

土柱混合取代試驗數值模擬方法之比較

A Comparison of Numerical Simulation Techniques for Miscible Displacement Study

國立臺灣大學農工系副教授

張 尊 國

Tsun-Kuo Chang

國立臺灣大學農工所研究生

譚 元 康

Yuan-Kang Tan

摘 要

土柱混合取代試驗被用來研究鈉在土壤剖面之傳輸。一維之移流-延散-吸附方程式用以描述鈉的傳輸過程。數值方法使用半無限及有限系統方式處理邊界條件用以比較計算機之執行時間及準確性，二者模擬之結果均能與實驗之觀測值相符，準確性二者相同，但有限系統較常用之半無限系統在計算機執行時間節省許多，約僅為七分之一。

ABSTRACT

Miscible displacement techniques were used to study the movement of sodium through a soil profile. The one-dimensional convection-dispersion-adsorption equation was formulated to describe the movement process. Numerical simulation techniques employing semiinfinite system and finite system two different ways to handle boundary conditions were compared in terms of execution time, accuracy and programming considerations. Both yielded excellent agreement with the experimental effluent data measured at various times in the soil column. However, finite system only takes one seventh computer execution time as compared with semiinfinite system.

一、前 言

研究污染質在土壤中的傳輸現象時，利用室內的土柱混合取代實驗，是最能直接探究不同污染質在不同土壤中的傳輸行為，但是僅僅了解傳輸行為並非土壤研究的最終目的，如何建立一個能提供早期警報的預測模式，才是真正令人關切的問題。在大多數的情況下，一維的移流-延散-吸附方程式便能適切描述污染質的傳輸現象，故可利用此方程式模擬實驗結果來建立一個傳輸模式。在建立模式時有解析解或數值解之區別，解析解是大多數學者

所公認的真實解，但在碰到非線性的吸附項時便無法解析，在此狀況便僅能靠數值方法求解。數值方法在運用上又有許多不同的技巧可利用，因此精度及效率自然有所不同，本研究便在討論不同的邊界處理方法對模擬結果之影響，以提供土壤污染研究者的參考。

二、理論推演

(一) 一維定含水率孔隙流之移流-延散-吸附方程式

一維的移流-延散-吸附方程式，是研究水質模式時最常用的數學式，在孔隙導水介質 (porous

media) 中之形態，與水中之基本式並無不同，但孔隙並非充滿了全部控制體積(control volume) 中，因此加上傳輸介質的孔隙度便可應用，方程式之組成如下：

1. 移流通量 (Convective flux)

所謂移流，在定義上是垂直方向的對流(adv-
ection) (Fisher et al., 1979)，故移流通量可
寫成：

$$J_c = V_p \cdot C \cdot \theta \dots\dots\dots(1)$$

其中 J_c ：移流通量 ($M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}$)；
 V_p ：平均孔隙流速 ($L \cdot T^{-1}$)；
 C ：溶液中溶質濃度 ($M \cdot L^{-3}$)；
 θ ：土壤孔隙度 ($L^3 \cdot L^{-3}$)。

2. 延散通量 (Dispersive flux)

延散在定義上是剪力與傳導綜合作用之擴散 (diffusion) (Fisher et al., 1979)，故延散通量可寫成：

$$J_d = -D \cdot \theta \cdot \frac{dC}{dz} \dots\dots\dots(2)$$

其中 J_d ：延散通量 ($M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}$)；
 D ：縱長方向 (或軸向) 水力延散係數 ($L^2 \cdot T^{-1}$)；
 (dC/dz) ：溶質在 z 軸方向上的濃度梯度 ($M \cdot L^{-3} \cdot L^{-1}$)；
 負號表溶質是由高濃度到低濃度

3. 總通量 (Total flux)

$$J_T = J_c + J_d = -D \cdot \theta \cdot \frac{dC}{dz} + V_p \cdot \theta \cdot C \dots\dots(3)$$

其中 J_T ：總通量。

4. 控制體積內之溶質總質量 (Total mass of solutes in control volume)

