
Krigeage

Automne 2003

Plan

- Définition
- Krigeage simple et krigeage ordinaire
- Interprétation
- Exemple numérique
- Propriétés du krigeage
- Aspects pratiques
- Validation croisée
- Lien entre KS et KO

Définition

Méthode d'estimation linéaire, sans biais, minimisant la variance d'estimation telle que calculée à l'aide du variogramme

Dans le cadre stationnaire, il y a 2 formes particulières de krigeage :

- Le krigeage simple :
$$Z_v^* = m + \sum_{i=1}^n \lambda_i (Z_i - m)$$

- Le krigeage ordinaire :
$$Z_v^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i$$

Le krigeage simple suppose la moyenne du processus (m) connue.

Le krigeage ordinaire est plus fréquemment utilisé.

Krigeage simple

La variance d'estimation est:

$$\sigma_e^2 = \text{Var}[Z_v] + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j \text{Cov}[Z_i, Z_j] - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \text{Cov}[Z_v, Z_i]$$

L'idée est de choisir les λ_i de façon à minimiser la variance d'estimation.

Pour trouver le minimum, on dérive σ_e^2 par rapport à chacun des λ_i et l'on pose ces dérivées partielles égales à zéro (condition d'un extrémum; cet extrémum est un minimum)

On obtient alors le système linéaire suivant comportant « n » équations à « n » inconnues (les « n » λ_i)

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \text{Cov}[Z_i, Z_j] = \text{Cov}[Z_v, Z_i] \quad \forall i = 1 \dots n$$

À l'optimum, la variance d'estimation s'écrit, tenant compte des équations précédentes:

$$\sigma_{ks}^2 = \text{Var}[Z_v] - \sum_{i=1}^n \lambda_i \text{Cov}[Z_v, Z_i]$$

L'estimé est obtenu par :

$$Z_v^* = m + \sum_{i=1}^n \lambda_i (Z_i - m)$$

Ces équations s'écrivent sous forme matricielle :

$$\mathbf{K}_s \boldsymbol{\lambda}_s = \mathbf{k}_s \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{\lambda}_s = \mathbf{K}_s^{-1} \mathbf{k}_s$$

$$\sigma_{k_s}^2 = \sigma_v^2 - \boldsymbol{\lambda}'_s \mathbf{k}_s$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \sigma^2 & \text{Cov}(Z_1, Z_2) & \bullet & \text{Cov}(Z_1, Z_n) \\ \text{Cov}(Z_2, Z_1) & \sigma^2 & \bullet & \text{Cov}(Z_2, Z_n) \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \text{Cov}(Z_n, Z_1) & \text{Cov}(Z_n, Z_2) & \bullet & \sigma^2 \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}_s} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \bullet \\ \bullet \\ \lambda_n \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\lambda}_s} = \underbrace{\begin{bmatrix} \text{Cov}(Z_1, Z_v) \\ \text{Cov}(Z_2, Z_v) \\ \bullet \\ \bullet \\ \text{Cov}(Z_n, Z_v) \end{bmatrix}}_{\mathbf{k}_s}$$

Krigeage ordinaire

Dans le krigeage ordinaire, « m » n'est pas connue. L'estimateur prend alors la forme :

$$Z_v^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i$$

Pour que l'estimateur soit sans biais, il faut imposer la contrainte habituelle :

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$$

On a un problème de minimisation sous contrainte => méthode de Lagrange, i.e. on forme le lagrangien.

$$\begin{aligned} L(\lambda, \mu) &= \sigma_e^2 + 2\mu \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right) \\ &= \text{Var}[Z_v] + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j \text{Cov}[Z_i, Z_j] - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \text{Cov}[Z_v, Z_i] + 2\mu \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right) \end{aligned}$$

Poser les dérivées partielles par rapport à λ et μ égales à zéro => système linéaire de $n+1$ équations à $n+1$ inconnues

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \text{Cov}[Z_i, Z_j] + \mu = \text{Cov}[Z_v, Z_i] \quad \forall i = 1 \dots n$$

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j = 1$$

À l'optimum, la variance d'estimation est :

$$\sigma_{k_o}^2 = \text{Var}[Z_v] - \sum_{i=1}^n \lambda_i \text{Cov}[Z_v, Z_i] - \mu$$

Sous forme matricielle :

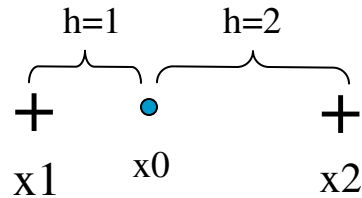
$$\begin{aligned} \mathbf{K}_o \boldsymbol{\lambda}_o &= \mathbf{k}_o \\ \sigma_{k_o}^2 &= \sigma_v^2 - \boldsymbol{\lambda}'_o \mathbf{k}_o \end{aligned}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \sigma^2 & \text{Cov}(Z_1, Z_2) & \bullet & \text{Cov}(Z_1, Z_n) & 1 \\ \text{Cov}(Z_2, Z_1) & \sigma^2 & \bullet & \text{Cov}(Z_2, Z_n) & 1 \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \text{Cov}(Z_n, Z_1) & \text{Cov}(Z_n, Z_2) & \bullet & \sigma^2 & 1 \\ 1 & 1 & \bullet & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}_0} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \bullet \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\lambda}_0} = \underbrace{\begin{bmatrix} \text{Cov}(Z_1, Z_v) \\ \text{Cov}(Z_2, Z_v) \\ \bullet \\ \text{Cov}(Z_n, Z_v) \\ 1 \end{bmatrix}}_{\mathbf{k}_0}$$

Le krigeage permet d'estimer directement un bloc (Z_v) ou un point (Z_0)
 Tout ce qui change c'est le membre de droite \mathbf{k}_0 .

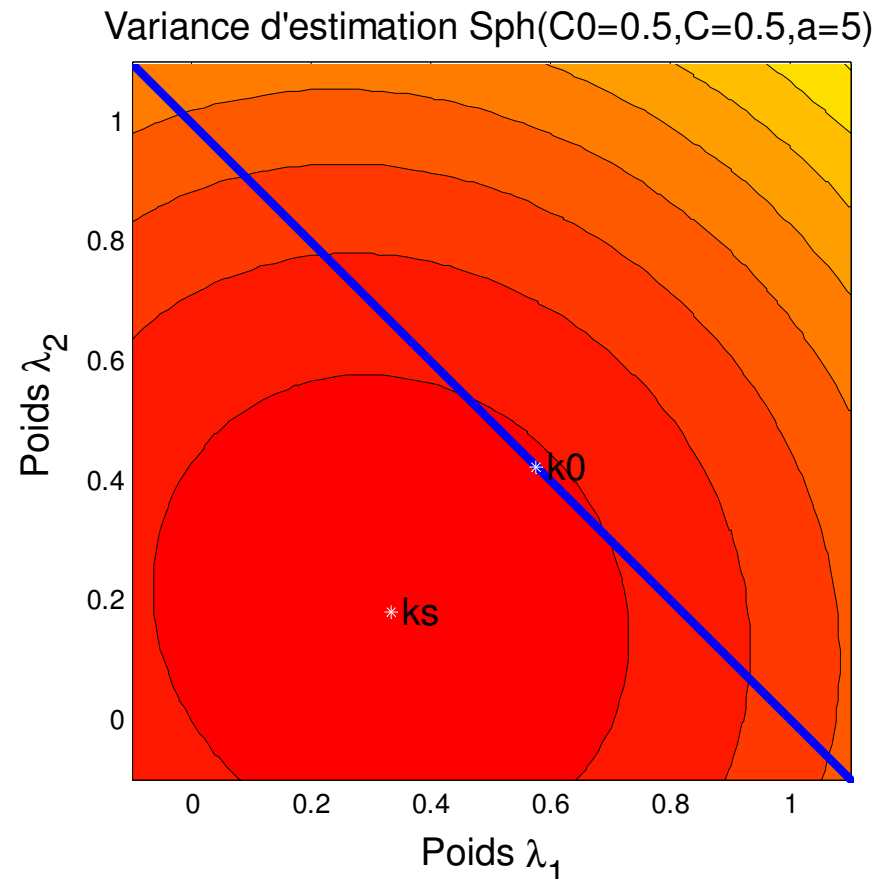
Le krigeage d'un bloc est égal à la moyenne des krigeages ponctuels dans le bloc.

Exemple



On a toujours :

$$\sigma_{k_0}^2 \geq \sigma_{k_s}^2$$



Interprétation du krigeage

Le krigeage minimise la variance d'estimation théorique calculée à partir du variogramme.

Le krigeage est-il plus juste que tout autre estimateur linéaire ?

Oui, en moyenne (i.e. sur un grand nombre de valeurs estimées),

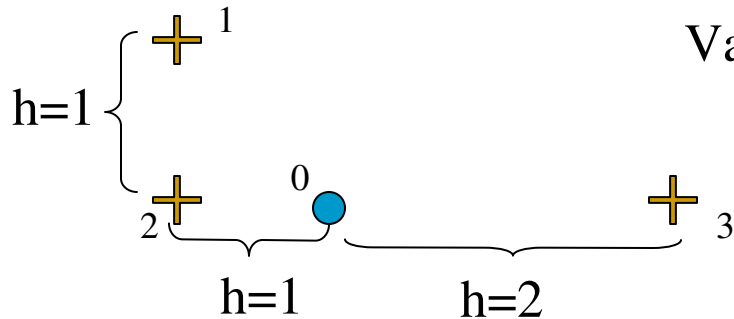
lorsque:

- hypothèse de stationnarité est valide
- on a le bon modèle de variogramme

Pour un bloc particulier ou un point, on ne peut rien affirmer.

En pratique, dans la plupart des cas, le krigeage est en moyenne au moins aussi juste que les autres estimateurs.

