УДК 519.246:622.1

ГЕОСТАТИСТИЧЕСКИЙ СМЫСЛ НЕОПРЕДЕЛЕННОГО МНОЖИТЕЛЯ ЛАГРАНЖА В МЕТОДАХ ОРДИНАРНОГО И ДВОЙНОГО КРИГИНГА

Степанов Дмитрий Юрьевич[1],
sdu@ispms.ru

Шестаков Валерий Владимирович[2],
valeriy.shestakov@inbox.ru

Гергет Ольга Михайловна[2],
gerget@tpu.ru

[1] Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
Россия, 634055, г. Томск, пр. Академический, 2/4.

[2] Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

Актуальность. *При разработке новых методов объемного моделирования вещественного состава геологических сред по данным скважинных и наземных наблюдений ранее авторы выдвинули предположение о возможности альтернативной оценки ошибки с помощью множителя Лагранжа. На практике, в силу малого количества скважинных измерений и большого расстояния между скважинами, важно не только использовать эффективную модель среды, но и оценить ее точность в межскважинном пространстве. Использование простых и понятных оценок точности моделирования является залогом снижения рисков принятия неверного решения по последующему бурению.*

Метод неопределенных множителей Лагранжа используется при решении экстремальных задач с ограничениями типа равенства. В таких науках, как экономика, статистическая и классическая механика в множители Лагранжа вкладывается экономический или физический смысл, и он приобретает практическое значение. Однако в геостатистике при решении задачи выбора оптимальных методов интерполяции пространственных данных от множителя Лагранжа избавляются на первых этапах решения систем линейных уравнений. В связи с этим отсутствуют как аналитические, так и прикладные исследования его значения.

Цель: *выяснить смысл множителя Лагранжа при решении систем ординарного и двойного кригинга; разработать новые способы получения нормированных оценок ошибки геостатистического моделирования; провести исследования полученных выражений на реальных материалах, а именно, при решении задач прогноза вещественного состава геологических сред.*

Методы: *ординарный кригинг, двойной кригинг, метод неопределенных множителей Лагранжа, метод Крамера.*

Результаты. *Для проведения исследований предложено в модель набора известных значений прогнозируемого параметра добавить неизвестную составляющую. На основе этой модели проведены аналитические и численные исследования, которые привели к новым выражениям, связывающим вес неизвестной составляющей и ковариационные свойства измерений с множителем Лагранжа. Предложены оценки весовой функции неизвестной составляющей. На примере реальных данных для решения задачи прогноза вещественного состава геологических сред показана практическая значимость множителя Лагранжа при анализе ошибок моделирования.*

Ключевые слова:
Моделирование параметров геологической среды, ошибки моделирования, геостатистика, кригинг, неопределенные множители Лагранжа, статистические оценки.

Введение

Геостатистические методы активно используются в практике геолого-геофизических работ. Несмотря на наличие хороших теоретических работ по анализу их ошибок, статистический анализ редко применяется при моделировании реальных геологических сред. Возможно, это связано с желанием прикладных специалистов оперировать простыми и понятными цифрами. Традиционно проблемы анализа ошибок должны решаться путем перехода от анализа среднего значения квадрата ошибки к анализу среднеквадратической ошибки или нормированной среднеквадратической ошибки. Так, в работе [1] приводится описание анализа ошибок метода двойного кригинга и выдвигается предположение о связи множителя Лагранжа с ошибкой моделирования. Метод имеет общий характер, но разрабатывался специально для решения задач объемного моделирования петрофизических свойств геологических сред. В отличие от других геостатистических методов, метод двойного кригинга объединяет две модели: первую, построенную по данным петрофизических измерений в скважинах, и вторую, построенную по данным наземных сейсмических наблюдений. В данном случае вопрос оценки точности моделирования может быть решен классическим подходом, т. е. оценкой дисперсии кригинга. Однако этот подход опирается на предположение о несмещенности оценки прогнозного значения, и в противном случае анализ дисперсии кригинга дает неверную интерпретацию. Для ординарного кригинга и, возможно, для других геостатистических методов анализ смещённости прогнозного значения не даст результатов ввиду отсутствия дополнительной информации в области интерполяции. Но для метода двойного кригинга, где сейсмические данные дополняют модель скважинных измерений, такой анализ позволяет по-

DOI 10.18799/24131830/2022/8/3652

строить новую оценку точности моделирования параметров среды, обладающую большей детальностью.

Экстремальные задачи занимают достаточно большое место в практике вычислительных методов. В ситуации, когда необходимо решать линейные, нелинейные и дифференциальные уравнения с дополнительными ограничениями типа равенства, часто используют метод неопределенных множителей Лагранжа [2–4]. В литературе большое внимание уделяется результатам применения этого метода в различных областях исследований и разработок. Так, в работе [5] приводится большой ряд примеров внедрения метода при решении задач статической механики, классической механики, экономики, инженерии и т. п. Отмечается, что там, где были проведены исследования, смысл множителей Лагранжа всегда тесно связан со смыслом равенств-ограничений. Например, в экономике множители Лагранжа связывают со скоростью изменения оптимизируемой величины по отношению к некоторому параметру вычисления [4–7]. В других областях интерпретация физического значения множителей Лагранжа часто остается за рамками исследований. Геостатистика в этом плане не является исключением: в попытке найти оптимальные методы интерполяции пространственных данных от множителя Лагранжа избавляются на первых этапах решения систем линейных уравнений [8–12]. В данной работе приводится исследование смысла множителя при решении систем кригинга и возможности его использования для оценки точности интерполяции.

