Linearnost i Lagrangeov linearni multiplikator u jednadžbama običnoga kriginga

T. Malvić i D. Balić

IZVORNI ZNASTVENI ČLANAK

Analizirane su jednadžbe jednostavnoga i običnoga kriginga kako bi se uočila razlika u izračunu procjene u točki, te zorno prikazalo na koji način se Lagrangeov multiplikator iskazuje kao veličina u tehnici običnoga kriginga koja minimizira varijancu procjene. Detaljnom analizom matrica i linearnih jednadžbi, koje se inače automatski izračunavaju u pozadini računalnih programa za kartiranje, prikazana je važnost geomatematike u jednoj od temeljnih geoloških djelatnosti – kartiranju. Nadalje, izvođenjem niza jednadžbi kroz članak pruža se na inženjerski način razumijevanje algoritama jednostavnoga i običnoga kriginga, koje su danas dvije najčešće korištene geostatističke tehnike (uz indikatorski kriging kao treće). U zaključku su predloženi postupci kojima se može odrediti najprimjerenija vrijednost Lagrangeovog multiplikatora za bilo koju jednadžbu običnoga kriginga.

Ključne riječi: geostatistika, jednostavni kriging, Lagrangeov multiplikator, obični kriging

1. UVOD

Postupak kriginga smatra se naprednom interpolacijskom metodom za procjenu vrijednosti regionalizirane varijable u odabranim točkama mreže. Pod pojmom *regionalizirane varijable* podrazumijeva se takva varijabla koja može biti smatrana slučajnom varijablom u beskonačno malom području oko pojedinačne lokacije, ali gdje postoji funkcija kojom se u cijelom takvom području može opisati odnos između više takvih varijabli. Pod pojmom "slučajna" podrazumijeva se kako vjerojatnost da varijabla bude manja od nekoga realnoga broja postoji za svaki takav broj.

Kriging kao statistička metoda procjene je imenovana prema južnoafričkom inženjeru Krigeu[6] koji ju je prvi upotrijebio i opisao prilikom procjene koncentracije rudače u ležištima zlata. Zatim je vremenom uslijedio daljnji teoretski razvoj metode, najvećim dijelom u francuskih znanstvenika, poglavito Matherona[11], te je razvijen niz tehnika kriginga (poput jednostavnoga, običnoga, indikatorskoga i drugih).

Procjena krigingom se temelji na upotrebi postojećih mjerenja (tzv. kontrolnih točaka) čiji je utjecaj izražen odgovarajućim težinskim koeficijentima. Takva procjena također podrazumijeva da su zadovoljeni određeni kriteriji. Prema njima procjena mora biti nepristrana te načinjena tako da je varijanca razlike između stvarnih i procijenjenih vrijednosti u odabranim točkama najmanja moguća. Ta vrijednost naziva se i varijancom kriginga, koja predstavlja provjeru kvalitete interpolacije te je usko povezana s postupkom kros-validacije.

Upravo u postupku minimiziranja pogrješke procjene uvodi se u sve tehnike kriginga nova varijabla nazvana „Lagrangeovim multiplikatorom". Njegova uloga, način procjene njegove vrijednosti te uloga toga postupka u minimiziranju varijance cilj je prikazane analize.

2. SVOJSTVA KRIGINGA

Tehnike kriginga pripadaju skupu linearnih algoritama metode najmanjih kvadrata. Odabir tehnike temelji se na stohastičkim svojstvima slučajne varijable koju se želi interpolirati krigingom. Tehnike se temelje na određivanju težinskih koeficijenata uz podrazumijevanje nepristranosti. Prilikom procjene vrijednosti krigingom svakome podatku uključenom u postupak dodijeljen je određeni težinski koeficijent (λ) kojim je procijenjen njegov utjecaj na ukupni račun vrijednosti točke procjene. Odnosi između postojećih vrijednosti i točke u kojoj se ona procjenjuje izražavaju se vrijednostima variograma (ako pretpostavimo postojanje intrinističke hipoteze), te rjeđe kovarijance u slučaju stacionaranosti drugoga reda. Na taj način su određene zavisnosti i utjecaji pojedine lokacije s obzirom na njezinu udaljenost i smjer od točke čija se vrijednost procjenjuje.

U pravilu model s većim brojem kontrolnih točaka, većim variogramskim dosegom, manjim odstupanjem i bez utvrđene anizotropije bit će puno pouzdaniji. Bez obzira je li prostorna veza opisana variogramima ili kovarijancama težinski koeficijent vezan uz pojedinu lokaciju isključivo je mjera njezine udaljenosti i orijentacije u odnosu na točku procjene, a ne i stvarne vrijednosti podatka u toj točki. Porast vrijednosti variograma (unutar dosega prostorne zavisnosti) ukazuje na porast "reda" ili pouzdanosti procjene, odnosno veća vrijednost dobivena za neki par pokazuje na veće međusobno međudjelovanje tih točaka, pretpostavljajući da je njihova udaljenost manja od dosega prostorne zavisnosti. Dodatnu kvalitetu procjeni dat će pravilniji raspored kontrolnih točaka. Zbog svojih kvaliteta kriging je, kao statistička interpolacijska tehnika, opisana akronimom „BLUE", koji u engleskom znači „**B**est **L**inear **U**nbiased **E**stimator".

U daljnjem tekstu bit će detaljno opisano značenje *linearnosti* kod tehnika jednostavnoga i običnoga kriginga, te kako se takva linearnost postiže.

