通用克利金法的統計結構模型選擇和參數檢定方法

李天浩[2]　溫欣儀[1]　陳雲蘭[2]　陳孟詩[2]
國立臺灣大學土木工程學系[1]　中央氣象局[2]

摘　要

克利金法在統計理論上的兩個主要優勢，一是利用觀測樣本決定變數的統計結構，包括趨勢函數和半變異圖；另一是該方法為「最佳線性不偏估計」。在實際應用時，使用者需要選擇統計結構模型、檢定參數和評估估計結果。通用克利金法只須辨識趨勢函數結構、但不需估計係數；在估計時，利用限制條件去除趨勢函數係數值影響的作法，增加了估計方法的方便性，但也讓一階統計結構參數的影響變得隱晦不明；在沒有清楚一階統計結構參數及其可能影響的條件下，連帶也無法設計強健的二階統計結構參數檢定方法和程序。
本研究簡介最大概似和交叉驗證兩種統計結構參數檢定方法，推薦通用克利金法應用交叉驗證法，檢定半變異圖模式的參數，同時鑑別不同半變異圖模式的良窳。目標函數採用趨勢函數的迴歸估計誤差平方總和SST，與通用克利金法的去一估計誤差平方總和SSE，計算通用克利金法估計改進迴歸估計的效率係數，$1-$ SSE/SST。
利用2008到2012年的小時溫度、日均溫和月均溫案例數據，證實各種半變異圖模型，利用不同方法檢定得到的最佳參數，計算交叉驗證法目標函數的初始值，透過再搜尋模型參數，各種模型的目標函數都還能再改進，且容易客觀判斷和選擇合宜的半變異圖模型。比較應用不同半變異圖模形估計的結果，顯示應用球形半變異圖模型的估計經常表現最佳。本研究闡明既然克利金法估計的最終目的是使估計誤差變異數最小化，則選擇統計結構模型，和估計個別模型統計結構參數，都只是克利金法估計的部分過程。因此建議使用（通用）克利金法估計時，應該嘗試使用不同統計結構模型，分別以交叉驗證法檢定其模型參數，比較不同模型最佳參數估計的目標函數，鑑別模型間優劣；最後，再以最適用的半變異圖模型和最佳參數組合，作空間面化估計。

關鍵詞：通用克利金法、迴歸克利金法、外部趨勢克利金法、統計結構、迴歸、趨勢函數、半變異圖、模式選擇、參數檢定、去一估計

一、問題說明

和其他空間資料客觀分析方法比較，克利金法(Kriging technique)在統計理論上的兩個主要優勢，一是利用觀測樣本決定變數的統計結構，包括趨勢函數(trend function)和半變異圖(semi-variogram)；另一是該方法為基於變數空間統計結構的「最佳線性不偏估計」(Best Linear Unbiased Estimate)。雖然克利金法的統計理論健全(robust)，實際應用時，在三個方面仍有不確定性，或是欠缺有效的指標來評估。氣象局擬應用通用克利金法作近地面溫度氣候資料的內插或面化，首先要對這三個問題提出有說服力的作法。

第一個問題，是如何選擇適當的模型。在利用「觀測樣本決定變數統計結構」的部分，有許多半變異圖模型可供選擇，例如定常性的指數、高斯、球形(spherical)等模型，以及許多內在假設模型，如何選擇、比較何者較佳？在「最佳線性不偏估計」的部分，也有多種不同的克利金理論模型，例如普通克利金、通用克利金、迴歸克利金等方法（更多不同的克利金法可參考Li & Heap的2008年回顧報告），有沒有評估指標可以輔助選擇？

第二個問題，是在選擇某種變數統計結構後，可以用什麼方法和程序來估計趨勢函數和半變異圖模型參數？要如何評估不同「模型參數」的優劣或判斷是否為最佳？應用通用克利金法內插、面化近地面溫度等變數，因為不需要估計空間趨勢函數，相對容易；但要有什麼統計健全的程序可循，來估計半變異圖參數？卻變成是更不清楚、更難回答的問題。

