Η Μέθοδος Kriging από τη Σκοπιά της Θεωρίας Πρόγνωσης Τυχαίων Πεδίων

Α. Δερμάνης

Τομέας Γεωδαισίας και Τοπογραφίας, Α.Π.Θ.
Πανεπιστημιακή Θυρίδα 503, 54124 Θεσσαλονίκη
Τηλ. 2310-99611, email: dermanis@topo.auth.gr, ιστοσελίδα: http://der.topo.auth.gr

Περίληψη

Η μέθοδος kriging εξετάζεται κριτικά, τόσο από τη σκοπιά της κλασσικής θεωρίας πρόγνωσης τυχαίων πεδίων των Wiener-Kolmogorov, όσο και από την πλευρά της πρόγνωσης στο πεπερασμένων διαστάσων στατιστικό μοντέλο των λεγομένων τυχαίων επιδράσεων. Αποδεικνύεται ότι το kriging ταυτίζεται με την βέλτιστη ομογενή γραμμική ανεπηρέαστη πρόγνωση και ότι το κύριο χαρακτηριστικό του δεν είναι το ανεπηρέαστο (unbiased) της πρόγνωσης αλλά ο ομογενής γραμμικός της χαρακτήρας. Προς επίρρωση της τελευταίας παρατήρησης προσδιορίζονται οι σχέσεις για το επηρεασμένο (biased) kriging με βάση την βέλτιστη μη ομογενή γραμμική ανεπηρέαστη πρόγνωση.

Kriging in the Light of the Theory of Random Field Prediction

A. Dermanis

Department of Geodesy and Surveying, Aristotle University of Thessaloniki
University Box 503, 54124 Thessaloniki
Phone: 2310-99611, Email: dermanis@topo.auth.gr, Web page: http://der.topo.auth.gr

Abstract

The method of kriging is critically examined from the viewpoint of the classical Wiener-Kolmogorov prediction theory for random fields, as well as from the viewpoint of the finite-dimensional statistical random effects model. It is shown that ordinary kriging is identical with the best homogeneous linear unbiased prediction and that its main characteristic is not the unbiased prediction but rather its homogeneous linear character (a strictly linear combination of the observations without an additional constant). The last argument is emphasized by deriving biased kriging on the basis of best homogeneous linear prediction which is biased.

1. Εισαγωγή

Η μέθοδος kriging αναπτύχθηκε στις αρχές της δεκαετίας του 50 από το μηχανικό ορυχείων Krige (1951) με σκοπό την πρόγνωση της περιεκτικότητας σε μετάλευμα μιας περιοχής εξόρυξης αξιοποιώντας μεμονωμένες μετρήσεις περιεκτικότητας σε συγεκριμένα σημεία. Η περιεκτικότητα αυτή μοντελοποιείται ως μια στοχαστική συνάρτηση στις τρεις διαστάσεις, δηλαδή ως ένα τυχαίο πεδίο (random field) σύμφωνα με τη πιο σύγχρονη ορολογία. Ο γενικότερος χαρακτήρας του kriging ως μεθόδου πρόγνωσης ενός τυχαίου πεδίου αναγνωρίστηκε από τον Matheron (1962) ο οποίος μελέτησε τα λεπτά μαθηματικά προβλήματα που σχετίζονται με τον απειροδιάστατο χαρακτήρα του άγνωστου τυχαίου πεδίου. Έτσι αργότερα η μέθοδος βρήκε εφαρμογή και σε άλλα προβλήματα πρόγνωσης όπως αυτά της υδρολογίας. Όμως παρόμοια προβλήματα πρόγνωσης τυχαίων πεδίων ή στοχαστικών συναρτήσεων (stochastic processes), όρος που επεκράτησε για συναρτήσεις του χρόνου, είχε ήδη μελετηθεί ανεξάρτητα τόσο από τον Kolmogorov (1941) όσο και από τον Wiener (1949), ώστε να μπορούμε να μιλούμε για μία συγκροτημένη θεωρία πρόγνωσης τυχαίων πεδίων των Wiener-Kolmogorov.

Στην γεωδαισία μια παρόμοια μέθοδος εισήχθηκε από τον Moritz (Heiskanen & Moritz, 1967) για την πρόγνωση του πεδίου βαρύτητας αλλά αναλύθηκε διεξοδικά από τον Krarup (1969), ο οποίος επιπλέον κατέδειξε τη σχέση με το ντετερμινιστικό πρόβλημα παρεμβολής μιας αρμονικής συνάρτησης δυναμικού έλξης η οποία ανήκει σε ένα χώρο συναρτήσεων Hilbert με αναπαραγωγό πυρήνα (reproducing kernel). Η σχετική μεθοδολογία ονομάστηκε σημειακή προσαρμογή (collocation) ενώ οι ντετερμινιστικές της όψεις υπήρξαν αντικείμενο διεξοδικών ερευνών από τους Dermanis (1976), Sansò (1978), και άλλους.

