



國立臺灣大學工學院土木工程學系

碩士論文

Department of Civil Engineering

College of Engineering

National Taiwan University

Master Thesis

以隱馬爾可夫模型進行土壤分層

Underground Stratification Using Hidden Markov Model

蔡宗祐

Tsung-Yu Tsai

指導教授：卿建業 博士

Advisor: Jianye Ching, Ph.D.

中華民國 107 年 7 月

July, 2018

國立臺灣大學碩士學位論文
口試委員會審定書

以隱馬爾可夫模型進行土壤分層
Underground Stratification Using Hidden Markov
Model

本論文係蔡宗祐君 (R05521129) 在國立臺灣大學土木工程學系碩士班完成之碩士學位論文，於民國 107 年 07 月 11 日承下列考試委員審查通過及口試及格，特此證明

口試委員：

卿 建 業

(指導教授)

劉 家 男

王 瑞 斌

卿 建 業

劉 家 男

王 瑞 斌

系主任

謝 尚 賢

謝 尚 賢

(簽名)

誌謝



終於寫到這一節了！在完成這一本論文的過程中，受到許多人的幫助，以下逐一表達感謝之意。首先感謝指導老師 卿建業教授，在我入學找指導教授時，就親切歡迎我的加入，接著暑假親自幫我們加強統計與機率的知識，碩一下教導我們可靠度，碩二開始加速做研究。老師總是會一步步引導我們走正確的研究方向，並且在我們遇到問題時幫我們開導，在我們上台報告時，總是會仔細聽講，並點出我們研究或報告的不足之處。最後在畢業前，協助我完成研究與論文，可以說是幫助我最多的人，非常感謝這兩年的指導！

感謝暨南大學的劉家男教授，與中央大學的王瑞斌教授，遠道而來擔任我們的口試委員，認真聽我們的報告一整天，提出關鍵的問題與寶貴的意見，使我們的論文能修正得更完善，最後給予我們認可，非常感謝委員的指導！

感謝南韓慶北大學地質系的 Eungyu Park 博士與 Jina Jeong 博士，在我們寫信請求提供 GCMC 模型的電腦程式時，二話不說就提供給我們了，使我能夠以他們的理論為基礎，進行案例分析，如期完成研究；同樣感謝武漢大學水利水電工程科學國家重點實驗室的肖特(Te Xiao)博士，在我們寫信請求提供 category-based model 程式碼時，義不容辭地提供給我們，並且耐心回答我遇到的問題，雖然最後並沒有使用這個方法，但還是幫助我更了解 CMC 模型，非常感謝！

感謝卿門同學覲嘉、沅羲、馨儀、姿町，從碩零暑假一起訓練，到最後口試順利結束，這兩年我們同甘苦，共患難，一路互相支持走到最後，非常慶幸選了卿門，跟你們成為夥伴。也感謝卿門學弟映中、元勳、玟翰、俊廷，在你們入學之後，馬上就跟我們熟絡了，使學長學弟之間沒有隔閡，謝謝你們在口試時擔任記錄，也謝謝你們主辦畢業前的送舊宴，為我們研究生生活畫下完美句點。

感謝組務助教高宇學姐幫我們處理口試的繁瑣手續，並且總是熱心提醒我們什麼時候該繳交什麼文件，使我們的口試順利完成，沒有出任何問題。感謝大地組 R05 級的其他同學們，即使在這充滿壓力的研究生活，大家還是能找到一些小樂趣，一同歡笑，一同分享。感謝好友郁仁在上研究所之後舊雨重逢，與我互相分享研究生活的大小事，一起回去找高中同學，最後一起畢業。

最後感謝我的家人，總是在背後支持我，在我論文趕不出來時替我擔心，在我口試前全家為我加油，在論文完成後替我開心，有你們的支持才有這篇論文。


摘要



在工址調查的作業中，調查地下土層是相當重要的環節，因為了解土層分布就能了解地層承載力的強弱，主導後續工程之設計。調查地下土層的主要內容為取得地下土層的厚度、層面之高程與土層之土壤種類，傳統做法是進行標準貫入試驗(standard penetration test, SPT)，取出土壤樣本來判別層面與土壤種類。而圓錐貫入試驗 (cone penetration test, CPT)雖然無法取樣，但是也可以進行土壤分層，而且其施作起來比 SPT 更簡單、方便。CPT 資料經過計算後可以得到土壤行為指數 (soil behavior type index, I_c)，它被證實能根據其數值大小而有效地區分土壤種類，因此許多學者致力發展以 CPT 資料為基礎的土壤分層方法。

本研究發展了以隱馬爾可夫模型(hidden Markov model, HMM)配合吉布斯抽樣法(Gibbs Sampling)應用於土壤分層的分析方法，稱為 HMM 土壤分層法。做法為將土壤種類視為隱馬爾可夫模型的隱含狀態，將 I_c 視為模型之輸出序列，並以 I_c 作為分析資料，用一維穩態高斯隨機場(stationary Gaussian random field)描述其空間變異性。接著以貝氏定理(Bayes' theorem)為基礎，使用吉布斯抽樣法估算 I_c 之平均值(μ)與標準差(σ)，再根據 I_c 與其平均值、標準差，使用前向—後向遞迴(forward-backward recursions, FB recursions)找出每一點最可能的土壤種類，將上述步驟進行疊代計算以得到收斂的結果，以此方法找出土壤的種類與層面。最後以概似遞迴 (likelihood recursions)計算每一種分群數的似然性(likelihood)，以此找出最佳分群數。

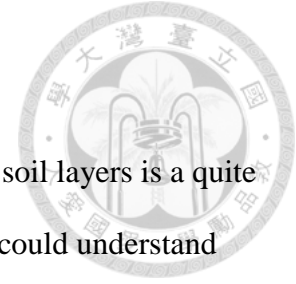
在案例分析方面，本研究使用南卡羅萊納州好萊塢(Hollywood, South Carolina)之現地 CPT 資料驗證 HMM 土壤分層法的結果，並與表現相當穩定的另一種一維土壤分層法——小波轉換調變極大值法(WTMM 法, Ching et al., 2015)進行比較與討論。結論為 HMM 土壤分層法的優點為分群數量可做 1~10 群的變化，而且能分析 I_c 的變化，自動將類似的土層歸類為一層。然而也發現其具有孤兒層問題、分層分數問題等問題需要後續的研究來解決。



本研究的第二部分為嘗試將 WTMM 法與 Park (2010)開發之廣義耦合馬爾可夫鏈(generalized coupled Markov chain, GCMC)模型結合，進行二維與三維土壤分層剖面預測之案例分析，藉此探索以 CPT 資料建立多維土壤分層模型之可行性，並分析了南卡羅萊納州好萊塢與南澳洲阿得雷德(Adelaide, South Australia)的 South Parklands 兩個案例，皆得到了合理的結果。

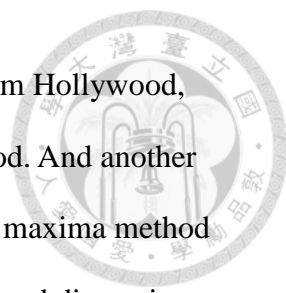
關鍵字：圓錐貫入試驗、土壤分層、隱馬爾可夫模型、土壤行為指數、吉布斯抽樣法、前向—後向遞迴

ABSTRACT



In the work of site investigation, investigating the underground soil layers is a quite important part. Once we know the distribution of the soil layers, we could understand the strength of stratum bearing capacity which leads the design of subsequent engineering project. The main contents of investigating underground soil layers are to obtain the thickness of the layers, the elevations of the interfaces and the types of the soils. The conventional way is to perform a standard penetration test (SPT) and take out the soil samples to identify the interfaces and the types of the soil layers. Although the cone penetration test (CPT) can not sample the soils, soil stratification still can be performed based on it. And CPT is more simple and convenient than SPT. Soil behavior type index (I_c), which has been proved to be able to distinguish soil types effectively according to its value, can be calculated from CPT data. Therefore, many scholars have devoted themselves to the development of soil stratification methods based in CPT data.

This study developed a method of soil stratification using the hidden Markov model (HMM) and Gibbs sampling, which is called HMM soil stratification method. The approach is to regard the soil types as the hidden states of the hidden Markov model, and to regard I_c as the output sequence of the model. Using I_c as the analytical data, describe the spatial variability of I_c with one-dimensional stationary Gaussian random field. Then based on Bayes' theorem, the mean (μ) and the standard deviation (σ) of I_c are estimated by Gibbs sampling. According to I_c and its mean and standard deviation, use forward-backward recursions (FB recursions) to find the most likely soil type at each point. The above steps are performed for iterative calculations to obtain convergent results, and the types and interfaces of the soil layers can be found by this method. Finally, the likelihood of each number of cluster is calculated by the likelihood recursions to find the optimal number of clusters.



In terms of case studied, this study used the in-situ CPT data from Hollywood, South Carolina, to verify the results of HMM soil stratification method. And another stable 1D soil stratification method—the wavelet transform modulus maxima method (WTMM method, Ching et al., 2015) was performed for comparison and discussion with HMM method. The conclusion is as following: the advantages of HMM soil stratification method is that the number of clusters can be changed from 1 to 10, and HMM can analyze the change of I_c and automatically classified similar soil layers into one layer. However, it was also found that the irrational thin layer problem and the cluster scores problem need to be addressed by subsequent studies.

The second part of this study is trying to combine the WTMM method with the generalized coupled Markov chain (GCMC) model developed by Park (2010). We conducted the case studies of the predictions of 2D and 3D soil stratification profiles. And we explored the feasibility of using CPT data to build a multidimensional soil stratification model and analyzed two cases in Hollywood and South Parklands in Adelaide, South Australia, respectively. Both cases have received reasonable results.

Keywords: cone penetration test (CPT), underground stratification, hidden Markov model, soil behavior type index, Gibbs sampling, forward-backward recursions

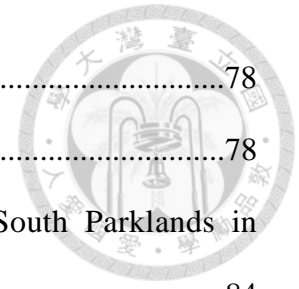
目錄



口試委員會審定書.....	i
誌謝.....	ii
摘要.....	iii
ABSTRACT.....	v
目錄.....	vii
圖目錄.....	x
表目錄.....	xvi
第一章 緒論.....	1
1.1 研究動機與目的.....	1
1.2 研究方法.....	2
1.3 本文內容.....	3
第二章 文獻回顧.....	4
2.1 地質分層.....	4
2.1.1 土壤行為指數 (soil behavior type, SBT, index).....	4
2.1.2 小波轉換調變極大值法 (wavelet transform modulus maxima method, WTMM method).....	6
2.1.3 學生檢定統計量法 (T ratio method).....	10
2.1.4 模糊方法 (Fuzzy approach).....	11
2.1.5 群法 (clustering).....	12
2.1.6 貝氏分析法 (Bayesian method).....	13
2.2 隱馬爾可夫模型回顧.....	16
2.2.1 一維穩態高斯隨機場 (one-dimensional stationary Gaussian random field).....	16
2.2.2 貝氏定理 (Bayes' theorem).....	19



2.2.3	共軛先驗 (conjugate prior).....	20
2.2.4	一維馬爾可夫鏈 (one-dimensional Markov chains).....	22
2.2.5	吉布斯抽樣法 (Gibbs sampling).....	25
2.2.6	隱馬爾可夫模型 (hidden Markov model, HMM).....	28
第三章	隱馬爾可夫模型土壤分層法.....	30
3.1	HMM 土壤分層法 (HMM soil stratification method).....	30
3.1.1	基本假設與初始值.....	30
3.1.2	吉布斯抽樣法更新參數.....	32
3.1.3	前向—後向遞迴 (forward-backward recursions, FB recursions).....	35
3.1.4	轉換機率矩陣的更新.....	39
3.1.5	似然遞迴 (likelihood recursion)與分群分數.....	40
3.1.6	HMM 土壤分層法使用流程與輸出結果.....	43
3.1.7	預燒期 (burn-in period)問題.....	45
3.2	多維土壤剖面預測.....	48
3.2.1	WTMM 法的延伸應用.....	48
3.2.2	回顧廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (generalized coupled Markov chain model, GCMC model).....	53
第四章	案例分析與討論.....	59
4.1	一維分層案例分析.....	59
4.1.1	第一現地：南卡羅萊納州好萊塢 (Hollywood, South Carolina).....	59
4.1.2	HMM 土壤分層法結果.....	60
4.1.3	WTMM 法結果.....	67
4.1.4	孤兒層問題.....	72
4.1.5	分群分數問題.....	74
4.1.6	HMM 土壤分層法與 WTMM 法的比較.....	74



4.2	二維分層案例分析.....	78
4.2.1	第一現地之二維分層預測.....	78
4.2.2	第二現地：南澳洲阿得雷德 South Parklands (South Parklands in Adelaide, South Australia).....	84
4.2.2	第二現地之二維分層預測.....	85
4.3	三維分層案例分析.....	90
4.3.1	第一現地之三維分層預測.....	90
4.3.2	第二現地之三維分層預測.....	98
4.3.3	第二現地之三維分層驗證.....	104
第五章	結論與建議.....	110
5.1	結論.....	110
5.1.1	HMM 土壤分層法.....	110
5.1.2	多維土壤剖面預測.....	111
5.2	建議.....	112
5.2.1	HMM 土壤分層法.....	112
5.2.2	多維土壤剖面預測.....	113
	參考文獻.....	114
附錄 A	公式推導.....	119
A.1	吉布斯抽樣法後驗分布公式推導.....	119
A.1.1	平均值 μ_i 之後驗超參數推導.....	119
A.1.2	變異數 σ_i^2 之後驗超參數推導.....	120
附錄 B	提問與答覆.....	121

圖目錄

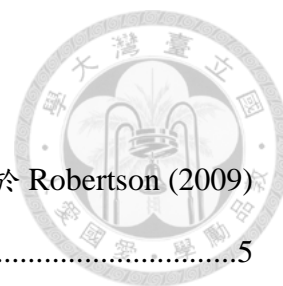


圖 2-1	以 CPT 為基礎的 SBTn 圖 (Robertson (1990)提出，並於 Robertson (2009)更新).....	5
圖 2-2	具有一個層面的模擬案例。(Ching et al., 2015) (a) I_c 圖 (b) 小波轉換連續頻譜 (c) 小波轉換離散頻譜.....	9
圖 2-3	WTMM 法應用真實案例的分層結果，其中底部層面為邊界誤判，分析時應剔除 (根據 Ching et al. (2015) WTMM 程式輸出圖) (a) I_c 鑽探資料與分層結果 (b) 每層的 SBT 土壤分類 (c) $ W_{I_c}(u,s) $ 頻譜圖與 WTMM 脊 (d) L-M 圖與 $p_{\text{jump}} = 0.5$ 線，紅圈代表潛在層面，藍叉代表雜訊。.....	9
圖 2-4	CPT 模糊方法土壤分類圖 (Zhang and Tumay, 1999).....	12
圖 2-5	CPT 資料的變異性示意圖 (Wang et al., 2013).....	16
圖 2-6	(a) 以隨機場描述土壤參數性質；(b) 估算垂直關聯性長度 δ (Phoon et al., 1995)	18
圖 2-7	一階馬爾可夫鏈.....	25
圖 2-8	二階馬爾可夫鏈.....	25
圖 2-9	n 個變數的吉布斯抽樣法步驟.....	27
圖 2-10	吉布斯抽樣法應用於高斯分佈之情況 (Bishop, 2006).....	27
圖 2-11	隱馬爾可夫模型示意圖.....	29
圖 3-1	(a) 人造之 I_c 隨深度 z 分布圖；(b) HMM 土壤分層法概念圖。.....	32
圖 3-2	I_c 參數 μ_i 與 σ_i 之吉布斯抽樣法更新順序.....	35
圖 3-3	三土層 I_c 模擬資料之似然遞迴分群分數.....	43
圖 3-4	HMM 土壤分層法結果；(a) 輸入資料 I_c 隨深度分布圖；(b) 由 (N-B) 條馬爾可夫鏈計算之土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。.....	45
圖 3-5	吉布斯抽樣法結果；(a) 參數 μ_i 與疊代次數 N 演變圖；(b) μ_i 與 σ_i 於 Gibbs sampling 中 (N-B) 次抽樣樣本分布圖。.....	45

圖 3-6	失敗之 HMM 土壤分層法結果；(a) 6 層之模擬 I_c 分布圖；(b) 只劃分了 5 層之種類機率演變圖，其中狀態 5 號未出現於任何深度；(c) 只劃分了 5 層之最高機率分層圖。.....	47
圖 3-7	分層失敗之參數 μ_i 與疊代次數 N 演變圖，其中 μ_5 一直處於預燒期狀態，不收敛。.....	47
圖 3-8	分層失敗之 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖，其中 (μ_5, σ_5) 一直處於預燒期狀態，不收敛。.....	48
圖 3-9	對某一土層進行 SBT 九分法之示範；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) SBT 土壤種類標示圖；(c) SBTn 圖與 F_t - Q_t 資料點在各區域之比例。.....	50
圖 3-10	依照圖 3-9(c) 各區資料數比例所繪出之 SBT 分層機率圖。.....	51
圖 3-11	四分法示意圖.....	51
圖 3-12	四分法結果；(a) 四分法土壤種類標示圖；(b) 四分法分層機率圖。.....	52
圖 3-13	三分法示意圖.....	52
圖 3-14	三分法分層機率圖。.....	53
圖 3-15	有採樣與未採樣資料之間兩種可能的子方向轉換 (Park, 2010)	58
圖 4-1	第一現地大小與鑽探計畫，白三角形為 CPT 孔位，黑圓點為搭配劈管取樣器之 SPT 孔位。(Bong and Stuedlein, 2017)	59
圖 4-2	截面 A-A' 處之地層剖面，其中 CPT 資料由連續線表示，SPT 資料由離散點表示。(Bong and Stuedlein, 2017)	60
圖 4-3	P1-1 之 I_c 資料的分群分數.....	62
圖 4-4	P1-1 的 3 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。.....	63
圖 4-5	P1-1 之 3 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖.....	63
圖 4-6	P1-1 的 4 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。.....	64

圖 4-7	P1-1 之 4 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖	64
圖 4-8	P3-1 之 I_c 資料的分群分數	65
圖 4-9	P3-1 的 5 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。	65
圖 4-10	P3-1 之 5 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖	66
圖 4-11	P3-1 的 6 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。	66
圖 4-12	P3-1 之 6 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖	67
圖 4-13	P1-1 之 WTMM SBT 九分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與 SBT 分類結果；(c) SBT 分層機率圖。	69
圖 4-14	P1-1 之 WTMM 四分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與四分法分類結果；(c) 四分法分層機率圖。	69
圖 4-15	P1-1 之 WTMM 三分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與三分法分類結果；(c) 三分法分層機率圖。	70
圖 4-16	P3-1 之 WTMM SBT 九分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與 SBT 分類結果；(c) SBT 分層機率圖。	70
圖 4-17	P3-1 之 WTMM 四分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與四分法分類結果；(c) 四分法分層機率圖。	71
圖 4-18	P3-1 之 WTMM 三分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與三分法分類結果；(c) 三分法分層機率圖。	71
圖 4-19	P5-1 的 4 群分層結果，可以發現 3 個孤兒層；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。	73
圖 4-20	P5-1 之 4 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖	73
圖 4-21	P1-1 孔土壤分層總比較；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) WTMM 法結果；(c) HMM 土壤分層法 3 群結果；(d) HMM 土壤分層法 4 群結果；(e) Bong and	

	Stuedlein (2017) SPT 搭配劈管取樣器分層結果。.....	76
圖 4-22	P3-1 孔土壤分層總比較；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) WTMM 法結果；(c) HMM 土壤分層法 5 群結果；(d) HMM 土壤分層法 6 群結果；(e) Bong and Stuedlein (2017) SPT 搭配劈管取樣器分層結果。.....	77
圖 4-23	截面 A-A'處之 WTMM 四分法分層結果。.....	80
圖 4-24	截面 A-A'處之 WTMM 三分法分層結果。.....	81
圖 4-25	截面 A-A'處之四分法二維 GCMC 土壤剖面預測結果。.....	81
圖 4-26	50 次模擬所計算之截面 A-A'處土壤種類出現機率圖；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土；(d) 4 號：礫質砂土。.....	82
圖 4-27	A-A'處三分法 2D GCMC 預測結果.....	83
圖 4-28	50 次模擬所計算之截面 A-A'處土壤種類出現機率圖；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土；(c) 3 號：礫質砂土。.....	83
圖 4-29	South Parklands 現地之垂直 CPT 鑽探佈局 (Jaksa, 1995).....	85
圖 4-30	South Parklands A5~K5 剖面之 WTMM 四分法結果；(a) 輸入 GCMC 之 11 孔 CPT 分層結果；(b) 連續 51 孔 CPT 分層結果。.....	87
圖 4-31	11 孔 CPT 進行四分法之二維 GCMC 土壤剖面預測結果。.....	88
圖 4-32	50 次模擬所計算之 A5~K5 剖面四分法土壤種類出現機率圖；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。.....	88
圖 4-33	South Parklands A5~K5 剖面之 WTMM 三分法結果；(a) 輸入 GCMC 之 11 孔 CPT 分層結果；(b) 連續 51 孔 CPT 分層結果。.....	89
圖 4-34	11 孔 CPT 進行三分法之二維 GCMC 土壤剖面預測結果。.....	89
圖 4-35	50 次模擬所計算之 A5~K5 剖面三分法土壤種類出現機率圖；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。.....	90
圖 4-36	好萊塢現地之四分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。.....	93
圖 4-37	好萊塢現地之四分法三維 GCMC 內部(截面 A-A')土壤剖面預測結果。...	93

圖 4-38	50 次模擬所計算之好萊塢現地外圍土壤種類機率圖(四分法)；(a) 1 號：黏土(b) 2 號：粉土(c) 3 號：砂土(d) 4 號：礫質砂土.....	94
圖 4-39	50 次模擬所計算之好萊塢現地內部土壤種類機率圖 (四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土；(d) 4 號：礫質砂土。.....	95
圖 4-40	好萊塢現地之三分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。.....	96
圖 4-41	50 次模擬所計算之好萊塢現地外圍土壤種類機率圖 (三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土；(c) 3 號：礫質砂土。.....	96
圖 4-42	好萊塢現地之三分法三維 GCMC 內部土壤剖面預測結果。.....	97
圖 4-43	50 次模擬所計算之好萊塢現地內部土壤種類機率圖 (三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土；(c) 3 號：礫質砂土。.....	97
圖 4-44	South Parklands 現地之四分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。.....	100
圖 4-45	50 次模擬所計算之 South Parklands 外圍土壤種類出現機率圖(四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。.....	100
圖 4-46	South Parklands 現地之四分法三維 GCMC 內部土壤剖面預測結果。.....	101
圖 4-47	50 次模擬所計算之 South Parklands 內部土壤種類出現機率圖(四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。.....	101
圖 4-48	South Parklands 現地之三分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。.....	102
圖 4-49	50 次模擬所計算之 South Parklands 外圍土壤種類出現機率圖(三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。.....	102
圖 4-50	South Parklands 現地之三分法三維 GCMC 內部土壤剖面預測結果。.....	103
圖 4-51	50 次模擬所計算之 South Parklands 內部土壤種類出現機率圖(三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。.....	103
圖 4-52	South Parklands 現地 C52、H53 兩鑽孔之 WTMM 四分法結果。.....	106
圖 4-53	50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 A5-K5 土壤種類出現機率圖(3D 四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。.....	106

圖 4-54	South Parklands 現地 F22、F73 兩鑽孔之 WTMM 四分法結果.....	107
圖 4-55	50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 F0-F10 土壤種類出現機率圖(3D 四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。.....	107
圖 4-56	South Parklands 現地 C52、H53 兩鑽孔之 WTMM 三分法結果.....	108
圖 4-57	50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 A5-K5 土壤種類出現機率圖(3D 三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。.....	108
圖 4-58	South Parklands 現地 F22、F73 兩鑽孔之 WTMM 三分法結果.....	109
圖 4-59	50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 F0-F10 土壤種類出現機率圖(3D 三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。.....	109

表目錄



表 2-1	土壤行為類型(SBT)與 I_c 的關係表 (Robertson, 2009).....	6
表 4-1	WTMM 法與 HMM 土壤分層法之性能比較.....	77
表 4-2	對好萊塢現地資料進行四分法二維 GCMC 分析之輸入參數.....	79
表 4-3	對好萊塢現地資料進行三分法二維 GCMC 分析之輸入參數.....	80
表 4-4	對 South Parklands 現地資料進行四分法二維 GCMC 分析之輸入參數.....	86
表 4-5	對 South Parklands 現地資料進行三分法二維 GCMC 分析之輸入參數.....	87
表 4-6	對好萊塢現地資料進行四分法三維 GCMC 分析之輸入參數.....	91
表 4-7	對好萊塢現地資料進行三分法三維 GCMC 分析之輸入參數.....	92
表 4-8	對 South Parklands 現地資料進行四分法三維 GCMC 分析之輸入參數.....	99
表 4-9	對 South Parklands 現地資料進行三分法三維 GCMC 分析之輸入參數.....	99

第一章 緒論



1.1 研究動機與目的

在工址調查的作業中，調查地下土層是相當重要的環節，因為了解土層分布就能了解地層承載力的強弱，主導後續工程之設計。調查地下土層的主要內容為取得地下土層的厚度、層面之高程與土層之土壤種類，傳統方法是以標準貫入試驗 (standard penetration test, SPT) 搭配劈管取樣器取樣，依照現場工程師的經驗與目視判斷層面位置與土壤種類，要求準確的話則將土樣送至實驗室進行實驗，依照統一土壤分類法進行分類。而圓錐貫入試驗 (cone penetration test, CPT) 雖然無法取樣，但是也可以進行土壤分層，因其簡單、方便，可取得接近連續又多個方面的地下數值資訊，更有文獻 (Ku et al., 2010) 指出 CPT 數據能幫助工程師進行土壤分類與其他動態資訊的量測，加強了 CPT 在土壤分層中的可行性。

現行以 CPT 資料進行土壤分層的方法有很多：有以訊號處理技術判斷土層層面之小波轉換調變極大值法 (WTMM 法) (Ching et al., 2015)；有的以統計方法實作 (Campanella and Wickremesinghe, 1991)；有的以模糊方法實作 (Zhang and Tumay, 1999)；有使用分群演算法 (clustering) 的 (Liao and Mayne, 2007)；有以貝氏分析法為主軸的 (Wang et al., 2013)；上述方法都各自有其優缺點，其中的 WTMM 法以 CPT 資料之土壤行為指數 (SBT index, I_c) 作為訊號來分析，其尋找層面的能力有出色的表現，惟判斷土壤種類的方法較簡單。

對工程師而言常用的分層多是以土壤行為指數 I_c 為依據，過去文獻已驗證 I_c 能有效的判別土壤的行為差異 (Ku et al., 2010)，因此如果仔細分析 I_c 的變化，對 I_c 資料依照指定的群數進行分群，同時考慮其相鄰資料的關聯性，就能合理地根據土壤種類的差異分群，並且依照分群結果劃分土層，所以我們決定開發新的一維土壤分層方法，以隱馬爾可夫模型 (hidden Markov model, HMM) 為主架構，描述土壤種類與 I_c 之間的關係，以穩態隨機場描述 I_c 的自相關性，以 Gibbs sampling 方法估算不同土壤種類的參數，建立一個能根據 I_c 自動區分土層的模型，分析出



土層位置與土壤種類。


另一方面，大地工程師更關心整個現地的分層，然而實務中施作的鑽探數量通常是有限且分散的，為了得到整體地層模型，需要知道鑽探地點的一維土壤分層，還有連接鑽探處與非鑽探處之間關係的地層分析模型，一維土壤分層可以由前幾段討論的方法分析鑽探資料求得，而預測鑽探處與未鑽探處之間的土層則分為兩種代表模型，第一種是以邊界為基礎的模型，其預測未鑽探處之土層邊界深度 (Nobre and Sykes, 1992)；第二種是以種類為基礎的模型，其預測未鑽探處之土壤種類 (Elfeki and Dekking, 2001, 2005; Li, 2007; Park et al., 2007; Park, 2010; Qi et al., 2016)；Xiao et al. (2017)結合上述兩種模型，開發啟發式的組合模型。

其中屬於種類基礎的 Park (2010)之廣義耦合馬爾可夫模型 (GCMC 模型)，它可以透過已知的數個一維土壤分層結果，進行二維或三維土壤分層剖面預測，結果相當穩定，因此我們希望能結合 WTMM 法與 GCMC 模型，進行兩個案例分析，探索以 CPT 資料建立多維土壤分層模型的可行性。

1.2 研究方法

在一維土壤分層的方面，本研究先回顧過去以 CPT 資料進行土壤分層的演算法之觀念與實作流程，整理過去方法的優缺點；而後，回顧與隱馬爾可夫模型 (HMM)相關之文獻，將 HMM 隱含狀態之概念套用到土壤分類當中，將輸出序列之概念應用到土壤行為指數 I_c 中，發展能根據 I_c 產生隱馬爾可夫鏈之演算法。隨後發展 Gibbs sampling 估算分群資料之參數，推導出能考慮 CPT 資料空間自相關性之條件機率方程式，發展評估最佳分群數的方法，最後將這些算法串聯在一起，形成 HMM 土壤分層法。在案例分析方面，使用南卡羅萊納州好萊塢之現地 CPT 資料驗證 HMM 土壤分層法的成果，並與表現相當穩定的小波轉換調變極大值法 (WTMM 法) (Ching et al., 2015)進行比較與討論。

在二維及三維土壤分層預測案例分析方面，採用 WTMM 法作為一維土壤分層



的方法，修改其對於土壤分類的定義，發展出土壤四分法與三分法；多維土壤分層預測方面採用廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (GCMC 模型) (Park, 2010)，它能根據已知的分層資訊進行二維或三維之土壤剖面預測，因此結合 WTMM 法與 GCMC 模型將能實現根據 CPT 資料建立多維土壤分層模型。最後使用好萊塢與南澳洲阿德雷德 South Parklands 現地資料進行兩處二維及三維土壤分層之案例分析，評估將兩種方法結合之表現。

1.3 本文內容

本文共分為五章，以下將各章內容概述如下：

第一章緒論，說明本研究之動機與目的，以及研究的概念與方法，最後簡述各章內容。

第二章文獻回顧，展示文獻上其他地質分層方法與概念，以及與隱馬爾可夫模型相關的主要文獻。

第三章隱馬爾可夫模型土壤分層法 (HMM soil stratification method)，描述 HMM 土壤分層法之基本假設、使用理論與分析方法。第二部分描述小波轉換調變極大值法 (WTMM 法) 的延伸應用，回顧廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (GCMC)，並說明多維土壤剖面預測的分析方法。

第四章案例分析與討論，展示 HMM 土壤分層法分析現地資料的表現，並與 WTMM 法的結果比較，還有說明 HMM 土壤分層法在現地分析遭遇的問題。第二部分展示 WTMM 法搭配 GCMC 模型進行多維土壤分層預測之兩個案例分析，輔佐說明與討論。

第五章結論與建議，針對本文的研究成果，提出數個主要的結論與相關之建議。

第二章 文獻回顧



2.1 地質分層

2.1.1 土壤行為指數 (soil behavior type, SBT, index)

Robertson (1990, 2009)提出以 CPT 為基礎的正規化土壤行為類型(normalized soil behavior type, SBTn)圖表，如圖 2-1，它是以現地土壤的力學行為(像是強度、勁度、壓縮性和排水)為基礎對土壤進行分類，分成 9 種土壤行為類型(SBT)，而非直接根據土壤的物理特徵(如粒徑分布和塑性)來分類。使用 SBTn 圖時必須根據以下兩個正規化參數 (Robertson, 2009)：

$$Q_{tn} = [(q_t - \sigma_{v0}) / P_a] \times C_N \quad (2.1)$$

$$F_r(\%) = 100 \times f_s / (q_t - \sigma_{v0}) \quad (2.2)$$

其中所求的 Q_{tn} 為正規化錐尖阻抗， F_r 為正規化套管摩擦； q_t 為 CPT 之修正孔隙水壓後的錐尖阻抗，算法為 $q_t = q_c + u_2(1-a)$ ，其中 q_c 為錐尖阻抗， u_2 為貫入孔隙水壓(緊接在錐尖後面)， a 是錐面積比； f_s 為 CPT 之套管摩擦力； P_a 為一大氣壓力(= 101.3 kN/m²)； σ'_{v0} 與 σ_{v0} 為有效與總覆土壓力； C_N 為有效覆土壓力的修正係數：

$$C_N = \left(\frac{P_a}{\sigma'_{v0}} \right)^n \quad (2.3)$$

其中 n 為 0.5~1 的修正指數，其值視 SBT 而定，偏黏土時， n 靠近 1，偏砂土時， n 靠近 0.5 (Robertson, 2009)：

$$n = \min \left(0.381 \times I_c - 0.05 \times \frac{\sigma'_{v0}}{P_a} - 0.15, 1.0 \right) \quad (2.4)$$

Idriss 與 Boulanger (2008)建議 C_N 不可超過 1.7：

$$C_N = \min \left[\left(\frac{P_a}{\sigma'_{v0}} \right)^n, 1.7 \right] \quad (2.5)$$

根據所求得之 Q_{tn} 與 F_r ，Robertson and Wride (1998)提出能配合 SBTn 圖的土壤行為指數 I_c (SBT index, I_c)：

$$I_c = \sqrt{[3.47 - \log(Q_{tn})]^2 + [\log(F_r) + 1.22]^2} \quad (2.6)$$

I_c 與 SBTn 圖的關係如表 2-1 所示，可以發現當 I_c 值愈大則該土壤愈偏向黏土，愈小則愈偏向砂土，Robertson and Wride (1998) 建議可以用 $I_c = 2.6$ 當作大概的界線判斷砂土與黏土，大於 2.6 則認為該土壤偏向黏土，小於 2.6 則偏向砂土，但是經驗顯示這個劃分並非總是有效。

I_c 被證實能有效區別土壤種類 (Ku et al., 2010)，在土層的層面能反映出大跳躍，而在均質的土層中則呈現小尺度震盪，因此我們可以利用此特性，將 I_c 當作判斷土壤種類與土層層面的重要依據。

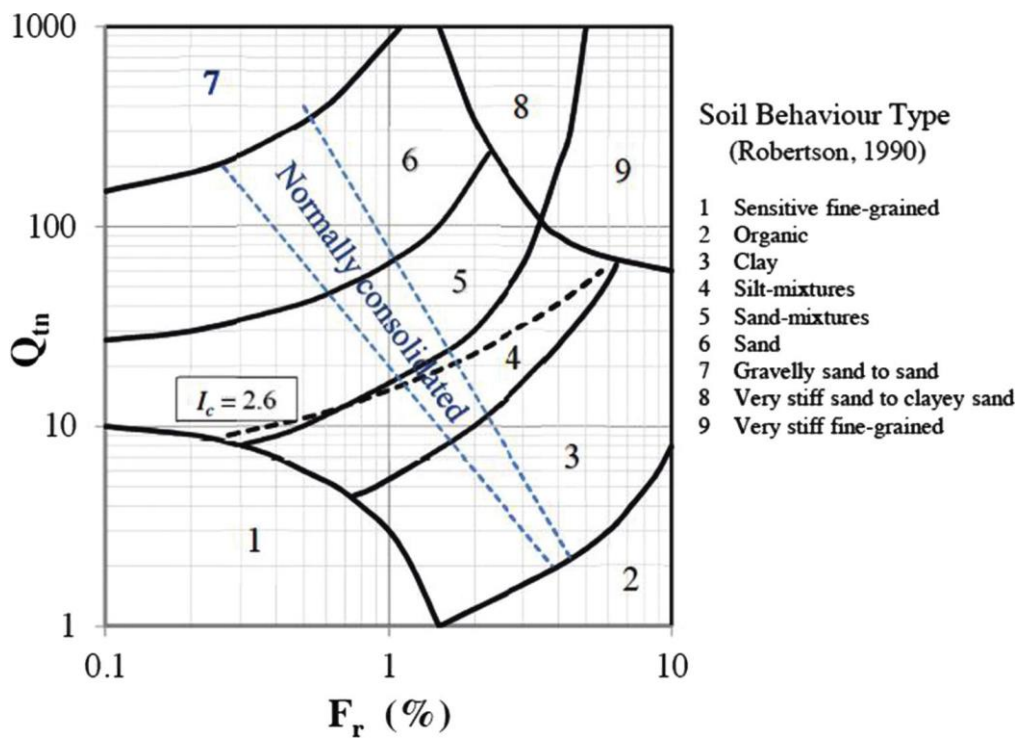


圖 2-1 以 CPT 為基礎的 SBTn 圖

(Robertson (1990) 提出，並於 Robertson (2009) 更新)

表 2-1 土壤行為類型(SBT)與 I_c 的關係表 (Robertson, 2009)

土壤行為指數(I_c)	區域(SBTn)*	土壤行為類型(SBT)
$I_c < 1.31$	7	礫質砂土
$1.31 < I_c < 2.05$	6	砂土: 純砂~粉土質砂
$2.05 < I_c < 2.60$	5	砂土混合物: 粉土質砂~砂質粉土
$2.60 < I_c < 2.95$	4	粉土混合物: 黏土質粉土~粉土質黏土
$2.95 < I_c < 3.60$	3	黏土
$I_c > 3.60$	2	有機土: 泥炭土

*對照圖 2-1 中的區域。

2.1.2 小波轉換調變極大值法 (wavelet transform modulus maxima method, WTMM method)

小波轉換調變極大值法, 簡稱 WTMM 法 (Ching et al., 2015; 王俊翔, 民 105), 是一種基於土壤行為指數 I_c 的土壤分層方法, 它的基本概念非常簡明: 土層層面位置可以被認為就在 I_c 剖面線發生變化的那一點, 並且自動地被識別出來。這個方法能夠精確地找出 I_c 剖面線中變化點的位置, 並且輸出與工程師視覺上及直覺上相同的土壤分層剖面圖, 而且計算速度非常快。有關 WTMM 的原理我們回顧如下。

連續小波轉換:

連續小波轉換 (continuous wavelet transform, CWT) 原本是應用於訊號處理、系統識別或影像壓縮的一種技術, WTMM 法將它應用到地質分層的問題中, 把 I_c 當作輸入的訊號值, 因此 CWT 被改寫成:

$$WI_c(u,s) = \int_0^D I_c(z) \times \psi_{u,s}(z) dz \quad (2.7)$$

其中 $WI_c(u,s)$ 為訊號的轉換頻譜, z 為深度變數, D 為貫入總深度, $\psi_{u,s}(z)$ 為母小波 (mother wavelet), u 為調變數 (modulation), 控制母小波中心位置, s 為尺度 (scale), 控制母小波寬度。

母小波的函數種類有很多, 而最受關注的母小波是多次微分的高斯函數:



$$\psi(z) = \frac{(-1)^m}{\sqrt{2\pi}} \times \frac{d^m[\exp(-z^2/2)]}{dz^m} \quad (2.8)$$

$$\psi_{u,s}(z) = s^{-1/2} \times \psi\left(\frac{z-u}{s}\right) \quad (2.9)$$

其中 WTMM 法採用 $m = 1$ 的高斯微分函數 (the Gaussian derivative)，因為其在地質分層應用的表現比其他微分階乘的函數更好。

快速傅立葉轉換：

理論上訊號應連續，但是實際上 I_c 為間距 2 公分或 5 公分的離散數據點所組成的，因此無法如(2.7)式那樣進行連續的積分，實作上 WTMM 法採用快速傅立葉轉換 (fast Fourier transform, FFT)及其反轉換實行之。首先，將 I_c 訊號增廣成 2^p 長度的二元冪次序列 (dyadic sequence)，則 I_c 與母小波 $\psi_{u,s}$ 可以被轉換至頻率域：

$$\hat{I}_c(k\Delta\omega) = \sum_{n=0}^{2^p-1} I_c(n\Delta z)\exp(-i2\pi kn/2^p) \quad k = 0, \dots, 2^p - 1 \quad (2.10)$$

$$\hat{\psi}_{u,s}(k\Delta\omega) = \sum_{n=0}^{2^p-1} \psi_{u,s}(n\Delta z)\exp(-i2\pi kn/2^p) \quad k = 0, \dots, 2^p - 1 \quad (2.11)$$

其中 Δz 為 I_c 數據的間距， $2^{p-1} \leq D/\Delta z < 2^p$ ， $i = \sqrt{-1}$ ， $\Delta\omega = 2\pi/2^p$ 。

透過快速傅立葉轉換之技術，可以有效地計算出 WI_c 值：

$$WI_c(n\Delta z, s) = \sum_{k=0}^{2^p-1} \hat{I}_c(k\Delta\omega) \cdot \hat{\psi}_{u,s}(k\Delta\omega)^* \cdot \exp(i2\pi kn/2^p) \quad (2.12)$$

$$n = 0, \dots, 2^p - 1$$

其中*表示其共軛複數。

小波轉換調變極大值：

從圖 2-2(c)中可以觀察到：不同大小的尺度 s 下，都有一個顯著的 $|WI_c|$ 局部極大值，這些局部極大值的組合則被稱為小波轉換調變極大值 (WTMM)，而這些不同尺度之下的頻譜極大值所連成的線稱為 WTMM 脊 (WTMM ridge)，對於每一個跳躍都會產生一個脊，如圖 2-2(b)、(c)中的紅虛線。WTMM 分層法即是運用 WTMM 對於資料中的跳躍會有 WTMM 脊的性質，來判識土壤層面的位置。



層面與雜訊 WTMM 脊之差異：

如圖 2-3(c)所示，我們可以發現， I_c 在真實層面的跳動會產生 WTMM 脊（圖中的紅實線），空間變異的雜訊也會產生 WTMM 脊（藍虛線），兩者的差別在於：

(1) 雜訊 WTMM 脊比較短，其在大尺度下會消退，而層面 WTMM 脊較長，在大、小尺度都能存在；(2) 對同一尺度而言，層面 WTMM 脊的頻譜值 $\log(|WI_c(u,s)|)$ 皆比雜訊 WTMM 脊的高出許多；(3) 雜訊 WTMM 脊的頻譜值在大尺度時會趨近於零，層面的則不會。因此如何有效地區分層面 WTMM 脊與雜訊 WTMM 脊是 WTMM 分層法的重要議題。

層面機率估計：

為了區分層面與雜訊 WTMM 脊，WTMM 法定義了兩個重要參數 L 與 M：

1. $L = \log(s_{\max})$ ，為 WTMM 脊所能存在的最大尺度對數值，用來量化 WTMM 脊的長度之指標。
2. $M = [\log(|WI_c(u,s_1)|), \dots, \log(|WI_c(u,s_{\max})|)]$ 之算術平均值，為對數頻譜值的平均值，用來量化 WTMM 脊的高度之參數。

最後經過資料庫訓練與邏輯回歸法，得到層面判斷式：

$$p_{\text{jump}} = P(\text{jump}) = \frac{1}{1 + \exp[-(4.398L + 3.429M + 5.025)]} \quad (2.13)$$

其中 p_{jump} 表示該 WTMM 脊在 I_c 剖面線上的位置為一個真實層面的機率值，Ching et al. (2015) 建議以 0.5 當門檻值來劃分層面與雜訊。L-M 圖與 p_{jump} 線如圖 2-3(d) 所示。

最後依照層面結果，計算每層中的資料點 (F_r, Q_{tn}) 在圖 2-1 中的位置，以最多資料點數的區域分類為該層的 SBT 土壤種類，如圖 2-3(b) 所示。

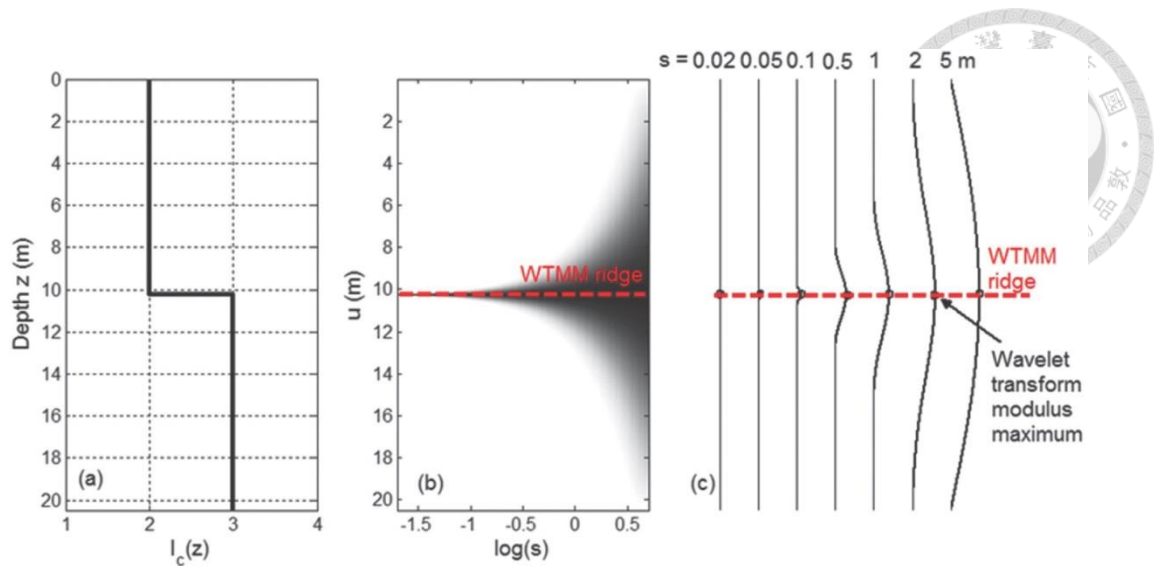


圖 2-2 具有一個層面的模擬案例。(Ching et al., 2015)

(a) I_c 圖 (b) 小波轉換連續頻譜 (c) 小波轉換離散頻譜

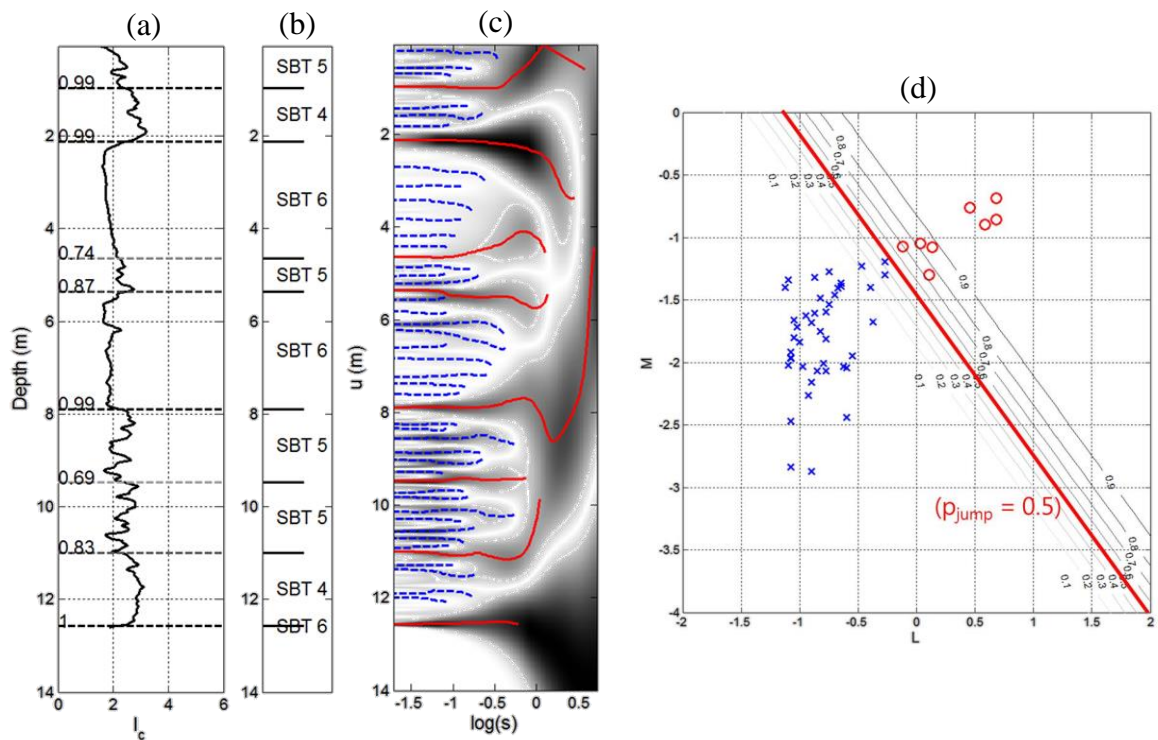


圖 2-3 WTMM 法應用真實案例的分層結果，其中底部層面為邊界誤判，分析時應剔除 (根據 Ching et al. (2015) WTMM 程式輸出圖) (a) I_c 鑽探資料與分層結果 (b) 每層的 SBT 土壤分類 (c) $|W_{I_c}(u,s)|$ 頻譜圖與 WTMM 脊 (d) L-M 圖與 $p_{\text{jump}} = 0.5$ 線，

紅圈代表潛在層面，藍叉代表雜訊。



2.1.3 學生檢定統計量法 (T ratio method)

學生檢定統計量法為應用學生檢定中的統計量 T 於地質分層的方法，此法由 Campanella and Wickremesinghe (1991) 提出，其核心概念為：兩個均質土層若是一層(在統計學中視為同一個母體)，則其 CPT 資料(如 q_t 、 I_c)的平均值應為相同，所以如果應用學生檢定法 (student T test) 則有以下虛無假設：

$$H_0: \mu_1 = \mu_2 \quad ; \quad H_1: \mu_1 \neq \mu_2 \quad (2.14)$$

其中 μ_1 、 μ_2 為土層 CPT 資料樣本的平均值。

應用此法在地質分層中，首先必須要決定窗尺寸 (window size)，通常訂為 1 到 2 公尺，並個別計算上窗與下窗資料的樣本變異數：

$$\begin{cases} \sigma_1^2 = \frac{1}{n_1-1} \sum_{i=1}^{n_1} [(I_c)_i - \overline{(I_c)}_1]^2 \\ \sigma_2^2 = \frac{1}{n_2-1} \sum_{i=1}^{n_2} [(I_c)_i - \overline{(I_c)}_2]^2 \end{cases} \quad (2.15)$$

其中 n_1 、 n_2 為上窗和下窗的總資料點數， $\overline{(I_c)}$ 為上窗和下窗中資料的樣本平均數。

再來定義合併變異數 (pooled variance) 與 T 統計量：

$$\gamma_\omega^2 = \frac{n_1\sigma_1^2 + n_2\sigma_2^2}{n_1 + n_2 - 1} \quad (2.16)$$

$$T = \frac{\overline{(I_c)}_1 - \overline{(I_c)}_2}{\gamma_\omega} \sqrt{\frac{n_1 n_2}{n_1 + n_2}} \quad (2.17)$$

