



行政院環境保護署

108 年度土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案

精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速 預測工具發展與人體健康風險評估應用 期末報告(定稿)

主 辦 單 位：  行政院環境保護署
專案執行單位： 國立中央大學／應用地質研究所
專案主持人： 陳瑞昇 教授
專案執行期間： 108 年 01 月 04 日起至
108 年 11 月 30 日止

中 華 民 國 108 年 12 月 印製





專案基本資料表

專案性質		<input type="checkbox"/> 實驗性質 <input checked="" type="checkbox"/> 非實驗性質		專案類別(單選)		<input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型	
研究主題		<input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 其他					
申請機構系所		國立中央大學應用地質研究所					
機構地址		桃園市中壢區中大路 300 號					
專案主持人		陳瑞昇		職等／職稱		教授	
協同主持人		梁菁萍		職等／職稱		副教授	
專案 名稱	中文	精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用					
	英文	Advancement of fast model for predicting the transport at chlorinated-solvent contaminated site and its application to health risk assessment.					
	關鍵字	解析解、含氯溶劑、傳輸、健康風險評估					
執行期程		自民國 108 年 01 月 04 日起 至民國 108 年 11 月 30 日止					
專案主持人		姓名：陳瑞昇		E-mail： jschen@geo.ncu.edu.tw		專線：03-2807427 手機：0932360361	
專任助理		姓名：王佳慧		Email： freelife1347@gmail.com		專線：03-422-7151#65860 手機：	
經費 分 析 總 表 (僅模場試驗專 案需填寫兩年 度金額)	專 案 預 估 經 費		第一年 金額		第二年 金額		編列說明
	1.	人事費用		472,000		(1~5 項相加之 50% 為限)	
	2.	貴重儀器使用含維護費		0		(與計畫實驗相關)	
	3.	消耗性器材與主要費用		149,355		(與計畫主體相關)	
	4.	其它研究相關費用		0		(含差旅與租賃費用)	
	5.	雜支費用		2,731		(1~6 項相加之 5% 為限)	
	6.	行政管理費		72,000		(1~5 項相加之 10% 為限)	
	7.	自籌款		0		(自行籌備款項)	
	申請補助金額(1~6 項)			696,086		總金額：696,086	
計畫總金額(1~7 項)			696,086		總金額：696,086		

專案主持人 (簽名及蓋章)：_____ 日期：_____





中文摘要

美國環保署地表下模式支援中心開放公開下載的 **BIOCHLOR** 模式為模擬含氯溶劑污染場址污染地下水自然衰減整治的篩選模式，然而 **BIOCHLOR** 模式僅能適用「所有物種使用相同遲滯因子」且「縱向延散係數不大時」。本專案工作提出一個全新的解析解模式以做為快速模擬含氯溶劑污染地下水多物種傳輸的解析解模式，模式發展主要是藉由三個積分轉換法與常微分的數學方法求解一組由一序列降解反應耦合的傳輸偏微分方程組，經由比較本專案所發展的解析解與文獻中有限域多物種傳輸解析解兩者所得的結果的一致性確認本專案解析解與其 Fortran 計算程式的正確性與準確性，另外本專案解析解模式的計算濃度的速度相較於文獻有限域多物種傳輸解析解可以非常有效的加快達 9,000 倍。本專案也利用所發展的解析解進行 **BIOCHLOR** 在三維模擬的功能表現評估，評估結果為當特定物種的遲滯因子相較含氯溶劑的 5 個物種的遲滯因子平均值小時，**BIOCHLOR** 可能低估這些物種的移動性與尖峰濃度。最後，我們也利用本專案所發展解析解模式結合健康風險模式進行含氯溶劑污染場址污染地下水的健康風險評估。





英文摘要

The **BIOCHLOR** model provided by the Center for Subsurface Modeling Support (CSMoS) of USEPA is an easy-to-use screening model that simulates aquifer remediation by natural attenuation of dissolved multi-species solvents at chlorinated-solvent contaminated site. However, the **BIOCHLOR** analytical model is only valid for all species having the same retardation factors and the longitudinal dispersion coefficients being not large. In this the project, we derive a novel analytical model for rapidly simulating multispecies dissolved chlorinated solvent transport problems. The analytical model is obtained by solving a set of transport equations sequentially coupled by a series of degradation reactions using three integral transformation techniques in combination with the mathematical method for solving second-order ordinary differential equations. The correctness of the mathematical model and its auxiliary Fortran computer program code is confirmed with excellent agreement between the derived mathematical model and multispecies transport analytical model for a finite domain. Moreover, the derived analytical model can perform a computation much more quickly with 9,000 speed-up than the analytical model derived for a finite domain can. The performance of **BIOCHLOR** is also evaluated using our derived analytical model. The evaluated result shows that **BIOCHLOR** can overestimate the mobility and peak concentration of the species with a retardation factor being smaller than the average value of retardation factors for 5 species. Ultimately, we present an application example that couples derived novel analytical model with the risk assessment model for assessing health risk at a chlorinated-solvent contaminated site.





目次

一、前言.....	1
二、研究目的.....	3
三、文獻探討.....	5
四、研究方法與過程.....	7
4.1 數學模式建立.....	7
4.2 健康風險評估.....	15
五、結果與討論.....	19
5.1 解析解驗證.....	19
5.2 解析解的計算效率評估與計算參數範圍限制.....	26
5.3 BIOCHLOR 功能表現評估.....	28
5.4 健康風險評估應用.....	32
5.5 模式應用於污染團遷移的三維空間分布.....	41
5.6 結論與建議.....	44
六、參考文獻.....	45
附錄一 108 年度專案成果績效自評表.....	48
附錄二 審查意見表.....	52





圖次

圖 1 含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式示意圖。	7
圖 2 BIOCHLOR 手冊使用之地下水污染場址參數及模式驗證示意圖，假設污染來源區位於入流邊界 ($x=0$ 處) $297.5\text{ ft} \leq y \leq 402.5\text{ ft}$ 以及 $0\text{ ft} \leq z \leq 56\text{ ft}$ 區間。	21
圖 3 本專案所發展之解析解與 Chen et al. (2016)解析解，於 1、5、10 及 20 年時通過邊界源中心沿 x 軸($y=350\text{ ft}$) 模擬 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的濃度空間剖面比較。	22
圖 4 本專案所發展之解析解與 Chen et al. (2016)解析解，於 1、5、10 及 20 年時垂直 x 軸($x=50\text{ft}$)模擬 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的濃度空間剖面比較。	23
圖 5 模擬三維立體空間濃度分布示意圖，假設污染來源區位於入流邊界($x=0$ 處) $297.5\text{ ft} \leq y \leq 402.5\text{ ft}$ 以及 $0\text{ ft} \leq z \leq 56\text{ ft}$ 區間，含水層厚度為 200 ft。	24
圖 6 本專案所發展之解析解與 STANMOD-3DADE 之三維溶質傳輸解析解，於 1、5、10 及 20 年時模擬 PCE 的濃度空間剖面比較。(a) 隨 x 軸方向 ($y=350\text{ft}$, $z=0$) (b) 隨 z 軸方向($x=50\text{ft}$, $y=350\text{ft}$).....	25
圖 7 本專案所發展之解析解評估 BIOCHLOR 模式模擬 1 年時通過邊界源中心沿 x 軸($y=350\text{ ft}$)之適用性。	29
圖 8 本專案所發展之解析解評估 BIOCHLOR 模式模擬 10 年時通過邊界源中心沿 x 軸($y=350\text{ ft}$)之適用性。	30
圖 9 利用快速預測工具預測污染物第 10 年 $z=10\text{ ft}$ 之濃度分布，並比較單一物種及多物種模式之差異，假設污染來源區位於入流邊界($x=0$ 處) $297.5\text{ ft} \leq y \leq 402.5\text{ ft}$ 。	34
圖 10 模擬 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種在時間為第 10 年的三維立體空間濃度分布，假設污染來源區位於入流邊界($x=0$ 處) $297.5\text{ ft} \leq y \leq 402.5\text{ ft}$ 以及 $0\text{ ft} \leq z \leq 56\text{ ft}$ 區間，含水層厚度為 200 ft。	42





表次

表 1 驗證範例，情境與傳輸參數	20
表 2 比較模式計算效率(平均一點所需時間)	26
表 3 模擬案例本專案模式與 BIOCHLOR 之參數使用以及預測結果比較	31
表 4 受體參數設定	35
表 5 污染物口服之參考劑量及致癌斜率	36
表 6 模式應用於污染場址計算之非致癌風險(HQ).....	38
表 7 模式應用於污染場址計算之致癌風險(TR)	39
表 8 本專案模式與 BIOCHLOR 及 Chen et al. (2016) 模式之總比較.....	43





一、前言

含氯有機溶劑為地下水體中常發現的污染物，其中如四氯乙烯(tetrachloroethylene, PCE)及三氯乙烯(Trichloroethylene, TCE)為在美國的超級基金場址(Superfund sites)及國防部隸屬單位場址常見的含氯有機污染物，在台灣有許多地下水污染場址，PCE 及 TCE 也為地下水污染場址主要的污染物。含氯有機污染物通常具高毒性，IARC(International Agency for Research on Cancer)指出長期飲用含氯有機溶劑污染的地下水容易造成腎臟損害或致癌。考慮含氯有機溶劑地下水污染對環境與人體健康的長期且嚴重的危害，相關污染場址的調查、控制與整治工作為將會是重要且迫切的工作，以確保周邊生活民眾的人體健康與地下水的永續使用。以物理機制為基礎的數學模式(physically-based mathematical model)為了解含氯有機溶劑污染物於地下水移動與分布之有效工具，數學模式對於含氯有機溶劑地下水污染場址的水文地質調查、污染控制、污染整治與人體健康風險評估等各項工作也多所助益。

依照數學模式所採用的求解地下水污染傳輸偏微分方程式的方法，可將其區分為解析解模式(analytical model)與數值解模式(numerical model)。解析解模式的主要優點為解在時間與空間都是連續，且解析解模式在進行濃度的計算相較數值解為快速與需較少的電腦記憶體負擔，且可計算任意時間的濃度，而無須如數值解模式須經過多個離散時間段(time step)的迭代演算(iteration)。McGuire et al. (2004)分析 45 個含氯有機物地下水污染場址，發現除統計方法外，其中有 60% 的污染場址使用數學模式進行分析工作，這其中最常使用的數學模式為美國環保署(United States Environmental Protection Agency, USEPA)模式支援中心(Center for Subsurface Modeling Support, CSMoS)的解析解模式 **BIOCHLOR**(Aziz et al., 2000)，**BIOCHLOR** 為可公開下載的免費模式，因具有很好的圖形使用者介面，因此在台灣為產、官或學界常使用的自然衰減監測式、自然衰減整治法或健康風險評估使用的模式工具(林尚峰，2011；傅楷滂，2016，馬與吳，2015)。

然而，**BIOCHLOR** 模式因為其解的基礎為 Domenico (1987)的近似解析解，因此其第一個限制為「不能適用大延散係數(dispersion coefficient)值含水層」。另外，因為利用變數變換解除原本耦合的聯立偏微分方程式，使其成為各自獨立的偏微分方程式，因此其第二個限制為「所有的物種只能採用相同的遲滯因子(retardation factor)」。考慮到含氯有機溶劑地下水污染的重要性，因此發展能不受上述兩個限制的含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式為重要的工作。



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用



二、研究目的

專案研究團隊在發展能不受上述「不能適用大延散係數值含水層」與「所有的物種只能採用相同的遲滯因子」兩個限制的含氯有機溶劑地下水污染多物種傳輸解析解模式發展累積有重大的突破進展，已發展出「二維有限域全解析解模式」(Chen et al., 2016)與「三維半無限域半解析解模式」(陳等，2016)。其中，「二維有限域全解析解模式」因為其解為無窮級數，因此在二維傳輸問題的數值計算非常耗時(1 個計算點約需 4 秒)。而「三維半無限域半解析解模式」雖然已加快計算速度，但因其採用 Laplace 數值逆轉換，以求得原時間的濃度值，然而由於 Laplace 數值逆轉換基本上也是用級數近似，同樣地在二維傳輸問題的數值計算上仍有改進空間(1 個計算點約需 0.2 秒)，因此考慮到一個計算更為快速的含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式的重要性，本專案的目的將包括：

1. 發展含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式做為快速預測工具；
2. 應用此快速預測工具評估 **BIOCHLOR** 的適用性；
3. 應用此快速預測工具於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估。



精進含氣有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用



三、文獻探討

BIOCHLOR 解析解數學模式的基礎為描述含氯有機污染物種如 $PCE \rightarrow TCE \rightarrow DCE \rightarrow VC \rightarrow ETH$ 共 5 個物種的傳輸行為的 5 個移流-延散 (advection-dispersion) 方程式，且方程式除應包含個別物種(第 i 物種)的一階降解反應項外，還要有來自其上一代母物種(第 $i-1$ 物種)的降解生成子物種的貢獻，因此聯立方程組為互相耦合(coupled)的一組偏微分方程式。由於求解聯立偏微分方程組的困難，相較於文獻中現存的大量單一物種的單一移流-延散方程式的解析解(以下稱單物種傳輸解析解模式)，目前研究者只發展出數量非常有限的求解耦合的多個移流-延散方程式的解析解(多物種傳輸解析解模式)。研究人員提出不同的數學方法來求解多個物種的聯立移流-延散偏微分方程式，主要數學方法包括(1)直接積分轉換(integral transform)結合序列迭代(sequential substitutions) (Cho, 1971; Lunn et al., 1996; van Genuchten, 1985, Miele and Zhan, 2012, Sudicky et al., 2013)；(2)變數變換除耦結合單物種傳輸解析解 (decomposition by change-of-variables with the help of existing single-species analytical solutions) (Sun and Clement, 1999; Sun et al., 1999a; 1999b)；(3)Laplace 轉換結合矩陣對角化(Laplace transform combined with decomposition of matrix diagonalization) (Quezada et al., 2004; Srinivasan and Clement, 2008a; 2008b)；(4)變數變換除耦結合通用型積分轉換(decomposition by change-of-variables coupled with generalized integral transform) (Pérez Guerrero et al., 2009; 2010)；(5)連續積分轉換結合代數除耦(sequential integral transforms in association with algebraic decomposition) (Chen et al., 2012a; 2012b; 2016; 2019)。須特別注意的是上述不同數學方法解得的多物種傳輸解析解很多是與 BIOCHLOR 發展所根據的解析解模式(Aziz et al., 2000)一樣採用「變數變換除耦結合單物種傳輸解析解」法，此方法限定每一物種要有相同遲滯因子。另外，大部份的解析解模式都是考慮一維的多物種傳輸問題。目前除 BIOCHLOR 外，文獻還存在非常少數的二、三維解析解，Quezada et al. (2004)發展了三維模式，但其模式的限制與 BIOCHLOR 同樣有「所有的物種只能採用相同的遲滯因子」的限制。目前文獻中可考慮不同遲滯因子的多維度的移流-延散方程組的解析解模式有 Sudicky et al. (2013)與 Chen et al. (2016)，Sudicky et al. (2013)的解為半解析解，其須藉由 Laplace 數值逆轉法計算原時間域濃度，且其雖然可考慮至 7 個物種，但只能考慮到 4 個世代的物種，因此在利用此模式模擬含氯有機污染物 5 個物種的傳輸行為就顯然有一些不足，然而，Chen et al. (2016)的解可算無限多代的物種，且為全解析解模式，但其解包含多個無窮級數，因此計算較為緩慢，目前較適用二維含氯有機溶劑地下水污染傳輸問題的模擬，對三維問題的模擬



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

則有計算時間過長的問題。



四、研究方法與過程

4.1 數學模式建立

本專案考慮如圖 1 的三維含氯有機溶劑地下水污染傳輸問題。

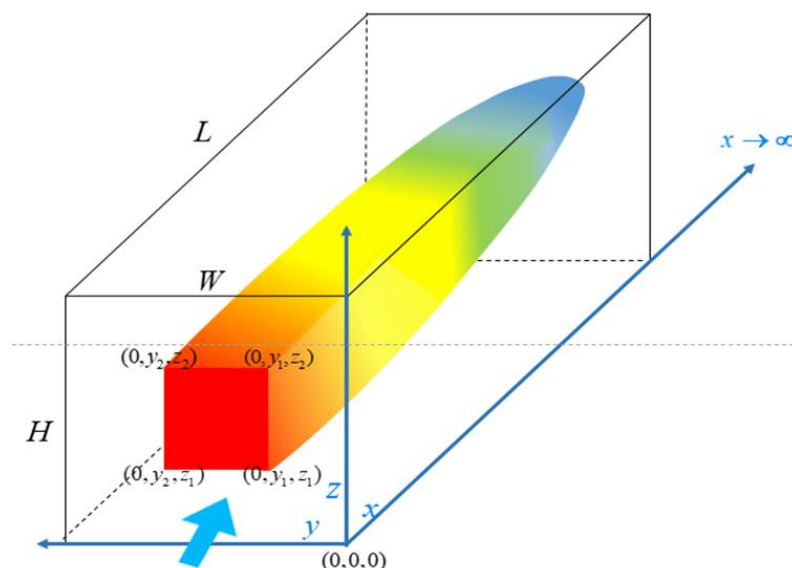


圖 1 含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式示意圖。

參考 BIOCHLOR 建立相關的控制方程式，求解一組 5 個互相耦合的聯立偏微分方程式來描述含氯有機污染物種如 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 於飽和地下水系統(saturated groundwater system)的反應化學傳輸，偏微分方程式主要考慮的傳輸機制包括一維移流、三維延散、線性等溫平衡吸附(linear isotherm equilibrium sorption)與序列一階生物轉換反應(sequential, first-order biotransformation)等機制過程如下所示：

$$D_x \frac{\partial^2 c_1(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c_1(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c_1(x, y, z, t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_1(x, y, z, t)}{\partial x} - k_1 c_1(x, y, z, t) = R_1 \frac{\partial c_1(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (1)$$

$$D_x \frac{\partial^2 c_2(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c_2(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c_2(x, y, z, t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_2(x, y, z, t)}{\partial x} + y_1 k_1 c_1(x, y, z, t) - k_2 c_2(x, y, z, t) = R_2 \frac{\partial c_2(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (2)$$



