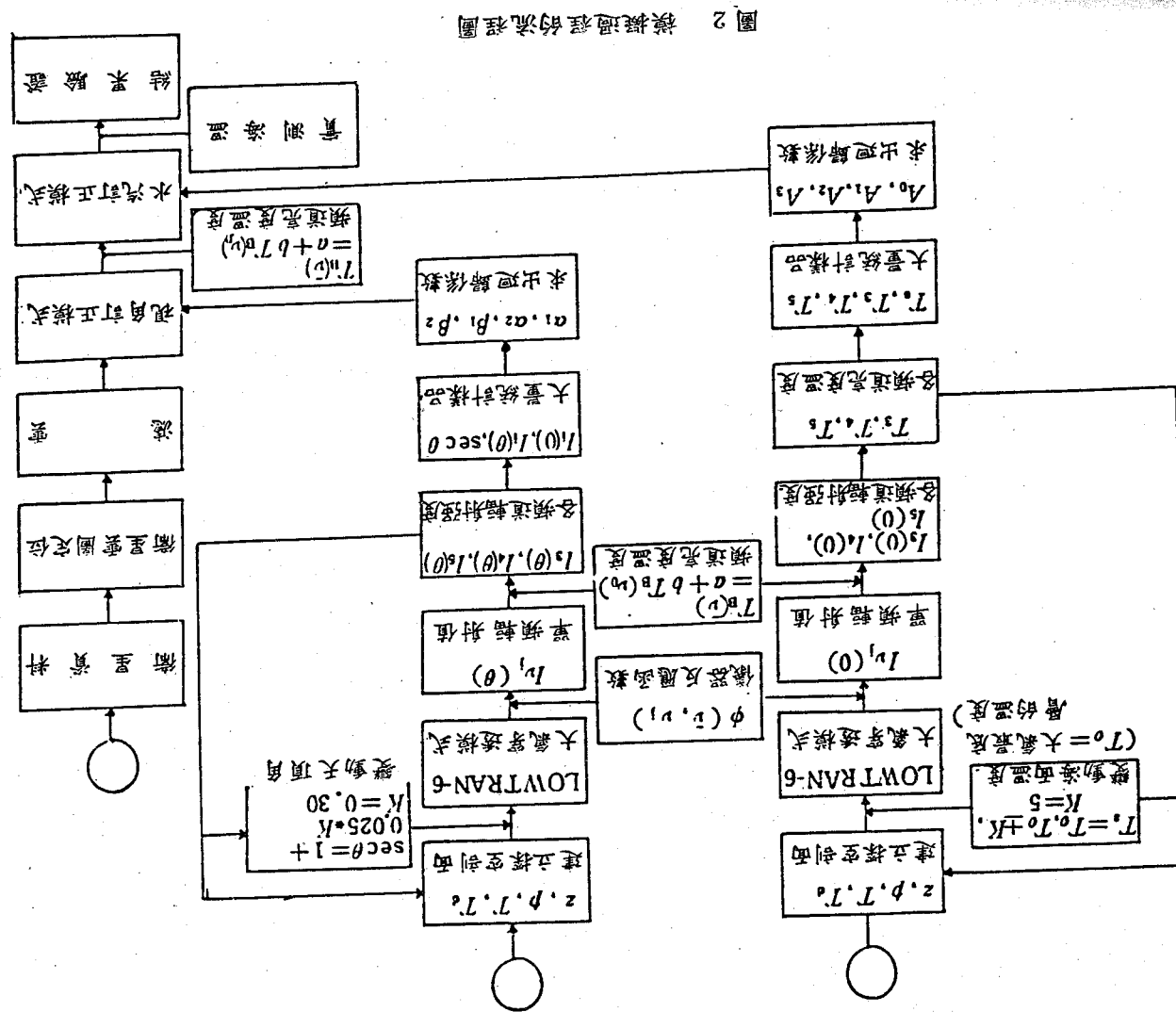


圖2 數據處理的流程圖

海面溫度遙測的水汽訂正問題

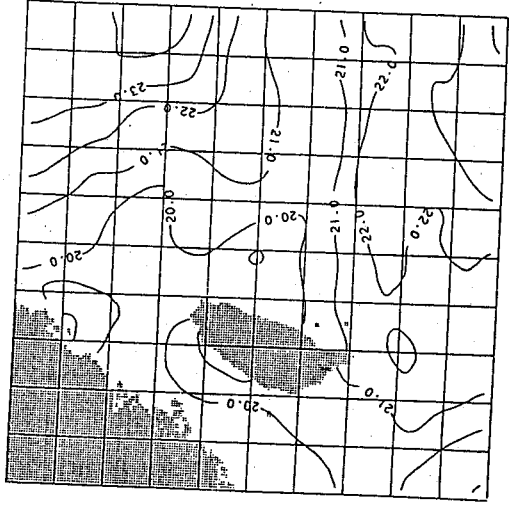


圖 7 74年10月8日沒做水汽訂正所求出的海面溫度分布。

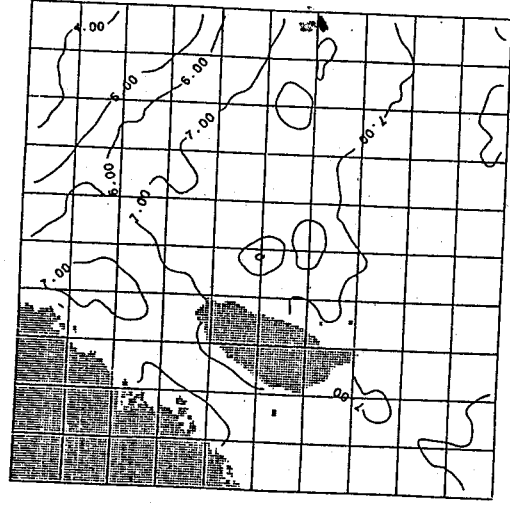


圖 8 74年10月8日做與不做水汽訂正所求得的海面溫度差值。

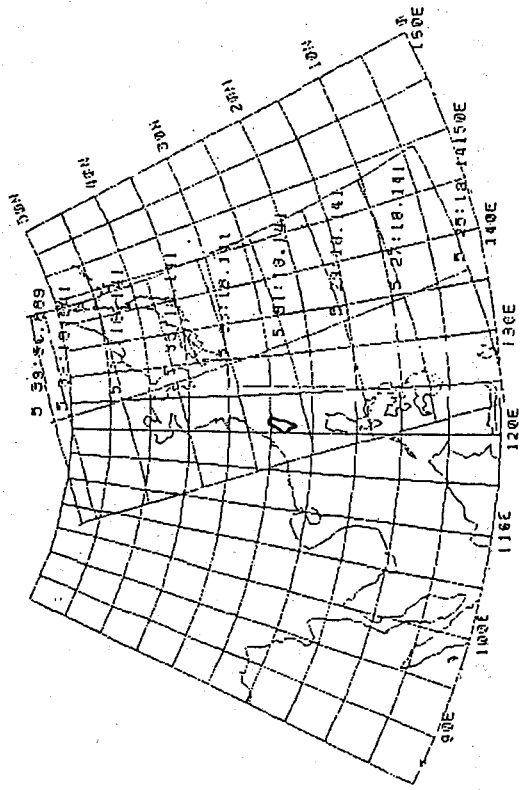


圖 6 74年10月8日NOAA-9號衛星的掃描範圍。

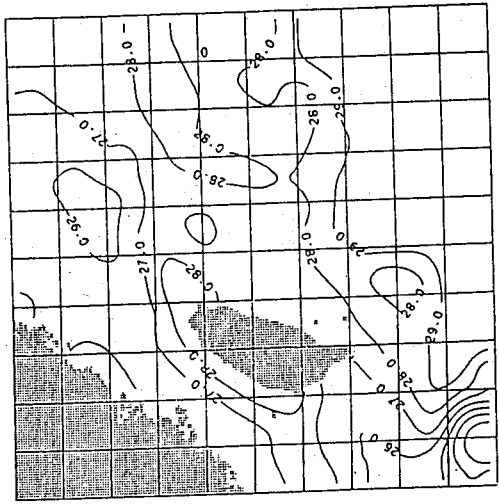


圖 9 用 74 年 10 月 7 日衛星資料推算出的海面溫度分布。

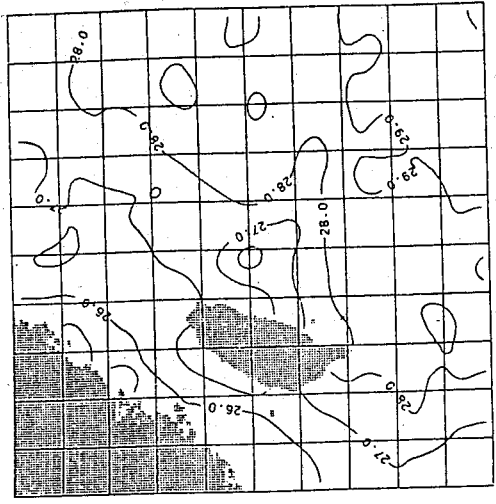


圖 10 同圖 9，但為 74 年 10 月 8 日。

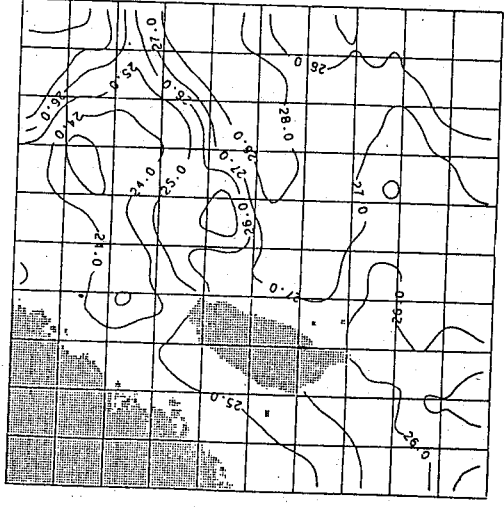


圖 11 同圖 9，但為 74 年 10 月 9 日。

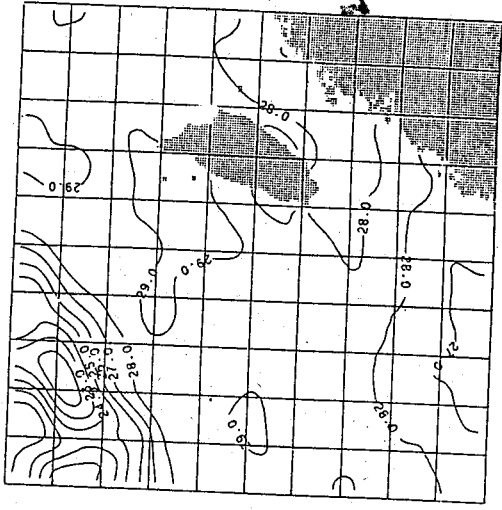


圖 12 同圖 9，但為 74 年 10 月 16 日。

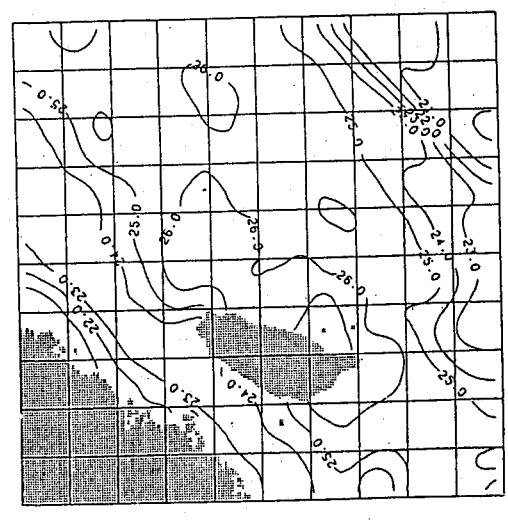


圖 13 同圖 9，但為 74 年 11 月 19 日。

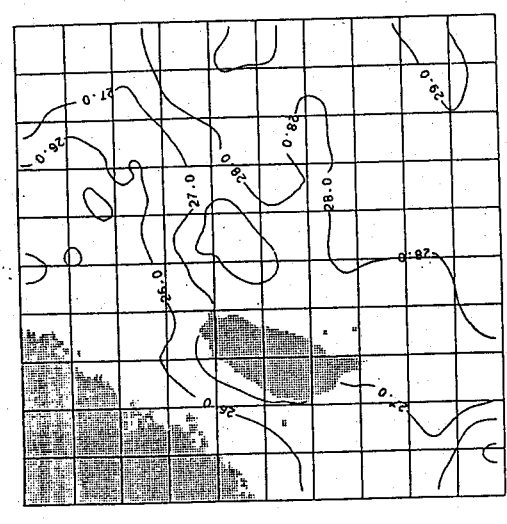


圖 14 使用 74 年 10 月 7 日到 9 日三天衛星資料所推算出的三天平均海面溫度分布。

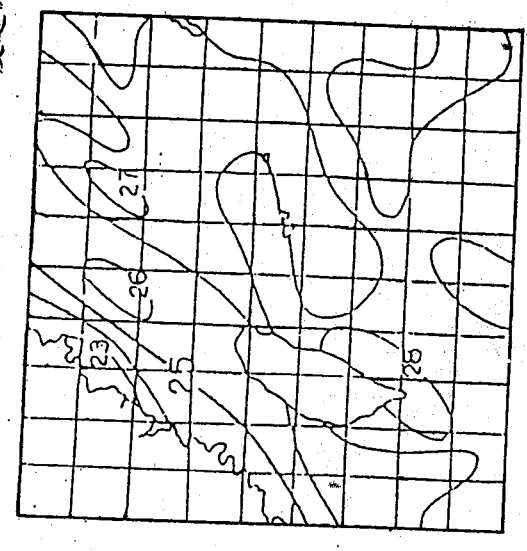


圖 15 東京發佈的東亞地區 74 年 10 月上旬平均海面溫度分布圖。

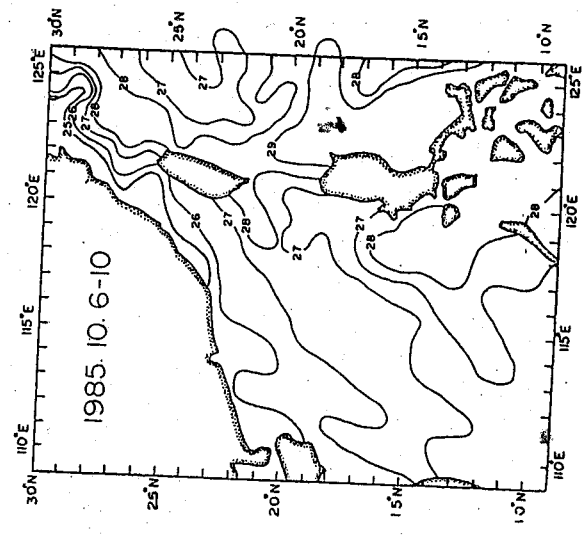


圖 16 台灣水產試驗所發布的 74 年 10 月 6 日到 10 日五天平均海面溫度。

河口流場傳輸及污染質擴散的數值研究

楊文昌* 黃崇鑑**

摘要

本文主要在探討河口水域中，河水流入與側向海流交匯作用下，流場之流況及濃度擴散的情形。由三維非穩定守恆方程式來描繪流場之交互作用，其中考慮之動力因素包含浮力、慣性力、靜水壓力及混合亂流效應。藉由雷諾近似法，以渦度黏滯性來模擬亂流效應；同時，基於解析上的便利，作了座標系統的轉換，結合水平向延伸轉換及垂直向 σ —座標轉換。在數值應用上，以顯性法由時間疊代來解折守恆方程式，直到流場變數隨着時間差分技巧不斷地修正，趨於穩定情況。為了確保模式穩定性之良好，對於黏滯項以Du Fort-Frankel 式子修飾；而濃度對流項採用二階上風法，以避免負濃度之發生。結果顯示於海流之下游有渦流、二次流及壁射流的現象發生，而濃度的擴散作用，隨着深度的增加而減低。

