تابع کوواریانس تعمیم یافته برای کریگیدن عام

محسن محمد زاده [1]

چکیده

روش کریگیدن که برای برآورد داده‌های مکانی بکار برده می‌شود، وابسته به تابع کوواریانس می‌باشد. معمولاً این تابع که تعیین کننده ساختار همبستگی مشاهدات مکانی است، نامعلوم و برآورد آن امری ضروری می‌باشد. اغلب در کریگیدن عادی که میانگین مشاهدات ثابت فرض می‌شود تابعی به کوواریانس تجربی داده‌ها برازش داده می‌شود. همین روش نیز برای کریگیدن عام، با استفاده از داده‌هایی که روند آنها حذف گردیده، بکار برده می‌شود. اما بدلیل آنکه توابع کوواریانس داده‌های روند زدوده و داده‌های اصلی متفاوت هستند این روش مشکل‌آفرین می‌باشد. در این مقاله نشان داده می‌شود داده‌های روندزدوده و داده‌های اصلی دارای توابع کوواریانس تعمیم یافته یکسانی هستند و می‌توان آنرا بر اساس کوواریانس تجربی داده‌های روند زدوده برآورد نمود. چون کریگیدن حاصل از توابع کوواریانس معمولی و تعمیم یافته معادل یکدیگرند برآورد کوواریانس تعمیم یافته را می‌توان برای محاسبه کریگیدن بکار برد.

کلمات کلیدی : داده‌های فضایی، کریگیدن عام و کوواریانس تعمیم‌یافته.

۱ مقدمه

داده‌های فضایی [2] را می‌توان مقادیر یک میدان تصادفی $Z(t): t \in D \subseteq R^d$ در نظر گرفت که در آن t یک موقعیت در مجموعه اندیس گذار D، زیر مجموعه‌ای از فضای اقلیدسی R^d، $d \geq ۱$ است و به ازاء هر t، $Z(t)$ یک متغیر تصادفی با میانگین و واریانس

$$\mu(t) = E[Z(t)] \qquad (۱)$$

$$Var(Z(t)) = E[(Z(t)-\mu(t))^۲] \qquad (۲)$$

است. همچنین برای دو موقعیت $t_۱$ و $t_۲$ در D تابع کوواریانس $Z(t_۱)$ و $Z(t_۱)$ که بصورت:

$$\sigma(t_۱, t_۲) = Cov(Z(t_۱), Z(t_۲)) \qquad (۳)$$

[1] محسن محمد زاده، گروه آمار، دانشگاه تربیت مدرس

[2] Spatial Data

تعریف می‌شود، نشان دهنده ساختار همبستگی داده‌های فضایی می‌باشد.

به ازاء هر t، میدان تصادفی $Z(t)$ را می‌توان بصورت

$$Z(t) = \mu(t) + \sigma(t) \qquad (۴)$$

تجزیه نمود که در آن $\sigma(t)$ یک میدان تصادفی با میانگین صفر است و $\mu(t)$ را قسمت قطعی[۳] و یا روند[۴] و $\sigma(t)$ را قسمت تصادفی مدل (۴) می‌نامند. چنانچه میانگین و تابع کوواریانس میدان تصادفی بصورت:

$$\mu(t) = \mu \quad \text{و} \quad \sigma(t_1, t_2) = \sigma(t_1 - t_2)$$

باشند،یعنی میانگین مقداری ثابت و کوواریانس تابعی از فاصلهٔ دو موقعیت t_1 و t_2 باشند،آنرا میدان تصادفی مانای مرتبهٔ دوم[۵] می‌نامند.

فرض کنید مشاهدات $Z = (Z(t_1), \ldots, Z(t_n))^T$ از میدان تصادفی $Z(.)$ در n موقعیت فضایی $t = (t_1, \ldots, t_n)$ در اختیار باشد. یکی از متداولترین روشهای برآورد فضایی برای مقدار میدان تصادفی در یک موقعیت مشخص t_0، بهترین برآوردگر خطی نااریب (BLUP) بر اساس مشاهدات است که پس از کریگ (۱۹۵۱) مهندس معدن آفریقای جنوبی، توسط ماترون (۱۹۶۳) کریگیدن[۶] نامیده شده است.

