# 應用監測式自然衰減整治法之可行性評估準則、設計及成效評估等規範建置計畫

期末報告定稿本

附冊三

## 自然衰減評估模式參考手冊

計畫編號：EPA-96-GA13-02-A069

計畫執行期間：民國 96 年 6 月 14 日至 97 年 6 月 30 日

受託單位：美商傑明工程顧問（股）台灣分公司

印製年月：中華民國 97 年 10 月

行政院環境保護署編印

# 自然衰減評估模式參考手冊

# 目　　錄

第一章　BIOSCREEN 模式 ..... 1-1
1.1　BIOSCREEN 模式簡介 ..... 1-1
1.2　BIOSCREEN 模式使用介面 ..... 1-2
1.3　BIOSCREEN 模式操作流程 ..... 1-11

第二章　BIOCHLOR 模式 ..... 2-1
2.1　BIOCHLOR 模式簡介 ..... 2-1
2.2　BIOCHLOR 模式使用介面 ..... 2-2
2.3　BIOCHLOR 模式操作案例說明 ..... 2-12

第三章　BIOPLUME III 模式 ..... 3-1
3.1　BIOPLUME III 模式簡介 ..... 3-1
3.2　BIOPLUME 模式使用介面介紹 ..... 3-2
3.3　BIOPLUME III 模式操作流程 ..... 3-7

# 表　次

表 1.1-1　水力資料 ..... 1-12
表 1.1-2　延散度 ..... 1-13
表 1.1-3　吸附數據 ..... 1-14
表 1.1-4　生物降解資料 ..... 1-15
表 1.1-5　一般性參數 ..... 1-16
表 1.1-6　污染源數據 ..... 1-16
表 1.1-7　比較現場數據 ..... 1-17
表 1.1-8　美國密西西比州，Keesler 空軍基地參數設定範例 ..... 1-18
表 2.2-1　常見含氯有機化合物一階衰減係數與半衰期 ..... 2-7
表 2.2-2　常見含氯有機化合物飽和溶解度 ..... 2-9
表 2.2-3　水文地質資料 ..... 2-14
表 2.2-4　延散度 ..... 2-15
表 2.2-5　吸附性 ..... 2-16
表 2.2-6　生物轉換數據 ..... 2-17
表 2.2-7　一般數據 ..... 2-18
表 2.2-8　污染源數據 ..... 2-19
表 2.2-9　現場比較數據資料 ..... 2-19
表 2.2-10　美國 Cape Canaveral 空軍基地模擬範例 ..... 2-20

# 圖　次

圖 1.1-1　Bioscreen 評估模式軟體參數輸入主畫面 ..... 1-4
圖 1.1-2　Bioscreen 評估模式軟體沿中心線污染濃度輸出畫面
..... 1-4
圖 1.1-3　Bioscreen 評估模式軟體污染帶計算結果輸出畫面 ..... 1-5
圖 1.1-4　Bioscreen 評估模式軟體參數輸入主畫面
(Keesler 空軍基地) ..... 1-19
圖 1.1-5　Bioscreen 評估模式軟體沿中心線污染濃度輸出畫面
(Keesler 空軍基地)..... 1-20
圖 1.1-6　Bioscreen 評估模式軟體計算結果三維濃度輸出畫面
(Keesler 空軍基地)..... 1-21
圖 2.2-1　BIOCHLOR 模式參數輸入主畫面 ..... 2-13
圖 2.2-2　BIOCHLOR 模式參數輸入主畫面
(Cape Canaveral 空軍基地)..... 2-22
圖 2.2-3　BIOCHLOR 模式模擬結果中心線濃度輸出畫面
(Cape Canaveral 空軍基地)..... 2-23
圖 2.2-4　BIOCHLOR 模式模擬結果 TCE 獨立中心線濃度
輸出畫面(Cape Canaveral 空軍基地)..... 2-24
圖 2.2-5　BIOCHLOR 模式模擬結果 TCE 三維濃度輸出畫面
(Cape Canaveral 空軍基地)..... 2-25
圖 3.3-1　BIOPLUME III 模式啓動畫面..... 3-3
圖 3.3-2　BIOPLUME III 模式模擬結果..... 3-6
圖 3.3-3　模式基本架構 ..... 3-8
圖 3.3-4　水流模式之邊界條件..... 3-10
圖 3.3-5　水位資料設定 ..... 3-12
圖 3.3-6　穩定水流模式模擬結果 ..... 3-17

圖 3.3-7　污染物分布影像圖 ..... 3-17
圖 3.3-8　污染傳輸模式濃度設定 ..... 3-18
圖 3.3-9　污染傳輸模式初始濃度執行結果 ..... 3-18
圖 3.3-10　污染傳輸模式傳輸結果 ..... 3-19
圖 3.3-11　污染傳輸模式固定污染源傳輸結果 ..... 3-19
圖 3.3-12　自然衰減模式新增電子接受者來源區域 ..... 3-22
圖 3.3-13　自然衰減 10 年後污染傳輸結果 ..... 3-23
圖 3.3-14　抽水模式之污染傳輸結果 ..... 3-26
圖 3.3-15　新增河川及湖泊定水頭之水流模式結果 ..... 3-26

# 第一章 BIOSCREEN 模式

## 1.1 BIOSCREEN 模式簡介

BIOSCREEN 是一套簡易使用的數值模擬軟體，主要可以模擬因石油化學油品洩漏而造成石油碳氫化合物污染(溶解相部份)場址中自然衰減情況。這一套程式是由德州休士頓地下水服務公司(Groundwater Services, Inc., Houston, Texas，簡稱 GSI)，爲了美國空軍卓越中心 (Air Force Center for Environmental Excellence，簡稱 AFCEE) 位於布魯克斯空軍基地(Brooks Air Force Base)而開發的。軟體程式主要是架構在微軟公司(Microsoft) EXCEL 試算表環境中，以 Domenico 解析溶解質傳輸模式爲基礎開發之模式，其可以模擬因對流、延散、吸附、好氧衰減以及厭氧反應等反應機制，在許多石油碳氫化合物洩漏場址中，不論是好氧的或是厭氧的條件下之生物降解等作用。BIOSCREEN 包括有三種不同的模式類型：

1. 無衰減之溶質傳輸
2. 以一階衰減程序之生物傳輸模式模擬之溶質傳輸(簡單參數輸入)
3. 以瞬間生物降解反應模擬生物降解溶解相傳輸(結合 BIOPLUME 模式)

BIOSCREEN 模式試著解決兩個自然衰減的基本疑問，1.若在沒有執行工程控制或是進一步的污染源削減措施下，溶解相的污染帶到底會移動多遠距離?；以及 2.污染帶在自然衰減程序開始前會滯留多久的時間?

關於第一個問題，BIOSCREEN 以溶質傳輸模式來模擬現地的生物降解情形，並且可以一階衰減或是瞬間反應不同的方式來模擬。模式可以預測污染帶可能最大的移動(或擴散)距離，而由此一預測結果，則可以和下游可能潛在暴露的受體(例如：飲用水井、地下水源補注區等)位置做一比較。而這樣的解析解地下水傳輸模式已經廣泛的應用，而由應用的經驗顯示，特別是污染帶所在的場址位置越爲均質的情況下，越可以得到可信賴的模擬結果。而關於第二個問題，BIOSCREEN 則以簡單的質量平衡方式，主要考量高污染源區內可溶解相的碳氫化合物質量以及這些碳氫化合物離開高污染源區的速率，以評估高污染源區污染物濃度隨時間的變化。

BIOSCREEN 模式之限制如下：

1. 因爲使用解析解，故 BIOSCREEN 只能模擬單純之地下水流狀況，並不適合應用在有抽水系統場址之複雜地下水流場，同時亦不適用於地下水中之垂直流向梯度過大會影響污染傳輸之場址。
2. 此外，本模式爲初步篩選之評估模式，僅能夠模擬近似現場之狀況，無法做出詳細及準確之結果。若該場址需要更精確或是詳盡的評估，則需要利用更完整的數值模擬軟體。

## 1.2 BIOSCREEN 模式使用介面

如第 1.1 節所述，BIOSCREEN 模式爲一使用 MS Excel 軟體爲基礎所開發之評估模式，因此，其主要係以 MS Excel 軟體中的 Visual Basic 程式語言做爲模式之程式設計語言，並將其模擬結果以 MS Excel 軟體做爲展示或輸出的軟體介面。目前美國環保署開放使用的 BIOSCREEN 模式版本爲 1.4 版，其程式執行之後，實爲開啓 MS Excel 軟體做爲操作的介面，主要包含有 1.Bioscreen 模式參數輸入主畫面；

2.沿中心線污染物濃度分佈輸出畫面；及 3.污染帶污染物濃度分佈輸出畫面；其操作介面與輸出畫面範例分別如圖 1.1-1 至圖 1.1-3 所示，並簡要說明如后。

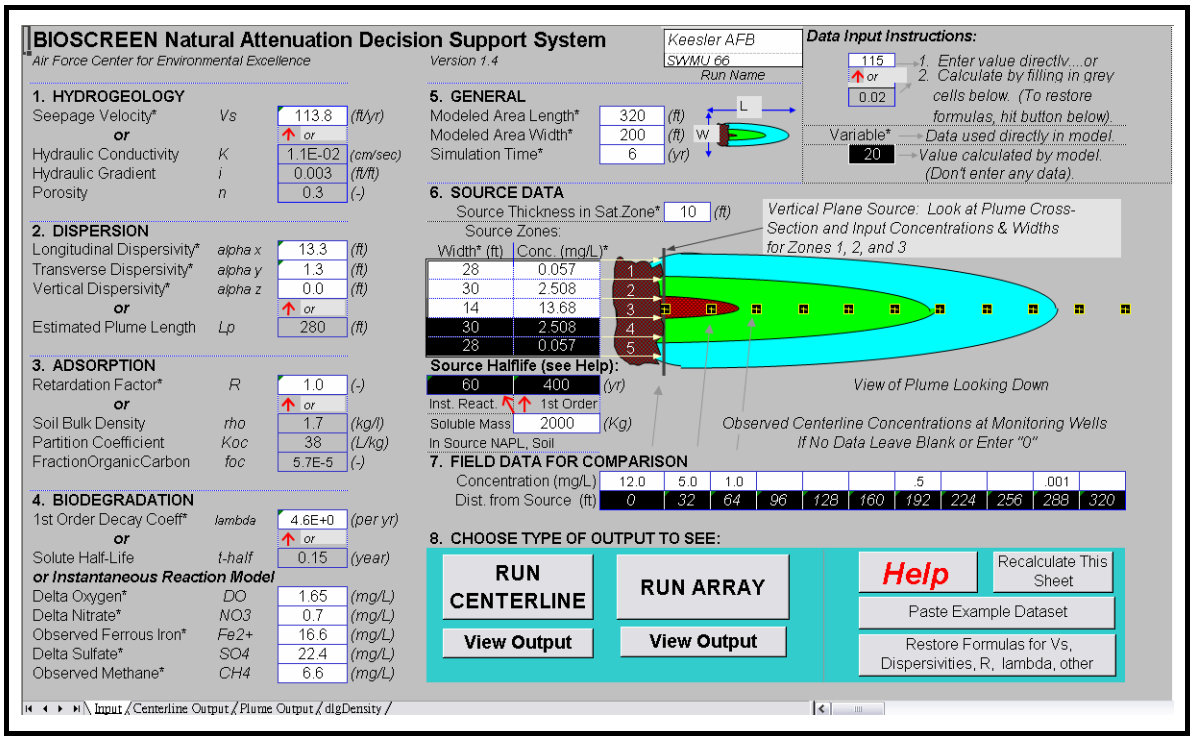



圖 1.1-1　Bioscreen 評估模式軟體參數輸入主畫面

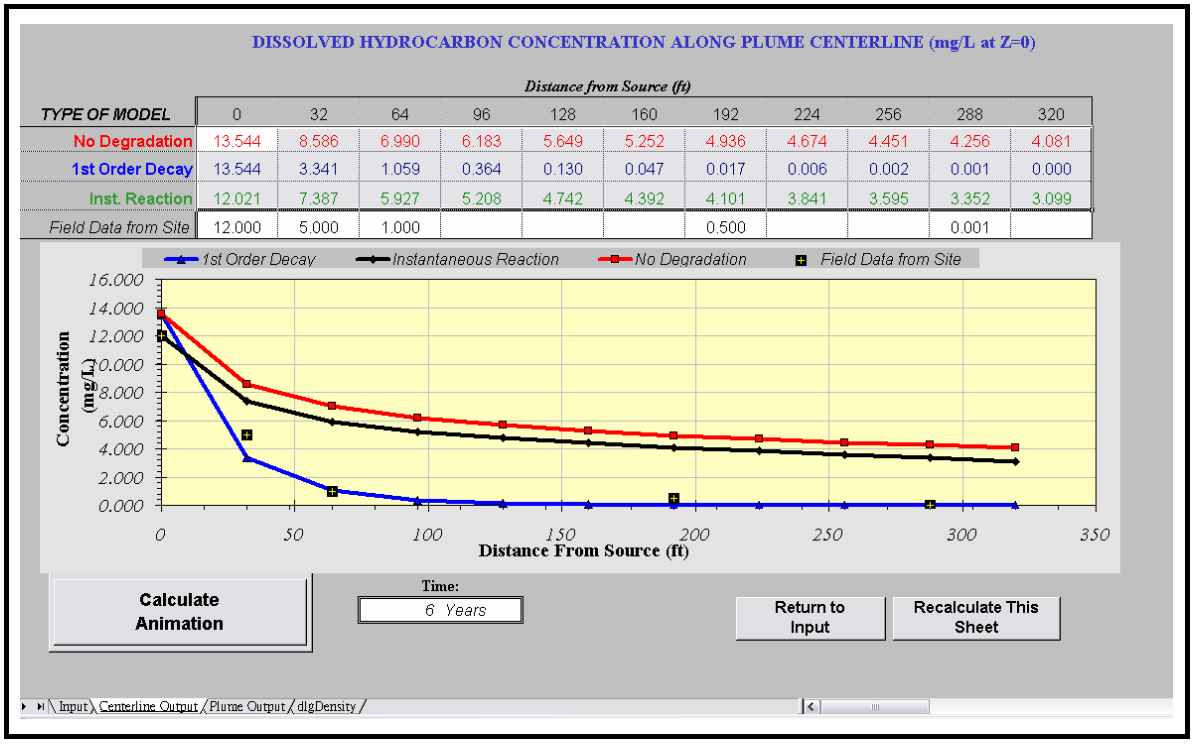



圖 1.1-2 Bioscreen 評估模式軟體沿中心線污染濃度輸出畫面

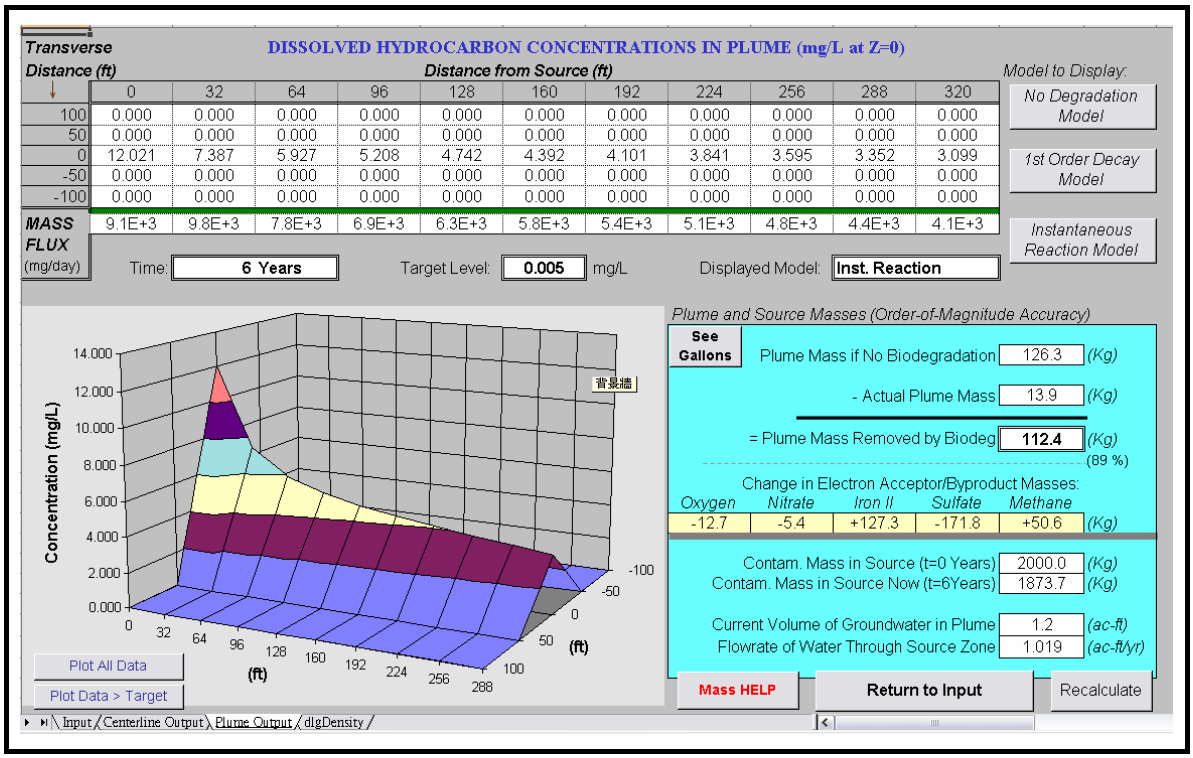



**圖 1.1-3　Bioscreen 評估模式軟體污染帶計算結果輸出畫面**

## 一、Bioscreen 模式參數輸入主畫面

在 Bioscreen 模式參數輸入的主畫面中，共包含有 8 個主要的操作項目，其中第 1~7 項分別爲場址資料、水文地質資料與污染物資料等之輸入，第 8 項則爲模式之操作選項。

### 1.水文地質(Hydrogeology)參數

在這一項輸入項目中，主要是要輸入場址內的滲流速率(Seepage Velocity，Vs)，若無法直接得知場址內的滲流速率，則可以由關於場址之水文地質條件參數，包括有 1.水力傳導係數(Hydraulic Conductivity，K)；2.水力梯度(Hydraulic Gradient，i)；及 3.孔隙率(Porosity，n)等 3 個參數，以下列公式加以計算後得之。

$$V_s = K \times i / n$$

**2.延散係數(Dispersion)**

在這一項輸入項目中，主要是要輸入場址內三維空間不同方向的延散度(Dispersivity)，以描述污染帶在沿著地下水流方向上(Longitudinal Direction)、垂直地下水流方向上(Transverse Direction)，以及於垂直方向上因污染物擴散而移動的情形。由於在場址現場並不容易得到各方向的延散度，因此，在此模式中，亦可以藉由量測地下水污染帶延著地下水流向上的縱向長度(Estimated Plume Length)來替代，再由不同的公式分別計算出縱向延散度(Longitudinal Dispersivity)、橫向延散度(Transverse Dispersivity)與垂直向延散度(Vertical Dispersivity)。

**3.吸附性(Adsorption)**

在這一項輸入項目中，主要是要輸入遲滯因子(Retardation Factor, R)。因爲污染物在地下含水層中的移動程度，會受到土壤顆粒吸附的影響而減低，因此，其遲滯的效應主要決定於含水層及污染物本身性質。而遲滯因子則爲地下水滲流速率與有機化合物在地下水中移動速率的比值。一般可以由下式計算而得：

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n} \quad ; \quad K_d = K_{oc} f_{oc}$$

其中：R：遲滯因子

$K_d$：分佈係數(Distribution Coefficient)

$K_{oc}$：有機碳與孔隙水中分配係數(Organic Carbon-water Partition Coefficient)，代表有機化合物被土壤吸附的傾

向，即當土壤空隙中水分濃度達平衡時，土壤表面每單位有機碳所能吸附的污染物

$f_{oc}$：土壤中有機碳含量，可由實驗室實驗獲得

$\rho_b$：土壤總體密度(Bulk Density)

n：孔隙率

**4.生物降解(Birdegradtion)參數**

此項參數爲輸入主要標的污染物的一階衰減係數(First-Order Decay Coefficient)，此項係數亦可以由污染物的半衰期(Half Life)直接由下列公式換算求得：

$$k = 0.693 / t_{1/2}$$

其中：k 爲一階衰減係數；$t_{1/2}$爲污染物半衰期。

在 Bioscreen 中係假設生物降解的速率僅與污染物初始濃度及衰減係數有關，例如：假設初期苯的污染濃度爲 3mg/L，其半衰期爲 728 天，則經過 728 天之後，苯的污染濃度則降爲 1.5 mg/L。一階衰減係數或是污染物的半衰期資料可以由許多的文獻資料中查得，特別注意的是，若是該場址中的主要標的污染物濃度已呈現穩定狀態或是持續降低的情形，則可以實際場址的污染物濃度監測資料，來求得最接近實際狀況的一階衰減係數，或是利用 Bioscreen 軟體，以試誤法校正原有的一階衰減係數，使其更接近真實的情況。

若是預定採用模擬的方式不是以一階衰減模式進行模擬，而是以瞬時反應模式(Instantaneous Reaction Model)來進行模擬的

話，則另外需要輸入溶氧、硝酸鹽、二價鐵離子、硫酸鹽及甲烷氣等資料，其輸入的數值則爲場址環境背景的平均濃度值減去於污染源所量測的最低濃度值，Bioscreen 軟體會依據所輸入的這些參數資料，自動的計算場址內生物降解之能力。

**5.一般性參數**

在這一項參數中，主要需要輸入的是所模擬場址的範圍大小，包括模擬區域的長度與寬度，以及所模擬的時間。

**6.污染源(Source)資料**

在這個項目的資料中，共有三大部份需要輸入，第一個是污染源於飽和含水層中的厚度，這項資料可以藉由位在(或非常接近)污染源區不同開篩深度的地下水監測井中得到，對於一般燃料油洩漏的場址而言，由於其污染物屬 LNAPL(比重比水輕的特性)多會浮在地下水位面上，因此其厚度約在 1.5~6 公尺間。若沒有地下水監測井的檢測數據資料，則可以將地下水位變化範圍當作是污染源於飽和層中的厚度，即所謂的污漬帶(Smear Zone)。Bioscreen 軟體中的預設值爲 3 公尺，這對一般的石油碳氫化合物污染場址而言，都是可以接受的數值。

