

土壤水分空间插值的克里金平滑效应修正方法

杨雨亭, 尚松浩, 李 超

(清华大学水利水电工程系水沙科学与水利水电工程国家重点实验室, 北京 100084)

摘要: 地统计学的普通克里金法是研究土壤水分空间变异特性和描绘其空间分布的有效方法。但与其它建立在最小二乘标准上的插值方法一样, 普通克里金法也存在着平滑效应问题, 即估计值的变异程度比实际要小, 从而导致估计值往往不能反映出土壤水分真实的空间变化特征。结合实际的土壤水分监测数据, 采用 Yamamoto 提出的一套针对普通克里金估计值进行后处理的方法, 较好地解决了普通克里金法平滑效应的问题, 在保证局部估计值精度的同时, 重现了土壤含水率在空间的分布与变化特征。

关键词: 土壤水分; 普通克里金法; 平滑效应; 插值方差; 修正方法

中图分类号: S152.7; P628.2 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-6791(2010)02-0208-06

田间土壤含水率分布图的精确绘制对科学指导农业灌溉有着重要意义。然而在实际生产中, 土壤含水率仅仅是在有限的测点上进行测试。那么, 如何根据有限的测点数据进行空间插值, 绘制尽可能反映真实情况的田间土壤含水率分布图, 一直以来都是研究的热点^[1-2]。在各种插值方法中, 克里金 (Kriging) 方法^[3-5]是插值效果较为理想的方法之一。

克里金方法是建立在区域化变量和半变异函数基础上的一系列对有限区域内的区域化变量取值进行线性无偏最小二乘估计的方法, 其中又以普通克里金法 (Ordinary Kriging) 的应用最为广泛。然而, 采用最小二乘的标准虽然可以保证普通克里金法插值的局部误差达到最小 (局部最优), 但是与其它同样采用最小二乘为标准的插值方法一样, 普通克里金法插值的结果仍然不可避免地存在着平滑效应, 即较小的值常常被夸大, 而较大的值往往被低估, 估计值不能反映区域化变量在空间的真实变化特性。在国外, 如何解决这一问题一直都是地统计学研究的热点, 许多学者都试图对这种平滑效应进行修正。随机模拟作为一种以重现区域化变量的空间结构 (全局最优) 为目的的方法, 很好地避免了克里金插值中的平滑效应而得到广泛的应用。但后来的研究发现^[6], 随机模拟的一个致命缺陷是不能保证局部估计的精度, 并且得到的结果也不唯一。Joumel 等^[6]在 Yao^[7]建立的一系列后处理算法的基础上, 发展出了一套对普通克里金估计值的后处理方法, 在牺牲局部估计精度的条件下较好地处理了平滑效应问题。Olea 等^[8]综合了传统的克里金估计与随机条件模拟的特点, 提出了补偿克里金方法, 但该方法的结果在全局最优性上不如随机模拟, 在局部精度上也低于传统的克里金估计。Goovaert^[9]认为将局部估计值误差最小作为目标函数应用到随机模拟中可以同时满足局部估计精度和全局最优的要求。Yamamoto^[10-12]结合 Olea 方法的思想, 提出了一套对克里金估计值的后处理方法, 较好地解决了上述问题, 在保证局部估计值精度的基础上, 再现了区域化变量的空间变化特性。

Yamamoto 的后处理方法提出的时间较短, 在不同领域的验证及应用也很少。本文将这种方法应用于土壤水分的空间插值估计中, 研究的目的在于验证该方法在土壤水分空间插值中的适用性, 并通过对比修正前后的土壤水分普通克里金估计结果, 检验该后处理方法的有效性, 为今后的土壤水分空间变异性研究提供线索。

收稿日期: 2009-05-15

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50579027); 教育部新世纪优秀人才支持计划资助项目 (NCET-06-0059)

