ROBUST'2000, 189 – 197

DVĚ POZNÁMKY O METODĚ KRIGING

JAROSLAV MICHÁLEK

Abstrakt. Kriging techniques are frequently used for the evaluation of continuous spatial processes. When the covariance structure of a considered spatial process is not known then it is necessary to estimate it from the data. Thus the first part of the article is devoted to the estimate of a variogram function which describes the covariance structure of the considered spatial process. In the second part of the article a problem is considered how some additional information about the observed spatial process can be incorporated into the statistical model. Two possibilities are considered. One is the application of Bayesian statistics the other is to use the minimax technique.

Резюме. Статистический метод называемый кригинг (*kriging*) часто употребляется для обработки непрерывных пространственных случайных процессов. Когда ковариационная структура рассматриваемого процесса неизвестна, тогда надо оценить ее из данных. По этому первая часть работы посвящена оценке вариограммы, которая описывает ковариационную структыру рассматриваемого процесса. Во второй части работы исследована проблема как можно какую-нибудь дополнительную информацию о наблюдаемом пространственном процессе включить в статистическую модель. В статье излозхены два возможности: применение Байесовской статистики и метод минимакса.

1. Úvod

V prostorové statistice (zejména v geologii, meteorologii apod.) je mezi inženýry velmi oblíbena metoda kriging. Její název pochází od Matherona [7], který ji pojmenoval po D.E. Krigeovi, jihoafrickém inženýrovi, který v padesátých letech rozvinul empirické statistické metody v důlním inženýrství. Podstatou této metody je nalezení optimální predikce kovariančně stacionárního náhodného procesu definovaného v dané oblasti vzhledem ke střední kvadratické chybě. Problémem je, že obvykle není známa kovarianční struktura tohoto procesu a je potřeba ji odhadnout z dat. Častá je též situace, že experimentátor má k dispozici jistou informaci o parametrech procesu, které je třeba odhadnout a problém je v nalezení modifikace klasické metody, která by umožnila začleněnit tuto dodatečnou informaci do modelu. Právě tyto dva problémy budou v tomto příspěvku diskutovány.

Po úvodním popisu modelu a zavedení odhadů typu "*kriging*" bude první poznámka (odstavec 5) věnována otázce odhadu kovarianční struktury prostorového procesu, zejména odhadu variogramu. V druhé poznámce (odstavce 6 a 7) pak budou zmíněny vybrané postupy, jak začlenit do modelu předem známou informaci o parametrech. Zejména bude diskutován přístup bayesovský (viz [12,13]) a minimaxový přístup pro hledání odhadů při známé dodatečné informaci o parametrech.

2000 *Mathematics Subject Classification.* Primary 62C20; Secondary 62M30.

Klíčová slova. Prostorová statistika, kovariogram, variogram, metoda kriging, bayesovské odhady, minimaxové odhady.

Výzkum byl podporován grantem MŠMT MSM 143100001.

2. Základní pojmy a označení

Nejdříve uvedeme označení a základní pojmy, s nimiž budme dále pracovat. Nechť $Z(\mathbf{s})$ je náhodný proces pozorovaný v jisté oblasti $D \subseteq \mathbb{R}^d$, která má kladný $d-$rozměrný objem. Tedy $Z(\mathbf{s})$ je pro každý bod $\mathbf{s} \in D$ náhodná veličina definovaná na pravděpodobnostním prostoru $(\Omega, \mathcal{A}, P)$. Předpokádáme, že existuje střední hodnota

$$\mathbf{E}Z(\mathbf{s}) = \mu(\mathbf{s})$$

a kovarianční funkce

$$C(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = cov(Z(\mathbf{s}_1), Z(\mathbf{s}_2)).$$

Jestliže kovarianční funkce záleží pouze na rozdílu argumentů, tedy když

$$C(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) = C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2),$$

říkáme, že proces je kovariančně stacionární a funkci $C(\mathbf{h}),\ \mathbf{h} \in D$, kterou značíme stejným písmenem, jako funkci kovarianční, nazýváme kovariogramem. V případě, když C závisí pouze na délce $\mathbf{h}$, zjednodušeně zapsáno, když $C(\mathbf{h}) = C(\|\mathbf{h}\|)$, kde $\|\mathbf{h}\|$ značí Euklidovskou normu vektoru $\mathbf{h}$, budeme říkat, že kovariogram je izotropicky stacionární. V některých situacích je praktičtější pracovat s jinou charakteristikou korelovanosti složek procesu Z, kterou je variogram. Jestliže rozptyl přírůstků procesu $var(Z(\mathbf{s}_1) - Z(\mathbf{s}_2))$ závisí pouze na rozdílu argumenetů, pak funkci

$$2\gamma(\mathbf{h}) = 2\gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) = var(Z(\mathbf{s}_1) - Z(\mathbf{s}_2)),\ \mathbf{h} = \mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2$$

nazýváme variogramem procesu Z a funkci $\gamma(\mathbf{h})$ semivariogramem procesu Z. Podobně jako v případě kovariogramu nazýváme variogram izotropickým, když $2\gamma(\mathbf{h}) = 2\gamma(\|\mathbf{h}\|)$, kde stejně jako u kovariogramu, užíváme pro označení obou funkcí $\gamma(\mathbf{h})$ a $\gamma(\|\mathbf{h}\|)$ stejné písmeno.

