Radiale Extrapolation und Simple Kriging

1 – Einleitung
2 – det. Extrapolation
3 – Radiale Extrapolation
4 – Simple Kriging
5 – Umformungen
6 – Ergebnis
7 – Implementierung in R
ANHANG
1 – Beispiel A
2 – Beispiel B

M. Michael
Januar 2003

1 Einleitung

bisher: Verschiedene Methoden der stochastischen Extrapolation (Kriging)
Die einfachste Form ist die des Simple Krigings.

heute: deterministische Herangehensweise

- Vorstellen einer deterministischen Extrapolationsmethode
- Simple Kriging als Spezialfall der radialen Extrapolation

Ergebnis: Unter gewissen Voraussetzungen fallen die Resultate des Simple Krigings mit denen der det. Extrapolation zusammen.

Anwendung: Einige Simulationen der Extrapolation zu gegebenen Testdatensätzen

Standardproblem in den Geowissenschaften:

(kleinster gemeinsamer Nenner des analytischen und stochastischen Ansatzes)
Man führt Messungen an verschiedenen Stellen durch; aus den Messwerten soll ein Wert für eine andere Stelle ermittelt werden.
($\rightarrow$ Extrapolationsproblem)

Formal:

Es sei $Z(x)$ eine nicht notwendigerweise zufällige Funktion,
$Z : D \subset \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, wir nehmen n Messungen in $D \subset \mathbb{R}^d$ mit Messwerten in $\mathbb{R}$

$\{x_1, \ldots, x_n\} \subset D$, Menge der Messstellen
und $\{z_1, \ldots, z_n\}$, Menge der Messwerte dh. es gilt
$Z(x_i) = z_i \qquad \forall\, 1 \leq i \leq n$

gesucht: ‚erwarteter' Messwert z zu einem $x \in D \setminus \{x_1, \ldots, x_n\}$.

2 deterministische Extrapolation

Annahme: Es gibt eine Funktion $Z : D \subset \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, so dass die Messwerte Auswertungen von Z an den Messstellen sind.

Versuch, diese Funktion aus den Daten zu rekonstruieren oder anzunähern.
Forderung an die Funktion Z:

- gewisse **Glätte**

- die **exakte Interpolation** an den Messstellen, dh.
  $Z(x_i) = z_i \qquad \forall\, 1 \leq i \leq n$

3 Radiale Extrapolation

Bei unregelmäßig verteilten Messstellen bietet sich ein radialer Extrapolationsansatz an.

Definition 1 (Radiale Basisfunktion)
Eine Funktion $\Phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ heißt radial, falls eine Funktion $\varphi : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ existiert, so dass gilt

$$\Phi(x) = \varphi(\|x\|)$$

mit $x \in \mathbb{R}^d$ und $\|x\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{d} |x_i|^2}$.

Anschaulich: allein die Länge des Vektors x bestimmt den Funktionswert von $\Phi(x)$

Wir approximieren die gesuchte Funktion $Z(x)$ durch Linearkombinationen der Verschiebungen einzelner radialer Funktionen.

$$\hat{Z}(x) = \sum_{j=1}^{n} a_j \Phi(x - x_j),\ x \in D$$

Dabei heißen die Koeffizienten a_j die Gewichte der Basisfunktion.

Exakte Extrapolation der Messstellen führt zu folgenden zusätzlichen Bedingungen:

$$\hat{Z}(x_j) = z_j \qquad \forall x_j$$

Obige Gleichung in Matrixnotation mit $A := (\Phi(x_j - x_k))_{j,k=1}^{n}$ und $z := (z_1, z_2, \ldots, z_n)^t \in \mathbb{R}^n$ sowie $a := (a_1, a_2, \ldots, a_n)^t \in \mathbb{R}^n$ führt zu:

$$Aa = z$$

mit der Forderung, dass die Funktion Φ **positiv definit** ist, dh.

$$z^t A z = z^t \left(\Phi(x_j - x_k)_{j,k=1}^{N}\right) z > 0 \quad \forall z \in \mathbb{R}^N \setminus \{0\}$$

für alle Mengen mit endlich vielen Vektoren $\{x_1, x_2, \ldots, x_N\} \in \mathbb{R}^n$.

