

國立臺灣大學生農學院生物環境系統工程研究所
碩士論文

Graduate Institute of Bioenvironmental Systems Engineering

College of Bioresources and Agriculture

National Taiwan University

Master Thesis

自動化時空過程推估方法之發展及應用，並以台北都會區空氣懸浮粒子時空分佈之研究為例

Development and Application of Automatic
Spatiotemporal Estimation Method

(A Case Study of Spatiotemporal Distribution of
Particulate Matter in Taipei)

王誌鑫

Chih-Hsin Wang

指導教授：余化龍 博士

Advisor: Hwa-Lung Yu, Ph.D.

中華民國 99 年 1 月

January, 2010

謝誌

本論文得以順利完成，首先誠摯感謝余化龍教授於授業期間提供充裕的資源與協助；並承蒙口試委員陳主惠教授、童慶斌教授、楊長興教授與鄭尊仁教授等不吝斧正，使本論文得以減少謬誤而更臻完善，受益無窮，此致最高謝意。

來台大學習遇到了許許多多的良師益友，在此特別的感謝，於遭遇瓶頸時，苦思不解時，感謝郁璋及阿顧慷慨解囊，提供研究上的建議與解答，使論文進度不致陷入膠著。在英文摘要的部份，感謝美清不厭其煩的幫我修改使之更臻完善。感謝恩慈、DK 及圖杰在口試記錄及幫忙，讓整個口試過程順利。感謝大頭學長及阿亮學長對我的生活照顧與課學上的指導。感謝大學專題生上人、心汝、一德、大黑、Jerry、郁唐、小柯、遠見等陪伴，讓冷清的研究室熱絡了起來。感謝隔壁林裕彬老師研究室的所有人，讓研究更添熱絡。感謝永和君悅豆漿店的幸福老闆及老闆娘，我們的相遇代表真的很有緣，你們的慈悲及信任使我免於在外找宿舍的煩惱。感謝飛飛中(含保生堂所有人)，帶我至好山好水的宜蘭四處晃晃，讓研究更有活力，也讓我體會了「休息是會了走更長的路」。感謝美嘉與力瞳在生活上的照顧及不吝的指導，讓我渡過歡樂的時光，我會銘記在心。

家人真實有恆的愛，是我背後最大的支持，陪著我一路過關斬將，不曾缺席。感謝爸爸培養健全樂觀的人格、開闊的視野並給予學習的自由，感謝媽媽無私無悔的付出、任勞任怨，感謝哥哥及奶奶的鼓勵，以及外公外婆的信心支持。如果我的人生有一點成就，都應歸功於摯愛的家人，也因為與你們分享，而更具意義。

由於感謝的人太多太多了，若再敘述下去，無窮亦無盡，最後引述陳之藩先生〈謝天〉的文章裏最後一段話，「這個覺悟即是：一粥一飯，半絲半縷，都是多少年、多少人的血汗結晶。感謝之情，無由表達，還是謝天罷」。

摘要

許多地理統計方法都假設資料隨機過程是定常性(stationary)與同質性(homogeneous)。然而在環境資料隨機過程中(例如:PM的時空分佈),常常不具定常性及同質性,也就是存在著趨勢(trend)。本研究發展一個自動化讓非定常性(non-stationary)及非同質性(non-homogeneous)隨機過程資料的時空共變異數轉換成定常性及同質性資料的時空共變異數。本研究分別使用 kernel smoothing 及粒子群最佳化演算法(particle swarm optimization method, PSO)和 Nelder-Mead 單體法(Nelder-Mead simplex method)來計算趨勢及參數的估計。並利用這些方法來迭代以求得最佳的趨勢與擬合時空共變異數(covariance fitting)。

許多研究指出細懸浮粒子比粗懸浮粒子更容易進入人體造成危險並影響生態。估算對人類及生態的衝擊需要長期的暴露資料,但是在台北都會區過去並無系統的監測細懸浮粒子,直到 2005 年 8 月整個監測網路才完成。台北都會區主要的污染源以工業及交通為主。懸浮粒子相關資料(如:PM₁₀、PM_{2.5}和 TSP)獨立搜集於中央及地方政府。在本研究使用貝氏最大熵法(Bayesian Maximum Entropy method, BME)去整合(a)時空的懸浮粒子(b)特殊位置上懸浮粒子的確定性資料(hard data)與不確定性資料(soft data)(c) PM_{2.5}/PM₁₀ and PM₁₀/TSP 比值關係去回推過去 2003-2004 年台北都會區 PM_{2.5} 時空分佈機率密度函數(probability density function, PDF)並與觀測值做比較。

本研究利用所提之自動化方法來推估台北市 PM₁₀ 時空分佈中之趨勢與共變異數模式之最佳化參數。PM_{2.5} 之回推預測結果顯示本研究可提供合理之推估結果,以 2003 年新莊超級測站及 2004 年 PM_{2.5} 測站為例,其推估相對誤差分別為 10.6% 與 10.7%,分析結果顯示較高的 PM_{2.5}、PM_{2.5}/PM₁₀ 及 PM_{2.5}/TSP 值發生在大同區、中山區偏南、中正區及新莊地區。

關鍵字: 懸浮粒子、貝氏最大熵法、粒子群演算法、NM 單體法、擬合共變異數

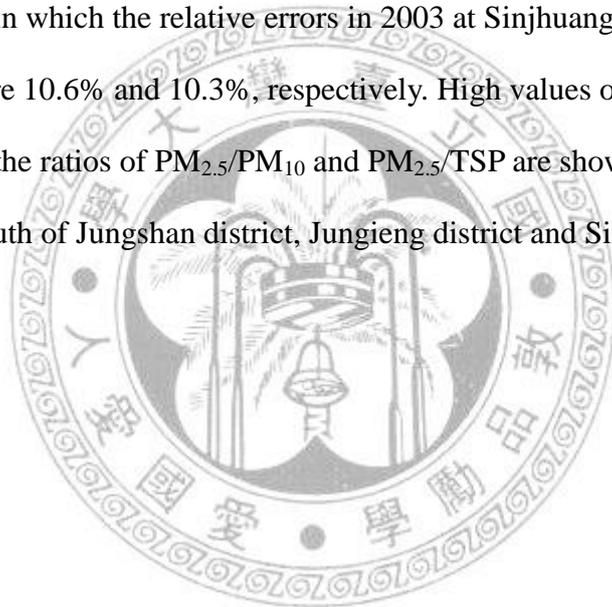
Abstract

Many geostatistics approaches assume the homogeneity and stationarity of the data process. However, the assumption is not valid for most of environmental processes of interest (e.g. spatiotemporal distribution of PM). This study developed an automatic scheme to decompose a nonstationary and nonhomogeneous process into a deterministic trend and a random process which can be characterized by the stationary and homogeneous S/T covariance model. Kernel smoothing method and particle swarm optimization method as well as Nelder-Mead simplex method were applied for trend modeling of parameter estimation, respectively. By the proposed scheme, the spatiotemporal bandwidths as well as the covariance parameters are estimated iteratively in order to account for the goodness-of-fit of trend and covariance modeling as well as the complexity of nested covariance model and S/T correlation among the dataset.

Numerous studies have shown that fine airborne particulate matter particles ($PM_{2.5}$) are more dangerous to human health than coarse particles, e.g. PM_{10} . The assessment of the impacts to human health or ecological effects by long-term $PM_{2.5}$ exposure is often limited by lack of $PM_{2.5}$ measurements. In Taipei, $PM_{2.5}$ was not systematically observed until August, 2005. Taipei is the largest metropolitan area in Taiwan, where a variety of industrial and traffic emissions are continuously generated and distributed across space and time. PM-related data, i.e., PM_{10} and Total Suspended Particles (TSP) are independently systematically collected by different central and local government institutes. In this study, the retrospective prediction of spatiotemporal distribution of monthly $PM_{2.5}$ over Taipei will be performed by using Bayesian Maximum Entropy method (BME) to integrate (a) the spatiotemporal

dependence among PM measurements (i.e. PM_{10} , TSP, and $PM_{2.5}$), (b) the site-specific information of PM measurements which can be certain or uncertain information, and (c) empirical evidence about the $PM_{2.5}/PM_{10}$ and PM_{10}/TSP ratios. The performance assessment of the retrospective prediction for the spatiotemporal distribution of $PM_{2.5}$ was performed over space and time during 2003-2004 by comparing the posterior pdf of $PM_{2.5}$ with the observations.

By the proposed scheme, the optimal parameters of trend and covariance models are obtained from PM_{10} dataset. The retrospective predictions of $PM_{2.5}$ provide reasonable results in which the relative errors in 2003 at Sinjhuang and 2004 at TWEPA stations are 10.6% and 10.3%, respectively. High values of $PM_{2.5}$ concentration and the ratios of $PM_{2.5}/PM_{10}$ and $PM_{2.5}/TSP$ are shown in the areas of Datong district, south of Jungshan district, Jungieng district and Sinjhuang.



Key word: particulates matter, BME, PSO, NM, covariance fitting

目錄

口試委員會審定書	
謝誌.....	I
摘要.....	II
Abstract.....	III
目錄.....	V
圖目錄.....	VII
表目錄.....	IX
第一章 前言.....	1
1.1 研究動機.....	2
1.2 研究目的.....	3
1.3 研究方法.....	4
1.3.1 貝氏最大熵法(BME)理論.....	5
1.3.2 Kernel Smoothing 理論.....	7
1.3.3 交叉驗證(cross validation).....	8
1.4 研究區域.....	9
1.5 本文架構.....	9
第二章 文獻回顧.....	10
2.1 計算趨勢相關文獻.....	10
2.2 擬合共變異數相關文獻.....	11
2.3 懸浮微粒的影響.....	12
2.4 台灣懸浮微粒特性.....	13
2.5 PM _{2.5} 組成成份.....	14
2.6 PM _{2.5} 與 PM ₁₀ 比值關係.....	14
第三章 自動化估計在時空非定常性過程之趨勢及共變異數.....	16
3.1 研究方法.....	16
3.1.1 粒子群演算法(PSO).....	17
3.1.2 Nelder-Mead 單體法(NM).....	19
3.2 研究資料.....	21
3.3 研究流程.....	22
3.4 研究結果.....	29
3.5 結果討論.....	38
第四章 台北都會區 PM _{2.5} 時空分佈推估研究.....	40
4.1 資料來源.....	40
4.2 研究流程.....	42
4.3 結果與討論.....	47

4.3.1 交叉驗證結果與 PM _{2.5} 時空推估圖.....	47
4.3.2 驗證 2004 年 PM _{2.5} 結果及 PM _{2.5} /PM ₁₀ 、PM _{2.5} /TSP 時空分佈圖.....	60
4.3.3 驗證 2003 年新莊超級測站 PM _{2.5} 結果.....	69
4.4 結果討論.....	70
4.4.1 交叉驗證結果及推估 PM _{2.5} 時空分佈之討論.....	70
4.4.2 回推 2004 年 PM _{2.5} 驗證結果及比值時空分佈圖討論.....	71
4.4.3 回推 2003 年新莊超級測站 PM _{2.5} 驗證結果之討論.....	72
第五章 結論與建議.....	73
5.1 結論.....	73
5.2 建議.....	74
參考文獻.....	76
附錄一.....	82
附錄二.....	84
附錄三.....	88



圖目錄

圖 3-1 NM 法中的(a)反射及(b)擴充圖.....	20
圖 3-2 NM 法中的(a)收縮在外面及(b)收縮在裡面(c)縮短.....	21
圖 3-3 PM ₁₀ 空氣品質監測站分佈圖.....	21
圖 3-4 研究流程圖.....	28
圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續).....	30
圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續).....	31
圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續).....	32
圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續).....	33
圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值).....	34
圖 3-6 為各測站及平均的趨勢.....	34
圖 3-7 搜尋最佳擬合參數在強化策略階段的變化情形(續).....	35
圖 3-7 搜尋最佳擬合參數在強化策略階段的變化情形.....	36
圖 3-8 不同粒子數中目標函數與迭代次數的關係.....	37
圖 3-9 不同粒子數中與搜尋時間的關係.....	37
圖 3-10 只使用 NM 法擬合的情況.....	38
圖 4-1 空氣品質監測站分佈圖.....	41
圖 4-2 士林測站二月份 PM _{2.5} /PM ₁₀ 比值圖(左圖未平滑化, 右圖為平滑化後)..	42
圖 4-4 回推 2004 年 PM _{2.5} 及驗證流程圖.....	45
圖 4-5 回推 2003 年新莊超級測站 PM _{2.5} 及驗證流程圖.....	46
圖 4-6 交叉驗證及推估 PM _{2.5} 時空圖之共變異圖.....	49
圖 4-7 各測站交叉驗證結果(續).....	50
圖 4-7 各測站交叉驗證結果(續).....	51
圖 4-7 各測站交叉驗證結果(續).....	52
圖 4-7 各測站交叉驗證結果.....	53
圖 4-8 各測站交叉驗證平均誤差比.....	53
圖 4-9 各測站交叉驗證平均誤差比.....	54
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖(續).....	54
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖(續).....	55
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖(續).....	56
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖(續).....	57
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖(續).....	58
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖(續).....	59
圖 4-10 2005-2007 年 PM _{2.5} 時空推估圖.....	60
圖 4-11 驗證 2004 年 PM _{2.5} 結果(續).....	62
圖 4-11 驗證 2004 年 PM _{2.5} 結果.....	63

圖 4-12 驗證 2004 年平均 $PM_{2.5}$ 誤差比.....	63
圖 4-13 驗證 2004 年平均 $PM_{2.5}$ 誤差比.....	64
圖 4-14 推估 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 時空分佈之共變異圖.....	64
圖 4-15 推估 $PM_{2.5}/TSP$ 時空分佈之共變異圖.....	65
圖 4-16 推估 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 時空圖(續).....	65
圖 4-16 推估 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 時空圖(續).....	66
圖 4-16 推估 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 時空圖.....	67
圖 4-17 推估 $PM_{2.5}/TSP$ 時空圖(續).....	67
圖 4-17 推估 $PM_{2.5}/TSP$ 時空圖(續).....	68
圖 4-17 推估 $PM_{2.5}/TSP$ 時空圖.....	69
圖 4-18 驗證 2003 新莊超級測站 $PM_{2.5}$ 結果.....	70
圖 4-19 推估 2003 新莊超級測站平均誤差比.....	70
圖附 3-1 士林測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖(續).....	88
圖附 3-1 士林測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	89
圖附 3-2 土城測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖(續).....	89
圖附 3-2 土城測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	90
圖附 3-3 三重測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖(續).....	90
圖附 3-3 三重測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	91
圖附 3-4 中山測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	92
圖附 3-5 古亭測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	93
圖附 3-6 永和測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	94
圖附 3-7 汐止測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	95
圖附 3-8 松山測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	96
圖附 3-9 林口測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	97
圖附 3-10 板橋測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	98
圖附 3-11 泰山測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	99
圖附 3-12 淡水測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	100
圖附 3-13 菜寮測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	101
圖附 3-14 陽明測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	102
圖附 3-15 新店測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	103
圖附 3-16 新莊測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	104
圖附 3-17 超級測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	105
圖附 3-18 萬里測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	106
圖附 3-19 萬華測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比値之 PDF 圖.....	107

表目錄

表 2-1 $PM_{2.5}$ 與 PM_{10} 比值表.....	15
表 3-1 PM_{10} 基本統計特性(單位: $\mu g/m^3$).....	22
表 3-2 比較 PSO-NM 及 NM 擬合方程式之交叉驗證結果.....	38
表 4-1 $PM_{2.5}$ 、 PM_{10} 及 TSP 基本的統計特性(單位: $\mu g/m^3$).....	41
表 4-2 主要流程表.....	43
表 4-3 懸浮粒子比值轉換公式.....	47
表 4-4 交叉驗證的結果(單位: $\mu g/m^3$).....	49
表 4-5 驗證 2004 年 $PM_{2.5}$ 結果.....	61
表 4-6 驗證 2003 新莊超級測站 $PM_{2.5}$ 結果.....	69
表附 1-1 PM_{10} 測站, 共計 26 站(續).....	82
表附 1-1 PM_{10} 測站, 共計 26 站.....	83
表附 2-1 $PM_{2.5}$ 測站, 共計 19 站.....	84
表附 2-2 PM_{10} 測站, 共計 27 站.....	85
表附 2-3 TSP 測站, 共計 15 站(續).....	86
表附 2-3 TSP 測站, 共計 15 站.....	87



第一章 前言

台北市與台北縣內板橋、三重、新莊、汐止等城市，形成大型都會區，為台灣最繁華、人口最稠密及汽機車最多的地區。也因如此，常常造成台北都會區空氣品質惡化，而惡化的主因大多是以懸浮微粒為主(楊忠盛，1998)。

懸浮粒子(particulate matter)，又稱為「氣膠」，由許多化學元素及化合物所組合而成，例如：Fe、Al、 NO_3^- 、Pb、 SO_4^{2-} 、Si 等。一般分類上主要可依粒徑大小區分為 $\text{PM}_{2.5}$ ($2.5\mu\text{m}$ 以下)及 PM_{10} ($10\mu\text{m}$ 以下)兩種。我們將粒徑小於 $2.5\mu\text{m}$ 稱為「細懸浮微粒」(suspended particulates),粒徑大於 $2.5\mu\text{m}$ 稱為「粗懸浮微粒」(coarse particle)。(資料來源:行政院環保署 <http://www.epa.gov.tw>)

懸浮粒子會影響人類健康及生態環境，如:氣喘加重、死胎率上升、造成酸雨及遮蔽植物葉片，降低光合作用的效率等，並造成氣溫的上升、能見度下降及改變氣候、氣象等(詹俊南，1996；蔣本基，1997；楊忠盛，1998；王秋森與陳志傑，1999；Grantz et al., 2003)。

更多的研究也指出細懸浮粒子比粗懸浮粒子更容易進入體內的肺，造成病變(雷侑蓁，2005；楊忠盛，1998；詹俊南，1996；王秋森，陳志傑，1999；Pope, 2000)。但由於行政院環保署在早期並無監測細懸浮粒子，直到 2005 全台才完成整個監測細懸浮粒子的監測網，故無法得知過去的 $\text{PM}_{2.5}$ 。

在許多環境的議題中如本研究的懸浮粒子，考慮使用時空統計學的知識去解決(如:貝氏最大熵法)。但是這一類的知識常假設資料共變異關係為定常性(stationary)及同質性(homogeneous)。但是事實上，環境資料共變異關係通常屬於非定常性(non-stationary)及非同質性(non-homogeneous)，也就是有一個趨勢(trend)存在著，也就是說移除趨勢所扮演的角色就非常重要。

而在時空統計另一個重要的關鍵則是時空的共變異關係，因為它能表達許多

空間及時間的關係性，所以要如何使用適合的數學模式去擬合(fitting)就變的相當重要，因為它會決定推估的精確度。故擬合共變數也扮演非常重要的角色。

所以在探討懸浮粒子的問題，必須先解決資料隨機過程中非定常性及非同質性的問題再能再深入以時空統計學的知識下去探討懸浮粒子的問題。

1.1 研究動機

由於早期行政院環保署並沒有把監測 $PM_{2.5}$ 項目納入空氣品質監測站，直到 1998 年才把 $PM_{2.5}$ 監測項目納入空氣品質監測站，不過當時分別只有古亭及三重兩個測站。2003 年萬華測站與萬里測站也加入監測 $PM_{2.5}$ 項目，直到 2005 年全台空氣品質測站監測 $PM_{2.5}$ 項目才算完備。

許多研究指出細懸浮粒子比粗懸浮粒子更容易造成人體健康及生態的影響，由於細懸浮粒子比粗懸浮粒子更小，容易吸入肺部，累積在肺泡，造成病變(雷侑蓁，2005；楊忠盛，1998；詹俊南，1996；王秋森與陳志傑，1999；Pope, 2000)。

在先進國家中定訂空氣法規的時候，需要考慮三個項目，即健康風險、經濟成本和量測方法。就健康風險的部份，但由於過去並無細懸浮粒子的監測資料，故無法得知風險值。但由於粗懸浮粒子及總懸浮粒子跟細懸浮粒子具有良好的相關性(蔣本基等，2003；邱瑞仙，2008)，故本研究利用最大貝氏熵法(Bayesian maximum entropy, BME)透過 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 及 $PM_{2.5}/TSP$ 去回推過去的 $PM_{2.5}$ 。

在解決資料的隨機過程中非定常性及非同質性的問題上，由於資料有趨勢的存在，所以必須計算趨勢，進而移除趨勢。本研究使用無母數平滑化的統計方法(如 kernel smoothing)來計算趨勢。但這一類的方法中，需要去決定參數，在傳統上，常使用本身經驗及試誤方法決定其參數。但這種方法常造成時間的損耗與估計的誤差。擬合共變異數(covariance fitting)對時空統計而言是非常重要的，但在

傳統上，通常使用眼睛及試誤的方法去調整。但這種方法無疑的會造成時間的損耗及擬合的不精確。

在考慮自動化去決定參數及擬合共變異數時，會想到使用一般傳統的數值方法(如:牛頓法)，但是這一類的方法在應用上，常需要用物理及數學方程式去描述，且大多數都需要梯度資訊(gradient information)，但是在許多複雜的問題上，例如:空氣汙染問題等。因為過於複雜，無法使用物理或是數學方程式來描述及可能無法得到梯度的資訊，且本身在應用上常需要一個較佳的初始值才能確保結果收斂且收斂的值不能確保是全域最佳解。而啟發式演算法(Heuristic algorithms)是近代發展的數值方法且在使用上，則不需要對問題的物理機制或是數學描述完全的了解也不需要梯度資訊，且它的應用層面非常的富有彈性，例如:可以結合不同啟發式演算方法等。

在過去的研究中，前人做的半自動化擬合共變異數中，例如:使用 Nelder-Mead 單體法(Nelder-Mead simplex method, NM)搭配權重最小平方法(weighted least squares, WLS)，通常只考慮空間的共變異關係，未考慮時間的共變異關係，且需要給定良好的初始值、適合的擬合模式型態及個數。

1.2 研究目的

在懸浮粒子的問題中，必須先解決資料隨機過程中的非定常性的資料及非同質性的問題，在探討這個問題，同時也是在探討如何決定參數的問題。之後在利用時空統計學來探討懸浮粒子的問題。故本研究希望能達到兩個目的:

(1)在計算趨勢決定參數時，使用啟發式演算法-粒子群演算法(particle swarm optimization, PSO)自動尋找參數取代使用本身的經驗及試誤法。在擬合共變異數時，結合 PSO 與 NM 兩者(PSO-NM)去搜尋最佳模式的型態、個數及參數去取代

用眼睛試誤調整。

(2)透過 $PM_{2.5}$ 與 PM_{10} 及 $PM_{2.5}$ 與總懸浮粒子(total suspended particle, TSP)的比值關係去回推過去未監測 $PM_{2.5}$ 之值，以提供健康風險計算上的需要。除了提供健康風險計算上的資料外，也分析台北都會區 $PM_{2.5}$ 、 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 及 $PM_{2.5}/TSP$ 的時空分佈情況。

所以在本研究會探討兩個主題，第一個主題為自動化估計在時空非定常性過程之趨勢及共變異數，來探討資料隨機過程中非定常性及非同質性的問題。解決了資料隨機過程非定常性及非同質性的問題後，接下來探討第二個主題為台北都會區 $PM_{2.5}$ 時空分佈推估研究。

1.3 研究方法

在空氣污染模擬上，主要可以分為兩大類，一是數值模式方法，如:AERMOD、CALPUFF 與 CMAQ 等，二是以資料導向方法(data-driven)如:類神經網(Artificial Neural Network, ANN)、克利金(kriging)與回歸分析(regression analysis)等。

在數值模式方法上，雖然可以考慮物理及化學的機制，但是卻無法克服不確定性的問題，如：模式參數的不確定性、污染源的不確定性、氣象條件決定的不確定性等，造成推估上的不精準。而在資料導向方法中，較常見的克利金需要用確定性資料(hard data)當依據，才能進行推估，且本身具有資料為高斯分佈的假設及線性推估的限制，且推估值並無考慮不確定性的影響，且通常只能考慮空間相關性，無法把時間相關性納入考慮(Yu et al., 2007)。

BME 為最近新的時空統計方法(Christakos, 1990 ; 1992)，是結合數值模式方法與資料導向方法，可以同時考慮空間與時間相關性。本身並無高斯分佈及線性

推估的限制。除了確定性資料外，亦可以加入不確定性資料(soft data)當推估的資料，這個好處是本研究將可以把粗懸浮微子透過比值關係，去轉化成細懸浮粒子不確定性資料，以提供更多推估資訊。

在計算趨勢方法中，常見使用無母數平滑的統計方法，這類方法有很多，例如：spline、general additive model(GAM)與 kernel smoothing 方法等(Hastie and Tibshirani, 1990)。在這些方法中，本研究使用 kernel smoothing 的方法去計算趨勢。

1.3.1 貝氏最大熵法(BME)理論

在地理統計方法中，較常見的方法都是利用克利金法(kriging method)去做推估，但是它有資料常態分佈及線性推估的假設且只能考慮確定性資料(hard data)。而 BME 不需要克利金法所使用的線性及常態分佈假設，它是可以包括非線性估計、非常態機率定律、整合一般知識資料及在不同尺度下複合的來源，同時可以考慮確定性資料及不確定性資料(soft data)。

在 BME 裡，空氣污染特性(例如:PM 的測量值或 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值)可代表一個時空隨機場(random field)。讓 $X_p = X_{s,t}$ ，表示在時空隨機場一項空氣污染屬性；向量 $p=(s,t)$ 是一個時空的點(s 是地理座標位置， t 是時間)。隨機場模式提供了普遍和數學嚴謹架構去調查空氣污染的現象。這樣可以提高在複合空間-時間域的預測能力。在機率場模式的機率密度函數(probability density function, PDF)， f_{KB} 可表示如下：

$$P_{KB}[\chi_1 \leq X_{p_1} \leq \chi_1 + d\chi_1, \chi_2 \leq X_{p_2} \leq \chi_2 + d\chi_2, \dots] = f_{KB}(X_{p_1}, X_{p_2}, \dots) d\chi_1 d\chi_2 \dots$$

寫在下面的 KB 是指使用知識庫(knowledge base, KB)去構成機率密度函

數。

BME 方法定義的特徵包括了(1)一般知識(general knowledge base)，又稱為 G-KB。(2)特殊位置(site specific knowledge base)的知識，又稱 S-KB。全部的知識庫就是 $k=G \cup S$ 。BME 的基礎方程式如下：(細節部份可以看(Christakos, 2000; Christakos et al., 2005))

$$\left. \begin{aligned} \int d\chi(\mathbf{g}-\bar{\mathbf{g}})e^{\mu^T \mathbf{g}} &= 0 \\ \int d\chi \xi_s e^{\mu^T \mathbf{g}} - A f_k(\mathbf{X}_p) &= 0 \end{aligned} \right\}, \quad (1)$$

這裡的 \mathbf{g} 是 $\mathbf{g}_\alpha (\alpha=1,2,\dots)$ 方程式中的一個向量，描述已知的 G-KB。 μ 是 \mathbf{g}_α 的係數， μ_α 所組成的向量，隨空間時間座標改變而改變。 ξ_s 代表 S-KB。 A 是一個參數標準化(normalization parameter)， f_k 是空氣污染特性在時空每一點的機率密度函數，底下 k 的意思是指混合 G-KB 跟 S-KB。

G-KB 參考整個研究範圍 p ，構成了時空點向量 p_k 的空氣污染估計。點向量 p_{data} 是特殊位置的有用資訊。在 G-KB 中包括了時空相關的統計學知識，例如平均值(mean)、共變異係數(covariance)、多點統計(multiple-point statistics)與連續階(continuity orders)等。其中平均值與共變異係數是在空氣污染研究中最常被使用。重要的參數都是在隨機場 X_p 中空氣污染的特性。在 S-KB 中主要是由確定性資料(hard data)的點向量 p_{hard} 和不確定性資料(soft data)的點向量 p_{soft} 所構成的。

S-KB 包括了從 $P_i (i=1,2,\dots,m)$ 物理的資料 X_{data} ，例如：PM 觀測資料，在 S-KB 可以被描述成 $S: X_{data} = (X_{hard}, X_{soft}) = (x_1, \dots, x_n)$ ，其中 $X_{hard} = (x_1, \dots, x_{m_h})$ 為 $P_i (i=1,2,\dots,m_h)$ 點上的 PM 的觀測資料， $X_{soft} = (x_{m_h+1}, \dots, x_n)$ 為 $P_i (i=m_h+1, \dots, n)$

點上的 PM 不確定性資料。在使用上不確定性資料可以考慮兩種型式。第一種型式為區間的型式(interval type) $X_{\text{soft}} : \{x_i \in I_i = [l_i, u_i], i = m_h + 1, \dots, n\}$, 第二種型式為或然率的型式(probabilistic type) $X_{\text{soft}} : P_s(x_{\text{soft}} \leq \xi) = \int_{-\infty}^{\xi} dx_{\text{soft}} f_s(x_{\text{soft}})$ 。

整合 G-KB 和 S-KB，在機率密度函數中的 f_k 在方程式(1)中，我們就可以去描述推估點 p_k 空氣污染的分佈。

1.3.2 Kernel Smoothing 理論

Kernel Smoothing 是一種無母數的統計方法，廣泛的被使用在資料不足、跳動所造成不平滑的情況。

主要是利用距離遠近去決定 kernel function 的值，其方程式可以定義如下：

$$K_h(X_0, X) = D\left(\frac{\|X - X_0\|}{h(X_0)}\right)$$

X, X_0 屬於實數，為座標位置。

$\|\bullet\|$: 為歐幾里德距離(Euclidean distance)。

$h(X_0)$ 為 kernel 半徑。

$D(t)$ 為一個正實數，且其值隨著距離增加而遞減的方程式。

而每一個 kernel 方程式必需要符合以下三個性質

1. kernel 之值一定要為正數或是零。

2. 要為對稱的方程式。
3. 從中心至 kernel 半徑的距離，kernel 值要為遞減。

決定完 kernel function 之後，其估計的方程式，如下

$$\hat{Y}(X_0) = \frac{\sum_{i=1}^N K_h(X_0, X_i) Y(X_i)}{\sum_{i=1}^N K_h(X_0, X_i)}$$

N 是觀測的樣本數。

$Y(X_i)$ 第 i 個觀測點的值。

1.3.3 交叉驗證(cross validation)

本研究模式驗證，使用留一交叉驗證(leave-one-out cross-validation)。將要驗證的資料移除，使用剩餘的資料去推估此資料，直到整筆資料驗證完畢。

驗證完畢，利用以下的公式去計算模式的誤差。

$$z_{err} = \frac{\sum_{i=1}^n \sqrt{(z_{i,obs} - z_{i,sim})^2}}{n}$$

z_{err} : 驗證的平均誤差。

$z_{i,obs}$: 第 i 個的觀測值。

$z_{i,sim}$: 第 i 個的模擬值。

n : 資料的筆數。

1.4 研究區域

台北市地形屬於盆地。與位於台北縣內的雙和、板橋、三重、新莊、蘆洲、汐止雙等周邊城市，形成大型都會區，因此市區的交通流量十分龐大。

在人口及交通上，台北都會區將近有 7 百萬人，汽機車數量近 5.5 百萬輛台。每逢尖峰時段或假日，經常導致市區內各重要幹道出現交通阻塞的情形。亦興建多條快速道路與聯外橋樑。亦為台灣大眾運輸最發達的都市，公車路線達 283 線。

(台北市政府主計處 <http://w2.dbas.taipei.gov.tw/statchart> 與台北縣政府主計處 http://www.bas.tpc.gov.tw/_file/1528/SG/36005/D.html)

1.5 本文架構

第二章為文獻回顧，分別在 2.1 節整理計算趨勢相關文獻。在 2.2 節整理擬合共變異數相關文獻。在 2.3 節整理懸浮微粒的影響相關文獻，在 2.4 節整理台灣懸浮微粒特性相關文獻，在 2.5 節整理 $PM_{2.5}$ 組成成份相關文獻，在 2.6 節整理 $PM_{2.5}$ 與 PM_{10} 比值關係相關文獻。

第三章為自動化估計在時空非定常性過程之趨勢及共變異數，探討本研究的第一個主題，主要分為 3.1 節為研究方法，在 3.1.1 介紹粒子群演算法，在 3.1.2 節介紹 Nelder-Mead 單體法(NM)，在 3.2 節為研究資料，在 3.3 節為研究流程，在 3.4 節為研究成果，在 3.5 為結果與討論。

第四章為台北都會區 $PM_{2.5}$ 時空分佈推估研究，探討本研究的第二個主題，4.1 節為資料來源，4.2 節為研究流程，4.3 節為結果與討論。

第五章為結論與建議，在 5.1 節為結論，5.2 節為建議。

第二章 文獻回顧

計算趨勢主要有二種方法，第一種為有參數的方法，例如：一般克利金。第二種方法為無母數的方法。在擬合共變數中，本研究回顧前人的做法及會遇到的問題。而在台北都會地區空氣品質惡劣的原因大多是以懸浮微粒為主，而懸浮粒子對人體健康的影響是決定在它的粒徑大小及所附帶的化學元素或化合物(楊忠盛，1998)。而懸浮粒子又會直接或間接受到氣候的影響，且各地會因各種因素的不同， $PM_{2.5}$ 及 PM_{10} 的比值關係也會有所不同(蔣本基等，2003)。

2.1 計算趨勢相關文獻

在計算趨勢主要有兩種類型，其一是有參數的方法，例如：一般克利金法(universal kriging)(Goovaerts, 1997 ; Olea, 1999)和回歸克利金(regression kriging)等(Hengl et al., 2007)，這些需要以物理或數學的知識去描述，但事實上，許多問題太複雜，而無法用物理或數學去描述(Host, 1999)。其二是無母數的方法，例如：general additive model、spline 和 kernel smoothing method 等。這一類的方法，完全由資料本身來決定，不需要依靠物理或數學的知識，所以在應用上較容易(Hastie and Tibshirani, 1990)。

大多數的平滑化方法，都是假設資料是由一個平滑的趨勢及無相關性的殘差所組成。若相關性的殘差存在於資料中，則會造成不強健的趨勢估計(Altman, 1990 ; 2000)。

若有偏態的趨勢估計，可以會使殘差的共變異數也產生偏態(Cressie, 1987 ; Beckers and Bogaert, 1998 ; Pardo-Iguzquiza and Dowd, 1998)。為了降低兩者的偏態，Neuman 和 Jacobson 兩位學者建議可以使用以下步驟(詳細公式，請見 3.3 研究流程公式(3)):

- 1、先給定共變異數關係，獲得一組時空 kernel 半徑。
- 2、計算出殘差的共變異數。
- 3、最佳擬合共變異數的模式。
- 4、可得時空下的共變異數關係獲得一組新的時空 kernel 半徑。
- 5、重覆(2)至(4)，直到時空 kernel 半徑穩定為止(Neuman and Jacobson, 1984)。

在 kernel smoothing 的 kernel 半徑中，若選擇不適當的 kernel 半徑，會造成沒有代表性或是過度擬合的趨勢模式(Altman, 1990 ; Altman, 2000)。

2.2 擬合共變異數相關文獻

在不同空間或時間尺度下，時空過程分佈越複雜，擬合共變異數的模式及參數就越難處理，且若超過兩個巢狀模式(nested model)，每一個模式的 sill 值就變的非常的不確定了，使整個最佳化的問題更驅於複雜(Pelletier, 2009)。使用巢狀模式去擬合共變異數，不僅只是去擬合共變異數的過程，也是在揭露整個潛在不同尺度的組成(Goovaerts, 1997)。應該避免用巢狀模式去擬合一個模式就能擬合非常好的情況(Jian et al., 1996)。

許多研究都是利用權重最小平方法搭配 NM 法去半自動擬合共變異/半變異數(Cressie, 1985 ; Gotway, 1991 ; Zhang et al., 1995 ; Jian et al., 1995 ; Pardo-Igúzquiza, 1998)。

在權重最小平方法中，權重的設定會影響擬合的結果，Pardo-Igúzquiza(1998)用了以下五種不同的權重，分別去討論擬合的情況，發現在沒有 nugget 的影響下，使用第四種權重有最小的誤差，若有 nugget 的話，使用第五種當權重有最小的誤差。

1. $w(i, j) = 1.0$
2. $w(i, j) = N(i, j)$
3. $w(i, j) = [\gamma(i, j)]^{-2}$
4. $w(i, j) = N(i, j) \cdot [\gamma(i, j)]^{-2}$
5. $w(i, j) = N(i, j) \cdot [D(i, j)]^{-2}$

$w(i, j)$: 權重。

$N(i, j)$: 配對數。

$\gamma(i, j)$: 半變異數。

$D(i, j)$: 配對數的平均距離

i, j : 第 i 方向的第 j 個的 lag。

而在 2003 年，Lark 和 Papritz 兩位學者，使用啟發式演算法中的退火模擬法自動去擬合共變異/半變異數(semivariogram)。

2.3 懸浮微粒的影響

慢性暴露在懸浮微粒中，會增加肺癌、缺血性中風、節律障礙、心臟衰竭及心臟等疾病的風險(Lei et al., 2005 ; Yanosky et al., 2008)也會造成死胎比率上升、呼吸困難、氣喘加重，住院率上升及急診次數增加(王秋森與陳志傑，1999)。近年來許多研究指出粒徑越小的懸浮粒子越容易進入人體的肺部，並累積於肺泡造成病變(李芝珊，1992；詹俊南，1996；蔣本基，1997；王竹方等，2002；Yanosky,

2008 ; Bell et al., 2008 ; Chen et al., 1999)。除了影響人體健康外，亦會造成能見度下降，影響行車安全(楊忠盛，1998)、改變氣象、氣候、影響太陽輻射驅動力(楊炳隆，2008；李崇德，2005)。最近的研究進一步指出，個體本身的易感受性也可能與微粒空氣污染造成的健康效應有關，流病研究發現，老人、小孩及本身患有呼吸道或心血管疾病的人對微粒空氣污染的影響較為敏感，最近的研究更顯示，糖尿病患可能是另一個與微粒空氣污染引發的心血管疾病有關的易感族群(Lei et al., 2005)，然而詳細的生物機轉仍須進一步驗證(雷佑蓁，2005)。

