

三维 Kriging 方法中的变异函数套合

姚凌青¹, 潘 懋², 成秋明^{1,3}, 常德峰⁴

1. 中国地质大学地质过程与矿产资源国家重点实验室, 湖北武汉 430074
2. 北京大学造山带与地壳演化教育部重点实验室, 北京 100871
3. 加拿大约克大学地球空间科学与工程系, 加拿大多伦多 M3J1P3
4. 山东水利职业学院建筑工程系, 山东日照 276826

摘要: 三维属性建模是利用有限的采样数据, 通过插值或模拟的方法来重构地学属性在三维空间中的分布. 将 Kriging 方法推广到三维空间, 从而演化为三维 Kriging 方法, 可以为三维属性建模提供可靠的手段. 而三维 Kriging 方法面临的一大难题就是各向异性变异函数的套合. 提出了一种简单通用的三维空间变异函数的套合方法. 该方法以空间坐标基的变换为基础, 在套合时充分考虑轴向上变异差异的影响, 并由此提出各向异性变化率的概念; 论证了套合方法的可行性, 并通过地下水水质三维属性建模的实例对该方法进行了有效的验证.

关键词: 三维 Kriging; 变异函数; 结构分析.

中图分类号: P628

文章编号: 1000-2383(2009)02-0294-05

收稿日期: 2008-11-14

Nested Overlap of Variograms in 3D Kriging

YAO Ling-qing¹, PAN Mao², CHENG Qiu-ming^{1,3}, CHANG De-feng⁴

1. State Key Laboratory of Geological Processes and Mineral Resources, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China
2. Key Laboratory of Orogenic Belts and Crustal Evolution, Ministry of Education, Peking University, Beijing 100871, China
3. Department of Earth and Space Science and Engineering, York University, Toronto M3J1P3, Canada
4. Department of Architectural Engineering, Shandong Water Polytechnic, Rizhao 276826, China

Abstract: 3D property modeling is hot nowadays in geoscientific researches, the essence of which is mapping geological properties in 3D space from limited samples by interpolation or simulation methods. By extending Kriging to 3D space which evolves to the so-called 3D Kriging, a reliable method can be provided for 3D property modeling. However, one of the most difficult problems in 3D Kriging is the nested overlap of anisotropic variograms. In this paper, a simple but universal method is proposed for the nested overlap. Based on the transformation of coordinate basis, this new method takes into full consideration the difference of variation on each axis direction and puts forward the concept of anisotropy ratio. The feasibility of the new method is demonstrated and testified by a case study about 3D property modeling of groundwater quality.

Key words: 3D Kriging; variogram; structural analysis.

近年来,随着可视化技术的发展以及地质勘察的立体化,地学领域的多个行业都开展了构建三维地质属性模型的工作(Mallet, 2002; 戴碧波等, 2007; Yao *et al.*, 2008a; 姚凌青等, 2008b),从而观测属性在地质体内的三维分布情况. 属性建模最根本的特点就是通过有限的采样资料, 采取合理的

方法来构建或模拟真实的属性分布规律. 因此, 选择合理的建模方法在建模流程中至关重要. Kriging 方法是一种重要的空间插值方法, 但通常应用于二维场合, 由这类应用直接过渡到三维属性建模则存在一定的局限性. 本文所探讨的三维 Kriging 方法是普通 Kriging 方法在三维空间中的扩展, 既具备了

基金项目: 国家自然科学基金项目(Nos. 40638041, 40502029); 教育部创新团队基金(No. IRT0755); 地质过程与矿产资源国家重点实验室科技部专项经费资助.

作者简介: 姚凌青(1980-), 男, 博士, 主要从事数字地质工作. E-mail: old_yao@163.com

Kriging 方法的最优线性无偏估计特点, 又能充分利用三维空间的信息样品进行估计, 因此可以作为三维属性建模的一种有效手段, 在很多场合三维 Kriging 方法的估计结果更为可靠 (Gallichand *et al.*, 1992; Pan *et al.*, 1992; Triantafilis *et al.*, 2001; 姚凌青等, 2008b)。