Общие положения кригинга

Основным предметом анализа геостатистики являются пространственные переменные, т. е. переменные с координатной привязкой. Примером пространственной переменной $z(\vec{\rho})$ являются параметры геологической среды, сейсмические атрибуты, объем выброса выхлопных газов и т. д. В геостатистике оценка неизвестной случайной пространственной переменной $Z(\vec{\rho})$ рассчитывается с использованием ограниченного набора известных значений z_i, измеренных в точках пространства $\vec{\rho}_i\ (i=\overline{1,N})$ и попавших в пределы некоторого геометрического поля. В рамках ординарного кригинга вводится предположение, что внутри этого поля можно восстановить значение пространственной переменной путем весового суммирования [8]:

$$\hat{Z}(\vec{\rho}) = \sum_{i=1}^{N} w_i(\vec{\rho})\, z_i, \qquad (1)$$

где $w_i(\vec{\rho})$ – весовые функции. Среднее значение квадрата ошибки оценки $\hat{Z}(\vec{\rho})$ можно записать в следующем виде [8, 11]:

$$\sigma^2_{\text{ОК}}(\vec{\rho}) = M\left[\left(Z(\vec{\rho}) - \hat{Z}(\vec{\rho})\right)^2\right] -$$
$$-\psi^2 - 2\sum_{j=1}^{N} w_j(\vec{\rho}) c_{j0}(\vec{\rho}) + \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} w_i(\vec{\rho}) w_j(\vec{\rho}) c_{ji}, \qquad (2)$$

где $c_{ji}=M[z_j z_i]$ – ковариации, определяемые значениями параметра в точках измерений; $c_{j0}(\vec{\rho}) = M\left[z_j Z(\vec{\rho})\right]$ – функция ковариации, определяемая значениями параметра в точке прогноза $\vec{\rho}$ и точках измерений; $\psi^2 = M\left[Z^2(\vec{\rho})\right]$ – вариация прогнозируемого поля.

Существует бесконечное множество равновероятных оценок $\hat{Z}(\vec{\rho})$, из всего этого множества необходимо выбрать одну единственную, удовлетворяющую некоторым критериям. В методе кригинга оценка $\hat{Z}(\vec{\rho})$ выбирается таким образом, чтобы она являлась несмещенной и удовлетворяла условию минимума среднего значения квадрата ошибки (2). Условие несмещенности достигается путем наложения на весовые функции ограничения [8, 11]:

$$\sum_{i=1}^{N} w_i(\vec{\rho}) = 1. \qquad (3)$$

При соблюдении ограничения (3) оценка (1) обладает нулевой ошибкой смещения и выражение (2) можно расценивать как *дисперсию ординарного кригинга* [11].

Если верно предположении о непрерывной дифференцируемости $\sigma^2_{\text{ОК}}(\vec{\rho})$ и $w_i(\vec{\rho})$, то задача оценки $\hat{Z}(\vec{\rho})$ становится классической задачей оптимизации с ограничением типа равенства и решается методом множителей Лагранжа. Функция Лагранжа в нашем случае примет вид:

$$L(\vec{\rho}) = \psi^2 - 2\sum_{j=1}^{N} w_j(\vec{\rho}) c_{j0}(\vec{\rho}) +$$
$$+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} w_i(\vec{\rho}) w_j(\vec{\rho}) c_{ji} + \mu(\vec{\rho})\left(\sum_{i=1}^{N} w_i(\vec{\rho}) - 1\right), \qquad (4)$$

где $\mu(\rho)$ – неопределенный множитель Лагранжа. Задача минимизации выражения (4) решается путем его дифференцирования относительно каждого $w_i(\rho)$и $\mu(\rho)$ и приравнивания их к нулю. В результате образуется система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) – *система уравнений ординарного кригинга* следующего вида [8, 11]:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{N} w_i(\vec{\rho}) c_{ji} + \mu(\vec{\rho}) = c_{j0}(\vec{\rho}),\ j = \overline{1,N}, \\ \sum_{i=1}^{N} w_i(\vec{\rho}) = 1. \end{cases} \qquad (5)$$

При решении системы (5) во многих работах, начиная с работ Ж. Матерона, значение множителя Лагранжа игнорируется и в дальнейшем не рассматривается, т. к. «не представляет интереса». Если решение системы (5) нетривиально, тогда, в соответствии с методом Крамера, неизвестные СЛАУ могут быть получены с помощью определителя основной матрицы СЛАУ C и определителя матрицы $C_i(\vec{\rho})$, полученной путем замены i-го столбца C на столбец свободных членов [1]:

$$w_i(\vec{\rho}) = \frac{\det(C_i(\vec{\rho}))}{\det(C)},\ i = \overline{1,N},\ \mu(\vec{\rho}) = \frac{\det(C_{N+1}(\vec{\rho}))}{\det(C)}. \quad (6)$$

В соответствии с выражением (6), если $\vec{\rho} = \vec{\rho}_k$, т. е. точка прогноза совпадает с *k-й* точкой измерений, *k-й* столбец основной матрицы СЛАУ будет совпадать со столбцом свободных членов и, следовательно, $\det(C_k(\vec{\rho})) = \det(C)$, а $\det(C_i(\vec{\rho})) = 0$ для $\forall i \neq k$. Из этого следует, что решениями (5) будут являться $w_k(\vec{\rho}) = 1$ и $w_i(\vec{\rho}) = 0$ для $\forall i \neq k$, а $\mu(\vec{\rho}) = 0$. Таким образом, множитель Лагранжа всегда будет равен нулю в точках измерений.

Ввиду того, что $Z(\vec{\rho})$ неизвестно в точке прогноза, невозможно рассчитать правую часть системы (5) и её необходимо моделировать. В большинстве методов геостатистики моделирование правой части системы (5) осуществляется в предположении о том, что пространственная переменная удовлетворяет условиям однородности второго рода и вместо ковариации используется модельная вариограмма, представляющая собой статистический момент второго порядка [11, 13–15]. Модельная вариограмма используется для описания пространственной вариации переменной $Z(\vec{\rho})$ и зависит только от расстояния между точками пространства $\Delta\rho$, ввиду чего может быть рассчитана в любой точке исследуемого пространства.

Анализ ошибок кригинга

При геостатистическом моделировании существует возможность оценки ошибки кригинга (2), которая получена в общих выражениях, не зависит от процедур подготовки исходных данных и использует модельную вариограмму. Поэтому ее величина не имеет практического значения, но демонстрирует важные свойства кригинга: *ошибка растет с удалением от точек прогноза, а сама прогнозная величина стремится к среднему значению*. В этой ситуации единственным способом количественной оценки качества геостатистического моделирования остается сравнение гистограмм исходных и модельных данных.

