

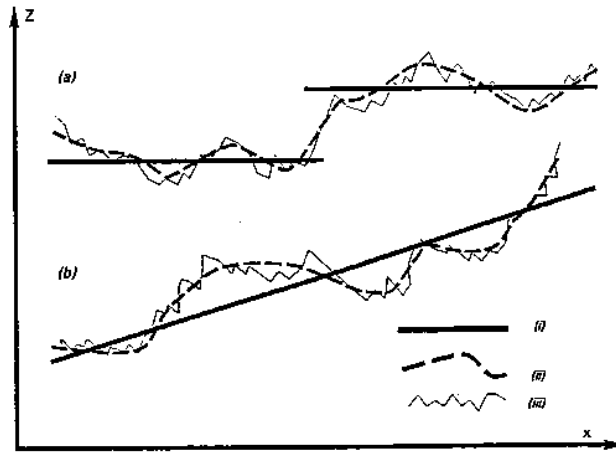
Geostatistické metody interpolace – STRUKTURNÍ ANALÝZA A KRIGING

Kriging patří do tzv. **stochastických** metod. Doposud uvedené metody se naopak označují jako **deterministické** a žádná z nich dosud neřešila následující problémy:

- počet bodů nutných k výpočtu lokálního průměru (interpolované hodnoty)
- velikost, orientaci a tvar okolí
- zda neexistuje jiná cesta k definování vah než funkce vzdálenosti bodů
- jaké jsou chyby a nejistoty spojené s interpolovanými hodnotami

Odpovědi na tyto otázky poskytují geostatistické postupy založené na tzv. **strukturní analýze a krigingu**.

V případě krigingu je interpolovaný povrch tvořen ze **tří složek** (obr. 1). První složku představuje tzv. strukturální komponenta s konstantním průměrem či trendem - **obecný trend** (tzv. drift). Druhou složku povrchu představují kolísání (drobné sníženiny či vyvýšeniny), jejichž podstatu lze vyjádřit určitou matematickou funkcí jako v případě trendu, ale která vyjadřují určitou prostorovou korelaci (tzv. **regionalizovaná proměnná**) – právě tato složka je geostatistickými metodami odhadována. Třetí složku potom představuje **náhodný šum**.



Obr. 1. Základní komponenty spojitého povrchu (i – trendová složka – drift; ii – tzv. regionalizovaná proměnná; iii – náhodná složka)

Hodnota náhodné proměnné Z v bodě x bude

$$Z(x) = \mu(x) + \varepsilon'(x) + \varepsilon''$$

x - pozice v 1, 2 či 3 rozměrném prostoru

Z - interpolovaná proměnná

$Z(x)$ - hodnota proměnné v bodě x

$\mu(x)$ - deterministická složka (trend)

$\varepsilon'(x)$ - stochastická složka (regionalizovaná proměnná) - lokálně proměnné, ale prostorově závislé reziduum od $\mu(x)$

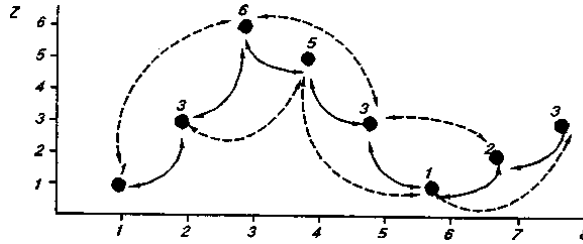
ε'' - náhodná, prostorově nezávislá složka, gaussovský šum s nulovým průměrem a s rozptylem σ^2 . Velké písmeno Z značí, že se jedná o náhodnou funkci a ne o měřenou hodnotu proměnné z .

Regionalizovaná proměnná se odhaduje v tzv. **strukturní analýze** pomocí hodnot strukturní funkce - tzv. **semivariance** $\gamma(h)$ – je to míra nepodobnosti hodnot dvou bodů vzdálených od sebe hodnotu h .

$$Z(x) = \mu(x) + \gamma(h) + \varepsilon''$$

1. Strukturální analýza

Je to procedura zahrnující výpočet strukturálních funkcí a je výchozím krokem geostatistického modelování.



