

比較正方形、三角形網格與空間模擬退火法採樣 佈點尋找圓形目標之效率

Relative Efficiencies of Square, Triangular Grids and SSA Sampling Design in the Search for Round Shaped Targets

台大生工系
博士候選人

鄭百佑

Bai-You Cheng

台大生工系
碩士

陳志豪

Chih-Hao Chen

台大生工系
碩士班研究生

林聖淇

Sheng-Chi Lin

台大生工系
教授

張尊國*

Tsun-Kuo Chang

摘 要

本文探討採樣策略在搜尋污染場址中高污染區之能力。文中應用空間分析的方式，進行採樣配置的高污染區命中率分析，並比較空間模擬退火佈點採樣策略與網格式佈點採樣策略在搜尋污染場址中高污染區之能力。本研究的結果指出空間模擬退火佈點法，在搜尋污染場址之高污染區方面確實比網格式佈點法更優良，在相同的條件下，相同的採樣密度和同一污染場址，模擬退火佈點法比網格式佈點法有較低的錯失率。

關鍵詞：空間模擬退火法，採樣策略，高污染區。

ABSTRACT

In this paper, objective of sampling is to determine where "hot spots" are present. Spatial analysis method is presented to assess the capability of searching for hot spots of sampling strategy, includes Spatial Simulated Annealing (SSA) and grid sampling strategy. The results indicate the Spatial Simulated Annealing is better than grid sampling design when searching for hot spots. Grid sampling design has the higher miss rate than Spatial Simulated Annealing when deal with the same pollution site with same sampling density.

Keywords: Spatial simulated annealing, Sampling strategy, Hot spots.

*通訊作者，台灣大學生物環境系統工程學系教授，106 台北市大安區羅斯福路 4 段 1 號，tknchang@ntu.edu.tw

一、前言

任何之採樣調查工作都期望以最小之資源投入獲取最大之資訊產出，本文目的在探討空間模擬退火佈點採樣策略與網格式佈點採樣策略在搜尋污染場址中高污染區(Hot spots)之能力。"Hot spots"通常定義為場址中較小、局部且具有較高濃度特徵的污染區域，為了尋找高污染區，需要恰當的採樣設計。由於採樣區域相較於母體通常非常有限，因此調查結果中必然存有一定之錯失機率。

在進行土壤污染調查之採樣設計時，對於場址如有足夠了解之情形下，以主觀判斷式採樣最具彈性與效益，進行土壤污染調查時，宜優先建立場址之概念模式。而對場址無概念與歷史記錄之先期調查；或如土壤整治驗證調查，場址經整治後，空間結構受到擾動破壞，造成主觀判斷式採樣難以施行，則網格式採樣與空間模擬退火法可適用。

本研究選取基力化工污染事件之中福地區部分坵塊，分別使用正方形網格式、三角形網格式、空間模擬退火法進行佈點，應用地理資訊系統(GIS)工具於各採樣點繪製欲計算錯失率大小之圓形，之後利用所切分出來的面積大小計算理論高濃度區錯失率，分別記錄三種採樣方法在不同圓形大小之表現進行比較。其結果再依照 Ferguson(1992)所提出的方法，進行模擬試驗，統計其結果並與理論值比較。結果指出空間模擬退火佈點法，在搜尋污染場址之高污染區方面確實比網格式佈點法更優良，在相同的條件下，相同的採樣密度和同一污染場址，模擬退火佈點法比網格式佈點法有較低的錯失率。

二、文獻回顧

Gilbert(1987)提出以搜尋高污染區為目的採樣設計應考慮下列因素：

1. 採樣點配置的幾何形狀與距離：三角形網格式較其他形狀在高污染區的搜尋上具有更好的效果；而隨著距離的縮短找到高污染區的機率會提高。

2. 高污染區的形狀與大小：高污染區越大，則越容易被發現；而高污染區的形狀也會影響被偵測到的機率。狹窄或者是較小的圓形可能恰好位在採樣點間而未被發覺，較大的圓以及長短軸比例相近的橢圓是較易被發現的。

3. 錯失率：評估場址內有高污染區存在而卻未發現的機率。

取得高含量分佈區之機率有關的問題(陳尊賢, 1997)，取決於：

1. 採樣的樣品數
2. 高濃度區分佈之範圍有多大
3. 選用之網格式為何
4. 污染區之形狀
5. 採樣與分析之成本等各方面之考量

表 1 條列了有關高污染區錯失率的文獻，圖 1 為 Smith (2004)提出不同網格式佈點法對高污染區命中率之表現。

Singer (1972, 1975, 1976)探討鑽探礦床資源時發展出計算錯失率的方法及軟體 (ELIPGRID)，Gilbert (1984, 1987)依其理論導出計算公式；以正方形網格式為例計算之公式如下：

$$G = \frac{R}{0.59} \dots\dots\dots(1)$$

$$N = \frac{A}{G^2} \dots\dots\dots(2)$$

G = 格點間距(公尺)

R = 所欲偵測之最小高濃度區半徑(公尺)

0.59 = 當污染區為圓形時，具有 95%命中率所使用之係數

A = 場址面積(平方公尺)

N = 所需採樣點數

美國環保署現行計算網格式採樣之高污染區命中率便是依照上述方法；紐西蘭環境部亦參考上式計算並提出之採樣點數建議如表 2 所示。

對土壤污染調查進行採樣設計時應考慮採樣目的、採樣設計的成本與效益、環境中污染物的型態與變異及實際使用上的可行性。

表 1 採樣配置與高污染區命中率相關之文獻

作者	摘要
D. A. Singer, F. E. Wickman (1969)	提出一個方法計算在空間中使用正方形、矩形、三角形的網格形式採樣時發現橢圓形目標的機率。
D. A. Singer (1972) (1975)	發表一套用於計算目標命中率的程式(ELIPGRID), 並且評定了正方形以及三角形網格在尋找橢圓形目標上的效率。
J. Zirschky, R. O. Gilbert (1984), (1987)	利用 ELIPGRID 建立用於對應不同格點間距以及目標大小所對應命中率的計算圖表, 並將其應用在環境中污染源的尋找。
J. R. Davidson (1995)	修正並改寫為 ELIPGRID-PC 使其能在個人電腦上使用, 隨後並被整合成為 DQO 在最佳化採樣設計時所使用的工具。
C. C. Ferguson (1992)	討論不同採樣配置、數量在搜尋受污染區時的表現。
U.S.EPA (2002)	詳細的介紹了不同形式的網格配置以及其特性。
S. Smith (2004)	提到三角形網格較其他形狀網格在尋找圓形的高污染區時具有較佳的效率。