S ohledem na tyto definice je potom zvykem mluvit o stacionaritě druhého řádu procesu Z, když Z má konstantní střední hodnotu a je kovariančně stacionární. V případě, že proces Z má konstantní střední hodnotu a existuje jeho variogram, říkáme, že proces je vnitřně stacionární (*intrinsically stationary*). Lze snadno ukázat, že stacionární proces druhého řádu je vnitřně stacionární, opak však neplatí. Jako příklad může posloužit $d-$rozměrný Wienerův izotropický proces, jehož semivariogram je

$$\gamma(\mathbf{h}) = var(W(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - W(\mathbf{s})) = \|\mathbf{h}\|,$$

ale jeho kovariogram je tvaru

$$cov(W(\mathbf{s}_1), W(\mathbf{s}_2)) = \frac{1}{2}\|\mathbf{s}_1\| + \frac{1}{2}\|\mathbf{s}_2\| - \frac{1}{2}\|\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2\|.$$

Proto někteří autoři (viz např. [1]]) dávají při popisu korelovanosti procesu Z přednost variogramu před kovariogramem.

3. Model

Nejdříve popíšeme model, který je znám pod názvem *univerzální kriging model* (viz [1]). Budeme předpokládat, že proces $Z(\mathbf{s})$ je tvaru

$$Z(\mathbf{s}) = \mu(\mathbf{s}) + \delta(\mathbf{s}),\ \mathbf{s} \in \mathbf{D}$$

kde $\mu(\mathbf{s})$ je střední hodnotou $Z(\mathbf{s})$ a tedy $\mu(\mathbf{s})$ je deterministická složka Z která popisuje tak zvanou *large-scale* variabilitu procesu Z. Dále předpokládáme, že druhý člen v uvedeném rozkladu, náhodný proces $\delta(\mathbf{s})$ je korelovaný chybový proces a popisuje směs tzv. *smooth-scale* variability dále *mikro-scale* variability a chyb měření. O náhodném procesu $\delta(\mathbf{s})$ budeme dále předpokládat, má nulovou střední hodnotu a je kovariančně stacionární. Jeho kovariogram označíme $C(\mathbf{h})$ a vyjdeme ze situace, kdy funkce $C(\mathbf{h})$ je známá.

Předpokládejme dále, že střední hodnota $\mu(\mathbf{s})$ procesu Z, je lineární kombinací známých funkcí $f_0(\mathbf{s}), \cdots, f_p(\mathbf{s})$, $\mathbf{s} \in D$, přičemž koeficienty této lineární kombinace jsou neznámé parametry $\beta_0, \cdots, \beta_p$, které potřebujeme odhadnout. Tedy předpokládáme, že

$$\mu(\mathbf{s}) = \sum_{j=0}^{p} \beta_j f_j(\mathbf{s}).$$

Je-li proces $Z(\mathbf{s})$ pozorován v n různých bodech $\mathbf{s}_1, \cdots, \mathbf{s}_n$ oblasti D, pak cílem metody zvané *univerzální kriging* je nalézt nejlepší lineární prediktor

$$Z^*(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\mathbf{s}_i)$$

procesu $Z(\mathbf{s})$ v bodě $\mathbf{s} = \mathbf{s}_0$ vzhledem ke střední kvadratické ztrátové funkci. To znamená, že hledáme reálná čísla $\lambda_1, \cdots, \lambda_n$, která minimalizují střední kvadratickou chybu

$$MSE(\mathbf{s}_0) = \mathbf{E}(Z^*(\mathbf{s}_0) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \mathbf{E}(Z(\mathbf{s}_0) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\mathbf{s}_i))^2 \tag{1}$$

predikce Z^* v bodě $\mathbf{s}_0$, přičemž požadujeme, aby tento odhad byl nestranný, tedy minimalizujeme (1) za podminky

$$\mathbf{E}Z^*(\mathbf{s}_0) = \mathbf{E}Z(\mathbf{s}_0,) \tag{2}$$

S ohledem na předchozí zavedené označení lze podmínku (2) vyjádřit ve tvaru

$$\mu(\mathbf{s}_0) = \sum_{j=0}^{p} \beta_j f_j(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \mu(\mathbf{s}_i) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \sum_{j=0}^{p} \beta_j f_j(\mathbf{s}_i). \tag{3}$$