Exemple numérique détaillé



Variogramme sphérique, $C_0=1$, $C=10$, $a=3$

$$Z_1=9, Z_2=3, Z_3=4$$

	X0	X1	X2	X3
X0	0	1.4	1	2
X1	1.4	0	1	3.2
X2	1	1	0	3
x3	2	3.2	3	0

h

	X0	X1	X2	X3
X0	0	7.55	5.81	9.52
X1	7.55	0	5.81	11
X2	5.81	5.81	0	11
x3	9.52	11	11	0

$\gamma(h)$

	X0	X1	X2	X3
X0	11	3.45	5.19	1.48
X1	3.45	11	5.19	0
X2	5.19	5.19	11	0
x3	1.48	0	0	11

C(h)

$$\begin{bmatrix}
 11 & 5.19 & 0 & 1 \\
 5.19 & 11 & 0 & 1 \\
 0 & 0 & 11 & 1 \\
 1 & 1 & 1 & 0
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \lambda_1 \\
 \lambda_2 \\
 \lambda_3 \\
 \mu
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 3.45 \\
 5.19 \\
 1.48 \\
 1
 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} .21 \\ .51 \\ .28 \\ -1.55 \end{bmatrix}$$

$$Z_0^* = \sum \lambda_i Z_i = (.21)*9 + (.51)*3 + (.28)*4 = 4.54$$

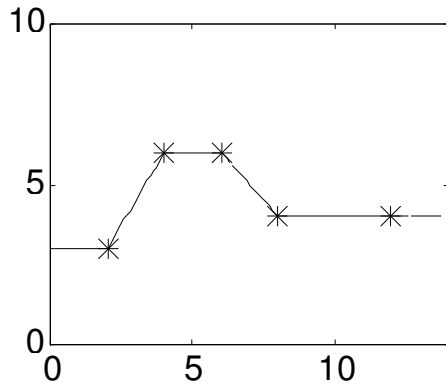
$$\sigma_{k_0}^2 = 11 - \lambda' k_0 = 8.76$$

Propriétés du krigeage

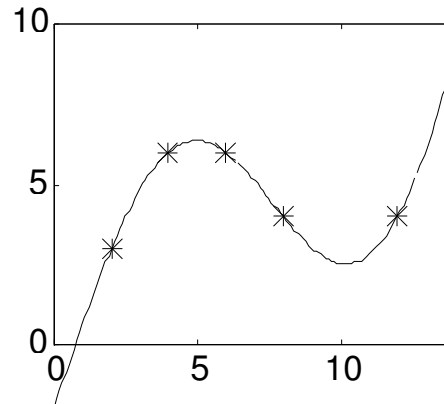
- i. Linéaire, sans biais, à variance minimale, par construction.
- ii. Interpolateur exact
- iii. Effet d'écran
- iv. Tient compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux.
- v. Tient compte de la continuité spatiale du phénomène étudié
- vi. Effet de lissage
- vii. Presque sans biais conditionnel.
- viii. Transitif (cohérence des estimés)

Interpolateur exact

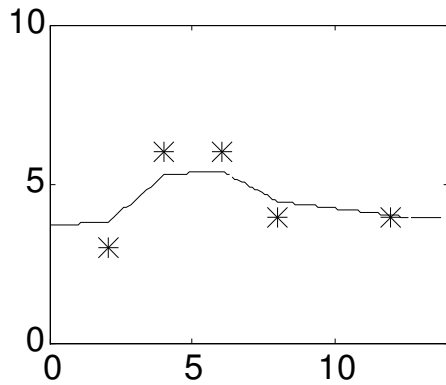
Linéaire



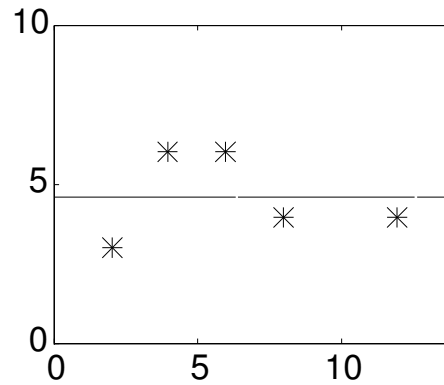
Gaussien



En présence d'effet de pépite, les valeurs interpolées sont discontinues => éviter d'estimer un point observé

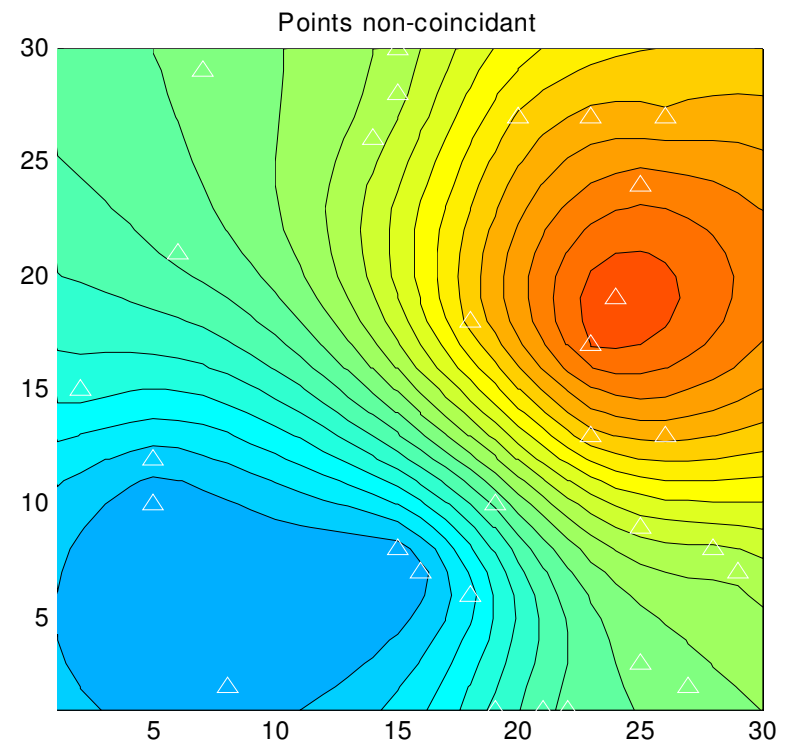
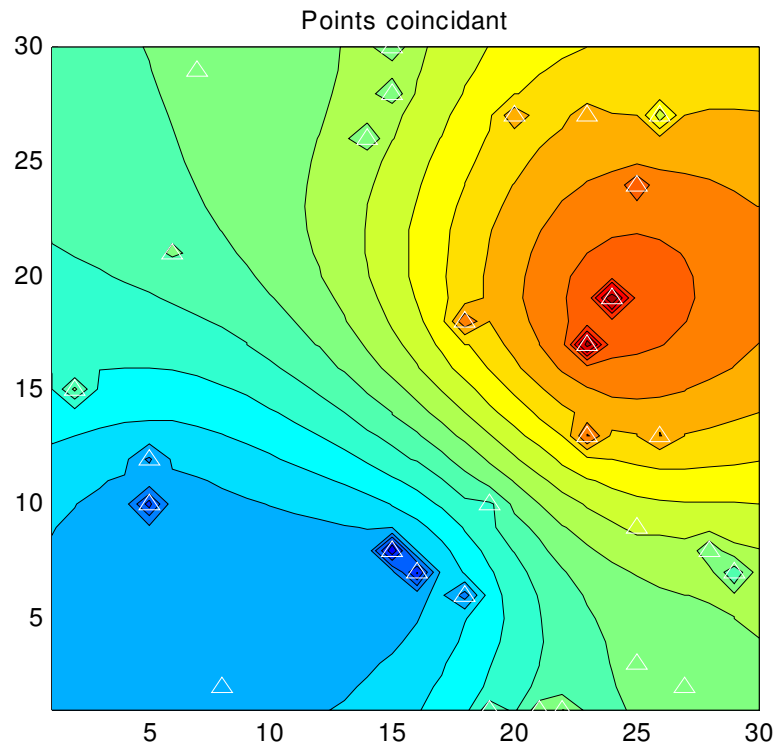


Pépite + Sphérique(.75, a=10)



Pépite pur

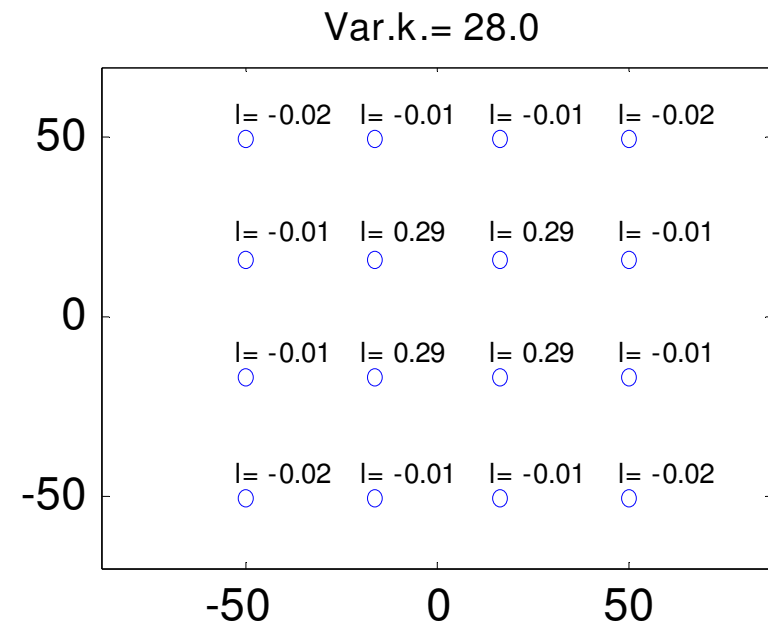
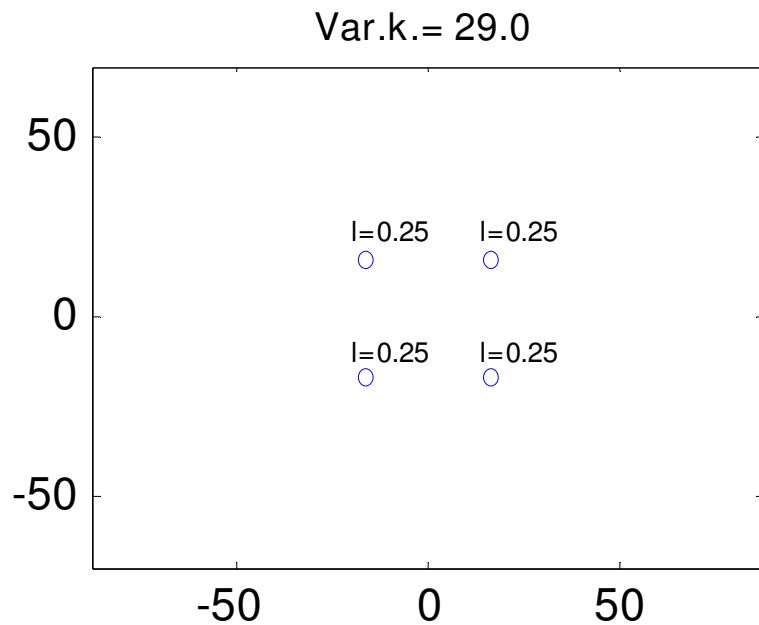
Exemple

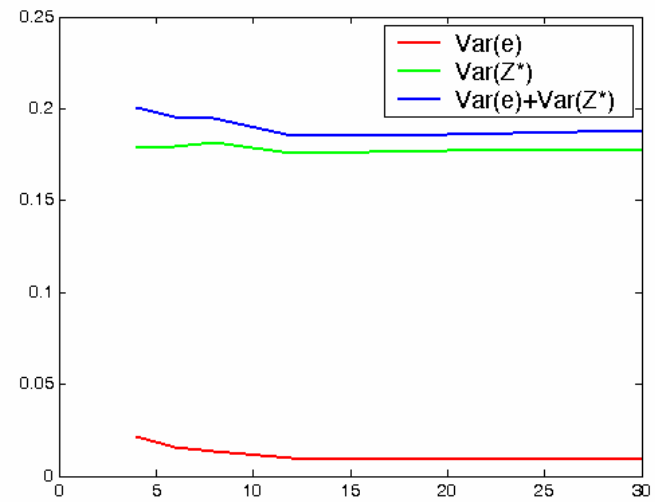
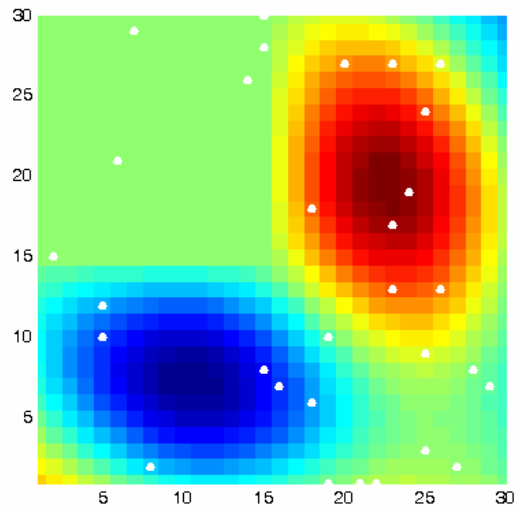