第二部份則是要輸入污染源區的寬度範圍，(在這裡所指的「污染源區」，一般爲含有高濃度土壤污染的區域、有自由移動相(如浮油)存在，或是大量的殘留相存在)，首先必須要先決定地下水流向，並繪製一條垂直於地下水流向的虛擬線(如圖 1.1-1 所示)，再將此一虛擬線所經過的污染源區分成 5 個等份(如圖 1.1-1 中的 1~5 區)，決定 1~3 區中的污染物濃度，其中第 3 區則爲污染濃度最高的中心區域。由於在 Bioscreen 軟體中係假設污染源區的

分佈是對稱的，因此，在軟體輸入的介面中，僅需要輸入第 1 至 3 區的資料，軟體會自動帶出第 4 至 5 區的數值。最後則是要決定每一分區的寬度，比較簡單的方式是將污染源區的總寬度平均分至每一區域，例如：污染源區的總寬度是 100 公尺，則每一個分區的寬度則爲 20 公尺。

第三個部份則爲污染源區的半衰期，這項參數可以由使用者輸入污染源區的污染物總量(包括自由移動相與殘留相的部份)後，Bioscreen 軟體會自動計算出污染源區的半衰期。其計算公式爲：

$$t_{halfsource} = 0.693 \times M_0 \Big/ Q \times C_0$$

其中，$M_0$：污染源區污染物總質量，包含殘留相及自由移動相部份

Q：流經污染源區的地下水流速；$C_0$ 爲污染源區污染物平均濃度

特別值得注意的是，在這裡所指的「污染源區半衰期」係爲在污染源區中，污染物濃度隨著時間變化的情形，與第 4 項評估生物降解參數中所提到的污染物之半衰期有所不同，後者所指的是，污染源在洩漏(或離開污染源區)之後，流經污染帶(plume)，在含水層中的濃度變化情形。

**7.現場比較數據資料**

在這一部份的輸入資料中，主要是需要輸入沿著場址中心線上，主要污染物於地下水中的濃度，其做法爲沿著中心線上，選擇適當的地下水監測井位(依序由離污染源區近而遠)，檢測其地下水中污染物之濃度。其最主要的目的爲可以校正模式模擬的結果。

## 二、Bioscreen 模式模擬結果輸出畫面

完成 Bioscreen 模式參數的輸入之後，即可以進行模式的模擬，其模擬的結果可以選擇 2 種不同的方式呈現，1.沿污染帶中心線污染物濃度分佈；及 2.污染帶在「空間上」分佈情況。

### 1.中心線輸出結果

當使用者按下輸入畫面中的「RUN CENTERLINE」按鈕後，Bioscreen 模式即會依據使用者所輸入的參數資料進行計算，並將計算結果顯示在「Centerline Output」的工作表畫面中。在這個輸出結果的畫面中，可以看到 Bioscreen 模式依據不同的模式類型之計算結果，包括：沒有降解模式、一階衰減模式以及瞬間反應模式等，在表格中可以看到不同模式模擬下，距污染源不同的距離之污染物濃度值。而在下方的圖示中，即繪製出污染物濃度與污染源距離的關係圖，由這個圖示中即可以清楚的看出，污染物濃度隨著距離污染源遠近的變化趨勢。

### 2.污染帶三維輸出結果

當使用者按下輸入畫面中的「RUN ARRAY」按鈕後，Bioscreen 模式即會依據使用者所輸入的參數資料進行計算，並將計算結果顯示在「Plume Output」的工作表畫面中。在這個輸出結果的畫面中，使用者可以選擇不同模式類型之計算結果，包括：沒有降解模式、一階衰減模式以及瞬間反應模式等。在輸出結果的表格中，主要分成沿地下水流向(縱向，X 軸)以及垂直地下水流方向(橫向，Y 軸)不同距離上之污染物濃度(Z 軸)，以呈現一個「三維」的污染帶(Plume)分佈情形。

使用者亦可以依據實際上的需求，自行輸入「目標值」，例如：污染物之管制標準，按下「Plot Data > Target」之按鈕後，三維的圖形中則只會呈現大於此一目標值(或濃度值)的模擬結果。而關於污染物質量平衡計算的結果則列在三維圖形的右表中。

## 1.3 BIOSCREEN 模式操作流程

### 一、注意事項與參數參考範圍說明

BIOSCREEN 之資料可鍵入於其屏幕畫面(如圖 1.1-1)，該畫面輸入時有三點需注意事項:

1. 參考軟體輸入畫面的範例資料，點選位於輸入畫面右下方的”Paste Example Data Set”按鈕。
2. 因爲 BIOSCREEN 是依據 EXCEL 表格，在任何按鍵做用前，使用者必須點選剛輸入欄位外面任一位置或按鍵盤上的”Return”鍵。
3. 幾個欄位可以直接輸入數據或者能藉由輸入其他參數利用本模式公式計算，如果計算功能並無運作，可檢查確認這空格中的公式是否仍存在，如已經不存在，可點擊在輸入屏幕的右下邊“Restore Formulas”按鈕。

共有七大項資料需輸入，詳細資訊可參考美國環保署”BIOSCREEN Natural Attenuation Decision Support System User’s Manual”，本報告摘錄部份內容扼要說明，資料及說明如表 1.1-1 至表 1.1-7。

# 表 1.1-1　水力資料

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 滲流速度(Vs) | 單位 | ft/yr |
| | 典型的數值範圍 | 0.5 到 200 ft/yr |
| | 如何輸入資料 | 1)直接輸入或<br>2)填入水力傳導係數、水力梯度和有效孔隙率之值利用 BIOSCREEN 計算滲流速度。<br>註：如果計算功能並無運作，可檢查確認這空格中的公式仍存在。如果不在，可點擊在輸入屏幕的右下邊“Restore Formulas”按鈕。 |
| 水力傳導係數(k) | 單位 | cm/sec |
| | 典型的數值範圍 | 黏土：　$<1x10^{-6}$ cm/s<br>坋土：　$1x10^{-6}$ - $1x10^{-3}$ cm/s<br>坋砂：　$1x10^{-5}$ - $1x10^{-1}$ cm/s<br>細砂：　$1x10^{-3}$ - 1 cm/s<br>礫石：　> 1 cm/s |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。如果已直接輸入滲流速度，在 BIOSCREEN 中便不須輸入這項參數。 |
| 水力梯度(i) | 單位 | ft/ft |
| | 典型的數值範圍 | 0.0001 - 0.05 ft/ft |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 如果已直接輸入滲流速度，在 BIOSCREEN 中便不須輸入這項參數。 |
| 有效孔隙率(n) | 單位 | 無單位 |
| | 典型的數值範圍 | 有效孔隙率之值：<br>黏土 0.01 - 0.20<br>泥砂 0.01 - 0.30<br>細砂 0.10 - 0.30<br>中子 0.15 - 0.30<br>粗砂 0.20 - 0.35<br>礫石 0.10 - 0.35<br>砂岩　0.005 - 0.10<br>非破碎石灰石 0.001 - 0.05<br>破碎花崗岩 0.00005 - 0.01 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。注意，如果已直接輸入滲流速度，亦仍需此參數以計算遲延因素和污染帶質量。 |

# 表 1.1-2　延散度

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 縱向延散度 (Alpha x)<br>橫向延散度 (Alpha y)<br>垂直的延散度 (Alpha z) | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 延散度關係 Lp(污染帶長度)分布距離(ft)。BIOSCREEN 以一些常用的典型關係式和低階延散度來計算：<br>• 縱向延散度<br>$\text{Alpha x} = 3.28 \cdot 0.83 \cdot \left[\log_{10}\left(\frac{L_p}{3.28}\right)\right]^{2.414}$<br>($L_p$ in ft)<br>• 橫向延散度<br>Alpha y = 0.10 alpha x<br>• 垂直的延散度<br>Alpha z = very low (i.e. 1 x $10^{-99}$ ft)<br>其他常用的關係包括：<br>Alpha x = 0.1 Lp<br>Alpha y = 0.33 alpha x<br>Alpha z = 0.05 alpha x<br>Alpha z = 0.025 alpha x to 0.1 alpha x |
| | 如何輸入資料 | 1)直接輸入或<br>2)填入估計的污染帶長度值利用 BIOSCREEN 計算延散度。 |
| 計算污染帶長度 (Lp) | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 於 BTEX 污染帶， 50 - 500 英呎。 於含氯的溶劑， 50 到 1000 英呎。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 如果已直接輸入延散度之值，在 BIOSCREEN 中便不須輸入這項參數。 |

## 表 1.1-3　吸附數據

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 遲滯因子(R) | 單位 | 無單位 |
| | 典型的數值範圍 | 1 到 2 (在較爲淺層的含水層，屬於 BTEX 污染) |
| | 如何輸入資料 | 1)直接輸入或<br>2)填入總體密度、分配系數和有機碳含量(fraction organic carbon)的數值，並利用 BIOSCREEN 計算遲滯因子。 |
| 土壤總密度($\rho_b$) | 單位 | kg/L 或 $g/cm^3$ |
| | 典型的數值範圍 | 雖然這個數值可以在實驗室裡測得，而在大多情況下仍可以使用估計值。常使用的估計值爲 1.7 kg/L。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。如果已直接輸入遲滯因子之值，在 BIOSCREEN 中便不須要這項參數。 |
| 有機碳分配系數(Koc) | 單位 | (mg/kg)/(mg/L)或(L/kg) 或(mL/g) |
| | 典型的數值範圍 | 苯 38 L/kg<br>乙苯 95 L/kg<br>甲苯 135 L/kg<br>二甲苯 240 L/kg<br>(ASTM 1995)<br>(請注意，不同文獻中這些值即有所差異。例如，Mercer 和 Cohen (1990) 報告中苯 Koc 則爲 83L/kg。) |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 如果已直接輸入遲滯因子之值，在 BIOSCREEN 中便不須輸入這項參數。 |
| 有機碳含量(foc) | 單位 | 無單位 |
| | 典型的數值範圍 | 0.0002 - 0.02 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。如果已直接輸入遲滯因子之值，在 BIOSCREEN 中便不須輸入這項參數。 |

# 表 1.1-4　生物降解資料

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 一階衰減系數(lambda，λ) | 單位 | 1/yr |
| | 如何輸入資料 | 1)直接輸入或<br>2) 填入估計的半衰期數值，且利用 BIOSCREEN 計算一階衰減系數。 |
| 溶解相的污染帶溶質半衰期 (t 1/2) | 單位 | 年 |
| | 典型的數值範圍 | 苯　0.02 到 2.0 年<br>甲苯　0.02 到 0.17 年<br>乙苯　0.016 到 0.62 年<br>二甲苯　0.038 到 1 年 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。如果已直接輸入一階衰減系數之值，這參數在 BIOSCREEN 中就不需輸入。 |
| 氧氣($O_2$) | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 中間值= 5.8 mg/L<br>最大值= 12.7 mg/L<br>極小值= 0.4mg/L |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 硝酸鹽($(NO_3^-)$) | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 中間值= 6.3 mg/L<br>最大值= 69.7 mg/L<br>極小值= 0 mg/L |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 亞鐵($Fe^{2+}$) | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 中間值= 16.6 mg/L<br>最大值= 599.5 mg/L<br>極小值= 0mg/L |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 硫酸鹽($SO_4^{2-}$) | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 中點= 24.6 mg/L<br>最大值= 109.2 mg/L<br>極小值= 0 mg/L |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 甲烷($CH_4$) | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 中點= 7.2 mg/L<br>最大值= 48.4 mg/L<br>極小值= 0.0 mg/L |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |

## 表 1.1-5　一般性參數

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 模擬場址的長度和寬度(L 和 W) | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 10 到 1000 ft |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 模擬時間(t) | 單位 | 年 |
| | 典型的數值範圍 | 1 到 1000 年 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |

## 表 1.1-6　污染源數據

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 在飽和含水層區域的污染源厚度(z) | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 5-50 ft |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 污染源區域寬度 | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 10 - 200 ft |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 污染源區域濃度 | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 0.010 到 120 mg/L |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| 污染源半衰期( Model 計算的值) | 單位 | 年 |
| | 典型的數值範圍 | 1 到 10,000 年 |
| | 如何輸入資料 | 直接由模式計算。隨溶解相變化而改變。 |
| 土壤中污染物的總(數)量 | 單位 | 公斤 |
| | 典型的數值範圍 | 0.1 到 100,000 公斤 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |

## 表 1.1-7　比較現場數據

| 參量 | 說明 | |
|---|---|---|
| 現場實測數據 | 單位 | mg/L |
| | 典型的價值 | 0.001 到 50 mg/L |
| | 如何輸入數據 | 視情況輸入或多或少的數值。使用沿中心線測得之數據相互比較，以幫助校正模式。<br>注意：污染源的距離值不能改變，盡可能使用最靠近的值。 |

### 二、操作範例

列舉一範例如表 1.1-8 所示，填入 Bioscreen 模式相關參數後(圖 1.1-4)，即可以進行模式的模擬，其模擬的結果可以選擇 2 種不同的方式呈現，1.沿污染帶中心線污染物濃度分佈(圖 1.1-5)；及 2.污染帶在「空間上」分佈情況(圖 1.1-6)。

## 表 1.1-8　美國密西西比州，Keesler 空軍基地參數設定範例

| 資料類型 | 參數 | 數值 | 數據的來源 |
|---|---|---|---|
| 水文地質 | • 水力傳導係數：<br>• 水力梯度：<br>• 有效孔隙率： | 1.1x10$^{-2}$(cm/sec)<br>0.003 (ft/ft)<br>0.3 | •微水試驗結果<br>•靜態水位測量<br>•推估 |
| 延散度 | 原數值：<br>• 縱向延散度：<br>• 橫向延散度：<br>• 垂直的延散度：<br>在定位以後：<br>• 縱向延散度：<br>• 橫向延散度：<br>• 垂直的延散度： | 13.3 (ft)<br>1.3 (ft)<br>0 (ft)<br><br>32.5 (ft)<br>3.25 (ft)<br>0 (ft) | •根據估計污染帶 280 ft 的長度和 Xu/Eckstein 關係<br><br>•根據定位後量測污染帶長度 |
| 吸附 | •Retardation Factor:<br>•土壤容積密度 ρb ：<br>• foc ：<br>• Koc ： | 1.0<br>1.7 (kg/L)<br>0.0057%<br>B: 38 T: 135<br>E: 95 X: 240 | •由下式計算 R=1+Koc xfocxpb/n<br>•估計<br>•實驗室分析<br>•參考文獻-使用 Koc = 38 |
| 生物降解 | 電子接受者：<br>背景濃度(mg/L)：<br>極小的濃度(mg/L)：<br>濃度變化(mg/L) ：<br><br>電子接受者：<br>最大濃度(mg/L) ：<br>平均濃度(mg/L) ： | O2 NO3 SO4<br>2.05 0.7 26.2<br>- 0.4 - 0 - 3.8<br>1.65 0.7 22.4<br><br>Fe CH4<br>~~36.1~~ ~~7.4~~<br>~~16.6~~ ~~6.6~~ | •根據 1995 年 3 月之地水採樣結果 |
| 一般 | •區域長度：<br>•區域寬度：<br>•模擬時間： | 320 (ft)<br>200 (ft), 50 (ft)<br>6 (yrs) | •根據受影響之地下水污染帶區域<br>•穩定狀態流體 |
| 污染源數據 | •污染源厚度：<br>•污染源濃度： | 10 (ft) | • 根據地質探勘和 BTEX 的監測數據 |
| 實際數據 | 至污染源(ft)的距離：<br>BTEX 濃度 (mg/L) ： | 30 60 180 280<br>5.0 1.0 0.5 0.001 | •根據場址監測之濃度 |

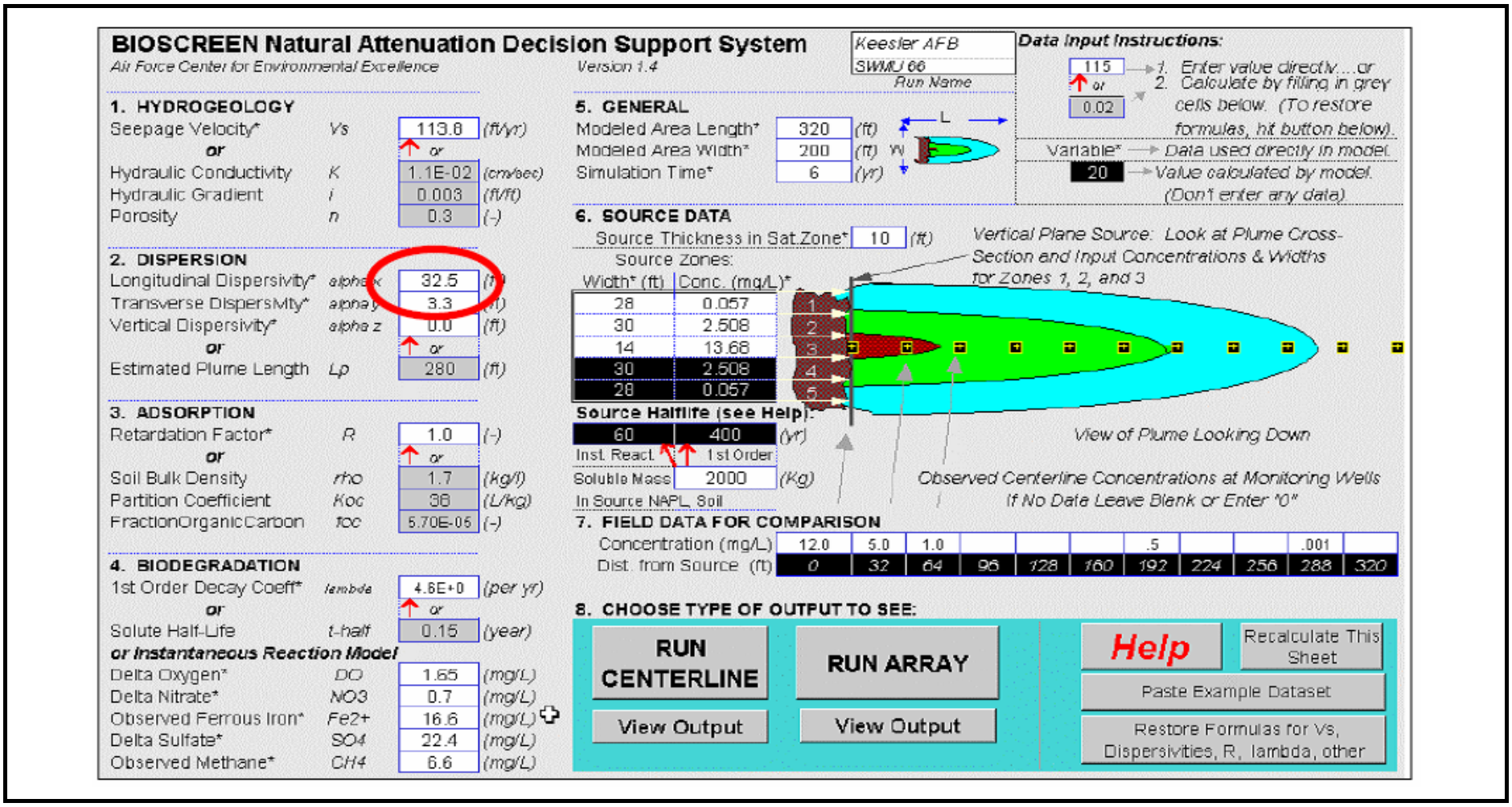



圖 1.1-4　Bioscreen 評估模式軟體參數輸入主畫面(Keesler 空軍基地)

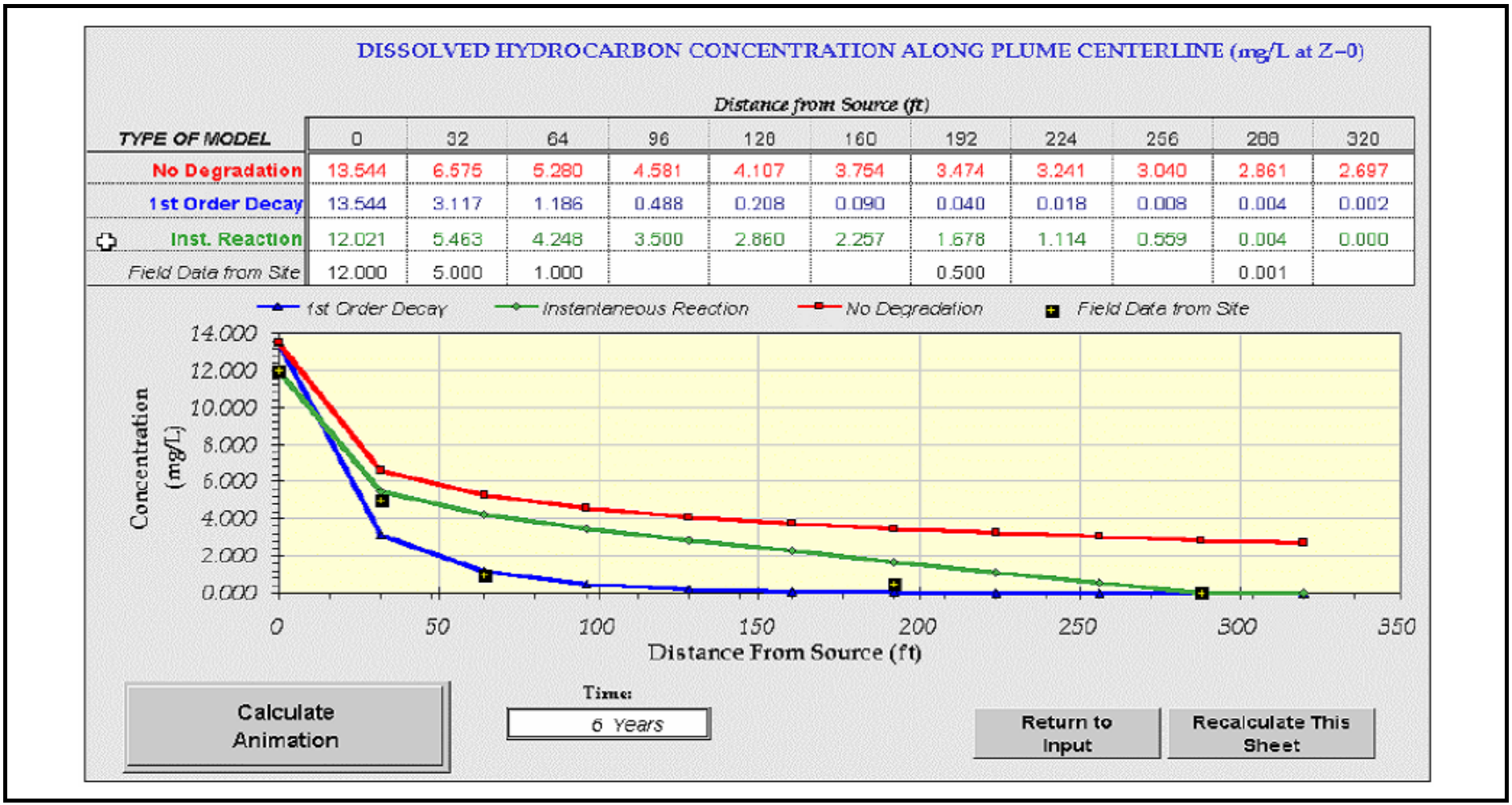



圖 1.1-5　Bioscreen 評估模式軟體沿中心線污染濃度輸出畫面(Keesler 空軍基地)

