УДК 519.233

Автоматическая калибровка параметров модели вариограммы

М.М. Горелов, В.С. Свительман, Е.А. Савельева

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

В работе рассматривается задача построения модели пространственной корреляции, оцененной в терминах вариограммы, для двумерного гауссова анизотропного поля. В качестве наиболее удобной была выбрана классическая сферическая модель вариограммы [1]. В случае геометрической анизотропии сферическая модель может быть описана следующей системой уравнений:

$$\gamma_i^*(h) = \begin{cases} c_0 + c\left[\dfrac{3h}{2a_i} - \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{h}{a_i}\right)^3\right] \text{ при } h \le a_i, \\ c_0 + c \text{ при } h > a_i, \end{cases} \tag{1}$$

где a_i — эффективный радиус корреляции в направлении φ_i (φ_i — угол между направлением вариограммы и осью абсцисс). Для всех i точки с радиус-векторами в направлении φ_i длиной a_i лежат на одном эллипсе, обозначим его большую и малую полуоси, как b_1 и b_2 соответственно. Для построения эллипса на вариограммной плоскости требуется набор из пяти параметров: c_0 (наггет), c (плато), b_1, b_2 (большая и малая полуоси) и ϑ (угол между главной осью эллипса и осью абсцисс).

Для описания реальных полей модель должна быть откалибрована относительно эмпирических точек. Иными словами, следует минимизировать целевую функцию, зависящую от пяти переменных (калибруемых параметров) и представляющую собой некую меру близости между моделируемой вариограммной плоскостью и эмпирическими точками.

Допустим, есть набор из n экспериментальных вариограмм для различных направлений φ_i, $i = 1,...,n$. Нужно найти такой набор параметров, при котором модельная вариограммная поверхность $\gamma = \gamma(x, y)$ максимально приблизится к экспериментальным значениям $\gamma_{ij}^* = \gamma^*(\varphi_i, h_j)$.

Эффективный радиус корреляции для i-го направления выражается как длина радиус-вектора точки пересечения эллипса, заданного входными параметрами, с лучом в данном направлении:

$$a_i = \frac{b_1 b_2}{\sqrt{b_1^2 \sin^2(\varphi_i - \vartheta) + b_2^2 \cos^2(\varphi_i - \vartheta)}}. \tag{2}$$

Таким образом, из уравнения (1) можно получить модельные значения вариограмм для тех же точек, в которых имеются экспериментальные данные. Меняя значения вышеописанных пяти параметров и сравнивая получающиеся модельные значения с экспериментальными, нужно найти оптимальный набор параметров, соответствующий лучшему из возможных приближений. Очевидно, что вручную найти минимум функции пяти переменных — непростая и весьма трудоёмкая задача даже в случае сильно гладкой функции. К тому же, требуемые для корректного решения таких задач объёмы вычислений делают ручную калибровку физически невозможной. В решении подобных задач более эффективным будет применение методов автоматической калибровки.

В качестве целевой функции для калибровки вариограмм использовался модифицированный индикатор Кресси [2]:

$$I_c = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{k} \frac{N_i(h_j)}{h_j^2}\left[\gamma_i^*(h_j) - \gamma_i(h_j)\right]^2, \tag{3}$$

где $N_i(h_j)$ — число пар точек i-й вариограммы, по которым вычислялось значение для лага.

Так как размерность поля параметров не позволяет оценить гладкость целевой функции, следует учитывать возможность сходимости алгоритмов оптимизации к локальному минимуму, не являющемуся наилучшим. В связи с этим в задаче калибровки был применён алгоритм роя частиц (Particle Swarm Optimization) [3], основанный на моделировании упрощённого социального поведения стайных животных. В отличие от, например, алгоритма Левенберга-Марквардта, Particle Swarm на тестируемых данных сходится лучше и не требует подбора конфигурации под конкретные данные.

Принцип алгоритма состоит примерно в следующем: задаётся определённое количество частиц, для каждой из которых случайным образом задаются значения оптимизируемых переменных. Для каждой частицы считается целевая функция и сохраняется её лучшее значение для каждой частицы и для всех частиц. На каждом шаге частицам присваиваются случайные скорости движения в поле оптимизируемых переменных в стороны личного лучшего результата и стайного. При этом частицы разными путями пробегают области между уже найденными «хорошими» местами. Значения параметров конфигурации алгоритма были взяты из работы [4]. Технически задача оптимизации решалась с помощью модельно-независимого пакета Ostrich [5].