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

$$D_x \frac{\partial^2 c_3(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c_3(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c_3(x, y, z, t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_3(x, y, z, t)}{\partial x} + y_2 k_2 c_2(x, y, z, t) - k_3 c_3(x, y, z, t) = R_3 \frac{\partial c_3(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (3)$$

$$D_x \frac{\partial^2 c_4(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c_4(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c_4(x, y, z, t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_4(x, y, z, t)}{\partial x} + y_3 k_3 c_3(x, y, z, t) - k_4 c_4(x, y, z, t) = R_4 \frac{\partial c_4(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (4)$$

$$D_x \frac{\partial^2 c_5(x, y, z, t)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 c_5(x, y, z, t)}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 c_5(x, y, z, t)}{\partial z^2} - v \frac{\partial c_5(x, y, z, t)}{\partial x} + y_4 k_4 c_4(x, y, z, t) - k_5 c_5(x, y, z, t) = R_5 \frac{\partial c_5(x, y, z, t)}{\partial t} \quad (5)$$

此處 $c_1(x, y, z, t)$ 、 $c_2(x, y, z, t)$ 、 $c_3(x, y, z, t)$ 、 $c_4(x, y, z, t)$ 、 $c_5(x, y, z, t)$ 分別為 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 的溶解相濃度[mg/L]； D_x 為沿水流方向的縱向延散係數(longitudinal dispersion coefficient) [m^2/yr]； D_y 與 D_z 為沿 y 方向與 z 方向的水平與垂直側向延散係數(transverse dispersion coefficient) [m^2/yr]； v 為平均滲流速度(average seepage velocity)[m/yr]； k_1 、 k_2 、 k_3 、 k_4 與 k_5 分別為 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 之一階衰減反應速率係數(first-order decay reaction constant)[1/yr]； y_1 、 y_2 、 y_3 與 y_4 分別為 TCE、DCE、VC 與 ETH 的反應生成係數(reaction yield coefficient)[dimensionless]；例如 y_1 表示每一單位質量[mg]的 PCE 降解後所產生的 TCE 的質量[mg]； R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 與 R_5 分別為 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 遲滯因子； x 、 y 、 z 為空間座標； t 為時間。

方程式(1)至方程式(5)必須給定適當的初始條件(initial condition)與邊界條件(boundary condition)才能求得惟一解，本專案考慮下列條件：

初始條件：

$$\text{考慮 5 個物種與 BIOCHLOR 一樣是將污染源的釋放考慮為邊界源，因此初始的濃度分布都為零}$$

$$c_1(x, y, z, t = 0) = 0 \quad (6)$$

$$c_2(x, y, z, t = 0) = 0 \quad (7)$$

$$c_3(x, y, z, t = 0) = 0 \quad (8)$$

$$c_4(x, y, z, t = 0) = 0 \quad (9)$$

$$c_5(x, y, z, t = 0) = 0 \quad (10)$$



邊界條件：

一般發展解析解模式通常可採用入流邊界源(inlet boundary source)與內部源(internal source)兩種不同的方式來描述污染源區(source region)，當考慮污染源區為邊界源時，通常表示忽略污染源區的長度，目前大部分的解析解模式都是考慮入流處的入流邊界源來描述污染源區。本專案考慮圖 1 的邊界污染源，假設污染源位於入流邊界處，其分布範圍為一長方形面積。

$$c_1(x=0, y, z, t) = C_1^0 \left[H(y - y_1^1) - H(y - y_2^1) \right] - \left[H(z - z_1^1) - H(z - z_2^1) \right] \quad (11)$$

$$c_2(x=0, y, z, t) = C_2^0 \left[H(y - y_1^2) - H(y - y_2^2) \right] - \left[H(z - z_1^2) - H(z - z_2^2) \right] \quad (12)$$

$$c_3(x=0, y, z, t) = C_3^0 \left[H(y - y_1^3) - H(y - y_2^3) \right] - \left[H(z - z_1^3) - H(z - z_2^3) \right] \quad (13)$$

$$c_4(x=0, y, z, t) = C_4^0 \left[H(y - y_1^4) - H(y - y_2^4) \right] - \left[H(z - z_1^4) - H(z - z_2^4) \right] \quad (14)$$

$$c_5(x=0, y, z, t) = C_5^0 \left[H(y - y_1^5) - H(y - y_2^5) \right] - \left[H(z - z_1^5) - H(z - z_2^5) \right] \quad (15)$$

此處 C_1^0 、 C_2^0 、 C_3^0 、 C_4^0 與 C_5^0 分別為 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的入流邊界源濃度， $H(\bullet)$ 為 Heaviside 單位階梯函數(unit step function)用來描述長方形入流邊界源的分布範圍，也就是需定義其污染源之寬度與高度，因此在 y 方向與 z 方向共需以四個座標描述， y_1^1 、 y_2^1 、 z_1^1 與 z_2^1 為描述第 1 個物種(PCE)的長方形分布範圍所需的四個空間座標參數； y_1^2 、 y_2^2 、 z_1^2 與 z_2^2 為描述第 2 個物種(TCE)的長方形分布範圍所需的四個空間座標參數； y_1^3 、 y_2^3 、 z_1^3 與 z_2^3 為描述第 3 個物種(DCE)的長方形分布範圍所需的四個空間座標參數； y_1^4 、 y_2^4 、 z_1^4 與 z_2^4 為描述第 4 個物種(VC)的長方形分布範圍所需的四個空間座標參數； y_1^5 、 y_2^5 、 z_1^5 與 z_2^5 為描述第 5 個物種(ETH)的長方形分布範圍所需的四個空間座標參數。

為求方程式有惟一解，本專案須另外考慮一半無限長的出流邊界(semi-infinite outlet boundary)，假設 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種都無法到達無窮遠處，因此 5 個含氯有機溶劑物種於此處濃度都為零，數學可表示為

$$c_1(x \rightarrow \infty, y, z, t) = 0 \quad (16)$$

$$c_2(x \rightarrow \infty, y, z, t) = 0 \quad (17)$$

$$c_3(x \rightarrow \infty, y, z, t) = 0 \quad (18)$$

$$c_4(x \rightarrow \infty, y, z, t) = 0 \quad (19)$$

$$c_5(x \rightarrow \infty, y, z, t) = 0 \quad (20)$$

另假設 y 方向上兩側之含水層邊界為不透水邊界，因此在邊界上之濃度變



化為 0，也就是 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個污染物在 y 方向的 2 個邊界的沒有質量傳輸通量(flux)通過，表示為

$$\frac{\partial c_1(x, y=0, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (21)$$

$$\frac{\partial c_2(x, y=0, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (22)$$

$$\frac{\partial c_3(x, y=0, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (23)$$

$$\frac{\partial c_4(x, y=0, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (24)$$

$$\frac{\partial c_5(x, y=0, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (25)$$

$$\frac{\partial c_1(x, y=W, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (26)$$

$$\frac{\partial c_2(x, y=W, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (27)$$

$$\frac{\partial c_3(x, y=W, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (28)$$

$$\frac{\partial c_4(x, y=W, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (29)$$

$$\frac{\partial c_5(x, y=W, z, t)}{\partial y} = 0 \quad (30)$$

此處 W 為地下水系統於 y 方向的寬度。

另外假設 z 方向之上下為不透水邊界，也就是濃度變化為 0，因此在兩個邊界上 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個污染物在上與下邊界的無質量傳輸通量通過，表示為

$$\frac{\partial c_1(x, y, z=0, t)}{\partial z} = 0 \quad (31)$$

$$\frac{\partial c_2(x, y, z=0, t)}{\partial z} = 0 \quad (32)$$

$$\frac{\partial c_3(x, y, z=0, t)}{\partial z} = 0 \quad (33)$$



$$\frac{\partial c_4(x, y, z=0, t)}{\partial z} \quad (34)$$

$$\frac{\partial c_5(x, y, z=0, t)}{\partial z} \quad (35)$$

$$\frac{\partial c_1(x, y, z=H, t)}{\partial z} \quad (36)$$

$$\frac{\partial c_2(x, y, z=H, t)}{\partial z} \quad (37)$$

$$\frac{\partial c_3(x, y, z=H, t)}{\partial z} \quad (38)$$

$$\frac{\partial c_4(x, y, z=H, t)}{\partial z} \quad (39)$$

$$\frac{\partial c_5(x, y, z=H, t)}{\partial z} \quad (40)$$

此處 H 為地下水系統於 z 方向的高度。

針對上述式(1)至式(5)的聯立偏微分方程組與其對應的初始、邊界條件(式(6)至(40))，本專案的求解方法如下：

1. 利用 Laplace 積分轉換法以消除式(1)至式(5)的聯立偏微分方程組中的時間變數(t)相關的一階微分項，Laplace 轉換與其操作公式定義如下：

$$\bar{c}_i(x, y, z, s) = L[c_i(x, y, z, t)] = \int_0^{\infty} e^{-sT} c_i(x, y, z, t) dt \quad (41)$$

$$L\left[\frac{\partial c_i(x, y, z, t)}{\partial t}\right] = sL[c_i(x, y, z, t)] - c_i(x, y, z, t=0) \quad (42)$$

此處 s 為 Laplace 轉換參數。

2. 利用 finite Fourier cosine 轉換消除偏微分方程式中的空間變數 y 的二階微分項，finite Fourier cosine 轉換與其操作公式定義如下：

$$\bar{\bar{c}}_i(x, m, y, s) = F_y[\bar{c}_i(x, y, z, s)] = \int_0^W \bar{c}_i(x, y, z, s) \cos\left(\frac{m\pi y}{W}\right) dy \quad (43)$$

$$F_y\left[\frac{\partial^2 \bar{c}_i(x, y, z, s)}{\partial y^2}\right] \quad (44)$$

$$= -(1)^m \frac{\partial \bar{c}_i(x, y=W, z, s)}{\partial y} - \frac{\partial \bar{c}_i(x, y=0, z, s)}{\partial y} - \frac{m^2 \pi^2}{W^2} F_y[\bar{c}_i(x, y, z, s)]$$



此處 m 為空間變數 y 的有限 Fourier 轉換參數。

3. 利用 finite Fourier cosine 轉換消除偏微分方程式中的空間變數 z 的二階微分項，finite Fourier cosine 轉換與其操作公式定義如下：

$$\bar{\bar{c}}_i(x, m, n, s) = F_z \left[\bar{c}_i(x, m, n, s) \right] = \int_0^H \bar{c}_i(x, m, z, s) \cos\left(\frac{n\pi z}{H}\right) dz \quad (45)$$

$$\begin{aligned} & F_z \left[\frac{\partial^2 \bar{c}_i(x, y, z, s)}{\partial y^2} \right] \\ &= -(1)^n \frac{\partial \bar{c}_i(x, m, z = H, s)}{\partial z} - \frac{\partial \bar{c}_i(x, m, z = 0, s)}{\partial z} - \frac{n^2 \pi^2}{H^2} F_y \left[\bar{c}_i(x, y, z, s) \right] \end{aligned} \quad (46)$$

此處 n 為空間變數 z 有限 Fourier 轉換參數。

4. 經過連續 3 個積分轉換消除時間變數 t 與空間變數 y 、 z 的相關微分項後，聯立偏微分方程組(式(1)至式(5))將成為一聯立常微分方程組，此時可利用解常微分方程的方法求解，求解的概念為由於方程式(1)經連續轉換後將只包含未知濃度 $\bar{\bar{c}}_1(x, m, n, s)$ ，因此可獨立求解得 $\bar{\bar{c}}_1(x, m, n, s)$ ，將 $\bar{\bar{c}}_1(x, m, n, s)$ 代入連續轉換後的方程式(2)可獨立求解得 $\bar{\bar{c}}_2(x, m, n, s)$ ，重覆相關步驟可依序解得 $\bar{\bar{c}}_3(x, m, n, s)$ 、 $\bar{\bar{c}}_4(x, m, n, s)$ 與 $\bar{\bar{c}}_5(x, m, n, s)$ 。因此 5 個物種的解為分別為：

$$\bar{\bar{c}}_1(x, m, n, s) = \frac{C_1^0}{s} \psi_1(m) \zeta_1(n) e^{\xi_1 x} \quad (47)$$

$$\begin{aligned} & \bar{\bar{c}}_2(x, m, n, s) \\ &= \left[\frac{C_2^0}{s} \psi_2(m) \zeta_2(n) + \frac{C_1^0}{s} \frac{k_1 R_1}{\alpha_{21}} \psi_1(m) \zeta_1(n) \right] e^{\xi_2 x} \\ & - \frac{C_1^0}{s} \frac{k_1 R_1}{\alpha_{21}} \psi_1(m) \zeta_1(n) e^{\xi_1 x} \end{aligned} \quad (48)$$



$$\begin{aligned}
 & \equiv c_3(x, m, n, s) \\
 & = \left[\frac{C_3^0}{s} \psi_3(m) \zeta_3(n) + \frac{C_2^0}{s} \frac{k_2 R_2}{\alpha_{32}} \psi_2(m) \zeta_2(n) + \frac{C_1^0}{s} \left(\frac{1}{\alpha_{32}} - \frac{1}{\alpha_{31}} \right) \frac{\sum_{l=1}^{l=2} k_l R_l}{\alpha_{21}} \psi_1(m) \zeta_1(n) \right] e^{\xi_{33} x} \\
 & \quad + \left[\frac{C_2^0}{s} \frac{k_2 R_2}{\alpha_{32}} \psi_2(m) \zeta_2(n) - \frac{C_1^0}{s} \frac{\sum_{l=1}^{l=2} k_l R_l}{\alpha_{32} \alpha_{21}} \psi_1(m) \zeta_1(n) \right] e^{\xi_{23} x} \\
 & \quad + \frac{C_1^0}{s} \frac{\sum_{l=1}^{l=2} k_l R_l}{\alpha_{32} \alpha_{21}} \psi_1(m) \zeta_1(n) e^{\xi_{13} x}
 \end{aligned} \tag{49}$$

此處

$$\psi_i(m) = \begin{cases} \frac{y_2^i - y_1^i}{\sqrt{W}} & m = 0 \\ \frac{\sqrt{2W}}{m\pi} \left[\sin\left(\frac{m\pi y_2^i}{W}\right) - \sin\left(\frac{m\pi y_1^i}{W}\right) \right] & m = 1, 2, \dots \end{cases} \tag{50}$$

$$\zeta_i(n) = \begin{cases} \frac{z_2^i - z_1^i}{\sqrt{H}} & n = 0 \\ \frac{\sqrt{2H}}{n\pi} \left[\sin\left(\frac{n\pi z_2^i}{H}\right) - \sin\left(\frac{n\pi z_1^i}{H}\right) \right] & n = 1, 2, \dots \end{cases} \tag{51}$$

$$\xi_i = \frac{v - \sqrt{v^2 + 4D_x \left(\frac{D_y m^2 \pi^2}{W^2} + \frac{D_z n^2 \pi^2}{H^2} + k_i R_i + R_i s \right)}}{2D_x} \tag{52}$$

$$\alpha_{ij} = (R_j - R_i) \left(s + \frac{k_j R_j - k_i R_i}{R_j - R_i} \right) \tag{53}$$

5. 解得的 $\equiv c_i(x, m, n, s)$ 須進行空間變數 z 有限 Fourier cosine 逆轉換，可採用下列逆轉換公式



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

$$\begin{aligned}\bar{c}_i(x, m, z, s) &= F_z^{-1} \left[\bar{c}_i(x, m, n, s) \right] \\ &= \frac{1}{H} \bar{c}_i(x, m, n=0, s) + \frac{2}{H} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_i(x, m, n, s) \cos\left(\frac{n\pi z}{H}\right)\end{aligned}\quad (54)$$

6. 緊接著須進行空間變數 y 有限 Fourier cosine 逆轉換，可採用下列逆轉換公式

$$\begin{aligned}\bar{c}_i(x, y, z, s) &= F_y^{-1} \left[\bar{c}_i(x, m, z, s) \right] \\ &= \frac{1}{W} \bar{c}_i(x, m=0, z, s) + \frac{2}{W} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_i(x, m, z, s) \cos\left(\frac{m\pi y}{W}\right)\end{aligned}\quad (55)$$

7. 進行 Laplace 逆轉換以求得原區域濃度 $c_i(x, y, z, t)$ ，本專案考慮下列 Laplace 逆轉換公式，並藉由第一平移定律(first shifting theorem)可得原時間-空間域的 5 個物種濃度 $c_i(x, y, z, t)$ 。

$$L^{-1} \left[\frac{e^{-x\sqrt{s}}}{s-a^2} \right] = \frac{A_3 + A_4}{2} \quad (56)$$

$$L^{-1} \left[\frac{e^{-x\sqrt{s}}}{(s-a^2)(a+\sqrt{s})} \right] = tA_1 + \frac{A_3}{4a} - \frac{1}{4a} (1+2ax+4a^2t)A_4 \quad (57)$$