Kriging 方法通过变异函数模型来反映属性变量的空间相关性, 并由此对未知属性值进行推断。三维空间中的地质采样数据常常存在不同尺度的变化, 例如在岩土参数采样时, 水平方向的采样尺度在千米级别, 而垂向上的采样间隔则在数米以内。与此同时, 地质变量在各个方向上的变异规律也不尽相同, 具体表现为不同尺度、不同方向上的变异函数具有不同的形式。将不同尺度、不同方向的变异函数模型经过一定的变换后叠加在一起形成统一的“套合”结构, 被称为变异函数的套合。

同一方向上不同尺度的变异函数套合较为简单, 只需要将变异函数在不同的分段区间进行叠加即可。在实际应用中, 更为常见的是针对各向异性特征变异函数的结构分析, 其处理过程也更为复杂。各向异性可分为两类 (王仁铎和胡光道, 1988): (1) 几何各向异性 (geometry anisotropy)。若各方向的变异函数均有相同的基台值 (不考虑块金常数), 只是变程不相同, 称这类各向异性为几何各向异性。这类各向异性可以通过线性变换转化为各向同性的结构。(2) 带状各向异性 (zonal anisotropy)。凡不属于几何各向异性的异向性类型都统称为带状各向异性。这种情况下, 不同方向的变异函数基台值不相同, 变程可以相同, 也可以不同。

在三维 Kriging 方法中, 变异函数出现不同尺度变化以及各向异性的可能性更大, 组合也更加复杂, 因而变异函数的套合尤为重要。关于三维变异函数的套合还没有一个完善的解决办法, 针对这一现状, 本文提出了一种新的套合方法, 该方法能处理几何各向异性、带状各向异性, 以及多种不同类型变异函数模型的组合。

1 现有套合方案与问题

对于几何各向异性, 记 3 个轴向 X, Y, Z 上的变程分别为 a_x, a_y, a_z , 则 X, Y, Z 方向各向异性比 (也称拉伸比) 定义如下式:

$$K_i = \frac{\max(a_x, a_y, a_z)}{a_i}, \quad i = x, y, z \quad (1)$$

关于几何各向异性的套合, 只需要通过轴向的压缩或拉伸即可将不同方向的模型套合为统一的结构。假定对应主要的变异方向——变程最长的轴向的变异函数为 γ_0 , 定义变换矩阵 A 如下:

$$A = \begin{pmatrix} K_x & 0 & 0 \\ 0 & K_y & 0 \\ 0 & 0 & K_z \end{pmatrix}, \quad (2)$$

则套合后的模型如下:

$$\gamma(h) = \gamma_0(\|Ah\|), \quad (3)$$

其中 $K_i, i = x, y, z$ 为各向异性比, 当 i 轴向不存在变异时, $K_i = 0$ 。

带状各向异性的处理比较复杂, 但在地质变量的结构分析中, 很多变异函数都可以归类到水平方向以及垂直方向两大方向上的套合, 因此从一定程度上简化了套合的过程。目前的套合方案多数都默认各个方向上块金效应一致, 即忽略了块金常数的异向性。第一类方法为, 将水平方向和垂直方向视为各自独立变化的成分。记水平方向的变异函数为 $\gamma_0(h) = \gamma_0(\sqrt{h_x^2 + h_y^2})$, 垂直方向的变异函数为 $\gamma_1(h) = \gamma_1(h_z)$ 。定义变换矩阵如下:

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

则最终的套合模型 $\gamma(h)$ 为:

$$\gamma(h) = \gamma_0(\|A_0h\|) + \gamma_1(\|A_1h\|) = \gamma_0(\sqrt{h_x^2 + h_y^2}) + \gamma_1(h_z). \quad (5)$$

第二类方法是将水平方向的变异函数视为整个三维空间中的各向同性模型, 总的套合模型为该各向同性模型上叠加一个垂向上的变异成分 $\gamma_2(h_z)$ 。记水平方向的变异函数为 $\gamma_0(h) = \gamma_0(\sqrt{h_x^2 + h_y^2})$, 垂直方向的变异函数为 $\gamma_1(h) = \gamma_1(h_z)$, 则

$$\begin{aligned} \gamma_1(h_z) &= \gamma_0(h_z) + \gamma_2(h_z) \Rightarrow \\ \gamma_2(h_z) &= \gamma_1(h_z) - \gamma_0(h_z). \end{aligned} \quad (6)$$