2.4 台灣懸浮微粒特性

蔣本基等(2003)研究指出 $PM_{2.5}$ 及 PM_{10} 兩者具有良好的關係性，以季節而言每年冬、春季（11~隔年3月）有濃度高值，5月後逐月下降，夏季7~9月間為每年濃度較低時期，10月後， $PM_{2.5}$ 濃度又逐月上升且都市中的濃度皆比在區域中還高，而雨天可減少機動車輛經過道路而揚起懸浮微粒。由因子分析(factor analysis)和聚類分析(cluster analysis)得知，土壤或街塵大多存在於 $PM_{2.5-10}$ 的懸浮微粒之中，而交通污染源及光化污染物大多存在於粒徑較小的 $PM_{2.5}$ 之中。風速、溫度、穩定度、混合層高度、局部區域環流等直接或間接的影響污染物的濃度分布。 $PM_{2.5}$ 懸浮微粒中則以人文活動所產生佔大部分，以台北為例，人文活動所產生的 $PM_{2.5}$ 濃度佔 $PM_{2.5}$ 總量的 67-94%。

在夜間時懸浮微粒濃度會低於日間，由此可知懸浮微粒和人為活動有關，且 $PM_{2.5}$ 會隨著人為污染增加而增加其比重(詹俊南，1996；楊忠盛，1998)。高壓迴流型態會影響污染物的濃度分布(王竹方等，2005)。

在人行道及不同高度之懸浮微粒及鉛濃度，白天和晚上兩採樣時段沒有顯著差異。對不同高度而言，環境中之懸浮微粒及鉛濃度隨高度升高而遞減，並且在

愈高處遞減速率愈慢，在 16 至 70 公尺之間幾乎維持平穩(王秀娟，1993)。

2.5 PM_{2.5} 組成成份

PM_{2.5} 會影響人體健康的主要原因除了粒徑大小之外，就是附著在 PM_{2.5} 的化學元素及化合物，不同的化學元素及化合物會造成人體上不同的病變，如：鉛會造成神經系統的病變等。而附著在上面的化合物會隨著污染源不同有所差異，主要可以分類三個不同來源，1、來自燃油、光化污染，其 PM_{2.5} 組成成份會有 Mn、S、SO₄²⁻。2、來自土壤、海鹽，其組成成份會有 Fe、K、Zn、Cl⁻。3、來自交通，其組成成份有 Ca、Cr、Ti、Zn、Pb、NO³⁻ (楊忠盛，1998)。

2.6 PM_{2.5} 與 PM₁₀ 比值關係

台北都會區懸浮粒子 PM₁₀ 中小於 2.5μm 的懸浮粒子佔約 6 成(PM_{2.5}/PM₁₀ = 0.6)，隧道內側則佔 8 成 7(PM_{2.5}/PM₁₀=0.87)(楊忠盛，1998)。而 Chen(1999)的研究中，指出全台灣平均的 PM_{2.5}/PM₁₀ 為 61%-67%，而北台灣較低，約為 54-59%。

Li(2002)分別在中山一般測站及大同交通測站量測 PM₁、PM_{2.5} 和 PM₁₀，發現 PM₁ 及 PM_{2.5} 在大同交通測站的比值高達 0.9。而中山一般測站與大同交通測站平均的 PM_{2.5}/PM₁₀ 分別為 0.57 與 0.68。

蔣本基(1992；2000)研究發現，福星國小與古亭國小 PM_{2.5}/PM₁₀ 為 0.5。而北投區與文山區懸浮微粒濃度特性相似，PM₁₀/TSP、PM_{2.5}/PM₁₀ 分別為 0.70 及 0.63，且立農國小、天母國小、木柵高工、木柵國小及吳興國小等測站位於交通流量大地區，PM_{2.5}/PM₁₀ 約為 0.7，可見交通污染源對細微粒有較大影響，表 2-1 整理台灣各地的 PM_{2.5} 與 PM₁₀ 比值(來源:蔣本基等，2003)。

表 2-1 PM_{2.5} 與 PM₁₀ 比值表

特性/分類	PM _{2.5} 濃度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	PM ₁₀ 濃度 ($\mu\text{g}/\text{m}^3$)	PM _{2.5} /PM ₁₀
福星國小與古亭國小	—	—	0.5
台北市交通流量大之立農 國小、天母國小、木柵高 工、木柵國小及吳興國小	—	—	0.63
白天	8.8-50.2	18.5-64.7	0.48-0.78
夜間	6.4-48.5	19.2-64.9	0.31-0.75
高交通流量區位	12-50	22-68	0.55-0.79
低交通流量區位	10-54	12-68	
北台灣地區	10-46 北	31-72	0.32-0.65
中台灣地區	13-50 中	32-105	0.41-0.72
南台灣地區	16-91 南	31-124	0.40-1.00
台灣地區	—	42-47(北) 74-95(南)	0.6
台灣中部地區於沙塵暴時 期	—	—	0.46-0.82

第三章 自動化估計在時空非定常性過程之趨勢 及共變異數

在文獻回顧的 2.1 節中，可以知道不穩健的趨勢估計，會造成不穩健的共變異數，為了避免此結果的發生，本研究採用 Neuman 和 Jacobson 兩位學者建議。在 2.2 節中，本研究採用 Pardo-Igúzquiza(1998)中第 2 種當權重。

3.1 研究方法

PSO 屬於啟發式演算法的一種，由 Eberhart 與 Kennedy 根據群體的智慧所發展出的演算法(Eberhart and Kennedy, 1995)。想法出自於魚群及鳥群的社會活動的概念。近年來 PSO 成功的應用在許多研究的領域上，原因是它簡單、穩健及有效率且原理富有意義性(Liang et al., 2006; Zhang and Teng., 2009)。其中還有一個使用它的理由，那就是它需要去調整的參數很少(Ravagnani et al., 2009; Shinzawa et al., 2007)。此方法具有跳脫區域最佳解的能力且可以同時使用一個以上的初始值，適合高維度的求解問題使用，且此方法非常的適合解決非限制性(unconstrained)的問題(如:擬合資料)(何怡偉，2004)。

NM 是由 John Nelder 與 Mead 兩位學者提出(Nelder and Mead, 1965)，也是屬於啟發式演算法的一種，被廣泛的使用在非線性非限制最佳化(nonlinear unconstrained optimization)上，目的是讓多維空間中的目標函數最小化。優點是能快速的找出全域或區域最佳解，缺點是會被侷限於區域最佳解。

Matlab 程式屬於高階語言，已被廣泛的使用在科學、數學及工程領域等。它的好處是程式編碼容易、具有豐富的函式庫且圖形展現方便，也就是說程式開發

速度較快。計算方式主要使用矩陣運算，這有別於其它的語言，這一項優點可以使計算時間大幅度的縮減。但其缺點為若需大量迴圈的運算時，將會造成運算時間增加。若計算矩陣若過大也會造成運算的記憶體不足的情況。

C 語言的優點為執行相當有效率，但編碼上較困難且在圖形的展現上較不容易。

本研究將使用 Matlab 與 C 語言兩者搭配使用。在需要大量迴圈運算時，使用 Matlab 去呼叫 C，例如在計算趨勢時。在演算法部分，將利用 PSO 去搜尋最佳的趨勢，而在搜尋最佳的模式、個數及參數，使用 PSO 與 NM 兩者相互搭配。

3.1.1 粒子群演算法(PSO)

粒子群演算法是由 Eberhart 和 Kennedy(1995)由魚群及鳥群的群落行為所發展出來的一套群體智慧的演算法(Eberhart and Kennedy, 1995)。

在 PSO 中，群體是由一個個稱為「粒子」(particle)所組成，每個粒子都代表在搜尋空間中一個具有潛力的解。每一個粒子受到本身及群體最佳位置的影響都有獨自的移步速度及方向。例如:在 D 維度的空間中有 M 個粒子在搜尋，其每一個粒子的位置 x 及速度 v ，可以用矩陣表達如下:

$$x = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1D} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2D} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ x_{M1} & x_{M2} & \cdots & x_{MD} \end{bmatrix}$$

$$v = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & \cdots & v_{1D} \\ v_{21} & v_{22} & \cdots & v_{2D} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ v_{M1} & v_{M2} & \cdots & v_{MD} \end{bmatrix}$$

而每一個粒子的移步的大小及方向，由以下的方程式來決定：

$$v_{id}^{k+1} = w \cdot v_{i,d}^k + c_1 \cdot r_{1,d}^k \cdot (pbest_{id}^k - x_{id}^k) + c_2 \cdot r_{2,d}^k \cdot (gbest_d^k - x_{id}^k)$$

$$x_{id}^{k+1} = x_{id}^k + u \cdot v_{id}^{k+1}$$

i :粒子的數目，本研究使用 30 個粒子去搜尋。

d :維度。

k :迭代的次數。

v_{id} :代表粒子的速度。

x_{id} :代表粒子的位置。

$pbest$:個別維度中，最佳粒子的位置。

$gbest$:群體中最佳粒子的位置。

c_1, c_2, w :正常數。本研究採 $c_1=2$ ， $c_2=2$ ， $w=0.5$ 。

r_1, r_2 :介於 0 與 1 之間的隨機值。

u :飛行時間，介於 0 與 1 之間的隨機值。



3.1.2 Nelder-Mead 單體法(NM)

自從 1965 年發表 NM 最佳化的方法後，一直被使用在非線性及無限制 (nonlinear and unconstrained) 的問題上，尤其在化學、化學工程及機械的領域 (Lagarias et al., 1998)。NM 是屬於直接搜尋法 (direct search)，不需使用到梯度 (gradient information)。這項特點非常適合現實世界中的複雜問題。

NM 是由單體 (simplex) 的大小及變化所構想出一個有規則性的演算法。就大小而言，幾何學的單體是由三角形或是四面體所構成的，具體的來說， n 個單體是 n 的維度多面體，由 $n+1$ 的角頂 (vertices) 所構成的，這裏的 n 可以視為要解決的問題中參數的數目。就變化而言，單體會透過四種方式變化：(1) 反射 (reflection) (2) 擴充 (expansion) (3) 收縮 (contraction) (4) 縮短 (shrink)。而這四種變化都有其係數，在本研究將定義反射係數 α 為 1，擴張係數 γ 為 2，收縮係數 β 為 0.5 及縮短係數 δ 為 0.5 (此參數定訂參考 Lagarias et al., 1998) 並在下面做詳細的步驟說明。

1. 首先：假設在一個函數 $f(x)$ 中有 n 個需要求解的參數，所以會產生 $n+1$ 的角頂，滿足如下：

$$f(x_1) \leq f(x_2) \leq \dots \leq f(x_{n+1})$$

2. 反射：計算反射點 x_r ，如以下的公式所示：

$$x_r = (1 + \alpha)\bar{x} - \alpha x_{n+1}, \quad \bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i / n \text{ 為 } x_1, x_2, \dots, x_n \text{ 的質量中心。}$$

計算 $f_r = f(x_r)$ ，假如 $f_1 \leq f_r < f_n$ ，接受 x_r 並繼續迭代。

3. 擴充：假如 $f_r \leq f_1$ ，計算擴充點 x_e 如以下的公式所示：

$$x_e = (1 + \alpha\gamma)\bar{x} - \alpha\gamma x_{n+1}$$

計算 $f_e = f(x_e)$ ，假如 $f_e \leq f_r$ ，接受 x_e 並繼續迭代，若是 $f_e \geq f_r$ ，則接受 x_r 繼續迭代。

4. 收縮: 假如 $f_r \geq f_n$ ，分為二種情況:

(a) 在外面的情況: $f_n \leq f_r < f_{n+1}$ ，計算收縮點 x_c 如以下的公式所示:

$$x_c = (1 + \alpha\beta)\bar{x} - \alpha\beta x_{n+1}$$

計算 $f_c = f(x_c)$ ，假如 $f_c \leq f_r$ ，接受 x_c 並繼續迭代，否則跳至第五點。

(b) 在內面的情況: $f_r \geq f_{n+1}$ ，計算收縮點 x_{cc} 如以下的公式所示:

$$x_{cc} = (1 - \beta)\bar{x} - \beta x_{n+1}$$

計算 $f_{cc} = f(x_{cc})$ ，假如 $f_{cc} \leq f_{n+1}$ ，接受 x_{cc} 並繼續迭代，否則跳至第五點。

5. 縮短: 重新計算 $f(x)$ 之值，此時的 x 更新為 x_1, v_2, \dots, v_{n+1} ，計算方法如下:

$$v_i = x_1 + \alpha(x_i - x_1), i = 2, \dots, n+1$$

圖 3-1 與 3-2 為二維的單體法在反射、擴充、收縮及縮短變化的示意圖。

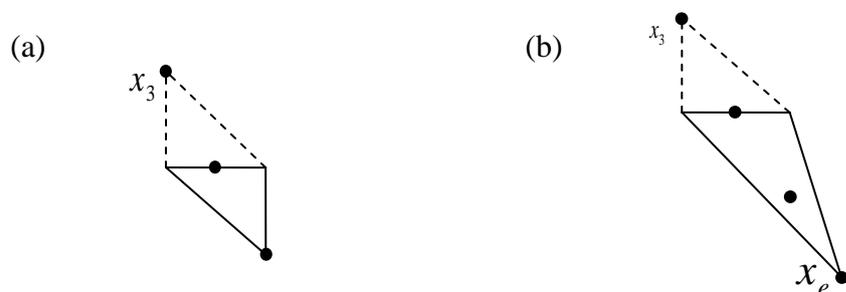


圖 3-1 NM 法中的(a)反射及(b)擴充圖

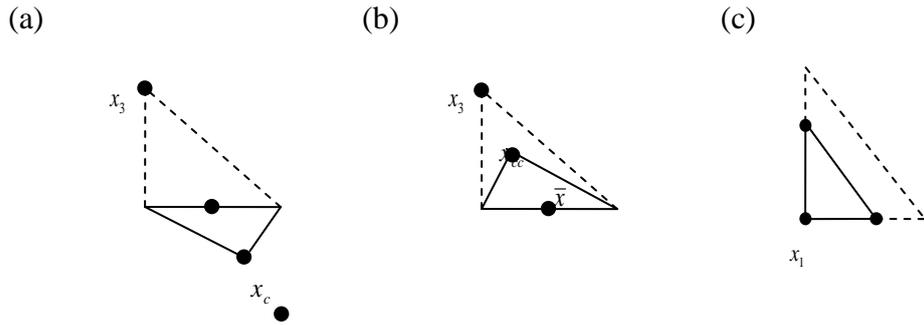


圖 3-2 NM 法中的(a)收縮在外面及(b)收縮在裡面(c)縮短

3.2 研究資料

研究時間為 2004-2007 年 PM_{10} (粒徑為 $10\mu m$ 以下)的資料可以從兩個單位獲得。一是行政院環保署，共有 8 個測站。二是台北市環保局，總共有 18 個測站。全部共有 26 個測站，其分佈如圖 3-3。在附錄一有詳細的測站名稱及地理座標。

PM_{10} 的基本統計特性，如表 3-1。

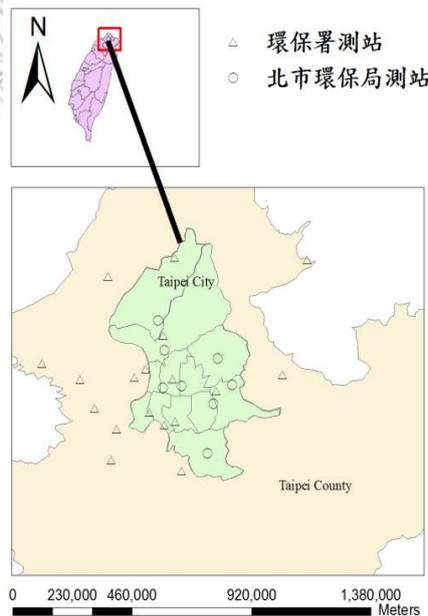


圖 3-3 PM_{10} 空氣品質監測站分佈圖

表 3-1 PM₁₀ 基本統計特性(單位: $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

平均值	標準差	中位數	最小值	最大值
51.470	13.119	50.441	13.148	95.803

3.3 研究流程

主要的流程，如圖 3-4 所示。以下將詳細介紹研究做法：

使用 kernel smoothing 去計算趨勢時，首先需定義 kernel 方程式如方程式(1)，需要決定空間及時間的 kernel 半徑 b_s 與 b_t 。其估計式如方程式(2)所示。本研究使用 PSO 去尋找最佳的 b_s 及 b_t ，為了避免不強健的趨勢估計，本研究採用第二章文獻回顧中 Neuman 和 Jacobson 兩位學者的建議。使用公式(3)GCV，當成 PSO 搜尋最佳 b_s 及 b_t 的目標函數且要使目標函數最小化。在方程式(3)，由於一開始不知道共變異矩陣，所以無法計算 GCV，故本研究先假設自己與自己共變異關係為 1，其餘為 0。

$$K(p_o, p_i) = \exp\left(-\left(\frac{|s_o - s_i|}{2b_s}\right)\right) \cdot \exp\left(-\left(\frac{|t_o - t_i|}{2b_t}\right)\right) \quad (1)$$

p_o, p_i : 屬於實數，為座標位置。

s_o : p_o 的空間座標。

s_i : p_i 的空間座標。

t_o : p_o 的時間。

t_i : p_i 的時間。

$|\cdot|$: 為歐幾里德距離。

b_s : 空間的 kernel 半徑。

b_t : 時間的 kernel 半徑。

$$\hat{Y}(p_0) = \frac{\sum_{i=0}^N k(p_0, p_i) \cdot y(p_i)}{\sum_{i=1}^N k(p_0, p_i)} = \sum_{i=1}^N w(p_0, p_i) \cdot y(p_i) \quad (2)$$

$y(p_i)$: 第 i 時空點的觀測值。

$\hat{Y}(p_0)$: p_0 點的估計值。

$$GCV = n \left[\sum_{i=1}^n \left(\frac{y(p_i) - z_{sim}(p_i)}{n - \text{trace}(W_i C_i)} \right)^2 \right] \quad (3)$$

n : 資料在 b_s 、 b_t 內的樣本數。

W_i : 為 $w(p_0, p_i)$ 的矩陣。

C_i : 相關係數。

由最小的 GCV 值，可以得到一組 b_s 及 b_t 。利用 b_s 及 b_t 計算趨勢，再把資料移除趨勢(remove trend)。移除趨勢的資料，稱為「殘差」(residue)。就可以計算殘差的共變異矩陣。有了共變異矩陣，現在需要去擬合它。本研究結合 PSO 與 NM 兩者的方法(PSO-NM)去搜尋最佳擬合模式的型態、個數及參數。搭配的方式為，PSO 迭代五次，使用 NM 一次。

此時定義一個目標函數並使之最小化，當成 PSO-NM 搜尋最佳擬合模式的個數、型態及參數，如方程式(4)

$$Obj_{\min} = \sum_{i=1, j=1}^{i=p_s, j=p_t} w(i, j) [\hat{C}(i, j) - C(i, j)]^2 \quad (4)$$

$$w(i, j) = N(i, j)$$

$i: 1, 2, \dots, p_s$ ， p_s 為空間最大的 lag 數。

$j: 1, 2, \dots, p_t$ ， p_t 為時間最大的 lag 數。

$w(i, j)$: 第 i 個空間 lag 及第 j 個時間 lag 的權重。

$N(i, j)$: 第 i 個空間 lag 及第 j 個時間 lag 的配對數。

$C(i, j)$: 第 i 個空間 lag 及第 j 個時間 lag 的真實的共變異數。

$\hat{C}(i, j)$: 第 i 個空間 lag 及第 j 個時間 lag 的擬合的共變異數。

擬合共變異數模式之個數，主要使用 1 至 3 個模式去擬合。使用 1 個模式時，所挑選的模式只有 (a)、(b) 及 (c) 3 種模式，其餘挑選的模式有 (a) 至 (e)。如下為模式的型態。

(a) Gaussian model

$$c(h) = c_0 \exp\left(-\frac{3h^2}{a_r^2}\right)$$

(b) Spherical model

$$c(h) = \begin{cases} c_0 \left(1 - \frac{3}{2} \frac{h}{a_r} + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a_r}\right)^3\right), & 0 \leq h \leq a_r \\ 0, & a_r \leq h \end{cases}$$

(c) Exponential model

$$c(h) = c_0 \exp\left(-\frac{3h}{a_r}\right)$$

(d) Holesin model

$$c(h) = a_{r1} \sin\left(\frac{1.5\pi h}{a_{r2}}\right) / \left(\frac{1.5\pi h}{a_{r2}}\right), h \geq 0,$$

As $h = 0, c(h) = a_{r1}$

(e) Nugget modle

$$c(h) = a_r, h = 0$$

以下為本研究利用 PSO-NM 去搜尋最佳擬合的模式個數、型態及參數的步驟:

首先決定第一個模式的型態。利用共變異矩陣如(5)中，空間的第一、二個共變異值 $c_{1,1}$ 、 $c_{2,1}$ 與時間的第一、二個共變異值 $c_{1,1}$ 、 $c_{1,2}$ ，其中 $c_{1,1}$ 為 sill。把空間的共變異值相鄰兩兩相減取絕對值，即 $|c_{2,1} - c_{1,1}|$ 、 $|c_{3,1} - c_{2,1}| \dots$ 、 $|c_{p_s,1} - c_{p_s-1,1}|$ ，同理，時間也是相同的做法，即 $|c_{1,2} - c_{1,1}|$ 、 $|c_{1,3} - c_{1,2}| \dots$ 、 $|c_{1,p_t} - c_{1,p_t-1}|$ 。本研究定義一個標準值 0.01，若在空間上第一個兩者的絕對差值小於 0.01，則所對應的距離就是 range。同理時間也是相同的做法。若絕對差值都大於 0.01，就標準值每次增加 0.001，直到有小於定義的標準值為止。

$$C_{i,j} = \begin{bmatrix} c_{1,1} & c_{1,2} & \cdots & c_{1,p_t} \\ c_{2,1} & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ c_{p_s,1} & \cdots & \cdots & c_{p_s,p_t} \end{bmatrix} \quad (5)$$

$C_{i,j}$:空間第 i 個 lag，時間第 j 個 lag 的共變異值。

$i = [1, 2, \dots, p_s]$ ，為 p_s 空間最大 lag 數。

$j = [1, 2, \dots, p_t]$ ，為 p_t 時間最大 lag 數。

有了空間及時間的 sill、range 之值，加上 $c_{2,1}$ 、 $c_{1,2}$ 所對應的距離，代入 Gaussian 及 Spherical model，可以分別得到 c_{Gs} 、 c_{Ss} 、 c_{Gt} 、 c_{St} ， c 底下的 G 為 Gaussian 模式， S 為 Spherical 模式， s 為空間， t 為時間。在空間上，若 $c_{1,1} \leq c_{2,1} \leq c_{Gs}$ 則使用 Gaussian 模式，若 $c_{Gs} \leq c_{2,1} \leq c_{Ss}$ 則使用 Spherical 模式，其它的情況則使用 Exponential 模式。同理，在時間方面也是相同的做法。若 $c_{1,1} \leq c_{1,2} \leq c_{Gs}$ 則使用 Gaussian 模式，若 $c_{Gs} \leq c_{1,2} \leq c_{Ss}$ 則使用 Spherical 模式，其它的情況則使用 Exponential 模式。

決定了第一個模式的型態後，使用 PSO-NM 去搜尋其參數且計算 Akaike information criterion(AIC)，其公式(6)如下：

$$AIC = n \ln\left(\frac{R_m}{n}\right) + 2p \quad (6)$$

n :共變異數的數目。

R_m :最小的目標函數值。

p :使用擬合的參數個數。

決定了第一個模式後，繼續決定第二個模式，而第二個模式的型態有 5 種可以挑選，就時空的組合有 25 種，本研究使用多樣性策略(diversity strategy)，即每一個都去試。從中選擇目標函數值最小時空模式當成第二個模式，並計算 AIC。

決定了第一個與第二個模式後，先比較一個模式與二個模式的 AIC，若二個模式的 AIC 小於一個模式的 AIC，則再繼續決定第三個模式，方法同決定第二個模式。比較二個模式、三個模式的 AIC，從中挑選出最小 AIC 值的模式，當成本次尋找中的最佳的模式個數及型態。若二個模式的 AIC 大於一個模式的 AIC，則使用一個模式當成本次尋找中最佳的模式個數及型態。

找到最佳模式的個數及型態後，使用 PSO-NM 配合強化性策略(intensive strategy)去搜尋參數，可以得到最佳擬合共變異數的方程式。

有了最佳的擬合共變異方程式，就可以知道相關係數，重新搜尋最佳的 b_s 與 b_l 。假如 b_s 與 b_l 與上一次絕對誤差相差 0.001 則停止搜尋，若不是的話，則繼續搜尋。



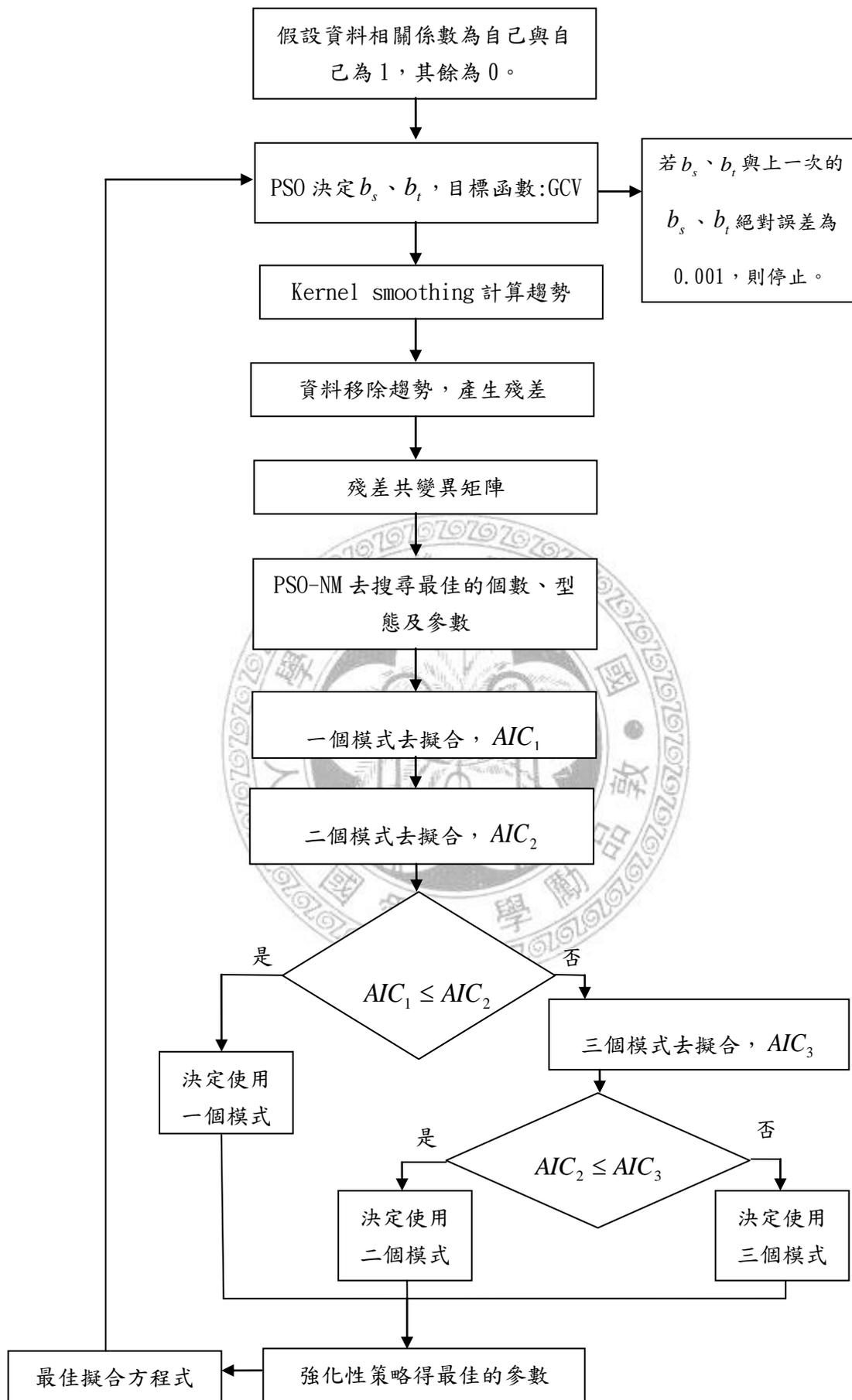


圖 3-4 研究流程圖

3.4 研究結果

找到最佳的 b_s 與 b_t 分別是 11250.658 公尺與 1 個月，各測站的觀測值及趨勢由圖 3-5。而圖 3-6 為各測站及平均的趨勢。搜尋最佳擬合方程式如下，其搜尋參數在強化策略階段變化情形如圖 3-7:

$$c(h, \tau) = c_0 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r1}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t1}}\right) + c_1 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r2}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t2}}\right) + N(c_2)$$

h : 為空間距離。

τ : 為時間距離。

$$[c_0, c_1, c_2] = [24.950, 57.713, 12.515]$$

$$[a_{r1}, a_{r2}, a_{t1}, a_{t2}] = [149585.407\text{m}, 4541.566\text{m}, 0.488 \text{ month}, 104.414 \text{ month}]$$

其中 $N(c_2)$ 為 nugget 模式，當 $h=0$ 及 $\tau=0$ 時， $N(c_2)=c_2$ ，其它情況 $N(c_2)=0$ 。

在 PSO-NM 中，本研究分別比較搜尋不同的粒子數目 10、20、30、40、50、80 及 100，搜尋 1000 次，每次迭代 500 次，去看不同粒子數與目標函數的關係與不同粒子數與搜尋時間的關係，如圖 3-8 及圖 3-9。

本研究也使用了權重最小平方法去擬合本研究的資料，假設趨勢值一樣，也就是有相同的殘差共變異數。擬合的結果圖如圖 3-10，擬合最佳的方程式如下:

$$c(h, \tau) = c_0 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r1}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t1}}\right) + N(c_1)$$

$$[c_0, c_1] = [29.792, 52.89]$$

$$[a_{r1}, a_{r2}] = [84923.037\text{m}, 120.47\text{month}]$$

其中 $N(c_1)$ 為 nugget 模式，當 $h=0$ 及 $\tau=0$ 時， $N(c_1)=c_1$ ，其它情況 $N(c_1)=0$ 。

為了比較 PSO-NM 法及只用 NM 法找出來的最佳擬合方程式的不同，本研究使用克利金法去做交叉驗證，結果如表 3-2。

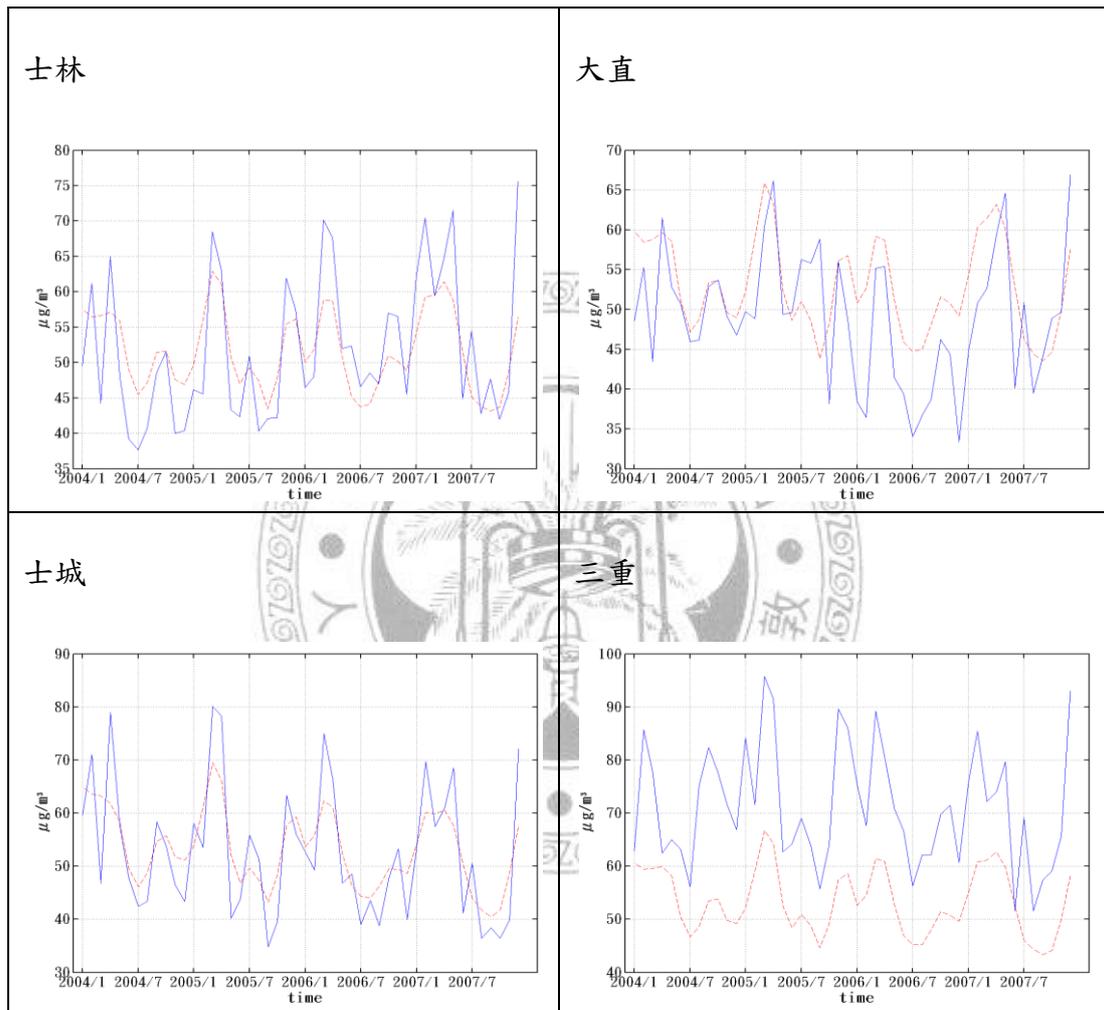


圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢，藍實線:觀測值)(續)

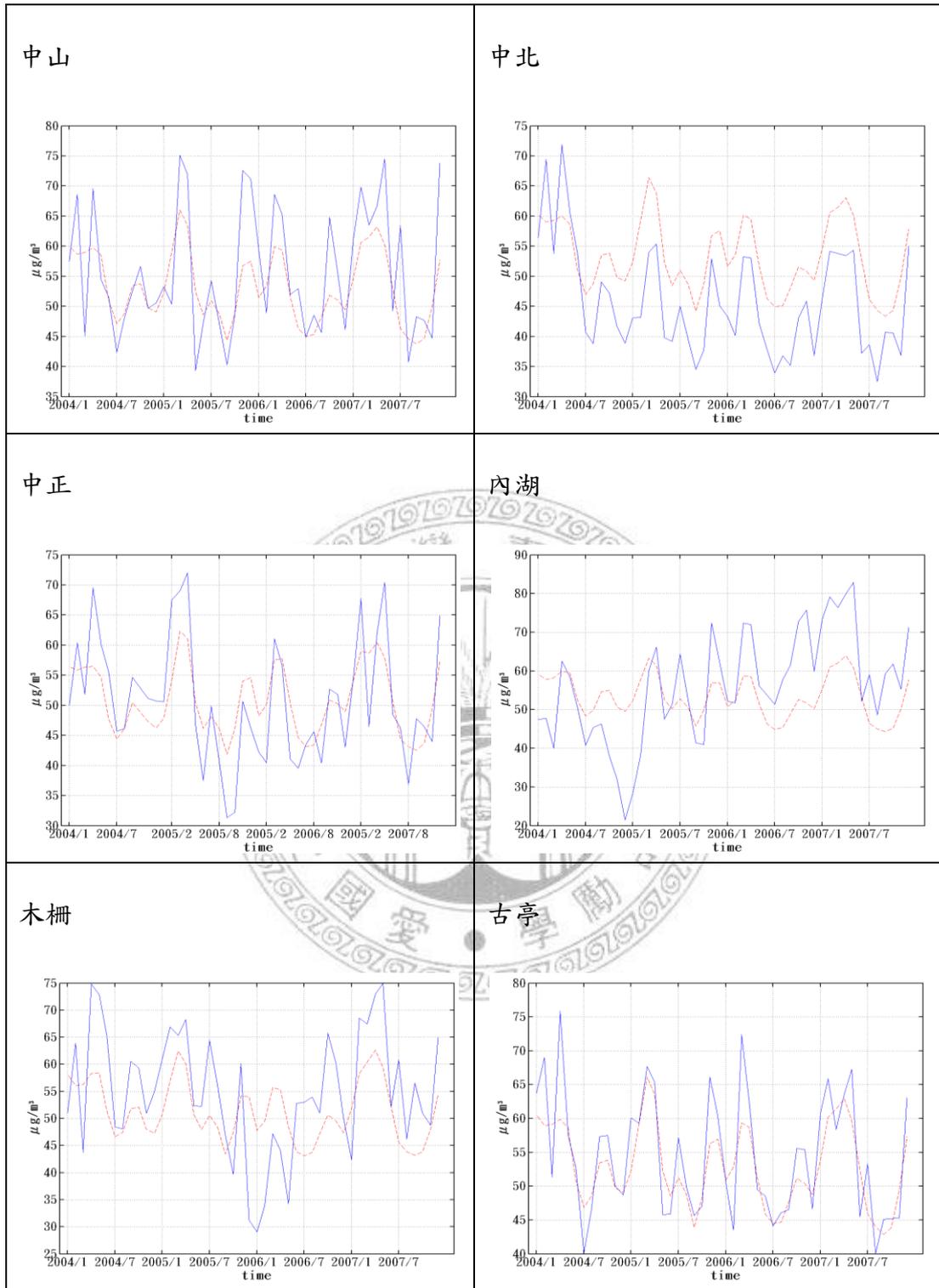


圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續)