此處

$$A_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-\frac{x^2}{4t}} \quad (58)$$

$$A_2 = \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}}\right) \quad (59)$$

$$A_3 = e^{a^2t-ax} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}} - a\sqrt{t}\right) \quad (60)$$

$$A_4 = e^{a^2t+ax} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x}{2\sqrt{t}} + a\sqrt{t}\right) \quad (61)$$



4.2 健康風險評估

傳統的解析解模式大多是單一物種傳輸模式，不太適用含氯有機物污染可能產生降解子物種的污染場址的傳輸評估分析，而目前產、官或學界使用的自然衰減監測式、自然衰減整治法或健康風險評估使用的模式工具 **BIOCHLOR** 則有預測不準確的問題，因此本專案所發展的解析解模式將為健康風險評估工作最有效的工具，本專案將使用此新發展解析解模式，應用於相關污染場址的健康風險評估美國國家科學院提出的風險推估量的表現方式主要分為非致癌風險(non-carcinogenic risk)與致癌風險(carcinogenic risk)兩種方式。

a. 非致癌風險估算

在非致癌風險的計算中以非致癌風險危害商數(hazard quotient)評估環境中有害物質所導致之人體非致癌健康風險，危害商數代表發生癌症以外疾病的可能性，是將終身平均每日攝入量除以口服參考劑量 (reference oral dose)，危害商數計算公式為

$$HQ = \frac{DI}{RfD} \quad (62)$$

此處 HQ 為危害商數； DI 為每日平均單位體重攝入量； RfD 為參考劑量。

HQ 大於 1 時表示會對人體健康產生危害，小於 1 時預期將不會對健康造成傷害。

DI 的計算可採用下式計算

$$DI = \frac{C \times IR}{BW} \quad (63)$$

C 為在地下水中污染物的濃度[mg/L]； IR 為水的攝入率[L/day]； BW 為體重[kg]。



b. 致癌風險估算

在致癌風險的計算中以口服致癌斜率因子(oral cancer slope factor)計算風險值，美國環保署(US EPA)採用數學外插來計算致癌斜率因子，致癌風險計算公式為

$$Risk = LADD \times CSF \quad (64)$$

此處 $Risk$ 為目標風險(target risk)； $LADD$ 為終身每日平均每單位體重的攝入質量(mg/kg/day)； CSF 為口服致癌斜率因子($(\text{mg/kg-day})^{-1}$)。

致癌風險是以機率值來表示，代表增加罹患癌症的機率，經常以 10^{-6} 為參考標準，即是指在一百萬人中可能增加 1 人罹患風險的機率。

$LADD$ 的計算可採用下式計算

$$LADD = \frac{C \times IR \times EF \times ED}{BW \times AT} \quad (65)$$

C 為在地下水中污染物的濃度[mg/L]； IR 為水的攝入率(intake rate)[L/day]； EF 為暴露頻率(exposure frequency)，指一年中暴露的天數[day/year]； ED 為暴露期間(exposure duration)，指暴露的年數[year]； BW 為體重[kg]； AT 為暴露的平均時間[day]。

在方程式(62)與(65)中的地下水中污染物濃度可利用本專案所發展的解析解模式進行計算。



工作進度甘特圖

年月 工作項目	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	備註
建立解析解模式與計算 FORTRAN 程式	X	X	X	X									
建立數值解模式與計算 FORTRAN 程式					X	X							
						※							
解析解與數值解交互比較驗證							X	X					
BIOCHLOR 三維模擬評估								X	X				
建立解析解於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估的應用案例									X	X			
投稿國際期刊論文										X	X		
撰寫期末報告											X	X	
												※	
工作進度估計百分比 (累積數)	5%	10%	20%	30%	40%	50%	55%	60%	70%	80%	90%	100%	
預定查核點	期中		完成解析解模式與 FORTRAN 計算程式。										
			完成數值解模式與 FORTRAN 計算程式。										
預定查核點	期末		完成地下水污染場址的人體健康風險評估的應用案例。										
			完成撰寫期末報告。										

說明：

- 1、工作項目請視專案性質及需要自行訂定。預定進度以粗線表示其起迄日期。
- 2、「工作進度百分比」欄係為配合管考作業所需，累積百分比請視工作性質就以下因素擇一估計訂定：(1) 工作天數，(2) 經費之分配，(3) 工作量之比重，(4) 擬達成目標之具體數字。
- 3、「預定查核點」，請在條形圖上標明※符號，並在「預定查核點」欄具體註明關鍵性工作要項。



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用



五、結果與討論

5.1 解析解驗證

根據上述推導所得的解析解，本專案撰寫了一個以 Fortran 程式語言為基礎的計算程式，為能驗證本專案所發展的解析解的正確性與對應的 Fortran 計算程式的準確性，本專案所推導的新解析解，將與文獻中相關解析解比較以確認所推導解的正確性，文獻中雖然有 Sudicky et al. (2013)之相關無限域三維半解析解，但其只能考慮 4 個世代的物種，而我們考慮的含氯有機溶劑傳輸問題則有 5 個世代的物種，因此本專案採用 Chen et al. (2016)的有限域的二維全解析解進行比較驗證。驗證採用 **BIOCHLOR** 使用手冊(Aziz et al., 2000)的解析解應用模擬案例，此應用範例明顯說明 **BIOCHLOR** 可以產生 1965 至 1998 年間 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 含氯溶劑地下水污染場址的污染團的遷移行為。此模擬問題為一個真實的含氯有機溶劑之地下水污染場址的自然衰減問題，為 $\text{PCE} \rightarrow \text{TCE} \rightarrow \text{DCE} \rightarrow \text{VC} \rightarrow \text{ETH}$ 具有序列降解反應之污染物，所使用之相關情境與傳輸參數如表 1 所列。



表 1 驗證範例，情境與傳輸參數

參數	值
長度 L [ft]	1085
寬 W [ft]	700
地下水流速 v [ft year ⁻¹]	111.7
縱向延散 D_x [ft ² year ⁻¹]	4468
水平方向側向延散 D_y [ft ² year ⁻¹]	446.8
垂直方向側向延散 D_z [ft ² year ⁻¹]	0
遲滯因子 R_i [-]	
PCE	7.13
TCE	2.87
DCE	2.8
VC	1.43
ETH	5.35
一階降解常數 k_i [year ⁻¹]	
PCE	2
TCE	1
DCE	0.7
VC	0.4
ETH	0
污染源濃度 C_i^0 [mg L ⁻¹]	
PCE	0.056
TCE	15.8
DCE	98.5
VC	3.08
ETH	0.03



由於此真實案例為假設污染源在 z 方向完全分布，因此我們的三維模式可與 Chen et al. (2016) 的有限域的二维全解析解來做驗證，污染來源區位於入流邊界 ($x=0$ 處) $297.5 \text{ ft} \leq y \leq 402.5 \text{ ft}$ 區間。圖 2 為 BIOCHLOR 真實案例之模擬示意圖。

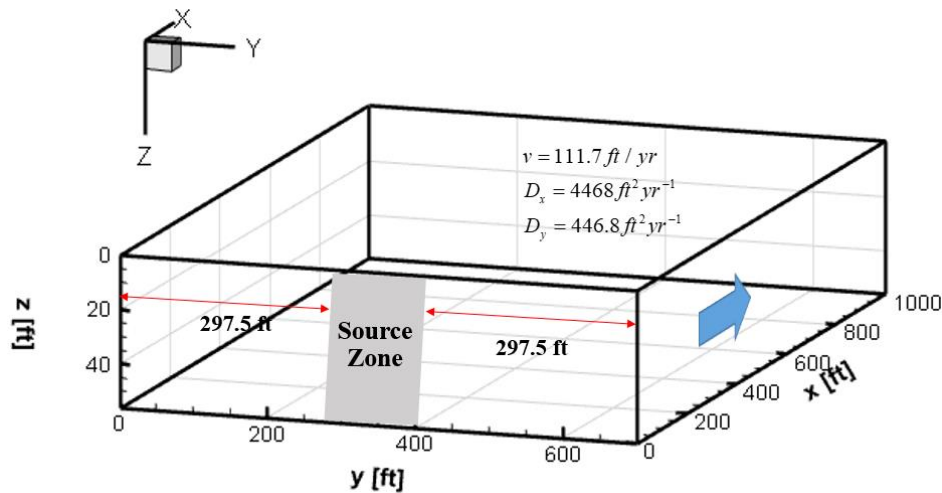


圖 2 BIOCHLOR 手冊使用之地下水污染場址參數及模式驗證示意圖，假設污染來源區位於入流邊界 ($x=0$ 處) $297.5 \text{ ft} \leq y \leq 402.5 \text{ ft}$ 以及 $0 \text{ ft} \leq z \leq 56 \text{ ft}$ 區間。

圖 3 為由本專案解析解與 Chen et al. (2016) 解析解，通過如圖 2 的邊界源中心沿 x 軸 ($y=350 \text{ ft}$) 5 個物種在不同時間下濃度空間剖面比較，圖中顯示本專案所發展的解析解與 Chen et al. (2016) 的解析解在 5 個物種的濃度剖面分布都有非常好的吻合，為進一步增加本專案所發展解析解模式的驗證，圖 4 為由本專案解析解模式與 Chen et al. (2016) 解析解模式，於如圖 2 的垂直 x 軸 ($x=50 \text{ ft}$) 的 5 個物種在不同時間下的濃度空間剖面比較，圖中顯示本專案解析解模式與 Chen et al. (2016) 的解析解模式在 5 個物種的濃度剖面也都有非常好的吻合。另外為了應用於三維之模擬，本模式也將與過去發展之 STANMOD 中的 3DADE 三維溶質傳輸模式來做相互驗證，但由於此模式為單一物種之模式，因此本驗證採用 PCE 為例，所使用之案例示意圖如圖 5，也就是污染源之厚度與含水層厚度不相同，並將 z 方向之延散係數增加為 $446.8 \text{ ft}^2 \text{ year}^{-1}$ ，圖 6 為本模式與 STANMOD-3DADE 在模擬在中心點隨 x 方向以及隨正 z 方向在不同時間下的濃度空間剖面比較，兩模式之模擬結果也相當吻合，再次證明了本專案所發展解析解的正確性與 Fortran 計算程式的準確性。



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

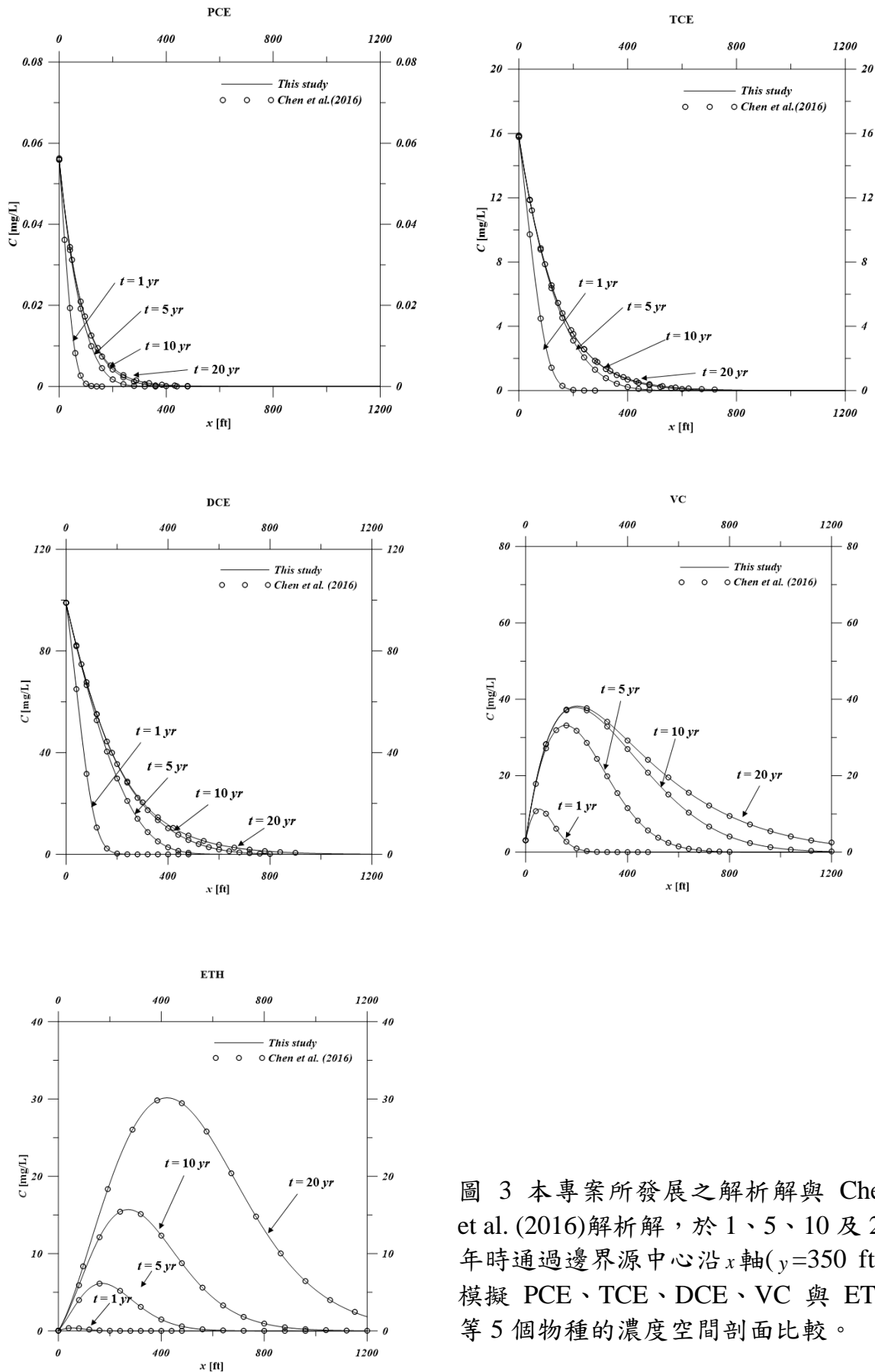


圖 3 本專案所發展之解析解與 Chen et al. (2016)解析解，於 1、5、10 及 20 年時通過邊界源中心沿 x 軸($y=350$ ft) 模擬 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的濃度空間剖面比較。



五、結果與討論

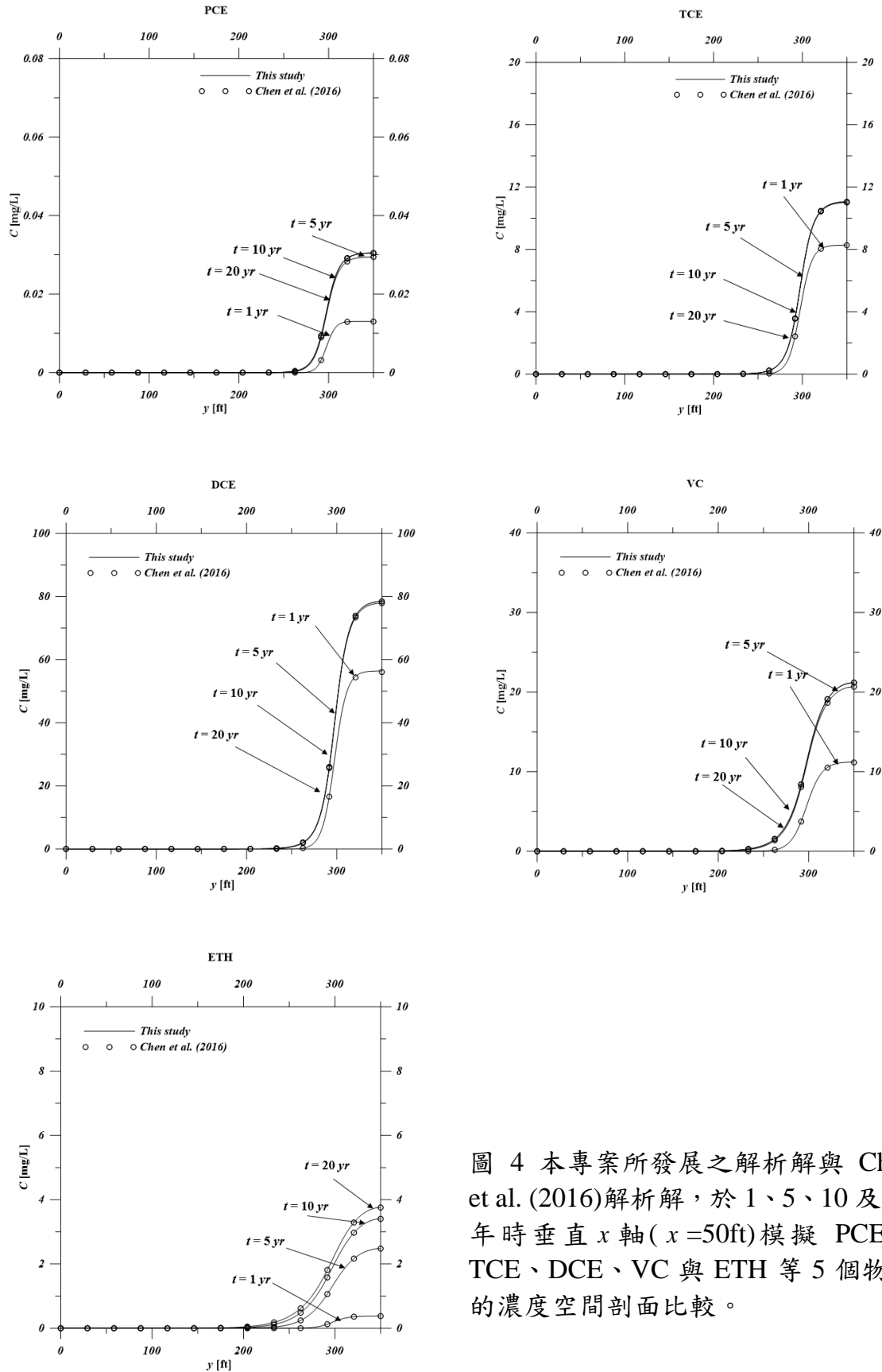


圖 4 本專案所發展之解析解與 Chen et al. (2016)解析解，於 1、5、10 及 20 年時垂直 x 軸 ($x=50\text{ft}$) 模擬 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的濃度空間剖面比較。



