

行政院原子能委員會
委託研究計畫研究報告

異質性含水層水流與傳輸不確定分析技術研究

**Uncertainty analysis of flow and transport in heterogeneous aquifer
systems**

計畫編號：1012001INER005

受委託機關(構)：國立中央大學

計畫主持人：倪春發

聯絡電話：03-4227151 # 65847

E-mail address：nichuenf@gmail.com

核研所聯絡人員：莊怡芳

報告日期：101 年 11 月 30 日

目 錄

目 錄.....	I
中文摘要.....	1
ABSTRACT	2
作者及所屬單位.....	4
壹、計畫緣起與目的.....	5
貳、研究方法與過程.....	7
參、主要發現與結論.....	26
肆、參考文獻.....	27

中文摘要

天然含水層因形成機制不同，均存在不同程度的異質性；此外，現實條件下，有限的觀測數據往往不足，若使用有限的觀測數據代入地下水模式，推估地下水水流與污染傳輸過程，其推估結果必然存在不確定性，此不確定性的量化近年來已成為風險評估的重要依據。本研究將利用既有數值模式如 MODFLOW、MT3DMS、MODPATH 或 FEMWATER 等，由選定的研究場址配合既有觀測數據(如地表水文資料、地質鑽探取樣、地下水位量測、抽水試驗分析、示蹤劑試驗等)，先以地質統計方法建立場址參數的空間分布結構，再以序率方法(Stochastic methods)量化分析各標的參數對水流與污染傳輸所引致之不確定性。研究成果將提供標準分析流程，包括模式理論、模式建立、模式運作與結果分析等；此外，將以選定的標的參數如水力傳導係數、降雨補注率、邊界條件等，對總體不確定性貢獻度，做分級成果可做為未來不同場址條件分析時的重要準則。

Abstract

Natural aquifers are heterogeneous due to the complex mechanisms of surficial deposit procedures and hydrogeological conditions. For realistic problems, the data availability for groundwater flow and transport simulations are generally limited because of the restricted resources. Such complex nature of aquifer heterogeneity and insufficient data usually lead to uncertainty in the problems of modeling groundwater flow and contaminant transport. The issues of uncertainty have been widely considered and are the key parameters for risk analysis in recent applications. This study will employ FEMWATER model and develop a GUI (Graphic User Interface) to simplify uncertainty analysis for groundwater flow and transport. The field data such as surface hydrological data, borehole data, groundwater levels, pumping and tracer tests and the associated parameters, are first used for spatial analysis to obtain the statistical structures of variables that are considered to be spatial random variables. This study then uses the statistical structure to perform Monte Carlo simulation to assess the degrees of uncertainty for different random variables. The study will provide technologies on analyzing uncertainty of groundwater flow and transport and provides output format for scientific graphical software.

This study also evaluates the contribution of sources of uncertainty such as hydraulic conductivity, recharge, and boundary conditions. The results and procedures can give guidelines for future investigations on site-specific conditions; especially for those the field observations are limited.

作者及所屬單位

作者	所屬單位
倪春發 副教授	國立中央大學應用地質研究所
陳瑞昇 教授	國立中央大學應用地質研究所
李唯祺 博士班研究生	國立中央大學應用地質研究所

壹、計畫緣起與目的

近年來一些重要的含水層水流及汙染傳輸議題，如隧道開挖、山區地下水資源評估、核廢料儲存場址選定與評估、二氧化碳地質封存與深層地熱替代能源等，在汙染團的移動路徑預測及地下水流方向判定問題上，數值模擬均扮演一項重要的分析工具(例如 Anderson and Woessner, 1992; Segol, 1993; Gümach, 1999; Yeh, 2004; Zheng and Bennett, 2002; Hill and Tiedeman, 2007)。然而，在面對各式各樣的汙染議題時，合適的數值模式選定以及各項邊界條件的選定往往對於模擬結果有重大的影響。特別像是高放射性與低放射性核廢料場址選定，由於現實狀況下，無法進行長時間的存放實驗，因此善用數值模擬工具可以大幅降低實驗成本，更可以達成為期數百、數千年的狀態預測(例如 Ahearne, 1997; Dyer and Peters, 2004; Rempe, 2007; Marpeaul and Saad, 2010)。

在實際的問題上，由於地下水含水層形成的機制不同，含水層本身即具有不同程度的異質性 (heterogeneity)，若要詳細描述場址之參數空間分布，則需要消耗許多人力物力，以在時間及空間上能得到許多精細的量測數據；考慮到資源及觀測能力上的限制，以有限的資料點去分析資料點不足或含水層異質性所造成的水流與汙染傳輸行為，成為替代的一種方法。序率方法是近幾年來常用的參數不確定性分析方法，此法主要有兩個目的，第一個目的是為了量化

資料點不足所造成的不確定性 (uncertainty)，另一個目的則是希望考慮含水層異質性所造成的不確定性 (例如 Varljen and Shafer, 1991; van Leeuwen et. al., 1998; Lu and Zhang, 2003, Zhang and Lu, 2004; Bakr and Butler, 2004, 2005; Kunstmann and Kastens, 2006)，此不確定性將作為規劃設計時風險評估的重要根據。序率方法在理論上是可以將定率方法包含在內，當觀測的資料點足夠去解析各種尺度 (scale) 的異質性時，序率方法中的推估不確定性將降至最低而回歸至定率方法 (例如 Gelhar, 1993; Dagan and Newman, 1997; Zhang, 2002; Rubin, 2003; de Marsily et. al., 2005)。

雖然以序率方法進行模式模擬能提供較多的資訊，其中最重要的為含水層異質性所造成的不確定性以及含水層參數與水位之相關空間分布特性等。但是根據近年來的研究，由於此法不如定率方法容易理解，使得序率方法為基礎的模式模擬較不容易為研究者及工程界使用。推究最大原因是理論及應用層面的結合過少，尤其是實際案例的分析更少，使得抽象的理論變得難以理解。

因此，本研究之目的為建立一涵蓋序率方法、現有數值模式以及案例分析等重要地下水污染傳輸分析流程，流程內容能有效地結合現地觀測資料，並將序率方法與現有觀測分析模式進行結合，量化各水文參數對地下水水流與污染傳輸造成的不確定性；同時辦理相關教育訓練與技術轉移研討會，透過數學理論及數值模式應用的深入分析，以提供未來地下水數值模擬相關研究上技術層面的提升。