Es sind eine Reihe von pos. definiten radialen Basisfunktionen bekannt.

3.1 einige Basisfunktionen

Die gebräuchlichsten radialen Basisfunktionen sind:

surface	$\varphi(r) = r^{2n-1}$	$n \in \mathbb{N}$
thin plate	$\varphi(r) = r^{2n} \log r$	$n \in \mathbb{N}$
multiquadric	$\varphi(r) = (r^2 + c^2)^{1/2}$	$c \in \mathbb{R}$
shifted surface	$\varphi(r) = (r^2 + c^2)^{n-1/2}$	$n \in \mathbb{N}, c \in \mathbb{R}$
shifted thin plate	$\varphi(r) = (r^2 + c^2)^n \log(r^2 + c^2)$	$n \in \mathbb{N}, c \in \mathbb{R}$
shifted logarithm	$\varphi(r) = log(r^2 + c^2)$	$c \in \mathbb{R}$
sandwell	$\varphi(r) = r^2(\log(r-1))$	

inverse multiquadric	$\varphi(r) = (r^2 + c^2)^{-1/2}$	$c \in \mathbb{R}$
Gaussian	$\varphi(r) = \exp(-cr^2)$	$c \in \mathbb{R}_+$
exponential	$\varphi(r) = d\exp(-\frac{r}{c})$	$c, d \in \mathbb{R}_+$

Die Funktionen der vorhergegangenen Folie sind allesamt monoton wachsend in r, die dieser Folie fallend bei wachsendem r.

Eine Extrapolation mit fallenden Funktionen erscheint einleuchtender (der Einfluss weit entfernter Messwerte ist gering), aber auch die anderen radialen Basisfunktionen können brauchbare Ergebnisse liefern.

3.2 Problem bei der praktischen Anwendung

Suche nach der ideale Größe des Trägers der radialen Funktion

- Matrizen A zu kompakten Trägern leicht zu invertieren
- Matrizen zu globalem Träger haben i.a. bessere Approximationseigenschaften

Theorie der radialen Basisfunktionen:

- Optimale Wahl der Messpunkte
- Bestimmung der Approximationsgüte in Abhängigkeit von der gewählten Funktion Φ und der Anzahl und der Verteilung der Messstellen x_i

Das soll hier unbehandelt bleiben.

4 Wiederholung: Simple Kriging

In der bekannten Notation sei $Z(\omega, x)$ ein zufälliges Feld, unser Beobachtungsfenster sei $D \subset \mathbb{R}^d$.

Das Verfahren des Simple Kriging setzt Stationarität 2. Ordnung voraus, dh. mit $h \in \mathbb{R}^d$:

$$\mathbb{E}\left[Z(x+h)\right] = \mathbb{E}\left[Z(x)\right] =: \mu,$$

$$Cov\left[Z(x+h), Z(x)\right] = C(h)$$

mit bekanntem Mittelwert und bekannter Kovarianzstruktur.

ObdA. sei $\mu = 0$ (sonst betrachte $Y(x) = Z(x) - \mathbb{E}\, Z(x)$).

Man schätzt den Funktionswert an einer Stelle x durch

$$\hat{Z}(x) = \mu + \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \left[Z(x_j) - \mu \right] \overset{\mu=0}{=} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j Z(x_j)$$

und die Gewichte λ_j werden bestimmt aus der Gleichung

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_j C(x_i - x_j) = C(x - x_i) \quad \forall\ 1 \leq i \leq n$$

(vergleiche Vortrag 2)

Weitere **Voraussetzung**: die Kovarianzfunktion $C(h)$ sei positiv definit (normalerweise ist das keine große Einschränkung).

