



# 行政院環境保護署

## 111 年度土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案

### 建置應用量子電腦進行污染溯源之技術

#### 期末報告

主 辦 單 位： 行政院環境保護署

專案執行單位：國立中央大學／環境研究中心

專案主持人：倪春發 教授

專案執行期間：111 年 09 月 01 日起至

112 年 08 月 31 日止

中 華 民 國 112 年 8 月 印製



## 專案基本資料表

|              |               |                                                                                                |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
|--------------|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|---------------------------|------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| 專案性質         |               | <input checked="" type="checkbox"/> 實驗性質 <input type="checkbox"/> 非實驗性質                        |         | 專案類別(單選)                  |                  | <input type="checkbox"/> 先導型 <input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型 |  |
| 研究主題         |               | <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 其他 |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
| 申請機構系所       |               | 國立中央大學/環境研究中心                                                                                  |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
| 機構地址         |               | 桃園市中壢區中大路 300 號                                                                                |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
| 專案主持人        |               | 倪春發                                                                                            |         | 職等/職稱                     |                  | 教授/主任                                                                                             |  |
| 協同主持人        |               | 李唯祺                                                                                            |         | 職等/職稱                     |                  | 研究員                                                                                               |  |
| 專案名稱         | 中文            | 建置應用量子電腦進行污染溯源之技術                                                                              |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
|              | 英文            | Develop a contamination source tracking technology with quantum computing                      |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
|              | 關鍵字           | Contamination source tracking, Quantum computer, Simulated annealing, Quantum annealing        |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
| 執行期程         |               | 自民國 1 1 1 年 0 9 月 0 1 日起至民國 1 1 2 年 0 8 月 3 1 日止                                               |         |                           |                  |                                                                                                   |  |
| 專案主持人        |               | 姓名：倪春發                                                                                         |         | Email: nichuenf@gmail.com |                  | 專線：03-4227151#65874<br>手機：0989483898                                                              |  |
| 專兼任人員        |               | 姓名：                                                                                            |         | Email：                    |                  | 專線：<br>手機：                                                                                        |  |
| 經費分配總表       | 專案變更後經費       |                                                                                                | 第一年金額   | 第二年金額                     | 編列說明             |                                                                                                   |  |
|              | 1.            | 人事費用                                                                                           | 300,000 |                           | (1~6 項相加之 50%為限) |                                                                                                   |  |
|              | 2.            | 設備使用含維護費                                                                                       | 0       |                           | (與計畫實驗相關)        |                                                                                                   |  |
|              | 3.            | 耗材與主要費用                                                                                        | 246,000 |                           | (與計畫主體相關)        |                                                                                                   |  |
|              | 4.            | 其它研究相關費用                                                                                       | 0       |                           | (含差旅與租賃費用)       |                                                                                                   |  |
|              | 5.            | 雜支費用                                                                                           | 9,000   |                           | (1~6 項相加之 5%為限)  |                                                                                                   |  |
|              | 6.            | 行政管理費                                                                                          | 55,000  |                           | (1~6 項相加之 10%為限) |                                                                                                   |  |
|              | 7.            | 自籌款                                                                                            | 0       |                           | (自行籌備款項)         |                                                                                                   |  |
|              | 申請補助金額(1~6 項) |                                                                                                | 610,000 |                           | 總金額：610,000      |                                                                                                   |  |
| 計畫總金額(1~7 項) |               | 610,000                                                                                        |         | 總金額：610,000               |                  |                                                                                                   |  |

校長周享揚

專案主持人(簽名及蓋章)：



日期：

112/8/25



# 行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☐構想書 ☐申請計畫書 ☐期中報告  
☐修正計畫書 ☒期末報告

## 審查意見回覆對照表

| 計畫年度                                                                                                                                                                                                          | 111 年度                                                                                         | 計畫類型                                                                                                                                                                                       | <input type="checkbox"/> 先導型 <input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 計畫類別                                                                                                                                                                                                          | <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 其他 | 主持人：倪春發                                                                                                                                                                                    | NO：C6                                                                                             |
| 計畫名稱                                                                                                                                                                                                          | 建置應用量子電腦進行污染溯源之技術                                                                              |                                                                                                                                                                                            |                                                                                                   |
| 審查意見                                                                                                                                                                                                          |                                                                                                | 執行單位回覆                                                                                                                                                                                     |                                                                                                   |
| 委員一                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                | 感謝委員意見：                                                                                                                                                                                    |                                                                                                   |
| 3. 報告內容成果豐碩建議計畫執行仍應以未來能實際應用於污染場址之整治為目標。<br>4. 建議可以針對未來應用於實場時建立操作參數條件。<br>5. 建議應針對本計畫成果產出績效做說明。                                                                                                                |                                                                                                | 1. 由於國內外皆仍未有類似技術，因此本計畫主要目的為工作流程之建置，應用至污染場址為後續技術精進之目標。<br>2. 本計畫已應用之推估參數包括污染源座標、流量與濃度，可依照現場狀況對推估參數進行調整。<br>3. 由於本計畫主要目的為新興技術之工作流程建置，因此設定績效為完成流程建置、初步成果產出與相關發表，目前僅剩相關發表仍未完成。                 |                                                                                                   |
| 委員二                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                | 感謝委員意見：                                                                                                                                                                                    |                                                                                                   |
| 5. 請以預定進度及查核點說明期末報告達成狀況，階段成果報告說明目前進程式撰寫，是否已完成預定工作內容？<br>6. 建議系統性說明研究設計與執行流程，如何驗證律定。<br>7. 本研究架設為地質均質且污染物為與水相同比重，假設條件與一般污染地下水的實際狀況差異大，未來如何運用，需進一步說明條件。<br>8. 請提出後續規劃如何執行工作。                                    |                                                                                                | 4. 由於國內外皆仍未有類似技術，因此本計畫主要目的為技術與工作流程之建置，並設定績效為完成流程建置與初步成果之產出。<br>5. 已依委員建議修正 3.1 小節內容。<br>6. 該技術應用至污染場址為本計畫後續技術精進之目標，目前已應用之推估參數包括污染源座標、流量與濃度，可依照現場狀況對推估參數進行調整。<br>7. 已新增後續工作規畫之說明至討論與結論小節內文。 |                                                                                                   |
| 委員三                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                | 感謝委員意見：                                                                                                                                                                                    |                                                                                                   |
| 5. 本案成果績效自評表中，國外期刊及國際研討會發表目標各 1 篇，惟期末達成數為 0，請說明原因。<br>6. 本計畫以理想案例模擬推估，其網格配置水平 X、Y 向各 50 格，垂直向卻僅有 2 格，比例差異較大，應較屬平面模擬結果，後續建議提升三維模擬程度，以符合實際行為，惟其花費時間增加是否符合實務應用效益應再評估。<br>7. 本計畫應用傳統退火法與量子退火法，以結果而言傳統法推估結果較為精確，量子 |                                                                                                | 1. 由於國內外皆仍未有類似技術，因此本計畫在建置技術與工作流程確認上花費較多時間，因此結果之發表仍在準備中。<br>2. 並將該技術應用至污染場址為後續技術精進之目標。<br>3. 感謝委員建議，已將其放入結論與建議，並成為後續技術精進之目標。<br>4. 感謝委員建議，此為後續技術精進之目標。                                      |                                                                                                   |



|                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                               |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>退火法執行 12 次推估，因轉換方法影響其準確性，建議參考 PDCA 原則，逐次檢核並檢討原因修正後續推估方式，以提升精確性。</p> <p>8. 此計畫具有創新性，預期提供污染預測溯源技術，惟其準確性及實場應用性仍待後續驗證。</p>                                                                        |                                                                                                                                                                                                               |
| <p><b>委員四</b></p> <p>2. 本計畫為「建置技術」，而非將量子運算技術引入之嘗試。</p> <p>3. 成效自評在論文發表上均未達標，何謂計畫進度達標 100%。</p> <p>4. 理想案例假設的地質材料為均質，污染物為保守性且密度與水相同，試問哪有這種地質環境與這種污染物？這種模擬可靠嗎？</p>                                 | <p>感謝委員意見：</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 本計畫之目的為建立應用量子電腦進行污染溯源之技術流程。</li> <li>2. 由於國內外皆仍未有類似技術，建置狀況難以預測。因此本計畫以完成技術漸至為主要目標，未規劃論文發表至計畫進度內。</li> <li>3. 本計畫目的為建置技術流程，應用至污染場址為後續精進之目標。</li> </ol> |
| <p><b>委員五</b></p> <p>5. P40 頁提到「...持續性釋出 60kg/d 之定濃度污染...」，設定每天 60 公斤污染物釋出是否偏高請再確認，回顧期中報告其設定污染物濃度 60mg/L。</p> <p>6. 利用量子概念進行污染溯源是相當前瞻之作法，若要引入土壤與地下水領域，建議宜再「結論與建議」提出量子模擬污染溯源可能面臨的問題及未來可修正的方向。</p> | <p>感謝委員意見：</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. P40 相關內容已修正。</li> <li>2. 已於結論與建議小節新增委員之建議。</li> </ol>                                                                                                |
| <p><b>委員六</b></p> <p>1. 本計畫初始設定之環境條件較為理想且保守，建議可以擇 1 處污染場址試運算，檢視模式運算結果與實際污染區域之準確度。</p> <p>2. 本國未有量子電腦可供運算，需租用國外之量子電腦做運算，雖本計畫之目的為將量子電腦運算技術引入土壤及地下水領域中，惟後續可評估其成本效益分析。</p>                           | <p>感謝委員意見：</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. 由於國內外皆仍未有類似技術，因此本計畫主要目的為技術與工作流程之建置，並將該技術應用至污染場址為後續精進之目標。</li> <li>2. 已於結論與建議小節新增委員之建議。</li> </ol>                                                    |



# 行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☐構想書 ☐申請計畫書 ☒期中報告

☐修正計畫書 ☐期末報告

## 審查意見回覆對照表

| 計畫年度                                                                                                                                                                                                                                        | 111 年度                                                                                         | 計畫類型                                                                                                                                                         | <input type="checkbox"/> 先導型 <input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 計畫類別                                                                                                                                                                                                                                        | <input type="checkbox"/> 調查 <input checked="" type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 其他 | 主持人：倪春發 NO：C6                                                                                                                                                |                                                                                                   |
| 計畫名稱                                                                                                                                                                                                                                        | 建置應用量子電腦進行污染溯源之技術                                                                              |                                                                                                                                                              |                                                                                                   |
| 審查意見                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                | 執行單位回覆                                                                                                                                                       |                                                                                                   |
| <b>委員一</b><br>1. 整體報告成果符合預期工作進度。<br>2. 建議應針對研究成果與實場驗證及未來應用規劃多做說明。                                                                                                                                                                           |                                                                                                | 感謝委員意見。本期計畫僅規劃以理想案例進行技術試驗，並未規劃實場驗證，接續將持續執行成果以與預期進度相符。                                                                                                        |                                                                                                   |
| <b>委員二</b><br>1. 請以預定進度及查核點說明期中報告達成狀況。<br>2. 建議系統性說明研究設計與執行流程，如何驗證律定。<br>3. 請彙整說明模擬案例之基本資料，結果雖呈現在一系列圖，然而請彙整說明各個參數條件變化所模擬之結果意義。例如以 16 口監測井模擬污染以熱區中心推估點源位置誤差量為 $\pm 1$ 個網格之大小，誤差距離為 0~0.5657 公尺，如何驗證，後續如何應用？請說明，且彙整結果意義。<br>4. 請提出後續規劃如何執行工作。 |                                                                                                | 感謝委員意見，以下回覆：<br>1. 依照第六章之預定進度表，期中完成進度為 55%，期末完成進度為 100%，僅剩國際研討會與學術期刊論文仍撰寫中。<br>2. 已於期末報告第三章節整理並說明計畫整體流程。<br>3. 已於期末報告 4.2 小節修改成果。<br>4. 已於期末報告第五章節提出結論與後續建議。 |                                                                                                   |
| <b>委員三</b><br>1. 請簡述本案所使用之模擬參數之設定依據為何？<br>2. P. 40 顯示「錯誤！尚未定義書籤」，應為內文連結設置錯誤，請修正。<br>3. P. 46 計畫工作甘特圖，建議以實際執行年月(111.9.1-112.8.31)撰寫，以利查核。<br>4. 請將期末預定查核點項目「投稿國際期刊」，納入甘特圖工作項目中並規劃預定完成期程。                                                     |                                                                                                | 感謝委員意見，以下為回覆：<br>1. 由於本計畫僅使用理想案例，除 K 值參考 Freeze and Cherry (1979) 設置外，其餘皆本單位於理論範圍內自行測試並設置。<br>2. 已修正。<br>3. 已修正。<br>4. 已修正。                                  |                                                                                                   |



|                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                   |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <p>委員四</p> <p>1. P. 37 中所使用之理想案例之假設:地質材料為均質、污染物為保守性物質其密度與水相同，在真實污染場地恐無如此理想狀態。</p>                                                                                                                                                                                                                       | <p>感謝委員意見。本期計畫目的為建置技術，因此僅規劃以理想案例進行試驗，後續規劃才會考慮實際狀況。</p>                                            |
| <p>委員五</p> <p>1. 本計畫退火演算包含傳統模擬退火法與量子退火法，建議結果討論中仍須加註清楚兩者標題。例如 P. 37 頁本計畫期中報告結果與討論主要是表達「模擬退火演算」的計算結果，在 4.1 測試案例標題或內文建議應標示討論主題。</p> <p>2. P. 40 頁最後一行出現「錯誤找不到參照來源」等字眼，請修正。</p> <p>3. P. 40 頁圖 25 之單次退火降溫過程標示迴圈次數是否與迭代數(iteration number)相同請補充說明？</p> <p>4. P. 42 頁至 P. 45 頁列有不同緩衝區的推估結果，建議列出各別緩衝區之誤差值。</p> | <p>感謝委員意見，以下為回覆：</p> <p>1. 已於期末報告第四章節修正。</p> <p>2. 已修正。</p> <p>3. 已於 4.1 章節修正。</p> <p>4. 已修正。</p> |
| <p>委員六</p> <p>1. 本計畫進度符合期中報告。</p> <p>2. 計畫目前已完成退火演算法之初步測試，接下來測試量子退火演算法，請於期末報告中比較兩種退火演算法應用於污染源推估之優缺點。</p> <p>3. 請檢附申請計畫書回覆意見對照表。</p>                                                                                                                                                                     | <p>感謝委員意見，以下為回覆：</p> <p>1. 感謝委員意見。</p> <p>2. 已於期末報告第四章進行討論。</p> <p>3. 已於期末報告中檢附。</p>              |



## 意見審查回覆對照表

行政院環境保護署「土壤及地下水污染整治基金補助研究與模場試驗專案」

☐構想書 ☐申請計畫書 ☐期中報告  
☐修正計畫書 ☐期末報告

### 審查意見回覆對照表

|                                                                     |                                                                                     |                            |                                                                                                   |
|---------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 計畫年度                                                                | 111 年度                                                                              | 計畫類型                       | <input type="checkbox"/> 先導型 <input checked="" type="checkbox"/> 研究型 <input type="checkbox"/> 模場型 |
| 計畫類別                                                                | <input type="checkbox"/> 調查 <input type="checkbox"/> 整治 <input type="checkbox"/> 其他 | 主持人：倪春發                    |                                                                                                   |
| 計畫名稱                                                                | 建置應用量子電腦進行污染溯源之技術                                                                   |                            |                                                                                                   |
| 審查意見                                                                |                                                                                     | 執行單位回覆                     |                                                                                                   |
| 目前本計畫已撰寫完成整套演算法並進行初步測試, 精報告顯示目前初步測試成果顯示收斂狀況良好, 整體進度達 20%, 符合預期執行進度。 |                                                                                     | 感謝委員意見。本計畫將持續執行成果以與預期進度相符。 |                                                                                                   |



## 一、成果績效自評

「計畫總預估數」應與計畫審查核定值相符，請執行單位依實際達成之量化成果填寫於欄位中。

### (一) 學術面

| 目標達成程度<br>項目                         |                  |                  | 申請<br>預估數 | 期中<br>達成數 | 期末<br>達成數 | 結案後半年<br>達成率 | 備註<br>(說明未達成<br>原因或學術產<br>出發表名稱) |
|--------------------------------------|------------------|------------------|-----------|-----------|-----------|--------------|----------------------------------|
| A<br>學<br>術<br>產<br>出<br>及<br>活<br>動 | 1.國內投稿<br>(篇數)   | (1)論文            |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (2)研討會論文         | 1         | 0         | 1         |              | 地質學會<br>2023 年會                  |
|                                      | 2.國外投稿<br>(篇數)   | (1)期刊論文          | 1         | 0         | 0         |              | 撰寫中                              |
|                                      |                  | (2)國際研討會<br>論文發表 | 1         | 0         | 0         |              | 撰寫中                              |
|                                      | 3.報告<br>(篇數)     | (1)技術報告          |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (2)研究報告          | 1         | 0         | 1         |              |                                  |
|                                      | 4.專著 (本數)        |                  |           |           |           |              |                                  |
|                                      | 5.辦理學術<br>會議(場數) | (1)研討/說明會        |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (2)成果發表會         |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (3)論壇            |           |           |           |              |                                  |
| 6.研發改良<br>技術(項數)                     | (1)已開發技術         |                  |           |           |           |              |                                  |
|                                      | (2)技術平台          |                  |           |           |           |              |                                  |
| B<br>人<br>才<br>培<br>育                | 7.研發人員<br>(人數)   | (1)碩士            |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (2)博士            |           |           |           |              |                                  |
|                                      | 8.研究團隊<br>(個數)   | (1)跨領域團隊         |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (2)跨機構團隊         |           |           |           |              |                                  |
|                                      |                  | (3)形成研究中<br>心    |           |           |           |              |                                  |
| (4)形成實驗室                             |                  |                  |           |           |           |              |                                  |
| 9.其他指標<br>(請自行命名)                    |                  | (請自填)            |           |           |           |              |                                  |



## (二) 產業面

| 項目 \ 目標達成程度       |                  |             | 申請<br>預估數 | 期中<br>達成數 | 期末<br>達成數 | 結案後半年<br>達成率 | 備註<br>(說明未達成原因或專利、技術轉移相關詳細資料) |
|-------------------|------------------|-------------|-----------|-----------|-----------|--------------|-------------------------------|
| A 智慧財產權           | 1.專利<br>(件數)     | 已核准         | 發明        |           |           |              |                               |
|                   |                  |             | 新型/設計     |           |           |              |                               |
|                   |                  |             | 合計        |           |           |              |                               |
|                   |                  | 申請中         | 發明        |           |           |              |                               |
|                   |                  |             | 新型/設計     |           |           |              |                               |
|                   |                  |             | 合計        |           |           |              |                               |
| B 研發技術轉移          | 2.先期技術<br>成果移轉   | 件數          |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 授權金(仟元)     |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 衍生利益金(仟元)   |           |           |           |              |                               |
|                   | 3.技術移轉<br>(專利)   | 件數          |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 授權金(仟元)     |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 衍生利益金(仟元)   |           |           |           |              |                               |
|                   | 4.技術移轉<br>(應用技術) | 件數          |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 授權金(仟元)     |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 衍生利益金(仟元)   |           |           |           |              |                               |
|                   | 5.可移轉<br>產業技術    | (1)技術(件數)   |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | (2)品種/系(件數) |           |           |           |              |                               |
| C 產學研合作           | 6.促成合作研究         | 件數          |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 金額(仟元)      |           |           |           |              |                               |
|                   | 7.促成投資           | 件數          |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 投資金額(仟元)    |           |           |           |              |                               |
|                   | 8.促成取得<br>業界科專   | 件數          |           |           |           |              |                               |
|                   |                  | 業界投資金額(仟元)  |           |           |           |              |                               |
| 9.其他指標<br>(請自行命名) |                  | (請自填)       |           |           |           |              |                               |