کریگیدن شامل دو نوع متداول کریگیدن عادی[۷] و کریگیدن عام[۸] است که ماترون (۱۹۶۹ و ۱۹۷۳) و کرسی (۱۹۹۳) آنها را مورد بررسی مفصل قرار داده‌اند. در روش کریگیدن عادی، فرض می‌شود میدان تصادفی مانای مرتبهٔ دوم با میانگین ثابت است. اما در روش کریگیدن عام که تعمیم کریگیدن عادی است، فرض می‌شود میانگین میدان تصادفی ترکیب خطی توابعی از قبل تعیین شده است.

در هر دو روش کریگیدن، با استفاده از تابع کوواریانس $\sigma(h)$ و مشاهدات Z، مقدار $Z(t_0)$ که جزئیات آنها در بخش ۲ ارائه خواهد شد، برآورد می‌شود. چون معمولاً تابع کوواریانس نامعلوم است، برآورد آن برای تجزیه و تحلیل داده‌های فضایی، بخصوص کریگیدن، امری ضروری می‌باشد. در روش کریگیدن عادی اغلب با استفاده از روشهای گرافیکی، تابعی به کوواریانس تجربی

$$\hat{\sigma}(h) = \frac{1}{|N(h)|} \sum_{N(h)} (Z(t_i) - \tilde{Z})(Z(t_j) - \tilde{Z}) \qquad (۵)$$

برازش می‌شود. در عبارت (۵) مجموع روی تمام اعضای مجزای مجموعهٔ $Nh = \{(i,j) : t_i - t_j = h\}$ گرفته می‌شود و h نشان دهنده فاصلهٔ دو موقعیت، $\tilde{Z}$ یک برآوردگر میانگین $Z(.)$ و $|N(h)|$ تعداد اعضای $N(h)$ می‌باشد.

دلفینر (۱۹۷۶) نشان داد وجود روند در داده‌ها کریگیدن عام را با مشکل تعیین تابع کوواریانس مواجه می‌نماید. بعلاوه کرسی و گروندونا (۱۹۹۲) برای این حالت تحت شرایط خاص جمع پذیری تابع کوواریانس نشان دادند برآورد تابع کوواریانس دارای اریبی از مرتبهٔ $O(1/n)$ است. لذا اغلب برای برآورد تابع کوواریانس در کریگیدن عام، ابتدا روند را از داده‌ها حذف نموده، سپس همان رویه فوق بر داده‌های روند زدوده اعمال می‌شود. اما آرمسترانگ (۱۹۸۴) نشان داد کوواریانس تجربی داده های بدون روند شده و داده‌های اصلی متفاوت هستند و کاملاً بستگی به روش روندزدایی داده‌ها دارد. بنابراین این رویه نیز موجب بروز اریبی در برآورد کوواریانس می‌گردد.

در بخش ۳ نشان داده می‌شود داده‌های اصلی و داده‌هایی که روند آنها حذف می‌گردد دارای تابع کوواریانس تعمیم یافته[۹] (GCF) یکسانی هستند و کوواریانس تجربی داده‌هایی که روند آنها حذف شده را فقط می‌توان برای برآورد تابع کوواریانس تعمیم یافته بکار برد و قابل استفاده برای برآورد تابع

[۳] Deterministic
[۴] trend
[۵] Second Order Stationary
[۶] Kriging
[۷] Ordinary Kriging
[۸] Universal Kriging
[۹] Generalized Covariance Function

کوواریانس معمولی نیستند. از طرفی ماترون (۱۹۷۱) نشان داده است برآوردهای حاصل از تمام توابع کوواریانس تعمیم یافته یکسان هستند. همچنین کریستنسن (۱۹۹۰) نشان داد برآوردهای حاصل از کریگیدن با استفاده از تابع کوواریانس معمولی و GCF معادل یکدیگرند. بنابراین کریگیدن عام را می‌توان بوسیله برآورد GCF که بر اساس داده‌های روندزدوده بدست آورده می‌شود، انجام داد.

۲ کریگیدن

ماترون (۱۹۷۱) کریگیدن عادی را برای برآورد فضایی میدان تصادفی در یک نقطه مشخص $t_\circ$ بر اساس بردار مشاهدات Z و با فرض آنکه میانگین یا روند در مدل (۴) مقدار ثابت $\mu(t) = \mu$ و $\delta(t)$ یک میدان تصادفی مانای مرتبه دوم باشد، توسط ترکیب خطی $\hat{Z}(t_\circ) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(t_i)$ مشروط بر آنکه $\sum \lambda_i = 1$ باشد معرفی کرد، که شرط $\sum \lambda_i = 1$ نااریب بودن برآوردگر را تضمین می‌نماید و ضرایب برآوردگر نیز به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که میانگین مجذور خطاها کمینه گردد.

