第六章 克利金法

克利金法(Kriging technique)又名地質統計法(Geostatistics technique)，是將**觀測數據**視為空間序率程序（或隨機場 random field）的一組樣本值，基於「定常性假設」，應用不同位置的資料對組合，來分析此組數據或變數在空間中分佈的統計特性，然後再決定線性內插係數的一種技術 (Bras and Rodriguez-Iturbe, 1985)。克利金法的估計分為兩個主要步驟：

(1) 結構分析(structural analysis)－使用資料，迴歸估計趨勢函數，以及協變異數隨測站距離變化的情形，即決定「變異圖」或「半變異圖」(variogram or semi-variogram)函數。

(2) 最佳線性不偏估估計(Best Linear Unbiased Estimation-BLUE)－假設估計值為已知值的線性權重平均，根據不偏估和最小估計誤差變異數兩項原則，根據變異圖或半變異圖導出權重係數值。

克利金法和其他空間內插方法的最主要差異為：(1)內插權重係數由觀測資料的空間統計特性所客觀決定，不是由分析者主觀決定；(2)統計理論完整，並且嚴謹。克利金法的重要優勢，是權重係數不單只是由**觀測資料**和**內插估計點**之間的距離函數（例如距離倒數）決定，而是使用所有觀測資料間的協變異矩陣，包括各觀測值和估計值之間的協變異矩陣；因此乃優於幾何平均法、算數平均法、距離倒數權重法或等高線法等。

在不同的假設狀況下，利用克利金法進行空間內插，估計空間中某特定點的變數值時，可分為「簡單克利金法」(simple Kriging)、「普通克利金法」(ordinary Kriging)和「通用克利金法」(universal Kriging)等。

6.1 資料空間統計結構分析

6.1.1 定常性假設與內在假設

一個空間隨機變數的一階與二階動差，若不隨空間位置而改變，則此一空間隨機變數具有定常性(stationarity)。具有定常性的空間隨機變數，其平均值為一常數，不隨空間位置而改變：

$$\mathrm{E}\left[Z(\mathbf{u})\right]=m \tag{6-1}$$

上式中，$\mathbf{u}=u(x,y)$為空間位置座標，$Z(\mathbf{u})$為空間隨機變數。除此以外，具有定常性的空間隨機變數空間中任意兩位置的隨機變數值協變異數，是兩地之間相對位置的函數，與絕對位置無關：

$$\boldsymbol{E}\left[\left(Z(\mathbf{u}_1)-m\right)\left(Z(\mathbf{u}_2)-m\right)\right]=\boldsymbol{cov}\left(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2\right) \tag{6-2}$$

協變函數 $\boldsymbol{cov}\left(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2\right)$ 與所有空間座標向量均有關係，$\boldsymbol{cov}\left(\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2\right)=$ $\boldsymbol{cov}\left(x_1-x_2,\, y_1-y_2\right)$。若此一空間隨機變數具有等向性(isotropy)，則可進一步簡化協變函數為距離的函數：

$$\boldsymbol{E}\left[\left(Z(\mathbf{u}_1)-m\right)\left(Z(\mathbf{u}_2)-m\right)\right]=\boldsymbol{cov}\left(\left|\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2\right|\right)=\boldsymbol{cov}\left(\left|\mathbf{d}\right|\right)=\boldsymbol{cov}\left(d\right) \tag{6-3}$$

其中 $\mathbf{d}$ 為距離向量，$d=\left|\mathbf{d}\right|=\left|\mathbf{u}_1-\mathbf{u}_2\right|=\sqrt{\left(x_1-x_2\right)^2+\left(y_1-y_2\right)^2}$ 為空間中的純量距離。當空間中的距離為 0 時，$\boldsymbol{cov}(0)$稱為「檻值」(sill)，由期望值的定義 $\boldsymbol{cov}(0)=\sigma^2$。隨著距離增加，空間變數的相關性減少，相關性消失不存在的距離稱為「影響範圍」(range)。

以上的平均值與協變函數模型，在假設空間資料具有定常性的情形下適用。在某些情形下，定常性假設不能成立，但資料可滿足以下的「內在模式」(intrinsic model)或內在假設，仍然可以應用克利金法。內在模型為：

$$\mathrm{E}\left[Z(\mathbf{u}_1)-Z(\mathbf{u}_2)\right]=0 \tag{6-4a}$$

$$2\gamma(d_{12})=E\left[\left(Z(\mathbf{u}_1)-Z(\mathbf{u}_2)\right)^2\right] \tag{6-4b}$$

$2\gamma(d)$ 稱為變異圖，同時$\gamma(d)$ 稱為半變異圖。內在假設並不嚴格要求以上 $\mathrm{E}\left[Z(\mathbf{u}_1)-Z(\mathbf{u}_2)\right]=0$ 在所有的距離均必須成立，僅要求在比較接近的距離內必須成立，至於什麼是「比較接近的距離」則必須視變異圖隨距離變化的情形而定。定常假設空間隨機變數是內在假設空間隨機變數的一個特例，若定常假設成立，則內在假設必然成立，反之則不必然。若一變數具有定常性，則其變異圖與協變函數之間的關係為：

$$\gamma(d)=\sigma^2-\boldsymbol{cov}(d) \tag{6-5}$$

在超過此一隨機變數的「影響範圍」時，半變異圖趨向於一個定值，此定值即為「檻值」，或是隨機變數的變異數。判斷一個符合內在假設的隨機變數是否具有定常性的方法，是觀察在距離很大時，半變異圖是否趨向於一個定值，若趨向一個定值(檻值)，則可假設此隨機變數具有定常性，若否，則可再考慮是否符合內在假設。

6.1.2 變異圖和半變異圖模式

「變異圖」或「半變異圖」的決定是由觀測樣本資料協變異數隨距離變化情形，決定的方法是選擇適當的「半變異圖」函數，並擬合估計其係數。變異圖的定義為 $2\gamma(d)=\boldsymbol{E}\left[\left(Z(\mathbf{u}_1)-Z(\mathbf{u}_2)\right)^2\right]$ 表示變異圖在距離等於 d 時，所有距離為 d 的兩點變數差異平方的「期望值」，亦即需要有許多個距離為 d 的組合決定 $\gamma(d)$，同時 d 由 0 變化到 ∞。