3. MATEMATIČKE OSNOVE KRIGINGA

Načelo rada kriginga najjednostavnije je prikazati nizom jednadžbi kojima je definiran. Krigingom se procjenjuje vrijednosti regionalizirane varijable na odabranoj lokaciji (Z_k), a na temelju postojećih okolnih vrijednosti (Z_i). Svakoj od tih postojećih vrijednosti pridružen je odgovarajući težinski koeficijent (λ_i), a način njihova proračuna je najzahtjevniji dio algoritma kriginga. Vrijednost regionalizirane varijable određena je kao:

$$Z_i = Z(x_i) \tag{3.1}$$

Gdje je x_i lokacija u kojoj je očitana vrijednost. Nadalje, vrijednost regionalizirane varijable procijenjene krigingom na temelju n okolnih mjerenih točaka je:

$$Z_k = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot Z_i \tag{3.2}$$

Gdje su:

λ_i - težinski koeficijenti za svaku lokaciju „i"
Z_i - okolne poznate vrijednosti, tzv. kontrolne točke
Z_k - vrijednost procjenjena krigingom

Do tih vrijednosti se dolazi rješavanjem sustava linearnih jednadžbi kriginga, koje su objavljene s primjerima njihove upotrebe u nizu knjiga, npr. u radovima [3, 4, 5, 7] i mnogim drugima.

Jednadžbu 3.2 moguće je napisati u obliku matričnih jednadžbi 3.3. Unutar dviju od tih matrica ([A] i [B]) vrijednosti su izražene vrijednošću variograma, odnosno ovise isključivo o međusobnoj udaljenosti i orijentaciji točaka na kojima postoje vrijednosti, a ne o njihovim vrijednostima. Treća matrica ([λ]) sadrži težinske koeficijente koji se na kraju procjenjuju iz jednostavnoga sustava „n" jednadžbi s „n" nepoznanica.

$$[A] \cdot [\lambda] = [B] \tag{3.3}$$

Kriging kao metoda sadrži više tehnika. To su jednostavni kriging, obični kriging, indikatorski kriging, višestruki indikatorski kriging, univerzalni kriging, IRFk (engl. „**I**ntrinsic **R**andom **F**unction of **K** Order") kriging, lognormalni kriging i nelinearni disjunktivni kriging. Rezultat dodavanja linearnog koeficijenta u jednadžbe kriginga, a s ciljem postizanja nepristranosti, bit će opisana na primjeru usporedbe jednostavnoga i običnoga kriginga.

3.1. Teorija jednostavnog kriginga

Jednostavni kriging, kako mu samo ime govori, najjednostavnija je tehnika kriginga. Matrična jednadžba u punome obliku glasi:

$$\begin{bmatrix} \gamma(Z_1-Z_1) & \gamma(Z_1-Z_2) & \dots & \gamma(Z_1-Z_n) \\ \gamma(Z_2-Z_1) & \gamma(Z_2-Z_2) & \dots & \gamma(Z_2-Z_n) \\ & & & \\ \gamma(Z_n-Z_1) & \gamma(Z_n-Z_2) & \dots & \gamma(Z_n-Z_n) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \\ \lambda_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(Z_1-Z) \\ \gamma(Z_2-Z) \\ \\ \gamma(Z_n-Z) \end{bmatrix} \tag{3.4}$$

Gdje su:

γ - vrijednosti variograma
$Z_1 \dots Z_n$ - poznate, mjerenje vrijednosti u točkama
Z - točka u kojoj se procjenjuje nova vrijednosti iz okolnih, poznatih $(Z_1 \dots Z_n)$

Kriging upotrebljava bezdimenzionalne točkaste podatke koji predstavljaju vrijednosti regionalizirane varijable. Kod jednostavnoga kriginga podrazumijeva se da je regionalizirana varijabla karakterizirana stacionarnošću drugoga reda, očekivanje je svugdje konstantno i poznato $[\mu(x)=0]$ te je poznata funkcija kovarijance $[C(x,y)=C(Z(x),Z(y))]$. Nadalje, ako se takva procjena načini na kontrolnoj točki može se na njoj izračunati i pogrješka:

$$\varepsilon = (Z_{prava} - Z_{procjenjena}) \tag{3.5}$$

Nadalje, ako ne postoji vanjski utjecaj (engl. „drift") na varijablu, a zbroj svih težinskih koeficijenata iznosi 1, ostvaren je uvjet nepristranosti. Razlika svih pravih i procijenjenih vrijednosti nazvana je **pogrješkom procjene** ili **varijancom kriginga** te se izražava kao:

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^{n} (Z_{prava} - Z_{procjenjena})_i^2}{n} \tag{3.6}$$

Ili kao drugi korijen varijance nazvanim s**tandardnom pogrješkom** procjene:

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} \tag{3.7}$$

U idealnom slučaju kriging pokušava izračunati optimalne težinske koeficijente koji će dovesti do procjene minimalne pogrješke procjene. Takvi koeficijenti koji dovode do nepristrane procjene uz minimalnu varijancu izračunati su rješavanjem sustava matričnih jednadžbi, poput onih prikazanih u jednadžbi 3.4. Ako se ta matrica predstavi linearnim jednadžbama, glasit će:

$$\begin{aligned} &\gamma(Z_1-Z_1)\cdot\lambda_1 + \gamma(Z_1-Z_2)\cdot\lambda_2 + \dots + \gamma(Z_1-Z_n)\cdot\lambda_n = \gamma(Z_1-Z) \\ &\gamma(Z_2-Z_1)\cdot\lambda_1 + \gamma(Z_2-Z_2)\cdot\lambda_2 + \dots + \gamma(Z_2-Z_n)\cdot\lambda_n = \gamma(Z_2-Z) \\ &\dots\dots \\ &\gamma(Z_n-Z_1)\cdot\lambda_1 + \gamma(Z_n-Z_2)\cdot\lambda_2 + \dots + \gamma(Z_n-Z_n)\cdot\lambda_n = \gamma(Z_n-Z) \end{aligned} \tag{3.8}$$

Procjenu u željenoj točki moguće je prikazati sljedećom jednadžbom:

$$Z = \frac{\begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \\ \lambda_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \gamma(Z_1-Z_0) \\ \dots \\ \gamma(Z_n-Z_0) \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} \gamma(Z_1-Z_1) & \dots & \gamma(Z_1-Z_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ \gamma(Z_n-Z_1) & \dots & \gamma(Z_n-Z_n) \end{pmatrix}} \tag{3.9}$$

Da bi linearne jednadžbe 3.8 bile smatrane nepristranima mora biti zadovoljen uvjet da je zbroj težinskih koeficijenata jednak 1, tj. $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$. Taj uvjet ispunjen je dodavanjem novih uvjeta u matrične jednadžbe kriginga, poput dodavanja Lagrangeovog multiplikatora u jednadžbama običnoga kriginga.

3.2. Teorija običnoga kriginga

Sve tehnike kriginga (osim jednostavnoga) imaju dodane neki "faktor ograničenja" unutar sebe (engl. „constraint") kako bi se minimizirala pogrješka $\sigma_k^2(x)$, pa time postaju nepristrane procjene. Takav faktor u pravilu bi trebao opisati neko vanjsko, prividno neuočljivo, ograničenje ulaznih podataka koje nije vidljivo već iz samih njihovih vrijednosti. Možda najčešće upotrebljavanja tehnika kriginga je *obični kriging*. Stoga će se razmotriti ograničavajući faktor koji se pojavljuje unutar tih jednadžbi, nazvanim *Lagrangeov multiplikator*.

Vratimo se u jednadžbe običnoga kriginga. Ako se zadovolji uvjet da je zbroj svih težinskih koeficijenata jednak 1 tada izraz 3.8 postaje:

$$\begin{aligned}
&\gamma(Z_1-Z_1)\cdot\lambda_1+\gamma(Z_1-Z_2)\cdot\lambda_2+\ldots+\gamma(Z_1-Z_n)\cdot\lambda_n+m=\gamma(Z_1-Z)\\
&\gamma(Z_2-Z_1)\cdot\lambda_1+\gamma(Z_2-Z_2)\cdot\lambda_2+\ldots+\gamma(Z_2-Z_n)\cdot\lambda_n+m=\gamma(Z_2-Z)\\
&\ldots\ldots\\
&\gamma(Z_n-Z_1)\cdot\lambda_1+\gamma(Z_n-Z_2)\cdot\lambda_2+\ldots+\gamma(Z_n-Z_n)\cdot\lambda_n+m=\gamma(Z_n-Z)\\
&\lambda_1+\lambda_2+\ldots+\lambda_n+0=1
\end{aligned} \tag{3.10}$$

Ako sada sustav linearnih jednadžbi prikažemo matrično dobiva se:

$$\begin{bmatrix}
\gamma(Z_1-Z_1) & \gamma(Z_1-Z_2) & \ldots & \gamma(Z_1-Z_n) & 1\\
\gamma(Z_2-Z_1) & \gamma(Z_2-Z_2) & \ldots & \gamma(Z_2-Z_n) & 1\\
\ldots & & & & \\
\gamma(Z_n-Z_1) & \gamma(Z_n-Z_2) & \ldots & \gamma(Z_n-Z_n) & 1\\
1 & 1 & \ldots & 1 & 0
\end{bmatrix}\cdot
\begin{bmatrix}\lambda_1\\ \lambda_2\\ \\ \lambda_n\\ m\end{bmatrix}=
\begin{bmatrix}\gamma(Z_1-Z)\\ \gamma(Z_2-Z)\\ \\ \gamma(Z_n-Z)\\ 1\end{bmatrix} \tag{3.11}$$

Broj težinskih koeficijenata ovisi o broju kontrolnih točaka i može se širiti na vrlo velike ulazne skupove, jer u današnje vrijeme računalni programi uspješno rješavaju velike linearne sustave. Nakon određivanja težinskih koeficijenata moguće je procjenu načiniti jednostavno zbrajajući utjecaj svih kontrolnih točaka otežanih pripadajućim koeficijentima (skraćeno prikazano u jednadžbi 3.2) te se dobiva:

$$Z=\lambda_1\cdot Z_1+\lambda_2\cdot Z_2+\ldots+\lambda_n\cdot Z_n \tag{3.12}$$

Izračun varijance procjene (kriginga) uključuje i dodavanje Lagrangeovog multiplikatora te glasi:

$$\sigma^2=\lambda_1\cdot\gamma(Z_1-Z)+\lambda_2\cdot\gamma(Z_2-Z)+\ldots+\lambda_n\cdot\gamma(Z_n-Z)+m \tag{3.13}$$

Prikazane su dvije, možda najčešće, tehnike kriginga. No, općenito kod svih linearnih varijanti tehnika kriginga (u kojima se rješavaju problemi optimizacije) sustav pripadajućih jednadžbi može se podijeliti u dva dijela:

a) Kroz jedan dio jednadžbi računa se prostorna zavisnost (prostorna korelacija) mjerenih podataka, najčešće koristeći variogram;

b) Drugi dio jednadžbi sadržava razne linearne multiplikatore kojima se postiže da je zbroj svih težinskih koeficijenata jednak 1.