### (三) 政策面

| 目標達成程度            |                  |        | 申請預<br>估數 | 期中<br>達成數 | 期末<br>達成數 | 結案後半年<br>達成率 | 備註<br>(說明未達成原<br>因或其他詳細資<br>料) |
|-------------------|------------------|--------|-----------|-----------|-----------|--------------|--------------------------------|
| 項目                |                  |        |           |           |           |              |                                |
| A<br>服務<br>便民     | 1.技術服務           | 次數     |           |           |           |              |                                |
|                   |                  | 收入(仟元) |           |           |           |              |                                |
|                   | 2.諮詢服務           | 次數     |           |           |           |              |                                |
|                   |                  | 收入(仟元) |           |           |           |              |                                |
| B<br>政策<br>推動     | 3.協助政府推動<br>(件數) | (1)政策  |           |           |           |              |                                |
|                   |                  | (2)法規  |           |           |           |              |                                |
| C<br>技術<br>效益     | 4.整治技術提升(%)      |        |           |           |           |              |                                |
|                   | 5.整治成本降低(%)      |        |           |           |           |              |                                |
|                   | 6.提升能源效率(%)      |        |           |           |           |              |                                |
| 7.其他指標<br>(請自行命名) |                  | (請自填)  |           |           |           |              |                                |

### 二、請依前述學術面、產業面、政策面等預期量化成果，具體敘明研究成果對本署政策推動之助益。(200字為限)

|                                                                                                                                                                                |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>學術面(如國內外研討會、期刊投稿件數、或人才培育碩博士生說明)</b><br>本工作之學術產出為參與「中華民國地質學會與中華民國地球物理學會 112 年學術研討會研討會」發表 1 篇論文，並將本工作之成果匯集成相關報告以供後續研究參考。                                                      |
| <b>產業面(如合作研發產業、申請專利、洽談技術移轉廠商件數說明)</b><br>目前國內外相關污染場址的整治流程均依照污染源的特徵進行規劃，因此亟需污染源特徵的相關分析技術以最佳化污染的整治效率。本計畫將評估並量化量子電腦於污染源特徵分析技術上之效能，並能提供相關產業評估應用此技術最佳化污染整治政策之參考。                    |
| <b>政策面(如整治費用降低、特定污染物整治效益提升、或提供政府作為監測/管制標準、污染址管理等政策及法規研訂之參考)</b><br>本計畫能量化量子電腦於污染溯源技術上之效能，並在土水領域內帶入許多量子運算的嶄新應用(如高異質性含水層模擬、高效整治藥劑開發、整治 決策最佳化或由觀測濃度值進行污染預測等，使土水領域技術能因本計畫成果而有更多進展。 |



### 三、主要研究人力

請依照「專案主持人」、「協同主持人」、「專任人員」、「兼任人員」及「臨時工」等類別之順序分別填寫

| 類別    | 姓名  | 服務機構/系所          | 職稱    | 在本研究專案內擔任之具體工作性質、項目及範圍 | 執行期間          |
|-------|-----|------------------|-------|------------------------|---------------|
| 專案主持人 | 倪春發 | 國立中央大學<br>環境研究中心 | 教授/主任 | 控制計畫研究流程、進度、品質與執行指導    | 111/09-112/08 |
| 協同主持人 | 李唯祺 | 工業技術研究院<br>綠能所   | 研究員   | 資料蒐集、執行工作流程、撰寫成果報告     | 111/09-112/08 |

### 四、產業界資源投入表

專案執行若有與產業界合作，請執行單位依實際量化成果填寫於欄位中。

| 投入資源類別            | 數量    | 說明 |
|-------------------|-------|----|
| 1.自籌款             | 元     |    |
| 2.人力              | 人月    |    |
| 3.設備              |       |    |
| 4.其他資源<br>(請自行增列) | (請自填) |    |



## 五、階段成果報告

|                             |                                                                                                                                                                                                                                                                  |
|-----------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>階段成果亮點<br/>(限 500 字)</b> | <p>為了使用退火演算法推算污染源特徵，本工作首先以測試案例驗證流程之正確性，案例中將一區域切割成均勻大小之網格，再從網格中隨機設定 16 處監測井並使用其污染濃度數值作為真值，以利與後續工作之推估值進行比對。另外為了能降低不確定性對推估結果的影響，本工作另外使用核密度估計法(Kernel density estimation)來描述推估結果的不確定性範圍。</p> <p>目前本工作已撰寫完成整套退火演算法並進行初步測試，並已開始進行量子退火演算法之程式撰寫，測試成果顯示傳統退火演算法收斂狀況良好。</p> |
| <b>執行進度百分比</b>              | <b>100%</b>                                                                                                                                                                                                                                                      |



## 章次

|           |                           |    |
|-----------|---------------------------|----|
| 一、        | 前言 .....                  | 9  |
| 二、        | 研究目的 .....                | 11 |
| 三、        | 研究方法與過程 .....             | 23 |
| 3.1.....  | 研究進度及預期完成之工作項目（甘特圖） ..... | 24 |
| 3.2.....  | MODFLOW 模式 .....          | 25 |
| 3.3.....  | MT3D-MS 模式 .....          | 26 |
| 3.4.....  | 模擬退火演算法 .....             | 28 |
| 3.3.1.    | 梯度搜尋法 .....               | 29 |
| 3.3.2.    | 波茲曼機率函數 .....             | 29 |
| 3.5.....  | 模擬退火演算法流程 .....           | 30 |
| 3.4.1.    | 目標函數 .....                | 30 |
| 3.4.2.    | 退火演算參數 .....              | 31 |
| 3.6.....  | 推估成果不確定性分析 .....          | 32 |
| 3.7. .... | 量子退火演算法 .....             | 33 |
| 3.8.....  | QUBO 問題轉換 .....           | 35 |
| 3.9.....  | 量子運算平台 .....              | 38 |
| 四、        | 結果與討論 .....               | 40 |
| 4.1.      | 測試案例 .....                | 40 |
| 4.2.      | 推估成果 .....                | 42 |
| 4.2.1.    | 模擬退火降溫 .....              | 42 |



|                             |    |
|-----------------------------|----|
| 4.2.2. 模擬退火法反推估結果.....      | 43 |
| 4.2.3. 量子退火法反推估結果-流程一 ..... | 44 |
| 4.2.4. 量子退火法反推估結果-流程二 ..... | 45 |
| 4.2.5. 綜合比較.....            | 46 |
| 五、 結論與建議.....               | 48 |
| 六、 參考文獻.....                | 49 |
| 附件：意見審查回覆對照表.....           | 53 |



## 圖目錄

|                                                        |    |
|--------------------------------------------------------|----|
| 圖一、污染物溯源方法的分類 .....                                    | 9  |
| 圖二、應用反推估法可能會遇到的問題 .....                                | 10 |
| 圖三、DTM 與 NTM 的演算架構比較 .....                             | 11 |
| 圖四、量子電腦的發展年表 .....                                     | 12 |
| 圖五、量子電腦於 2023 年的發展與預期市場規模 .....                        | 13 |
| 圖六、我國於第 3,780 次行政院會中宣布之量子技術開發規劃 .....                  | 13 |
| 圖七、量子電路示意圖 .....                                       | 14 |
| 圖八、現有量子邏輯閘種類 .....                                     | 15 |
| 圖九、現有量子位元技術類型 .....                                    | 17 |
| 圖十、元素標準模型表 .....                                       | 20 |
| 圖十一、量子自旋示意圖 .....                                      | 20 |
| 圖十二、量子位元所用到的技術介紹 .....                                 | 21 |
| 圖十三、量子位元的機率分布範例 .....                                  | 21 |
| 圖十四、過去研究的 $K_x$ 與 $K_y$ 值之原始值(a 與 b)反推估成果(c 與 d) ..... | 22 |
| 圖十五、本工作之分析流程 .....                                     | 23 |
| 圖十六、MODFLOW 離散含水層系統示意圖 .....                           | 25 |
| 圖十七、本工作使用模擬退火演算法推測污染源特徵之工作流程 .....                     | 28 |
| 圖十八、梯度搜尋法示意圖 .....                                     | 29 |
| 圖十九、波茲曼函數之機率分布 .....                                   | 30 |
| 圖二十、模擬退火演算法流程圖 .....                                   | 31 |



|                                                                    |    |
|--------------------------------------------------------------------|----|
| 圖二十一、以 KDE 推算點資料周圍空間概率分布示意圖 .....                                  | 32 |
| 圖二十二、使用伊辛模型描述量子場自旋狀態隨著磁場的變化。 .....                                 | 34 |
| 圖二十三、使用量子退火演算法的步驟 .....                                            | 34 |
| 圖二十四、QUBO 中變數間之網路關係表示法 .....                                       | 35 |
| 圖二十五、本工作為了執行量子退火疊代所設計的兩種流程 .....                                   | 36 |
| 圖二十六、IBM 於 2020 年 6 月發布第一台商用量子電腦 IBM Q .....                       | 39 |
| 圖二十七、使用 AWS 內建 Jupyter 進行量子程式碼撰寫 .....                             | 39 |
| 圖二十八、測試案例之溶質濃度分布與監測井位置與濃度(單位： $\text{kg/m}^3$ )                    | 41 |
| 圖二十九、單次退火降溫過程 .....                                                | 42 |
| 圖三十、以傳統退火演算法推估之污染源座標位置。其中黃色點為觀測<br>點，+字號為推估位置而紅色星星為實際污染源位置。 .....  | 43 |
| 圖三十一、以量子退火演算法推估之污染源座標位置。其中黃色點為觀測<br>點，+字號為推估位置而紅色星星為實際污染源位置。 ..... | 44 |
| 圖三十二、以量子退火演算法推估之污染源座標位置。其中黃色點為觀測<br>點，+字號為推估位置而紅色星星為實際污染源位置。 ..... | 45 |



## 表目錄

|                           |    |
|---------------------------|----|
| 表一、現有量子電腦相關程式語言 .....     | 18 |
| 表二、本工作使用的退火策略參數.....      | 32 |
| 表三、 測試案例之模擬參數.....        | 40 |
| 表四、 本工作設定之決策參數數值.....     | 41 |
| 表五、本工作進行所有反推估測試之成果比較..... | 46 |



## 摘要

地下水污染源特徵(例如總量、位置和排放時間等)識別的精準程度，攸關整治策略的制定、責任歸屬與整治成本的高低。目前雖已發展有許多污染源特徵的推估與追蹤方法，但大多數僅能用於簡化模型，並在分析效率與準確性上仍有許多改進空間。相較於目前多數研究仍嘗試結合數學演算法增強推估的效能，本計劃主要目的為新技術的導入，將應用目前最新的量子計算進行污染溯源，同時評估此新技術的效能。為了達成此新技術驗證目標，本計畫將利用既有地下水數值模式產生假想例，產出數種不同的污染情境(如不同污染源數量、污染源分布、降雨或地質條件等變化)的案例。假想例中的點位觀測資料，將分別利用量子運算與傳統反推估法對模擬區域中的污染源特徵進行反推估。最後本工作將所有反推估結果進行量化與比較，並評估應用量子運算的污染溯源技術在不同情境下的效能。由於本計畫為將量子運算技術引入至土壤地下水領域的嘗試，希望未來能有許多量子運算的嶄新應用(如高異質性含水層模擬、高效整治藥劑開發、整治決策最佳化或由觀測濃度值進行污染預測等)能因本計畫的成果而有更多進展。



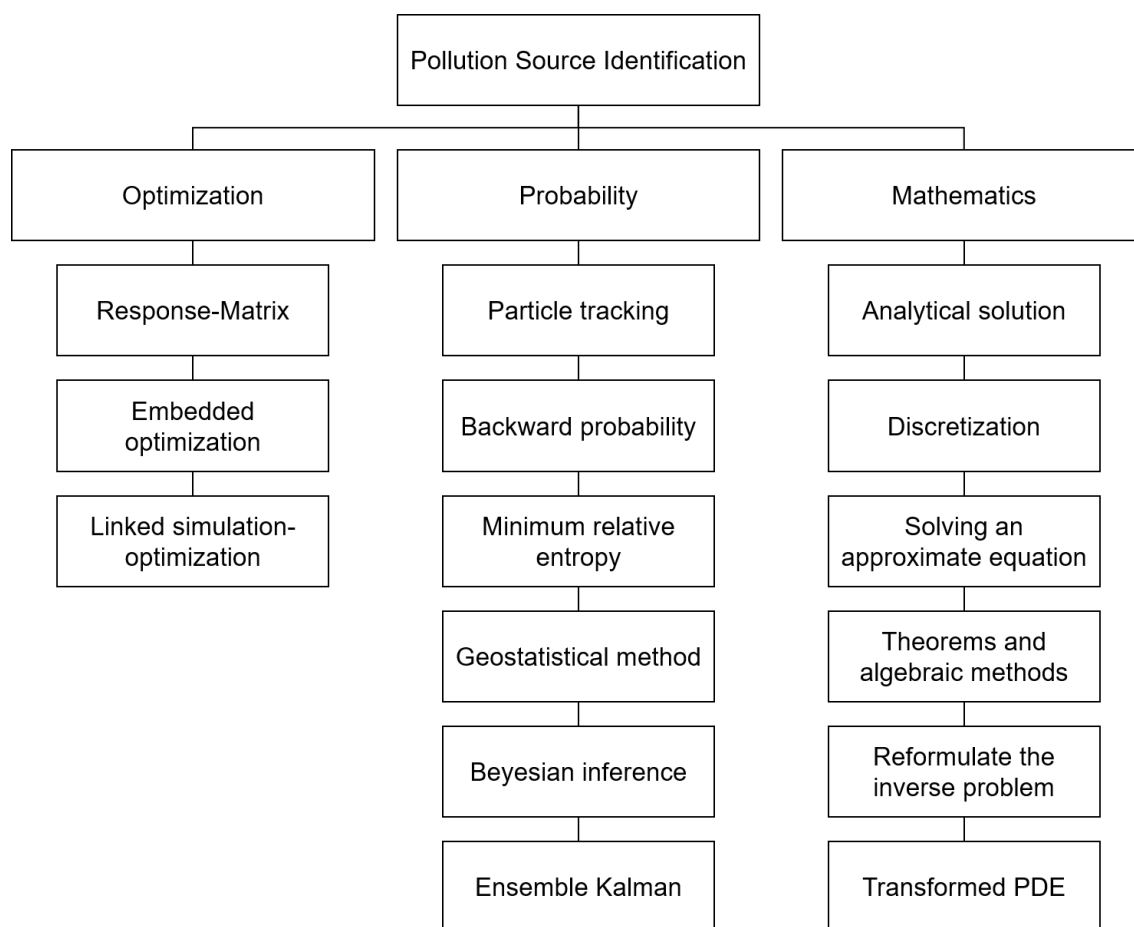
## Abstract

The accuracy of identifying groundwater contamination sources and transport characteristics (such as quantity, location, and released history) has significantly influenced remediation strategies, identifications of responsibilities, and budgets for remediation. There are numerous methods developed for characterizing contamination sources. However, most methods are available for simplified cases, and their efficiency and accuracy are under development. The study aims to develop and evaluate cutting-edge technology, quantum computing (QC), for source-tracking in soil and groundwater contamination. To achieve the research goal, this study employs traditional groundwater numerical models (MODFLOW and MT3D) to generate synthetic cases with several scenarios (such as different numbers or spatial distribution of pollution sources and precipitations or geological conditions). In addition, both QC and traditional inverse methods will be employed to estimate the characteristics of pollution sources. Finally, the study will evaluate the performance of QC on the source tracking with all of the results. This work is the first to introduce the QC for groundwater remediation tasks. The results are expected to extend the applications in the fields of soil and groundwater remediation for cases with highly heterogeneous aquifers and complex transport behavior.



## 一、前言

對於地下水污染源特徵(例如數量、位置和釋放歷史)識別的精準程度，攸關整治策略的制定、責任歸屬與整治成本的高低 (Hwang et al., 2022)。但現實中多半僅能調查污染濃度的時空分布，並無法得知污染源的特徵(Sun et al., 2006)。為了改善整治的效率，發展有效推估污染源特徵的方法是多年來被關注的課題之一 (Sun, 2013)。Moghaddam et al. (2021) 指出目前推估污染源特徵的方法，大致可分為最佳化法 (Optimization)、機率法 (Probability-based method) 以及數學方法 (Mathematic-based method) 三種，列如圖一所示。



圖一、污染物溯源方法的分類

(Moghaddam et al., 2021)

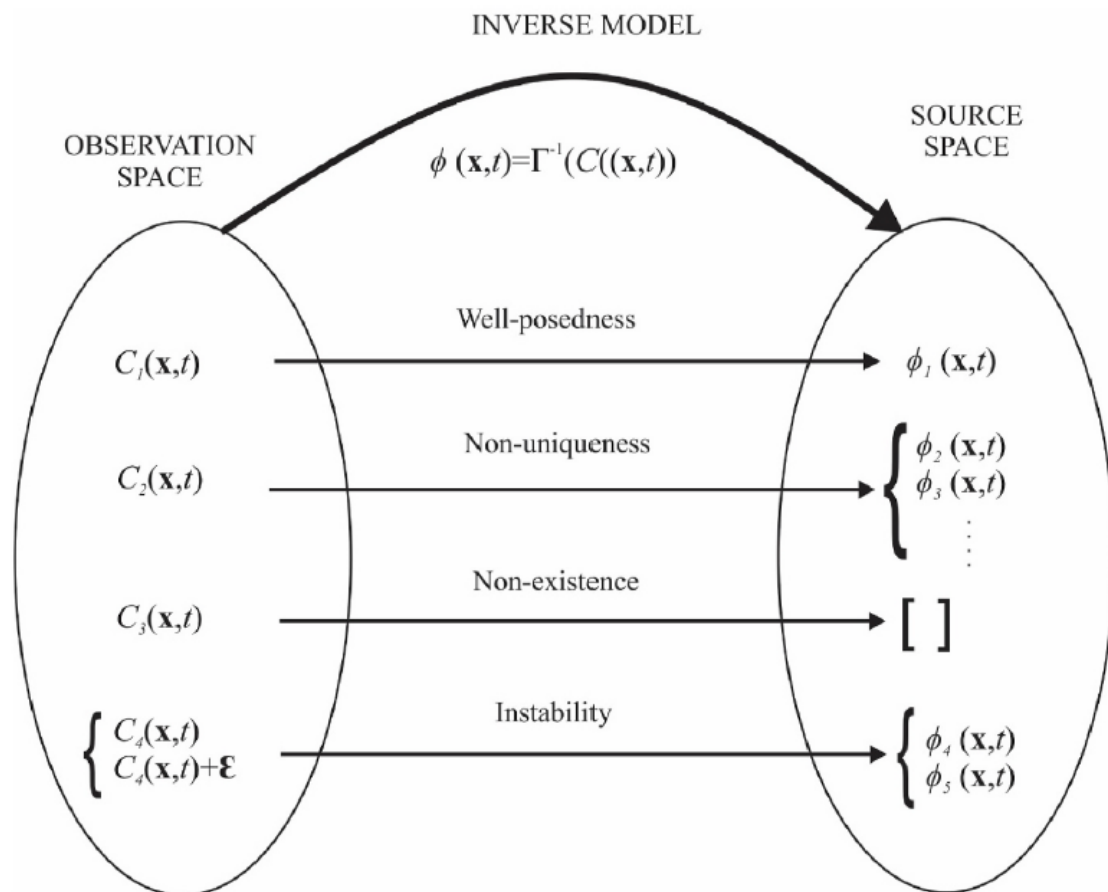
在這些方法中，最佳化法是被廣泛使用的方法之一 (Ayvaz, 2010)。最佳化方法採用了目標函數的絕對誤差作為溯源結果評價指標、結合數值模型的輸出與觀測結果去定義最佳的污染源位置、濃度等變數。其中目標函數可表示為：

$$f = \min \left( \sum_{t=1}^T \sum_{i=1}^N (|C_{\text{Cal}}^{i,t} - C_{\text{Obs}}^{i,t}|) \right), i = 1, 2, \dots, N, t = 1, 2, \dots, T \quad (1)$$

其中  $C_{\text{Cal}}^{i,t}$  為第  $t$  個時刻觀測點  $i$  的計算濃度， $C_{\text{Obs}}^{i,t}$  為第  $t$  個時刻觀測點  $i$  的觀測濃度。



然而如圖二所示，由於非線性(Nonlinear)、不適定性(Ill-posedness)和非凸解(Nonconvex)的問題，利用最佳化法時可能會遇到困難 (Moghaddam et al., 2021)。過去有許多研究嘗試將最佳化法與其他演算法結合，以提升找尋最佳解的能力，如啟發式演算法 (Heuristic Algorithm)、遺傳演算法 (Genetic Algorithm)、類神經網絡 (Artificial Neural Network) 或退火演算法 (Simulated Annealing) 等 (Habiyakare et al., 2022; Singh et al., 2004; Yeh et al., 2014; Chakraborty and Prakash, 2020)。上述方法已能一定程度地增強最佳化法的效能，但大部分方法僅能用於簡化模型，並在計算效率與準確性上仍有許多發展空間，因此目前多數研究仍致力於尋找改進最佳化法計算效率與準確性的方法 (Hwang et al., 2022; Moghaddam et al., 2021)。