壹、前言

河口 (River Mouth; Estuary) 區域向來為人類發展及生活的中心，隨着工業的進展與人口的俱增，其生產活動愈趨龐大，使得附帶產生之污染源 (Pollutant) 亦大幅增加，導致河口水體涵容能力 (Assimilative Capacity) 逐步遭受破壞。並由於濱海工業區日愈興盛，促使污染之延伸，擴及河口水域；其結果勢必造成河口水域環境的災難，進而影響人類生活的品質，甚至威脅到未來整個生態之自然平衡；因此，河口水域經理已成為舉世之趨勢，究其根本之道，則首在於對

* 中研院物理研究所助理。

** 中研院物理研究所研究員，台大造船所教授。

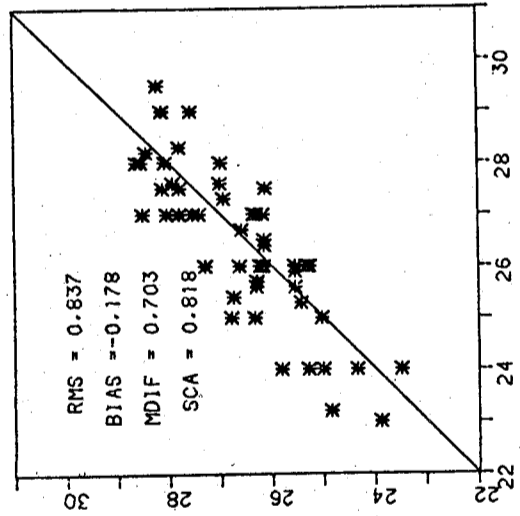


圖 17 60 組衛星海溫與船測海溫的比較

河口水域水理之瞭解。

在河口系統之數值模式探討方面，早期多局限於二維之水力動力模式 (Hydrodynamic Model)，基本上是根據非壓縮性水流之連續及運動方程式，採垂直向積分而得，因而無法解析垂直向之環流現象，如 Leendertse [1] 與 Reid [2]。近十餘年來，由於電子計算機計算速率的增進，以及三維數值模式之開拓成功且廣為運用，使模擬的情況較符合實際現象。在 Wadrop [3] 模式中，對於自由水面以固定蓋 (Rigid-Lid) 作為數值處理之依據，無法涵蓋水面波動的影響；然而對水面向作延伸轉換，則有助於局部解析 (Local-Resolution) 之精確性及開放邊界之方便設定。針對水面波動之實際因素，諸多學者如 Sengupta [4] 及 Miller [5, 6] 等，遂引用菲利浦 (Phillips) 氏 1953 年所創之 σ 一座標轉換，而建立三維自由表面之數值模式。

本文將就河口系統之物理過程，經由理論推導，配合座標系統之轉換，建立起三維自由表面之數值模式，應用有限差分法離散時間與空間，以顯性法 (Explicit Method) 由時間疊代作數值解析，來探討河口水域在與海流交匯作用下之運動特性及擴散作用的效應，以期作為河口經營，環境保護政策及防制措施之參考。

貳、基本方程式

本文之水力動力模式，主要根據三個基本定理，即連續守恆，動量守恆及濃度平衡，來描述交匯水流的作用。流場中採用卡氏座標 (Cartesian Coordinates) 系統，如圖一所示，為了問題求解之簡便，以利現象的探討起見，假設水體具非壓縮性及均質性，並由水力靜力 (Hydrostatic) 假設及布氏假設 (Boussinesq Assumption) 來近似。而考慮之動力因素，包括浮力、慣性力、壓力及混合亂流 (Turbulent Mixing) 效應，但不計風力，科氏力 (Coriolis Force) 與潮力之影響。基於河口系統的特性，考慮亂流效應之性質，引用雷諾 (Osborne Reynolds) 氏近似法，即由平均運動 (Mean-Motion) 的觀念來描述流場，並以渦度黏性 (Eddy Viscosity) 係數及渦度擴散 (Eddy diffusion) 黏性係數來模擬亂流效

應，將分子 (Molecular) 黏滯項和擴散項忽略不計，則流場之控制方程式為：

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{W}}{\partial z} = 0 \quad \dots\dots\dots(1)$$

$$\frac{\partial \bar{U}}{\partial t} = -\bar{U} \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} - \bar{V} \frac{\partial \bar{U}}{\partial y} - \bar{W} \frac{\partial \bar{U}}{\partial z} - \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} \frac{\partial \bar{U}}{\partial x} + E_x \frac{\partial \bar{U}}{\partial y^2} + E_y \frac{\partial \bar{U}}{\partial z^2} + E_z \frac{\partial \bar{U}}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots(2)$$

$$\frac{\partial \bar{V}}{\partial t} = -\bar{U} \frac{\partial \bar{V}}{\partial x} - \bar{V} \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} - \bar{W} \frac{\partial \bar{V}}{\partial z} - \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} \frac{\partial \bar{V}}{\partial y} + E_x \frac{\partial \bar{V}}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial \bar{V}}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial \bar{V}}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots(3)$$

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + g = 0 \quad \dots\dots\dots(4)$$

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = -\bar{U} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - \bar{V} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - \bar{W} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + D_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial y^2} + D_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial x^2} + D_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots(5)$$

式中 x, y, z : 為座標參數。

$\bar{U}, \bar{V}, \bar{W}$: 為對應於 x, y, z 方向之平均速度。

P : 壓力。

ρ : 密度。

g : 重力加速度。

\bar{C} : 濃度。

E_x, E_y, E_z : 為對應於 x, y, z 方向之渦度黏性係數。

D_x, D_y, D_z : 為對應於 x, y, z 方向之渦度擴散係數。

t : 時間。

式(1)為連續方程式，式(2)(3)(4)分別為 x, y, z 方向之運動方程式，式(5)為濃度平衡方程式。將控制方程式中所有變數作無因次化，所取用之因次參數為：(-)河口之河川水流最大速度 \bar{V}_r ，(□)流場最大深度 \bar{H} ，(○)河口之河川水流密度 $\bar{\rho}_r$ ，(四)河口之河川水流排放之最大濃度 \bar{C}_r 。藉此四個因次參數，可將流場變數無因次化如下：

$$\rho = \frac{\bar{\rho}}{\bar{\rho}_r} \quad x_i = \frac{\bar{x}_i}{\bar{H}} \quad t = \frac{\bar{t}}{(\bar{H}/\bar{V}_r)}$$

$$U_i = \frac{\tilde{U}_i}{\tilde{V}_i} \quad g = \frac{\tilde{g}}{(\tilde{V}_i^2 / \tilde{H})} \quad P = \frac{\tilde{P}}{(\tilde{\rho}_i \tilde{V}_i^2)}$$

$$E_i = \frac{\tilde{E}_i}{\tilde{V}_i \tilde{H}} \quad D_i = \frac{\tilde{D}_i}{\tilde{V}_i \tilde{H}} \quad C = \frac{\tilde{C}}{\tilde{C}_i}$$

式中變數具有上標符號 \sim ，均表示因次量，而具有下標 i 為張量式，用以表示 x ， y ， z 不同方向。以這些關係式代入控制方程式中，並於運動方程式及濃度平衡式中，引入連續方程式，則可得無因次化形式之控制方程式如下：

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} = 0 \quad \dots\dots\dots(6)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} - \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} + E_x \frac{\partial U}{\partial x} + E_y \frac{\partial U}{\partial y} + E_z \frac{\partial U}{\partial z} + E_x \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots(7)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} - \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} + E_x \frac{\partial V}{\partial x} + E_y \frac{\partial V}{\partial y} + E_z \frac{\partial V}{\partial z} + E_x \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots(8)$$

$$\frac{\partial P}{\partial z} + \rho g = 0 \quad \dots\dots\dots(9)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + D_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} + D_z \frac{\partial C}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad \dots\dots\dots(10)$$

邊界條件在數值模式中，會直接影響流場之變化，於此大致可歸納為三。(一)上游邊界 (Upstream Boundary)：包括河口河川之注入及側向正交之海流。河口為一矩形渠道斷面，注入水體亦為不可壓縮水流，注入量不隨時間而變，速度，水面高及濃度保持定值；而側向海流之流速亦為定值，至於速度剖面皆呈拋物線型分佈。(二)封閉邊界 (Closed Boundary)：為固體 (Solid) 邊界，包括側向海岸及水體底層，在此邊界上沒有質量流通 (Zero Flux) 及擴散；於底層為無滑動 (No-Slip) 條件，而在側向海岸基於解析所需為滑動 (Slip) 條件 [3, 5, 9]。開放邊界 (Open Boundary)：包括自由表面及水平向與廣大海體交接面。於自由表面無質量流通，且不考慮風力，亦無剪力作用；而在水平向之海體無窮遠處，不會受到交匯水流作用的影響，即其流場變數於此不產生變化。

叁、座標轉換

由前節所述之座標系統，推導出控制方程式，但在數值處理上，對於波動水面和地形變化，則有所困難，因此，為了問題解析之便利，作了座標轉換。利用反正切三角函數之水平向延伸轉換 (Stretching Transform)，結合垂直向 σ 一坐標轉換 (Sigma Transform)，將原先 (x, y, z) 座標系統轉換成 (X, Y, σ) 座標系統，如圖二所示，其轉換關係式為：

$$X(x) = \frac{1}{C_1} \tan^{-1} \left(\frac{x}{C_2} \right) \quad \dots\dots\dots(11)$$

$$Y(y) = \frac{1}{C_3} \tan^{-1} \left(\frac{y}{C_4} \right) \quad \dots\dots\dots(12)$$

$$\sigma = \frac{Z - \eta(X, Y, t)}{h(X, Y) + \eta(X, Y, t)} = \frac{Z - \eta}{H(X, Y, t)} \quad \dots\dots\dots(13)$$

式中 C_1, C_2, C_3, C_4 ：為水平延伸轉換係數
 η ：水面高。
 h ：平均海面下水深。
 H ：總水深。

轉換後除垂直向速度須作轉換外，其餘流場變數均保持不變；而將轉換後之垂直向座標變數 σ 對時間全微分，即為轉換後之垂直速度，以 Ω 表之，亦即 $\Omega = \frac{d\sigma}{dt}$ ，其與原座標系統垂直向速度 W 之關係式，經推導得：

$$W = (h + \eta) \Omega + (\sigma + 1) \frac{d\eta}{dt} + \frac{dh}{dt}$$

$$= H\Omega + (\sigma + 1) \left(\frac{\partial \eta}{\partial t} + U \frac{\partial \eta}{\partial X} + V \frac{\partial \eta}{\partial Y} \right) + \sigma \left(U \frac{\partial h}{\partial X} + V \frac{\partial h}{\partial Y} \right)$$

利用偏微分定理，將前節所得之無因次控制方程式作轉換，並忽略掉黏滯項及擴散

項中微小項之乘積，可得 (X, Y, σ) 座標系統下之控制方程式：

$$\frac{\partial HU}{\partial X} X' + \frac{\partial HV}{\partial Y} Y' + H \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} + \frac{\partial \eta}{\partial t} = 0 \dots\dots\dots (15)$$

$$\frac{\partial HU}{\partial t} = - \frac{\partial HUU}{\partial X} X' - \frac{\partial HUV}{\partial Y} Y' - H \frac{\partial U\Omega}{\partial \sigma} - (\sigma + 1) \frac{\partial U}{\partial \sigma} \frac{\partial \eta}{\partial t}$$

$$- \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial X} + \frac{g}{H} \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial X} + \frac{\partial \eta}{\partial X} \right) \right] X' + E_x \{ [H(X')^2] \frac{\partial^2 U}{\partial X^2} + [HX''] \frac{\partial U}{\partial X} \}$$

$$+ E_y \{ [H(Y')^2] \frac{\partial^2 U}{\partial Y^2} + [HY''] \frac{\partial U}{\partial Y} \} + E_\sigma \frac{1}{H} \frac{\partial^2 U}{\partial \sigma^2} \dots\dots\dots (16)$$

$$\frac{\partial HV}{\partial t} = - \frac{\partial HUV}{\partial X} X' - \frac{\partial HVV}{\partial Y} Y' - H \frac{\partial V\Omega}{\partial \sigma} - (\sigma + 1) \frac{\partial V}{\partial \sigma} \frac{\partial \eta}{\partial t}$$

$$- \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial Y} + \frac{g}{H} \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial Y} + \frac{\partial \eta}{\partial Y} \right) \right] Y' + E_x \{ [H(X')^2] \frac{\partial^2 V}{\partial X^2} + [HX''] \frac{\partial V}{\partial X} \}$$

$$+ E_y \{ [H(Y')^2] \frac{\partial^2 V}{\partial Y^2} + [HY''] \frac{\partial V}{\partial Y} \} + E_\sigma \frac{1}{H} \frac{\partial^2 V}{\partial \sigma^2} \dots\dots\dots (17)$$

$$\frac{1}{H} \frac{\partial P}{\partial \sigma} + \rho g = 0 \dots\dots\dots (18)$$

$$\frac{\partial HC}{\partial t} = - \frac{\partial HUC}{\partial X} X' - \frac{\partial HVC}{\partial Y} Y' - H \frac{\partial \Omega C}{\partial \sigma} - (\sigma + 1) \frac{\partial C}{\partial \sigma} \frac{\partial \eta}{\partial t}$$

$$+ D_x \{ [H(X')^2] \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} + [HX''] \frac{\partial C}{\partial X} \} + D_y \{ [H(Y')^2] \frac{\partial^2 C}{\partial Y^2} \}$$

$$+ [HY''] \frac{\partial C}{\partial Y} \} + D_\sigma \frac{1}{H} \frac{\partial^2 C}{\partial \sigma^2} \dots\dots\dots (19)$$

式中 $X' = \frac{dX}{dx}$ $Y' = \frac{dY}{dy}$
 $X'' = \frac{d^2 X}{dx^2}$ $Y'' = \frac{d^2 Y}{dy^2}$

自由水面與水體底面經轉換後，成為二個平行平面。在水體底面 $Z = -h$ ，轉換成 $\sigma = -1$ ，自由水面為 $\sigma = 0$ ；而在無窮遠處，則轉換成單位值，如 X 向轉換