Παρά την παρουσία ενός απειροδιάστατου πεδίου σε κάθε εφαρμογή, το πρόβλημα μπορεί να αναχθεί σε ένα κλασσικό πρόβλημα στατιστικής πρόγνωσης, με πεπερασμένες διαστάσεις, στα πλαίσια του λεγομένου μοντέλου τυχαίων επιδράσεων (random effects model), επειδή ο αριθμός των δεδομένων είναι πεπερασμένος αλλά και η ίδια η πρόγνωση του άγνωστου τυχαίου πεδίου μπορεί να αντιμετωπισθεί ως πρόβλημα πρόγνωσης μίας τιμής του σε οποιοδήποτε σημείο του πεδίου ορισμού του.

Παρ' όλες τις ομοιότητες με τη γενικότερη θεωρία πρόγνωσης των Wiener-Kolmogorov η μέθοδος kriging έχει μια σημαντική διαφορά, στο ότι χρησιμοποιεί τη συνάρτηση του μεταβολογράμματος (variogram) στη θέση της συνάρτησης συμμεταβλητότητας (covariance function) του σχετικού τυχαίου πεδίου. Από θεωρητική σκοπιά η επιλογή αυτή επεκτίνει την εφαρμοσιμότητα του kriging και σε τυχαία πεδία τα οποία διαθέτουν μεταβολόγραμμα αλλά όχι συνάρτηση συμμεταβλητότητας. Η ευρύτητα αυτή του πεδίου εφαρμογής είναι όμως ασήμαντη από πρακτική σκοπιά, όπου πλέον σημαντική είναι η δυνατότητα πρόγνωσης όταν το τυχαίο πεδίο έχει σταθερή μεν αλλά άγνωστη συνάρτηση μέσης τιμής, ενώ οι άλλες μέθοδοι προϋποθέτουν γνώση της σταθερής μέσης τιμής.

Περιοριζόμαστε εδώ λόγω του περιορισμένου χώρου στο λεγόμενο κοινό kriging (ordinary kriging) με άγνωστη σταθερή μέση τιμή. Το πρόβλημα του «παγκόσμιου» kriging (universal kriging) όπου η άγνωστη μέση συνάρτηση είναι γραμμικός συνδυασμός γνωστών συναρτήσεων με άγνωστους συντελεστούς, αντιμετωπίζεται και αυτό στα πλαίσια της κλασσικής πεπερασμένων διαστάσεων στατιστικής μεθοδολογίας εκτίμησης-πρόγνωσης στα πλαίσια του λεγομένου μοντέλου μικτών επιδράσεων (mixed effects model). Η ουσία όμως των εδώ συγκρίσεων και συμπερασμάτων δεν χρειάζεται τη γενίκευση του «παγκόσμιου» kriging (universal kriging), το οποίο απλά οδηγεί σε κάπως πολυπλοκότερους αλγορίθμους, οι οποίοι όμως (συνήθως) χρησιμοποιούν τη συνάρτηση συμμεταβλητότητας αντί του μεταβολογράμματος. Περισσότερο δραστική είναι η γενικευση του intrinsic kriging, το οποίο οδηγεί σε λύσεις ανεξάρτητες της άγνωστης συνάρτησης μέσης τιμής αξιοποιώντας τη λεγόμενη γενικευμένη συνάρτηση συμμεταβλητότητας. Τέλος μια πρόσφατη γενίκευση είναι το γενικευμένο kriging (generalized kriging) των Reguzzoni et al. (2005), το οποίο επιτρέπει τη χρήση οποιωνδήποτε σχεδόν πραματικών τιμών που σχετίζονται με το άγνωστο πεδίο, τόσο ως παρατηρήσεων όσο και ως πρσοτήτων προς πρόγνωση, αρκεί αυτές να μπορούν να εκφραστούν ως γραμμικά συναρτησιακά του σχετικού πεδίου (γραμμικές απεικονίσεις συναρτήσεων σε πραγματικές τιμές). Από την εδώ σύγκριση στα πλαίσια του στατιστικού μοντέλου τυχαίων επιδράσεων, προκύπτει μια ακόμη γενίκευση, το «επηρεασμένο kriging» (biased kriging) η οποία έχει ήδη προταθεί από τους Dermanis & Sansò (2007).