En décalant d'un epsilon la grille d'interpolation, on évite les discontinuités sur la carte interpolée

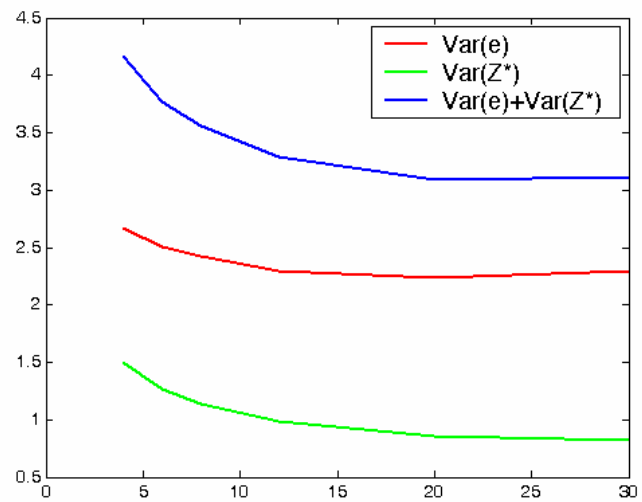
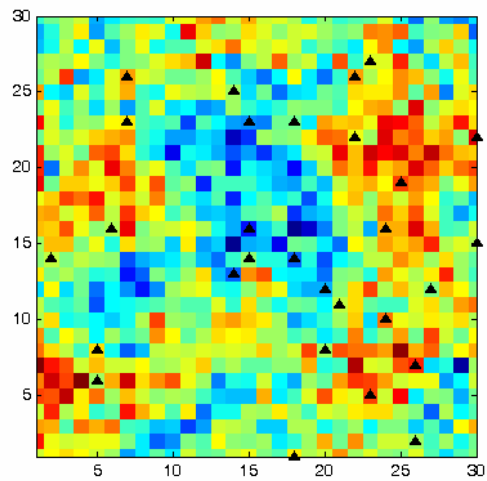
Effet d'écran

Variogramme sphérique; $C=100$, $a=100$, $C_0=0$





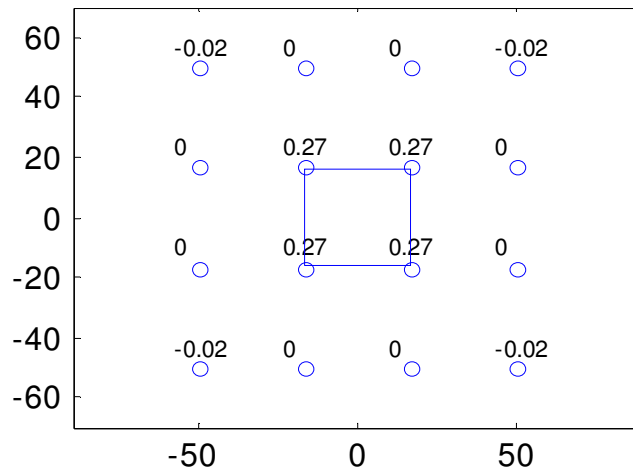
Nb. de points dans le voisinage



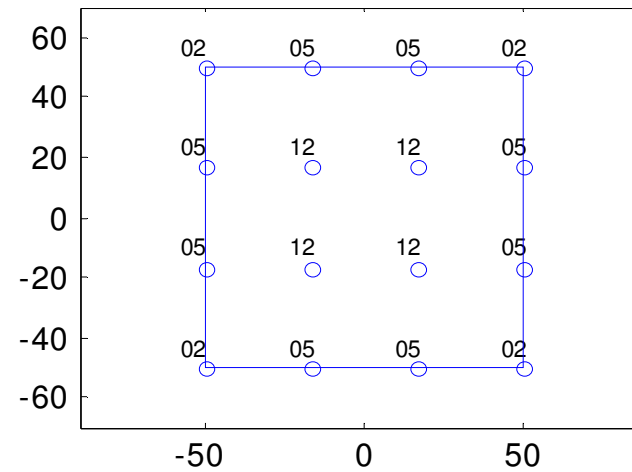
Nb. de points dans le voisinage

Tient compte de la taille du champ à estimer

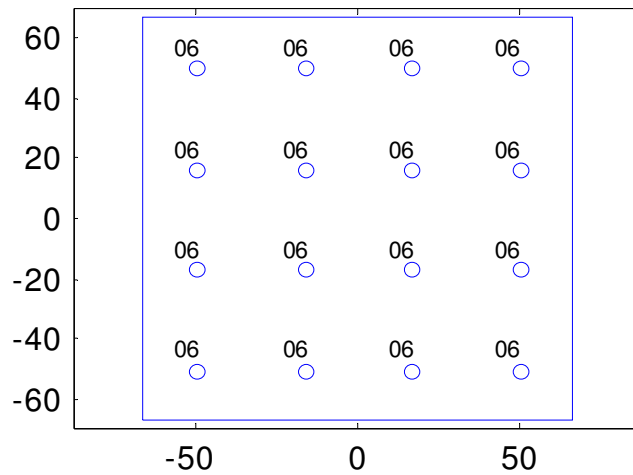
Var. k. = 8.24



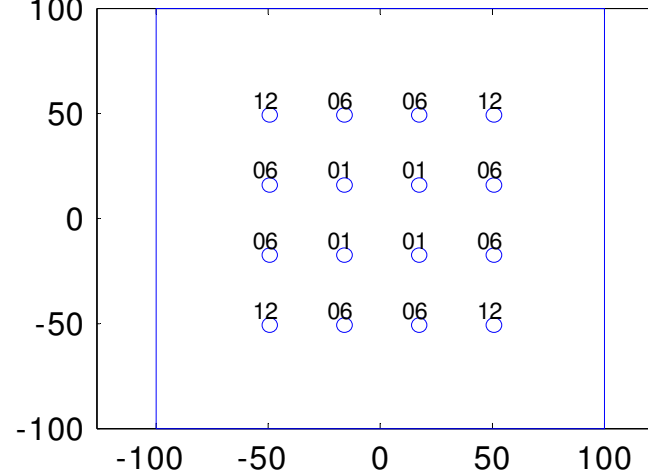
Var. k. = 1.56



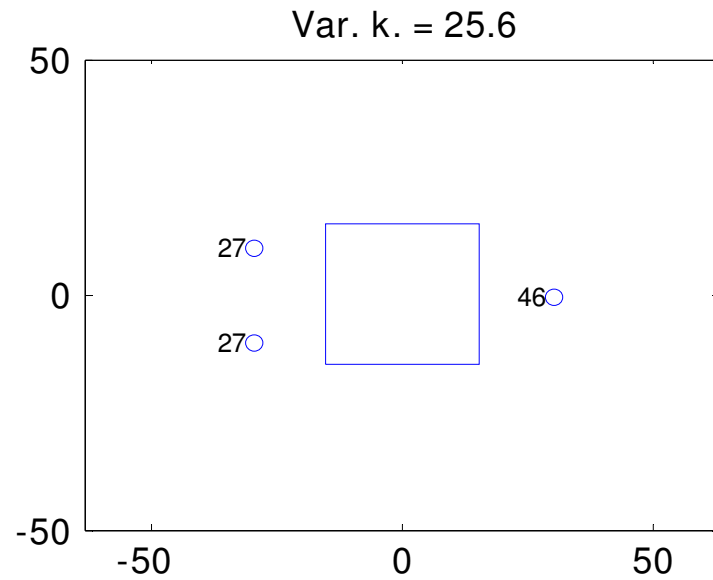
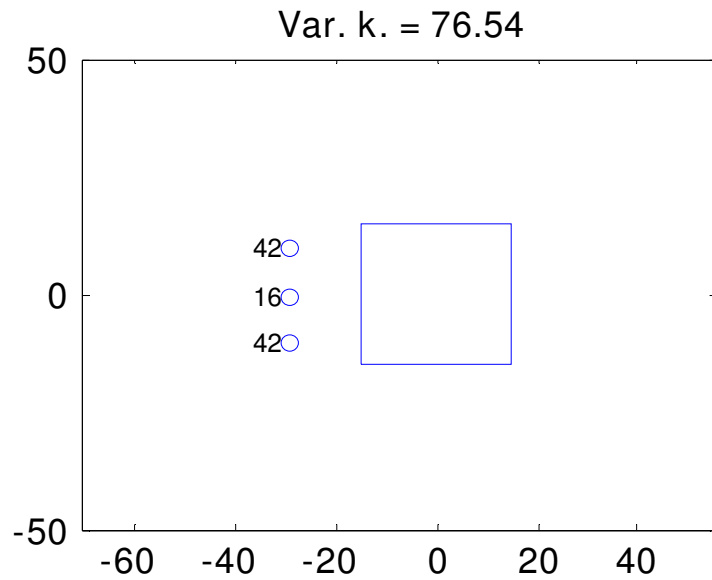
Var. k. = 1.06



