Sigrunn Hansen (1994)
Prediksjon i stokastiske felt med ikke-homogen varians
Hovedoppgave, NTH

Kapittel 2

Prediksjon under generell modell

Et stokastisk felt defineres av en stokastisk prosess $\{Z(x) : x \in D \subseteq \Re^n\}$. Dersom $D \in \Re^2$ vil realisasjonene $\{z(x) : x \in D\}$ være en flate i rommet. I denne oppgaven vil vi anta at $D \subseteq \Re$, men resultatene kan generaliseres til høyere dimensjoner. Verdien til $Z(x)$ antas kjent i n observasjonspunkt. Utfra de kjente observasjonene, $\{z(x_i);\ i = 1, \ldots, n\}$, i kjente posisjoner, $\{x_i;\ i = 1, \ldots, n\}$, ønsker vi å predikere realisasjonen av den stokastiske prosessen $Z(x)$ i et vilkårlig punkt $x = x_0 \in D$. I dette kapittelet presenteres den velkjente prediksjonsmetoden kriging. Aktuelle referanser for kapittelet er Journel og Huijbregts (1978) og Cressie (1991).

2.1 Modell

Vi antar at den stokastiske prosessen $Z(x)$ kan uttrykkes som summen av et forventningsledd og et residualledd, det vil si,

$$Z(x) = \mu(x) + \epsilon(x)$$

der

$$\mathrm{E}(Z(x)) = \mu(x)$$
$$\mathrm{Var}(Z(x)) = \sigma^2(x)$$
$$\mathrm{Cov}(Z(x), Z(y)) = K(x, y) = \sigma(x)\sigma(y)\rho(x, y)$$

Størrelsen $K(\cdot)$ kalles romlig kovariansfunksjon, mens $\rho(\cdot)$ kalles romlig korrelasjonsfunksjon. Vi definerer observasjonsvektoren

$$Z'_{\text{obs}} = (Z(x_1), \ldots, Z(x_n))$$

med tilhørende kovariansmatrise

$$K = \begin{pmatrix} K(x_1, x_1) & \ldots & K(x_1, x_n) \\ \vdots & & \vdots \\ K(x_n, x_1) & \ldots & K(x_n, x_n) \end{pmatrix}$$

Kovariansvektoren mellom Z_{obs} og prosessen i et vilkårlig punkt, $Z(x_0)$, angis ved,

$$k' = (K(x_0, x_1), \ldots, K(x_0, x_n))$$

Et av problemene i prediksjonen av realisasjoner til $Z(x)$, er at måling av $Z(x)$ i hvert observasjonspunkt er ikke-repeterbar. For å oppnå pseudo-repeterbarhet er det vanlig å gjøre stasjonaritetsantakelser.

2.2 Terminologi og begreper

$Z(x)$ sies å være en annen-ordens stasjonær prosess dersom,

$$\mathrm{E}(Z(x)) = \mu$$
$$\mathrm{Cov}(Z(x), Z(y)) = K(x-y) = \sigma^2\rho(x-y)$$

Dette betyr at antakelsen om annen-ordens stasjonaritet medfører at en modell blir homogen, det vil si at $\sigma(x)$ er konstant for alle $x \in D$. Når $\sigma(x)$ varierer kalles modellen ikke-homogen. En mye brukt størrelse for å karakterisere en stokastisk prosess er variogrammet, $\gamma(x-y)$, definert ved,

$$\gamma(x-y) = \frac{1}{2}\mathrm{Var}(Z(x) - Z(y))$$

Sammenhengen mellom variogrammet og den romlige kovariansfunksjonen er spesielt enkel for en annen-ordens prosess,

$$\begin{aligned}\gamma(x-y) &= \frac{1}{2}(\mathrm{Var}(Z(x)) + \mathrm{Var}(Z(y))) - \mathrm{Cov}(Z(x), Z(y)) \\ &= K(0) - K(x-y)\end{aligned}$$

Enhver kovariansmatrise skal være positivt semi-definit, det vil si,

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_i a_k K(x_i, x_k) \geq 0$$

for alle n, for alle $\{a_i;\ a_i \in \Re,\ i = 1, \ldots, n\}$ og for alle $\{x_i;\ x_i \in D,\ i = 1, \ldots, n\}$. For en annen-ordens prosess er,