精進含氣有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

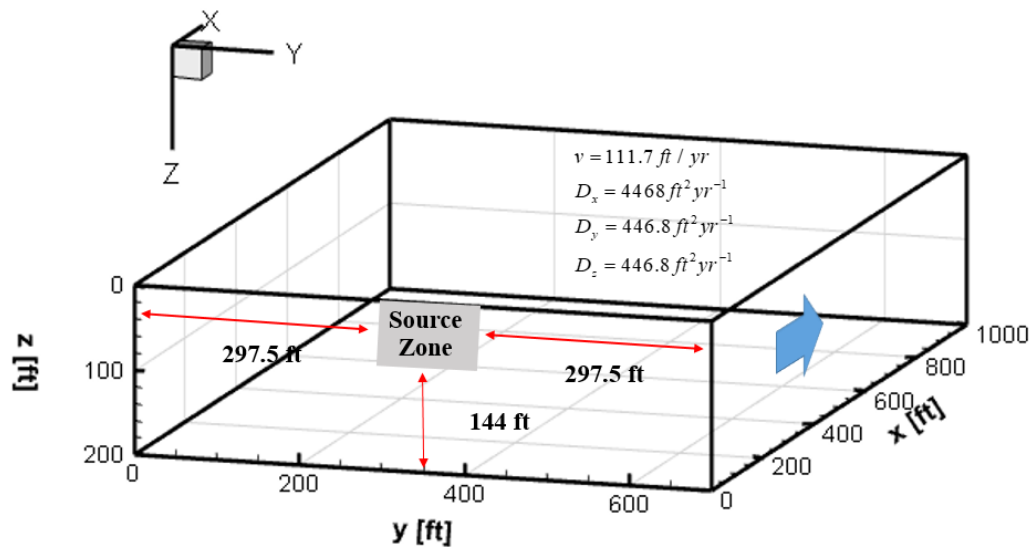
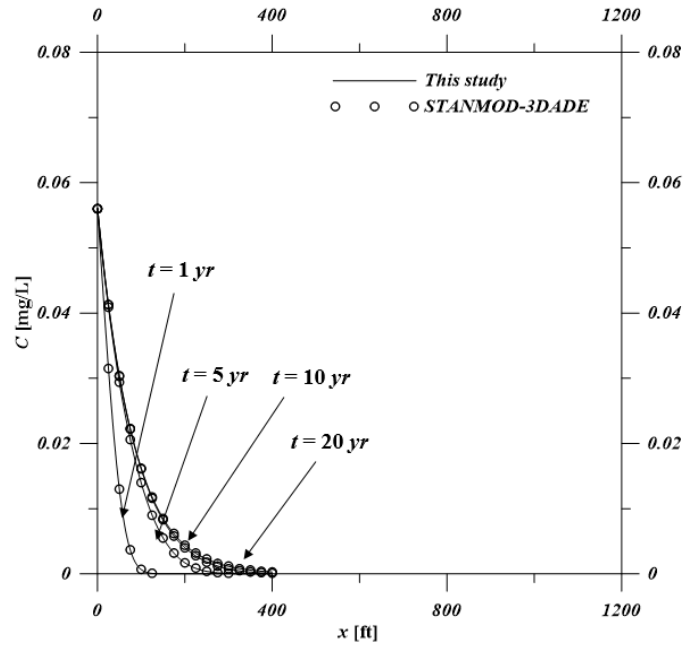


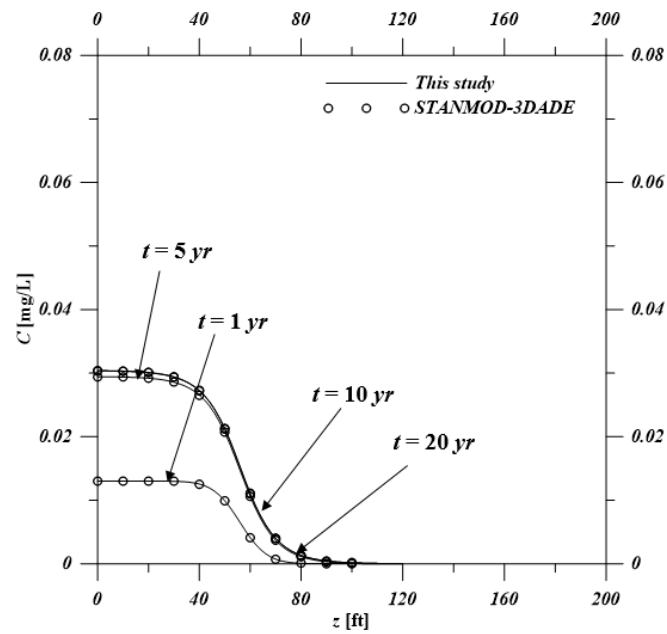
圖 5 模擬三維立體空間濃度分布示意圖，假設污染來源區位於入流邊界($x=0$ 處) $297.5 \text{ ft} \leq y \leq 402.5 \text{ ft}$ 以及 $0 \text{ ft} \leq z \leq 56 \text{ ft}$ 區間，含水層厚度為 200 ft 。



五、結果與討論



(a)



(b)

圖 6 本專案所發展之解析解與 STANMOD-3DADE 之三維溶質傳輸解析解，於 1、5、10 及 20 年時模擬 PCE 的濃度空間剖面比較。(a)隨 x 軸方向($y=350\text{ft}$, $z=0$) (b) 隨 z 軸方向($x=50\text{ft}$, $y=350\text{ft}$)



5.2 解析解的計算效率評估與計算參數範圍限制

由於本專案的目的為發展含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式做為快速預測工具，因此也特別進行所發展的解析解的計算效率評估，計算效率的評估主要比較本專案的新的三維全解析解與 Chen et al. (2016) 「二維有限域全解析解模式」與陳等(2016)的「三維半無限域半解析解模式」進行二維驗證案例所需的時間。計算時間如表 2 所示，計算是在 Intel (R) Pentium(R) CPU N3540 @2.16 GHz 執行，考慮的精度是兩個小數，從表中可知計算的時間與物種的序列有關，越後面的物種需要較多的計算時間，Chen et al. (2016) 「二維有限域全解析解模式」在計算 ETH 所需時間約為 PCE 計算時間的 30 倍，陳等(2016)的「三維半無限域半解析解模式」在計算 ETH 所需時間約為 PCE 計算時間的 80 倍，本專案解析解模式在計算 ETH 所需時間約為 PCE 計算時間的 40 倍。另外在計算 PCE，Chen et al. (2016) 「二維有限域全解析解模式」1 個計算點約需花費 6.3 秒，陳等(2016)的「三維半無限域半解析解模式」1 個計算點約需花費 1.5 秒，但本專案解析解約須花費 0.0005 秒，很明顯可以發現陳等(2016)的「三維半無限域半解析解模式」有較 Chen et al. (2016) 「二維有限域全解析解模式」快速，但計算速度的增加並沒有特別顯著，但本專案所發展的「三維半無限域全解析解模式」較 Chen et al. (2016) 「二維有限域全解析解模式」計算速度加快達 12,600 倍，在計算 TCE，本專案較 Chen et al. (2016) 計算速度加快達 20,000 倍，在計算 DCE，本專案較 Chen et al. (2016) 計算速度加快達 30,000 倍，在計算 VC，本專案較 Chen et al. (2016) 計算速度加快達 10,000 倍，在計算 ETH，本專案較 Chen et al. (2016) 計算速度加快達 9,000 倍。整體而言，計算速度至少加速了 9,000 倍，也說明本專案計畫的具體重要貢獻。

表 2 比較模式計算效率(平均一點所需時間)

	Chen et al. (2016)	陳等(2016)	本專案
PCE	6.3 s	1.5 s	0.0005 s
TCE	20.1 s	7.6 s	0.001 s
DCE	87.2 s	25.1 s	0.003 s
VC	103.3 s	62.1 s	0.01 s
ETH	184.9 s	125.3 s	0.02 s



一般對於模擬地下水污染傳輸問題，常會遭遇的困難是當延散係數小時，解析解或數值解無法準確計算或根本無法計算，一般解的計算與無因化參數 Pectlet number 有關，Pectlet number 定義為 vL/D_x ，Chen et al. (2016) 的「二維有限域全解析解模式」只能計算至 Pectlet number 值 40 左右，大於 40 計算就無法收斂，本專案的解析解可計算至 Pectlet number 值 100 以上，遠大於「二維有限域全解析解模式」的計算範圍，這也顯示本專案所開發的解析解的優點。



5.3 BIOCHLOR 功能表現評估

BIOCHLOR 須考慮每一含氯物種有相同的遲滯因子，然而實際每一含氯物種可能有不同的遲滯因子，因此在 **BIOCHLOR** 中採用五個含氯物種的遲滯因子的平均值 ($R_{average} = 1/5(R_{PCE} + R_{TCE} + R_{DCE} + R_{VC} + R_{ETH})$) 進行計算，然而如此將有可能高估或低估部份含氯物種的移動性，而本專案所發展的解析解模式可以考慮每一含氯物種可能有不同的遲滯因子，因此用來評估 **BIOCHLOR** 的適用性。適用性評估考慮與驗證案例相同為三維含氯有機溶劑的傳輸。所使用之相關情境與傳輸參數如表 1 所列，因相較於二維的驗證，在三維的傳輸因多考慮垂直方向，因此須給定污染源厚度，此處採用 **BIOCHLOR** 手冊的 56 ft，**BIOCHLOR** 的遲滯因子則採用五個物種之平均值 ($R_{av}=2.87$)。圖 7 為本專案的解析解模式與 **BIOCHLOR** 模式五個物種之於第 1 年的濃度剖面空間分布(通過如圖 2 示意圖中 $y = 350\text{ft}$ 與 $z = 10\text{ft}$ 與 x 軸平行的直線)，圖中可以發現 **BIOCHLOR** 與本專案解析解模式會有不同的預測結果，對 TCE ($R_{TCE}=2.87$) 與 DCE ($R_{DCE}=2.80$) 這兩物種，因其實際的遲滯因子與五個物種的平均的遲滯因子 $R_{average} = 1/5(7.13 + 2.87 + 2.80 + 1.43 + 5.35) = 2.87$ 相當接近，**BIOCHLOR** 與本專案的解析解所預測的結果較為接近，對 PCE ($R_{PCE}=7.13$) 因為其遲滯因子較遲滯因子平均值 ($R_{average}=2.87$) 大，所以 **BIOCHLOR** 相較於本專案解析解模式相較於 **BIOCHLOR** 所預測的濃度剖面有較快速的污染團移動性。對 VC ($R_{VC} = 1.43$) 因為遲滯因子較五個物種的遲滯因子平均值小，所以 **BIOCHLOR** 就有較慢的污染團移動與較低的尖峯濃度，換句話說 **BIOCHLOR** 低估 VC 的濃度，其中更可以發現當低估了 VC 的濃度時會進一步影響其次一物種 ETH 的預測。圖 8 為本專案的解析解模式與 **BIOCHLOR** 模式五個物種於第 10 年的濃度剖面空間分布，其中可以發現當模擬時間越久時，**BIOCHLOR** 在越後面的物種 VC 以及 ETH 預測上會有更嚴重低估的情形發生，相關參數使用以及預測結果說明如表 3。從以上 **BIOCHLOR** 在預測上 VC 與 ETH 濃度的顯著誤差，也說明 **BIOCHLOR** 模式無法考慮不同物種有不同遲滯因子時，就無法真實預測不同具降解性污染物之實際的傳輸行為，因此也說明本專案克服「所有的物種只能採用相同的遲滯因子」的具體貢獻。