2. Πρόγνωση με το μοντέλο των τυχαίων επιδράσεων

Το μοντέλο των τυχαίων επιδράσεων είναι ένα γραμμικό μοντέλο της μορφής $\mathbf{y} = \mathbf{Gs} + \mathbf{v}$, όπου $\mathbf{s}$ είναι ένα διάνυσμα τυχαίων μεταβλητών με γνωστή μέση τιμή $\mathrm{E}\{\mathbf{s}\} = \mathbf{m}$ και γνωστό πίνακα συμμεταβλητότητας $\mathrm{E}\{(\mathbf{s}-\mathbf{m})(\mathbf{s}-\mathbf{m})^{\mathrm{T}}\} = \mathbf{C}_{\mathrm{ss}}$, $\mathbf{v}$ είναι το διάνυσμα των τυχαίων σφαλμάτων της μέτρησης με $\mathrm{E}\{\mathbf{v}\} = \mathbf{0}$ και $\mathrm{E}\{\mathbf{vv}^{\mathrm{T}}\} = \mathbf{C}_{\mathrm{v}}$, $\mathbf{G}$ είναι ένας γνωστός πίνακας και $\mathbf{y}$ είναι το τυχαίο διάνυσμα των παρατηρήσεων για το οποίο είναι διαθέσιμη μία δειγματική τιμή ως αποτέλεσμα συγκεκριμένων μετρήσεων. Το πρόβλημα είναι η πρόγνωση (δηλαδή η εκτίμηση της αντίστοιχης δειγματικής τιμής) οποιασδήποτε τυχαίας μεταβλητής s' με γνωστή μεση τιμή $\mathrm{E}\{\mathrm{s}'\} = \mathrm{m}'$, η οποία είναι συσχετισμένη με τις τυχαίες μεταβλητές του μοντέλου, μέσω του γνωστου πίνακα δια-συμμεταβλητότητας

$$\mathrm{E}\{(\mathbf{s}-\mathbf{m})(\mathrm{s}'-\mathrm{m}')\}=\mathbf{c}_{\mathrm{ss}'} .$$

Η πρόγνωση χαρακτηρίζεται ως βέλτιστη (best) όταν ικανοποιείται το κριτήριο της ελαχιστοποίησης του μέσου τετραγωνικού σφάλματος $\mathrm{E}\{\varepsilon^2\}=\min$, όπου $\tilde{\mathrm{s}}'=\tilde{\mathrm{s}}'(\mathbf{y})$ είναι η τιμή της πρόγνωσης και $\varepsilon=\tilde{\mathrm{s}}'-\mathrm{s}'$ το σφάλμα της πρόγνωσης. Η πρόγνωση είναι μια συνάρτηση $\tilde{\mathrm{s}}'=\tilde{\mathrm{s}}'(\mathbf{y})$ των γνωστών παρατηρήσεων $\mathbf{y}$, η οποία είναι κατά κανόνα γραμμική (linear) με δύο δυνατές μορφές την ομογενή (hom) γραμμική $\mathrm{s}'=\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}$ και την μη ομογενή γραμμική (inhom) $\mathrm{s}'=\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{y}+\mathrm{k}$. Επίσης οι προγνώσεις διακρίνονται σε ανεπηρέαστες (unbiased) για τις οποίες $\mathrm{E}\{\tilde{\mathrm{s}}'\}=\mathrm{E}\{\mathrm{s}'\}$ και τις επηρεασμένες (biased) για τις οποίες δεν ισχύει ο περιορισμός αυτός. Με βάση τις παραπάνω δυνατότητες μπορούμε να διακρίνουμε τέσσαρεις τύπους βέλτιστης πρόγνωσης:

- Βέλτιστη ανεπηρέαστη μη ομογενής πρόγνωση
  (inhomBLUP = inhomogeneous Best Linear Unbiased Prediction)
- Βέλτιστη ανεπηρέαστη ομογενής πρόγνωση
  (homBLUP = homogeneous Best Linear Unbiased Prediction)
- Βέλτιστη επηρεασμένη μη ομογενής πρόγνωση
  (inhomBLIP = inhomogeneous Best Linear Prediction)
- Βέλτιστη επηρεασμένη ομογενής πρόγνωση
  (homBLIP = homogeneous Best Linear Prediction)

Οι βέλτιστες τιμές των συντελεστών $\mathbf{d}$, ή $\mathbf{d}$ και k, προσδιορίζονται ελαχιστοποιώντας τη συνάρτηση $\mathrm{E}\{\varepsilon^2\}=f(\mathbf{d})$, ή $\mathrm{E}\{\varepsilon^2\}=f(\mathbf{d},\mathrm{k})$, απευθείας ή κάτω από τη συνθήκη ανεπηρέαστη πρόγνωσης $\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{Gm}=\mathrm{m}'$, ή $\mathbf{d}^{\mathrm{T}}\mathbf{Gm}+\mathrm{k}=\mathrm{m}'$. Με βάση τις τιμές των $\mathbf{d}$ και k που προκύπτουν, έχουμε τους παρακάτω τύπους πρόγνωσης:

inhomBLUP = inhomBLUP:

$$\tilde{\mathrm{s}}'=\mathrm{m}'+\mathbf{c}_{\mathrm{ss}'}^{\mathrm{T}}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{\mathrm{ss}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}+\mathbf{C}_{\mathrm{v}})^{-1}(\mathbf{y}-\mathbf{Gm}) \tag{1}$$

homBLUP:

$$\left.\begin{aligned}
&\tilde{\mathrm{s}}'=\alpha\mathrm{m}'+\mathbf{c}_{\mathrm{ss}'}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{\mathrm{ss}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}+\mathbf{C}_{\mathrm{v}})^{-1}\left(\mathbf{y}-\alpha\mathbf{Gm}\right)\\
&\alpha=\frac{\mathbf{m}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{\mathrm{ss}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}+\mathbf{C}_{\mathrm{v}})^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{m}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{\mathrm{ss}}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}+\mathbf{C}_{\mathrm{v}})^{-1}\mathbf{Gm}}
\end{aligned}\right\} \tag{2}$$

homBLIP:

$$\left.\begin{aligned} \tilde{s}' &= \alpha\, m' + \mathbf{c}_{ss'}^{T}\mathbf{G}^{T}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{ss}\mathbf{G}^{T} + \mathbf{C}_{v})^{-1}\left(\mathbf{y} - \alpha\,\mathbf{G}\mathbf{m}\right) \\ \alpha &= \frac{\mathbf{m}^{T}\mathbf{G}^{T}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{ss}\mathbf{G}^{T} + \mathbf{C}_{v})^{-1}\mathbf{y}}{1 + \mathbf{m}^{T}\mathbf{G}^{T}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{ss}\mathbf{G}^{T} + \mathbf{C}_{v})^{-1}\mathbf{G}\mathbf{m}} \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

Παρατηρούμε ότι οι παραπάνω εκτιμήσεις έχουν την ίδια ακριβώς μορφή με διαφορετική μόνο την παράμετρο α, η οποία για την πρόγνωση inhomBLUP = inhomBLUP μπορεί να θεωρηθεί ότι έχει την τιμή $\alpha = 1$. Στην περίπτωση μηδενικών μέσων τιμών ($m_i = 1$, $m' = 1$) όλες οι παραπάνω προγνώσεις ταυτίζονται παίρνοντας την κοινή μορφή $\tilde{s}' = \mathbf{C}_{ss'}^{T}\mathbf{G}^{T}(\mathbf{G}\mathbf{C}_{ss}\mathbf{G}^{T} + \mathbf{C}_{v})^{-1}\mathbf{y}$. Στην περίπτωση της μη ομογενούς πρόγνωσης η ύπαρξη του σταθερού όρου k εξαφανίζει αυτόματα την “παρέκκλιση” (bias) και η σχετική πρόγνωση είναι ανεπηρέαστη, ακόμη και όταν αυτό δεν είναι μια από τις a priori απαιτήσεις. Έτσι ανεπηρέαστη και επηρεασμένη πρόγνωση ταυτίζονται. Οι ομογενείς προγνώσεις προτάθηκαν από τον Schaffrin (Grafrend & Schaffrin, 1993) ως «ανθεκτικές» (robust) εναλλακτικές λύσεις στη κλασσική μη ομογενή ανεπηρέαστη πρόγνωση, επειδή οι τελευταίες πολλαπλασιάζουν τις μέσες τιμές με ένα συντελεστή α, ο οποίος εξαρτάται από τις παρατηρήσεις και κατά κάποιο τρόπο «προστατεύει» από λανθασμένες υποθέσεις σχεικά με τις μέσες τιμές. Παρόμοιες και κατα τι γενικευμένες σχέσεις δόθηκαν και από τον Dermanis (1987) στα πλαίσια της κλασσικής μη ομογενούς ανεπηρέαστης πρόγνωσης, περιλαμβάνοντας τον συντελεστή α στο μοντέλο, είτε ως άγνωστη ντετερμινιστική παράμετρο, είτε ως στοχαστική παράμετρο με μέση τιμή 1 και γνωστή a priori μεταβλητότητα.

3. Εφαρμογή στην πρόγνωση τυχαίων πεδίων

Στην περίπτωση ενός αγνώστου τυχαίου πεδίου $u(\mathbf{x})$, όπου π.χ. $\mathbf{x} = [x\,y\,z]^T$ το διάνυσμα των καρτεσιανών συντεταγμένων, οι παρατηρήσεις $\mathbf{y}$ έχουν τη μορφή $y_i = u(\mathbf{x}_i) + v_i$, $i = 1,2,...,n$ δηλαδή παρατηρούνται οι τιμές $u(\mathbf{x}_i)$ του πεδίου σε n σημεία $\mathbf{x}_i$ με πρόσθετα τυχαία σφάλματα v_i και ζητείται η πρόγνωση $\tilde{u}_x \equiv \widetilde{u(\mathbf{x})}$ της τιμής του πεδίου $u(\mathbf{x})$ σε οποιοδήποτε άλλο σημείο $\mathbf{x}$. Υποθέτουμε πως το τυχαίο πεδίο έχει σταθερή συνάρτηση μέση τιμής $m(\mathbf{x}) \equiv E\{u(\mathbf{x})\} = \mu$ και γνωστή συνάρτηση συμμεταβλητότητας $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \equiv E\{[u(x) - \mu][u(\mathbf{x}') - \mu]\}$.