貳、研究方法與過程

一、序率分析模式架構

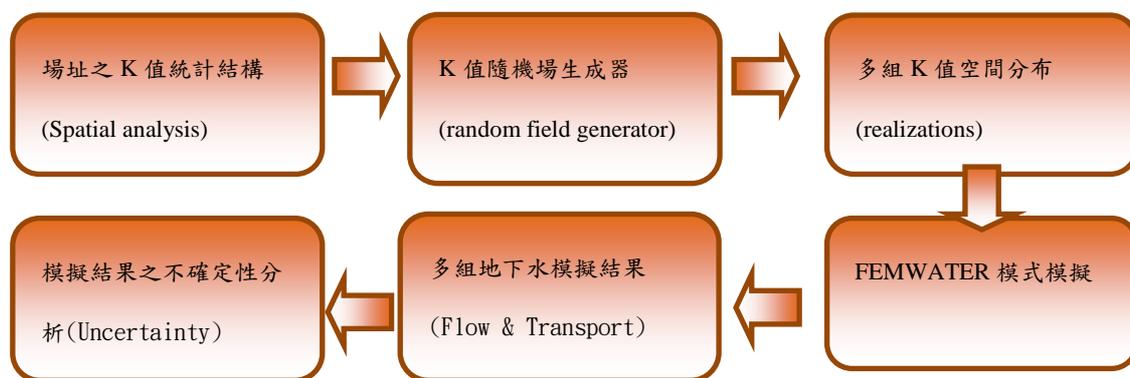
本研究中的序率地下水模式是建構在既有水流及污染傳輸模式之下，以蒙地卡羅法建立序率地下水模式，將根據以下過程進行：

(一) 利用 GMS 介面設定模擬區域，設定邊界與初始條件，再透過工作項目一所得之觀測數據，完成 FEMWATER 均值(mean)流場及污染傳輸設定，如網格建立，網格材質、邊界與初始條件等。

(二) 選定標的參數作為隨機變數，如水力傳導係數、孔隙率或延散度等，預計使用蒙地卡羅法進行不確定性分析，其流程如圖一所示，主要依據以下幾個步驟：

1. 使用地質統計方法取得場址之參數統計結構。
2. 利用隨機場生成器 (Random field generator)，輸入步驟 1 所取得之參數統計結構，生成多組異質性含水層參數空間分佈，例如水力傳導係數、孔隙率或延散度等，其中生成的隨機場可依指定的空間統計特性例如高斯 (Gaussian) 或非高斯 (non-Gaussian) 型式。
3. 將含水層參數代入地下水模擬模式中，加上給定之邊界條件、起始條件等模擬區域特性，進行水流流場模擬，計算地下水流流速，進而模擬污染物傳輸過程。
4. 記錄模擬後的水流流場及特定時間的污染物濃度分佈，重複步驟

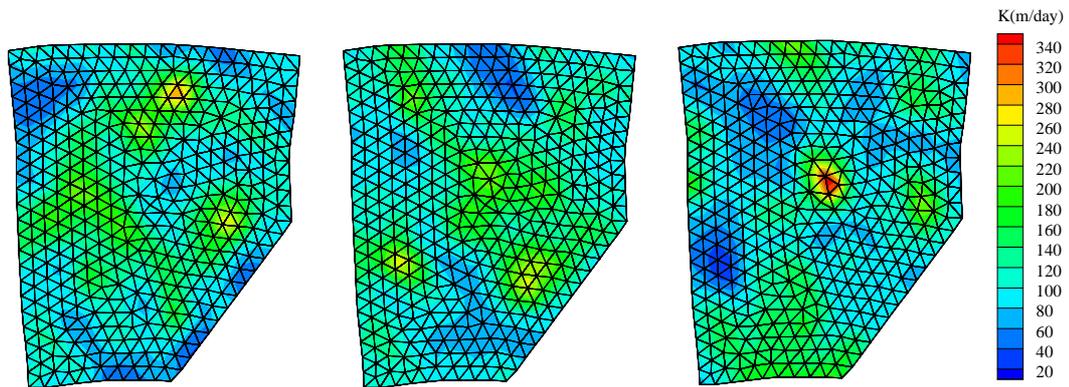
- 1 到 2，直到給定的隨機場均模擬完畢。
5. 將記錄的各種隨機場模擬結果進行統計分析，即可求得水流流場之不確定性如水頭變異數 (σ_h^2)、地下水流速變異數 (σ_v^2) 或污染物濃度變異數 (σ_c^2)。



圖一、本研究所使用之蒙地卡羅法步驟示意圖

此法僅需遵守分析的概念，可用既有的任何模式，只要選定特性參數，即可獲得參數變異下，輸出結果的不確定性量化結果。此法需要求解較多的隨機場才可使所得流場不確定性具有代表性，一般來說需要數千次到數萬次不等的隨機場生成與流場模擬才可達到要求的精確度。

圖二為利用蒙地卡羅法搭配 FEMWATER 的三個 realizations 所使用之隨機場生成的分 K 值分佈，由於分析過程執行過於繁複，因此本研究將開發相關模組以簡化此流程。

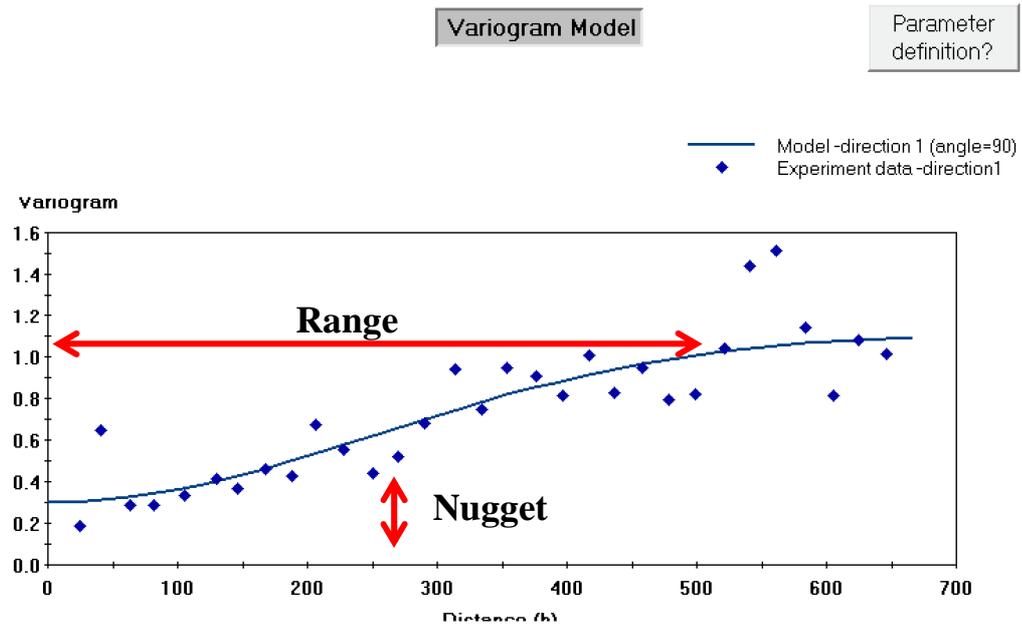


圖二、蒙地卡羅法操作流程中所產生的隨機水力傳導係數場，圖中僅顯示三個 realizations。

二、 參數統計結構分析

在自然狀況下， $\ln K$ 為常態分布 (Willardson and Hurst, 1965; Nielsen et al., 1973; Lee et al., 1985)。因此就同一實驗場址而言，場址內多個觀測點經實驗所得 K 值，在取 \log 值之後 K 值的數量與大小之間會呈現常態分布，此時便可以藉此常態分佈反推實驗場址之 $\ln K$ 的 variance 和 mean；值得一提的是，本研究所開發的模組中，mean 的值設定為定率案例所採用的 K 值。