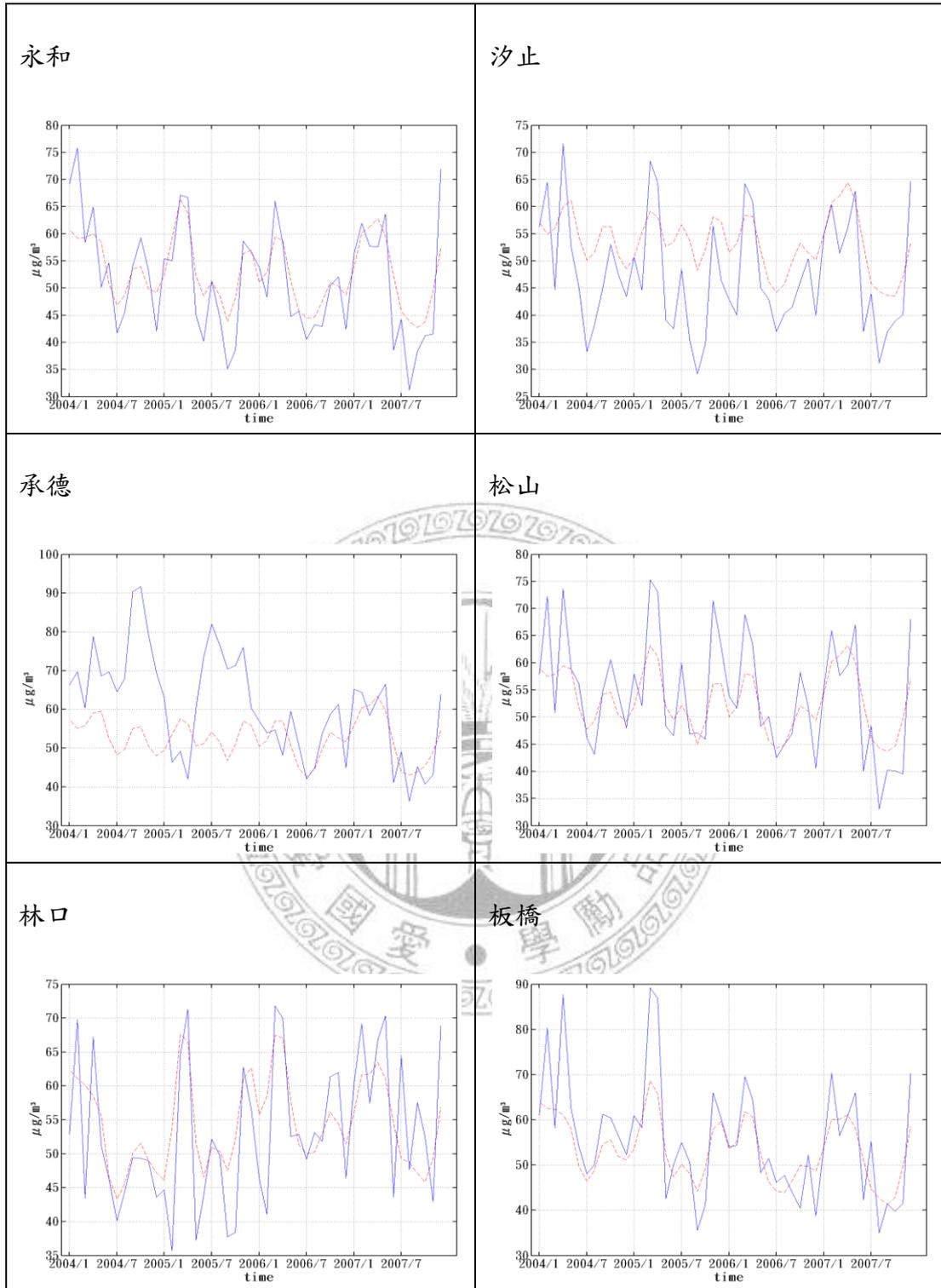


圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續)

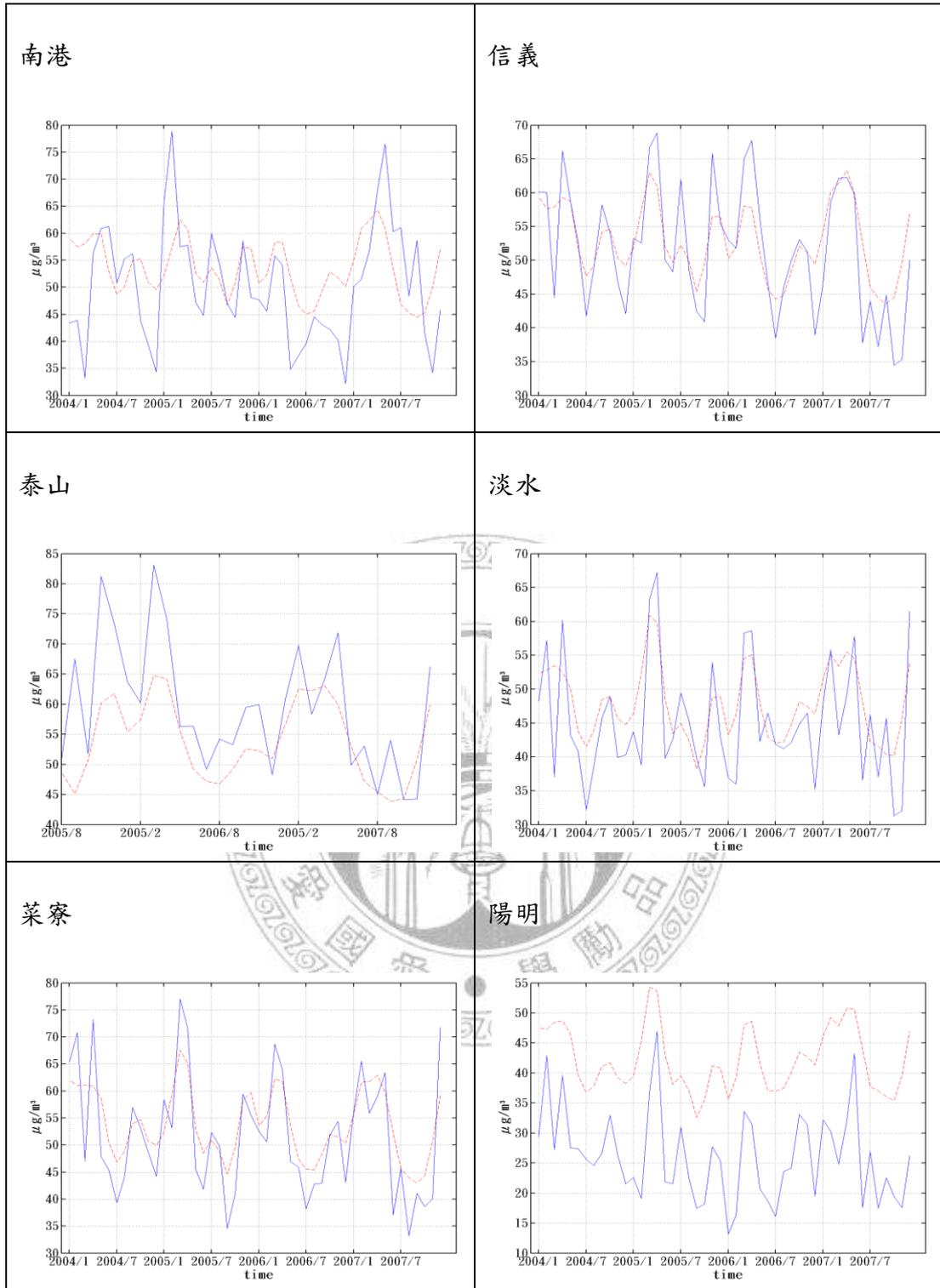


圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)(續)

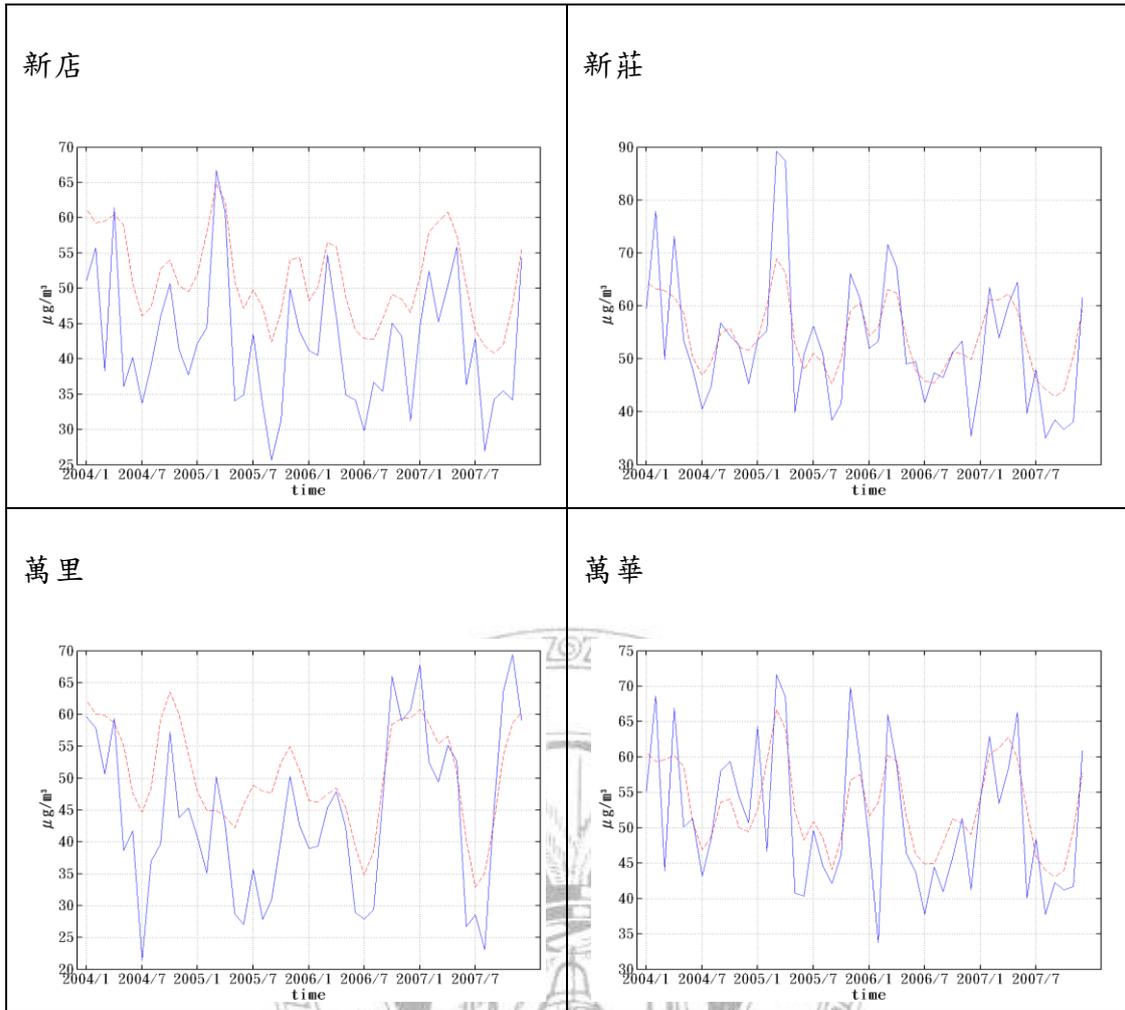


圖 3-5 各測站觀測值及趨勢(紅虛線:趨勢, 藍實線:觀測值)

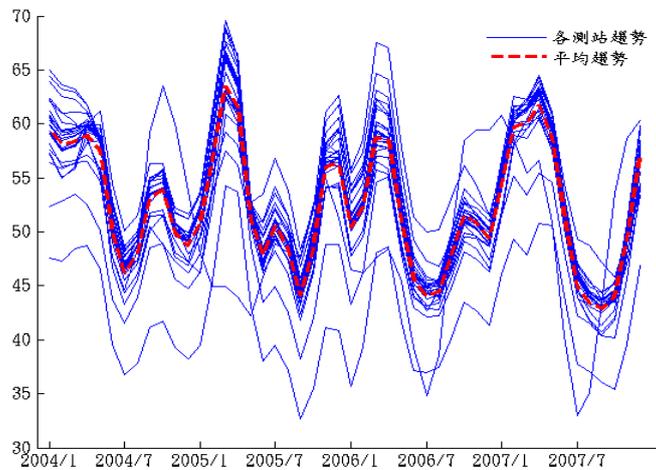


圖 3-6 為各測站及平均的趨勢

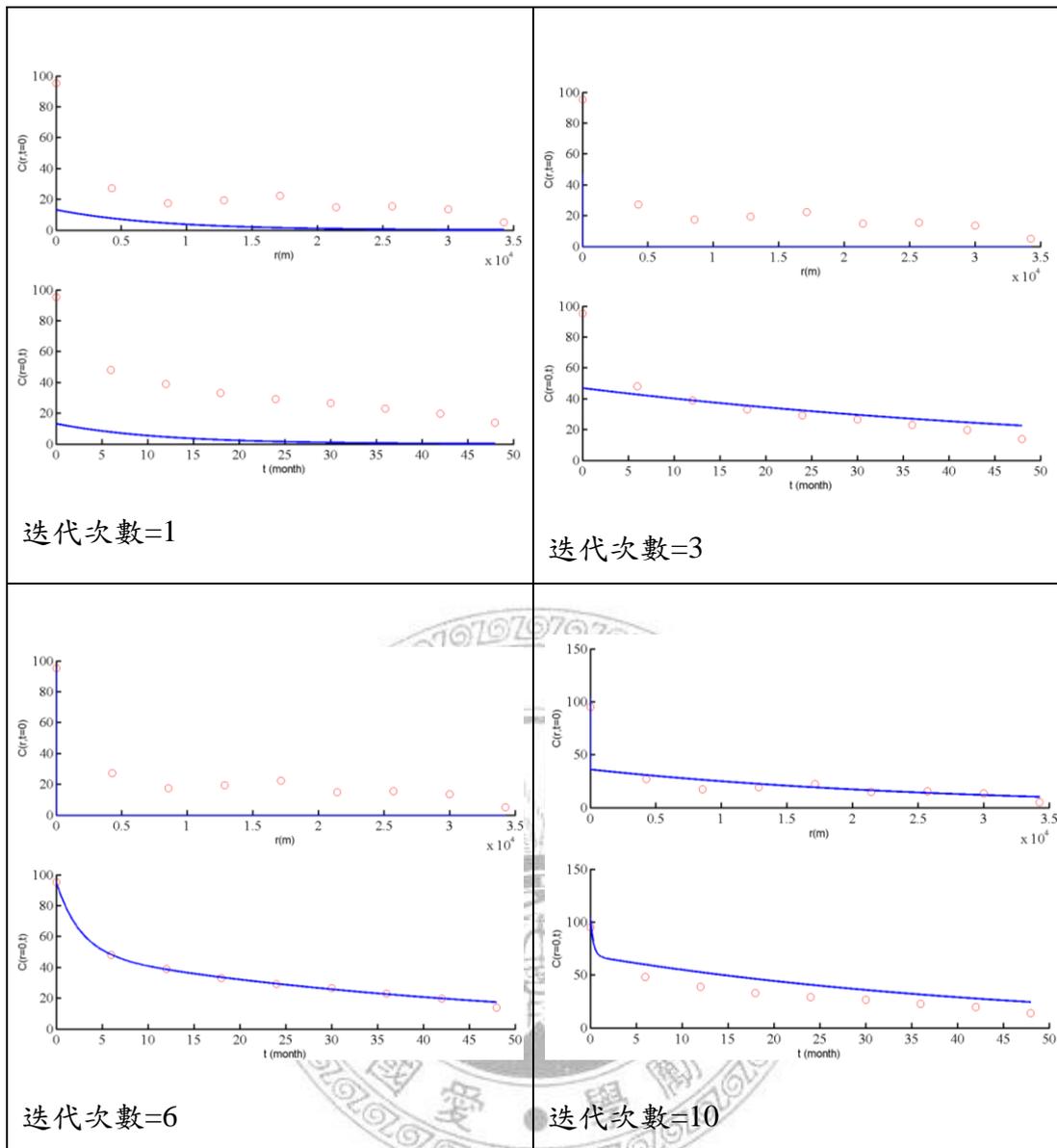


圖 3-7 搜尋最佳擬合參數在強化策略階段的變化情形(續)

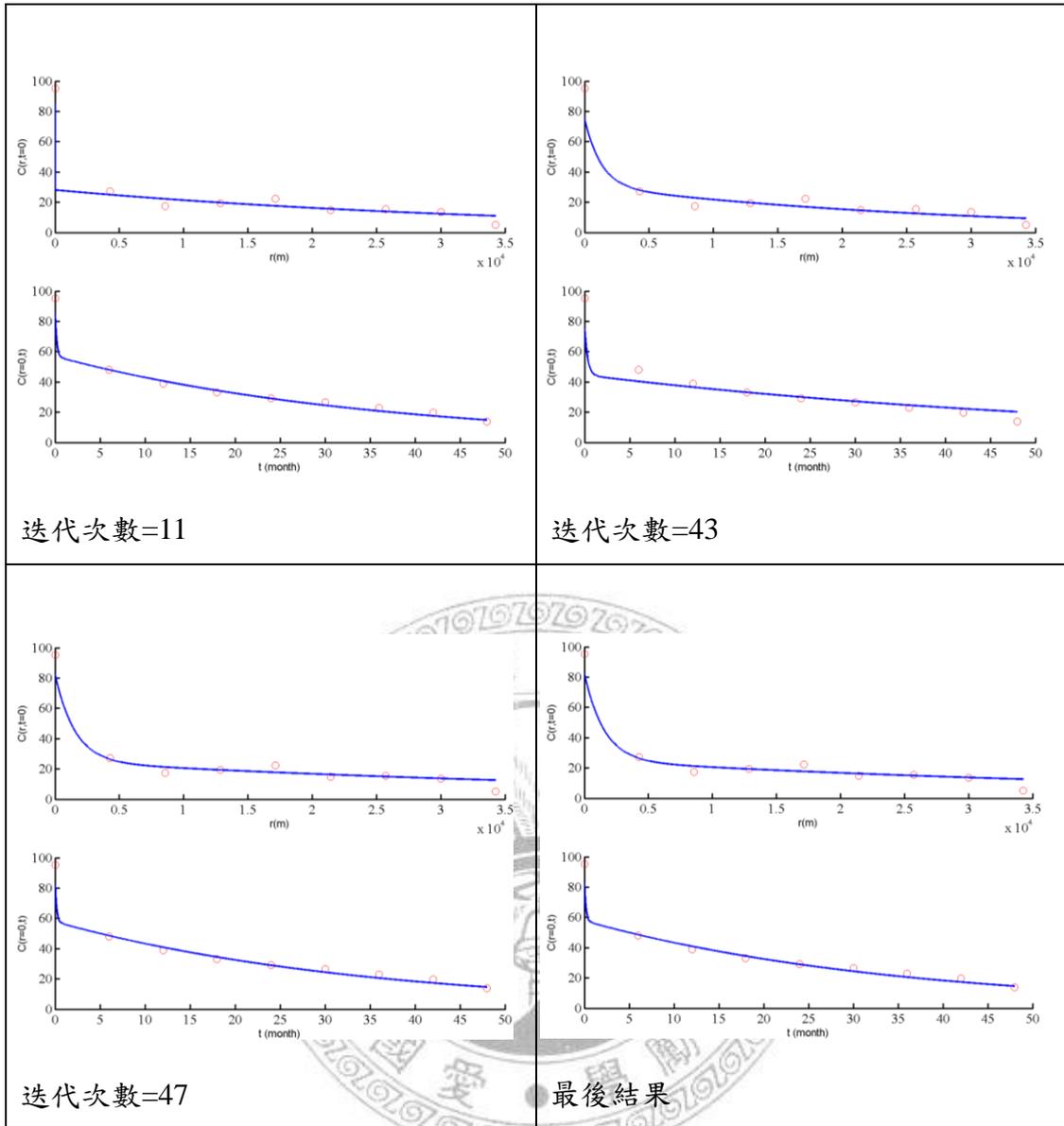


圖 3-7 搜尋最佳擬合參數在強化策略階段的變化情形

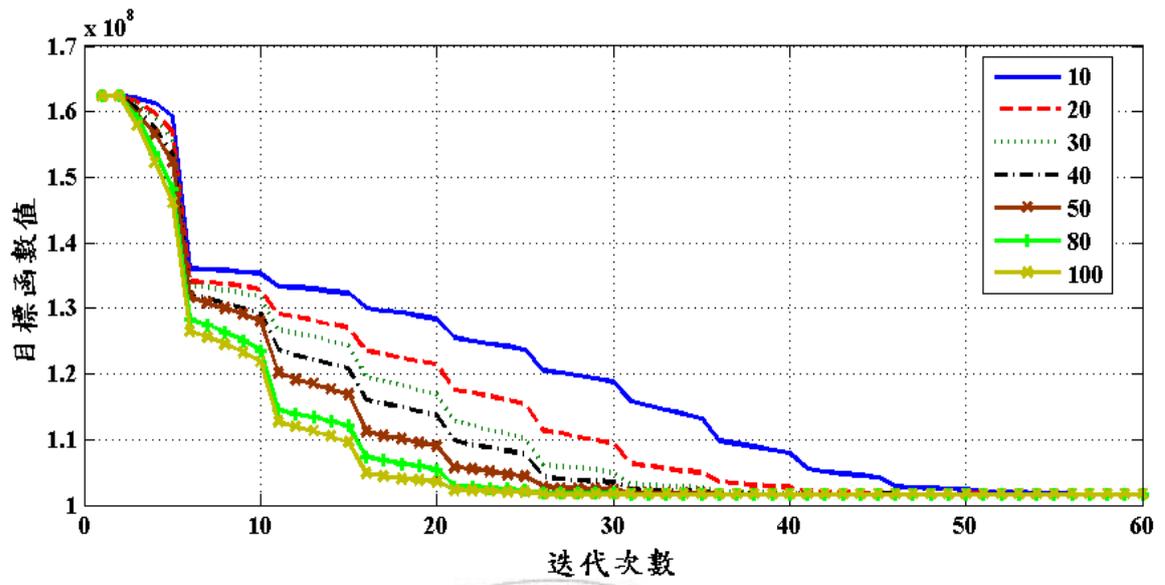


圖 3-8 不同粒子數中目標函數與迭代次數的關係

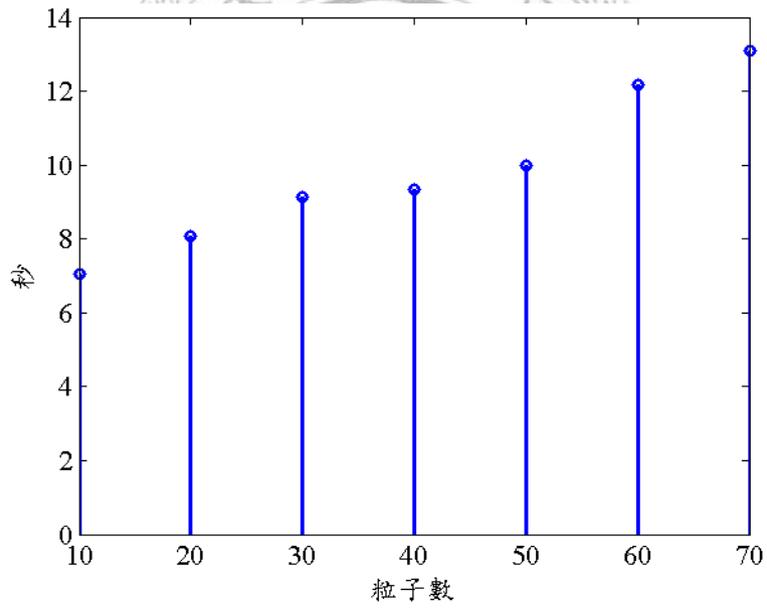


圖 3-9 不同粒子數中與搜尋時間的關係

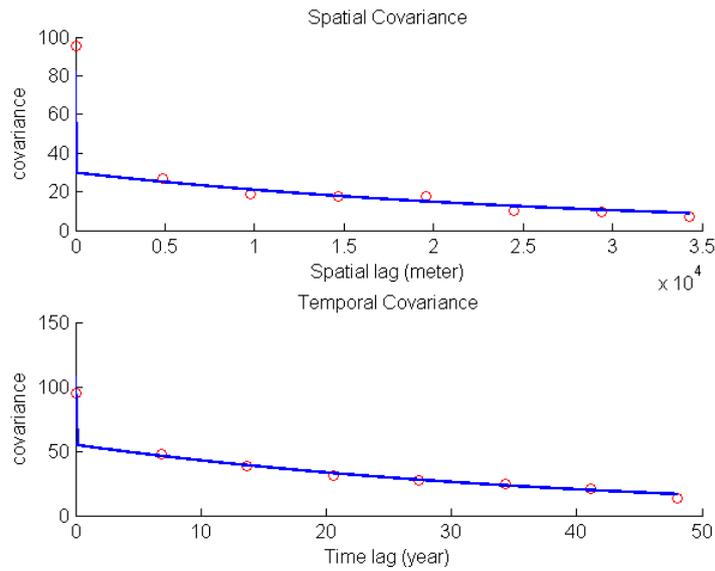


圖 3-10 只使用 NM 法擬合的情況

表 3-2 比較 PSO-NM 及 NM 擬合方程式之交叉驗證結果

類型	平均	標準差	中位數	誤差	誤差
	誤差值			最小值	最大值
PSO-NM	3.512	3.349	-0.107	0.0001	25.677
NM	7.471	5.496	-1.047	0.0013	31.141

3.5 結果討論

在圖 3-5 中，可以發現在陽明測站的觀測值都低於趨勢值，這是由於此測站設於陽明山的關係，所以觀測值皆低於整體的趨勢，而在三重測站中觀察值皆高於整體的趨勢值，主要的原因是三重測站位於大同區的邊界，而大同區是台北市交通重要的樞紐，例如：台北轉運站、台北交流道、環北交流道及台北橋等。由圖 3-2 可以得知趨勢有季節性的變化，夏季有較低趨勢，而春、冬則存在著較高的趨勢。

由 PSO-NM 的方法找到最佳擬合共變異方程式中，是由兩個巢狀模式所組成，且兩個時空模式都是 Exponential 模式。就空間而言，是由區域尺度 (range=4541.566m) 與大尺度 (range=149585.407m) 所組成的，就時間而言，也是由一個區域尺度 (range=0.488month) 與大尺度 (range=104.414month) 所組成。這裡的大尺度可以看成受季節性的影響。

通常以眼睛去擬合共變異數，只能靠單純空間及單純時間去擬合共變異數，無法考慮整個時空的共變異數，PSO-NM 可以考慮整體的共變異數，不單單只是依單純空間及單純時間去擬合，這是用眼睛去試誤所辦不到的。而 PSO-NM 能自動判斷使用最佳的模式型態、數量及參數去擬合，使擬合的情況更能接近真實的共變異數。

在圖 3-8 與圖 3-9 中，很明顯可以知道使用粒子數越多，目標函數就下降越快，但所要花的搜尋時間就越長。

表 3-2 比較 PSO-NM 與只用 NM 法所找的最佳擬合共變異數方程式，發現用 PSO-NM 所找的擬合方程式，比只用 NM 法所找的方程式更能減少估計的誤差。

第四章 台北都會區 PM_{2.5} 時空分佈推估研究

4.1 資料來源

研究時間為 2005 至 2007 年，資料可以從三個單位取得，一是行政院環保署提供 PM_{2.5}、PM₁₀ 資料，共有 19 個測站，二是台北市環保局提供 PM₁₀ 及 TSP 資料，分別為 8 個測站及 15 個測站。三是台北縣環保局提供 TSP 資料，共有 24 個測站。全部加總後，PM_{2.5} 總共有 19 個測站，PM₁₀ 總共有 27 個測站，TSP 總共有 39 個測站，其 PM_{2.5}、PM₁₀ 與 TSP 的基本統計特性及測站的分佈如表 4-1 與圖 4-1 所示，並在附錄二附上各測站名稱及地理座標位置。

資料的原始尺度為小時尺度，將升尺度至天尺度後，移除發生沙塵暴的日期，再升尺度至月尺度。

從圖 4-1 中可以發現 PM_{2.5} 與 PM₁₀ 有些為相同的測站，而 TSP 測站與 PM_{2.5} 及 PM₁₀ 並沒有相同的測站。由此可以知道在計算 PM_{2.5}/PM₁₀ 時，若兩者都是觀測值，則將會使用日資料所組成的 PDF 當成其比值分佈，而不直接使用其平均值，原因是傳統的方法會直接使用平均值當代表，不過這方法並不能考慮其資料的不確定性。而在計算 PM_{2.5}/TSP 時，則不會出現兩者都是觀測值的情況。

在計算日資料組成的比值分佈，由於資料只有 3 年時間，每個測站每個月最多只有 90 個樣本數，會造成 PDF 不平滑化的現象。故本研究採取 kernel smoothing 的方法去把它平滑化，如圖 4-2 為士林測站二月 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值 PDF，左圖為未平滑化，右圖為平滑化後，並於附錄三放上所有測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值 PDF 圖。

表 4-1 PM_{2.5}、PM₁₀ 及 TSP 基本的統計特性(單位: $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

資料類型	平均值	標準差	中位數	最小值	最大值
PM _{2.5}	28.92	8.48	28.29	9.31	81.60
PM ₁₀	54.24	33.26	47.04	0.83	598.25
TSP	81.63	29.20	79	12	253

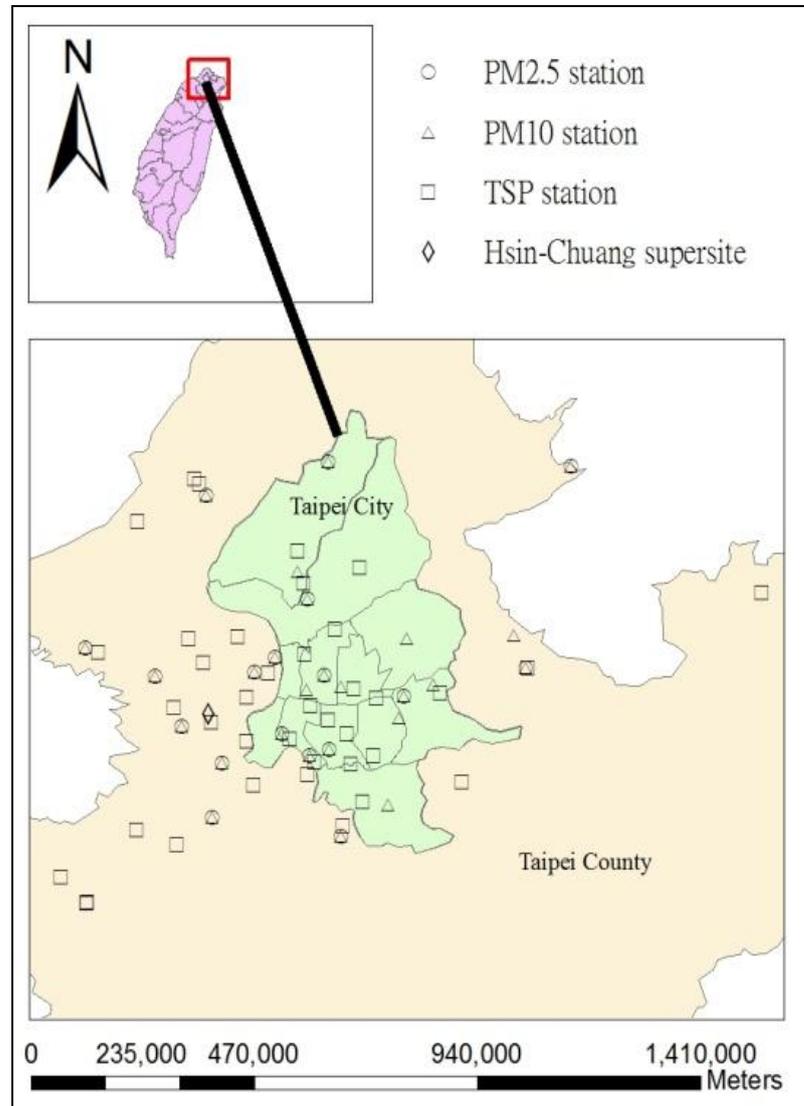


圖 4-1 空氣品質監測站分佈圖

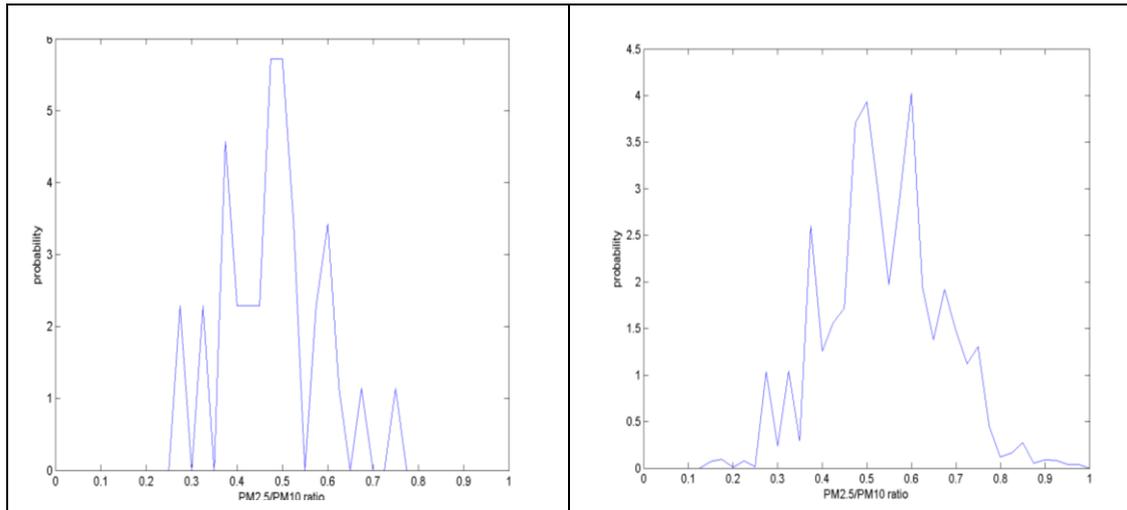


圖 4-2 士林測站二月份 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比值圖(左圖未平滑化，右圖為平滑化後)

4.2 研究流程

主要分為三個部份，如表 4-2，第一部份是 2005-2007 年 $PM_{2.5}$ 交叉驗證及推估 $PM_{2.5}$ 時空分佈推估，流程如圖 4-3。第二部份是回推 2004 年 $PM_{2.5}$ 之驗證和 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 、 $PM_{2.5}/TSP$ 比值時空分佈推估，流程如圖 4-4。第三部份是回推 2003 年新莊超級測站 $PM_{2.5}$ 之驗證，流程如圖 4-5。

主要細節說明：

- 一、在資料中若有遺漏資料，使用第三章的自動化計算趨勢及擬合共變異數後，利用 BME 去補遺資料，以方便計算比值。
- 二、在計算比值時。若兩者資料為觀測資料，則使用日資料所建構的分佈，若不是的話，則利用 Yu et al. (2007) 研究中懸浮粒子比值計算公式，如表 4-3。計算 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 與 $PM_{2.5}/TSP$ 比值關係。
- 三、依測站把相同每個月的比值取平均，得到每個測站每月平均比值分佈。推估台北都會區 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 及 $PM_{2.5}/TSP$ 比值時空分佈圖。

(1)交叉驗證及推估 PM_{2.5} 時空分佈:

在模式交叉驗證時，由於 PM_{2.5} 與 PM₁₀ 有相同的測站，所以先移除相同的測站後，把 PM₁₀、TSP 透過上述第二點的比值關係轉換成 PM_{2.5} 不確定性資料。在利用 PM_{2.5} 確定性資料及 PM_{2.5} 不確定性資料去做交叉驗證及推估台北市都會區時空 PM_{2.5} 濃度分佈圖。

(2) 回推 2004 年 PM_{2.5} 之驗證和 PM_{2.5}/PM₁₀、PM_{2.5}/TSP 比值時空分佈推估:

先把 2004 年 PM₁₀、TSP 透過上述第三點的平均比值轉換成 PM_{2.5} 不確定性資料。利用 PM_{2.5} 不確定性資料去推估台北市都會區時空 PM_{2.5} 濃度分佈圖。

(3) 回推 2003 年新莊超級測站 PM_{2.5} 之值及驗證:

先把 2003 年 PM₁₀、TSP 透過上述第三點的平均比值轉換成 PM_{2.5} 不確定性資料。PM_{2.5} 不確定性資料去推估台北市都會區時空 PM_{2.5} 濃度分佈圖。

表 4-2 主要流程表

分類	類型	驗證點
第一部份	交叉驗證	(1)2005-2007 年 PM _{2.5} 測站(19 站)
第二部份	回推	(2)2004 PM _{2.5} 測站(7 站)
第三部份		(3)2003 超級測站