壹、 半變異圖方法

若有 m 個空間觀測值，兩兩組合，m 取 2 共有 $m(m-1)/2$ 種組合，將這些組合按照距離長短分為 n 個區間，則每個區間內平均有 $m(m-1)/2n$ 個資料，第 k 個間距的 $m(m-1)/2n$ 個樣本資料組合的距離平均值，作為平均距離 $\bar{d}_k$；由等數量觀測樣本計算試驗變異圖數據的傳統方法為：

$$2\gamma\left(\bar{d}_k\right)=\frac{2n}{m(m-1)}\sum_{i=1}^{m(m-1)/2n}\left\{\left[z(\mathbf{u}_1)-z(\mathbf{u}_2)\right]_i^2\right\} \tag{6-6}$$

其中，$d_{k-1}\le\sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2}\le d_k$，$k=1,\cdots n$，$d_{k-1}$ 和 d_k 是第 k 個距離間距的距離上、下限；z 為隨機變數 Z 的實現值。下圖為將所有空間數據組合計算 $\frac{1}{2}\left[z(\mathbf{u}_i)-z(\mathbf{u}_j)\right]^2$ 對 d_{ij} 繪出的「原始半變異圖」；取某間距內的平均距離，和間距內半變異圖數據 $\left(\bar{d}_k,\gamma(\bar{d}_k)\right)$ 繪出的「試驗半變異圖」；最後選用某個「半變異圖函數」，以最小化「試驗半變異圖」和「半變異圖函數」的誤差平方和原則，估計半變異圖函數的參數。

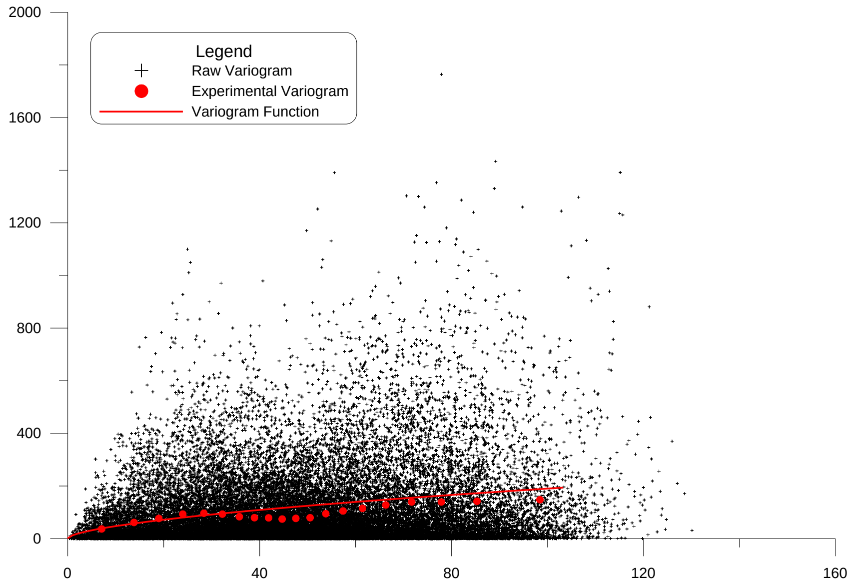


圖 1 原始半變異圖、試驗半變異圖和擬合半變異圖函數模型示意圖

幾種常用的定常性與內在假設半變異圖模式，包括：

(一)、**定常性模型** (stationary models)

A. 指數模型 (exponential model)

$$\gamma(d)=\sigma^2\left[1-\exp\left(-\frac{d}{L}\right)\right] \tag{6-7}$$

指數模型有兩個參數，分別是空間變數的變異數σ^2，和表現空間相關性質的積分距離(integral length) L (>0)。定義影響範圍α為當相關係數為 0.05 的距離，則$\alpha \approx 3L$。因為指數模型符合相關性隨距離梯降(cascade)的特性、並為簡單解析形式，故最常被應用於空間資料內插分析中。

B. 球形模型 (spherical model)

$$\gamma(d)=\begin{cases}\sigma^2\left[\dfrac{3}{2}\dfrac{d}{\alpha}-\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{d}{\alpha}\right)^3\right] & \text{if } d \le \alpha \\ \sigma^2 & \text{if } d > \alpha\end{cases} \tag{6-8}$$

其中，參數σ^2為變異數，α為影響範圍，球形模型在影響範圍以外的兩筆資料完全不相關。

C. 高斯模型(Gaussian model)

$$\gamma(d)=\sigma^2\left[1-\boldsymbol{exp}\left(-\frac{d^2}{L^2}\right)\right] \tag{6-9}$$

模型參數為σ^2和L (>0)，影響範圍α=1.73L。

D. 距離倒數模型(inverse-distance model)

$$\gamma(d)=\sigma^2\left[1-\frac{L}{\sqrt{d^2+L^2}}\right] \tag{6-10}$$

模型參數σ^2和L (>0)，影響範圍$\alpha \approx 20L$。

E. 坑洞效應模型 (hole-effect model)

$$\gamma(d)=\sigma^2\left[1-\left(1-\frac{d}{L}\right)\exp\left(-\frac{d}{L}\right)\right] \tag{6-11}$$

模型參數σ^2和L (>0)，$d=0.88L$時$\rho=0.05$，$d=7.11L$時$\rho=-0.05$。

坑洞效應模型的協變異數並非隨距離增加呈現單調衰減，適合用在模擬具有擬週期性(pseudo-periodic)的協變異數變化的情形。

指數模型與球型模型在距離很小時呈現線性增長，高斯模型和距離倒數模型在接近原點的區域呈現拋物線型增長。若存在距離極接近的兩個測站，後二者在內插時容易造成協變異數矩陣行列式值接近零，必須注意控制數值誤差。

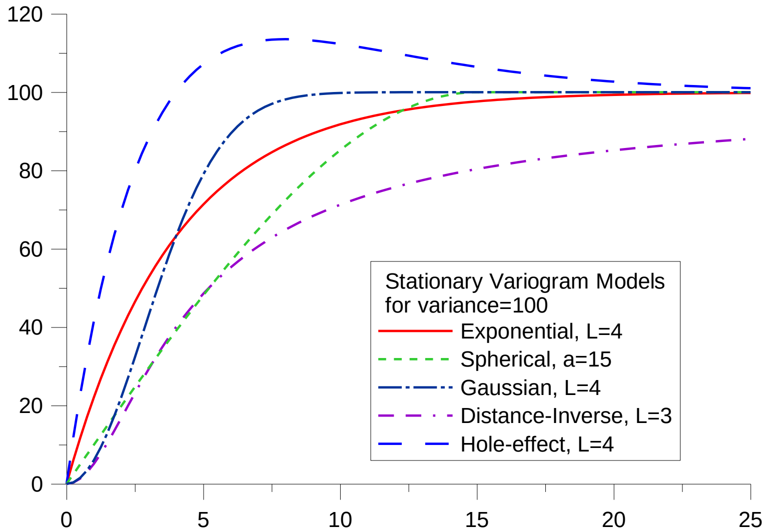


圖 2 定常性半變異圖函數模型示意圖

(二) 內在模型或非定常性模型(intrinsic or non-stationary models)

