

以動差近似法應用於污染傳輸之不確定性分析

An Uncertainty Analysis of Contamination Transport by Using Moment Closure Method

桃園市政府水務局
污水工程科
技士

吳郁璋*

Yu-Zhang Wu

國立臺灣大學
生物環境系統工程學系
教授

余化龍

Hwa-Lung Yu

國立臺灣大學
生物環境系統工程學系
碩士班研究生

莊紹榕

Shao Yong Cheung

摘 要

移流反應方程式常用來模擬河川中流速及生物化學反應率對污染物傳輸之影響。由於觀測資料的有限性，流速及生物化學反應的不確定性，造成模擬結果具有高度的不確定性。透過隨機微分方程式的求解，可對於由參數不確定性所造成污染傳輸之不確定性進行分析。過去常見的分析方向有(1)隨機偏微分方程式係數的實現，例如：蒙地卡羅法，(2)估計特定位置的統計動差，例如：動差近似法及擾動矩法。動差近似法的特色是將物理方程式轉化成動差方程式，透過解動差方程式求得各時空分布之各階統計動差。本研究使用動差近似法計算隨機移流反應方程式之前三階動差，以三個模擬案例進行分析，並透過蒙地卡羅法進行結果驗證。案例 1 中假設移流反應公式中初始及邊界條件具有不確定性。案例 2 中，除考慮案例 1 不確定性來源外，進而考慮反應率之不確定性。案例 3 中，除考慮案例 1 不確定性外，再多考慮流速之不確定性。模擬結果發現(1)動差近似法可以同時考慮邊界上的各階動差及參數不確定性。(2)動差近似法與蒙地卡羅法得到的前三階動差具極高度相關性。(3)相對於蒙地卡羅法，透過動差近似法可大幅增加不確定性分析的效率。(4)流速及反應率的不確定性會增加模擬濃度之不確定性，並且使模擬濃度呈獻正偏態。總結而言，動差近似法可快速計算出前三階之動差，且保有一定的精準度。

關鍵詞：動差近似法、動差、移流反應方程式。

ABSTRACT

The advection-reaction equation is often used for simulating the effect of velocity and biochemical reaction rates to contamination transportation in river flow. Due to the

*通訊作者，桃園市政府水務局污水工程科技士，33043 桃園市成功路一段 32 號 6 樓，b90602045@ntu.edu.tw

limited hydrogeological observation data and its high levels of uncertainty, the result of the simulation is also high uncertainty. By solving the stochastic differential equation, the uncertainty of contamination transportation caused by the parameter uncertainty could be analyzed. Usual analytical methods are (1) Implementation of the stochastic partial differential equation such as the Monte Carlo Method (2) Statistical moments of specific position estimation like Moment Closure Method and Perturbance Moments Method. The statistical moments in different spatiotemporal could be obtained by solving the Moment Equations because the feature of Moment Closure Method is to convert the physics equation into Moment Equations. This research uses Moment Closure Method to calculate the first three order moment of Advection-reaction Equation, and the moments of three simulation cases are validated by the Monte Carlo method. In case 1, the initial and boundary condition uncertainty exist. Case 2, besides considering the uncertainties in case 1, the uncertainty of reaction rates is also considered. Lastly, in Case 3, consider the uncertainty in Case 1 and velocity uncertainty. The simulation result is categorized into four types: (1) The Moment Closure Method could consider the moments of initial and boundary condition and parameters uncertainty simultaneously. (2) Results of the first three order moment by using Moment Closure Method and Monte Carlo Method have a high correlation. (3) Comparing to Monte Carlo Method, the Moment Closure Method could improve the efficiency of uncertainty analysis. (4) The uncertainty of velocity and reaction rate could increase the uncertainty of concentration simulation as well as positive skew. In conclusion, the first three order moment could be calculated by using the Moment Closure Method efficiently and precisely.

Keywords: Moment closure method, Moments, Advection-reaction equation.

一、前 言

透過求解相關的物理方程式模擬時空間的水文現象是很常見的(Abokifa, *et al.*, 2016, Dale and English, 1999, Mynett, 1999)。在求解物理方程式前，必須先決定物理方程式、邊界條件、初始條件及物理參數(Burden and Faires, 2011)。由於對物理現象的知識不足、初始及邊界條件資料不足及觀測資料之量測誤差，造成了不確定性(Kolovos, *et al.*, 2002, Wagener and Gupta, 2005)。在水文模型中，常見的不確定性可以區分成四類：(1)模型的不確定性(Model uncertainty)，如：是否考慮移流、擴散或反應率等物理機制；(2)參數不確定性(Parameter uncertainty)，如：反應率為許多生物化學反應的結果，其值會隨著環

境條件的變化而改變；(3)數據不確定性(Data uncertainty)，如：觀測儀器之誤差；(4)邊界及初始條件不確定性(Boundary and initial condition uncertainty)，如：在初始或邊界條件上沒有足夠的觀測值(Kolovos, *et al.*, 2002, Liu and Gupta, 2007, Tartakovsky, 2007, Wagener and Gupta, 2005)。輸入的不確定性會造成模擬輸出的不確定性(Broyda, *et al.*, 2010)。從不確定性的觀點來看這些污染物濃度隨時空間之分布，這些物理方程式通常有一個隨機偏微分方程式(Stochastic partial differential equation)，並給定一組帶有不確定性的邊界及初始條件進行隨機偏微分方程式之模擬(Kolovos, *et al.*, 2002)。本研究在沒有模型不確定性及數據不確定性的假設下探討參數、邊界及初始條件不確定性對模擬結果之影響。

常見的解隨機偏微分方程式的兩種技術：(1) 第一種技術重點在隨機偏微分方程式係數的實現，如常見的蒙地卡羅法(Monte Carlo method) (Abdulle and Blumenthal, 2013, Nouy, 2007)及擬蒙地卡羅法(Quasi-Monte Carlo method) (Morokoff and Caflisch, 1995)。此技術的優點在於不需要直接解隨機偏微分方程式，但需要解多次的實係數偏微分方程式，易造成計算量過大(Davidsen, *et al.*, 2014)。(2)第二種技術為估計隨機偏微分方程式在特定時空間之統計動差，常見的方法如二點法(Two points method) (Harr, 1989, Hong, 1998, Rosenblueth, 1975, Tsai and Franceschini, 2005)、三點法(Three points method) (Franceschini, *et al.*, 2012, Li, 1992) 及動差近似法(Moment closure method) (Bergman, *et al.*, 1995, Gillespie, 2009, Lee, 2013)。其中二點法及三點法是在空間中抽樣少數幾點進行模擬，得到模擬位置上的機率分布。其優點為計算量比蒙地卡羅法小，但因為只用少數幾點來代表機率分布，在結果上會失去部分精準度。然而，動差近似法可將隨機偏微分方程式轉成動差方程式，藉由解動差方程式獲得隨時空間之各階統計動差(Lee, 2013)；其特色是計算量小，只需要計算 N 次動差方程式即可獲得隨時空分布的 N 階動差。不過，這兩種技術各自都有優缺點，在探討隨機偏微分方程式之行為時，應視為兩種互補的工具(Flaherty, *et al.*, 1989, Jordan and Smith, 2007)。

本研究以隨機移流反應方程式(Stochastic advection-reaction equation)為例，透過動差近似法進行污染傳輸之不確定性分析。隨機移流反應方程式之參數具有高度的不確定性，如：流速、生物化學的反應速率(Severino, *et al.*, 2000)、溶解物顆粒大小(Tartakovsky, *et al.*, 2009)、觀測數據不足和觀測誤差都是不確定性的來源(Boso and Tartakovsky, 2013)。本研究使用動差近似法將隨機移流反應方程轉成動差方程式，再用特性法(Characteristic method)及泰勒級數法(Taylor-Series Method)進行離散並求出前三階動差之數值解，再以蒙地卡羅法(Monte Carlo method)進行驗證，確保透過這兩種不同方法計算所得到的動

差值非常相近。

二、理 論

一維移流反應方程式表示如下：

$$\frac{\partial X_{s,t}}{\partial t} = -q \frac{\partial X_{s,t}}{\partial s} - kX_{s,t} \dots\dots\dots (1)$$

其中， $X_{s,t}$ 下標 s 表示位置，下標 t 表示時間， $X_{s,t}$ 表示位置 s 時間 t 下的污染物濃度， q 為流速， k 為反應率。流速 q 並非為定值，以流速平均 \bar{q} 及流速白噪音 q' (White noise)表示之，如下

$$q = \bar{q} + q' \dots\dots\dots (2)$$

本研究假設的流速為一組高斯分布。同樣的反應率 k 也非定值，以及反應率平均 \bar{k} 及反應率白噪音 k' 表示之，如下

$$k = \bar{k} + k' \dots\dots\dots (3)$$

將式(2)及式(3)代入式(1)可得

$$\frac{\partial X_{s,t}}{\partial t} = -(\bar{q} + q') \frac{\partial X_{s,t}}{\partial s} - (\bar{k} + k')X_{s,t} \dots\dots\dots (4)$$

將式(4)中的平均數與白噪音項分開可得

$$\frac{\partial X_{s,t}}{\partial t} = F(X_{s,t}) + L(X_{s,t})W_t \dots\dots\dots (5)$$

其中平均數項於式(6)，白噪音項於式(7)及式(8)

$$F(X_{s,t}) = \left[-\bar{q} \frac{\partial X_{s,t}}{\partial s} - \bar{k}X_{s,t} \right] \dots\dots\dots (6)$$

$$L(X_{s,t}) = \left[-\frac{\partial X_{s,t}}{\partial s} \quad -X_{s,t} \right] \dots\dots\dots (7)$$

$$W_t = [q' \quad k']^T \dots\dots\dots (8)$$

將式(5)改寫成對間積分形式，如式(9)

$$\begin{aligned} X_{s,t} - X_{s,0} &= \int_0^t F(X_{s,t}) dt + \int_0^t L(X_{s,t}) W_t dt \dots\dots (9) \\ &= \int_0^t F(X_{s,t}) dt + \int_0^t L(X_{s,t}) d\beta_t \end{aligned}$$

其中 β_t 表示白噪音 W_t 之布朗運動， W_t 為零均值及共變異數矩陣為 Qdt 之高斯分布，而矩陣 Q 中對角線位置分別為 q' 及 k' 變異數，矩陣 Q 非對角

線上為 q' 與 k' 的共變異係數。由於布朗運動在數學上為連續但不可微分，因此布朗運動只能保證積分存在而無法確定微分存在 (Øksendal, 2003)。亦即，改寫成式(9)的積分型態比式(5)的微分型態更為合理。在這裡引入 N 階離散的動差近似法 (Lee, 2013)，如式(10)

$$d\varphi_t = \sum_{k=1}^N \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k \varphi_t}{\partial X_{i_1, t} \partial X_{i_2, t} \dots \partial X_{i_k, t}} \prod_{j=1}^k dX_{i_j, t} \dots \dots \dots (10)$$

其中 φ_t 可為任意函數。在本研究中使用二階的動差近似法，二階的動差近似法即為常見的 Ito formula (Øksendal, 2003)如下

$$d\varphi_t = \sum_{i=1} \frac{\partial \varphi_t}{\partial X_{i,t}} dX_{i,t} + \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 \varphi_t}{\partial X_{i,t} \partial X_{j,t}} \right) dX_{i,t} dX_{j,t} \dots \dots \dots (11)$$

將式(5)帶入式(11)可改寫如下

$$d\varphi_t = \sum_{i=1} \frac{\partial \varphi_t}{\partial X_{i,t}} F(X_{i,t}) dt + \sum_{i=1} \frac{\partial \varphi_t}{\partial X_{i,t}} L(X_{s,t}) d\beta_t + \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 \varphi_t}{\partial X_{i,t} \partial X_{j,t}} \right) \left(L(X_{s,t}) QL(X_{s,t})^T \right) dt \dots \dots \dots (12)$$