در روش کریگیدن عام که توسط ماترون (۱۹۶۹) ارایه گردیده‌است فرض می‌شود روند در مدل (۴) یک ترکیب خطی از توابعی از قبل تعیین شده مانند $\phi_j(.)$ با ضرایب نامعلوم بصورت:

$$\mu(t) = \sum_{j=0}^{p} \beta_j \phi_j(t) \qquad (6)$$

است، که در آن توابع $\{\phi_\circ(t), \ldots, \phi_p(t)\}$ با توجه به ماهیت روند تعیین می‌شوند. دراین حالت مدل (۴) را می‌توان به فرم ماتریسی

$$Z = X\beta + \delta \qquad (7)$$

نوشت که در آن توابع $\delta = (\delta(t_1), \ldots, \delta(t_n))$ و $\beta = (\beta_\circ, \ldots, \beta_p)^T \in R^{p+1}$ و X یک ماتریس $n \times (p+1)$ با عناصر زیر است.

$$x_{ij} = \phi_{j-1}(t_i) \quad i = 1, \ldots, n; \quad j = 1, \ldots, p+1$$

کریگیدن در موقعیت $t_\circ$ عبارتست از انتخاب یک تخمین‌گر خطی بصورت:

$$\hat{Z}(t_\circ) = \lambda^T Z \qquad (8)$$

که بطور یکنواخت نااریب باشد، یعنی

$$E(\hat{Z}(t_\circ)) = E(Z(t_\circ)); \quad \beta \in R^{p+1} \text{ برای هر} \qquad (9)$$

باشد و میانگین مجذور خطاهای

$$\sigma_e^2 = E[(\hat{Z}(t_\circ) - Z(t_\circ))^2]$$

را نسبت به λ کمینه نماید. شرط بطور یکنواخت نااریب (۹) معادل آنستکه $\lambda^T X = x_\circ^T$ باشد که در آن $x_\circ = (\phi_\circ(t_\circ), \ldots, \phi_n(t_\circ))^T$ است.

کریگیدن در نقطه $t_\circ$ بصورت (۸) است که مقدار بهینه λ از رابطه:

$$\lambda = \Sigma^{-1}[\sigma_\circ + X(X^T\Sigma^{-1}X)^{-1}(x_\circ - X^T\Sigma^{-1}\sigma_\circ]$$

که در آن $\sigma_\circ = (\sigma(t_\circ - t_1), \ldots, \sigma(t_\circ - t_n)$ است، محاسبه می‌گردد. بعلاوه مقدار کمینه میانگین مجذور خطای برآورد برابر

$$\begin{aligned} \sigma_\circ^2(t_\circ) &= \sigma(\circ) - \sigma_\circ^T\Sigma^{-1}\sigma_\circ + (x_\circ - X^T\Sigma^{-1}\sigma_\circ)^T \\ &\times (X^T\Sigma^{-1}X)^{-1}(x_\circ - X^T\Sigma^{-1}\sigma_\circ) \end{aligned}$$

می‌باشد. بدیهی است اگر $p = \circ$ و $\phi_\circ(t) = 1$ اختیار شود، کریگیدن عام به کریگیدن عادی تبدیل می‌گردد.

۳ تابع کوواریانس تعمیم یافته

در روش کریگیدن عادی، معلوم بودن تابع کوواریانس تا یک مقدار ثابت کفایت می‌کند. بعنوان مثال، کریگیدن برای دو تابع کوواریانس

$$\sigma(h) = \theta_1 exp(-h/\theta_2) \quad (۱۰)$$

$$\sigma(h) = \theta_1 exp(-h/\theta_2) + a \quad (۱۱)$$

که در آنها θ_1 و θ_2 پارامتر و a یک مقدار ثابت دلخواه هستند، نتایج یکسانی را تولید می‌کند. علت عدم تأثیر مقدار ثابت a وجود قید ناaریبی است، زیرا اضافه کردن یک مقدار ثابت به تابع کوواریانس معادل آنستکه به میدان تصادفی $Z(.)$ یک میدان تصادفی با میانگین صفر و واریانس ثابت a اضافه نماییم. چون اضافه کردن یک مقدار ثابت به میدان تصادفی $Z(.)$ در خطای برآورد بی‌تأثیر است، a هیچ تغییری در کریگیدن ایجاد نمی‌کند. پس برای کریگیدن عادی، تمام اعضای یک خانواده توابع از تابع کوواریانس واقعی که به اندازه یک مقدار ثابت باهم تفاوت دارند، غیر قابل تمایز هستند. لذا هر یک از توابع ممکن را می‌توان بصورت:

$$\sigma(h) = C(h) + a \quad (۱۲)$$

شامل یک قسمت مشترک $C(h)$ و یک قسمت ثابت a در نظر گرفت که در آن ثابت a موجب فرق گذاشتن یک تابع از بقیه می‌شود اما دارای اهمیت نیست. قسمت $C(h)$ را تابع کوواریانس تعمیم یافته (GCF) نامیده و در عمل هر تابعی را که فقط با یک مقدار ثابت از توابع دیگر فرق دارد می‌توان برای آن بکار برد. بعنوان مثال، هر یک از توابع (۱۰) و (۱۱) را می‌توان GCF نامید.

برای کریگیدن عام نیز لزومی ندارد نگران پیدا کردن تابع کوواریانس کامل باشیم، بلکه در اختیار بودن GCF کافی می‌باشد. در کریگیدن عام تعداد قیود نااریبی برابر تعداد ضرایب نامعلوم روند خطی، یعنی p در عبارت (٦) است. هرچقدر تعداد قیود نااریبی بیشتر باشد، تعداد توابع کوواریانسی که کاملاً یکسان عمل می‌کنند بیشتر می‌شود. بعنوان مثال برای کریگیدن عام با روند خطی، دو تابع کوواریانس

$$\sigma(h) = \theta_1 exp(-h/\theta_2) \quad (۱۳)$$

$$\sigma(h) = \theta_1 exp(-h/\theta_2) + a_1 + a_2 h^2 \quad (۱۴)$$

که در آن a_1 و a_2 ثابت‌های دلخواه هستند، همانند می‌باشند.

در این حالت تابع کوواریانس را می‌توان بصورت:

$$\sigma(h) = C(h) + l(h) \quad (۱۵)$$

نشان داد که در آن $C(h)$ قسمت اصلی یا GCF و $l(h)$ قسمت افزونه نامیده می‌شود. عبارت (۵۱) که GCF را بعنوان قسمت اصلی تابع کوواریانس معرفی می‌نماید، در محاسبه کریگیدن عام با روندی شامل ضرایب نامعلوم و همچنین ضرایب روشهای برآورد تابع کوواریانس مربوطه بسیار مفید می‌باشد. بعلاوه افزایش تعداد قیود ناaریبی، آزادی بیشتری برای انتخاب یک تابع کوواریانس فراهم می‌سازد. بطور کلی، با معرفی جملات بیشتر در روند یا قسمت قطعی مدل (۴)، عملاً جملات بیشتری از قسمت اصلی تابع کوواریانس به قسمت افزونه انتقال داده می‌شود، زیرا با بیان بیشتر تغییرات از طریق یک تابع قطعی، اهمیت تابع کوواریانس (که قسمت تصادفی مدل را تشریح می‌کند) کاهش می‌یابد. در حد، وقتی تمام تغییرات مدل را از طریق یک تابع قطعی بیان نماییم، GCF فقط به یک اثر قطعه[۱۰] ساده تبدیل می‌گردد.

اکنون نشان‌داده‌می‌شود داده‌های اصلی و داده‌های بدون روند دارای توابع کوواریانس متفاوتی هستند ولی GCF آنها یکسان است. فرض کنیم Σ ماتریس کوواریانس داده‌های اصلی، یعنی Z ، با عناصر

$$\sigma_{ij} = \sigma(t_i - t_j) \quad i,j = 1,\ldots,n$$

[۱۰] Nugget Efect

و X یک ماتریس $n \times (p+1)$ با عناصر

$$x_{ij} = \phi_{j-1}(t_i) \quad i = 1, \ldots, n; \;\; j = 1, \ldots, p+1$$

باشد. در اینصورت روند، به فرم:

$$\mu(t) = E(Z) = X\beta$$

خواهد بود و برآورد حداقل مربعات برای پارامتر β بصورت:

$$\hat{\beta} = (X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1} Z$$

است و داده‌های بدون روند شده نیز بصورت:

$$R = Z - X\hat{\beta} = (I - X(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1}) Z$$

