第10卷 第18期 2010年6月
1671-1815(2010)18-4370-06

科 学 技 术 与 工 程
Scie nce Technology and Engineering

Vol. 10 No. 18 June 2010

© 2010 Sci. Tech. Engng.

地球科学

空间变异函数的数学模型及参数反演

张旭臣 卢全海

(河北省承德水文水资源勘测局,承德067000)

摘 要 空间变异函数在克里格估计中占有重要地位。基于椭圆分布函数可导出两类空间变异函数的数学模型。一类是只考虑变程各项异性的模型,称之为AE模型;一类是只考虑拱高各项异性的模型,称之为CE模型。传统的方法需要先进行空间变异函数的拟合,然后进行克里格估计。交叉检验方差是评价估计精度的一项重要指标。根据克里格方程组的重要性质,克里格估值仅与标准变异函数有关,对标准变异函数进行线性变换得到新的变异函数不会改变克里格估值和交叉检验方差。因此,用拟合方法获得的最优变异函数进行交叉检验,通常并不能有效地降低交叉检验方差。如果直接以交叉检验方差为目标函数进行参数反演,则可以有效地解决这个问题。变异函数数学模型一般含有5个参数,其中2个是线性变换作用。进行交叉检验时只需研究标准变异函数的3个参数,从而可以降低参数反演的复杂度。研究表明:较之AE类模型CE类模型具有更强的适应性,通常可获得更小的交叉检验方差;鉴于评价面非常复杂,将遗传算法(GA)应用于参数反演是可行和有效的。滦河流域降水量空间插值实例表明,交叉检验均方差降幅分别为11.7%和29.8%。

关键词 空间变异函数 数学模型 参数反演 克里格方程组 交叉检验 方差 降水量空间插值

中图法分类号 P332.4; **文献标志码** A

克里格(Kriging)方法最早是由南非采矿工程师克里格(D. G. Krige)于1951年提出的。1962年法国学者马特隆(G. Matheron)提出了“区域化变量”的概念,从而奠定了该方法的理论基础[1]。该方法用变异函数来描述随机变量的空间分布结构,进而在数学上对所研究的对象提供一种空间最优线性无偏估计,在诸多领域得到了广泛应用。因此,变异函数的确定的是否正确,与克里格(Kriging)插值精度密切相关。本文以椭圆分布函数为基础,推导出两类空间变异函数的数学模型,探讨了以交叉检验为目标函数的参数反演方法,通过滦河流域1956—2007年多年平均降水量空间插值进行了实例验证。

2010年4月1日收到 河北省2009年水利科研与推广计划项目(2009-62)资助

第一作者简介:张旭臣(1965—),男,河北乐亭县人,高级工程师,研究方向:水文水资源。

1 空间变异函数的数学模型

1.1 普通克里格方程组

设随机变量 $Z(x,y)$ 有个观测值 $z(x_i,y_i)$,$i=1,2,\cdots,n$,则随机变量 $z(x,y)$ 在 XY 平面上任意一点 (x,y) 处的估值 $\hat{Z}_K(x,y)$ 可以普通克里格方程[2]组来描述:

$$\begin{cases}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\gamma(h_{i,j})+\mu=\gamma(h_{j,0})\\ \sum_{i=1}^{n}\lambda_i=1\\ \hat{Z}_K(x,y)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i Z(x_i,y_i)\end{cases}\tag{1}$$

式(1)中:λ_i 为 $z(x_i,y_i)$ 的克里格权重,$h_{i,j}$ 为点 (x_i,y_i) 与 (x_j,y_j) 间的欧氏距离,$\gamma(h_{i,j})$ 为观测值 $z(x_i,y_i)$ 与 $z(x_j,y_j)$ 间的空间变异函数值,μ 为拉格朗日算子,$\gamma(h_{i,0})$ 为观测值 $z(x_i,y_i)$ 与克里格估值 $\hat{z}_k(x,y)$ 间的空间变异函数值。