Για λόγους που σχετίζονται με το σκοπό της σύγκρισης με το kriging, υποθέτουμε επιπλέον πως η συνάρτηση μέσης τιμής είναι σταθερή, $m(\mathbf{x}) = \mu$, υπόθεση η οποία προκύπτει υποχρεωτικά αν υποθέσουμε ότι το τυχαίο πεδίο είναι ομογενές, δηλαδή αν $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C(\mathbf{x}+\boldsymbol{\tau}, \mathbf{x}'+\boldsymbol{\tau})$ για οποιαδήποτε μετατόπιση $\boldsymbol{\tau}$, οπότε (επιλέγοντας $\boldsymbol{\tau} = -\mathbf{x}$) η συνάρτηση συμμεταβλητότητας είναι συνάρτηση μόνο της διαφοράς $\mathbf{x}' - \mathbf{x}$, δηλαδή έχει τη μορφή $C(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$.

Θέτοντας $u_i = u(\mathbf{x_i})$ και $C_{ik} = C\big(u(\mathbf{x}_i), u(\mathbf{x}_k)\big)$, $c_i = C\big(u(\mathbf{x}), u(\mathbf{x}_i)\big)$, έχουμε το μοντέλο τυχαίων επιδράσεων $\mathbf{y} = \mathbf{u} + \mathbf{v}$, το οποίο αντιστοιχεί στο γενικό μοντέλο $\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{s} + \mathbf{v}$ με $\mathbf{G} = \mathbf{I}$, $\mathbf{s} = \mathbf{u}$, $s' = u(\mathbf{x}) \equiv u_x$, $\mathbf{C_{ss}} = \mathbf{C}$, $\mathbf{c_{ss'}} = \mathbf{c}$, $m' = \mu$, $\mathbf{m} = \mu\,\mathbf{s}$, όπου $\mathbf{s} = [1\,1\,...\,1]^T$. Με τις αντικαταστάσεις αυτές οι σχετικές προγνώσεις γίνονται

inhomBLUP = inhomBLUP:

$$\tilde{u}_x = \mu + \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}(\mathbf{y} - \mu\,\mathbf{s}) \tag{4}$$

homBLUP:

$$\tilde{u}_x = \alpha\mu + \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\big(\mathbf{y} - \alpha\mu\mathbf{s}\big), \qquad \alpha = \frac{1}{\mu}\frac{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}s} \tag{5}$$

homBLIP:

$$\tilde{u}_x = \alpha\mu + \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\big(\mathbf{y} - \alpha\mu\mathbf{s}\big), \qquad \alpha = \frac{\mu\,\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}y}{1+\mu^2 s^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}s} \tag{6}$$

4. Η μέθοδος kriging ως βέλτιστη ομογενής ανεπηρέαστη πρόγνωση

Όπως ήδη επισημάνθηκε από τον Dermanis (1984), η μέθοδος kriging αντιστοιχεί στην βέλτιστη γραμμική ομογενή ανεπηρέαστη πρόγνωση (homBLUP), ενώ η σημειακή προσαρμογή της γεωδαισίας στην βέλτιστη γραμμική μη ομογενή ανεπηρέαστη πρόγνωση. Έτσι το κύριο χαρακτηριστικό του kriging είναι ο ομογενής γραμμικός χαρακτήρας και όχι ο ανεπηρέαστος χαρακτήρας της πρόγνωσης όπως κοινά πιστεύεται. Για να αποδείξουμε τον παραπάνω ισχυρισμό θα πρέπει να μεταφράσουμε το σχετικό αποτέλεσμα από τη «γλώσσα» της συνάρτησης συμμεταβλητότητας στη «γλώσσα» του μεταβολογράμματος το οποίο ορίζεται ως

$$\gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \frac{1}{2}E\{[u(\mathbf{x}) - u(\mathbf{x}')]^2\} \tag{7}$$

