

利用對稱三階因子載荷得點擬牛頓法於 地下水數值模式參數檢定與監測站網設計

Use of Symmetric Rank-three Vectorized Loading-Scores Quasi-Newton Algorithm for
Identification of Multiple Parameters and Monitoring Network Design in Groundwater
Modeling

國立臺灣大學
土木工程學系
兼任教授

徐年盛*

Nien-Sheng Hsu

國立臺灣大學
土木工程學系
博士後研究員

黃建霖

Chien-Lin Huang

國立臺灣大學
土木工程學系
碩士

謝亦歡

I-Huan Hsieh

國立臺灣大學
水工試驗所
助理研究員

劉宏仁

Hung-Jen Liu

國立臺灣大學
土木工程學系
博士生

姚俊豪

Chun-Hao Yao

摘 要

為了近似地下水流模式參數檢定的 Hessian 矩陣、解決非線性不適定問題(ill-posed problem)並檢測目標函數全域最小區，本研究修改 Levenberg-Marquardt 和 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno 演算法，以提出兩種對稱三階載荷得點擬牛頓演算法，第一種使用敏感度分解的高低階載荷得點計算 Hessian 的校正矩陣，第二種利用蓄水量模擬誤差分解的多階載荷得點近似 Hessian 及 Jacobian 矩陣，以求解地面水補注量、邊界補注量、河床滲漏率、含水層水力傳導係數和阻水層滲漏係數之時空分佈。為了加速方向性收斂、趨近全域最佳解並達成適定性問題，本研究使用向量化有限可切換步長逆向求解地下水流問題，以修正搜索方向並減少異類參數之差異。此外利用敏感度載荷得點分解地下水觀測輔助井網優選模式之目標函數(估計參數共變異數矩陣之行列式最小化)，以有效率的計算新增輔助井之最佳位置。本研究設計兩數值實驗以驗證載荷得點擬牛頓法的辨識能力，結果顯示利用 Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓法所檢定水力傳導係數之平均誤差分別為 4.26 %、0.02 %和 1.33 %、地面水補注量的誤差分別為 1.71 %、0.66 %和 4.20 %；證實敏感度擬牛頓可藉由去蕪存菁的方式，配合設定的目標函數(模擬蓄水量的最小平方誤差)，較精確的近似 Hessian 矩陣以檢定收斂至真解；模擬誤差擬牛頓可相對於 Levenberg-Marquardt 和敏感度擬牛頓降低 34.88 %的暫態模擬次數及計算成本。本研究應用建立的優選模式率定名竹盆地之地下水流數值模式，模擬均方根誤差(RMSE)顯示，第一含水層的地下水位變化趨勢能準確

模擬，新民、N4 與竹山站模擬與觀測歷線之相關係數可分別達到 0.971、0.969 與 0.678；新增輔助井後三站的 RMSE 相較無輔助井模式降低 33.4 %、31.7 %與 30.2 %，明顯提升地下水頭擬合之精度；證實使用地下蓄水變化量的多階載荷所決定之輔助井位，可有效減少水位模擬之限制及不確定性；配合研發的演算法能有效偵測流動敏感度和誤差來源以量化時空校正，並精確模擬地下水位的峰值和波動。

關鍵詞：地下水流模擬、參數檢定、擬牛頓演算法、奇異值分解、因子載荷得點。

* 通訊作者，國立臺灣大學土木工程學系
10617 台北市羅斯福路四段 1 號，nsshue@ntu.edu.tw

Use of Symmetric Rank-three Vectorized Loading-Scores Quasi-Newton Algorithm for Identification of Multiple Parameters and Monitoring Network Design in Groundwater Modeling

Nien-Sheng Hsu*

National Taiwan University
Department of Civil
Engineering

Chien-Lin Huang

National Taiwan University
Department of Civil
Engineering

I-Huan Hsieh

National Taiwan University
Department of Civil
Engineering

Hung-Jen Liu

National Taiwan University
Hydrotech Research Institute

Chun-Hao Yao

National Taiwan University Department of
Civil Engineering

ABSTRACT

To approximate the Hessian matrix for identifying groundwater flow model parameters, solve the nonlinear ill-posed problem, and detect the minimum area of the objective function, this study modified the Levenberg-Marquardt and Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno algorithms to propose two symmetric rank-three loading-score quasi-Newton algorithms. To solve the aquifer hydraulic conductivity, riverbed leakage conductivity, aquitard leakance conductivity, surface recharge, and boundary recharge, the first uses high-low-rank loading-score of sensitivity decomposition to calculate the Hessian correction matrix, and the second uses the multi-rank loading-score of simulated storage error decomposition to approximate Hessian and Jacobian matrices. To accelerate the directional convergence, approach the global optimal solution, and achieve the well-posed problem, this study uses the vectorized limited switchable step size to inversely solve and to correct the searching direction and reduce the difference between different parameters. Besides, this study uses the sensitivity loading-score decomposed from the objective function of the groundwater auxiliary monitoring-well network optimization model (*i.e.* minimize the determinant of the estimated parameter covariance matrix) to efficiently calculate the optimal newly-added auxiliary-well position. This study designed two numerical experiments to verify the identification capability of the proposed loading-score quasi-Newton algorithms. Results show that the average errors of hydraulic conductivity identified by Levenberg-Marquardt, decomposed sensitivity, and simulated error quasi-Newton algorithm is 4.26%, 0.02%, and 1.33%, respectively, and those of surface recharge is 1.71%, 0.66%, and 4.20%. It proved that the sensitivity decomposition quasi-Newton can be more precisely approximate the Hessian matrix and converge to the true solution by decontaminating the sensitivity difference in transmissive flow cooperated with the designed objective function (least square error of simulated storage). Compared with Levenberg-Marquardt and sensitivity decomposition quasi-Newton, the simulated error decomposition quasi-Newton can reduce the number of transient simulations and calculation cost by 34.88%. The established optimization model is applied to calibrate the groundwater flow numerical model of Ming-Chu Basin. The root means square error (RMSE) shows that the changing trend in groundwater level of

the first aquifer can be accurately simulated. The correlation coefficients between simulated and observed groundwater levels in Stations Sin-Ming, N4, and Chu-Shan can reach 0.971, 0.969, and 0.678, respectively. The RMSE of the three stations after adding the auxiliary-wells is reduced by 33.4%, 31.7%, and 30.2%, respectively, compared with those without auxiliary wells, which significantly improves the head-fitting accuracy. It proved that the auxiliary-well position determined by the storage-fluctuant multi-rank loading can effectively reduce the limitation and uncertainty of groundwater level simulation. Moreover, the proposed algorithm can efficiently detect the flow sensitivity and error source to quantify the spatiotemporal correction vector and achieve accurate groundwater-head simulation in the peak and fluctuation.

Keywords: Groundwater modeling, Spatiotemporal parameter identification, Quasi-Newton algorithm, Singular value decomposition, Factor loading and score.

Hsu, N.S.*, Huang, C.L., Hsieh, I.H., Liu, H.J., & Yao, C.H. (2021). "Use of Symmetric Rank-three Vectorized Loading-Scores Quasi-Newton Algorithm for Identification of Multiple Parameters and Monitoring Network Design in Groundwater Modeling." *Journal of Taiwan Agricultural Engineering*, 67(4), 1-28. [https://doi.org/10.29974/JTAE.202112_67\(4\).0001](https://doi.org/10.29974/JTAE.202112_67(4).0001)

一、前言

台灣位於東亞沿岸與太平洋交界處，全年受到季風影響，加上夏季颱風侵襲，因此降雨量十分豐沛；然而由於台灣地勢坡陡流急及山脈阻隔效應，造成降雨時空分布不均及地表逕流截蓄不易，地面水資源無法滿足各標的用水需求，地下水因此成為相當重要的水資源替代來源。然而由於民眾與政府鑿井取用地下水資源缺乏適當管理，多數區域有地下水超抽之情形，導致地下水位大幅下降而引發地層下陷、海水入侵等災害，對於環境、經濟及民生安全造成相當大的影響及衝擊。為了有效且合理的研擬地下水管理策略，就必須足夠了解地下水系統抽水量、淨補注量及參數隨時間與空間之分佈，並且選擇適合的地下水流數值模式(例如 MODFLOW)作為評估工具。建立數值模式前，須針對該研究區域之地下水系統進行資料蒐集及流入量辨識，以設定模式初始及邊界條件，最後進行模式率定，以驗證該模式具有確實模擬地下水流動之能力。

輸入地下水流數值模式之補注量、抽水量與流失量為影響地下水位最直接的關鍵因素，其估算的時空分布影響水文地質參數之辨識準確度甚劇。前人研究經常廣泛使用地下水位歷線波動法(Water-Table Fluctuation method, WTF)於辨識系統流出入量^[1,9,11,12,16,17]，然而其質量守恆方程式與同位素分析法結合後，僅能估算地下水系統各類型抽水量與補注量之時間分佈。舉例來說，Arnold *et al.* (2000)^[1]分別採用 SWAT (Soil and Water Assessment Tool model) 的土壤水平衡分析與河川基流分離法的修正退水曲線估算地下水系統之補注量與流失量。Healy *et al.* (2002)^[11]指出地下水位波動法為最廣泛應用於估計地下水補注量之方法(Gerhart, 1986)^[9]，該方法總和簡化各種複雜的地下水流動機制，僅能估算團塊系統中補注量之時間變化趨勢。Lee *et al.* (2008)^[16]運用土壤水分收支平衡法(soil moisture budget method)估算集水區入滲量、逕流量、蒸發散量及地下水補注量之時間分布，並在忽略蒸發散量之條件下應用河川基流分離法估算清水溪之地下水補注量。Martinez *et al.* (2010)^[17]結合地下水位波動法及水平衡方程式於估算抽水量，結果顯示該方法對於乾旱或半乾旱之氣候區域有較高的適用性，而且估算結果對於比出水量及半變異數模型有相當高的敏感度。Hsu *et al.* (2013)^[12]將濁水溪沖積扇地下水抽水量分為全年穩定之非灌溉抽水量與多類期作灌溉抽水量，並應用地下水-降雨歷線與農委會灌溉抽水紀錄，估算各類型抽水量之時間分布；接著利用地下水

位波動配合抽水率估算降雨日與非降雨日之補注量，並配合同位素分析法分離雨水與河水之補注量、灌溉抽水量紀錄區分灌溉補注量與區外地下水補注量，最後使用地下水平衡方程式反推流失量。

美國地質調查所(USGS)開發的三維地下水流數值模式 MODFLOW 經過率定後，藉由有限差分法模擬雨水、河水入滲、邊界補注及井群抽水的時空分布對於含水層地下水位之影響和衝擊^[14,22]，可釐清及評估地下水與河水之相互關係，以作為地下水資源規劃之依據。舉例來說，Igboekwe *et al.* (2008)^[14]採用 MODFLOW 與河川套件建立奈及利亞 Kwa Ibo 河集水區之地下水流數值模式，以評估河水與含水層間之交換量。Takounjou *et al.* (2009)^[22]採用 Visual-MODFLOW 與河川套件建立喀麥隆 Anga'a 河流域之地下水流汙染物質傳輸模式，以釐清河水與地下水含水層之交換量。Sheffer *et al.* (2010)^[21]連結日補注評估模式(Daily Recharge Assessment Model, 簡稱 DREAM)與地下水流模式(FEFLOW)進行地下水位率定，以探討氣候變遷情境下，地下水補注率之時空分布。模式參數檢定是建模的重要步驟，其中非線性規劃(nonlinear programming)常作為建模的工具，而非線性規劃當中的牛頓法為傳統地下水建模的參數辨識方法，其透過初始猜測參數序列 η^0 尋找目標函數一階偏導數的根 $J'(\eta^*)=0$ ， η^0 使用敏感度係數(模式輸出對於參數的一階偏導數)矩陣 Jacobian matrix 收斂至最佳解 η^* 。為了提高參數(決策變數)檢定的收斂速度，高斯-牛頓法(Floudas and Pardalos, 2008)^[8]使用目標函數對於參數的二階偏導數方陣 Hessian matrix 於參數檢定，Hessian 描述參數函數的局部曲率，因此高斯-牛頓法相較於牛頓法沿著更短、更直接的方向路徑來優選參數值(Mittelhammer *et al.*, 2000)^[18]。然而找到高維度的 Hessian 逆矩陣是一項昂貴的操作，可使用各種分解或近似迭代方法來解決。但是計算完整的 Hessian 矩陣元素需要耗費的模擬次數及記憶體為參數數量之平方，這對於具有多個參數的高維函數/模式來說是不可行的(Nocedal and Wright, 2006)^[20]。另外，如果 Hessian 與不可逆矩陣相似，則反相的 Hessian 可能在數值上不穩定且解可能會發散，因此改良梯度的變化構造於近似 Hessian 矩陣的擬牛頓演算法: Jacobian 擬牛頓法、Levenberg-Marquardt 演算法(LMA)和 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS)演算法被開發出來。

Jacobian 擬牛頓法經常高估 Hessian 矩陣(Nocedal and Wright, 2006)^[20]，因此在具有流通性的地下水問題中可能無法保證收斂性，而且可能陷入不適定問題(ill-

posed problem)，造成優選過程中目標函數值達到區域最小，但是對應之參數非為真解。LMA 由於增加了對角線校正矩陣，因此比 Jacobian 擬牛頓法更為強健，但是 LMA 往往收斂較為緩慢；而且 LMA 的搜尋解僅在初始估計值已接近目標函數全域最小時，才會收斂至全域最佳解(Kanzow *et al.*, 2005)^[15]。BFGS 演算法僅適用於求解非限制的優選問題，而且除非函數在最佳位置附近具有二次泰勒展開特性，否則牛頓法和 BFGS 演算法不能保證收斂(Curtis and Que, 2015)^[5]。導致上述挑戰的主要原因為 Jacobian 擬牛頓法的步長(step size)·LMA 的 Marquardt 阻尼因子(damping factor)和 BFGS 的割線比例因子(secant scale factor)為純量性質。

傳統擬牛頓演算法透過純量步長 $\alpha^k > 0$ 最小化目標函數 $J = f(\boldsymbol{\eta}^k + \alpha^k \cdot \mathbf{d}^k)$ ，使用線搜尋演算法(line search)沿著計算方向 $\mathbf{d}^k$ 尋找下一組解 $\boldsymbol{\eta}^{k+1}$ 。線搜尋法是透過最小化目標函數來搜尋純量步長最佳解的兩種迭代方法之一，另一方法為信賴域法(trust region)。line search 首先計算目標函數 J 的梯度下降方向，並沿著該方向計算步長，以優選參數向量 $\boldsymbol{\eta}^k$ 應沿該方向 $\mathbf{d}^k$ 移動多遠。常用的雙誤位置趨近法(double false position method)所搜尋的最小值須置於一區間中，因此能確保收斂並應對更困難的問題(Dahlquist and Björck, 2003)^[6]，進化版本採用系統方法收縮內部圍繞區間，並且著重於近似求解速度；若電腦程式需要在運行過程中反覆求解方程式，則可節省時間的更快方法將成為首選。如果純量步長擴展到向量化有限步長，將可修改方向 $\mathbf{d}^k$ 以更好地近似 Hessian，為了加快步長圍繞區間之收縮，初始間隔和加速方法的選擇為有效優選之關鍵。

為了減少擬牛頓法經常高估 Hessian 矩陣之情形，需要將敏感度矩陣 Jacobian matrix 降維度(常用方法如主成分分析等)後再進行 Hessian 矩陣之近似。主成分分析(Principal Component Analysis, PCA)將原始多變數以線性權重組合轉換為數量相同、相互獨立的新變數，稱為主成分。經驗正交函數(Empirical Orthogonal Function, EOF)也透過此原理計算影響訊號整體變化趨勢之主要因子，近年來也逐漸被應用於辨識地下水系統之水位時空變動特徵。舉例來說，Moon *et al.* (2004)^[19]應用主成份分析於南韓 62 口監測井之地下水位歷線，並將其分為五種類型，Type I 歷線反映季節性之補注型態，Type II 反映降雨造成地下水位迅速抬升，Type III 反映融雪入滲補注，Type IV 反映抽水導致之水位洩降。Yu *et al.* (2010)^[26]分析濁水溪沖積扇 66 口觀測井之地下水位資料，結果發現經驗正交函數 EOF1 主要反映補注量之空間分佈，EOF2 反映扇尾區

域因養殖漁業人為抽水所導致地下水位之洩降，EOF3 反映局部降雨所造成地下水位抬升。Yu *et al.* (2015)^[27]整合經驗正交函數分析與小波轉換分析，以調查地下水系統補注特性之時空分布。上述研究指出主成分分析所得之多階層因子(multi-rank factor)載荷(loading)-得點(score)有助於將觀測或模擬的地下水位空間-時間歷線分解，並透過成份組合、消去或萃取以辨識地下水系統抽水、補注等流出入量之時空分布及流況；然而當區域觀測井不足或分布不均時，較難模擬出真實流況，故如何建立系統化的方法於選取觀測輔助井位，促進模式模擬更貼近現地流況為相當重要之主題。

本研究目的為利用多階層載荷得點建立擬牛頓參數檢定的演算法，以快速且有效的檢定地下水流數值模式參數之真解。本研究使用主成分分析辨識地下水收支量隨時間與空間之變化分布，特別利用奇異值分解所得之敏感度載荷得點資訊於新增輔助井，並結合地下蓄水變化歷線分析和分解的模擬誤差載荷得點，以評估影響模擬精度之各項因素，接著針對各類型雨水、河水與邊界補注量及水力傳導係數進行時空分布之檢定修正，最後將所建立的方法應用於名竹盆地地下水流數值模式之參數檢定及最佳監測站網設計。

2. 方法建立

本研究修改 Levenberg-Marquardt 及 BFGS 演算法，利用向量化可切換步長，提出對稱三階載荷(loading)-得點(score)擬牛頓法，求解地下水文地質參數及補注量之時空分佈；茲將發展的參數檢定優選模式敘述於 2.2 節，求解參數修正方向之理論敘述於 2.3 節。本研究利用奇異值分解(Singular value decomposition, SVD)計算敏感度和模擬誤差矩陣的多階載荷得點，以分別較精確的近似 Hessian 矩陣和減少模擬計算成本(2.4 節)，並建立向量化多階導數精確雙圍繞點位趨近於步長優選之方法(2.5 節)。2.6 節則展示利用敏感度分解的多階載荷得點於決定新增觀測輔助井最佳位置之方法理論，茲將研究步驟敘述於 2.1 節。

2.1 研究流程

本研究流程可分為三大部分：(1)地下水流數值模式建立與參數初始值估算；(2)敏感度與模擬誤差分解的載荷得點於參數檢定方向計算之方法建立與應用；(3)利用載荷得點於參數修正步長向量精確搜尋法和

