



國立臺灣大學生物資源暨農學院生物環境系統工程學研究所

碩士論文

Department of Bioenvironmental Systems Engineering

College of Bioresources and Agriculture

National Taiwan University

Master Thesis

具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解模式發展及現地應用

Development and field application of analytical model for two-dimensional multispecies transport involving multiple internal sources

許時凱

Shih-Kai Hsu

指導教授：劉振宇 博士、陳瑞昇 博士

Advisor: Chen-Wuing Liu, Ph.D. 、Jui-Sheng Chen, Ph.D.

中華民國 105 年 7 月

July, 2016

## 誌謝



兩年的碩士生涯即將畫下尾聲，在這段時間學習到很多知識，也認識了很多  
人，並受到許多人幫助，使本論文能夠順利完成，並感謝所有幫助過我的貴人。

首先特別感謝指導教授劉振宇老師，提供豐富的資源與研究環境，並細心指導與  
協助修改論文。感謝共同指導教授陳瑞昇老師的指導與幫助，使我能夠順利地在  
中央大學完成我的論文研究。

此外也特別感謝口試委員陳世楷老師，大學時期即受到老師很多幫助，並給  
予日後研究生活許多方向與建議。感謝口試委員張誠信老師提供論文上寶貴的建  
議與指正。首先感謝台大研究室的大家，感謝學姊高雨瑄博士在台大研究生活的  
所有幫助，熱心提供我很多研究方向與資源。感謝范致豪老師每次 Meeting 上的  
指導，感謝卓姐在行政事務上的協助，感謝學長蔡政諺博士的關心與幫助，感謝  
庭祐在研究生涯的鼓勵與陪伴，感謝學長宗男、學弟振佑。

感謝中央大學污染傳輸研究室的各位，讓我在中央的研究生活感受到像家人  
一樣的溫暖，感謝學長賴庚辛博士在解析解模式上的指導與相關建議，感謝學姊  
慶芳、秉叡、懷恩、思燕、爽德及虛子，謝謝你們豐富我的研究生活。感謝北科  
研究室的大家，使我在研究生活遇到挫折能夠更加堅強，感謝學長誠斌在論文上  
的提攜，感謝狗任與致恆。

感謝大學好友智豪、重諺、寶賢及翊群，感謝高中好友峻毅，研究生活總是  
互相給對方打氣。最後我要感謝我阿婆、阿公、爸爸與媽媽的幫助與體諒，感謝  
哥哥時倫研究生涯的關心與幫助。一路走來受過太多人的幫助與鼓勵，要感謝的  
人太多了，不及備載，在此一併致上謝意。

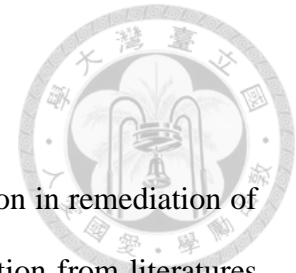
## 摘要



在現地污染整治上常見場址內有多處污染源長期釋出的情況，然而前人發展之移流—延散方程式多為邊界源(boundary source)溶質傳輸解析解，在模擬現地場址污染問題時容易受到限制且較難廣泛應用。而考慮內部源(inner source)之溶質傳輸解析解模式可模擬流場任意位置污染源注入情形。且過去發展之單物種傳輸模式，無法模擬序列降解下多物種的衰減與傳輸情形。本研究發展具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解模式，並考慮移流、延散、線性平衡吸附和一階衰減情況，以描述溶質在二維孔隙介質中的傳輸行為，模式亦可應用在模擬放射性核種衰變鏈、氮氣及含氯有機物之降解過程。解析解推導依續使用 Laplace 轉換、finite Fourier cosine 轉換及廣義型積分轉換消去時間及空間微分項，將偏微分方程式轉換為代數方程式進行求解，再利用一系列逆轉換求得原域之解析解。本研究發展之解析解與有限差分(Finite difference method)數值方法進行驗證，結果顯示兩者相當吻合，確定發展模式之正確性。模式應用在 Dover 空軍基地第六區，模擬含氯有機溶劑污染場址 PCE 及 TCE 污染團分別在在 10 年、20 年、30 年及 40 年情境之分布與擴散情形，並與現地場址數據做比較，闡述模式的適用性。本研究可了解含氯有機物序列降解上多物種污染物傳輸行為，且作為現地場址初步評估污染整治的基礎。

關鍵字：內部源、邊界源、污染傳輸、二維多物種、解析解、現地應用

## Abstract



The long term releases of multiple sources are common situation in remediation of contaminated site. However, most of the advective-dispersive equation from literatures are analytical model for solute transport developed only for boundary source, which could be limited to simulate the transport of contaminant for field-scale site. Considering the analytical model for solute transport of inner source could simulate any position for the contaminant sources injection. The analytical model for single-species solute transport could not simulate the decay and transport of multispecies in the condition of sequential decay chain. This study presents an multiple sources analytical model for two-dimensional multi-species advective-dispersive equation which considered linear equilibrium sorption and first order decay reaction. The model could also be applied in predicting the behavior of decaying contaminant such as radionuclide, nitrogen transformation and dissolved chlorinated solvent. Generalized analytical solutions are derived through the sequential application of the Laplace, finite Fourier cosine and generalized integral transform to remove the temporal and spatial derivatives in the coupled partial differential equation. The system of coupled partial differential equation is transform to a set of linear algebraic equations, and the solutions in the original domain are then obtained through consecutive integral transform inversions. The developed analytical solution is tested by comparing their results against the numerical solutions using a finite difference scheme. Results show perfect agreements between the analytical and numerical solutions. The developed model was applied to analyze field-scale transport and biodegradation processes occurring at the Area-6 site in Dover Air Force Base, and predict the distribution of PCE and TCE plumes in different scenario (10 years, 20 years, 30 years and 40 years). The developed model in this study is a useful tool for simulation sequential decay reactions between multispecies, and a foundation of a

preliminary assessment to the remediation of the field site.

Keyword: Inner Source, Boundary Source, Contaminant Transport, Two-dimensional  
Multi-species, Analytical Solution, Field Application



# 目錄



謝誌.....	i
摘要.....	ii
Abstract.....	iii
目錄.....	v
表目錄.....	vii
圖目錄.....	viii
符號表.....	ix
第一章 前言.....	1
1-1 研究背景.....	1
1-2 研究目的.....	2
第二章 文獻回顧.....	3
2-1 多物種解析解模式發展.....	3
2-2 具內部源解析解模式發展.....	5
2-3 模式現地應用.....	5
第三章 二維多物種溶質傳輸解析解數學模式.....	8
3-1 數學模式建立.....	8
3-2 解析解推導.....	13
第四章 模式收斂性測試與驗證.....	24
4-1 收斂性測試.....	24
4-2 模式驗證.....	34
第五章 模式現地場址應用.....	41
5-1 現地場址應用.....	41
5-1-1 背景介紹.....	41
5-1-2 污染物種類及分布.....	42

5-1-3 模式現地場址應用 .....	42
5-2 結果與討論 .....	42
5-3 各模式之比較 .....	44
第六章 結論與建議 .....	55
6-1 結論 .....	55
6-2 建議 .....	56
參考文獻 .....	57
附錄 .....	62



## 表目錄



表 3-1 源/匯項函數與對應之 Heaviside 函數.....	10
表 4-1 數值收斂性測試所輸入之參數設定.....	27
表 4-2 四物種在 $Pe=10$ 時，不同累加項數 $l$ 的收斂情況.....	28
表 4-3 四物種在 $Pe=10$ 時，不同累加項數 $n$ 的收斂情況.....	29
表 4-4 四物種在 $Pe=25$ 時，不同累加項數 $l$ 的收斂情況.....	30
表 4-5 四物種在 $Pe=25$ 時，不同累加項數 $n$ 的收斂情況.....	31
表 4-6 四物種在 $Pe=50$ 時，不同累加項數 $l$ 的收斂情況.....	32
表 4-7 四物種在 $Pe=50$ 時，不同累加項數 $n$ 的收斂情況.....	33
表 5-1 Dover 空軍基地現地參數(From: Clement et al. 2000).....	48
表 5-2 Dover site 污染源預估質量釋出率， $\dot{m}$ (kg/year).....	48



## 圖目錄



圖 3-1 二維有限域溶質傳輸概念模型.....	11
圖 3-2 具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解推導流程.....	12
圖 4-1 內部源收斂性測試概念化模型.....	26
圖 4-2 內部源模式驗證之概念模型.....	36
圖 4-3 物種一解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形.....	36
圖 4-4 物種二解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形.....	37
圖 4-5 物種三解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形.....	37
圖 4-6 物種四解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形.....	38
圖 4-7 PCE 之解析解與數值解濃度分布情形.....	38
圖 4-8 TCE 之解析解與數值解濃度分布情形.....	39
圖 4-9 DCE 之解析解與數值解濃度分布情形.....	39
圖 4-10 VC 之解析解與數值解濃度分布情形.....	40
圖 5-1 Dover site 場址示意圖(From: Clement et al. 2000) .....	46
圖 5-2 Dover site 地下水位等高線圖(單位=ft)(From: Clement et al. 2000).....	46
圖 5-3 Dover site 概念化流場模型.....	47
圖 5-4 本研究發展模式模擬 $t=10$ years 的 PCE 濃度分布.....	49
圖 5-5 本研究發展模式模擬 $t=20$ years 的 PCE 濃度分布.....	49
圖 5-6 本研究發展模式模擬 $t=30$ years 的 PCE 濃度分布.....	49
圖 5-7 本研究發展模式模擬 $t=40$ years 的 PCE 濃度分布.....	50
圖 5-8 現地數據模擬 $t=40$ years 的 PCE 濃度分布.....	50
圖 5-9 現地數據與本研究發展模式在 40 years PCE 濃度分布為 200 $\mu\text{g/L}$ 比較....	50
圖 5-10 本研究發展模式模擬 $t=10$ years 的 TCE 濃度分布.....	51
圖 5-11 本研究發展模式模擬 $t=20$ years 的 TCE 濃度分布.....	51
圖 5-12 本研究發展模式模擬 $t=30$ years 的 TCE 濃度分布.....	51

圖 5-13 本研究發展模式模擬 $t=40$ years 的 TCE 濃度分布.....	52
圖 5-14 現地數據模擬 $t=40$ years 的 TCE 濃度分布.....	52
圖 5-15 現地數據與本研究發展模式在 40 years TCE 濃度分布為 $1000\ \mu\text{g/L}$ 比較..	52
圖 5-16 本研究發展之模式與現地數據之 PCE 濃度分佈比較.....	53
圖 5-16 RT3D 與現地數據之 PCE 濃度分佈比較.....	53
圖 5-16 MIKSS 與現地數據之 PCE 濃度分佈比較.....	53
圖 5-16 本研究發展之模式與現地數據之 TCE 濃度分佈比較.....	54
圖 5-16 RT3D 與現地數據之 TCE 濃度分佈比較.....	54
圖 5-16 MIKSS 與現地數據之 TCE 濃度分佈比較.....	54

## 符號說明



符號	說明	因次
$C_i(x,y,t)$	物種 $i$ 溶質濃度	$[ML^{-3}]$
$G_i(X,Y,s)$	物種 $i$ Laplace 轉換後的濃度	$[ML^{-3}]$
$H_i(X,n,s)$	物種 $i$ finite Fourier cosine 轉換後的濃度	$[ML^{-3}]$
$U_i(X,n,s)$	物種 $i$ 變數變換後的濃度	$[ML^{-3}]$
$Z_i(\zeta_l,n,s)$	物種 $i$ 廣義型積分轉換後的濃度	$[ML^{-3}]$
$B_i$	物種 $i$ 連續注入之溶質濃度	$[ML^{-3}]$
$D_L$	縱向延散係數	$[L^2T^{-1}]$
$D_T$	側向延散係數	$[L^2T^{-1}]$
$L$	介質長度	$[L]$
$W$	介質寬度	$[L]$
$v$	地下水流速度	$[LT^{-1}]$
$Pe$	Peclet number	$[-]$
$x$	空間座標	$[L]$
$y$	空間座標	$[L]$
$t$	時間	$[T]$
$R_i$	物種 $i$ 的遲滯因子	$[-]$
$k_i$	物種 $i$ 的一階衰減常數	$[T^{-1}]$
$S_i$	物種 $i$ 源/匯項濃度強度參數	$[-]$
$p_{x,i}(x)$	物種 $i$ 源/匯項空間變化函數	
$P_{y,i}(x)$	物種 $i$ 源/匯項空間變化函數	
$q_{i,i}(t)$	物種 $i$ 源/匯項時間變化函數	
$\zeta_l$	特徵函數	

$K(\xi_l, X)$

正規化特徵函數

$N(\xi_l)$

範數

$Q_i(s)$

物種  $i$  Lapace 轉換後源/匯項時間變化函數

$P_{y,i}(n)$

物種  $i$  finite Fourier cosine 轉換後源/匯項空間變化函數

$P_{x,i}(\xi_l)$

物種  $i$  廣義型積分轉換後源/匯項空間變化函數



# 第一章 前言



## 1-1 研究背景

近年來台灣工業迅速發展，工業製程產生的廢棄物若未經妥善處理或非法棄置容易造成環境污染，其中污染物若處置不當或隨雨水滲漏至地表下，將會對土壤與地下水系統造成嚴重污染，並進一步威脅生態系統或人民生命安全，故污染場址的管制與整治工作相當重要。我國於民國八十九年公告施行「土壤及地下水污染整治法」針對有土壤、地下水污染之虞地區優先檢測，進行相關水文地質參數調查，並依照調查結果訂定污染整治計畫。

為了預測污染物在地下水系統中的傳輸與宿命，我們常用污染物傳輸模式進行模擬，而污染傳輸模式的建立通常採用移流－延散方程式，其中移流與延散傳輸為污染物在地下水系統中主要機制，移流主要描述污染物隨地下水流移動，而溶質在地下水系統中會受到孔隙異質性影響導致水流速度與水流路徑差異，故加入延散觀念來描述溶質在地下水系統中的分散現象。

在處理現地污染整治問題時，常見場址內有多處多物種污染源釋出情況，而前人發展之溶質傳輸解析解多為邊界源(boundary source)注入，在模擬現地場址污染問題時容易受到限制且較難廣泛應用，考慮內部源(inner source)注入之溶質傳輸模式可模擬流場任意位置污染源注入情形。且過去發展之單物種傳輸模式，無法模擬序列降解下多物種的衰減與傳輸情形。為了模擬及預測現地場址多物種污染團的傳輸與分布情形，以作為土壤與地下水污染整治之基礎，本研究發展多內部源二維多物種溶質傳輸解析解。

本研究選擇 Clement et al. (2000)之 Dover 空軍基地污染場址作為模式發展與應用之案例，場址由於過去各種軍事作業產生的廢棄物或污染物滲漏，造成土壤及地下水遭受含氯有機溶劑嚴重污染。本研究應用發展的模式模擬污染場址內四氯乙烯(PCE)及三氯乙烯(TCE)污染團之傳輸與分布情形，並與現地數據作比較，闡明發展解析解模式的適用性。

## 1-2 研究目的

現地污染場址通常為場址內有多處污染源注入情形，前人研究大多著重在發展邊界源溶質傳輸模式，在處理現地場址污染問題時容易受到限制且較難廣泛應用，考慮內部源注入之溶質傳輸模式，可模擬流場任意位置污染源注入情形。本研究考慮序列降解下多物種溶質傳輸反應，發展多內部源二維多物種溶質傳輸解析解模式，依序利用 Laplace 轉換、finite Fourier cosine 轉換及廣義型積分轉換移除時間及空間之偏微分項，再進行一系列逆轉換及代數運算求得二維多物種解析解通解，模式可模擬任意數目污染源注入情況，及序列降解鏈下各種污染物衰減過程，如放射性核種衰變鏈、氨氮轉換及含氯有機物自然衰減過程，進一步了解多物種污染團的衰減與傳輸情形。推導之解析解模式進行收斂性測試，並與數值模式進行驗證，以確認解析解的正確性。為了測試發展之模式於現地場址的適用性，本研究利用過去文獻含氯有機污染場址之相關參數與現地數據進行模擬，預測 PCE 及 TCE 污染團濃度分布情形，並與現地濃度分布數據作比較，希望所發展的解析解能夠應用在現地場址的整治與調查上。

## 第二章 文獻回顧



為了評估孔隙介質中污染物的傳輸與宿命，各種溶質傳輸解析解模式和數值模式相繼發展，而解析解模式可以了解土壤與地下水中污染物之行為與溶質傳輸機制外，亦可作為數值模式評估的有效工具(Pérez, 2010；田傑仁, 2013)，此外，土壤與地下水污染整治的後續評估工作亦顯重要，故溶質傳輸模式在現地應用的模擬與預測工作上扮演一個重要的角色。本研究旨在發展一套有效的多內部源二維多物種溶質傳輸模式，並將模式應用在分析現地場址的整治評估上。

### 2-1 多物種解析解模式發展

過去數十年，溶質傳輸解析解問題已被廣泛研究與討論，Van Genuchten et al. (1982)發展一維移流－延散方程式，其方程式描述一維空間座標下單物種溶質傳輸問題，並考慮線性平衡吸附與一階降解反應，推導不同控制方程式與邊界條件下之解析解。

Batu (1989)利用 Laplace 轉換與 Fourier analysis 推導二維單物種解析解，其解考慮縱向與側向延散、放射性衰減反應與線性平衡吸附，並與有限元素法之數值解比較驗證，結果十分吻合。

上述研究發展不同溶質傳輸問題的解析解，但僅限於模擬單物種溶質傳輸現象。相對於單物種溶質傳輸模式，在討論放射性核種衰變鏈、氮氮與含氯有機物之降解問題時，多物種溶質傳輸模式扮演極重要的角色，但其解析解發展較單物種溶質傳輸問題來的困難且相對稀少。

Cho (1971)利用 Laplace transform 推導一維無窮遠下多物種溶質傳輸問題之解析解，其解考慮依序一階降解反應下三物種傳輸模式，模擬地下水系統中氮氮的傳輸與宿命。Van Genuchten (1985)利用 Laplace transform 推導一維無窮遠下四物種降解反應，並模擬放射性核種衰變鏈與氮氮轉化過程。Lunn et al. (1996)利用有限 Fourier transform 推導 Cho (1971)之解析解。Chen et al. (2011)提出利用 Laplace 轉

換和廣義型積分轉換依序求解時間域和空間域偏微分方程式之新方法，發展有限域下四物種解析解。這些利用 Laplace transform、finite Fourier transform 或廣義型積分轉換推導多物種解析解方法大多受限於求解一維系統。

Sun and Clement (1999)與 Sun et al. (1999)發展通用方法求解多維多物種依序降解反應，其方法可求解任意數目物種之解析解，但轉換方法只能適用於所有物種遲滯係數相同時。Bauer et al. (2001)利用 Laplace transform 提出求解不同遲滯係數下多物種移流－延散方程式方法，此方法利用遞迴公式將單物種基礎解擴展至更複雜的多物種解，並可應用在二維及三維系統。

但上述方法需對各別物種依序求解其解析解，在處理不同數目物種問題時需要重新推導解析解，在應用上缺乏適用性。Clement (2001)發展任意數目物種解析解通解，此方法可應用在一階降解反應下一維、二維及三維系統，在求解多物種溶質傳輸問題上有更大的適用性，但其在計算上受限於需假設所有物種遲滯係數相同。

Quezada et al. (2004)延伸 Clement (2001)所提出的方法，利用 Laplace 轉換及線性轉換法求解偏微分方程式，推導不同遲滯係數下多維多物種解析解通解，但其考慮出流邊界為無窮遠。

然而上述研究多假設出流邊界為無窮遠，此假設較不符合實際狀況，Parlange and Starr (1984)、Parlange et al. (1985)、Parlange et al., (1992)提出在延散作用主導的傳輸情形下，出流邊界條件為無窮遠情況對溶質傳輸有極大影響。Pérez Guerrero et al., (2009)亦提出污染傳輸模式在進行的數值模擬時，通常考慮為有限邊界，Chen et al., (2011)也發現在出流邊界為無限遠時會低估污染物濃度，因此本研究考慮出流邊界條件為有限長度情況。

Chen et al. (2016)為了預測多物種污染團的傳輸與分布情形，延伸 Chen et al. (2011)的研究，並依序利用 Laplace 轉換、finite Fourier cosine 轉換及廣義型積分轉換對時間及空間偏微分項進行轉換，發展二維多物種解析解模式。並將其應用在模



擬放射性核種衰變鏈與含氯有機污染團的傳輸。



## 2-2 具內部源解析解模式發展

Batu (1993)利用 Fourier analysis 和 Laplace 轉換求得均勻流場下多邊界源注入模式，邊界源考慮隨時間及空間變換之函數，模式可模擬隨時間及位置變換之污染源注入，但其考慮污染源為邊界源注入，無法模擬場址內任意位置污染源釋出情形。

V. Srinivasan et al. (2007)利用 Laplace 轉換和線性轉換方法導出一維多物種 closed-form 解析解，並各別推導隨空間變化之 Bateman-type 初始條件下邊界條件分別為 Dirichlet 和 Cauchy 之解析解。然而其控制方程式不考慮源/匯項，故無法模擬內部源注入情形。

上述研究多著重在發展邊界源溶質傳輸解析解，然而邊界源注入模式無法模擬現地場址任意位置之污染源注入情形。考慮內部源注入之溶質傳輸模式，可模擬現地多處污染源釋出情況，對現地場址的整治評估工作有很大的幫助。

Park et al. (2001)考慮有限厚度含水層，利用 Green's function 方法求得具內部源之三維溶質傳輸解析解，並分別考慮點、線及面注入情形，惟其發展之單物種模式，無法模擬現地場址多物種溶質衰減情形。

Pérez Guerrero et al., (2009)考慮出流邊界為有限長度，利用廣義型積分轉換求得具源/匯項之三維解析解，其源/匯項可模擬隨時間及空間變化的內部源，分別考慮穩態及暫態下的溶質傳輸機制，但所發展的之單物種解析解模式亦無法模擬序列降解下的傳輸行為。

上述研究在發展具內部源注入之單物種溶質傳輸模式，無法模擬多物種溶質序列降解下的傳輸機制，在使用上有許多限制，本研究欲發展具多內部源之二維多物種溶質傳輸模式，模擬現地場址多物種污染團衰減與傳輸行為。

## 2-3 模式現地應用

工業發展產生的廢棄物若處置不當容易造成土壤與地下水污染，而地表下污

染物的傳輸與宿命會受到孔隙介質中物理、化學及生物反應間交互作用影響，為了模擬污染整治情形並建立污染場址相關風險評估，現地場址的模擬與相關模式發展與應用非常重要。

Rifai et al. (1987)發展一個二維生物整治數值模式 BIOPLUME-II 模擬厭氧生物降解反應下碳氫污染物的傳輸與宿命，且 Rifai et al. (1988); Chiang et al. (1989) 利用 BIOPLUME-II 模擬各種碳氫燃料場址的厭氧生物整治方法及其他污染物降解機制。

Essaid et al. (1995)發展二維多物種反應傳輸模式 BIOMOC 模擬原油洩漏場址自然生物衰減過程。BIOMOC 可模擬好氧反應下揮發性與非揮發性有機溶劑衰減、錳還原、鐵還原及甲烷生成反應，並應用模式研究明尼蘇達州 Bemidji 原油洩漏場址現地傳輸及衰減過程。

