

Lab8: Validation

การทำ **Cross Validation** ใน Geostatistical Analyst บน ArcGIS เป็นกระบวนการตรวจสอบความถูกต้องของแบบจำลองการพยากรณ์เชิงพื้นที่ที่สร้างขึ้นจาก **Geostatistical Analyst** ใน ArcGIS โดยใช้ข้อมูลจุดที่มีค่าเชิงปริมาณ (เช่น คุณภาพแร่, ระดับมลพิษ, ปริมาณน้ำฝน ฯลฯ) เพื่อทดสอบว่าแบบจำลองสามารถประมาณค่าที่ไม่ทราบได้อย่างแม่นยำเพียงใด

1. Prediction Error Statistics

การประเมินผลของโมเดล Kriging จะมีสถิติเกี่ยวกับข้อผิดพลาดในการพยากรณ์ ซึ่งสามารถใช้เป็นเครื่องมือวินิจฉัยเพื่อประเมินความแม่นยำของการพยากรณ์ได้ ดังนี้

Prediction Errors	
Samples	100 of 100
Mean	0.07035832
Root-Mean-Square	23.25223
Mean Standardized	0.0009824164
Root-Mean-Square Standardized	1.01022
Average Standard Error	22.94367

1. **Sample:** คือ จำนวนตัวอย่างทั้งหมดที่ใช้
2. **Mean Error** คือ ค่าความคลาดเคลื่อนเฉลี่ยระหว่างค่าที่วัดได้กับค่าที่พยากรณ์

$$\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Z}(\mathbf{s}_i) - z(\mathbf{s}_i))}{n}$$

- เป็นค่าเฉลี่ยของข้อผิดพลาดในการทำนาย ซึ่งคำนวณจากความแตกต่างระหว่างค่าจริงและค่าที่ทำนายออกมา โดยมีค่าเป็นบวกหรือเป็นลบขึ้นอยู่กับว่าการทำนายมีแนวโน้มที่จะสูงกว่าหรือต่ำกว่าค่าจริง
 - หากค่า MPE ใกล้ 0 หมายความว่าในการทำนายโดยรวมไม่ค่อยมีอคติ (Bias-free) แต่ถ้าค่า MPE มีค่าสูงมาก แสดงว่าโมเดลมีอคติในการทำนาย
 - ค่าที่ดีคือใกล้ 0 หรือไม่มีอคติอย่างชัดเจน
- อย่างไรก็ตาม **Mean Prediction Error** นี้ขึ้นอยู่กับ **ขนาดของข้อมูล**

3. **Root Mean Square Error (RMSE)** แสดงรูปแบบโมเดลที่สามารถพยากรณ์ค่าที่วัดได้แม่นยำเพียงใด ยิ่งค่านี้น้อย โมเดลยิ่งดี

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Z}(\mathbf{s}_i) - z(\mathbf{s}_i))^2}{n}}$$

- ค่า RMSE เป็นการวัดความผิดพลาดเฉลี่ยในรูปของหน่วยของข้อมูลต้นฉบับ โดยคำนวณจากการหารค่ารากที่สองของค่าเฉลี่ยของข้อผิดพลาดที่ยกกำลังสอง

- ใช้เพื่อประเมินว่าความแตกต่างระหว่างค่าจริงและค่าทำนายมีขนาดใหญ่หรือไม่ หากค่า RMSE ต่ำแสดงว่าโมเดลทำนายได้ดี
- ค่าที่ต่ำแสดงว่าโมเดลทำนายได้แม่นยำ ส่วนค่าที่สูงอาจบ่งชี้ว่าโมเดลมีข้อผิดพลาดมาก

4. **Mean Standardized Error (MSE)** คือ ค่าเฉลี่ยของข้อผิดพลาดที่ได้มาตรฐาน ซึ่งคำนวณจากการหาข้อผิดพลาดที่ได้มาตรฐาน (Standardized) แล้วหาค่าเฉลี่ย

$$\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Z}(\mathbf{s}_i) - z(\mathbf{s}_i)) / \hat{\sigma}(\mathbf{s}_i)}{n}$$

- ใช้ในการเปรียบเทียบผลการทำนายระหว่างหลายๆ โมเดลในกรณีที่มีหน่วยไม่เหมือนกัน โดยค่านี้จะช่วยให้เข้าใจได้ว่าโมเดลมีแนวโน้มที่จะมีความผิดพลาดที่ได้มาตรฐานเป็นอย่างไร
- ค่าที่ใกล้ 0 ถือว่าโมเดลมีการทำนายที่ไม่มียอดคิดในทุกช่วง
 - หากค่าเฉลี่ยของ **MSE** > **RMSE** แสดงว่าค่าการประเมินความแปรผันของการพยากรณ์ *Overestimating Variability*
 - หากค่าเฉลี่ยของ **MSE** < **RMSE** แสดงว่าค่าการประเมินความแปรผันของการพยากรณ์ *Underestimating Variability*