成 1，Y 向下游為 -1。轉換後之邊界條件，以數學符號表示如下：

(A) 封閉邊界

在側向海岸 (X = 0) 在水體底面 (σ = -1)

$$U = 0 \quad U = V = \Omega = 0$$

$$\frac{\partial HV}{\partial X} = 0 \quad \frac{\partial C}{\partial \sigma} = 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial X} = 0$$

(B) 開放邊界

在自由表面 (σ = 0) 在無窮遠處

$$\Omega = 0 \quad \frac{\partial}{\partial X} \{ U, V, \Omega, C \} = 0 \quad (X \rightarrow 1)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \sigma} = 0 \quad \frac{\partial}{\partial Y} \{ U, V, \Omega, C \} = 0 \quad (Y \rightarrow -1)$$

$$\frac{\partial V}{\partial \sigma} = 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial \sigma} = 0$$

肆、數值解析

1. 格點系統 (Grid System)

格點網的安排，採交互錯置格點系統 (Stagger Grid System) [4, 9]，如圖三所示，以實線為主要網格，其交點為實格點 (Full-Grid Point)，以虛線為次要網格，其交點為半格點 (Half-Grid Point)，格點間距分別於 X, Y 向均等。流場變數皆置於同一平面上，如圖四所示；其平面位置示之於圖五。

運算式中須用到變數 U, V, η 格點上之總水深，由 $H = h + \eta$ ，利用平均法可求得 h 與 η 值，其相關位置如圖五所示，關係式為：

$$h_{ij}^u = \frac{1}{2} (h_{ij} + h_{i,j+1})$$

Time) 差分法。

若 i, j, k 表空間指標, n 表時間指標, F 表因變數, 則黏滯項與擴散項之數值式可化為:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial X_m^2} \Big|_{ijk} = \frac{F_{i+1jk} - 2F_{ijk} + F_{i-1jk}}{(\Delta X_m)^2}$$

為了確保數值計算之穩定性 [4, 5, 9, 10], 在水平向皆以前一時段 ($n-1$) 之變數值取代; 而在 σ 垂直向, 則採用 Du Fort-Frankel 之中央時間差分式 [4, 5, 6]:

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \sigma^2} \Big|_{ijk} = \frac{F_{ijk-1}^{n+1} - F_{ijk}^{n+1} + F_{ijk+1}^{n+1}}{(\Delta \sigma)^2}$$

另外, 濃度平衡式之水平向對流項, 採用上風 (Upwind) 差分法, 以消除可能出現負值的情形 [6], 如 Roache [10] 之一維示例:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial UC}{\partial x}$$

$$\text{化成差分式即為 } \frac{\Delta C_i}{\Delta t} = \frac{U_R C_R - U_L C_L}{\Delta x}$$

$$U_R = \frac{1}{2}(U_{i+1} + U_i)$$

$$U_L = \frac{1}{2}(U_i + U_{i-1})$$

單根據 U_R 及 U_L 之正負值, 對濃度作適當的調整。

$$U_R > 0 \rightarrow C_R = C_i \quad ; \quad U_R < 0 \rightarrow C_R = C_{i+1}$$

$$U_L > 0 \rightarrow C_L = C_{i-1} \quad ; \quad U_L < 0 \rightarrow C_L = C_i$$

利用上述原理, 將濃度平衡式之對流項 $\frac{\partial HUC}{\partial X}$ 及 $\frac{\partial HVC}{\partial Y}$ 作同樣的處理。

(B) 積分法

壓力 P 的計算, 由垂向之運動方程式積分, 從自由表面積至計算格點, 即可求

$$h_{ij}^v = \frac{1}{2}(h_{ij} + h_{i+1j})$$

$$h_{ij}^7 = \frac{1}{4}(h_{ij} + h_{i+1j} + h_{i+1j+1} + h_{i+1j+1})$$

$$H_{ij}^u = h_{ij}^v + \frac{1}{2}(\eta_{i-1j} + \eta_{ij})$$

$$H_{ij}^v = h_{ij}^v + \frac{1}{2}(\eta_{ij-1} + \eta_{ij})$$

$$H_{ij}^7 = h_{ij}^7 + \eta_{ij}$$

而實格點上之水面高 E_{ij} 為:

$$E_{ij} = \frac{1}{4}(\eta_{ij} + \eta_{i-1j} + \eta_{i-1j-1} + \eta_{ij-1})$$

$$H_{ij} = h_{ij} + E_{ij}$$

同理, 運動方程式中之非線性項, 亦以平均法求算, 相關位置亦如圖五所示。

$$U_{ij}^x = \frac{1}{2}(U_{i+1j} + U_{ij})$$

$$V_{ij}^y = \frac{1}{2}(V_{ij} + V_{ij+1})$$

$$U_{ij}^y = \frac{1}{2}(U_{ij} + U_{ij-1})$$

$$V_{ij}^x = \frac{1}{2}(V_{ij} + V_{i-1j})$$

2. 數值方法

在數值上, 應用有限差分法與積分法

(A) 有限差分法 (Finite Difference Method)

由於控制方程式為非穩定 (Unsteady) 型態, 故而須對時間與空間作離散化。於空間離散化採用中央差分 (Central Difference) 法; 而對時間離散, 於濃度平衡式採用前進時間 (Forward Time) 差分法, 其餘皆以中央時間 (Central

得該點之壓力。

$$P(\sigma) = -gH \int_0^\sigma \rho d\sigma \dots \dots \dots (20)$$

而在 σ 一座標系統，其上下二平面之垂直向速度 Ω 均為零，故利用連續方程式，從底平面積分至自由表面，即可求得水面高 η 值。

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = - \int_{-1}^0 \left(\frac{\partial HU}{\partial X} X' + \frac{\partial HV}{\partial Y} Y' \right) d\sigma \dots \dots \dots (21)$$

同時，求算垂直向速度，亦利用連續方程式，由自由表面積分至 σ 計算格點，即為

$$\Omega(\sigma) = - \frac{\sigma}{H} \frac{\partial \eta}{\partial t} - \frac{1}{H} \int_0^\sigma \left(\frac{\partial HU}{\partial X} X' + \frac{\partial HV}{\partial Y} Y' \right) d\sigma \dots \dots \dots (22)$$

上述三式於數值皆以積分法則運算，而在求 η 時以辛浦申積分法則 (Simpson's Rule)，其餘則用梯形積分法則 (The Trapezoidal Rule)。

3. 計算步驟

利用顯性法 (Explicit Method) 由時間疊代，其計算步驟如下：

- A、由初始值以前進時間差分，求算現階段各變數值。
 - B、由連續方程式計算下時段 η 值。
 - C、由 X 向運動方程式計算下時段 U 值。
 - D、由 Y 向運動方程式計算下時段 V 值。
 - E、由連續方程式計算下時段 Ω 值。
 - F、上述 B 至 E 步驟每算 5 次，則計算下時段濃度 C 值。
 - G、判斷因變數 U、V 之變化量是否小於精度要求，若否，則重覆 B 至 F 步驟。
- 而 W 速度不須每個時段計算，只須在輸出時才計算。

4. 穩定性 (Stability) 分析

以顯性法計算數值模式，時距大小有其限制，若超過極限值，則會出現不穩定而發散。Forsythe & Wasow 指出在純擴散模式，即黏滯擴散為疏散的唯一效應之情況，下式為無條件穩定之依據。

$$\Delta t_{\max} = \frac{\Delta x}{\sqrt{2gH_{\max}}}$$

Δx ：最小格點間距

H_{\max} ：最大水深

而 Lee [4] 之水力熱力模式，亦採用此式為時距極限值的憑距，效果頗佳，故本模式援例引用。

至於穩定 (stable) 流場的判定，則由前後時段因變數值之變化量取絕對值相加；當流場趨於穩定時，其相加之值趨近於零。若以 G 表示前後時段因變數之變化量和，F 表因變數， μ 為一極小值，則表示如下：

$$G = \sum_{ijk} [|F_{n+1,ijk} - F_{n,ijk}|]$$

當流場趨於穩定時

$$\lim G \leq \mu \quad \mu \rightarrow 0$$

伍、結果與結論

流場計算區域如圖一所示，河口水流注入斷面為 100m 寬，10m 深，海岸為直線，海流上下游邊界距離河口中心線各 1500m，沿河口離岸方向邊界距海岸 1000m。數值演算時，側向海流表面速度固定為 1m/s，河口中心表面速度分別為 1, 2, 4, 10m/s 四種情況，並將河口中心表面速度與側向海流之表面速度比值定為 R 值。澗度黏性係數假設為常數，且垂直向為水平向之百分之一；而水平向澗度黏性係數採 Schlichting (1960) 之射流經驗式 [3]。

$$E = 0.0256 b V_{\max}$$

b：為射流口之半徑

V_{\max} ：為射流口之最大速度

於此河口斷面為矩形，故以河口寬度的一半為 b 值， V_{\max} 值則以河口中心之表面速度代之。澗度擴散黏性係數和澗度黏性係數之比值為 Schmidt 數，取其值為 1 [6]。

水平座標轉換係數， C_1 和 C_3 為 $\pi/2$ ， C_2 和 C_4 取為15。

計算結果顯示在海流及河口之下游有水平渦流的形成，圖六、七分別為R值2和4之速度向量分佈，由此即可看出此現象。而其渦流中心，可由速度等值分佈求出，如圖八為R值等於2之等值速度分佈；同時將渦流中心位置整理成表一。當R值愈大時，其渦流產生的位置，愈遠離海岸及河口，同時渦流範圍亦愈形擴大；而就水深之影響，使較深處之渦流範圍愈小。再者，由於水流交匯，使得河口流偏折，產生類似旋轉流作用，於垂直向有二次流（Secondary Flow）的發生，以R=2之情況來說，圖十之速度剖面於接近底部的地方，有最大速度存在，即說明了此現象之存在。由圖九其速度有正負值出現，可知垂直渦流之形成，而圖十一、十二則可判定河口流之偏折與否。根據不同R值的情形，對河口流之偏折是隨着R值愈大，愈形緩和。另外於流場中尚可發現壁射流（Wall Jet）之效應，由側向等速分佈圖八，及水平向速度剖面圖十三、十四，不難看出於近岸處有最大值之存在，會使流向偏近岸邊；而R值愈小，其影響愈近岸邊。至於濃度的擴散情形，由圖十五可知其濃度會延續停留於岸邊，且水體愈上層之擴散效果愈佳。

陸、結 論

河口區域交匯水流之作用下，使下游端會形成渦流的現象（含水平向及垂直向），加上壁射流的作用，會使得流向傾向岸壁，對下游海岸而言，可能會受到侵蝕淘刷。混合效應促使河口流向偏折，產生二次流的效應，同樣地會使底層有淘刷之可能。而污染質之停滯於下游岸邊，對於下游海岸形成污染，如石油等，一經附着則環境倍受侵害，須值得注意。

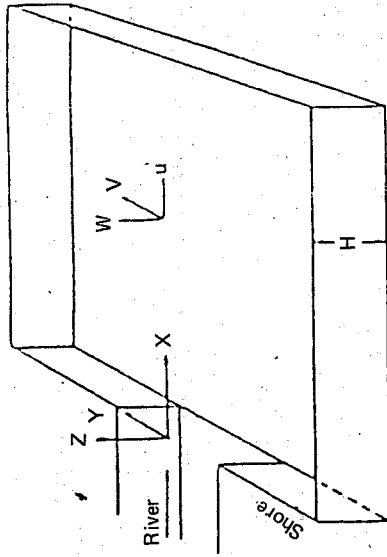
本模式在數值演算上，以顯性法對時間疊代，根據前述時間限制式求得之最大值，在實際計算時，若以此疊代，必呈現發散不穩定情況，甚至於以其二分之一的值來疊代，仍然如此；於此根據實算心得，建議採取最大時距值的三分之一強，於演算必能達到很好的穩定效果。

參考文獻

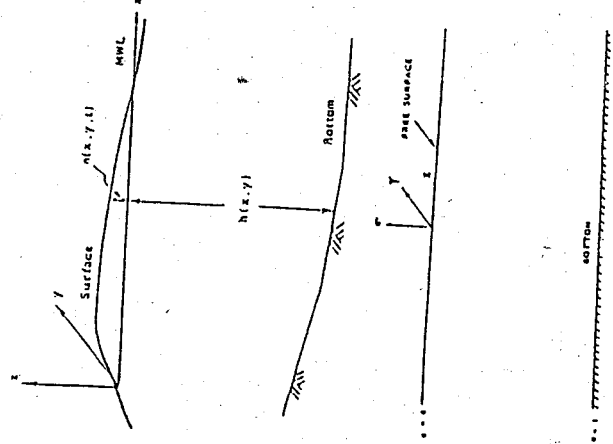
1. Leendertse, J. J., "Aspects of a Computational Model for Long-Period Water-Wave propagation", RM-592-Pr, The Rand Corp., 1967.
2. Reid, R. O. and Bodine, B. R., "Numerical Model for Storm Surges in Galveston Bay", Proc. ASCE, Vol. 94, No. WW1, 33-57, 1968.
3. Waldrop, W. R. and Farmer, R. C., "Three Dimensional Computation of Buoyant Plumes", J. Geophys. Res., 79(6), 1269-1276, 1974.
4. Lee, S. S., Sengupta, S., Tuann, S. Y. and Lee, C. R., "Verification of Three-Dimensional Free-Surface Model", NAS 10-9410 Final Report, May 1982.
5. Sengupta, S., Miller, H. P. and Lee, S. S., "Effect of Open Boundary Condition on Numerical Simulation of Three-Dimensional Hydrothermal Behavior of Biscayne Bay, Florida", International Journal for Numerical Method in Fluids, Vol. 1, 145-169, 1981.
6. Miller, H. P., "Three-Dimensional Free-Surface Suspended in The South Biscayne Bay, Florida", International Journal for Numerical Method in Fluids, Vol. 4, 901-914, 1984.
7. Bowden, K. F., "Turbulent Process in Estuary", Estuaries, Geophysics, and the Environment, The National Research Council, 1977.
8. Harlow, F. H. and Welch, J. E., "Numerical Calculation of Time-Dependent Viscous Incompressible Flow of Fluid with Free Surface", The Physics of Fluids, Vol. 8, Num. 12, 2182-2189, 1965.
9. Freeman, N. G., Hale, A. M. and Danard, M. B., "A Modified Sigma Equations, Approach to the Numerical Modeling of Great Lakes Hydrodynamics", J. Geophys. Res., 77(6), 1050-1060, 1972.
10. Roache, P. J., "Computational Fluid Dynamics", Hermosa Publishers, Albuquerque, N. M., 1972.
11. Pond, S. and Pickard, L. G., "Introductory, Dynamic Oceanography", Publisher: Robert Maxwell, M. C., Pergman International Library of Science, Technology, Engineering and Social Studies, New York, 1978.
12. Dyer, K. R., "Estuaries: A Physical Introduction", A Wiley-Interscience Publication, London, 1977.
13. 劉肖孔，"中國海域之三度空間數學模式"，行政院科技顧問組發行，台北市，72年6月。