Var. k. = 5.03

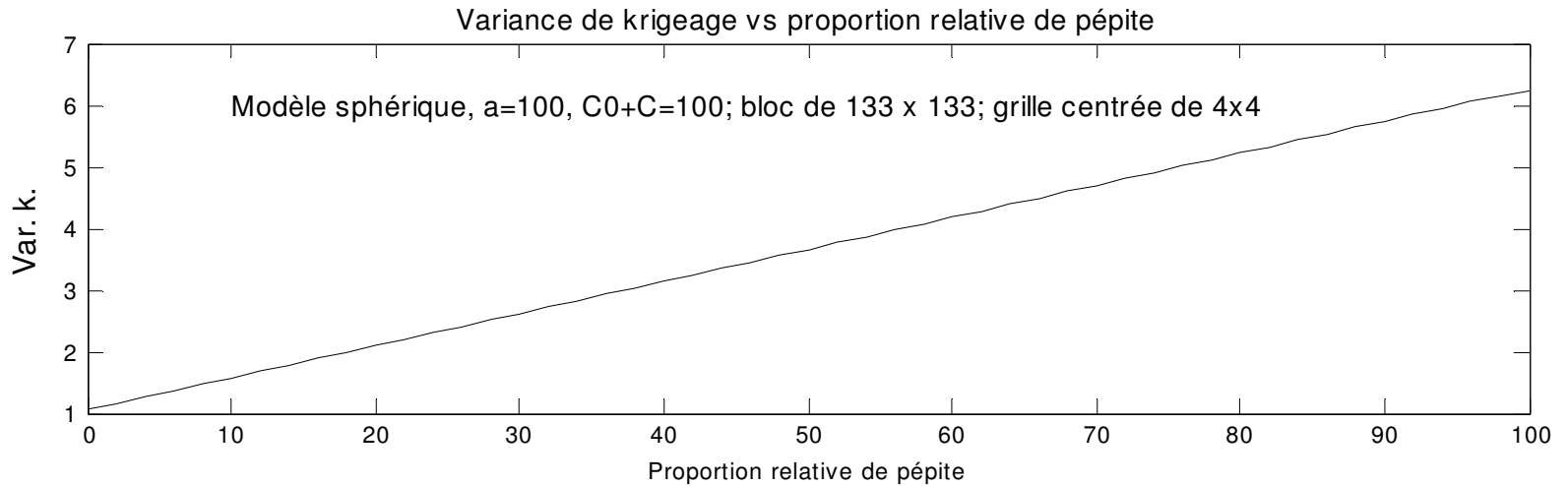


Tient compte de la redondance des données

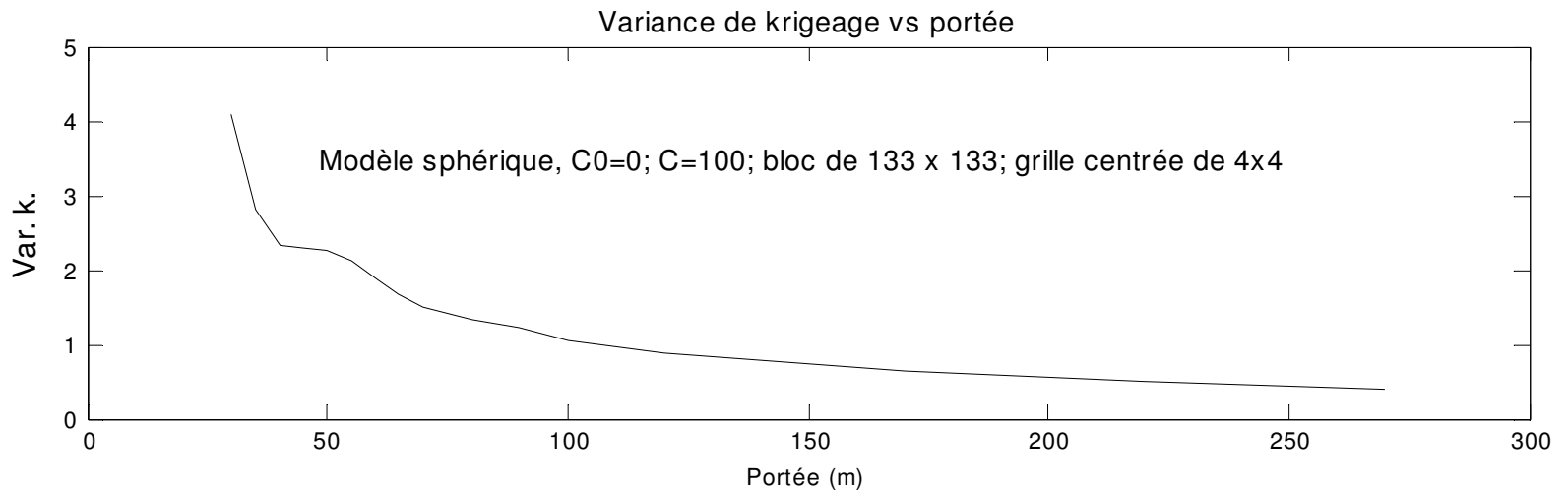


Tient compte de la continuité spatiale

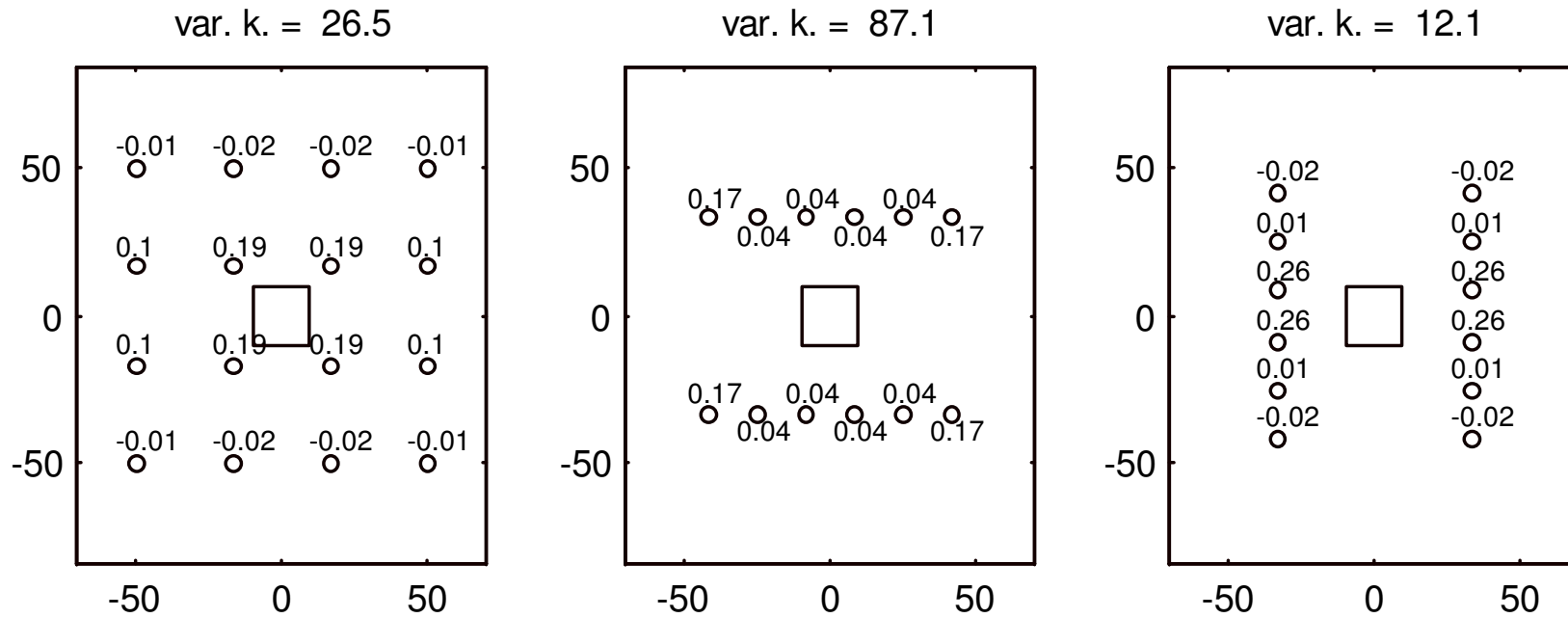
Effet de pépite



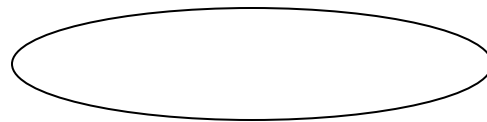
Portée



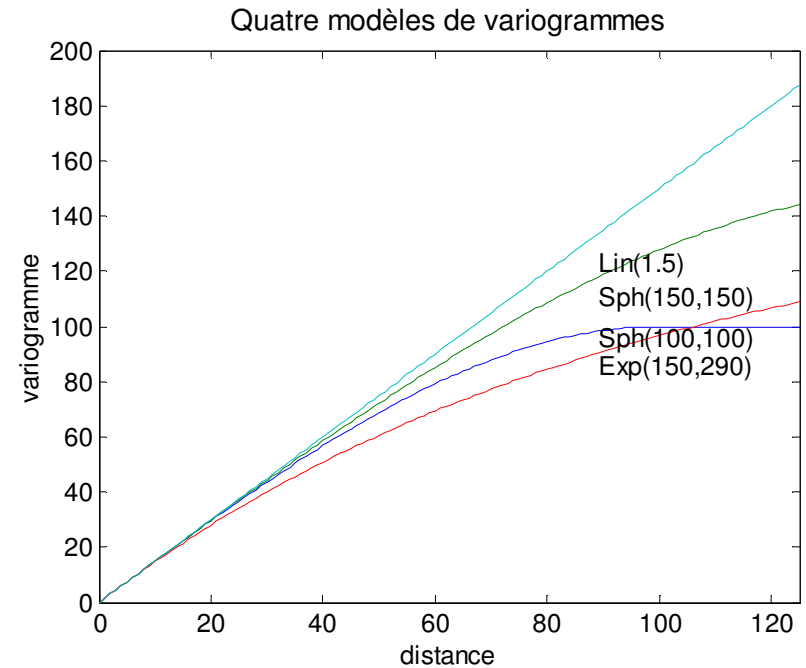
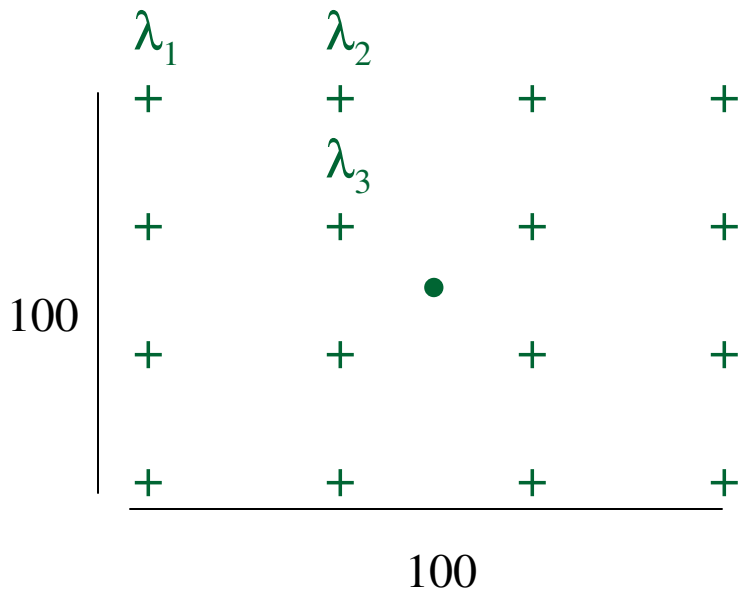
Influence d'anisotropies



Var. anisotrope



Influence du modèle



	λ_1	λ_2	λ_3	σ_k^2
Sphérique, C=100, a=100	-0.02	-0.01	.29	28.0
Sphérique, C=150, a=150	-0.01	-0.01	.29	27.8
Exp. C=150, a _{eff} =290	-0.01	-0.01	.28	28.2
Linéaire, pente=1	-0.01	-0.01	.28	27.6

**4 ajustements équivalents
h<30**

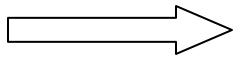
=> mêmes poids λ

=> même σ_k^2

Effet de lissage

K. Simple

$$\text{Var}(Z_v) = \text{Var}(Z_v^*) + \sigma_{\text{ks}}^2$$



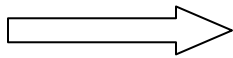
$$\text{Var}(Z_v^*) \leq \text{Var}(Z_v)$$