In Matrixschreibweise mit
$C = (C(x_i - x_j))_{i,j=1}^n$,
$c = (C(x - x_1), C(x - x_2), \ldots, C(x - x_n))^t$
und $\lambda = (\lambda_1, \ldots \lambda_n)^t$ ergibt sich für
$\sum_{j=1}^n \lambda_j C(x_i - x_j) = C(x - x_i) \quad \forall\, 1 \leq i \leq n$
folgendes:

$$C\lambda = c$$

$$
\begin{aligned}
& C\lambda && = c \\
\Rightarrow \quad & \lambda && = C^{-1}c, \qquad C^{-1} \text{ existiert, da C pos. definit} \\
\Rightarrow \quad & \lambda^t && = \left(C^{-1}c\right)^t \\
& && = c^t \ \left(C^{-1}\right)^t \\
& && = c^t \ \left(C^t\right)^{-1} \\
& && = c^t \ C^{-1}, \qquad \text{da } C \text{ symmetrisch} \\
\Rightarrow \quad & \hat{Z}(x_0) && = c^t \ C^{-1} \left(Z(x_1), \ldots, Z(x_n)\right)^t \\
& && = c^t \ C^{-1} \left(z_1, \ldots, z_n\right)^t
\end{aligned}
$$

Auf dieses Ergebnis werden wir noch später zugreifen müssen.

5 Berechnungen im det. Modell

Wir haben gesehen, dass die Extrapolation mit radialen Basisfunktionen folgender Form genügt:

$$\begin{aligned} \hat{Z}(x) &= \sum_{j=1}^{n} a_j \Phi(x - x_i), \qquad x \in D \\ \Leftrightarrow \quad \hat{Z}(x) &= \phi^t a \end{aligned}$$

Hierbei ist $\phi = (\Phi(x - x_1), \ldots, \Phi(x - x_n))^t$.

Weiter gilt (da $A\ a = z$):

$$\begin{aligned} A\ a &= z \\ \Rightarrow \quad a &= A^{-1} z, \qquad A^{-1} \text{ existiert, da } A \text{ pos. definit} \end{aligned}$$

Setzt man das Ergebnis in Formel zur Berechnung der approximierenden Funktion ein, so erhält man:

$$\hat{Z}(x) = \phi^t A^{-1} z$$

und wenn man das mit $\left[\hat{Z}(x) = c^t \; C^{-1} \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \right]$

vergleicht, so stellt man Ähnlichkeiten fest:

6 Ergebnis

$\boxed{\text{Vorhersage}} = \boxed{\begin{array}{l}\text{Funktion der Abstände}\\ \text{zwischen } x \text{ und } x_i\end{array}} \boxed{\text{Matrix}^{-1}} \boxed{\text{Messwerte}}$

Ist $C(h)$ positiv definit und gilt $C(h) \equiv \Phi(h)$, so stimmen die Resultate von Kriging und rad. Extrapolation überein.

$\Rightarrow$ Aufgaben des Simple Krigings auch mit deterministischen Methoden lösbar

Die radiale Extrapolation ist auch ohne die Stationarität zweiter Ordnung anwendbar, i.a. stimmen die Ergebnisse nicht mit denen des Krigings überein.

Also ist die Methode des Simple Krigings ein echter Sonderfall der Extrapolation mit radialen Basisfunktionen.

In der Anwendung verwendet man oft den Krige-Ansatz, da die Parameter der radialen Basisfunktionen nicht mehr bestimmt werden müssen. Diese werden bei der Wahl der Kovarianzstruktur festgelegt.

Der deterministische Ansatz ist allgemeiner und liefert zum Teil auch brauchbare Ergebnisse, wenn die Bedingungen des Simple Krigings nicht erfüllt sind.

7 Anwendung

Erstellen einer Funktion in R, die die Extrapolation vornimmt.

Aufruf:

```
radialFkt(daten, AnzExtrastellen, methode, param1, param2)
```

- daten – Messdatensatz
- AnzExtrastellen – Anzahl der Stellen, an denen extrapoliert werden soll
- methode – anzuwendende radiale Basisfunktion
- param1, param2 – Parameter, mit denen die radiale Basisfunktion aufgerufen werden soll

Ablauf:

- Berechnung eines gleichmäßigen Extrapolationsgitters
- Berechnung der Abstände der Messwerte untereinander sowie von der Extrapolationsstelle.
- Berechnung der Gewichte
- Erstellen und Ausgabe der Extrapolationen

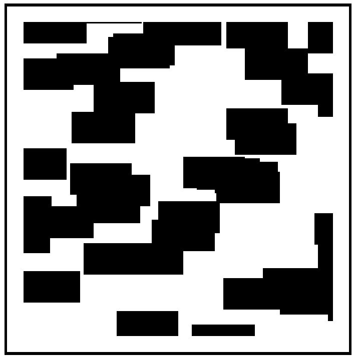
Anwendung auf zwei Testdatensätze, denen ein Boolsches Modell zugrundeliegt.

