

國立臺灣大學工學院土木工程學系

博士論文

Department of Civil Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Doctoral Dissertation

利用伴隨狀態法耦合水流與傳輸

逆推地下水參數及未知條件

Coupling flow and transport for groundwater parameter and  
unknown condition identification using adjoint state method



Liu, Hung-Jen

指導教授：李天浩、徐年盛 教授

Major Professor: Lee, Tim Hau, Hsu, Nien-Sheng

中華民國 98 年 6 月

Jun. 2009



國立臺灣大學博士學位論文  
口試委員會審定書

利用伴隨狀態法耦合水流與傳輸  
逆推地下水參數及未知條件

Coupling flow and transport for groundwater parameter and  
unknown condition identification

本論文係劉宏仁 (F91521308) 在國立臺灣大學土木工程學系博士班完成之博士學位論文，於民國 98 年 5 月 6 日承下列考試委員審查通過及口試及格，特此證明

口試委員：

李天浩

符年豐

(指導教授)

蔡德

陳主惠

張良正

劉振宇

蔡正雄

系主任

張國鎮

## 誌謝

余致力於學術研究七載有餘，初學懵懂，幸賴恩師李天浩教授與徐年盛教授辛勤指導，每遇壅塞之際給予學生明燈指引，於無涯學海中覓得一份天地，教授們用心至深，萬分感謝。安孺、呈懋、文生、孝忠、德霖、智勇、國展諸位學長姐，於研究過程中，無私的經驗分享與學思交流，一路引領與提攜著我踏上研究的旅途，學長姐用意至深，萬分感謝。

摯友欣懋、宗翰、嘉興、俊宏，一路相伴、談天歡笑、悲喜與共，真誠的關懷給予我無限的溫暖，使苦澀的青春染上繽紛色彩，摯友們用情至深，萬分感謝。文明、佑誠、玉豪、柏凱、耀霖、威名、佑蓉等學弟妹，一同在學術的殿堂下，教學相長、互相扶持，走過了這段研究所的歲月，學弟妹用誠至深，萬分感謝。每一日，家人、表哥與玉樺給我最大的勉勵與鼓舞，伴我度過一個個春夏秋冬，無論起落、無論得失，永遠無條件的支持，使本人永遠陽光進取、奮發向上，家人們用愛至深，萬分感謝。

特別感謝陳主惠老師，對於繁雜的數學不厭其煩地幫助學生一一推導與檢核，使得論文更加完備。最後感謝這些年來所有的研究伙伴們，能與你們相識是我的榮幸。僅以此篇文章獻給各位。

## 摘要

本研究提出一個一般化逆向問題求解方法，結合了地下水模擬模式、伴隨狀態變數法、梯度法與近似牛頓法，在最小誤差平方和的架構下，最佳化估計未知參數、初始條件或邊界條件。應用伴隨狀態法推導所得之伴隨問題是一種對於參數或條件估計錯誤所造成之模擬誤差的描述，藉由狀態變數與伴隨狀態變數的積分，目標函數對應於所有未知數的梯度值可以快速獲得。

本研究以水平二維拘限含水層為考量對象，首先以一個設計過的示蹤劑試驗探討水力傳導係數(K)檢定問題。除了水頭與一階動差觀測外，再加入了地下水流速與示蹤劑零階動差的觀測。貢獻度指標分析結果指出流速僅包含觀測位置 K 的資訊，而水頭與動差則包含了大範圍內 K 值分佈的訊息。

本研究提出不同示蹤劑濃度釋放策略，營造一個隨空間變化的零階動差場，解決零階動差二元分佈問題，且所得之零階動差其對於檢定 K 的貢獻度還高於水頭與一階動差。參數檢定結果發現，水頭觀測資料描述的是地下水等勢能線的分佈，此分佈直接反應參數場大小；動差觀測描述的是流線的分佈，可以表現出流線與流線間 K 值差異與的資訊。

在完整逆向問題的探討上，本研究以一個試驗設計過的抽水實驗配合最佳化演算法，同時估計蓄水係數、導水係數、初始水位、邊界水位與邊界流量。相關性分析結果顯示蓄水係數與初始水位呈高度相關；導水係數與邊界水位、邊界流量皆高度相關，這樣的相關性導致逆向問題成為非唯一解。

觀測貢獻度分析發現抽水實驗初期的非穩態洩降對於蓄水係數與初始條件檢定貢獻度較高，但單一個水位觀測的貢獻度仍小於一；而抽水晚期的穩態水位觀測，則是對於檢定導水係數與邊界條件特別有效。靠近邊界的觀測井對於邊界條件特別敏感，而抽水井的洩降主要貢獻至參數檢定。在觀測充足的狀況下，逆向演算法可有效融合上述這些資訊，使得檢定結果收斂至未知數的真值。

**關鍵字：**地下水模擬、水流與傳輸、參數檢定、完整逆向問題、伴隨狀態變數法、試驗設計、觀測貢獻度、資料融合

## Abstract

In this paper, groundwater simulation models, adjoint state method, gradient search method, and least square algorithm are combined to formulate an efficient optimization approach to solve the groundwater inverse problem. The adjoint state method is used to evaluate effectively the gradient of objective function with respect to parameter or condition.

The horizontal two-dimensional confined aquifer is the research target. First, the parameter identification is discussed through a designed tracer test. Head, flux, zeroth and first moment observations are utilized to estimate hydraulic conductivity( $K$ ) field. The moment observations at different locations contain some indirect trend information of  $K$  field. Next to head observations, they provide additional knowledge useful to parameter identification in groundwater system. Using all three kinds together, the case study demonstrates to elevate the efficiency and accuracy of solution substantially.

Second, the complete inverse problem is taken into consideration. A designed pumping test is performed to simultaneously estimate aquifer parameters, initial condition, and boundary conditions in groundwater modeling. The correlation analysis shows high connection between storage coefficient and initial condition. Besides, transmissivity and boundary conditions are also highly correlated. A time series of unsteady head is needed for storage coefficient and initial condition estimation. The observation near boundary is very effective on boundary condition estimation. The observation at pumping well mostly contributes to the estimation of transmissivity.

**Keywords:** groundwater modeling, flow and transport, parameter identification, complete inverse problem, adjoint state method, experimental design, contribution of observation, data assimilation

## 目錄

口試委員會審定書 .....	I
誌謝 .....	II
中文摘要 .....	III
英文摘要 .....	IV
目錄 .....	V
表目錄 .....	VII
圖目錄 .....	VIII

第一章 緒論 .....	1-1
1.1 問題概述和研究動機 .....	1-1
1.2 文獻回顧 .....	1-3
1.2.1 地下水觀測和試驗設計 .....	1-4
1.2.2 參數檢定 .....	1-8
1.2.3 完整逆向問題 .....	1-10
1.3 研究目標 .....	1-12
1.4 論文架構 .....	1-13

第二章 研究方法論 .....	2-1
2.1 最佳化演算法 .....	2-1
2.2 地下水參數檢定 .....	2-3
2.2.1 地下水水流與示蹤劑動差控制方程式 .....	2-4
2.2.2 目標函數 .....	2-9
2.2.3 伴隨問題 .....	2-10
2.2.4 參數更新方法 .....	2-13
2.3 完整逆向問題 .....	2-15
2.3.1 非穩態地下水水流控制方程式 .....	2-15
2.3.2 目標函數 .....	2-16
2.3.3 伴隨問題 .....	2-17

<b>第三章 參數檢定之案例研究</b> .....	3-1
<b>3.1 試驗設計</b> .....	3-1
<b>3.1.1 案例說明</b> .....	3-2
<b>3.1.2 狀態變數場</b> .....	3-4
<b>3.1.3 初始估計誤差</b> .....	3-9
<b>3.2 貢獻度分析</b> .....	3-12
<b>3.3 伴隨狀態變數場</b> .....	3-20
<b>3.4 檢定結果分析</b> .....	3-24
<b>3.4.1 參數最佳化估計</b> .....	3-24
<b>3.4.2 水位、流速與動差觀測的價值</b> .....	3-27
<b>第四章 完整逆向問題之案例研究</b> .....	4-1
<b>4.1 試驗設計</b> .....	4-1
<b>4.2 敏感度分析</b> .....	4-3
<b>4.3 相關性分析</b> .....	4-4
<b>4.4 貢獻度分析</b> .....	4-6
<b>4.5 可檢定性分析</b> .....	4-8
<b>第五章 總結與建議</b> .....	5-1
<b>5.1 伴隨狀態法</b> .....	5-1
<b>5.2 試驗設計</b> .....	5-2
<b>5.3 參數檢定</b> .....	5-3
<b>5.4 完整逆向問題</b> .....	5-5
<b>參考文獻</b> .....	參-1
<b>附錄 A 地下水參數檢定之伴隨問題推導</b> .....	A-1
<b>附錄 B 參數檢定問題之實際求解過程</b> .....	B-1
<b>附錄 C 完整逆向問題之伴隨問題推導</b> .....	C-1
<b>簡歷</b>	



## 表目錄

表 3.1 含水層真實參數場 .....	3-3
表 3.2 OSSE 觀測資料 .....	3-12
表 3.3 觀測精度與要求之參數精度 .....	3-14
表 3.4 水位、流速與動差觀測對於檢定 $K_1$ 的貢獻度指標 .....	3-18
表 3.5 水位、流速與動差觀測對於檢定 $K_2$ 的貢獻度指標 .....	3-19
表 3.6 不同觀測資料組合下之最佳參數估計結果 .....	3-25
表 3.7 單一觀測資料下之參數最佳估計值結果 .....	3-28
表 4.1 參數、初始與邊界條件之相關性矩陣 .....	4-5
表 4.2 觀測精度與要求之參數、初始與邊界條件精度 .....	4-6
表 4.3 不同觀測組合下之最佳估計結果 .....	4-8
表 4.4 不同未知數設定下之最佳估計結果 .....	4-9



## 圖目錄

圖 2.1 地下水一般化逆向問題求解流程圖 .....	2-2
圖 2.2 參數最佳化搜尋過程圖 .....	2-15
圖 3.1 虛擬拘限含水層俯視圖 .....	3-3
圖 3.2 真實地下水水位與流速分布場 .....	3-5
圖 3.3 真實零階動差分布場 .....	3-6
圖 3.4 真實一階動差分布場 .....	3-8
圖 3.5 初始參數估計所造成之水頭與流速誤差分布圖 .....	3-9
圖 3.6 初始參數估計所造成之零階動差誤差分布圖 .....	3-10
圖 3.7 初始參數估計所造成之一階動差誤差分布圖 .....	3-11
圖 3.8 觀測 $H(60,15)$ 對於檢定各個計算節點 $K$ 值的貢獻度分布圖 .....	3-14
圖 3.9 觀測 $q(60,45)$ 對於檢定各個計算節點 $K$ 值的貢獻度分布圖 .....	3-15
圖 3.10 觀測 $m_0(30,45)$ 對於檢定各個計算節點 $K$ 值的貢獻度分布圖 .....	3-16
圖 3.11 觀測 $m_1(90,15)$ 對於檢定各個計算節點 $K$ 值的貢獻度分布圖 .....	3-16
圖 3.12 伴隨一階動差分布圖, $\phi_3 * E10$ .....	3-21
圖 3.13 伴隨零階動差分布圖, $\phi_2$ .....	3-22
圖 3.14 伴隨水頭分布圖, $\phi_1$ .....	3-23
圖 3.15 伴隨流速分布圖, $\phi$ .....	3-23
圖 3.16 參數最佳化過程中不同觀測資料組合下誤差平方和的遞減圖 .....	3-25
圖 3.17 參數最佳化過程中單一觀測資料下誤差平方和的遞減圖 .....	3-27
圖 4.1 虛擬二維拘限含水層示意圖 .....	4-2
圖 4.2 抽水實驗過程之抽水井與監測井之洩降曲線圖 .....	4-3
圖 4.3 水位 $h(30,20)$ 對於參數、初始與邊界條件的敏感度隨時間變化圖 ...	4-3
圖 4.4 水位 $h(10,20)$ 對於參數、初始與邊界條件檢定之貢獻度隨時間變化圖 .....	4-6
圖 4.5 水位 $h(30,20)$ 對於參數、初始與邊界條件檢定之貢獻度隨時間變化圖 .....	4-7
圖 4.6 水位 $h(50,20)$ 對於參數、初始與邊界條件檢定之貢獻度隨時間變化圖 .....	4-7

## 第一章 緒論

### 1.1 問題概述和研究動機

土壤與地下水受到有機物污染的問題近年來在台灣受到關注，如美國無線電公司 (RCA) 有機溶劑污染地下水，中油高雄煉油廠大型油槽及台南縣永華等多個加油站儲油槽洩漏污染事件等。汽油、柴油等石化油品以及三氯乙烯 (TCE)、四氯乙烯 (PCE) 等有機溶劑均屬於微溶於水的非水相液體 (non-aqueous phase liquid, 簡稱 NAPL)，進入到地下含水層中，主要是以未溶解的殘留相 (residual)、自由相 (free product) 與污染池 (NAPL pool) 存在含水層中。由於 NAPL 在地下水系統中的移動，受兩液相的介面力主控，抽出殘留相或自由相，可能需要垂直:水平達 100:1 的水力梯度，現場實際上不可能實施。過去採用抽出處理 (pump and treat) NAPL 污染場址的經驗，停抽後地下水中 NAPL 濃度會回彈 (rebound)；近年許多案例改採圍堵和自然衰減 (Natural Attenuation) 的方法控制。

地下水污染整治或控制的前提，是透過場址特徵調查 (site characterization)，掌握水文地質與污染分布。場址特徵包括：

- 一、**水文地質參數**：地質特徵參數包括含水層地質剖面，如土壤組成、地質分層等；以及水力傳導係數 (hydraulic conductivity)、蓄水係數 (storage coefficient) 與延散係數 (dispersion coefficient) 等。
- 二、**水流特徵**：地下水流動特徵包括地下水水位分布、流向、流速與流量、水文初始條件和邊界條件等。
- 三、**污染特徵**：污染物分布特徵包括液態污染物位置、污染總量、溶解相的污染範圍，污染物的物理化學參數，如吸附係數 (adsorption coefficient)、衰減係數 (decay coefficient) 等。

常用的場址特徵調查方法有鑽井取樣 (core sample)、抽水實驗 (pumping test) 與示蹤劑試驗 (tracer test) 等。近年不同的井中流速量測儀 (borehole flow meter) 技術趨於成熟，可以在水井內直接量測「井中流速」(未必等於地下水流速)。示蹤劑試驗是在水井中直接注入示蹤劑，或在注入井中隨水注入示蹤劑，使其隨地

下水流傳輸；在觀測井處觀察其濃度隨時間變化情形，此濃度歷線又稱為突破曲線（breakthrough curve，簡稱 BTC）。示蹤劑試驗過去多用來估計地下水的延散係數，進年來井際分溶示蹤劑試驗（partitioning inter-well tracer test，簡稱 PITT，Jin et al. 1995）則應用於調查污染場址的 NAPL 總量與分布。試驗方法是利用抽水井與注水井營造一個局部穩態的地下水流場，於注水井注入多種守恆示蹤劑（conservative tracer）與不同分溶係數的示蹤劑（partitioning tracer），取得觀測井和抽水井的突破曲線資料，對於開始注入時間（ $t=0$ ）積分為各階動差（moments），可提供場址污染物分布資訊。

由於 NAPL 分布不均、地文參數空間異質性、水流特徵因地文參數而變；以及上述場址特徵調查方法，或為在平面上的點觀測（如鑽井取樣），或為參數的區域平均值（如抽水試驗），無法透過取樣直接獲得全域、高解析度的特徵值。所以場址特徵調查，除了必須從基本背景資料著手，透過**試驗設計**（experimental design）取得富含資訊的（informative）的調查、觀測資料外；還須配合**地下水模式**（groundwater model），逆向反演各種場址特徵參數。反演場址特徵參數問題可以分為三類：

- 一、**參數檢定**（parameter identification）：「水文地質參數」和「污染特徵參數」不確定，透過遞迴調整參數，使得模式反應逼近調查數據的方式，反演估計未知參數。
- 二、**資料同化**（data assimilation）：「水文地質參數」已知，利用地下水模式反演估計「水流特徵」中不確定的水文初始條件與邊界條件。
- 三、**完整逆向問題**（complete inverse problem）：「水文地質參數」、「水文初始條件」與「邊界條件」同時具有不確定性，利用地下水模式同步遞迴反演推估。

傳統上對於「試驗設計」的認知，是在有限的預算內、對於反演最有助益的空間位置、最短的試驗觀測時間，取得最大化場址特徵值的調查資訊。唯示蹤劑試驗和井中流速等新類型調查資料和配置方法，對於反演場址特徵參數的效益，

並不明朗。James et al. (2000)在四周打入鋼板樁形成不透水條件的 PITT 現場實驗場址，場址大小為  $4.4*3.5*1.7\text{m}^3$ ，為小範圍的污染場址，比較平行和輻射兩種注入井與抽水井的配置，發現所得的示蹤劑動差觀測對參數之敏感度不同。除了井配置外，不同掃瞄範圍、邊界條件和回收條件，都有可能使示蹤劑動差對反演的效益不同，但文獻中可供「試驗設計」參考的方法和案例研究極少；配合反演方法論，完整呈現調查資訊效益的研究付之闕如。

伴隨狀態法 (adjoint state method, 簡稱 ASM) 自 1990 年由 Sun 和 Yeh 提出以後，陸續被應用於水文地質參數檢定問題的求解過程，取代「微小擾動法」 (perturbation method) 計算賈克比矩陣中目標函數對於參數的梯度。相同論文亦提出利用狀態變數與伴隨狀態變數，計算某個別觀測對於某檢定參數敏感度的方法；以及利用參數自然變異的標準偏差，和該觀測誤差標準偏差作標準化後的「貢獻度」 (contribution of observation) 量化指標，來評估該觀測對於檢定不同參數的資訊有效程度。唯文獻中並無呈現伴隨狀態變數對於不同觀測值「貢獻度」影響，並將其與試驗設計結合的研究。

最後，在參數檢定問題中，通常假設只有參數場為未知。實際狀況下，場址的邊界條件未必能完全掌握；若場址範圍較大，初始條件與範圍內的補注量 (或滲漏量) 和抽水量亦可能不確定，這些水文條件不確定性會影響參數檢定結果，理論上參數檢定時必須同時考量參數和水文條件的不確定性，但目前仍未見到求解完整逆向問題的研究。

## 1.2 文獻回顧

本節對於前人研究進行文獻回顧，1.2.1 小節說明現有地下水觀測與試驗設計，1.2.2 小節描述在地下水模擬中對於參數檢定問題，已有的研究方法與成果，由回顧中發現更進一步的問題；1.2.3 小節描述地下水完整逆向問題求解至目前為止的成果，以及後續發展的方向。

### 1.2.1 地下水觀測和試驗設計

透過對於地下水系統的觀測與試驗設計，可以得到場址特徵資訊。早期的現場實驗方法主要有抽水實驗 (pumping test) 與微水實驗 (slug test)，實驗方法是透過抽水使得場址產生一水力梯度 (hydraulic gradient)，此水位差異造成了地下水流動，於抽水井或觀測井觀測水位的變化，利用地下水流模式與達西方程式可估計地層的水文地質參數，這樣的求解方法在 Yeh (1986) 的文章中有一個完整的回顧，所有研究結果皆顯示了水位觀測包含了參數分布場資訊，所以可用於正確檢定水力傳導係數 (hydraulic conductivity,  $K$ )。

Sun and Yeh (1990)除了使用水頭觀測外，同時引入了示蹤劑試驗 (tracer test)，從上游注入井注入示蹤劑後於下游觀測井觀測流經示蹤劑之濃度 (concentration)，將此濃度歷線作為觀測資料，並結合了地下水水流與示蹤劑傳輸兩個偏微分方程，求解逆向問題，估計水力傳導係數的分布。在他們的兩個  $K$  分區的虛擬案例中發現，濃度觀測資料對於水力傳導係數的敏感度高於水頭觀測，此結果顯示了濃度觀測資料在應用於求解地下水逆向問題時，提供了很有意義的資訊。Wagner (1992)、Cheng and Yeh (1992)、Barlebo et al. (1998)、以及 Mayer and Huang (1999)的研究結果也支持了這一項發現，據此他們建議求解逆向問題時同時使用水頭與濃度的觀測資料，可以達到較佳的檢定結果。

但是濃度的觀測資料是一個時間序列 (time series)，在數值模擬與逆向演算上較為耗時，且數值正確性 (accuracy) 易受到離散處理方法的影響，所以後續有人提出將分穩態濃度歷線積分為穩態動差 (moment) 的概念。此概念最早由 Jin et al. (1995)所提出，但一直發展至 Cirpka and Kitanidis (2000)才正式將示蹤劑動差應用於水力傳導係數的檢定問題中。Jin et al. (1995)針對受 NAPL 污染之場址提出了井際分溶示蹤劑試驗 (partitioning inter-well tracer test, 簡稱 PITT), PITT 是一種非破壞性間接量測方法，其試驗方法是利用抽水、注水井形成穩態地下水流場，由注水井處釋放至少一種守恆與一種分溶示蹤劑以掃瞄井間的含水層，於觀測井與抽水井處觀測並記錄示蹤劑濃度變化歷線或又稱為突破曲線

(Breakthrough Curve, 簡稱 BTC)。守恆示蹤劑不與 NAPL 反應，而分溶示蹤劑則會分溶進入 NAPL 中造成傳輸延遲 (retardation)，Jin et al. (1995)將突破曲線對時間取零階及一階動差 (zeroth and first moments) 後，計算示蹤劑的平均到達時間 (mean arrival time)，據以估計場址中之平均 NAPL 殘餘量多寡，到達時間越晚，表示含水層中的污染量越大。

而 Harvey and Gorelick (1995)進一步直接將非穩態的溶質傳輸方程式 (unsteady-state solute transport equation) 對整個時間域做積分，成為穩態的示蹤劑動差方程式 (steady-state tracer moment equation)。依其對時間積分的數量級大小，對濃度積分所得為零階動差；對濃度乘上時間的一次方積分為一階動差；對濃度乘上時間的二次方積分後為二階動差，依此類推。如此積分所得之動差僅在空間中進行變化，而無時間上的變化問題，此舉將示蹤劑傳輸問題減低一個變化維度，更容易求解。他們同時也說明一條完整的突破曲線上無限多個的時間觀測資料可以由其前四個動差，即零階、一階、二階與三階動差 ( $0^{\text{th}}$  to  $3^{\text{rd}}$  moment)，代表了大部分的資訊。零階動差代表了整個突破曲線下方所包含的面積大小，即為累積通過的示蹤劑質量除以觀測位置的流通量；一階動差代表了一個濃度權重過後的示蹤劑到達時間，將其除以零階動差即等於抵達觀測井位的示蹤劑平均到達時間；二階動差與三階動差則分別代表了突破曲線的開展 (spread) 與偏斜 (skewness) 程度，此四個動差適切地描述了整條突破曲線。Harvey and Gorelick (1995)推導出示蹤劑動差方程式，使得後來的研究可以直接使用穩態的動差，解決了非穩態的濃度時間歷線難以使用於逆向問題求解的缺點。

Rubin et al. (1997)推導了一個動差方程式的半解析解 (quasi-analytical solution)，可以快速計算瞬間吸脫附的溶質其在異質性 (heterogeneous) 地層中的傳輸與動差分布情形。他們的研究結果發現，平均的示蹤劑傳輸速度約等於全域流場流速的幾何平均值 (geometric mean)。由於一階動差除上零階動差即代表了示蹤劑的平均到達時間，也代表了示蹤劑傳輸速度的快慢，據此他們建議取一階動差的觀測資料來估計整個水力傳導係數場的平均值，這是第一篇說明了濃度

積分後的動差包含了有意義的水力傳導係數場資訊的文章。

James et al. (2000)採用 Jin et al. (1995)的 PITT 試驗方法，場址四周打入鋼板樁形成不透水封閉流場，於場址中央注入井注入多種示蹤劑，於四周圍空間均勻分布的抽水井處完整回收 (recover) 所有的示蹤劑，記錄其突破曲線後取積分成為動差觀測資料。利用穩態水流與 Harvey and Gorelick (1995)所提出之動差方程式作為模擬模式，取水頭與一階動差作為觀測資料，逆向檢定三維含水層之延遲係數 (retardation factor, R) 分布場。延遲係數與 NAPL 殘餘飽和度為一對一函數，藉此推估得 NAPL 殘留量的空間分布。該研究宣稱其方法也可推估含水層水力傳導係數，唯文中並未呈現其成果。James et al. (2000)也探討了抽水、注水井的設置對於參數檢定的影響，發現 PITT 最先以上游注入下游抽出示蹤劑，對含水層進行水平掃瞄，得到的動差觀測資料對於延遲係數的敏感度比較低。而若改以中央注入四周圍抽出示蹤劑的輻射狀掃瞄，可以得到較為敏感的觀測。所以他們由敏感度分析 (sensitivity analysis) 結果，建議採用輻射狀的抽水、注水井配置。

Cirpka and Kitanidis (2000)是第一個將地下水水流與示蹤劑動差方程式公式化 (formularize) 為一個地下水反向問題，以最佳化求解水力傳導係數場的研究。其實驗方法採用傳統的示蹤劑試驗，在穩態流場中，於上游一水井中注入示蹤劑，於下游多口觀測井處觀測。他們利用地下水水流模式結合示蹤劑動差模式正向模擬示蹤劑於含水層中的傳輸情形，逆向問題則與 James et al. (2000)一樣同時採用了水頭與一階動差作為觀測資料，反演水力傳導係數場的分布。結果發現一階動差對於觀測位置上游一狹窄區段內的水力傳導係數場很敏感，此區段內參數分布的細部特徵可以藉由引入一階動差觀測的方式而加以辨識。但是如果僅僅使用動差觀測而無水頭觀測資料，逆向求解的結果將不穩定 (unstable)，這表示水頭觀測仍是必要的限制條件 (constraint)，而示蹤劑的觀測資料為補充 (complemental) 條件。研究結果也顯示當兩種不一樣的觀測資料同時使用時，由於資訊的增加使得參數檢定的結果比單獨使用者為佳。

在 James et al. (2000)以及 Cirpka and Kitanidis (2000)求解參數檢定問題時，



發現其試驗設計使得在示蹤劑流經區域零階動差為固定常數，在示蹤劑未流經區域零階動差為零的二元 (binary) 狀態；這樣斷然的、不連貫的 (abrupt) 分布，使得後續在計算目標函數對應於未知參數的梯度值時呈劇烈變化，導致零階動差觀測無法應用在逆向問題求解中，Cirpka and Kitanidis (2000)的論文文末即建議針對此點繼續進行研究探討。

另外 Cirpka and Kitanidis (2000)之試驗設計採用傳統的示蹤劑試驗方法，這樣的試驗設計會導致示蹤劑僅掃描了部分含水層，在非完全掃描 (non-fully scanned) 的狀況下，動差的觀測僅僅包含了掃描區域範圍內的資訊，將有限的局部資訊用於推估全域的參數場時，形成了條件不足 (ill-posed) 的問題，這也是另一個導致反演結果不穩定的原因。

Barth and Hill (2005)的研究則是指出突破曲線的動差是一種整合性的資料，相較於單一的濃度觀測來說提供了一種更為強健的 (robust) 資訊，特別適用於敏感度分析與參數檢定的問題。

除了上述普遍使用的水頭與濃度或動差的觀測外，對於地下水系統的參數分布，我們還可透過地下水流速的測量予以瞭解，在固定的水力梯度下，地下水流速越快，表示場址的水力傳導係數越高。傳統上流速觀測相較於水位與濃度觀測而言較為困難，但隨著量測技術的發展，目前已有兩種主要可行的現地量測方法：電磁流速儀 (electromagnetic borehole flowmeter)，可參考 Dinwiddie et al. (1999)與被動流量計 (passive flux meter)，可參考 Basu et al. (2006)。實驗是以分層抽水的方式，量測得到的各個不同深度的流速資料，以反演水力傳導係數的垂直分布，反演過程假設每個深度的含水層在水平方向上為均質 (homogeneous)，K 值僅在垂直方向上有所變化，每個不同的深度量測到的流速資料即代表該深度的平均 K 值資訊。

Zijl (2004)首先嘗試同時使用水頭與流速觀測於逆向估計三維的導水係數分布場，其反演方法採用直接求解參數法 (direct approach)，結果發現新加入的流速觀測資料，使得檢定過程中融合 (assimilate) 了額外的資訊，參數估計結果明

顯變得穩定。然而其所給之虛擬案例依然假設整個地下水流場為均勻流 (uniform flow)，流速到處相同，所以他的研究結果與前人研究相同，都是將觀測流速置於邊界條件上作為限制式使用，而非將場址內觀測得到的流速資料視為觀測資料放入逆向演算邏輯中，所以地下水流速觀測資料中所包含的有用資訊仍然未被引用到地下水逆向問題的求解中。

Wu et al. (2008) 進行沙箱實驗與現地實驗，結果發現地下水流速儀量測所得井中水流向與實際地下水流向相符，但量測所得之井中流速則為實際土壤中平均流速的 3 至 6 倍，相關的研究也顯示了相同的結果，凸顯了地下水流速儀於現地試驗應用的限制性，引用流速資料於參數檢定時需注意此問題。

綜上所述，地下水水頭、示蹤劑動差與地下水流速等這些可以觀測得到的資料，都直接或間接包含了地下水含水層的資訊 (information)，應該同時被使用於參數估計的問題中，以收最佳的反演結果。再者，Jawitz et al. (2003) 發現零到三階動差中又以零階動差與一階動差最具意義，但目前為止，在運移項主控、延散程度很小的示蹤劑試驗中，僅有一階動差被應用於逆向反演水力傳導係數，而零階動差則礙於其二元的分布型態，無法有效地應用，這是有待解決的問題。傳統的示蹤劑試驗，只掃描了局部區域，產生了條件不足的問題，此點可以透過試驗設計進行改善。井際分溶示蹤劑試驗即以抽水與注水井系統使得示蹤劑可以完全掃描整個場址，並且採用空間均勻布置觀測井的方式，取得了足夠多的空間資訊，此試驗方法值得做為參考。

### 1.2.2 參數檢定

對於地下水參數檢定問題的求解，除了給定適當的觀測資料外，還需有一套有效率的演算邏輯，此邏輯中包含了水流與傳輸模擬以及參數的更新。Sun and Yeh (1990) 回顧自 60 年代以來應用伴隨狀態法 (adjoint state method, 簡稱 ASM) 於地下水參數檢定之研究，歸納並提出了系統化的伴隨操作規則 (adjoint operation rules)，使得後續的研究可以依其規則很簡單且快速地由原始的模擬問

題 (simulation problem) 中推導出伴隨問題 (adjoint problem)，求解此伴隨問題即可評估參數估計錯誤對於模擬所得狀態變數之誤差大小的影響。在應用上，只要透過求解一次模擬問題與求解一次伴隨問題，目標函數對應於所有未知參數的梯度值或敏感度就可以同時得到。相較於傳統的擾動法 (perturbation method)，一次變化一個參數值的大小，以求取其梯度，當參數數量很多時，擾動法的計算量會過於龐大，伴隨狀態變數法解決了此一問題，大幅地提升了計算效率，James et al. (2000)以及 Cirpka and Kitanidis (2000)皆應用伴隨狀態法於其逆向演算程序中。

