Оцінка ефективності застосування крігінга (Kriging) для геопросторової інтерполяції показників якості покладів нерудних будівельних матеріалів

Крігінг передбачає, що відстань чи напрямок між опорними точками відображає просторову кореляцію, яка може використовуватися для пояснення зміни на поверхні. Крігінг – покроковий процес, він включає пошуковий статистичний аналіз даних, моделювання варіограми, створення поверхні і (додатково) вивчення дисперсії поверхні.

Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z_0 = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot Z_i,$$

де λ_i є рішенням крігінга

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot C_{ij} = C_{0j},\ j = 1,\ldots,n,$$

а похибка оцінки крігінга визначається як квадратний корінь із дисперсії оцінки:

$$\sigma^2 = Var\{Z(X_0,Y_0)|Z_1,\ldots,Z_n\} = E\left[(Z_0 - Z(X_0,Y_0))^2\right] = C(0) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i C_{0i}$$

де $C_{ij} = C((X_i,Y_i);(X_j,Y_j))$ – значення функції коваріації, що характеризує зв’язок між випадковою величиною $Z(X_i,Y_i)$ в *i*-ій точці вибірки і випадковою величиною $Z(X_j,Y_j)$ в *j*-ій точці вибірки.

Крігінг дає оцінку можливої похибки в проінтерпольованих значеннях. При коректно побудованій моделі варіограми та інших параметрів, можна отримати максимально правдоподібну модель явища. Зважаючи на геостатистичну природу крігінга існує широкий спектр його варіантів для різної оцінки. Помилки в крігінгу мінімальні, в порівнянні з іншими інтерполяційними методами. Недоліком крігінга є наявність горизонтальної дотичної в пунктах вимірювань, оскільки поблизу його роль інших пунктів незначна або відсутня. Крігінг відтворює математичне очікування і не завжди проходить через точки даних, і не гарантує гладкості.

Крігінг – базова інтерполяційна модель геостатистики. Він є основою всіх методів, пов'язаних з геостатистикою (імовірнісного картування, стохастичного моделювання). Термін "Крігінг" служить для позначення сімейства алгоритмів лінійної просторової регресії.

Вихідна інформація про змінну представлена у вигляді набору $\{z(x_i), i=1,\ldots,n\}$ із n вимірювань, зроблених в точках $x_1, x_2, ..., x_n$ простору. Всі інтерполятори сімейства крігінга є різного роду модифікаціями базового лінійного регресійного оцінювача $Z^*(x_0)$, який визначається наступним чином:

$$Z^*(x_0) - m(x) = \sum_{i=1}^{n(x)} \lambda_i(x)[Z(x_i) - m(x_i)],$$

де $\lambda_i(x)$ – вагові коефіцієнти, що відносяться до даних $z(x_i)$;

$m(x)$ і $m(x_i)$ – математичні очікування випадкових змінних $Z(x)$ і $Z(x_i)$

Тип оцінювача залежить від моделі випадкової функції $Z(x)$. Її завжди можна розкласти на дві компоненти – детерміністичний тренд $m(x)$ і випадкову нев'язку $R(x)$:

$$Z(x) = m(x) + R(x).$$

Компонента нев'язки $R(x)$ моделюється як стаціонарна випадкова функція з нульовим математичним очікуванням $m_R(x)$ і коваріацією $C_R(h)$

$$E\{R(x)\} = 0,$$

$$Cov\{R(x), R(x+h)\} = E\{R(x)R(x+h)\} = C_R(h).$$

Математичне очікування просторової змінної *Z* в точці x, таким чином, буде рівне значенню тренда:

$$E\{Z(x)\} = m(x).$$

Всі методи сімейства крігінга використовують одну і ту ж цільову функцію для мінімізації, а саме варіацію помилки оцінки $\sigma_E^2(x)$ при додатковій умові незміщеності оцінки, варіація

$$\sigma_E^2(x) = Var\{Z^*(x) - Z(x)\}$$

мінімізується при обмеженні

$$E\{Z^*(x) - Z(x)\} = 0.$$

Байєсовський крігінг (Bayesian Kriging)

Байєсовський підхід дозволяє використовувати в якості додаткової інформації попередні знання, сформульовані в імовірнісному вигляді як пріорний розподіл. Пріорний розподіл спільно з даними дозволяють оцінювати зони невизначеності досліджуваної змінної. У разі повного байєсовського підходу невизначеність представляється як постеріорна локальна або глобальна функція розподілу.

Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z^*(x_0) = \tilde{c}_0^T \tilde{C}^{-1}(Z - F\mu) + f_0^T \mu,$$

де $Z^*(x_0)$ – оцінка досліджуваної функції в точці;

$(c_0)_i;(C_0)_i$ – коваріаційні функції;

μ – множник Лагранжа;

$f_0^T;F$ – вектор із базисних функцій.

Стандартні помилки інтерполяції менше в порівнянні з іншими методами крігінга. Потрібно мінімум інтерактивного моделювання. Можливість точної інтерполяції помірно нестаціонарних даних. Більш висока точність для невеликих наборів даних в порівнянні з іншими методами крігінга. Цей метод враховує помилку, пов'язану з оцінкою основної варіограми.

Час обробки швидко зростає зі збільшенням числа вхідних точок, розміру піднабору або коефіцієнта перекриття. Обробка відбувається повільніше, ніж в інших методах крігінга, особливо при виведенні в растр. Кокрігінг і анізотропна корекція недоступні. Логарифмічні емпіричні перетворення особливо чутливі до випадаючих значень.

Логнормальний крігінг (Lognormal Kriging)

Логнормальним випадковим процесом називається такий позитивно-визначний процес, коли оцінка функції в заданій точці є гауссовим процесом. Нелінійне логарифмічне перетворення робить вхідні дані, які відрізняються на порядки, придатними для геостатистики [ ].

Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z^*(x_0)=\exp\left\{Y^*(x_0)+\frac{1}{2}\left[Var\left\{Y(x_0)\right\}-Var\left\{Y^*(x_0)\right\}\right]\right\}=$$
$$=\exp\left\{Y^*(x_0)+\frac{1}{2}\sigma_{OK}^2(x_0)-\mu\right\},$$

де $Z^*(x_0)$ – оцінка досліджуваної функції в точці;

μ – множник Лагранжа, значення якого визначається при рішенні системи рівнянь звичайного крігінга для оцінки $Y^*(x_0)$;

$Y^*(x_0)$ – оцінка функції $Y(x)$ в точці x_0;

$\sigma_{OK}^2(x_0)$ – варіація звичайного крігінга.

На практиці логнормальний крігінг зазвичай використовується для даних, де значення відрізняються на порядки. Логнормальний крігінг при такому сильному розходженні буде оптимальним вибором типу крігінгу і дасть можливість отримати модель просторової кореляції. Через математичну складність обчислень рівнянь крігінга іноді дисперсія крігінга може бути більше ніж поріг моделі варіограми.

Індикаторний крігінг (Indicator Kriging)

Індикаторним крігінгом називається звичайний крігінг, виконаний для індикаторів, тобто це лінійний оцінювач, побудований за аналогією зі звичайним крігінгом, але не для значень аналізованої змінної, а для індикатора.

Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z_E^*(x) = \int z dF(x,z) \approx \sum_{i=1}^{K-1} z_i \left(F^{**}(x, z_{i+1}) - F^{**}(x, z_i)\right),$$

де $Z_E^*(x)$ – оцінка досліджуваної функції в точці;

$F^{**}(z)$ – гіперболічна модель екстраполяції;

K – число відсікань (зрізів). Цьому методу не потрібно, щоб набір даних відповідав конкретному розподілу. Значення даних перетворюються в ряд *0* і *1* відповідно до того, вище або нижче порога значення даних. Індикаторний крігінг використовується на родовищах складної будови з високою мінливістю геологорозвідувальних параметрів, там де недостатня щільність мережі по окремих ділянках родовища і високі значення ефекту самородків.

При оцінці індикаторів інформація про дані використовується не повністю. Більш повним була б побудова багатозмінної моделі з урахуванням всіх індикаторів відразу при багатофакторному аналізі.

Звичайний крігінг (Ordinary Kriging)

Звичайний крігінг відрізняється від простого тим, що не передбачає знання середнього значення. У звичайному крігінгу середнє значення вважається постійним, але воно невідомо. Крім того, звичайний крігінг при використанні локальної оцінки не вимагає сталості середнього по всій зоні оцінювання. Вважається, що середнє постійно тільки в околиці точки оцінювання. Припущення про сталість середнього в рамках малої околиці більш реалістично, тим більше що дані володіють просторовою безперервністю.

Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z^*(x)=\sum_{i=1}^{n(x)}\lambda_i(x)Z(x_i),$$

де $\lambda_i(x)$ – вагові коефіцієнти;

$Z(x_i)$ – випадкові функції;

$Z^*(x)$ – оцінка досліджуваної функції в точці.

Варіація звичайного крігінга визначається:

$$\sigma_{OK}^2(x)=\sigma_Z^2-\sum_{i=1}^{n(x)}\lambda_i(x)C_{i0}+\mu(x),$$

де C_{i0} – коваріація для вектора, відповідного вектору, який розділяє точки x_i і x_0 (точка оцінки);

$\mu(x)$ – множник Лагранжа.

Зважаючи на простоту даного методу інтерполяції безумовною перевагою можна вважати його гнучкість. Недоліком є те, що із-за невідомого значення середнього спостерігається збільшення варіації, що веде до зростання невизначеності оцінки.

Простий крігінг (Simple Kriging)

Простий крігінг працює на припущенні про стаціонарність другого порядку випадкової змінної. Крім того, передбачається, що детерміністична компонента в постійна і відома на всій ділянці дослідження []. Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z^*(x)=m+\sum_{i=1}^{n(x)}\lambda_i(x)Y(x_i),$$

де $Z^*(x)$ – оцінка досліджуваної функції в точці;

$\lambda_i(x)$ – вагові коефіцієнти;

m – глобальне середнє або локальне середнє, постійне по всій області;

$Y(x_i)$ – випадкові функції.

Варіацію помилки простого крігінга обчислюють за формулою:

$$\sigma_{SK}^2(x)=\sigma_Z^2-\sum_{i=1}^{n(x)}\lambda_i(x)C_{i0},$$

де C_{i0} – коваріація для вектора, відповідного вектору, який розділяє точки x_i і x_0 (точка оцінки).

Простий крігінг є найкращою оцінкою в класі лінійних інтерполяторів. Так як помилка простого крігінга ортогональна оцінці простого крігінга в гільбертовому просторі, побудованому з усіх можливих лінійних комбінацій вихідних даних і має в якості метрики коваріацію. Основним недоліком простого крігінга є припущення про те, що середнє заздалегідь відоме. Використання в якості середнього його статистичної оцінки (математичного очікування) робить ваги залежними від значень вихідного набору даних. Крім того, оцінка математичного очікування може виявитися спотвореною, зміщеною.

Універсальний крігінг (Universal Kriging)

Універсальний крігінг припускає, що невідоме середнє значення плавно змінюється у всій ділянці дослідження. Передбачається, що детерміністична компонента випадкової змінної (тренд) моделюється як лінійна комбінація базисних (відомих) функцій з коефіцієнтами, невідомими і постійними всередині ділянки оцінюваної точки.

Система рівнянь універсального крігінга матиме наступний вигляд:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n(x)} \lambda_j(x) C_R(x_i - x_j) + \sum_{k=0}^{K} \mu_k(x) f_k(x_i) = C_R(x_i - x), i = 1, \ldots, n(x), \\ \sum_{j=1}^{n(x)} \lambda_j(x) = 1, \\ \sum_{j=1}^{n(x)} \lambda_j(x) f_k(x_j) = f_k(x), k = 1, \ldots, K. \end{cases}$$

Варіація помилки універсального крігінга визначається за формулою:

$$\sigma_{UK}^2(x) = C_R(0) - \sum_{i=1}^{n(x)} \lambda_i(x) C_R(x_i - x) - \sum_{k=0}^{K} \mu_k(x) f_k(x),$$

де $\lambda_i(x)$ – вагові коефіцієнти;

$f_k(x_i)$ – базисні функції;

$C_R(\cdot)$ – коваріації випадкових компонент;

$\sigma_{UK}^2(x)$ – варіація помилки універсального крігінга;

μ_k – множник Лагранжа.