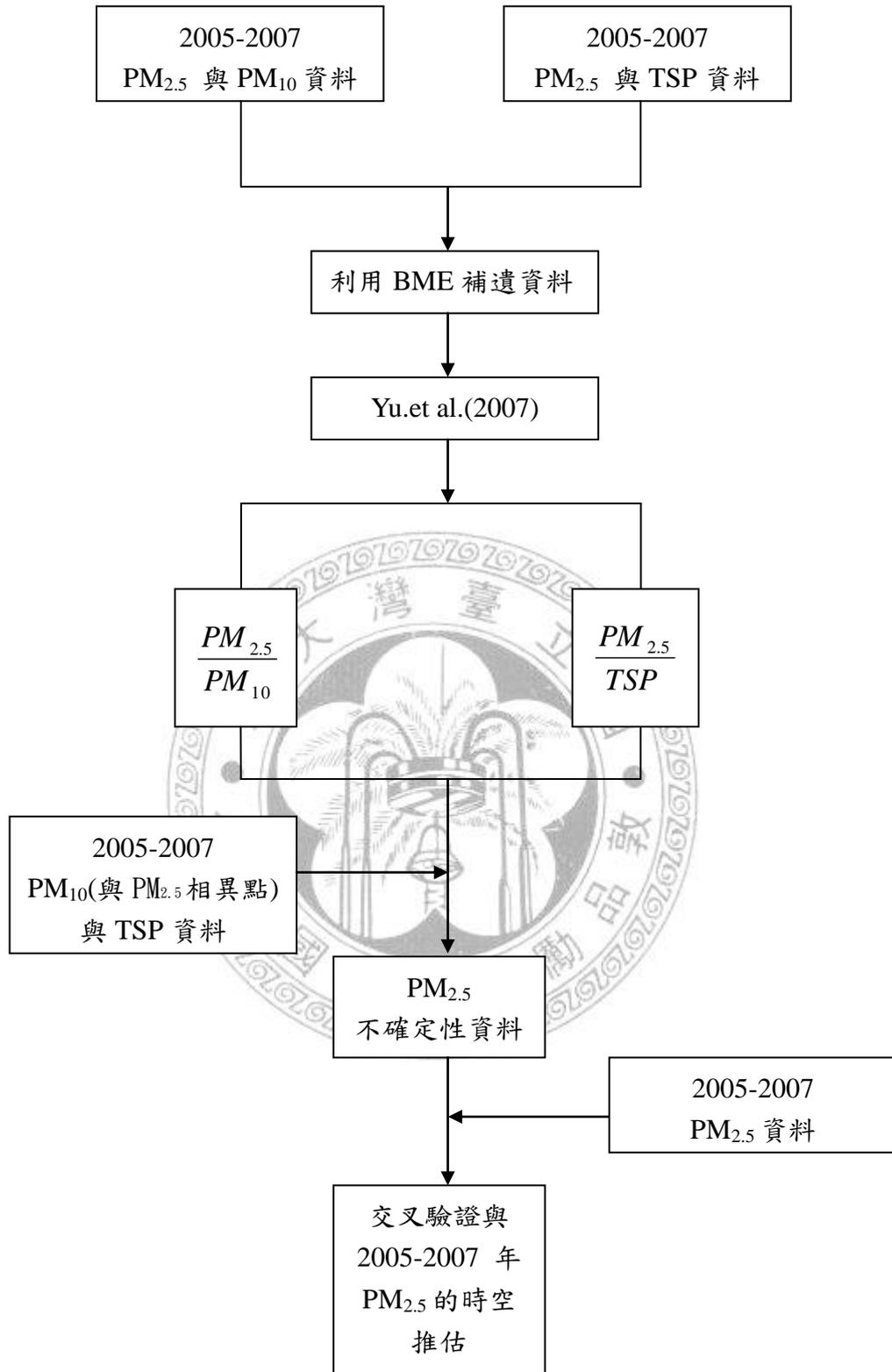


圖 4-3 交叉驗證流程圖

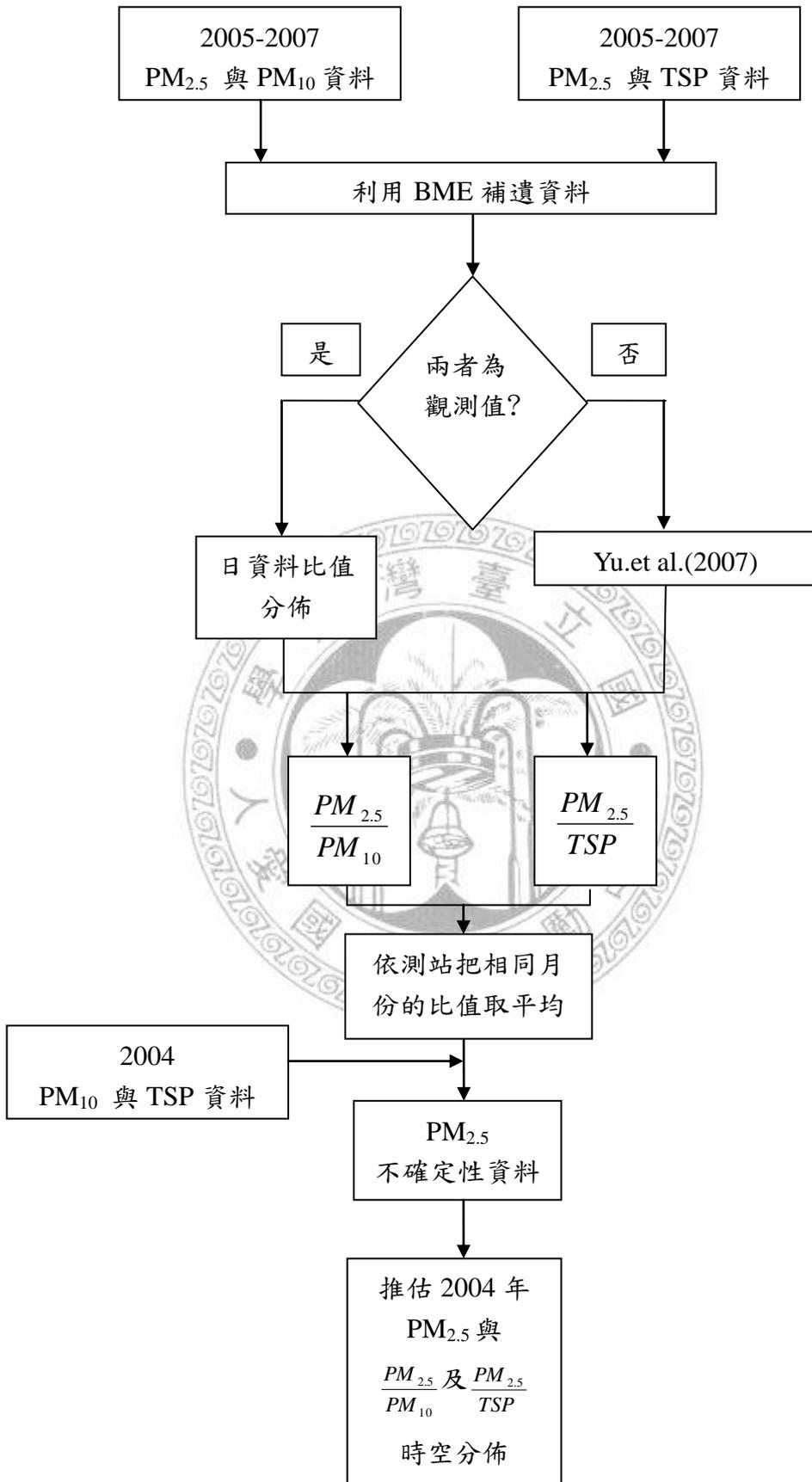


圖 4-4 回推 2004 年 $PM_{2.5}$ 及驗證流程圖

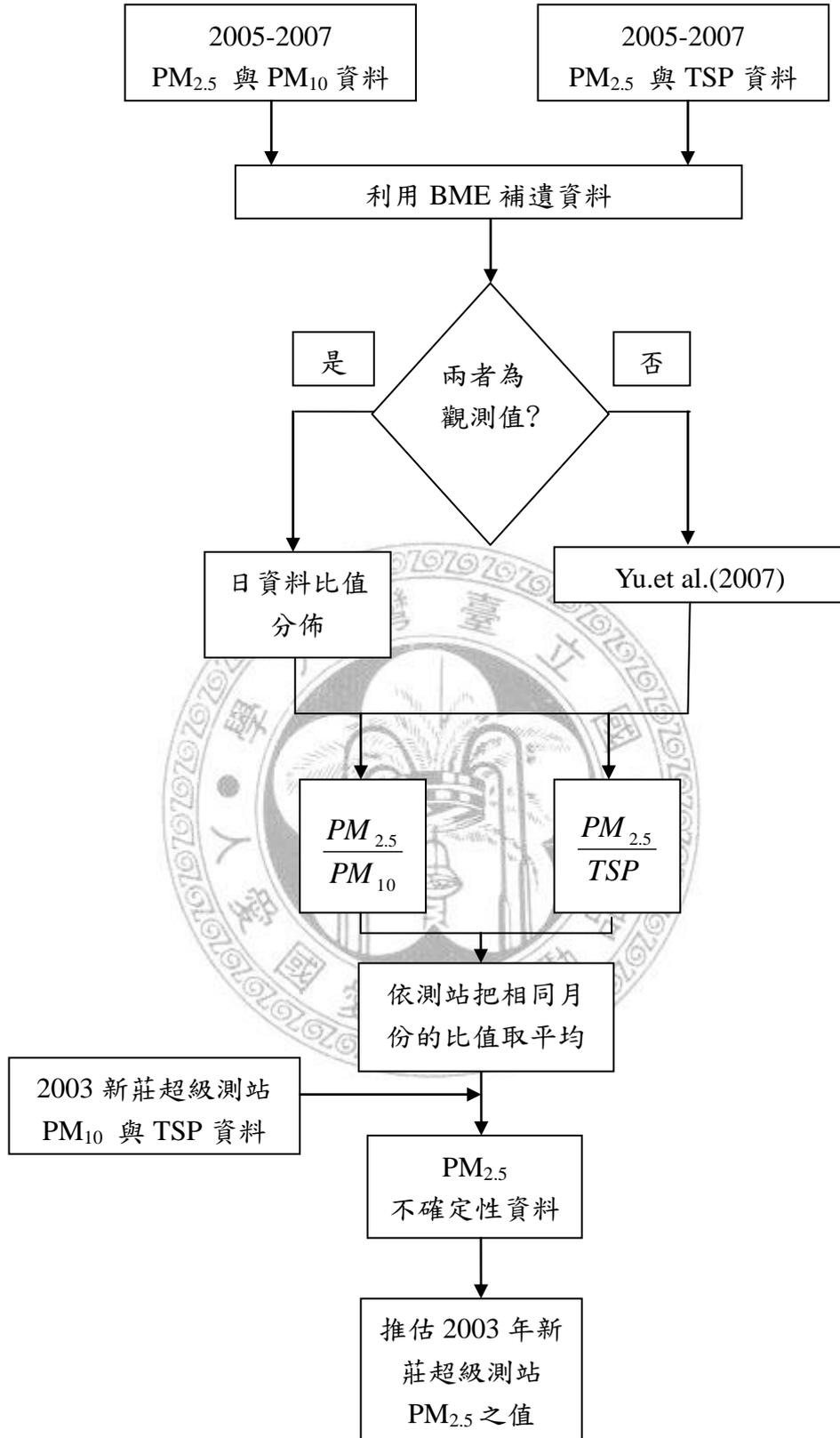


圖 4-5 回推 2003 年新莊超級測站 $PM_{2.5}$ 及驗證流程圖

表 4-3 懸浮粒子比值轉換公式

PM _{2.5} $X(s,t)$	PM ₁₀ $Y(s,t)$	Ratio $r(s,t)$
$X = x$	$Y \approx f_s(y)$	$f_r \approx f_s(x/r) \left -x/r^2 \right $, where x is a constant
$X \approx f_s(x)$	$Y = y$	$f_r \approx f_s(ry) y $
$X \approx f_{s1}(x)$	$Y \approx f_{s2}(y)$	$f_r \approx \int_y f_s(ry, y) y dy$

註: $f_s(x)$ 和 $f_s(y)$ 可以是任何一個分佈，在本研究它們是使用 BME 推估出來的分佈。

4.3 結果與討論

本章分成三個結果分別討論。4.3.1 節為交叉驗證結果及 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖，4.3.2 節為回推 2004 年 PM_{2.5} 驗證結果及 PM_{2.5}/PM₁₀、PM_{2.5}/TSP 時空分佈圖。4.3.3 節為回推 2003 年新莊超級測站 PM_{2.5} 之驗證結果。4.4 節為結果討論，分為三小節，4.4.1 節為交叉驗證結果及推估 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空分佈之討論。4.4.2 節為回推 2004 年 PM_{2.5} 之驗證的結果及 PM_{2.5}/PM₁₀ 與 PM_{2.5}/TSP 時空分佈圖之討論。4.4.3 節為回推 2003 年新莊超級測站 PM_{2.5} 驗證結果之討論。

4.3.1 交叉驗證結果與 PM_{2.5} 時空推估圖

交叉驗證及推估 PM_{2.5} 時空分佈之共變異圖為圖 4-6 所示。上圖為空間共變異圖，下圖是時間共變異圖。紅色點是 PM_{2.5} 的共變異值，藍線為擬合的線(以下的共變異圖同)。本研究找出二個時空模式去擬合共變異數。公式如下:

$$c(h, \tau) = c_0 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r1}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t1}}\right) + c_1 \left(1 - \frac{3}{2} \frac{h}{a_{r2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a_{r2}}\right)^3\right) I(a_{r2}) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t2}}\right)$$

h : 為空間距離。

τ : 為時間距離。

$$[c_0, c_1] = [32.943, 57.077]$$

$$[a_{r1}, a_{r2}, a_{t1}, a_{t2}] = [80000 \text{ m}, 10000 \text{ m}, 550 \text{ month}, 8 \text{ month}]$$

其中， $I(a_{r2})$ 為 0 跟 1 的指標函數，若 $a_{r2} > h$ ，則 $I(a_{r2})$ 為 0。

交叉驗證結果如表 4-4 及圖 4-7 所示，主要分為四個不同類型做交叉驗證。第一類型為使用 $PM_{2.5}$ 當確定性資料及 PM_{10} 與 TSP 透過比值關係轉換成 $PM_{2.5}$ 不確定性資料去做交叉驗證。第二類型為使用 $PM_{2.5}$ 當確定性資料及只使用 PM_{10} 透過比值關係轉換成 $PM_{2.5}$ 不確定性資料去做交叉驗證。第三類型為使用 $PM_{2.5}$ 當確定性資料及只使用 TSP 透過比值關係轉換成 $PM_{2.5}$ 不確定資料去做交叉驗證。第四類型為只使用 $PM_{2.5}$ 確定性資料去做交叉驗證。

各測站交叉驗證平均誤差比如圖 4-8 及 4-9。2005-2007 年的 $PM_{2.5}$ 時空推估圖如圖 4-10 所示。

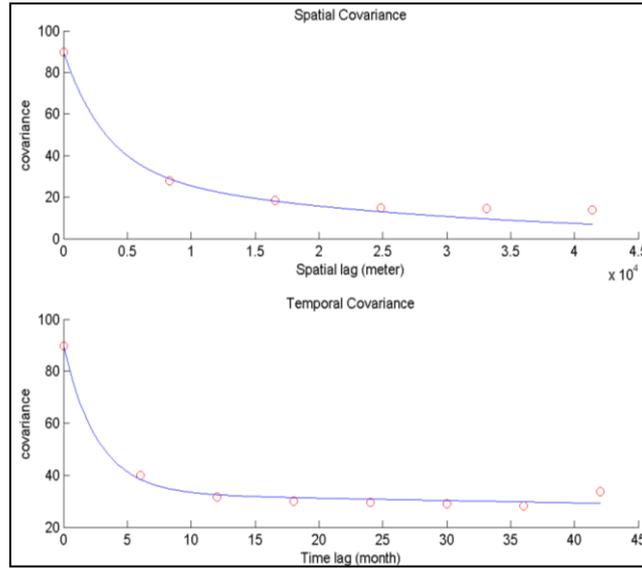


圖 4-6 交叉驗證及推估 PM_{2.5} 時空圖之共變異圖

表 4-4 交叉驗證的結果(單位: $\mu\text{g}/\text{m}^3$)

類型	平均	標準差	中位數	誤差	誤差
	誤差值			最小值	最大值
PM _{2.5} +PM ₁₀ +TSP	2.070	1.767	-0.467	-10.093	10.556
PM _{2.5} +PM ₁₀	2.761	2.167	-0.421	-9.947	12.758
PM _{2.5} +TSP	2.295	1.884	-0.517	-10.092	10.508
PM _{2.5}	3.242	2.469	-0.456	-11.058	12.917

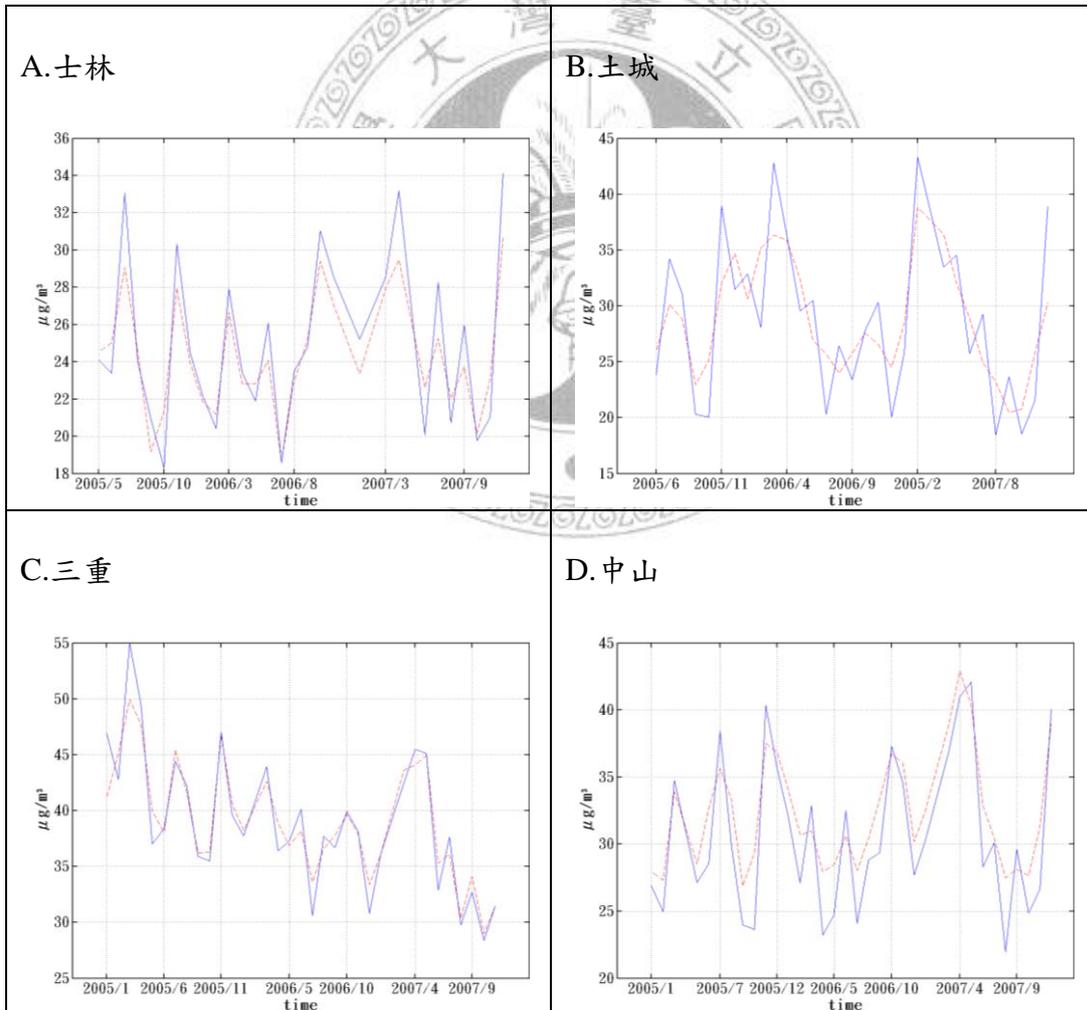
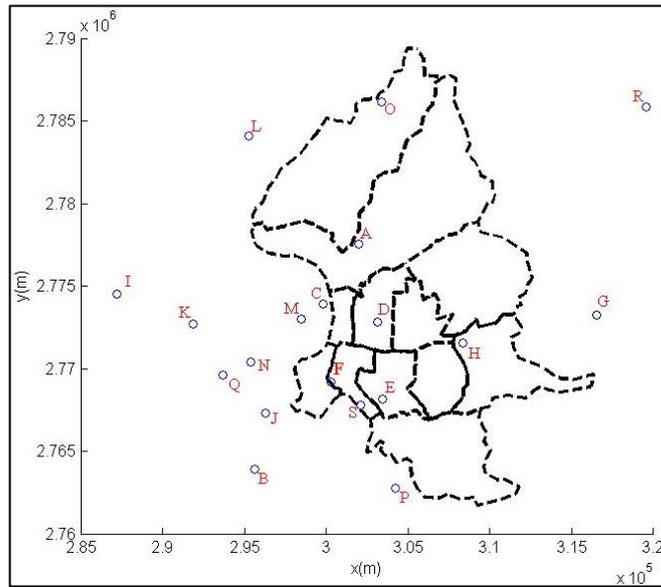


圖 4-7 各測站交叉驗證結果(續)

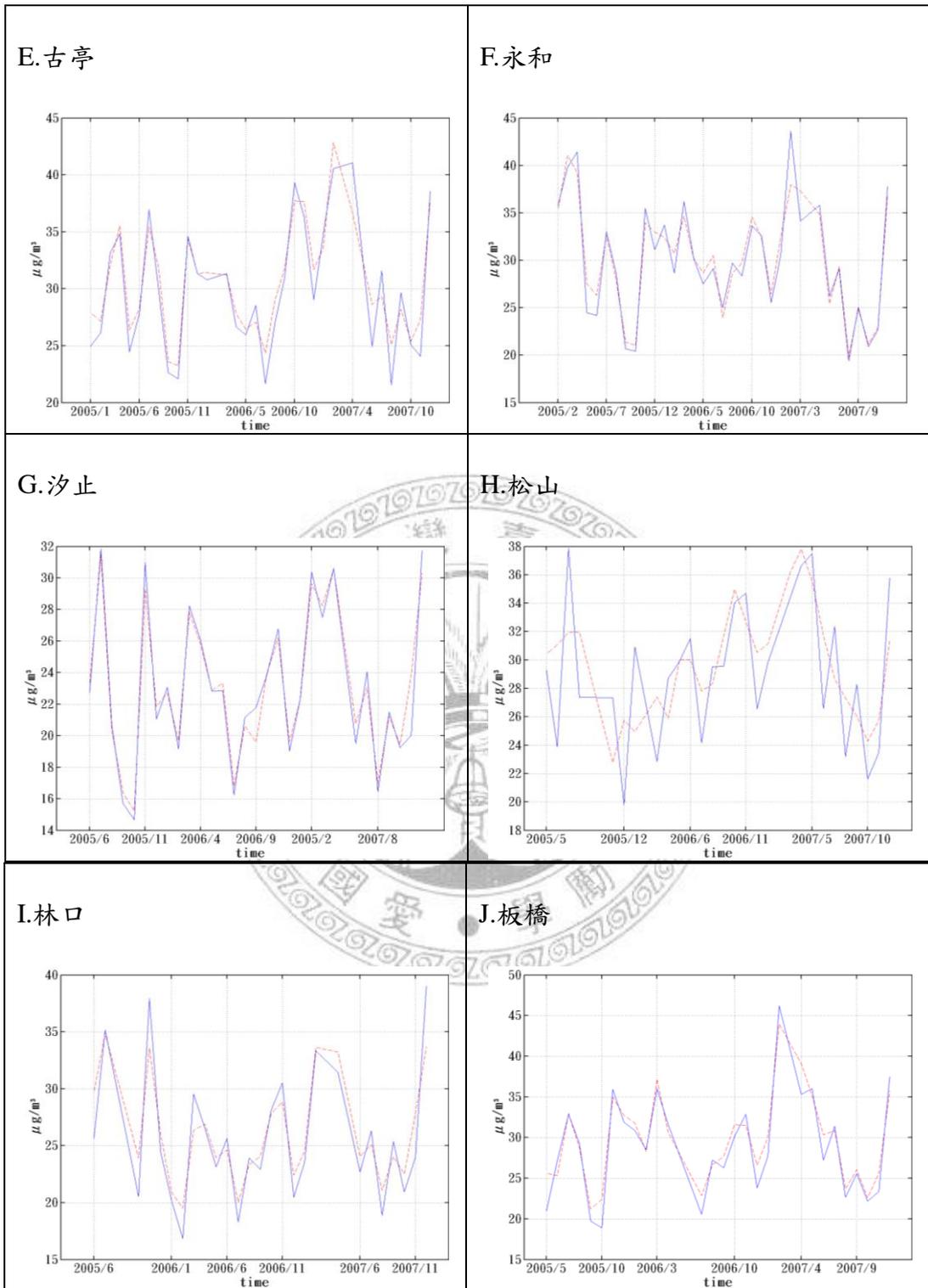


圖 4-7 各測站交叉驗證結果(續)

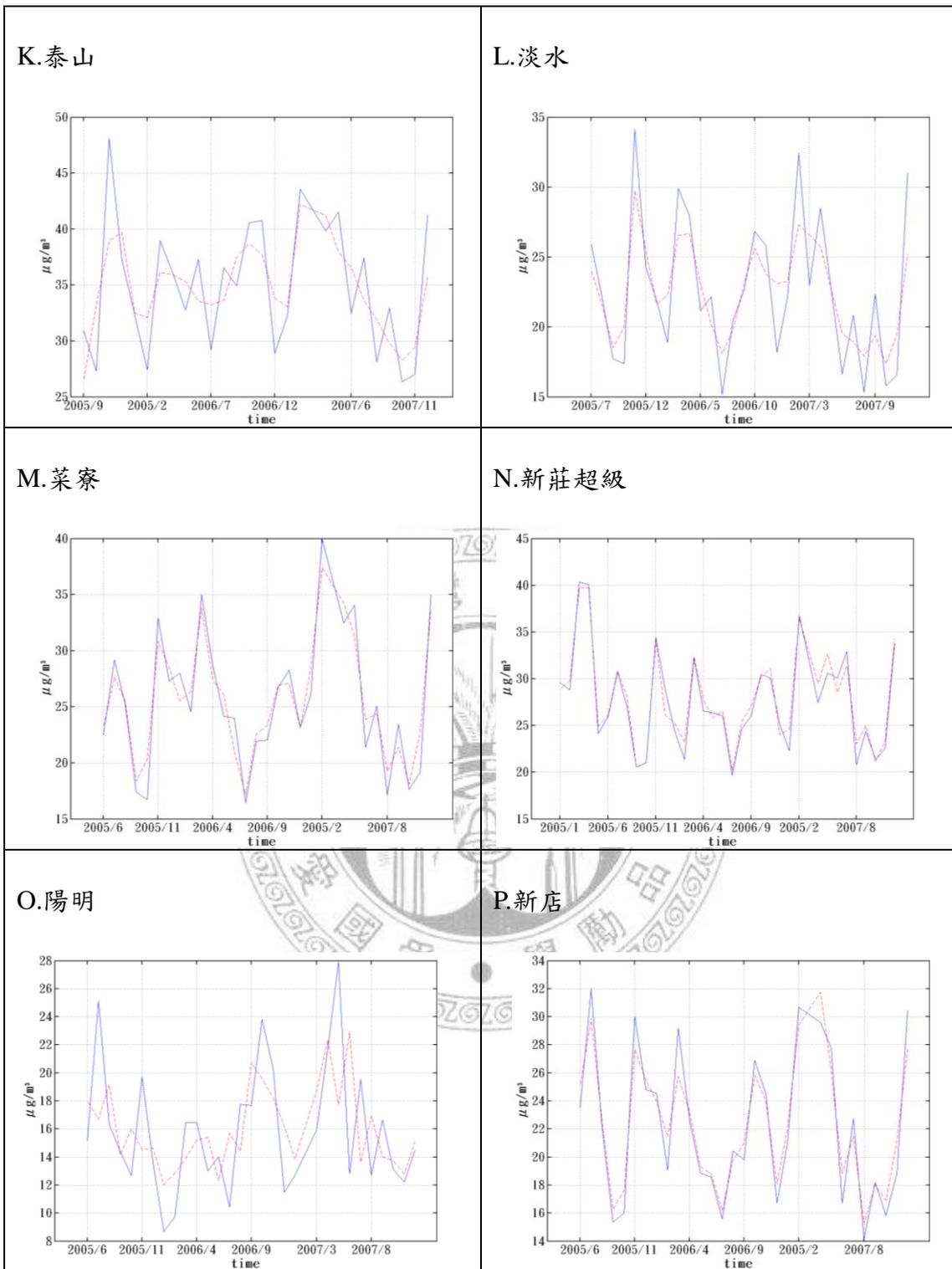


圖 4-7 各測站交叉驗證結果(續)

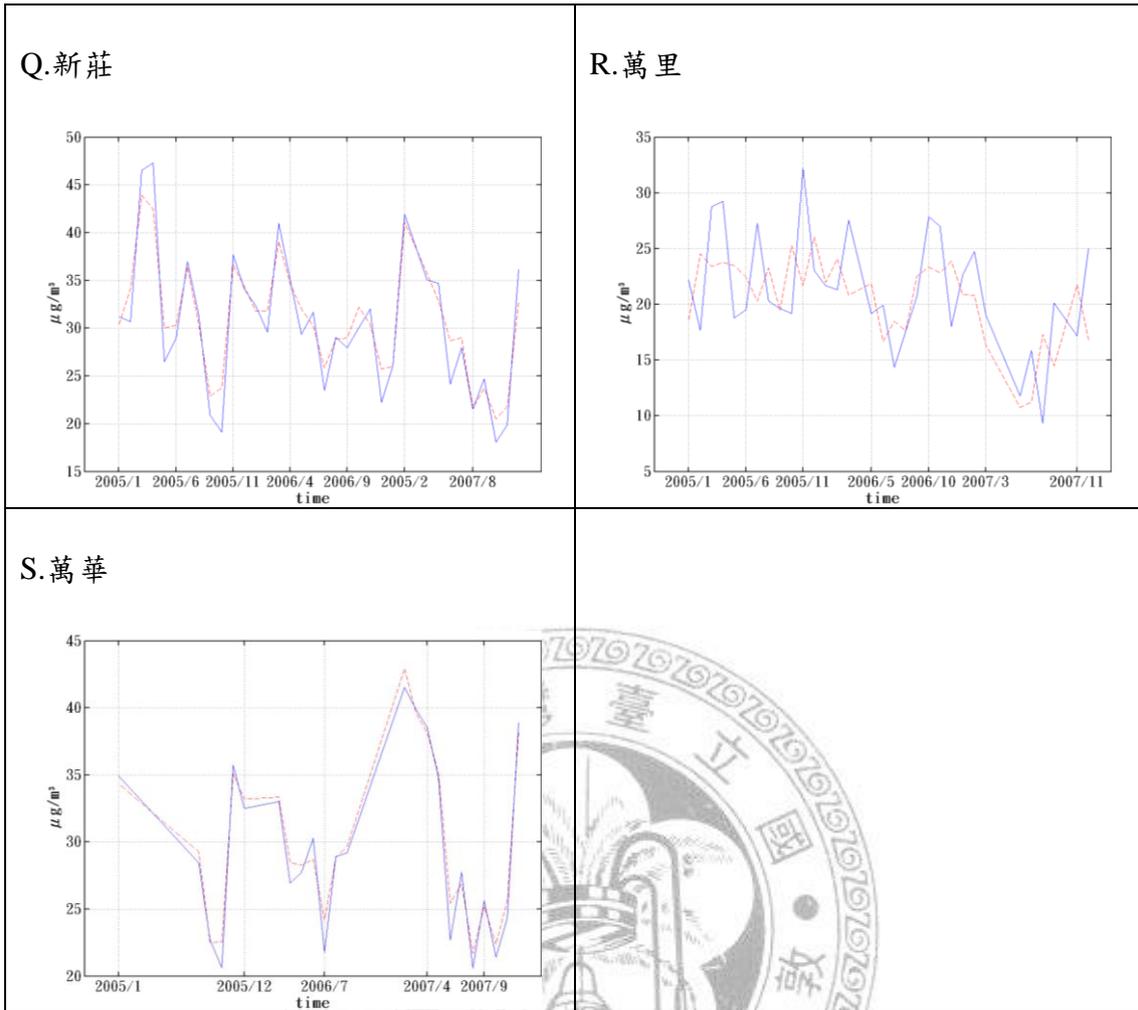


圖 4-7 各測站交叉驗證結果

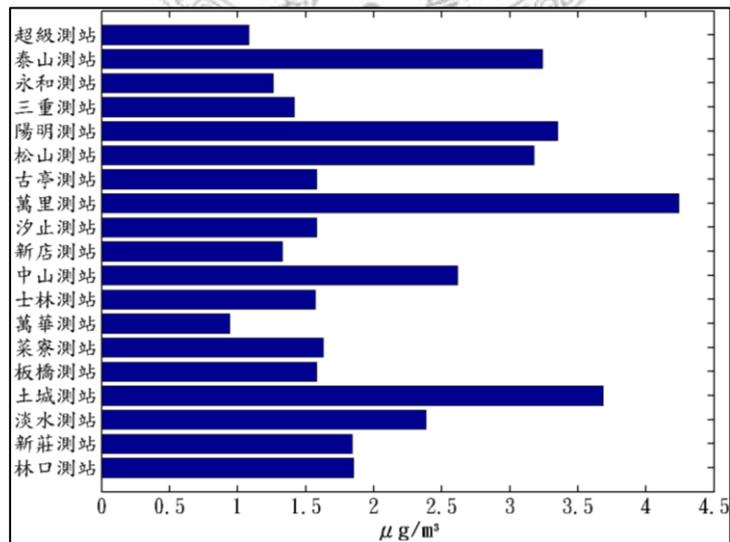


圖 4-8 各測站交叉驗證平均誤差比

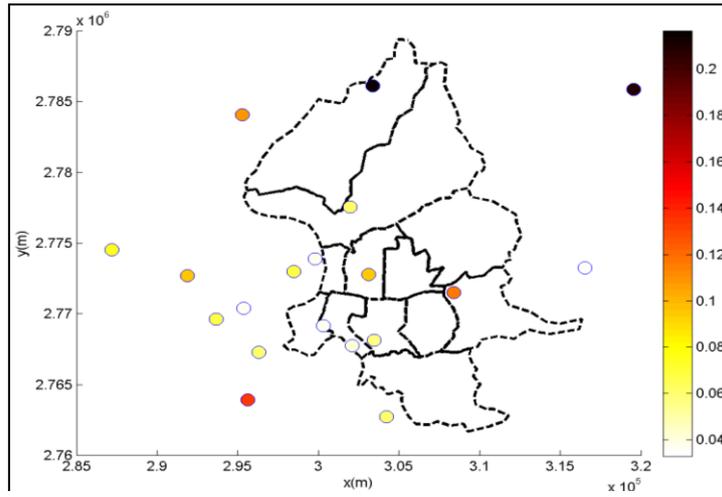


圖 4-9 各測站交叉驗證平均誤差比

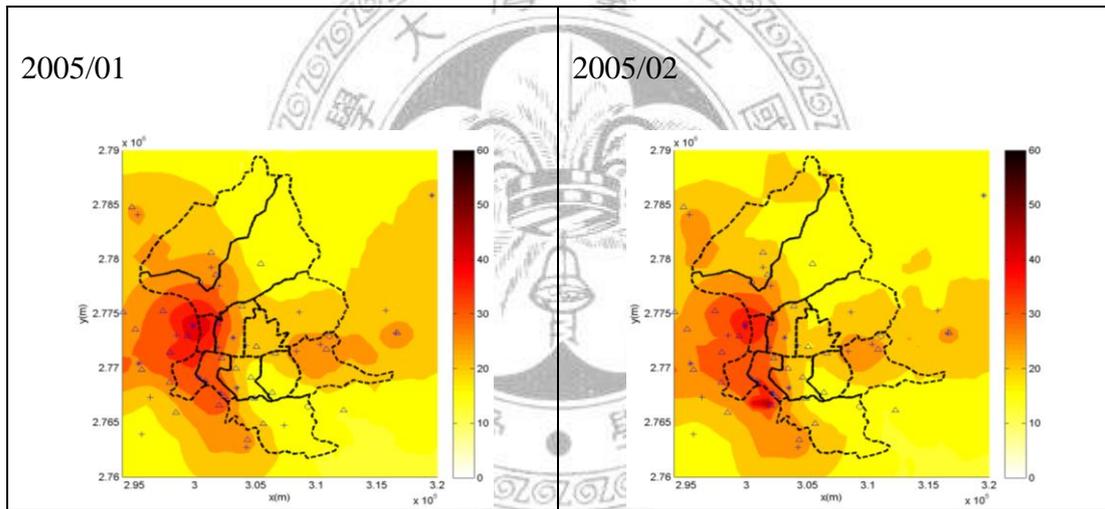


圖 4-10 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖(續)

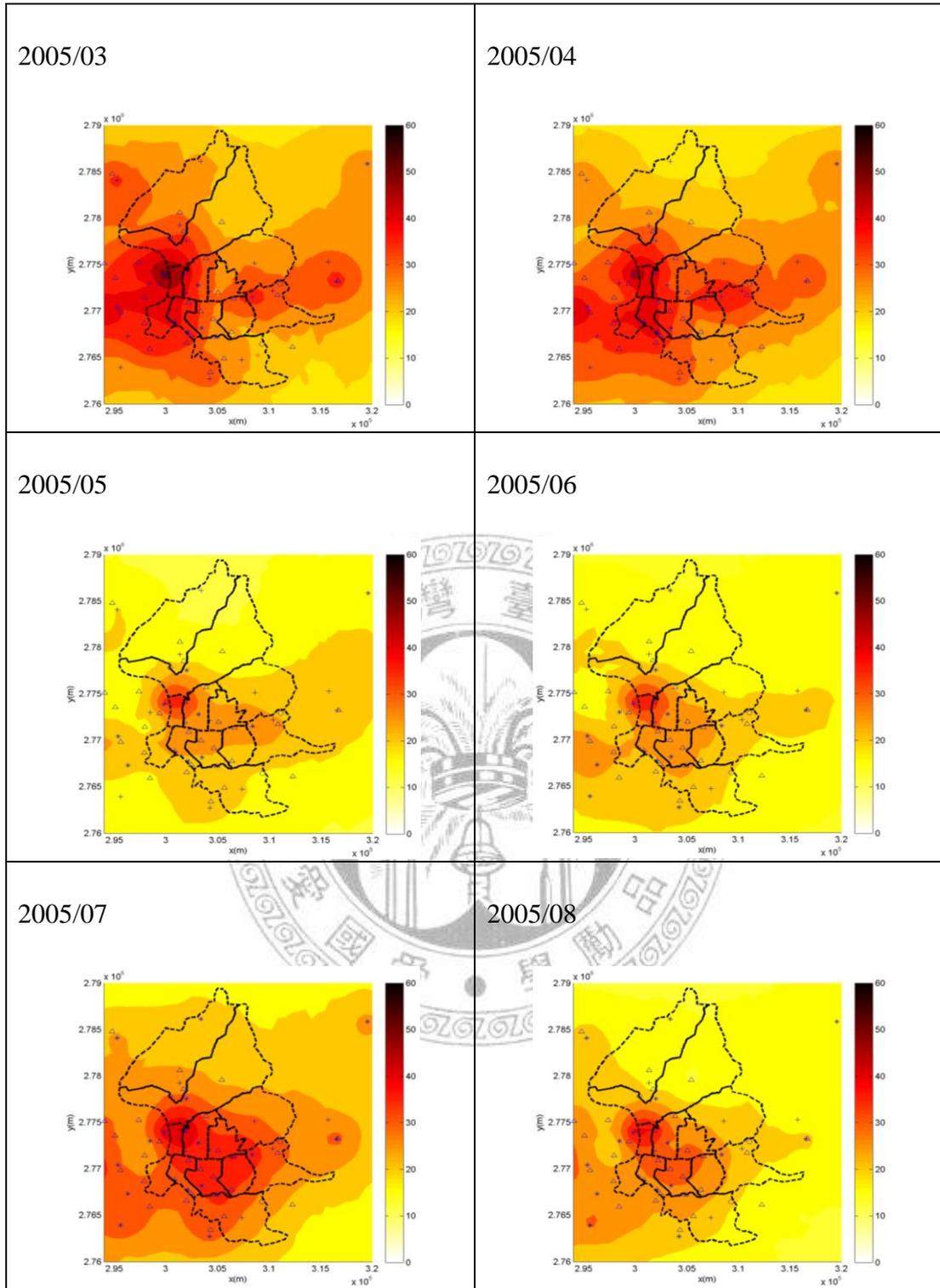


圖 4-10 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖(續)