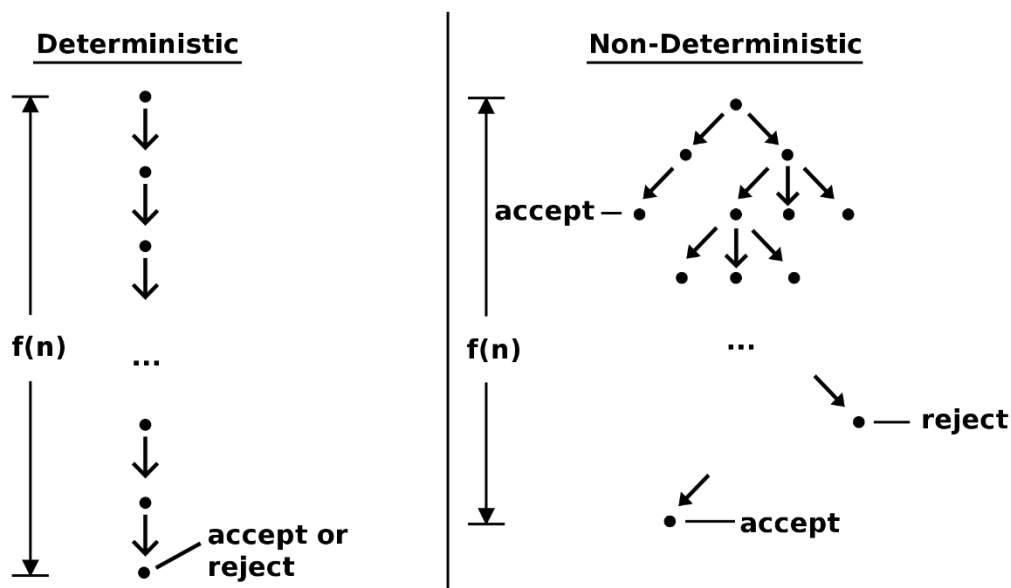
圖二、應用反推估法可能會遇到的問題

(Moghaddam et al., 2021)



## 二、研究目的

以應用電腦解決問題的邏輯而言，目前傳統位元的運算仍以 Deterministic Turing Machine (DTM)為主，演算架構如圖三所示。其定義為給予電腦一個狀態與訊號，下一步運算結果只會出現一種可能。因此傳統電腦會依照當下特定的狀態與訊號決定下一步的動作。但是量子電腦所使用的 Non-Deterministic Turing Machine (NTM)架構並不適用於此邏輯。對於量子電腦而言，當下輸入的狀態或訊號的下一步可能會出現很多種可能，理論上此種架構讓電腦能同時處理無限多組問題。只要計算過程中有任一組到達要求，便可當作問題求解完成並停止計算，由於此平行計算的功能，NTM 的計算速度理論上遠超過 DTM (Sarkar et al., 2022)。



圖三、DTM 與 NTM 的演算架構比較

([https://en.wikipedia.org/wiki/Nondeterministic\\_Turing\\_machine](https://en.wikipedia.org/wiki/Nondeterministic_Turing_machine))

除了演算架構超過傳統電腦外，量子電腦能解決的問題複雜度亦遠高於傳統電腦。目前電腦計算領域多以符號  $O$  定義任一計算問題的複雜度，所需計算量則標記為  $O(N)$ ，其中  $N$  為計算元素量 (Ugwisshiwu et al., 2021)。若一問題複雜度表示為  $O(N \cdot 2^N)$ ，在應用 100 個元素解題的狀況下，所需計算量為  $100 \cdot 2^{100}$ ，若有一台電腦每秒計算速度為  $2^{50}$ ，所需計算時間便為  $100 \cdot 2^{50}$  秒。由於目前最快的超級電腦(美國橡樹嶺國家實驗室的 FRONTIER HPE CRAY EX235A) 每秒能處理的資料量約在  $2^{64}$  左右(每秒 1,685.65 兆浮點運算數 Tera Floating-Point Operations per second, TFLOPs)，因此定義當計算量未到次方級時，其所需計算量為 polynomial time。有了此定義後，便能用以判斷問題與演算法的複雜度。若在 DTM 架構下，任一問題或演算法所需計算時間為 polynomial time，那這類演算法或問題被稱為 P 問題。相同情況在 NTM 架構下便稱為 NP 問題。NP 問題複雜度遠高於 P 問題，



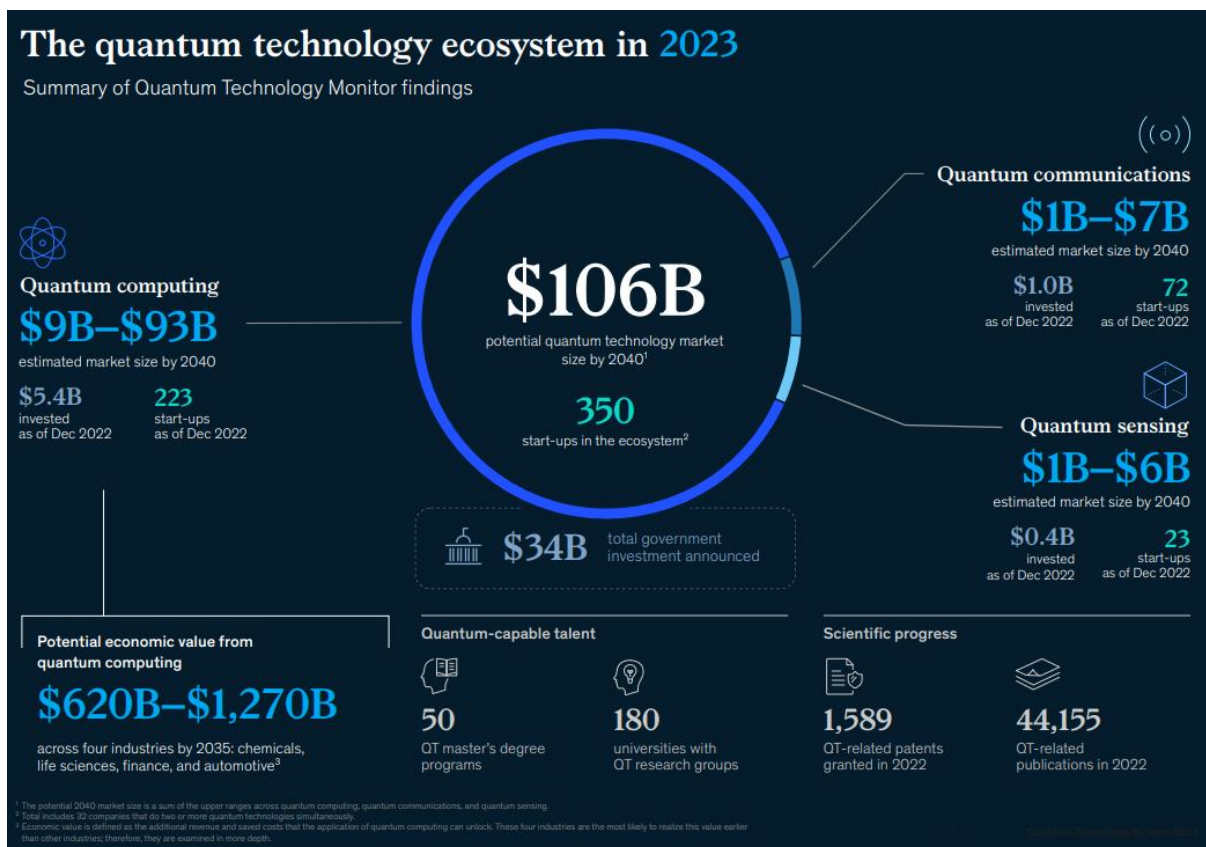
因此目前世界主流的加密方法(如 RSA 加密)皆為 NP 問題。量子電腦的目標便為將 NP 問題簡化為跟 P 問題等價。

由於量子電腦理論上的計算速度遠高於傳統電腦，因此自 1980 年代便開始有了發展量子電腦的想法如圖四。IBM(2022)推測自 2030 年後，量子電腦便能開始改寫目前的規則。根據麥肯錫顧問公司於 2023 年四月的調查結果(Mckinsey & Company, 2023)如圖五，目前全球已有 223 家公司 (如 D-Wave、Microsoft、IBM 或 Google )、57 個國家與 176 個團隊投入量子電腦的技術開發，全球投資總金額達到約 340 億美元，並有許多領域(如物流、醫學或機器學習)投入量子運算的應用 (Hassija et al., 2020)，2040 的市場規模達到 930 億美元。量子電腦亦能協助各領域的減碳技術發展，根據麥肯錫顧問公司在 2022 年的報告(Cooper et al., 2022)，預計在 2035 年後，量子電腦能協助減少每年 70 億噸的減碳量。為了趕上此趨勢，台灣在 2021 年 12 月第 3,780 次行政院會中宣布投入五年 80 億元以成立量子國家隊，希望能整合多間大學、研究機構與民間廠商的能量，以進行量子領域相關技術列如圖六的發展。

|      |                                                                                                                                                           |
|------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1980 | Paul Benioff suggests quantum mechanics could be used for computation.                                                                                    |
| 1981 | Term "Quantum Computer" coined by Nobel-winning physicist Richard Feynman.                                                                                |
| 1985 | David Deutsch formulated a blueprint of quantum computers called <b>Quantum Turing Machine</b> .                                                          |
| 1992 | Deutsch-Jozsa algorithm, one of the first examples of quantum algorithm exponentially faster than any possible deterministic classic algorithm, proposed. |
| 1994 | Shor's algorithm, which can break widely used encryption forms was proposed.                                                                              |
| 1996 | Grover's algorithm, a quantum search algorithm offers a quadratic speedup over classical computers.                                                       |
| 2007 | D-Wave, a startup announces a quantum computing chip that it claims can solve Sudoku Puzzles.                                                             |
| 2008 | HHL Algorithm, solving linear systems and provided speedup over classical counterparts.                                                                   |
| 2009 | Yale, created first solid-state quantum processor, a <b>2-qubit superconducting chip</b> .                                                                |
| 2011 | The first commercially available quantum computer is offered by D-Wave Systems.                                                                           |
| 2012 | 1QB Information Technologies (1QBit), the first dedicated quantum computing software company is founded.                                                  |
| 2013 | Google teams up with NASA to fund a lab to try out D-Wave's hardware.                                                                                     |
| 2015 | NASA publicly displayed the world's first fully operational quantum computer, D-Wave Systems.                                                             |
| 2016 | IBM Research announced it is making quantum computing publicly accessible via cloud.                                                                      |
| 2017 | IBM unveils <b>17-qubit quantum</b> computer.                                                                                                             |
| 2018 | Google announces 72-bit quantum chip called Bristlecone.                                                                                                  |
| 2019 | IBM launches first 2-qubit commercial quantum computer (Q System One). IBM Announces 53-qubit quantum computer.                                           |
| 2020 | Amazon Braket, AWS Cloud Quantum Computing Service launched.                                                                                              |
| 2021 | Honeywell Quantum Solutions: The System Model H1 became the first Quantum Model achieving 1024 <b>Quantum Volume</b> .                                    |
| 2022 | IBM unveiled 127-qubit Eagle processor. Quantinuum Announces Quantum Volume 4096 Achievement.                                                             |

圖四、量子電腦的發展年表

(Rassool et al., 2023)



圖五、量子電腦於2023年的發展與預期市場規模

(Mckinsey & Company, 2023)



圖六、我國於第3,780次行政院會中宣布之量子技術開發規劃

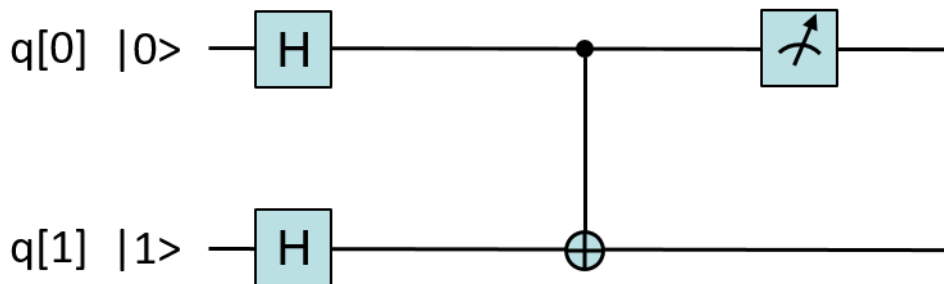
(第 3,780 次行政院會簡報)



除了硬體技術發展外，目前已有許多程式碼或套件能用於撰寫量子電腦程式，如 IBM 的 Qiskit 或是 Google 的 Cirq 等，現有計畫列如表一。這些量子程式數量繁多，但依撰寫類型，大致可分為量子電路閘門模型(Quantum Circuit Gate Model)以及絕熱量子運算模型(Adiabatic Quantum Computation Model)兩種，分述如下：

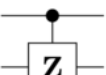
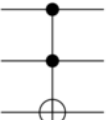
#### (1) 量子電路閘門模型：

傳統電腦中，每條電路上的每個傳統位元(Bit)皆具備有邏輯閘(logic gate)的能力。當位元為通電狀態時，代表邏輯為 1；而斷電時則代表邏輯為 0。由於量子效應，量子電路模型中將邏輯視為 0 與 1 的矩陣，其表示為 $|0\rangle$ 與 $|1\rangle$ ，如圖七。量子電路由線路、邏輯閘與量子位元資訊組成，其操作如同傳統電路，可利用量子閘進行矩陣操作以改變量子位元的疊加態。量子電路有許多邏輯閘可供操作，如 X 閘、Y 閘或 H 閘等，各閘門意義列如圖八所示。將邏輯閘組起後便能稱為量子電路，圖七即表示為基本的量子電路。該電路由兩個量子位元(q[0]與 q[1])所組成，其初始狀態分別為 $|0\rangle$ 與 $|1\rangle$ 。線路代表為程式隨時間執行的邏輯順序，往右時間增加。依照圖七，本電路首先經過 H 閘進行 Hadamard 轉換，因此 $|0\rangle$ (寫作 $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ )與 $|1\rangle$ (寫作 $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ )便分別乘上 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$ 而成為 $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} |0\rangle+|1\rangle \\ |0\rangle-|1\rangle \end{pmatrix}$ 的疊加狀態。接著使用的 CNOT 閘便是使兩疊加狀態的量子位元進行糾纏，使其成為倆互相糾纏的量子位元，最後的輸出閘為將結果輸出的(Output gate)，可顯示經過此電路的量子位元，其結果依機率將為[00]、[01]、[10]或[11]其中一種。



圖七、量子電路示意圖



| Operator                   | Gate(s)                                                                                                                                                                 | Matrix                                                                                                                                                                                                                                                                                               |
|----------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Pauli-X (X)                |       | $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                                                                       |
| Pauli-Y (Y)                |                                                                                        | $\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Pauli-Z (Z)                |                                                                                        | $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                                                                      |
| Hadamard (H)               |                                                                                        | $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                                                   |
| Phase (S, P)               |                                                                                        | $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                                                                       |
| $\pi/8$ (T)                |                                                                                        | $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                                                              |
| Controlled Not (CNOT, CX)  |                                                                                        | $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                     |
| Controlled Z (CZ)          |     | $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                    |
| SWAP                       |   | $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$                                                                                                                                                                                                     |
| Toffoli (CCNOT, CCX, TOFF) |                                                                                      | $\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$ |

圖八、現有量子邏輯閘種類

(https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\_logic\_gate)



## (2) 絕熱量子計算：

絕熱量子運算與量子退火息息相關。其表示為量子位元在絕熱系統(系統未與外界進行能量交換)中的哈密頓量(Hamilton, 系統的總能量)與量子態 $|\Psi(t)\rangle$ 變化，其變化能使用薛丁格方程式(Schrödinger equation)如式(2)進行解釋(Grant, 2020)。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{H}(t) |\Psi(t)\rangle \quad (2)$$

其中 $\hat{H}(t)$ 為哈密頓量的變化情形。基於式(2)，量子退火便能將計算拆解為從初始哈密頓量到最終哈密頓量的連續變換過程，其最小值便為退火演算找到的解。

確認運算模型後，由於量子運算以量子位元(Qubit)為基本單位，因此須了解與量子位元的相關技術。現有的量子位元可分為五種類型(Popkin, 2016)，分別為超導量子線路、離子阱、矽量子點、拓樸系統與晶體空缺，各類型之代表公司如圖九所示，描述如下：

- (1) 超導量子線路(Superconducting loops): 將超導材料線路冷卻至接近絕對零度，電流便能在沒有阻抗的情況下流動。此時迴圈中的電流會因量子作用(包含能階量子化、疊加與糾纏等作用)而具有量子效應，並使用瑟夫森結 (Josephson junction)進行電子相位的調整。約瑟夫森結為兩層超導體線路中間所參入的弱絕緣層，對於此絕緣層，電子僅能透過量子穿隧效應通過，並在電路中形成非線性電感 (non-linear inductance)，以改變電流相位(也可以改變電荷或通量)。代表公司有 Google 與 IBM。
- (2) 離子阱(Trapped ions): 利用電場或磁場將帶電離子(目前常選用鈣 43)捕獲並囚禁在一定經過超冷處理的真空範圍內。便能利用電極或電場，將離子的能階進行量子化處理，接著便能利用能階的轉換作為量子位元。代表公司有 IonQ 與 Honeywell。
- (3) 矽量子點(Silicon quantum dots): 利用三維的半導體奈米結構以及外加磁場等外場作用，將電子束縛在結構中，便能以磁場操控其自旋態。此結構縫隙設計小於一半的電子波長，因此電子無法以穿隧效應(Tunneling effect)逃脫。早期的量子點結構多使用砷化鎵晶體進行建構，目前以矽為主，並由於其具備發光穩定的特性，另外發展有量子電視等應用。代表公司有 IBM 與 Intel。
- (4) 拓樸量子位元(Topological qubits)為利用準粒子(quasi-particle)的拓樸保護(topological protection) 性質建立的量子電腦，主要應用二維空間的不同準粒子在三維時空中的運動軌跡(稱為世界線, worldline)，在時空中互相交錯後產生的辮子(braids)拓樸形式作為邏輯閘。拓樸量子位元的好處為量子

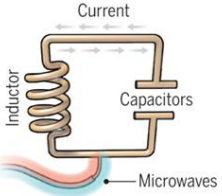
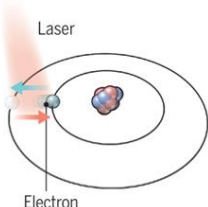
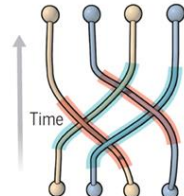
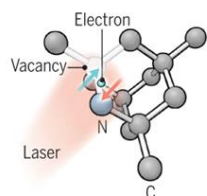


位元拓撲性質不會因環境擾動而變化，因此能比其他結構更加穩定。但拓撲量子位元的壞處為難以在現實中實現。代表公司有 Bell Lab 與 Microsoft，但目前發展仍存在於理論階段。

- (5) 晶體空缺(Diamond vacancies)：氮空缺 (nitrogen-vacancy, NV)為氮取代晶格中原本的碳原子造成的現象，為鑽石晶格中常見的雜質缺陷。在此晶格中，由於氮比碳多出一個電子，因此能用於束縛電子，並將其用作量子位元使用。選用鑽石晶體空缺的原因為氮空缺能容易地使用 EPR (Electron Paramagnetic Resonance)進行讀取，為目前唯一能在室溫底下操作的量子計算技術。代表公司有美國的 QDTI (Quantum Diamond Technologies Inc)。

### A bit of the action

In the race to build a quantum computer, companies are pursuing many types of quantum bits, or qubits, each with its own strengths and weaknesses.