如果 T 統計量超過門檻值，則推翻虛無假設，並推斷上、下窗的土層為不同土壤種類，即可判定窗中點為一土層交界面，反之則無法推翻現虛無假設，並接受現狀；在現今相關文獻中，並無建議使用的門檻值，而不同的案例適用的門檻值與窗尺寸可能會有所不同，因此使用者在使用此法時需要測試表現最佳的門檻值與窗尺寸。



2.1.4 模糊方法 (Fuzzy approach)

模糊邏輯 (Fuzzy logic)與模糊方法從 1960 年代開始便發展至今，常應用於人工智慧、自適控制、信號及資訊處理、不確定性事件決策模型等工程科技發展中。而在基於 CPT 鑽探的土壤分層議題中，也可以看到相關的文獻研究 (Zhang and Tumay, 1996; Zhang and Tumay, 1999)。

Zhang and Tumay (1996)提出 U 系統 (U system)與統一土壤分類參數的關係；1999 年更進一步提出應用模糊方法於基於 CPT 的土壤分層架構，並沿用 U 系統的概念，將土壤概分為三種：高可能性砂土 (high probably sand, HPS)、高可能性粉土 (high probably silt, HPM)以及高可能性黏土 (high probably clay, HPC)；主要的分層特徵為土壤行為參數 U (soil behavior unit)，再依照他們提出的分類圖(如圖 2-4)與公式，可供使用者辨別土壤種類，進而辨別土壤層面。使用者可以選擇 $\ln(Q_t)$ 或 $\ln(F_r)$ 作為主要的分層指標 (即採用 $u = \ln(Q_t)$ 或 $\ln(F_r)$)，而分類公式如下：

$$\mu_s(u) = \begin{cases} 1.0 & u > 2.6575 \\ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{u - 2.6575}{0.834586}\right)^2\right] & u \leq 2.6575 \end{cases} \quad (2.18)$$

$$\mu_m(u) = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{u - 1.35}{0.724307}\right)^2\right] \quad -\infty < u < \infty \quad (2.19)$$

$$\mu_c(u) = \begin{cases} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{u + 0.1775}{0.86332}\right)^2\right] & u \geq 0.1775 \\ 1.0 & u < 0.1775 \end{cases} \quad (2.20)$$

透過上述的圖與統計經驗式可以決定各點的土壤種類，以及大致的土壤層面位置。模糊方法的優點為可以透過現地數據中獲得的門檻值局部校準來建立新舊之間的橋樑，可以讓使用者意識到過渡區或混合地層造成的誤判地質分層的存在與解釋，還有透過其靈活的格式，可以整合其他現地的土壤行為性質，為多種土壤工程預測增加基礎分類的價值。而缺點為理論的發展過於複雜，使用的土壤分類系統也與常用的 CPT 土壤分類系統不同，分析時考慮的特徵只有一個，往往無法完美地分層，在使用上還是需要使用者人工確認層面位置。

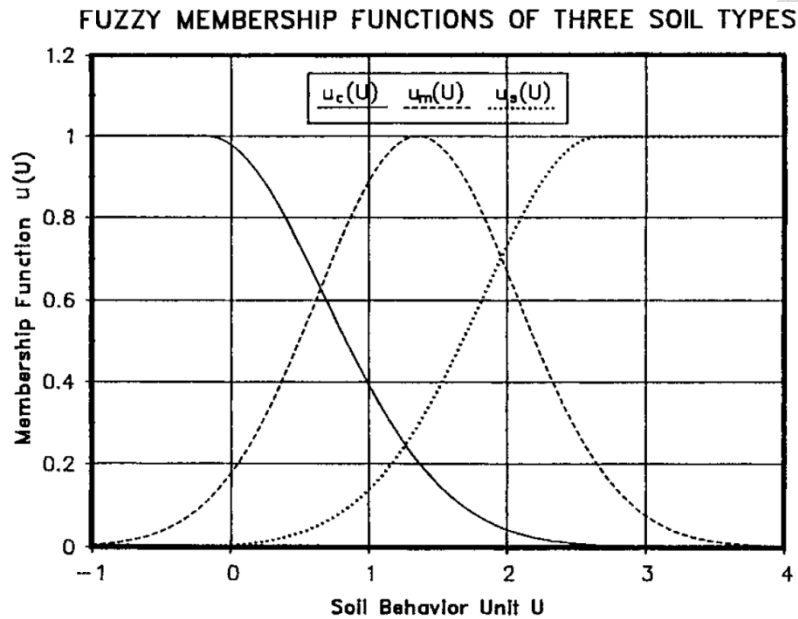


圖 2-4 CPT 模糊方法土壤分類圖 (Zhang and Tumay, 1999)

2.1.5 群法 (clustering)

群法是一種數值統計方法，用於從大量數據中發現相同特徵的資料點，並將它們分為數群，通常同一分群的資料點會有相同的特徵，而與其他分群的資料點的關聯性較低；群法對於大量物件或個體的分類是非常有用的工具，每個物件都有一些特徵可以用數學方法描述，它可以揭示數據中固有的關聯性。群法在應用上可以被開發成不同的演算法，也可以依照不同的需求，被應用在各種領域中，如生物學、醫學和社會科學。

Liao and Mayne (2007)提出一個以 CPT 資料為基礎，應用群法於地質分層的方法，以下說明該方法之流程與概念。正規的電子圓錐貫入試驗可以量測地下土壤的三種數據：修正孔隙水壓後之錐尖阻抗 q_t 、套管摩擦力 f_s 與貫入孔隙水壓 u_2 ，可依照 Robertson (1990)的方法，將其正規化成：正規化錐尖阻抗 Q_{tn} 、正規化套管摩擦 F_r 與正規化超額孔隙水壓 B_q ，以此作為土壤分類的依據，故此法正是以這三個正規化參數當作分層的主要特徵。

此法的基本概念是：同一種類的土壤，應有相似的 Q_{tn} 、 F_r 與 B_q ；若以數學的

角度說明，即為在 Q_m 、 F_r 、與 B_q 所組成的三維空間中，兩個點位(或兩群)如果土壤種類相同，其距離應相較於不同種類的土壤點位(或群)近，在 Liao 與 Mayne 的方法中，距離的定義為歐幾里得距離 (Euclidean distance)，兩群的距離由兩群的形心位置決定。實際情況下， Q_m 和 F_r 通常大於 B_q 非常多，計算 Q_m - F_r - B_q 空間中的距離會讓 B_q 的貢獻因為其他兩個向度而縮小，所以在此方法中，採用 $\ln(Q_m)$ - $\ln(F_r)$ - B_q 空間中的距離為分群特徵，也就是：

$$L_{ij} = \sqrt{[\ln(Q_{m,i}) - \ln(Q_{m,j})]^2 + [\ln(F_{r,i}) - \ln(F_{r,j})]^2 + [B_{q,i} - B_{q,j}]^2} \quad (2.21)$$

實作群法的演算法很多，Liao and Mayne (2007)建議使用階級演算法 (hierarchical algorithm)，其基本概念為：起初每一點皆為一群，尋找空間中距離最近的兩群(點)，並將其歸為新的一群，以其兩群的形心為新群，再依次尋找距離最近的兩群，合併成新的群，直到總群數達到標的為止，故使用此演算法進行分群必須由使用者決定目標總群數，Liao and Mayne (2007)建議選在 8 至 15 群為佳。

群法分層的優點為：它可以檢測出土壤性質改變所導致的 CPT 資料微妙差異，其中該差異是視覺檢查或其他可用的解釋技術不容易發現的。而群法的缺點為：建議的目標總群數並非通用於所有案例，使用者還是需要個別選定，往往耗費許多時間與精神，還有此法「土壤種類相同」是「 $\ln(Q_m)$ - $\ln(F_r)$ - B_q 空間距離很近」的充分非必要條件，意即即使兩群在 $\ln(Q_m)$ - $\ln(F_r)$ - B_q 空間中的距離很近，也不代表兩者必定為同一種土壤。

2.1.6 貝氏分析法 (Bayesian method)

Wang et al. (2013)提出以貝氏分析 (Bayesian analysis)為主架構實作地質分層的方法。貝氏分析在各領域中已被廣泛應用，其理論發展具有一定的複雜度，為了不模糊焦點，本節只討論其 Wang 等人應用在地質分層上的操作方法，不深入討論貝氏理論。

首先令 CPT 資料組 ξ 為：



$$\xi = \begin{bmatrix} \ln(F_r) \\ \ln(Q_{tn}) \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

則第 n 層資料點屬於同一層的機率應為：

$$p(\xi_n | N) = \sum_{j=1}^9 P_{ST,j}(\xi_n | N) \quad (2.23)$$

其中 N 為土層總數，應在分析前給定； $P_{ST}(\cdot)$ 為同為一類土壤的機率，因 Robertson (2009) 提出之土壤分類系統中共分九種土壤，故共有九個機率相加。

同為一類土壤的機率 P_{ST} 則以每一點都為同一類土壤的機率相乘：

$$P_{ST,j}(\xi_n | N) = \prod_{i=1}^{nn} P_{ST,j}(\xi_{n,i} | N) \quad (2.24)$$

其中 nn 為該層的資料總點數。

雖然根據圖 2-1 可以將每筆 CPT 資料歸類成所屬的土壤種類，但無法避免的，所觀測到的 CPT 資料仍有不確定性 (如圖 2-5 示意)，如空間變異性，量測不確定性等等。根據 maximum entropy principle (Jaynes, 2003)，每筆資料的不確定性可以聯合高斯機率密度函數模擬 (Sivia and Skilling, 2006)；以每筆資料為中心的高斯模型可定義為：

$$p(\xi | \sigma) = \frac{1}{2\pi\sigma_{F_r}\sigma_{Q_{tn}}} \exp \left\{ -\frac{[\ln(F_r) - \ln(F_r)_i]^2}{2\sigma_{F_r}^2} - \frac{[\ln(Q_{tn}) - \ln(Q_{tn})_i]^2}{2\sigma_{Q_{tn}}^2} \right\} \quad (2.25)$$

其中 σ 為：

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{F_r} \\ \sigma_{Q_{tn}} \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

在(2.25)式的定義之下，每筆資料屬於某一類土壤的機率可由此積分而得：

$$P_{ST,j} = \iint_j p(\xi | \sigma) d\xi \quad j = 1, 2, \dots, 9 \quad (2.27)$$

其積分區域依圖 2-1 中各土壤所屬區域的面積而定。

在貝氏分析的架構下，依照資料更新不確定性的模型 (updating model) 可定義為：



$$p(\Omega_N | \xi, N) = \frac{p(\xi | \Omega_N, N) p(\Omega_N | N)}{p(\xi | N)} \quad (2.28)$$

其中 $\Omega_N = [\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N]$ ， $p(\xi | \Omega_N, N)$ 為似然函數 (likelihood function)，由下式計算：

$$p(\xi | \Omega_N, N) = \prod_{n=1}^N p(\xi_n | \sigma_n, N) \quad (2.29)$$

$p(\Omega_N | N)$ 為先驗分布函數 (prior distribution function)，可由圖 2-1 定義：

$$p(\Omega_N | N) = \prod_{n=1}^N p(\sigma_n | N) \quad (2.30)$$

其中 $p(\sigma_n | N)$ ：

$$p(\sigma_n | N) = \begin{cases} \left(\frac{1}{1.33}\right)\left(\frac{1}{1.99}\right) & \sigma_{Fr} \in [0, 1.33], \sigma_{Qm} \in [0, 1.99] \\ 0 & \text{o/w} \end{cases} \quad (2.31)$$

在給定總層數 N 之下，最大化(2.28)式可得到該模型 M_N 所有的層面位置。此處要進行 $N \times 9$ (9 種土壤) 個二維度的積分 (求取該層為同一層的機率)，也需求解 $N-1$ 維的最佳化問題 ($N-1$ 個土層交界面)，其中的計算量已經相當可觀；此處尚未完成整個議題，還必須決定最有可能之總層數，必須求解各模型的證據機率 (evidence)：

$$p(\xi | N) = \int p(\xi | \Omega_N, N) p(\Omega_N | N) d\Omega_N \quad (2.32)$$

重複上述計算，直到所訂之最大總層數為止，選出證據機率最大的模型，即可估得總土層數與各土層交界面之位置。

(2.32)式是一個 $2N$ 維的積分，若實際的地下土壤有 6 層，則必須進行 12 維的積分，要能求得精準的積分數值，將需要相當龐大計算量；整個分析必須從單層的計算，持續進行至最大總層數，若最大總層數為 6 層，則必須進行二維度、四維度.....，直到十二維度的積分，背後的計算量將會一直累加，而運算的效率也會持續減緩，要應用在實務操作上恐有困難，是此法之應用缺點。

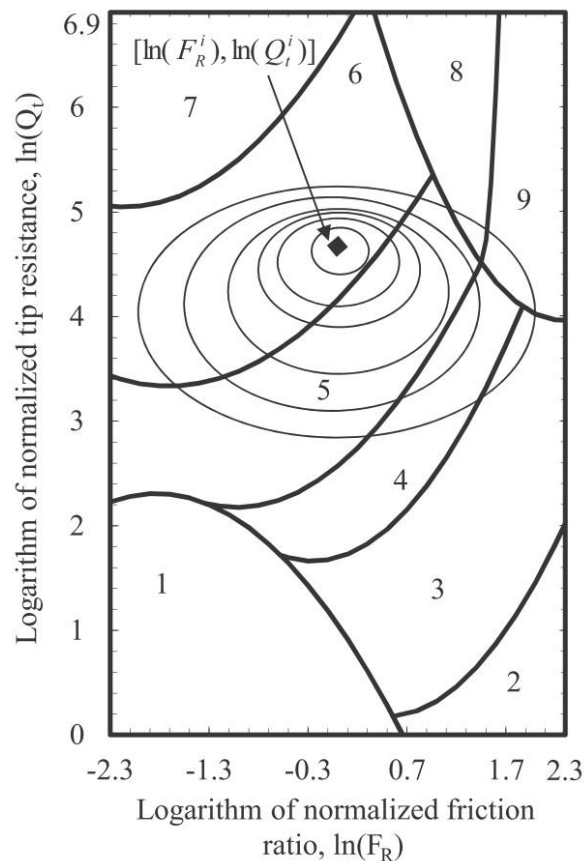


圖 2-5 CPT 資料的變異性示意圖 (Wang et al., 2013)

2.2 隱馬爾可夫模型回顧

2.2.1 一維穩態高斯隨機場 (one-dimensional stationary Gaussian random field)

Vanmarcke (1977) 提出使用隨機場模型來描述土壤空間變異性的方法，土壤空間變異性是土壤的參數性質隨著空間位置不同而變化的現象，也就是「非均質」情況，在天然土壤中，因為礦物的組成、應力歷史的變化，還有地層深度變化等原因，導致形成土壤固有的空間變異性。

隨機場是空間中的隨機函數，常見的隨機場模型有馬爾可夫隨機場 (Markov random field)、吉布斯隨機場 (Gibbs random field)、條件隨機場 (conditional random field) 和高斯隨機場，其中以穩態高斯隨機場最被廣為使用。具有趨勢的土壤參數



性質可以用零均 (zero-mean) 穩態高斯隨機場來模擬，如圖 2-6(a) 所示，一個土壤參數性質 $\xi(z)$ 可以方便地分解為下式 (DeGroot and Baecher, 1993)：

$$\xi(z) = t(z) + w(z) \quad (2.33)$$

其中 z 為深度位置， $t(z)$ 為趨勢函數 (trend function)， $w(z)$ 稱為空間變異性。 $t(z)$ 通常會透過最小二乘 (least squares) 回歸分析將其消除，然後假設剩下的 $w(z)$ 為一個零均的穩態隨機場。

一個二階 (second order) 穩態高斯隨機場可以由三個參數來描述：平均值 (μ)、標準差 (σ)，與自關聯性函數 (auto-correlation function, $\rho(\Delta z)$)；對於一維穩態隨機場 $w(z)$ 來說，其平均值為：

$$\mu = E[w(z)] = 0 \quad (2.34)$$

其標準差為：

$$\sigma = \sqrt{\text{Var}[w(z)]} \quad (2.35)$$

其自關聯性函數定義為：

$$\rho(\Delta z) = \rho[w(z), w(z + \Delta z)] = \frac{\text{COV}[w(z), w(z + \Delta z)]}{\sqrt{\text{Var}[w(z)]}\sqrt{\text{Var}[w(z + \Delta z)]}} \quad (2.36)$$

其中 $E(\cdot)$ 為期望值函數， $\text{Var}(\cdot)$ 為變異數函數， Δz 為資料間距， $\text{COV}[\cdot, \cdot]$ 為共變異數函數。

自關聯性函數的模型有很多種，其中最被廣為使用的是指數一階模型 (single exponential model, SExp) (Vanmarcke, 1977; Vanmarcke and Grigoriu, 1983)：

$$\rho(\Delta z) = \exp(-2|\Delta z| / \delta) \quad (2.37)$$

其中 δ 稱為關聯性長度 (scale of fluctuation)。從(2.37)式可以看出當 Δz 愈大， $\rho(\Delta z)$ 值就愈小，這和天然土壤所觀察到的現象一致：土壤性質在很小的間隔有很強的空間關聯性，相距遙遠則空間關聯性弱。

綜合上述定義，一維穩態高斯隨機場可以用平均值 (μ)、標準差 (σ)，以及關聯性長度 (δ) 來模擬：

$$\mathbf{W} = \mu \cdot \mathbf{1} + \sigma \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \quad (2.38)$$



其中 $\mathbf{W} = [w(z_1) \ w(z_2) \ \dots \ w(z_n)]^T$, 包含感興趣的 n 個位置處的 $w(z)$ 值; $\mathbf{1} = [1 \ 1 \ \dots \ 1]^T$; $\mathbf{U} = [U_1 \ U_2 \ \dots \ U_n]^T$, 包含 n 個獨立標準常態樣本; \mathbf{L} 為關聯性矩陣 \mathbf{R} 的 Cholesky 分解矩陣 ($\mathbf{R} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$):

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} 1 & \exp\left(-2\frac{|z_1-z_2|}{\delta}\right) & \dots & \exp\left(-2\frac{|z_1-z_n|}{\delta}\right) \\ & \ddots & & \vdots \\ & \text{SYM} & & 1 \\ & & & \exp\left(-2\frac{|z_{n-1}-z_n|}{\delta}\right) \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

關聯性長度(δ)是判斷土壤關聯性的簡明指標, 有兩種方法可以解釋其物理意義: (1) 當兩點間隔大於 δ , 可以認為土壤參數性質 $\xi(z)$ 之間沒有關聯性, 而當兩點間隔小於 δ , 則它們的 $\xi(z)$ 會同時大於或小於平均值, 顯示其高關聯性; 或是(2) 在 Δz 範圍內, 會有 $(\Delta z/\delta)$ 個有效獨立樣本。 (Vanmarcke, 1977)

有很多方法可以估算 δ , 其中一種簡單估算垂直關聯性長度的方法如下式所估算 (Vanmarcke, 1977), 我們在第三章將會採用此法:

$$\delta \approx 0.8 \times \bar{d} \quad (2.40)$$

其中 \bar{d} 為 $\xi(z)$ 與 $t(z)$ 的各個交點之間的平均距離, 如圖 2-6(b) 所示。

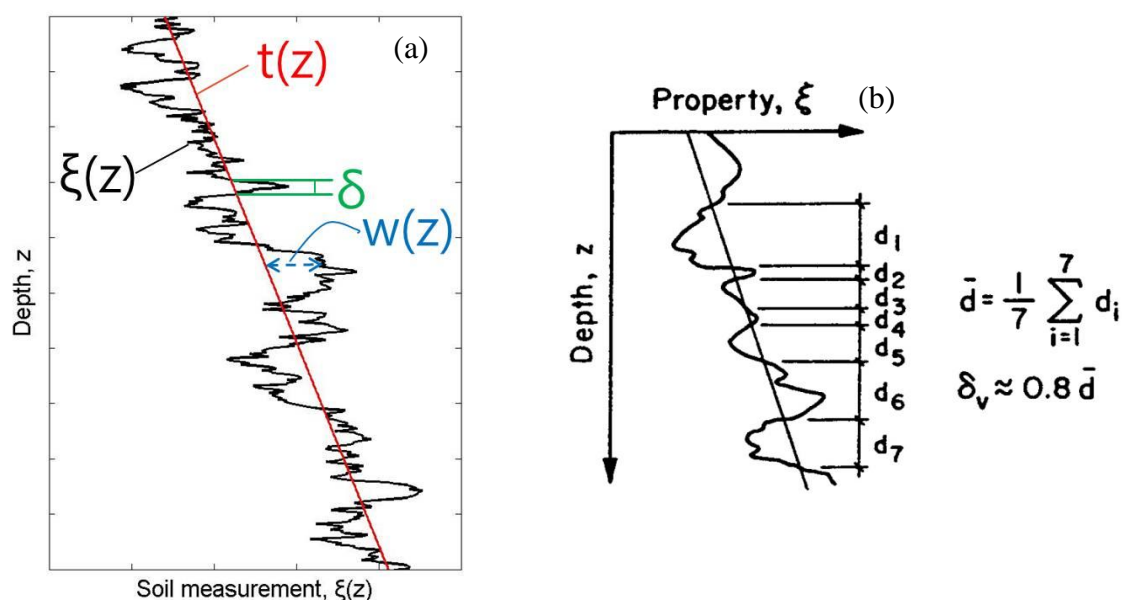


圖 2-6 (a) 以隨機場描述土壤參數性質; (b) 估算垂直關聯性長度 δ (Phoon et al., 1995)



2.2.2 貝氏定理 (Bayes' theorem)

貝氏定理是機率論中的一個重要的定理，它能夠量化我們對不確定性的表達，告訴我們如何利用新證據修改已有的看法，並對不確定性進行精確修正，以採取最佳行動或決策。此定理最早於 1763 年托馬斯·貝葉斯 (Thomas Bayes) 的論文中被提出，並且以他的名字命名。

根據 Bishop (2006) 解釋，從貝氏定理的角度來看，我們可以使用機率論的機制來描述模型參數中的不確定性。現在我們有已知的觀察資料 $\mathbf{D} = [d_1, \dots, d_T]$ ，以及模型參數 θ ，貝氏定理被用來透過結合觀察資料提供的證據 (evidence) 來將先驗機率轉換為後驗機率。在觀察資料之前，我們獲取關於 θ 的假設，以先驗機率分布 $p(\theta)$ (prior probability distribution) 的形式來表示，而觀察資料 \mathbf{D} 的影響透過條件機率分布 $p(\mathbf{D}|\theta)$ 來表示，所以貝氏定理表現的形式為：

$$p(\theta|\mathbf{D}) = \frac{p(\mathbf{D}|\theta)p(\theta)}{p(\mathbf{D})} \quad (2.41)$$

上式允許我們以後驗機率分布 $p(\theta|\mathbf{D})$ (posterior probability distribution) 的形式，在觀察了 \mathbf{D} 之後，來評估 θ 中的不確定性，其中 $p(\mathbf{D})$ 為證據， $p(\cdot)$ 代表機率密度函數。

(2.41) 式右邊的 $p(\mathbf{D}|\theta)$ 為觀察資料集 \mathbf{D} 所估算，並且可以被視為參數向量 θ 的函數，在這種情況下，它被稱為似然函數 (likelihood function)，它表現了 \mathbf{D} 對於不同設置的 θ 的可能性，我們需要注意的是似然性 (likelihood) 不是 θ 的機率分布，因此其對於 θ 的積分不一定等於 1。

有了似然性的定義，我們可以用下式描述貝氏定理：

$$\text{後驗} \propto \text{似然性} \times \text{先驗} \quad (2.42)$$

每個部份都被視為 θ 的函數，(2.41) 式中的分母 $p(\mathbf{D})$ 是正規化常數，它確保左邊的後驗分布是一個有效的機率密度函數，並且積分後等於 1。實際上，將 (2.41) 式左右兩側同時對 θ 積分，則我們可以用先驗分布和似然函數來表示貝氏定理的分母：

$$p(\mathbf{D}) = \int p(\mathbf{D}|\theta)p(\theta)d\theta \quad (2.43)$$

貝氏觀點的一個優點是，先驗知識為自然產生，採用合理先驗的貝氏方法較

少產生極端的結論。然而貝氏方法的一個普遍爭議是，先驗分布通常是基於數學上的方便，而不是基於任何先驗信念的反映，即使透過先前選擇之結論的主觀性質來假設先驗分布，也會被視為問題的根源。減少對先驗的依賴是「無提示性的先驗機率」(Non-informative prior)的動機之一，其通常假設先驗為均勻分布。

2.2.3 共軛先驗 (conjugate prior)

在貝氏定理中，如果後驗機率分布 $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{D})$ 與先驗機率分布 $p(\boldsymbol{\theta})$ 具有相同的機率分布形式，則先驗和後驗被稱為共軛分布(conjugate distributions)，而先驗分布被稱為似然函數的共軛先驗。Raiffa and Schlaifer (1961)首度引入了這個概念以及「共軛先驗」這個術語。

根據 Bishop (2006)解釋，考慮一般推導連續機率分布的問題，假設模型參數 $\boldsymbol{\theta}$ ，並給定已知資料 \mathbf{D} ，根據(2.41)式之貝氏定理，對於一個給定的似然函數 $p(\mathbf{D}|\boldsymbol{\theta})$ ，我們可以找一個與它共軛的先驗分布 $p(\boldsymbol{\theta})$ ，使得後驗分布 $p(\boldsymbol{\theta}|\mathbf{D})$ 有與先驗相同的函數形式，如此一來即形成共軛分布。共軛先驗可以大幅簡化貝氏分析，提供代數上的方便性，給後驗一個封閉的表達式，否則的話只能進行數值積分。此外，共軛先驗也有助於獲得關於似然函數如何更新先驗分布的直觀印象。雖然不是每個機率分布都有共軛先驗，但可以確定的是，指數家族的所有機率分布都有共軛先驗。

以高斯分布為例子，我們考慮一個單一高斯隨機變量 x ，假設其變異數 σ^2 是已知的，再來我們考慮給定 n 個觀測值的集合 $\mathbf{X} = [x_1, \dots, x_n]$ 的情況，想要推導平均值 μ 的後驗分布，首先必須假設似然函數，即給定 μ 的情況下 \mathbf{X} 的機率，但是視為 μ 的函數，如下式給出：

$$p(\mathbf{X}|\mu) = \prod_{i=1}^n p(x_i|\mu) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{n/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\sigma^2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right\} \quad (2.44)$$

我們看到上式似然函數是 μ 的指數二次形式，因此，如果我們選定高斯分布



的先驗分布 $p(\mu)$ ，它將是似然函數的共軛先驗，後驗分布也將會是高斯分布。所以我們假設 μ 的先驗分布為：

$$p(\mu) = \mathcal{N}(\mu|\mu_h, \sigma_h^2) \quad (2.45)$$

其中 μ_h, σ_h^2 為描述 $p(\mu)$ 的平均值和變異數，稱為先驗超參數 (prior hyperparameter)。而 μ 的後驗分布由下式給出：

$$p(\mu|\mathbf{X}) \propto p(\mathbf{X}|\mu)p(\mu) \quad (2.46)$$

而推導完成的後驗分布如下式：

$$p(\mu|\mathbf{X}) = \mathcal{N}(\mu|\mu_p, \sigma_p^2) \quad (2.47)$$

其中

$$\mu_p = \frac{1}{\frac{1}{\sigma_h^2} + \frac{n}{\sigma^2}} \left(\frac{\mu_h}{\sigma_h^2} + \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{\sigma^2} \right) \quad (2.48)$$

$$\sigma_p^2 = \left(\frac{1}{\sigma_h^2} + \frac{n}{\sigma^2} \right)^{-1} \quad (2.49)$$

μ_p, σ_p^2 為描述 $p(\mu|\mathbf{X})$ 的平均值和變異數，稱為後驗超參數 (posterior hyperparameter)。

接下來，我們改假設平均值 μ 為已知的，想要推導變異數 σ^2 的後驗分布，同樣地，如果我們選擇先驗分布的共軛形式，則計算將可以大大簡化。然而經驗證實，使用精密度 (precision) $\lambda \equiv 1/\sigma^2$ 來推導公式會比起用 σ^2 方便，所以假設 λ 的似然函數為：

$$p(\mathbf{X}|\lambda) = \prod_{i=1}^n \mathcal{N}(x_i|\mu, \lambda^{-1}) \propto \lambda^{n/2} \exp\left\{-\frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right\} \quad (2.50)$$

相對應的共軛先驗應該要和上式右半邊成正比，選用伽瑪分布 (Gamma distribution) 可以符合這個條件，其定義為：

$$\text{Gam}(\lambda|\alpha, \beta) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \beta^\alpha \lambda^{\alpha-1} \exp(-\beta\lambda) \quad (2.51)$$

其中伽瑪函數 $\Gamma(\alpha) \equiv \int_0^\infty u^{\alpha-1} e^{-u} du$ ，用於確保(2.51)式正確地正規化。伽瑪分布的平均值和變異數為：



$$E[\lambda] = \frac{\alpha}{\beta}; \text{Var}[\lambda] = \frac{\alpha}{\beta^2} \quad (2.52)$$

考慮一個先驗分布 $\text{Gam}(\lambda|\alpha_h, \beta_h)$ ，其中 α_h 為形狀參數 (shape parameter)， β_h 為比率參數 (rate parameter)，兩者皆為先驗超參數，如果我們將先驗分布乘以似然函數(2.50)式，則可以得到後驗分布：

$$p(\lambda|\mathbf{X}) \propto \lambda^{\alpha_h-1} \lambda^{n/2} \exp\left\{-\beta_h \lambda - \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2\right\} \quad (2.53)$$

我們認為它同樣是伽瑪分布形式 $\text{Gam}(\lambda|\alpha_p, \beta_p)$ ，其中：

$$\alpha_p = \alpha_h + n/2 \quad (2.54)$$

$$\beta_p = \beta_h + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (x_i - \mu)^2 \quad (2.55)$$

α_p 與 β_p 為描述 $p(\lambda|\mathbf{X})$ 的形狀參數和比率參數，為後驗超參數。

但是如果我們想要探討的不是精密度 λ ，而是變異數 σ^2 的話，則共軛先驗必須換成逆伽瑪分布 (inverse-gamma distribution) $\text{Inv-Gam}(\sigma^2|\alpha_h, \beta_h)$ ，而後驗超參數 α_p, β_p 之公式與(2.54)、(2.55)式相同。

2.2.4 一維馬爾可夫鏈 (one-dimensional Markov chains)

一維馬爾可夫鏈是一種機率模型，它基於以下觀點：當下步驟的系統狀態僅取決於前一步的狀態，因此獨立於前一步之外的所有步驟。對於許多實際應用，我們希望能夠根據以前的觀測值預測時間序列中的下一個值，更進一步地說，我們會預期最近的觀測值可能會比久遠以前的觀測值更具預測未來的資訊量，所以對於預測未來狀態取決於所有先前的觀測是不切實際的，因為隨著觀測數量增加，模型將會愈來愈複雜，因此這個議題導致我們考慮馬爾可夫鏈，假設對未來的預測獨立於除了最近觀測之外的所有觀測值。

一階馬爾可夫鏈：

在馬爾可夫鏈的公式中，設 $h_0, h_1, h_2, \dots, h_T$ 為隨機變數的序列，該序列的值取



決於狀態空間 $\{S_1, S_2, \dots, S_m\}$ ，其中 m 為狀態總數。一維馬爾可夫鏈假設 h_t 的條件機率 ($t = 0, \dots, T$)：

$$\begin{aligned} p(h_t = S_k | h_{t-1} = S_l, h_{t-2} = S_n, h_{t-3} = S_r, \dots, h_0 = S_a) \\ = p(h_t = S_k | h_{t-1} = S_l) =: q_{lk} \end{aligned} \quad (2.56)$$

其中 q_{lk} 定義為從狀態 S_l 轉換到 S_k 之轉換機率。綜合上述，我們得到的是一階馬爾可夫鏈(first-order Markov chain)，如圖 2-7 所示，使用這樣的模型來預測序列中的下一個觀測值，那麼預測的分布將僅取決於前一個觀測值，並且獨立於所有的先前觀測值。

時間齊次馬爾可夫鏈：

如果轉換機率(2.56)式在每一步轉換皆不會改變，也就是令 $p(h_t = S_k | h_{t-1} = S_l)$ 在每一步轉換時都相等，如下式：

$$p(h_t = S_k | h_{t-1} = S_l) = p(h_{t-1} = S_k | h_{t-2} = S_l) \quad (2.57)$$

則此馬爾可夫鏈為時間齊次的(time-homogeneous)，並且此時轉換機率與步次 t 無關。時間齊次馬爾可夫鏈的一個很好的性質是，當鏈的運行時間很長， $T \rightarrow \infty$ 時，它將達到平衡狀態，稱為平穩分布 (stationary distribution)。

轉換機率矩陣：

在一維問題中，如果馬爾可夫鏈的狀態空間為數量有限的不同值所組成，並且是時間齊次的，則轉換機率可以由轉換機率矩陣 \mathbf{Q} 來表示：

$$\mathbf{Q} = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdot & \cdot & q_{1m} \\ q_{21} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & q_{lk} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ q_{m1} & \cdot & \cdot & \cdot & q_{mm} \end{bmatrix} \quad (2.58)$$

其中 q_{lk} 同(2.56)式所定義，而 m 為狀態總數，因此，從狀態 S_1 到狀態 S_1, S_2, \dots, S_m 的轉換機率由第一列的 $q_{1k}, k = 1, 2, \dots, m$ 所給出，以此類推。矩陣 \mathbf{Q} 必須滿足以下的性質：(1) 它的元素皆不是負值；(2) 每列的元素總和等於 1。



N 步轉換與平穩機率：

前一段所考慮的轉換機率稱為單步轉換，我們也有情況會考慮 N 步轉換，N 步轉換的意思是從一個狀態到另一個狀態的轉換跨越了 N 步，在時間齊次的馬爾可夫鏈，N 步的轉換機率可以透過將單步轉換機率矩陣乘以自己 N 次來獲得。

轉換機率矩陣在一些適度的條件下(非週期性和不可約性)，連續的相乘會導致每一列(w_1, w_2, \dots, w_m)最終變得一模一樣，所以 w_k ($k = 1, 2, \dots, m$)由下式給出：

$$\lim_{N \rightarrow \infty} q_{lk}^{(N)} = w_k \quad (2.59)$$

w_k 稱為平穩機率 (stationary probabilities)，不再依賴於初始狀態 S_l 。平穩機率也可以透過求解方程式來找出：

$$\sum_{l=1}^m w_l q_{lk} = w_k, \quad k = 1, \dots, m \quad (2.60)$$

其中 $w_k \geq 0$ 而且 $\sum_k (w_k) = 1$ 。

高階馬爾可夫鏈：

讓更早的觀察產生影響的一種方法是使用高階馬爾可夫鏈，如果我們允許預測也考慮更前面的一個觀察值，我們可以得到一個二階馬爾可夫鏈 (second-order Markov chain)，如圖 2-8 所示，其轉換機率為：

$$p(h_t = S_k | h_{t-1} = S_l, h_{t-2} = S_n) \quad (2.61)$$

可以發現每個觀測值現在受到前面兩個觀察結果影響，我們同樣可以考慮擴展到一個 M 階的馬爾可夫鏈 (M^{th} order Markov chain)，也就是一個特定變數的條件分布取決於前面 M 個變數，但是這種靈活性所付出的代價為模型的參數數量變得更多，假設觀測值是具有 K 個狀態的離散變數，一階馬爾可夫鏈中的條件分布 $p(h_t | h_{t-1})$ 由一組數量為 K-1 的參數決定，對於 h_{t-1} 的 K 個狀態，總共會有 $K(K-1)$ 個參數。如果將模型擴展到 M 階，則將會有 $K^{M-1}(K-1)$ 個參數，數量隨著 M 的指數成長，所以當 M 值太大時，模型使用起來會變得不切實際。

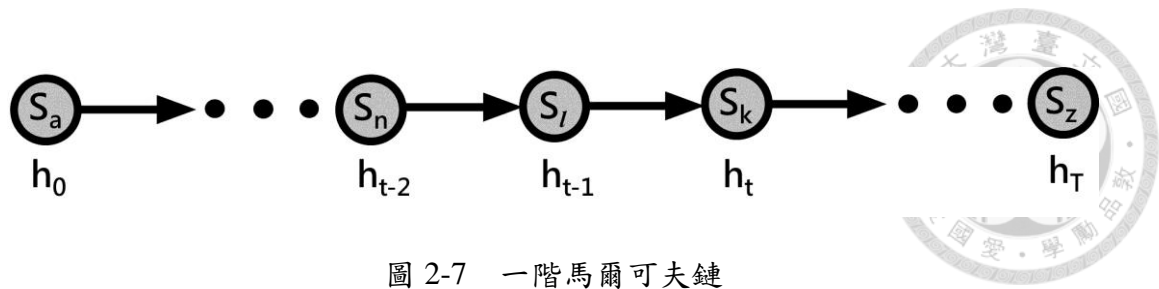


圖 2-7 一階馬爾可夫鏈

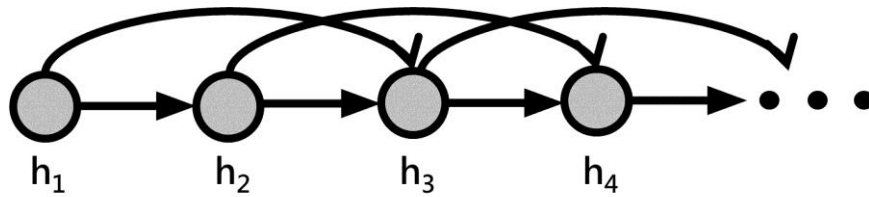


圖 2-8 二階馬爾可夫鏈

2.2.5 吉布斯抽樣法 (Gibbs sampling)

吉布斯抽樣法 (Geman and Geman, 1984) 是一種簡單、廣泛應用的馬爾可夫蒙地卡羅 (Markov chain Monte Carlo, MCMC) 演算法，並且可看作 Metropolis-Hastings 演算法的一個特例。

根據 Bishop (2006) 解釋，考慮我們想要從中抽樣的機率分布 $p(\mathbf{x}) = p(x_1, \dots, x_n)$ ，並且假設我們為馬爾可夫鏈選擇了一些初始狀態，吉布斯抽樣過程的每一步都涉及用一個從某變數的分布抽樣的值，來取代該變數的值，其中該變數的分布以剩餘變數的值為條件。因此我們用從分布 $p(x_i | \mathbf{x}_{-i})$ 抽樣的值來取代 x_i ，其中 x_i 表示 \mathbf{x} 的第 i 個分量，而 \mathbf{x}_{-i} 表示 x_1, \dots, x_n ，但是不包括 x_i 。透過某種特定順序循環更新變數或透過從某個分布中隨機選擇每個步驟要更新的變數，來重複吉布斯抽樣的程序。

以三個變數的情況為例，假設我們有一機率分布 $p(x_1, x_2, x_3)$ ，然後在演算法的步驟 k 時，我們選擇了 $x_1^{(k)}$ 、 $x_2^{(k)}$ 、 $x_3^{(k)}$ ，首先我們用一個從條件分布抽樣而來的新值 $x_1^{(k+1)}$ 來取代 $x_1^{(k)}$ ，其中該條件分布為：



$$p(x_1|x_2^{(k)}, x_3^{(k)}) \quad (2.62)$$

接著我們用從下式的條件分布抽樣而來的值 $x_2^{(k+1)}$ 來取代 $x_2^{(k)}$ ：

$$p(x_2|x_1^{(k+1)}, x_3^{(k)}) \quad (2.63)$$

所以 x_1 的新值會馬上被用在接下來的抽樣步驟。最後我們用樣本 $x_3^{(k+1)}$ 更新 x_3 ，從：

$$p(x_3|x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}) \quad (2.64)$$

如此依次循環三個變數，即為吉布斯抽樣程序，而多變數的情況可以參考圖 2-9。

為了表明這個程序確實是從要求的分布中抽樣的，我們首先要注意的是，分布 $p(x_1, \dots, x_n)$ 是各別每一個吉布斯抽樣步驟以及整個馬爾可夫鏈的不變量，這是因為當我們從 $p(x_i | \mathbf{x}_{-i})$ 中抽樣時，邊際分布 $p(\mathbf{x}_{-i})$ 是不變的，因為 \mathbf{x}_{-i} 的值是不變的。同樣地，每個步驟藉由從正確的條件分布 $p(x_i | \mathbf{x}_{-i})$ 中定義了樣本，因為這些條件分布和邊際分佈共同指定了聯合分佈，所以我們看到聯合分布本身是不變的。

關於第二個要求，為了能讓吉布斯抽樣程序從正確的分布中抽樣，其必須是遍歷的 (ergodic)。遍歷性的充分條件是沒有任何條件分佈在任何零點，如果滿足的話，那麼 x 空間中的任意點都可以從其他任意點以有限步數到達，每一步涉及每個分量變數的更新；如果這個要求不滿足，也就是某些條件分佈有零點，那麼遍歷性（如果適用）必須被明確地證明。此外，為了完成吉布斯抽樣法，還必須指定初始狀態分布，即使在多次迭代後抽取的樣本將有效地獨立於這個分布。

我們可以藉由調查吉布斯抽樣法應用於高斯分佈的狀況來了解其行為，如圖 2-10 所示，考慮兩個變數的相關高斯分布，其具有寬度 l 的條件分佈和寬度 L 的邊際分佈，典型的步長由條件分佈控制，並且將具有 l 階 ($O(l)$)。因為狀態是根據隨機遊走進行演變的，所以從分佈中獲得的獨立樣本所需步數將具有 $(L/l)^2$ 階 ($O((L/l)^2)$)。當然，如果高斯分佈不相關，那麼吉布斯抽樣程序將有最佳效率。

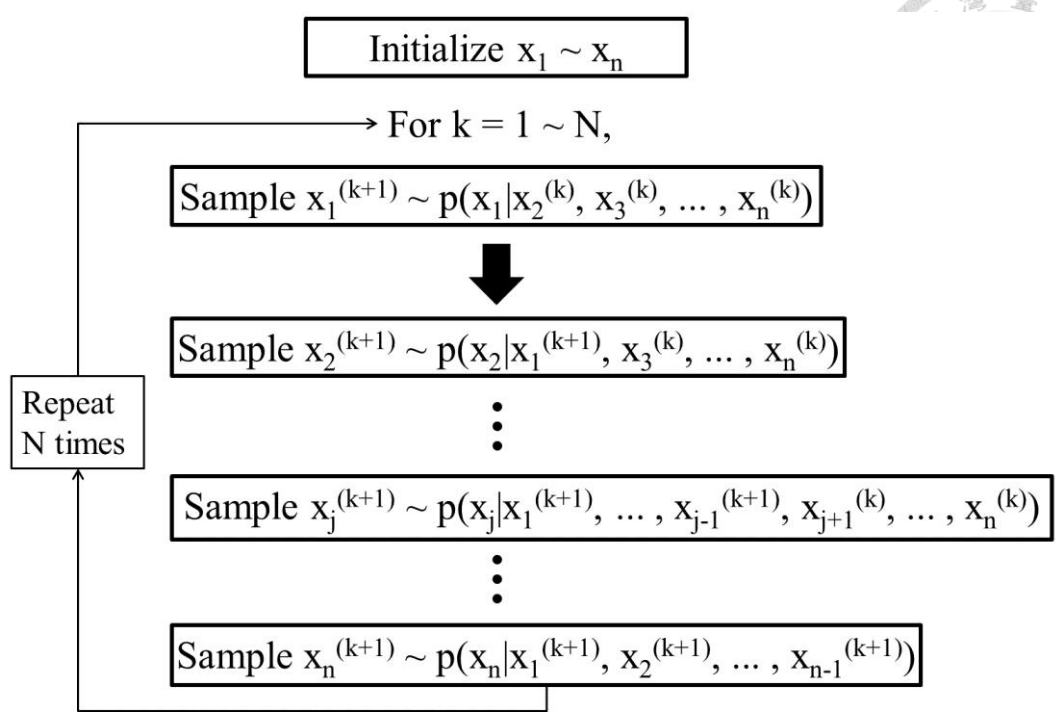


圖 2-9 n 個變數的吉布斯抽樣法步驟 (注意：上標的(t)是索引而非指數)

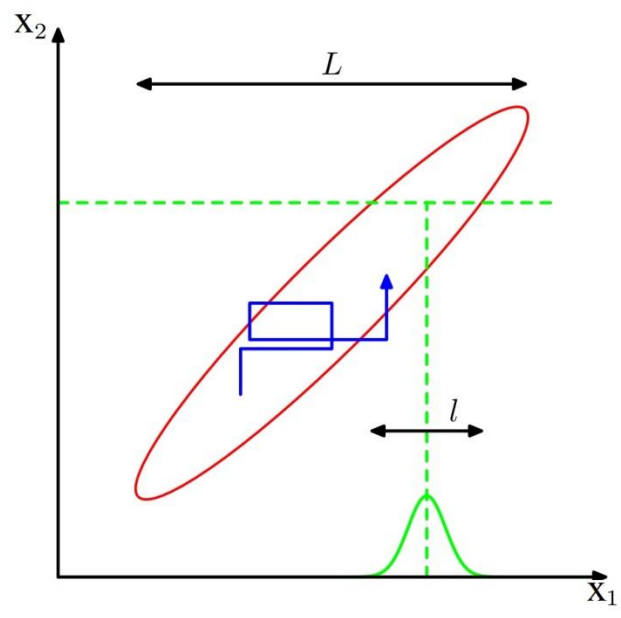


圖 2-10 吉布斯抽樣法應用於高斯分佈之情況 (Bishop, 2006)



2.2.6 隱馬爾可夫模型 (hidden Markov model, HMM)

隱馬爾可夫模型 (HMM) 是一種統計的馬爾可夫模型，其中模型系統被假設為具有未觀察(隱藏)狀態的馬爾可夫過程 (Markov process)。在普通的馬爾可夫鏈中，狀態對觀察者而言是直接可見的，因此狀態的轉換機率便是唯一的參數，然而在 HMM 中，狀態不是直接可見的，可見的是輸出資料，其取決於狀態，每個狀態都有其可能輸出資料的機率分布，因此 HMM 產生的輸出序列给出了一些關於隱藏狀態序列的資訊。HMM 已被廣泛地應用於各種領域，像是訊號處理、人工智慧、圖像分析、經濟學……等。

根據 Scott (2002) 與 Bishop (2006) 解說，HMM 可以被認為是一種混合模型的推廣，其中的隱藏變數控制著為每次觀察選擇的混合組件，隱藏變數之間的關係為馬爾可夫過程，而不是彼此獨立。圖 2-11 展示了 HMM 一般的體系結構，每個圓圈代表一個隨機變數，隨機變數 h_t 是時間 t 的隱藏狀態，而隨機變數 d_t 是時間 t 處的觀測值，其中 $t = 1, \dots, T$ ，圖中的箭頭表示條件相依關係。

從圖 2-11 可以看出，在時間 t 時隱藏變數 h_t 的條件機率分布關係，只要隱藏變數 h_t 的值始終取決於隱藏變數 h_{t-1} ，那麼時間 $t-2$ 和更之前的值將不會影響到 h_t ，這種情況稱為馬爾可夫屬性。類似地，觀察變數(或稱為輸出變數) d_t 的值僅取決於隱藏變數 h_t (均在時間 t 上)。

在這裡考慮的標準 HMM 中，隱藏變數的狀態空間 $S = \{S_1, S_2, \dots, S_m\}$ 是離散的 (其中 m 為狀態總數)，而觀測值本身可以是離散或連續的，離散值通常由分類分布(categorical distribution)生成，而連續值通常由高斯分布生成。HMM 的參數有兩種類型，為轉換機率 (transition probabilities) 和輸出機率(output probabilities)。

轉換機率控制時間 t 時隱藏狀態 h_t 的抽選，根據時間 $t-1$ 時不同的狀態而有不同的轉換機率，假設隱藏狀態空間由 m 個可能的狀態所構成，這表示對於時間 t 處的隱藏變數 h_t 可能是 m 個可能狀態中的其中一個狀態，而從 h_t 的狀態轉換到隱藏變數 h_{t+1} 又有 m 個可能狀態，因此一共有 m^2 個轉換機率，一般以 $m \times m$ 的轉

換機率矩陣 Q 來表示，如同 2.2.4 節所提到的(2.58)式，因為任何一個轉換機率都可以在其他參數已知時確定，所以總共有 $m(m-1)$ 個轉換參數。

輸出機率方面，對於 m 個可能狀態中的每一個狀態，在給定當時隱藏狀態的情況下，存在一組控制特定時間之觀察變數分布的輸出機率集合，這個集合的大小取決於觀測變數的性質，觀測變數可能的值愈多，則輸出機率的參數量愈多，模型的複雜度愈高。

HMM 有三個典型問題：

預測 (filter) :

已知模型參數和某一特定輸出序列，求最後時刻各個隱藏狀態的機率分布，即求 $p(h_T | d_1, \dots, d_T)$ 。這個問題通常使用前向(forward)算法解決

解碼 (most likely explanation) :

已知模型參數，尋找最可能的能產生某一特定輸出序列的隱藏狀態的序列。即求 $p([h_1, \dots, h_T] | [d_1, \dots, d_T])$ ，通常使用 Viterbi 算法來解決。

平滑 (smoothing) :

已知模型參數和某一特定輸出序列，求中間時刻各個隱藏狀態的機率分布，即求 $p(h_t | d_1, \dots, d_T), t < T$ ，通常使用前向-後向 (forward-backward)算法解決。

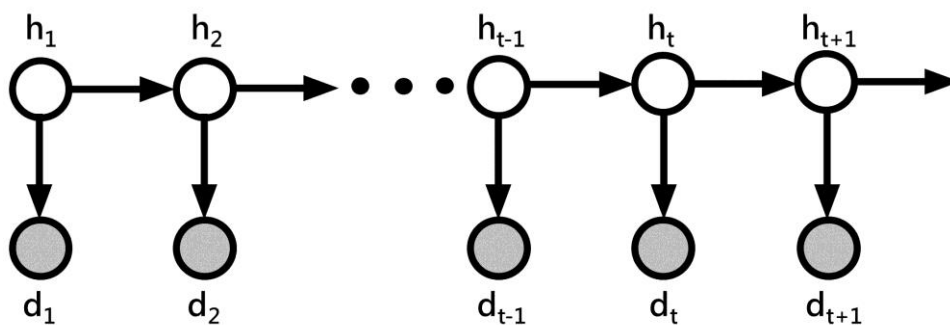


圖 2-11 隱馬爾可夫模型示意圖

第三章 隱馬爾可夫模型土壤分層法



3.1 HMM 土壤分層法 (HMM soil stratification method)

3.1.1 基本假設與初始值

在進行 HMM 土壤分層法之前，我們必須先取得計算處理後的 CPT 鑽探資料之土壤行為指數 I_c ，還有其各個資料點所對應的深度 z ，如圖 3-1(a)所示，但是這張圖的 I_c 值並非從真實 CPT 資料而來，而是人工產生的，為了方便展示真實層面位置與分析結果的差異。