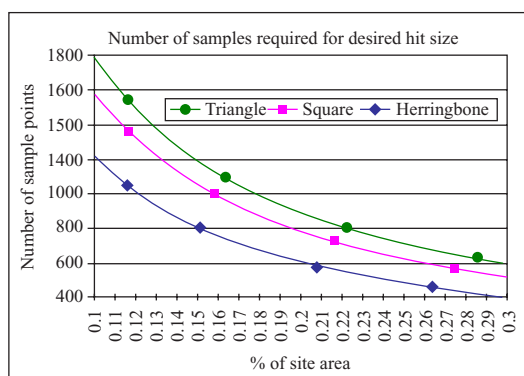


圖 1 三角形網格、正方形網格、魚骨狀網格對不同比例之受污染區命中率達 100% 所需點數 (Smith, 2004)

空間土壤採樣中策略是影響調查工作效率與成本的主要因素，密集式的採樣花費龐大的經費與人力，但可獲得整個地區空間變異性的完整輪廓；然而，少數的採樣樣品雖然是較經濟的，但卻可能錯失重要的空間特性。為了解調查場址的空間特性，Christakos (1992) 探討不同種類的系統網格方法，如三角形、矩形等進行採樣，U.S. EPA 也建議土壤污染場址運用網格式採樣佈點策略，若是以機率模組的採樣設計選擇採樣點，Brus 和 De Gruijter(1997)認為這種採樣的過程會減低選擇性偏估和選擇主觀性之影響。

表 2 使用系統網格佈點搜尋圓形高濃度區具有 95% 命中率所需最少點數 (Ministry for the Environment, New Zealand, 2004)

Diameter of the circular hot spot that can be detected with 95% confidence (m)	Square grid size G(m)	Area of site (m ²)	Minimum number of sampling points recommended (N)
11.8	10.0	500	5
15.2	12.9	1000	6
19.9	16.9	2000	7
21.5	18.2	3000	9
22.5	19.1	4000	11
23.1	19.6	5000	13
23.6	20.0	6000	15
23.9	20.3	7000	17
24.2	20.5	800	19
25.0	21.2	9000	20
25.7	21.8	10,000	21
28.9	24.5	15,000	25
30.5	25.8	20,000	30
31.5	26.7	25,000	35
32.4	27.5	30,000	40
32.9	27.9	35,000	45
33.4	28.3	40,000	50
34.6	29.3	45,000	52
35.6	30.2	50,000	55

一般演算法可以用來幫助尋找組合問題之解集合，但對於複雜的組合解空間則須更有效率的利用優選法來解決這一類問題，但前提是須能收斂到全域最佳解，Aarts 和 Korst(1990)認為模擬退火法是具備這種功能的演算法之一，不同形式的模擬退火演算法之觀念，最早是 Metropolis 等人在 1953 年提出，但當時所處理的並不是優選的問題，是提供高速電腦處理二維有限空間最大放置問題 (two-dimensional rigid- sphere system)。一直到了 1983 年，才由 Kirkpatrick (1983) 於科學期刊(Science)上將它應用在大尺度組合優選之問題上，其後模擬退火法陸續地被應用於不同領域之優化求解問題。

土壤採樣點的配置應考量土壤的全面情況，避免分佈過度集中或散佈在田邊或溝渠旁的位置。一般系統網格式的佈點受不規則邊界的限制，使原本依起始點往週遭延伸的衍生點會落於緊鄰邊界線的區域，通常遇到這一類的情形時，規劃者必須重新計算隨機起始點，或手動調整偏離點，人為調整可能違反了原本的設計原則。

Van Groenigen 和 Stein 在 1998 年提出空間模擬退火演算法(Spatial Simulated Annealing, 簡稱 SSA)，其應用是針對優選採樣策略來設計。它的特色包括結合初步的觀測點且考慮採樣時的限制因子與邊界條件，藉由離散化後的編碼，將障礙物的編碼與邊界外的屬性歸屬於同一性質的參數；這樣的方式，可以考量到障礙物造成的邊界效應，在進行演算的過程中，改變目前解集合的候選點不會考慮往障礙物處作移動，因障礙物造成邊界效應，使得結果能均勻分佈。關於 SSA 的均勻分佈特性，張等(2003)由控制面積的觀點評價出 SSA 相較其他網格式佈點有更優的均勻性。

SSA 尚允許搭配不同的量化後目標函數來使用。由前人研究中可知，網格式佈點之格點間距將直接影響高污染區之命中率。本文中採用最短距離法的分佈點位置的方法 MMSD (min of the mean of the shortest distances)，目的是將採樣點均勻散佈在研究區域上，其計算方法是量測任意選取的位置與其最近的一處採樣點距離的期望值

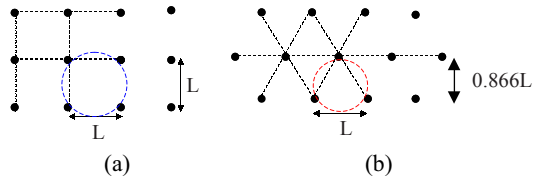


圖 2 (a)正方形網格式佈點法 (b)三角形佈點法之最大可能發生且未被偵測到之情形。

最小，如此可以藉此方式優選出高污染區錯失率最低之解。

三、方法與材料

3.1 高污染區錯失率

1. 最大錯失圓之定義：

假若固定採樣點目以網格式佈點方式，均佈在場址上，則採樣點兩兩間必有一固定距離 L ，對角線距離為 $\sqrt{2}L$ ，若 Hot Spot 的半徑為 $\sqrt{2}L/2$ 且圓心在網格的中正心時，此圓周正好鄰接 4 個網格式採樣點，則此圓稱之為最大錯失圓，如圖 2(a) 所示，三角形佈點亦然如圖 2(b) 所示。