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\left(\sum_{i=1}^{n} a_i Z(x_i)\right) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_i a_k K(x_i, x_k) \\ &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_i a_k K(x_i - x_k) \\ &\geq 0\end{aligned}$$

slik at betingelsen for gyldig kovariansfunksjon sammenfaller med den nødvendige betingelse ved en modell, nemlig ikke-negativ varians. Fra sammenhengen mellom kovariansfunksjonen og variogrammet ser vi at kravet om gyldig kovariansfunksjon er ekvivalent med

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_i a_k \gamma(x_i - x_k) \leq 0 \quad \text{der} \quad \sum_{i=1}^{n} a_i = 0$$

for alle n, for alle $\{a_i;\ a_i \in \Re,\ i = 1, \ldots, n\}$ og for alle $\{x_i;\ x_i \in D,\ i = 1, \ldots, n\}$. Dette betyr at variogrammet er det en betegner betinget negativt definit. I resten av dette kapittelet vil vi se på en generell modell, der vi i utgangspunktet ikke gjør hverken stasjonaritetsantakelser eller antakelse om homogen modell.

2.3 Kriging prediktorer som betinget forventning

Prediktoren for den stokastiske prosessen $Z(x)$ i et vilkårlig punkt $x = x_0$, betegnes $\hat{Z}(x_0)$, og finnes ved å minimere den forventede kvadratiske prediksjonsfeilen gitt observasjonene, det vil si minimer,

$$\mathrm{MKPE} = \mathrm{E}\left(\left(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)\right)^2 \mid Z(x_i) = z(x_i),\ i = 1, \ldots, n\right)$$

Velkjent resultat, Christensen(1987), gir en optimal prediktor på formen,

$$\hat{Z}(x_0) = \mathrm{E}(Z(x_0) \mid Z(x_i) = z(x_i),\ i = 1, \ldots, n) \tag{2.1}$$

Prediksjonsvariansen er definert ved,

$$\begin{aligned} \sigma^2_{\mathrm{pe}}(x_0) &= \mathrm{Var}\left(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0) \mid Z(x_i) = z(x_i),\ i = 1, \ldots, n\right) \\ &= \mathrm{Var}(Z(x_0) \mid Z(x_i) = z(x_i),\ i = 1, \ldots, n) \end{aligned}$$

Generelt vil den optimale prediktor være ikke-lineær, men vi vil konsentrere oss om lineære prediktorer. Gruppen av lineære og forventningsrette prediktorer som er optimale med hensyn på minimering av MKPE, kalles kriging prediktorer. Det er definert flere typer kriging prediktorer avhengig av forskjellige modellantakelser for $Z(x)$ og forskjellige antakelser vedrørende formen på prediktoren. Vi vil finne uttrykkene for prediktoren og prediksjonsvariansen under enkel kriging og universell kriging, samt et spesialtilfelle av universell kriging.

2.4 Enkel kriging

I enkel kriging antas både forventningsfunksjonen $\mu(x)$ og den romlige kovariansfunksjonen $K(\cdot)$ som kjent i modellen,

$$Z(x) = \mu(x) + \varepsilon(x)$$

der

$$\begin{aligned} \mathrm{E}(Z(x)) &= \mu(x) \\ \mathrm{Var}(Z(x)) &= \sigma^2(x) \\ \mathrm{Cov}(Z(x), Z(y)) &= K(x, y) \end{aligned}$$

I de kjente observasjonspunktene vil

$$Z_{\mathrm{obs}} = \mu_{\mathrm{obs}} + \varepsilon_{\mathrm{obs}}$$

der

$$\begin{aligned} \mu'_{\mathrm{obs}} &= (\mu(x_1), \ldots, \mu(x_n)) \\ \varepsilon'_{\mathrm{obs}} &= (\varepsilon(x_1), \ldots, \varepsilon(x_n)) \end{aligned}$$

Prediktoren i et vilkårlig punkt x_0 skal være lineær i Z_{obs}, det vil si,

$$\hat{Z}(x_0) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Z(x_i) + b$$

Vi ønsker kun å se på forventningsrette prediktorer,

$$\mathrm{E}\left(\hat{Z}(x_0)\right) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mu(x_i) + b = \mu(x_0)$$

Dette gir følgende betingelse på b,

$$b = \mu(x_0) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mu(x_i)$$

For å finne uttrykket for de ukjente vektene, $\{\alpha_i;\ i = 1, \ldots, n\}$, minimeres MKPE med hensyn på disse parametrene. Vi må løse,

$$\mathrm{Min}\left(\mathrm{E}\left(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)\right)^2\right) \text{ der } b = \mu(x_0) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mu(x_i)$$

