農業工程學報　第 46 卷第 2 期
中華民國 89 年 6 月出版

Journal of Chinese Agricultural Engineering
Vol. 46, No. 2, June 2000

補克利金及無偏束制

Cokriging and Unbiasedness Constraints

國立臺灣大學農業工程學系博士班研究生

張 國 良

Kuo-Liang Chang

摘　　要

一組資料中，往往不只含有所需要的主變量，同時也含有第二種資訊，並可用來改善推估精度。然而，傳統的 cokriging 無偏束制(unbiasedness constraint)強制使第二種資訊的權重總和爲零，這樣的做法使第二種資訊的貢獻很小。本文提出一新的無偏束制，使得多變量 cokriging 的公式和單變量的 kriging 公式完全相同。同時，本文是第一個列出 rescaled cokriging 及 correlogram cokriging 關係式的文獻。若 simple cokriging 中的 mean 以 local mean 取代，本文亦成功的證明 simple cokriging 和 ordinary cokriging 之間的等價性質並非必然存在。

關鍵詞：多變量，規畫，矩陣式。

ABSTRACT

A data set may contain not only the primary variable of interest, but also some available secondary information that could improve the precision of estimation. However, the traditional unbiasedness constraints require that all secondary data weights add up to zero. This method reduces the influence of the secondary information. This paper presents a new unbiasedness constraint. The formulas of multi-variate cokriging are identical with those of single-variate ordinary kriging based on the new unbiasedness constraint. In the meantime, this paper is the first one that arrives at the relations between rescaled cokriging and correlogram cokriging. If the stationary mean of simple cokriging is replaced by local mean, it can be shown that the equivalence relation between simple cokriging and ordinary cokriging will not necessarily hold.

Keywords: Multi-variate, Programming, Matrix form.

一、前　言

利用第二種資訊以 cokriging 進行推估一向是很重要的問題。可利用的方法有很多種，其中最常用的爲 simple cokriging (SCK)，ordinary cokriging (OCK) (Goovaerts, 1998)。

Wackernagel (1998) 及 Journel and Rossi (1989)曾證明在單變量時，ordinary kriging 及 kriging with a trend model 僅是 simple kriging 中的 stationary mean 以 local mean 取代(SKM)。Goovaerts (1998) 則進一步推導出在多變量 (multi-variate)時，上述的關係亦存在。這個結論是錯誤的，關係式成立與否和無偏束制有很大的關係。

Goovaerts(1998)曾詳細討論了各種型式的 cokriging 以加入第二種資訊。並以不同 unbiasedness constraints 的應用，變化出多種 cokriging 的變型。然而，Goovaerts (1998)在文中推導 correlogram cokriging 時，觀念上犯了一個很大的錯誤，使其無法導出正確的式子。

同時，Goovaerts (1998)實驗的理論是基於驗證 2-constraints 及 1-constraint 對負權重的影響，本文亦提出解釋何以此實驗沒有意義。

以下幾項強調出本文的主要貢獻

1. 本文是第一篇導出 correlogram cokriging 方程式的文獻。
2. 導出 SKM 和 ordinary cokriging 相等的充分必要條件。
3. 提出一種無偏束制，和傳統的無偏束制不同，使得所有 cokriging 的公式等於 kriging 的公式。

在本節之後，本文的安排爲：下一節討論 best linear estimator，以便導出推估法的一般式，第三節列出新的單一無偏束制。第四節討論 SKM 並得到它和 OCK 相等的充要條件。第五節提出 rescaled cokriging 及 correlogram cokriging 的關係式。最後，則對負權重的問題提出說明及各項結論。

二、Best linear estimator

本節在推導推估誤差方差(estimation error variance)與 estimator 之間的數學式。

本文全篇所用的區域化變數(regionalized variable)爲 U，V。若不特別說明皆設 U 爲主變量，或者以下標"(・)"標示。同一種數學變數以不同推估方法計算者則直接將方法的字首縮寫加在變數名稱之後。以小寫 u，v 下標則表示相對於 U 或 V。