James et al. (1997)利用序率方法 (stochastic approach)，在水文地質參數具有定常性的假設下，利用擾動技巧，以貝氏推估法 (Bayesian Estimator) 計算突破曲線之動差、地下水流速、延遲係數與水力傳導係數的共變異數 (covariance) 及交互共變異數 (cross-covariance)；再藉由空間中某些觀測點的突破曲線觀測資料，推求三維含水層之延遲係數分布場。進一步，James et al. (2000)利用伴隨狀態法改良其目標函數對各參數之敏感度矩陣計算，以空間點突破曲線動差和水頭為狀態變數的方程式，配合高斯牛頓法求解三維地下水流與污染傳輸之反向問題。其方法應用至一個模擬現場的 PITT 試驗，正確估計了的 NAPL 殘留的分布趨勢，但其虛擬案例設定成四周為不透水的全封閉 (closed) 邊界，導致數學上因為缺乏一個水頭參考值而無法計算。這問題在給定內部一參考點的水位之後，獲得解決；但這個已知參考點於後續求解伴隨問題時，卻成為一個無限點源 (point sink/source)，誤差無法正確分布至伴隨狀態變數場，使得梯度值計算錯誤。這些一方面是試驗設計不良的問題，另一方面也是對於伴隨狀態法原理的不瞭解所造成的錯誤，需要由方法的原理以及伴隨狀態變數 (adjoint state variables) 的意義出發進行探討與改善。

Cirpka and Kitanidis (2000)採用了伴隨狀態法及水流與示蹤劑動差模式於水力傳導係數的估計問題上，利用 Kitanidis (1995)所提之半線性地質統計方法逆向求解水力傳導係數場的分布，求解過程中不斷更新參數場，要求其模擬狀態變數

與實際觀測之水頭與一階動差相符。他們的參數場採用地質統計 (geostatistics) 的觀念，呈對數常態 (log-normal) 分布，每一個計算格點上皆有一未知水力傳導係數  $K$ 。逆向推求結果顯示，伴隨狀態法確實可應用於多參數求解問題中，快速且正確地估計目標函數對應於大量未知參數的梯度值，反演所得之參數場可以抓到整個真實分布趨勢以及部分的細部特徵。但由於其示蹤劑僅部分掃瞄了含水層，非全域完整掃瞄，所以應用伴隨狀態法時，僅在局部幾個觀測點有誤差資訊進入，導致估計所得之梯度值正確性降低。

Sun and Yeh (1990) 提出伴隨狀態法的同時，也提出了一個「觀測貢獻度 (contribution of observation)」量化指標，此指標改良了敏感度的計算，先將敏感度乘上參數解析度再除以觀測精度，等於將敏感度做了標準化的動作。若貢獻度指標值大於一，表示在要求的參數解析度下，不同參數數值所造成的狀態變數差異，可以被量測出來，如此該觀測即為有效觀測，可有效用於檢定參數場。此貢獻度指標解決了敏感度分析易受參數本身數值大小影響，往往是參數數值越小者敏感度越高的問題，提供了一個更客觀的評比工具，唯此一指標鮮少被引用於參數檢定的問題中。

總結上述地下水參數檢定的研究成果發現，透過觀測資料的取得，配合地下水模式與伴隨狀態法，確實可有效辨識含水層特徵與參數分布場。進一步的研究應著重在嘗試將更多可觀測到的資料放入參數檢定流程中，配合最佳化演算法將資料整合，以使得資訊最大化；最佳化演算法也必須探究其原理，以增加演算效率，減少檢定的誤差。貢獻度這樣一個有意義的指標應該用來取代傳統的敏感度，以辨識出真正有效的觀測資料，而且可以嘗試將貢獻度分析與上一小節之試驗設計結合，使試驗設計更為完整。

### 1.2.3 完整逆向問題

完整的地下水逆向問題，除了參數場是未知需要檢定外，初始的地下水水位分布與場址四周圍的邊界水位或流入、流出量也是未知的，同樣需要透過最佳化

程序尋找最適合的條件限制。少數幾篇文章探討了參數與邊界條件檢定問題，如 Rubin and Dagan (1988) 利用序率方法 (stochastic method) 分析，發現靠近邊界的水位受邊界條件影響很明顯。若邊界的位置或形式不確定時，他們建議採用開放邊界的形式較為合理，也就是給定其為自由流通的邊界。LaVenue and Pickens (1992) 先分析地下水模式對於何處的參數或邊界水位最為敏感，將這些點位指定為控制點 (pilot point)，針對控制點進行參數與邊界水位檢定，而後其他未知參數場與邊界水位再以克利金法 (kriging approach) 內插得到。Yeh and Mock (1996) 發展一個三階段的參數與邊界條件檢定方法，首先檢定一個全域平均參數值，然後調整邊界條件以降低水頭模擬誤差，最後再微調局部的參數值，使其符合局部地下水位觀測。

Gomez-Hernandez et al. (1997) 以地質統計 (geostatistic) 結合最佳化方法估計導水係數場與邊界條件。Bonilla and Cushman (2000) 研究發現異質性含水層的邊界條件對地下水位計算影響大。Hendricks Franssen and Gomez-Hernandez (2002) 以伴隨狀態法同時檢定了三維實際含水層之水力傳導係數與邊界水位。Brochu and Marcotte (2003) 建議以觀測水位內插至邊界位置上，做為邊界水頭。Sun and Yeh (2007) 提出了一個強健的 (robust) 參數檢定方法，結果顯示檢定所得之最佳參數會隨著模式結構、事前資訊、邊界條件與模式應用目標不同而異。

除了邊界條件外，地下水模式的初始條件也是一個未知的分布場，在一般模式模擬時，都是使用觀測水位內插後即假設為已知給定。Chen and Zhang (2006) 使用了卡門濾波 (Kalman filter)，在逐一時刻演算地下水位的過程中，不斷更新上一時刻的水位。

回顧地下水完整逆向問題的文獻發現，額外考量了邊界條件與初始條件的不確定性後，確實可讓檢定得到的模式比單純檢定參數者為佳。然而，初始條件的影響，初始條件、邊界條件與參數間的關係 (correlation) 以及初始條件的檢定問題皆鮮少有研究探討；更進一步，未知的初始條件、邊界條件與參數場應該同時被檢定，這樣一個完整的逆向問題 (complete inverse problem) 求解到目前為

止還未有人提出有效的方法，而且對於這樣一個複雜問題的試驗設計也未有探討，預料其將比參數檢定之試驗設計更為複雜，需想辦法取得有效的時間與空間之觀測資料。

### 1.3 研究目標

本研究的目標有五點，分點敘述如下：

首先，發展一套可以融合 (assimilate) 水頭、流速、示蹤劑動差，計算效率高，適用於逆向估計地下含水層水力傳導係數場的**參數檢定方法**。選擇包括地下水守恆方程式、達西定率，和不同階示蹤劑動差方程式為控制方程式的模擬模式，狀態變數包含水頭、流速、和各階示蹤劑動差等變數。本研究首創將**地下水流速、示蹤劑零階動差**此二觀測，與水頭觀測、**示蹤劑一階動差**觀測，共同納入目標函數值 (objective function)，探討這四種不同觀測對於地下水參數檢定的貢獻。

其次，選擇**伴隨狀態法**，在穩態流場狀況下，推導包含地下水流速，假設水力傳導係數為未知地下水參數的地下水流，和示蹤劑傳輸動差等變數的伴隨狀態方程式；以及，在非穩態流況下，假設導水係數、蓄水係數等地下水參數，同時初始、邊界兩水文條件亦不確定，推導在這些假設條件下的伴隨方程式。導出目標函數對於各地下水參數、初始條件和邊界條件等未知數的梯度計算式，再結合梯度搜尋法 (gradient search method) 建立逆向反演各不確定參數和條件的最佳化演算方法。

第三，嘗試透過守恆示蹤劑注入、抽取、觀測井和邊界條件的空間配置，進行示蹤劑**試驗設計**，使系統能夠達成五項目標：1.避免所得之示蹤劑零階動差為二元化觀測，期望使零階動差能對檢定參數產生實質資訊；2.示蹤劑能完整掃描整個場址，動差觀測資料可以表現全域所有參數的資訊，同時掃描範圍不隨地下水參數改變；3.示蹤劑能完全面回收，避免從注入井流出示蹤劑的部份流管

(stream tube) 掃描資訊流失；4.部分邊界條件為定水頭邊界條件，以滿足地下水控制方程式的數學穩定性要求；5.部分示蹤劑邊界條件為定動差值條件，以滿足示蹤劑動差控制方程式的數學穩定性要求。

第四，設計**參數檢定**的「觀測系統模擬試驗」(Observing System Simulation Experiment, 簡稱 OSSE) 案例，透過案例呈現伴隨狀態變數所隱含的意義與其如何用於計算「貢獻度」指標，以利設計者理解不同場址調查井位安排下，水頭、流速、示蹤劑動差等觀測，對於不同空間位置檢定參數的「貢獻度」。再利用不同水頭、流速、示蹤劑動差組合，逆向反演地下水參數，驗證不同位置、各種觀測資料對於參數檢定的實際影響。

第五，設計**完整逆向問題**的 OSSE 案例，透過案例分析參數、初始條件與邊界條件間的相關性 (correlation)；利用貢獻度分析尋找可有效用於檢定這些不同型態未知數的時間與空間觀測資料，然後將這些觀測以不同的組合應用在完整的地下水逆向問題求解中，對檢定結果進行分析，討論各個未知數的可檢定性以及方法論的適用性。最後將所有可得的資訊同時使用於參數檢定、參數與邊界條件檢定以及完整的逆向問題求解中，點出參數檢定將不確定的初始條件與邊界條件假設為已知對檢定結果的影響，以及完整逆向問題的重要性。

#### 1.4 論文架構

本論文架構與各章節重點如下：第二章針對地下水逆向問題的求解提出本研究的最佳化方法論，結合模擬模式以及伴隨狀態法，將逆向問題公式化為一目標函數最小化問題。後續將其應用在參數檢定問題以及完整逆向問題中，對所使用的地下水模擬模式、目標函數、伴隨問題、梯度積分式以及參數更新方法做一完整的描述。第三章是參數檢定問題的案例研究，藉由設計好的試驗，驗證最佳化方法的可行性。首先詳細描述試驗設計的整體構想與作法，接著依反向求解過程一一呈現狀態變數場分布、貢獻度指標分析、初始估計誤差、伴隨狀態變數場分布及參數最佳化估計結果，詳細探討最佳化過程中每一個單元環節，並由最佳化

結果揭示各種觀測的價值。第四章是完整逆向問題的初探，以一個簡單的抽水實驗配合上試驗設計，有效收集地下水洩降曲線資料。檢視未知參數、初始條件與邊界條件對於逆向問題求解的影響，並探討這些未知數間彼此的關連性。應用貢獻度指標於辨識有效觀測的時空位置，最後就完整逆向問題的求解結果，顯示出本最佳化方法的適用性。第五章提出本研究過程中主要的發現和貢獻。





## 第二章 研究方法論

本章描述地下水逆向問題求解的方法論，2.1 節先清楚呈現逆向求解的程序，包括未知數的給定、模擬模式與目標函數的計算，以及未知數的迭代更新。2.2 節是將所提之最佳化方法應用於地下水參數檢定問題，詳細描述所使用的控制方程式、邊界條件、目標函數、伴隨問題、梯度計算式與參數更新方法。2.3 節則是將研究方法擴展至完整的逆向問題求解，不僅檢定參數，同時檢定初始條件與邊界條件，此節詳細描述控制方程式、初始條件與邊界條件、其對應之伴隨問題與未知數之梯度計算式以及未知數之更新方法。

### 2.1 最佳化演算法 (Optimization Algorithm)

地下水參數檢定問題的定義是模式參數未知，而有部分的狀態變數觀測資料。反向問題的求解即在尋找最佳的參數場，使得模擬所得狀態變數場與觀測資料相符。此搜尋過程是一個不斷更新 (update) 參數場的過程，更新的方法可分為搜尋法 (search method)、梯度法 (gradient method) 與擬牛頓法 (quasi-Newton method)，更新參數的目的在使得目標函數值，即模擬與觀測之誤差平方和最小。由數學上看，此三種更新方法分別為目標函數的零階、一階與二階近似方程式，最佳化過程即在求使得目標函數為零的解，此解就是真實參數場。

而完整的地下水逆向問題除了上述的模式參數未知以外，初始條件與邊界條件同樣也是未知數，需要以一個有效率的逆向求解程序估計之。於是針對地下水逆向問題之求解，本研究提出一個一般化的 (generalized) 逆向問題求解方法，此方法使用地下水模擬模式進行正向模擬，以模擬與觀測之誤差平方和為目標函數，並應用伴隨狀態法推導所得之伴隨問題與梯度積分式計算目標函數對應於所有未知參數與條件之梯度值，以梯度法或擬牛頓法更新參數場，不斷迭代演算以達最佳未知數估計，此一般化逆向問題求解的流程如圖 2.1 所示。

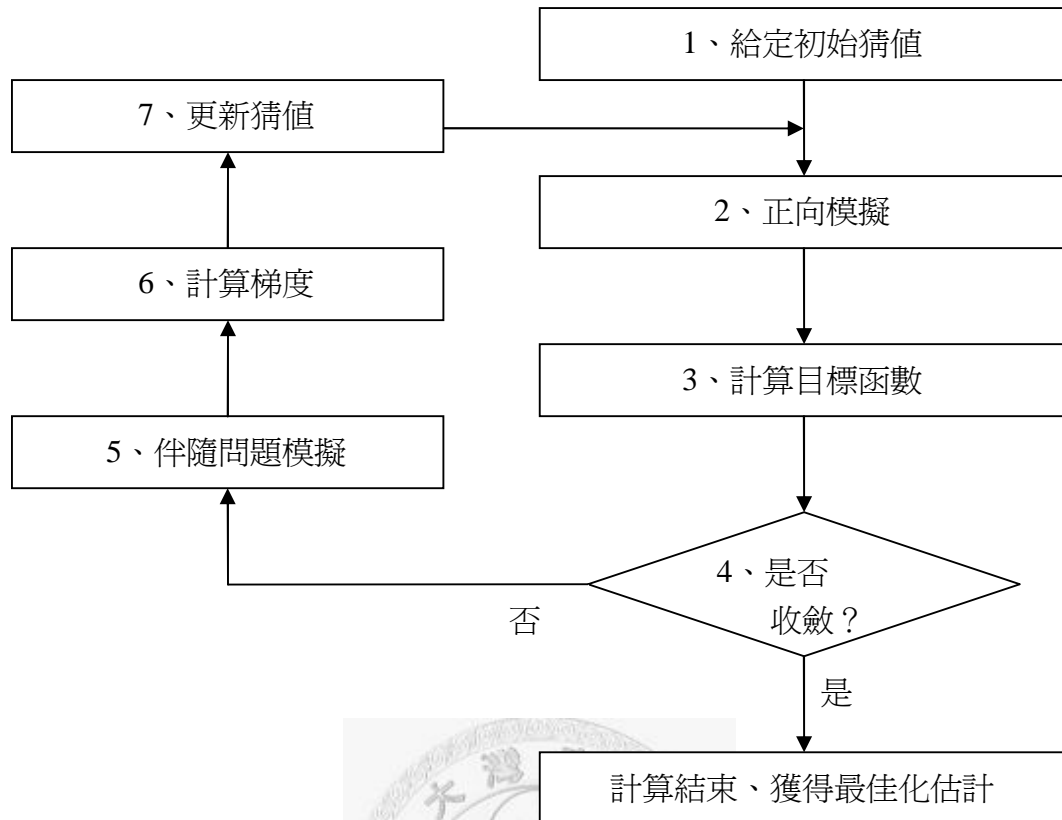


圖 2.1 地下水一般化逆向問題求解流程圖

以下描述最佳化估計所有模式未知數的每個步驟：

步驟 1、**給定初始猜值**：一開始對於所有未知的參數、初始條件或邊界條件給定其初始猜值，此猜值可依據現場初步的量測與實驗或者模式使用者本身的經驗判斷，給定一個值與其合理範圍；此初始猜值只是一個初步估計值，此後會根據最佳化演算法求解其最佳估計值。

步驟 2、**正向模擬**：利用控制方程式、初始條件與邊界條件，在給定的未知數初始猜值下，正向模擬以求解地下水模擬問題（simulation problem），得到模擬狀態變數分布場。

步驟 3、**計算目標函數**：計算全域目標函數，即模擬狀態變數與實際現場觀測的誤差平方和。目標函數是一個具體的量化指標，藉由狀態變數場的誤差評估未知參數與條件的估計誤差。最佳化的過程將不斷調整所有的未知數，使得模擬與觀測越來越接近，目標函數達最小。

步驟 4、**判斷是否收斂**：判斷目標函數值是否小於一給定之容許值（given

tolerance)，容許值由模式使用者本身決定，可以依據量測資料的多寡與精確度給定。如果目標函數已小於容許值，表示模擬與觀測的誤差已降低至可接受範圍內，參數與條件以達最佳化，逆向問題求解完成。

步驟 5、**伴隨問題** (adjoint problem) **模擬**：若目標函數大於容許值，表示未知數估計偏離實際情形，導致模擬狀態變數與實際觀測仍有段差異，此時將這些誤差放入伴隨狀態方程式的源匯項中，配合伴隨邊界條件與終點條件 (final condition)，求解伴隨問題，得伴隨狀態變數場。

步驟 6、**計算梯度**：利用伴隨狀態法推導所得之梯度積分式，此梯度式僅為狀態變數與伴隨狀態變數的函數，將其依各個未知數所代表的時空區域進行積分，即可同時計算在此估計未知數場下目標函數對應於所有未知數的梯度值。

步驟 7、**更新猜值**：將計算所得之梯度值以梯度法或擬牛頓法計算未知數的修正方向，再輔以直線搜尋法 (line search method) 決定最佳的修正步幅，一次更新所有未知的參數、初始條件與邊界條件，使其往真值場步步逼近。

重複步驟 2 至步驟 7，不斷迭代直到滿足收斂門檻，目標函數值小於容許值為止，如此完成了地下水逆向問題的求解，得到最佳的參數、初始條件與邊界條件估計。

上述的最佳化流程，已經將地下水逆向問題給一般化，此流程可適用於地下水參數檢定以及初始條件與邊界條件的估計，最佳的未知數分布可以很有效率地在幾次迭代 (iteration) 搜尋之後完成，使得檢定所得之地下水模擬模式最可以適切的描述實際狀況。以下將就應用目標之不同，分別描述如何將本研究所提之方法論應用於地下水參數檢定與完整的逆向問題求解上。

## 2.2 地下水參數檢定 (Parameter Identification)

對污染場址特徵調查而言，井際分溶示蹤劑試驗以普遍使用於評估現場的污染分布情形，其收集了富含訊息的水頭與動差觀測資料，應不只限定於估計污染分布，而可往回一步檢定地下水模式，使用守恆示蹤劑的動差資料配合水頭觀

測，可以正確估計水力傳導係數。本節描述此一地下水參數檢定問題的求解過程，包含地下水流與示蹤劑動差控制方程式、目標函數、伴隨問題、梯度積分式與參數更新方法。本文中僅呈現重要結果，伴隨狀態法的理論與詳細推導過程置於附錄 A 中。

### 2.2.1 地下水水流與示蹤劑動差控制方程式

關於地下水參數檢定問題，本研究以水平二維等向性拘限地下含水層 (horizontal two-dimensional isotropic and confined aquifer) 為研究對象，探討其水流與示蹤劑傳輸問題，所用到的方程式包括有：連續方程式、達西方程式、傳輸方程式積分後之零階動差方程式與一階動差方程式，分述如下。其中穩態地下水流之控制方程式為：

$$\nabla \cdot (-\underline{\mathbf{q}}) + \frac{Q_{source}}{B} - \frac{Q_{sink}}{B} = 0 \quad (2.1)$$

$$\underline{\mathbf{q}} + K\nabla H = \underline{\mathbf{0}}, \quad (x,y) \in \Omega \quad (2.2)$$

方程式(2.1)為基本之連續方程式，代表了一個拘限含水層中內部水量的增減與其邊界面上的流通量變化相等；方程式(2.2)為達西方程式，此式說明流通量的大小與單位距離的水頭差成正比，其中乘上一個參數水力傳導係數 K，這是一個地下含水層的水文地質參數，此參數越大表示地下水越容易在含水層中流量，反之則流動不易。

而這兩個方程式有其附帶的邊界條件，其通式表示如下：

$$\begin{aligned} H|_{\Gamma_1} &= f_1 \\ -\underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= f_2 \end{aligned} \quad (2.3)$$

其中

$H=H(x,y)$  是壓力水頭 (piezometric head)，單位是長度 [L]

$\underline{\mathbf{q}} = q_x(x,y)\mathbf{i} + q_y(x,y)\mathbf{j}$  是達西流速 (Darcy velocity)，單位是速度 [L/T]

$K=K(x,y)$  即水力傳導係數場，也是速度單位 [L/T]

$B$  是含水層厚度，此處假設含水層厚度均等，為一固定常數值，單位是長度[L]  
 $Q_{sink} = Q_{sink} \delta(x, y)$  是在抽水井位置才有的固定抽水量，為單位時間單位面積的抽  
 出水量，所以單位是長度除以時間[L/T]

$Q_{source} = Q_{source} \delta(x, y)$  是注入井處的注水量，單位是長度除以時間[L/T]

$\Omega$  是整個水流的模擬區域，邊界位於  $\Gamma_1$  與  $\Gamma_2$ ， $\Gamma_1$  是一個給定水頭邊界； $\Gamma_2$  是一個給定流通量的邊界。

$\underline{\mathbf{n}} = \underline{\mathbf{n}}(x, y)$  是  $\Gamma_2$  邊界上的一個垂直於邊界的向外單位法向量。

$f_1 = f_1(x, y)$ 、 $f_2 = f_2(x, y)$  則是用於描述邊界條件的兩個函數。

在拘限含水層中，不考慮吸脫附 (adsorption/desorption) 的非穩態示蹤劑傳輸方程式如下：

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{v}} C) - \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla C) + \frac{Q_{sink}}{B} C = \frac{Q_{source}}{B} C_s \quad (2.4)$$

傳輸方程式(2.4)其附帶的初始條件與邊界條件如下，此處考量實際現場之示蹤劑試驗，實驗前並無任何示蹤劑於含水層中，所以初始濃度為零。

$$\begin{aligned} C &= 0 \text{ on } \Omega, \quad t = 0 \\ C|_{\Gamma_1} &= f_3 \\ \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla C \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= f_4 \end{aligned} \quad (2.5)$$

其中

$C = C(x, y, t)$  是示蹤劑的濃度，其為時間與空間的函數，單位是質量除以體積[M/L<sup>3</sup>]

$C_s = C_s(t)$  是由注入井處所注入之示蹤劑濃度歷線，單位為質量除以體積[M/L<sup>3</sup>]

$\underline{\mathbf{v}} = \underline{\mathbf{v}}(x, y) = u\mathbf{i} + v\mathbf{j} = \frac{q_x}{\theta}\mathbf{i} + \frac{q_y}{\theta}\mathbf{j}$  是孔隙流速，等於達西流速除上孔隙率大小，單位是長度除以時間[L/T]

$f_3 = f_3(x, y)$ 、 $f_4 = f_4(x, y)$  都是已知函數，用於描述邊界條件

$\theta$  是含水層的孔隙率，是一個比例所以沒有單位[ ]

$$\underline{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} \\ D_{yx} & D_{yy} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_T V + (\alpha_L - \alpha_T) u^2 / V & (\alpha_L - \alpha_T) uv / V \\ (\alpha_L - \alpha_T) uv / V & \alpha_T V + (\alpha_L - \alpha_T) v^2 / V \end{bmatrix} \text{ 是水力延散係數}$$

(hydraulic dispersion coefficient)，單位是長度二次方除以時間[L<sup>2</sup>/T]，此處假設分子擴散 (molecular diffusion) 很小可以忽略。其中的速度  $V = \sqrt{u^2 + v^2}$ 、 $\alpha_L$  是縱向延散度(longitudinal dispersivity)是長度單位[L]、 $\alpha_T$  是橫向延散度(transverse dispersivity) 是長度單位[L]， $\alpha_L$  和  $\alpha_T$  皆假設其在研究區域中為一定值常數。

將傳輸方程式以及邊界條件對時間域無窮積分(實際上僅需積分至試驗完成時間即可)，獲得零階動差方程式與其邊界條件。積分完成後，原來的非穩態傳輸模擬模式變為一個穩態的動差模擬模式，其控制方程式與邊界條件如方程式(2.6)、(2.7)所示。

$$\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{v}} m_0) - \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_0) + \frac{Q_{sink}}{B} m_0 = \frac{Q_{source}}{B} t_s C_s \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} m_0|_{\Gamma_1} &= f_5 = t_c f_3 \\ \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_0 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= f_6 = t_c f_4 \end{aligned} \quad (2.7)$$

其中

$m_0 = m_0(x, y) = \int_0^{\infty} C(x, y, t) dt$  是零階動差，是將突破曲線對時間積分，所以單位是濃度乘上時間[T·M/L<sup>3</sup>]

$t_s$  是示蹤劑注入時間[T]

$t_c$  是試驗完成時間[T]

$f_5 = f_5(x, y)$ 、 $f_6 = f_6(x, y)$  皆為已知函數，用於描述邊界條件

由動差的定義可以看出，零階動差代表了整個突破曲線下方所包含的面積大小，即為累積通過的示蹤劑質量除以觀測位置的流通量；其積分範圍從時間零開始至時間為無窮大，如此才能確定示蹤劑以被完全回收，突破曲線以包含完整的場址訊息。實際現場觀測時，是取樣至濃度很小即可停止試驗，將時間離散的瞬間觀測，利用數值積分，可估計得到零階動差的觀測。而濃度取樣頻率需依據突破曲線之斜率變化進行取樣，在斜率變化大的濃度上升段以及濃度下降段，取樣點要多；試驗出奇雨後其較為平緩的濃度變化取樣之時間間隔可以較長，如此才可利用有限的量測資料代表完整的突破曲線，再由數值積分所得之動差才會正

確。

零階動差方程式是由傳輸方程式積分而來，所以其基本形式與傳輸方程式相同，唯其時間項已經被積分掉了。等號右手邊的源匯項代表了注入示蹤劑的多寡，此項會直接影響模擬所得之零階動差大小。零階動差是突破曲線與時間軸包圍而成的面積，在一個運移主控 (advection-dominant) 的穩態地下水流場中 (即擴散作用相對而言較小)，零階動差值在示蹤劑流經範圍 (plume) 內，等於注入示蹤劑質量除以注入速率，也等於注入時間乘以注入濃度 ( $m_0 = t_s C_s$ )，是一個常數值；相反地，在示蹤劑沒有掃瞄過的地方，其零階動差值恆等於零，形成了一個二元的分布型態。Cirpka and Kitanidis (2000) 首先發現這樣一個二元分布行為，這樣的分布只適合用於辨識示蹤劑的流徑，以及劃分參數可檢定的區域，卻無法對於參數檢定提供有意義的資訊。為了解決零階動差資訊不足的問題，本研究提出了一個新的示蹤劑釋放策略 (release strategy)，以巧妙的操作零階動差分布場，使之產生一個空間連續變化的分布形式，如此一方面由於此分布形式與水利傳導係數場分布相關，可增加其所包含的參數場資訊；另一方面連續的零階動差分布場，使得零階動差可以被引入反向問題的求解流程中，其目標函數對應於未知參數的梯度值可以被正確的估計。

一階動差方程式同樣由傳輸方程式推導而來，是將傳輸方程式與邊界條件乘上時間一次方後對無窮時間域積分；而二階動差方程式則是乘上時間二次方後對時間積分，三次、四次動差等依此類推。推導方法可以參考 Harvey and Gorelick (1995) 的文章，裡頭有詳細的方法論、推導流程與模擬結果。本研究直接引用其成果，由於動差方程式已經是穩態方程式了，所以不再帶有初始條件，一階動差方程式與其對應之邊界方程式如下所示：

$$\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{v}} m_1) - \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_1) + \frac{Q_{sink}}{B} m_1 = \frac{Q_{source}}{B} \frac{t_s^2 C_s}{2} + \theta m_0 \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} m_1 |_{\Gamma_1} &= f_7 \\ \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_1 \cdot \underline{\mathbf{n}} |_{\Gamma_2} &= f_8 \end{aligned} \quad (2.9)$$

其中

$m_1 = m_1(x, y) = \int_0^{\infty} Ctdt$  是一階動差，為一個二維空間的狀態變數，單位是時間二次方乘上濃度 [ $T^2 \cdot M/L^3$ ]

$f_1 = f_1(x, y)$ 、 $f_8 = f_8(x, y)$  為已知函數，用於描述邊界條件

一階動差是示蹤劑從注入井到觀測井的抵達時間 (arrival time) 乘上了抵達時的濃度大小作為權重，所以再將一階動差除以零階動差 (所有濃度值總和) 進行正規化 (normalize)，得到了平均抵達時間 (mean arrival time)，這是一個很重要的資訊，他代表示蹤劑於含水層中傳輸的平均速度快慢，平均抵達時間越久則示蹤劑流速越慢，示蹤劑流速又與地下水流速相近，所以也包含了場址的水力傳導係數的資訊。實際現場觀測時，是將觀測所得之濃度變化歷線，乘上其對應之觀測時間與離散之時間間隔，然後累積加總得到一階動差的觀測。

由一階動差方程式(2.8)可以看出，積分完成後，注入的示蹤劑以及零階動差皆以源匯項形式出現在等號的右手邊，實際上所有高階的動差方程式皆包含了比自身低一階的動差於源匯項中，所以在求解高階動差方程式之前，一定要依序求解比其低階的動差。以一階動差為例，首先求解零階動差方程式，再將零階動差場放入一階動差方程式的源匯項中，求解得一階動差分布場。上述四個方程式於實際使用時，是以有限插分法進行離散後，再以 FORTRAN 語言編碼為電腦程式。

動差是濃度對時間積分後的資料，包含了整合性、壓縮的 (lumped) 資訊，比被時間稀釋的 (temporally diluted) 濃度觀測資料更可以反應出水力傳導係數場的變化，所以更適合被使用於參數檢定的問題。而且無論幾階的動差方程式皆為穩態方程式，這些方程式的形式也都一樣，所以相較於非穩態的傳輸方程式而言，其求解容易且精度提高。基於上述的資訊充足性與計算的簡單性，本研究中選擇以穩態的零階動差與一階動差模擬模式取代非穩態的傳輸模式，以更正確的描述示蹤劑的傳輸行為，並提供更有效的觀測資料以逆向推估水力傳導係數場。