L'estimateur KS est toujours moins variable que la réalité qu'il cherche à estimer

K. Ordinaire

$$\text{Var}(Z_v) = \text{Var}(Z_v^*) + \sigma_{\text{ko}}^2 + 2\mu$$

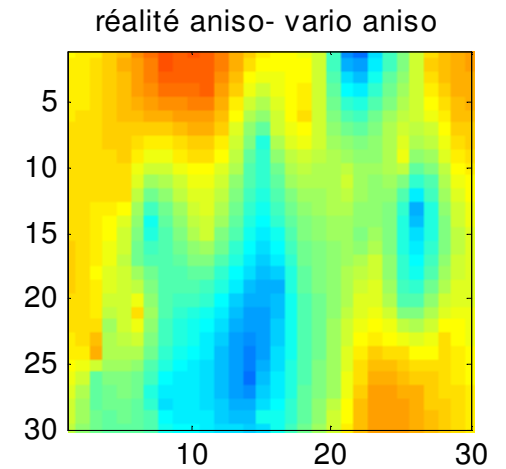
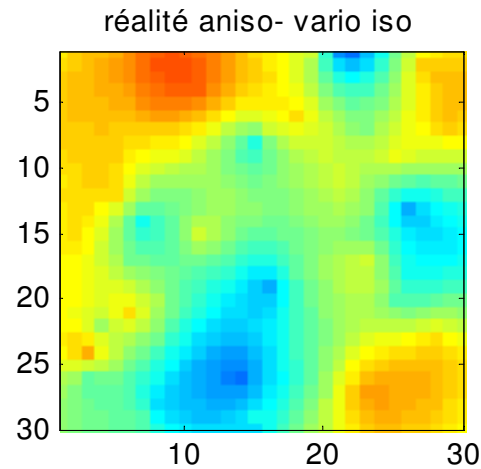
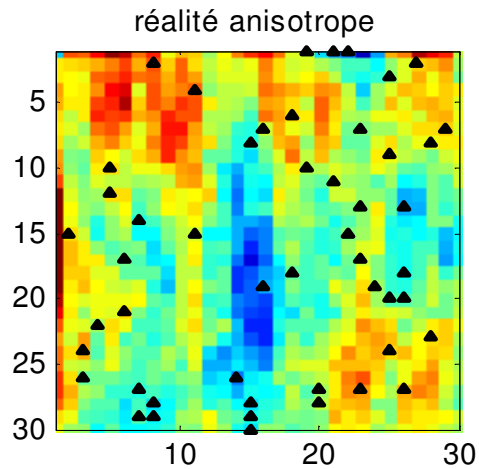
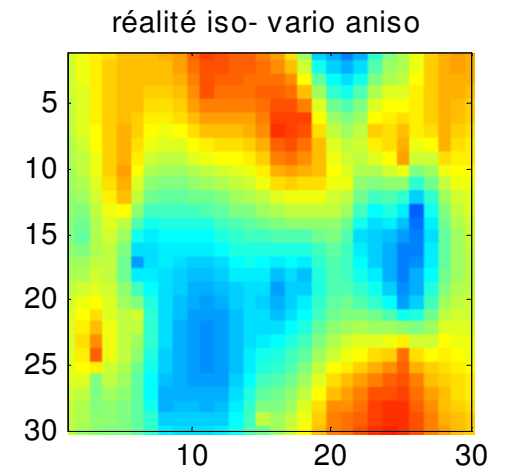
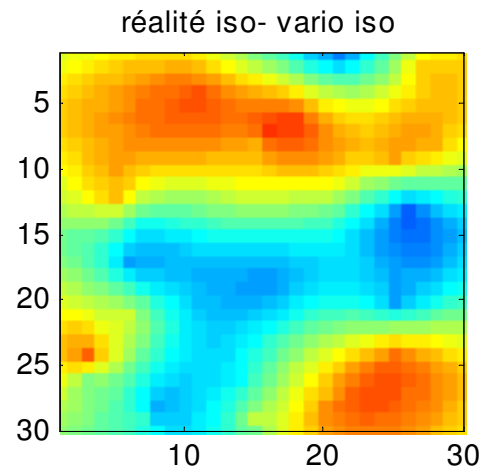
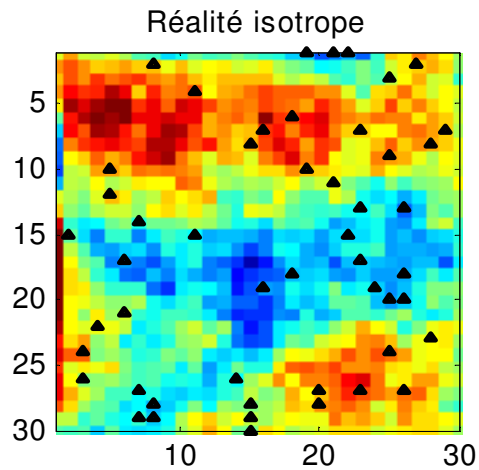
Habituellement $\mu < 0$ et $|2\mu| < \sigma_{\text{ko}}^2$



$$\text{Var}(Z_v^*) \leq \text{Var}(Z_v)$$

L'estimateur KO est habituellement moins variable que la réalité qu'il cherche à estimer

Exemple



Biais conditionnel

Si Z_v et Z_v^* suivent une loi binormale de moyenne « m » :

$$E[Z_v | Z_v^*] = a + bZ_v^*$$

$$b = \frac{\text{Cov}(Z_v, Z_v^*)}{\text{Var}(Z_v^*)}$$

Équations de la régression

et

$$a = (1-b)m$$

Krigeage simple, par construction :

$$\text{Var}(Z_v^*) = \text{Cov}(Z_v, Z_v^*) \Rightarrow b = 1, a = 0$$

$$\Rightarrow E[Z_v | Z_v^*] = 0 + 1 * Z_v^* = Z_v^*$$

L'estimateur KS est *sans biais conditionnel* dans le cas normal

Krigeage ordinaire

Par construction :

$$\underbrace{\text{Var}(Z_v^*) + \mu = \text{Cov}(Z_v, Z_v^*)}_{\text{Équations du KO}} \Rightarrow b = 1 + \frac{\mu}{\text{Var}(Z_v^*)}, a = \frac{-\mu}{\text{Var}(Z_v^*)}$$

Équations du KO

$$\Rightarrow E[Z_v | Z_v^*] = Z_v^* + \frac{\mu}{\text{Var}(Z_v^*)} (Z_v^* - m)$$

Dans le cas normal, l'estimateur KO présente un **biais conditionnel proportionnel** à μ . Habituellement,

$\mu < 0 \Rightarrow b < 1$, les fortes valeurs de KO ***surestiment*** les vraies teneurs des blocs
 $|\mu|$ est faible \Rightarrow le KO est ***presque*** sans biais conditionnel

Lien entre lissage et biais conditionnel

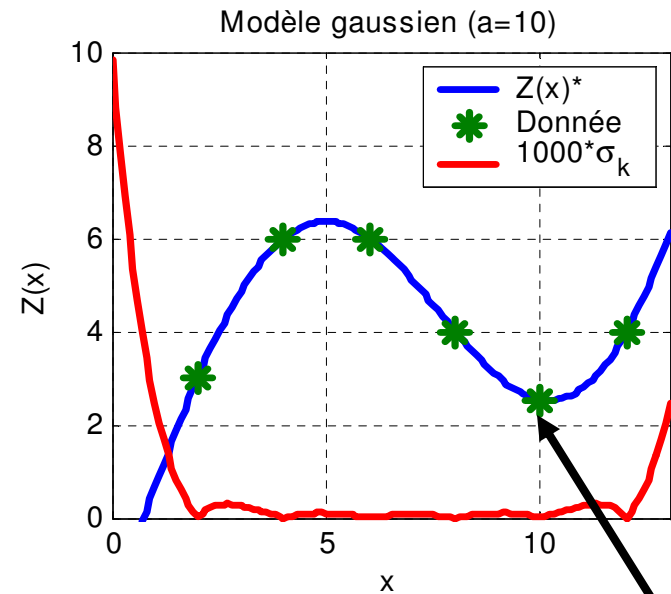
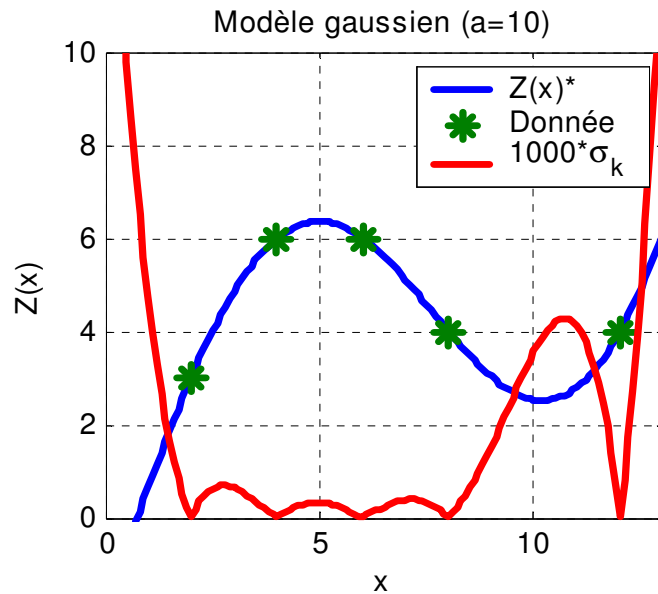
$$b = \frac{\text{Cov}(Z_v, Z_v^*)}{\text{Var}(Z_v^*)}$$

$$b = \frac{\rho \sigma_v \sigma_v^*}{\text{Var}(Z_v^*)} = \frac{\rho \sigma_v}{\sigma_v^*}$$

Absence de biais conditionnel $\Rightarrow b=1 \Rightarrow \sigma_v^* \leq \sigma_v$

Un estimateur sans lissage est nécessairement avec biais conditionnel.
Les valeurs estimées doivent montrer une variance inférieure aux vraies valeurs.

Le krigeage est transitif



À droite, à $x=10$, on observe une donnée égale à la valeur krigée à gauche. Toutes les valeurs krigées demeurent inchangées. Seules les variances de krigeage sont réduites.

