GLQ3401/GLQ3651 : Deuxième partie
Cours 8 : Variance d'estimation et krigeage

POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL

UNIVERSITÉ
D'INGÉNIERIE

GLQ3401/GLQ3651 : Deuxième partie
Cours 8a) Variance d’estimation

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
UNIVERSITÉ D’INGÉNIERIE

Plan du cours

Cours : Variance d'estimation

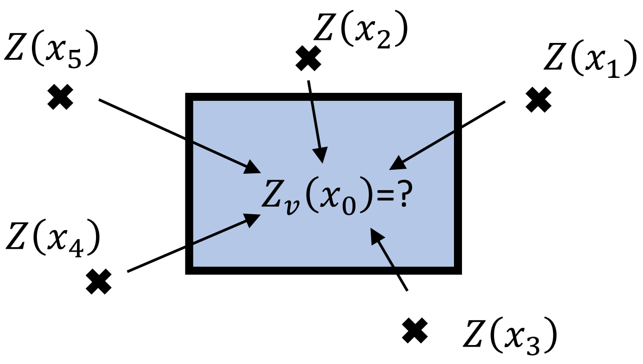
1. Définition
2. Les trois composantes essentielles
3. Applications
4. Abaques
5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires
6. Calcul numérique
7. Abaques moins fréquents

Objectifs

Variance d'estimation

- Comprendre la notion de variance d'estimation;
- Calculer des variances d'estimation pour une configuration d'estimation et le modèle de variogramme;
- Identifier le lien entre patron d'échantillonnage et anisotropie du variogramme.

0. Où sommes-nous rendus ?



Nous savons comment déterminer la continuité spatiale de notre gisement ;

Nous savons comment transformer nos données de forages en teneur de blocs ;

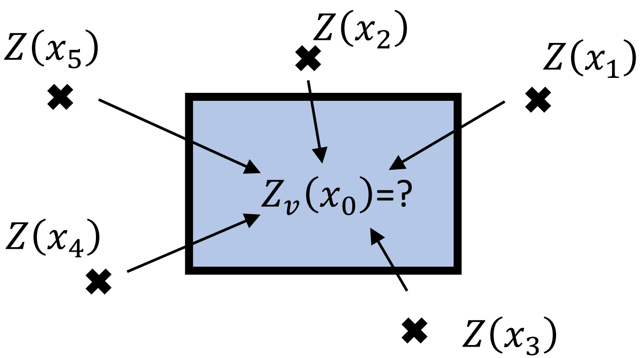
Nous savons comment calculer la variance de bloc de notre gisement ;

Nous savons comment comparer l'efficacité entre différentes méthodes d'homogénéisation des minerais ;

Que manque-t-il pour raffiner et compléter notre modèle ?

0. Que manque-t-il pour compléter notre modèle ?

Contexte :



Comment estimer la teneur des blocs à des localisations non observées en tenant compte de la continuité spatiale ?

Quelle est l'erreur associée à l'estimation du bloc $Z_v(x)$?

Comment ces erreurs varient-elles dans l'espace selon la configuration des données ?

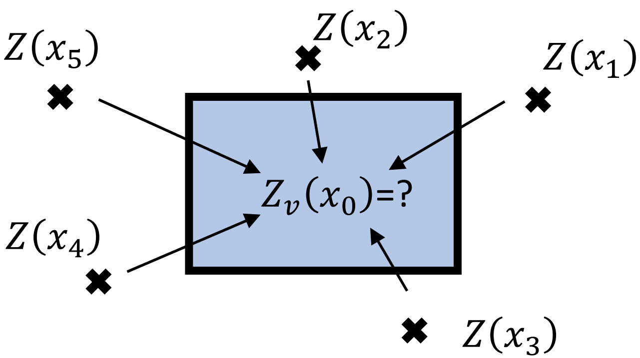
Quel sera l'impact sur l'évaluation des ressources ?

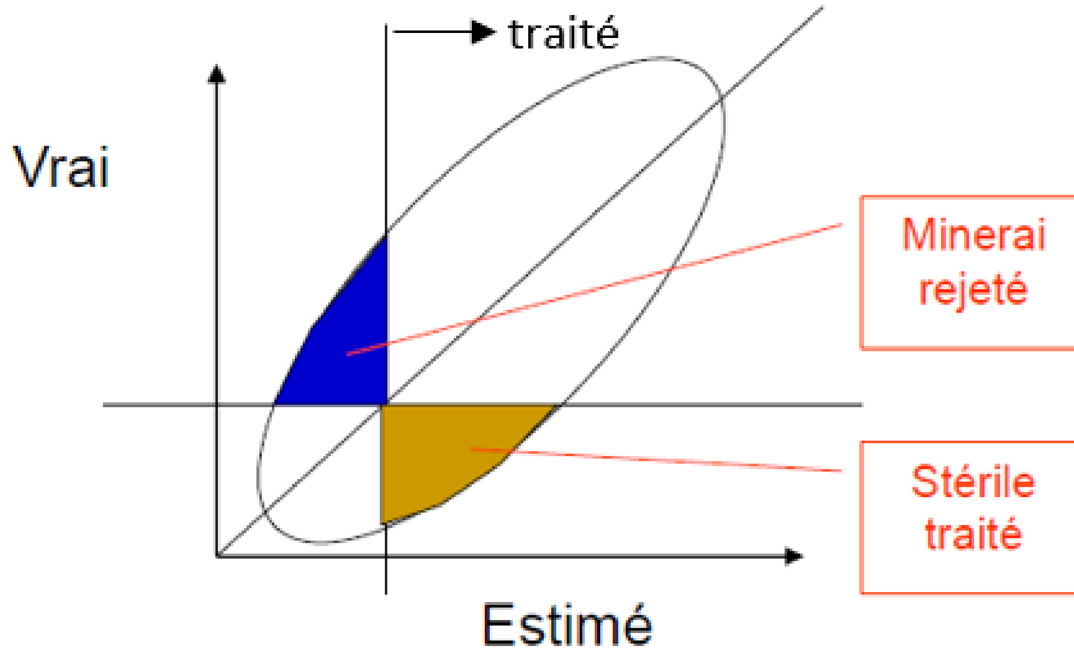
Peut-on juger l'efficacité de deux méthodes d'estimation différentes (p. ex. polygone, inverse de la distance, triangle, krigeage) ?

Quel patron d'échantillonnage favoriser selon la continuité spatiale du gisement ?

0. Que manque-t-il pour compléter notre modèle ?

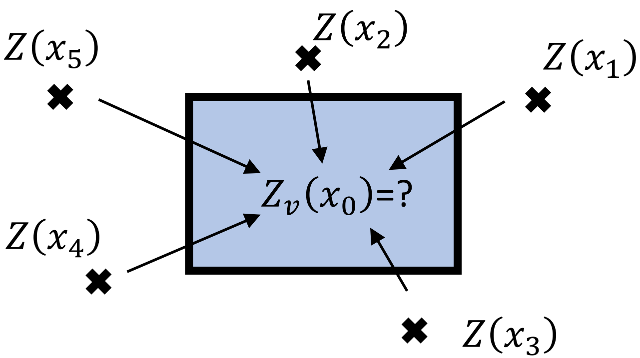
Conclusion : on cherche à maximiser notre effet d'information





1. Définition

Équation :



Estimation linéaire du bloc v :

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

Erreur d'estimation du bloc v :

$$e = Z_v - Z_v^*$$

(erreur = réel – estimé)

$$\text{Variance d'estimation} = Var(e) = Var(Z_v - Z_v^*)$$

2. Les trois composantes essentielles

Signification :

$$Var(e) = Var(Z_v - Z_v^*)$$

$$Var(e) = Var(Z_v) + Var(Z_v^*) - 2Cov(Z_v, Z_v^*)$$

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

$$\sigma_e^2 = Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$

Ce que l'on cherche à estimer est-il foncièrement variable ou non ?

Quel est le degré de redondance entre les observations ?

Les observations sont-elles bien placées par rapport à ce que l'on veut estimer ?

Exercice en équipe

1) Comprendre l'importance des trois composantes essentielles de la variance d'estimation

$$\sigma_e^2 = Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2\sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$

Ce que l'on cherche à estimer est-il foncièrement variable ou non ?

Quel est le degré de redondance entre les observations ?

Les observations sont-elles bien placées par rapport à ce que l'on veut estimer ?

2. Les trois composantes essentielles

En termes de variogramme :

Si nous posons : $\sum_i \lambda_i = 1$ ⟵ Vrai pour la plupart des estimateurs

$$Var(e) = \sigma_e^2 = -\bar{\gamma}(v,v) - \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \gamma(x_i, x_j) + 2 \sum_i \lambda_i \bar{\gamma}(x_i, v)$$

Que remarquez-vous sur la structure de l'équation ?

$Var(e)$ **ne dépend que de la géométrie et du variogramme**. Indépendant des valeurs *observées* et estimées. Existe même si le variogramme ne présente pas un palier.

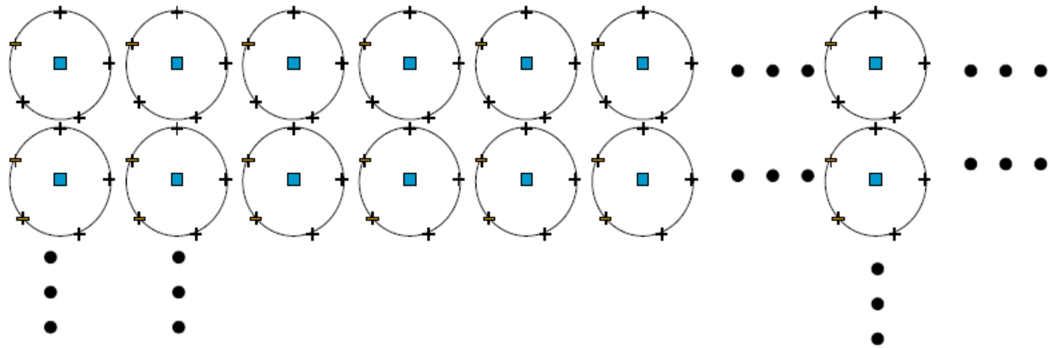
Note : Si la condition sur les poids n'est pas respectée, alors il n'est pas possible de calculer $var(e)$ lorsque le variogramme n'a pas de palier.

2. Les trois composantes essentielles

Interprétations de $Var(e)$:

- Ne dépend pas des valeurs → mesure non conditionnelle

- Représente la variance des erreurs que l'on obtiendrait si l'on faisait glisser le bloc et la configuration de données sur un domaine très grand



3. Applications

Utilité :

1. Comparer la précision obtenue par différentes méthodes d'interpolation
   - P. Ex. : Polygone vs Inverse de la distance vs Triangle vs Krigeage

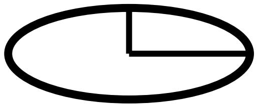
2. Déterminer le nombre d'observations requises pour atteindre une précision donnée
   - P. Ex. Planification des campagnes d'échantillonnage

3. Déterminer un patron d'échantillonnage optimal
   - P. Ex. Localisation des forages selon la continuité spatiale du gisement

3. Applications : patron d'échantillonnage

Choix de la grille :

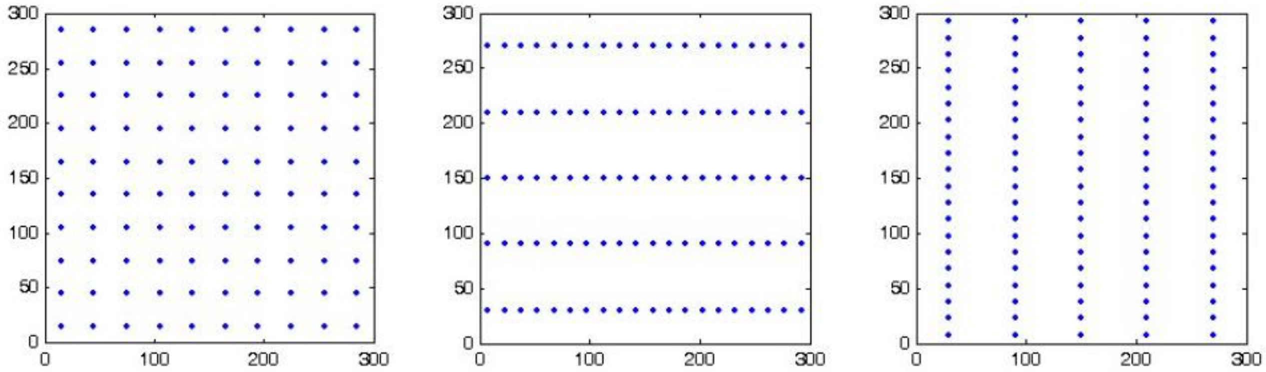
Portée variogramme



Variogramme sphérique $\left(a_x = 100, a_y = 25, C = 40, C_0 = 10\right)$

Domaine à estimer : 300×300

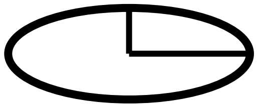
100 observations, 3 patrons différents. Lequel procure la plus grande précision pour l'estimation globale ?