Clement (1997)與 Clement et al. (1998)發展多物種反應傳輸模式 RT3D 模擬地下水系統中生物整治情境。不同於其他的生物整治模式通常只能解特定種類污染傳輸問題，RT3D 為通用反應傳輸模式可模擬任意種類與任意數目在生物化學反應下溶質傳輸方程式。例如 Lu et al. (1999)利用 RT3D 模擬好氧及連續厭氧環境下碳氫化合物污染團降解及傳輸之反應方程式。Sun et al. (1998)利用 RT3D 模擬碳氫化合物在細菌生長下降解的多物種傳輸模式。Clement et al. (1998)利用 RT3D 發展四物種依序降解模式，並模擬含氯有機溶劑如 PCE 及 TCE 在厭氧反應下的自然衰減過程。

針對現地場址污染整治，美國環保署亦推廣一些解析解模式，模擬現地污染物自染衰減過程，例如 BIOSCREEN (Newell et al., 1996)及 BIOCHLOR (Aziz et al., 2000)，其中 BIOSCREEN 可模擬因石油洩漏而造成碳氫化合物污染場址中自然衰減的過程，而 BIOCHLOR 可模擬受含氯有機物污染場址之自然衰減現象。Clement et al. (2002)利用 BIOCHLOR 模擬含氯有機污染物降解過程，並評估監測式自然衰減於 Superfund site 的可行性。

上述二種解析模式 BIOSCREEN 及 BIOCHLOR 均假設入流邊界為第一類邊界條件。由於入流邊界為第一類邊界條件，相較於第三類邊界條件通常會高估濃度 (Parker and van Genuchten, 1984; Parlange et al., 1985)，故本研究採用第三類邊界條件作為入流邊界發展解析解。

Clement et al. (2000) 為了分析含氯有機污染場址自然降解過程，發展一個多維多物種反應傳輸模式，該模式可模擬多物種同時進行的衰減過程，包含好氧及厭氧生物降解過程。模式應用在分析德拉瓦州 Dover 空軍基地現地污染傳輸和生物降解過程，並利用現地資料校正，校正後之模式不僅可驗證地下水流況，亦可重建 PCE、TCE、DCE、VC 及含氯污染團觀測分布。

Atteia et al. (2008) 分別利用發展之半解析解模式 MIKSS 與 RT3D 模擬 Dover 空軍基地污染團濃度分布與相關降解反應，結果顯示兩模式的濃度分布圖形相當吻合，並利用現地 PCE 及 TCE 同位素資料驗證模式。

本研究延伸 Chen et al. (2016) 之方法發展具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解模式，為了模擬真實場址內各物種內部污染源情況，本研究改良並加入源/匯項情形(涂佑霖, 2015)，考慮不同遲滯係數、線性吸附、一階降解反應。模式配套文獻之含氯有機污染場址現地資料(Clement et al. 2000)，預測 PCE 及 TCE 污染團在各種情境的濃度分布，並與現地數據比較，以說明模式的適用性。

## 第三章 二維多物種溶質傳輸解析解數學模式



### 3-1 數學模式建立

溶質在土壤與地下水系統中的濃度與分布，會受到溶質種類、地表下物理、化學特性及生物種類間的交互作用影響。一般而言，會造成溶質分散的機制由延散和擴散控制，但在地下水問題中由於擴散係數遠小於延散係數（擴散係數介於  $1\sim 2\times 10^{-9}\text{m}^2/\text{sec}$  遠小於延散係數），因此在計算時分子擴散常被忽略。故討論污染傳輸問題時須考慮以下機制：

- (1)移流：溶質在孔隙介質中隨水流移動地行為，其中孔隙水流速度遵循達西定律 (Darcy's law)。
- (2)延散：由於孔隙介質在微觀尺度下的異質性，造成溶質在孔隙水流中的流徑及流速不同，因此採用延散的觀念來描述達西定律的不足，並假設延散作用遵守 Fick's law 的型式。
- (3)吸附：溶質和孔隙介質表面結合的現象稱之為吸附。
- (4)生物降解：土壤與地下水系統中的微生物會對特定污染物進行自然分解，將污染物轉化成毒害較小的物質。

根據上述機制及假設，發展具內部源二維多物種溶質傳輸解析解。假設溶質傳輸在二維等向、均質流場，且地下水流為平行  $x$  軸之穩態均勻 (steady uniform) 流場，建立一個序列降解之聯立控制方程組，方程式加入源/匯項以模擬流場內部源注入情形，並設定初始與邊界條件。其二維有限域溶質傳輸概念模型見圖 3-1。

為求出聯立控制方程組之解析解，首先將控制方程式及初始與邊界條件無因次化，接著依序進行 Laplace 轉換、有限 Fourier cosine 轉換及廣義型積分轉換移除時間及空間之偏微分項，最後透過一系列逆轉換求得原域之解析解，二維多物種溶質傳輸解析解流程見圖 3-2，考慮線性平衡吸附及一階降解反應之序列降解二維控制方程式及初始與邊界條件如下：



控制方程式：

$$D_L \frac{\partial^2 C_1(x, y, t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_1(x, y, t)}{\partial x} + D_T \frac{\partial^2 C_1(x, y, t)}{\partial y^2} - k_1 R_1 C_1(x, y, t) + \sum_{m=1}^{NS} S_1^m p_{x,1}^m(x) p_{y,1}^m(y) q_1^m(t) = R_1 \frac{\partial C_1(x, y, t)}{\partial t} \quad (3-1)$$

$$D_L \frac{\partial^2 C_i(x, y, t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_i(x, y, t)}{\partial x} + D_T \frac{\partial^2 C_i(x, y, t)}{\partial y^2} - k_i R_i C_i(x, y, t) + k_{i-1} R_{i-1} C_{i-1}(x, y, t) + \sum_{m=1}^{NS} S_i^m p_{x,i}^m(x) p_{y,i}^m(y) q_i^m(t) = R_i \frac{\partial C_i(x, y, t)}{\partial t} \quad (3-2)$$

$$i = 2 \dots N$$

此處  $C_i(x, y, t)$  表示物種  $i$  在孔隙介質中的濃度  $[ML^{-3}]$ ； $D_L$  與  $D_T$  分別代表縱向與側向的延散係數  $[L^2T^{-1}]$ ； $x$  與  $y$  為空間座標  $[L]$ ； $t$  為時間  $[T]$ ； $v$  為孔隙水流速度  $[LT^{-1}]$ ； $k_i$  表示物種  $i$  的一階衰減常數  $[T^{-1}]$ ； $R_i$  為物種  $i$  的遲滯因子  $[-]$ ；

$\sum_{m=1}^{NS} S_i^m p_{x,i}^m(x) p_{y,i}^m(y) q_i^m(t)$  為控制方程式之源/匯項  $[ML^{-3}]$ ，其中  $NS$  為內部源數

目； $S_i^m$  為內部源  $m$  物種  $i$  濃度強度參數  $[-]$ ， $p_{x,i}^m(x)$  與  $p_{y,i}^m(y)$  代表內部源  $m$  物種

$i$  隨空間變化的函數， $q_i^m(t)$  代表內部源  $m$  物種  $i$  隨時間變化的函數。

初始條件：

假設實驗進行前，孔隙介質中無任何溶質存在，則初始狀態可表示為

$$C_i(x, y, t = 0) = 0 \quad (3-3)$$

邊界條件：

入流處考慮為第三類邊界條件以滿足質量守恆，並假設  $y$  方向注入邊界為  $y_1$  到

$y_2$ ，其中  $B_i$  為物種  $i$  之注入濃度， $H$  為 Heaviside 函數用以表示空間段注入情形。

則入流處之邊界條件可表示為



$$-D_L \frac{\partial C_i(x=0, y, t)}{\partial x} + v C_i(x=0, y, t) = v B_i [H(y - y_1) - H(y - y_2)] \quad (3-4)$$

$i = 1 \dots N$

考慮  $x$  方向出流處邊界濃度梯度變化為零，表示為

$$\frac{\partial C_i(x=L, y, t)}{\partial x} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-5)$$

考慮  $y$  方向上、下邊界濃度梯度變化為零，表示為

$$\frac{\partial C_i(x, y=0, t)}{\partial y} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-6)$$

$$\frac{\partial C_i(x, y=W, t)}{\partial y} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-7)$$

控制方程式(3-1)及(3-2)中，加入源/匯項  $S_i^m p_{x,i}^m(x) p_{y,i}^m(y) q_i^m(t)$  以模擬現地應用情況，場址某空間座標上污染源隨時間持續或週期排放的現象，其中  $p_{x,i}^m(x)$  及  $p_{y,i}^m(y)$  代表隨空間方向  $x$  及  $y$  變化之函數，分別以  $H(x - x_{p1}^m) - H(x - x_{p2}^m)$  及  $H(y - y_{p1}^m) - H(y - y_{p2}^m)$  表示  $x$  方向上  $x_{p1}^m \leq x \leq x_{p2}^m$  及  $y$  方向上  $y_{p1}^m \leq y \leq y_{p2}^m$  區域段所圍成之矩形區域有源項之濃度釋放， $q_i^m(t)$  表示隨時間  $t$  變化之函數，以  $H(t) - H(t - t_q^m)$  表示週期為  $0 \leq t \leq t_q^m$  之源項釋放情況，如表 3-1 所示。

表 3-1 源/匯項函數與對應之 Heaviside 函數

源/匯項函數	對應之 Heaviside 函數
$p_{x,i}^m(x)$	$H(x - x_{p1}^m) - H(x - x_{p2}^m)$
$p_{y,i}^m(y)$	$H(y - y_{p1}^m) - H(y - y_{p2}^m)$
$q_i^m(t)$	$H(t) - H(t - t_q^m)$

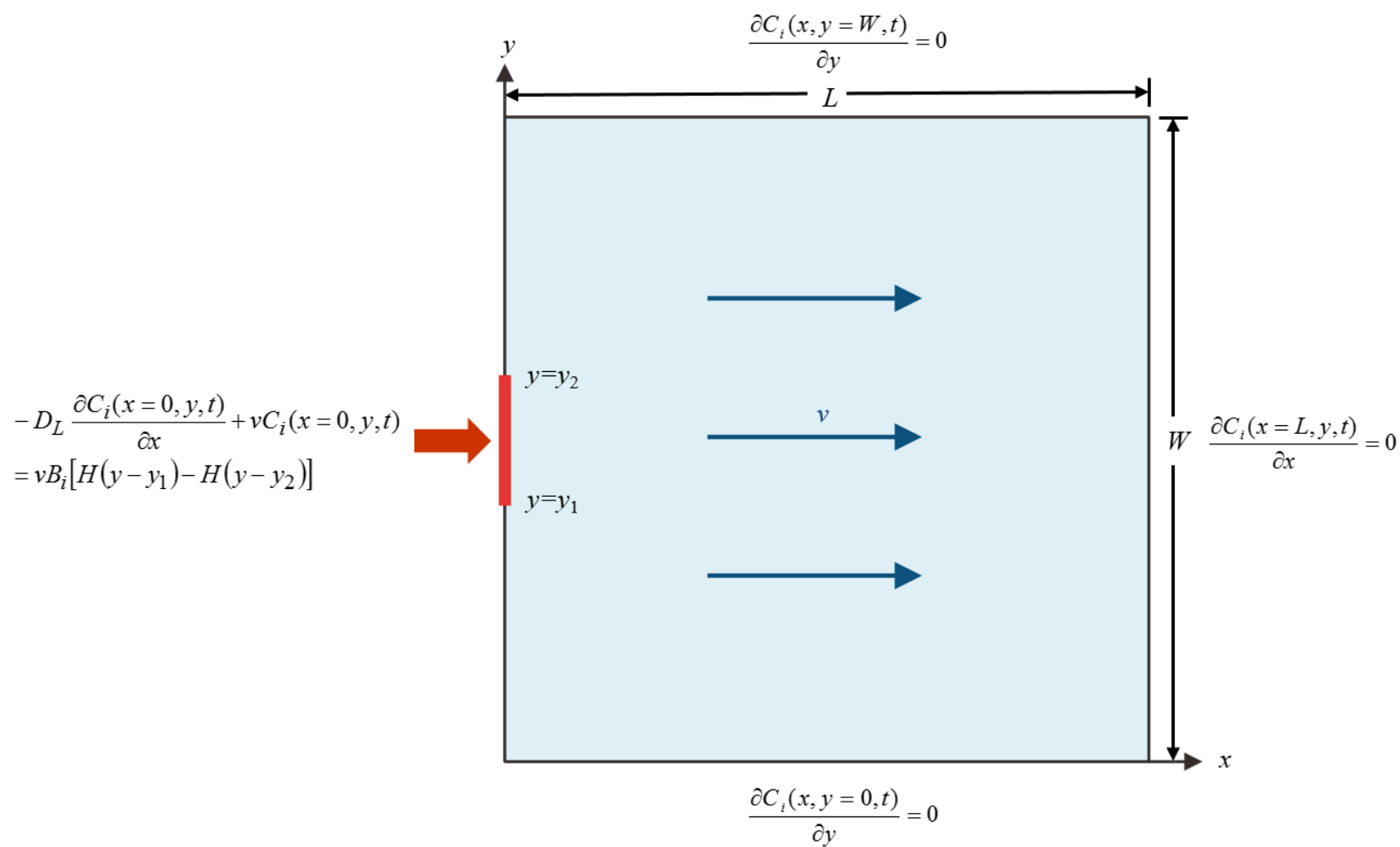


圖 3-1 二維有限域溶質傳輸概念模型

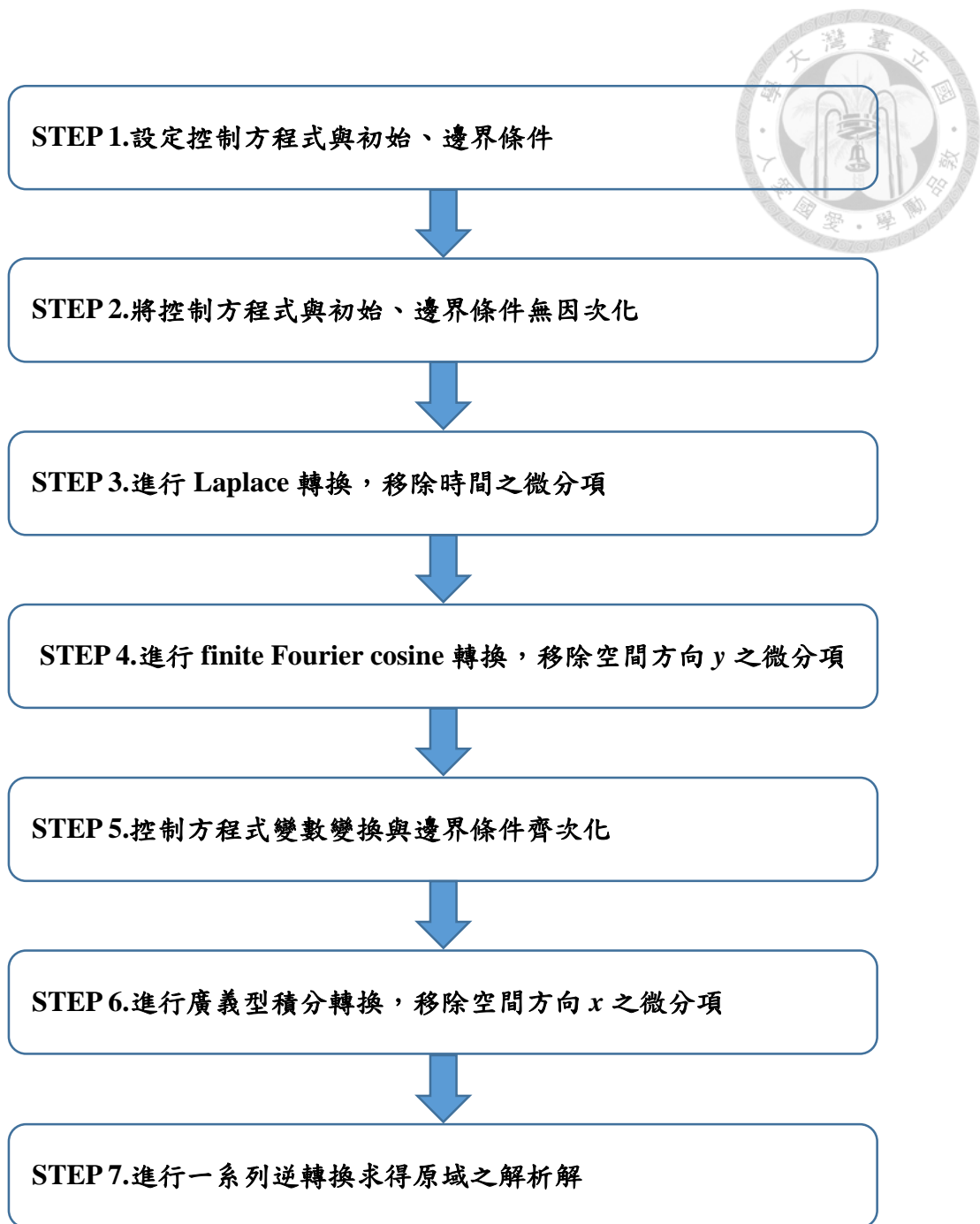


圖 3-2 具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解推導流程





### 3-2 解析解推導

#### STEP 1. 設定控制方程式與初始、邊界條件

本研究為發展二維多物種解析解模式，考慮控制方程式、初始及邊界條件如下：

$$D_L \frac{\partial^2 C_1(x, y, t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_1(x, y, t)}{\partial x} + D_T \frac{\partial^2 C_1(x, y, t)}{\partial y^2} - k_1 R_1 C_1(x, y, t) + \sum_{m=1}^{NS} S_1^m p_{x,1}^m(x) p_{y,1}^m(y) q_1^m(t) = R_1 \frac{\partial C_1(x, y, t)}{\partial t} \quad (3-1)$$

$$D_L \frac{\partial^2 C_i(x, y, t)}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_i(x, y, t)}{\partial x} + D_T \frac{\partial^2 C_i(x, y, t)}{\partial y^2} - k_i R_i C_i(x, y, t) + k_{i-1} R_{i-1} C_{i-1}(x, y, t) + \sum_{m=1}^{NS} S_i^m p_{x,i}^m(x) p_{y,i}^m(y) q_i^m(t) = R_i \frac{\partial C_i(x, y, t)}{\partial t} \quad (3-2)$$

$$i = 2 \dots N$$

$$C_i(x, y, t=0) = 0 \quad (3-3)$$

$$-D_L \frac{\partial C_i(x=0, y, t)}{\partial x} + v C_i(x=0, y, t) = v B_i [H(y - y_1) - H(y - y_2)] \quad (3-4)$$

$$i = 1 \dots N$$

$$\frac{\partial C_i(x=0, y, t)}{\partial x} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-5)$$

$$\frac{\partial C_i(x, y=0, t)}{\partial y} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-6)$$

$$\frac{\partial C_i(x, y=W, t)}{\partial y} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-7)$$

#### STEP 2. 將控制方程式與初始、邊界條件無因次化

發展數學模式時，首先將控制方程式與初始、邊界條件無因次化，讓所求出的解能應用於不同的尺度大小。假設無因次參數  $X = \frac{x}{L}$ ， $Y = \frac{y}{W}$ ， $Y_1 = \frac{y_1}{W}$ ，

$Y_2 = \frac{y_2}{W}$  ,  $T = \frac{vt}{L}$  代入方程式(3-1)-(3-7)進行無因次化，則方程式可改寫成

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{\partial^2 C_1(X,Y,T)}{\partial X^2} - \frac{\partial C_1(X,Y,T)}{\partial X} + \frac{\rho^2}{Pe_T} \frac{\partial^2 C_1(X,Y,T)}{\partial Y^2} - \kappa_1 C_1(X,Y,T) \\ & + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m p_{x,1}^m(X) p_{y,1}^m(Y) q_1^m(T) = R_1 \frac{\partial C_1(X,Y,T)}{\partial T} \end{aligned} \quad (3-8)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{\partial^2 C_i(X,Y,T)}{\partial X^2} - \frac{\partial C_i(X,Y,T)}{\partial X} + \frac{\rho^2}{Pe_T} \frac{\partial^2 C_i(X,Y,T)}{\partial Y^2} - \kappa_i C_i(X,Y,T) \\ & + \kappa_{i-1} C_{i-1}(X,Y,T) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m p_{x,i}^m(X) p_{y,i}^m(Y) q_i^m(T) = R_i \frac{\partial C_i(X,Y,T)}{\partial T} \end{aligned} \quad (3-9)$$

$i = 2 \dots N$

初始條件：

$$C_i(X,Y,T=0) = 0 \quad (3-10)$$

邊界條件：

$$-\frac{1}{Pe_L} \frac{\partial C_i(X=0,Y,T)}{\partial X} + C_i(X=0,Y,T) = B_i [H(Y-Y_1) - H(Y-Y_2)] \quad i=1 \dots N \quad (3-11)$$

$$\frac{\partial C_i(X=1,Y,T)}{\partial X} = 0 \quad i=1 \dots N \quad (3-12)$$

$$\frac{\partial C_i(X,Y=0,T)}{\partial Y} = 0 \quad i=1 \dots N \quad (3-13)$$

$$\frac{\partial C_i(X,Y=1,T)}{\partial Y} = 0 \quad i=1 \dots N \quad (3-14)$$

此處  $Pe_L = \frac{vL}{D_L}$  ,  $Pe_T = \frac{vL}{D_T}$  ,  $\kappa_i = \frac{k_i R_i L}{v}$  ,  $\rho = \frac{L}{W}$  ,  $\Omega_i^m = S_i^m \frac{L}{v}$

針對(3-8)-(3-14)之控制方程式與初始及邊界條件，本研究連續使用 Laplace 轉換、有限 Fourier cosine 轉換及廣義型積分轉換將偏微分方程式轉化成代數方程式求解，推導過程如下所示：



### STEP 3. 進行 Laplace 轉換，移除時間之微分項

利用 Laplace 轉換移除方程式中的時間  $t$  之微分項，Laplace 轉換的定義如下：

$$G_i(X, Y, s) = \int_0^\infty e^{-sT} C_i(X, Y, T) dT \quad (3-15)$$

$$Q_i^m(s) = \int_0^\infty e^{-sT} q_i^m(T) dT \quad (3-16)$$

此處  $G_i(X, Y, s)$  與  $Q_i(s)$  為 Laplace 轉換後之函數， $s$  為  $t$  之 Laplace 轉換參數。而

Laplace 逆轉換公式如下：

$$C_i(X, Y, T) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha-i\infty}^{\alpha+i\infty} e^{sT} G_i(X, Y, s) ds \quad (3-17)$$