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <b>Superconducting loops</b><br>A resistance-free current oscillates back and forth around a circuit loop. An injected microwave signal excites the current into superposition states.<br><b>Longevity (seconds)</b><br>0.00005<br><b>Logic success rate</b><br>99.4%<br><b>Number entangled</b><br>9<br><b>Company support</b><br>Google, IBM, Quantum Circuits<br><b>Pros</b><br>Fast working. Build on existing semiconductor industry.<br><b>Cons</b><br>Collapse easily and must be kept cold. | <b>Trapped ions</b><br>Electrically charged atoms, or ions, have quantum energies that depend on the location of electrons. Tuned lasers cool and trap the ions, and put them in superposition states.<br><b>Longevity (seconds)</b><br>>1000<br><b>Logic success rate</b><br>99.9%<br><b>Number entangled</b><br>14<br><b>Company support</b><br>ionQ<br><b>Pros</b><br>Very stable. Highest achieved gate fidelities.<br><b>Cons</b><br>Slow operation. Many lasers are needed. | <b>Silicon quantum dots</b><br>These "artificial atoms" are made by adding an electron to a small piece of pure silicon. Microwaves control the electron's quantum state.<br><b>Longevity (seconds)</b><br>0.03<br><b>Logic success rate</b><br>~99%<br><b>Number entangled</b><br>2<br><b>Company support</b><br>Intel<br><b>Pros</b><br>Stable. Build on existing semiconductor industry.<br><b>Cons</b><br>Only a few entangled. Must be kept cold. | <b>Topological qubits</b><br>Quasiparticles can be seen in the behavior of electrons channeled through semiconductor structures. Their braided paths can encode quantum information.<br><b>Longevity (seconds)</b><br>N/A<br><b>Logic success rate</b><br>N/A<br><b>Number entangled</b><br>N/A<br><b>Company support</b><br>Microsoft, Bell Labs<br><b>Pros</b><br>Greatly reduce errors.<br><b>Cons</b><br>Existence not yet confirmed. | <b>Diamond vacancies</b><br>A nitrogen atom and a vacancy add an electron to a diamond lattice. Its quantum spin state, along with those of nearby carbon nuclei, can be controlled with light.<br><b>Longevity (seconds)</b><br>10<br><b>Logic success rate</b><br>99.2%<br><b>Number entangled</b><br>6<br><b>Company support</b><br>Quantum Diamond Technologies<br><b>Pros</b><br>Can operate at room temperature.<br><b>Cons</b><br>Difficult to entangle. |

**Note:** Longevity is the record coherence time for a single qubit superposition state, logic success rate is the highest reported gate fidelity for logic operations on two qubits, and number entangled is the maximum number of qubits entangled and capable of performing two-qubit operations.

## 圖九、現有量子位元技術類型

(Popkin, 2016)



表一、現有量子電腦相關程式語言  
(Ivancova et al., 2020)

| 計畫名稱              | 語言                           | 描述                                                   |
|-------------------|------------------------------|------------------------------------------------------|
| Cirq              | Python                       | 中型嘈雜量子(Noise Intermediate Scale Quantum, NISQ)程式撰寫   |
| Clioffords.ji     | Julia                        | Cliofford 量子電路程式碼的 Julia 函式庫                         |
| Dimod             | Python                       | D-wave 用程式碼                                          |
| Dwave-system      | Python                       | D-wave 介接量子電腦用 API                                   |
| Fermilib          | Python                       | 用以測試費米子量子電腦(Fermionic quantum simulation)            |
| Forest            | Python                       | 用以撰寫傳統電腦與量子電腦的混合(Hybrid)程式                           |
| OpenFermion       | Python                       | 用以測試費米子量子電腦(Fermionic quantum simulation)            |
| ProjectQ          | Python, C++                  | 開源量子電路門程式碼                                           |
| PyZX              | Python                       | 量子電路門程式碼的 Python 函式庫                                 |
| QGL.ji            | Julia                        | 量子電路門程式碼的 Julia 函式庫                                  |
| Qbsolv            | C                            | QUBO(Quadratic Unconstrained Binary Optimization)函式庫 |
| Qiskit            | Python, C++                  | Google 量子電腦用程式                                       |
| Qiskit.js         | JavaScript                   | Google 量子電腦的 JavaScript 函式庫                          |
| Qrack             | C++                          | 結合 GPU 與量子電腦                                         |
| Quantum Fog       | Python                       | 貝葉斯網路(Bayesian network)問題的 Python 函式庫                |
| Quantum++         | Python, C++                  | 量子電腦的 C++函式庫                                         |
| Qubiter           | Python, C++                  | 量子電路程式碼的 Python 函式庫                                  |
| Quirk             | JavaScript                   | 量子電路程式碼的 JavaScript 函式庫                              |
| Reference-qvm     | Python                       | 虛擬量子電腦的 Python 函式庫                                   |
| ScaffCC           | C++,<br>Objective C,<br>LLVM | Cliofford 量子電路程式碼                                    |
| Strawberry Fields | Python                       | 量子光學電路程式碼                                            |
| XACC              | C++                          | 混合量子電腦與傳統電腦的計算架構                                     |
| XACCVQF           | C++                          | 用於變分量子特徵(Variational Quantum Eigensolver)的 CVACC 套件  |



建造量子位元後，便能利用量子力學中量子疊加 (Superposition)、量子糾纏 (Entanglement) 與量子干涉 (Quantum Interference) 等現象進行資料處理。各技術描述如下 (Hidary and Hidary, 2021)：

- (1) 量子：將物體切割至最小不可分割單位後，該單位即稱為量子。目前不可分割的粒子列如圖十，其中因自旋數區分有夸克、輕子、規範玻色子和希格斯玻色子等四大類型。
- (2) 量子自旋：與傳統位元相同，量子位元在使用前必須先定義「0」與「1」。目前使用量子位元的自旋態作為定義，逆時針為 1 而順時針為 0，如圖十一所示。量子自旋量為粒子本身性質之一，粒子本身並未旋轉。
- (3) 量子疊加：與傳統位元 (Classical Bit) 相比，傳統位元僅有 0 和 1 兩種狀態，但量子位元由於狀態可表示為式(3)，能容許多種不同狀態的 0 與 1 同時存在，表示如圖十二。

$$|\psi\rangle = \cos\theta |0\rangle + \sin\theta e^{i\varphi} |1\rangle \quad (3)$$

其中  $\theta$  與  $\varphi$  為與機率相關的複數係數，並以繪於 Bloch sphere 面上的三維向量  $\vec{a} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta)$  表示量子位元狀態，如圖十三所示。

- (4) 量子纏繞：完成一個量子位元後，為了擴大量子電腦的規模，需將兩個量子位元放一起，並使用雷射使兩者調整到同一自旋態。當兩者同時調到同樣的自旋態後，兩個量子位元間便有纏繞(兩者共稱為 Coupler 量子對)：當其中一個位元的狀態改變，另一個也會跟著改變，調整過程繪如圖十二。
- (5) 量子干涉：由於每個量子位元出現特定組合為哈密頓場的機率波問題，如圖十三。為了使最後跑出的成果能受演算法限制，則需使用相對應的機率波進行干涉：讓想要的答案因為波型相同而使出現的機率增加，相反地不想要的答案亦能因波形相反而減少出現機率。使計算結果終於能為人所控制。



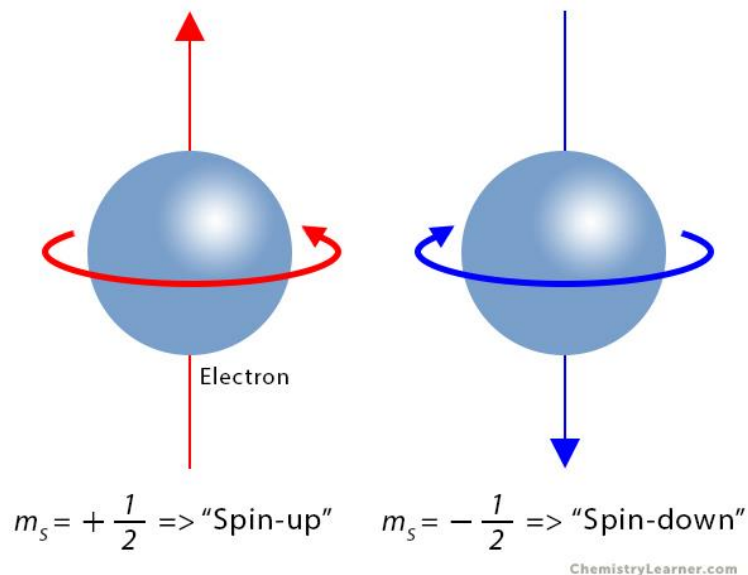
|                |                                           |                                       |                                      |                         |                         |
|----------------|-------------------------------------------|---------------------------------------|--------------------------------------|-------------------------|-------------------------|
| mass →         | ≈2.3 MeV/c <sup>2</sup>                   | ≈1.275 GeV/c <sup>2</sup>             | ≈173.07 GeV/c <sup>2</sup>           | 0                       | ≈126 GeV/c <sup>2</sup> |
| charge →       | 2/3                                       | 2/3                                   | 2/3                                  | 0                       | 0                       |
| spin →         | 1/2                                       | 1/2                                   | 1/2                                  | 1                       | 0                       |
|                | <b>u</b><br>up                            | <b>c</b><br>charm                     | <b>t</b><br>top                      | <b>g</b><br>gluon       | <b>H</b><br>Higgs boson |
| <b>QUARKS</b>  | ≈4.8 MeV/c <sup>2</sup>                   | ≈95 MeV/c <sup>2</sup>                | ≈4.18 GeV/c <sup>2</sup>             | 0                       |                         |
|                | -1/3                                      | -1/3                                  | -1/3                                 | 0                       |                         |
|                | 1/2                                       | 1/2                                   | 1/2                                  | 1                       |                         |
|                | <b>d</b><br>down                          | <b>s</b><br>strange                   | <b>b</b><br>bottom                   | <b>γ</b><br>photon      |                         |
|                | 0.511 MeV/c <sup>2</sup>                  | 105.7 MeV/c <sup>2</sup>              | 1.777 GeV/c <sup>2</sup>             | 91.2 GeV/c <sup>2</sup> |                         |
|                | -1                                        | -1                                    | -1                                   | 0                       |                         |
|                | 1/2                                       | 1/2                                   | 1/2                                  | 1                       |                         |
|                | <b>e</b><br>electron                      | <b>μ</b><br>muon                      | <b>τ</b><br>tau                      | <b>Z</b><br>Z boson     |                         |
| <b>LEPTONS</b> | <2.2 eV/c <sup>2</sup>                    | <0.17 MeV/c <sup>2</sup>              | <15.5 MeV/c <sup>2</sup>             | 80.4 GeV/c <sup>2</sup> |                         |
|                | 0                                         | 0                                     | 0                                    | ±1                      |                         |
|                | 1/2                                       | 1/2                                   | 1/2                                  | 1                       |                         |
|                | <b>ν<sub>e</sub></b><br>electron neutrino | <b>ν<sub>μ</sub></b><br>muon neutrino | <b>ν<sub>τ</sub></b><br>tau neutrino | <b>W</b><br>W boson     |                         |
|                |                                           |                                       |                                      |                         | <b>GAUGE BOSONS</b>     |

圖十、元素標準模型表

([https://en.wikipedia.org/wiki/Standard\\_Model](https://en.wikipedia.org/wiki/Standard_Model))

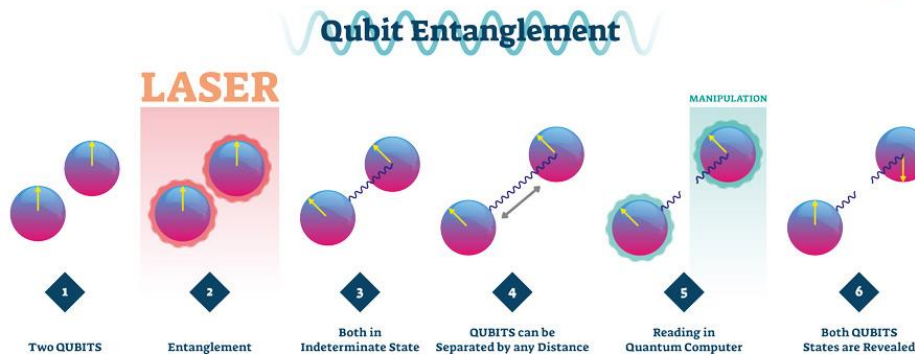
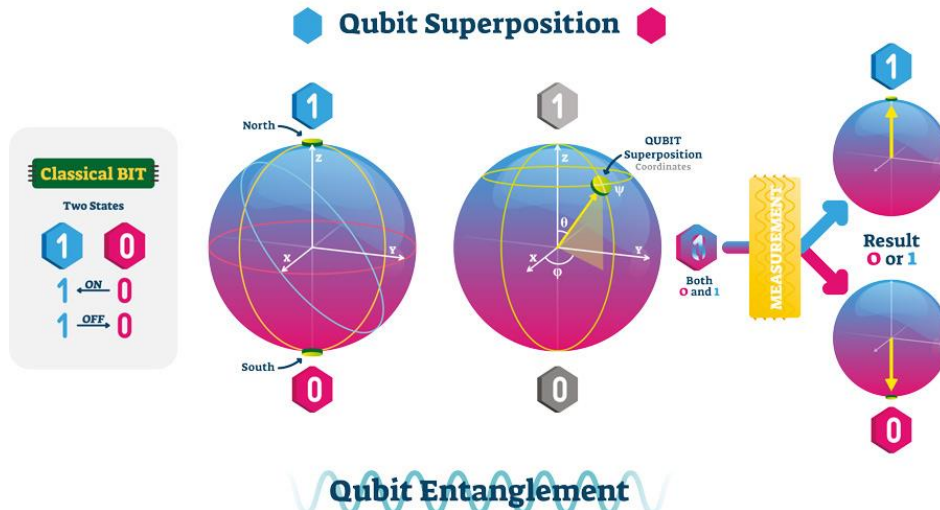
### Spin Quantum Number ( $m_s$ )

$m_s$  indicates the orientation of the electron spin

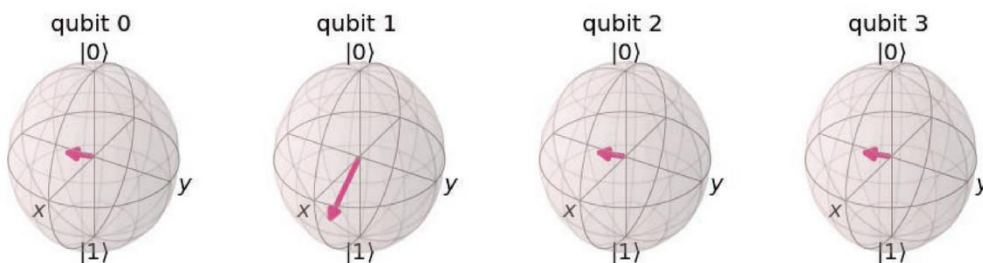
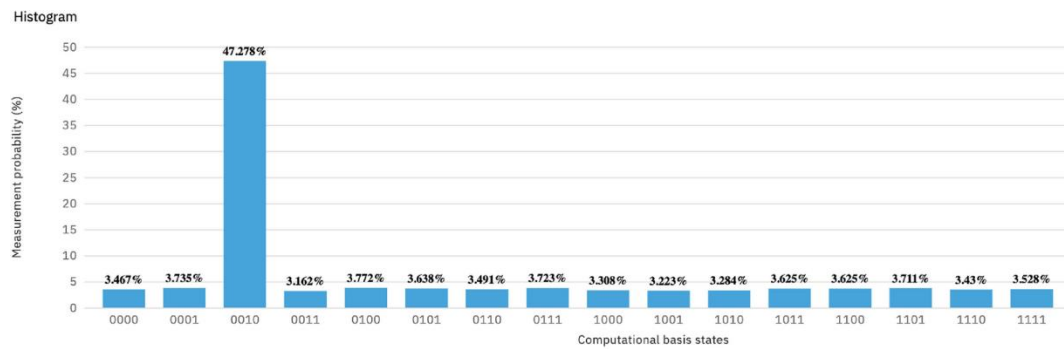


圖十一、量子自旋示意圖

(<https://www.chemistrylearner.com/>)



圖十二、量子位元所用到的技術介紹  
(VectorMine/Shutterstock.com)

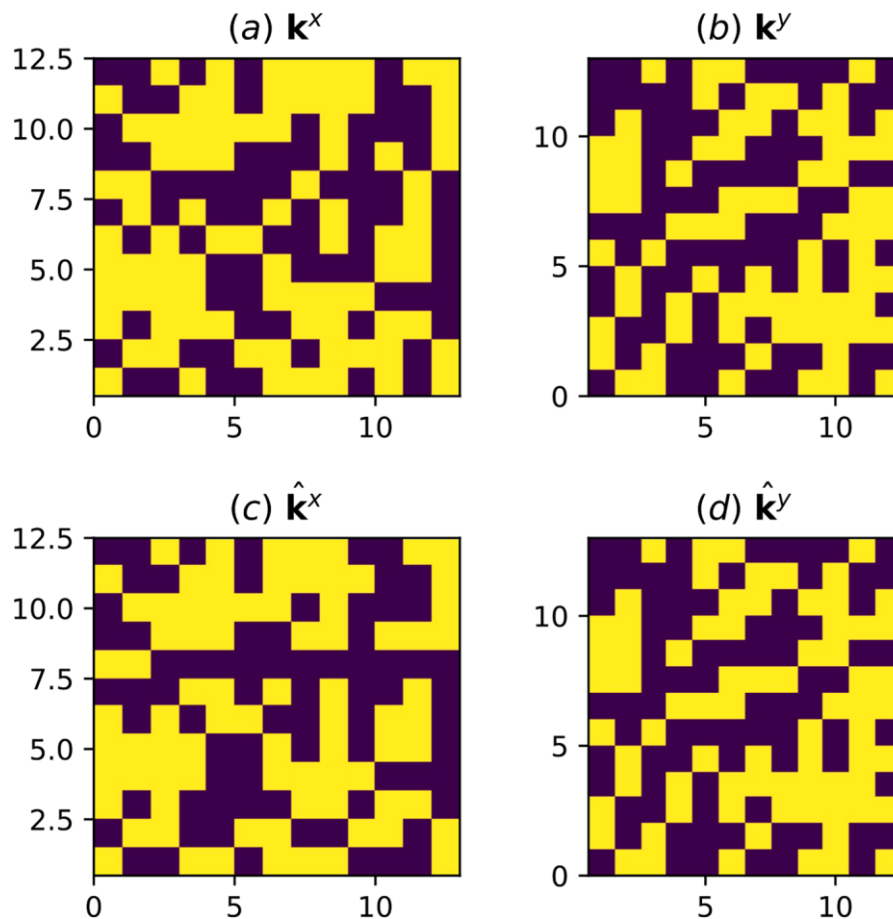


圖十三、量子位元的機率分布範例  
(Alexiades Armenakas and Baker, 2021)



完成上述處理後，量子對的數量與攜帶的資訊量將成指數關係，稱為尺度效應(Scaling)。1 量子位元代表該位元能儲存 0 與 1 兩種狀態，2 量子位元能儲存[0 1]、[00]、[10]與[1 1]四種狀態，n 量子位元則有 $2^n$ 種狀態，其表示如圖十三之各狀態的機率分布。這種大量並同時儲存資訊的能力，使量子電腦在處理最佳化問題時，能較傳統電腦節省大量時間 (Russo et al., 2018)。Google 更於 2019 年十月 (Arute et al., 2019)聲稱自家量子電腦計算能力已超越目前最快的超級電腦，並在 2023 年七月 (Morvan et al., 2023)統計量子電腦能在一秒內計算傳統超級電腦 47 年的計算量，以宣告量子霸權(Quantum Supremacy)時代的到來。

由於在處理最佳化問題上的潛力，量子運算近年來開始被用於參數反推估的研究上。Souza et al. (2022) 使用 D-wave 反推估地震波速的垂直分布、Mally (2018)、Golden and Mally (2021) 則利用地下水流場反推估含水層參數的分布，並獲得一定的成果如圖十四。本工作希望能延伸上述研究的成果，將量子運算應用於污染物溯源追蹤上。並藉此探討量子電腦在水文地質領域的應用與未來發展的可能性。