第三個問題，是需要設計一個數量指標，來評估通用克利金法產出的估計值；但這個數量指標應該採用什麼東西當作參考基準？什麼數值，代表這組估計到底是有多好？

除了以上三個資料統計結構模型選擇和參數檢定方法的問題外；通用克利金法的另一個主要問題

是一階統計結構的趨勢函數，用Lagrange Multiplier變成多個不偏估條件後，資料的參數模型是什麼？

Hengl等人(2003)認為通用克利金法(Universal Kriging, UK)、外部趨勢克利金法(Kriging with External Drift, KED) 和迴歸克利金法(Regression Kriging, RK)「基本上」都是相同的方法。將他們的歸類定義摘要整理如下：（Wikipedia的Regression Kriging詞條的說明網頁，即是採用他們的觀點。）

- UK法和KED法都是用Lagrange Multiplier，將趨勢函數轉變為不偏估條件，放到估計權重係數的聯立方程組中。如果影響變數都是空間座標，則名稱建議使用UK法；如果影響變數中有空間座標以外的其他變數，則名稱建議使用KED法。
- RK法是將（空間隨機）變數視為是趨勢和序率兩個分量的和，估計時，首先使用觀測值作（空間）迴歸，建立內插點的趨勢分量估計式；再利用觀測點的迴歸殘差值，以普通克利金法估計內插點的序率分量。最後，再將趨勢分量估計值和序率分量估計值相加，得到空間變數的估計值。

Hengl等人(2003)建議，UK法的半變異圖參數檢定，採用和RK相同的程序和作法，先用迴歸法估計趨勢函數的參數，再利用迴歸殘差值，選擇半變異圖模型，並檢定參數。本研究基於兩個理由，不贊同UK法使用這個參數檢定程序和作法。

首先，本研究認為，RK法的變數估計和參數檢定，是用一組資料，分兩次估計。在迴歸估計一階統計結構參數時，因為在空間統計問題中，觀測是和距離（座標）相關的，違反了迴歸問題殘差和自變數不相關的基本假設。在使用殘差估計二階統計結構參數時，殘差值會也受到趨勢函數（係數）不確定性的影響。因為RK法的變數估計和參數檢定，並不是統計理論健全的參數檢定方法；所以，本研究不贊同採用和RK法相同的參數檢定程序和作法。

其次，本研究也不認同Hengl等人(2003)認為UK法和RK法「基本上相同」的看法。主要原因是UK法只須辨識趨勢函數中的影響變數是否顯著，並將顯著者納入估計變數的不偏估限制條件；趨勢函數的係數數值，除了不會在估計程序中出現，所以不需要估計趨勢函數係數外；趨勢函數係數數值不同，理論上也不會讓變數估計出現差異。理論上，UK法只需要選擇半變異圖模型，和估計半變異圖模型參數；但是，利用限制條件去除趨勢函數係數影響的作法，使得二階統計結構的參數檢定問題變得隱晦不明，無法設計參數檢定方法。可能也是這個困難，在沒有其他選項時，Hengl等人(2003)於是建議採用RK的參數檢定程序和作法。

二、參數檢定方法

UK法**需要**用到一階**統計結構**，和二階統計結構與參數，但不需要用到一階統計結構參數。一般克利金法教科書介紹，檢定定常性(stationary)隨機場半變異圖參數的傳統方法是：

a. 利用所有觀測值，每次任取兩站計算原始半變異圖樣本$\left[T_i-T_j\right]^2/2$，距離則通常採用兩站的水平距離$d_{ij}=\sqrt{(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2}$；
b. 集合距離類似、數量略同的原始半變異圖，分群計算原始半變異圖平均值，得到實驗半變異圖$\gamma\left(\bar{d}_{ij}\right)=E\left[T_i-T_j\right]^2/2\approx\sum_{k=1}^{N}\left[T_{i,k}-T_{j,k}\right]^2/(2N)$；
c. 選擇半變異圖函數，以實驗半變異圖樣本擬合半變異圖函數$\gamma\left(d_{ij}\right)$，採用估計誤差平方和最小化原則，決定半變異圖函數參數值。