3. Applications : patron d'échantillonnage

Choix de la grille :

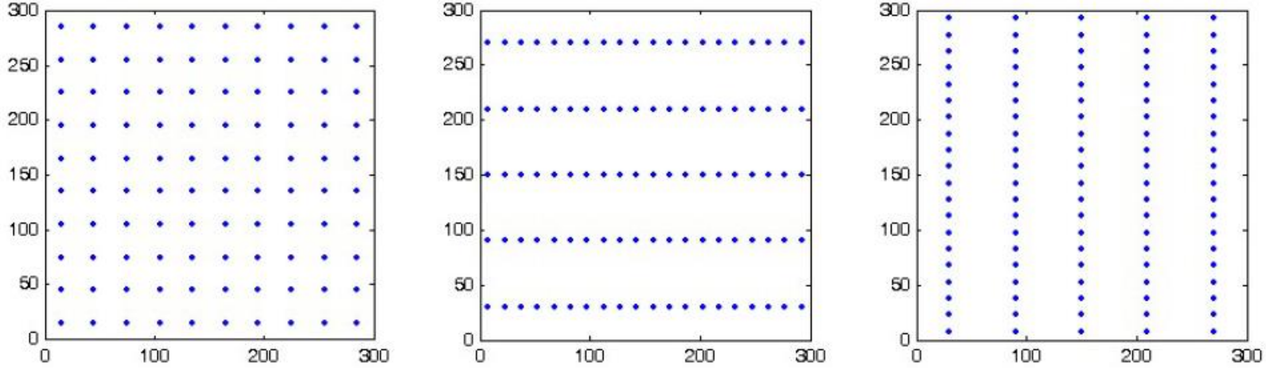
Portée variogramme



Variogramme sphérique $\left(a_x = 100, a_y = 25, C = 40, C_0 = 10\right)$

Domaine à estimer : 300×300

$Var(e) = 0.24$ $\quad Var(e) = 0.36$ $\quad Var(e) = 0.19$



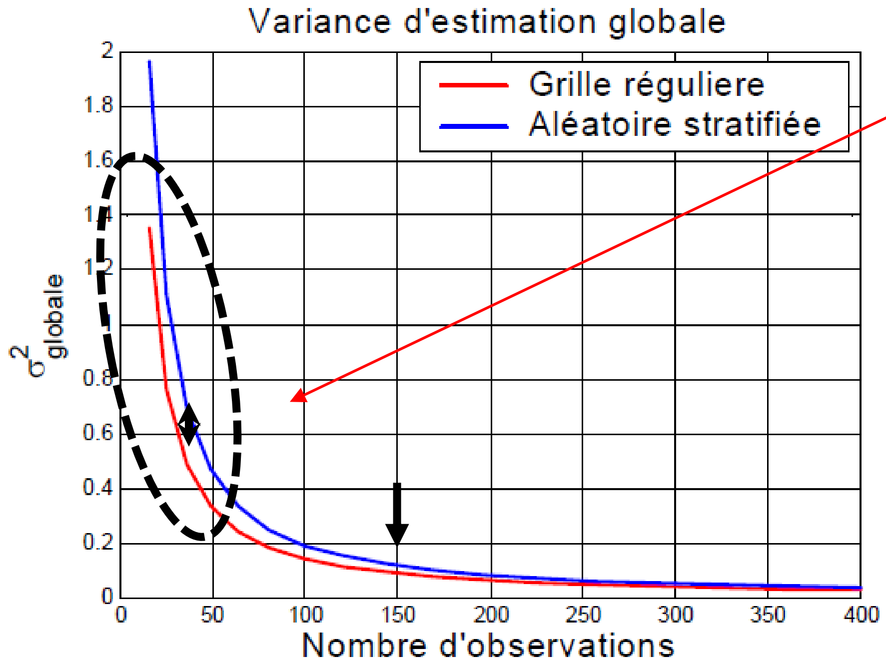
Densifier l'échantillonnage dans la direction de faible continuité spatiale

3. Applications : nombre d'observations requis et grille

Grille aléatoire versus grille régulière :

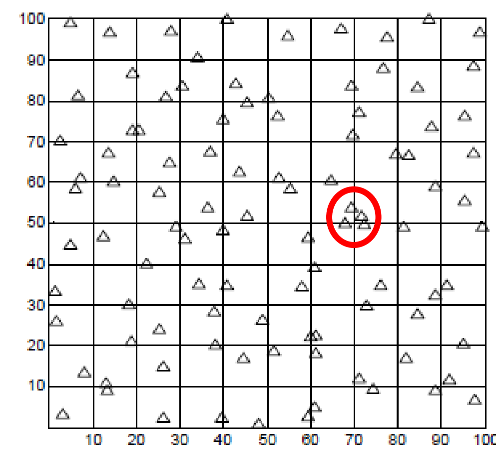
Variogramme sphérique $(a = 100, C = 40, C_0 = 10)$

Domaine à estimer : 300×300



Que constatez-vous ?

Grille aléatoire stratifiée

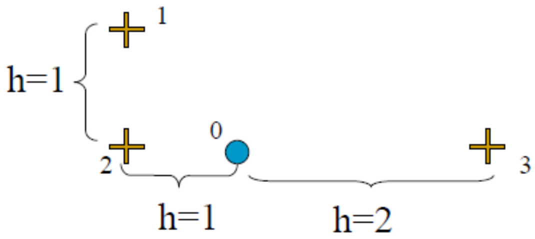


3. Applications : comparaison méthodes d'estimation

Estimateur linéaire :

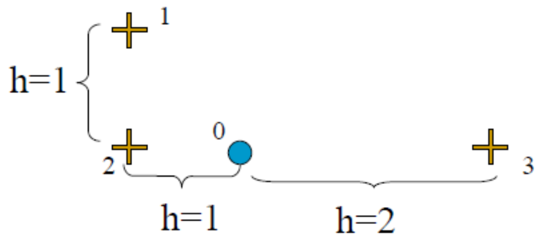
On peut calculer $Var(e)$ pour tout estimateur linéaire

1) Polygone
   - $\lambda_i = 1, \lambda_j = 0 \; \forall \, j \neq i$
2) Inverse de la distance
   - $\lambda_i = \frac{1/d_i^b}{\sum_{j=1}^{n} 1/d_j^b}$
3) Triangle
   - $\lambda_i = \frac{w_i}{\sum_{j=1}^{3} w_j}, \forall \, i = 1, \dots, 3$
4) Krigeage
   - $\sum_{j=1}^{n} \lambda_j Cov(Z_i, Z_j) = Cov(Z_i, Z_v), \forall \, i$
   - $\sum_{j=1}^{n} \lambda_j = 1$



On a un outil pour juger de la précision d'une méthode versus une autre pour un gisement donné !

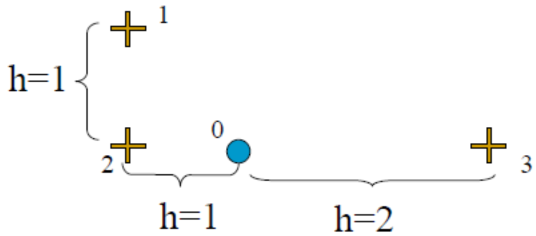
Exemple : variogramme linéaire



Variogramme linéaire, pente=1, C_0=1

Méthode	Poids	Var(e)
Polygone	l_1=0; l_2=1; l_3=0	4.0
Inverse de la distance (b=1)	l_1=0.32; l_2=0.45; l_3=0.23	2.72
Inverse de la distance (b=2)	l_1=0.29; l_2=0.57; l_3=0.14	2.88
Triangle (méthode des %)	l_1=0; l_2=2/3; l_3=1/3	2.89
Krigeage	l_1=0.25; l_2=0.43; l_3=0.32	2.65

Exemple : variogramme sphérique

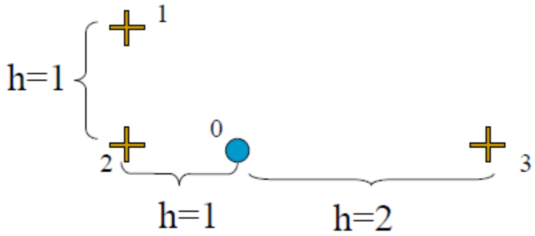


Variogr. sphérique a=10, C=1 C_0=0

Méthode	Poids	Var(e)
Polygone	l_1=0; l_2=1; l_3=0	0.30
Inverse de la distance (b=1)	l_1=0.32; l_2=0.45; l_3=0.23	0.21
Inverse de la distance (b=2)	l_1=0.29; l_2=0.57; l_3=0.14	0.22
Triangle (méthode des %)	l_1=0; l_2=2/3; l_3=1/3	0.20
Krigeage	l_1=0.16; l_2=0.53; l_3=0.31	0.20

3. Applications : comparaison méthodes d'estimation

Exemple : effet de pépite pur

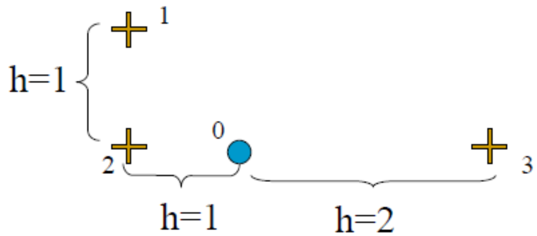


Effet de pépite pur, $C_0=1$

Méthode	Poids	Var(e)
Polygone	$l_1=0$; $l_2=1$; $l_3=0$	2
Inverse de la distance (b=1)	$l_1=0.32$; $l_2=0.45$; $l_3=0.23$	1.36
Inverse de la distance (b=2)	$l_1=0.29$; $l_2=0.57$; $l_3=0.14$	1.43
Triangle (méthode des %)	$l_1=0$; $l_2=2/3$; $l_3=1/3$	1.56
Krigeage	$l_1=1/3$; $l_2=1/3$; $l_3=1/3$	1.33

3. Applications : comparaison méthodes d'estimation

Exemple : variogramme gaussien



Gaussien a=2, C=1;

Méthode	Poids	Var(e)
Polygone	l_1=0; l_2=1; l_3=0	0.44
Inverse de la distance (b=1)	l_1=0.32; l_2=0.45; l_3=0.23	0.36
Inverse de la distance (b=2)	l_1=0.29; l_2=0.57; l_3=0.14	0.37
Triangle (méthode des %)	l_1=0; l_2=2/3; l_3=1/3	0.32
Krigeage	l_1=-0.01; l_2=0.74; l_3=0.27	0.31

3. Applications : comparaison méthodes d'estimation

Exemple : Tableau récapitulatif des $var(e)$

Méthode	Linéaire (pente=1,C_0=1)	Sphérique (a=10,C=1, C_0=0)	Pépite (C_0=1)	Gaussien (a=2,C=1, C_0=0)
Polygone	**4.00**	**0.30**	**2**	**0.44**
Inverse de la distance (b=1)	**2.72**	**0.21**	**1.36**	**0.36**
Inverse de la distance (b=2)	**2.88**	**0.22**	**1.43**	**0.37**
Triangle	**2.89**	**0.20**	**1.56**	**0.32**
Krigeage	**2.65**	**0.20**	**1.33**	**0.31**

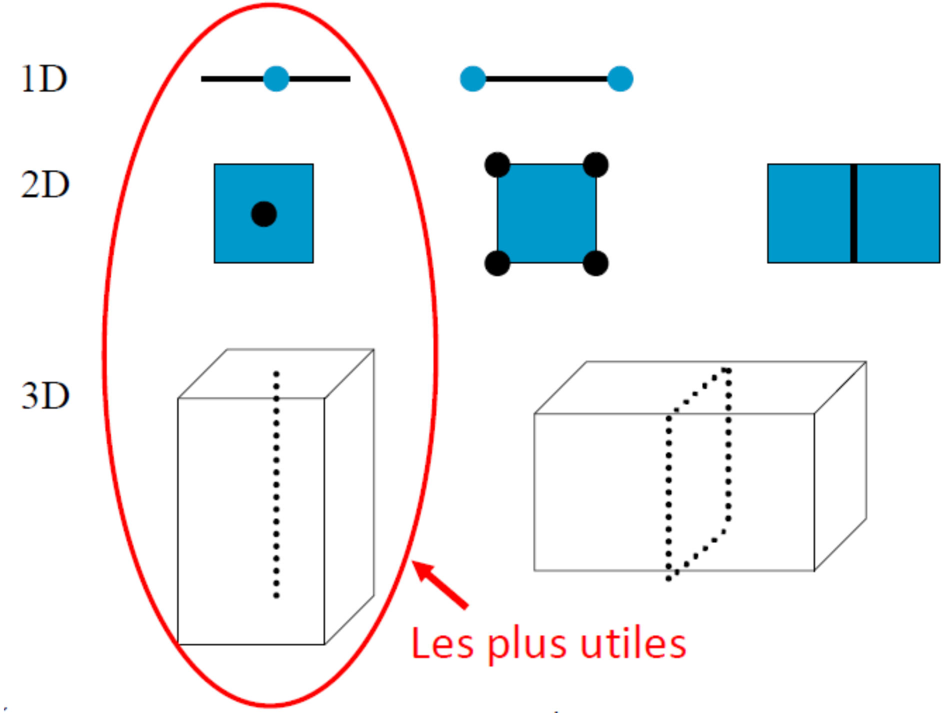
* Le krigeage est la seule méthode dont les poids varient selon le variogramme

4. Abaques

Utilisation des abaques :

Seules des configurations très simples sont répertoriées

Supposent le variogramme ponctuel connu



4. Abaques

Implication :

- Si le support des données est quasi-ponctuel :

  Remplacer C_0 par une composante sphérique de portée « epsilon » et utiliser les abaques avec cette composante

  Dans les abaques, cela revient à poser que $L/a = \infty$

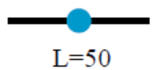
- Si le support des données n'est pas quasi-ponctuel :

  La contribution à Var(e) est C_0 /n où « n » est le nombre de fois que le support d'observation entre dans le support d'extension

  Par exemple, le support des données est des carottes de $5m$ dans un support d'extension de $\mathrm{L} = 25m$. Ainsi, $n = 25/5 = 5$.