Vi har

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\left(Z(x_0)-\hat{Z}(x_0)\right)^2 &= \mathrm{E}\left(Z(x_0)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i Z(x_i)-\mu(x_0)+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mu(x_i)\right)^2 \\
&= \mathrm{E}\left((Z(x_0)-\mu(x_0))-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(Z(x_i)-\mu(x_i)\right)\right)^2
\end{aligned}$$

Derivasjon med hensyn på α_j gir,

$$\mathrm{E}\left(\left((Z(x_0)-\mu(x_0))-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\left(Z(x_i)-\mu(x_i)\right)\right)(Z(x_j)-\mu(x_j))\right)=0$$

$$\Updownarrow$$

$$\mathrm{Cov}\left(Z(x_0),Z(x_j)\right)=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathrm{Cov}\left(Z(x_i),Z(x_j)\right)\ \text{ for } j=1,\ldots,n$$

$$\Updownarrow$$

$$k'=\alpha' K$$

Ettersom kovariansmatrisen K er positivt semi-definit, vil matrisen være inverterbar, slik at $\alpha'=k'K^{-1}$. Uttrykket for den enkle kriging prediktoren blir dermed,

$$\begin{aligned}
\hat{Z}(x_0) &= k'K^{-1}Z_{\mathrm{obs}}+b \\
&= k'K^{-1}\left(Z_{\mathrm{obs}}-\mu_{\mathrm{obs}}\right)+\mu(x_0)
\end{aligned}$$

Når uttrykket for vektene, $\{\alpha_i;\ i=1,\ldots,n\}$, er kjent kan prediksjonsvariansen $\sigma^2_{\mathrm{pe}}(x_0)$ beregnes,

$$\begin{aligned}
\sigma^2_{\mathrm{pe}}(x_0) &= \mathrm{Var}\left(Z(x_0)-\hat{Z}(x_0)\right) \\
&= \mathrm{Var}\left(Z(x_0)-\alpha' Z_{\mathrm{obs}}\right) \\
&= \mathrm{Var}(Z(x_0))+\alpha'\mathrm{Var}(Z_{\mathrm{obs}})\alpha-2\alpha'\mathrm{Cov}(Z_{\mathrm{obs}},Z(x_0)) \\
&= K(x_0,x_0)+\alpha' K\alpha-2\alpha' k \\
&= K(x_0,x_0)+k'K^{-1}k-2k'K^{-1}k \\
&= K(x_0,x_0)-k'K^{-1}k
\end{aligned}$$

2.5 Universell kriging

I de fleste tilfeller kan ikke forventningsfunksjonen antas kjent, slik at enkel kriging ikke kan brukes. I universell kriging ser vi på følgende modell,

$$Z(x)=\mu(x)+\varepsilon(x)$$

der

$$\mathrm{E}(Z(x))=\sum_{j=1}^{p}\beta_j f_j(x)$$

$$\mathrm{Var}(Z(x))=\sigma^2(x)$$

$$\mathrm{Cov}\left(Z(x),Z(y)\right)=K(x,y)$$

Funksjonene $\{f_j(x);\ j = 1,\ldots,p\}$ antas å være kjente, mens $\{\beta_j;\ j = 1,\ldots,p\}$ er ukjente parametre. Vektoren av funksjoner i prediktorpunktet, x_0, defineres som

$$f' = (f_1(x_0),\ldots,f_p(x_0))$$

I de kjente observasjonspunktene kan modellen uttrykkes på matriseform som,

$$Z_{\text{obs}} = F\beta + \varepsilon_{\text{obs}}$$

$$\Updownarrow$$

$$\begin{pmatrix} Z_1(x_1) \\ \vdots \\ Z_n(x_n) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \ldots & f_p(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ f_1(x_n) & \ldots & f_p(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon(x_1) \\ \vdots \\ \varepsilon(x_n) \end{pmatrix}$$