就地質統計而言，同一實驗場址內，多個觀測點經實驗所得 K 值繪製成 variogram 圖形後，便可由圖形求出其他地質統計參數，如 nugget effect、range 等，其關係如圖三所示。



圖三、variogram 圖形與其參數之關係

三、分析模組開發

本研究所開發之模組介面如圖四所示。模組內包含之不確定性分析工具模組如下：

1. 序率隨機場產生器模組
2. GMS 內建之 FEMWATER 模擬結果展示模組
3. 基於 FEMWATER 之不確定性分析模組

本模組介面除了用於科學上進行不確定性分析計算外，另外結合了國內較為廣泛使用的地下水數值模擬商業化介面 GMS (Groundwater Modeling System) 以及科學繪圖工具 Tecplot 以作為資料前處理和結果展示之用。本研究所使用之計算地下水流用數值模

式為美國賓州大學(Pennsylvania State University)葉高次教授所發展之 FEMWATER，其他地下水相關模擬模式如 MODFLOW，MT3DMS，及 MODPATH 等，均可依據相同流程進行分析。

使用模組之系統需求如下：

1. 系統內安裝有 .NET Framework 3.5 以上的版本。
2. 軟體是以 32 位元(X86)平台寫成的，在 64 位元(X64) 經測試應該可正常運作。
3. 足夠的硬碟空間，以 realization 量為準，每 10 個 realizations 約需 1GB 的空間。
4. 系統內安裝有 Tecplot。



圖四、本研究所開發之模組介面

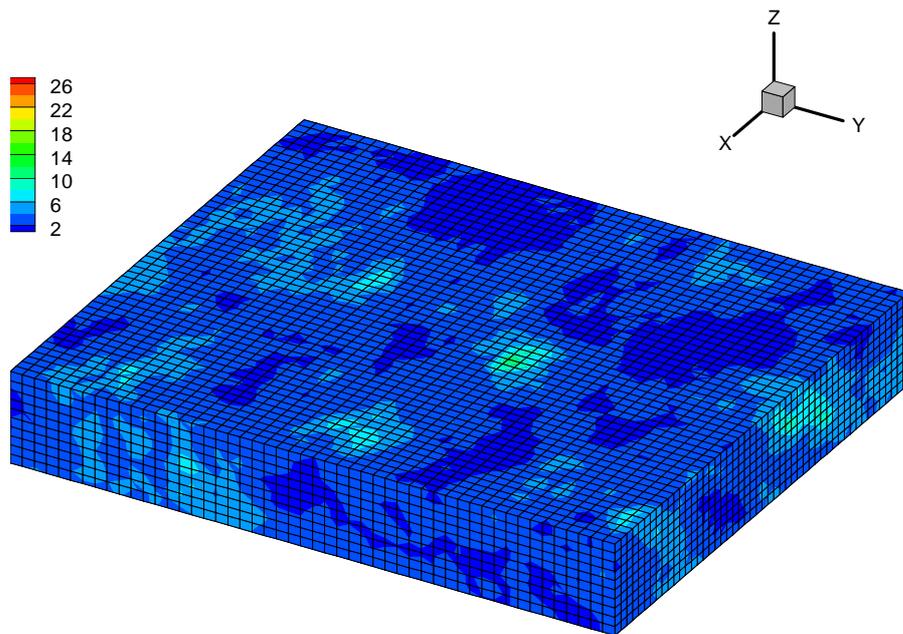
(一)各項子模組功能概述

1. 序率隨機場產生器 (Random field generator) 模組

本模組之介面結構如圖五所示。能藉由輸入以場址內之空間結構分布狀況所得之地質統計參數，如 variance、nugget effect 等。本模組便能利用 SGSIM (Sequential Gaussian Simulation) 產生出以高斯空間統計分布為主，並與場址具有相同空間統計分布結構之隨機場以利後續之利用，模式所作出之隨機場分布狀況如圖六所示。



圖五、序率隨機場產生器模組之介面結構



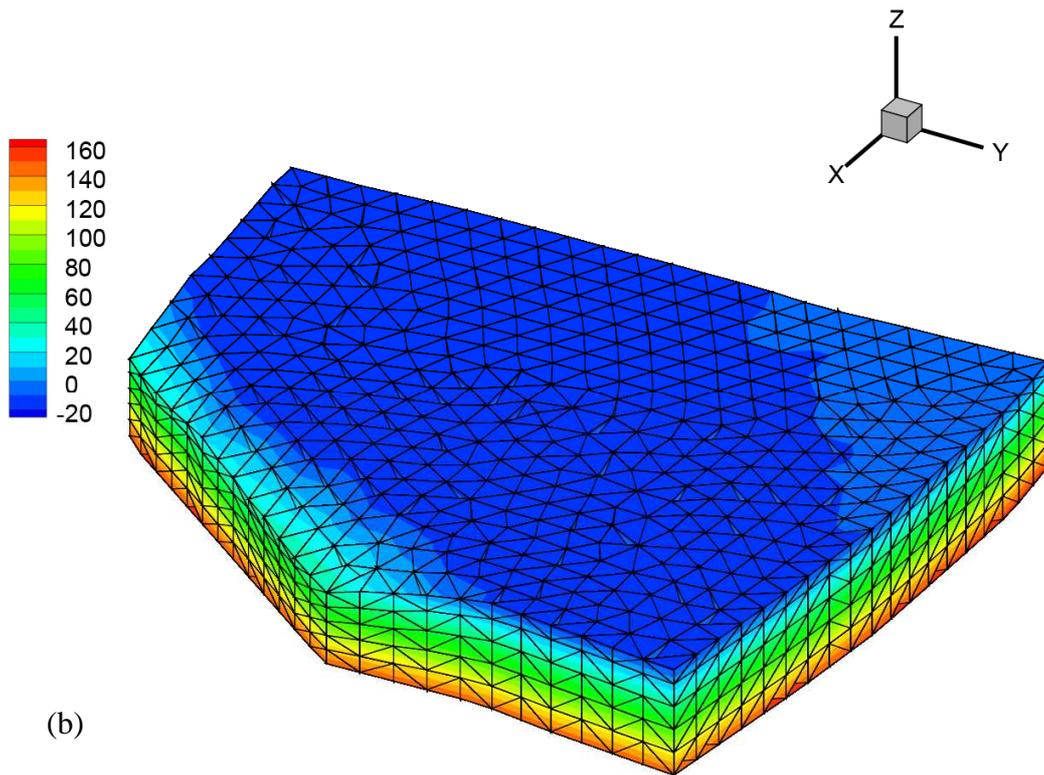
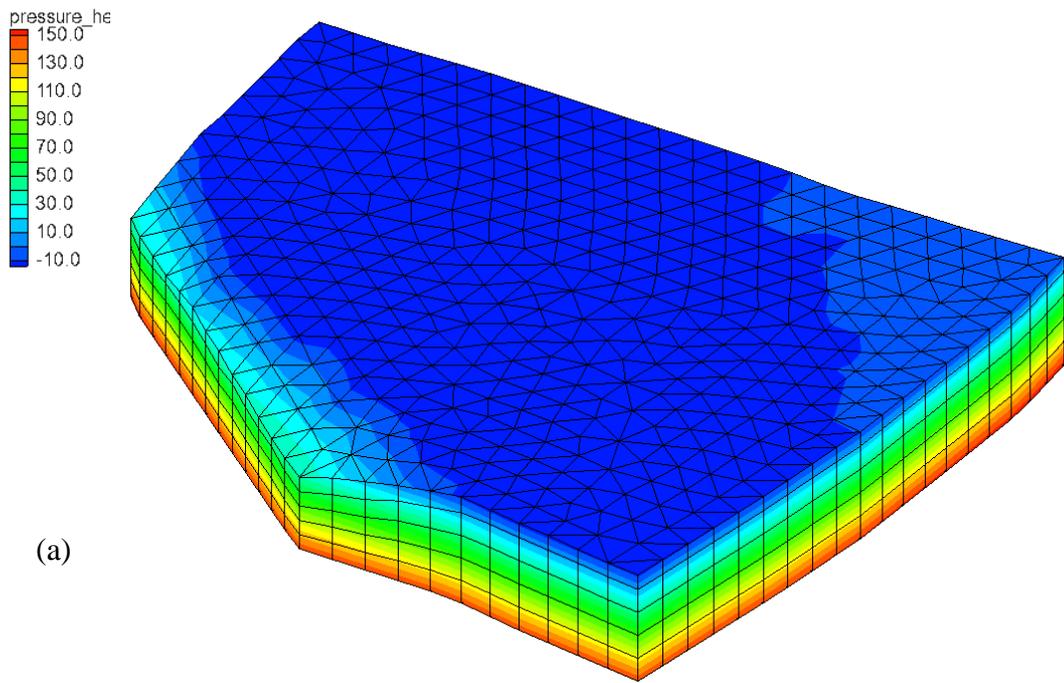
圖六、本模組利用 SGSIM 所作出之隨機場空間分布