4. PRIMJERI IZRAČUNA MATRICA KRIGINGA

Kao ogledni polazni primjer izračuna matrica kriginga preuzet je prostorni model podataka koji su prikazali Dorsel & La Breche [2]. Nema posebnih razloga zašto bi taj model bio bolji od drugih jednostavnih rasporeda s nekoliko točaka, osim što su autori vrlo jasno naveli sve prostorne podatke mjerene varijable te vrijednosti variograma između njih. Znači, s takvim jasnim i jednostavnim modelom u daljnjem dijelu rada može se usredotočiti samo na promjene koje će takvi podatci uzrokovati u jednadžbama različitih tehnika kriginga. Uspoređeni su računski postupci kod *jednostavnoga kriginga* (tehnike *najboljega linearnoga procjenitelja*) te *običnoga kriginga* (tehnike *najboljega linearnog nepristranog procjenitelja*).

4.1. Razlika varijanca procjene kod tehnika jednostavnoga i običnoga kriginga

Ako se na temelju podataka iz slike 1 te lit.[2] raspiše matrična jednadžba običnog kriginga (formula 3.11) dobiva se:

$$\begin{bmatrix}
0 & 12{,}65 & 21{,}54 & 1\\
12{,}65 & 0 & 14{,}42 & 1\\
21{,}54 & 14{,}45 & 0 & 1\\
1 & 1 & 1 & 0
\end{bmatrix}\cdot
\begin{bmatrix}0{,}3805\\ 0{,}4964\\ 0{,}1232\\ -0{,}9319\end{bmatrix}=
\begin{bmatrix}8\\ 5{,}66\\ 14{,}42\\ 1\end{bmatrix} \tag{4.1}$$

Odnosno za izračun matrice [B] vrijedi:

- za 1. red

$0\cdot 0{,}3805+12{,}65\cdot 0{,}4964+21{,}54\cdot 0{,}1232-0{,}9319=8{,}001$

- te jednako i za 2., 3. i 4. red.

Nadalje, varijanca običnog kriginga se računa prema:

$$\sigma^2_{\mathrm{OK}}=\lambda_1\cdot\gamma(Z_1-Z)+\lambda_2\cdot\gamma(Z_2-Z)+\ldots+\lambda_n\cdot\gamma(Z_n-Z)+m \tag{4.2}$$

Varijanca iznosi σ^2=6,70 m^2, pa standardna pogrješka σ=2,59 m. Zapazimo da je $\sum\lambda=1$ (zbog zaokruživanja razlika iznosi +1 ‰). Promotrimo sada ponašanje gornje matrične jednadžbe ako se zadrži raspored kontrolnih točaka te vrijednosti težinskih koeficijenata kakvi su dani na slici 1, ali ako ih raspišemo tehnikom jednostavnog kriginga. Tada se dobiva:

$$\begin{bmatrix}
0 & 12{,}65 & 21{,}54\\
12{,}65 & 0 & 14{,}42\\
21{,}54 & 14{,}45 & 0
\end{bmatrix}\cdot
\begin{bmatrix}0{,}3805\\ 0{,}4964\\ 0{,}1232\end{bmatrix}=
\begin{bmatrix}8{,}939\\ 6{,}5919\\ 15{,}3519\end{bmatrix} \tag{4.3}$$

Zapazimo kako su u takvom matričnom računu promijenjene vrijednosti variograma udaljenosti od kontrolnih točaka do točke procjene, odnosno u jednadžbi 3.3 vrijednosti matrice [B]. To znači da *bi se promijenio položaj točke* procjene u ravnini na slici 1, a time bi porasla i varijanca procjene koja iznosi σ^2=7,631 m^2 (odnosno standardna pogrješka σ=2,76 m).

4.2. Promjena vrijednosti težinskih koeficijenata kod jednostavnoga kriginga

Krenimo sada promotriti sljedeći slučaj, a to je da su kod jednostavnog kriginga zadržani položaji svih kontrolnih i točke procjene kao i kod običnog kriginga. Time su zadržane jednake variogramske vrijednosti između svih točaka u obje promatrane tehnike kriginga. Jasno je da će se tada promijeniti vrijednosti težinskih koeficijenata kod jednostavnog kriginga, koji će se računati prema sljedećoj jednadžbi:

$$\begin{bmatrix} 0 & 12{,}65 & 21{,}54 \\ 12{,}65 & 0 & 14{,}42 \\ 21{,}54 & 14{,}45 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8{,}939 \\ 6{,}5919 \\ 15{,}3519 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