五、結果與討論

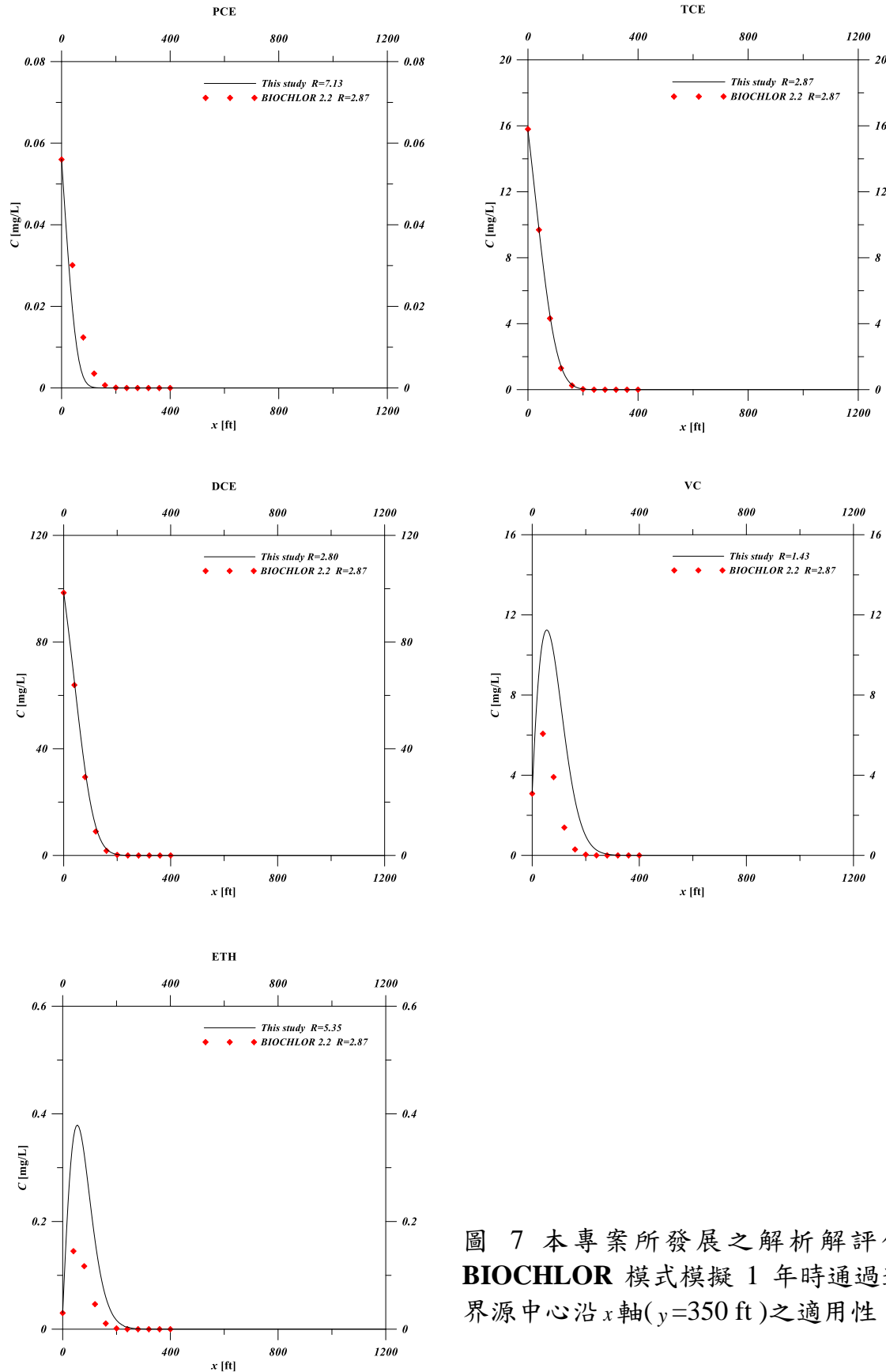


圖 7 本專案所發展之解析解評估 BIOCHLOR 模式模擬 1 年時通過邊界源中心沿 x 軸($y=350$ ft)之適用性。



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

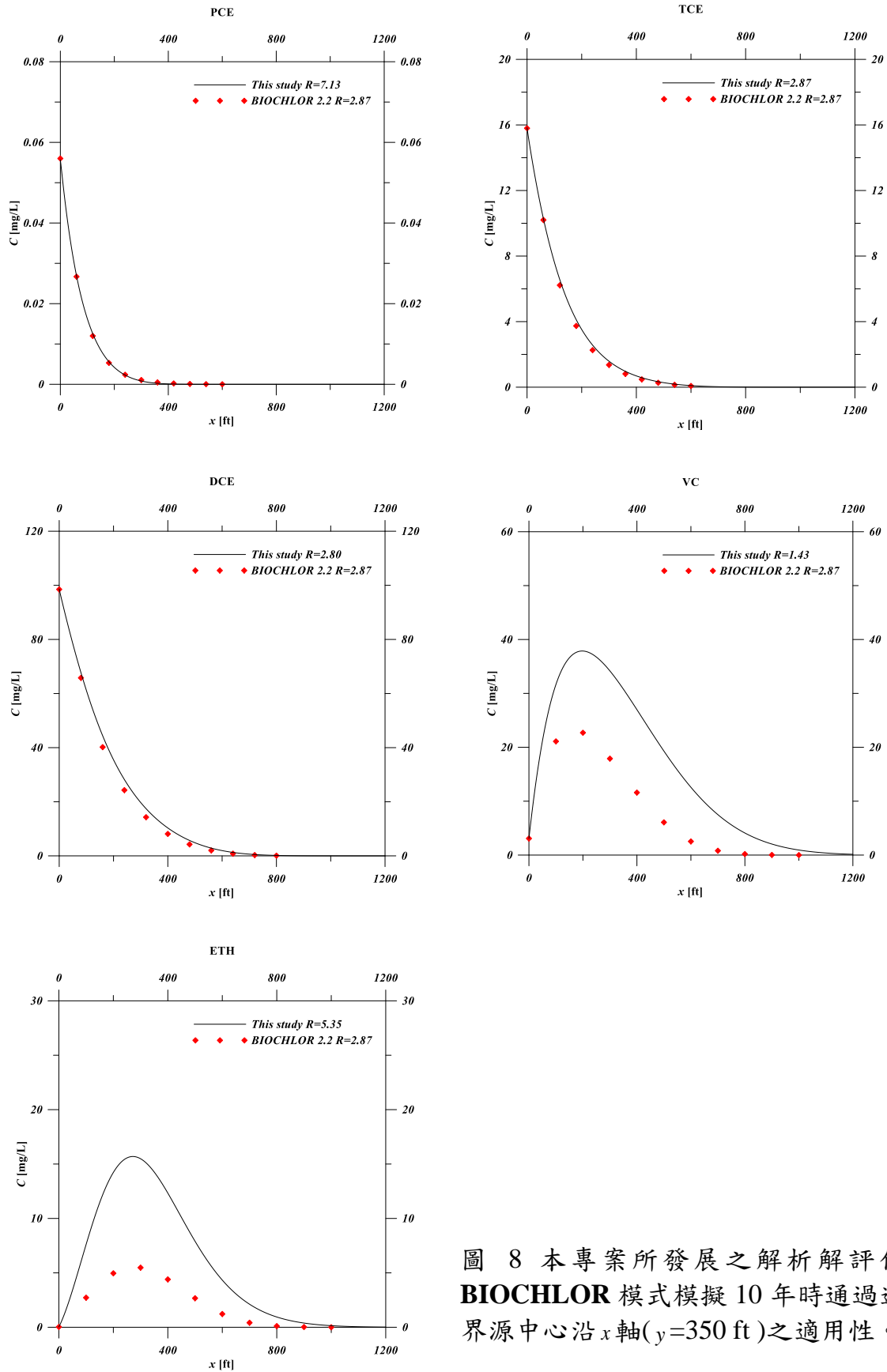


圖 8 本專案所發展之解析解評估 BIOCHLOR 模式模擬 10 年時通過邊界源中心沿 x 軸($y=350$ ft)之適用性。



表 3 模擬案例本專案模式與 BIOCHLOR 之參數使用以及預測結果比較

物種	BIOCHLOR	本專案模式
PCE	採用遲滯因子平均值 2.87。 時間小時會高估流動性及濃度，但當時間大時呈現穩態時，預測結果與專案模式差異不大。	採用真實遲滯因子 7.13。
TCE	採用遲滯因子平均值 2.87。 與真實參數相符，預測結果與專案模式相同。	採用真實遲滯因子 2.87。
DCE	採用遲滯因子平均值 2.87。 與真實參數差異不大，預測結果與專案模式差異不大。。	採用真實遲滯因子 2.8。
VC	採用遲滯因子平均值 2.87。 預測結果會低估流動性及濃度。	採用真實遲滯因子 1.43。
ETH	採用遲滯因子平均值 2.87。 比真實參數小，但預測結果受到前一物種濃度低估而有嚴重的影響。	採用真實遲滯因子 5.35。



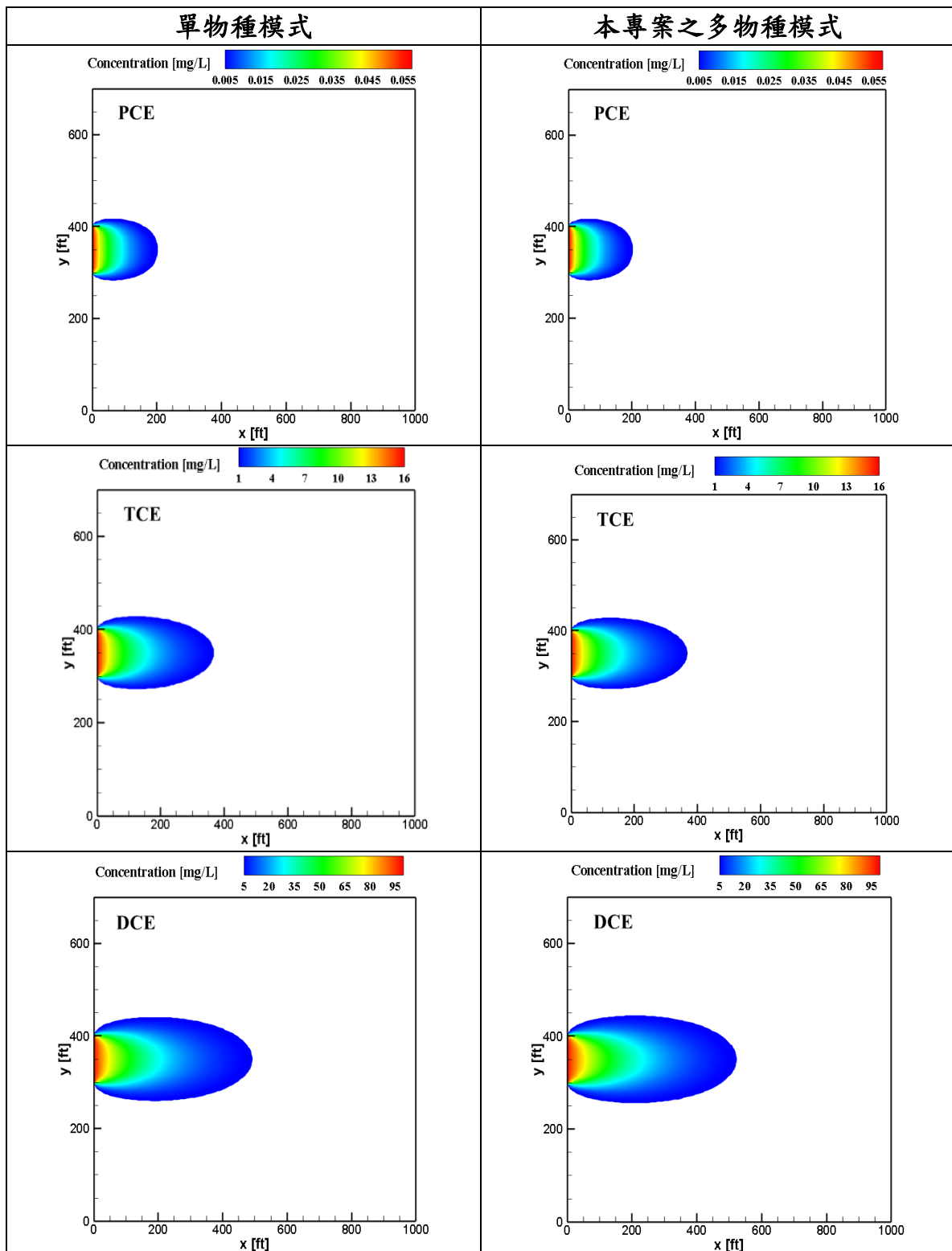
5.4 健康風險評估應用

由於傳統的單一物種傳輸解析解模式大量使用於地下水污染傳輸的模擬，因此本專案也比較單一物種傳輸解析解模式及本專案所發展之多物種傳輸解析解模式兩者在模擬含氯溶劑 5 個物種污染團遷移三維空間分布的差異，使用案例參數同上述 **BIOCHLOR** 手冊，圖 9 為單一物種模式及本專案多物種模式預測第 10 年 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 時濃度的比較結果，結果顯示單一物種模式在模擬越序列後面的物種會低估濃度，此低估差異會隨著所模擬的物種序列增加而放大，其主要原因為單一物種模式沒考慮到來自前一序列物種在傳輸過程伴隨的降解反應的生成產物貢獻。

根據單一物種傳輸解析解模式及本專案所發展之多物種傳輸解析解模式上述的比較，本專案進行含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估，健康風險評估考慮了非致癌風險與致癌風險。相關之受體參數值如表 4 所示，根據美國環保署的 IRIS (Integrated Risk Information System)，可以查得含氯物種的非致癌風險的口服參考劑量及致癌風險的口服斜率因子分別如表 5 所示。



五、結果與討論





精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

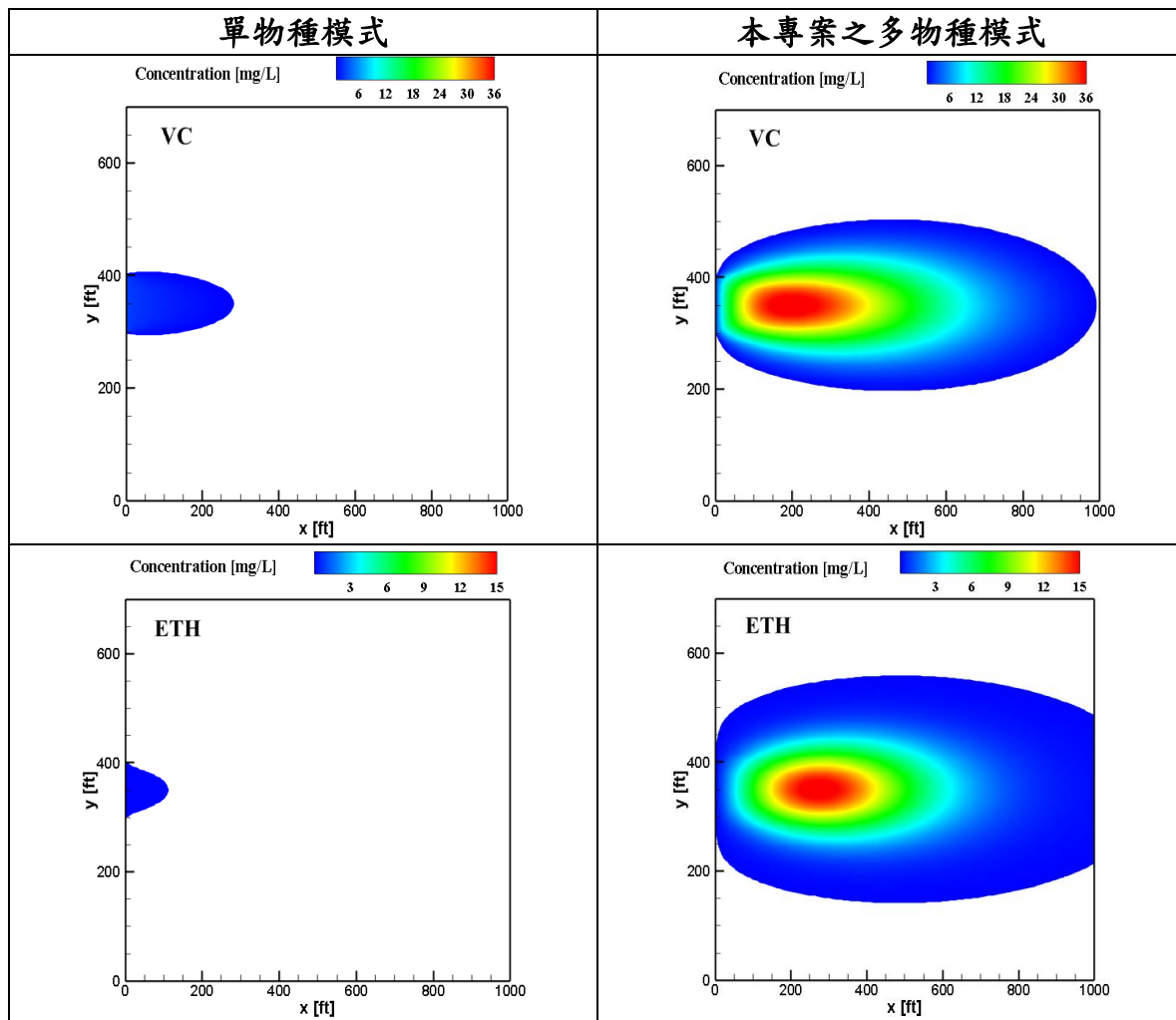


圖 9 利用快速預測工具預測污染物第 10 年 $z = 10$ ft 之濃度分布，並比較單一物種及多物種模式之差異，假設污染來源區位於入流邊界 ($x=0$ 處) $297.5 \text{ ft} \leq y \leq 402.5 \text{ ft}$ 。



表 4 受體參數設定

參數	值
<i>EF</i> 一年中暴露 [day year^{-1}]	350
<i>ED</i> 暴露期間 [year]	30
<i>BW</i> 體重 [kg]	70
<i>IR</i> 水的攝入率 [L day^{-1}]	2
<i>AT</i> 暴露的平均時間 [day]	70*365



表 5 污染物口服之參考劑量及致癌斜率

物種	參考劑量	致癌斜率
	值 (mg/kg-day)	值 (mg/kg-day)
PCE	0.006	0.0021
TCE	0.0005	0.046
DCE	0.002	-
VC	0.003	0.72
ETH	-	-



表 6 為單一物種傳輸解析解模式與本專案所發展之多物種傳輸解析解模式計算非致癌風險之結果，結果顯示單一物種傳輸模式會低估總危害商數，在距離污染源邊界源不遠處兩者的總危害商數的差距不是太顯著，但距離污染源 600ft 單一物種傳輸解析解模式計算出的總危害商數相對於多物種模式低估達 10 倍左右，到了距離較遠的 1000 ft，相對於多物種模式單一物種傳輸解析解模式低估危害商數達 20 倍左右，單一物種所計算出的危害商數值小於 1，但多物種傳輸模式則遠大於 1。表 7 為單一物種傳輸解析解模式與本專案所發展之多物種傳輸解析解模式計算致癌風險之結果，表 6 清楚顯示單一物種傳輸模式會低估目標風險值，在距離污染源邊界源不遠處兩者的目標風險值差距可達 10 倍，但距離污染源 600ft 單一物種傳輸解析解模式計算出的目標風險值相對於多物種模式低估達 20 倍左右，到了距離較遠的 1,000 ft，相對於多物種模式單一物種傳輸解析解模式低估危害商數達目標風險值 20 倍左右，若以目標風險值 10^{-6} 為可接受的風險，單一物種傳輸模式和多物種傳輸模式計算之總目標風險都顯示超過 10^{-6} ，但實際計算出的致癌風險值，不管在任何距離，單一物種傳輸模式相對於多物種傳輸模式還是低估目標風險值達約 30 倍左右。上述比較所呈現單一物種傳輸模式對於這些污染場址進行健康風險評估時會有嚴重低估的現象，並再次說明本專案多物種模式開發的重要性。



表 6 模式應用於污染場址計算之非致癌風險(HQ)

	x= 200 ft		x= 600 ft		x= 1000 ft	
	單物種模式	多物種模式	單物種模式	多物種模式	單物種模式	多物種模式
PCE	2.00E-02	2.00E-02	0	0	0	0
TCE	2.00E+02	2.01E+02	5.54E+00	5.56E+00	9.20E-03	9.23E-03
DCE	4.39E+02	5.07E+02	2.11E+01	2.78E+01	5.06E-02	7.00E-02
VC	1.35E+01	3.61E+02	2.60E+00	1.20E+02	3.40E-01	8.91E+00
總危害 商數	6.53E+02	1.07E+03	2.93E+01	1.53E+02	4.00E-01	8.99E+00

*紅色值為總危害商數大於 1



表 7 模式應用於污染場址計算之致癌風險(TR)

	x= 200 ft		x= 600 ft		x= 1000 ft	
	單物種模式	多物種模式	單物種模式	多物種模式	單物種模式	多物種模式
PCE	1.04E-07	1.04E-07	0	0	0	0
TCE	1.89E-03	1.90E-03	5.25E-05	5.26E-05	8.70E-08	8.73E-08
VC	1.20E-02	3.20E-01	2.31E-03	1.06E-01	3.02E-04	7.91E-03
總風險	1.39E-02	3.22E-01	2.36E-03	1.06E-01	3.02E-04	7.91E-03

*紅色值為超出目標風險值 10^{-6}



精進含氣有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用



5.5 模式應用於污染團遷移的三維空間分布

本專案所發展的解析解模式，可更實際的用來了解 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的污染團遷移的三維空間分布。同樣考慮 BIOCHLOR 案例中的美國 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 之含氯溶劑地下水污染場址，所模擬的情境與傳輸參數如表 1 所示，並假設污染來源區跟 BIOCHLOR 手冊中一樣位於入流邊界 ($x=0$ 處) $297.5\text{ ft} \leq y \leq 402.5\text{ ft}$ 以及 $0\text{ ft} \leq z \leq 56\text{ ft}$ 區間，因為 BIOCHLOR 考慮污染源厚度與含水層厚度一樣，因此無垂直方向變化，所以考慮為 z 方向的側向延散係數 $D_z = 0\text{ ft}^2\text{ year}^{-1}$ ，在本例子中除了改變其 z 方向的側向延散係數為 $D_z = 446.8\text{ ft}^2\text{ year}^{-1}$ ，且將模擬含水層厚度改變為 200 ft，如此污染源厚度與含水層厚度不一樣以呈現三維的變化，模擬情境如圖 5 所示。圖 10 為 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種的污染團在第 10 年三維空間分布，從圖可以發現 5 個物種有著不同的遷移行為，VC 有較大遷移的距離，而 PCE 則不容易移動，主要是因為 VC 的遲滯因子為 1.43，而 PCE 的遲滯因子為 7.13。另外值得特別說明的是序列越後面的含氯溶劑物種，由於有一部份的來源是來自於前一代含氯溶劑物種遷移過程中降解所產生的，並不是全部來自原來的污染源區，因此也可發現序列越後面的含氯溶劑物種，有較遠的遷移距離。此三維快速預測工具確實對於污染物在濃度預測上是一個很實用的工具，對於本專案模式與過去 Chen et al. (2016) 與 BIOCHLOR 的特性比較如表 8，本專案所發展的模式可考慮每一物種有不同遲滯因子且適用任意的縱向延散係數，但又有快速的計算速度，充份顯示本專案所發展模式的優點。