2. FEMWATER 模擬結果展示模組

本模組之介面結構如圖七所示。GMS 本身雖內建展示 FEMWATER 模擬結果的功能，但其展示能力仍往往有所限制。為了能使地下水流模擬結果能得到更多的調整，本研究結合了 GMS 和科學繪圖軟體 Tecplot，模組首先讀取 FEMWATER 所作出之總水頭或污染濃度分布等模擬結果，接著進行網格系統轉換以符合 Tecplot 的網格形式。由於 GMS 執行 FEMWATER 時的建網格過程中會使用到 TIN(triangulated irregular network, 不規則三角網格)，因此所建出的網格為六角柱(Prism)，這種型態不被 Tecplot 支援。因此本模組藉由計算更改節點間的連接，將 GMS 所產生出之六角柱網格型態切割為三個 Tecplot 可支援的四面體(Tetrahedron)。轉換前後差異如圖八所示，最後此轉換成功的模擬結果便可在 Tecplot 軟體裡進行更多項圖形細部之調整。



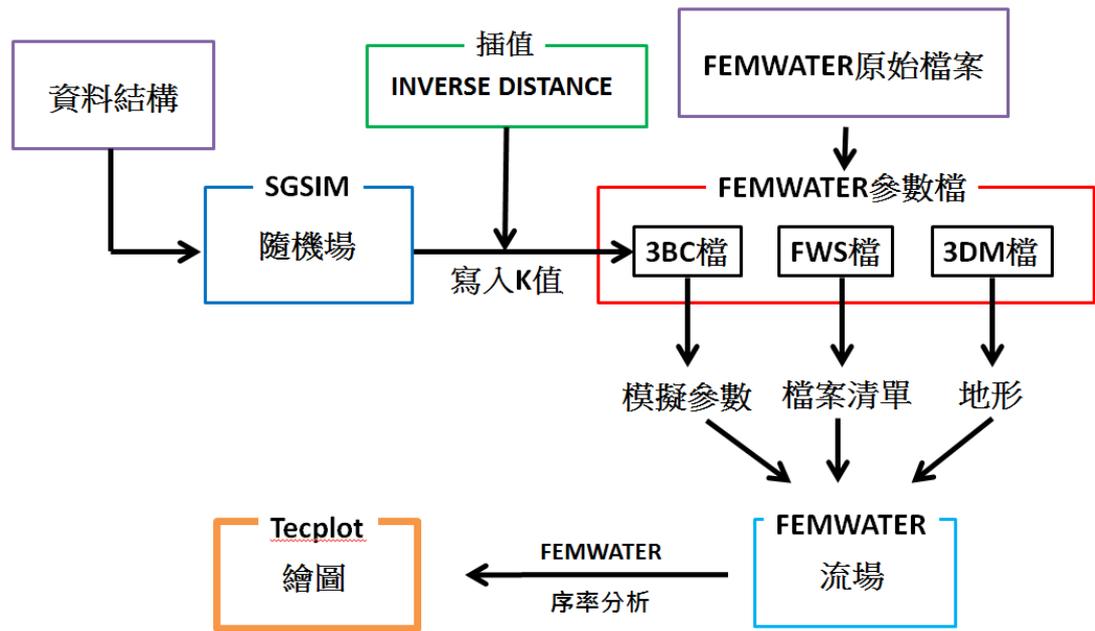
圖七、FEMWATER 模擬結果展示模組之介面結構



圖八、使用模組將 FEMWATER 模擬結果轉換入 Tecplot。(a) 轉換前於 GMS 內之展示，(b) 轉換後於 Tecplot 內之展示

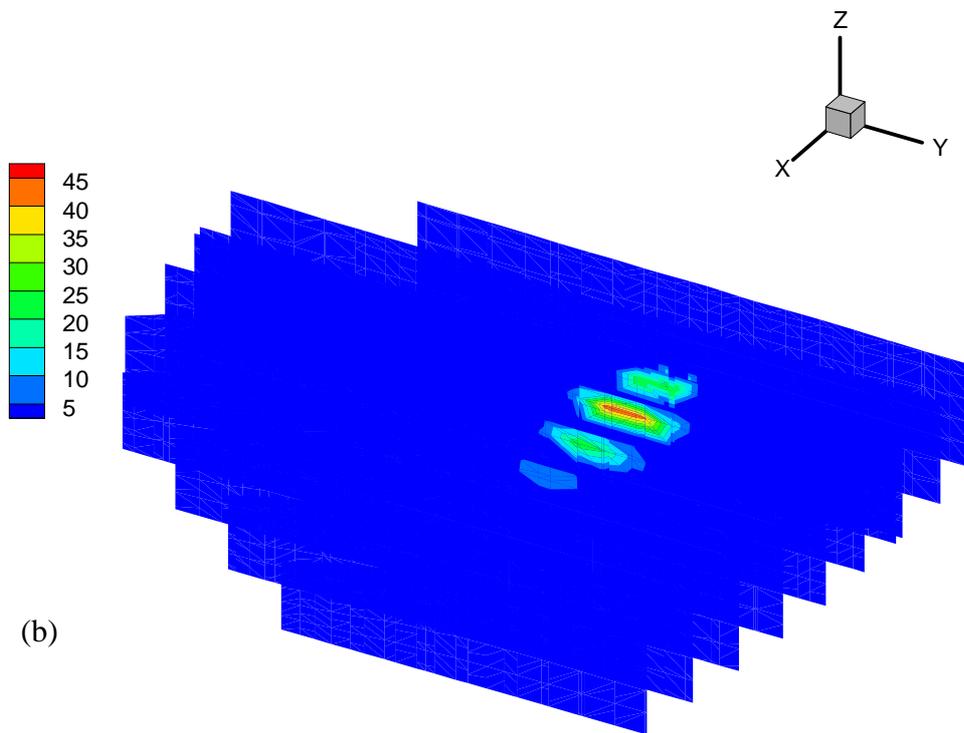
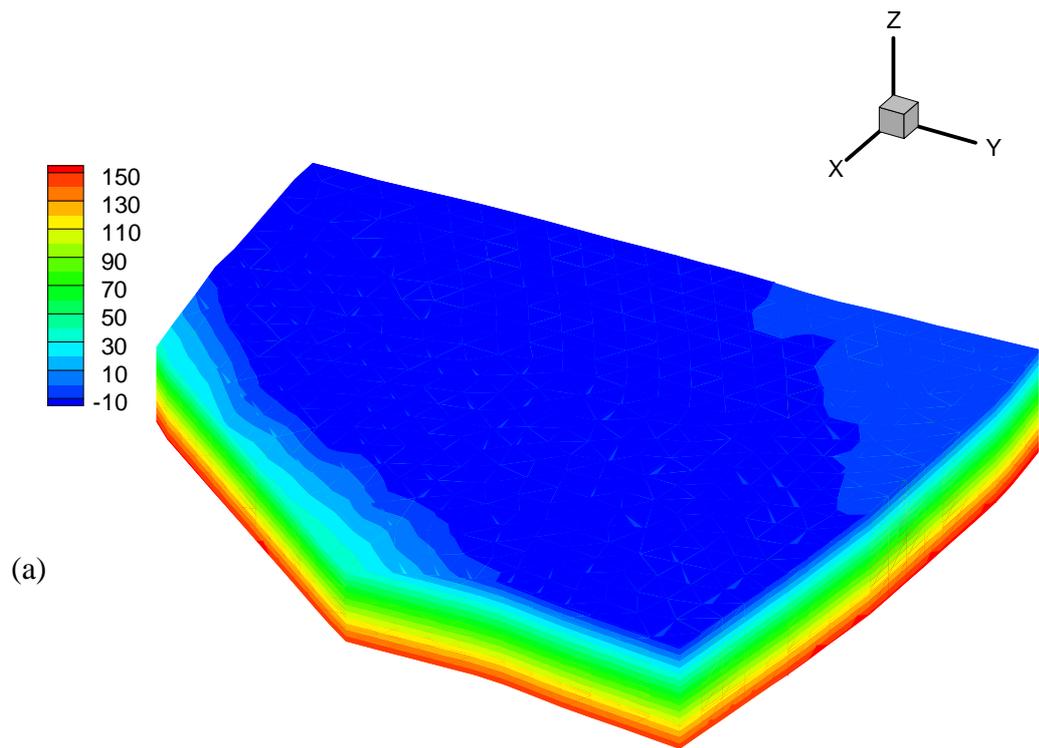
3. 基於 FEMWATER 之序率地下水數值模式模組

本模組進行 FEMWATER 水流與汙染傳輸不確定性分析時，依據前述序率分析模式架構之步驟進行蒙地卡羅流程，其介面結構如圖九所示。首先，模組會要求使用者輸入使用 GMS 建立完成之 FEMWATER 原始檔案與場址資料結構。