Στο kriging ισχύει η λεγόμενη εγγενής (intrinsic) υπόθεση ότι το μεταβολόγραμμα είναι συνάρτηση μόνο της μετατόπισης $\mathbf{h} = \mathbf{x}' - \mathbf{x}$, η οποία είναι αντίστοιχη με την υπόθεση της ομογενούς συμμεταβλητότητας $C(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = C(\mathbf{x}' - \mathbf{x})$, οπότε

$$\gamma(\mathbf{h}) = \tfrac{1}{2}\mathrm{E}\{[\mathrm{u}(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - \mathrm{u}(\mathbf{x})]^2\} = \tfrac{1}{2}\mathrm{E}\{\mathrm{u}(\mathbf{x}+\mathbf{h})^2\} - \mathrm{E}\{\mathrm{u}(\mathbf{x}+\mathbf{h})\mathrm{u}(\mathbf{x})\} + \tfrac{1}{2}\mathrm{E}\{\mathrm{u}(\mathbf{x})^2\} =$$

$$= \mathrm{C}(\mathbf{0}) - \mathrm{C}(\mathbf{h}) \tag{8}$$

Κάτω από την εγγενή υπόθεση της ομογένειας η μέση τιμή είναι υποχρεωτικά σταθερή. Εισάγοντας τους πίνακες μεταβολογράμματος $\boldsymbol{\Gamma}$, $\boldsymbol{\gamma}$ με στοιχεία $\Gamma_{ik} = \gamma(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k)$, $\gamma_i = \gamma(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$, αντίστοιχα και θέτοντας $C_0 \equiv C(\mathbf{0})$, ισχύουν οι σχέσεις μετατροπής $\mathbf{C} = C_0\mathbf{s}\mathbf{s}^T - \boldsymbol{\Gamma}$, $\mathbf{c} = C_0\mathbf{s} - \boldsymbol{\gamma}$ και οι αντίστροφες $\boldsymbol{\Gamma} = C_0\mathbf{s}\mathbf{s}^T - \mathbf{C}$, $\boldsymbol{\gamma} = C_0\mathbf{s} - \mathbf{c}$. Για να δείξουμε την ταύτιση της μεθόδου kriging με τη βέλτιστη ομογενή ανεπηρέαστη πρόγνωση θα ξεκινήσουμε από το πολύ κοινό «σύστημα kriging» το οποίο έχει τη μορφή

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{C}_v & \mathrm{s} \\ \mathbf{s}^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \mathrm{k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma \\ 1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

ή αναλυτικά

$$(\boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{C}_v)\boldsymbol{\lambda} + \mathrm{k}\mathbf{s} = \boldsymbol{\gamma}, \qquad \mathbf{s}^T\boldsymbol{\lambda} = 1, \tag{10}$$

η λύση του οποίου ως προς $\boldsymbol{\lambda}$ οδηγεί στην kriging πρόγνωση $\hat{\mathrm{u}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\lambda}^T\mathbf{y}$. Αν αντικαταστήσουμε $\boldsymbol{\Gamma} = C_0\mathbf{s}\mathbf{s}^T - \mathbf{C}$, $\boldsymbol{\gamma} = C_0\mathbf{s} - \mathbf{c}$, το σύστημα kriging γίνεται $\mathbf{s}^T\boldsymbol{\lambda} = 1$ και $(C_0\mathbf{s}\mathbf{s}^T - \mathbf{C} - \mathbf{C}_v)\boldsymbol{\lambda} + \mathrm{k}\mathbf{s} = C_0\mathbf{s}\mathbf{s}^T\boldsymbol{\lambda} - (\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)\boldsymbol{\lambda} + \mathrm{k}\mathbf{s} = C_0\mathbf{s} - (\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)\boldsymbol{\lambda} + \mathrm{k}\mathbf{s} = C_0\mathbf{s} - \mathbf{c}$, ή απλά

$$(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)\boldsymbol{\lambda} - \mathrm{k}\mathbf{s} = \mathrm{c}, \qquad \mathbf{s}^T\boldsymbol{\lambda} = 1. \tag{11}$$

Η πρώτη σχέση δίνει $\boldsymbol{\lambda} = (\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}(\mathbf{c} + \mathrm{k}\mathbf{s})$, το οποίο αν αντικατασταθεί στην δεύτερη δίνει $\mathbf{s}^T\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}(\mathbf{c} + \mathrm{k}\mathbf{s}) = \mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{c} + \mathrm{k}\mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s} = 1$ και κατά συνέπεια $\mathrm{k} = \dfrac{1 - \mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{c}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}}$. Με την τιμή αυτή του k οι συντελεστές $\boldsymbol{\lambda}$ γίνονται

$$\lambda = (\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}(\mathbf{c} + \mathrm{k}\mathbf{s}) = (\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{c} + \frac{1 - \mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{c}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}}(\mathbf{C} + \mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s} \tag{12}$$

και η αντίστοιχη πρόγνωση $\hat{\mathrm{u}}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\lambda}^T\mathbf{y}$ παίρνει τη μορφή

$$\hat{u}(\mathbf{x}) = \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y} + \frac{1-\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{c}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}}\mathrm{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y} =$$

$$= \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y} + \frac{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathrm{s}} - \frac{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}}\mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s} =$$

$$= \frac{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}} + \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\left[\mathbf{y} - \frac{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}}\mathbf{s}\right] \tag{13}$$

