

## 地下水中有機污染物生物性傳輸三維模式之發展 (I)

### Development of Three Dimensional Biotransformation Model for Organic Chemicals (I)

計畫編號：NSC87-2211-E-009-006

執行期限：86年8月1日至88年7月31日

主持人：葉弘德教授

交通大學環境工程研究所

#### 中文摘要

關鍵詞：微生物分解，地下水，數值模式

本研究利用一個三維污染物含生物性分解的傳輸模式，結合地下水流模式，透過有限元素法，模擬分析有機污染物於飽和地下水層中的傳輸及其宿命。這個三維模式，把污染物視為基質，同時考慮微生物的成長、衰減、及它與基質、氧、硝酸鹽及營養源的利用關係；傳輸的機制，包括傳流、延散、吸附、源/沈及生物動力反應。

本文針對一個地下水受到油脂類有機污染，濃度高達 1000mg/L 的場址，使用代表抽取處理法的抽注井各三口和加氧促進生物分解法，整治該場址的地下水。模式模擬的結果顯示，污染物隨著供氧量之增加，濃度分佈呈現下降的趨勢，若一併使用抽注井整治地下水時，污染團濃度降低的趨勢更顯著；此外，此結果與 MOC/BIOPLUME II 模式模擬結果比較，顯示殘留的污染物濃度稍微偏高，這有可能是因使用的數值方法或/及生物轉換機制與它相關參數值不同所造成。

#### ABSTRACT

The research employs a

three-dimensional (3D) finite element solute transport model, which can couple with a 3D groundwater flow model, to simulate the migration and fate of microbes and organic contaminants in saturated or unsaturated aquifer. This model composes of five coupled nonlinear equations, while one is to describe the processes of transport, growth, and decay for microbes and four equations are to describe the processes of transport and biotransformation for each substrate, oxygen, nitrate, and nutrient.

A hypothetical site contamination by organic chemical with the concentration of 1000mg/L is remediated using three pumping wells and three injection wells and the injection of oxygen to enhance biodegradation. Simulation results indicate that organic concentrations decrease more than one order of magnitude after the simulation time of two years while increasing the injection oxygen concentration. Besides the simulation results of organic concentrations are higher than those simulation results by MOC/BIOPLUME II model. The differences between these two results may be due to the use of numerical approaches

and/or different biotransform function and its parameter values.

(1)

### 緣由與目的

近幾年來，由於工廠不當的排放廢水或除油槽及其配置管路的滲漏，而使地下水受有機污染物污染的問題，逐漸受到重視。一些針對有機污染物的研究成果中顯示，兼氣厭養菌利用氧或硝酸鹽的呼吸，對地表下有機碳的分解，扮演一個主要的角色。而進行此代謝作用時，在好氧的條件下，氧是電子的接受者；在厭氧的條件下，硝酸鹽則是電子的接受者，而這時候營養源如氮氣，需同時存於地下水中。因此，利用微生物的成長、衰減與基質、氧、硝酸鹽和營養源之間關係和傳輸的機制，可建立五條耦合非線性之傳輸、宿命方程式 (Widdowson et al., 1988; Bedient et al., 1994; Yeh and Cheng, 1998)，透過數值方法，如有限元素法或有限差分法，可將此五條方程式發展成數值模式，能用於地下水整治復育工作的模擬分析。

### 模式理論

基質、氧、硝酸鹽、營養鹽、及微生物之傳輸方程式，主要是建立於質量不滅定律和希克 (Fick) 定律的基礎下，而傳輸的機制，包括傳流、延散、吸附、源/沉、及生物動力反應。利用符號 S、O、N、A、M 分別來表示基質、氧、硝酸鹽、營養鹽、及微生物，可發展得如下五條非線性之傳輸、宿命方程式：

#### 1. 基質

$$R_s \frac{\partial S}{\partial t} = D \nabla^2 S - V \cdot \nabla S - R_s S + WS'$$

$$- R_m M \left\{ \begin{array}{l} \frac{\mu_o}{Y_o} \left( \frac{S}{K_{so} + S} \right) \left( \frac{O}{K_o + O} \right) \left( \frac{A}{K_{ao} + A} \right) + \\ \frac{\mu_n}{Y_n} \left( \frac{S}{K_{sn} + S} \right) \left( \frac{N}{K_n + N} \right) \left( \frac{A}{K_{an} + A} \right) I(O) \end{array} \right\}$$