對方程式(3-8)-(3-14)進行 Laplace 轉換後可得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{\partial^2 G_1(X, Y, s)}{\partial X^2} + \frac{\rho^2}{Pe_T} \frac{\partial^2 G_1(X, Y, s)}{\partial Y^2} - \frac{\partial G_1(X, Y, s)}{\partial X} - (R_1 s + \kappa_1) G_1(X, Y, s) \\ & = - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m p_{x,1}^m(X) p_{y,1}^m(Y) Q_1^m(s) \end{aligned} \quad (3-18)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{\partial^2 G_i(X, Y, s)}{\partial X^2} + \frac{\rho^2}{Pe_T} \frac{\partial^2 G_i(X, Y, s)}{\partial Y^2} - \frac{\partial G_i(X, Y, s)}{\partial X} - (R_i s + \kappa_i) G_i(X, Y, s) \\ & + \kappa_{i-1} G_{i-1}(X, Y, s) = - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m p_{x,i}^m(X) p_{y,i}^m(Y) Q_i^m(s) \end{aligned} \quad (3-19)$$

$$i = 2 \dots N$$

$$- \frac{1}{Pe_L} \frac{\partial G_i(X=0, Y, s)}{\partial X} + G_i(X=0, Y, s) = \frac{B_i}{s} [H(Y - Y_1) - H(Y - Y_2)] \quad (3-20)$$

$$\frac{\partial G_i(X=0, Y, s)}{\partial X} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-21)$$

$$\frac{\partial G_i(X, Y=0, s)}{\partial Y} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-22)$$

$$\frac{\partial G_i(X, Y=1, s)}{\partial Y} = 0 \quad i = 1 \dots N \quad (3-23)$$



#### STEP 4. 進行 finite Fourier cosine 轉換，移除空間方向 y 之微分項

執行有限 Fourier cosine 轉換移除方程式中的 y 方向二階微分項。有限 Fourier cosine 轉換的定義如下：

$$H_i(X, n, s) = \int_0^1 G_i(X, Y, s) \cos(n\pi Y) dY \quad (3-24)$$

$$P_{y,i}^m(n) = \int_0^1 p_{y,i}^m(Y) \cos(n\pi Y) dY \quad (3-25)$$

此處  $H_i(X, n, s)$  與  $P_{y,i}^m(n)$  為有限 Fourier 轉換後之函數， $n$  為 y 之有限 Fourier 轉換參數。有限 Fourier cosine 逆轉換的公式如下：

$$G_i(X, Y, s) = H_i(X, n=0, s) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} H_i(X, n, s) \cos(n\pi Y) \quad (3-26)$$

方程式(3-18)-(3-23)經有限 Fourier cosine 轉換後可得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{d^2 H_1(X, n, s)}{dX^2} - \frac{dH_1(X, n, s)}{dX} - \left( R_1 s + \kappa_1 + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} \right) H_1(X, n, s) \\ &= - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m p_{x,1}^m(X) P_{y,1}^m(n) Q_1^m(s) \end{aligned} \quad (3-27)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{d^2 H_i(X, n, s)}{dX^2} - \frac{dH_i(X, n, s)}{dX} - \left( R_i s + \kappa_i + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} \right) H_i(X, n, s) \\ &+ \kappa_{i-1} H_{i-1}(X, n, s) = - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i p_{x,i}^m(X) P_{y,i}^m(n) Q_i^m(s) \end{aligned} \quad (3-28)$$

$i = 2 \dots N$

$$- \frac{1}{Pe_L} \frac{dH_i(X=0, n, s)}{dX} + H_i(X=0, n, s) = \frac{B_i}{s} \Phi(n) \quad i=1 \dots N \quad (3-29)$$

$$\frac{dH_i(X=1, n, s)}{dX} = 0 \quad i=1 \dots N \quad (3-30)$$

其中  $\Phi(n) = \begin{cases} Y_2 - Y_1 & n=0 \\ \frac{\sin(n\pi Y_2) - \sin(n\pi Y_1)}{n\pi} & n=1, 2, 3, \dots \end{cases}$  為 Heaviside 函數  $H(y - y_1) - H(y - y_2)$



有限 Fourier 轉換後之函數。

#### STEP 5. 控制方程式變數變換與邊界條件齊次化

進行廣義型積分轉換前，Pérez Guerrero et al. (2009) 建立先將邊界條件齊性化，再利用變數變換消除  $x$  方向空間一階微分項之方法，本研究根據 Chen et al. (2011) 之方法將邊界條件齊性化及變數變換之函數定義為

$$H_i(X, n, s) = \frac{B_i}{s} \Phi(n) + e^{\frac{Pe_L}{2} X} U_i(X, n, s) \quad (3-31)$$

此處  $U_i(X, n, s)$  為齊性化及變數變換後之函數。

方程式(3-27)-(3-30)經由齊性化及變數變換後可得

$$\begin{aligned} & \frac{1}{Pe_L} \frac{d^2 U_1(X, n, s)}{dX^2} - \left( R_1 s + \kappa_1 + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} + \frac{Pe_L}{4} \right) U_1(X, n, s) \\ &= \left( R_1 s + \kappa_1 + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} \right) \frac{B_1}{s} \Phi(n) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} \end{aligned} \quad (3-32)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m p_{x,1}^m(X) P_{y,1}^m(n) Q_1^m(s) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} \\ & \frac{1}{Pe_L} \frac{d^2 U_i(X, n, s)}{dX^2} - \left( R_i s + \kappa_i + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} + \frac{Pe_L}{4} \right) U_i(X, n, s) \\ &= \left( R_i s + \kappa_i + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} \right) \frac{B_i}{s} \Phi(n) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} - \kappa_{i-1} \left( \frac{B_{i-1}}{s} \Phi(n) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} + U_{i-1}(X, n, s) \right) \end{aligned} \quad (3-33)$$

$$\begin{aligned} & - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m p_{x,i}^m(X) P_{y,i}^m(n) Q_i^m(s) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} \\ & i = 2 \dots N \\ & - \frac{dU_i(X=0, n, s)}{dX} + \frac{Pe_L}{2} U_i(X=0, n, s) = 0 \end{aligned} \quad (3-34)$$

$$\frac{dU_i(X=1, n, s)}{dX} + \frac{Pe_L}{2} U_i(X=1, n, s) = 0 \quad (3-35)$$



## STEP 6. 進行廣義型積分轉換，移除空間方向 $x$ 之微分項

本研究利用廣義型積分轉換移除  $x$  方向二階微分項(Cotta, R.M., 1993; Pérez Guerrero et al., 2009)，其求解過程包含以下步驟：

- (1)選擇合適的特徵值問題並根據問題求解特徵值(eigenvalue)、特徵方程式(eigenfunctions)、範數(norm)及正交化特性(orthogonalization property)。
- (2)發展廣義型積分轉換及廣義型積分逆轉換。
- (3)將微分方程式轉化成代數方程式並求解。
- (4)利用廣義型積分逆轉換求得未知的函數。

根據方程式(3-33)及邊界條件(3-34)、(3-35)定義特徵值問題，並求得特徵值  $\xi_l$ 、正規化特徵函數  $K(\xi_l, X)$  及範數  $N(\xi_l)$ ，其定義如下（詳細推導過程見附錄）：

$$K(\xi_l, X) = \frac{Pe_L}{2} \sin(\xi_l X) + \xi_l \cos(\xi_l X) \quad (3-36)$$

$$N(\xi_l) = \frac{\frac{Pe_L^2}{4} + Pe_L + \xi_l^2}{2} \quad (3-37)$$

廣義型積分轉換的定義如下：

$$Z_i(\xi_l, n, s) = \int_0^1 K(\xi_l, X) U_i(X, n, s) dX \quad (3-38)$$

$$\begin{aligned} \Theta(\xi_l) &= \int_0^1 K(\xi_l, X) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} dX \\ &= \frac{Pe_L \xi_l}{\frac{Pe_L^2}{4} + \xi_l^2} \end{aligned} \quad (3-39)$$

$$P_{x,i}(\xi_l) = \int_0^1 K(\xi_l, X) p_{x,i}(X) e^{-\frac{Pe_L}{2} X} dX \quad (3-40)$$

而廣義型積分逆轉換之公式如下：

$$U_i(X, n, s) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X) Z_i(\xi_l, n, s)}{N(\xi_l)} \quad (3-41)$$



此處  $Z_i(\xi_l, n, s)$ 、 $\Theta(\xi_l)$  與  $P_{x,i}(\xi_l)$  為廣義型積分轉換後之函數。

利用廣義型積分轉換將方程式(3-32)-(3-34)轉化成代數方程式如下：

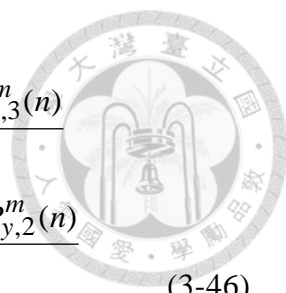
$$\begin{aligned}
 & - \left( R_1 s + \kappa_1 + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} + \frac{Pe_L}{4} + \frac{\xi_l^2}{Pe_L} \right) Z_1(\xi_l, n, s) \\
 & = \left( R_1 s + \kappa_1 + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} \right) \frac{B_1}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m P_{x,1}^m(\xi_l) P_{y,1}^m(n) Q_1^m(s)
 \end{aligned} \quad (3-42)$$

$$\begin{aligned}
 & - \left( R_i s + \kappa_i + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} + \frac{Pe_L}{4} + \frac{\xi_l^2}{Pe_L} \right) Z_i(\xi_l, n, s) \\
 & = \left( R_i s + \kappa_i + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T} \right) \frac{B_i}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) - \kappa_{i-1} \left( \frac{B_{i-1}}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + Z_{i-1}(\xi_l, n, s) \right) \\
 & - \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m P_{x,i}^m(\xi_l) P_{y,i}^m(n) Q_i^m(s) \\
 & i = 2 \dots N
 \end{aligned} \quad (3-43)$$

求解代數方程式(3-42)、(3-43)，依序推導各物種之  $Z_i(\xi_l, n, s)$  可得

$$Z_1(\xi_l, n, s) = - \frac{s + \alpha_1 - \beta_1}{s + \alpha_1} \frac{B_1}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m \frac{Q_1^m(s)}{s + \alpha_1} \frac{P_{x,1}^m(\xi_l) P_{y,1}^m(n)}{R_1} \quad (3-44)$$

$$\begin{aligned}
 Z_2(\xi_l, n, s) & = - \frac{s + \alpha_2 - \beta_2}{s + \alpha_2} \frac{B_2}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_2^m \frac{Q_2^m(s)}{s + \alpha_2} \frac{P_{x,2}^m(\xi_l) P_{y,2}^m(n)}{R_2} \\
 & + \frac{B_1 \beta_1 \sigma_2}{(s + \alpha_2)(s + \alpha_1)} \frac{1}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m \sigma_2 \frac{Q_1^m(s)}{(s + \alpha_2)(s + \alpha_1)} \frac{P_{x,1}^m(\xi_l) P_{y,1}^m(n)}{R_1}
 \end{aligned} \quad (3-45)$$



$$\begin{aligned}
Z_3(\xi_l, n, s) = & -\frac{s + \alpha_3 - \beta_3}{s + \alpha_3} \frac{B_3}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_3^m \frac{Q_3^m(s)}{s + \alpha_3} \frac{P_{x,3}^m(\xi_l) P_{y,3}^m(n)}{R_3} \\
& + \frac{B_2 \beta_2 \sigma_3}{(s + \alpha_3)(s + \alpha_2)} \frac{1}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_2^m \sigma_3 \frac{Q_2^m(s)}{(s + \alpha_3)(s + \alpha_2)} \frac{P_{x,2}^m(\xi_l) P_{y,2}^m(n)}{R_2} \\
& + \frac{B_1 \beta_1 \sigma_3 \sigma_2}{(s + \alpha_3)(s + \alpha_2)(s + \alpha_1)} \frac{1}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) \\
& + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_1^m \sigma_3 \sigma_2 \frac{Q_1^m(s)}{(s + \alpha_3)(s + \alpha_2)(s + \alpha_1)} \frac{P_{x,1}^m(\xi_l) P_{y,1}^m(n)}{R_1}
\end{aligned} \tag{3-46}$$

此處  $\alpha_i(\xi_l)$ 、 $\beta_i(\xi_l)$  及  $\sigma_i$  之定義為

$$\alpha_i(\xi_l) = \frac{\kappa_i}{R_i} + \frac{\rho^2 n^2 \pi^2}{Pe_T R_i} + \frac{Pe_L}{4R_i} + \frac{\xi_l^2}{Pe_L R_i} \tag{3-47}$$

$$\beta_i(\xi_l) = \frac{Pe_L}{4R_i} + \frac{\xi_l^2}{Pe_L R_i} \tag{3-48}$$

$$\sigma_i = \frac{\kappa_{i-1}}{R_i} \tag{3-49}$$

檢視方程式(3-34)-(3-46)，可推適用於任意數目物種之通式為

$$\begin{aligned}
Z_i(\xi_l, n, s) = & D_i(\xi_l, n, s) + E_i(\xi_l, n, s) \\
i = & 1 \dots N
\end{aligned} \tag{3-50}$$

其中  $D_i(\xi_l, n, s)$  與  $E_i(\xi_l, n, s)$  可表示為

$$\begin{aligned}
D_i(\xi_l, n, s) = & -\frac{s + \alpha_i - \beta_i}{s + \alpha_i} \frac{B_i}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m \frac{Q_i^m(s)}{s + \alpha_i} \frac{P_{x,i}^m(\xi_l) P_{y,i}^m(n)}{R_i} \\
i = & 1 \dots N
\end{aligned} \tag{3-51}$$





$$\begin{aligned}
 E_i(\xi_l, n, s) = & \sum_{k=0}^{i-2} \left[ \frac{\beta_{i-k-1} \prod_{j_1=0}^{j_1=k} \sigma_{i-j_1} \Phi(n) \Theta(\xi_l)}{\prod_{j_2=0}^{j_2=k+1} (s + \alpha_{i-j_2})} \frac{B_{i-k-1}}{s} \right. \\
 & \left. + \sum_{m=1}^{NS} \frac{\Omega_{i-k-1}^m Q_{i-k-1}^m(s)}{\prod_{j_2=0}^{j_2=k+1} (s + \alpha_{i-j_2})} \frac{P_{x,i-k-1}^m(\xi_l) P_{y,i-k-1}^m(n)}{R_{i-k-1}} \right] \\
 & i = 2 \dots N
 \end{aligned} \tag{3-52}$$

#### STEP 7. 進行一系列逆轉換求得原域之解析解

方程式(3-50)為經由 Laplace 轉換、有限 Fourier cosine 轉換及廣義型積分轉換後之代數方程式，本研究藉由一系列逆轉換結合變數變換求得原域之解析解。

將方程式(3-50)代入廣義型積分逆轉換之公式(3-41)後可得

$$U_i(X, n, s) = \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X)}{N(\xi_l)} [D(\xi_l, n, s) + E(\xi_l, n, s)] \tag{3-53}$$

利用方程式(3-31)齊性化及變數變換之關係帶入上式後可得

$$H_i(X, n, s) = \frac{B_i}{s} \Phi(n) + e^{\frac{Pe_L}{2} X} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X)}{N(\xi_l)} (D(\xi_l, n, s) + E(\xi_l, n, s)) \tag{3-54}$$

將上式代入有限 Fourier cosine 逆轉換之公式(3-26)後可得

$$\begin{aligned}
 G_i(X, Y, s) = & \frac{B_i}{s} \Phi(n=0) + e^{\frac{Pe_L}{2} X} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X)}{N(\xi_l)} [D(\xi_l, n=0, s) + E(\xi_l, n=0, s)] \\
 & + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{B_i}{s} \Phi(n) + e^{\frac{Pe_L}{2} X} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X)}{N(\xi_l)} [D(\xi_l, n, s) + E(\xi_l, n, s)] \right) \cos(n\pi Y)
 \end{aligned} \tag{3-55}$$

將上式代入方程式(3-17)進行 Laplace 逆轉換可求得原域之解析解如下：



$$\begin{aligned}
C_i(X, Y, T) &= B_i \Phi(n=0) \\
&+ e^{\frac{Pe_L}{2} X} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X)}{N(\xi_l)} \left[ L^{-1}[D(\xi_l, n=0, s)] + L^{-1}[E(\xi_l, n=0, s)] \right] \\
&+ 2 \sum_{n=1}^{\infty} \left( B_i \Phi(n) + e^{\frac{Pe_L}{2} X} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{K(\xi_l, X)}{N(\xi_l)} \left[ L^{-1}[D(\xi_l, n, s)] + L^{-1}[E(\xi_l, n, s)] \right] \right) \cos(n\pi Y)
\end{aligned} \quad (3-56)$$

方程式(3-56)中  $D(\xi_l, n, s)$  與  $E(\xi_l, n, s)$  之 Laplace 逆轉換可表示成

$$\begin{aligned}
L^{-1}[D(\xi_l, n, s)] &= L^{-1} \left[ -\frac{s + \alpha_i - \beta_i}{s + \alpha_i} \frac{B_i}{s} \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m \frac{Q_i^m(s)}{s + \alpha_i} \frac{P_{x,i}^m(\xi_l) P_{y,i}^m(n)}{R_i} \right] \\
&= \left( -B_i + \beta_i e^{-\alpha_i T} \int_0^T B_i e^{\alpha_i \tau} d\tau \right) \Phi(n) \Theta(\xi_l) \\
&+ \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m \frac{P_{x,i}^m(\xi_l) P_{y,i}^m(n)}{R_i} e^{-\alpha_i T} \int_0^T e^{\alpha_i \tau} q_i^m(\tau) d\tau
\end{aligned} \quad (3-57)$$

$$\begin{aligned}
L^{-1}[E(\xi_l, n, s)] &= L^{-1} \left[ \sum_{k=0}^{k=i-2} \left[ \frac{\beta_{i-k-1} \prod_{j_1=0}^{j_1=k} \sigma_{i-j_1} \Phi(n) \Theta(\xi_l)}{\prod_{j_2=0}^{j_2=k+1} (s + \alpha_{i-j_2})} \frac{B_{i-k-1}}{s} \right. \right. \\
&+ \left. \left. \sum_{m=1}^{NS} \frac{\Omega_{i-k-1}^m Q_{i-k-1}^m(s)}{\prod_{j_2=0}^{j_2=k+1} (s + \alpha_{i-j_2})} \frac{P_{x,i-k-1}^m(\xi_l) P_{y,i-k-1}^m(n)}{R_{i-k-1}} \right] \right] \\
&= \sum_{k=0}^{k=i-2} \left[ \Phi(n) \Theta(\xi_l) \beta_{i-k-1} \prod_{j_1=0}^{j_1=k} \sigma_{i-j_1} \sum_{j_2=0}^{j_2=k+1} \frac{e^{-\alpha_{i-j_2} T} \int_0^T e^{\alpha_{i-j_2} \tau} B_{i-k-1} d\tau}{\prod_{\substack{j_3=i \\ j_3=i-k-1, j_3 \neq i-j_2}}^{j_3=i} (\alpha_{j_3} - \alpha_{i-j_2})} \right. \\
&+ \left. \sum_{m=1}^{NS} \Omega_{i-k-1}^m \frac{P_{x,i-k-1}^m(\xi_l) P_{y,i-k-1}^m(n)}{R_{i-k-1}} \sum_{j_2=0}^{j_2=k+1} \frac{e^{-\alpha_{i-j_2} T} \int_0^T e^{\alpha_{i-j_2} \tau} q_{i-k-1}^m(\tau) d\tau}{\prod_{\substack{j_3=i \\ j_3=i-k-1, j_3 \neq i-j_2}}^{j_3=i} (\alpha_{j_3} - \alpha_{i-j_2})} \right]
\end{aligned} \quad (3-58)$$



方程式(3-57)與(3-58)中  $q_i^m(\tau)$  與  $q_{i-k-1}^m(\tau)$  之函數如表 3-1 所示為 Heaviside 函數，

可表示成  $H(\tau) - H(\tau - T_{q,i}^m)$  及  $H(\tau) - H(\tau - T_{q,i-k-1}^m)$ ，代入後可得

$$L^{-1}[D(\xi_l, n, s)] = \left( -B_i + \frac{\beta_i B_i (1 - e^{-\alpha_i T})}{\alpha_i} \right) \Phi(n) \Theta(\xi_l) + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_i^m \frac{P_{x,i}^m(\xi_l) P_{y,i}^m(n)}{R_i} e^{-\alpha_i T} \frac{(e^{\alpha_i T_{q,i}^m} - 1)}{\alpha_i} \quad (3-59)$$

$$L^{-1}[E(\xi_l, n, s)] = \sum_{k=0}^{i-2} \left[ \Phi(n) \Theta(\xi_l) \beta_{i-k-1} B_{i-k-1} \prod_{j_1=0}^{j_2=k} \sigma_{i-j_1} \sum_{j_2=0}^{j_2=k+1} \frac{(1 - e^{-\alpha_{i-j_2} T})}{\alpha_{i-j_2} \prod_{j_3=i-k-1, j_3 \neq i-j_2}^{j_3=i} (\alpha_{j_3} - \alpha_{i-j_2})} \right. \\ \left. + \sum_{m=1}^{NS} \Omega_{i-k-1}^m \frac{P_{x,i-k-1}^m(\xi_l) P_{y,i-k-1}^m(n)}{R_{i-k-1}} \sum_{j_2=0}^{j_2=k+1} \frac{e^{-\alpha_{i-j_2} T} [e^{-\alpha_{i-j_2} T_{q,i-k-1}^m} - 1]}{\alpha_{i-j_1} \prod_{j_3=i-k-1, j_3 \neq i-j_2}^{j_3=i} (\alpha_{j_3} - \alpha_{i-j_2})} \right] \quad (3-60)$$

此處  $P_{y,i}^m(n)$ 、 $P_{x,i}^m(\xi_l)$  分別為  $p_{y,i}^m(y)$  及  $p_{x,i}^m(x)$  經有限 Fourier cosine 轉換及廣義型

積分轉換後之函數，其函數值如表 3-1 所示，代入方程式(3-25)及(3-40)後可得

$$P_{y,i}^m(n) = \begin{cases} Y_{p2,i}^m - Y_{p1,i}^m & n = 0 \\ \frac{\sin(n\pi Y_{p2,i}^m) - \sin(n\pi Y_{p1,i}^m)}{n\pi} & n = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \quad (3-61)$$

$$P_{x,i}^m(\xi_l) = \frac{e^{-\frac{Pe_L}{2} X_{p2,i}^m} \left[ -Pe_L \xi_l \cos(\xi_l X_{p2,i}^m) + \left( \xi_l^2 - \left( \frac{Pe_L}{2} \right)^2 \right) \sin(\xi_l X_{p2,i}^m) \right]}{\left( \frac{Pe_L}{2} \right)^2 + \xi_l^2} \\ - \frac{e^{-\frac{Pe_L}{2} X_{p1,i}^m} \left[ -Pe_L \xi_l \cos(\xi_l X_{p1,i}^m) + \left( \xi_l^2 - \left( \frac{Pe_L}{2} \right)^2 \right) \sin(\xi_l X_{p1,i}^m) \right]}{\left( \frac{Pe_L}{2} \right)^2 + \xi_l^2} \quad (3-62)$$

## 第四章 模式收斂性測試與驗證




### 4-1 收斂性測試

本研究推導具內部源二維多物種溶質傳輸解析解過程中，依序使用 finite Fourier cosine 積分轉換與廣義型積分轉換移除控制方程式中的空間二階微分項，使偏微分方程式先轉換成常微分方程式再轉換成代數方程式，進而利用代數方程式求解。進行 finite Fourier cosine 積分逆轉換及廣義型積分逆轉換所求得的解析解，會使用無窮級數來進行累加，理論上無窮級數在計算上需累加至無窮項數以求得精確濃度，但在實務應用上累加項數只要所得之解不再隨累加項數增加而改變即可，如此在計算機運算上可更有效率計算結果，因此本研究對於解析解級數項數累加之收斂性探討是必須的。