此外，在邊界條件的設定上，本研究同時採用了**給定通量** (given flux) 與給



定值 (given value) 這兩種邊界條件，如此在正向模擬時才能正確求解。若邊界條件均為給定通量，則無狀態變數值的限制，其值高低變成相對值而非絕對值；相反地，若全部都是給定值邊界條件，則場址的水力梯度確定但通量卻不知道，則任意的參數場皆可滿足水位觀測，所以在數學上的處理，邊界條件需包含兩種形式。但是此限制可以透過內部計算條件給定的方式進行處理，如在四周為給定水頭的邊界條件下，再額外給定內部一點的抽水或注水量，狀態變數場即可得唯一解；同樣地，若四周都是不透水的邊界條件，也只需給定一個內部點的水頭值，全域的狀態變數場也可解得唯一解。但這樣的處理方法在應用伴隨狀態法時，將面臨發散的問題，而變得不適用，此點將在 2.2.3 小節說明。

## 2.2.2 目標函數

求解地下水逆向問題的最佳化方法，是由一個初始猜測的參數場出發，在此參數場分布下配合水流與動差模式模擬水頭、流速、零階動差與一階動差的空間分布。參數檢定的目標就是透過不斷調整參數分布場，使得模擬結果符合觀測資料，如此才可以確定檢定得到的參數場符合實際現場狀況，為最佳參數。

估計過程中，會設立一個具體的量化指標稱為目標函數，以判斷參數估計之正確與否。此指標乃模式計算值與現場實際觀測值的差異，差異越小表示模擬狀態變數場越正確，也就表示了估計的參數場越正確，參數檢定的過程也就是目標函數最小化的過程。一般選擇以計算值與觀測值之誤差平方和作為目標函數，是一個可微分的二次方程式，分為單一觀測點誤差的局部目標函數  $f$  與所有研究區域內觀測點誤差總和的全域目標函數  $E$ ，計算式如下。

$$\begin{aligned}
 f &= \frac{1}{2} [(H_{com} - H_{obs})^2 + (q_{xcom} - q_{xobs})^2 + (q_{ycom} - q_{yobs})^2 + (m_{0com} - m_{0obs})^2 + (m_{1com} - m_{1obs})^2] \\
 E &= \int f d\Omega \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{x,y} [(H_{com} - H_{obs})^2 + (q_{xcom} - q_{xobs})^2 + (q_{ycom} - q_{yobs})^2 + (m_{0com} - m_{0obs})^2 + (m_{1com} - m_{1obs})^2]
 \end{aligned}
 \tag{2.10}$$

其中  $H_{com}$ 、 $q_{xcom}$ 、 $q_{ycom}$ 、 $m_{0com}$ 、 $m_{1com}$  分別是模式模擬的水頭、x 方向流速、y 方向流速、零階動差與一階動差；而  $H_{obs}$ 、 $q_{xobs}$ 、 $q_{yobs}$ 、 $m_{0obs}$ 、 $m_{1obs}$  則是其相對應的現場觀測資料。

由於此目標函數整合了所有可得的觀測資料，但觀測資料本身數量級不同 (order)，如果直接使用在後續參數檢定時會發現檢定過程由數值最大的一階動差所主控，其他觀測的資訊無法被有效融合，所以上述的觀測資料在用於計算目標函數前需事先經過正規化 (normalized) 使其數值大小相近，將位於零到一之間，如此使得各個狀態變數的收斂速度相近，所有的觀測資訊可以有效的利用。本研究中，水頭觀測資料以初始水頭正規化之；流速觀測以最大流速觀測正規化之；零階動差是以示蹤劑平均注入濃度與試驗時間正規化之；一階動差是以示蹤劑平均注入濃度乘上試驗時間的平方正規化之，正規化後所有觀測資料已成為無因次。

### 2.2.3 伴隨問題

目前為止，模擬模式已架構完成，可以透過數值模擬計算流場與示蹤劑傳輸歷程；目標函數也已設定完成，可以評估模擬結果的好壞；這時只需要有一個可以有效修正參數的演算法即可完成求解地下水反向問題。這個演算法必須可以評估參數估計錯誤對於模擬結果的影響，以正確的計算目標函數對應於未知參數的梯度值 (the gradients of objective function with respect to unknown parameters)，梯度之定義為任意一個參數值的單位變化所造成的目標函數變化大小，此一梯度值指示了參數該如何更新。

一般的逆向演算法耗費最多的計算時間在求取這些梯度值，在參數眾多的情況下，將大幅降低演算法的求解效率。為了增進反演的效率，本研究選用 Sun and Yeh (1990) 所提出之伴隨狀態法以加快求解梯度值的速度，提升最佳化方法的效率。伴隨狀態法基本作法是將原本的模擬問題 (simulation problem) 取變分，經

過一系列數學推導得出其伴隨問題 (adjoint problem)，此伴隨問題一樣包含了控制方程式與邊界條件，且其形式與模擬問題相似，易於使用相同數值程式求解。最重要的是，推導結果可以得到一個目標函數對應於所有未知參數的梯度表示式，此式僅為狀態變數與伴隨狀態變數的函數，過程中只需求解一次模擬問題與一次伴隨問題，配合此梯度式即可同時求得所有未知參數的梯度值，大幅提昇了計算效率。在此我們選用伴隨狀態法，將其應用於耦合水流與動差模擬問題，推導其伴隨問題，以及目標函數對應於水力傳導係數的梯度表示式以利後續梯度之計算。類似的推導可以在 James et al. (2000) 和 Cirpka and Kitanidis (2000) 的文章中看到，但是不同於這兩篇文章，本研究不多設額外的假狀態變數 (dummy state variables)，採用一個狀態變數以一個方程式表示，多個方程式連立求解，此法較為直覺且簡單。同時，於本研究的控制方程式中，我們考量了源匯項，使得模式可以模擬實際之示蹤劑試驗，這也是前人研究所沒有的。在水流與傳輸邊界條件的處理上，我們使用了相同的邊界條件形式，即假設均為 Neumann or Dirichlet 形式，一個是限制了邊界上狀態變數值，一個是限制了邊界上的通量，如此可以避免推導結果需進行複雜的邊界轉換，詳細的伴隨狀態法原理與應用及伴隨問題的推導過程請參見附錄 A。以下為推導所得之伴隨問題的控制方程式：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial H} - \nabla \cdot (K \underline{\varphi}) &= 0 \\
\frac{\partial f}{\partial \underline{\mathbf{q}}} + \nabla \varphi_1 + \underline{\varphi} + m_0 \nabla \varphi_2 + m_1 \nabla \varphi_3 &= \underline{\mathbf{0}} \\
\frac{\partial f}{\partial m_0} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_2) + \theta \underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \frac{Q_{sink}}{B} + \varphi_3 \theta &= 0 \\
\frac{\partial f}{\partial m_1} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_3) + \theta \underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \varphi_3 - \varphi_3 \frac{Q_{sink}}{B} &= 0
\end{aligned} \tag{2.11}$$

其中  $\varphi_1$ 、 $\underline{\varphi} = \begin{bmatrix} \varphi_x \\ \varphi_y \end{bmatrix}$ 、 $\varphi_2$  與  $\varphi_3$  是四個引入的伴隨狀態變數；分別對應  $H$ 、 $\underline{\mathbf{q}}$ 、 $m_0$  與

$m_1$  而設立。

$$\frac{\partial f}{\partial H} = H - H_{obs}, \quad \frac{\partial f}{\partial q_x} = q_x - q_{xobs}, \quad \frac{\partial f}{\partial q_y} = q_y - q_{yobs}, \quad \frac{\partial f}{\partial m_0} = m_0 - m_{0obs}, \quad \frac{\partial f}{\partial m_1} = m_1 - m_{1obs} \quad \text{皆}$$

為觀測井處之模擬與觀測狀態變數間的誤差值，伴隨問題將此誤差視為源匯項（sink or source term）處理。

伴隨問題的邊界條件，其數量與模擬問題相當，共有三個限定值與三個限定通量的邊界條件，而且這些邊界條件皆為零，其形式如下。

$$\begin{aligned} \varphi_1|_{\Gamma_1} &= 0, K \underline{\boldsymbol{\varphi}} \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \\ \varphi_2|_{\Gamma_1} &= 0, \nabla \varphi_2 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \\ \varphi_3|_{\Gamma_1} &= 0, \nabla \varphi_3 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

邊界條件皆設為零，這是因為原本的伴隨狀態法假設了所有的狀態變數模擬的誤差來自於參數場估計的誤差，而邊界條件為已知值，不會有任何誤差。（這假設在邊界條件未知時是無法成立的，這情形將於 2.3 節地下水完整逆向問題求解中探討，此處假設邊界條件已知。）

而推導所得目標函數對應於未知水力傳導係數之梯度：

$$\frac{\partial E}{\partial K} = \int \underline{\boldsymbol{\varphi}} \cdot \nabla H d\Omega \quad (2.13)$$

可以發現所得之梯度表示式僅是狀態變數與伴隨狀態變數的積分而已，推導過程假設全域為單一參數，所以積分結果是對全域做積分；如果參數是分區給定者，則積分區域即為各個參數分區；如果是每個計算格點皆給定一個參數者，則積分區域為計算單位面積。如此依據參數代表範圍的大小進行積分，即可一次得到目標函數對應於所有未知參數的梯度值，大幅降低了計算的負擔

（computational burden）。另外，此伴隨狀態變數法推導所得之梯度式，在高次項可以忽略的狀況下，其為無誤差的數學解，數值正確性優於微小擾動法的離散差分表示式。

觀察伴隨問題可以發現，其控制偏微分方程式與邊界條件的形式，和水流與動差模擬問題一模一樣，此結果使得原本被用來求解模擬問題的數值程式也可以用來求解伴隨問題，不需要再額外多寫一套程式。伴隨問題與模擬問題最大一點的不同在於水流的方向，其兩者運移項的符號一個為正一個為負，恰好相反。這樣的差異是有其道理的。因為在正向的水流與傳輸模擬時，誤差會由上游往下游

傳遞而影響到下游計算結果的正確性。所以在進行誤差分析時，這些由上游來的誤差必須透過某個方法讓他合理的往上游逆向分布回去，伴隨問題的控制方程式就是這樣一個逆向演算式，這也就是為何其流向會與模擬問題相反。藉由伴隨控制方程式，模擬與觀測的誤差分布就由伴隨狀態變數場來適切地描述，所以未知參數的修正也可以由狀態變數和伴隨狀態變數的積分值計算得到一個合理的結果。對於異質性 (heterogeneous) 含水層而言，其參數處處不同，也一樣可以使用相同的梯度積分式計算，只是積分區域將針對各個參數所代表的區域積分。所以應用伴隨狀態法，僅需求解一次模擬問題與一次伴隨問題，所有參數的更新梯度可以同時評估完成。後續只需重複更新參數值直到演算法收斂，目標函數值小於容許值為止，即完成了地下水水力傳導係數的最佳估計。

最後，再次強調伴隨問題的邊界條件需包含給定值與給定通量的邊界形式，而且不能以全部給定為通量邊界後再給定內部參考點的方式解除此一限制，因為任何內部點的給定對於伴隨問題來說，都將是一個無限的源匯項，在各個時間中不斷進入或流出伴隨狀態變數場中，使得伴隨狀態變數值發散，計算所得之梯度錯誤。所以對於伴隨問題而言，一定必須只少有一個給定值的邊界與一個給定通量的邊界。

#### 2.2.4 參數更新方法

參數更新的通式表示如下：

$$K_{n+1} = K_n + \lambda d \quad (2.14)$$

其中  $n$  為迭代次數， $\lambda$  是修正步幅， $d$  是修正方向。

方程式(2.14)表示將原本的參數猜值，依據修正方向，增加或減少一個修正步幅後，即可得到新的參數猜值。修正方向的決定有梯度法與擬牛頓法可以選擇，最簡單的梯度法是最陡坡降法 (steepest descent method)，其參數更新方向恰與梯度方向相反，即：

$$d = -g \quad (2.15)$$

其中  $g$  即為剛剛計算得到的參數梯度向量。

但由於最陡坡降法僅是目標函數的一階近似，所以在求解過程中，修正方向有許多重複的情形。當未知數多、參數維度大時的求解效率將大打折扣。擬牛頓法則是以梯度值的一階微分近似二階微分的赫式矩陣（Hessian matrix）

$$H_{n+1} = H_n + \frac{\Delta K_n \Delta K_n^T}{\Delta K_n^T \Delta g_n} - \frac{H_n \Delta g_n \Delta g_n^T H_n}{\Delta g_n^T H_n \Delta g_n} \quad (2.16)$$

其中  $H$  為赫式矩陣， $\Delta K$  是前後兩次參數猜值的差異， $\Delta g$  是前後兩次迭代之梯度值的差異。

擬牛頓法的參數修正方向等於：

$$d = -Hg \quad (2.17)$$

由上式可以看出，此修正方向不只使用了梯度值，而且還包含了梯度的微分，也就是同時考慮了目標函數對應於參數的梯度與曲率資訊，所以此參數更新方法的收斂性普遍較梯度法為佳，可以在少數幾次的迭代後即得到最佳的水力傳導係數估計值。

修正方向有了之後，仍須決定最佳的修正步幅，以更新參數。最常使用的是直線搜尋法，也就是沿著修正方向往前進行直線搜尋，在試誤（trail and error）後得最佳修正步幅，依此更新參數猜值，反覆迭代之後即可得參數最佳估計值，完成地下水參數檢定問題的求解，整體參數最佳化搜尋過程示意如圖 2.2。

上述求解過程是數學形式的描述，而實際上是以電腦程式進行自動化演算，其演算過程與步驟請參考附錄 B。

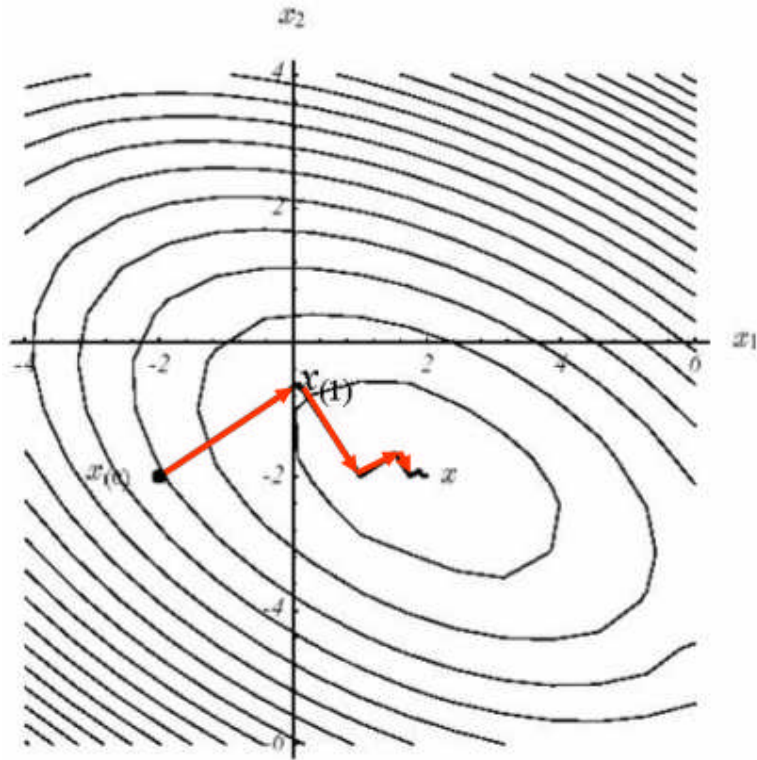


圖 2.2 參數最佳化搜尋過程圖

### 2.3 完整逆向問題 (Complete Inverse Problem)

一個完整的地下水逆向問題，不只有 2.2 節所述的參數檢定，還包含了未知初始條件與邊界條件的檢定。本節描述一個完整逆向問題求解過程中的每一個環節，依序描述非穩態地下水流控制方程式初始條件、邊界條件、目標函數、伴隨問題、梯度積分式與未知數更新方法。本文中僅呈現重要結果，伴隨狀態法的理論與詳細推導過程置於附錄 C 中。

#### 2.3.1 非穩態地下水水流控制方程式

關於完整的逆向問題求解，本研究以水平二維等向性拘限地下含水層為研究對象，探討非穩態(unsteady-state)地下水流動變化情形，其控制方程式(governing equation, GE)與初始條件(initial condition, IC)、邊界條件(boundary condition, BC)為：

$$\begin{aligned}
GE: S \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot (T \nabla h) &= Q \quad x, y \in \Omega, \quad 0 \leq t \leq t_f \\
IC: h|_{t=0} &= f_0 \\
BC: h|_{\Gamma_1} &= f_1, \quad T \nabla h \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = f_2
\end{aligned} \tag{2.18}$$

其中

$h=h(x,y)$ 是壓力水頭 (piezometric head)，單位是長度[L]

$T=T(x,y)$ 即導水係數場 (transmissivity)，是速度乘上長度單位[L<sup>2</sup>/T]

$S=S(x,y)$ 為蓄水係數場 (storage coefficient)，是無因次[ ]

$Q$ 是抽水井處的抽水量，為單位時間單位面積內的水量變化，單位是長度除以時間[L/T]

$f_0=f_0(x,y)$ 是用於描述初始條件的函數。

$t_f$ 是抽水實驗結束的時間

$\Omega$ 是整個水流的模擬區域，邊界位於 $\Gamma_1$ 與 $\Gamma_2$ ， $\Gamma_1$ 是一個給定水頭邊界； $\Gamma_2$ 是一個給定流通量的邊界。

$\underline{\mathbf{n}}=\underline{\mathbf{n}}(x,y)$ 是 $\Gamma_2$ 邊界上的一個垂直於邊界的單位法向量。

$f_1=f_1(x,y)$ ， $f_2=f_2(x,y)$ 則是用於描述邊界條件的兩個函數。

此一方程式在給定抽水量的狀況下，可用於模擬抽水試驗過程中，地下水水位隨時間與空間的變化情形。此數學方程式於後續使用時，是以有限插分法進行離散後，再以 FORTRAN 語言編碼為電腦程式進行數值計算。

### 2.3.2 目標函數

以各個時空位置的模擬水頭與觀測水頭之誤差平方和作為目標函數，局部目標函數  $F$  與全域目標函數  $E$  之計算式如下。

$$\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} (h^{i,j} - h_{obs}^{i,j})^2 \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(t - t_j) \\
E &= \int_0^{t_f} \int_{\Omega} F d\Omega dt = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J (h^{i,j} - h_{obs}^{i,j})^2
\end{aligned} \tag{2.19}$$



其中  $h$  是模式模擬的水頭，而  $h_{obs}$  則是其相對應的現場觀測資料。

### 2.3.3 伴隨問題

依據伴隨狀態法的基本推導方法，本研究將未知數從參數擴展到參數、初始條件與邊界條件，推導過程詳見附錄 C。推導所得之伴隨問題的控制方程式與伴隨終點條件（final condition, FC）與邊界條件如下表示：

$$\begin{aligned}
 GE: S \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (T \nabla \phi) - \frac{\partial F}{\partial h} &= 0 \\
 FC: \phi|_{t_f} &= 0 \\
 BC: \phi|_{\Gamma_1} = 0, \quad T \nabla \phi \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= 0
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

其中  $\phi$  為伴隨著水頭  $h$  而設的伴隨狀態變數。而源匯項  $\frac{\partial F}{\partial h} = h - h_{obs}$  是模擬與觀測狀態變數間的誤差值。

伴隨狀態法將邊界條件與終點條件皆設為零，即假設未知數估計誤差對模擬水位的影響會分布在整個時間與空間計算域中。

推導所得目標函數對應於未知導水係數、蓄水係數、初始水位、邊界水頭與邊界流量之梯度：

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E}{\partial T} &= \iint (\nabla \phi \cdot \nabla h) d\Omega dt \\
 \frac{\partial E}{\partial S} &= \iint \phi \frac{\partial h}{\partial t} d\Omega dt \\
 \frac{\partial E}{\partial f_0} = \frac{\partial E}{\partial h|_{t=0}} &= -\int S \phi|_{t=0} d\Omega \\
 \frac{\partial E}{\partial f_1} = \frac{\partial E}{\partial h|_{\Gamma_1}} &= \iint T \nabla \phi \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma_1 dt \\
 \frac{\partial E}{\partial f_2} = \frac{\partial E}{\partial T \nabla h \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2}} &= -\iint \phi d\Gamma_2 dt
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

梯度表示式與地下水參數檢定問題相似，都是狀態變數與伴隨狀態變數的積分而已，而邊界條件與初始條件的梯度值則是針對邊界位置與一開始的時間進行積分。同樣地，僅需求解一次模擬問題一次伴隨問題，即可得到所有未知參數與條

件的梯度，顯示了伴隨狀態法廣泛的應用性。後續只需重複更新未知數值直到演算法收斂，目標函數值小於容許值為止，即完成了地下水導水係數、蓄水係數、初始水位與邊界水位及邊界流量的最佳估計。未知數更新的方法同 2.2.4 小節所述之參數更新方法，只要將原本的參數梯度向量擴充為未知數梯度向量即可。

截至目前為止，本研究所提一般化逆向問題求解的方法論，其邏輯在數學上的推導是可行的，而後續在第三章與第四章將個別以一個經過設計的案例進行方法論的應用，以探討方法論應用於地下水參數檢定與完整逆向問題的求解上的可行性。



### 第三章 參數檢定之案例研究

本章將以一個設計案例測試研究所提之地下水參數最佳化方法的可行性，並探討參數檢定問題，過程中詳細探討最佳化流程的每一個單元環節。3.1 節闡述地下水參數檢定試驗設計的思維與案例說明，呈現所得之狀態變數場分布，並探討其與參數場間的對應關係，再藉由初始估計誤差，進一步說明因參數估計錯誤所造成之狀態變數誤差分布；3.2 藉由貢獻度指標分析以判定試驗設計所得之觀測資料是否為有效觀測？而後各節依循最佳化演算法的計算步驟，一步步呈現研究結果，包括 3.3 節詳盡探討伴隨狀態變數場分布以及伴隨狀態法的應用原理、3.4 節進行參數最佳化估計，呈現加入新的觀測資料後，可以提升求解耦合水流與傳輸反向問題的效率與參數檢定結果的正確性；最後，藉由不同觀測值的使用，揭示本方法論的可行性以及水頭、流速、零階與一階動差的價值。

本最佳化方法的特點在於使用了所有可得的直接觀測資料，包含水位、流速、零階動差與一階動差，所以提供的資訊是最多的；另外進一步，這些觀測所隱含的資訊被伴隨狀態法適當的描述並整合成一個梯度值，可正確且快速的估計參數場對於模擬誤差的影響，有效率地更新參數估計值。

#### 3.1 試驗設計 (Experimental Design)

為了得到好的參數檢定結果，必須透過試驗設計取得有效的觀測資料。前人研究成果顯示，同濃度的示蹤劑釋放會造成零階動差二元分布的問題，所以本研究提出以**不同濃度**的示蹤劑注入以期形成隨空間變化的零階動差分布場。而動差對於上游處的參數敏感，所以在注入井與抽水井間應隨**空間均勻**布置觀測井。在示蹤劑不完全回收的狀況下，會有資訊流失，造成不完整掃瞄，所以示蹤劑必須全面回收，試驗場址必須是一個**封閉**的狀態；但對於伴隨狀態法而言，四周不透水的條件不適用，所以將水流與傳輸邊界設定為至少有一個是**給定值**形式，並且必須限制其流向只能往場址**內**流動，不可往外流，所以將抽水井設置於靠近給定值邊界但不影響邊界條件的位置。而在示蹤劑部分掃瞄的狀況下，會使得參數檢

定結果不穩定，所以必須進行**完全掃瞄**，注入井的設置要使示蹤劑能流經整個試驗場址。依據上述基本原則，本研究進行示蹤劑試驗設計，此設計適用於中尺度（公尺等級）的現場示蹤劑試驗，具體於下列各小節中描述：3.1.1 小節說明案例設定；3.1.2 小節描述試驗設計下所得到的伴隨狀態變數場，並說明其與參數場間的關係；3.1.3 小節則呈現在給定初始參數猜值下，模擬與觀測的誤差分布，以闡述狀態變數場的誤差與參數估計的誤差有何關連。

### 3.1.1 案例說明

研究以一個水平二維虛擬拘限含水層的逆向問題，測試所提出參數最佳化方法論是否可以如期找到水力傳導係數的真值。圖 3.1 為虛擬拘限含水層的俯視圖，研究場址長 120 米、寬 60 米、厚 10 米，場址內水力傳導係數參數場分布分為兩區，分區範圍如下（案例中所有數值皆使用公制單位表示）：

$$\text{Zone 1: } 0 \leq x \leq 40, 0 \leq y \leq 60 \text{ and } 40 < x \leq 120, 40 < y \leq 60$$

$$\text{Zone 2: } 40 < x \leq 120, 0 \leq y \leq 40$$

其中第一區為高水力傳導係數區  $K_1=8\text{m/day}$ ，第二區為低水力傳導係數區  $K_2=2\text{m/day}$ ，其他的參數：縱向延散度  $\alpha_L=1.0\text{m/day}$ ，橫向延散度  $\alpha_T=0.3\text{m/day}$ ，孔隙率  $\theta=0.5$ 。以上設定視為真實參數場，其值列於表 3.1。

待檢定的參數即為兩區塊的水力傳導係數  $K_1$  與  $K_2$ ，其他參數視為已知。此案例中的參數場特別設計為兩區塊，其中一區塊水力傳導係數高，另一區塊水力傳導係數小，後續將以此案例突顯出水頭、流速、零階動差與一階動差等各種不同的觀測在水力傳導係數檢定中的價值（worth），並探討所應用之伴隨狀態法如何透過伴隨問題的設立，正確地計算目標函數對應於未知參數的梯度。

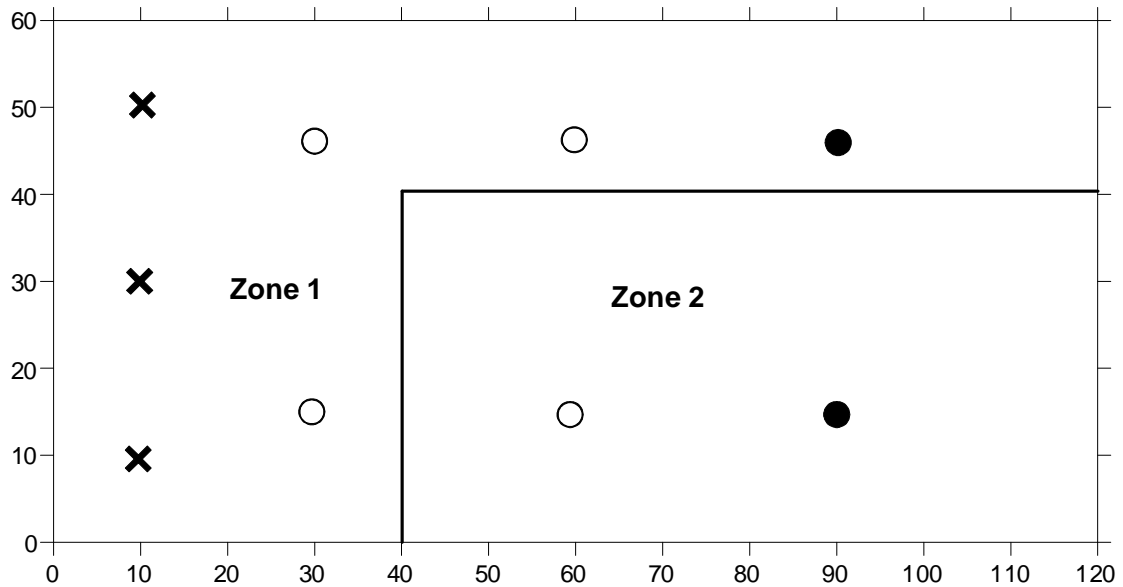


圖 3.1 虛擬拘限含水層俯視圖

表 3.1 含水層真實參數場

Parameter	Zone 1	Zone 2
$K$ (m/day)	8	2
$\alpha_L$ (m/day)	1	1
$\alpha_T$ (m/day)	0.3	0.3
$\theta$	0.5	0.5

含水層四周的邊界條件設定，在上邊界、下邊界與左邊界，即  $y=60$ 、 $y=0$ 、 $x=0$  處，為無流通之不透水 (impervious) 邊界；右邊界，即  $x=120$  處，為一定水頭邊界，水頭固定為 50 米，且邊界上之零階與一階動差都等於零，即無示蹤劑通過此一邊界。有三個注入井 (以叉號表示於圖 3.1 中)，設置於靠近右邊界的上游處，座標分別為 (10,10)、(10,30) 與 (10,50)；兩口抽水井 (以實心黑點表示於圖 3.1 中)，位於下游靠近右邊界，井座標分別是 (90,15) 與 (90,45)。每口注入井有固定注入水量  $Q_{\text{source}}=40\text{m}^3/\text{day}$ ，總注水量為  $120\text{m}^3/\text{day}$ ；每口抽水井固定抽出水量  $Q_{\text{sink}}=120\text{m}^3/\text{day}$ ，總抽水量為  $240\text{m}^3/\text{day}$  為注水量的兩倍。由於上、下、左

邊界為不透水，所以抽水量一半由注水井而來，另一半由右邊界處流入。此抽、注水井與邊界條件的設計，使模擬場址內形成一個穩態流場，如此才能進行示蹤劑試驗的模擬，計算其零階與一階動差；此外，這個流場也是個封閉流場，地下水僅從右邊界流入而無流出，可以保證在示蹤劑試驗過程中，沒有任何示蹤劑跑出研究場址外，所有示蹤劑可由抽水井處抽出回收 (recover)，一方面可以避免污染，另一方面完全回收使得觀測所包含的資訊最為完整。

穩態流場形成後，假設井的儲蓄 (storage) 可以忽略，開始示蹤劑試驗，試驗設計如下：試驗一開始的 0.1 天內，將單一種守恆示蹤劑以不同的濃度注入三口抽水井中，在座標(10,10)的注入井處示蹤劑注入濃度為 5 mg/L、在(10,30)處注入濃度為 10 mg/L、在(10,50)處注入濃度為 15 mg/L。以往的示蹤劑釋放策略，採用單一種且同一濃度的示蹤劑，或者是多種不同的示蹤劑同時放入，但每一種示蹤劑個別的濃度皆相同，只要是注入濃度相同者都會造成文獻回顧中所提及的零階動差呈二元分布問題，所以本研究提出使用單一示蹤劑但以不同濃度於不同注入井注入的示蹤劑釋放策略，正可以解決二元分布問題，形成一個隨空間變化而處處不同的零階動差場，得到比以往都更有意義的觀測資訊，這點會以實際模擬結果進一步說明。

### 3.1.2 狀態變數場

本小節主要呈現模擬狀態變數場的分布，如何反應出不同空間中水力傳導係數的大小，結果顯示在現場參數有明顯趨勢的分布情況下，狀態變數場也會有明顯的高低變化趨勢。

示蹤劑試驗過程，注入的不同濃度示蹤劑隨著穩態地下水流場流動，掃瞄過整個注水井與抽水井間的地層後，從兩口抽水井處被抽出，傳輸過程中於觀測井與抽水井處記錄示蹤劑濃度值，得突破曲線，而後積分得零階與一階動差。由於本研究已事先將傳輸方程式積分為動差方程式，所以直接求解穩態的動差模擬問