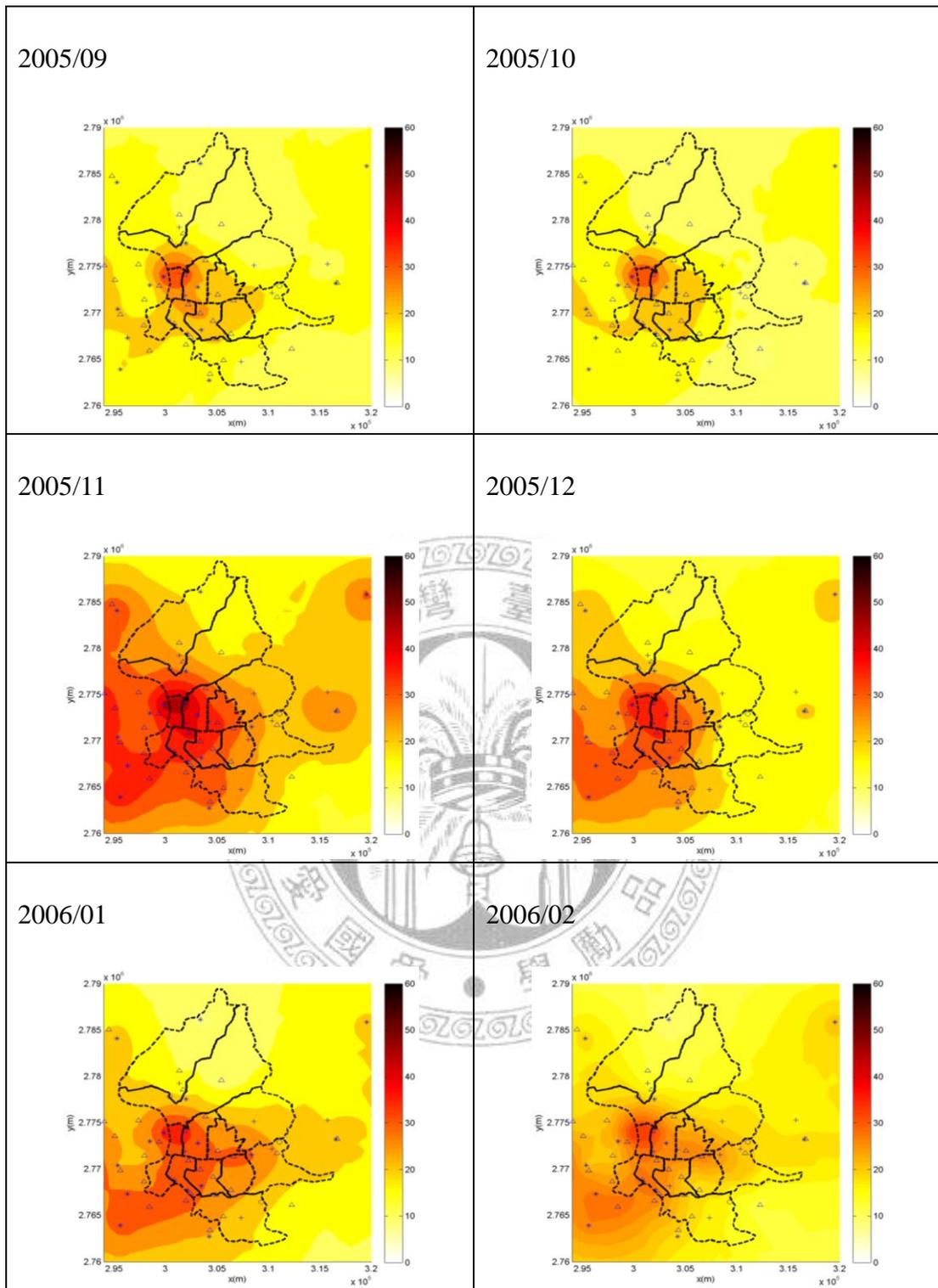


圖 4-10 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖(續)

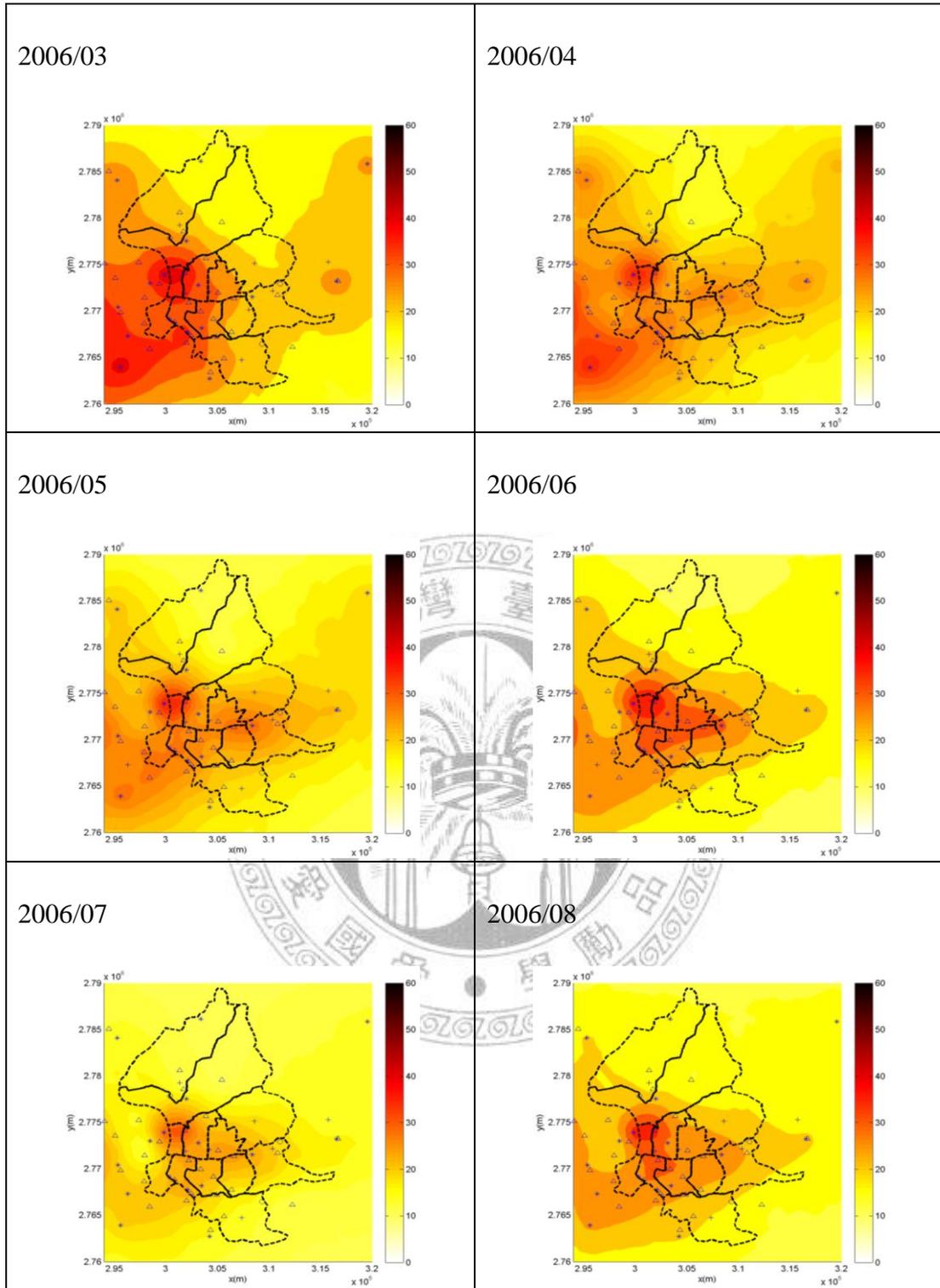


圖 4-10 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖(續)

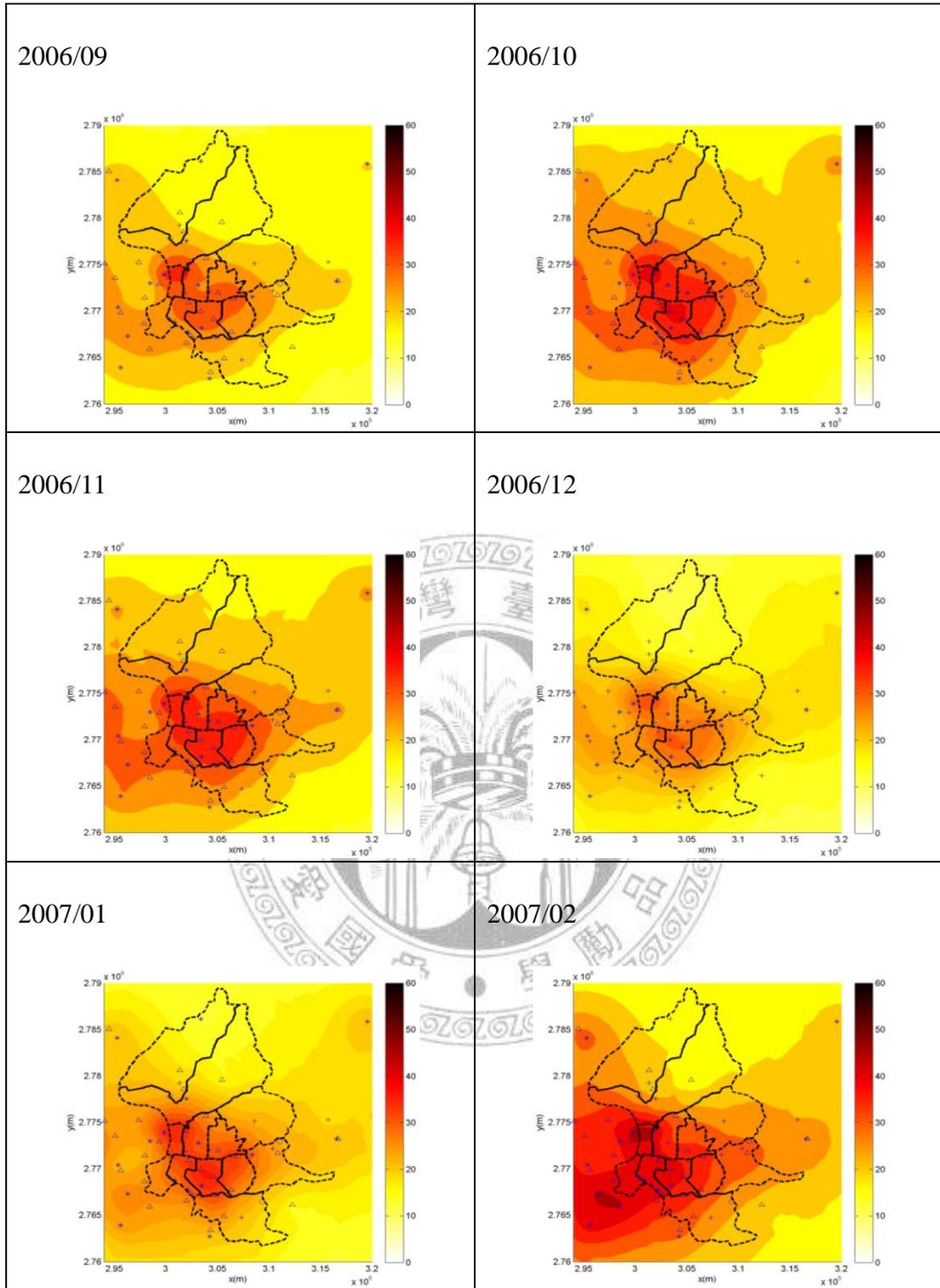


圖 4-10 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖(續)

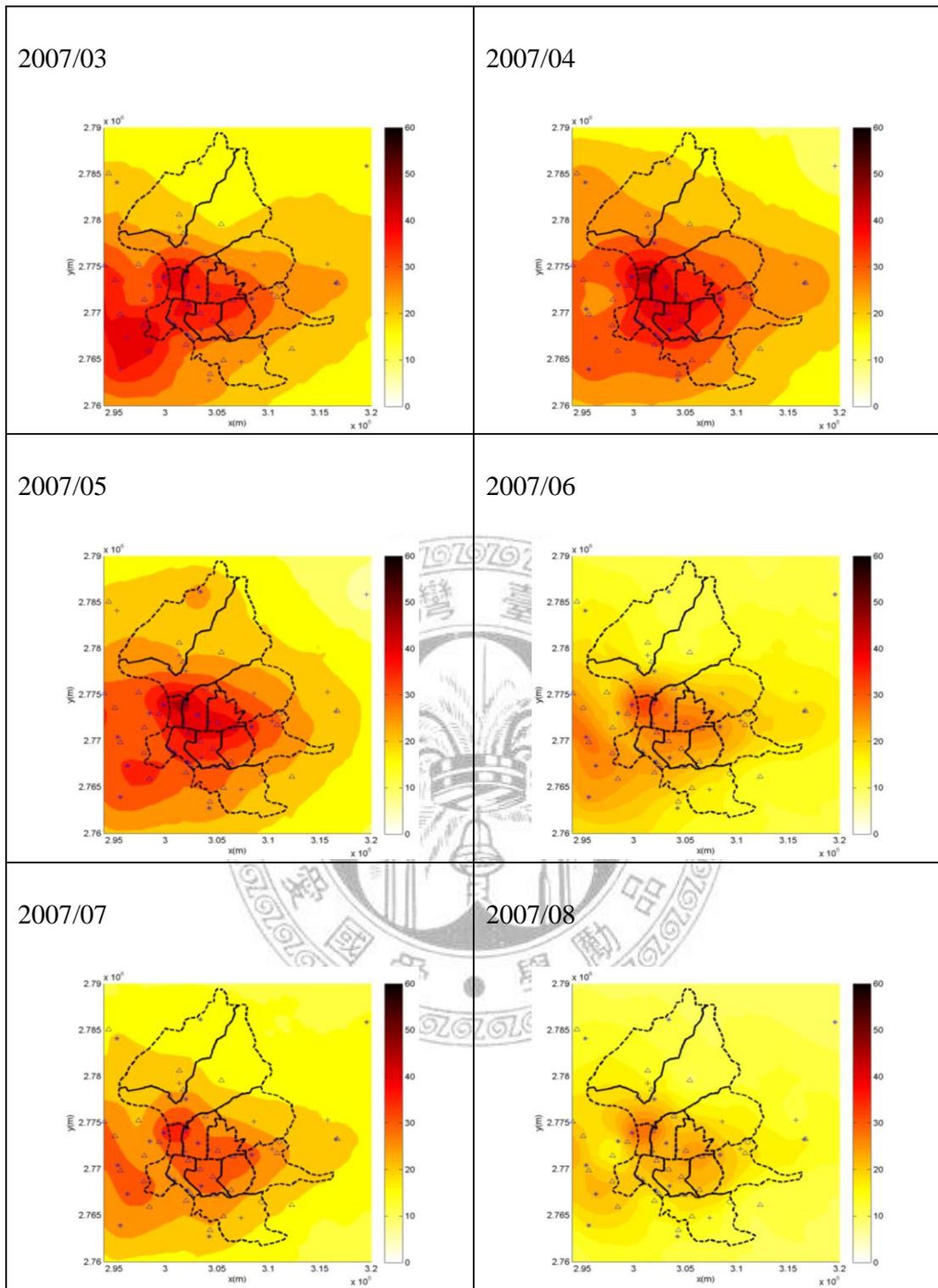


圖 4-10 2005-2007 年 PM_{2.5} 時空推估圖(續)

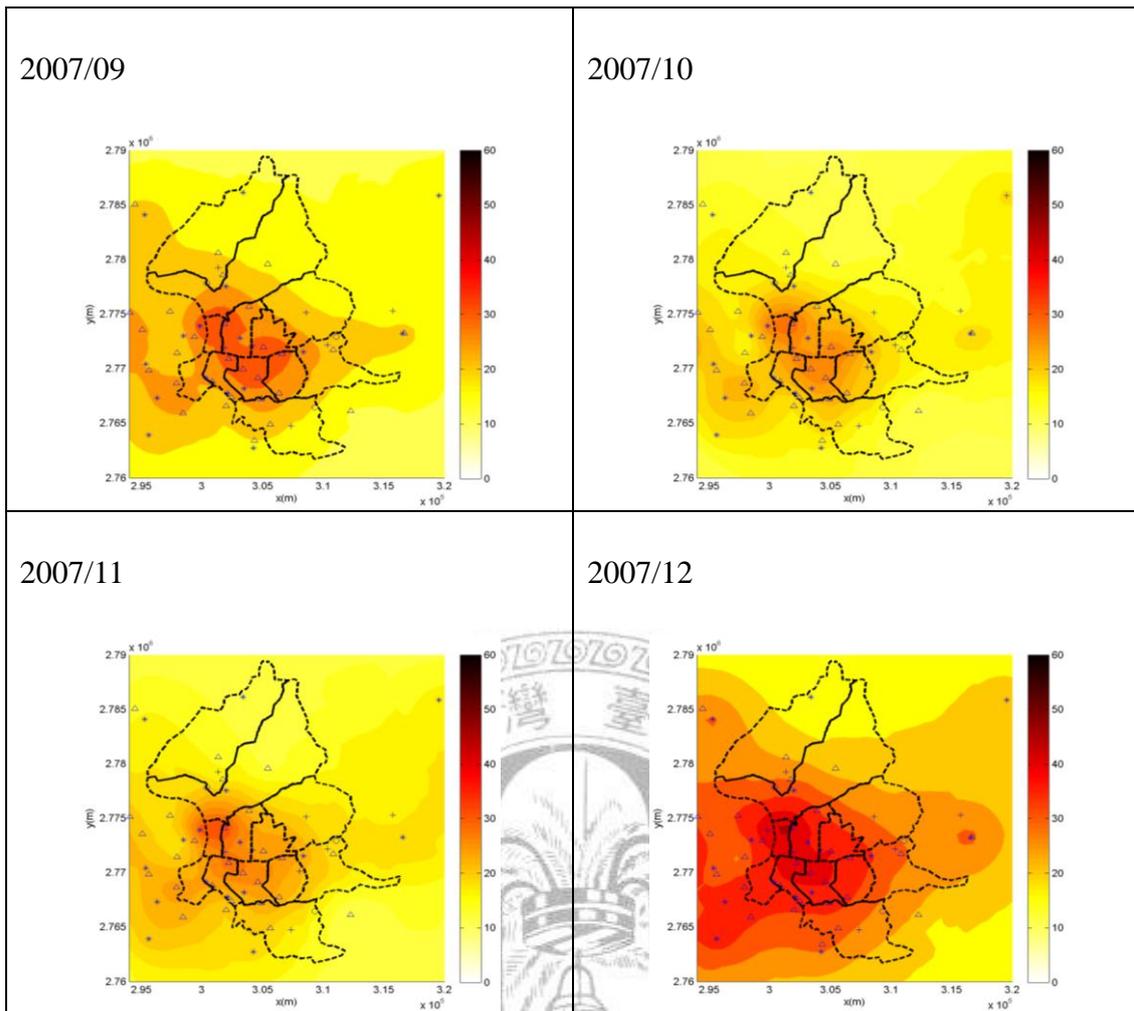


圖 4-10 2005-2007 年 $PM_{2.5}$ 時空推估圖

4.3.2 驗證 2004 年 $PM_{2.5}$ 結果及 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 、 $PM_{2.5}/TSP$ 時

空分佈圖

驗證 2004 年的 $PM_{2.5}$ 結果如表 4-5 及圖 4-11 所示。各測站平均誤差比如圖 4-12 及 4-13。

推估 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 時空分佈之共變異圖為圖 4-14 所示。本研究找出二個時空模式去擬合共變異數，公式如下：

$$c(h, \tau) = c_0 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r1}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t1}}\right) + c_1 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r2}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t2}}\right)$$

h : 為空間距離。

τ : 為時間距離。

$$[c_0, c_1] = [0.0067, 0.003]$$

$$[a_{r1}, a_{r2}, a_{t1}, a_{t2}] = [10000 \text{ m}, 6000 \text{ m}, 550 \text{ month}, 6 \text{ month}]$$

推估平均 PM_{2.5}/TSP 時空分佈之共變異圖為圖 4-15 所示。本研究找出二個時空模式去擬合共變異數。公式如下：

$$c(h, \tau) = c_0 \exp\left(-\frac{3h}{a_{r1}}\right) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t1}}\right) + c_1 \left(1 - \frac{3h}{2a_{r2}} + \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a_{r2}}\right)^3\right) I(a_{r2}) \exp\left(-\frac{3\tau}{a_{t2}}\right)$$

$$[c_0, c_1] = [0.004, 0.0079]$$

$$[a_{r1}, a_{r2}, a_{t1}, a_{t2}] = [20000 \text{ m}, 15000 \text{ m}, 5 \text{ month}, 110 \text{ month}]$$

其中， $I(a_{r2})$ 為 0 跟 1 的指標函數，若 $a_{r2} > h$ ，則 $I(a_{r2})$ 為 0。

推估 PM_{2.5}/PM₁₀ 與 PM_{2.5}/TSP 時空圖如圖 4-16 及圖 4-17 所示。

表 4-5 驗證 2004 年 PM_{2.5} 結果

類型	平均 誤差值	標準差	中位數	誤差 最小值	誤差 最大值
驗證 2004 PM _{2.5}	2.890	2.407	-0.001	-9.126	9.708

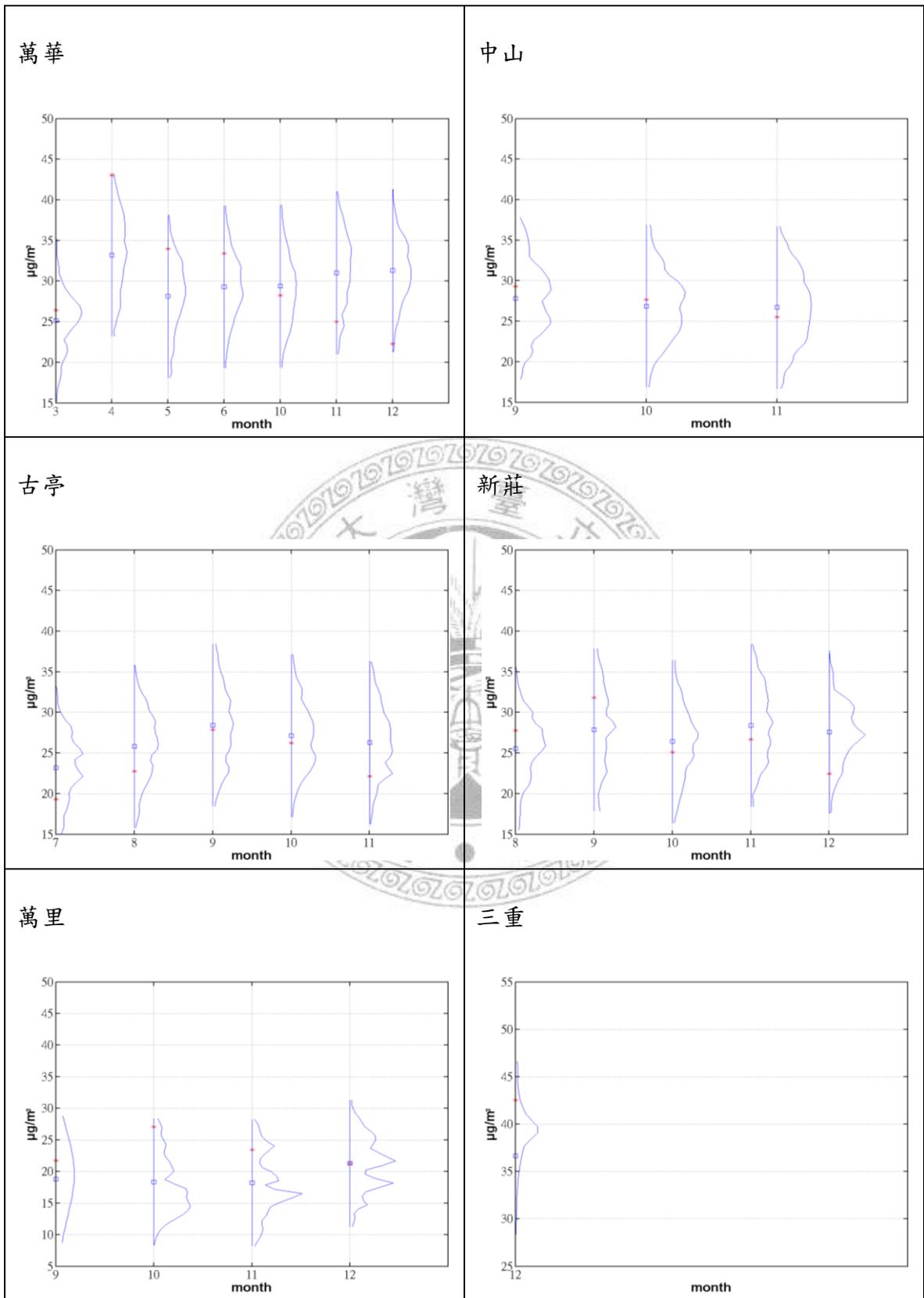


圖 4-11 驗證 2004 年 $\text{PM}_{2.5}$ 結果(續)

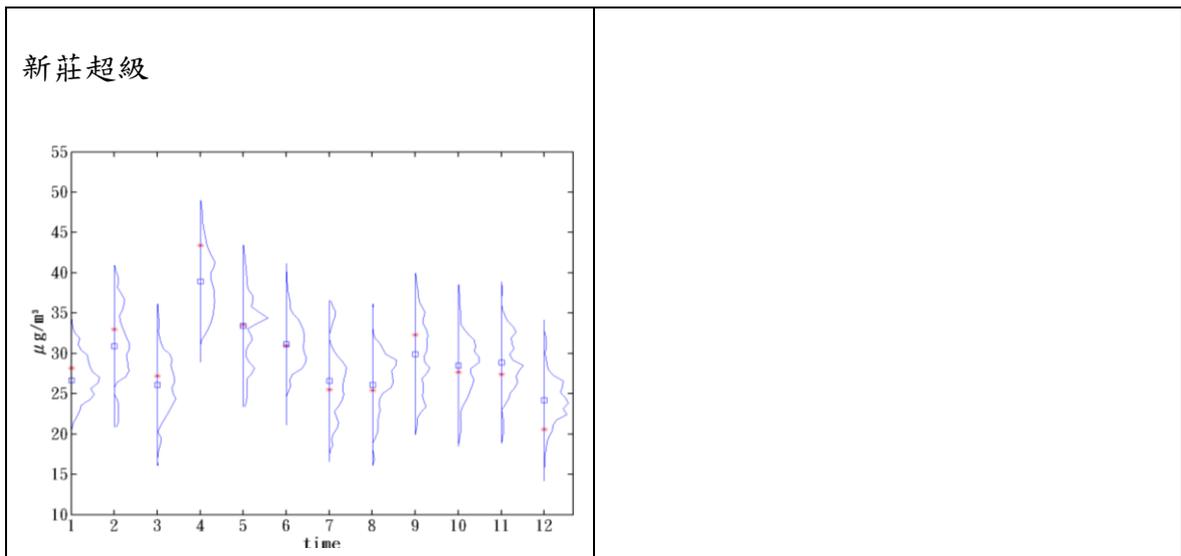


圖 4-11 驗證 2004 年 PM_{2.5} 結果

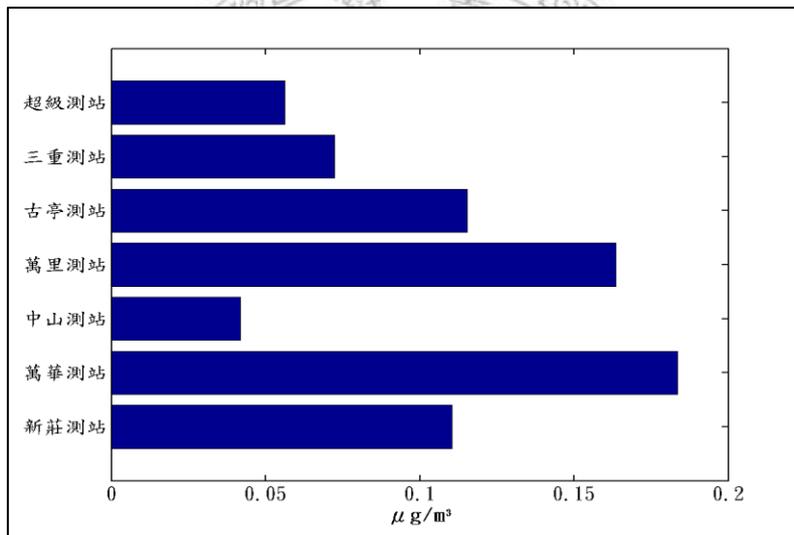


圖 4-12 驗證 2004 年平均 PM_{2.5} 誤差比

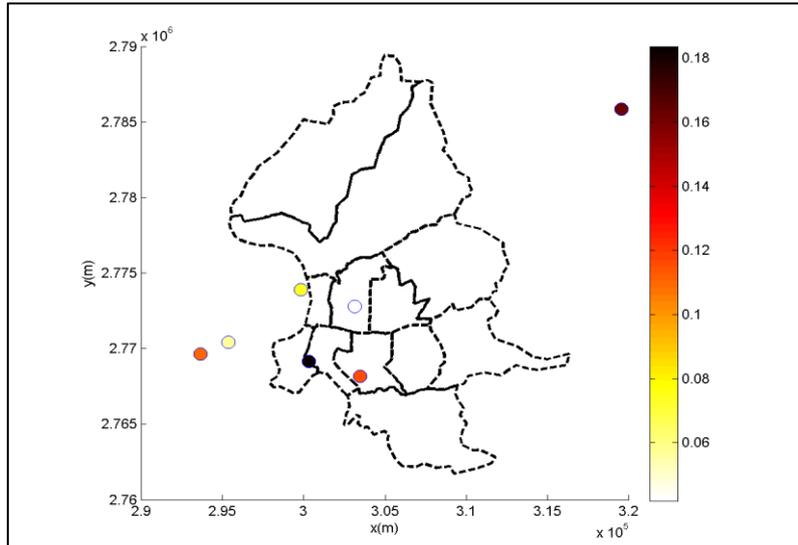


圖 4-13 驗證 2004 年平均 PM_{2.5} 誤差比

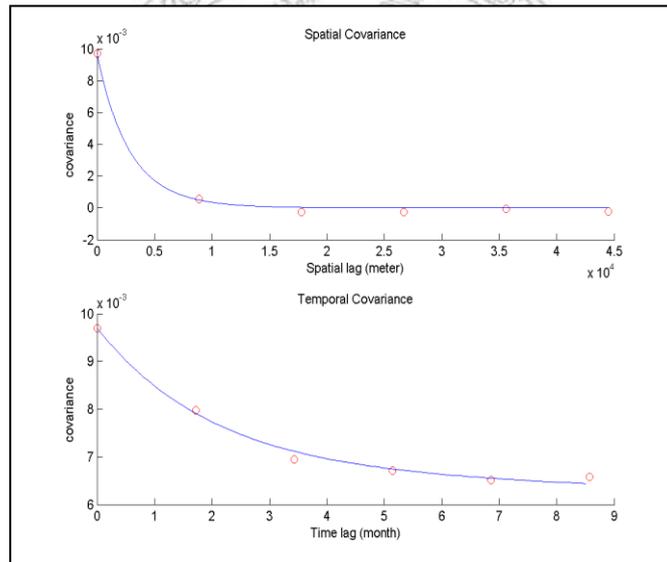


圖 4-14 推估 PM_{2.5}/ PM₁₀ 時空分佈之共變異圖

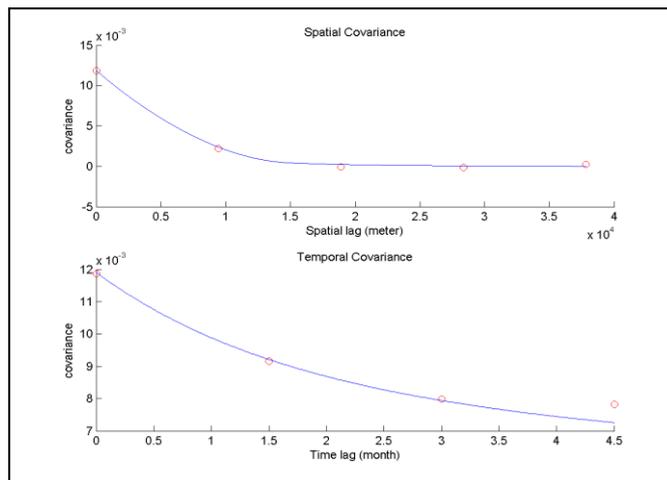


圖 4-15 推估 PM_{2.5}/ TSP 時空分佈之共變異圖

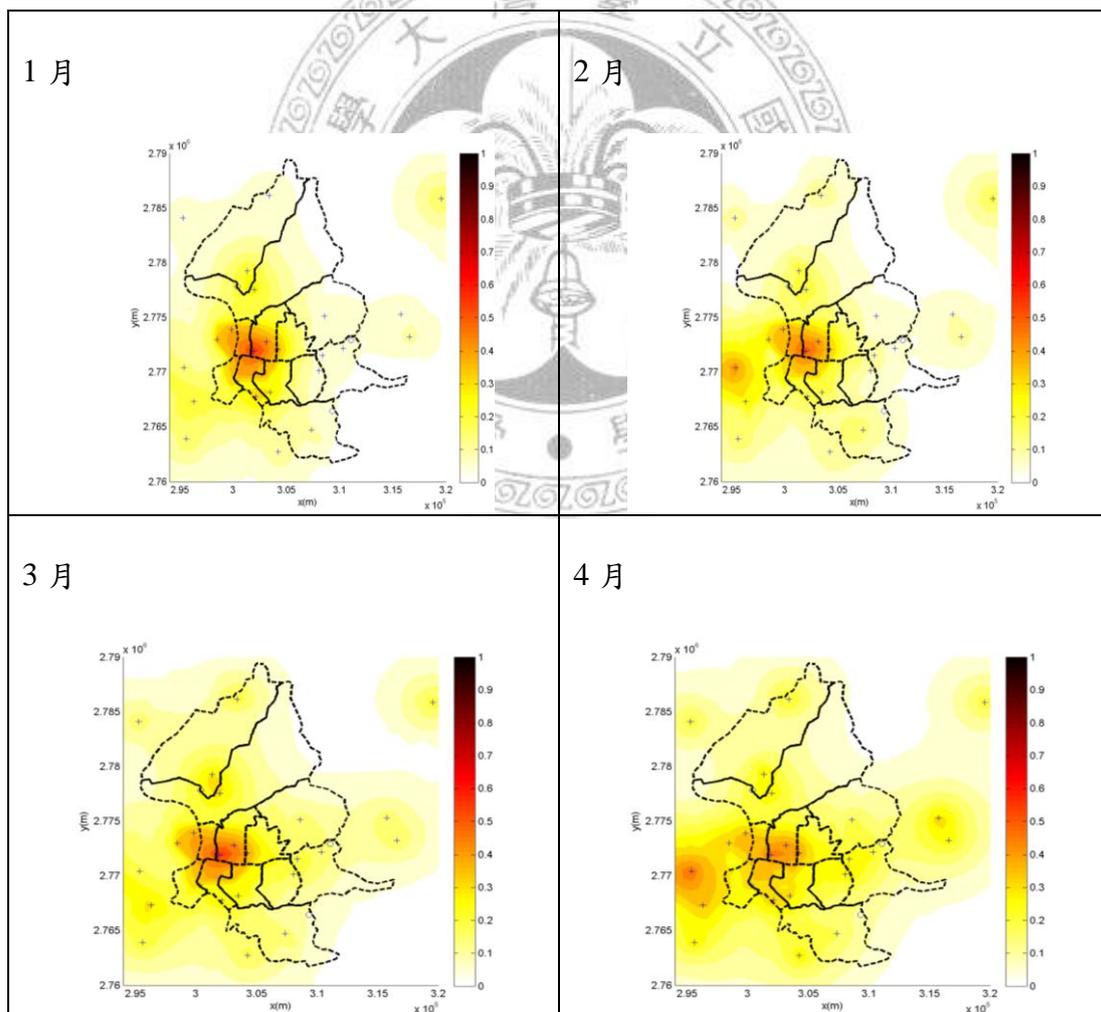


圖 4-16 推估 PM_{2.5}/PM₁₀ 時空圖(續)