5. **Root Mean Square Standardized Error (RMSSE)** เป็นอีกวิธีหนึ่งในการตรวจสอบความถูกต้องของ Prediction Standard Errors

- ค่านี้ควรใกล้เคียง 1 หากค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐานของการพยากรณ์มีความถูกต้อง
 - หาก **RMSSE** > 1 หมายความว่าค่าความแปรปรวนของการพยากรณ์ต่ำเกินไป
 - หาก **RMSSE** < 1 หมายความว่าค่าความแปรปรวนของการพยากรณ์สูงเกินไป

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n [(\hat{Z}(\mathbf{s}_i) - z(\mathbf{s}_i)) / \hat{\sigma}(\mathbf{s}_i)]^2}{n}}$$

6. **Average Standard Error** คือ ค่าเฉลี่ยของค่าความคลาดเคลื่อนมาตรฐานของการพยากรณ์

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n \hat{\sigma}^2(\mathbf{s}_i)}{n}}$$

- คุณต้องการให้การประเมินความไม่แน่นอนของการพยากรณ์ (Prediction Standard Errors) เป็นไปอย่างถูกต้อง
- เมื่อใช้วิธี **Kriging** ต่างๆ จะได้ **Estimated Prediction Kriging Standard Errors** ซึ่งเป็นการประเมินความแปรผันของค่าพยากรณ์จากค่าจริง
- การประเมินความแปรผันที่ถูกต้องมีความสำคัญมาก เนื่องจาก **Quantile** และ **Probability Maps** ขึ้นอยู่กับ **Kriging Standard Errors** เช่นเดียวกับค่าพยากรณ์
- หาก ค่าเฉลี่ยของ **Standard Errors** ใกล้เคียงกับ **Root Mean Squared Prediction Errors** แสดงว่าเราได้ประเมินความแปรผันในการพยากรณ์อย่างถูกต้อง

สรุป

1. **Mean Prediction Error** และ **Standardized Prediction Errors** ควรจะใกล้ 0 เพื่อให้โมเดลไม่มีอคติ
2. **Prediction Standard Errors** ควรถูกประเมินอย่างถูกต้องเพื่อให้ความแปรผันของการพยากรณ์เหมาะสม
3. การเปรียบเทียบ **Standard Errors** กับ **Root Mean Squared Prediction Errors** ช่วยในการตรวจสอบว่ามีการประเมินความแปรผันอย่างเหมาะสมหรือไม่
4. **Root Mean Squared Standardized Errors** ควรใกล้ 1 หากโมเดลประเมินความแปรผันได้อย่างถูกต้อง

การใช้สถิติเหล่านี้จะช่วยให้คุณมั่นใจว่าโมเดล **Kriging** ของคุณสามารถพยากรณ์ค่าด้วยความแม่นยำและความเชื่อมั่นสูงสุด!

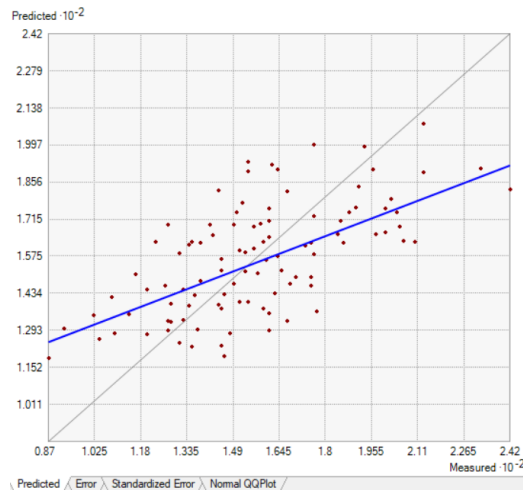
สำหรับ **IDW, Global Polynomial Interpolation, Radial Basis Functions, Diffusion Interpolation With Barriers** และ **Kernel Interpolation With Barriers** จะสามารถดูผลลัพธ์ได้เพียงแค่ Mean Error และ Root Mean Square Error (RMSE) เท่านั้น