在不失一般性的情形下，本文的推導過程皆假設僅有二種資訊可應用。然而，公式的結果皆可適用於有多種資訊的情況。

假設在一採樣區中，$\mathbf{U}$ 爲主要變量 U 的採樣值所組成的 N_u-向量，$\mathbf{V}$ 爲輔助變量 V 的採樣值所組成的 N_v-向量。設 Z 爲 U 在某一欲推估點的 estimator，則(Cressie，1991，p. 109)

$$
\begin{aligned}
Z &= \begin{bmatrix} \mathbf{W}_u^T & \mathbf{W}_v^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{V} \end{bmatrix} + k \\
&= \mathbf{W}^T \mathbf{Z} + k
\end{aligned}
$$

其中 $\mathbf{W}_u, \mathbf{W}_v$ 爲權重。若設 $N = N_u + N_v$，則 $\mathbf{W}$ 爲所有權重所組成的 N-向量。$\mathbf{Z}$ 爲採樣值的 N-向量。k 爲一定量。而且

$$
\begin{aligned}
E\{\mathbf{Z}\} = \mathbf{M} = E\left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{U} \\ \mathbf{V} \end{bmatrix} \right\} &= \begin{bmatrix} \mathbf{1}_u m_u \\ \mathbf{1}_v m_v \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \mathbf{1}_u & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_v \end{bmatrix} \begin{bmatrix} m_u \\ m_v \end{bmatrix} = \mathbf{Am}
\end{aligned}
$$

其中 $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{1}_u & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_v \end{bmatrix}; \mathbf{m} = \begin{bmatrix} m_u & m_v \end{bmatrix}^T$ 爲 U，V 的期望值所成的 2-向量。$\mathbf{1}_u, \mathbf{1}_v$ 的所有元素皆爲 1，維度分別等於 $\mathbf{U}$，$\mathbf{V}$ 的維度

設 $\mathbf{U}_0$ 爲欲推估點的眞值，則考慮推估誤差方差，並詳加推導可得到：

$$
\begin{aligned}
& E\left\{ \left(\mathbf{W}_u^T \mathbf{U} + \mathbf{W}_v^T \mathbf{V} + k - U_0 \right)^2 \right\} \\
&= \sigma_u^2 + \mathbf{W}^T \mathbf{C} \mathbf{W} - 2\mathbf{W}^T \mathbf{b} + \left[k - \left(m_u - \mathbf{W}^T \mathbf{Am} \right) \right]^2
\end{aligned} \quad \text{....(1)}
$$

其中$\tilde{\sigma}_u^2$爲 U 的 stationary variance，**b** 爲欲推估點和採樣點之間的 covariances 所組成的向量；**C** 爲各個採樣點之間的 covariances 所形成的矩陣。

無論是 simple (co) kriging 或 ordinary (co) kriging，estimator 被設計爲讓(1)中的

$$k-\left(m_u-\mathbf{W}^T\mathbf{Am}\right)=0$$

也就是說 simple (co)kriging 的 estimator 使得

$$k=m_u-\mathbf{W}^T\mathbf{Am} \quad \text{......................(2)}$$

ordinary (co)kriging 的 estimator 使得

$$k=m_u-\mathbf{W}^T\mathbf{Am}=0 \quad \text{..................(3)}$$

注意到，k 爲 0 使得 estimator 爲採樣值的線性組合。而(3)中間的項則爲無偏條件(unbiasedness condition)。

三、尺度變換的單一無偏束制

傳統的 2-constraints 也就是由(3)導得：

$$\mathbf{A}^T\mathbf{W}=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$$

然而，2-constraints 的缺點有兩個：

1. 若兩個變量的方差差距過大，則 **C** 可能在考慮數値精度的捨去下產生錯誤。
2. 強制使第二種變量的權重總和爲零，導致第二種資訊對推估値的貢獻過小。

爲改善第一個缺點，Goovaerts (1998)採用 correlogram 變換。爲改善第二個缺點，他們使第二種資訊的 mean 平移至和主變量相同，製造出單一無偏束制。以下將討論另一種單一無偏束制，稱之爲尺度變換束制(R1-constraint)可同時改善上述的兩個缺點，同時使得推估公式簡潔。