地下水觀測井網設計之建立與應用；其流程如

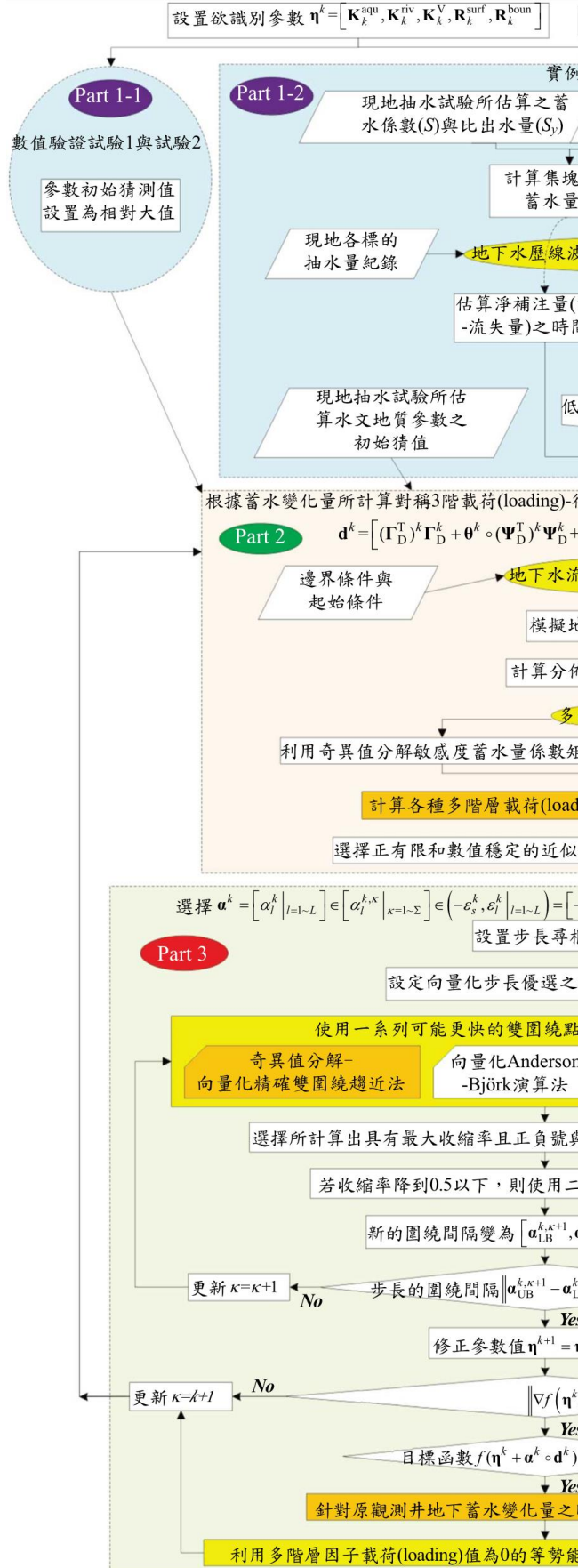


圖 1 所示。茲將研究步驟分述於下：

步驟 1：設定檢定參數 $\eta^k =$

$[K_k^{aqu}, K_k^{riv}, K_k^V, R_k^{surf}, R_k^{boun}]$ 的迭代計數器 $k = 0$ 和參數向量的初始猜值 η^0 (原理詳述於 2.2 節)。

步驟 1-1：數值試驗 1 與 2 的 η^0 設定為一相對大值。

步驟 1-2：在實際應用中，補注量時空初始值由集塊式蓄水量波動歷線分析，配合抽水率所估算補注量之時間分佈(Hsu et al., 2013)^[12]，乘上分佈式入流量歷線(蓄水變化量+抽水量)所計算因子載荷空間分布來估算，水文地質參數根據現地抽水試驗來估算初始值。

步驟 2：分別將敏感度矩陣和模擬蓄水誤差或變化量矩陣分解，計算對稱三階載荷得點 $[(\Gamma_D^T)^k \Gamma_D^k + \theta^k \circ (\Psi_D^T)^k \Psi_D^k + \omega^k \circ (\Gamma_D^T)^k \Psi_D^k]$ 於估算目標函數的二階導數下降方向 $d^k = [(\Gamma_D^T)^k \Gamma_D^k + \theta^k \circ (\Psi_D^T)^k \Psi_D^k + \omega^k \circ (\Gamma_D^T)^k \Psi_D^k]^{-1} \cdot (J_D^T)^k \cdot r(\eta^k)$ (詳述於 2.3 與 2.4 節)。

步驟 2-1：根據設定的水文地質參數、抽水量與補注量時空分布、邊界和初始條件，使用 MODFLOW-2005 模擬含水層地下水位之時空分布(Winston, 2009)^[23]。

步驟 2-2：根據現地抽水試驗所估算的儲水係數和比出水率、鑽探的水文地質架構和觀測/模擬的地下水頭歷線，計算分佈的地下蓄水量歷線。

步驟 2-3：分別將敏感度矩陣 $(J_D^T)^k$ (如式(11a)所示)和模擬蓄水誤差矩陣 $r(\eta^k)$ (原觀測井模式所使用，如式(11b)所示)或模擬蓄水變化矩陣(新增輔助井模式所使用，如式(11c)所示)進行奇異值分解，計算高階與低階載荷得點 $(\Psi_D^k$ 與 $\Gamma_D^k)$ 並利用組合係數 θ^k 與 ω^k 近似 Hessian 和 Jacobian 矩陣，接著選擇正有限和數值穩定的近似矩陣計算方向 d^k ，以搜尋全域最小解。

步驟 3：求解步長向量 $\alpha^k = [\alpha_l^k |_{l=1 \sim L}] \in$

$[\alpha_l^{k,K} |_{\kappa=1 \sim \Sigma}] \in [-\varepsilon_{s,f}^k, \varepsilon_{s,f}^k] = [-\varepsilon^k, \varepsilon^k]$ 以最小化目標函數 $f(\eta^k + \alpha^k \cdot d^k)$ (如 2.5 節所述)。

步驟 3-1：設定步長尋根迭代計數器 $\kappa = 0$ ，並設置向量化步長優選的初始間隔為

$$\left[\mathbf{a}_{LB}^{k,0}, \mathbf{a}_{UB}^{k,0} \right] = \left[-\mathbf{e}^k, \mathbf{e}^k \right]。$$

步驟 3-2：使用多階導數雙圍繞點位(double false position bracketing)趨近法優選步長向量，包括利用奇異值分解階層-深度(SVD rank-depth)資訊的向量化趨近法、向量化的 Anderson-Björk 和 Illinois 演算法計算收縮中點 $\mathbf{a}_{MP,l}^{k,\kappa}$ ，其計算方法原理詳述於 2.5 節與式(15)。

步驟 3-3：選擇具有最大收縮率且正負號與 $J'(\mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa})$ 相同的 $\mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa} = \left[\mathbf{a}_{MP,l}^{k,\kappa} \mid l=1 \sim L \right]$ 。

步驟 3-4：若收縮率降到 0.5 以下，則使用二分法(bisection)計算 $\mathbf{a}_{MP,l}^{k,\kappa} = \frac{\mathbf{a}_{LB,l}^{k,\kappa} + \mathbf{a}_{UB,l}^{k,\kappa}}{2}$ 。

步驟 3-5：新的圍繞間隔變為 $\left[\mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa+1}, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa+1} \right] = \left[\mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa}, \mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa} \right]$ 。令 $\kappa = \kappa + 1$ 並返回步驟 3-2。

步驟 3-6：直到步長的圍繞間隔 $\left\| \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa+1} - \mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa+1} \right\| < \text{容忍度}$ 。

步驟 4：更新 $\mathbf{\eta}^{k+1} = \mathbf{\eta}^k - \mathbf{a}^k \circ \mathbf{d}^k$ 。設置 $k = k + 1$ 並返回步驟 2-1。

步驟 5：直到目標函數的下降梯度 $\left\| \nabla f(\mathbf{\eta}^k, \mathbf{a}^k) \right\| < \text{容忍度}$ 。

步驟 6：若 $f(\mathbf{\eta}^k + \mathbf{a}^k \circ \mathbf{d}^k) > \text{容忍度}$ ，針對原觀測井地下蓄水變化量之時空分布進行奇異值分解，利用多階層載荷值為 0 的等勢能線交點，決定新增觀測輔助井之最佳位置(原理詳述於 2.6 節)，接著返回步驟 2-1。

2.2 地下水流模擬模式參數檢定之優選模式建立

傳統模式率定方法使用模擬地下水頭的最小二乘誤差(least-squares error, LSE)為最小化的目標函數，以根據有限數量的觀測值($h_{t,s,y}^{\text{obs}}$)優選水文地質參數或抽水量/補注量($\mathbf{\eta}$)之時空分布，可表示如式(1a)所示(Yeh, 1986)^[24]。考量影響地下水頭波動的主控因子：受壓含水層的儲水係數與非受壓含水層的比出水量之間的階數差異極大，本研究特別提出利用模擬與觀測蓄水量歷線($q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}}$ 與 $q_{t_s,s_f,f}^{\text{obs}}$)的 LSE 作為優選參數向量 $\mathbf{\eta}$ 之目標函數，如式(1b)所示：

$$\begin{aligned} \text{Min}_{\mathbf{\eta}} J(\mathbf{\eta}) = & \left[h_{t,x,y}^{\text{sim}}(\mathbf{\eta}) - h_{t,x,y}^{\text{obs}} \right]^T \left[h_{t,x,y}^{\text{sim}}(\mathbf{\eta}) - h_{t,x,y}^{\text{obs}} \right] \dots\dots\dots (1a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Min}_{\mathbf{\eta}} J(\mathbf{\eta}) = & \sum_{f=1}^F \sum_{s_f=1}^{S_f} \sum_{t_s=1}^{T_s} (q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}}(\mathbf{\eta}) - q_{t_s,s_f,f}^{\text{obs}})^2 \dots\dots\dots (1b) \\ = & \sum_{m=1}^M (g_m^{\text{sim}}(\mathbf{\eta}^k) - g_m^{\text{obs}})^2 = \sum_{m=1}^M r_m^2(\mathbf{\eta}^k) \end{aligned}$$

其中， $h_{t,x,y}^{\text{sim}}(\mathbf{\eta})$ 為根據估算參數 $\mathbf{\eta}$ 於觀測井處的模擬地下水頭； $q_{t_s,s_f,f}^{\text{obs}}$ 與 $q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}}$ 分別為根據含水層 f 、分區 s_f 、時刻 t_s 的觀測與模擬地下水位所計算出的觀測與模擬蓄水量(徐年盛等, 2012)^[28]； F 為含水層總數。式(1b)假設地下水系統在含水層 f 有 s_f 個觀測井及多個時間期距 T_s ，並使用 $M = T_s \times S_f \times F$ 分別取代 $q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}}$ 和 $q_{t_s,s_f,f}^{\text{obs}}$ 的下標符號並將其表示為 g_m^{sim} 與 g_m^{obs} 。為了建立簡潔且高效率的優選模式，本研究根據觀測井位置使用 Voronoi 分區方法(Cooley, 1977^[4]; Carrera and Neuman, 1986^[3])進行參數空間分區。

假設抽水量之時空分佈可根據水井普查及用電量紀錄預先估算得到，蓄水係數和比出水量可從抽水試驗獲得；接著設定優選模式所估算的參數向量 $\mathbf{\eta} = \left[\mathbf{Q}^{\text{pw}}, \mathbf{K}^{\text{aqu}}, \mathbf{K}^{\text{riv}}, \mathbf{K}^{\text{V}}, \mathbf{R}^{\text{surf}}, \mathbf{R}^{\text{boun}} \right]$ ，包括含水層水力傳導係數 $\mathbf{K}^{\text{aqu}} = \left\{ K_{s_f,f}^{\text{aqu}} \mid s_f = 1, \dots, S_f; f = 1, \dots, F \right\}$ 、河床滲漏傳導係數 $\mathbf{K}^{\text{riv}} = \left\{ K_{\tau_\gamma,\gamma}^{\text{riv}} \mid \tau_\gamma = 1, \dots, R_\gamma; \gamma = 1, \dots, H \right\}$ 、阻水層滲漏透水性係數 $\mathbf{K}^{\text{V}} = \left\{ K_{s_f,f}^{\text{V}} \mid s_f = 1, \dots, S_f; f = 1, \dots, F \right\}$ 和地面水補注量 $\mathbf{R}^{\text{surf}} = \left\{ R_{t_s,s_f}^{\text{surf}} \mid s_f = 1, \dots, S_f \right\}$ 與邊界補注量 $\mathbf{R}^{\text{boun}} = \left\{ R_{t_s,\alpha_f,f}^{\text{boun}} \mid \alpha_f = 1, \dots, B_f; f = 1, \dots, F \right\}$ 之時空分布；向量 $\mathbf{\eta}$ 含有 L 個參數數量， $L = F \times S_f + R_f + (F-1) \times S_f + T_s \times S_f + T_s \times F \times B_f$ ，其中 $K_{s_f,f}^{\text{aqu}}$ 為含水層 f 區域 s_f 的水力傳導係數[LT^{-1}]； $K_{\tau_\gamma,\gamma}^{\text{riv}}$ 為河川 γ 、河段 τ_γ 的河床水力傳導係數[LT^{-1}]； $R_{t_s,s_f}^{\text{surf}}$ 為時刻 t_s 於區域 s_f 的地面水補注量； $R_{t_s,\alpha_f,f}^{\text{boun}}$ 為含水層 f 的邊界線 α_f 在時刻 t_s 的邊界補注量[L^3T^{-1}]； T_s 、 H 、 R_γ 與 B_f 分別為總時間期距、河流總數、河流 γ 的總河段數和含水層 f 的總分界線數量。

本優選模式包含四條限制式，分別如式(2a)至式(2d)所示：(1)多種類型的補注量時空分布應符合質量守衡；(2)地下水頭模擬應遵循控制方程式(2b)；(3)水文地質參數應符合現地抽水試驗及地質鑽探的土壤組成所容許的上下限；以及(4)地面水補注量分配應符合降雨量與河川逕流量所容許的上下限。水文地質參數

和補注量於實際問題的檢定通常屬於大尺度高度非線性的優選問題。

s.t.

$$\sum_{f=1}^F \sum_{s_f=1}^{S_f} \sum_{\alpha_f=1}^{B_f} \sum_{t_s=1}^{\omega} [R_{t_s, s_f}^{\text{surf}} + R_{t_s, f, \alpha_f}^{\text{boun}}] = \sum_{t_s=1}^{\omega} Q_{t_s}^R \quad \dots\dots\dots (2a)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z}) + W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad \dots\dots\dots (2b)$$

$$\begin{aligned} & [(\mathbf{K}^{\text{aqu}})^{\text{LB}}, (\mathbf{K}^{\text{riv}})^{\text{LB}}, (\mathbf{V}^{\text{L}})^{\text{LB}}] \leq \\ & [\mathbf{K}^{\text{aqu}}, \mathbf{K}^{\text{riv}}, \mathbf{V}^{\text{L}}] \leq \quad \dots\dots\dots (2c) \\ & [(\mathbf{K}^{\text{aqu}})^{\text{UB}}, (\mathbf{K}^{\text{riv}})^{\text{UB}}, (\mathbf{V}^{\text{L}})^{\text{UB}}] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & [(\mathbf{R}^{\text{surf}})^{\text{LB}}, (\mathbf{R}^{\text{boun}})^{\text{LB}}] \leq \\ & [\mathbf{R}^{\text{surf}}, \mathbf{R}^{\text{boun}}] \leq \quad \dots\dots\dots (2d) \\ & [(\mathbf{R}^{\text{surf}})^{\text{UB}}, (\mathbf{R}^{\text{boun}})^{\text{UB}}] \end{aligned}$$

其中， $Q_{t_s}^R$ 為由地下水歷線分析法(徐年盛等，2012)^[28]所估算 t_s 時刻地下水系統之總補注量； ω 為月日數； K_{xx} 、 K_{yy} 和 K_{zz} 是沿著 x 、 y 和 z 方向的水力傳導係數[LT^{-1}]； S_s 是孔隙介質的比儲水率[L^{-1}]； W 是單位體積的通量，代表流入入地下水系統的補注量(正值)和抽水量(負值)[T^{-1}]；上標 UB 和 LB 分別代表參數的上限和下限。

2.3 改良式對稱三階載荷得點擬牛頓法於求解地下水流參數

在非線性規劃中，牛頓法試圖從初始猜值 $\boldsymbol{\eta}^0$ 透過迭代序列 $\boldsymbol{\eta}^k$ 來找到 J' 的根，該序列在滿足 $J'(\boldsymbol{\eta}^*)=0$ 的條件下收斂至某參數值 $\boldsymbol{\eta}^*$ 。該 $\boldsymbol{\eta}^*$ 是 J 的靜止點(stationary point)，其中目標函數 J 圍繞 $\boldsymbol{\eta}^k$ 的二階泰勒展開式 $J_T(\boldsymbol{\eta}^*)$ 為：

$$\begin{aligned} J_T(\boldsymbol{\eta}^{k+1}) &= J_T(\boldsymbol{\eta}^k + \Delta\boldsymbol{\eta}^k) \approx J(\boldsymbol{\eta}^k) + J'(\boldsymbol{\eta}^k)^T \cdot \\ & \Delta\boldsymbol{\eta}^k + \frac{1}{2} (\Delta\boldsymbol{\eta}^k)^T J''(\boldsymbol{\eta}^k) \cdot \Delta\boldsymbol{\eta}^k + \text{HOT} \quad \dots\dots\dots (3) \end{aligned}$$

理想情況下，我們希望選擇 $\Delta\boldsymbol{\eta}^k$ 使得 $\boldsymbol{\eta}^k + \Delta\boldsymbol{\eta}^k$ 為 J 的靜止點。使用此泰勒展開作為近似，可求解得到 $\Delta\boldsymbol{\eta}^k$ 相對應展開導數的根：

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{d\Delta\boldsymbol{\eta}^k} (J(\boldsymbol{\eta}^k) + J'(\boldsymbol{\eta}^k)^T \cdot \Delta\boldsymbol{\eta}^k + \frac{1}{2} (\Delta\boldsymbol{\eta}^k)^T J''(\boldsymbol{\eta}^k) \cdot \Delta\boldsymbol{\eta}^k) \\ &= J'(\boldsymbol{\eta}^k) + J''(\boldsymbol{\eta}^k) \cdot \Delta\boldsymbol{\eta}^k \quad \dots\dots\dots (4) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta\boldsymbol{\eta}^k = -[J''(\boldsymbol{\eta}^k)]^{-1} J'(\boldsymbol{\eta}^k) \quad \dots\dots\dots (5)$$

將 $J'(\boldsymbol{\eta}^k)$ 替換為梯度 $\nabla J(\boldsymbol{\eta}^k)$ 、二階導數的倒數 $[J''(\boldsymbol{\eta}^k)]^{-1}$ 替換為 Hessian 矩陣的逆矩陣 $[H(\boldsymbol{\eta}^k)J(\boldsymbol{\eta}^k)]^{-1}$ ，上述迭代法可推導至多個參數維度，如下所示：

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\eta}^k - [H(\boldsymbol{\eta}^k)J(\boldsymbol{\eta}^k)]^{-1} \nabla J(\boldsymbol{\eta}^k), k \in \square \quad \dots\dots\dots (6)$$

若 J 的所有二階偏導數存在並且在函數域上是連續的，則 Hessian 矩陣 $\mathbf{H}$ 通常定義如下：

$$\mathbf{H}(\boldsymbol{\eta}^k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_1^2} & \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_1 \partial \eta_2} & \dots & \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_1 \partial \eta_L} \\ \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_2 \partial \eta_1} & \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_2 \partial \eta_L} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_L \partial \eta_1} & \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_L \partial \eta_2} & \dots & \frac{\partial^2 J}{\partial \eta_L^2} \end{bmatrix} \quad \dots\dots\dots (7)$$

在 J 的局部最小區，Hessian 矩陣為半正定的。高斯-牛頓法在每次迭代中， $J_T(\boldsymbol{\eta}^k)$ 由圍繞 $\boldsymbol{\eta}^k$ 的二次函數進行近似，配合使用一個純量步長 $\alpha \in (0,1)$ 移動至該函數的最小值，如式(8a)所示。Jacobian 擬牛頓法使用 Jacobian 矩陣 $\mathbf{J}_D$ 迭代地近似 Hessian 矩陣 $\mathbf{H} \approx 2\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D$ ，如式(8b)所示。Levenberg-Marquardt 演算法添加一個單位矩陣 $\mathbf{I}$ 至 Hessian 矩陣 $\mathbf{H} \approx \mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D + \lambda \mathbf{I}$ ，並在迭代間調整尺度比例，其中增量向量朝著最陡坡降方向旋轉，如式(8c)所示。Fletcher 於 1971 年提出將梯度分量按照曲率縮放(亦即將單位矩陣取代為 $\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D$ 的對角矩陣)，可避免小梯度方向的緩慢收斂並增加較大的移動(Nocedal and Wright, 2006)^[20]，減輕較大的阻尼係數 λ 所帶來不利影響，以解決線性不適定問題(ill-posed problems)，如式(8d)所示。BFGS 演算法透過使用牛頓方程式的模擬解設置搜索方向 $\mathbf{d}^k = -\mathbf{H}^{-1}(\boldsymbol{\eta}^k) \nabla J(\boldsymbol{\eta}^k) \approx -\mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\eta}^k) \nabla J(\boldsymbol{\eta}^k)$ ，以求解非限制非線性優選問題，其中 $\mathbf{A}(\boldsymbol{\eta}^k)$ 為近似的 Hessian 矩陣，如式(8e)所示。