В данной работе ошибки кригинга рассмотрены с другой стороны, а именно, когда исходное предположение о возможности представить прогнозное значение в виде взвешенной суммы известных значений не выполняется, что приводит к появлению отклонения:

$$Q(\vec{\rho}) = Z(\vec{\rho}) - \sum_{i=1}^{N} \upsilon_i(\vec{\rho}) z_i. \quad (7)$$

Если математическое ожидание (7) отлично от нуля (оценка (1) смещенная), то $Q(\vec{\rho})$ можно интерпретировать как недостающее (неизвестное) и представить в виде произведения веса и значения неизвестного: $Q(\vec{\rho}) = w_{N+1}(\vec{\rho}) z_{N+1}$. В последующих геостатистических методах (универсальный кригинг, кригинг с внешним дрейфом, кокригинг) это отклонение учитывают путем добавления в модель (1) тренда, дрейфа и т. п. В данной работе ограничимся условиями ординарного кригинга и будем считать, что если в исходный набор известных измерений добавить измерение z_{N+1}, то отклонение $Q(\vec{\rho})$ обратится в нуль.

Проведем анализ отклонения (7) на основе общей модели прогнозируемого значения, представляющего собой линейную комбинацию известных N значений и неизвестного ($N+1$)-го значения:

$$Z(\vec{\rho}) = \hat{Z}(\vec{\rho}) + Q(\vec{\rho}) = \sum_{i=1}^{N} \upsilon_i(\vec{\rho}) z_i + \upsilon_{N+1}(\vec{\rho}) z_{N+1}.$$

Пусть для этой модели выполняется условие несмещенности:

$$\sum_{i=1}^{N} \upsilon_i(\vec{\rho}) + \upsilon_{N+1}(\vec{\rho}) = 1. \quad (8)$$

Для получения среднего квадрата ошибки оценим вариацию и множитель Лагранжа. Вариация модели:

$$\psi^2 = M\left[Z^2(\vec{\rho})\right] =$$
$$= \sum_{i=1}^{N} \upsilon_i(\vec{\rho}) \sum_{j=1}^{N} \left(\upsilon_j(\vec{\rho}) c_{ji} + 2\upsilon_{N+1}(\vec{\rho}) c_{jN+1}\right) + \upsilon_{N+1}^2(\vec{\rho}) \psi_{N+1}^2,$$

где ψ^2_{N+1} – вариация неизвестной составляющей; $c_{jN+1} = M[z_j z_{N+1}]$. Для оценки множителя Лагранжа найдем определители матриц $C_i(\vec{\rho})$ и $C_{N+1}(\vec{\rho})$. Коэффициенты ковариации матрицы свободных членов СЛАУ (5) теперь могут быть представлены в виде линейной комбинации элементов основной матрицы:

$$c_{j0} = M\left[z_j Z(\vec{\rho})\right] = \sum_{i=1}^{N} \upsilon_i(\vec{\rho}) c_{ji} + \upsilon_{N+1}(\vec{\rho}) c_{jN+1}.$$

Следовательно, в общем случае матрицу $C_i(\vec{\rho})$ с учетом условия несмещенности (8) можно записать в виде:

$$C_i(\vec{\rho}) =$$
$$= \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & ac_{11} + \dots + bc_{1N} + dc_{1N+1} & \dots & c_{1N} & 1 \\ c_{21} & \dots & ac_{21} + \dots + bc_{2N} + dc_{2N+1} & \dots & c_{2N} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{N1} & \dots & ac_{N1} + \dots + bc_{NN} + dc_{NN+1} & \dots & c_{NN} & 1 \\ 1 & \dots & a + \dots + b + d) & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$a = \upsilon_1(\vec{\rho}),\ b = \upsilon_N(\vec{\rho}),\ d = \upsilon_{N+1}(\vec{\rho}). \quad (9)$$

Та как определитель матрицы является полилинейной функцией строк или столбцов [16], определитель матрицы (9) можно разложить в виде суммы следующего вида [1]:

$$\det\left(C_i(\vec{\rho})\right) = \upsilon_i(\vec{\rho}) \det(C) + \upsilon_{N+1}(\vec{\rho}) \det(G_i),$$

где $G_i = \begin{array}{c} \begin{array}{cccccc} 1 & \dots & i & \dots & N & N+1 \end{array} \\ \begin{pmatrix} c_{11} & \dots & c_{1N+1} & \dots & c_{1N} & 1 \\ c_{21} & \dots & c_{2N+1} & \dots & c_{2N} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ c_{N1} & \dots & c_{NN+1} & \dots & c_{NN} & 1 \\ 1 & \dots & 1 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array}$ – матрица, в которой, в отличие от матрицы $C_i(\vec{\rho})$, в i-м столбце стоят не ковариации известных значений с прогнозным, а ковариации известных значений с неизвестным. Аналогичным способом, анализируя матрицу $C_{N+1}(\vec{\rho})$, можно доказать, что:

$$\det\left(C_{N+1}(\vec{\rho})\right) = \upsilon_{N+1}(\vec{\rho})\det(G_{N+1}).$$

Решением системы (5) будут значения:

$$w_i(\vec{\rho}) = \upsilon_i(\vec{\rho}) + \upsilon_{N+1}(\vec{\rho})\frac{\det(G_i)}{\det(C)},\ i=\overline{1,N}, \quad (10)$$

$$\mu(\vec{\rho}) = \upsilon_{N+1}(\vec{\rho})\frac{\det(G_{N+1})}{\det(C)}, \quad (11)$$