上例中當 Hot Spot 的半徑大於 $\sqrt{2}L/2$ 時，無論其圓心位置何處(不考慮佈點邊界問題)，此圓必包含了一個以上的採樣點，此時稱為命中 (Hit)；當 Hot Spot 的半徑小於 $\sqrt{2}L/2$ 時即有錯失的機率 (β)，令其圓心位置的集合為 S ，則全部可佈點面積 A 與可錯失圓心位置集合面積 AS 之比值即為錯失率，如式(3)：

$$\beta = \frac{AS}{A} \dots\dots\dots(3)$$

- β : 採樣佈點錯失 Hot Spots 的機率
- AS : 可錯失圓心位置集合面積
- A : 全部可佈點面積，即調查場址面積

表 3 條列出正方形場址 10×10 單位且佈點在 4 個角落間的 Hot Spot 半徑(r)與可錯失面積(AS)之關係，當場址中 Hot Spot 半徑為 r 時，若 Hot Spot 之圓心與採樣點距離小於 r 時，採樣點將在 Hot Spot 之範圍內，故大於 r 時之可錯失圓心位置集合面積將為 AS ，當 $r=7.071$ 時，由於 Hot Spot 之範圍已經涵蓋整個場址，無論其圓心在何處，四個佈點最少有一點可以在其範圍內，故 AS 為 0，而圖 3 將此關係描繪出來。

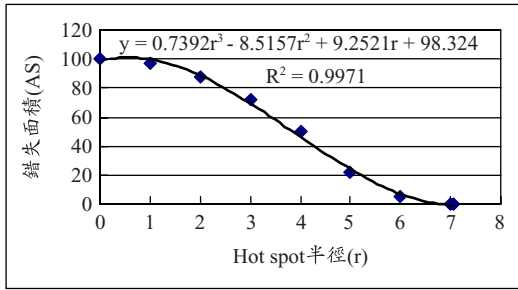


圖 3 正方形場址錯失面積計算

表 3 Hot Spot 半徑(r)與可錯失面積之關係

幾何圖形	Hot Spot 半徑(r)	可錯失面積(AS)
	r = 0	AS = 100
	r = 1	AS = 96.858
	r = 2	AS = 87.434
	r = 3	AS = 71.726
	r = 4	AS = 49.735
	r = 5	AS = 21.46
	r = 6	AS = 5.066
	r = 7	AS = 0.038
	r = 7.071	AS = 0
	r > 7.071	AS = 0

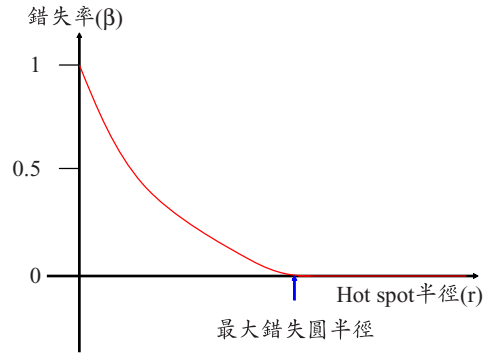


圖 4 Hot Spot 半徑對其錯失率關係圖

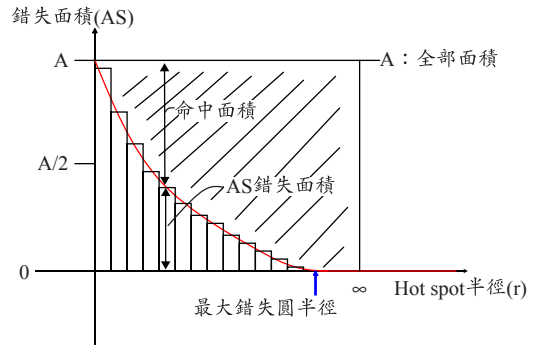


圖 5 Hot Spot 半徑(r)對其錯失面積(AS)關係圖

2. Hot Spot :

Hot Spot 在污染場址的表現上，若為圓形，可表示如式(4)：

$$U(S, r) = U(x_i, y_i, r_i) \dots\dots\dots(4)$$

S : 可錯失圓心位置集合

r : Hot Spot 的半徑

固定場址之錯失率 β 與 Hot Spot 半徑 r 關係

如圖 4，為錯失率 $\propto \frac{1}{r}$

當 Hot Spot 極小時半徑(r)接近於 0，採樣點對其命中的機率極近於 0，所以錯失率接近於 1；

當 Hot Spot 半徑(r)達到最大錯失圓時，採樣點對其命中的機率極近於 1，所以錯失率接近於 0。

固定場址之可錯失圓心位置集合面積 AS 與 Hot Spot 半徑 r 關係如圖 5 所示：

圖 5 中表示在固定場址與固定採樣點數目下，Hot Spot 的半徑會影響錯失面積(AS)，將曲

線下的面積積分即得 Hot Spot 半徑由 0 到最大錯失圓半徑此區間下的所有錯失面積，而其上的斜線為是命中面積。

3.2 空間模擬退火法

1. 模擬退火法演算流程

模擬退火演算法基本步驟，包括(1)初始解；(2)鄰近解；(3)移步；(4)停止原則。在模擬退火法中，從鄰近解隨機挑選一解，與目前解進行比較，如比目前解較佳則無條件移到此鄰近解，然而如果比目前解較差，則由移步機率 (for Minimization Problem) 決定

$$B_{ij}(\beta) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{\Delta C_{ij}}{\beta}\right) & \text{if } \Delta C_{ij} > 0 \\ 1 & \text{if } \Delta C_{ij} \leq 0 \end{cases} \dots\dots(5)$$

其中 B_{ij} 為移步機率， $\Delta C_{ij} = C_i(\text{鄰近解}) - C_j(\text{目前解})$ ， β 為溫度參數，其值逐漸減小。當 $\Delta C_{ij} > 0$ 時， β 越小則接受劣解之機率越小。 β 大小由三個參數控制：最高溫 (T_{max})、最低溫 (T_{min})、與降溫梯度 (γ)；初始搜尋時 β 令為最高溫度，在同一溫度進行最大搜尋次數 $Lmax$ 後，則溫度降低為 $\gamma \times T_{max}$ 。然當溫度降低並低於最低溫 (T_{min})，則演算停止。因此，可有最高溫 (T_{max})、最低溫 (T_{min})、降溫梯度 (γ)、與 $Lmax$ 決定演算停止時間。模擬退火法之初始解為隨機決定、鄰近解視問題設定、評估鄰近解隨機挑一鄰近解、移步則由移步機率決定、停止原則由溫度相關參數決定。

遇到最佳化求解問題時，必需先定義問題的目標函數式以及限制式，因為目標函數式所對應出來的目標函數值，將會影響到退火時間的設定，而退火時間參數中，如起始溫度、最終溫度等參數的設定，都和目標函數值之值域有關，並且左右演算的結果。目標函數式與限制式一旦被合適的定義使用之後，便開始進行搜尋最佳解的工作，開始時先隨機抓取初始解，整個搜尋過程便由此初始解出發，一般來說，模擬退火法之搜尋結果，較不受到初始解的影響，因為模擬退火法有能力於搜尋初期時，接受較劣解而搜尋許多不同的區域，不同於傳統最佳化求解方法，容易