定义变换矩阵如下:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

则最终的套合模型 $\gamma(h)$ 为:

$$\gamma(h) = \gamma_0(\|h\|) + \gamma_1(\|Ah\|) - \gamma_0(\|Ah\|). \quad (8)$$

对于更一般的结构套合, 通常的思路是将各个方向

视为独立变化的成分进行线性变换, 转为各向同性的表达形式之后, 再将这些独立的成分叠加在一起, 如下式:

$$\gamma(h) = \sum_{i=1}^n \gamma_i(\|Ah\|). \quad (9)$$

目前多数的地质统计学文献仅对几何各向异性结构和某些特殊的带状各向异性套合进行了讨论, 其中存在的问题有: (1) 常规套合方法忽略了块金常数的各向异性, 对于在不同方向上具有不同块金效应的变异函数难以处理; (2) 无论是几何各向异性, 还是带状各向异性, 常规的方法仅适用于不同方向上的变异函数类型是一致的情况, 例如同为球形模型, 对于在不同方向上存在不同变异函数类型的情况没有加以解决。

2 新的套合方法

针对上述问题, 本文提出了一种新的变异函数统一套合的形式, 可以处理在三维空间内不同类型的各向异性套合, 同时将套合推广到变异轴与原始数据坐标不一致的情况。具体的思路是以最大和最小的变异方向构造新的坐标基, 同时保证新的基为标准正交向量组。这是因为, 三维欧氏空间的任意向量总是可以通过其中 3 个线性无关的向量来表示, 而标准正交基则保证了距离的规范定义和不变性。不失一般性, 假定新的基 F 为标准正交基, 不妨将采样数据的原始坐标系记为 $E = (X, Y, Z)$, 新定义的基记为 $F = (U, V, W)$ 。则新定义的基 F 在原有的坐标系 E 下可以用方向余弦表示如下:

$$F = (\vec{F}_x, \vec{F}_y, \vec{F}_z) = \begin{pmatrix} \cos\alpha_x & \cos\beta_x & \cos\theta_x \\ \cos\alpha_y & \cos\beta_y & \cos\theta_y \\ \cos\alpha_z & \cos\beta_z & \cos\theta_z \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$\vec{F}_x, \vec{F}_y, \vec{F}_z$ 分别为新的基在原有基上的坐标向量, $\alpha_i, \beta_i, \theta_i$ 分别代表 $\vec{F}_x, \vec{F}_y, \vec{F}_z$ 在 X, Y, Z 轴上的方向余弦角度。由于 F 的正交性质, 容易推导出列向量 ξ 从坐标系 E 到坐标系 F 的变换为:

$$\xi_F = \begin{pmatrix} \xi_u \\ \xi_v \\ \xi_w \end{pmatrix}_F = F \xi_E = \begin{pmatrix} \cos\alpha_x & \cos\alpha_y & \cos\alpha_z \\ \cos\beta_x & \cos\beta_y & \cos\beta_z \\ \cos\theta_x & \cos\theta_y & \cos\theta_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \xi_x \\ \xi_y \\ \xi_z \end{pmatrix}_E. \quad (11)$$

在定义新坐标基的前提下, 就可以在距离向量 h 的坐标投影基础上进行各向异性的讨论。首先需要引入一个新的常数定义——各向异性变化率。

定义 1 各向异性变化率 (anisotropic variation velocity) 指的是变异函数模型中从起点到基台值的平均变化速率, 记为 I ,

$$I = \frac{\text{rise}}{a} = \frac{\text{sill} - \text{nugget}}{a}, \quad (12)$$

rise 为拱高, 即基台值 sill 和块金值 nugget 的差值, a 为变程。

设 I_u, I_v, I_w 分别为变异轴向上的各向异性变化率, $\gamma_u, \gamma_v, \gamma_w$ 分别为变异轴向上的变异函数。套合的思路是将各个方向上变化的变异函数按距离分量进行量化加权, 加权的系数与各向异性变化率以及距离相关, 可以看作是变异函数在该方向上的影响的近似量度。定义函数如下:

$$\varphi(h, \gamma) = \begin{cases} I \circ h, & 0 \leq h < a, \\ \text{rise}, & h > a. \end{cases} \quad (13)$$