Gauss-Newton:

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\eta}^k - \alpha^k [H(\boldsymbol{\eta}^k)J(\boldsymbol{\eta}^k)]^{-1} \nabla J(\boldsymbol{\eta}^k), k \in \square \quad \dots\dots\dots (8a)$$

Jacobian quasi-Newton:

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\eta}^k - \alpha^k [2\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D]^{-1} \mathbf{J}_D^T \mathbf{r}(\boldsymbol{\eta}^k), k \in \square \quad \dots\dots\dots (8b)$$

$$\mathbf{J}_D^T(\boldsymbol{\eta}^k) = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathcal{G}_1^{\text{sim}}}{\partial \eta_1} & \frac{\partial \mathcal{G}_2^{\text{sim}}}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_1} & \dots & \frac{\partial \mathcal{G}_M^{\text{sim}}}{\partial \eta_1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial \mathcal{G}_1^{\text{sim}}}{\partial \eta_L} & \frac{\partial \mathcal{G}_2^{\text{sim}}}{\partial \eta_L} & \dots & \frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_L} & \dots & \frac{\partial \mathcal{G}_M^{\text{sim}}}{\partial \eta_L} \end{bmatrix}_{L \times M} \quad (8c)$$

Levenberg-Marquardt algorithm:

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\eta}^k - \left[\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D + \lambda \mathbf{I} \right]^{-1} \mathbf{J}_D^T \mathbf{r}(\boldsymbol{\eta}^k), k \in \square \quad (8d)$$

Fletcher-modified LMA:

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\eta}^k - \left[\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D + \lambda \text{diag}(\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D) \right]^{-1} \mathbf{J}_D^T \mathbf{r}(\boldsymbol{\eta}^k), k \in \square \quad (8e)$$

BFGS quasi-Newton:

$$\boldsymbol{\eta}^k = \boldsymbol{\eta}^{k-1} + \mathbf{A}^{-1}(\boldsymbol{\eta}^k) \cdot \left[\nabla J(\boldsymbol{\eta}^k) - \nabla J(\boldsymbol{\eta}^{k-1}) \right] \quad (8f)$$

$$\mathbf{A}(\boldsymbol{\eta}^k) = \mathbf{A}(\boldsymbol{\eta}^{k-1}) + \chi^k \boldsymbol{\mu}^{k-1} (\boldsymbol{\mu}^{k-1})^T + \gamma^k \mathbf{v}^{k-1} (\mathbf{v}^{k-1})^T \quad (8g)$$

$$\chi^k = \frac{1}{(\mathbf{y}^{k-1})^T \mathbf{s}^{k-1}}, \gamma^k = - \frac{1}{(\mathbf{s}^{k-1})^T \cdot \mathbf{A}(\boldsymbol{\eta}^{k-1}) \cdot \mathbf{s}^{k-1}}, \mathbf{y}^{k-1} = \nabla J(\boldsymbol{\eta}^k) - \nabla J(\boldsymbol{\eta}^{k-1}), \mathbf{s}^{k-1} = \boldsymbol{\eta}^k - \boldsymbol{\eta}^{k-1} \quad (8h)$$

Proposed SR3 VLS quasi-Newton:

$$\boldsymbol{\eta}^{k+1} = \boldsymbol{\eta}^k - \boldsymbol{\alpha}^k \cdot \left\{ \begin{bmatrix} (\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Gamma}_D^k + \boldsymbol{\theta}^k \circ (\boldsymbol{\Psi}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k + \boldsymbol{\omega}^k \\ (\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k \end{bmatrix} \cdot (\mathbf{J}_D^T)^k \cdot \mathbf{r}(\boldsymbol{\eta}^k) \right\}, k \in \square \quad (8i)$$

其中, $\mathbf{J}_D^T(\boldsymbol{\eta}^k)$ 為 $\mathcal{G}_m^{\text{sim}}$ 的敏感度矩陣, 茲將其定義於式(8c); BFGS 演算法的 Hessian 近似矩陣 $\mathbf{A}(\boldsymbol{\eta}^k)$ 須符合對稱性和正定性, $\chi^k \boldsymbol{\mu}^{k-1} (\boldsymbol{\mu}^{k-1})^T$ 和 $\gamma^k \mathbf{v}^{k-1} (\mathbf{v}^{k-1})^T$ 皆為對稱一階矩陣, 它們的和是 2 階的更新矩陣。

大尺度地下水建模的動態模擬時間會隨著參數和數值網格數量的增多而顯著增加(Hayley *et al.*, 2019)^[10]。為了在實務中模仿真實複雜的地下水文地質架構, 含水層/阻水層形態的多參數細緻化是必要且不可避免的, 因此直接計算和儲存完整的 Hessian 矩陣無法達成且成本太昂貴; Jacobian 擬牛頓法經常高估

近似狀態 $\left| r_m \frac{\partial^2 r_m}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \right| \square \left| \frac{\partial r_m}{\partial \eta_i} \frac{\partial r_m}{\partial \eta_j} \right|$, 不能保證其收斂

性; 在具有多個最小值的情況, Levenberg-Marquardt 演算法僅在初始猜值接近最終解時才會收斂至全域最小值(Kanzow *et al.*, 2005)^[15], 而且演算速度往往較 Jacobian 擬牛頓法稍慢; BFGS 更新則必須滿足 $\mathbf{A}(\boldsymbol{\eta}^{k+1})$ 及曲率條件 $(\mathbf{s}^{k-1})^T \mathbf{y}^{k-1} > 0$ 為正定。導致上述缺點的原因為 Jacobian 擬牛頓的步長 α^k 、Levenberg-Marquardt 法的阻尼係數 λ 以及 BFGS 的割線比率係數 β^k 和 γ^k 為純量性質。

為了加速收斂且跳脫局部最小區, 本研究使用向

量化有限可切換步長 $\boldsymbol{\alpha}^k = [\alpha_l^k]_{l=1 \sim L} \in (-\varepsilon_{s_f, f}^k, \varepsilon_{s_f, f}^k)$

逆推地下水文地質參數和補注量。為了解決傳統擬牛頓使用敏感度矩陣近似 Hessian 矩陣時(e.g.

$\mathbf{H} \approx 2\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D$)經常高估的問題 $\left| r_m \frac{\partial^2 r_m}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \right| \square \left| \frac{\partial r_m}{\partial \eta_i} \frac{\partial r_m}{\partial \eta_j} \right|$

(未考量單參數擾動的波動敏感度與擬牛頓法多參數同時修正後水力波降所引致的流通誤差量), 以達成

$$\left| r_m \frac{\partial^2 r_m}{\partial \eta_i \partial \eta_j} \right| \approx \left| \frac{\partial r_m}{\partial \eta_i} \frac{\partial r_m}{\partial \eta_j} \right| - \prod_{l=i}^j \text{SVD} \left(\frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l}, \mathcal{G}_m^{\text{sim}}(\eta_l) - \mathcal{G}_m^{\text{obs}} \right) \quad \left| \begin{matrix} \text{Count}(i, j)=2 \\ s_f=1 \sim S_f \\ l \in [s_f] \end{matrix} \right|$$

、檢測並趨近全域最佳解區、解決非線性不適定問題, 本研究改良 Levenberg-Marquardt 演算法並從 BFGS 導入三階結構求解限制非線性的參數優選問題,

分別利用奇異值分解的敏感度矩陣 $\text{SVD} \left(\frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l} \right)$

和模擬蓄水誤差矩陣 $\text{SVD} (\mathcal{G}_m^{\text{sim}} - \mathcal{G}_m^{\text{obs}})$ 或模擬蓄水變

化矩陣 $\text{SVD} (q_{s, s_f, f}^{\text{sim}} - q_{s-1, s_f, f}^{\text{sim}}) / \eta_l - \eta_{l-1}$, 選擇正定且

數值穩定之低階與高階載荷得點($\boldsymbol{\Gamma}_D$ 與 $\boldsymbol{\Psi}_D$)組合, 在不使用其餘高階成份的方式去除單參數敏感度與多參數同時擾動下的流通誤差量, 以萃取出較準確的

Hessian 近似矩陣並計算校正矩陣, 茲將提出的演算法命名為對稱三階載荷(loading)-得點(score)擬牛頓法,

如式(8h)所示, 其中 $(\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Gamma}_D^k$ 、 $\boldsymbol{\theta}^k \circ (\boldsymbol{\Psi}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k$ 和 $\boldsymbol{\omega}^k \circ (\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k$ 的和是對稱三階矩陣。去除特徵分量的

原則為根據單參數對於全體各類型參數的敏感度

佔比 $\frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l} / \sum_{l=1}^L \frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l}$, 選擇解釋變異度貢獻比例

$\tau_{j, f}^2 / \sum_{j=1}^{s_f} \tau_{j, f}^2$ 小於敏感度佔比的高階分量為需消滅的

高估流通誤差量。

$(\mathbf{\Gamma}_D^T)^k$ 和 $(\mathbf{\Psi}_D^T)^k$ 的列向量是由 $(\mathbf{\Gamma}_{D,l}^T)^k$ 和 $(\mathbf{\Psi}_{D,l}^T)^k$ 進行排列置換所得到， $(\mathbf{\Gamma}_{D,l}^T)^k$ 和 $(\mathbf{\Psi}_{D,l}^T)^k$ 的元素值是由 $\text{SVD}(\frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l})$ 、 $\text{SVD}(\mathcal{G}_m^{\text{sim}} - \mathcal{G}_m^{\text{obs}})$ 或 $\text{SVD}(q_{t_s, s_f, f}^{\text{sim}} - q_{t_s-1, s_f, f}^{\text{sim}})$ / $\eta_l - \eta_{l-1}$ 取得的得點 $(\mathbf{C}_{\square, f})^k$ 和載荷 $(\mathbf{F}_{\square, f}^T)^k$ 來計算，如式(9a)-(9c)和式(9d)-(9f)所示，其中低階分量 j 為 1、高階分量 j 為 2 至 S_f ， $\mathbf{D}_{\square, f}^k = \text{diag}(\varepsilon_{1, f}, \dots, \varepsilon_{S_f, f})$ 是對角標準偏差矩陣，式 9(c)與 9(f)可由 2.4 節的式(11)-(14)來計算求得。本研究透過設計的 $(\mathbf{\Gamma}_D^T)^k \mathbf{\Gamma}_D^k + \mathbf{\theta}^k$ 、 $(\mathbf{\Psi}_D^T)^k \mathbf{\Psi}_D^k + \mathbf{\omega}^k$ 、 $(\mathbf{\Gamma}_D^T)^k \mathbf{\Psi}_D^k$ 校正近似的 Hessian 矩陣並探索不同局部最小區的位置，其中根據正交屬性特徵值 τ_j^k 所計算之尺度同化比率矩陣 $\mathbf{\theta}^k$ 和 $\mathbf{\omega}^k$ ，伸縮和消滅可能高估的流通誤差量，以藉此修正及移動梯度較小的參數方向，其計算如式(10)所示：

$$(\mathbf{\Gamma}_{D,l}^T)^k = \begin{bmatrix} Y_{1,1,l}, Y_{1,2,l}, \dots, Y_{1,t_s,l}, \dots, Y_{1,T_s,l}, \dots, Y_{S_f,1,l}, \dots, Y_{S_f,t_s,l}, \dots, Y_{S_f,T_s,l} \\ \dots, Y_{S_f,T_s,l}, \dots, Y_{S_f,1,l}, \dots, Y_{S_f,t_s,l}, \dots, Y_{S_f,T_s,l} \end{bmatrix} \quad (9a)$$

$$Y_{S_f, t_s, l} = \sum_{t=1}^{t_s} Y_{S_f, t, l} \quad (9b)$$

$$(\mathbf{\Gamma}_{\square, l}^T)^k = (\mathbf{C}_{\square, f})^k (\mathbf{F}_{\square, f}^T)^k \mathbf{D}_{\square, f}^k - \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{T_s \times 1} \quad (9c)$$

$$(\mathbf{C}_{\square, f})^k (\mathbf{F}_{\square, f}^T)^k \mathbf{D}_{\square, f}^k, \quad l = 1 \sim L$$

$$(\mathbf{\Psi}_{D,l}^T)^k = \begin{bmatrix} G_{1,1,l}, G_{1,2,l}, \dots, G_{1,t_s,l}, \dots, G_{1,T_s,l}, \dots, G_{S_f,1,l}, \dots, G_{S_f,t_s,l}, \dots, G_{S_f,T_s,l} \\ \dots, G_{S_f,T_s,l}, \dots, G_{S_f,1,l}, \dots, G_{S_f,t_s,l}, \dots, G_{S_f,T_s,l} \end{bmatrix} \quad (9d)$$

$$G_{S_f, t_s, l} = \sum_{t=1}^{t_s} G_{S_f, t, l} \quad (9e)$$

$$(\mathbf{\Psi}_{\square, l}^T)^k = (\mathbf{C}_{j, \square, f})^k (\mathbf{F}_{j, \square, f}^T)^k \mathbf{D}_{\square, f}^k - \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{T_s \times 1} \quad (9f)$$

$$(\mathbf{C}_{j, \square, f})^k (\mathbf{F}_{j, \square, f}^T)^k \mathbf{D}_{\square, f}^k, \quad j = 2 \sim S_f$$

$$\mathbf{\theta}^k = \left[\frac{\tau_{1, f}^k}{\tau_{j, f}^k} \right]_{j=1 \sim S_f} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{1 \times L} \quad (10a)$$

$$\mathbf{\omega}^k = 2 \left[\sqrt{\frac{\tau_{1, f}^k}{\tau_{j, f}^k}} \right]_{j=1 \sim S_f} \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{1 \times L} \quad (10b)$$

2.4 利用奇異值分解計算敏感度和模擬誤差矩陣之多階層載荷得點

本研究利用奇異值分解敏感度矩陣 $\text{SVD}(\frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l})$

和模擬蓄水變化矩陣 $\text{SVD}(q_{t_s, s_f, f}^{\text{sim}} - q_{t_s-1, s_f, f}^{\text{sim}}) / \eta_l - \eta_{l-1}$ (新增輔助井模式透過分解模擬的地下水位蓄水變化來增加參數敏感度及因子成份之數量和流通資訊，因為輔助井之觀測水位僅能根據含水層型態將原觀測井水位輸入 MODFLOW 水頭觀測分析模組 HOB package 後，使用有限差分內插來得到)，致力於以去蕪存菁的方式(去除部分成份的高階載荷得點 $\mathbf{\Psi}_D^k$)更準確的近似 Hessian 矩陣；此外，由式(8h)可推導得知 $[(\mathbf{\Gamma}_D^T)^k \mathbf{\Gamma}_D^k + \mathbf{\theta}^k \circ (\mathbf{\Psi}_D^T)^k \mathbf{\Psi}_D^k + \mathbf{\omega}^k \circ (\mathbf{\Gamma}_D^T)^k \mathbf{\Psi}_D^k]^{-1} \cdot (\mathbf{J}_D^T)^k \propto [\mathbf{r}(\mathbf{\eta}^k)]^{-1}$ ，因此將模擬蓄水誤差矩陣進行奇異值分解 $\text{SVD}(\mathcal{G}_m^{\text{sim}} - \mathcal{G}_m^{\text{obs}})$ ，接著透過高低階載荷得點的組合將可近似 Hessian 及 Jacobian 矩陣，以大量減少近似 Hessian 所需的模擬次數。

奇異值分解前須先使用含水層 f 與分區 s_f 的平均值 $a_{s_f, f}$ 和標準差 $\varepsilon_{s_f, f}$ 將敏感度矩陣 $\left[\frac{\partial \mathcal{G}_m^{\text{sim}}}{\partial \eta_l} \right]$ 、模擬誤差矩陣 $[\mathcal{G}_m^{\text{sim}} - \mathcal{G}_m^{\text{obs}}]$ 和模擬蓄水變化矩陣 $[q_{t_s, s_f, f}^{\text{sim}} - q_{t_s-1, s_f, f}^{\text{sim}}]$ 進行正規化，其分析矩陣 $\bar{\mathbf{X}}$ 可分別表示如下：

$$\bar{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial \mathbf{q}_{1, \square, f}^{\text{sim}}}{\partial \mathbf{\eta}} - \mathbf{a} \right)^T \\ \left(\frac{\partial \mathbf{q}_{2, \square, f}^{\text{sim}}}{\partial \mathbf{\eta}} - \mathbf{a} \right)^T \\ \vdots \\ \left(\frac{\partial \mathbf{q}_{T_s, \square, f}^{\text{sim}}}{\partial \mathbf{\eta}} - \mathbf{a} \right)^T \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/\varepsilon_{1, f} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1/\varepsilon_{2, f} & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 1/\varepsilon_{S_f, f} \end{bmatrix} \quad (11a)$$

$$\bar{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} (\mathbf{q}_{1,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{1,\square,f}^{\text{obs}} - \mathbf{a})^T \\ (\mathbf{q}_{2,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{2,\square,f}^{\text{obs}} - \mathbf{a})^T \\ \vdots \\ (\mathbf{q}_{T_s,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{T_s,\square,f}^{\text{obs}} - \mathbf{a})^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\varepsilon_{1,f} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/\varepsilon_{2,f} & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1/\varepsilon_{S_f,f} \end{bmatrix} \quad (11b)$$

$$\bar{\mathbf{X}} = \begin{bmatrix} (\mathbf{q}_{1,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{0,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{a})^T \\ (\mathbf{q}_{2,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{1,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{a})^T \\ \vdots \\ (\mathbf{q}_{T_s,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{T_s-1,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{a})^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/\varepsilon_{1,f} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/\varepsilon_{2,f} & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1/\varepsilon_{S_f,f} \end{bmatrix} \quad (11c)$$

式(11a)與(11b)內平均值向量 $\mathbf{a}$ 的元素分別為

$$a_{s_f,f} = \frac{1}{T_s \times L} \sum_{l=1}^L \sum_{t_s=1}^{T_s} \left(\frac{\partial q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}}}{\partial \eta_l} \right) \text{ 與 } a_{s_f,f} = \frac{1}{T_s} \sum_{t_s=1}^{T_s} (q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}} - q_{t_s,s_f,f}^{\text{obs}}) ,$$

$$\text{標準差則分別為 } \varepsilon_{s_f,f} = \sqrt{\frac{1}{(T_s-1) \times (L-1)} \sum_{l=1}^L \sum_{t_s=1}^{T_s} \left(\frac{\partial q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}}}{\partial \eta_l} - a_{s_f,f} \right)^2}$$

$$\text{與 } \varepsilon_{s_f,f} = \sqrt{\frac{1}{T_s-1} \sum_{t_s=1}^{T_s} [(q_{t_s,s_f,f}^{\text{sim}} - q_{t_s,s_f,f}^{\text{obs}}) - a_{s_f,f}]^2} , \text{ 以此類推。因此}$$