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

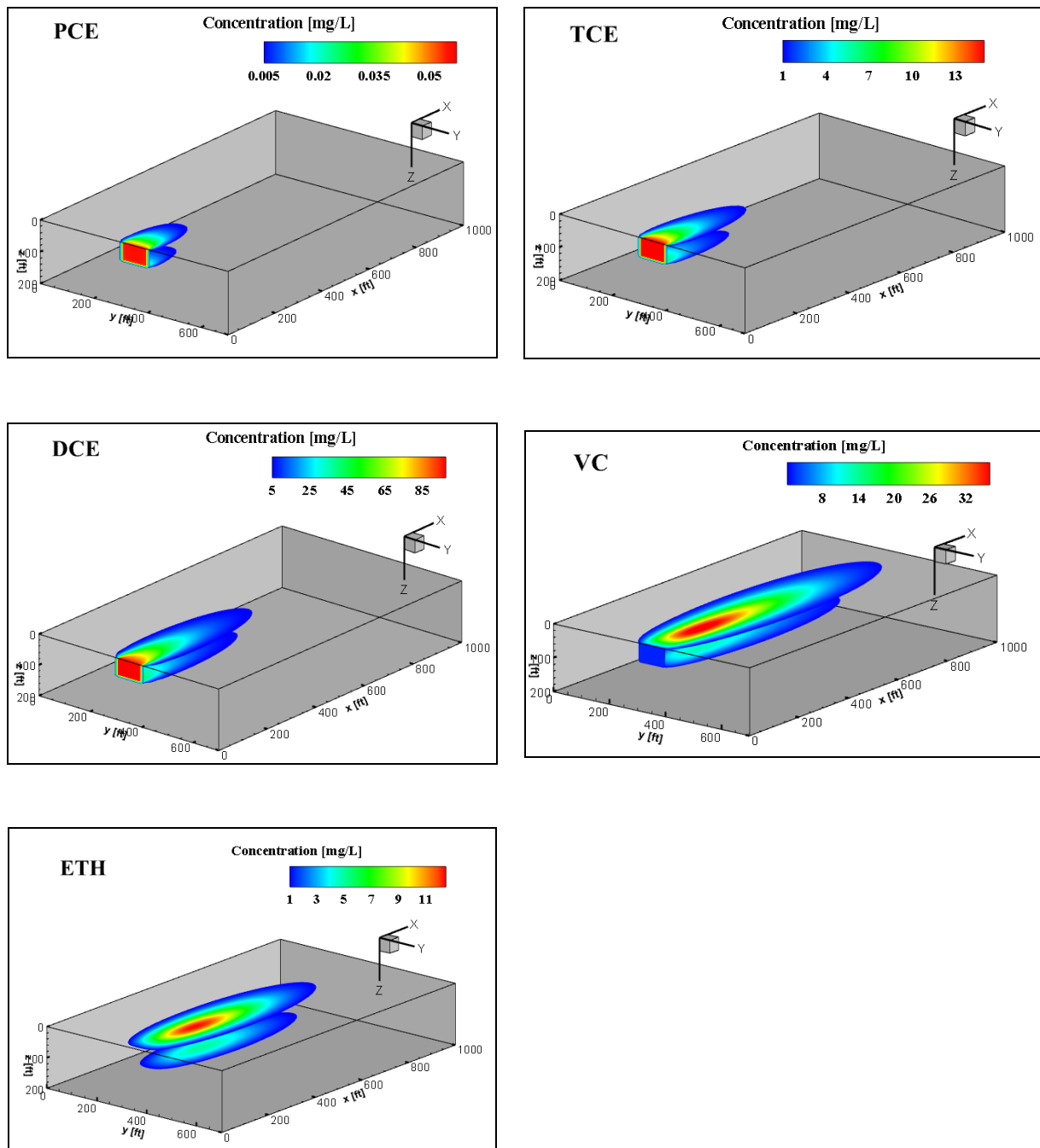


圖 10 模擬 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種在時間為第 10 年的三維立體空間濃度分布，假設污染來源區位於入流邊界 ($x=0$ 處) $297.5 \text{ ft} \leq y \leq 402.5 \text{ ft}$ 以及 $0 \text{ ft} \leq z \leq 56 \text{ ft}$ 區間，含水層厚度為 200 ft。



表 8 本專案模式與 BIOCHLOR 及 Chen et al. (2016) 模式之總比較

	BIOCHLOR	Chen et al. (2016)	本專案之模式
參數之限制	1.不同物種有相同遲滯因子。 2.縱向延散係數不大。	1.不同物種有不同遲滯因子。 2.適用較大之延散係數。 3.太小之延散係數無法計算。	1.不同物種有不同遲滯因子。 2.任意的縱向延散係數
計算速度	快	慢	快



5.6 結論與建議

本專案發展含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式做為快速預測工具，經評估計算效率，發現對所有的物種至少都比 Chen et al. (2016)的解析解模式快上 9,000 倍，且對 ETH 的 1 個計算點最多只要 0.02 秒。應用此快速預測工具評估 **BIOCHLOR** 的適用性，發現當對物種的遲滯因子較五個物種的遲滯因子平均值大或小時，**BIOCHLOR** 就會高估或低估污染物的移動性。應用此快速預測工具於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估並與單一物種傳輸解析解模式的人體健康風險評估比較發現，單一物種模式會低估人體健康風險，特別是對序列越後面的物種。在許多現地污染傳輸參數不確定下，有時必須進行機率式評估與分析，相關機率式評估與分析通常藉由多次的 Monte Carlo 模擬進行，為了避免龐大的計算時間，本專案解析解模式因計算快速可提供了機率式分析快速又實用的選擇。另外本專案所發展的模式可免除 **BIOCHLOR** 的「所有物種使用相同遲滯因子」且「縱向延散係數不大時」限制，建議可推薦給國內產、官或學界使用，甚至也可將模式提供給國際相關領域學者與研究人員使用以提昇土水模式的國際競爭力與領先形象。



六、參考文獻

- 陳瑞昇、劉振宇、梁菁萍，2016，快速計算三維含氯溶劑污染地下水宿命污染傳輸模式發展與應用，科技部產學計畫成果報告。
- 風險評估專書編寫小組，2015，土壤地下水污染場址的風險評估與管理：挑戰與機會，馬鴻文、吳先琪主編，五南圖書出版公司。
- 林尚鋒，2011，地下水含氯有機污染場址之風險管理案例研究，國立中山大學環境工程研究所碩士論文。
- 傅楷滂，2016，以健康風險評估訂定含氯有機物污染場址之整治目標，國立中山大學海洋環境及工程學系碩士論文。
- Aziz, C. E., Newell, C. J., Gonzales, J. R., Haas P., Clement, T. P., Sun, Y., 2000, BIOCHLOR–Natural attenuation decision support system v1.0, User's Manual, US EPA Report, EPA 600/R-00/008.
- Chen, J. S., Lai, K. H., Liu, C. W., Ni, C. F., 2012a, A novel method for analytically solving multi-species advective-dispersive transport equations sequentially coupled with first-order decay reactions, J. Hydrol., 420–421, 191-204.
- Chen, J. S., Liu, C. W., Liang, C. P., Lai, K. H., 2012b, Generalized analytical solutions to sequentially coupled multi-species advective-dispersive transport equations in a finite domain subject to an arbitrary time-dependent source boundary condition, J. Hydrol., 456-457, 101-109.
- Chen, J. S., Liang, C. P., Liu, C. W., Li, L. Y., 2016, An analytical model for simulating two-dimensional multispecies plume migration, Hydrol. Earth Sys. Sci., 20, 733-753.
- Chen, J. S., Ho, Y. C., Liang, C. P., Wang, S. W., Liu, C. W., 2019, Semi-analytical model for coupled multispecies advective-dispersive transport subject to rate-limited sorption, J. Hydrol., 579, 124794.
- Cho, C. M., 1971, Convective transport of ammonium with nitrification in soil, Can. J. Soil Sci., 51, 339-350, 1971.
- Domenico, P. A., 1987, An analytical model for multidimensional transport of a decaying contaminant species, J. Hydrol., 91, 49-58.
- Domenico, P. A., Schwartz, F. W., 1998. Physical and Chemical Hydrogeology, 2nd edition, New York, John Wiley and Sons, Inc., 506pp.
- Lunn, M., Lunn, R. J., Mackay, R., 1996, Determining analytic solution of multiple species contaminant transport with sorption and decay, J. Hydrol., 180, 195-210.



- McGuire, T. M., Newell, C. J., Looney, B. B., Vangeas, K. M., Sink, C. H., 2004, Historical analysis of monitored natural attenuation, A survey of 191 chlorinated solvent site and 45 solvent plumes. *Remiat. J.* 15: 99-122.
- Mieles, J., Zhan, H., 2012, Analytical solutions of one-dimensional multispecies reactive transport in a permeable reactive barrier-aquifer system, *J. Contam. Hydrol.*, 134-135, 54-68.
- Pérez Guerrero, J. S., Pimentel, L. G. G., Skaggs, T. H., van Genuchten, M. T., 2009, Analytical solution for multi-species contaminant transport subject to sequential first-order decay reactions in finite media, *Transport Porous Med.*, 80, 357-373.
- Pérez Guerrero, J. S., Skaggs, T. H., van Genuchten, M., T., 2010, Analytical solution for multi-species contaminant transport in finite media with time-varying boundary condition, *Transport 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 Resour.*, 27, 507-520.
- Srinivasan, V., Clememt, T. P., 2008a, Analytical solutions for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems - Part I: Mathematical derivations, *Adv. Water Resour.*, 31, 203-218.
- Srinivasan, V., Clememt, T. P., 2008b, Analytical solutions for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems - Part II: Special cases, implementation and testing, *Adv. Water Resour.*, 31, 219-232.
- Sudicky, E. A., Hwang, H. T., Illman, W. A., Wu, Y. S., 2013, A semi-analytical solution for simulating contaminant transport subject to chain-decay reactions, *J. Contam. Hydrol.*, 144, 20-45.
- Sun, Y., Clement, T. P., 1999, A decomposition method for solving coupled multi-species reactive transport problems, *Transport Porous Med.*, 37, 327-346.
- Sun, Y., Peterson, J. N., Clement, T. P., 1999a, A new analytical solution for multiple species reactive transport in multiple dimensions, *J. Contam. Hydrol.*, 35, 429-440.
- Sun, Y., Petersen, J. N., Clement, T. P., Skeen, R. S., 1999b, Development of analytical solutions for multi-species transport with serial and parallel reactions, *Water Resour. Res.*, 35, 185-190.



六、參考文獻

van Genuchten, M. T., 1985, Convective-dispersive transport of solutes involved in sequential first-order decay reactions, *Comput. Geosci.*, 11, 129-147.



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

附錄一 108 年度專案成果績效自評表

一、專案基本資料

填表日期：108 年 10 月 24 日

專案性質	<input type="checkbox"/> 實驗性質	<input checked="" type="checkbox"/> 非實驗性質	專案類別	<input checked="" type="checkbox"/> 研究型	<input type="checkbox"/> 模場型
研究主題	<input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 其他				
申請機構系所	國立中央大學應用地質研究所		專案主持人	陳瑞昇	
專案名稱	精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用				
專案執行期程	<input type="checkbox"/> 申請階段 <input type="checkbox"/> 期中 <input checked="" type="checkbox"/> 期末				

二、成果績效自評

「計畫總預估數」應與計畫審查核定值相符，請執行單位依實際達成之量化成果填寫於欄位中。

(一) 學術面

目標達成程度			申請 預估數	期中 達成數	期末 達成數	結案後半年 達成率	備註 (說明未達成 原因或學術產 出發表名稱)
項目							
A 學術 產出及 活動	1.國內投稿 (篇數)	(1)論文					
		(2)研討會論文		1	1		
	2.國外投稿 (篇數)	(1)期刊論文	1				已完投稿 撰寫，正進 行編修工 作。
		(2)研討會論文	1	1	1		
	3.報告 (篇數)	(1)技術報告	1	1			
		(2)研究報告	1				
	4.專著 (本數)						
	5.辦理學術 會議(場數)	(1)研討/說明會					
		(2)成果發表會					
		(3)論壇					
B 人才 培育	6.研發改良 技術(項數)	(1)已開發技術	1	1			
		(2)技術平台					
	7.研發人員 (人數)	(1)碩士	2	1	2		
		(2)博士					
	8.研究團隊 (個數)	(1)跨領域團隊	1	1			
		(2)跨機構團隊	1		1		
		(3)形成研究中 心					
		(4)形成實驗室					



目標達成程度 項目		申請 預估數	期中 達成數	期末 達成數	結案後半年 達成率	備註 (說明未達成 原因或學術產 出發表名稱)
9.其他指標 (請自行命名)	(請自填)					



精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用

(二) 產業面

項目 \ 目標達成程度				申請 預估數	期中 達成數	期末 達成數	結案後半年 達成率	備註 (說明未達成原因 或專利、技術轉移 相關詳細資料)
A 智慧財產權	1.專利 (件數)	已 核 准	發明					
			新型/設計					
			合計					
		申 請 中	發明					
			新型/設計					
			合計					
B 研發技術轉移	2.先期技術 成果移轉	件數						
		授權金(仟元)						
		衍生利益金(仟元)						
	3.技術移轉 (專利)	件數						
		授權金(仟元)						
		衍生利益金(仟元)						
	4.技術移轉 (應用技術)	件數						
		授權金(仟元)						
		衍生利益金(仟元)						
	5.可移轉 產業技術	(1)技術(件數)						
(2)品種/系(件數)								
C 產學研合作	6.促成合作 研究	件數						
		金額(仟元)						
	7.促成投資	件數						
		投資金額(仟元)						
	8.促成取得 業界科專	件數						
		業界投資金額(仟元)						
9.其他指標 (請自行命名)								



(三) 政策面

項目		目標達成程度	申請預估數	期中達成數	期末達成數	結案後半年達成率	備註 (說明未達成原因或 其他詳細資料)
A 服務 便民	1.技術服務	次數					
		收入(仟元)					
	2.諮詢服務	次數					
		收入(仟元)					
B 支 援 合 作	3.協助政府制定 (件數)	(1)政策					
		(2)法規					
		(3)規範					
		(4)標準					
D 社 會 效 益	4.獲得認證(件數)						
	5.獲得獎項(件數)						
	6.提升能源效率(%)						
	7.節能減碳效率(%)						
8.其他指標 (請自行命名)		建立評估標準 工具	1	1	1		

三、請依學術成就、技術創新、經濟效益、社會影響等方面，評估研究成果對現況或本署之學術或應用價值。(簡述成果所代表之意義、價值、影響或進一步發展之可能性，500字為限)

本專案所開發的含氯有機溶劑地下水污染傳輸模式解析解模式，將是國際「含氯有機溶劑地下水污染傳輸模式」發展學術研究的重要突破，在學術上研究成果預期可發表於相關領域國際頂尖期刊，並對國際此領域研究有非常重大衝擊，預期有一定的引用數，並建立台灣於此研究領域的領先地位。在技數創新方面，相較於美國 BIOCHLOR 模式，所發展的模式可考慮更廣泛且符合實務的應用，將是工程實務人員使用最好的工具，因此解析解模式的 FORTRAN 計算程式可進一步可發展為具圖形使用者介面的預測工具，更便利產業從業人員使用，做為相關有機溶劑地下水污染場址污染物濃度預測與健康風險評估的工具。另外我們有充份信心所發展的模式更深具發展為國際受歡迎公開軟體的潛力，希望藉由提供相關軟體的下載或執行，整體提升台灣地下水污染整治規劃與健康風險的國際競爭力與國際形象。



附錄二 審查意見表

行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☒申請計畫書 ☐期中報告
☐修正計畫書 ☐期末報告

審查意見回覆對照表

計畫年度	108 年度	計畫類型	<input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型
計畫類別	<input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 其他	主持人：陳瑞昇 NO：	
計畫名稱	精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用		
委員審查意見		計畫單位回覆	
委員一： 1. 精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用，構想立意良好。 2. 請說明本計畫人體健康風險評估之驗證。		1. 謝謝委員肯定。 2. 謝謝委員指教，本專案為了讓人體健康風險評估具可信度，本專案將加強計算含氯有機溶劑濃度模式的驗證。	
委員二： 1. 本項研究需要含氯有機物吸附的物理化學參數，建議補充說明這些參數的取得性。 2. 建議本研究成果與實際的傳輸數據進行驗證。		1. 理論上這些參數須由實驗室批次試驗與土柱試驗或現地雙示蹤劑試驗（保守性與非保守性示蹤劑）配合適合的模式分析試驗資料而推求得，但受限於經費、人力與時間的考量，有時會根據現地的濃度監測資料去利用模式去擬合出一組含氯有機物吸附的物理化學參數，計畫書已說明加這些含氯有機物吸附參數取得的方式與相關場址的含氯有機物吸附參數數值。 2. 謝謝委員指教，模式驗證的流程應是先進行與相關模式比較確認解與計算程	