令$V'=V\dfrac{m_u}{m_v}$。則可以使得$E\{V'\}=m_u$。

Ordinary cokriging (OCK)的誤差方差的公式(Wackernagel, 1998)爲合併(1)(3)，以矩陣型式可表爲

$$\sigma_R^2=\tilde{\sigma}_u^2+\mathbf{W}^T\mathbf{C}'\mathbf{W}-2\mathbf{W}^T\mathbf{b}'$$

其中$\mathbf{C}'$，$\mathbf{b}'$爲以 U，V'計算者。

尺度變換(co)kriging 可表爲

$$\begin{aligned}&\underset{\mathbf{W}}{\text{minimize}} \quad \sigma_R^2=\tilde{\sigma}_u^2+\mathbf{W}^T\mathbf{C}'\mathbf{W}-2\mathbf{W}^T\mathbf{b}'\\&\text{subject to} \quad \mathbf{1}^T\mathbf{W}=1\end{aligned} \quad \text{.(4)}$$

(4)型式和單變數的 ordinary kriging 完全相同。注意當只有單變量時，(4)自然退縮爲適用單變量。事實上，(4)在數學上的意義等於將第二種變量在尺度變換之後視爲第一種變量的資料。雖然在觀念上是不可以這麼做，然而公式所顯示的意義的確如此。可見 cokriging 的理論仍有不周延之處。

四、具有 local mean 的 simple cokriging

要導得各個 estimator 之間的關係，首先需考慮下列一般性的 ordinary cokriging 問題：

$$\begin{aligned}&\underset{\mathbf{W}}{\text{minimize}} \quad \sigma_R^2=\tilde{\sigma}_u^2+\mathbf{W}^T\mathbf{C}\mathbf{W}-2\mathbf{W}^T\mathbf{b}\\&\text{subject to} \quad \mathbf{E}^T\mathbf{W}=\mathbf{D}\end{aligned} \quad \text{..........(5)}$$

列出 Karush-Kuhn-Tucker conditions (Chang and Żak，1996)，加以整理可得到

$$\begin{bmatrix}\mathbf{W}\\\mathbf{L}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{C}^{-1}&\mathbf{E}\\\mathbf{E}^T&\mathbf{0}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\mathbf{b}\\\mathbf{D}\end{bmatrix} \quad \text{................(6)}$$

其中，**L** 爲 Lagrange multiplier vector。

(6)中反矩陣的計算可利用 Grabill (1983)。

Simple cokriging (SCK)爲

$$\underset{\mathbf{W}}{\text{minimize}} \quad \sigma_R^2=\tilde{\sigma}_u^2+\mathbf{W}^T\mathbf{C}\mathbf{W}-2\mathbf{W}^T\mathbf{b} \quad \text{...........(7)}$$

將(2)中的 stationary mean 以 local mean 取代，則此時 SCK 的 estimator 爲：

$$
\begin{aligned}
Zskm &= \tilde{m}_u + \mathbf{W}sck^T\left(\mathbf{Z}-\tilde{\mathbf{M}}\right)\\
&= \tilde{m}_u + \mathbf{W}sck^T\left(\mathbf{Z}-\begin{bmatrix}\mathbf{1}_u & \mathbf{0}\\ \mathbf{0} & \mathbf{1}_v\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\tilde{m}_u\\ \tilde{m}_v\end{bmatrix}\right)\\
&= \tilde{m}_u + \mathbf{W}sck^T\left(\mathbf{Z}-\mathbf{A}\tilde{\mathbf{m}}\right)
\end{aligned}
$$

其中 $\tilde{m}_u$ $\tilde{m}_v$ 分別是 **U** ， **V** 的 local mean (Goovaerts, 1998)。

注意到，因 SKM 和 SCK 都是藉由(7)求得，所以

$$\mathbf{W}skm = \mathbf{W}sck \text{ 。}$$

若 local mean 以 OCK 推估 (Goovaerts，1998)則 estimator 爲：

$$\tilde{m}_u = \mathbf{W}km^T\mathbf{Z}$$

推估問題爲

$$
\begin{aligned}
&\underset{\mathbf{W}}{\text{minimize}} \quad \sigma_R^2 = \mathbf{W}^T\mathbf{C}\mathbf{W}\\
&\text{subject to} \quad \mathbf{E}^T\mathbf{W} = \mathbf{D}
\end{aligned}
$$