Таким образом, исходя из выражений (10), (11), если в текущей точке прогноза известных измерений не хватает для осуществления точной оценки в виде (1), *ошибка оценки весовых функций и множитель Лагранжа прямо пропорциональны весовому коэффициенту неизвестного значения $\upsilon_{N+1}(\vec{\rho})$ и в общем случае отличны от нуля.* Средний квадрат ошибки, соответственно, также становится отличным от нуля

$$\sigma^2_{\text{ОК}}(\vec{\rho}) = \upsilon_{N+1}(\vec{\rho})\left(\begin{array}{l}\upsilon_{N+1}(\vec{\rho})\psi^2_{N+1} + \\ +\sum\limits_{j=1}^{N}\left(\begin{array}{l}\upsilon_j(\vec{\rho})c_{jN+1} - \\ -\dfrac{\det(G_i)}{\det(C)}\left(\begin{array}{l}\sum\limits_{i=1}^{N}\upsilon_i(\vec{\rho})c_{ji} - \\ -\upsilon_{N+1}(\vec{\rho})c_{iN+1}\end{array}\right)\end{array}\right)\end{array}\right) \quad (12)$$

и также прямо пропорционален весовому коэффициенту неизвестного значения. Сопоставляя выражения (11) и (12), видим, что *множитель Лагранжа несет в себе информацию об ошибках прогнозирования, точнее о весе (значимости) недостающих данных, и определяется ковариациями не только известных значений, но и неизвестного значения с известными.* В работе [5] утверждается, что смысл множителя Лагранжа должен быть связан со смыслом ограничения. В постановке задачи кригинга ограничение (3) введено для получения несмещенной оценки прогнозируемого параметра, т. е. статистического критерия ограничения на ошибку. Как видно из приведенных выражений, множитель Лагранжа связан с ошибкой прогнозирования, но отличается от среднего значения квадрата.

В предельном случае, когда все известные и неизвестное измерения

a) обладают нулевым математическим ожиданием;
b) некоррелированы между собой (c_{ji}=0 и c_{jN+1}=0);
c) обладают одинаковыми средними значениями квадрата ($c_{11}=c_{22}\ldots\ \ldots=c_{NN}=\psi^2_{N+1}=\psi_0^2$).

Определитель основной матрицы и определители матриц G_i принимают простые выражения:

$$\det\left(C\right) = -N\psi_0^{2N-2},\ \det\left(G_i\right) = \psi_0^{2N},$$

а множитель Лагранжа

$$\mu(\vec{\rho}) = -\upsilon_{N+1}(\vec{\rho})\frac{\psi_0^2}{N} \quad (13)$$

оказывается прямо пропорционален весу неизвестного и вариации измерений и обратно пропорционален их количеству. Дисперсия кригинга:

$$\sigma^2_{\text{ОК}}(\vec{\rho}) = \upsilon^2_{N+1}(\vec{\rho})\psi_0^2. \quad (14)$$

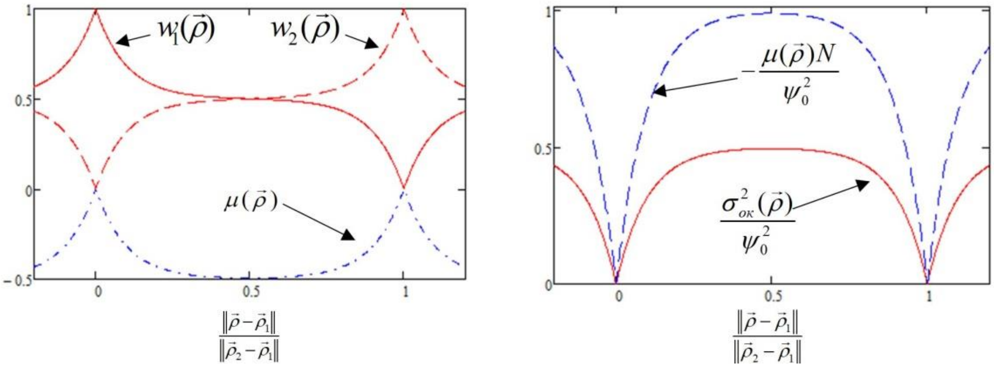


Рис. 1. *Решение системы ординарного кригинга (а), нормированные дисперсия ординарного кригинга и множитель Лагранжа (б)*

Fig. 1. *Solution of the ordinary kriging system (a), normalized variance of ordinary kriging and Lagrange multiplier (b)*

На рис. 1 приведены результаты расчета дисперсии ординарного кригинга (2) и множителя Лагранжа на примере модели из двух известных измерений (N=2) и ковариации $c(\Delta\rho)=\psi_0^2e^{-\beta\Delta\rho}$, зависящей от расстояния между пространственными координатами $\Delta\rho$. Как видно из рисунка, множитель Лагранжа имеет схожее поведение с дисперсией кригинга. С точки зрения практического применения полученные выражение (11) и (13) для ординарного кригинга могут показаться незначимыми, т. к. в расчетах используются модельные вариограммы и по сравнению с оценкой дисперсии кригинга они не несут новой информации о точности моделирования.

Совсем другое дело, когда при геостатистическом моделировании производится уточнение ковариационных связей за счет привлечения дополнительной информации. Так, в методе двойного кригинга оценка ковариаций осуществляется не по измеренным значениям, которые обычно получаются по редкой сетке наблюдений, а по измерениям дополнительного параметра среды, измеренного по более частой сетке [1, 14]. Такой прием позволяет получить более достоверную ковариационную функцию прогнозируемого параметра и тем самым повысить точность прогноза, не увеличивая объема исходных данных. Например, при изменении ковариации, использованной в эксперименте рис. 1, на иную ковариацию, когда на середине интервала между точками измерений она достигает максимально возможной величины $\frac{\psi^2}{2}$ (рис. 2, соответственно вид функции 1 и 2). Это обусловлено требованием сохранения статистических характеристик исследуемого процесса: сумма ковариаций точки прогноза и точек измерений не должна превосходить среднее значение квадрата

$$(c(\|\vec{\rho}-\vec{\rho}_1\|)+c(\|\vec{\rho}-\vec{\rho}_2\|)\le\psi^2).$$

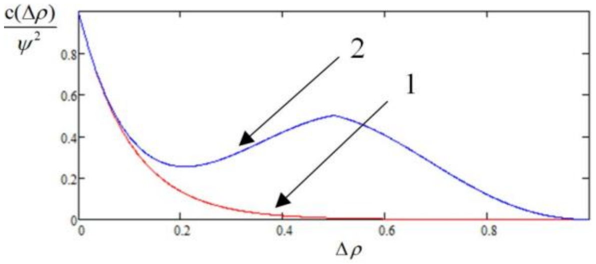


Рис. 2. *Ковариационные функции экспериментов*
Fig. 2. *Covariance functions of experiments*

Далее по методу двойного кригинга решая систему (5) с ковариацией вида 2 (рис. 2) мы получим аналогичные весовые функции и совершенно другой множитель Лагранжа (рис. 3, *а*). Очевидно и закономерно, что в данном случае для ординарного и двойного кригинга результаты прогнозирования будут одинаковыми, однако дисперсия ординарного кригинга будет иметь в середине интервала прогноза ошибку, близкую к 50 %, а дисперсия двойного кригинга и множитель Лагранжа будут свидетельствовать о точном прогнозе (рис. 3, *б*).