利用以上作法估計半變異圖函數時，使用者除了不知道應該如何選擇半變異圖函數模型外，其他必須面對、常感困擾的問題，還有：要如何將原始半變異圖按照距離分群，計算實驗半變異圖？估計半變異圖函數參數時，是否應該以距離權重實驗半變異圖擬合誤差的平方？是否應該假設金塊效應為0？這些問題並無標準答案、相當隨意(arbitrary)、通常必須依賴使用者的經驗來決定。還有就是統計理論上也有多重估計的問題。

對任意兩觀測站溫度差值平方樣本取期望值，再將其分為半變異圖$\gamma\left(d_{ij}\right)$，和空間趨勢差值平方$\left[\beta_x\Delta x_{ij}+\beta_y\Delta y_{ij}+\beta_z\Delta z_{ij}\right]^2$兩部分如下式：

$$\begin{aligned}E\left[T_i-T_j\right]^2&=2\gamma\left(d_{ij}\right)+E\left[\bar{T}_i-\bar{T}_j\right]^2\\&=2\gamma\left(d_{ij}\right)+E\left[\beta_x\Delta x_{ij}+\beta_y\Delta y_{ij}+\beta_z\Delta z_{ij}\right]^2\end{aligned}\qquad(1)$$

(1)式中等號左邊的$E\left[T_i-T_j\right]^2$可以使用溫度觀測數據計算得到；等號右邊的$\gamma\left(d_{ij}\right)$即是半變異圖。當變數場為定常性隨機場($\beta_x=\beta_y=\beta_z=0$)時，空間趨勢函數差值平方項為0，可以直接使用分群的變異圖資料，$E\left[T_i-T_j\right]^2$，估計半變異圖函數參數。若隨機場非定常時，$\left[T_i-T_j\right]^2$的變異圖資料樣本，便會受到空間趨勢函數差值平方項的「汙染」。

在P5計畫尚未開發有效求解最大概似法目標函數數值方法的齊間，曾經嘗試兩種簡單方法估計二階統計結構參數。這些嘗試，都是在想辦法清除或降低(1)式中，$\left[T_i-T_j\right]^2$樣本資料中空間趨勢函數差值平方項的影響。

第一個嘗試，是使用類似RK迴歸克利金法的程序，先利用迴歸法估計趨勢函數的係數值，再從$\left[T_i-T_j\right]^2$樣本中扣除$\left[\beta_x\Delta x_{ij}+\beta_y\Delta y_{ij}+\beta_z\Delta z_{ij}\right]^2$，然後再使用「去除趨勢」的殘差值，估計半變異圖參數。

第二個嘗試，是利用迴歸法估計趨勢函數的係數值 $\beta_x, \beta_y, \beta_z$，選擇可接受的趨勢差值平方門檻值，例如 $\left[\beta_x \Delta x_{ij} + \beta_y \Delta y_{ij} + \beta_z \Delta z_{ij}\right]^2 < V_c = 0.25(^\circ C)^2$；在利用觀測樣本計算原始半變異圖(raw variogram)樣本時，根據任意兩站的座標差值 $\Delta x_{ij}, \Delta y_{ij}, \Delta z_{ij}$，計算樣本的趨勢差值平方數值，若小於 V_c 條件，則保留這筆原始半變異圖資料，若否，則拋棄不用。其概念是剔除趨勢差值平方項「汙染」嚴重的資料，再以汙染不嚴重的半變異圖樣本，計算實驗半變異圖和檢定二階參數。此方法簡單，但應用時伴隨的兩個問題是：若採用比較小的 V_c 值、嚴格的剔除標準，則剩餘可用的原始半變異圖樣本資料數量稀少；以及不論採用多小的 V_c 值，趨勢差值的汙染值總是為正，有偏估參數的傾向。

以上兩個嘗試，都是先作一階參數估計，純化原始半變異圖資料後，再作二階參數估計，基本上都並不是理想的參數檢定方法。針對RK法的一階和二階統計結構參數檢定，Martin & Simpson (2004)建議採用：(1)最大概似法(Maximum Likelihood Estimation, MLE)和(2)交叉驗證法(Cross Validation, CV)。相對於本研究團隊的嘗試，這兩種方法都可以同時檢定一階和二階統計結構參數，統計理論健全的方法。

