МЕТОДЫ ЦИФРОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ: КРИГИНГ И РАДИАЛЬНАЯ ИНТЕРПОЛЯЦИЯ*

С.М. Кошель, О.Р. Мусин (МГУ)
skoshel@geogr.msu.ru

Мы продолжаем, после некоторого перерыва, серию публикаций [см. ИБ NN 4(16), 5(17), 2(19), 3(20)], посвященных методам цифрового моделирования в ГИС. В настоящей статье речь пойдет об одном из самых мощных методов геостатистики – *кригинге*. Перед нами стоит весьма непростая задача: как в популярном журнале, каковым является "Информационный бюллетень", доступно описать этот метод, базирующийся на довольно сложных математических понятиях и изобилующий различными формулами и алгоритмами. В принципе, приведенные в статье формулы предназначены для тех читателей, которые желают самостоятельно запрограммировать этот метод. Остальные могут пропускать "математику", обращая главное внимание на понимание терминологии и практический смысл скрытых за ней понятий, без чего использование кригинга и радиальной интерполяции при цифровом моделировании подобно "гаданию на кофейной гуще". Для удобства читателей, которые используют в своей работе англоязычные пакеты по моделированию, мы будем приводить наряду с русскими названиями терминов и понятий кригинга их английский вариант.

Метод кригинга был назван так известным французским исследователем, одним из "отцов" геостатистики Г. Матероном по фамилии южноафриканского геолога D.G. Krige, который применял его для определения запасов золота в россыпях. Иногда неправильно называют этот метод крайгингом (как бы сохраняя английское произношение слова *kriging*). Фамилия Krige произносится и по-русски, и по-английски как Криге, и, соответственно, название метода (в том числе и по-английски) произносится как кригинг.

В отличие от других методов цифрового моделирования, например, триангуляции Делоне, по кригингу имеется обширная библиография на русском языке. Однако практически все эти публикации исходят от геологов или геофизиков и предназначены для специалистов именно в этих областях. С этой точки зрения с кригингом можно ознакомиться, например, по книгам: В.Ф.Родионов, Справочник по математическим методам в геологии, М: Недра, 1987 и Дж. Дэвис, Статистический анализ данных в геологии, М.: Недра, 1990. В начале своей деятельности ГИС-Ассоциация активно поддерживала работу сотрудника ВНИИ Геосистем В.А. Мальцева, автора программного комплекса для геостатистического моделирования и анализа "GST". На наш взгляд, руководство пользователя "GST" содержит неплохое описание процедуры моделирования с помощью кригинга.

Основные термины и уравнения кригинга.

Перейдем теперь к краткому описанию идеи и уравнений кригинга. Предположим, что у нас есть некоторый пространственно-зависимый показатель Z (высота, глубина, поллютант, концентрация минерала и т.д.) и нам известны значения z_i этого показателя в конечном наборе опорных точек $\boldsymbol{p}_i, i=1,...n$ (так как метод кригинга применим для пространства любой размерности, для простоты обозначений мы будем использовать векторное обозначение точек пространства, то есть выделять их жирным шрифтом). Требуется построить функцию $Z=f(\boldsymbol{p})$ такую, что ее значения в опорных точках равны (интерполяция) или приблизительно равны (аппроксимация) z_i. На Рис.1 показан пример расположения опорных точек и значений в них, который мы будем в дальнейшем использовать в качестве тестового. В геостатистике предполагается, что Z является случайным процессом со стационарными приращениями и заданной вариограммой (*variogram, semivariogram*) $\gamma(\boldsymbol{h})$ (или ковариационной функцией $c(\boldsymbol{h})$), а значения в опорных точках являются некоторой реализацией этого случайного процесса. Вариограмма (а также ковариационная или автокорреляционная функции) является важнейшей характеристикой случайного процесса со стационарными приращениями и задает распреде-

