УДК 519.6
Аналог интерполяционного метода крайгинга без геостатистического обоснования.

Владимир Николаевич Кутрунов
заведующий кафедрой математического моделирования
факультета математики и компьютерных наук
Тюменского государственного университета,
доктор физико-математических наук, профессор,

Михаил Владимирович Дмитриевский
аспирант кафедры математического моделирования.

Разработан интерполяционный метод восстановления геологических полей. Если в качестве базиса брать систему функций, полученную из вариограммы ее сдвигами в точки экспериментальных данных, то результат интерполяции тождественно совпадет с результатом, полученным по методу крайгинга.

An interpolation method of geological fields reconstruction was developed. If we take a system of fuctions built into points of experimental data as a basis then the result of interpolation will be identical to the result worked out by kriging.

Известно большое количество методов восстановления геолого-геофизических полей. Все они опираются на некоторое количество значений исследуемого признака в ряде точек поля. Эти точки, как правило, расположены на нерегулярной сетке и могут существовать области, в которых об исследуемом признаке ничего не известно. Восстановить поле означает построить по всему полю регулярную сетку значений признака и нарисовать карту линий уровня признака.

Один из хорошо известных методов, решающих эту задачу - метод крайгинга. Он построен на основе идей теории вероятностей, а восстанавливаемая функция содержит ряд коэффициентов, которые находятся из условия минимума дисперсии отклонения построенной функции от известных с некоторой погрешностью данных. Существенную роль при выполнении расчетов играет вариограмма, построенная по исходным данным. Построение этой функции предполагает не только наличие этих данных, но также и наличие эмпирического опыта исследователя. По этой и другим причинам ее выбор в какой-то мере оказывается искусством.

В данной статье была поставлена задача получить некоторый метод восстановления геолого-геофизических полей с детерминистских позиций с тем, чтобы найти какие-либо другие способы построения функций, аналогичных вариограмме. Можно надеяться получить метод, который будет обладать всеми свойствами крайгинга и в котором будут разработаны способы построения различных базисов, а также указано место специфического базиса, называемого вариограммой.

Классическая задача восстановления геологического поля формулируется следующим образом: пусть функция $f(x), x \in \Omega$, задана дискретно в точках x_i:

$$y_i = f(x_i), \quad i = \overline{1, n},$$

где n - количество исходных данных, Ω - геологическое поле.

Необходимо восстановить функцию $f(x)$ на некоторой сетке $\{\overline{x}_k\}, \quad k = \overline{1, m}$.

В данной работе, как было сказано выше, сравниваются два подхода к решению поставленной задачи. Первый подход представляет собой стандартный метод крайгинга, так, как он изложен, например, в [1]. Второй, разработанный нами, является интерполяционным и при определенных условиях дает результаты, тождественно совпадающие с методом крайгинга. Такое совпадение позволяет понять различные аспекты метода крайгинга с достаточно элементарных позиций и использовать это для построения базисов, обладающих нужными свойствами.

Вкратце изложим основные идеи метода крайгинга.

Функцию $\widetilde{f}(x)$, приближающую $f(x)$ будем искать в виде:

$$\widetilde{f}(x) = \sum_{i=1}^{n} \widetilde{a}_i(x) y_i. \tag{1}$$

Зависимость неизвестных коэффициентов от x означает, что для расчета $\widetilde{f}(x)$ в узлах сетки $\{\overline{x}_k\}, k = \overline{1,m}$ потребуется решать задачу (1) m раз, т.е. для каждого узла сетки задача решается отдельно, что, несомненно, является недостатком метода.

Рассмотрим задачу расчета $\widetilde{f}(\overline{x}_k)$ в отдельно взятой фиксированной точке $\overline{x}_k$. Для краткости ведем обозначения:

$$f(\overline{x}_k) = \overline{y}_k,$$

$$\widetilde{f}(\overline{x}_k) = \widetilde{\overline{y}}_k,$$

$$\overline{a}_i(\overline{x}_k) = \overline{a}_i,$$

где $\overline{y}_k$ - неизвестные точные значения функции на сетке, $\widetilde{\overline{y}}_k$ - искомые приближенные значения функции в узлах сетки.