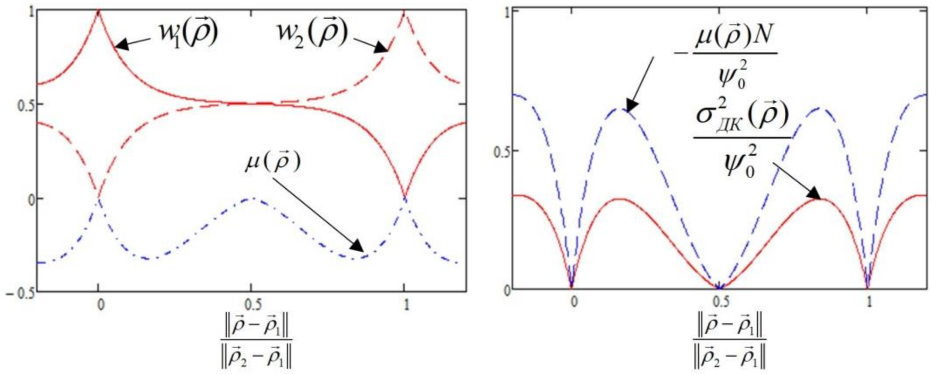
Основываясь на выражениях (13) и (14), можно построить оценки весовой функции неизвестной составляющей в виде:

$$\hat{\upsilon}_{N+1}(\vec{\rho})=-\frac{N\mu(\vec{\rho})}{\psi_0^2},\qquad(15)$$

или

$$\hat{\upsilon}_{N+1}(\vec{\rho})=-\frac{\sigma^2_{\text{ОК}}(\vec{\rho})}{N\mu(\vec{\rho})}.\qquad(16)$$

Обе полученные оценки имеют практическое значение и отличаются только процессом вычисления. Оценки неизвестной составляющей можно рассматривать и как нормированную ошибку кригинга, т. к. она дает значения в диапазоне [0,1], который является более удобным для интерпретации ошибок прогнозирования.

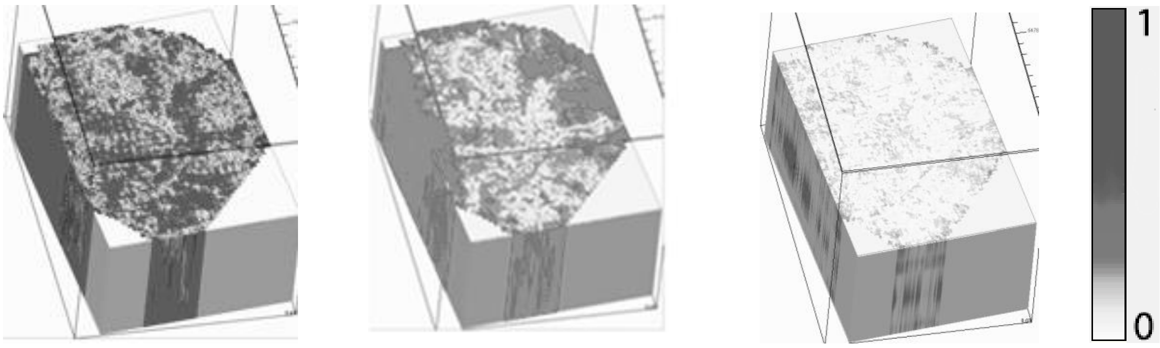


а/a *б/b*

Рис. 3. *Решение системы двойного кригинга (а), нормированные дисперсия двойного кригинга и множитель Лагранжа (б)*
Fig. 3. *Solution of the double kriging system (a), normalized double kriging variance and Lagrange multiplier (b)*

Для проверки полученных соотношений были проведены расчеты по геолого-геофизическим данным. Проведена специальная обработка материалов метода общей глубинной точки (3D МОГТ) Конторовичского месторождения Томской области и данных геофизических исследований в скважинах (ГИС), пробуренных на этом же месторождении. Методом двойного кригинга осуществлялось моделирование петрофизических свойств в диапазоне глубин, охватывающих Меловые и Юрские отложения.

На первом этапе множество исходных данных включало в себя данные ГИС только трех скважин (рис. 4, *а*). На многих участках анализируемой области, за исключением отдельных зон, оценка весовой функции неизвестной составляющей оказалась значимой (больше 0,8), что говорит о плохом качестве полученной модели. На втором этапе в расчеты были добавлены данные ГИС еще двух скважин, расположенных в центральной части площади. В результате значение оценки весовой функции существенно снизилось как вблизи скважин, так и на значительном удалении от них (рис. 4, *б*). На третьем этапе множество включало в себя данные ГИС семи скважин. Результаты моделирования приведены на рис. 4, *в*. Оценка весовой функции неизвестной составляющей оказалась менее 0,05 в большей части рассматриваемой области, а наибольшие значения (до 0,3) наблюдались в зонах, соответствующих краям сейсмического куба, где преобладают ошибки обработки сейсмических наблюдений.

