

序率地下水污染擴散模擬

STOCHASTIC SIMULATION OF GROUNDWATER SOLUTE TRANSPORT

國立臺灣大學
生物環境系統工程學系
教授

余化龍*

Hwa-Lung Yu

對陳院長榮退的感言

我之所以選擇走上學術的道路，以及還留在學術圈中，陳主惠老師是對我影響最大的那個人。我從大學專題開始，就極其有幸地認識陳主惠老師，陳老師用身教的方式告訴我什麼是做學問的態度，什麼是對學術的熱誠，也慢慢地引發了我對學術的興趣，最後決定繼續在這條道路上努力。這篇論文是我未發表的碩士論文改寫，記錄著當年陳老師一步一步地帶著我探索序率分析這條道路的過程，我還深深地記得老師當年對我的期待，也感謝老師當年紮實的訓練，讓我至今還能在這領域持續努力與學習著。在學業外，陳老師對學生視如己出，一日為師、終身為父，非常感謝陳主惠老師對於學生的種種付出，恭喜陳院長卸下責任重擔並可以常常雲遊四海，陳主惠院長在學校期間對學術對學生的方式及態度，一直都是我的模範，是我努力與砥礪自己的方向。

摘要

由於地下水孔隙介質之異質特性，增加了對於地下水污染擴散範圍推估之不確定性。為了瞭解孔隙介質之異質性對於地下水水溶性污染物擴散特性之影響，本研究包括兩個部分，第一部分為透過隨機場理論，對於水力傳導係數隨機場以及速度場進行模擬，第二部分為發展隨機漫步法來近似地下水傳輸方程，對於地下水水溶性污染物之擴散過程進行模擬。其中隨機場模擬部分，本研究透過頻譜法進行隨機場模擬，並發展可考慮對於有水力傳導係數採樣之條件隨機場模擬，以考慮具有採樣資料下之不確定性分析。地下水傳輸模擬部分，本研究透過與污染傳輸方程之解析解之比較，驗證隨機漫步法結果之合理性。為探討結合條件隨機場模擬與隨機漫步法對異質性孔隙介質擴散之合理性，本研究將模擬結果與 Gelhar(1979) 以及 Dagan(1989) 所提出之解析解進行比較，另外透過發展模式模擬美國麻州 Cape Code 實驗場之水溶性污染物擴散情形。成果顯示本研究污染擴散推估之成果與解析解以及試驗資料皆有一定之吻合度。

關鍵詞：地下水、污染傳輸、隨機漫步法、隨機場。

* 通訊作者，國立臺灣大學生物環境系統工程學系教授

106 台北市大安區羅斯福路四段 1 號 · hlyu@ntu.edu.tw

STOCHASTIC SIMULATION OF GROUNDWATER SOLUTE TRANSPORT

Hwa-Lung Yu*

National Taiwan University Department of
Bioenvironmental Systems Engineering

ABSTRACT

The heterogeneity of porous media increases the uncertainty in the pollution extent estimation for groundwater solute transport. To assess the impact of porous media heterogeneity on the groundwater transport, this study applied random field theory for the simulation of hydraulic conductivity and groundwater flow and developed the random walk approach to approximate the solute transport in groundwater. A spectral-based conditional random field simulation approach was applied to perform the uncertainty analysis of transport characteristics with consideration of field hydraulic conductivity observations. Our development was verified by comparing the analytical solutions in published papers, and also validated by comparing the field concentration observations at Cape Cod in the US.

Keywords: Groundwater, Solute transport, Random walk, Random field.

一、前言

地下水資源一直以來都是人類賴以維生的資源，而在過去由於人們濫用造成地下水污染之問題，也在近幾年陸續地被發現，然而卻無法找到有效方法來處理與整治。一方面是無法對地底下的狀況做有效及完整地了解，另一方面是無法完整了解污染物的性質。因此若是能夠了解污染物於地下水中可能移動情形，將可對地下水污染的管理有相當大的幫助。若僅考慮水溶性污染物，地下孔隙介質的特性會嚴重影響到水溶性污染物的傳輸過程，然而受限於經費以及人力關係，一般工程上卻不可能對已知廠址做過多的採樣以及探測，去瞭解真正的水文地質特性。然而孔隙介質的異質性普遍存在於自然界中，Gelhar and Axness(1983)指出土壤水力傳導係數的異質特性為影響污染傳輸的主要因素。因此若是忽略土壤的異質性來考慮水溶性污染物的傳輸現象，將會低估水溶性污染物的影響範圍。對於土壤異質性對於水溶性污染傳輸的影響。為探討土壤異質性對於地下水污染傳輸之影響，Gelhar and Axness(1983)以及 Dagan(1984)分別利用頻譜法以及拉格藍基(Lagrangian)法分別描述異質性土壤中的地下水溶性污染物的傳輸行為，皆假設土壤對數水力傳導係數的分佈為定常性。