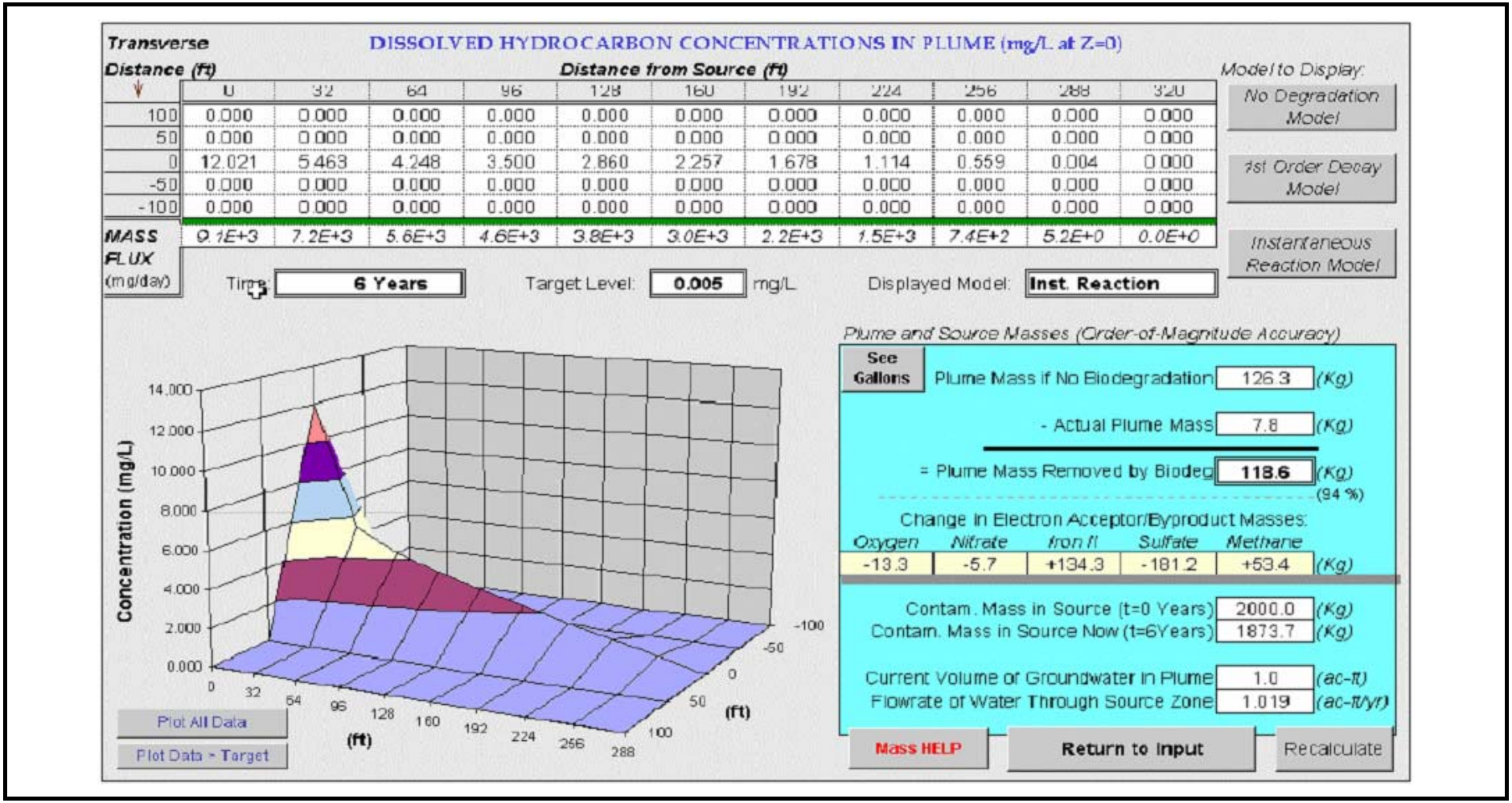



**圖 1.1-6　Bioscreen 評估模式軟體計算結果三維濃度輸出畫面(Keesler 空軍基地)**

# 第二章 BIOCHLOR 模式

## 2.1 BIOCHLOR 模式簡介

BIOCHLOR 爲一套模擬模式，可以模擬採用自然衰減整治法之受含氯碳氫化合物污染之地下水污染場址。軟體程式主要是架構在微軟公司(Microsoft) EXCEL 試算表環境中，以 Domenico 解析溶解質傳輸模式爲基礎開發之模式，其可以模擬一維對流(1-D Advection)、三維延散(3-D Dispersion)、線性吸附作用(Linear Adsorption)，以及經由還原脫氯降解之生物轉換(Biotransformation)作用等。含氯有機物之降解作用則假設係依據一連續的一階衰減程序進行。BIOCHLOR 包括有三種不同的模式類型：

1. 無衰減之溶質傳輸
2. 以一階衰減程序之生物傳輸模式模擬之溶質傳輸
3. 以一階衰減程序之生物傳輸模式(包括兩個不同的反應區，各反應區均有不同的速率參數值)模擬之溶質傳輸

這一套程式是由德州休士頓地下水服務公司(Groundwater Services, Inc., Houston, Texas，簡稱 GSI)，爲了美國空軍卓越中心 (Air Force Center for Environmental Excellence，簡稱 AFCEE) 位於布魯克斯空軍基地(Brooks Air Force Base)而開發的。其中，反應傳輸方程式之數理分析技術，則是由貝泰太平洋西北國家實驗室(Battelle Pacific Northwest National Laboratory)所研發發展。

BIOCHLOR 模式試著解決自然衰減的基本疑問：若在沒有執行工程控制或是進一步的污染源削減措施下，溶解相的污染帶到底會移動

多遠距離? 關於這個問題，BIOCHLOR 以溶質傳輸模式來模擬現地的生物降解情形，並且以一階衰減程序來模擬。模式可以預測污染帶可能最大的移動(或擴散)距離，而由此一預測結果，則可以和下游可能潛在暴露的受體(例如：飲用水井、地下水源補注區等)位置做一比較。而這樣的解析地下水傳輸模式已經廣泛的應用，而由應用的經驗顯示，特別是污染帶所在的位置場址越爲均質的情況下，越可以得到可信賴的模擬結果。

BIOCHLOR 模式使用之限制如下：

1. 因爲使用解析解，故 BIOCHLOR 只能模擬單純之地下水流狀況，並不適合應用在有抽水系統場址之複雜地下水流場，同時亦不適用於地下水中之垂直流向梯度過大會影響污染傳輸之場址。較值得注意的是，由於含氯碳氫化合物比重比水重會穿越整個飽和含水層的特性，並不影響 BIOCHLOR 模式的使用，因爲這個現象是含氯碳氫化合物本身的特性所致。
2. BIOCHLOR 模式爲初步篩選之評估模式，僅能夠模擬近似現場之狀況，無法做出詳細及準確之結果。若該場址需要更精確或是詳盡的評估，則需要利用更完整的數值模擬軟體。
3. BIOCHLOR 模式主要是設計來模擬含氯烯類或是含氯烷類一連串的還原脫氯反應，不適合用在並不會經由一階衰減機制反應的污染物之模擬。

## 2.2 BIOCHLOR 模式使用介面

如第 2.1 節所述，BIOCHLOR 模式爲一使用 MS Excel 軟體爲基礎所開發之評估模式，因此，其主要係以 MS Excel 軟體中的 Visual Basic 程式語言做爲模式之程式設計語言，並將其模擬結果以 MS Excel 軟體

做爲展示或輸出的軟體介面。目前美國環保署開放使用的 BIOCHLOR 模式版本爲 2.2 版，其程式執行之後，實爲開啓 MS Excel 軟體做爲操作的介面，主要包含有 1.Biochlor 模式參數輸入主畫面；以及 2.污染物濃度模擬結果輸出畫面；其操作介面與輸出畫面範例分別如圖 2.2-1 至圖 2.2-3 所示，並簡要說明如后。

## 一、Biochlor 模式參數輸入主畫面

在 Biochlor 模式參數輸入的主畫面中，共包含有 8 個主要的操作項目，其中第 1~7 項分別爲場址資料、水文地質資料與污染物物化資料等之輸入，第 8 項則爲模式之操作選項。在輸入各項參數之前，必須要先選擇欲定要進行模擬的含氯有機化合物是屬於烯類(Ethenes)或是烷類(Ethanes)。各項參數簡要說明如后。

### 1.對流(Advection)參數

在這一個項目中，主要是要輸入場址的水文質地條件參數，即滲流速率(Seepage Velocity，$V_s$)，若無法直接得知場址內的滲流速率，則可以由關於場址之水文地質條件參數，包括有 1.水力傳導係數(Hydraulic Conductivity，K)；2.水力梯度(Hydraulic Gradient，i)；及 3.孔隙率(Porosity，n)等 3 個參數，以下列公式加以計算後得之。

$$V_s = K \times i / n$$

### 2.延散係數(Dispersion)

在這一項輸入項目中，主要是要輸入場址內三維空間不同方向的延散度(Dispersivity)，以描述污染帶在沿著地下水流方向上

(Longitudinal Direction)、垂直地下水流方向上(Transverse Direction)，以及於垂直方向上因污染物擴散而移動的情形，由上述的 3 項參數，即可以瞭解污染物在空間中的分佈情況，並描繪出污染帶(Plume)在含水層中空間分佈的情形。由於在場址現場並不容易得到各方向的延散度，因此，在此模式中，亦可以藉由量測地下水污染帶延著地下水流向上的縱向長度(Estimated Plume Length，x)，再由不同的公式與比例分別計算出縱向延散度(Longitudinal Dispersivity)、橫向延散度(Transverse Dispersivity)與垂直向延散度(Vertical Dispersivity)。

若使用者無法決定縱向延散度的數值，則可以按下「Calc. Alpha x」按鈕，以取得 Biochlor 軟體的協助，按下「Calc. Alpha x」的按鈕之後，會跳出一個新的視窗，在這個新的視窗中，共有 3 個不同的選項，提供使用者決定縱向延散度的數值。

**(1)固定值**

在第 1 個選項中，使用者可以直接輸入一固定的縱向延散度的數值，在 Biochlor 軟體中的建議數值是介在 3~21 公尺間。

**(2)0.1 倍污染帶長度**

在第 2 個選項中，使用者可以輸入量測的污染帶長度，按下「Calc. Alpha x」按鍵之後，Biochlor 軟體會自動計算出縱向延散度的數值，即 0.1 倍污染帶長度。

**(3)文獻修正公式**

在第 3 個選項中，使用者可以輸入量測的污染帶長度，按

下「Calc. Alpha x」按鍵之後，Biochlor 軟體會以 Xu and Eckstein 等人所提出的修正公式，自動計算出縱向延散度的數值，其修正公式如下：

$$Alpha \quad x = 0.82 * 3.28\left[\log\left(x/3.28\right)\right]^{2.446}$$

在輸入完縱向延散度的數值之後，接下來必須要決定 Alpha y 與 Alpha x，以及 Alpha z 與 Alpha x 之比值，以進一步決定橫向延散度與垂直向延散度。

**3.進一步決定橫向延散度與垂直向延散度**

**(1)橫向延散度**

一般文獻建議：Alpha y 與 Alpha x 之比值爲 0.1(Gelhar et al., 1992)，而這也是 Biochlor 軟體的預設值。

**(2)垂直向延散度**

一般文獻建議：Alpha z 與 Alpha x 之比值爲 0.05(ASTM, 1995)，不過，若對於垂直向的延散採比較保守估計的話，則其比值爲 $1*10^{-99}$，而這也是 Biochlor 軟體的預設值。至於其他的比值，則可以參考 Biochlor 軟體的使用手冊中之說明。

**4.吸附性(Adsorption)**

在這一項輸入項目中，主要是要輸入遲滯因子(Retardation Factor, R)。因爲污染物在地下含水層中的移動程度，會受到土壤顆粒吸附的影響而減低，因此，其遲滯的效應主要決定於含水層及污染物本身性質。而遲滯因子則爲地下水滲流速率與有機化合

物在地下水中移動速率的比值。一般可以由下式計算而得：

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n} \quad ; \quad K_d = K_{oc} f_{oc}$$

其中：R：遲滯因子

$K_d$：分佈係數(Distribution Coefficient)

$K_{oc}$：有機碳與孔隙水中分配係數(Organic Carbon-water Partition Coefficient)，代表有機化合物被土壤吸附的傾向，即當土壤空隙中水分濃度達平衡時，土壤表面每單位有機碳所能吸附的污染物。常見的含氯有機化合物之 $K_{OC}$ 值：PCE：426L/Kg；TCE：130L/Kg；DCE：125L/Kg；VC：30L/Kg。

$f_{oc}$：土壤中有機碳含量，可由實驗室實驗獲得

$\rho_b$：土壤總體密度(Bulk Density)

n：孔隙率

在完成所有的參數輸入之後(包括土壤總體密度與土壤中有機碳含量)，使用者可以直接按下右上角紅色「C」鍵，Biochlor 軟體即會自動計算出每一個污染物之遲滯因子，並自動選出一個中間值做爲這些污染物的代表值，以進行後續的模擬計算。而使用者也可以直接輸入一遲滯因子的數值，而不使用 Biochlor 軟體所設定之數值。

**5.生物降解(Birdegradtion)參數**

此項參數爲輸入主要標的污染物的一階衰減係數(First-Order Decay Coefficient)，此項係數亦可以由污染物的半衰期(Half Life)

直接由下列公式換算求得：

$k = 0.693 / t_{1/2}$ ；其中：k 爲一階衰減係數；$t_{1/2}$爲污染物半衰期。

污染物的一階衰減係數（一階反應常數）或是半衰期資料最好是依據實際調查資料進行估計，尤其在主要標的污染物濃度呈現穩定狀態或是持續降低的情形時，以實際場址的污染物濃度監測資料，可以求得最接近實際狀況的一階衰減係數。其次的做法是由文獻中查得（較不建議）相關資料，如表 2.2-1 列舉由文獻與污染場址實際取得之常見含氯有機化合物的一階衰減係數及半衰期資料示，但由文獻所得的數值範圍差異極大（因爲反應速率會隨著反應物濃度、溫度及壓力等條件改變），導致使用者不易抉擇採用哪一個數值。此時可以利用 Biochlor 軟體，以試誤法校正原有的一階衰減係數，使其更接近真實的情況。於軟體中輸入不同化合物之一階衰減係數，或是輸入半衰期之後，再按下右上角紅色「C」鍵，Biochlor 軟體即會自動計算出每一個污染物之一階衰減係數。如果使用者不知道場址實際污染物濃度變化情形，也沒有相關的文獻資料值可以參考，則可以利用 Biochlor 軟體「λ HELP」的功能，依其畫面指示操作，亦可完成一階衰減係數之輸入。

## 表 2.2-1　常見含氯有機化合物一階衰減係數與半衰期

| 項次 | 含氯有機化合物 | 一階衰減係數($yr^{-1}$) | 半衰期(yr) |
|---|---|---|---|
| 1 | 四氯乙烯 | 0.07-1.2 | 0.58-9.9 |
| 2 | 三氯乙烯 | 0.01~1.27 | 0.77-13.9 |
| 3 | 順-1,2-二氯乙烯 | 0.04-3.3 | 0.21-3.9 |
| 4 | 氯乙烯 | 0.12-2.6 | 0.27-5.8 |

資料來源：Wiedemeier, T.H. & Haas, P. (1999).、Air Force Center for Environmental Excellence (1999).、AFCEE (2001).

**6.一般性參數資料**

在這一項參數中，主要需要輸入的是所模擬場址的範圍大小，包括模擬區域的長度與寬度，以及所模擬的時間。

如果場址內的相關參數值變異較大，例如：溶氧、氧化還原電位或是氫濃度等，則可以將欲定模擬的區域分成兩個區域，以在不同的區域內輸入適當的一階衰減係數或半衰期。特別注意的是，只有在靠近污染源的第 1 區污染物濃度已達穩定狀態下，才可以使用分區(增加第 2 區)來進行模擬。

**7.污染源(Source)資料**

在這一項參數中，主要是要輸入污染源寬度、污染源於飽和含水層中的厚度以及污染物濃度值。污染源的寬度指的是以二維平面圖(俯視圖)中，於 Y 軸方向或是垂直於地下水流方向之污染源寬度。而污染源於飽和含水層中的厚度，對於大多數的含氯有機化合物洩漏場址而言，其厚度即等於飽和含水層的厚度，因爲含氯有機化合物在洩漏之後，其比重比水重的關係，受重力影響會逐漸往下移動，直到遇到較爲密緻的土壤質地爲止，例如黏土層，而在其移動的路徑上形成殘留相，變成持久性的污染源。因此，大多數的含氯有機化合物污染場址，其污染物在垂直方向上的分佈，往往會移動到第一含水層底部爲止。最後則輸入污染源各個污染物的濃度，包括 PCE、TCE、DCE 及 VC 等。特別注意的是，其各個污染物的濃度值並不會超過其飽和溶解度，常見含氯有機化合物之飽和溶解度列如表 2.2-2 所示。

使用者也可以按下「Source Options」之按鈕，Biochlor 軟體會協助使用者完成相關參數之輸入。

## 表 2.2-2　常見含氯有機化合物飽和溶解度

| 項次 | 含氯有機化合物 | 飽和溶解度(mg/L@20℃) |
|---|---|---|
| 1 | 四氯乙烯 | 150 |
| 2 | 三氯乙烯 | 1100 |
| 3 | 順-1,2-二氯乙烯 | 800 |
| 4 | 氯乙烯 | 6800 |
| 5 | 1,1,1-三氯乙烷 | 4400 |
| 6 | 1,1-二氯乙烷 | 5500 |
| 7 | 氯乙烷 | 5710 |

註：資料來源：Mackay et al., 1993

**8.現場比較數據資料**

在這一部份的輸入資料中，主要是需要輸入沿著場址中心線上，主要污染物(包括 PCE、TCE、DCE 及 VC 等)於地下水中的濃度，其做法爲沿著中心線上，選擇適當的地下水監測井位(依序由離污染源區近而遠)，檢測其地下水中污染物之濃度。其最主要的目的爲可以校正模式模擬的結果。

## 二、Biochlor 模式模擬結果輸出畫面

完成 Biochlor 模式參數的輸入之後，即可以進行模式的模擬，其模擬的結果可以選擇 2 種不同的方式呈現，1.沿污染帶中心線污染物濃度分佈；及 2.污染帶在「空間上」分佈情況。

**1.中心線輸出結果**

當使用者按下輸入畫面中的「RUN CENTERLINE」按鈕後，Biochlor 模式即會依據使用者所輸入的參數資料進行計算，並將計算結果顯示在「Centerline Output」的工作表畫面中。在這個輸出結果的畫面中，可以看到 Biochlor 模式依據不同的模式類型之計算結果，包括：沒有降解模式及一階衰減模式等，在表格中可以看到不同模式模擬下，距污染源不同的距離之污染物濃度值。而在下方的圖示中，即繪製出污染物濃度與污染源距離的關係圖，由這個圖示中即可以清楚的看出，污染物濃度隨著距離污染源遠近的變化趨勢。使用者可以按下左側不同污染物的按鈕(「See PCE」、「See TCE」、「See DCE」、「See VC」及「See ETH」等)，切換各個不同的污染物濃度沿著中心線分佈的情形。

**2.污染帶三維輸出結果**

當使用者按下輸入畫面中的「RUN ARRAY」按鈕後，Biochlor 模式即會依據使用者所輸入的參數資料進行計算，並將計算結果顯示在「Plume Output」的工作表畫面中。在這個輸出結果的畫面中，使用者可以選擇不同模式類型之計算結果，包括：沒有降解模式及生物傳輸模式等。在輸出結果的表格中，主要分成沿地下水流向(縱向，X 軸)以及垂直地下水流方向(橫向，Y 軸)不同距離上之污染物濃度(Z 軸)，以呈現一個「三維」的污染帶(Plume)分佈情形。

使用者可以點選左上側不同污染物的選項(包括有：PCE、TCE、DCE、 VC 及 ETH 等)，切換各個不同的污染物濃度三維分佈的情形。

使用者亦可以依據實際上的需求，自行輸入「目標值」，例如：污染物之管制標準，按下「Plot Data > Target」之按鈕後，三維的圖形中則只會呈現大於此一目標值(或濃度值)的模擬結果。而關於污染物質量平衡計算的結果則列在三維圖形的右表中。

**3.生物傳輸是否發生評估表**

使用者在進行 Biochlor 軟體模擬之前，可以先進行場址內是否具有自然衰減現象進行評估，使用者可以按下在輸入畫面右上角「Natural Attenuation Screening Protocol」之按鈕，Biochlor 軟體會出現自然衰減評估畫面，在這個畫面的選項中，使用者依據場址實際情況，依序點選各個項目是屬於「Yes」或是「No」，評估表會自動帶出每一個項目的評分值，最後會自動加總這些評分值，由評分