題即可得到零階與一階動差，不需先模擬非穩態傳輸模式後再積分得動差，大幅節省計算時間，並提升模擬結果之正確性。四個觀測井（以空心圓圈表示於圖 3.1 中），採用場址均勻佈井方式分別設置於座標(30,15)、(30,45)、(60,15)與(60,45)處。水頭、速度、零階動差與一階動差在兩口抽水井與四口觀測井處被記錄下來，當作觀測系統模擬試驗（Observing System Simulation Experiment，簡稱 OSSE）虛擬產生的觀測資料。此 OSSE 之實際水頭、流速、零階動差與一階動差場分別繪於圖 3.2 至圖 3.4 中，其中虛線表示兩個參數分區の間隔線。

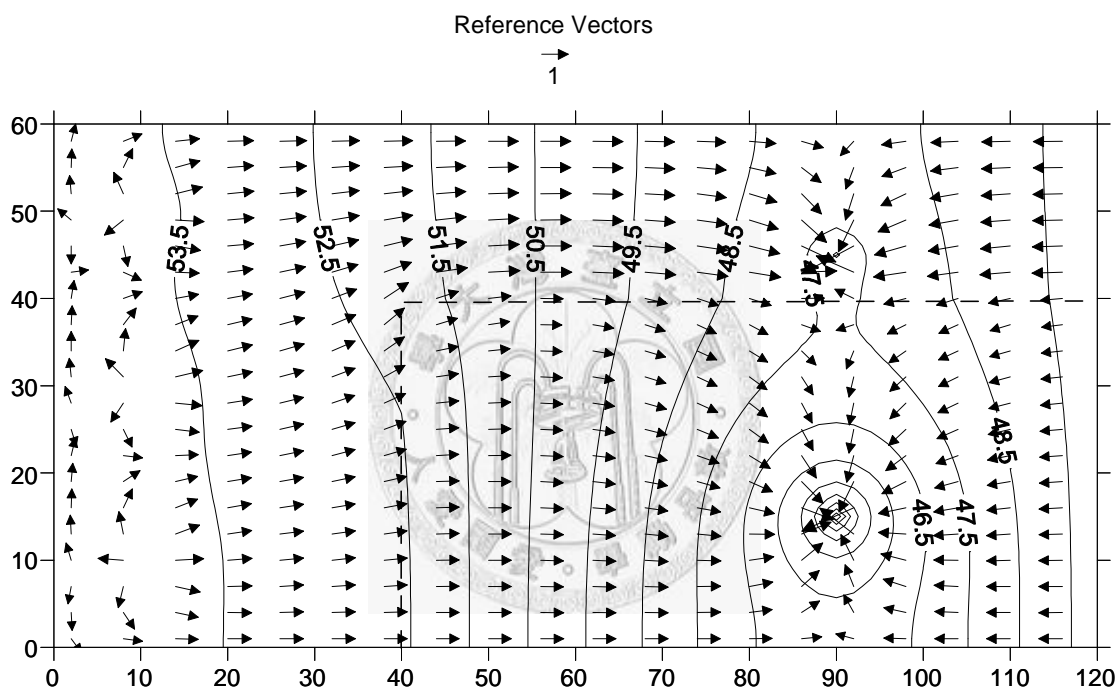


圖 3.2 真實地下水水位與流速分布場

圖 3.2 顯示了地下水流場的分布，包括水頭與流速。可以看到水由注水井與右邊定水頭界處流入，往抽水井方向流動，而後被抽出。如先前所述，此流場使得所有被注入地下含水層的示蹤劑均可由抽水井處回收，沒有示蹤劑從周圍邊界流失，觀測示蹤劑之動差可以提供最多的參數場資訊，提高求解逆向問題結果的正確性。等勢能線在靠近兩抽水井處形成兩個洩降錐，而且第一區的等勢能線密度明顯小於第二區，這是因為在兩抽水井抽水量相同的條件下，為了滿足此一固定大小的抽水量，等勢能線的密度會與水力傳導係數成反比，第一區的水力傳導係數大，所以其水力梯度（單位距離內的水頭差）較小。這也是為何在兩個不同

大小  $K$  的交界處，流線會彎曲，水流繞過水力傳導係數小的區域往較容易透水的區域流動。所以由水頭與流速的觀測，我們可以直接推估參數場的分布情形。

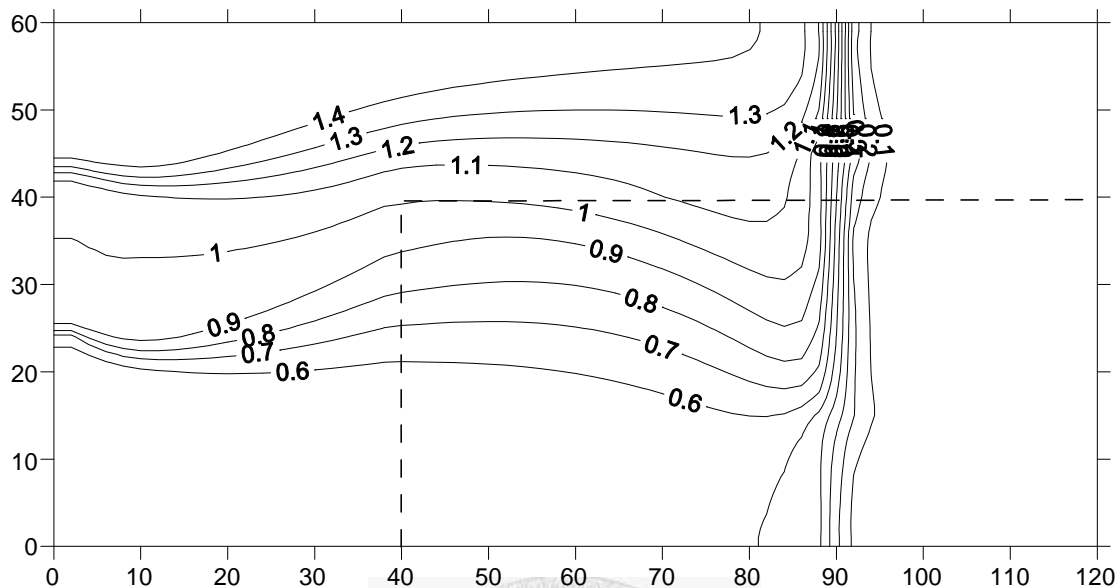


圖 3.3 真實零階動差分布場

為了避免先前所提的零階動差二元分布問題，本研究中將示蹤劑以不同濃度由不同注入井處注入，形成了一個變化的零階動差分布場如圖 3.3 所示。零階動差隨空間位置變化而不同，而且其型態 (pattern) 與流線相符。其原因是因為各個位置的零階動差即代表了通過此點的累積濃度值 (cumulative concentration)，越大量或越高濃度的示蹤劑通過此量測點，觀測所得之零階動差值越大。以往由於不同井注入來源濃度皆相同，導致每條流線所帶之示蹤劑濃度一模一樣，所以零階動差皆為一定值常數 (等於注入時間乘以注入濃度)。本研究乃根據這個基本概念，使得每個注入來源包含不同量的示蹤劑，假設上游有無窮多個注入井，每個注入井的注入示蹤劑濃度皆不同的話，則每一條流線所帶的示蹤劑質量也都不同，而且在這樣一個人為營造的水力梯度流場下，傳輸主要由運移主控

(advection dominant)，延散 (dispersion) 的影響小，流線間溶質的交換較為緩慢，所以量測所得每一條流線上的零階動差皆不同，所以零階動差場可以完全描述流場的分布，也就反應了水文地質參數場的分布。

但是實際上難以達到無窮多個注入井的注入，所以本研究設定一個合理的注



入井數，透過三口注入井三種不同濃度的單一示蹤劑注入，還是可以發現零階動差的分布適切地描述了地下水穩態流線分布，尤其流線在不同 K 分區交接處的彎曲限向，由圖中可以看出被清楚的呈現了出來，所以透過零階動差場的觀察，我們可以瞭解到第二區的 K 值較小。但由於井數較少，可以看出在個別注入井的周圍，零階動差依然維持一個定值，因為這些區域的水與示蹤劑都是由單一井主控，一直要到不同濃度的示蹤劑相接觸的過渡區（transition zone）時，零階動差才開始產生了梯度上的變化。

另外，由於為了形成封閉的流場，以確保所有的示蹤劑都可以由抽水井處回收，所以右邊界給定為定水頭與零動差邊界，地下水只有從右邊界流入，而且不帶有任何示蹤劑，其零階動差為零。此不帶濃度的地下水流至抽水井處與從上游注入井傳輸過來的示蹤劑混合後抽出，所以零階動差場在抽水井處急遽降低，其值約為注入井處平均零階動差的一半。

同時可以發現，在三口注入井的周圍示蹤劑零階動差各為一定值，等於該注入井注入濃度乘上注入時間，這是因為這些區域剛好是三口井各自主控的區域，示蹤劑僅來自一口井單一濃度的貢獻，所以零階動差在此區域內處處相同，無法提供有效資訊。但在進入場址中間區域以後，來自不同井不同濃度的示蹤劑開始混合，所以出現了一個有梯度由上至下漸變的零階動差場，這一段是可以提供最多資訊的觀測位置；如果場址區域過大，則最後所有的示蹤劑濃度混合均勻了，所有零階動差場又將變為一固定常數，零階動差觀測又變為無效觀測了，所以示蹤劑試驗區域範圍在設計試驗時也是該謹慎劃分的。

綜合而言，本研究所提出之變化濃度釋放策略，確實產生了一個隨空間變化的零階動差場，使得零階動差成為有效觀測資料。而且此有一漸變梯度而非二元分布那樣巨變的零階動差場，使得應用梯度法以最佳化估計參數的過程中，得以納入零階動差觀測資料，以取得更多的參數分布資訊。

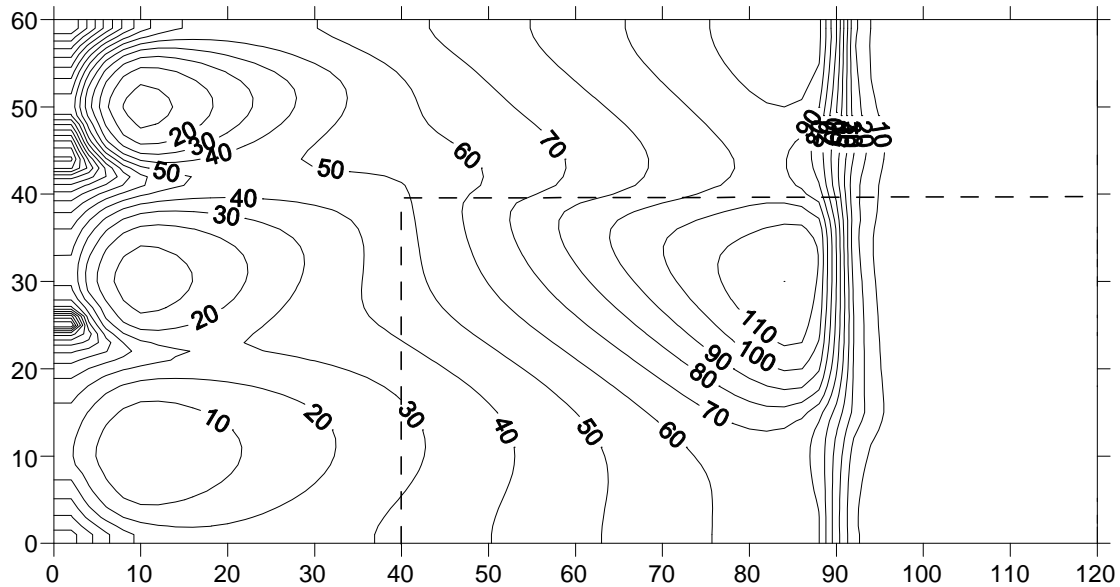


圖 3.4 真實一階動差分布場

一階動差是所有抵達時間乘上示蹤劑濃度的積分，如果注入濃度高，一階動差值自然大，注入濃度以左上方為最高，左下方為最低，所以靠近注入井處，一階動差由上邊界往下邊界處依次遞減。同樣地，如果抵達時間越久或者所經流徑（flow path）越長，一階動差值也會變大，所以從上游往下游走，一階動差逐漸遞增，至抽水井前達其最大值。但在抽水井處由於混合了右邊界所流入之清水，示蹤劑濃度降低，所以一階動差值也變小，在抽水井處皆有明顯遞減，其分布場與零階動差場相同。除了濃度與流徑長短外，從一階動差方程式可以看出，零階動差以一源減項形式出現在等號右邊，所以零階動差大小一樣會影響一階動差的值。既然靠近上邊界的零階動差值比較大，所以上邊界附近的一階動差值普遍較大。

但此處特別注意到，最大的一階動差值發生在第二參數分區內，而且越靠近抽水井，一階動差變大的越明顯，這是因為示蹤劑試驗的後期，第一參數分區內的示蹤劑已大部分被抽出，而第二區內水力傳導係數小水流較慢，低濃度的示蹤劑緩慢的被抽出，使得抵達時間不斷增加，一階動差值也不斷變大，所以觀察一階動差的分布，一樣可以得知水力傳導係數的分布情形。由上述水流與動差模擬結果可以發現，水頭、流速、零階動差與一階動差皆包含了水力傳導係數的資訊，

完整的全域狀態變數觀測即可顯現出參數場的分布情形，但在實際情況下則需以有限的觀測配合模式推估之。

### 3.1.3 初始估計誤差

此小節描述在給定的初始參數猜值下，模擬水位、流速及動差與觀測之間的誤差，會確實反應參數場的高估與低估情形。對於耦合地下水與傳輸的逆向問題而言，參數場是未知的，本研究所發展之最佳化方法即用於估計這些未知的參數值，對此案例而言即為  $K_1$  與  $K_2$ 。首先我們猜測全域為一均質 (homogeneous) 參數場，水力傳導係數為一定值常數等於 5m/day。由於參數估計的錯誤，將導致透過控制方程式與邊界條件計算所得的狀態變數場產生誤差，將模擬所得每一點計算值減去 OSSE 的觀測值，可以得到水頭、流速、零階與一階動差的誤差分布場，分別描繪於圖 3.5 至圖 3.7。繪製這些誤差分布場的目的，是要評估參數數值的高估與低估，如何反應在模擬狀態變數場的誤差中。

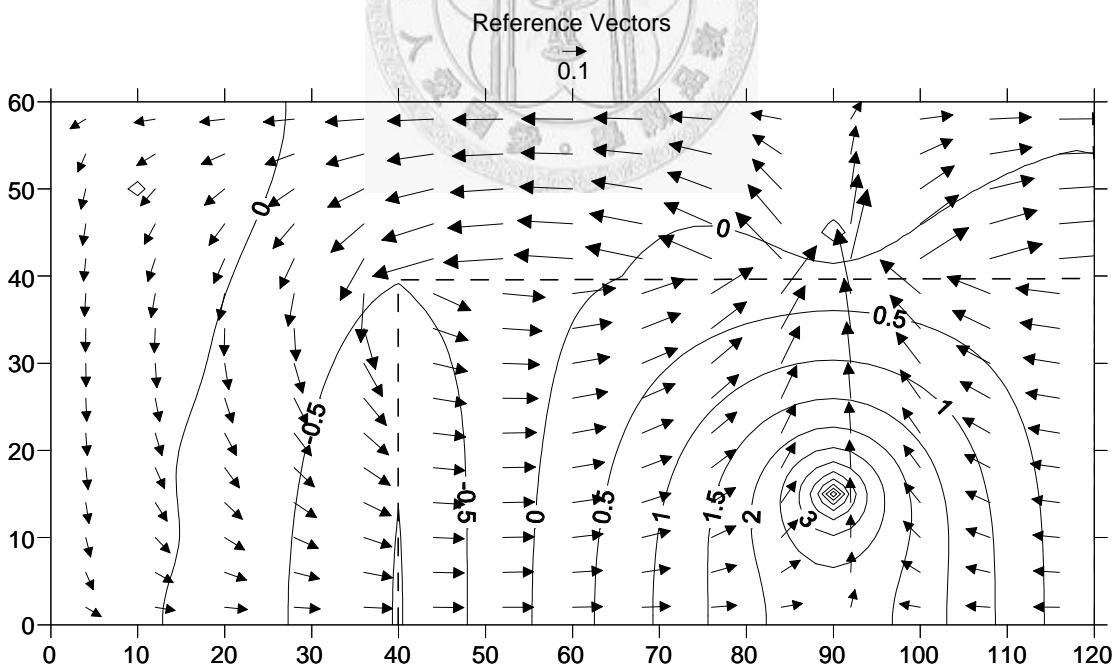


圖 3.5 初始參數估計所造成之水頭與流速誤差分布圖

對於穩態流場而言，抽水量為一固定常數，所以如果參數場中有部分水力傳導係數值被高估 (higher-estimated) 了，如第二參數分區其  $K$  值真值為 2m/day，

初始猜值卻高估成 5m/day，區域二之水力梯度只好降低以維持固定的流通水量，這也表示區域二的水位會變得平緩，水頭會被高估，所以圖 3.5 中區域二內的誤差值大部分為正，越靠近抽水井處高估的越嚴重。相反地，在區域一中的  $K$  值是低估的，所以其計算水頭也會變低，誤差值為負。參數估計的誤差也造成了區域一內的水流變緩慢，而區域二的流速變快。此結果顯示，水頭與流速的誤差分布表現出了參數場估計的錯誤，水頭與流速的觀測提供了水力傳導係數的直接資訊 (direct information)，其關係表示式即為達西定律 (Darcy's law)。

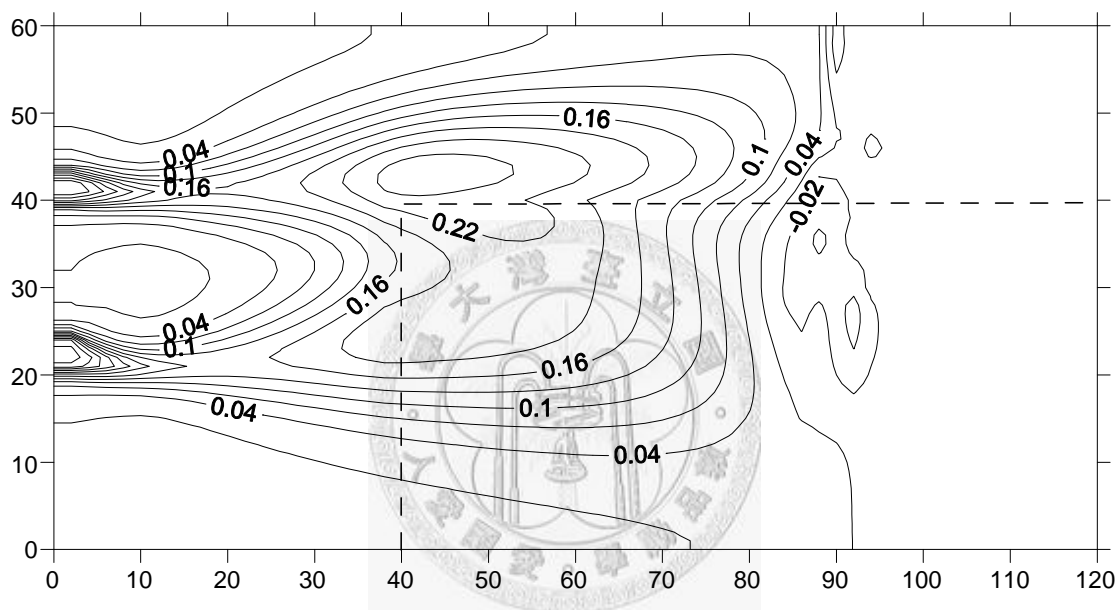


圖 3.6 初始參數估計所造成之零階動差誤差分布圖

由圖 3.6 可以看出，錯誤的參數估計場對應產生了一個非常不同的零階動差場，模擬與觀測之誤差最高達 0.250，為觀測值的 20%，此巨大的誤差發生於流線轉折處。而在靠近注入井處，零階動差大小主要由注入之示蹤劑濃度控制，與參數場較為無關，所以其誤差為零。因為初始參數場為均質場，所以流線大部分成平行分布，而真實流場因地質異質性，流線在參數分區交界處彎曲，所以隨著此彎曲程度模擬的零階動差誤差持續增大，在流線趨於平緩後再漸漸變小。在區域一中的水力傳導係數真值為 8m/day，被低估為 5m/day，導致抽水井處所得之突破曲線變為平緩，使得濃度積分後的零階動差值變大了，模擬值高估。相反地，在區域二的抽水井處由於高估了  $K$  值，使得模擬零階動差被低估。結果顯示了

在不同示蹤劑注入濃度策略下，形成的隨空間變化的零階動差場，的確提供了關於水流狀況以及參數場分布很有意義的資訊。

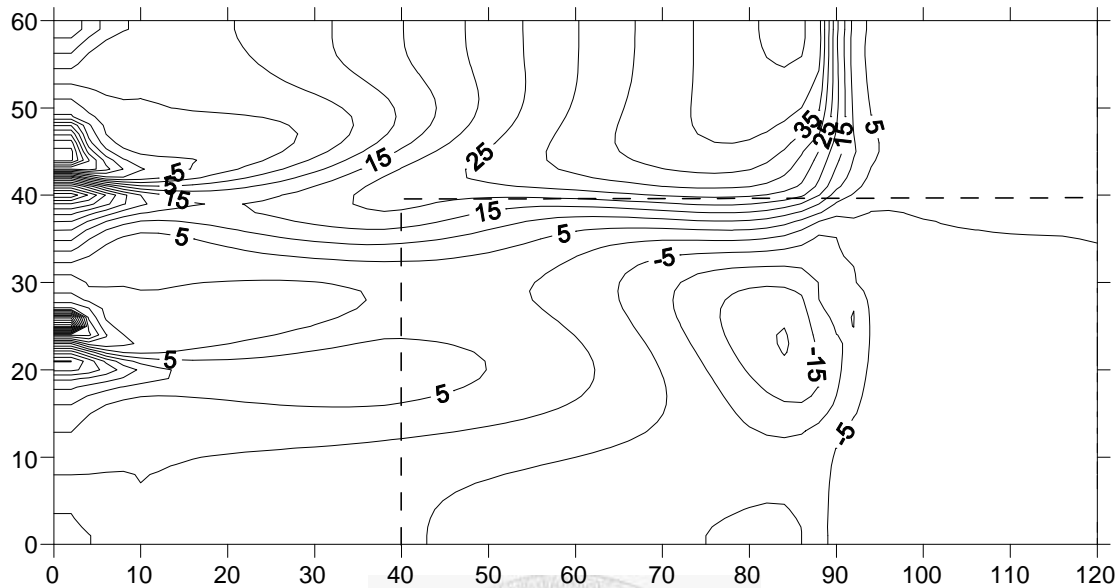


圖 3.7 初始參數估計所造成之一階動差誤差分布圖

圖 3.7 中顯示一階動差場在第二參數分區中被低估了，而在第一參數分區為高估之情形。這是因為分區二的  $K$  值被高估了，導致了流線變為水平而無彎曲，使得流徑變短了，流徑越短則一階動差值越小。而在第一分區中，低估的水力傳導係數使得流徑變長，且由於突破曲線變為平緩，使得濃度乘上時間後的積分值也變大了，最後模擬所得一階動差值較實際觀測為大。這樣的誤差分布情形顯示了一階動差觀測也包含了水力傳導係數場的分布資訊；但不同於水頭與流速與水力傳導係數是直接相關的，從達西方程式中就可以知道參數場對於狀態變數的影響，動差則是以傳輸之後的形式，提供檢定參數場時一種間接的資訊 (indirect information)，這樣的間接資訊可以視為傳輸方程式中孔隙流速  $v$  所引入之流場資訊的呈現，所以在估計水力傳導係數場時，需將水流與傳輸方程式耦合求解，耦合之意義即在於  $K$  值場不僅影響的水頭與流速，也影響了動差的分布場。在本研究中，無論是直接或間接的資訊，水頭、流速、零階動差與一階動差四種不同的觀測資料，將以所提出之最佳化方法論適當地整合，以估計水力傳導係數場。

### 3.2 貢獻度分析 (Contribution analysis)

真正的現場示蹤劑試驗，無法像上面所描述的一樣包含無窮多個觀測點位，實際上可以得到的觀測都是有限且稀少的，所以本案例選擇了四個觀測井與兩個抽水井處的觀測資料作為參數最佳化時所輸入的觀測資料，資料包含所有可觀測之狀態變數，有水頭、流速、零階動差與一階動差，所以一共有  $6 \times 4 = 24$  筆觀測資料，列於表 3.2 之中。

表 3.2 OSSE 觀測資料

Observation location (m,m)	$H_{\text{obs}}$ (m)	$q_{\text{xobs}}$ (m/day)	$q_{\text{yobs}}$ (m/day)	$m_{0\text{obs}}$ (day mg/L)	$m_{1\text{obs}}$ (day <sup>2</sup> mg/L)
(30,15)	53.01	0.66	0.10	0.519	20
(30,45)	52.59	1.00	0.23	1.272	51
(60,15)	49.74	0.58	-0.04	0.542	50
(60,45)	50.08	1.45	-0.04	1.153	72
(90,15)	39.60	-0.01	-0.15	0.346	47
(90,45)	46.35	0.02	-0.62	0.654	54

在進入最佳化邏輯估計參數之前，我們先引用 Yeh and Sun (1990) 所提之「觀測貢獻度 (contribution of observation)」量化指標，評估此 24 筆觀測資料對於檢定水力傳導係數的貢獻度如何，以判斷這些觀測是否為有效觀測，是否可以真正納入最佳化求解程序中，結果顯示了水頭與動差皆有效包含了區域性的參數場資訊。

觀測貢獻度指標計算式如下：

$$CTB(s, K) = \frac{\varepsilon_K}{\sigma_s} \int_D \frac{\partial s}{\partial K} dD \quad (3.1)$$

其中  $s$  代表了任意一個可以被觀測的狀態變數值； $\sigma_s$  是觀測雜訊 (noise) 的標準偏差 (standard deviation) 也就是量測精度 (precision)； $\varepsilon_K$  是水力傳導係數  $K$

估計所要求達到之估計精度； $D_{ij} = \{(x, y) | x \in (x_i, x_i + \Delta x); y \in (y_j, y_j + \Delta y)\}$  是參數分區範圍； $\partial s / \partial K$  是觀測對於參數的敏感度 (sensitivity)，敏感度之定義為任意一個參數變化一個單位所造成之某一個時空狀態變數的變化大小，敏感度之評估方式與梯度之計算相同，同樣使用伴隨問題及推導所得之梯度積分式，不同處在於進行敏感度計算時，目標函數是給定某一個特定空間位置的狀態變數。

整個貢獻度指標的意義即是評估在要求的參數精度  $\varepsilon_K$  下，狀態變數對於參數的敏感度  $\partial s / \partial K$  是否足夠，其對狀態變數之影響是否可以在有限的觀測精度  $\sigma_s$  下被分辨出來。一般的敏感度分析僅考慮敏感度一項，敏感度是參數變化一單位時，狀態變數的變化量多寡，參數可能因為本身數值就小而變得十分敏感。所以貢獻度指標進一步將敏感度乘上參數精度，使得參數的變化大小與其本身的數量級相近。譬如要求水力傳導係數之估計精度達 0.01m/day，計算得到每一觀測水頭對 K 的敏感度為 1m/(1m/day)，所以實際上狀態變數變化的量等於 0.01\*1=0.01m，只有小小的一公分，而非一公尺。

而這參數值 0.01m/day 的差異所造成一公分水位的差異，是否可以被水位計量測出來，取決於水位計的量測精度。如果水位計可達 0.01m 觀測精度，則此變化量可以被觀測得到，此觀測為有效觀測，其貢獻度指標等於 0.01/0.01=1；反之，若水位計僅能達 0.1m 的觀測精度，0.01m 的變化當然無法被辨識，貢獻度指標等於 0.01/0.1=0.1，小於一。結果可以發現，任意觀測值只要其貢獻度指標絕對值大於或等於一者，即為有效觀測資料，應予以採用於反向問題中；如果貢獻度指標絕對值小於一，表示觀測無法提供有效的參數分布場資訊，應多收集額外的觀測資料，以提供更多的資訊。虛擬案例中要求檢定所得水力傳導係數需達精度  $\varepsilon_K = 0.01\text{m/day}$ ，觀測水位精度  $\sigma_h$  可達 0.01m，觀測流速精度  $\sigma_q$  為 0.001m/day，觀測零階動差精度  $\sigma_{m_0} = 0.01 \text{ day} * \text{mg/L}$ ，觀測一階動差精度  $\sigma_{m_1} = 1 \text{ day}^2 * \text{mg/L}$ ，表 3.2 中所列觀測值即依此精度表示，上述所有的精度設定列於表 3.3。

針對四種不同的觀測資料，將其具有代表性的貢獻度指標分布繪於圖 3.8 至

圖 3.11，分別呈現水頭、流速、零階動差與一階動差對於檢定任一節點之參數值的貢獻度。

表 3.3 觀測精度與要求之參數精度

Parameter	Value
$\varepsilon_K$	0.01 m/day
$\sigma_h$	0.01 m
$\sigma_q$	0.001 m/day
$\sigma_{m_0}$	0.01 day mg/L
$\sigma_{m_1}$	1 day <sup>2</sup> mg/L

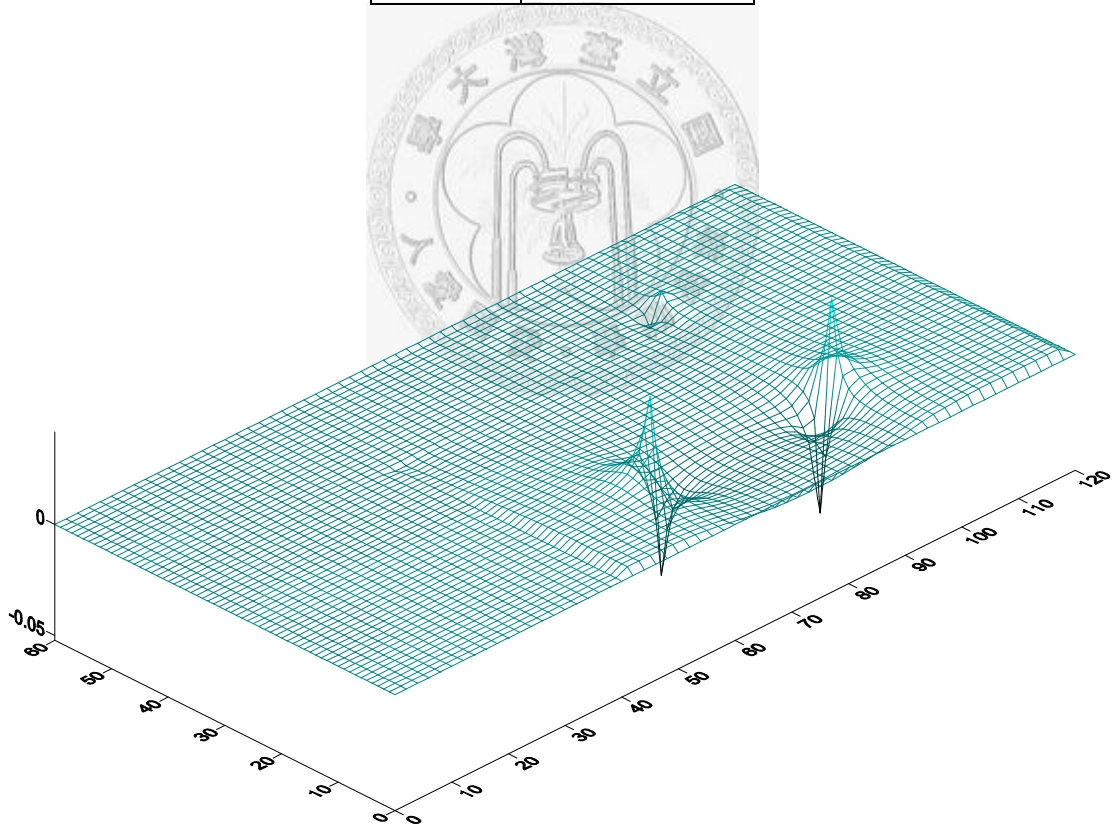


圖 3.8 觀測  $H(60,15)$  對於檢定各個計算節點  $K$  值的貢獻度分布圖

圖 3.8 為座標(60,15)觀測井處觀測所得水位，對於研究區域中所有計算節點  $K$  值檢定的貢獻度分布圖，觀察圖中貢獻度的分布可以發現任意水頭觀測對於其觀測井周圍參數檢定的貢獻度最大，隨著距離增加而逐漸減小，但仍有一定的貢