向量化步長 $\mathbf{a}^k$ 是在 $-\varepsilon_l^k$ 和 ε_l^k 之間的可切換受限集合，即 $\mathbf{a}^k = [\alpha_l^k]_{l=1 \sim L} \in (-\varepsilon_{s_f,f}^k, \varepsilon_{s_f,f}^k) \circ$

奇異值分解將離差的敏感度矩陣

$$\mathbf{X} = \left[\left(\frac{\partial \mathbf{q}_{t_s,\square,f}^{\text{sim}}}{\partial \boldsymbol{\eta}} - \mathbf{a} \right) \right]_{t_s=1 \sim T_s}^T \text{ 和模擬蓄水誤差或變化量矩陣}$$

($\mathbf{X} = [\mathbf{q}_{t_s,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{t_s,\square,f}^{\text{obs}} - \mathbf{a}]^T$ 或 $\mathbf{X} = [\mathbf{q}_{t_s,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{q}_{t_s-1,\square,f}^{\text{sim}} - \mathbf{a}]^T$) 分解成一系列獨立的分量(由某因子所造成近似的蓄水差異量)，可表示為：

$$\mathbf{X} = \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^T \quad (12)$$

其中， $\mathbf{U} (= T_s \times S_f)$ 的列向量為單範正交左奇異向量 $\{\mathbf{u}_{1,\square,f}, \dots, \mathbf{u}_{T_s,\square,f}\}$ ； $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_{1,f}, \dots, \sigma_{S_f,f})$ ， $\sigma_{1,f} \geq \dots \geq \sigma_{S_f,f} \geq 0$ 是奇異值， $\sigma_{j,f}$ 可計算特徵值

$$\tau_{j,f} = \frac{1}{T_s-1} \sigma_{j,f}^2 ; \mathbf{V} (= S_f \times S_f) \text{ 的列向量是單範正交右}$$

奇異向量 $\{\mathbf{v}_{1,\square,f}, \dots, \mathbf{v}_{S_f,\square,f}\}$ 。令 $\phi_{j,s_f,f}$ 為第 s_f 個觀測井的蓄水變化量與第 j 個主成分得點之相關係數，稱為因子載荷，其集合為 $S_f \times S_f$ 階的矩陣 $\mathbf{F} = [\phi_{j,s_f,f}]$ 。由

於 $\bar{\mathbf{X}}$ 包含標準化數據，使用下列取代： $\bar{\mathbf{X}} = \mathbf{X} \mathbf{D}^{-1}$ 、

$$\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{T_s-1}} \boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{C} = \mathbf{X} \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}, \mathbf{S} = \frac{1}{T_s-1} \mathbf{X}^T \mathbf{X} = \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{V}^T,$$

可推導得到：

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \frac{1}{T_s-1} \bar{\mathbf{X}}^T \mathbf{C} = \frac{1}{T_s-1} (\mathbf{D}^{-1} \mathbf{X}^T) (\mathbf{X} \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}) \\ &= \mathbf{D}^{-1} \mathbf{S} \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda} \mathbf{V}^T) \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} \quad (13) \\ &= \mathbf{D}^{-1} \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda} \boldsymbol{\Lambda}^{-1/2} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{V} \boldsymbol{\Lambda}^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{T_s-1}} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{V} \boldsymbol{\Sigma} \end{aligned}$$

主成分分析使用奇異值分解模擬蓄水時空差異變量，可藉此提供參數擾動下的描述模型，時空離差矩陣 $\mathbf{X}$ 可分解為由多個成份所組成的時間變量(因子得點 $\mathbf{C}$)和空間變量(載荷 $\mathbf{F}$)，其計算可推導如下：

$$\begin{aligned} \mathbf{X} &= \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^T = \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^T \mathbf{D}^{-1} \mathbf{D} \\ &= \sqrt{T_s-1} \mathbf{U} \left(\frac{1}{\sqrt{T_s-1}} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{V} \boldsymbol{\Sigma} \right)^T \mathbf{D} = \mathbf{C} \mathbf{F}^T \mathbf{D} \quad (14) \end{aligned}$$

2.5 利用奇異值分解資訊推展向量化多階導數雙圍繞趨近法於步長優選

本研究建立對稱三階載荷得點擬牛頓法配合向量化步長求解地下水流參數，此技術透過可切換的受限結構特製化每個參數的步長，因此有助於減少異類參數之間的差異、提高收斂速度和調整搜索方向。為了讓估算參數 $\boldsymbol{\eta}^{k+1}$ 達成非常小的誤差並在目標函數 $J(\boldsymbol{\eta}^{k+1})$ 達成快速收斂，本研究提出利用奇異值分解所得到的階層和深度資訊於多階導數精確雙圍繞趨近的強化方法，可以確保收斂並決定對應於不同水文地質參數和補注量的向量化步長。

傳統雙圍繞試誤趨近的尋根問題僅決定純量步長 $\alpha^k \in [\alpha_*^{k,\kappa}]_{\kappa=1 \sim \Sigma}$ 配合多次迭代 κ 來達成目標函數偏導狀態 $J'(\alpha_*^{k,\kappa}) = 0$ ，可保證收斂並減少低速的情況 (Dahlquist and Björck, 2003)^[6]。對於更困難及複雜的向量化步長尋根問題，雙圍繞點位趨近法可寫成以下代數形式：決定 $\alpha^k \in [\alpha_*^{k,\kappa}]_{\kappa=1 \sim \Sigma}$ ，使得 $J'(\square \alpha_*^{k,\kappa}) = 0$ ，已知條件為： $J'(\square \alpha_{\text{LB}}^{k,\kappa}) = \mathbf{b}_1$ 、 $J'(\square \alpha_{\text{UB}}^{k,\kappa}) = \mathbf{b}_2$ 。若 $J'(\square \alpha_*^{k,\kappa})$ 為非線性連續函數，並且存在兩個向量 $\alpha_{\text{LB}}^{k,\kappa}$ 和 $\alpha_{\text{UB}}^{k,\kappa}$ ，使得 $J'(\square \alpha_{\text{LB}}^{k,\kappa})$ 和 $J'(\square \alpha_{\text{UB}}^{k,\kappa})$ 的每個對應元素具有相反的正負符號，則根據中間值定理，函數 $J'(\square \alpha_*^{k,\kappa})$ 在間隔 $[\alpha_{\text{LB}}^{k,\kappa}, \alpha_{\text{UB}}^{k,\kappa}]$ 中具有根 $\alpha_*^{k,\kappa}$ ；向量化的二分法、Illinois 和 Anderson-Bjork 演算法使用系統化的技巧 $\mathbf{m}_p$ 計算中點向量 $\alpha_{\text{MP}}^{k,\kappa}$ 以趨近 $\alpha_*^{k,\kappa}$ ，分別如式

(15a)-(15c)所示；若 $J'(\mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa})$ 具有與 $J'(\mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa})$ 相同的正負符號，則新的圍繞間隔更新為 $[\mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa+1}, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa+1}] = [\mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa}, \mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa}]$ 。

傳統非線性規劃未使用式(6)中的 $J(\boldsymbol{\eta}^k)$ 於參數步長精確優選，因此本研究修改傳統純量的雙圍繞趨近法，使用一系列目標函數的非導數、一階導數和奇異值分解的深度-成分資訊，計算截半收縮向量 $\mathbf{m}$ 及步長圍繞中點向量 $\mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa} = [\alpha_{MP,l}^{k,\kappa} |_{l=1 \sim L}]$ ，如式(15d)所示。

$$\alpha_{MP,l}^{k,\kappa} = \frac{\zeta_l \cdot [\mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa} \circ \nabla J(\square, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa}) - \mathbf{m}_p \circ \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa} \circ \nabla J(\square, \mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa})]}{\zeta_l \cdot [\nabla J(\square, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa}) - \mathbf{m}_p \circ \nabla J(\square, \mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa})]} \quad (15a)$$

$$\text{Vectorized false-position method: } \mathbf{m}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{L \times 1},$$

$$\text{Vectorized Illinois algorithm: } \mathbf{m}_2 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ \vdots \\ 1/2 \end{bmatrix}_{L \times 1} \quad (15b)$$

Vectorized Anderson-Bjork algorithm:

$$\mathbf{m}_3 = \begin{bmatrix} 1 - \frac{\zeta_1 \cdot \nabla J(\square, \mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa})}{\zeta_1 \cdot \nabla J(\square, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa})} \\ \vdots \\ 1 - \frac{\zeta_l \cdot \nabla J(\square, \mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa})}{\zeta_l \cdot \nabla J(\square, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa})} \\ \vdots \\ 1 - \frac{\zeta_L \cdot \nabla J(\square, \mathbf{a}_{MP}^{k,\kappa})}{\zeta_L \cdot \nabla J(\square, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa})} \end{bmatrix}_{L \times 1} \quad \text{if } m > 0, \quad \mathbf{m}_3 = \begin{bmatrix} 1/2 \\ \vdots \\ 1/2 \end{bmatrix}_{L \times 1} \quad \text{else} \quad (15c)$$

Proposed SVD depth-rank component-based vectorized double false-position method:

$$\mathbf{m}_4 = \frac{J(\boldsymbol{\eta}^k, \mathbf{a}_{LB}^{k,\kappa})}{J(\boldsymbol{\eta}^k, \mathbf{a}_{UB}^{k,\kappa})} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}_{L \times 1}, \quad \mathbf{m}_5 = \begin{bmatrix} \varpi_1 \\ \vdots \\ \varpi_l \\ \vdots \\ \varpi_L \end{bmatrix}_{L \times 1}, \quad (15d)$$

$$\varpi_l \in \left[\frac{1}{j_l} \cdot d_l, \frac{1}{d_l}, \frac{1}{j_l}, \frac{d_l}{j_l}, 1/2, 1 \right]$$

其中 ζ_l 是第 l 個單位向量； $\mathbf{m}_1$ 、 $\mathbf{m}_2$ 和 $\mathbf{m}_3$ 分別是向量化的傳統雙點圍繞趨近法、Illinois 和 Anderson-Björk 演算法之對分向量 (Dahlquist and Björck, 2003)^[6]； $\mathbf{m}_4$ 是 0 階導數的雙點圍繞趨近之對分向量； $\mathbf{m}_5$ 是基於 SVD 深度階層分量所提出雙點圍繞趨近之對分向量，該法使用第 d 個深度內第 j 個高階載荷得點 Ψ_D^k 進行 Hessian 矩陣校正。

2.6 觀測輔助井網設計模式之建立

本研究欲探討當一區域觀測井不足或是分布不均時，新增輔助井可否使暫態模擬更接近實際觀測的地下水位，並且檢定出更準確的參數值。輔助井網試驗設計考量一定成本進行觀測井網最佳佈置優選，設計理念基於地下水頭觀測之可靠度及佈井效能。本研究利用 Hsu and Yeh (1989)^[13]所發展最佳觀測井網 D-Optimal 試驗設計準則方法，目的在求取估計參數共變異數矩陣行列式值最小，亦即估計參數的不確定性為最小之設井方案。Yeh and Yoon (1981)^[25]首先使用泰勒級數展開模擬水頭 $(\mathbf{h}_{\square f}^{\text{sim}})^k$ 以得到式(16a)，接著忽略高階項(HOT)，將式(16a)代入式(1)後，施加必要條件 $\frac{\partial J(\boldsymbol{\eta})}{\partial \boldsymbol{\eta}} = 0$ 以達到最小化要求，可推導得到估計參數

共變異數矩陣之近似目標函數為式(16b)；由於 $\mathbf{h}_{\square f}^{\text{sim}}$ 不是抽水量、補注量及水文地質參數的線性函數，最小二乘估計值(目標函數)通常存在偏差，因此 Yeh and Yoon (1981)^[25]提出可使用變換矩陣 $\mathbf{G} = \{g_{l,n}\} = v_l(x_n, y_n)$ 提升參數共變異數矩陣之估計精確度(v_l 是 $\boldsymbol{\eta}$ 的第 l 個參數所使用的基底函數， (x_n, y_n) 表示網格系統的第 n 個節點)，如式(16c)所示，然而尚未發展及應用於實際數值案例當中。

$$(\mathbf{h}_{\square f}^{\text{sim}})^k = \mathbf{h}_{\square f}^{\text{obs}} + \mathbf{J}_D^T(\boldsymbol{\eta}^{\text{act}})(\boldsymbol{\eta}^k - \boldsymbol{\eta}^{\text{act}}) + \text{HOT} \quad (16a)$$

$$\underset{\lambda^{\text{OW}}, \lambda^{\text{PW}}, \boldsymbol{\eta}}{\text{Min}} |\text{Cov}(\boldsymbol{\eta})| = \frac{J(\boldsymbol{\eta})}{M-L} [\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D]^{-1} \quad (16b)$$

$$\underset{\lambda^{\text{OW}}, \lambda^{\text{PW}}, \boldsymbol{\eta}}{\text{Min}} |\text{Cov}(\boldsymbol{\eta})| = \frac{J(\boldsymbol{\eta})}{M-L} \mathbf{G} [\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D]^{-1} \mathbf{G}^T \quad (16c)$$

$$(\mathbf{q}_{\square f}^{\text{sim}})^k = \mathbf{q}_{\square f}^{\text{obs}} + \mathbf{J}_D^T(\boldsymbol{\eta}^{\text{act}})(\boldsymbol{\eta}^k - \boldsymbol{\eta}^{\text{act}}) + \text{HOT} \quad (17a)$$

$$\underset{\lambda^{\text{OW}}, \lambda^{\text{PW}}, \boldsymbol{\eta}}{\text{Min}} |\text{Cov}(\boldsymbol{\eta})| = \frac{J(\boldsymbol{\eta})}{M-L} \boldsymbol{\Pi} \left[(\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Gamma}_D^k + \boldsymbol{\theta}^k \circ (\boldsymbol{\Psi}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k + \boldsymbol{\omega}^k \circ (\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k \right]^{-1} \boldsymbol{\Pi}^T \quad (17b)$$

其中， $\boldsymbol{\eta}^{\text{act}}$ 是真實的參數向量值； $\text{Cov}(\boldsymbol{\eta})$ 為估計

參數的共變異數矩陣； $\boldsymbol{\eta}^k$ 為抽水量、補注量和水文地質參數之估計值； $\mathbf{M}$ 和 $\mathbf{L}$ 分別為觀測和參數的數量； $\boldsymbol{\Pi} = \text{diag}(\eta_1 - \eta_0, \dots, \eta_l - \eta_{l-1}, \dots, \eta_L - \eta_{L-1})$ 。

張良正等(2006)^[29]設立兩類簡化的案例探討影響佈井之因素，此研究在同一水文地質分區設立兩口觀測井，且未同時優選實際案例之所有決策變數：多類型補注量、水文地質參數、抽水量、觀測井數量及位置；此外，前人研究之設計案例大多假設含水層為等向均質的二維拘限含水層。行列式可描述為一個交替多線性變換在歐幾里德空間對「體積」的函數，因此本研究使用泰勒級數展開模擬蓄水量 $(\mathbf{q}_{\square f}^{\text{sim}})^k$ 以得到式(17a)；為了保證行列式的每個體積向量為線性，本研究將地下蓄水變化量奇異值分解為高低階層線性正交的載荷得點，即以 $(\boldsymbol{\Psi}_D^T)^k$ 和 $(\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k$ (由式(11c)分解計算得到)取代式(17a)的 $\mathbf{J}_D^T \mathbf{J}_D$ ，並將暫態模擬所使用之參數變化對角矩陣 $\text{diag}(\eta_1 - \eta_0, \dots, \eta_l - \eta_{l-1}, \dots, \eta_L - \eta_{L-1})$ 設定為變換矩陣 $\boldsymbol{\Pi}$ ，嘗試考量泰勒展開式的高階項(HOT)，更精確地近似估計參數之共變異數矩陣，藉此挑選試驗不確定性最小的觀測井位集合，如式(17b)所示。

行列式為零若且唯若 $\mathbf{L}$ 維向量共線或者共面(線性相依)，這時多面體退化為平面圖形，體積為零；若

要達成最小化目標： $\underset{\lambda^{\text{OW}}, \lambda^{\text{PW}}, \boldsymbol{\eta}}{\text{Min}} |\text{Cov}(\boldsymbol{\eta})| = \frac{J(\boldsymbol{\eta})}{M-L} \boldsymbol{\Pi}$

$$\left[(\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Gamma}_D^k + \boldsymbol{\theta}^k \circ (\boldsymbol{\Psi}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k + \boldsymbol{\omega}^k \circ (\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k \boldsymbol{\Psi}_D^k \right]^{-1} \boldsymbol{\Pi}^T \approx 0$$
，
 則 $(\boldsymbol{\Gamma}_D^T)^k$ 和 $(\boldsymbol{\Psi}_D^T)^k$ 內的空間變量(載荷)必須達成 $(\mathbf{F}_{l \square f}^T)^k \approx 0$ 和 $(\mathbf{F}_{j \square f}^T)^k \approx 0$ 。式(9c)與(9f)內 $(\boldsymbol{\Psi}_{\square l}^T)^k > 0$ 或 $(\boldsymbol{\Gamma}_{\square l}^T)^k > 0$ 代表在現地抽水井位及土壤孔隙介質組成情況下，參數修正(變化)擾動後所造成補注和地下水流入之蓄水變化； $(\boldsymbol{\Psi}_{\square l}^T)^k < 0$ 或 $(\boldsymbol{\Gamma}_{\square l}^T)^k < 0$ 代表參數變化後所造成抽水和流失之變化量； $(\boldsymbol{\Psi}_{\square l}^T)^k$ 和 $(\boldsymbol{\Gamma}_{\square l}^T)^k$ 內達成 $(\mathbf{F}_{l \square f}^T)^k \approx 0$ 和 $(\mathbf{F}_{j \square f}^T)^k \approx 0$ 的等高線交點於物理觀點上，代表參數修正擾動後可同時觀測到補注、抽水、流入及流失之空間點位；故本研究選擇在 $(\mathbf{F}_{l \square f}^T)^k \approx 0$ 和 $(\mathbf{F}_{j \square f}^T)^k \approx 0$ 的等高線交點 $\mathbf{w}_\alpha^{\text{new}}$ 新增輔助井，期望可得到足夠的參數對於地下水流之影響資訊，以增加地下水流參數檢定之精確度。新設輔助井與原觀測井須滿足 Voronoi 特性分區法，選取 $\mathbf{w}_\alpha^{\text{new}}$ 時須符合以下條件限制式：(1)若空間位置 (x, y) 所對應的載荷為 ϕ ，則第 m 個月(日數 $t_s(m) = 30, 31, 28$)所分析第 j 個成份的載荷等高線 $\varepsilon_{j,m}$ 如式(18a)所示；(2)經