值的分級，則可以判定該場址中是否具有厭氧還原脫氯的潛勢。評估表中的各項內容與評估結果分級請參閱報告本文第 3.5 節說明。

## 2.3 BIOCHLOR 模式操作案例說明

### 一、注意事項與參數參考範圍說明

BIOCHLOR 之資料可鍵入於其屏幕畫面(如圖 2.2-1)，該畫面輸入時有三點需注意事項：

1. 參考軟體輸入畫面的範例資料，點選位於輸入畫面右下方的”Paste Example Data Set”按鈕。
2. 因爲 BIOCHLOR 是依據 EXCEL 表格，在任何按鍵作用前，使用者必須點選剛輸入欄位外面任一位置或按鍵盤上的” Return”鍵。
3. 模式中所使用的參數可在白色欄位中直接輸入或按下”C”按鈕由模式使用灰色欄位的資料計算(例:滲漏速率可直接數入或由水力傳導係數、水力梯度及有效孔隙率計算說得)。

詳細資訊可參考美國環保署” BIOCHLOR Natural Attenuation Decision Support System User’ s Manual” ，本報告僅摘錄部份內容扼要說明。相關資料及說明如表 2.2-3 至表 2.2-7，雖然在此提供文獻數值，但由衷建議使用者，僅可能使用所量測之水文地質及生物轉換數值。假如使用數值有不確定性時，需進行敏感分析以決定不確定性對模式預測之影響。

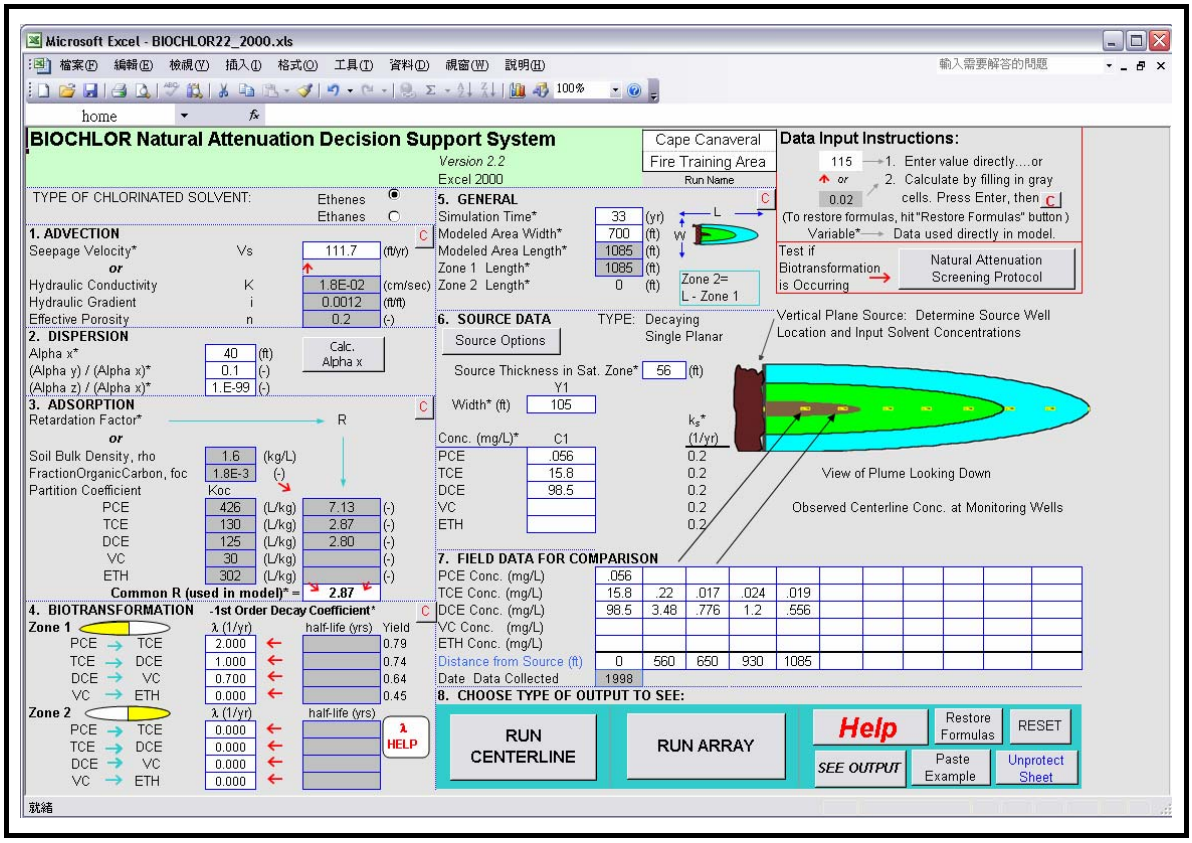



圖 2.2-1　BIOCHLOR 模式參數輸入主畫面

# 表 2.2-3　水文地質資料

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 滲流速度 | 單位 | ft/yr |
| | 描述 | 實際介質孔隙中之地下水流速，相當於達西速度除以有效孔隙率。 |
| | 典型的數值範圍 | 0.5 到 200 ft/yr |
| | 數據的來源 | 由水力傳導係數乘以水力梯度除以有效孔隙率計算。建議使用場址之實際水力傳導係數和水力梯度數數值，有效孔隙率可使用推估的數值。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入<br>填入水力傳導係數、水力梯度及有效孔隙率數值如下所述，按下 “C”按鈕由 BIOSCHLOR 計算。 |
| 水力傳導係數(K) | 單位 | 公分/秒 |
| | 描述 | 飽和的多孔介質的水平水力傳導係數。 |
| | 典型的數值範圍 | 黏土： $<1x10^{-6}$ cm/s　　粉砂： $1x10^{-6}$～$1x10^{-5}$ cm/s<br>粉質細砂：$1x10^{-5}$～$1x10^{-1}$ cm/s<br>純細砂： $1x10^{-3}$～ 1 cm/s　　礫石： > 1 cm/s |
| | 數據的來源 | 現場抽水試驗或微水試驗。建議使用實際場址試驗數據。 |
| | 如何輸入資料 | 直接地輸入。假如果滲流速度是直接輸入，在 BIOCHLOR 中便不須輸入這項參數。 |
| 水力梯度(i) | 單位 | ft/ft |
| | 描述 | 此爲水位面之傾斜度。在非受壓含水層，相當於地下水位面之傾斜度。 |
| | 典型的數值範圍 | 0.0001 - 0.05 ft/ft |
| | 數據的來源 | 由監測井靜態水位面資料繪製等水位線圖計算，推估其等水位面傾斜度。 |
| | 如何輸入資料 | 直接地輸入。假如滲流速度是直接輸入，在 BIOCHLOR 中便不須輸入這項參數。 |
| 有效孔隙率(n) | 單位 | 無單位 |
| | 描述 | 含水層基質之有效容積爲無方向性。 |
| | 典型的數值範圍 | 有效孔隙率數值：<br>黏土 0.01 - 0.20　　粉砂 0.01 - 0.30<br>細砂 0.10 - 0.30　　中砂 0.15 - 0.30<br>粗砂 0.20 - 0.35　　礫石 0.10 - 0.35<br>砂岩 0.005 - 0.10　　非破碎石灰石 0.001 - 0.05<br>破碎的花崗岩 0.00005 - 0.01 |
| | 數據的來源 | 通常以推估，常用之數值粉砂及砂之有效孔隙率爲 0.25。 ASTM RBCA 標準(ASTM 1995) 所用之內定值爲 0.38 (主要使用在非固結沉積物) |
| | 如何輸入資料 | 直接地輸入。注意假如滲流速度是直接輸入，仍需輸入此數值以計算延遲因子及污染物質量。 |

## 表 2.2-4　延散度

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 縱向延散度 (Alpha x)<br>橫向延散度 (Alpha y)<br>垂直的延散度 (Alpha z) | 單位 | ft |
| | 描述 | 延散作用相關於三維空間不同方向的延散度。一般而言，延散係數不易推估，在污染帶的長度某段距離上其延散係數，往往會有 2-3 次方(100~1000 倍)的差異。 |
| | 典型的數值範圍 | 常用的數值有：<br>Alpha x = 0.1 Lp<br>Alpha y = 0.33Alpha x<br>Alpha z = 0.025 Alpha x 至 0.1 Alpha x |
| | 如何輸入資料 | 點選「Calc. Alpha x」按鍵，會跳出 Dispersivity 視窗，共有三個選項，假如選用選項一時，直接輸入 Alpha x 的值。<br>假如選用選項二時，輸入 Lp 的值然後按下視窗內的選項二下方的「Calc. Alpha x」。<br>假如選用選項三時，同上輸入 Lp 值，然後按下視窗內的選項三下方的「Calc. Alpha x」。<br>選完上述其中一種，然後按下[OK]，結束視窗。<br>此時 Alpha x 數值會改變，並輸入 Alpha x 相對於 Alpha y 及 Alpha z 的比值。 |

# 表 2.2-5　吸附性

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 遲滯因子(R) | 單位 | 無單位 |
| | 描述 | 土壤的吸附能減少被地下水中溶解的污染物濃度，遲滯因子是地下水滲流數率與有機化學物在水中游移的速率的比率，與含水層及其組成有關。 |
| | 典型的數值範圍 | 1 到 6 (爲溶劑在典型的淺含水層) |
| | 數據的來源 | 通常以<br>$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n}$　Where K d　. Koc X̣foc<br>$\rho_b$ = 容積密度， n =有效孔隙率， Koc = 有機碳水比數(organic barbon-water partition coefficient)，<br>Kd =分佈係數 和 foc = 未污染土壤中有機碳比例 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入遲滯因子。請勿按 [C]鍵，工作表單位自行更新。<br>填入 bulk density, Partition coefficient, effective porosity 及 fraction organic carbon 的估計值，同時按下[C]鍵 以計算遲延因子 (R)。<br>在 BIOCHLOR 中，所有的污染物都使用同一個遲延參數因素，也就是表中之 Common R。 |
| 土壤總體密度($\rho_b$) | 單位 | kg/L 或 $g/cm^3$ |
| | 典型的數值範圍 | 雖然本參數可在實驗室裡被測量，在許多情況下則採用估計值。通常以 1.7 kg/L。 |
| | 數據的來源 | 由地工實驗室之土壤分析或使用估計的值如 1.7 kg/L。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。如果遲滯因子是直接輸入，在 BIOCHLOR 不需要此參數值。 |
| 有機碳與孔隙水中分配級數 | 單位 | (mg/kg)/ (mg/L)或(L/kg)或(mL/g) |
| | 典型的數值範圍 | 四氯乙烯　426 L/kg　三氯乙烯　130 L/kg<br>二氯乙烯　125 L/kg　氯乙氯　29.6 L/kg　(在 20 ℃時)<br>*(備註：此類數值因爲與溫度有關，故範圍變化大)* |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 如果遲滯因子是直接地被輸入，在 BIOCHLOR 中便不須輸入這項參數。 |
| 有機碳含量(foc) | 單位 | 無單位 |
| | 描述 | 含水層土壤基質與未受污染天然有機碳的組成比例，有越多的天然有機碳表示有較好的吸附能力。 |
| | 典型的數值範圍 | 0.0002 - 0.02 |
| | 數據的來源 | 此數值可量測，可能的話收集未受污染含水層之土壤由實驗室分析。如果未知，常用內定值爲 0.001。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。如果直接輸入遲滯因子，在 BIOCHLOR 中便不須輸入這項參數。 |

# 表 2.2-6　生物轉換數據

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 區域 1 和 2 之一階反應常數(λ) | 單位 | 1/yr |
| | 描述 | 一階反應常數相當於 0.693 除以地下水中污染物的半衰期。假如溶解的溶劑正值一階衰減，其生物轉換與污染物濃度及一階反應常數有關。 |
| | 典型的數值範圍 | 四氯乙烯:0.07 到 1.20 年$^{-1}$　　三氯乙烯: 0.05 到 0.9 年$^{-1}$<br>順 1,2-二氯乙烯: 0.18 到 3.3 年$^{-1}$　　氯乙烯: 0.12 到 2.6 年$^{-1}$<br>備註：BIOCHLOR 不接受零的數值。 |
| | 數據的來源 | 適當的衰減常數有以下選擇：<br>校準至到現有的污染帶數據：以 BIOCHLOR 用 trial-and-error 法，調校至一階反應常數符合監測場址的濃度。<br>參考文獻值： 各種出版參考文獻所列之常數值(如 USEPA 1998; Howard et al., 1991)。<br>備註： 對使用參考文獻之常數值可能高生物轉換的發生，使用者應該進行靈敏度分析，以決定所使用的常數對污染帶長度的影響。<br>其他方法： 「Technical Protocol for Evaluating Natural Attenuation of Chlorinated Solvents in Ground Water`」(USEPA 1998) 描述其他取得常數的方法。 |
| | 如何輸入資料 | 1)直接輸入或<br>2)填入估計的半衰期，按[C]按鈕由 BIOCHLOR 計算之。 |
| 溶解相溶劑的半衰期(t1/2) | 單位 | 年 |
| | 典型的數值範圍 | 四氯乙烯:0.58 到 9.9 年　　三氯乙烯:0.77 到 13.9 年<br>順 1,2-二氯乙烯: 0.21 到 3.9 年　　氯乙烯:0.27 到 5.8 年 |
| | 數據的來源 | 與一階反應常數同。 |
| | 如何輸入資料 | 在灰色的欄位直接輸入然後按〔C〕按鈕。 如果一階反應常數是直接輸入，在 BIOCHLOR 中便不須輸入這項參數。 |
| 非生物性一階反應常數(1/yr) | 單位 | 1/years |
| | 典型的數值範圍 | Chloroethane to ethanol 0.37 年$^{-1}$ (20 ℃)<br>1,1,1 三氯乙烷 到 1,1-CE 0.058-0.32 年$^{-1}$ (10-20℃ )<br>1,1,1 三氯乙烷 to acetic acid 0.25 到 0.41 年$^{-1}$ |
| | 如何輸入資料 | 按`[λ] 按鈕，在彈出的視窗內輸入數值，然後[OK]。 |
| Yield | 單位 | 無單位 |
| | 典型的數值範圍 | TCE/PCE 0.795　　DCA/TCA 0.742<br>DCE/TCE 0.737　　CA/DCA 0.652<br>VC/DCE 0.645　　ETHA/CA 0.465<br>ETH/VC 0.450 |
| | 數據的來源 | 內建提供 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |

## 表 2.2-7　一般數據

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 模擬面積長度及寬度 | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 500-3000 ft (長度)<br>250-1000 ft (寬度) |
| | 數據的來源 | 數值應比最終污染帶大或應超過所關切的點之下游。假如只有輸出中心線結果時，污染帶寬度並不影響結果。 |
| | 如何輸入資料 | 直接進入。 |
| 模擬時間 (t) | 單位 | 年 |
| | 描述 | 被計算濃度之時間，穩態模擬應使用較大的值(如 1000 年) |
| | 典型的數值範圍 | 1~1000 年 |
| | 數據的來源 | 爲符合既有之污染帶，估計介於原始釋放與野外資料取得之日期。預估污染帶最大移動，增加模擬時間直到污染帶不再增加長度爲止。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |
| Zone 1(區域 1)及 Zone 2(區域 2)長度 | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 500~3000 ft |
| | 數據的來源 | 如果只模擬一個區域時，使用相同的模式長度。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入 zone 1 的值，按[C]鍵會自動計算 Zone 2 個值。 |

## 表 2.2-8　污染源數據

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 污染源區域濃度 | 單位 | mg/L |
| | 典型的數值範圍 | 0.010 到 120 mg/L<br>20 ℃<br>PCE 150 mg/L 1,1,1-TCA 4400 mg/L<br>TCE 1100 mg/L 1,1-DCA 5500 mg/L<br>cDCE 800 mg/L CA 5710 mg/L<br>VC 6800 mg/L |
| | 數據的來源 | 污染源區之監視井數據 |
| | 如何輸入資料 | 在輸入頁直接輸入頁或按[Source Options]鍵並遵照說明指示。 |
| 污染源區寬度 | 單位 | ft |
| | 如何輸入資料 | 在輸入頁直接輸入頁或按[Source Options]鍵並遵照說明指示。 |
| 污染源在飽和層之厚度(Z) | 單位 | ft |
| | 典型的數值範圍 | 20-50 ft |
| | 數據的來源 | 此數據通常從靠近污染源之不同深度監測井之地下水資料推估而得。假如無法取得時，可使用含水層厚度作爲保守之估計。 |
| | 如何輸入資料 | 直接輸入。 |

## 表 2.2-9　現場比較數據資料

| 參數 | 說明 | |
|---|---|---|
| 現場濃度(與污染源之距離) | 單位 | mg/L |
| | 描述 | 此爲靠近污染帶中心線之監測井中溶解之有機物濃度。此數據用於幫助校準模型並顯示模擬結果在「RUN Centerline」選項。 |
| | 典型的數值範圍 | 0.001 到 50 mg/L |
| | 數據的來源 | 靠近污染帶中心線之監測井 |
| | 如何輸入資料 | 依需要而輸入點數，此資料只幫助校正模式。輸入距污染源距離相對應之現場濃度。<br>警告：不要從某依欄位剪貼現場濃度數據至另一欄位。這可能會導致計算錯誤，複製數據然後刪除不要的數據。 |

## 二、操作範例

列舉一範例如表 2.2-10 所示，填入 Biochlor 模式相關參數後(圖 2.2-2)，即可以進行模式的模擬，其模擬的結果可以選擇 2 種不同的方式呈現，1.沿污染帶中心線污染物濃度分佈(圖 2.2-3、圖 2.2-4)；及 2.污染帶三維分佈情況(圖 2.2-5)。

### 表 2.2-10　美國 Cape Canaveral 空軍基地模擬範例

| 數據類型 | 參數 | 數值 | 數據的來源 |
|---|---|---|---|
| 水文地質 | •水力傳導係數：<br>•水力梯度：<br>•有效孔隙率： | 1.8 × $10^{-2}$ (cm/sec)<br>0.0012 (ft/ft)<br>0.2 | •微水試驗結果<br>•靜態水平面測量<br>•估計值 |
| 延散作用 | •縱向延散度： | 40 | •中間值爲 800-1200 英呎。污染帶(從 Gelhar 和 Al (1992)) |
| | •橫向延散度： | 4 | •0.1×縱向延散度。 |
| | •垂直延散度： | 0 (ft) | •假設垂直延散度自污染源的深度(約爲蓄水層的深度)爲零。 |
| 吸附 | •各別的遲滯因子 | PCE：7.1<br>TCE：2.9<br>cis-DCE：2.8<br>VC：1.4<br>ETH：5.3 | •利用下式計算<br>$R=1+K_{oc}\bullet f_{oc}\bullet \rho_b/n$ |
| | 共同的遲滯因子 | 2.9 | •中間值 |
| | •含水層容積密度 | 1.6 (kg/L) | •估計值 |
| | •foc ： | 0.184% | •實驗室分析 |
| | •Koc ： | PCE：426 (L/kg)<br>TCE：130(L/kg)<br>cis-DCE：125 (L/kg)<br>VC：29.6 (L/kg)<br>ETH：302 (L/kg) | •文獻中常使用之在 20℃時的數值 |

# 表 2.2-10　（續）

| 數據類型 | 參數 | 數值 | 數據的來源 |
|---|---|---|---|
| 生物轉化 | 生物轉化率係數，(1/yr)<br>PCE----> TCE<br>TCE---->cDCE<br>Cis-DCE--->VC<br>VC-----> ETH | <br>2.0<br>1.0<br>0.7<br>0.4 | •基於分類，該區域數據使用的模擬時間爲 32 年(區域數據收集於 1997)。開始時參考文獻值，然後調整模式至適合現場數據 |
| 一般 | •區域長度：<br>•區域寬度：<br>•模擬時間： | 1085 (ft)<br>700 (ft)<br>33 (yrs) | •基於受影響之地水污染帶區域<br>• 從 1965 年(第一次釋出)到 1998 年 |
| 污染源數據 | •來源厚度： | 56(ft) | •基於地質日誌和監測數據 |
| | •來源寬度(ft) | Area 1 105; Area 2 175; Area 3 298 | •由污染來源估算 |
| | •來源濃度(mg/L)<br>PCE<br>TCE<br>Cis-DCE<br>VC<br>ETH | Area 1: 0.056, 15.8, 98.5, 3.080, 0.030<br>Area 2: 0.007, 0.316, 1.0, 0.089, 0.013<br>Area 3: 0.001, 0.01, 0.01, 0.009, 0.003 | •污染源濃度爲溶解相濃度 |
| 實際數據 | 距污染源(ft)的距離：<br>PCE 濃度 (mg/L) ：<br>TCE 濃度 (mg/L)<br>Cis-DCE (mg/L)<br>VC (mg/L)<br>ETH (mg/L) | 560: <0.001, 0.220, 3.48, 3.080, 0.188<br>650: ND, 0.0165, 0.776, 0.797, ND<br>930: <0.001, 0.0243, 1.200, 2.520, 0.107<br>1085: <0.001, 0.019, 0.556, 5.024, 0.150 | •基於觀察 1997 年在場址污染帶中心線附近之濃度 |