В крайгинге исходные данные y_i понимаются как реализация случайного процесса $f(x)$, а весовые коэффициенты $\overline{a}_i$ находятся из минимизации дисперсии отклонения $\widetilde{\overline{y}}_k$ от $\overline{y}_k$:

$$S = E\left[\overline{y}_k - \widetilde{\overline{y}}_k\right]^2 = E\left[\overline{y}_k - \sum_{i=1}^{n} \overline{a}_i y_i\right]^2 \tag{2}$$

Расписав выражение (2) получим:

$$S = E\overline{y}_k^2 - 2E\overline{y}_k\widetilde{\overline{y}}_k + E\widetilde{\overline{y}}_k^2 =$$

$$= D\overline{y}_k - 2\sum_{i=1}^{n} \overline{a}_i\ cov(\overline{y}_k, y_i) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \overline{a}_i\overline{a}_j\ cov(y_i, y_j) =$$

$$= K(\overline{y}_k, \overline{y}_k) - 2\sum_{i=1}^{n} \overline{a}_i\ K(\overline{y}_k, y_i) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \overline{a}_i\overline{a}_j\ K(y_i, y_j), \tag{3}$$

где K - ковариационная функция. В крайгинге на $\widetilde{f}(x)$ накладывается серьезное ограничение, заключающееся в предположении стационарности ковариационной функции, т.е. предполагается, что $K(y_i, y_j)$ зависит не от самих значений y_i и y_j, а от расстояния h_{ij} между ними, т.е. $K(y_i, y_j) = K(h_{ij})$. Таким образом (3) запишется:

$$S = K(0) - 2\sum_{i=1}^{n} \overline{a}_i K(h_{ki}) + \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \overline{a}_i\overline{a}_j\ K(h_{ij}) \tag{4}$$

Для того, чтобы найти коэффициенты $\overline{a}_i$, необходимо минимизировать диперсию (4). Продифференцируем ее по $\overline{a}_m$ и полученное выражение приравняем к нулю:

$$\frac{\partial S}{\partial \overline{a}_m} = -2K(h_{km}) + 2\sum_{j=1}^{n} \overline{a}_j K(h_{mj}) = 0, \quad m = \overline{1, n}. \tag{5}$$

Формулировка задачи крайгинга требует "несмещенности" оценки $\widetilde{f}(\overline{x}_k)$, т.е. что среднее значение $\widetilde{f}(x)$ должно равняться среднему, полученному по исходным данным. Это требование записывается в ввиде:

$$\sum_{i=1}^{n} \overline{a}_i = 1 \tag{6}$$

Минимизируя дисперсию (4) при условии (6) методом неопределенных множителей Лагранжа, получим систему линейных уравнений, отличающейся от системы (5)

$$\begin{cases} \overline{a}_1 K(0) + \overline{a}_2 K(h_{12}) + \ldots + \overline{a}_n K(h_{1n}) + \overline{\lambda} = K(h_{1k}) \\ \overline{a}_1 K(h_{12}) + \overline{a}_2 K(0) + \ldots + \overline{a}_n K(h_{2n}) + \overline{\lambda} = K(h_{2k}) \\ \ldots \\ \overline{a}_1 K(h_{1n}) + \overline{a}_2 K(h_{2n}) + \ldots + \overline{a}_n K(0) + \overline{\lambda} = K(h_{nk}) \\ \overline{a}_1 + \overline{a}_2 + \ldots + \overline{a}_n = 1 \end{cases} \tag{7}$$