我們使用 HMM 對 I_c 進行分析，首先要假設的是， I_c 序列為 HMM 的可觀察之輸出序列，而 HMM 隱藏的狀態序列的狀態空間 $S = \{0, 1, 2, \dots, (m-1)\}$ ，代表 m 種不同的土壤種類；原本的時間軸 $t = 1, \dots, T$ ，現在變成了深度的概念，從地表演變至鑽探的最深處，對應到鑽探深度資料 z ，因此隱藏的狀態序列代表土層的土壤種類，依不同的狀態來劃分土層，並且在狀態發生變化的地方代表潛在的層面位置，如圖 3-1(b)所示。

根據 HMM 隱藏的狀態序列，我們假設屬於同一群的 I_c 資料可以用一維穩態隨機場來描述，也就是可以用平均值 μ 、標準差 σ 和關聯性長度 δ 等三個參數來描述它，其中隨機場的自關聯性函數假設是指數一階模型 (SExp)。舉例來說，同屬於第 0 群狀態的 I_c 資料可以用它的三個參數 μ_0 、 σ_0 和 δ_0 來描述，同屬於第 1 群狀態的 I_c 資料可以用 μ_1 、 σ_1 和 δ_1 來描述，然而 $[\mu_0, \sigma_0, \delta_0]$ 和 $[\mu_1, \sigma_1, \delta_1]$ 是不同的參數，第 0 群的 I_c 和第 1 群的 I_c 資料被假設為互相獨立。

在分析前，我們要先自行假設這筆 I_c 資料的分群數 m 。而為了避免分群順序混亂，我們規定分群的編號將照著 $\mu_0 < \mu_1 < \dots < \mu_{m-1}$ 的規則排列，編號愈大的 I_c 資料群將有愈大的平均值。每一個分群的參數 $[\mu, \sigma, \delta]$ 在分析之前都是未知的，但是為了進行之後的吉布斯抽樣法，我們必須給它們一個初始值，在我們的 HMM 土壤分層法，我們假設 $\boldsymbol{\mu} = [\mu_0, \mu_1, \dots, \mu_{m-1}] = [2, 4, \dots, 2m]$ ， $\boldsymbol{\sigma} = [\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_{m-1}] = [2,$

2, ..., 2], 因為吉布斯抽樣法的結果最終將會收斂，所以在此適當地假設初始值即可。而關於 I_c 的關聯性長度 δ ，我們假設可以用(2.40)式對全部 I_c 資料來估算，即：

$$\delta_0 = \delta_1 = \dots = \delta_{m-1} = \delta \approx 0.8 \times \bar{d} \quad (3.1)$$

其中 \bar{d} 同(2.40)式所定義，因此關聯性長度 δ 在同一筆 I_c 資料的估算都是相同的，在每個分群的 δ 值也都相同， δ 不會在之後進行吉布斯抽樣法。

接著還需假設 HMM 的初始轉換機率矩陣 Q_1 ，我們假設前一個狀態轉換到當前狀態時，保持一樣的機率是 0.9，變換成任一個不同的狀態之機率是 $0.1/(m-1)$ ，以矩陣來表示的話如下：

$$Q_1 = \begin{bmatrix} 0.9 & \frac{0.1}{m-1} & \dots & \frac{0.1}{m-1} \\ \frac{0.1}{m-1} & 0.9 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \frac{0.1}{m-1} \\ \frac{0.1}{m-1} & \frac{0.1}{m-1} & \dots & 0.9 \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

因為 Q 為轉換機率矩陣，所以要注意每列的元素總和必須等於 1。我們狀態保持一樣的機率設為 0.9 的原因是因為我們希望下一個狀態不會太過輕易地變化，能與前一個狀態有很高的機率相同，否則會不斷轉換狀態，形成分層混亂。

接著因為 HMM 的狀態序列 h_1 在一開始也是未知的，所以也必須假設其初始序列，原本採用隨機抽樣的狀態序列應為最客觀的方法，但是我們發現這樣分析時容易遇到預燒期(burn-in period)的問題，因此改採用 K-means 分群法對 I_c 資料進行分群，再將所得之分群結果當作初始狀態序列，以減少預燒期問題出現機率，關於預燒期問題、K-means 分群法等細節我們將在 3.1.7 節詳細解釋。

再來還需假設 μ 與 σ 之先驗分布的先驗超參數，這一部分我們將在下一節詳細解釋。最後再設定疊代的次數 N ，還有預計捨棄之預燒期長度 B ， N 必須大於 B 。上述參數都給定了之後，即完成了 HMM 土壤分層法分析前的準備。

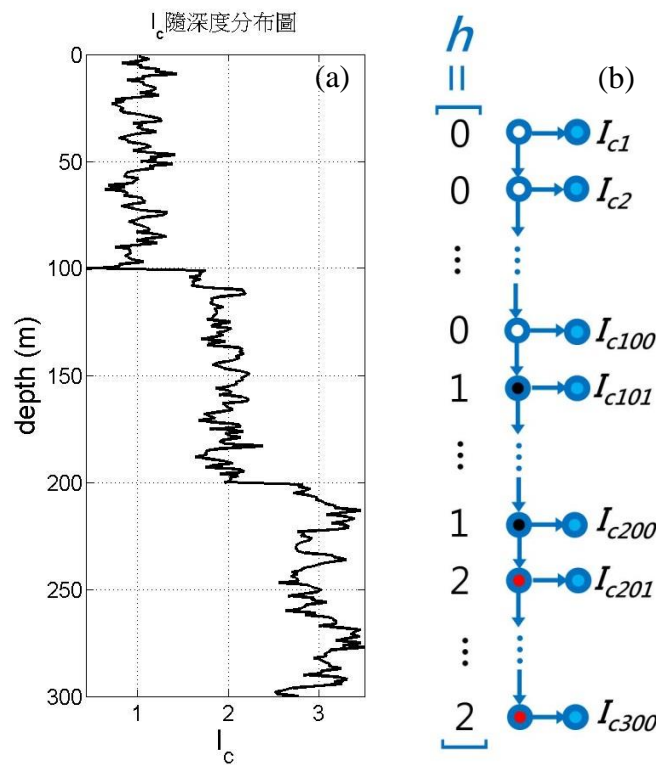


圖 3-1 (a) 人造之 I_c 隨深度 z 分布圖；(b) HMM 土壤分層法概念圖。

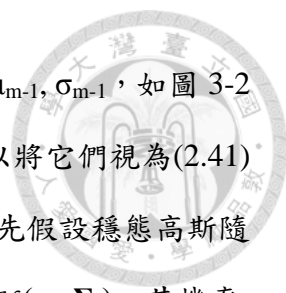
3.1.2 吉布斯抽樣法更新參數

有了輸入資料 I_c 與相關的初始值之後，我們希望能進行吉布斯抽樣法近似出 I_c 每一分群的平均值 μ_i 與標準差 σ_i 的聯合機率分布，即 $p(\mu_i, \sigma_i)$ ，其中 $i = 0, 1, \dots, m-1$ 。我們根據初始 HMM 狀態序列或前一個迴圈產生的狀態序列，將 I_c 資料分成 m 群，分別進行吉布斯抽樣法，因為不同分群之間的 I_c 假設為互相獨立，所以吉布斯抽樣法更新參數所需的條件分布將只與各自分群內的 $\mathbf{I}_{c(i)}$ 、 μ_i 、 σ_i 、 δ 有關，如下二式所示：

$$p(\mu_i | \sigma_i^{(k)}, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta) \quad i = 0, 1, \dots, m-1 \quad (3.3)$$

$$p(\sigma_i | \mu_i^{(k+1)}, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta) \quad i = 0, 1, \dots, m-1 \quad (3.4)$$

其中 $\mathbf{I}_{c(i)}$ 表示屬於第 i 分群的 I_c 資料群，上標 (k) 非指數，而是吉布斯抽樣法步次之索引， $k = 1, \dots, N$ 。



我們設定吉布斯抽樣法更新的參數順序為 $\mu_0, \sigma_0, \mu_1, \sigma_1, \dots, \mu_{m-1}, \sigma_{m-1}$ ，如圖 3-2 所示。再來的問題就是如何求得(3.3)、(3.4)之條件分布，我們可以將它們視為(2.41)式貝氏定理公式之後驗分布，並在給定 μ_i, σ_i 和 δ 的條件下，首先假設穩態高斯隨機場 $\mathbf{I}_{c(i)}$ 為多變量高斯分布 (multivariate Gaussian distribution)， $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$ ，其機率密度函數為：

$$p(\mathbf{I}_{c(i)} | \mu_i, \sigma_i, \delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}_i|}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)\right] \quad (3.5)$$

其中 $n = \mathbf{I}_{c(i)}$ 之變數個數， $\boldsymbol{\mu}_i = \mu_i \mathbf{1}$ ，其中 $\mathbf{1} =$ 長度 n 之 $[1, 1, \dots, 1]^T$ ， $|\boldsymbol{\Sigma}_i| =$ 第 i 分群共變異數矩陣之行列式，而 $\boldsymbol{\Sigma}_i$ 為：

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = \sigma_i^2 \mathbf{R}_i = \sigma_i^2 \begin{bmatrix} 1 & \exp\left(-2\frac{|z_1-z_2|}{\delta}\right) & \dots & \exp\left(-2\frac{|z_1-z_n|}{\delta}\right) \\ & \ddots & & \vdots \\ & \text{SYM} & & 1 & \exp\left(-2\frac{|z_{n-1}-z_n|}{\delta}\right) \\ & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

其中 z_1, \dots, z_n 為 $\mathbf{I}_{c(i)}$ 所對應之深度變數， \mathbf{R}_i 為相關矩陣 (correlation matrix)。

為了求得 μ_i 的後驗分布，也就是(3.3)式，在 $\sigma_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta$ 已知的情況下，我們假設 μ_i 的似然函數等於(3.5)式 $\mathbf{I}_{c(i)}$ 的機率密度函數，並且假設 μ_i 的先驗分布 $p(\mu_i)$ 為高斯常態分布 $\mathcal{N}(\mu_{h(i)}, \sigma_{h(i)}^2)$ ，其中 $(\mu_{h(i)}, \sigma_{h(i)}^2)$ 為描述 $p(\mu_i)$ 的先驗超參數，它們的值必須在分析前先自行假設，一般來說我們會將 $\sigma_{h(i)}^2$ 的值設得大一些，使得先驗分布曲線變得扁平，減少先驗機率對結果的影響，形式上更接近「無提示性的先驗機率」。

給定了似然函數與先驗機率，我們便可以推導 μ_i 的後驗分布 $p(\mu_i | \sigma_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta)$ ，結果發現後驗分布同樣屬於高斯常態分佈 $\mathcal{N}(\mu_{p(i)}, \sigma_{p(i)}^2)$ ，形成了共軛先驗的情況， μ_i 的後驗超參數 $\mu_{p(i)}, \sigma_{p(i)}^2$ 可以被推導出來：

$$p(\mu_i | \sigma_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta) \sim \mathcal{N}(\mu_{p(i)}, \sigma_{p(i)}^2) \quad (3.7)$$



$$\mu_{p(i)} = \frac{\mathbf{I}_{c(i)}^T \Sigma_i^{-1} \mathbf{1} + \mu_{h(i)} / \sigma_{h(i)}^2}{\mathbf{1}^T \Sigma_i^{-1} \mathbf{1} + 1 / \sigma_{h(i)}^2} \quad (3.8)$$

$$\sigma_{p(i)}^2 = (\mathbf{1}^T \Sigma_i^{-1} \mathbf{1} + 1 / \sigma_{h(i)}^2)^{-1} \quad (3.9)$$

其中 $\mathbf{1} =$ 長度 n 之 $[1, 1, \dots, 1]^T$ ， Σ_i 如同(3.6)式定義，詳細的推導過程在附錄 A.1.1 節可供參考。

為了求得 σ_i 的後驗分布，也就是(3.4)式，在 $\mu_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta$ 已知的情況下，我們假設變異數 σ_i^2 的似然函數也等於(3.5)式 $\mathbf{I}_{c(i)}$ 的機率密度函數，並且假設 σ_i^2 的先驗分布 $p(\sigma_i^2)$ 為逆伽瑪分布 $\text{Inv-Gam}(\alpha_{h(i)}, \beta_{h(i)})$ ，其中 $(\alpha_{h(i)}, \beta_{h(i)})$ 為描述 $p(\sigma_i^2)$ 的先驗超參數，它們的值也必須在分析前先自行假設，一般來說我們會將 $\alpha_{h(i)}$ 與 $\beta_{h(i)}$ 的值設得小一些，使得先驗分布曲線變得扁平，減少先驗機率對結果的影響，形式上更接近「無提示性的先驗機率」。

給定了似然函數與先驗機率，我們便可以推導 σ_i^2 的後驗分布 $p(\sigma_i^2 | \mu_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta)$ ，結果發現後驗分布同樣屬於逆伽瑪分布 $\text{Inv-Gam}(\alpha_{p(i)}, \beta_{p(i)})$ ，形成了共軛先驗的情況， σ_i^2 的後驗超參數 $\alpha_{p(i)}, \beta_{p(i)}$ 可以被推導出來：

$$p(\sigma_i^2 | \mu_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta) \sim \text{Inv-Gam}(\alpha_{p(i)}, \beta_{p(i)}) \quad (3.10)$$

$$\alpha_{p(i)} = \alpha_{h(i)} + n/2 \quad (3.11)$$

$$\beta_{p(i)} = \beta_{h(i)} + \frac{1}{2} [\mathbf{I}_{c(i)} - \mu_i]^T \mathbf{R}_i^{-1} [\mathbf{I}_{c(i)} - \mu_i] \quad (3.12)$$

其中 $n = \mathbf{I}_{c(i)}$ 之變數個數， $\mu_i = \mu_i \times \mathbf{1}$ ，其中 $\mathbf{1} =$ 長度 n 之 $[1, 1, \dots, 1]^T$ ， \mathbf{R}_i 如同(3.6)式定義，詳細的推導過程在附錄 A.1.2 節可供參考。

有了 μ_i 的後驗分布 $\mathcal{N}(\mu_{p(i)}, \sigma_{p(i)}^2)$ 和 σ_i^2 的後驗分布 $\text{Inv-Gam}(\alpha_{p(i)}, \beta_{p(i)})$ 之後，我們便可以在吉布斯抽樣法中透過蒙地卡羅方法，分別從 $\mathcal{N}(\mu_{p(i)}, \sigma_{p(i)}^2)$ 和 $\text{Inv-Gam}(\alpha_{p(i)}, \beta_{p(i)})$ 中產生一個新的 μ_i 值和 σ_i 值，來更新原本的變數，並照著圖 3-2 的順序演算，最後便能近似出所求的聯合機率分布 $p(\mu_i, \sigma_i)$ 。

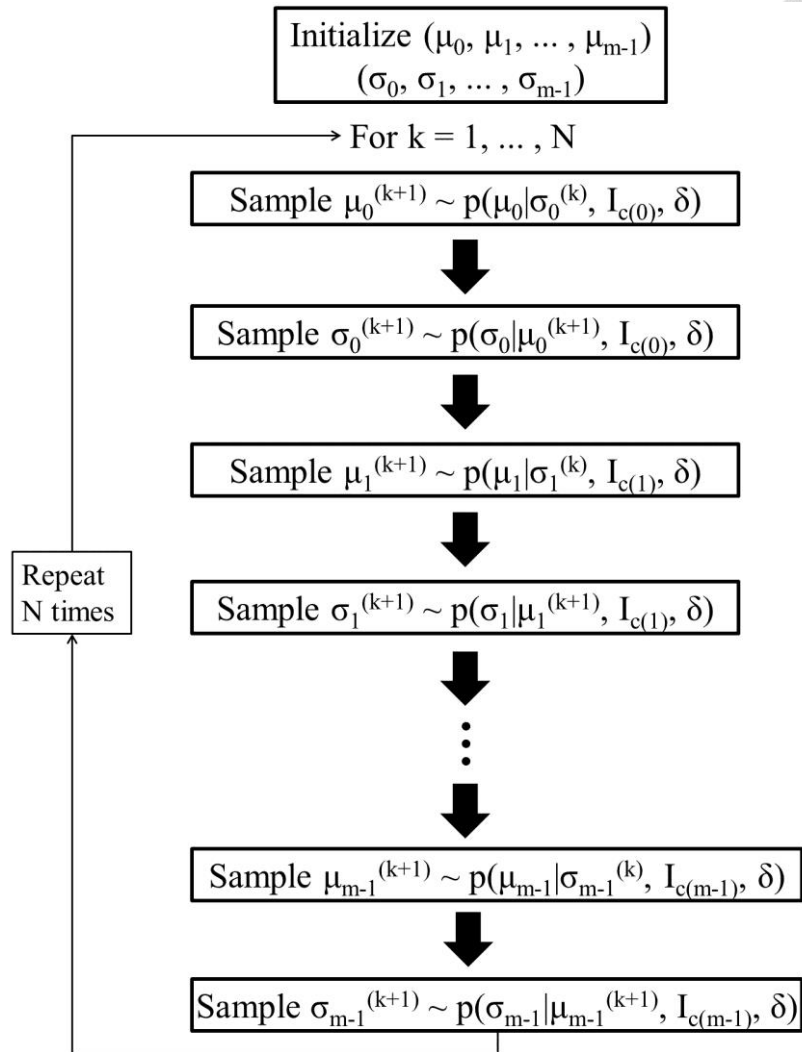
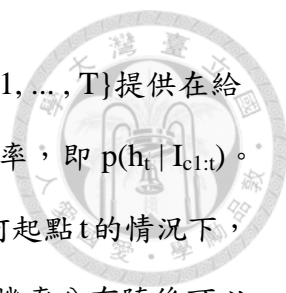


圖 3-2 I_c 參數 μ_i 與 σ_i 之吉布斯抽樣法更新順序

3.1.3 前向—後向遞迴 (forward-backward recursions, FB recursions)

FB 遞迴的介紹：

前向—後向遞迴 (FB 遞迴) 是 HMM 的推演算法，最早是 Baum et al. (1970) 所開發的，在給定觀察序列 $I_{c1:T} := I_{c1}, \dots, I_{cT}$ 的情況下，它計算所有隱藏狀態變數的後驗邊際機率分布，也就是計算所有隱藏狀態變數 $h_t \in \{h_1, \dots, h_T\}$ 的機率分布 $p(h_t | I_{c1:T})$ 。這個推算任務一般稱作平滑 (smoothing)，FB 遞迴利用動態程序設計原理，在兩段歷程中，高效計算獲得後驗邊際分布所需的值，第一段歷程照著序列的順序往前走，而第二段往後走，因此這個程序被稱為前向—後向遞迴。



在第一段歷程，FB 遞迴計算一組前向機率，其為所有 $t \in \{1, \dots, T\}$ 提供在給定序列中前 t 個觀察值 $I_{c1:t}$ 的情況下，以任何特定狀態結束的機率，即 $p(h_t | I_{c1:t})$ 。在第二段歷程中，該演算法計算一組後向機率，其提供在給定任何起點 t 的情況下，觀察從 $t+1$ 到 T 的觀察值 $I_{ct+1:T}$ 之機率，即 $p(I_{ct+1:T} | h_t)$ 。這兩組機率分布隨後可以被組合，以獲得在給定整個觀察序列 $I_{c1:T}$ 的任何特定時間點上的狀態分布 $p(h_t | I_{c1:T})$ 。

如上所述，完整的 FB 遞迴包含三個步驟：(1) 計算前向機率、(2) 計算後向機率和(3) 計算平滑值 (smoothed values)，在序列的每一個觀察值中，機率被一個一個計算出來，平滑步驟可以在後向的過程中一起計算，平滑步驟允許演算法考慮過去任何輸出觀察值，以計算更準確的結果。FB 遞迴用於在任何時間點找到最可能的狀態，然而它不能用於找到最可能的狀態序列。

FB 遞迴的理論：

在實際計算上，根據 Scott (2002) 解釋，FB 遞迴的前向遞迴累積關於 h_t 分布的資訊，一旦從所有觀測資料都收集到了資訊，後向遞迴便更新在前向步驟中計算的 h_t 的分布。一種表達 FB 遞迴的形式為產生矩陣 $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_T$ ，其中 $\mathbf{P}_t = (p_{trs})$ ，而 $p_{trs} = p(h_{t-1} = r, h_t = s | I_{c1:t}, \boldsymbol{\theta})$ ， r 與 s 分別代表 h_{t-1} 與 h_t 的狀態， $\boldsymbol{\theta}$ 為參數向量，也就是說， \mathbf{P}_t 是在給定模型參數和 $I_{c1:t}$ 的情況下， (h_{t-1}, h_t) 的聯合分布。前向遞迴中從 \mathbf{P}_{t-1} 計算 \mathbf{P}_t 的公式如下：

$$\begin{aligned} p_{trs} &\propto p(h_{t-1} = r, h_t = s, I_{ct} | I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta}) \\ &= \pi_{t-1}(r | \boldsymbol{\theta})q(r,s)p(I_{ct} | h_{t-1} = r, h_t = s, I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta}) \end{aligned} \quad (3.13)$$

其中 p_{trs} 的比例必須符合 $\sum_r \sum_s p_{trs} = 1$ 。而 $q(r,s) =$ 轉移機率矩陣 \mathbf{Q} ， $p(I_{ct} | h_{t-1} = r, h_t = s, I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta})$ 為在給定狀態 r 、 s 、資料 $I_{c1:t-1}$ 和參數 $\boldsymbol{\theta}$ 的情況下， I_{ct} 的機率分布。而 $\pi_t(s | \boldsymbol{\theta}) = p(h_t = s | I_{c1:t}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_r p_{trs}$ (在時間 t 時)，它在 \mathbf{P}_t 求得後便能計算出來，從而設置遞迴的下一步。

在後向遞迴中，我們用 $\mathbf{P}'_1, \dots, \mathbf{P}'_T$ 取代 $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_T$ ，其中 $\mathbf{P}'_t = (p'_{trs})$ ，為給定模型參數和 $I_{c1:T}$ 之 (h_{t-1}, h_t) 的條件分布， \mathbf{P}'_t 與 \mathbf{P}_t 的差異為 \mathbf{P}'_t 以所有的觀察資料為條件，而 \mathbf{P}_t 僅以時間 1 至 t 所觀察到的資料為條件。我們可以推知 $\mathbf{P}'_T = \mathbf{P}_T$ ，並使用貝氏定理從 \mathbf{P}_t 和 \mathbf{P}'_{t+1} 獲得 \mathbf{P}'_t ：

$$\begin{aligned} p'_{trs} &= p(h_{t-1} = r \mid h_t = s, I_{c1:T}, \boldsymbol{\theta}) p(h_t = s \mid I_{c1:T}, \boldsymbol{\theta}) \\ &= p(h_{t-1} = r \mid h_t = s, I_{c1:t}, \boldsymbol{\theta}) \pi'_t(s \mid \boldsymbol{\theta}) \\ &= p_{trs} \frac{\pi'_t(s \mid \boldsymbol{\theta})}{\pi_t(s \mid \boldsymbol{\theta})} \end{aligned} \quad (3.14)$$

其中 $\pi'_t(s \mid \boldsymbol{\theta}) \equiv p(h_t = s \mid I_{c1:T}, \boldsymbol{\theta}) = \sum_r p'_{(t+1),r,s}$ ，稱為後向變數。

HMM 土壤分層法使用 FB 遞迴之假設與推導：

前向遞迴：

對 $t = 1, \dots, T$ ，前向遞迴使用(3.13)式計算 \mathbf{P}_t 矩陣，因此我們需要知道以下三個部分：

(1) $\pi_{t-1}(r \mid \boldsymbol{\theta})$ ：

初始邊際機率 $\pi_0(s \mid \boldsymbol{\theta})$ 可假設為均勻機率分布，之後的 $\pi_t(s \mid \boldsymbol{\theta})$ 則在 \mathbf{P}_t 求出後，計算 $\sum_r p_{trs}$ 來求得。

(2) $q(r,s)$ ：

$q(r,s)$ 即為轉移機率矩陣 \mathbf{Q} ，在第一次吉布斯迴圈計算 ($k = 1$) 時， \mathbf{Q} 使用(3.2)式所計算之結果，在第二次迴圈以後 (即 $k = 2, \dots, N$) 之 \mathbf{Q} 矩陣則依照 3.1.4 節之(3.23)式來計算，為了讓 \mathbf{Q} 能隨著馬爾可夫鏈變化。

(3) $p(I_{ct} \mid h_{t-1} = r, h_t = s, I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta})$ ：

在這個條件機率中，我們有一個重要假設：第一，當 $(h_{t-1} = r) = (h_t = s)$ 時， I_{ct} 將與 I_{ct-1} 有自相關性，但與 I_{ct-1} 之外的其他 $I_{c1:t-2}$ 獨立。第二，當 $(h_{t-1} = r) \neq (h_t = s)$ 時， I_{ct} 將與 $I_{c1:t-1}$ 全部互相獨立。如此假設的物理意義為我們希望在相同土壤種類的地層中，即 $r = s$ 的情況， I_{ct} 會與前一個資料點 I_{ct-1} 有自相關性，與 3.1.1 節提到



之相同土壤種類的 I_c 值可用穩態高斯隨機場描述之假設一致；而 I_c 在地層層面處，即 $r \neq s$ 的情況，兩種不同土壤種類之 I_c 互相獨立，也與之前的假設一致。因此：

i. 當 $r = s = i$ ，假設以 I_{ct-1} 為條件之 I_{ct} 的分布為常態分布：

$$p(I_{ct} | h_{t-1} = r, h_t = s, I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta}) = p(I_{ct} | I_{ct-1}, s = i, \boldsymbol{\theta}) \sim \mathcal{N}(\mu_{|t-1}, \sigma_{|t-1}^2) \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \mu_{|t-1} &= E[I_{ct} | I_{ct-1}, \boldsymbol{\theta}] \\ &= E[I_{ct} | \boldsymbol{\theta}] + \text{COV}[I_{ct}, I_{ct-1} | \boldsymbol{\theta}] \text{Var}[I_{ct-1} | \boldsymbol{\theta}]^{-1} [I_{ct-1} - E(I_{ct-1} | \boldsymbol{\theta})] \\ &= \mu_i + \sigma_i^2 \times \exp\left(-\frac{2|\Delta z|}{\delta}\right) \times \sigma_i^{-2} \times (I_{ct-1} - \mu_i) \\ &= \mu_i + \exp\left(-\frac{2|\Delta z|}{\delta}\right) \times (I_{ct-1} - \mu_i) \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{|t-1}^2 &= \text{Var}[I_{ct} | I_{ct-1}, \boldsymbol{\theta}] \\ &= \text{Var}[I_{ct} | \boldsymbol{\theta}] - \text{COV}[I_{ct}, I_{ct-1} | \boldsymbol{\theta}] \times \text{Var}[I_{ct-1} | \boldsymbol{\theta}]^{-1} \times \text{COV}[I_{ct-1}, I_{ct} | \boldsymbol{\theta}] \\ &= \sigma_i^2 - \left[\exp\left(-\frac{2|\Delta z|}{\delta}\right) \sigma_i^2 \right]^2 \times \sigma_i^{-2} \\ &= \sigma_i^2 \left[1 - \exp\left(-\frac{4|\Delta z|}{\delta}\right) \right] \end{aligned} \quad (3.17)$$

其中 $\mu_{|t-1}$ 為以 I_{ct-1} 為條件之 I_{ct} 的平均值， $\sigma_{|t-1}^2$ 為以 I_{ct-1} 為條件之 I_{ct} 的變異數， μ_i 為第 i 分群之 $I_{c(i)}$ 的平均值， σ_i^2 為第 i 分群之 $I_{c(i)}$ 的變異數， $\Delta z = z_t - z_{t-1}$ ，為兩點深度間距， δ 為 I_c 的關聯性長度。將 $\mu_{|t-1}$ 和 $\sigma_{|t-1}^2$ 代入高斯分布機率密度函數公式中，

可以推導出 $p(I_{ct} | I_{ct-1}, s = i, \boldsymbol{\theta})$ ：

$$\begin{aligned} &p(I_{ct} | I_{ct-1}, s = i, \boldsymbol{\theta}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sigma_i \sqrt{1 - \exp(-4|\Delta z|/\delta)}} \exp \left\{ -\frac{1}{2\sigma_i^2(1 - \exp(-4|\Delta z|/\delta))} \left[I_{ct} - \left[\mu_i + \exp\left(-\frac{2|\Delta z|}{\delta}\right) \times (I_{ct-1} - \mu_i) \right] \right]^2 \right\} \end{aligned} \quad (3.18)$$

ii. 當 $r \neq s$ ，假設 $p(I_{ct} | h_{t-1} = r, h_t = s, I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta})$ 為互相獨立之常態分布：



$$p(I_{ct} | h_{t-1} = r, h_t = s, I_{c1:t-1}, \boldsymbol{\theta}) = p(I_{ct} | h_t = s, \boldsymbol{\theta}) \sim \mathcal{N}(\mu_i, \sigma_i^2) \quad (3.19)$$

$$p(I_{ct} | h_t = s, \boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_i} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma_i^2} (I_{ct} - \mu_i)^2 \right] \quad (3.20)$$

可以發現上式正好是(3.18)式在 $\delta = 0$ 時的特例。有了(3.13)的三個部分之定義，我們便可以在前向遞迴中計算每個時間 t 時的 \mathbf{P}_t 矩陣與邊際機率 $\pi_t(s | \boldsymbol{\theta})$ ，直到 $t = T$ 為止。

後向遞迴：

前向遞迴計算完成之後，我們得到矩陣 $\mathbf{P}_1, \dots, \mathbf{P}_T$ ，與邊際機率 $\pi_1(s | \boldsymbol{\theta}), \dots, \pi_T(s | \boldsymbol{\theta})$ ，利用 $\pi'_T(s | \boldsymbol{\theta}) = \pi_T(s | \boldsymbol{\theta})$ 的性質，我們可以從機率 $\pi'_T(s | \boldsymbol{\theta})$ 抽出 h_T 的狀態，接著因為 $\mathbf{P}'_T = \mathbf{P}_T$ ，我們可以從 \mathbf{P}'_T 求得 $\pi'_{T-1}(s | \boldsymbol{\theta})$ ，並從機率 $\pi'_{T-1}(s | \boldsymbol{\theta})$ 抽出 h_{T-1} 的狀態，然後從 \mathbf{P}'_T 和 \mathbf{P}_{T-1} 求得 \mathbf{P}'_{T-1} ，以此類推，從 \mathbf{P}'_{t+1} 求得 $\pi'_t(s | \boldsymbol{\theta})$ ，根據 $\pi'_t(s | \boldsymbol{\theta})$ 抽出 h_t 的狀態，再根據 \mathbf{P}'_{t+1} 和 \mathbf{P}_t 求得 \mathbf{P}'_t ，直到 $t = 1$ 為止。

前向遞迴和後向遞迴都完成之後，我們便完成了平滑任務，FB 遞迴考慮了所有輸出觀察值 $I_{c1:T}$ ，在任何時間點找到其最可能的狀態，最終形成一條隱馬爾可夫鏈。

3.1.4 轉換機率矩陣的更新

初始轉換機率矩陣 \mathbf{Q}_1 我們假設為(3.2)式，其狀態保持一樣的機率 q_1 設為 0.9，然而，我們希望 q 值在第二次 Gibbs 迴圈之後，能根據馬爾可夫鏈 \mathbf{h}_k 更新，其中 $k = 1, \dots, N$ ，如此一來，在 \mathbf{h}_k 達到收斂狀態時， q 值也能一起收斂，所以我們根據長度為 T 的馬爾可夫鏈 \mathbf{h}_k 發生 (*jump*) 次狀態改變的機率：

$$w(q) = (1 - q)^{\text{jump}} \times (q)^{\text{stay}} \quad , \quad 0 \leq q \leq 1 \quad (3.21)$$

其中 q 為狀態保持一樣的機率變數，(*jump*) = \mathbf{h}_k 序列中狀態發生變化的次數，(*stay*) = \mathbf{h}_k 序列中狀態保持一樣的次數，(*jump*) + (*stay*) = $T - 1$ 。我們將 q 的機率密度函數假設為：



$$p(q) = \frac{w(q)}{\int_0^1 w(q) dq} \quad (3.22)$$

接著便可以使用蒙地卡羅方法從 $p(q)$ 分布中抽出一個樣本 q_k ，更新原來的轉換機率，如此一來， q 值便從原本的 0.9，每經過一次迴圈便根據馬爾可夫鏈的狀態改變次數做變化，改變次數愈少， q_k 愈接近 1，改變次數愈多， q_k 愈接近 0，並且在馬爾可夫鏈收斂之後， q_k 的變化也達穩定狀態。

在新的 q_k 被抽樣出來之後，我們便可以計算新的轉換機率矩陣 \mathbf{Q}_k ，以利下一次 FB 遞迴的進行：

$$\mathbf{Q}_k = \begin{bmatrix} q_k & \frac{1-q_k}{m-1} & \cdots & \frac{1-q_k}{m-1} \\ \frac{1-q_k}{m-1} & q_k & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \frac{1-q_k}{m-1} \\ \frac{1-q_k}{m-1} & \frac{1-q_k}{m-1} & \cdots & q_k \end{bmatrix} \quad (3.23)$$

3.1.5 似然遞迴 (likelihood recursion) 與分群分數

似然遞迴：

有了本章前幾節的方法之後，基本上我們已經可以進行 HMM 土壤分層法，然而我們尚未探討的問題是：究竟多大的分群數(狀態數) m 才最適合所輸入的資料 $I_{c1:T}$ ？為了分析這個問題，我們採用的方法是似然遞迴。

似然遞迴是計算似然函數 $p(I_{c1:T} | \theta)$ 的程序，根據 Scott (2002) 解釋，我們定義所謂的前向變數 (forward variable) $l_t(h_t) \equiv p(I_{c1:t}, h_t | \theta)$ ，也就是， $l_t(s)$ 是 $I_{c1:t}$ 和 h_t 的聯合似然性貢獻，來自 $I_{c1:t}$ 的似然性貢獻為 $l_t^* = \sum_{s=0}^{m-1} l_t(s)$ ，其中當 $t=T$ 時，我們便得到了 $p(I_{c1:T} | \theta)$ 。似然遞迴是從 $l_{t-1}(r)$ 來計算 $l_t(s)$ 的，在計算 $l_t(s)$ 之前，與 3.1.3 節一樣，我們假設兩種情況：(1) 當 $(h_{t-1} = r) \neq (h_t = s)$ 時， I_{ct} 將與 $I_{c1:t-1}$ 全部互相獨立；(2) 當 $(h_{t-1} = r) = (h_t = s)$ 時， I_{ct} 將與 I_{ct-1} 有自相關性，但與 I_{ct-1} 之外的其他 $I_{c1:t-2}$ 獨立。



i. 當 $r \neq s$ ，前向變數的遞迴公式推導如下：

$$\begin{aligned}
 l_t(s) &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct}, I_{c1:t-1}, s, r | \boldsymbol{\theta}) \\
 &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct}, I_{c1:t-1} | s, r, \boldsymbol{\theta}) p(s, r | \boldsymbol{\theta}) \\
 &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct} | s, \boldsymbol{\theta}) p(I_{c1:t-1} | r, \boldsymbol{\theta}) p(r | \boldsymbol{\theta}) p(s | r) \\
 &= p(I_{ct} | s, \boldsymbol{\theta}) \sum_{r=0}^{m-1} q(r, s) l_{t-1}(r) \tag{3.24}
 \end{aligned}$$

然而 Chib (1996) 觀察到(3.24)式計算時並不穩定，因為其計算的是似然性，而不是對數似然性，不過存在(3.24)式的穩定修正方法，我們定義 $\pi_t(s | \boldsymbol{\theta}) = l_t(s) / l_t^* = p(h_t = s | I_{c1:t}, \boldsymbol{\theta})$ ，還有令 $M_t = \max_s \ln\{p(I_{ct} | s, \boldsymbol{\theta}) \sum_r q(r, s) \pi_{t-1}(r | \boldsymbol{\theta})\}$ ，便可以證明 $\ln l_t^*$ 遵從下列遞迴關係：

$$\begin{aligned}
 \ln l_t^* &= \ln l_{t-1}^* + M_t \\
 &\quad + \ln \left\{ \sum_{s=0}^{m-1} \exp \left[\ln p(I_{ct} | s, \boldsymbol{\theta}) \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \ln \left(\sum_{r=0}^{m-1} \pi_{t-1}(r | \boldsymbol{\theta}) q(r, s) \right) - M_t \right] \right\} \tag{3.25}
 \end{aligned}$$

上式在乘冪之前就對 $\ln \pi_t(s | \boldsymbol{\theta})$ 的每個分量進行縮放，以防止電腦溢位，然後透過縮放因子和 $\pi_t(s | \boldsymbol{\theta})$ 的正規化常數的對數來增加 $\ln l_t^*$ 的值。其中 $p(I_{ct} | s, \boldsymbol{\theta})$ 與 FB 遞迴中的(3.20)式相同， $q(r, s)$ 和 $\pi_{t-1}(r | \boldsymbol{\theta})$ 也都與之前相同，因此似然遞迴可以和 FB 遞迴的前向階段一起計算，無須分開進行。

ii. 當 $r = s$ 時， I_{ct} 與 I_{ct-1} 有自相關性，則前向變數的遞迴公式會變成：

$$\begin{aligned}
 l_t(s) &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct}, I_{c1:t-1}, s, r | \boldsymbol{\theta}) \\
 &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct}, I_{c1:t-1} | s, r, \boldsymbol{\theta}) p(s, r | \boldsymbol{\theta}) \\
 &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct} | I_{c1:t-1}, s, r, \boldsymbol{\theta}) p(I_{c1:t-1} | r, \boldsymbol{\theta}) p(r | \boldsymbol{\theta}) p(s | r) \tag{3.26}
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct}|I_{ct-1}, s, r, \theta) p(I_{c1:t-1}, r|\theta) p(s|r) \\
 &= \sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct}|I_{ct-1}, s, r, \theta) q(r, s) l_{t-1}(r)
 \end{aligned}$$

而 M_t 在這個情況下變為： $M_t = \max_s \ln \{ \sum_r p(I_{ct} | I_{ct-1}, r = s, \theta) q(r, s) \pi_{t-1}(r | \theta) \}$ ，而穩定性修正公式推導結果如下：

$$\begin{aligned}
 &\ln l_t^* \\
 &= \ln l_{t-1}^* + M_t \\
 &+ \ln \left\{ \sum_{s=0}^{m-1} \exp \left[\ln \left(\sum_{r=0}^{m-1} p(I_{ct} | I_{ct-1}, r = s, \theta) q(r, s) \pi_{t-1}(r | \theta) \right) - M_t \right] \right\} \quad (3.27)
 \end{aligned}$$

其中 $p(I_{ct} | I_{ct-1}, r = s, \theta)$ 與 FB 遞迴中的(3.18)式相同， $q(r, s)$ 和 $\pi_{t-1}(r | \theta)$ 也都與之前相同，因此在這個情況似然遞迴仍然可以和 FB 遞迴的前向階段一起計算。

分群分數：

因為當 $t = T$ 時， $l_T^* = p(I_{c1:T} | \theta)$ ，我們可以利用它來發展「分群分數」的概念，即利用 l_T^* 計算出 $I_{c1:T}$ 對於不同 θ 的似然性，模型參數 θ 在不同的分群數 m 會有不同的參數數量，而最適合 $I_{c1:T}$ 的參數 θ ，其似然函數 $p(I_{c1:T} | \theta)$ 的值將會最大，也就是「分群分數」 l_T^* 會最高，由此可以找出多大的 m 會是最佳分群數。

實際計算時，我們設定分群數 $m = 1, 2, \dots$ ，直到某正整數上限，然後蒐集每一次 Gibbs 迴圈中似然遞迴所計算出的 l_T^* ，扣除預燒期的部分之後，計算其平均值，即得到此 m 值情況下的「分群分數」，然後重覆計算在不同 m 值的情況下的分群分數，其中分群分數最大的 m 值即為最佳分群數。然而，此法的缺點為為了獲得最佳分群數，必須不斷重複進行不同 m 值的 HMM 土壤分層法，增加計算時間。

以圖 3-1(a)的情況為例，將此模擬 I_c 資料輸入至 HMM 土壤分層法計算似然遞迴之 $\ln l_T^*$ ，從 $m = 1$ 開始，分析一次 HMM 得到此次分群分數 $\ln l_T^*$ 的平均值，再換 $m = 2$ 分析一次，得到 $m = 2$ 之分層分數，重複這個過程，一直到 $m = 6$ 為止，如圖 3-3 所示，我們得到了 6 個分群分數 $\ln l_T^*$ ，可以發現分數在 $m = 1$ 和 2 時很小，在 $m = 3$ 時為最大值，在 $m = 4, 5, 6$ 時緩慢下降，表示 3 群即為最佳分群數，與我



們在圖 3-1(a)的直覺相符。

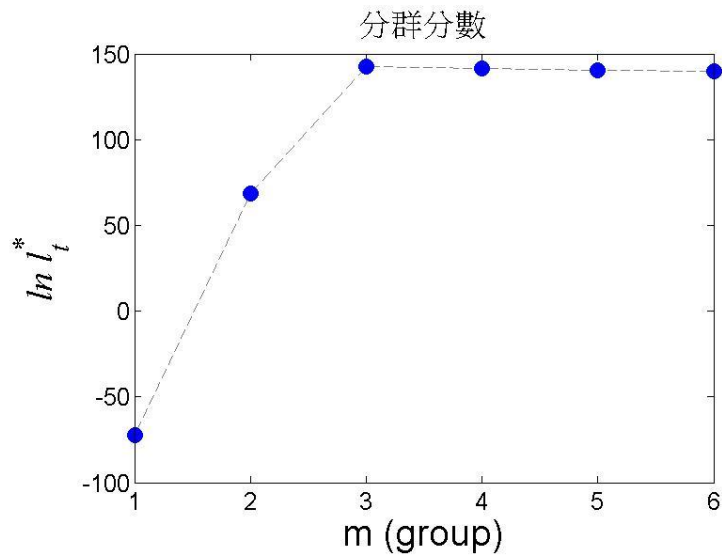


圖 3-3 三土層 I_c 模擬資料之似然遞迴分群分數

3.1.6 HMM 土壤分層法使用流程與輸出結果

使用流程：

本研究方法之 Matlab function—「HMM_Stratification」已經被開發出來，以下總結使用 HMM 土壤分層法的流程：

步驟 1：給定欲輸入之土壤行為指數 I_c 資料與其相對應之 z 深度，設定想要進行的分層數 m 、疊代次數 N ，還有預計捨棄之預燒期長度 B ，分析之前，需要用(3.1)式估算全體 I_c 之關聯性長度 δ ，然後將這些參數輸入至程式中。

步驟 2：假設參數初始值 $\mu = [2, 4, \dots, 2m]$ 、 $\sigma = [2, 2, \dots, 2]$ ， μ 的先驗超參數 $\mu_h = [1, 3, \dots, 2m-1]$ 、 $\sigma_h = [2, 2, \dots, 2]$ ， σ 的先驗超參數 $\alpha_h = [0.01, 0.01, \dots, 0.01]$ 、 $\beta_h = [0.01, 0.01, \dots, 0.01]$ ，還有假設轉換機率矩陣初始保持一樣的機率 $q_1 = 0.9$ ，最後使用 K-means 分群法對 I_c 進行分群，將分群結果當作初始狀態序列 h_1 。

步驟 3：進行 Gibbs sampling，計算後驗超參數 $\mu_{p(i)}$ 與 $\sigma_{p(i)}$ ，再透過蒙地卡羅方法抽



出一個新的 μ_i 樣本；計算後驗超參數 $\alpha_{p(i)}$ 與 $\beta_{p(i)}$ ，再透過蒙地卡羅方法抽出一個新的 σ_i 樣本。

步驟 4：進行 FB 遞迴與似然遞迴，FB 遞迴產生新的狀態序列 \mathbf{h}_k ，似然遞迴計算新的 $\ln l_T^*$ 。

步驟 5：更新轉換機率矩陣 \mathbf{Q} ，計算(3.22)式之機率分布，透過蒙地卡羅方法從中抽出一個新的 q_k 樣本，以此計算新的 \mathbf{Q}_k 矩陣。

步驟 6：重複步驟 3~5 一共 N 次，最後會分別得到 N 組 $\boldsymbol{\mu}$ 、 $\boldsymbol{\sigma}$ 和 \mathbf{h} ，還有 N 個 $\ln l_T^*$ 。

輸出結果：

將 N 個 $\ln l_T^*$ 扣除一開始預燒期範圍 B 個之後，計算其平均值，即得到本次 m 群情況下的分群分數。將 N 組馬爾可夫鏈 \mathbf{h} 扣除前面的 B 組後，計算各個土壤種類在每一點深度時的出現機率，即得到圖 3-4(b)，舉例來說，在某個深度點 z_t ，全部 $(N-B)$ 條馬爾可夫鏈 \mathbf{h} 在該點的狀態皆為 0 的話，則種類 0 在該點的機率將會是 1。所以我們根據圖 3-4(b) 之各個種類機率，將每一個深度點 z_t 的最高機率種類定義為該點的土壤種類，因此在佔優勢的種類發生變化時，該處將會形成一個層面，最後我們可以得到一個更直觀的分層剖面圖，如圖 3-4(c) 所示。

將 N 組 $\boldsymbol{\mu}$ 與疊代次數 N 作圖，可以得到圖 3-5(a)，我們可以藉由 μ_i 的更新狀況觀察它在 N 等於多少時達到收斂狀態。而將 $(N-B)$ 組 $\boldsymbol{\mu}$ 與 $(N-B)$ 組 $\boldsymbol{\sigma}$ 作圖，可以得到圖 3-5(b)，這是由 $(N-B)$ 次 Gibbs sampling 所得到的近似 μ_i 與 σ_i 之聯合機率分布，可以藉由此圖觀察每一分群之差異。

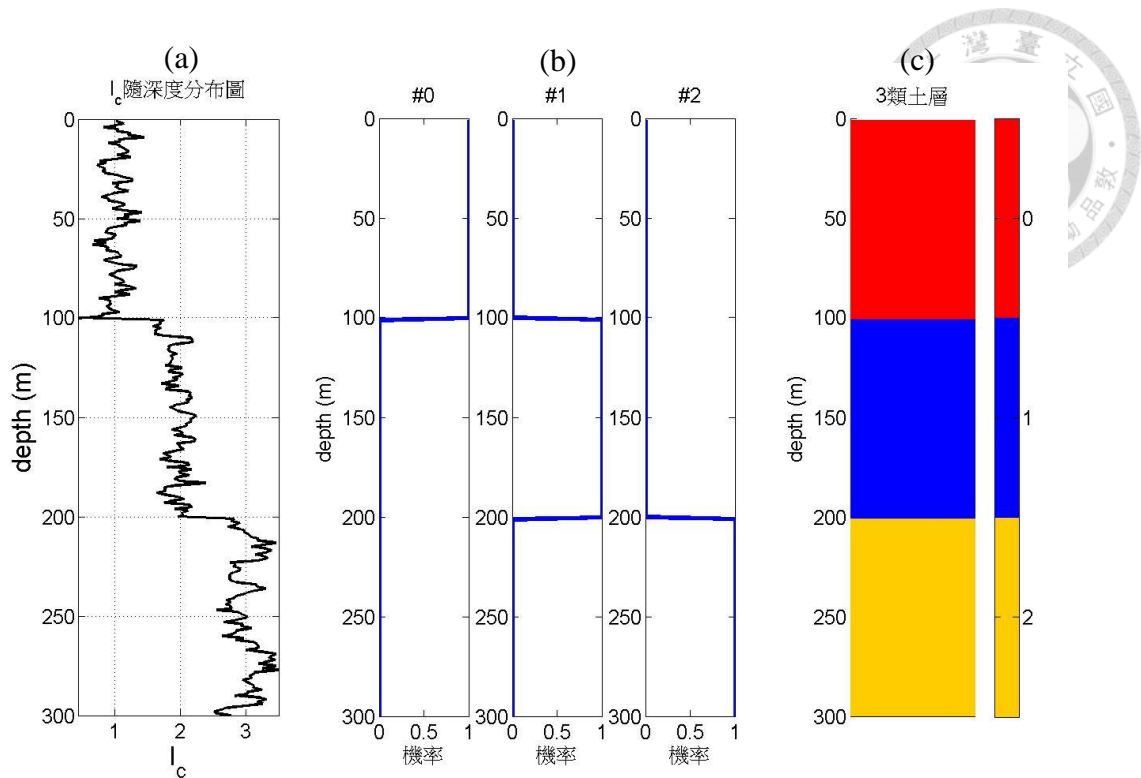


圖 3-4 HMM 土壤分層法結果；(a) 輸入資料 I_c 隨深度分布圖；(b) 由(N-B)條馬爾可夫鏈計算之土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。

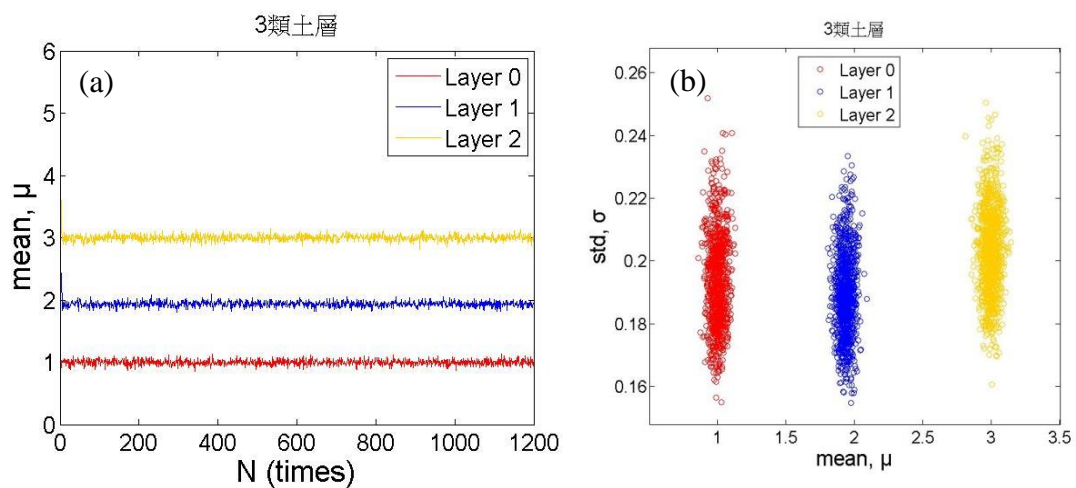


圖 3-5 吉布斯抽樣法結果；(a) 參數 μ_i 與疊代次數 N 演變圖；(b) μ_i 與 σ_i 於 Gibbs sampling 中(N-B)次抽樣樣本分布圖。