Obr. 2 Příklad výpočtu měř prostorové variability pro 1D (řadu hodnot)

Ke kvantifikaci prostorové autokorelace, která vyjadřuje skutečnost, že objekty blízké si jsou více podobné než objekty vzdálenější slouží **strukturální funkce**. Strukturální funkce měří sílu korelačního vztahu jako funkci vzdálenosti. Na obr. 2 je pro jednoduchost odvozena strukturální funkce pro řadu pravidelně rozmístěných bodů na linii (tedy pro 1D). Charakteristiky, které popisují prostorovou variabilitu lze odvodit z měř úrovně a variability následovně:

$$\text{průměr} = (1+3+6+5+3+1+2+3)/8=3,0$$

$$\text{rozptyl}=[(1-3)^2+(3-3)^2+(6-3)^2+(5-3)^2+(3-3)^2+(1-3)^2+(2-3)^2+(2-3)^2]/8=2,75$$

$$\text{kovariance}(1)=[(1-3)*(3-3)+(3-3)*(6-3)+(6-3)*(5-3)+(5-3)*(3-3)+(3-3)*(1-3)+(1-3)*(2-3)+(2-3)*(3-3)]/7=1,14$$

$$\text{semivariance}(1)=[(1-3)^2+(3-6)^2+(6-5)^2+(5-3)^2+(3-1)^2+(1-2)^2+(2-3)^2]/7=3,43$$

$$\text{semivariance}(2)=[(1-6)^2+(3-5)^2+(6-3)^2+(5-1)^2+(3-2)^2+(1-3)^2]/6=9,83$$

$$\text{semivariance}(3)=[(1-5)^2+(3-3)^2+(6-1)^2+(5-2)^2+(3-3)^2]/5=12,50$$

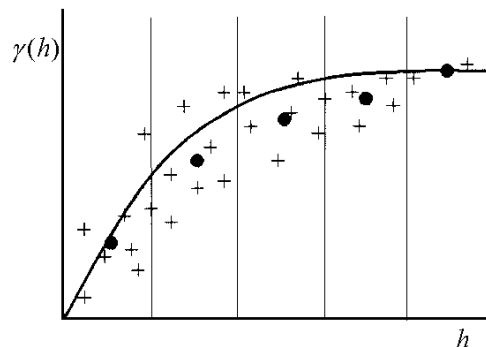
...

Abychom popsali závislost hodnot studovaného jevu v prostoru, vyneseme hodnoty semivariací pro všechny dvojice bodů do semivariogramu obdobně jako ve výše uvedeném případě. **Semivariogram** je strukturální funkce, která popisuje závislost průměrné kvadratické difference hodnot prostorové proměnné veličiny Z na vzdálenosti h. Semivarianci lze odhadnout z naměřených dat podle následujícího vztahu:

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (z(x_i) - z(x_i + h))^2 \tag{1}$$

kde:

n - počet dvojic bodů pozorování proměnné s atributem z vzdálených o hodnotu h
h - tzv. lag - vzdálenost dané dvojice bodů.

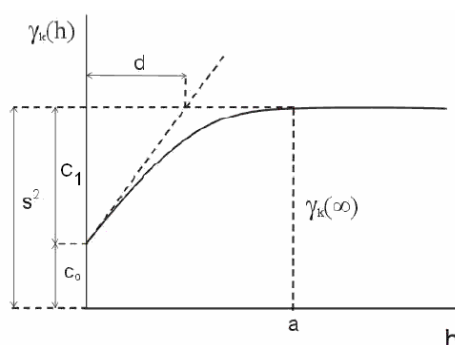


Obr. 4 Experimentální semivariogram (+) s charakteristickými hodnotami pro vzdálenosti h (●) a proložený teoretický model semivariogramu (plná čára)

Graf hodnot $\hat{\gamma}(h)$ a h se označuje jako **experimentální semivariogram** a je prvním krokem ke kvantitativní deskripci regionalizované proměnné. I když je semivariogram vektorová funkce, sestavuje se často jako **izotropní** (tj. bez ohledu na směr) pro celkové charakterizování hodnoceného náhodného pole nebo tehdy, je-li k dispozici omezený počet pozorování. Experimentálním semivariogramem se v následujícím kroku prokládá **teoretický model**.