A. 冪次模型 (power model)

$$\gamma(d)=\theta\cdot d^{s} \tag{6-12}$$

模型參數 $\theta>0$ 且 $0<s<2$。

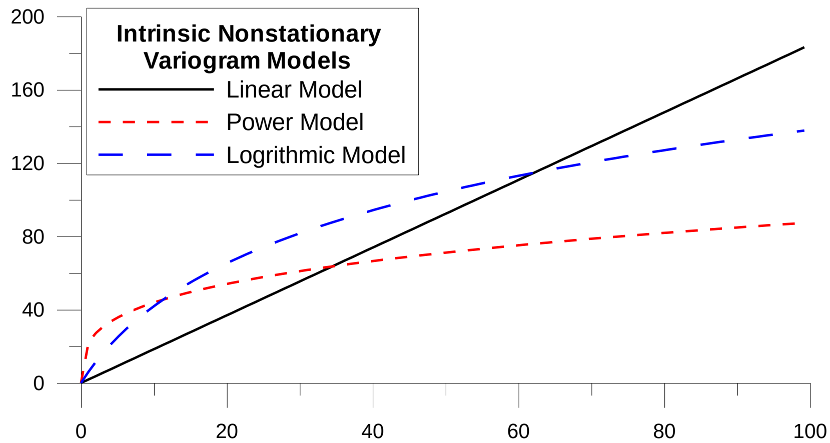


圖 3 內在假設或非定常性半變異圖函數模型示意圖

B. 線性模型 (linear model)

$$\gamma(d)=\theta\cdot d \tag{6-13}$$

線性模型為冪次模型的特例，模型參數θ為半變異圖的斜率。

C. 對數模型 (logarithmic model)

$$\gamma(d)=\theta\log\left(1+\frac{d}{L}\right) \tag{6-14}$$

(三) **金塊效應模型** (nugget-effect model)

$$\gamma(d)=C_0\delta(d)=\begin{cases}C_0 & \text{if } d>0\\ 0 & \text{if } d=0\end{cases} \tag{6-15}$$

其中C_0>0 稱為金塊效應變異數，表現極近距離($d\to 0$)的隨機變數值也不會完全相同的差值變異數。例如雨量站網中，有兩座雨量計的距離為 100 公尺，就站網距離尺度的觀點而言，可視為接近於零(但不等於 0)，但兩個雨量站的觀測值未必相同。金塊效應模型的$\gamma(d=0)=0$的意義是：同點、相同的觀測，變異數當然應該是 0。

金塊效應模型主要應用，是與其他形式的半變異圖模型相疊加(Superposition)，例如以上定常模型與內在模型，疊加金塊效應以後，在$d>0$的半變異圖模型方程式分別變為：

A. 指數模型：$\gamma(d)=C_0+\left(\sigma^2-C_0\right)\left[1-\exp\left(-\frac{d}{L}\right)\right]$

B. 球形模型：$\gamma(d)=C_0+\left(\sigma^2-C_0\right)\left[\frac{3}{2}\frac{d}{\alpha}-\frac{1}{2}\left(\frac{d}{\alpha}\right)^3\right]$ for $0<d\le\alpha$

C. 高斯模型：$\gamma(d)=C_0+\left(\sigma^2-C_0\right)\left[1-\boldsymbol{exp}\left(-\frac{d^2}{L^2}\right)\right]$

D. 距離倒數模型：$\gamma(d)=C_0+\left(\sigma^2-C_0\right)\left[1-\frac{L}{\sqrt{d^2+L^2}}\right]$

E. 坑洞效應模型：$\gamma(d)=C_0+\left(\sigma^2-C_0\right)\left[1-\left(1-\frac{d}{L}\right)\boldsymbol{exp}\left(-\frac{d}{L}\right)\right]$

F. 冪次模型：$\gamma(d)=C_0+\theta\cdot\left(\frac{d}{L}\right)^s$

G. 線性模型：$\gamma(d)=C_0+\theta\cdot d$

H. 對數模型：$\gamma\left(d\right)=C_0+\theta\,\boldsymbol{log}\left(1+\dfrac{d}{L}\right)$

貳、 最大概似法

半變異圖法決定統計結構的雖然已屬創新，但是其估計統計結構參數(檢定參數)的程序、方法或理論，仍然不如最大概似法(Maximum Likelihood Estimation, MLE)的。最大概似法決定統計結構參數的原理，是在統計結構(函數形態)已知的條件下，找出使觀測樣本數值聯合機率最大的參數向量或參數組合。例如，在假設溫度T為常態分布空間隨機變數的問題中，MLE 法的目標函數如下：

$$P(\mathbf{T}=\mathbf{t})=e^{-(\mathbf{t}-\mathbf{m})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}(\mathbf{t}-\mathbf{m})/2}\left[(2\pi)^n\left|\boldsymbol{\Lambda}\right|\right]^{-0.5}$$

其中，隨機變數向量為$\mathbf{T}$，觀測值樣本的向量為$\mathbf{t}$，$\mathbf{m}$是各觀測點(隨機)變數的期望值向量，其元素可表示為$m_i=\beta_0+\beta_x x_i+\beta_y y_i+\beta_z z_i$，$(x,y,z)$是觀測點的經、緯和高度座標；$\boldsymbol{\Lambda}=E\left[(\mathbf{t}-\mathbf{m})(\mathbf{t}-\mathbf{m})^{\mathrm{T}}\right]$是協變異數矩陣，元素為$\lambda_{ij}=\boldsymbol{E}[(T_i-m_i)(T_j-m_j)]$，也可用半變異圖函數$\gamma(d_{ij})$表示，$\lambda_{ij}=\sigma^2-\gamma(d_{ij})$，$\sigma^2$為隨機變數的變異數，$d_{ij}$為兩變數的距離。

參、估計誤差變異數目標函數法

使用**(2)最大概似法決定統計結構參數，再以最小估計誤差變異數原理，導出線性內插係數**；這樣的克利金法的估計效果，通常會優於**(1)使用半變異圖法決定統計結構參數，再以最小估計誤差變異數原理，導出線性內插係數**的克利金法估計效果。但是，以上兩種方法都因為仍然是將內插估計分為兩個步驟完成－先**決定統計結構參數**，再**決定空間內插權重值和計算變數值**，最大概似法是在第一階段**決定統計結構參數**的最佳化方法，**最小估計誤差變異數**是在第二階段**決定權重係數**的最佳化方法，但是兩階段分別最佳化，不能保證最終估計結果的最佳化[1]，要確保最終估計結果的最佳化，可以考慮採用：(3)使「去一估計觀測值」的誤差平方和最小化的原則，來比較不同統計結構函數和參數值的優劣。