其解爲(6)中，令 **b**=0。

要證明 $Zskm = Zock$ 有兩種方法，其中之一是利用(6)對 SKM，OCK，SK，local mean 分別計算權重及推估值。經過極爲繁複的矩陣運算之後可得證。在此，採用另一個比較優雅的證法：

當 SCK 具有 local mean 時，

$$
\begin{aligned}
&Zskm = \tilde{m}_u + \mathbf{W}sck^T\left(\mathbf{Z}-\tilde{\mathbf{M}}\right)\\
&= \mathbf{W}km_{(u)}^T\mathbf{Z} + \mathbf{W}sck^T\mathbf{Z} - \mathbf{W}sck^T\mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{W}km_{(u)}^T\mathbf{Z}\\ \mathbf{W}km_{(v)}^T\mathbf{Z}\end{bmatrix}\\
&= \left(\mathbf{W}km_{(u)}^T + \mathbf{W}sck^T - \mathbf{W}sck^T\mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{W}km_{(u)}^T\\ \mathbf{W}km_{(v)}^T\end{bmatrix}\right)\mathbf{Z}\\
&= \mathbf{W}'^T\mathbf{Z}
\end{aligned}
$$

若能證明 $\mathbf{W}'$ 符合(5)中的無偏束制，則 $\mathbf{W}'$ 即爲(5)的解。自然 $Zskm = Zock$ 。

倘若 $\mathbf{W}'$ 要符合(5)中的無偏束制，則必須：

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{W}'^T\mathbf{E}\\
&= \mathbf{W}km_{(u)}^T\mathbf{E} + \mathbf{W}sck^T\mathbf{E} - \mathbf{W}sck^T\mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{W}km_{(u)}^T\\ \mathbf{W}km_{(v)}^T\end{bmatrix}\mathbf{E}\\
&= \mathbf{D}^T + \mathbf{W}sck^T\mathbf{E} - \mathbf{W}sck^T\mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{D}_{(u)}^T\\ \mathbf{D}_{(v)}^T\end{bmatrix} = \mathbf{D}^T
\end{aligned}
$$

觀察上式可成立：

定理 1　$\mathbf{W}' = \mathbf{W}ock$ 的充分必要條件爲

$$\mathbf{E} = \mathbf{A}\begin{bmatrix}\mathbf{D}_{(u)}^T\\ \mathbf{D}_{(v)}^T\end{bmatrix} \quad \text{.........................(8)}$$

可見 $Zskm = Zock$ 並不是必然成立。Goovaerts 認爲"Similar relations exist in the multivariate situation and are developed here."。他並沒有認識到定理 1的存在，SKM 和 OCK 之所以相等，只是因爲他所用的傳統 2-constriants 恰巧符合(8)。

只要能舉一反例就可以證明(8)不是必然存在。例如：令 2-constraints 爲各個變量對推估值各貢獻一半。令：

$$\mathbf{E}^T\mathbf{W} = \mathbf{A}^T\mathbf{W} = \begin{bmatrix}\frac{1}{2}\\ \frac{m_u}{m_v}\frac{1}{2}\end{bmatrix} \quad \text{...............(9)}$$

則

$$\mathbf{A}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{m_u}{m_v}\frac{1}{2}\\ \frac{m_v}{m_u}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix} \neq \mathbf{E} = \mathbf{A}$$

在(9)的無偏束制下，SKM 就不等於 OCK。

此外，要符合(8)有很多方式，並不一定是傳統 2-constraints。例如：直接以(3)做無偏束制。令 **E=A**，且當 U 爲主變量時

$$\mathbf{E}^T\mathbf{W} = \mathbf{M}^T\mathbf{W} = m_u = \mathbf{D}_{(u)}$$

當 V 爲主變量時，

$$\mathbf{E}^T\mathbf{W}=\mathbf{M}^T\mathbf{W}=m_v=\mathbf{D}_{(v)}$$

則(8)滿足，意即此時 SKM 的 estimate 也會等於 OCK 的 estimate。

五、各種 cokriging 變型

本節僅列出 Goovaerts 文中的錯誤及其相關部份。其他型式的 cokriging 可詳見 Goovaerts (1998)，Cressie (1991)，Wackernagel (1998)。