1.2　空间变异函数的数学模型

1.2.1　椭圆分布函数

变量的各向异性通常用如图 1 的一个椭圆来描述。椭圆的长半轴长度为 1,椭圆的短半轴长度为 b ($b \leqslant 1$),并称 b 为各向异性比率。α 为椭圆的长轴与 x 坐标轴(+ 方向)的夹角,称为长轴方位角($0^\circ \leqslant \alpha \leqslant 180^\circ$)。则椭圆上 θ 方向上的点 P 到椭圆圆心的距离 $\rho(\theta,\alpha,b)$ 可以作为该方向上各向异性的一种标准度量。并有:

$$\rho(\theta,\alpha,b) = \frac{b}{\sqrt{b^2\cos^2(\theta-\alpha) + \sin^2(\theta-\alpha)}} \tag{2}$$

则称式(2)为椭圆分布函数,称该椭圆为描述变量空间变异的等效椭圆[3,4]。

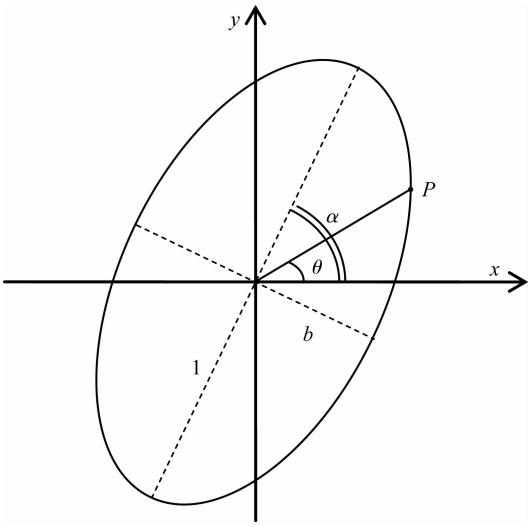


图 1　椭圆分布

1.2.2　空间变异函数的数学模型

不失一般性,随机变量 $z(x_i,y_i)$ 与 $z(x_j,y_j)$ 的空间变异函数 $\gamma(h_{i,j})$ 的数学模型可表示为:

$$\gamma(h_{i,j}) = c_0(\theta_{i,j}) + c(\theta_{i,j}) f\left(\frac{h_{i,j}}{a(\theta_{i,j})}\right) \tag{3}$$

式(3)中:$\theta_{i,j}$ 为由点 (x_i,y_i) 指向 (x_j,y_j) 的向量的方位角,$c_0(\theta_{i,j})$ 称块金值,$c(\theta_{i,j})$ 称为拱高,$a(\theta_{i,j})$ 称为变程。

显然,如果块金值 $c_0(\theta_{i,j})$、拱高 $c(\theta_{i,j})$、变程 $a(\theta_{i,j})$ 均为各向异性时,变异函数 $\gamma(h_{i,j})$ 将非常复杂。通常为了简化,只能考虑其中之一为各向异性,而其它则视为各向同性。由于块金值 $c_0(\theta_{i,j})$ 主要用于描述观测误差与空间微变异,一般可视为各向同性,故 $c_0(\theta_{i,j}) = c_0$,则有:

$$\gamma(h_{i,j}) = c_0 + c(\theta_{i,j}) f\left(\frac{h_{i,j}}{a(\theta_{i,j})}\right) \tag{4}$$

为进一步简化,假设 $c(\theta_{i,j})$ 呈各向同性,即 $c(\theta_{i,j}) = c_m$, $a(\theta)$ 服从椭圆分布,且 $a(\theta_{i,j}) = a_m\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)$,则有:

$$\gamma(h_{i,j}) = c_0 + c_m f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right) \tag{5}$$

式(5)中称为最大变程。

此即变程各向异性时的空间变异函数的数学模型。由于它只考虑了变程 $a(\theta_{i,j})$ 服从椭圆(Ellipse)分布,故可简称之为 AE 模型。此类模型也是目前广泛使用一类数学模型,同时,根据函数 $f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)$ 不同型式,可衍生出多种不同的数学模型。著名的 Surfer 软件采用的就是此类模型[5,6]。