由於對布朗運動 $d\beta_t$ 取期望值後其值為零 $E(d\beta_t) = 0$ ，因此對式(12)取期望值如下

$$dE(\varphi_t) = \sum_{i=1} E \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial X_{i,t}} F(X_{i,t}) \right) dt + \sum_{i,j} E \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_t}{\partial X_{i,t} \partial X_{j,t}} \right) \left(L(X_{s,t}) QL(X_{s,t})^T \right) \right] dt \dots \dots \dots (13)$$

在式(13)中已經沒有布朗運動項，因此可同除 dt ，再改回成微分方程的型式如下

$$\frac{dE(\varphi_t)}{dt} = \sum_{i=1} E \left(\frac{\partial \varphi_t}{\partial X_{i,t}} F(X_{i,t}) \right) + \sum_{i,j} E \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi_t}{\partial X_{i,t} \partial X_{j,t}} \right) \left(L(X_{s,t}) QL(X_{s,t})^T \right) \right] \dots \dots \dots (14)$$

對式(14)取 $\varphi_t = X_{s,t}$ ，可得污染物濃度的一階動差方程式如式(15)

$$\frac{dE(X_{s,t})}{dt} = -\bar{q} \frac{dE(X_{s,t})}{ds} - \bar{k} E(X_{s,t}) \dots \dots \dots (15)$$

對式(14)取 $\varphi_t = X_{s,t} X_{s',t}$ ，可得污染物濃度的二階動差方程式如式(16)

$$\begin{aligned} \frac{dE(X_{s,t} X_{s',t})}{dt} &= -\bar{q} \frac{dE(X_{s,t} X_{s',t})}{ds} \\ &\quad - 2 \left(\bar{k} - \frac{\sigma_k^2}{2} \right) E(X_{s,t} X_{s',t}) \dots \dots \dots (16) \\ &\quad + \sigma_q^2 E \left(\frac{dX_{s,t}}{ds} \frac{dX_{s',t}}{ds} \right) \end{aligned}$$

對式(14)取 $\varphi_t = X_{s,t}^3$ ，可得污染物濃度的三階動差方程式如式(17)

$$\begin{aligned} \frac{dE(X_{s,t}^3)}{dt} &= -\bar{q} \frac{dE(X_{s,t}^3)}{ds} + 3(\sigma_k^2 - \bar{k}) E(X_{s,t}^3) \\ &\quad + \frac{3}{2} \sigma_q^2 E \left(\frac{dX_{s,t}}{ds} \frac{dX_{s,t}}{ds} \right) \end{aligned} \dots \dots \dots (17)$$

解式(15)、式(16)及式(17)即可得污染物濃度的一二三階動差。Evans (1998) 提到藉由進一步觀察對流線方向的微分，可發現這三式的一階微分項都可以改寫成對流線方向 P 之微分，其流線方向 P 與時間 t 及空間 s 方向的微分關係如下

$$\frac{dE(\varphi_t)}{dP} = \frac{dE(\varphi_t)}{dt} \frac{dt}{dP} + \frac{dE(\varphi_t)}{ds} \frac{ds}{dP} \dots \dots \dots (18)$$

將式(18)與式(15)、式(16)及式(17)比較係數可得

$$\frac{dt}{dP} = 1 \dots \dots \dots (19)$$

$$\frac{ds}{dP} = \bar{q} \dots \dots \dots (20)$$

因此，污染物濃度於流線方向之一階動差方程式如式(21)

$$\frac{dE(X_{s,t})}{dP} = -\bar{k} E(X_{s,t}) \dots \dots \dots (21)$$

污染物濃度於流線方向之二階動差方程式如式(22)

$$\frac{dE(X_{s,t}X_{s',t})}{dP} = -2\left(\bar{k} - \frac{\sigma_k^2}{2}\right)E(X_{s,t}X_{s',t}) + \sigma_q^2 E\left(\frac{dX_{s,t}}{ds} \frac{dX_{s',t}}{ds}\right) \quad \dots (22)$$

污染物濃度於流線方向之三階動差方程式如式(23)

$$\frac{dE(X_{s,t}^3)}{dP} = 3(\sigma_k^2 - \bar{k})E(X_{s,t}^3) + \frac{3}{2}\sigma_q^2 E\left(\frac{dX_{s,t}^2}{ds} \frac{dX_{s,t}}{ds}\right) \quad \dots (23)$$

透過式(18)、式(19)及式(20)的方法，將多個方向的一階微分改成對流線單一方向的一階微分。這樣的方法稱為特性法(Characteristic method)，其優點為透過改變微分方向，大量減少對不同方向的一階微分(Van, *et al.*, 1999)。在流線方向考慮 N_1 階的泰勒級數法(Taylor-Series Method)之前差分式(Forward scheme) (Burden and Faires, 2011, Pachner, 1983)，如下

$$\varphi_{t+\Delta P} = \varphi_t + \sum_{i=1}^{N_1} \frac{1}{i!} \frac{d^i E(\varphi_t)}{dP^i} \Delta P^i + O\left(\frac{\Delta P^{N_1}}{N_1!}\right) \quad \dots (24)$$

由式(19)可知 $\Delta P = \Delta t$ ，因此式(24)可改寫如下

$$\varphi_{t+\Delta P} = \varphi_t + \sum_{i=1}^{N_1} \frac{1}{i!} \frac{d^i E(\varphi_t)}{dP^i} \Delta t^i + O\left(\frac{\Delta t^{N_1}}{N_1!}\right) \quad \dots (25)$$

流線方向 N_1 階的泰勒級數法之後差分式(Backward scheme) (Burden and Faires, 2011, Pachner, 1983)如下

$$\varphi_{t+\Delta P} = \varphi_t - \sum_{i=1}^{N_1} \frac{1}{i!} \frac{d^i E(\varphi_{t+\Delta P})}{dP^i} (-\Delta t)^i + O\left(\frac{\Delta t^{N_1}}{N_1!}\right) \quad \dots (26)$$

式(25)及式(26)平均後可得

$$\varphi_{t+\Delta P} = \varphi_t + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{d^i E(\varphi_t)}{dP^i} \Delta t^i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{i!} \frac{d^i E(\varphi_{t+\Delta P})}{dP^i} (-\Delta t)^i + O\left(\frac{\Delta t^{N_1}}{N_1!}\right) \quad \dots (27)$$

因此污染物濃度一階動差經式(27)離散後，可得離散版本如下

$$E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) = \frac{2 + \sum_{i=1}^{N_1} \frac{(-\bar{k} \Delta t)^i}{i!}}{2 + \sum_{i=1}^{N_1} \frac{(\bar{k} \Delta t)^i}{i!}} E(X_{s,t}) + O\left(\frac{\Delta t^{N_1}}{N_1!}\right) \quad \dots (28)$$

污染物濃度二階動差離散版本如下

$$E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t} X_{s'+\Delta s, t'+\Delta t}) = \frac{(a_2 + a_4)}{(a_1 + a_3)} E(X_{s,t} X_{s',t'}) + \frac{a_3}{(a_1 + a_3)} \left[E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t} X_{s', t'+\Delta t}) + E(X_{s, t+\Delta t} X_{s'+\Delta s, t'+\Delta t}) - E(X_{s, t+\Delta t} X_{s', t'+\Delta t}) \right] - \frac{a_4}{(a_1 + a_3)} \left[E(X_{s+\Delta s, t} X_{s', t'}) + E(X_{s, t} X_{s'+\Delta s, t'}) - E(X_{s+\Delta s, t} X_{s'+\Delta s, t'}) \right] + O\left(\frac{\Delta t^{N_1}}{N_1!}\right) \quad \dots (29)$$

其中式(29)之係數如下

$$a_1 = 2 + \sum_{i=1}^{N_1} (\sigma_k^2 - 2\bar{k}) \frac{(-\Delta t)^i}{i!} \quad \dots (29-1)$$

$$a_2 = 2 + \sum_{i=1}^{N_1} (\sigma_k^2 - 2\bar{k}) \frac{\Delta t^i}{i!} \quad \dots (29-2)$$

$$a_3 = \frac{\sigma_q^2}{\Delta s^2} \left(\sum_{i=1}^{N_1} (-2)^{i-1} \left(\sum_{j=0}^{i-1} \bar{k}^j \left(\bar{k} - \frac{\sigma_k^2}{2} \right)^{i-1-j} \right) \frac{(-\Delta t)^i}{i!} \right) \dots\dots\dots (29-3)$$

$$a_4 = \frac{\sigma_q^2}{\Delta s^2} \left(\sum_{i=1}^{N_1} (-2)^{i-1} \left(\sum_{j=0}^{i-1} \bar{k}^j \left(\bar{k} - \frac{\sigma_k^2}{2} \right)^{i-1-j} \right) \frac{\Delta t^i}{i!} \right) \dots\dots\dots (29-4)$$

污染物濃度的三階動差經由式(27)離散後如下

$$E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t}^3) = \frac{(b_2 + b_4)}{(b_1 + b_3)} E(X_{s,t}^3) + \frac{b_3}{(b_1 + b_3)} \left[\begin{aligned} & E(X_{s,t+\Delta t}^2) E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) + 2E(X_{s,t+\Delta t}) Cov(X_{s,t+\Delta t}, X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) \\ & + E(X_{s,t+\Delta t}) E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t}^2) + 2E(X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) Cov(X_{s,t+\Delta t}, X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) \\ & - E(X_{s,t+\Delta t}^3) \end{aligned} \right] \dots\dots\dots (30) - \frac{b_4}{(b_1 + b_3)} \left[\begin{aligned} & E(X_{s,t}^2) E(X_{s+\Delta s, t}) + 2E(X_{s,t}) Cov(X_{s,t}, X_{s+\Delta s, t}) - E(X_{s+\Delta s, t}^3) \\ & + E(X_{s,t}) E(X_{s+\Delta s, t}^2) + 2E(X_{s+\Delta s, t}) Cov(X_{s,t}, X_{s+\Delta s, t}) \end{aligned} \right] + O\left(\frac{\Delta t^{N_1}}{N_1!}\right)$$

其中式(29)之係數如下

$$b_1 = \left(2 + \sum_{i=1}^{N_1} 3^i (\sigma_k^2 - \bar{k})^i \frac{(-\Delta t)^i}{i!} \right) \dots\dots\dots (30-1)$$

$$b_2 = \left(2 + \sum_{i=1}^{N_1} 3^i (\sigma_k^2 - \bar{k})^i \frac{\Delta t^i}{i!} \right) \dots\dots\dots (30-2)$$

$$b_3 = \frac{3 \sigma_q^2}{2 \Delta s^2} \left(\sum_{i=1}^{N_1} \frac{(3\Delta t)^i}{i! (-N)} \left(\sum_{j=0}^{i-1} \bar{k}^j \left(\bar{k} - \sigma_k^2 \right)^{i-1-j} \right) \right) \dots\dots\dots (30-3)$$

$$b_4 = \frac{3 \sigma_q^2}{2 \Delta s^2} \left(\sum_{i=1}^{N_1} \frac{(-3\Delta t)^i}{i! (-3)} \left(\sum_{j=0}^{i-1} \bar{k}^j \left(\bar{k} - \sigma_k^2 \right)^{i-1-j} \right) \right) \dots\dots\dots (30-4)$$

式(28)、式(29)、式(30)為污染物濃度一二三階動差離散的版本，精度為 $O(\Delta t^{N_1} / N_1!)$ 。最大的特色為透過調整 N_1 ，可輕易考慮到高階泰勒級數的離散。

