

Berekenen van de meest waarschijnlijke lithoklasse in GeoTOP

TNO – Geologische Dienst Nederland

Versiehistorie

Documentversie	GeoTOP versie	Toelichting
17 september 2014	GeoTOP v1.2	De tekst van dit document is grotendeels overgenomen uit “TNO Rapport GeoTOP modellering”. Het volledige rapport is verkrijgbaar via DINOLOket: www.dinoloket.nl/meer-weten-over-geotop

Inleiding

In GeoTOP is de ondergrond onderverdeeld in een regelmatig grid van aaneengesloten voxels (volumecellen) van 100 bij 100 m in de horizontale richtingen en 50 cm in de verticaal. Voor elke voxel wordt geschat tot welke geologische eenheid de voxel behoort en wat de voor de voxel representatieve lithoklasse is. De lithoklassen in het voxelmodel zijn:

Lithoklasse	Nummer
Antropogeen	0
Organisch materiaal (veen)	1
Klei	2
Kleiig zand, zandige klei en leem	3
Fijn zand	5
Matig grof zand	6
Grof zand	7
Grind	8
Schelpen	9

De lithoklasse wordt berekend in een stochastisch rekenproces dat resulteert in 100 statistisch gezien even waarschijnlijke schattingen. Omdat het in veel toepassingen ondoenlijk is om met 100 verschillende modeluitkomsten te werken wordt de 100 uitkomsten samengevat in één ‘meest waarschijnlijke lithoklasse’. Ook in de visualisaties op DINOLOket wordt de ‘meest waarschijnlijke lithoklasse’ getoond.

De berekening van deze ‘meest waarschijnlijke lithoklasse’ is ingewikkelder dan het op het eerste gezicht misschien lijkt. Ten eerste geldt dat we niet eenvoudigweg een gemiddelde van de 100 lithoklassen kunnen berekenen: het gemiddelde van lithoklasse 1 (organisch materiaal) en 2 (klei) is

Berekenen van de meest waarschijnlijke lithoklasse in GeoTOP

immers niet 1,5. Een voor de hand liggende oplossing zou zijn om de lithoklasse die het vaakst geschat is te kiezen (als er bijvoorbeeld 60 keer veen en 40 keer klei wordt geschat dan zou veen de meest waarschijnlijke lithoklasse worden). Deze oplossing leidt er echter toe dat de lithoklassen die veel voorkomen in het modelresultaat overschat worden.

Soares (1992) heeft een algoritme ontwikkeld om uit de kansen (berekend als het aantal keren dat een lithoklasse is geschat gedeeld door 100) voor elke voxel een meest waarschijnlijke uitkomst te berekenen.

Dit document beschrijft hoe dit algoritme in de totstandkoming van GeoTOP wordt toegepast. Na een beschrijving van de berekeningswijze volgt een voorbeelduitwerking waarin het algoritme stap voor stap is uitgewerkt. In de voorbeelduitwerking wordt ook duidelijk waarom we niet eenvoudigweg de lithoklasse die het vaakst geschat is kunnen gebruiken.

Voor een beschrijving van het stochastisch rekenproces dat resulteert in de 100 statistisch gezien even waarschijnlijke uitkomsten wordt verwezen naar het rapport GeoTOP modellering (Stafleu et al., 2012).

Berekeningswijze

De berekening wordt voor elke geologische eenheid afzonderlijk uitgevoerd. De invoer bestaat uit een bestand met voor elke voxel van een geologische eenheid de (x,y,z)-coördinaten en de kansen op de verschillende lithoklassen. De kansen zijn berekend als het aantal keren dat een lithoklasse is geschat gedeeld door 100. De ruimtelijke kansverdeling wordt door Soares (1992) de *estimate* genoemd. Daarnaast heeft het algoritme de globale verhoudingen van de lithoklassen nodig. Het gaat hier om de aandelen van elke lithoklasse over alle voxels in de betreffende geologische eenheid. Onderstaande tabel geeft bij wijze van voorbeeld de globale verhoudingen van de lithoklassen in de Formatie van Echteld in het Rivierengebied weer:

Lithoklasse	Nummer	Fractie
Organisch materiaal (veen)	1	0,1054
Klei	2	0,4274
Kleiig zand, zandige klei en leem	3	0,3519
Fijn zand	5	0,0144
Matig grof zand	6	0,0619
Grof zand	7	0,0390
Grind	8	0,0000
Schelpen	9	0,0000
Totaal		1,0000

De globale verhoudingen worden door Soares (1992) het **target histogram** genoemd. Het algoritme zal nu de **estimate** conditioneren aan het **target histogram**. Dit wil zeggen dat aan elke voxel in de **estimate** een lithoklasse wordt toegekend, en dat het totaal aantal voxels met een bepaalde lithoklasse overeenkomt met het aantal volgens het **target histogram**.