Vi ser kun på lineære prediktorer,

$$\hat{Z}(x_0) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Z(x_i) + b$$

Betingelsen for forventningsretthet for prediktoren blir,

$$\mathrm{E}\left(\hat{Z}(x_0)\right) = \mathrm{E}(Z(x_0))$$

$$\Downarrow$$

$$\mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i Z(x_i)\right) + b = \mathrm{E}(Z(x_0))$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i \sum_{j=1}^{p} \beta_j f_j(x_i) + b = \sum_{j=1}^{p} \beta_j f_j(x_0)$$

$$\Downarrow$$

$$\sum_{j=1}^{p} \beta_j \sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_j(x_i) + b = \sum_{j=1}^{p} \beta_j f_j(x_0)$$

Dette gir

$$b = \sum_{j=1}^{p} \beta_j \left(f_j(x_0) - \sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_j(x_i)\right)$$

Ved å kreve

$$\sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_j(x_i) = f_j(x_0) \text{ for } j = 1,\ldots,p$$

blir $b = 0$ for alle β_j. Uttrykket for prediktoren, $\hat{Z}(x_0)$, finnes ved å minimere MKPE under denne betingelsen, det vil si at følgende problem må løses,

$$\text{Min}\left(\mathrm{E}\left(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)\right)^2\right) \text{ der } \sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_j(x_i) = f_j(x_0) \text{ for } j = 1,\ldots,p$$

For å minimere MKPE under en betingelse brukes standard Lagransk teknikk. Metoden går ut på å innføre Lagranske multiplikatorer m_j, som sikrer at kravet om forventningsretthet blir tilfredsstilt. Dette betyr at vi ønsker å minimere uttrykket,

$$\mathrm{E}\left(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)\right)^2 - 2\sum_{j=1}^{p} m_j \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i f_j(x_i) - f_j(x_0)\right)$$

der

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\left(Z(x_0)-\hat{Z}(x_0)\right)^2 &= \mathrm{Var}\left(Z(x_0)-\sum_{i=1}^{n}\alpha_i Z(x_i)\right)\\
&= \mathrm{Var}\left(Z(x_0)\right)+\mathrm{Var}\left(\sum_{i=1}^{n}\alpha_i Z(x_i)\right)-2\mathrm{Cov}\left(Z(x_0),\sum_{i=1}^{n}\alpha_i Z(x_i)\right)\\
&= \mathrm{Var}(Z(x_0))+\sum_{i=1}^{n}\alpha_i{}^2\mathrm{Var}\left(Z(x_i)\right)+2\sum_{k=1}^{n}\sum_{i<k}\alpha_i\alpha_k\mathrm{Cov}\left(Z(x_i),Z(x_k)\right)\\
&\quad -2\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathrm{Cov}\left(Z(x_0),Z(x_i)\right)
\end{aligned}$$

Uttrykket minimeres ved å derivere med hensyn på parametrene $\{\alpha_i;\ i=1,\ldots,n\}$ og multiplikatorene $\{m_j;\ j=1,\ldots,p\}$ og sette disse uttrykkene lik 0. Derivasjon med hensyn på α_r gir,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial\alpha_r} &= 2\alpha_r\mathrm{Var}\left(Z(x_r)\right)+2\sum_{i<r}\alpha_i\mathrm{Cov}\left(Z(x_i),Z(x_r)\right)+2\sum_{r<k}\alpha_k\mathrm{Cov}\left(Z(x_r),Z(x_k)\right)\\
&\quad -2\mathrm{Cov}(Z(x_0),Z(x_r))-2\sum_{j=1}^{p}m_j f_j(x_r)\\
&= 0 \text{ for } r=1,\ldots,n
\end{aligned}$$

Utskrevet på matriseform,

$$\begin{pmatrix}\alpha_1\sigma^2(x_1)\\ \alpha_2\sigma^2(x_2)\\ \vdots\\ \alpha_n\sigma^2(x_n)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}0 & K(x_1,x_2) & \ldots & K(x_1,x_n)\\ K(x_2,x_1) & 0 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots\\ & & & K(x_{n-1},x_n)\\ K(x_n,x_1) & \ldots & K(x_n,x_{n-1}) & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \alpha_2\\ \vdots\\ \alpha_n\end{pmatrix}=$$

$$\begin{pmatrix}K(x_0,x_1)\\ K(x_0,x_2)\\ \vdots\\ K(x_0,x_n)\end{pmatrix}+\begin{pmatrix}f_1(x_1) & \ldots & f_p(x_1)\\ \vdots & & \vdots\\ f_1(x_n) & \ldots & f_p(x_n)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}m_1\\ m_2\\ \vdots\\ m_p\end{pmatrix}$$