3.1.7 預燒期 (burn-in period)問題

預燒期是 Gibbs sampling 等 MCMC 演算法從初始狀態到達穩態之前的時階區

間，這段區間所取出的樣本原則上與後驗機率分布的相關性非常小，並非演算法真正想取得的樣本，最簡單的方法是以人工的方式找出預燒期，再將其刪去，或是像我們採用的第二種方法：產生足夠多的樣本 (N 個)，再捨棄掉可能是預燒期的前面 B 個樣本，最後得到 $N-B$ 個達穩態的樣本。

然而，我們發現 HMM 土壤分層法在長度 T 大於 400，並且分群數 $m \geq 5$ 時，很容易分層失敗，如圖 3-6(a)、(b)、(c) 所示，它們顯示長度 600 單位之 I_c 模擬資料透漏出 6 層的土層資訊，但是 HMM 土壤分層法卻誤將兩層合為一層，使得種類 5 號從未出現。而圖 3-7(a)、(b) 則顯示第 5 群之 μ_5 與 σ_5 具有非常長的預燒期，不斷地在探索參數空間，始終未達收斂狀態，形成「預燒期問題」。

因為長度 T 愈長、群數 m 愈多的情況下，HMM 的複雜度就愈高，使得初始值 h_1 的選定變得相當重要，不良的初始值選擇可能會大大增加預燒期長度 (Walsh, 2004)，甚至產生始終未達穩態的預燒期問題，如上一段所述。雖然理論上進行近乎無限次的疊代將可以看到收斂的結果，但是在有限的運算時間內我們無法辦到。為了降低預燒期的影響，對於初始值給定的建議是盡可能地接近平穩狀態。

因此我們採用 K-means 分群法對 I_c 資料初步分群，將分群結果作為 HMM 初始狀態序列 h_1 ，使 h_1 更接近平穩時的狀態序列，以此方法降低預燒期問題出現的機率。其中 K-means 分群法是 MacQueen (1967) 提出的分群演算法，原本是訊號處理中的一種向量量化方法，現今則更常作為一種分群分析方法，流行於資料探勘領域，K-means 分群的核心概念是：把 T 個點劃分到 m 個分群中，使得每個點都屬於離它最近的分群中心所對應的分群，以之作為分群的標準；做法為先選擇分群數 m ，接著任意產生 m 個分群，然後確定分群中心，或者直接生成 m 個中心，再來對每個點計算其與各個分群中心的距離，將該點歸類到最近的分群中心那一組，然後計算每個分群的質心，取代原本的分群中心，最後重複以上步驟直到滿足收斂要求。該算法的最大優點在於簡潔和快速，缺點在於對於一些結果並不能夠滿足需要，因為結果往往需要隨機點的選擇非常巧合。

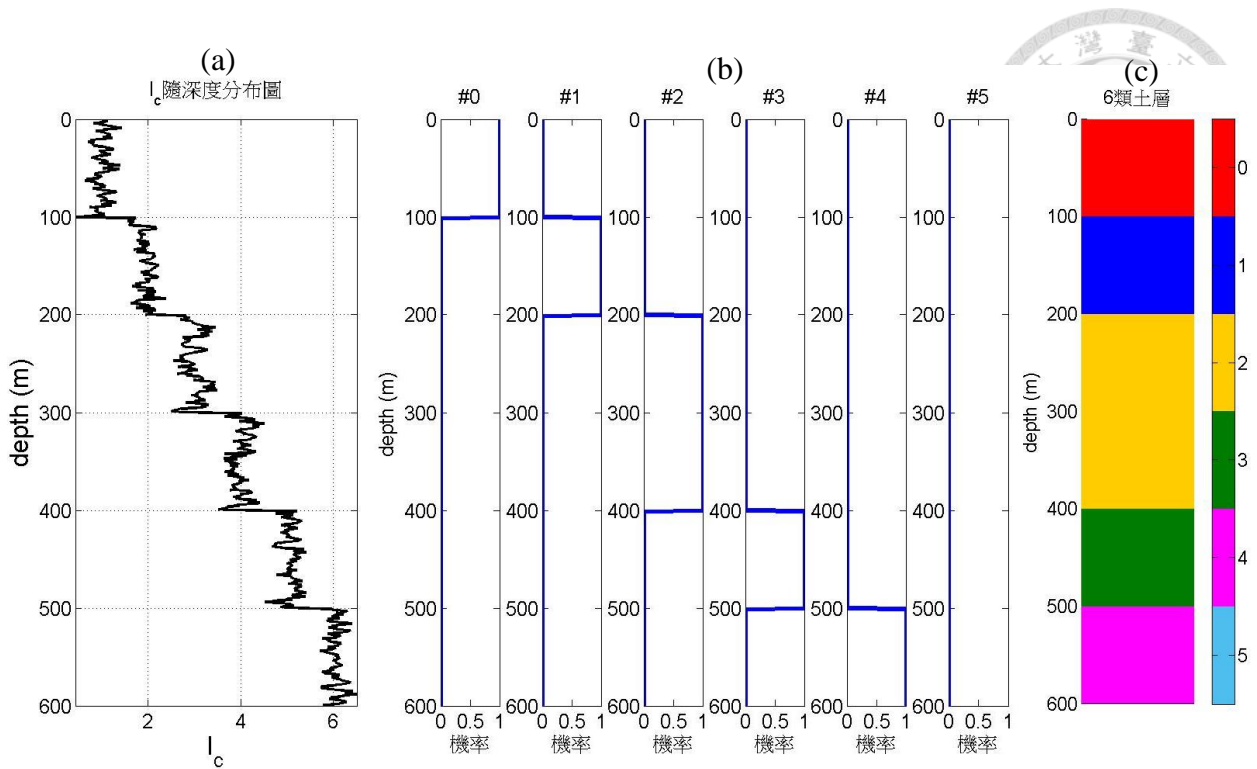


圖 3-6 失敗之 HMM 土壤分層法結果；(a) 6 層之模擬 I_c 分布圖；(b) 只劃分了 5 層之種類機率演變圖，其中狀態 5 號未出現於任何深度；(c) 只劃分了 5 層之最高機率分層圖。

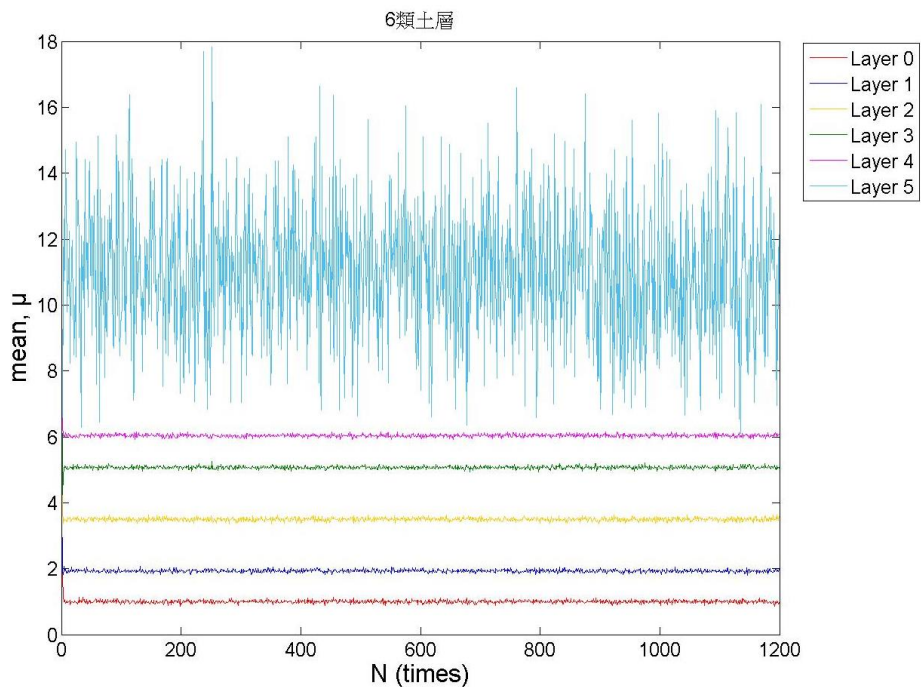


圖 3-7 分層失敗之參數 μ_i 與疊代次數 N 演變圖，其中 μ_5 一直處於預燒期狀態，不收斂。

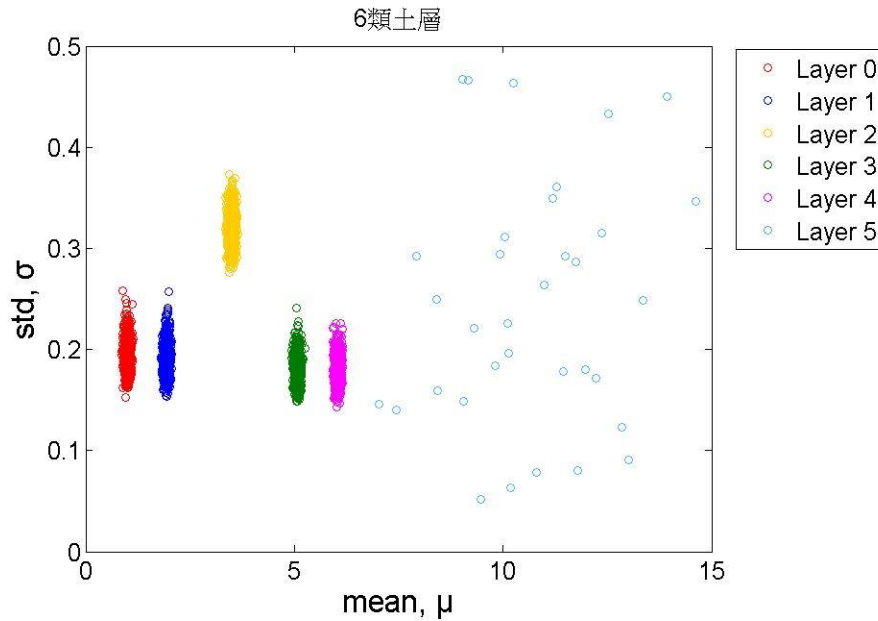


圖 3-8 分層失敗之 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖，其中 (μ_5, σ_5) 一直處於預燒期狀態，不收敛。

3.2 多維土壤剖面預測

本研究的第二部分是以一維土壤分層為基礎，嘗試結合前人開發的多維土壤種類預測模型，探討以 CPT 資料建立多維土壤分層模型的可行性。一維土壤分層我們有本研究開發之 HMM 土壤分層法，與 Ching et al. (2015) 提出之 WTMM 法，然而我們只選擇 WTMM 法參與多維土壤剖面預測，這是因為該方法具有計算快速，層面清楚準確，分類簡單等優點，如之後的 4.1.6 節所述。在進行多維土壤剖面預測之前，我們先對 WTMM 法發展一些延伸應用，然後回顧在多維土壤剖面預測方面表現穩定的廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (generalized coupled Markov chain model, GCMC model) (Park, 2010)，最後結合這兩種方法進行多維分層案例分析。

3.2.1 WTMM 法的延伸應用

2.1.2 節回顧了 Ching et al. (2015) 所開發之 WTMM 法，它能分析 I_c 訊號的跳動點，然後找出可能的層面，最後依照 SBTn 圖判別該層土壤種類。我們為了之後多維土壤剖面分析上的方便性，在此以 WTMM 法為基礎來發展一些延伸應用，如下



述之四分法、三分法等。

SBT 九分法：

原始 WTMM 法決定層面之間土壤種類的方法即為 SBT 九分法，SBT 九分法的做法為已知某土層的上、下層面之後(如圖 3-9(a)所示)，將屬於該層之 I_c 資料點所對應之 F_r 、 Q_t 資料點繪至 SBTn 圖中(如圖 3-9(c)所示)，統計 9 個區域各自所包含的資料數，以比例最高者獲判為該土層種類之代表(如圖 3-9(b))。

然而觀察圖 3-9(c)可以發現，雖然 SBT 5 獲判為該土層種類代表，但是 SBT 6 也有不容忽視的高比例，為了方便觀察某土層各個 SBT 分類之比例，我們可以繪出如圖 3-10 之 SBT 機率圖，其同一層之機率總和為 1。可以發現該圖與 HMM 法之土壤種類機率圖(圖 3-4(b))類似，但是生成原理不同，WTMM 法是根據該層 F_r 、 Q_t 資料點座落於 SBTn 圖各區域之比例所繪出，而 HMM 法是根據 N-B 條馬爾可夫鏈計算每個種類出現機率所繪出的。

黏土、粉土、砂土與礫質砂之四分法：

有了 SBT 九分法的基礎之後，接下來我們為了簡化研究問題，透過重新定義 SBTn 圖的劃分，如圖 3-11 所示，我們把 SBT 1~3 結合，定義為「黏土區」；把 SBT 4、9 結合，定義為「粉土區」；把 SBT 5、6、8 結合，定義為「砂土區」；把 SBT 7 定義為「礫質砂區」，如此一來土壤種類便從九種縮減為四種，分類更簡單，名稱更直觀，讓使用者對結果更有概念。

拿上一段的例子示範，輸入與圖 3-9 相同的資料進行四分法，該層土壤種類將會從原本的 SBT 5 變成砂土，如圖 3-12(a)所示。而該土層之四分法機率圖如圖 3-12(b)所示。

細粒土、砂土與礫質砂之三分法：



如果將兩種細粒土壤—黏土與粉土視為同一種種類，則可以將土壤分類進一步簡化成三分法，如圖 3-13 所示，如此一來，性質相似的黏土與砂土將結合成同一種土壤種類「細粒土」，使土壤分層結果更簡單清晰。

拿 SBT 九分法的例子來示範，輸入與圖 3-9 相同的資料進行三分法，該層土壤種類與四分法結果一樣是砂土，而該土層之三分法機率圖如圖 3-14 所示。

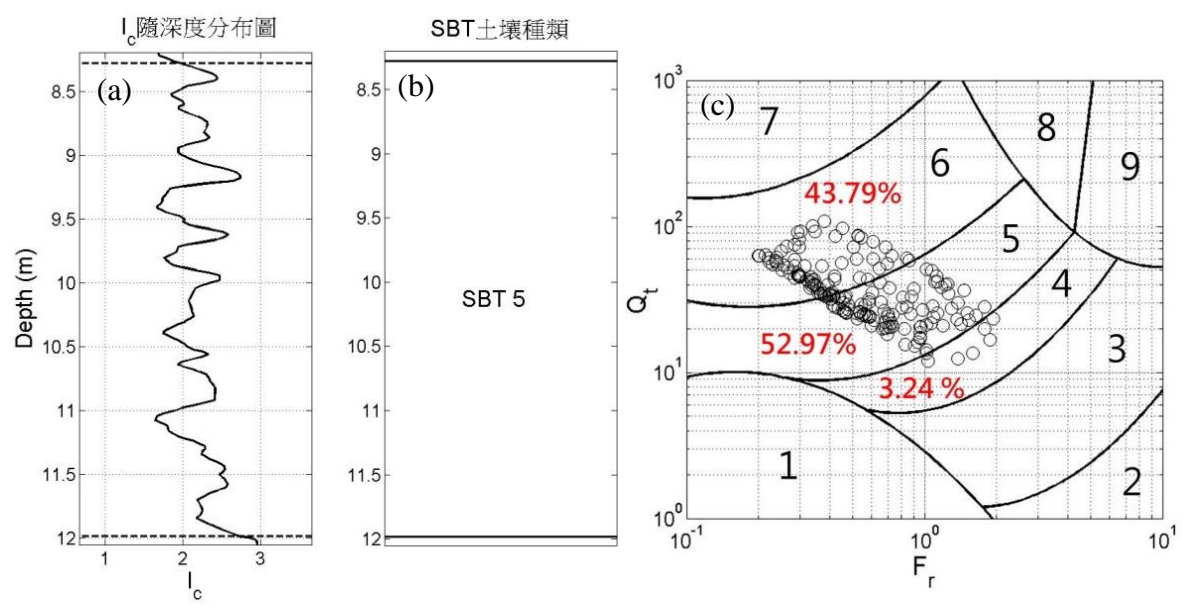


圖 3-9 對某一土層進行 SBT 九分法之示範；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) SBT 土壤種類標示圖；(c) SBTn 圖與 F_r-Q_t 資料點在各區域之比例。

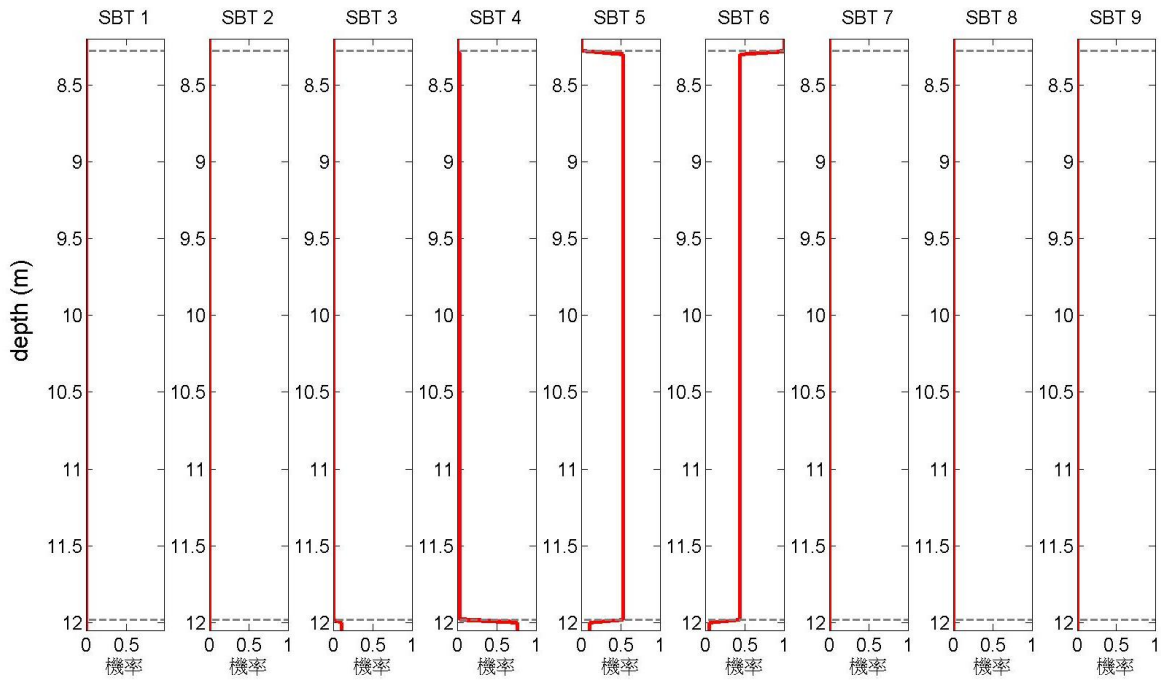


圖 3-10 依照圖 3-9(c)各區資料數比例所繪出之 SBT 分層機率圖。

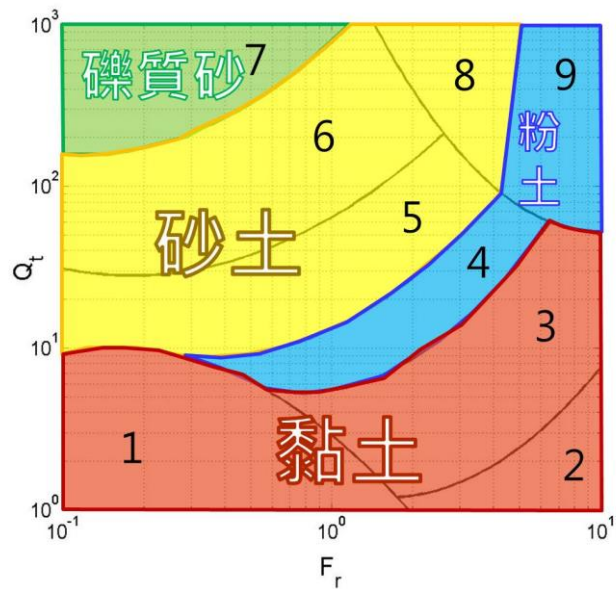


圖 3-11 四分法示意圖

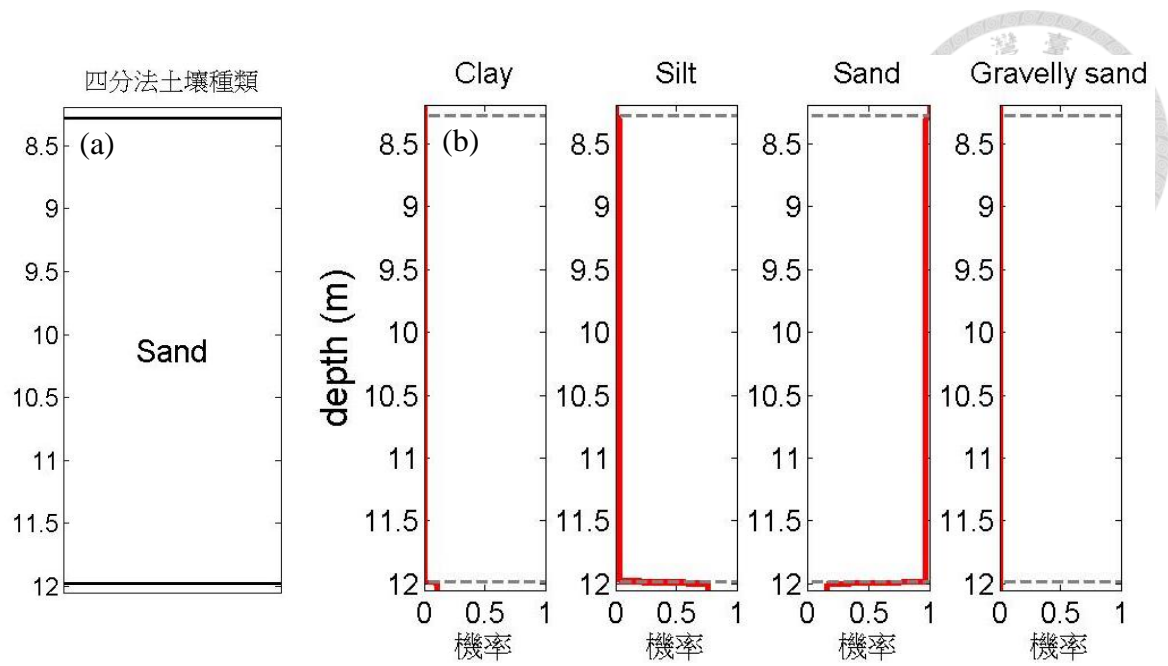


圖 3-12 四分法結果；(a) 四分法土壤種類標示圖；(b) 四分法分層機率圖。

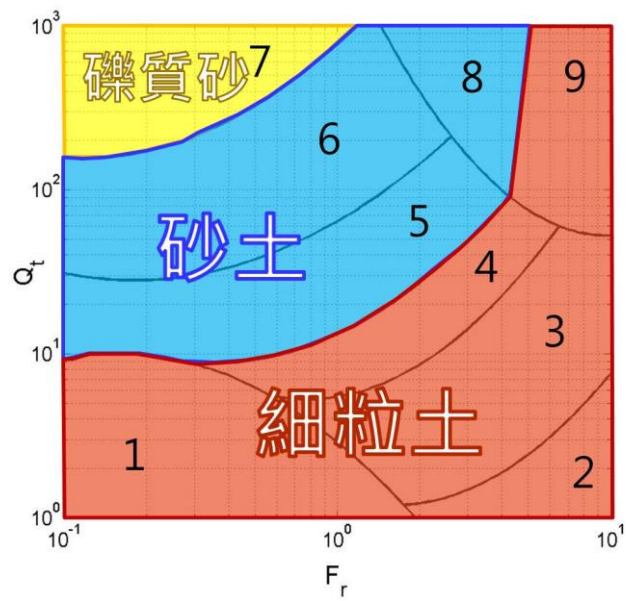


圖 3-13 三分法示意圖

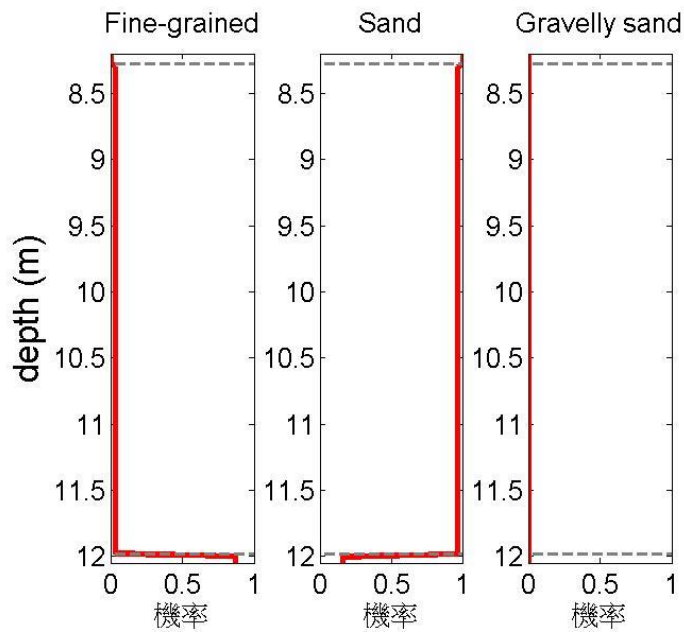


圖 3-14 三分法分層機率圖。

3.2.2 回顧廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (generalized coupled Markov chain model, GCMC model)

廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (簡稱GCMC模型)是 Park et al. (2007)提出的一個以馬爾可夫鏈為基礎的地質統計模型，用於二維現地的土壤種類預測，並且於 Park (2010)擴展成二維及三維皆能分析之模型。GCMC 模型是以 Elfeki and Dekking (2001)提出的耦合馬爾可夫鏈 (coupled Markov chain, CMC)模型為基礎進行開發，使用條件比 CMC 模型更靈活，因為其對輸入資料的格式並沒有限制，並且使用隨機序列計算算法，輸入數據簡單，無需經過預處理，僅需輸入鑽孔的座標與土壤種類，便可以預測鑽孔之間土壤分層情形。

耦合馬爾可夫鏈模型 (CMC model)：

Elfeki and Dekking (2001)提出了二維空間中的 CMC 模型。以 2.2.4 節一維馬爾可夫鏈的理論為基礎，我們知道在馬爾可夫的架構中，如果給定目前狀態，則任何未來狀態之條件分布將都與過去的狀態無關，只與其前一個時刻之狀態有關。



設 $h_0, h_1, h_2, \dots, h_T$ 為隨機變數的序列，該序列的值取決於狀態空間 $\{S_1, S_2, \dots, S_m\}$ ，其中 m 為狀態總數， q_{lk} 同(2.56)式定義的從狀態 S_l 轉換到 S_k 之轉換機率，Elfeki and Dekking (2001)推導了由前一個時刻之狀態與未來狀態一起支配的條件機率方程式：

$$p(h_t = S_k \mid h_{t-1} = S_l, h_T = S_z) = \frac{q_{kz}^{T-t} q_{lk}}{q_{lz}^{T-t+1}} \quad (3.28)$$

其中 h_T 是未來的隨機變數， S_z 是未來的狀態，圖形可參照圖 2-7。

這可以透過耦合兩個狀態空間 $\{S_1, S_2, \dots, S_m\} \times \{S_1, S_2, \dots, S_m\}$ 來擴展到二維空間，假設在二維空間中，兩條獨立的馬爾可夫鏈轉換到給定位置時，該點必須同時從兩條鏈子轉換為一樣的狀態。對(3.28)式做一個簡單的修改，可以得到二維 CMC 公式：

$$p(h_{t,j} = S_k \mid h_{t-1,j} = S_l, h_{T,j} = S_z, h_{t,j-1} = S_f, h_{t,P} = S_g) = C \frac{q_{lk} q_{kz}^{T-t} q_{fk} q_{kg}^{P-j}}{q_{lz}^{T-t+1} q_{fg}^{P-j+1}} \quad (3.29)$$

其中 C 是：

$$C = \frac{q_{lz}^{T-t+1} q_{fg}^{P-j+1}}{\sum_i^m q_{li} q_{iz}^{T-t} q_{fi} q_{ig}^{P-j}} \quad (3.30)$$

然而，CMC 模型的局限是作為條件的過去資訊必須與計算位置相鄰 (Elfeki and Dekking, 2001)，而且強制逐行依序計算，還有指標區塊容易產生角度為 $\tan^{-1}(\Delta y/\Delta x)$ 的傾斜。而 Park (2010)提出的 GCMC 模型將可以破除這些局限性，作為條件的資訊不必在計算位置旁邊，採用隨機序列計算，而且分層結果不會產生傾斜。

廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (GCMC model)：

Park (2010)開發的 GCMC 模型其方法如接下來所回顧：在一維空間中，當沿著子方向(subdirection)找到作為條件的資訊時，有兩種可能的轉換：從採樣位置到非採樣位置的轉換 (STU)，也就是後向；或是從非採樣位置到採樣位置的轉換 (UTS)，也就是前向 (如圖 3-15)。在以前的 CMC 方法中，STU 轉換方向是首選，



因為它確保了機率總和為 1，然而 STU 轉換會有小比例的狀態消失等問題，為了避開這些問題，GCMC 模型選擇了 UTS 轉換方案，並將其定義為轉換似然性 (transition likelihood)。從未採樣位置 h_1 (其假設狀態 S_i) 到採樣位置 h_2 (其固定狀態 S_j) 的轉換似然性，根據貝氏定理，可以寫作以下轉換似然函數 $\pi_i(S_j)$ ：

$$\pi_i(S_j) = p(h_2 = S_j | h_1 = S_i) = \frac{p(h_1 = S_i, h_2 = S_j)}{p'(h_1 = S_i)}, \quad i=1, \dots, m \quad (3.31)$$

其中 m 是不同狀態的數量。轉換似然性函數的下標 i 表示於 h_1 的假設狀態為狀態 S_i 的似然性。正規化常數 $p'(h_1 = S_i)$ 是狀態 S_i 的先驗機率，它是在每個估算階段被決定的，不包括在 h_2 的 S_j 新觀察。每個 $\pi_i(S_j)$ 皆大於 0，但是對 i 值的總和不一定為 1，因為每個似然性分量皆來自一個獨立轉換，在這個研究中假設子方向轉換的獨立性。(3.31) 式的分母 $p'(h_1 = S_i)$ 是根據輸入及先前預測的狀態比例來決定，該比例在計算過程中的每一個預測處更新。

為了考慮方向非平穩性問題 (Park, 2010)，分子 $p(h_1 = S_i, h_2 = S_j)$ 需要作為兩個子方向轉換機率矩陣 (TPM) 的函數被給出，為了提高數值分辨率，使用幾何平均值作為函數，而不是兩種可逆形式 ($p(h_1 = S_i | h_2 = S_j)p(h_2 = S_j)$ 與 $p(h_2 = S_j | h_1 = S_i)p(h_1 = S_i)$) 的簡單乘法。因此在使用兩個可逆形式的幾何平均數之數學公式中，隨著作為條件的狀態 S_j (位於 h_2) 的發現，一個未確定狀態 S_i (位於 h_1) 的離散轉換似然性可以被給出為：

$$\pi_i(S_j) = \frac{\sqrt{p(h_2=S_j | h_1=S_i)p(h_1=S_i)p(h_1=S_i | h_2=S_j)p(h_2=S_j)}}{p'(h_1 = S_i)} \quad (3.32)$$

其中 $i = 1, \dots, m$ 。

在 GCMC 模型中，沿著子方向 1 與相反的子方向 2 之 r 步 TPM 由下兩式給出：

$${}^1Q^{(r)} = \begin{bmatrix} {}^1q_{1,1}^{(r)} & {}^1q_{1,2}^{(r)} & \cdots & {}^1q_{1,m-1}^{(r)} & {}^1q_{1,m}^{(r)} \\ {}^1q_{2,1}^{(r)} & {}^1q_{2,2}^{(r)} & \cdots & {}^1q_{2,m-1}^{(r)} & {}^1q_{2,n}^{(r)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ {}^1q_{m-1,1}^{(r)} & {}^1q_{m-1,2}^{(r)} & \cdots & {}^1q_{m-1,m-1}^{(r)} & {}^1q_{m-1,m}^{(r)} \\ {}^1q_{m,1}^{(r)} & {}^1q_{m,2}^{(r)} & \cdots & {}^1q_{m,m-1}^{(r)} & {}^1q_{m,m}^{(r)} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$



$${}^2\mathbf{Q}^{(r)} = \begin{bmatrix} {}^2q_{1,1}^{(r)} & {}^2q_{1,2}^{(r)} & \cdots & {}^2q_{1,m-1}^{(r)} & {}^2q_{1,m}^{(r)} \\ {}^2q_{2,1}^{(r)} & {}^2q_{2,2}^{(r)} & \cdots & {}^2q_{2,m-1}^{(r)} & {}^2q_{2,m}^{(r)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ {}^2q_{m-1,1}^{(r)} & {}^2q_{m-1,2}^{(r)} & \cdots & {}^2q_{m-1,m-1}^{(r)} & {}^2q_{m-1,m}^{(r)} \\ {}^2q_{m,1}^{(r)} & {}^2q_{m,2}^{(r)} & \cdots & {}^2q_{m,m-1}^{(r)} & {}^2q_{m,m}^{(r)} \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

在上述兩個矩陣中，左上標表示前向(子方向 1)與後向(子方向 2)的方向，而右上標表示轉換步數，其中 ${}^1\mathbf{Q}^{(r)} = \prod_{m=1}^r {}^1\mathbf{Q}$ 以及 ${}^2\mathbf{Q}^{(r)} = \prod_{m=1}^r {}^2\mathbf{Q}$ 。

矩陣元素的第一個與第二個下標各自表示起始和結束的狀態。使用(3.33)、(3.34)式的 TPM，則(3.32)式可被簡化為：

$$\pi_i(S_j) = \frac{\sqrt{{}^1q_{ji}^{(d1)} \cdot {}^2q_{ij}^{(d1)} \cdot w_i \cdot w_j}}{w'_i}, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.35)$$


其中 ${}^1q_{ji}^{(d1)}$ 與 ${}^2q_{ij}^{(d1)}$ 分別為來自一步 TPM ${}^1\mathbf{Q}$ 與 ${}^2\mathbf{Q}$ 的 d1 步轉換的(j, i)與(i, j)分量；d1 與 d2 分別為沿著子方向 1、2 的到達採樣資料的單元距離； w_i 、 w_j 分別為狀態 S_i 與 S_j 之邊際分布；還有 w'_i 為狀態 S_i 的中間比例。

對於三維情況，需要全部六個不同的子方向調節參數來形成離散的條件機率公式：

$$\pi_i(S_j) = \frac{\prod_{k=1}^6 \sqrt{{}^kq_{kl}^{(dk)} \cdot {}^{k*}q_{lk}^{(dk)} \cdot w_i \cdot w_{S(k)}}}{\sum_{l=1}^m \prod_{k=1}^6 \sqrt{{}^kq_{kl}^{(dk)} \cdot {}^{k*}q_{lk}^{(dk)} \cdot w_l \cdot w_{S(k)}}}, \quad i = 1, \dots, m \quad (3.36)$$

假設子方向鏈的獨立性，在(3.36)式中， k^* 是 k 的對比符號 (表示 $k \rightarrow k^* : 1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1, 3 \rightarrow 4, 4 \rightarrow 3, 5 \rightarrow 6, 6 \rightarrow 5$)。此外， $w_{S(k)}$ 表示在第 k 子方向上找到的調節狀態的邊際分布，而分母是令 π_i 的總和為 1 的修正因子。

GCMC 模型是從訓練圖 (training map)來估算子方向的轉移機率矩陣的，透過修改 Park et al. (2007)的方法來製作訓練圖，這個方法是在未採樣的位置，尋找等向歐氏距離(Euclidean distance)最短的採樣數據，然後採樣數據隨即被分配到未採



樣位置，透過這個方法，鑽探地點的每個採樣岩性都變成一個種子，其影響以均勻的速率增長，直到其他種子的生長中斷其進一步的生長，因此，岩性包裹的邊緣光滑圓潤。總而言之，在這個方法中，每個觀察(輸入數據)被假設為具有相同的影響力，而且沒有任何結構假設。當先驗結構資訊為不可得時，這可能是在無偏見的情況下兌現稀疏數據的一種方式。

因為域是用等間隔的規則網格所離散化的，所以沿著每個子方向計算轉換機率，就像在一個計數矩陣中沿著每個主要子方向記錄子方向岩性轉換一樣簡單，並且將每列的分量與它們的列總和相除。在這種子方向轉換機率的計算，假設由採樣過程中的不確定性所引起的小擾動，並且在轉換記錄開始之前，當透過簡單地分配個體給計數矩陣的所有分量來構成計數矩陣時，假設狀態之間的單個轉換。這個過程在生成的 TPM 中產生非零分量，並提高計算穩定性。預測的準確性沒有被該方案嚴重破壞，因為與計算域中記錄的轉換次數相比，源自單一轉換的數量相對較小。

在未採樣位置的狀態預測中，採用隨機順序路徑，整體的搜索算法也與 Park et al. (2007)使用的算法類似，在該演算法中，域首先被分成許多單元，然後採樣的數據被指派到相對應的單元。在給定的隨機訪問的未採樣位置，沿著主方向尋找每個維度兩個調節資訊(一個子方向一個，也就是二維找四個，三維找六個)，為了有效搜索作為條件的資訊，在子方向搜索演算法中允許角度公差，並且根據沿著方向的平均關聯長度決定公差值，其中橫向公差角被給定為 $\tan^{-1}(\lambda_t / \lambda_l)$ ， λ_t 與 λ_l 分別是在縱向與橫向搜索方向的平均關聯長度。因此，在搜索步驟的橫向搜索範圍由搜索距離乘以角度公差的正切值決定。最大搜索範圍由沿著縱向的每個岩性的平均長度決定，其由近似轉換率 (ATR)決定。ATR 根據同一維度的一步 TPM (\mathbf{Q})和單位矩陣(\mathbf{I})之間的差值來計算(也就是 $\text{ATR} = \mathbf{Q} - \mathbf{I}$)。在選擇搜索範圍時，為了搜索演算法的效率，平均長度大於沿著該方向的域長度的四倍將被忽略。

一旦採樣的數據全部都在子方向中被尋找，則條件機率分布將從(3.36)式被計

算出來，其中從訓練圖獲取一步 TPM，並且根據條件機率分布建立累積機率。如果採樣數據不在搜索範圍內，則(3.36)式中的前向(UTS)和後向(STU)轉換機率變成邊際機率。利用累積機率和產生的均勻分布隨機數，在未採樣位置產生模擬樣本。在計算期間，當前階段的狀態比例以連續方式更新並用於接下來的預測，計算持續進行直到所有未採樣位置都被訪問過為止。

Park (2010)開發了以 Fortran 90 寫成的 GCMC 程式，該程式僅需要採樣資料座標和土壤種類，以及模擬域的尺寸資訊作為輸入，因此進行 WTMM 四分法或三分法之後得到的結果可以輸入至 GCMC 模型中，藉此結合這兩種方法，進行以 CPT 資料為基礎之多維土壤分層預測。

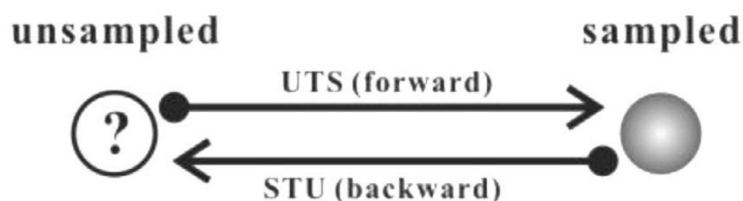


圖 3-15 有採樣與未採樣資料之間兩種可能的子方向轉換 (Park, 2010)

第四章 案例分析與討論



4.1 一維分層案例分析

4.1.1 第一現地：南卡羅萊納州好萊塢 (Hollywood, South Carolina)

本研究使用之第一現地資料是 Bong and Stuedlein (2017)於南卡羅萊納州的好萊塢進行一系列的 CPT 與 SPT 而來的，如圖 4-1 所示，顯示了 25 孔 CPT 與 10 孔搭配劈管取樣器之 SPT 的鑽探位置，5 個區域的中心鑽孔形成截面 A-A'。該現地地層大部分是由相當厚之可液化沙灘砂所組成，該層沙灘砂之平均粒徑 D_{50} 與均勻係數 C_u 的平均值分別為 0.18 mm 與 1.8，範圍分別為 0.14 ~ 0.25 mm 與 1.4 ~ 3.8。

圖 4-2 顯示了截面 A-A'之地層剖面，最上層由一個 2 公尺厚的疏鬆至中等緊密的粉土質與黏土質砂土層(USCS 分類分別為 SM 和 SC)，其下為 8.5 ~ 9 公尺厚的疏鬆至中等緊密的不良級配至粉土質細砂(SP 和 SM)，其特徵在於平均粒徑為 0.2 mm。在這個可能液化的土壤單元下面有幾層不可液化的地層，包括一層約 1 公尺厚的中等堅硬砂質黏土層，其下有一層 1.5 公尺厚的緊密砂土層。地下水位隨著降雨情況而變化，於鑽探期間，水位大約在地表下 2.5 ~ 2.7 公尺處。

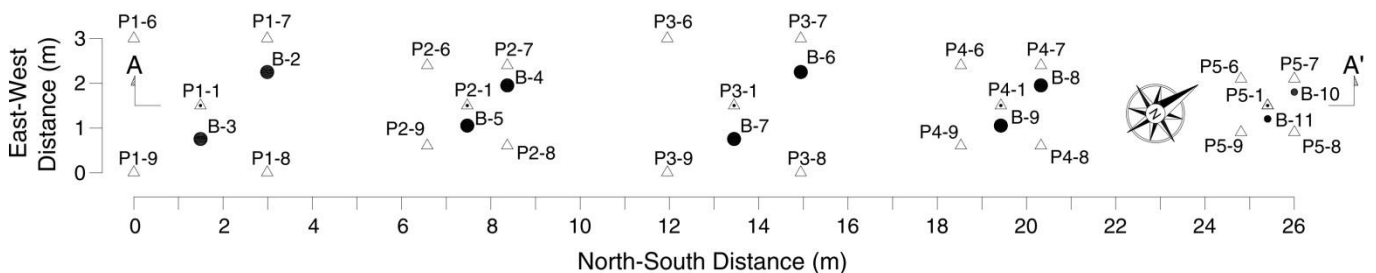


圖 4-1 第一現地大小與鑽探計畫，白三角形為 CPT 孔位，黑圓點為搭配劈管取樣器之 SPT 孔位。(Bong and Stuedlein, 2017)

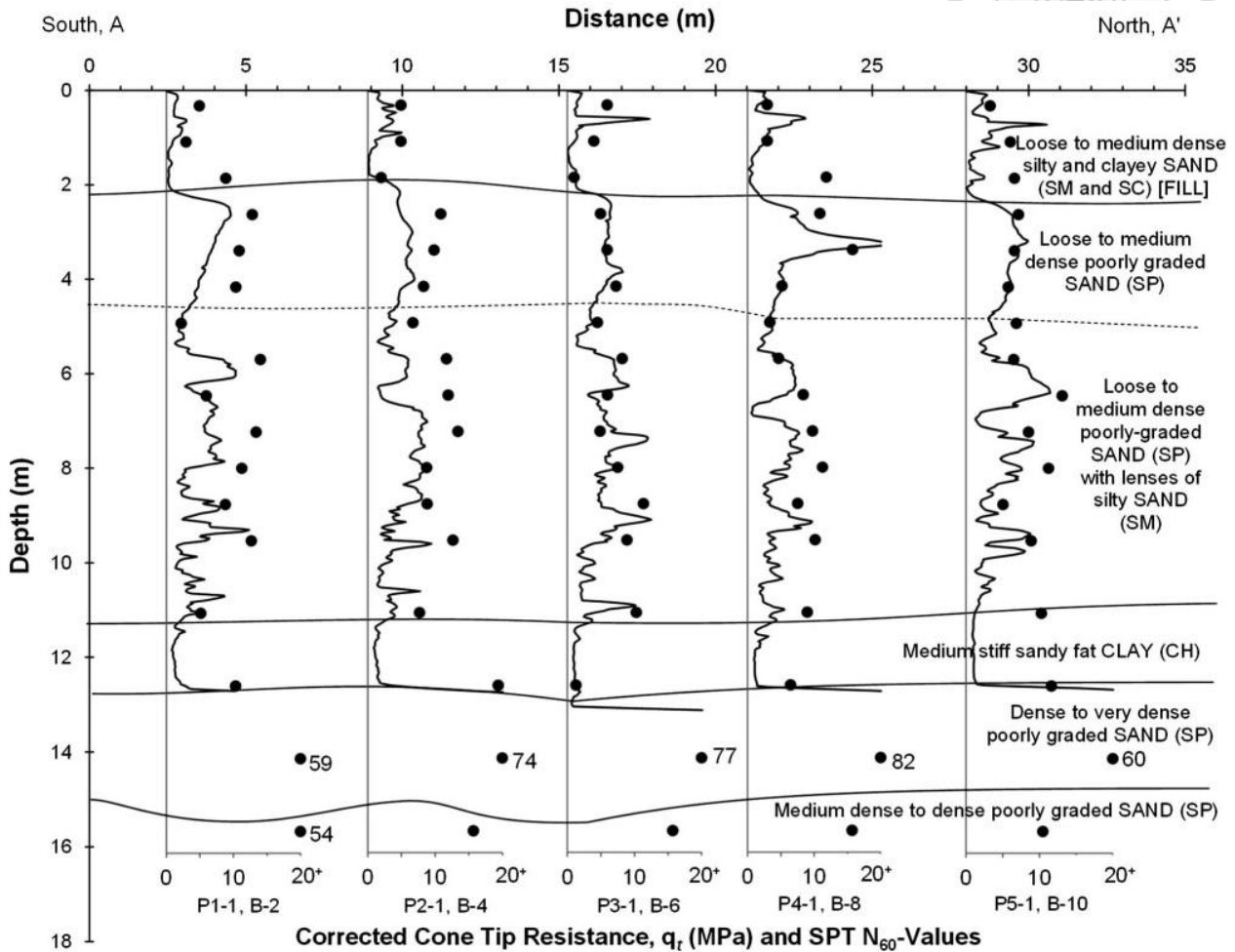


圖 4-2 截面 A-A'處之地層剖面，其中 CPT 資料由連續線表示，SPT 資料由離散點表示。(Bong and Stuedlein, 2017)

4.1.2 HMM 土壤分層法結果

有了南卡羅萊納州好萊塢的 25 孔 CPT 所算出的 I_c 值之後，我們便可以來進行現地資料之 HMM 土壤分層，以下展示兩處資料的分析結果：孔位 P1-1 作為分層表現較好的例子，孔位 P3-1 作為分層表現較差的例子。

P1-1 的分層結果：

在分析 P1-1 方面，必須先用(2.40)式估算 P1-1 之 I_c 的關聯性長度 δ ，經估算

後得 $\delta = 0.4 \text{ m}$ 。將 I_c 與其對應的深度 z ，還有 δ 與欲劃分的群數 m ，全部輸入至程式便可以進行土壤分層。在嘗試了各種不同的群數 m 之後得到了圖 4-3 的結果，可以發現分群分數最高的為 $m = 4$ ，然而，4 群之後的分群數竟然都有兩個分群分數，這是因為 K-means 法產生的 h_1 初始值每次都不一樣，有的 h_1 會導致 HMM 只抓到 3 群並收斂，有的會導致 HMM 抓到 4 群並收斂，抓到 4 群的分群分數將會比 3 群的分數高一個層次，此類「分群分數問題」我們將在 4.1.5 節詳細討論。

根據分群分數，我們來觀察 P1-1 被分為 3 群和 4 群的結果。3 群的結果如圖 4-4、4-5 所示，可以發現分層結果大致上都有照著 I_c 的平均值和標準差的差異進行劃分，佔優勢的種類機率變化時產生層面，並且可以告訴我們哪些土層屬於同一個分群，然而，深度 2.16 公尺和 12.58 公尺處的兩個薄層卻不是正確的劃分，該處應該是層面而不是薄層，這個是「孤兒層問題」，我們將在 4.1.4 節詳細解釋，應用時可以人工將孤兒層剔除，化為層面。

P1-1 分為 4 群的結果如圖 4-6、4-7 所示，可以發現分層結果差別在原本的第 0 分群被拆成了第 0 和第 1 兩群，其他部分大致和分 3 群時相同，使用者可以自行判斷哪一種結果比較合理。最後，4 群同樣在 2.16 公尺和 12.58 公尺處有孤兒層問題。

P3-1 的分層結果：

在分析 P3-1 方面， δ 經估算為 0.4 m，將 I_c 、 z 、 δ 、 m 輸入至程式便可以進行土壤分層，在嘗試了各種不同的 m 值之後得到了圖 4-8 的結果，可以發現 7 群以後的分群數竟然都有 4 個分群分數，這同樣是「分群分數問題」，會有 4 種分群分數的原因是因為 P3-1 的情況比 P1-1 更複雜多變，HMM 從 4 到 7 群都有可能抓到，並且抓到愈多群數的結果，分群分數愈高。

根據分群分數，我們觀察 4 群到 7 群的結果，發現分為 5 群或 6 群較為合理。5 群的結果如圖 4-9、4-10 所示，可以發現分層結果大致上都有盡量照著 I_c 的平均



值和標準差的差異進行劃分，然而卻因為 I_c 波形的多變，使得分層混亂，產生很多層面和薄層，「孤兒層」的數量也變多了，如 2.66、6.34、7.22、8.02 和 10.74 公尺處。

P3-1 分為 6 群的結果如圖 4-11、4-12 所示，可以發現分層結果差別在原本的第 2 分群某些部分被歸類到新產生的第 3 分群，其他部分大致和分 5 群時相同，而 2.08、2.66、6.34、7.22、8.02 公尺處為孤兒層。