控制體積內的溶質包括液相溶液中的溶解量，加上固相中的吸附量，故總質量可寫成：

$$Q = \theta \cdot C + \beta \cdot S \dots\dots\dots(4)$$

其中 Q ：控制體積內溶質總量 ($M \cdot L^{-3}$)；
 β ：土壤總體密度 ($M \cdot L^{-3}$)；
 S ：土壤單位重溶質吸附量 ($M \cdot M^{-1}$)。

依質量守恆原理，單位時間在單位體積內的溶質總通量變化率應等於溶質的累積率 (Murali and Aylmore, 1981)，所以：

$$-\frac{\partial J_T}{\partial z} = \frac{\partial Q}{\partial t} \dots\dots\dots(5)$$

將(3)、(4)兩式代入(5)式中，可得：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - V_p \cdot \frac{\partial C}{\partial z} - \frac{\beta}{\theta} \cdot \frac{\partial S}{\partial t} \dots\dots(6)$$

(6)式即為一維定含水率之移流-延散-吸附方程式，在孔隙流之應用式，也是最常被研究土壤傳輸現象的學者所採用的數學式。雖然本式可廣泛的應用在土壤傳輸問題的研究，但其應用仍有限制條件，例如在具有大孔隙及大團粒之土壤時，本式便無法直接運用而需加以修正 (Murali and Aylmore, 1981)，另外在邊界不具有連續流通量時無法適用為其缺陷。

(二) 吸附模式與移流-延散-吸附方程式之合併

在解析移流-延散-吸附方程式時，因為其有兩個未知變數 C 與 S ，所以無法解析之，因此必須先加以處理，才能夠以數學方法解析之。處理的方法，是應用吸附模式，將 S 轉換成 C 的函數，如此在方程式中便僅剩單一變數而可解析。

吸附模式不勝枚舉，一般分為平衡及動態吸附模式，其中又有線性及非線性之區分，在本研究中採用一種非線性的平衡模式：Langmuir Isotherm Model (LIM)，

$$S = \frac{K_{ads} \cdot b \cdot C}{1 + K_{ads} \cdot C} \dots\dots\dots(7)$$

其中， K_{ads} ：溶質與土壤表面吸附反應常數 ($L^3 \cdot M^{-1}$)；
 S ：污染質土壤吸附濃度 ($M \cdot M^{-1}$)；
 C ：溶質體積平均濃度 ($M \cdot L^{-3}$)；
 b ：土表最大吸附容量 ($M \cdot M^{-1}$)。

將(7)式對時間偏微分，可得

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{K_{ads} \cdot b}{(1 + K_{ads} \cdot C)^2} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \dots\dots\dots(8)$$

(8)式便可併入移流-延散-吸附方程式中而直接以數學方法解析之。

(三) 解析之邊界條件及起始條件

在模擬土柱實驗時，雖然可用數學或物理的方法，將邊界之情形以數學式表示，但數學式並不能代表實際狀況，僅是盡可能的試著描述，因此可以有各種不同的式子來描述，在本研究中，採用傳統的連續方程式及體積平均濃度法 (volume average concentration) 來描述污染質的傳輸，因此土柱的上下邊界可寫成如下的形式：

$$\begin{aligned} \text{上邊界 } V_p \cdot C_0 | Z = 0^- &= [V_p \cdot C_i - D \cdot \frac{\partial C_i}{\partial z}] \\ Z = 0^+ &\dots\dots\dots(9) \end{aligned}$$

$$\text{下邊界 } [Vp \cdot Ci - D \cdot \frac{\partial Ci}{\partial z}] Z = L^- = Vp \cdot Ce$$

$$[Z = L^+ \dots \dots \dots (10)]$$

其中，
 Ci ：土柱內溶質濃度；
 Co ：實驗施用之入流濃度；
 Ce ：土柱外濃度；
 L ：土柱長度。

(9)、(10)兩式即為標準的第三型邊界條件，在(10)式中有一個不確定的下邊界條件，因此在解析時需加以處理，否則無法解之(van Genuchten and Parker, 1984)，一般之處理方式有兩種，第一種是用 farfield solution 之觀念，即當 L 趨近於無窮大時，其濃度梯度為零 (zero concentration gradient)，此時可得解析解(Liggett and Liu, 1983)，用半無限系統(semi-infinite system)來定義下邊界條件，可得：