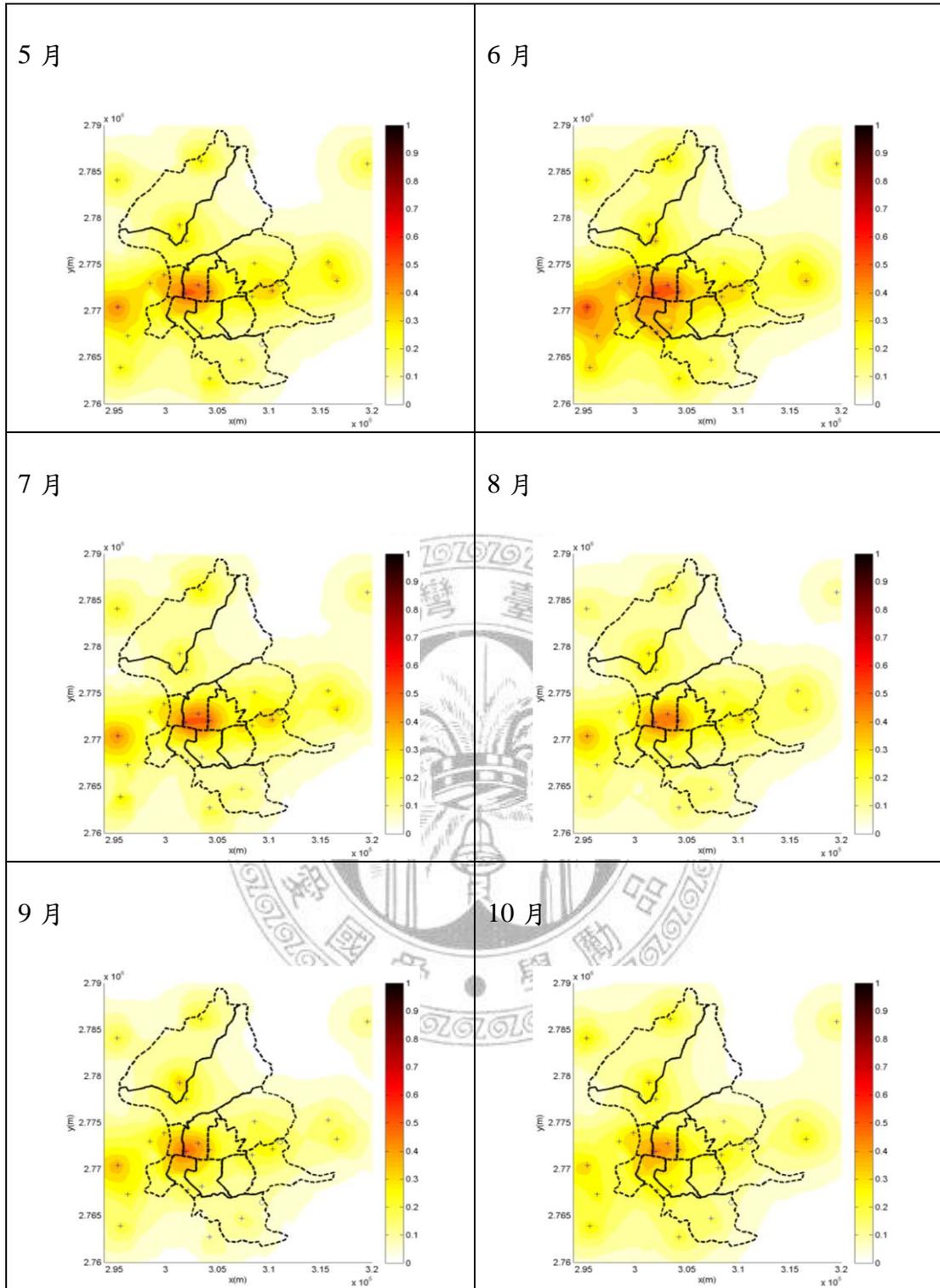


圖 4-16 推估 PM_{2.5}/PM₁₀ 時空圖(續)

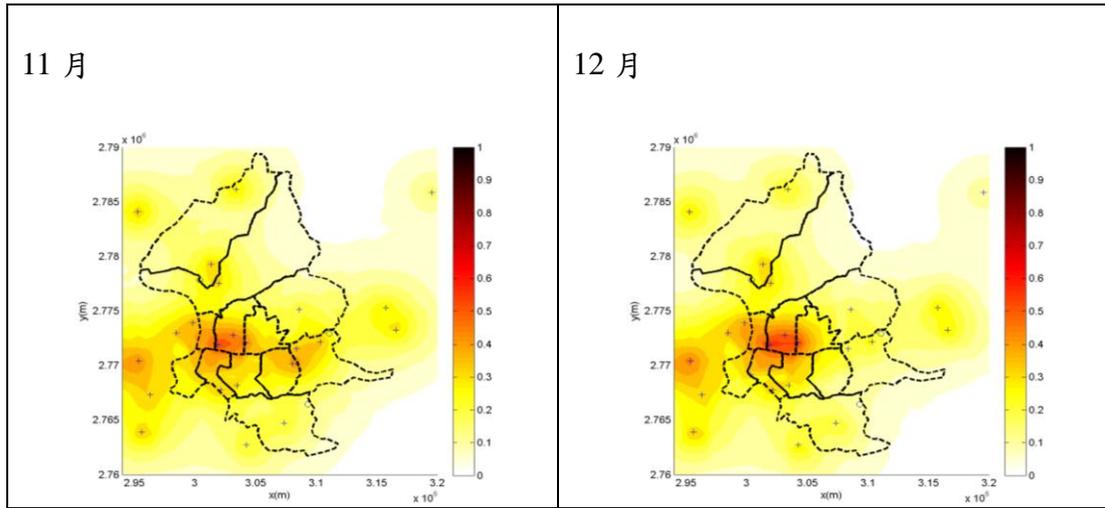


圖 4-16 推估 PM_{2.5}/PM₁₀ 時空圖

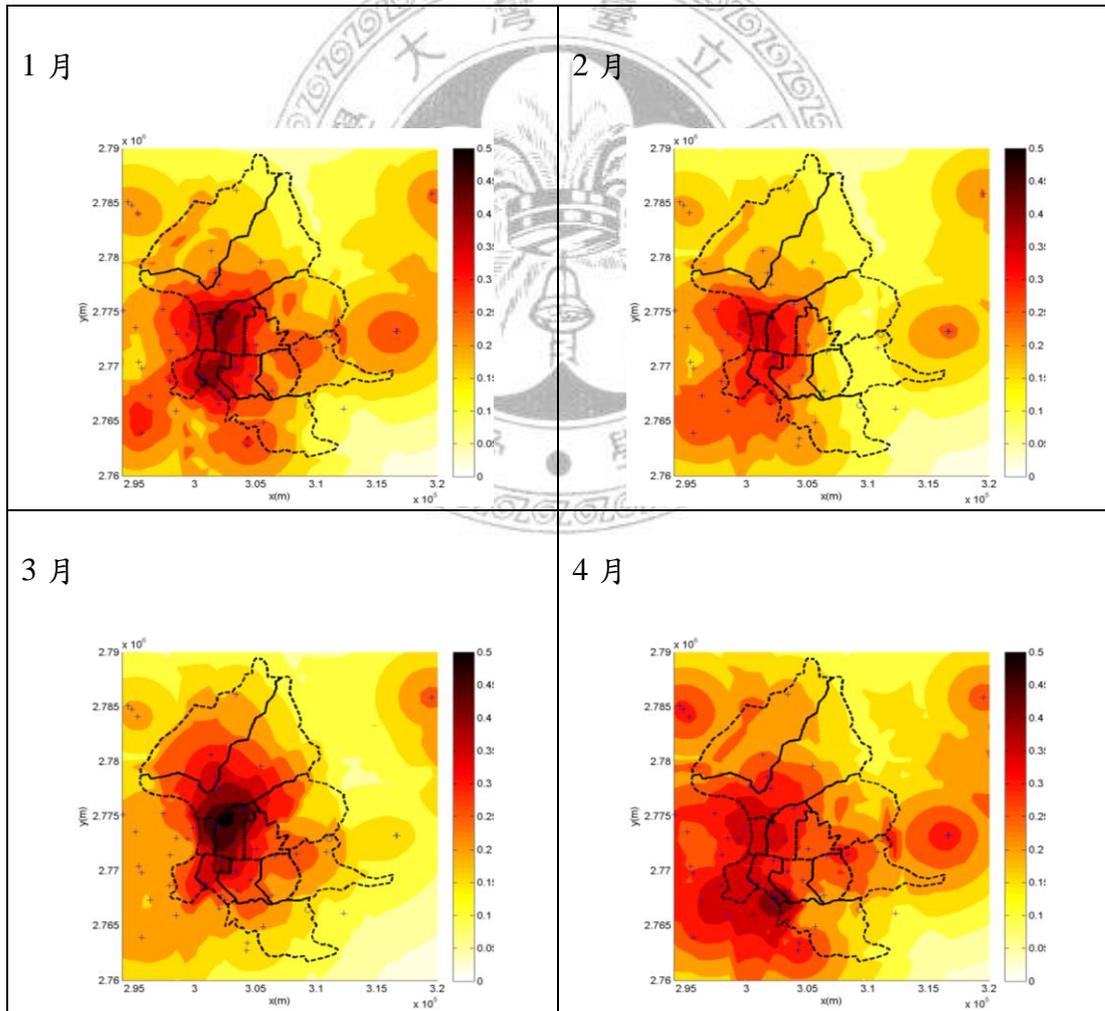


圖 4-17 推估 PM_{2.5}/TSP 時空圖(續)

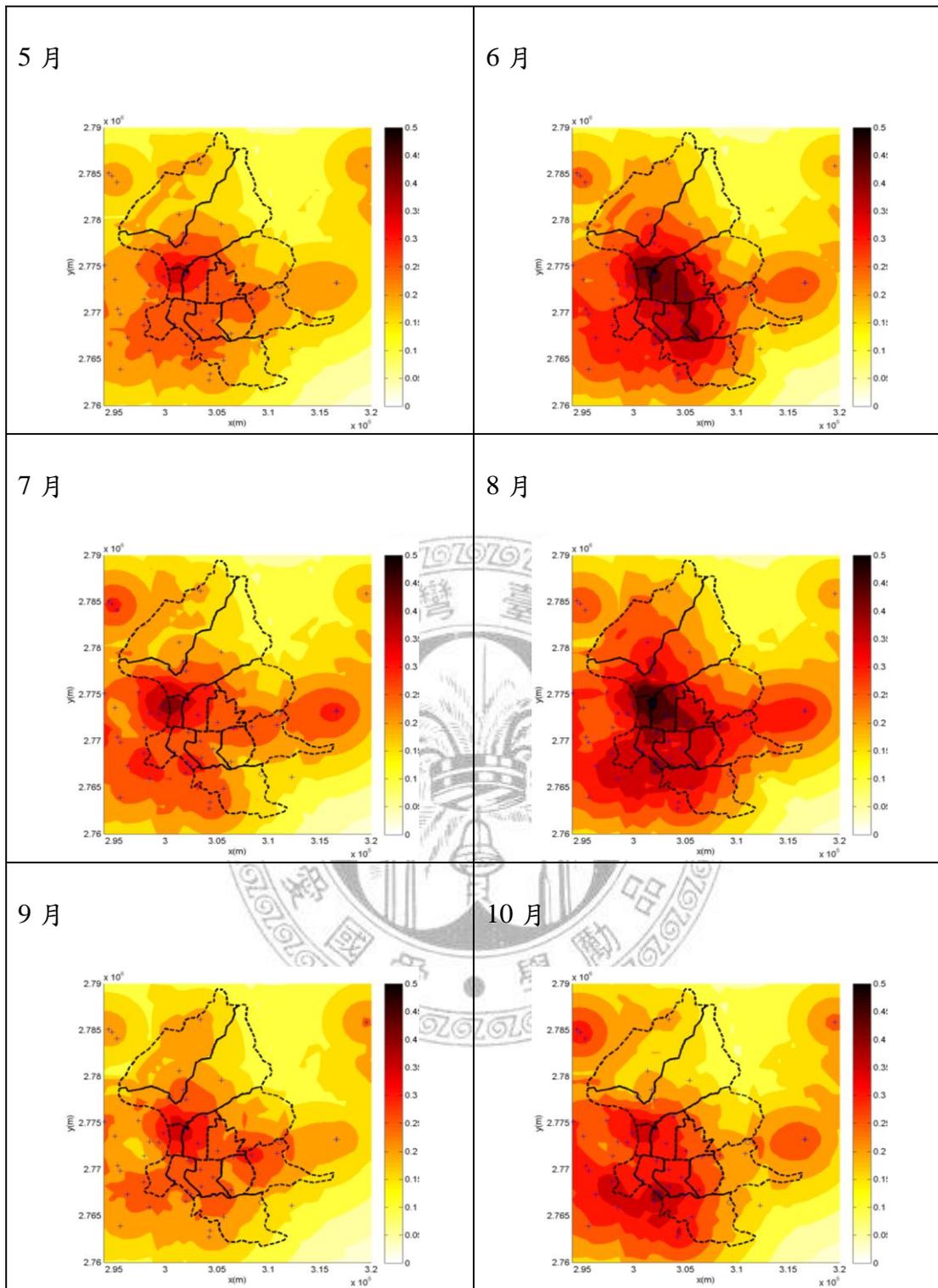


圖 4-17 推估 PM_{2.5}/TSP 時空圖(續)

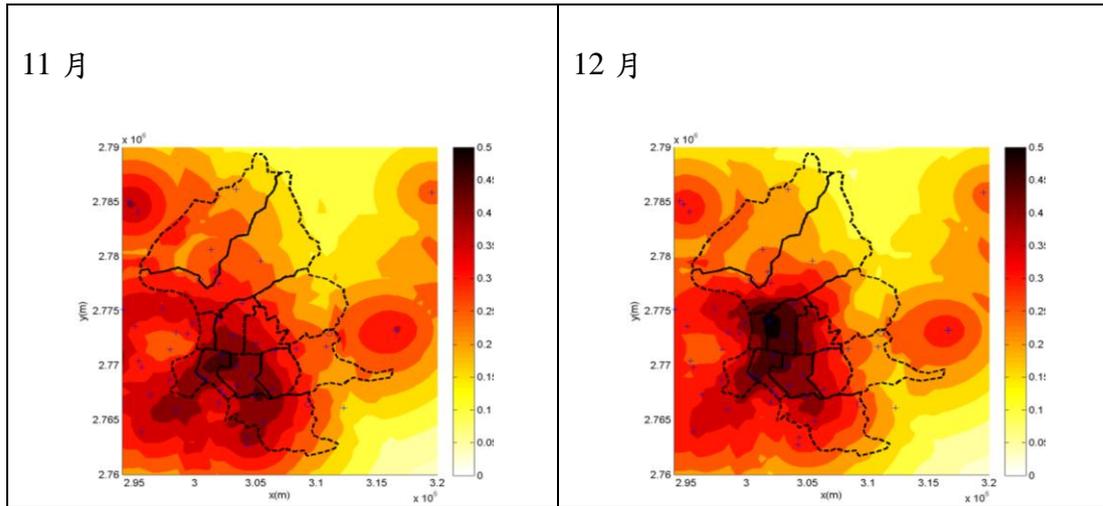


圖 4-17 推估 PM_{2.5}/TSP 時空圖

4.3.3 驗證 2003 年新莊超級測站 PM_{2.5} 結果

驗證 2003 年新莊超級測站 PM_{2.5} 結果如表 4-6 及圖 4-18 所示。其平均誤差比圖為圖 4-19 所示。

表 4-6 驗證 2003 新莊超級測站 PM_{2.5} 結果

類型	平均 誤差值	標準差	中位數	誤差 最小值	誤差 最大值
驗證 2003 超級測站	3.920	6.049	0.325	-2.549	17.270

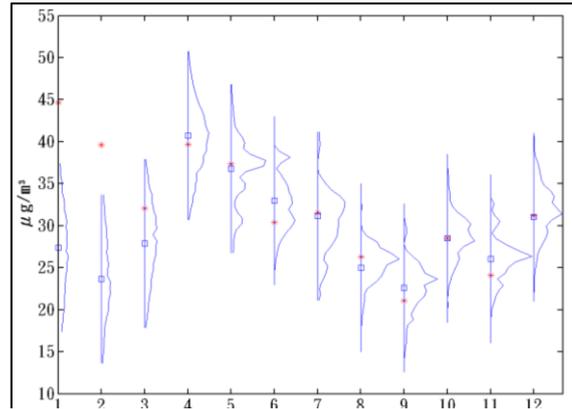


圖 4-18 驗證 2003 新莊超級測站 PM_{2.5} 結果

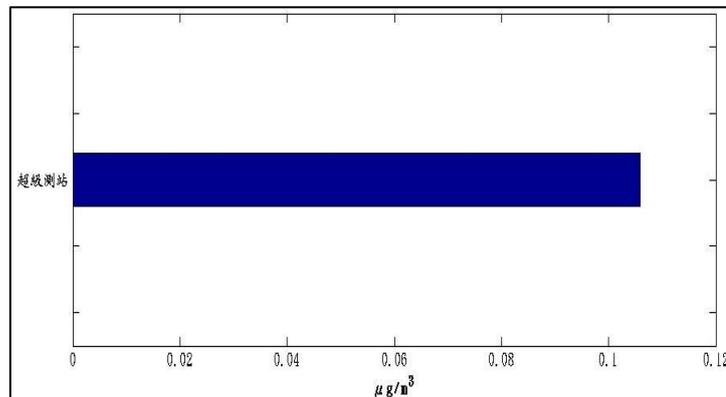


圖 4-19 推估 2003 新莊超級測站平均誤差比

4.4 結果討論

4.4.1 交叉驗證結果及推估 PM_{2.5} 時空分佈之討論

在表 4-4 中增加不確性資料會使推估誤差減少，且增加越多的不確定性資料，推估的精準度越高。而若比較只增加 PM₁₀ 轉換的不確定性資料與只增加 TSP 轉換的不確定性資料發現只增加 TSP 轉換的不確定資料比只增加 PM₁₀ 轉換的不確定資料推估精準度更高。原因是 TSP 總共有 39 個測站遠大於 PM₁₀ 只有 8 個測站，所以 TSP 更能提供推估的資訊。

從圖 4-8 與 4-9 中，陽明測站與萬里測站誤差最為嚴重約 20%，主要原因是周圍附近無其它測站提供資料，而萬華測站及三重測站推估誤差值最小，原因是周圍測站提供較多空間及時間相關性，以利推估。

圖 4-10 中，PM_{2.5} 高濃度主要發生台北都會區西南方。主要有永和市、新莊市等商業區、居宅區、工業區。也是重要交通轉運位置的所在地，如台北車站、台北轉運站。北部濃度較低，主要為陽明山的關係。PM_{2.5} 隨的季節有明顯的差異，夏季濃度較低，而冬、春濃度較高。

4.4.2 回推 2004 年 PM_{2.5} 驗證結果及比值時空分佈圖討論

在萬華測站，可以發現觀測值從四月異常上升至五月後往下降，從十月至十二月一路下降，且下降幅度很大。在萬華四月觀測值偏高主要因為受到高壓迴流的影響(王竹方與李崇德，2005)。

在萬華附近測站，依距離由近至遠有永和測站、古亭測站、中山測站及三重測站。其中永和及三重測站為交通測站，王竹方與李崇德(2005)研究指出交通站為一般站的 1.4~1.8 倍。故在推估上雖有納入永和測站較高濃度 PM_{2.5} 也無法精確推估受高壓迴流而產生高濃度的 PM_{2.5} 之值。

萬華測站，11 月及 12 月份有很明顯高估，其推測主要原因是受到附近永和測站較高 PM_{2.5} 濃度的影響。

預測 2004 年 PM_{2.5}，以中山測站最好誤差 4%，萬華測站誤差為 18% 最差。氣候因素會影響推估的精確度。

在圖 4-16，PM_{2.5}/PM₁₀ 時空推估圖中，比值較高的地區有大同區、中山區偏南、中正區、新莊地區。就大同區而言，此區為台北市交通流量最密集的地區，

為台北轉運站、台北交流道、中山高、環北交流道與台北橋等重要交通樞紐集聚地。就中山區偏南，此區主要為商業人文區且鄰近台北車站、人文活動熱絡，如：美麗華百樂園、圓山飯店、行天宮等。就中正區而言，此區亦是交通流量非常大的地區，台北火車站與許多高架道路，如：新生高架道路。而新莊地區為工業重鎮，許多工業設廠於此。由此可知 $PM_{2.5}$ 主要來源為交通、工業及人文活動為主。

在圖 4-17 推估 $PM_{2.5}/TSP$ 時空圖，與 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比值有其類似性，高濃度主要也是高交通流量及人文活動密集的地方為主。

4.4.3 回推 2003 年新莊超級測站 $PM_{2.5}$ 驗證結果之討論

回推 2003 年新莊超級測站，誤差百分比為 10.6%。在圖 4-18 所示，發現一月及二月有嚴重低估的情況，主要原因為：(1)1 月發生高壓迴流天數達 15 天，使濃度升高。(2)1/31-2/3 因機器濾紙未更換，造成高值(環保署，2003 年新莊超級測站年報)。可見人為因素、機器及氣候會影響預測的精確度。

第五章 結論與建議

5.1 結論

本研究分別探討了兩個主要的問題，以下為本研究綜合兩個問題後的結論及建議：

- 一、PSO 可以搜尋最佳的 kernel 半徑，以取代經驗法則。
- 二、PSO-NM 可以自動的搜尋最佳的模式的型態、數目及參數，取代使用試誤的不方便，且可以考慮整體的共變異數去擬合。
- 三、PSO-NM 不用跟 NM 一樣，需要給定適合的初始值及模式型態。
- 四、本研究可以結合時空統計推估，例如：最大貝氏熵法(Bayesian maximum entropy method, BME)完全自動化去推估。
- 五、BME 可以考慮不確定性資料，提高推估的精確性。
- 六、在 $PM_{2.5}$ 時空推估圖與 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 與 $PM_{2.5}/TSP$ 圖中，可以知道 $PM_{2.5}$ 的主要來源是交通頻繁、人文活動熱烈及工業駐立的地方，而較未發展的地方則不管是 $PM_{2.5}$ 還是其比值都相對較低，這個結果與前人的研究發現相同。

七、細懸浮粒子的分佈除了受交通、工業等污染源的影響外，亦受驅勢影響。而驅勢具有明顯的季節性差異，故造成細懸浮粒子在春、冬季有較高的濃度，夏季則較低的濃度，這個結果與前人的研究發現相同。

八、在沒有氣候及人為因素的干擾下，利用 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 與 $PM_{2.5}/TSP$ 的比值關係去回推過去的 $PM_{2.5}$ 是可行的。

5.2 建議

一、在本研究中是假設 2003-2007 年台北都會區的土地利用是相同的，也就是未考慮土地利用的改變情況。由於台北都會區土地利用改變快速，若之後回推更遠的時間，將需要把土地利用因子納入推估的考慮。

二、在結果討論中，可以知道氣象因子亦是影響 $PM_{2.5}$ 的因素之一，可將 $PM_{2.5}$ 與氣象因子做回歸分析，利用回歸的結果，把氣象因子轉換成不確定性資料，增加更多的推估資訊。

三、每年汽機車的數量，亦可以當推估時重要的資訊。

五、本研究是以 2004-2007 年台北都會區的 PM_{10} 的資料，可以在測試其它的資

料。

六、在 BME 中，本研究只利用 S-KB 的知識去進行推估，可以考慮把 G-KB 的知識，例如：擴散方程式等納入考慮。

七、本研究是使用月尺度的資料，故無法看出極端值的表現，如沙塵暴等，若要看極端值的表現，可以考慮更小的尺度，如日尺度或旬尺度等。

八、在交叉驗證中，可以更深入的探討測站設置位置是否符合監測與經濟價值。

九、台北都會區內設置的空氣品質監測站數目相較其它區域多。若應用在別的區域時，應該考慮測站是否足夠且儘量把其它有關資訊納入考慮。



參考文獻

中文：

王竹方，李崇德(2005)，北部空品區懸浮微粒成因探討及改善效益策略研究---子計畫:探討大台北地區懸浮微粒成因及污染來源，行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告(NSC93-EPA-Z007-003)。

王竹方，蔣本基，李崇德(2002)，都會型氣膠(PM_{2.5})管制策略研究---子計畫III：以多種化學分析技術探討都會型氣膠(PM_{2.5})物化特性之研究，行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告(NSC91-EPA-Z007-002)。

王秀娟(1993)，台北都會區不同高度懸浮微粒濃度之變異及機動車輛對其之貢獻，國立臺灣大學公共衛生學研究所碩士學位論文。

王秋森，陳志傑(1999)，臭氧及PM₁/PM_{2.5}/PM₁₀空氣懸微粒之暴露及健康風險評估---子計畫二：PM₁/PM_{2.5}/PM₁₀空氣懸微粒粒徑分佈特性之評估，行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告(NSC90-2621-Z-002-030)。

何怡偉(2004)，Nelder-Mead 搜尋法處理無限制式及隨機最佳化問題之研究，私立元智大學工業工程與管理系博士學位論文。

李芝珊，氣膠與健康，環保科技通訊，1992，4(5)，4。

李崇德，周崇光(2005)，微粒空氣污染物研究與修訂空氣品質標準之可行性評估---子計畫二：微粒超級測站微粒監測特性，行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告(NSC94-EPA-Z-008-003)。

邱瑞仙(2008)，桃園地區空氣污染物濃度相關性及地理分布，國立中央大學環境工程研究所碩士在職專班論文。

楊忠盛(1998)，台北都會區懸浮微粒特性及來源之探討，國立臺灣大學環境工程研究所碩士學位論文。

楊炳隆(2008)，不同地域雲凝結核微物理特性之探討，國立中央大學大氣物理所碩士學位論文。

詹俊南(1996)，台灣地區 PM₁₀ 污染特性分析，國立臺灣大學環境工程研究所碩士學位論文。

雷侑蓁(2005)，空氣懸浮微粒心肺毒性研究，國立臺灣大學職業醫學與工業衛生研究所博士學位論文。

蔣本基(1992)，北桃地區空氣污染受體模式應用之研究(三)，行政院環境保護署(EPA-81-E3F1-09-06)。

蔣本基，張怡怡，江鴻龍(2003)，都會型氣膠 (PM_{2.5}) 管制策略研究---子計畫一：都會型氣膠 (PM_{2.5}) 污染源探討分析，行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告(NSC91-EPA-Z-002-003)。

環保署(2003)，新莊超級測站年報，行政院環境保護署。

英文：

Altman, N. (2000) Krige, smooth, both or neither? (with discussion). Australian & New Zealand Journal of Statistics 42(4), 441-454.

Altman, N.S. (1990) Kernel Smoothing of Data with Correlated Errors. Journal of the American Statistical Association 85(411), 749-759.

Beckers, F. and Bogaert, P. (1998) Nonstationarity of the mean and unbiased variogram estimation: Extension of the weighted least-squares method. Mathematical Geology 30(2), 223-240.

Bell, M.L., Levy, J.K. and Lin, Z. (2008) The effect of sandstorms and air pollution on cause-specific hospital admissions in Taipei, Taiwan. *Occupational and Environmental Medicine* 65(2), 104-111.

Chen, M.L., Mao, I.F. and Lin, I.K. (1999) The PM_{2.5} and PM₁₀ particles in urban areas of Taiwan. *Science of the Total Environment* 226(2-3), 227-235.

Christakos, G. (1991) On Certain Classes of Spatiotemporal Random-Fields with Applications to Space-Time Data-Processing. *Ieee Transactions on Systems Man and Cybernetics* 21(4), 861-875.

Christakos, G. and Olea, R.A. (2005) New space-time perspectives on the propagation characteristics of the Black Death epidemic and its relation to bubonic plague. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment* 19(5), 307-314.

Christakos, G. and Serre, M.L. (2000) BME analysis of spatiotemporal particulate matter distributions in North Carolina. *Atmospheric Environment* 34(20), 3393-3406.

Christakos, G. (1992), *Random Field Models in Earth Sciences*. San Diego: Acad Press; New edition, Mineola, N.Y.: Dover Publ.Inc., 2005

Cressie, N. (1985) Fitting Variogram Models by Weighted Least-Squares. *Journal of the International Association for Mathematical Geology* 17(5), 563-586.

Cressie, N. (1987) A Nonparametric View of Generalized Covariances for Kriging. *Mathematical Geology* 19(5), 425-449.

Deutsch, C.V. and A.G. Journel. (1998), *Gslib: Geostatistical Software Library and User's Guide. 2.0, 2nd.*

Eberhart R, Kennedy J. (1995), A new optimizer using particle swarm theory. Presented at Proceedings of the Sixth International Symposium on Micro Machine and

Human Science, Nagora, Japan.

Goovaerts, P.(1997), Geostatistics for natural resources evaluation. New York, Oxford University Press.

Gotway, C.A. (1991) Fitting Semivariogram Models by Weighted Least-Squares. Computers & Geosciences 17(1), 171-172.

Grantz, D.A., Garner, J.H.B. and Johnson, D.W. (2003) Ecological effects of particulate matter. Environment International 29(2-3), 213-239.

Hastie, T.and R. Tibshirani,(1990), Generalized additive models. London; New York,Chapman and Hall.

Hengl, T., Heuvelink, G.B.M. and Rossiter, D.G. (2007) About regression-kriging: From equations to case studies. Computers & Geosciences 33(10), 1301-1315.

Host, G. (1999) Kriging by local polynomials. Computational Statistics & Data Analysis 29(3), 295-312.

Jian, X.D., Olea, R.A. and Yu, Y.S. (1996) Semivariogram modeling by weighted least squares. Computers & Geosciences 22(4), 387-397.

Lagarias, J.C., Reeds, J.A., Wright, M.H. and Wright, P.E. (1998) Convergence properties of the Nelder-Mead simplex method in low dimensions. Siam Journal on Optimization 9(1), 112-147.

Lark, R.M. and Papritz, A. (2003) Fitting a linear model of coregionalization for soil properties using simulated annealing. Geoderma 115(3-4), 245-260.

Lei, Y.C., Hwang, J.S., Chan, C.C., Lee, C.T. and Cheng, T.J. (2005) Enhanced oxidative stress and endothelial dysfunction in streptozotocin-diabetic rats exposed to

fine particles. *Environmental Research* 99(3), 335-343.

Li, C.S. and Lin, C.H. (2002) PM1/PM2.5/PM10 characteristics in the urban atmosphere of Taipei. *Aerosol Science and Technology* 36(4), 469-473.

Liang, J.J., Qin, A.K., Suganthan, P.N. and Baskar, S. (2006) Comprehensive learning particle swarm optimizer for global optimization of multimodal functions. *Ieee Transactions on Evolutionary Computation* 10(3), 281-295.

Nelder, J.A. and Mead, R. (1965) A Simplex-Method for Function Minimization. *Computer Journal* 7(4), 308-313.

Neuman, S.P. and Jacobson, E.A. (1984) Analysis of Nonintrinsic Spatial Variability by Residual Kriging with Application to Regional Groundwater Levels. *Journal of the International Association for Mathematical Geology* 16(5), 499-521.

Olea, R. A.(1999), *Geostatistics for Engineers and Earth Scientists*. Kluwer Academic Publishers.

Pardo-Iguzquiza, E. (1999) VARFIT: a fortran-77 program for fitting variogram models by weighted least squares. *Computers & Geosciences* 25(3), 251-261.

Pardo-Iguzquiza, E. and Dowd, P.A. (1998) The second-order stationary universal kriging model revisited. *Mathematical Geology* 30(4), 347-378.

Pelletier, B., Dutilleul, P., Larocque, G. and Fyles, J.W. (2009) Coregionalization analysis with a drift for multi-scale assessment of spatial relationships between ecological variables 1. Estimation of drift and random components. *Environmental and Ecological Statistics* 16(4), 439-466.

Pope, C.A. (2000) Epidemiology of fine particulate air pollution and human health: Biologic mechanisms and who's at risk? *Environmental Health Perspectives* 108,

713-723.

Ravagnani, M.A.S.S., Silva, A.P., Biscaia, E.C. and Caballero, J.A. (2009) Optimal Design of Shell-and-Tube Heat Exchangers Using Particle Swarm Optimization. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 48(6), 2927-2935.

Shinzawa H, Jiang JH, Iwahashi M, Ozaki Y.(2007), Robust curve fitting method for the Nelder–Mead simplex method in low dimensions, *SIAM J. Optim.*, 9, pp. 112–147.

Shinzawa, H., Jiang, J.H., Iwahashi, M. and Ozaki, Y. (2007) Robust curve fitting method for optical spectra by least median squares (LMedS) estimator with particle swarm optimization (PSO). *Analytical Sciences* 23(7), 781-785.

Yanosky, J.D., Paciorek, C.J. and Suh, H.H. (2009) Predicting Chronic Fine and Coarse Particulate Exposures Using Spatiotemporal Models for the Northeastern and Midwestern United States. *Environmental Health Perspectives* 117(4), 522-529.

Yu, H-L, G. Christakos and J-C Chen(2007), Spatiotemporal air pollution modeling and prediction in epidemiologic research. In *Air Pollution Research Trends*, Columbus, F. (ed.), Nova Science Publishers, Inc., Hauppauge, NY. 57-75.

Zhang, X.F., Vaneijkeren, J.C.H. and Heemink, A.W. (1995) On the Weighted Least-Squares Method for Fitting a Semivariogram Model. *Computers & Geosciences* 21(4), 605-608.

附錄一

表附 1-1 PM₁₀測站，共計 26 站(續)

測站名稱	X(m)	Y(m)	來源
中正	301326	2779252	臺市環保局
大直	304191	2772093	
信義	308051	2770124	
南港	310340	2772196	
內湖	308590	2775111	
木柵	307368	2764711	
承德	315735	2775267	
中北	301905	2771884	
三重	299815.799	2773911.112	環保署
士林	301979.33	2777552.98	
古亭	303444.912	2768164.644	
汐止	316546.212	2773247.087	
板橋	296293.272	2767292.739	
泰山	291877.699	2772707.236	
菜寮	298482.6	2772980.372	

表附 1-1 PM₁₀測站，共計 26 站

土城	295617.612	2763918.284	環保署
中山	303121.339	2772788.219	
永和	302109.168	2767759.805	
林口	287184.278	2774514.083	
松山	308376.056	2771517.389	
陽明	303377.296	2786121.423	
淡水	295285.909	2784073.576	
新莊	293653.181	2769619.361	
萬里	319536.018	2785856.125	
萬華	300315.016	2769163.511	
新店	304227.861	2762734.317	

附錄二

各測站名稱及地理座標位置，如表附2-1、表附2-2及表附2-3。

表附 2-1 PM_{2.5}測站，共計 19 站

測站名稱	X(m)	Y(m)	來源
汐止	316546.212	2773247.087	環保署
萬里	319536.018	2785856.125	
新店	304227.861	2762734.317	
土城	295617.612	2763918.284	
板橋	296293.272	2767292.739	
新莊	293653.181	2769619.361	
菜寮	298482.6	2772980.372	
林口	287184.278	2774514.083	
淡水	295285.909	2784073.576	
士林	301979.33	2777552.98	
中山	303121.339	2772788.219	
萬華	300315.016	2769163.511	
古亭	303444.912	2768164.644	
松山	308376.056	2771517.389	
陽明	303377.296	2786121.423	
三重	299815.799	2773911.112	
永和	302109.168	2767759.805	
泰山	291877.699	2772707.236	
新莊超級測站	295367.189	2770410.614	

表附 2-2 PM₁₀測站，共計 27 站

測站名稱	X(m)	Y(m)	來源
中正	301326	2779252	臺市環保局
大直	304191	2772093	
信義	308051	2770124	
南港	310340	2772196	
內湖	308590	2775111	
木柵	307368	2764711	
承德	315735	2775267	
中北	301905	2771884	
三重	299815.799	2773911.112	
士林	301979.33	2777552.98	
古亭	303444.912	2768164.644	
汐止	316546.212	2773247.087	
板橋	296293.272	2767292.739	
泰山	291877.699	2772707.236	
菜寮	298482.6	2772980.372	
土城	295617.612	2763918.284	
中山	303121.339	2772788.219	
永和	302109.168	2767759.805	
林口	287184.278	2774514.083	
松山	308376.056	2771517.389	
陽明	303377.296	2786121.423	
淡水	295285.909	2784073.576	
新莊	293653.181	2769619.361	
萬里	319536.018	2785856.125	
萬華	300315.016	2769163.511	
新店	304227.861	2762734.317	
新莊超級測站	295367.189	2770410.614	

表附 2-3 TSP 測站，共計 15 站(續)

測站名稱	X(m)	Y(m)	來源
北門	302189.548	2770905.3	臺市環保局
東門	303390.586	2769968.86	
雙園	300837.918	2768830.97	
公館	304902.492	2767213.62	
景美	305646.591	2764905.12	
長春	305050.565	2771954.78	
金華	304614.089	2769136.76	
六張犁	306371.547	2767771.42	
敦化	306597.686	2771356.49	
大同	302654.715	2773946.76	
士林	303851.015	2775699.79	
陽明山	303377.296	2786121.42	
北投	301317.826	2780604.91	
南港	310820.075	2771722.83	
石牌	253368.115	2777917.72	
板橋莒光國小	297912.894	2768649.536	
三重興穀國小	297914.889	2771438.4	
三重明志國中	299369	2772914.321	
永和國小	301975.063	2766588.73	
永和網溪國小	302423.03	2767342.423	
中和積穗國中	298425.802	2765911.417	
新店大豐國小	304333.972	2763405.961	
新莊國中	295611.275	2769830.552	
樹林山佳國小	290603.703	2763122.083	
鶯歌鎮公所	285602.408	2760206.78	
三峽安溪國小 (三峽國小)	287289.116 (287312.312)	2758555.037 (2758589.56)	
淡水鎮公所 (淡水國小)	294786.203 (294470.75)	2784770.916 (2785075.414)	
汐止秀峰高級中學	316669.584	2773237.733	
瑞芳國中	332216.739	2777970.795	
蘆洲國小	297373.36	2775237.046	
五股鄉公所	294057.547	2775104.391	
泰山明志國小	293130.03	2770767.388	
林口國中	288086.491	2774244.582	