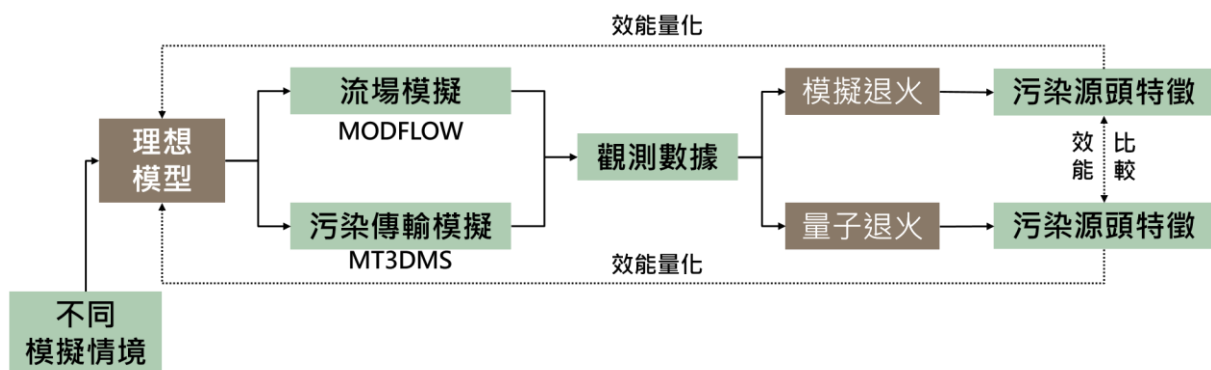
圖十四、過去研究的  $K_x$  與  $K_y$  值之原始值(a 與 b)反推估成果(c 與 d)

(Mally et al., 2019)



### 三、研究方法與過程

為了達到以上目的，本工作設計流程如圖十五所示。首先本工作會建立理想模型，並應用MODFLOW與MT3D-MS兩種模擬模式分別進行地下水流場與溶質傳輸的模擬。模擬後便得到場址內各個觀測點的濃度觀測數據，該數據將分別用於模擬退火法與量子退火法的反推估運算，並分別計算出污染源頭特徵。推估後之污染源頭特徵與理想模型之差異，以及兩者之推估時間效率將用於量化演算法之效能。本工作更考慮不同的模擬情境，藉以量化模擬退火法與量子退火法之效能差異。各工作項目之描述如以下小節：



圖十五、本工作之分析流程

### 3.1. 研究進度及預期完成之工作項目（甘特圖）

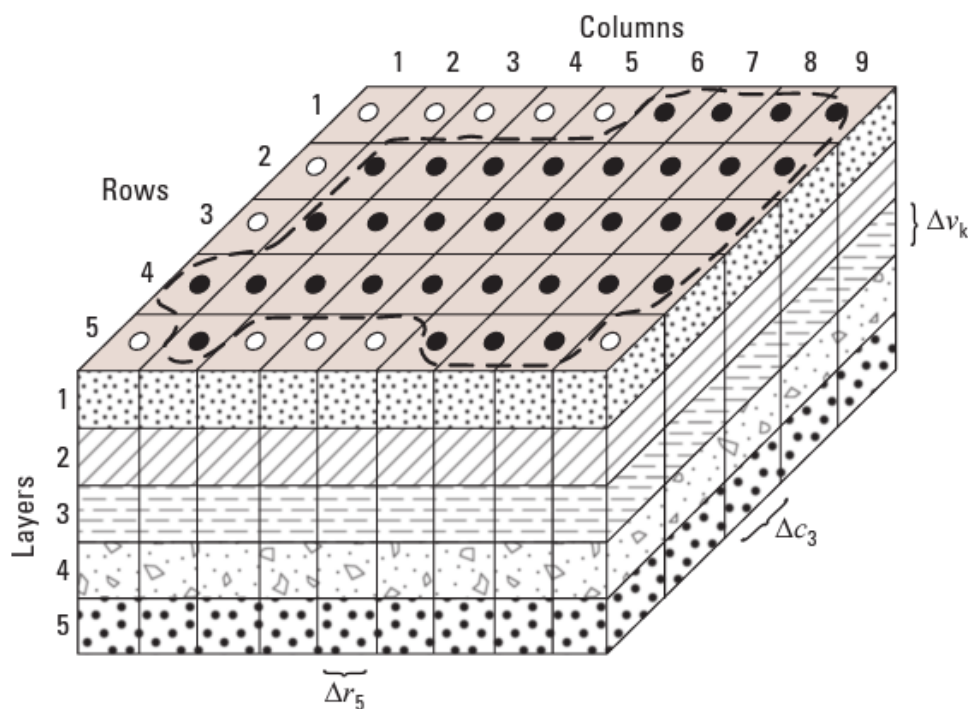
依照計畫申請之甘梯圖，本工作以於期末完成理想案例與模擬退火演算法之建置，並完成量子退火演算法之建置與效能評估。除國際期刊文章仍在準備外，其餘工作進度與預期相符。

| <div> <div>年月</div> <div>工作項目</div> </div>                                                                                                                                                                                                              | 2022 |                                 |     |     | 2023 |     |     |     |     |     |     |      | 備註 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|---------------------------------|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|----|
|                                                                                                                                                                                                                                                         | 9    | 10                              | 11  | 12  | 1    | 2*  | 3   | 4   | 5   | 6   | 7*  | 8    |    |
| 地下水流場理想案例建置                                                                                                                                                                                                                                             |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 溶質傳輸理想案例建置                                                                                                                                                                                                                                              |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 模擬退火法進行污染溯源                                                                                                                                                                                                                                             |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 量子退火法進行污染溯源                                                                                                                                                                                                                                             |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 污染溯源法校能評估量化                                                                                                                                                                                                                                             |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 報告繳交                                                                                                                                                                                                                                                    |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 工作進度估計百分比<br>( 累 積 數 )                                                                                                                                                                                                                                  | 10%  | 20%                             | 30% | 40% | 50%  | 55% | 60% | 70% | 80% | 90% | 95% | 100% |    |
| 預定查核點                                                                                                                                                                                                                                                   | 期中   | 完成地下水流場與傳輸的理想案例建置、模擬退火法與期中成果報告。 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
|                                                                                                                                                                                                                                                         | 期末   | 完成量子退火法、退火法效能比較、投稿國際期刊與期末成果報告。  |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |
| 說明：<br>1、工作項目請視專案性質及需要自行訂定。預定進度以粗線表示其起迄日期。<br>2、「工作進度百分比」欄係為配合管考作業所需，累積百分比請視工作性質就以下因素擇一估計訂定：(1)工作天數，(2)經費之分配，(3)工作量之比重，(4)擬達成目標之具體數字。<br>3、「預定查核點」，請在條形圖上標明※符號，並在「預定查核點」欄具體註明關鍵性工作要項。<br>4、以 12 個月作規劃，其中期中報告書提送要件需達計畫執行進度 50% 以上，期末報告書需於計畫結束前 1.5 個月提送。 |      |                                 |     |     |      |     |     |     |     |     |     |      |    |



### 3.2. MODFLOW模式

MODFLOW(Modular three-dimensional groundwater flow model)為美國地質調查所(US Geological Survey, USGS)自1988年起發展的數值模式，為目前應用最廣泛的地下水模式之一。MODFLOW使用有限差分法(block-centered finite-difference approach)求解三維多孔隙介質內的地下水流場，如圖十六。其求解方法採用迭代運算技巧，有強制隱式法(strongly implicit procedure, SIP)、片式連續鬆弛法(slice-successive over relaxation, SSOR) 及預置共軛梯度法II(preconditioned conjugate-gradient 2, PCG2)等多種方法。並能在不考慮水密度變化的情況下，考慮地質異質性、多種源匯項、暫態變化水頭等條件。



#### EXPLANATION

- Aquifer boundary
- Active cell
- Inactive cell
- $\Delta r_5$  Dimension of cell along the row direction—  
Subscript indicates the number of the column
- $\Delta c_3$  Dimension of cell along the column direction—  
Subscript indicates the number of the row
- $\Delta v_k$  Dimension of cell along the vertical direction—  
Subscript (k) indicates the number of the layer

圖十六、MODFLOW 離散含水層系統示意圖

(McDonald and Harbaugh, 2005)



MODFLOW 中每一格網格(cell)之水文地質特性皆能設定為均質、非均質以及等向性、非等向性任一類型之含水層。並以數個模組(modules)所組合而成之模組群/packages)，進行各種水文地質條件下水流模式模擬，例如定水頭(CHD)、河流(RIV)、蒸發(EV1)或是湖泊(LAK)等條件。MODFLOW程式中含水層的形式可以設定為：

- (1) 受壓含水層(Confined Aquifer);
- (2) 非受壓含水層(Unconfined Aquifer);
- (3) 受壓-非受壓含水層(Confined/Unconfined Aquifer, Constant Transmissivity);
- (4) 受壓-非受壓含水層(Confined/Unconfined Aquifer, Variable Transmissivity);
- (5) 含水層型式(1)+半受壓層(semi-confining layer);
- (6) 含水層型式(2)+半受壓層(semi-confining layer);
- (7) 含水層型式(3)+半受壓層(semi-confining layer);
- (8) 含水層型式(4)+半受壓層(semi-confining layer)。

根據達西定律(Darcy 's Law)，MODFLOW在流體的密度固定下，其三維地下水流控制方程式如式(4)所示：

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_{xx} \frac{dh}{dx} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_{yy} \frac{dh}{dy} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( K_{zz} \frac{dh}{dz} \right) - W = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (4)$$

其中 $K_{xx}$ 、 $K_{yy}$ 、 $K_{zz}$ 分別表示各主軸的水力傳導係數[LT<sup>-1</sup>];

$h$ 為壓力水頭[L];  $W$ 為源(source)匯(sink)項的通量;  $S_s$ 是地質材料的比儲水率(specific storage) [L<sup>-1</sup>];  $t$  則代表時間[T]。

### 3.3. MT3D-MS模式

MT3D-MS(Modular Transport 3-Dimensional Multi-Species Model)為美國USGS所開發之模組化三維傳輸模式MT3D之多物種(Multi Species)版本 (Zheng and Wang, 1999)。MT3D-MS使用移流延散方程式(advection-dispersion equation, ADE)描述溶質的傳輸行為，其方程式如式(5)所示：

$$\begin{aligned} & \theta \frac{\partial C^k}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \bar{C}^k}{\partial t} \\ & = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \theta v_i C^k + q_s C_s^k - q_s C^k - \lambda_1 \theta C^k - \lambda_2 \rho_b \bar{C}^k \end{aligned} \quad (5)$$



其中 $\theta$ 為孔隙率[-]; $C^k$ 為物種 $k$ 的濃度[ML<sup>-3</sup>]; $\rho_b$ 為孔隙介質的總體密度[ML<sup>-3</sup>]; $\bar{C}^k$ 為物種 $k$ 的吸附濃度[ML<sup>-3</sup>]; $D_{ij}$ 為延散度張量[L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>]; $v_i$ 為孔隙內流速; $q_s$ 為單位體積內的源匯項流量[T<sup>-1</sup>]; $C_s^k$ 為源匯項濃度[ML<sup>-3</sup>]; $q_s$ 為單位體積下的水儲蓄率變化; $\lambda_1$ 與 $\lambda_2$ 為化學反應速度。

其中延散項 $D_{ij}$ 可表示如式(6):

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + D^* \quad (6a)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad (6b)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (6c)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (6d)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad (6e)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_z v_y}{|v|} \quad (6f)$$

其中 $\alpha_L$ 為縱向延散(longitudinal Dispersivity, L); $\alpha_T$ 為橫向延散(Transverse Dispersivity, L); $v_x$ 、 $v_y$ 、 $v_z$ 為不同軸上的速度分量; $|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ 為速度值(LT<sup>-1</sup>); $D^*$ 為擴散係數(L<sup>2</sup>T<sup>-1</sup>)。

MT3D-MS另外考慮土壤吸附與衰減,其中吸附能以三種模式進行描述,如式(7):

線性等溫吸附(linear Sorption):

$$\bar{C} = K_d C \quad (7a)$$

Freundlich isotherm:

$$\bar{C} = K_f C^a \quad (7b)$$

Freundlich isotherm:

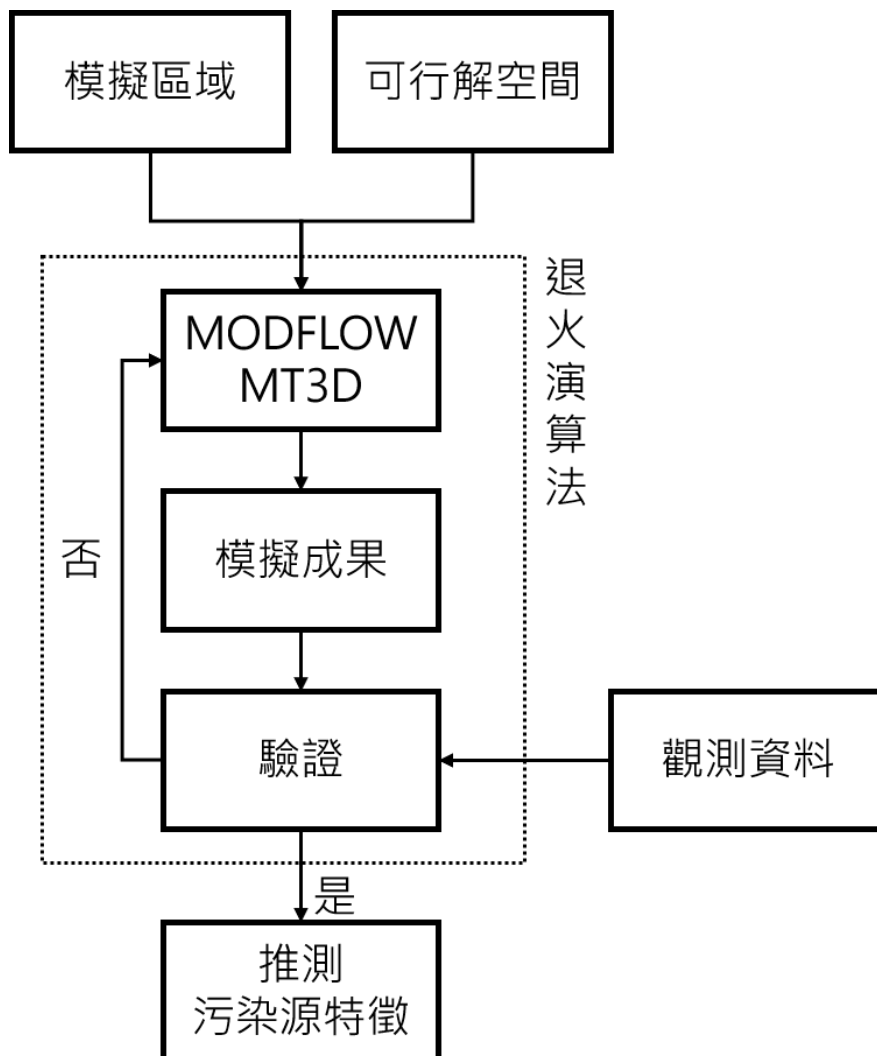
$$\bar{C} = \frac{K_l S C}{1 + K_l C} \quad (7c)$$

$\bar{C}$ 為吸附後的濃度; $K_d$ 為分散係數[L<sup>3</sup>M<sup>-1</sup>]; $K_f$ 為Freundlich常數[(L<sup>3</sup>M<sup>-1</sup>)<sup>a</sup>]; $a$ 為Freundlich指數[-]; $K_l$ 為Langmuir常數[L<sup>3</sup>M<sup>-1</sup>]而 $S$ 為場址中的總濃度。



### 3.4. 模擬退火演算法

本工作應用模擬退火演算法推算污染源特徵之工作流程如圖十七。首先本工作先設計進行流程試驗用的理想案例，並依此案例設定模擬區域及預分析的參數與其參數數值範圍(稱為可行解空間feasible solution space)。決定好模擬區域與可行解空間後，本工作便應用MODFLOW與MT3D兩模擬模式，以進行模擬區域內流場與溶質分布的模擬。模擬成果將與理想案例的觀測資料進行驗證比較，並藉由相關函數(如RMSE)定義模擬結果與觀測結果間的差異。當模擬與觀測兩結果間的差異小於可接受值時，便視推估之參數分布與現場狀況相符。本工作所使用的模擬退火演算法可分為梯度搜尋法(gradient search)、利用波茲曼機率分布函數(Boltzmann probability distribution)產生的劣解接受機制兩部分，詳述如下列小節。

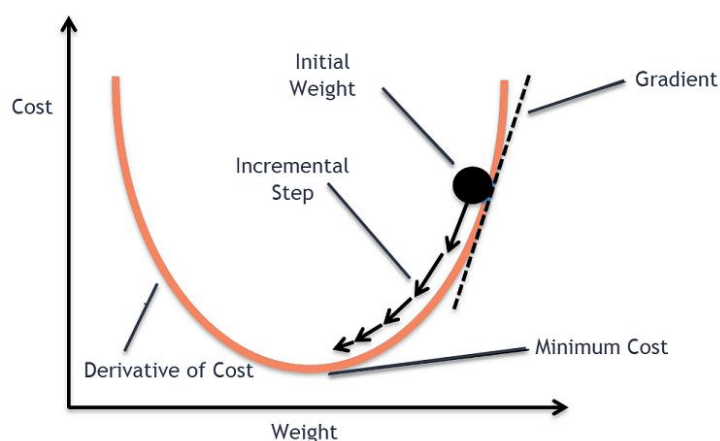


圖十七、本工作使用模擬退火演算法推測污染源特徵之工作流程



### 3.4.1. 梯度搜尋法

梯度搜尋法是最陡坡降法(method of steepest decent)與隨機搜尋兩種概念的結合，其示意如圖十八。最陡坡降法在求解過程會搜尋最大的目標函數梯度方向，並往其移動以尋求問題的最佳解。隨機搜尋則為在搜尋過程中會隨機決定目標參數變動量與移動距離大小。梯度搜尋法的效率往往被初始位置所限制，不好的初始位置使搜尋點落入區域最佳解(local optimal)並無法跳出，造成無法獲得全域最佳解(global optimal)。



圖十八、梯度搜尋法示意圖

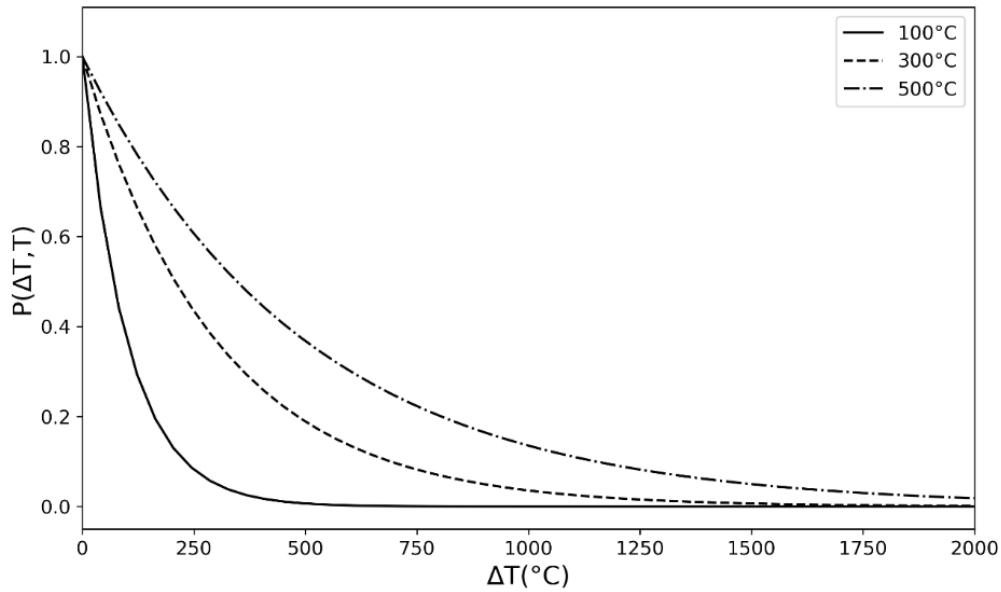
(O' Reilly library)

### 3.4.2. 波茲曼機率函數

若搜尋過程中的鄰近解函數值大於當前解之函數值，此鄰近解便被稱為劣解(inferior solution)；若系統選擇往此劣解移動，則稱為「接受劣解」。本工作利用波茲曼機率函數(Boltzmann probability function) 協助決定系統是否接受劣解，其方程式如式 (8) (Arabnia et al., 2020)：

$$P(\Delta T, T) = \exp\left(\frac{-\Delta f}{T}\right) \quad (8)$$

其中 $P(\Delta T, T)$ 為系統接受的機率， $0 \leq P \leq 1$ ， $\Delta f$ 為當前解與鄰近解的差值， $T$ 為當下的溫度。波茲曼函數之機率分布與溫度之變化關係如圖十九所示，其中顯示溫度 $T$ 的數值大小和接受機率成反比關係。對本工作使用的模擬退火演算法而言，當鄰近解與當前解間的差異越大時，劣解被接受的機率相對越小，便能藉此降低系統在反推估過程中的擾動量。



