Navorsings- en Oorsigartikels

Verskillende benaderings vir die beraming van 'n ruimte-afhanklike veranderlike

G.J. van Tonder en J.F. Botha

Instituut vir Grondwaterstudies, Posbus 339, U.O.V.S., Bloemfontein

UITTREKSEL

'n Ruimte afhanklike veranderlike is enige numeriese funksie met 'n ruimtelike verspreiding wat verander met skynbare kontinuïteit. Daar bestaan verskillende metodes, soos die metode van kleinste kwadrate, die afstandsgeweegde metode en kriging, om 'n benadering vir die veranderlike by nie-eksperimentele punte te verkry. Hierdie artikel gee 'n oorsig oor hierdie verskillende metodes en wys dan hoe Chebychev polinome saam met gewone kriging gebruik kan word om skattings te kry.

ABSTRACT

Different approximation for regionalized variables

A regionalized variable is any numerical function with a spatial distribution which varies from one place to another with apparent continuity. Least squares, distance weighted averaging and kriging can be used to approximate these regionalized variables. This paper presents an overview of these methods and shows how Chebychev polynomials are used in conjunction with simple kriging for the approximation of regionalized variables.

1. INLEIDING

Geologiese verskynsels kan dikwels wiskundig beskryf word deur 'n ruimte-afhanklike veranderlike, gedefinieer oor 'n gegewe gebied. In die meeste gevalle van praktiese belang, is die omvang van hierdie gebied so groot dat dit net eenvoudig onmoontlik is om die veranderlike by elke punt in die gebied te bepaal, soos die wiskundige formulering vereis. Al wat prakties moontlik is, is om die grootte van so 'n verskynsel by 'n klompie punte in die gebied te bepaal en dan die waardes by ander punte te skat. Die benaderings wat hiervoor gevolg kan word, speel dus 'n besondere rol in die aardwetenskappe.

Wiskundig gesien, bestaan daar drie basiese metodes wat afsonderlik of in kombinasie vir die doel gebruik kan word:

- (i) die metode van kleinste kwadrate;
- (ii) die afstandsgeweegde metode;
- (iii) die metode van interpolasie.

Verskillende faktore, soos bv. die aantal eksperimentele punte, die akkuraatheid verlang en die gedrag van die veranderlike oor die gebied sal onder meer bepaal watter metode van skatting gebruik moet word. Vir een geval mag (i) hierbo die beste skattings gee, terwyl vir ander gevalle (ii) of (iii) weer die beste metode is.

2. DIE METODE VAN KLEINSTE KWADRATE (MKK)

Die basiese beginsel van die metode van kleinste kwadrate is welbekend, en word in verskeie boeke bespreek.¹

Gestel dat $f(x,y)$ 'n funksie van die ruimte-veranderlikes x,y is. As $g_k(x,y)$ 'n volledige versameling van bekende funksies (algemeen bekend as basis-

funksies) is, kan die funksie $f(x,y)$ ook ontwikkel word in terme van 'n oneindige reeks van die vorm:²

$$f(x,y) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k g_k(x,y) \quad (1)$$

waar a_k koëffisiënte is wat bereken moet word.

In die praktyk is dit natuurlik nie moontlik om die sommasie aangedui in (1) uit te voer nie. Gevolglik word die reeks na 'n eindige aantal terme, sê K , afgebreek, sodat daar 'n benaderde waarde

$$f(x,y,a) = \sum_{k=0}^K a_k g_k(x,y) \approx f(x,y) \quad (2)$$

gevind word met

$$f(x,y) - f(x,y,a) = R(x,y,a) = \text{residu}$$

Veronderstel dat $f(x_i,y_i)$ met $i = 1, \dots, n$, 'n versameling bekende waardes van $f(x,y)$ by die punte (x_i,y_i) is, met $n \geq K + 1$. Die MKK ontstaan wanneer daar geëis word dat die som

$$S = \sum_{i=1}^n (R(x_i,y_i,a))^2 \quad (3)$$

so klein as moontlik is. Aangesien S 'n kwadratiese funksie van die a_k is, word daar aan hierdie eis voldoen indien die a_k so gekies word dat die afgeleide van S gelyk aan sero is. Indien R in (3) vervang word met sy uitdrukking in (2) en die resultaat in die afgeleide gestel word, ontstaan die sogenaamde normaal-vergelykings:

$$\sum_{k=0}^K a_k \sum_{i=1}^n g_k(x_i,y_i) g_j(x_i,y_i) = \sum_{i=1}^n f(x_i,y_i) g_j(x_i,y_i), \quad \text{vir } j = 0, \dots, K \quad (4)$$

Hierdie stel van K lineêre vergelykings kan, sodra

die $g_i(x,y)$ gekies is, gebruik word om die K onbekendes a_k te bepaal.