Aspects pratiques du krigeage

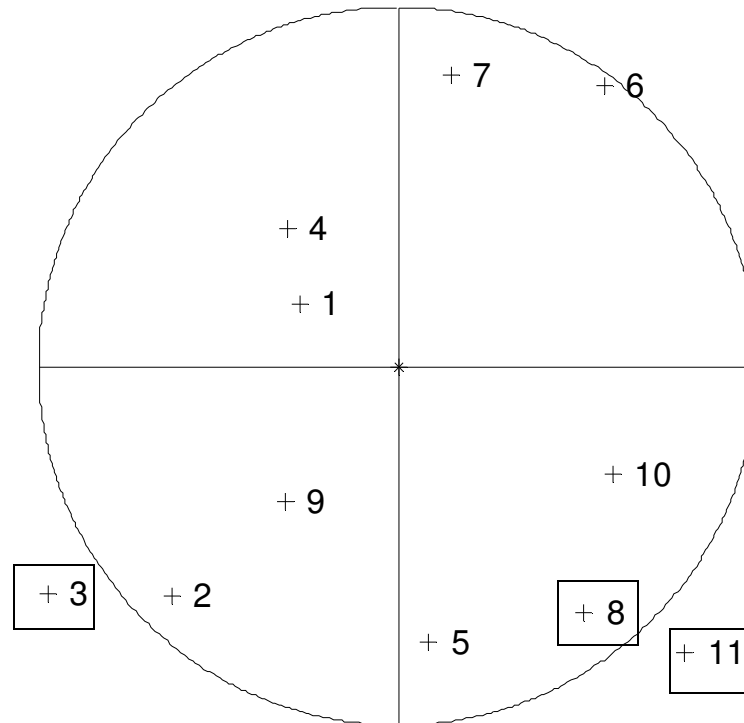
Krigeage ordinaire => syst. d'éq. linéaire (n+1) équations et (n+1) inconnues
=> limite pratique sur « n »

« m » est estimée implicitement => voisinage glissant (ou local) permet de relaxer l'hypothèse de stationnarité (« m » peut fluctuer d'un voisinage à l'autre)

Grille de krigeage: régulière ou non, points ou blocs.

Voisinage utilisé pour le krigeage:

- Habituellement en voisinages glissants.
- Nombre de points suffisant (>10; peut atteindre jusqu'à 50-100).
 - Zone de recherche assez grande pour assurer un minimum de points.
 - Recherche par quadrants (2D) ou octants (3D) (min 2 ou 3 points par quadrant/octant)

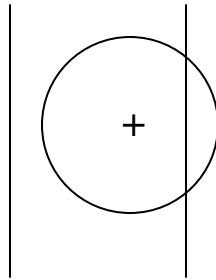
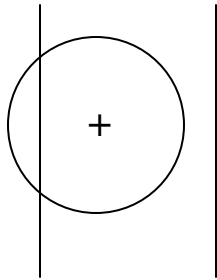


Exemple: Recherche circulaire, maximum de 2 points par quadrant.

3 et 11 sont rejetés car en dehors du cercle de recherche.

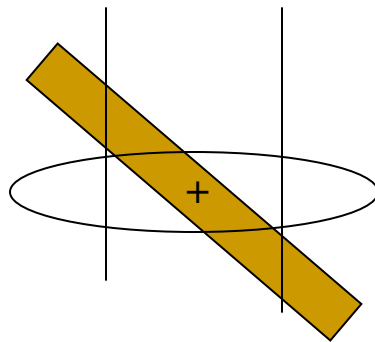
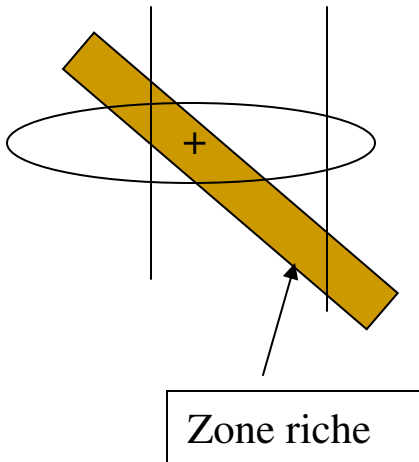
8 est rejeté car deux autres points sont plus proches dans ce quadrant.

Dans certains cas, le choix d'un voisinage approprié est crucial !



Tous les points proviennent d'un même forage =>

- discontinuité prononcée sur la carte
- estimation peu précise



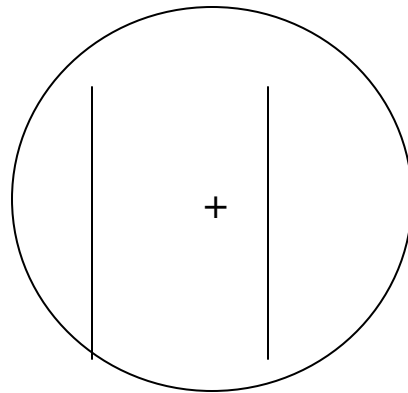
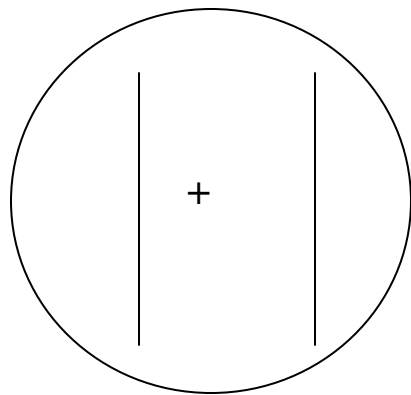
Les points proviennent des 2 forages =>

à gauche : qq points dans la zone riche

À droite : aucun point dans la zone riche

=>

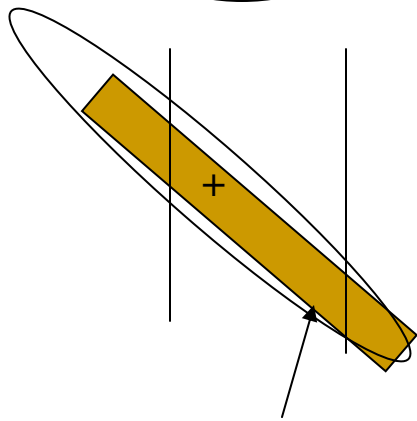
- discontinuité prononcée sur la carte
- estimation peu précise



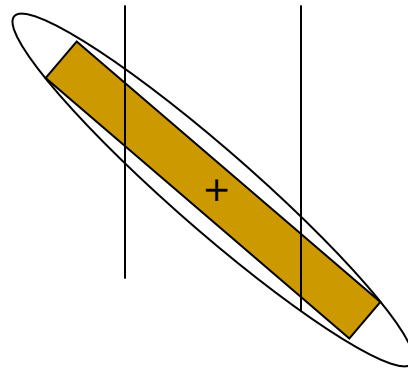
Les points proviennent des 2 forages =>

- pas de discontinuité

- estimation précise



Zone riche

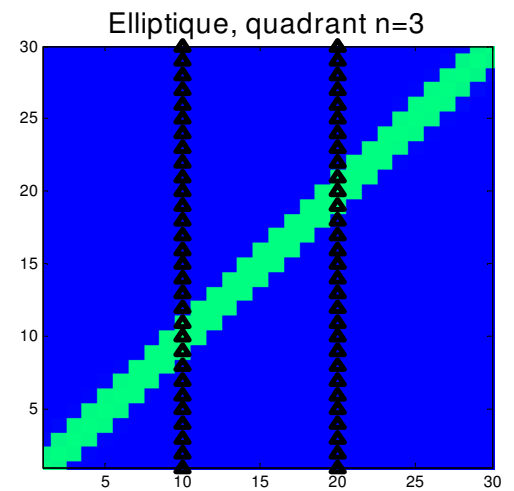
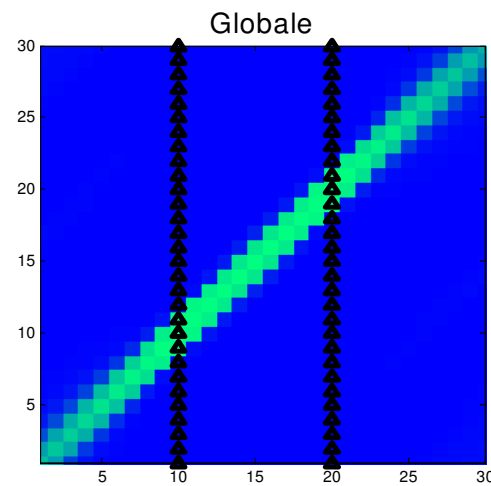
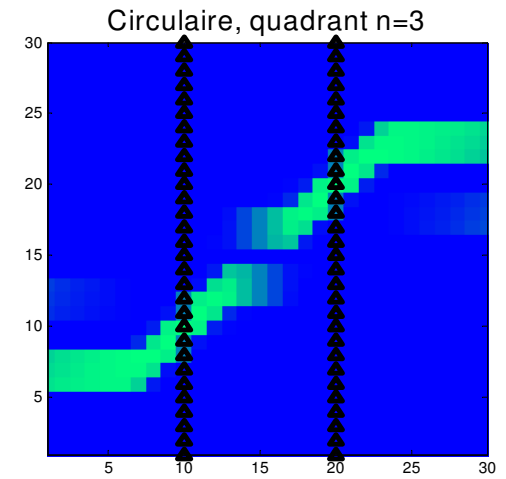
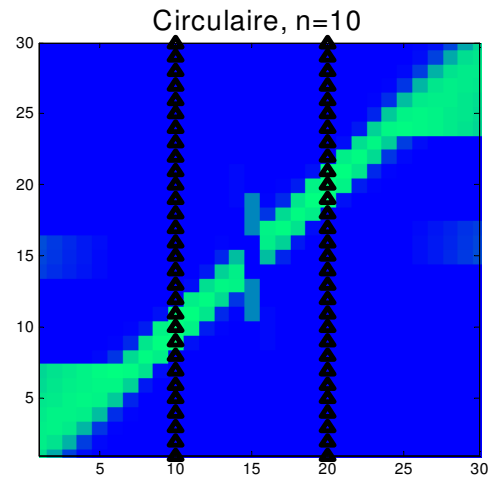
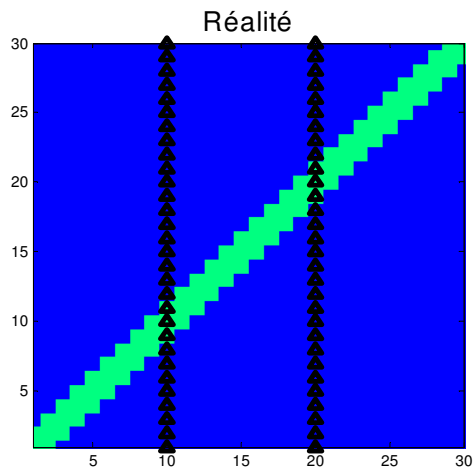