som er ekvivalent med $K\alpha=k+Fm$. Derivasjon med hensyn på m_r gir,

$$\sum_{i=1}^{n}\alpha_i f_r(x_i)=f_r(x_0) \text{ for } r=1,\ldots,p$$

det vil si $F'\alpha=f$. Ligningene

$$K\alpha=k+Fm$$
$$F'\alpha=f$$

løses med hensyn på m og α,

$$\alpha=K^{-1}k+K^{-1}Fm$$
$$\Downarrow$$
$$F'\alpha=F'K^{-1}k+F'K^{-1}Fm=f$$

$$\Downarrow$$
$$m = (F'K^{-1}F)^{-1}(f - F'K^{-1}k)$$

Uttrykket for vektene α blir dermed,

$$\alpha = K^{-1}(k + Fm) = K^{-1}\left(k + F(F'K^{-1}F)^{-1}(f - F'K^{-1}k)\right)$$

og prediktoren blir,

$$\begin{aligned}\hat{Z}(x_0) &= \alpha' Z_{\text{obs}} \\ &= \left(k' + (f' - k'K^{-1}F)(F'K^{-1}F)^{-1}F'\right)K^{-1}Z_{\text{obs}}\end{aligned}$$

Den universelle kriging prediksjonsvariansen blir på formen,

$$\begin{aligned}\sigma^2_{\text{pe}}(x_0) &= \text{Var}\left(Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)\right) \\ &= K(x_0, x_0) + \alpha' K \alpha - 2\alpha' k \\ &= K(x_0, x_0) + \alpha'(k + Fm - 2k) \\ &= K(x_0, x_0) + f'm - \alpha' k \\ &= K(x_0, x_0) + m'f - k'K^{-1}k - m'F'K^{-1}k \\ &= K(x_0, x_0) + (f - F'K^{-1}k)'(F'K^{-1}F)^{-1}(f - F'K^{-1}k) - k'K^{-1}k\end{aligned}$$

Prediksjonsvariansen under universell kriging vil naturlig nok bli større enn under enkel kriging, ettersom det knytter seg usikkerhet til parameterestimering. De ukjente parametre, $\{\beta_j;\ j = 1, \ldots, p\}$, kan finnes ved samme metode som prediktoren $\hat{Z}(x_0)$. Vi antar

$$\hat{\beta}_k = \sum_{i=1}^{n} \eta_i Z(x_i) + b$$

Kravet om forventningsretthet gir

$$\sum_{j=1}^{p} \beta_j \sum_{i=1}^{n} \eta_i f_j(x_i) = \beta_k$$

Derivering gir ligningssystemet

$$\begin{aligned}K\eta &= Fm \\ F'\eta &= 1\end{aligned}$$

som løses med hensyn på η. Dette gir

$$\hat{\beta} = (F'K^{-1}F)^{-1}F'K^{-1}Z_{\text{obs}}$$

Den universelle kriging prediktoren kan dermed forenklet uttrykkes som

$$\hat{Z}(x_0) = f'\hat{\beta} + k'K^{-1}(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta})$$

2.6 Spesialtilfeller av kriging

2.6.1 Antakelse om Gaussisk prosess

Den optimale prediktoren (2.1), med hensyn på minimering av MKPE, kan finnes direkte fra simultanfordelingen til Z_{obs} og $Z(x_0)$, dersom denne fordelingen er kjent, Hjort og Omre (1992). Dersom $Z(x)$ antas Gaussisk vil,

$$\begin{pmatrix} Z(x_0) \\ Z_{\text{obs}} \end{pmatrix} \sim N_{n+1}\left\{\begin{pmatrix} f\beta \\ F\beta \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{pmatrix}\right\}$$

der

$$\begin{aligned} K_{11} &= \mathrm{Var}(Z(x_0)) = K(x_0, x_0) \\ K_{12} &= K'_{21} = \mathrm{Cov}(Z(x_0), Z_{\mathrm{obs}}) = k' \\ K_{22} &= \mathrm{Cov}(Z_{\mathrm{obs}}) = K. \end{aligned}$$

Resultat fra Johnson og Wichern (1992) gir,

$$Z(x_0) \mid Z_{\mathrm{obs}} \sim N(f\beta + k'K^{-1}(Z_{\mathrm{obs}} - F\beta), K(x_0, x_0) - k'K^{-1}k)$$

slik at

$$\mathrm{E}(Z(x_0) \mid Z_{\mathrm{obs}}) = f\beta + k'K^{-1}(Z_{\mathrm{obs}} - F\beta)$$
$$\mathrm{Var}(Z(x_0) \mid Z_{\mathrm{obs}}) = K(x_0, x_0) - k'K^{-1}k$$