$$\frac{\partial Ci}{\partial z}(L \rightarrow \infty, t) = 0 \quad (t > 0) \dots \dots \dots (11)$$

$$\Rightarrow Ci = Cc$$

其中 Cc ：土柱初始時之平衡濃度。

另一種處理方式則是以連續方程式之觀念，假定土柱內外濃度呈連續變化，當下邊界處無吸附及延散作用時，

$$Ce(t) = Ci(L^-, t) \dots \dots \dots (12)$$

代入(9)式中，得

$$Vp \cdot Ci|L^- - D \cdot \frac{\partial Ci}{\partial z} = Vp \cdot Ci|L^+ \dots \dots \dots (13)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial Ci}{\partial z}(L, t) = 0 \dots \dots \dots (14)$$

此種處理法稱為有限系統(finite system)(van Genuchten and Parker, 1984)，理論上解析解亦可用此方法解之，但若容器分散數 $D/VL > 0.05$ 時，則無法以解析解解之，僅能應用數值解(Selim and Mansell, 1976)。

土柱之起始條件為原本孔隙內之溶質濃度，故起始及邊界條件可寫成如下之式子：

$$I. C.: C(z, 0) = Cc \quad 0 < z < L \dots \dots \dots (15)$$

$$B. C. (semi-infinite system):$$

$$\begin{cases} C(0, t) = Co \\ C(L \rightarrow \infty, t) = Cc \end{cases} \quad t > 0 \dots \dots \dots (16)$$

$$B. C. (finite system):$$

$$\begin{cases} C(0, t) = Co \\ \frac{\partial Ci}{\partial z}(L, t) = 0 \end{cases} \quad t > 0 \dots \dots \dots (17)$$

三、數值差分方法

移流-延散-吸附方程式是屬於拋物線型的微分方程式(parabolic differential equation)，可利用數值方法求其近似解。本研究採用有限差分法(finite difference method)解析，差分方式採 MTCS (Middle Time Central Space) 的Crank-Nicolson 隱式差分法，對已知及未知時間項作中央差分，由於是二階隱式差分法(two-step implicit finite difference method)，對空間項之差分式具有二階截餘誤差(2nd order truncate error)，故精度較高。依泰勒級數展開式(Taylor's expansion)，各項差分式可寫成如下之形式(Gerald and Wheatley, 1984)：

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial C}{\partial t} \right]_j^{m+1/2} &= \frac{C_j^{m+1} - C_j^m}{\Delta t} - \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right]_j^{m+1/2+\epsilon} \\ &= \delta_t C_j^{m+1/2} + O(\Delta t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right]_j^{m+1/2} &= \frac{1}{2} \frac{C_{j+1}^{m+1} - 2 \cdot C_j^{m+1} + C_{j-1}^{m+1}}{\Delta z^2} \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{C_{j+1}^m - 2 \cdot C_j^m + C_{j-1}^m}{\Delta z^2} \\ &\quad - \frac{\Delta z^2}{12} \cdot \left[\frac{\partial^4 C}{\partial z^4} \right]_j^{m+s} - \frac{\Delta z^2}{12} \cdot \left[\frac{\partial^4 C}{\partial z^4} \right]_j^{m+1+\epsilon} \\ &= \frac{1}{2} \cdot (\delta_z^2 C_j^{m+1} + \delta_z^2 C_j^m) + O[(\Delta z)^2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial C}{\partial z} \right]_j^{m+1/2} &= \frac{1}{2} \cdot \frac{C_{j+1}^{m+1} - C_{j-1}^{m+1}}{2 \cdot \Delta z} \\ &\quad + \frac{1}{2} \cdot \frac{C_{j+1}^m - C_{j-1}^m}{2 \cdot \Delta z} - \frac{\Delta z^2}{6} \cdot \left[\frac{\partial^3 C}{\partial z^3} \right]_j^{m+1+\epsilon} \\ &\quad - \frac{\Delta z^2}{6} \cdot \left[\frac{\partial^3 C}{\partial z^3} \right]_j^{m+\epsilon} \\ &= -\frac{1}{2} \cdot (\delta_z C_j^{m+1} + \delta_z C_j^m) + O[(\Delta z)^2] \end{aligned}$$