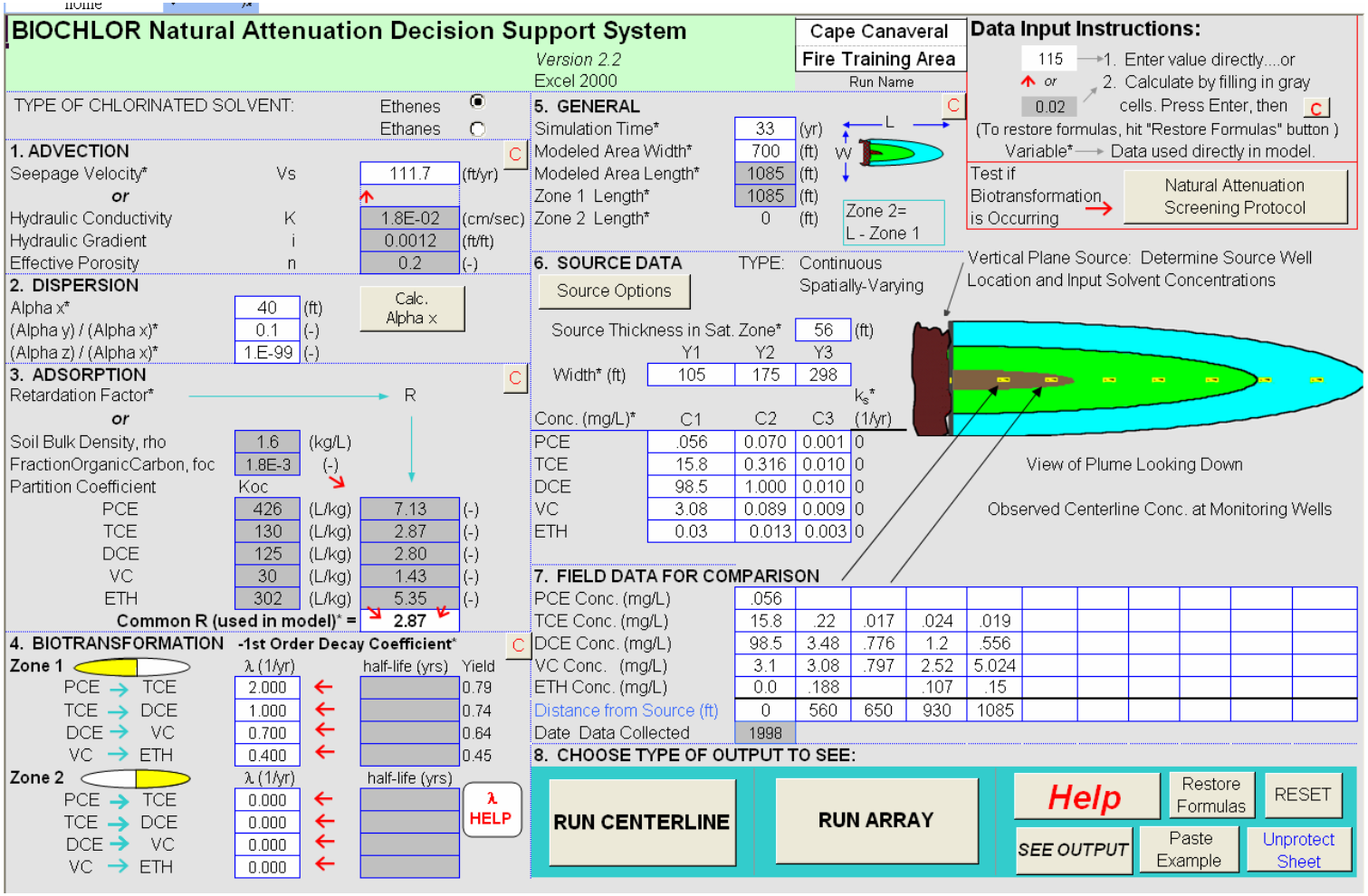



圖 2.2-2　BIOCHLOR 模式參數輸入主畫面（Cape Canaveral 空軍基地）

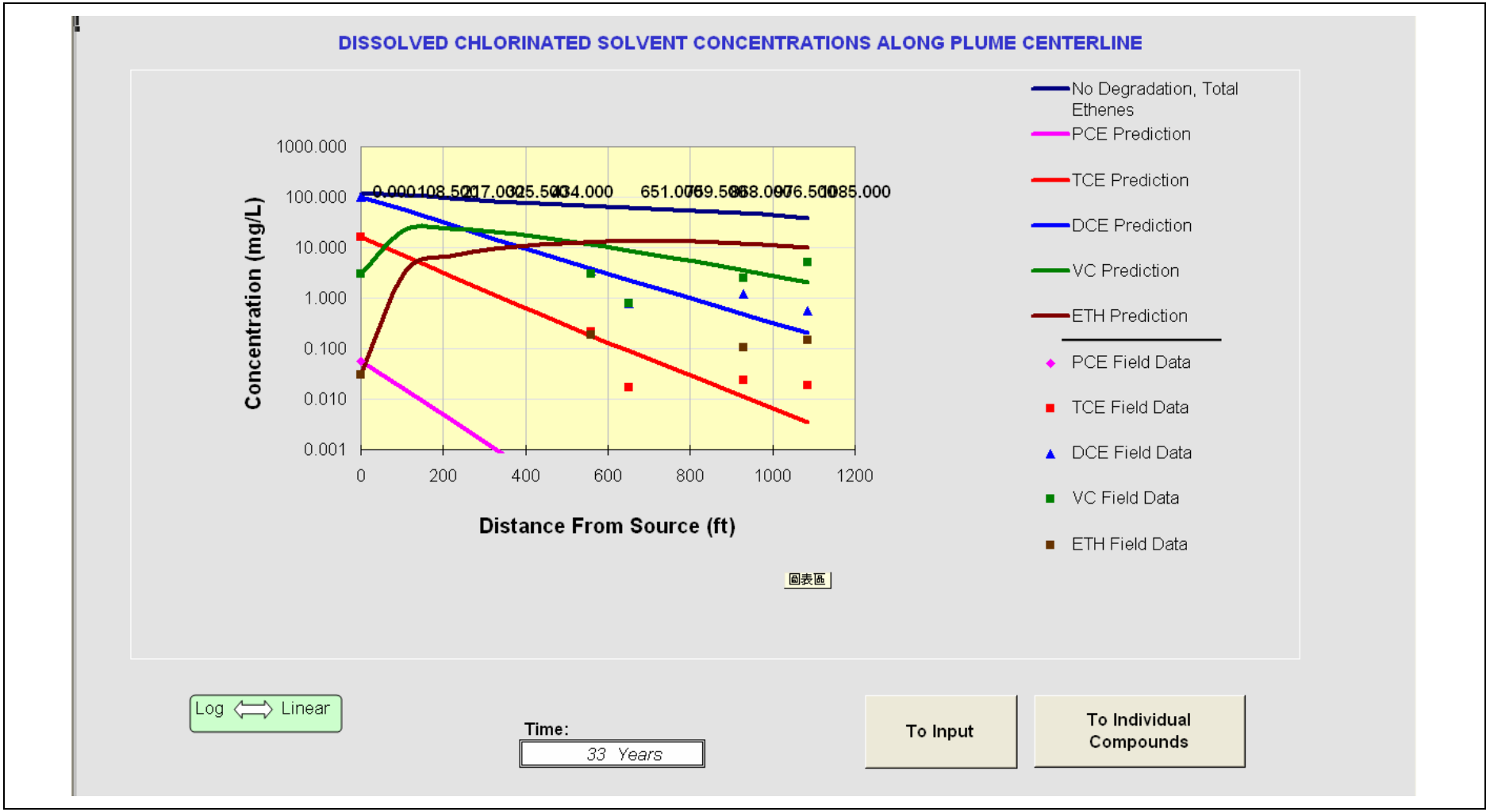



**圖 2.2-3　BIOCHLOR 模式模擬結果中心線濃度輸出畫面（Cape Canaveral 空軍基地）**

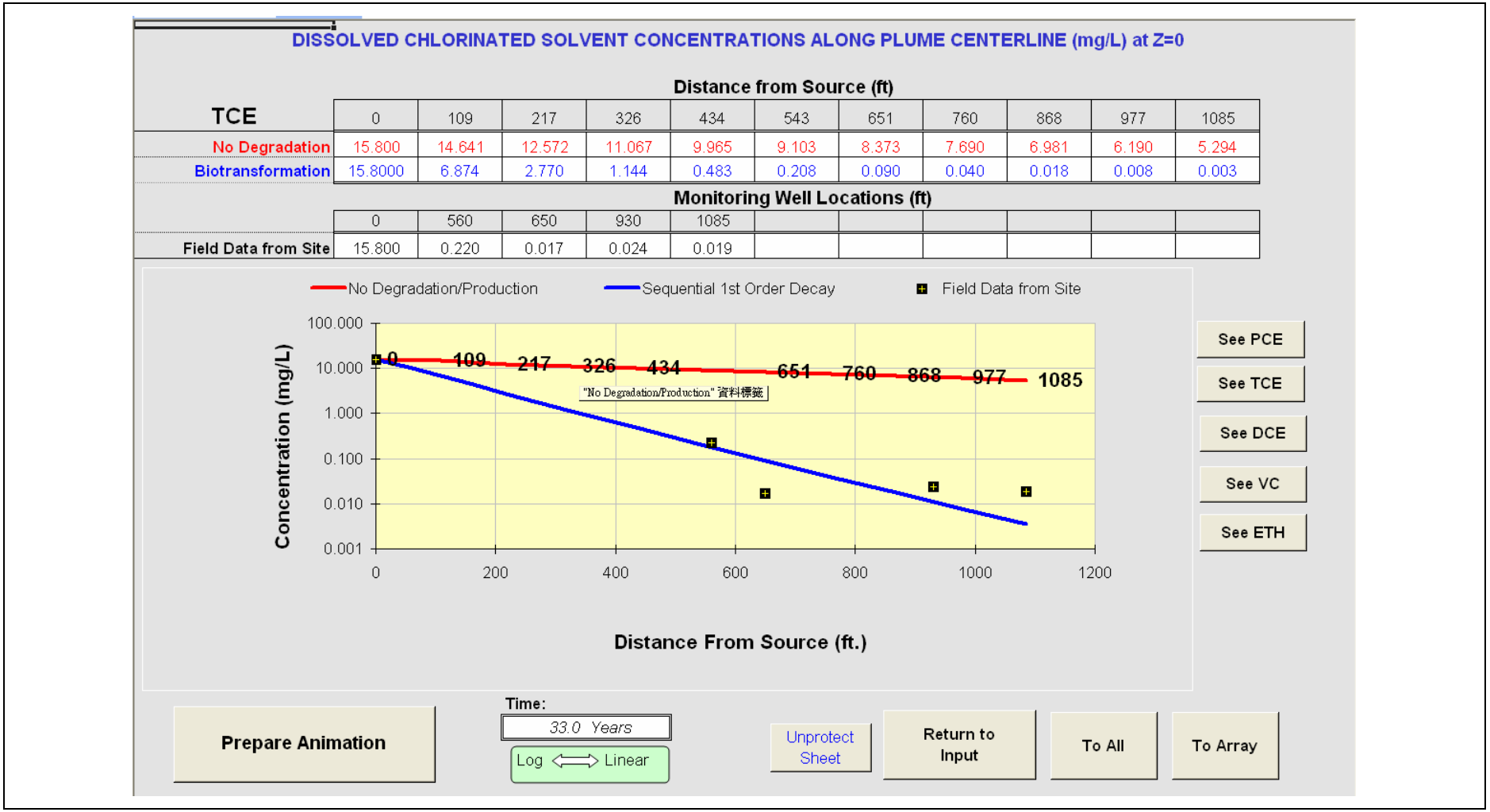



圖 2.2-4　BIOCHLOR 模式模擬結果 TCE 獨立中心線濃度輸出畫面（Cape Canaveral 空軍基地）

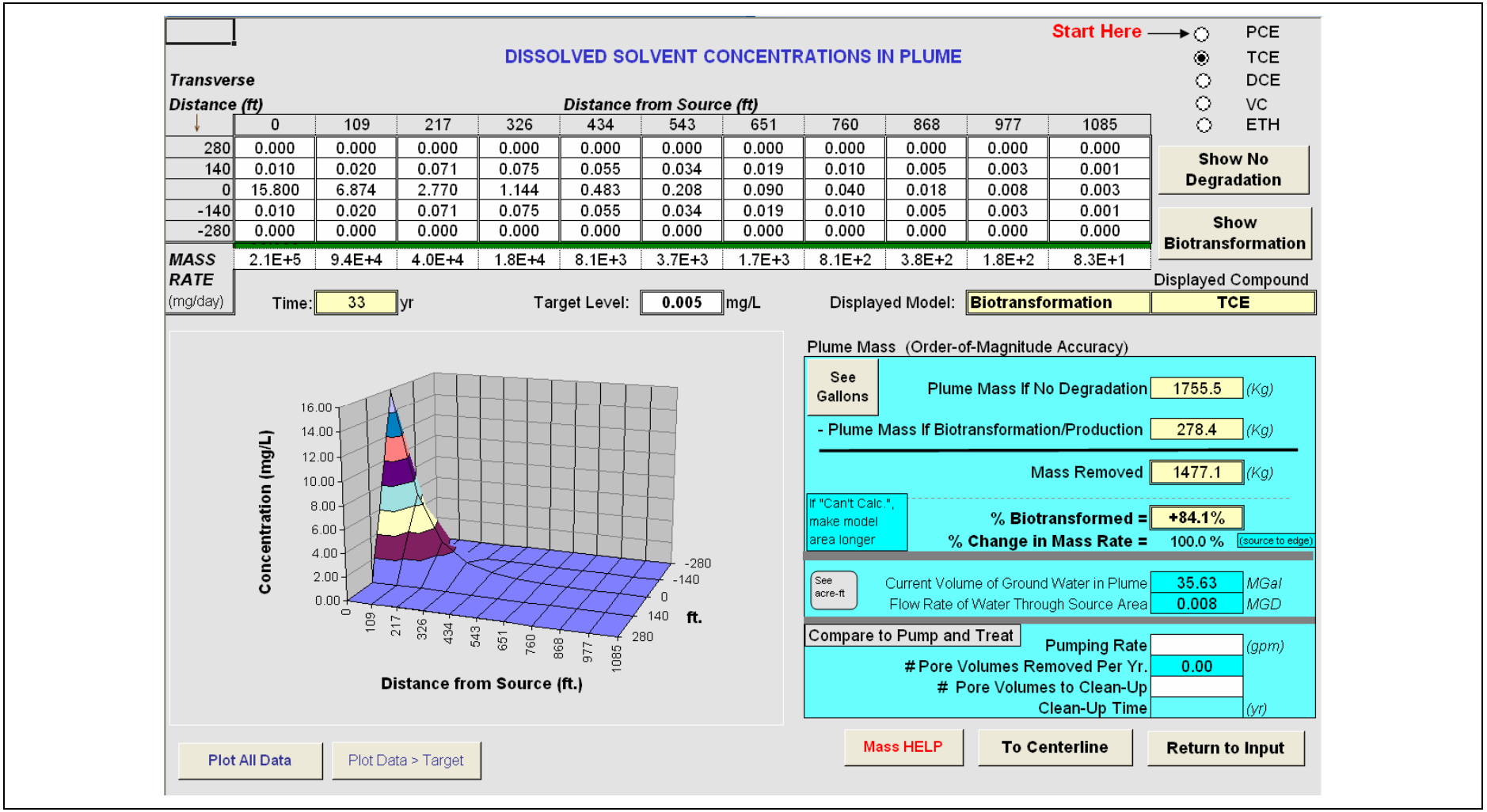



**圖 2.2-5　BIOCHLOR 模式模擬結果 TCE 三維濃度輸出畫面（Cape Canaveral 空軍基地）**

# 第三章 BIOPLUME III 模式

## 3.1 BIOPLUME III 模式簡介

BIOPLUME III 模式是 1997 年依據前一版 BIOPLUME II（Rifai, 1988） 改版，主要加強了一階衰減反應、瞬間反應及 Monod 動力式。依據美國地質調查局 （U.S. Geologic Survey, USGS）所發展之特徵方法（Method of Characteristics, MOC）模式爲基礎改良而來，是一個二維、有限差分法模式。可模擬地下水之延散、擴散及生物降解作用所造成之有機污染物的自然衰減。模式使用好氧及厭氧性電子接受者做爲模擬有機污染物之生物降解依據，這些電子接受者包括有溶氧、硝酸鹽、三價鐵離子、硫酸鹽及二氧化碳等。

模式解出六個傳輸方程式以決定碳氫化合物的衰減及傳輸與電子接受者（或反應產物）。三種不同的動力反應式可用於模擬好氧及厭氧性之生物降解反應。主要加強了一階衰減反應、瞬間反應及 Monod 動力式，而疊置原理（Principle of Superposition）用於結合碳氫化合物污染帶與電子接受者團。

BIOPLUME III 通常可提供下列自然衰減的解答：

1. 在無整治控制污染源的情況下，污染帶會如何擴大?
2. 污染物於自然衰減作用下完全分解前污染帶會持續多久?
3. 在整治控制或污染源移除（如自由相移除或土壤中殘留污染物移除）下，污染帶將如何擴大或持續多久?

## 3.2 BIOPLUME 模式使用介面介紹

### 一、模式軟體下載

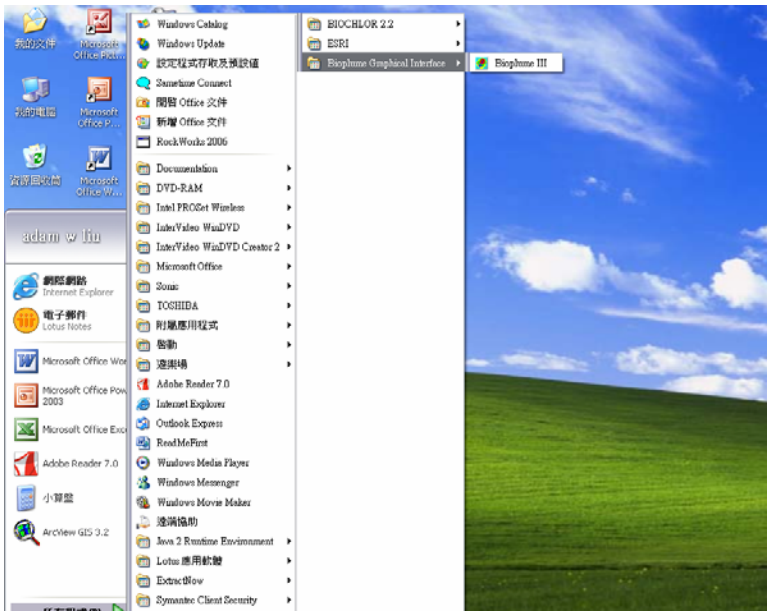
BIOPLUME III 模式可以免費在美國環保署網站上下載，其下載網址爲：「http://www.epa.gov/ada/csmos/models/bioplume3.html」。在這個網頁中可以下載 BIOPLUME III 的主程式（bioplume3.exe）及 BIOPLUME III 的使用說明手冊（bpiiiman.pdf）等。

### 二、模式軟體安裝

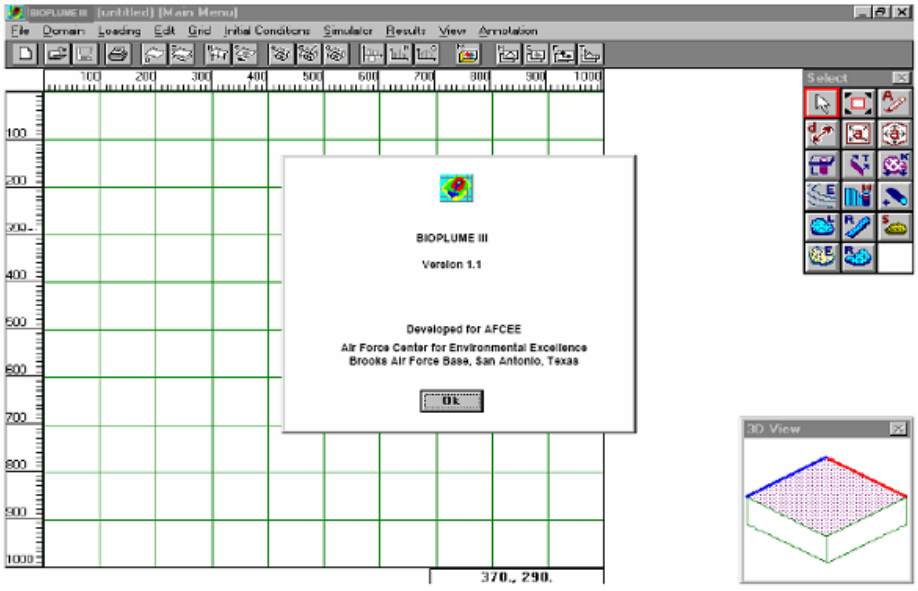
下載之後的 bioplume3.exe 檔案是一個自動解壓縮的執行檔，使用者直接點擊後，該檔案會自行解壓縮，並產生 BIOPLUME III 主程式的安裝檔案（INSTALL.EXE）。使用者直接點擊 INSTALL.EXE 檔案，即開始進行 BIOPLUME III 軟體的安裝程序。使用者在設定完預定安裝的路徑（預設值爲：C:\BIOPLUME\）之後，安裝程式即會自動完成安裝工作。

### 三、模式軟體操作

模式軟體安裝完成之後，會在程式集中自動產生軟體啓動路徑（如圖 3.3-1-A），使用者可直接點選即可以啓動 BIOPLUME III 模式。啓動模式之後，即進入模式啓動歡迎畫面（如圖 3.3-1-B），使用者按下「OK」鍵之後，即進入模式預設畫面。在這個畫面的指令列（畫面中最上層第二列）中共有 10 個主要的指令，並以下拉式選單方式呈現，包括有：檔案（File）、範圍（Domain）、載入（Loading）、編輯（Edit）、網格（Grid）、初始條件（Initial Conditions）、模擬器（Simulator）、結果（Results）、畫面呈現（View）及注解（Annotation）等。分別簡述如后。




**A. BIOPLUME III 模式啓動路徑**




**B. BIOPLUME III 模式啓動畫面**

## 圖 3.3-1　BIOPLUME III 模式啓動畫面

**1.檔案（File）**

在這一個下拉式的選單中，共包括有新開啓檔案（New）等 11 項指令，主要可以透過這一個下拉式選單中的各項指令，新增一個模式、開啓既有模式、存檔及刪除等關於檔案管理之工作，以及相關的操作環境介面設定等。

**2.範圍（Domain）**

在這一個下拉式的選單中，共包括有地表範圍設定（Surface Domain）等 6 項指令，主要可以透過這一個下拉式選單中的各項指令，進行地表範圍與高程範圍（Elevation Domain）等邊界條件的設定；或是在直接載入（Loading Domain）的選項中，輸入相關的參數範圍，包括時間（Time）、抽水率（Pumping Rates）、濃度（Concentration）、入滲率（Infiltration）及水頭（Hydraulic Head）等。

在「Chemical Species」的選項中，則可以輸入污染物與電子接受者等相關的資料。而關於場址的水文地質條件，包括：水力傳導係數、儲水係數與有效孔隙率等，則可以在「Define Strata」的選項中輸入。