Kada se gornja matrična jednadžba raspiše linearnim izrazima dobiva se sustav:

$$\begin{aligned} 12{,}65 \cdot \lambda_2 + 21{,}54 \cdot \lambda_2 &= 8 \\ 12{,}65 \cdot \lambda_1 + 14{,}45 \cdot \lambda_3 &= 5{,}66 \\ 21{,}54 \cdot \lambda_1 + 14{,}42 \cdot \lambda_2 &= 14{,}42 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Težinski koeficijenti mogu se izraziti kao:

$$\lambda_2 = \frac{8 - 21{,}54 \cdot \lambda_3}{12{,}65} \qquad \lambda_1 = \frac{5{,}66 - 14{,}45 \cdot \lambda_3}{12{,}65} \qquad \lambda_1 = \frac{14{,}42 - 14{,}42 \cdot \lambda_2}{21{,}54} \quad (4.6)$$

Nakon izračuna koeficijenti iznose $\lambda_1 = 0{,}347$; $\lambda_2 = 0{,}483$; $\lambda_3 = 0{,}088$ (zapazimo da je $\Sigma\lambda=0{,}918$). To znači da matrična jednadžba jednostavnog kriginga za položaj točaka kakav je prikazan na slici 1 glasi:

$$\begin{bmatrix} 0 & 12{,}65 & 21{,}54 \\ 12{,}65 & 0 & 14{,}42 \\ 21{,}54 & 14{,}45 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0{,}347 \\ 0{,}483 \\ 0{,}088 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8{,}939 \\ 6{,}5919 \\ 15{,}3519 \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

4.3. Izračun matrica običnoga kriginga kod pravilnoga rasporeda kontrolnih točaka uz promjenu vrijednostima Lagrangeovog multiplikatora

U ovome potpoglavlju upotrijebljen je novi raspored kontrolnih točaka (slika 2) te druge vrijednosti variogramskog modela. Cilj analize bio je prikaz promjene vrijednosti Lagrangeovog multiplikatora te utjecaj takvoga postupka na procjenu.

Analizirani su slučajevi s tri različite vrijednosti multiplikatora. U prvomu Lagrangeova vrijednost iznosi 0,06, a preuzeta je iz objavljenoga primjera[3]. U sljedeća dva izračuna vrijednosti Lagrangeovog multiplikatora iznosile su 0,9, odnosno -0,9. Te dvije vrijednosti smatrane su približnim ekstremima koje ta varijabla najčešće u praksi može poprimiti.

Odabirom triju vrijednosti za jednake matrične jednadžbe željelo se pokazati kako odabir vrijednosti Lagrangeovog multiplikatora ima presudan utjecaj na minimiziranje pogrješke kod izračuna vrijednosti u točki. Račun je izveden ručno, kako bi se mogle pratiti promjene kroz matrične i linearne jednadžbe kriginga (jednadžbe 3.10 i 3.13). Analizirani raspored sadrži 4 kontrolne točke te se upotrebom običnoga kriginga procijenila vrijednost u točki smještenoj u središtu poligona (slika 2).

Na slici 2 označena je međusobna relativna udaljenost kontrolnih točaka (50 m), na temelju koje su izračunate variogramske vrijednosti. Takav variogramski model ima sljedeće vrijednosti:

- eksperimentalna krivulja aproksimirana je sfernim modelom;
- prag modela je 1;
- doseg modela je 200 m;
- odstupanje modela ne postoji (0).

4.3.1. Vrijednost Lagrangeovog multiplikatora 0,06 (kao u preuzetom primjeru)

U ovom potpoglavlju vrijednost Lagrangeovog multiplikatora preuzeta je iz lit.[3]. Takva vrijednost osigurava najmanju vrijednost varijance procjene običnim krigingom pa smo ju kao takvu raspisali kroz jednadžbe te upotrijebili za kalibraciju računa s drugim vrijednostima Lagrangeovog multiplikatora.

Matrica običnoga kriginga za ovaj slučaj izražena kovarijancama (inverzne su variogramu) glasi:

$$\begin{bmatrix} 1{,}0 & 0{,}49 & 0{,}49 & 0{,}31 & 1{,}0 \\ 0{,}49 & 1{,}0 & 0{,}31 & 0{,}49 & 1{,}0 \\ 0{,}49 & 0{,}31 & 1{,}0 & 0{,}49 & 1{,}0 \\ 0{,}31 & 0{,}49 & 0{,}49 & 1{,}0 & 1{,}0 \\ 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}06 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}63 \\ 0{,}63 \\ 0{,}63 \\ 0{,}63 \\ 1{,}0 \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

S obzirom da se radi o pravilnom rasporedu, unutar matrice [λ] te [B] (jednadžba 3.3) dobivene su konstantne vrijednosti. Ako se matrična jednadžba raspiše linearnim izrazima dobiva se:

$$\begin{aligned} &1 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}31 \cdot 0{,}25 + 0{,}06 = 0{,}6325 \\ &0{,}49 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0{,}31 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}06 = 0{,}6325 \\ &0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}31 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}06 = 0{,}6325 \\ &0{,}31 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0{,}06 = 0{,}6325 \\ &1 \cdot 0{,}25 + 1x0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0 \cdot 0{,}06 = 1 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Sada je moguće izračunati varijancu kriginga prema:

$$\sigma^2_{OK} = 0.25 \cdot 0.63 + 0.25 \cdot 0.63 + 0.25 \cdot 0.63 + 0.25 \cdot 0.63 + 0.06 = 0.69 \quad (4.10)$$