表一 渦流中心位置

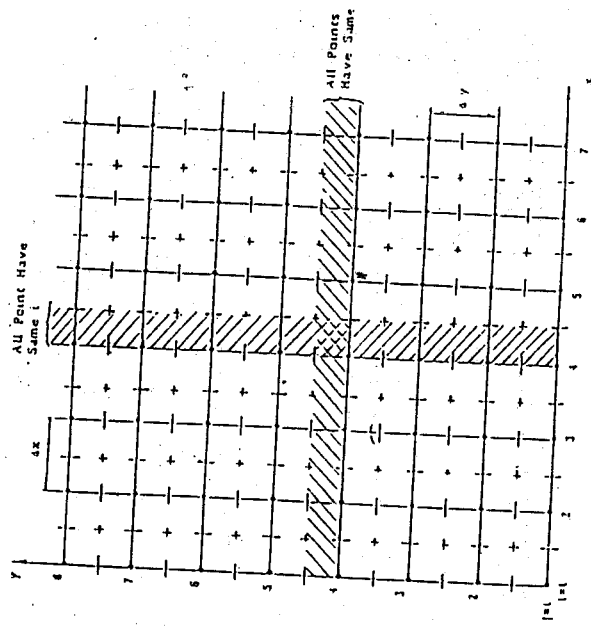
R 值	水深	渦流中心座標
1	0	(21, -178)
2	0	(49, -180)
	75	(30, -166)
4	0	(114, -211)
	75	(102, -171)
10	0	(348, -312)
	75	(340, -288)



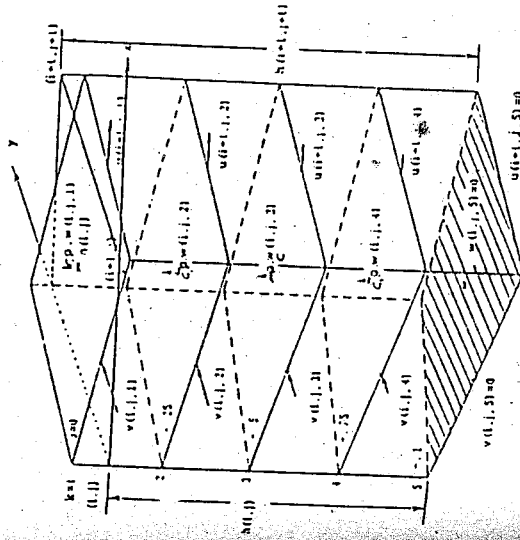
圖一 流場佈置



圖二 座標系統

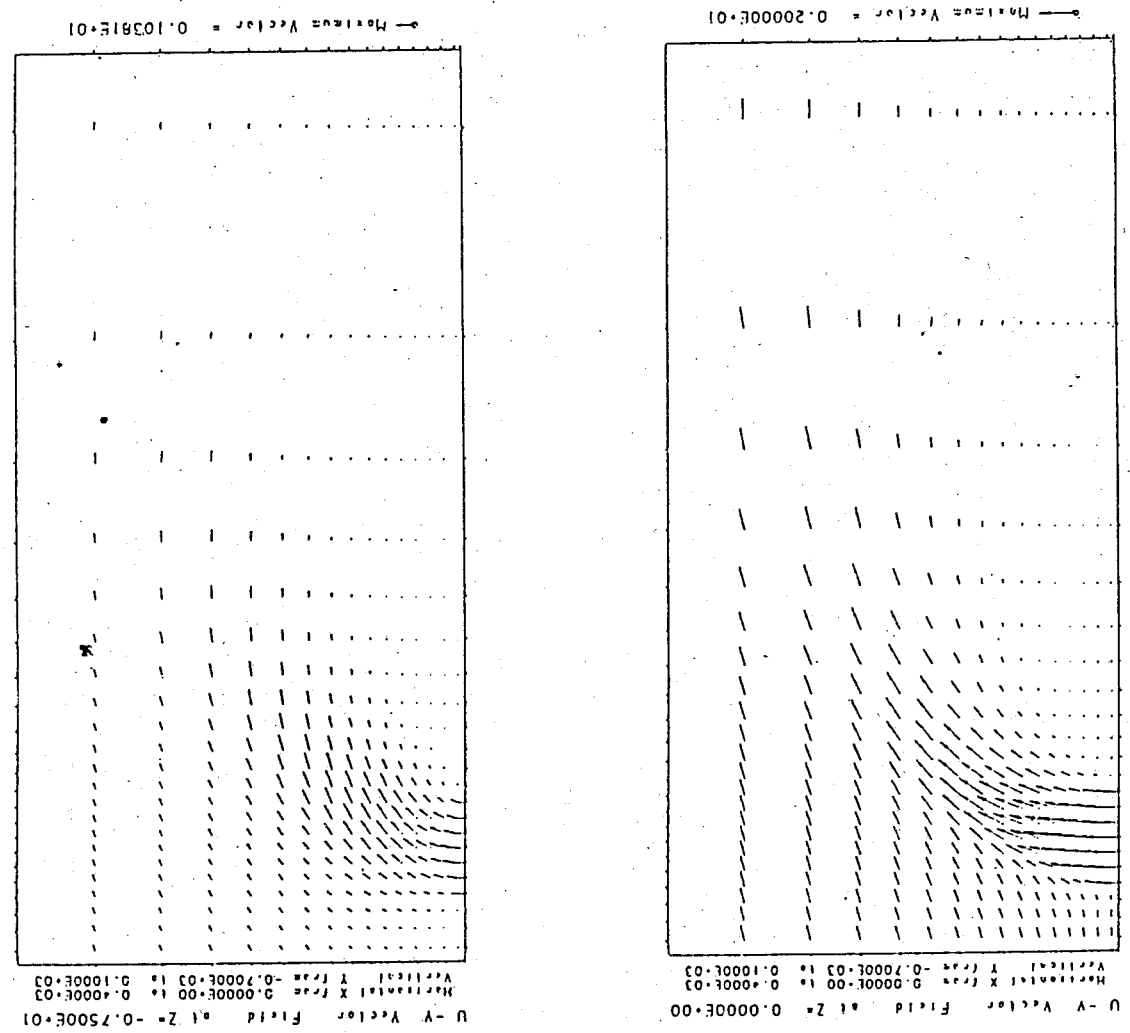


圖三 計算格點網

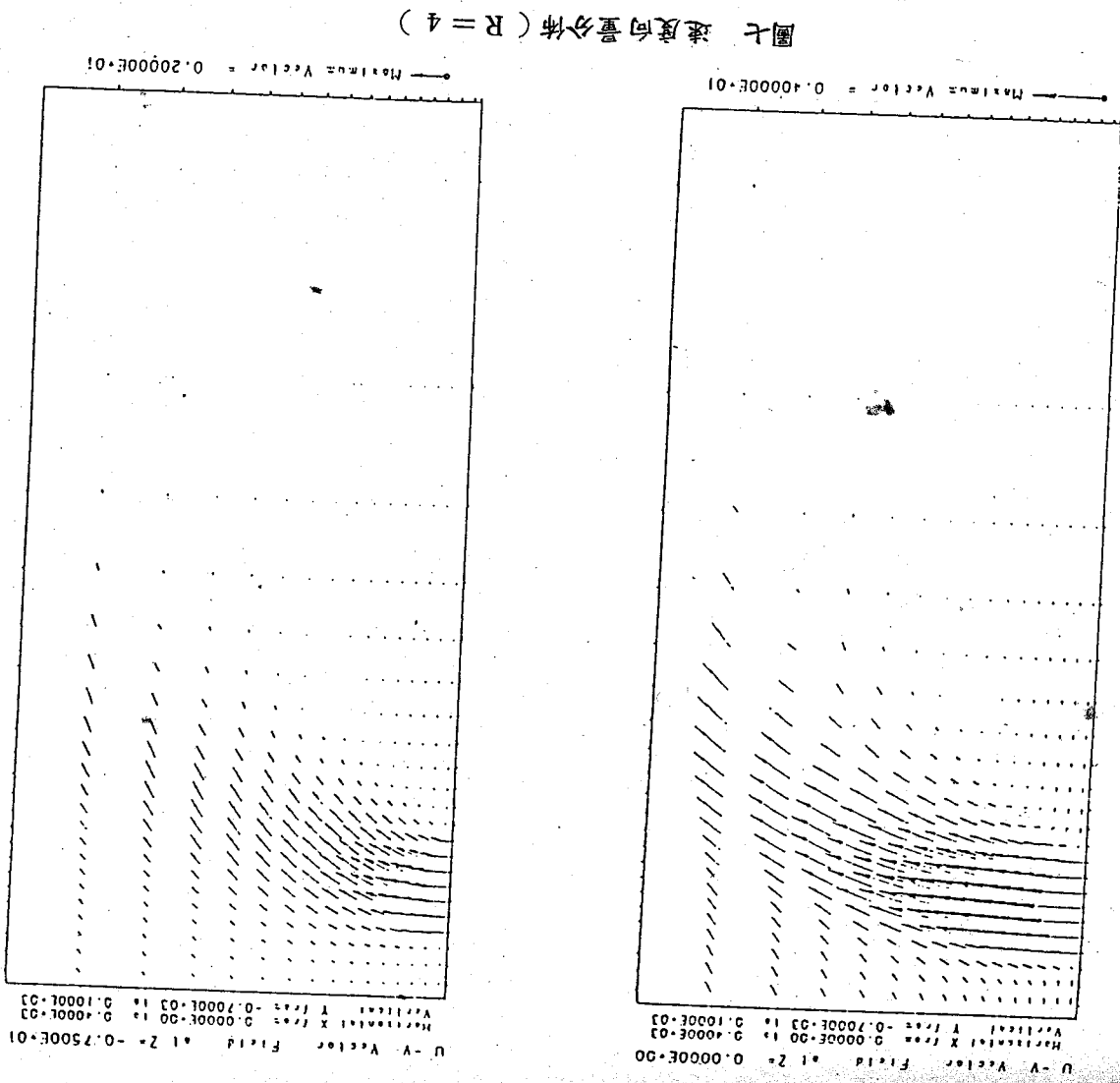


圖四 垂直水柱

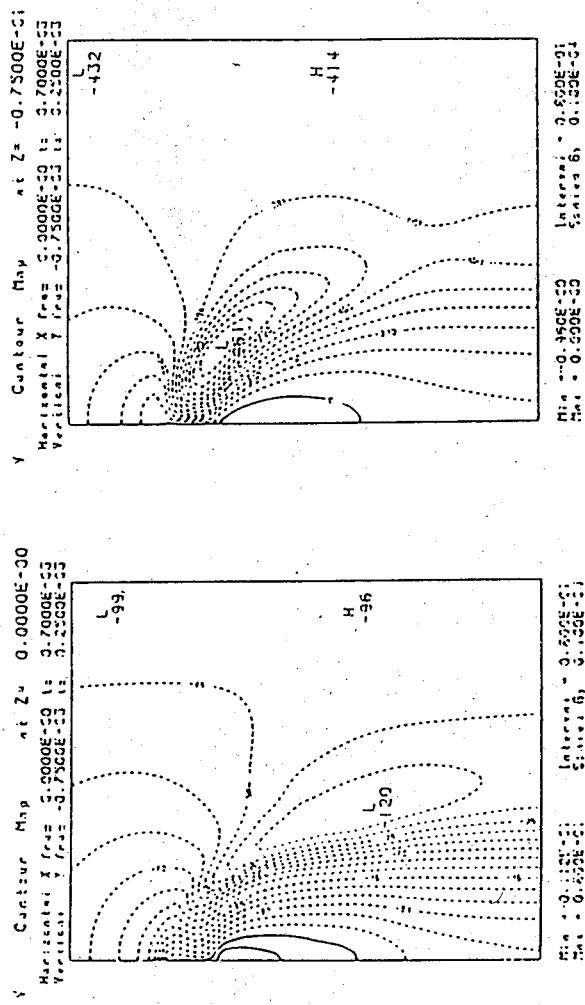
圖五 格點變數相關位置平面圖



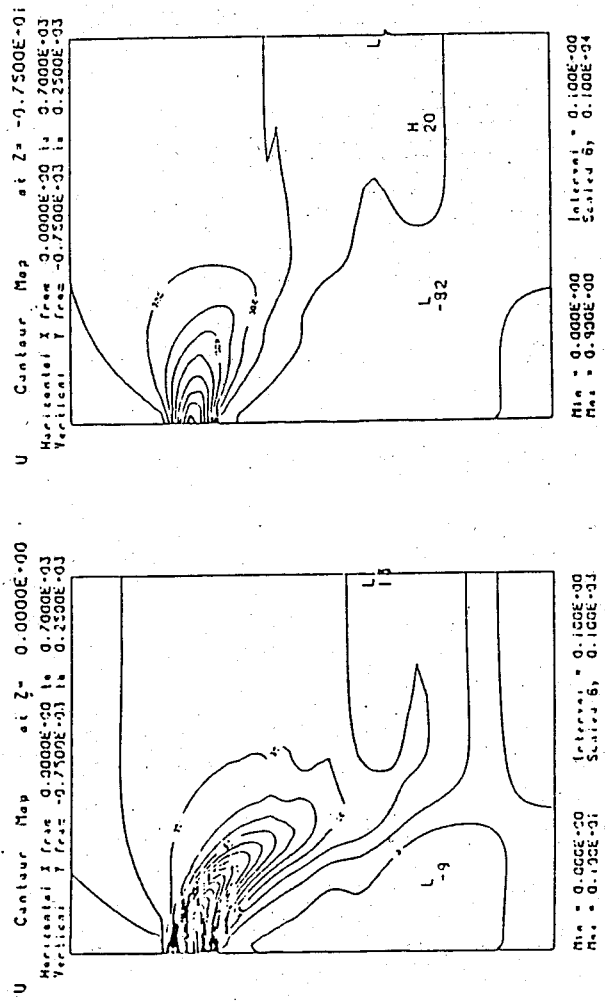
圖六 速度向量分佈 (R = 2)



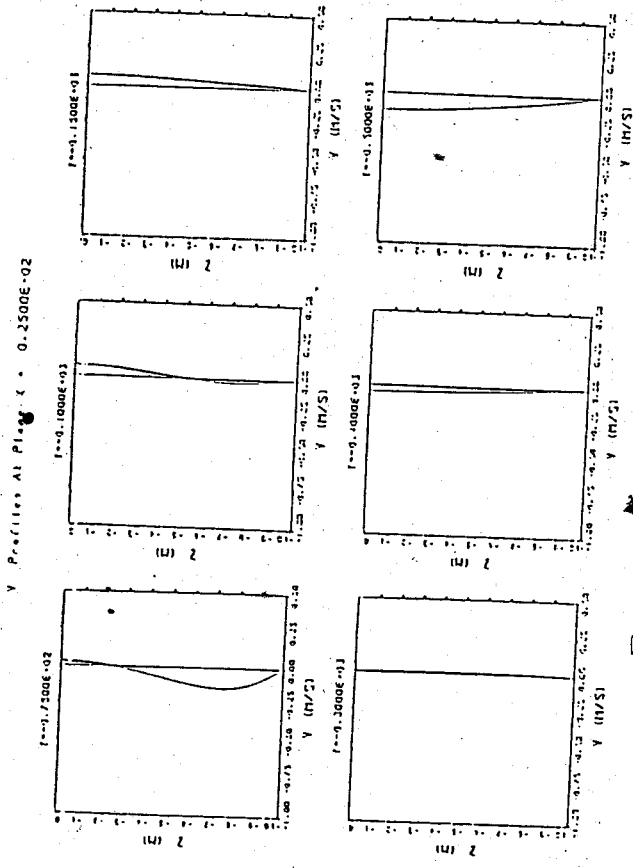
圖七 速度向量分佈 (R = 4)