Užijeme-li maticové označení

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} f_0(\mathbf{s}_1) & \cdots & f_p(\mathbf{s}_1) \\ \vdots & & \vdots \\ f_0(\mathbf{s}_n) & \cdots & f_p(\mathbf{s}_n) \end{pmatrix}, \ \mathbf{x} = \begin{pmatrix} f_0(\mathbf{s}_0) \\ \vdots \\ f_p(\mathbf{s}_0) \end{pmatrix}, \ \lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{pmatrix} \text{ a } \beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix}$$

dostaneme (3) v maticovém tvaru

$$\mathbf{x}'\beta = \lambda'\mathbf{X}\beta \tag{4}$$

Z podmínky nestrannosti (2) prediktoru $Z^*(\mathbf{s})$ pak plyne , že (4) platí pro každé $\beta \in \mathbb{R}^{p+1}$ a tedy ze (4) plyne $\mathbf{x} = \mathbf{X}'\lambda$. Když množina $\mathcal{U} = \{\lambda \in \mathbb{R}^n : \mathbf{x} = \mathbf{X}'\lambda\}$ je neprázdná, pak universální kriging estimátor Z^* může být nalezen minimalizací střední čtvercové chyby (1) za podmínky, že $\lambda \in \mathcal{U}$.

4. Kriging odhady

V případě, že chybový proces $\delta(\mathbf{s})$ je stacionární druhého řádu, se známým kovariogramem C, je snadné najít kriging estimátor Z^* náhodného procesu Z.

Označme nejdříve $\mathbf{Z} = (Z(\mathbf{s}_1), \cdots, Z(\mathbf{s}_n))'$ vektor pozorovaných hodnot procesu Z v bodech $\mathbf{s}_1, \cdots, \mathbf{s}_n$ a $\delta = (\delta(\mathbf{s}_1), \cdots, \delta(\mathbf{s}_n))'$ odpovídající vektor náhodných chyb. Pak pomocí označení z předchozího odstavce můžeme psát

$$Z(\mathbf{s}_0) = \mu(\mathbf{s}_0) + \delta(\mathbf{s}_0) = \mathbf{x}'\beta + \delta(\mathbf{s}_0)$$

a tedy

$$Z^*(\mathbf{s}_0) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\mathbf{s}_{\ i}) = \lambda'\mathbf{Z} = \lambda'\mathbf{X}\beta + \lambda'\delta.$$

Tudíž pro střední kvadratickou chybu predikce v bodě $\mathbf{s}_0$ dostaneme vyjádření

$$(5) \qquad MSE(\mathbf{s}_0) = \mathbf{E}(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \mathbf{E}((\mathbf{x} - \mathbf{X}'\lambda)'\beta + \delta(\mathbf{s}_0) - \lambda'\delta)^2$$

a minimalizace $MSE(\mathbf{s}_0)$ za podmínky $\lambda \in \mathcal{U}$ vede k minimalizaci

$$\mathbf{E}(\delta(\mathbf{s}_0) - \lambda'\delta)^2 = \lambda'\mathbf{C}\lambda - 2\mathbf{c}'\lambda + C(\mathbf{0}),$$

kde

$$\mathbf{C} = var(\delta) = \begin{pmatrix} C(\mathbf{0}) & C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) & \cdots & C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_1) & C(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_2) & \cdots & C(\mathbf{0}) \end{pmatrix}$$

je varianční matice vektoru δ a

$$\mathbf{c} = cov(\delta, \delta(\mathbf{s}_0)) = (C(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_0), \cdots, C(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_0))'$$

je vektor kovariancí mezi δ a $\delta(s_0)$.

Je-li matice $\mathbf{C}$ regulární a matice $\mathbf{X}$ je plné sloupcové hodnosti, pak pomocí Lagrangeových multiplikátorů (viz [1]) snadno nahlédneme, že

$$(6) \qquad \lambda = \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{c} + \mathbf{X}(\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c}))$$

minimalizuje $MSE(\mathbf{s}_0)$ a tedy $Z^*(\mathbf{s}_0) = \lambda'\mathbf{Z}$, kde λ je dáno rovnicí (6), je universalní kriging estimátor procesu $Z(\mathbf{s}_0)$. Ze vztahu (6) lze snadno získat univerzální kriging estimátor $Z^*(\mathbf{s}_0)$ ve tvaru

$$(7) \qquad Z^*(\mathbf{s}_0) = \mathbf{Z}'\lambda = \mathbf{c}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{Z} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c})'\hat{\beta}_{GLS}$$

kde $\hat{\beta}_{GLS} = (\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{Z}$ je odhad zobecněnou metodou nejmenších čtverců (GLS-odhad) parametru β. Pro minimální střední kvadratickou chybu predikce (*kriging variance*) pak dostaneme vyjádření

$$\sigma_k^2(\mathbf{s}_0) = \min_{\lambda \in \mathcal{U}} MSE(\mathbf{s}_0) = C(\mathbf{0}) - \mathbf{c}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c})'(\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{X})^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c}).$$