Prvky semivariogramu

Na obr. 5 uveden často používaný tzv. sférický model s vysvětlením používané terminologie.



Obr.5 Příklad teoretického semivariogramu – sférický model. Parametry semivariogramu: a - dosah (range), d – rozpětí, c_0 - zbytkový rozptyl (nugget), $c=c_0 + c_1$ - práh (sill), h – lag (krok vzdálenosti)

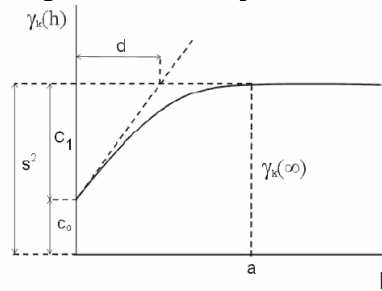
Na horizontální ose je vynášena vzdálenost h mezi jednotlivými vstupními body interpolovaného povrchu (tzv. **lag**), na vertikální ose potom rozptyl zkoumané proměnné jako funkce vzájemných vzdáleností jednotlivých měřených bodů – tedy semivariance. Je mírou, která vyjadřuje, jak velké je okolí, daného bodu, ve kterém se nacházejí body sousední, jejichž hodnota interpolovaného atributu závisí (koreluje) s hodnotou v tomto bodě. Takto vnesenými body je proložena křivka mající charakteristický tvar. Je-li vzdálenost mezi dvěma body malá, jejich hodnoty jsou podobné a hodnota semivariance je také malá. Se zvětšující se vzdáleností hodnota semivariance roste. Při určité vzdálenosti dvou bodů je možno říci, že jejich hodnoty (např. výšky) spolu již nekorelují a hodnota semivariance i se zvyšováním vzdálenosti již neroste, ale zůstává konstantní. Plochá část semivariogramu určuje tzv. **práh (sill)** a je rovna rozptylu zpracovávaných dat. Existence prahu značí, že se zvětšující se vzdáleností se hodnoty semivariance nemění. Kritická hodnota vzdálenosti, na níž se křivka semivariogramu stává rovnoběžnou s vodorovnou osou se označuje jako **dosah (range)**. Dosah definuje pro daný bod velikost okolí, které je nutné uvažovat při interpolaci hodnoty v daném bodě.

Z výše uvedeného by také mělo platit, že proložená křivka semivariogramu by měla procházet počátkem souřadné soustavy (nulová vzdálenost mezi body znamená zákonitě také nulovou hodnotu rozptylu). Velmi často nenabývají experimentální semivariogramy v počátku nulové hodnoty; protínají osu y v nenulové hodnotě, která je nazývána **zbytkový rozptyl (nugget variance)**. To může ukazovat na rozptyl menší než je "vzorkovací" vzdálenost, nebo na malou přesnost měření, kdy např. jsou v datech obsaženy dva vzorky ze stejného místa, pokaždé s jinou hodnotou. Zbytkový rozptyl je tak vyjádřením náhodného šumu ε . V případě nulového zbytkového rozptylu je krigování exaktním interpolátorem.

Efekt anizotropie - rozdíly v hodnotách semivariance v závislosti na směru

Teoretický semivariogram - model, který nejlépe aproximuje průběh experimentálního semivariogramu v okolí počátku a prahu, proces hledání teoretického semivariogramu se někdy označuje jako strukturální analýza.

Příklad teoretického semivariogramu: **Sférický model**

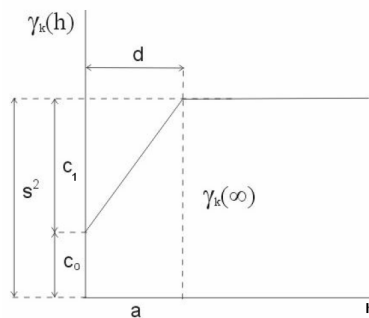


Obr. 9 Sférický model semivariogramu

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 * \left[\frac{3}{2} \frac{h}{a} - \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right] \dots\dots\dots \text{pro } h \leq a$$

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 \dots\dots\dots \text{pro } h > a$$

Lineární model s prahem - jednoduchý a poměrně často využívaný zvláště programy provádějícími interpolaci pomocí krigování na základě automaticky vypočítaného a vyhodnoceného semivariogramu. Při provádění strukturální analýzy se využívá raději jiných přechodových modelů.