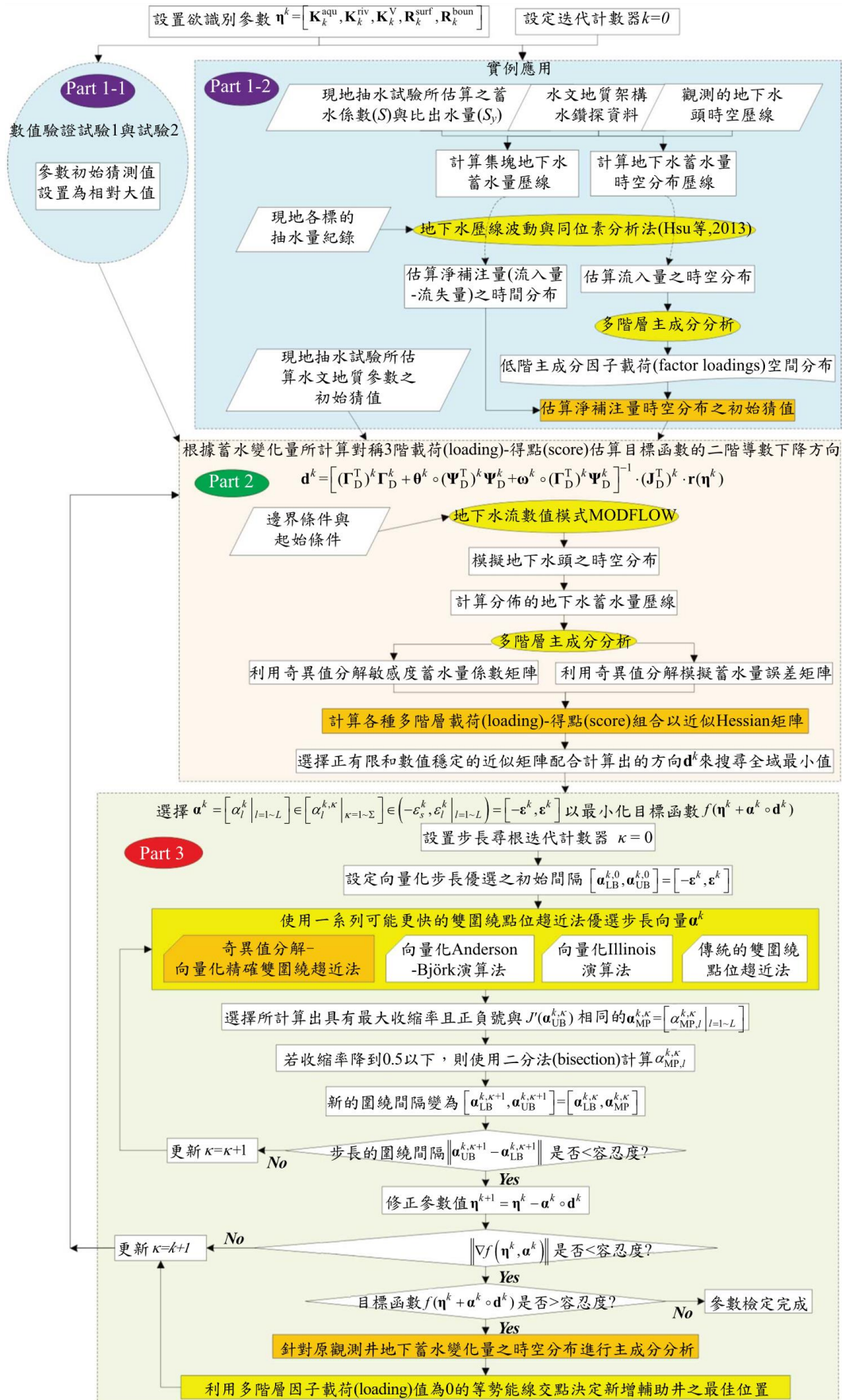


圖 1 研究流程圖

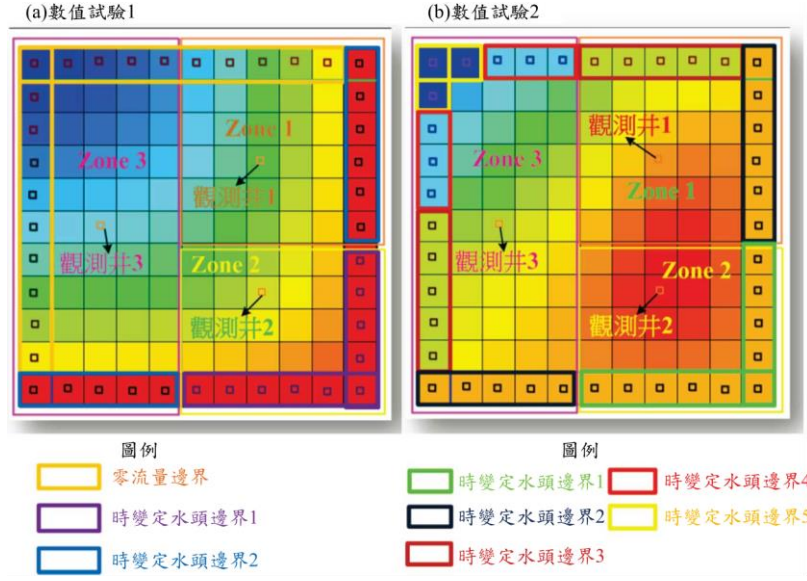


圖 2 數值試驗研究區域

由 Kriging 法內插所得到載荷為 0 之等高線如式(18b)所示；(3)本研究考量成本限制，當有 4 條以上載荷為 0 的等高線通過同一交點時，才設定其為新輔助井，如式(18c)所示：

$$W_{\alpha}^{\text{new}} = \begin{cases} y = \varepsilon_{j,m}(x, \phi) \rightarrow \text{等高線方程式} \\ y = \varepsilon_{j,m}(x, 0) \rightarrow \text{PC loading} = 0 \text{ 之等高線方程式} \\ \left. \varepsilon_{j,m}(x, 0) \right|_{j=1 \sim S_f} \cap \left. \varepsilon_{j,m}(x, 0) \right|_{t_s(m)=30, 31, 28} \geq 4 \end{cases} \quad (18a)$$

$$W_{\alpha}^{\text{new}} \notin \Omega(W_o^{\text{origin}}) \quad (18d)$$

$$W_{\alpha}^{\text{new}} \in \left\{ \Omega^{\text{aqu}} \mid d(W_{\alpha}^{\text{new}}, W_o^{\text{origin}}) > \gamma_{\alpha} \right\} \quad (18e)$$

s.t.

$$[\lambda^{\text{OW}}, \lambda^{\text{PW}}] \subset [\Omega^{\text{OW}}, \Omega^{\text{PW}}] \quad (19a)$$

$$\begin{aligned} [0, 0] &\leq [\text{Count}(\lambda^{\text{OW}}), \text{Count}(\lambda^{\text{PW}})] \\ &\leq [(\varpi^{\text{OW}})^{\text{max}}, (\varpi^{\text{PW}})^{\text{max}}] \end{aligned} \quad (19b)$$

$$\text{Equations (2a) - (2d)} \quad (19c)$$

其中， W_{α}^{new} 是根據空間載荷為 0 的等高線交點所選取新增輔助井之點位； W_o^{origin} 為原始已設置之觀測

井位；新增輔助井與原觀測井之距離需大於抽水影響半徑 γ_{α} ，如式(18f)所示； Ω^{aqu} 為含水層候選設井點位； d 為歐基里德距離。限制式則如式(19)所示， λ^{OW} 與 Ω^{OW} 分別為原始與候選觀測井網位之集合； λ^{PW} 與 Ω^{PW} 分別為原始與候選抽水井網位之集合； $(\varpi^{\text{OW}})^{\text{max}}$ 與 $(\varpi^{\text{PW}})^{\text{max}}$ 分別為觀測井與抽水井設置口數之上限。

3. 數值試驗驗證

3.1 試驗案例之建立

本研究使用美國地質調查所(USGS)發展之地下水流模擬軟體 ModelMuse v. 3.10 (Winston, 2009)^[23]於建立試驗案例，設計地下水系統之長寬高分別為 100×100×20 公尺，列與行俯視的網格數為 11×11，每列和每行的寬度為 200×200 公尺，如圖 2 所示。假設實際參數值大小是由東南到西北的沖積順序所設置，含水層類型設置為可轉換的拘限與非拘限含水層 (Convertible)，分區 1 到 3 所設定的比出水量分別為 0.23、0.21 和 0.17、比儲水率則為 3×10^{-4} 、 2×10^{-4} 和 4×10^{-4} 1/公尺。實驗區域根據 Voronoi 圖騰設計三個參數分區、三個觀察井，並使用補注模組(RCH)建構及模擬地面水補注量。30 天的模擬時間步長(time steps)設定四個壓力週期(stress periods)，含水層底部標高與初始水頭分別設置為 -10 與 2 公尺。參數值是根據半乾旱水文地質環境及 ModelMuse v.10-MODFLOW2005

模擬器和 ModelMate v.0.3.1-UCODE 求解器的可計算狀態所設定。

本研究設計兩類不同邊界條件之數值實驗，以驗證提出的敏感度與模擬誤差擬牛頓法於辨識不同種類參數的效能和準確性；實驗 1 使用單一載荷得點近似 Hessian 矩陣並計算修正方向，辨識單型態水力傳導係數於零流量(不透水)與定水頭混和邊界之地下水系統；實驗 2 使用疊合的載荷得點近似 Hessian 及校正方向，以檢定三個地面水補注量和三個水力傳導係數於多種定水頭邊界之系統。為了提高參數檢定的準確性，本研究特別設計地下水模擬蓄水量的最小平方誤差(LSE)為目標函數；為了驗證和討論演算法與不適定問題的因果關係，嵌入在 USGS ModelMate 1.0.3-UCODE 模組 (Banta, 2011)^[2] 所使用 Levenberg-Marquardt 擬牛頓法之檢定過程及結果也置入探討，其模組使用地下水頭模擬 LSE 為目標函數。

3.2 結果與討論

3.2.1 實驗 1—辨識單種型態參數於不透水與定水頭邊界之系統

實驗 1 的目標函數下降歷線如圖 3(a)所示，結果顯示三種測試演算法的目標函數值皆可有效下降以尋找最佳參數解，其中敏感度擬牛頓法的誤差下降速度比 Levenberg-Marquardt 和模擬誤差擬牛頓為快，而且敏感度擬牛頓在三個分區皆可檢定得到更為準確的水力傳導係數，如圖 4 所示。Levenberg-Marquardt 演算法於第五次迭代的分區誤差百分比介於 0.70 %與 6.40 %之間，平均為 2.77 %；敏感度擬牛頓法的誤差範圍為 0.40 %至 1.60 %，平均為 0.80 %；模擬誤差擬牛頓的誤差範圍由 1.93 %至 3.11 %不等，平均為 2.57 %；敏感度擬牛頓可藉由去蕪存菁的方式較精確的近似 Hessian 矩陣以檢定得到參數解，模擬誤差與

Levenberg-Marquardt 擬牛頓次之。然而模擬誤差擬牛頓在五次迭代僅需要 14 次暫態模擬於計算 Hessian 矩陣和步長，Levenberg-Marquardt 和敏感度擬牛頓則需要 22 次暫態模擬才能完成參數檢定計算；因此相較於 Levenberg-Marquardt 和敏感度擬牛頓，模擬誤差擬牛頓在三區參數系統只需要 63.64 %的暫態模擬次數即可收斂至最佳解。

實驗 1 水力傳導係數之初始解設定為一相對較大的值：30 m/day，敏感度和模擬誤差擬牛頓在五次迭

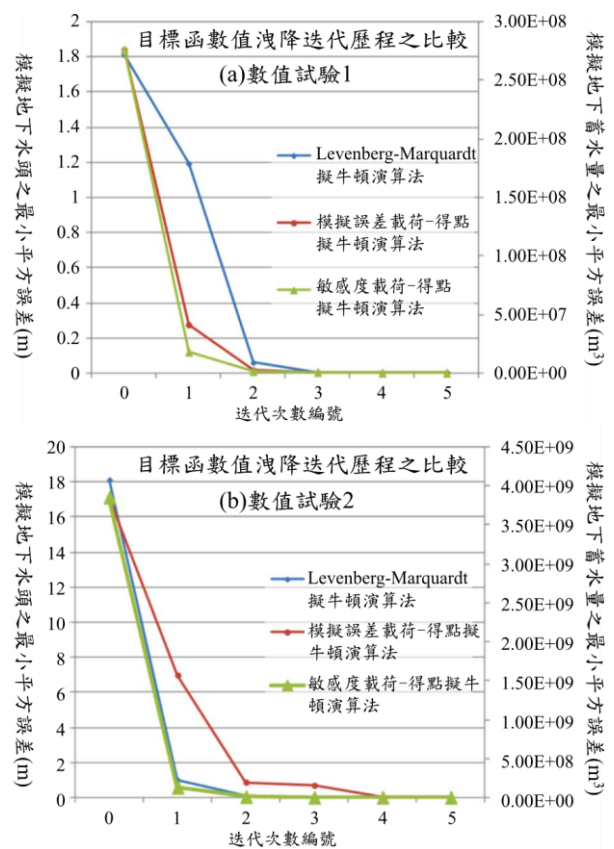


圖 3 目標函數洩降迭代歷程比較：(a)數值試驗 1；(b)數值試驗 2

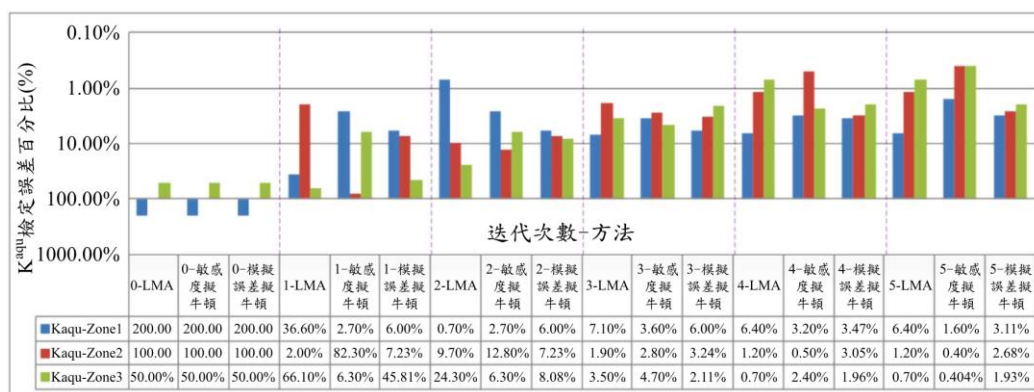


圖 4 利用 Levenberg-Marquardt 演算法、敏感度與模擬誤差擬牛頓法於數值試驗 1 水力傳導係數檢定之誤差迭代歷程比較

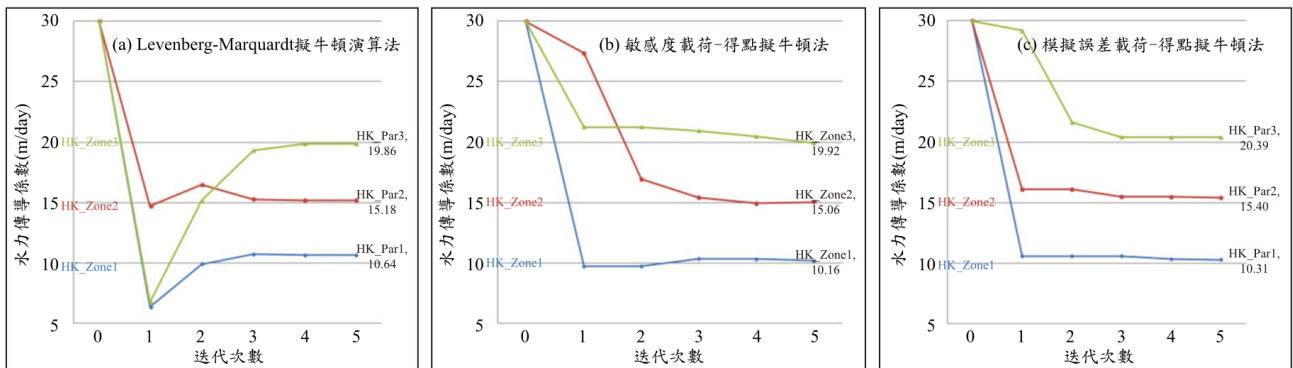


圖 5 數值試驗 1 使用(a)Levenberg-Marquardt 演算法；(b)敏感度擬牛頓法；和(c)模擬誤差擬牛頓法於水力傳導係數檢定之迭代歷程

代演算分別使用平均階層分量 1.80 與 1.20 的載荷得點於近似 Hessian 矩陣，並且使用向量化有限步長沿著參數方向進行校正、伸長和縮放，代表水力傳導係數是影響地下水蓄水量波動較小且集流時間較長的參數，需要使用較高階的載荷得點近似 Hessian 和 Jacobian 矩陣。圖 5(a)、(b)與(c)分別展示使用 Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓於實驗 1 優選傳導係數之迭代歷線，結果顯示儘管向量化有限可切換步長致力於加快收斂速度，並修正朝向全域最佳解區的方向，但是模擬誤差擬牛頓僅使用單載荷得點於檢測全域最小區域的效能稍較敏感度擬牛頓為低；因此針對各參數使用專門的多階組合載荷得點，有望在參數檢定和地下水頭擬合達成最小誤差。

3.2.2 實驗 2—辨識多種混合定水頭邊界系統之多類參數

實驗 2 參數檢定結果顯示，使用高低階載荷得點疊合的敏感度擬牛頓法之目標函數下降速度比 Levenberg-Marquardt 和模擬誤差擬牛頓為快，如圖 3(b)所示，但是三種演算法之目標函數皆可成功以二次收斂速率下降尋找到最佳解；敏感度擬牛頓可藉由迭代修正演算，相對於 Levenberg-Marquardt 和模擬誤差擬牛頓檢定更精確的水力傳導係數和地面水補注量，如圖 6 所示。Levenberg-Marquardt 演算法的步長為純量，因此傾向於修正高度敏感的地面水補注量；由於使用奇異值分解 3 個分區的實驗僅得到三個載荷得點成分，模擬誤差擬牛頓較難找到高低階組合以準確近似兩種參數的 Hessian 及 Jacobian 矩陣。Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓法在第五次迭代地面水補注量之平均檢定誤差百分比分別為 1.71 %、0.66 %和 4.20 %，水力傳導係數之誤差則分別為 4.26 %、0.02 %和 1.33 %。代表本研究所設計

的目標函數(模擬蓄水量的 LSE)配合使用於方向計算之高低階載荷得點，可檢測出多個目標函數值最小的局部最佳解區，且可透過向量化可切換步長進行校正及伸縮，以趨近全域最佳解及防止陷入不適定問題。此外，實驗 2 相較 1 增加三個參數，造成實驗 2 由 Levenberg-Marquardt 演算法所檢定傳導係數之平均誤差較實驗 1 增加 1.49 %，顯示當參數總量增加時，不適定發生風險也隨之增加。

實驗 2 地面水補注率的初始解設定為一相對大值： 3×10^{-3} m/day，水力傳導係數則同樣設定為：30 m/day。為了檢定水力傳導係數，可切換的對稱三階敏感度與模擬誤差擬牛頓法在五次迭代，平均分別使用 1.60 與 2.00 較高階的載荷得點計算 Hessian 矩陣，並且利用向量化有限步長擴大/縮放多參數的修正方向；敏感度與模擬誤差擬牛頓分別使用平均 1.60 與 1.80 稍較低階的載荷得點分量檢定地面水補注量，顯示其為影響地下蓄水量波動最大、最直接的因素，且其傳播時間較短，因此需要使用解釋變異量(即得點平方和 $\mathbf{c}_{U,f} \cdot (\mathbf{c}_{U,f})^T$)較大的低階載荷得點近似地面水補注量的 Hessian 和 Jacobian 矩陣。

圖 7(a)、(b)與(c)分別展示使用 Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓法於實驗 2 地面水補注量和水力傳導係數優選之迭代歷線，結果顯示高低階載荷得點組合可檢測出目標函數全域最小區域，且影響地下蓄水量波動的高低敏感度參數未受到分區模擬誤差大小的限制，皆可有效適切的根據目標函數的二次下降梯度修正各參數；向量化有限可切換步長致力於加速方向的校正，以迭代地由局部最佳解區收斂至全域最佳解；因此使用對稱三階載荷得點配合向量化可切換步長優選參數可收斂至真實解，以解決非線性不適定問題。此外，模擬誤差擬牛頓不需額外模擬以近似 Jacobian 及 Hessian 矩陣，因此可大幅