三、案 例

本節討論在一維空間中的一維移流反應方程式，全長度設定成 20 (km)，在空間中離散成

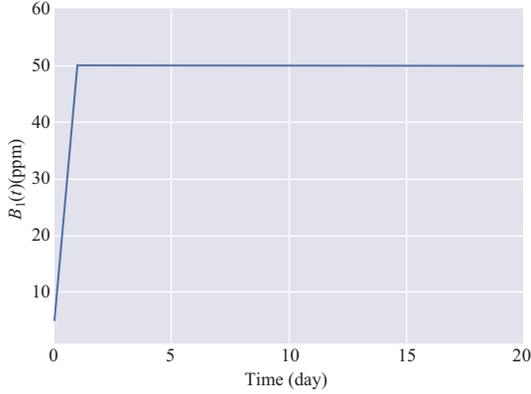
$N_x = 11$ 個網格，每個網格間距為 $\Delta s = 2$ (km)，最左邊位置設成原點，最右邊的位置為 20 (km)。時間由第 0 天開始到第 20 天，共 21 個時網格，每個網格時間間距 $\Delta t = 1$ (day)，離散成 $N_t = 21$ 個網格。並以式(28)當成一階動差的控制方程式，式(29)當成二階動差的控制方程式，式(30)當成三階動差的控制方程式，而泰勒展開式取 $N_1 = 10$ 階。在計算控制方程式前必需給定初始條件及邊界條件才能解這些控制方程式，其一階動差的初始條件設定為 5 (ppm)，表示如下

$$I_1(s) = E(X_{s,t})|_{t=0} = 5 \dots\dots\dots (31)$$

假設有一間工廠在原點的位置($s = 0$)，在時間大於零時排放污染物，在排放位置的污染物濃度為 50 ppm，如下式

$$B_1(t) = X_{s,t} \Big|_{\substack{t>0 \\ s=0}} = 50 \dots\dots\dots (32)$$

其中 $B_1(t)$ 下標 1 表示一階動差， B 表示邊界條件， t 表示時間， $B_1(t)$ 即為一階動差的邊界條件(如圖一)，圖一中可以發現在一開始時污染物濃度為 5 ppm，而第二天開始為 50 ppm。而二階動差初始條件可表示如下



圖一 一階動差之邊界條件。

$$I_2(s, s') = \begin{cases} I_1(s)I_1(s') + Var(X_{s,t})|_{t=0} & \text{if } s = s' \\ I_1(s)I_1(s') + Cov(X_{s,t}, X_{s',t})|_{t=0} & \text{if } s \neq s' \end{cases} \dots\dots\dots (33)$$

其中 $Var(X_{s,t})$ 表示污染物濃度 $X_{s,t}$ 的變異數 (Variance)，而 $Var(X_{s,t})|_{t=0}$ 為初始污染物濃度變異數，在本研究中假設為 4 (ppm²)。 $Cov(X_{s,t}, X_{s',t})$ 表示污染物濃度 $X_{s,t}$ 與 $X_{s',t}$ 之共變異係數 (Covariance)， $Cov(X_{s,t}, X_{s',t})|_{t=0}$ 為在第 0 時刻下不同位置間初始共變異係數，在本研究中假設為 0 (ppm²)。因此，在同位置 $s = s'$ 下二階動差初始值設定為 29 (ppm²)；而在不同位置下 ($s \neq s'$) 二階動差初始值設定為 25 (ppm²)。

二階動差的邊界條件如下

$$B_2(s, t) = \begin{cases} B_1(t)E(X_{s,t}) + Var(X_{s,t})|_{s=0} & \text{if } s' = 0 \\ B_1(t)E(X_{s,t}) + Cov(X_{0,t}, X_{s,t})|_{s \neq 0} & \text{if } s' \neq 0 \end{cases} \dots\dots\dots (34)$$

其中 $B_2(s, t)$ 下標 2 表示二階動差， B 表示邊界條件， t 表示時間， s 表示位置， $B_2(s, t)$ 表示在時間 t 下排放點 $X_{0,t}$ 對內部任意點 $X_{s,t}$ 的二階動差邊界條件。 $Var(X_{s,t})|_{s=0}$ 為不同時間下污染物濃度在邊界上的變異係數，也就是工廠排放污染物的變異係數，在本研究中假設為 4 (ppm²)。 $Cov(X_{0,t}, X_{s,t})|_{s \neq 0}$ 為邊界對內部的共變異係數，根據 First order second moment (FOSM) 的理論 (Dettinger and Wilson, 1981)，計算出下一時刻邊界對內部的共

變異係數，表示如下

$$Cov(X_{0,t+\Delta t}, X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) = \sum_{i=0} \frac{dE(X_{0,t+\Delta t})}{dE(X_{0,t})} Cov(X_{0,t}, X_{i,t}) \frac{dE(X_{s+\Delta s, t+\Delta t})}{dE(X_{i,t})} \dots\dots\dots (35)$$

其中式(35)中含有兩微分項，此兩項可用式(38)及式(39)估計而得。 $Cov(X_{0,t}, X_{0,t+\Delta t})$ 表示邊界與下一時刻的共變異係數，可使用相關係數與變異數來表示，如下

$$Cov(X_{0,t}, X_{0,t+\Delta t}) = \rho_{\Delta t} \sqrt{Var(X_{0,t})} \sqrt{Var(X_{0,t+\Delta t})} \dots\dots\dots (36)$$

其中 $\rho_{\Delta t}$ 為 $X_{0,t}$ 與 $X_{0,t+\Delta t}$ 的相關係數， $Var(X_{0,t})$ 為變數 $X_{0,t}$ 的變異數， $Var(X_{0,t+\Delta t})$ 為變數 $X_{0,t+\Delta t}$ 的變異數。另一方面， $Cov(X_{0,t}, X_{0,t+\Delta t})$ 也可使用 FOSM 進行估計，如下

$$Cov(X_{0,t}, X_{0,t+\Delta t}) = \frac{dE(X_{0,t+\Delta t})}{dE(X_{0,t})} Cov(X_{0,t}, X_{0,t}) \dots\dots\dots (37)$$

整理式(36)及式(37)，其微分項可用相關係數及變異數來表示，如下

$$\frac{dE(X_{0,t+\Delta t})}{dE(X_{0,t})} = \rho_{\Delta t} \sqrt{\frac{Var(X_{0,t+\Delta t})}{Var(X_{0,t})}} \dots\dots\dots (38)$$

式(35)中另一項的微分量可由式(28)計算而得，如下

$$\frac{dE(X_{s+\Delta s, t+\Delta t})}{dE(X_{i,t})} = \begin{cases} r & \text{if } i = s \\ 0 & \text{if otherwise} \end{cases} \dots\dots\dots (39)$$

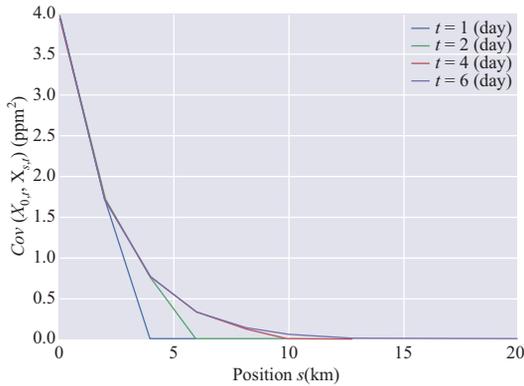
其中

$$r = \left(1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_i} \frac{(-\bar{k}\Delta t)^i}{i!} \right) / \left(1 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_i} \frac{(\bar{k}\Delta t)^i}{i!} \right) \dots\dots\dots (40)$$

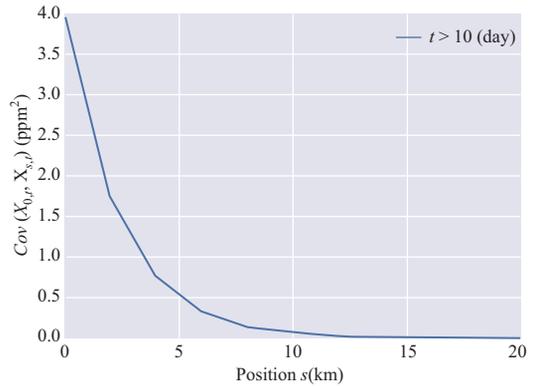
將式(38)與式(39)代入式(35)可得邊界點與內部點的共變異係數如下

$$Cov(X_{0,t+\Delta t}, X_{s+\Delta s, t+\Delta t}) = \rho_{\Delta t} r Cov(X_{0,t}, X_{s,t}) \sqrt{\frac{Var(X_{0,t+\Delta t})}{Var(X_{0,t})}} \dots\dots\dots (41)$$

在本研究中假設工廠排放污染物的變異數為



圖二 第 1、2、4、6 天邊界點與內部點之共變異係數圖。



圖三 平衡時邊界點與內部點之共變異係數。

$Var(X_{s,t})|_{s=0} = 4 \text{ (ppm}^2\text{)}$ 及相關係數 $\rho_{\Delta t}$ 假設為 0.8，因此式(41)可整理成

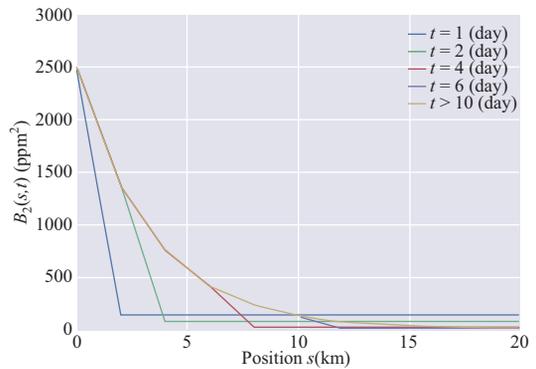
$$Cov(X_{0,t+\Delta t}, X_{s+\Delta s,t+\Delta t}) = 0.8rCov(X_{0,t}, X_{s,t}) \dots (42)$$

透過式(42)，邊界與內部點的共變異係數可由前一時刻的計算出(如圖二及圖三)。在圖二中展現了第 1、2、4、6 天的邊界點與內部位置點之共變異係數，由於污染會順著水流，從工廠排放點往下游移動，因此在圖二中可發現邊界與內部點的共變異係數會隨時間而增加。經過 10 天之後，邊界點與內部點污染物之共變異係數將達到平衡(圖三)。從圖三中可發現在邊界上之共變異係數為 4 (ppm²)，即為工廠排放濃度之變異數。平衡狀態下的共變異係數隨距離減少而增加，這也代表污染物濃度的空間相關性也是隨距離遞減。將工廠排放污染物的變異數為 4 (ppm²)及邊界對內部的共變異係數式(42)代入式(34)中，可得二階動差邊界條件(如圖四)。在圖四中展現了第 1 天、第 2 天、第 4 天、第 6 天的及平衡時的二階動差邊界條件。

本研究中假設污然物之初始及邊界條件為對稱分布，故假設三階中央動差之初始及邊界條件為 0，表示如下

$$E[(X_{s,t=0} - I_1(s))^3] = 0 \dots (43)$$

$$E[(X_{s=0,t} - B_1(t))^3] = 0 \dots (44)$$



圖四 二階動差之邊界條件。

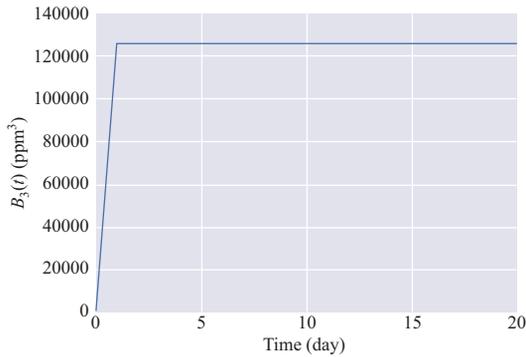
整理式(43)可得三階動差初始條件

$$\begin{aligned} E[X_{s,t=0}^3] &= I_3(s) \\ &= 3I_1(s)Var(X_{s,t=0}) + I_1(s)^3 \dots (45) \end{aligned}$$

在本研究中，因為污染物濃度初始值 $I_1(s)$ 假設為 5 (ppm)，污染物濃度之變異數初始值假設為 $Var(X_{s,t=0}) = 4 \text{ (ppm}^2\text{)}$ ，因此，三階動差初始條件設定為 185 (ppm³)。三階動差邊界條件可由式(44)整理而得，如下

$$\begin{aligned} E[X_{s=0,t}^3] &= B_3(t) \\ &= 3B_1(t)Var(X_{s=0,t}) + B_1(t)^3 \dots (46) \end{aligned}$$

