

文獻來源

Xiaomin Wang\*, Christopher J. Neville, (2019), A semi-analytical solution for the transport of solutes with complex sequences of first-order reactions, *Computers and Geosciences 2019*, 123, 121-136.

英文

A semi-analytical solution for one-dimensional transport of multiple species along a reaction chain is introduced. The DECAY solution considers advection, dispersion, equilibrium sorption, and arbitrarily complex sequences of first-order reactions. The treatment of branching accommodates transport that potentially involves multiple parents and daughter products. The solution is general in that the individual species may have different dispersion and sorption coefficients and different decay rates specified in the dissolved and sorbed phases for each species. Yield coefficients can be specified so that the calculations can be conducted in terms of concentrations expressed in units of either mass or moles per unit volume of water. The DECAY solution accommodates Dirichlet and Cauchy inflow boundary conditions with general influent concentration histories. The concentrations of each species are evaluated by accurate and efficient numerical inversion of the Laplace transform solutions. The semi-analytical solution has been tested extensively and verified against existing analytical solutions and numerical simulations.

中文

本研究是發展含氯溶劑或放射性核種等，會產生新的生成物種的降解性或衰變性污染物的多物種(包括原始污染物的物種與其後續子世代生成產物)同時遷移的一維半解析解模式，此半解析解模式可考慮直鏈反應網路(reaction network)更為複雜的反應網路(可能 1 個原始母物種會產生多個不同型式的後續子世代生成產物)。由於污染物洩漏到地下環境會使地下水資源遭受污染，甚至更進一步對人體健康造成危害。其中最常見的含氯有機污染物：三氯乙烯及四氯乙烯，在厭氧環境下，三氯乙烯會因降解反應同時轉變成 3 個不同型式的二氯乙烯的同分異構物，此 3 個不同型式的同分異構物二氯乙烯的毒性、物理與化學的性質皆不同，而這 3 個同分異構物二氯乙烯又會同時降解成氯乙烯。若是採用過去文獻中發展的直鏈反應網路多物種污染物遷移模式進行模擬，除不符合真實場址現況，在濃度預測上亦會產生錯估。

此模式(DECAY program)考慮傳輸過程機制，包括移流、延散、平衡吸附以及任意複雜的一階序列衰變或降解反應，當中不同污染物可因不同特性有不同的遲滯因子，在吸附相與溶解相的衰變係數也可以彼此不同，還

考量了母物種與子物種間質量轉換的因子及衰變的百分比。此外，半解析解 DECA Y 也同時適用第一類及第三類入流邊界。此模式採用簡化的方法對污染程度進行初步、快速的估算，可以針對在反應途徑中的任一衰變階層的不同污染物濃度進行計算(最多考量三個反應階層，起始的物種位於 0 階層)，模擬評估的結果可作為進一步調查及整治的依據。

最後，應用此模式計算具不同複雜程度衰變反應途徑的污染物遷移案例，並將模式計算結果與 MT3D-USGS 模式進行比較。此半解析解模式之發展可以考量較複雜的反應途徑，能更真實且快速了解具降解或衰變性污染物的污染場址之污染情形。