圖十九、波茲曼函數之機率分布

(鍾佳良，2021)

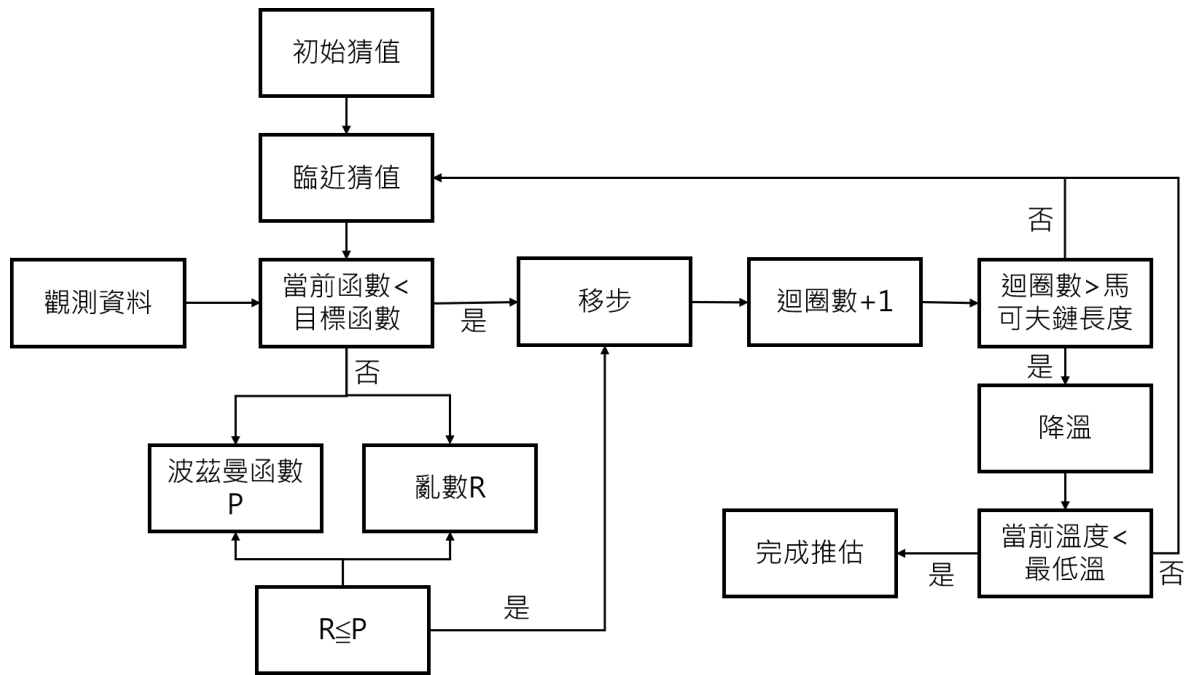
### 3.5. 模擬退火演算法流程

本工作利用模擬退火演算法的流程如圖二十所示。首先本流程將針對問題訂定目標函數，此目標函數會被視為一個溫度函數 $T(x)$ 。目標函數制定完成後將制定退火策略(annealing strategy)中合適的參數，包含初始溫度( $T_i$ )、終止溫度( $T_f$ )、馬可夫鏈長度( $L$ )與降溫率 $\alpha$ 。接著在可行解空間範圍中，隨機或選定初始猜值(initial configuration)與其對應的目標函數值。決定初始解後，隨機挑選鄰近的解與其目標函數值。當求到的目標函數值小於等於當前目標函數值，稱此解為優解並移步。若相反則稱此解為劣解，便進入劣解移步機制。此機制利用亂數產生器生成一個介於0到1之間的亂數，並利用此亂數與式(3)計算波茲曼函數 $P$ ，若 $R \leq P$ 時接受劣解，反之則放棄。若搜尋迴圈數達到馬可夫鏈長度，則執行降溫過程(Cooling Process)直到溫度低於終止溫度。

#### 3.5.1. 目標函數

本工作目的為最小化推估結果的誤差。為了達到此目的，本工作利用測試案例中的觀測井濃度 $C_{obs}$ 做為真值，並使用均方根誤差(Root Mean Square Error, RMSE)推算其與推估濃度 $C_{est}$ 間的誤差大小，如式(9)：

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (C_{est} - C_{obs})^2}{N}} \quad (9)$$



圖二十、模擬退火演算法流程圖

### 3.5.2. 退火演算參數

為了與量子演算法進行比較，本研究使用python進程式碼撰寫，並以CPU為i7-12700H (2.3GHz)之個人電腦執行全程退火演算法。執行過程中，演算參數的訂定將對計算效率有很大影響。好的退火演算滿足兩個條件：初期時接受劣解的機會夠高，與溫度低時能順利將解集中於最低能量區域。退火演算所需制定的參數包含初始溫度 $T_i$ 、馬可夫鏈長度 $L$ 、降溫率 $\alpha$ 與停止溫度 $T_f$ 。這些參數的範圍隨不同系統而變化，需經測試才能決定其數值。在設定參數時能依照數個準則(Walid Ben-Ameur, 2004)：

1. 初始溫度必須夠高，才能使搜索範圍有效擴大(Walid Ben-Ameur, 2004)。
2. 依照Kirkpatrick(1983)建議， $\alpha$ 值介於0.8至0.9之間較適當，最低不宜低於0.5，但實際情況仍依測試成果而定。
3. 馬可夫鏈長度( $L$ )依照Dougherty and Marryott(1991)建議，將其設為決策變數個數之100倍。

依照測試結果，本工作使用之退火演算參數列如表一。其中初始溫度設定為13度；最終溫度設定為0.003度；降溫率設定為0.775。整個退火過程將執行至當前執行溫度低於最終溫度時即停止。



表二、本工作使用的退火策略參數

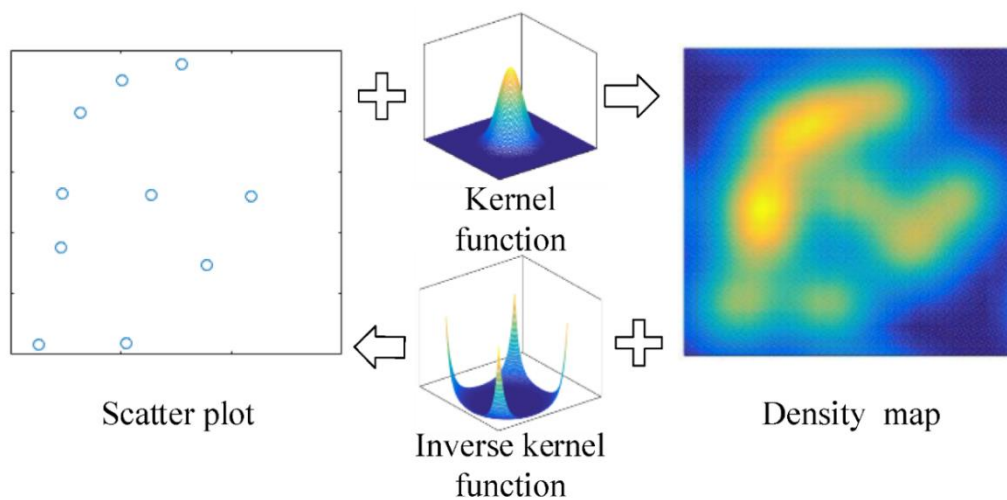
| 參數                    | 數值                | 說明       |
|-----------------------|-------------------|----------|
| 馬可夫鍊長度(L)             | 1000              | 100倍決策變數 |
| 初始溫度(T <sub>i</sub> ) | 13                |          |
| 最終溫度(T <sub>f</sub> ) | 0.003             |          |
| 降溫率( $\alpha$ )       | 0.775             |          |
| 停止條件                  | 當前溫度低於最終溫度時，退火即停止 |          |

### 3.6. 推估成果不確定性分析

為了分析推估成果的不確定性，本工作使用了核密度推估(Kernel Density Estimation, KDE)技術，如圖二十一所示。並結合概率密度函數(Probability Distribution Function, PDF)進行空間上的概率密度計算。目前 PDF 多以常態分佈函數(Normal Distribution Function)表示，其如式(10)所示：

$$P(x) = \frac{1}{h\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-d^2}{2h^2}} \quad (10)$$

其中 h 為帶寬(Bandwidth)，在本工作中設定與網格解析度相同；d 則為推估污染源與網格點間的距離。污染源在各迴圈的推估位置將使用此 PDF，若不同的推估污染源間的距離小於一個網格，則 PDF 將會相加，最終結果將能顯示污染源位置的不確定性與推估的密集程度。



圖二十一、以 KDE 推算點資料周圍空間概率分布示意圖

(Wang et al., 2019)



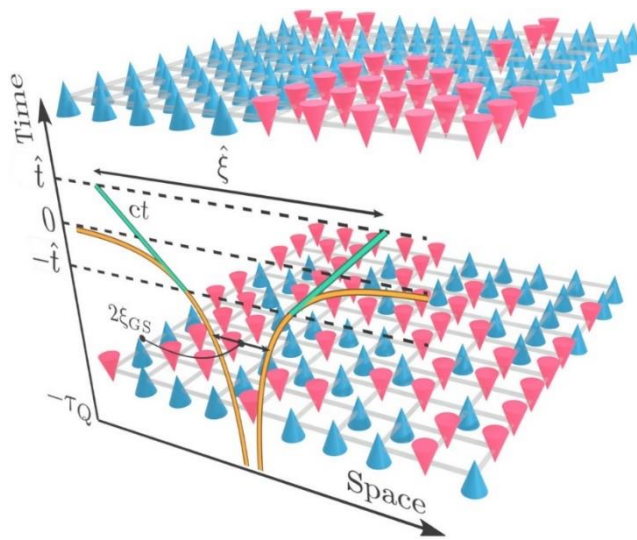
### 3.7. 量子退火演算法

如同第二章節所描述，目前量子模型主要可分為以量子電路閘門模型以及絕熱量子運算模型，所代表的最佳化演算法分別稱量子近似最佳演算法(Quantum Approximate Optimization Algorithm, QAOA)，與二次無約束二元最佳化(Quadratic Unconstrained Binary Optimization, QUBO)。由於 D-wave 公司所提供的量子退火器對 QUBO 有較佳支援，因此本工作以此作為運算平台。D-wave 的量子退火演算法為絕熱量子運算模型，主要目的為找到伊辛模型內最小的哈密頓量(ground state of an Ising model Hamiltonian)，伊辛模型為將實際物理系統離散化成網格的數學模型，每個網格都處於兩種狀態之一，紀錄為 $\sigma_i = -1$  或是  $+1$ ，也因此伊辛模型常如圖二十二用於表示磁性或量子自旋態的分布狀況。哈密頓量則為每個網格所包含的能量大小，其表示為式(11)：

$$H(\sigma) = \sum_{ij} \sigma_i J_{ij} \sigma_j + \sum_i h_i \sigma_i \quad (11)$$

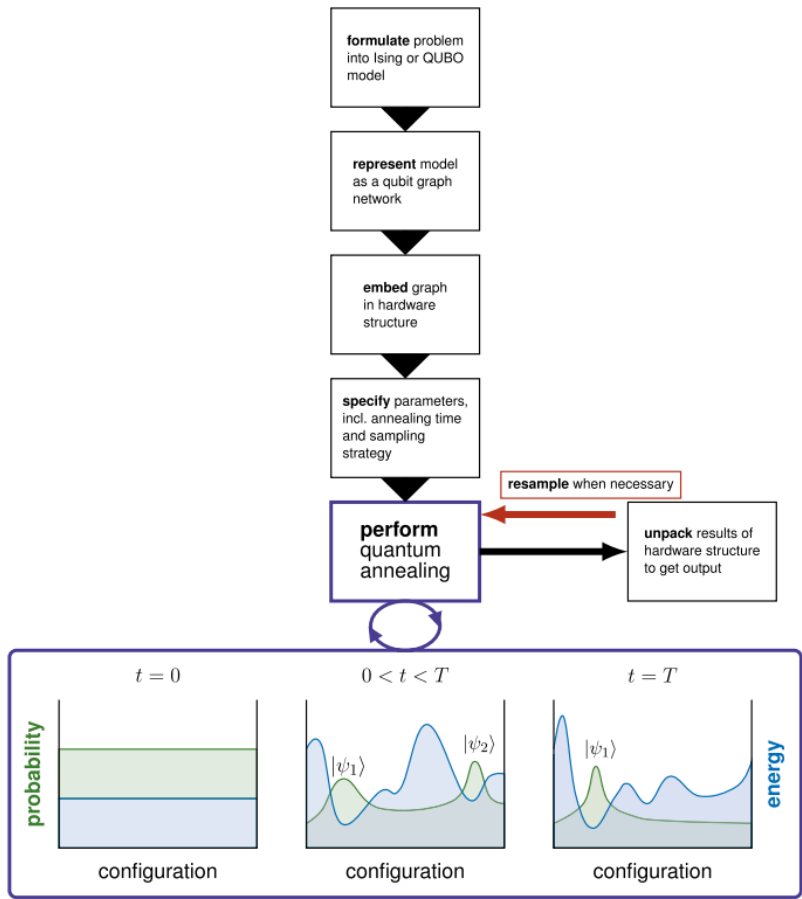
式中可知哈密頓量由兩種類型的作用互相疊加而成。以量子電腦而言，兩作用分別代表相鄰量子位元自旋態的相互作用，以及外部的場(External Field)作用。伊辛模型假設相互作用來源為自旋態差異導致的磁場影響，且此作用僅存在於相鄰量子 $\sigma_i$ 與 $\sigma_j$ 之間。J 的大小表示為該場的影響強度，而正負號則代表兩位元間的自旋方向(或是磁性)是否相同。由於此作用發生於兩個量子位元間，因此必須以對(pairs)的方式計算才能找到總能量。外部場同樣可以區分因自旋方向造成的能量差異，其中 h 的大小代表場的強度，正負號亦表示為自旋方向是否相同。由於每個量子位元都受到外部場的影響，必須加總所有位元以找到外部場的總貢獻。

若要應用量子電腦解決問題，需要執行的步驟如圖二十三所示。首先要將問題簡化為二元問題(Binary Problem)，接著將此二元問題轉化(Formulate)為伊辛模型或是 QUBO 模型。轉化後之模型便能以網格形式表現其哈密頓量間之連結關係，如圖二十四即為 QUBO 模型  $H(x,y) = 0.5X_0 + X_1 - 3X_2 + 5X_3 - X_0X_1 + X_0X_2 - 7X_2X_3 + 2X_0X_3$  之網格形式 (Network Graph)，或稱奇美拉圖(Chimera Graph)。得到網格形式後，便能將此網格應對(Embedding)至量子退火器上的量子位元。接著輸入表二的退火參數與初始( $t=0$ )能量狀態(Energy Configuration)，便能開始進行機率運算( $0 < t < T$ )。接著對計算結果不斷進行取樣(Sampling)，直至取樣結果發現全局最低哈密頓量值，也就是機率最高的地方，方能結束運算( $t=T$ )。



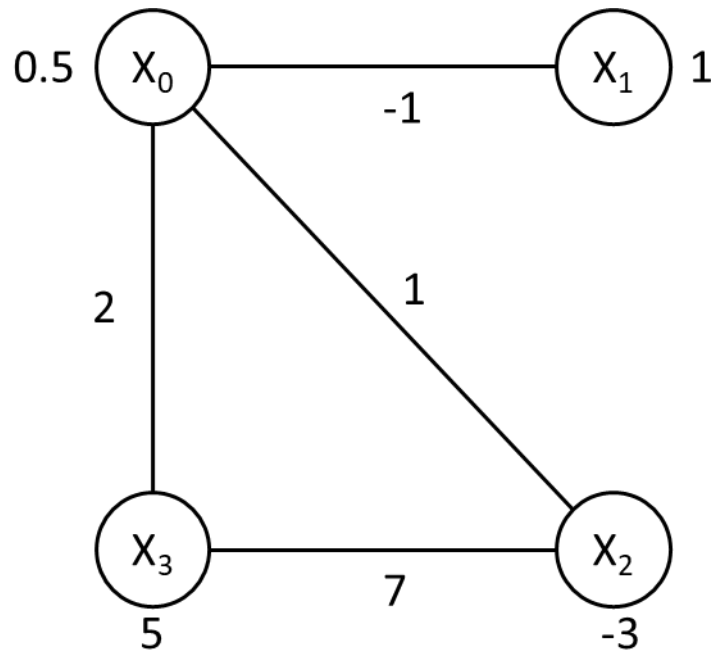
圖二十二、使用伊辛模型描述量子場自旋狀態隨著磁場的變化。

圖中包含底部的初始自旋狀態(包含向上的藍色錐體與向下的紅色錐體兩種自旋)，以及磁場隨著時間增加後，自旋與磁場方向對齊的狀態。(Schmitt et al., 2022)



圖二十三、使用量子退火演算法的步驟

(Au-Yeung et al., 2023)



圖二十四、QUBO 中變數間之網路關係表示法

### 3.8. QUBO 問題轉換

如 3.6 小節所述，若要應用量子電腦解決傳統最佳化問題，則須將問題轉化為 QUBO 問題形式，其定義如式(11)：

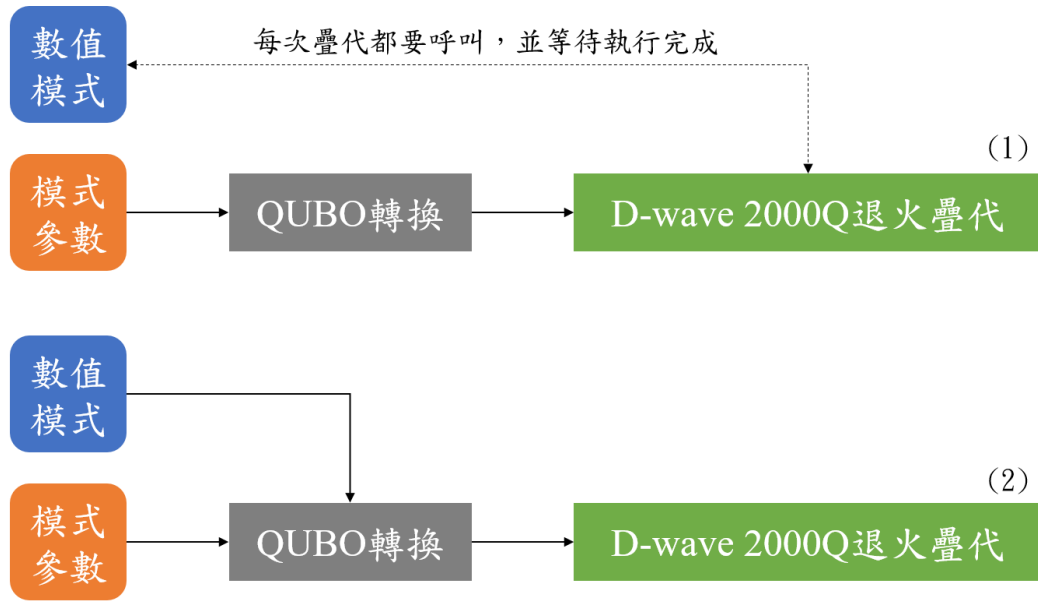
$$H = \underset{x}{\operatorname{argmin}}(x^T Q x) = \underset{x}{\operatorname{argmin}}\left(\sum_{ij} Q_{ij} x_i x_j\right) \quad (11)$$

其中  $T$  為預測值； $x$  為進行最佳化的參數； $Q$  為由過去資料所推算的常數矩陣。

帶入  $x_i = \frac{(1+\sigma_i)}{2}$ ，式(9)便能轉變為伊辛模式的形式如式(12)：

$$H = \frac{1}{4} \sum_{ij(i \neq j)} Q_{ij} \sigma_i \sigma_j + \frac{1}{2} \left( \sum_i Q_{ij} \sigma_i \right) + \frac{1}{2} \left( \sum_j Q_{ij} \sigma_j \right) + \text{const} \quad (12)$$