В условиях используемых гипотез вместо ковариационной функции $K(h)$ используют вариограмму $\gamma(h) = K(0) - K(h)$, тогда (7) с учетом (6) преобразуется к виду:

$$\begin{pmatrix} \gamma(0) & \gamma(h_{12}) & \ldots & \gamma(h_{1n}) & 1 \\ \gamma(h_{12}) & \gamma(0) & \ldots & \gamma(h_{2n}) & 1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \gamma(h_{1n}) & \gamma(h_{2n}) & \ldots & \gamma(0) & 1 \\ 1 & 1 & \ldots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{a}_1 \\ \overline{a}_2 \\ \ldots \\ \overline{a}_n \\ \overline{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma(h_{1k}) \\ \gamma(h_{2k}) \\ \ldots \\ \gamma(h_{nk}) \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Обозначим

$$\begin{aligned} \gamma &= \{\gamma(h_{1k}), \gamma(h_{2k}), \ldots, \gamma(h_{nk})\}, \\ \overline{a} &= \{\overline{a}_1, \overline{a}_2, \ldots, \overline{a}_n\}, \\ e &= \{1, 1, \ldots, 1\}, \\ y &= \{y_1, y_2, \ldots, y_n\}, \\ A &= \{\gamma(h_{ij})\}. \end{aligned}$$

Тогда систему уравнений (8) можно записать в матричном виде

$$\begin{pmatrix} A & e^T \\ e & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{a}^T \\ \overline{\lambda} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma^T \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{9}$$

В соответствии с (9) функция (1), восстанавливающая поле в узлах сетки также запишется в матричной форме:

$$\widetilde{f}(\overline{x}_k) = y\overline{a}^T, \tag{10}$$

где $\overline{a}^T$ - решение системы (9) для точки $\overline{x}_k$.

Как уже отмечалось выше, задачу (1) приходится решать для каждой точки $\overline{x}_k$. При большом количестве исходных данных это может вылиться в длительную расчетную процедуру.

В качестве примера можно привести работу [4]. В этой работе для решения задачи крайгинга используется высокопроизводительный компьютер CM5, оснащенный 128 процессорами с 32 мегабайтами оперативной памяти каждый. Восстановление поля, заданного 4000 точками на сетке 2000x2000 заняло на таком компьютере 1750 минут. Такое большое количество времени потребовалось потому, что пришлось решать систему линейных уравнений размерности 4001x4001 4 миллиона раз! Предлагаемый нами первый этап оптимизации для той же задачи требует решения СЛУ всего два раза.

Воспользуемся блочной структурой матрицы в (9). Задачу можно записать следующим образом:

$$\begin{cases} A\overline{a}^T + e^T\overline{\lambda} = \gamma^T \\ e\overline{a}^T = 1 \end{cases}$$

Из первого уравнения системы найдем $\overline{a}^T$ и подставим его во второе уравнение:

$$\overline{a}^T = A^{-1}\left(\gamma^T - e^T\overline{\lambda}\right)$$

$$e\overline{a}^T = eA^{-1}\gamma^T - eA^{-1}e^T\overline{\lambda} = 1$$

Найдя $\overline{\lambda}$ и подставляя его в $\overline{a}^T$ можно получить:

$$\overline{\lambda} = \frac{eA^{-1}\gamma^T - 1}{eA^{-1}e^T} \Rightarrow \overline{a}^T = A^{-1}\gamma^T - \frac{eA^{-1}\gamma^T - 1}{eA^{-1}e^T}A^{-1}e^T$$

Тогда (10) запишется:

$$\widetilde{f}(\overline{x}_k) = yA^{-1}\gamma^T - \frac{eA^{-1}\gamma^T - 1}{eA^{-1}e^T} yA^{-1}e^T \qquad (11)$$

Транспонируя (11) и учитывая симметрию матрицы A, получим:

$$\widetilde{f}(\overline{x}_k) = \gamma A^{-1}y^T - \frac{\gamma A^{-1}e^T - 1}{eA^{-1}e^T} eA^{-1}y^T \qquad (12)$$

Отсюда видно, что для нахождения $\widetilde{f}(\overline{x}_k)$ необходимо дважды обратить матрицу A, а именно, найти вектора $A^{-1}y^T$ и $A^{-1}e^T$, что значительно ускоряет процесс вычислений. Количество обращений матрицы A теперь не зависит от числа узлов сетки.