1. 最大概似法

最大概似法檢定參數的概念是，找出參數向量的數值，以使觀測樣本數值的聯合機率為最高。在此問題中，聯合機率便是目標函數。應用最大概似法檢定參數，需要已知：(1)觀測和估計（隨機）變數（如溫度）的機率密度函數，例如常態或對數常態分布等；(2)（隨機）變數一階統計結構（即趨勢函數）的模型方程式，例如溫度隨緯度和隨高度變化為線性關係；和(3)（隨機）變數的二階統計結構（即協變異圖，其意義是任意兩空間位置隨機變數的協變異數，隨兩變數距離變化的函數。在定常性條件下，協變異圖為半變異圖的補函數）。若（隨機）變數的機率密度函數為三參數或更多參數，則除了趨勢函數和協變異圖外，還需要更多的高階變數統計結構。

假設溫度 T 為常態分布的隨機變數，一組（測站）隨機變數向量為 $\mathbf{T}$，觀測值的向量樣本為 $\mathbf{t}$，其聯合機率密度函數為：

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

其中，$\mathbf{m}$ 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、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 $\lambda_{ij} = \boldsymbol{E}[(T_i - m_i)(T_j - m_j)]$，也可用半變意圖函數 $\gamma(d_{ij})$ 表示，$\lambda_{ij} = \sigma^2 - \gamma(d_{ij})$，$\sigma^2$ 是（隨機變數的）變異數，d_{ij} 是兩變數的距離。

因為(2)式的最大概似問題需要明確的趨勢函數和協變異圖，所以Martin & Simpson (2004)採用RK的迴歸克利金法。最大概似法將一階和二階參數都放在同一個目標函數內檢定，故此方法在統計理論上並無疑慮。唯如Martin & Simpson (2004)指出，將選擇的趨勢函數和半變異圖函數代入(2)式，求解使聯合機率數值最大化的問題，未必能計算各檢定參數的微分值，必須使用其他數值方法搜尋參數最佳解。在一階和二階參數檢定方法沒有統計理論疑慮的狀況下，利用參數已知的趨勢函數，計算各觀測值的殘差；繼而使用參數值已知的半變異圖和殘差值，以普通克利金法估計序率分量；最後再將趨勢估計和序率估計相加，得到內插點的估計值，便無統計理論問題。

2. 交叉驗證法

交叉驗證法(Cross Validation, CV)是以克利金法作各觀測值的去一估計(leave-one-out estimate)，參數檢定的目標，是使估計誤差平方和等預報瑕疵(predictive deficiency)最小化等方式，找出最佳的統計結構參數值(Currin等人，1988)。

其他克利金法參數檢定方法，都是在選擇了統計結構函數型式後，決定統計結構參數的方法，並不涉及第二部分的最佳線性不偏估估計。但是，在某種統計結構型式條件下，最佳化的模型參數，未必可以得到最佳的去一估計誤差平方和。交叉驗證法直接以最終估計效果為目標函數，決定統計結構的最佳參數值。唯有在所有因素都達到最佳化的條件下，交叉驗證法的目標函數才會是最佳值；因此，交叉驗證法除了可以檢定半變異圖參數外，也可以用來選擇半變異圖模型、和判斷哪種克利金法（UK、RK等）的估計結果最佳。

3. 目標函數

若使用估計誤差平方和作為目標函數，可用數值大小來比較計算所得目標函數值之間相對的好與壞，但是使用者無法直接從指標數值，判斷估計的絕對好、壞標準。設計目標函數的這個數量指標，應該採用什麼東西當作參考基準？

以內插面化近地面溫度為例，針對上述兩個問題，本研究選擇使用所有測站溫度觀測資料，直接以趨勢函數迴歸得到各測站估計才殘差的「總差值平方和SST」(sum of squared total)，作為參考比較基準；再使用UK法去一估計的「平方誤差和SSE」(sum of squared errors)和SST，計算交叉驗證法的效率係數(Coefficient of Efficiency)作為本研究的目標函數：

$$C_e = 1 - [\,SSE/SST\,] \qquad (3)$$

此指標的意義，若 C_e 值小於 0，表示通用克利金法的估計結果，尚不如簡單的資料線性迴歸估計；若 C_e 值大於 0，則表示表示通用克利金法的估計優於迴歸估計法。最佳的C_e 值是1，此時SSE的數值為0，即UK法對所有觀測值的去一估計，都是完美估計。