Die bekendste MKK benadering ontstaan wanneer $g_i(x,y)$ gekies word uit die versameling van polinome

$$P_K(x,y) = x^u y^v \quad (u + v = K)$$

Alhoewel hierdie metode (bekend as tendensanalise) baie eenvoudig is om toe te pas, het dit die nadeel dat die koëffisiënte matriks in (4) sleggeaard word vir groot waardes van K . (Die ander twee metodes wat bespreek sal word het nie hierdie nadeel nie). Gewoonlik word K kleiner of gelyk aan 4 gekies. 'n Ander nadeel van die metode is die onvermoë van polinome om vinnig veranderde funksies getrou te benader.

'n Ander MKK ontstaan indien die $g_i(x,y)$ identies aan 'n kombinasie van die trigonometriese funksies $\sin(u\pi x/L_x)$ en $\cos(v\pi y/L_y)$ met $[0 \leq x \leq L_x$ en $0 \leq y \leq L_y]$ te stel. Dit staan bekend as die Fourier-benadering.

3. AFSTANDSGEWEEGDE METODE (AGM)

As aanvaar word dat die funksie $f(x,y)$ nie baie vinnig oor klein afstande binne sy gebied van definisie verander nie, is dit geregverdig om te aanvaar dat 'n waarde $f(x_0,y_0)$ 'n noue verband behoort te toon met waardes van $f(x,y)$ by punte (x_k,y_k) in die omgewing van punte (x_0,y_0) . In die besonder kan verwag word dat hoe nader 'n punt (x_i,y_i) aan (x_0,y_0) lê, hoe beter word $f(x_0,y_0)$ deur $f(x_i,y_i)$ benader, want

$$\lim_{\substack{x_0 \rightarrow x_j \\ y_0 \rightarrow y_j}} f(x_0,y_0) \equiv f(x_j,y_j)$$

wat die basis vir die AGM vorm. Die eenvoudigste AGM bestaan daaruit dat $f(x_0,y_0)$ benader word deur 'n lineêre kombinasie van die $f(x_i,y_i)$ in sy onmiddellike omgewing. Die eenvoudige vorm van so 'n benadering is²

$$f(x_0,y_0) = \sum_{i=1}^n W_i f(x_i,y_i)$$

waar W_i 'n gewigsfunksie is wat slegs afhang van die afstand

$$d_{i0} = ((x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2)^{1/2}$$

Om te verseker dat die benadering onsydig is, word verder vereis dat

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

In die praktyk word daar onder andere van die volgende gewigsfunksies gebruik gemaak:

- (a) $1/d_{i0}$
- (b) $1/d_{i0}^m$ ($m \geq 2$)
- (c) $e^{-d_{i0}}$
- (d) $(e^{-d_{i0}^2})/d_{i0}^2$

Die keuse van die gewigsfunksies hang af van hoe vinnig die funksie met afstand verander.

Die basiese beginsels van die AGM kan natuurlik ook op die MKK toegepas word. Al wat hiervoor benodig word, is om die S in (3) te herdefinieer as

$$S = \sum_{i=1}^n [R(x_i,y_i,a)]^2 \cdot W_i$$

Die normaalvergelykings word dan gegee deur:

$$\sum_{k=0}^K a_k \sum_{i=1}^n W_i g_k(x_i,y_i) g_j(x_i,y_i) = \sum_{i=1}^n W_i f(x_i,y_i) g_j(x_i,y_i) \quad (5)$$

'n Besondere interessante toepassing van die afstandsgewegde kleinste kwadraatbenadering (AGKKB) is dié voorgestel deur McLain.³ Hier word $f(x,y,a)$ gekies as 'n polinoom van 'n lae graad en die koëffisiënte a_k word bepaal vir elke gegewe (x_0,y_0) met behulp van (5). Hierdie metode het miskien die nadeel teenoor tendensanalise dat 'n nuwe $f(x,y,a)$ bepaal moet word vir elke (x_0,y_0) .