其中 $m+1/2$ ：表對時間之中間項，也是差分式展開位置；

$m+1$ ：表未知時段；

m ：已知時段；

$O(\quad)$ ：截餘誤差之 Order。

由於解析時，是將土柱內各控制斷面乘上斷面間距而成為控制體積，每個控制體積可稱為元素，同時計算距離是以控制斷面為準，因此亦可直接稱

斷面，實驗土柱可視為由數個元素串聯組合而成，故在畫差分格網時，可將各元素置於格網中心，而不是放在節點 (Node) 上，差分式展開位置關係見圖 1。

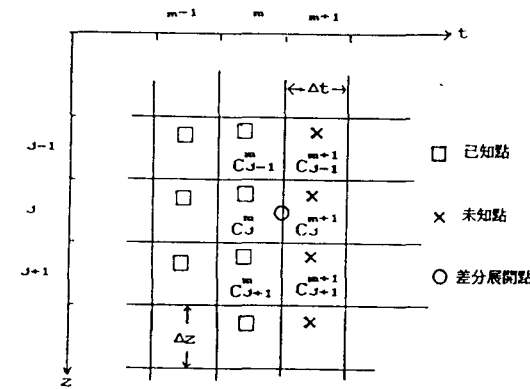


圖 1 差分式展開點關係圖

將(8)式代入(6)式中，整理後可得

$$\left(1 + \frac{\beta}{\theta} \cdot \frac{K_{ads} \cdot b}{(1 + K_{ads} \cdot C)^2}\right) \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - Vp \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \dots\dots\dots(18)$$

再將(18)代入差分式運算，可得如下之通式

$$P \cdot C_{j+1}^{n+1} + Q \cdot C_j^{n+1} + R \cdot C_{j-1}^{n+1} = E \cdot C_{j+1}^n + F \cdot C_j^n + G \cdot C_{j-1}^n \dots\dots\dots(19)$$

(19)式對每個控制體積（或稱元素）即有一個關係式，上下邊界在解析時必須單獨處理，上邊界在有限及半無限系統都一樣，是以實驗所施用的溶質濃度代入，為已知之條件。下邊界的處理則兩種方法有很大的差別，半無限系統的下邊界因為定在無限遠處，為背景濃度，濃度梯度趨近於零，因此可用實驗值代入，且維持固定不變，為已知條件。若假設土柱由上到下共有 j+2 個元素，扣掉上下邊界為已知值，共有 j 個元素需要解析，故共可寫成 j 條如(19)式之關係式，(19)式中等號左邊為未知時間項，右邊則為已知時間項，每一式中有 3 個未知數、3 個已知數，因此單獨 1 條式子無法解析，但各式間有共通之未知數，因而可以合併成為聯立方程式，並組成如圖 2 之矩陣型式。若採用有限系統，在 j+2 個元素的土柱中，上邊界為已知值，下邊界是土柱傳出之溶質濃度，其值為未知，但可由控制方程式藉差分方法求得其值，故須加以處理，處理方法如下：