4. Abaques

Exemples : variogramme sphérique ponctuel $(C_0 = 20, C = 40, a = 100)$



Étendre un point à un segment (abaque Fig.4)

$$Var(e) = C \times E\left(\frac{L}{a}\right) + C_0 \times E\left(\frac{L}{a}\right)$$
$$= C \times E\left(\frac{50}{100}\right) + C_0 \times E(\infty)$$
$$= 40 \times E(0.5) + 20 \times E(\infty)$$
$$= 40 \times 0.13 + 20 \times 1$$
$$= 25.2$$

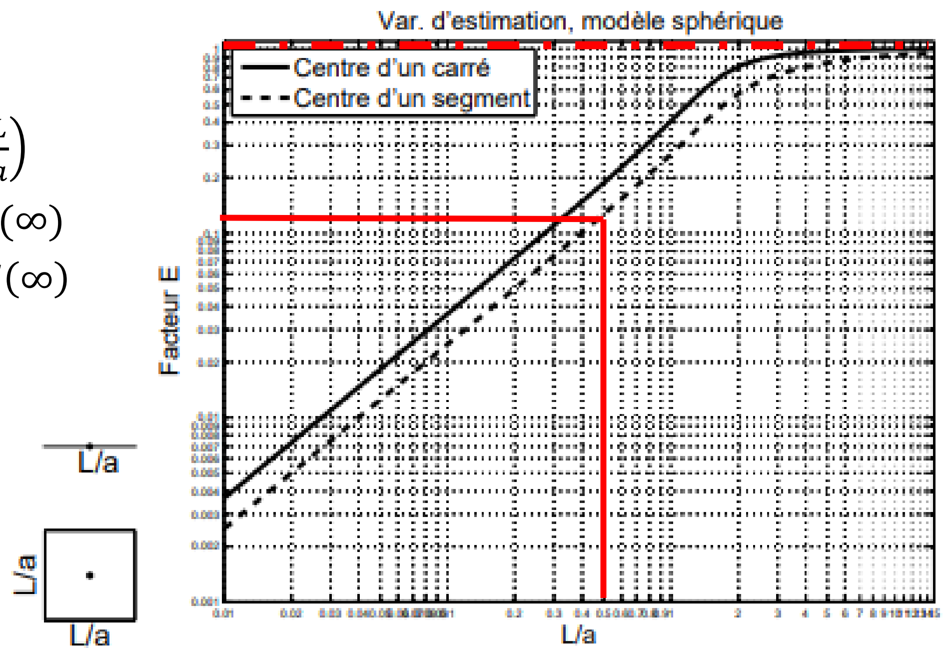
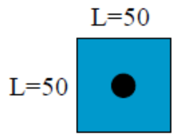


Fig. 4. Variance d'estimation: un segment ou un carré estimé par son point central

4. Abaques

Exemples : variogramme sphérique ponctuel ($C_0 = 20, C = 40, a = 100$)



Étendre un point à un carré (abaque Fig.4)

$$
\begin{aligned}
Var(e) &= C \times E\left(\frac{L}{a}\right) + C_0 \times E\left(\frac{L}{a}\right) \\
&= C \times E\left(\frac{50}{100}\right) + C_0 \times E(\infty) \\
&= 40 \times E(0.5) + 20 \times E(\infty) \\
&= 40 \times 0.20 + 20 \times 1 \\
&= 28
\end{aligned}
$$

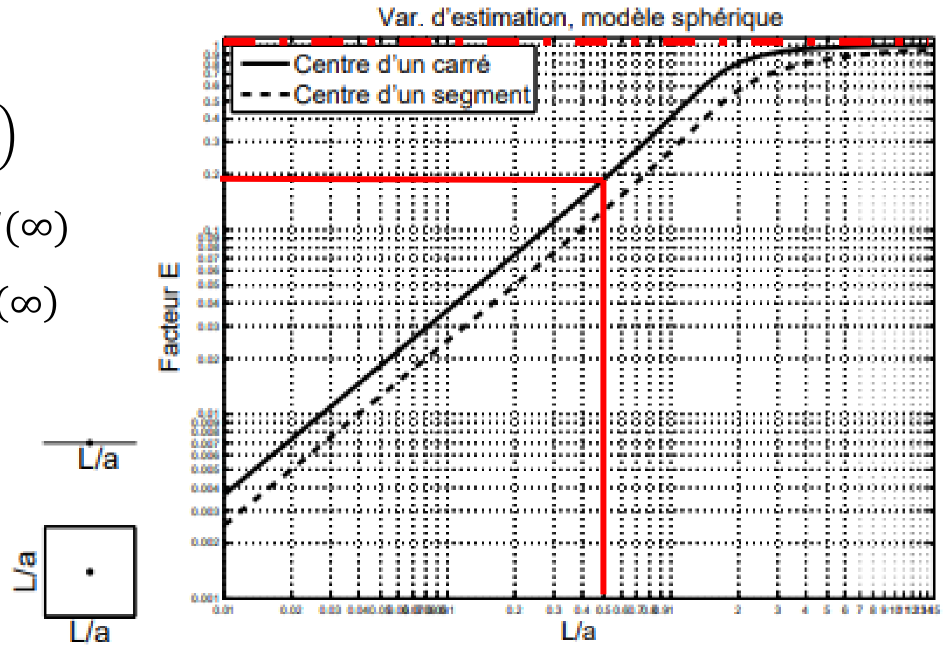
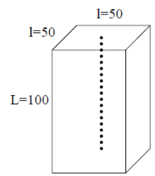


Fig. 4. Variance d'estimation: un segment ou un carré estimé par son point central

4. Abaques

Exemples : variogramme sphérique ponctuel $(C_0 = 20, C = 40, a = 100)$



Étendre un segment à un parallélépipède à section carrée (abaque Fig.8)

Si le segment est très petit

$$
\begin{aligned}
Var(e) &= C \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_z}{a_z}\right) + C_0 \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_z}{a_z}\right) \\
&= C \times E\left(\frac{50}{100}, \frac{100}{100}\right) + C_0 \times E(\infty, \infty) \\
&= 40 \times E(0.5,1) + 20 \times E(\infty, \infty) \\
&= 40 \times 0.047 + 20 \times 0 \\
&= 1.88
\end{aligned}
$$

Si carottes de 5m

$$
\begin{aligned}
Var(e) &= C \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_z}{a_z}\right) + C_0/n \\
&= 40 \times E(0.5,1) + 20/20 \\
&= 40 \times 0.047 + 1 \\
&= 2.88
\end{aligned}
$$

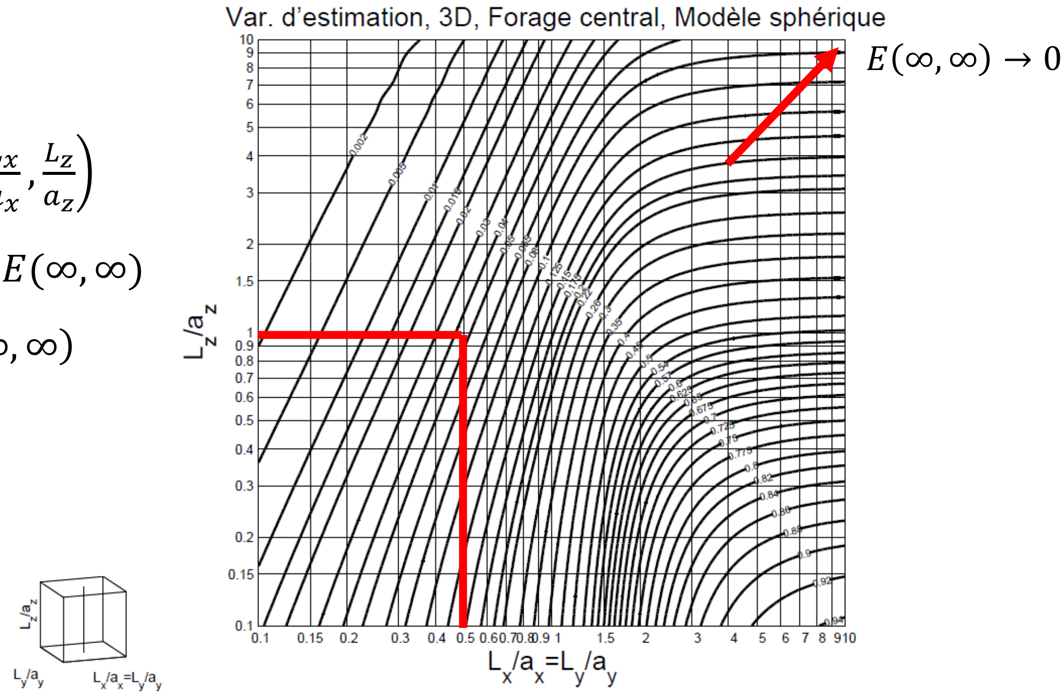
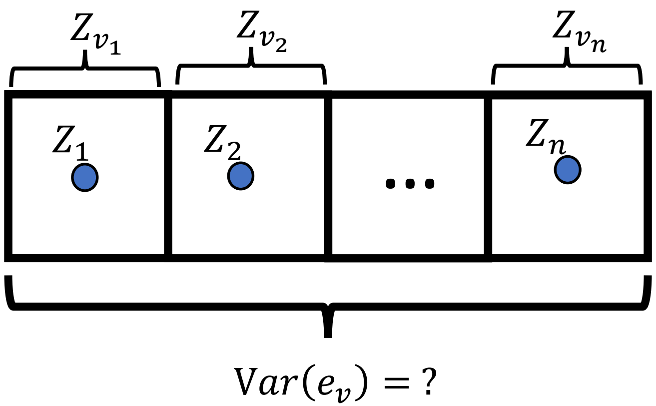


Fig. 8. Variance d'estimation: un bloc à section carrée de côté $L_x/a_x = L_y/a_y$ estimé par le segment central parallèle à L_z/a_z

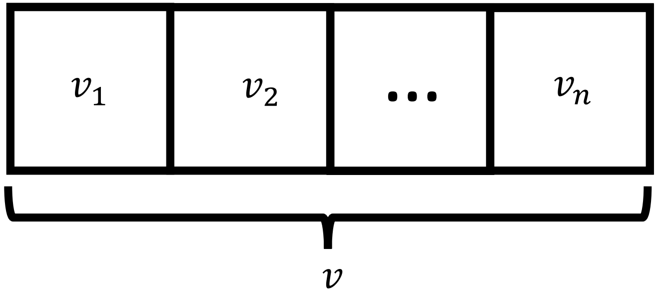
5. Principes de combinaison d’erreurs élémentaires

Contexte :

Teneur :



Volume :

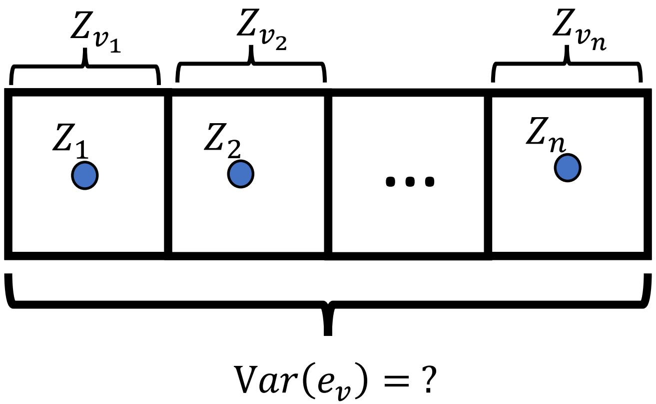


Question :

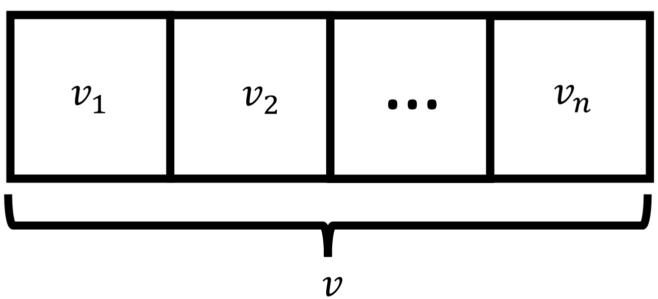
Comment déterminer la variance d’estimation d’un gisement lorsque celui-ci est divisé en plusieurs zones distinctes ?

Définitions :

Teneur :



Volume :



Réalité :

$$Z_v = \frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i Z_{v_i}, \qquad v = \sum_{i=1}^{n} v_i$$

Estimateur :

$$Z_v^* = \frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i Z_i,$$

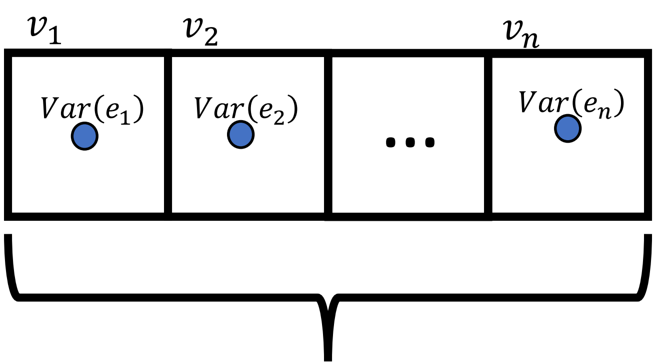
Variance d'estimation du bloc v :

$$Var(e_v) = Var(Z_v - Z_v^*) = ?$$

5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Relation :

$$\boxed{Var(e_v) \approx \frac{1}{v^2}\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i)}$$



$Var(e_v) = ?$

Démonstration :

$$Var(e_v) = Var(Z_v - Z_v^*)$$

$$Var(e_v) = Var\left(\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i Z_{v_i} - \frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i Z_i\right)$$

$$= Var\left(\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i (Z_i - Z_{v_i})\right)$$

$$= Var\left(\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i \times e_i\right)$$

$$? \left(\begin{array}{l} = \dfrac{1}{v^2}\displaystyle\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} v_i v_j Cov(e_i, e_j) \\ \approx \dfrac{1}{v^2}\displaystyle\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i) \end{array} \right.$$

5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

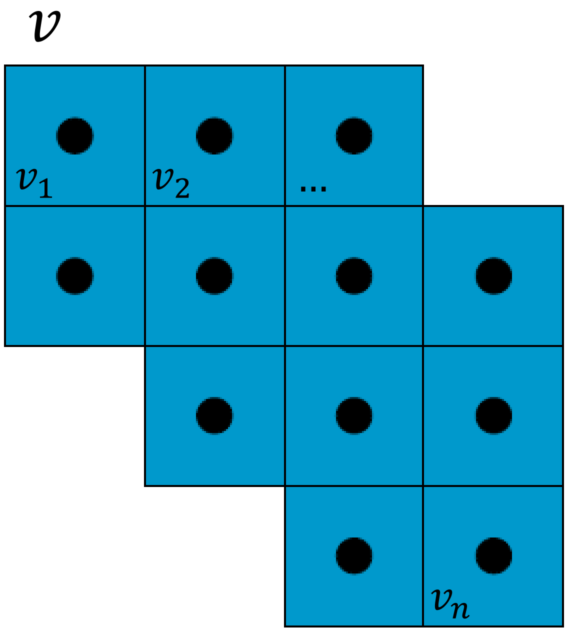
Condition d'application :

Chaque zone $(v_1, v_2, \ldots, v_n)$ est estimée uniquement avec les données contenues dans la zone

- Se généralise à autant de zones quelconques que nécessaire ;
- $Var(e_i)$ peut être obtenu soit directement soit par composition des erreurs élémentaires (échantillonnage régulier ou aléatoire stratifié) ;
- On peut toujours recourir au calcul exact de $Var(e)$, mais l'approche par composition des erreurs élémentaires allège les calculs.