4. DIE METODE VAN INTERPOLASIE

Een van die bekendste wiskundige metodes vir die benadering van 'n funksie is interpolasie. In sy eenvoudigste vorm kom die metode daarop neer dat daar gesoek word na 'n polinoom van graad n wat so is dat

$$P_n(x_i) = f(x_i)$$

Die bekendste van hierdie polinome is sekerlik die lineêre Lagrange-polinome. Die wesenlike verskil tussen die interpolasiemethode en die ander metodes vroeër bespreek, is daarin geleë dat $P_n(x_i)$ vir $f(x_i)$ eksak benader. Die interpolasiemethode word egter selde, indien ooit, na twee dimensies uitgebrei omrede (i) die polinoom nie noodwendig in twee dimensies bestaan nie⁴ en (ii) dat vir punte weg van eksperimentele punte die polinoom nie altyd met die gegewe funksie ooreenstem nie.⁵

'n Metode wat hierdie nadele oorkom, maar terselfdertyd aan die interpolasie-eienskap voldoen en 'n geskatte fout weergee, is die metode van kriging.⁶ Die metode van kriging maak gebruik van die statistiese aanname dat hoe nader twee punte aan mekaar lê, hoe groter is die korrelasie tussen die waardes by die twee punte. Hierdie ruimtelike verband word deur die semivariogramfunksie van Matheron⁷ weer-gegee:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N [f(x_i) - f(x_i + h)]^2 \quad (6)$$

waar N = aantal pare afstand h van mekaar.

Die metode van kriging bestaan daaruit dat:

- (a) $f(x_0,y_0) = \sum_{i=1}^n A_i f(x_i,y_i)$ (AGM metode)
- (b) $\sum_{i=1}^n A_i = 1$ (voorwaarde van onsydigheid)
- (c) $\sigma^2 = \text{minimum}$ (waar σ^2 = beramingsvarians).

Minimering van die beramingsvarians lei tot die

fig. 1a

$$(x - 5,5)^2 + (y - 5,5)^2 + z^2 = 64$$

fig. 1b

$$z = \exp - [(x-5)^2 + (y-5)^2]$$

fig. 1c

$$z = \exp - 1/4[(x-5)^2 + (y-5)^2]$$

fig. 1d

$$z = \tanh (x + y - 11)$$

FIGUUR 1: Driedimensionele voorstellings van die verskillende funksies onder bespreking.

volgende stelsel van $(n+1)$ vergelykings in $(n+1)$ onbekendes:

$$\sum_j A_j \gamma_{ij} + \mu = \gamma_{i0} \quad (7)$$

$$\sum_i A_i = 1$$

waar μ = Lagrange vermenigvuldiger

waar γ_{ij} uit die semivariogram funksie verkry word.

Vergelyking (7) geld net indien daar geen drywing in die data voorkom nie. (Indien die verwagtingswaarde nie 'n konstante is nie, maar afhang van die afstand tussen twee punte, is daar 'n drywing in die data.) Indien daar wel 'n drywing voorkom, moet daar van universele kriging gebruik gemaak word soos voorgestel deur Matheron. Dit kon daarop neer dat die drywing uit die data gefiltreer moet word deur van hoogstens tweedegraadse magspolinome gebruik te maak. Hierdie tipe benadering gee egter dikwels aanleiding tot 'n sleggeaarde matriks,⁸ sodat dit nie aanbeveel word nie. Gambolati en Volpi⁸ stel voor dat die drywing as *a priori* bereken moet word, en gewone kriging dan slegs op die residu toegepas word. Vir hierdie tipe benadering is dit handig om van die ortogonale Chebychev polinome gebruik te maak om die drywing na te boots. Hierdie polinome word gevind deur van die gewigsfunksie

$$W(x) = 1/(1-x^2)^{1/4}$$

oor die interval $(-1;1)$ gebruik te maak. Hierdie Chebychev-polinome word gegee deur:

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x), n \geq 0.$$

'n Belangrike eienskap van hierdie polinome is dat hulle die minimum-maksimumfout van alle polinome van graad n en kleiner oor die interval $(-1;1)$ het.