На рис.1 Представлено искусственно сгенерированное поле, использовавшееся для тестирования калибровки модели и вариограмма в одном из направлений, для которого имелись эмпирические данные. Результат калибровки представляет собой набор значений для пяти параметров используемой модели, которая задаётся уравнениями (1) и (2).

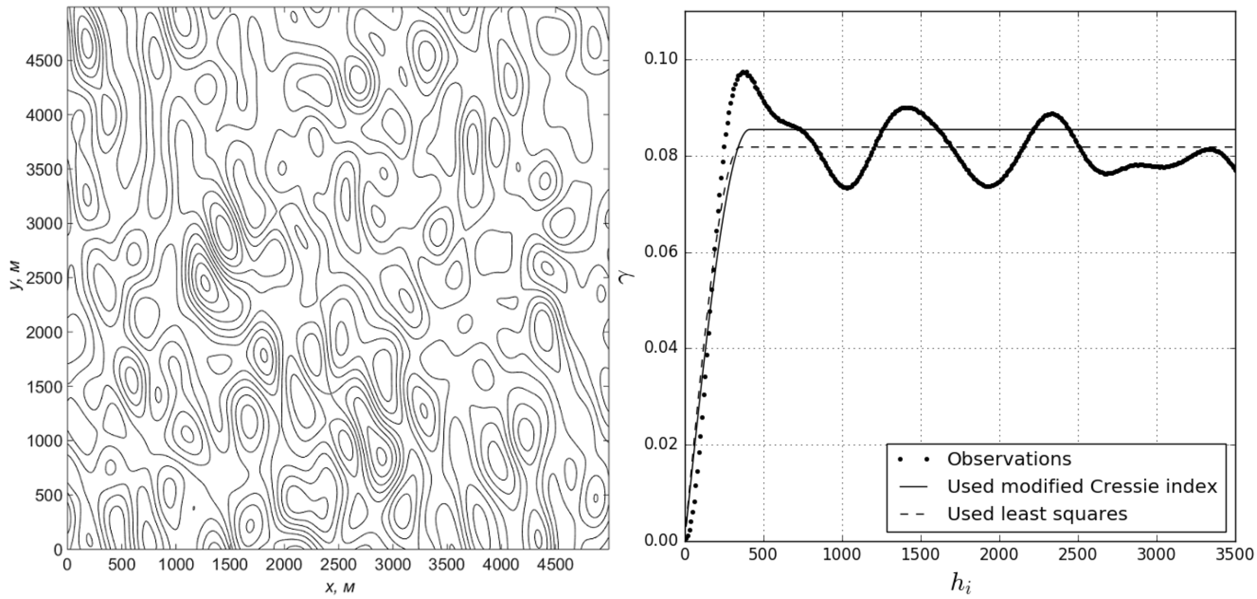

Рис.1 Анизотропное гауссово поле, на котором была применена сферическая модель вариограммы (слева) и вариограмма в направлении 30° от оси абсцисс (справа)

Литература

1. Геостатистика: теория и практика/ Савельева Е.А., Демьянов В.В.; под ред. Р.В. Арутюняна; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН. – М.: Наука, 2010. – 327 с.
2. Zhang X.F., Van Eijkeren J.C.H., Heemink A.W. On the weighted least-square method for fitting a semivariogram model // Computers and Geosciences. — 1995. — Vol. 21, N 4. — P. 605—608.
3. Kennedy, J.; Eberhart, R. (1995). "Particle Swarm Optimization". Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks. pp. 1942–1948
4. Eberhart, R. C., and Shi, Y. (2001). Particle swarm optimization: developments, applications and resources. Proc. Congress on Evolutionary Computation 2001, Seoul, Korea. Piscataway, NJ: IEEE Service Center.
5. OSTRICH — An Optimization Software Toolkit for Research Involving Computational Heuristics. Documentation and User’s Guide v.16.02.10 / L. Shawn Matott, State University of New York at Buffalo Center for Computational Research, 2016. — 77 p.