其中 FEMWATER 原始檔案將被模組用於讀取模式使用的參數，而場址資料結構將被傳入 SGSIM 隨機場產生器以產生隨機場，產生的隨機場數量由使用者輸入的 realization 數決定。第二步，模組將每個 realization 內隨機場網格的值，使用 inverse distance 的方式，插值成 FEMWATR 相對應網格上的 K 值，另外每個 realization 皆會依據 FEMWATER 原始檔案，建立其他模擬時所需的參數檔案。第三步，模組將會開啟 FEMWATER 模式，依序運算完所有 realization，並輸出水流或汙染傳輸等模擬結果；最後，模組將統計分析所有的模擬結果，並輸出成 Tecplot 檔案展示。



圖九、基於 FEMWATER 之序率地下水數值模式模組之介面結構

圖十為以模組內建之蒙地卡羅法進行水流及汙染傳輸不確定性分析模擬之結果。使用此不確定性分析與一般定率分析的差異將於模擬案例章節中討論。



圖十、(a)不確定性分析後之平均水頭空間分布;(b)不確定性分析後之平均污染團空間分布

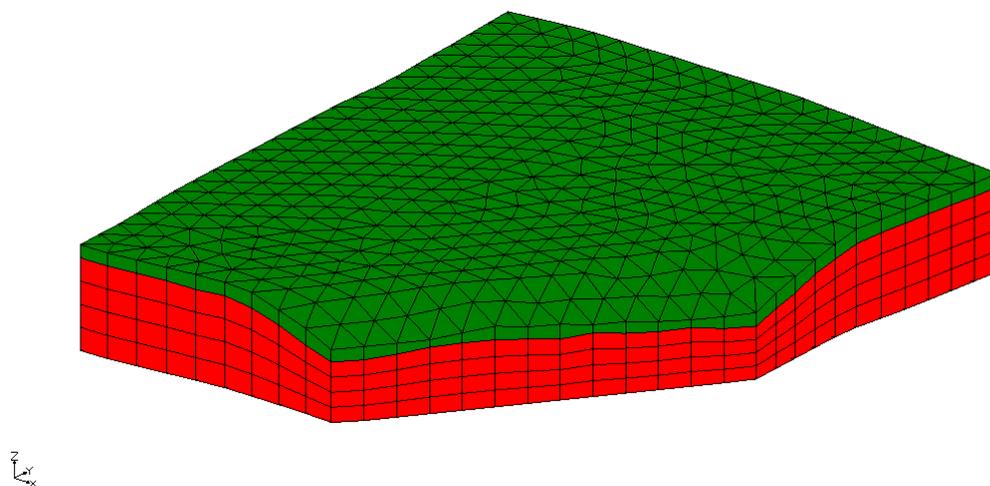
四、 模擬案例

本研究將利用本模組進行具吸附及衰變效應的污染團傳輸模擬的不確定性分析。考慮一假設模擬範圍，模擬範圍內之網格材質分布如圖十一所示，模擬範圍區分為底岩層與沖積層兩層，底岩層 K 值為 0.1 m/d，而沖積層 K 值則為 10 m/d；邊界條件部分，本研究於模擬區域左右兩側設置定水頭，分別為 207 m 與 198 m；而上下兩側則為不透水邊界，邊界條件設置如圖十二所示。考慮自然狀態，本工作之水位初始條件使用重力排水後的水位分布。在污染傳輸方面，本研究假設初始狀態下模擬區域內無污染物，並考慮一濃度為 100 mg/l 的污染團，自模擬時間的第一天開始，以 50L/day 的速率注入至沖積層與底岩層的交界處，此污染團將持續注入至模擬時間第兩萬天，也就是模擬結束為止。注入位置於井場的相對位置如圖十三所示。