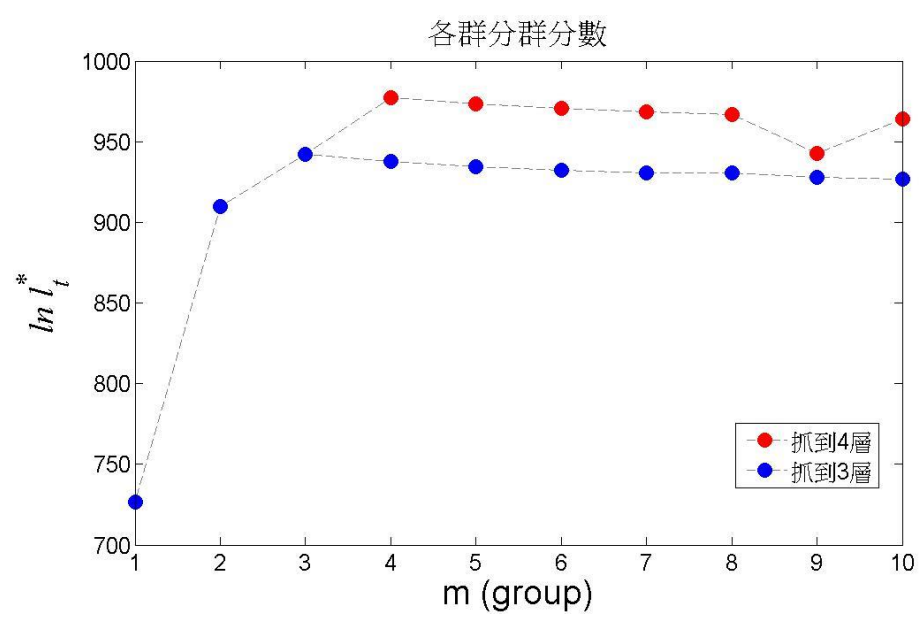


圖 4-3 P1-1 之 I_c 資料的分群分數

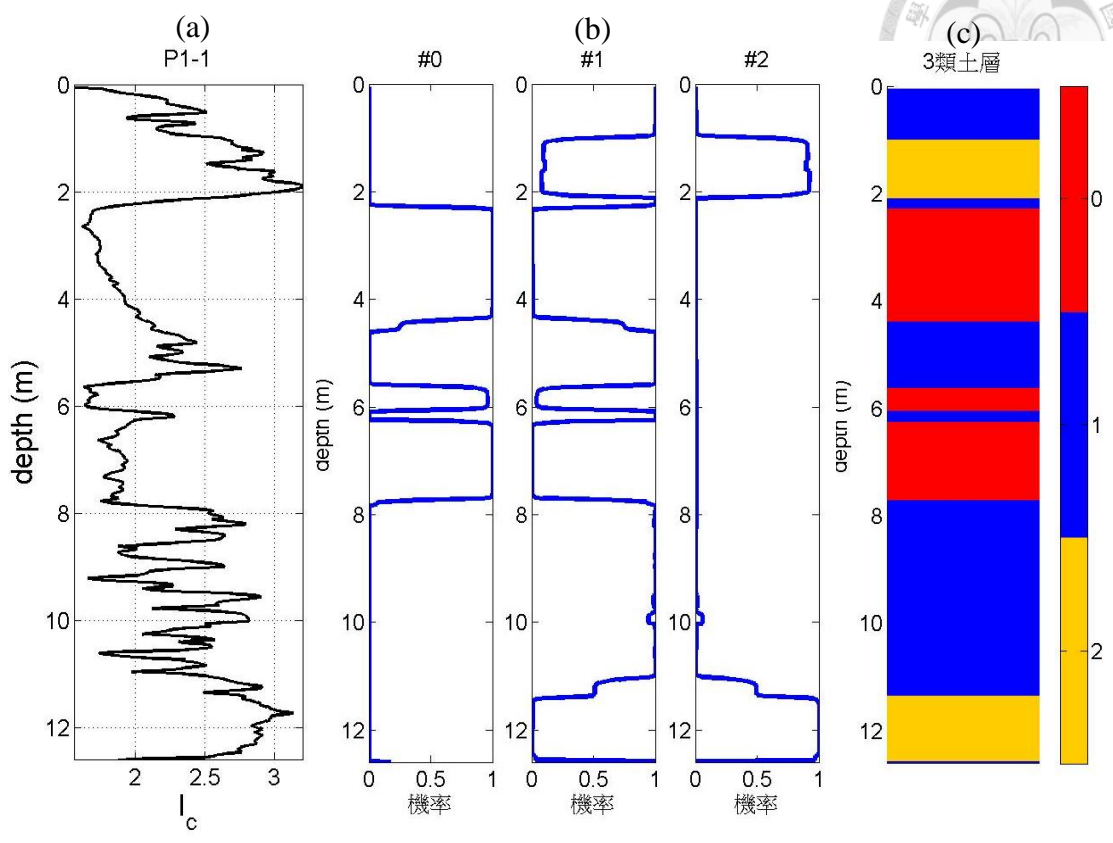
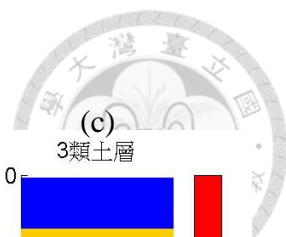


圖 4-4 P1-1 的 3 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。

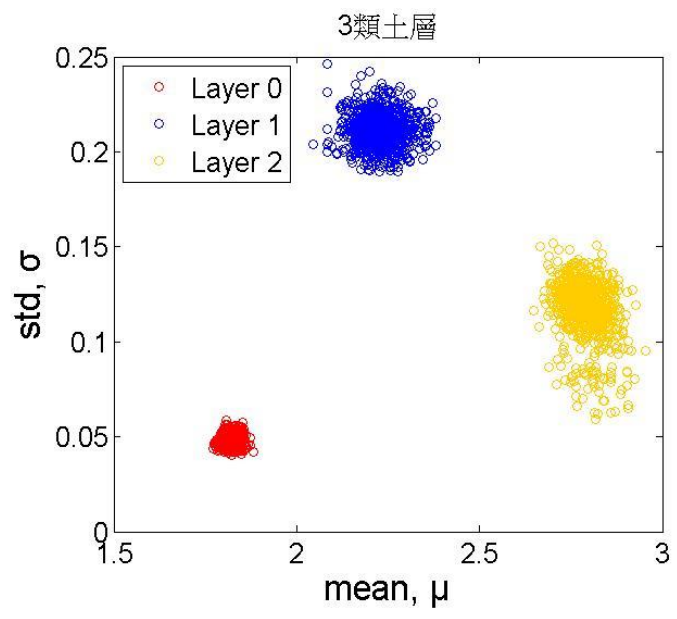


圖 4-5 P1-1 之 3 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖

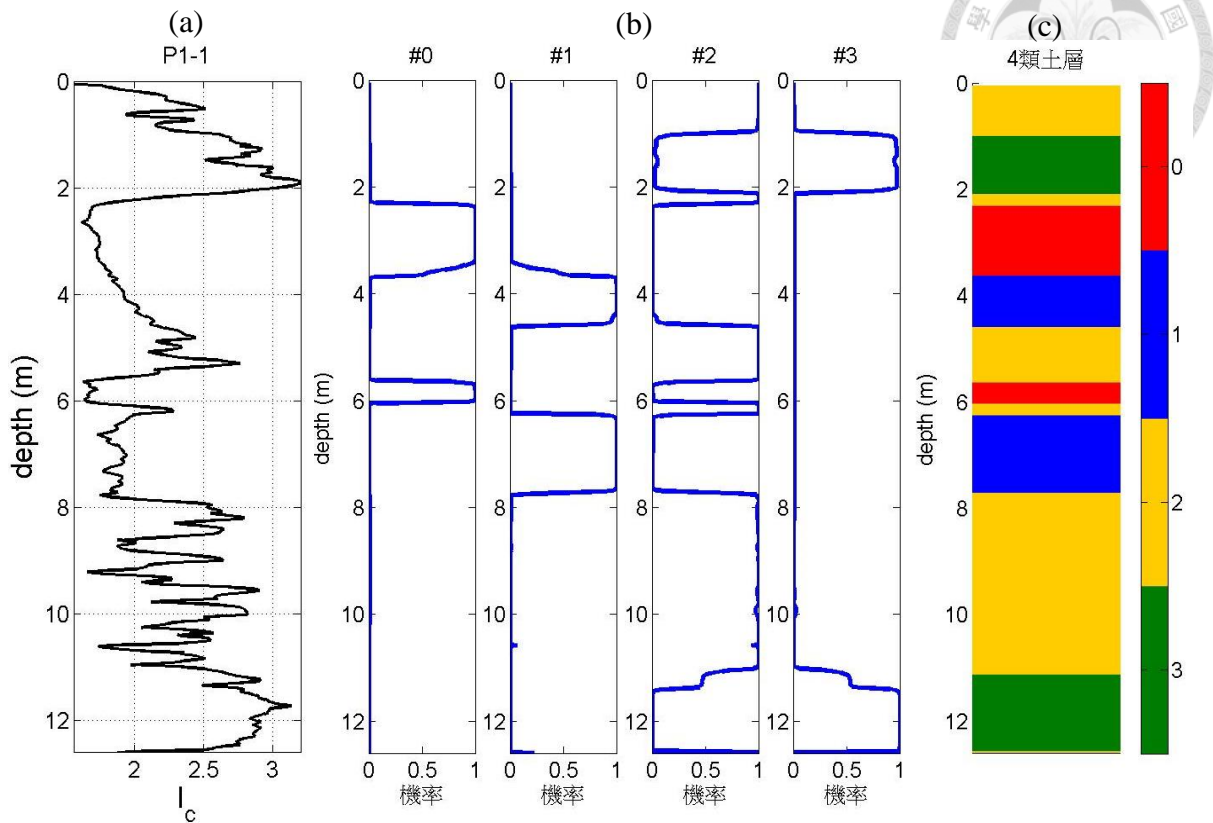


圖 4-6 P1-1 的 4 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。

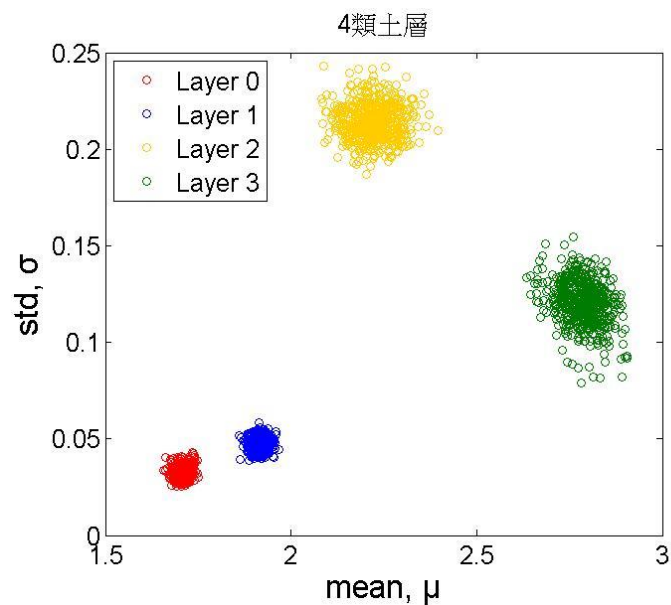


圖 4-7 P1-1 之 4 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖

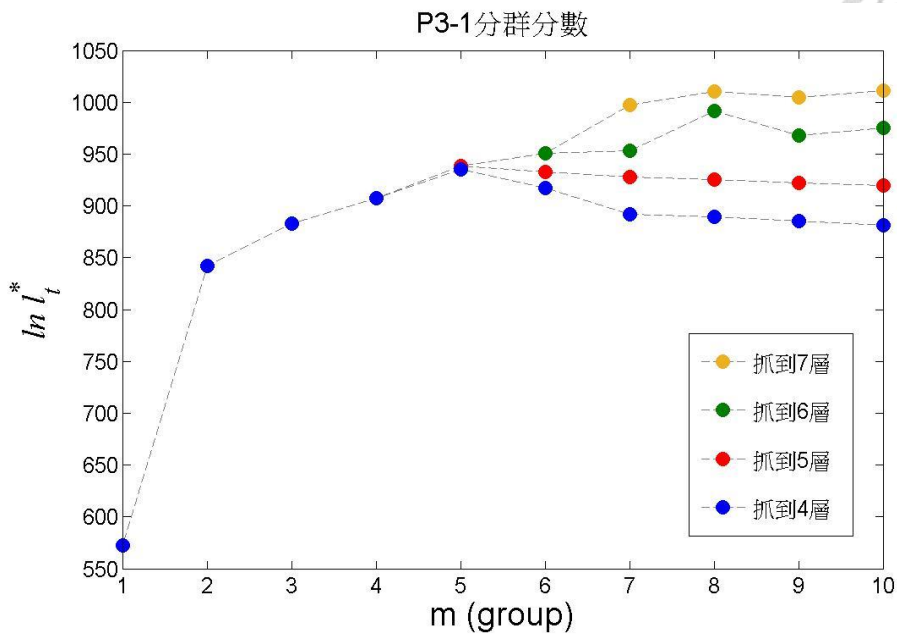
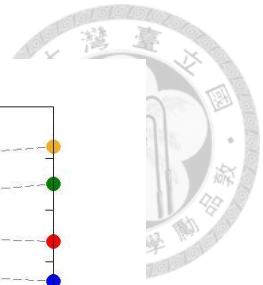


圖 4-8 P3-1 之 I_c 資料的分群分數

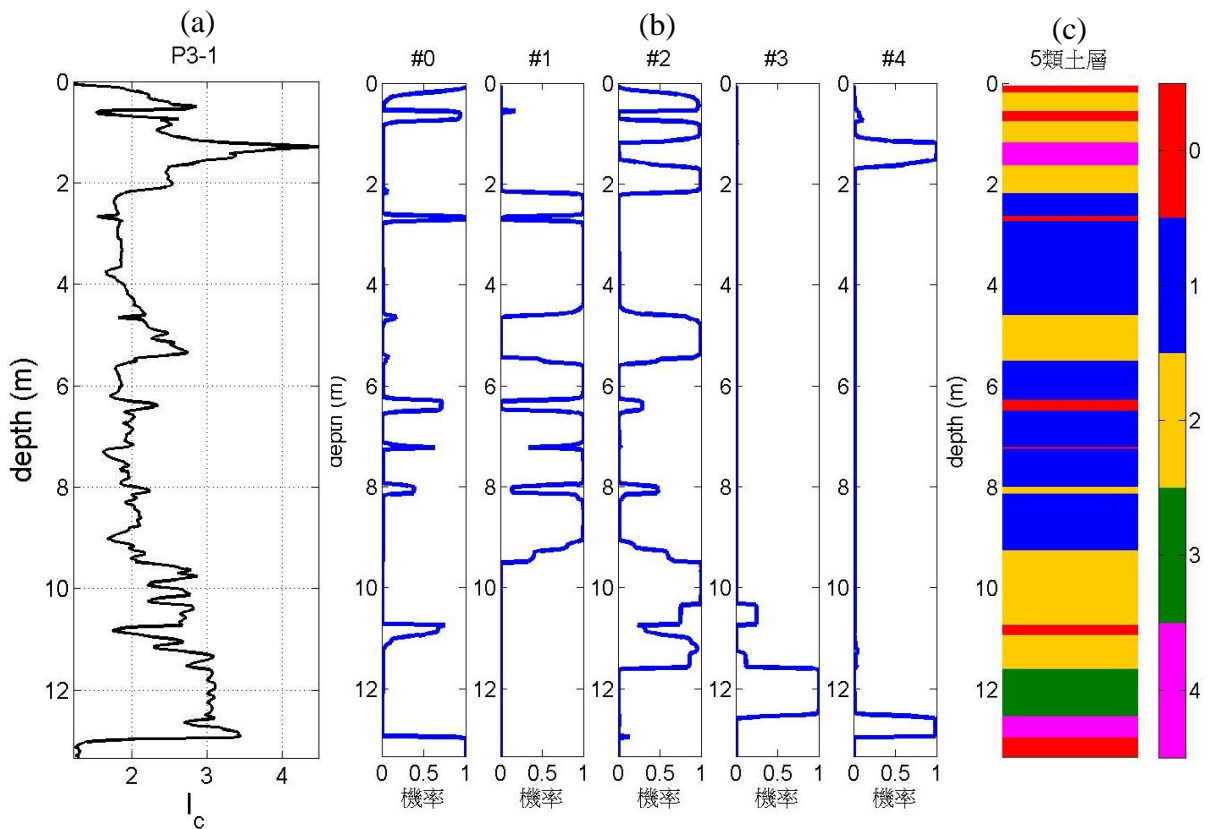


圖 4-9 P3-1 的 5 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變

圖；(c) 最高機率分層圖。

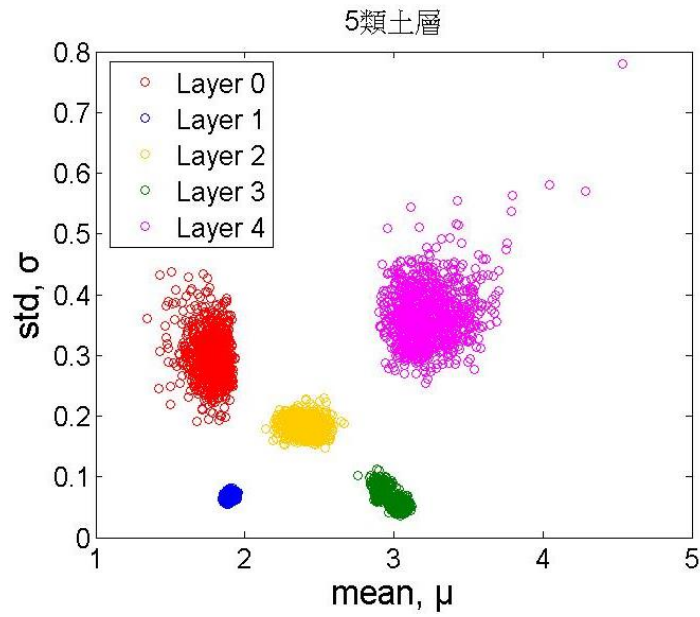


圖 4-10 P3-1 之 5 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖

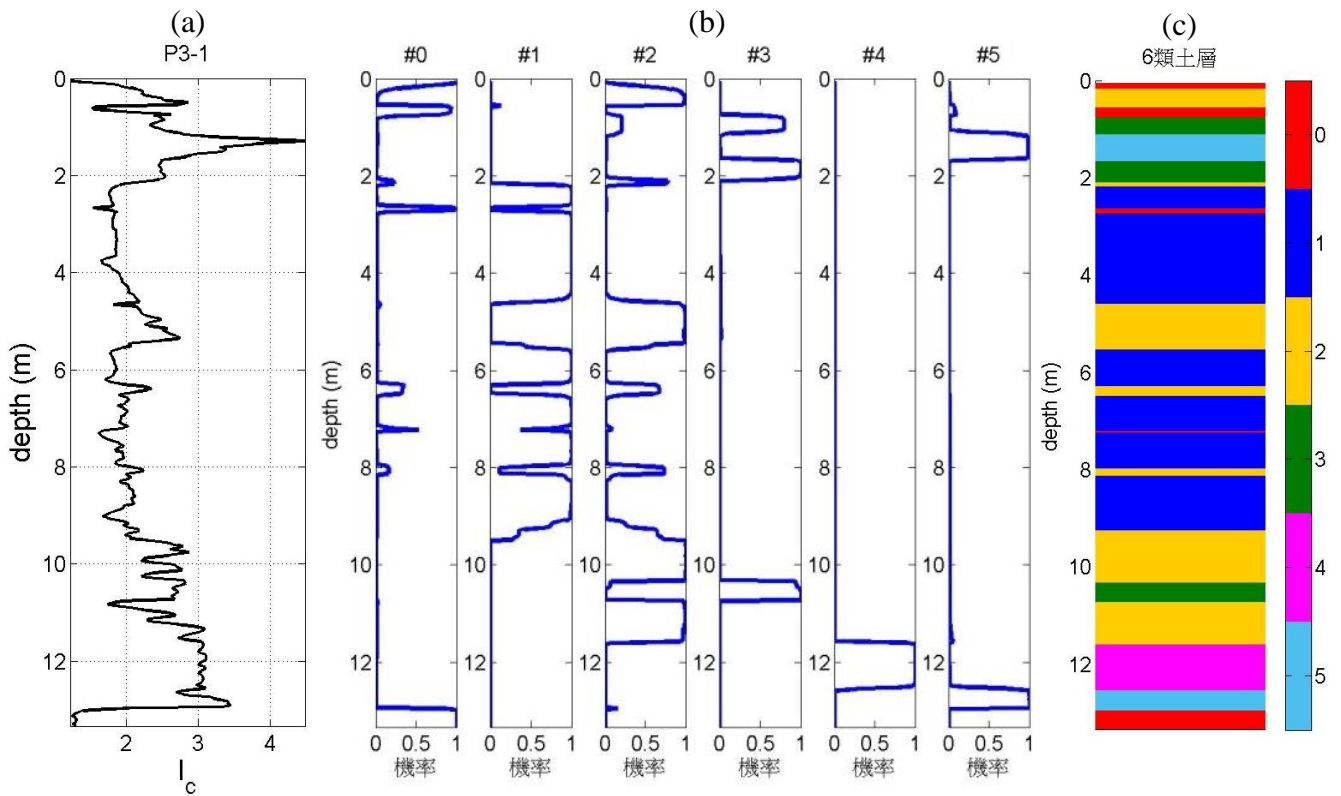


圖 4-11 P3-1 的 6 群分層結果；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。

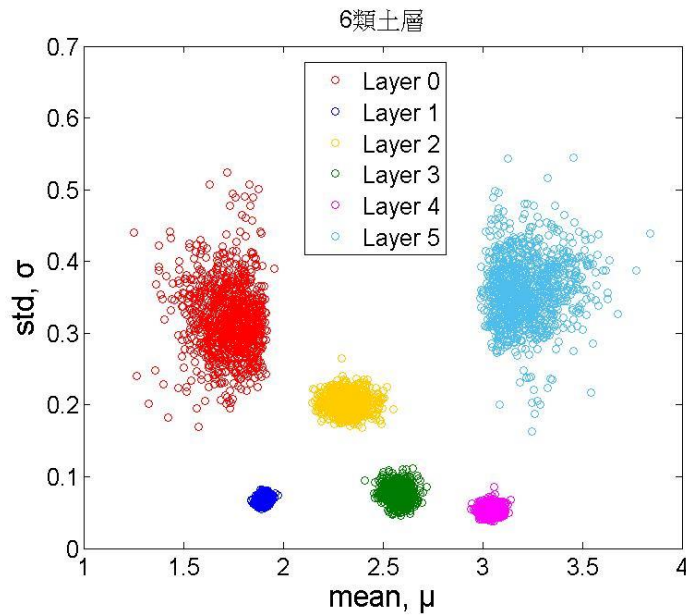


圖 4-12 P3-1 之 6 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖

4.1.3 WTMM 法結果

本節改用 Ching et al. (2015) 的 WTMM 法同樣分析 P1-1 與 P3-1 兩孔資料作為對照，每次分析時 p_{jump} 值皆設為 0.5，分析需要輸入 F_r 和 Q_t ，還有其對應的深度 z ，之後程式會自動計算 I_c 來進行土壤分層。

P1-1 的分層結果：

P1-1 的 WTMM 法結果如圖 4-13(a)、(b)、(c) 所示，有了 I_c 之後，WTMM 法便會自動分析 I_c 的訊號，找出可能的土壤層面，如圖 4-13(a)；再來統計兩層面之間的 (F_r, Q_t) 資料分別落於 SBTn 圖九個區域的比例，即 SBT 九分法，如圖 4-13(c) 所示；最後找出每層比例最高的 SBT 種類，獲判為該層代表，如圖 4-13(b) 所示。可以發現 WTMM 法能確實找出 I_c 的跳動處，並判斷是否為層面，不會被土層中的雜訊混淆，加上 SBT 九分法結果，我們便能知道該層的土壤性質，因此得知 P1-1 的最上面兩層為 SBT 5 與 SBT 4，表現性質為砂土混合物與粉土混合物，其下 4 層為 SBT 6 與 SBT 5 交互相疊，可以知道這 4 層是相當厚的砂土層，最下面的土



層為 SBT 4，為粉土混合物。

P1-1 的 WTMM 四分法結果如圖 4-14(a)、(b)、(c)所示，可以發現層面位置基本上與圖 4-13 相同，而土壤種類根據四分法的定義，將原本的 SBT 5 和 6 轉為砂土，SBT 4 轉為粉土，再透過鄰層種類相同合併的機制，層數減至 4 層，土壤種類的描述更簡單直觀，可以發現第一層是砂土，第二層粉土，第三層為一層相當厚的砂土，最下層是粉土。

P1-1 的 WTMM 三分法結果如圖 4-15(a)、(b)、(c)所示，可以發現層面位置與四分法相同，惟土壤種類根據三分法的定義，將原本的粉土轉變為細粒土，層數一樣是 4 層，土壤的分類更簡單，可以發現 4 層土是砂土和細粒土的交互堆疊。

P3-1 的分層結果：

P3-1 的 WTMM SBT 九分法如圖 4-16(a)、(b)、(c)所示，可以發現，相較於表現較混亂的 HMM 土壤分層法，WTMM 法還是能清楚地切出層面，然後透過 SBT 分類得知第一層為 SBT 5，第二層為種類是 SBT 2 的薄層，可能是泥炭土；第三、四、五層為 SBT 6 或 SBT 5 組成的厚砂土層，第六層為 SBT 4 粉土混合物，第七層為 SBT 3 黏土層，最底層出現了 SBT 7 礫質砂土層。由此可知，與 P1-1 相比，P3-1 孔的土壤性質是較為多變的。

P3-1 的 WTMM 四分法結果如圖 4-17(a)、(b)、(c)所示，可以發現層面位置基本上與圖 4-16 相同，而土壤種類根據四分法的定義做轉換，再將相同種類的鄰層合併，層數減至 6 層，最後得知第一層為砂土層，其下為一層薄黏土層，第三層為一層厚砂土層，第四層為粉土，第五層為黏土，底部為礫質砂層。

P3-1 的 WTMM 三分法結果如圖 4-18(a)、(b)、(c)所示，可以發現層面位置大致上與四分法相同，惟土壤種類根據三分法的定義，將原本的粉土和黏土轉變為細粒土，層數減至 5 層，可以發現上面 4 層是砂土層與細粒土層交互相疊，而最底層為礫質砂層。

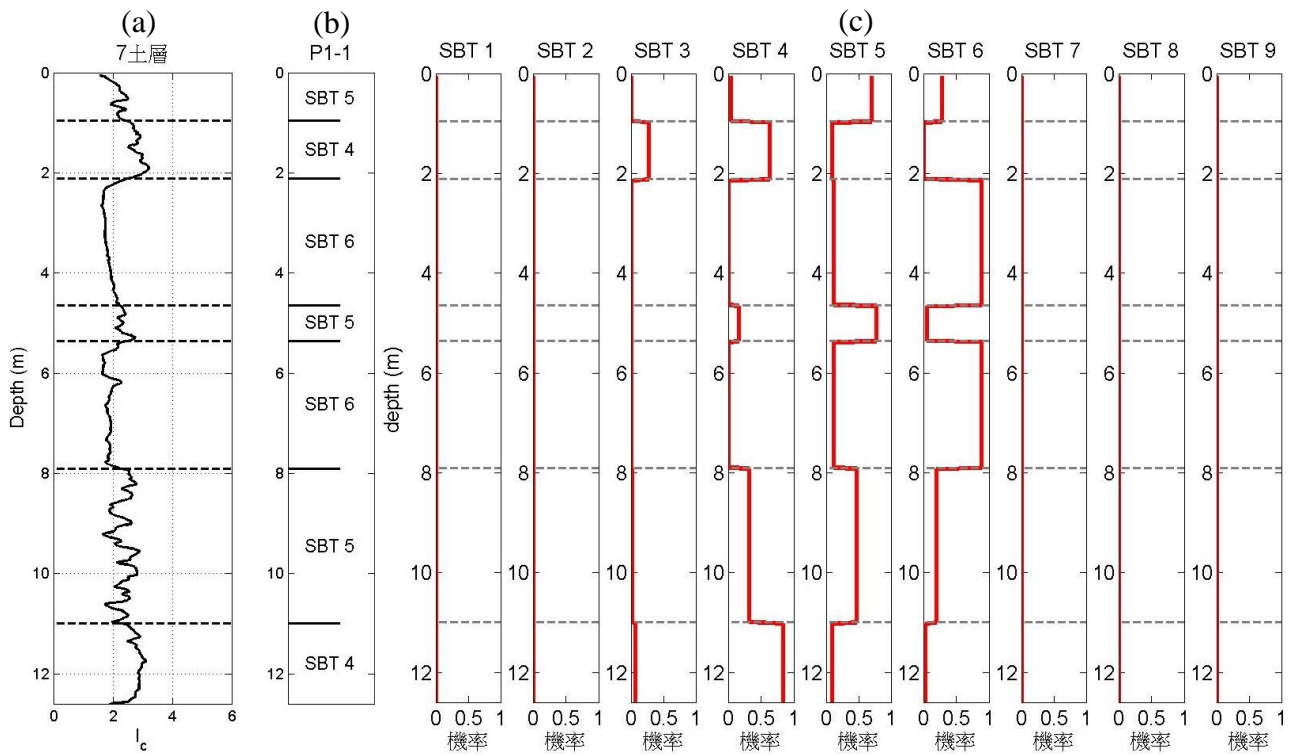


圖 4-13 P1-1 之 WTMM SBT 九分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與 SBT 分類結果；(c) SBT 分層機率圖。

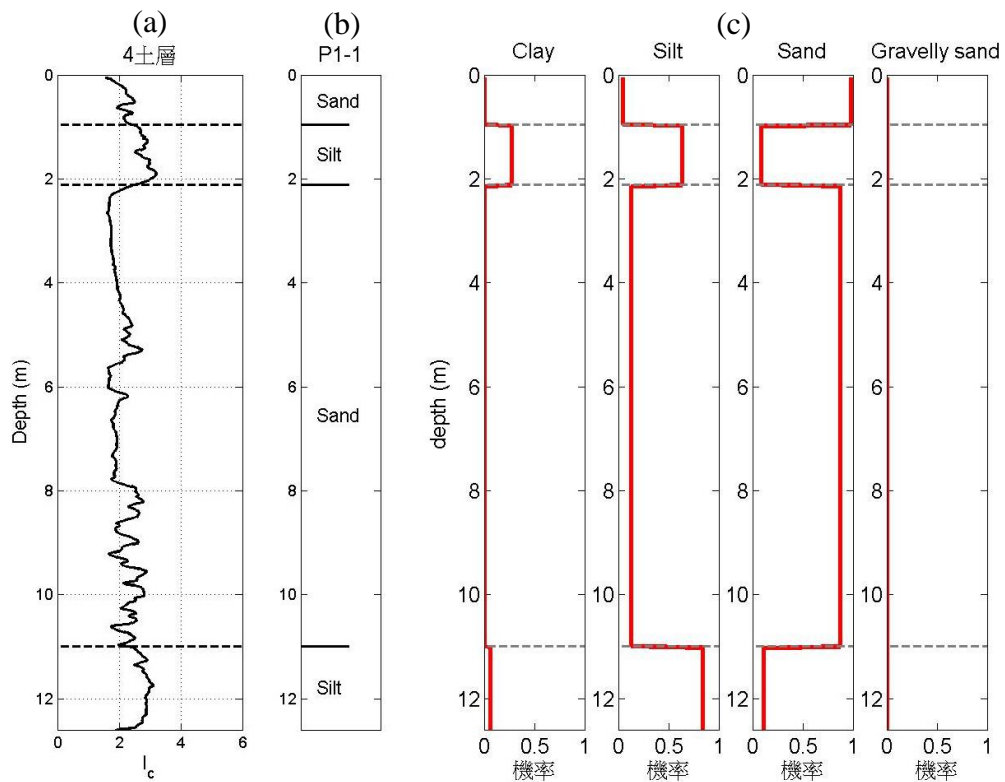


圖 4-14 P1-1 之 WTMM 四分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與四分法分類結果；(c) 四分法分層機率圖。

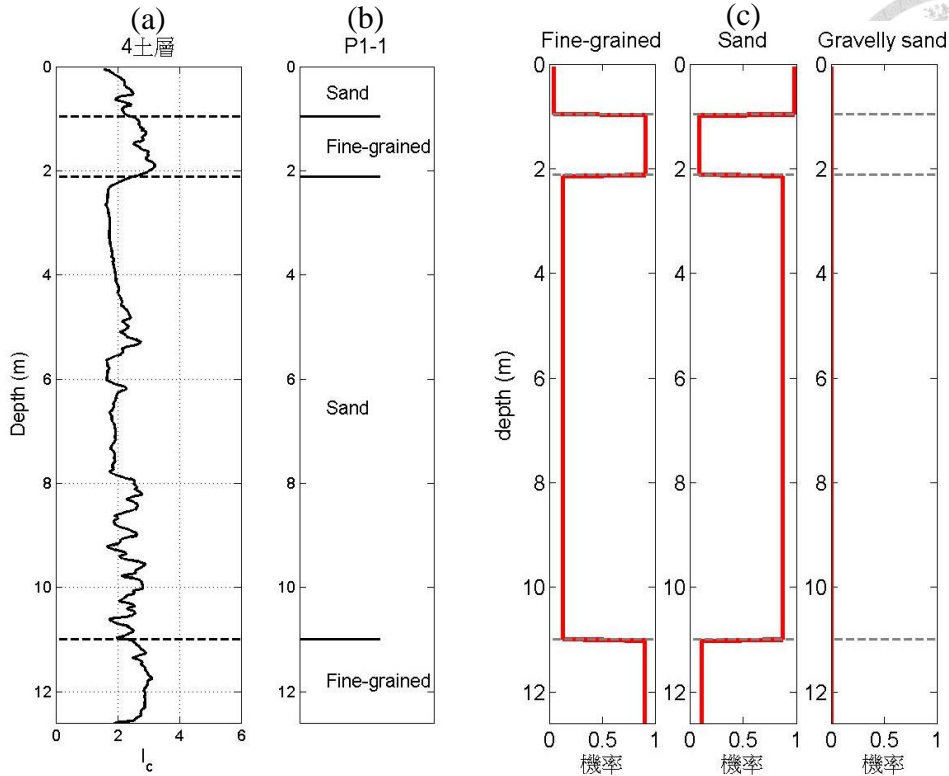


圖 4-15 P1-1 之 WTMM 三分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與三分法分類結果；(c) 三分法分層機率圖。

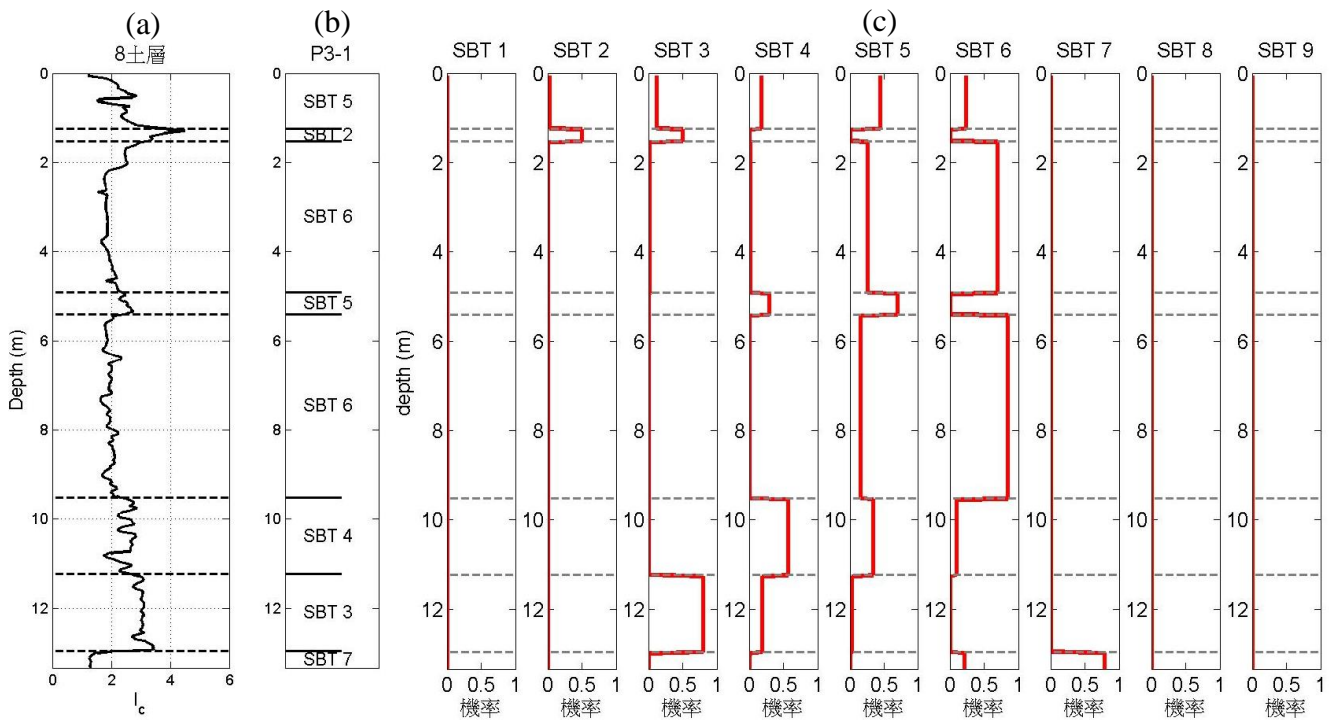


圖 4-16 P3-1 之 WTMM SBT 九分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與 SBT 分類結果；(c) SBT 分層機率圖。

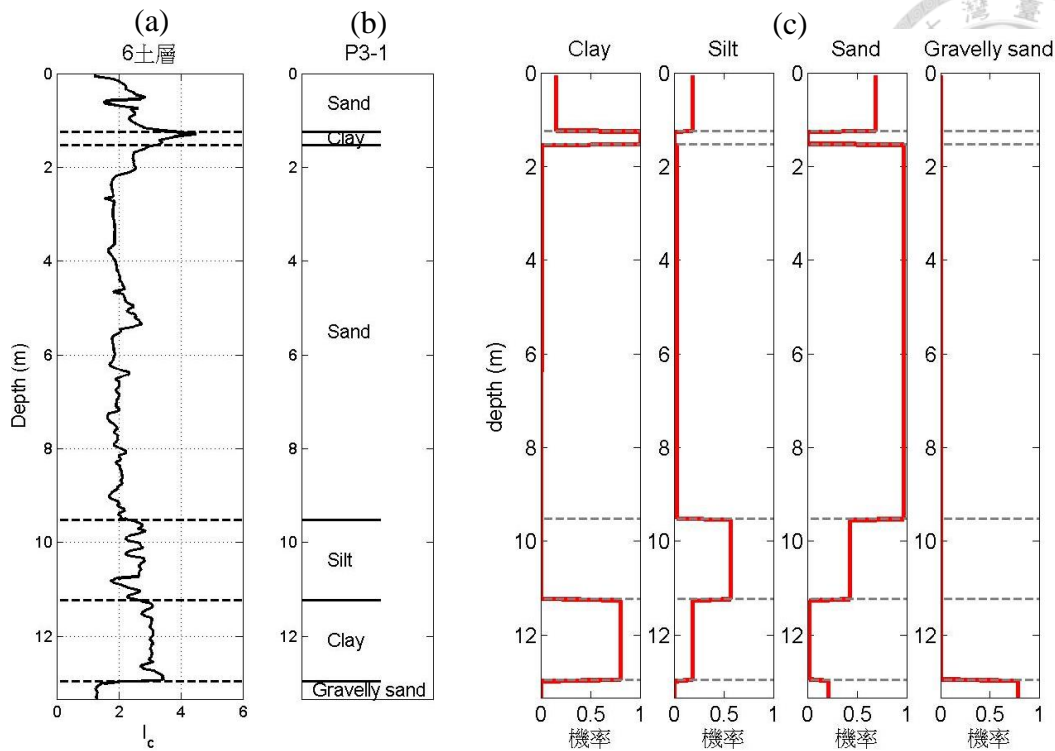


圖 4-17 P3-1 之 WTMM 四分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與四分法分類結果；(c) 四分法分層機率圖。

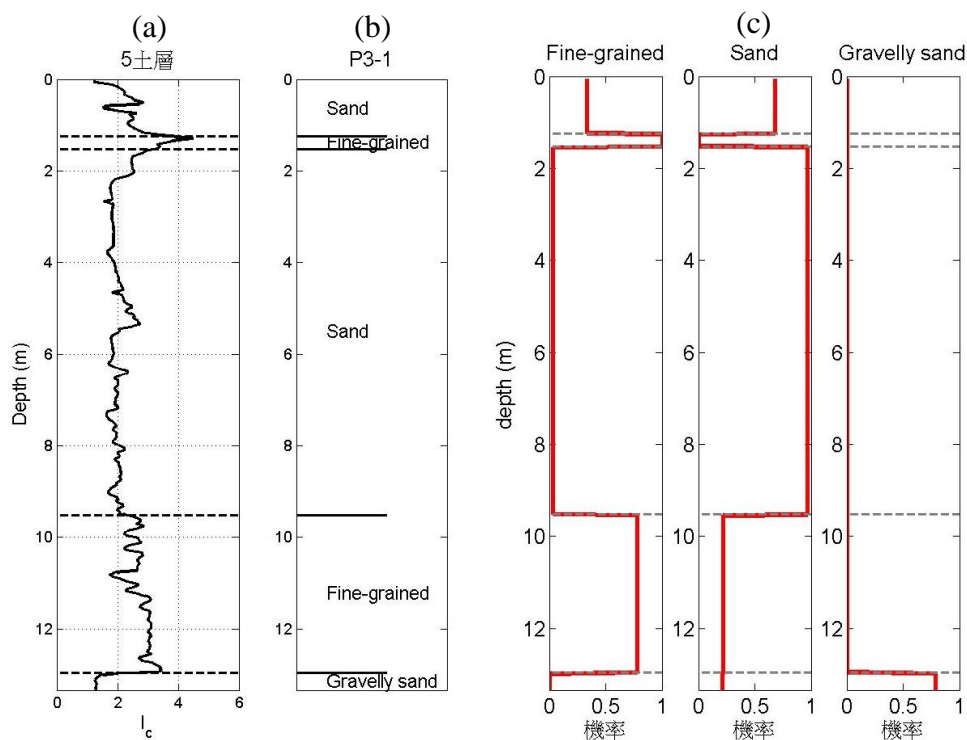


圖 4-18 P3-1 之 WTMM 三分法分層結果；(a) I_c 分布圖與分層層面；(b) 分層層面與三分法分類結果；(c) 三分法分層機率圖。



4.1.4 孤兒層問題

孤兒層問題是 HMM 土壤分層法在辨識現地 I_c 資料層面時所遭遇的問題，該問題好發於 I_c 大幅度下降，或是資料突然有個深谷(或尖峰)，使得 HMM 感受到變化，需要轉變狀態時，然而合理的目標族群其 $I_{c(i)}$ 的標準差 σ_i 很小，在過渡區的那些資料點受到排斥，既不會被歸類到新族群，也不會被歸類到原本族群，反而被迫歸類到其他標準差 σ_i 較大的族群。

圖 4-19 和圖 4-20 顯示了具有 3 個孤兒層的 P5-1 孔的分層結果，其孤兒層分別位於 0.66、2.32 和 12.48 公尺處，形成的條件皆是因為 I_c 資料突然有個深谷，或是遇到層面，開始大幅度下降，但是合理的目標族群的 σ_i 很小，最終這些「孤兒」被迫分類到 σ_i 較大的族群，例如第 3 分群，造成我們得到了不符合實際情況的薄層。

孤兒層問題的原因出於 FB 遞迴，因為即使 I_c 大幅下降，其下降的過程中仍然存在著資料點，這些資料點 I_{ct} 在 FB 遞迴中會透過(3.18)式和(3.20)式計算它們與 μ_i 、 σ_i 的似然性， I_{ct} 與 μ_i 相差愈大，似然性愈小，這些資料點通常介於 μ_i 與 μ_{i+1} 之間，與兩邊的平均值都不是特別地接近。而另問題更嚴重的是當 σ_i 很小時，似然性會趨近於 0，使得之後計算出來的後向變數 $\pi'_t(s|\theta)$ 中，標準差小的分群其機率會趨近於 0，而平均值離 I_{ct} 遠但是標準差大的分群，其機率反而變得相當大，使得這些資料點在後向遞迴抽樣時，有很大的機率被分配到標準差大的群組中，而不是最接近但標準差很小的群組，形成孤兒層問題。

簡單來說，我們可以把標準差大小想像成納入該分群的「入口」大小，若入口太小，資料點離入口太遠，則無法進入，只能改去入口較大的其他分群。綜觀來看，FB 遞迴仍然有照著它的規則進行計算，只是產生的結果並非我們所樂見，孤兒層理想上不應該存在，應用時可以人工將孤兒層剔除，以獲得更乾淨的層面。

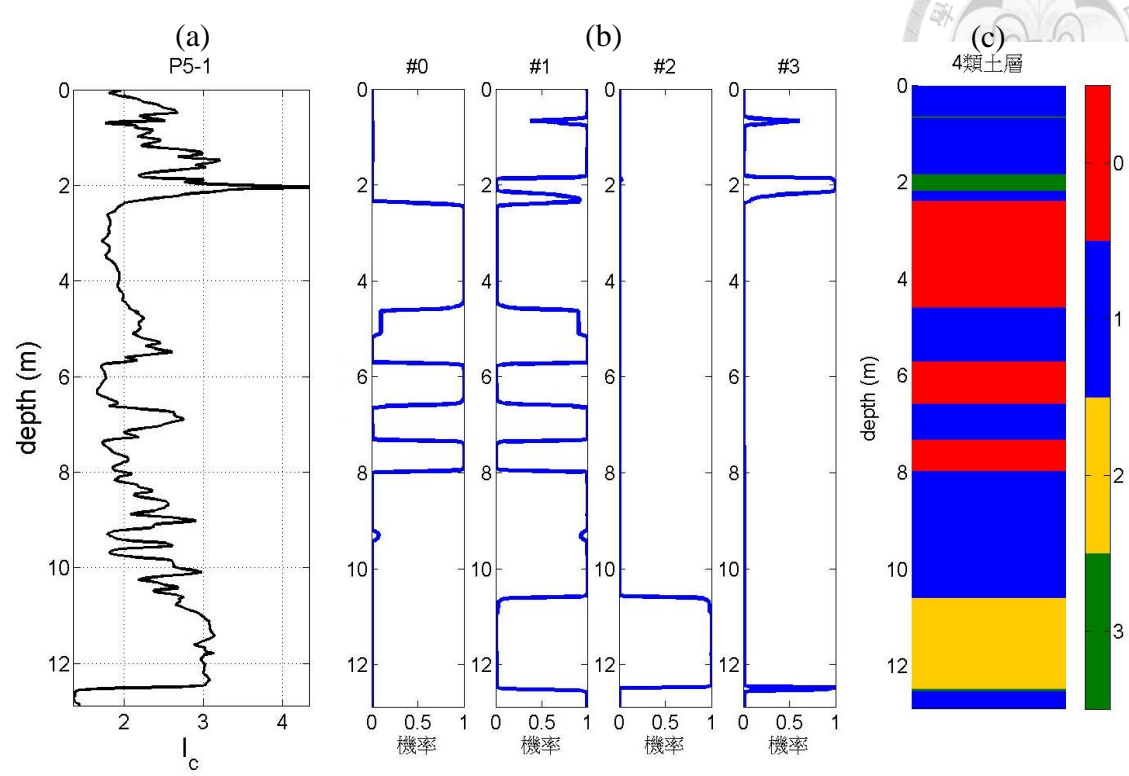
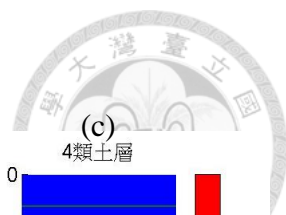


圖 4-19 P5-1 的 4 群分層結果，可以發現 3 個孤兒層；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) 土壤種類機率隨深度演變圖；(c) 最高機率分層圖。

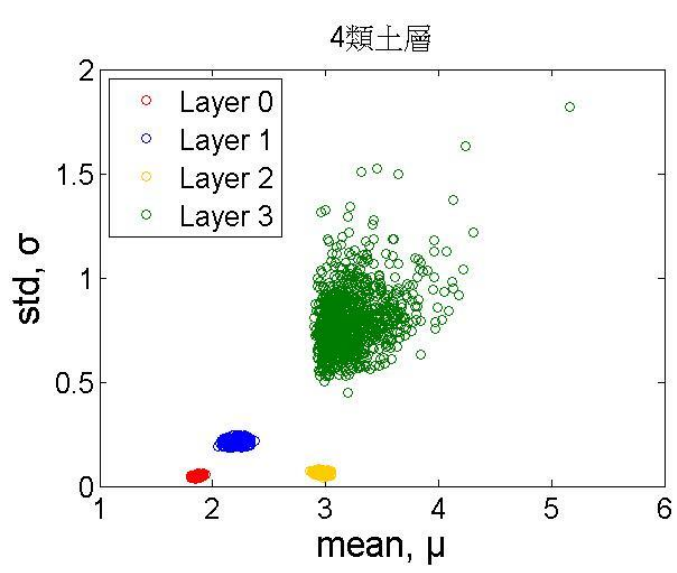


圖 4-20 P5-1 之 4 群 μ_i 與 σ_i 樣本分布圖



4.1.5 分群分數問題

分群分數問題是 HMM 土壤分層法分析現地資料時，在分群數 m 大於某個值 (大約是 5) 之後，似然遞迴所計算出來的分群分數 $\ln l_i^*$ 會變得可能不只一種結果，使得分析一次 HMM 土壤分層法未必能得到最高的分群分數，而最高的分群分數未必是最好的分層結果，形成找尋最佳分群數的困難。


原本分群分數的機制是計算 $I_{c1:T}$ 對於不同 θ 的似然性，愈接近最佳分群數則分數愈高，在最佳分群數達到最高點，超過之後則每多一個空白的群組就損失一些分數，由此來判斷最佳分群數。由圖 4-8 可以發現，當分群數 m 大於 5 時，分群分數開始變得不只一種，甚至到後面最多有 4 種分群分數，這是因為 K-means 法產生的 h_1 初始序列每次都不一樣，有的 h_1 會導致 HMM 只抓到 4 群，有的會導致 HMM 抓到 5 群。每多抓到一群，分數就會高一個層次，這是因為每多一個分群數，(3.25) 式就會多一個項目需要加總，所以分群分數就會變高。

分群分數問題可能是 3.1.7 節提到的預燒期問題在此所衍生的問題，因為該問題也是因為 h_1 的不同導致 HMM 可能會少抓到一層，分群分數也因此降低，分群分數的準確性是建立在沒有預燒期問題的條件之上。然而在分析現地資料時，我們很難保證分數最高者就是最好的結果，少抓到一層的就是不好的結果，因此以圖 4-8 的情況為例，除了參考分數之外，我們應該再比較 4 群、5 群、6 群和 7 群的結果，選出最合理的分層結果來使用。

4.1.6 HMM 土壤分層法與 WTMM 法的比較

本研究開發的 HMM 土壤分層法與 Ching et al. (2015) 提出的 WTMM 法，兩者皆有相同的輸入資料和目的，差別在於方法不同，以下比較兩者對 P1-1 與 P3-1 進行土壤分層的結果差異，還有與 Bong and Stuedlein (2017) 進行的 SPT 劈管取樣分層結果進行驗證，觀察哪一種方法表現較佳。

圖 4-21 顯示了 P1-1 之 3 種分層方法的總比較，可以發現 WTMM 法和 HMM



法表現都很好，兩者分層的趨勢接近，雖然層面的位置稍有差異，但兩者都有顯示出相同的土壤種類變化，而 HMM 法展示其細分土壤種類的的能力，能劃分更多土層。SPT 分層法顯示最少的層數，只劃分了四層，而 WTMM 法展示其分析層面的精準度，圖 4-21(e)的 3 個層面 WTMM 法皆有精準地找到，而 HMM 法除了第一個層面誤判為孤兒層之外，其他兩個層面也有找出。