過去有許多學者利用統計相關隨機場來表示模擬孔隙介質的異質性。譬如，Wagner and Gorelick(1987, 1989)利用隨機場之模擬進行地下水整治的研究。Massmann and Freeze(1987)利用隨機場的產生來進行地下水污染管理之研究。P. Storck *et al.*(1997)利用隨機場產生研究地下水監測井位置放置問題。Bellin *et al.*(1992)以及 Tompson and Gelhar(1990)亦利用隨機場來研究污染物擴散於異質性土壤中的問題。在地下水污染模擬來說，有相當多方法可用來模擬水溶性污染物傳輸問題，包括有限差分法，有限元素法(Zienkiewicz, 1977)，修正型特性法(Cheng *et al.*, 1984)以及隨機漫步法(Kinzelbach, 1988)，由於解決污染傳輸問題的對流擴散方程式，其對流項及擴散項分別屬於雙曲線以及拋物線方程式，因此若是採用有限元素法以及有限差分法容易有數值擴散情形產生。以隨機漫步法由於是採用統計之方式去模擬對流擴散方程式，因此不會有數值擴散的情形產生，並且不會有質量平衡的問題

(Labolle *et al.*, 1996)，然而此一方法也會造成相當大的計算量。

本研究透過頻譜法進行隨機場模擬以及透過隨機漫步法來推估地下水污染擴散，發展考慮孔隙介質的異質特性下，地下水污染傳輸行為之模擬方式，一方面瞭解地下污染物在異質土壤中傳輸行為，另一方面可了解在有限資料下對於地下水污染傳輸範圍評估之不確定性。

二、隨機場建立與模擬

為了能夠對水文地質特性做一有效描述，統計相關理論被引用來解決目前尚未能解決的困難。將未知的現象，以隨機變數來表示，將不確知的現象，如降雨等，將所關心的一連串變數，以一隨機過程來表示。所謂空間隨機場，即是包含著統計的概念，代表著是一組空間隨機變數的集合。以機率的觀點去描述空間上我們有興趣的值以及不確定現象，一方面是機率這個觀念夠直觀，另一方面是機率有其完整的測度空間。本研究將採用頻譜法建立符合二階定常性空間隨機場，接著建立與實驗資料相符的條件隨機場，並產生相對應的速度場。

2.1 頻譜法

頻譜法主要精神為傅立葉轉換，

$$Z(x) = \int_{-\infty}^{\infty} Z(k) e^{2\pi i k x} dk \dots\dots\dots(1)$$

其中 $Z(x)$ 為空間變數， x 為一維位置變數， k 為波數，而 $Z(x)$ 表示頻率域的空間變數。然而當 $Z(x)$ 為隨機變數時，傅立葉轉換不一定存在，(1)是原本用的黎曼積分形式變得不適用，因此將原來的傅立葉轉換改寫成傅立葉-史丁矩(Fourier-Stieltjes)的積分形式

$$Z(x) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{2\pi i k x} dZ(k) \dots\dots\dots(2)$$

本研究以頻譜法模擬二維污染傳輸問題，產生二維之隨機場為

$$Z(x_1, x_2) = Z(m_1 \Delta x_1, m_2 \Delta x_2) \approx \sum_{n_1=0}^{L-1} \sum_{n_2=0}^{L-1} e^{i n_1 \Delta k_1 m_1 \Delta x_1 + i n_2 \Delta k_2 m_2 \Delta x_2} S(\xi(n_1 \Delta k_1, n_2 \Delta k_2)) e^{i \phi} (\Delta k_1 \Delta k_2)^{\frac{1}{2}} \dots\dots\dots(3)$$

S 為共變異函數所相對應的頻譜密度函數； $\xi(n)$ 為週期性轉換式； ϕ 模擬隨機產生的相位角。

2.2 條件隨機場

以頻譜法產生非條件隨機場時，以均勻分布產生相位角，可以藉由調整相位角來達成在已知點上資料符合的要求，調整相位角並不會影響隨機場於頻率域上的特性。若假設已知的實驗資料值為 $z(x_i)$ ，其中 x_i 為各已知點的位置， $i = 1, 2, \dots, n$ ，而模擬於已知點位置產生之值為 $z_s(x_i)$ ，首先由頻譜法產生一非條件隨機場，其相位角以均勻分布之方式給定，檢查模擬值與已知值是否接近，將所有已知位置的值相減，並予以標準化，檢查其大小，如下式的表示

$$\text{obj} = \sum_{i=1}^n \left| \frac{z(x_i) - z_s(x_i)}{z(x_i)} \right| \dots\dots\dots (4)$$