獻度。此結果符合預期，因為觀測周圍的參數場分布直接關係到計算水頭的高低。

另外觀測水位對於抽水井處的參數場貢獻度也大，顯示在這樣一個人為驅動的地下水流系統中，抽水井處的參數場分布會影響流場的分布形式。圖中也顯示單一點的水位觀測可以貢獻到大面積的水力傳導係數檢定，這是因為水頭的模擬結果受到四面八方的  $K$  值影響，局部節點的參數值變化會改變流場水力梯度的分布，而反應至其周圍與觀測位置的水頭上。

同時可以發現單一觀測水位對於任一節點上的  $K$  值檢定的貢獻度皆小於一，表示難以單一筆觀測資料檢定節點上的參數值，需增加觀測數，或加入他種觀測資料才能有效檢定水力傳導係數場；或者需要將參數場進行分區，以提高觀測的貢獻度。

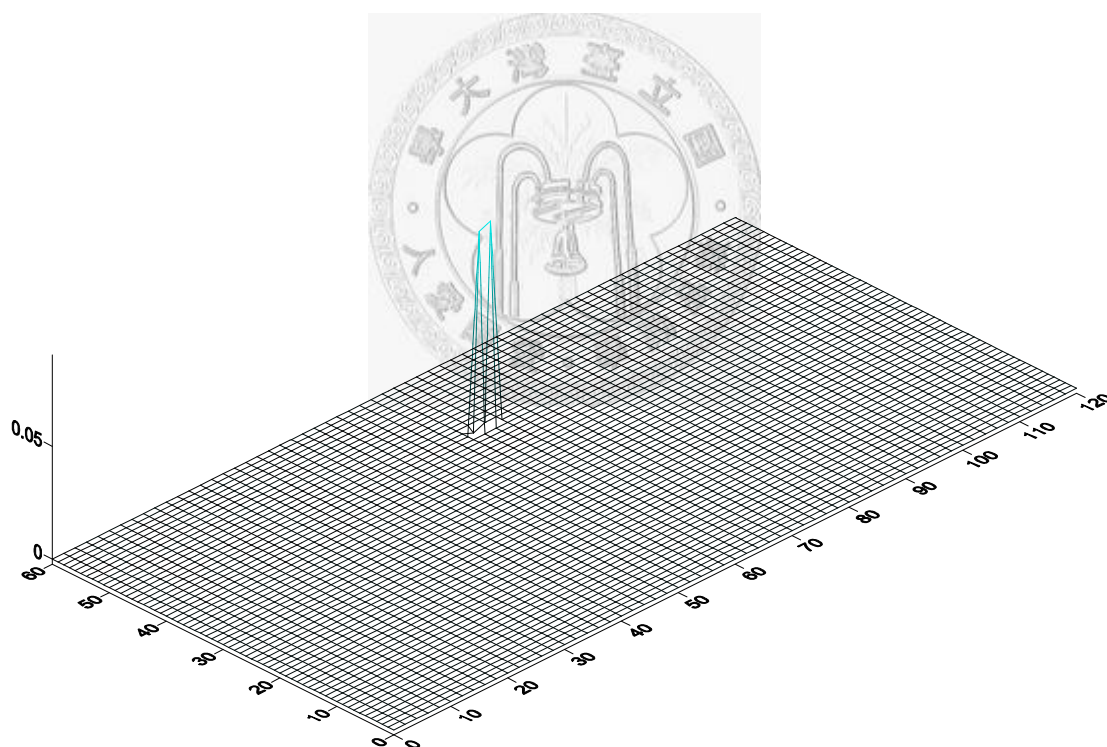


圖 3.9 觀測  $q(60,45)$  對於檢定各個計算節點  $K$  值的貢獻度分布圖

圖 3.9 為觀測位置(60,45)觀測所得流速對於各節點  $K$  值檢定貢獻度分布圖，可以發現流速觀測僅對觀測點及其周圍四點的水力傳導係數值檢定有貢獻，其他節點處貢獻度指標皆為零，這表示了流速只對觀測點位置的水力傳導係數敏感，其所包含的資訊是很狹隘而局部的，可能難以應用於分布式的參數檢定問題中。

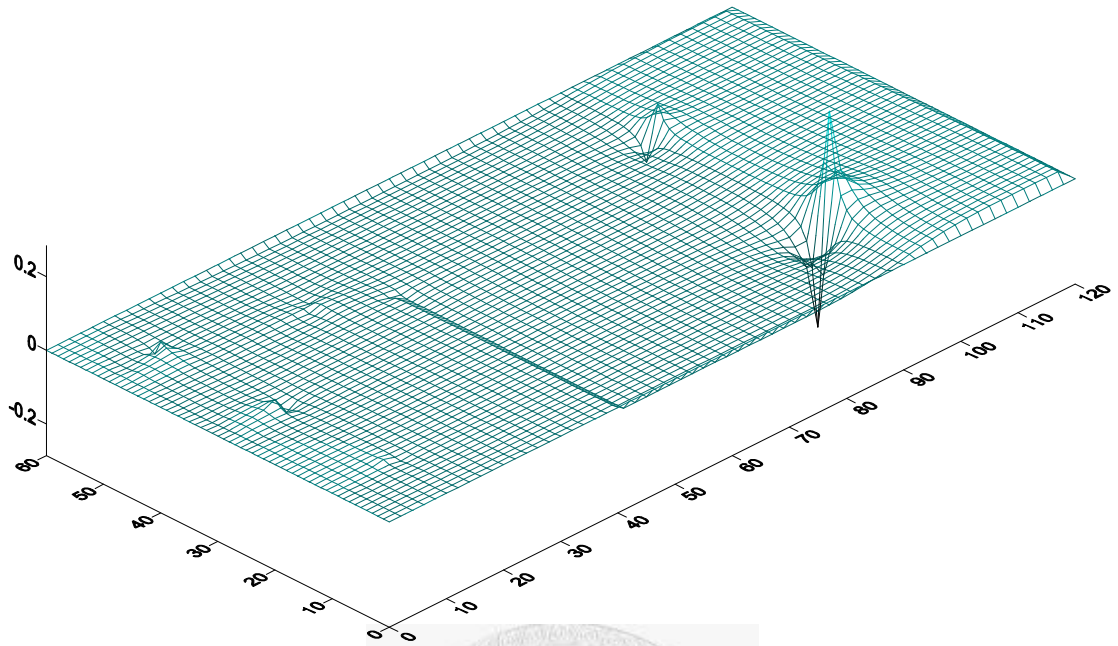


圖 3.10 觀測  $m_0(30,45)$ 對於檢定各個計算節點  $K$  值的貢獻度分布圖

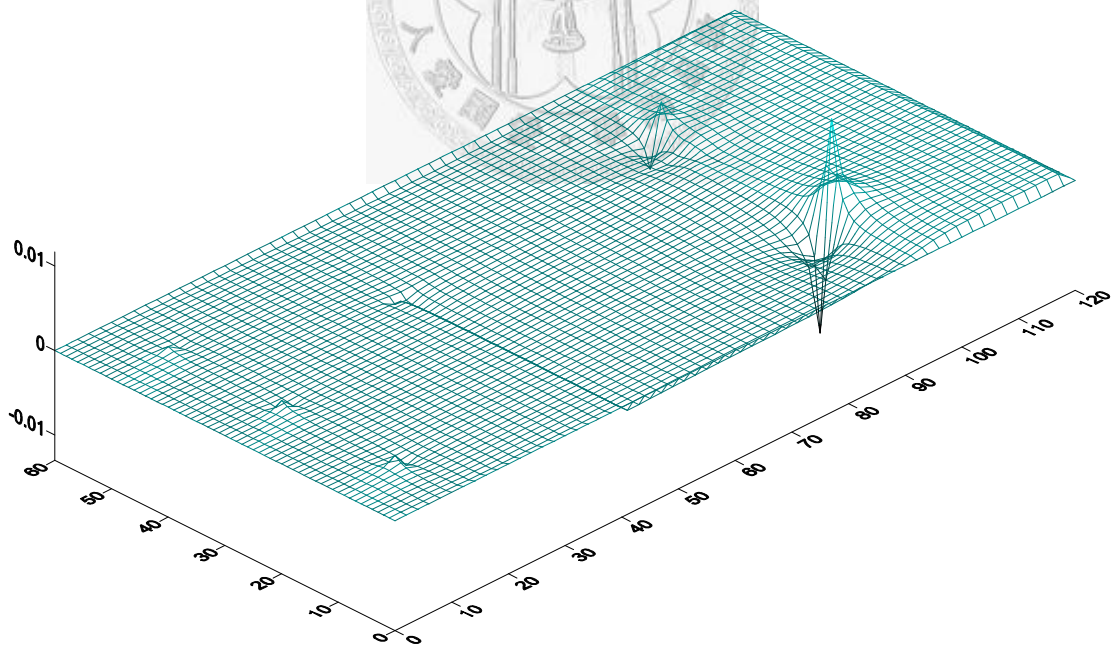


圖 3.11 觀測  $m_1(90,15)$ 對於檢定各個計算節點  $K$  值的貢獻度分布圖

圖 3.10 是空間位置(30,45)處的零階動差觀測值對所有節點參數值檢定的貢獻度指標分布，圖 3.11 是空間位置(90,15)處的一階動差觀測值對所有節點參數

值檢定的貢獻度指標分布，可以看出兩者的分布型態十分相近。與水頭觀測相似，動差觀測也是包含了較廣大區域內的參數場資訊。除了與前人研究發現動差觀測對於觀測位置上游一帶的  $K$  敏感相符外，還有幾點值得注意。在本案例的試驗設計下，動差對於注入井處的  $K$  值檢定有一定程度的貢獻度，這是因為注入井周圍的  $K$  值分布直接影響到後續的示蹤劑傳輸，所以其變化會明顯影響下游動差觀測值，這種特徵 (character) 是沒有在水頭貢獻度指標(圖 3.8)中發現，而僅在動差貢獻度指標中特別發現的。另外一項特點是，不同於以往的研究，由貢獻度分布圖可以發現，動差觀測不僅僅對上游端的  $K$  值有貢獻，對於下游端靠近抽水井處的參數檢定也是有很大的貢獻度。我們推論之所以會有這樣的分布特徵，是因為示蹤劑傳輸受到整個地下水流場影響，而此穩態流場是利用注入井與抽水井系統產生，當抽水井處的  $K$  值改變，如第二參數區塊的  $K$  值變成與第一區塊相同時，所有流線皆成水平分布，所有的零階與一階動差均會與異質性 (heterogeneous) 參數場下的模擬值有很大的不同。結果如圖 3.10 與圖 3.11 所示，動差不僅如前人所說包含上游區域水力傳導係數的資訊，本研究進一步發現，其對下游的  $K$  值檢定也有其貢獻。所以示蹤劑的動差觀測的確是可以做為一種有效的觀測資料，可以放入地下水逆向問題的求解中，以作為相對於水頭以外，一種可以提供有意義的參數場分布資訊的擬合資料。

以上是描述不同觀測資料，各自對哪些區域內節點的水力傳導係數值敏感，結果顯示水頭與動差都是對區域的、大範圍的  $K$  值有一定的貢獻度，而流速卻只對觀測點  $K$  值敏感。本研究將  $K$  值分為兩個參數區，所以我們將同一個參數代表區域內的貢獻度指標相加，即得到了特定點觀測對於檢定區域水力傳導係數  $K_1$  與  $K_2$  的貢獻大小，由此可以看出後續進行參數檢定時，哪些觀測可以視為有效觀測，提供正確的參數分布場資訊。四口觀測井與兩口抽水井處的水位、流速、零階與一階動差觀測對於檢定  $K_1$  的貢獻度指標詳列於表 3.4，而 24 個觀測對於檢定  $K_2$  的貢獻度指標則詳列於表 3.5。

表 3.4 水位、流速與動差觀測對於檢定  $K_1$  的貢獻度指標

Observation location (m,m)	CTB( $h, K_1$ )	CTB( $q, K_1$ )	CTB( $m_0, K_1$ )	CTB( $m_1, K_1$ )
(30,15)	0.46	0.19	0.83	0.28
(30,45)	0.45	0.31	<b>6.95</b>	<b>3.43</b>
(60,15)	0.12	0.00	<b>1.67</b>	0.40
(60,45)	0.02	0.35	<b>3.22</b>	<b>2.18</b>
(90,15)	0.09	0.00	0.18	0.28
(90,45)	0.77	0.15	<b>1.66</b>	0.70

由表 3.4 可以看出，對於  $K_1$  檢定的貢獻度以零階動差最大，一階動差次之，水頭觀測排第三，最沒有貢獻度的是流速觀測資料。此發現符合先前觀測對檢定節點  $K$  的貢獻度指標分析結果，因為水頭與動差觀測皆包含了大面積的參數場資訊，所以雖然對單一節點  $K$  值的貢獻度小於一，但積分後其貢獻度變大，尤其對動差而言許多點的觀測貢獻度指標皆大於一，為有效觀測資料。所以未知參數場並非如地質統計方法所述都可以檢定到每一個節點的  $K$  值，這樣一方面造成過度參數化 (over-parameterization) 的問題，另一方面觀測資料也並非有效觀測，實際上必須依據現場地質分布狀況給定一合理的參數分布型態，檢定有限的幾個參數值，這樣才是對真實參數場最適切的描述。

而且可以觀察到，由於不同濃度釋放策略營造出更有意義的零階動差分布場，使得零階動差對於檢定  $K_1$  的貢獻度提高許多，甚至與一階動差相比，為更有效的觀測資料。這結果表示，零階動差資料是有效觀測資料，應該與一階動差及水頭觀測資料同時使用於逆向地下水參數檢定問題中；至於流速觀測對於區域水力傳導係數並非有效觀測，加入檢定後貢獻度可能很有限。

表 3.5 是觀測對於檢定  $K_2$  的貢獻度，其指標大小與對檢定  $K_1$  的貢獻度相似，也是以零階動差為最大；比較不同的地方是其水頭觀測值對於  $K_2$  檢定貢獻度明顯較大，且有兩處(30,15)與(90,15)觀測貢獻指標有大於一，顯示在此異質性參數

場中，水力傳導係數小者對水頭分布場影響較大。

而由貢獻度大於一的觀測位置看來， $y=45$  處的動差觀測資料普遍對於  $K$  值的檢定有效，水頭觀測則為無效；相反地  $y=15$  處的則以水頭觀測資料對於參數場為有效觀測，動差則為無效觀測，此發現進一步說明了水頭與動差對參數場估計所提供的資訊恰好是互補的 (complementary)，同時使用會有最好的結果。但對於流速觀測而言，無論在哪裡觀測都屬無效觀測。

表 3.5 水位、流速與動差觀測對於檢定  $K_2$  的貢獻度指標

Observation location (m,m)	CTB( $h,K_2$ )	CTB( $q,K_2$ )	CTB( $m_0,K_2$ )	CTB( $m_1,K_2$ )
(30,15)	<b>1.35</b>	0.00	<b>2.11</b>	0.44
(30,45)	0.98	0.00	<b>9.49</b>	<b>5.43</b>
(60,15)	0.49	0.54	<b>4.84</b>	0.64
(60,45)	0.22	0.00	<b>2.62</b>	<b>3.22</b>
(90,15)	<b>9.79</b>	0.16	0.37	0.49
(90,45)	0.39	0.00	<b>2.62</b>	<b>1.06</b>

由貢獻度分析可以初步評估各種不同類型、不同空間位置的觀測資料，對於檢定  $K$  值是否有效，但貢獻度指標大小是一參考值，而非絕對指標。並非指標小於一就無法使用於參數檢定，必須將觀測放入逆向推估參數的邏輯中，由最佳化後的結果進行判斷才更能顯示每筆觀測資料的貢獻。但是如果遇到觀測資料數量眾多時，我們可以事先利用貢獻度分析，將無效的資料先剔除，節省後續的逆向求解計算負擔；或者是根本還無法判定該選擇何種觀測資料時，透過貢獻度指標的計算，也可以選擇指標高者作為觀測資料。

接下來，我們將上面由 OSSE 所虛擬產生的 24 筆水頭、流速、零階與一階動差資料，視為現場實際觀測資料。此資料將放入架構好的參數最佳化程序中，進行反向推估水力傳導係數場。最佳化過程中首先對於未知參數場給定一初始猜值，而後依此給定的參數場以水流與動差模擬各個狀態變數場，此模擬與觀測的

誤差值將放入伴隨問題中求解伴隨狀態變數分布場，而後再計算目標函數對應於未知參數的梯度值，以更新參數，以下將詳細描述這一段過程與所獲得的各項結果。

### 3.3 伴隨狀態變數場

本節敘述伴隨狀態變數的分布，發現其恰巧是模擬誤差的分布場，其分布特徵也顯示了水位、流速與動差所包含之參數場的資訊，因此可以正確地用於評估梯度值。

在計算完參數估計錯誤所造成狀態變數的誤差後，取四個觀測井處與兩個抽水井處的誤差，以源減項形式放入伴隨狀態方程式中，配合伴隨邊界條件求解四個伴隨狀態變數場。這些誤差以點源（point source）的形式進入伴隨狀態變數場後，即依據伴隨問題進行誤差分布，所以伴隨狀態變數可以視為一個誤差分布場，但此分布場與上述的狀態變數誤差分布又不同，他是比較像在描述參數場的誤差分布，此部分後續將進一步論述。

由於水頭、流速、零階動差與一階動差的數量級（order）各不相同，如水頭的數量級是 10 的一次方，而零階動差是 10 的負二次方，相差了一千倍，所以不同觀測資料模擬與觀測誤差值的數量級也是差異甚大，將這樣差異甚大的誤差以相同的源減項形式放入伴隨問題中時，計算結果發現所有的伴隨狀態變數場由一階動差主控，因為他的數量級是 10 的二次方，最大；所有其他種類的觀測誤差相較之下完全不具有任何意義。為了避免這種單一觀測資料數值過大導致主控了計算結果的問題發生，在將誤差放入伴隨問題之前，先將所有的誤差正規化（normalize），使其值相近，皆介於零到一之間，這樣不同的觀測資料才得以有效的融合（assimilate）在一起。正規化方法如下，所有的水頭誤差將除以邊界水頭值，正規化之；流速誤差則是除以最大流速值；零階動差誤差除以注入濃度與試驗時間的乘積；一階動差誤差則是除以濃度以及試驗時間平方的乘積，最後得到不帶有單位的誤差值。

對於地下水流與傳輸模擬問題求解，首先是聯立解連續方程式與水流方程式，得水頭與流速場。據此流場以及零階動差方程式，求解得零階動差場。最後流場與零階動差場置於一階動差方程式中，計算一階動差場。但對於伴隨問題而言，其求解的程序則剛好相反，首先是將正規化後的一階動差誤差值放入一階動差的伴隨方程式，求解得伴隨一階動差場。接著將零階動差的誤差與伴隨一階動差場放入零階動差的伴隨方程式中，計算伴隨零階動差場。而後將水頭誤差、流速誤差、伴隨零階與一階動差，放入伴隨連續方程式與伴隨水流方程式中，聯立求解伴隨水頭場與伴隨流速場，整個求解程序正好與模擬問題相反（reversed）。這樣的反向計算目的即在將求解模擬問題過程中，參數估計誤差導致水頭、流速誤差，在影響零階動差，最後導致一階動差的誤差，全部反向分布。一階動差誤差反向分布後以伴隨一階動差場描述，而後再反向分布於零階動差場，最後是流場，最後這些反向誤差分布場配合推導所得梯度積分式計算得到參數估計的誤差，所以是一層一層將誤差回復至一開始的來源，即參數場的估計錯誤，所以本小節一開始即將伴隨狀態變數場解釋為一種對於參數估計誤差場之描述。伴隨一階動差、伴隨零階動差與伴隨水頭、伴隨流速的分布情形，分別繪於圖 3.12 至圖 3.15。

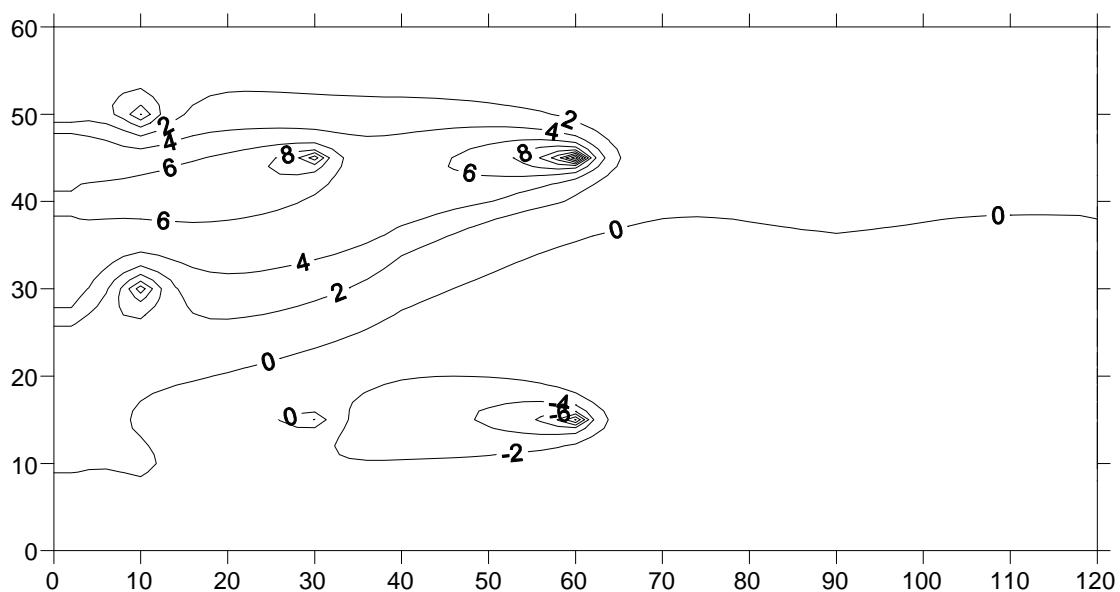


圖 3.12 伴隨一階動差分布圖， $\phi_3 * E10$

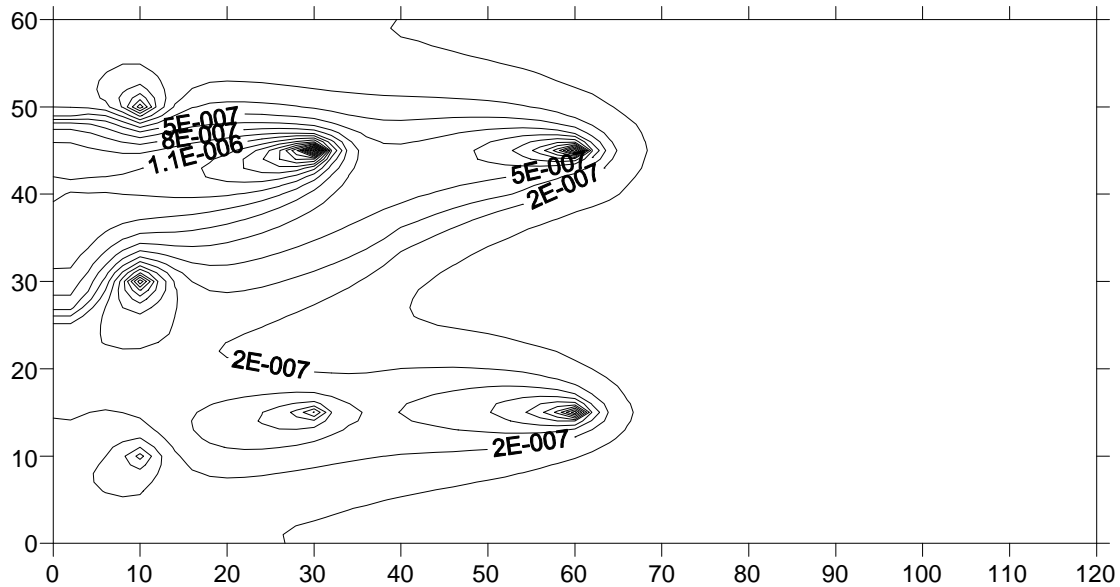


圖 3.13 伴隨零階動差分布圖,  $\phi_2$

圖 3.12 明顯的表示出一階動差的誤差從六個觀測點源處注入，逆向從下游往上游傳輸，最後的伴隨一階動差分布場僅在左半邊上游處有值，下游處皆為零。而原本的一階動差是 10 的二次方數量級，而且是一個時間積分值，再經過正規化與逆向傳輸分布後，攤平為一個非積分 (non-integral) 的誤差分布形式，其數量級降為 10 的負十次方，這就是為何計算所得伴隨一階動差變數  $\phi_3$  的值大幅小於一階動差。從圖 3.12 也可以看出  $\phi_3$  的分布在場址上半部較大，而下半部較小，這是因為第一參數分區內的一階動差誤差大於分區二的誤差，這誤差從抽水井處往上游逆流至注入井處，所以伴隨一階動差場在觀測井與注入井處的值都比較大，且分區一大於分區二。此伴隨一階動差分布場以源點項注入了伴隨零階動差場中，所以圖 3.12 與圖 3.13 伴隨一階動差與伴隨零階動差兩者分布的型態十分相似，其值都是從觀測井處往上游緩慢的遞減，但可以看出伴隨零階動差場經過再一次的反向傳輸後，分布的更為均勻。



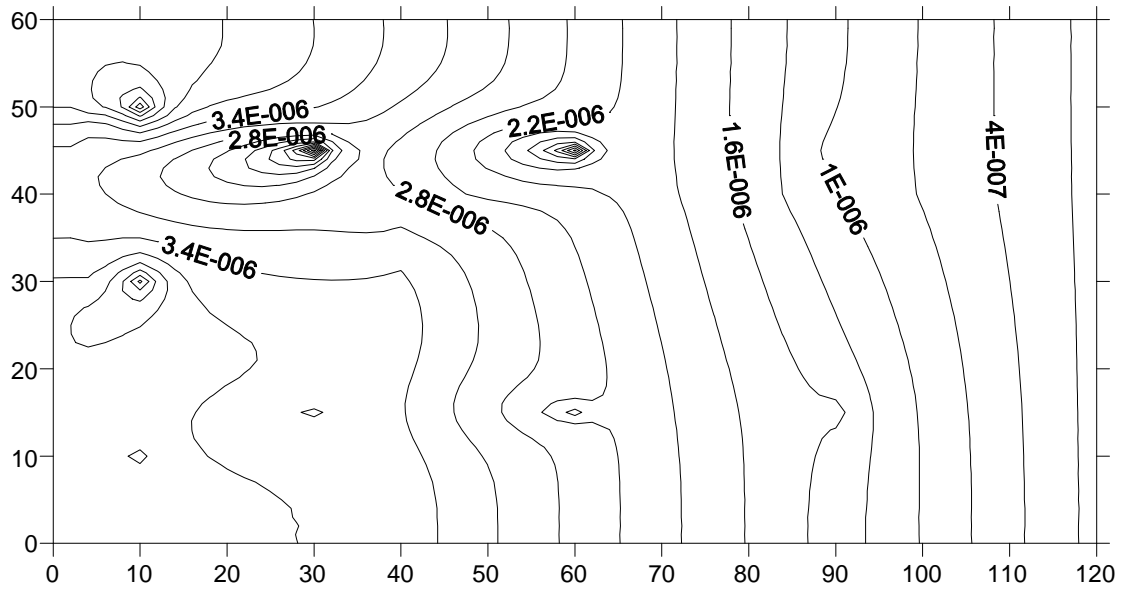


圖 3.14 伴隨水頭分布圖,  $\phi_1$

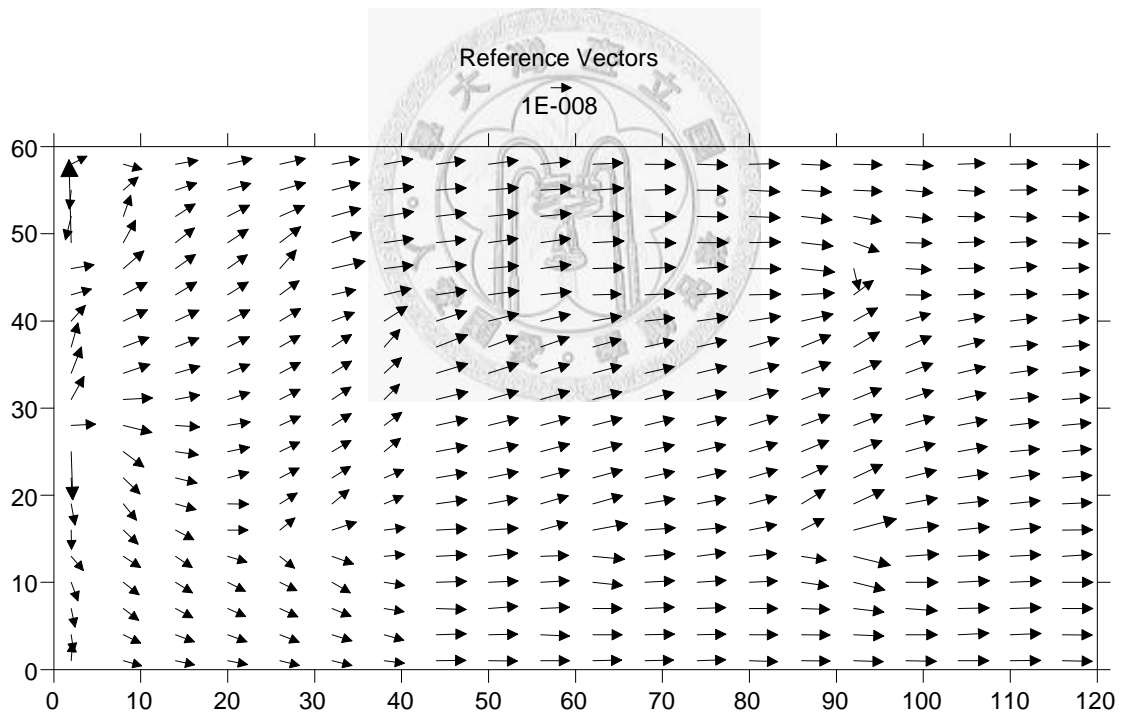


圖 3.15 伴隨流速分布圖,  $\phi$

最後聯立解得的伴隨水頭與伴隨流速場分布如圖 3.14 與圖 3.15 所示，伴隨水頭場的分布形式與伴隨動差場明顯不同，不再偏向於上游分布，而是全域皆有值，除了注入井與觀測井有較大值外，抽水井處也有明顯的值。這就表示說水頭觀測包含了更大範圍的參數場資訊，四周圍的水力傳導係數估計錯誤都會影響到觀測水頭值，不像動差觀測僅侷限於上游處  $K$  的資訊。至於伴隨流速場，可以