V případě, že střední hodnota $\mu(\mathbf{s}) = \mathbf{E}Z(\mathbf{s})$ je známá, pak mluvíme o prosté metodě kriging (*simple kriging*) (viz [8]). V tomto případě je známý vektor β a vzorec (7) pro predikci $Z(\mathbf{s}_0)$ prostou metodou kriging pak lze zapsat ve tvaru

$$Z^*(\mathbf{s}_0) = \mathbf{c}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{Z} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c})'\beta.$$

Uvedené odhady lze snadno modifikovat pro případ, že proces δ je vnitřně stacionární. V tom případě místo s kovariogramem pracujeme s variogramem $\gamma(\mathbf{h})$ procesu δ. Označíme-li

$$\mathbf{\Gamma} = \begin{pmatrix} \gamma(\mathbf{0}) & \gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_2) & \cdots & \gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \gamma(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_1) & \gamma(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_2) & \cdots & \gamma(\mathbf{0}) \end{pmatrix}$$

a

$$\gamma = (\gamma(\mathbf{s}_1 - \mathbf{s}_0), \cdots, \gamma(\mathbf{s}_n - \mathbf{s}_0))',$$

pak za předpokladu, že $f_0(\mathbf{s}) \equiv 1$, (který zaručí, že $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$,) lze odvodit (viz [1]),že hledaný váhový vektor λ pro odhad metodou univerzální kriging, je opět tvaru

(6), kde matice $\mathbf{C}$ je nahrazena maticí $\mathbf{\Gamma}$, vektor $\mathbf{c}$ vektorem γ a místo $C(0)$ je 0. Pro kriging varianci pak dostaneme vyjádření

$$\sigma_k^2(\mathbf{s}_0) = \min_{\lambda \in \mathcal{U}} MSE(\mathbf{s}_0) = \gamma' \mathbf{\Gamma}^{-1} \gamma - (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{\Gamma}^{-1} \gamma)' (\mathbf{X}' \mathbf{\Gamma}^{-1} \mathbf{X})^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{X}' \mathbf{\Gamma}^{-1} \gamma).$$

5. Odhad variogramu

Při praktických aplikacích metody kriging zůstává hlavním problémem skutečnost, že kovariogram C nebo variogram $2\gamma(\mathbf{h})$ procesu Z je neznamý. Potom nalezení kvalitního odhadu C nebo $2\gamma(\mathbf{h})$ není jednoduchý problém, protože chybový proces δ není přímo pozorovatelný a k odhadu jeho kovariogramu nebo variogramu je zapotřebí užít nějakých specifických rysů uvažovaného modelu. Často se vychází z předpokladu izotropie a skutečnosti, že funkce μ je v nějakém směru konstantní apod.

Protože vnitřně stacionární procesy zahrnují třídu procesů druhého řádu stacionárních, dáme v tomto odstavci při popisu korelovanosti sledovaného procesu Z přednost variogramu před kovariogramem a budeme se věnovat způsobu jeho odhadu za předpokladu, že sledovaný proces je vnitřně stacionární .

Klasický odhad variogramu pochází od Mathorna viz [6] a je dán vztahem

$$2\hat{\gamma}(\mathbf{h}) = \frac{1}{|N(\mathbf{h})|} \sum_{N(\mathbf{h})} (Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_j))^2,$$

kde $N(\mathbf{h}) = \{(\mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j) : \mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j = \mathbf{h};\ i, j = 1, 2, \dots n\}$ a $|N(\mathbf{h})|$ je počet prvků v množině $N(\mathbf{h})$. Protože uvedený odhad je velmi citlivý na odlehlá pozorování, navrhli Cressie a Hawkins v [2] dvě varianty robustního odhadu variogramu. První je tvaru

$$2\bar{\gamma}(\mathbf{h}) = \Big[\frac{1}{|N(\mathbf{h})|} \sum_{N(\mathbf{h})} |Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_j)|^{\frac{1}{2}}\Big]^4 \Big/ \Big(0.457 + \frac{0.494}{|N(\mathbf{h})|}\Big).$$