[1] 可能的原因很多，但是都和定常性假設不成立有關。以溫度空間內插為例，不同的土地利用可能代表不同的熱慣性（主要是含水量、比熱的影響），濱海湖邊、森林、都市受到太陽輻射和地球本身長波輻射散熱的變化不同，表現在溫度記錄中，會是統計上的非均質性。以降雨量為例，台灣中央山脈降雨空間分布特性和平地不同，也是統計上的非均質性。另外，如果內插估計的空間範圍很大，便可能存在變數的氣候非均質性。

6.1.3 等向性與非等向性

空間變數可能屬於空間等向的變數，或是非等向的變數，處理非等向變數的方式之一，是將座標做一旋轉或是結合座標的比例等化，轉換為等向性變數。

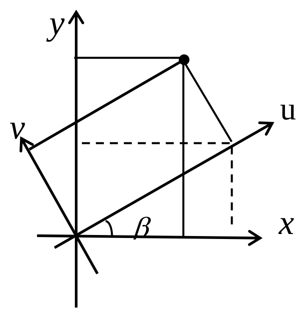
(一) 等向性變數：

$$\text{距離}\, d = \left|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\right| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \tag{6-16}$$

(二) 非等向性變數，且 x-、y-軸分別為主軸(principle axis)之比例等化方法：

$$d = \left|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\right| = \sqrt{\frac{(x_1 - x_2)^2}{l_x^2} + \frac{(y_1 - y_2)^2}{l_y^2}} \tag{6-17}$$

(三) 非等向性變數，並且 x-、 y-軸不是主軸(principle axis)之處理方法，是先進行軸旋轉，將任意點的(x, y)座標轉為主軸座標(u, v)，再作比例等化處理：



$$\begin{cases} u = x\cos\beta + y\sin\beta \\ v = y\cos\beta - x\sin\beta \end{cases}, \quad \begin{cases} x = u\cos\beta - v\sin\beta \\ y = u\sin\beta + v\cos\beta \end{cases}$$

(6-18)

$$d = \left|\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2\right| = \sqrt{\frac{(u_1 - u_2)^2}{l_u^2} + \frac{(v_1 - v_2)^2}{l_v^2}} \tag{6-19}$$

(四) 利用最大概似法決定半變異圖參數：

目標函數：

6.2 最佳線性不偏估估計

6.2.1 何謂最佳線性不偏估估計

最佳線性不偏估估計為將空間中某無觀測點$\mathbf{u}_0$之估計值$\hat{z}(\mathbf{u}_0)$，以各觀測點的觀測值$z(\mathbf{u}_i)$的線性化組合：

$$\hat{z}(\mathbf{u}_0) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i z(\mathbf{u}_i) \tag{6-20}$$

其中，λ_i為$z(\mathbf{u}_i)$的權重係數，$i = 1,2,\ldots,n$；n為觀測點個數，以不偏估和最

小估計誤差變異數兩項原則，求出線性組合的權重係數，再代入估計式計算空間內插值。

(一) 不偏估條件：即估計值的平均值須等於真值的平均值 $\boldsymbol{E}\left[\hat{Z}\left(\mathbf{u}_0\right)\right]=\mu_{z_0}$，估計誤差的期望值為零，$\boldsymbol{E}\left[\hat{Z}\left(\mathbf{u}_0\right)-Z\left(\mathbf{u}_0\right)\right]=0$。

(二) 最小估計誤差變異數條件：即估計誤差的變異數的期望值 $\sigma_{\hat{z}_o}^2=\boldsymbol{E}\left[\left(\hat{Z}\left(\mathbf{u}_0\right)-Z\left(\mathbf{u}_0\right)\right)^2\right]$ 為最小。

6.2.2 簡單克利金法（Simple Kriging）

假設空間隨機變數具有定常性，平均值為常數，並且其數值 m 為已知，因此內插估計時，可先將各變數減去已知的平均值。去除平均值的變數差值已經自動滿足「不偏估條件」，因此權重係數僅須滿足「最小估計誤差變異數條件」，此種內插估計狀況稱為簡單克利金法。簡單克利金法的內插估計式為：

$$\hat{z}(\mathbf{u}_0)=m+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left[z(\mathbf{u}_i)-m\right] \tag{6-21}$$

估計誤差變異數為 $\sigma_{\hat{z}_o}^2=\boldsymbol{E}\left[\left(\hat{Z}\left(\mathbf{u}_0\right)-Z\left(\mathbf{u}_0\right)\right)^2\right]$，使估計誤差變異數為最小的必要條件是：$\sigma_{\hat{z}_o}^2$ 對任意權重係數 λ_i 的微分值必須為零。將(6-21)式代入估計誤差變異數 $\sigma_{\hat{z}_o}^2$，並且對 λ_i 微分，整理可得以下方程式：

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\sigma_{\hat{z}_o}^2}{\partial\lambda_i}=2\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)-2\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_0)=0\\&\Leftrightarrow\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)=\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_0)\end{aligned}\qquad \text{for } i=1,2,....,n \tag{6-22}$$

令 $c_{ij}=\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)$，將以上 n 組權重係數的線性方程式改寫為矩陣式：

$$\begin{bmatrix}\sigma^2 & c_{12} & \cdots & c_{1n}\\ c_{21} & \sigma^2 & \cdots & c_{2n}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & \sigma^2\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\\ \vdots\\ \lambda_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c_{01}\\ c_{02}\\ \vdots\\ c_{0n}\end{bmatrix} \tag{6-23}$$

將上式解出的權重係數，代入簡單克利金法的內插估計式，得到的期望估計誤差變異數為：

$$\boldsymbol{E}\left[\left\{\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right\}^2\right]=\sigma_z^2-\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_0-\mathbf{u}_j) \tag{6-24}$$

若空間定常性不存在而使用內在假設，則權重係數的聯立方程式組可以改寫為：

$$\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\gamma(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)=\gamma(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_0) \tag{6-25}$$

或 $$\begin{bmatrix} 0 & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1n} \\ \gamma_{21} & 0 & \cdots & \gamma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \cdots & 0 \end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\\ \vdots\\ \lambda_n\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\gamma_{01}\\ \gamma_{02}\\ \vdots\\ \gamma_{0n}\end{bmatrix}$$