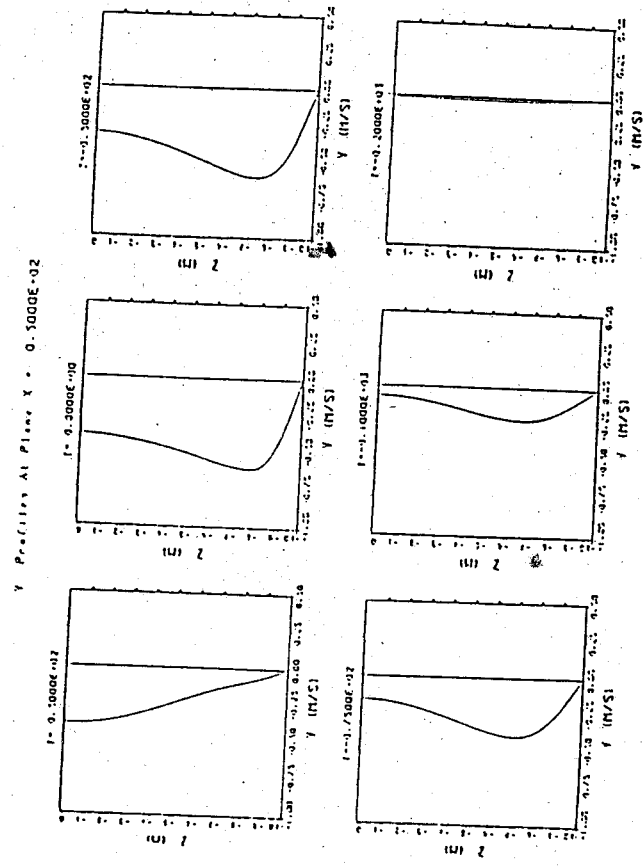
圖八 速度等速線分佈 (R=2)

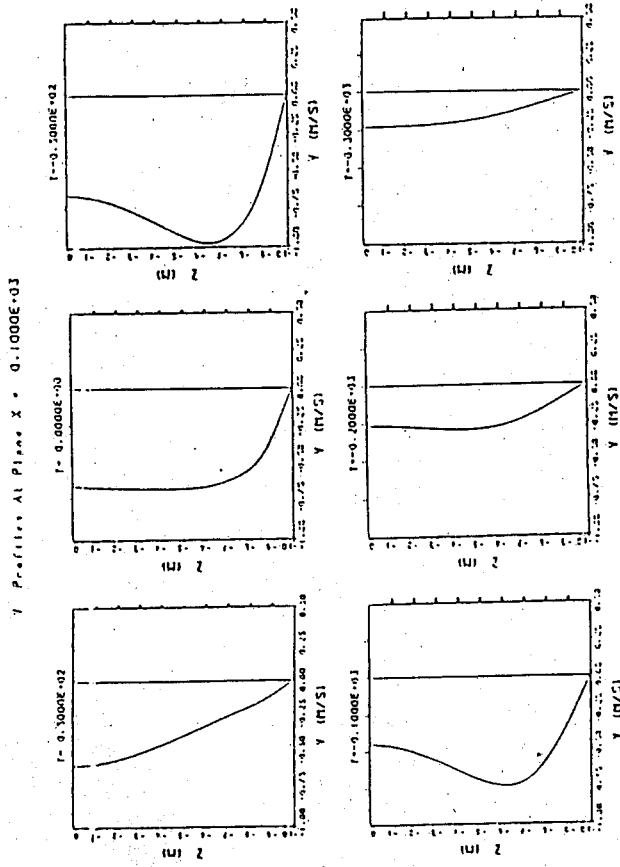


圖九 垂向速度剖面 (R=2)

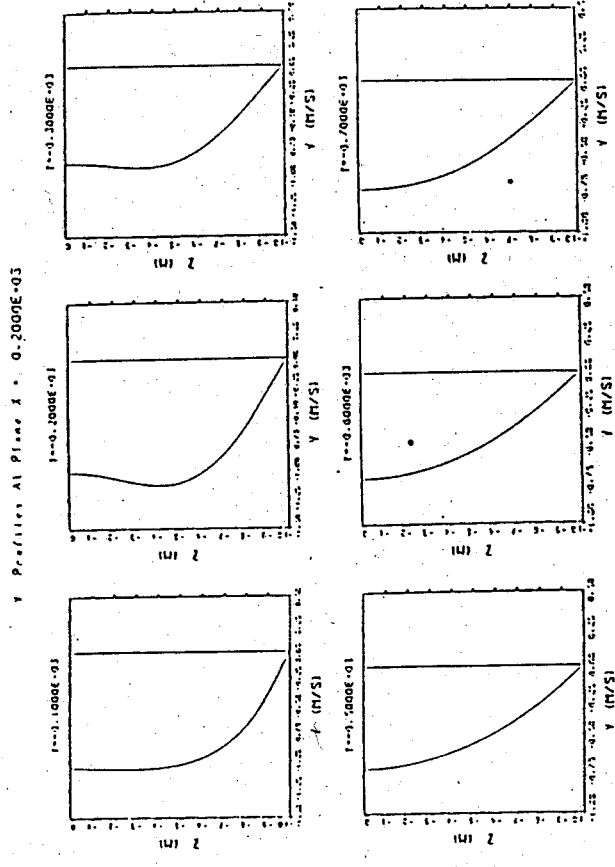


圖十 垂向速度剖面 (R=2)

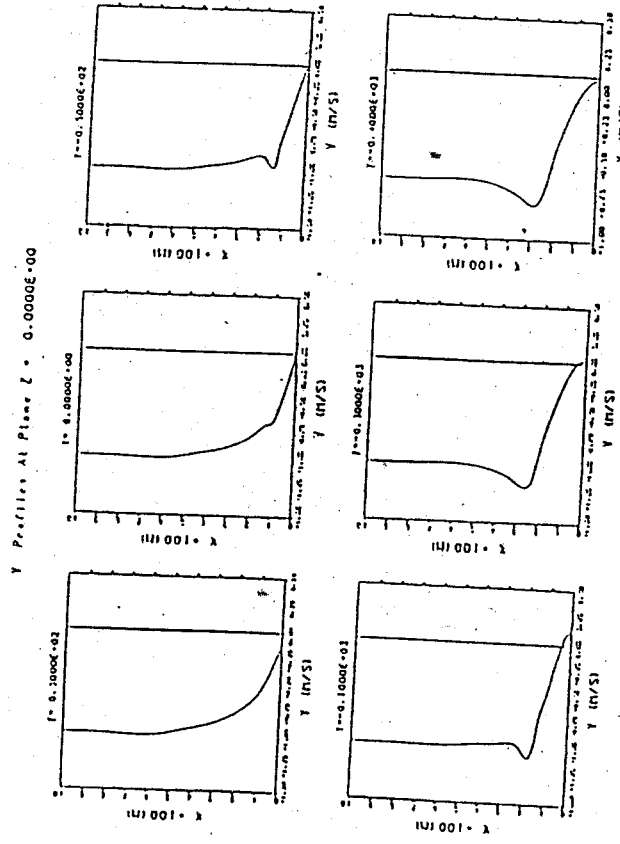




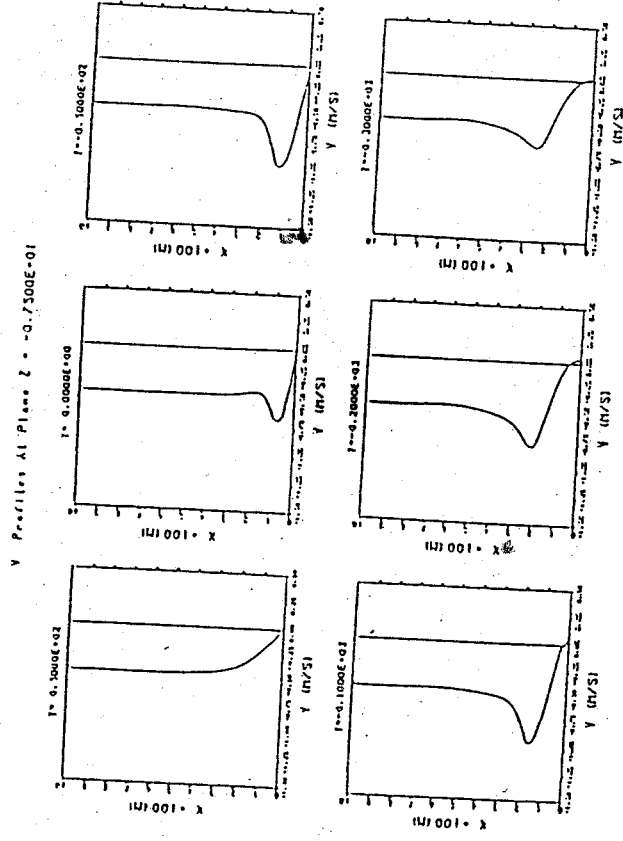
圖十一 垂直速度剖面 (R=2)



圖十二 垂直速度剖面 (R=2)



圖十三 水平向速度剖面 (R=2)



圖十四 水平向速度剖面 (R=2)

NUMERICAL SOLUTION OF FLOW OVER A REARWARD FACING STEP*

Lai-Chen Chien and Yang-You Niu

Institute of Physics, Academia Sinica
 Department of Mechanical Engineering
 National Central University, R.O.C.

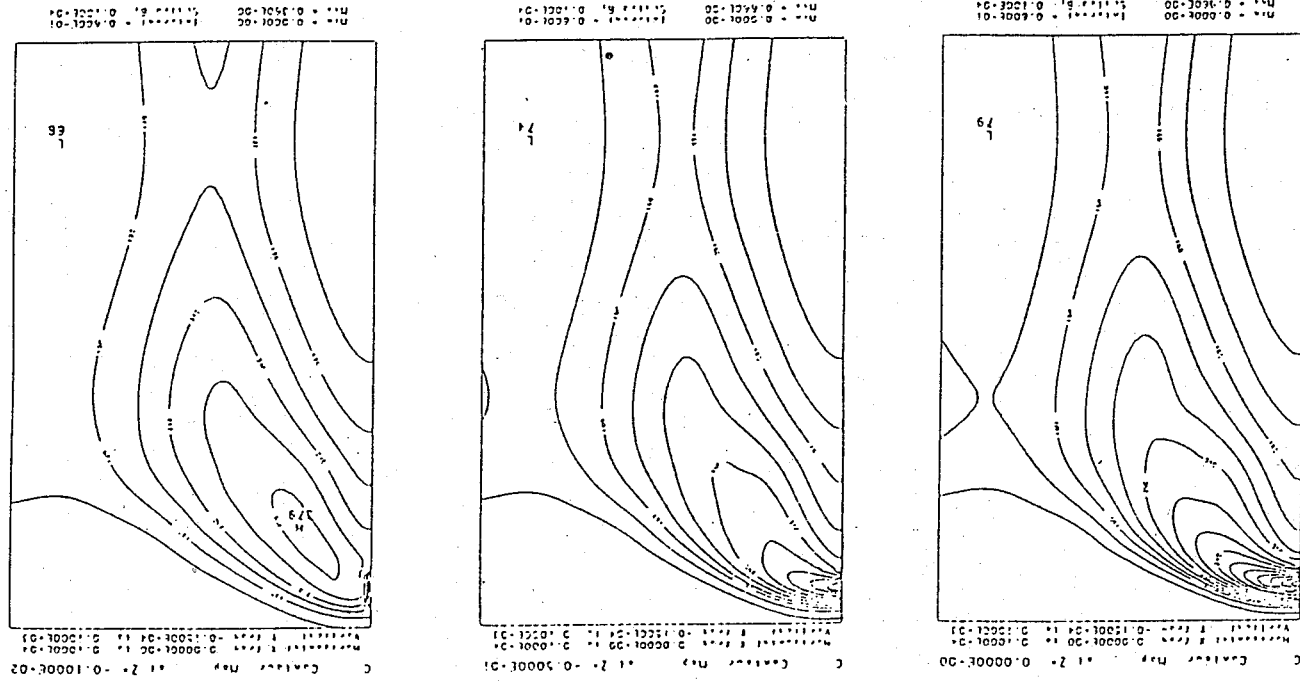
Abstract

The laminar and turbulent flow over a rearward facing step into two dimensional channel was investigated by finite element method. The one equation model is used for the turbulent flow analysis. The computations provide how the Reynolds number and expansion ratio influence the reattachment length and downstream location of the eddy. The results also show additional regions of flow separation downstream of the step at upper wall for the higher Reynolds number flow. Comparing with experiment and numerical data, we confirm that this investigation satisfactorily agrees with the existing solutions.

1. Introduction

This paper presents the results of study on the steady state incompressible separation flow over a rearward facing step. The back facing step problem, for which numerical solutions are provided herein, is a sudden expansion by a step change in width of the channel. The internal separated flows are of considerable interest to the designer of fluid handling devices because flow separation is associated with considerable loss in energy (Chang, 1970). Laminar flows in duct are of considerable importance to the designer of forced convection heating and cooling devices used in electronics, biomechanics (Shan and Landon, 1978). Turbulent flows in a sudden expansion duct is widely considered in aerospace industry. Recently, there has been increased interest in the study of flow over back step. Roache and Mueller (1970) studied the length of recirculation zone for a back faced step by upwind algorithm with stream function-vorticity formulation.

Presented at the 5th National Conference on Mechanical Engineering.



圖十五 濃度等值線分布

Atkins, Maskell and Patrick (1980) used the finite difference method to study the relationship among the inlet velocity, expansion ratio, length of the recirculation region and mass flow rate.

At Swansea, Thomas, Morgan and Taylor (1985) formulated the problem by $K-\epsilon$ model and investigated the turbulent kinetic energy distribution, velocity distribution and energy loss in the channel. Hackman, Raithby and Strong (1984) analyzed the back facing step flow field by finite volume method.

Experimentally, Denham and Patrick (1974) used the laser anemometer investigated the two dimensional flow field characteristics length of reattachment and the mass flow rate. Denham, Briard and Patrick (1975) studied the high Reynolds number turbulent flow density. Durst, Melling and Whitelaw (1974) employed the sensitive laser anemometer to scrutinize the three dimensional flow field for the channel of expansion. More recently, the related problem was considered by Armaly, Durst, Pereira and Schonung at ratio 3 and aspect ratio 9.2. And the existence of the second recirculation region located at the downstream is discerned.

In the next section, the mathematical problems solved numerically are described, including the boundary conditions for each of the problems. Newly developed one-equation model (Davidson and Olssen, 1987) is adopted to study the turbulent flow. In the subsequent section, the computational method, finite element method is described and the results for the laminar and turbulent flow over a back facing step are discussed and compared with the existing numerical solution and experimental data.

