

應用 PMF、CPF 分析鄰近石化工業區大氣 VOCs 來源貢獻

陳品心，國立陽明交通大學環境工程研究所碩士班研究生
黎氏菊，國立陽明交通大學環境工程研究所博士後研究員
Manisha Mishra，國立陽明交通大學環境工程研究所博士後研究員
阮氏佳嚴，國立陽明交通大學環境工程研究所博士班研究生
維佛多，國立陽明交通大學環境工程研究所博士班研究生
蔡春進，國立陽明交通大學環境工程研究所講座教授

計畫編號：MOST 110-2622-8-110-001

一、前言

揮發性有機化合物(Volatile Organic Compounds, VOCs)對大氣中臭氧和二次有機氣溶膠(Secondary Organic Aerosols, SOA)的形成扮演著重要角色。在陽光下，揮發性有機化合物與氮氧化物產生化學反應，形成臭氧和二次有機氣溶膠。台塑六輕工業園區位於雲林縣麥寮鄉，填海造地面積約 2255 公頃，園區內興建煉油廠、輕油裂解廠、汽電廠、發電廠、重機廠、鍋爐廠、矽晶圓廠及石化相關工廠，共計 56 廠。為了瞭解台塑六輕工業園區的巨大規模對該地區的空氣品質有潛在的影響，本研究使用台西光化學評估監測站於 2021 年的有機光化前驅物自動監測數據，將檢測率大於 40% 的 20 種 VOC 輸入正矩陣因子法(Positive Matrix Factorization, PMF)辨識源排放並量化其對空氣污染的貢獻量以及條件機率函數(Conditional Probability Function, CPF)推估各污染源方位影響的機率。

二、研究方法

1. 正矩陣因子法(Positive Matrix Factorization, PMF)

PMF 屬於多變量分析，將原始樣本數據拆解成 2 個矩陣，一個為因子貢獻，另一個為因子成分組成(因子指紋)。依據來源因子的物種成分組成，透過污染源因子指紋資料，來判斷解釋該來源因子的污染源類型。

$$x_{ij} = \sum_{k=1}^p g_{ik}f_{kj} + e_{ij}$$

PMF 的主要目標為找出適當的 g_{ik} 、 f_{kj} 與 p 值以得到最接近樣本測值 x_{ij} 之值，目標函數 Q 是利用最小平方法計算適合度的參數，透過調整 g_{ik} 與 f_{kj} 值以得到最小之 Q 值，以獲得最佳的因子數。

$$Q = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \left[\frac{x_{ij} - \sum_{k=1}^p g_{ik}f_{kj}}{u_{ij}} \right]^2$$

其中， m 和 n 為樣本數和 VOC 種類， u_{ij} 是 x_{ij} 的不確定性， e 為殘差， g 是污染源的貢獻量， f 則是污染源數量。

2. 條件機率函數(Conditional Probability Function, CPF)