經由式(46)可計算得三階動差的邊界條件(如圖五)，在圖五中在 0 時刻下三階動差為 185



圖五 三階動差之邊界條件。

(ppm³)，而這個計算結果與式(45)所計算而得的三階動差初始條件相同；而在工廠開始排放污染物之後，三階動差邊界條件為 125600 (ppm³)。

在案例 1 中探討的流速及反應率均為常數，初始及邊界條件的三階中央動差為 0，且初始及邊界的污染物濃度都為常態分布。假設在河流的流速為 $\bar{q}=2$ (km/day) 及流速非常穩定 $\sigma_q^2=0$ (km/day)²。並且設定在污染物的反應率為 $\bar{k}=0.6$ (day⁻¹) 及反應率也非常穩定 $\sigma_k^2=0$ (day⁻²)。在案例 1 中將河流假設的非常理想，河流流速及反應率階設定為定值，流入的污染物為常態分布，其主要目的是要幫助後面釐清每個物理量與動差之間的關係。

在案例 2 中探討的流速同樣為常數，反應率呈常態分布，初始及邊界條件的三階中央動差同樣設定為 0，初始及邊界的污染物濃度都為常態分布。假設河流的流速為 $\bar{q}=2$ (km/day)，流速非常穩定 $\sigma_q^2=0$ (km/day)²，污染物的反應率為常態分布且其平均值 $\bar{k}=0.6$ (day⁻¹) 及變異數 $\sigma_k^2=0.0036$ (day⁻²)。並假設三階中央動差初始及邊界條件為 0 與案例 1 相同如式(43)及式(44)，其初始條件如式(45)及邊界條件如式(46)。案例 2 與案例 1 最大的差別在於反應率具有不確定性，因此把反應率設定成常態分布，此研究將在後續探討反應率的不確定性對動差的影響。

在案例 3 中，探討反應率為常數、流速為常態分布、初始及邊界條件的三階中央動差為 0 的情況，初始及邊界的污染物濃度都為常態分布。

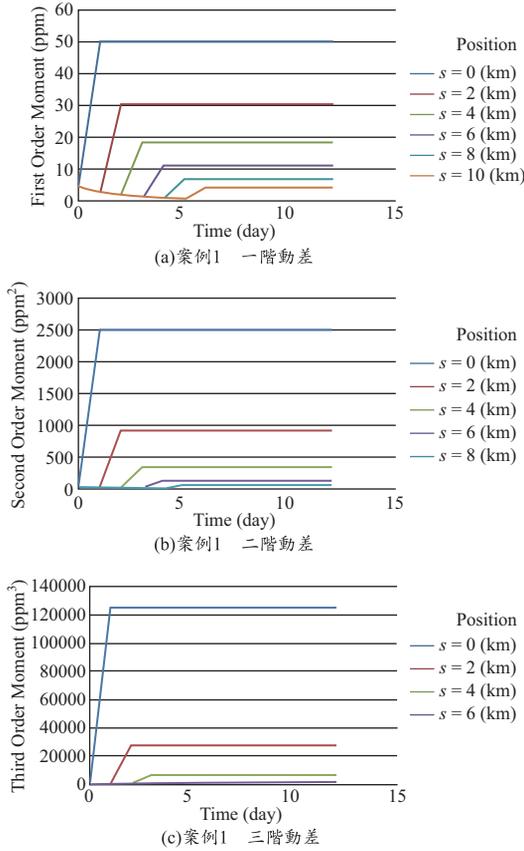
假設在流速為平均值 $\bar{q}=2$ (km/day) 及變異數 $\sigma_q^2=0.04$ (km/day)² 之常態分布。並且設定在污染物的反應率為 $\bar{k}=0.6$ (day⁻¹) 及反應率也非常穩定 $\sigma_k^2=0$ (day⁻²)。假設三階中央動差初始及邊界條件為 0 與案例 1 相同如式(43)及式(44)。其三階動差初始條件如式(45)，邊界條件如式(46)。案例 3 與案例 1 最大的差別在於流速具有不確定性，在案例 3 中，假設流速為常態分布，並探討流速的不確定性對一二三階動差的影響。

在這三個案例中，為了驗證動差近似法的正確性，本研究採用蒙地卡羅法對邊界及初始條件進行 2²² 組抽樣，透過隨機移流反應方程式(28)計算獲得時空間中濃度值及前三階動差。並探討 (1)邊界及初始條件之抽樣與案例設定兩者之間的誤差，以確定蒙地卡羅法之抽樣具有代表性；(2)蒙地卡羅法及動差近似法所獲得之前三階動差之差異。以確定兩方法所獲得的前三階動差非常相近。

四、結果與討論

在案例 1 中假設流速及反應率均為常數。初期河川的污染物濃度為 5 (ppm)，變異數為 4 (ppm²) 為對稱分布，其三階中央動差之初始假設為 0 (ppm³)。在原點有一間工廠從第一天時開始排放污染物，排放點污染物濃度為 50 (ppm)，變異數為 4 (ppm²) 為對稱分布，其三階中央動差之邊界亦假設為 0 (ppm³)。這些污染物會隨著水流往下游移動，同時污染物在河川中也會產生化學反應而分解。

在案例 1 中，一階動差初始值為式(31)，邊界條件為式(32)，經由式(28)取泰勒展開式前 10 階計算，可得案例 1 的一階動差計算結果，於圖六(a)中展現了距離排放源 10km 內濃度隨時空分布之一階動差。在圖六(a)中可以發現：(1)以固定的河川位置來觀察污染物濃度，污染物會被水流往下游帶，當污染物到達觀察位置時污染物濃度會大幅的提升。(2)當工廠排放污染與分解反應達到平衡時，污染之一階動差為水平線，在固定位置時間夠長下污染物濃度將達平衡。(3)離排放點越遠，平衡時污染物濃度越低，這是因為污染物



圖六 案例 1 中以動差近似法所得之污染物濃度前三階動差。

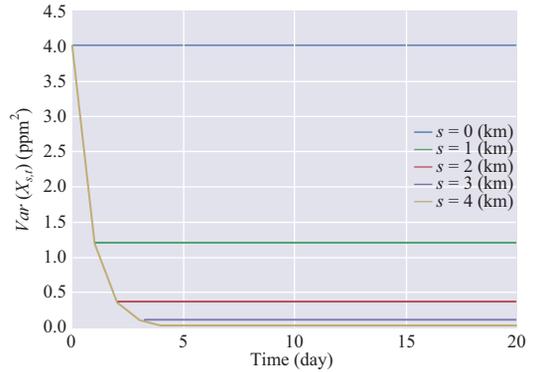
經由化學反應而減少所造成的。

使用動差近似法計算二階動差，其初始值為式(33)及邊界條件為式(34)(如圖四)，經二階動差控制方程式(式(29))計算可得隨時空分布(如圖六(b))。由一階及二階動差，可進一步計算出每個時空位置的變異數及共變異數，如下

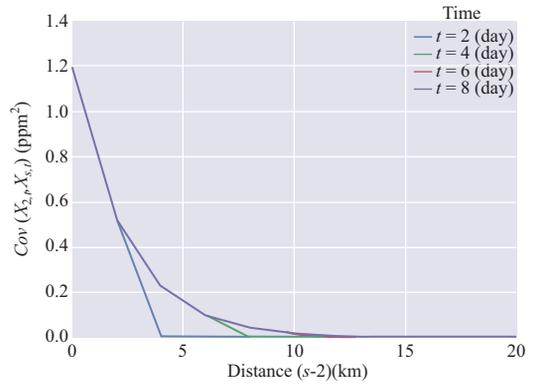
$$Var(X_{s,t}) = E(X_{s,t}^2) - E(X_{s,t})^2 \dots\dots\dots(47)$$

$$Cov(X_{s,t}, X_{s',t'}) = E(X_{s,t}X_{s',t'}) - E(X_{s,t})E(X_{s',t'}) \dots\dots\dots(48)$$

由式(47)計算出不同時空位置上濃度之變異數，並展示於圖七中。從圖七可以發現(1)在邊界上($s = 0$)污染物濃度的變異數為 $4 \text{ (ppm}^2\text{)}$ ，這是因為對工廠排放不夠了解而設定的邊界不確定性。(2)



圖七 案例 1 不同時空下濃度的變異數。



圖八 案例 1 不同時間下內部第一點($s = 2 \text{ km}$)與不同距離的共變異係數。

所有位置污染物濃度的初始變異數為 $4 \text{ (ppm}^2\text{)}$ ，這是因為對於初始值不夠了解而加上的不確定性。(3)當污染物經移流及化學反應達平衡後，其變異數也會達平衡，為一水平線。而這樣的結果也表示動差近似法可以同時考慮初始及邊界條件的不確定性。

由式(48)計算出案例 1 不同位置間的變異係數(如圖八)。在圖八中展示了內部第一點($s = 2 \text{ km}$)與不同距離的共變異係數，可以發現在相同距離下，污染物濃度之共變異係數隨時間的推移而增加，這是因為水流會把污染物由上游往下游帶，造成上下游的相關性增加。

在三階動差方面，案例 1 中三階動差初始值

為式(45)及邊界條件為式(46)，經動差近似法之三階動差控制方程式(式(30))計算，可得三階動差隨時空分布(如圖六(c))。再透過前三階動差，可進一步計算出每個時空位置的偏度係數(skewness)，定義如下

$$Ske(X_{s,t}) = \frac{E\left[\left(X_{s,t=0} - E[X_{s,t}]\right)^3\right]}{Var(X_{s,t})^{1.5}} \dots\dots\dots(49)$$

其中

$$E\left[\left(X_{s,t=0} - E[X_{s,t}]\right)^3\right] = \dots\dots\dots(50)$$

$$E[X_{s,t}^3] - 3E[X_{s,t}]Var(X_{s,t}) - E[X_{s,t}]^3$$

$$Var(X_{s,t}) = E(X_{s,t}^2) - E(X_{s,t})^2 \dots\dots\dots(51)$$

於式(50)及式(51)的右邊完全只用一二三階動差來表示，也就是說透過式(49)，由前三階動差就可以計算出偏度係數。在案例 1 中經由式(49)計算出不同時空位置的偏度係數，結果發現內部點的偏度係數全為零，也就是說，污染物濃度為對稱分布。此案例將有助於之後探討不同物理因素之不定性對偏度係數的影響。

本研究以蒙地卡羅法來檢驗動差近似法的正確性，但蒙地卡羅法的抽樣數會影響到其初始及邊界條件上的誤差。一般而言，抽樣數越多誤差將越小。本研究以平均根號對稱 KL 距離(Root Mean Symmetric Kullback-Leibler divergence, SKL_{BI})相加當成差指標，用來衡量邊界及初始條件之抽樣結果與案例中設定的分布之相似性， SKL_{BI} 定義如下

$$SKL_{BI} = \sum_{\substack{s=0 \\ t \neq 0}} \frac{SKL(f(X_{s,t}), f_{MD}(X_{s,t}))^{0.5}}{N_x + N_t - 1} \dots\dots\dots(52)$$

$$+ \sum_{t=0} \frac{SKL(f(X_{s,t}), f_{MD}(X_{s,t}))^{0.5}}{N_x + N_t - 1}$$

其中， N_x 為空間離散的網格數， N_t 為時間離散的網格數，分母 $N_x + N_t - 1$ 為邊界與初始條件的總網格數， $f(X_{s,t})$ 表示在空間 s 及時間 t 下設定的濃度機率密度函數， $f_{MD}(X_{s,t})$ 表示在空間 s 及時間 t