Aus vorhergegangenen Vorträgen wissen wir, dass die Kovarianzfunktion einem exponentiellen Modell folgen sollte.
(vergleiche Vortrag 4, 6)

Anhang

1 Beispiel A

Das Beispiel stammt aus dem Vortrag 4.
Hier werden die unterschiedlichen Radialen Basisfunktionen auf den Testdatensatz angewandt.



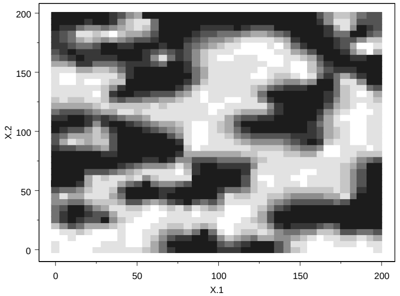
Testdatensatz

min 0

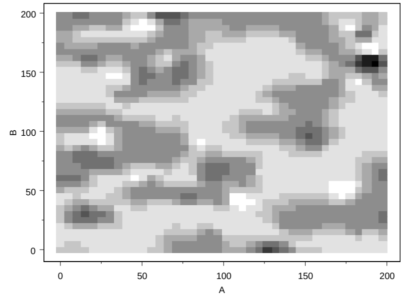
max 1

mean 0.439

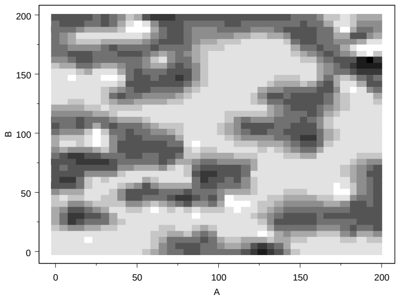
410 Messwerte



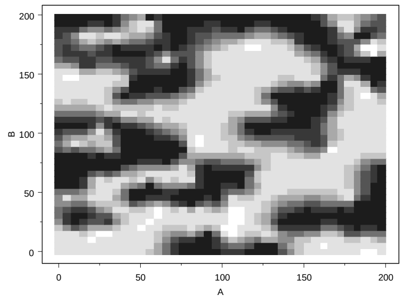
$\varphi(r) = r$
min -0.141
max 1.132
mean 0.475
surface, n=1



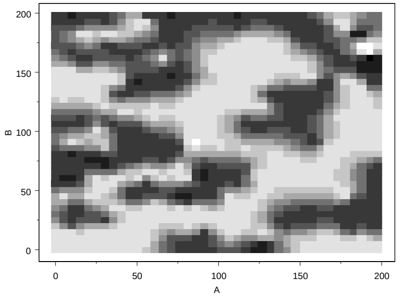
$\varphi(r) = r^3$
min -0.635
max 3.091
mean 0.481
surface, n=2



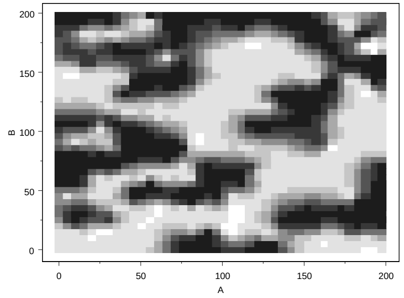
$\varphi(r) = r^2 \log r$
min -0.3689
max 1.932
mean 0.478
thin plate, n=1



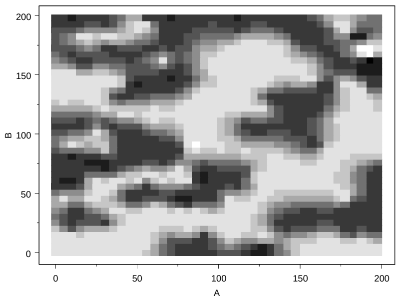
$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4})^{1/2}$
min -0.194
max 1.236
mean 0.475
multiquadric, c=0.5