4.3.2. Vrijednost Lagrangeovog multiplikatora 0,9

U ovome primjeru za Lagrangeov multiplikator odabrana je pozitivna vrijednost 0,9. Tada matrica kovarijanci glasi:

$$\begin{bmatrix} 1{,}0 & 0{,}49 & 0{,}49 & 0{,}31 & 1{,}0 \\ 0{,}49 & 1{,}0 & 0{,}31 & 0{,}49 & 1{,}0 \\ 0{,}49 & 0{,}31 & 1{,}0 & 0{,}49 & 1{,}0 \\ 0{,}31 & 0{,}49 & 0{,}49 & 1{,}0 & 1{,}0 \\ 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1{,}47 \\ 1{,}47 \\ 1{,}47 \\ 1{,}47 \\ 1{,}0 \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

Ponovno su unutar matrice [λ] te [B] prikazane konstantne vrijednosti, kao u potpoglavlju 4.3.1. Kada se gornja matrična jednadžba raspiše linearnim izrazima dobiva se sustav:

$$\begin{aligned} &1 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}31 \cdot 0{,}25 + 0{,}9 = 1{,}4725 \\ &0{,}49 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0{,}31 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}9 = 1{,}4725 \\ &0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}31 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}9 = 1{,}4725 \\ &0{,}31 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 0{,}49 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0{,}9 = 1{,}4725 \\ &1 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 1 \cdot 0{,}25 + 0 \cdot 0{,}9 = 1 \end{aligned} \quad (4.12)$$

Varijanca kriginga uz Lagrangeov koeficijent 0,9 iznosi:

$$\sigma^2_{OK} = 0{,}25 \cdot 1{,}47 + 0{,}25 \cdot 1{,}47 + 0{,}25 \cdot 1{,}47 + 0{,}25 \cdot 1{,}47 + 0{,}9 = 1{,}2675 \quad (4.13)$$

4.3.3. Vrijednost Lagrangeovog multiplikatora -0,9

U zadnjem primjeru za Lagrangeov multiplikator odabrana je negativna vrijednost od -0,09 (po uzoru na sličnu vrijednost primijenjenu u potpoglavlju 4.1). Tada matrica glasi:

$$\begin{bmatrix} 1{,}0 & 0{,}49 & 0{,}49 & 0{,}31 & 1{,}0 \\ 0{,}49 & 1{,}0 & 0{,}31 & 0{,}49 & 1{,}0 \\ 0{,}49 & 0{,}31 & 1{,}0 & 0{,}49 & 1{,}0 \\ 0{,}31 & 0{,}49 & 0{,}49 & 1{,}0 & 1{,}0 \\ 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 1{,}0 & 0{,}0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ 0{,}25 \\ -0{,}9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0{,}33 \\ -0{,}33 \\ -0{,}33 \\ -0{,}33 \\ 1{,}0 \end{bmatrix} \tag{4.14}$$

Kao i u prethodna dva primjera unutar matrica $[\lambda]$ i [B] izračunate su konstantne kovarijance. Ako se gornja matrična jednadžba raspiše linearnim izrazima dobiva se sustav:

$$\begin{aligned} &1\cdot 0{,}25 + 0{,}49\cdot 0{,}25 + 0{,}49\cdot 0{,}25 + 0{,}31\cdot 0{,}25 + (-0{,}9) = -0{,}3275 \\ &0{,}49\cdot 0{,}25 + 1\cdot 0{,}25 + 0{,}31\cdot 0{,}25 + 0{,}49\cdot 0{,}25 + (-0{,}9) = -0{,}3275 \\ &0{,}49\cdot 0{,}25 + 0{,}31\cdot 0{,}25 + 1\cdot 0{,}25 + 0{,}49\cdot 0{,}25 + (-0{,}9) = -0{,}3275 \\ &0{,}31\cdot 0{,}25 + 0{,}49\cdot 0{,}25 + 0{,}49\cdot 0{,}25 + 1\cdot 0{,}25 + (-0{,}9) = -0{,}3275 \\ &1\cdot 0{,}25 + 1\cdot 0{,}25 + 1\cdot 0{,}25 + 1\cdot 0{,}25 + 0\cdot(-0{,}9) = 1 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Pripadajuća varijanca tada je negativna (što je matematički nemoguće, pa je i Lagrangeov multiplikator neispravan) iznosi:

$$\begin{aligned} \sigma_{OK}^2 &= 0{,}25\cdot(-0{,}3275) + 0{,}25\cdot(-0{,}3275) + 0{,}25\cdot(-0{,}3275) + \\ &\quad 0{,}25\cdot(-0{,}3275) + (-0{,}9) = -0{,}982 \end{aligned} \tag{4.16}$$

Iz sva tri primjera prikazana u potpoglavlju 4.3 jasno je kako je vrijednost Lagrangeovog koeficijenta 0,06 (kako je navedeno u lit.[3] i prikazano na slici 2) a to je upravo ta vrijednost gdje je varijanca kriginga minimalna. Način izbora općenito najprimjerenije vrijednosti Lagrangeovog koeficijenta, analizirani su kroz sljedeća poglavlja, odnosno diskusiju i zaključke izvedene iz analize.

5. DISKUSIJA O MATEMATIČKOM ZNAČENJU LAGRANGEOVOG MULTIPLIKATORA

Iz rezultata u poglavlju 4 vidljivo je kako prilikom upotrebe običnoga kriginga, kao statističkog postupka procjene, određivanje Lagrangeovog multiplikatora ima presudnu važnost na konačni rezultat.