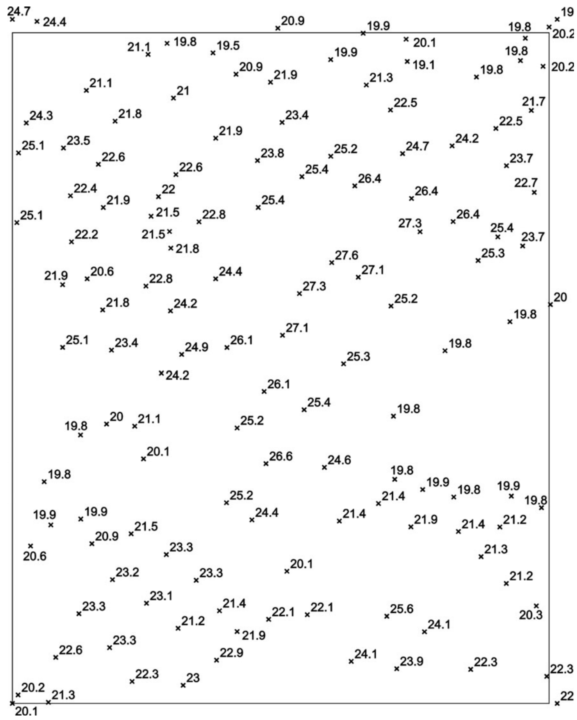

Рис. 1. Пример расположения опорных точек

---

* Кошель С.М., Мусин О.Р. Методы цифрового моделирования: кригинг и радиальная интерполяция // Информационный бюллетень ГИС-Ассоциации. – 2000. - №4(26)-5(27). – с.32-33. – 2001. - №1(28). – с.58, №2(29)-3(30). – с.23-24.

ление квадратов разностей значений (или корреляцию) в парах точек в зависимости от их взаимного расположения, но не от их абсолютного положения. Процедура интерполяции называется *оцениванием (estimating)*, а полученное в результате интерполяции значение $Z_0 = f(\boldsymbol{p}_0)$ называется *оценкой (estimation)* в точке $\boldsymbol{p}_0$. В наиболее простом и самом распространенном варианте *линейного* кригинга оценка в произвольной точке $\boldsymbol{p}_0$ рассматриваемой области ищется в виде линейной комбинации значений в опорных точках: $Z = a_1 z_1 + a_2 z_2 + \ldots + a_n z_n$. Неизвестные коэффициенты a_i определяются из условий несмещенности оценки и минимизации ее дисперсии, что приводит к системе линейных уравнений кригинга. При условии, что процесс Z имеет стационарное математическое ожидание, система уравнений кригинга выглядит следующим образом:

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \gamma_{ij} + \mu = \gamma_i,\ i = 1,\ldots,n;\ \sum_{j=1}^{n} a_j = 1;$$

где μ - множитель Лагранжа, возникающий из-за условия несмещенности оценки, $\gamma_{ij} = \gamma(\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{p}_j)$, $\gamma_i = \gamma(\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{p}_0)$. Процедура оценивания в этом случае называется *ординарным* (простым) *линейным* кригингом (*ordinary linear* kriging). Так как минимизируемая дисперсия оценки может быть записана также и через ковариационную функцию, в уравнениях кригинга может использоваться функция $c(\boldsymbol{h})$. Если же процесс Z не является стационарным (в данных присутствует значимый тренд), используют процедуру *универсального* (*universal*) линейного кригинга. В этом случае считается, что случайный процесс Z может быть представлен в виде $Z(\boldsymbol{p}) = \sum_{i=1}^{k} b_i \varphi_i(\boldsymbol{p}) + \varepsilon(\boldsymbol{p})$, где $\varphi_1(\boldsymbol{p}),\ldots,\varphi_k(\boldsymbol{p})$ - набор линейно-независимых детерминированных базисных функций, а $\varepsilon(\boldsymbol{p})$ - стационарный случайный процесс с нулевым математическим ожиданием. Детерминированная составляющая называется *трендом* или *дрифтом* (*drift*), а в качестве функций $\varphi_i(\boldsymbol{p})$ обычно используют мономы, то есть тренд представляет собой полином, как правило, не выше второй степени. Минимизация дисперсии оценки и учет несмещенности приводят к системе уравнений универсального кригинга для коэффициентов a_i:

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \gamma_{ij} + \sum_{j=1}^{k} \mu_j \varphi_j(\boldsymbol{p}_i) = \gamma_i, i = 1,\ldots,n;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \varphi_i(\boldsymbol{p}_j) = \varphi_i(\boldsymbol{p}_0), i = 1,\ldots,k;$$

где $\mu_1,\ldots,\mu_k$ – множители Лагранжа. Отметим, что ординарный кригинг является частным случаем универсального при $k = 1$ и $\varphi_1(\boldsymbol{p}) = 1$. Метод кригинга, кроме вычисления самого показателя, позволяет найти дисперсию в точке $\boldsymbol{p}_0$ по формуле $\sigma^2(\boldsymbol{p}_0) = \sum_{i=1}^{n} a_i \gamma_i + \sum_{i=1}^{k} \mu_i \varphi_i(\boldsymbol{p}_0)$, что дает возможность оценить точность моделирования.

Вариография.

Заметим теперь, что уравнения кригинга мы выписывали, считая известной вариограмму. На практике же вариограмма моделируемого процесса практически никогда неизвестна и ее приходится подбирать по исходным данным в опорных точках. Эта процедура называется *вариографией* и, собственно говоря, является начальным и самым важным этапом в кригинге, от которого полностью зависит результат моделирования. На первом шаге вариографии по исходным данным строится *выборочная* (*экспериментальная*) вариограмма, для дискретного набора точек определяемая формулой $\gamma^*(\boldsymbol{h}) = \frac{1}{2N_h} \sum_{i=1}^{N_h} \left[Z(\boldsymbol{p}_i + \boldsymbol{h}) - Z(\boldsymbol{p}_i)\right]^2$, N_h - количество пар точек со сдвигом $\boldsymbol{h}$. Здесь различают *изотропный* (когда вариограмма и, соответственно, взаимовлияние между парами точек зависит только от расстояний между ними) и *анизотропный* (когда вариограмма зависит не только от расстояния между парами точек, но и от направления вектора, соединяющего эти точки) случаи. Из-за нерегулярности расположения опорных точек на практике выборочную вариограмму вычисляют в осредненном виде. Пусть s – некоторый эмпирически выбранный шаг осреднения, $t_k = (k - \frac{1}{2})s$, $k = 1,2,\ldots$, тогда (для изотропного случая) $\gamma^*(t_k) = \frac{1}{2n_k} \sum_{i,j} (z_i - z_j)^2$, где суммирование ведется по всем парам точек, для которых $t_k - \frac{s}{2} \le |\boldsymbol{p}_i - \boldsymbol{p}_j| < t_k + \frac{s}{2}$, а n_k - количество таких пар. Экспериментальную вариограмму изображают в виде кусочно-линейной функции, по горизонтальной оси откладывают расстояния между парами точек, по вертикальной – вариацию (квадрат

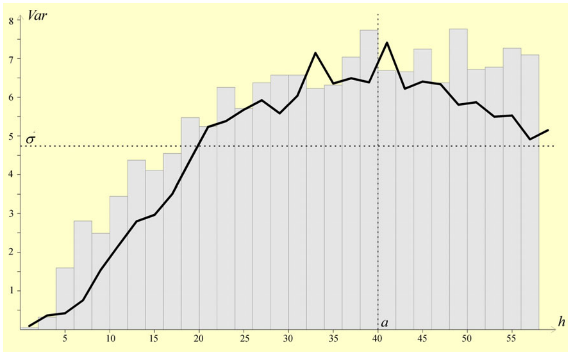

Рис. 2. Пример выборочной вариограммы

разности значений). Точки t_k, для которых $n_k = 0$, не учитываются. На Рис.2 показан пример выборочной вариограммы, построенной по данным Рис.1.