為掌握污染來源之方位貢獻，可使用 CPF 透過風速及風向結合污染濃度數據，進一步推估各污染源方位影響的機率。CPF 公式如下：

$$CPF_{\Delta\theta} = \frac{m_{\Delta\theta|C \geq x}}{n_{\Delta\theta}}$$

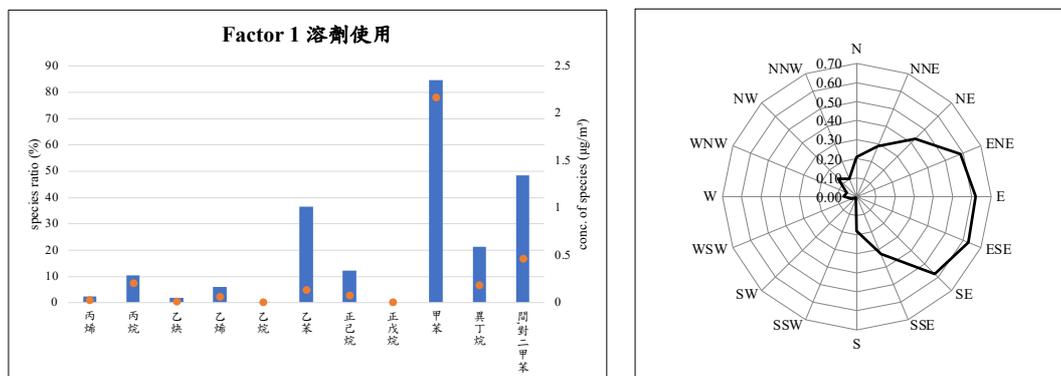
$C \geq x$ 為大於臨界值 x 之濃度， $m_{\Delta\theta}$ 是風向區間扣除靜風後，超過臨界值的樣本個數， $n_{\Delta\theta}$ 是風向區間扣除靜風的樣本個數， $\Delta\theta$ 風向角度區間。

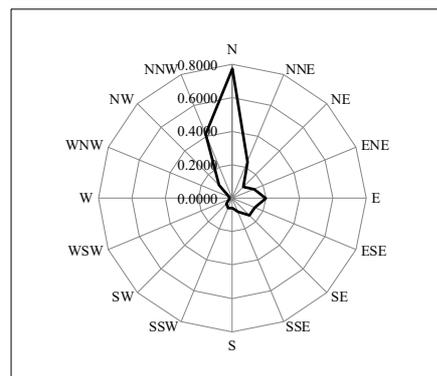
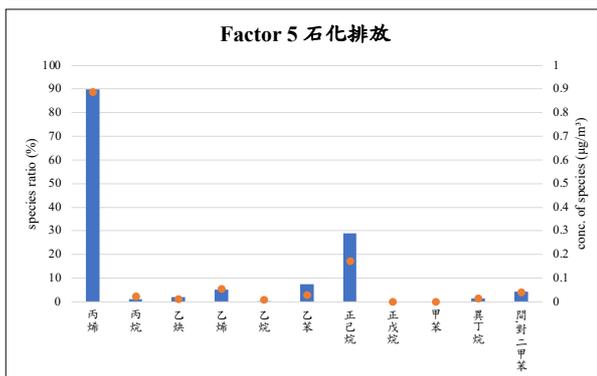
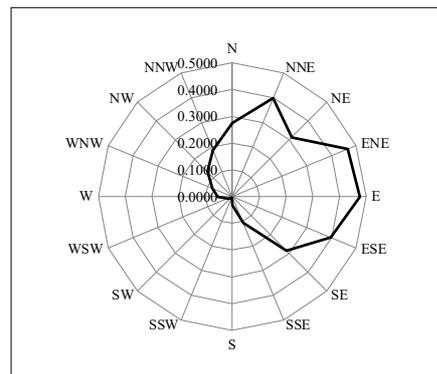
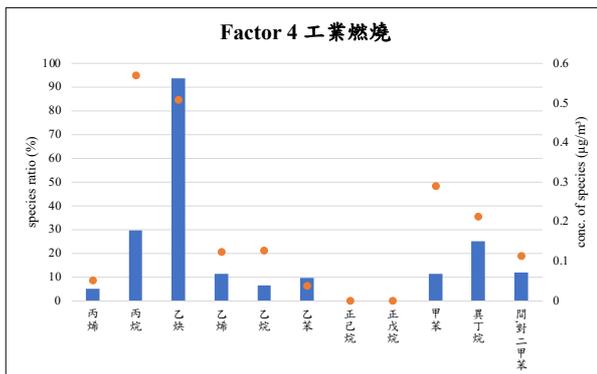
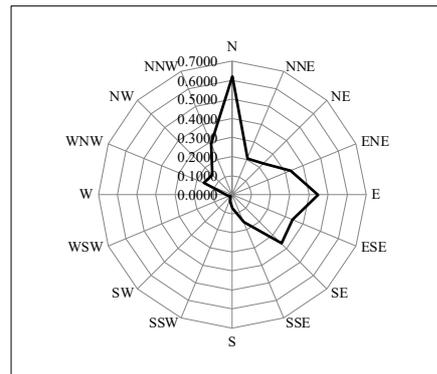
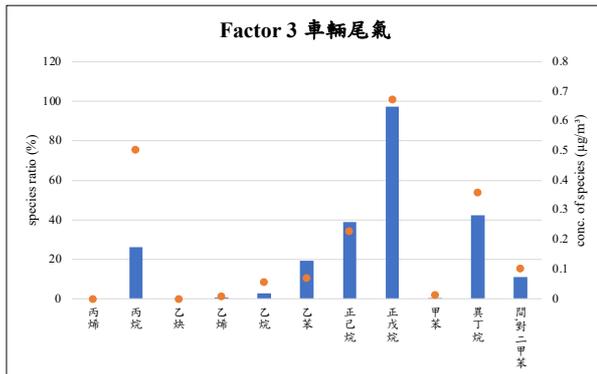
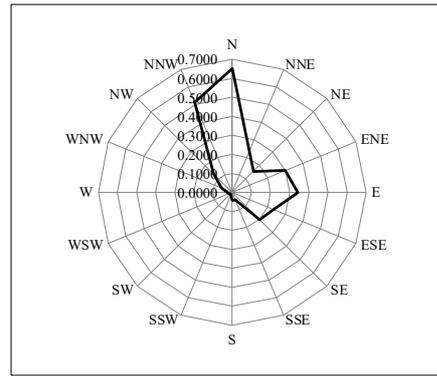
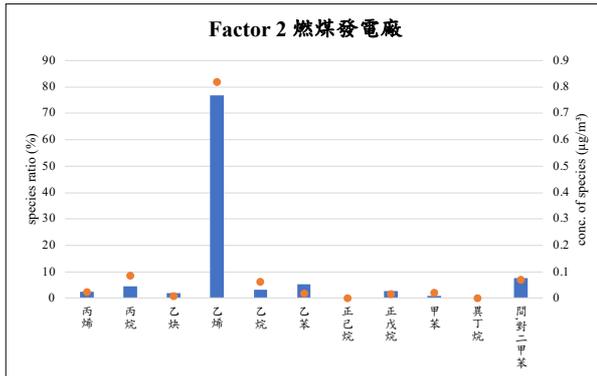
三、 結果與討論