Obr. 13 Lineární model semivariogramus prahem

$$\gamma(h) = c_0 + bh \dots\dots\dots \text{pro } h \leq a$$

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 \dots\dots\dots \text{pro } h > a$$

2. KRIGING – geostatistické metody interpolace

Interpolovaná odhadovaná hodnota je vypočtena jako lineární kombinace vstupních hodnot:

$$\hat{z}(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot z(x_i) \quad (2)$$

kde pro váhy platí

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$$

K určení vah λ_i potřebných pro interpolaci se využívá **strukturní analýzy** – semivariogramu. Váhy λ_i jsou zvoleny tak, aby odhad $\hat{z}(x_0)$ byl nestranný a odhad rozptylu σ_e^2 byl menší, než jakákoliv jiná lineární kombinace pozorovaných hodnot (minimální). Pro minimální rozptyl hodnot $\hat{z}(x_0)$ platí výraz :

$$\hat{\sigma}_e^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma(x_i, x_0) + \phi \quad (3)$$

kde:

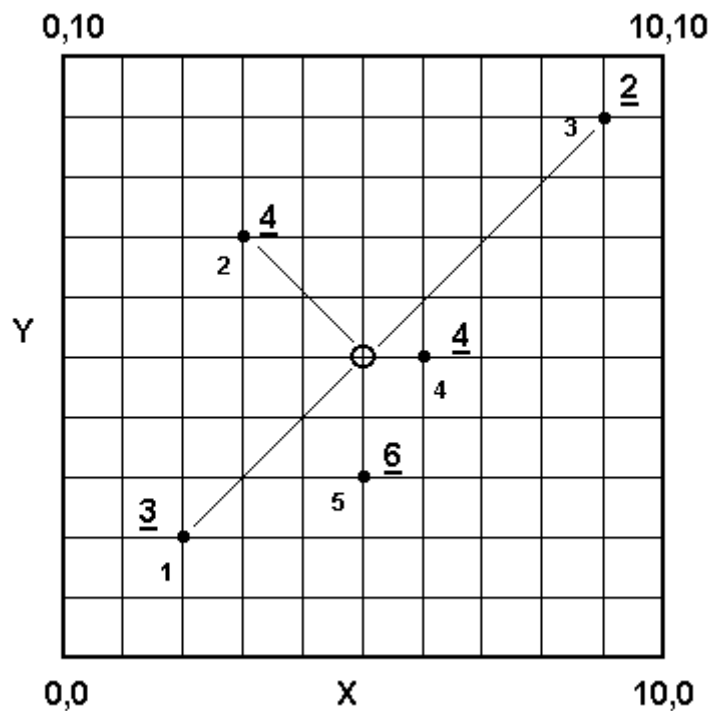
$$\sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma(x_i, x_j) + \phi = \gamma(x_j, x_0) \text{ pro všechna } j. \quad (4)$$

Hodnota $\gamma(x_i, x_j)$ je semivariance proměnné z mezi body x_i a x_j . Hodnota $\gamma(x_i, x_0)$ je semivariance proměnné z mezi bodem x_i a bodem x_0 , pro který je hodnota proměnné z zjišťována. Obě hodnoty lze získat z vhodného teoretického modelu semivariogramu. Hodnota ϕ je tzv. Lagrangeův multiplikátor, který zajišťuje požadavek minimalizace odchylek a zároveň podmínku, že suma vah je rovna jedné.

Uvedená metoda se označuje jako **základní (ordinary) kriging** a je možné ji použít pro interpolaci v pravidelné mřížce hodnot, ke konstrukci map (např. izolinií).

PŘÍKLAD: Výpočet neznámé hodnoty v bodě metodou základního krigingu.