У деяких випадках неможливо припустити локальну сталість середнього навіть в околиці оцінюваної точки. Одним з можливих у такому випадку підходів є саме універсальний крігінг. Недоліком універсального крігінгу є дуже складне завдання підбору функцій для моделювання тренда, що послугувало вузькому розповсюдженню даного виду крігінгу.

Кокрігінг (Cokriging)

Кокрігінг – природне узагальнення крігінга на випадок багатозмінних даних, коли між змінними є просторова кореляція. Основна змінна оцінюється на основі її власних вимірів і даних по іншим (додатковим) змінним. Знання всіх змінних у всіх точках не потрібно. Для звичайного кокрігінга обов'язково принаймні один вимір основною змінною, для простого ж досить знання її середнього значення, інша інформація вноситься за рахунок додаткових змінних []. Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z_{\alpha_0}^{*}\left(x\right)=\sum_{\alpha=1}^{K}\sum_{i=1}^{n_\alpha}\lambda_i^{\alpha}Z_{\alpha}\left(x_i\right),$$

де $Z_{\alpha_0}^{*}\left(x\right)$ – оцінка досліджуваної функції в точці;

n_α – різні змінні.

Варіацію помилки простого крігінга обчислюють за формулою:

$$\sigma_{CK}^{2}=\sum_{\alpha=1}^{K}\sum_{i=1}^{n_\alpha}\lambda_i^{\alpha}\gamma_{\alpha\alpha_0}\left(h_{ii_0}\right)+\mu_{i_0}-\gamma_{\alpha_0\alpha_0}\left(0\right),$$

де h – вектор, що задає просторову орієнтацію при обчисленні і моделюванні просторової кореляції;

n_α – змінні;

σ_{CK}^{2} – варіація помилки;

μ_{i_0} – множник Лагранжа;

K – число змінних при багатозмінному аналізі;

λ_i^{α} – вагові коефіцієнти.

Кокрігінг дозволяє будувати поверхні по декільком наборам даних, що збільшує надійність і детальність результатів інтерполяції в міжсвердловинному просторі за рахунок використання додаткової інформації по взаємокорелюючим даним. Швидкість інтерполяції при використанні кокрігінга може значно перевищувати швидкість інтерполяції звичайними методами. Кокрігінг дозволяє поліпшити оцінку високих значень. Теоретично кокрігінг не має обмежень на число змінних, і додавання нової інформації повинно вести до поліпшення оцінки. Недоліками кокрігінгу є те, що у разі n змінних для кокрігінга потрібно n^2 моделей варіограм. Перевірка всіх гіпотез для такої кількості даних і подальше сумісне моделювання стає досить трудомістким. Крім того, оцінка експериментальних варіограм, крос-варіограм і їх моделювання на практиці виконується з деякою помилкою. Велика кількість моделей варіограм може настільки ускладнити обчислення остаточної оцінки, що результат навіть може погіршитися. У разі кокрігінга має місце ефект екранування і він проявляється частіше за рахунок додаткової інформації в додаткових точках вимірювання.

Колокаційний кокрігінг (Collocated Cokriging)

Колокаційний кокрігінг для оцінки значення в заданому місцеположенні використовує тільки значення додаткових змінних, які розташовані в найближчій околиці точки оцінювання, і вони приписуються до просторового положення точки оцінювання.

Оцінка досліджуваної функції в точці визначається за формулою:

$$Z_{\alpha_0}^{*}\left(x_0\right)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^{\alpha_0}Z_{\alpha_0}\left(x_i\right)+\sum_{\beta\neq\alpha_0}\lambda_{i_0}^{\beta}Z_{\beta}\left(x_0\right),$$

де $Z_{\alpha_0}^{*}\left(x_0\right)$ – оцінка досліджуваної функції в точці;

λ_i – вагові коефіцієнти вхідних значень;

$Z_{\alpha}\left(x\right);Z_{\beta}\left(x\right)$ – випадкові змінні у випадку багатозмінної функції Z.

Колокаціонний кокрігінг дає можливість уникати надлишкової інформації за допомогою додаткових змінних. Колокаційний кокрігінг передбачає лінійний зв'язок між коваріацією основної змінної і кросковаріацією. Це знімає необхідність моделювання крос-коваріацій, обмежуючи моделювання тільки коваріацією. Колокаційний кокрігінг обчислюється простіше і швидше повного кокрігінга.