使用內在假設時，估計誤差變異數為：

$$\boldsymbol{E}\left[\left\{\hat{z}(\mathbf{u}_0)-z(\mathbf{u}_0)\right\}^2\right]=\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\gamma(\mathbf{u}_0-\mathbf{u}_j) \tag{6-26}$$

6.2.3 普通克利金法（Ordinary Kriging）

假設空間隨機變數具有定常性，平均值為常數但其數值未知，內插估計值的表示法為 $\hat{z}(\mathbf{u}_0)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i z(\mathbf{u}_i)$ ，以不偏估條件可導出所有權重係數的和必須為 1：

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=1 \tag{6-27}$$

由估計誤差變異數最小的條件可知對任意 λ_j 微分，微分值必須為零：

$$\frac{\partial\sigma_{\hat{z}_o}^2}{\partial\lambda_i}=2\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)-2\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_0)=0 \quad \text{for } i=1, 2, ..., n \tag{6-28}$$

利用 Lagrange multiplier 將以上兩種條件結合：

$$L=\sigma_{\hat{z}_o}^2+2\nu\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i-1\right) \tag{6-29}$$

ν 為 Lagrange multiplier 係數。上式對各變數的偏微分在最小值時皆應為 0：

$$\frac{\partial L}{2\partial\lambda_i}=\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)-\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_0)+\nu=0 \quad \text{for } i=1, 2, ..., n \tag{6-30}$$

$$\frac{\partial L}{2\partial \nu}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i -1 =0 \tag{6-31}$$

由(6-30)及(6-31)的 n+1 組聯立方程式求得權重係數：

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n}\lambda_j \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)+\nu = \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_0) \quad \text{for } i=1, 2, ..., n \\ \sum_{j=1}^{n}\lambda_j =1 \end{cases} \tag{6-32}$$

$$\text{或} \begin{bmatrix} \sigma^2 & c_{12} & \cdots & c_{1n} & 1 \\ c_{21} & \sigma^2 & \cdots & c_{2n} & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{n1} & c_{n2} & \cdots & \sigma^2 & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{01} \\ c_{02} \\ \vdots \\ c_{0n} \\ 1 \end{bmatrix}$$

估計誤差變異數為：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}\left[\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right]^2 &= \boldsymbol{E}\left[\left(Z_0 - m\right)-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left(Z_i - m\right)\right]^2 \\ &= \sigma_z^2 - 2\sum_{i=1}^{n}\lambda_i \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_i)+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\lambda_i\lambda_j \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j) \\ &= \sigma_z^2 - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_i)+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left[\sum_{j=1}^{n}\lambda_j \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_j)-\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_i)\right] \end{aligned}$$

將(3-32a)式代入[ ]化簡得到：

$$\boldsymbol{E}\left[\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right]^2 = \sigma_z^2 - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_i)+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i(-\nu)$$

再將(3-32b)式代入，化簡即可得到以下(6-33)式的估計誤差變異數：

$$\boldsymbol{E}\left[\left\{\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right\}^2\right] = \sigma_z^2 - \nu - \sum_{i=1}^{n}\lambda_i \boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_0 - \mathbf{u}_i) \tag{6-33}$$

若定常性假設不能成立，而內在假設可以成立，則(6-28)及(6-32)式中的協變異函數可藉由轉換式 $\boldsymbol{cov}(d)=\sigma^2-\gamma(d)$ 或 c_{ij}=$\sigma^2-\gamma_{ij}$，以半變異圖函數取代協變異函數，聯立方程式變為：

$$
\begin{bmatrix}
\sigma^2 & \sigma^2-\gamma_{12} & \cdots & \sigma^2-\gamma_{1n} & 1 \\
\sigma^2-\gamma_{21} & \sigma^2 & \cdots & \sigma^2-\gamma_{2n} & 1 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
\sigma^2-\gamma_{n1} & \sigma^2-\gamma_{n2} & \cdots & \sigma^2 & 1 \\
1 & 1 & \cdots & 1 & 0
\end{bmatrix}
\cdot
\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \nu \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} \sigma^2-\gamma_{01} \\ \sigma^2-\gamma_{02} \\ \vdots \\ \sigma^2-\gamma_{0n} \\ 1 \end{bmatrix}
$$

消去以上矩陣方程式中的$\sigma^2\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=\sigma^2$，等號左右皆乘以$-1$，令$\nu'=-\nu$以上矩陣方程式可以轉換和簡化為：

$$
\begin{cases}
\sum\limits_{j=1}^{n}\lambda_j\gamma(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_j)+\nu'=\gamma(\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_0) \quad \text{for} \quad i=1,2,....,n \\
\sum\limits_{j=1}^{n}\lambda_j=1
\end{cases}
\tag{6-34}
$$

或
$$
\begin{bmatrix}
0 & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1n} & 1 \\
\gamma_{21} & 0 & \cdots & \gamma_{2n} & 1 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\
\gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \cdots & 0 & 1 \\
1 & 1 & \cdots & 1 & 0
\end{bmatrix}
\cdot
\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \nu' \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} \gamma_{01} \\ \gamma_{02} \\ \vdots \\ \gamma_{0n} \\ 1 \end{bmatrix}
$$

當內在假設成立時，估計誤差變異數為：

$$
\boldsymbol{E}\left[\left\{\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right\}^2\right]=\nu'+\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\gamma(\mathbf{u}_0-\mathbf{u}_j)
\tag{6-35}
$$

一個互動式普通克利金法的網站，請大家上去使用，以利對克利金法有感。

http://www.unigis.ac.at/fernstudien/UNIGIS_professional/traun/spatial_interpolation/kriging4.htm

6.3 平均值具有空間變化趨勢的內插估計

6.3.1 平均值具空間變化趨勢的隨機變數

空間隨機變數常具有某種空間平均趨勢，例如溫度會隨緯度、高度變化

$$
Z(\mathbf{u})=m(\mathbf{u})+\zeta(\mathbf{u})
\tag{6-36}
$$

其中，$m(\mathbf{u})$為隨空間位置而變化的平均趨勢(drift or trend)，$m(\mathbf{u})=\boldsymbol{E}\left[Z(\mathbf{u})\right]$。在通用克利金法中，通常將平均趨勢以未知係數的單項式組合方程式表示之

$$
m(\mathbf{u})=\sum_{k=1}^{p}\beta_k f_k(\mathbf{u})
\tag{6-37}
$$

其中，$\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_p$ 為未知常數，稱為趨勢係數(drift coefficients)；$f_1(\mathbf{u}), f_2(\mathbf{u}), \ldots, f_p(\mathbf{u})$ 為已知的空間函數，稱為基礎函數(base function)。二度空間隨機變數的前數階基礎函數形式如下