由式 (13) 可知, $\varphi(h, \gamma)$ 是和变异函数 γ 相关的, 且 $0 \leq \varphi(h, \gamma) \leq \text{rise}$ 。

记 U, V, W 方向上的变异函数为 $\gamma_u, \gamma_v, \gamma_w$, 对应的 $\varphi(\cdot)$ 函数为 $\varphi_u, \varphi_v, \varphi_w$, 则可定义权重函数如下:

$$W_i(h) = \frac{\varphi(h_i)}{\sum_{i=(u,v,w)} \varphi(h_i)}, \quad i = u, v, w \quad (14)$$

当距离分量在变程以内变化时, 该方向上变异函数的权重与距离和各向异性变化率的乘积成正比; 当超出变程时, 权重与拱高成正比, 这是因为此时的距离变化已和变异函数的取值无关。考虑变异主轴方向与原始数据轴向不重合的情形, 本文定义套合形式如下:

$$\begin{aligned} A_u &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A_v &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A_w &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ B_u &= A_u F^T = \begin{pmatrix} \cos\alpha_x & \cos\beta_x & \cos\theta_x \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (15)$$

$$B_v = A_v F' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \cos\alpha_y & \cos\beta_y & \cos\theta_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$B_w = A_w F' = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \cos\alpha_z & \cos\beta_z & \cos\theta_z \end{pmatrix}, \quad (16)$$

$$C = \begin{pmatrix} \frac{\varphi_u(\|B_u h\|)}{\sum_{i=(u,v,w)} \varphi_i(\|B_i h\|)} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\varphi_v(\|B_v h\|)}{\sum_{i=(u,v,w)} \varphi_i(\|B_i h\|)} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\varphi_w(\|B_w h\|)}{\sum_{i=(u,v,w)} \varphi_i(\|B_i h\|)} \end{pmatrix}, \quad (17)$$

$$\gamma(h) = C \circ \begin{pmatrix} \gamma_u(\|B_u h\|) \\ \gamma_v(\|B_v h\|) \\ \gamma_w(\|B_w h\|) \end{pmatrix}. \quad (18)$$

当变异方向少于 3 个主轴向时, 只需对上述变换矩阵稍做改动. 从式(18)可以看出: (1) 只要各个轴向上的变异函数 γ_i 为条件非负定, 则套合后的模型必然为条件非负定函数, 因此它满足变异函数理论模型的要求. (2) 套合后的模型结构随不同方向动态变化, 其比例由各个轴向上的距离分量和变异函数确定.

3 实验

本实例数据来源于某地区的地下水水质调查结果, 地下水水质通过水质综合评价指数衡量. 水质综合评价指数的意义以及对应的水质分类如表 1 所

表 1 地下水水质分级

Table 1 Grading of underground water quality					
级别	优良	良好	较好	较差	极差
F	< 0.80	0.80 ~ < 2.50	2.50 ~ < 4.25	4.25 ~ < 7.20	> 7.20

示, 总体来说指数越高, 代表水质越差. 由于原始数据基本上都在一定的区间内独立分布, 本文选取对其中水质较差的区段进行单独控制, 以便了解研究区水质恶化情况, 采用的方法为三维指示 Kriging 方法, 最终建立了地下水水质的三维属性模型.

记水质综合评价指数为变量 Z , 设定指示函数为:

$$i(x, z) = \begin{cases} 1, & z > 4.25, \\ 0, & z \leq 4.25. \end{cases} \quad (19)$$

利用上述指示变异函数对地下水水质的综合评价指数原始数据进行变换后, 求取了水平方向和垂直方向的指示变异函数. 水平方向变异函数为球形模型, 结果为:

$$\gamma(h) = 3.24 + 2.29 \cdot sph(13.364). \quad (20)$$

垂直方向变异函数为高斯模型, 结果为:

$$\gamma(h) = 5.05 + 0.94 \cdot gauss(46.7). \quad (21)$$

由于 2 个模型的函数类型不同, 用常规的方法难以套合, 本文采用新提出的方法进行套合.