5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Qu'arrive-t-il lorsque les zones sont identiques (grille régulière) :



$$Var(e_v) \approx \frac{1}{v^2}\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i)$$

Les v_i sont tous égaux :

$$v_i = v_1 \text{ et } v = nv_1$$

Les $Var(e_i)$ sont tous égaux :

$$Var(e_i) = Var(e_1)$$

Alors, on obtient :

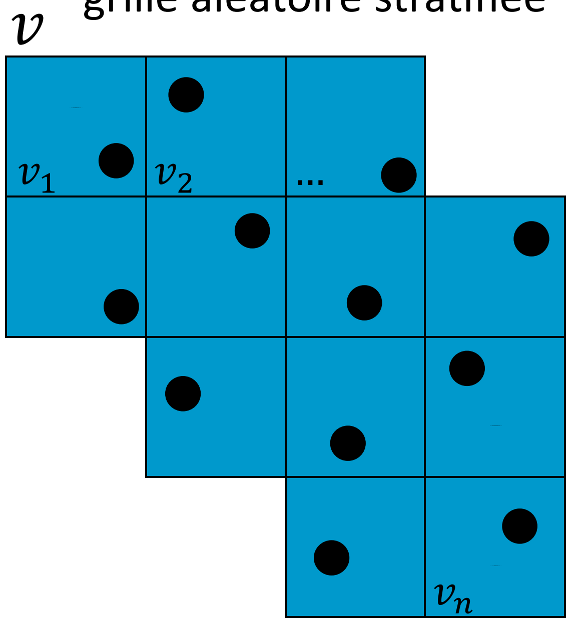
$$Var(e_v) = \frac{1}{n}Var(e_1)$$

Abaque

5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Qu'arrive-t-il lorsque les données ne sont pas sur une grille régulière :

Approcher le patron par une grille aléatoire stratifiée



$$Var(e_v) \approx \frac{1}{v^2}\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i)$$

Les v_i sont tous égaux :

$$v_i = v_1 \text{ et } v = nv_1$$

Les $Var(e_i)$ ne sont plus égaux :

$$Var(e_i) \neq Var(e_1)$$

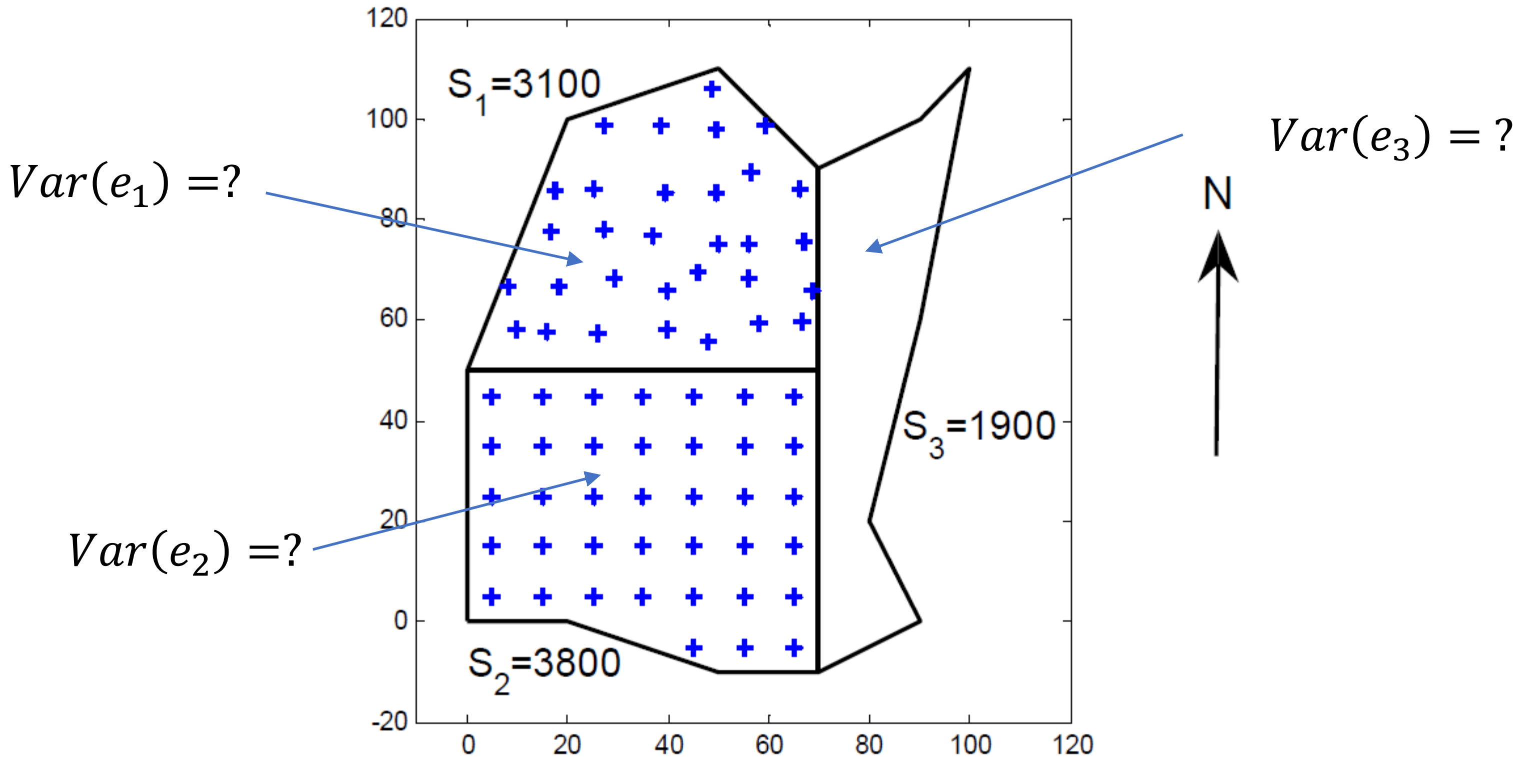
Alors, on obtient :

$$Var(e_v) \approx \frac{1}{(v)^2}\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i) = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n} Var(e_i)$$

$$= \frac{1}{n}\left(\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Var(e_i)\right) \approx \frac{1}{n} D^2(\cdot\,|v_i)$$

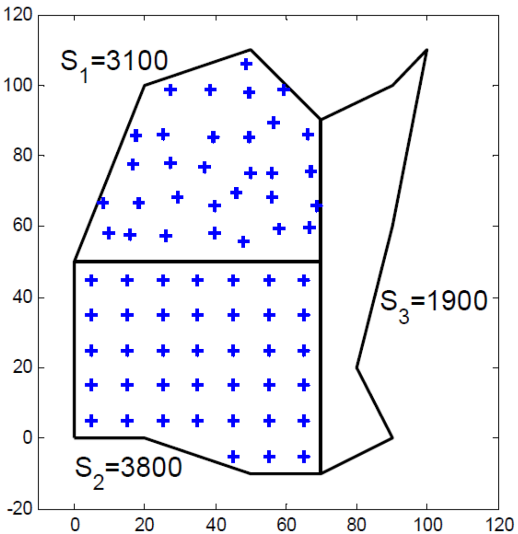
5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Que faire avec ce type de patron :



5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Que faire avec ce type de patron :

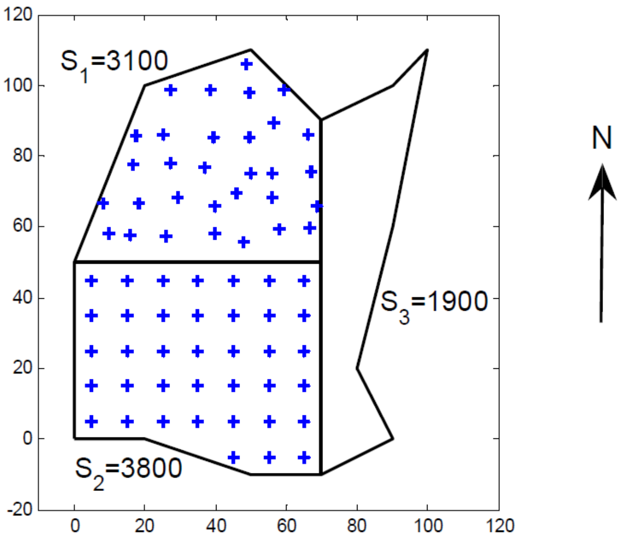


	Nature de la grille	Variance d'estimation
Zone 1 :	Grille aléatoire stratifiée	$Var(e_1)$?
Zone 2 :	Grille régulière	$Var(e_2)$?
Zone 3 :	Estimé par krigeage	$Var(e_3)$?

$$Var(e) \approx ?$$

5. Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Que faire avec ce type de patron :



	Nature de la grille	Variance d'estimation
Zone 1 :	Grille aléatoire stratifiée	$Var(e_1) \approx \frac{1}{n_1} D^2(\cdot\,\vert v_1)$
Zone 2 :	Grille régulière	$Var(e_2) = \frac{1}{n_2} Var(e_{v_2})$
Zone 3 :	Estimé par krigeage	$Var(e_3) = \sigma_K^2$

$$Var(e) \approx \frac{1}{S^2}\left(S_1^2 Var(e_1) + S_2^2 Var(e_2) + S_3^2 Var(e_3)\right)$$

Exercice en équipe

2) Principes de combinaison d'erreurs élémentaires

Combinaison d'erreurs élémentaires :

$$Var(e_v) \approx \frac{1}{v^2}\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i)$$

Grille aléatoire stratifiée $Var(e_v) \approx \frac{1}{n} D^2(\cdot\,|v_i)$

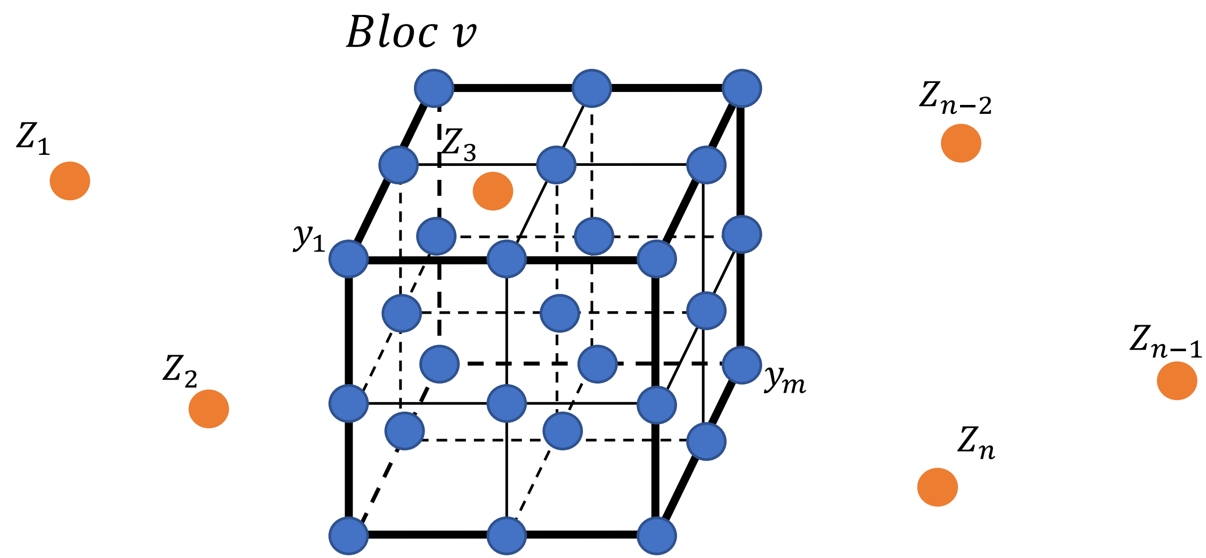
Grille régulière $Var(e_v) = \frac{1}{n} Var(e_1)$

Complément d'information

Approximation numérique :

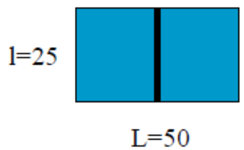
« v » est représenté par une grille de points (<u>régulière</u> ou aléatoire).

$$Var(e) = \sigma_e^2 \approx Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$



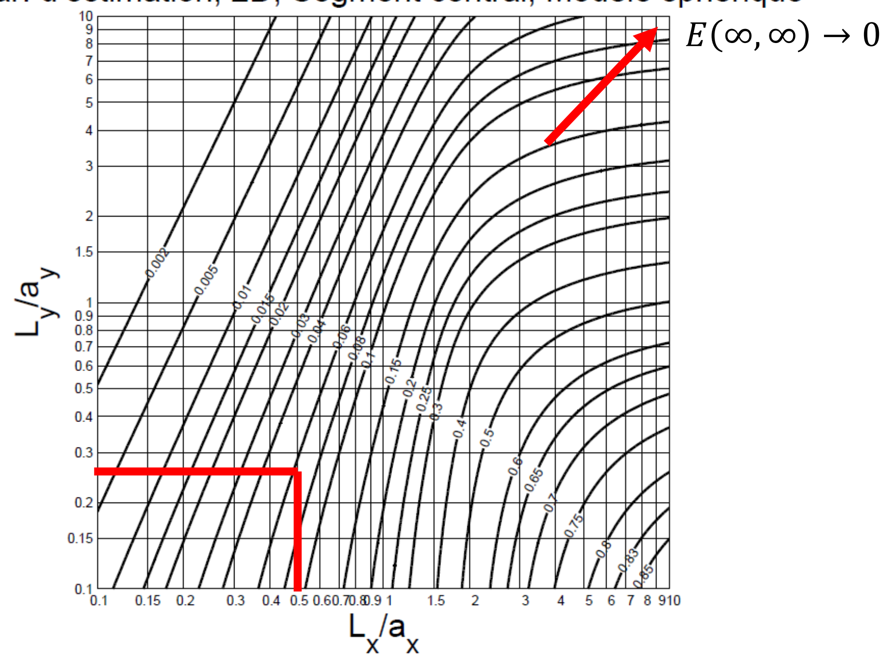
Moins fréquent

Exemples : variogramme sphérique ponctuel ($C_0 = 20, C = 40, a = 100$)



Étendre un segment à un rectangle (abaque Fig.6)

Var. d'estimation, 2D, Segment central, Modèle sphérique



Si le segment est très petit

$$Var(e) = C \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_y}{a_y}\right) + C_0 \times E(\infty,\infty)$$
$$= 40 \times E(0.5, 0.25) + 20 \times E(\infty,\infty)$$
$$= 40 \times 0.065 + 20 \times 0$$
$$= 2.6$$

Si carottes de 5m

$$Var(e) = C \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_y}{a_y}\right) + C_0/n$$
$$= 40 \times E(0.5, 0.25) + 20/5$$
$$= 40 \times 0.065 + 4$$
$$= 6.6$$

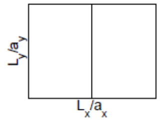
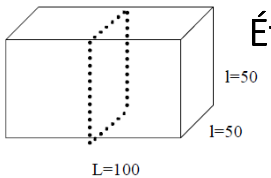


Fig. 6. Variance d'estimation: un rectangle estimé par le segment central parallèle à L_y/a_y

7. Abaques moins fréquents

Moins fréquent

Exemples : variogramme sphérique ponctuel ($C_0 = 20, C = 40, a = 100$)