2. Plots ใน Geostatistical Analyst

Geostatistical Wizard จะแสดงกราฟและสรุปสถิติเพื่อเปรียบเทียบค่าที่วัดได้กับค่าที่พยากรณ์

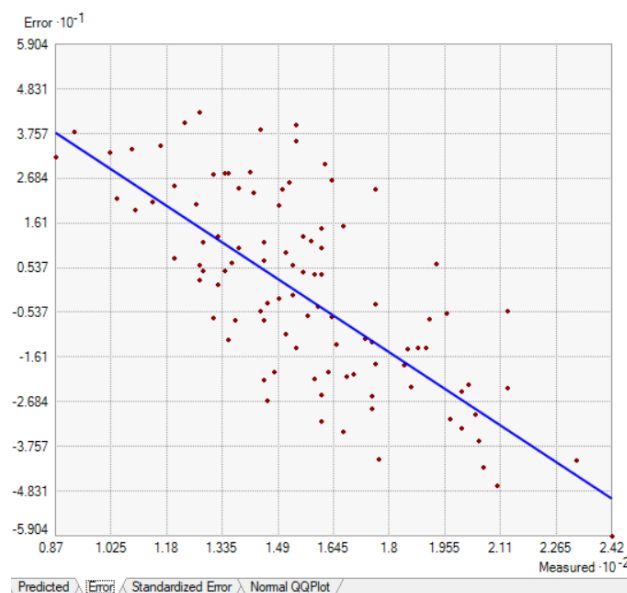
1. Scatterplot (กราฟการกระจายของค่าทำนายและค่าจริง)

- จุดข้อมูลจะถูกกระจายรอบเส้น 1:1 (เส้นสีเทา) ส่วนเส้นสีน้ำเงิน คือเส้นถดถอยเชิงเส้นที่พล็อตผ่านค่าทำนายทั้งหมด และสมการของเส้นนี้จะแสดงอยู่ด้านล่างกราฟ
- โมเดลที่ดีเส้นสีน้ำเงินจะอยู่ใกล้กับเส้น 1:1 ถ้าเส้นสีน้ำเงินมีความลาดเอียง
 < 1 : Underpredicts large values ; > 1 : Overpredicts small values



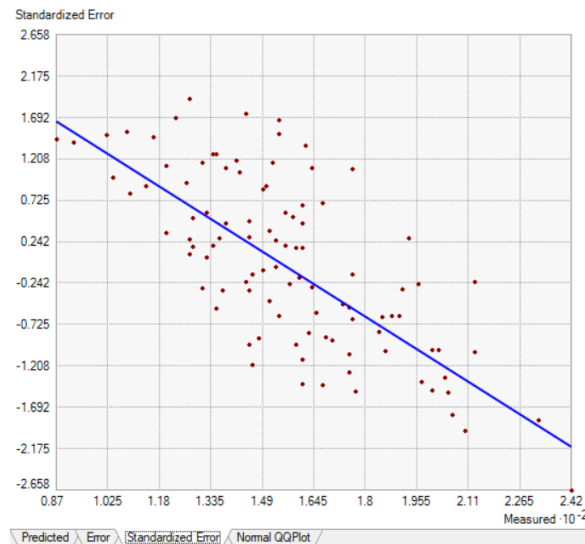
2. Error Plot (กราฟแสดงข้อผิดพลาด)

- คล้ายกับ Prediction Scatterplot แต่แสดงค่าความคลาดเคลื่อนโดยการลบ ค่าที่วัดได้ ออกจากค่าที่พยากรณ์
- หากโมเดลสมบูรณ์แบบ จุดควรกระจายรอบเส้น 0 โดยไม่มีรูปแบบที่ชัดเจน
- หากเห็นลักษณะเป็นแนวเส้นหรือโค้ง แสดงว่าโมเดลอาจยังมีข้อผิดพลาดเชิง โครงสร้าง



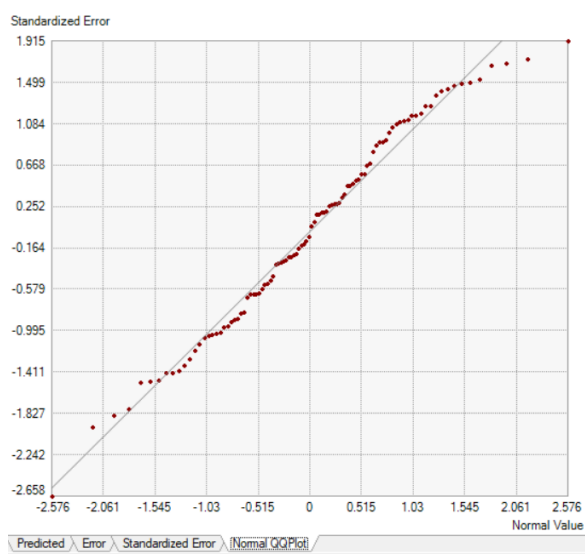
3. Standardized Error Plot (กราฟข้อผิดพลาดที่ถูกปรับมาตรฐาน)