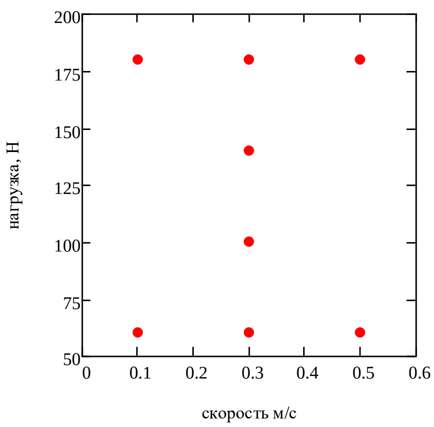


а/a *б/b* *в/c*

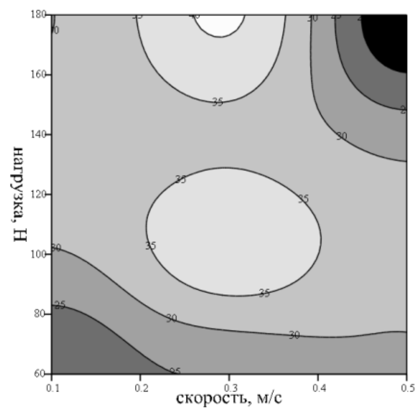
Рис. 4. *Срез куба оценки весовой функции неизвестной составляющей, полученный вдоль Баженовской свиты при моделировании: по трем скважинам (а); пяти скважинам (б); семи скважинам (в). Конторовичское месторождение Томской области (с разрешения ООО «Томскгеонефтегаз»)*

Fig. 4. *Slice of the cube of the unknown component weight function estimation obtained along the Bazhenov formation during modeling: for three wells (a); five wells (b); seven wells (c). Kontorovichskoe field of the Tomsk region (with the permission of Tomskgeoneftegaz LLC)*

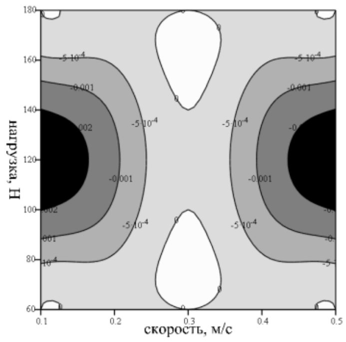
Проведенный эксперимент показал возможность использования новых выражений для оценки точности построения объемной петрофизической модели и доказал достаточность выборки данных ГИС семи скважин для достижения ошибки моделирования в 5 %. В общем случае оценка веса неизвестной составляющей может быть использована для локализации зон недостаточности выборки данных ГИС с целью выявления возможных аномальных зон, требующих проведения дополнительных исследований или признания результатов моделирования в них недостоверными.



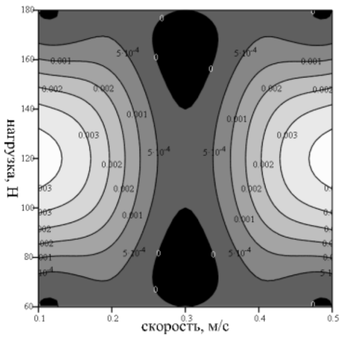
а/a
параметры натурных экспериментов
field experiments parameters



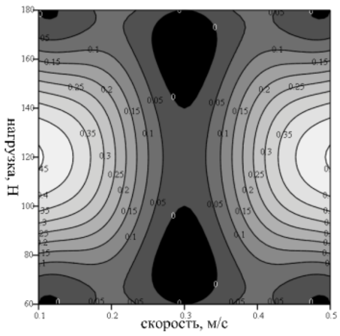
б/b
результат интерполяции кригингом интенсивности изнашивания
result of wear intensity kriging interpolation



в/c
множитель Лагранжа
Lagrange multiplier



г/d
дисперсия кригинга
kriging variance



д/e
оценка весовой функции неизвестной составляющей
timation of the unknown component weight function

Рис. 5. *Исследование множителя Лагранжа на примере изнашивания композитов на основе полиимида*

Fig. 5. *Research of the Lagrange multiplier on the example of wear of polyimide-based composites*

С целью обоснования универсальности данного подхода были также проведены расчеты по материалам трибологических исследований антифрикционных композитов на основе полиимида [17–19].

Осуществлено восемь экспериментов с различными параметрами, определяющими координаты пространственных геостатистических переменных на плоскости нагрузка–скорость (рис. 5, *а*). Итогом натурного эксперимента являлось измерение трибологических свойств материала – коэффициент трения, интенсивность изнашивания и температура. В области экспериментальных параметров измеренные значения интерполировались методом ординарного кригинга (пример на рис. 5, *б*). Вместе с оценкой прогнозной величины осуществлялась оценка дисперсии кригинга (2) и оценка весовой функции неизвестной составляющей (15), (16). Как показали расчеты, оценки (15) и (16) дают одинаковый результат (приведены на рис. 5, *д*). Множитель Лагранжа, как и дисперсия кригинга дают величины в размерности среднего значения квадрата прогнозной величины (на рис. 5, *в, г* в размерности (мм^3/Н*м $10^{-6})^2$). Для анализа величины ошибки прогнозирования с помощью дисперсии обычно проводят дополнительные расчеты, например, используют правило трех сигм или переходят к нормированному среднему значению квадрата, или используют приближенные выражения, полученные в предположении наличия белого шума [20, 21]. Выражения (15), (16) оказываются альтернативными данным подходам и позволяют получить нормированную ошибку, оценить уровень ошибки (на рис. 5, *д* не превышает 0,46) и локализовать области максимальной ошибки.

Заключение

Показано, что в случае, когда оценка геостатистического моделирования имеет смещение, множитель Лагранжа несет в себе информацию об ошибках прогнозирования, точнее о весе недостающих данных. Множитель Лагранжа связан с дисперсией кригинга соотношениями (13), (14) и определяется весом неизвестной составляющей. Практическое значение проведенных исследований заключается в возможности оценивания нормированной ошибки кригинга через множитель Лагранжа по выражениям (15) или (16).

Проведены исследования на реальных измерениях свойств антифрикционных композитов при решении задач прогноза трибологических свойств. Показано, что разработанные оценки оказываются альтернативным подходом и позволяют получить нормированную ошибку прогнозирования и локализовать области максимальной ошибки.