作者简介: 杨雨亭 (1986 -), 男, 四川泸州人, 博士研究生, 主要从事水文水资源研究。

E-mail: yy08@mails.tsinghua.edu.cn

通信作者: 尚松浩, E-mail: shangsh@tsinghua.edu.cn

1 材料和方法

1.1 普通克里金法

对于区域化的随机变量 $Z(x)$, 待估点变量的估计值可以认为是在给定范围内全部实测点值的线性组合。

$$Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n w_i Z(x_i) \quad (1)$$

式中 $Z^*(x_0)$ 为待估点变量的估计值, w_i 为克里金权重值; n 为给定范围内实测点的个数; $Z(x_i)$ 为各实测数据点值。

为保证估计量的无偏性, 必须使得

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1 \quad (2)$$

此时, 估计量的误差方差为

$$\begin{aligned} D[Z(x_0) - Z^*(x_0)] &= \\ D\{Z(x_0) - 2 \sum_i w_i \text{cov}[Z(x_i), Z(x_0)] + \sum_i \sum_j w_i w_j \text{cov}[Z(x_i), Z(x_j)]\} \end{aligned} \quad (3)$$

最小化式 (3), 便得到普通克里金方程组, 即

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n w_j \text{cov}[Z(x_i), Z(x_j)] + \mu = \text{cov}[Z(x_i), Z(x_0)] \\ \sum_{j=1}^n w_j = 1 \end{cases} \quad (4)$$

式中 $\text{cov}[Z(x_i), Z(x_j)]$ 为点 x_i 与 x_j 的协方差; μ 为拉格朗日参数。

通过求解线性方程组 (4) 便可得到 Kriging 权重值 以及拉格朗日参数 μ , 将 代入式 (1) 便可求得待估点变量值的估计值。

此时的误差方差, 也称为克里金方差为

$$D^2 = C(0) - \sum_i w_i C(x_i - x_0) \mu \quad (5)$$

式中 $C(0)$ 为空间距离为 0 的两点间的协方差。

1.2 克里金插值平滑效应的 Yamamoto 修正法

如前所述, 利用普通克里金进行空间插值时会产生平滑效应。Yamamoto 在分析了产生这种平滑效应原因的基础上, 提出了一套对普通克里金估计值进行后处理的方法, 较好地修正了平滑效应的影响。

由于克里金方差仅仅考虑了样本点与待估点位置在空间的几何分布特征, 而忽视了待估点周围变量值对其大小的影响。所以, Kriging 方差并不能真实地反应估计值误差在空间的分布情况。鉴于此, 定义插值方差^[11]为

$$S_0^2 = \sum_{i=1}^n w_i [Z(x_i) - Z^*(x_0)]^2 \quad (6)$$

式中 w_i 为克里金权重值。

从式 (6) 中可以看出, 插值方差的大小与给定范围内实测点的数值大小直接相关; 并且由于引入了克里金权重值, 插值方差还受给定范围内实测点空间位置的影响。所以, 可以认为插值方差比克里金方差更能反映实际的估计误差变化情况, 对插值方差求取期望。

$$E[S_0^2] = \sum_i w_i D[Z(x_i)] - D[Z^*(x_0)] = D[Z(x)] - D[Z^*(x_0)] = 0 \quad (7)$$

该期望值可以看作是由于平滑效应所导致的误差方差的亏缺值。

通过交叉验证分析可以得到真实值与普通克里金估计值之间的误差, 定义为

$$E_T = [Z^*(x_0) - Z(x_0)] \quad (8)$$

利用上述概念, 采用以下 4 个步骤对普通克里金估计值做平滑效应修正:

(1) 利用交叉验证分析求得实测点的插值标准差 (插值方差的平方根) S_0 和 E_T 值, 并将之转换为插值标准差数, 即

$$N_{S_0} = \frac{-E_T}{S_0} \quad (9)$$

(2) 利用普通克里金方法对待估点的插值标准差数进行插值。注意在插值时应尽可能少地利用实测数据点, 因为插值所引起的平滑效应大小与插值时所利用实测数据的多少成正比。