Na základě změřených hodnot veličiny Z v pěti bodech ($i=1, \dots, 5$) (viz. obrázek) máme za úkol odhadnout hodnotu Z bodě ($i=0$) o souřadnicích ($x=5, y=5$) metodou krigingu.



Obr. 1 Vstupní data pro lokální odhad metodou základního krigování (podtržená čísla značí hodnotu atributu v bodě)

Na základě předem provedené strukturální analýzy použijeme **sférický semivariogram**.

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 * \left[\frac{3h}{2a} - \frac{1}{2} \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right] \dots \dots \dots \text{pro } h \leq a$$

$$\gamma(h) = c_0 + c_1 \dots \dots \dots \text{pro } h > a$$

Parametry použitého teoretického semivariogramu odhadnuté z předchozí strukturální analýzy jsou následující:

$$c_0 = 2,5$$

$$c_1 = 7,5$$

$$a = 10,0 \text{ (dosah)}$$

Data v pěti měřených bodech mají následující souřadnice

i	x	y	z
1	2	2	3
2	3	7	4
3	9	9	2
4	6	5	4
5	5	3	6

Pokud budeme dále značit:

A – matice semivariancí mezi všemi dvojicemi bodů

b – vektor semivariancí mezi všemi body a bodem predikovaným

λ – vektor vah jednotlivých bodů

Φ – tzv. Lagrangeův člen

potom základní vztah pro odhad metodou korigování (rovnice 4) lze psát jako:

$$A \cdot \lambda = b$$

Pro vlastní řešení je nutné vypočítat váhy λ , které musí splňovat podmínku $\sum \lambda = 1$

Uvedený základní vztah lze vyjádřit jako soustavu rovnic:

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & \gamma_{1n} & 1 \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \gamma_{2n} & 1 \\ \cdot & \cdot & & & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & & & \cdot \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \cdot & \cdot & \cdot & \gamma_{nn} & 1 \\ 1 & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & 1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \lambda_n \\ \phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{10} \\ \gamma_{20} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \gamma_{n0} \\ 1 \end{bmatrix}$$

V tomto zápisu poslední řádek a poslední sloupec v první matici a hodnota Lagrangeova členu ϕ jsou použity pro zajištění podmínky sumy vah $\sum \lambda = 1$. Hodnota Lagrangeova multiplikátoru ϕ také slouží pro výpočet rozptylu odhadnuté hodnoty. Uvedená soustava rovnic nám poskytne hodnoty všech vah λ a hodnotu ϕ . V maticovém zápisu lze tedy psát:

$$A^{-1} \cdot b = \begin{bmatrix} \lambda \\ \phi \end{bmatrix}$$

Aby bylo možné vyčíslit hodnoty semivariací, je v prvním kroku zapotřebí vytvořit matici vzdáleností mezi datovými body:

i	1	2	3	4	5
1	0,000	5,099	9,899	5,000	3,162
2	5,099	0,000	6,325	3,606	4,472
3	9,899	6,325	0,000	5,000	7,211
4	5,000	3,606	5,000	0,000	2,236
5	3,162	4,472	7,211	2,236	0,000

Vektor vzdáleností mezi měřeními body a bodem predikovaným:

i	0
1	4,234
2	2,828
3	5,657
4	1,000
5	2,000

Těchto vzdáleností využijeme k výpočtu semivariací pro sférický model semivariogramu s výše uvedenými parametry c_0 , c_1 , a – tedy k sestavení matice A a vektoru b :

Matice A :

i	1	2	3	4	5	6
1	2,500	7,739	9,999	7,656	5,939	1,000
2	7,739	2,500	8,667	6,381	7,196	1,000
3	9,999	8,667	2,500	7,656	9,206	1,000
4	7,656	6,381	7,656	2,500	4,936	1,000
5	5,939	7,196	9,206	4,936	2,500	1,000
6	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000

Ve výše uvedené matici má řádek navíc ($i=6$) zajistit podmínku, že váhy budou mít sumu rovnou jedné.

