SCHWENTKER, Friedhelm: Zur Methodik räumlicher Prognosen nach dem Kriging-Ansatz

1. Problemstellung

Mit den ständig wachsenden Einsatzmöglichkeiten der EDV gewinnt der Aufbau räumlicher Informationssysteme insbesondere auch im Bereich der Raumplanung zunehmend an Bedeutung (PETZOLD,1982). Diese Informationssysteme arbeiten auf der Grundlage raumvarianter Daten wie sie etwa Bodenkennwerte oder hydrologisch relevante Variable darstellen. Die entsprechenden Werte werden in der Regel an räumlich ungleichmäßig verteilten Meßstationen erhoben. Räumliche Informationssysteme arbeiten hingegen meist mit gerasterten Daten. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit zur räumlich gleichmäßigen Verdichtung punkthafter Informationen: Die vorhandenen Meßwerte müssen auf Rasterbasis interpoliert werden. Eine weitere Aufgabe stellt sich in der Berechnung flächenbezogener Daten - z.B. des Gebietsniederschlages - auf der Grundlage punktbezogener Daten.

Für die Lösung dieser beiden Aufgaben sind verschiedene Verfahren entwickelt worden, unter denen Trendoberflächenanalysen und die Ermittlung von Gebietsmittelwerten mit Hilfe von Thiessen-Polygonen zu den bekanntesten zählen. Einen Überblick über diese und weitere Methoden gibt STREIT (1981a).

2. Der Kriging-Ansatz

Im folgenden soll der Kriging-Ansatz als eine alternative geostatistische Methode vorgestellt werden. Dieses räumliche Prognoseverfahren, das auf lagerstättenkundliche Arbeiten von KRIGE (1951) zurückgeht, wurde maßgeblich in den 70- und 80-er Jahren von MATHERON (u.a. 1965,1973) weiterentwickelt.

2.1. Räumliche stochastische Prozesse

Ausgangspunkt der Überlegungen ist eine mathematisch-statistische

Begriffsbildung zur formalen Beschreibung raumvarianter Prozesse. Jede in einem zuvor definierten Bereich B mit einem Ortsvektor $\vec{x}$ variierende Variable z wird als regionalisierte Variable $z(\vec{x})$ mit $\vec{x} \in B$ bezeichnet. Ein einfaches Beispiel für eine regionalisierte Variable ist die räumliche Niederschlagsverteilung in einem Flußeinzugsgebiet.

Um statistische Methoden anwenden zu können, faßt man den Variablenwert $z(\vec{x})$ für beliebiges aber festes $\vec{x} \in B$ als Realisation einer Zufallsvariablen $Z(\vec{x})$ auf. Die Menge

$$\{Z(\vec{x}),\ \vec{x} \in B\} \tag{1}$$

bezeichnet man als räumlichen stochastischen Prozeß. Die Menge der punktbezogenen Meßwerte

$$\{z(\vec{x}_i),\ \vec{x}_i \in B \text{ für } i=1,\ldots,n\} \tag{2}$$

kann in diesem Zusammenhang als doppelt endliche Stichprobe dieses Prozesses angesehen werden. In der Regel liegt nur eine Realisation $z(\vec{x}_i)$ der Zufallsvariablen $Z(\vec{x}_i)$ für ein festes $\vec{x}_i$ vor. Somit lassen die Stichprobenwerte keine Rückschlüsse auf die Wahrscheinlichkeitsverteilung von $Z(\vec{x})$ zu. Hieraus ergibt sich die Notwendigkeit, a priori gewisse Annahmen über den räumlichen stochastischen Prozeß (1) zu setzen.

Die Annahme schwacher Stationarität beinhaltet die beiden folgenden Bedingungen:

$$E[Z(\vec{x})] = \text{const} \tag{3a}$$

$$\text{Cov}(Z(\vec{x}),Z(\vec{x}+\vec{h})) = C(\vec{h}),\ \vec{h} = \text{Inkrement-Vektor}. \tag{3b}$$