同理,假设 $a(\theta_{i,j})$ 呈各向同性,即 $a(\theta_{i,j}) = a_m$, $c(\theta_{i,j})$ 各向异性且 $\frac{1}{c(\theta_{i,j})}$ 服从椭圆分布,且 $c(\theta_{i,j}) = \frac{c_m}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}$,则有:

$$\gamma(h_{i,j}) = c_0 + c_m\left(\frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right) f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m}\right) \tag{6}$$

此即拱高各向异性时的空间变异函数的数学模型。由于它只考虑了拱高的倒数 $\frac{1}{c(\theta_{i,j})}$ 服从椭圆(Ellipse)分布,故可简称之为 CE 模型。同样,根据函数 $f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m}\right)$ 不同型式,也可衍生出多种不同的数学模型。

分别将 $\gamma_0(h_{i,j}) = f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)$ 和 $\gamma_0(h_{i,j}) = \left(\frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right) f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m}\right)$ 代入式(5)和式(6)则得到变异函数的通用表达式:

$$\gamma(h_{i,j}) = c_0 + c_m\gamma_0(h_{i,j}) \tag{7}$$

式(7)中 $\gamma_0(h_{i,j})$ 称为标准化变异函数。

因此,变异函数实际上是标准化变异函数的线性函数。因此可导出两类标准化变异函数数学模型。

A-E 模型的标准化变异函数:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right) \tag{8}$$

C-E 模型的标准化变异函数:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \left(\frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)f\left(\frac{h_{i,j}}{a_m}\right) \tag{9}$$

2 空间变异函数线性变换与克里格插值的关系

将式(7)代入克里格方程组(1):

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i[c_0 + c_m\gamma_0(h_{i,j})] + \mu = c_0 + c_m\gamma_0(h_{j,0}) \tag{10}$$

将式(10)展开得:

$$c_0\sum_{i=1}^{n}\lambda_i + c_m\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\gamma_0(h_{i,j}) + \mu = c_0 + c_m\gamma_0(h_{j,0}) \tag{11}$$

将 $\sum_{i=1}^{n}\lambda_i = 1$ 代入式(11)并整理得:

$$\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\gamma_0(h_{i,j}) + \frac{\mu}{c_m} = \gamma_0(h_{j,0}) \tag{12}$$

由此可以证明:由克里格方程组求解的克里格权重 λ_i 只与标准化变异函数 $\gamma_0(h_{i,j})$ 有关,而与 $\gamma(h_{i,j}) = c_0 + c_m\gamma_0(h_{i,j})$ 中的常数 c_0 和 c_m 无关。换言之,对空间变异函数 $\gamma_0(h_{i,j})$ 进行各向同性线性变换不会影响克里格插值结果。这是普通克里格方程组的一个重要性质。

3 空间变异函数参数反演与应用

3.1 变异函数的参数反演方法

通常我们根据样本的半方差图通过曲线拟合的方式来确定变异函数的类型与参数,并应用于克里格(Kriging)插值。但由于变异函数点群比较散乱,给确定变异函数带来很大困难。因此确定变异函数的类型与参数常被称为"科学 + 艺术"。对于克里格估计以及变异函数是否合理,人们常常采用克里格交叉检验方差来进行最终评价[7,8]。结果发现,用曲线拟合算法得到的变异函数往往并非最优。文献[9]曾提出过用交叉检验方法来优化变异函数。在此基础上,本文结合普通克里格方程组重要性质,提出了以克里格交叉检验精度为目标函数的变异函数参数反演方法。

由于克里格插值仅与标准化变异函数 $\gamma_0(h_{i,j})$ 有关,而由(6)式和(7)式可知:标准化异函数 $\gamma_0(h_{i,j})$ 有三个待定参数 (α,b,a_m)。

参数 α 的值域为 $0^\circ \leqslant \alpha < 180^\circ$。参数 b 的值域为 $0 < b \leqslant 1$。参数 a_m 的值域范围不确定,为便于参数优选,可用包围所有观测点的最小矩形对角线长度 a_L 的线性函数来描述,即:$a_m = ka_L$, $0 < k \leqslant 1$ 为比例系数, a_L 为已知,则可以通过对参数 k 的变化来计算 a_m。