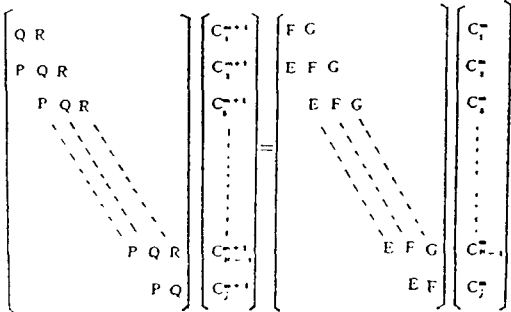


圖 2 數值解之矩陣排列圖

由(14)式，應用映像 (image) 觀念，令土柱外虛擬斷面之濃度會與下邊界內第一個斷面濃度相同，而可寫成

$$C_{j+1} = C_{j+3} \dots\dots\dots(20)$$

第(19)式的下邊界關係式可寫成：

$$P \cdot C_{j+3}^{n+1} + Q \cdot C_{j+2}^{n+1} + R \cdot C_{j+1}^{n+1} = E \cdot C_{j+3}^n + F \cdot C_{j+2}^n + G \cdot C_{j+1}^n$$

將(20)式代入之可得：

$$(P + R) \cdot C_{j+1}^{n+1} + Q \cdot C_{j+2}^{n+1} = (E + G) \cdot C_{j+1}^n + F \cdot C_{j+2}^n \dots\dots\dots(21)$$

包含(21)式，則共有 j+1 條聯立方程式，同樣可組成如圖 2 之矩陣型式，僅是最下面再多加一個元素的關係式，由於矩陣是帶寬矩陣，可經濃縮法以節省計算機記憶空間，再以 LU 分解法 (LU decomposition method) 解聯立方程組 (林聰悟，1986)，代入邊界條件及起始條件，即可逐步求得各時段不同位置之濃度變化。

四、有限及半無限系統之比較

半無限系統的理論，建立在 far-field solution 上，在這種狀況下，如果土柱長度取得夠長時，可以得到合理的解析解，或稱為真解，若方程式具有非線性吸附項時，雖然沒有解析解，但只要濃度潤鋒沒有傳到下邊界，便可得到理想之數值解，在過去的研究中，已證明半無限系統的數值解法是一種可靠而精確的解法，如丁健原 (1987) 及劉建民 (1988) 便以此法解析問題。在本研究中，利用半無限系統解析之數值解當做標準解，來比較不同狀況下有限系統之數值解，以選取既經濟又不失精度的數值方法。模擬的土柱資料如下：土柱尺寸

為 9*10cm(d*h)，土壤樣本為砂頁岩沖積土，假比重 1.35，貫穿用污染質濃度為 1000ppm 之鈉離子，實驗時間 72hr，各時段之溫度及平均孔隙流速變化見圖 3。

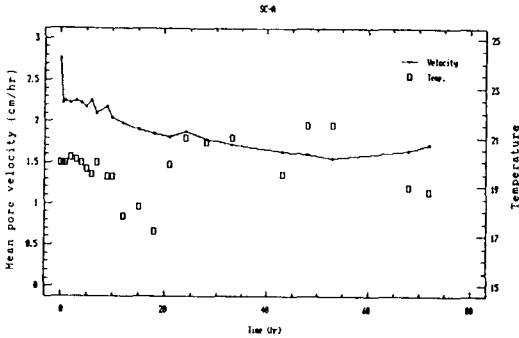


圖 3 SC-A 土柱平均孔隙流速及外氣溫變化圖

半無限系統之解析條件如下：

1. 利用一虛擬土柱，全長 600cm，實驗土柱則為最上面 10cm。
2. 上邊界條件為入流溶液之濃度，下邊界條件則維持起始之平衡濃度 C_c 。
3. $\lambda = 2\text{cm}$ ，則 $D/VL = 0.003333$ ，由此值判斷流況屬柱塞流 (Levenspiel, 1972)，數值解與真解接近。
4. 取 $\Delta z = 1\text{cm}$ ，模擬 10cm 處之濃度變化，此組模擬結果稱為標準解。

有限系統之解析條件：

1. 利用一虛擬土柱，全長 60cm，實驗土柱則為最上面 10cm。
2. 上邊界條件為入流溶液之濃度，下邊界條件則以零濃度梯度觀念，利用映射原理 (image) 將濃度傳出。
3. 取 $\Delta z = 1\text{cm}$ ，同樣模擬 10cm 處之濃度變化。