Vektor b :

i	0
1	7,151
2	5,597
3	8,815
4	3,621
5	4,720
6	1,000

Inverzní matice A^{-1} :

i	1	2	3	4	5	6
1	-,172	,050	,022	-,026	,126	,273
2	,050	-,167	,032	,077	,007	,207
3	,022	,032	-,111	,066	-,010	,357
4	-,026	,077	,066	-,307	,190	,030
5	,126	,007	-,010	,190	-,313	,134
6	,273	,207	,357	,003	,134	-6,873

Řešením výše uvedené soustavy rovnic lze pro jednotlivé vzdálenosti získat hodnoty vah λ :

i	λ
1	0,0175
2	0,2281
3	-0,0891
4	0,6437
5	0,1998
6	0,1182

vypočtené hodnoty vah

vypočtená hodnota ϕ

Pro váhy $i=1,\dots,5$ platí, že jejich suma se rovná jedné, v posledním řádku je hodnota Lagrangeova členu ϕ .

Vzdálenosti měřených bodů od bodu predikovaného, již přísluší výše určené váhy:

i	0
1	4,234
2	2,828
3	5,657
4	1,000
5	2,000

Podle rovnice (2) bude odhad hodnoty Z v bodě ($i=0$) o souřadnicích ($x=5, y=5$):

$$Z(x_{i=0}) = 0,0175*3+0,2281*4-0,0891*2+0,6437*4+0,1998*6 =$$

$$Z(x_{i=0}) = \mathbf{4,560}$$

Rozptyl odhadu (rovnice 3):

$$\sigma_e^2 = [0,0175*7,151+0,2281*5,597-0,0891*8,815+0,6437*3621+0,1998*4,720]+ \phi =$$

$$\sigma_e^2 = 3,890 + 0,1182 =$$

$$\sigma_e^2 = \mathbf{4,008}$$

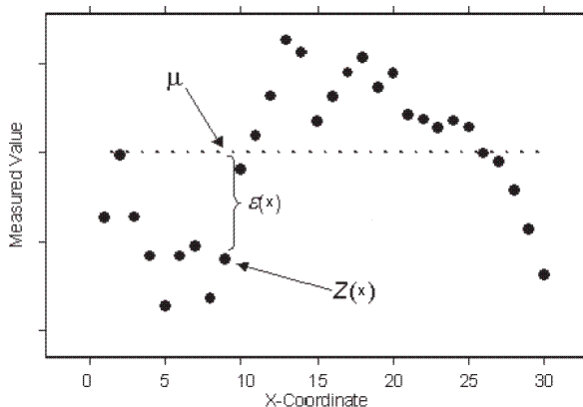
Typy krigování

Na rozdíl od deterministických metod interpolace nabízí metody krigingu vedle odhadů vlastní interpolované hodnoty také **odhady pravděpodobnosti výskytu** těchto hodnot a dále **odhady chyb predikce**. Existuje celá řada typů krigování, pro jejich charakterizování předpokládáme jednoduchý model:

$$Z(x_i) = \mu(x_i) + \varepsilon(x_i)$$

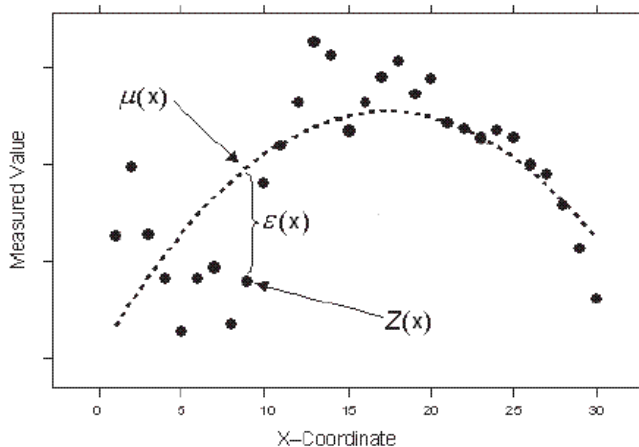
kde $Z(x_i)$ je proměnná v bodě x_i , která se skládá z deterministické hodnoty trendu $\mu(x_i)$ a autokorelované náhodné proměnné $\varepsilon(x_i)$.