發現流速誤差僅僅反應在六個觀測位置處，且其值很小，整體的伴隨流速場十分均勻，伴隨流線大致成水平分布，此分布與貢獻度分析結果相同，流速僅對觀測點位 K 值檢定有貢獻。綜上所述，可以發現在四種觀測中，以水頭觀測資料包含了最多未知水文地質參數場的分布資訊。確定了不同類型的觀測對於參數檢定的貢獻度，以及伴隨狀態變數所隱含的意義後，以下將利用本研究所提之最佳化演算法，逆向估計水力傳導係數場。

### 3.4 檢定結果分析

本節描述參數檢定的結果，首先於 3.4.1 小節探討不同觀測資料組合下，反演的效率與結果的正確性，發現同時使用水位、零階動差與一階動差觀測者，反演效率最佳。緊接著 3.4.2 小節，則以單一類的觀測資料進行參數檢定，探討每個觀測資料於估計水力傳導係數的價值，結果顯示水位觀測包含了參數場的直接訊息，而動差觀測則恰巧提供了輔助的資訊。

#### 3.4.1 參數最佳化估計

所有的模擬誤差皆來自參數場的估計錯誤，此錯誤的程度可以由目標函數對應於未知參數的梯度值大小進行判斷，如果梯度為正表示參數值應該減小，反之梯度為負者，表示參數值應該上修。應用伴隨狀態法結果發現，此梯度值即為參數代表範圍內的狀態變數與伴隨狀態變數的積分，將此梯度值配合最陡坡降法，即可很有效率地更新水力傳導係數場。

本研究採用空間均勻觀測方式，於四口觀測井及兩口抽水井處有四種不同的觀測資料，包含水頭、流速、零階動差與一階動差。不同種類的觀測資料包含了不同的參數場資訊，本研究嘗試融合所有觀測資料於參數最佳化流程中，並測試了不同的觀測組合對於檢定結果的影響，最佳化過程中所有模擬值與觀測值的誤差平方和變化情形繪於圖 3.16，最佳參數估計值則列於表 3.6。圖 3.16 中的線標題「HM0M1q」，表示最佳化過程中使用了水頭、零階動差、一階動差與流速觀

測資料；線標題「HM0M1」表示最佳化過程中使用了水頭、零階動差、一階動差觀測資料，流速觀測資料僅用於計算所有的誤差平方和，而不置於目標函數中；線標題「HM1」等等依此類推，均代表了有使用到的觀測資料。

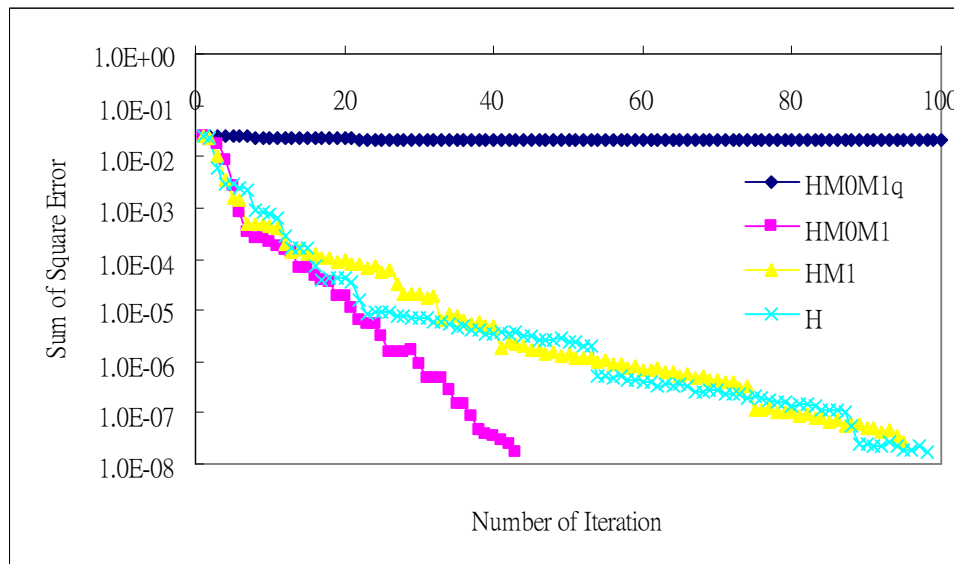


圖 3.16 參數最佳化過程中不同觀測資料組合下誤差平方和的遞減圖

表 3.6 不同觀測資料組合下之最佳參數估計結果

Observation Data	Number of Iteration	$K_1$	$K_2$	Sum of Square Error
H,M0,M1,q	100	3.38	3.34	2.04E-02
H,M0,M1	43	7.99	2.00	1.66E-08
H,M1	95	7.99	2.00	2.64E-08
H	98	7.99	2.00	1.71E-08

本研究在進行參數場反演時，同時使用了達西公式、連續方程式與零階及一階動差方程式，大部分的測試案例中，在幾次的最佳化搜尋後，估計所得之參數值皆收斂至參數真值，即  $K_1=8\text{m/day}$  而  $K_2=2\text{m/day}$ ，顯示本研究所提之最佳化方法論確實可用於求解耦合逆向問題。觀察「H」、「HM1」與「HM0M1」三條誤

差平方和變化線，可以發現求解的效率隨著不同種類的資料被引入而提高，模擬與觀測的誤差快速減小。同樣地，最佳化流程的收斂性也隨著資訊的增加而變好，不會產生不穩定 (unstable) 的解。由於水頭包含了最多且直接的參數場資訊，所以單獨使用水頭觀測資料就可以檢定得到參數真值，只是搜尋次數會偏多。對本設計案例而言，引入一階動差觀測資料，對於檢定結果正確性與最佳化效率並無顯著提升，可能是因為水頭已經解釋了大部分的參數場變異，一階動差所隱含的間接資訊在此幫助不大。但是加入零階動差觀測資料後，參數估計的效率戲劇性地 (dramatically) 提高了，相對於僅使用水頭觀測資料搜尋了 98 次，最佳化程序僅搜尋 43 次而已，就找到了參數的真值，效率提升了一倍，我們將此歸功於示蹤劑釋放策略的成功。利用不同濃度的單一示蹤劑注入，產生了比以往更有意義的零階動差分布場，此分布場適切的描述了流線與水力傳導係數的分布，因此增進了逆向問題求解的效率。但由於使用動差觀測資料時需求解水流與動差方程式，而使用水頭觀測時，僅需求解水流方程式，所以計算總效率會受影響。

但是當再進一步額外加入流速的觀測資料後，檢定結果反而不如預期，無法回到參數真值，這表示流速所包含之參數資訊太過局部 (local)，但此局部效應卻主控了整個梯度的計算，使得水頭與動差等包含較大範圍 K 值資訊的觀測無法有效反應至參數的梯度計算上，修正方向因此估計錯誤，結果使得參數最佳化失敗，流速觀測無法用於區域水力傳導係數值的檢定。這也解釋了為何前人應用流速觀測資料於參數檢定時必須假設全域 K 值為均質場，而無法是一個空間分布的形式。

本研究更進一步測試了當水頭觀測資料減少而增加動差觀測資料時，是否仍可由動差提供足夠多的參數場資訊，使得檢定之參數場正確？檢定結果發現，當水位資料減少至一定程度後，參數場即無法正確的被檢定出來，無論加入再多的動差觀測資料也是如此，此結果與前人研究相符，水位所包含的是參數場的主要資訊，而動差或濃度則包含輔助的次要資訊。另，在 Cirpka and Kitanidis (2000)

的研究中顯示了動差可以表現水利傳導係數場的細部特徵 (feature)，但在本研究的案例中，參數場是兩個區域 K 值，僅有趨勢而無細部特徵，所以無法進一步利用動差資料檢定出參數場的細部變化。

### 3.4.2 水位、流速與動差觀測的價值 (worth)

最後，本研究要回答到底水頭、流速、零階動差與一階動差這四種觀測資料分別包含了哪些水力傳導係數場的分布資訊？所以，研究將四種觀測資料分別單獨用於參數最佳化程序中，由檢定所得結果對此問題進行探討。最佳化過程中所有模擬值與觀測值的誤差平方和變化情形繪於圖 3.17，最佳參數估計值則列於表 3.7。圖 3.17 中的線標題「q」，表示最佳化過程中只使用了流速觀測資料；線標題「M0」表示最佳化過程中只使用零階動差觀測資料，依此類推。為了讓模擬結果好壞有一個共通的標準，所以雖然每個案例只使用一種觀測資料，但計算誤差平方和時，四種狀態變數的模擬值與觀測值誤差皆納入計算。

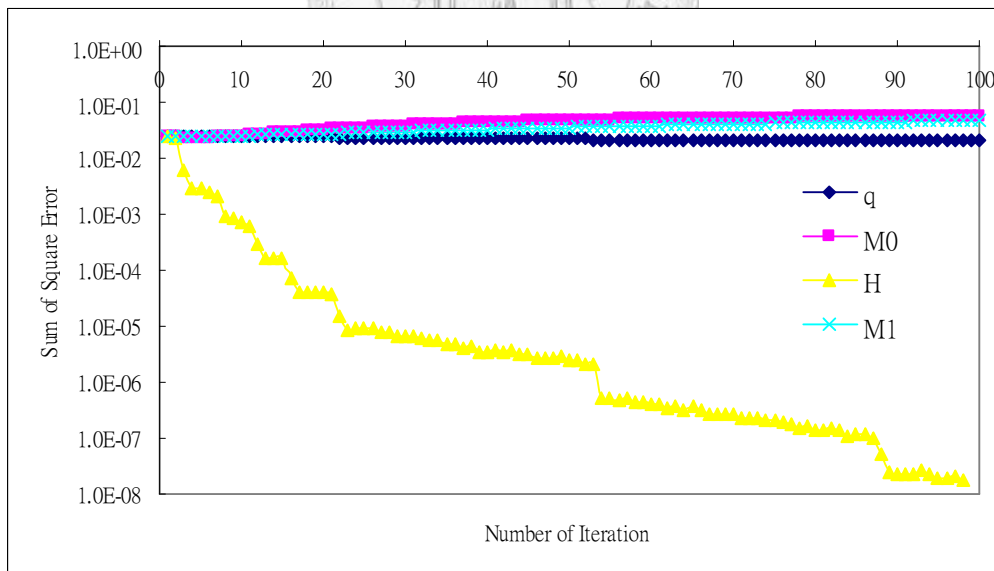


圖 3.17 參數最佳化過程中單一觀測資料下誤差平方和的遞減圖

表 3.7 單一觀測資料下之參數最佳估計值結果

Observation Data	Searching Times	$K_1$	$K_2$	Sum of Square Error
H	98	7.99	2.00	1.71E-08
M0	100	14.95	8.24	5.60E-02
M1	100	14.80	10.00	4.74E-02
Q	100	3.34	3.33	2.07E-02

這四個案例揭示了各種不同觀測資料所包含的水力傳導係數場資訊。若只使用水頭觀測資料進行參數檢定，估計結果得到參數的真值。這是因為對一個穩態地下水流場來說，觀測在不同空間位置的壓力水頭，可以得知空間上水力梯度的變化，水力梯度直接反映了  $K$  值的大小，水力梯度越大者水力傳導係數值越小。所以水頭觀測資料包含了  $K$  值絕對大小的直接資訊。若只使用零階動差或一階動差作為觀測資料者，檢定結果很差，所得誤差平方和為 5.60E-02，與初始猜值的誤差很接近，表示參數無法被正確的估計，但是可以發現檢定所得之  $K_1$  值會比  $K_2$  大，這樣的參數分布趨勢是正確的，進一步增加最佳化搜尋的次數之後，可以發現零階動差、一階動差的模擬值與觀測值的誤差會越來越小至趨近於零，但其檢定所得之參數卻越來越偏離參數真值。這是因為動差場是透過流場與  $K$  分布場進行關連，這樣的觀測資料僅提供了間接的參數場資訊，對動差而言，他提供的是  $K$  值相對大小的資訊，所以最佳化過程並不要求其滿足絕對大小  $K_1=8\text{m/day}$  與  $K_2=2\text{m/day}$ ，而是要求參數場滿足  $K_1 : K_2=1 : 4$  的比例。只要滿足這樣的比例，即滿足參數場分布大小的趨勢，雖然水頭模擬值是錯的，但是流場的分布，示蹤劑傳輸的快慢卻與真實場一模一樣，所以結果才會發現動差場誤差越來越小，水頭場誤差越來越大。而估計結果最差者，是僅使用流速觀測資料者，參數分布趨勢與絕對值大小皆無法辨別出來。這是因為流速僅僅包含了該觀測位

置  $K$  值絕對大小的直接資訊，太過局部了，使得估計結果再次顯示利用此局部資訊於推估區域參數  $K$  不可行。

研究結果發現，水頭觀測資料描述的是地下水等勢能線的分佈，此分佈直接反應參數場大小；零階動差觀測描述的是流線的分佈，可以表現出流線與流線間  $K$  值差異的資訊；一階動差場則描述了流徑的長短與傳輸的快慢，也是一種間接的參數場資訊。水頭與動差恰恰提供了互補的資訊，逆向求解程序融合了觀測所提供之等勢能線與流線資訊，以有限的觀測資料編織 (weave) 出試驗區域的整體流網，而後得以最佳化程序估計參數值。

綜上所述，水頭包含了參數場的主要資訊，單純使用水頭觀測資料與水流方程式即可估計水利傳導係數場。而對於污染場址的調查工作而言，井際分溶示蹤劑試驗以普遍用於污染場址的特徵調查，其所得觀測資料不只包含了水頭，同時也有動差的觀測資料，這些資料一樣是富含資訊且對參數場敏感，以往僅將其應用於估計污染物的分布，本研究發現也可將其使用於估計水利傳導係數場。水文參數估計正確以後，還可以進一步幫助判別污染物的分布情形，更確實掌握實際污染狀況。





## 第四章 完整逆向問題之案例研究

本章將以一個設計案例測試所提之地下水完整逆向問題求解方法論的可行性，並探討參數、初始條件與邊界條件的檢定問題。4.1 節闡述地下水完整逆向問題試驗設計的思維與案例說明；4.2 節對觀測資料進行敏感度與相關性分析，判定觀測資料對於何種未知數是敏感的；4.3 節再利用敏感度計算相關性矩陣以瞭解未知數間彼此的關連。4.4 節藉由貢獻度指標分析以判定對於不同種類的未知數，其個別有效的時間與空間觀測位置。4.5 節探討完整的逆向問題的可檢定性以及試驗設計的重要性，揭示了本方法論可有效整合所有的資訊，成功地同時最佳化參數與條件。並進一步由未知數間的相關性，說明地下水參數檢定可能因錯誤的條件給定而使得估計錯誤。

本最佳化方法的特點在於將模式的假設降至最低，開放以最佳化方法檢定所有的未知數，而非直接給其定值。如此，一方面使得參數與條件皆可正確的被估計；另一方面也因為未知數的增加，使得試驗設計更顯重要，必須收集足夠多的時空觀測資料，加上強健的逆向演算法以融合所有可得的資訊，才能正確的求解完整逆向問題。

### 4.1 試驗設計

本研究以二維虛擬拘限含水層中的地下水流作為探討案例，透過一個抽水實驗的試驗設計，有效收集各個時空位置的觀測資料，再利用所提出之逆向演算法最佳化估計參數與條件。待估計的未知數有蓄水係數、導水係數、初始水位、邊界水位與邊界流量，前人研究發現參數場的檢定需要有一個完整的洩降曲線觀測，所以試驗時間從抽水開始直到水位達穩定一段時間後為止；邊界的狀態變數場對於邊界條件特別敏感，所以應在靠近邊界處設置觀測井，以利於檢定邊界水位或流量；而初始條件的檢定雖無前人研究，但可以合理推測其對於初始洩降影響最大，所以可由非穩態的水位觀測估計之。依據上述基本原則，本研究設計一個適用於實際場址的抽水實驗，其觀測系統模擬試驗設定如下：

虛擬的拘限含水層設定為 60 米長、40 米寬、10 米厚。參數場給定為均質場，導水係數  $T=23 \text{ m}^2/\text{day}$ ，蓄水係數  $S=0.00010$ 。右邊界條件( $BC_H$ )給定為定水頭邊界，水頭為 20.00 米；左邊界( $BC_Q$ )則為定流量邊界，以單位長度  $0.17 \text{ m}^2/\text{day}$  的流量流出左邊界；上下兩邊界皆為不透水邊界。而初始條件( $IC$ )即是滿足這樣一個參數場與邊界條件下的穩態地下水水位。從時間等於零開始，進行抽水實驗，試驗設計如下：於含水層中央，座標(30,20)處設置一口抽水井，固定抽水量為  $10 \text{ m}^3/\text{day}$ ，連續抽水 0.12 天；並於場址中採空間均勻佈設兩口監測井，座標分別位於(10,20)以及(50,20)。在抽水試驗過程，紀錄三口井的地下水水位洩降曲線，作為後續未知數檢定時的觀測資料。此試驗設計特別將三口井分別設置於含水層的上、中、下游，以收集不同空間的觀測資訊，並且在時間上持續觀測至地下水水位達穩態後的一段時間，以取得足夠多的歷線觀測資料。設計的拘限含水層示意如圖 4.1。

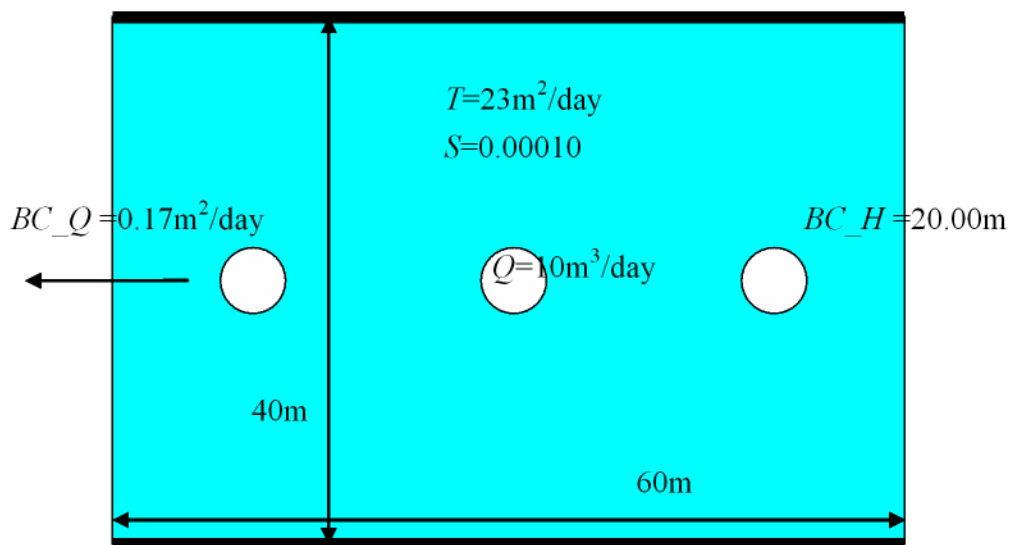


圖 4.1 虛擬二維拘限含水層示意圖

將整個計算空間域離散為 2400 個網格點，每個格點為 1 米長寬；時間域則離散為 12 個時間段，每 0.01 天輸出一水水位分佈。抽水井與觀測井處得到的洩降曲線如圖 4.2 所示，約在 0.04 天時水位大致以達穩態，最後總共有  $3 \times 12 = 36$  筆的水位觀測資料，這些資料將用於後續的敏感度分析、相關性分析、貢獻度分

析以及可檢定性分析中。

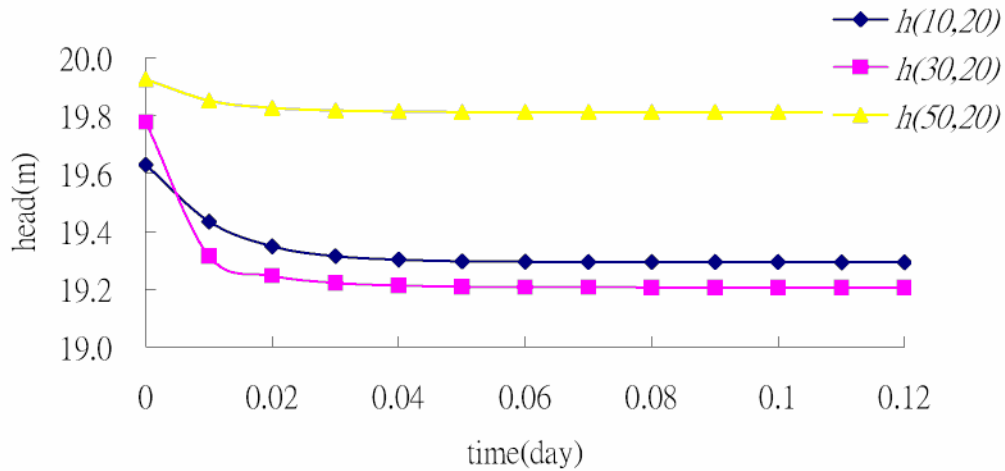


圖 4.2 抽水實驗過程之抽水井與監測井之洩降曲線圖

#### 4.2 敏感度分析 (Sensitivity Analysis)

敏感度分析目的在找出觀測對於何種未知數敏感，結果顯示隨觀測時間的不同，敏感度有升有降。首先將抽水井處的水位拿來進行敏感度分析，利用伴隨狀態法計算各個不同時刻的水位對應於蓄水係數、導水係數、初始水位、邊界流量與邊界水頭的敏感度，繪製於圖 4.3。積分的區域包含整個計算域以及邊界，這樣的作法是將各個未知數視為單一因子，以整體積分的方式考量其影響。

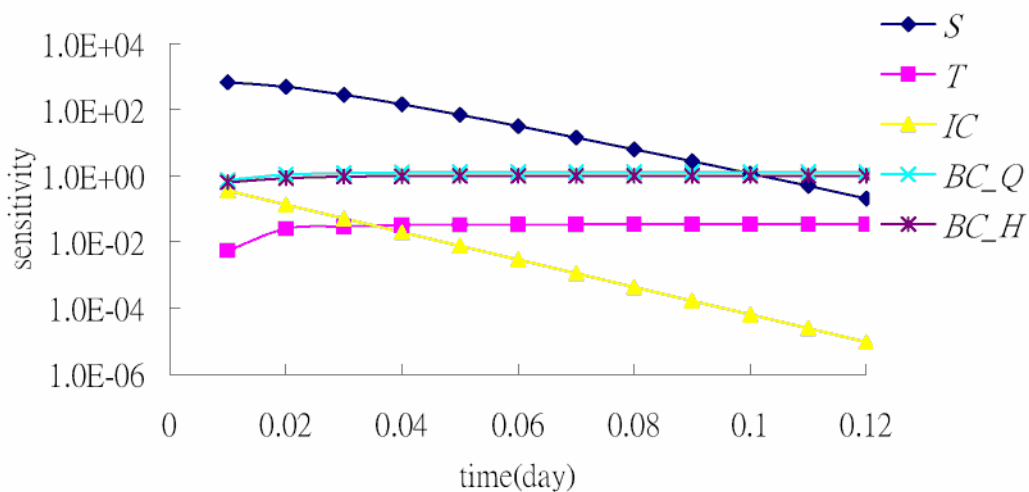


圖 4.3 水位  $h(30,20)$  對於參數、初始與邊界條件的敏感度隨時間變化圖

因為不同未知數本身數值大小差異很大，所以計算所得敏感度數值也有很大的變化。對蓄水係數與初始條件而言，觀測水位在一開始的時候對兩者非常敏感，但是很快遞減到極小的值，顯示穩態水位對二者並不敏感。相反地，水位對於導水係數與邊界條件的敏感度一開始很小，在水位達穩態後其值也達到一個穩定的峰值。

### 4.3 相關性分析 (Correlation Analysis)

相關性分析目的在瞭解各種不同類型的未知數間彼此的關係，結果顯示參數與初始條件或邊界條件呈高度相關，這樣會導致後續檢定上的困難。相關性分析的過程首先是將觀測井的水位設為目標函數值，以伴隨問題及梯度積分式計算得到水位對應於參數與條件的敏感度向量，而這些未知數的共變異數矩陣可以透過下式進行計算：

$$COV = [ss^T]^{-1} \quad (4.1)$$

其中  $s$  是觀測井水位對於所有未知數的敏感度向量，將其與轉秩後之矩陣相乘，再取反矩陣 (inverse) 即得到共變異數矩陣  $COV$ 。

而相關性矩陣則是將共變異數矩陣以其對應之變異數 (variance) 正規化後即得，計算式如下：

$$COR = \begin{bmatrix} \frac{C_{11}}{\sqrt{C_{11} \cdot C_{11}}} & \frac{C_{12}}{\sqrt{C_{11} \cdot C_{22}}} & \cdots & \frac{C_{1L}}{\sqrt{C_{11} \cdot C_{LL}}} \\ \frac{C_{21}}{\sqrt{C_{22} \cdot C_{11}}} & \cdots & & \\ \cdots & & \cdots & \\ \frac{C_{L1}}{\sqrt{C_{LL} \cdot C_{11}}} & & & \frac{C_{LL}}{\sqrt{C_{LL} \cdot C_{LL}}} \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

其中  $C_{ij}$  是共變異數矩陣的每個元素 (element)， $L$  是未知數的數量，於此案例中包含蓄水係數、導水係數、初始水位、邊界水位與邊界流量一共五個未知數。

此處選擇靠近左邊界的觀測井水位洩降資料進行相關性分析，所得之相關性

矩陣如表 4.1 所示。在這樣一個抽水試驗設計下，可以發現初始條件與蓄水係數高度相關 (highly correlated)，同樣地，邊界條件與導水係數也是高度相關。這發現與敏感度分析結果相同，即水位對於蓄水係數與初始條件的敏感度呈現相同的變化。從物理上也可以合理地解釋，當初始水位高估時，表示會有更多的地下水被抽出，為了維持固定的抽水量，蓄水係數只好變小以減少地下水蓄水量，所以初始水位與蓄水係數兩者呈負相關；同樣地，邊界水位與流量高估或低估時，但觀測水頭限定了流場的水力梯度變化，為了維持固定的抽水量，導水係數只好一起改變，所以兩者呈高度相關。不同的試驗設計所得之相關性分析結果可能與本研究所得不同，但由上述分析可以發現此相關性應是普遍存在於地下水模擬中。因為傳統的地下水參數檢定法假設初始條件與邊界條件為已知，若參數與此二條件高度相關，則會嚴重影響檢定參數結果的正確性，檢定參數偏離真實參數的幅度，和假設的初始、邊界條件與真實條件的差距有關。

表 4.1 參數、初始與邊界條件之相關性矩陣

COR	S	T	IC	BC_Q	BC_H
S	1.00	-0.37	-0.93	0.48	-0.45
T		1.00	-0.23	0.99	-1.00
IC			1.00	0.34	-0.31
BC_Q				1.00	1.00
BC_H					1.00

由上述分析結果可以發現，觀測水位並非對所有未知數都敏感，且未知數間彼此高度相關，這些均有可能導致最佳化演算方法的失敗，所以下面將以貢獻度分析先找出有效的觀測，提供適切的含水層資訊，最後才能將觀測有效用於完整逆向問題的求解。

#### 4.4 貢獻度分析

以觀測貢獻度指標的大小，判斷不同時間與空間位置的觀測對於未知參數與條件檢定是否有效，結果顯示因檢定未知數的不同，所需之有效觀測資料也不同。此處假設水位的觀測精度為 0.01 米，要求之參數精度對 S 與 T 而言分別為 1 與 0.00001，初始水位與邊界水位要求精度均為 0.01，檢定所得之邊界流量要求其精度為 0.01，上述數值詳列於表 4.2。計算所得之三條洩降曲線對於檢定參數與條件的貢獻度分別繪於圖 4.4 至圖 4.6 中。

表 4.2 觀測精度與要求之參數、初始與邊界條件精度

$\sigma_h$	0.01
$\varepsilon_S$	0.00001
$\varepsilon_T$	1
$\varepsilon_{IC}$	0.01
$\varepsilon_{BC_Q}$	0.01
$\varepsilon_{BC_H}$	0.01