Étendre un carré à un parallélépipède (abaque Fig.7)

Si le segment est très petit

$$Var(e) = C \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_z}{a_z} = \frac{L_y}{a_y}\right) + C_0 \times E(\infty, \infty)$$
$$= 40 \times E(1{,}0.5) + 20 \times E(\infty, \infty)$$
$$= 40 \times 0.1 + 20 \times 0$$
$$= 4$$

Si carottes de 5m

$$Var(e) = C \times E\left(\frac{L_x}{a_x}, \frac{L_z}{a_z} = \frac{L_y}{a_y}\right) + C_0/n$$
$$= 40 \times E(0.5{,}0.25) + 20/\infty$$
$$= 40 \times 0.1 + 0$$
$$= 4$$

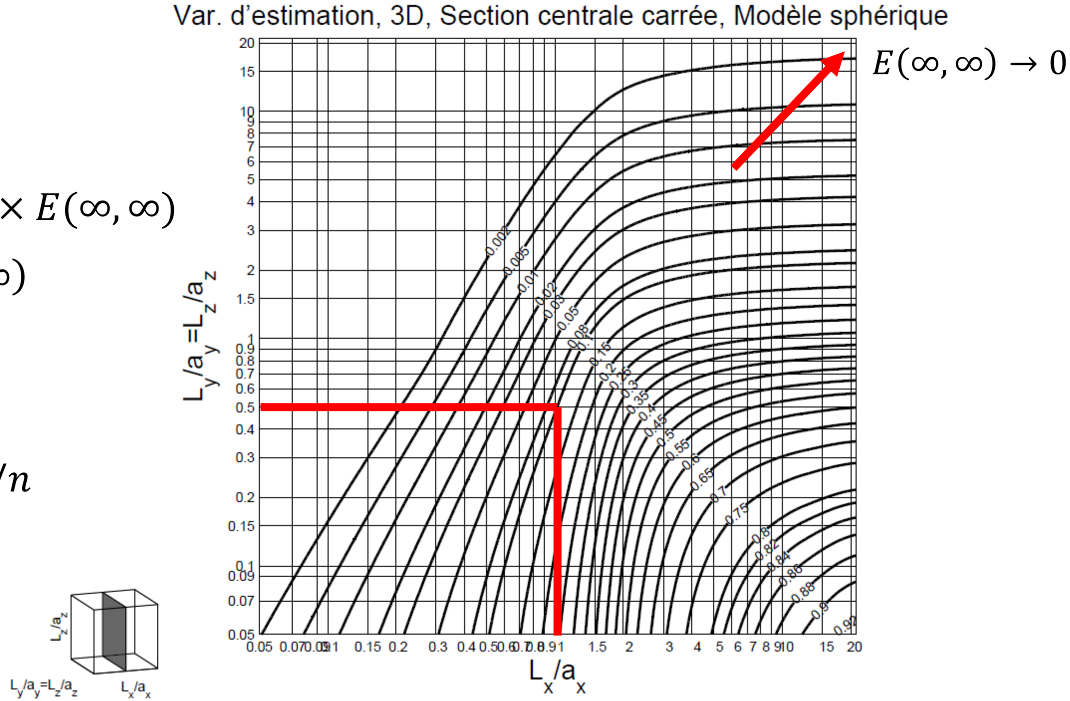


Fig. 7. Variance d'estimation: un bloc estimé par la section centrale carrée de côté $L_y/a_y = L_z/a_z$

GLQ3401/GLQ3651 : Deuxième partie
Cours 8b) Krigeage

POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL

UNIVERSITÉ
D'INGÉNIERIE

Plan du cours

Cours krigeage

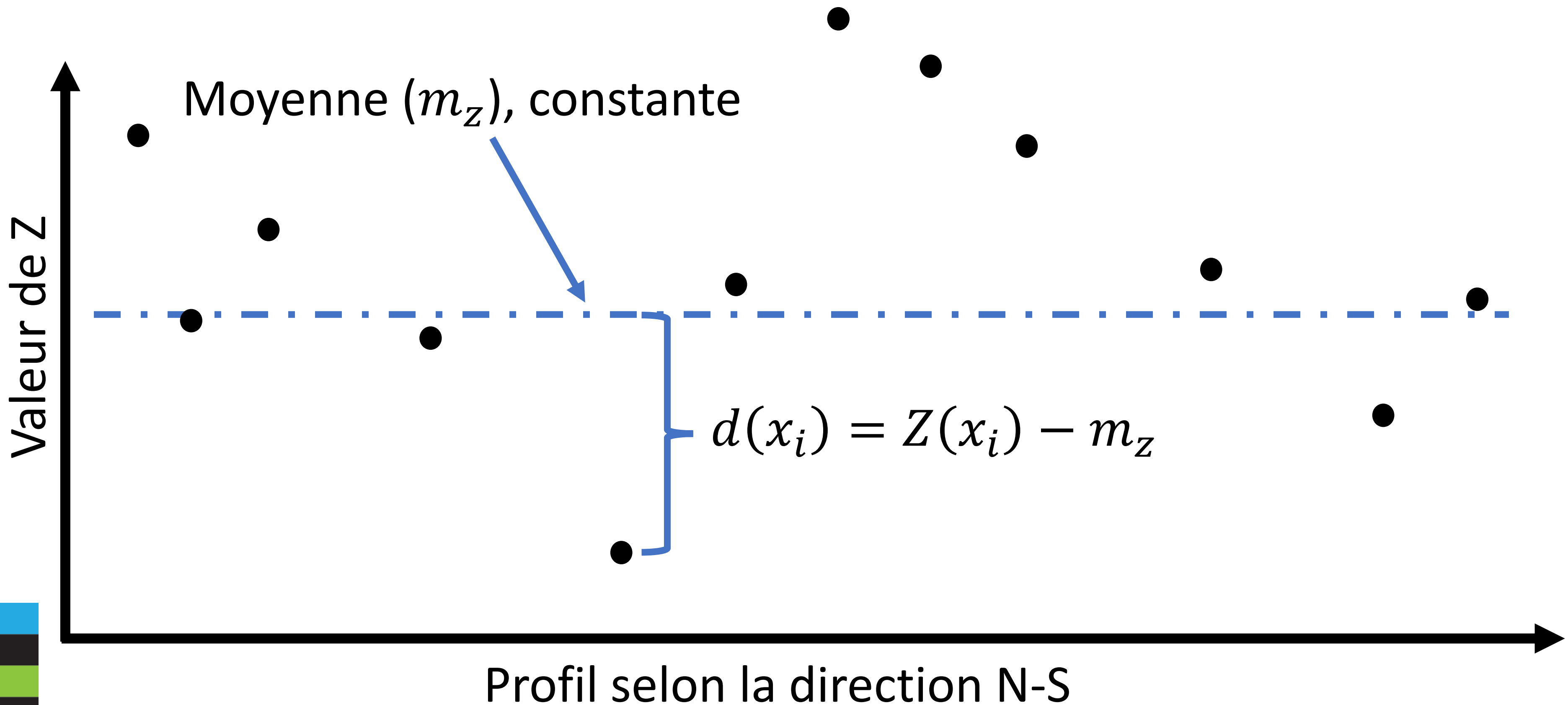
1. Définitions
2. Krigeage simple et krigeage ordinaire
   - Krigeage simple
   - Krigeage ordinaire
3. Interprétation
4. Exemple numérique
5. Propriétés du krigeage
6. Aspects pratiques
7. Validation croisée
8. Lien entre krigeage simple et krigeage ordinaire

Objectifs

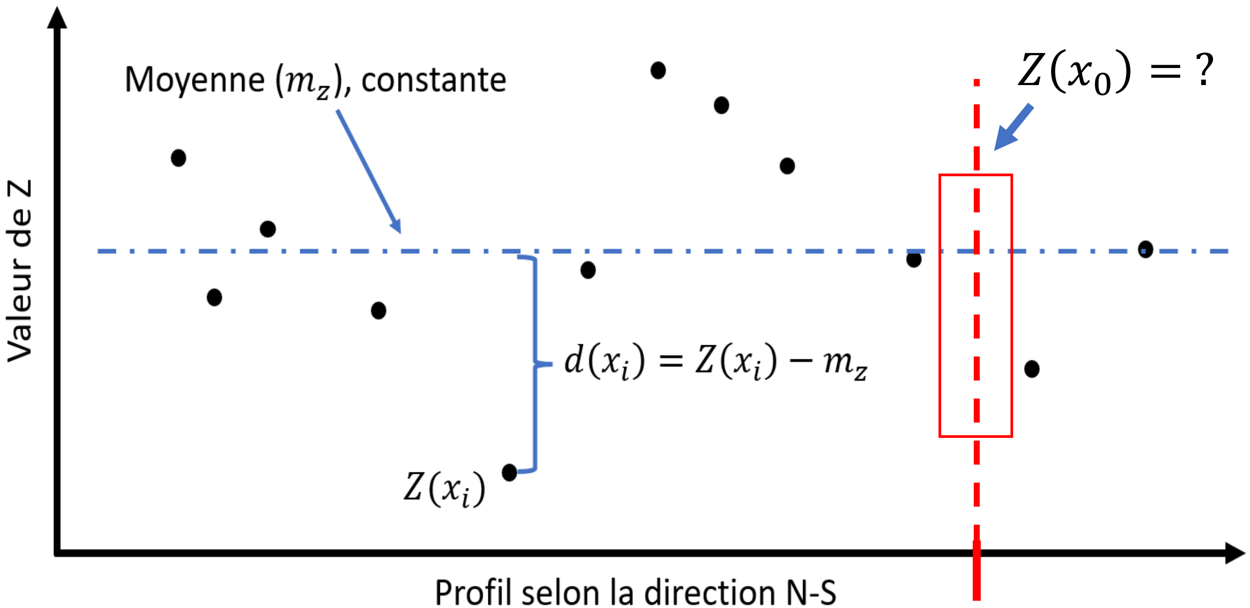
Krigeage

- Expliquer les différences entre krigeage simple et ordinaire;
- Être capable de dériver les équations du krigeage;
- Construire et résoudre les systèmes de krigeage simple et ordinaire, calculer la teneur estimée et la variance de krigeage;
- Expliquer les différentes propriétés du krigeage;
- Pouvoir utiliser et interpréter la validation croisée par krigeage en lien avec le modèle de variogramme.

Introduction : Mise en contexte



Introduction : Mise en contexte



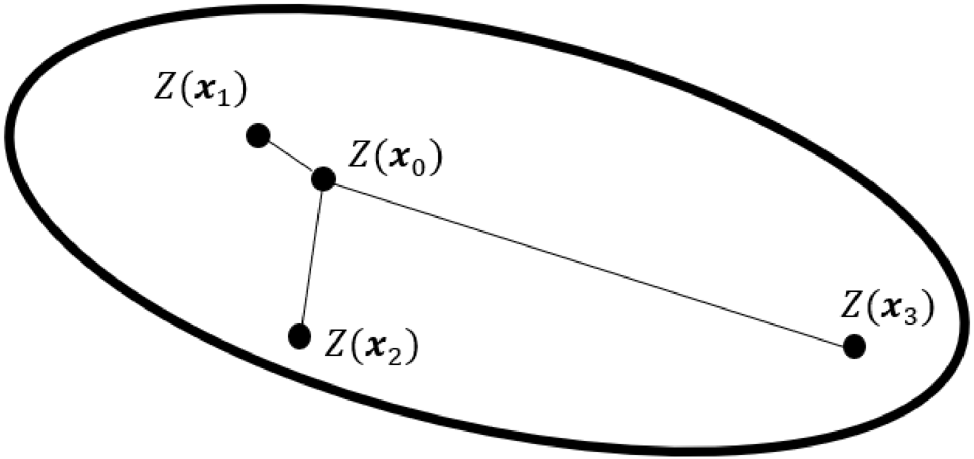
$Z(\boldsymbol{x}_0)$: à estimer
$Z(\boldsymbol{x}_i)$: Données connues

$Z^*(\boldsymbol{x}_0)$: Estimé de $Z(\boldsymbol{x}_0)$
λ_i : poids associé à $Z(\boldsymbol{x}_i)$
m_Z : Moyenne de Z

Contrainte : sans biais

$$Z^*(\boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\boldsymbol{x}_i) + \left(1 - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i\right) m_Z \, ; \quad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$$

Mise en situation (2D)

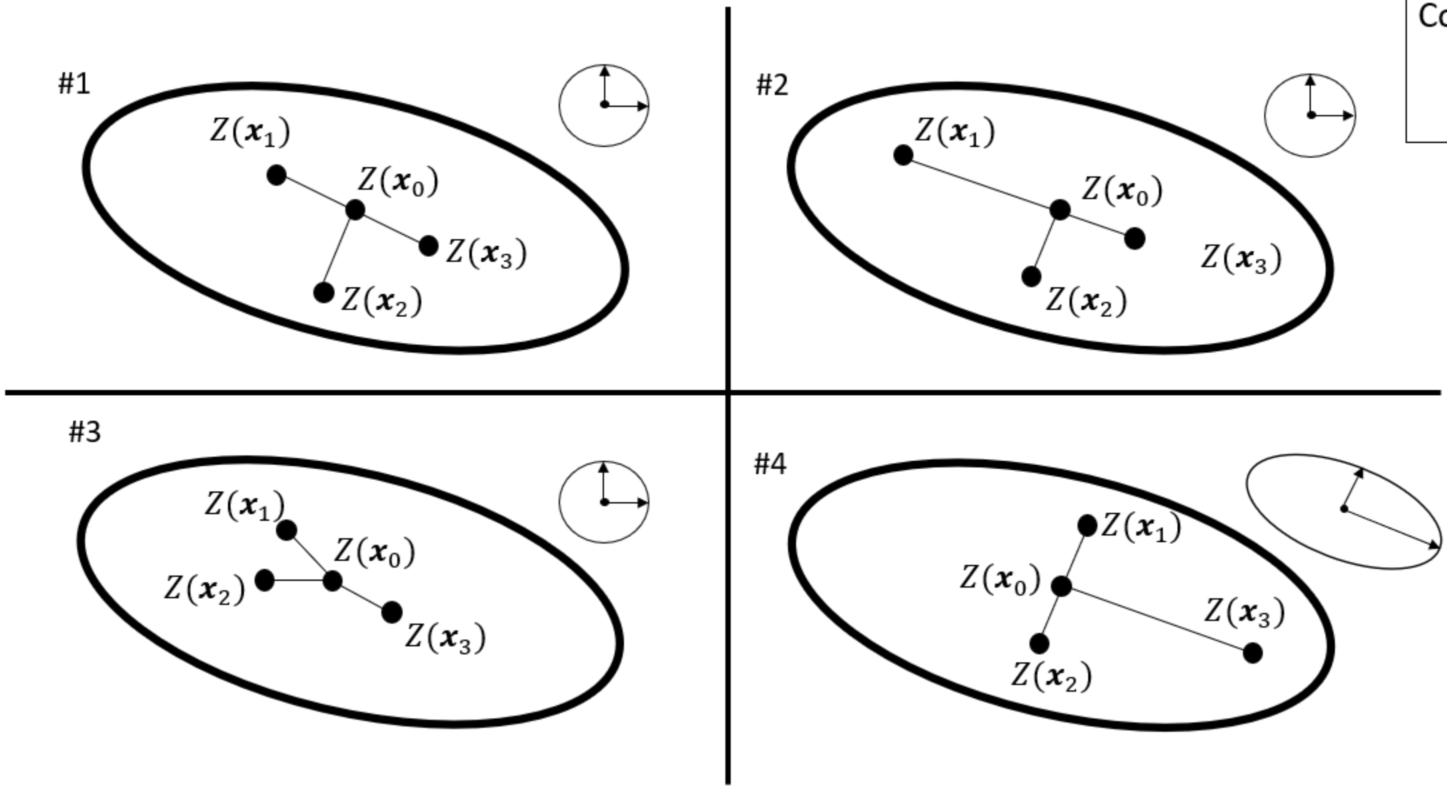


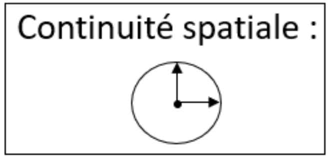
Comment déterminer les poids associés aux données $Z(\boldsymbol{x}_1)$, $Z(\boldsymbol{x}_2)$ et $Z(\boldsymbol{x}_3)$?