Фоном в виде столбчатой диаграммы показано распределение пар точек по интервалам осреднения. В случае анизотропии вводят шаг осреднения по углу, аналогичным образом вычисляют несколько выборочных вариограмм, соответствующих разным угловым секторам, и одновременно отображают их на графике. Выборочную вариограмму нельзя напрямую использовать в уравнениях кригинга, ее необходимо приблизить некоторой модельной функцией вариограммы. В качестве модельной годится не любая функция, а только обладающая некоторыми определенными свойствами, на которых мы не будем здесь останавливаться. Приведем формулы для некоторых наиболее популярных модельных функций вариограмм (здесь везде $t = h/a$, $\gamma(0) = 0$; для пп. 1)-5) $\gamma(h) = c_0 + c_1$ при $h > a$):

1) линейная

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 t;$$

2) сферическая

$$\gamma(h) = c_0 + c_1\left(\tfrac{3}{2}t - \tfrac{1}{2}t^3\right);$$

3) логарифмическая

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 t^2\left(1 - \ln t^2\right);$$

4) квадратичная

$$\gamma(h) = c_0 + c_1\left(2t - t^2\right);$$

5) круговая

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 \frac{2}{\pi}\left(t\sqrt{1-t^2} + \arcsin t\right);$$

6) экспоненциальная

$$\gamma(h) = c_0 + c_1\left(1 - e^{-3t}\right);$$

7) гауссова

$$\gamma(h) = c_0 + c_1\left(1 - e^{-3t^2}\right);$$

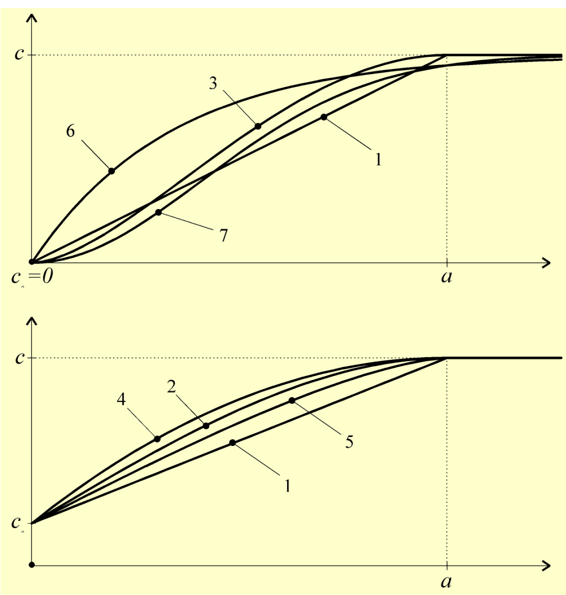

Рис. 3. Графики модельных вариограмм

Параметрами вариограмм являются: *a – радиус влияния* или *лаг* (*range*), c_0 - *эффект самородка* (*nugget effect*), $c = c_0 + c_1$ - *порог* (*sill*), c_0/c - *относительный эффект самородка* (*relative nugget*). На Рис.3 показаны графики перечисленных модельных функций.

Практические рекомендации.

В этом разделе мы хотели бы поделиться с читателями некоторыми рекомендациями по выбору параметров кригинга, основанными на более чем десятилетнем практическом опыте, накопленном при создании и использовании пакета "МАГ".