Druhá varianta je založena na mediánu a příslušný odhad má při asymptotické korekci vychýlení tvar

$$2\tilde{\gamma}(\mathbf{h}) = \Big[med\{|Z(\mathbf{s}_i) - Z(\mathbf{s}_j)|^{\frac{1}{2}} : (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \in N(\mathbf{h})\}\Big]^4 \Big/ 0.457.$$

Praktické i simulační zkušenosti ukazují, že tyto robustní varianty dávají podstatně kvalitnější odhady, než původní klasický odhad navržený Mathornem. Motivace. které vedly ke konstrukci těchto robustních odhadů nalezne čtenář v [1]. Na dosud uvedené odhady variogramu se dále budeme odvolávat jako na odhady empirické.

Z teoretických analýz vlastností variogramu viz např. [3] plyne, že variogram $2\gamma(\mathbf{h})$ je podmíněně negativně definitní funkcí a tedy musí splňovat nerovnost

$$\Sigma_{i=1}^m \Sigma_{j=1}^m a_i a_j 2\gamma(\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \le 0$$

pro každou konečnou množinu bodů $\{\mathbf{s}_i;\ i = 1, \dots, m\}$ oblasti D a pro libovolná reálná čísla $a_1, \dots, a_m$, která splňují nerovnost $\sum_{i=1}^m a_i = 0$. Tato vlastnost variogramu odpovídá známé vlastnosti kovariogramu, totiž tomu, že kovariogram musí být pozitivně semidefinitní funkcí. Proto je přirozené, že na odhad variogramu klademe požadavek, aby byl také podmíněně negativně definitní. Potom za předpokladu, že sledovaný proces je izotropický, je možné uvést základní typy modelových variogramů a jim odpovídajících semivariogramů $\gamma(\mathbf{h})$ (viz [1], [4]), které tomuto požadavku vyhovují a zároveň mají při praktických aplikacích nejčastější uplatnění.

Lineární model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + b\|\mathbf{h}\|, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0$ a $b \geq 0$ jsou parametry.

Sférický model pro $1 \leq d \leq 3$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + c_s\Big\{\frac{3}{2}\frac{\|\mathbf{h}\|}{a_s} - \frac{1}{2}\big(\frac{\|\mathbf{h}\|}{a_s}\big)^3\Big\}, & 0 < \|\mathbf{h}\| \leq a_s, \\ c_0 + c_s, & \|\mathbf{h}\| \geq a_s, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, c_s \geq 0$ a $a_s \geq 0$ jsou parametry.

Exponenciální model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + c_e\Big[1 - \exp\big\{-\frac{\|\mathbf{h}\|}{a_e}\big\}\Big], & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0,\ c_e \geq 0$ a $a_e \geq 0$ jsou parametry.

Racionální kvadratický model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + \frac{c_r\|\mathbf{h}\|^2}{1+\frac{\|\mathbf{h}\|^2}{a_r}}, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, c_r \geq 0$ a $a_r \geq 0$ jsou parametry.

Mocninný model pro $d \geq 1$:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{h} = \mathbf{0}, \\ c_0 + b_m\|\mathbf{h}\|^\lambda, & \mathbf{h} \neq \mathbf{0}, \end{cases}$$

kde $c_0 \geq 0, b_m \geq 0$ a $0 \leq \lambda < 2$ jsou parametry.

Příslušný odhad semivariogramu pak dostaneme proložením některého z vybraných modelů empirickým variogramem vhodnou statistickou procedurou. Často se pro odhad parametrů uvedených teoretických modelů používá nelineární metoda nejmenších čtverců. Jiný postup vychází z postupné volby parametrů modelu a vizuálním porovnáním empirického odhadu s proloženým teoretickým modelem. Oba tyto postupy jsou implementovány v softwareovém balíku S+SpatialStats (viz [5]).

Zajímavý přístup k modelování variogramu je popsán v článku [14]. Vychází se z faktu, že reálná funkce $g(\mathbf{h}), \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d$ je přípustný variogram, je-li spojitá v $\mathbb{R}^d$ s případnou vyjímkou počátku, nezáporná , symetrická (tj. $g(\mathbf{h}) = g(-\mathbf{h}), \mathbf{h} \in \mathbb{R}^d$) a podmíněně negativně definitní. Přičemž vhodnou podmíněně negativně definitní funkci g lze získat z vhodné pozitivně semidefinitní funkce $f(\mathbf{h})$ pomocí vztahu $g(\mathbf{h}) = -f(\mathbf{h})+c$, kde c je vhodná konstanta. Volbou f s výše uvedenými vlastnostmi pak dostaneme speciální typy variogramu.