若 obj 的值小於某一設定之值，則表示模擬值均與已知值相近到一定程度，此模擬值則可拿來當作條件隨機場之值，反之，需要繼續計算，將各個模擬值給定為已知值，至於其他位置則維持原來先前產生的模擬值，利用離散傅立葉轉換，產生新的頻率域，且可由此一新的頻率域取得新的頻譜密度函數以及各個頻率值的相位角。其中各個位置的頻譜密度函數以及相位角可以式(5.1)和式(5.2)表示，

$$S(k) = [R(dZ(k))]^2 + [I(dZ(k))]^2 \dots\dots\dots (5.1)$$

$$\phi = \tan^{-1} \left(\frac{I(dZ(k))}{R(dZ(k))} \right) \dots\dots\dots (5.2)$$

由於隨機場的共變異函數在模擬開始時已經假設得知，因此其頻譜密度函數為固定，為維持原來相關函數的架構，模擬時維持原來的頻譜密度函數，而新的模擬採用所計算出來的相位角，重新產生一新的頻率域，再經由離散傅立葉逆轉換，產生新的模擬值，用以判斷是否符合模擬標準。

2.3 速度場

為了降低電腦的負荷量並加速模擬效率，本研究利用達西公式中流速與水力傳導係數的線性關係，直接產生相對應於已知水力傳導係數的空間隨機場的速度場。Gelhar and Axness(1983)得出於一等向性之土壤中，對數水力傳導係數擾動項之頻率， dZ_f ，與其對應

的達西速度擾動項頻率， dZ_{q_i} ，有以下的對應關係

$$dZ_{q_i} = K_G \left(J_i - \frac{J_j k_i k_j}{k^2} \right) dZ_f \dots\dots\dots (6)$$

其中 $k^2 = k_1^2 + k_2^2$ ， J_i 為 i 方向上的平均水力坡降， $K_G = \exp(\ln K)$ ，假設水頭 ϕ 可表示為 $\phi(x) = H(x) + h$ ， h 為水頭的擾動項，期望值為零，則 J_i 可表示為

$$J_i = - \frac{\partial H(x_i)}{\partial x_i} \dots\dots\dots (7)$$

假設 $J_1 = J$ ， $J_2 = 0$ ，則各個方向的速度頻率可依序寫為

$$dZ_{u_1'} = \frac{K_G J}{nk^2} k_1^2 dZ_f \dots\dots\dots (8.1)$$

$$dZ_{u_2'} = \frac{K_G J}{nk^2} k_1 k_2 dZ_f \dots\dots\dots (8.2)$$

經由傅立葉逆轉換可得 u_1 以及 u_2 的擾動項， u_1' 及 u_2' 於空間中的分布。因此產生的二維速度場可寫為

$$u_1 = \frac{K_G J}{n} + u_1' \dots\dots\dots (9.1)$$

$$u_2 = u_2' \dots\dots\dots (9.2)$$

三、隨機漫步法污染傳輸模擬

Fokker 以及 Planck 首先希望能夠以序率微分方程式在模擬巨觀現象外並將微觀的擾動行為給考慮進去，因此提出 Fokker-Planck 方程式，然而在此方程式中，所描述的巨觀變數屬於一個機率密度函數，以此一方程式來巨觀運動的平均以及微觀行為，一維的 Fokker-Planck 方程式可表示為

$$\frac{\partial f(x, t)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} D^{(1)}(x, t) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} D^{(2)}(x, t) \right] f(x, t) \dots (10)$$

$D^{(1)}(x, t)$ 可稱為移流係數， $D^{(2)}(x, t)$ 為擴散係數，而 $f(x, t)$ 為一推移機率密度函數。而布朗運動是最簡單的巨觀運動包含微觀行為之運動，一維 Langevin 方程式則為描述布朗運動中一自由粒子於空間中的移動的方程式，為了應用於計算機模擬，可將一維 Langevin 方程式寫成下列的離散形式

$$X_{n+1} = X_n + D^{(1)}(X_n, t_n) \Delta t + Z_n \sqrt{2D^{(2)}(X_n, t_n) \Delta t} \dots\dots\dots (11)$$

其中 X_n 為自由粒子於 n 時刻的位置， Δt 為電腦模

擬時計算的時間間距， Z_n 為一來自標準常態分配的隨機變數，且任何時間產生的隨機變數， Z_0, Z_1, \dots, Z_n 均互相獨立。

若將對流擴散方程式寫成一維形式，可寫為

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \dots\dots\dots (12)$$

其中 c 為污染物濃度(M/L^3)， u 為孔隙流速(L/T)。可發現 Fokker-Planck 方程式與對流擴散方程式相當近似，若將對流擴散方程式改寫為 Fokker-Planck 方程式形式，即可以利用離散型 Langevin 方程式來對對流擴散

方程式進行模擬，因此，一維對流擴散方程式可寫作

$$X_{n+1} = X_n u + \frac{\partial D}{\partial x} \Big|_{X_n, t_n} \Delta t + Z_n \sqrt{2D\Delta t} \Big|_{X_n, t_n} \dots\dots\dots (13)$$