4. 檢定方法

UK法使用Lagrange Multiplier將一階統計結構轉變為限制條件，不需要檢定一階統計結構參數；內插估計時必要的二階統計結構，因為沒有一階統計結構參數，無法建構只檢定二階參數的問題。應用UK法時，仍然建議可以先使用最大概似法，同時檢定一階和二階的參數，然後再使用正確的二階統計結構作內插估計。

本研究團隊最後選擇交叉驗證法檢定參數；首先，選擇二階統計結構模型，利用UK法計算估計誤差平方和目標函數，其次，再以交叉驗證法檢定模型參數，使目標函數最小化。方法步驟是：

a. 採用RK迴歸克利金法的程序，先迴歸估計趨勢函數係數值；以迴歸去除一階趨勢影響的方式，純化原始半變異圖資料，檢定所選擇半變異圖模型的參數的粗估值。
b. 以粗估的半變異圖參數值，利用UK法作去一估計，計算(3)式的效率係數目標函數。
c. 半變異圖模型不變，採用多分法(multi-section)法或Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS)演算法配合微小擾動估計梯度，檢定半變異圖參數。檢定時，以UK法再計算(3)式的效率係數目標函數，若目標函數優於先前的最佳結果，則以新參數取代之。
d. 重複步驟c，直到目標函數不再改善，或是參數改變量小於設的的門檻值為止，便得到該組半變異圖模型的最佳參數。
e. 改更半變異圖模型，回到步驟a，經過b~d各迭代步驟求出最佳參數後，又再回到此步驟e，繼續變更半變異圖模型，直到找出所有半變異圖模型的最佳參數為止。
f. 比較使用不同半變異圖模型分別檢定得到最佳參數對應的目標函數；從中選出效率係數最高的半變異圖模型和參數，並採用此組模型和參數，以UK法作內插估計或面化。

三、應用與討論

本研究從2003年到2012年的氣象局、環保署、農業氣象站等小時資料中，取出沒有任何一小時缺漏、有效觀測站數最多，四組不同時間長度的近地面溫度資料，進行UK法的半變異圖模型選擇和參數檢定數值試驗。這四組資料的日期和時間如下：

- D1：2009年12月2日24時的小時溫度，201筆觀測資料；
- D2：2009年11月21日的日均溫，183筆觀測資料；
- D3：2008年2月的月均溫，共104筆觀測資料；
- D4：2012年12月的月均溫，共240筆觀測資料(為求最大有效觀測站數，這組資料部分測站的部分時間，利用資料補遺補齊，唯資料品質並非本研究探討重點）。

1. 粗估參數與估計效率

以上D1~D4的四組資料，先利用線性迴歸法估計趨勢函數，再採用「去除趨勢」或「去除汙染」的方法粗估半變異圖參數。由於這4組殘差半變異圖資料，都具有定常性質，故僅採用四種定常性半變異圖模型，分別是指數模型(M1)、球形模型(M2)、高斯模型(M3)和坑洞效應(Hole-effect)模型(M4)。這四種模型包含金塊效應 C_0 的數學方程式簡單表示如下，其中 σ^2 是變異數，$\tilde{d} = d/L$ 是正規化的距離，L 是距離參數。

$$\text{M1：}\ \gamma(d) = C_0 + \left(\sigma^2 - C_0\right)\left[1 - \boldsymbol{exp}\left(-\tilde{d}\right)\right] \tag{4a}$$

$$\text{M2：}\ \gamma(d) = C_0 + \left(\sigma^2 - C_0\right)\left[3\tilde{d} - \tilde{d}^3\right]/2 \quad \text{for } \tilde{d} < 1 \tag{4b}$$

$$\text{M3：}\ \gamma(d) = C_0 + \left(\sigma^2 - C_0\right)\left[1 - \boldsymbol{exp}\left(-\tilde{d}^2\right)\right] \tag{4c}$$

$$\text{M4：}\ \gamma(d) = C_0 + \left(\sigma^2 - C_0\right)\left[1 - \left(1 - \tilde{d}\right)\boldsymbol{exp}\left(-\tilde{d}\right)\right] \tag{4d}$$