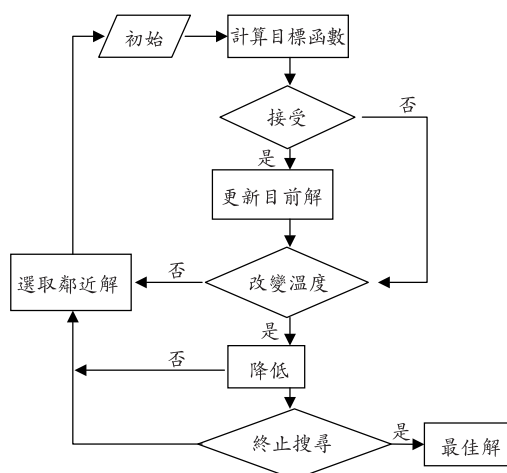


圖 6 模擬退火演算法流程

受到初始解選取之影響，造成搜尋範圍被侷限於初始解附近之可行解空間；另外就算是遇到可行解空間超級龐大的問題，也可以藉由增加每一階段的搜尋次數來彌補因為可行解空間過大，而沒有辦法有效地搜尋整個可行解空間的缺點；初始解給定之後，再加上最適合此問題的退火時間表，便可以進行最佳解之搜尋。圖 6 為模擬退火法之演算流程。模擬退火法以 Metropolis Method (式 5)，來判斷是否接受鄰近解成為下一次搜尋開始的目前解，每當完成一個溫度階段內所設定的搜尋次數時，便將目前溫度乘上降溫梯度，若是低於最終溫度之設定值，則整個最佳解搜尋過程宣告停止，若尚未到達最終溫度，則繼續於更新過後之溫度階段中搜尋最佳解，如此反覆進行，一直到符合停止原則結束搜尋(童，2002)。

2. 建構問題模型

(1) 初始化-前置作業之資料處理

一般土地利用的資料儲存格式是以向量式圖層(Vector Data)的點、線、面來表示地理上的邊界特徵與變化，同時儲存該圖層的屬性資料，每一個 Vector Data 均有精確的座標位置與相鄰圖徵的位向關係，但此種資料格式較不適合用來表達研究區域的邊界或土地使用等連續性的變化的現象；而網格式資料(Raster Data)是以一群同形狀的方格(Cell)來表示地理上的特徵，每一個方格均含有一數值，並以該方格的中心點記載該

方格在圖層上的位置，適合套於具不同幾何形狀的研究區域，以利演算法之進行。

在進行模擬退火演算法之前，須先將圖層資料初始化，此步驟可藉由 ARCVIEW 3.X 的嵌入式空間分析模組將 Shapefile 檔案格式的圖層轉換為 Raster Data 後，再編碼以 0-1 數值型態的矩陣值來表示 Cell 屬性，也就是 Ascii File 的資料格式，且於同時讀取出圖層的方格的大小與研究地區的起始邊界座標值，方便演算終止後，整合最佳佈點位置資訊(相對座標)。

由於本研究方法是應用在考慮二維空間的採樣點分佈，所以並無將高程因素考慮進來，在進行模式運算時需將研究的區域先”初始化”，即將研究區域加以離散化(Discrete)成為有限之網格(Grid Cell)維度，也就是整個區域可以用 Raster Data 來代表，然而一般在進行網格計算時，還是會因為維度太大而造成計算之複雜與耗時，所以需要將劃定有效範圍後，需將離散化之網格再加以分區，如此不但可以有效地降低參數之維度提高演算的效率與效能，更能反應出實際區域中其參數擁有一定程度之地區性。

(2) 空間解：

在有限範圍的佈點區域上，給予需求的調查點個數(有限的 n 個採樣點)，假設可佈點區域具有 m 個可佈點處，則在此區域可能的採樣點組合為 C_n^m 組可能，將全部的組合之各別解(ϕ_{MMSD} ，下節陳述)計算出再比較得最小解即為所求取之最佳組合點， ϕ_{MMSD} 為均勻性指標，具有均勻的特性，但是若 $m=100, n=10, C_{10}^{100} = 1.731E13$ 這是一個相當大的數目，然而 $m=100$ 的佈點尺度可能以現地情形來說，尚顯得太小，例如以 1 公頃的土地來進行可佈點位置的離散化工作，我們將選擇以 1 公尺 x1 公尺為適當採樣精度，則如此 $m=10,000$ ，故任意一個小區域佈點，即可能具有天文數字的組合數目，若不以演算法來進行優化，可能無法順利達成佈點的目標。

(3) 目標函數(ϕ_{MMSD})：

本研究是採用以最短距離法的分佈點位置的方法 MMSD，目的是將採樣點均勻散佈在研究區域上，其計算方法是量測任意選取的位置與其

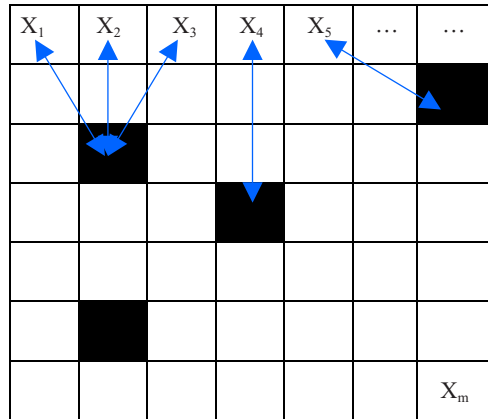


圖 7 MMSD 計算方法示意圖

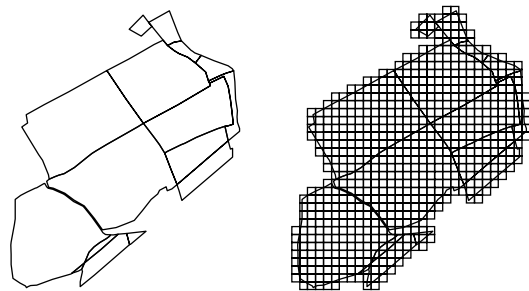


圖 8 研究區域離散化示意圖(Convert to Grid Cell)