上式中，第二項被稱為對流項，其中 $u\Delta t$ 表達在一時間間距下的平均移動距離， $\frac{\partial D}{\partial x} \Delta t$ 是一校正項，為了避免粒子不正常地在低擴散係數的區域堆積(Uffink, 1988)。第三項則被稱為擴散項。而由於此式每一個時間間距均是一定率項加上一隨機項，因此利用此式來模擬對流擴散行為時，被稱為隨機漫步法。二維之隨機漫步模擬方程式可寫為

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= X_n + \left(u_x + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} \right) \Delta t + \sqrt{2\Delta t} \left(Z_{1x} \sqrt{D_{xx}} + Z_{2x} \sqrt{D_{xy}} \right) \dots\dots\dots (14) \\ Y_{n+1} &= Y_n + \left(u_y + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} \right) \Delta t + \sqrt{2\Delta t} \left(Z_{1y} \sqrt{D_{yy}} + Z_{2y} \sqrt{D_{yx}} \right) \end{aligned}$$

隨機漫步法以自由粒子的移動來模擬污染物之移動，在任何一時間間距下，若假設 u 為常數，自由粒子的移動距離可由改寫為

$$\Delta X_\eta = \left(u + \frac{\partial D}{\partial x} \right) \Delta t + Z_n \sqrt{2D\Delta t} \dots\dots\dots (15)$$

其中 ΔX_η 代表一自由粒子於位置 η 在 Δt 時間下的移動距離。經過隨機變數標準化後會趨近於標準常態分配的分布，若是假設 M 個自由粒子來模擬污染物的擴散行為，由於假設每一自由粒子的移動為獨立，不受其他粒子所影響，則污染物於時間 t 的濃度分布可寫為下列的離合機率密度函數

$$f_C(\eta_t) \sim N \left(\eta_0 + \left(u + \frac{\partial D}{\partial x} \right) t, 2Dt \right)^M \dots\dots\dots (16)$$

因此可藉由二項式分布的概念，求取於任一時間和位置的污染濃度分布

$$P(c(\eta, t)) = \frac{k}{M} \Big|_{\phi \leq \eta \leq \phi + \varepsilon} \dots\dots\dots (17)$$

其中 ϕ 表示任一位置， ε 表示一很小的距離， k 代表在 ε 間距中的粒子個數，在式(16)中的 p 與 q 可寫為

$$\begin{aligned} p &= \int_{\phi}^{\phi + \varepsilon} f_C(\eta_t) d\eta t \dots\dots\dots (18) \\ q &= 1 - p \end{aligned}$$

若是模擬污染物瞬間投入污染區的情形，則於時間初始，以一定數量之粒子代表污染濃度，置入污染區域。假設污染源區域濃度為 C_0 ，污染源區域體積為 V_p ，模擬區域任一網格的體積為 V_g ，粒子數量為 N ，則每一粒子所表的濃度為

$$c_p = \frac{C_0 V_p}{N V_g} \dots\dots\dots (19)$$

若是模擬一穩定濃度污染源對污染區域的影響，為了保持污染源的濃度為固定，則在每一次模擬時間間距，均投入一定量的粒子數，然而需確保污染源的連續性，每個時間間距必須控制在所有污染物不會完全流出原本的污染體積，否則會造成污染濃度的低估，需要符合

$$\frac{Q_s \Delta t}{C_0 V_p} \leq 1 \dots\dots\dots (20)$$

其中 Q_s 代表污染源流出的流量，因此每個時間間距投入粒子數目乃根據下式

$$PN = IN \frac{V_p - V_f}{V_p} \dots\dots\dots (21)$$

其中 IP 為初始時代表濃度的粒子數。 V_f 為每個時間間距流出污染區域的體積。

四、模擬結果

4.1 一維瞬間污染源模擬

若於 $t = 0$ 於原點處置入將一瞬間污染源，質量為 M ，在沒有背景濃度下，可寫出下列的初始及邊界條件

$$\begin{cases} C(x,t) = 0 & \text{if } x \neq 0, t = 0 \\ C(x,t) = 0 & \text{if } x = \infty, t > 0 \end{cases} \dots\dots\dots (22)$$

其中 $C(x, t)$ 為濃度， M 為單位體積下所投入的污染物，則可得到下列之解析解

$$C(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x-ut)^2}{4Dt}\right) \dots\dots\dots (23)$$

其中 D 為擴散係數， u 為 x 方在的孔隙流速。隨機漫步法模擬一維瞬間污染源的對流擴散方程式之解析解，模擬時條件列於表 1，模擬結果亦比較模擬粒子數對模擬結果的精確度加以比較，並分別模擬隨機變數為均勻分配與隨機變數為常態分配的情形，模擬結果如圖 1。

表 1 一維瞬間污染情形濃度分佈模擬條件

模擬區域	$X = 1000$ $\Delta X = 20$	$Y = 1$ $\Delta Y = 1$	$Z = 1$ $\Delta Z = 1$
模擬邊界	自由邊界		
濃度	於開始瞬間於 $100 \leq X \leq 101$ 之位置置入濃度為 100 的 N 個粒子之污染物		
速度	$V_x = 2$	$V_y = 0$	$V_z = 0$
區域延散係數	$\alpha_L = 20$	$\alpha_T = 1$	
模擬時間	$T = 200$	$\Delta t = 0.5$	