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

Introduction : Déterminer les poids

Mise en situation (2D)





Introduction : Déterminer les poids

Variance d'estimation

$$\sigma_e^2 = Var(Z) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z)$$

Ce que l'on cherche à estimer est-il foncièrement variable ou non ?

Quel est le degré de redondance entre les observations ?

Les observations sont-elles bien placées par rapport à ce que l'on veut estimer ?

1. Définitions

Krigeage simple et krigeage ordinaire :

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

Cas stationnaire : deux formes particulières

Krigeage simple (KS) → $Z_v^* = m + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i (Z_i - m)$ m est connu

Krigeage ordinaire (KO) → $Z_v^* = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z_i \; ; \; \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$ m est inconnu

En général, KO est préférable à KS. Cependant, dans les cas du krigeage d'indicatrices (cours 10) et des simulations géostatistiques (cours 11-13), il est préférable de recourir au KS.

1. Définitions

Idée du krigeage :

Le krigeage a pour objectif de **minimiser** la variance d'estimation.

Qui dit minimiser, dis ?

$$\sigma_e^2 = Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$

ATTENTION, il y a une subtilité pour le krigeage ordinaire afin de tenir compte de la condition sur les poids

2.1. Krigeage simple

Lorsque la moyenne est connue :

Pour le krigeage simple, la moyenne 'm' est connue. Il n'y a aucune contrainte sur les poids.

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

On a alors un problème de minimisation classique par dérivées partielles sur les poids.

$$\sigma_e^2 = Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$

$$\frac{\partial \sigma_e^2}{\partial \lambda_i} = 0$$

2.1. Krigeage simple

Dérivées partielles :

$$\sigma_e^2 = Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$

Système d'équations à n inconnus :

$$\frac{\partial \sigma_e^2}{\partial \lambda_i} = 0 \rightarrow \quad \sum_{j=1}^{n} \lambda_j Cov(Z_i, Z_j) = Cov(Z_i, Z_v) \;, \qquad \forall i = 1, \ldots, n$$

Variance du krigeage simple :

$$\sigma_{KS}^2 = Var(Z_v) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$

Estimée par krigeage simple :

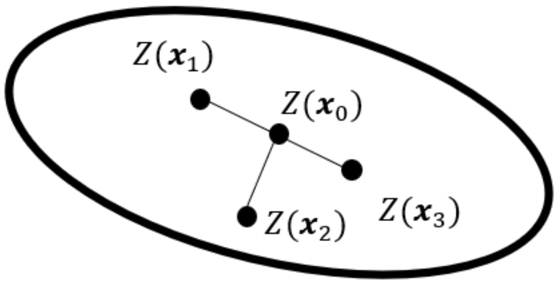
$$Z_v^* = m + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i (Z_i - m)$$

2.1. Krigeage simple

Forme matricielle :

$$K_S \lambda_S = k_S \rightarrow \lambda_S = K_S^{-1} k_S$$

$$\sigma_{KS}^2 = \sigma_v^2 - \lambda_S' k_S$$



$$\boxed{\begin{aligned} cov(Z_n, Z_n) &= var(Z_n) = \sigma^2 \\ cov(Z_n, Z_m) &= cov(Z_m, Z_n) \end{aligned}}$$

$$\underbrace{\overset{K_S}{\begin{bmatrix} Cov(Z_1,Z_1) & Cov(Z_1,Z_2) & Cov(Z_1,Z_3) \\ Cov(Z_2,Z_1) & Cov(Z_2,Z_2) & Cov(Z_2,Z_3) \\ Cov(Z_3,Z_1) & Cov(Z_3,Z_2) & Cov(Z_3,Z_3) \end{bmatrix}}}_{\textbf{Matrice de redondance}} \overset{\lambda_S}{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_n \end{bmatrix}} = \underbrace{\overset{k_S}{\begin{bmatrix} Cov(Z_1,Z_0) \\ Cov(Z_2,Z_0) \\ Cov(Z_3,Z_0) \end{bmatrix}}}_{\textbf{Vecteur de proximité}}$$

2.2. Krigeage ordinaire

Lorsque la moyenne est inconnue :

Pour le krigeage ordinaire, la moyenne ‘m’ n’est pas connue. Il faut imposer une contrainte sur les poids pour obtenir un estimateur sans biais.

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

On a alors un problème de minimisation sous contrainte. Méthode de Lagrange.

$$L(\lambda, \mu) = \sigma_e^2 + 2\mu \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1 \right)$$

2.2. Krigeage ordinaire

Méthode de Lagrange :

$$L(\lambda,\mu) = \sigma_e^2 + 2\mu\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1\right)$$

$$L(\lambda,\mu) = Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2\sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v) + 2\mu\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1\right)$$

<u>Système d'équations à $n+1$ inconnus</u>

$$\frac{\partial L(\lambda,\mu)}{\partial \lambda_i} = 0 \rightarrow \qquad \sum_{j=1}^{n} \lambda_j Cov(Z_i, Z_j) + \mu = Cov(Z_i, Z_v) \ , \qquad \forall i = 1, \dots, n$$

$$\frac{\partial L(\lambda,\mu)}{\partial \mu} = 0 \rightarrow \qquad \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1$$

2.2. Krigeage ordinaire

Estimateur et variance :

Variance du krigeage ordinaire :

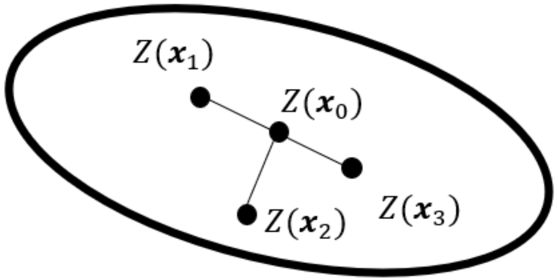
$$\sigma_{KO}^2 = Var(Z_v) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Cov(Z_i, Z_v) - \mu$$

Estimée par krigeage ordinaire :

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

Forme matricielle :

$$K_O\lambda_O = k_O \rightarrow \lambda_O = K_O^{-1}k_O$$



$$\sigma^2_{KO} = \sigma^2_v - \lambda_O k_O$$

$$\begin{array}{ccc} \boldsymbol{K_O} & \boldsymbol{\lambda_O} & & \boldsymbol{k_O} \\ \underbrace{\begin{bmatrix} \sigma^2 & cov(Z_1,Z_2) & \dots & cov(Z_1,Z_n) & 1 \\ cov(Z_2,Z_1) & \sigma^2 & \dots & cov(Z_2,Z_n) & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ cov(Z_n,Z_1) & cov(Z_n,Z_2) & \dots & \sigma^2 & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{\text{Matrice de redondance}} & \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \dots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} & = & \underbrace{\begin{bmatrix} cov(Z_1,Z) \\ cov(Z_2,Z) \\ \dots \\ \dots \\ cov(Z_n,Z) \\ 1 \end{bmatrix}}_{\text{Vecteur de proximité}} \end{array}$$

2. Krigeage simple et krigeage ordinaire

Notes :

1. Le krigeage permet d'estimer directement tout bloc (Z_v) ou point (Z_0). Tout ce qui change d'une estimation à l'autre est le membre de droite de la forme matricielle (K reste identique, k change) .
    - $K_S \lambda_S = k_S$
    - $K_O \lambda_O = k_O$

2. Le krigeage d'un bloc est égal à la moyenne des krigeages ponctuels dans le bloc.
    - On peut estimer directement un bloc par krigeage sans estimer chacun des points qui le composent.

3. Interprétation

Observations :

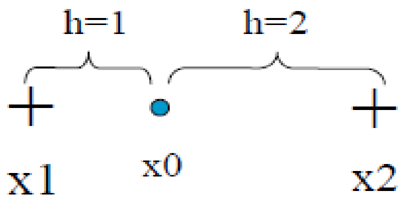
- Le krigeage minimise la variance d'estimation théorique calculée à partir du variogramme.

- Le krigeage est-il plus juste que tout autre estimateur linéaire ?
  - Oui, en moyenne (c.-à-d. 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.

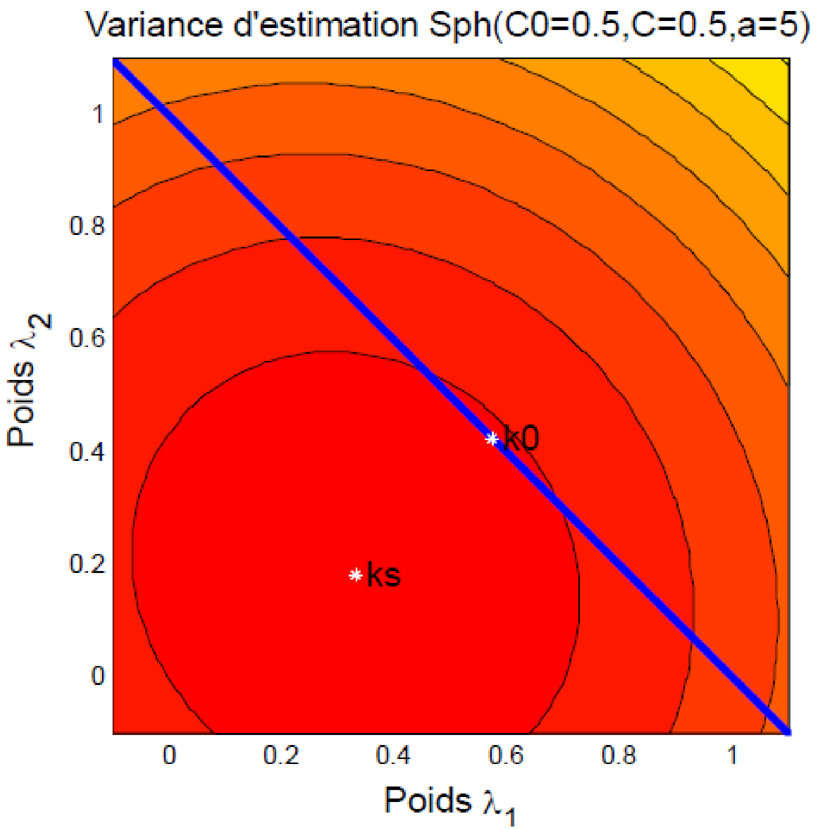
- **Les poids du krigeage peuvent être positifs ou négatifs.**

Liens entre KS et KO :



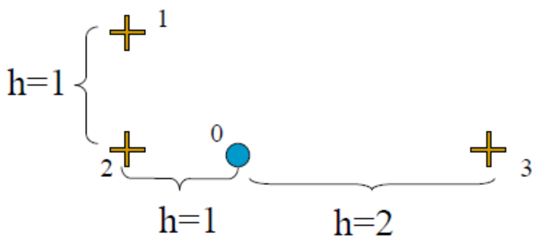
On a toujours :

$$\sigma_{KS}^2 \leq \sigma_{KO}^2$$



4. Exemple numérique

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Modèle sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

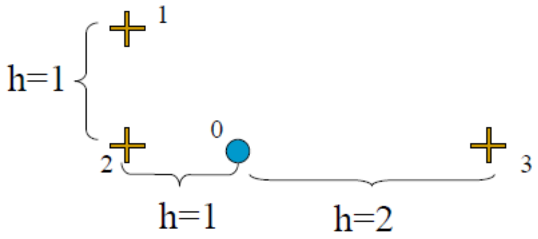
Données observées

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

Comment solutionner un système de krigeage ?