- คล้ายกับ **Error Plot** แต่ค่าความคลาดเคลื่อนจะถูกหารด้วย Kriging Standard Error
- ค่าที่ได้จะแสดงเป็นหน่วยมาตรฐาน ซึ่งช่วยให้วิเคราะห์ได้ว่าโมเดลประมาณค่าความไม่แน่นอนได้แม่นยำแค่ไหน
- หากค่าที่ได้มีการกระจายตัวสม่ำเสมอ **ค่าเฉลี่ย 0** และไม่มีแนวโน้มผิดปกติ แสดงว่าโมเดลมีความแม่นยำดี



4. Normal QQ Plot (กราฟเช็คการแจกแจงของข้อผิดพลาด)

- กราฟนี้เปรียบเทียบ Quantiles ของค่าคลาดเคลื่อน กับ Quantiles ของการแจกแจงปกติ (Standard Normal Distribution)
- ถ้าค่าความคลาดเคลื่อนมีการแจกแจงแบบปกติ จุดข้อมูลควรเรียงตัวใกล้กับ เส้นสีเทา
- ถ้ามีความเบ้ (skewness) หรือมีค่าผิดปกติอย่างชัดเจน อาจบ่งบอกว่าข้อผิดพลาดไม่ได้แจกแจงแบบปกติ และอาจต้องปรับปรุงโมเดล



สรุป

- **Scatterplot** → ดูว่าค่าทำนายใกล้เคียงกับค่าจริงแค่ไหน
- **Error Plot** → วิเคราะห์ข้อผิดพลาดของโมเดล
- **Standardized Error Plot** → ตรวจสอบว่าค่าความผิดพลาดมาตรฐานมีแนวโน้มผิดปกติหรือไม่
- **Robust Regression** → ลดอิทธิพลของค่าผิดปกติในการคำนวณเส้นถดถอย
- **Normal QQ Plot** → ตรวจสอบว่าข้อผิดพลาดมีการแจกแจงแบบปกติหรือไม่
- ถ้าโมเดลดี เส้นสีน้ำเงินควรอยู่ใกล้เส้น 1:1 และจุดข้อมูลใน QQ Plot ควรเรียงตัวใกล้เส้นสีเทา

3. Performing cross-validation and validation

Cross-validation และ **Validation** ช่วยให้คุณตัดสินใจได้อย่างมีข้อมูลว่าโมเดลใดให้ผลพยากรณ์ที่ดีที่สุด โดยสถิติจากการคำนวณจะทำหน้าที่เป็นเครื่องมือวินิจฉัย เพื่อบ่งชี้ว่าโมเดลและค่าพารามิเตอร์ที่ใช้มีความเหมาะสมหรือไม่

Cross-validation และ **Validation** ใช้แนวคิดดังนี้:

- ทำการลบตำแหน่งข้อมูลออกหนึ่งหรือหลายตำแหน่ง
- ใช้ข้อมูลที่เหลือเพื่อพยากรณ์ค่าที่ตำแหน่งที่ถูกลบออก
- เปรียบเทียบค่าที่พยากรณ์กับค่าจริงที่สังเกตได้

กระบวนการนี้ช่วยให้คุณได้ข้อมูลสำคัญเกี่ยวกับคุณภาพของ **Kriging model** เช่น พารามิเตอร์ของ **Semivariogram** และการกำหนด **Searching Neighborhood**

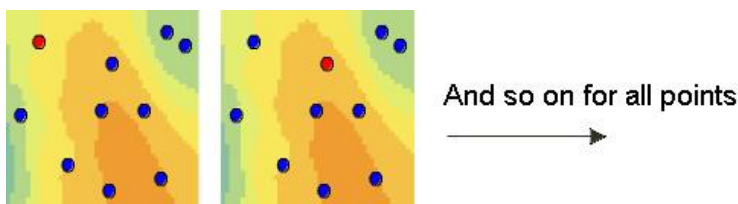
Cross-validation

Cross-validation ใช้ข้อมูลทั้งหมดเพื่อประมาณค่าของโมเดลแนวโน้ม (Trend Model) และความสัมพันธ์เชิงพื้นที่ (Autocorrelation Model) โดยกระบวนการทำงานเป็นดังนี้:

1. ลบข้อมูลออกที่ละจุด (เช่น จุดสีแดง)
2. ใช้ข้อมูลที่เหลือ (จุดสีน้ำเงิน) เพื่อพยากรณ์ค่าที่ตำแหน่งที่ถูกลบออก
3. เปรียบเทียบค่าพยากรณ์กับค่าจริง
4. ทำซ้ำขั้นตอนนี้สำหรับทุกจุดในชุดข้อมูล
5. เมื่อครบทุกจุด จะนำค่าที่วัดได้และค่าที่พยากรณ์มาเปรียบเทียบกันทั้งหมด

จุดสำคัญของ Cross-validation

- กระบวนการนี้ใช้ข้อมูลทั้งหมดเพื่อสร้างโมเดลแนวโน้มและความสัมพันธ์เชิงพื้นที่ ซึ่งอาจส่งผลให้การประเมินโมเดลมีความลำเอียงเล็กน้อย
- หากพบว่าบางจุดมีค่าผิดพลาดสูงผิดปกติ อาจต้องตั้งข้อสังเกตว่าจุดนั้นเป็นค่าผิดปกติ (Outlier)
- ในบางกรณี อาจต้องปรับค่า Trend Model และ Autocorrelation Model ใหม่เพื่อให้ผลลัพธ์มีความแม่นยำมากขึ้น



Remove each point one by one

Cross-validation จะถูกดำเนินการแบบอัตโนมัติ โดยผลลัพธ์จะแสดงในขั้นตอนสุดท้ายของ Geostatistical Wizard นอกจากนี้ยังสามารถทำ Cross-validation ได้เองด้วยการใช้ Cross Validation Geoprocessing Tool ใน ArcGIS

Validation

Validation เป็นกระบวนการตรวจสอบโมเดลโดยแบ่งข้อมูลออกเป็น 2 ชุด:

1. **Test Dataset** – ข้อมูลที่ถูกนำออกเพื่อใช้ทดสอบ
2. **Training Dataset** – ข้อมูลที่เหลือใช้สร้างโมเดล

กระบวนการทำงาน:

1. นำบางส่วนของข้อมูลออก (สร้าง **Test Dataset**)
2. ใช้ข้อมูลที่เหลือ (**Training Dataset**) เพื่อพัฒนารูปแบบแนวโน้ม (**Trend Model**) และความสัมพันธ์เชิงพื้นที่ (**Autocorrelation Model**)
3. ใช้โมเดลที่ได้ไปพยากรณ์ค่าของ **Test Dataset**
4. เปรียบเทียบค่าจริงกับค่าที่พยากรณ์เพื่อประเมินคุณภาพของโมเดล

การใช้งาน Validation ใน ArcGIS

- ใช้ Subset Features Tool เพื่อแบ่งข้อมูลเป็น Test และ Training Dataset
- ใช้ GA Layer To Points Geoprocessing Tool เพื่อประเมินผล
- กราฟและสถิติที่ใช้เปรียบเทียบค่าที่พยากรณ์และค่าจริงจะคล้ายกับที่ใช้ใน Cross-validation

ข้อแตกต่างระหว่าง Validation และ Cross-validation

Validation	Cross-validation
ใช้เพียงบางส่วนของข้อมูลเพื่อสร้างโมเดล	ใช้ข้อมูลทั้งหมดในการสร้างโมเดล
ตรวจสอบว่าแนวทางการเลือกโมเดลมีความเหมาะสมหรือไม่	ตรวจสอบว่าค่าที่พยากรณ์ใกล้เคียงค่าจริงหรือไม่
เหมาะสำหรับการทดสอบพารามิเตอร์ เช่น Semivariogram Model และ Search Neighborhood	ใช้สำหรับประเมินความแม่นยำของโมเดลโดยรวม

ข้อสังเกต

- Validation ไม่ได้ตรวจสอบโมเดลสุดท้ายโดยตรง เนื่องจากโมเดลสุดท้ายควรใช้ข้อมูลทั้งหมด
- แต่ช่วยตรวจสอบว่าแนวทางที่ใช้เลือกพารามิเตอร์ เช่น Semivariogram Model, Lag Size, และ Search Neighborhood นั้นถูกต้องหรือไม่
- หากโมเดลผ่านการตรวจสอบใน Validation ก็มีโอกาสสูงที่จะทำงานได้ดีเมื่อใช้กับชุดข้อมูลทั้งหมด