Dette betyr at i det spesielle tilfellet med en Gaussisk prosess blir den optimale prediktor lineær i Z_{obs} og prediksjonsvariansen blir uavhengig av Z_{obs}. Paramtrene, β, antas kjent slik at forventningsfunksjonen kjent. Ettersom antakelsen om Gaussisk prosess gir en optimal lineær prediktor og ettersom forventningsfunksjonen antas kjent, vil uttrykkene for prediktor og prediksjonsvarians være de samme som ved enkel kriging.

2.6.2 Ordinær kriging

Prediksjonsmetoden som vil bli benyttet i denne oppgaven tar utgangspunkt i et spesialtilfelle av universell kriging, kalt ordinær kriging. I ordinær kriging antas prosessen $Z(x)$ å være første-ordens stasjonær, det vil si forventningsfunksjonen $\mu(\cdot)$ antas ukjent, men konstant. Vi ser på modellen,

$$Z(x) = \mu(x) + \varepsilon(x)$$

der

$$\mathrm{E}(Z(x)) = \mu$$
$$\mathrm{Var}(Z(x)) = \sigma^2(x)$$
$$\mathrm{Cov}(Z(x), Z(y)) = K(x, y)$$

Dette betyr at vi under modellen i universell kriging har satt

$$\sum_{j=1}^{p} \beta_j f_j(x_i) = \mu \ , \ i = 1, \ldots, n$$

$$\Updownarrow$$

$$F\beta = \mu$$

For den lineære prediktor

$$\hat{Z}(x_0) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i Z(x_i) + b$$

blir kravet om forventningsretthet,

$$\mathrm{E}\left(\hat{Z}(x_0)\right) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mu + b = \mu$$

Vi krever $1'\alpha = 1$ slik at $b = 0$. Ligningssystemet som løses under ordinær kriging blir,

$$K\alpha + m = k$$

$$1'\alpha = 1$$

der m er Lagrange multiplikator som sikrer at kravet om forventningsretthet blir oppfylt. Vektene, $\{\alpha_i,\ i = 1, \ldots, n\}$, kan finnes ved å løse det utvidete ligningssystemet,

$$\begin{pmatrix} K(x_1, x_1) & \ldots & K(x_1, x_n) & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ K(x_n, x_1) & \ldots & K(x_n, x_n) & 1 \\ 1 & \ldots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} K(x_0, x_1) \\ \vdots \\ K(x_0, x_n) \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\Updownarrow$$

$$K_0\alpha_0 = k_0$$

Den ordinære kriging prediksjonsvariansen kan dermed uttrykkes ved utvidete matriser som,

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathrm{pe}}(x_0)^2 &= K(x_0, x_0) + \alpha' K\alpha - 2\alpha' k \\ &= K(x_0, x_0) + \alpha'(K\alpha - k) - \alpha' k \\ &= K(x_0, x_0) - \alpha' k - m \\ &= K(x_0, x_0) - \alpha_0' k_0 \end{aligned}$$

Den enkleste måten å finne formen på den ordinære kriging prediktor og prediksjonsvarians er å innse at $F\beta = \mu$ oppfylles når $F' = (1, 1, \ldots, 1)$ og $f = 1$. Direkte innsetting i uttrykkene under universell kriging gir,

$$\hat{Z}(x_0) = \left(k' + \frac{1 - k'K^{-1}1}{1'K^{-1}1} 1'\right) K^{-1} Z_{\mathrm{obs}}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{\mathrm{pe}}(x_0)^2 &= (1 - 1'K^{-1}k)'(1'K^{-1}1)^{-1}(1 - 1'K^{-1}k) - k'K^{-1}k + K(x_0, x_0) \\ &= K(x_0, x_0) - k'K^{-1}k + \frac{(1 - 1'K^{-1}k)^2}{1'K^{-1}1} \end{aligned}$$