最近的一處設計採樣點距離的期望值之和為最小，如此可以藉此方式優選出散佈在區域內最均勻的點分佈。

圖 7 為一個範例採樣場址，經離散化後具有 m 個網格，其中黑色的格子為預計的佈點位置(此為隨機產生)，然後準備優化這些起始點。圖 8 中取每一個網格(x_1, \dots, x_n)與其最近之佈點位置計算其距離(d_1, \dots, d_n)，則 MMSD 其值為

$$\phi_{MMSD} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m d(x_i) \dots\dots\dots(6)$$

因為不同的佈點會影響 MMSD 的計算，所以，將佈點位置的集合視為 S，則式 6 可改寫為

$$\phi_{MMSD}(S_j) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m d(x_i, S_j) \dots\dots\dots(7)$$

其中 S_j ：第 j 次採樣方案， x_i ：整個研究地區裡第 i 個網格點， $d(x_i)$ ：網格點與最近的已佈點位置距離。

3. 鄰近解產生與接受機制

(1) 衍生機制(Generation Mechanism)

在 SSA 演算法中(Van Gronigen, 1998), 鄰近解之產生是由衍生機制來製造, 新的採樣點組合方式 S^{j+1} 是從前一組的點組合 S^j 中隨機選一點 $t \in S^j$; 它的移動方向由向量 \vec{h} 決定, 其中 \vec{h} 的方向是隨機選擇的, 而 t 點移動的長度會由 $|\vec{h}|$ 來控制, $|\vec{h}|$ 是屬於 0 到 h_{\max} 函數區間內的一個純量, 純量值是隨機從此區間選取, h_{\max} 函數本身隨時間逐漸減小, 與溫度的性質相似, 於退火程序加以說明。

(2) 接受準則(Acceptance Criterion)

最佳化求解過程以隨機選取採樣點位置開始, $S^{j=0} \in S^n$ 。之後便牽涉到文獻上所建議的隨機擾動因子, 它有令組合點位置產生一連串移動的機制; 首先說明如何決定 S^j 的組合是否能被 S^{j+1} 的組合所取代, 它是由機率 $P_c(S^j \rightarrow S^{j+1})$ 來判斷是否接受, 此轉換機率是以前面敘述的 Metropolis 準則決定:

$$\begin{cases} P_c(S^j \rightarrow S^{j+1}) = 1, & \text{if } \phi(S^{j+1}) \leq \phi(S^j) \\ P_c(S^j \rightarrow S^{j+1}) = \exp\left(-\frac{\phi(S^j) - \phi(S^{j+1})}{T^j}\right), & \dots(8) \\ & \text{if } \phi(S^{j+1}) > \phi(S^j) \end{cases}$$

T 表示大於零的控制參數, 即退火程序中的溫度, 會隨著求解過程而逐漸降低。假如 S^{j+1} 被接受了, 則它成為下一次組合方案 S^{j+2} 的起始點, 相同的擾動過程會一直持續下去, 且配合退火程序直到滿足終止條件則停止演算。

(3) 建構退火程序

當問題模型建立之後, 必須決定控制算法進行的一組參數, 亦即建構退火程序, 而退火程序包含了改變當時溫度與候選點移動大小的係數 α_T 與 α_h 。方程式如下列所示:

$$\begin{cases} T^{j+1} = \alpha_T T^j \\ h_{\max}^{j+1} = \alpha_h h_{\max}^j \end{cases} \dots\dots\dots(9)$$

其中 α_T 與 α_h 皆小於 1, 退火程序主要參考 Metropolis 演算法中的參數決定法則, 由於本演

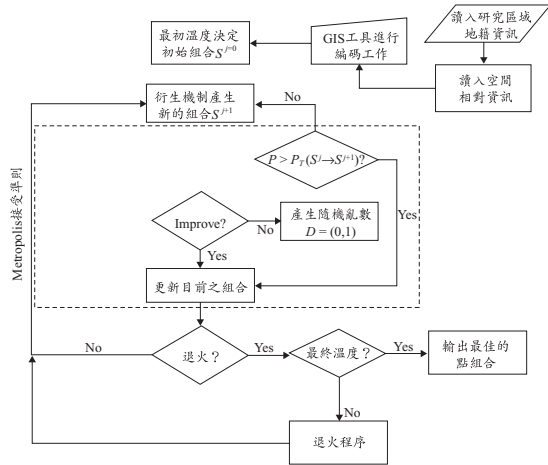


圖 9 優選演算之流程圖

算法是在二維空間上搜尋較佳的解集合, 依衍生機制的 $|\vec{h}|$ 參數來產生採樣點移動的機制, 將改變後的組合當成新的鄰近解組合, 並依退火程序中的 α_h 來逐漸收斂的大小, h_{\max} 的大小會隨程式演算的進行逐漸變小而收斂, 而 h_{\max} 的初始值為研究區域內最長的長度。

由優選理論得知, 在進行模擬退火演算法優選模擬前, 我們必須先設定模擬退火演算法參數: 初始溫度 $T^{j=0}$ 、最終溫度 T_f 、每一溫度最大搜尋次數 L_{\max} , 以及降溫準則 α_T 與 α_h 。而在本研究中設定 $T^{j=0}=2.25$ 、 $T_f=0.015$ 、 $\alpha_T=0.99$ 與 $\alpha_h=0.99$, 以及 $L_{\max}=200$ 次。圖 9 為優選演算的流程圖。

四、結果與討論

4.1 採樣之空間配置與數量: 推論命中率

Gilbert(1987)運用 Singer(1972)之概念計算採樣設計之高污染區錯失率時, 是利用網格圍成之面積及高污染區面積推論其高污染區錯失率。以單一正方形網格為例, 由四個採樣點所圍成, 當假設:

1. 網格中有一高污染區。
2. 高污染區為圓形(設其半徑為 r)。
3. 高污染區之圓心位在研究範圍(採樣點所圍成之網格)任意位置之機率皆相同。

欲計算此網格之高污染區錯失率步驟如下:

表 10 正方形及三角形網格佈點法對應不同半徑之圓形所對應無法偵測之面積大小

形式	高污染區半徑(r)	對應無法偵測之面積(AS)
正方形網格	$r \leq \frac{a}{2}$	$AS = a^2 - \pi r^2$
	$\frac{a}{2} < r < \frac{\sqrt{2}}{2}a$	$AS = a^2 - 4\left(\frac{\frac{\pi}{2} - 2\sin^{-1}\frac{\sqrt{r^2 - a^2/4}}{r}}{2\pi} \times \pi r^2 + \frac{a}{2}\sqrt{r^2 - a^2/4}\right)$
	$r = \frac{\sqrt{2}}{2}a$	$AS = 0$
三角形網格	$r \leq \frac{a}{2}$	$AS = \frac{\sqrt{3}}{4}a^2 - \frac{\pi r^2}{2}$
	$\frac{a}{2} < r < \frac{\sqrt{3}}{3}a$	$AS = \frac{\sqrt{3}}{4}a^2 - 3\left(\frac{\frac{\pi}{3} - 2\sin^{-1}\frac{\sqrt{r^2 - a^2/4}}{r}}{2\pi} \times \pi r^2 + \frac{a}{2}\sqrt{r^2 - a^2/4}\right)$
	$r = \frac{\sqrt{3}}{3}a$	$AS = 0$

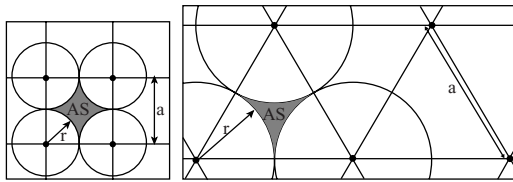


圖 10 正方形及三角形網格佈點法之示意圖

1. 分別對四個採樣位置繪製一半徑與欲計算高污染區半徑同樣為 r 之圓。
2. 計算研究範圍與所繪四個圓之補集面積。
3. 此面積即當場址中發生一半徑為 r 之高污染區時，無法被採樣位置偵測之範圍。
4. 由於假設圓心位於範圍內任意位置之機率皆相同，因此將無法偵測範圍之面積除以研究範圍面積即可得此正方形網格佈點對半徑 r 圓形高污染區之錯失機率。

圖 10 所示分別為正方形及三角形網格佈點法之示意圖，表 10 為此兩種網格佈點法所推導不同污染區大小對應之無法偵測面積，並可推廣至多個網格。

將採樣點距離 a 與高污染區半徑 r 代入所導出之面積公式計算命中率可獲得與 Gilbert(1987) 所推導之結論完全相同之結果，然而使用其公式所得之場址面積在意義上為採樣設計網格所圍

成之面積，其與場址之真實面積具有一定程度差異。若要將此概念應用在不規則場址及不規則之採樣配置，則可藉由 GIS 空間分析技術以數值方式解得近似解。

4.2 案例研究：於不規則場址比較採樣策略之高污染區錯失率

在本範例中，分別以網格式佈點、三角形佈點、空間模擬退火法佈 10 點及 20 點如圖 11 與圖 12 所示。

進行命中率之計算，以採樣點為圓心，預備推測命中率大小之高污染區半徑為半徑，對每一採樣點繪製相同之圓形如圖 13，計算所有圓形所包含範圍外之面積即為錯失面積，並可計算錯失率。

依不同污染源半徑下計算其錯失面積大小並以計算錯失率。整理數據如表 4 並繪成圖 14 之折線圖。

以佈 10 點為例，當高污染半徑為 20 公尺時，使用空間模擬退火法具有 4.8% 的錯失率，三角形網格法具有 13.9% 之錯失率，正方形網格法具有 15.7% 之錯失率；以佈 20 點為例，當高污染區半徑為 15 公尺時，使用空間模擬退火法具有

表 4 不同高污染區半徑於空間模擬退火法、正方形網格法、三角形網格法佈 10 點與 20 點所對應之錯失率

空間模擬退火法- 10 點			正方形網格法- 10 點			三角形網格法-10 點		
r (m)	所佔比例	錯失率	r (m)	所佔比例	錯失率	r (m)	所佔比例	錯失率
0	0.00%	1	0	0.00%	1	0	0.00%	1
5	0.79%	0.921	5	0.79%	0.921	5	0.79%	0.924
10	3.18%	0.691	10	3.18%	0.705	10	3.18%	0.706
15	7.15%	0.333	15	7.15%	0.397	15	7.15%	0.392
20	12.70%	0.048	20	12.70%	0.157	20	12.70%	0.139
25	19.85%	1.2E-03	25	19.85%	5.47E-02	25	19.85%	5.62E-02
30	28.58%	0	30	28.58%	1.65E-02	30	28.58%	1.76E-02
35	38.90%	0	35	38.90%	2.56E-03	35	38.90%	3.42E-03

空間模擬退火法- 20 點			正方形網格法- 20 點			三角形網格法-20 點		
r (m)	所佔比例	錯失率	r (m)	所佔比例	錯失率	r (m)	所佔比例	錯失率
0	0.00%	1	0	0.00%	1	0	0.00%	1
5	0.79%	0.842	5	0.79%	0.844	5	0.79%	0.849
10	3.18%	0.384	10	3.18%	0.429	10	3.18%	0.432
15	7.15%	0.016	15	7.15%	0.074	15	7.15%	0.068
20	12.70%	7.4E-05	20	12.70%	9.8E-03	20	12.70%	1.01E-02
25	19.85%	0	25	19.85%	2.65E-03	25	19.85%	0
30	28.58%	0	30	28.58%	1.38E-04	30	28.58%	0

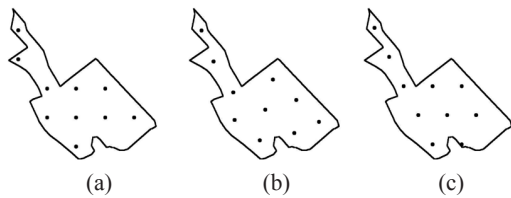


圖 11 三種佈點方法佈 10 點之空間分佈示意圖(場址面積 9887.08 平方公尺)

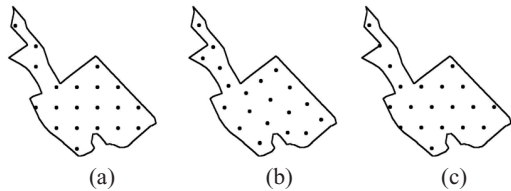


圖 12 三種佈點方法佈 20 點之空間分佈示意圖(場址面積 9887.08 平方公尺)