Het conditioneren werkt als volgt:

- Bepaal initieel per lithoklasse:
 - **Werkelijk aantal** voxels gevuld met de lithoklasse (initieel 0).
 - **Doel aantal** voxels gevuld met de lithoklasse (aantal voxels * waarde volgens het target histogram).
 - **Fractie** van de lithoklasse (**werkelijk aantal / doel aantal**).
- Zolang er nog voxels in de **estimate** zonder lithoklasse zijn:
 - Bepaal de lithoklasse die op dit moment de kleinste **fractie** heeft. Deze lithoklasse zal nu aan een voxel worden toegewezen. (NB: voor de allereerste voxel zijn alle fracties 0 en kiezen we arbitrair de eerste lithoklasse met een fractie groter dan 0).
 - Selecteer uit de voxels in de **estimate** waaraan nog geen lithoklasse is toegewezen de voxel met de hoogste kans op voorkomen van de lithoklasse.
 - Wijs aan deze voxel de lithoklasse toe.
 - Verhoog het **werkelijk aantal** toegewezen voxels van de lithoklasse met 1;
 - Herbereken de **fractie** van de lithoklasse (**werkelijk aantal / doel aantal**).

Voorbeelduitwerking

Hieronder volgt een theoretische voorbeelduitwerking voor een **estimate** van vijf voxels met twee lithoklassen.

Estimate data:

Voxelnummer	Kans op lithoklasse 1	Kans op lithoklasse 2
1	0,75	0,25
2	0,50	0,50
3	0,80	0,20
4	0,65	0,35
5	0,90	0,10

Target histogram, gebaseerd op boorinformatie:

Lithoklasse 1	0,74
Lithoklasse 2	0,26

Initieel:

Voor lithoklasse 1 geldt dat er $5 * 0,74 = 3,7$ voxels gevuld moeten worden.

Voor lithoklasse 2 geldt dat er $5 * 0,26 = 1,3$ voxels gevuld moeten worden.

Voor beide lithoklassen is het werkelijk aantal gevulde voxels nog 0.

Stap 1:

We starten met lithoklasse 1. De voxel met de hoogste kans op lithoklasse 1 is voxel nummer 5 met een kans van 0,9. Deze voxel krijgt lithoklasse 1.

Lithoklasse 1 heeft nu 1 van de 3,7 voxels gevuld.

Stap 2:

Fractie van lithoklasse 1 is $1 / 3,7 = 0,27$.

Fractie van lithoklasse 2 is $0 / 1,3 = 0$.

Lithoklasse 2 heeft nu de kleinste fractie. De voxel met de hoogste kans op lithoklasse 2 is voxel nummer 2 met een kans van 0,5. Deze voxel krijgt lithoklasse 2. Lithoklasse 2 heeft nu 1 van de 1,3 voxels gevuld.

Stap 3:

Fractie van lithoklasse 1 is $1 / 3,7 = 0,27$.

Fractie van lithoklasse 2 is $1 / 1,3 = 0,77$.

Lithoklasse 1 heeft nu de kleinste fractie. De voxel met de hoogste kans op lithoklasse 1 is voxel nummer 3 met een kans van 0,8. Deze voxel krijgt lithoklasse 1. Lithoklasse 1 heeft nu 2 van de 3,7 voxels gevuld.

Stap 4:

Fractie van lithoklasse 1 is $2 / 3,7 = 0,54$.

Fractie van lithoklasse 2 is $1 / 1,3 = 0,77$.

Lithoklasse 1 heeft nu de kleinste fractie. De voxel met de hoogste kans op lithoklasse 1 is voxel nummer 1 met een kans van 0,75. Deze voxel krijgt lithoklasse 1. Lithoklasse 1 heeft nu 3 van de 3,7 voxels gevuld.

Stap 5:

Fractie van lithoklasse 1 is $2 / 3,7 = 0,81$.

Fractie van lithoklasse 2 is $2 / 1,3 = 0,77$.

Lithoklasse 2 heeft nu de kleinste fractie. De voxel met de hoogste kans op lithoklasse 2 is voxel nummer 4 met een kans van 0,35. Deze voxel krijgt lithoklasse 2. Lithoklasse 2 heeft nu 2 van de 1,3 voxels gevuld.

Resultaat:

Voxel-nummer	Kans op lithoklasse 1	Kans op lithoklasse 2	Stap 1	Stap 2	Stap 3	Stap 4	Stap 5
1	0,75	0,25				1	
2	0,50	0,50		2			
3	0,80	0,20			1		
4	0,65	0,35					2
5	0,90	0,10	1				

Bovenstaande resultaat tabel toont in welke stap welke voxel welke lithoklasse toegekend krijgt. Deze toegekende lithoklasse wordt de meest waarschijnlijke lithoklasse genoemd. Merk op dat als we eenvoudigweg steeds de lithoklasse met de hoogste kans hadden gekozen, **alle** voxels de lithoklasse 1 toegekend hadden gekregen. Merk verder op dat voxel nummer 4 lithoklasse 2 krijgt toegekend terwijl de kans op lithoklasse 2 0,35 is.

Uitzondering: Antropogeen

Er geldt een uitzondering voor de geologische eenheid 'Antropogeen'. Voor deze eenheid geldt dat er geen lithoklassen worden gesimuleerd. Alle voxels van de eenheid krijgen als meest waarschijnlijke lithoklasse de waarde 0 = Antropogeen toegekend. De kansen van de lithoklassen binnen de eenheid krijgen allemaal de waarde 0.

Referenties

Soares, A., 1992. Geostatistical estimation of multi-phase structure. *Mathematical Geology* 24 (2), p.149-160.

Stafleu, J., Maljers, D., Busschers, F.S., Gunnink, J.L., Schokker, J., Dambrink, R.M., Hummelman, H.J., Schijf, M.L., 2012. GeoTOP modellering. TNO Rapport 2012 R10991, 216 p.