محاسبه می‌گردند. بدیهی است میانگین داده‌های بدون روند شده برابر صفر است زیرا

$$\begin{aligned} E(R) &= (I - X(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1}) E(Z) \\ &= (I - X(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \Sigma^{-1}) X\beta = 0 \end{aligned}$$

و ماتریس کوواریانس آنها عبارتست از:

$$\begin{aligned} \Sigma_R &= E(RR^T) \\ &= \Sigma - X(X^T \Sigma^{-1} X)^{-1} X^T \end{aligned} \qquad (١٦)$$

همانطور که در (٦١) ملاحظه می‌شود در حالت کلی Σ و Σ_R با یکدیگر برابر نیستند. اما تفاوت آنها مربوط به قسمت اصلی نیست. برای حذف قسمت غیر اصلی، نموهای تعمیم یافته [11] را از ضرب ماتریسی مانند G، که $GX = 0$ باشد، در داده‌های روندزدوده بدست می‌آوریم. در اینصورت ماتریس کوواریانس نموهای تعمیم یافته، یعنی GR ، برابر $G\Sigma_R G^T$ خواهدبود. همچنین ماتریس کوواریانس نموهای تعمیم‌یافته داده‌های اصلی یعنی GZ نیز $G\Sigma G^T$ است و با استفاده از رابطه (٦١) داریم:

$$G\Sigma_R G^T = G\Sigma G^T$$

بنابراین ماتریس‌های کوواریانس تعمیم‌یافته و در نتیجه توابع کوواریانس تعمیم‌یافتهٔ داده‌های اصلی و داده‌های روندزدوده یکسان هستند.

۴ نتیجه‌گیری

بدلیل وجود روند در داده‌ها، برآورد تابع کوواریانس برای کریگیدن عام، اریب است و در این حالت معمولاً آنرا با استفاده از تابع کوواریانس تجربی داده‌های روندزدوده بدست می‌آورند. برآورد حاصل از این روش که بستگی به نوع حذف روند دارد نیز اریب است. با توجه به اینکه داده‌های روندزدوده و داده‌های اصلی دارای توابع کوواریانس تعمیم یافته یکسانی هستند و کریگیدن حاصل از توابع کوواریانس معمولی و تعمیم یافته معادل یکدیگرند و از طرفی حذف روند از داده‌ها موجب حذف بیشتر تغییرات مربوط به روند در کوواریانس تجربی و آشکارتر شدن تابع کوواریانس تعمیم یافته می‌گردد، محاسبه کریگیدن عام بر اساس تابع کوواریانس تعمیم یافته داده‌های روندزدوده، توصیه می‌گردد.

[11] Generalized Increament

مراجع

[1] Armstrong, M. (1984), Problems with Universal Kriging, *Mathematical Geology* , **16**, 101-108.

[2] Cressie, N. (1993), *Statistics for Spatial Data*,John Wiley and Sons, New York.

[3] Cressie, N. and Gronoda, M. O. (1992), A Comparison of Variogram Estimation with Covariogram Estimation, In *The Art of Statistical Science*, K. V. Mardia, ed. Wiley, Chichester.

[4] Christensen, R.(1990), *Linear Models for Multivariate, Time Series and Spatial Data*, Springer Verlag, New York.

[5] Delfiner, P. (1976), Linear Estimation of Nonstationary Spatial Phnomena, In *Advanced Geostatistics in the Mining Industry*, M. Guarascio, M. David, and C. Hijbregts, eds. Riedel, Dordrecht, 46-68.

[6] Krige, D. G. (1951), A Statistical Approach to Some Basic Mine Valuation Problems on The Witwatersrand, *Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa*, **52**, 119-139.

[7] Matheron, G. (1963), Principles of Geostatistics, *Economic Geology*, **58**, 1246-1266.

[8] Matheron, G. (1969), Le Krigeag, Universal, *Cahiers du Center de Morphologie Mathematique*, **No. 1** Fountainbleau, France.

[9] Matheron, G. (1971), The Theory of Regionalized Variables and its Applications, *Cahiers du Center de Morphologie Mathematique* **No. 5**, Fountainbleau, France.

[10] Matheron, G. (1973), The Intrinsic Random Functions and their Applications. *Adv. appl. prob.* **5**, 439-468.