PMF 輸出中選擇了 6 個因子。分別為溶劑使用(26.59%)、燃煤發電廠(9.06%)、車輛尾氣(16.25%)、工業燃燒(16.26%)、石化排放(9.91%)以及老化氣團(21.92%)。

因子 1 溶劑使用中甲苯(84.66%)佔主導地位，其次是間,對二甲苯(48.44%)和乙苯(36.47%)。這些都是溶劑常見的有機物，乙苯是傢俱油漆排放的主要成分，甲苯和間,對二甲苯是建築塗料的特徵化合物(Chen et al., 2019)。因子 2 乙烯(76.73%)為燃煤電廠煙道排氣中含量最多的化合物(Yang et al., 2016)。因子 3 車輛尾氣中含有高百分比的 $C_3 \sim C_5$ 烷烴，例如：正戊烷(97.47%)、異丁烷(42.35%)、正己烷(38.76%)和丙烷(26.27%)，烷烴已被認為是車輛的恆定排放物(Hsu et al., 2018, Hui et al., 2018, Chen et al., 2019)。因子 4 工業燃燒含有高比例的乙炔(93.66%)，乙炔是常見的燃燒源的指標(Liu et al., 2020)。因子 5 石化排放含有高百分比的丙烯(89.98%)主要來自石油裂解的副產物，是石化工業的主要原料(Chen et al., 2019)。乙烷(61.40%)和丙烷(19.74%)屬於大氣生命週期較長的物種，其中乙烷在大氣中的化學壽命可達約 2 個月，丙烷約 14 天(Chen et al., 2019)，所以將因子 6 判斷為老化氣團。