(3) 利用普通克里金方法对待估点变量进行插值, 并计算待估点变量的插值标准差 S_0 。在插值时必须保证所利用的实测点数目与步骤 (1) 中的相同。

(4) 对待估点估计值进行转换处理, 如下:

$$Z^{**}(x_0) = Z^*(x_0) + N_{S_0}(x_0) \cdot S_0 \quad (10)$$

式中 $Z^{**}(x_0)$ 为修正后的普通克里金估计值。

普通克里金估计值在经过式 (10) 修正后, 还必须检查修正后的估计值是否落在给定范围内实测点的数值范围内。如果超出了这个范围, 还需要对修正后的估计值做二次修正。具体方法如下:

如果 $Z^{**}(x_0) > Z_{\max}$ 或 $Z^{**}(x_0) < Z_{\min}$, 则 $Z^{**}(x_0) = Z^*(x_0) + f$ (11)

式中 当 $N_{S_0} < 0$ 时, $f = -[Z^*(x_0) - Z_{\min}]$; 当 $N_{S_0} > 0$ 时, $f = Z_{\max} - Z^*(x_0)$; f 是一个优化因子, 以保证修正后值的方差尽可能接近样本的方差^[12]。

将经过上述二次修正的估计值与所有的实测样本点进行对比, 检查该值是否落在全部样本点数值范围内。若超出该范围, 将再次进行修正, 即

$$Z^{**}(x_0) = \begin{cases} S_{\max}, & Z^{**}(x_0) > S_{\max} \\ S_{\min}, & Z^{**}(x_0) < S_{\min} \end{cases} \quad (12)$$

上式保证了修正后普通克里金估计值的平均值与样本的平均值尽量保持一致。

1.3 田间试验布置

田间土壤含水率的采样工作在山西省临汾市汾西水利管理局灌溉试验站北侧农田进行, 选择 6 块条田中的中间 4 块作为试验田。测点采用 8 行、8 列、间距 30 m 布置 (共 64 个测点), 同时在第 4 行、第 4 列相邻 2 个测点中间增加一个测点 (共 14 个测点), 合计 78 个测点, 具体位置见图 1。土壤取样在 2008 年 4 月 25 日进行, 取样深度为 20~40 cm, 采用烘干法测定土壤含水率, 测定结果见图 1。

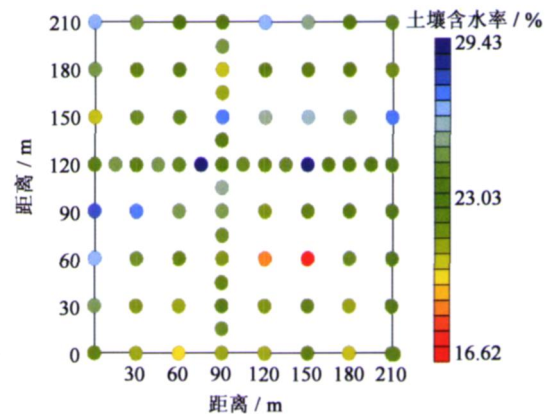


图 1 试验点空间位置及实测土壤含水率
Fig.1 Spatial location of the sampling points and the measured soil moisture

2 结果与分析

2.1 田间土壤含水率普通克里金插值

对于 20~40 cm 土壤层平均含水率, 利用最近 4 点的实测数据采用普通克里金法进行插值估计, 插值的空间精度为 5 m, 即在每两个实测点间插入 5 个估计值, 总计 1764 个估计值, 实验半变异函数采用球状模型进行拟合 ($h = 66$ m, $C_0 = 0$, $C = 5.3$), 插值结果如图 2 所示。

对比实测土壤含水率和经过普通克里金法插值后的土壤含水率的统计分析结果(表 1),可以看出: 实测土壤含水率与普通克里金估计的土壤含水率均值几乎保持不变,表明了普通克里金的估计满足无偏性要求;

实测土壤含水率的标准差明显大于普通克里金估计土壤含水率的标准差,这反映出在利用普通克里金法进行空间插值时,会产生比较明显的平滑效应,导致估计值的变异程度小于实际情况。极差的锐减同样能够说明平滑效应的存在; 土壤含水率频率分布由实测值的正偏变为估计值的负偏,也说明单纯利用普通克里金法对土壤水分进行空间插值的结果并不能反映真实的土壤水分空间分布特性。