Na příklad pro $d = 2$ je přípustný model semivariogramu $\gamma(\mathbf{h}),\ \mathbf{h} = (h_1, h_2) \in \mathbb{R}^2$ funkce $g(h_1, h_2) = c - f(h_1, h_2)$, kde

$$f(h_1, h_2) = \sum_{j_1=-m_1}^{m_1} \sum_{j_2=-m_2}^{m_2} a_{j_1 j_2} \cos(h_1 t_{j_1} + h_2 t_{j_2}),$$

přičemž m_1 a m_2 jsou daná přirozená čísla, $t_{j_1}, t_{j_2},\ a_{j_1 j_2}$, jsou pro $j_1 = -m_1, \ldots, m_1$ a pro $j_2 = -m_2, \ldots, m_2$ vhodné reálné konstanty vyhovující podmínce

$$c \ - \sum_{j_1=-m_1}^{m_1} \sum_{j_2=-m_2}^{m_2} a_{j_1 j_2} \geq 0.$$

Jejich doporučená optimální volba vychází ze simulací (viz [14]).

Položíme-li (viz [14])

$$g(h_1, h_2) = c - \sum_{j=1}^{m} J_0(t_j \sqrt{(h_1^2 + h_2^2)} a_j),$$

kde J_0 je Besselova funkce prvního druhu (viz [15]), dostaneme, za podmínky, že uvedené konstanty splňují nerovnost $c - \sum_{j=1}^{m} |a_j| \geq 0$ izotropický variogram.

Výhodou těchto modelů je, že umožňují modifikovat odhad variogramu na reálná data a že zahrnují také třídu modelů, které nevycházejí z předpokladů izotropie.

6. Odhady v modelu s dodatečnou informací

Odlišný přístup k metodě kriging, kde se předpokládá, že variogram není znám, ale je k dispozici dodatečná informace o neznámém vektoru parametrů β založili Omre and Halvorsen v [12,13] na bayesovské metodě odhadu. Předpokládají, že parametrický vektor β je náhodný a sdružené rozdělení vektorů β a $\mathbf{Z}$ je mnohorozměrné normální. Pak, za předpokladu, že apriorní rozdělení parametru β je známé, tedy za předpokladu normality vektoru β jsou apriori známé střední hodnota

$$\mathbf{E}(\beta) = \beta_{apriori}$$

a varianční matice

$$var(\beta) = \mathbf{\Sigma}_{apriori}.$$

Pak je snadné v případě, že Z je kovariančně stacionární odvodit (viz [13]) bayesovský odhad $Z(\mathbf{s}_0)$ ve tvaru

$$Z_B^*(\mathbf{s}_0) = \beta_B'\mathbf{x} + \mathbf{c}'\mathbf{C}^{-1}(\mathbf{Z} - \mathbf{X}\beta_B) = \mathbf{c}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{Z} + (\mathbf{x} - \mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{c})'\beta_B, \tag{8}$$

kde β_B je aposteriorní střední hodnota β a může být vyjádřena ve tvaru

$$\beta_B = (\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{X} + \mathbf{\Sigma}_{apriori}^{-1})^{-1}(\mathbf{X}'\mathbf{C}^{-1}\mathbf{Z} + \mathbf{\Sigma}_{apriori}^{-1}\beta_{apriori}) \tag{9}$$

nebo, zapsáno ekvivalentně

$$\beta_B = \mathbf{\Sigma}_{apriori}\mathbf{X}'(\mathbf{X}\mathbf{\Sigma}_{apriori}\mathbf{X}' + \mathbf{C})^{-1}(\mathbf{Z} - \mathbf{X}\beta_{apriori}) + \beta_{apriori} \tag{10}$$

Z (10) je zřejmé, že aposteriorní střední hodnota β_B je součtem apriorního "kvalifikovaného" odhadu $\beta_{apriori}$ a lineární transformace vektoru rozdílů pozorování a kvalifikovaného odhadu jejich střední hodnoty.

Dále ze srovnání klasického odhadu (7), který dává univerzální kriging metoda a bayesovského odhadu (8) je zřejmé, že tyto odhady mají stejnou strukturu. Když v odhadu Z^* procesu Z nahradíme odhad $\hat{\beta}_{GLS}$ aposteriorním odhadem β_B, který je dán vzorcem (9), pak univerzální kriging odhad přejde v bayesovský odhad Z_B^*.