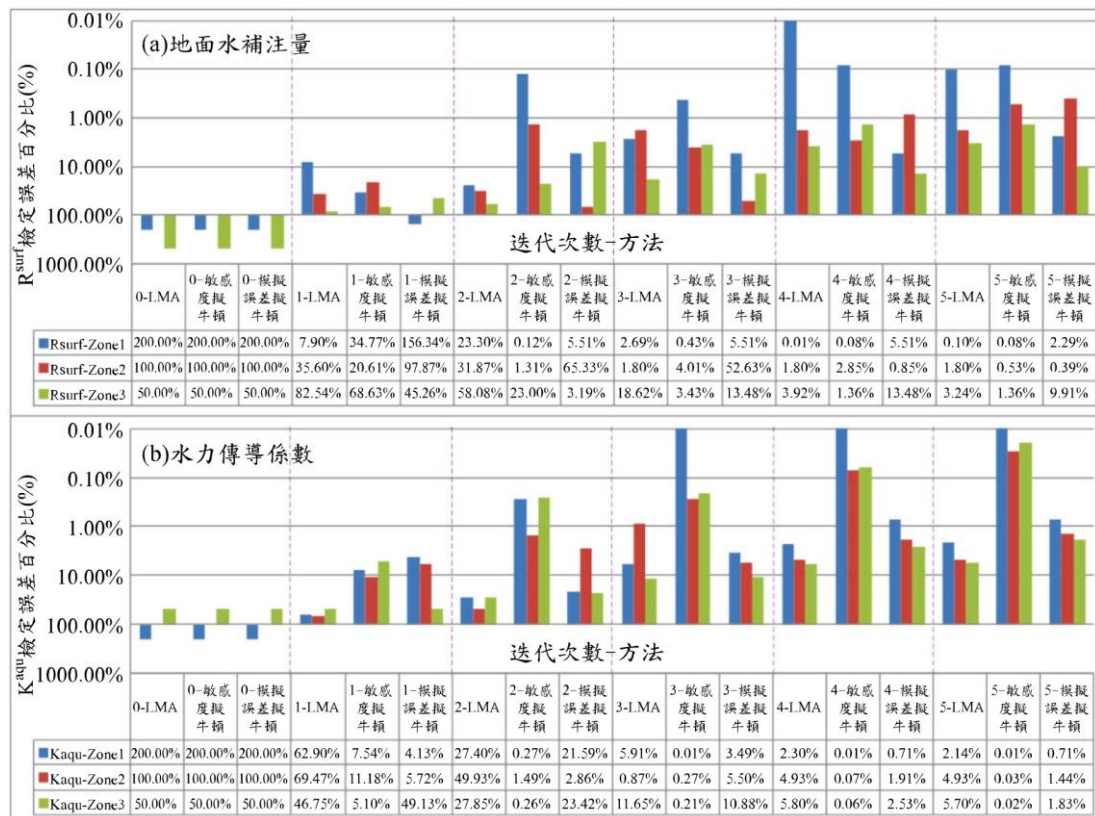


圖 6 利用 Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓法於數值試驗 2：地面水補注量(a)和水力傳導係數(b)檢定之誤差迭代歷程比較

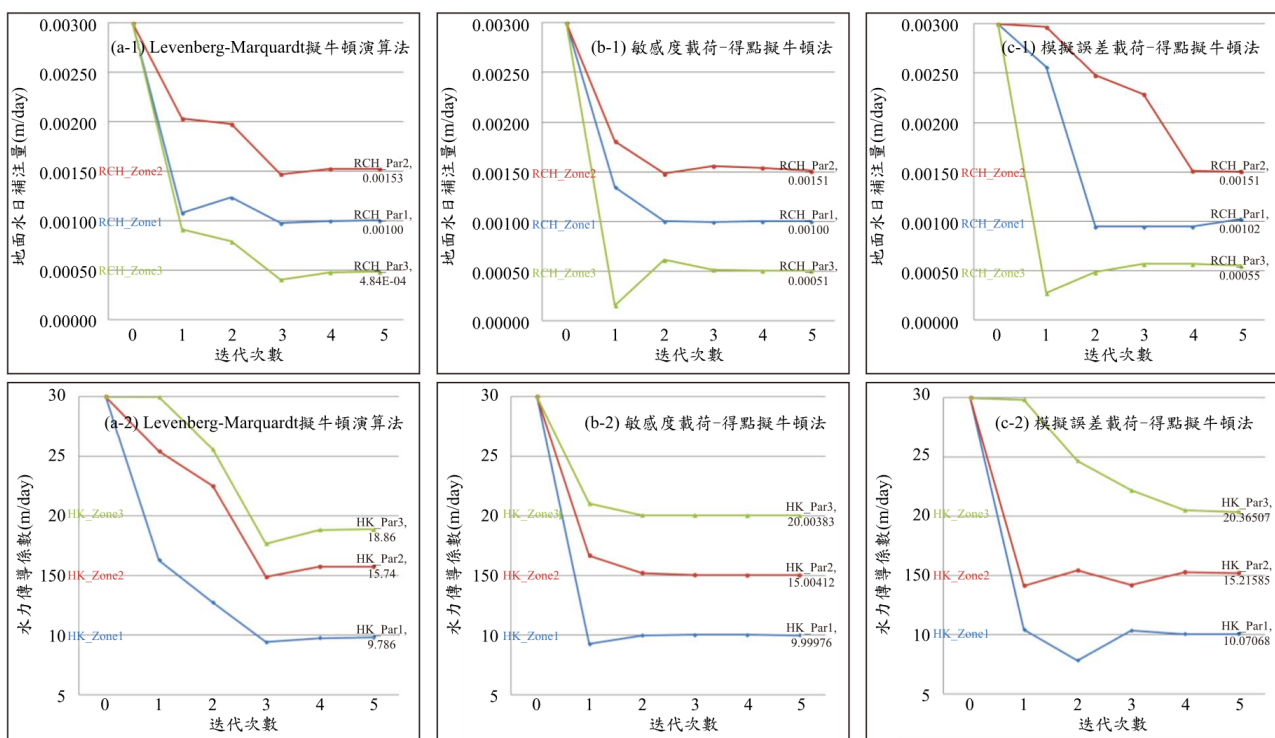


圖 7 數值試驗 2 使用：(a) Levenberg-Marquardt 演算法；(b)敏感度擬牛頓法；與(c)模擬誤差擬牛頓法優選地面水補注量(-1)和水力傳導係數(-2)之迭代歷程

降低模擬次數，雖然需要利用載荷得點階層資訊決定向量化步長，模擬誤差擬牛頓在五次迭代僅進行 28 次暫態模擬以計算 Hessian 矩陣及步長，Levenberg-Marquardt 和敏感度擬牛頓則需要 43 次模擬，因此模擬誤差擬牛頓在六參數系統相對於 Levenberg-Marquardt 和敏感度擬牛頓只需要 65.12 % 的暫態模擬時間。

4.方法應用

4.1 研究區域概述

本研究將建立的優選模式應用於名竹盆地及濁水溪沖積扇頂地下水流數值模式之率定，名竹盆地位於

南投縣名間鄉與竹山鎮之間，總面積約 53.91 km²，隘口邊界僅第一含水層有地下水由名竹盆地流出至濁水溪沖積扇，如圖 8(a)所示。2004 至 2012 年平均降雨量為 2,279.73 mm，主要河川為濁水溪主流及東南側東埔蚋溪和南側清水溪兩條支流，隘口附近彰雲橋站之年平均流出量為 168.91 m³/sec。沖積層主要分布於濁水溪和清水溪河道(河畔)，如圖 8(b)所示。地下水系統透過河水及雨水入滲補注，含水層間無明顯阻水層存在，河水補注含水層速度快，補注潛勢極高。

名竹盆地 6 口地下水位觀測井之位置分布和地質柱狀圖展示於圖 8(d)，河畔附近的新民井由粗礫及泥質礫組成、觸口由泥質礫及薄層組成，判定為非受壓含水層；竹山井的砂及泥將階地堆積層與頭料山礫岩層分隔為多層受壓含水層，坪頂和鯉魚兩井的泥層將礫岩層分隔為受壓含水層。名竹盆地可分為三個地下

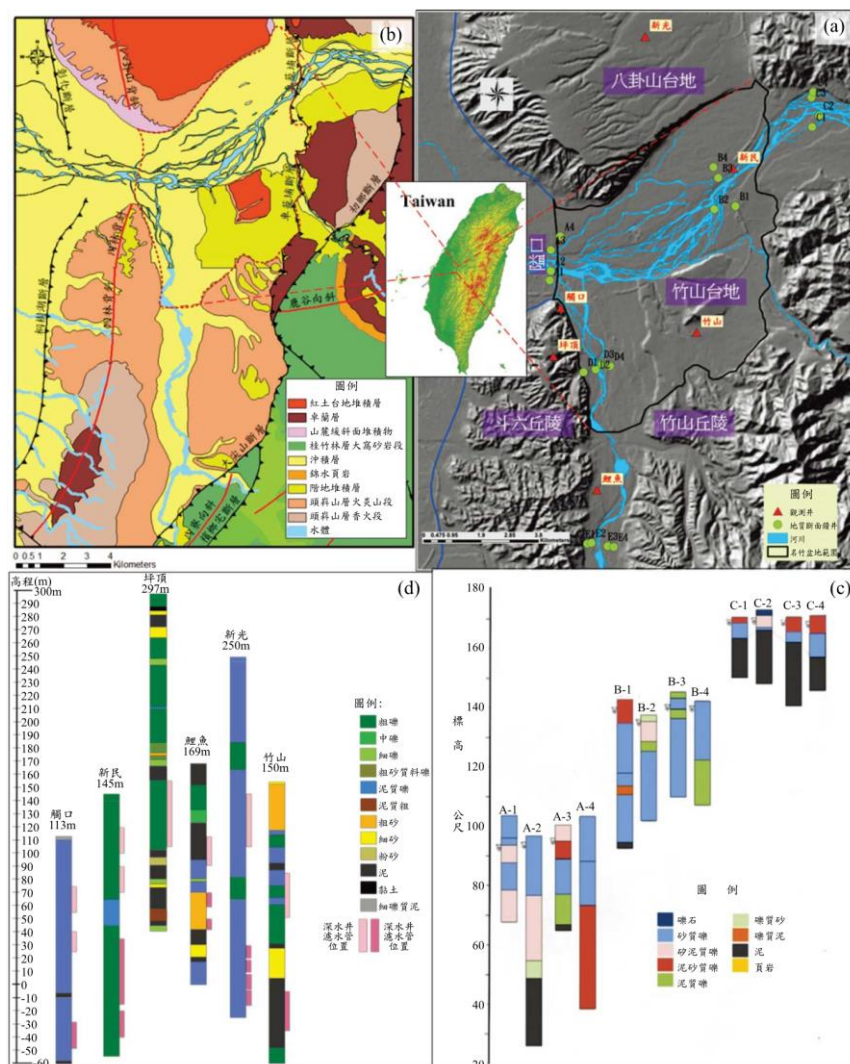


圖 8 名竹盆地之：(a)觀測井和河川斷面地質鑽井位置；(b)地質調查圖；(c)濁水溪河道斷面 A 至 C 地質柱狀圖；(d)觀測井地質柱狀圖及濾水管位置^[30]

含水層，圖 8(c)與(d)顯示其礫石與泥質礫層無深厚黏土層阻隔，故不區分阻水層；本研究將河階沖積層和階地堆積層設定為第一含水層，厚度約 20 至 33 公尺，第二含水層之平均厚度約為 50 公尺，其概念分層如圖 10(b)所示。

4.2 地下水團塊系統流出入量辨識

本研究採用新民、竹山和成功大學於名竹盆地濁水溪兩岸設置的 C1、N4、N8、S4 四口觀測井，進行地下水系統流出入量辨識及水流數值模擬，觀測井控制點位所劃分之 Voronoi Diagram 控制區域如圖 9(a)所示。本研究蒐集並分析地下水位監測井 2012 年之觀測資料，計算地下蓄水量歷線以估算地下水流出量、流入量及流失量；圖 9(b)顯示名竹盆地 11 月至 4 月之枯水期降雨量較少，蓄水量歷線呈現下降趨勢，系統之流入量小於流出量；5 月至 10 月之豐水期降雨量豐沛，蓄水量歷線上升，系統之流入量大於流出量。

根據水文年枯水期無降雨日蓄水量歷線之穩定退水斜率估算日穩定流出量，其系統流出量包括隘口地下水流出量及抽水量。根據自來水公司竹山營運所之日抽用地下水量紀錄及水井口數，可估算 2012 年抽水量為 $3.789 \times 10^6 \text{ m}^3$ ；歷線分析估算結果顯示系統總流出量為 1.03 億噸，減去年抽水量後可估算得到下游隘口地下水年流出量為 0.99 億噸。

由於水力坡降和集流時間之因素造成降雨日所引致地面水入滲補注量遠大於區外地下水流入量，因此降雨日之流入量主要由雨水與河水補注量所組成；非

降雨日之地面水入滲補注較小，且名竹盆地抽水之主要用途為民生用水，灌溉補注量很小可忽略不計，因此非降雨日系統流入主要為區外地下水流入量。本研究雨水與河水來源之補注量使用氧同位素質量守恆分析法來釐定(徐年盛等, 2012)^[28]，可求解計算得知雨水與河水於枯水期之平均補注比例為 0.62 : 0.38，豐水期平均為 0.83 : 0.17。結果顯示名竹盆地 2012 年地下水系統總入流量為 1.63 億噸，其中雨水、河水與邊界流入量分別為 0.74、0.19 與 0.70 億噸。系統流失量主要為地下水流失至河道之基流量，根據前述計算得到的地下水總流入量和流出量，以及歷線計算的蓄水變化量 0.17 億噸，可反推地下水系統年流失量為 0.47 億噸。

4.3 地下水流數值模式建立

本研究建立名竹盆地地下水流數值模式 MODFLOW 之模擬年限為 2012 年 1 月 1 日至 2012 年 12 月 31 日，以日為時間間距進行暫態(transient)模擬，茲將六項建模過程：(1)模擬範圍和邊界條件設定；(2)含水層和數值網格設定；(3)水文地質參數分區和起始水位設定；(4)河流演算套件設定；(5)抽水量設定；(6)補注量分區和初始設定分述於下：

4.3.1 模擬範圍邊界條件設定

名竹盆地西側邊界為八卦山台地與斗六丘陵之內林背斜連線，東側因車籠埔斷層經過，水流遭到截斷因而設定為無流量邊界；北側與南側分別有八卦山與

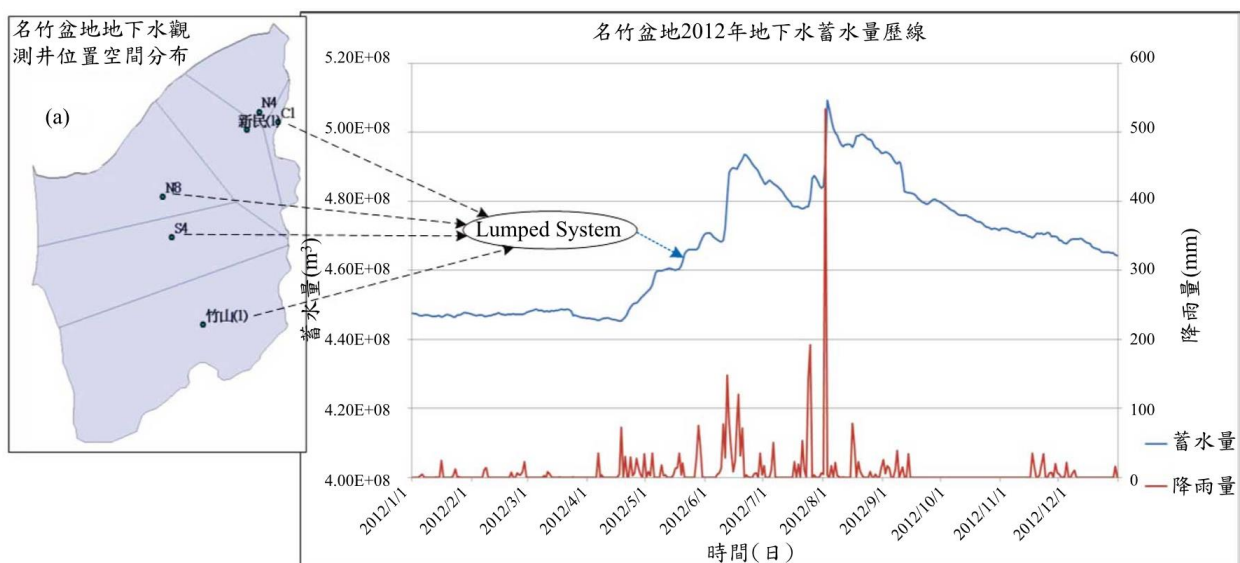


圖 9 名竹盆地觀測井之(a)Voronoi Diagram：與(b)2012 年地下蓄水量歷線

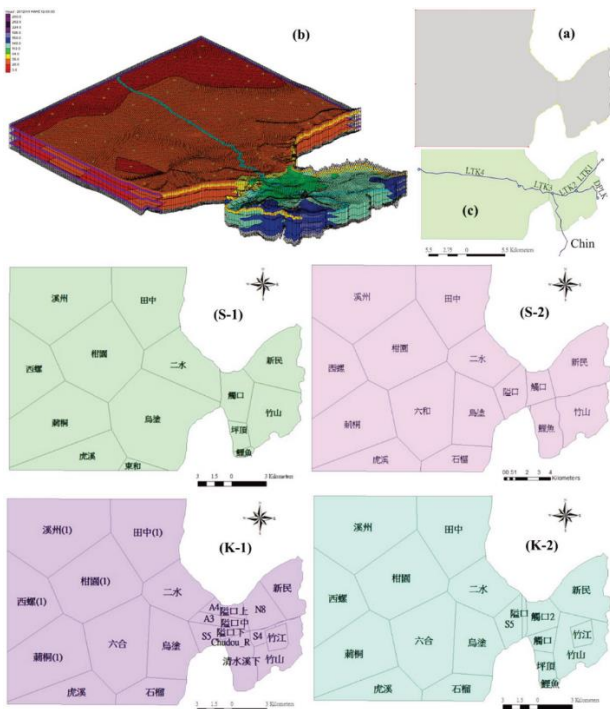


圖 10 濁水溪沖積扇頂及名竹盆地之模式範圍與邊界：(a) 地下水流模式三維網格分層；(b) 河流演算路徑及分段；(c) 第一含水層 S_y 參數分區(S-1)、第二三含水層 S_s 參數分區(S-2)、第一含水層 K_h 參數分區(K-1)、第二三含水層 K_h 參數分區(K-2)

竹山台地之地下水流入，設定為已知流量邊界；濁水溪沖積扇部分扇頂區的北、西、南邊界以觀測水位線性內插為已知水頭邊界，東側八卦山台地與斗六丘陵有地下水側流補注，故設定為已知流量邊界。

4.3.2 地層分層和數值網格設定

根據 4.1 節所述，名竹盆地劃分為三層含水層且其間無阻水層，下游扇頂區根據水利署高程資料建立兩層含水層，第一層與第二層之平均厚度為 37.64 公尺與 121.5 公尺。考量模擬範圍內數值計算之精度，採用邊長 150 公尺之正方形為離散網格；垂直則以每一含水層為一個離散網格，地層厚度介於 20 至 50 公尺，總共 34,554 個離散網格，建構的概念模型分層和離散網格如圖 10(b)所示。

4.3.3 水文地質參數分區與設定

本研究根據現地抽水試驗場址作為地下水流模式參數分區之控制點，比出水量 S_y 及比儲水率 S_s 、水平與垂直水力傳導係數(K_h 與 K_v)所劃分之分區控制範圍皆不盡相同。 S_y 及 S_s 主要以控制點之 Voronoi Diagram 進行參數分區劃分，如圖 10(S)所示；根據抽水試驗，