Les points proviennent des 2 forages =>

- pas de discontinuité

- estimation précise

Exemple



Validation croisée

Valider le modèle de variogramme

Valider le voisinage utilisé pour le krigeage

résidu : $e_i = Z_i - Z_i^*$ résidu normalisé

$$n_i = \frac{e_i}{\sigma_{ki}}$$

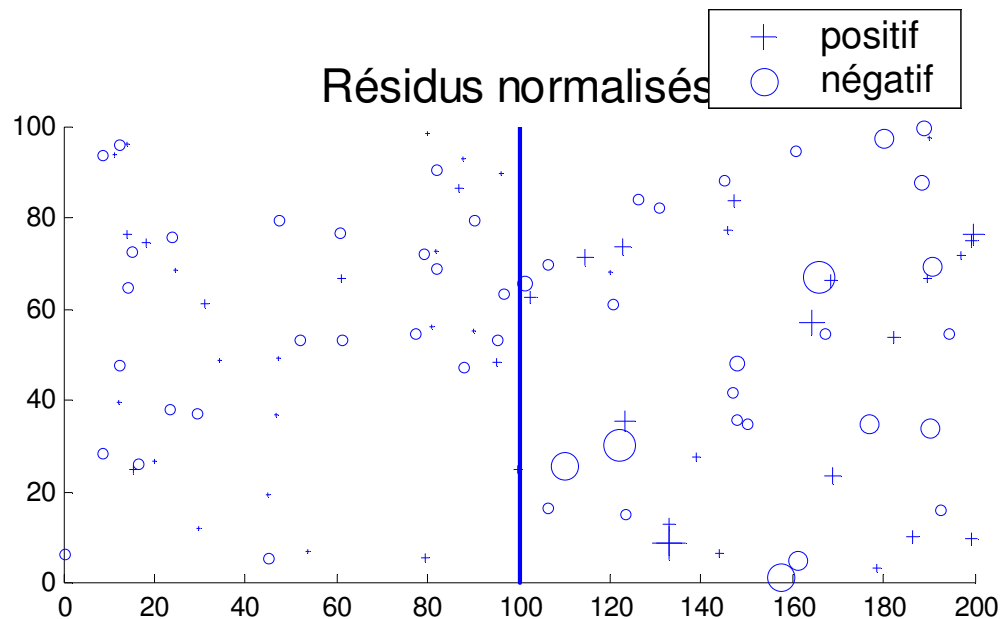
$$\sum_i e_i \approx 0 \text{ et } \sum_i n_i \approx 0$$

$$\sum_i |e_i| \text{ min ou } \sum_i e_i^2 \text{ min}$$

$$\left(\frac{1}{N} \sum_i n_i^2 \right)^{0.5} \approx 1$$

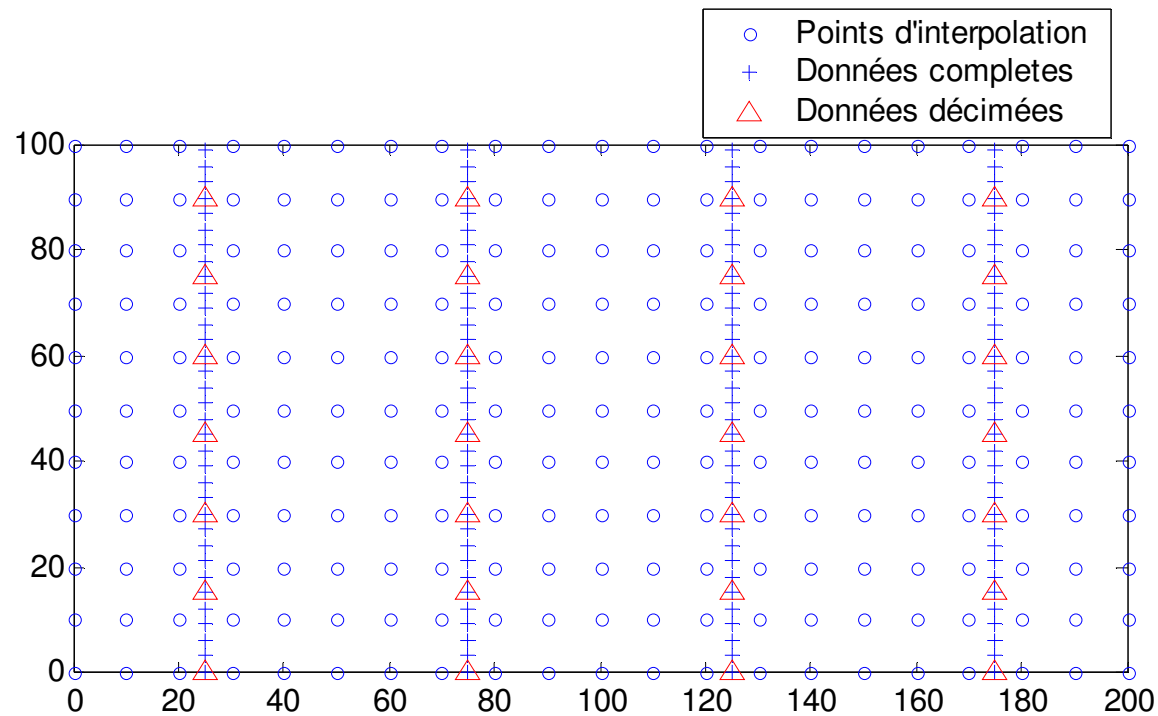
Aussi :

- histogramme des résidus et résidus normalisés
- carte des résidus et résidus normalisés



Résidus normalisés +
grands à droite qu'à
gauche => considérer
scinder le domaine en 2

- important de reproduire dans la validation des situations réalistes d'estimation (semblables à celles du krigeage final)

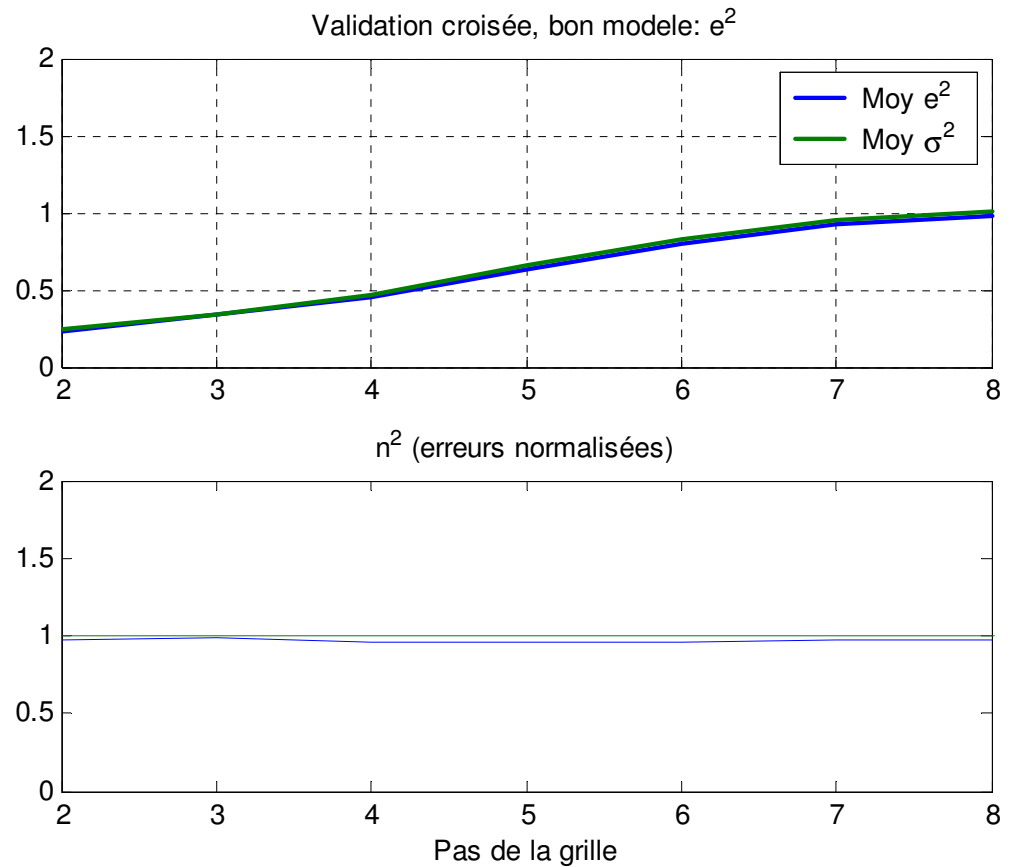


Avec grille complète des données => valider le variogramme à petite échelle seulement

Avec grille décimée => valider le variogramme pour des distances + grandes

Exemple de validation croisée

1600 points (40 x 40)
Pas de la grille variable
50 voisins
Sphérique $a=10$, $C=1$ $C_0=0$
(bon modèle)