Выбор параметров c_0, c_1 и типа модельной вариограммы при фиксированном радиусе влияния может быть сделан как визуально, путем изучения графиков выборочной и модельных вариограмм, так и автоматически с помощью метода наименьших квадратов. Мерой близости модельной и выборочной вариограмм в этом случае является сумма квадратов отклонений в точках t_k при $t_k < a$. Наличие эффекта самородка обычно хорошо определяется по графику выборочной вариограммы (при подходе к нулю функция стремится к некоторой константе, отличной от нуля). В связи с этим, часто при автоматическом выборе параметров значение c_0 фиксируют, а ищут только c_1. Начальное значение радиуса влияния обычно выбирают равным значению *h*, при котором график выборочной вариограммы впервые пересекает горизонтальную прямую, проведенную на уровне общей дисперсии показателя, вычисленной по всей совокупности значений в опорных точках. Эту горизонтальную прямую всегда рисуют на графиках вариограмм, так как считается, что на расстояниях, при которых значение функции вариограммы превосходит общую дисперсию, взаимовлияние между точками отсутствует. Иногда применяют и нелинейные методы оптимизации для одновременного поиска всех параметров (a, c_0, c_1). В этом случае желательно проконтролировать найденные параметры визуально из-за возможного наличия нескольких локальных минимумов целевой функции. Для более полного понимания значения эффекта самородка заметим, что при его ненулевом значении кригинг превращается в процедуру аппроксимации, а не интерполяции. При этом эффект сглаживания, то есть отклонение вычисленных данных от исходных, возрастает с ростом относительного эффекта самородка.

Правильному выбору типа модельной вариограммы может помешать наличие глобального тренда в исходных данных. Выборочная вариограмма при этом обычно все время возрастает с ростом *h* и ведет себя как выпуклая вниз парабола или экспонента, тогда как при отсутствии тренда выборочная вариограмма сначала возрастает с ростом *h* приблизительно до значения общей дисперсии, а с дальнейшим увеличением расстояния продолжает колебаться вокруг этого значения. В таких случаях необходимо строить тем или иным способом (обычно методом наименьших квадратов) тренд по опорным точкам, последовательно увеличивая его степень, вычитать его из исходных данных и изучать вариограмму остатков, то есть, в терминах универсального кригинга постараться найти детерминированную составляющую случайного процесса. Если же с помощью обычных полиномов этого сделать не удается, можно попробовать тригонометрические полиномы или использовать в качестве базисных функций системы ортогональных полиномов. Моделирование при наличии тренда можно выполнять с как с помощью ординарного кригинга по остаткам, прибавляя к полученному результату вычтенный ранее тренд, так и с помощью универсального кригинга, используя в качестве базисных функций дрифта те же, что и в найденном тренде.

Следует отметить, что при создании цифровых моделей показателя приходится решать систему уравнений кригинга для каждого узла регулярной сетки. Кроме того, при большом количестве опорных точек (>300-500 для двойной точности) численное решение системы линейных уравнений становится неустойчивым, а при количестве в несколько тысяч и вовсе невозможным. В таких случаях прибегают к следующему приему. В уравнениях кригинга используют не все опорные точки, а только те, которые попали в заданную окрестность точки, в которой мы ищем оценку. Окрестность задается *радиусом поиска* (*search radius*) и, в принципе, может иметь эллиптическую форму в соответствии с выбранными параметрами анизотропии. Количество отобранных точек при этом можно ограничивать снизу и сверху, то есть использовать только $n_{\max}$ ближайших и увеличивать окрестность поиска до тех пор, пока не будет отобрано $n_{\min}$ точек. Для того чтобы среди отобранных точек были представлены по возможности все направления, область поиска часто разбивают на несколько секторов (обычно 4 или 8) и константы $n_{\max}$, $n_{\min}$ применяют для каждого сектора. Такой прием позволяет существенно снизить размерность решаемых систем уравнений и повысить скорость вычислений. Но здесь есть и свои проблемы. Дело в том, что при таком отборе точек моделируемая функция формально становится разрывной. Это приводит к появлению на построенной модели линий, на которых происходит заметный скачок функции, обусловленный только неравномерностью расположения точек, а не природой самого показателя. В таких случаях не нужно "притягивать за уши" различные объяснения происхождения этого разрыва, а попытаться избавиться от него, изменяя область поиска.

Рис.4 иллюстрирует разницу в моделях при разном радиусе влияния. При моделировании использовалась логарифмическая вариограмма, для уравнений кригинга выбирались 16 ближайших точек, черным цветом показаны изолинии при $a = 40$, а красным при $a = 20$.