D1~D4各組資料利用不同半變異圖模型擬合，粗估得到的參數 σ^2 、C_0 和 L 數值，分別如表 1中的第2、3、4欄。利用各半變異圖模型和粗估參數，使用UK法作去一估計，得到表 1中第5欄的效率係數。

表 1 利用去除趨勢法粗估，和交叉驗證法最佳化，得到的半變異圖參數與效率係數

D1	σ^2	C_0	L	C_e	C_0^*	L^*	C_e^*
M1	2.09	0.209	0.086	0.183	0.009	0.549	0.302
M2	2.00	0.200	0.159	0.150	0.000	0.934	0.317
M3	2.03	0.100	0.074	0.155	0.195	0.081	0.158
M4	2.04	0.789	0.404	-12.0	1.422	0.006	0.280
D2	σ^2	C_0	L	C_e	C_0^*	L^*	C_e^*
M1	1.30	0.130	0.084	0.189	0.072	0.466	0.244
M2	1.27	0.012	0.112	0.077	0.120	0.556	0.264
M3	1.27	0.227	0.065	0.101	0.285	0.281	0.229
M4	1.21	0.121	0.200	-108	0.351	0.051	0.258
D3	σ^2	C_0	L	C_e	C_0^*	L^*	C_e^*
M1	0.74	0.191	0.349	-0.032	0.426	0.258	-0.002
M2	0.74	0.267	1.070	-0.001	0.421	0.744	0.024
M3	0.74	0.328	0.528	0.010	0.464	0.478	0.018
M4	0.68	0.202	0.693	-0.865	0.548	0.180	-0.034
D4	σ^2	C_0	L	C_e	C_0^*	L^*	C_e^*
M1	0.72	0.093	0.168	0.363	0.045	0.255	0.369
M2	0.71	0.213	0.460	0.351	0.047	0.699	0.393
M3	0.71	0.273	0.224	0.314	0.243	0.294	0.320
M4	0.66	0.151	0.383	-1606	0.330	0.018	0.369

比較表 1中第5欄，利用各種半變異圖模型和粗估係數計算得到的效率係數，發現：

(1) M1指數模型和去除趨勢法粗估參數的去一估計效率係數表現通常最優，其次是M2球形模型和M3高斯模型，後二者的差距不大。
(2) 四組案例資料應用M4坑洞效應半變異圖模型的效率係數數值都小於0，表示估計結果都不如單純迴歸的估計；效率係數數值出現-1606，可能是權重係數矩陣不穩定的結果。
(3) D3：2008年2月104筆有效月均溫觀測的案例，應用四種模型估計的效果都不佳，應該是迴歸殘差的變異數原本就小，同時，觀測資料密度也比較低有關。

2. 檢定參數與改善效果

接著，採用交叉驗證法搜尋最佳參數的方法，是利用簡單的多變數多分法(Multi-section)，檢定M1~M4的半變異圖模型參數中的金塊效應 C_0 和長度因子 L。不檢定變異數參數 σ^2 的原因，是克利金法的估計，只會和 C_0/σ^2 的比率有關，不需要同時檢定 C_0 和 σ^2 兩參數。多切法搜尋此二參數設定的演算法為：

a. 設定檢定參數的初始範圍，令 $C_0 \in \left(0,\ 0.7\sigma_i^2\right)$ 和 $L \in \left(0.3L_i,\ 5L_i\right)$。
b. 將每個參數範圍 $(a,\ b)$ 都均分為3等份（或5等分等單數等分），參數間距為 $\Delta p = (b-a)/3$，每次多變數多分法迭代共計算 4×4 次的去一法UK估計，得到16個不同參數組合的目標函數 C_e 值。取16組 C_e 值之中的最高者 C_e^*，及其對應的參數 C_0^* 和 L^*。
c. 以參數 C_0^* 和 L^* 為中心，參數間距 ΔC_0 與 ΔL 都減半，重新令搜尋範圍為 $\left(C_0^*-\Delta C_0/2, C_0^*+\Delta C_0/2\right)$ 和 $\left(L^*-\Delta L/2, L^*+\Delta L/2\right)$，再以多切參數作去一估計，計算目標函數。