4.2 一維連續污染源模擬

若將一瞬間污染源於原點處至入，在沒有背景濃度下，可寫出下列的初始及邊界條件

$$\begin{cases} C(x,t) = C_0 & \text{if } -\infty \leq x \leq 0, t \leq 0 \\ C(x,t) = 0 & \text{if } x > 0, t = 0 \\ C(x,t) = 0 & \text{if } x = \infty, t > 0 \end{cases} \dots\dots\dots (24)$$

其中 C_0 為污染源的濃度，則可得到下列解析解

$$\frac{C(x, t)}{C_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left[\frac{x-ut}{2\sqrt{Dt}}\right] + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{ux}{D}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{(x+ut)}{2\sqrt{Dt}}\right] \dots\dots\dots (25)$$

以隨機漫步法模擬一維連續污染源的對流擴散方程式之解析解，模擬時條件列於表 2，模擬隨機變數為均勻分配於圖 2。

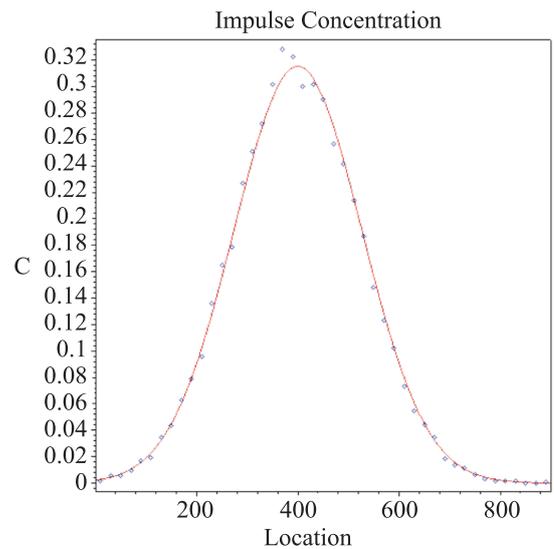


圖 1 一維瞬間污染情形濃度分布模擬圖(分配：常態；粒子數：20,000)

表 2 一維瞬間污染情形濃度分佈模擬條件

模擬區域	$X = 1000$ $\Delta X = 20$	$Y = 1$ $\Delta Y = 1$	$Z = 1$ $\Delta Z = 1$
模擬邊界	自由邊界		
濃度	於每個時間間距於 $0 \leq X \leq 1$ 之位置置入濃度為 100 的 N 個粒子之污染物		
速度	$V_x = 2$	$V_y = 0$	$V_z = 0$
區域延散係數	$\alpha_L = 20$	$\alpha_T = 1$	
模擬時間	$T = 200$	$\Delta t = 0.5$	

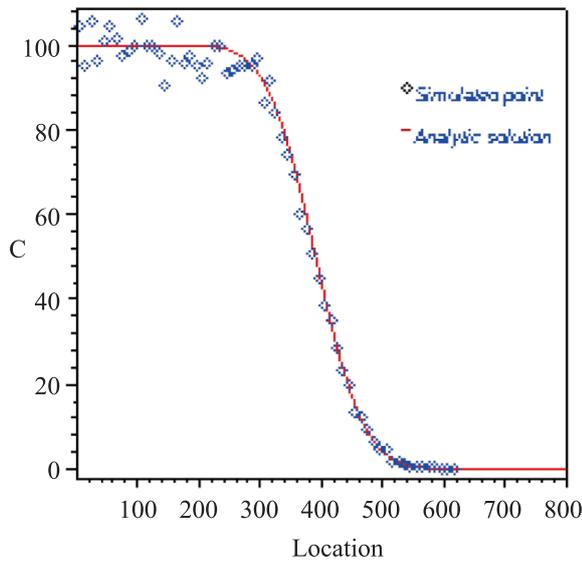


圖 2 一維連續污染情形濃度分布模擬圖(分配：均勻；粒子數：100)

4.3 二維異質性污染傳輸模擬

為了探討異質性污染物傳輸特性，Gelhar and Axness(1983)在地下水污染傳輸一階近似假設下(即不考慮流速與土壤異質擾動項交錯之影響)，推得二維傳輸行為的軸向穩態巨觀延散係數解析為

$$A_{11} = \frac{\sigma_f^2 \lambda}{\gamma^2} \dots\dots\dots (26)$$

其中 σ_f^2 為對數水力傳導係數擾動項的變異數， λ 為土壤對數水力傳導係數之相關長度(L)， γ 為一流動因子，可寫為 $\gamma = \frac{q}{J_1 K_G}$ ，而 $K_G(x) = \exp(F(x))$ ， J_1 為地下水主要流向之梯度。另一方面，Dagan(1984)則在一階近似假設並假設地下水污染受速度影響高於區域擴散係數的影響，假設在等向性土壤下，描述污染物沿主軸方向擴散變異可分別寫為

$$X_{11} = \lambda^2 \sigma_f^2 \left\{ 2t' - 2 \left[\frac{3}{8} - \frac{4}{t'} + \frac{8}{t'^3} - \frac{8}{t'^2} \left(1 + \frac{1}{t'^2} \right) \exp^{-t'} \right] \right\} \dots\dots\dots (27)$$