Следующая проблема, которая рассматривается в этой статье связана с попыткой построения метода, аналогичного крайгингу, однако построенного на идеях функционального анализа и разложении функций по базисам в соответствующих пространствах. Необходимость в этом заключается в попытке объяснить смысл вариограммы с детерминистских позиций.

Будем искать решение исходной задачи в следующем виде:

$$\widetilde{f}(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i B_i(x) + \lambda \cdot 1, \qquad (13)$$

где $B_i(x)$ и 1 - базисные функции. Для нахождения коэффициентов a_i и λ потребуем, чтобы функция $\widetilde{f}(x)$ была интерполирующей, т.е. проходила через исходные данные:

$$\begin{cases} a_1B_1(x_1) + a_2B_2(x_1) + \ldots + a_nB_n(x_1) + \lambda = y_1 \\ a_1B_1(x_2) + a_2B_2(x_2) + \ldots + a_nB_n(x_2) + \lambda = y_2 \\ \ldots \\ a_1B_1(x_n) + a_2B_2(x_n) + \ldots + a_nB_n(x_n) + \lambda = y_n \end{cases} \qquad (14)$$

Как и в крайгинге, наложим на решение требование "несмещенности" искомой функции $\widetilde{f}(x)$ относительно среднего значения по исходным данным. Это требование имеет вид:

$$\lim_{\xi\to\infty} \frac{1}{2\xi} \int_{-\xi}^{\xi} \widetilde{f}(x)dx = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i. \qquad (15)$$

Подставляя в (15) выражение (13) и (14), получим запись этого условия через базисные функции $B_i(x)$ и λ:

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \cdot \lim_{\xi \to \infty} \frac{1}{2\xi} \int\limits_{-\xi}^{\xi} B_i(x)dx + \lambda = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} a_i B_i(x_j) + \lambda \right).$$

В процессе выкладок коэффициент λ сокращается и получается равенство:

$$\sum_{i=1}^{n} a_i \left[\lim_{\xi \to \infty} \frac{1}{2\xi} \int\limits_{-\xi}^{\xi} B_i(x)dx - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^{n} B_i(x_j) \right] = 0. \tag{16}$$

Предположим для дальнейшего, что выражение в квадратных скобках есть величина не зависящая от номера i. Она может быть постоянной конечной величиной, тогда вынося ее за знак суммы получим условие на коэффициенты

$$\sum_{i=1}^{n} a_i = 0. \tag{17}$$

Если величина в квадратных скобках не зависит от i и при $\xi \to \infty$ стремиться к ∞, то равенство нулю формулы (16) также возможно при выполнении условия (17).

Следовательно, условие "несмещенности" (15) привело к дополнительному уравнению (17), которым следует дополнить алгебраическую систему (14).

Решение (13) и систему (14) - (17) можно записать в матричной форме:

$$\widetilde{f}(x) = \gamma a^T + \lambda,$$

$$\begin{pmatrix} B & e^T \\ e & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^T \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y^T \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{18}$$

где по сравнению с системой алгебраических уравнений метода крайгинга (9) в правой части вместо вариограммы γ^T стоят исходные данные y^T. Матрица B составлена из базисных функций, вычисленных в точках, соответствующих координатам исходных данных, тогда как в матрице A на соответствующих местах стоят значения вариограммы. Покажем, что если в системе (18) и решении (13) в качестве базиса взять вариограмму, то решение задачи (1) по методу крайгинга и решение (13) по методу (18) тождественно совпадут.

Действительно, решим систему (18) в предположении, что в ней матрица B заменена на матрицу A. По аналогии с решением (9) запишем ответ:

$$\widetilde{f}(\overline{x}_k) = \gamma A^{-1}y^T + \frac{eA^{-1}y^T}{eA^{-1}e^T}\left(1 - \gamma A^{-1}e^T\right) \tag{19}$$