2.6.3 Homogen modell

Uttrykket som ble funnet for den universelle kriging prediktoren var avhengig av den ukjente standardavviksfunksjonen $\sigma(x)$. Som nevnt tidligere sies en modell å være homogen dersom $\sigma(x)$ er konstant for alle $x \in D$. Denne antakelsen gir modellen,

$$Z(x) = \mu(x) + \varepsilon(x)$$

der

$$\begin{aligned} \mathrm{E}(Z(x)) &= \mu(x) \\ \mathrm{Var}(Z(x)) &= \sigma^2 \\ \mathrm{Cov}\,(Z(x), Z(y)) &= K(x, y) = \sigma^2 \rho(x, y) \end{aligned}$$

Under homogen modell er

$$k' = \sigma^2(\rho(x_1, x_0), \ldots, \rho(x_n, x_0))$$

og kovariansmatrisen for observasjonsvektoren er

$$K = \sigma^2 \begin{pmatrix} \rho(x_1, x_1) & \ldots & \rho(x_1, x_n) \\ \vdots & & \vdots \\ \rho(x_n, x_1) & \ldots & \rho(x_n, x_n) \end{pmatrix} = \sigma^2 \Sigma$$

Av uttrykket for den universelle kriging prediktor ser vi at under homogen modell vil prediksjonen være uavhengig av σ^2, mens prediksjonsvariansen kan uttrykkes på formen,

$$\sigma^2_{\text{pe}}(x_0) = a\sigma^2$$

der a er konstant med hensyn på standardavviket. Som estimat for σ^2 kan man for eksempel benytte den forventningsrette estimatoren, Hjort og Omre (1992),

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{n-p}(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta})'\Sigma^{-1}(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta})$$

Estimatoren er forventningsrett ettersom,

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\left(\left(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta}\right)'\Sigma^{-1}\left(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta}\right)\right) &= \mathrm{E}\left(\mathrm{tr}\left(\left(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta}\right)'\Sigma^{-1}\left(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta}\right)\right)\right) \\
&= \mathrm{tr}\left(\Sigma^{-1}\mathrm{E}\left(\left(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta}\right)'\left(Z_{\text{obs}} - F\hat{\beta}\right)\right)\right) \\
&= \mathrm{tr}\left(\Sigma^{-1}(\Sigma - F(F'\Sigma^{-1}F)^{-1}F')\sigma^2\right) \\
&= \sigma^2\left(\mathrm{tr}I^{n\times n} - \mathrm{tr}\left(\Sigma^{-1}F(F'\Sigma^{-1}F)^{-1}F'\right)\right) \\
&= \sigma^2(n-p)
\end{aligned}$$

2.6.4 Ingen korrelasjon under homogen modell

I det ukorrelerte tilfellet med homgen varians er $k = 0$ og $K = \sigma^2 I$. Prediktor og prediksjonsvarians blir,

$$\begin{aligned}
\hat{Z}(x_0) &= (k' + (f' - k'K^{-1}F)(F'K^{-1}F)^{-1}F')K^{-1}Z_{\text{obs}} \\
&= f'(F'F)^{-1}F'Z_{\text{obs}} \\
\sigma^2_{\text{pe}}(x_0) &= (f - F'K^{-1}k)'(F'K^{-1}F)^{-1}(f - F'K^{-1}k) - k'K^{-1}k + K(x_0, x_0) \\
&= \left(f'(F'F)^{-1}f + 1\right)\sigma^2
\end{aligned}$$

For de ukjente parametre β gir antakelsen om ingen korrelasjon,

$$\hat{\beta} = (F'F)^{-1}F'Z_{\text{obs}}$$

som er den vanlige minste kvadraters estimator for de ukjente parametre i en regresjonsmodell.

2.6.5 Prediksjon i observasjonspunktene

En prediktor i et observasjonspunkt bør bli observasjonen selv. Ettersom $x_0 = x_i$ vil vektoren f' bli i'te rad i F og k' blir i'te rad i K. Dette betyr at,

$$k'K^{-1} = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)$$

med 1 på i'te plass. For den universelle kriging prediktor og prediksjonsvarians får vi,

$$\begin{aligned}
\hat{Z}(x_i) &= (k' + (f' - k'K^{-1}F)(F'K^{-1}F)^{-1}F')K^{-1}Z_{\text{obs}} \\
&= Z(x_i) \\
\sigma^2_{\text{pe}}(x_i) &= (f - F'K^{-1}k)'(F'K^{-1}F)^{-1}(f - F'K^{-1}k) - k'K^{-1}k + K(x_i, x_i) \\
&= 0
\end{aligned}$$

for alle $\{x_i;\ i = 1, \ldots, n\}$.