Bayesovský odhad má další zajímavou vlastnost, kterou Omre a Halverson v [13] nazvali bayesovský můstek mezi prostou a univerzální metodou kriging. Jednoduše lze tuto vlastnost charakterizovat následovně. Při známém vektoru β je jeho varianční matice $\mathbf{\Sigma}_{apriori}$ nulová a bayesovský odhad přechází v odhad metodou prostého krigingu (simple kriging). Na druhé straně, když není známa žádná dodatečná informace o parametrech, pak lze předpokládat, že variabilita parametrů $\beta_0, \cdots, \beta_p$ je velká, což odpovídá tomu, že varianční matice $\mathbf{\Sigma}_{apriori}^{-1}$ je přibližně nulová a tedy β_B

je blízko $\hat{\beta}_{GLS}$ a bayesovský odhad přechází v odhad (7) získaný metodou univerzální kriging.

Celkově lze shrnout, že kvalita bayesovských odhadů procesu Z podstatně závisí na tom, jak dobrý je kvalifikovaný odhad $\beta_{apriori}$ a $\mathbf{\Sigma}_{apriori}$. Jejich nalezení může být v řadě praktických situací velkým problémem. Ovšem na druhé straně jsou popsány experimentální situace, kdy je možné tyto kvalifikované odhady spolehlivě stanovit (viz [12, 13]) a získat pomocí bayesovských metod kvalitní odhady, vhodné pro praktické použití.

Jiný způsob, jak se vyrovnat s problémem začlení dodatečné informace o parametrech modelu přímo do modelu, může být založena na minimaxové metodě odhadu a bude jí věnován následující odstavec.

7. Minimaxový odhad

V tomto odstavci budeme předpokládat, že chybový proces δ je druhého řádu stacionární a zavedeme minimaxový estimátor pro $Z(\mathbf{s}_0),\ \mathbf{s}_0 \in D$. Z (5) plyne, že ze předpokladu nevychýlenosti odhadu predikce, tedy když $\lambda \in \mathcal{U}$, je MSE odhad $Z(\mathbf{s}_0)$ dán vztahem

$$\mathbf{E}(Z^*(\mathbf{s}_0) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \lambda'\mathbf{C}\lambda - 2\mathbf{c}'\lambda + C(0) = (1,\lambda')\mathbf{C}_m(1,\lambda')'$$

kde $\mathbf{C}_m$ je bloková matice $\mathbf{C}_m = \begin{pmatrix} C(0) & -\mathbf{c}' \\ -\mathbf{c} & \mathbf{C} \end{pmatrix}$

Zřejmě matice $\mathbf{C}_m$ je kovarianční maticí vektoru $(-\delta(\mathbf{s}_0), \delta(\mathbf{s}_1), \cdots, \delta(\mathbf{s}_n))'$ a tedy je to matice positivně semidefinitní.

Pro získání minimaxového estimátoru pro $Z(\mathbf{s}_0)$ pak lze užít princip minimaxu podobným způsobem jako byl užit pro odhad regreních parametrů v [10,11].

Předpokládejme nejdříve, že je k dispozici dodatečná informace o kovariogramu C, speciálně, že je známo, že matice $\mathbf{C}_m$ leží v nějakém okolí positivně definitní matice $\mathbf{\Sigma}_m$ typu $(n+1)\times(n+1)$. Zapsáno formálně, když $\mathbf{\Sigma}_m$ je nějaká positivně definitní matice typu $(n+1)\times(n+1)$ a $q > 0$ dané reálné číslo, pak předpokládáme, že $Tr(\mathbf{\Sigma}_m - \mathbf{C}_m)^2 < q^2$, kde $Tr(\mathbf{W})$ značí stopu čtvercové matice $\mathbf{W}$ a $q > 0$ je dané reálné číslo. Dále nechť $\mathcal{R} = \{\mathbf{W} : Tr(\mathbf{W} - \mathbf{\Sigma}_m)^2 \le q^2\}$ je uvažované okolí matice $\mathbf{\Sigma}_m$, do něhož matice $\mathbf{C}_m$ patří. Pak užitím principu minimaxu dostaneme odhad váhového vektoru λ minimalizací funkcionálu

$$J(\lambda) = \sup_{\beta\in\mathbb{R}^{p+1}, \mathbf{C}_m\in\mathcal{R}} \mathbf{E}(Z^*(\mathbf{s}_0) - Z(\mathbf{s}_0))^2 = \sup_{\beta\in\mathbb{R}^{p+1}, \mathbf{C}_m\in\mathcal{R}} (1,\lambda')\mathbf{C}_m(1,\lambda')'$$

pro $\lambda \in \mathcal{U}$.