Проведены исследования на реальных материалах ГИС и МОГТ при решении задач прогноза вещественного состава геологических сред. Показано, что полученные выражения оценки весовой функции неизвестной составляющей позволяют получить пространственное распределение нормированной ошибки моделирования и локализовать области, в которых моделирование осуществляется со значительными погрешностями. В последующем в условиях недостаточности данных ГИС совместная интерпретация результатов моделирования и подобных оценок нормированной ошибки должна позволить исключить некорректные заключения о вещественном составе геологических сред в зонах повышенного значения ошибок.

В основу выполненных аналитических исследований положены системы ординарного кригинга, а исследования проведены на реальных данных. Для более уверенного заключения о смысле неопределенного множителя Лагранжа необходимо провести подобные исследования и для других геостатистических методов с целью обобщить полученные выводы.

Работа выполнена при частичной поддержке государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2021-0010.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шестаков В.В., Степанов Д.Ю. Влияние репрезентативности исходных данных на результаты моделирования методом двойного крайгинга // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2019. – Т. 330. – № 1. – С. 88–97.
2. Bertsekas D.P. Constrained optimization and Lagrange multiplier methods. – Belmont: Academic press, 2014. – 395 p.
3. Осипов Г.С., Вашакидзе Н.С., Филиппова Г.В. Основы теории и методологии решения экстремальных задач методом Лагранжа // Постулат. – 2019. – № 3. – С. 1–9.
4. Моклячук М.П. Вариационное исчисление. Экстремальные задачи. – М.; Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2006. – 430 с.
5. Karabulut H. The physical meaning of Lagrange multipliers // European Journal of Physics. – 2006. – V. 27. – № 4. – P. 709–724.
6. Chiang, Alpha C. Fundamental Methods of Mathematical Economics (Third ed.). – USA: McGraw-Hill, 2005. – 386 p.
7. Бикетова С.В. Использование метода множителей Лагранжа в задачах на оптимизацию экономических процессов // Математические методы и модели техники, технологий и экономики. Сборник материалов Всероссийской научно-практической студенческой конференции. – СПб., 2021. – С. 38–42.
8. Matheron G. Traité de géostatistique appliqué // Paris, France: Editions BGRM, 1962. – 460 p.
9. Дюбрюль О. Геостатистика в нефтяной геологии. – М.: Институт компьютерных исследований, НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», 2009. – 256 с.
10. Morosov A.L., Bratvold R.B. Probability elicitation using geostatistics in hydrocarbon exploration // Computational Geosciences. – 2021. – V. 25. – P. 2109–2130.
11. Демьянов В.В., Савельева Е.А. Геостатистика: теория и практика. – М.: Наука, 2010. – 328 с.
12. Ковалевский Е.В. Геологическое моделирование на основе геостатистики. – М.: Изд-во EAGE, 2011. – 117 с.
13. Кошель С.М., Мусин О.Р. Методы цифрового моделирования: кригинг и радиальная интерполяция // Информационный бюллетень ГИС-Ассоциации. – 2001. – № 1 (28). – С. 23–24.
14. Шестаков В.В., Гергет О.М. Адаптация метода двойного крайгинга к структурным факторам геологической среды // Научный вестник новосибирского государственного технического университета. – 2020. – № 1. – С. 119–134.
15. Фрейдин К.В. Методы построения экспериментальных вариограмм случайного поля // Молодежный вестник Уфимского государственного авиационного технического университета. – 2020. – № 2. – С. 143–146.
16. Тыртышников Е.Е. Матричный анализ и линейная алгебра. – М.: Физматлит, 2007. – 480 с.
17. Effect of transfer film on tribological properties of anti-friction PEI- and PI-based composites at elevated temperatures / S.V. Panin, J. Luo, D.G. Buslovich, V.O. Alexenko, F. Berto, L.A. Kornienko // Polymers. – 2022. – V. 14. – № 6. – P. 1215–1243.

18. Omrani E., Rohatgi P.K., Menezes P.L. Tribology and applications of self-lubricating materials. 1st ed. – USA, Boca Raton: CRC Press, 2018. – 206 p.
19. Singer I.L., Pollock H.M. Fundamentals of friction: macroscopic and microscopic processes. – Germany, Dordrecht: Springer, 1992. – 621 p.
20. Bendat J.S., Piersol A.G. Random data: analysis and measurement procedures. – Hoboken: John Wiley & Sons, 2011. – 640 p.
21. Max J. Methodes et techniques de traitement du signal et applications aus mesures physiques. Vol. 2: Appareillage, methodes nouvelles, exemples d'applications. – Paris: Masson, 1987. – 256 p.

Поступила 06.07.2022 г.

Информация об авторах

Степанов Д.Ю., кандидат технических наук, научный сотрудник лаборатории механики полимерных композиционных материалов Института физики прочности и материаловедения СО РАН.

Шестаков В.В., аспирант Национального исследовательского Томского политехнического университета.

Гергет О.М., доктор технических наук, профессор отделения информационных технологий, Инженерной школы информационных технологий и робототехники, Национальный исследовательский Томский политехнический университет.

UDC 519.246:622.1

GEOSTATISTICAL MEANING OF THE INDEFINITE LAGRANGE MULTIPLIER IN THE ORDINARY AND DOUBLE KRIGING METHODS

Dmitry Y. Stepanov[1],
sdu@ispms.ru

Valery V. Shestakov[2],
valeriy.shestakov@inbox.ru

Olga M. Gerget[2],
gerget@tpu.ru

[1] Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS,
2/4, Academichesky avenue, Tomsk, 634055, Russia.

[2] National Research Tomsk Polytechnic University,
30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russia.