設定二維多切法的搜尋次數為5次迭代，檢定得到的最佳 C_0^*、L^* 參數和目標函數值 C_e^*，如表 1中第6~8欄。比較利用交叉驗證法檢定參數得到的效率係數，和以迴歸殘差值粗估得到的效率係數，發現：

(1) 使用不同半變異圖模型，分別以交叉驗證法檢定參數，M2球形模型檢定得到的效率係數表現通常最優，其他三個模型檢定後的差距不大。
(2) 重新檢定參數後，四組案例資料應用M4坑洞效應半變異圖模型的效率係數數值改善最多，目標函數和另外三種半變異圖的相差不遠，表示利用迴歸殘差和傳統方法，估計M4坑洞效應半變異圖模型參數的效果相對不佳。
(3) D3：2008年2月104筆有效月均溫觀測的案例，應用四種模型，以交叉驗證法再檢定參數後，UK法的估計效果仍然不佳。證實是迴歸殘差的變異數原本就小，同時，觀測資料密度也比較低有關。

3. 鄰近站距離的影響

Bourennane等人(2000)的研究，證實觀測資料密度對於克利金法去一估計效率係數的影響；當資料密度愈高，去一估計的效率係數亦隨之升高。其背後原因，是隨著觀測資料密度升高，每個去一估計和鄰近觀測的平均距離會變短，或其鄰近觀測站對於估計點的資訊平均都會增加。

根據以上觀測資料密度和估計效率係數關係的理解，本研究按照去一估計和其最鄰近一站($n_s=1$)的距離，或最鄰近三站($n_s=3$)的平均距離，分為近、中、遠三類，統計UK法作去一估計的分區效率係數如表 2。表 3中的第一欄，標示D1~D4的資料案例種類，以及經過交叉驗證法檢定過的長度因子 L；按照去一估計和其最鄰近一站($n_s=1$)的距離分區，第二欄的*n*是各分區範圍內的樣本數；第三欄是應用交叉驗證法檢定M1指數模型得到的最佳參數，分別將距離轉換為相關係數 ρ，再計算各去一估計和鄰近站的平均相關係數 $\bar{\rho}$；第四欄的***Reg***是各距離分區內，趨勢函數的迴歸估計誤差變異數；第五欄的***UK***是各距離分區內，以UK法去一估計誤差的變異數；第六欄是各距離分區內的效率係數。

表 4中各欄資料的意義，均和表 5的相同。兩表主要的不同，是表 6是採用去一估計和其最鄰近三站($n_s=3$)的平均距離作分區計算。採用最鄰近三站距離和單站距離的主要差別，是單面臨海測站，作去一估計時，最近一站距離和最近三站平均的差異較大；內陸測站兩者的差異會較小。

表 7 按照估計點與最鄰近觀測站($n_s=1$)距離，分為三個分區，分別計算去一估計的效率係數，得到的誤差變異量比較。

	n	$\bar{\rho}$	***Reg.***	***UK***	C_e
D1 L=0.549	52	0.94	1.647	0.748	0.55
	64	0.87	2.039	1.663	0.18
	75	0.74	2.119	2.094	0.01
D2 L=0.466	35	0.88	0.994	0.531	0.47
	67	0.78	1.187	1.29	-0.08
	73	0.67	1.945	1.099	0.44
D3 L=0.258	31	0.38	0.353	0.277	0.22
	32	0.31	0.501	0.394	0.22
	34	0.22	1.174	1.27	-0.08
D4 L=0.255	31	0.82	0.370	0.176	0.52
	90	0.67	0.804	0.504	0.37
	112	0.49	1.172	0.95	0.19