本研究包含  $x$  方向與  $y$  方向之無窮級數， $x$  方向的累加項數為  $l$ ，而  $y$  方向的累加項數為  $n$ 。為了測試發展模式之收斂性，本研究發展內部源注入概念化模型，如圖 4-1 所示。假設流場內有一個污染源長期定濃度釋放， $x$  方向出流邊界為  $0 \text{ m} \leq x \leq 20 \text{ m}$ ， $y$  方向出流邊界為  $140 \text{ m} \leq y \leq 160 \text{ m}$ ，分別計算  $t=40 \text{ years}$  時序列降解之 PCE、TCE、DCE 及 VC 在流場長度  $L=120 \text{ m}$  ( $Pe=10$ )、 $L=300 \text{ m}$  ( $Pe=25$ ) 及  $L=600 \text{ m}$  ( $Pe=50$ ) 之數值收斂所需的累加項數  $l$  及  $n$ 。

本研究進行內部源數值收斂所使用之參數參考 Clement et al. (2000) 之 Dover 含氯有機污染場址，如表 4-1 所示，討論序列降解下四物種在不同 Peclet number 的級數收斂所需累加項數，Peclet number 的定義為  $Pe = \frac{vL}{D_L}$ ，其物理定義為移流與延散之比值， $Pe$  越大代表此流場由移流傳輸主導， $Pe$  越小則代表此流場由延散主導。



由表 4-2 至 4-7 可知，若要求計算精確度到科學記號小數點以下第四位，當  $Pe$  越大時流場由移流主導，收斂所需的累加項數  $l$  及  $n$  越多；反之當  $Pe$  越小時溶質傳輸由延散主導，所需的累加項數  $l$  及  $n$  越少。且邊界處所需的累加項數較多，隨著  $Pe$  越大， $x$  越接近邊界處時不容易達到收斂。觀察結果亦發現相同  $Pe$  下，降解鏈越後面的物種，所需的累加項數  $l$  及  $n$  較前一個物種少。

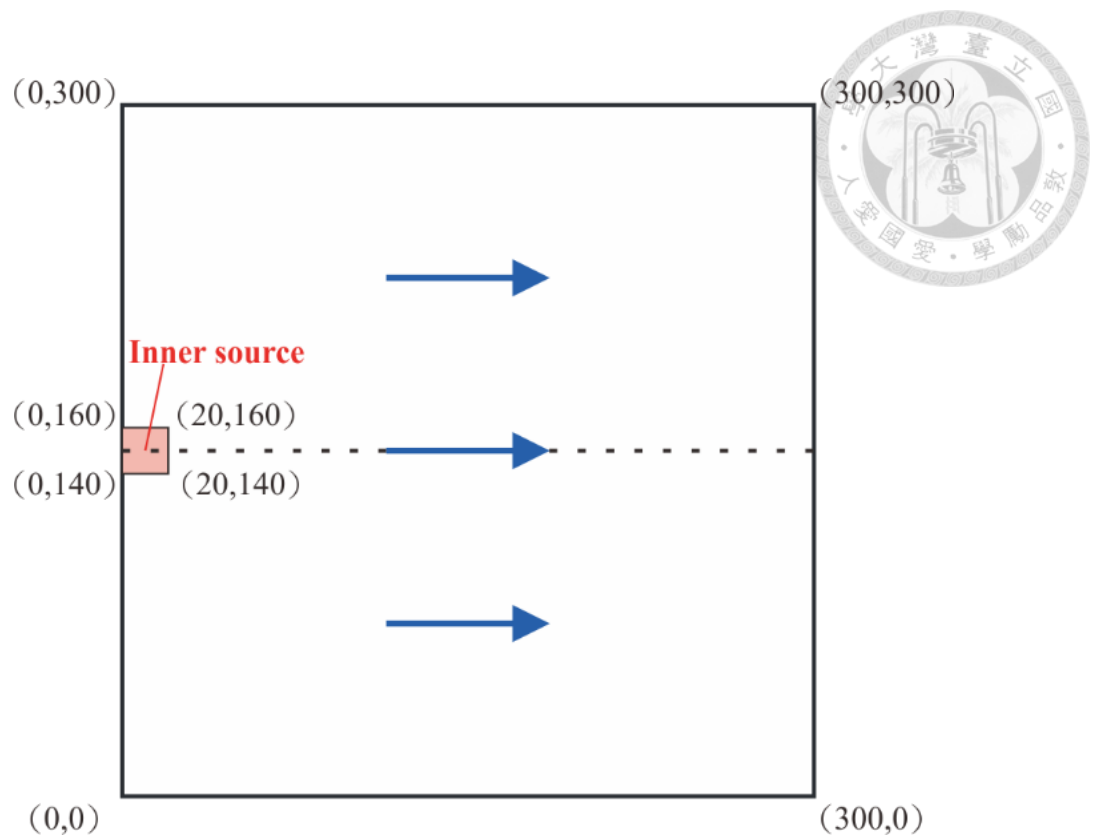


圖 4-1 內部源收斂性測試概念化模型

表 4-1 數值收斂性測試所輸入之參數設定

參數	數值
長度, $L$ [m]	120 300 600
寬度, $W$ [m]	300
滲流速度, $v$ [m year <sup>-1</sup> ]	66.75
縱向延散係數, $D_L$ [m <sup>2</sup> year <sup>-1</sup> ]	813.83
徑向延散係數, $D_T$ [m <sup>2</sup> year <sup>-1</sup> ]	162.77
PCE 遲滯因子, $R_1$ [-]	0.1314
TCE 遲滯因子, $R_2$ [-]	0.1261
DCE 遲滯因子, $R_3$ [-]	0.2728
VC 遲滯因子, $R_4$ [-]	0.2373
PCE 一階降解常數, $k_1$ [year <sup>-1</sup> ]	0.0007
TCE 一階降解常數, $k_2$ [year <sup>-1</sup> ]	0.0005
DCE 一階降解常數, $k_3$ [year <sup>-1</sup> ]	0.00045
VC 一階降解常數, $k_4$ [year <sup>-1</sup> ]	0.00038
PCE 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{PCE}}$ [kg year <sup>-1</sup> ]	10
TCE 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{TCE}}$ [kg year <sup>-1</sup> ]	0
DCE 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{DCE}}$ [kg year <sup>-1</sup> ]	0
VC 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{VC}}$ [kg year <sup>-1</sup> ]	0

表 4-2 四物種在  $Pe=10$  時，不同累加項數  $l$  的收斂情況

PCE					
$x$ (m)	$l=1000$	$l=2000$	$l=3000$	$l=4000$	$l=5000$
0	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01
30	1.7274E-01	1.7274E-01	1.7274E-01	1.7274E-01	1.7274E-01
60	1.2017E-01	1.2017E-01	1.2017E-01	1.2017E-01	1.2017E-01
90	9.2089E-02	9.2068E-02	9.2068E-02	9.2068E-02	9.2068E-02
120	7.4302E-02	7.4284E-02	7.4270E-02	7.4268E-02	7.4268E-02
TCE					
$x$ (m)	$l=200$	$l=400$	$l=600$	$l=800$	$l=1000$
0	3.9172E-03	3.9172E-03	3.9172E-03	3.9172E-03	3.9172E-03
30	1.3185E-02	1.3185E-02	1.3185E-02	1.3185E-02	1.3185E-02
60	1.8666E-02	1.8666E-02	1.8666E-02	1.8666E-02	1.8666E-02
90	2.2346E-02	2.2346E-02	2.2346E-02	2.2346E-02	2.2346E-02
120	2.5071E-02	2.5067E-02	2.5066E-02	2.5065E-02	2.5065E-02
DCE					
$x$ (m)	$l=40$	$l=80$	$l=120$	$l=160$	$l=200$
0	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04
30	5.1159E-04	5.1159E-04	5.1159E-04	5.1159E-04	5.1159E-04
60	1.0233E-03	1.0233E-03	1.0233E-03	1.0233E-03	1.0233E-03
90	1.5869E-03	1.5869E-03	1.5869E-03	1.5869E-03	1.5869E-03
120	2.1714E-03	2.1706E-03	2.1695E-03	2.1693E-03	2.1693E-03
VC					
$x$ (m)	$l=16$	$l=32$	$l=48$	$l=64$	$l=80$
0	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06
30	1.0326E-05	1.0326E-05	1.0326E-05	1.0326E-05	1.0326E-05
60	2.7041E-05	2.7041E-05	2.7041E-05	2.7041E-05	2.7041E-05
90	5.2690E-05	5.2690E-05	5.2690E-05	5.2690E-05	5.2690E-05
120	8.7253E-05	8.7247E-05	8.7246E-05	8.7246E-05	8.7246E-05



表 4-3 四物種在  $Pe=10$  時，不同累加項數  $n$  的收斂情況

PCE					
$x$ (m)	$n=200$	$n=400$	$n=600$	$n=800$	$n=1000$
0	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01
30	1.7274E-01	1.7274E-01	1.7274E-01	1.7274E-01	1.7274E-01
60	1.2017E-01	1.2017E-01	1.2017E-01	1.2017E-01	1.2017E-01
90	9.2089E-02	9.2073E-02	9.2068E-02	9.2068E-02	9.2068E-02
120	7.4298E-02	7.4284E-02	7.4269E-02	7.4268E-02	7.4268E-02
TCE					
$x$ (m)	$n=100$	$n=200$	$n=300$	$n=400$	$n=500$
0	3.9172E-03	3.9172E-03	3.9172E-03	3.9172E-03	3.9172E-03
30	1.3185E-02	1.3185E-02	1.3185E-02	1.3185E-02	1.3185E-02
60	1.8666E-02	1.8666E-02	1.8666E-02	1.8666E-02	1.8666E-02
90	2.2346E-02	2.2346E-02	2.2346E-02	2.2346E-02	2.2346E-02
120	2.5073E-02	2.5067E-02	2.5065E-02	2.5065E-02	2.5065E-02
DCE					
$x$ (m)	$n=30$	$n=60$	$n=90$	$n=120$	$n=150$
0	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04
30	5.1159E-04	5.1159E-04	5.1159E-04	5.1159E-04	5.1159E-04
60	1.0233E-03	1.0233E-03	1.0233E-03	1.0233E-03	1.0233E-03
90	1.5869E-03	1.5869E-03	1.5869E-03	1.5869E-03	1.5869E-03
120	2.1698E-03	2.1693E-03	2.1693E-03	2.1693E-03	2.1693E-03
VC					
$x$ (m)	$n=10$	$n=20$	$n=30$	$n=40$	$n=50$
0	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06
30	1.0326E-05	1.0326E-05	1.0326E-05	1.0326E-05	1.0326E-05
60	2.7041E-05	2.7041E-05	2.7041E-05	2.7041E-05	2.7041E-05
90	5.2690E-05	5.2690E-05	5.2690E-05	5.2690E-05	5.2690E-05
120	8.7248E-05	8.7246E-05	8.7246E-05	8.7246E-05	8.7246E-05

表 4-4 四物種在  $Pe=25$  時，不同累加項數  $l$  的收斂情況

PCE					
$x$ (m)	$l=2000$	$l=4000$	$l=6000$	$l=8000$	$l=10000$
0	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01
75	1.0429E-01	1.0429E-01	1.0429E-01	1.0429E-01	1.0429E-01
150	6.1751E-02	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02
225	4.1909E-02	4.1907E-02	4.1908E-02	4.1908E-02	4.1908E-02
300	3.1603E-02	3.1564E-02	3.1569E-02	3.1569E-02	3.1569E-02
TCE					
$x$ (m)	$l=600$	$l=1200$	$l=1800$	$l=2400$	$l=3000$
0	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03
75	2.0659E-02	2.0659E-02	2.0659E-02	2.0659E-02	2.0659E-02
150	2.7170E-02	2.7170E-02	2.7170E-02	2.7170E-02	2.7170E-02
225	3.0705E-02	3.0703E-02	3.0703E-02	3.0703E-02	3.0703E-02
300	3.2530E-02	3.2500E-02	3.2497E-02	3.2497E-02	3.2497E-02
DCE					
$x$ (m)	$l=100$	$l=200$	$l=300$	$l=400$	$l=500$
0	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04
75	1.3012E-03	1.3012E-03	1.3012E-03	1.3012E-03	1.3012E-03
150	2.7506E-03	2.7506E-03	2.7506E-03	2.7506E-03	2.7506E-03
225	4.1184E-03	4.1184E-03	4.1184E-03	4.1184E-03	4.1184E-03
300	5.1254E-03	5.1252E-03	5.1252E-03	5.1252E-03	5.1252E-03
VC					
$x$ (m)	$l=40$	$l=80$	$l=120$	$l=160$	$l=200$
0	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06
75	3.8740E-05	3.8740E-05	3.8740E-05	3.8740E-05	3.8740E-05
150	1.3069E-04	1.3069E-04	1.3069E-04	1.3069E-04	1.3069E-04
225	2.7112E-04	2.7112E-04	2.7112E-04	2.7112E-04	2.7112E-04
300	4.1679E-04	4.1676E-04	4.1676E-04	4.1676E-04	4.1676E-04

表 4-5 四物種在  $Pe=25$  時，不同累加項數  $n$  的收斂情況

PCE					
$x$ (m)	$n=400$	$n=800$	$n=1200$	$n=1600$	$n=2000$
0	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01
75	1.0429E-01	1.0429E-01	1.0429E-01	1.0429E-01	1.0429E-01
150	6.1753E-02	6.1751E-02	6.1751E-02	6.1751E-02	6.1751E-02
225	4.1909E-02	4.1909E-02	4.1909E-02	4.1909E-02	4.1909E-02
300	3.1606E-02	3.1604E-02	3.1603E-02	3.1603E-02	3.1603E-02
TCE					
$x$ (m)	$n=200$	$n=400$	$n=600$	$n=800$	$n=1000$
0	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03
75	2.0659E-02	2.0659E-02	2.0659E-02	2.0659E-02	2.0659E-02
150	2.7170E-02	2.7170E-02	2.7170E-02	2.7170E-02	2.7170E-02
225	3.0704E-02	3.0703E-02	3.0703E-02	3.0703E-02	3.0703E-02
300	3.2516E-02	3.2514E-02	3.2496E-02	3.2496E-02	3.2496E-02
DCE					
$x$ (m)	$n=50$	$n=100$	$n=150$	$n=200$	$n=250$
0	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04
75	1.3011E-03	1.3011E-03	1.3011E-03	1.3011E-03	1.3011E-03
150	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03
225	4.1189E-03	4.1172E-03	4.1172E-03	4.1172E-03	4.1172E-03
300	5.1226E-03	5.1226E-03	5.1226E-03	5.1226E-03	5.1226E-03
VC					
$x$ (m)	$n=20$	$n=40$	$n=60$	$n=80$	$n=100$
0	1.9211E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06
75	3.8740E-05	3.8740E-05	3.8740E-05	3.8740E-05	3.8740E-05
150	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04
225	2.7069E-04	2.7069E-04	2.7069E-04	2.7069E-04	2.7069E-04
300	4.1628E-04	4.1628E-04	4.1628E-04	4.1628E-04	4.1628E-04

表 4-6 四物種在  $Pe=50$  時，不同累加項數  $l$  的收斂情況

PCE					
$x$ (m)	$l=20000$	$l=40000$	$l=60000$	$l=80000$	$l=100000$
0	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01
150	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02
300	3.0139E-02	3.0139E-02	3.0139E-02	3.0139E-02	3.0139E-02
450	1.6894E-02	1.6976E-02	1.6967E-02	1.6966E-02	1.6968E-02
600	-2.3536E-02	1.4664E-02	1.0730E-02	1.0123E-02	1.0913E-02
TCE					
$x$ (m)	$l=4000$	$l=8000$	$l=12000$	$l=16000$	$l=20000$
0	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03
150	1.2248E-02	1.2248E-02	1.2248E-02	1.2248E-02	1.2248E-02
300	1.3261E-02	1.3261E-02	1.3261E-02	1.3261E-02	1.3261E-02
450	1.2436E-02	1.2432E-02	1.2432E-02	1.2432E-02	1.2432E-02
600	4.4354E-02	4.1203E-02	2.5531E-02	1.1534E-02	1.1571E-02
DCE					
$x$ (m)	$l=2000$	$l=4000$	$l=6000$	$l=8000$	$l=10000$
0	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04
150	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03
300	5.1007E-03	5.1007E-03	5.1007E-03	5.1007E-03	5.1007E-03
450	5.7581E-03	5.7573E-03	5.7573E-03	5.7573E-03	5.7573E-03
600	5.9954E-03	5.9898E-03	5.9843E-03	5.9836E-03	5.9836E-03
VC					
$x$ (m)	$l=400$	$l=800$	$l=1200$	$l=1600$	$l=2000$
0	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06
150	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04
300	4.1516E-04	4.1516E-04	4.1516E-04	4.1516E-04	4.1516E-04
450	4.6274E-04	4.6268E-04	4.6268E-04	4.6268E-04	4.6268E-04
600	4.9005E-04	4.8992E-04	4.8984E-04	4.8983E-04	4.8983E-04

表 4-7 四物種在  $Pe=50$  時，不同累加項數  $n$  的收斂情況

PCE					
$x$ (m)	$n=5000$	$n=10000$	$n=15000$	$n=20000$	$n=25000$
0	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01	1.1214E-01
150	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02	6.1750E-02
300	3.0139E-02	3.0139E-02	3.0139E-02	3.0139E-02	3.0139E-02
450	1.7382E-02	1.7071E-02	1.6969E-02	1.6969E-02	1.6969E-02
600	4.3548E-02	3.5618E-02	2.1543E-02	1.1242E-02	1.1241E-02
TCE					
$x$ (m)	$n=1000$	$n=2000$	$n=3000$	$n=4000$	$n=5000$
0	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03	3.9162E-03
150	1.2248E-02	1.2248E-02	1.2248E-02	1.2248E-02	1.2248E-02
300	1.3289E-02	1.3255E-02	1.3261E-02	1.3261E-02	1.3261E-02
450	1.3655E-02	1.2454E-02	1.2438E-02	1.2434E-02	1.2434E-02
600	1.1854E-02	1.1670E-02	1.1589E-02	1.1563E-02	1.1559E-02
DCE					
$x$ (m)	$n=400$	$n=800$	$n=1200$	$n=1600$	$n=2000$
0	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04	1.1763E-04
150	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03	2.7501E-03
300	5.1004E-03	5.0989E-03	5.0989E-03	5.0989E-03	5.0989E-03
450	5.7573E-03	5.7568E-03	5.7568E-03	5.7568E-03	5.7568E-03
600	5.9896E-03	5.9841E-03	5.9829E-03	5.9824E-03	5.9824E-03
VC					
$x$ (m)	$n=200$	$n=400$	$n=600$	$n=800$	$n=1000$
0	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06	1.9206E-06
150	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04	1.3031E-04
300	4.1512E-04	4.1512E-04	4.1512E-04	4.1512E-04	4.1512E-04
450	4.6282E-04	4.6267E-04	4.6256E-04	4.6256E-04	4.6256E-04
600	4.9048E-04	4.9007E-04	4.8986E-04	4.8979E-04	4.8979E-04

## 4-2 模式驗證

為了驗證所發展的解析解模式之正確性，本研究利用 *Laplace* 轉換有限差分 (LTFD) 數值模式與解析解模式進行驗證。在現地應用上常見情況為場址某處有一污染源長期排放，在模式驗證上可以用兩個空間方向之 Heaviside step 函數組合來表示源/匯項。

本研究發展一個二維概念模型並假設其污染源長期定濃度釋放，而釋放濃度為矩形區間  $1 \text{ kg day}^{-1}$ ，其內部源之概念模型如圖 4-2 所示，模式驗證不考慮邊界條件溶質注入且假設初始濃度為零濃度分布，所使用的參數如表 4-8 所示。

圖 4-3 至圖 4-6 表示物種一、物種二、物種三及物種四之解析解與數值解在模擬內部源條件下、不同時間之溶質分布情形。結果顯示兩者相當吻合，故證實本研究發展的數學模式在模擬內部源條件下溶質濃度分布之正確性。

為了測試本研究發展的模式模擬 Dover 空軍基地污染場址的正確性，本研究配套 Dover 空軍基地污染場址現地數據，如表 4-1 所示，分別模擬 PCE、TCE、DCE 及 VC 解析解與數值解在內部源條件下之溶質分布情形，概念化模型如圖 4-1 所示。圖 4-7 至圖 4-10 表示定濃度持續注入下，序列降解的四物種在  $Pe=25$ ， $t=40 \text{ years}$  時溶質分布情形。結果顯示兩者相當吻合，故證實本研究發展模式在模擬 Dover 空軍基地污染場址內部源釋出情形之正確性。

表 4-8 不同時間下四物種模式驗正所輸入之參數設定

參數	數值
長度, $L$ [m]	10
寬度, $W$ [m]	10
滲流速度, $v$ [m day <sup>-1</sup> ]	1
縱向延散係數, $D_L$ [m <sup>2</sup> day <sup>-1</sup> ]	1
徑向延散係數, $D_T$ [m <sup>2</sup> day <sup>-1</sup> ]	0.1
PCE 遲滯因子, $R_1$ [-]	1
TCE 遲滯因子, $R_2$ [-]	1
DCE 遲滯因子, $R_3$ [-]	1
VC 遲滯因子, $R_4$ [-]	1
PCE 一階降解常數, $k_1$ [day <sup>-1</sup> ]	0.1
TCE 一階降解常數, $k_2$ [day <sup>-1</sup> ]	0.08
DCE 一階降解常數, $k_3$ [day <sup>-1</sup> ]	0.06
VC 一階降解常數, $k_4$ [day <sup>-1</sup> ]	0.04
PCE 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{PCE}}$ [kg day <sup>-1</sup> ]	1
TCE 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{TCE}}$ [kg day <sup>-1</sup> ]	0
DCE 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{DCE}}$ [kg day <sup>-1</sup> ]	0
VC 質量釋出率, $\dot{m}_{\text{VC}}$ [kg day <sup>-1</sup> ]	0