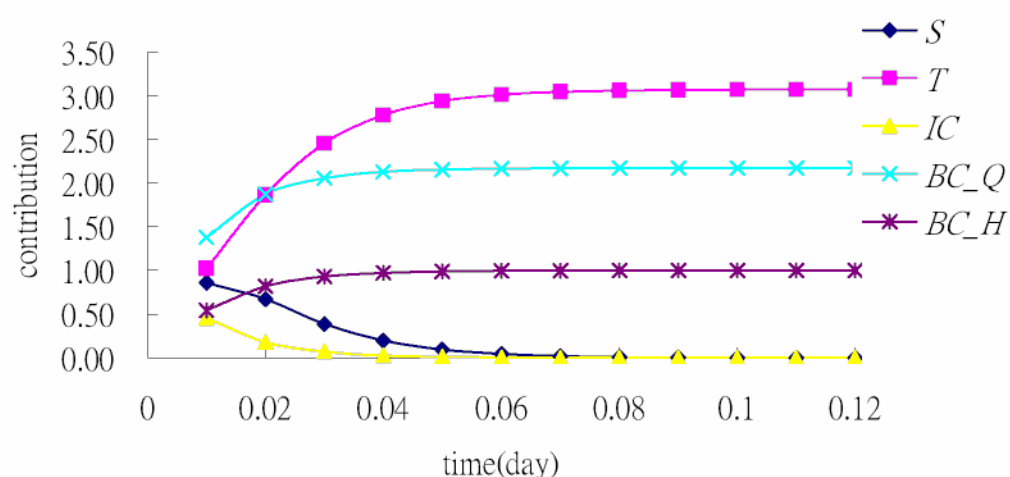


圖 4.4 水位  $h(10,20)$  對於參數、初始與邊界條件檢定之貢獻度隨時間變化圖

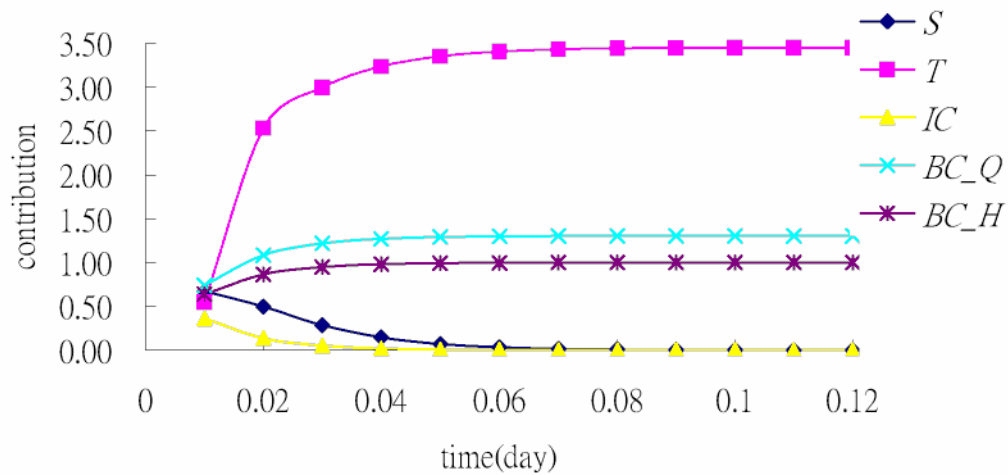


圖 4.5 水位  $h(30,20)$  對於參數、初始與邊界條件檢定之貢獻度隨時間變化圖

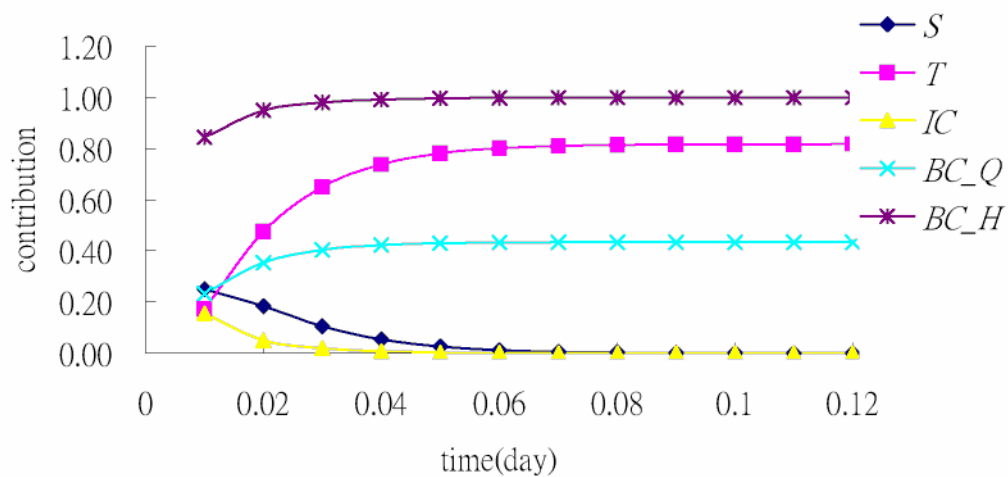


圖 4.6 水位  $h(50,20)$  對於參數、初始與邊界條件檢定之貢獻度隨時間變化圖

觀測對於蓄水係數與初始條件的貢獻度在一開始最大，但很快遞減為零，而且不管任何時間的貢獻度均小於一，這表示了此二者是難以檢定的。對於導水係數與邊界條件而言，觀測水位的貢獻度在抽水晚期均大於一，顯示觀測包含了較多的導水係數與邊界條件的資訊，如此將使得此二者較易於檢定。貢獻度除了隨觀測時間不同而變化以外，不同空間位置的觀測也有不同的貢獻度。靠近左邊界處的水位觀測特別適用於檢定左邊的定流量邊界；抽水井位置的水位觀測則是對於檢定導水係數有效；在右邊界的水位觀測則僅僅包含了邊界水位的資訊。

總括來說，非穩態水位觀測對於檢定蓄水係數與初始條件有效，但不能只使用單一時間觀測，需要使用密集的時間序列觀測。穩態時的水位觀測，則可有效的檢定導水係數與邊界條件，但除了抽水井的洩降外，仍須收集靠近邊界處的水位觀測資料。

#### 4.5 可檢定性分析 (Identifiability Analysis)

作為第一篇同時探討參數、初始條件與邊界條件檢定問題的研究，案例分析的目標是探討最佳化方法的適用性，以及各種未知數的可檢定性，所以我們先將問題簡化為一種未知數一個值，即假設無論參數與條件皆為均質場，以所提出之逆向問題最佳化求解方法估計未知數值。其初始猜值給定為  $T = 30 \text{ m}^2/\text{day}$ 、 $S = 0.00008$ 、 $BC\_H = 21.00$ 、 $BC\_Q = 0.15 \text{ m}^2/\text{day}$ 。而初始條件的給定上則是假設現場的自然穩態水力梯度已知，未知的是地下水位的相對高程，真值為  $20.00 \text{ m}$ ，初始猜值給定為  $IC = 19.00 \text{ m}$ 。並給定容許誤差值  $10^{-5}$ ，應用最佳化邏輯求解其最佳估計值。求解的過程中分別單獨使用抽水井與觀測井的洩降資料進行檢定，而後再將三條洩降曲線同時使用，最佳化的估計結果如表 4.3 所示。

表 4.3 不同觀測組合下之最佳估計結果

Observation	$S$	$T$	$BC\_Q$	$BC\_H$	$IC$
$H(10,20)$	0.00007	14	0.16	20.42	20.03
$H(30,20)$	0.00006	13	0.15	20.59	20.17
$H(50,20)$	0.00011	25	0.15	19.98	20.01
$H(10,20), h(30,20), h(50,20)$	0.00010	23	0.17	20.00	20.00

結果顯示當僅使用單一條水位洩降曲線時，估計的參數與條件會偏離真值。這是因為局部的觀測資料只包含了局部的資訊，無法有效包含整個空間中未知數的資訊，譬如靠近左邊界的觀測水位對於蓄水係數與初始條件根本無法提供有效的資訊，再加上導水係數又與邊界條件相關，使得最佳化邏輯收斂至一錯誤的解。



而抽水井處與靠近右邊界觀測井的水位洩降，一樣也只對特定的參數或條件有效，使得地下水逆向問題變成一個多解的（multi-solution）問題。只有在同時使用了三條洩降曲線觀測下，最佳化程序成功的收斂至未知數真值。這是因為檢定過程中，提供了最大量且分佈於整個時間與空間的觀測資訊，使得地下水逆向問題收斂至一個可以檢定（identifiable）的問題。結果也顯示當越來越多的未知數內入考量時，觀測資料也必須隨之增加以支撐此可檢定性。

最後，我們比較參數檢定、參數與邊界條件檢定與完整的逆向問題求解的差異。所有未知數的初始猜值與上述相同，但對於參數檢定問題而言，其假設初始條件與邊界條件已知，所以過程中，這些條件將不更新，僅更新參數而已。而參數與邊界條件檢定問題則不更新初始條件，僅估計參數與邊界條件而已。只有完整的逆向問題求解，才將所有的參數與條件視為未知數檢定之。檢定過程均使用三條洩降曲線的觀測資料，以提供足夠多的資訊，最佳的估計值詳列於表 4.4。

表 4.4 不同未知數設定下之最佳估計結果

Unknowns	$S$	$T$	$BC\_Q$	$BC\_H$	$IC$
$S, T$	0.00001	9	0.15	21.00	19.00
$S, T, BC$	0.00001	20	0.15	20.07	19.00
$S, T, BC, IC$	0.00010	23	0.17	20.00	20.00

結果顯示傳統的參數檢定或參數與邊界條件檢定問題，其估計結果嚴重受到錯誤的初始條件與邊界條件的影響，使得估計結果收斂至與真值相差甚遠的錯誤估計值，除非給定之初始條件與邊界條件恰巧為真值，參數檢定結果才會正確。這進一步說明了，當參數與初始條件及邊界條件高度相關時，錯誤的條件給定將導致錯誤的參數估計結果。但由於模擬所得的水頭變化仍與實際的觀測資料相符，所以這樣的錯誤很難被發掘。由這一個案例的結果我們可以發現，唯一可以收斂至真值的方法，是將參數檢定問題擴展至參數、初始條件與邊界條件檢定問題，利用足夠多的觀測資料，配合本研究所提之最佳化方法估計所有未知數，才

能收斂至真值，檢定所得的模式才是正確且具有代表性的。

最後，對於完整逆向問題而言，由於未知數眾多，所以其自由度相當大，不是隨意的給定初始猜值即可估計得到正確的參數與條件，仍須對於現場有一定的調查與瞭解，給定一個較為合乎實際狀況的初始猜測，最佳化演算法才能估計得到正確的參數、初始條件與邊界條件。



## 第五章 總結與建議

本章總結本研究之心得與成果，以及對於求解地下水逆向問題的貢獻，共可分為四大部分，分別於四個小節中詳細敘述，5.1 節呈現應用伴隨狀態法對於逆向演算的效益；5.2 節呈現本研究在場址調查試驗設計方面的思維和成果；5.3 節描述應用所提之最佳化演算法於參數檢定問題之成果，不同觀測資訊對於檢定水力傳導係數之價值；5.4 節描述本研究初步應用最佳化演算法於完整逆向問題求解之成果。各節文末並依據研究成果提出具體的建議事項，以供後續研究。

### 5.1 伴隨狀態法

本研究提出一個一般化逆向問題求解方法，結合了地下水模擬模式、伴隨狀態法、梯度法與近似牛頓法，在最小誤差平方和（least square error）的架構下，最佳化估計未知數分布。此一般化方法可應用至參數檢定問題，更可進一步應用至完整逆向問題的求解，而會有如此廣泛的適用性主要來自於伴隨狀態法的使用，對於應用伴隨狀態法本研究的成果如下：

1. 研究發現，伴隨狀態變數場其實就是模擬誤差的分布場，其給定終點條件與邊界條件為零，而後將參數估計誤差所造成之模擬狀態變數場誤差以源減項的形式加入伴隨控制方程式中，以反向（backward）分布誤差於計算時間域與空間域中，所以觀察伴隨狀態變數場的分布就可以知道誤差來自哪些地方。再以梯度積分式對狀態變數與伴隨狀態變數進行積分，即能得到目標函數對應於未知數的梯度值，此梯度值在越接近未知數真值時，將越接近接近數學上的正確值，所以可以快速有效更新未知數。
2. 本研究成功推導得到了穩態地下水水流與示蹤劑動差的伴隨問題，以及目標函數對應於水力傳導係數之梯度積分式；進一步推導了非穩態地下水流的伴隨問題，得到了目標函數對應於參數、初始條件與邊界條件的梯度積分式，應用在兩個觀測系統模擬試驗中，顯示了方法論的可行

性。且推導所得之結果皆是一般化的表示式，利於進一步應用至估計更複雜的未知數分布場。

3. 研究也由伴隨狀態法的原理與應用的探討發現，其必須給定至少一個邊界條件為給定值邊界，才能正確計算梯度值，但這只是應用上的少數限制，現場的狀況很容易可以滿足。

後續建議可直接應用此方法論於真實水力傳導係數分布場的估計問題，不只檢定參數場的平均趨勢，還可檢定細部的變異。初始水位、邊界水位與邊界流量也可以是隨空間位置不同而變化，以同樣的伴隨問題與梯度積分式同時計算目標函數對應於多個未知數的敏感度；而且此方法不只可用於空間變化的估計，若邊界條件隨時間而變也同樣可以估計。逆向問題的非線性行為與參數維度相關，在增加未知數數量後，可能會導致無法求解的問題，建議可再將伴隨狀態法不斷地推廣，測試其極限。

## 5.2 試驗設計

本研究特別強調試驗設計的重要性，兩個虛擬案例都是經過事先的試驗設計，收集有效的觀測資料後，才得以正確的檢定未知數數值，具體成果如下：

1. 對於以示蹤劑試驗推估含水層的水力傳導係數場而言，本研究以井際分溶示蹤劑試驗為基礎，對場址進行完全掃瞄，使得觀測包含全域的資訊。
2. 抽水量將其設計為大於注水量，以確保示蹤劑可以全面回收，達動差資訊最大化，並且在邊界條件設定上，我們將三邊的邊界條件給定為不透水，使得示蹤劑掃瞄區域維持一固定空間範圍，增加了逆向演算方法的穩定性；而剩下的一邊，則為了模擬模式與伴隨問題數值計算的正確，將其給定為水頭邊界。這樣的試驗設計使觀測所得之動差資料，可用於正確逆推  $K$  場。
3. 本研究提出了以單一示蹤劑但於不同注入井以不同濃度注入的釋放策略，成功營造出一個隨空間變化的零階動差場，解決了二元化的問題，

並多提供一種可用於參數檢定的有效觀測資料，且其在某些空間位置的觀測貢獻度明顯大於水頭。

4. 對於嘗試以抽水實驗估計參數、初始條件與邊界條件的案例而言，為了正確求解這樣一個完整的逆向問題，特別於試驗場址中採用空間均勻佈井的方式，收集全域的洩降曲線資料。而試驗時間則在地下水水位達穩態後一段時間才停止，如此收集足夠多的穩態及非穩態洩降曲線資料，增加時間上的訊息。

除了試驗設計以外，本研究還引用了觀測貢獻度指標，具體評估這樣的試驗設計下，所獲得的觀測資料是否真的對於檢定未知數有貢獻，也分辨出了各種不同類型、不同時間與不同空間的觀測分別對於不同的未知數敏感：

1. 任意空間點的水頭與動差觀測，對於區域範圍內水力傳導係數皆有很高的貢獻度，顯示此兩種觀測特別適用於水力傳導係數檢定。而流速觀測僅對量測點參數值檢定為有效觀測，不利於估計參數場的分布。
2. 零階與一階動差不只對觀測位置上游的  $K$  有貢獻度，對於下游抽水井處的  $K$  值也有其貢獻，這顯示了動差觀測資料比前人就所提還包含了更廣範圍的參數場資訊。
3. 非穩態水位歷線觀測對於蓄水係數與初始條件之估計貢獻度較大，但兩者都仍小於一，所以必須增加觀測時間才能檢定此二者。穩態水位觀測對於檢定導水係數與邊界條件為有效觀測。

建議後續可將試驗設計與貢獻度分析結合，試驗之抽水、注水井布置，可以嘗試多種不同的組合，並選擇貢獻度最高者作為抽水、注水井的布置；觀測井的布置也可依據貢獻度分析，選擇貢獻度高的時間與空間位置進行觀測，據此進行現場實驗，以取得有效觀測資料，用於求取相關的未知數分布場。

### 5.3 參數檢定

本研究將上述的試驗設計，配合應用伴隨狀態法的最佳化方法，進行參數檢

定。利用示蹤劑試驗對污染場址進行掃瞄，同時得到了水位與動差等眾多的觀測資料。研究所得之最佳化演算結果，具體呈現了各觀測資料所包含的資訊與其價值：

1. 觀測在不同空間位置的水頭，可以得知空間上水力梯度的變化，此梯度直接反映了水力傳導係數的大小，所以水頭觀測包含了參數場的直接訊息。
2. 示蹤劑動差是透過流場與水力傳導係數進行關連，僅提供了間接的參數場資訊，無法單獨使用於參數檢定，但其提供了與等勢能線互補的流線資訊。
3. 流速觀測僅僅包含了觀測位置參數值的資訊，難以用於推估水力傳導係數的分布場。
4. 增加不同種類的觀測資料可以提供不同的參數場資訊，且資料本身如果越有意義、其包含參數場資訊越多，可使得估計結果變得更好。本研究結果顯示零階動差即為一種富含資訊的觀測資料，與水頭觀測同時使用，可提升參數檢定的效率與收斂性，此結果也直接證明了試驗設計的成功。

建議後續求解更為複雜的地下水逆向問題時，可依據本研究成果，選定對於待檢定的參數有價值的觀測資料，並納入更多的觀測資料，才可能正確估計真實場址的特徵分布，並且進一步探討這些不同種類、不同時空的觀測資料所包含之參數場的資訊。除了檢定未知的參數場以外，亦可參考完整逆向問題，蒐集更多的觀測資料，將試驗場址的邊界條件視為未知，與參數場同時檢定，可以使得水力傳導係數場的估計更為正確。

此外，本研究的水文地質參數場是利用污染場址調查所得資料進行檢定，而目前井際分溶示蹤劑試驗已廣泛應用於調查污染分布，本研究使用其守恆示蹤劑的動差資料配合水頭觀測，可以正確估計  $K$  場；後續建議再引入分溶示蹤劑（partitioning tracers）的動差觀測資料，可以進一步檢定污染分布場。

## 5.4 完整逆向問題

由研究成果發現，本最佳化方法論有效整合了各種觀測資訊，使地下水逆向問題的求解變為可行，具體成果如下：

1. 相關性分析結果顯示蓄水係數與初始水位呈高度相關，導水係數與邊界水位、邊界流量皆高度相關。這樣的相關性導致逆向問題的求解成為一個非唯一解 (non-unique solution) 的問題，估計結果受到給定觀測資料的不同而異。
2. 在探討案例中，由原本使用單一洩降曲線觀測導致參數與條件估計錯誤，在同時使用觀測井與抽水井的洩降曲線後，由於觀測資訊的增加，使得完整逆向問題收斂為一個可以檢定的問題，參數、初始條件以及邊界條件可以同時正確估計。
3. 蓄水係數與初始條件之檢定有賴於非穩態水位時間序列觀測，而且越早期動態的洩降貢獻度越大。晚期穩態的水位則是對於導水係數與邊界條件之檢定提供了有效的資訊。
4. 在觀測充足 (sufficient) 的狀況下，比較參數檢定、參數與邊界條件檢定以及完整逆向問題的估計結果，發現初始與邊界條件已知的假設影響了檢定結果的正確性，傳統的參數檢定問題得到的參數估計值依賴於 (depend on) 給定條件的數值，除非給定值正確，否則唯有開放將初始條件與邊界條件也納入檢定，才能得到正確的估計。

後續建議將參數、初始與邊界條件為均質場的假設放寬，增加其空間的變異，並以本研究所提之最佳化方法論求解，以測試方法論的實用性 (practicability)。當應用此方法於現場場址特徵調查時，建議增加更多的限制條件 (constraints) 與事先資訊 (prior information)，才能確保最佳化程序的收斂性與估計結果的正確性。





## 參考文獻

1. Barlebo, H. C., M. C. Hill, D. Rosbjerg, and K. H. Jensen (1998), Concentration data and dimensionality in groundwater models: Evaluation using inverse modeling, *Nordic Hydrology*, 29(3), 149-178.
2. Barth, G., and M. C. Hill (2005), Numerical methods for improving sensitivity analysis and parameter estimation of virus transport simulated using sorptive-reactive processes, *Journal of Contaminant Hydrology*, 76(3-4), 251-277.
3. Basu, N. B., P. S. C. Rao, I. C. Poyer, M. C. Annable, and K. Hatfield (2006), Flux-based assessment at a manufacturing site contaminated with trichloroethylene, *Journal of Contaminant Hydrology*, 86(1-2), 105-127.
4. Bear, J. (1979), *Hydraulics of Groundwater*, McGraw-Hill Inc., New York.
5. Bonilla, F. A., and J. H. Cushman (2000), Role of boundary conditions in convergence and nonlocality of solutions to stochastic flow problems in bounded domains, *Water Resour. Res.*, 36(4), 981-997.
6. Brochu, Y., and D. Marcotte (2003), A simple approach to account for radial flow and boundary conditions when kriging hydraulic head fields for confined aquifers, *Mathematical Geology*, 35(2), 111-139.
7. Carrera, J., and S. P. Neuman (1986), Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Maximun likelihood method incorporating prior information, *Water Resour. Res.*, 22(2), 199-210.
8. Carrera, J. (1987), State of the art of the inverse problem applied to the flow and solute transport equations, in *Groundwater Flow and Quality Modeling*, NATO ASI Ser., pp.549-585, D. Reidel Pub. Co., Holland.
9. Carrera, J., A. Alcolea, A. Medina, J. Hidalgo, and L. J. Slooten (2005), Inverse problem in hydrogeology, *Hydrogeology Journal*, 13(1), 206-222.

10. Cirpka, O. A., and P. K. Kitanidis (2000), Sensitivity of temporal moments calculated by the adjoint-state method and joint inverting of head and tracer data, *Adv. Water Resour.*, 24(1), 89-103.
11. Cheng, J. M., and W. W.-G. Yeh (1992), A proposed quasi-newton method for parameter-identification in a flow and transport-system, *Adv. Water Resour.*, 15(4), 239-249.
12. Chen, Y., and D. Zhang (2006), Data assimilation for transient flow in geologic formations via ensemble Kalman filter, *Adv. Water Resour.*, 29, 1107–1122.
13. Dinwiddie, C. L., N. A. Foley, and F. J. Molz (1999), In-well hydraulics of the electromagnetic borehole flowmeter, *Groundwater Water*, 37(2), 305-315.
14. Gomez-Hernandez, J. J., A. Sahuquillo, and J. E. Capilla (1997), Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data - I. Theory, *Journal of Hydrology*, 203(1-4), 162-174.
15. Harvey, C. W., and S. M. Gorelick (1995), Temporal moment-generating equations: Modeling transport and mass transfer in heterogeneous aquifers, *Water Resour. Res.*, 31(8), 1895-1911.
16. James, A. I., W. D. Graham, K. Hatfield, P. S. C. Rao, and M. D. Annable (1997), Optimal estimation of residual non-aqueous phase liquid saturations using partitioning tracer concentration data, *Water Resour. Res.*, 33(12), 2621-2636.
17. James, A. I., W. D. Graham, K. Hatfield, P. S. C. Rao, and M. D. Annable (2000), Estimation of spatially variable residual nonaqueous phase liquid saturations in nonuniform flow fields using partitioning tracer data, *Water Resour. Res.*, 36(4), 999-1012.
18. Jawitz, J. W., M. D. Annable, G. G. Demmy, and P. S. C. Rao (2003), Estimating nonaqueous phase liquid spatial variability using partitioning tracer higher

temporal moments, *Water Resour. Res.*, 39(7), 1192,  
doi:10.1029/2002WR001309.

19. Jin, M. Q., M. Delshad, V. Dwarakanath, D. C. Mckinney, G. A. Pope, K. Sepehrnoori, C. E. Tilburg, and R. E. Jackson (1995), Partition tracer test for detection, estimation, and remediation performance assessment of subsurface nonaqueous phase liquids, *Water Resour. Res.*, 31(5), 1201-1211.
20. Kitanidis, P. K. (1995), Quasi-linear geostatistical theory for inversing, *Water Resour. Res.*, 31(10), 2411-2419.
21. LaVenue, A. M., and J. F. Pickens (1992), Application of a coupled adjoint sensitivity and kriging approach to calibrate a groundwater-flow model, *Water Resour. Res.*, 28(6), 1543-1569.
22. Mayer, A. S., and C. L. Huang (1999), Development and application of a coupled-process parameter inversion model based on the maximum likelihood estimation method, *Adv. Water Resour.*, 22(8), 841-853.
23. McLaughlin, D. and L. R. Townley (1996), A reassessment of the groundwater inverse problem, *Water Resour. Res.*, 32(5), 1131-1161.
24. Rubin, Y., and G. Dagan (1988), Stochastic analysis of boundaries effects on head spatial variability in heterogeneous aquifers 1. Constant head boundary, *Water Resour. Res.*, 24(10), 1689-1697.
25. Rubin, Y., M. A. Cushey, and A. Wilson (1997), The moments of the breakthrough curves of instantaneously and kinetically sorbing solutes in heterogeneous geologic media: Prediction and parameter inference from field measurements, *Water Resour. Res.*, 33(11), 2465-2481.
26. Sun, N.-Z., and W. W.-G. Yeh (1990), Coupled inverse problems in groundwater modeling, 1. Sensitivity analysis and parameter identification, *Water Resour. Res.*, 26(10), 2507-2525.

27. Sun, N.-Z. (1994), *Inverse Problems in Groundwater Modeling*, Kluwer Acad., Netherlands.
28. Sun, N.-Z., and W. W.-G. Yeh (2007), Development of objective-oriented groundwater models: 1. Robust parameter identification, *Water Resour. Res.*, 43(2), W02420.
29. Wagner B. J. (1992), Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modeling, *Journal of Hydrology*, 135(1-4), 275-303.
30. Wu, Y.-S., C.-H. Lee, and J.-L. Yu (2008), Effects of Hydraulic Variables and Well Construction on Horizontal Borehole Flowmeter Measurements, *Ground Water Monitoring & Remediation*, 28(1), 65-74.
31. Yeh, T.-C. J., and P. A. Mock (1996), A structured approach for calibrating steady-state ground-water flow models, *Ground Water*, 34(3), 444-450.
32. Yeh, T.-C. J., C. H. Lee, K.-C. Hsu, and Y.-C. Tan (2007), Fusion of active and passive hydrologic and geophysical tomographic surveys: The future of subsurface characterization. In *Data Integration in Subsurface Hydrology*, ed. D.W. Hyndman, F.D. Day-Lewis, and K. Singha, AGU monograph.
33. Yeh, W. W.-G. (1986), Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology : The inverse problem, *Water Resour. Res.*, 22(2), 95-108.
34. Yeh, W. W.-G., and N.-Z. Sun (1990), Variational sensitivity analysis, data requirement, and parameter identification in a leaky aquifer system, *Water Resour. Res.*, 26(9), 1927-1938.
35. Zijl, W. (2004), A direct method for the identification of the permeability field based on flux assimilation by a discrete analog of Darcy's law, *Transport in Porous Media*, 56(1), 87-112.

## 附錄 A 地下水參數檢定之伴隨問題推導

水平二維等向性拘限地下含水層之穩態地下水流之控制方程式為：

$$\nabla \cdot (-\underline{\mathbf{q}}) + \frac{Q_{source}}{B} - \frac{Q_{sink}}{B} = 0 \quad (A1)$$

$$\underline{\mathbf{q}} + K \nabla H = \underline{\mathbf{0}}, \quad (x, y) \in \Omega \quad (A2)$$

其邊界條件表示如下：

$$\begin{aligned} H|_{\Gamma_1} &= f_1 \\ -\underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= f_2 \end{aligned} \quad (A3)$$

零階動差方程式與其邊界條件為：

$$\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{v}} m_0) - \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_0) + \frac{Q_{sink}}{B} m_0 = \frac{Q_{source}}{B} t_s C_s \quad (A4)$$

$$\begin{aligned} m_0|_{\Gamma_1} &= f_5 \\ \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_0 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= f_6 \end{aligned} \quad (A5)$$

一階動差方程式與其邊界方程式如下：

$$\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{v}} m_1) - \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_1) + \frac{Q_{sink}}{B} m_1 = \frac{Q_{source}}{B} \frac{t_s^2 C_s}{2} + \theta m_0 \quad (A6)$$

$$\begin{aligned} m_1|_{\Gamma_1} &= f_7 \\ \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla m_1 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= f_8 \end{aligned} \quad (A7)$$

在水流與動差模擬問題中，水頭(H)、流速( $q_x, q_y$ )、零階動差( $m_0$ )與一階動差( $m_1$ )是待解的狀態變數，而水力傳導係數(K)是待估計的水文地質參數。利用伴隨狀態法，首先對參數 K 取一微小變量  $\delta K$ ，這一個微小變量透過控制方程式會使得四個狀態變數 H、 $q$ 、 $m_0$ 、 $m_1$  產生一微小變化  $\delta H$ 、 $\delta q$ 、 $\delta m_0$ 、 $\delta m_1$ 。由於此變量很小所以可以假設其依然滿足原始的控制方程式與邊界條件，將新的變數與狀態變數帶入後得變分問題(variational problem)如下：

$$\begin{aligned}
\nabla \cdot (-\delta \underline{\mathbf{q}}) &= 0 \\
\delta \underline{\mathbf{q}} + K \nabla \delta H + \delta K \nabla H &= \underline{\mathbf{0}} \\
\delta H|_{\Gamma_1} = 0, -\delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= 0 \\
\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \delta m_0 - \underline{\mathbf{q}} \delta m_0 - \theta m_0 \delta \underline{\mathbf{q}}) - \frac{Q_{sink}}{B} \delta m_0 &= 0 \\
\delta m_0|_{\Gamma_1} = 0, \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \delta m_0 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= 0 \\
\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \delta m_1 - \underline{\mathbf{q}} \delta m_1 - \theta m_1 \delta \underline{\mathbf{q}}) - \frac{Q_{sink}}{B} \delta m_1 &= -\theta \delta m_0 \\
\delta m_1|_{\Gamma_1} = 0, \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \delta m_1 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} &= 0
\end{aligned} \tag{A8}$$

首先對變分問題的控制方程式進行數學處理，將其乘上一個伴隨狀態變數 (adjoint state variable)。每一個狀態變數皆有一個伴隨狀態變數，所以共有四個伴隨狀態變數分別乘上與其對應的原來四個狀態變數的變分控制方程式。之後對整個時間空間域進行積分，也就是伴隨狀態法考量了整個模擬區域與時間內，參數變化對於狀態變數場的影響。積分後之方程式使用格林定理(Green's theorem)處理，格林定理基本概念是一個物理量的改變可以分為兩項做探討，一項是物體內部物理量的改變，另一項是物體邊界上物理量的改變。這邊採用這樣的數學處理，目的是要將包含於方程式微分項中的狀態變數變分項，從微分項移出至積分項，其結果如下所示：

$$\begin{aligned}
\int \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_1 d\Omega - \int \varphi_1 \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma &= 0 \\
\int \underline{\boldsymbol{\varphi}} \cdot \delta \underline{\mathbf{q}} d\Omega + \int \underline{\boldsymbol{\varphi}} \cdot (\delta K \nabla H) d\Omega - \int \delta H \nabla \cdot (K \underline{\boldsymbol{\varphi}}) d\Omega + \int \delta H (K \underline{\boldsymbol{\varphi}}) \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma &= 0 \\
\int \delta m_0 \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_2) d\Omega + \int \theta \underline{\mathbf{D}} \cdot (\varphi_2 \nabla \delta m_0 - \delta m_0 \nabla \varphi_2) \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma \\
+ \int \delta m_0 \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_2 d\Omega - \int \varphi_2 \delta m_0 \underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma + \int m_0 \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_2 d\Omega - \int \varphi_2 m_0 \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma \\
- \int \varphi_2 \frac{Q_{sink}}{B} \delta m_0 d\Omega &= 0 \\
\int \delta m_1 \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_3) d\Omega + \int \theta \underline{\mathbf{D}} \cdot (\varphi_3 \nabla \delta m_1 - \delta m_1 \nabla \varphi_3) \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma \\
+ \int \delta m_1 \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_3 d\Omega - \int \varphi_3 \delta m_1 \underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma + \int m_1 \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_3 d\Omega - \int \varphi_3 m_1 \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \underline{\mathbf{n}} d\Gamma \\
- \int \varphi_3 \frac{Q_{sink}}{B} \delta m_1 d\Omega + \int \varphi_3 \theta \delta m_0 d\Omega &= 0
\end{aligned} \tag{A9}$$