式中  $R_s$ 、 $R_m$  分別為基質與微生物的遲滯係數 (Retardation factor)， $D$  為延散係數 (Dispersion coefficient)， $W$  為氧、硝酸鹽、營養鹽之注流比 (inject flow rate)， $\mu_o$ 、 $\mu_n$  分別代表氧與硝酸鹽之最大比生長率 (maximum specific growth rate)， $Y_o$ 、 $Y_n$  分別代表氧與硝酸鹽之成長轉換率 (yield coefficient)， $K_{so}$ 、 $K_o$ 、 $K_{ao}$  分別為喜氣狀態下基質、氧、營養鹽之飽和常數， $K_{sn}$ 、 $K_n$ 、 $K_{an}$  分別代表厭養狀態下基質、氧、營養鹽之飽和常數， $I(O)$  為限制方程 (inhibition function)， $I(O) = [1 + O / K_c]^{-1}$ ， $K_c$  為限制係數。

#### 2. 氧

$$R_o \frac{\partial O}{\partial t} = D \nabla^2 O - V \cdot \nabla O - \tau_o R_o S + WS'$$

$$- R_m M \left\{ \begin{array}{l} \gamma_o \mu_o \left( \frac{S}{K_{so} + S} \right) \left( \frac{O}{K_o + O} \right) \left( \frac{A}{K_{ao} + A} \right) \\ + \alpha_o \kappa_o \left( \frac{O}{K_o' + O} \right) \end{array} \right\}$$

(2)

$\gamma_o$  代表氧的使用係數， $\alpha_o$ 、 $\kappa_o$ 、 $K_o'$  分別代表氧轉換成能量的係數、微生物在好氧狀況下之衰減係數、及在微生物衰減時氧的飽和係數 (好氧狀況下)。

#### 3. 硝酸鹽

$$R_n \frac{\partial N}{\partial t} = D \nabla^2 N - V \cdot \nabla N - \tau_n R_n N + WN'$$

$$- R_m M \left\{ \begin{array}{l} \eta \mu_n \left( \frac{S}{K_{sn} + S} \right) \left( \frac{O}{K_o + O} \right) \left( \frac{A}{K_{an} + A} \right) \\ + \alpha_n \kappa_n \left( \frac{N}{K_n' + N} \right) \end{array} \right\} I(O)$$

(3)

$\eta$  代表硝酸鹽使用係數， $\alpha_n$  代表硝酸鹽轉換成能量的係數， $K_n$  代表微生物在厭氧狀況下之衰減係數， $K_n'$  微生物衰減時硝酸鹽的飽和係數（厭氧狀況下）。

#### 4. 營養鹽（考慮氮氣）

$$R_a \frac{\partial A}{\partial t} = D \nabla^2 A - V \cdot \nabla A - \tau_a R_a A + W A' - R_m M \left\{ \begin{array}{l} \left[ \psi \mu_o \left( \frac{S}{K_s + S} \right) \left( \frac{O}{K_o + O} \right) \left( \frac{A}{K_{ao} + A} \right) \right. \\ \left. + \varepsilon \mu_n \left( \frac{S}{K_{sn} + S} \right) \left( \frac{N}{K_n + N} \right) \left( \frac{A}{K_{an} + A} \right) \right] I(O) \end{array} \right\} \quad (4)$$

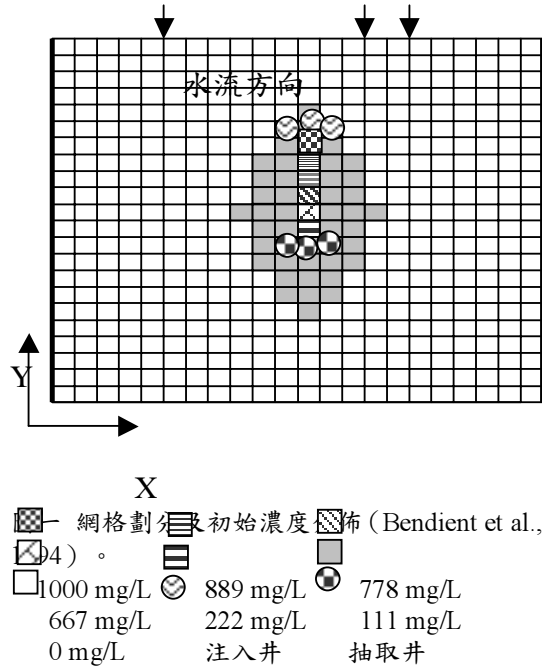
$\psi$ 、 $\varepsilon$  分別代表在好氧與厭養狀態下氮氣使用係數。