(一) 將機率曲線平移之後的 Ordinary cokriging (RCK)

令

$$\mathbf{V}'=\mathbf{V}-\mathbf{1}_v m_v+\mathbf{1}_v m_u$$

則 estimator 爲

$$Zrck=\mathbf{W}rck^T\begin{bmatrix}\mathbf{U}\\ \mathbf{V}'\end{bmatrix}=\mathbf{W}rck^T\mathbf{Z}' \quad ....(10)$$

1-constraint 爲

$$\mathbf{1}^T\mathbf{W}rck=1$$

(二) 以 Correlogram 表示的 1-constraint cokriging

這個方法的 estimator (Goovaerts，1998)爲

$$\frac{Zrck'-m_u}{\sigma_u}=\mathbf{W}rck_u'^{\mathbf{T}}\left(\frac{\mathbf{U}-m_u}{\sigma_u}\right)+\mathbf{W}rck_v'^{\mathbf{T}}\left(\frac{\mathbf{V}-m_v}{\sigma_v}\right) \quad ....(G17)$$

其中 $\mathbf{W}rck'$ 爲權重

且 1-constraint (Goovaerts，1998，(18)式)爲

$$\mathbf{1}^T\mathbf{W}rck'=1 \quad ....(G18)$$

加入這個 1-constraint 似乎沒有特別的目的。

Goovaerts 認爲 $Zrck'\neq Zrck$，他的理由是 "Unlike simple or ordinary cokriging, the weights provided by rescaled ordinary cokriging... are not linearly related, and so the estimators...are different!"。

這是正確的，因爲以他文中的公式來看，這兩者的確不同，但是(G17)聯合(G18)究竟是什麼呢?觀察(G17)，可知不需要任何無偏束制，無偏條件(unbiasedness condition)必定滿足。Goovaerts 加上(G18)只是爲了滿足"1-constraint"。結果(G17)聯合(G18)就變成一個新的 estimator。Goovaerts 文中 Figure 5 即爲以此新的 estimator 和 OCK (2-constraints)來做比較。他的 Figure 5 是正確的，然而，似乎並沒有額外的理由支持他做這種比較。

其實，要使得 $Zrck'\neq Zrck$ 是可能的。

(G17)經整理後爲

$$\begin{aligned}Zrck'&=\mathbf{W}rck_u'^{\mathbf{T}}\mathbf{U}+\frac{\sigma_u}{\sigma_v}\mathbf{W}rck_v'^{\mathbf{T}}\left(\mathbf{V}-\mathbf{1}_v m_v+\mathbf{1}_u m_u\right) \quad .(11)\\ &+\left(m_u-\mathbf{W}rck_u'^{\mathbf{T}}\mathbf{1}_u m_u+\frac{\sigma_u}{\sigma_v}\mathbf{W}rck_v'^{\mathbf{T}}\mathbf{1}_v m_u\right)\end{aligned}$$

由(11)知無偏束制爲

$$\mathbf{W}rck_u'^{\mathbf{T}}\mathbf{1}_u+\frac{\sigma_u}{\sigma_v}\mathbf{W}rck_v'^{\mathbf{T}}\mathbf{1}_v=\mathbf{E}^T\mathbf{W}rck'=1 \quad .....(12)$$

其中 $\mathbf{E}^T=\begin{bmatrix}\mathbf{1}_u^T & \frac{\sigma_u}{\sigma_v}\mathbf{1}_v^T\end{bmatrix}$

若令

$$\mathbf{W}rck_u=\mathbf{W}rck'_u$$

$$\mathbf{W}rck_v=\frac{\sigma_u}{\sigma_v}\mathbf{W}rck'_v$$

則應該可以成立 $Zrck=Zrck'$ 爲了驗證這個論點。考慮(G17)聯合(12)形成：

$$\begin{aligned}\underset{\mathbf{W}rck'}{\text{minimize}}\quad & \sigma_R^2=1+\mathbf{W}rck'^T\mathbf{C}'\mathbf{W}rck'\\ & \quad -2\mathbf{W}rck'^T\mathbf{b}' \qquad ..(13)\\ \text{subject to}\quad & \mathbf{E}^T\mathbf{W}rck'=1\end{aligned}$$