蒙地卡羅法抽出的濃度機率密度函數。式(52)中第一項計算邊界條件中設定與抽樣分布的距離，式(52)中第二項計算初始條件中設定與抽樣分布的距離，因此，當 SKL_{BI} 越小，代表兩個方法的邊界條件及初始條件之機率密度函數越接近。一般而言，抽樣數越多 SKL_{BI} 越小，但計算時間越長；而抽樣數越少其誤差將越大。而式(52)中的 $SKL(f(X_{s,t}), f_{MD}(X_{s,t}))$ 表示 $f(X_{s,t})$ 及 $f_{MD}(X_{s,t})$ 兩機率密度函數的對稱 KL 距離(Symmetric Kullback-Leibler divergence, SKL)，根據 Jensen's 不等式對稱 KL 距離會落在半正定空間(positive semi-definite)(Cover and Thomas, 2012)，也就是說，當兩個機率密度函數相同時 SKL 值為零；當兩個機率密度函數不同時 SKL 大於零。 SKL 計算上使用 KL 距離(Kullback-Leibler divergence)來定義如下(Benevides, et al., 2012)，

$$SKL(f(X_{s,t}), f_{MD}(X_{s,t})) = KL(f(X_{s,t}) || f_{MD}(X_{s,t})) + KL(f_{MD}(X_{s,t}) || f(X_{s,t})) \dots\dots\dots(53)$$

KL 距離定義如下

$$KL(f(X_{s,t}) || f_{MD}(X_{s,t})) = \int_{-\infty}^{\infty} f(X_{s,t}) \log\left(\frac{f(X_{s,t})}{f_{MD}(X_{s,t})}\right) dX_{s,t} \dots\dots\dots(54)$$

雖然 KL 距離經常用來計算兩個機率密度函數之間的相似性，但是 KL 距離有兩個嚴重的缺點。第一：不滿足對稱性(即 $KL(a || b) \neq KL(b || a)$)，也就是說，兩個分布的 KL 距離非唯一。第二：不滿足三角不等式(即 $KL(a || c) < KL(a || b) + KL(b || c)$)，也就是說可能會發生兩較不相似的機率密度函數但是 KL 距離較小的情況(Rubner, et al., 2000)，這兩個缺點也讓 KL 距離不滿足歐氏空間的距離概念，換言之，KL 距離不滿足賦距空間(Metric Space)(Taneja, 2005)。本研究為了避免這兩個缺點，以 SKL_{BI} 當評估邊界及初始條件的誤差指標； SKL_{BI} 滿足對稱性、三角不等式及滿足賦距空間(Taneja, 2005)。因此，當 SKL_{BI} 越大時，表示邊界及初始條件模擬的越

表一 蒙地卡羅法不同抽樣數之耗時與 SKL_{BI} 距離

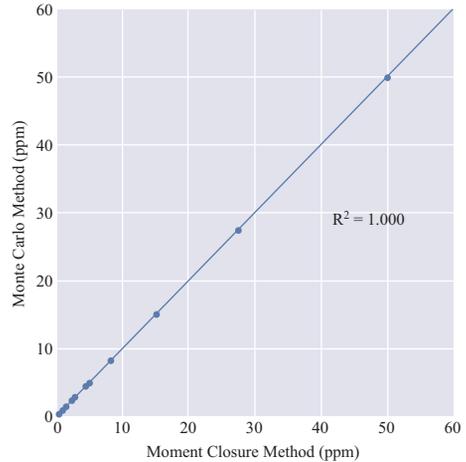
抽樣數	SKL_{BI}	耗時(sec)			動差近似法 減少耗時
		案例 1	案例 2	案例 3	
2^2	1.339503	0.006	0.006	0.006	0.000%
2^5	0.151578	0.007	0.007	0.007	14.286%
2^8	0.051754	0.012	0.013	0.013	52.632%
2^{11}	0.011367	0.079	0.075	0.079	92.275%
2^{14}	0.002030	0.515	0.515	0.516	98.836%
2^{17}	0.000305	4.056	4.069	4.071	99.852%
2^{20}	0.000051	34.882	34.884	34.885	99.983%
2^{22}	0.000014	168.942	168.946	168.968	99.996%

不好，而當 SKL_{BI} 越小時，表示邊界及初始條件模擬的越好。

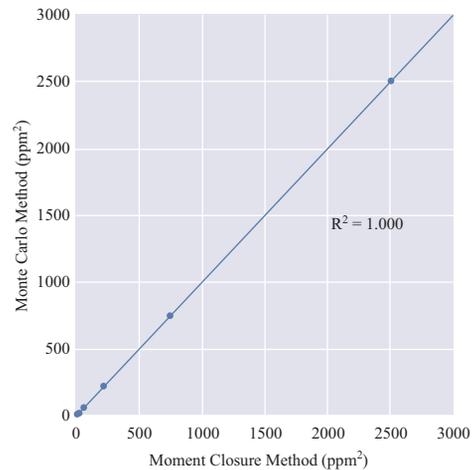
測試不同抽樣數下蒙地卡羅法與設定的邊界及初始值之誤差及案例 1 之計算時間(如表一)，由表一中可以發現，抽樣數越多其 SKL_{BI} 越小，代表蒙地卡羅法之初始條件及邊界條件與設定值越相近，但計算時間越長。Brooks (1998)認為當抽樣數平均值誤差小於樣本標準差的 5% 時，即可視為較佳的近似值。將此條件換算成 SKL_{BI} 時即為 $SKL_{BI} < 0.05$ ，其意義為(1)抽樣數平均值誤差將小於 0.05 倍設定的標準差，(2)抽樣數標準差誤差將小於 0.05 倍設定的標準差。也就是說，根據 Brooks (1998)的建議本研究之蒙地卡羅法抽樣數應至少大於 268 個，此時誤差 SKL_{BI} 為 0.047。

本研究中蒙地卡羅法抽樣數為設定為 2^{22} 組 (4,194,304)，抽樣數遠遠超過 Brooks (1998)所建議的抽樣數，誤差 $SKL_{BI} = 1.4 \times 10^{-5}$ 也遠遠低於 Brooks (1998)建議的 0.00028 倍。主要原因在於本文的蒙地卡羅法是要用來檢驗動差近似法的計算結果，若蒙地卡羅法誤差過大，將無法驗證動差近似法的正確性。

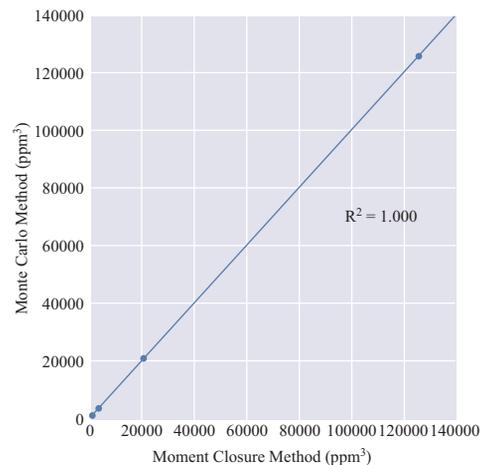
在案例 1 中，使用蒙地卡羅法對邊界及初始條件進行抽樣 2^{22} 組(共 4,194,304 組) 並進行模擬。比較位置在 20km 內及時間在 20 天內，總共 231 個時空間網格點之蒙地卡羅法與動差近似法之模擬結果(如圖九)。在圖九中，水平軸為動差



(a) 案例 1 一階動差比較圖

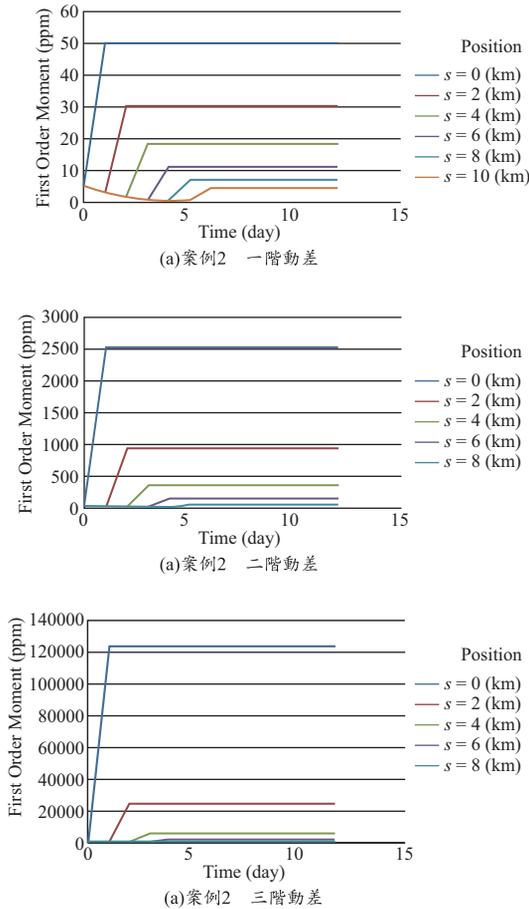


(b) 案例 1 二階動差比較圖



(c) 案例 1 三階動差比較圖

圖九 案例 1 動差近似法與蒙地卡羅法前三階動差比較圖。



圖十 案例 2 中以動差近似法所得之污染物濃度前三階動差。

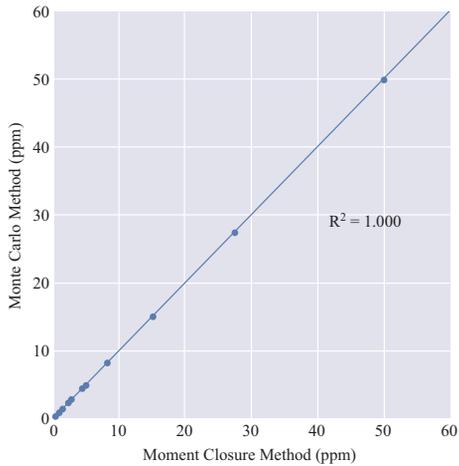
近似法求得之動差，垂直軸為蒙地卡羅法求得之動差。圖九(a)展現一階動差比較圖，圖九(b)中展現二階動差比較圖，圖九(c)中展現三階動差比較圖。由圖九可以發現兩種不同方法所求得前三階動差，其 R^2 在小數點下第四位四捨五入後其值都為 1.000。雖然動差近似法不能提供機率密度函數只能提動差，因此，無法直接用 SKL 來計算兩方法間機率密度函數之誤差。但兩方法間的 R^2 為 1.000，也間接的說明了動差近似法所求得前三階動差是非常接近蒙地卡羅法之結果。而這時蒙地卡羅法在邊界及初始條件上的誤差 SKL_{BI} 只有 1.4×10^{-5} ；因此，可以推論動差近似法所求得的結果與設定的相近。總合以上所述，在案例 1

中動差近似法與蒙地卡羅法所得到的前三階動差幾乎一樣，而且蒙地卡羅法跟所設定初始及邊界條件之誤差非常的小。

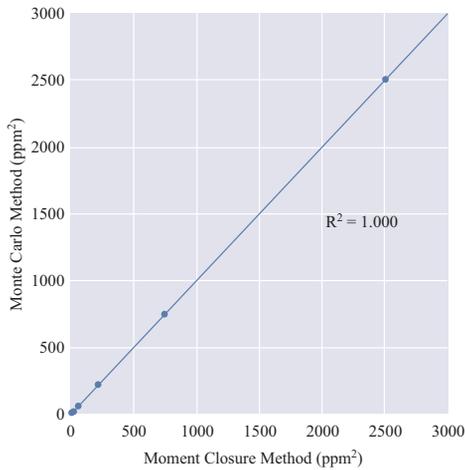
在案例 2 中流速為常數 $\bar{q} = 2$ (km/day)，反應率 k 為常態分布平均數 $\bar{k} = 0.6$ (day^{-1})及變異數 $\sigma_k^2 = 0.0036$ (day^{-2})，其他的假設與案例 1 相同。案例 2 中，一階動差初始值為式(31)，邊界條件為式(32)，經由一階動差控制方程式(28)之計算可得案例 2 污染物濃度隨時間空間分布的一階動差模擬結果(如圖十(a))。由於案例 1 與案例 2 最大的差異為反應率之變異數 σ_k^2 不同，但一階動差控制方程式(式(28))不受變異數 σ_k^2 所影響，因此案例 2 隨時空間分布的一階動差與案例 1 相同。案例 2 中，二階動差邊界條件設定為式(34)，初始條件設定為式(33)，經二階動差控制方程式(式(29))計算可得不同時空間之二階動差(如圖十(b))。由於二階動差之邊界(式(34))及初始條件(式(33))都不受 σ_k^2 所影響，而二階動差控制方程式會受 σ_k^2 所影響，因此二階動差的計算上，案例 2 與案例 1 有相同邊界及初始條件，但控制方程式不相同。