Approche en 6 étapes

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

Données observées

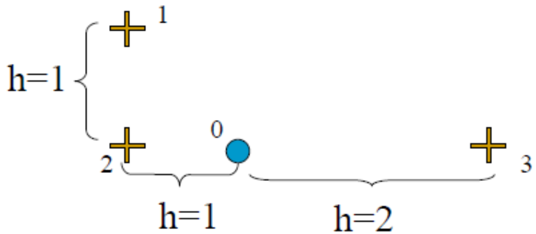
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

Étape 1) Calculer la matrice des distances

Cood.	x_0	x_1	x_2	x_3
x_0	0	1.4	1	2
x_1	1.4	0	1	3.2
x_2	1	1	0	3
x_3	2	3.2	3	0

4. Exemple numérique

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

Données observées

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

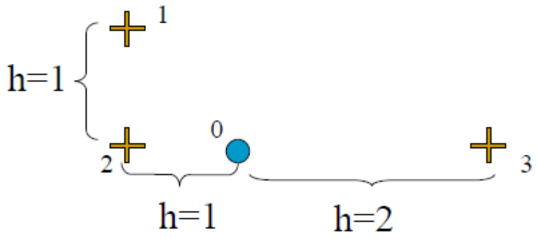
Étape 2) Transformer la matrice des distances en matrice de variogramme

$$h \rightarrow \gamma(h)$$

Cood.	x_0	x_1	x_2	x_3
x_0	0	7.55	5.81	9.52
x_1	7.55	0	5.81	11
x_2	5.81	5.81	0	11
x_3	9.52	11	11	0

4. Exemple numérique

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

Données observées

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

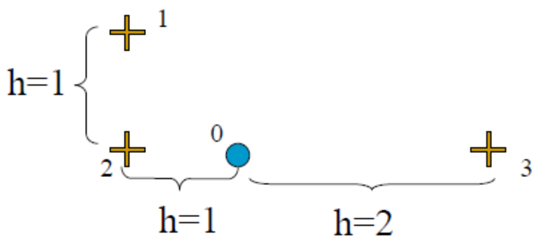
Étape 3) Transformer la matrice de variogramme en matrice de covariance

$$\gamma(h) \rightarrow C(h) = \sigma^2 - \gamma(h)$$

Cood.	x_0	x_1	x_2	x_3
x_0	11	3.45	5.19	1.48
x_1	3.45	11	5.19	0
x_2	5.19	5.19	11	0
x_3	1.48	0	0	11

Rouge : K
Bleu : k

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

Données observées

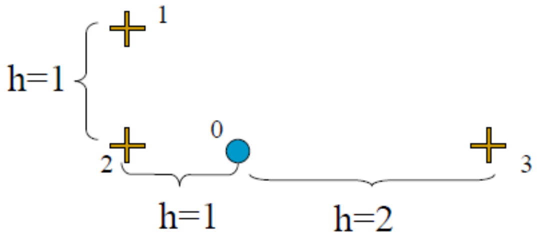
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

Étape 4) Construire le système de krigeage (ici KO)

$$\begin{array}{ccccc} K_O & & \lambda_O & & k_O \\ \begin{bmatrix} 11 & 5.19 & 0 & 1 \\ 5.19 & 11 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 11 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} & & \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \mu \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} 3.45 \\ 5.19 \\ 1.48 \\ 1 \end{bmatrix} \end{array}$$

4. Exemple numérique

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

Données observées

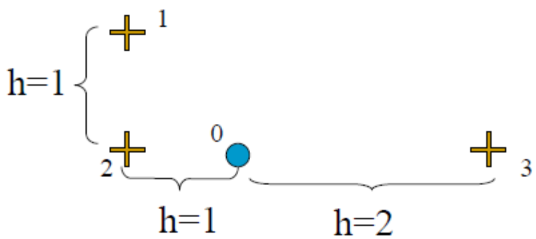
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

Étape 5) Résoudre le système d'équations

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.21 \\ 0.51 \\ 0.28 \\ -1.55 \end{bmatrix}$$

4. Exemple numérique

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

- Effet de pépite, $C_0 = 1$
- Sphérique, $a = 3$ et $C = 10$

Données observées

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

Étape 6) Estimer Z_0^* et calculer la variance de krigeage

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^{3} \lambda_i Z_i = (.21) \times 9 + (.51) \times 3 + (.28) \times 4 = 4.54$$

$$\sigma_{KO}^2 = \sigma^2 - \lambda' k_0 = 11 - (.21) \times 3.45 - (.51) \times 5.19 - (.28) \times 1.48 + 1.55 = 8.76$$

Exercice en équipe
3) Se familiariser avec le krigeage

5. Propriétés du krigeage

Par construction : estimateur linéaire, sans biais, à variance d’estimation minimale

1. Presque sans biais conditionnel
2. Effet de lissage
3. Interpolateur exact
4. Effet d'écran
5. Tiens compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux.
6. Tiens compte de la continuité spatiale du phénomène étudié
7. Transitif (cohérence des estimations)

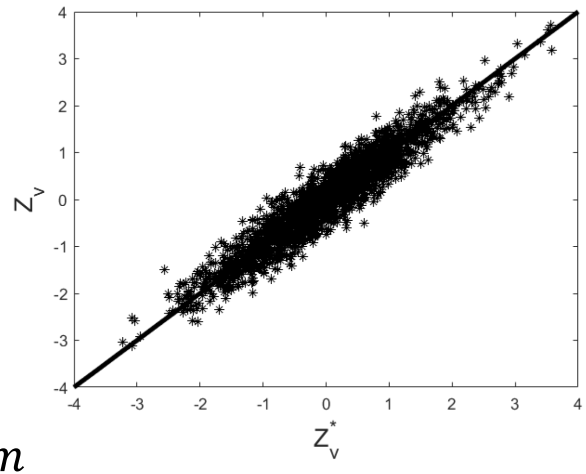
5. Propriétés du krigeage

1. Presque sans biais conditionnel :

Définition : Biais conditionnel

Si Z_v et Z_v^* suivent une loi binormale de moyenne m, alors la régression linéaire de Z_v sur Z_v^* s'écrit :

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



Avec

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

$$a = \left(1 - \frac{Cov(Z_v, Z_v^*)}{Var(Z_v^*)}\right) m = (1 - b)m$$

5. Propriétés du krigeage

1. Presque sans biais conditionnel :

$$E[Z_v|Z_v^*] = a + bZ_v^* \; ; \quad b = \frac{Cov(Z_v, Z_v^*)}{Var(Z_v^*)} \; ; \quad \mathrm{a} = (1-b)m$$

<u>Krigeage simple, par construction :</u>

$$Var(Z_v^*) = Cov(Z_v, Z_v^*) \rightarrow b = 1 \, ; a = 0 \rightarrow \boxed{E[Z_v|Z_v^*] = Z_v^*}$$

- Le krigeage simple est sans biais conditionnel seulement dans le cas normal.

- Si on n'est pas dans un cas normal, alors on peut simplement dire que l'estimateur KS est approximativement sans biais conditionnel.

5. Propriétés du krigeage

1. Presque sans biais conditionnel :

$$E[Z_v|Z_v^*] = a + bZ_v^* \; ; \quad b = \frac{Cov(Z_v, Z_v^*)}{Var(Z_v^*)} \; ; \quad \mathrm{a} = (1-b)m$$

<u>Krigeage ordinaire, par construction :</u>

$$Var(Z_v^*) + \mu = Cov(Z_v, Z_v^*) \rightarrow b = 1 + \frac{\mu}{Var(Z_v^*)} \; ; a = \frac{-\mu}{Var(Z_v^*)}$$

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

- Dans le cas normal, l'estimateur KO présente un biais conditionnel proportionnel à μ
- Si $\mu < 0 \; \rightarrow b < 1$, alors les fortes valeurs de KO surestiment les vraies teneurs des blocs
- Si $|\mu|$ tend vers 0, alors KO tend à être sans biais conditionnel

5. Propriétés du krigeage

2. Effet de lissage :

Krigeage simple : $$Var(Z_v) = Var(Z_v^*) + \sigma_{KS}^2$$

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

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

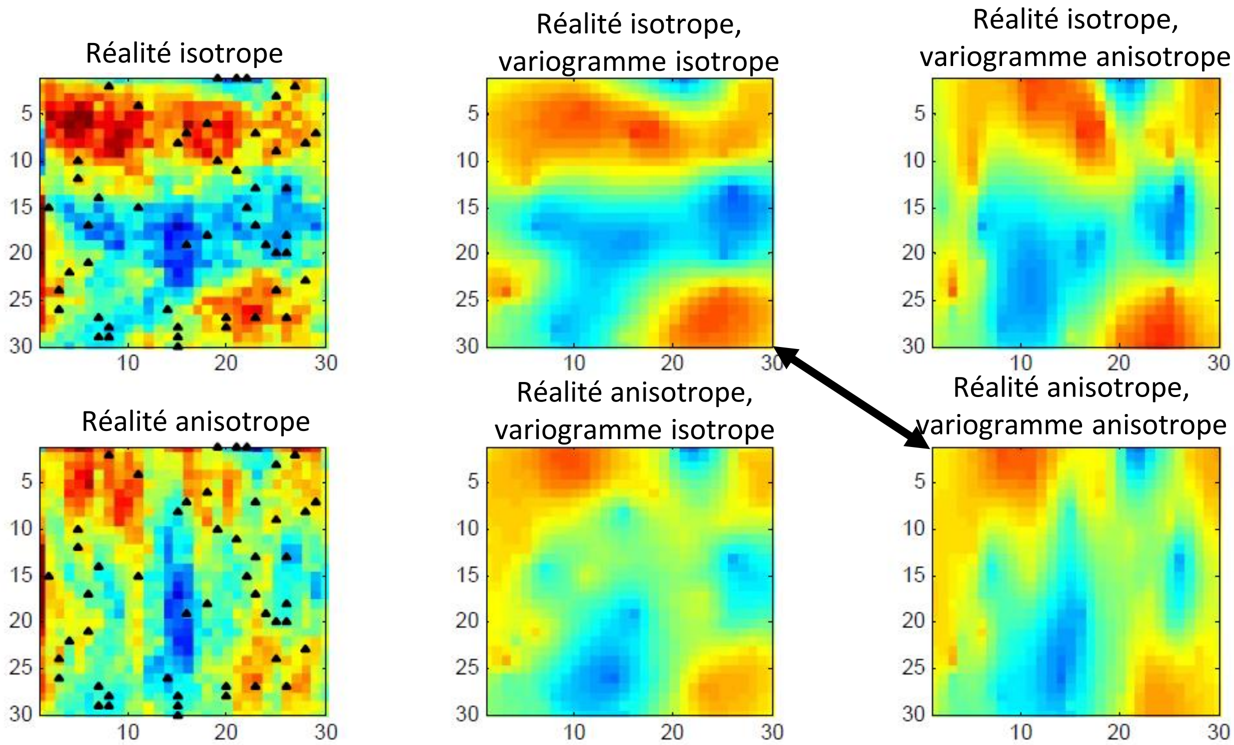
Krigeage ordinaire : $$Var(Z_v) = Var(Z_v^*) + \sigma_{KO}^2 + 2\mu$$

Habituellement, $\mu < 0$ et $2|\mu| < \sigma_{KO}^2$

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

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

2. Effet de lissage :



5. Propriétés du krigeage

2. Effet de lissage :

<u>Lien entre le lissage et le biais conditionnel :</u>

$$b = \frac{Cov(Z_v, Z_v^*)}{Var(Z_v^*)} = \frac{\rho\sigma_v\sigma_v^*}{\sigma_v^{*2}} = \frac{\rho\sigma_v}{\sigma_v^*}$$

Une absence de biais conditionnel implique que $b = 1$, alors $\sigma_v^* \leq \sigma_v$

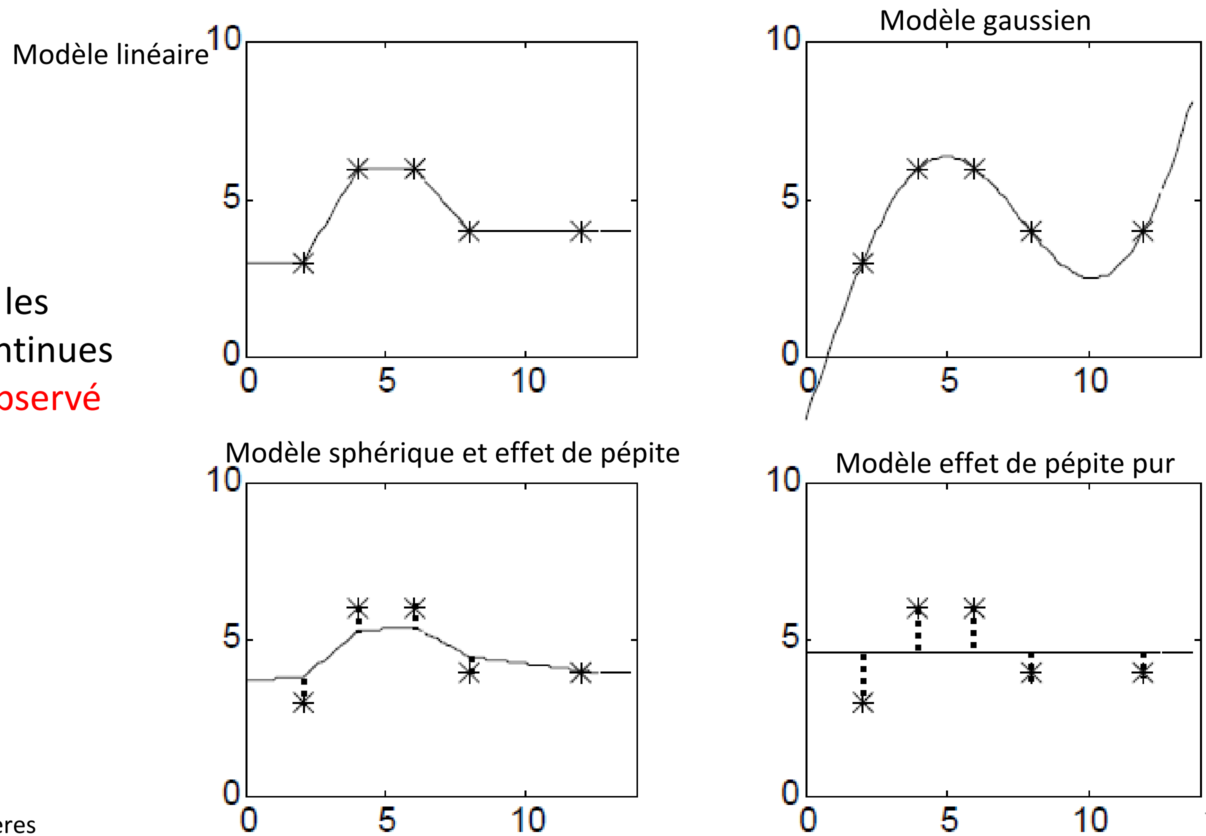
- Un estimateur sans lissage est nécessairement avec biais conditionnel.
- Les valeurs estimées doivent montrer une variance inférieure aux vraies valeurs.