圖 4-22 顯示了 P3-1 之 3 種分層方法的總比較，可以發現 SPT 分層法同樣是劃分 4 層，而 HMM 法卻劃分得很混亂，劃分了很多層，也出現了很多孤兒層。WTMM 法則是圖 4-22(e)的第一個層面沒有判讀到，但其餘層面還是有成功找出來，而且分層穩定，結果清楚。

經過第一現地 25 孔資料的測試，我們可以歸納出 HMM 土壤分層法與 WTMM 法的優缺點，總結如以下說明，還有表 4-1 所示。

HMM 土壤分層法的優點為：

- (1) 種類區分是深入分析 I_c 波形變化，它根據 I_c 的參數 μ 與 σ 區分土壤種類。
- (2) 分群數量可以做從 1 到 10 的變化，再選擇最佳的結果。

HMM 土壤分層法的缺點為：

- (1) 運算時間較久，疊代次數愈多愈久。
- (2) 層面劃分較混亂，有孤兒層問題。
- (3) 因為預燒期問題，每次結果可能會不一樣。

WTMM 法的優點為：

- (1) 運算時間極短。
- (2) 層面劃分清楚、精準。
- (3) 結果不會因為重新分析而變化。

WTMM 法的缺點為：

- (1) 種類區分簡單，如果兩相同土層之 F_r , Q_t 資料群落於 SBTn 圖定義的界線，容易將兩土層判斷為不同土壤種類。



(2) 分群數量固定 9 種，無法更進一步細分，而 SBT 1、2、8、9 出現機率較低。

綜觀上述優缺點，WTMM 整體表現還是比 HMM 土壤分層法好，因為前者層面清楚，種類區分能確實反映出現地狀況，結果穩定，計算時間極短，因此後面章節的二維與三維土壤剖面預測我們將選擇以 WTMM 法搭配 GCMC 進行分析，如此一來將會有比較穩定的結果。

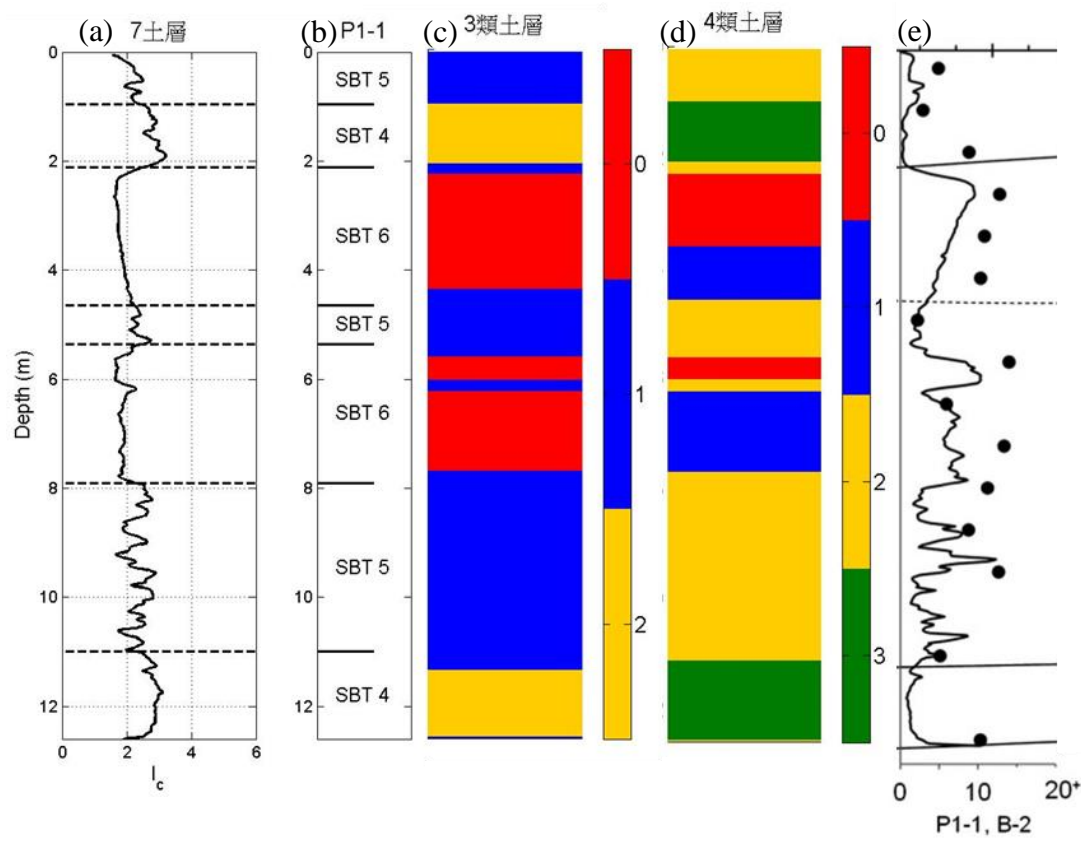


圖 4-21 P1-1 孔土壤分層總比較；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) WTMM 法結果；(c) HMM 土壤分層法 3 群結果；(d) HMM 土壤分層法 4 群結果；(e) Bong and Stuedlein (2017) SPT 搭配劈管取樣器分層結果。

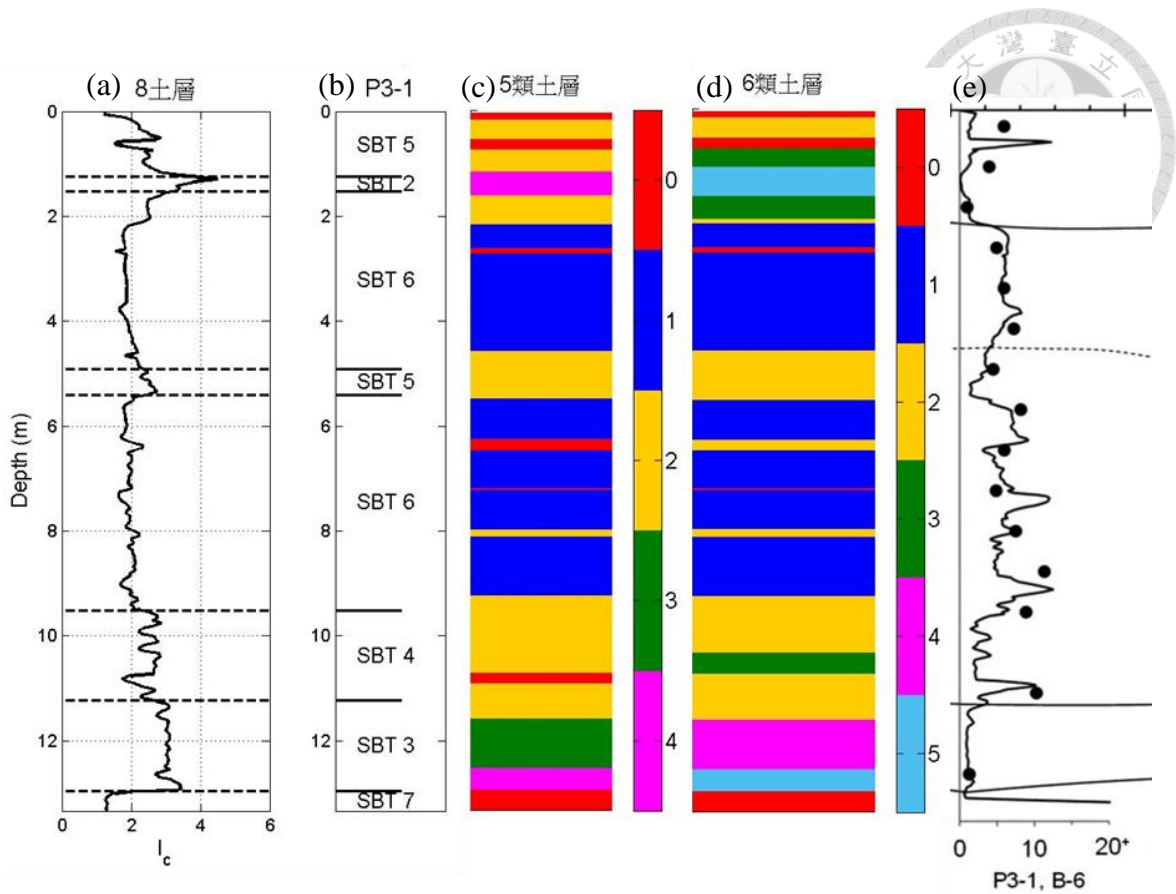


圖 4-22 P3-1 孔土壤分層總比較；(a) I_c 隨深度分布圖；(b) WTMM 法結果；(c) HMM 土壤分層法 5 群結果；(d) HMM 土壤分層法 6 群結果；(e) Bong and Stuedlein (2017) SPT 搭配劈管取樣器分層結果。

表 4-1 WTMM 法與 HMM 土壤分層法之性能比較

WTMM	項目	HMM
極短	運算時間	較久
清楚	層面劃分	較亂
簡單	種類區分	深入
固定 9 種	分群數量	可變化
固定	結果變化性	變化



4.2 二維分層案例分析

4.2.1 第一現地之二維分層預測

本節將對好萊塢現地中的截面 A-A' 進行二維 GCMC 土壤分層剖面預測，而為了簡化結果，輸入的鑽孔資料為 WTMM 四分法結果，如此一來土壤種類將可簡單分類為四種。截面 A-A' 中的 5 孔 CPT 資料在進行 WTMM 四分法之後的結果如圖 4-23 所示，可以發現 5 孔一維分層結果已經透露出一些二維剖面資訊，而如何預測鑽孔與鑽孔之間的土壤種類便是接下來 GCMC 模型的工作。

此外，為了觀察黏土與粉土在結合為同一種土壤種類之後，是否就能準確預測細粒土層的分布，我們也進行了 WTMM 三分法搭配 GCMC 之二維土壤剖面預測，藉此觀察四分法與三分法的差異，其中截面 A-A' 中的 5 孔 CPT 資料進行 WTMM 三分法之後的結果如圖 4-24 所示。

WTMM 四分法搭配 GCMC 模型：

有了截面 A-A' 之 5 孔 CPT 資料 (P1-1 至 P5-1)，它們的 WTMM 四分法結果之後，我們便可以將這些鑽孔資料座標與分層結果輸入至 GCMC 模型，GCMC 所需輸入之參數如表 4-2 所示，比較重要的是網格間距 Δx 、 Δy 的選定，間距的大小、形狀將會影響 GCMC 的行為，本次案例分析 Δx 、 Δy 的選定以正方形、小間距為原則，故採用 $0.1 \text{ m} \times 0.1 \text{ m}$ 。而模擬的數量設為 50 個。

因此輸入了圖 4-23 的 5 孔資料，所得到的其中一個 GCMC 分層結果如圖 4-25 所示，還有以 50 個模擬結果計算每一種土壤種類在各個位置出現的機率，如圖 4-26(a) ~ (d) 所示，該圖可以看作是圖 3-4(b) 的二維版本，顯示了該土壤種類在某個位置的出現機率，若在某處 100% 機率出現則其值為 1 (深紅色)，0% 機率出現則為 0 (深藍色)。

圖 4-25 與 4-26(a) ~ (d) 的結果可以與圖 4-2 進行驗證，可以發現 WTMM 四分法搭配 GCMC 能準確地預測出二維土層分布，截面 A-A' 之上部粉土、黏土混合薄

層，中間大片厚砂土層，下部黏土層，以及底部礫質砂土層，它們分布之趨勢大致上與 Bong and Stuedlein (2017)所觀察的結果(圖 4-2)一致，然而，不一致地方在於 P1-1 與 P5-1 的底部沒有預測出礫質砂土層，還有 P5-1 之上部沒有粉土、黏土混合薄層，這是因為輸入的 WTMM 四分法原本就沒有顯現這些土層，可以知道 GCMC 準確預測的前提為 WTMM 結果的準確性。

表 4-2 對好萊塢現地資料進行四分法二維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax	26 m, 13.5 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y$	0.1 m, 0.1m
條件資料數量	4 個	輔助資料	無
分析維度	二維	輸入鑽孔資料	CPT 資料座標與 WTMM 四分法結果
岩性數量	4 個	計算轉移機率矩陣	是

WTMM 三分法搭配 GCMC 模型：

現在換成三分法再分析一次，對截面 A-A'中的 5 孔 CPT 資料進行 WTMM 三分法分層，得到圖 4-24，將該結果輸入至 GCMC 模型中，模型所需輸入的參數如表 4-3 所示，大部分的設定皆與四分法分析時相同，但是土壤種類少了一種，分析可能會因此產生差異。

所以 WTMM 三分法搭配 GCMC 模型的結果如圖 4-27、4-28(a) ~ (c)所示，可以發現結果並非單純地等於將四分法之黏土與粉土合併，在三分法的結果中，下部的細粒土層有連接在一起，但是上部的細粒土薄層卻沒有，這可能是因為在三分法中，砂土的轉換機率相對較大，再加上上部細粒土層比較薄，其影響力並不足以使其與相鄰細粒土層相連，因此在過程中就轉變為砂土，形成斷斷續續的細粒土層。而其他地方的結果大致與四分法相同。

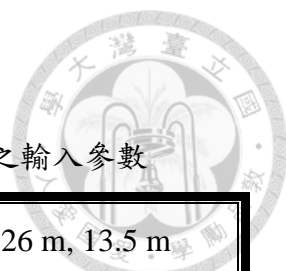


表 4-3 對好萊塢現地資料進行三分法二維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax	26 m, 13.5 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y$	0.1 m, 0.1m
條件資料數量	3 個	輔助資料	無
分析維度	二維	輸入鑽孔資料	CPT 資料座標與 WTMM 三分法結果
岩性數量	3 個	計算轉移機率矩陣	是

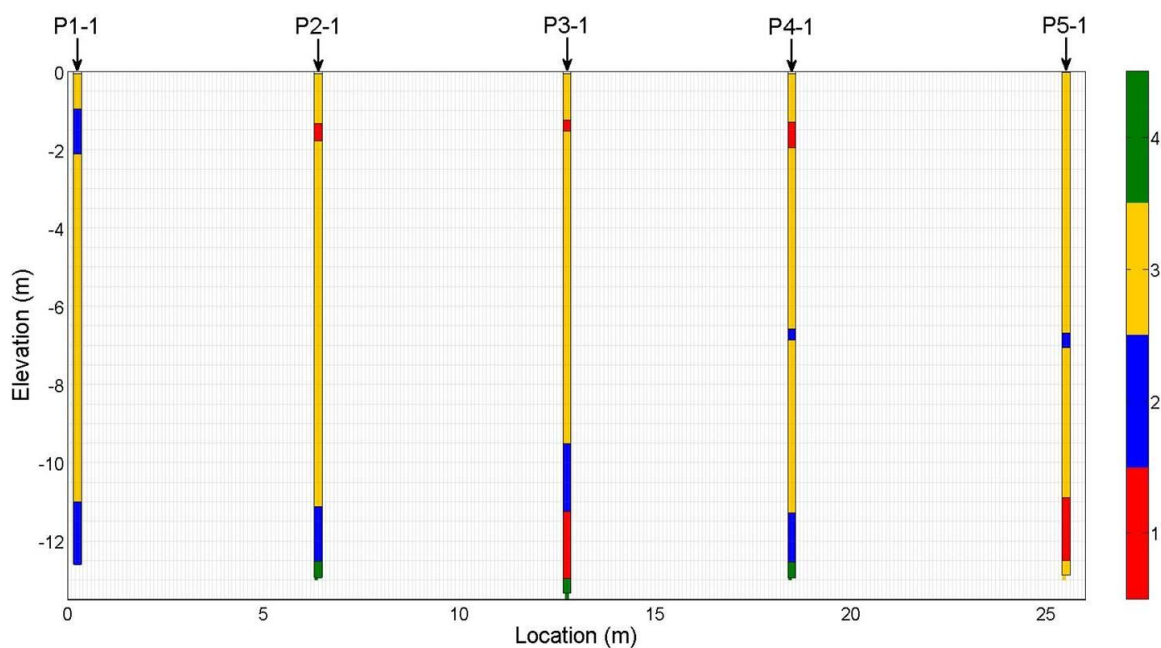


圖 4-23 截面 A-A'處之 WTMM 四分法分層結果。

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

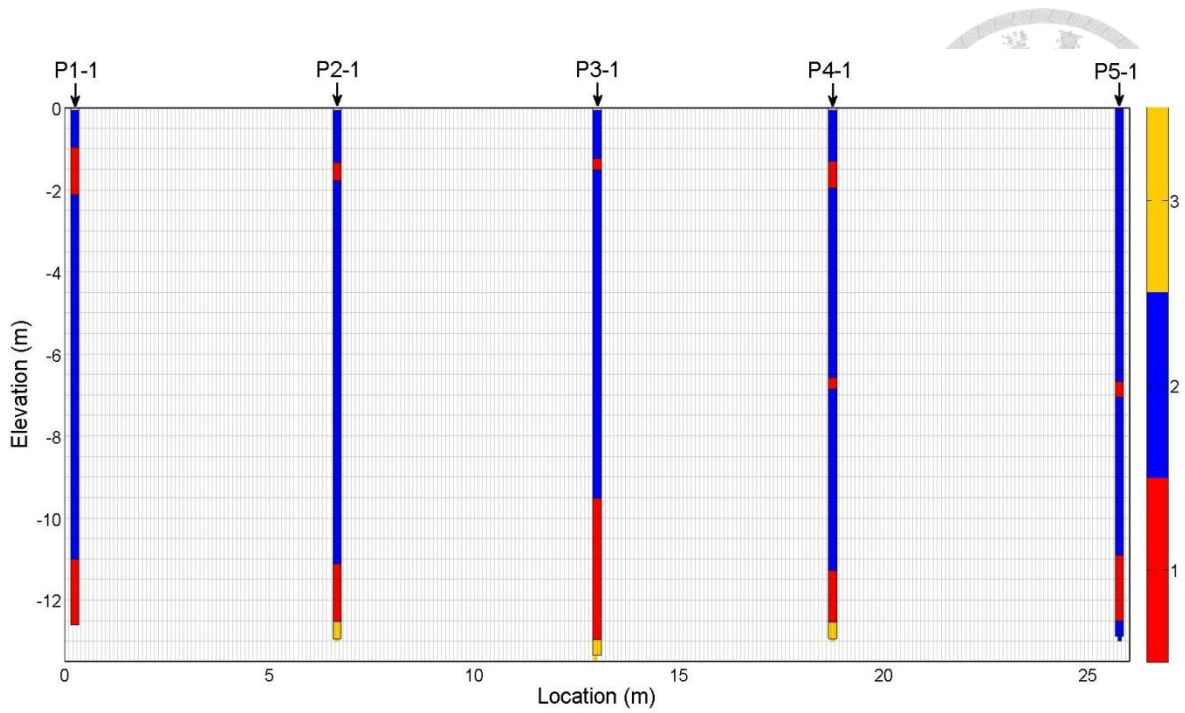


圖 4-24 截面 A-A'處之 WTMM 三分法分層結果。

(其中 1 為細粒土，2 為砂土，3 為礫質砂土)

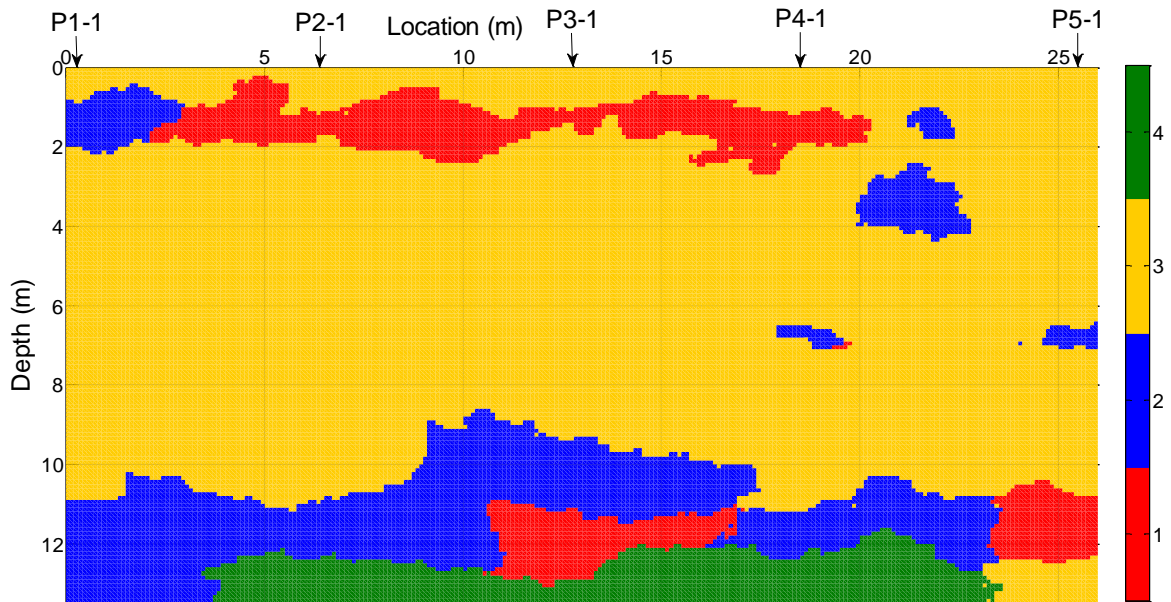


圖 4-25 截面 A-A'處之四分法二維 GCMC 土壤剖面預測結果。

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

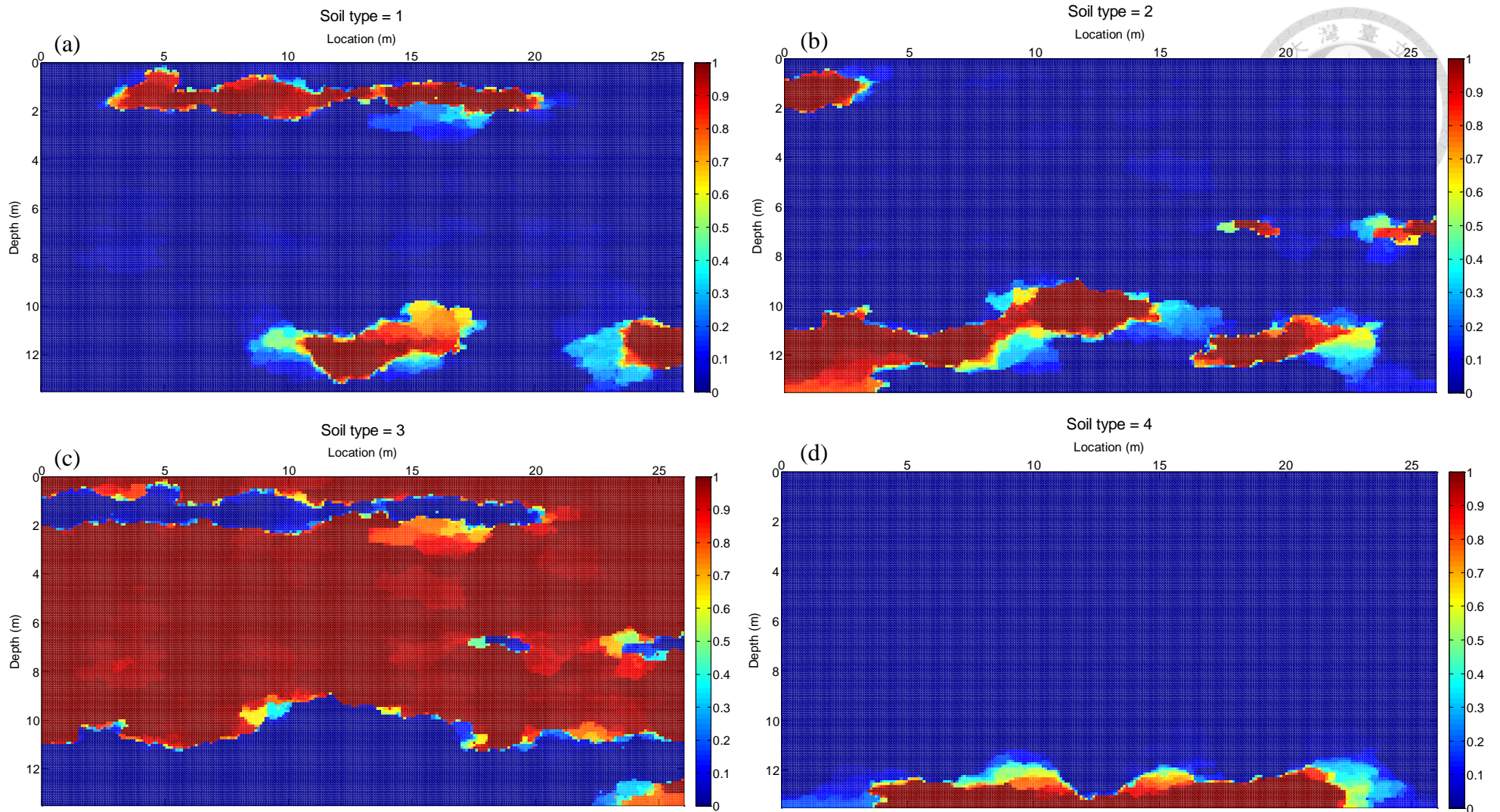


圖 4-26 50 次模擬所計算之截面 A-A'處土壤種類出現機率圖；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土；(d) 4 號：礫質砂土。

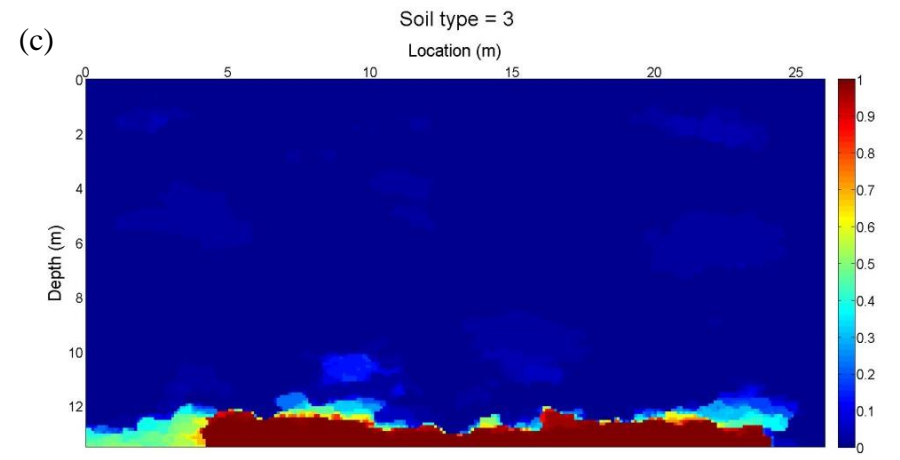
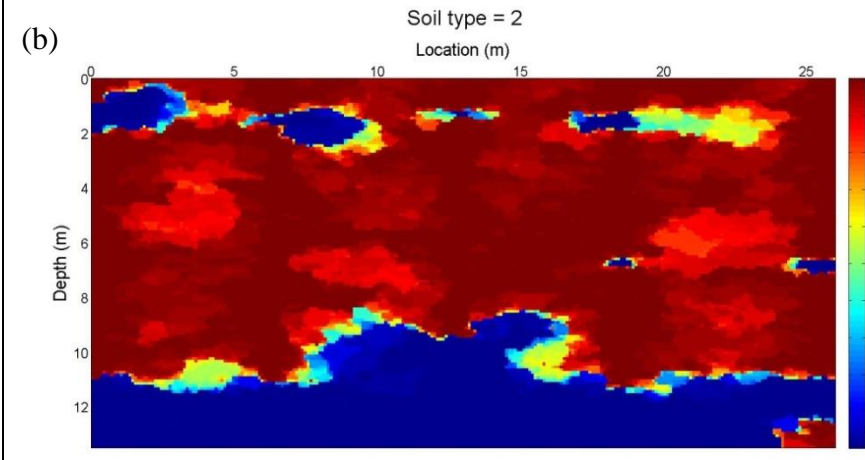
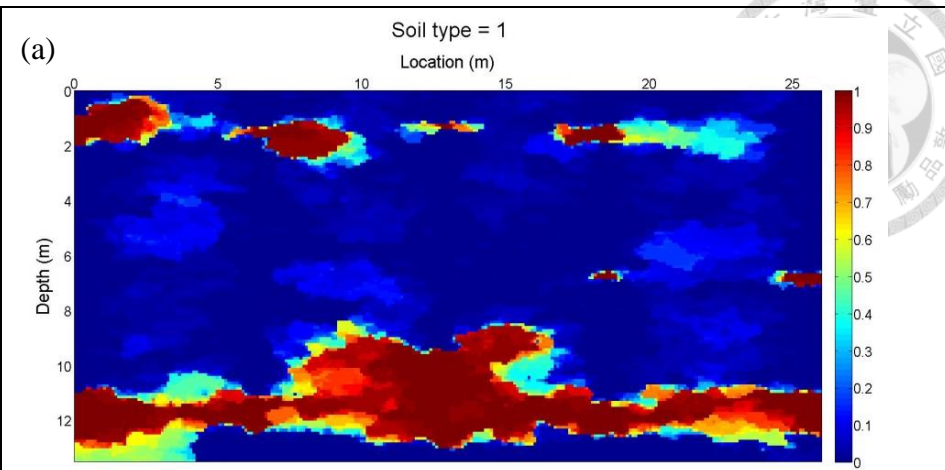
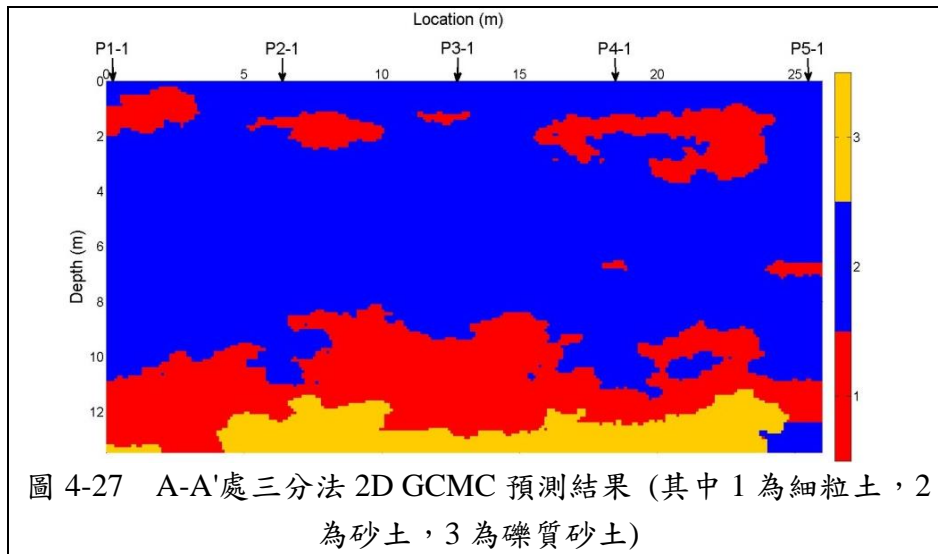


圖 4-28 50 次模擬所計算之截面 A-A'處土壤種類出現機率圖；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土；(c) 3 號：礫質砂土。



4.2.2 第二現地：南澳洲阿得雷德 South Parklands (South Parklands in Adelaide, South Australia)

本研究使用之第二現地資料是 Jaksa (1995) 在位於南澳洲阿得雷德市中心商業區最南端的 South Parklands 地區，進行了 236 個 CPT 鑽探而來的。為了確定 South Parklands 地下黏土在垂直方向和水平方向上的小尺度變化，Jaksa 選擇採用網格佈局的 CPT 鑽探計畫，如圖 4-29 所示，該佈局主要由 11×11 的陣列所組成，兩個方向的網格間距皆為 5 公尺，還有另外 101 個 CPT 以水平間距為 1 公尺的排列布置(第 F 列與第 5 行)。為了便於參考，採用了一個字母搭配數字的網格編號系統。每個 CPT 鑽至地下 5 公尺左右，因為測量間距為 5 毫米，所以一共記錄了 1000 次錐尖阻抗量測值 q_c 與套管摩擦力 f_s 。

為了盡量減少季節對 CPT 量測的影響，鑽探計畫在盡可能短的時間內完成(43 天)，這段時間包括所有 CPT 鑽探，除了 CD1 到 CD50 之外，因為它們是在大約 6 個月之後才花了 3 天進行。由於大部分 CPT 鑽探與 CD1 至 CD50 具有時間上的差異，因此兩個資料集使用時被分開處理。完整 South Parklands 鑽探計畫細節可參考 Jaksa (1995)。

我們在後續的現地多維土壤剖面預測將只選取在 11×11 陣列上的 CPT 資料來分析，不考慮緊密排列的 CPT 鑽探資料。選取的資料扣除失敗的孔位之後，一共有 105 筆，然而 South Parklands 的 CPT 資料只有每個深度的 q_c 與 f_s 值，這樣的條件是不足以計算 I_c 的，因此我們必須適當假設地下水位大於地下 5 公尺，不影響土壤性質，溼土單位重 γ 假設為 18 kN/m^3 ，有效覆土壓力 σ'_{v0} 等於總覆土壓力 σ_{v0} ，貫入孔隙水壓 $u_2 = 0$ ， $q_c = q_t$ ，如此一來便可計算 I_c ，供後續分析使用。

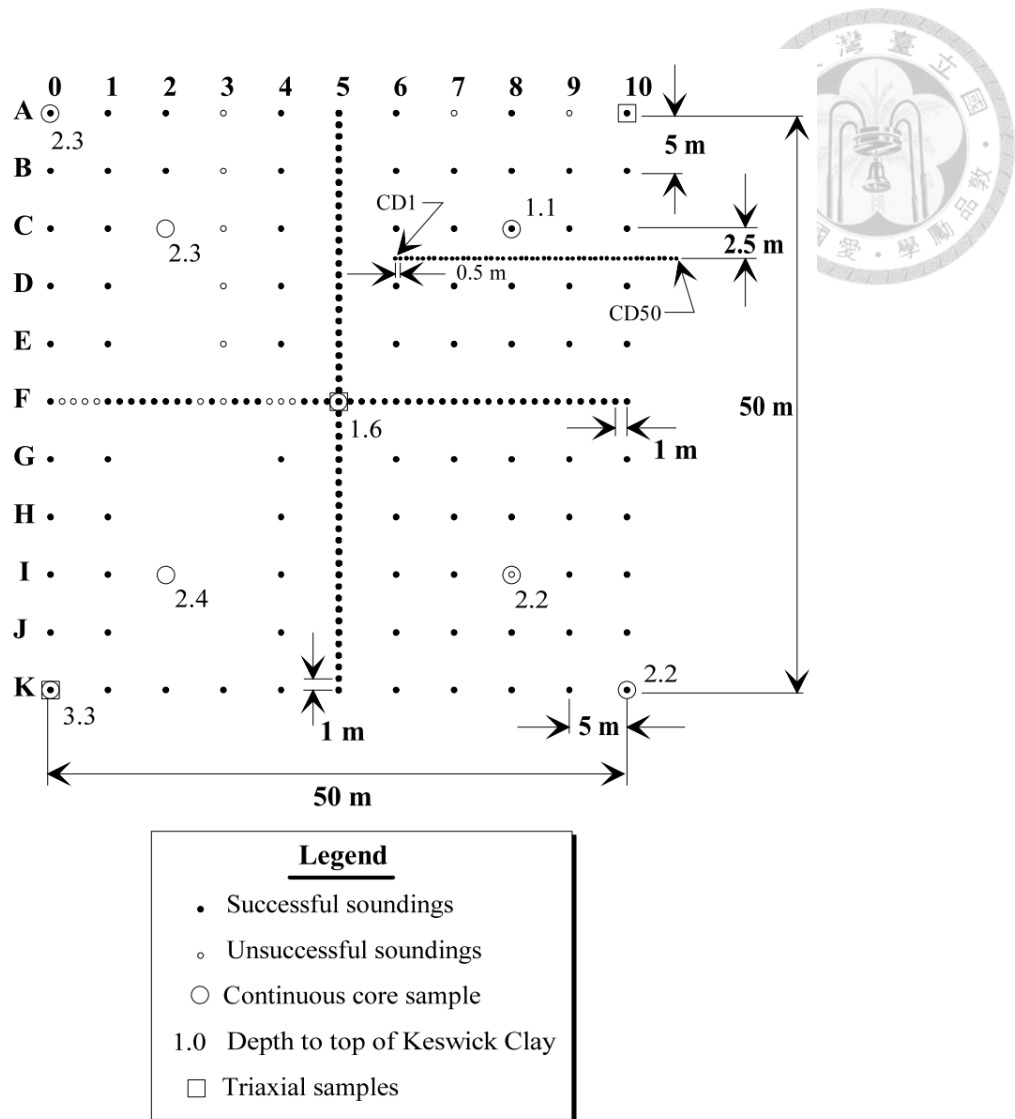


圖 4-29 South Parklands 現地之垂直 CPT 鑽探佈局 (Jaksa, 1995)

4.2.3 第二現地之二維分層預測

本節將對 South Parklands 現地中的 A5-K5 剖面進行二維 GCMC 土壤分層預測，Jaksa (1995)於 A5-K5 剖面施做了 51 個間隔 1 公尺的 CPT 鑽探(參考圖 4-29)，以便分析土壤水平變異性。今我們將 51 孔 CPT 資料全部進行 WTMM 四分法，可以得到圖 4-30(b)，由此可以得到幾乎整個剖面使用 WTMM 四分法分層之後的結果。

進行 GCMC 分析時，我們只選取 A5、B5、C5、...、K5 等 11 筆間隔 5 公尺的 CPT 資料，先進行 WTMM 四分法，得到圖 4-30(a)，再將這些結果輸入至 GCMC 分析，最後將二維分層預測結果拿來與圖 4-30(b)比較。



同樣為了觀察黏土與粉土是否能合理地結合為同一土層，也進行條件相同的 WTMM 三分法搭配 GCMC 分析，觀察與四分法的差異。

WTMM 四分法搭配 GCMC 模型：

將 A5、B5、C5、…、K5 等 11 筆 CPT 資料拿去進行 WTMM 四分法分層之後(如圖 4-30(a))，將這些結果輸入至 GCMC 模型，所需要輸入的參數如表 4-4，其中較特別的地方為雖然進行了四分法，但是因為此現地礫質砂土層未出現，所以條件資料與岩性 (lithology)數量需設為 3 個，而 Δx 與 Δy 一樣設為 0.1 公尺。

分析結果如圖 4-31 與 4-32(a)、(b)、(c)所示，將結果與圖 4-30(b)比較，發現 I5、J5 與 K5 三孔之間的預測相當準確，而 C5、D5、E5 與 F5 四孔之間的預測與圖 4-30(b)有些出入，大多是因為這四個鑽孔被 WTMM 判定的土壤種類與周圍土壤的種類不一致，由此可知 GCMC 分析準確的前提，是鑽孔被 WTMM 判定的土壤種類需要足以代表其周圍區域的土壤種類。總體來說，GCMC 模型還是能根據 WTMM 四分法分層預測出合理的結果。

表 4-4 對 South Parklands 現地資料進行四分法二維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax	52 m, 5.3 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y$	0.1 m, 0.1m
條件資料數量	3 個	輔助資料	無
分析維度	二維	輸入鑽孔資料	CPT 資料座標與 WTMM 四分法結果
岩性數量	3 個	計算轉移機率矩陣	是

WTMM 三分法搭配 GCMC 模型：

現在換成三分法再分析一次，對 A5-K5 剖面之 11 筆 CPT 資料進行 WTMM 三分法之後，得到圖 4-33(a)，將其結果輸入至 GCMC 模型之中，模型所需輸入的參數如表 4-5 所示，大部分的設定皆與四分法分析時相同，只有條件資料與岩性數量



又少了一種，只剩細粒土與砂土兩種。

WTMM 三分法搭配二維 GCMC 分析結果如圖 4-34、4-35(a)、(b)所示，其結果可以與圖 4-33(b)之連續 51 孔 WTMM 三分法剖面比較，我們可以發現細粒土的分布大致上與四分法的黏土、粉土相同，但是比之前有更多與周圍同類相接在一起的趨勢，總體來說，雖然細粒土層形狀與四分法時有些微不同，但是結果與四分法一樣合理。

表 4-5 對 South Parklands 現地資料進行三分法二維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax	52 m, 5.3 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y$	0.1 m, 0.1m
條件資料數量	2 個	輔助資料	無
分析維度	二維	輸入鑽孔資料	CPT 資料座標與 WTMM 三分法結果
岩性數量	2 個	計算轉移機率矩陣	是

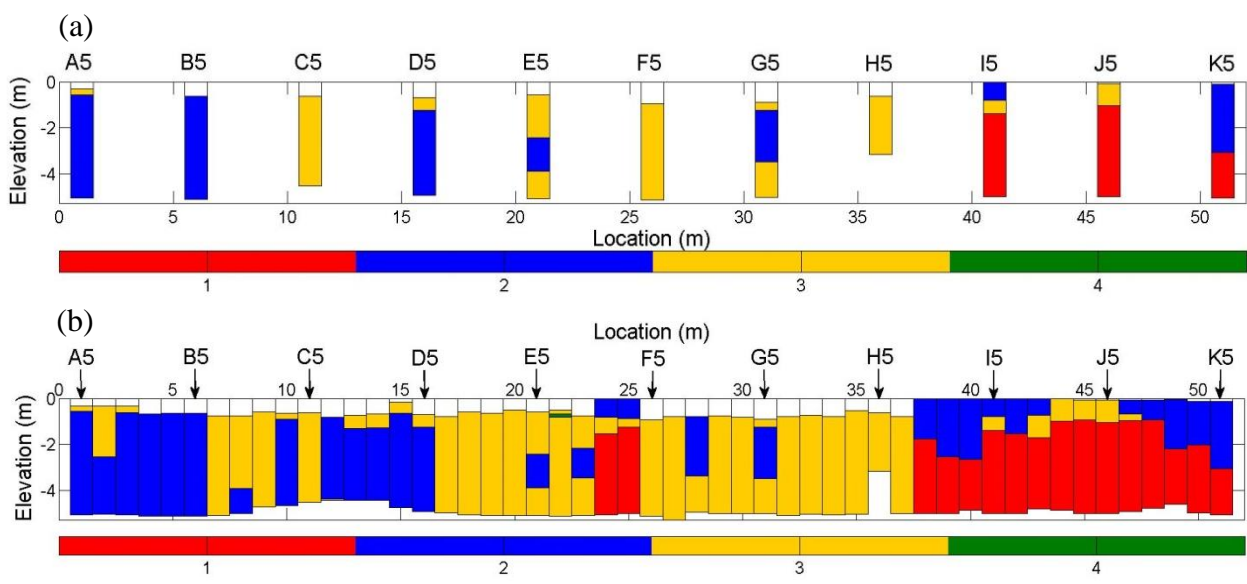


圖 4-30 South Parklands A5~K5 剖面之 WTMM 四分法結果；(a) 輸入 GCMC 之 11 孔 CPT 分層結果；(b) 連續 51 孔 CPT 分層結果。
(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

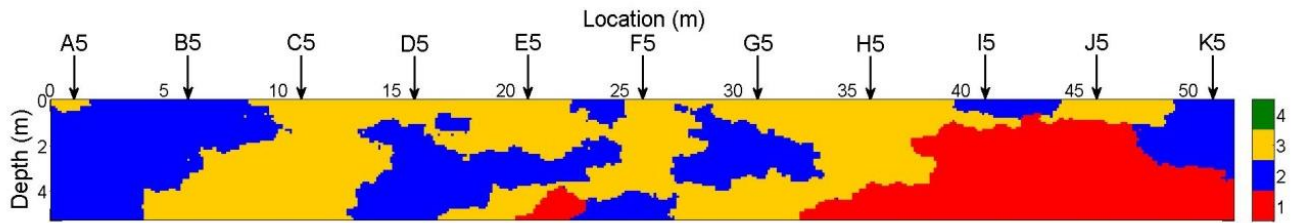


圖 4-31 11 孔 CPT 進行四分法之二維 GCMC 土壤剖面預測結果。

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

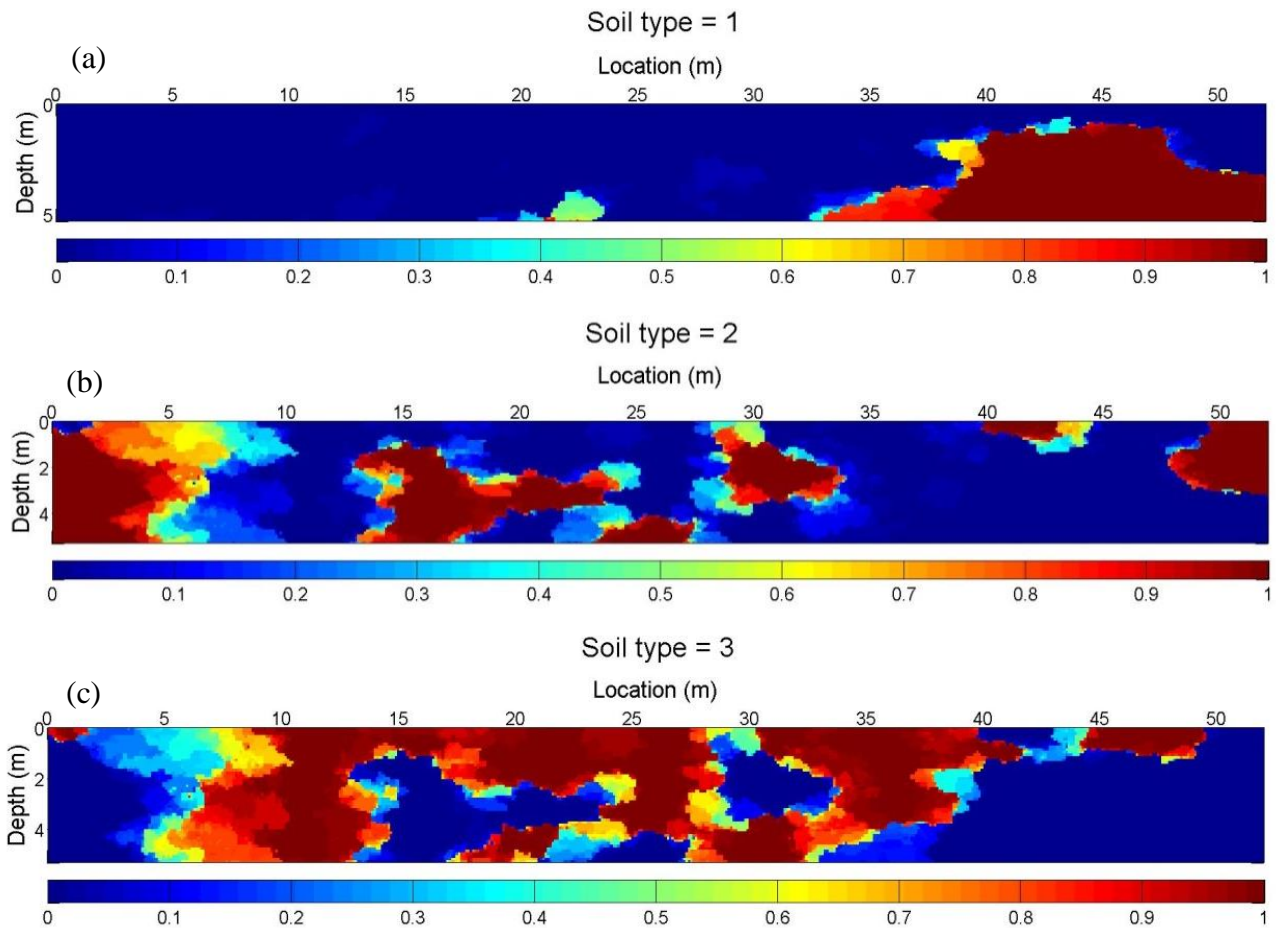


圖 4-32 50 次模擬所計算之 A5~K5 剖面四分法土壤種類出現機率圖；

(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。

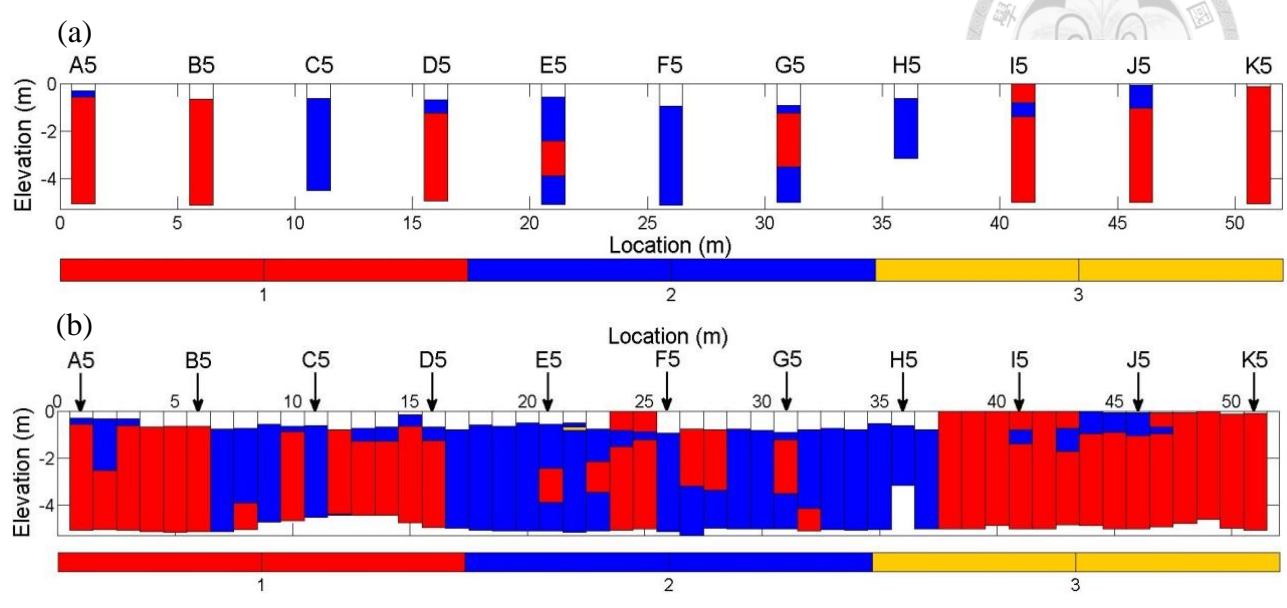


圖 4-33 South Parklands A5~K5 剖面之 WTMM 三分法結果；(a) 輸入 GCMC 之 11 孔 CPT 分層結果；(b) 連續 51 孔 CPT 分層結果。
(其中 1 為細粒土，2 為砂土，3 為礫質砂土)