<p>3. 本案的目標之一是預測污染物的傳輸，建議補充說明相關的具體作法。</p>	<p>式的正確性，再利用現地資料進行參數校正與模擬結果與現地資料的驗證，但能否達成現地資料的驗證取決於是否有太多參數的不確定性(例如污染源釋放位置與釋放歷史)，因此本專案將收集各種模式在現地應用的範例與驗證的可行性。</p> <p>3. 謝謝委員指教，將會補充說明具體作法。</p>
<p>委員三：</p> <p>1. 本計畫較過去含氯傳輸預測精進方式是否應進一步校正或驗證(實際場址分析)。</p> <p>2. 研究評估所需參數(地質、水文)是否可由目前各場址調查有效取得。</p> <p>3. 如何以快速預測與現地場址情況如何評估其健康風險?(其所需參數與情境規劃?)</p>	<p>1. 本專案精進的方式主要是解除 BIOCHLOR 須假設每一物種有相同遲滯因子的限制，以更合理的物理概念發展更符合現地的模式。當然由現地場址資料的分析進一步校正或驗證是更好的方式，只是能否進行須先審核相關資料是否充足，如果相關資料不足進行現地的校正或驗證，則可省思如何加強相關資料的取得。</p> <p>2. 根據申請人對於國外相關污染場址模擬的長期收集與分析，要達成全部參數的有效取得恐不容易，因此須適度根據相關文獻或經驗公式合理選用合適的參數。</p> <p>3. 污染傳輸模式預測的準確性須取得有效的參數，健康風險參數的選用暴露情境的假設將參考教科書或相關科學文獻資料，與國內衛福部相關國民營養健康調查資料。</p>



<p>委員四：</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 本計畫屬延續型計畫。 2. 原計畫書中說明:”...發展含氯有機溶劑地下水污染傳輸解析解模式做為快速預測工具;應用此快速預測工具評估 BIOCHLOR 的適用性;以及應用此快速預測工具於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估...”。 3. 建議說明已執行計畫成果的實務應用性? 4. 土污基金已執行(或執行中)多項類似計畫,建議參考。 	<ol style="list-style-type: none"> 1. 本專案非延續型計畫。 2. 謝謝委員指教。 3. 本專案非延續型計畫,目前無法提供已執行計畫成果的實務應用性。 4. 謝謝委員指教,將納入參考。
本署審查意見	計畫單位回覆



行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☐申請計畫書 ☐期中報告

☒修正計畫書 ☐期末報告

審查意見回覆對照表

計畫年度	108 年度	計畫類型	<input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型
計畫類別	<input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 其他	主持人：陳瑞昇 NO：	
計畫名稱	精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用		
委員審查意見		計畫單位回覆	
委員一： 1. 構想書審查回覆意見對照表未附報告內。 2. 國內現有污染場址之地質與地下水特性差異很大，其發展的模式是否都能適用。 3. 總經費可以適度的檢討。		1. 構想書審查回覆意見對照表將於修正計畫書附上。 2. 模式的適用性取決於模擬的目的與現地資料的可取得性，計畫所發展的解析解模式主要是根據美國環保署的 BIOCHLOR 的傳輸方程式而重新求解，以 BIOCHLOR 普遍可滿足美國許多污染場址的模擬目的，相信本專案發展的快速預測工具對國內許多污染場的初步評估是非常有效的工具。 3. 謝謝委員指教。	
委員二： 1. 建議補充說明快速模擬含氯溶劑污染地下水多物種的傳輸，所謂快速模擬的定義應訂定相關指標。 2. 請補充說明本模擬的相關參數如何取得。例如四氯乙烯及三氯乙烯兩種含氯有機污染物的降解反應參數及各物種的		1. 謝謝委員指教，解析解模式相較於數值解模式其解的計算較快因此為一快速工具，計畫會以電腦執行計算所需的時間做為快速模擬的指標，另外解析解模式不須如數值解花費太多時間建立網格的時間，只要發展簡單的介面工程師，可根據現場資料在數分鐘內得到關切位置的污染物濃度，相關補充說明與相關指標將增列於修正計畫書。 2. 本專案為研究型計畫，主要工作在模式發展的精進，相關參數的取得將為將階段模場應用的工作，因此本專案目前階	



<p>遲滯因子。</p> <p>3. 請補充說明應用範例的實例場域。</p> <p>4. 建議補充說明計畫書對於應用範例的具體作法。</p> <p>5. 請補充說明 BIOCHLOR 三維模擬的適用性評估準則。</p> <p>6. 建議本計畫補充風險評估的具體作法。</p>	<p>段將於國際已經較完整水文地質調查已有相關模擬參數的場址做為示範案例，另外本專案會收集、整理與校核模擬參數資料，並建議合理的模擬參數選用準則，方便使用者執行模式使用計算。</p> <p>3. 本專案目前階段將先以國際已經較完整水文地質調查已有相關模擬參數的場址做為示範案例。</p> <p>4. 謝謝委員指教，將於計畫書中補充。</p> <p>5. 根據申請人過去的研究，在一維傳輸下，BIOCHLOR 對於含氯溶劑每一物種有相同遲滯因子較為準確，BIOCHLOR 三維模擬的適用性評估準則必須以本專案精進的新模式與 BIOCHLOR 才能確認 BIOCHLOR 三維模擬的適用性評估準則。</p> <p>6. 謝謝委員指教，將於計畫書中補充。</p>
<p>委員三：</p> <p>1. 建議宜以過去試驗含氯場址評估，作為本年度可精進(或對其他含氯)場址作預測。</p> <p>2. 建議宜再強化說明對人體健康風險評估應用範例之可能情境。</p>	<p>1. 謝謝委員指教，將於計畫執行中納入考慮。</p> <p>2. 謝謝委員指教，將於計畫書中加強說明。</p>
<p>委員四：</p> <p>1. 主持人的學術研究能力與土水污染技術發展能力均佳，其專業能力足以勝任本計畫。主持人近五年研究與土水污染技術發展績效亦佳。</p>	<p>1. 謝謝委員肯定。</p>



<p>2. 本計畫執行團隊的學術研究能力與土水污染技術發展能力佳，其研發能力足以勝任本研究計畫。本計畫執行團隊近五年執行與土水污染相關計畫的執行績效佳。</p> <p>3. 本計畫的執行對國內未來土壤及地下水污染調查及整治工作推動有其貢獻，但工程實務應用的可行性仍待進一步評估。本專案的屬性為”補助研究與模場試驗專案”，建議具體評估實務應用性與驗證。中央大學已有其他團隊執行土污基金會所委託的地下水擴散傳輸模式發展計畫，本計畫與該模式發展計畫的相關性如何？是互補的關係？或是另一獨立的模式開發？</p> <p>4. 依申請計畫書內所提出的成果績效自評表，可推估本專案所預估的執行成果對國內土水污染的技術研發有其貢獻。</p> <p>5. 本計畫書撰寫具體，計畫書中對研究方法的說明具可行性。但計畫執行成果對未來土水污染的實場實務應用性仍待評估。本專案的屬性為”補助研究與模場試驗專案”，因此，模式開發(或擴充)建議宜有適當的驗證方式，以評估其適用範圍與限制。若能以國內相關含氯污染場址為驗證對相當更具實務應用價值。</p>	<p>2. 謝謝委員肯定。</p> <p>3. 謝謝委員指教，本專案執行會具體考慮與評估實務應用性與驗證。申請人並未參與中央大學已有其他團隊執行土污基金會所委託的地下水擴散傳輸模式發展計畫，因此本專案為一獨力的模式開發計畫。但是不同模式的發展完成後，彼此間可進行交互驗證與基準案例測試比較，特別是本專案所發展的模式是解析解，適合其它數值模式採用做為驗證工具與評數值模式採用的網格尺寸是否合適。</p> <p>4. 謝謝委員肯定。</p> <p>5. 謝謝委員肯定與指教，關於模式的實場實務應用與其驗證，將待模式發展完成依序逐一進行，以增加實務應用價值。</p>
本署審查意見	計畫單位回覆
<p>計畫書內容「消耗性及主要費用」印表機單價及總價編列有誤，請修正。</p>	<p>已修正編列錯誤。</p>



行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☐申請計畫書
 ☒期中報告

☐修正計畫書
 ☐期末報告

審查意見回覆對照表

計畫年度	108 年度	計畫類型	<input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型
計畫類別	<input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 其它	主持人：陳瑞昇 NO：A4	
計畫名稱	精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用		
委員審查意見		計畫單位回覆	
委員一 1.依原工作進度，期中報告將完成解析解模式與 Fortran 計算程式，與完成數值解模式與 Fortran 計算程式。本研究已完成「解析解模式的推導」及 Fortran 計算程式之撰寫，與「解析解與文獻解析解交互比較驗證」等工作。數值解模式與 Fortran 計算程式部分，請再說明。 2.後續的工作將包含「解析解與數值解交互比較驗證」、「應用此快速預測工具評估 BIOCHLOR 的適用性」與「應用此快速預測工具於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估」，成果值得期待。		1.謝謝指教，將補充詳細說明數值解模式與 Fortran 計算程式。 2.謝謝指教，將依進度陸續完成後續工作。	
委員二 1.自評表期中達成數，請補填列。 2.完成解析解模式推導及 Fortran 計算程式撰寫。 3.後續建議能選實際場址驗證。		1.謝謝指正，將補充填列自評表期中達成數。 2.謝謝肯定。 3.謝謝指教，但須請委員見諒，本專案的目的是根據一般可接受美國環保署的 BIOCHLOR 的傳輸控制方程式，放寬 BIOCHLOR 每個物種都有相同遲滯因子參數值的限制，重新提出每個物種可有各自獨立的遲滯因子值的求解方法，並加速解的計算，計畫中的研究結果與 Chen et al. (2016)結果基本上除靠近有限出流邊界處外，兩者幾乎完全相同，但本專案解析解的計算速度快了近 10,000 倍。這也說明本	



專案達成了預設目的。

模式的驗證重點應該在數值計算結果的驗證(verification)，而非與現地資料結果比較的校正(calibration)與驗證(validation)。地下水污染傳輸解析解模式主要可做為快速初步篩選級的預測工具外，還可用來進行傳輸參數推估。然而，不管地下水污染傳輸解析模式與地下水污染傳輸數值模式在污染場址的實務應用基本都是非常大的挑戰。因為惟有建立符合場址現地特性的水文地質概念模式與選用合適的傳輸參數做為模式輸入使用，才會有較佳的預測結果。以本專案所發展的解析解模式而言，所有輸入模式的傳輸參數都會影響污染物模擬空間分布的結果。首先，以最重要的污染源位置與污染源濃度強度而言，由於在大部份的場址污染源的位置與污染源強度只能藉由現有的污染物濃度觀測資料、地下水流場、水文地質調查的結果與污染源的可能歷史記錄去推測及假設，因此會存在很大的不確定性。地下水流速因為可藉由現地水頭觀測與進行水力試驗取得水力傳導係數值，因此其為不確定性較小的輸入參數。延散係數的選用，理論上可藉由現地示蹤劑試驗去取得，但是由於地下水流動緩慢，因此示蹤劑試驗需要較長的時間去執行，許多場址不見得會執行示蹤劑試驗，當因為經費、人力與時間而無法取得延散係數值時，可根據污染物的傳輸距離以經驗公式選用延散係數值。關於 5 個污染物的降解常數，雖然可根據文獻中的實驗室降解試驗獲得，但這 5 個污染物的降解常數應該受現場的環境影響，因此為場址特定(site-specific)的參數，相關建議參數的選用方法則是藉由數學模式去擬合



現地污染觀測資料而取得。另外關於 5 個污染物的遲滯因子，也是場址特定 (site-specific) 的參數，此 5 個污染物遲滯因子參數也是不建議採用實驗室的批次試驗去取得，而是以數學模式去擬合現地污染觀測資料而獲得。由於太多不確定的輸入參數資料和經費、人力與時間限制下所得數量極少的濃度觀測資料，因此也許可校正出一組參數資料去滿足現地觀測資料，但需要有足夠的觀測資料進行所謂模式的驗證，以現況而言根本不可行或充滿不確定性。以 BIOCHLOR 的應用範例，作者也很保守的說明在他們所選用的參數條件下，BIOCHLOR 可以產生 1965 至 1998 年間 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 污染場址的污染團的遷移行為。以台灣目前場址所投入的經費、人力與時間來說，特別在污染源位置與來源強度無法完全確認下，包括延散係數、5 個污染物的降解常數與 5 個污染物遲滯因子參數十多個輸入參數無法確定下，數學模式於污染場址「驗證」的用語要非常的保守謹慎使用，如果輸入參數較少的解析解模式都有此問題，更遑論需要更多輸入參數的數值解模式。正確的模式使用觀念應該是保守的藉由模式來確認、修正與改進水文地質概念模式內所蘊含的污染情境、傳輸與宿命過程及相關參數的合理性。污染傳輸模式所扮演的角色應該是可做為架構去整合從實驗室與文獻所獲得現地資料，藉由持續地進行模式模擬與現地觀測資料的比較，逐步調整、改進或修正數學模式考慮的情境、過程與參數，但要因此達到非常詳細的驗證工作成果是不可能，若有非常大量的現地試驗與觀測資料下，模式與現地資料趨勢



	<p>的比較應該可以達到一定的信賴度。本專案會嘗試依委員建議尋找合適的場址，在有限的觀測資料下，進行模式的應用，但「驗證」用語計畫中將謹慎保守的避免使用。</p>
<p>委員三</p> <p>1.公式 31-40，通量=0，請修正。</p> <p>2.表 1，請補充相關傳輸參數的參考來源。本項研究需要含氯有機物吸附的物理化學參數，建議補充說明這些參數的取得性。</p> <p>3.建議本研究成果與實際的傳輸數據進行驗證</p>	<p>1.謝謝指正，公式(31)-(40)打字疏漏已修正。</p> <p>2.謝謝指正，已補充表 1 相關傳輸參數的參考來源。</p> <p>3.謝謝指教，但須請委員見諒，本專案的目的是根據一般可接受美國環保署的 BIOCHLOR 的傳輸控制方程式，放寬 BIOCHLOR 每個物種都有相同遲滯因子參數值的限制，重新提出每個物種可有各自獨立的遲滯因子值的求解方法，並加速解的計算，計畫中的研究結果與 Chen et al. (2016)結果基本上除靠近有限出流邊界處外，兩者幾乎完全相同，但本專案解析解的計算速度快了近 10,000 倍。這也說明本專案達成了預設目的。</p> <p>模式的驗證重點應該在數值計算結果的驗證(verification)，而非與現地資料結果比較的校正(calibration)與驗證(validation)。地下水污染傳輸解析解模式主要可做為快速初步篩選級的預測工具外，還可用來進行傳輸參數推估。然而，不管地下水污染傳輸解析模式與地下水污染傳輸數值模式在污染場址的實務應用基本都是非常大的挑戰。因為惟有建立符合場址現地特性的水文地質概念模式與選用合適的傳輸參數做為模式輸入使用，才會有較佳的預測結果。以本專案所發展的解析解模式而言，所有輸入模式的傳輸參數都會影響污染物模擬空間分布的結果。首先，以</p>



最重要的污染源位置與污染源濃度強度而言，由於在大部份的場址污染源的位置與污染源強度只能藉由現有的污染物濃度觀測資料、地下水流場、水文地質調查的結果與污染源的可能歷史記錄去推測及假設，因此會存在很大的不確定性。地下水流速因為可藉由現地水頭觀測與進行水力試驗取得水力傳導係數值，因此其為不確定性較小的輸入參數。延散係數的選用，理論上可藉由現地示蹤劑試驗去取得，但是由於地下水流動緩慢，因此示蹤劑試驗需要較長的時間去執行，許多場址不見得會執行示蹤劑試驗，當因為經費、人力與時間而無法取得延散係數值時，可根據污染物的傳輸距離以經驗公式選用延散係數值。關於 5 個污染物的降解常數，雖然可根據文獻中的實驗室降解試驗獲得，但這 5 個污染物的降解常數應該受現場的環境影響，因此為場址特定(site-specific)的參數，相關建議參數的選用方法則是藉由數學模式去擬合現地污染觀測資料而取得。另外關於 5 個污染物的遲滯因子，也是場址特定(site-specific)的參數，此 5 個污染物遲滯因子參數也是不建議採用實驗室的批次試驗去取得，而是以數學模式去擬合現地污染觀測資料而獲得。由於太多不確定的輸入參數資料和經費、人力與時間限制下所得數量極少的濃度觀測資料，因此也許可校正出一組參數資料去滿足現地觀測資料，但需要有足夠的觀測資料進行所謂模式的驗證，以現況而言根本不可行或充滿不確定性。以 BIOCHLOR 的應用範例，作者也很保守的說明在他們所選用的參數條件下，BIOCHLOR 可以產生 1965 至 1998 年間



	<p>Florida.州 Cape Canaveral Air Station 污染場址的污染團的遷移行為。以台灣目前場址所投入的經費、人力與時間來說，特別在污染源位置與來源強度無法完全確認下，包括延散係數、5 個污染物的降解常數與 5 個污染物遲滯因子參數十多個輸入參數無法確定下，數學模式於污染場址「驗證」的用語要非常的保守謹慎使用，如果輸入參數較少的解析解模式都有此問題，更遑論需要更多輸入參數的數值解模式。正確的模式使用觀念應該是保守的藉由模式來確認、修正與改進水文地質概念模式內所蘊含的污染情境、傳輸與宿命過程及相關參數的合理性。污染傳輸模式所扮演的角色應該是可做為架構去整合從實驗室與文獻所獲得現地資料，藉由持續地進行模式模擬與現地觀測資料的比較，逐步調整、改進或修正數學模式考慮的情境、過程與參數，但要因此達到非常詳細的驗證工作成果是不可能，若有非常大量的現地試驗與觀測資料下，模式與現地資料趨勢的比較應該可以達到一定的信賴度。本專案會嘗試依委員建議尋找合適的場址，在有限的觀測資料下，進行模式的應用，但「驗證」用語計畫中將謹慎保守的避免使用。</p>
<p>4.本計畫重點之一為人體健康風險評估，期中報告對於此部分工作可以再強化。</p>	<p>4.感謝指教，將於期中報告補充人體健康風險評估相關工作。</p>
<p>委員四</p> <p>1.專案執行進度符合期程及工作內容。</p> <p>2.建議相關含氣傳輸快速預測工具，所需基礎地質、水文資料或其他參數，是否於環境場址評估第一階段(phase I)已能達到？</p> <p>3.若進行快速預測分析適用時機，場址樣態宜於後續工作說明之。</p>	<p>1.謝謝肯定。</p> <p>2.謝謝指教，可根據蒐集的基礎地質、水文資料或其他參數利用本專案所發展的模式進行環境場址評估第一階段評估。</p> <p>3.謝謝指教，快速預測分析適用時機，場址樣態將於後續工作說明。</p>