#### 5. 微生物

$$R_m \frac{\partial M}{\partial t} = D \nabla^2 M - V \cdot \nabla M + W M - R_m M \left\{ \begin{array}{l} \left[ \mu_o \left( \frac{S}{k_{so} + S} \right) \left( \frac{O}{k_o + O} \right) \left( \frac{A}{k_{ao} + A} \right) - \kappa_o \right] \\ \left[ \mu_n \left( \frac{S}{k_n + S} \right) \left( \frac{N}{k_n + N} \right) \left( \frac{A}{k_{an} + A} \right) - \kappa_n \right] \end{array} \right\} I(O) \quad (5)$$

#### 案例模擬

本研究針對 Bendant et al. (1994, p.236) 所設計的一個虛構受有機污染的場址，以展示模式用於設計地下水污染整治與生物復育系統的功能。場址網格劃分及污染初始濃度分佈，示於圖一，模擬時之和網格相關水文地質參數值，列於表一，與基質、氧有關的生物參數值，係參考相關文獻 (Watson et al., 1986; Wheeler et al., 1987) 並取合理值，列於表二。



表一 模式參數表

模擬參數	數量/單位
Grid size	22*22
Cell size	15m*15m
Transmissivity	1.8E-4 m <sup>2</sup> /sec
Aquifer thickness	3.048m
Hydraulic gradient	0.001
Longitudinal dispersivity	3.48m
Transverse dispersivity	0.9m
Effective porosity	0.3

表二 生物參數表

生物參數	數量/單位
$\mu_o$	2.10D-01 day <sup>-1</sup>
$Y_o$	4.26D-01 kg/kg
$K_{so}$	6.54D+02 kg/m <sup>3</sup>
$K_o$	1.00D+02 kg/m <sup>3</sup>
$K_{ao}$	3.00D-04 kg/m <sup>3</sup>
$K_o'$	2.00D-04
$\gamma_o$	7.044D+00

模式模擬時間為 2 年 (730 天)，地下水中氧的背景濃度為 3mg/L，考慮無抽注井與抽注井各三口且流量為 5.43m<sup>3</sup>/day 的情形，分別探討下列三種條件對地下水復育的效果：(1) 注入水

不含氧；(2) 於注入井注入氧的濃度為 20mg/L；(3) 注入氧的濃度為 40mg/L。

### 結果與討論

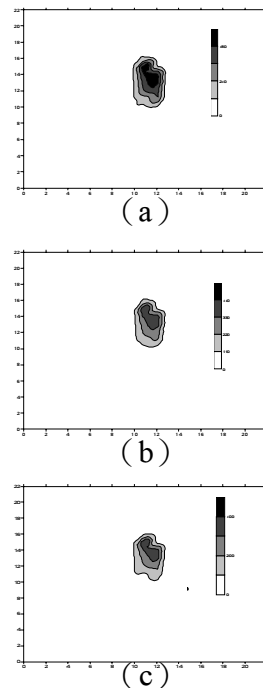
在無抽注井的條件下，污染物的濃度變化，隨著供氧量的不同，模擬二年後場址中污染物的濃度分佈，繪於圖二，其中最大污染濃度點分別為 558mg/L、419mg/L、及 384mg/L，由此濃度的分佈可得知，當地下水中氧的濃度增加時，模擬的結果顯示，污染物濃度會降低。在抽注井各三口的情況時，模擬整治二年後的結果，繪於圖三，它顯示注入井不含氧，而地下水中氧的背景濃度為 3mg/L 時，污染團的最高濃度為 37mg/L。當注入氧的濃度為 20mg/L 時，污染團的最高濃度降至 26mg/L。而注入氧的濃度為 40mg/L 時，污染團最高濃度減至 15.9mg/L。