Ispravne vrijednosti u oba primjera običnoga kriginga, gdje je taj multiplikator upotrijebljen za minimiziranje varijance procjene, bile su drugačije - jedna negativna (-0,9319), a druga pozitivna (0,06). Dokaz o odabiru ispravne vrijednosti prikazan je variranjem vrijednosti multiplikatora kroz matrice u potpoglavlju 4.3. Odstupanjem od najprimjerenije vrijednosti varijanca procjene će rasti (potpoglavlje 4.3.2) ili postati (potpoglavlje 4.3.3) negativna (matematički neispravno).

Promotrimo još jedanput matematičko značenje Lagrangeovog multiplikatora u jednadžbama običnoga kriginga. Vrijednosti u točki procjene može se prikazati kao:

$$Z(r) = \mu + \varepsilon(r) \tag{5.1}$$

Gdje su:

μ - točna (ali stvarno nepoznata) sredina cijele populacije;

$\varepsilon(r)$ - pogrješka normalizirana oko vrijednosti 0 na krivulji slučajne prostorne funkcije

Stvarna vrijednost očekivanja (μ) za mjerenu varijablu u stvarnosti nam je nepoznata, pa se zato procjena najčešće radi tehnikom običnoga kriginga (umjesto jednostavnim krigingom). U običnom krigingu prostorni model računa sredinu isključivo iz podataka koji se nalaze u okolini točke procjene. To je postupak određivanje tzv. *lokalne sredine* gdje se u svakoj točki mreže upotrebljava srednja vrijednost podataka obuhvaćenih *radijusom pretraživanja*. Nadalje, kod primjene kriginga dodatno se pretpostavlja stacionarnost 2. reda te se tada može izračunati kovarijanca C_Z svojstvena procjeni $Z(x)$. Ona se može izraziti kao:

$$C_Z(r_1,r_2) = E[\varepsilon(r_1)\cdot\varepsilon(r_2)] = C_Z(r_1 - r_2) \tag{5.2}$$

Ako se kovarijanca zamijeni variogramom stacionarnost se može izraziti kao:

$$\gamma_Z(r_1,r_2) = \frac{1}{2}\cdot E[\varepsilon(r_1) - \varepsilon(r_2)]^2 = \gamma_Z(r_1 - r_2) \tag{5.3}$$

Pretpostavimo niz od N mjerenja $Z(x_1)\ldots Z(x_n)$ na poznatim lokacijama $x_1\ldots x_n$. Ako se iz tih podataka želi običnim krigingom procijeniti vrijednost varijable Z ($\hat{Z}$) na nekoj neuzrokovanoj lokaciji x_0 trebaju se zadovoljiti tri uvjeta:

1. $\hat{Z}$ treba biti linearan i izračunat iz niza $Z(\gamma_1)\ldots Z(\gamma_n)$;
2. $\hat{Z}$ je nepristrana procjena;
3. $\hat{Z}$ minimizira vrijednost srednje kvadratne pogrješke izražene kao $E\left[Z(x_0) - \hat{Z}(x_0)\right]^2$.

Linearnost (uvjet 1) se postiže ako je zadovoljen izraz $\hat{Z} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot Z(r_i)$.

Nepristranost (uvjet 2) je zadovoljena ako vrijedi:

$$E\left[\hat{Z}(r_0)\right] = \mu \Rightarrow \mu = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot E[Z(r_i)] \Rightarrow \mu = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot \mu \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1 \tag{5.4}$$

Minimiziranje pogrješke (uvjet 3) zahtijeva određivanje najboljih mogućih vrijednosti koeficijenata $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ te Lagrangeovog parametra $2m$. Njihova optimizacija može se izraziti za svaku točku procjene u obliku funkcije $L(\lambda_1, \ldots, \lambda_n, m)$:

$$L = E\left(Z(x_0) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \cdot Z(x_i)\right)^2 - 2m\cdot\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1\right) \qquad L \to 0 \tag{5.5}$$

Optimizacija koeficijenata ($\lambda_1,\ldots,\lambda_n$) i Lagrangeovog (m) parametra postiže se rješavanjem diferencijalne jednadžbe .

Ako se vratimo na osnovnu matričnu jednadžbu kriginga (jednadžba 3.3) te ju prikažemo preko kovarijanci tada ona glasi:

$$C\cdot\lambda_0 = C_0 \tag{5.6}$$

Vrijednosti C i C_0 mogu se matrično prikazati kao:

$$C = \begin{pmatrix} C(0) & C(Z_1 - Z_2) & \dots & C(Z_1 - Z_n) & 1 \\ C(Z_2 - Z_1) & C(0) & \dots & C(Z_2 - Z_n) & 1 \\ & & \dots & & \\ C(Z_n - Z_1) & C(Z_n - Z_2) & \dots & C(0) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

$$C_0 = \begin{pmatrix} C(Z_0 - Z_1) \\ C(Z_0 - Z_2) \\ \dots \\ C(Z_0 - Z_n) \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

Očekivani težinski koeficijenti za točku, izraženi preko jednadžbe 5.6, glase:

$$\hat{\lambda}_0 = C^{-1} \cdot C_0 \quad (5.9)$$

A procjena u odabranoj točki je:

$$\hat{Z}(x_0) = \lambda_1 \cdot Z(x_1) + \dots + \lambda_n \cdot Z(x_n) \quad (5.10)$$

Optimalni težinski koeficijenta te primjereni Lagrangeov multiplikator rezultirat će u izračunu najmanje moguće standardne pogrješke kriginga prikazane kao:

$$\sigma(x_0) = C(0) - \lambda' \cdot c_0 + m \quad (5.11)$$

6. ZAKLJUČAK

U prethodnim poglavljima pokazali smo zašto je tehnika običnoga kriginga primjerenija za interpolaciju točkastih podataka nego li osnovna tehnika jednostavnoga kriginga. Nadalje, u nekim ranijim radovima koji su prikazali upotrebu metode kriginga na naftnogeološkim podatcima (poroznost) izmjerenim u ležištima ugljikovodika u hrvatskom dijelu Panonskoga bazena dokazano je kako su geostatistička interpolacija (pa i stohastička procjena) najprimjereniji pristup za kartiranje geoloških varijabli (npr. literatura [1, 8, 9, 10, 12]).