其中 $t' = \frac{tU}{\lambda}$ ， t 為時間， U 為污染物移動沿均勻流方向之平均速度。巨觀延散係數則分為表面(apparent)巨觀延散係數以及有效(effective)巨觀延散係數，可分別定義為

表 3 二維異質土壤中傳輸模擬

模擬區大小(m)	256	256
模擬區間距(m)	0.5	0.5
相關長度(m)	1	1
污染初始位置(m)	10 < x < 12	128 < x < 129
平均水力傳導係數 K_G (m/d)	1	
孔隙率	0.4	
梯度	-0.04	
粒子數	10000	
延散係數(m)	0.05	0.005
時間(day)	T = 2000	

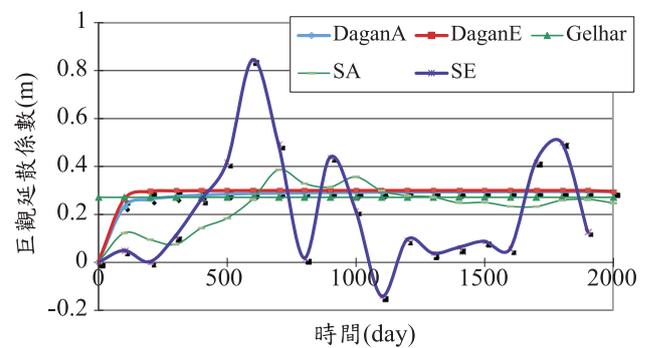


圖 3 對數水力傳導係數為 0.3 時，巨觀延散係數隨時間變化圖

$$A_{11}^a = \frac{X_{11}}{2Ut} \dots\dots\dots (28.1)$$

$$A_{11}^e = \frac{1}{2U} \frac{dX_{11}}{dt} \dots\dots\dots (28.2)$$

由於一階近似假設，上述延散係數之解析解需要對數水力傳導係數變異數不能太大，一般來說需要 $\sigma_f^2 < 1$ 。為了評估污染模擬之傳輸擴散情形，本研究透過 Gelhar et al. (1979)以及 Dagan(1989)提出描述時變性之軸向巨觀擴散係數的方法，來分別評估模擬之表面以及有效巨觀延散係數，亦即

$$SA_{11}^a(t) = \frac{\text{Var}(X)}{2Ut} \dots\dots\dots (29.1)$$

$$SA_{11}^e(t) = \frac{1}{2U} \frac{d\text{Var}(X)}{dt} \Big|_t - \alpha_L \dots\dots\dots (29.2)$$

其中 $\text{Var}(X)$ 為隨機漫步法之模擬粒子於流向方向之變異數，此一變異數於模擬期間會隨著時間增加而變化。二維異質性土壤中污染傳輸模擬條件如表 3，並分別就不同的對數水力傳導係數模擬結果計算結果如圖 3，圖中符號對應於表 4。不同模擬狀況的污染物移動平均對時間關係如圖 4。

表 4 符號對應表

DaganA	Dagan 理論表面巨觀延散係數
DaganE	Dagan 理論有效巨觀延散係數
Gelhar	Gelhar 理論穩態巨觀延散係數
SA	模擬表面巨觀延散係數
SE	模擬有效巨觀延散係數

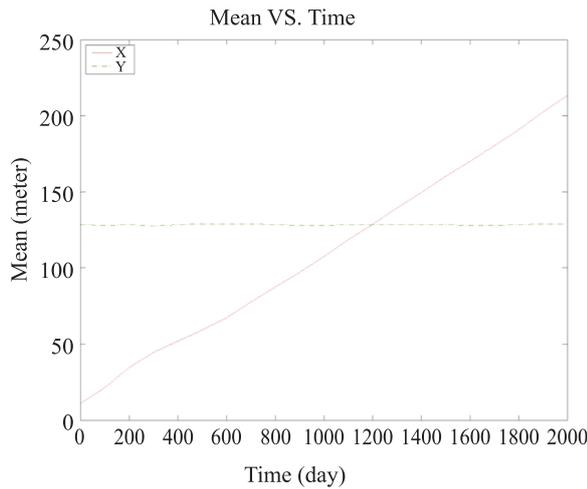


圖 4 對數水力傳導係數變異數 0.3 時模擬粒子平均位移對時間圖

4.4 Cape Cod 廠址實驗驗證

自 1985 年起，美國國家地理調查所(USGS)於美國麻州 Cape Cod 進行一項自然梯度大尺度之追蹤劑試驗，包括會反應及不會反應之追蹤劑，歷時達三年，其目的為測量各種追蹤劑在現地傳輸情形。此區域主要由砂土及礫石所構成，經量測發現其水力傳導係數的變化並不大，由於天候之關係，該區域降水量並不大，地下水位變化皆於 1 公尺以內，由於實驗之前十七個月地下水位震盪僅有 0.3 公尺，是故將此區域視為固定水力梯度之區域。經實測其水力梯度大概為 0.0015。此實驗區域之現地情形如圖 5。