兩種不同邊界處理觀念的數值解運算結果列在表 1 中，表中列出不同時段土柱中間 6cm 處及底端 10cm 處之濃度變化，在小數點後三位的精度要求下，兩種方法有完全相同之模擬結果，但由表中所述的計算時間、所需記憶體大小及編譯後執行檔大小上來看，有限系統比半無限系統經濟太多。有限系統的下邊界處理方法，由於是利用映射方法將濃度傳出，此種處理會造成下邊界之誤差，在解聯立方程組時會將誤差回傳，但回傳之誤差會隨距邊界之距離加大而縮小，故太長的虛擬土柱會延長運算時間，太短則會因誤差回傳而影響精度。

表 2 中所列的結果，是在討論同樣模擬 10cm 處之濃度變化時，使用不同之演算長度對模擬值的影響，本組資料運算時採用 $\Delta z = 0.5\text{cm}$ ，意即採用比前面與半無限系統比較時更短的距離間隔。表中 30cm 演算長度之模擬結果，可與表 1 中之標準解比較，可發現 Δz 縮短時會改變初期之運算結果。當演算長度由 30cm 縮至 15cm 後，模擬之結果與 30cm 之模擬結果僅存在最大約 1% 的相對誤差，但演算長度若縮短至 10cm 時，與觀測值比較時，則發現有極大的誤差，由此證明有限系統之下邊界不可定在模擬斷面上，而須加上一小段保護層。

五、數值模擬可靠度分析

任何一種數值模擬方法皆會誤差，在缺乏解析解比較的情況下，絕對無法保證數值方法模擬結果一定正確，但不幸非線性的吸附項會令移流-延散-吸附方程式沒有解析解，因此僅能嘗試以不同的解析條件代入模式中比較其結果，再由模擬結果來判斷其可信度，雖然本研究採用之 Crank-Nicolson 差分法本身是無條件穩定，但仍可能因為各參數之不同而使模擬結果有誤差發生。

以差分式將移流-延散-吸附方程式差分式將化開時，可得如下之形式：

$$\begin{aligned} & \left(1 + \frac{\beta}{\theta} \cdot \frac{K_{ads} \cdot b}{(1 + K_{ads} \cdot C)^2}\right) \cdot (C_j^{m+1} - C_j^m) \\ &= \frac{1}{2} \cdot \frac{D \cdot \Delta t}{\Delta z^2} \cdot (C_{j-1}^{m+1} - 2 \cdot C_j^{m+1} + C_{j+1}^{m+1} \\ & \quad + C_{j-1}^m - 2 \cdot C_j^m + C_{j+1}^m) \\ & \quad - \frac{V_p}{4} \cdot \frac{\Delta t}{\Delta z} \cdot (C_{j+1}^{m+1} - C_{j-1}^{m+1} + C_{j+1}^m - C_{j-1}^m) \end{aligned}$$

在差分式各項係數中，數值最大的一項是延散項的係數 $D \Delta t / \Delta z^2$ ，令此係數叫 X，因此本研究便以此係數之大小做為比較代表值，由於 Δz 大小將影響模擬精度，而 D 又是土壤幾何延散度 λ 與孔隙流速之函數，故先選定 Δz 後，能改變的值僅有 Δt ，比較仍以前面討論所用同組資料進行模擬，模擬時各項參數及運算時間見表 3，模擬結果見圖 4，由圖中可發現除 Δt 太大時之模擬結果有右移現象外，其餘情形可得到很接近之結果，在數值上這種模擬結果右移之情形可稱為傳輸誤差 (transitional error)，由圖 5 的部分放大圖中可看出，當 $X < 10$ 以後會有很接近的模擬結果，但在計算時間上則有很大的差異，由此可知，在數值模擬時並