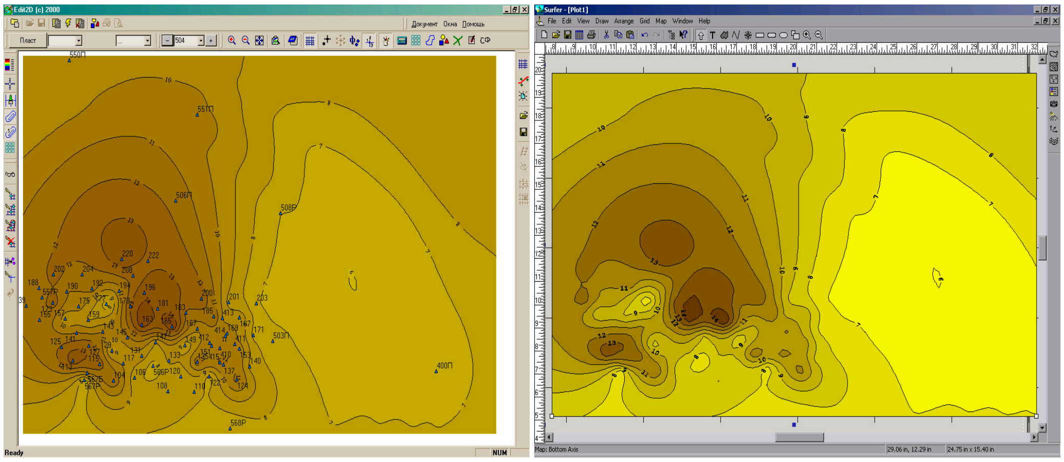
Вычтем из решения (19) решение (12) и покажем, что результат будет нулевым:

$$\gamma A^{-1}y^T + \frac{eA^{-1}y^T}{eA^{-1}e^T}\left(1 - \gamma A^{-1}e^T\right) - \gamma A^{-1}y^T + \frac{\gamma A^{-1}e^T - 1}{eA^{-1}e^T}eA^{-1}y^T =$$

$$= \frac{eA^{-1}y^T}{eA^{-1}e^T}\left(1 - \gamma A^{-1}e^T\right) + \frac{eA^{-1}y^T}{eA^{-1}e^T}\left(\gamma A^{-1}e^T - 1\right) = 0$$

Следовательно, доказано, что если в качестве базиса в постановке (13) взять базис сдвига, получаемый из вариограммы путем ее последовательного смещения из одной экспериментальной точки в другую точку, то оба метода дадут одинаковый результат. Например, расчет крайгингом на основе программы Surfer 7.0 (c) Golden SoftWare и по методу (13), реализованному нами в ИПК "Баспро" в организации "АЦ Сибинкор" (г. Тюмень), дают одинаковые картинки (Рис 1.).

Рис. 1: ИПК "Баспро" и Surfer 7.0



Время счета этих программ оказалось примерно одинаковым и на несколько порядков меньшим, чем полученное в работе [4].

Совпадение результатов основано на нетривиальном предположении о независимости от индекса i выражения

$$\lim_{\xi\to\infty}\frac{1}{2\xi}\int\limits_{-\xi}^{\xi}B_i(x)dx-\frac{1}{n}\sum_{j=1}^{n}B_i(x_j)=F(x). \tag{20}$$

Остается установить, когда это предположение имеет место.

В работе [3] в качестве моделей вариограмм приведены следующие функции:

1. Линейная модель $\gamma(h)=Ah+B$
2. Степенная модель $\gamma(h)=ah^{\lambda}$
3. Экспоненциальная модель $\gamma(h)=C_0+C\left[1-\exp\left(-\frac{|h|}{a}\right)\right]$
4. Модель де Вийса $\gamma(h)=A\ln(h)+B$
5. Сферическая модель $\begin{cases}\gamma(h)=C\left(\frac{3h}{2a}-\frac{h^3}{2a^3}\right)+C_0, \text{ если } h\le a\\ \gamma(h)=C+C_0, \text{ если } h>a,\\ \gamma(0)=0\end{cases}$

Из этих вариограмм базисы сдвига получаются, например, так:

$$B_i(x)=A|x-x_i|+B \qquad \text{(линейная модель)}$$

Нетрудно видеть, что в этом случае в выражении (20) интеграл не будет зависеть от индекса i и, кроме того, он стремится к бесконечности, поэтому вторым конечным слагаемым можно пренебречь, откуда необходимо следует условие (17). Аналогичный результат имеет место почти для всех приведенных типов вариограмм и для них верно соотношение (17).