Základní krigování (ordinary kriging) - μ je neznámá hodnota, kterou odhadujeme z měřených dat



Obr. Princip základního krigování

Univerzální krigování (Universal kriging) - $\mu(x)$ je deterministická funkce - např. polynom druhého stupně jako na přiloženém obrázku.



Obr. Princip univerzálního krigování

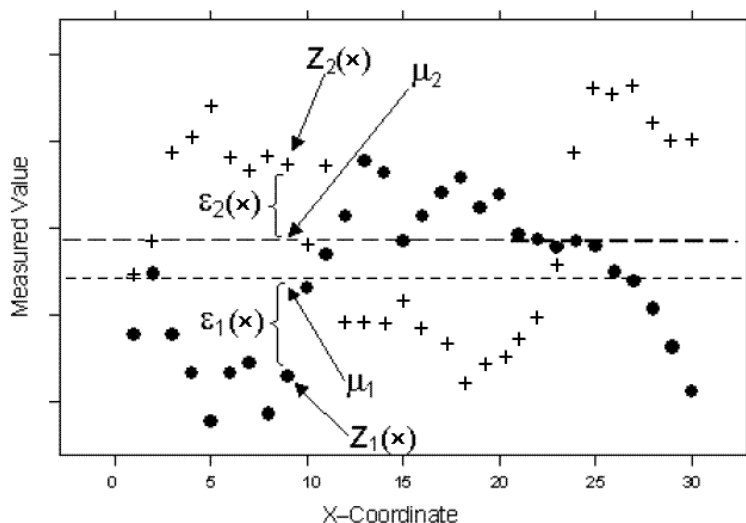
Co-kriging

Máme dvě proměnné z_1 a z_2 , které vykazují prostorovou korelaci. Pak lze využít hodnot proměnné z_2 , k interpolaci hodnot proměnné z_1 . Tento koncept je vhodný zvláště v případech, kdy je proměnná z_2 snáze získatelná a rozšiřitelný i na více než dvě proměnné. Přitom pro přesnější odhady se používá jak autokorelace jednotlivých proměnných, tak vzájemné (cross) korelace všech použitých proměnných. Základní co-kriging využívá následujících modelů:

$$Z_1(x) = \mu_1 + \varepsilon_1(x)$$

$$Z_2(x) = \mu_2 + \varepsilon_2(x)$$

kde μ_1 a μ_2 jsou neznámé konstanty. Dále dostáváme dvě náhodné chyby $\varepsilon_1(x)$ a $\varepsilon_2(x)$. Základní co-kriging odhaduje hodnotu proměnné $Z_1(x_0)$ stejně jako základní krigování, ovšem navíc využívá kovariance s hodnotu $Z_2(x)$.



Obr. Princip co-kringu

Hodnocení a verifikace modelů

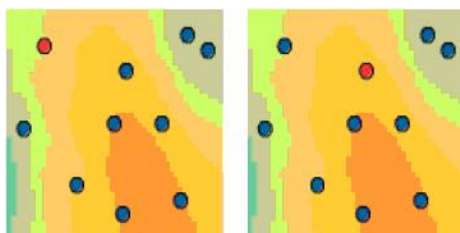
Krigování jako interpolační metoda umožňuje pro každý interpolovaný bod odhadnout potenciální velikost chyby odhadu. Vedle map predikovaných hodnot tak lze především konstruovat mapy hodnot σ_e^2 (rozptyl krigingu), které vypovídají o spolehlivosti interpolovaných hodnot. Tyto hodnoty se obvykle prezentují v podobě map druhé odmocniny σ_e - tzv. **směrodatné chyby** (odchylky) **kringu (Standard error map)**, protože tyto mají stejné jednotky jako predikované hodnoty.