表 2 不同演算長度模擬 10cm 處之濃度變化比較表

時 間 (hr)	演 算 長 度				觀 測 值
	30cm	20cm	15cm	10cm	
1.0	8.798	8.798	8.798	8.798	9.50
2.0	8.993	8.993	8.993	9.129	16.58
3.0	12.884	12.884	12.884	15.532	18.05
4.0	31.665	31.665	31.665	45.313	33.15
5.0	72.946	72.946	72.947	108.018	72.60
6.0	134.359	134.359	134.365	197.028	140.80
7.0	209.664	209.664	209.692	300.594	
8.0	288.116	288.116	288.212	402.377	
9.0	367.259	367.259	367.510	498.868	501.40
10.0	442.110	442.110	442.648	584.251	
11.0	508.047	508.047	509.014	654.551	
12.0	566.116	566.117	567.656	712.549	665.90
13.0	617.108	617.110	619.345	760.270	
14.0	662.171	662.174	665.204	799.759	
15.0	701.768	701.775	705.656	832.274	730.30
16.0	736.390	736.402	741.142	858.945	
17.0	766.530	766.550	772.114	880.763	
18.0	792.747	792.779	799.096	898.616	781.50
19.0	815.657	815.704	822.680	913.298	
20.0	835.868	835.965	843.494	925.499	
22.0	869.601	869.722	877.989	944.080	
24.0	896.335	896.529	905.045	957.122	824.70
26.0	916.984	917.264	925.586	966.012	
28.0	932.323	932.688	940.507	971.839	
30.0	943.870	944.311	951.450	975.716	
31.0	948.579	949.053	955.816	977.155	
34.0	959.488	960.034	965.634	980.125	
37.0	966.858	967.433	971.940	981.797	
40.0	971.886	972.456	976.017	982.748	
44.0	976.263	976.791	979.344	983.422	
48.0	979.046	979.506	981.298	983.760	927.50
52.0	980.825	981.208	982.446	983.929	
56.0	981.954	982.263	983.114	984.013	
60.0	982.691	982.935	983.513	984.056	
64.0	983.175	983.362	983.751	984.077	
68.0	983.493	983.635	983.893	984.089	
72.0	983.705	983.810	983.979	984.095	950.00
76.0	983.846	983.921	984.030	984.097	

表 3 數值模式可靠度分析運算條件比較表

土 柱 別	Δz (cm)	Δt (hr)	$D \cdot \Delta t / \Delta z^2$	運 算 時 間
SC-A	0.5	0.05	1.1	4'08"
	0.5	0.125	2.75	1'40"
	0.5	0.25	5.5	52"
	0.5	0.5	11	27"
	0.5	2.0	44	7"

使用機器：IBM PC AT (80286-12 CPU with
80287-10 Math co-processor)
run in virtual disk on board.

運算時間：以 TM. EXE 測執行時間。
執行時間包含 IO 時間。

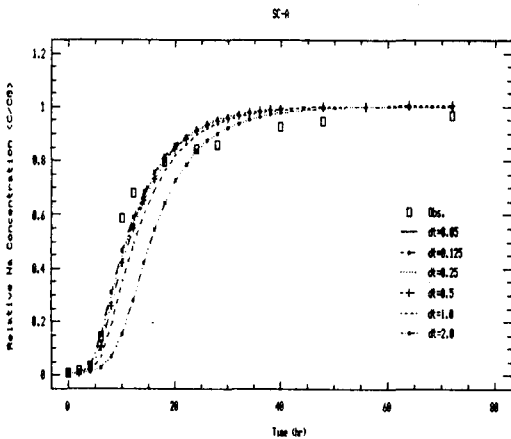


圖 4 數值模式可靠度分析結果圖 (SC-A 土柱)

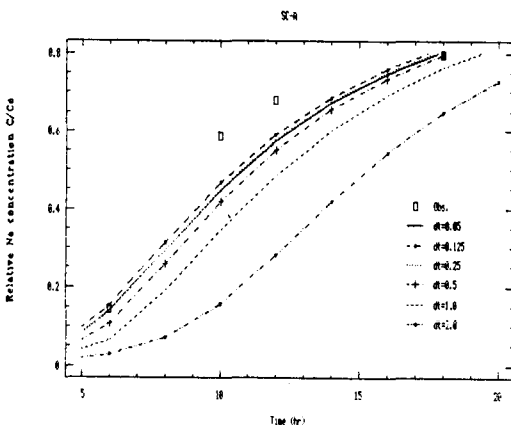


圖 5 數值模式可靠度分析結果部分放大圖 (SC-A 土柱)