II. Problem Formulation

1. Formulation for laminar flow

The problem to be solved is given by the incompressible two dimensional Navier-Stokes equations written in primitive variable. For laminar flow, the governing equations are

$$U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

$$U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad (3)$$

2. Formulation for turbulent flow

For turbulent flow, the x component of instantaneous velocity it may be expressed by time mean value U and turbulent fluctuation u i.e. $U = \bar{U} + u$. Similarly, we express the variables in the same way. Velocity components and pressure are sum of the mean value and fluctuation. Substituting the expressions into the governing equations (1)-(3). We get the equations connecting the mean values.

$$U \frac{\partial U}{\partial x} + V \frac{\partial U}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\overline{u^2}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{uv}), \quad (4)$$

$$U \frac{\partial V}{\partial x} + V \frac{\partial V}{\partial y} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} + \nu \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\overline{uv}) - \frac{\partial}{\partial y} (\overline{v^2}), \quad (5)$$

$$\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad (6)$$

The Reynolds stresses can be expressed as

$$-\rho \overline{u^2} = 2 \mu_T \frac{\partial U}{\partial x} \quad (7)$$

$$-\rho \overline{v^2} = 2 \mu_T \frac{\partial V}{\partial y} \quad (8)$$

$$-\rho \overline{uv} = \mu_T \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \quad (9)$$

where μ_T is the turbulent viscosity.

Equations (4)-(9) form a closed set equations which can be solved for U , V and P provided that an acceptable turbulent viscosity model is defined. Prandtl and Kolmogorov independently proposed the relationship.

$$\nu_T = \mu_T / \rho = \ell \times K^{1/2} \times C_\mu \quad (10)$$

where $K = \frac{1}{2} (\overline{u^2} + \overline{v^2})$ is time average turbulent kinetic energy; C_μ , the constant; ℓ , a typical turbulent length scale.

By suitable manipulation of the Navier-stokes equations, it can be shown that the time averaged turbulent kinetic energy can be expressed as transport equation (Davidson and Olssen, 1987).

$$\begin{aligned} U \frac{\partial K}{\partial x} + V \frac{\partial K}{\partial y} = & \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial K}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_K} \right) \frac{\partial K}{\partial y} \right] \right] \\ & + \nu_T \left[2 \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^2 \right] \\ & + 2 \frac{\partial U}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial x} + \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)^2 + C_D \frac{K^{3/2}}{\ell} \end{aligned} \quad (11)$$

where C_D and σ_K are constants. Equations (4) to (11) described the one-equation hydrodynamic model of turbulence as defined by Launder and Spalding (1972).

3. Boundary conditions

Taking the non-slip conditions on the boundary surfaces and fully development conditions on the downstream exit, we have the following boundary conditions:

- (1) parabolic U-velocity distribution; $V = 0$ and $\partial K / \partial n = 0$ for the upstream entrance.
- (2) $U = V = K = 0$ on the boundary surfaces.
- (3) The gradients of velocity and kinetic energy vanish at the far field of downstream exit.
- (4) Choose any point at the exit as reference $P = 0$.

Numerical Method

1. Finite element formulation

We solve the Navier-Stokes equations and turbulent kinetic energy transport equation by Galerkin weighted residue method. The domain of interested is divided into quadrilateral elements. An extended form of the mixed interpolation technique is adopted. N_i is used to depict variations in velocity, turbulent kinetic energy, turbulent viscosity and length scale. Four-noded isoparametric parabolic element, with associated shape functions M_ℓ are used for the pressure. The element interpolation function are defined by

$$U = \sum_{i=1}^8 U_i N_i \quad (12a)$$

$$V = \sum_{i=1}^8 V_i N_i \quad (12b)$$

$$K = \sum_{i=1}^8 K_i N_i \quad (12c)$$

$$\nu_T = \sum_{i=1}^8 \nu_{T_i} N_i \quad (12d)$$

$$\ell = \sum_{i=1}^8 \ell_i N_i \quad (12e)$$

$$P = \sum_{\ell=1}^4 P_\ell M_\ell \quad (12f)$$

where $i = 1 \sim 8$, $\ell = 1 \sim 4$. Substituting Equations (12) into Equation (1)-(11), and applying the weighted residue method with weighting function for the governing equations, we got the standard matrix equation

$$[A] [X] = [B] \quad (13)$$

2. Laminar flow

Substituting the weighting function into the governing equations (1)-(3) for

laminar flow, we obtain the equation

$$\sum_{1}^{N_e} \int A^e \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & 0 & a_{23} \\ 0 & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ P \\ V \end{bmatrix} dA = \sum_{1}^{N_e} \int A^e \begin{bmatrix} b_1 \\ 0 \\ b_3 \end{bmatrix} dS \quad (14)$$

where the integration is carried out over the domain with total element number N_e , and

$$a_{11} = \sum N_i N_k U_k \frac{\partial N}{\partial x} j + \sum N_i N_k V_k \frac{\partial N}{\partial y} j + \nu \sum \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} x \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} x \frac{\partial N_j}{\partial y} \right),$$

$$a_{12} = \frac{N_i}{\rho} \frac{\partial M \varrho}{\partial x}, \quad a_{21} = \sum M \varrho \frac{\partial N_j}{\partial x}$$

$$a_{23} = \sum M \varrho \frac{\partial N_j}{\partial y}, \quad a_{32} = \sum \frac{N_i}{\rho} \frac{\partial M \varrho}{\partial y}$$

$$a_{33} = a_{11}$$

$$b_1 = \sum \nu N_i \left[\frac{\partial U}{\partial x} \varrho_x + \frac{\partial U}{\partial y} \varrho_y \right]$$

$$b_3 = \sum \nu N_i \left[\frac{\partial V}{\partial x} \varrho_x + \frac{\partial V}{\partial y} \varrho_y \right]$$

$$i = 1 \sim 8, k = 1 \sim 8, j = 1 \sim 8, \ell = 1 \sim 4$$

In the above expressions ϱ_x and ϱ_y are the direction cosine in x and y direction

respectively.

3. Turbulent flow

Similarly, we employ the Galerkin weighted method on the governing equations of turbulent flow, and have the matrix equation.

$$\sum_{1}^{N_e} \int A^e \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & e_{13} & 0 \\ e_{21} & 0 & e_{23} & 0 \\ e_{31} & e_{32} & e_{33} & 0 \\ e_{41} & 0 & e_{43} & e_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ P \\ V \\ K \end{bmatrix} dA^e = \sum_{1}^{N_e} \int A^e \begin{bmatrix} f_1 \\ 0 \\ f_2 \\ f_3 \end{bmatrix} dA^e \quad (15)$$

where

$$e_{ii} = \sum N_i N_k U_k \frac{\partial N_i}{\partial x} + \sum N_i N_k V_k \frac{\partial N_i}{\partial y} + \sum (\nu + N_k \nu_{TK}) \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) - \sum N_i \frac{\partial N_k}{\partial x} \nu_{TK} \frac{\partial N_j}{\partial x}$$

$$e_{12} = a_{12}$$

$$e_{13} = - \sum N_i \frac{\partial N_k}{\partial y} \nu_{TK} \frac{\partial N_j}{\partial x}$$

$$e_{21} = a_{21}$$

$$e_{23} = a_{23}$$

$$e_{31} = - N_i \frac{\partial N_k}{\partial x} \nu_{TK} \frac{\partial N_j}{\partial y}$$

$$e_{32} = a_{32}$$

$$e_{33} = \sum N_i N_k U_k \frac{\partial N_i}{\partial x} + N_i N_k V_k \frac{\partial N_i}{\partial y} + \sum (\nu + N_k \nu_{TK}) \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) - \sum N_i \frac{\partial N_k}{\partial y} \nu_{TK} \frac{\partial N_j}{\partial y}$$

$$e_{41} = -\sum N_i N_k \nu_{TK} \left[2 \frac{\partial N_k}{\partial x} U_k \frac{\partial N_j}{\partial x} - \frac{\partial N_j}{\partial y} \left(\frac{\partial N_k}{\partial y} U_k + \frac{\partial N_k}{\partial x} V_k \right) \right]$$

$$e_{42} = -\sum N_i N_k \nu_{TK} \left[2 \frac{\partial N_k}{\partial y} U_k \frac{\partial N_j}{\partial y} - \frac{\partial N_j}{\partial x} \left(\frac{\partial N_k}{\partial x} V_k + \frac{\partial N_k}{\partial y} U_k \right) \right]$$

$$e_{44} = \sum N_i (N_k U_k \frac{\partial N_j}{\partial x} + N_k V_k \frac{\partial N_j}{\partial y}) + \left(\frac{N_k \nu_{TK}}{\sigma_k} + \nu \right)$$

$$\times \left(\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} \right) + \frac{C_D N_i (N_k K_k)^{1/2}}{N_k \ell_k} N_j$$

$$f_1 = \sum N_i \left[\frac{\partial U}{\partial x} \ell_x + \frac{\partial U}{\partial y} \ell_y \right] [N_k V_{TK} + \nu]$$

$$f_2 = \sum N_i \left[\frac{\partial V}{\partial x} \ell_x + \frac{\partial V}{\partial y} \ell_y \right] [N_k V_{TK} + \nu]$$

$$f_3 = \sum N_i \left[\frac{\partial K}{\partial x} \ell_x + \frac{\partial K}{\partial y} \ell_y \right] \left[\frac{N_k V_{TK}}{\sigma_k} + \nu \right]$$

where i, j , and K range from 1 to 8, ℓ from 1 to 4

Results and Discussion

The geometrical configuration of the rearward facing step is shown in Figure 1. The boundary conditions specified in the previous section are also depicted in the figure. A fully developed velocity profile is given for the inlet. An initial values

for velocity components and pressure over the computation domain are specified to compute the elements in matrix A for equation (13), the correspondent matrix in equations (14) and (15). The frontal method is chosen to solve the equations. Computation is repeated until the prescribed convergent criteria satisfied and obtained the solution desired.

1. Laminar flow

At first, we study the flow field of the case for expansion ratio 1.5 at Reynolds number 100 and 200. The flow patterns are shown in figure (2) and (3) for $Re = 100, 200$ respectively, where the Reynolds number is based on the width of the entrance. The flow patterns show that the greater the Reynolds number, the larger the recirculation region. Comparing the velocity distribution in the recirculation region in Figure (2) and (3), we observed the more negative U-velocity component for $Re = 200$. The fully developed parabolic velocity profiles are shown at the downstream.

We can measure the length of the reattachment point from the flow patterns. The computation results for various Reynolds number are plotted in Figure 4. The existing theoretical studies on the reattachment length variation with respect to Reynolds number obtained by the previous investigators are also shown in the figure. Examining the reattachment length computed by Attkin, et. al. (1980), Thomas, et. al. (1981), we observed that the characteristic length acquired in our computation is shorter than those of previous studies. Whilst comparing the experimental data measured by Deham and Patrick (1974) for the cases of Reynolds number at 73, 100, 200 and 229, we found that the reattachment lengths in our computation agreed closed to those obtained by experiment.

In order to compare with the experimental study of the characteristic length for the back facing step flow by Armaly et. al. (1983), we examine the case of expansion ratio 2. They discovered the phenomena that there exists second recirculation region near the upper boundary downstream to the main one. Their report ascertained that this is the phenomena caused by three dimension effect.

In this study, we investigate the problem by two dimension model with the same geometry configuration. We also found the existence of the second recirculation region at the downstream of the main one. The flow patterns and velocity distribution at $Re = 900$ with expansion ratio 2 are shown in Figure 5. The second recirculation region is discernible. The existing second recirculation region is caused by the adverse pressure gradient due to the sudden expansion of the flow over the step. For the cases of higher Reynolds number, the variation of momentum behind

the step is more severe than that for the flow over the step at lower Reynolds number.

We investigate the cases for Reynolds number at 100, 389, 450, 500 (100) 900, the same with those of Armaly, et. al. (1983). The relationship between the Reynolds number and the characteristic lengths for the laminar flow over a back-facing step is obtained and compared with the experimental data. It shows that the relationship between the length of main recirculation region and Reynolds number is nonlinear. When Reynolds number at 600, the length decreases. Armaly et. al. (1983) described that the length decreases began at Reynolds number 500 (Figure 6). The tendency agrees with our study. But the numerical results are not coincidence because their experiments are three dimensional, while our investigation is simulated by two dimensional model.

The second recirculation region is located at the upper boundary with distance X_4 downstream to the step and of length X_5 . For the initial point of the second recirculation region X_4 , the larger the Reynolds number, the smaller the X_4 . The trend is consistent with the experiment of Armaly et. al. They also concluded that the length of the second recirculation almost kept constant when Reynolds number is greater than 650. In our computation, the larger the Reynolds number, the longer the length of second recirculation region, Figure 5.

Durst, Melling and Whitelaw (1974) consider the problem with the channel of expansion ratio 3 and aspect ratio 9.2 at Reynolds number 250. The observed more than one recirculation region because of the three dimension effect.

2. Turbulent flow

In order to compare the results of the numerical computation and experimental study for the turbulent flow over the rearward facing step, we choose the case of Reynolds number 3025. The flow pattern is shown in Figure 7. The recirculation region is discernible downstream to the step similar to that of laminar flow. We also compare velocity profiles measured by Denham et. al. (1975) using laser anemometer and the numerical computation of Taylor et. al. (1981). The figure shows that the horizontal velocity is negative at the position $X/H = 2$ near the wall. The profiles at various section agree with the previous solutions qualitatively.

The flow pattern and velocity distribution for Reynolds number 2×10^5 are shown in Figure 8. Comparing the flow patterns for $Re = 3025$ and 2×10^5 , we found that the patterns are similar. The reattachment length $4.2H$ for $Re = 3025$ and $4.0H$ for the latter. No second recirculation region appears. We also compare the velocity profiles with those computed by Taylor et. al. (1980), using one

equation turbulent model. Both results show the adverse velocity at $X/H = 2$ downstream the step near the lower boundary. Our velocity profiles are more uniform than those computed by Taylor et. al. at the downstream near the exit. And the velocity gradient is greater than that of Taylor et. al. neighbor to the wall.

The theoretical study of Taylor et. al. (1981) concluded that length of the recirculation region and center location are constant at high Reynolds number turbulent flow. We try to investigate this conclusion by the case of Reynolds number 3025, 10^4 , 6×10^4 and 2×10^5 . The results are shown in Table 1. The computations show that the lengths of the reattachment almost is constant of value $4H$ and the center of the region is $1H$ downstream to the step at various Reynolds number. The results are of values less than those of Taylor et. al. (1981) probably the different inlet boundary condition considered in the computation.

Conclusions

Both laminar and turbulent flow over a rearward facing step are investigated by finite element method. For laminar flow, the larger the Reynolds number, the larger the recirculation region. There exists second recirculation region. It is located at the upper boundary surface downward to the main recirculation region for Reynolds number greater than 400. Comparing the length of the recirculation region of the experimental measurement, we concluded that our numerical results more agree with those obtained by the theoretical investigation.