(一) 零階函數：$\mathrm{k}=0: p=1,\ f_1(x,y)=1$

即常數趨勢：$m(\mathbf{u})=\beta_1 \cdot 1=\beta_1$

(二) 一階函數：$\mathrm{k}=1: p=3, \begin{cases} f_1(x,y)=1 \\ f_2(x,y)=x \\ f_3(x,y)=y \end{cases}$

此平均趨勢即為一斜面：$m(\mathbf{u})=\beta_1+\beta_2 x+\beta_3 y$

(三) 二階函數：$\mathrm{k}=2: p=6, \begin{cases} f_1(x,y)=1 & f_4(x,y)=x^2 \\ f_2(x,y)=x & f_5(x,y)=y^2 \\ f_3(x,y)=y & f_6(x,y)=xy \end{cases}$，

此平均趨勢為二次曲面：$m(\mathbf{u})=\beta_1+\beta_2 x+\beta_3 y+\beta_4 x^2+\beta_5 y^2+\beta_6 xy$

以上形式的趨勢函數又稱為內在函數(intrinsic function)。

6.3.2 平均值具有空間變化趨勢的最佳線性無偏估估計

當隨機變數的平均值具有空間變化趨勢，可以採用兩種方式估計趨勢參數與半變異圖，一是採用迭代的方法，先以迴歸法估計平均趨勢，再將變數值減去平均趨勢的剩餘值估計半變異圖或協變函數，再代入平均值具有空間變化趨勢的克利金法聯立線性方程組中，重新估計平均值空間趨勢係數，再重新求半變異圖或協變函數，直到收斂為止；此方法稱為「去除趨勢法」。另一種方法僅假設趨勢函數，但不估計趨勢函數係數，而採用「一般化協變函數」(generalized covariance)，假設一般化協變函數的參數、平均值變化的趨勢係數、以及內插權重係數等，均為未知數，利用通用克利金法(universal Kriging)同時估計三種係數值。

採用以下線性估計式，估計點變數值為：

$$\hat{z}(\mathbf{u}_0)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i z(\mathbf{u}_i)$$

不偏估條件要求：

$$\boldsymbol{E}\left[\hat{z}(\mathbf{u}_0)\right]=\boldsymbol{E}\left[\sum_{i=1}^{n}\lambda_i z(\mathbf{u}_i)\right]=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,\boldsymbol{E}\left[z(\mathbf{u}_i)\right]=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\sum_{k=1}^{p}\beta_k f_k\left(\mathbf{u}_i\right)$$

$$=\sum_{k=1}^{p}\beta_k\left[\sum_{i=1}^{n}\lambda_i f_k\left(\mathbf{u}_i\right)\right] \tag{6-38a}$$

$$\boldsymbol{E}\left[\hat{z}(\mathbf{u}_0)\right]=\boldsymbol{E}\left[z(\mathbf{u}_0)\right]=\sum_{k=1}^{p}\beta_k\left[\,f_k\left(\mathbf{u}_0\right)\right] \tag{6-38b}$$

因為趨勢係數為未知，因此共有 p 個不偏估限制式以確保估計結果不為趨勢係數變數的函數，即

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i f_k(\mathbf{u}_i)=\ f_k(\mathbf{u}_0)\quad \text{for}\ \ k=1,2,....,p \tag{6-39}$$

利用 Lagrange multiplier 將最小估計誤差變異數條件與 p 個不偏估限制式條件結合得到 n+p 組聯立方程式解 n+p 未知數$\lambda_i,\cdots,\lambda_n,\nu_1,\cdots\nu_p$

$$\begin{cases}\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\,\boldsymbol{cov}(d_{ij})+\sum_{k=1}^{p}\nu_k f_k(\mathbf{u}_i)=\boldsymbol{cov}(d_{i0}) & \text{for}\ \ i=1,2,....,n\\ \sum_{j=1}^{n}\lambda_j f_k(\mathbf{u}_j)=f_k(\mathbf{u}_0) & \text{for}\ \ k=1,2,....,p\end{cases} \tag{6-40a}$$

或是利用半變異圖建立聯立方程組：

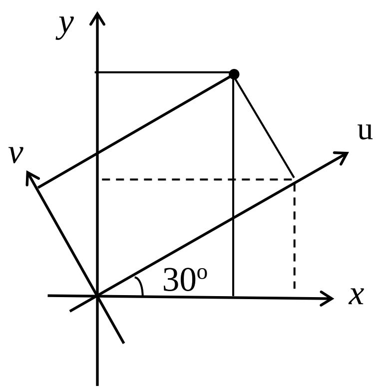
$$\begin{cases}\sum_{j=1}^{n}\lambda_j\gamma(d_{ij})+\sum_{k=1}^{p}\nu'_k f_k(\mathbf{u}_i)=\gamma(d_{i0}) & \text{for}\ \ i=1,2,....,\mathrm{n}\\ \sum_{j=1}^{n}\lambda_j f_k(\mathbf{u}_j)=f_k(\mathbf{u}_0) & \text{for}\ \ k=1,2,....,p\end{cases} \tag{6-40b}$$

估計誤差變異數為

$$\boldsymbol{E}\left[\left\{\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right\}^2\right]=\sigma_z^2-\sum_{k=1}^{p}\nu_k f_k(\mathbf{u}_0)-\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,\boldsymbol{cov}(\mathbf{u}_{i0}) \tag{6-41a}$$

或 $$\boldsymbol{E}\left[\left\{\hat{Z}(\mathbf{u}_0)-Z(\mathbf{u}_0)\right\}^2\right]=\sum_{k=1}^{p}\nu'_k f_k(\mathbf{u}_0)+\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\gamma(d_{i0}) \tag{6-41b}$$

例題5-1 若定義水平方向的對數傳導係數 $z=10\log T$ 為隨機變數，某地下水層的隨機域(random field)資料分析結果顯示兩個主軸方向的半變異圖具有定常性與非等向性，並且第一個主軸在 30° － 210° 方向(x 軸方向為 0° ，逆時鐘旋轉)，半變異圖為 $16\left(1-\exp(-d/2)\right)$；第二個主軸在 120°