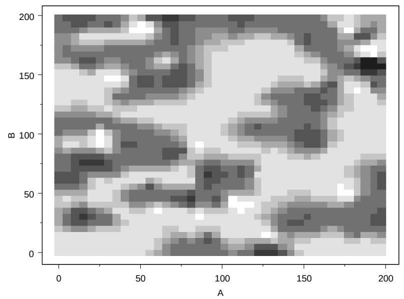
$\varphi(r) = (r^2+1)^{1/2}$
min -0.278
max 1.446
mean 0.475
multiquadric, c=1



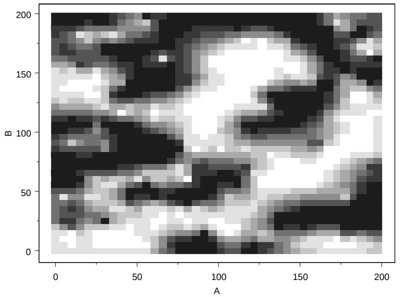
$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4})^{-1/2}$
min -0.194
max 1.236
mean 0.475
shifted surface, n=1, c=0.5



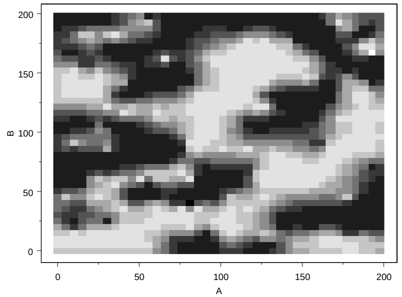
$\varphi(r) = (r^2+1)^{1/2}$
min -0.278
max 1.446
mean 0.476
shifted surface, n=1, c=1



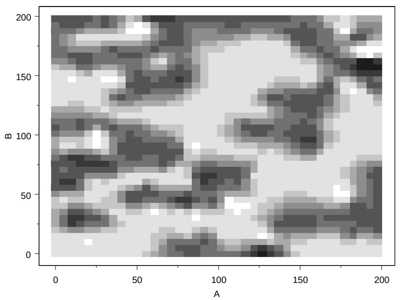
$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4}) \log(r^2 + \frac{1}{4})$
min -0.391
max 2.053
mean 0.478
shifted thin plate, n=1, c=0.5



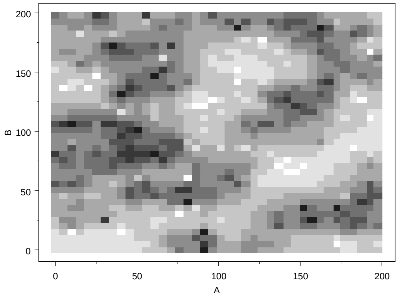
$\varphi(r) = \log(r^2 + \frac{1}{4})$
min -0.030
max 0.993
mean 0.466
shifted logarithm, c=0.5



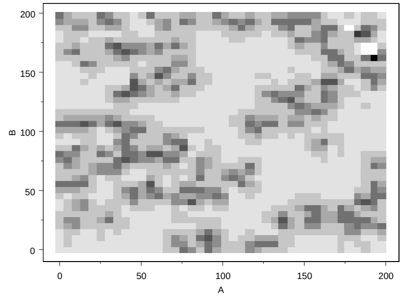
$\varphi(r) = \log(r^2 + 1)$
min -0.165
max 1.029
mean 0.469
shifted logarithm, c=1



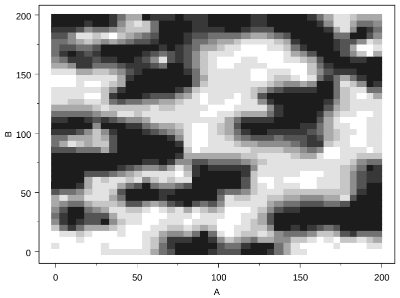
$\varphi(r) = r^2(\log(r-1))$
min -0.369
max 1.932
mean 0.478
Sandwell



$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4})^{-1/2}$
min 0.004
max 0.879
mean 0.333
inverse multiquadric, c=0.5



$\varphi(r) = \exp(-0.05 \cdot r^2)$
min -0.511
max 2.048
mean 0.196
Gaussian, c=0.05



$\varphi(r) = 2 \cdot \exp(-\frac{r}{15})$
min -0.128
max 1.094
mean 0.452
Exponential, c=15, d=2

2 Beispiel B

Das Beispiel stammt aus dem Vortrag 6.