For the turbulent flow, one equation model is considered. The cases for Reynolds number range from 3025 to 2×10^5 are investigated and recirculation region was observed in our study. The flow patterns are almost the same for the turbulent flow of Reynolds number in this range. The length of recirculation region is independent of the Reynolds number. The phenomena is the same as the theoretical study of Taylor, Thomas and Morgan (1981), and the experimental work of Denham, Briard and Patrick (1975).

Nomenclature

a_i	: weighting coefficient
C_D, C_μ	: turbulent coefficient
E_r	: expansion ratio
H	: height of the step
K	: turbulent kinetic energy

- L_e : length of reattachment
 ℓ_x, ℓ_y : direction cosine in x- and y-direction
 M_1 : four points shap function
 N_i : eight points shap function
 N_e : total number of element
 P : pressure
 Re : Reynolds number based on the width of entrance.
 S : width of entrance
 U : horizontal velocity
 U_0 : mean horizontal velocity
 u : maximum entrance horizontal velocity
 v : perturbed horizontal velocity
 v : vertical velocity
 v : perturbed vertical velocity
 X, Y : horizontal and vertical velocity
 μ_T : turbulent viscosity
 ν : kinematic viscosity
 ν_T : turbulent kinematic viscosity
 ρ : density
 σ_K : coefficient of turbulent model
 ψ : stream function

References

1. Armaly, B. F., F. Durst, J.C.F. Pereira and B. Schonung, "Experimental and Theoretical Investigation of Backward Facing Step Flow", *J. Fluid Mech.*, Vol. 127, 473-496, 1983.
2. Atkins, D. J. S. J. Maskell and M. A. Patrick, "Numerical Prediction of Separated Flow" *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 15, pp. 129-144, 1980.
3. Chang, P. N. Separation of Flow, Pergamon Press, New York, 1970.
4. Davidson, L. and E. Olssen, "Calculation of Some Parabolic and Elliptic Flow Using a New One-equation Turbulence Model. *Pro. Numerical Methods in Laminar and Turbulent Flow*. Vol. 5, pp. 411-422, 1987.
5. Menham, M. K. and M. A. Patrick, "Laminar Flow over a Downstream-Facing Step in a Two-Dimensional Flow Channel" *Trans. Instrn. Chem. Eng.*, Vol. 52, pp. 361-367, 1974.
6. Durst, F. A. Melling and J. H. Whitelaw, "Low Reynolds Number Flow over a

- Plane Symmetric Sudden Expansion", *J. Fluid Mech.*, Vol. 64, pp. 111-128, 1974.
7. Hackman, L. P. G. D. Raithby and A. B. Strong "Numerical Predictions of Flows over Backward-Facing Steps" *Intl. J. Num. Meth. Fluids*, Vol. 4, pp. 711-724, 1984.
 8. Launder, C. E. and D. C. Spalding, "Mathematical Models of Turbulence," Academic Press, London/New York, 1972.
 9. Roache, P. J. and T. J. Mueller "Numerical Solution of Laminar Separated Flows" *AIAA J.*, Vol. 8, pp. 538-538, 1970.
 10. Shah, R. and A. L. London, "Laminar Flow Forced Convection in Duct". *Advances in Heat Transfer*, Vol. 1, 1978.
 11. Taylor, C. and T. G. Hughes and K. Morgan, "A FE Model of one and Two Equation Models of Turbulent Flow". *Recent Adv. Num. Meth. Fluid*, Vol. 1, pp. 310-334, 1980.
 12. Taylor, C., C. E. Thomas and K. Morgan, "Modelling Flow over a Backward-Facing Step Using the F.E.M. and the Two-Equation Model of Turbulence" *Intl. J. Num. Meth. Fluids*, Vol. 1, pp. 295-304, 1981.
 13. Thomas, C. E., K. Morgan and C. Taylor, "A Finite Element Analysis of Flow over a Backward Facing Step" *Computers and Fluids*, Vol. 9, pp. 265-278, 1981.

Table 1. Reattachment length and zone center for various Re

Re	3025	3025	10 ⁴	6 x 10 ⁴	2 x 10 ⁵
Thomas et. al.					
Reattachment length	5.6 H	4.2 H	3.8 H	3.9 H	4.0 H
Zone center	2H	1.10H	1.01H	1.10H	1.20H

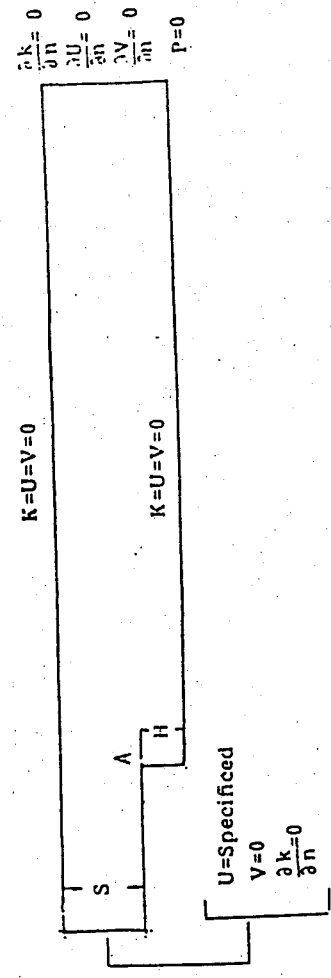


Figure 1. Geometry and boundary conditions for the backward facing step.

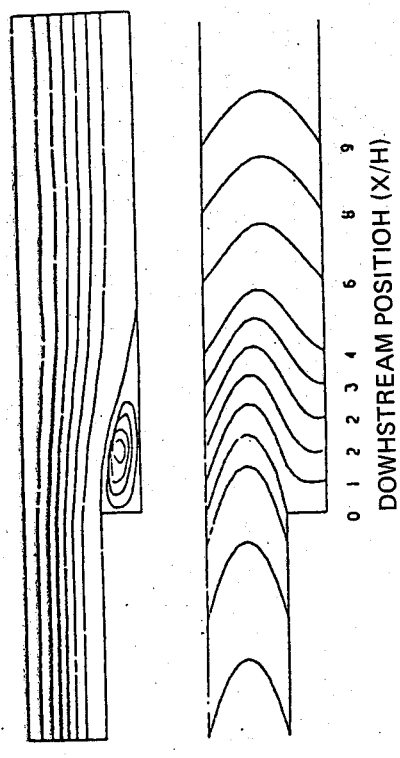


Figure 2. The streamlines and velocity distribution for the laminar flow at $Re=100$ with expansion ratio 1.5.

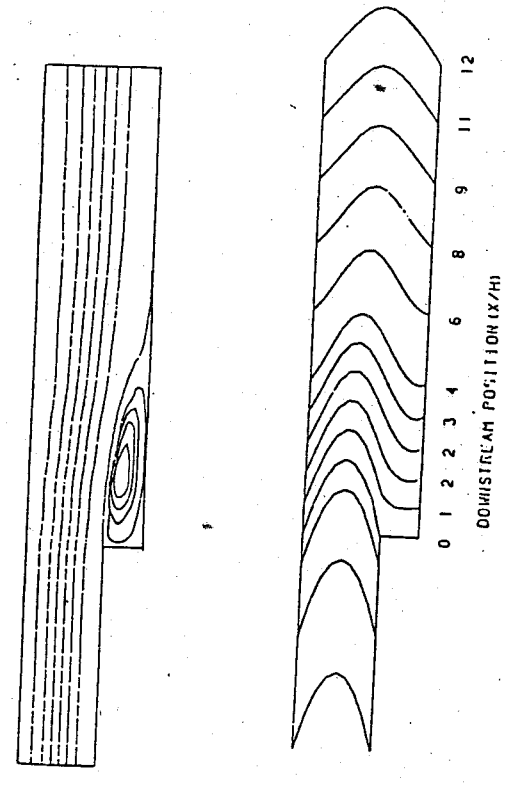


Figure 3. The streamlines and velocity distribution for the laminar flow at $Re = 200$ with expansion ratio 1.5.

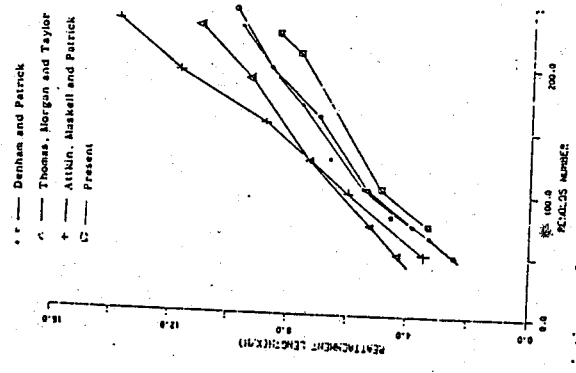


Figure 4. Variation of reattachment length with respect to Reynolds number.

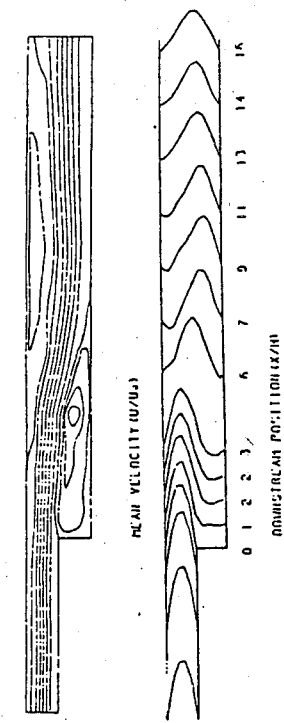


Figure 5. The flow pattern and velocity distribution for turbulent flow at $Re = 900$ with expansion ratio 2.

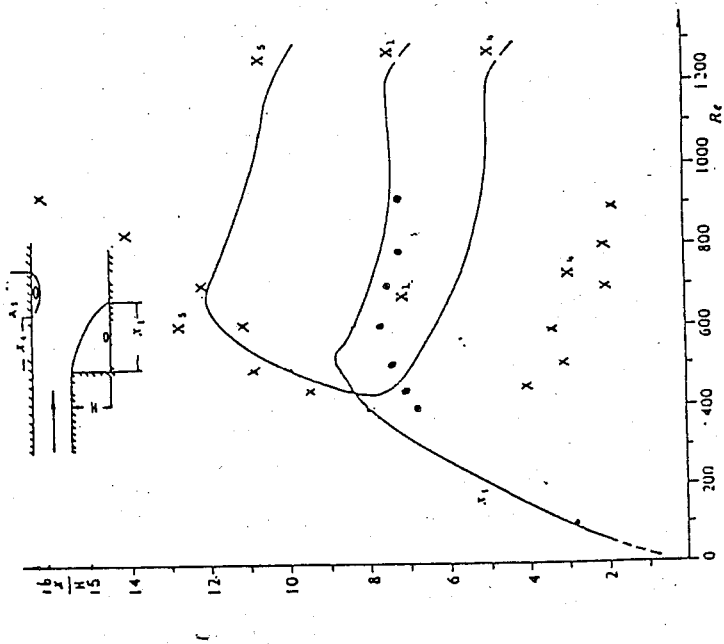


Figure 6. Comparison the characteristic lengths for the rearward facing step flow.

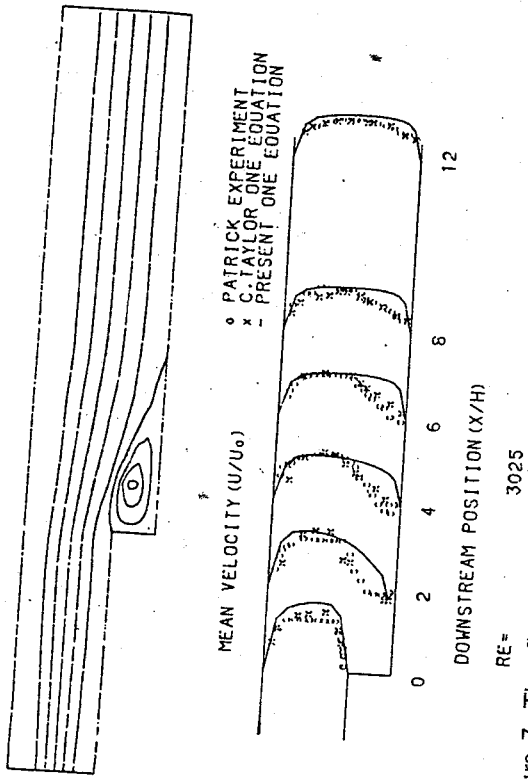


Figure 7. The flow pattern and velocity distribution for turbulent flow at $Re = 3025$ with expansion ratio 1.5.

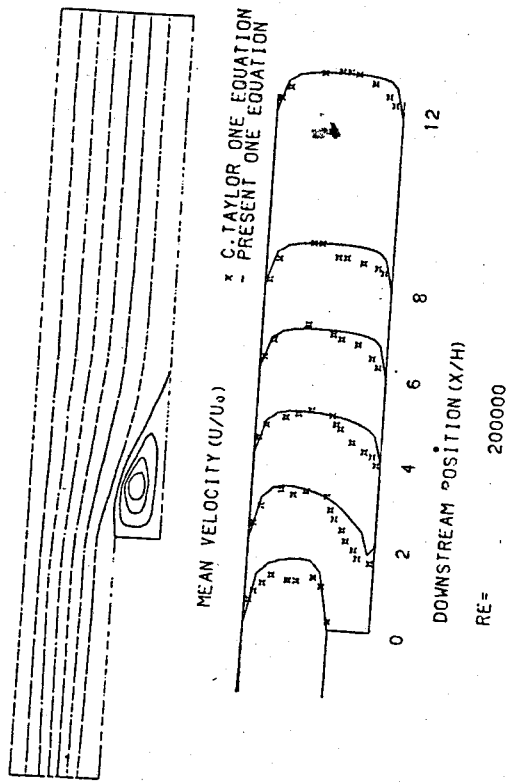


Figure 8. The flow pattern and velocity distribution for turbulent flow at $Re = 2 \times 10^5$ with expansion ratio 1.5.

BOSON PAIR-BREAKING STATES IN NUCLEI

Hsi-Tseng Chen

*Department of Physics, National Taiwan University,
Taiwan, R.O.C.*

and

*Pelletron Laboratory, Universidade de Sao Paulo,
Sao Paulo, Brazil*

R. W. Richardson

*Physics Department, New York University,
New York, NY
U.S.A.*

L. L. Kiang

*Department of Physics, National Tsing-Hua University,
Taiwan, R.O.C.*

Y. Tzeng, P. K. Teng, G. C. Kiang, C. W. Wang, S. F. Tsai and E. K. Lin

*Institute of Physics, Academia Sinica
Taipei, Taiwan
R.O.C.*

A. Arima

*Department of Physics, University of Tokyo
Tokyo, Japan*

Abstract

The exact dispersion equations for the eigenstates of a system of bosons in a spherical or deformed potential well and interacting through a pairing interaction are used to reproduce the physics of the interacting boson model in three dynamical symmetry limits. These equations are generalized to treat

*Submit to PRL for publication.

the seniority-zero and -two states by switching on a surface-delta interaction between unpaired bosons. The model reproduces the quasi-band structure in transition nuclei.