Relevance. *When developing new methods of volumetric modeling of the material composition of geological environment according to borehole and surface observations, the authors previously proposed the possibility of an alternative estimate of the error using the Lagrange multiplier. In practice, due to small number of borehole measurements and large distance between boreholes, it is important not only to use effective model of the medium, but also to estimate its accuracy in the interwell space. The use of simple and understandable estimates of model accuracy is the key to reducing the risks of making incorrect decisions on subsequent drilling.*
The method of indefinite Lagrange multipliers is used in solving extreme problems with constraints of equality type. In such sciences as economics, statistical and classical mechanics, Lagrange multipliers have economic or physical meaning and become of practical importance. However, in geostatistics, when solving the problem of selection of optimal methods of interpolation of spatial data, Lagrange multipliers are avoided at the first stages of solution of systems of linear equations. In this relation there are no both analytical and applied researches of its value.
Objective: *to clarify the meaning of the Lagrange multiplier when solving systems of ordinal and double kriging; to develop new ways of obtaining normalized estimates of geostatistical modeling error; to carry out investigations of the obtained expressions on the real materials, namely, in solving the tasks of geological media material composition prediction.*
Methods: *ordinary kriging, double kriging, Lagrange multiplier method, Cramer's method.*
Results. *In order to conduct research it was propose to add an unknown component to the model of the set of known values of the predicted parameter. Based on this model, analytical and numerical studies were conducted, which led to new expressions linking the weight of the unknown component and the covariance properties of the measurements with the Lagrange multiplier. Estimates of the weight function of the unknown component were proposed. The practical importance of the Lagrange multiplier in the analysis of modeling errors is shown on the example of real data for the solution of the problem of predicting the material composition of geological environments.*

Key words:
Modeling geological environment parameters, modeling errors, geostatistics, kriging, indefinite Lagrange multipliers, statistical estimates.

The research was partially supported by the State task Institute of strength physics and materials science SB RAS, project FWRW-2021-0010.

REFERENCES

1. Shestakov V.V., Stepanov D.Yu. Influence of initial data representation on the simulation results by double kriging method. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2019, vol, no. 1, pp. 88–97. In Rus.
2. Bertsekas D.P. *Constrained optimization and Lagrange multiplier methods*. Belmont, Academic press, 2014, 395 p.
3. Osipov G.S., Vashakidze N.S., Filippova G.V. Fundamentals of the theory and methodology for solving extremal problems by the Lagrange method. *Postulat*, 2019, no. 3, pp. 1–9. In Rus.
4. Moklyachuk M.P. *Variatsionnoe ischislenie. Ekstremalnye zadachi* [Variational calculus. Extreme tasks]. Moscow, Izhevsk, Institute for Computer Research Publ., 2006. 430 p.
5. Karabulut H. The physical meaning of Lagrange multipliers. *European Journal of Physics*, 2006, vol. 27, no. 4, pp. 709–724.
6. Chiang A.C. *Fundamental methods of mathematical economics* (Third ed.). USA, McGraw-Hill, 2005. 386 p.
7. Biketova S.V. Ispolzovanie metoda mnozhiteley Lagranzha v zadachakh na optimizatsiyu ekonomicheskikh protsessov [Using the method of Lagrange multipliers in problems of optimizing economic processes]. *Matematicheskie metody i modeli tekhniki, tekhnologiy i ekonomiki. Sbornik materialov Vserossiyskoy nauchno-prakticheskoy studencheskoy konferentsii* [Mathematical methods and models of engineering, technology and economics. Collection of materials of the All-Russian scientific and practical student conference]. St-Petersburg, 2021. pp. 38–42.
8. Matheron G. *Traité de géostatistique appliqué*. Paris, Editions BGRM, 1962. 460 p.
9. Dyubryul O. *Geostatistika v neftyanoy geologii* [Geostatistics in petroleum geology]. Moscow, Institute for Computer Research, National Research Center «Regular and Chaotic Dynamics» publ., 2009. 256 p.
10. Morosov A.L., Bratvold R.B. Probability elicitation using geostatistics in hydrocarbon exploration. *Computational Geosciences*, 2021, vol. 25, pp. 2109–2130.
11. Demianov V.V., Savelyeva E.A. *Geostatistika: teoriya i praktika* [Geostatistics: theory and practice]. Moscow, Nauka publ., 2010. 328 p.
12. Kovalevskiy E.V. *Geologicheskoe modelirovanie na osnove geostatistiki* [Geological modeling based on geostatistics]. Moscow, EAGE Publ., 2011. 117 p.

13. Koshel S.M. Musin O.R. Metody tsifrovogo modelirovaniya: kriging i radialnaya interpolyatsiya [Digital modeling methods: kriging and radial interpolation]. *Informatsionnyy byulleten GIS-Assotsiatsii*, 2001, no. 1 (28), pp. 23–24.
14. Shestakov V.V., Gerget O.M. The adaptation of the double kriging method to the geological environment structural factors. *Bulletin of the NSTU*, 2020, no. 1, pp. 119–134. In Rus.
15. Freydin K.V. Methods for constructing experimental variograms of a random field. *Youth Bulletin of the Ufa State Aviation Technical University*, 2020, no. 2, pp. 143–146. In Rus.
16. Tyrtyshnikov E.E. *Matrichny analiz i lineynaya algebra* [Matrix analysis and linear algebra]. Moscow, Fizmatlit Publ., 2007. 480 p.
17. Panin S.V., Luo J., Buslovich D.G., Alexenko V.O., Berto F., Kornienko L.A. Effect of transfer film on tribological properties of anti-friction PEI- and PI-based composites at elevated temperatures. *Polymers*, 2022, vol. 14, no. 6, pp. 1215–1243.
18. Omrani E., Rohatgi P.K., Menezes P.L. *Tribology and applications of self-lubricating materials*. 1st ed. USA, Boca Raton, CRC Press, 2018. 206 p.
19. Singer I.L., Pollock H.M. *Fundamentals of friction: macroscopic and microscopic processes*. Germany, Dordrecht, Springer, 1992. 621 p.
20. Bendat J.S., Piersol A.G. *Random data: analysis and measurement procedures*. Hoboken, John Wiley & Sons, 2011. 640 p.
21. Max J. Methodes et techniques de traitement du signal et applications aus mesures physiques. *Appareillage, methodes nouvelles, exemples d'applications*. Paris, Masson, 1987. 256 p.

Received: 6 July 2022.

Information about the authors

Dmitry Y. Stepanov, Cand. Sc., researcher, Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS.

Valery V. Shestakov, postgraduate student, National Research Tomsk Polytechnic University.

Olga M. Gerget, Dr. Sc., professor, National Research Tomsk Polytechnic University.