Wieder werden die verschiedenen Radialen Basisfunktionen angewandt.

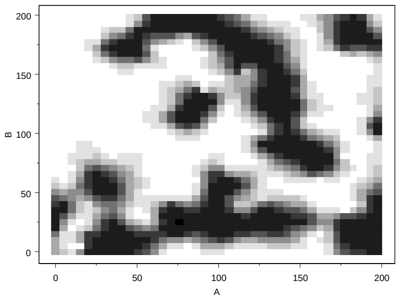
Testdatensatz,

min 0

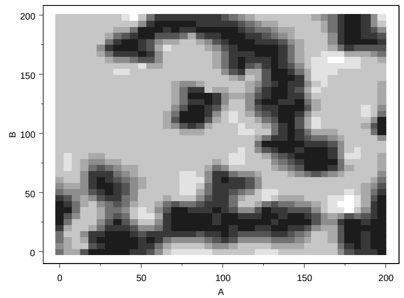
max 1

mean 0.332

413 Messwerte

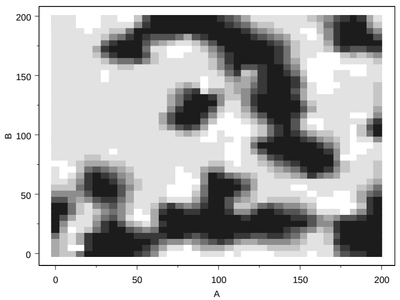


$\varphi(r) = r$
min -0.116
max 1.103
mean 0.354
surface, n=1

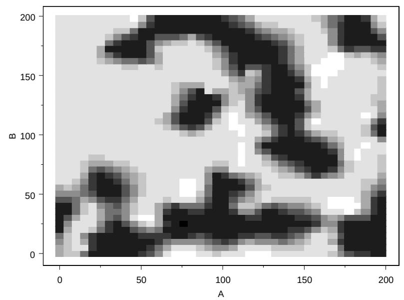


$\varphi(r) = r^2 \log r$

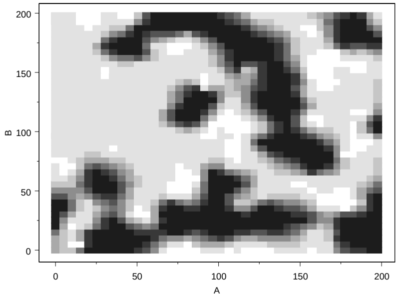
min -0.46
max 1.37
mean 0.361
thin plate, n=1



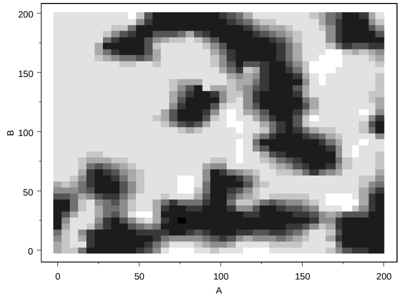
$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4})^{1/2}$
min -0.155
max 1.121
mean 0.355
multiquadric, c=0.5



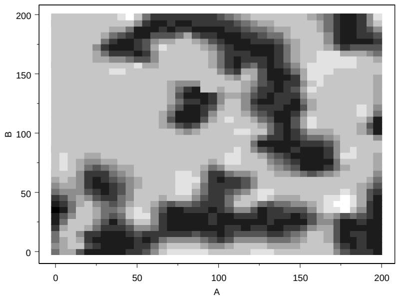
$\varphi(r) = (r^2 + 1)^{1/2}$
min -0.195
max 1.14
mean 0.356
multiquadric, c=1



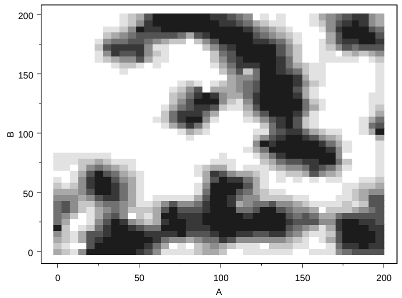
$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4})^{-1/2}$
min -0.155
max 1.121
mean 0.355
shifted surface, n=1, c=0.5