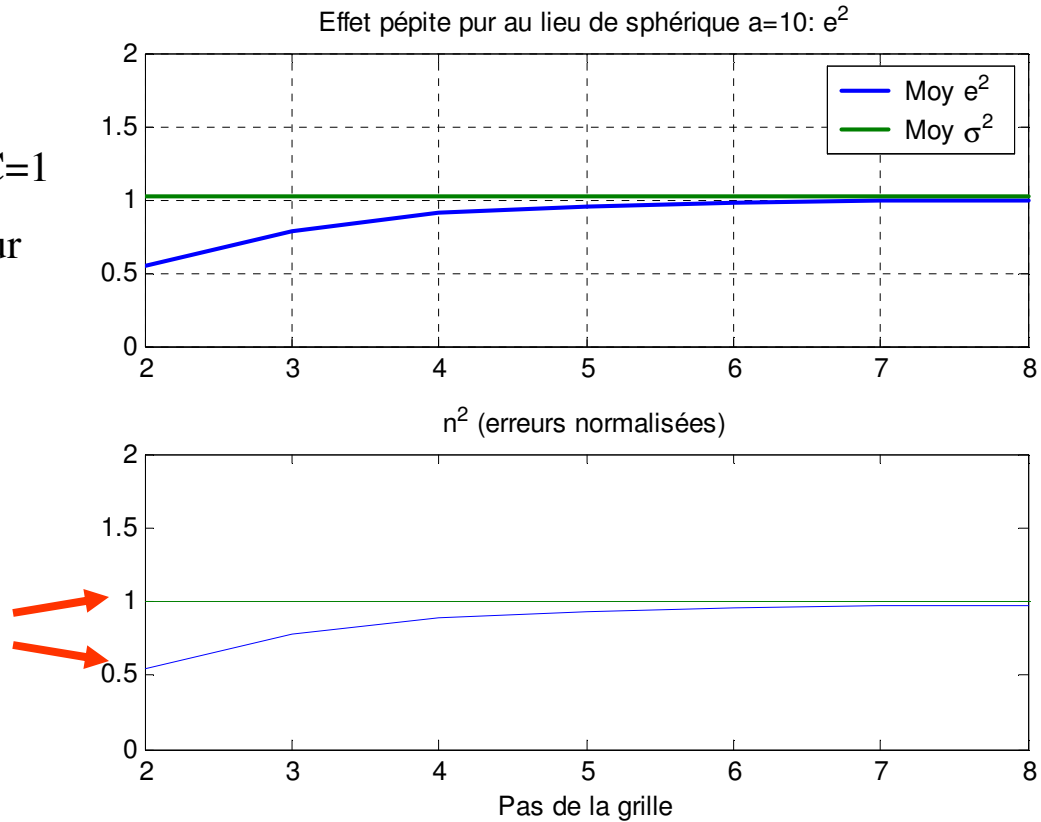


Idem

Vrai modèle : Sphérique $a=10$, $C=1$

Modèle validé: effet de pépite pur
 $C_0=1$

Le modèle validé
est pessimiste par
rapport au vrai
modèle



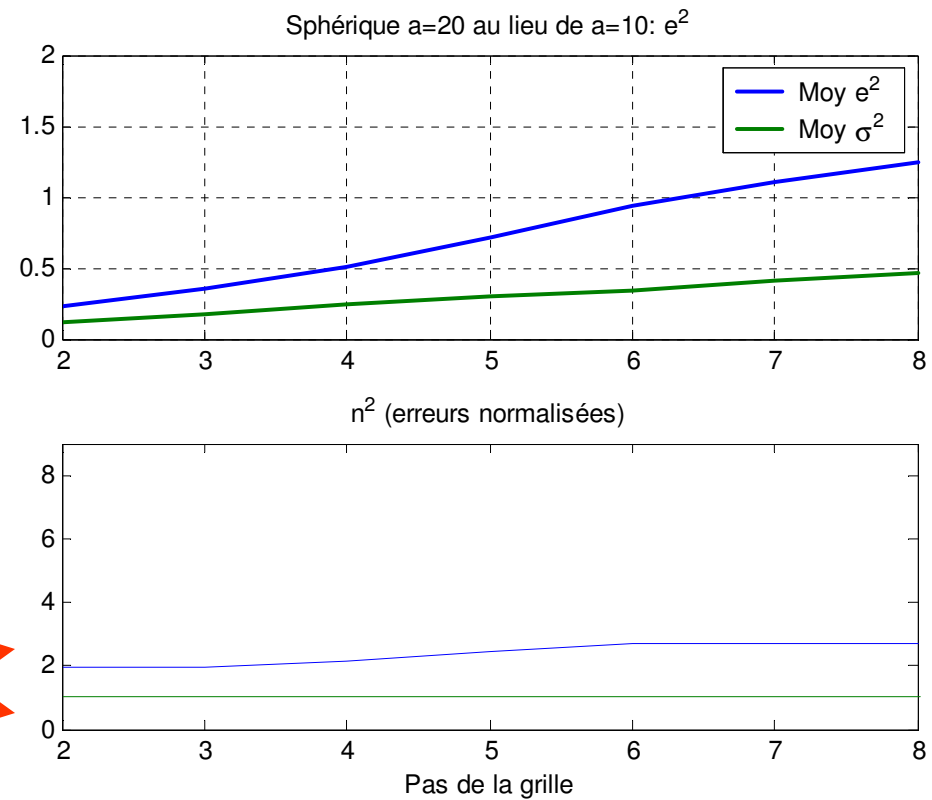
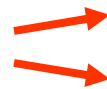
Pourquoi à de larges mailles la validation fournit-elle de bons résultats ?

Idem

Vrai modèle : Sphérique a=10, C=1

Modèle validé: Sphérique a=20, C=1

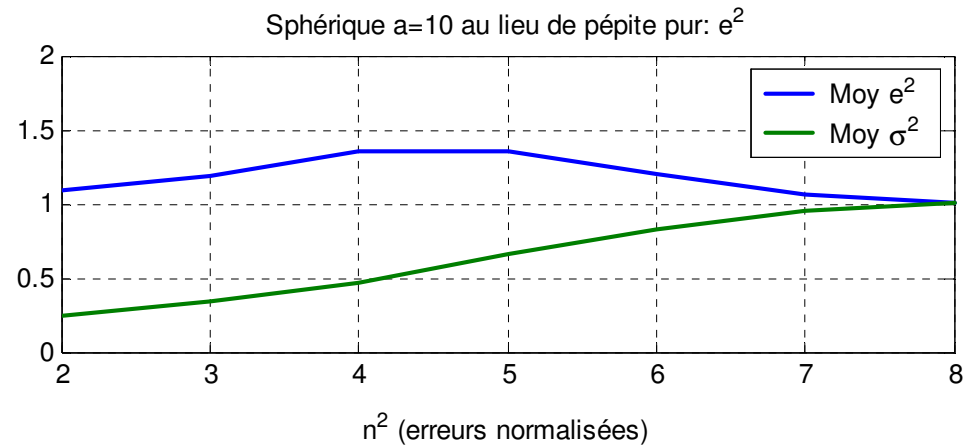
Le modèle validé
est optimiste par
rapport au vrai
modèle



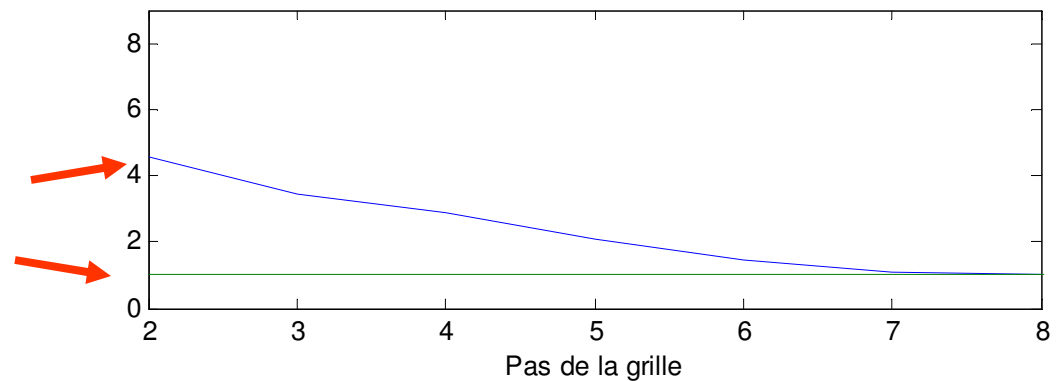
Idem

Vrai modèle : Effet de pépite pur, $C_0=1$

Modèle validé: Sphérique $a=10$, $C=1$

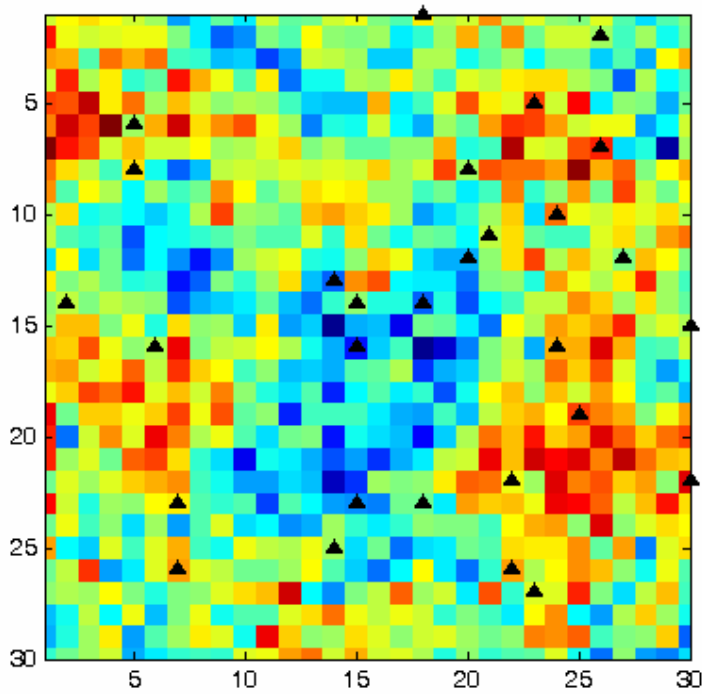


Le modèle validé
est optimiste par
rapport au vrai
modèle



Pourquoi à de larges mailles la validation fournit-elle de bons résultats ?

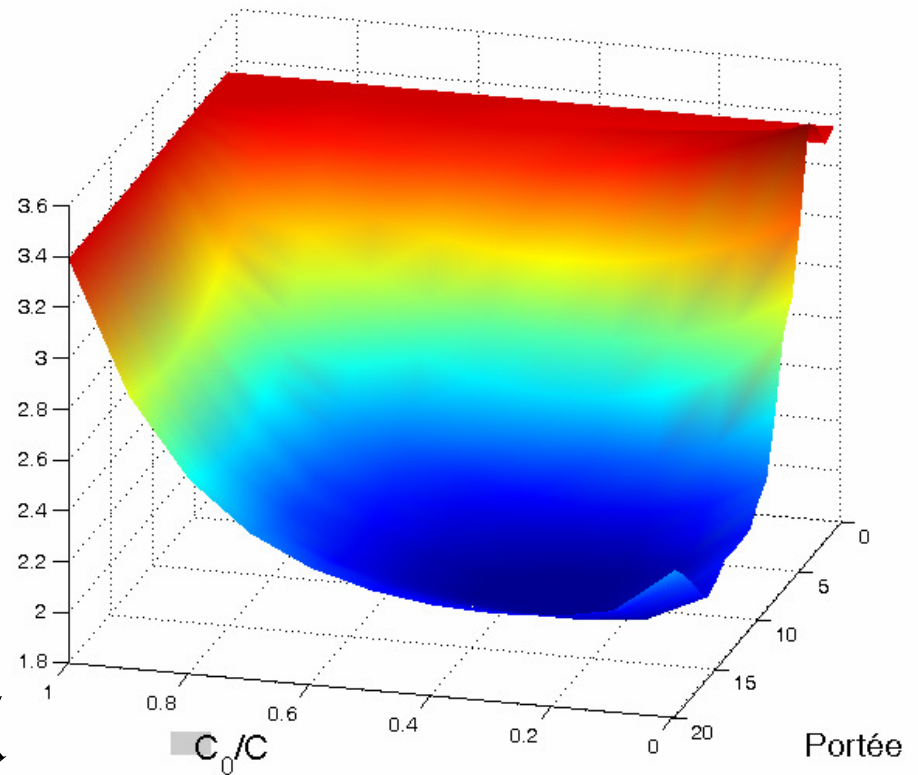
Exemple simulé



Nb. données =30

Validation

Var(e)



Minimum en $a=15$, $C_0/C=0.3$; près des valeurs utilisées pour la simulation ($C_0/C=0.33$; $a=10$)

Autres mesures de validation

-Variance expérimentale des observations vs valeur théorique $D^2(\bullet|G)$

-Variance expérimentale des valeurs krigées vs valeurs théoriques (pour différentes tailles de blocs « v »)

$$\hat{\sigma}_{Z_v}^{2*} \approx D^2(Z_v | G) - \bar{\sigma}_{k_0}^2 - 2\bar{\mu}$$

Variance
expérimentale des
valeurs krigées

Valeur moyenne des
variances de krigage

Valeur moyenne des
multiplicateurs de Lagrange

Lien entre KS et KO

KO => estimer « m » par KO suivi de KS avec cette moyenne estimée

Estimation de « m » par KO => $\lambda_{m,i}$ μ_m $\sigma_{ko,m}^2 = -\mu_m$

Estimation de $Z_v(x)$ par KO => $\lambda_{o,i}$ μ σ_{ko}^2

Estimation de $Z_v(x)$ par KS avec m estimé par KO => $\lambda_{s,i}$ σ_{ks}^2 $S_s = (1 - \sum_i \lambda_{s,i})$

$$\lambda_{o,i} = \lambda_{s,i} + S_s \lambda_{m,i}$$

$$\mu = S_s \mu_m$$

$$\sigma_{ko}^2 = \sigma_{ks}^2 + S_s^2 \sigma_{ko,m}^2$$