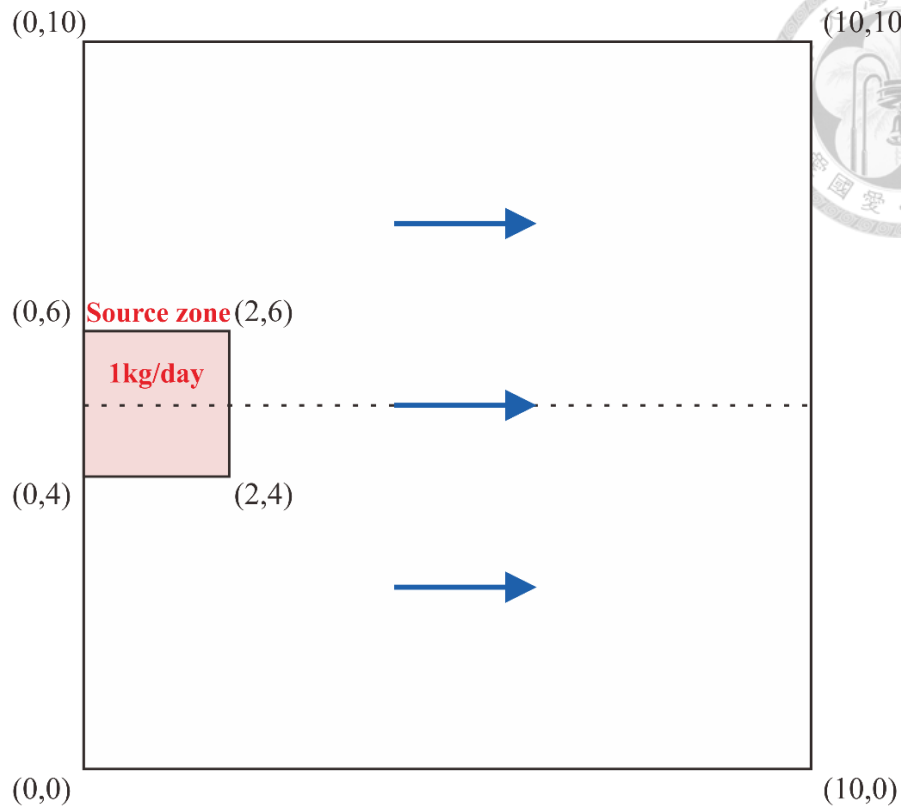


圖 4-2 內部源模式驗證之概念模型

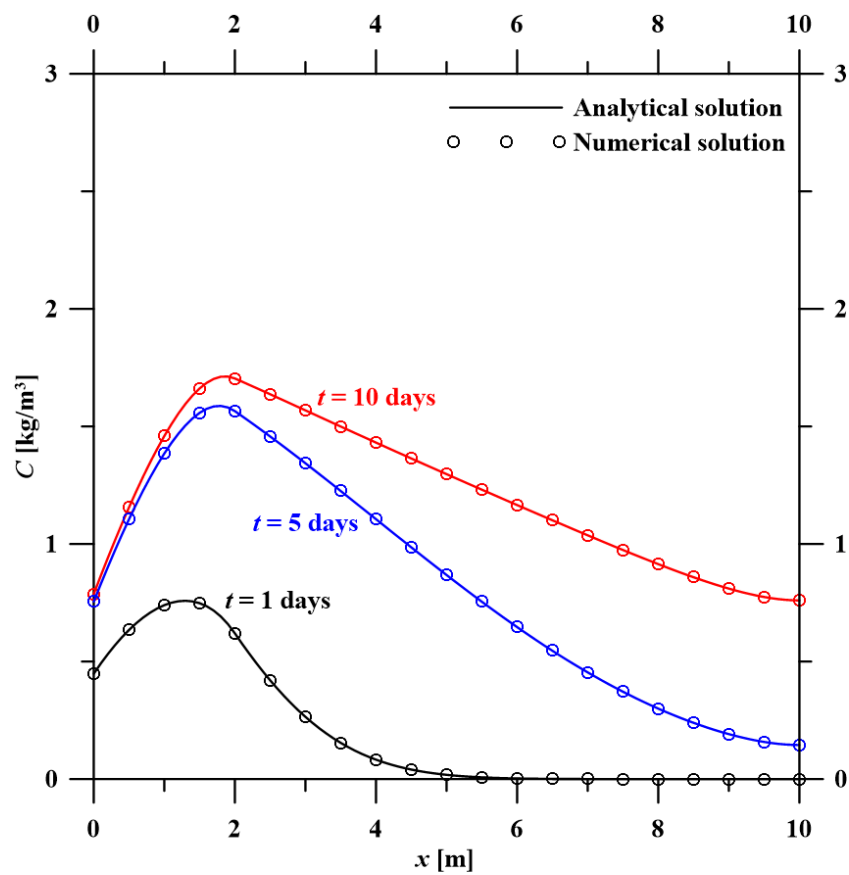


圖 4-3 物種一解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形



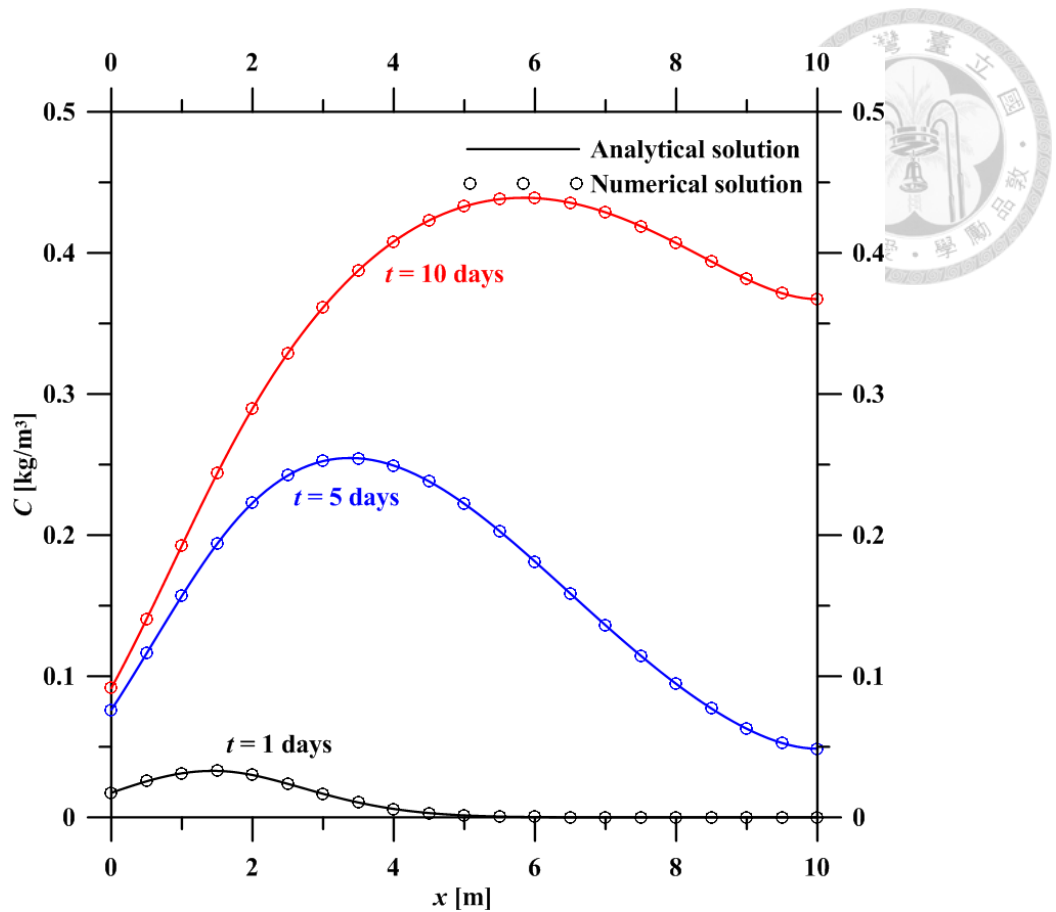


圖 4-4 物種二解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形

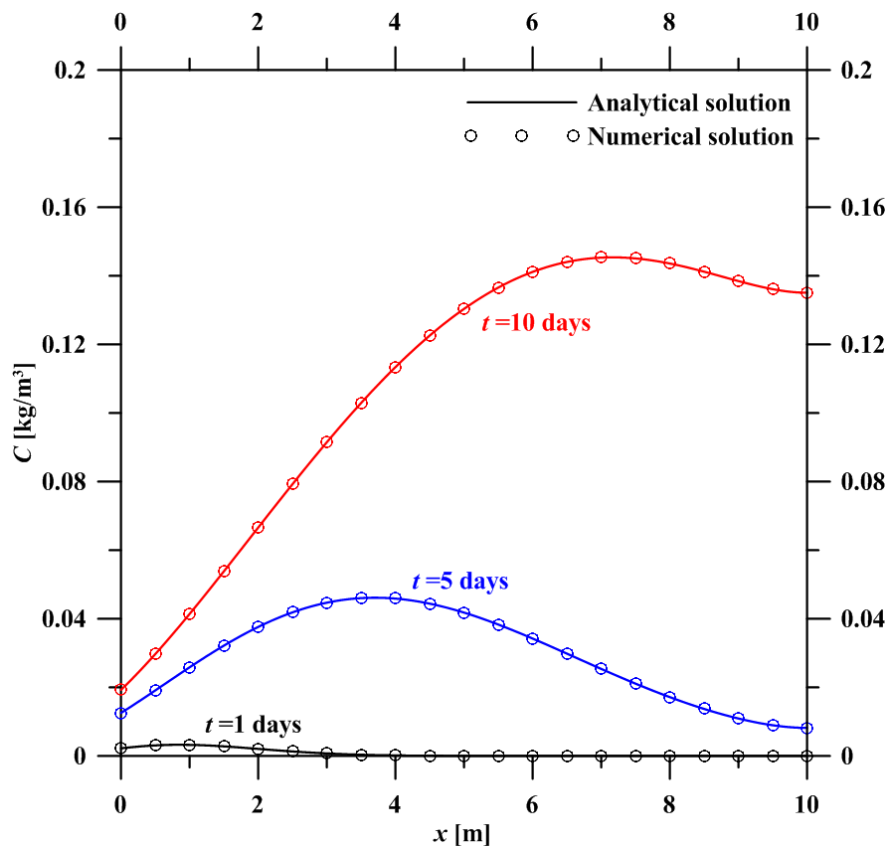


圖 4-5 物種三解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形

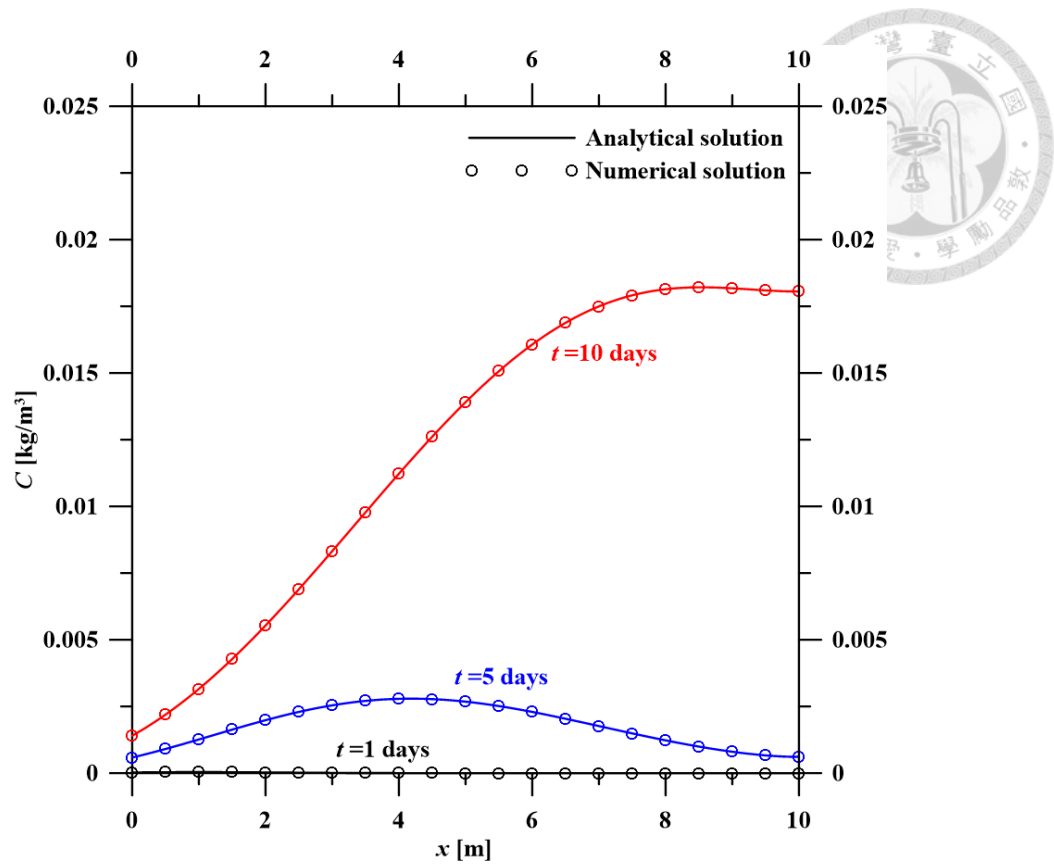


圖 4-6 物種四解析解與數值解在不同時間下濃度分布情形

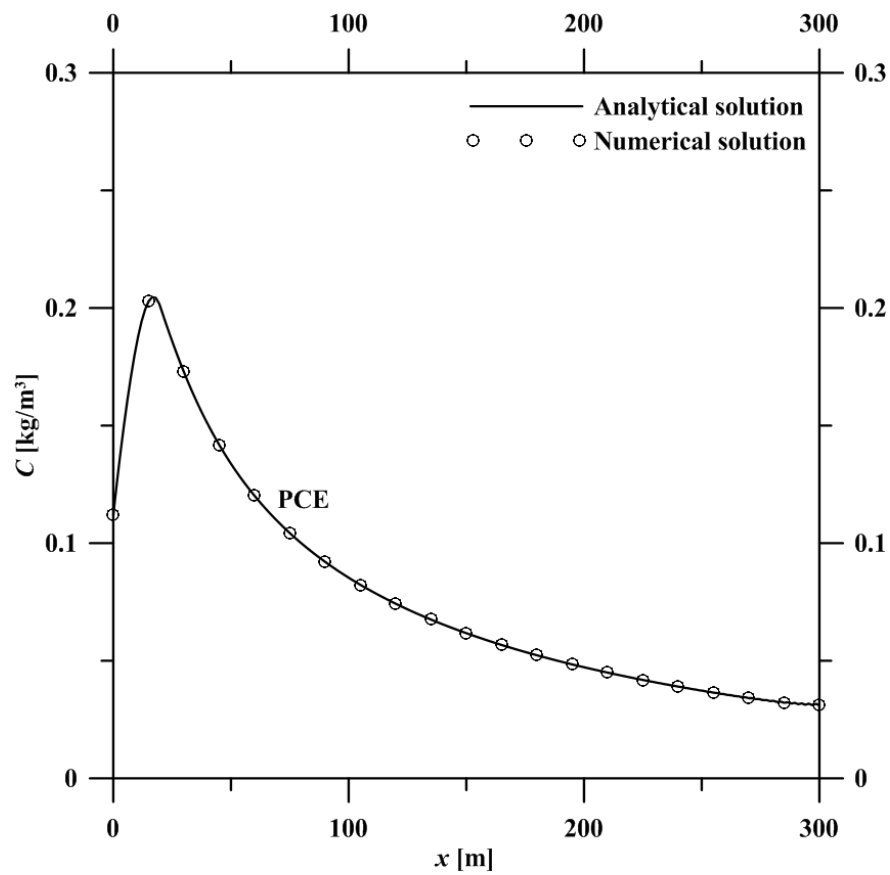


圖 4-7 PCE 之解析解與數值解濃度分布情形

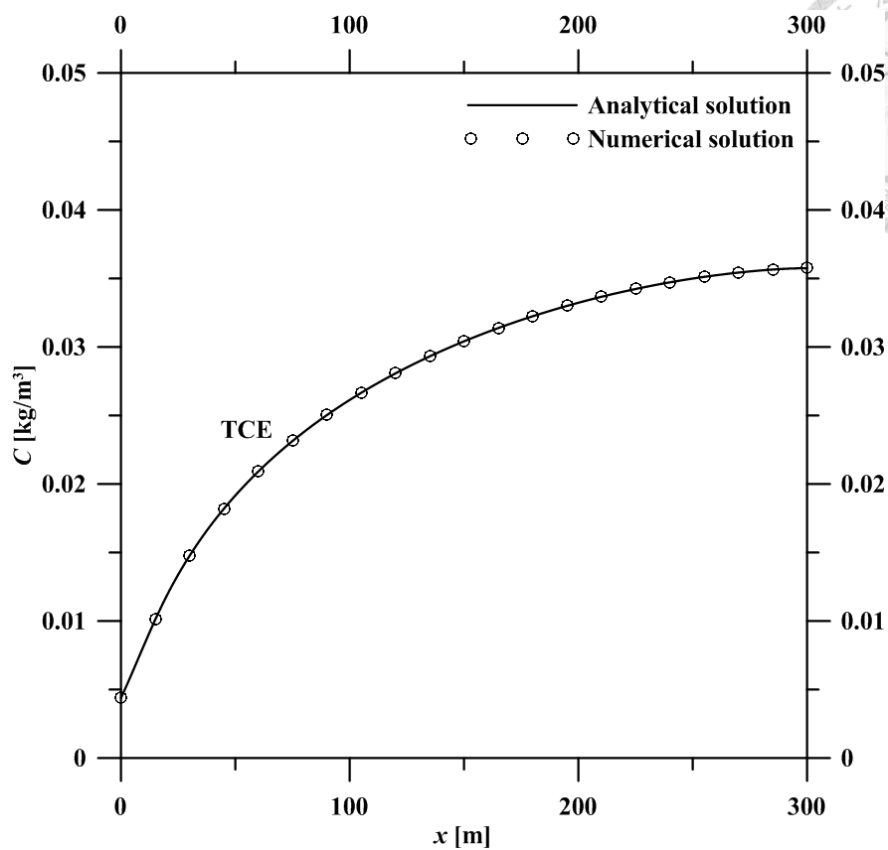


圖 4-8 TCE 之解析解與數值解濃度分布情形

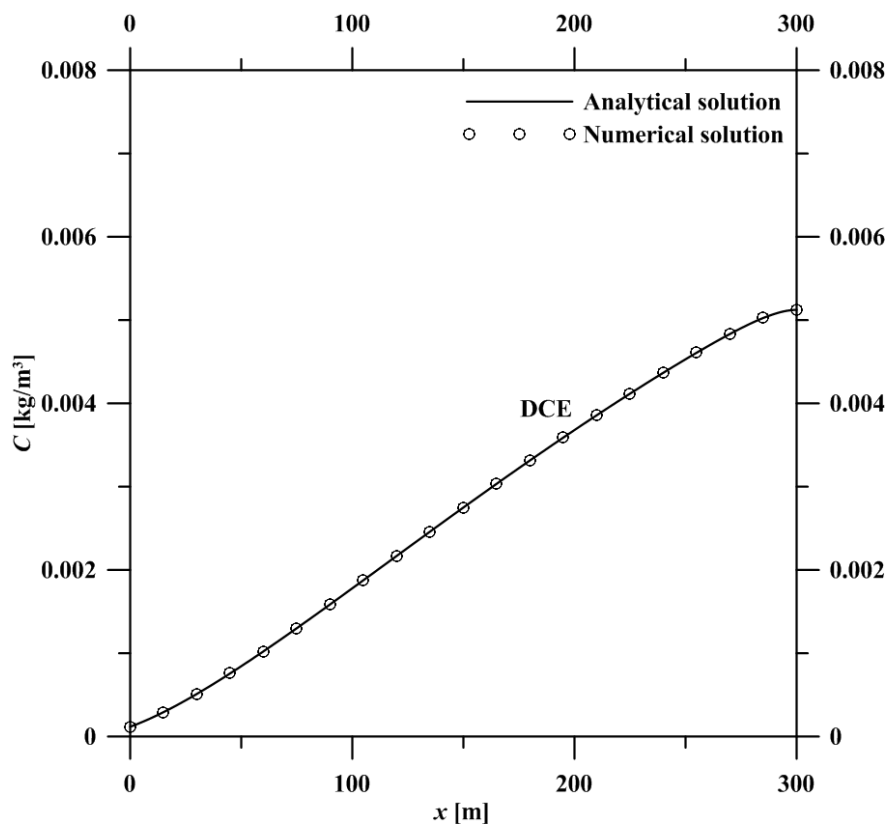


圖 4-9 DCE 之解析解與數值解濃度分布情形

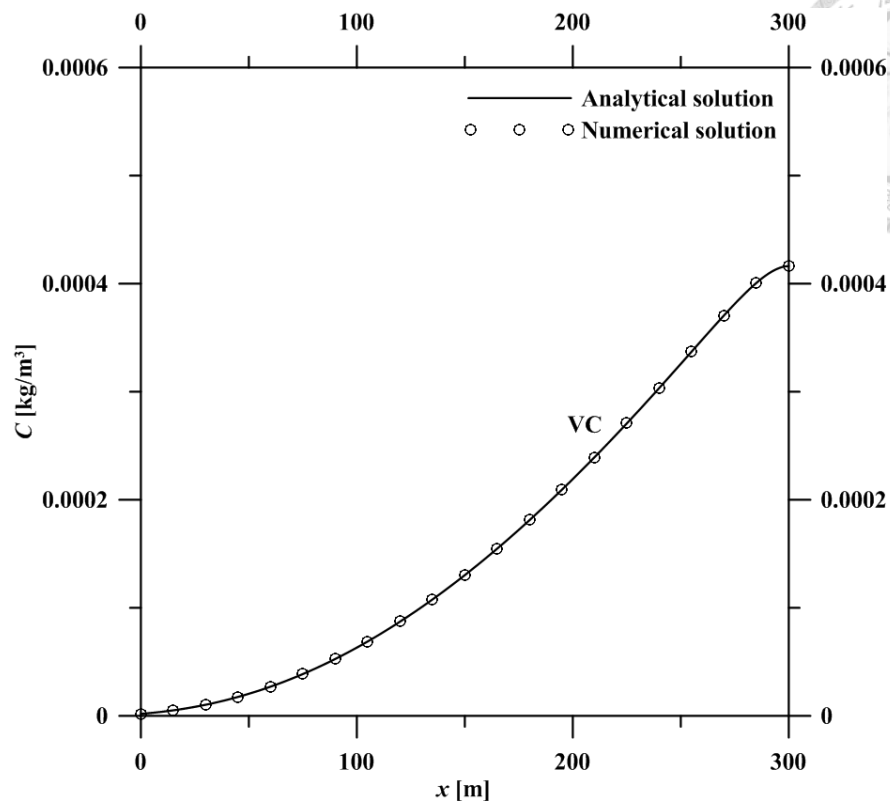


圖 4-10 VC 之解析解與數值解濃度分布情形

## 第五章 模式現地場址應用



### 5-1 現地場址應用

本研究發展具多內部源二維多物種溶質傳輸模式，並應用此模式分析自然衰減下的含氯有機污染場址。案例參考 Clement et al. (2000)之 Dover 空軍基地污染場址 (Dover site)，其中包含 13 處推測之污染源位置，而污染物主要為含氯有機溶劑 PCE 和 TCE，模式配合現地水文地質參數模擬場址含氯污染團之傳輸與衰減情形，預測場址於 10、20、30 及 40 years 的污染團濃度分布情境，並與 Clement et al. (2000)之 PCE 及 TCE 現地濃度數據分布圖做比較。本章節主要分成三部分介紹 Dover site 含氯有機溶劑污染場址，包含(1)背景介紹(2)污染物分布及現地參數(3)模式現地場址應用。

#### 5-1-1 背景介紹

過去各種軍事行動的作業造成 Dover site 土壤與地下水污染。污染物包含碳氫燃料和含氯溶劑 PCE 和 TCE。場址北部中央之 TCE 污染團被檢測出是全區最大的污染團。多物種污染團源於過去各種飛行載具維修作業產生的廢棄物或滲漏。相對 TCE 污染團而言，較小的 PCE 污染團亦源於這些污染源。1994 年工業和政府機關聯盟組織—整治技術研究論壇(Remediation Technology Development Forum, RTDF)的含氯溶劑生物整治工作團隊開始進行監測式自然衰減法於 Dover site 含氯有機污染場址的可行性評估。監測式自然衰減法係指在非人為介入下，合理時間內利用土壤及地下水系統物理或化學、生物反應等自然過程將土壤或地下水中的污染物予以清除或減少。現地過程包含生物降解、延散、稀釋、吸附、揮發及污染物化學或生物穩定、轉化或破壞作用。計畫決定採用監測式自然衰減法作為整治方法必須仰賴足夠的現地場址特徵資料。此外，為了表現場址整治方法的效能評估需要利用解析或數值方法模擬複雜的降解過程。由於大多數污染問題涉及多物種污染物，能夠模擬多物種反應傳輸之模式在自然降解的研究上有更大的實用性。