Под описанный случай не подходят экспоненциальная и сферическая модели вариограмм. В тоже время численные эксперименты со сферической и экспоненциальной вариограммами и в этом случае дают совпадающие с крайгингом результаты.

Отметим некоторые особенности вариограмм, которые трактуются теперь как порождающие функции для базисов сдвигов. Эти особенности следующие:

1. Все они порождают существенно нелокальный базис.

2. Некоторые из них являются неограниченными при возрастании аргумента.

3. Аргументы вариограмм - всегда расстояния от точки с номером i до произвольной текущей точки.

4. Вероятно, вариограммы порождают в некотором смысле оптимальный базис, т.к. их построение опирается на экспериментальные данные задачи.

С другой стороны, поскольку теперь понятно, что вариограмма - это порождающая функция базиса, обладающая указанными выше свойствами, то открываются неограниченные возможности в его конструировании на основе каких-либо других соображений.

Условие $\sum\limits_{i=1}^{n} \overline{a}_i = 1$ в крайгинге не всегда обоснованно. В некоторых работах, например [2], считают, что во многих случаях это условие использовать не нужно. В данной работе условие $\sum\limits_{i=1}^{n} a_i = 0$ (17) появилось как следствие предположения независимости от индекса выражения (20). Если предположить теперь, что выбранный нами базис $B_i(x)$ удобен для решения задачи и в тоже время он не удовлетворяет этому условию, тогда вместо уравнения (17) можно использовать условие (16). В этом случае совпадения с крайгингом не будет, зато будет точно выполняться условие "несмещенности" и наш метод будет обладать многими чертами крайгинга.

В работе [2], стр. 120, утверждается следующее: "В ряде работ большое внимание уделяется выбору типов вариограмм. На самом деле это имеет чисто техническое значение. Вряд ли можно установить общий закон изменчивости на месторождениях, во всяком случае всегда будет неизвестно заранее, выдерживается ли этот закон на новом месторождении. Важно лишь достаточно хорошо аппроксимировать реальную вариограмму, что всегда можно сделать, взяв несколько функций с соответствующими параметрами. Главное заключается в том, насколько в действительности эмпирическая вариограмма близка к истинной."

В этом утверждении автор противоречит себе, утверждая, с одной стороны невозможность хорошего построения вариограммы, а с другой, требуя ее хорошей аппроксимации. Вероятно, автор численно убедился в том, что во многих случаях отсутствует необходимость в качественном подборе вариограмм. С позиций данной работы необходимо лишь, чтобы базис был полным и обладал перечисленными выше свойствами. Достаточное количество базисных функций в решении будет давать удовлетворительный результат.

Наконец, еще одна возможность модернизации метода заключается в том, что средняя величина (интеграл в формуле (16)) может вычисляться для конечной области. Это среднее может равняться также среднему значению взятому, например, с тренда, а не полученному по исходным данным.

Из сопоставления двух методов со всей определенностью очевидно, что метод крайгинга является интерполяционным методом, несмотря на его аппроксимационную постановку (он получен как следствие минимизации дисперсии).

Авторы признательны проф. Волкову А.М. и к.г.-м.н. Сидорову А.Н. за полезные обсуждения этой работы.

Список литературы

[1] Матерон Ж. Основы прикладной геостатистики. М.:Мир. 1968. с. 408.

[2] Аронов В.И. Методы построения карт геолого-геофизических признаков и геометризация залежей нефти и газа на ЭВМ. М.:Недра. 1990. с. 301.

[3] Давид М. Геостатистические методы при оценке запасов руд. Л.:Недра. 1980. с. 360.

[4] K.E. Kerry, K.A. Hawick. Kriging Interpolation on High-Perfomance Computers. Department of Computer Science, University of Adelaide, SA 5005, Australia. Technical Report DHPC-035, http://acsys.adelaide.edu.au/reports/035/abs-035.html