本模擬採用前人對本實驗場地所分析得到之相關數據(Grarabedian *et al*, 1991; Hess *et al*, 1992; LeBlanc *et al*, 1991)，列於表 5，應用於污染物傳輸模擬，並將模擬得到污染物的平均位移與實驗所得之真實數據作比較，模擬及果如圖 6。

五、結論與建議

本研究主要目的在於模擬地下水溶性污染物於異質性土壤中的傳輸行為，其中以隨機漫步法模擬水溶

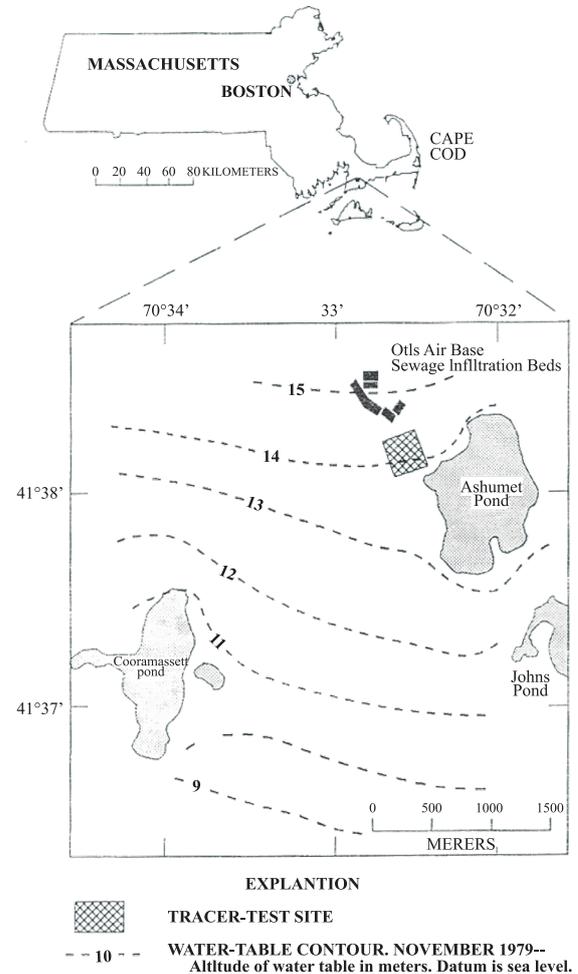


圖 5 Cape Cod 實驗場區域圖

表 5 Cape Cod Tracer Test 基本資料

相關長度	2.6m	2.6m
水力梯度	0.0015	
對數水力傳導係數之變異	0.24	
區域延散係數(m)	0.96	0.018
Mean K	110m/day	
孔隙率	0.39	
初始濃度	640mg/L	

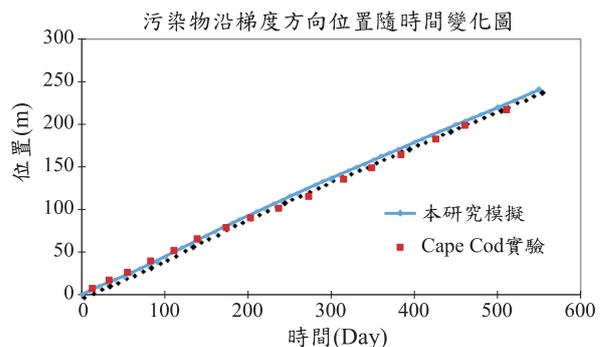


圖 6 模擬污染物沿梯度方向平均位移距離對時間關係與實驗結果對照圖

性污染物傳輸並結合隨機場的產生用以模擬異質性土壤，發現在土壤的異質性會造成污染擴散範圍增大，異質性越明顯，污染擴散範圍也就會越大，而且是遠大於假設土壤為均質情形下污染擴散情形，因此在推估地下水溶性污染物之傳輸行為時，應考慮土壤異質性之影響。

以隨機漫步法可模擬污染物分佈隨時間的變化情形，當模擬對數傳導係數很小時的污染傳輸問題時，估計的表面巨觀擴散係數會隨時間漸漸地逼近 Gelhar 所推求的穩態近似解。隨機漫步法的隨機變數不論是均勻分佈或常態分佈，均可得到不錯的模擬結果，因此在利用隨機漫步法模擬污染傳輸問題時，建議可採用均勻分佈之亂數產生器，以加速模擬速度。對隨機漫步法來說，控制庫倫係數在無論均質或異質土壤中的污染傳輸模擬，均是相當重要，於均質性土壤中是排除污染模擬結果跳動的問題，於異質性土壤中是排除模擬粒子被不正常囚禁以及增加模擬粒子速度正確性的問題。