4.相關技術與建立評估標準工具之可行性、適用性宜論述之。	4.謝謝指教，本專案在主要模式發展與程式撰寫工作外，會增加相關技術與建立評估標準工具之可行性，適用性的論述。
<p>委員五</p> <p>1.請說明本研究解析結果與 Chen et al. (2016) 結果的差異性，及本開發方法的特點。</p> <p>2.請說明後續將用哪些數據驗證開發模式的正確性。</p>	<p>1.本專案解析解考慮無窮遠出流邊界，Chen et al. (2016)則考慮有限出流邊界，本專案結果與 Chen et al. (2016)結果基本上除靠近有限出流邊界處外，兩者幾乎完全相同，但本專案解析解的計算速度快了近 10,000 倍。</p> <p>2.謝謝指教，但須請委員見諒，本專案的目的是根據一般可接受美國環保署的 BIOCHLOR 的傳輸控制方程式，放寬 BIOCHLOR 每個物種都有相同遲滯因子參數值的限制，重新提出每個物種可有各自獨立的遲滯因子值的求解方法，並加速解的計算，計畫中的研究結果與 Chen et al. (2016)結果基本上除靠近有限出流邊界處外，兩者幾乎完全相同，但本專案解析解的計算速度快了近 10,000 倍。這也說明本專案達成了預設目的。</p> <p>模式的驗證重點應該在數值計算結果的驗證(verification)，而非與現地資料結果比較的校正(calibration)與驗證(validation)。地下水污染傳輸解析解模式主要可做為快速初步篩選級的預測工具外，還可用來進行傳輸參數推估。然而，不管地下水污染傳輸解析模式與地下水污染傳輸數值模式在污染場址的實務應用基本都是非常大的挑戰。因為惟有建立符合場址現地特性的水文地質概念模式與選用合適的傳輸參數做為模式輸入使用，才會有較佳的預測結果。以本專案所發展的解析解模式而言，所有輸入模式的傳輸參數都會影響污染物模擬空間分布的結果。首先，以最重要的</p>



污染源位置與污染源濃度強度而言，由於在大部份的場址污染源的位置與污染源強度只能藉由現有的污染物濃度觀測資料、地下水流場、水文地質調查的結果與污染源的可能歷史記錄去推測及假設，因此會存在很大的不確定性。地下水流速因為可藉由現地水頭觀測與進行水力試驗取得水力傳導係數值，因此其為不確定性較小的輸入參數。延散係數的選用，理論上可藉由現地示蹤劑試驗去取得，但是由於地下水流動緩慢，因此示蹤劑試驗需要較長的時間去執行，許多場址不見得會執行示蹤劑試驗，當因為經費、人力與時間而無法取得延散係數值時，可根據污染物的傳輸距離以經驗公式選用延散係數值。關於 5 個污染物的降解常數，雖然可根據文獻中的實驗室降解試驗獲得，但這 5 個污染物的降解常數應該受現場的環境影響，因此為場址特定(site-specific)的參數，相關建議參數的選用方法則是藉由數學模式去擬合現地污染觀測資料而取得。另外關於 5 個污染物的遲滯因子，也是場址特定(site-specific)的參數，此 5 個污染物遲滯因子參數也是不建議採用實驗室的批次試驗去取得，而是以數學模式去擬合現地污染觀測資料而獲得。由於太多不確定的輸入參數資料和經費、人力與時間限制下所得數量極少的濃度觀測資料，因此也許可校正出一組參數資料去滿足現地觀測資料，但需要有足夠的觀測資料進行所謂模式的驗證，以現況而言根本不可行或充滿不確定性。以 BIOCHLOR 的應用範例，作者也很保守的說明在他們所選用的參數條件下，BIOCHLOR 可以產生 1965 至 1998 年間 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 污



染場址的污染團的遷移行為。以台灣目前場址所投入的經費、人力與時間來說，特別在污染源位置與來源強度無法完全確認下，包括延散係數、5 個污染物的降解常數與 5 個污染物遲滯因子參數十多個輸入參數無法確定下，數學模式於污染場址「驗證」的用語要非常的保守謹慎使用，如果輸入參數較少的解析解模式都有此問題，更遑論需要更多輸入參數的數值解模式。正確的模式使用觀念應該是保守的藉由模式來確認、修正與改進水文地質概念模式內所蘊含的污染情境、傳輸與宿命過程及相關參數的合理性。污染傳輸模式所扮演的角色應該是可做為架構去整合從實驗室與文獻所獲得現地資料，藉由持續地進行模式模擬與現地觀測資料的比較，逐步調整、改進或修正數學模式考慮的情境、過程與參數，但要因此達到非常詳細的驗證工作成果是不可能，若有非常大量的現地試驗與觀測資料下，模式與現地資料趨勢的比較應該可以達到一定的信賴度。本專案會嘗試依委員建議尋找合適的場址，在有限的觀測資料下，進行模式的應用，但「驗證」用語計畫中將謹慎保守的避免使用。

3.請補專案成果自評表。

3.謝謝指正，將補專案成果自評表。

委員六

建議執行單位未來可用國內的含氯污染場址，建立利用此快速預測工具於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估的案例。

謝謝指教，將會參考 BIOCHLOR 的應用案例建立此快速預測工具於含氯有機溶劑地下水污染場址的人體健康風險評估的案例。



行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☐申請計畫書 ☐期中報告

☐修正計畫書 ☒期末報告

審查意見回覆對照表

計畫年度	108 年度	計畫類型	<input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型
計畫類別	<input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 其它		主持人： 陳瑞昇 NO：A4
計畫名稱	精進含氯有機溶劑地下水污染傳輸快速預測工具發展與人體健康風險評估應用		
委員審查意見		計畫單位回覆	
<p>委員一</p> <p>1. 本計畫以垂直擴散以 0 為模擬條件，此狀況是否為一般含氯場址情境？</p> <p>2. 建議是否以幾處不含地質、水文條件之實際含氯場址作為污染流布模擬與風險做相關評估。</p> <p>3. 由今年 BIOCHLOR 三維精進在污染物流布，對實場或土水管理可提供哪些具體參考基準？</p>		<p>1.本專案使用的是 BIOCHLOR 在模擬 1965 至 1998 年間 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 含氯溶劑地下水污染場址之真實案例，在 BIOCHLOR 手冊中有提到，此模擬之真實案例為污染源區的厚度與整個含水層厚度相同，因此在垂直方向濃度梯度可以忽略，BIOCHLOR 將垂直向之延散係數假設為 0。為了讓模式符合三維傳輸之模擬應用，期末報告也有模擬污染源區厚度跟含水層厚度不一樣之例子。</p> <p>2.感謝委員建議，由於此部分在現地場址之資料以及參數比較難取得，因此在這次報告採用的是過去文獻中實際污染場址之案例。考慮地質、水文條件之實際含氯場址作為污染流布模擬與風險做相關評估在 7 日的期末報告修正期間暫時無法達成，懇請委員見諒。</p> <p>3.過去 BIOCHLOR 模式使用的解析解其不僅不能適用較大之延散係數，而且每個物種須採用相同之遲滯因子，也就是每個污染物之吸附速率都假設為相同，其很難準確去描述不同污染物之特性以及對於濃度預測上會有嚴重誤差。本專案所發展的模式更符合實際現況，對於地下水含氯污染物的遷移更能</p>	



<p>4. 本計畫次污染源厚度與水層厚度一樣，且年垂直方向變化作為評估之準則為何？</p>	<p>真實掌握。</p> <p>4. 專案所發展的模式是三維模式，但所考慮的應用案例為 BIOCHLOR 手冊中之真實含氯有機污染場址案例使用的條件以及參數，專案中也考慮了污染源與含水層厚度不一樣之例子。另外須注意許多採樣並非利用封塞(packer)分深度採樣，因此此時所得濃度也是垂直向的平均濃度，此時也無法應用三維模式。</p>
<p>委員二</p> <p>1. P.9 描述物種分布範圍為何需「四個」空間座標參數？</p> <p>2. 建議增加一個本模式與 Chen et al. (2016)模式及 USEPA BIOCHLOR 模式的差異分析、使用限制及優缺點等的綜合性比較表，以突顯本研究的重要貢獻。</p> <p>3. 圖 5-7 二種模式的模擬差異大，是否有實場數據可供驗證所開發模式的正確性？</p>	<p>1. 由於假設邊界污染源區外釋至含水層於邊界長方形區域，要描述此長方形區域的寬度與高度，需要分別定義在 y 以及 z 方向上之區間，因此須分別各以兩個座標位置，可根據報告中圖 1 的示意圖更清楚。</p> <p>2. 感謝委員建議，已於報告中加入於修正稿表 8。</p> <p>3. 圖 5 及圖 6 為本專案模式與 BIOCHLOR 模式模擬結果的比較，此差異主要是 BIOCHLOR 模式只適用所有物種相同遲滯因子，此為 BIOCHLOR 模式的限制與不合理處，而本專案成功克服此限制以更合理而正確的方式描述污染物之遷移行為，這純粹是理論正確性問題，應與實場數據驗證無關的。圖 7 為比較此發展之多物種模式以及傳統之單一物種模式計算污染物之差異，含氯有機溶劑具降解性之污染物會因降解作用變成次一物種還同時會接受來自前一物種之濃度貢獻，而傳統發展之單一物種模式無法考量來自前一物種之</p>



<p>4. 本模式計算所須之資料說明及是否可套裝視覺化呈現，可再說明。</p> <p>5. 本模式為三維尺度，為何表 1 垂直方向測向延散 D_z 為 0？</p>	<p>濃度貢獻，因此對於濃度之低估非常嚴重，尤其是越後面的物種。這是單一物種模式理論的限制與不足所引起的差異，這純粹是理論正確性問題，與實場數據驗證的問題。另外必須說明實場數據的驗證須在有非常足夠的資料進行污染源區位置與強度的確認及相關參數的校正才能在有信賴度達成，以目前大部份場址的現況，參數的數目比數據還多，實場數據的驗證雖然可以進行，但可能數學上的非惟一解問題，也可說實場驗證存在太多不確定性。</p> <p>4. 為了更方便實務工程人員使用本專案所發展的 Fortran 計算程式，研究團隊也正在進行發展圖形使用者介面，目前正進行界面展示樣版設計工作，完成後會以 C# 程式語言撰寫圖形使用者介面。</p> <p>5. 本專案使用的是 BIOCHLOR 在模擬 1965 至 1998 年間 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 含氯溶劑地下水污染場址之真實案例，在 BIOCHLOR 手冊中有提到，此模擬之真實案例為污染源區的厚度與整個含水層厚度相同，因此在垂直方向濃度梯度可以忽略，BIOCHLOR 將垂直向之延散係數假設為 0。為了讓模式符合三維傳輸之模擬應用，期末報告也有模擬污染源區厚度跟含水層厚度不一樣之例子。</p>
<p>委員三</p> <p>1. 成果績效自評表、A 學術產出及國外期刊論文，若改投國內，請備註。</p> <p>2. 建議將模擬案例之相關因子及預測結果，列表比較，有利於閱讀。</p>	<p>1. 感謝委員指正，目前已完成英文版投稿論文初稿，目前正進行編修工作，預計於二個月內完成投稿國際期刊。</p> <p>2. 遵照辦理。</p>



<p>3. 健康風險評估應用，以本專案比較單一物種析解模式預測結果差異大，請說明如何加強本專案之信賴度。</p>	<p>3. 含氯有機溶劑為具降解性之污染物，本身不僅自身會因降解作用降解成次一物種，還同時會接受來自前一物種之濃度貢獻，傳統發展之單一種模式確實因無法考量來自前一物種之濃度貢獻，因此對於具降解性之污染物濃度預測上會有嚴重低估之情況，尤其是越後面的物種以及模擬時間更長時，假始濃度上已有預測上之誤差，如果更進一步計算健康風險時，兩者模式也相對會有很大之差異。本專案的多物種模式相對單一物種模式理論更為嚴謹，更是國際社群普遍接受且持續努力的方向，因此本專案所發展的模式當然更具信賴度。</p>
<p>委員四</p> <p>1. 本研究所得到的模擬分析應可用於現有場址的風險評估。目前考慮 5 個含氯有機物物種，評估的初始的濃度分布都為零，建議可以根據現有場址的濃度作為模擬的初始條件。</p> <p>2. 本專案考慮一半無限長的出流邊界 (semi-infinite outlet boundary)，假設 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個物種都無法到達無窮遠處。建議根據現有污染場址現況，補充說明本件模擬設之合理性。</p> <p>3. 請補充說明本模擬的相關參數，各物種的遲滯因子的模擬範圍。</p> <p>4. 本模擬假設 PCE、TCE、DCE、VC 與 ETH 等 5 個污染物在 y 方向的 2 個邊</p>	<p>1. 感謝委員建議，本模式參考 BIOCHLOR 模式考慮 5 個含氯有機物物種的初始濃度為零，因此並不考慮 5 個含氯有機物物種的初始濃度，另外須說明污染物的長期行為(穩態行為)不會受初始濃度分布影響。</p> <p>2. 模擬污染物傳輸只要遠離邊界條件基本上模擬結果不會受邊界條件影響，因此不管採用有限出流邊界條件或無限出流邊界條件都會得到相同結果，此可從驗證案例證明，採用無限出流邊界條件的優點為可得到相同準確的結果，但本專案模式比有限出流邊界模式計算速度快了 9,000 倍。</p> <p>3. 基本上模擬參數為場址特定參數，所以不易界定模擬參數的可能範圍，本專案所使用參數主要是根據 BIOCHLOR 的真實案例。</p> <p>4. 只要污染團不碰觸邊界基本上模擬結果不受邊界條件影響，除非污染團碰觸</p>



<p>界的沒有質量傳輸通量(flux)通過。有鑑於地下水流動的實際狀況,建議補充說明本假設之合理性。</p> <p>5. 圖 5 及 6, R=5.35 的模擬結果與 BIOCHLOR 三維模擬似乎有不一致的情況,請補充說明。</p>	<p>邊界,此時零通量邊界才不適用。</p> <p>5.BIOCHLOR 模式中為採用五個含氯物種的遲滯因子的平均值=2.87 來進行計算,而在 ETH 的前一物種 VC,因為其真實遲滯因子 1.43 較五個物種的遲滯因子平均值小,所以 BIOCHLOR 就有較慢的污染團移動與較低的濃度,換句話說 BIOCHLOR 低估 VC 的濃度,因此也間接影響到其次序列物種 ETH 之濃度預測,這也進一步說明模式能考量不同物種有不同遲滯因子之重要性。</p>
<p>委員五</p> <p>1. 本報告圖、表與本文分離,不易閱讀,請修正。</p> <p>2. 本研究是發展 BIOCHLOR 進一步之分析三維工具,但內文並未詳細敘述是已發展了模式、程式或僅解析數學模型? FORTRAN 程式的呈現?</p> <p>3. 另模式運用於三維空間分布並未有實證或實例比較?應增補。</p> <p>4. 人體健康風險評估應用之內容未呈現及詳述,請補充。</p>	<p>1.感謝委員建議,已進行修正。</p> <p>2.本研究目前已成功發展了解析解數學模式以其對應的 Fortran 計算程式,並已於 19 頁 5-1 節第 1 行文字說明,FORTRAN 程式的原始程式碼暫時不公開。</p> <p>3.由於過去文獻之三維模式少有多物種之傳輸解析解,尤其能適用每個物種能採用不同遲滯因子之模式更是顯少,因此本研究採用的是與 Chen et al. (2016) 二維多物種傳輸解析解來做驗證。期末報告已補上文獻單一物種 STANMOD 之三維溶質傳輸模式進行 PCE 的比較。</p> <p>4.人體健康風險評估考量國內現有場址並無足夠的污染源區與污染源強度資料,且無足夠的長期濃度資料可進行參數的校正,因此以 BIOCHLOR 在模擬 1965 至 1998 年間 Florida 州 Cape Canaveral Air Station 含氯溶劑地下水</p>



<p>5. 本研究所發展數學模式有否期刊或研討會發表及其他人之 Review 驗證？請補充說明。</p>	<p>污染場址之真實案例做為人體健康風險評估應用的案例，本專案也比較應用多物種與單一物種模式在人體健康風險評估的差異，以說明單一物種模式會低估人體健康風險。</p> <p>5. 感謝委員意見，專案團隊過去所發展的含氯溶劑多物種傳輸解析解的成果已有 4 篇發表於 Journal of Hydrology 與 Hydrology and Earth System Sciences 期刊，這兩個期刊都是水資源領域前 5% 的頂尖期刊，本專案成果已完成投稿論文初稿，目前正進行編修工作，預計於二個月內完成投稿國際期刊。</p>
--	---