**3.載入（Loading）**

在此一選項中，主要是可以直接載入先前在「範圍（Domain）」項目中，已經輸入的各項參數，並直接以圖形介面的方式呈現。包括有：水頭、碳氫化合物濃度及電子接受者濃度等。另外，若是場址背景中有補注的來源，亦可以於「Background Recharge」項目中輸入。

**4.編輯（Edit）**

關於模式中有關的編輯工作均可以在此一項目中完成。

**5.網格（Grid）**

這個項目中最主要是要透過網格的設定以定義並產生邊界條件，另外在此一網格邊界區域內的任一網格裡的相關參數，亦可以在此一選項中做編輯。

**6.初始條件（Initial Conditions）**

在此一選項中主要是設定模擬的期距以及初始的條件。

**7.模擬器（Simulator）**

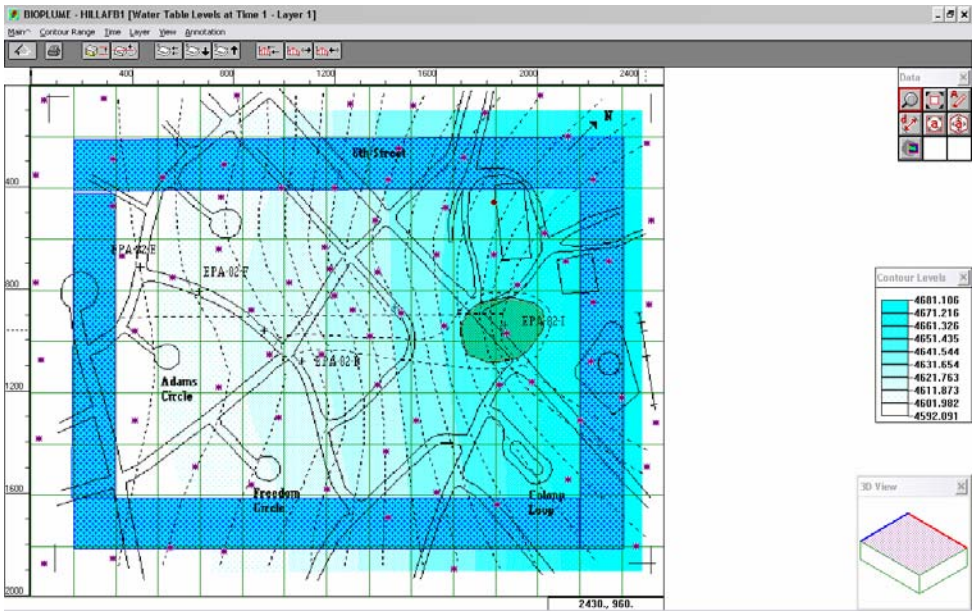
在使用者設定完相關的參數之後，即可選擇適當的模式進行模擬。

**8.結果（Results）**

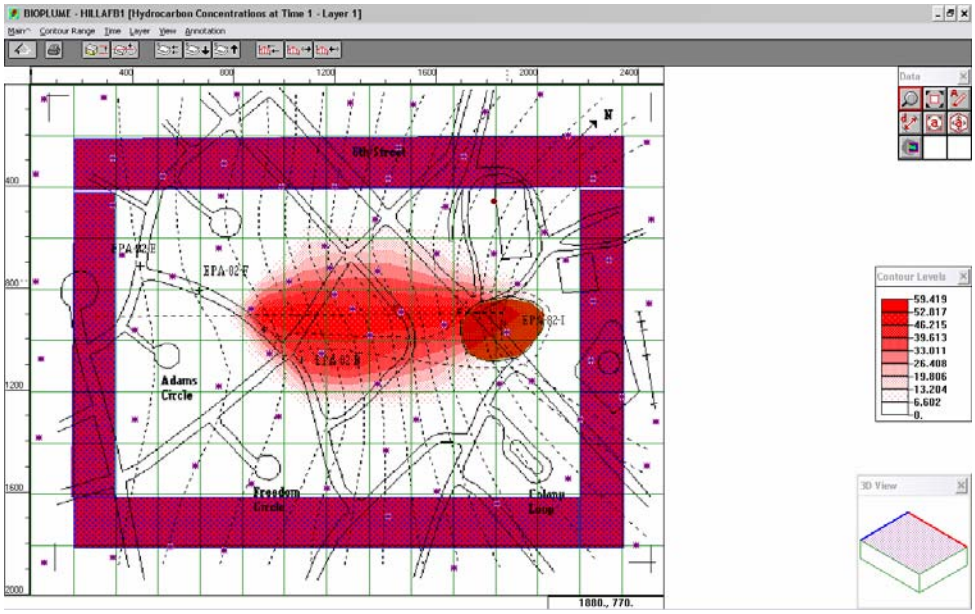
在這一個選項中主要是模式模擬的輸出結果，使用者可以透過不同的選項，查看每一個項目模擬的結果，包括水頭、污染物濃度分佈、地下水位、地下水流速、觀測井以及預測模擬的結果（如圖 3.3-2 所示）。

**9.畫面呈現（View）**

在這一個選項中，主要是可以調整模式的操作介面，包括放大、縮小、格線設定及基本底圖設定等。




**A. BIOPLUME III 水位模擬結果**




**B. BIOPLUME III 污染物濃度模擬結果**

## 圖 3.3-2 BIOPLUME III 模式模擬結果

## 3.3 BIOPLUME III 模式操作流程

BIOPLUME 模式依 3.2 節將模式軟體下載及安裝，並執行 BIOPLUME III 後即可進入本程式主畫面之操作，主要功能包括檔案（File）、領域（Domain）、輸入（Loading）、編輯（Edit）、網格（Grid）、初始條件（Initial Condition）、模擬器（Simulator）、結果（Results）、畫面呈現（View）及註解（Annotation）等，本節依 BOIPLUME III 模式操作方式，配合軟體內之教學案例，有系統地介紹如何發展場址特徵及模式測試，操作方式可分爲六大主題，包括：

1. 基本模式建立（Basic Model Development）
2. 地下水流模式（Basic Flow model）
3. 非自然衰減碳氫化合物傳輸（Non-Attenuated Hydrocarbon Mass Transport）
4. 模擬微生物自然衰減（Simulated Microbial Attenuation）
5. 特別特徵介紹（Special Features）
6. 動畫及介面呈現（Video Animation）

以下依此六大主題配合主要畫面之各項功能說明於后。

### 一、基本模式建立（Basic Model Development）

建立一個基本模式架構。分別於 x 及 y 軸以 0-2000 英呎邊界之領域內，建立一個 20 × 20 網格，每網格大小爲 100 × 100 英呎之模式，其步驟說明於后。

1. 執行檔案（File），並存檔（Aave As）爲 Test01。
2. 執行領域（Domain），選擇表面區域設定（Surface Domain），

設定左邊界（Left）0、右邊界（Right）2000、上邊界（Top）0、下邊界（Bottom）2000；水平主刻度（Horizontal Major）100、次刻度（Horizontal Minor）10、垂直主刻度（Vertical major）100、次刻度（Vertical Minor）10。

3. 執行網格（Grid），選擇產生網格（Generate Grid），設定 x 軸最小值（Left）0、x 軸最大值（Right）2000、y 軸最小值（Top）0、y 軸最大值（Bottom）2000；網格大小（Grid Size）中之欄位數量（Number of Columns）20、列位數量（Number of Rows）20。

4. 存檔（Save），已完成一個基本模式架構之建立，如圖 3.3-3。

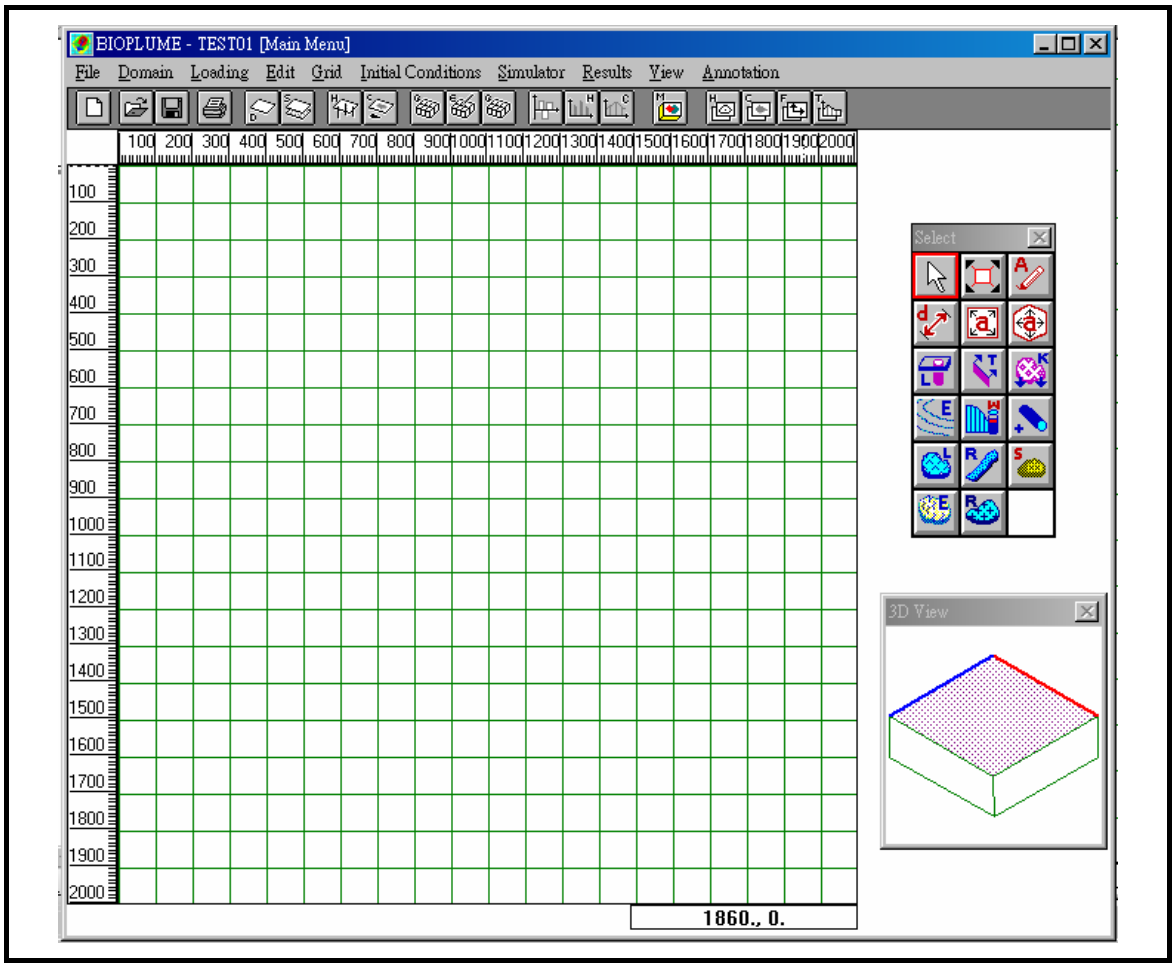



圖 3.3-3　模式基本架構

## 二、地下水流模式（basic flow model）

### A.區域及邊界狀況設定（domain and boundary conditions）

定義地下水在穩定狀況（Steady State）下，模式之領域及基本含水層資料。

1. 開啓舊檔案 Test01。
2. 執行領域（Domain），選擇含水層高程設定（Elevation Domain），設定高程最高值（Elevation Maximum）10、高程最低值（Elevation Minimum）-10 、主刻度（Ruler major）10、次刻度（Ruler minor）1、游標解析度（Cursor resolution）1。
3. 由工具列中選擇井點（Log Points），如，游標在畫面中即出現星型符號，在網格中設定適當井點，游標再迅速按二下，即出現含水層上部及底部之高程資料，在 BIOPLUME III 模式中至少要設立一點井點。
4. 執行領域（Domain），選擇輸入領域（Loading Domain），再選擇時間（Time），設定最大時間（Maximum Time）10、主刻度（Ruler Major）10、次刻度（Ruler minor）1。
5. 執行領域（Domain），選擇輸入領域（Loading Domain），再選擇抽水速率（Pumping Rates）預設值。
6. 執行領域（Domain），選擇輸入領域（Loading Domain），再選擇濃度（Concentration）預設值。
7. 執行領域（Domain），選擇輸入領域（Loading Domain），再選擇滲透率（Infiltration）預設值。
8. 執行領域（Domain），選擇輸入領域（Loading Domain），再

選擇水頭（Hydraulic Heads），設定上水頭（Upper Head）10，主刻度（Ruler Major）10、次刻度（Ruler Minor）1、游標解析度（Cursor Resolution）1。

9. 執行領域（Domain），選擇定義地層 （Define strata），設定水平水力傳導係數（Horiz. Hydraulic Conductivity）3 e-4，異向性（Anisotropy）1、儲水係數（Storage Coefficient）0.20、有效孔隙率（Effective Porosity）0.20、傳輸特性（Transport Properties）預設值。

10. 存檔（Save），完成水流模式邊界狀況設定。

11. 執行網格（Grid），選擇編輯網格（Edit Grid），即出現水流模式之邊界條件，如圖 3.3-4。

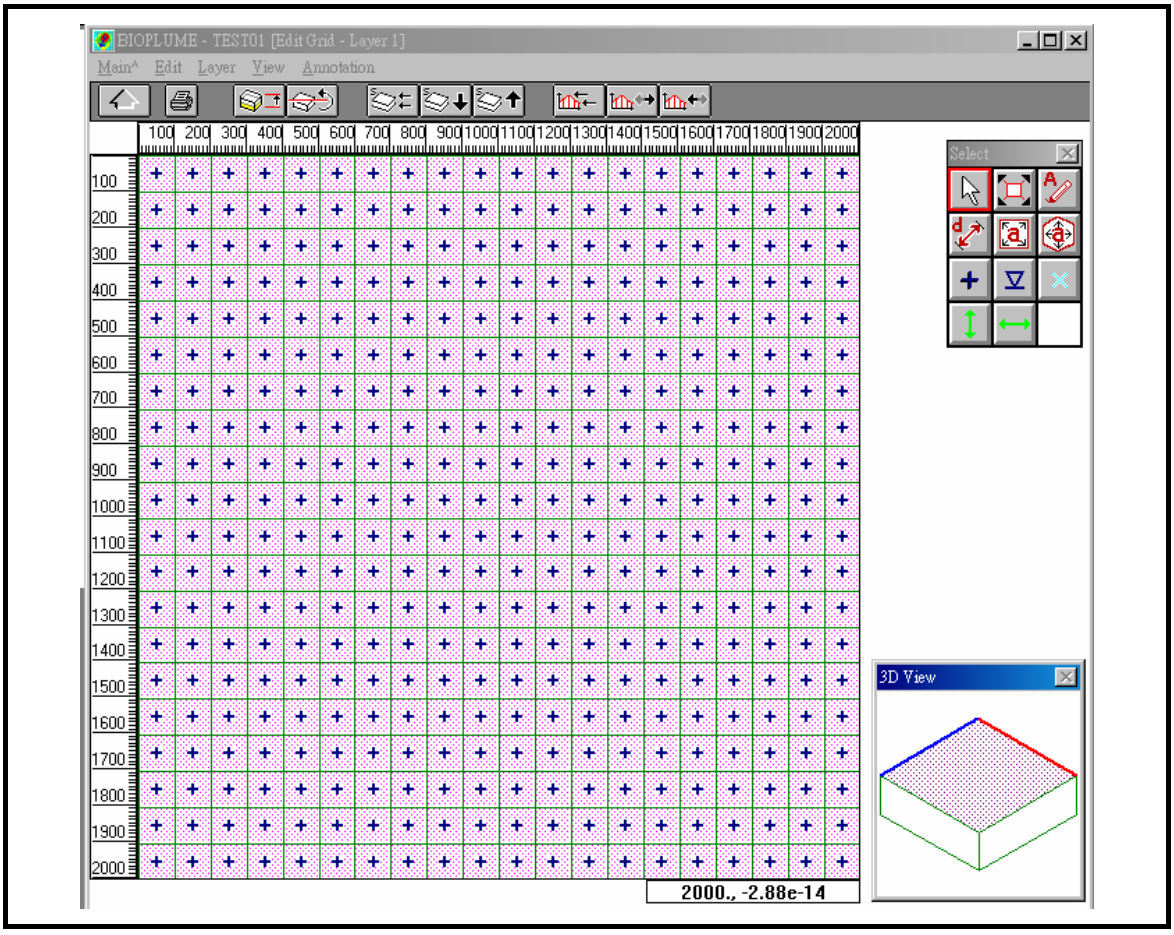



**圖 3.3-4　水流模式之邊界條件**

**B.水頭設定（hydraulic head condition）**

由建立之模式邊界狀況，依現場實際水頭高程設定水頭單位（Head Cell），以建立地下水流模式。

1. 開啓舊檔案 Test01。
2. 執行輸入（Loading），選擇觀測水位（Observed Heads），由工具列中選擇水位線（Head Line），如，游標在畫面中即出現十字符號。
3. 依現場定位之結果，在網格中選擇適當井位，並點出水位相同之水位線，游標在水位線上迅速按二下，輸入水位值（Head）。在模式中畫出 7 條水位線，並在各水位線中輸入 2 至 8 之水位值，如圖 3.3-5。
4. 選擇主畫面（Main），回到主畫面。
5. 執行網格（Grid），選擇克利金法（Select Kringing），進行網格水位線克利金法之回歸計算。
6. 存檔（Save），完成水流模式水頭設定。

**C.含水層厚度設定（Aquifer Thickness）**

由現場地質鑽探或監測井設置結果，設立本場址各區域之含水層厚度資料。

1. 開啓舊檔案 Test01。
2. 由工具列中選擇井點（Log Points），如，游標在畫面中即出現星型符號，由現場地質鑽探或監測井設置結果在網格中設定各個井點，游標在每個井點位置迅速按二下，再選擇剖面

（Cross Section），設定含水層上部在 7 英呎，下部在-3 英呎，即建立一厚 10 英呎的含水層。

3. 執行網格（Grid），選擇克利金法（Select Kringing），再選擇剖面係數（Cross-Sectional Parameters），設定高程（Elevation）爲克利金法之主要係數。

4. 存檔（Save），完成含水層厚度設定。

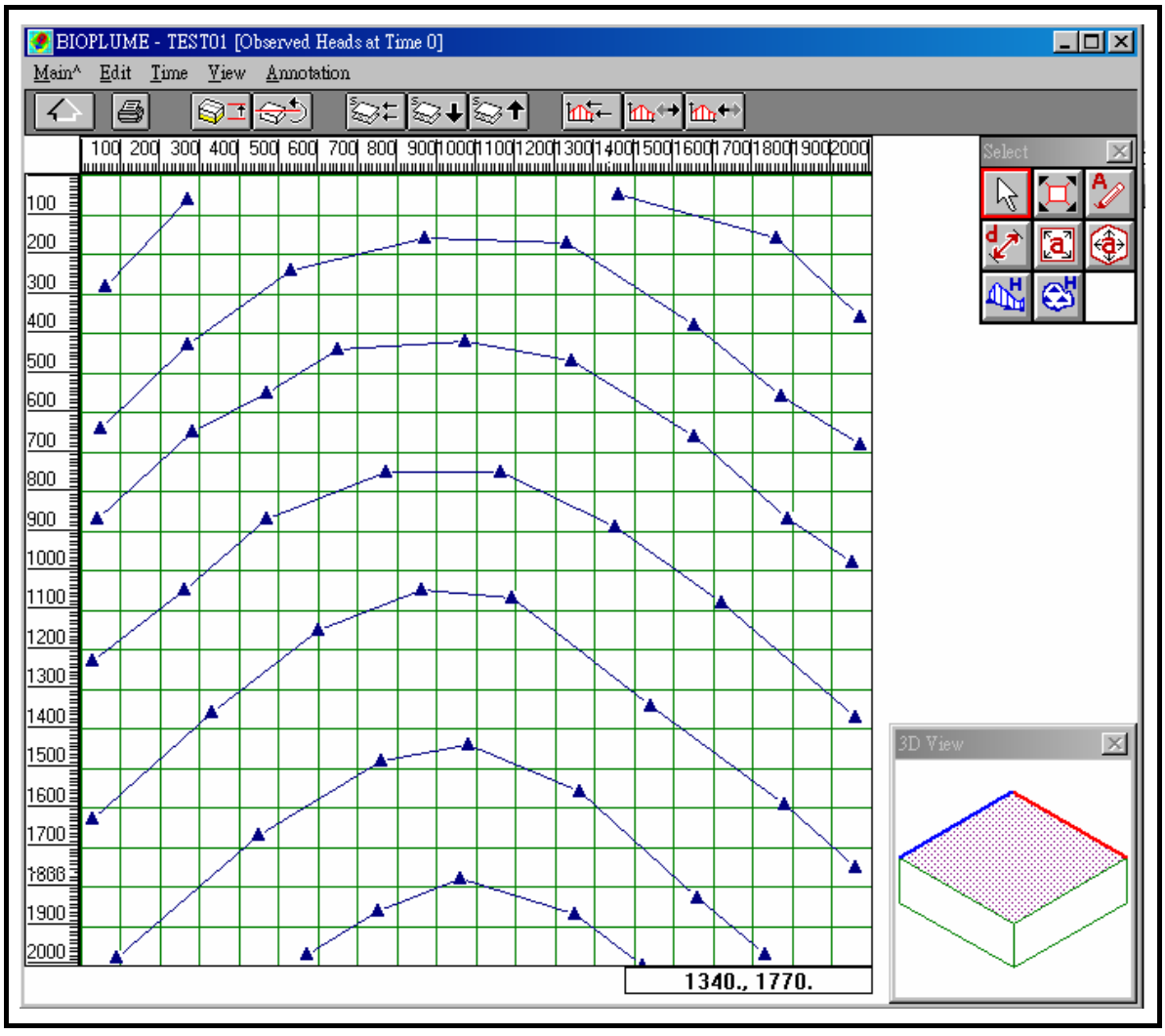



圖 3.3-5　水位資料設定

**D.穩定流模擬（Steady-State Simulation）**

目前已完成初步的模式建立，執行在穩定地下水流狀況下之水流模擬。

1. 開啓舊檔案 Test01。
2. 執行初始條件（Initial Condition），選擇模擬時間（Simulation Period）10。
3. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始水頭（Starting Heads），選擇觀察值（Observed Values）。
4. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始濃度（Starting Concentrations），選擇觀察值（Observed Values）。
5. 執行模擬器（Simulator），選擇 BOIPLUME III。在資料表頭（Data Set Heading）輸入【static piezometric surface】。在選擇時間設定（Runtime Option）上再選擇時間係數（Time Parameters），設定最大模擬時間（Maximum No. of Time Step）10、初始時間（initial Time Step in seconds）0、再選擇穩定水流（Steady State Run）；再選擇執行係數（Execution Parameters），設定重覆係數（No. of Iteration Parameters）7、收斂標準（Convergence Criteria）0.001、最大重覆次數（Maximum No. of Iteration）100、其他項目皆爲預設值。最後選擇存檔及執行模擬（Save Data and Run Simulation）。
6. 執行結果（Results），選擇水頭（Hydraulic Heads），再選擇 2-D 水位線（2-D Contours）。即出現模擬結果如圖 3.3-6。
7. 存檔（Save），完成水流模式設定。