Diese Forderungen besagen insbesondere, daß der Mittelwert von der Lage unabhängig ist und die Kovarianz nur von der relativen, nicht aber von der absoluten Lage im Raum abhängig ist. Die etwas schwächere Forderung der intrinsischen Hypothese ermöglicht die Definition des Semi-Variogrammes $\gamma(\vec{h})$:

$$E[Z(\vec{x}) - Z(\vec{x}+\vec{h})] = 0 \tag{4a}$$

$$\text{Var}[Z(\vec{x}) - Z(\vec{x}+\vec{h})] = 2\gamma(\vec{h}) \text{ bzw.} \tag{4b}$$

$$E[(Z(\vec{x}) - Z(\vec{x}+\vec{h}))^2] = 2\gamma(\vec{h}), \tag{4c}$$

d.h. $2\gamma(\vec{h})$ ist gleich der mittleren quadratischen Wertedifferenz für die Punktepaare $(\vec{x},\vec{x}+\vec{h})$.

2.2. Berechnung des Schätzwertes

Kehren wir nun zunächst zu den beiden anfangs erläuterten Fragestellungen zurück. Gesucht ist im Fall der räumlichen Interpolation für einen vorgegebenen Punkt $\vec{x}_o$ ein Schätzwert $z_o^* = z^*(\vec{x}_o)$ für den Wert $z(\vec{x}_o)$. Im anderen Fall ist der Schätzwert $z_o^* = z^*(G_o)$ für den Gebietsmittelwert $z(G_o)$ zu bestimmen, wobei G_o das in Frage stehende Gebiet bezeichnet. In beiden Fällen besteht die Ausgangsinformation nur aus der Menge der Meßwerte (2). Als Schätzwert z_o^* wählt man eine Linearkombination der n Meßwerte

$$z_o^* = \sum_{i=1}^{n} a_i z(\vec{x}_i), \tag{5}$$

wobei die Koeffizienten a_i so zu bestimmen sind, daß z_o^* der best mögliche Schätzwert im Sinne eines definierten Gütekriteriums ist. Dieses Gütekriterium besagt, daß der Schätzwert erwartungstreu und optimal im Sinne einer minimalen Fehlervarianz sein soll:

$$E[Z_o - Z_o^*] = 0 \tag{6a}$$

$$\mathrm{Var}[Z_o - Z_o^*] = \text{minimum}. \tag{6b}$$

Die erste Bedingung ergibt

$$\sum_{i=1}^{n} a_i = 1. \tag{7}$$

Um die zweite Bedingung umsetzen zu können, verwendet man einen allgemeineren Satz von MATHERON (1965), der den Zusammenhang zwischen der Fehlervarianz und dem zuvor definierten Variogramm unter Annahme der intrinsischen Hypothese herstellt.
Für die Varianz des Fehlers, der bei der Übertragung des Wertes $z(B_1)$ für einen Bereich B_1 auf einen Bereich B_2 mit dem unbekannten Wert $z(B_2)$ entsteht, gilt:

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}[Z(B_2) - Z(B_1)] &= \frac{2}{|B_1||B_2|} \int_{B_2} dx \int_{B_1} \gamma(x-x')dx' \\ &- \frac{1}{|B_2|^2} \int_{B_2} dx \int_{B_2} \gamma(x-x')dx' \\ &- \frac{1}{|B_1|^2} \int_{B_1} dx \int_{B_1} \gamma(x-x')dx' \end{aligned} \tag{8}$$

Diese Formel vereinfacht sich im Fall der räumlichen Interpolation zu:

$$\mathrm{Var}[Z_o - Z_o^*] = - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_i a_j \gamma(\vec{x}_i - \vec{x}_j) + 2 \sum_{i=1}^{n} a_i \gamma(\vec{x}_i - \vec{x}_o) \tag{9}$$

bzw. bei der Gebietsmittelwertbildung zu:

$$\mathrm{Var}[Z_o - Z_o^*] = -\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_i a_j \gamma(\vec{x}_i-\vec{x}_j) + 2\sum_{i=1}^{n} a_i \frac{1}{|G_o|}\int_{G_o}\gamma(\vec{x}_i-\vec{x})d\vec{x}$$

$$-\frac{1}{|G_o|^2}\int_{G_o} d\vec{x}\int_{G_o}\gamma(\vec{x}-\vec{x}')d\vec{x}'. \qquad (10)$$