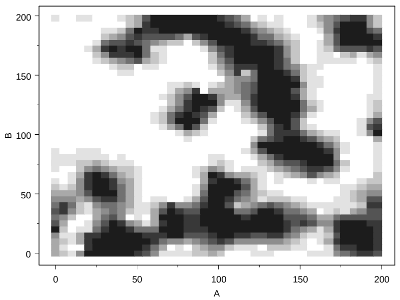
$\varphi(r) = (r^2 + 1)^{-1/2}$
min -0.194
max 1.14
mean 0.356
shifted surface, n=1, c=1



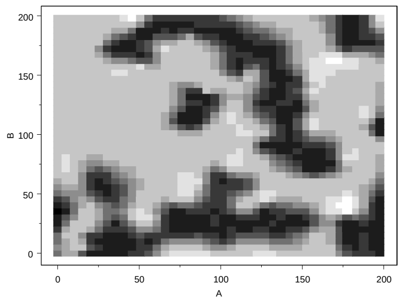
$\varphi(r) = (r^2 + \frac{1}{4})\log(r^2 + \frac{1}{4})$
min -0.469
max 1.375
mean 0.361
shifted thin plate, n=1, c=0.5



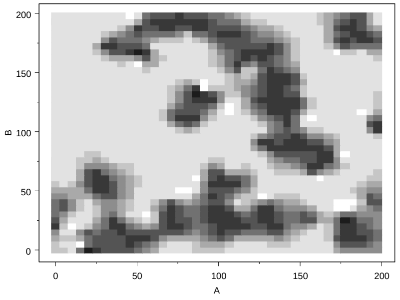
$\varphi(r) = \log(r^2 + \frac{1}{4})$
min 0
max 0.988
mean 0.348
shifted logarithm, c=0.5



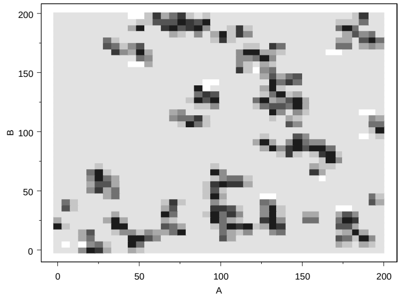
$\varphi(r) = \log(r^2 + 1)$
min -0.029
max 1.003
mean 0.349
shifted logarithm, c=1



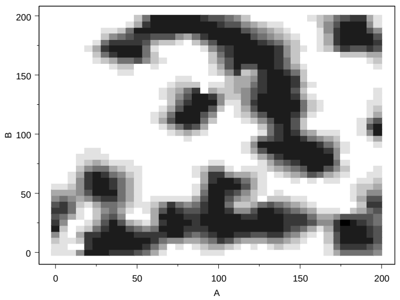
$\varphi(r) = r^2(\log(r-1))$
min -0.46
max 1.37
mean 0.361
Sandwell



$\varphi(r) = (r^2 + 25)^{-1/2}$
min -0.213
max 1.442
mean 0.344
inverse multiquadric, c=5



$\varphi(r) = \exp(-\frac{1}{15} \cdot r^2)$
min -0.133
max 1.088
mean 0.119
Gaussian, c=1/15



$\varphi(r) = 2 \cdot \exp(-\frac{r}{15})$
min -0.083
max 1.084
mean 0.36
Exponential, c=15, d=2

Literatur

[1] W. zu Castell, U. Weller, M. Zipprich, M. Sommer, M. Wehrhan, Kriging considered from the deterministic point of view, Schriften der Afred-Wegener-Stiftung 03/2002, Berlin 2002, S. 249-254

[2] Hans Wackernagel, Multivariate Geostatistics, Springer, 2nd edition

[3] H. Schaeben, S. Lindner, Mathematische Geologie II, Statistik regionalisierter Variablen, Geostatistik, TU Bergakademie Freiberg, Vorlesungsskript Sommersemester 2000

[4] David T. Sandwell, Biharmonic interpolation of GEOS-3 and SEASAT altimeter data, Geophysical Research Letters, Vol. 14, Feb 1987