**三、非自然衰減碳氫化合物傳輸 （non-attenuated Hydrocarbon mass**

**transport）**

**A.觀測新增之污染帶（observed contaminant plume addition）**

由原來已建立之水流模式，建立碳氫化合物污染來源至系統中。

1. 開啓舊檔案 Test01，並另存新檔爲 Test02。
2. 執行領域（Domain），選擇基本影像（Base Image），再選擇 Test02.bmp，即出現污染物分布影像圖，如圖 3.3-7 所示。
3. 執行領域（Domain），選擇輸入領域 （Loading Domain），再選擇濃度（Concentration），設定初始濃度設定（Default）0、最小濃度（Minimum）0、最大濃度（Maximum）100、主刻度(ruler major)10、次刻度(ruler minor)2、游標增加(cursor increment）2。
4. 執行領域（Domain），選擇化學種類 （Chemical Species），再選擇污染物（contaminant），再選擇反應（Reaction），設定線性吸收(linear sorption)之吸收係數(sorption parameter)之分布係數(distribution coefficient)0.093；密度(bulk density)2.14。
5. 執行領域（Domain），選擇定義地層 （define strata），再選擇傳輸特性(transport properties)，設定延散性(dispersivity)10、延散比（dispersivity ratio）0.1、垂直延散比（vertical dispersivity ratio）1、分子擴散（molecular diffusion）0、及密度（bulk density）2.14。
6. 執行輸入（Loading），選擇觀測濃度（Observed Concentrations），再選擇碳氫化合物（Hydrocarbon），由工具列中選擇區域濃度工具 Concentration Area Tool），如

，在主畫面中 0.1 濃度以外的地方進行圈選，迅速按二下後設定濃度爲 0；再由工具列中選擇線性濃度工具，如，在主畫面中依 0.1、1 及 10 之影像圖中位置依序繪出等濃度線，迅速按二下後分別設定濃度爲 0.1、1 及 10；並於 10 等濃度線中心設定單一點濃度爲 15。污染傳輸模式濃度設定結果如圖 3.3-8 所示。

7. 執行網格（Grid），選擇克利金法（Select Kringing），再選擇觀測濃度（Observed Concentrations）之碳氫化合物（Hydrocarbon），選取快速克利金法（Quick Kringing）。

8. 存檔（Save），完成污染模式設定，濃度執行結果如圖 3.3-9 所示。

**B.傳輸執行及結果（transport execution and results）**

由原來已建立之水流及污染模式，執行污染傳輸模式。

1. 開啓舊檔案 Test02。

2. 執行初始條件（Initial Condition），選擇模擬時間（Simulation Period）10。

3. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始水頭（Starting Heads），選擇觀察值（Observed Values）。

4. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始濃度（Starting Concentrations），選擇觀察值（Observed Values）。

5. 執行模擬器（Simulator），選擇 BOIPLUME III。在資料表頭（Data Set Heading）輸入【static piezometric surface】。在選擇時間設定（Runtime Option）上再選擇時間係數（Time Parameters），設定最大模擬時間（Maximum No. of Time Step）

10、初始時間（initial Time Step in seconds）0、再選擇穩定水流（Steady State Run）；再選擇執行係數（Execution Parameters），設定重覆係數（No. of Iteration Parameters）7、收斂標準（Convergence Criteria）0.001、最大重覆次數（Maximum No. of Iteration）100、其他項目皆爲預設值。最後選擇存檔及執行模擬（Save Data and Run Simulation）。

6. 執行結果（Results），選擇濃度（Concentrations），再選擇2-D 碳氫化合物（2-D Contours）。即出現模擬結果如圖 3.3-10。

7. 存檔（Save），完成傳輸模式設定。

**C.新增固定污染源（Constant Source Addition）**

由原來已建立之污染傳輸模式，新增固定污染源。

1. 開啓舊檔案 Test02，並另存新檔爲 Test03。

2. 執行輸入（Loading），選擇觀測濃度（Observed Concentration），再選擇碳氫化合物（Hydrocarbon），選取畫面網格中的濃度 0 區域予以刪除；再依序選取濃度 0.1、1.0、10 及 15 之濃度線後予以刪除，回到主畫面。

3. 由工具列中選取污染源工具（Source），如，游標在畫面中即出現十字符號。沿著等濃度線 10 之區域繪出固定污染源，迅速按二下後出現污染源畫面，選取污染物爲碳氫化合物（Hydrocarbon），污染濃度（Set Value）爲 10。

4. 重覆執行上述 B.傳輸執行及結果之步驟 2 至步驟 6，即出現傳輸模擬結果如圖 3.3-11 所示。

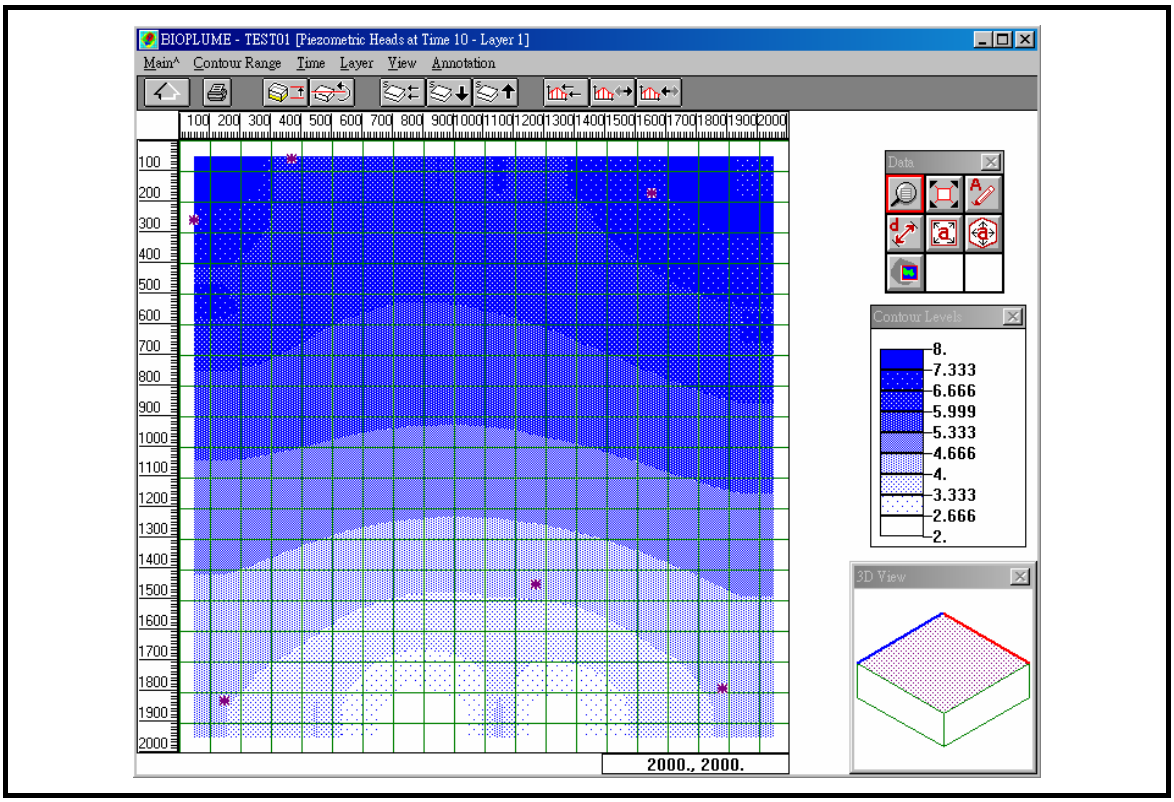



圖 3.3-6　穩定水流模式模擬結果

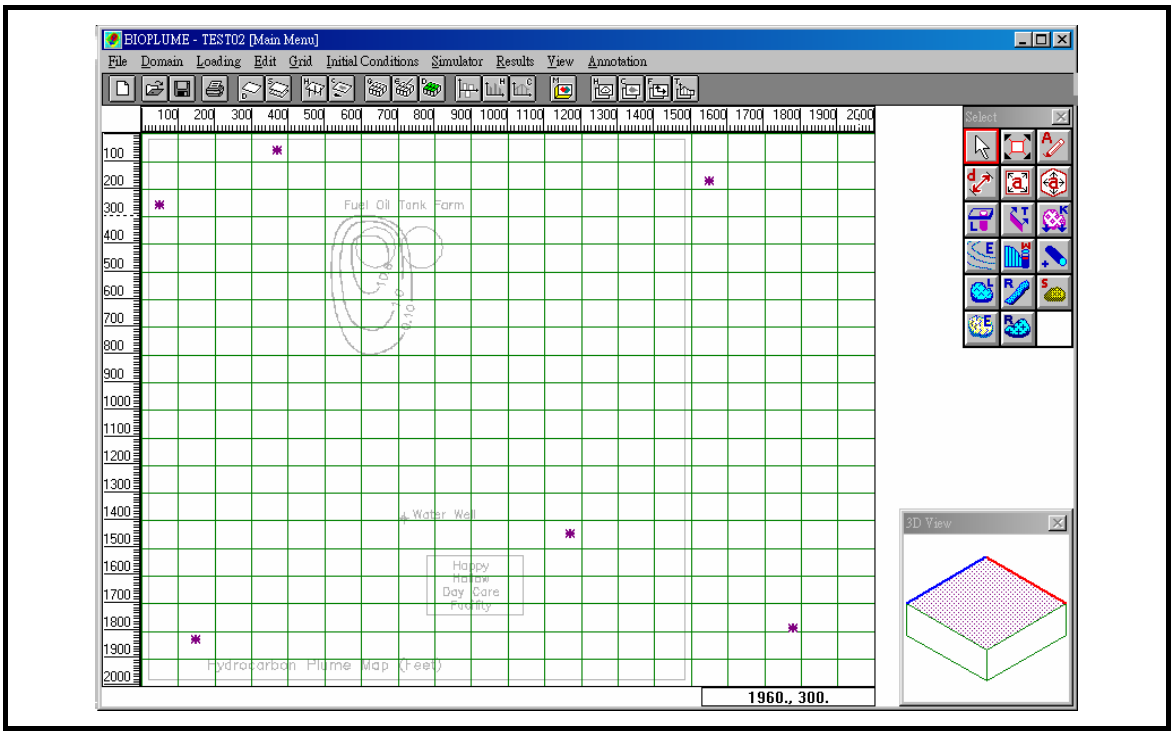



圖 3.3-7　污染物分布影像圖

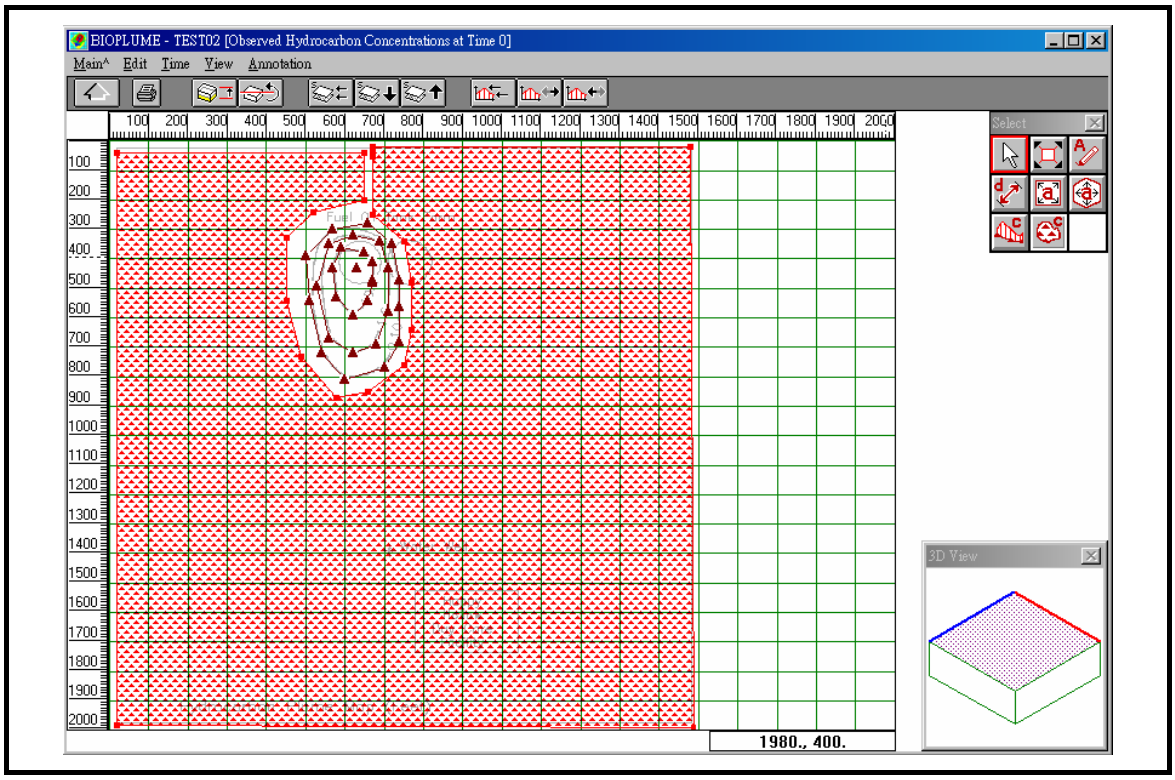



圖 3.3-8　污染傳輸模式濃度設定

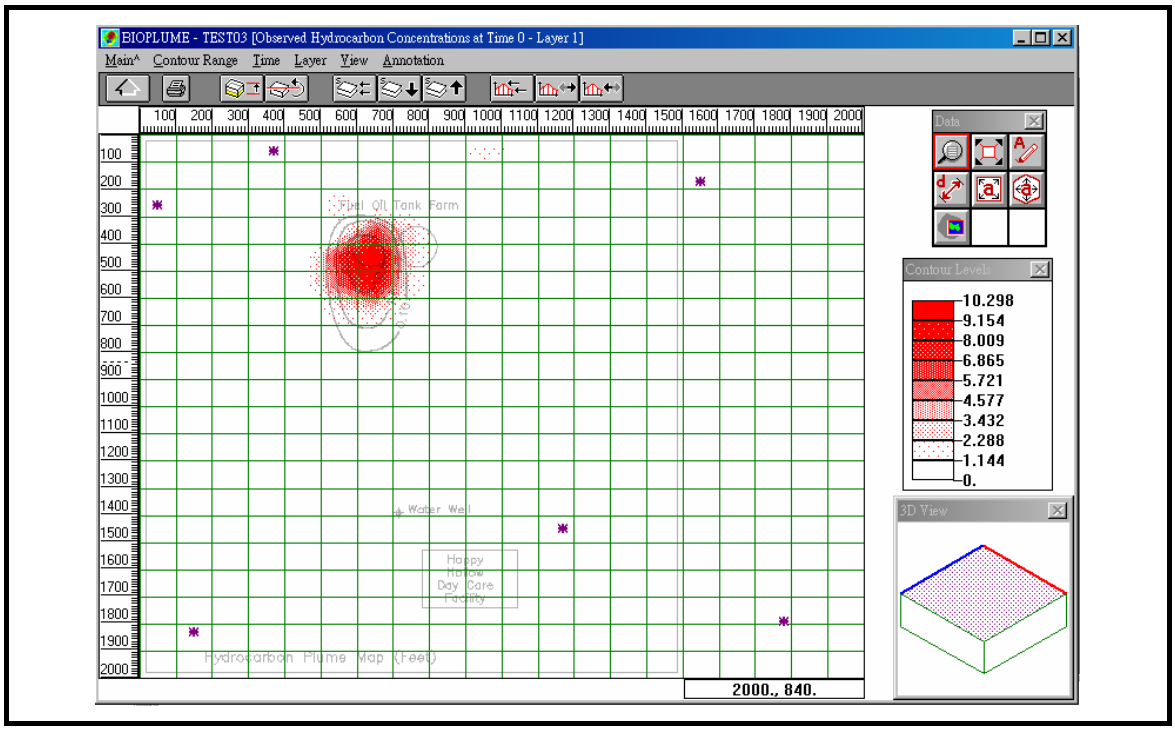



圖 3.3-9　污染傳輸模式初始濃度執行結果

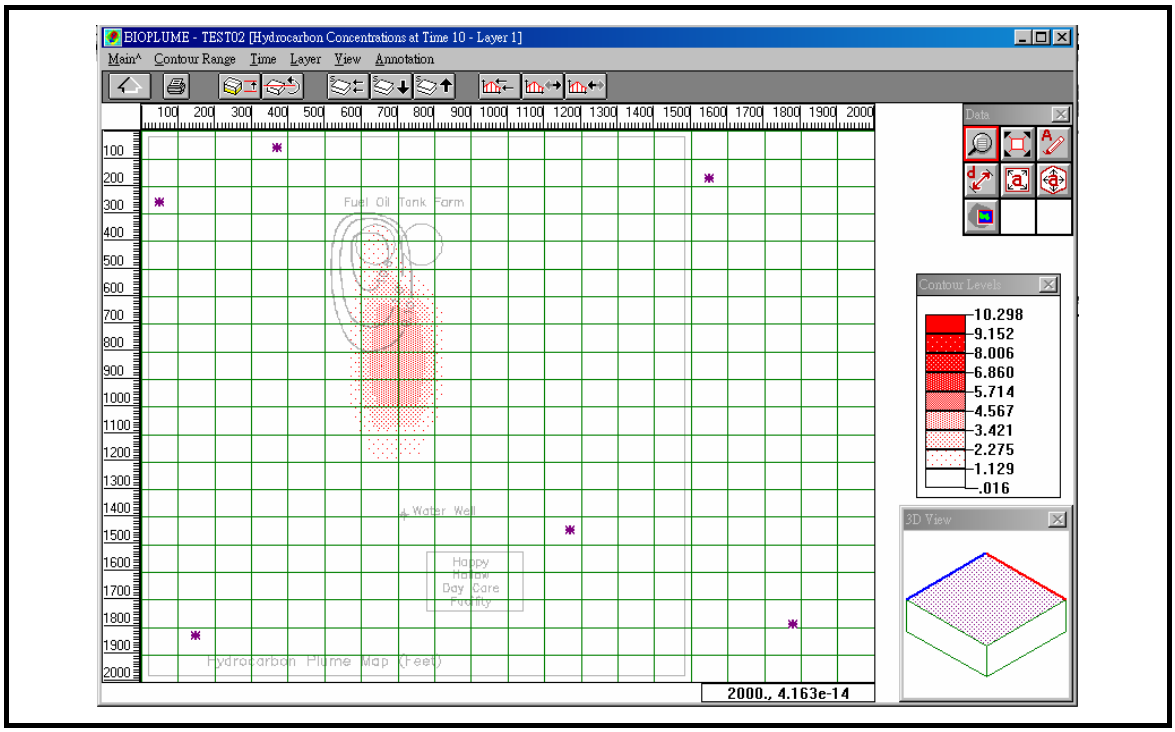



圖 3.3-10　污染傳輸模式傳輸結果

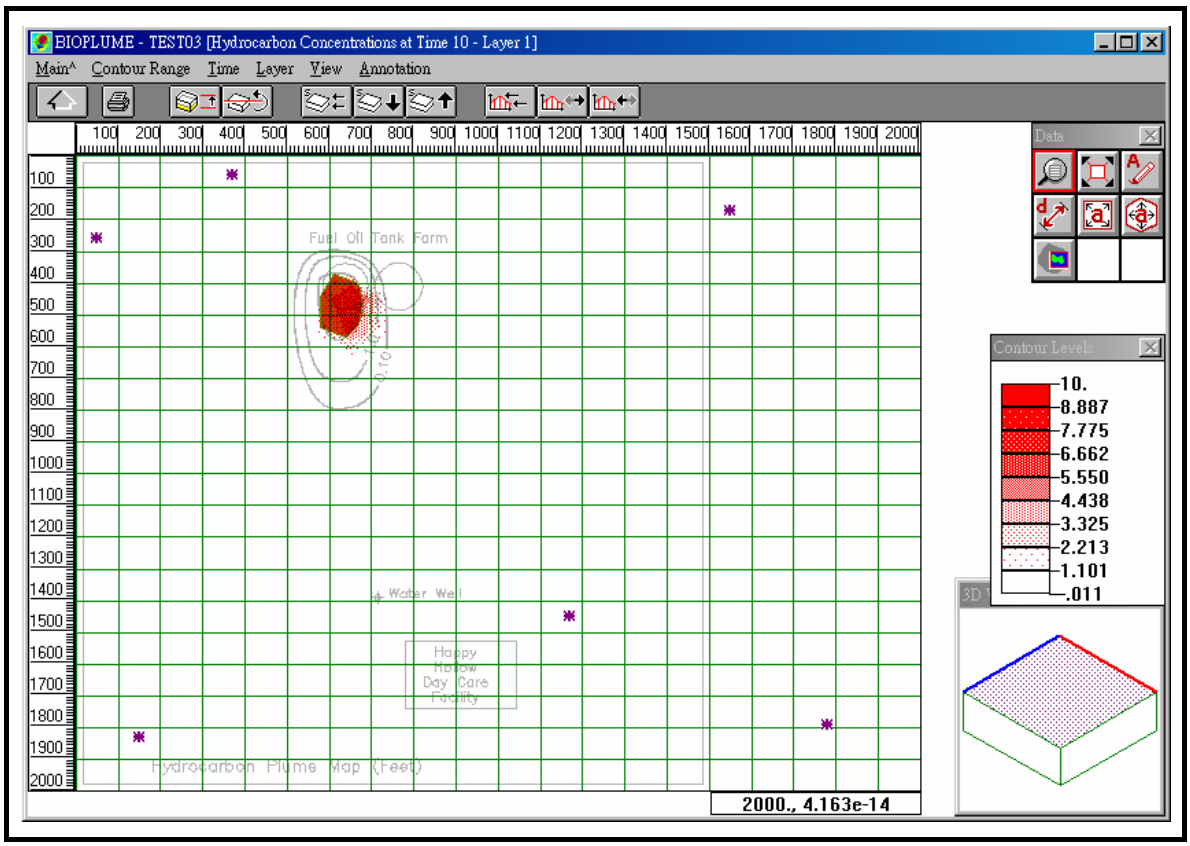



圖 3.3-11　污染傳輸模式固定污染源傳輸結果

## 四、模擬微生物自然衰減（Simulated Microbial Attenuation）

由原來已建立之水流模式及非自然衰減碳氫化合物污染傳輸模式，進一步地介紹，生物自然衰減的過程與環境中氧及硫酸鹽降解之化學計量平衡關係。

1. 開啓舊檔案 Test02，並另存新檔爲 Test04。
2. 執行領域（Domain），選擇化學種類（Chemical Species），再選擇電子接受者（Electron Acceptors），設定氧（Oxygen）之反應（Reaction）爲非等濃度吸收（No Sorption Isotherm）、非衰減（No Decay）及非電子交換（No Exchange）；交互作用（Interaction）爲碳氫化合物電子接受者之化學計量平衡比（Stoichiometric Ratio of Electron Acceptor to Hydrocarbon）3.1、電子接受者門檻（Electron Acceptor Threshold）0.5、一階衰減率（First Order Decay Rate）0、其他皆爲預設值。
3. 接續步驟 2，設定硫化物（Sulfate）之反應（Reaction）爲非等濃度吸收（No Sorption Isotherm）、非衰減（No Decay）及非電子交換（No Exchange）；交互作用（Interaction）爲碳氫化合物電子接受者之化學計量平衡比（Stoichiometric Ratio of Electron Acceptor to Hydrocarbon）3.82、電子接受者門檻（Electron Acceptor Threshold）0、一階衰減率（First Order Decay Rate）0.001、其他皆爲預設值。
4. 執行輸入（Loading），選擇觀測濃度（Observed Concentrations），再選擇氧（Oxygen），由工具列中選擇區域濃度工具 Concentration Area Tool），如，在畫面中由網格之角落拖曳至全部網格皆涵蓋在其中，迅速按二下後設定濃度（Concentration）爲 8.0。