各分區 S_y 之初始設定值介於 0.152 至 0.260 之間、 S_s 則介於 0.00044 與 0.00138 (1/m)之間。名竹盆地表層地質組成(沖積層與紅土堆積層)差異性較大，根據岩性及觀測井位所劃分各分層之 K_h 分區較為細緻，如圖 10(K)所示；根據經濟部水利署(2011)^[31]，各分區 K_h 之初始設定值介於 5.33 至 199.62 (m/d)之間； K_v 之分區劃分方式與 S_y 及 S_s 相同，初始設定值介於 4.32 至 147.72 (m/d)之間。

4.3.4 河流演算套件設定

河流演算套件(SFR2)所需輸入資料為河道路徑兩岸之曼寧 n 值、河川流量、斷面、上下游河床高程、底泥透水係數 K_r 和厚度。名竹盆地所設定河道路徑與分段如圖 10(c)所示，濁水溪支流東埔蚋溪(DPLK)與清水溪(Chin)各建一河段，濁水溪主流由盆地東至西邊界分為四個河段(LTK1-4)。河川斷面採用經濟部水利署(2012)^[32]現地量測及河床質調查資料，曼寧 n 值之設定介於 0.035 至 0.05 之間。

K_r 之初始解設定引用經濟部中央地質調查所(1996)^[30]針對河床底泥特性所調查各斷面三軸透水試驗之結果，研究範圍內濁水溪之 K_r 介於 $4.22 \times 10^{-6} \text{ cm/sec}$ 與 $8.56 \times 10^{-4} \text{ cm/sec}$ 之間，而清水溪則介於 $4.45 \times 10^{-6} \text{ cm/sec}$ 與 $1.03 \times 10^{-4} \text{ cm/sec}$ 之間。河床底泥厚度初始設定為 1 m，後續考量洪水通過對於河床質之影響變化再進行模式率定修正。

4.3.5 地下水補注量時空分布之初始設定

本研究分析地下蓄水變化歷線來進行淨補注量空間分布檢定，根據地下水平衡理論，將地下蓄水變化量加上抽水量後，其餘資訊代表地下水流入量與流失量之綜合影響，如式(20)所示，本研究分析各含水層淨流出入量之載荷得點，以獲得淨補注量之時間空間分布資訊。

$$\begin{aligned} R_{\square f}^{\text{net}} &= R_{\square f}^{\text{surf}} + R_{\square f}^{\text{boun}} \\ &= Q_{\square f}^{\text{in}} - Q_{\square f}^{\text{loss}} = \Delta Q_{\square f}^{\text{sto}} + Q_{\square f}^{\text{PW}} \end{aligned} \quad \text{.....(20)}$$

其中， $R_{\square f}^{\text{net}}$ 、 $Q_{\square f}^{\text{in}}$ 、 $Q_{\square f}^{\text{loss}}$ 、 $\Delta Q_{\square f}^{\text{sto}}$ 分別為第 s_f 分區、Stress period 第 m 月($t_s=1$ 至 28、30 或 31)之地下水淨補注量 [L^3]。

4.4 地下水流數值模式率定結果

名竹盆地含水層(一)蓄水量模擬誤差分解之分析

結果顯示，前五個階層的主成分得點所計算之特徵值約佔 91 % 的解釋變異量，第六至第八成分的解釋變異百分比約為 8 %，其餘總和則不足 1 %。本研究地下水流數值模式參數迭代修正檢定所採用成分階層的高低順序，考量目標函數對於參數之誤差下降梯度，亦即參數對地下水位的敏感度百分佔比與高低階載荷得點的解釋變異百分比之對應關係，影響地下水位最直接且快速的雨水補注量使用第一和第二個($j=1\sim2$)成分的載荷得點計算修正量，降雨後大量影響地下水位的河床底泥透水係數和厚度採用 $j=3\sim4$ 的成分計算修正量，影響地下水位較為延遲的邊界補注量利用 $j=5\sim6$ 的成分計算修正，敏感度最小的水力傳導係數則使用 $j=7\sim10$ 的成分計算修正。

名竹盆地含水層(一)原始包含 2 口水利署觀測井與 4 口成大觀測井，地下水觀測井分布相當不平均，尤其新民、N4 與 C1 集中於濁水溪上游，模擬時對於距離觀測井較遠之區域較難顯示含水層受到水文地質參數控制與抽水及補注影響下，地下水流動之真實情形。因此本研究提出使用因子載荷得點決定新增輔助井之最佳位置，首先針對原始六口觀測井之蓄水變化時空變量進行奇異值分解，亦即利用多階載荷得點分解敏感度矩陣，並特別調查名竹盆地空間上各階層載荷向量中元素值為 0 之等高線，以搜尋可使估計參數共變異數矩陣行列式為最小(如式(17b)所示)之觀測站網空間佈點最佳設計，如圖 11(a)所示；圖中顯示受到共變異數矩陣計算之影響，載荷值為 0 之交點部分集中於原六口觀測井周圍，但仍有不少交點散布於其餘區域；根據 2.6 節所推導之限制式(18-19)，本研究選

取有 4 條以上載荷值為 0 的等高線所通過之交點為選定的新輔助井位，其與原始觀測井之距離須大於 1,200 m 的抽水影響半徑，選取結果如圖 11(a)所示，分別將其命名為東(East)、南(South)、西(West)、北(North)輔助井，並將 4 口輔助井及原始 6 口觀測井共 10 口井重新劃分 Voronoi Diagram 控制區域，如圖 11(b)所示。

本研究考量河床底泥沖刷/堆積會隨著流量大小而變化，因此底泥透水係數具有時變性，其河流演算套件之參數檢定結果如圖 12 所示；LTK1、DPLK 與 CHIN 河段率定出之最高底泥透水係數分別為 36、2.7 與 10.5 m/day，係數大小與流量多寡之間呈現正比相關。圖中顯示 6 月至 8 月時河床受到雨季(包含梅雨、午後雷陣雨及颱風豪雨)洪水沖刷之影響，底泥厚度最小且滲透係數最大，亦即該時段河水入滲至地下水之補注量較大，此論述與降雨後河床附近觀測井(新民、N4、C1)的地下水位迅速上升之趨勢相符。



圖 13 與圖 14 分別顯示水平與垂直水力傳導係數之檢定結果皆在合理範圍內，受到隘口地形影響，隘口、觸口、S5 分區之水平水力傳導相當快速且附近變化梯度相當大，最大水平傳導係數可達到 190~205 m/day；當地下水流通過隘口後，扇頂處由透水性良好之連通礫石層所組成，因此二水與烏塗之垂直水力傳導係數最高可達到 360~510 m/day。比出水量與儲水係數之檢定值則大多與根據抽水試驗所設定之初始值相近，平均差異不到 3%，其修正量主要由解析解與數值解之求解差異所造成。

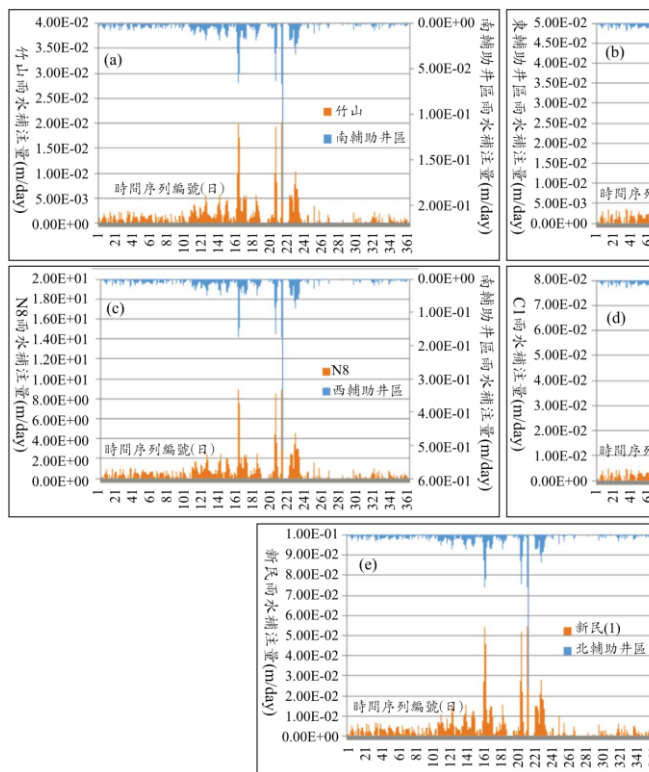


圖 15 與圖 16 分別展示使用模擬誤差擬牛頓法檢定名竹盆地各分區雨水補注量與各分段邊界補注量之結果；傳統地下水歷線波動分析只能估算整區雨水與邊界之補注量(其控制方程式為質量守恆)，無法準確估算其空間分布，故在模擬上容易產生較大之誤差；因此本研究使用載荷得點近似 Hessian 及 Jacobian 矩陣，可分別檢定得到雨水補注量及邊界補注量之時間空間分布，以減少空間分布不確定性所導致之模擬誤

差。結果顯示，豐水期(四月至九月)與枯水期(十月至三月)之雨水補注比約為 3.95:1，豐水期與枯水期之日平均補注率分別為 $1.99 \times 10^{-1} \text{ m/day}$ 與 $5.04 \times 10^{-2} \text{ m/day}$ ，最大補注率皆出現在 N8 站分區，分別為 $1.12 \times 10^0 \text{ m/day}$ 與 $2.83 \times 10^{-1} \text{ m/day}$ ；豐枯水期地面水與邊界地下水之補注比介於 3.32:1 至 0.87:1 之間，各分段日平均邊界補注量約介於 $4.65 \times 10^4 \text{ m}^3$ 至 $2.01 \times 10^5 \text{ m}^3$ 之間；由於地下水於飽和孔隙介質中流動較地表淺水緩慢，邊界補注量於豐枯水期間之差異較雨水補注量為小，降雨集流時間(日)過後，延遲上升的地下水經常於快速退水之河床產生流失的情形。

本研究為驗證新增觀測輔助井後，是否有達到改善地下水模擬及參數檢定之精度，分別針對僅有原始

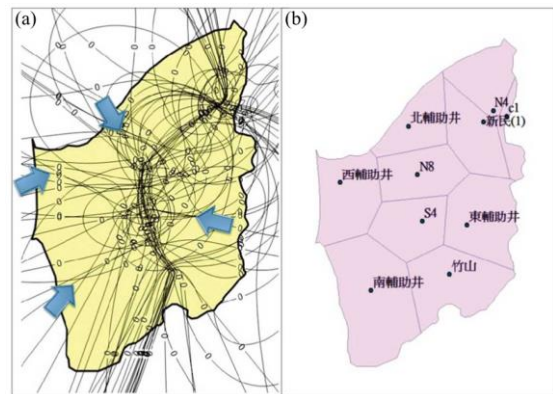


圖 11 (a)多階層載荷值為 0 的等高線分佈圖及選井位置；(b)名竹盆地新增輔助井後所重新劃設之 Voronoi Diagram 分區

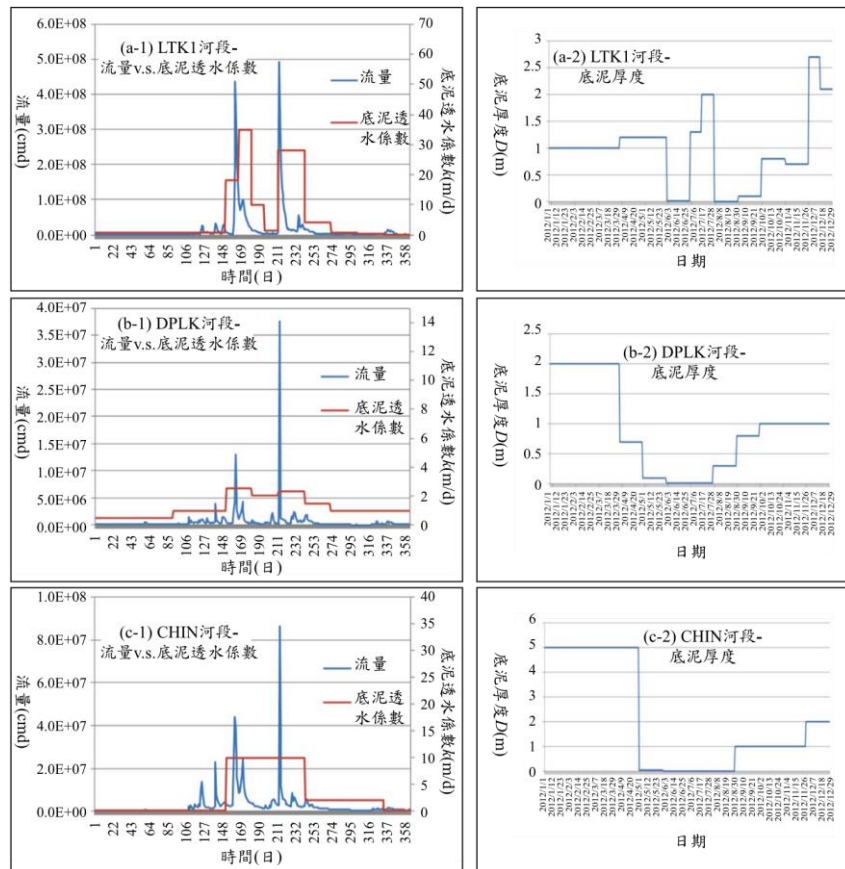


圖 12 名竹盆地河流演算套件於(a)LTK1；(b)DPLK；與(c)CHIN 河段底泥透水係數(-1)與底泥厚度(-2)之率定結果

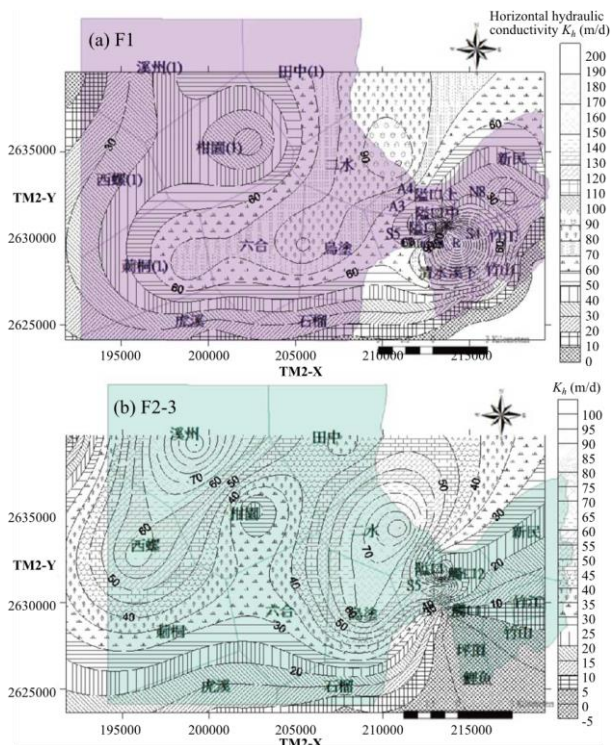


圖 13 名竹盆地水平水力傳導係數之檢定結果：(a)第一含水層；(b)第二三含水層

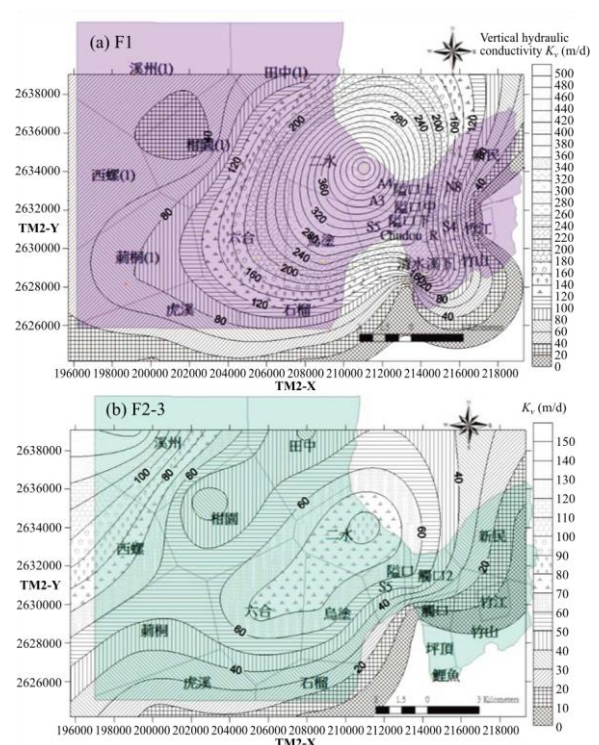


圖 14 名竹盆地垂直水力傳導係數之檢定結果：(a)第一含水層；(b)第二三含水層

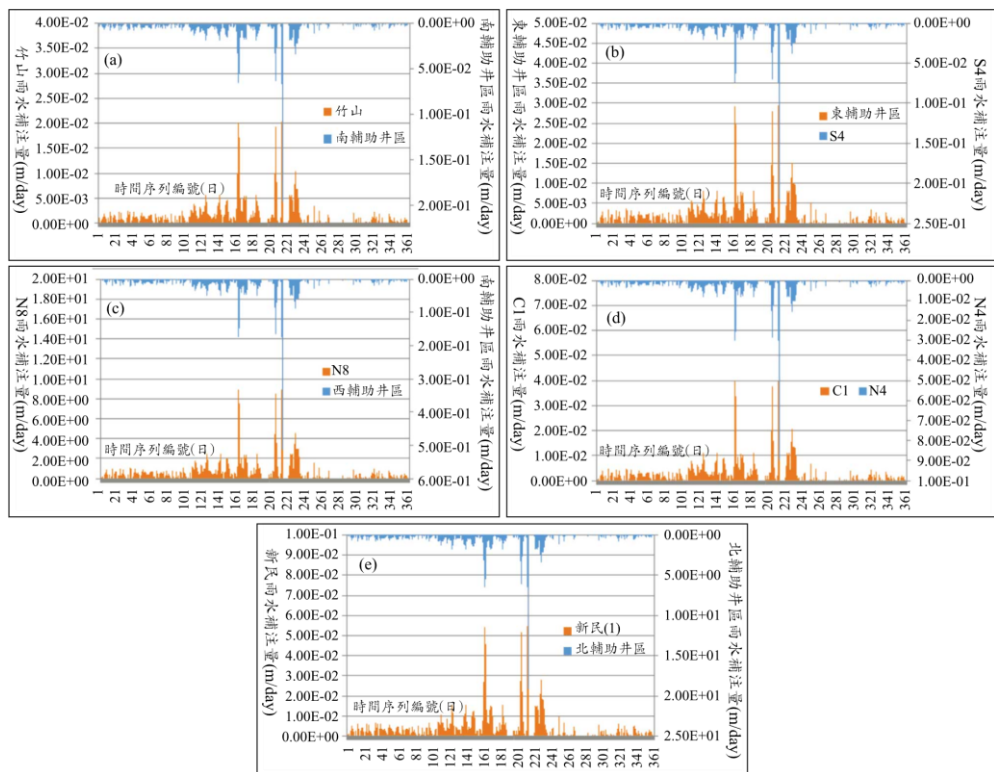


圖 15 名竹盆地雨水補注量之檢定結果：(a)竹山及南輔助井分區；(b)東輔助井及 S4 分區；(c)N8 及西輔助井分區；(d)C1 及 N4 分區；與(e)新民及北輔助井分區