案例 2 中，三階動差初始值為式(45)及邊界條件為式(46)，經動差近似法之三階動差控制方程式(式(30))計算，可得三階動差隨時空分布(如圖十(c))。由於三階動差之邊界(式(45))及初始條件(式(46))都不受 σ_k^2 所影響，而三階動差控制方程式(式(30))會受 σ_k^2 所影響，因此在三階動差的計算上，案例 2 與案例 1 有相同邊界及初始條件，但控制方程式不相同。

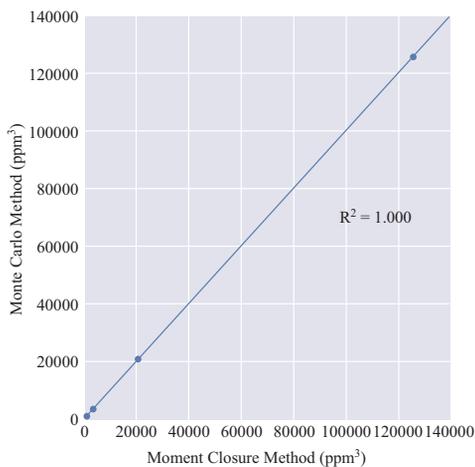
在案例 2 中使用蒙地卡羅法對邊界及初始條件進行抽樣 2^{22} 組(共 4,194,304 組) 並進行模擬。在位置在小於 20km 及時間在小於 20 天共 231 個時空間網格點內，比較蒙地卡羅法與動差近似法之前三階動差(如圖十一)。圖十一中，水平軸為動差近似法求得之動差，垂直軸為蒙地卡羅法求得之動差。在圖十一(a)中展現一階動差比較圖，圖十一(b)中展現二階動差比較圖，圖十一(c)中展現三階動差比較圖。由圖十一可以發現由兩種不同方法所求得前三階動差，其 R^2 在小數點下第四位四捨五入後其值都為 1.000，而此時蒙地卡羅



(a) 案例2 一階動差比較圖

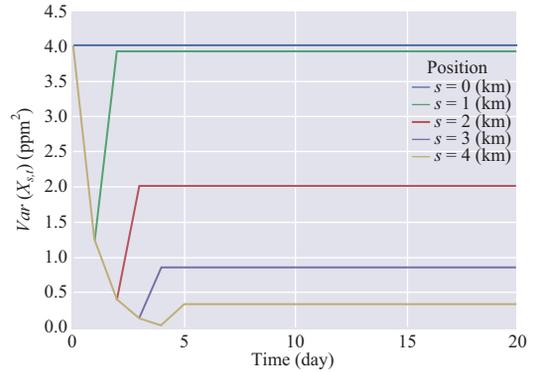


(b) 案例2 二階動差比較圖



(c) 案例2 三階動差比較圖

圖十一 案例2 動差近似法與蒙地卡羅法之前三階動差比較圖。



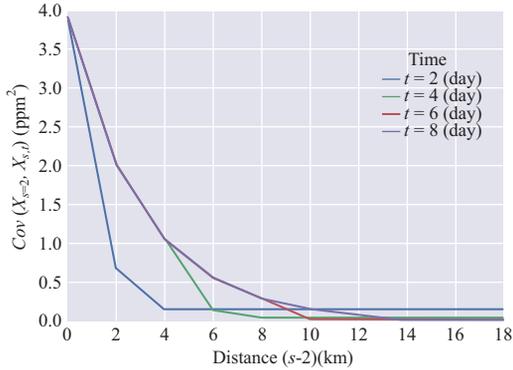
圖十二 案例2 不同時空間位置下濃度的變異數。

法在邊界及初始條件上的誤差 SKL_{BI} 只有 1.4×10^{-5} 。因此在案例2中動差近似法與蒙地卡羅法所得到的前三階動差幾乎一樣，而且蒙地卡羅法跟所設定初始及邊界條件之誤差非常的小。

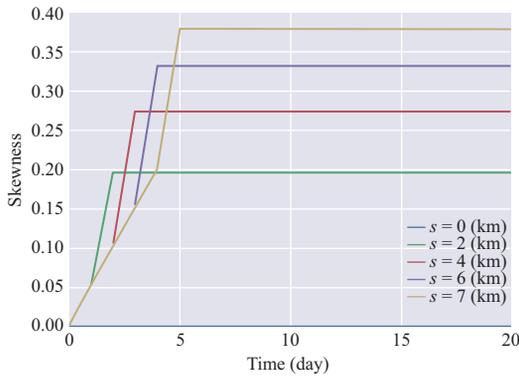
由式(47)可計算出污染物濃度之變異數。圖十二中展示了案例2不同位置下染物濃度之變異數隨時間推遣之變化。在圖十二中可以發現(1)由於對排放點不夠了解必需設定邊界不確定性，因此在邊界上($s=0$)污染物濃度的變異數為4 (ppm^2)。 (2)同樣的對於初始值不夠了解而產生了初始濃度的不確定性，在本案例中所有位置污染物濃度的初始變異數4 (ppm^2)。因此動差近似法可以考慮邊界條件及初始條件的不確定性。

將案例2與案例1之變異數進行比較，發現案例2在污染物流至時，其變異數會增加，例如：第1天在位置0 km時污染物流為50 (ppm)，經過一天後(第2天)污染物流至2 km的位置，案例2的變異數為3.925 (ppm^2)，比案例1中相同時空位置之變異數1.205 (ppm^2)還多；這是因為案例2中反應率的變異數較大，造成污染物流動的反應過程中濃度之變異數也較大，最後造成了污染物流至時案例2的變異數會比案例1的變異數還大。也就是說反應率的變異數為圖十二中變異數上升的主要因素，這也造成案例2在污染濃度平衡時有較高的變異數。

由式(48)可計算出污染物濃度之共變異數，圖十三展示了案例2中不同時間下，內部第一點



圖十三 案例 2 不同時間下內部第一點($s = 2$ km)與不同距離的共變異係數。



圖十四 案例 2 不同時空間下污染物濃度之偏度係數。

($s = 2$ km)與不同距離的共變異係數。圖十三可以發現，不管在任何時間，當兩點之間的距離越近時共變異係數越大，而距離越遠時共變異係數越小。也就是說，污染物濃度比較容易影響較近的位置，不易影響較遠的位置，這樣的結果是合理的。

將前三階動差代入式(49)式可得偏度係數(如圖十四)，在圖十四中可以發現：(1)偏度係數不管在哪一個位置，時間為第 0 天時偏度係數皆為 0，這是因為案例 2 中三階中央動差之初始為 0(如式(43))。(2)在原點($s = 0$)時偏度係數值皆為零，這是因為案例 2 中三階中央動差之邊界值為 0(如式(44))。(3)在內部點的偏度係數大於零，而

造成大於零的原因，因為在於案例 2 中反應率 k 為常態分布而非定值，相對案例 1 中反應率 k 為常數，其偏度係數全部為零。然而，在真實的河川中因生物或溫度而造成反應率 k 為非定值(Severino, *et al.*, 2000)；因此，非定值的假設更為合理。

Groeneveld 和 Meeden (1984)提出了以累積機率密度之反函數推估偏度係數如下

$$Ske(u) = \frac{F_{CD}^{-1}(u) + F_{CD}^{-1}(1-u) - 2F_{CD}^{-1}(0.5)}{F_{CD}^{-1}(u) - F_{CD}^{-1}(1-u)} \dots (55)$$

其中 u 為累積機率，在式(55)中的範圍為 $0.5 < u < 1$ ， $F_{CD}^{-1}(u)$ 為以累積機率密度之反函數(Inverse distribution function)，定義為整個分布中， u 的比例值小於 $F_{CD}^{-1}(u)$ ， $F_{CD}^{-1}(u)$ 為單調遞增函數(Monotonic increasing function)。也就是說當 $u_1 > u_2$ 時 $F_{CD}^{-1}(u_1) > F_{CD}^{-1}(u_2)$ ，這個性質可以確保式(55)中分母恆大於零。 $F_{CD}^{-1}(0.5)$ 即為中位數(Median)或稱第二四分位數(Second quartile)，若以中位數為中心，往下 ΔC 的值後，累積機率值為 $F_{CD}^{-1}(1-u)$ ，中位數往上 ΔC 的累積機率值為 $F_{CD}^{-1}(u_c)$ ，整理可得

$$F_{CD}^{-1}(0.5) - F_{CD}^{-1}(1-u) = \Delta C = F_{CD}^{-1}(u_c) - F_{CD}^{-1}(0.5) \dots (56)$$

在案例 2 中內部點的偏度係數全大於零 ($Ske > 0$)，因此式(56)式可化簡為

$$F_{CD}^{-1}(u) - F_{CD}^{-1}(0.5) > F_{CD}^{-1}(0.5) - F_{CD}^{-1}(1-u) \dots (57)$$

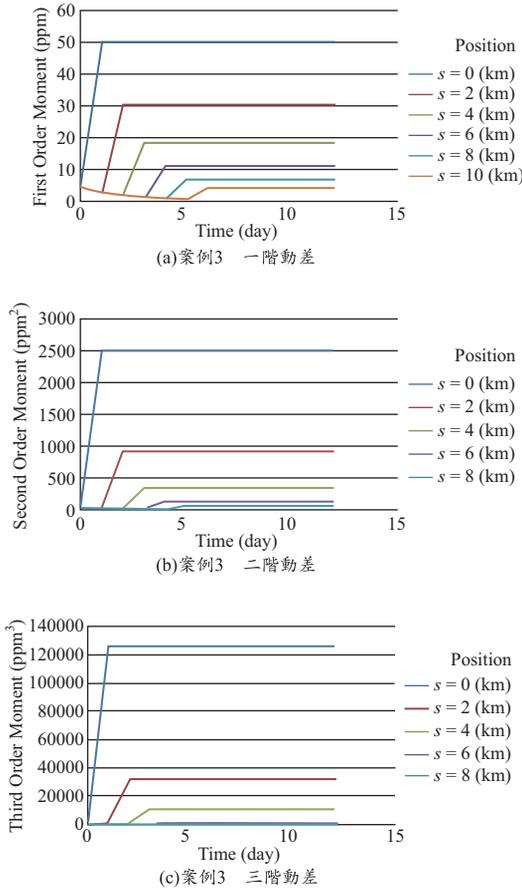
將式(56)代入式(57)可得 $F_{CD}^{-1}(u) > F_{CD}^{-1}(u_c)$ ，其在累積機率下的不等式即為

$$1 - F_{CD}(F_{CD}^{-1}(u_c)) > 1 - F_{CD}(F_{CD}^{-1}(u)) \dots (58) \\ = 1 - u = F_{CD}(F_{CD}^{-1}(1-u))$$

將 u_c 與 $1-u$ 用中位數及 ΔC 表示可得

$$1 - F_{CD}(F_{CD}^{-1}(0.5) + \Delta C) > F_{CD}(F_{CD}^{-1}(0.5) - \Delta C) \dots (59)$$

式(59)中說明濃度高於中位數加 ΔC 的機率會大於濃度低於中位數減 ΔC 的機率，也就是說，出現高濃度值的機率較高。當取 ΔC 為中位數時



圖十五 案例 3 中以動差近似法所得之污染物濃度前三階動差。

($\Delta C = F_{CD}^{-1}(0.5)$), 可得如下

$$1 - F_{CD}(2F_{CD}^{-1}(0.5)) > F_{CD}(0) \dots\dots\dots(60)$$

式(60)更說明了濃度低於零的機率更小於濃度高於兩倍中位數的機率, 即是濃度低於零的機率相對非常的小, 由於真實世界中, 不可能出現濃度低於零, 因此這樣的結果相對案例 1 的對稱分布是更為合理的。