因此,可将式(8)、式(9)改写为:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = f\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right) \tag{13}$$

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \left(\frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)f\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L}\right) \tag{14}$$

则待定参数就由 (α,b,a_m) 转变为 (α,b,k)。作为一种特例,当 $f(h) = h^\tau$ 时,根据克里格方程组的重要性质,参数 k 可以消去,此时待定参数为 (α,b,τ), τ 的值域为 $0 < \tau < 2$。

由于参数的数目和值域范围均为已知,因此,可以采用多元最优化算法,来达到参数反演的目的。

下面分常用的四种函数类型分别列出其标准化变异函数的 AE 模型和 CE 模型的具体型式:

3.1.1 幂函数(Power)

AE-P 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \frac{1}{\rho^\tau(\theta_{i,j},\alpha,b)}\left(\frac{h_{i,j}}{a_L}\right)^\tau, 0 < \tau < 2 \tag{15}$$

CE-P 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\left(\frac{h_{i,j}}{a_L}\right)^\tau, 0 < \tau < 2 \tag{16}$$

3.1.2　球型函数

AE-S 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \begin{cases} \left[\frac{3}{2}\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)^3\right], & h_{i,j} < ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b) \\ 1, & h_{i,j} \geqslant ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b) \end{cases} \tag{17}$$

CE-S 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \begin{cases} \frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\left[\frac{3}{2}\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L}\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L}\right)^3\right], & h_{i,j} < ka_L \\ \frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}, & h_{i,j} \geqslant ka_L \end{cases} \tag{18}$$

3.1.3　指数函数(Exponential)

AE-E 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)\right] \tag{19}$$

CE-E 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\left\{1 - \exp\left[-\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L}\right)\right]\right\} \tag{20}$$

3.1.4　高斯函数(Gaussian)

AE-G 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\right)^2\right] \tag{21}$$

CE-G 模型:

$$\gamma_0(h_{i,j}) = \frac{1}{\rho(\theta_{i,j},\alpha,b)}\left\{1 - \exp\left[-\left(\frac{h_{i,j}}{ka_L}\right)^2\right]\right\} \tag{22}$$

比较式(15)和式(16)可以看出,当 $\tau = 1$ 时,AE-P 和 CE-P 两种模型完全相同。

3.2　参数反演应用实例

滦河潘家口水库以上流域面积 33 700 km^2,设有 100 个雨量站,针对 1956—2007 年多年平均降水量的空间分布,应用以克里格交叉检验精度为目标函数的变异函数参数反演方法确定空间变异函数,并进行克里格插值。本例采用遗传算法(GA)作为多元最优化方法[10],取得较好效果。表 1 系直接采用 1956—2007 年多年平均降水量数据进行参数反演成果;表 2 系对 1956—2007 年多年平均降水量数据先进行趋势面分离后,用得到的残差数据进行参数反演成果,分辨率取值为:$\Delta\alpha = 1°$,$\Delta b = 0.01$,$\Delta\tau = 0.02$,$\Delta k = 0.01$。表中分 8 种情况列出了反演参数及相应的交叉检验均方差。并以各向同性线性模型 AE-P(0,1,1)为基准值,分别计算其均方差改善值。

表 1　降水量空间变异函数参数反演成果表

模型类别	参数			交叉检验	均方差改善值
	α	b	τ 或 k		
AE-P	148°	0.43	1.42	23.869 0	-1.595 4
CE-P	75°	0.56	1.80	22.477 9	-2.986 5
AE-S	149°	0.60	1.00	24.936 2	-0.528 2
CE-S	150°	0.54	1.00	24.759 5	-0.704 9
AE-E	149°	0.57	1.00	24.891 1	-0.573 3
CE-E	147°	0.57	1.00	24.822 6	-0.641 8
AE-G	149°	0.64	1.00	25.374 8	-0.089 6
CE-G	149°	0.63	1.00	25.255 0	-0.209 4
AE-P	0°	1.00	1.00	25.464 4	0