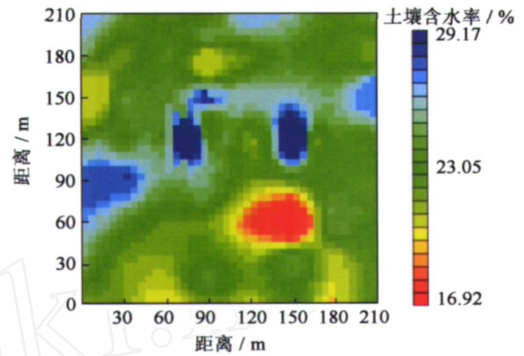


图 2 普通克里金插值后的土壤含水率分布图

Fig. 2 Image of ordinary Kriging estimates for soil moisture

表 1 土壤含水率的实测值、普通克里金估计值及修改克里金估计值的统计分析

Table 1 Statistical summaries for distributions of sampling points, ordinary Kriging estimates and corrected ordinary Kriging estimates of soil moisture

样本	样本数	均值 / %	中位数 / %	标准差 / %	极差 / %	偏度	最大值 / %	最小值 / %
实测样本	78	23.23	23.23	2.163	12.80	0.187	29.40	16.60
普通克里金估计值	1764	23.12	23.23	1.382	9.42	-0.271	27.47	18.05
修正后的估计值	1764	23.23	23.23	2.163	12.25	0.004	29.23	16.98

2.2 对平滑效应进行修正

针对上述普通克里金估计结果,采用式(6)~式(12)进行平滑效应修正,其中优化因子为 0.95。修正后的土壤含水率分布图及其统计特性分别见图 3 与表 1。

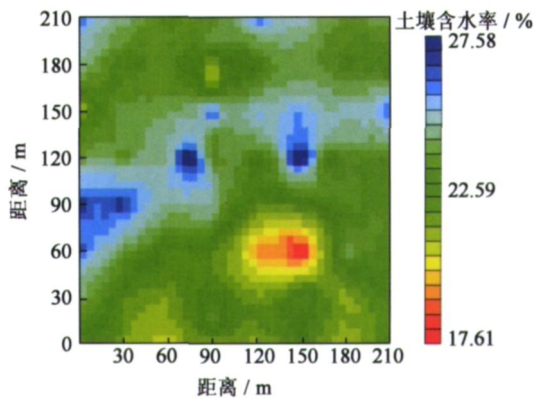


图 3 平滑效应修正后的土壤含水率分布图

Fig. 3 Image of smoothing corrected ordinary Kriging estimates for soil moisture

修正后的土壤含水率均值与实测土壤含水率均值相等,这说明该修正方法仍然保持了普通克里金无偏估计的特性; 经过修正后,土壤含水率的标准差较之前有了较大提升,并与实测土壤含水率的标准差几乎相等。同样,极差的变化也表现出同一趋势; 修正后的土壤含水率分布同实测值一样表现出轻微的正偏,并且其它统计量也与实测值十分接近。上述 3 点均很好的表明经过修正后的土壤含水率估计值基本能够反映田间土壤含水率真实的空间分布状况。

为了更好的说明修正后的估计值较普通克里金估计值更能真实地反映土壤含水率在空间的分布特征,重新绘制了二者的频率分布直方图(图 4)以及实验半变异函数(图 5),并将之与实测样本进行了对比。

在修正过程中,计算得到由于平滑效应所引起的估计值误差方差亏损的期望值达到了 2.95,而样本方差为 4.68,克里金方差仅为 1.91,这一方面说明了对普通克里金估计进行平滑效应修正的必要性,另一方面也说明采用插值方差来描绘由平滑效应导致的误差方差亏损是比较合理的。修正后的土壤含水率分布落在 3 倍插值方差以外区域的值有 21 个,占全部估计值的 1.12%。此外,经过初次修正后的估计土壤含水率位于给定范围内实测土壤含水率值域内的比例为 89.23%,分别仅有 95 个估计值大于或小于实测土壤含水率的数值范围,而经过二次修正后的土壤含水率则全都落在实测样本的数值范围内,这表明所选样本的代表性较好。

另外,通过对比实测土壤含水率和经过对平滑效应修正后的土壤含水率的统计特性(表 1)可以看出:

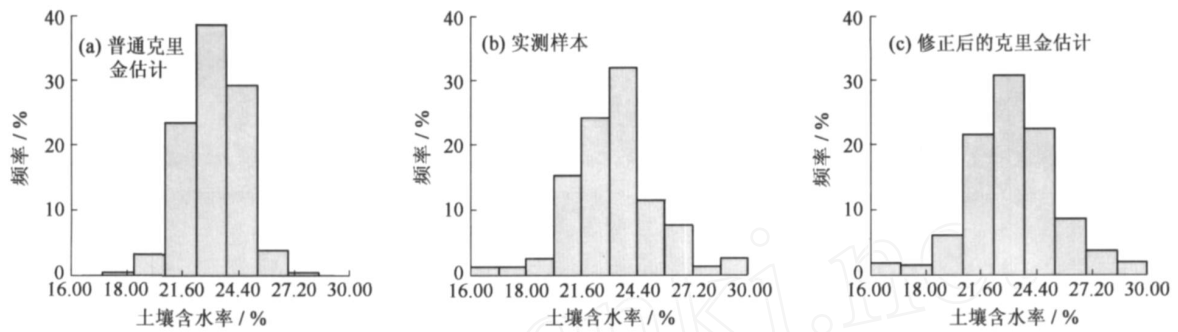


图 4 土壤含水率频率分布直方图

Fig. 4 Soil moisture frequency distribution histograms

从图 4 中可以清楚地看出, 普通克里金法估计的土壤含水率频率分布直方图被限制在一个较窄的区间内, 这与实测值的频率分布直方图有较大出入, 而修正后的土壤含水率频率分布直方图则与实测的更加接近。同时, 由于修正后的克里金估计值重现了土壤含水率在空间的变化特性, 使得修正后土壤含水率估计值的实验半变异函数与实测样本的实验半变异函数十分吻合, 但未经修正的估计值实验半变异函数则与实测样本的相差较远(图 5)。此外, 通过对比 3 组实验半变异函数拟合模型的参数(均采用球状模型进行拟合)也可以看出(表 2), 未经修正处理的土壤含水率估计值在空间中的变化幅度(即基台值与块金值之差)较修正之后要小很多, 这也从另一个侧面反映出利用普通克里金法在进行空间插值时所具有的平滑效应。

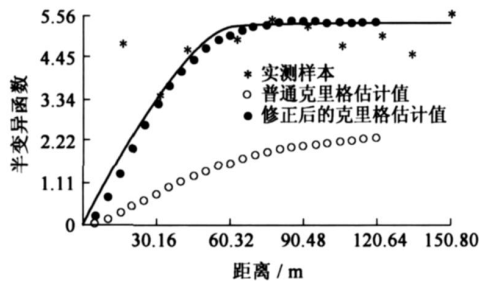


图 5 不同样本的半变异函数

Fig. 5 Sem-ivariograms for the different sampling soil moistures

表 2 实验半变异函数拟合模型参数(球状模型)

Table 2 Parameters for fitted spherical models of experimental semivariograms

样本	块金值 (C_0)	基台值 (C)	变程 h/m
实测样本	0	5.3	66
普通克里金估计值	0	2.6	122
修正后的估计值	0	5.5	81

3 结 论

结合实测土壤水分数据, 采用 Yamamoto 提出的对普通克里金估计值进行后处理的方法对土壤水分的克里金估计值进行消除平滑效应的处理。从处理的结果来看, 普通克里金插值所带来的平滑效应得到了较好的修正, 土壤水分的空间变化特性也得到了较为真实的重现。

由于插值方差的期望值实际上是对由于平滑效应所带来的估计值方差亏缺的精确估计, 所以经过本方法修正后估计值的精度是可以得到保证的。从二者的统计特性中也能反映出修正后的土壤水分估计值具有较高的反映真实值的能力。