### 5-1-2 污染物分布及現地參數

根據 Clement et al. (2000) 現地蒐集的污染物資料顯示，污染物大多為含氯有機溶劑 PCE 及 TCE，且地下水監測資料亦顯示 TCE 為主要污染物，其次為 PCE。如圖 5-1 所示，場址內有 13 處推測之污染源位置，皆位於場址北部中央位置。場址地下水位等高線如圖 5-2 所示，如圖可知場址為非均勻流場，根據文獻指出，地下水流大致從東北往西南方邊界 St. Jones 河灣流去。

根據文獻中的污染源分布位置與污染物的傳輸特性，本研究沿著主要地下水流方向發展一個概念化流場模型如圖 5-3 所示，流場長 2000 m、寬 1000 m，地下水流沿著  $x$  方向速度為  $66.75 \text{ m year}^{-1}$ ，縱向延散係數為  $813.83 \text{ m}^2 \text{ year}^{-1}$ ，側向延散係數為  $162.77 \text{ m}^2 \text{ year}^{-1}$ ，現地參數如表 5-1 所示。設定 13 個污染源注入，且每個污染源為  $1\text{m} \times 1\text{m}$  的正方形區域，並考慮主要污染源為 PCE 及 TCE，模擬時間總長為 40 years，且每 10 years 為一個單位共分四個周期，每個周期所釋出之 PCE 及 TCE 質量均不同，質量釋出率如表 5-2 所示。

### 5-1-3 模式現地場址應用

由於過去軍事作業產生的廢棄物處置不當，造成 Dover site 土壤與地下水受到含氯有機溶劑污染，RTDF 遂利用監測式自然衰減法進行場址整治，本研究利用發展的具多內部源二維多物種解析解模式配套 Dover site 現地水文地質參數，模擬場址整治後污染物之衰減與傳輸情形。如表 5-2 所示，在數學模式設定上考慮場址內 13 個污染源於四個週期之 PCE 及 TCE 污染源注入情形，分別模擬場址於 10、20、30 及 40 years 的 PCE 及 TCE 污染團濃度分布情境，並與 Clement et al. (2000)  $t=40$  years 之 PCE 及 TCE 現地濃度數據分布圖做比較。

## 5-2 結果與討論

圖 5-4 至圖 5-7 為本研究所發展之模式模擬 Dover site 含氯有機污染場址於 10、20、30 及 40 years 的 PCE 濃度分布情境，從圖 5-4 中可以看出模擬區域有一個較

高濃度的點源釋放，為表 5-2 中第 5 號污染源造成流場濃度集中現象，隨著模擬時間增加，污染物也隨著地下水流遷移，在模擬時間為 20 年時，第 5 號及第 9 號污染源濃度達到最高，以 PCE 污染團濃度  $200\text{ }\mu\text{g/L}$  區域面積為例，此時面積達到最大，模擬時間為 30 年時，面積逐漸縮小，由表 5-2 的質量釋出率發現第三周期(模擬時間達 30 年)之後各 PCE 污染源之質量釋出率開始下降，而在模擬時間為 40 年時濃度  $200\text{ }\mu\text{g/L}$  區域面積為最小，表示 PCE 之質量釋出率漸趨平緩，從表中觀察可知第一個物種 PCE 已逐漸降解成第二個物種 TCE，此處為本研究針對 PCE 四個周期的濃度分布變化之模擬結果。

圖 5-8 為  $t=40\text{ years}$  時 PCE 於 Dover site 現地數據濃度分布圖，從圖中可看出污染團有濃度集中的現象且隨地下水流大致往南遷移。圖 5-9 為本研究發展之模式與 Dover site 現地數據在模擬時間為 40 years 時 PCE 濃度為  $200\text{ }\mu\text{g/L}$  區域面積比較，由圖可知本研究發展的模式模擬之結果與 Dover site 現地數據無法完全吻合，因本研究簡化地下水流流動方向並假設地下水流沿著東北往西南方向均勻流動，不符合現地複雜的地下水流況。但模擬結果與現地數據仍有部分區域重疊，因此本研究發展的模式在情境預測上可做為模擬結果之參考與快速計算的工具。

圖 5-10 至圖 5-13 為本研究所發展之模式於 10、20、30 及 40 years 的 TCE 濃度分布情境，TCE 污染團濃度除了 TCE 自身降解反應影響外，亦會受到 PCE 降解反應影響。從圖 5-10 可看出第一周期時，第 5 號污染源造成污染團濃度集中現象，且隨地下水流遷移，以 TCE 污染團濃度  $1000\text{ }\mu\text{g/L}$  區域面積為例，在模擬時間為 20 年時，面積達到最大，且濃度集中在第 5、9 及 11 號污染源位置，尤其第 9 及第 11 號污染源濃度釋出率突然增加，可能由第一周期時第 5 號污染源質量釋出隨地下水流遷移至第 9 及第 11 號有關，在模擬時間為 30 年時  $1000\text{ }\mu\text{g/L}$  區域面積逐漸縮小，至模擬時間為 40 年時濃度  $1000\text{ }\mu\text{g/L}$  區域面積為最小，顯示 TCE 污染團逐漸降解成 DCE。

圖 5-14 為  $t=40\text{ years}$  時 TCE 於 Dover site 現地數據濃度分布圖，由圖可知污染團濃度集中在特定區域且隨著地下水流大致往南遷移。圖 5-15 為本研究發展之

模式與 Dover site 現地數據在模擬時間為 40 years 時 TCE 濃度為 1000  $\mu\text{g/L}$  區域面積比較，由圖可知本研究發展之模式無法與 Dover site 現地數據吻合，且污染團 1000  $\mu\text{g/L}$  之範圍相對於現地數據較小，但污染團流向均隨同一方向流動，本研究發展之模式由第四章收斂性測試可知，在模擬大尺度流場時需要較多累加次數，且當流場長度超過 300 m 時， $Pe$  值大於 25， $x$  越接近邊界處時越不容易達到收斂，模擬結果容易產生誤差。

圖 5-9 與圖 5-15 顯示模式模擬與現地數據比較，雖有部分濃度分布區域重疊，但仍無法準確預測污染團濃度分布情形。因解析解模式在數學設定上假設地下水流為均勻流場，但真實情況之現地場址通常為非均勻流場，且本研究發展之模式在模擬大尺度流場時， $Pe$  值大於 25 時模式不容易達到收斂，模擬結果容易產生誤差。本研究發展之模式亦無法模擬現地場址複雜的好氧及厭氧反應。故本研究發展之解析解模式適合應用在中小尺度( $Pe \leq 25$ )且地下水流為均勻單一方向之流場。

本研究發展的具多內部源溶質傳輸解析解模式可模擬流場任意位置污染注入情形，對於預測污染物的濃度與分布與評估污染整治情形有很大的幫助，且了解污染物的傳輸與宿命對於未來土壤及地下水污染整治有相當大的幫助，除了能夠預測污染物的擴散情形可幫助限制污染物繼續擴大，亦可作為污染場址相關風險評估的工具，故本研究發展的數學模式可適當應用在現地場址的污染調查上。

### 5-3 各模式之比較

在評估污染傳輸模式的適用性時，除了與現地數據作比較外，亦藉由各種模式模擬結果作比較，以評估模式的適用性。故本研究藉由與各種解析解模式作比較，來評估發展的解析解模式的適用性。

為了評估發展的模式模擬 Dover site 含氯有機污染物濃度分布的正確性，利用 Dover site 現地數據分別與本研究發展的解析解模式、Atteia et al. (2008)發展之半解析解模式 MIKSS 及 Clement et al. (2000)使用 RT3D 模擬之結果作比較。

圖 5-16 至圖 5-18 為 Dover site 現地數據與各模式模擬 PCE 污染團 200  $\mu\text{g/L}$  濃



度區域面積之比較，結果顯示各模式雖然無法與現地數據吻合，但仍有部分模擬區域重疊，其中本研究發展的模式與 RT3D 在模擬結果上較 MIKSS 準確。圖 5-19 至圖 5-21 為 Dover site 現地數據與各模式模擬 TCE 污染團 1000  $\mu\text{g/L}$  濃度區域面積之比較，由結果可知在模擬 TCE 污染團濃度上，本研究發展的解析解模式與 RT3D 及 MIKSS 比較有較明顯的誤差。研究可透過進一步評估地下水流況以改進模擬之結果。

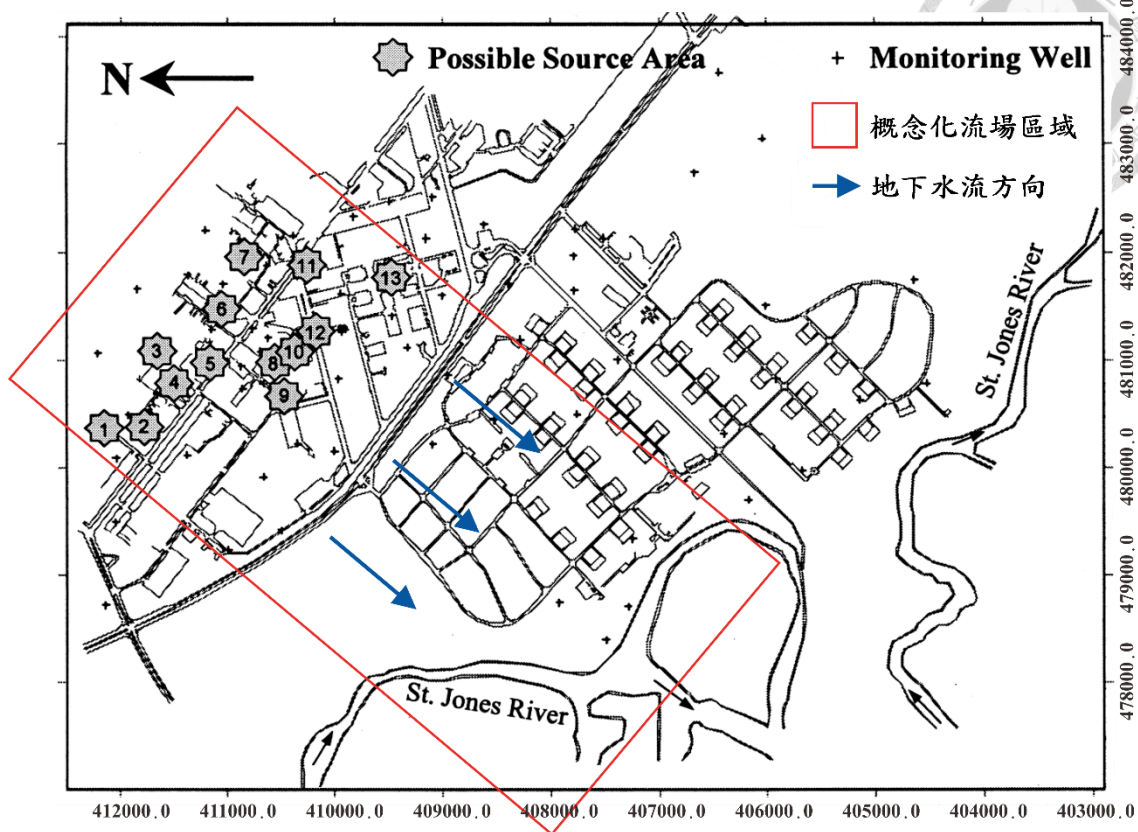


圖 5-1 Dover site 示意圖 (From: Clement et al. 2000)

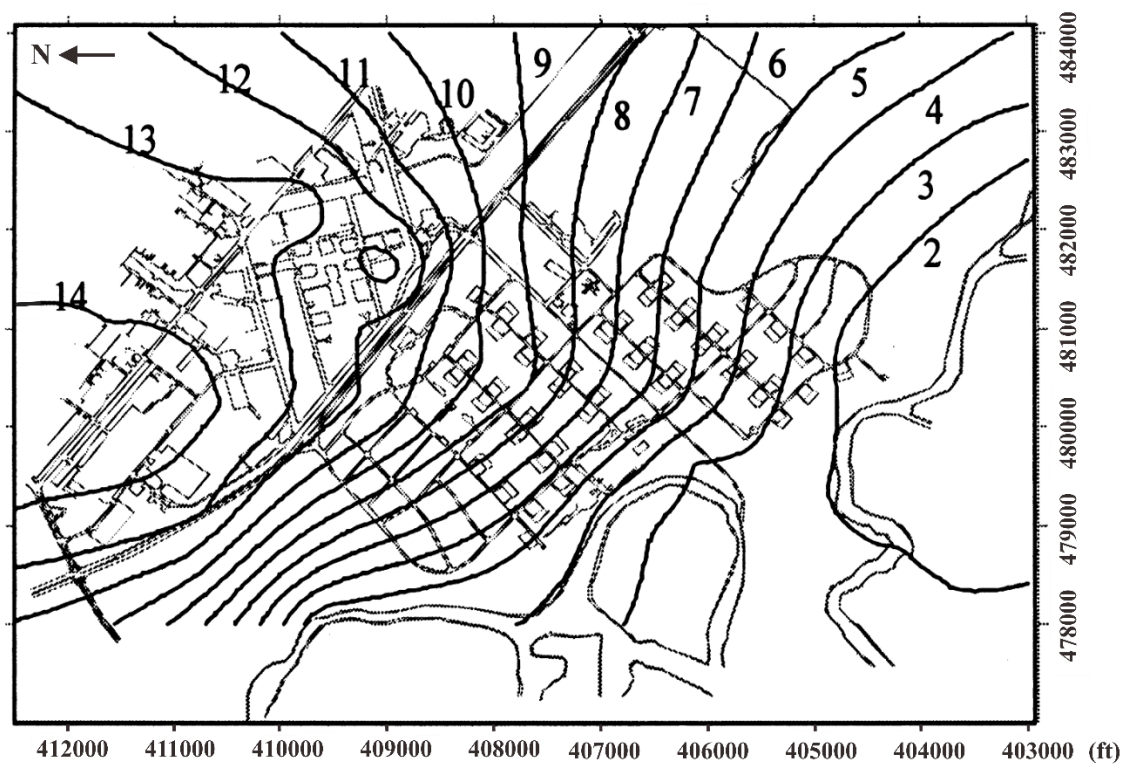


圖 5-2 Dover site 地下水位等高線圖(單位=ft)(From: Clement et al. 2000)

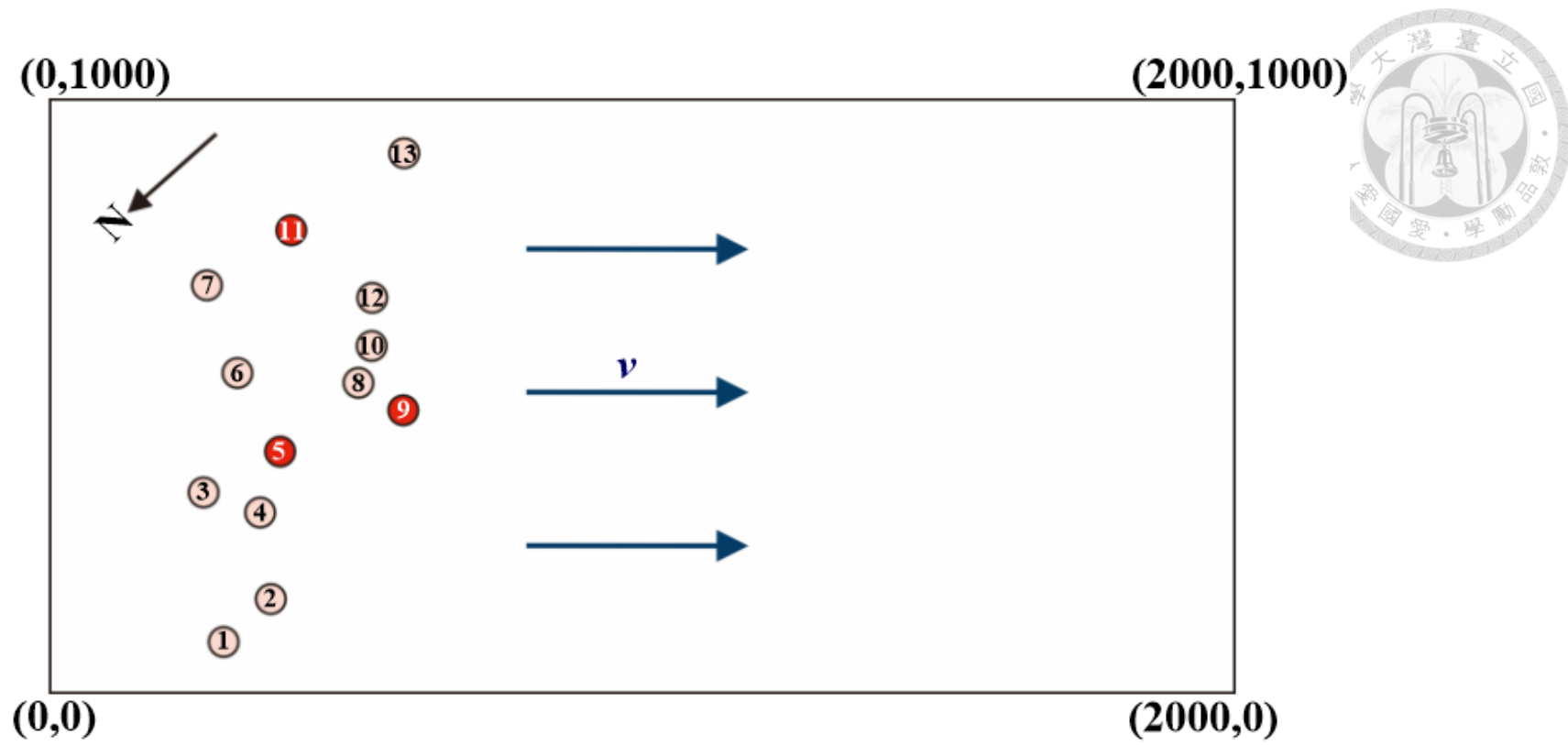


圖 5-3 Dover site 概念化流場模型

表 5-1 Dover site 現地參數(From: Clement et al. 2000)

參數	數值
流場長度 [m]	2000
流場寬度 [m]	1000
地下水流速度 [ $\text{m year}^{-1}$ ]	66.75
縱向延散係數 [ $\text{m}^2 \text{year}^{-1}$ ]	813.83
側向延散係數 [ $\text{m}^2 \text{year}^{-1}$ ]	162.77
PCE 一階降解常數 [ $\text{year}^{-1}$ ]	0.1314
TCE 一階降解常數 [ $\text{year}^{-1}$ ]	0.1261
PCE 遲滯因子 [-]	1.3
TCE 遲滯因子 [-]	1.2

表 5-2 Dover site 污染源預估質量釋出率， $\dot{m}$  ( $\text{kg year}^{-1}$ )(From: Clement et al. 2000)

Source number	Stress period#1		Stress period#2		Stress period#3		Stress period#4	
	PCE	TCE	PCE	TCE	PCE	TCE	PCE	TCE
1	1	10	2	10	1	8	1	1
2	1	2	1	2	1	1	1	0
3	1	52	1	1	0	1	0	1
4	1	19	2	19	2	8	2	2
5	25	413	25	165	17	74	0	17
6	1	9	0	1	0	1	0	1
7	1	1	1	1	1	1	0	0
8	0	5	0	5	0	5	0	5
9	10	1	31	517	10	1	1	1
10	0	41	0	41	0	4	0	2
11	2	0	0	413	0	0	0	0
12	0	21	0	21	0	17	0	2
13	0	0	0	0	0	0	0	0