Рис.5 иллюстрирует разницу в моделях при разном типе вариограммы. Здесь $a = 40$, для уравнений кригинга выбирались 16 ближайших точек, черным цветом показаны изолинии при использовании логарифмической вариограммы, а красным - при использовании экспоненциальной.

Интерполяция с помощью радиальных функций.

В заглавии нашей статьи имеется указание на еще один метод цифрового моделирования - *радиальная интерполяция* (интерполяция с помощью радиальных функций, *interpolation by radial func-*

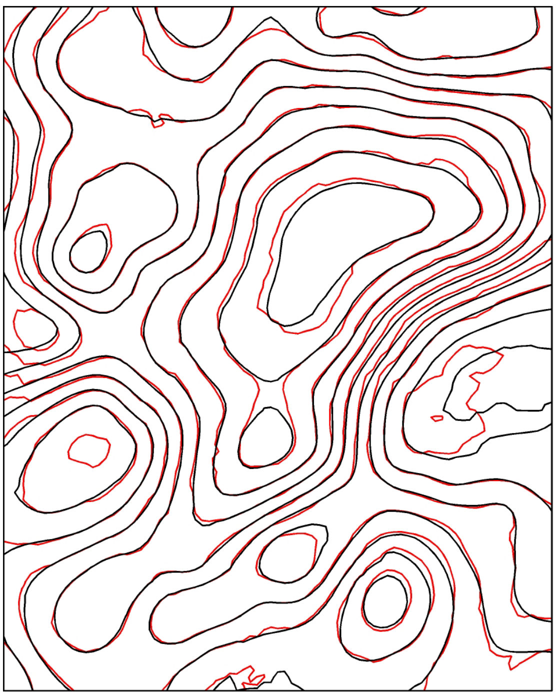

Рис.4.

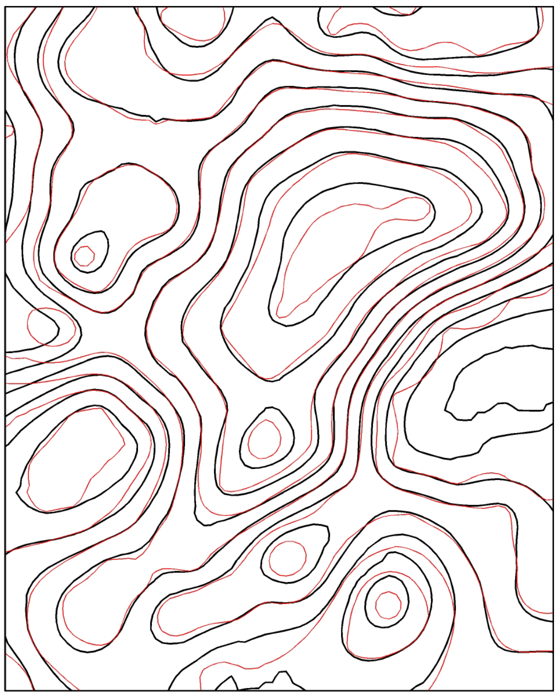

Рис. 5.

functions). Во многих учебниках, монографиях и статьях по геоинформатике и геометрическому моделированию описываются такие способы построения цифровых моделей рельефа как мультиквадрики, аналитические сплайны (D-сплайны) и др. В последние годы появилось общее название для класса этих методов - радиальная интерполяция. Коротко, суть этого метода состоит в следующем. Пусть $\gamma(t)$ – функция, возрастающая с ростом t (мы намеренно используем то же обозначение, что и для вариограммы в методе кригинга). Предположим, что искомая функция $f(\boldsymbol{p})$ имеет вид:

$$f(\boldsymbol{p}) = \sum_{i=1}^{n} a_i \gamma(|\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}_i|) + \sum_{i=1}^{k} b_i \varphi_i(\boldsymbol{p}).$$