本工作設計兩種量子電腦執行反推估的流程如圖二十五，兩者差異在於利用傳統電腦或是量子電腦執行 MODFLOW 與 MT3D。若使用第一個流程執行反推估，則每次退火降溫過程中需更換參數並計算 RMSE 時，便需要跳出量子電腦執行一次數值模型，並等待模型執行完成並計算完 RMSE 後，再次連入量子電腦選取下次使用的參數。由於本工作使用量子電腦為全球共享，此流程的執行時間除了花費在執行模式外，每次連入量子電腦的等待(Pending)時間都需加入計算。雖然量子電腦每次進行運算花費時間少於 5 毫秒，但其他等待時間造成整個退火過程花費超過一個月，本工作於計畫執行期間僅執行一次。



圖二十五、本工作為了執行量子退火疊代所設計的兩種流程

為了避免以上問題，本工作設計第二套流程如圖二十五(2)。此流程避免了疊代過程中排程量子電腦造成的時間浪費，但缺點是為了利用量子電腦執行 MODFLOW 與 MT3D，需要將兩模型的差分(Finite Difference Method, FDM)網格轉換成伊辛或 QUBO 模型，目前主要有偏微分方程約束組合最佳化( Practical Differential Equation Constrained Combinatorial Optimization, PDECCO)(Chandra, 2013)、量子線性演算法(Quantum Linear Systems Algorithms, QLSA)(Bharadwaj and Sreenivasan, 2023)或超參數(hyperparameters)( Criado and Spannowsky, 2022)等方法。這些方法都有發展相對應的 python 套件，但測試結果顯示，QLSA 與超參數僅能處理較簡單的 PDE。由於本工作利用的 MODFLOW 與 MT3D 包含較多參數，最後選擇以 PDECCO 進行轉換。

PDECCO 的 QUBO 形式如式(13)：

$$\zeta = c^T W c + w^T c + constant \quad (13)$$

其中

$$W = (EB^{-1}A - D)^T (F - EB^{-1}C)^{-T} (F - EB^{-1}C)^{-1} (EB^{-1}A - D) \quad (14)$$

$$w^T = 2(N^T - h_d^T)(F - EB^{-1}C)^{-1} (EB^{-1}A - D) \quad (15)$$

$$N = (F - EB^{-1}C)^{-1} (b_2 - EB^{-1}b_1) \quad (16)$$

$$constant = N^T N - 2N^T h_d + h_d^T u_d \quad (17)$$

其中  $A$  為  $N_{in} \times N_c$ ； $B$  為  $N_{in} \times N_{in}$ ； $C$  為  $N_{in} \times N_{ex}$ ； $D$  為  $N_{ex} \times N_c$ ； $E$  為  $N_{ex} \times N_{in}$ ； $F$  為  $N_{ex} \times N_{ex}$ ； $F - EB^{-1}C$  為  $N_{ex} \times N_{ex}$ 。



以式(18)之偏微分方程為例，首先應用 FDM 離散為差分形式如式(19)。

$$T\left(\frac{d^2h}{dx^2} + \frac{d^2h}{dy^2}\right) = 0 \quad (18)$$

$$T_{i,j} \left[ \left( \frac{h_{i+1,j} - 2h_{i,j} + h_{i-1,j}}{\Delta x^2} \right) + \left( \frac{h_{i,j+1} - 2h_{i,j} + h_{i,j-1}}{\Delta y^2} \right) \right] = 0 \quad (19)$$

假設 X 軸與 Y 軸皆為 4 個網格，且左側邊界(節點 1,2,3,4,5)條件為  $h=10$ ，右側(節點 21,22,23,24,25)、上側(節點 10,15,20)與下側(節點 6,11,16)邊界條件皆為  $h=0$ ，節點 7,8,9,12,13,14,17,18 與 19 之水位未知，則式(19)便能轉為矩陣形式如式(20)。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_i \\ h_7 \\ h_8 \\ h_9 \\ h_{12} \\ h_{13} \\ h_{14} \\ h_{17} \\ h_{18} \\ h_{19} \\ h_{left} \\ h_{right} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -10 \\ -10 \\ -10 \\ 0 \\ 10 \end{bmatrix} \quad (20)$$

依照前述定義， $A = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ ， $C = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & -4 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & -4 \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} -4 & 1 \\ 1 & -4 \end{bmatrix},$$



$$E = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, c = h_i^T, u_{in} = [h_7, h_8, h_9, h_{12}, h_{13}, h_{14}, h_{17}, h_{18}, h_{19}]^T$$

$$, d = [h_{left}, h_{right}]^T$$

將其代入式(13)便能獲得 QUBO 模型。

### 3.9. 量子運算平台

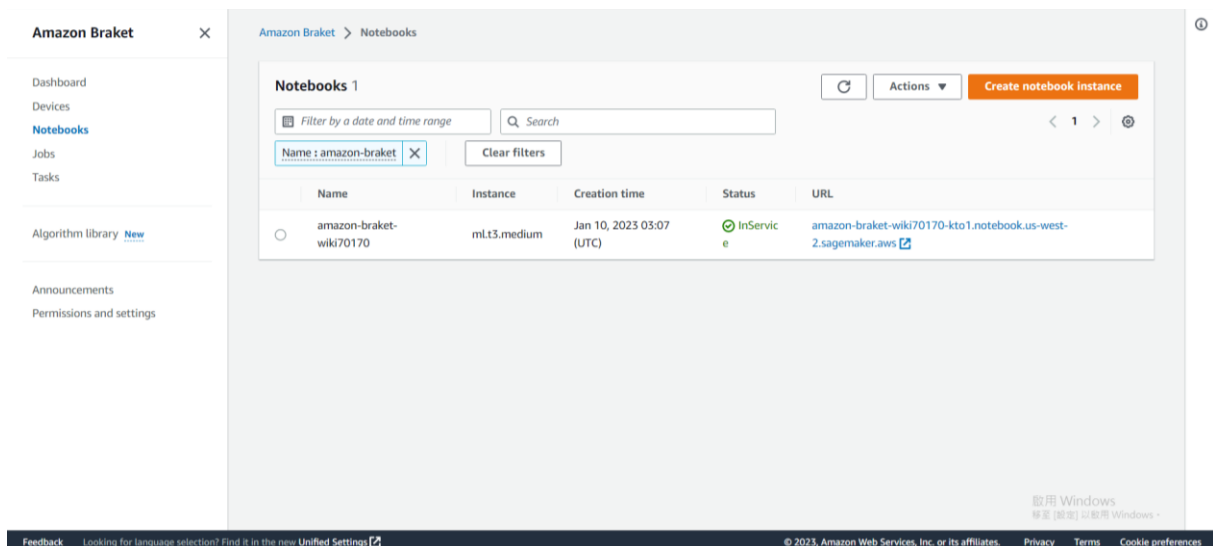
自從 IBM 於 2020 年六月發表第一台商用量子電腦 IBM Q 如圖二十六以來，目前世界上的商用量子電腦共可分為三種類型，依建造難度依序為量子退火器 (Quantum Annealer)、類比量子 (Analog Quantum) 與全量子系統 (Universal Quantum)。由於量子退火器僅能用於最佳化運算，大多數公司多選擇將資源投入用以發展功能較多的全量子系統。市面上提供商業量子退火演算法之廠商共有三家，分別為加拿大公司 D-Wave、西班牙公司 Qilimanjaro 以及日本公司 NEC。

其中 D-Wave 為全球第一家將退火量子電腦應用至商業領域的廠商，也是目前量子退火電腦的領導者，目前擁有最高計算能力之量子電腦為 Advantage™，其由超過 5,000 個量子位元所組成。西班牙 Qilimanjaro 量子科技則是由巴塞隆納超級計算機中心 (Barcelona Supercomputer Center)、巴塞隆那大學 (University of Barcelona) 和中國高能物理研究所 (Institute of High-Energy Physics) 的衍生公司。該公司致力於發展基於超導量子位元的量子電腦，並架構雲端平台為企業服務。目前為歐盟委員會 AVaQus H2020 干涉量子退火計畫的主要參與者。日本電氣公司 NEC (Nippon Electric Company Limited) 為日本跨國資訊技術和電子公司，其目的在於建立量子退火器的實際應用，並在 2021 年 12 月 7 日與 D-wave 合作，並於 2022 年 9 月 8 日推出 30,000 量子位元的量子退火器，為目前市面上能應用最多量子位元之量子電腦。

由於租用 D-wave 的存取權限的價格為每年 7,000 美金。因此本工作選擇使用 AWS (Amazon Web Server) 雲端中的 Braket 服務以介接 D-wave，其介面如圖二十七所示，以能在最小的花費下，測試並撰寫與執行量子電腦演算法相關程式。本工作所介接之量子電腦為 D-Wave 2000Q，為一具備相當 1,000 量子位元能力之量子退火器。Braket 為一項完全託管的 AWS 服務，其中提供了各種量子計算技術的單點接入，讓操作人員能以較低的預算測試和設計量子演算法。Braket 的使用分為構建、測試和執行三個階段。在建構階段，Braket 提供 pytohn 常用的 Jupyter Notebook 環境讓使用者能以較低門檻進入量子計算的領域。Jupyter Notebook 內除了相對應開發者工具外，另外還有 Amazon Braket SDK 協助使用者以簡易的程式碼構建量子演算法。並且能以如同撰寫傳統程式碼一般，對程式碼進行修改並能馬上進行測試或執行。



圖二十六、IBM 於2020年6月發布第一台商用量子電腦 IBM Q  
(IBM Research)



圖二十七、使用 AWS 內建 Jupyter 進行量子程式碼撰寫



## 四、結果與討論

### 4.1. 測試案例

本工作所使用之理想案例基於以下假設：地質材料為均質、污染物為保守性物質且密度與水相同。理想案例的配置如圖二十八所示，為長寬皆20公尺，厚度1公尺之三維含水層。

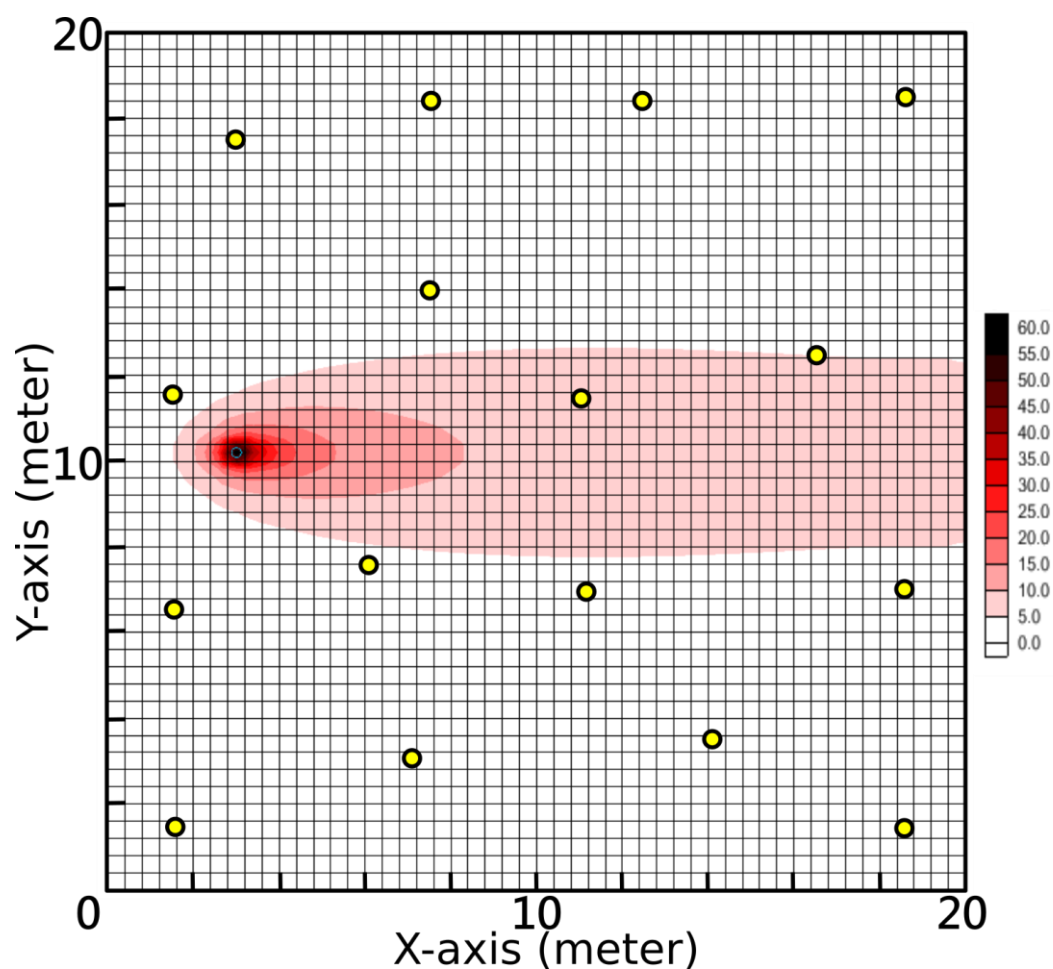
本工作設定案例中有16口位置平均隨機分布的觀測井，其觀測到的濃度隨時間變化情形，將用於後續的污染源頭反推估。本工作所使用模擬參數列如表二，其中場址的水平網格解析度為0.4公尺，垂直向則設定為0.5公尺，總共由5,000個網格與7,803個節點組成。含水層之地質材料設定為砂質，水力傳導係數為12m/d，與Freeze and Cherry (1979)之約介於 $10^0 \sim 10^3$ (m/day)間的成果相符。

本案例所假設的污染源位於含水層表層，座標則為(2.8,10.0)，為持續性釋出60kg/d之定濃度污染。含水層在初始時無污染濃度且模擬邊界為不透水邊界。

為了進行污染源頭的反推估，本工作設定污染源座標X、Y、污染源濃度C與污染源流量Q作為反推估參數，範圍列如表四。並如3.4.1.小節描述，以模擬值與觀測值間的RMSE做為目標函數。

表三、測試案例之模擬參數

| 參數名稱                  | 數值         |
|-----------------------|------------|
| 網格解析度[m]              | 0.4        |
| 水力傳導係數[m/d]           | 12         |
| 污染源座標                 | (2.8,10.0) |
| 溶質注入濃度[mg/L]          | 60         |
| 注入體積[m <sup>3</sup> ] | 2.5        |
| 縱向延散度[m]              | 1          |
| 縱向延散度比                | 0.4        |
| 模擬時間[Day]             | 100        |



圖二十八、測試案例之溶質濃度分布與監測井位置與濃度(單位： $\text{kg/m}^3$ )

表四、 本工作設定之決策參數數值

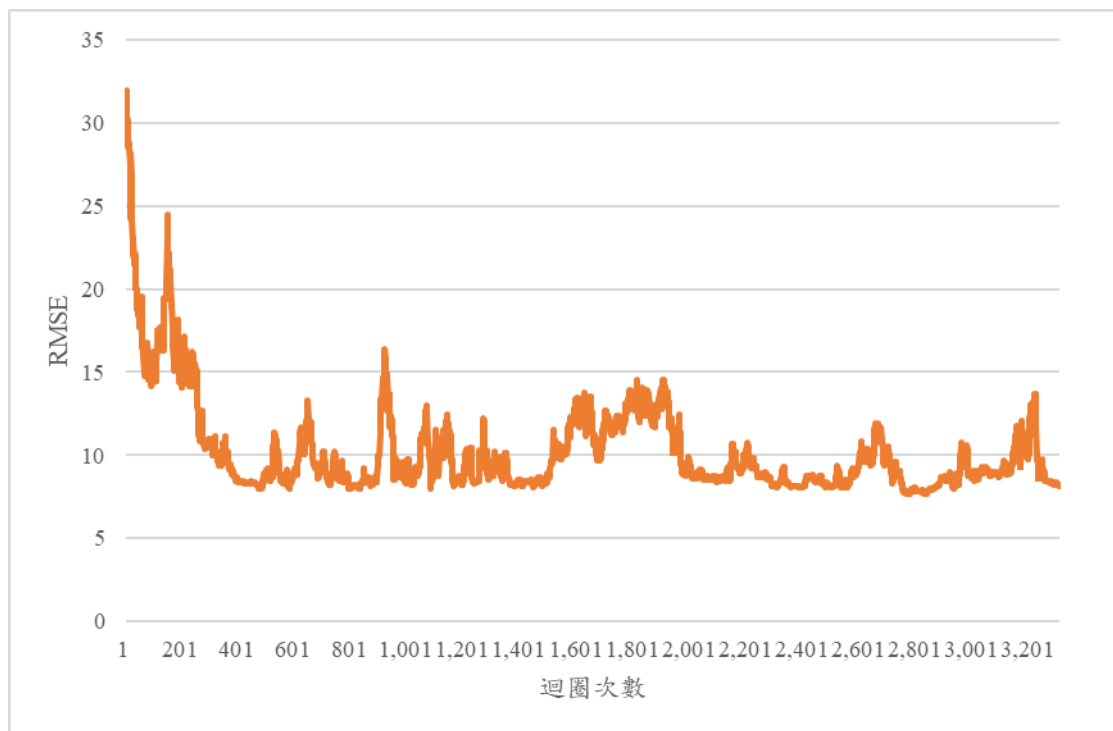
| 參數                   | 數值下界 | 數值上界 | 間距   |
|----------------------|------|------|------|
| 座標X                  | 0    | 20   | 0.4  |
| 座標Y                  | 0    | 20   | 0.4  |
| 溶質注入量(kg/d)          | 60   | 300  | 5    |
| 注入體積( $\text{m}^3$ ) | 0.05 | 2.5  | 0.05 |



## 4.2. 推估成果

### 4.2.1. 模擬退火降溫

本工作首先於隨機位置設立共16處監測井，並得到濃度數值，其點位分布如圖二十八所示。接著利用RMSE當作目標函數，其收斂性由波茲曼機率中的溫度差值( $\Delta f$ )與當前溫度( $T$ )所控制，圖二十九為單次的降溫過程，圖中顯示此退火過程總共執行3201次疊代，退火過程中RMSE高起的現象表示整個退火過程轉換至下一個退火溫度。轉換後之RMSE的變化亦顯示轉換退火溫度後，退火過程所設置的波茲曼機率函數能有效地迅速降低RMSE，並在震盪時跳離區域最佳解。此圖顯示本工作所訂定的退火策略良好，並能求到品質較佳的解。

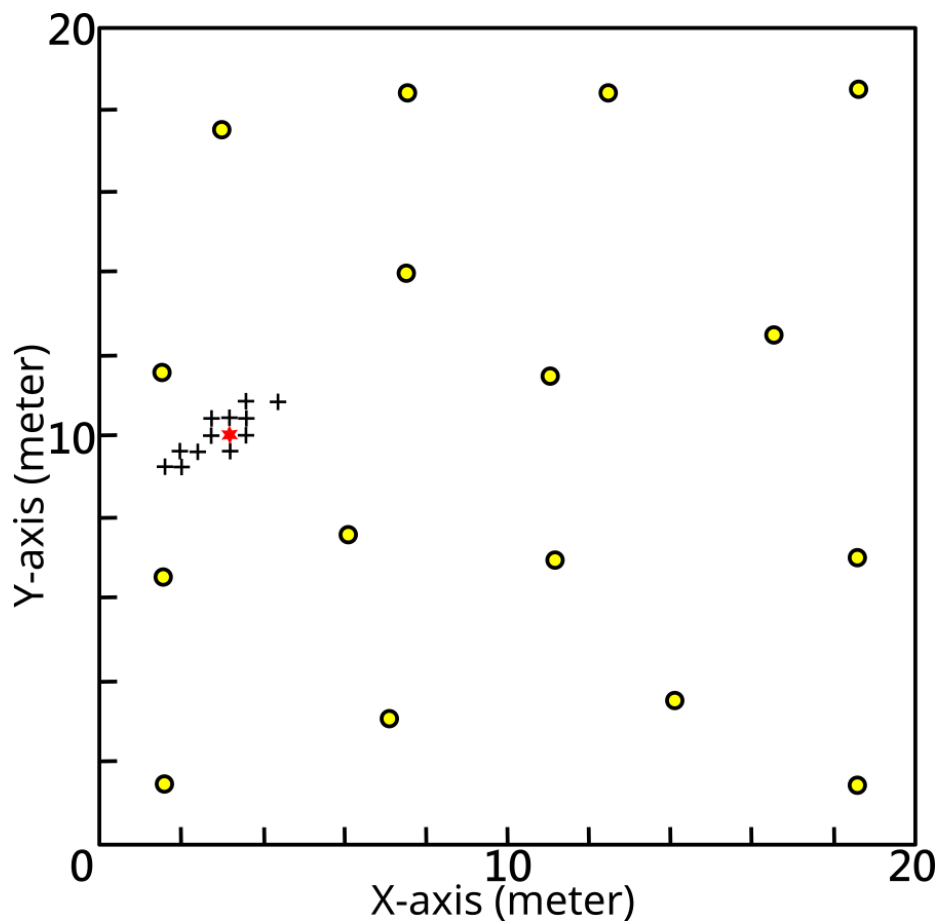


圖二十九、單次退火降溫過程



#### 4.2.2. 模擬退火法反推估結果

根據上一小節成果與 3.4 的演算法流程，每次模擬退火降溫過程約會執行 3000 次疊代，實際數字依疊代狀況變化。每個疊代皆要執行一次 MODFLOW 與 MT3D 進行模擬，因此整個降溫流程平均耗時約 12 至 14 天，計畫執行期程內共執行 12 次降溫過程。圖三十便分別為 12 次反推估之污染源座標，考慮降溫過程涉及隨機性與不確定性，本工作以一個網格解析度 0.4 公尺做為 KDE 的不確定範圍距離並依此繪圖。