不需要把時間間距取的非常小才能得到精確的結果。
在 Δt 的選擇上，只要使 $X < 15$ 即可。

六、結 論

數值方法近年來逐漸被土壤污染研究者所重用，雖然它可以解決許多過去用解析解無法處理的問題，但它也不是萬能的，仍然有其限制條件及不能使用的地方，因此在採用時，最好先了解它的適用性。在本研究中，將過去所慣用的半無限邊界處理方法，改為有限系統，如此可較快及較經濟便得到所須的答案，也使程式更適於在個人電腦上執行。過去因半無限系統的邊界條件與解析解完全相同，在比較上較為方便，但在沒有解析解的非線性模式中，仍抱持傳統採用半無限系統來處理邊界條件則嫌效率不足。

有限系統的下邊界處理方法會產生數值誤差，這誤差也會因聯立方程組的矩陣解而回傳，為避免這誤差所造成的困擾，必須在模擬斷面外再加10個斷面的長度以構成保護層，如此便可適切的模擬污染質在土壤中之傳輸。

數值模式一般須經過穩定度分析 (stability analysis) 的步驟才能確保解的可信度，但非線性模式沒有方法可以驗證其穩定度，因此僅能以試誤法 (trial and error) 找出其適宜範圍。在本研究中，以 X 為判別依據，當 $X < 15$ 時，便能得到可接受的數值解，由此在解析模擬時，有了一種明確的標準來決定 Δt 的大小，使運算時不會因 Δt 太

小而耗時，同時亦能達到一般土壤研究所須的精度。

七、參考文獻

1. 丁健原，1987，『重金屬鉻之土壤污染及其溶質吸附移動模擬研究』，臺大農工所碩士論文。
2. 林聰悟，1986，工程基本程式，新學識文教出版中心，臺北市。
3. 劉建民，1988，『酚在飽和及非飽和砂質壤土中傳輸模式之研究』，臺大農工所碩士論文。
4. Fisher, B. H. et al., 1979, *Mixing in Inland and Coastal Waters*, Academic Press, Inc. London, U.K.
5. Gerald, I. C. and P. O. Wheatley, 1984, *Applied Numerical Analysis*, 3rd Edition, Appism-Wesley Mass, U.S.A.
6. Levenspiel, O., 1972, *Chemical Reaction Engineering*, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Inc. New York, U.S.A.
7. Liggett, J. A. and P. L-F. Liu, 1983, *The Boundary Integral Equation Method*

- for Porous Media Flow*, George Allen & Unwin (Publishers) Ltd. London, U.K.
8. Muraly, V. and L. A. G. Aylmore, 1981, "A convective-dispersive-adsorptive flow model for solution transport in soil. I Model description and some simulations", *Aust. J. Soil Res.* 19:23-29.
 9. Selim, H. M. and R. S. Mansell, 1976, "Analytical solution of the equation for transport of reactive solutes through soils", *Water Resour. Res.* 12(3): 523~528.
 10. van Genuchten, M. Th. and J. C. Parker, 1984, Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns", *Soil Sci. Soc. Am. J.* 48:703~708.

收稿日期：民國78年11月18日

修正日期：民國79年2月13日

接受日期：民國79年2月21日

專營土木、水利、建築等工程

貴福企業有限公司

負責人：蔡建豐

地址：新竹市綠水里光復路二段365號

電話：(037)821581

專營土木、水利、建築等工程

中埔混凝土股份有限公司

負責人：蔡金田

地址：苗栗縣三義鄉鯉魚村90號

電話：(037)872551

專營土木、水利、建築等工程

吉鴻土木包工業

負責人：劉信吉 地址：高雄縣大寮鄉琉球村農場路10號

專營土木、水利、建築等工程

恒勝土木包工業

地址：宜蘭礁溪鄉吳沙村北門巷49號

電話：(039)326081