ή απλά

$$\hat{u}(\mathbf{x}) = \beta + \mathbf{c}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}(\mathbf{y}-\beta\mathbf{s}), \quad \beta = \frac{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{y}}{\mathbf{s}^T(\mathbf{C}+\mathbf{C}_v)^{-1}\mathbf{s}} \tag{14}$$

Συγκρίνοντας με τη σχέση (5) για την ομογενή βέλτιστη πρόγνωση, διαπιστώνουμε ότι οι δύο μέθοδοι ταυτίζονται, αρκεί να αναγνωρίσουμε ότι $\beta = \alpha\mu$. Επομένως το κοινό kriging (ordinary kriging) ταυτίζεται με την ομογενή βέλτιστη πρόγνωση, προκειμένου για τυχαία πεδία τα οποία συνάρτηση μεταβλητότητας. Η ταύτιση αυτή δεν είναι απόλυτη για δύο λόγους:

(α) το kriging είναι κατά τι «γενικότερο» επειδή μπορεί να εφαρμοστεί σε τυχαία πεδία που διαθέτουν μεταβολόγραμμα αλλά όχι και συνάρτηση μεταβλητότητας.

(β) το kriging δεν απαιτεί γνώση της σταθερής μέσης τιμής μ του σχετικού ομογενούς τυχαίου πεδίου.

Εκ πρώτης όψεως η δεύτερη παρατήρηση φαίνεται να μην ευσταθεί επειδή η παρουσία της μέσης τιμής μ στη σχέση (5) είναι εικονική, όπως εξάλλου φαίνεται από την ισοδύναμη σχέση (14) όπου το γινόμενο $\alpha\mu$ έχει αντικατασταθεί από την παράμετρο $\beta = \alpha\mu$. Όμως η γνώση της τιμής μ σχετίζεται όχι με την εφαρμογή της σχέσης πρόγνωσης, αλλά με τον προσεγγιστικό προσδιορισμό του μεταβολογράμματος $\gamma(\mathbf{h})$ ή της συνάρτησης συμμεταβλητότητας $C(\mathbf{h})$, κατά περίπτωση, με βάση τις αντίστοιχες σχέσεις

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2}E\{[u(x) - u(\mathbf{x}+\mathbf{h})]^2\} \tag{15}$$

$$C(\mathbf{h}) = E\{[u(\mathbf{x}) - \mu][u(\mathbf{x}+\mathbf{h}) - \mu]\} \tag{16}$$

Οι σχετικές προσεγγίσεις βασίζονται στον διαχωρισμό του πεδίου ορισμού D σε επικαλύπτοντα και ανεξάρτητα τμήματα D_m ($\cup D_m = D$, $D_m \cap D_{m'} = \varnothing$ για $m' \neq m$) και την προσέγγιση της $\gamma(\mathbf{h})$ ή $C(\mathbf{h})$ από βηματικές συναρτήσεις με σταθερές τιμές σε κάθε τμήμα D_m ($\gamma(\mathbf{h}) = \gamma_m$, $\forall \mathbf{h} \in D_m$ και $C(\mathbf{h}) = C_m$, $\forall \mathbf{h} \in D_m$).

Αν υποθέσουμε την παρουσία ασυσχέτιστων τυχαίων σφαλμάτων με σταθερή μεταβλητότητα, $E\{v_i v_k\} = \sigma_v^2 \delta_{ik}$, οι τιμές γ_m ή C_m προσεγγίζονται από τις τιμές των παρατηρήσεων $y_i = u(\mathbf{x}_i) + v_i$, μέσω των σχέσεων

$$2\hat{\gamma}_m + 2\sigma_v^2 = \frac{1}{N_m} \sum_{x_k - x_i \in D_m} (y_i - y_k)^2 \tag{17}$$

$$\hat{C}_m = \frac{1}{N_m} \sum_{x_k - x_i \in D_m} (y_i - \mu)(y_k - \mu) \tag{18}$$

όπου N_m ο αριθμός των ζευγών σημείων με $\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_i \in D_m$. Οι σχετικές εκτιμήσεις είναι ανεπηρέαστες, ισχύει δηλαδή ότι $E\{\hat{\gamma}_m\} = \gamma_m$ και $E\{\hat{C}_m\} = C_m$. Για το μεταβολόγραμμα $\gamma(\mathbf{0}) = 0$ εξ ορισμού, ενώ η αντίστοιχη τιμή $C_0 = C(\mathbf{0})$ εκτιμάται από τη σχέση

$$\hat{C}_0 + \sigma_v^2 = \frac{1}{N_m} \sum_{x_i} (y_i - \mu)^2 \tag{19}$$

με $E\{\hat{C}_0\} = C_0$.