－300° 方向，半變異圖為 $16(1-\exp(-d))$；兩個半變異圖函數中的 d 均為距離，單位是 km。欲估計 A (x, y)=(0, 0)地方的 $10\log T$，其中 (x, y) 為空間位置座標，單位為 km；估計時利用附近的三個抽水試驗得到的 $\log T$ 資料，三站的 (x, y, z) 分別為 B(2, 3, -3.5)、C(-2, 1, -1.2) 與 D(1, -1, -6.5)。

(1) 寫出任意兩點 (x_1, y_1) 與 (x_2, y_2) 之間的半變異圖函數式。

(2) 先寫出估計 A 點變數的克利金內插權重係數矩陣方程式的代數形式，再寫出將所有已知數字代入的數字形式，不需解出矩陣。

(3) 先寫出估計誤差變異數的代數式，再將所有已知的數字代入式中，寫出唯有權重係數與 Lagrange multiplier 為未知數的表示法。

解：(1) 由圖形可知

$$x = u\,\boldsymbol{cos}\,30^\circ - v\,\boldsymbol{sin}\,30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2}u - \frac{1}{2}v \qquad (1)$$

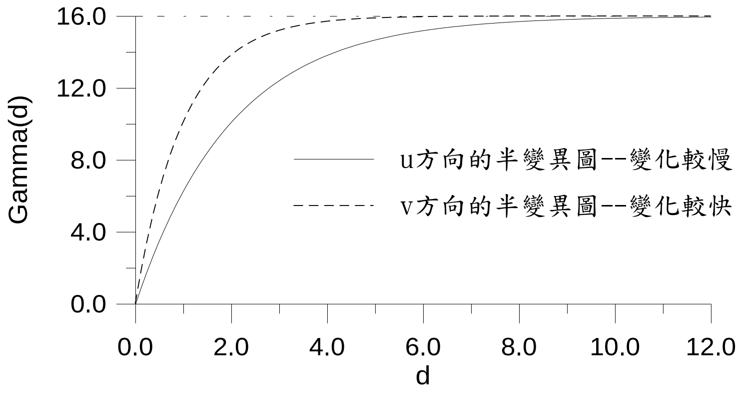
$$y = u\,\boldsymbol{sin}\,30^\circ + v\,\boldsymbol{cos}\,30^\circ = \frac{1}{2}u + \frac{\sqrt{3}}{2}v \qquad (2)$$

由(1)和(2)式可得

$$u = x\,\boldsymbol{cos}\,30^\circ + y\,\boldsymbol{sin}\,30^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{1}{2}y \qquad (3)$$

$$v = -x\,\boldsymbol{sin}\,30^\circ + y\,\boldsymbol{cos}\,30^\circ = -\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y \; (4)$$

題目給的 u 方向及 v 方向半變異圖如下



要加上尺度因子使兩者變化速度相同，所以正規化的距離為

$$d' = \sqrt{\frac{(u_1-u_2)^2}{4} + \frac{(v_1-v_2)^2}{1}}$$

$$= \sqrt{\frac{1}{4}\left[\frac{\sqrt{3}}{2}(x_1-x_2) + \frac{1}{2}(y_1-y_2)\right]^2 + \left[\frac{-1}{2}(x_1-x_2) + \frac{\sqrt{3}}{2}(y_1-y_2)\right]^2}$$

$$= \sqrt{\frac{7}{16}(x_1-x_2)^2 + \frac{13}{16}(y_1-y_2)^2 + \frac{3\sqrt{3}}{8}(x_1-x_2)(y_1-y_2)}$$

$d'_{AB} = 2.27 \quad d'_{BC} = 2.25$

$d'_{AC} = 1.97 \quad d'_{BD} = 3.29$

$d'_{AD} = 1.38 \quad d'_{CD} = 3.33$

正規化的半變異圖為

$$\gamma'(d') = 16[1 - \exp(-d')]$$

(2) 因為隨機域具有定常性，因此不偏估的條件為

$\lambda_B + \lambda_C + \lambda_D = 1$，最小估計誤差的條件如下：

$$\begin{bmatrix} \sigma^2 & \boldsymbol{cov}(B,C) & \boldsymbol{cov}(B,D) & 1 \\ \boldsymbol{cov}(B,C) & \sigma^2 & \boldsymbol{cov}(C,D) & 1 \\ \boldsymbol{cov}(B,D) & \boldsymbol{cov}(C,D) & \sigma^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_B \\ \lambda_C \\ \lambda_D \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{cov}(A,B) \\ \boldsymbol{cov}(A,C) \\ \boldsymbol{cov}(A,D) \\ 1 \end{bmatrix}$$

代入所有已知數字得到：

$$\begin{bmatrix} 16 & 1.7 & 0.6 & 1 \\ 1.7 & 16 & 0.6 & 1 \\ 0.6 & 0.6 & 16 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_B \\ \lambda_C \\ \lambda_D \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.7 \\ 2.2 \\ 4.0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

(3) 估計誤差變異數（估計不確定性）的估計：

$$\boldsymbol{E}\left[\left(Z_A - \hat{Z}_A\right)^2\right] = \sigma^2 - \nu - \lambda_B\,\boldsymbol{cov}(A,B) - \lambda_C\,\boldsymbol{cov}(A,C) - \lambda_D\,\boldsymbol{cov}(A,D)$$

$$= 16 - \nu - 1.7\lambda_B - 2.2\lambda_C - 4\lambda_D$$

例題5-2 利用克利金法內插估計上題含水層的地下水水位 (z，單位為 m)空間分佈，透過資料分析已知該區域的地下水水位資料具有非定常、非等向性，第一個主軸在 $30^\circ - 210^\circ$ 方向(x 軸方向為 0° ，逆時

鐘旋轉)，半變異圖為$\theta_u \cdot d$，參數θ_u為$1\,m^2/km$；第二個主軸在120°－300°方向，半變異圖為$\theta_v \cdot d$，參數θ_v為$2\,m^2/km$。A、B、C、D四點的座標與上題相同，地面高程（海拔）分別為 120m、130m、115m和 100m；B、C、D 三點的地下水水位（海拔）分別為，107m、103m與 90m。若選擇的平均趨勢模式為$\mu_Z(x,y,h)= a_0+a_1x+a_2y+a_3h$，請回答以下問題：

(1) 寫出任意兩點(x_1,y_1)與(x_2,y_2)之間的半變異圖函數式。

(2) 先寫出估計 A 點地下水水位的克利金內插權重係數矩陣方程式的代數形式，再寫出將所有已知數字代入的數字形式，不需解出矩陣。

(3) 先寫出估計誤差變異數的代數式，再將所有已知的數字代入式中，寫出唯有權重係數與 Lagrange multiplier 為未知數的表示法。

解： (1) 由於主軸相同，第一主軸的線性模式半變異圖參數θ_u為第二主軸參數θ_v的一半；也就是第一主軸變化比較慢，第二主軸變化比較快的情形，因此正規化的距離d'可以定義如前，正規化的半變異圖為$\gamma(d')=2d'$。