本文只利用农田尺度的土壤水分取样结果对 Yamamoto 修正法进行了验证和应用。对于不同尺度的土壤水分及其它空间要素, 还需要进一步检验该方法的有效性。

致谢: 感谢巴西圣保罗大学 Jorge K. Yamamoto 教授提供的 Geovisual System 4.0 及使用指导, 山西汾西水利管理局王红全等同志在田间取样工作中给予的大力帮助。

参考文献:

- [1] 代俊峰, 崔远来. 灌溉水文学及其研究进展 [J]. 水科学进展, 2008, 19(2): 294-300. (DA I Jun-feng, CUI Yuan-lai. Progress in study of the irrigation hydrology[J]. Advances in Water Science, 2008, 19(2): 294-300. (in Chinese))
- [2] 史海滨, 陈亚新. 线性非平稳型农田土壤水分信息空间变异性及预测研究 [J]. 农业工程学报, 1996, 12(3): 78-82. (SHI Hai-bin, CHEN Ya-xin. Spatial variability and estimation of information of linear-nonstationary soil moisture in farm field [J]. Transactions of the CSAE, 1996, 12(3): 78-82. (in Chinese))
- [3] 徐英, 陈亚新, 王俊生, 等. 农田土壤水分和盐分空间分布的指示克里格分析评价 [J]. 水科学进展, 2006, 17(4): 477-482. (XU Ying, CHEN Ya-xin, WANG Jun-sheng, et al. Using indicator Kriging to analyze and evaluate spatial distributions of soil water and salt in field [J]. Advances in Water Science, 2006, 17(4): 477-482. (in Chinese))
- [4] 胡克林, 李保国, 陈德立, 等. 农田土壤水分和盐分的空间变异性及其协同克里格估值 [J]. 水科学进展, 2001, 12(4): 460-466. (HU Ke-lin, LI Bao-guo, CHEN De-li, et al. Spatial variability of soil water and salt in field and their estimations by the CoKriging [J]. Advances in Water Science, 2001, 12(4): 460-466. (in Chinese))
- [5] GOOVAERTS P. Geostatistics for natural resources evaluation [M]. New York: Oxford University Press, 1997.
- [6] JOURNAL A, KYR AKD IS P C, MAO S. Correcting the smoothing effect of estimators: a spectral postprocessor [J]. Mathematical Geology, 2000, 32(7): 787-813.
- [7] YAO T. Conditional spectral simulation with phase identification [J]. Mathematical Geology, 1998, 30(3): 258-308.
- [8] OLEA R, PAWLOW SKY V. Compensating for estimation smoothing in Kriging [J]. Mathematical Geology, 1996, 28(4): 407-417.
- [9] GOOVAERTS P. Accounting for estimation optimality criteria in simulated annealing [J]. Mathematical Geology, 1998, 30(5): 511-534.
- [10] YAMAMOTO J K. Correcting the smooth effect of ordinary Kriging estimates [J]. Mathematical Geology, 2005, 37(11): 69-94.
- [11] YAMAMOTO J K. An alternative measure of reliability of ordinary kriging estimates [J]. Mathematical Geology, 2000, 32(4): 489-509.
- [12] YAMAMOTO J K. On unbiased backtransform of lognormal kriging estimates [J]. Computational Geoscience, 2007, 11: 219-234.

Correcting the smoothing effect of ordinary Kriging estimates in soil moisture interpolation *

YANG Yu-ting, SHANG Song-hao, LI Chao

(State Key Laboratory of Hydrosience and Engineering, Department of Hydraulic Engineering,

Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Ordinary Kriging of geostatistics is an effective tool in studying the spatial variability of soil moisture and describing its spatial distribution. Like other interpolation methods based on the criterion of least-squares, ordinary Kriging estimates present a serious inherent drawback well known as the smoothing effect with decreased variation of estimates. In this study, the post-processing approach of Yamamoto is used to correct the smoothing effect of ordinary Kriging estimates in observed soil moisture interpolation. The result shows that the Yamamoto's approach can effectively correct the smoothing effect, and the real soil moisture spatial distributions can thus be preserved without losing local accuracy.

Key words: soil moisture; ordinary Kriging; smoothing effect; interpolation variance; correcting method

* The study is financially supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 50579027) and NCET Program of the Ministry of Education of China (No. NCET-06-0059).