本研究以隨機漫步法模擬均勻流下於小對數水力傳導係數變異數下的污染傳輸行為，主要目的是希望能與 Gelhar 以及 Dagan 的近似解做一比較，然而在許多實際的污染傳輸過程中，此一狀況並不一定符合，因此建議在未來可利用流場模式求解在大對數水力傳導係數變異數的流場，並模擬地下水溶性污染傳輸行為，應用於實際狀況模擬。在許多實際情形中，地下水流況會隨著季節、降雨或是抽水而有所改變，以隨機漫步法模擬地下水污染傳輸的好處是模擬污染物之粒子，其移動方式由每一個時間間距下各土壤區塊中的流動特性，因此建議可將此一方法應用於模擬非穩態地下水流況下的污染傳輸行為。本研究乃根據飽和情況下的對流擴散方程式；若是在非飽和土壤中的污染傳輸，根據的即為非飽和情況下的對流擴散方程式，由於隨機漫步法亦可模擬非飽和對流擴散方程式，非飽和的水力傳導係數值亦可由隨機場分別代表飽和對數水力傳導係數以及形狀因子來模擬。

參考文獻

1. Bellin, A., P. Salandin, and A. Rinaldo, Simulation of dispersion in heterogeneous porous formations: statistical first-order theories, convergence of computations, *Water Resour. Res.*, 28(9), 2211-2227, 1992.
2. Cheng R. T., V. Casulli, and S. N. Milford, Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates, *Water Resour. Res.*, 20(7), 944-952, 1984
3. Dagan G., Solute Transport in Heterogeneous Porous Formations, *J. Fluid Mech.*, 145, 151-177, 1984.
4. Dagan G., *Flow and Transport in Porous Formations*, Springer-Verlag, New York, 1989.
5. Garabedian, S. P., D. R. LeBlanc, L. W. Gelhar, and M. A. Celia, Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts 2. Analysis of Spatial Moments for a Nonreactive Tracer, *Water Resour. Res.*, 27(5), 911-924, 1991.
6. Gelhar, L. W. and C. W. Axness, Three Dimensional Analysis of Macrodispersion in Aquifers, *Water Resour. Res.*, 19(1), 161-180, 1983.
7. Gelhar, L. W., A. L. Gutjahr, and R. L. Naff, Stochastic Analysis of Macrodispersion in a Stratified Aquifer, *Water Resour. Res.*, 15(6), 1387-1397, 1979.
8. Hess, K. M., S. H. Wolf, and M. A. Celia, Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts 3. Hydraulic Conductivity Variability and Calculated Macrodispersivities, *Water Resour. Res.*, 28(8), 2011-2027, 1992.
9. Kinzelbach W., The random walk method in pollutant transport simulation, *Groundwater flow and quality modeling*, 227-245, 1988
10. LeBlanc, D. R., S. P. Garabedian, K. M. Hess, L. W. Gelhar, R. D. Quardi, K. G. Stollenwerk, and W. W. Wood, Large-Scale Natural Gradient Tracer Test in Sand and Gravel, Cape Cod, Massachusetts, 1. Experimental Design and Observed Tracer Movement, *Water Resour. Res.*, 27(5), 895-910, 1991.
11. Massmann, J., and R. E. Freeze, Groundwater contamination from waste management sites: The interaction between risk-based engineering and regulatory policy, 1, *Methodology*, *Water Resour. Res.*, 23(2), 351-367, 1987.
12. Storck, P., J. W. Eheart, and A. Valocchi, A method for optimal location of monitoring wells for detection of groundwater contamination in three-dimensional heterogeneous aquifers, *Water Resour. Res.*, 33(9), 2081-2088, 1997.
13. Tompson, A. F. B., and L. W. Gelhar, Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media, *Water Resour. Res.*, 26(10), 2541-2562, 1990.

14. Uffink, G. J. M., Modelling of Solute Transport with the Random Walk Method, *Groundwater Flow and Quality Modelling*, 247-265, 1998.
15. Wagner, B. J., and S. M. Gorelick, Optimal groundwater quality management under parameter uncertainty, *Water Resour. Res.*, 23(7), 1162-1174, 1987.
16. Wagner, B. J., and S. M. Gorelick, Reliable aquifer remediation in the presence of spatially varying hydraulic conductivity: From data to design, *Water Resour. Res.*, 25(10), 2211-2225, 1989.
17. Zienkiewicz, O. C., *The finite-element method*, McGraw-Hill, London, 1977.

收稿日期：民國 108 年 06 月 18 日

修正日期：民國 109 年 02 月 05 日

接受日期：民國 109 年 02 月 07 日