表 2　降水量趋势面残差空间变异函数参数反演成果表

模型类别	参数			交叉检验	均方差改善值
	α	b	τ 或 k		
AE-P	150°	0.44	1.08	23.844 3	-1.139 8
CE-P	77°	0.34	1.54	22.646 1	-2.338 0
AE-S	152°	0.48	0.19	22.004 5	-2.979 6
CE-S	133°	0.87	0.10	17.548 7	-7.435 4
AE-E	153°	0.57	0.08	23.095 7	-1.888 4
CE-E	25°	0.57	0.11	19.993 2	-4.990 9
AE-G	152°	0.56	0.17	23.094 4	-1.889 7
CE-G	161°	0.82	0.08	20.297 8	-4.686 3
AE-P	0°	1.00	1.00	24.984 1	0

4 结论

(1)根据克里格方程组的重要性质,可以将优选参数由 5 维降至 3 维。以克里格交叉检验精度为目标函数的变异函数参数反演方法是可行的,使用反演参数可以有效减小克里格交叉检验方差。由于评价面非常复杂,因此,常常需要在精度与计算复杂度之间进行权衡。实例证明 GA 算法非常有效。

(2)以椭圆分布函数为基础,分别导出了变程异性和拱高各向异性的两类标准变异函数的数学模型,AE 模型和 CE 模型。表 1、表 2 的实例计算结果表明:本文导出的 CE 模型在表中所列情况下均优于目前广泛使用的 AE 模型。

(3)由于降水量的空间分布存在明显趋势性,直接进行分析时幂函数模型表现最好(表 1),其中 CE-P 模型交叉检验均方差比 AE-P(0,1,1)模型降低了 2.9865 mm,降幅为 11.7%。将数据进行趋势面分离后,残差变量的空间分布呈现出明显的区域化特征,此时球状函数模型表现最好(表 2),其中 CE-S 模型交叉检验均方差比 AE-P(0,1,1)模型降低了 7.435 4 mm,降幅为 29.8%,将残差与趋势面叠加可得到相应的降水量等值线图(图 2)。显然,当变量的空间分布存在明显区域化特征时参数反演效果更为显著。因此,对原始数据进行某种可逆变换,尽量消除趋势性因素,对提高精度是有帮助的。参数反演的效果是显著的,也足以说明在克里格插值中变异函数分析的重要性。

(4)由于根据实际资料计算出的半方差云图点群较散乱,用曲线拟合方法得到的参数,与克里格交叉检验结果是不一致的,有时差距较大。采用未经认真分析的模型及参数常常会得到比直接使用 AE-P(0,1,1)模型更差的结果。著名软件 Sursfer 将 AE-P(0,1,1)模型设为默认模型是有道理的,因为在多数情况下它会得到一个相对较好的结果。而 AE-P(0,1,1)恰与 CE-P(0,1,1)完全相同,这也可能是 CE 模型优于 AE 模型的一个佐证。

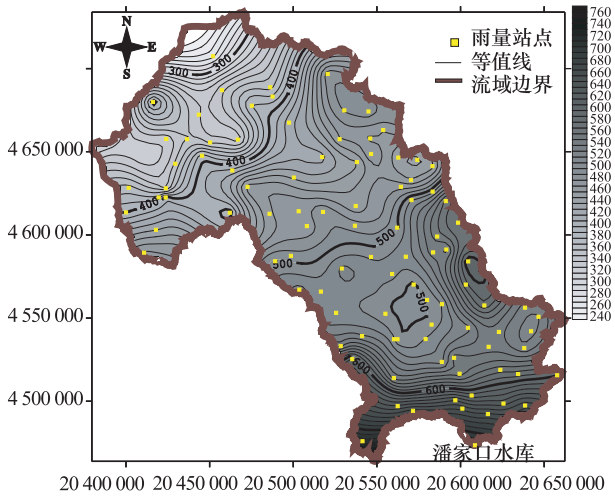


图 2 降水量等值线图

(5)对于一个较大的分析范围而言,变异函数在空间上的分布是不同的,因此我们常常得到和使用的变异函数是在分析范围内一个均化的模型,这也使变异函数的空间分布分析变得更加困难。当然,如果有足够的观测点我们也可以优选出分析范围内任意局部区域的变异函数,但是如何运用是需要进一步研究的问题。