表 8 按照估計點與最鄰近三個觀測站($n_s = 3$)的平均距離，分為三個分區，分別計算去一估計的效率係數，得到的誤差變異量比較。

	n	$\bar{\rho}$	*Reg.*	*UK*	C_e
D1 ***L=0.549***	45	0.90	1.900	1.102	0.42
	76	0.82	1.589	1.070	0.33
	72	0.71	2.33	2.408	-0.04
D2 ***L=0.466***	38	0.84	0.913	0.541	0.43
	55	0.73	1.314	1.299	0.01
	81	0.62	1.865	1.262	0.32
D3 ***L=0.258***	30	0.33	0.338	0.244	0.28
	30	0.28	0.475	0.429	0.08
	34	0.19	0.952	1.085	-0.14
D4 ***L=0.255***	31	0.76	0.413	0.209	0.49
	79	0.60	0.849	0.519	0.39
	122	0.45	1.144	0.866	0.24

表 9和表 10的數據，清楚顯示估計點和最鄰近測站的（平均）距離愈近（平均相關係數愈高），UK法改進迴歸法的效率係數愈高。即使是2008年2月104筆有效月均溫觀測的D3案例，表 11中M1~M4四種半變異圖模型的效率係數都接近0，和去一估計站距離最近分區的效率係數，仍然約有0.3。這兩個表的分析結果，證實去一估計和鄰近觀測的平均距離愈短，或與其鄰近觀測站的相關係數愈高，UK法去一估計改善迴歸估計的效率係數愈高。這和觀測資料密度對於克利金法去一估計效率係數的影響相同；當資料密度愈高，去一估計的效率係數亦隨之升高。

根據以上理解，即使觀測資料密度較低，去一估計改善迴歸估計的效率係數接近0，使用（通用）克利金法內插和面化資料，仍然是有意義的，原因是內插估計點和最鄰近測站的（平均）距離，會小於去一估計點和最鄰近測站的（平均）距離。但是，若利用交叉驗證法作去一估計，得到的效率係數若是接近0，則可能表示：

- 觀測站之間的相關性太低，採用交叉驗證法選擇半變異圖模型，和檢定模型參數的不確定性很高；利用傳統法估計半變異圖，得到錯誤參數的可能性更高。
- 台灣36000平方公里面積，建設100到200個溫度測站，密度應該已經很高；相關係數偏低的另一個可能原因，是去一估計溫度時，除了空間座標影響變數外，還應該納入土地利用和降雨（土壤水分、鮑文比差異）等影響。

四、總結

本研究採用交叉驗證法，並設計效率係數目標函數，評估UK通用克利金法的去一估計效果，證實可以用來協助選擇半變異圖模型，和檢定模型參數。

利用最大概似法、克利金法估計半變異圖參數的傳統方法等作參數檢定，不是以最終估計誤差變異數最小為目標函數；只是克利金法部分過程的最佳化，其結果可以作為以交叉驗證法檢定參數和選擇模式的初始估計值，最後還是應該利用交叉驗證法再搜尋最佳化參數。

應用交叉驗證法檢定既定半變異圖的模型參數時，因為無法計算UK法去一估計效率係數對各參數的微分值，採用多分法的計算耗時，除非是應用GPU運算，否則並不建議採用。作業化應用，建議採用微小擾動法和BFGS演算法，協助搜尋和檢定參數。

五、參考文獻

[1] Li, Jin, and Andrew D. Heap (2008) A Review of Spatial Interpolation Methods for Environmental Scientists, Geoscience Australia, Geo Cat #68229.

[2] Hengl. T., G.B.M. Geuvelinkand A. Stein (2003) Comparison of Kriging with external drift and regression-Kriging. Technical Note, International Institute for Geo-Information Science and Earth Observation (ITC). (available online at http://www.itc.nl/library/Academic-output/

[3] Martin, Jay D., and Timothy W. Simpson (2004) On the use of Kriging Models to Approximate Deterministic Computer Models, Proceedings of DETC'04: ASME 2004 International Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference, Salt Lake City, Utah USA.

[4] Currin, C., Mitchell, T.J., Morris, M.D., and Ylvisaker, D., (1988) A Bayesian Approach to the Design and Analysis of Computer Experiments," Oak Ridge National Laboratory ORNL-6498, Oak Ridge, TN.

[5]Bourennane, H., D. King, and A. Couturier, (2000) Comparison of Kriging with External Drift and Simple Linear Regression for Predicting Soil Horizon Thickness with Different Sample Densities. Geoderma, Volume 97, Issues 3－4, September 2000, Pages 255－271