Die Minimierung dieser beiden Ausdrücke führt schließlich durch die Einführung eines Lagrange-Multiplikators zu dem folgenden linearen Gleichungssystem

$$S\cdot A = D \qquad (11)$$

mit:

$$S = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \cdots & \gamma_{1n} & 1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ \gamma_{n1} & \cdots & \gamma_{nn} & 1 \\ 1 & \cdots & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \\ \lambda \end{pmatrix} \quad D = \begin{pmatrix} \gamma_{o1} \\ \vdots \\ \gamma_{on} \\ 1 \end{pmatrix}$$

wobei: $\gamma_{ij} = \gamma(\vec{x}_i-\vec{x}_j)$, $\gamma_{oi} = \gamma(\vec{x}_i-\vec{x}_o)$ bzw. $\gamma_{oi} = \frac{1}{|G_o|}\int_{G_o}\gamma(\vec{x}_i-\vec{x})d\vec{x}$

λ = Lagrange-Multiplikator.

Der Lösungsvektor $A = S^{-1}\cdot D$ enthält die zu bestimmenden Kriging-Gewichte a_i.

2.3. Das Variogramm

Es ist somit unmittelbar klar, daß die Bestimmung des Variogrammes $\gamma(\vec{h})$ von zentraler Bedeutung innerhalb des Kriging-Verfahrens ist. Aus den vorhandenen Meßwerten läßt sich das empirische Variogramm

$$g(h) = \frac{1}{2N(\vec{h})}\sum_{i=1}^{N(h)}(z(\vec{x}_i)-z(\vec{x}_i+\vec{h}))^2,$$

mit: $N(\vec{h})$ = Anzahl der Wertepaare $(z(\vec{x}_i),z(\vec{x}_i+\vec{h}))$, für die $\vec{x}_i+\vec{h}$ bzgl. $\vec{x}_i$ ebenfalls ein Bezugspunkt der Stichprobe ist.

berechnen.

Für die Berechnung des empirischen Variogrammes ist es erforderlich, sowohl die Länge als auch die Richtung des Inkrement-Vektors $\vec{h}$ zu diskretisieren, denn zu beliebig vorgegebenem $\vec{h}$ wird i.a. kein Punkt $\vec{x}_i$ aus der Stichprobe existieren, so daß $z(\vec{x}_i+\vec{h})$ als gemessener

Variablenwert vorliegt. Die Diskretisierung wird mit Hilfe einer festzulegenden Distanzschrittweite und der Definition von Sektoren vorgenommen. Auf diese Weise können sektorspezifische empirische Variogramme berechnet werden, die die Identifikation einer anisotropen Struktur des betrachteten räumlichen Prozesses ermöglichen.

Der Kriging-Ansatz setzt allerdings die Kenntnis des theoretischen Variogramms $\gamma(\vec{h})$ voraus. Da das theoretische Variogramm in aller Regel unbekannt ist, ist seine approximative Bestimmung mittels geeigneter theoretischer Variogramm-Modelle notwendig.