参 考 文 献

1 王卫光,薛绪掌,耿 伟. 河套灌区地下水位的空间变异性及其克里格估值. 灌溉排水学报,2007;26(1):18—21

2 王家华,高海余,周 叶. 克里格地质绘图技术. 北京:石油工业出版社,1999

3 张 朔,鲁学军,赵英俊,等. 空间变异函数等效应椭圆套合方法及其应用. 地球信息科学学报,2009;11(3):342—348

4 张仁铎. 空间变异理论及应用. 北京:科学出版社,2005

5 Barnes R, Tutorial V. Golden Software, Inc. http://www.goldensoftware.com/ variogramTutorial.pdf

6 Golden Software, Inc. Surfer Demo Version 9. 2009

7 吴学文,晏路明. 普通 Kriging 法的参数设置及变异函数模型选择方法. 地球信息科学,2007;9(3):104—108

8 张 征,解明曙 王毅力,等. 环境模拟与评价中多变量空间结构模型及应用. 北京林业大学学报,2003;25(5):59—63

9 王家华,高海余. 利用循环交叉验证法确定变异函数. 西安石油学院学报,1992;7(4):3—9

10 张 晖,吴 斌,余张国. 引入模拟退火机制的新型遗传算法. 电子科技大学学报,2003;32(1):39—43

The Mathematical Model of Spatial Variogram and Parameters Inversion

ZHANG Xu-chen, LU Quan-hai

(Chengde Bureau for Hydrology and Water Resources Survey of Hebei Province, Chengde 067000, P. R. China)

[**Abstract**] The spatial variogram plays an important role in Kriging estimation. Two types of the mathematical models of spatial variogram are inferred based on the elliptic distribution function. One type only considers the anisotropy of variable-range(A) in the model, which is called the AE model. Another only considers the anisotropy of high arch(C) in the model, which is called the CE model. Traditional methods need to fit the spatial variogram and then deal with the kriging estimation. The cross-examination variance is an important indicator to evaluate the estimation accuracy. According to the important characteristic of Kriging equation set, Kriging estimation is only related to the standard spatial variogram, and for the linear change from standard spatial variogram to a new spatial variogram, it will not change the result of kriging estimation and the cross-examination. Thus, doing the cross-examination by the spatial variogram from optimal fitting method can not usually reduce the cross-examination variance effectively. If directly process parameters inversion within the cross-examination variance as the objective function, this problem effectively can be solved. The spatial variogram model generally contains five parameters in which two play linear effect on the function. Three parameters of the standard spatial variogram on the cross-examination be need only study in order to make it easy to progress parameter inversion. Studies have shown that CE model has more flexibility than AE model, and it is usually get smaller cross-examination variance. Because of the complexity of evaluation surface, Genetic Algorithms (GA) being applied to parameter inversion is feasible and effective. The case of spatial interpolation of precipitation on the Basin of Luan River shows that the standard deviation reduced 11.7% and 29.8% separately.

[**Key words**] spatial variogram　mathematical model　parameter inversion　kriging equation set　cross-examination　variance　precipitation spatial interpolation

(上接第 4365 页)

Wavelet Estimation of Regression Function under $\tilde{\rho}$ Mixing Errors

PAN Li-jing[1,2], GUO Peng-jiang[1]

(Department of Mathematics, Northwest University[1], Xi'an 710127, P. R. China;
Department of Mathematics and information science, Weinan Teachers University[2], Weinan 714000, P. R. China)

[**Abstract**] The wavelet estimation of regression function is considered in fixed design nonparametric regression model under $\tilde{\rho}$ mixing stationary errors. Under suitable conditions, the asymptotic unbiasedness, mean square consistency and strong consistency are obtained.

[**Key words**] $\tilde{\rho}$ -mixing　wavelet estimation　strong consistency