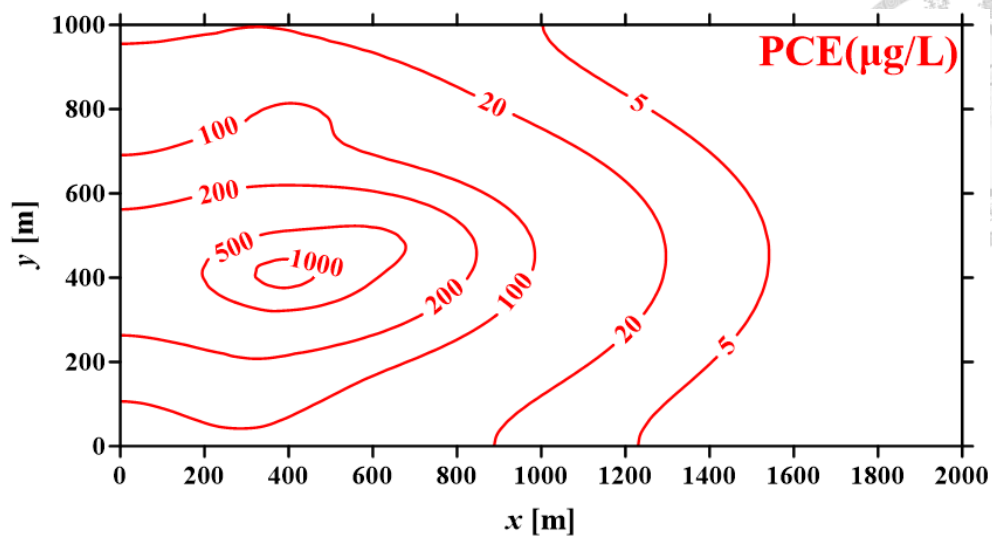


圖 5-4 本研究發展模式模擬  $t=10$  years 的 PCE 濃度分布

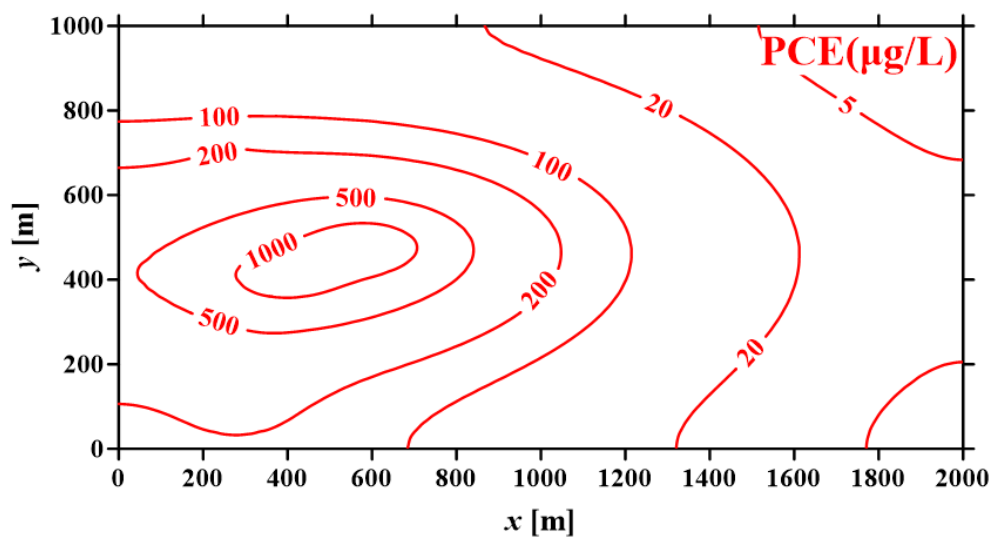


圖 5-5 本研究發展模式模擬  $t=20$  years 的 PCE 濃度分布

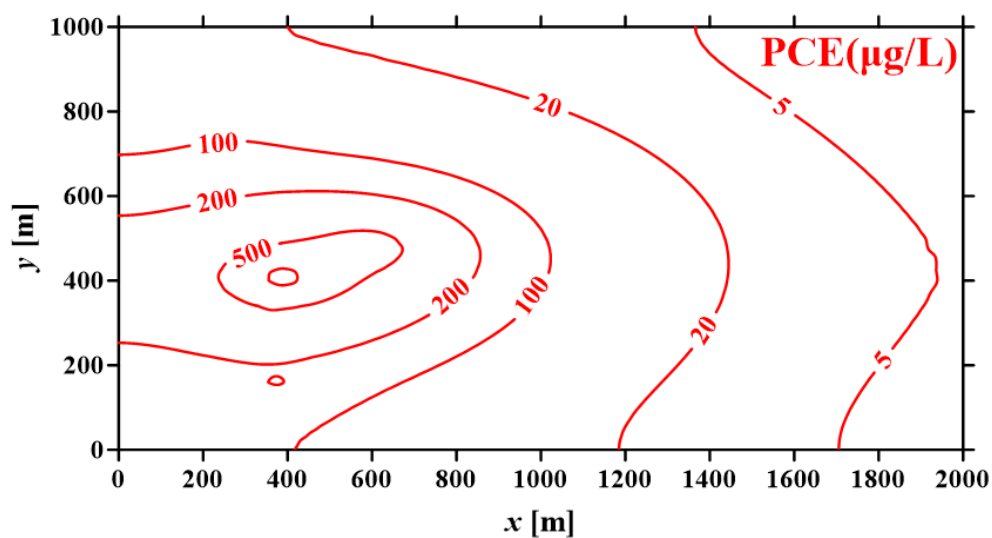


圖 5-6 本研究發展模式模擬  $t=30$  years 的 PCE 濃度分布

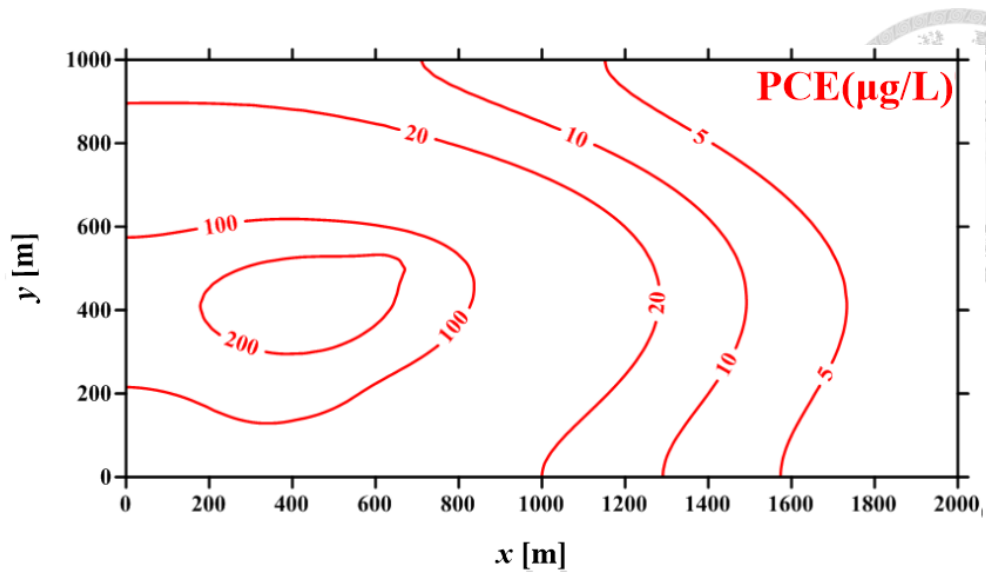


圖 5-7 本研究發展模式模擬  $t=40$  years 的 PCE 濃度分布

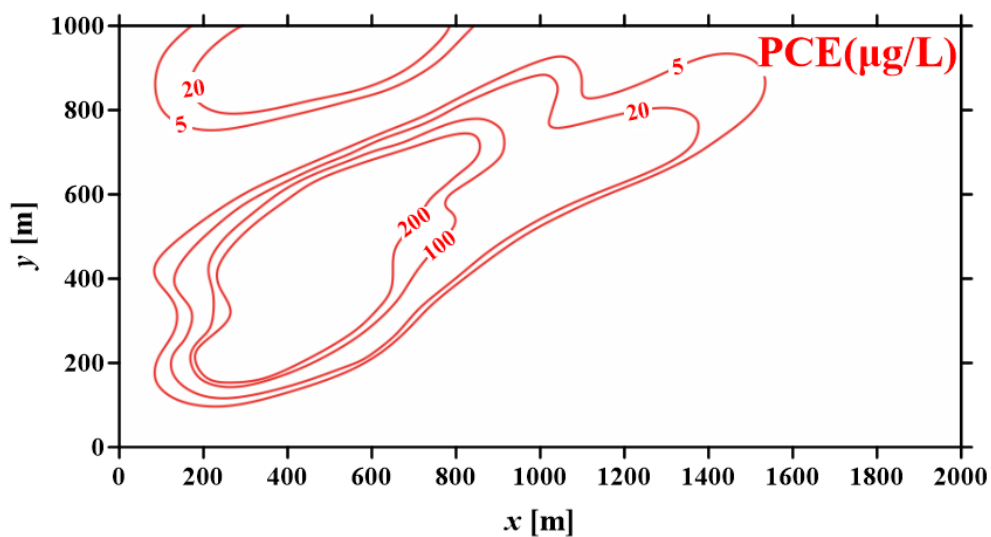


圖 5-8 現地數據模擬  $t=40$  years 的 PCE 濃度分布

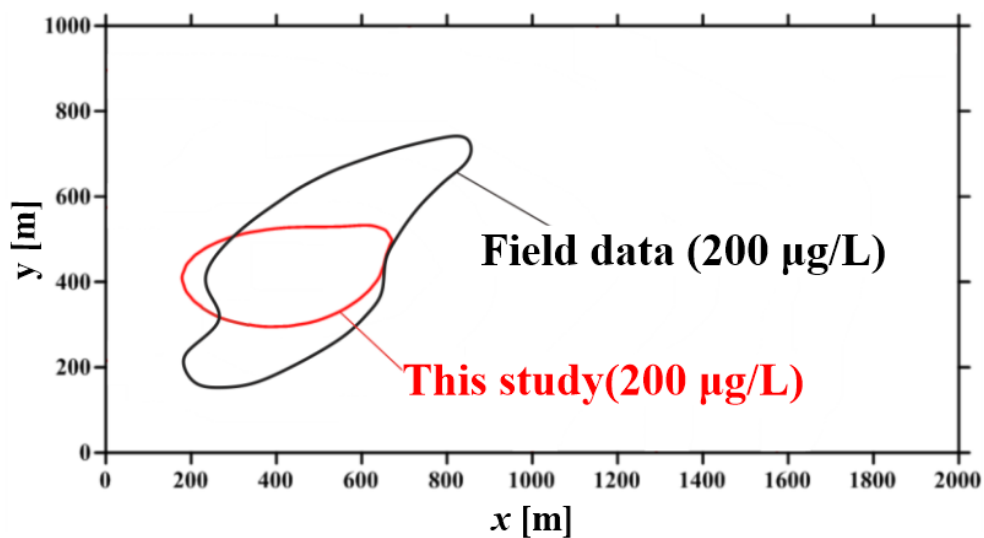


圖 5-9 現地數據與本研究發展模式在 40 years PCE 濃度分布為  $200 \mu\text{g/L}$  比較

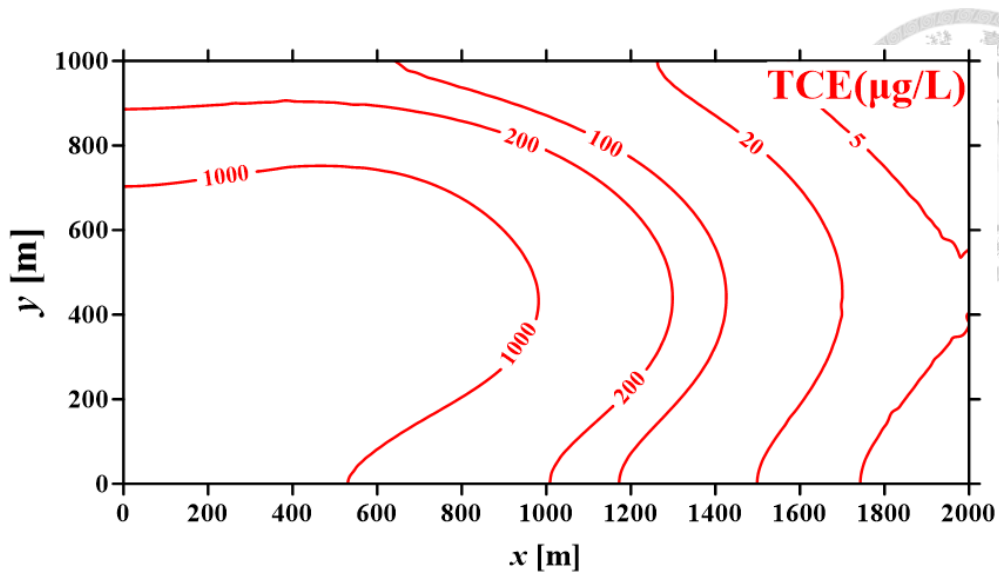


圖 5-10 本研究發展模式模擬  $t=10$  years 的 TCE 濃度分布

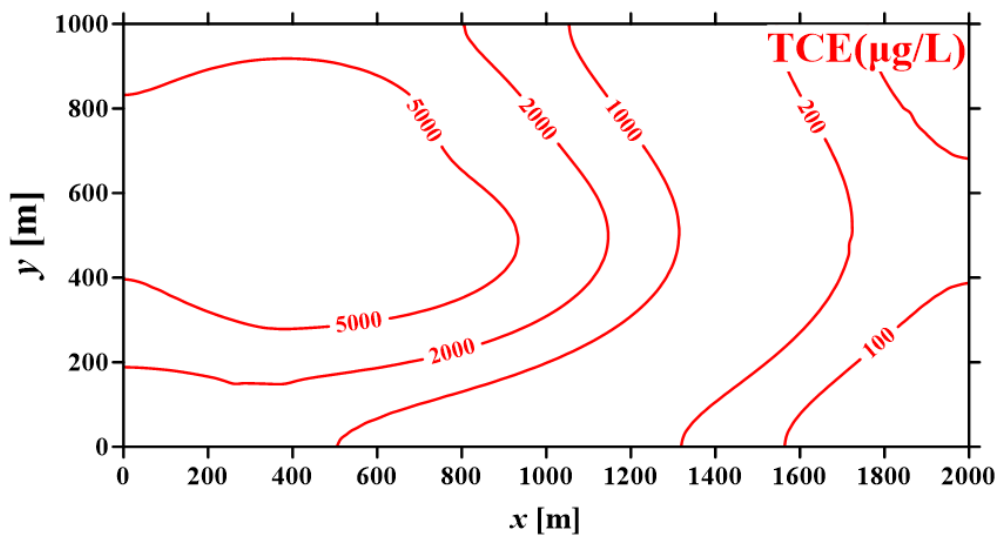


圖 5-11 本研究發展模式模擬  $t=20$  years 的 TCE 濃度分布

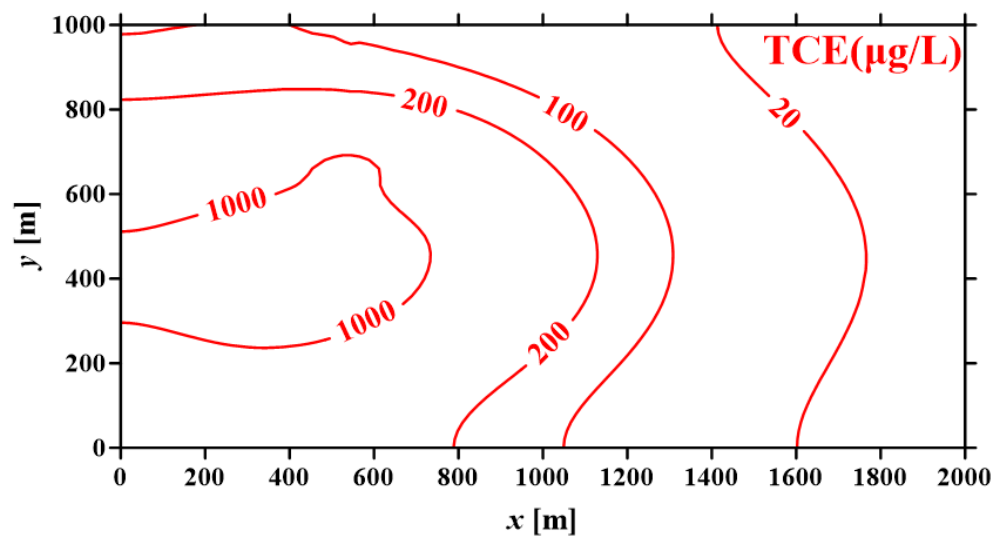


圖 5-12 本研究發展模式模擬  $t=30$  years 的 TCE 濃度分布

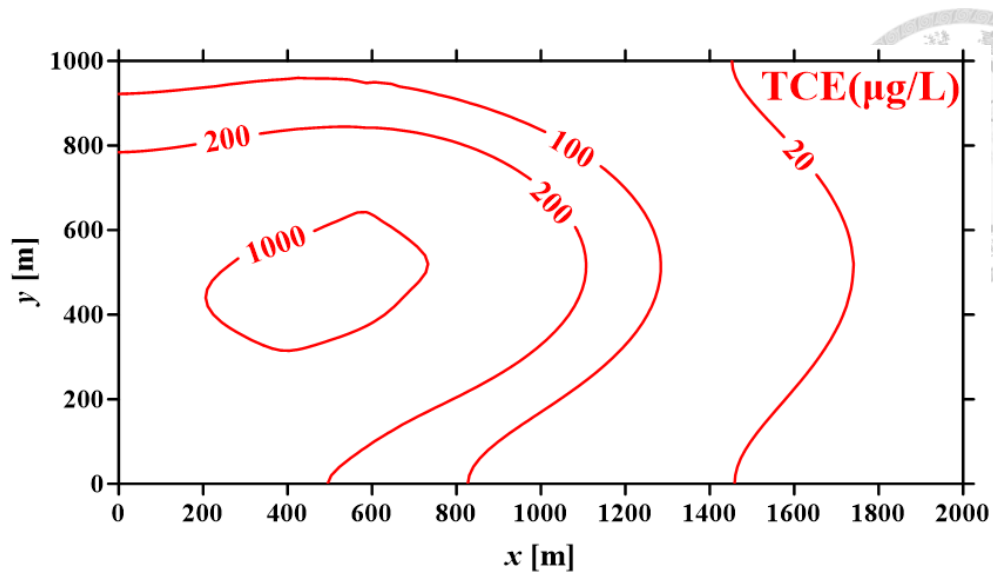


圖 5-13 本研究發展模式模擬  $t=40$  years 的 TCE 濃度分布

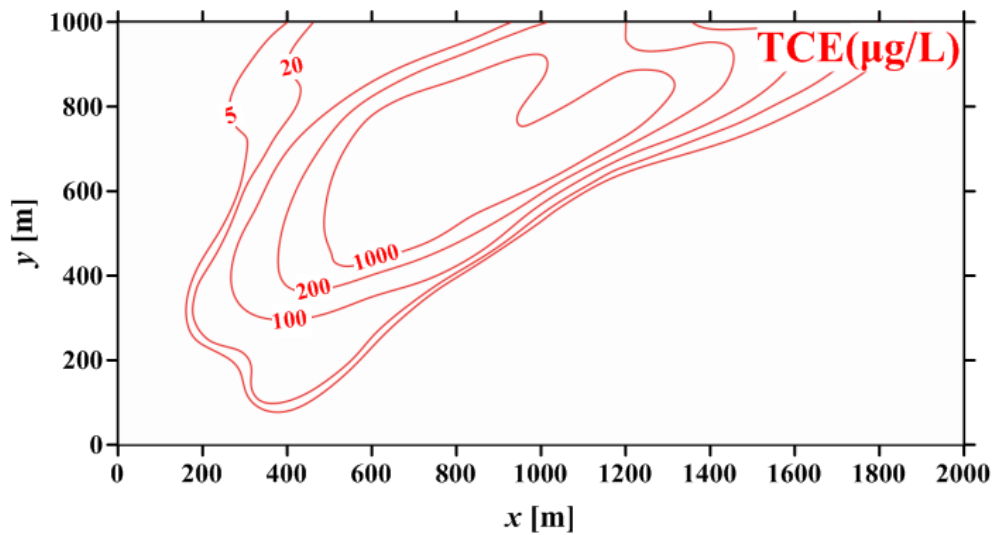


圖 5-14 現地數據模擬  $t=40$  years 的 TCE 濃度分布

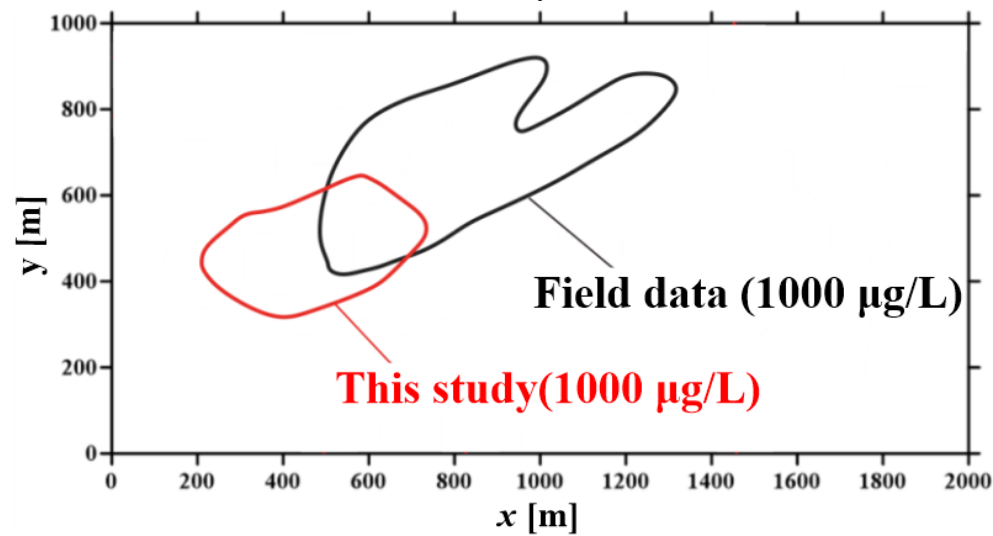


圖 5-15 現地數據與本研究發展模式在 40 years TCE 濃度分布為 1000  $\mu\text{g/L}$  比較



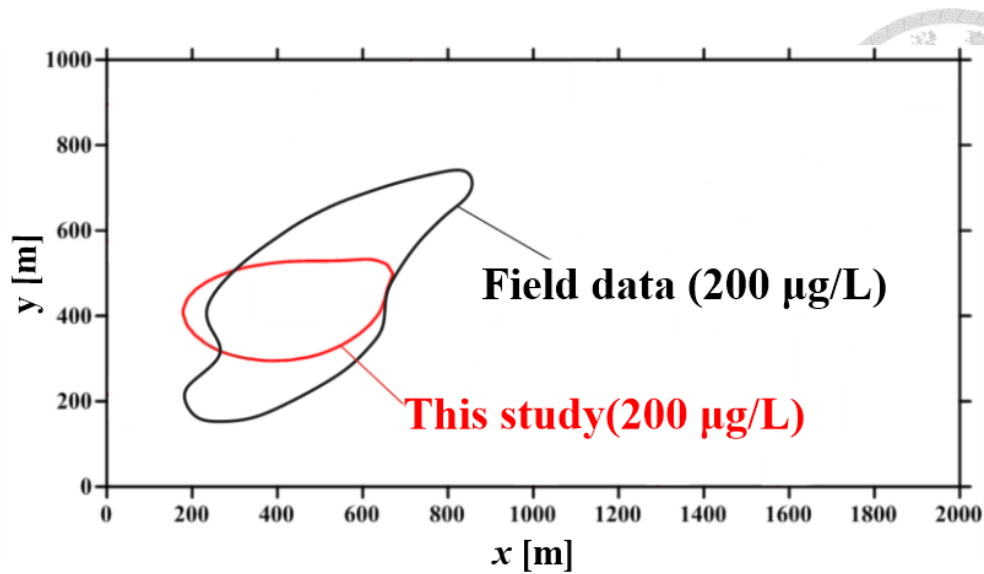


圖 5-16 本研究發展之模式與現地數據之 PCE 濃度分佈比較

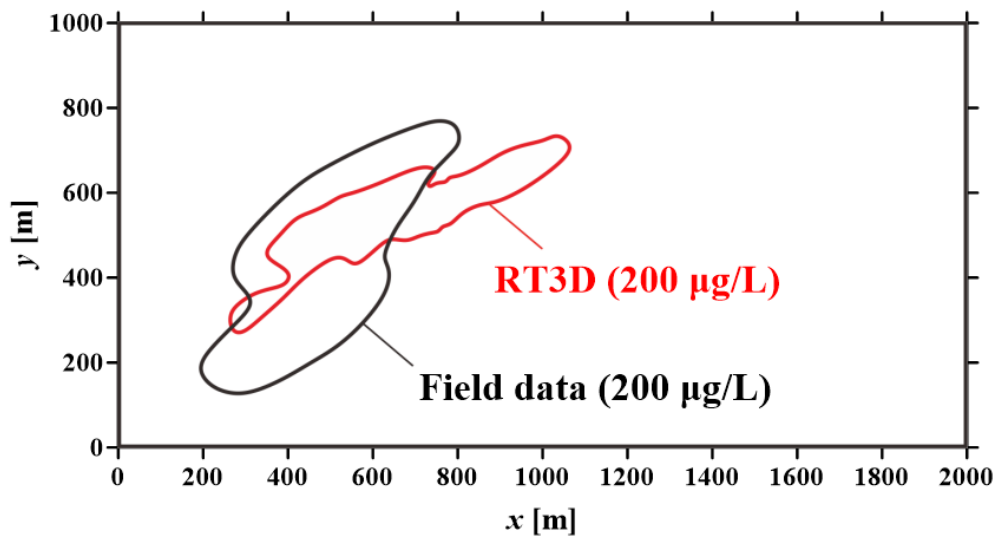


圖 5-17 RT3D 與現地數據之 PCE 濃度分佈比較

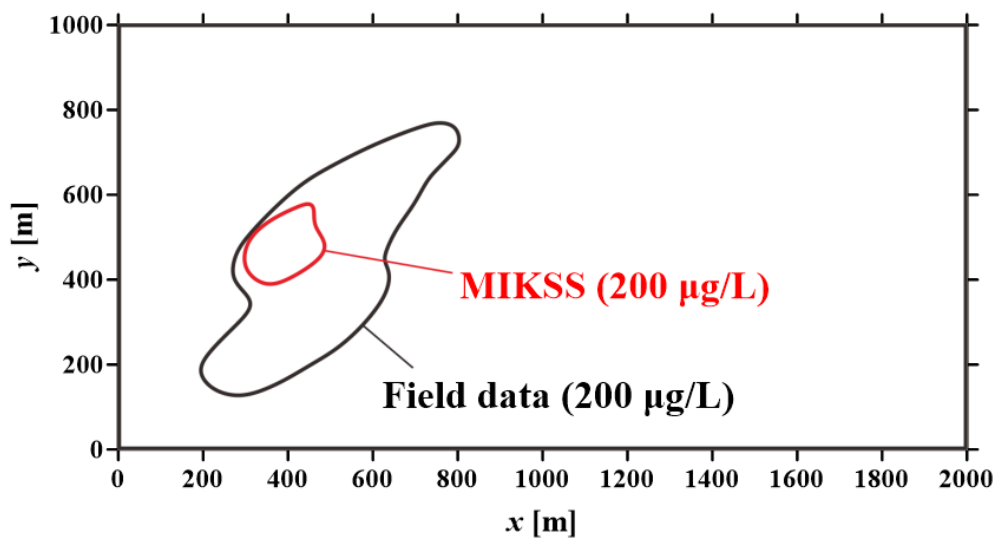


圖 5-18 MIKSS 與現地數據之 PCE 濃度分佈比較

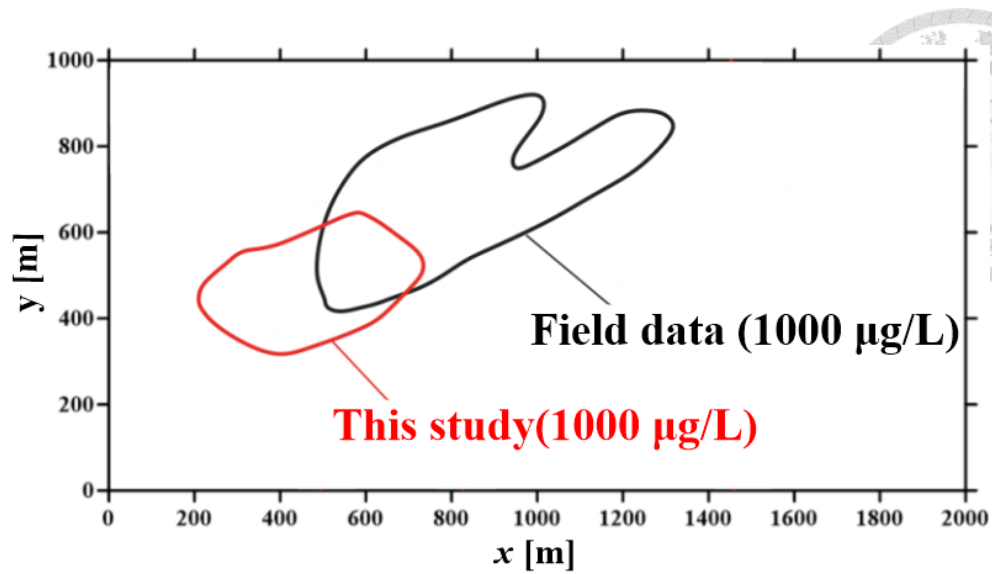


圖 5-19 本研究發展之模式與現地數據之 TCE 濃度分佈比較

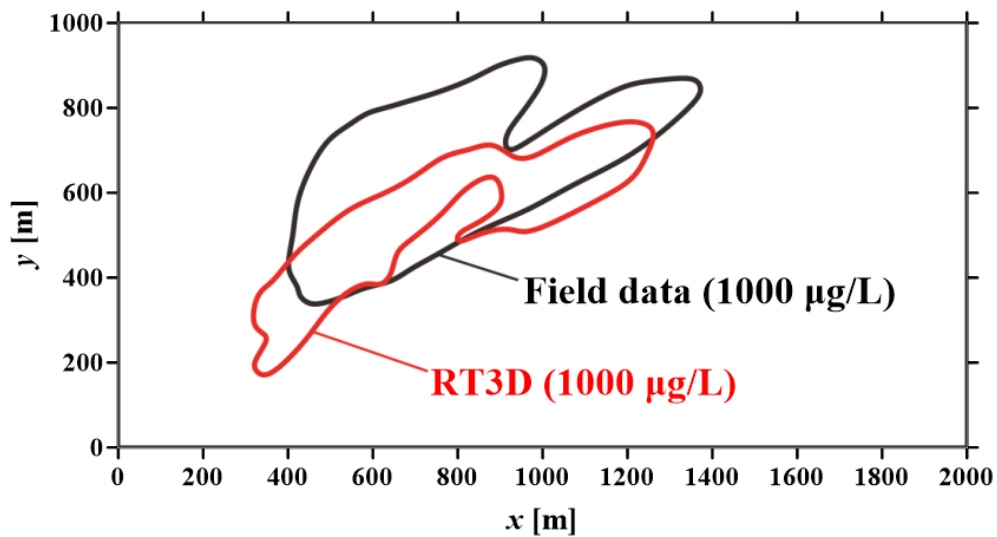


圖 5-20 RT3D 與現地數據之 TCE 濃度分佈比較

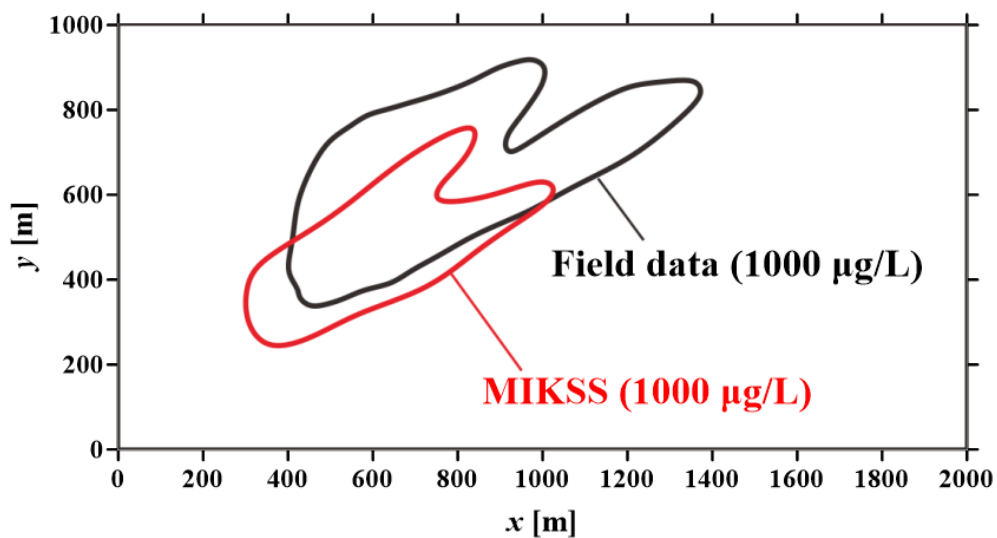


圖 5-21 MIKSS 與現地數據之 TCE 濃度分佈比較

## 第六章 結論與建議



### 6-1 結論

前人研究之邊界源解析解模式已被廣泛研究與討論，但現地場址通常為任意位置多物種污染源注入情形，故在探討具多內部源溶質傳輸污染問題時容易受到限制且不利廣泛應用。而過去發展的單物種傳輸模式無法模擬序列降解下多物種的衰減與傳輸情形。本研究發展具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解模式，並考慮移流、延散傳輸、線性平衡吸附及一階衰減反應，以描述二維溶質的傳輸行為。

本研究推導解析解過程中，因為使用 finite Fourier cosine 轉換與廣義型積分轉換消去空間微分項，故產生兩個無窮級數  $l$ 、 $n$  累加， $Pe$  較大的情況下所需較多的累加項數  $l$ 、 $n$  才能達成收斂，反之  $Pe$  較小時達成收斂所需的累加項數  $l$ 、 $n$  較少。發展之解析解與有限差分數值解在不同  $Pe$  值下均有良好的驗證結果，並確認此模式解析解推導的正確性。

本研究接著針對實際的含氯有機污染場址進行現地模擬，並模擬多物種污染團序列降解反應下的濃度分布情形，其中由於污染源為 DNAPL 的殘留項，較不適合做為邊界條件，故本研究考慮多個內部源注入較符合實際情況，模式可快速進行長時間情境的模擬，且對於場址內污染物的擴散與整治情況能夠有初步的了解。由模擬結果可知，發展的模式可表現多污染源釋出情形，並表現污染團濃度集中及隨地下水流遷移的現象，但與 Dover site 現地數據比較發現無法準確預測污染團濃度分布情形，亦顯示模式在模擬大尺度流場時，無法準確預測地下水流況，且  $Pe$  大於 25 時解析解模式不容易達到收斂，模擬結果在  $x \geq 300$  m 容易產生誤差。



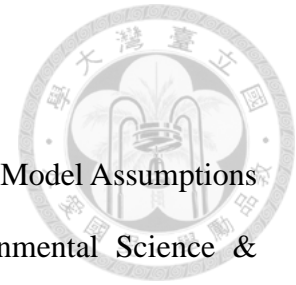
## 6-2 建議

具多內部源溶質傳輸模式可以幫助了解現地場址污染源的釋出與傳輸情形，並可作為土壤與地下水污染整治參考與依據，而現地情況多為三維流場，溶質傳輸除了受到縱向與側向延散效應影響外，地下水流與污染物傳輸亦與流場厚度與重力影響有關，故本研究發展的具多內部源二維多物種溶質傳輸解析解方法可擴展至求解三維溶質傳輸解析解模式中，可更完整的描述污染物的溶質傳輸情形。

本研究發展的解析解模式考慮線性平衡吸附作用並假設延散係數為常數，可進一步擴展至考慮非平衡吸附或尺度延散作用下的溶質傳輸模式，以描述各種不同情況溶質傳輸情形。

具多內部源多物種溶質傳輸模式可嘗試應用在其他中小尺度或是  $Pe \leq 25$  之流場，並與現地數據比較，討論發展模式的適用性。

## 參考文獻



- Atteia, O., Franceschi, M., Dupuy, A., (2008). Validation of Reactive Model Assumptions with Isotope Data: Application to the Dover Case. *Environmental Science & Technology*, 42, 3289-3295.
- Aziz, C.E., Newell, C.J., Gonzales, J.R., Haas, P., Clement, T.P., Sun, Y., (2000). BIOCHLOR: Natural attenuation decision support system, User's manual version 1.0, EPA/600/R-00/008. USEPA Office of Research and Development, Washington, DC.
- Batu, V., (1989). A generalized two-dimensional analytical solution for hydrodynamic dispersion in bounded media with the first-type boundary condition at the source. *Water Resources Research*, 25 (6), 1125–1132.
- Batu, V., (1993). A generalized two-dimensional analytical solute transport model in bounded media for flux-type finite multiple sources. *Water Resources Research*, 29(8), 2881-2892.
- Bauer, P., Attinger, S., Kinzelbach, W., (2001). Transport of a decay chain in homogeneous porous media: analytical solutions. *Journal of Contaminant Hydrology*, 49, 217-239.
- Chen, J.S., Lai, K.H., Liu, C.W., Ni, C.F., (2011). A novel method for analytically solving multi-species advective–dispersive transport equations sequentially coupled with first-order decay reactions. *Journal of Hydrology*, 420-421, 191-204.
- Chen, J.S., Liang, C.P., Liu, C.W., Li, L.Y., (2016). An analytical model for simulating two-dimensional multispecies plume migration. *Hydrology and Earth System Sciences*, 20, 733-753.
- Chiang, C.Y., Salanitro, J.P., Chai, E.Y., Colthart, J.D., Klein, C.L., (1989). Aerobic biodegradation of benzene, toluene, and xylene in a sandy aquifer-data analysis



- and computer modeling. *Ground Water*, 27,823–834.
- Cho, C.M., (1971). Convective transport of ammonium with nitrification in soil. *Canadian Journal of Soil Science*, 51 (3), 339-350.
- Clement, T.P., (2001). Generalized solution to multispecies transport equations coupled with a first-order reaction network. *Water Resources Research*, 37:157-163.
- Clement, T.P., (1997). RT3D: A modular computer code for simulating reactive multi-species transport in 3-dimensional groundwater systems, Pacific Northwest National Laboratory Report, PNNL-SA 11720.
- Clement, T.P., Sun, Y., Hooker, B.S., Petersen, J.N., (1998). Modeling multi-species reactive transport in groundwater aquifers. *Groundwater Monitoring Remediation*, 18(2), 79-92.
- Clement, T.P., Johnson, C.D., Sun, Y., Klecka, G.M., Bartlett, C., (2000). Natural attenuation of chlorinated ethane compounds: model development and field-scale application at the Dover site. *Journal of Contaminant Hydrology*, 42,113-140.
- Cotta, R.M., (1993). Integral transforms in computational heat and fluid flow. CRC Press, Boca Raton, FL.
- Essaid, H.I., Bekins, B.A., Godsy, E.M., Warren, E., Baedecker, M.J., Cozzarelli, I.M., (1995). Simulation of aerobic and anaerobic biodegradation processes at a crude oil spill site. *Water Resources Research*, 31(12),3309-3327.
- Lu, G., Clement, T.P., Zheng, C., Wiedemeier, T.H., (1999). Natural attenuation of BTEX compounds: model development and field-scale application. *Ground Water*, 37(5), 707-717.
- Lunn, M., Lunn, R.J., Mackay, R., (1996). Determining analytic solution of multiple species contaminant transport, with sorption and decay. *Journal of Hydrology*, 180, 195–210.

Newell, C.J., McLeod, R.K., Gonzales, J., (1996). BIOSCREEN: Natural Attenuation Decision Support System, User's manual version 1.3, EPA/600/R-96/087. USEPA Office of Research and Development, Washington, DC.



Parlange, J.Y., Barry, D.A., Starr, J.L., (1985). Comments on “boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns.” Soil Science Society of America Journal, 49, 1325.

Parlange, J.Y., Starr, J.L., (1978). Dispersion in soil column: effect of boundary conditions and irreversible reactions. Soil Science Society of America Journal, 42, 15-18.

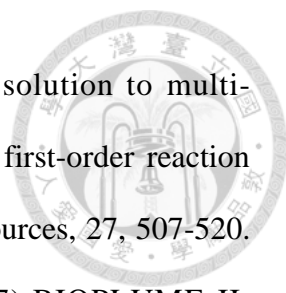
Parlange, J.Y., Starr, J.L., van Genuchten, M.Th., Barry, D.A., Parker, J.C., (1992). Exit condition for miscible displacement experiments in finite columns. Soil Science, 153, 165-171.