這個結果若與 Bendient et al.(1994) 利用 MOC/BIOPLUME II 模擬結果比較，在注入氧量分別為 0、20、及 40mg/L 的情況，其污染團最高濃度分別為 20、15、及 9mg/L，略低於我們模擬的結果，這個差異可能是下列兩個原因造成：1. 使用的數值方法不同。在 BIOPLUME II Model 是利用特徵曲線法 (method of characteristics, 簡稱 MOC) 做計算，與本研究採用的 back particle tracking 與有限元素法不同，造成模擬結果之差異。2. 使用的生物轉換機制和它相關參數值不同所造成。本文採用的生物轉換機制是根據 Monod 公式，見方程式(1)-(5)，而 BIOPLUME II Model 則利用簡單的轉換因子 (F)，以轉化污染物的濃度 (Bendient et al., 1994, eq8-20, p.226)。

### 結論與建議

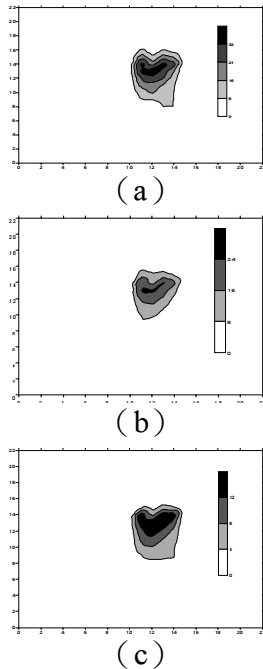
由上述的實例顯示，我們採用的模

式，具有模擬分析以抽注法及生物復育整治受有機污染的地下水。此外，值的注意的，在當注入井及抽水井各三口以整治地下水時，污染團的濃度從 1000mg/L 降至 37mg/L，此時地下水中的含氧量，係自然背景值 3mg/L，但當三口注入井連續地各加入 20mg/L 與 40mg/L，污染團的最高濃度只各再降 11mg/L ( $37-26=11$ ) 與 21mg/L ( $37-16=21$ )，加氧轉化污染物的成效，似乎不彰，一個較有效率的物化或生物復育方法，配合抽注井或其他設施，以整治地下水的污染，在實際上是必要的。未來我們將近一步考慮，在厭氧狀態或兼氣性狀態下地下水的生物復育，並配合其他的整治措施 (如 funnel -and- gate 法)，作模擬分析，使地下水復育系統的規劃，能更有效率、省錢。



圖二 無注入及抽取井作用，注入井中氧的濃度

(a) 0mg/L (b) 20mg/L (c) 40mg/L，污染團濃度分佈圖。



圖三 有三口注入及抽取井作用時，注入井中氧的濃度 (a) 0mg/L (b) 20mg/L (c) 40mg/L，污染團濃度分佈圖。

### Reference

- Bedient, P. B., H. S. Rifai and C. J. Newell, Ground Water Contamination Transport and Remediation, PTR Prentice Hall, Inc., New Jersey, 1994.
- Watson, J. E., and W. R. Gradner, A mechanistic model of bacteria colony growth response to substrate supply, paper presented at the *Chapman Conference on Microbial Processes in the Transport, Fate and in situ Treatment of Subsurface*

*Contaminants*, Snowbird, Utah, Oct 1-3, 1986.

Wheeler, M. F., C. N. Dawson, P. B. Bedient, C. Y. Chiang, R. C. Borden, and H. S. Rifai, Numerical simulation of microbial biodegradation of hydrocarbons in groundwater, paper presented at the *NWWA Conference on Solving Ground Water Problems with Models*, Natl. Water Well Assoc., Denver, CO, 1987.

Widdowson, M. A., F. J. Molz, and L. D. Benefield, "A Numerical Transport Model for Oxygen- and Nitrate-based Respiration Linked to Substrate and Nutrient Availability in Porous Media", *Water Resour. Res.*, Vol.24, No.9, pp.1553-1565, 1988.

Yeh, G. T., and J. R. Cheng, "Three-Dimensional Subsurface Flow, Fate and Transport of Microbes and Chemical Model, User's Manual", U.S.EPA, 1998.