綜合以上所述, 案例 2 中, 動差近似法不但可以考慮邊界及初始值的前三階動差, 還可以考慮非定值的反應率 k ; 由於非定值的反應率 k 造成了內部點污染物濃度之偏度係數都大於零, 也造成濃度小於零的機率比對稱分布更低, 這樣的

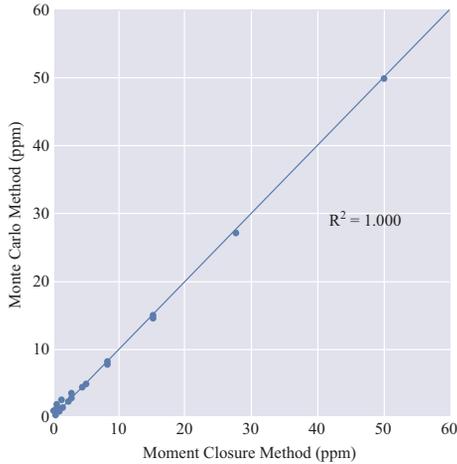
結果也更為合理。

在案例 3 中, 假設反應率為常數, 河流的流速為常態分布其平均值 $\bar{q} = 2$ (km/day) 及變異數 $\sigma_q^2 = 0.04$ (km/day)²; 其他的假設與案例 1 相同。經由一階動差控制方程式(式(28))之計算, 可得案例 3 污染物濃度隨時間空間分布的一階動差模擬結果(圖十五(a))。由於案例 1 與案例 3 之差異在於流速之變異數 σ_q^2 的不同, 但一階動差控制方程式(式(28))不受變異數 σ_q^2 所影響, 因此案例 3 中, 一階動差隨時空間分布與案例 1 相同。

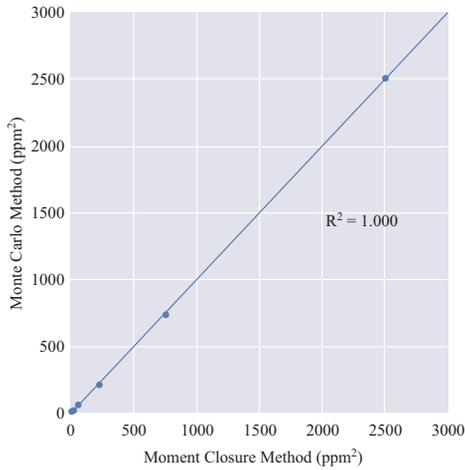
在案例 3 中, 二階動差初始值為式(33)及邊界條件為式(34)(如圖四), 經動差近似法之二階動差控制方程式(式(29))計算, 可得二階動差(圖十五(b))。由於式(33)及式(34)都不受流速之變異數 σ_q^2 所影響; 因此, 案例 3 中二階動差初始及邊界條件都與案例 1 相同。但式(29)會受流速變異數 σ_q^2 所影響, 因此案例 3 二階動差控制方程式與案例 1 不相同。

案例 3 中三階動差初始條件為式(45)及邊界條件為式(46), 經動差近似法之三階動差控制方程式(式(30))計算, 可得三階動差隨時空之分布(圖十五(c))。由於式(45)及式(46)都不受 σ_q^2 所影響, 而式(30)會受 σ_q^2 所影響; 因此, 三階動差的初始及邊界條件與案例 1 相同, 但控制方程式與案例 1 不同。

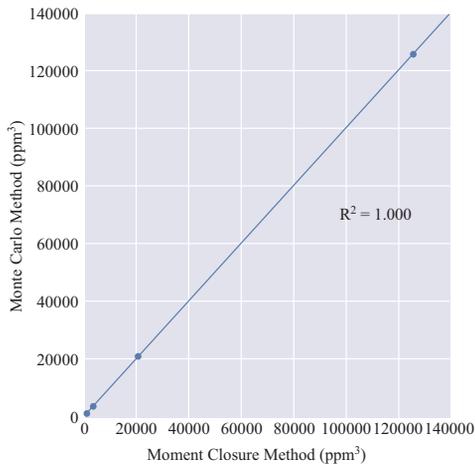
在案例 3 中使用蒙地卡羅法對邊界及初始條件進行抽樣 2^{22} 組(共 4,194,304 組) 並進行模擬。在位置小於 20 km 內及時間小於 20 天內共 231 個時空間網格點上, 比較蒙地卡羅法與動差近似法之前三階動差(如圖十六)。圖十六中, 水平軸為動差近似法求得之動差, 垂直軸為蒙地卡羅法求得之動差。在圖十六(a)中展現一階動差比較圖, 圖十六(b)中展現二階動差比較圖, 圖十六(c)中展現三階動差比較圖。由圖十六可以發現由兩種不同方法所求得前三階動差, 其 R^2 在小數點下第四位四捨五入後其值都為 1.000, 因此在案例 3 中動差近似法與蒙地卡羅法所得到的前三階動差幾乎一樣。



(a) 案例3 一階動差比較圖

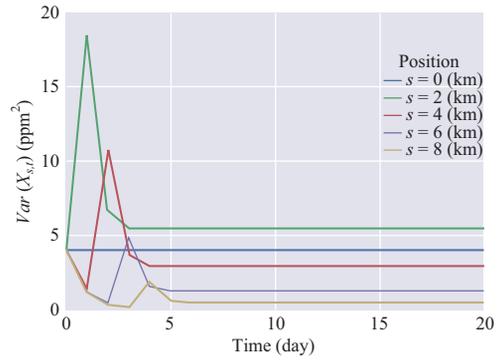


(b) 案例3 二階動差比較圖

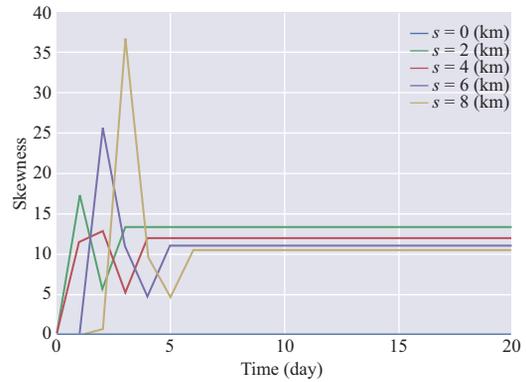


(c) 案例3 三階動差比較圖

圖十六 案例3 動差近似法與蒙地卡羅法之前三階動差比較圖。



圖十七 案例3 不同時空位置下濃度的變異數。



圖十八 案例3 不同時空位置下污染物濃度之偏度係數。

由式(47)可計算出污染物濃度之變異數，圖十七中展示了案例3 固定位置下濃度之變異數隨時間的變化圖形。由圖十七中可以發現(1)在邊界上($s = 0$)污染物濃度的變異數為 $4 \text{ (ppm}^2\text{)}$ ，這是因為對排放點不夠了解而設定的邊界不確定性，而動差近似法可以考慮邊界不確定性。(2)所有位置污染物濃度的初始變異數 $4 \text{ (ppm}^2\text{)}$ ，這是對初始值不夠了解而加上了初始濃度之不確定性，也就是說動差近似法可以考慮初始條件之不確定性。(3)與案例1 比較(如圖七)，流速的不確定性 σ_q^2 增加，會造成污染物流至內部前一時刻的變異數大幅增加，這也表示流速的不確定性有可能讓污染物提早到達。(4)相對於案例1，流速的不確定性 σ_q^2 增加，會造成相同位置下平衡態的變異數

表二 不同來源比例之偏度係數

來自工廠比例 (50 ppm)	來自初始值比例 (5 ppm)	偏度係數
0.0001	0.9999	99.985
0.0005	0.9995	44.688
0.001	0.999	31.575
0.005	0.995	14.036
0.01	0.99	9.849
0.05	0.95	4.129
0.1	0.9	2.667

增加。

將前三階動差代入式(52)式可得偏度係數(如圖十八)，在圖十八中可以發現：(1)偏度係數的初始值及邊界值階為零，這是因為案例 2 的三階中央動差之初始及邊界條件為 0(如式(43)及式(44))，(2)在污染物到達前偏度係數會大幅提升，不過當污染物到達會再降回至平衡，(3)所有內部點的偏度係數均大於零。

整理不同來源比例之偏度係數(如表二)，可以發現當來自工廠污染比例很低時偏度係數較大。由於案例 3 中流速為非常數，有很低比例的工廠污染物較早到達，也造成了偏度係數較高，因此，圖十八中偏度係數的峰值都出現於污染物大量到達之前。

在案例 3 中造成偏度係數大於零的原因在於流速 q 為常態分布而非定值。相對的，在案例 1 偏度係數全部為零(q 為常數)，可知流速的不確定性會造成偏度係數的增加。而真實的河川中會因為孔隙介質的滲透性及地表摩擦係數之空間異質性而造成流速 q 非定值(Jarman and Russell, 2003, Wang and Tartakovsky, 2012)，因此非定值的假設更為合理。偏度係數大於零的另外一個意義為污染物濃度小於零的機率比對稱分布來的更低(如式(60))，而真實的污染物濃度也不可能有負值出現，因此，在流速非定值下的推估結果也比案例 1 更接近真實的情況。總合以上所述，案例 3 中，考慮孔隙介質的滲透性及地表摩擦係數

之空間異質性，而把流速 q 設成非定值，造成內部點的偏度係數都大於零，濃度小於零的機率比對稱分布更低，這樣的結果也更為合理。

本研究處理器 intel i7-3770，硬碟 WD SATA II 500GB 7200RPM (WD5000AAKS-22YGA0)，記憶體 DDR3-1600 32GB 下，程式碼為符合 C99 標準之 C 語言，以 GCC4.7.2 版 O2 級最佳化編譯成執行檔，於 windows 7 作系統進行計算速度測試。動差近似法中只要解三次偏微分方程(式(27)、式(29)、式(30))即可獲得前三階動差，在實際測試上這三個案例中動差近似法之耗時(包含計算及記錄時間)沒有太大的差別，其耗時為 0.006 (sec)。由於硬碟存檔速度慢於其他硬體，因此動差近似法效率瓶頸在於硬碟存檔。

在這三個案例中蒙地卡羅法耗時如表一，主要耗時可分成三個部分，(1)計算出共變異數矩陣，在計算過程中必需透過離均差矩陣相乘，其矩陣相乘計算量正比於 $N_x * N_t * O(N_s^2)$ (Press, *et al.*, 1996)，其中 N_x 為空間離散的網格數， N_t 為時間離散的網格數，因此耗時正比於抽樣數平方 $O(N_s^2)$ ；(2)解多組移流反應方程式之耗時，這部分可以透過平行計算而加速，其耗時正比於抽樣數 $O(N_s)$ ；(3)硬碟存檔時間，其耗時與抽樣數無關。在這三個案例中，蒙地卡羅法耗時沒有太大的差別，而這三個案例平均耗時與抽樣數近進迴歸可得如下

$$T = 2.233 \times 10^{-12} N_s^2 + 3.092 \times 10^{-5} N_s + 0.006 \dots (61)$$

其中 T 代表耗時，這個結果可以得知(1)雖然計算共變異數矩陣正比於抽樣數的平方，次方數最高但計算量小，因此其係數很小；(2)解移流反應方程式之耗時雖然只正比於抽樣數的一次方，但每組的計算量很大，因此這項是蒙地卡羅法計算效率瓶頸；(3)存檔時間平均為 0.006 (sec)，而不論是蒙地卡羅法或是動差近似法都必需把計算完的結果進行存檔，兩種方法所需存檔的資料大小及存檔時間是相同的，這也表示動差近似法的耗時幾乎是存檔所耗掉的，但存檔這個動作是不能避免的。

在這三個案例中，動差近似法與抽樣數 2^{22}

蒙地卡羅法前三階動差 R^2 為 1.000，但動差近似法可以減少 99.996% 的耗時。若蒙地卡羅法抽樣數減少至 256，此時誤差約為 Brooks (1998) 的建議值 $SKL_{BI} = 0.052$ ，然而動差近似法依然可以減少 52.632% 的耗時。當蒙地卡羅法抽樣數減少至 4 個時，其耗時與動差近似法相近，但蒙地卡羅法之誤差 $SKL_{BI} = 1.34$ ，其誤差為 2^{22} 抽樣數蒙地卡羅法的 95678 倍。綜合以上所述，動差近似法可快速計算前三階之動差，且保有一定的精準度。