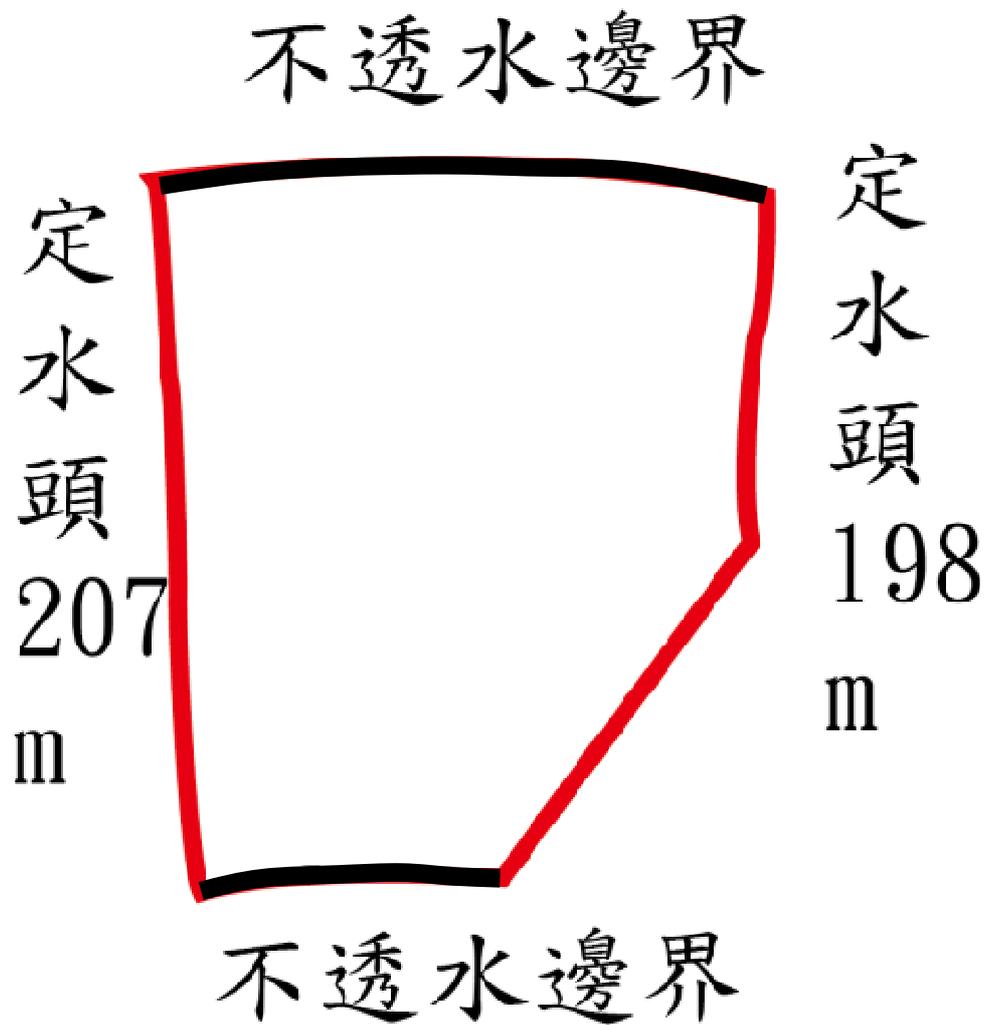
為考慮污染團的衰變與吸附現象對不確定性分析的影響，本研究考慮了三種不同條件的污染團情境，情境考慮了污染物在不同的半衰期與吸附係數下，K 值的不確定性對於觀測污染濃度造成的影響。三種情境設定分別列於表一。而在不確定性分析之前，本研究首先進行定率的模擬結果以進行比較，圖十四顯示了在三種情境下，圖十三所示之觀測點所觀測到自模擬天數第一天至第兩萬天時的濃度穿透曲線(Breakthrough Curve)。由圖可知由於吸附係數及衰