图 1 为根据指示 Kriging 方法构建的地下水水质三维属性模型, 其中颜色渐变代表的涵义为水质较差类型的概率. 从图中可以看出, 研究区西南角和东北角水质较差的可能性较大, 其他区域内水质大部分判定为差的概率在 0.5 左右, 可以理解为该区域的水质情况处于恶化的边缘. 通过不同水平切面的

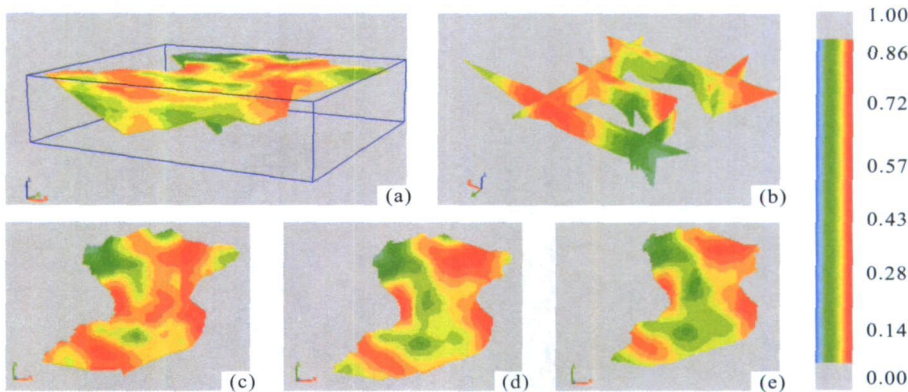


图 1 地下水水质三维属性模型

Fig. 1 3D property model of underground water quality

a. 三维显示图; b. 栅栏图; c. 地下 50 m 水平切片; d. 地下 100 m 水平切片; e. 地下 150 m 水平切片

展示(图 1c, 1d, 1e), 可以发现深层水遭受的污染较轻, 但仍然有部分地区处于恶化阶段。

4 结论

本文针对三维 Kriging 方法中的变异函数套合进行了研究, 提出了一种新的套合方法。套合的结构具有简单统一的形式, 且能适用于多种复杂变异函数组合。套合的结果符合 Kriging 方法中变异函数模型条件非负定的要求。通过对地下水水质的三维属性建模的实例, 论证了该套合方法的可行性。这种套合结构是一种近似的套合方式, 其优点是形式简单, 适用于变异方向不同的变异函数模型类型, 且对块金常数的异向性变化不做限制, 因此适用的场合更为广泛。

References

- Dai, B. B., Wang, L. G., Jia, M. T., et al., 2007. Application of 3D digital modeling in a copper mine. *Geology and Prospecting*, 43(3): 97–101 (in Chinese with English abstract).
- Gallichand, J., Buckland, G. D., Marcotte, D., et al., 1992. Spatial interpolation of soil salinity and sodicity for a saline soil in southern Alberta. *Can. J. Soil Res.*, 72(4): 503–516.
- Mallet, J. L., 2002. *Geomodeling*. Oxford Press, Oxford, 1–

600.

- Pan, G. C., Moss, K., Heiner, T., et al., 1992. A Fortran program for three-dimensional Cokriging with case demonstration. *Comput. Geosci.*, 18(5): 557–578.
- Triantafilis, J., Odeh, I. O. A., McBratney, A. B., 2001. Five geostatistical models to predict soil salinity from electromagnetic induction data across irrigated cotton. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 65: 869–878.
- Wang, R. D., Hu, G. D., 1988. *Linear geostatistics*. Geological Publishing House, Beijing, 1–260 (in Chinese).
- Yao, L. Q., Pan, M., Cheng, Q. M., 2008a. 3D property modeling of void ratio by Cokriging. *Journal of China University of Geosciences*, 19(4): 410–415.
- Yao, L. Q., Pan, M., Qu, H. G., et al., 2008b. Research on application of Kriging in construction of three-dimensional property model about water content. *Application Research of Computers*, 25(8): 2554–2556 (in Chinese with English abstract).

附中文参考文献

- 戴碧波, 王李管, 贾明涛, 等, 2007. 三维数字建模技术在某铜矿山中的应用. *地质与勘探*, 43(3): 97–101.
- 王仁铎, 胡光道, 1988. *线性地质统计学*. 北京: 地质出版社, 1–260.
- 姚凌青, 潘懋, 屈红刚, 等, 2008b. Kriging 算法在含水量三维属性模型构建中的应用研究. *计算机应用研究*, 25(8): 2554–2556.