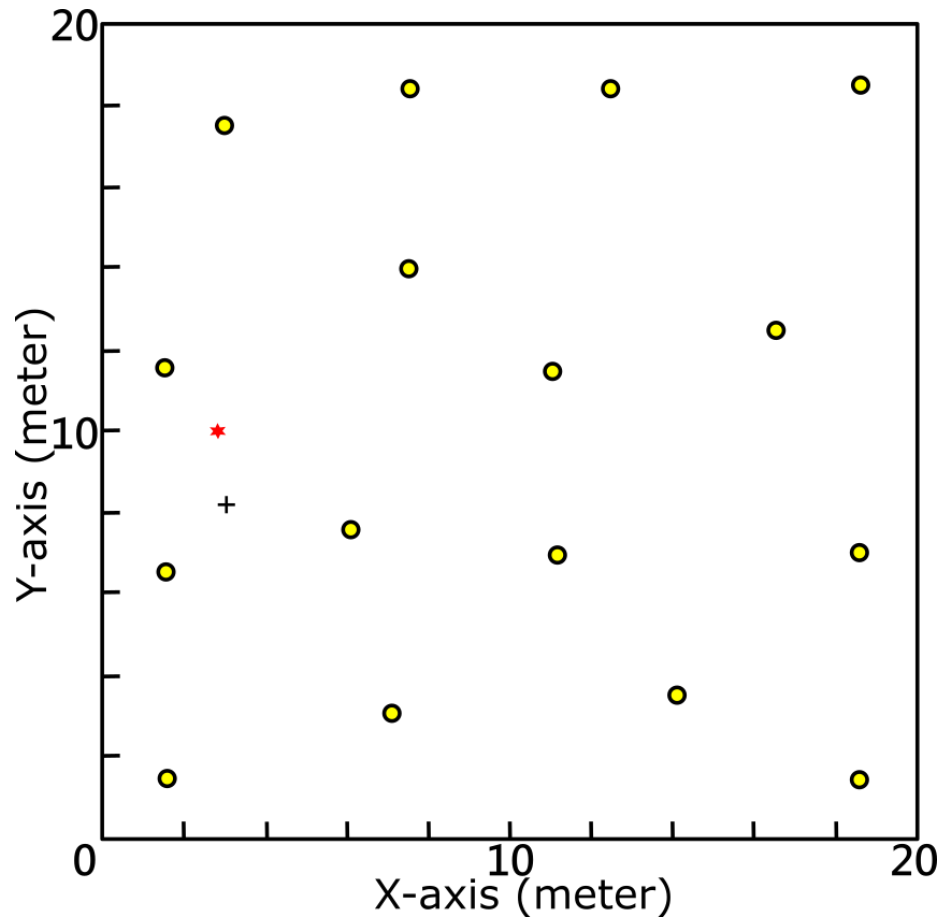


圖三十、以傳統退火演算法推估之污染源座標位置。其中黃色點為觀測點，+字號為推估位置而紅色星星為實際污染源位置。



### 4.2.3. 量子退火法反推估結果-流程一

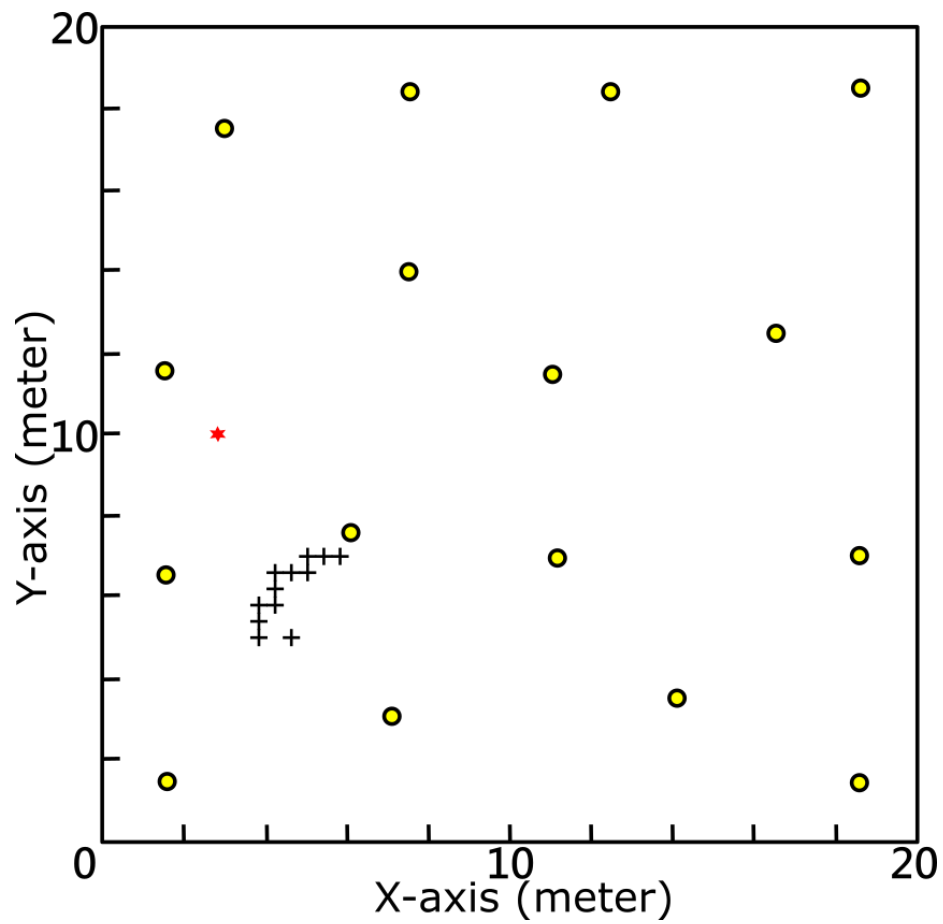
如同 3.7 小節描述，由於流程設計造成單次降溫過程花費超過一個月時間，本工作僅執行一次降溫流程，反推估之污染源座標如



圖三十一、以量子退火演算法推估之污染源座標位置。其中黃色點為觀測點，+字號為推估位置而紅色星星為實際污染源位置。



#### 4.2.4. 量子退火法反推估結果-流程二



圖三十二、以量子退火演算法推估之污染源座標位置。其中黃色點為觀測點，+字號為推估位置而紅色星星為實際污染源位置。



4.2.5. 綜合比較

如同 4.1 所述，除了污染源座標外，本工作另外執行溶質重量與注入量之反推估。表五便為 12 次傳統退火法、1 次量子退火法流程一與 12 次量子退火法流程二之反推估成果比較。結果顯示流程一的量子演算法與傳統退火演算法算出的結果接近，流程二的量子演算法反推估成果差異較大，推測可能為將數值模式轉換至 QUBO 模型時，轉換過程造成的差異。

表五、本工作進行所有反推估測試之成果比較

|            | 理想案例       | 傳統退火       | 量子退火 1    | 量子退火 2     |
|------------|------------|------------|-----------|------------|
| 污染源座標      | (3.0,10.2) | (1.0,9.6)  | (2.8,8.4) | (5.6, 7.2) |
|            |            | (2.8,9.6)  |           | (5.2, 7.2) |
|            |            | (1.6,10.4) |           | (4.8,7.2)  |
|            |            | (2.0,10.4) |           | (4.8,6.8)  |
|            |            | (2.0,10.0) |           | (4.4,6.8)  |
|            |            | (2.0,9.6)  |           | (4.0,5.2)  |
|            |            | (2.0,9.2)  |           | (4.0, 6.8) |
|            |            | (2.4,10.4) |           | (4.0, 6.0) |
|            |            | (3.2,9.2)  |           | (3.6, 6.0) |
|            |            | (2.8,10.4) |           | (3.6, 5.6) |
|            |            | (3.6,10.0) |           | (4.0, 6.4) |
|            |            | (4.0,10.8) |           | (3.6, 5.2) |
| 溶質重量[kg/d] | 60         | 28         | 26        | 21         |
|            |            | 29         |           | 23         |
|            |            | 28         |           | 22         |
|            |            | 28         |           | 25         |
|            |            | 28         |           | 41         |
|            |            | 27         |           | 36         |
|            |            | 29         |           | 26         |



|               |     |      |      |      |
|---------------|-----|------|------|------|
|               |     | 28   |      | 25   |
|               |     | 26   |      | 27   |
|               |     | 27   |      | 32   |
|               |     | 29   |      | 30   |
|               |     | 26   |      | 29   |
| 注入量[m³]       | 2.5 | 0    | 0    | 1    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 1    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 1    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 2    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
|               |     | 0    |      | 0    |
| 平均 RMSE[mg/L] | -   | 5.56 | 6.32 | 8.18 |



## 五、結論與建議

本工作藉由建立地下水流與污染傳輸理想案例之觀測值，應用傳統退火與量子退火兩種演算法進行污染溯源，並藉此評估兩種技術的效能差異。為了達成此目標，本計畫使用傳統電腦 CPU i7-12700H 與量子電腦 D-wave 2000Q，並將所有反推估結果進行量化與比較。執行時間方面，由於退火過程需執行 MODFLOW 與 MT3D 運算，需耗時約兩個禮拜方能完成一次傳統退火流程。而量子電腦則分成兩種執行流程，第一種流程反推估成果與傳統電腦接近，但由於使用傳統電腦執行模式，導致須花費大部分時間在執行模式與排隊登入量子電腦上，完成一次退火流程需花費約一個月。第二種流程則是將模擬模式轉換為 QUBO 形式，但由於轉換方法仍處於發展階段，大部分轉換方法均無法適用於複雜問題。而本研究選用的 PDECCO 轉換方法雖然能成功執行整個轉換流程，並於量子電腦內花費 0.9 秒完成退火流程，但可能受轉換影響，反推估成果較第一種流程差，且需花費許多時間進行轉換的前置作業。

由於本計畫目的僅為將量子運算技術引入至土壤地下水領域的嘗試。未來除了希望能將此技術應用於現場並進行效能測試外，並將依照現場狀況測試更多參數(如含水層異質性或接近真實狀況的含水層)在反推估上的效率。除此之外本工作在推估過程中所遭遇的問題，將應用相關品質管理流程如 PDCA(Plan-Do-Check-Act)找出問題根源，以解決本工作所遭遇之效率問題，並增進將量子計算技術應用至現場之可能性。本工作之成果希望能推進量子運算於土水領域的嶄新應用(如高異質性含水層模擬、高效整治藥劑開發、整治決策最佳化或由觀測濃度值進行污染預測等)，並使土水領域的技術能有更多進展。



## 六、參考文獻

1. Alexiades Armenakas, A., Baker, O. K. (2021). Implementation and analysis of quantum computing application to Higgs boson reconstruction at the large Hadron Collider. *Scientific Reports*, 11(1), 1-12.
2. Ayvaz, M. T. (2010). A linked simulation–optimization model for solving the unknown groundwater pollution source identification problems. *Journal of Contaminant Hydrology*, 117(1-4), 46-59.
3. Arabnia, H. R., Daimi, K., Stahlbock, R., Soviany, C., Heilig, L., & Brüssau, K. (Eds.). (2020). *Principles of Data Science*. Springer.
4. Arute, F., Arya, K., Babbush, R., Bacon, D., Bardin, J. C., Barends, R., ... & Martinis, J. M. (2019). Quantum supremacy using a programmable superconducting processor. *Nature*, 574(7779), 505-510.
5. Au-Yeung, R., Chancellor, N., & Halffmann, P. (2023). NP-hard but no longer hard to solve? Using quantum computing to tackle optimization problems. *Frontiers in Quantum Science and Technology*, 2, 1128576.
6. Bharadwaj, S. S., & Sreenivasan, K. R. (2023). Hybrid quantum algorithms for flow problems. *arXiv preprint arXiv:2307.00391*.
7. Chakraborty, A., & Prakash, O. (2020). Identification of clandestine groundwater pollution sources using heuristics optimization algorithms: a comparison between simulated annealing and particle swarm optimization. *Environmental Monitoring and Assessment*, 192(12), 1-19.
8. Chandra, R. (2013). Partial differential equations constrained combinatorial optimization on an adiabatic quantum computer (Doctoral dissertation, Purdue University).
9. Chemistry Learner, <https://www.chemistrylearner.com/>
10. Criado, J. C., & Spannowsky, M. (2022). Qade: solving differential equations on quantum annealers. *Quantum Science and Technology*, 8(1), 015021.
11. Dougherty, D. E., Marryott, R.A. (1991) "Optimal groundwater management: 1. Simulated annealing", *Water Resources Research*, 27(10), pp.2493-2508.



12. Golden, J. K., & O'Malley, D. (2021). Pre-and post-processing in quantum-computational hydrologic inverse analysis. *Quantum Information Processing*, 20(5), 1-18.
13. Cooper, P., Ernst, P., Kiewell, D., & Pinner, D. (2022). Quantum computing just might save the planet. McKinsey & Company.
14. Freeze, R. A., Cherry, J.A., 1979. *Groundwater*.
15. Grant, E. K., & Humble, T. S. (2020). Adiabatic quantum computing and quantum annealing. In *Oxford Research Encyclopedia of Physics*.
16. Habiyakare, T., Zhang, N., Feng, C. H., Ndayisenga, F., Kayiranga, A., Sindikubwabo, C., ... & Shah, S. (2022). The implementation of genetic algorithm for the identification of DNAPL sources. *Groundwater for Sustainable Development*, 16, 100707.
17. Hassija, V., Chamola, V., Goyal, A., Kanhere, S.S. and Guizani, N. (2020), Forthcoming applications of quantum computing: peeking into the future. *IET Quantum Commun.*, 1: 35-41.
18. Hidary, J. D., & Hidary, J. D. (2021). *Quantum computing: an applied approach* (Vol. 1). Springer.
19. Hwang, H. T., Neupauer, R. M., Jeon, S. W., Steinmoeller, D. T., Sudicky, E. A., Lee, S. S., & Lee, K. K. (2022). Evaluating backward probability model under various hydrogeologic and hydrologic conditions. *Journal of Contaminant Hydrology*, 244, 103909.
20. IBM , 2022. The Quantum Decade. IBM Institute of Business Value.  
<https://www.ibm.com/downloads/cas/J25G35OK>.
21. IBM Research, <https://research.ibm.com/>
22. Ivancova, O., Korenkov, V., Tyatyushkina, O., Ulyanov, S., & Fukuda, T. (2020). Quantum supremacy in end-to-end intelligent IT. Pt. 2: State-of-art of quantum sw/hw computational gate-model toolkit. *Системный анализ в науке и образовании*, (1), 85-125.
23. HaKirkpatrick, S., Gelatt Jr, C. D., & Vecchi, M. P. (1983). Optimization by simulated annealing. *science*, 220(4598), 671-680.



24. Morvan, A., Villalonga, B., Mi, X., Mandra, S., Bengtsson, A., Klimov, P. V., ... & Smith, W. C. (2023). Phase transition in random circuit sampling. arXiv preprint arXiv:2304.11119.
25. O'Malley, D. (2018). An approach to quantum-computational hydrologic inverse analysis. *Scientific reports*, 8(1), 1-9.
26. O'Reilly library.  
<https://www.oreilly.com/library/view/learn-arcore-/9781788830409/e24a657a-a5c6-4ff2-b9ea-9418a7a5d24c.xhtml>
27. M.G., McDonald and A.W., Harbaugh. (1998). A modular three dimensional finite-difference ground-water flow model. *USGS Techniques of Water Resources Investigations Book 6, Ch. A1*, 586p.3
28. Mckinsey & Company, 2022. Quantum Technology Monitor.  
<https://www.mckinsey.com/~/media/mckinsey/business%20functions/mckinsey%20digital/our%20insights/quantum%20technology%20sees%20record%20investments%20progress%20on%20talent%20gap/quantum-technology-monitor-april-2023.pdf>
29. Moghaddam, M. B., Mazaheri, M., & Samani, J. M. V. (2021). Inverse modeling of contaminant transport for pollution source identification in surface and groundwaters: a review. *Groundwater for Sustainable Development*, 15, 100651.
30. Popkin, G. (2016). Quest for qubits. *Science*, 354( 6316), 1090-1093. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.354.6316.1090>.
31. Russo, M., Thaker, A., & Adam, S. (2018). The coming quantum leap in computing. Boston consulting group (BCG).
32. Sarkar, A. (2022). Automated Quantum Software Engineering: why? what? how?. arXiv preprint arXiv:2212.00619.
33. Schmitt, M., Rams, M. M., Dziarmaga, J., Heyl, M., & Zurek, W. H. (2022). Quantum phase transition dynamics in the two-dimensional transverse-field Ising model. *Science Advances*, 8(37), eabl6850.
34. Souza, A. M., Martins, E. O., Roditi, I., Sá, N., Sarthour, R. S., & Oliveira, I. S. (2022). An application of quantum annealing computing to seismic inversion. *Frontiers in Physics*, 9, 748285.



35. Singh, R. M., Datta, B., & Jain, A. (2004). Identification of unknown groundwater pollution sources using artificial neural networks. *Journal of water resources planning and management*, 130(6), 506-514.
36. Sun, A. Y., Painter, S. L., & Wittmeyer, G. W. (2006). A constrained robust least squares approach for contaminant release history identification. *Water Resources Research*, 42(4).
37. Sun, N. Z. (2013). *Inverse problems in groundwater modeling* (Vol. 6). Springer Science & Business Media.
38. Ugwuishiwu, C. H., Okoronkwo, M. C., Bande, P. S., & Asogwa, C. N. (2021). An overview of classical and quantum complexity theory. In 2021 IEEE 4th Int. Conf. on Information Systems and Computer Aided Education (pp. 166-171).
39. Walid Ben-Ameur (2004). Computing the Initial Temperature of Simulated Annealing. *Computational Optimization and Applications*, 29(3), 369–385.
40. Wang, Z., Liu, L., Zhou, H., & Lan, M. (2019). How is the confidentiality of crime locations affected by parameters in kernel density estimation? *ISPRS International Journal of Geo-Information*, 8(12), 544.
41. Wikipedia, [https://en.wikipedia.org/wiki/Nondeterministic\\_Turing\\_machine](https://en.wikipedia.org/wiki/Nondeterministic_Turing_machine).
42. Wikipedia, [https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum\\_logic\\_gate](https://en.wikipedia.org/wiki/Quantum_logic_gate).
43. Wikipedia, [https://en.wikipedia.org/wiki/Standard\\_Model](https://en.wikipedia.org/wiki/Standard_Model)
44. Yeh, H. D., Lin, C. C., & Yang, B. J. (2014). Applying hybrid heuristic approach to identify contaminant source information in transient groundwater flow systems. *Mathematical Problems in Engineering*, 2014.
45. Zheng, C.M., Wang, P. P. (1999). MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide. US Army Corps of Engineers, Engineer Research and Development Center Contract Report SERDP-99-1.
46. 鍾佳良 (2021)。利用模擬退火演算法推估地下污染物來源。國立中央大學應用地質研究所碩士論文。
47. 行政院(2020)。第3,780次行政院會簡報。