Park, E., Zhan, H., (2001). Analytical solutions of contaminant transport from finite one-, two-, three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer. Journal of Contaminant Hydrology, 53 (1-2), 41–61.

Parker, J.C., van Genuchten, M.Th., (1984) Fluxaveraged and volume-averaged concentrations in continuum approaches to solute transport. Water Resources Research, 20, 866-872.

Pérez Guerrero, J.S., Pimentel, L.C.G., Skaggs, T.H., van Genuchten, M.Th., (2009). Analytical solution of the advection-diffusion transport equation using a change-of-variable and integral transform technique. Int. J. Heat Mass Transf., 52, 3297-3304.

Pérez Guerrero, J.S., Skaggs, T.H., van Genuchten, M.Th., (2010). Analytical Solution for Multi-Species Contaminant Transport in Finite Media with Time-Varying Boundary Conditions. Transp Porous Med., 85:171–188.

- 
- Quezada, C.R., Clement, T.P., Lee, K.K., (2004). Generalized solution to multi-dimensional multi-species transport equations coupled with a first-order reaction network involving distinct retardation factors. *Adv. Water Resources*, 27, 507-520.
- Rifai, H.S., Bedient, P.B., Borden, R.C., Haasbeek, J.F., (1987). BIOPLUME II: Computer model of two-dimensional contaminant transport under the influence of oxygen limited biodegradation in ground water. National Center for Ground Water Research, Rice University.
- Rifai, H.S., Bedient, P.B., Wilson, J.T., Miller, K.M., Armstrong, J.M., (1988). Biodegradation modeling at aviation fuel spill site. *Journal of Environmental Engineering*, 114(5), 1007-1029.
- Semprini, L., Kitanidis, P.K., Kampbell, D.H., Wilson, J.T., (1995). Anaerobic transformation of chlorinated aliphatic hydrocarbons in a sand aquifer based on spatial chemical distribution. *Water Resources Research*, 31, 1051-1062.
- Srinivina, V., Clement, T.P., (2007). Analytical solution for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems – Part I: Mathematical derivations. *Advances in Water Resources*, 31, 203-218.
- Srinivina, V., Clement, T.P., (2007). Analytical solution for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems – Part II: Special cases, implementation and testing. *Advances in Water Resources*, 31, 219-232.
- Sun, Y., Clement, T.P., (1999). A decomposition method for solving coupled multi-species reactive transport problems. *Transport in Porous Media*, 37, 327-346.
- Sun, Y., Petersen, J.N., Clement, T.P., Hooker, B.S., (1998). Effects of reaction kinetics on predicted concentration profiles during subsurface bioremediation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 31, 359-372.
- Sun, Y., Petersen, J.N., Clement, T.P., Skeen, R.S., (1999). Development of analytical



solutions for multispecies transport with serial and parallel reactions. *Water Resources Research*, 35, 185-190.

Van Genuchten, M.Th., Alves, W.J., (1982). Analytical solutions of the one-dimensional convective–dispersive solute transport equation. US Department of Agriculture. Technical Bulletin Number 1661.

Van Genuchten, M.Th., (1985). Convective–dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions. *Computer & Geosciences*, 11(2), 129-147.

Van Genuchten, M.Th., Parker, J.C., (1984) Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns. *Soil Science Society of America Journal*, 48, 703-708.

田傑仁(2013)，「層狀地質介質溶質傳輸之解析解」，碩士論文，國立中央大學應用地質研究所。

涂佑霖(2015)，「二維有限域溶質傳輸解析解模式發展」，碩士論文，國立中央大學應用地質研究所。

## 附錄



此附錄提出推導正交化特徵函數  $K(\xi_l, X)$  之過程。根據方程式(3-33)與邊界條

件(3-34)、(3-35)定義特徵值問題如下：

$$\frac{d^2 K(X)}{dX^2} + \xi_l^2 K(X) = 0 \quad (A1)$$

$$\frac{dK(X=0)}{dX} - \frac{Pe_L}{2} K(X=0) = 0 \quad (A2)$$

$$\frac{dK(X=1)}{dX} + \frac{Pe_L}{2} K(X=1) = 0 \quad (A3)$$

方程式(A1)之通解為

$$K(\xi_l, X) = c_1 \cos(\xi_l X) + c_2 \sin(\xi_l X) \quad (A4)$$

將(A4)代入邊界條件(A2)後可得

$$\left[ -c_1 \xi_l \sin(\xi_l X) + c_2 \xi_l \cos(\xi_l X) - \frac{Pe_L}{2} (c_1 \cos(\xi_l X) + c_2 \sin(\xi_l X)) \right]_{X=0} = 0$$

$$c_2 = \frac{Pe_L}{2\xi_l} c_1 \quad (A5)$$

將(A4)代入邊界條件(A3)後可得

$$\left[ -c_1 \xi_l \sin(\xi_l X) + c_2 \xi_l \cos(\xi_l X) + \frac{Pe_L}{2} (c_1 \cos(\xi_l X) + c_2 \sin(\xi_l X)) \right]_{X=1} = 0 \quad (A6)$$

將(A4)代入(A5)後整理可得

$$\left( \xi_l^2 - \left( \frac{Pe_L}{2} \right)^2 \right) \sin \xi_l - Pe_L \xi_l \cos \xi_l = 0 \quad (A7)$$

則特徵方程式為

$$\xi_l \cot \xi_l - \frac{\xi_l^2}{Pe_L} + \frac{Pe_L}{4} = 0 \quad (A8)$$



其中  $\xi_l$  為特徵值，則正交化特徵函數  $K(\xi_l, X)$  可表示為


$$K(\xi_l, X) = \frac{Pe_L}{2} \sin(\xi_l X) + \xi_l \cos(\xi_l X) \quad (A9)$$

而範數之定義為

$$N(\xi_l) = \int_0^1 K(\xi_l, X) \cdot K(\xi_l, X) dX \quad (A10)$$

代入特徵函數(A4)後可得

$$\begin{aligned} N(\xi_l) &= \int_0^1 \left( \frac{Pe_L}{2} \sin(\xi_l X) + \xi_l \cos(\xi_l X) \right)^2 dX \\ &= \int_0^1 \left( \frac{Pe_L^2}{4} \sin^2(\xi_l X) + Pe_L \xi_l \sin(\xi_l X) \cos(\xi_l X) + \xi_l^2 \cos^2(\xi_l X) \right) dX \\ &= \int_0^1 \frac{Pe_L^2}{4} \sin^2(\xi_l X) dX + \int_0^1 Pe_L \xi_l \sin(\xi_l X) \cos(\xi_l X) dX + \int_0^1 \xi_l^2 \cos^2(\xi_l X) dX \\ &= \frac{Pe_L^2}{4} \int_0^1 \frac{1 - \cos(2\xi_l X)}{2} dX + \frac{Pe_L \xi_l}{2} \int_0^1 2 \sin(2\xi_l X) dX + \xi_l^2 \int_0^1 \frac{1 + \cos(2\xi_l X)}{2} dX \\ &= \frac{Pe_L^2}{8} \left( 1 - \frac{\sin(2\xi_l)}{2\xi_l} \right) + \frac{Pe_L \xi_l}{2} \left( -\frac{\cos(2\xi_l)}{2\xi_l} \right) + \frac{\xi_l^2}{2} \left( 1 + \frac{\sin(2\xi_l)}{2\xi_l} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \frac{Pe_L^2}{4} - \frac{Pe_L^2 \sin(2\xi_l)}{8\xi_l} - \frac{Pe_L \cos(2\xi_l)}{2} + \frac{Pe_L}{2} + \xi_l^2 + \frac{\xi_l \sin(2\xi_l)}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) + \frac{(4\xi_l^2 - Pe_L^2) \sin(2\xi_l)}{8\xi_l} - \frac{Pe_L \cos(2\xi_l)}{2} + \frac{Pe_L}{2} \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) + \frac{\left( \xi_l^2 - \frac{Pe_L^2}{4} \right) \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) \sin(2\xi_l)}{\left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) \cdot 2\xi_l} - \frac{\left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) Pe_L \cos(2\xi_l)}{2 \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right)} + \frac{Pe_L}{2} \right) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) \left( 1 + \frac{\left( \xi_l^2 - \frac{Pe_L^2}{4} \right) \sin(2\xi_l)}{\left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) \cdot 2\xi_l} - \frac{Pe_L \cos(2\xi_l)}{2 \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right)} + \frac{Pe_L}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) \left( 1 + \frac{\left( \xi_l^2 - \frac{Pe_L^2}{4} \right) 2 \sin(\xi_l) \cos(\xi_l) - Pe_L \xi_l (2 \cos^2(\xi_l) - 1)}{\left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) \cdot 2\xi_l} + \frac{Pe_L}{2} \right) \\
&= \frac{1}{2} \left( \xi_l^2 + \frac{Pe_L^2}{4} \right) + \frac{2 \cos(\xi_l) \left( \left( \xi_l^2 - \frac{Pe_L^2}{4} \right) \sin(\xi_l) - Pe_L \xi_l \cos(\xi_l) \right) + Pe_L \xi_l}{2\xi_l} + \frac{Pe_L}{2}
\end{aligned}$$

將(A7)代入上式後可得範數

$$N(\xi_l) = \frac{\frac{Pe_L^2}{4} + Pe_L + \xi_l^2}{2} \quad (A11)$$