RELATIVISTIC ENHANCEMENT OF THE MAGNETIC SPIN-ORBIT CONTRIBUTIONS TO NUCLEAR COULOMB ENERGIES

Yiharn Tzeng

Institute of Physics

Academia Sinica

Nankang, Taipei, Taiwan 11529, R.O.C.

and

Chun Wa Wong

Department of Physics

University of California

Los Angeles, California 90024, U.S.A.

Abstract

The magnetic spin-orbit contribution to nuclear Coulomb energies is enhanced by the nucleon's coupling to the strong relativistic nuclear scalar potential in the Dirac-Hartree-Fock theory. An enhancement factor of 40-60% is found in a number of light nuclei in the oscillator shell model. The effect reduces the Okamoto-Nolen-Schiffer anomaly in single-hole states, but has the wrong sign in single-particle states.

A STUDY OF THE REACTION (π^+ , π^+p) IN ^{12}C AND ^6Li

J. R. Hurd^a, J. S. Boswell^b, R. C. Minehart^c, L. B. Rees^d,
Y. Tzeng^e, H. J. Ziock^a and K. O. H. Ziock^c

^a Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM 87545, USA

^b General Research Corporation, 7655 Old Springhouse Road,
Westgate Research Park, McLean, VA 22102, USA

^c Physics Department, University of Virginia, Charlottesville, VA 22901, USA

^d Department of Physics and Astronomy, Brigham Young University,
Provo, UT 84602, USA

^e Institute of Physics, Academia Sinica, Taipei, Taiwan 15, R.O.C.

Received 7 April 1986

(Revised 1 August 1986)

Abstract

We have measured the angular and momentum distributions of the scattered pions from the reactions $^{12}\text{C}(\pi^+, \pi^+p)^{11}\text{B}$ and $^6\text{Li}(\pi^+, \pi^+p)^5\text{He}$ in a coincidence experiment. We compare our results with the plane and distorted wave impulse approximations.

* Published in Nucl. Phys. A 462, 605 (1987).

**CONTRIBUTIONS OF TWO-GLUON EXCHANGE DIAGRAMS TO THE NN
SPIN-ORBIT INTERACTION**

Yiharn Tzeng*

National Research Institute for Mathematical Sciences
Council for Scientific and Industrial Research
Pretoria 0001, Republic of South Africa
and Institute of Physics,
Academia Sinica, Nankang Taipei, Taiwan 1152g,
Republic of China

(Received 23 December 1986)

Abstract

Contributions of the two-gluon exchange diagrams to the nucleon-nucleon spin-orbit interaction are investigated via the Glauber approximation, and comparisons are made with the gluon-quark exchange diagrams calculated in the resonating group method. Numerical results at $E_{\text{lab}} = 800$ MeV show that contributions from these diagrams are relatively small as compared to those from the resonating group calculations when the oscillator parameter λ of the three-quark cluster and the interaction range a are fitted from the nucleon radius r_N at 0.83 and 0.59 fm. A non-negligible contribution for λ and a at $r_N = 0.42$ fm. Possible reasons are briefly discussed.

* Published in Phys. Rev. C 36, 277 (1987).

DIFFUSION AND CONDUCTIVITY OF SODIUM IMPURITY IN SILICON AND GERMANIUM

L. T. Ho (何侗民)

*Institute of Physics,
Academia Sinica
Nankang, Taipei, Taiwan,
Republic of China*

Abstract

It has been found that sodium can be diffused into silicon using electrolysis method. The resistivity of an undoped silicon sample, initially about 3000 ohm-cm, decreases to about 1 ohm-cm after addition of sodium. Conversion of the sample conductivity from p-type to n-type indicates that sodium is a donor in silicon, which also suggests that sodium occupies an interstitial rather than a substitutional site in silicon.

Using similar technique, sodium can also be diffused into germanium. The resistivity of an undoped germanium sample, initially about 40 ohm-cm, also decreases to about 1 ohm-cm after addition of sodium. The sample, however, shows a p-type conductivity which indicates that, contrary to the case of silicon, sodium is a substitutional acceptor in germanium.

It has also been found that the resistivity of a sodiumdoped silicon sample increases with time. Several possible reasons for this time-dependent effect will be discussed. Such an interesting phenomenon, however, does not occur for sodium-doped germanium.

* Published in 18th International Conference on the Physics of Semiconductors, edited by Olof Engstrom (World Scientific, Singapore, 1987), pp. 1193-1196.

DIFFUSION AND CONDUCTIVITY OF POTASSIUM IMPURITY IN SILICON AND GERMANIUM*

L. T. Ho (何侗民)

*Institute of Physics,
Academia Sinica
Nankang, Taipei, Taiwan,
Republic of China*

Abstract

It has been found that potassium can be introduced into silicon and germanium by the electrolysis method. The resistivity of an undoped sample, initially about 3000 ohm-cm for silicon and 40 ohm-cm for germanium, decreases to a few ohm-cm after addition of potassium. When diffused into the crystal, potassium has been shown to be an interstitial donor in silicon while a substitutional acceptor in germanium. A diffusion profile is presented to check the uniformity of the potassium impurity distribution.

* Published in Defects in Semiconductors, edited by H. J. von Bardeleben, Materials Science Forum Volumes 10-12 (Trans Tech Publications, Switzerland, 1986), pp. 175-180.

INFRARED ABSORPTION SPECTROSCOPY OF CHEMICAL IMPURITIES IN SEMICONDUCTORS

L. T. Ho (何侗民)

*Institute of Physics,
Academia Sinica
Taipei, Taiwan,
Republic of China*

Abstract

Chemical impurities in semiconductors can bind electrons or holes with bound states having binding energies small compared to the intrinsic energy gap of the host. The energy levels of these donors or acceptors can be viewed as scaled-down version of the hydrogen or helium atom. A series of excitation lines in absorption can be observed in the infrared region. In this review we present and discuss some important experimental results on the infrared absorption spectroscopy of donors and acceptors in semiconductors.

LASER RAMAN STUDY OF SOLID CARBON TETRACHLORIDE

W. S. Tse (謝雲生)

*Institute of Physics, Academia Sinica,
Taipei, Taiwan 11529
R.O.C.*

S. J. Lin (林樹枝)

*Shu-Teh Junior College of Technology
Taichung 40202, Taiwan
R.O.C.*

Abstract

The Raman spectra of crystalline carbon tetrachloride have been recorded over the temperature range 18K to the melting point at 250K. Changes in the molecular stretching spectra at various temperatures show that there are indeed three solid phases. The spectral splittings are mainly due to crystal effects together with some isotopic effects. The reorientational relaxation time of f. c. c. rhombohedral and monoclinic phases are 1.25 psec, 1.4 psec, and 0.75 psec, respectively.

HYDRODYNAMICAL THEORY OF THE LO-PHONON-PLASMO DISPERSION IN $Al_xGa_{1-x}As$

C. P. Chang^{**}, C. S. Fang^{*}, W. S. Tse^{*} and K. F. Pai^{**}

^{*}Institute of Physics, Academia Sinica,
Taipei, 11529, Taiwan
R.O.C.

^{**}Department of Physics, National Cheng Kung University
Tainan, Taiwan
R.O.C.

Abstract

Since $Al_xGa_{1-x}As$ semiconductor compounds have polar phonons and variable concentrations of free carriers, the dielectric function includes contributions from the valence electrons, the phonons and free carriers. The contributions of valence electrons and phonons give no wave vector dependence in the range interested (0 to 10^6 cm⁻¹). The free carrier contribution is then the cause for the wave vector dependence of the dielectric function and the spatial dispersion of the LO-phonon-plasmon modes.

In this work we used the hydrodynamical theory to find a suitable description for the free carrier electric susceptibility. This theory uses also a phenomenological damping constant and is an extension of the Drude approach through the introduction of a diffusion term in the free carrier equation of motion. A wave vector dependent susceptibility and corresponding to the contribution of a harmonic oscillator with an eigenfrequency was obtained.

$Al_xGa_{1-x}As$ exhibits two separate optical-phonon branches, while GaAs contains one pair of TO, LO modes. The phonon contribution to the dielectric function in $Al_xGa_{1-x}As$ contains GaAs- and AlAs- type phonon modes. The effective mass was determined from the effective mass of GaAs with corrections of the nonparabolicity of the conduction band [1].

Numerical results look similar to those in GaAs [2], although there are qualitative and quantitative differences. The free carrier term is largest at frequency = 0 as well as the wave vector and decreases with increasing frequency and wave vector. The wave vector independent phonon contribution proceeds parallel to the wave vector axis at the GaAs-like and AlAs-like resonance frequencies of lattice vibration.

¹D. Kirillov, Y. Chai, C. Webb, and G. David, J. Appl. Phys., 59 (1986) 231.

²U. Nowak, W. Richter and G. Sachs, Phys. Stat. Sol., 108 (1981) 131.

THE RAMAN SPECTRA AND CRYSTAL STRUCTURE OF CRYSTALLINE SNBR₄

Wan-Sun Tse and Nai-Tsung Liang

Institute of Physics, Academia Sinica
Taipei, Taiwan 11529
Republic of China

(Received, April 16, 1986; Accepted, September 16, 1986)

Abstract

The Raman spectra of crystalline tin tetrabromide at various temperatures between 80K and the melting point has been studied. There is no evidence of a second phase transition at 223K. In the stretching mode region, site and factor-group effects determine the mode splittings and that compared with those tetrachloride compounds (CCl₄, SnCl₄, TiCl₄, GeCl₄, SiCl₄) isotopic splitting is not observed.

Key words: Raman spectra, crystalline structure, vibrational modes, solid SnBr₄.

A thermal and Raman investigation of the phase transitions in Zinc Perchlorate Hexahydrate

A THERMAL AND RAMAN INVESTIGATION OF THE PHASE TRANSITIONS IN ZINC PERCHLORATE HEXAHYDRATE

K. F. Pai, Y. C. Chen and J. S. Hwang
Department of Physics, National Cheng Kung University,
Tainan, Taiwan
R.O.C.

W. S. Tse* and C. S. Fang
Institute of Physics, Academia Sinica
Taipei, Taiwan
R.O.C.

Abstract

The Raman spectra of crystalline zonce perchlorate hexahydrate have been studied by Raman spectroscopic techniques over the temperature range 80K to 385K. The temperature dependent Raman and DSC results are consistent with the EPR work that two phase transitions occur at 290K and 347K respectively.

Investigations on the Biological Corrosion of Condenser Tubes by Scanning Auger Microprobe Techniques

INVESTIGATIONS ON THE BIOLOGICAL CORROSION OF CONDENSER TUBES BY SCANNING AUGER MICROPROBE TECHNIQUES

Jiann-Ruey Chen
Department of Materials Science and Engineering
National Tsing Hua University, Hsinchu 30043, Taiwan,
Republic of China; and Institute of Physics
Academia Sinica, Taipei 11529, Taiwan,
Republic of China.

San-Der Chyou
Power Research Laboratories, Taiwan Power Company,
Taipei 10765, Taiwan
Republic of China

Shwa-Ing Lew and Chen-Jen Huang
Department of Materials Science and Engineering
National Tsing Hua University, Hsinchu 30043, Taiwan
Republic of China

Chien-Shyong Fang and Wan-Sun Tse
Institute of Physics, Academia Sinica,
Taipei 11529, Taiwan,
Republic of China

Abstract

A duration test was conducted at the inlet bay of Hsin-Da Power Plant in Taiwan to study the roles of macro-organisms and microorganisms in facilitating or inhibiting the microbiologically influenced corrosion (MIC) of metal alloys in seawater. A significant amount of fouling organisms was grown on the attachment plate submerged in the field for 56-92 days. Copper toxicity resulted in little fouling but slight corrosion still occurred on the copper plate. Titanium was found to be 100% fouled by the fouling organisms. Stainless steel plate was found to be the worst MIC corrosion among tested samples. After mechanically peeled off the polychaeta and barnacle organisms, samples

Os/W alloy-coated area.

Numerical Study on Flow Transport and Pollutant Diffusion at River Mouths

NUMERICAL STUDY ON FLOW TRANSPORT AND POLLUTANT DIFFUSION AT RIVER MOUTHS

W. C. Yang* and Robert R. Hwang**

ABSTRACT

In this study, it is desirable to investigate the state of the flow field and the diffusion of the concentration under the interaction of a stream debouchment and sea currents at the region of river mouth. Three-dimensional unsteady conservation equations are used to describe the interaction of the flow field, of which the dynamic factors to be considered include the effects of buoyancy, inertia, hydrostatic pressure and mixing turbulence. Turbulence effects are modeled by using an eddy viscosity through the Reynolds approximation. And for the convenience of solution, the coordinate system transform, combining the horizontal stretching transform and the sigma-coordinate transform, will be taken.

In the numerical process, the conservation equations are solved by explicit method with time-iteration, until the flow field variables are continuously adjusted with the time-dependent finite difference technique to steady state. The terms of viscosity are modified by DuFort-Frankel formula to make sure the steady state of this model well, and apply the second upwind method for the convective terms of concentration to avoid the negative value.

Results showed that, the phenomena of vortex, secondary flow and wall jet exist at the downstream of the stream and sea current. And the diffusion of concentration decreases with the increasing of the depth.

¹ C. E. Maloney and C. S. Fang, the Symposium on Surface Science, Obertraun, Austria (1985).

² C. E. Maloney and C. S. Fang, the 5th Tri-Service Cathode Workshop, Griffiss AFB, New York, U. S. A. (1986).

* Research Assistant, Institute of Physics, Academia Sinica.
** Professor, Institute of Physics, Academia Sinica and Department of Naval Architecture, National Taiwan University.

**PARTICLE - PARTICLE RING DIAGRAMS IN ^{16}O AND SKYRME
EFFECTIVE INTERACTIONS**

Yiharn Tzeng (曾詣涵)

*Institute of Physics
Academia Sinica
Nankang, Taipei, Taiwan 11529
Republic of China*

and

T. T. S. Kuo (郭子斯)

*Dept. of Physics
State University of New York at Stony Brook
Stony Brook, N. Y. 11794
U.S.A.*

Abstract

We calculate the particle - particle ring diagrams for the ground state energy shift of the atomic nucleus ^{16}O using four versions of the Skyrme effective nucleon-nucleon interactions. The sum of all the higher order such diagrams, i.e. those with more than one interaction vertex, is found to be remarkably small compared with the corresponding first order ring diagram. The ratio of the former to the latter ranges from 0.7% for interaction SkIV to 3% for SkM*. Implication of our calculation on the reliability of the conventional Hartree-Fock description of closed shell nuclei using Skyrme interactions is discussed.

非 賣 品

中 央 研 究 院

物 理 研 究 所 集 刊

第 十 七 卷

發 行 人：林

爾

康

編 輯 者：中 央 研 究 院 物 理 研 究 所 集 刊 編 輯 委 員 會

出 版 者：中 央 研 究 院 物 理 研 究 所 臺 北 市 南 港 區

印 刷 者：萬 達 打 字 印 刷 有 限 公 司

電 話：三 九 四 〇 七 一 八

中 華 民 國 七 十 七 年 六 月 出 版