Z [10] lemma 5.2. plyne, že funkcional $J(\lambda)$ může být vyjádřen ve tvaru

$$J(\lambda) = (1,\lambda')(\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I})(1,\lambda')'$$

a tedy vektor λ^*, který vyhovuje vztahu

$$J(\lambda^*) = \inf_{\lambda\in\mathcal{U}} J(\lambda) \tag{11}$$

je minimaxovým odhadem váhového vektoru λ. Zavedeme-li označení $\lambda_m = (1,\lambda')'$, $\mathbf{0}_k = (0,\cdots,0)' \in \mathbb{R}^k$, $\mathbf{x}_m = (1,\mathbf{x}')'$ a $\mathbf{X}_m = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0}'_{p+1} \\ \mathbf{0}_n & \mathbf{X} \end{pmatrix}$, pak $\lambda \in \mathcal{U}$ právě když $\lambda_m \in \mathcal{U}_m = \{\lambda_m = (\lambda_0,\lambda')' : \mathbf{x}_m = \mathbf{X}'_m\lambda_m\}$ a je zřejmé, že minimimalizace (11) vede k nalezení λ^*_m vyhovujícího vztahu

$$J(\lambda^*_m) = \inf_{\lambda_m\in\mathcal{U}_m} \lambda'_m(\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I})\lambda_m. \tag{12}$$

Nyní snadno nahlédneme (viz [9]), že váhový vektor

$$\lambda_m^* = (1, \lambda^*)' = (\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I}\ )^{-1}\mathbf{X}_m(\mathbf{X}_m'(\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}_m)^{-}\mathbf{x}_m, \tag{13}$$

kde matice $(\mathbf{X}_m'(\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}_m)^{-}$ značí libovolnou zobecněnou inverzi matice $(\mathbf{X}_m'(\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}_m)$, je hledaný vektor λ_m^*. Jeho subvektor λ^* je pak hledaný váhový vektor, který určuje minimaxový kriging prediktor veličiny $Z(\mathbf{s}_0)$. Konečně z [9] plyne, že minimaxový "kriging" rozptyl estimátoru $Z^*(\mathbf{s}\ _0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^* Z_i$ je dán vztahem

$$J(\lambda_m^*) = \mathbf{x}_m'(\mathbf{X}_m'(\mathbf{\Sigma}_m + q^2\mathbf{I})^{-1}\mathbf{X}_m)^{-}\mathbf{x}_m.$$

Literatura

[1] Cressie, N.A.C., Statistics for spatial data. John-Wiley & Sons, Inc., New York, 1993
[2] Cressie, N. A.C. and Hawkins, D.M. Robust estimation of the variogram, Journal of the International Assciation for Mathematical Geology, 12, 1980, p.115-125.
[3] Johansen, S. An application of extreme point methods to the representation of infinitely divisible distributions. Zeitschfrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und verwandte Gebiete, 5, 1966, p. 304-316.
[4] Journel, A.G. and Huijbregts, C.J. Mining Geostatistics. Academia Press, London. 1978.
[5] Kaluzny, S.P. Vega, S.C. Cardoso, T.P. and Shelly, A.A.: S+Spatials, User's manual for WINDOWS and UNIX, Versions 1.0 , MathSoft, Inc. Seattle, Washington. 1996.
[6] Matheron, G. Traite de Geostatistique Appliquee, Tome I. Memoires du Bureau de Recherches Geologiques at Minieres, No. 14. Editions Technip, Paris. 1962.
[7] Matheron, G. Principles of geostatistics. Economic Geology, 58,1246-1266, 1963.
[8] Matheron, G. The Theory of Regionalized variables and Its applications. Cahiers du Centre de Morphologie Mathematique, No. 5. Fontainebleau, France. 1971.
[9] Michálek, J. Minimax approach to kriging. Folia - Mathematica. (Přijato do tisku)
[10] Michálek, J. and Nakonechny, O. Minimax estimates of linear parameter function in regression model under restrictions on parameters and variance-covariance matrix. J. Comput. Appl. Math. No. 81, 1987, pp.79-92.
[11] Michálek, J. and Nakonechny, O. Minimax estimates in regression model with restrictions on parameters and with variance matrix belonging to a special class of variance matrices. Folia - Mathematica 7, 1998, p. 95-104.
[12] Omre, H. Bayesian Kriging - Merging Observations and Qualified Guesses in Kriging. Mathematical Geology, Vol. 19, No. 1 1987, pp. 25-39.
[13] Omre, H. and Halvorsen, K. B.: The Bayesian Bridge between Simple and Universal Kriging. Mathematical Geology, Vol.21, No.7, 1989, pp.767-786.
[14] Rehman, S.U. and Shapiro, A.: An Integral transform approach to cross-variograms modeling. Computional Statistics & Data Analysis 22 1996 p. 213-233.
[15] Shapiro,A. and Botha, J.D.: Variogram fitting with a general class of conditionally positive definite functions. Computional Statistics & Data Analysis. 11 1991 p.87-96.

MU PřF, KAM, Janáčkovo 2a, 662 95 Brno
E-mail: michalek@math.muni.cz