變的影響，前兩種情境的觀測點在模擬時間兩萬天時，測出的濃度各約為 47、1 mg/l，第三種情境則測不出污染濃度。

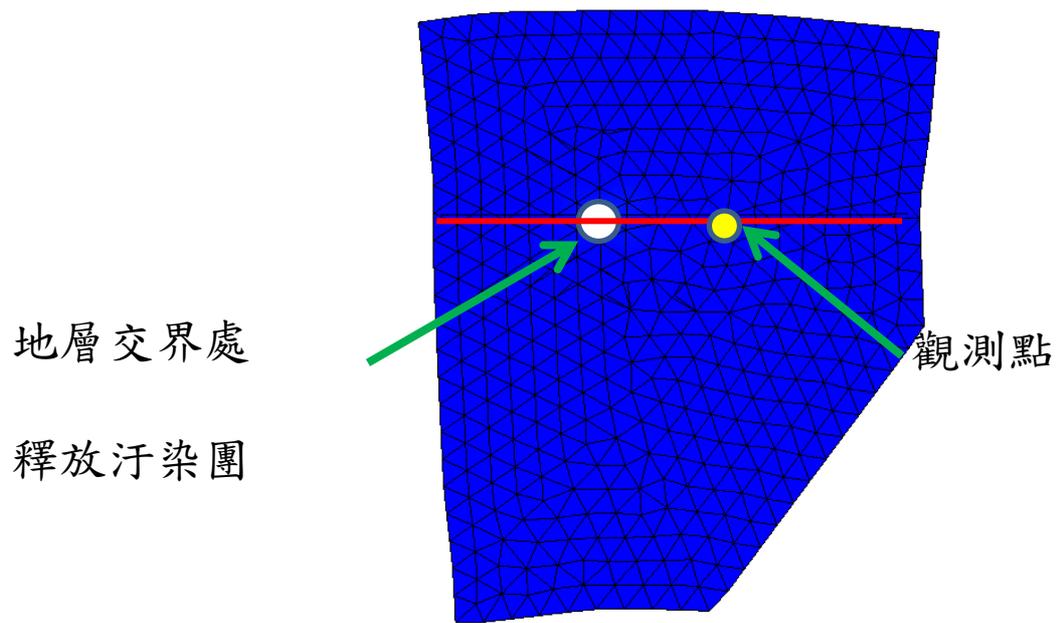
 底岩層
 沖積層



圖十一、 模擬範圍之網格材質分布



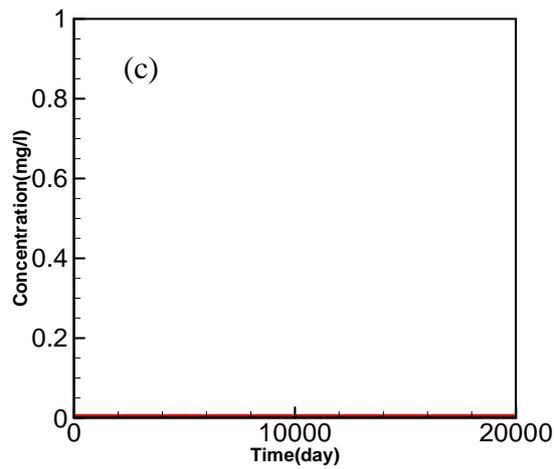
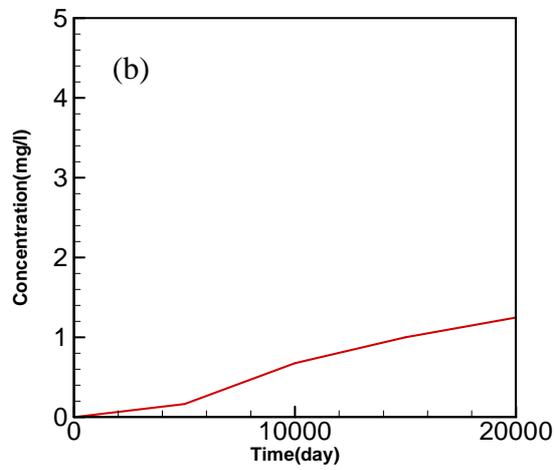
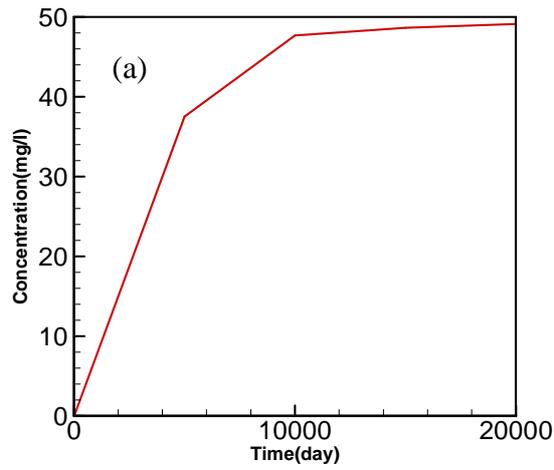
圖十二、邊界條件設定



圖十三、 污染團注入點與觀測點的位置圖

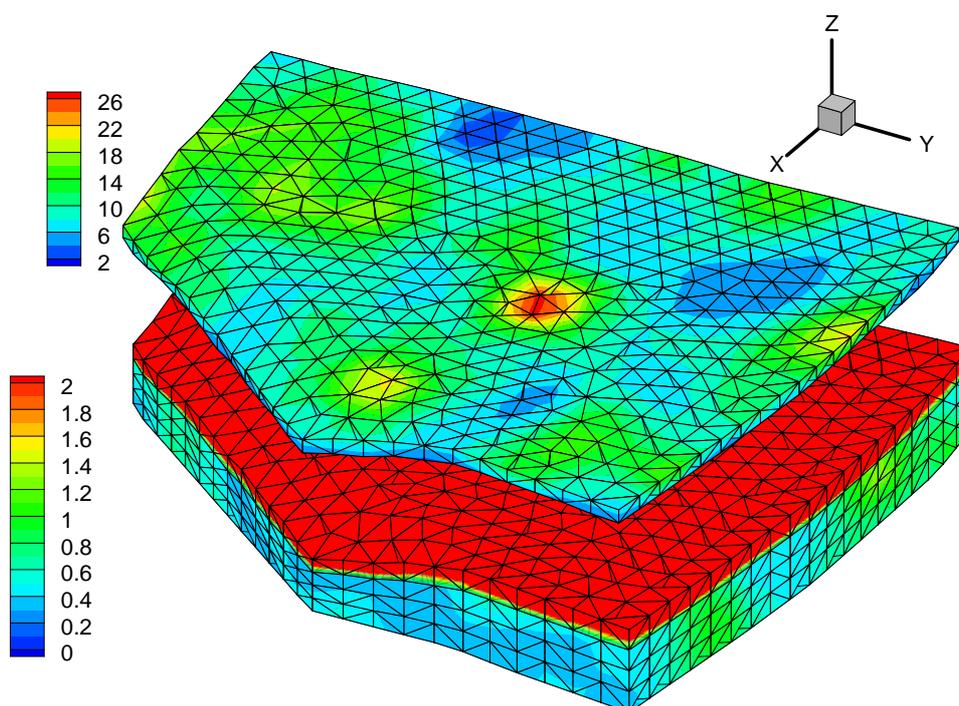
表一 本研究於污染傳輸模擬時使用之情境

參數	情境一	情境二	情境三
半衰期(year)	0	12.32	28.79
吸附係數(m ³ /kg)	0	0.01015	0.32

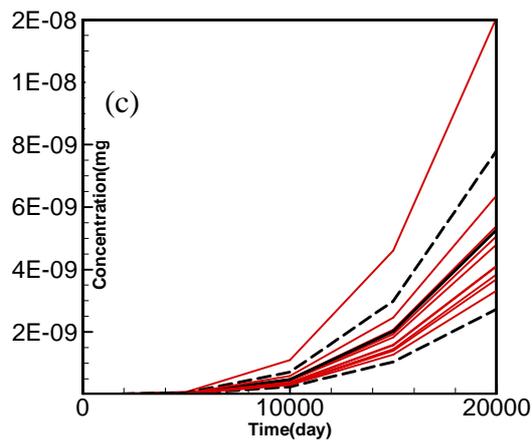
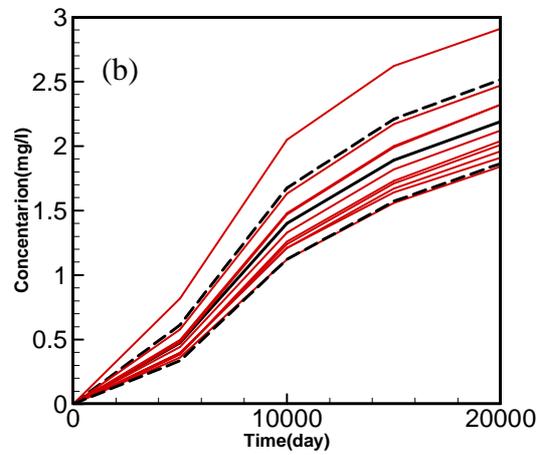
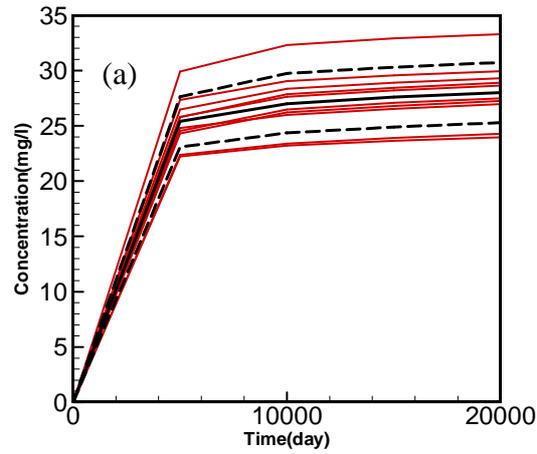