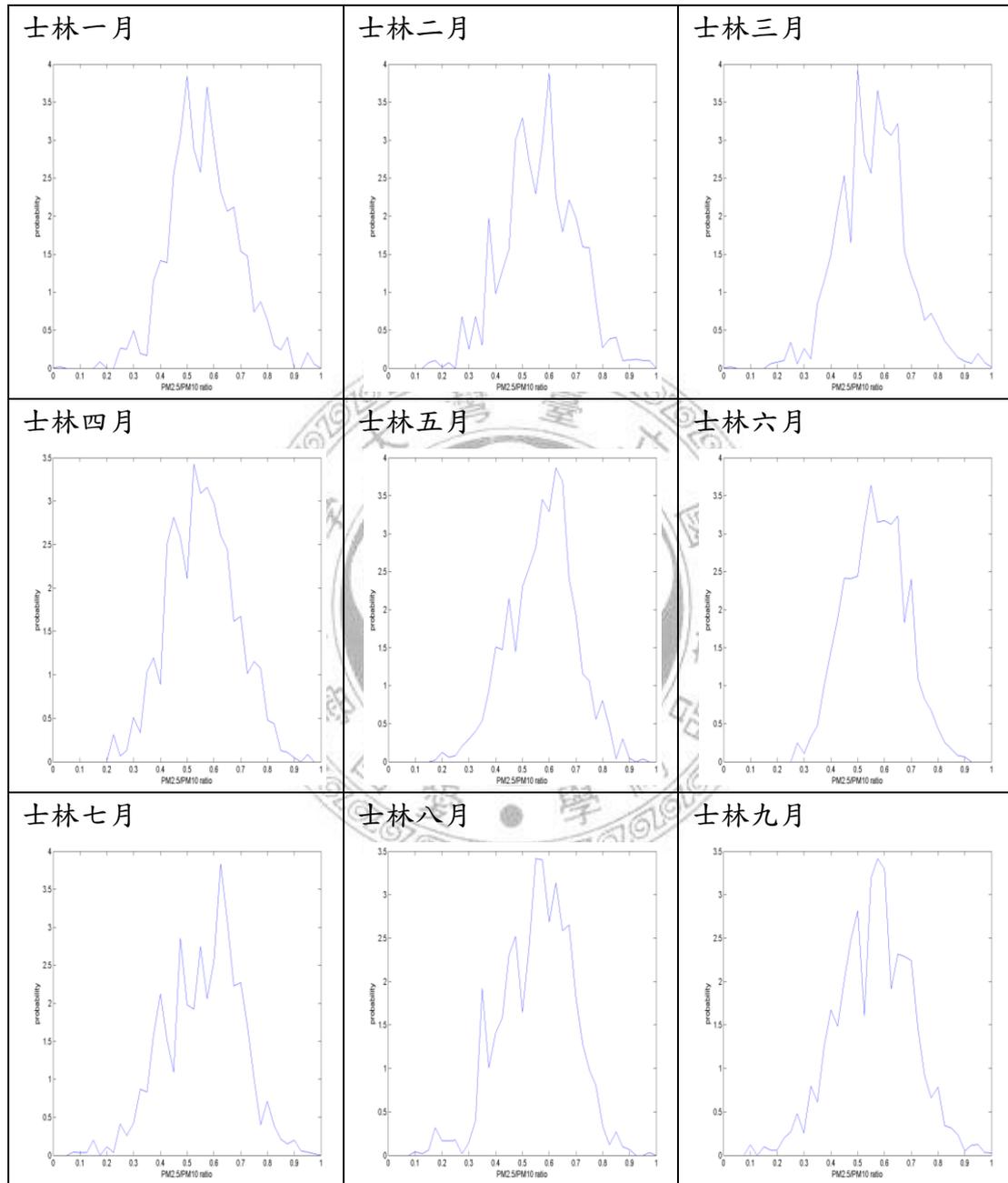
表附 2-3 TSP 測站，共計 15 站

深坑國小	312267.788	2766117.247	北縣環保局
八里國小	290662.224	2782433.673	
土城污水處理廠	293312.471	2762187.033	
五股污水處理廠	295065.491	2773568.643	

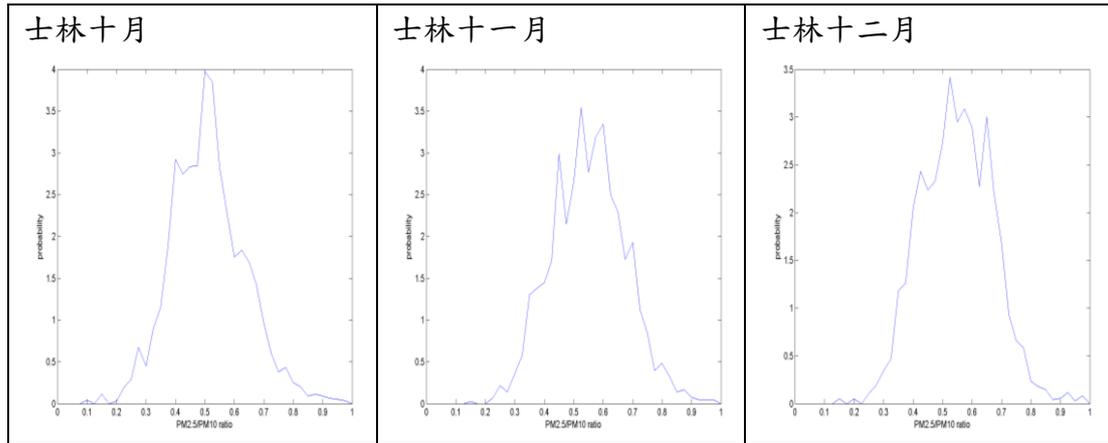


附錄三

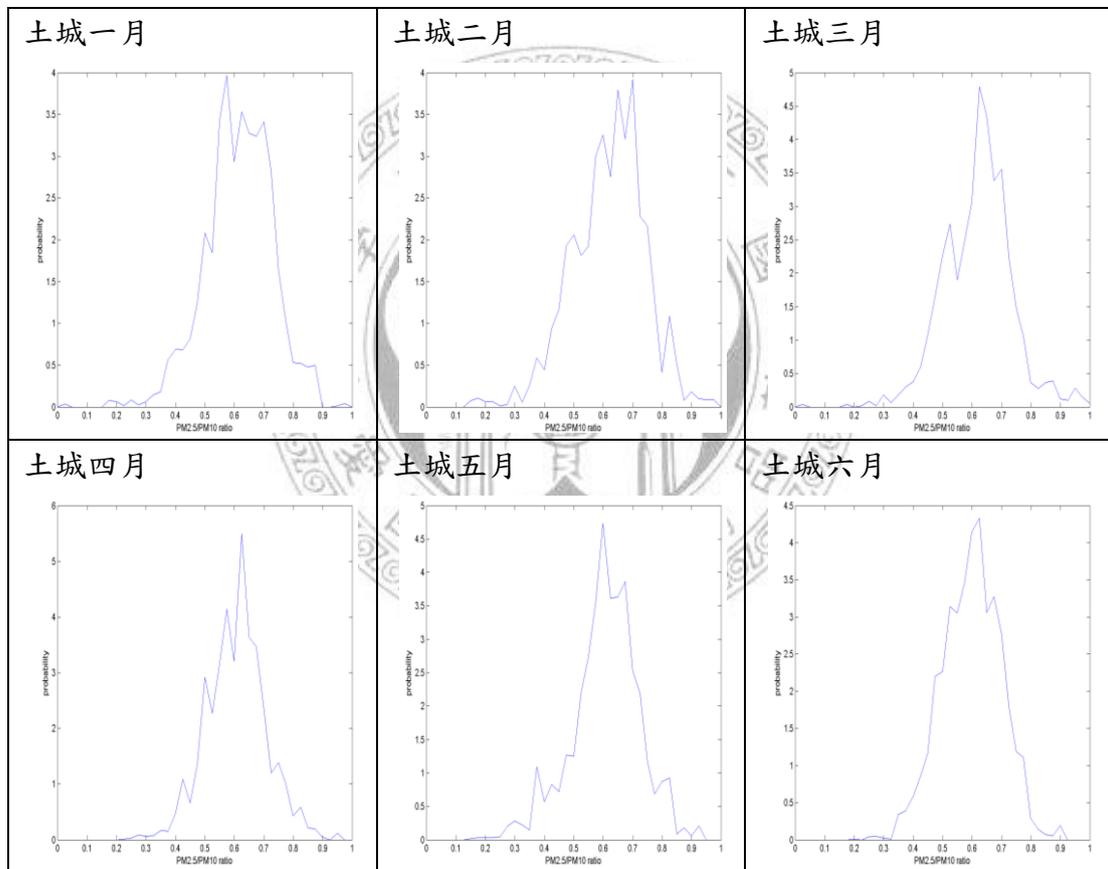
由日資料組成各測站的PM_{2.5}/PM₁₀比值之PDF圖。



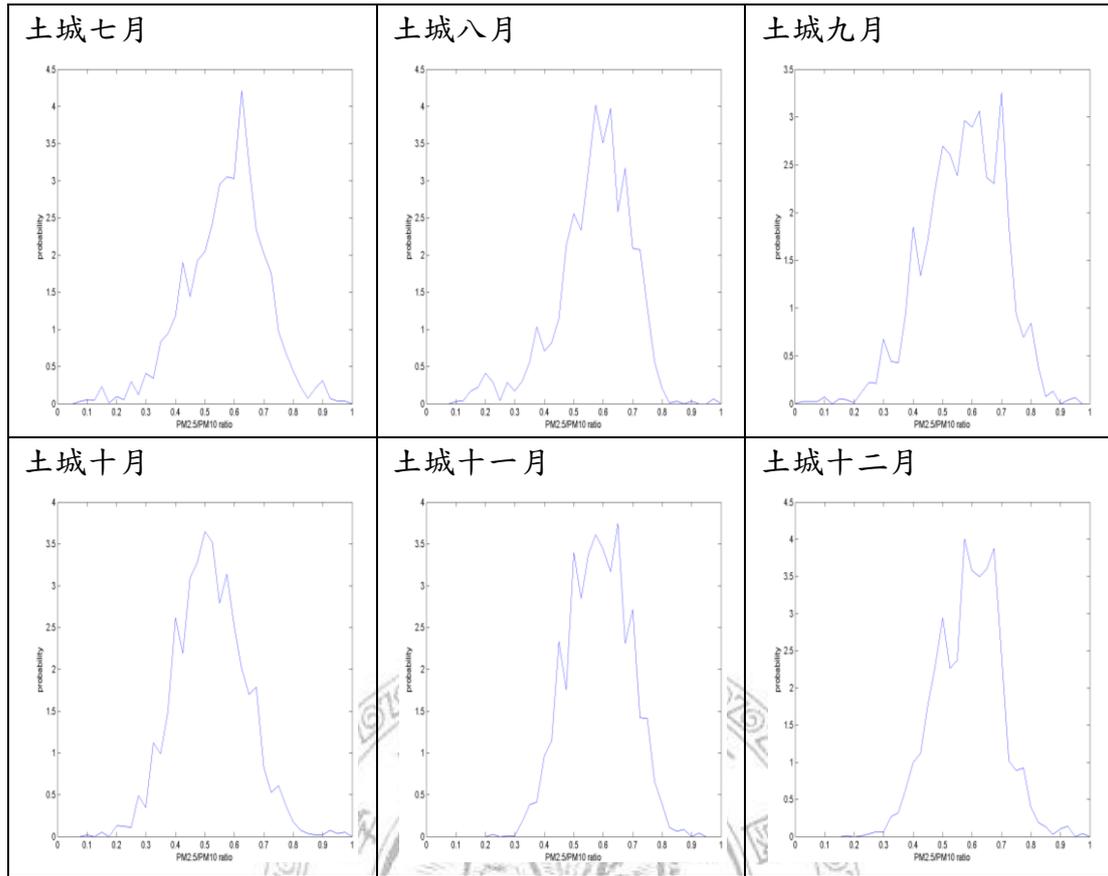
圖附 3-1 士林測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值之 PDF 圖(續)



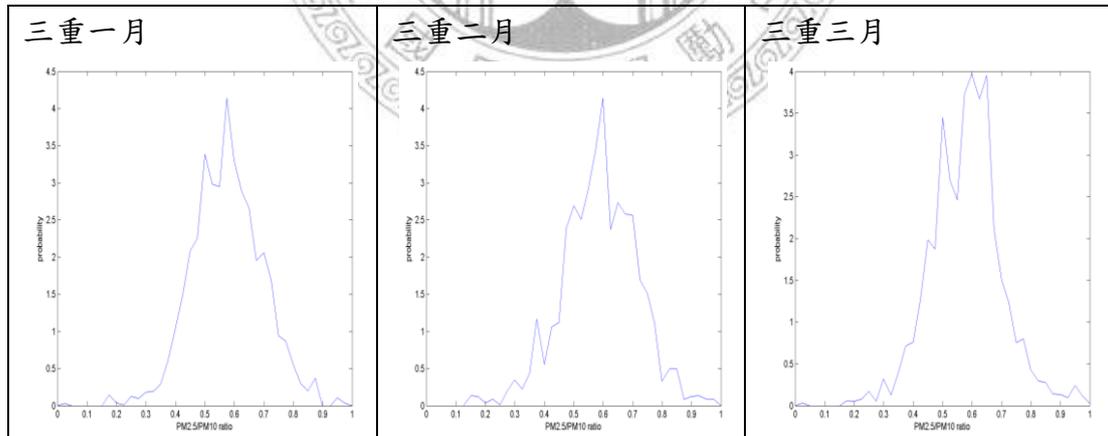
圖附 3-1 士林測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比值之 PDF 圖



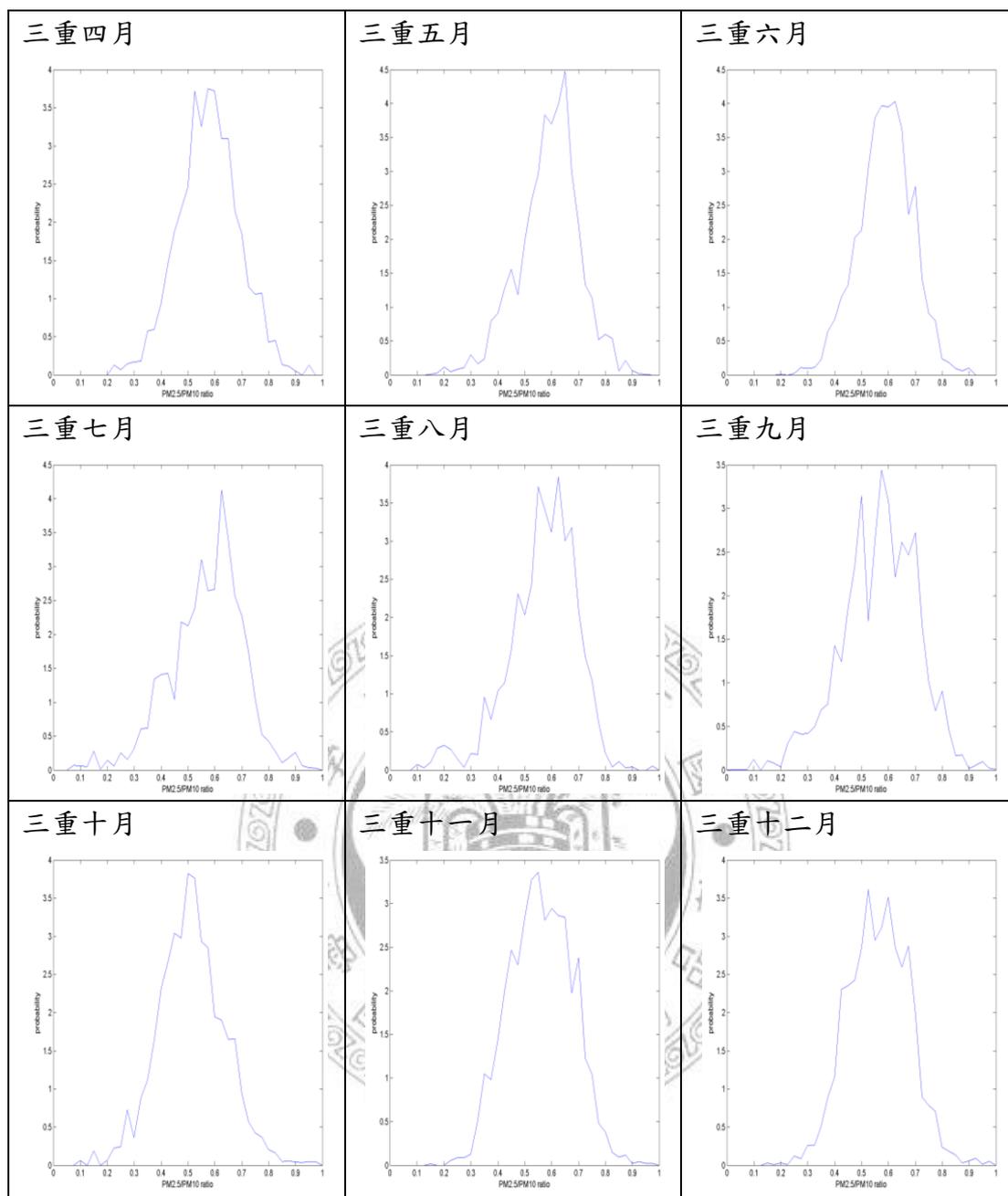
圖附 3-2 土城測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比值之 PDF 圖(續)



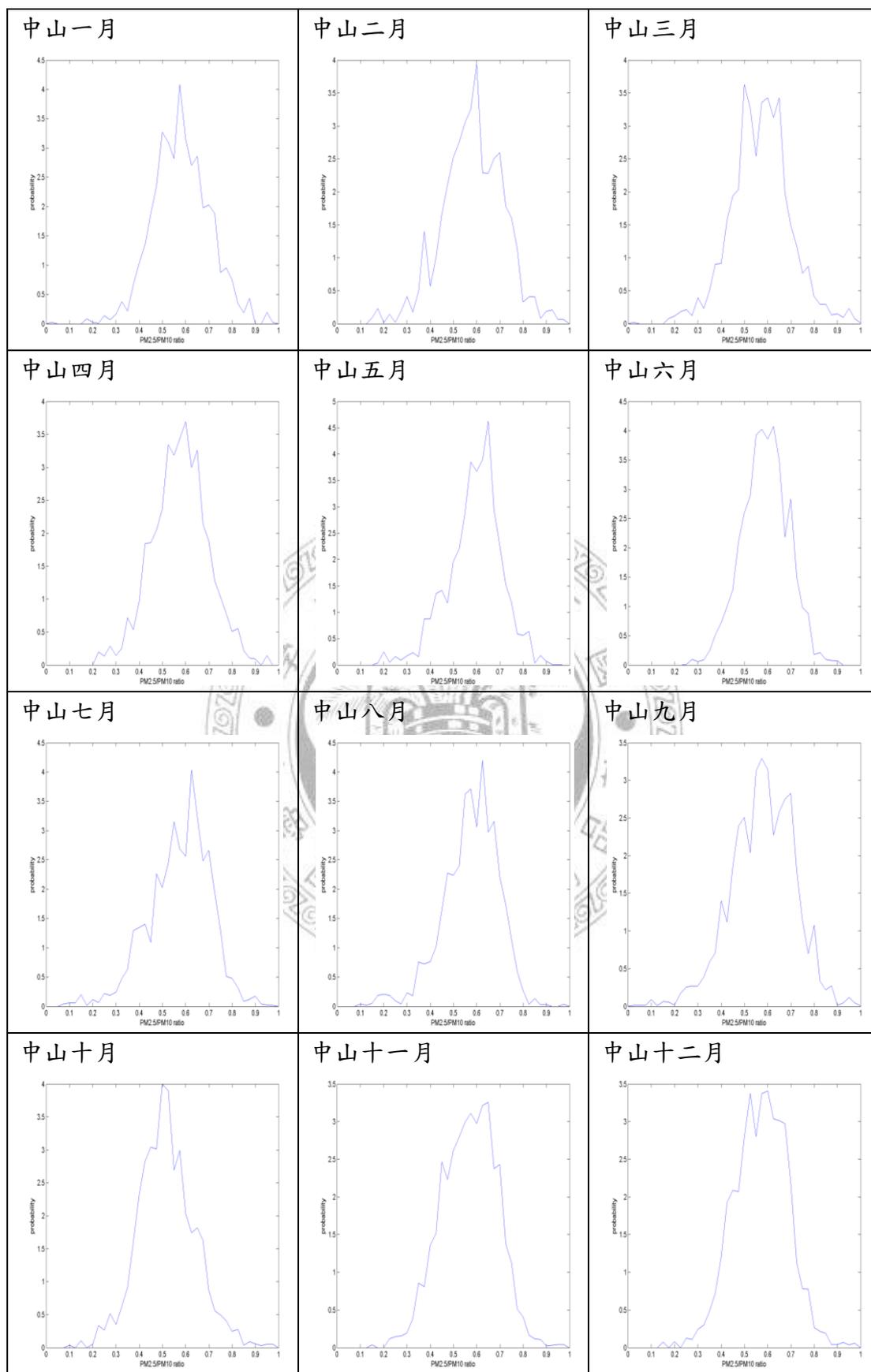
圖附 3-2 土城測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比值之 PDF 圖



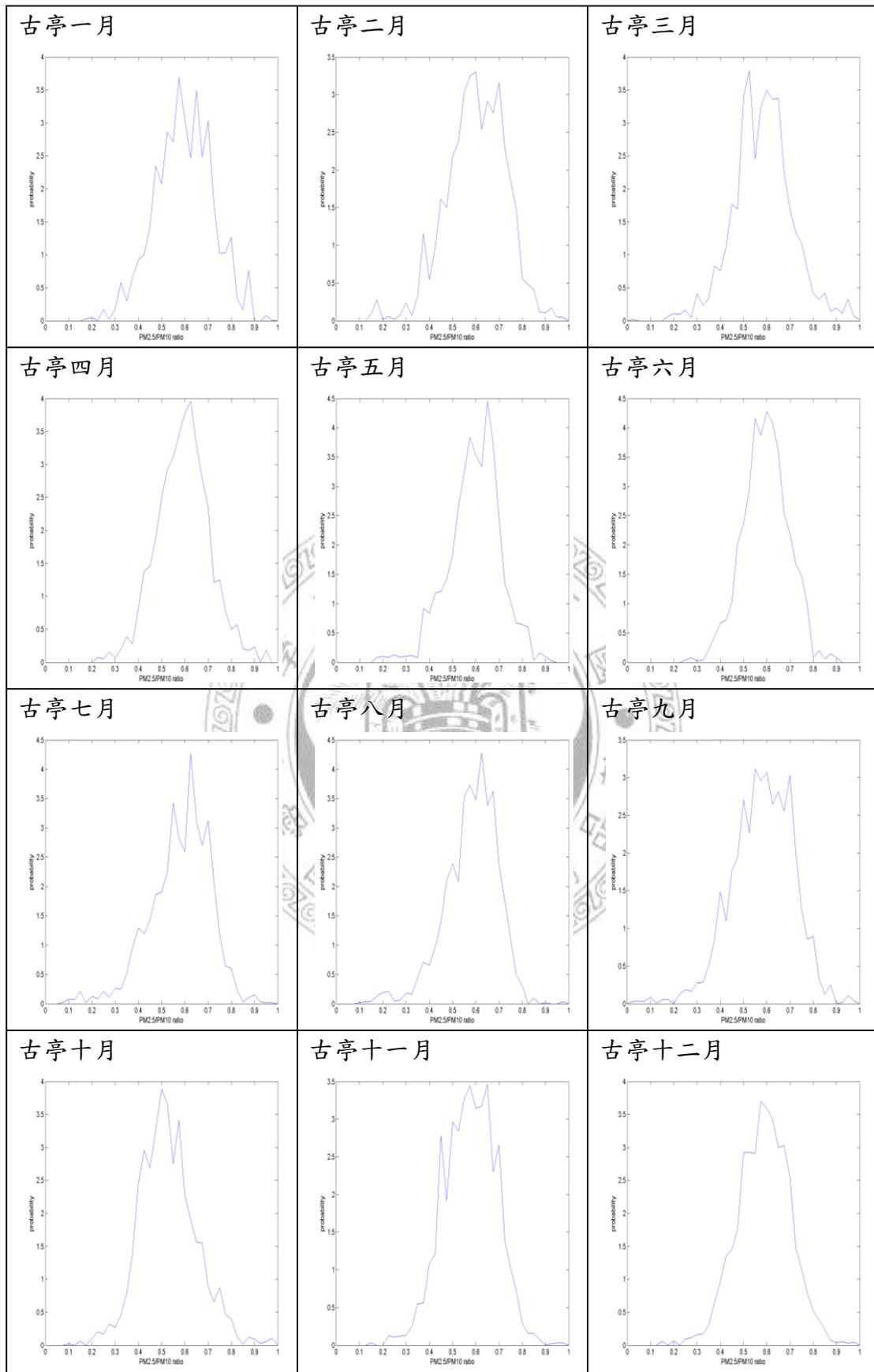
圖附 3-3 三重測站 $PM_{2.5}/PM_{10}$ 比值之 PDF 圖(續)



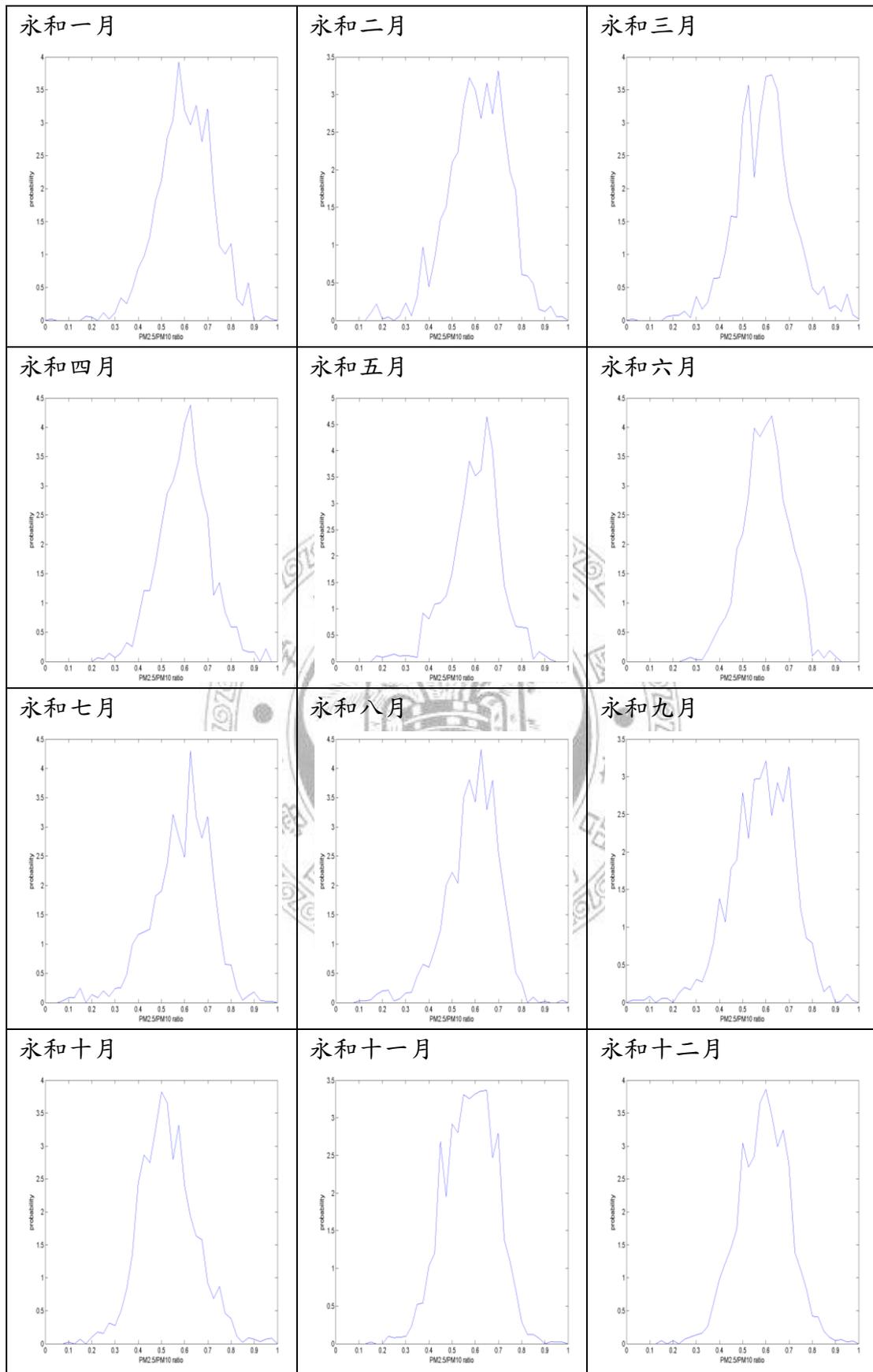
圖附 3-3 三重測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值之 PDF 圖



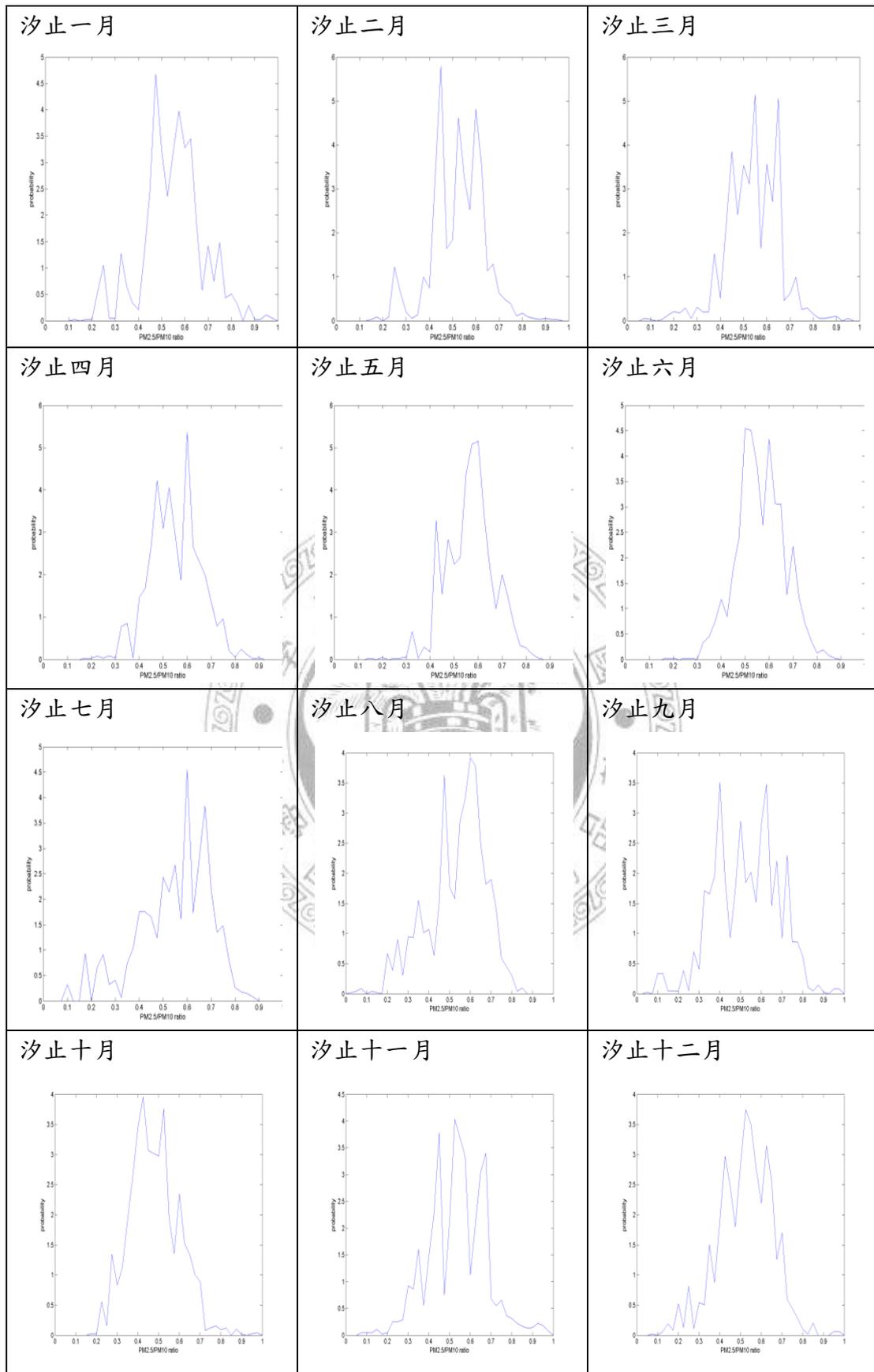
圖附 3-4 中山測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



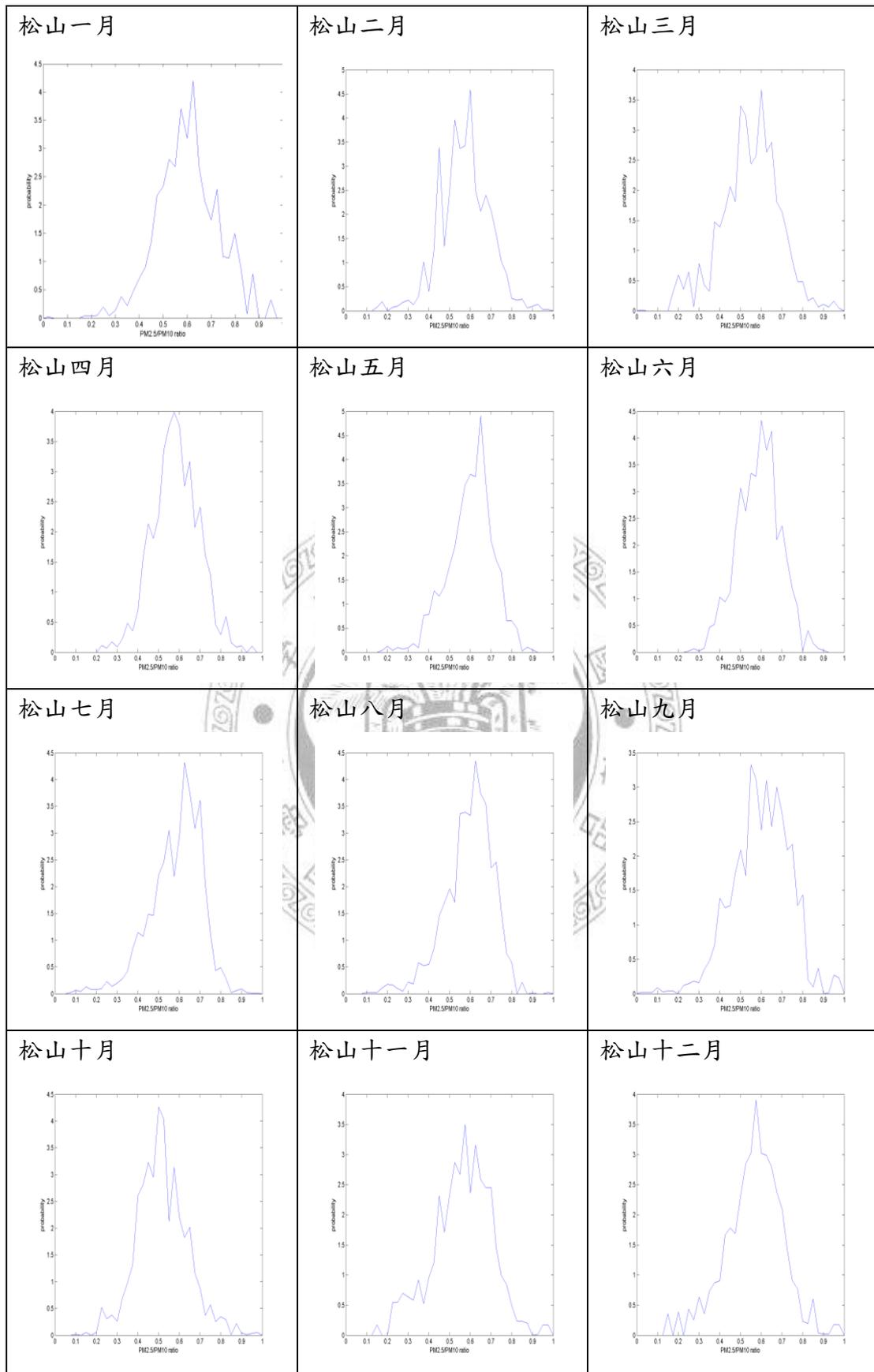
圖附 3-5 古亭測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



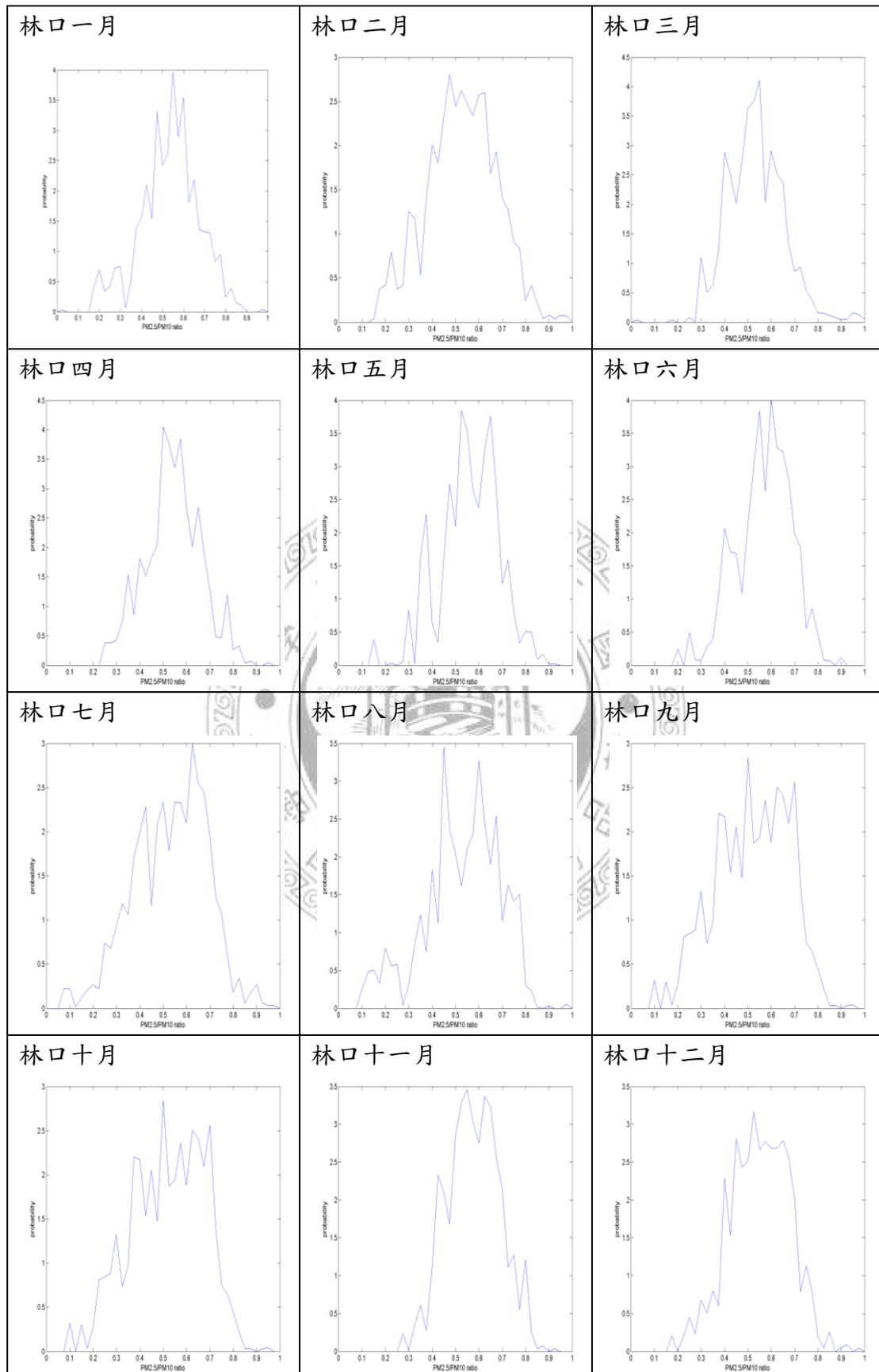
圖附 3-6 永和測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