Vydeme-li z výše uvedeného příkladu, kdy rozptyl odhadu je $\sigma_e^2 = 4,008$. Potom směrodatná chyba krigingu bude $\sigma_e = 2,002$. Budeme-li předpokládat, že chyby predikce mají normální rozdělení, potom 95% interval spolehlivosti predikovaných hodnot lze určit z následujícího vztahu:

$$Z(x_0) \pm 1,96 \cdot \sqrt{\sigma_e^2}$$

kde $Z(x_0)$ je odhad hodnoty proměnné z v bodě x_0 a σ_e^2 je rozptyl odhadu. V našem případě tedy při opakovaném použití stejného modelu padne 95 % odhadovaných hodnot do intervalu $(4,560 \pm 1,96 \cdot 2,002)$ tj. $(0,64; 8,48)$

Křížová validace modelu - k vytvoření spojitého povrchu jsou použita všechna vstupní data v měřených bodech. Poté jsou jednotlivé body měření (červené) po jednom postupně vynechány ze vstupní množiny dat a ze zbývajících (modrých) je vypočtena hodnota v místě vynechaného bodu.



Obr. Princip křížové validace modelu

Statistické zhodnocení

Pozorované a vypočtené hodnoty mohou být porovnávány jednoduchými charakteristikami (měrami): Je-li $\hat{Z}(x_i)$ predikovaná hodnota pro daný bod x_i , kterou obdržíme v procesu křížové validace, potom:

MPE – mean prediction error - průměr rozdílů měřených a předikovaných hodnot - hodnoty chyb odhadů by měly být nestranné – tedy jejich průměr by se měl rovnat nule.

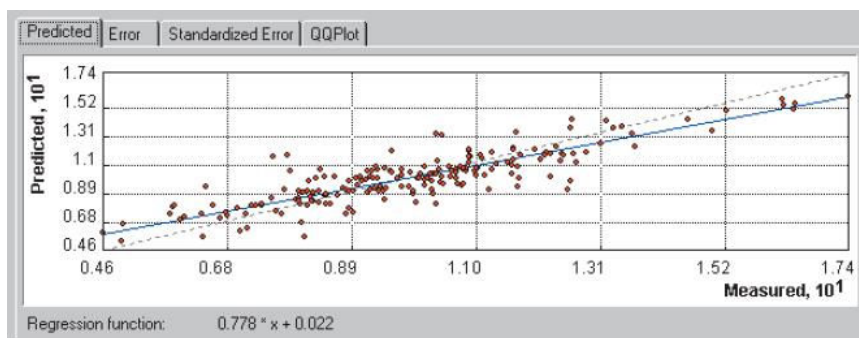
$$MPE = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Z}(x_i) - z(x_i))}{n}$$

RMSPE (root mean square prediction error) – druhá odmocnina průměrného čtverce vzdálenosti vypočtených hodnot (červené body) od teoretických (zelená přímka v grafech). Tato hodnota slouží k porovnání několika různých modelů. Čím menší je RMSPE, tím vhodnější je model (tím bližší jsou vypočtené hodnoty hodnotám měřeným).

$$RMSPE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Z}(x_i) - z(x_i))^2}{n}}$$

Validace modelu - vstupní soubor měřených hodnot rozdělí na dvě části – data trénovací a testovací. Trénovací množina dat se použije pro odhad trendu a autokorelačního modelu. Pokud sestavený model vyhovuje trénovacím datům, je ověřen na datech testovacích.

Obecnou vlastností krigingu jako interpolační metody je podhodnocení vysokých hodnot a naopak nadhodnocení hodnot nízkých. Tato vlastnost se projeví menší hodnotou směrnice přímky proložené korelačním polem.



Obr. Korelační pole měřených a predikovaných hodnot

V případě značného podílu šumové složky (např. v důsledku chyb v měření) či v případě značně komplexního povrchu nedává kriging lepší výsledky než jiné interpolátory. Na rozdíl o jiných metod kriging nabízí objektivní, a priori metodu odhadu vhodného okolí pro vlastní interpolaci. Řeší tedy otázku počtu bodů v okolí daného bodu, otázku velikosti a tvaru tohoto okolí. V případě existence bariér (náhlých skoků v hodnotách interpolovaného povrchu) nedává kriging dobré výsledky a je nutné jej rozdělit na elementární části neobsahující bariéry.

Doplňující informace k prostorové analýze a metodám interpolace:

<http://www.spatialanalysisonline.com/output/>

<http://uncert.mines.edu/tutor/>

<http://www.u.arizona.edu/~donaldm/homepage/glossary.html>