圖十四、(a)情境一 (b) 情境二與(c)情境三於觀測點之濃度穿透曲線

不確定性分析方面，本研究於 10 個 realization、variance 為 0.1 的狀況下，其中一個 realization 之 K 值隨機場分布如圖十五所示。而圖十六則為在不確定性分析時，觀測點的濃度穿透曲線隨者 realization 變化而產生之變化情形。由圖可知三種情境的觀測點在模擬時間兩萬天時，測出的濃度各約為 25~30、1.5~2.5 及 2E-9~8E-9 mg/l 的區間，而非圖十四所做出之定值結果。另外結果亦顯示了 K 值的不確定性將會對較高濃度的污染團有較大的影響，並造成較大的觀測值不確定性。



圖十五、不確定性分析過程中，其中一個 realization 的沖積層和底岩層之隨機 K 值空間分布



圖十六、不確定性分析時，(a)情境一、(b) 情境二與(c)情境三於觀測點的濃度穿透曲線變化。紅線為各 realization 之濃度；黑色實線為所有 realization 之 mean；黑色虛線則為觀測點所觀測到之污染物濃度不確定性區間。

參、主要發現與結論

本研究建立一使用涵蓋序率方法、現有數值模式以及結果展示等地下水異質性序率分析流程之模組，流程內容能有效地結合現地觀測資料，並將序率方法與現有觀測統計模式進行結合，量化各異質性水文參數對地下水水流與污染傳輸造成的不確定性；在模擬實例方面，傳統的數值模擬顯示了不同的污染物半衰期與吸附係數會造成不同的觀測濃度差異；而相較於傳統數值模擬，不確定性分析能提供一污染團濃度的機率範圍，模擬結果亦顯示：在污染團濃度較高的地方，K 值不確定性所造成之污染濃度分布影響也越大。此結果將更能提供決策者能更審慎地評估污染團治理方法。本研究並透過數學理論及數值模式應用的深入分析，以提供未來地下水異質性數值模擬相關研究上技術層面的提升。

肆、参考文献

Ahearne, J.F., 1997. Radioactive waste: The size of the problem, *Physics Today*, 50(6): 24-29.

Anderson, M.P., and Woessner, W.W., 1992. *Applied Groundwater Modeling - Simulation of Flow and Advective Transport*. Academic Press.

Dyer, J.R., and Peters, M.T., 2004. Progress in permanent geologic disposal of spent nuclear fuel and high-level radioactive waste in the United States, *Proceedings of The Institution of Mechanical Engineers Part A-Journal of Power And Energy*, 218(A5): 319-334.

Harbaugh, A.W., and McDonald, M.G., 1996, User's documentation for MODFLOW-96, an update to the U.S. Geological Survey modular finite-difference ground-water flow model: U.S. Geological Survey Open-File Report: 96-485.

Harbaugh, A.W., and McDonald, M.G., 1996, Programmer's documentation for MODFLOW-96, an update to the U.S. Geological Survey modular finite-difference ground-water flow model: U.S. Geological Survey Open-File Report: 96-486.

Harbaugh, A.W., Banta, E.R., Hill, M.C., and McDonald, M.G., 2000, MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -- User guide to modularization concepts and the Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Open-File Report: 00-92.

Helton, J.C., 1993. Uncertainty and sensitivity analysis techniques for use in performance assessment for radioactive waste disposal, *Reliability Engineering & System Safety*, 42(2-3): 327-367.

Hill, M.C., Banta, E.R., Harbaugh, A.W., and Anderman, E.R., 2000, MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -- User guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter-Estimation Processes and three post-processing programs: U.S. Geological Survey Open-File Report: 00-184.

Hill, M.C., and Tiedeman, C.R., 2007. Effective Groundwater Model Calibration, With Analysis of Data, Sensitivities, Predictions, and Uncertainty, John Wiley and Sons.

LEE, D. M, W. D. REYNOLDS, D. E. ELRICK, and B. E. CLOTHIER., 1985. A comparison of three field methods for measuring saturated hydraulic conductivity. *Can. J. Soil Sci.* 65: 563-573.

Marpeau1, F., and Saad, M., 2010. 3D simulation of radionuclide transport in porous media, *Int. J. Numer. Meth. Fluids*,70: 64:44.

Mehl, S.W. and Hill, M.C., 2006, MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground-Water Model -- Documentation of Local Grid Refinement (LGR): U.S. Geological Survey Techniques and Methods: 6-A12.

McLaughlin, D., and E. F. Wood, 1988. A distributed parameter approach for evaluating the accuracy of groundwater model predictions: 1. Theory, *Water Resour. Res.*, 24(7), 1037-1047.

NIELSEN, D. R., J. W. BIGGAR, and K. T. ERH., 1973. Spatial variability of field-measured soil-water properties. *Hilgardia* 42:215-260.

Ng, C.W.W., Wang, B., and Tung, Y.K., 2001. Three-dimensional numerical investigations of groundwater responses in an unsaturated slope subjected to various rainfall patterns, *Can. Geotech. J.*, 38:1049-1062.

Pollock, D.W.,1986. Simulation of Fluid Flow and Energy

Transport Processes Associated With High-Level Radioactive Waste Disposal in Unsaturated Alluvium, WATER RESOURCES RESEARCH, 22(5): 765-775.

Richards, L.A., 1931. Capillary conduction of liquids through porous medium, Physics, 1:313-333.

SEBASTIAN, G., 1994. Classic Groundwater Simulations, Prentice Hall.

van Genuchten, M.Th., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, Soil Sci. Soc. Am. J., 44: 892–898.

WILLARDSON, L. S. and R. L. HURST. 1965. Sample size estimates in permeability studies. J. Irrig. Drain Div., Proc. Am. Soc. Civil Eng. 91(IR1): 1-9.

Yeh, G.T. and D.S. Hard. 1979. FEMWATER: A finite-element model of water flow through saturated-unsaturated porous media. ORNL-5567. Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee. 162 pp.

Yeh, G.T., Shan, H., and Hu, G., 2006. A model to simulate hydrodynamics and thermal and salinity transport in three dimensional bays and estuaries, Advances In Hydro-Science And -Engineering, Volume VI, 1-15.

Zheng, C., and Bennett, G. D. 1995. Applied contaminant transport modeling: Theory and practice, John Wiley and Sons.