5. EKSPERIMENTELE RESULTATE

Om die werking van die bespreekte benaderingsmetode toe te lig, sal enkele wiskundig gedefinieerde funksies beskou word:

FUNK-SIE	VEGELYKING	OPMER-KING
f1	$(x-5,5)^2 + (y-5,5)^2 + z^2 = 64$	deel van 'n sfeer (fig. 1a)
f2	$z = \exp - [(x-5)^2 + (y-5)^2]$	'n steil heuwel (fig. 1b)
f3	$z = \exp - 1/4[(x-5)^2 + (y-5)^2]$	'n minder steil heuwel (fig. 1c)
f4	$z = \tanh(x+y-11)$	'n plato en vlakke geskei deur 'n steil kloof (fig. 1d)

Vir elkeen van hierdie vier funksies is data op 'n reëlmatige 10×10 netwerk ($x, y = 1, \dots, 10$) gegenereer en gebruik om waardes by 81 tussenin punte te skat met behulp van die volgende metodes:

M1: AGM met $W_i = \frac{1}{d_{i0}}$

M2: AGM met $W_i = 1/d_{i0}^2$

M3: AGM met $W_i = e^{-d_{i0}}$

M4: AGM met $W_i = e^{-\alpha d_{i0}^2} / (d_{i0} + \epsilon)$, ($\alpha = 10^{-5}$, $\epsilon = 10^{-8}$)

M5: Tendensanalise graad 2

M6: Tendensanalise graad 3

M7: AGKKB met $W_i = e^{-\alpha d_{i0}^2} / (d_{i0}^2 + \epsilon)$ en 'n kwadratiese polinoom

M8: Gewone kriging

M9: Universele kriging (Matheron metode)

M10: Universele kriging met Chebychev polinome *a priori*.

Die gemiddelde afwykings tussen die geskatte en werklike waardes word in tabel 1 gegee.

TABEL 1.
GEMIDDELDE AFWYKING TUSSEN DIE WERKLIKE EN GESKATTE WAARDES

Metode	Funksie				
	F1	F2	F3	F4	F
M1	0,1003	0,0294	0,0388	0,1035	0,068
M2	0,1525	0,0359	0,0506	0,1353	0,093
M3	0,0909	0,0288	0,0373	0,0991	0,064
M4	0,0502	0,0207	0,0238	0,0626	0,039
M5	0,0369	0,0619	0,1246	0,3443	0,141
M6	0,0368	0,0613	0,1163	0,1999	0,1035
M7	0,0137	0,0346	0,0494	0,0928	0,0476
M8	0,0295	0,0331	0,0073	0,0212	0,0227
M9	2,6257	0,2154	0,0219	0,1364	0,7498
M10	0,0034	0,0390	0,0083	0,0216	0,0180

$$F = (F1 + F2 + F3 + F4)/4$$

Metode M10 (Chebychev-kriging) het die kleinste gemiddelde afwyking vir die vier funksies gelewer, gevolg deur M8 (gewone kriging) en M4 (AGM met eksponensiële gewigsfunksie). Op grond van die resultate van tabel 1 kan Matheron universele kriging dadelik verwerp word.

6. OPSOMMEND

Geen vaste reël kan neergelê word om te bepaal

watter metode gebruik moet word vir die benaderings van 'n veranderlike nie. Vir die meeste gevalle sal kriging die beste resultate lewer. Daar moet egter in gedagte gehou word dat kriging baie meer rekenaar-tyd in beslag neem as die ander metodes. Universele kriging soos voorgestel deur Matheron word nie aan-beveel nie, vanweë die inherente probleem van 'n sleggeaarde matriks. Dit mag lonend wees om eers te kyk of die drywing nie met Chebychev-polinome voorgestel kan word nie en om dan gewone kriging op die residu toe te pas.

7. VERWYSING

1. Burden, R.L., Faires, J.D. en Reynolds, A.C. (1978).

Numerical analysis. Pindle, Weber and Schmidt, Inc.: Massachusetts.

2. Rivlin, T.J. (1969). *An introduction to the approximation of functions*. Blaisdell: Waltham Mass.
3. McLain, D.H. (1974). Drawing contours from arbitrary data points. *The Computer Journal*, Vol. 17, 318-324.
4. Prenter, P.M. (1975). *Splines and variational methods*. John Wiley & Sons: New York.
5. Stroud, A.H. (1974). *Numerical quadrature and solution of ordinary differential equations*. Springer-Verlag: New York.
6. Krige, D.G. (1951). *A statistical approach to some mine valuation and allied problems at the Witwatersrand*. (Unpublished M.Sc. thesis) Univ. of the Witwatersrand: Johannesburg.
7. Matheron, G. (1971). The theory of regionalized variables and its applications, *Les Cahiers du CMM*, Fasc. Nr. 5, CG, Fontainebleau.
8. Gambolati, G. en Volpi, G. (1979). Groundwater mapping in Venice by stochastic interpolators. *Water Resources Research*, Vol. 15, No. 2, 281-297.