五、結 論

本研究以隨機移流反應方程式為例，透過動差近似法計算出前三階的濃度動差，並以三個案例探討參數、邊界及初始條件不確定性對於前三階動差的影響。在這三個案例中，假設河川初始濃度為 5 (ppm)、變異數為 4 (ppm²) 及三階中央動差為 0 (ppm³)，工廠位置在原點，從第一天開始原點濃度值為 50 (ppm)、變異數為 4 (ppm²) 及三階中央動差為 0 (ppm³)。這樣的假設即具有初始及邊界條件的不確定性。在案例 1 中，先不考慮參數不確定性，因此假設流速及反應率為常數，其值分別為 $\bar{q} = 2$ (km/day) 及 $\bar{k} = 0.6$ (day⁻¹)。在案例 2 中考慮反應率具有不確定性，設定為平均值 $\bar{k} = 0.6$ (day⁻¹) 及變異數 $\sigma_k^2 = 0.0036$ (day⁻²) 之常態分布，而反應率與案例 1 相同設定為常數。在案例 3 中考慮反應率具有不確定性，設定為 $\bar{q} = 2$ (km/day) 及變異數 $\sigma_q^2 = 0.04$ (km/day)² 之常態分布，而流速與案例 1 相同設定為常數。

本研究使用動差近似法將隨機移流反應方程式轉成動差方程式，並以特性法將動差方程式的微分方法向轉成流線方向，最後透過泰勒級數法對動差方程式雙邊展開，可得到離散版本的動差方程式，此離散版本可以考慮到泰勒級數高階項。在本研究中考慮泰勒級數前 10 項，分別對這三個案例解三次動差方程，得到這三個案例的前三階動差。

本研究中，透過抽樣數 2^{22} 之蒙地卡羅法進行驗證動差近似法之計算結果，分別比較這三個案例一二三階動差之 R^2 ，可以發現這 9 個 R^2 值

在小數點下第四位四捨五入之後皆為 1.000，這樣的結果也表示由動差近似法所獲得的前三階動差與蒙地卡羅法非常的相近。

比較案例 1 及案例 2 的結果，可以瞭解反應率之不確定性對於濃度動差的影響，由於反應率之不確定性增加，造成污染物流至時濃度之變異數增加，平衡濃度之變異數也大於案例 1 平衡濃度之變異數，表示反應率之不確定性會造成推估濃度之不確定性增加。另外，反應率之不確定性增加也造成內部點的偏度係數全為正數，同時也表示污染濃度小於零的機率比對稱分布小。由於濃度不可能小於零，因此偏度係數全為正的結果比對稱分布更為合理。

比較案例 1 及案例 3 的結果，可以瞭解流速之不確定性對於濃度動差的影響，由於流速之不確定性增加，造成污染物流至前濃度之變異數增加，平衡濃度之變異數也比案例 1 更大，表示流速之不確定性會增加推估濃度之不確定性。另外，反應率之不確定性增加也造成內部點的偏度係數全為正數，同時也表示污染濃度小於零的機率比對稱分布小；由於濃度不可能小於零，因此偏度係數全為正的結果比對稱分布更為合理。

動差近似法於這三個案例間的耗時幾乎沒有差別，其耗時為 0.06 (sec)，效率瓶頸在於硬碟存檔。而蒙地卡羅法耗時主要取決於抽樣數，當抽樣數為 2^{22} 時，蒙地卡羅法之誤差 SKL_{BI} 為 1.4×10^{-5} ，動差近似法可以減少 99.996% 的耗時，兩方法之間的 R^2 高達 1.000。當蒙地卡羅法抽樣數減少至 256，此時蒙地卡羅法誤差 SKL_{BI} 為 0.052，然而動差近似法依然可以減少 52.632% 的耗時。因此動差近似法可快速計算出前三階之動差，且保有一定的精準度。

謝 誌

本論文係科技部計畫「巨量資料下之時空過程分析與模式推估：以屏東地區降雨與地下水機制分析為例」(編號 105-2221-E-002-039)之研究成果，承蒙科技部經費之贊助使本研究得以完成，謹致感謝之意。

參考文獻

1. Abdulle, A. and Blumenthal, A., "Stabilized multilevel Monte Carlo method for stiff stochastic differential equations," *Journal of Computational Physics*, vol. 251, pp. 445-460, 2013.
2. Abokifa, A. A., Yang, Y. J., Lo, C. S. and Biswas, P., "Water quality modeling in the dead end sections of drinking water distribution networks," *Water research*, vol. 89, pp. 107-117, 2016.
3. Benevides, A. B., Bastos Filho, T. F. and Sarcinelli Filho, M., "Pseudo-online classification of mental tasks using Kullback-Leibler symmetric divergence," *Journal of Medical and Biological Engineering*, vol. 32, no. 6, pp. 411-416, 2012.
4. Bergman, L., Wojtkiewicz, S., Johnson, E. and Spencer Jr, B., "Some reflections on the efficacy of moment closure methods." in *Proceedings of the Second International Conference on Computational Stochastic Mechanics, Balkema, Rotterdam*, pp. 87-95 Published, 1995.
5. Boso, F. and Tartakovsky, D., "CDF Solutions of Advection-Reaction equations with uncertain parameters." in *AGU Fall Meeting Abstracts*, p. 01 Published, 2013.
6. Brooks, S., "Markov chain Monte Carlo method and its application," *Journal of the royal statistical society: series D (the Statistician)*, vol. 47, no. 1, pp. 69-100, 1998.
7. Broyda, S., Dentz, M., and Tartakovsky, D., "Probability density functions for advective-reactive transport in radial flow," *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, vol. 24, no. 7, pp. 985-992, 2010.
8. Burden, R. L. and Faires, J. D., *Numerical Analysis*, 9 ed., 888: Cengage Learning Asia Pet. Ltd., 2011.
9. Cover, T. M. and Thomas, J. A., *Elements of information theory*: John Wiley & Sons, 2012.
10. Dale, V. H. and English, M. R., *Tools to aid environmental decision making*: Springer Science & Business Media, 1999.
11. Davidsen, C., Pereira-Cardenal, S. J., Liu, S., Mo, X., Rosbjerg, D. and Bauer-Gottwein, P., "Using stochastic dynamic programming to support water resources management in the Ziya River basin, China," *Journal of Water Resources Planning and Management*, vol. 141, no. 7, pp. 04014086, 2014.
12. Dettinger, M. D. and Wilson, J. L., "First Order Analysis of Uncertainty in," *Water Resources Research*, vol. 17, no. 1, pp. 149-161, 1981.
13. Evans, L. C., "Partial differential equations," *Graduate Studies in Mathematics*, vol. 19, 1998.
14. Flaherty, J. E., Paslow, P. J., Shepard, M. S. and Vasilakis, J. D., *Adaptive methods for partial differential equations*, 250: Society of Industrial and Applied Mathematics, 1989.
15. Franceschini, S., Tsai, C. and Marani, M., "Point estimate methods based on Taylor Series Expansion—The perturbation moments method—A more coherent derivation of the second order statistical moment," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 36, no. 11, pp. 5445-5454, 2012.
16. Gillespie, C. S., "Moment-closure approximations for mass-action models," *Systems Biology, IET*, vol. 3, no. 1, pp. 52-58, 2009.
17. Groeneveld, R. A. and Meeden, G., "Measuring skewness and kurtosis," *The Statistician*, pp. 391-399, 1984.
18. Harr, M. E., "Probabilistic estimates for multivariate analyses," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 13, no. 5, pp. 313-318, 1989.
19. Hong, H., "An efficient point estimate method for probabilistic analysis," *Reliability Engineering & System Safety*, vol. 59, no. 3, pp. 261-267,

- 1998.
20. Jarman, K. D. and Russell, T. F., "Eulerian moment equations for 2-D stochastic immiscible flow," *Multiscale Modeling & Simulation*, vol. 1, no. 4, pp. 598-608, 2003.
 21. Jordan, D. W. and Smith, P., *Nonlinear ordinary differential equations*: Oxford Univ. Press, 2007.
 22. Kolovos, A., Christakos, G., Serre, M. L. and Miller, C. T., "Computational Bayesian maximum entropy solution of a stochastic advection-reaction equation in the light of site-specific information," *Water Resources Research*, vol. 38, no. 12, 2002.
 23. Lee, C. H., "A moment closure method for stochastic chemical reaction networks with general kinetics," *MATCH Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, vol. 70, pp. 785-800, 2013.
 24. Li, K., "Point-estimate method for calculating statistical moments," *Journal of Engineering Mechanics*, vol. 118, no. 7, pp. 1506-1511, 1992.
 25. Liu, Y. and Gupta, H. V., "Uncertainty in hydrologic modeling: Toward an integrated data assimilation framework," *Water Resources Research*, vol. 43, no. 7, 2007.
 26. Morokoff, W. J. and Caflisch, R. E., "Quasi-monte carlo integration," *Journal of computational physics*, vol. 122, no. 2, pp. 218-230, 1995.
 27. Mynett, A. E., "Hydroinformatics and its applications at Delft Hydraulics," *Journal of Hydroinformatics*, vol. 1, no. 2, pp. 83-102, 1999.
 28. Nouy, A., "A generalized spectral decomposition technique to solve a class of linear stochastic partial differential equations," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 196, no. 45, pp. 4521-4537, 2007.
 29. Øksendal, B., "Stochastic differential equations," *Stochastic differential equations*, pp. 65-84: Springer, 2003.
 30. Pachner, J., *Handbook of numerical analysis applications with programs for engineers and scientists*: McGraw-Hill, Inc., 1983.
 31. Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. and Flannery, B. P., *Numerical recipes in C*: Cambridge university press Cambridge, 1996.
 32. Rosenblueth, E., "Point estimates for probability moments," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 72, no. 10, pp. 3812-3814, 1975.
 33. Rubner, Y., Tomasi, C. and Guibas, L. J., "The earth mover's distance as a metric for image retrieval," *International journal of computer vision*, vol. 40, no. 2, pp. 99-121, 2000.
 34. Severino, G., Dagan, G. and van Duijn, C., "A note on transport of a pulse of nonlinearly reactive solute in a heterogeneous formation," *Computational Geosciences*, vol. 4, no. 3, pp. 275-286, 2000.
 35. Taneja, I. J., "Generalized symmetric divergence measures and inequalities," *arXiv preprint math/0501301*, vol. 7, no. 4, Art. 9., 2005.
 36. Tartakovsky, D. M., "Probabilistic risk analysis in subsurface hydrology," *Geophysical research letters*, vol. 34, no. 5, 2007.
 37. Tartakovsky, D. M., Dentz, M. and Lichtner, P. C., "Probability density functions for advective - reactive transport with uncertain reaction rates," *Water resources research*, vol. 45, no. 7, 2009.
 38. Tsai, C. W. and Franceschini, S., "Evaluation of probabilistic point estimate methods in uncertainty analysis for environmental engineering applications," *Journal of environmental engineering*, vol. 131, no. 3, pp. 387-395, 2005.
 39. Van, T. D., Tsuji, M. and Son, N. D. T., *The*

Characteristic method and its generalizations for first-order nonlinear partial differential equations: CRC Press, 1999.

40. Wagener, T. and Gupta, H. V., "Model identification for hydrological forecasting under uncertainty," *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, vol. 19, no. 6, pp. 378-387, 2005.
41. Wang, P. and Tartakovsky, D. M., "Uncertainty

quantification in kinematic-wave models," *Journal of computational Physics*, vol. 231, no. 23, pp. 7868-7880, 2012.

收稿日期：民國 105 年 12 月 9 日
修正日期：民國 106 年 1 月 23 日
接受日期：民國 106 年 2 月 6 日