Здесь $a_1,...,a_n,b_1,...,b_k$ - неизвестные коэффициенты; $|\boldsymbol{p} - \boldsymbol{p}_i|$ - расстояние между точками $\boldsymbol{p}$ и $\boldsymbol{p}_i$; $\varphi_1(\boldsymbol{p}),...,\varphi_k(\boldsymbol{p})$ - набор линейно-независимых базисных функций (обычно мономы), а $T(\boldsymbol{p}) = \sum_{i=1}^{k} b_i \varphi_i(\boldsymbol{p})$ - функция тренда (обычно полином степени не выше 2). Требование, чтобы функция $f(\boldsymbol{p})$ удовлетворяла условиям интерполяции и была точна на любой линейной комбинации базисных функций, приводит к следующей системе линейных уравнений для вычисления неизвестных коэффициентов:

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \gamma_{ij} + \sum_{j=1}^{k} b_j \varphi_j(\boldsymbol{p}_i) = z_i, i = 1,...,n;$$

$$\sum_{j=1}^{n} a_j \varphi_i(\mathbf{p}_j) = 0,\ i = 1,...,k.$$

Наиболее известными среди радиальных интерполянтов являются

- *мультиквадрики*: $\gamma(t) = (s^2 + t^2)^{\alpha}$, параметры $\alpha = \pm\frac{1}{2},\ s > 0,\ k = 1,\ \varphi_1(\boldsymbol{p}) = 1$;
- *D-сплайны* (сплайны Дюшона, аналитические сплайны): $\gamma(t) = t^2 \log t$ для двумерного случая (легко видеть, что это тоже самое, что кригинг с логарифмической вариограммой).

Также как и в кригинге, в методе радиальной интерполяции можно учитывать радиус влияния и анизотропию с помощью соответствующей нормировки пространства независимых переменных. Функцию $\gamma(t)$ в этом методе называют *радиальной* функцией. Для того чтобы система уравнений на коэффициенты имела решение, радиальная функция должна, кроме возрастания с ростом t, удовлетворять некоторым дополнительным требованиям. Оказывается, что этим требованиям удовлетворяют все модельные функции вариограмм. Можно также доказать, что в случае ординарного кригинга с некоторой вариограммой и радиальной интерполяции с аналогичной радиальной функцией, трендом нулевой степени и нормировкой пространства на радиус влияния, вычисленные значения $f(\boldsymbol{p})$ будут совпадать во всех точках. Таким образом, с точки зрения теории приближений, радиальную интерполяцию можно рассматривать как вариант кригинга, а подбор подходящей радиальной функции, радиуса влияния и параметров анизотропии выполнять с помощью вариографии. При небольшом количестве опорных точек гораздо удобней пользоваться радиальной интерполяцией, так как здесь систему уравнений приходится решать только один раз.

* * *

Методы моделирования, основанные на кригинге, в настоящее время получили широчайшее распространение. Для понимания этого достаточно осуществить поиск в INTERNETе с ключевым словом *kriging*. В результате получится список из нескольких тысяч статей. Все университетские курсы по геоинформатике (геоматике) и геостатистике обязательно включают раздел связанный с кригингом.

Читателям, желающим более подробно ознакомиться с математическим аппаратом и другими процедурами кригинга (блочный, индикаторный, нелинейный и др.), мы можем посоветовать монографию Journel, A.G., and Huijbregts, C.J., 1978, Mining Geostatistics: Academic Press, 600 p. Желающим же быть постоянно в курсе всех новинок в этой науке порекомендуем читать журнал *Mathematical Geology*, являющийся своеобразным клубным журналом любителей геостатистики и содержащий, кроме статей, посвященных теоретическим проблемам, множество работ по вычислительным алгоритмам различных процедур кригинга.

В рамках небольшой статьи невозможно сделать обзор многочисленных приложений этого метода. Отметим, что для ГИС наиболее важными приложениями кригинга и радиальной интерполяции являются: создание цифровых моделей геополей (рельефа); цифровое моделирование динамических изменений, в том числе и прогнозирование (когда одной из координат является время); геометрическая трансформация снимков (или карт) в проекцию карты по опорным точкам.