5. Επηρεασμένο kriging

Για να καταδείξουμε ότι το κύριο χαρακτηριστικό του kriging είναι ο ομογενής γραμμικός χαρακτήρας της πρόγνωσης και όχι ότι αυτή είναι ανεπηρέαστη, όπως συνήθως πιστεύεται, θα «μεταφράσουμε» τη βέλτιστη ομογενή γραμμική πρόγνωση (6) στη «γλώσσα» του kriging μέσω των σχέσεων $\mathbf{C} = C_0 \mathbf{s}\mathbf{s}^T - \boldsymbol{\Gamma}$, $\mathbf{c} = C_0 \mathbf{s} - \boldsymbol{\gamma}$. Αντικαθιστώντας τους πίνακες C και c στη σχέση (6) με τις παραπάνω τιμές, φθάνουμε, ύστερα από εκτεταμένους αλγεβρικούς μετασχηματισμούς, στη σχέση για το επηρεασμένο kriging (biased kriging)

$$\hat{u}(\mathbf{x}) = \beta + \boldsymbol{\gamma}^T (\boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{C}_v)^{-1} (\mathbf{y} - \beta \mathbf{s}), \quad \beta = \frac{H\, \mathbf{s}^T (\boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{C}_v)^{-1} \mathbf{y}}{H\, \mathbf{s}^T (\boldsymbol{\Gamma} - \mathbf{C}_v)^{-1} \mathbf{s} - 1} \tag{20}$$

η οποία δεν περιέχει τη μέση τιμή μ, αλλά την παράμετρο $H \equiv C_0 + \mu^2$. Όμως η παράμετρος H αν και περιέχει τη μέση τιμή μ, μπορεί να προσδιοριστεί απευθείας από της παρατηρήσεις μέσω της σχέσης

$$\hat{H} + \sigma_v^2 = \frac{1}{N_m} \sum_{x_i} y_i^2 \tag{21}$$

όπου $E\{\hat{H}\} = H$, έχουμε δηλαδή μια ανεπηρέαστη εκτίμηση.

Βιβλιογραφία

1. Dermanis, A., 1976. *Probabilistic and Deterministic Aspects of Linear Estimation in Geodesy*. Report No. 244, Dep. of Geodetic Science, The Ohio State University.
2. Dermanis, A., 1984. Kriging and Collocation - A Comparison. *Manuscripta Geodetica*, 9(2): 159-167.
3. Dermanis, A., 1987. *Geodetic Applications of Interpolation and Prediction*. International School of Geodesy "A. Marussi". 4th Course: "Applied and Basic Geodesy: Present and Future Trends". Ettore Majorana Centre for Scientific Culture, Erice-Sicily, 15-25 June 1987. Eratosthenes, 22, 229-262.
4. Dermanis, A. and Sansò, F., 2007. *On the Feasibility of Biased Kriging*. Presented at the XXIV IUGG Congress, Perugia X-X July 2007 (to be published).
5. Grafarend, E. and Schaffrin, B., 1993. *Ausgleichungs-rechnung in linearen Modellen*. Bibliographisches Institut Wissenschaftsverlag, Mannheim.
6. Heiskanen, W. and Moritz, H., 1967. *Physical Geodesy*. W. Freeman and Co., San Francisco.
7. Karup, T., 1969. *A Contribution to the Mathematical Foundation of Physical Geodesy. Geodaetisk Instituts*, Med. No. 44, Copenhagen.
8. Kolmogorov, A.N., 1941. *Interpolation and extrapolation of stationary random sequences*. Izvestiia Akademii Nauk SSR, Seriia Matematicheskaia, vol. 5, p. 3-14. Translation: Memo RM-3090-PR, Rand Corporation, Santa Monica, California, 1962.
9. Krige, D. G., 1951, *A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand*. J. Chem. Metal. Min. Soc. South Africa, v. 52, p. 119-139.
10. Matheron, G., 1962, *Traité de geostatisque appliquée, vol. I*: Memoires du Bureau de Recherches Géologiques et Miniéres, no. 14, Editions Technip, Paris, 333 pp.
11. Reguzzoni, M., Sansò, F. and Venuti, G., 2005. The theory of general kriging, with applications to the determination of a local geoid. Geophys. J. Int., 162: 303–314.
12. Sansò, F., 1978. The Minimum Mean Square Estimation Error Principle in Physical Geodesy (Stochastic and Non-Stochastic Interpretation)". Proceedings 7th Symposium on Mathematical Geodesy, Assissi, 1978.
13. Wackernagel, H., 2003. *Multivariate Geostatistics. An Introduction with Applications*. 3rd completely revised edition. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
14. Wiener, N., 1949. Extrapolation, interpolation and smoothing of stationary time series: MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 158 pp.