5. 接續步驟 4，選擇硫酸鹽（Sulfate），由工具列中選擇區域濃度工具 Concentration Area Tool），如，在畫面中由網格之角落拖曳至全部網格皆涵蓋在其中，迅速按二下後設定濃度（Concentration）爲 80，回主畫面。

6. 在工具列中選取補注（Recharge），如，游標在畫面中即出現十字符號，在網格之上邊界選取一矩形涵蓋第一列之網格，迅速按二下後設定氧（Oxygen）之濃度（Concentration）爲 8.0；硫酸鹽（Sulfate）之濃度（Concentration）爲 80。依上述方法依序在下邊界、左邊界及右邊界設定氧及硫酸鹽濃度爲 8.0 及 80，如圖 3.3-12。

7. 執行網格（Grid），選擇克利金法（Select Kringing），再選擇觀測濃度（Observed Concentrations）之氧（Oxygen），選取快速克利金法（Quick Kringing）。

8. 同步驟 7，選擇克利金法（Select Kringing），再選擇觀測濃度（Observed Concentrations）之硫酸鹽（Sulfate），選取快速克利金法（Quick Kringing）。

9. 存檔（Save），完成自然衰減模式設定。

10. 執行初始條件（Initial Condition），選擇模擬時間（Simulation Period）預設值。

11. 執行初始條件(Initial Condition)，選擇起始水頭(Starting Heads)預設值。

12. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始濃度（Starting Concentrations），選擇觀察值（Observed Values）。

13. 執行模擬器(Simulator)，選擇 BOIPLUME III。在資料表頭(Data Set Heading）輸入【Attenuated Hydrocarbon Model】。在選擇時

間設定（Runtime Option）上再選擇時間係數（Time Parameters），設定最大模擬時間（Maximum No. of Time Step）10、抽水時間（Pumping Period in Years）0、其他項目皆爲預設值。執行係數（Execution Parameters），設定重覆係數次數（No. of Iteration Parameters）7、收斂標準（Convergence Criteria）0.001、最大重覆次數（Maximum No. of Iteration）200、其他項目皆爲預設值。生物降解（Biodegradation）設定氧（Oxygen）爲立即反應（Instantaneous Reaction）、硫酸鹽（Sulfate）爲一階衰減（First Order Decay），最後選擇存檔及執行模擬（Save Data and Run Simulation）。

14. 執行結果（Results），選擇濃度（Concentration），再選擇 2-D 濃度線（2-D Contours）。即出現模擬結果如圖 3.3-13。

15. 存檔（Save）。

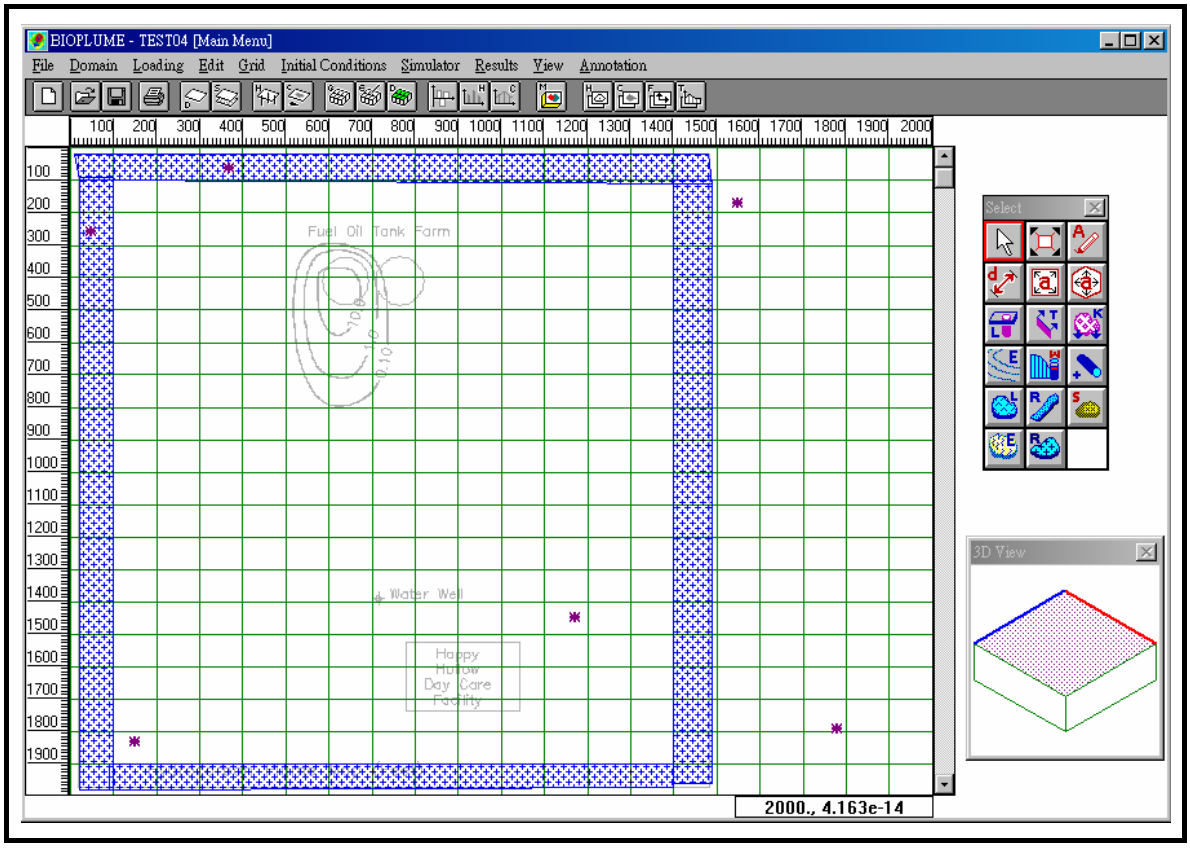



**圖 3.3-12　自然衰減模式新增電子接受者來源區域**

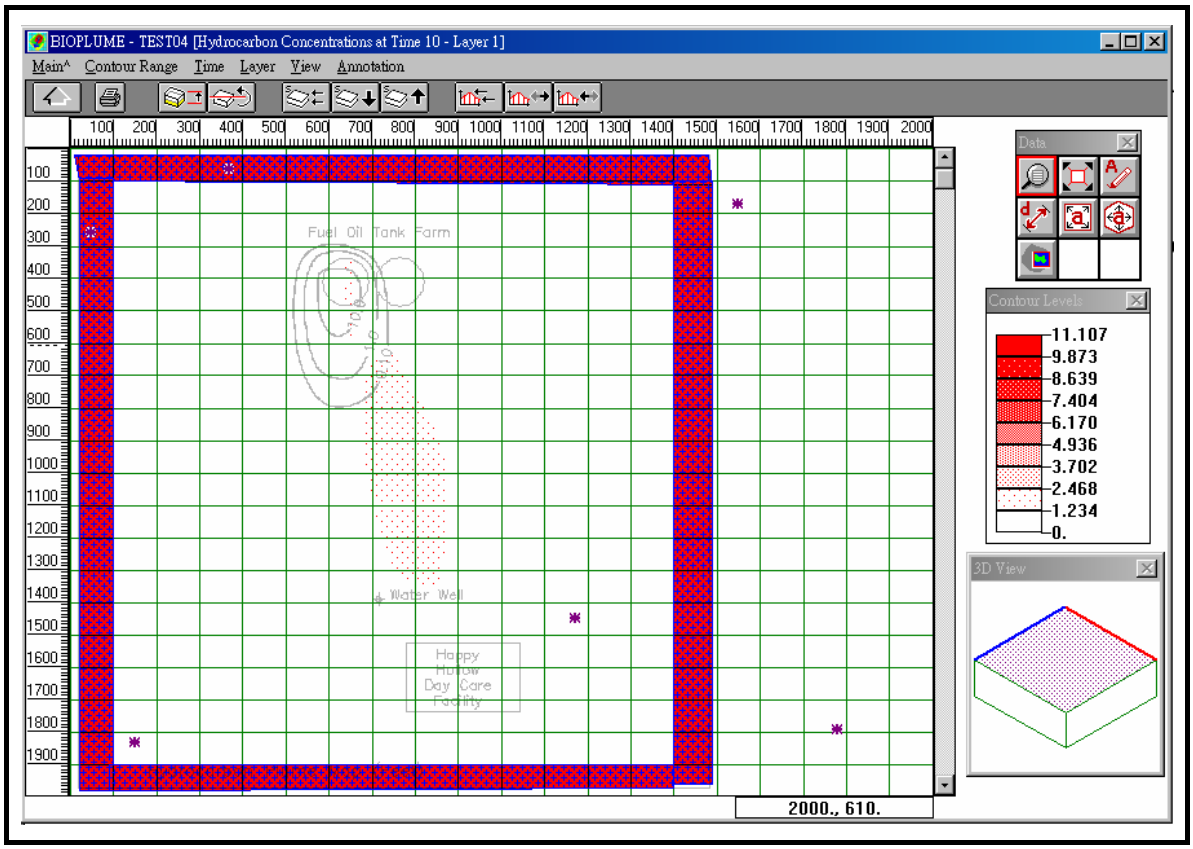



圖 3.3-13　自然衰減 10 年後污染傳輸結果

## 五、特別特徵模式（Special Features）

本模式中有幾個特別特徵模式，藉由圖形平台介面可使用來呈現模擬之結果，如湖泊、河川及排水等。

### A.增加抽水井/注入井（Adding Well）

1. 開啓舊檔案 Test02，並另存新檔爲 Test05。
2. 執行領域（Domain），選擇輸入領域（Loading Domain），再選擇抽水速率（Pumping Rates），設定預設值（Default）0（表示無抽水狀態，正值表示抽水；負值表示注水）、最小值（Minimum）-0.1、最大值（Maximum）0.1、主刻度增加（Major Ruler）0.1、次刻度增加（Minor Ruler）0.02、游標增加（cursor

increments）0.02。

3. 由工具列中選擇井圖示工具（Well），如，在畫面中游標變成圓形，在主畫面中選擇適當的井位置，迅速按二下後，設定時間步驟（Time Steps）中之增加時間步驟（Add Timesteps）5（指在 5 年後開始增加新的抽水狀況）；再選擇抽水速率（Pumping Rates），並設定 5 年後之抽水速率（Rates）0.02。
4. 執行初始條件（Initial Condition），選擇模擬時間（Simulation Period）預設值。
5. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始水頭（Starting Heads）預設值。
6. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始濃度（Starting Concentrations）預設值。
7. 執行模擬器（Simulator），選擇 BOIPLUME III。在資料表頭（Data Set Heading）輸入【Pumping Well Test with No Biodegradation】。在選擇時間設定（Runtime Option）上再選擇時間係數（Time Parameters），設定最大模擬時間（Maximum No. of Time Step）5、抽水期間（Pumping Period）0、其他項目皆爲預設值。最後選擇存檔及執行模擬（Save Data and Run Simulation）。
8. 執行結果（Results），選擇濃度（Concentrations），再選擇 2-D 碳氫化合物（2-D Contours）。即出現模擬結果如圖 3.3-14。
9. 9.存檔（Save），完成抽水模式設定。

**B.增加河川、排水及湖泊（River, Drain, Lakes）**

1. 開啓舊檔案 Test02，並另存新檔爲 Test06。

2. 執行領域（Domain），選擇基本影像（Base Image），再選擇 Test04.bmp，即出現河川及湖泊影像圖。

3. 由工具列中選擇河川圖示工具（River Tool），如，在畫面中游標變成十字形，在主畫面中沿著溪流（Creek）畫出河川位置，迅速按二下後，設定河川地層（River Bed）中之地層高程（Bed Level）0（指河川底部高程）、厚度（Thickness）1、及水力傳導係數（Hydraulic Conductivity）0.1；設定輸入（Loading）高程（Level）之地表高程（Surface Level）3。

4. 由工具列中選擇湖泊圖示工具（Lake Tool），如，在畫面中游標變成十字形，在主畫面中沿著小湖泊（Tiny Lake）畫出湖泊位置，迅速按二下後，設定湖泊地層（Lake Bed）中之地層高程（Bed Level）4、厚度（Thickness）10、及水力傳導係數（Hydraulic Conductivity）0.1；設定輸入（Loading）高程（Level）之地表高程（Surface Level）6.5。

5. 執行初始條件（Initial Condition），選擇模擬時間（Simulation Period）預設值。

6. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始水頭（Starting Heads）預設值。

7. 執行初始條件（Initial Condition），選擇起始濃度（Starting Concentrations）預設值。

8. 執行模擬器（Simulator），選擇 BOIPLUME III。在資料表頭（Data Set Heading）輸入【River/Lake Test with No Biodegradation】、其他皆爲預設值。

9. 執行結果（Results），選擇水頭（Hydraulic Heads），再選擇 2-D 等水位線（2-D Contours）。即出現模擬結果如圖 3.3-15。

10. 存檔（Save）。

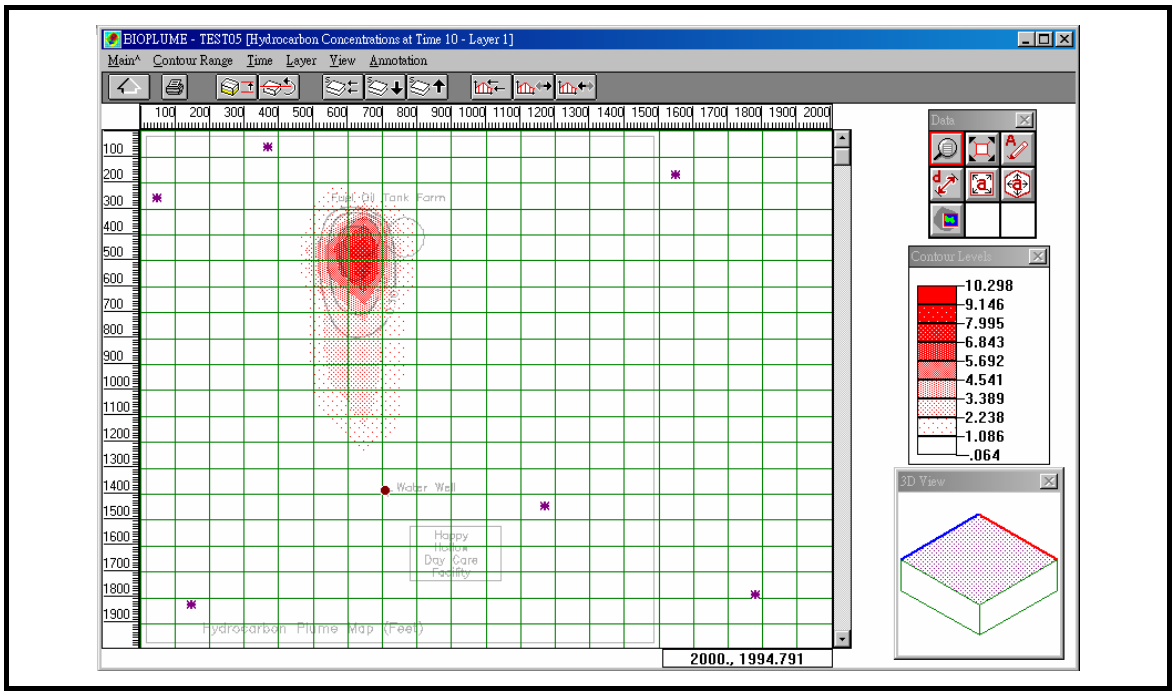



圖 3.3-14　抽水模式之污染傳輸結果

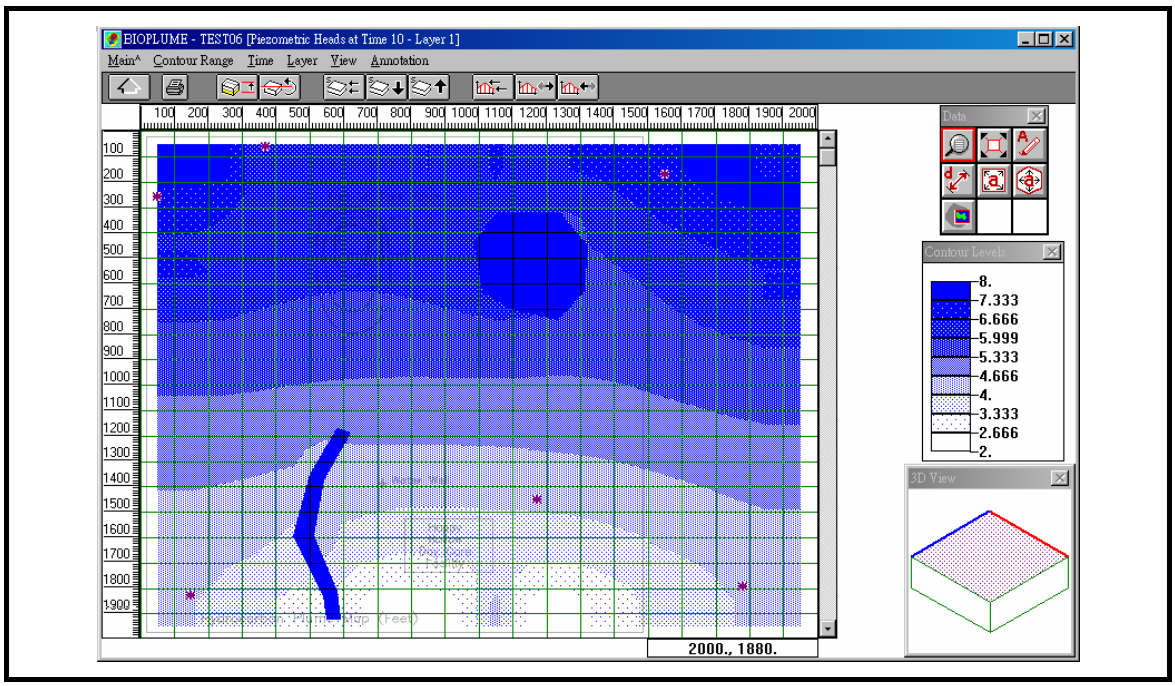



圖 3.3-15　新增河川及湖泊定水頭之水流模式結果

## 六、動畫及介面呈現（Video Animation）

藉由本模式之影像動畫，呈現出模擬結果污染物之傳輸過程。

1. 開啓舊檔案 Test04。
2. 依主題四之步驟 10 至 13 執行模擬。
3. 執行結果（Results），選擇濃度（Concentration），再選擇 2-D 濃度線（2-D Contours）。
4. 於主畫面中選取時間步驟（Time Step），如，將模式執行至時間原點（Time Step = 0）。
5. 由工具列中選擇存成圖檔工具（Save Bitmap），如，在畫面中游標變成正方形，在主畫面中選取要模式存檔之區域，畫面上即出現存圖檔至（Save Bitmap File As）之圖示，將檔名存爲 A.bmp。
6. 在主畫面中選取時間步驟（Time Step），如，將模式執行至時間 1（Time Step = 1），再以工具列中選擇存成圖檔工具（Save Bitmap），如，在畫面中游標變成正方形，在主畫面中選取要模式存檔之區域，畫面上即出現存圖檔至（Save Bitmap file as）之圖示，將檔名存爲 B.bmp，依此類推，將時間步驟 0 至 11 之圖檔分別存到 A.BMP 至 K.BMP。
7. 執行結果（Results），選擇 AVI 動畫（Avi Animation），出現 EIS Video Animation，至檔案（File）中選取 Select bitmap files to compile，選取全部檔案（A.bmp 至 K.bmp）後存爲 Test avi 檔，在 EIS Video Animation 畫面中執行 Test.avi 即可看到不同時間的污染傳輸變化。