1.6%的錯失率，三角形網格法具有 6.8%之錯失率，正方形網格法具有 7.4%之錯失率。由結果及

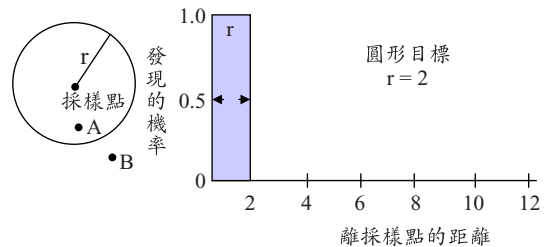


圖 13 (a)繪製圓形之示意圖，以及當高污染區圓心位於 A 時，將被採樣點所命中，而位於 B 時無法命中

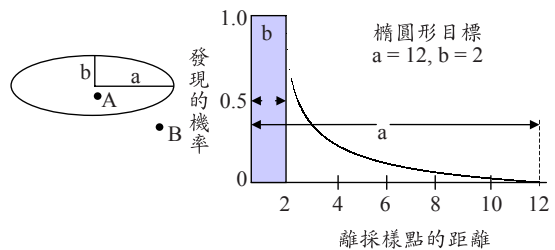


圖 13 (b)繪製橢圓形之示意圖，以及當高污染區圓心位於 A 時，將被採樣點所命中，而位於 B 時無法命中

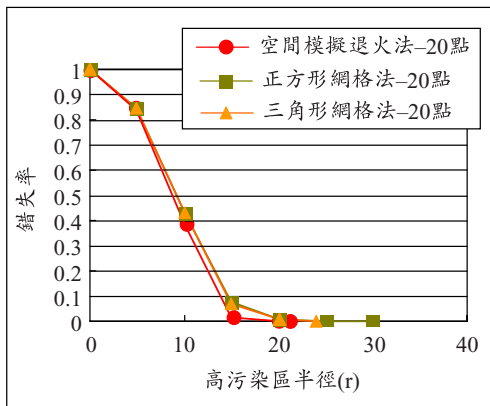
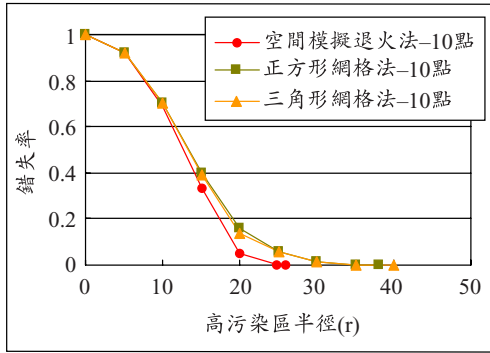


圖 14 錯失率與高污染區半徑關係圖

圖表可得以下結論：

1. 給定欲搜尋之最小高污染區半徑(例如太小的高污染區可能是可以接受的)、調查區範圍、欲採用的採樣策略，即可透過此分析方式解得給定可容忍錯失機率下所需最小採樣點數(大於最小搜尋半徑的高污染區，其錯失率只會更小)。
2. 在相同場址與相同採樣點數量下，空間模擬退火法在搜尋高濃度熱點(Hot Spot)的效能明顯優於系統網格式之佈點。亦可推論在空間模擬退火法需要較傳統網格式佈點法更少的採樣點數即可達到相同之命中率，可有效節省調查經費與人力。

事實上依照不同場址之狀況，可能存在任何大小與形狀之污染源。由前人之研究(徐，1999；Juang, 2004)可知污染區經常會近似圓形與橢圓形，或是由近似圓形與橢圓形之形狀所組成，並且不因不同之法規標準而改變。而由 Ferguson