(2) 不偏估的條件共有四個

$$\lambda_B+\lambda_C+\lambda_D=1$$

$$x_B\lambda_B+x_C\lambda_C+x_D\lambda_D=x_A$$

$$y_B\lambda_B+y_C\lambda_C+y_D\lambda_D=y_A$$

$$h_B\lambda_B+h_C\lambda_C+h_D\lambda_D=h_A$$

(註：以上共四個方程式、三個未知數λ_B、λ_C和λ_D，所以除非矩陣的行列式為零否則無解，本題僅為示範做法，因此只用三個點代表)。

$$\begin{bmatrix} 0 & \gamma'(d'_{BC}) & \gamma'(d'_{BD}) & 1 & x_B & y_B & h_B \\ \gamma'(d'_{BC}) & 0 & \gamma'(d'_{CD}) & 1 & x_C & y_C & h_C \\ \gamma'(d'_{BD}) & \gamma'(d'_{CD}) & 0 & 1 & x_D & y_D & h_D \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_B & x_C & x_D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ y_B & y_C & y_D & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_B & h_C & h_D & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_B \\ \lambda_C \\ \lambda_D \\ \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \\ \nu_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma'(d'_{AB}) \\ \gamma'(d'_{AC}) \\ \gamma'(d'_{AD}) \\ 1 \\ x_A \\ y_A \\ h_A \end{bmatrix}$$

代入所有已知數字得到：

$$\begin{bmatrix} 0 & 4.5 & 6.6 & 1 & 2 & 3 & 130 \\ 4.5 & 0 & 6.6 & 1 & -2 & 1 & 115 \\ 6.6 & 6.6 & 0 & 1 & 1 & -1 & 100 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 130 & 115 & 100 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_B \\ \lambda_C \\ \lambda_D \\ \nu_0 \\ \nu_x \\ \nu_y \\ \nu_h \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.5 \\ 4.0 \\ 2.8 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 120 \end{bmatrix}$$

(3) 最小估計誤差的條件如下：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{E}\left[\left(Z_A - \hat{Z}_A\right)^2\right] &= -\nu_0 - \nu_x x_A - \nu_y y_A - \nu_z h_A \\ &\quad + \lambda_B \gamma'(d'_{AB}) + \lambda_C \gamma'(d'_{AC}) + \lambda_D \gamma'(d'_{AD}) + \gamma'(0) \\ &= -\nu_0 - 120\nu_h + 4.5\lambda_B + 4\lambda_C + 2.8\lambda_D \end{aligned}$$

6.4 模式適用性測試

在克利金法中，半變異圖的決定是經由觀測樣本資料的協變異數隨距離變化的情形選定適當的函數擬合而成的，然而，所選擇函數的是否合宜則必須模式適用性測試得知。常用的測試法為正交殘餘值測試法(ortho-normal residuals test)或效率係數(coefficient of efficiency)測試。

6.4.1 正交殘餘值測試法

正交殘餘值測試法中主要在測量實際值與估計值間的誤差(即殘餘值)分佈，若所選擇函數的合宜，則殘餘值間必為彼此獨立不具相關性的。假設有 n 個測量點，測試的方法為對第 k 個點只取前面 k-1 個觀測值來內插估計第 k 個點的估計值 $\hat{z}(\mathbf{u}_k)$，$k = p+1,\cdots,n$，p 為趨勢係數的個數(例如內在假設為零階函數，則 p=1)，然後計算第 k 個點的觀測值 $z(\mathbf{u}_k)$ 與估計值 $\hat{z}(\mathbf{u}_k)$ 間的誤差 $z(\mathbf{u}_k) - \hat{z}(\mathbf{u}_k)$ 並將誤差值除以估計誤差的標準偏差值 σ_k (加以正規化(normalized)

$$\varepsilon_k = \frac{z(\mathbf{u}_k) - \hat{z}(\mathbf{u}_k)}{\sigma_k} \quad k = p+1,\cdots,n \tag{6-42}$$

由此得到 n-p 個殘餘項，若選擇函數的合宜，則殘餘值的平均應為零，變異數為一，且為不相關的：

$$E\left[\varepsilon_k \varepsilon_l\right] = \begin{cases} 1 & \text{if } k = l \\ 0 & \text{if } k \neq l \end{cases} \qquad k, l = p+1, \cdots, n \tag{6-43}$$

計算

$$Q_1 = \frac{1}{n\text{-}p} \sum_{k=p+1}^{n} \varepsilon_k \tag{6-44}$$

$$Q_2 = \frac{1}{n\text{-}p} \sum_{k=p+1}^{n} \varepsilon_k^2 \tag{6-45}$$

Q_1 必須接近於零而 Q_2 必須接近於一。Q_1 及 Q_2 均為隨機變數，Q_1 的樣本空間應接近平均值為零變異數為 $1/(n-p)$ 的常態分佈，所以 Q_1 有 95%機率落在

$$|Q_1| < \frac{2}{\sqrt{n-p}} \tag{6-46}$$

而 $(n-p)Q_2$ 的樣本空間接近於一自由度為 n-p 的卡方分佈(chi-square distribution)分佈，所以 Q_2 有 95%機率落在以下範圍內：

$$\chi^2_{0.025,n-p} < (n-p)Q_2 < \chi^2_{0.975,n-p} \tag{6-47}$$

若 Q_1 及 Q_2 落在 95%信心區間之外，則所選擇的擬合模式可能為不適用。

6.4.2 效率係數測試

對於 n 個測量點，每次均假設其中一站 i（$i = 1, \cdots, n$）為未知，而以其他 n-1 個點的測量值來內插估計，如此可得到 n 組觀測值 $z(\mathbf{u}_i)$ 與估計值 $\hat{z}(\mathbf{u}_i)$，$i = 1, \cdots, n$。定義效率係數 CE 為：

$$\mathrm{CE} = 1 - \left\{ \sum_{i=1}^{n} \left[z(\mathbf{u}_i) - \hat{z}(\mathbf{u}_i) \right]^2 \Big/ \sum_{i=1}^{n} \left[z(\mathbf{u}_i) - m \right]^2 \right\} \tag{6-48}$$

m 為量測平均值。效率係數愈趨近於一，表示估計結果與實際資料愈接近，模式的適用性越良好，若效率係數小於 0.5，則模式的選擇可能不適宜。