其中  $\varphi_1$ 、 $\underline{\varphi} = \begin{bmatrix} \varphi_x \\ \varphi_y \end{bmatrix}$ 、 $\varphi_2$  與  $\varphi_3$  是四個引入的伴隨狀態變數；分別對應  $H$ 、 $\underline{\mathbf{q}}$ 、 $m_0$  與  $m_1$  而設立。

可以看到處理過後的方程式裡，每一個微小變量  $\delta H$ 、 $\delta \underline{\mathbf{q}}$ 、 $\delta m_0$ 、 $\delta m_1$  都已經從微分項中被提了出來，之後將微小變量視為變數，把與之相乘者視為係數，對係數項做整理後，引入變分問題的邊界條件，這些邊界條件皆等於零，所以上式中大部分的邊界積分項皆可消去，剩下一些無法消去的邊界積分項來自於我們剛剛額外增加的伴隨狀態變數，所以我們直接指定這些邊界條件為零，這些指定的邊界條件也就是伴隨問題的邊界條件，其數量與模擬問題相當，共有三個限定值與三個限定通量的邊界條件，而且這些邊界條件皆為零，其形式如下。

$$\begin{aligned} \varphi_1|_{\Gamma_1} &= 0, K \underline{\varphi} \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \\ \varphi_2|_{\Gamma_1} &= 0, \nabla \varphi_2 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \\ \varphi_3|_{\Gamma_1} &= 0, \nabla \varphi_3 \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A10})$$

邊界條件皆設為零，這是因為原本的伴隨狀態法假設了所有的狀態變數模擬的誤差來自於參數場估計的誤差，而邊界條件為已知值，不會有任何誤差。(這假設在邊界條件未知時是無法成立的，這情形將另外探討，此處假設邊界條件已知。)

之後，所有的邊界積分項都已消去，只剩下簡單的區域內積分項，由式中可以看出，這些積分項都是由一個微小變化量乘上一個係數組合而成。

$$\begin{aligned} & \int \delta H [-\nabla \cdot (K \underline{\varphi})] d\Omega \\ & + \int \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot (\nabla \varphi_1 + \underline{\varphi} + m_0 \nabla \varphi_2 + m_1 \nabla \varphi_3) d\Omega \\ & + \int \delta m_0 [\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_2) + \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \frac{Q_{sink}}{B} + \varphi_3 \theta] d\Omega \\ & + \int \delta m_1 [\nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_3) + \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_3 - \varphi_3 \frac{Q_{sink}}{B}] d\Omega \\ & + \int \delta K (\underline{\varphi} \cdot \nabla H) d\Omega = 0 \end{aligned} \quad (\text{A11})$$

接著把全域目標函數

$$\begin{aligned}
E &= \int f d\Omega \\
&= \frac{1}{2} \sum_{x,y} [(H_{com} - H_{obs})^2 + (q_{xcom} - q_{xobs})^2 + (q_{ycom} - q_{yobs})^2 + (m_{0com} - m_{0obs})^2 + (m_{1com} - m_{1obs})^2]
\end{aligned} \tag{A12}$$

取全微分，和這些全域積分相加得到：

$$\begin{aligned}
\delta E &= \int \delta H \left[ \frac{\partial f}{\partial H} - \nabla \cdot (K \underline{\varphi}) \right] d\Omega \\
&+ \int \delta \underline{\mathbf{q}} \cdot \left( \frac{\partial f}{\partial \underline{\mathbf{q}}} + \nabla \varphi_1 + \underline{\varphi} + m_0 \nabla \varphi_2 + m_1 \nabla \varphi_3 \right) d\Omega \\
&+ \int \delta m_0 \left[ \frac{\partial f}{\partial m_0} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_2) + \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \frac{Q_{sink}}{B} + \varphi_3 \theta \right] d\Omega \\
&+ \int \delta m_1 \left[ \frac{\partial f}{\partial m_1} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_3) + \underline{\mathbf{q}} \cdot \nabla \varphi_3 - \varphi_3 \frac{Q_{sink}}{B} \right] d\Omega \\
&+ \int \delta K (\underline{\varphi} \cdot \nabla H) d\Omega
\end{aligned} \tag{A13}$$

指定所有狀態變數變分量所乘係數為零，這些指定就成為了伴隨問題的控制方程式。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial H} - \nabla \cdot (K \underline{\varphi}) &= 0 \\
\frac{\partial f}{\partial \underline{\mathbf{q}}} + \nabla \varphi_1 + \underline{\varphi} + m_0 \nabla \varphi_2 + m_1 \nabla \varphi_3 &= \underline{\mathbf{0}} \\
\frac{\partial f}{\partial m_0} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_2) + \theta \underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \frac{Q_{sink}}{B} + \varphi_3 \theta &= 0 \\
\frac{\partial f}{\partial m_1} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_3) + \theta \underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \varphi_3 - \varphi_3 \frac{Q_{sink}}{B} &= 0
\end{aligned} \tag{A14}$$

其中

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial H} &= H_{com} - H_{obs}, \quad \frac{\partial f}{\partial q_x} = q_{xcom} - q_{xobs}, \quad \frac{\partial f}{\partial q_y} = q_{ycom} - q_{yobs}, \quad \frac{\partial f}{\partial m_0} = m_{0com} - m_{0obs}, \\
\frac{\partial f}{\partial m_1} &= m_{1com} - m_{1obs} \text{ 皆為模擬與觀測狀態變數間的誤差值。}
\end{aligned}$$

而剩下唯一一項參數變分項  $\delta E = \delta K \int (\underline{\varphi} \cdot \nabla H) d\Omega$ ，依據泰勒展開式(Taylor's expansion)對目標函數的一階展開式觀察可以發現，上式等號右邊的係數恰等於目標函數對應於未知水力傳導係數之梯度，即：



$$\frac{\partial E}{\partial K} = \int \phi \cdot \nabla H d\Omega \quad (\text{A15})$$

可以發現推導完成後的梯度表示式僅是狀態變數的梯度與伴隨狀態變數的積分而已，推導過程假設全域為單一參數，所以積分結果是對全域做積分；如果參數是分區給定者，則積分區域即為各個參數分區；如果是每個計算格點皆給定一個參數者，則積分區域為計算單位面積。如此依據參數代表範圍的大小進行積分，即可一次得到目標函數對應於所有未知參數的梯度值，大幅降低了計算的負擔(computational burden)。

至此我們完成了伴隨水流與動差模擬問題的推導，所得之伴隨問題的控制方程式如方程式(A14)所示，其附帶邊界條件如方程式(A10)所示。比對模擬問題的控制方程式可以發現，兩者的流向相反，而且伴隨控制方程式多了一個誤差的源減項，此模擬與觀測間的誤差，從觀測位置逆向往上游傳遞，依控制方程式分佈於模擬區域中，加上邊界設定為零，等於設立了一個封閉邊界，所有的誤差僅會在計算域中分佈，不會跑出此範圍外而無法掌握，所以伴隨狀態變數場可以視為一個誤差分佈場，其控制方程式即等於誤差分佈方程式。藉由這些方程式，由於參數估計所造成的模擬狀態變數誤差可以被分析，並且透過推導所得之梯度積分式(A15)，可以具體的被量化，相關研究也顯示了其梯度計算結果的正確性。

觀察伴隨問題可以發現，其控制偏微分方程式與邊界條件的形式，和水流與動差模擬問題一模一樣，此結果使得原本被用來求解模擬問題的數值程式也可以用來求解伴隨問題，不需要再額外多寫一套程式。伴隨問題與模擬問題最大一點的不同在於水流的方向，其兩者運移項的符號一個為正一個為負，恰好相反。這樣的差異是有其道理的。因為在正向的水流與傳輸模擬時，誤差會由上游往下游傳遞而影響到下游計算結果的正確性。所以在進行誤差分析時，這些由上游來的誤差必須透過某個方法讓他合理的往上游逆向分佈回去，伴隨問題的控制方程式就是這樣一個逆向演算式，這也就是為何其流向會與模擬問題相反。藉由伴隨控制方程式，模擬與觀測的誤差分佈就由伴隨狀態變數場來適切地描述，所以未知

參數的修正也可以由狀態變數和伴隨狀態變數的積分值計算得到一個合理的結果。對於異質性(heterogeneous)含水層而言，其參數處處不同，也一樣可以使用相同的梯度積分式計算，只是積分區域將針對各個參數所代表的區域積分。所以應用伴隨狀態法，僅需求解一次模擬問題與一次伴隨問題，所有參數的更新梯度可以同時評估完成。後續只需重複更新參數值直到演算法收斂，目標函數值小於容許值為止，即完成了地下水水力傳導係數的最佳估計。



## 附錄 B 參數檢定問題之實際求解過程

求解地下水流與傳輸之參數檢定問題步驟如下：

### 1. 正向模擬

首先求解穩態地下水流方程式：

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (-\mathbf{q}) + \frac{Q_{source}}{B} - \frac{Q_{sink}}{B} &= 0 \\ \mathbf{q} + K\nabla H &= \mathbf{0}, \quad (x,y) \in \Omega \end{aligned} \quad (B1)$$

離散後得：

$$\begin{aligned} -\frac{q_{xi+1/2,j} - q_{xi-1/2,j}}{\Delta x} - \frac{q_{yi,j+1/2} - q_{yi,j-1/2}}{\Delta y} + \frac{Q_{source}}{B} - \frac{Q_{sink}}{B} &= 0 \\ q_{xi+1/2,j} + K_{i+1/2,j} \frac{H_{i+1,j} - H_{i,j}}{\Delta x} &= 0, \quad i = 1, 2, \dots, M \\ q_{yi,j+1/2} + K_{i,j+1/2} \frac{H_{i,j+1} - H_{i,j}}{\Delta y} &= 0, \quad j = 1, 2, \dots, N \end{aligned} \quad (B2)$$

將所有離散方程式聯立，可以得到矩陣式如  $AH=B$ ，求解此矩陣式即可得到水頭分與流速分布場。

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\theta \mathbf{v} m_0) - \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \cdot \nabla m_0) + \frac{Q_{sink}}{B} m_0 &= \frac{Q_{source}}{B} t_s C_s \\ \nabla \cdot (\theta \mathbf{v} m_1) - \nabla \cdot (\theta \mathbf{D} \cdot \nabla m_1) + \frac{Q_{sink}}{B} m_1 &= \frac{Q_{source}}{B} \frac{t_s^2 C_s}{2} + \theta m_0 \end{aligned} \quad (B3)$$

離散後得：

$$\begin{aligned} &[D_{xyi,j} / 4\Delta y \Delta x + D_{yxi,j} / 4\Delta x \Delta y] m_{0i-1,j-1} + \\ &[-D_{xyi,j} / 4\Delta y \Delta x - D_{yxi,j+1} / 4\Delta x \Delta y] m_{0i-1,j+1} + \\ &[D_{xyi+1,j} / 4\Delta y \Delta x + D_{yxi,j+1} / 4\Delta x \Delta y] m_{0i+1,j+1} + \\ &[-D_{xyi+1,j} / 4\Delta y \Delta x - D_{yxi,j} / 4\Delta x \Delta y] m_{0i+1,j-1} + \\ &[D_{xxi,j} / \Delta x \Delta x - D_{yxi,j+1} / 4\Delta x \Delta y + D_{yxi,j} / 4\Delta x \Delta y + v_{xi,j} / 2\Delta x] m_{0i-1,j} + \\ &[D_{xyi+1,j} / 4\Delta y \Delta x - D_{xyi,j} / 4\Delta y \Delta x + D_{yyi,j+1} / \Delta y \Delta y - v_{yi,j+1} / 2\Delta y] m_{0i,j+1} + \\ &[D_{xxi+1,j} / \Delta x \Delta x + D_{yxi,j+1} / 4\Delta x \Delta y - D_{yxi,j} / 4\Delta x \Delta y - v_{xi+1,j} / 2\Delta x] m_{0i+1,j} + \\ &[-D_{xyi+1,j} / 4\Delta y \Delta x + D_{xyi,j} / 4\Delta y \Delta x + D_{yyi,j} / \Delta y \Delta y + v_{yi,j} / 2\Delta y] m_{0i,j-1} + \\ &[-D_{xxi+1,j} / \Delta x \Delta x - D_{xxi,j} / \Delta x \Delta x - D_{yyi,j+1} / \Delta y \Delta y - D_{yyi,j} / \Delta y \Delta y + \\ &+ v_{xi,j} / 2\Delta x - v_{yi,j+1} / 2\Delta y - v_{xi+1,j} / 2\Delta x + v_{yi,j} / 2\Delta y] m_{0i,j} + \frac{Q_{sink}}{\theta B} m_{0i,j} = \frac{Q_{source}}{\theta B} t_s C_s \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& [D_{xyi,j}/4\Delta y\Delta x + D_{yxi,j}/4\Delta x\Delta y]m_{1i-1,j-1} + \\
& [-D_{xyi,j}/4\Delta y\Delta x - D_{yxi,j+1}/4\Delta x\Delta y]m_{1i-1,j+1} + \\
& [D_{xyi+1,j}/4\Delta y\Delta x + D_{yxi,j+1}/4\Delta x\Delta y]m_{1i+1,j+1} + \\
& [-D_{xyi+1,j}/4\Delta y\Delta x - D_{yxi,j}/4\Delta x\Delta y]m_{1i+1,j-1} + \\
& [D_{xxi,j}/\Delta x\Delta x - D_{yxi,j+1}/4\Delta x\Delta y + D_{yxi,j}/4\Delta x\Delta y + v_{xi,j}/2\Delta x]m_{1i-1,j} + \\
& [D_{xyi+1,j}/4\Delta y\Delta x - D_{xyi,j}/4\Delta y\Delta x + D_{yyi,j+1}/\Delta y\Delta y - v_{yi,j+1}/2\Delta y]m_{1i,j+1} + \\
& [D_{xxi+1,j}/\Delta x\Delta x + D_{yxi,j+1}/4\Delta x\Delta y - D_{yxi,j}/4\Delta x\Delta y - v_{xi+1,j}/2\Delta x]m_{1i+1,j} + \\
& [-D_{xyi+1,j}/4\Delta y\Delta x + D_{xyi,j}/4\Delta y\Delta x + D_{yyi,j}/\Delta y\Delta y + v_{yi,j}/2\Delta y]m_{1i,j-1} + \\
& [-D_{xxi+1,j}/\Delta x\Delta x - D_{xxi,j}/\Delta x\Delta x - D_{yyi,j+1}/\Delta y\Delta y - D_{yyi,j}/\Delta y\Delta y + \\
& + v_{xi,j}/2\Delta x - v_{yi,j+1}/2\Delta y - v_{xi+1,j}/2\Delta x + v_{yi,j}/2\Delta y]m_{1i,j} + \frac{Q_{sink}}{\theta B} m_{1i,j} = \frac{Q_{source}}{\theta B} \frac{t_s^2 C_s}{2} + m_{0i,j}
\end{aligned} \tag{B4}$$

將所有離散方程式聯立，可以得到矩陣式如  $Am=B$ ，將先前所得水頭與流速代入可得所有的係數項，求解矩陣式即可得零階動差分布場；再將零階動差放入一階動差的矩陣式中，即可求解得到一階動差分布場，至此完成正向模擬，得四個狀態變數場。

## 2. 計算目標函數

$$E = \frac{1}{2} \sum_{x,y} [(H_{com} - H_{obs})^2 + (q_{xcom} - q_{xobs})^2 + (q_{ycom} - q_{yobs})^2 + (m_{0com} - m_{0obs})^2 + (m_{1com} - m_{1obs})^2] \tag{B5}$$

## 3. 伴隨問題模擬

伴隨問題數學方程式如下：

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial f}{\partial H} - \nabla \cdot (K \underline{\varphi}) = 0 \\
& \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} + \nabla \varphi_1 + \underline{\varphi} + m_0 \nabla \varphi_2 + m_1 \nabla \varphi_3 = \mathbf{0} \\
& \frac{\partial f}{\partial m_0} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_2) + \theta \underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \varphi_2 - \varphi_2 \frac{Q_{sink}}{B} + \varphi_3 \theta = 0 \\
& \frac{\partial f}{\partial m_1} + \nabla \cdot (\theta \underline{\mathbf{D}} \cdot \nabla \varphi_3) + \theta \underline{\mathbf{v}} \cdot \nabla \varphi_3 - \varphi_3 \frac{Q_{sink}}{B} = 0
\end{aligned} \tag{B6}$$

觀察其形式與模擬問題相同，差別只在某些正負號，僅需在離散式中將其符號變號即可；而多出來的源匯項恰好等於模擬誤差，所以將源匯項的數值加上此誤差即可，整個求解的矩陣式與正向模擬一模一樣，所以也是使用相同的電腦程式求解。唯一不同處在於，求解伴隨狀態變數場的過程是先求解一階動差的伴隨狀態變數場，而後將其視為源匯項進入求解零階動差的伴隨狀態變數場，最後是聯立求解水頭與流速的伴隨狀態變數場，求解順序恰好與正向模擬相反，所以有些研究亦將此稱為反向模擬。

#### 4. 參數更新

求解狀態變數場與伴隨狀態變數場後即可依據梯度積分是計算梯度值。

$$\frac{\partial E}{\partial K} = \int \phi \cdot \nabla H d\Omega \quad (B7)$$

將其離散為：

$$\frac{\partial E}{\partial K_i} = \sum_{\Omega_i} \left( \phi_x \frac{H_{i+1,j} - H_{i,j}}{\Delta x} + \phi_y \frac{H_{i,j+1} - H_{i,j}}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta y \quad (B8)$$

將計算所得之狀態變數與伴隨狀態變數值代入，即可一次估計得所有未知水利傳導係數之梯度值。此梯度值將代入參數更新式當中，以梯度搜尋法計算最佳修正步幅。參數更新式如下：

$$K^{n+1} = K^n - \lambda g \quad (B9)$$

以最陡坡降法為例，修正步幅等於 1,2,3,... 依序往梯度的反方向搜尋，直到找到目標函數值最小的點，其 K 值即為此次參數修正下之最佳解。再從這個解出發，重複步驟一至四，使誤差平方和不斷縮小，至可接受範圍為止，即得到參數之最佳估計值。



## 附錄 C 完整逆向問題之伴隨問題推導

伴隨狀態法 (Adjoint State Method, 簡稱 ASM) 由變分理論發展而來, 用來作為估計不確定性的工具。此方法廣泛應用於電子工程、大氣科學及河川演算等方面。在地下水應用上, 主要是用來作為參數檢定、敏感度分析、可靠度分析及試驗設計。

本研究將應用伴隨狀態法於地下水流參數檢定, 與初始條件、邊界條件資料同化的問題上。首先由狀態變數的控制方程式、初始條件與邊界條件, 推導出伴隨狀態變數之控制方程式、初始條件與邊界條件; 接著利用數值方法分別解出狀態變數與伴隨狀態變數隨時間與空間之變化情形; 再由解得之狀態變數與伴隨狀態變數, 計算目標函數對每個待定參數之偏微分值, 即目標函數對應於參數之梯度, 決定參數的調整方向。伴隨狀態法的優點之一, 是不管模式未知參數有幾個, 伴隨狀態法僅需求解一次狀態變數, 與一次伴隨狀態變數, 即可得所有參數的調整方向, 當參數數量多時, 可大幅提昇計算效率。

### 數學模式

真實世界是屬於較複雜的狀況, 一般會將其予以簡化並用一個簡單的數學模式表示。以水平一維等向性非均質拘限含水層之水平地下水流為例, 其控制方程式、初始條件與邊界條件表示如下:

$$\begin{aligned} GE: S \frac{\partial h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( T \frac{\partial h}{\partial x} \right) &= 0 \quad a \leq x \leq b, \quad 0 \leq t \leq t_f \\ IC: h|_{t=0} &= f_1 \\ BC: h|_{x=a} &= f_2, \quad T \frac{\partial h}{\partial x} |_{x=b} = q|_{x=b} = f_3 \end{aligned} \quad (\text{Original Problem}) \quad (C1)$$

其中,  $h$  為壓力水頭, 即為待解之狀態變數。  $S$  為貯蓄係數,  $T$  為水力傳導係數, 此二者即為含水層之參數。  $x$  為介於  $a$  到  $b$  之間的空間座標, 時間座標  $t$  由 0 開始到最終時間  $t_f$  結束。 初始條件  $f_1$  為初始壓力水頭分佈, 邊界條件  $f_2$  為定水頭邊界, 邊界條件  $f_3$  為定流量邊界,  $f_1$ 、 $f_2$ 、 $f_3$  為已知或待資料同化。

### 參數修正方向

ASM 法，首先對參數 T 取一維小擾動量  $\delta T$ ，此微小擾動量將造成狀態變數 h 產生一微小變化量  $\delta h$ ，此變化關係仍會滿足上述之控制方程式、初始條件與邊界條件：

$$\begin{aligned} GE: S \frac{\partial(h+\delta h)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} [(T+\delta T) \frac{\partial(h+\delta h)}{\partial x}] &= 0 \\ IC: h+\delta h|_{t=0} &= f_1 \\ BC: h+\delta h|_{x=a} &= f_2, \quad (T+\delta T) \frac{\partial(h+\delta h)}{\partial x}|_{x=b} = f_3 \end{aligned} \quad (C2)$$

將上式展開，但僅保留一次項、忽略高次項，可得變分控制方程式、初始條件與邊界條件：

$$\begin{aligned} GE: S \frac{\partial \delta h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \delta h}{\partial x} + \delta T \frac{\partial h}{\partial x}) &= 0 \\ IC: \delta h|_{t=0} &= 0 \\ BC: \delta h|_{x=a} &= 0, \quad T \frac{\partial \delta h}{\partial x} + \delta T \frac{\partial h}{\partial x}|_{x=b} = 0 \end{aligned} \quad \text{(Variational Problem)} \quad (C3)$$

將(C3)式的變分控制方程式乘以伴隨狀態變數  $\psi$ ，並對整個時間及空間積分：

$$\begin{aligned} &\int_0^{t_f} \int_a^b \phi [S \frac{\partial \delta h}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \delta h}{\partial x} + \delta T \frac{\partial h}{\partial x})] dx dt \\ &= \int_0^{t_f} \int_a^b [\phi S \frac{\partial \delta h}{\partial t} - \phi \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \delta h}{\partial x}) - \phi \frac{\partial}{\partial x} (\delta T \frac{\partial h}{\partial x})] dx dt = 0 \end{aligned} \quad (C4)$$

(a)                      (b)                      (c)

(a)、(C)、(c)三項分別處理。其中，(a)項：

$$(a): \int_0^{t_f} \int_a^b \phi S \frac{\partial \delta h}{\partial t} dx dt = \int_a^b \phi S \delta h|_0^{t_f} dx - \int_0^{t_f} \int_a^b S \delta h \frac{\partial \phi}{\partial t} dx dt \quad (C5)$$

(C)項應用 Green's Theorem：

$$\int_R \phi \nabla \cdot (k \nabla \psi) dR = \int_R \psi \nabla \cdot (k \nabla \phi) dR + \int_S k(\phi \nabla \psi - \psi \nabla \phi) \cdot n ds, \quad \text{將空間之積分轉化成邊}$$

界之積分，可得：

$$(b): \int_a^b \phi \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \delta h}{\partial x}) dx = \int_a^b \delta h \frac{\partial \phi}{\partial x} (T \frac{\partial \phi}{\partial x}) dx + \int_{\Gamma} T(\phi \frac{\partial \delta h}{\partial x} - \delta h \frac{\partial \phi}{\partial x}) \cdot n d\Gamma \quad (C6)$$

其中， $\Gamma$  代表空間之邊界，即 a 與 b。

(c)項應用 Green's Theorem：



$\int_R \phi \nabla \cdot (u \nabla \psi) dR = - \int_R u (\nabla \phi \cdot \nabla \psi) dR + \int_S u \phi \nabla \psi \cdot nds$ ，將空間之積分轉化成邊界之積

分，可得：

$$(c) : \int_a^b \phi \frac{\partial}{\partial x} (\delta T \frac{\partial h}{\partial x}) dx = - \int_a^b \delta T (\frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x}) dx + \int_{\Gamma} \delta T \phi \frac{\partial h}{\partial x} \cdot nd\Gamma \quad (C7)$$

再將轉換所得之(a)、(C)、(c)三項帶回原方程式(C4)，整理可得：

$$\begin{aligned} & \int_0^{t_f} \int_a^b [\phi S \frac{\partial \delta h}{\partial t} - \phi \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \delta h}{\partial x}) - \phi \frac{\partial}{\partial x} (\delta T \frac{\partial h}{\partial x})] dx dt \\ & = \int_a^b \phi S \delta h \Big|_0^{t_f} dx - \int_0^{t_f} \int_a^b [S \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \phi}{\partial x})] \delta h - (\frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x}) \delta T dx dt \\ & - \int_0^{t_f} \int_{\Gamma} [\phi (T \frac{\partial \delta h}{\partial x} + \delta T \frac{\partial h}{\partial x}) - T \delta h \frac{\partial \phi}{\partial x}] \cdot nd\Gamma dt = 0 \end{aligned} \quad (C8)$$

令最終條件、邊界條件為 0：

$$FC : \phi \Big|_{t_f} = 0$$

$$BC : \phi \Big|_{x=a} = 0, \quad T \frac{\partial \phi}{\partial x} \Big|_{x=b} = 0 \quad (C9)$$

代回(C8)式，最後簡化得：

$$- \int_0^{t_f} \int_a^b [S \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \phi}{\partial x})] \delta h + (\frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x}) \delta T dx dt = 0 \quad (C10)$$

取誤差平方和為目標函數，局部誤差平方為  $F(h, T)$ ，全域誤差平方為

$E(h, T)$ ：

$$E(h, T) = \int_0^{t_f} \int_a^b F(h, T) dx dt \quad (C11)$$

目標函數 E 為狀態變數 h 與水力傳導係數 T 之函數，此處假設 h、T 為獨立變數，對目標函數取變分，得：

$$\delta E = \int_0^{t_f} \int_a^b \frac{\partial F}{\partial T} \delta T + \frac{\partial F}{\partial h} \delta h dx dt \quad (C12)$$

將上式加上(C10)式，得

$$\delta E = \int_0^{t_f} \int_a^b [\frac{\partial F}{\partial h} - S \frac{\partial \phi}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \phi}{\partial x})] \delta h + [\frac{\partial F}{\partial T} + (\frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x})] \delta T dx dt \quad (C13)$$

(a)

(C13)式中的(a)項即為伴隨方程式，可以逆向積分滿足伴隨方程式的方式，使(a)項逐漸逼近於零。伴隨狀態變數之控制方程式、最終條件與邊界條件如下：

$$\begin{aligned}
GE: S \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial \phi}{\partial x}) - \frac{\partial F}{\partial h} &= 0 \\
FC: \phi|_{t_f} &= 0 \\
BC: \phi|_{x=a} &= 0, \quad T \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{x=b} = 0
\end{aligned}
\tag{Adjoint Problem} \tag{C14}$$

若上式中(a)項可以滿足伴隨方程式，即可消去得：

$$\frac{\delta E}{\delta T} = \int_0^{t_f} \int_a^b \frac{\partial F}{\partial T} + \left( \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) dx dt \tag{C15}$$

依據泰勒展開式： $\delta E = \frac{\partial E}{\partial T} \delta T + H.O.T.$ ，忽略高次項，(C15)式即為目標函數

對參數 T 之偏微分值，即目標函數對應於參數之梯度。

同樣的方法可以推得目標函數對應於參數 S 之偏微分值：

$$\frac{\delta E}{\delta S} = \int_0^{t_f} \int_a^b \frac{\partial F}{\partial S} + \phi \frac{\partial h}{\partial t} dx dt \tag{C16}$$

若(C3)式中的  $\delta h|_{t=0} \neq 0$ ，即狀態變數之初始條件為未知，同樣的方法可以推

導出目標函數對應於初始條件之偏微分值：

$$\frac{\delta E}{\delta h|_{t=0}} = - \int_a^b S \phi|_{t=0} dx \tag{C17}$$

經由初始條件的修正，最後會滿足  $\delta h|_{t=0} = 0$ 。

若(C3)式中的  $\delta h|_{x=a} \neq 0$ ， $T \frac{\partial \delta h}{\partial x} + \delta T \frac{\partial h}{\partial x}|_{x=b} = \delta q|_{x=b} \neq 0$ ，即狀態變數之邊界條

件為未知，可以推導出目標函數對應於邊界條件之偏微分值：

$$\begin{aligned}
\frac{\delta E}{\delta h|_{x=a}} &= - \int_0^{t_f} T \frac{\partial \phi}{\partial x}|_{x=a} dt \\
\frac{\delta E}{\delta q|_{x=b}} &= - \int_0^{t_f} \phi|_{x=b} dt
\end{aligned} \tag{C18}$$

同樣地，經由邊界條件的修正，最後會滿足  $\delta h|_{x=a} = 0$ ， $\delta q|_{x=b} = 0$ ，使得變分問題

(Variational Problem) 成立。

利用上述狀態變數的控制方程式與伴隨變數的控制方程式作參數檢定與資料同化時，僅需求解一次原始問題 (Original Problem) 與一次伴隨問題 (Adjoint

Problem), 即可求得所有參數、未知初始條件或邊界條件的梯度(即修正方向)。  
所有的參數或未知條件可一起修正, 與傳統作法比較, 大幅提昇了計算效率。





## 簡歷

劉宏仁  
台灣省台南縣人



### 學經歷

1980	出生
1986~1992	台南縣立仁德國小
1992~1995	台南縣立仁德國中
1995~1998	台灣省立台南一中
1998~2002	台灣大學土木工程學系
2002~2009	台灣大學土木工程研究所

### 個人著作

1. Hung-Jen Liu, Nien-Sheng Hsu, and Tim Hau Lee, Simultaneous Identification of Parameter, Initial Condition, and Boundary Condition in Groundwater Modeling, 2008, *Hydrological Processes*. 發表中
2. 劉宏仁、徐年盛、李天浩、林聖鈞, 「應用 AIC 指標優選地下水水位模擬之類神經網路結構」, 2008, 中國土木水利工程學刊。發表中
3. 劉宏仁、李天浩、徐年盛, 「伴隨狀態法於地下水流參數檢定與資料同化之應用」, 第六屆地下水資源及水質保護研討會, 93 年 4 月, 台中市逢甲大學。
4. 劉宏仁、徐年盛、李天浩, 「應用地下水傳輸模式於地下水污染來源追蹤」, 第十五屆水利工程研討會, pp. E166-E171, 國立中央大學, 桃園縣中壢市, 95 年 7 月。
5. 劉宏仁、李天浩、徐年盛, 「應用伴隨狀態法於耦合推估地下水系統之水文地質參數與微溶性非水相液體殘留量分佈」, 第十五屆水利工程研討會, pp. E179-E184, 國立中央大學, 桃園縣中壢市, 95 年 7 月。
6. 徐年盛、陳主惠、劉宏仁、林宏儒, 「孔隙介質中異質物對水力傳導係數及水力特性曲線影響之研究」, 2008, 農業工程研討會, 97 年 10 月, 臺北。