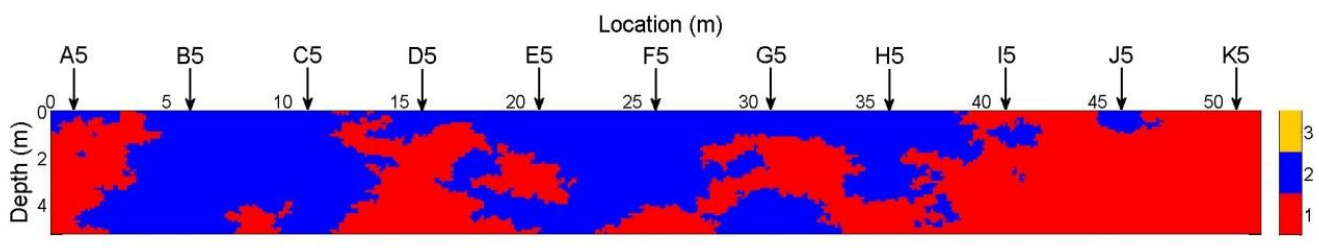


圖 4-34 11 孔 CPT 進行三分法之二維 GCMC 土壤剖面預測結果。
(其中 1 為細粒土，2 為砂土，3 為礫質砂土)

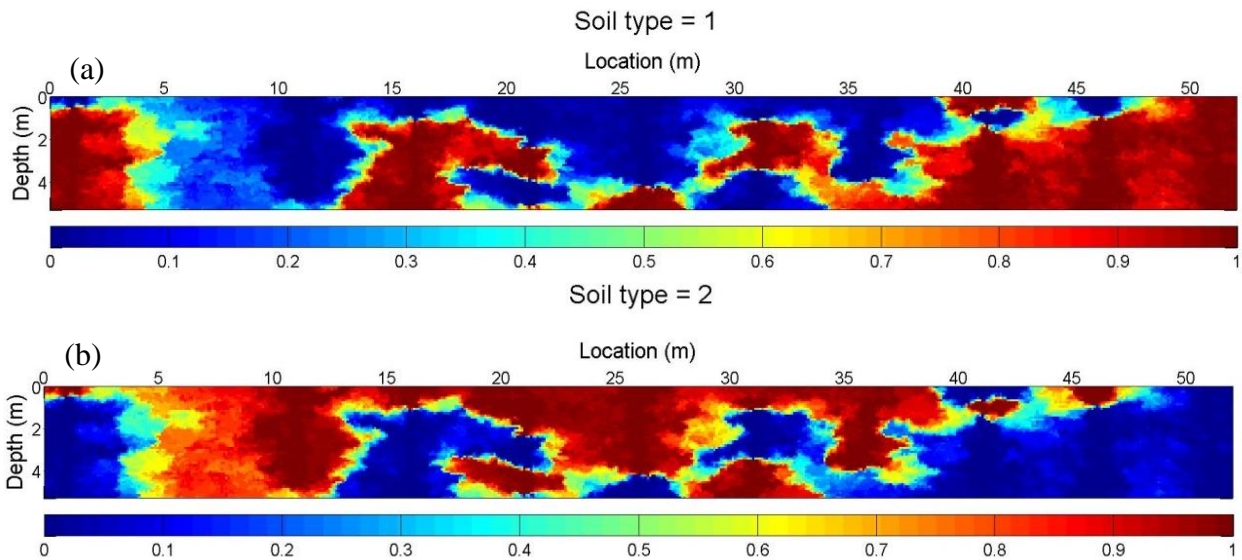


圖 4-35 50 次模擬所計算之 A5~K5 剖面三分法土壤種類出現機率圖；

(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。

4.3 三維分層案例分析

4.3.1 第一現地之三維分層預測

本節將對好萊塢現地之全部 25 孔 CPT 資料進行三維 GCMC 土壤分層剖面預測，CPT 資料將先進行 WTMM 四分法，再將結果輸入至三維 GCMC 中，GCMC 將會預測整個現地立體的土壤種類分布。同樣為了觀察細粒土層的行為，也會進行 WTMM 三分法搭配三維 GCMC 之案例分析，藉此觀察四分法與三分法的差異。

WTMM 四分法搭配三維 GCMC 模型：

對全部 25 孔 CPT 資料進行 WTMM 四分法之後，我們便可以將結果輸入至三維 GCMC，GCMC 模型所需要輸入之參數如表 4-6 所示，比較重要的部份是網格間距 Δx , Δy , Δz 的選定，間距的大小、形狀將會影響 GCMC 的行為，我們以正方體、小間距為選定原則，但是電腦程式能計算的元素量有其上限（約 16 萬左右），



間距最小只能設定為 0.25 公尺，因此我們便採用此值。

分析完畢後，外圍的分層結果如圖 4-36、4-38(a) ~ (d)所示，內部的分層結果我們以截面 A-A'為代表，如圖 4-37、4-39(a) ~ (d)所示，其中圖 4-38(a) ~ (d)與 4-39(a) ~ (d)為以 50 個模擬結果計算每一種土壤種類在各個三維座標出現的機率，該圖可以看作是圖 4-26 的立體版本，顯示了該土壤種類在某個位置的出現機率，100 % 機率出現為深紅色，0 % 機率出現則為深藍色。

三維模型外圍的結果顯示在上部有一層黏土薄層，中間是一大塊厚砂土層，其下為一層黏土、粉土混合層，底部為礫質砂土層，與之前觀察到的現地情況一致。而內部的截面 A-A'結果可與圖 4-2 的分層結果驗證，也可以與二維 GCMC 的結果做比較，從圖 4-37 可以發現第一層是黏土或粉土與砂土的混合層，第二層是厚砂土層，皆與圖 4-2 的觀察結果一致，而第三層是黏土與粉土的混合層，但是在二維 GCMC 中這一層有很大的比例被判定為粉土，三維分析考慮了周圍其他鑽孔，使得黏土的比例增加了，更接近圖 4-2 此層是黏土層的觀察結果。而在底層，三維 GCMC 能更準確地預測出礫質砂土層的分布。

表 4-6 對好萊塢現地資料進行四分法三維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax, Zmax	3.5 m, 28.5 m, 13.75 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	0.25 m, 0.25m, 0.25 m
條件資料數量	4 個	輔助資料	無
分析維度	三維	輸入鑽孔資料	25 孔 CPT 資料座標與 WTMM 四分法結果
岩性數量	4 個	計算轉移機率矩陣	是



WTMM 三分法搭配三維 GCMC 模型：

現在換成 WTMM 三分法再分析一次，對全部 25 孔 CPT 資料進行三分法之後，將結果輸入至三維 GCMC 中，模型所需要輸入的參數如表 4-7 所示，大部分的設定皆與四分法時相同，但是土壤種類少了一種，分析可能會因此產生差異。

WTMM 三分法搭配三維 GCMC 模型的外圍結果如圖 4-40、4-41(a)、(b)、(c) 所示，內部截面 A-A' 分層結果如圖 4-42、4-43(a)、(b)、(c) 所示，可以發現其結果趨勢大致與四分法一致，惟細粒土層之形狀與四分法的黏土、粉土層有些差異，其餘部分還是都獲得了合理的結果。

表 4-7 對好萊塢現地資料進行三分法三維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax, Zmax	3.5 m, 28.5 m, 13.75 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	0.25 m, 0.25m, 0.25 m
條件資料數量	3 個	輔助資料	無
分析維度	三維	輸入鑽孔資料	25 孔 CPT 資料座標與 WTMM 三分法結果
岩性數量	3 個	計算轉移機率矩陣	是

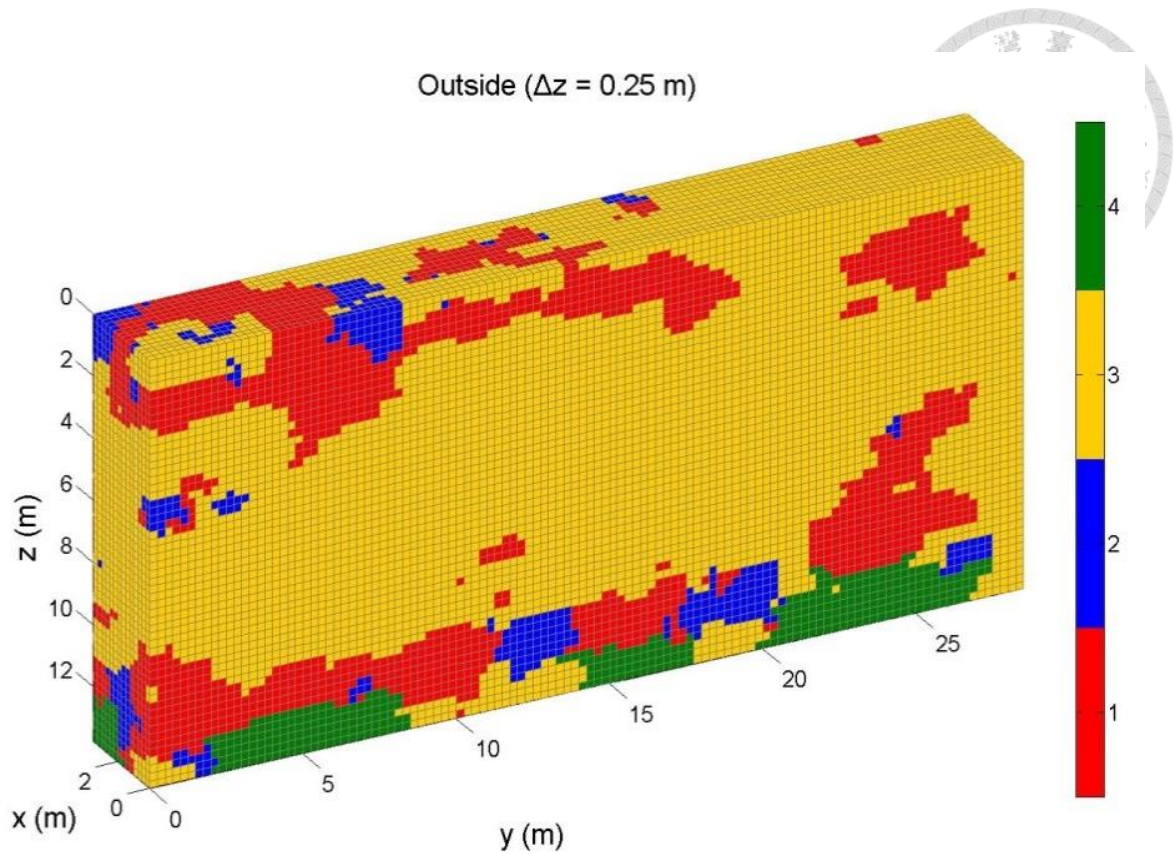


圖 4-36 好萊塢現地之四分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

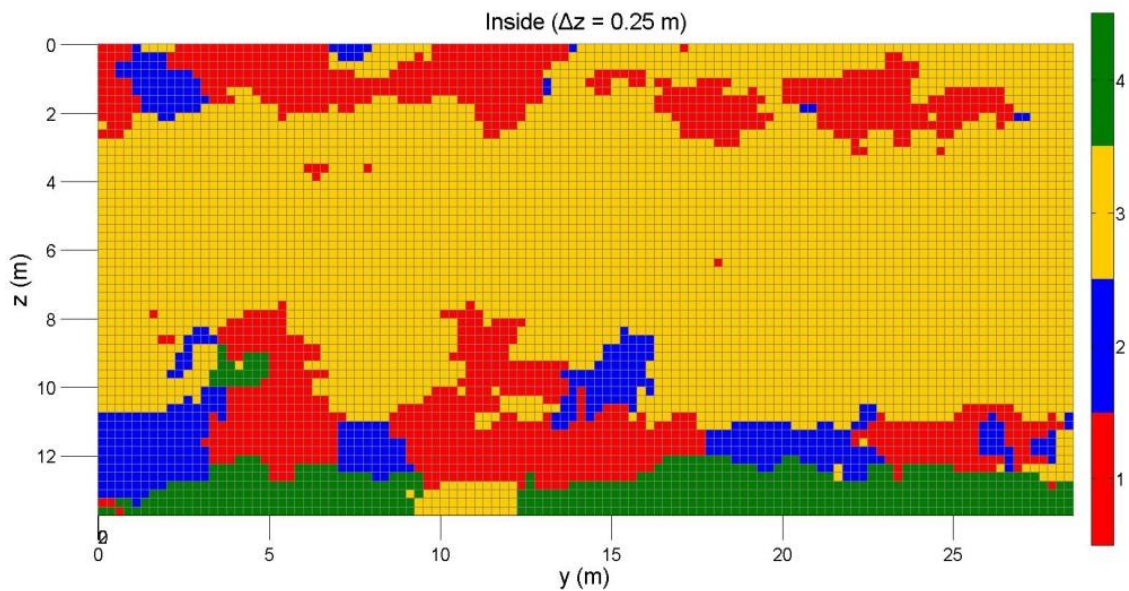


圖 4-37 好萊塢現地之四分法三維 GCMC 內部(截面 A-A')土壤剖面預測結果。

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

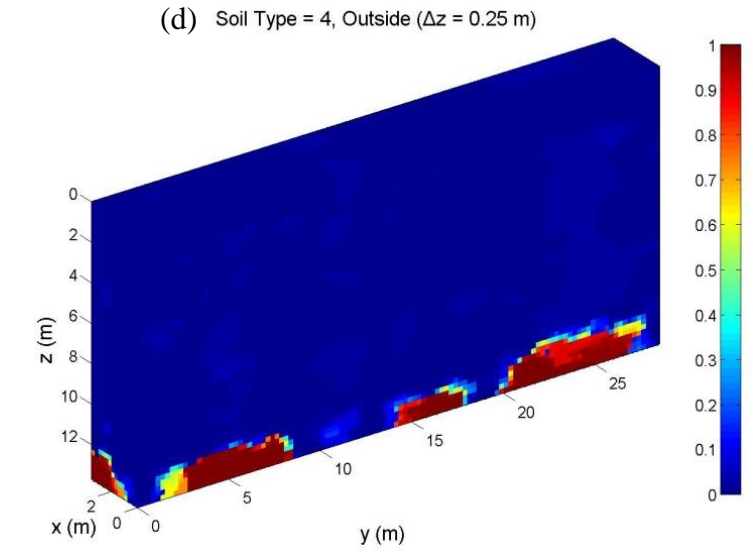
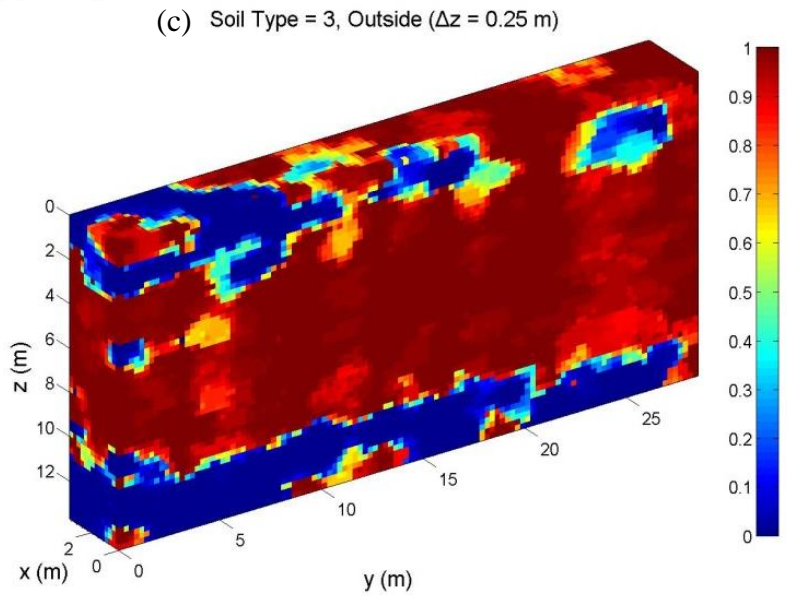
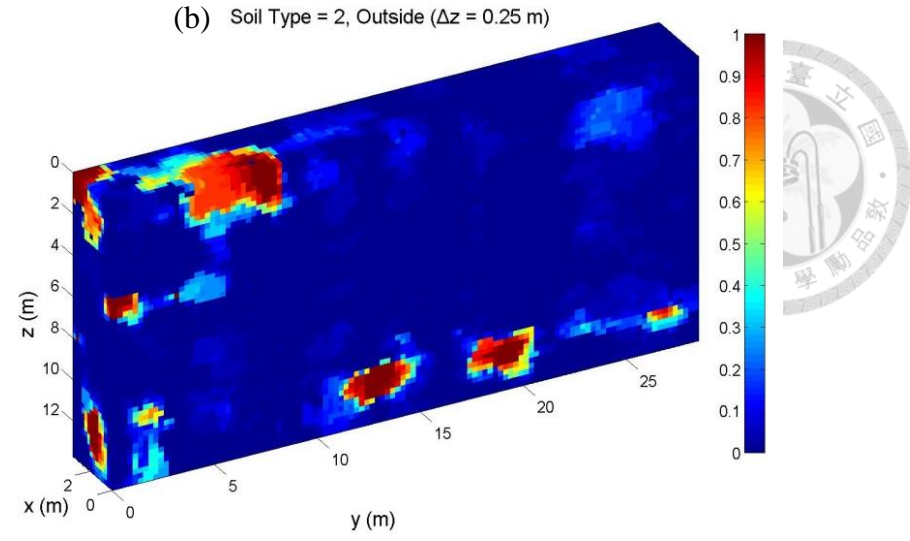
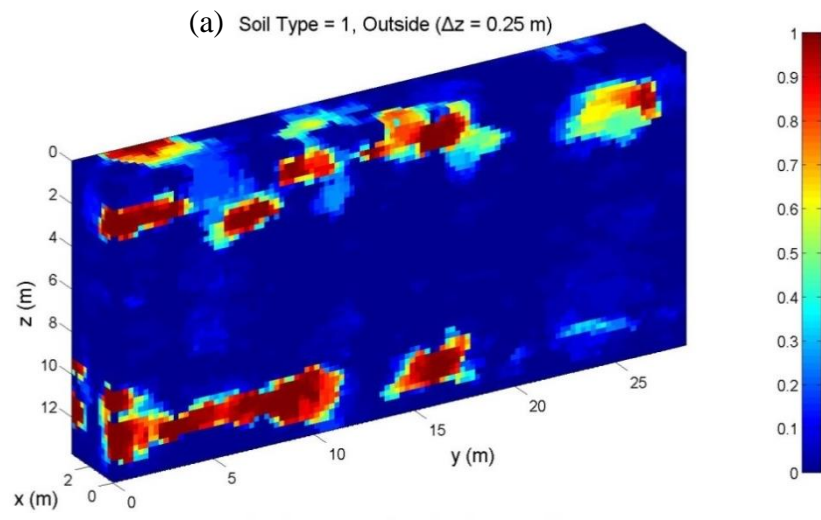


圖 4-38 50 次模擬所計算之好萊塢現地外圍土壤種類機率圖(四分法)；(a) 1 號：黏土(b) 2 號：粉土(c) 3 號：砂土(d) 4 號：礫質砂土

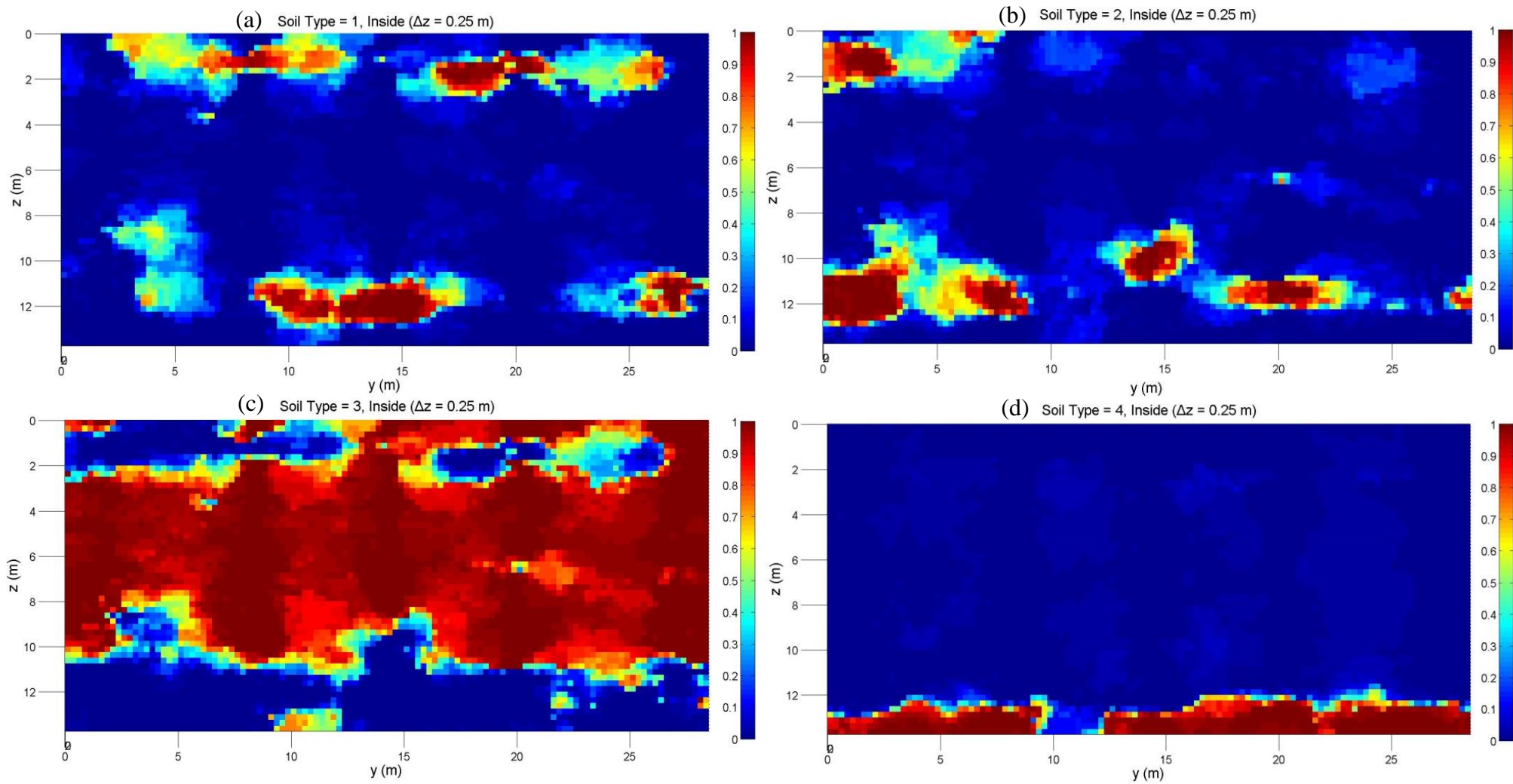


圖 4-39 50 次模擬所計算之好萊塢現地內部土壤種類機率圖 (四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土；(d) 4 號：礫質砂土。

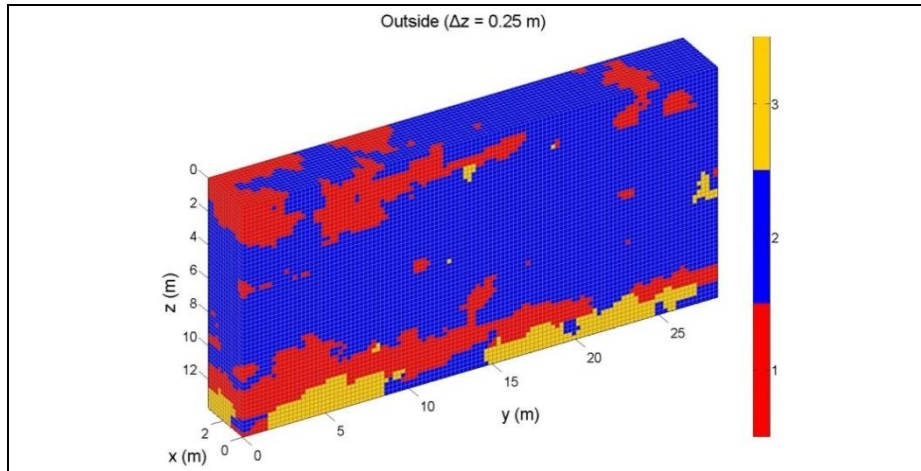


圖 4-40 好萊塢現地之三分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。(其中 1 為細粒土，2 為砂土，3 為礫質砂土)

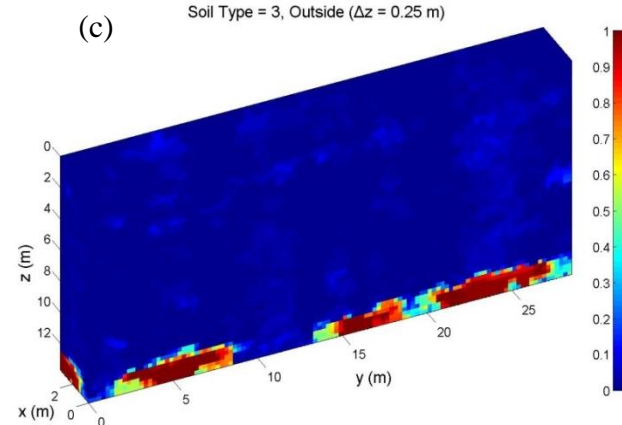
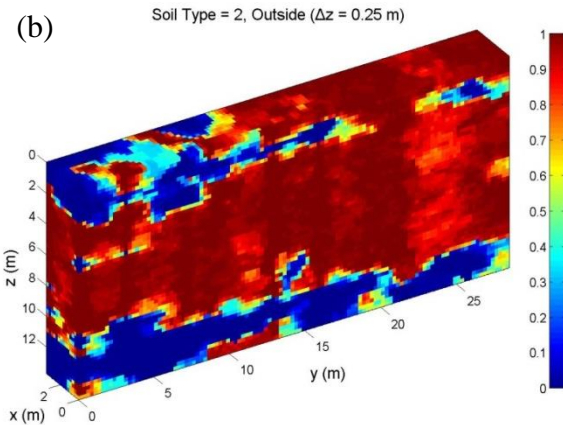
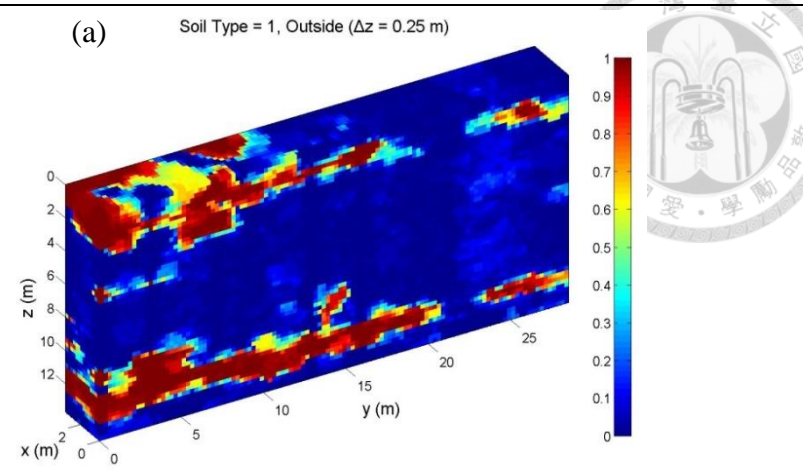
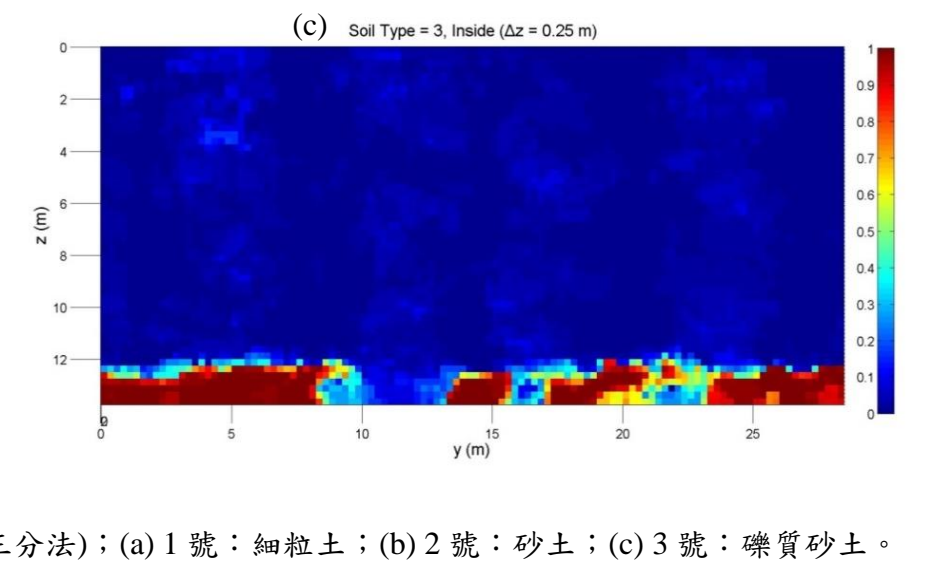
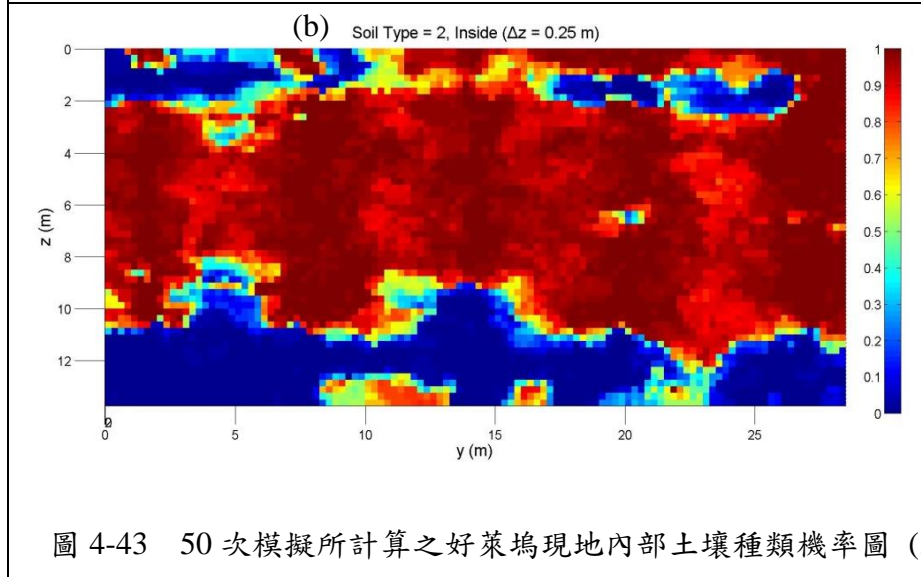
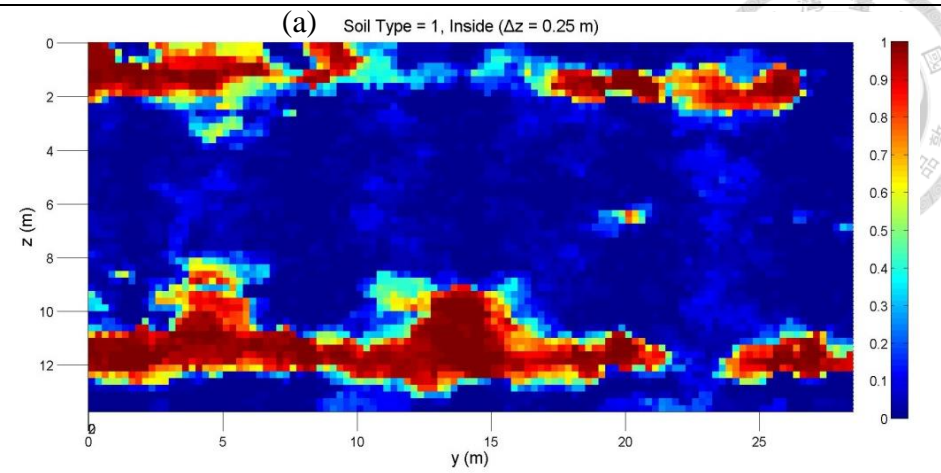
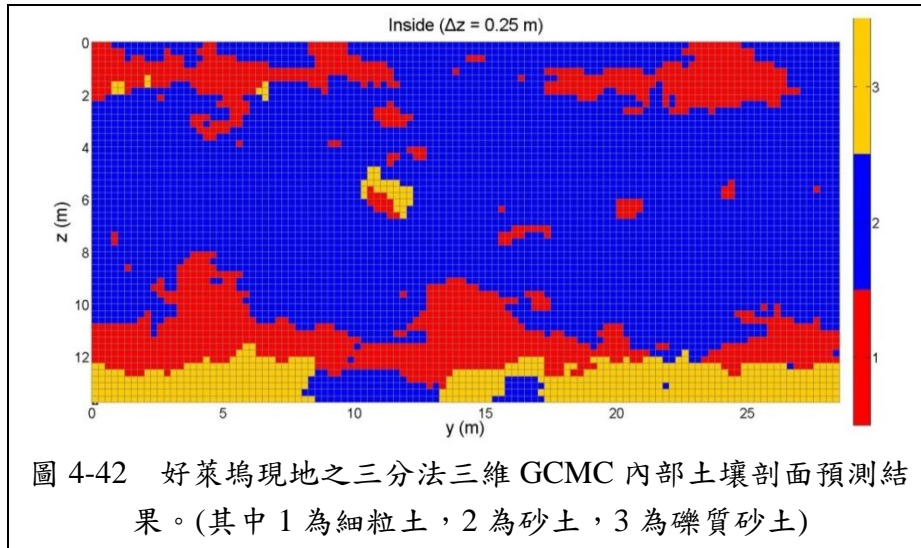


圖 4-41 50 次模擬所計算之好萊塢現地外圍土壤種類機率圖 (三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土；(c) 3 號：礫質砂土。





4.3.2 第二現地之三維分層預測

本節將對 South Parklands 現地選取 11×11 陣列上的 CPT 資料進行三維 GCMC 土壤分層剖面預測，扣除無資料的失敗孔位之後，一共有 105 筆資料，將全部先進行 WTMM 四分法，再進行三維 GCMC 分析，預測出整個現地立體的土壤分層剖面。同樣為了觀察細粒土層的行為，也會進行 WTMM 三分法搭配三維 GCMC，藉此觀察四分法與三分法的差異。

WTMM 四分法搭配三維 GCMC 模型：

對 105 筆 CPT 資料進行 WTMM 四分法之後，將結果輸入至三維 GCMC，模型所需要輸入之參數如表 4-8 所示，其中因為此現地無礫質砂土層，因此條件資料數量與岩性數量皆為 3 個，比較重要的部分是網格間距 Δx , Δy , Δz 的選定，我們以正方體、小間距為選定原則，然而電腦程式可計算的元素量有其上限 (約 16 萬左右)，此現地範圍寬廣，所以間距最小只能設定為 0.5 公尺，故我們採用此值。

分析完畢後，外圍的分層結果如圖 4-44、4-45(a)、(b)、(c)所示，內部的分層結果我們以 x 方向展示 3 個剖面，y 方向展示 3 個剖面的方式呈現，如圖 4-46、4-47(a)、(b)、(c)所示。外圍的結果顯示表層有一半以上是粉土層，其餘部分是一些砂土層與一些黏土層，而底層是一大片黏土層。

內部的結果顯示下半部大部分是黏土層，粉土層分布占表層一半的比例，砂土層則只在中央核心區域有較深入的分布。

表 4-8 對 South Parklands 現地資料進行四分法三維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax, Zmax	52 m, 52 m, 5.5 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	0.5 m, 0.5m, 0.5 m
條件資料數量	3 個	輔助資料	無
分析維度	三維	輸入鑽孔資料	105 孔 CPT 資料座標與 WTMM 四分法結果
岩性數量	3 個	計算轉移機率矩陣	是

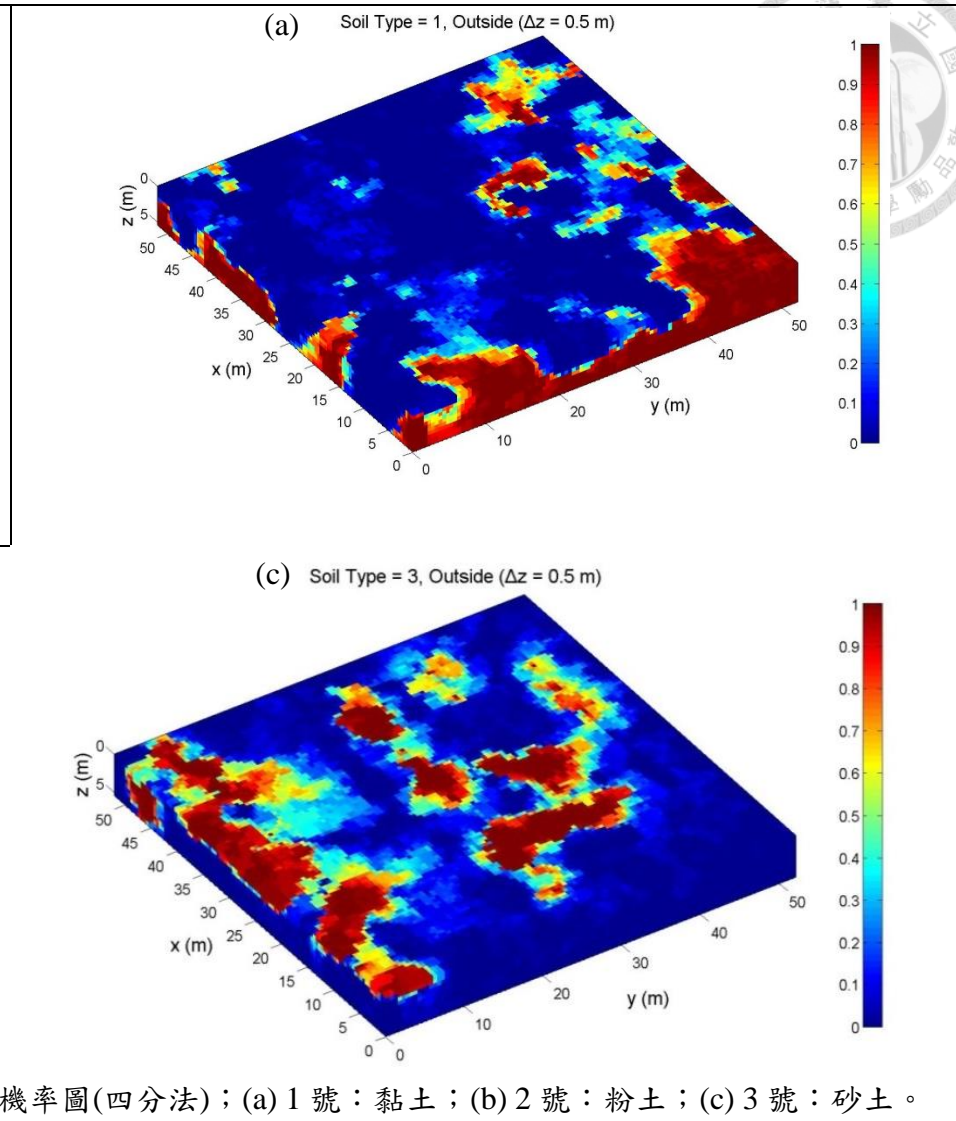
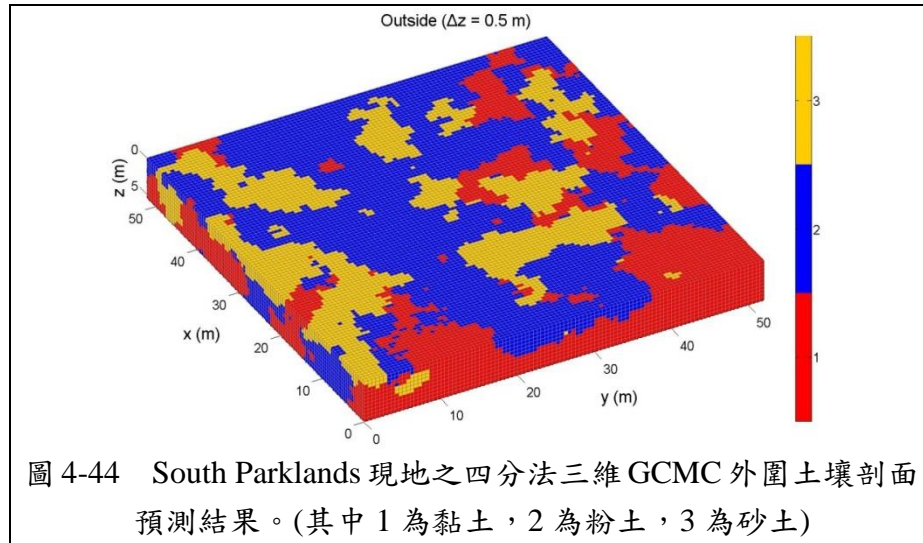
WTMM 三分法搭配三維 GCMC 模型：

現在換 WTMM 三分法再分析一次，對 105 孔 CPT 資料進行三分法之後，將結果輸入至三維 GCMC 中，模型所需要輸入的參數如表 4-9 所示，土壤種類剩細粒土與砂土兩種，分析時可能會因此產生差異。

WTMM 三分法搭配三維 GCMC 模型的外圍結果如圖 4-48、4-49(a)、(b)所示，內部結果如圖 4-50、4-51(a)、(b)所示，可以發現現地大部分皆為細粒土，僅表層和中央內部區域存在砂土層，雖然大部分的分布與四分法時相似，但是在三分法的模擬條件下，強勢的細粒土層似乎有侵蝕砂土層交界面的現象，使得砂土層的體積略小於四分法時的體積，形狀也比較粗糙、散亂。

表 4-9 對 South Parklands 現地資料進行三分法三維 GCMC 分析之輸入參數

隨機性分析	是	Xmax, Ymax, Zmax	52 m, 52 m, 5.5 m
模擬數量	50 個	$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	0.5 m, 0.5m, 0.5 m
條件資料數量	2 個	輔助資料	無
分析維度	三維	輸入鑽孔資料	105 孔 CPT 資料座標與 WTMM 三分法結果
岩性數量	2 個	計算轉移機率矩陣	是



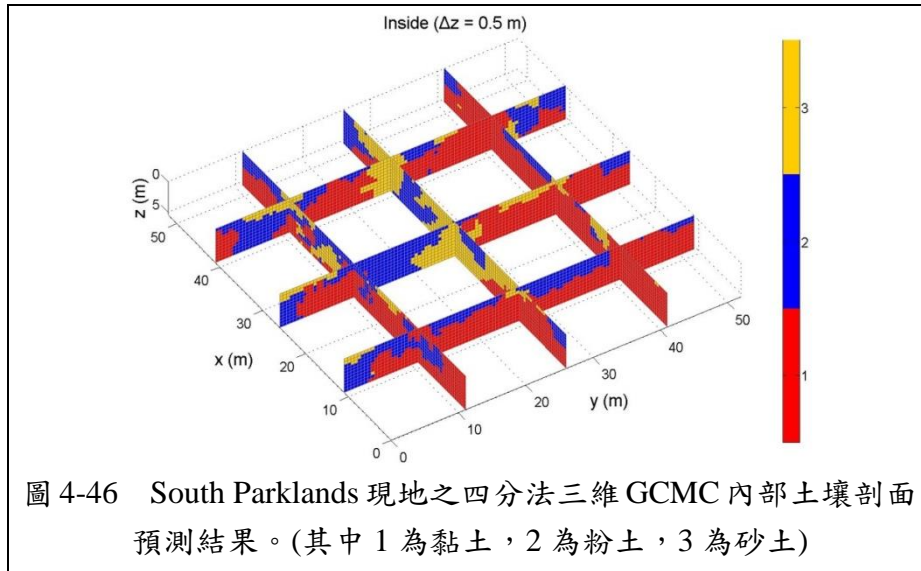


圖 4-46 South Parklands 現地之四分法三維 GCMC 內部土壤剖面預測結果。(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土)

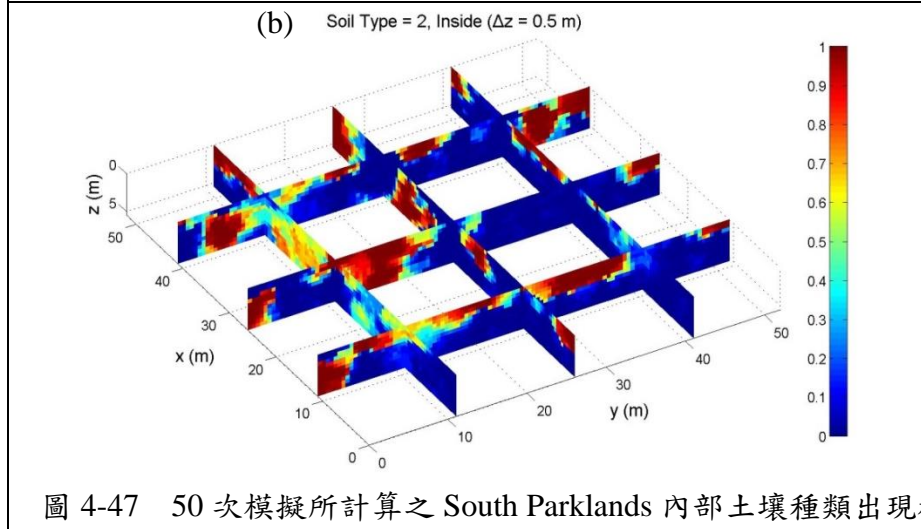


圖 4-47 50 次模擬所計算之 South Parklands 內部土壤種類出現機率圖(四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。

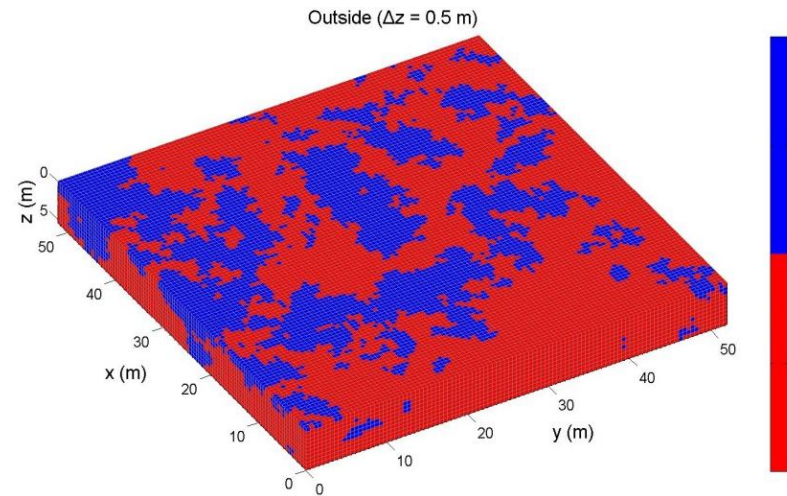


圖 4-48 South Parklands 現地之三分法三維 GCMC 外圍土壤剖面預測結果。(其中 1 為細粒土，2 為砂土)

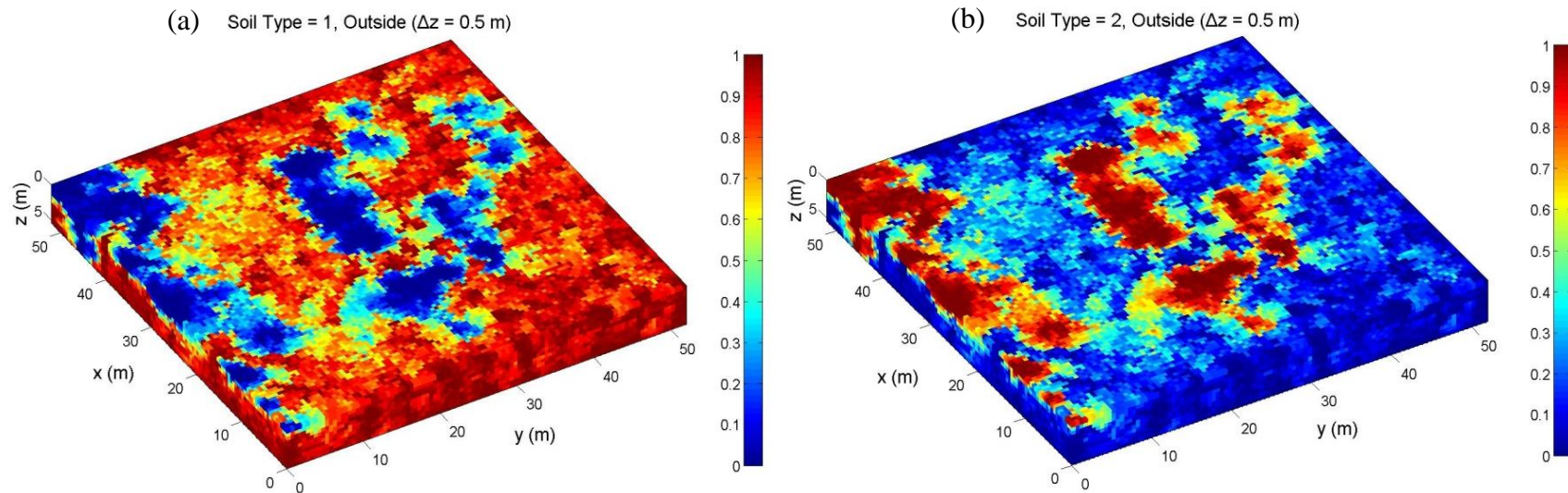


圖 4-49 50 次模擬所計算之 South Parklands 外圍土壤種類出現機率圖(三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。

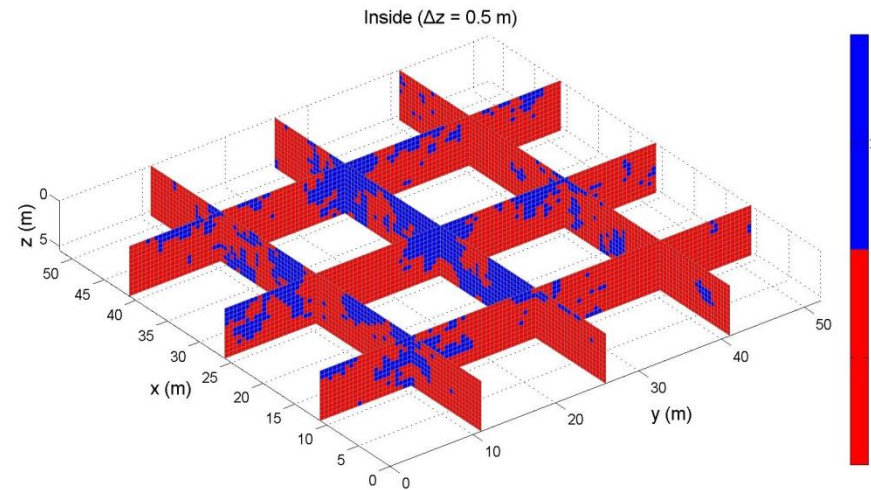


圖 4-50 South Parklands 現地之三分法三維 GCMC 內部土壤剖面預測結果。(其中 1 為細粒土，2 為砂土)