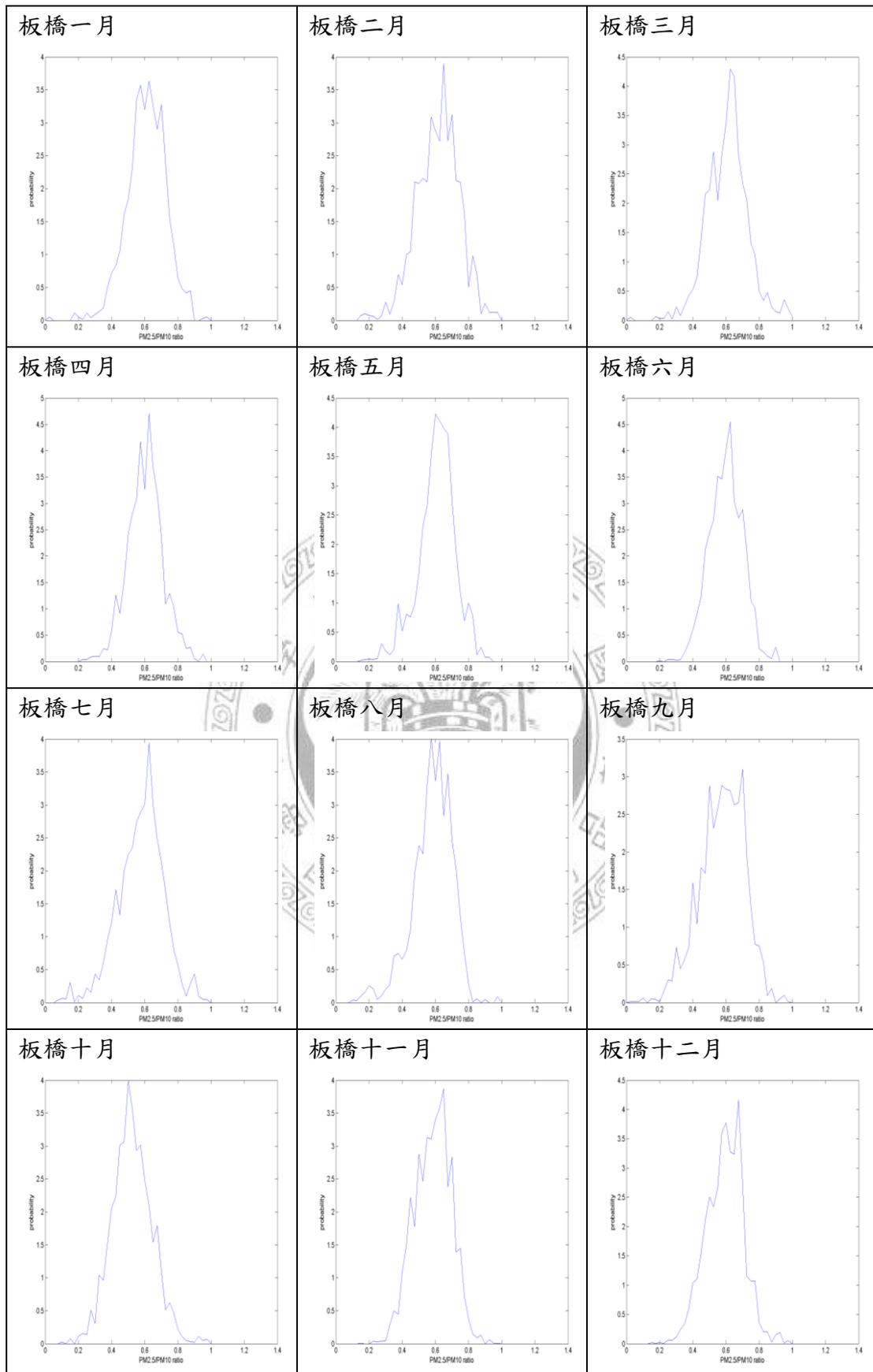
圖附 3-7 汐止測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



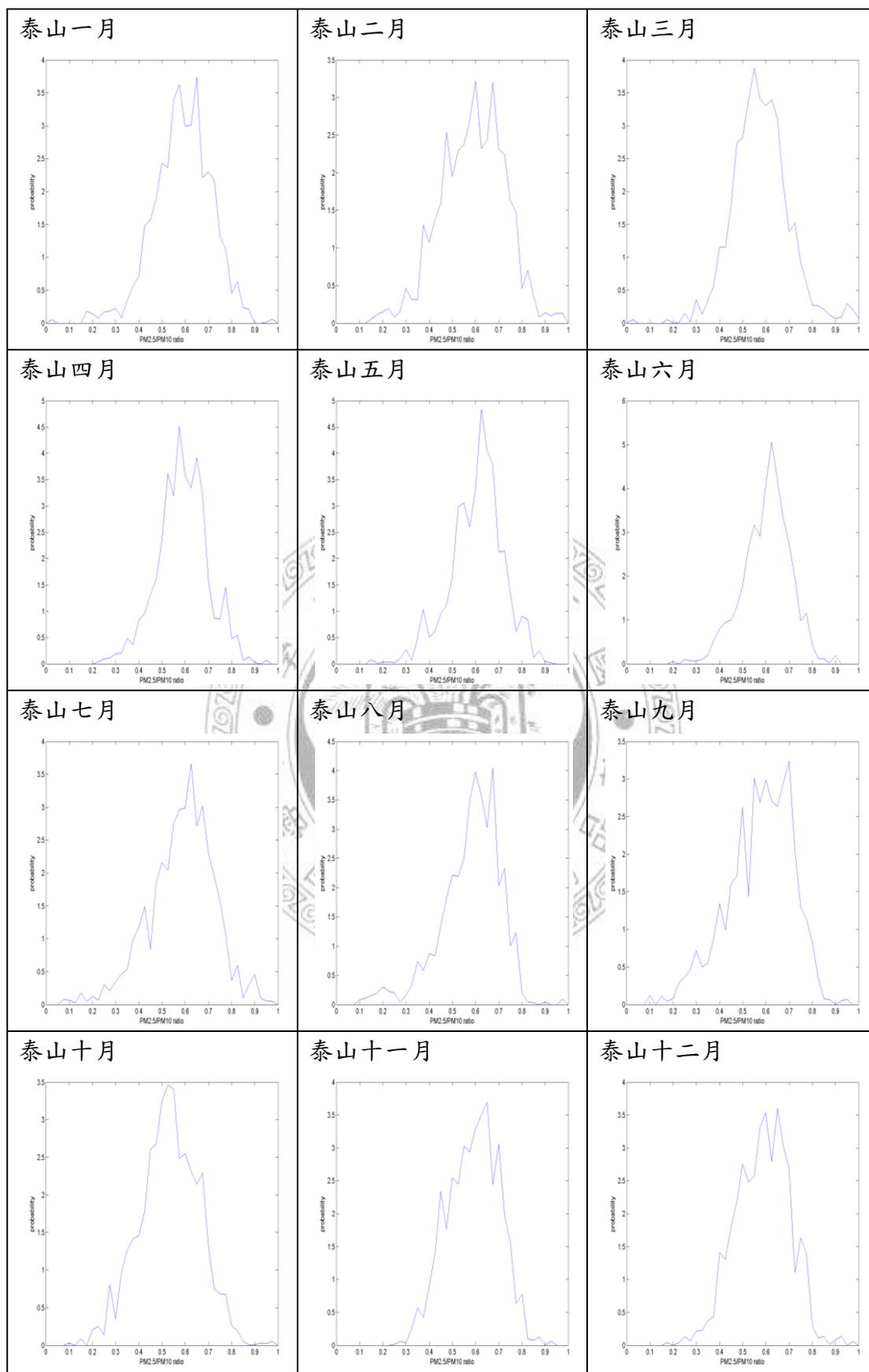
圖附 3-8 松山測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



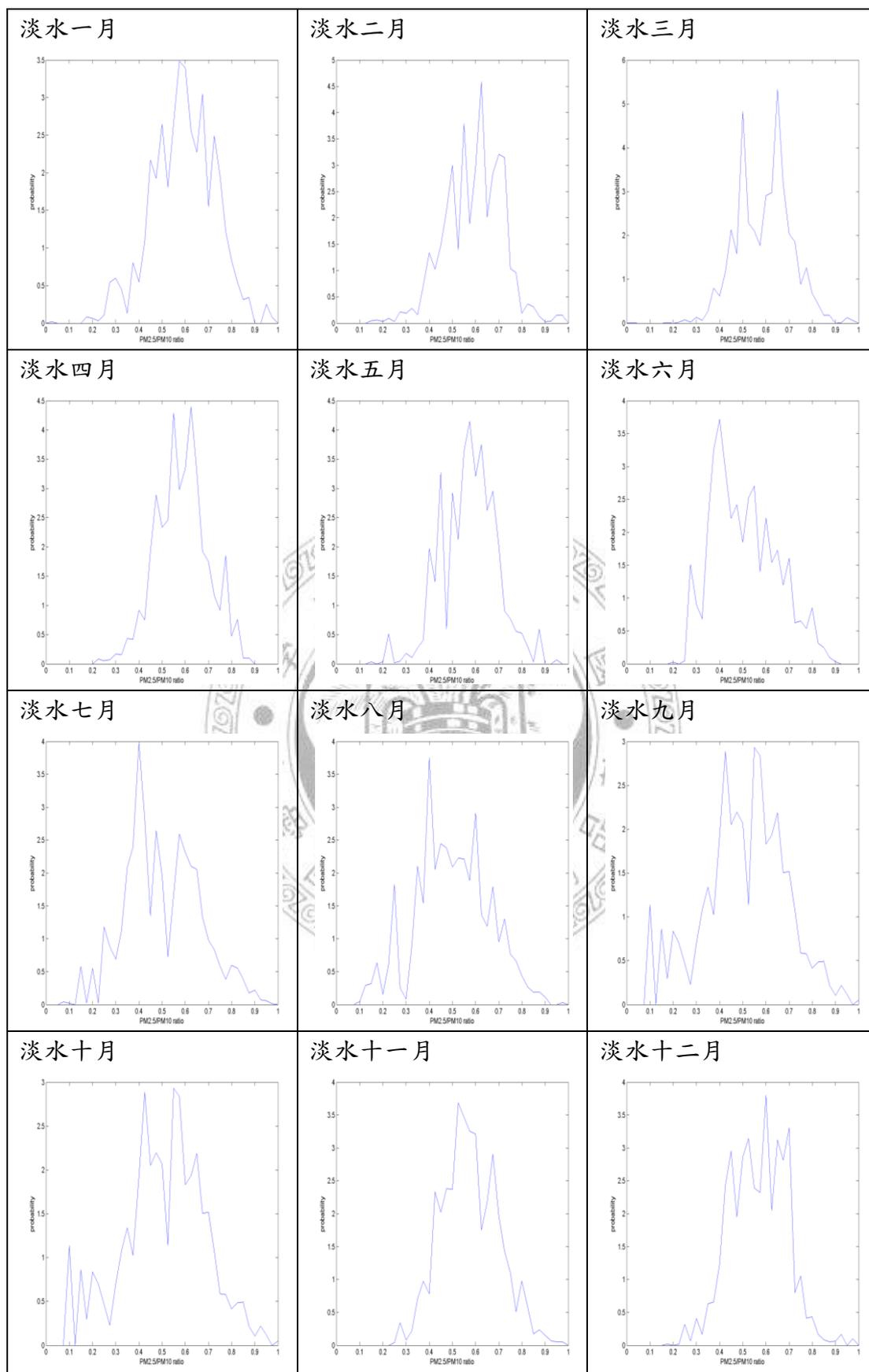
圖附 3-9 林口測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值之 PDF 圖



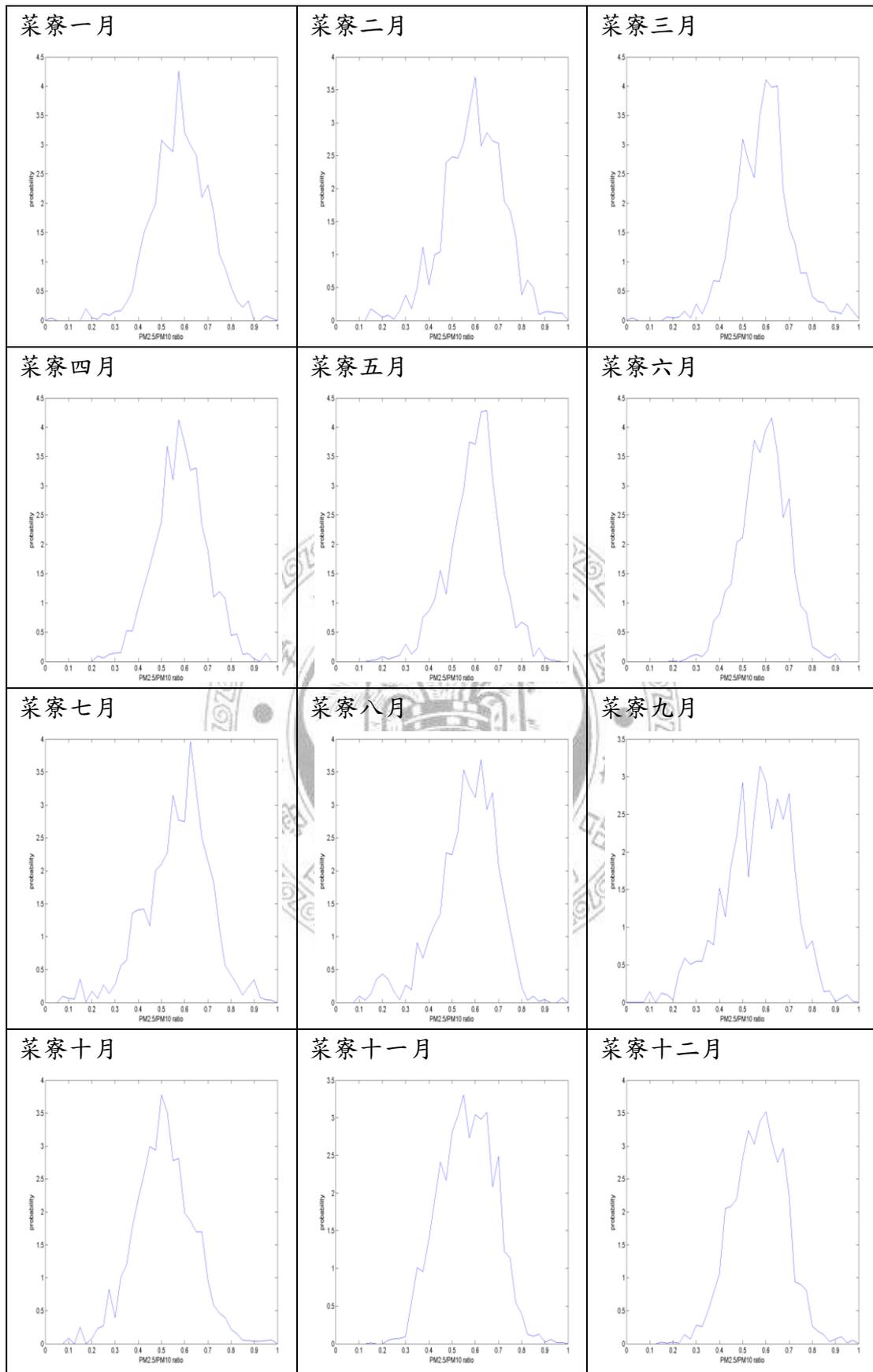
圖附 3-10 板橋測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比之 PDF 圖



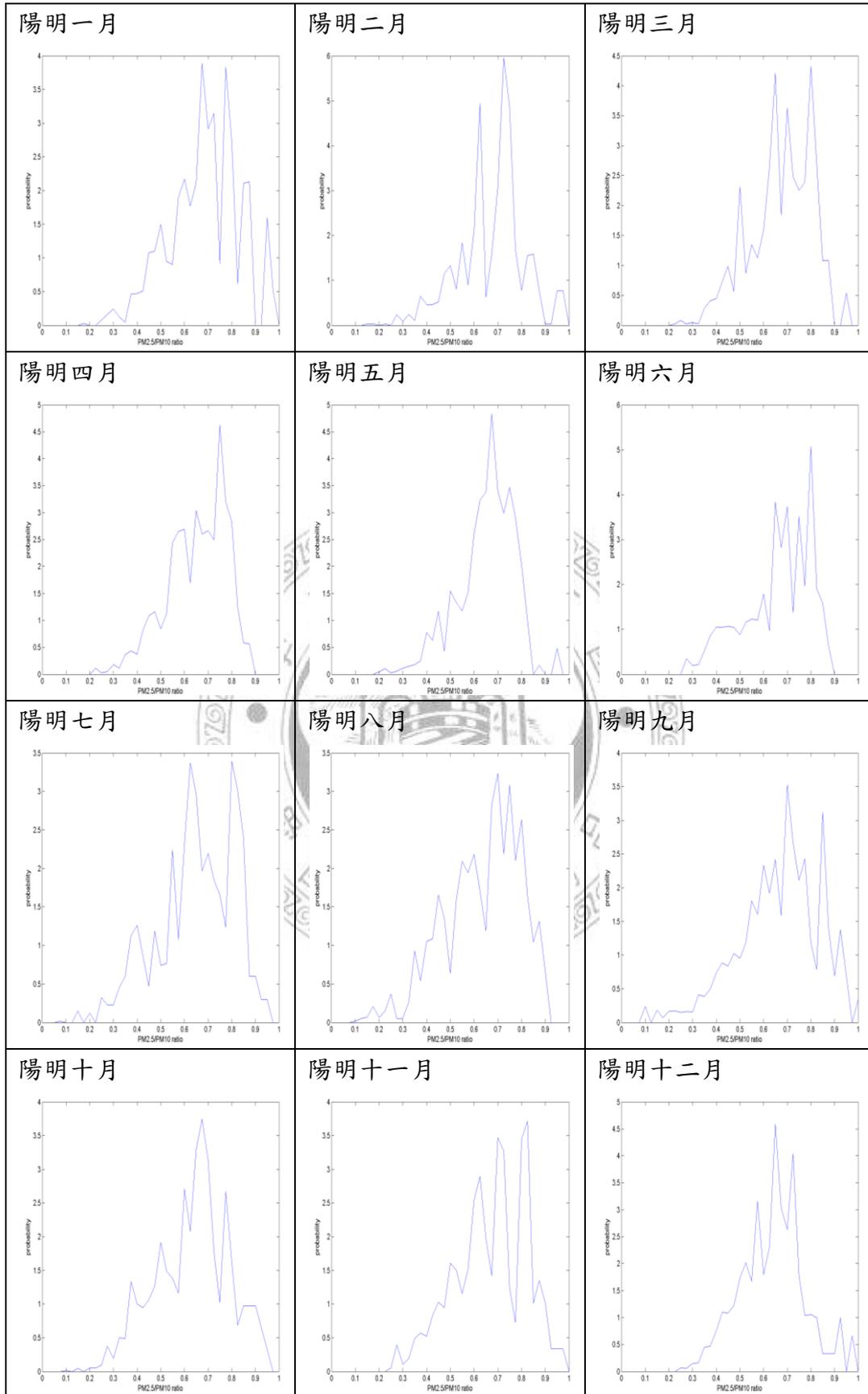
圖附 3-11 泰山測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



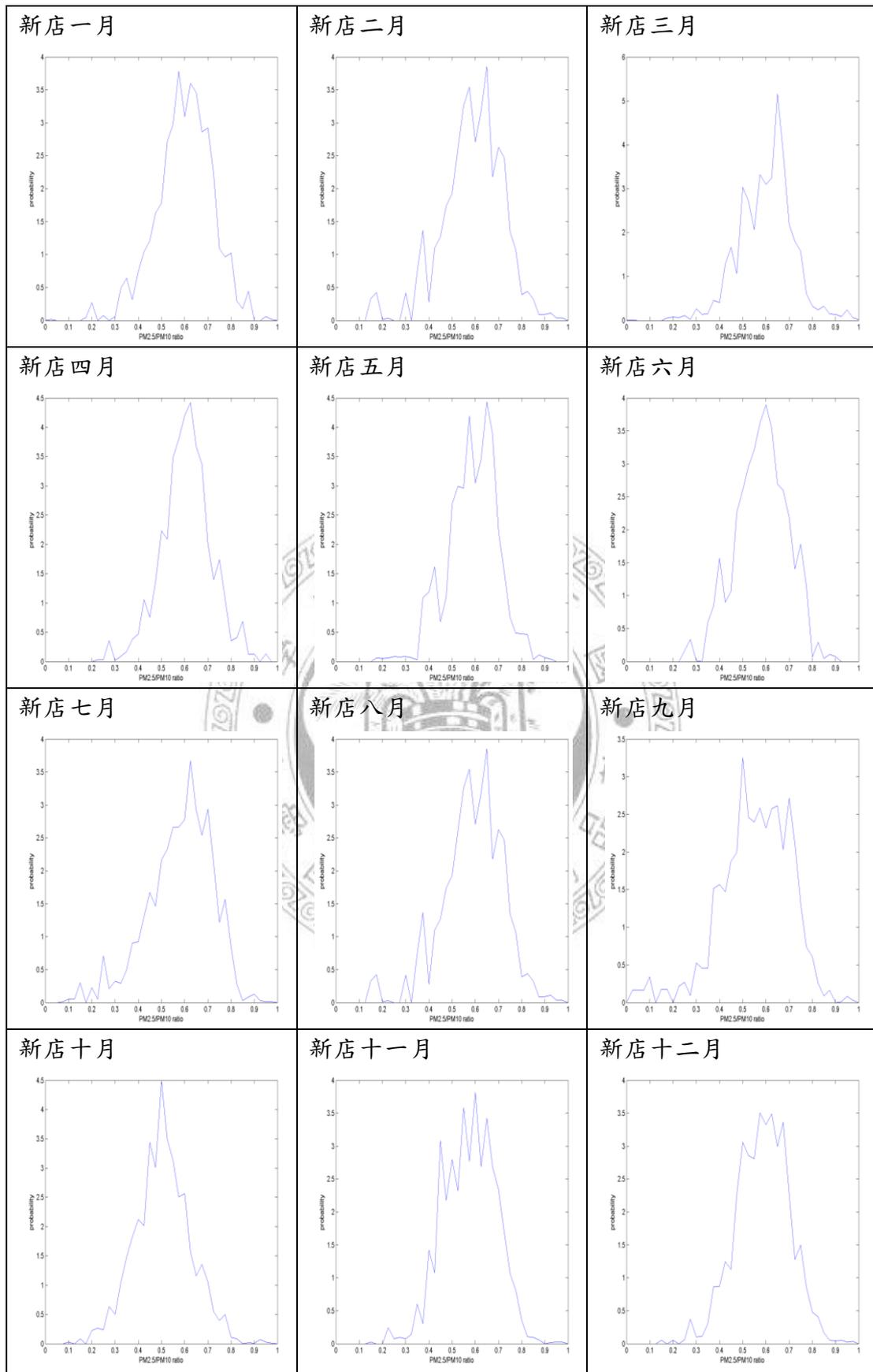
圖附 3-12 淡水測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



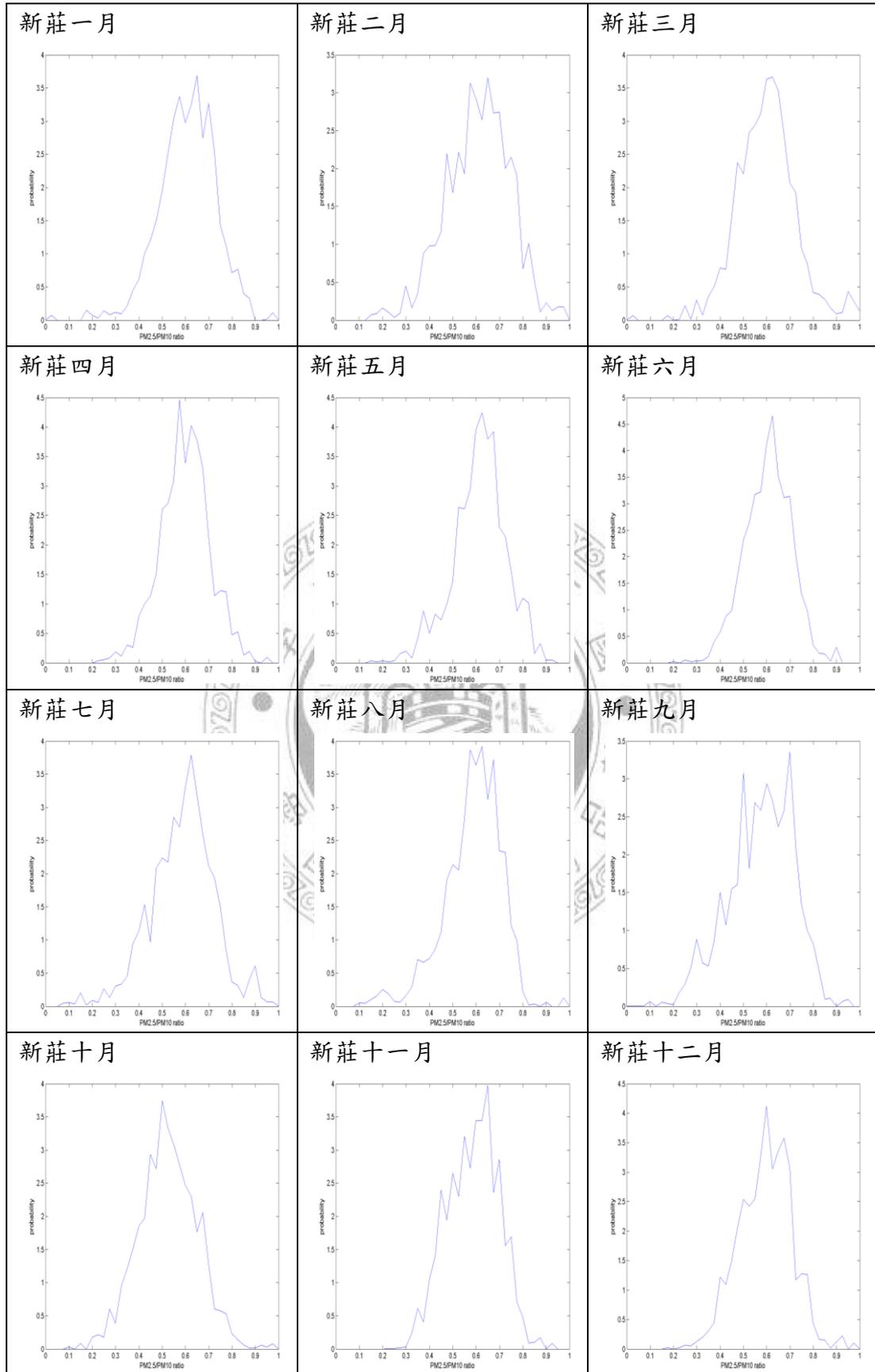
圖附 3-13 菜寮測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



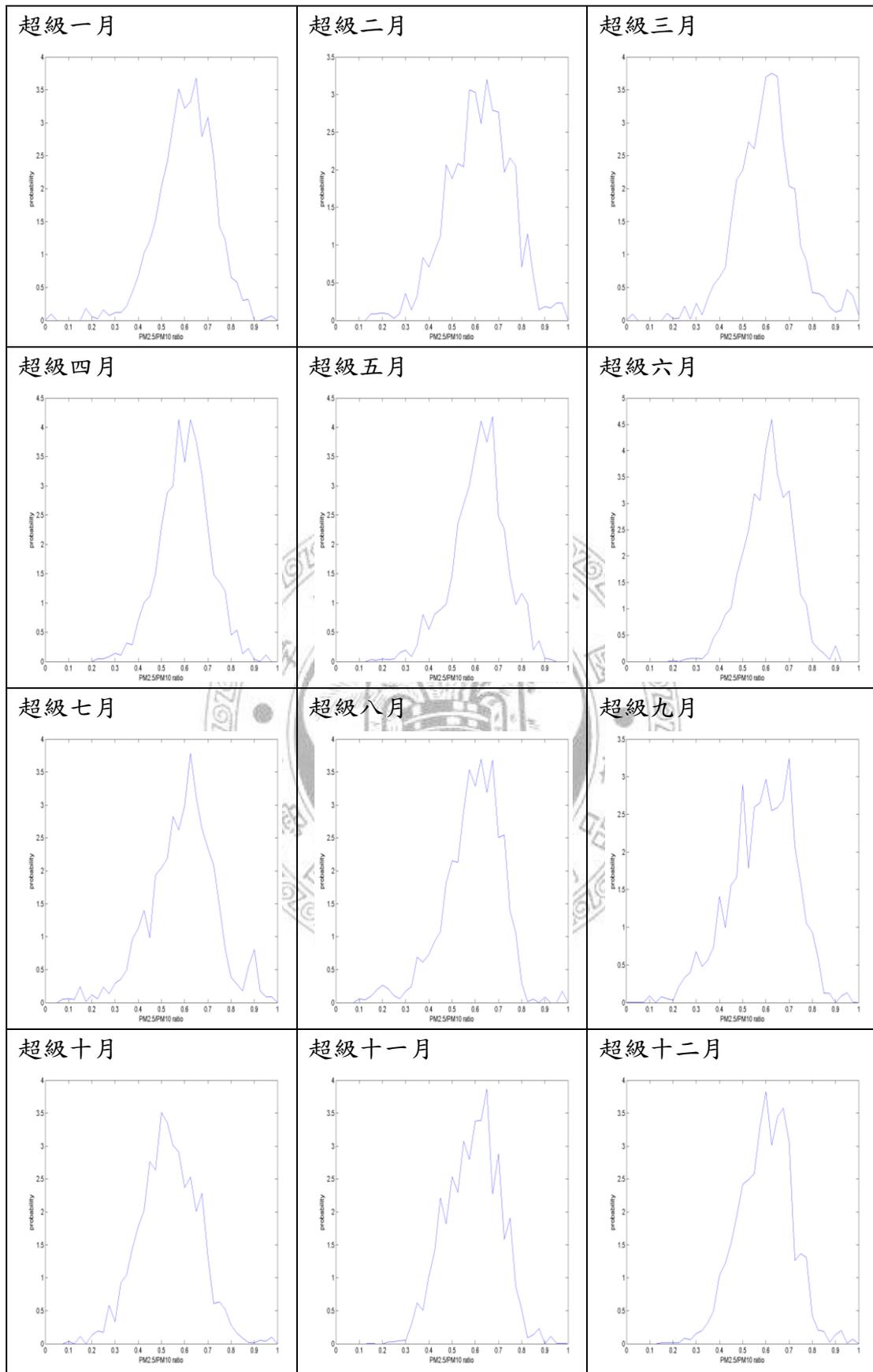
圖附 3-14 陽明測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



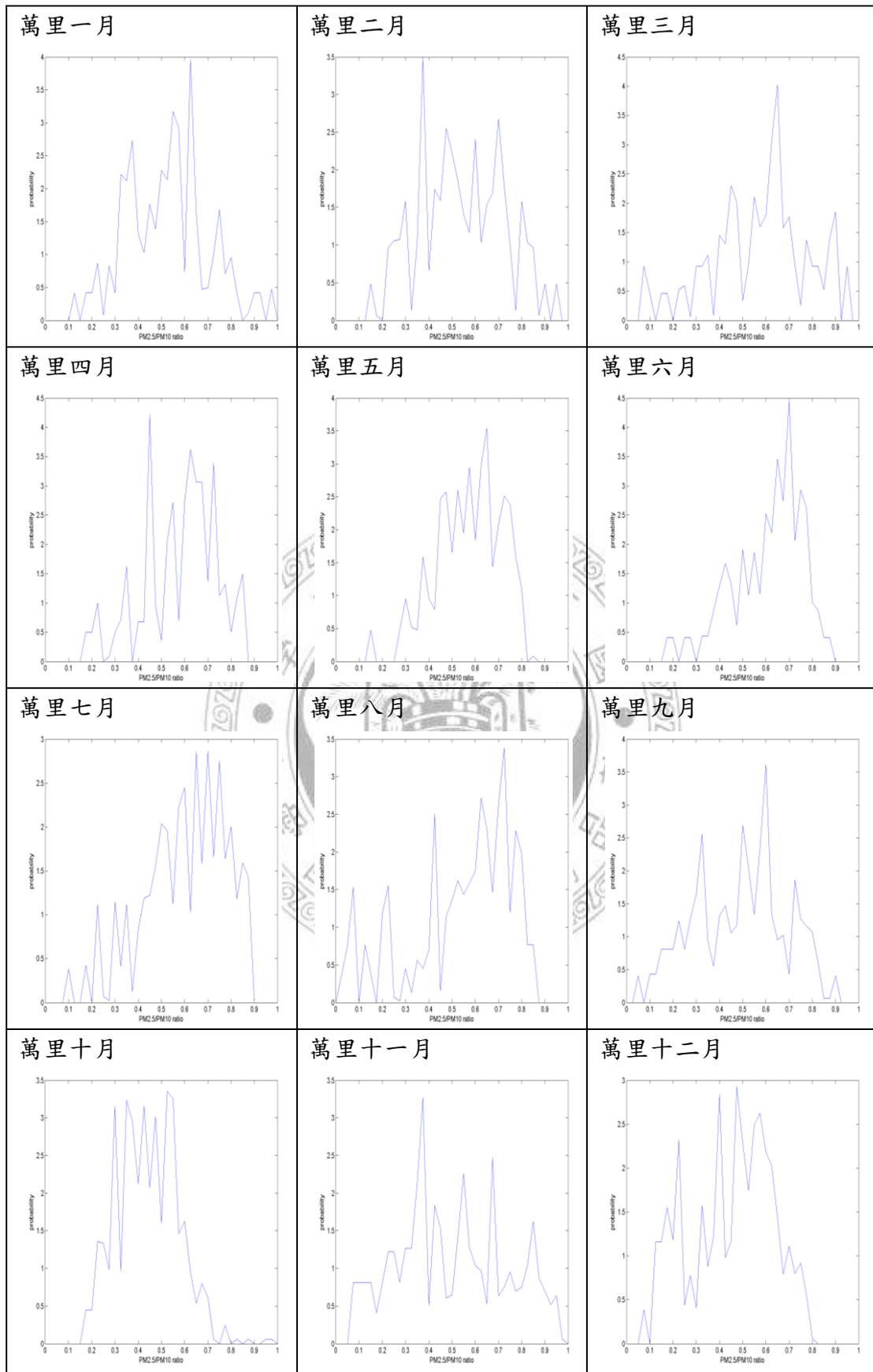
圖附 3-15 新店測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



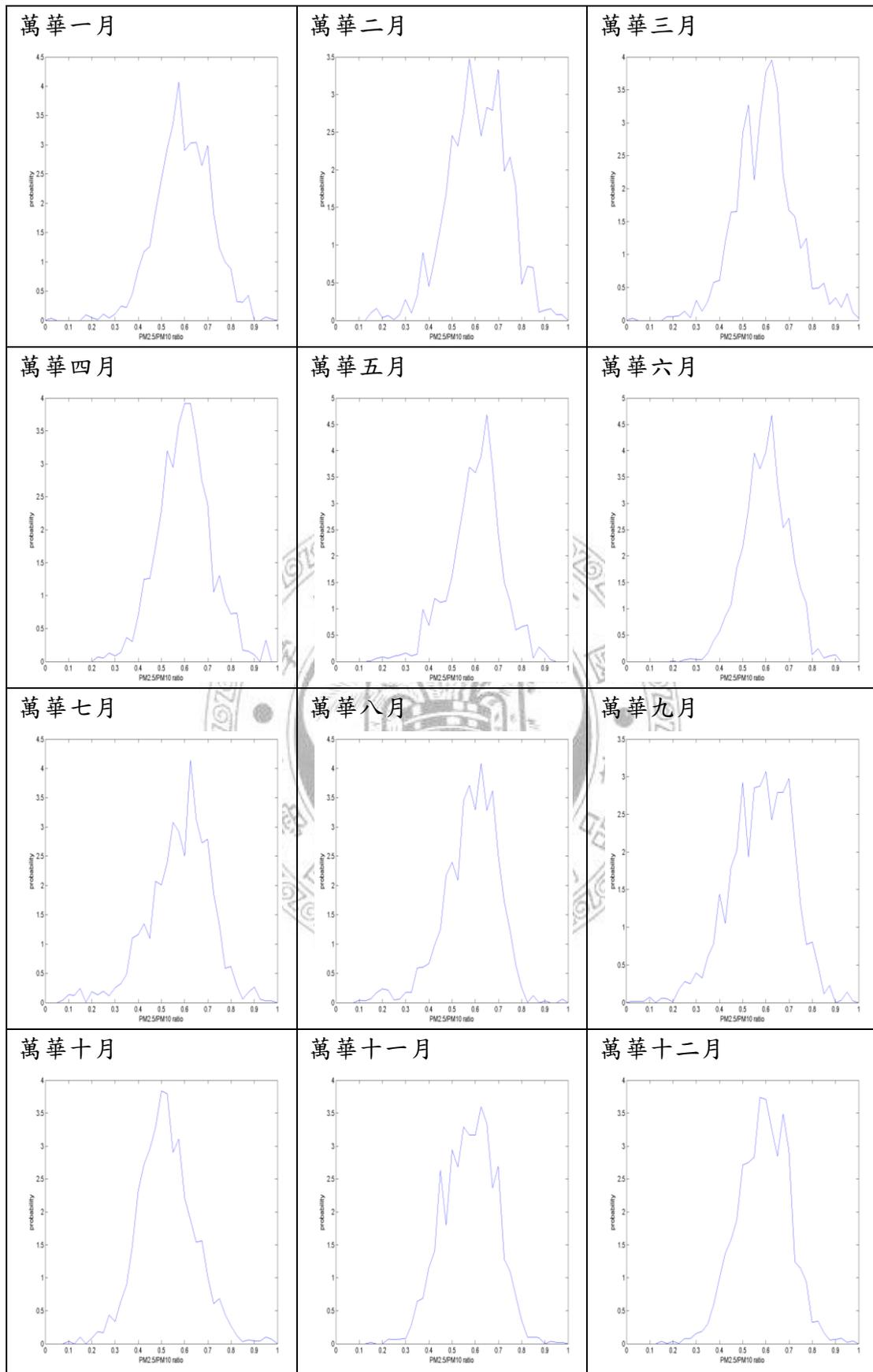
圖附 3-16 新莊測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比值之 PDF 圖



圖附 3-17 超級測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



圖附 3-18 萬里測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖



圖附 3-19 萬華測站 PM_{2.5}/PM₁₀ 比値之 PDF 圖