CPF 結果顯示污染源大多來自北方及東方，台塑六輕工業園區位於測站的北方，直線距離約 9 公里，鄰近測站東方有兩條主要幹道台 61 線與台 78 線，由此來判斷台塑六輕工業園區對鄰近地區的影響。





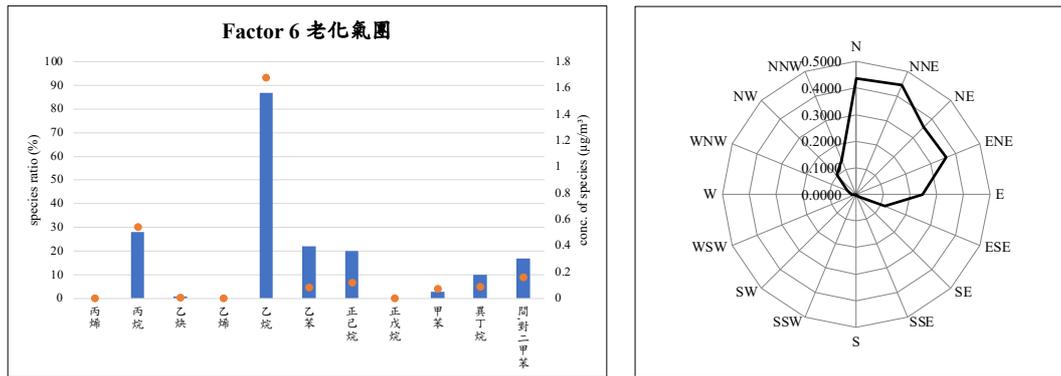


圖 1、PMF 及 CPF 結果(長條圖為物種比例，圓點為物種濃度)

四、結論

本研究顯示當地的主要污染源為溶劑使用(26.59%)、老化氣團(21.92%)、工業燃燒(16.26%)及車輛尾氣(16.25%)。污染源根據來源方向可分為工業污染源及交通污染源，工業污染源來自北方的台塑六輕工業園區，交通污染源則受到東方的台 61 線與台 78 線影響。

五、參考文獻

1. Yan, Y.L., Yang, C., Peng, L., Li, R.M., Bai, H.L., Emission characteristics of volatile organic compounds from coal-, coal gangue-, and biomass-fired power plants in China, *Atmospheric Environment*, 143, 261-269 (2016).
2. Hui, L.R., Liu, X.G., Tan, Q.W., Feng M., An, J.L., Qu, Y., Zhang, Y.H., Jiang, M.Q., Characteristics, source apportionment and contribution of VOCs to ozone formation in Wuhan, Central China, *Atmospheric Environment*, 192, 55-71 (2018).
3. Chen, C.H., Chuang, Y.C., Hsieh, C.C., Lee, C.S., VOC characteristics and source apportionment at a PAMS site near an industrial complex in central Taiwan, *Atmospheric Pollution Research*, 10, 4, 1060-1074 (2019).
4. Liu, Y.F., Song, M.D., Liu, X.G., Zhang, Y.P., Hui, L.R., Kong, L.W., Zhang, Y.Y., Zhang, C., Qu, Y., An, J.L., Ma, D.P., Tan, Q.W., Feng, M., Characterization and sources of volatile organic compounds (VOCs) and their related changes during ozone pollution days in 2016 in Beijing, China, *Environmental Pollution*, 257 (2020).
5. Hsu, C.Y., Wu, P.Y., Chen, Y.C., Chen, P.C., Guo, Y.L., Lin, Y.J., Lin, P.P., An integrated strategy by using long-term monitoring data to identify volatile organic compounds of high concern near petrochemical industrial parks, *Science of the Total Environment*, 821 (2022).