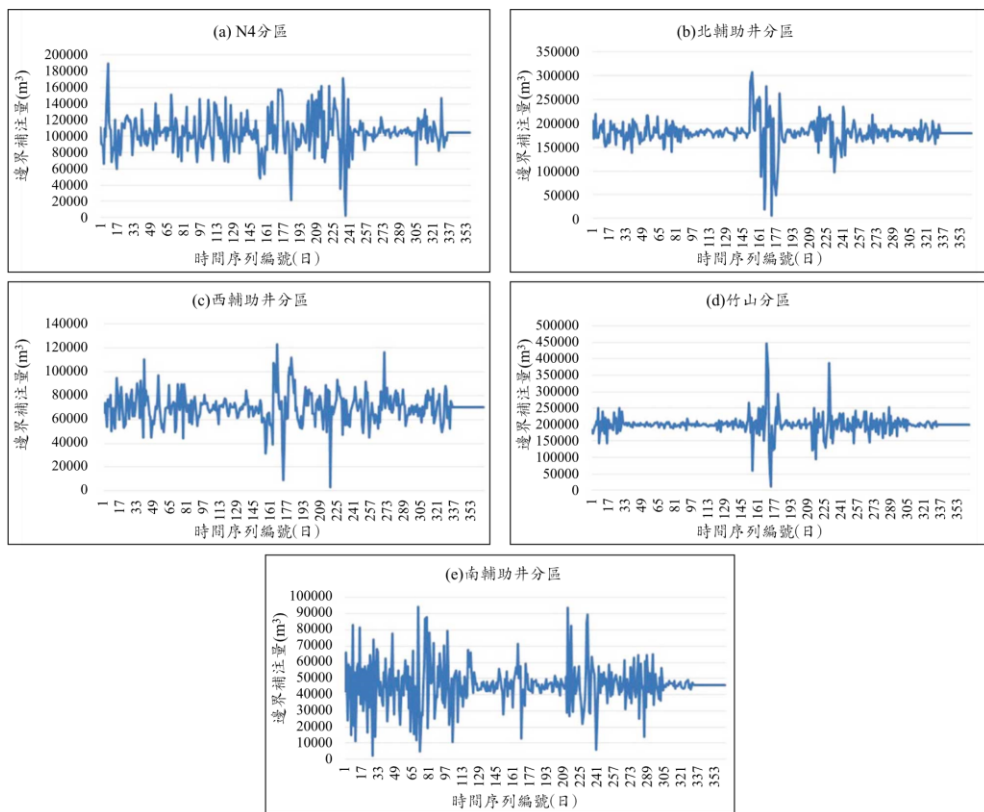


圖 16 名竹盆地邊界補注量之檢定結果：(a)N4 分區；(b)北輔助井分區；(c)西輔助井分區；(d)竹山分區；與(e)南輔助井分區

六口觀測井與新增輔助井之兩種模擬模式進行率定，其模擬成效比較如圖 17 所示。結果顯示名竹盆地第一含水層地下水頭模擬均方根誤差(RMSE)皆在可接受範圍內，能夠準確模擬地下水位變化趨勢，新民站、N4 站與竹山站模擬與觀測歷線之相關係數分別可達到 0.971、0.969 與 0.678；新增輔助井後新民站、N4 站與竹山站之模擬 RMSE 分別相較於原始模式減低 33.4 %、31.7 %與 30.2 %，證明新增輔助井確實能明顯改善模擬精度，代表使用地下蓄水變化量分解的多

階層載荷所決定之輔助井位，可有效觀測多種敏感度參數影響水頭量之水流情況，隨後計算的模擬蓄水波動載荷得點可較準確的估算朝向真解移動之參數修正時空向量，以有效率的減少地下水位模擬精度之限制及不確定性。

過往在率定地下水流數值模式時，經常使用分站之地下水歷線波動分析進行抽水量與補注量之推估，水文地質參數則大多僅以現地土壤組成及地質鑽探資料進行推估，未曾使用多階載荷得點分解蓄水變化量

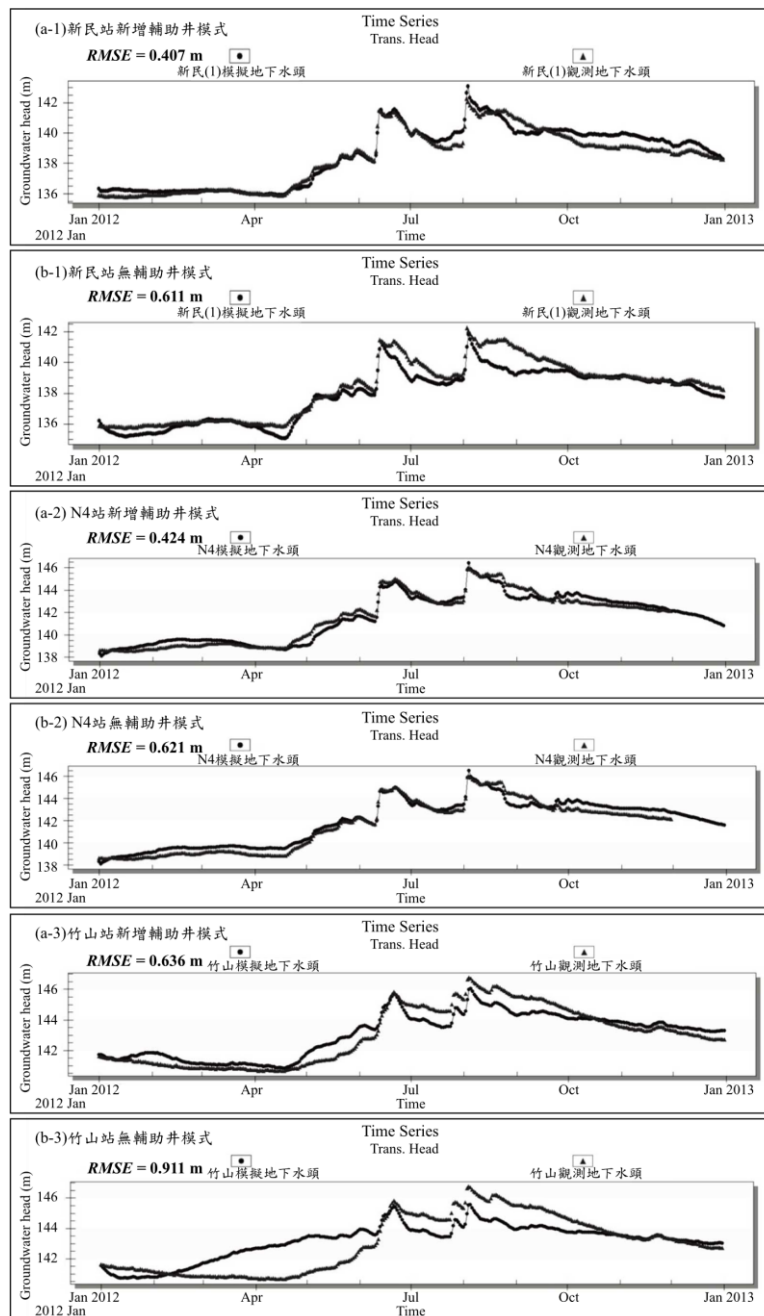


圖 17 模式率定完成後新民站(-1)、N4 站(-2)與竹山站(-3)地下水位模擬與觀測歷線之比較：(a)新增輔助井模式；(b)無輔助井模式

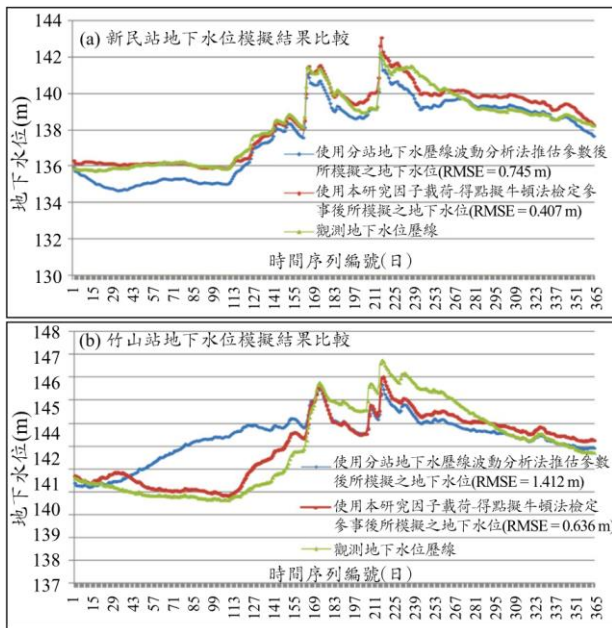


圖 18 使用分站地下水歷線分析法與載荷得點擬牛頓法檢定參數後地下水位模擬之成效比較：(a)新民站(一)；(b)竹山站(一)

歷線及模擬蓄水誤差歷線，也無新增觀測輔助井以提升水頭模擬及參數檢定之精度，其模擬成效比較如圖 18 所示；結果顯示，本研究所使用載荷得點擬牛頓法(紅色歷線)相較於分站地下水歷線波動分析法可明顯改善水位模擬趨勢，並有效分別降低新民站 45.4 %與竹山站 55.0 %之模擬誤差(RMSE)，證實本演算法可在減小計算成本的優勢下，提升地下水位擬合之準確度。

5. 結論與建議

針對複雜多層多類型的地下水模式參數進行準確的時空辨識，並解決不適定問題為模式率定的重要研究主題。本研究提出兩種對稱三階載荷-得點擬牛頓法，此法乃修改 Levenberg-Marquardt 演算法並從 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno 演算法導入三階結構，以求解大尺度地下水系統水文地質參數和補注量時空分佈之限制問題。補注參數包括地面水補注量和邊界補注量，水文地質參數包括河床滲漏率、含水層水力傳導係數和阻水層滲漏傳導係數。為了加速方向性收斂、趨近全域最佳解並達成適定性問題，本研究使用向量化有限可切換步長於流通地下水之逆向問題，透過可切換的技巧特製每種參數的專有步長，以修正搜索方向並減少不同種類參數間的差異；為了近似 Hessian 矩陣、解決非線性不適定問題並檢測目標

函數全域最小區域，第一種擬牛頓法使用敏感度分解的高低階因子載荷得點於計算 Hessian 校正矩陣，第二種使用蓄水量模擬誤差分解的多階載荷得點近似 Hessian 及 Jacobian 矩陣。此外，本研究利用奇異值分解所得到載荷得點的階層和深度資訊，將傳統純量線搜尋法修改為向量化多階導數精確雙圍繞趨近的強化方法，以求解對應於不同水文地質參數和補注量的向量化步長。另外，本研究特別利用敏感度載荷得點分解地下水觀測井網優選模式之目標函數(估計參數共變異矩陣之行列式值最小化)，以有效率的計算新增輔助井之最佳位置。

本研究設計兩種數值實驗，以驗證敏感度與模擬誤差擬牛頓法於辨識不同種類參數的能力和準確性；實驗 1 使用單一載荷得點近似 Hessian 矩陣並計算對應的修正方向，以辨識不透水與定水頭混和邊界系統之地下水力傳導係數；實驗 2 使用疊合的高低階載荷得點近似 Hessian 和校正方向，以檢定地面水補注量和水力傳導係數於多種定水頭邊界之地下水系統。結果顯示，Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓法的迭代目標函數歷線皆可以二次收斂速率下降，以搜尋到最佳解，然而敏感度擬牛頓法的誤差下降速度比 Levenberg-Marquardt 和模擬誤差擬牛頓法為快；實驗 1 利用 Levenberg-Marquardt、敏感度與模擬誤差擬牛頓所檢定水力傳導係數之平均誤差百分比分別為 2.77 %、0.80 %和 2.57 %，實驗 2 中水力傳導係數的平均檢定誤差分別為 4.26 %、0.02 %和 1.33 %、地面水補注量的平均誤差則分別為 1.71 %、0.66 %和 4.20 %；證實敏感度擬牛頓法可藉由去蕪存菁的方式，較精確的近似 Hessian 矩陣以檢定得到更準確的水力傳導係數和地面水補注量。此外，本研究設計的目標函數(地下水模擬蓄水量的最小平方誤差)和高低階組合的載荷得點可檢測出確切的全域最小區域，其中向量化的有限可切換步長致力於沿校正方向加速收斂，並將參數向量跳脫局部次佳解區以迭代的趨近全域最佳真實解、解決非線性不適定問題。由於模擬誤差擬牛頓法分解蓄水誤差量為載荷得點以進行 Hessian 及 Jacobian 矩陣之近似，因此相對於 Levenberg-Marquardt 和敏感度擬牛頓可大幅降低 34.88 %的暫態模擬次數和計算成本。

本研究將建立的優選模式應用於名竹盆地地下水流數值模式率定，模擬時期為 2012 年 1 月 1 日至 12 月 31 日，以單日為時間步長進行暫態(transient)模擬。為驗證新增輔助井是否能改善地下水模擬及參數檢定之精度，分別針對原始六口觀測井與新增輔助井兩種模式進行率定。結果顯示第一含水層地下水頭模擬與

觀測之均方根誤差(RMSE)皆在可接受範圍內，能夠準確模擬地下水位變化趨勢，新民站、N4 站與竹山站模擬與觀測歷線之相關係數可分別達到 0.971、0.969 與 0.678；新增輔助井後新民站、N4 站與竹山站之 RMSE 分別相較於原始無輔助井模式降低 33.4 %、31.7 %與 30.2 %，明顯提升地下水頭擬合之準確度，代表使用地下蓄水變化量之多階層載荷所決定之輔助井位，可有效率觀測各種敏感度參數影響水頭流量之情況，隨後分解敏感度與模擬誤差為多階載荷得點後，可較精確的計算朝向真解移動之參數修正時空向量，並減少地下水位模擬之限制及不確定性。此外，對稱三階載荷得點擬牛頓法相較於分站地下水歷線波動分析可明顯改善水位模擬趨勢，以有效分別降低新民站 45.4 %與竹山站 55.0 %之模擬 RMSE，證實本方法不僅可有效地偵測流動敏感度和誤差來源以量化時空校正值，而且可精確模擬地下水位的峰值和波動。

參考文獻

1. Arnold, J.G., Muttiah, R.S., Srinivasan, R., and Allen, P.M., "Regional estimation of base flow and groundwater recharge in the Upper Mississippi river basin," *Journal of Hydrology*, Vol. 227, pp. 21-40, 2000.
2. Banta, E.R., Modelmate—a graphical user interface for model analysis, U.S. Geological Survey Techniques and Methods, 31 pages, 2011.
3. Carrera, J., and Neuman, S.P., "Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions: 1. Maximum likelihood method incorporating prior information," *Water Resour. Res.*, Vol. 22, pp. 199-210, 1986.
4. Cooley, R.L., "A method of estimating parameters and assessing reliability for models of steady state groundwater flow: 1. Theory and numerical properties," *Water Resour. Res.*, Vol. 13, pp. 318-324, 1977.
5. Curtis, F.E., and Que, X.C., "A quasi-newton algorithm for nonconvex, nonsmooth optimization with global convergence guarantees," *Math. Program. Comput.*, Vol. 7, pp. 399-428, 2015.
6. Dahlquist, G., and Björck, Å., Numerical methods, Dover Publications, 2003.
7. Fletcher, R., Practical methods of optimization, Wiley, 2013.
8. Floudas, C.A., and Pardalos, P.M., Encyclopedia of optimization, Springer, US, 2008.
9. Gerhart, J.M., "Ground-Water recharge and its effects on nitrate concentration beneath a manured field site in Pennsylvania," *Groundwater*, Vol. 24, Issue 4, pp. 483-489, 1986.
10. Hayley, K., Valenza, A., White, E., Hutchison, B., and Schumacher, J., "Application of the iterative ensemble smoother method and cloud computing: A groundwater modeling case study," *Water*, Vol. 11, pp. 1649, 2019.
11. Healy, R.W., and Cook, P.G., "Using groundwater levels to estimate recharge," *Hydrogeology Journal*, Vol. 10, pp. 91-109, 2002.
12. Hsu, N.S., Chiang, C.J., Wang, C.H., Liu, C.W., Huang, C.L., and Liu, H.J., "Estimation of pumpage and recharge in alluvial fan topography under multiple irrigation practices," *Journal of Hydrology*, Vol. 479, pp. 35-50, 2013.
13. Hsu, N.S., and Yeh, W.W.G., "Optimum Experimental Design for Parameter Identification in Groundwater Hydrology," *Water Resources Research*, Vol. 25, Issue 5, pp. 1025-1040, 1989.
14. Igboekwe, M.U., Rao, V.V.S.G., and Okwueze, E.E., "Groundwater flow modelling of Kwa Ibo River watershed, southeastern Nigeria," *Hydrological Processes*, Vol. 22, Issue 10, pp. 1523-1531, 2008.
15. Kanzow, C., Yamashita, N., and Fukushima, M., "Levenberg-Marquardt methods with strong local convergence properties for solving nonlinear equations with convex constraints," *J. Comput. Appl. Math.*, Vol. 173, pp. 321-343, 2005.
16. Lee, C.H., Yeh, H.F., and Chen, J.F., "Estimation of groundwater recharge using the soil moisture budget method and the base-flow model," *Environmental Geology*, Vol. 54, Issue 8, pp. 1787-1797, 2008.
17. Martinez-Santos, P., and Martinez-Alfaro, P.E., "Estimating groundwater withdrawals in areas of intensive agricultural pumping in central Spain," *Agricultural Water Management*, Vol. 98, Issue 1, pp. 172-181, 2010.
18. Mittelhammer, R.C., Judge, G.G., and Miller, D.J., Econometric foundations pack with CD-ROM, Cambridge University Press, 2000.
19. Moon, S.K., Woo, N.C., and Lee, K.S., "Statistical analysis of hydrographs and water-table fluctuation to estimate groundwater recharge," *Journal of Hydrology*, Vol. 292, Issue 1-4, pp. 198-209, 2004.

20. Nocedal, J., and Wright, S., Numerical optimization, Springer, New York, 2006.
21. Sheffer, N.A., Dafny, E., Gvirtzman, H., Navon, S., Frumkin, A., and Morin, E., "Hydrometeorological daily recharge assessment model (DREAM) for the Western Mountain Aquifer, Israel: Model application and effects of temporal patterns," *Water Resour. Res.*, Vol. 46, No. W05510, 2010.
22. Takounjou, A.F., Rao, V.V.G.S., Ngoupayou, J.N., Nkamdjou, L.S., and Ekodeck, G.E., "Groundwater flow modelling in the upper Anga'a river watershed, Yaounde, Cameroon," *African Journal of Environmental Science and Technology*, Vol. 3, Issue 10, pp. 341-352, 2009.
23. Winston, R.B., Modelmuse—A graphical user interface for MODFLOW-2005 and PHAST, In U.S. Geological Survey Techniques and Methods, USGS, Reston, Virginia, USA, 2009.
24. Yeh, W.W.G., "Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem," *Water Resour. Res.*, Vol. 22, pp. 95-108, 1986.
25. Yeh, W.W.G., and Yoon, Y.S., "Parameter Identification with Optimal Dimension in Parameterization," *Water Resources Research*, Vol. 17, Issue 3, pp. 664-672, 1981.
26. Yu, H.L., and Chu, H.J., "Understanding space-time patterns of groundwater system by empirical orthogonal functions: A case study in the Choshui River alluvial fan, Taiwan," *Journal of Hydrology*, Vol. 381, Issue 3-4, pp. 239-247, 2010.
27. Yu, H.L., and Lin, Y.C., "Analysis of space-time non-stationary patterns of rainfall-groundwater interactions by integrating empirical orthogonal function and cross wavelet transform methods," *Journal of Hydrology*, Vol. 525, pp. 585-597, 2015.
28. 徐年盛、江崇榮、汪中和、劉振宇、劉宏仁、黃建霖，「多類灌溉型式地下水系統抽水量與補注量之估算」，台灣農業工程學報，第 58 卷，第 1 期，第 69-90 頁，2012。
29. 張良正、朱宏杰、陳宇文、陳信華，「遺傳演算法與試驗設計原理於地下水井網設計之應用」，台灣農業工程學報，第 52 卷，第 2 期，第 1-11 頁，2006。
30. 經濟部中央地質調查所，濁水溪中游地區地下水補注調查與評估，1996。
31. 經濟部水利署，雲林內陸地層下陷地區地下水抽水機制之探討與評估期末報告，2011。
32. 經濟部水利署，「經濟部水利署水文水資源資料管理供應系統」網站，<http://gweb.wra.gov.tw/wrweb/>，2012。