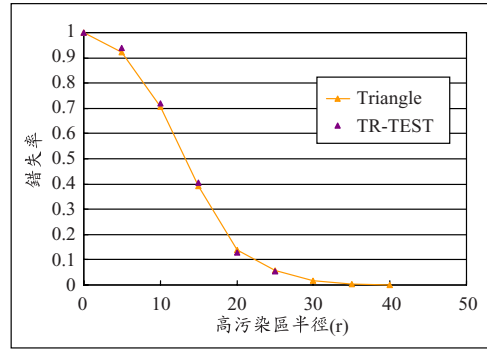


圖 15 (a)三角形網格法佈 10 點對應不同高污染區大小之命中率與實驗統計之機率

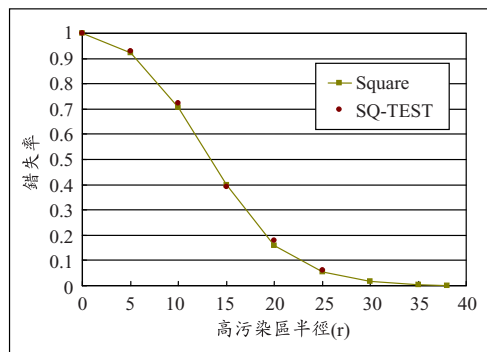


圖 15 (b)正方形網格法佈 10 點對應不同高污染區大小之命中率與實驗統計之機率

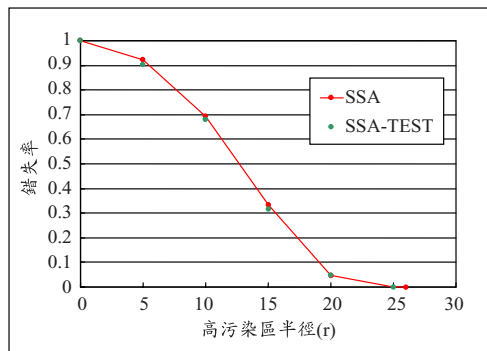


圖 15 (c)空間模擬退火法佈 10 點對應不同高污染區大小之命中率與實驗統計之機率

(1992)之研究可知特殊形狀之污染區會與形狀相近之圓形或橢圓形具有相似之結論，定義圓形或橢圓形的意義為對較狹長之形狀在不同方向上，所產生之相異結果做考慮。

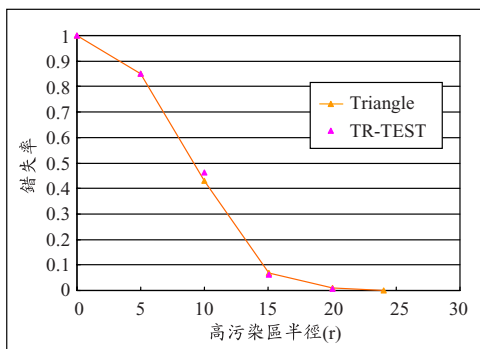


圖 15 (d)三角形網格法佈 20 點對應不同高污染區大小之命中率與實驗統計之機率

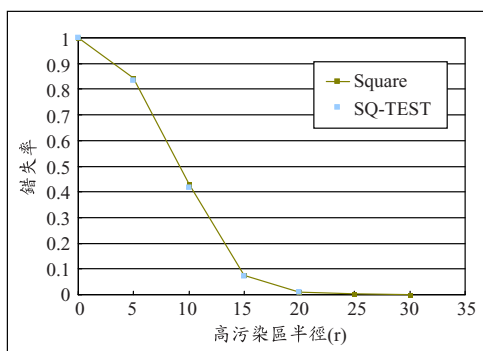


圖 15 (e)正方形網格法佈 20 點對應不同高污染區大小之命中率與實驗統計之機率

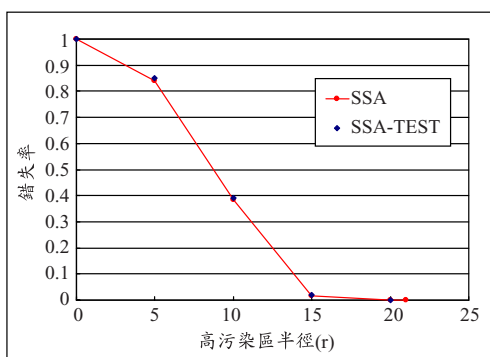


圖 15 (f)空間模擬退火法佈 20 點對應不同高污染區大小之命中率與實驗統計之機率

另外並依 Ferguson(1992)所使用之實驗方式，與模擬場址中隨機產生一高污染區，進行 1000 次實驗並統計其命中率，其結果如圖 15 所示。

圖 15 中之折線為依理論計算之高污染區錯失率，不同形狀所標記之點為給定半徑下隨機產生高污染區 1000 次統計錯失次數所得之錯失率。由圖中可知依實驗方式所計算而得之高污染區錯失率雖有些微跳動，但與理論方式所求得之錯失率非常接近。

四、結 論

1. 進行土壤污染調查之採樣設計時，藉由分析採樣策略之高污染區錯失率，可降低對所掌握資訊不了解而造成誤判之風險，透過控制採樣數量與所能得到之命中率，能更精確的控制調查成本與效益，並可用以評估已採樣場址錯失高污染區之機率。
2. 在相同場址與相同採樣點數量下，空間模擬退火法在搜尋高濃度區(Hot Spot)的效能明顯優於系統網格式之佈點，即空間模擬退火法需要較傳統網格式佈點法更少的採樣點數即可達到相同之命中率，可有效節省調查經費與人力。

參考文獻

1. 徐貴新，1999，「台灣地區土壤重金屬含量空間特性分析」，國立臺灣大學農業工程學研究所博士論文。
2. 陳尊賢，1997，「土壤污染物採樣之原則與策略」，環檢新知，第 14 期。
3. 張尊國、陳信瑜、鄭百佑、徐貴新，2003，「模擬退火演算法在土壤採樣佈點之應用」，第一屆土壤與地下水研討會論文集。
4. 童慶斌，2002，「啟發式演算法」，第六章模擬退火法，台大生物環境系統工程學系講義，台北市。
5. Aarts, E., Korst, J., 1990, Simulated Annealing and Boltzmann Machines - A Stochastic Approach to Combinatorial Optimization and Neural Computing, Wiley, New York.
6. Brus, D. J., De Gruijter, J. J., 1997, "Random sampling or geostatistical modeling? Choosing between design-based and model-based

- sampling strategies for soil (with discussion),” *Geoderma*, Vol. 80, pp. 1-44.
7. Christakos, G., 1992, *Random Field Models in Earth Sciences*, Academic Press.
 8. Davidson, J. R., 1995, *ELIPGRID-PC: Upgraded Version*, ORNL-TM-13103, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge.
 9. Ferguson C. C., 1992, “The statistical basis for spatial sampling of contaminated land,” *Ground Engineering*, Vol. 25, No. 5, pp. 34-38.
 10. Gilbert, R.O., 1987. *Statistical Methods for Environmental Pollution Monitoring*, Van Nostrand Reinhold, New York.
 11. Juang, K. W., Chen, Y. S., Lee, D. Y., 2004, “Using sequential indicator simulation to assess the uncertainty of delineating heavy-metal contaminated soils,” *Environmental Pollution*, Vol. 127, pp. 229-238.
 12. Kirkpatrick, S., Gelatt Jr., C. D., and Vecchi, M. P., 1983, “Optimization by simulated annealing,” *Science*, Vol. 220, No. 4598, pp. 671-680.
 13. Ministry for the Environment, 2004, *Contaminated Land Management Guidelines No.5 : Site Investigation and Analysis of Soils*, New Zealand.
 14. Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H., 1953, “Equation of state calculations by fast Computing machines,” *J. Chem. Phys.*, Vol. 21, No.6, pp. 1087-1092.
 15. Steven Smith, 2004, “Expected Confidence and Required Probability of Sampling Patterns,” Paper Presented at EIGG conference on the Non-Invasive Investigation and Monitoring of Waste Sites, Birmingham, UK.
 16. Singer, D. A., Wickman, F. E., 1969, *Probability Tables for Locating Elliptical Targets with Square, Rectangular and Hexagonal Point Nets*, Pennsylvania State University, University Park, Pennsylvania.
 17. Singer, D. A., 1972, “ELIPGRID : A Fortran IV program for calculating the probability of success in locating elliptical targets with square and rectangular and hexagonal grids,” *Geocom Programs*, Vol. 4, pp. 1-16.
 18. Singer, D. A., 1975, “Relative efficiencies of square and triangular grids in the search for elliptically shaped resource targets,” *Journal of Research of the U.S. Geological Survey*, Vol. 3, No. 2, pp. 163- 167.
 19. Singer, D. A., Drew, L. J., 1976, “The Area of Influence of an Exploratory Hole,” *Economic Geology*, Vol. 71, pp. 642- 647.
 20. U.S. EPA, 2002, *Guidance on Choosing a Sampling Design for Environmental Data Collection*, EPA-240-R-02-005, Washington.
 21. Van Groenigen, J. W., Stein, A., 1998, “Constrained optimization of spatial sampling using continuous simulated annealing,” *J. Environ. Qual.*, Vol.27, No. 5, pp.1078-1086.
 22. Zirschky, J., Gilbert, R. O., 1984, “Detecting hot spots at hazardous-waste sites,” *Chemical Engineering*, Vol. 91, pp. 97-100.

收稿日期：民國 95 年 4 月 28 日
 修正日期：民國 95 年 5 月 9 日
 接受日期：民國 95 年 5 月 12 日