其中 $\mathbf{C}',\mathbf{b}'$ 爲用 $\frac{\mathbf{U}-m_u}{\sigma_u},\frac{\mathbf{V}-m_v}{\sigma_v}$ 兩新的變量計算者。

考慮 RCK 問題

$$\underset{\mathbf{W}rck}{\text{minimize}} \quad \sigma_R^2 = \tilde{\sigma}_u^2 + \mathbf{W}rck^T\mathbf{C}\mathbf{W}rck - 2\mathbf{W}rck^T\mathbf{b} \qquad (14)$$

$$\text{subject to} \quad \mathbf{1}^T\,\mathbf{W}rck = 1$$

令

$$\mathbf{W}rck = \begin{bmatrix} \mathbf{W}rck'_u \\ \dfrac{\sigma_u}{\sigma_v}\mathbf{W}rck'_v \end{bmatrix} \qquad (15)$$

以(15)的關係可以很容易驗證(13)(14)是等價的。因此，(15)成立。

Goovaerts(1998)似乎是沒有注意到不同組的變量間的關係，以致於認爲 RCK 和 RCK'的 estimate 不會相同。其 Figure 5 若以(10)(11)做比較將合理的多。

六、負權重需要關心嗎?

Goovaerts (1998)認爲之所以要提出 1-constraint 是爲了減小第二種資訊的負權重。爲了驗證這一點，Goovaerts (1998)設計了一連串的實驗，並計算出 1-constraint 的確能有效的減小負權重。然而我們必須先探討出爲什麼會有負權重? 答案很簡單：「因爲本來就沒有對權重設限」。因此，不只第二種資訊會出現負權重，主變量也會出現負權重。爲了本來就沒有設限的數學問題，而在計算結果中覺得奇怪是沒有意義的。唯一合理的方法是在問題中一開始就對權重設限。但是，負權重需要關心嗎?

Goovaerts(1998)提出他關心負權重的理由爲："some of the secondary data weights are negative, thereby increasing the risk of getting unacceptable estimates such as negative concentrations,..."。所以重點是爲了防止有負的推估値出現。其實，防止負推估値的解決方法已有 Barnes and You (1992)完整的解決了。

七、結　論

無偏束制中的 1-constraint 及 2-constraint 的確使推估結果有很大的差異。然而，重點並非 Goovaerts 文中所討論者。

本文所提出的 R1-constraint 可以同時解決 2-constraint 引發的問題。

束制條件的選擇不但關係公式的呈現方式，同時，在某些已定型的觀念中亦扮演重要的角色：本文成功的導出任意無偏束制下，SKM 和 OCK 相等的充分必要條件。

經過變數變換，correlogram cokriging 和 rescaled cokriging 之間的對應關係式亦可得到。

八、參考文獻

Barnes, R. J. and You, K., 1992, Adding bounds to kriging, Math. Geology, v. 24, no. 2, p. 171-176.

Chong, E. K. P. and Ż ak, S. H., 1996, An introduction to optimization: John Wiley & Sons, New York, 409 p.

Cressie, Noel A. C., 1991, Statistics for spatial data: John Wiley & Sons, New York, 900 p.

Goovaerts, P., 1998, Ordinary cokriging revisited, Math. Geology, v. 30, no. 1, p. 21-42.

Grabill, F. A., 1983, Matrices with applications in statistics: Wadsworth, Belmont-California, 461 p.

Journel, A. G., and Rossi, M. E., 1989, When do we need a trend model in kriging?, Math. Geology, v. 21, no. 7, p. 715-739.

Wackernagel, Hans, 1998, Multivariate geostatistics: 2nd ed., Springer, Berlin, 291 p.

收稿日期：民國 88 **年** 12 **月** 20 **日**
接受日期：民國 89 **年** 3 **月** 8 **日**