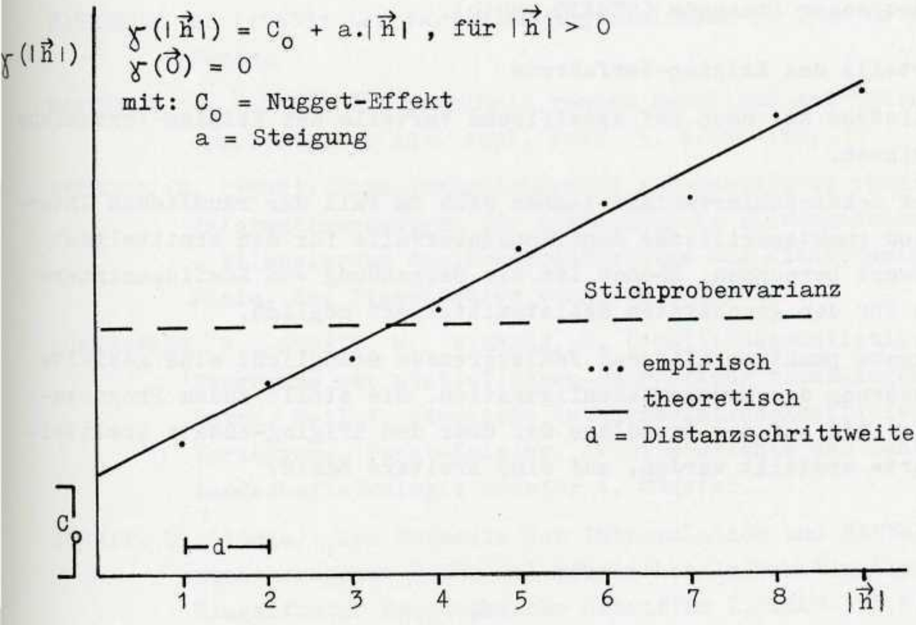

Abb.1:Lineares Variogramm-Modell

Die Abb.1 zeigt ein isotropes, d.h. richtungsunabhängiges empirisches Variogram und das zugehörige lineare Variogramm-Modell. Eine Zusammenstellung möglicher theoretischer Variogramm-Modelle findet sich in DAVID (1977) und DELHOMME (1978).

Die theoretischen Variogramm-Modelle können als Maß für eine dem raumvarianten Prozeß innewohnende räumliche Erhaltensneigung angesehen werden, die in der überzufälligen Konstellation ähnlich hoher Werte an benachbarten Meßpunkten zum Ausdruck kommt. Derartige Persistenzeffekte können als Folge zeitlicher und/oder räumlicher Transfer- und Speicherungsvorgänge von Masse und Energie verstanden werden, die durch endogene Systemmechanismen gesteuert werden oder unter Mitwirkung exogener Variablen entstehen. Ein anderes statistisches Maß zur Erfassung räumlicher Erhaltensneigungen sind räumliche Autokorrelationskoeffizienten. Diese bilden die Grundlage weiterer stochastischer Verfahren zur Modellierung räumlicher stochastischer Prozesse (STREIT,1981b).

3. Vorteile des Kriging-Verfahrens

Abschließend sei noch auf spezifische Vorteile des Kriging-Verfahrens hingewiesen.

Aus der Schätzfehlervarianz lassen sich im Fall der räumlichen Interpolation punktspezifische Konfidenzintervalle für den ermittelten Schätzwert berechnen. Ebenso ist die Berechnung von Konfidenzintervallen für den geschätzten Gebietsmittelwert möglich.

Die Angabe punktspezifischer Fehlergrenzen ermöglicht eine gezielte Verbesserung der Meßpunktekonfiguration. Sie stellt zudem Prognosemodelle, die auf der Grundlage der über den Kriging-Ansatz ermittelten Werte erstellt werden, auf eine breitere Basis.

Literatur

DAVID, M. (1977): Geostatistical ore reserve estimation, Amsterdam.

DELHOMME, J.P. (1978): Kriging in the hydrosciences. Advances in Water Resources 1, S.251-266.

KRIGE, D.G. (1951): A statistical approach to some basic mine evaluation problems on the Witwatersrand. Journal of the Chem. and Metall. Soc. of South Africa 52, S.119-139.

MATHERON, G. (1965): Les Variables Régionalisées et leur Estimation, Paris.

MATHERON, G. (1973): The intrinsic random functions and their applications, Adv. Appl. Prob. 5, S.438-468.

PETZOLD, E. (1982): Einsatzmöglichkeiten EDV-gestützter räumlicher Informationssysteme für hydrologische Planungszwecke - Bilanzierung des Wasserdargebotes auf kleinräumiger Basis. Zur Dissertation vorgelegt, Münster.

SCHWENTKER, F., STREIT, U., WIENEKE, G. (1981): Geostatistik: Fortran-Programme zur statistischen Bearbeitung raumbezogener Daten. Teil 1: Räumliche Autokorrelationskoeffizienten, Variogramm, Punkt-Kriging. Arbeitsberichte des Lehrstuhls Landschaftsökologie Münster 4, Münster.

STREIT, U. (1981a): Zur Methodik der Interpolation und Mittelbildung punktbezogener Daten bei räumlichen Informationssystemen. Klagenfurter Geographische Schriften 2,S.309-333,Klagenfurt.

STREIT, U. (1981b): Analysing spatial data by stochastic methods: Some examples from physical geography. In: BAHRENBERG, G., STREIT, U. (Hrsg.): German quantitative geography. Münstersche Geographische Arbeiten 11, S.35-44, Paderborn.

STREIT, U. (1981c): Kriging - eine geostatistische Methode zur räumlichen Interpolation hydrologischer Informationen. Wasserwirtschaft 71, S.219-223