Također, na temelju tih i drugih analiza zaključeno je kako za primjerenu upotrebu metoda kriginga broj ulaznih podataka treba biti veći od 10, pa i 15 točkastih vrijednosti. No, reprezentativni statistički uzorak u analizi geoloških varijabli svakako bi trebao sadržavati 30 i više točkastih vrijednosti. To znači da teško možemo zaključiti o stvarnome očekivanju populacije predstavljene mjerenim vrijednostima, te je moguće jedino upotrebljavati tzv. lokalnu srednju vrijednost podataka uključenih kroz radijus pretraživanja čvrstih podataka oko točke procjene. To ističe kao primjerenu tehniku običnoga kriginga.

Zbog toga treba s najvećom pažnjom proučiti parametre uključene u jednadžbu te tehnike. Većina njih standardna je za matrični prikaz metode kriginga, ali se javlja i jedan dodani član nazvan linearnim multiplikatorom Lagrangea. Njegovu ulogu i važnost prikazali smo u prethodnim poglavljima. Još jedino nismo odgovorili na pitanje kako se izračunava najprimjerenija vrijednosti toga parametra (m), odnosno vrijednost koja će u konačnici rezultirati minimalnom varijancom kriginga.

Odgovor na to tražili smo u slučajnom uzorkovanju iz skupa mogućih (očekivanih) vrijednosti te veličine. Pokazali smo da ta vrijednost može biti i negativna no vrijednosti varijance kriginga to ne mogu biti (inače je račun besmislen). Nadalje, ako slučajno uzorkujemo tu vrijednost iz nekoga intervala (npr. [-1,1]) većim brojem pokušaja jedna od njih će rezultirati u najmanjoj varijanci kriginga. Način kako odrediti širinu intervala uzorkovanja i njihov broj može se prikazati kroz četiri koraka (slika 3):

1. Iskustveno smo odredili da bi numerički interval u kojem možemo očekivati vrijednost Lagrangeovog multiplikatora približno trebao biti [-1,1]. Također, ponekad ta veličina može biti vrlo bliska vrijednosti 0 (kako je to prikazano). Zato je početna vrijednost za generator slučajnih brojeva Lagrangeovog multiplikatora postavljena na 0,01.

2. U sljedećem koraku (veličina koraka bila bi 0,05) ta vrijednost smanjena je, te prelazi u negativno područje. Izračunata je ponovno pripadajuća varijanca kriginga i zabilježena. Takav postupak bio bi ponavljan sve dok varijanca kriginga ne bi postala negativna. Na tom negativnom intervalu vrijednosti *m* bila bi izdvojena ona s najmanjom varijancom (slika 3 lijevo).

3. Tada bi vrijednost m=0,01 bila uvećana za korak 0,05 u pozitivnom smjeru, ponovno prateći smanjuje li se vrijednost varijance. Ako da, nastavilo bi se s njezinim izračunom dok se ne zabilježi njezin porast i na taj način bio bi određen njezin minimum (nakon prvoga porasta, slika 3 desno).

4. Važno je upamtiti, ako izračunom za prvi pozitivni *m* varijanca odmah počinje rasti, tada se može smatrati da je minimum varijance kriginga određen u negativnom području i postupak se može prekinuti (slika 3 lijevo).

Vjerujemo kako gornja 4 pravila u potpunosti zadovoljavaju ispravan postupak određivanja vrijednosti Lagrangeovog multiplikatora u jednadžbama običnoga kriginga, odnosno primjenu te tehnike kao jedne od najboljih interpolacijskih pristupa za kartiranje geoloških varijabli.

ZAHVALA

Rad predstavlja teorijsku analizu geomatematičkih metoda načinjenu u 2008. godini u okviru dva projekta:

- „Stratigrafska i geomatematička istraživanja naftnogeoloških sustava u Hrvatskoj" (broj 195-1951293-0237) financiranog od strane Ministarstva znanosti, obrazovanja i športa RH;
- „Unaprijeđivanje geoloških interpretacijskih metoda u cilju povećanja iscrpka unutar pješčenjačkih ležišta", financiranog i poduprtog od strane INA-e d.d. Projekt je suradnja Sektora za razradu (INA) i Zavoda za geologiju i geološko inženjerstvo (RGNF).

❖

Autori:

Tomislav Malvić, Dr. sc., dipl. ing., INA-Naftaplin, Sektor za razradu, savjetnik, tomislav.malvic@ina.hr

Davorin Balić, dipl. ing., INA-Naftaplin, Sektor za razradu, Služba za geološku razradu ležišta, inženjer za razradu ležišta, davorin.balic@ina.hr