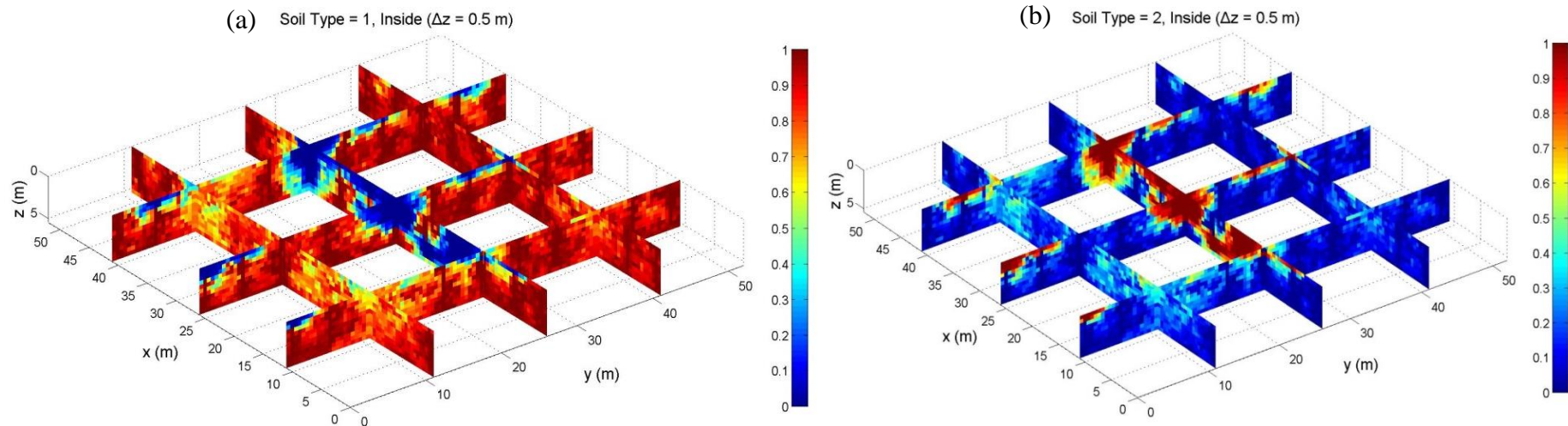


圖 4-51 50 次模擬所計算之 South Parklands 內部土壤種類出現機率圖(三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。



4.3.3 第二現地之三維分層驗證

為了驗證上一節 South Parklands 現地之三維 GCMC 分析成效，本節我們將挑選 4 孔沒有輸入進 GCMC 的額外 CPT 資料，來與三維 GCMC 預測結果進行比較和驗證。我們所挑選的 4 孔 CPT 編號分別為 C52、H53、F22 以及 F73 (參考圖 4-29)，其中 C52 與 H53 皆位於截面 A5-K5 之上，C52 位於 C5 與 D5 兩孔之間，H53 位於 H5 與 I5 之間；而 F22 與 F73 皆位於截面 F0-F10 之上，F22 位於 F2 與 F3 兩孔之間，F73 位於 F7 與 F8 之間。

驗證 WTMM 四分法搭配三維 GCMC 模型：

首先對 C52、H53、F22 與 F73 進行 WTMM 四分法，結果如圖 4-52 與圖 4-54 所示，C52 上層為一層砂土薄層，下層皆為粉土；H53 上半部為粉土，下半部為黏土；F22 上層為一層黏土薄層，下層皆為粉土；F73 上層為一層砂土層，下層皆為黏土。

將已知分層的鑽孔直接與種類機率圖比較的話會有較客觀的結果，我們將上一節圖 4-47(a)、(b)及(c)之中的截面 A5-K5 和截面 F0-F10 單獨顯示，可以得到圖 4-53(a)、(b)、(c)以及圖 4-55(a)、(b)、(c)。首先比較截面 A5-K5 的圖 4-52 與圖 4-53(a)~(c)，可以發現三維 GCMC 模型有成功預測出 C52 孔上層為砂土，下層為粉土，惟層面位置稍微不確定；而三維 GCMC 模型預測 H53 的上層為砂土，與 WTMM 四分法的結果有所出入，可能是因為受到周圍其他已知鑽孔的影響，而下層有成功預測到黏土層，惟預測的黏土層比實際上來得厚。

再來比較截面 F0-F10 之圖 4-54 與圖 4-55(a)~(c)，可以發現三維 GCMC 模型預測 F22 孔整層皆為粉土層，對下層來說算是預測正確，但是實際上層的黏土薄層被忽略了，可能是受到周圍其他鑽孔的影響；而 F73 孔的預測就非常地成功，不但土壤種類皆正確預測，層面位置也相當準確和確定。總體來說，C52 與 F73 的結果相當合理，而 H53 與 F22 的結果差強人意。



驗證 WTMM 三分法搭配三維 GCMC 模型：

首先對 C52、H53、F22 與 F73 進行 WTMM 三分法，結果如圖 4-56 與圖 4-58 所示，C52 上層為一層砂土薄層，下層皆為細粒土層；H53 與 F22 整層皆為細粒土層；F73 上層為一層砂土層，下層皆為細粒土層。

我們將上一節圖 4-51(a)、(b)之中的截面 A5-K5 和截面 F0-F10 單獨顯示，可以得到圖 4-57(a)、(b)以及圖 4-59(a)、(b)。首先比較截面 A5-K5 的圖 4-56 與圖 4-57(a)、(b)，可以發現三維 GCMC 模型有預測出 C52 孔上層為砂土層，但是對於下層的土壤種類就比較不確定；而三維 GCMC 模型預測 H53 上半部為砂土層，下半部為細粒土層，與實際整層都是細粒土層的情況有所出入，可能是受到周圍其他鑽孔的影響。

再來比較截面 F0-F10 之圖 4-58 與圖 4-59(a)、(b)，可以發現三維 GCMC 模型預測 F22 孔整層為細粒土層，結果可以說是相當正確；而 F73 孔的預測也相當成功，上、下層的土壤種類都有成功預測到，層面位置也相當接近。總體來說，F22 與 F73 的結果相當合理，而 C52 與 H53 的結果差強人意。

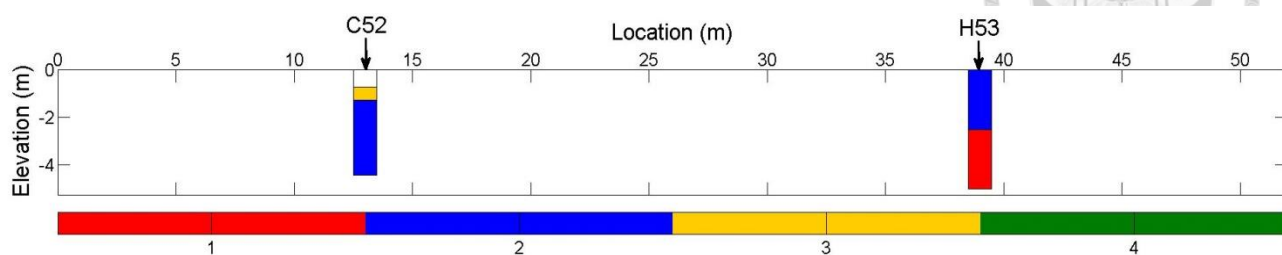


圖 4-52 South Parklands 現地 C52、H53 兩鑽孔之 WTMM 四分法結果。

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

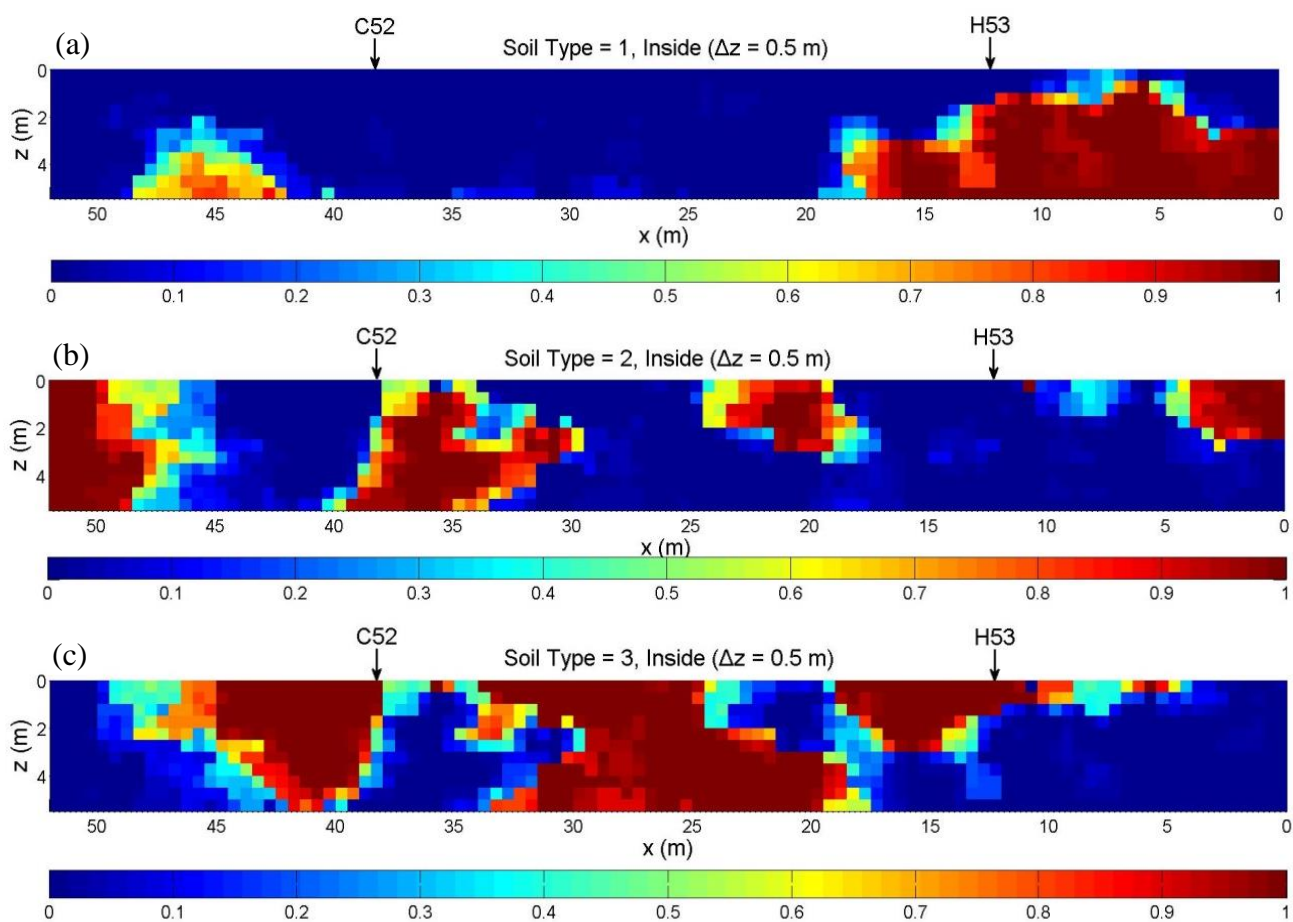


圖 4-53 50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 A5-K5 土壤種類出現機率圖(3D

四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。

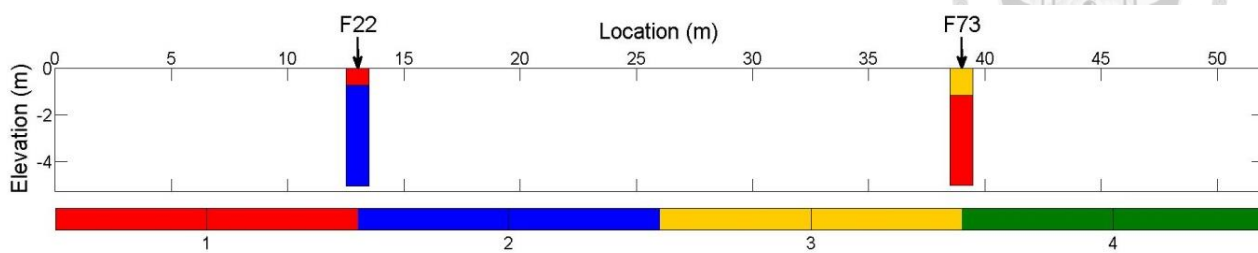


圖 4-54 South Parklands 現地 F22、F73 兩鑽孔之 WTMM 四分法結果

(其中 1 為黏土，2 為粉土，3 為砂土，4 為礫質砂土)

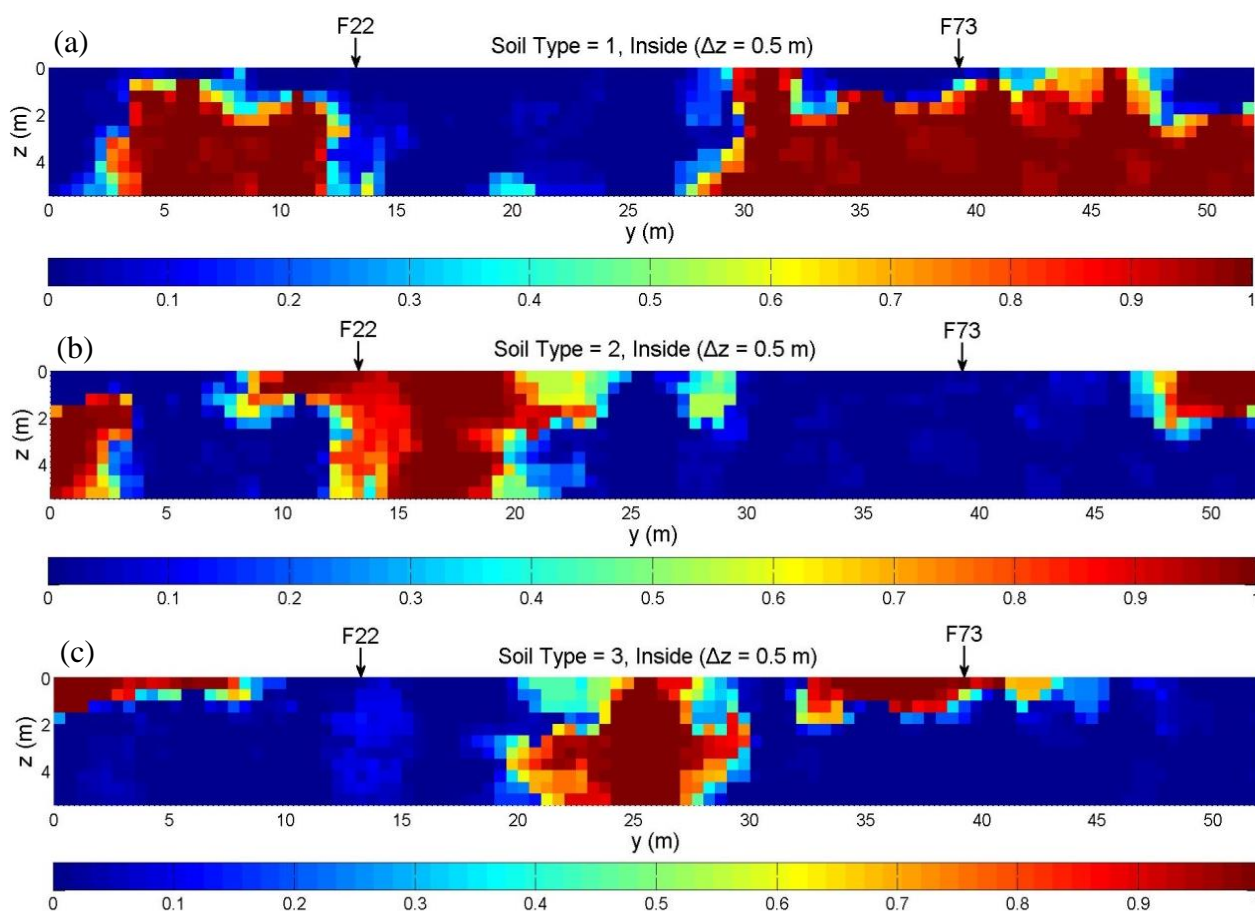


圖 4-55 50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 F0-F10 土壤種類出現機率圖(3D

四分法)；(a) 1 號：黏土；(b) 2 號：粉土；(c) 3 號：砂土。

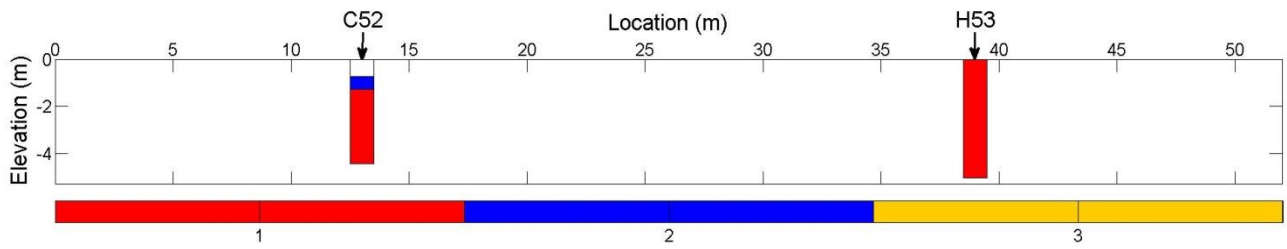


圖 4-56 South Parklands 現地 C52、H53 兩鑽孔之 WTMM 三分法結果

(其中 1 為細粒土，2 為砂土，3 為礫質砂土)

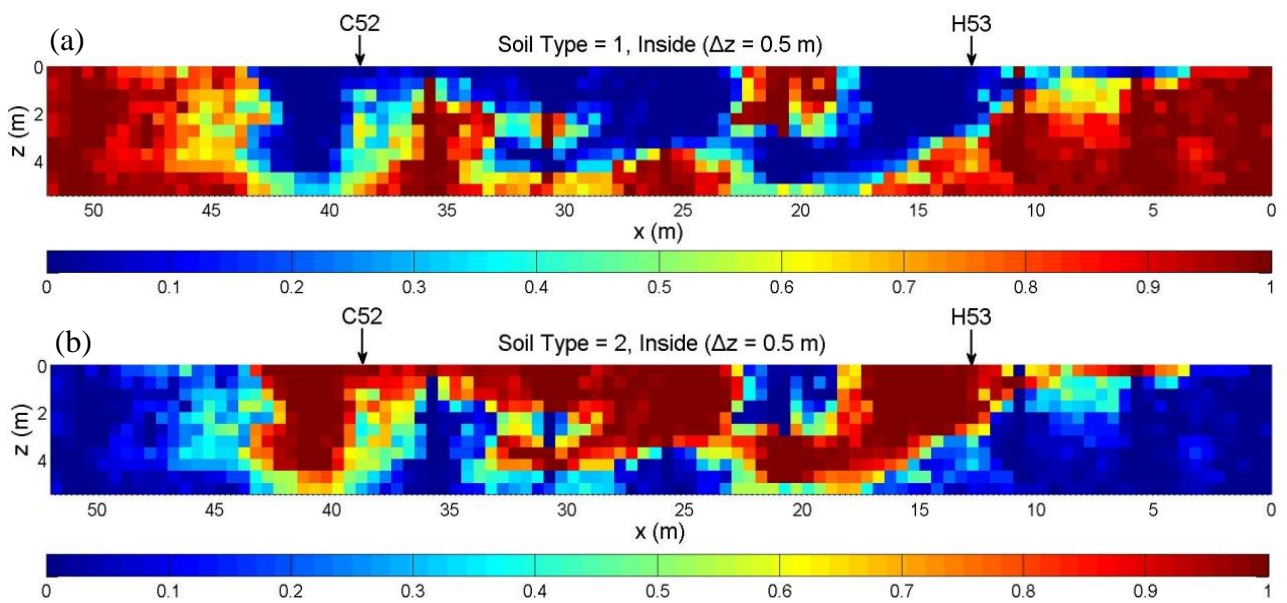


圖 4-57 50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 A5-K5 土壤種類出現機率圖(3D

三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。

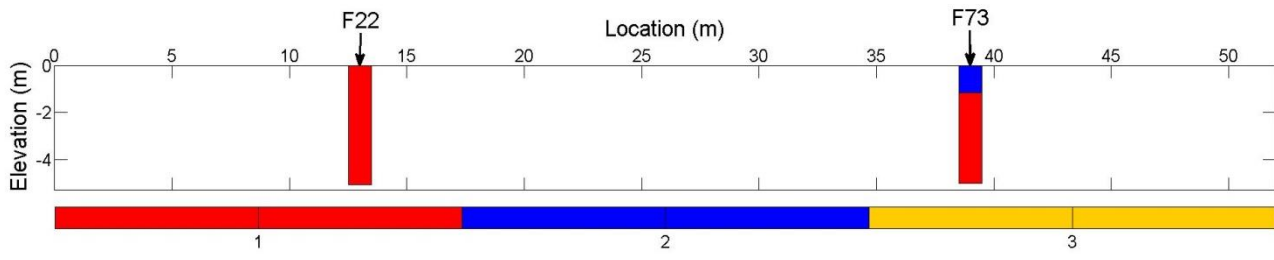


圖 4-58 South Parklands 現地 F22、F73 兩鑽孔之 WTMM 三分法結果
(其中 1 為細粒土，2 為砂土，3 為礫質砂土)

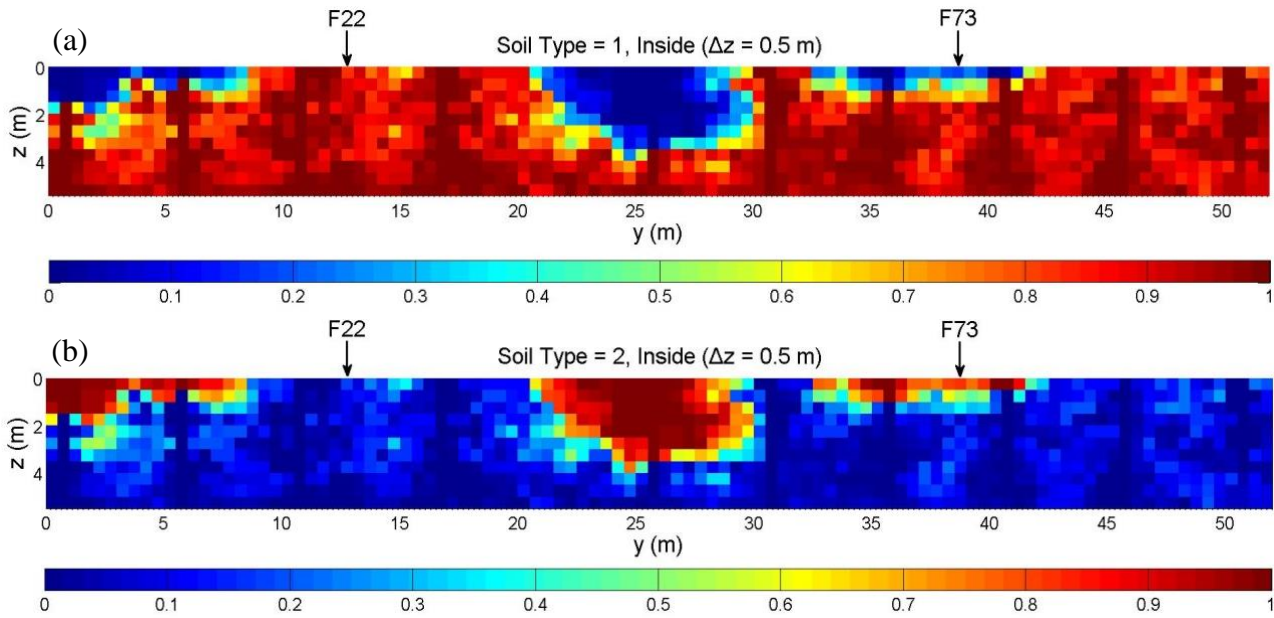


圖 4-59 50 次模擬所計算之 South Parklands 截面 F0-F10 土壤種類出現機率圖(3D 三分法)；(a) 1 號：細粒土；(b) 2 號：砂土。

第五章 結論與建議



5.1 結論

5.1.1 HMM 土壤分層法

1. 本研究開發出了一維 HMM 土壤分層法，它以土壤行為指數 I_c 為輸入資料，能考慮單一關聯性長度 δ 的影響，以 Gibbs sampling 近似出各群 I_c 的平均值 μ_i 與標準差 σ_i 的聯合機率密度，以 HMM 計算出每一點分層之機率，以此進行土壤分層，還有以似然遞迴計算分群分數 ($\ln l_t^*$) 提供最佳分層數之建議。最後對南卡羅萊納州好萊塢現地 25 孔 CPT 資料進行案例分析，得到了合理的結果。

2. HMM 土壤分層法的優點為：區分土壤種類的方法是深入分析各群 I_c 的平均值 μ_i 與標準差 σ_i 的差異，反映 I_c 的變化，能自動將相似的土層歸類為一群，還有分群數量可以做從 1 到 10 的變化，再從中選擇最佳的結果。而缺點為：運算時間久，層面劃分較混亂，有孤兒層問題，還有因為預燒期問題，每次得到的結果可能會不一樣。

3. 預燒期問題是當 HMM 長度 T 大於 400 單位，分群數 m 大於 5 時，土層容易少抓一層，使得空分群具有近乎無限長預燒期的問題，這是因為不良的初始值選擇可能會大大增加預燒期長度，甚至可能始終無法收斂，因此初始值 h_1 的選定變得相當重要，為了降低預燒期的影響，我們採用 K-means 分群法對 I_c 資料初步分群，將分群結果作為 HMM 初始狀態序列 h_1 ，使 h_1 更接近平穩時的狀態序列，以此方法降低預燒期問題出現的機率。

4. 孤兒層問題是 HMM 土壤分層法有時會產生一個不合理薄層的問題，好發於 I_c 大幅度下降，或是資料突然有個深谷 (或尖峰)，使得 HMM 感受到變化，需

要轉變狀態時，然而合理的分群其標準差 σ 很小，使在過渡區的資料點受到排斥，被迫歸類到其他標準差較大的分群。其原因出自 FB 遞迴，過小的標準差將會使過渡區的資料點沒有機率被分配到該去的分群，因此產生孤兒層，孤兒層會影響我們判讀層面的位置，應用時需要人工將其剔除，以獲得更乾淨的層面。

5. 分群分數問題是 HMM 土壤分層法分析現地資料時，在分群數 m 大於某個值(大約是 5)之後，似然遞迴所計算出來的分群分數 $\ln l_i^*$ 會變得可能不只一種結果，使得分析一次 HMM 土壤分層法未必能得到最高的分群分數，而最高的分群分數未必是最好的分層結果，形成找尋最佳分群數的困難。原因是分群數高時，因為預燒期問題 HMM 會有數種不同層數的收斂結果，又因 K-means 法產生的初始序列 h_1 每次都不一樣，才會導致每次都有不同的分群結果，因此應用時除了參考分數之外，還要再一一觀察分層結果，才能得到最佳分層數。

5.1.2 多維土壤剖面預測

1. Ching et al. (2015)提出的小波轉換調變極大值法 (WTMM 法)能準確辨識土壤層面，且演算十分快速，搭配 SBT 分類之後能有效指出層面之間的土壤種類，其結果的穩定性比 HMM 土壤分層法表現更好，較適合後續與 GCMC 模型搭配進行多維土壤剖面預測。此外，為了簡化結果，我們將原本的 SBT 九分法做一些小修改，新定義的 WTMM 四分法能有效將土層分成黏土、粉土、砂土與礫質砂土四類，還有 WTMM 三分法能將土層分成細粒土、砂土與礫質砂土三類。

2. Park (2010)開發的廣義耦合馬爾可夫鏈模型 (GCMC 模型)是以馬爾可夫鏈和轉換機率為基礎的多維地質統計模型，該模型包括一個結合子方向轉換機率的條件機率方程，來優化方向非穩定性情況，能根據所輸入之鑽孔分層情況進行二維或三維的土壤剖面預測。我們嘗試使用 WTMM 四分法或三分法搭配 GCMC

模型，將 WTMM 法的分層結果當作 GCMC 的輸入資料，並進行了兩個二維與三維的土壤剖面預測之案例分析，皆得到了合理的結果，顯示結合這兩種方法將使得以 CPT 鑽探資料建立多維土壤分層模型具有可行性。



5.2 建議

5.2.1 HMM 土壤分層法

1. 關聯性長度 δ 為唯一一個沒有被我們納入 Gibbs sampling 估算的隨機場參數，這是因為 δ 並沒有共軛先驗的條件可以求出 Gibbs sampling 所需的後驗分布，必須採用其他 MCMC 方法，然而我們測試過 Metropolis-Hastings 演算法、矩估計法 (method of moments)，表現皆不夠理想，仍未找到能將 δ 估得精準的方法，若之後的研究者能找到適合估算 δ 的方法，HMM 法將能考慮 δ 的改變，使土壤分層更具靈敏度。

2. 孤兒層問題導因於目標分群之標準差太小，過渡區的資料點無法被分類到該群，因此被歸類到標準差較大的分群，產生一個不合理的薄層，若後續研究能判斷這些資料點應該被分類到哪些族群，並防止它們被歸類到其他不合理的族群，同時又不破壞 HMM 的架構，將能阻止孤兒層問題的發生。實際上，小於關聯性長度 δ 的薄層其獨立性本身將受到質疑，這是因為隨機場理論中當兩點距離大於 δ 才能視為它們之間沒有關聯性，小於 δ 的薄層將不符合我們「不同土壤種類之間互相獨立」的這個假設，後續研究若能防止產生小於 δ 的薄層，同時防止孤兒層問題的發生，將能使 HMM 土壤分層結果更符合我們的假設，得到更清楚的分層。

3. 「分層分數問題」使得分層分數變得不是絕對可信，實際上我們還是沒有得到一個最佳分層數的指標，若後續研究能防止預燒期問題在分群數高時產生多種收斂結果的問題，使 HMM 後期抓取的層數皆相同，則分群分數在每一個群數

將會只有一種分數，讓使用者更容易找出最佳分群數。



5.2.2 多維土壤剖面預測

1. 目前 WTMM 四分法判定土層位置與土壤種類之後，GCMC 模型便會完全根據輸入的土壤種類進行多維分層預測，然而 WTMM 四分法所判斷的土壤種類是機率性的，某層土壤根據 SBTn 圖的劃分，可能會顯示其具有 60 % 的機率砂土，40 % 的機率是粉土，因此 WTMM 四分法最終會判定其為砂土，結果 GCMC 會是以 100 % 相信它是砂土的條件下進行分析，忽略了 40 % 機率是粉土的影響，造成分析結果會與實際情況有所出入，因此往後多維土壤分層模型若是能同時考慮不同土壤種類機率的影響的話，也就是以圖 4-14(c) 為輸入資料，而不是圖 4-14(b)，或許將能更準確地預測土層的分布情形。

參考文獻



- Baum, L. E., Petrie, T., Soules, G., & Weiss, N. (1970). A Maximization Technique Occurring in the Statistical Analysis of Probabilistic Functions of Markov Chains. *The Annals of Mathematical Statistics*, 41(1), 164-171.
doi:10.1214/aoms/1177697196
- Bishop, C. M. (2006). *Pattern recognition and machine learning*. New York: Springer.
- Bong, T., & Stuedlein, A. W. (2017). Spatial Variability of CPT Parameters and Silty Fines in Liquefiable Beach Sands. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 143(12), 04017093. doi:10.1061/(asce)gt.1943-5606.0001789
- Campanella, R. G., & Wickremesinghe, D. S. (1991). Statistical methods for soil layer boundary location using the cone penetration test. *Proceedings of the 6th International Conference on Applications of Statistics and Probability in Civil Engineering*, 636-643.
- Chib, S. (1996). Calculating Posterior Distributions and Modal Estimates in Markov Mixture Models. *Journal of Econometrics*, 75(1), 79-97.
doi:10.1016/0304-4076(95)01770-4
- Ching, J. Y., Wang, J. S., Juang, C. H., & Ku, C. S. (2015). Cone Penetration Test (CPT)-based Stratigraphic Profiling Using the Wavelet Transform Modulus Maxima Method. *Canadian Geotechnical Journal*, 52(12), 1993-2007.
doi:10.1139/cgj-2015-0027
- DeGroot, D. J., & Baecher, G. B. (1993). Estimating Autocovariance of In-situ Soil Properties. *Journal of Geotechnical Engineering*, ASCE, 119(1), 147-166.
- Elfeki, A., & Dekking, M. (2001). A Markov Chain Model for Subsurface Characterization: Theory and Applications. *Mathematical Geology*, 33(5), 569-589.
- Elfeki, A. M. M., & Dekking, F. M. (2005). Modelling Subsurface Heterogeneity by



Coupled Markov Chains: Directional Dependency, Walther's Law and Entropy. *Geotechnical and Geological Engineering*, 23(6), 721-756.

doi:10.1007/s10706-004-2899-z

Geman, S., & Geman, D. (1984). Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 6(6), 721-741. doi:10.1109/TPAMI.1984.4767596

Idriss, I. M., & Boulanger, R. W. (2008). *Soil liquefaction during earthquakes*. Oakland, California: Earthquake Engineering Research Institute.

Jaksa, M. B. (1995). *The Influence of Spatial Variability on the Geotechnical Design Properties of a Stiff, Overconsolidated Clay*. PhD thesis, The University of Adelaide, Adelaide.

Jaynes, E. T. (2003). *Probability theory: The logic of science* (G. L. Bretthorst, Ed.). Cambridge: Cambridge University Press.

Ku, C. S., Juang, C. H., & Ou, C. Y. (2010). Reliability of CPT I_c as an Index for Mechanical Behaviour Classification of Soils. *Géotechnique*, 60(11), 861-875. doi:10.1680/geot.09.p.097

Li, W. (2007). Markov Chain Random Fields for Estimation of Categorical Variables. *Mathematical Geology*, 39(3), 321-335. doi:10.1007/s11004-007-9081-0

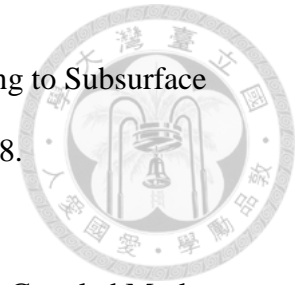
Liao, T., & Mayne, P. W. (2007). Stratigraphic Delineation by Three-dimensional Clustering of Piezocone Data. *Georisk: Assessment and Management of Risk for Engineered Systems and Geohazards*, 1(2), 102-119.

doi:10.1080/17499510701345175

MacQueen, J. B. (1967). Some Methods for Classification and Analysis of Multivariate Observations. In *Proceedings of the Fifth Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability*, Berkeley, Calif: University of California Press. 281-297

Nobre, M. M., & Sykes, J. F. (1992). Application of Bayesian Kriging to Subsurface Characterization. *Canadian geotechnical journal*, 29(4), 589-598.

doi:10.1139/t92-066



Park, E., Elfeki, A. M. M., Song, Y., & Kim, K. (2007). Generalized Coupled Markov Chain Model for Characterizing Categorical Variables in Soil Mapping. *Soil Science Society of America Journal*, 71(3), 909-917. doi:10.2136/sssaj2005.0386

Park, E. (2010). A Multidimensional, Generalized Coupled Markov Chain Model for Surface and Subsurface Characterization. *Water Resources Research*, 46(11).

doi:10.1029/2009wr008355

Phoon, K. K., Kulhawy, F. H., & Grigoriu, M. D. (1995). Reliability-based Design of Foundations for Transmission Line Structures. Electric Power Research Institute, Palo Alto, Report TR-105000.

Qi, X. H., Li, D. Q., Phoon, K. K., Cao, Z. J., & Tang, X. S. (2016). Simulation of Geologic Uncertainty Using Coupled Markov Chain. *Engineering Geology*, 207, 129-140. doi:10.1016/j.enggeo.2016.04.017

Robertson, P. K. (1990). Soil Classification Using the Cone Penetration Test. *Canadian Geotechnical Journal*, 27(1), 151-158. doi:10.1139/t90-014

Robertson, P. K., & Wride, C. E. (1998). Evaluating Cyclic Liquefaction Potential Using the Cone Penetration Test. *Canadian Geotechnical Journal*, 35(3), 442-459.

doi:10.1139/t98-017

Robertson, P. K. (2009). Interpretation of Cone Penetration Tests — a Unified Approach. *Canadian Geotechnical Journal*, 46(11), 1337-1355.

doi:10.1139/t09-065

Raiffa, H., & Schlaifer, R. (1961). *Applied statistical decision theory*. Cambridge: Harvard University Press.



- Scott, S. L. (2002). Bayesian Methods for Hidden Markov Models. *Journal of the American Statistical Association*, 97(457), 337-351.
doi:10.1198/016214502753479464
- Sivia, D. S., & Skilling, J. (2006). *Data analysis: A Bayesian tutorial*. Oxford: Oxford University Press.
- Vanmarcke, E. H. (1977). Probabilistic Modeling of Soil Profiles. *Journal of the Geotechnical Engineering*, 103(11), 1227-1246.
- Vanmarcke, E., & Grigoriu, M. (1983). Stochastic Finite Element Analysis of Simple Beams. *Journal of Engineering Mechanics*, 109(5), 1203-1214.
doi:10.1061/(asce)0733-9399(1983)109:5(1203)
- Walsh, B. (2004). Markov Chain Monte Carlo and Gibbs Sampling. Lecture Notes for EEB 581.
- Wang, Y., Huang, K., & Cao, Z. (2013). Probabilistic Identification of Underground Soil Stratification Using Cone Penetration Tests. *Canadian Geotechnical Journal*, 50(7), 766-776. doi:10.1139/cgj-2013-0004
- Xiao, T., Zhang, L. M., Li, X. Y., & Li, D. Q. (2017). Probabilistic Stratification Modeling in Geotechnical Site Characterization. *ASCE-ASME Journal of Risk and Uncertainty in Engineering Systems, Part A: Civil Engineering*, 3(4), 04017019.
doi:10.1061/AJRUA6.0000924
- Zhang, Z., and Tumay, M. T. (1996). The Reliability of Soil Classification Derived from Cone Penetration Test. *ASCE Spec. Conf.—Uncertainty in the geologic environment: From theory to practice*, ASCE, 383-408.
- Zhang, Z., & Tumay, M. T. (1999). Statistical to Fuzzy Approach Toward CPT Soil Classification. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 125(3), 179-186. doi:10.1061/(ASCE)1090-0241(1999)125:3(179)

王俊翔(民 105)。根據圓錐貫入試驗資料判識土壤層面與分析工址的機率特性。(碩士論文)。國立台灣大學，臺北市。doi:10.6342/NTU201601155





附錄 A 公式推導

A.1 吉布斯抽樣法後驗分布公式推導

平均值 μ_i 與變異數 σ_i 之似然函數為：

$$p(\mathbf{I}_{c(i)} | \mu_i, \sigma_i, \delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^n} \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}_i|}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)\right] \quad (\text{A.1})$$

A.1.1 平均值 μ_i 之後驗超參數推導

假設先驗分布 $p(\mu_i)$ 為高斯分布，則其機率密度函數為：

$$p(\mu_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sigma_{h(i)}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_{h(i)}^2}(\mu_i - \mu_{h(i)})^2\right] \quad (\text{A.2})$$

後驗分布推導： $p(\mu_i | \sigma_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta) \propto p(\mathbf{I}_{c(i)} | \mu_i, \sigma_i, \delta)p(\mu_i)$

$$\begin{aligned} &\propto \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i) - \frac{1}{2\sigma_{h(i)}^2}(\mu_i - \mu_{h(i)})^2\right] \\ &\propto \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{I}_{c(i)}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{I}_{c(i)} + \boldsymbol{\mu}_i^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \boldsymbol{\mu}_i - 2\mathbf{I}_{c(i)}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \boldsymbol{\mu}_i + \frac{\mu_i^2}{\sigma_{h(i)}^2} + \frac{\mu_{h(i)}^2}{\sigma_{h(i)}^2} - \frac{2\mu_i \mu_{h(i)}}{\sigma_{h(i)}^2})\right] \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left[\left(\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + \frac{1}{\sigma_{h(i)}^2}\right)\mu_i^2 - 2\left(\mathbf{I}_{c(i)}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + \frac{\mu_{h(i)}}{\sigma_{h(i)}^2}\right)\mu_i\right]\right\} \\ &\propto \exp\left\{-\frac{1}{2(\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2)^{-1}}\left[\mu_i^2 - 2\left(\frac{\mathbf{I}_{c(i)}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + \mu_{h(i)}/\sigma_{h(i)}^2}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2}\right)\mu_i\right]\right\} \\ &\propto \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{(\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2)^{-1/2}} \exp\left\{-\frac{1}{2(\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2)^{-1}}\left[\mu_i - \left(\frac{\mathbf{I}_{c(i)}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + \mu_{h(i)}/\sigma_{h(i)}^2}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2}\right)\right]^2\right\} \quad (\text{A.3}) \end{aligned}$$

可以發現上式為 μ_i 的常態分布機率密度函數，其描述 μ_i 之後驗超參數平均值 $\mu_{p(i)}$

與變異數 $\sigma_{p(i)}^2$ 為：

$$\mu_{p(i)} = \frac{\mathbf{I}_{c(i)}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + \mu_{h(i)}/\sigma_{h(i)}^2}{\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2} \quad (\text{A.4})$$



$$\sigma_{p(i)}^2 = (\mathbf{1}^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} \mathbf{1} + 1/\sigma_{h(i)}^2)^{-1} \quad (\text{A.5})$$

A.1.2 變異數 σ_i^2 之後驗超參數推導

假設先驗分布 $p(\sigma_i^2)$ 為逆伽瑪分布，則其機率密度函數：

$$p(\sigma_i^2) \propto \frac{1}{\sigma_i^{2\alpha_{h(i)}+2}} \exp(-\beta_{h(i)}\sigma_i^{-2}) \quad (\text{A.6})$$

後驗分布推導：

$$\begin{aligned} p(\sigma_i^2 | \boldsymbol{\mu}_i, \mathbf{I}_{c(i)}, \delta) &\propto p(\mathbf{I}_{c(i)} | \sigma_i^2, \boldsymbol{\mu}_i, \delta) p(\sigma_i^2) \\ &\propto \frac{1}{\sqrt{|\boldsymbol{\Sigma}_i|}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)\right] \times \frac{1}{\sigma_i^{2\alpha_{h(i)}+2}} \exp(-\beta_{h(i)}\sigma_i^{-2}) \\ &\propto \end{aligned}$$

$$\frac{1}{\sqrt{|\sigma_i^2 \mathbf{R}_i|}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_i^2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \mathbf{R}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)\right] \times \left[\frac{1}{\sigma_i^{2\alpha_{h(i)}+2}} \exp(-\frac{\beta_{h(i)}}{\sigma_i^2})\right]$$

因為 $\sqrt{|\sigma_i^2 \mathbf{R}_i|} = \sigma_i^n$ ，所以上式變為：

$$\begin{aligned} &\propto \frac{1}{\sigma_i^{n+2\alpha_{h(i)}+2}} \exp\left[-\frac{1}{2\sigma_i^2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \mathbf{R}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i) - \frac{\beta_{h(i)}}{\sigma_i^2}\right] \\ &\propto \frac{1}{\sigma_i^{2(n/2+\alpha_{h(i)}+2)}} \exp\left\{-\left[\beta_{h(i)} + \frac{1}{2}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)^T \mathbf{R}_i^{-1}(\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i)\right]/\sigma_i^2\right\} \quad (\text{A.7}) \end{aligned}$$

可以發現上式與 σ_i^2 的逆伽瑪分布機率密度函數成正比，可以看出其描述 σ_i^2 之後驗超參數形狀參數 $\alpha_{p(i)}$ 與尺度參數 $\beta_{p(i)}$ 為：

$$\alpha_{p(i)} = \alpha_{h(i)} + n/2 \quad (\text{A.8})$$

$$\beta_{p(i)} = \beta_{h(i)} + \frac{1}{2}[\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i]^T \mathbf{R}_i^{-1}[\mathbf{I}_{c(i)} - \boldsymbol{\mu}_i] \quad (\text{A.9})$$

附錄 B 提問與答覆

劉家男 博士

提問與建議

作者答覆

論文(3.1)式提到，各層土壤的 δ 值被假設為全部都相同(皆為 $0.8 \times \bar{d}$)，這種假設合不合理？為什麼要這樣假設？

又或者有了馬爾可夫鏈 h 樣本之後，你將同一種狀態的資料聚集在一起，每一群的 I_c 資料用 $\delta \approx 0.8 \times \bar{d}$ 去估算關聯性長度，這樣為什麼不可以？

理論上不同土層會有不同的 δ 值，這樣假設與實際有所出入。理想上會希望不同層的 δ 能各自被估算出來，並且有所差別，然而有一個難點是分析之前，我們並不知道土層怎麼劃分，所以才會假設全部土層都是可以用 $\delta \approx 0.8 \times \bar{d}$ 來估算。

如果依照 h 樣本對相同分類的 I_c 資料估算其 δ ，則資料有可能是被切分成好幾段的，如此一來計算 \bar{d} 所需要的 I_c 與趨勢線交點就會比較難找出，還有如果遇到薄層片段的話，可能不管是交點還是趨勢線都會無法得到，使得公式 $\delta \approx 0.8 \times \bar{d}$ 無法使用。

你的建議是要把小於 δ 的薄層拿掉，但是如果它真實存在小於 δ 的薄層的話怎麼辦？

如果根據建議，把小於 δ 的薄層剔除，確實有可能會忽略真實存在的薄層，但是目前我們的 HMM 分層法還沒有剔除薄層，產生的薄層有可能是孤兒層問題(假薄層)或是真薄層，不管是哪一種薄層，都是後續研究需要處理的問題，假薄層影響層面的判別，真薄層違反分層獨立性的假設。

在 Gibbs sampling 的計算中，你現在都把參數 μ 、 σ 的條件分布假設是共軛先驗的情況，如果它不是的話怎麼辦？

使用共軛先驗是因為計算上的方便，其本身不算是很離譜的假設，因為它們可以調整它們的超參數，使共軛先驗變為無提示性的先驗，例如：常態分布就將其標準差設為無限大，使其變成扁平的分布，接近無提示性的先驗，形式上仍然是共軛，共軛先驗的好處就是後驗會有精確解。

Gibbs sampling 中的疊代次數 N 與要捨棄之預燒期長度 B ，你是如何決定的？

MCMC 的方法一開始都會有幾個樣本屬於預燒期，預燒期結束之後才會開始得到收斂的結果，所以 N 值需要大於預

關於論文的圖 4-8，在分群數大於 6 之後的結果有 4 種變化，這是 K-means 分群法造成的嗎？

K-means 分群法如何影響 HMM 最終抓到多少土層？

燒期長度，並且包含足夠多的收斂結果。我根據經驗，發現預燒期大部分都在 $k = 200$ 之前就會結束，因此設 $B = 200$ ，並且希望收斂的結果至少要有 1000 筆，因此設 $N = 1200$ ，作為一般情況下的設定。

會有 4 種變化是預燒期問題造成的， h 的初始值如果給得不一樣，預燒期問題會造成 HMM 可能有 4 層、5 層、6 層或 7 層等不一樣的結果，K-means 分群法只是在幫 HMM 產生一個 h 的初始值，因為其產生的初始值每次都會有些差異，所以導致 K-means 引導 HMM 收斂到 4 種可能結果的其中 1 種。

K-means 分群法的分群數我們是設定與 HMM 的分群數相同，分析時，我們令 K-means 法產生一個目標分群數的分群結果，當作 h 的初始值，該初始值的情況會影響後來 HMM 分析有沒有被抓到一個地方，使得有預燒期問題產生，導致每次分析結果都不一樣，形成分岔的 4 種變化。

GCMC 模型在抽樣時有沒有考慮到未知點與已知點的距離？比較近的已知點有沒有比較大的權重，而比較遠的比較小？

根據 Park (2010)，距離的影響會在 r 步轉換機率矩陣 ${}^k Q^{(r)}$ 產生效果，因為兩點距離 r 步，轉換機率矩陣就要自己相乘 r 次，距離愈遠乘愈多次，此時距離較近的已知點其轉換機率矩陣相乘次數較少，關聯性比較強，距離較遠的相乘次數較多，因此關聯性較弱。

論文的圖 3-4(b)與(c)中，你是否就是以最大的狀態出現機率當作分層根據？模擬資料做出來的結果，機率不是 100% 就是 0%，但實際的現地資料會不會狀態機率很接近，分層很難判定？

對，就是以每一點機率最大的狀態當作分層結果。

實際現地案例狀態機率不一定會到 100%，不過在分層的定義下，依舊是照最大機率進行分層，如果某一點 3 個狀態的機率為 34%、33%、33%，則機率為 34% 的狀態獲判為該點代表。

論文的圖 3-3 中，模擬資料和分群分數都顯示分 3 層是最好的，但是為什麼圖中的資料線最後都是一個高原的形狀？也就是從 $m = 1$ 爬升到 3 之後，3~6 的分群分數都差不多，為什麼？

分群分數的核心概念就是計算似然性函數 $p(I_{c1:T} | \theta)$ ，在不同分群數的情況下 θ 都會不一樣，根據似然函數的特性，最大的似然性表示相應的參數能夠使得統計模型最為合理，因此該情況計算出 3 的似然性最大，1 與 2 則相差甚遠。分數最高的 3 出現之後，4、5 與 6 的分數與 3 相當接近，這是因為我們並沒有非常強的證據說 4、5 與 6 層不正確，假設第 4 群的參數恰巧與第 3 群一樣，則此模型也可以說它合理，所以 4、5、6 的似然性會非常接近 3 群的，不過還是會略小於 3 群。

在論文的(3.2)式中，這個轉換機率矩陣 Q_1 ，在狀態 0 維持一樣的機率是 0.9，那狀態 1 維持一樣的機率也一定要是 0.9 嗎？所有對角線元素一定要一樣嗎？

Q_1 維持一樣的機率為 0.9 是一個初始值的假設，我們在此假設轉換機率矩陣對角線元素都是相同的。

維持一樣的機率一定要為 0.9 嗎？可以是 0.95 或 0.8 嗎？

Q 矩陣的數值會在之後的疊代進行更新與收斂，0.9 只是個初始值設定，只要結果會收斂的話，無論初始值設什麼數值，對後面的結果都不會有太大的影響。

矩陣 Q 的初始值設定不會對結果造成太大的影響？

Q 、 μ 、 σ 的初始值都不會對 HMM 的結果造成太大的影響，而是 h 的初始值對 HMM 有很大的影響，因為它會造成預燒期問題。

在 WTMM 法搭配 GCMC 模型的兩個案例分析中，有沒有把分析結果拿去跟實際已知剖面做比較、驗證？

第一現地之二維分層結果已於 4.2.1 節與圖 4-2 之 SPT 分層結果進行比較。

可以少輸入一筆已知資料，再將預測結果與該筆資料進行驗證；或是有額外的鑽探資料的話，可以在該處使用額外資料驗證。

第一現地之三維分層內部結果已於 4.3.1 節與圖 4-2 之剖面進行比較。

第二現地之二維分層結果已於 4.2.3 節與圖 4-30(b)、圖 4-33(b)進行比較。

第二現地之三維分層結果已於 4.3.3 節進行驗證，謝謝委員的建議。