5. Propriétés du krigeage

3. Interpolateur exact :

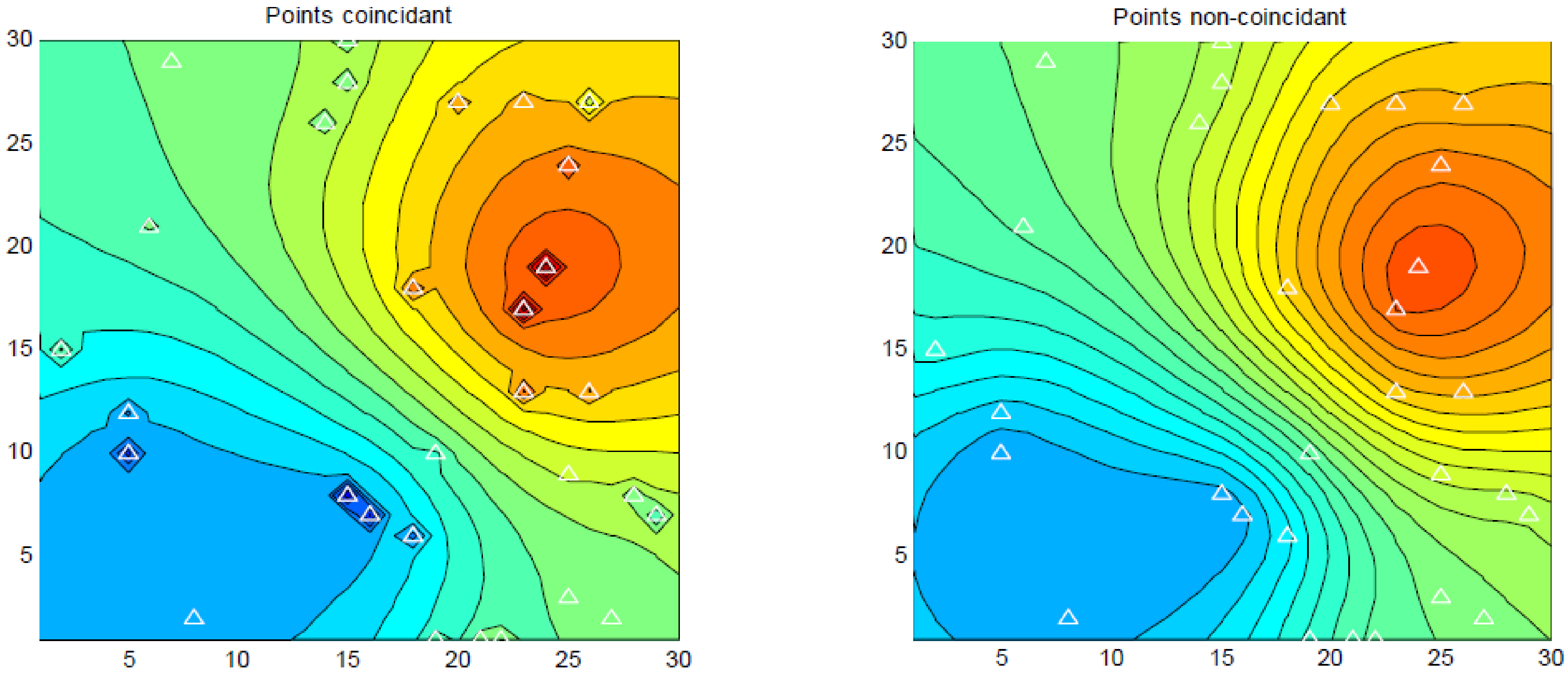
Estime les données observées avec exactitude

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



5. Propriétés du krigeage

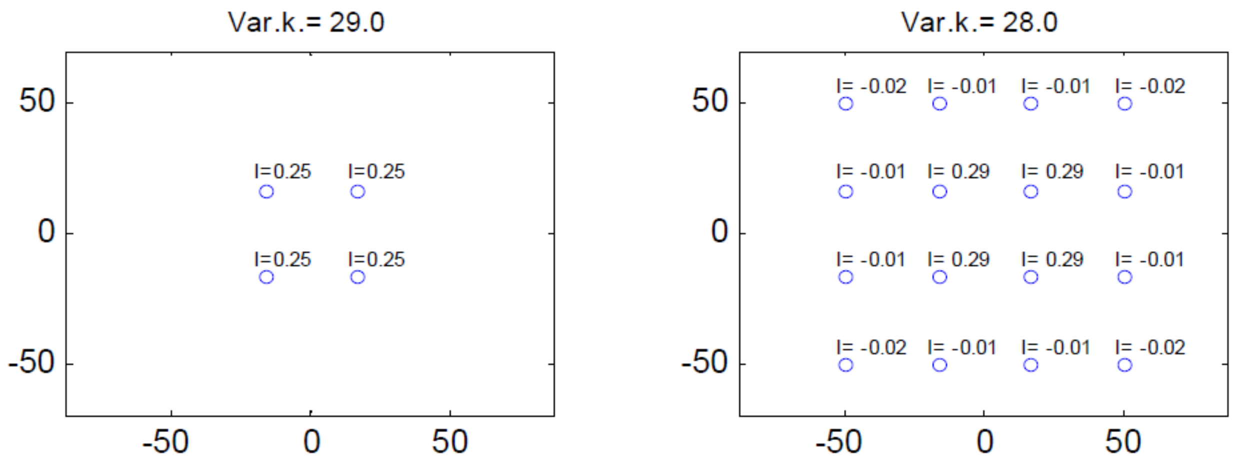
3. Interpolateur exact :



4. Effet d’écran :

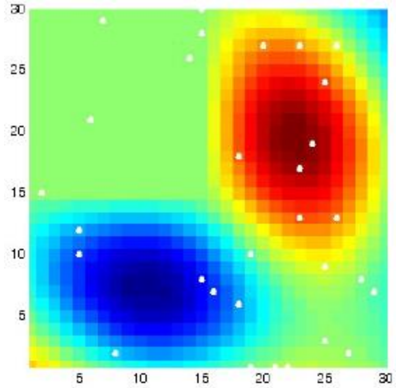
- Les poids des points périphériques sont faibles.

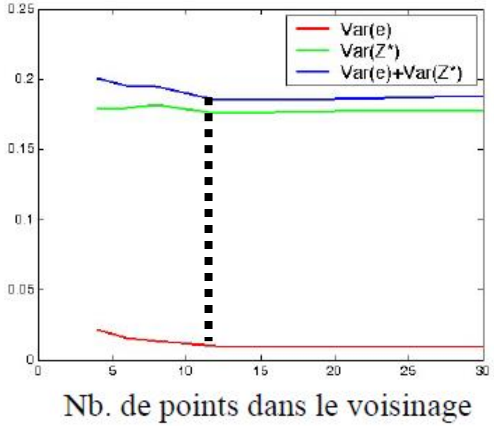
- Les poids des points proches sont forts.

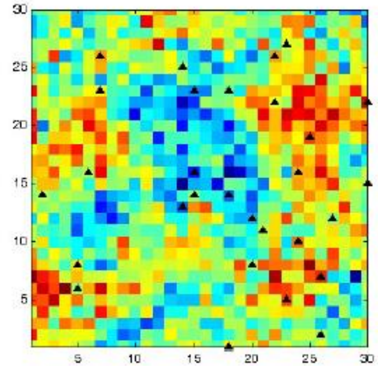


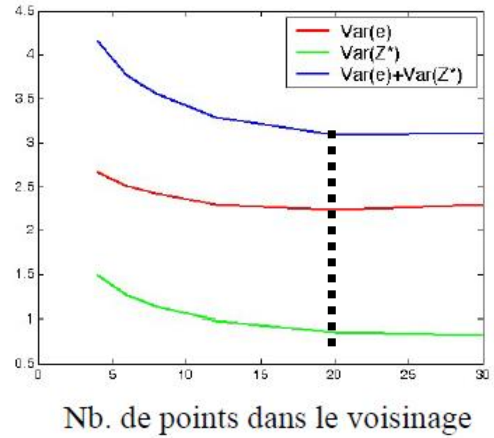
Limiter l’estimation d’un point par son voisinage

4. Effet d'écran :

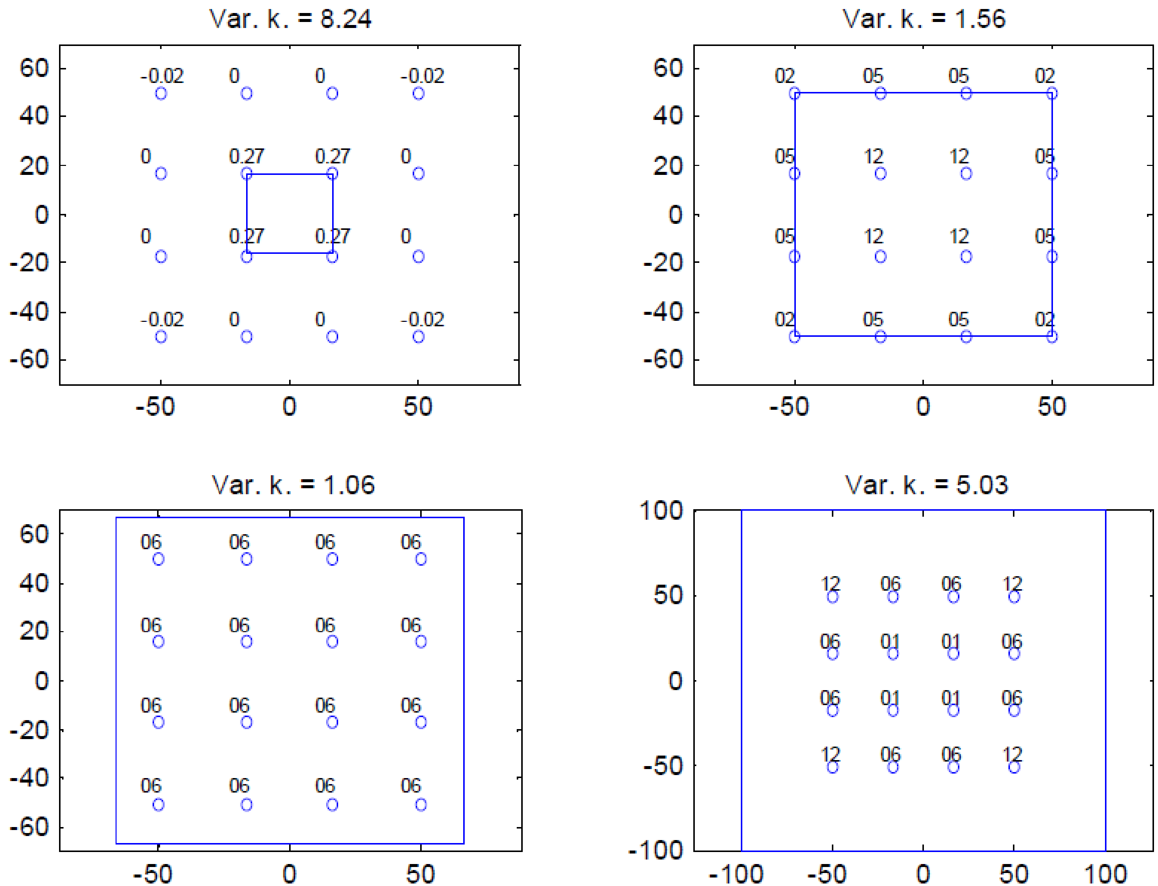






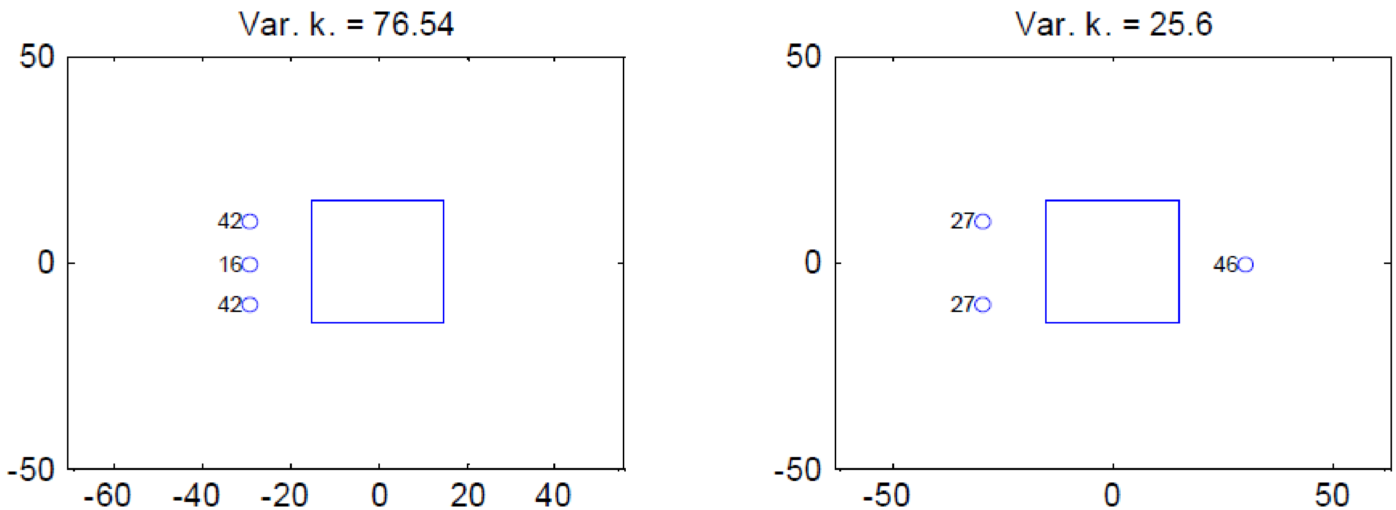


5. Tiens compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux :



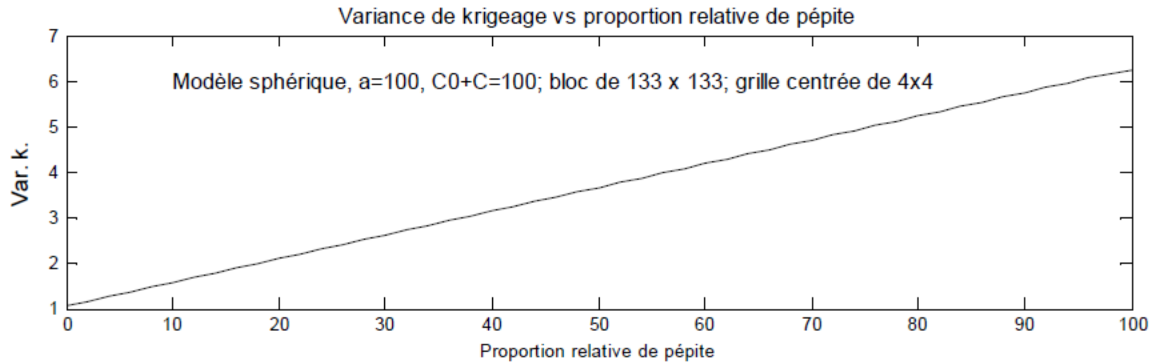
5. Tiens compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux :

Redondance des données :

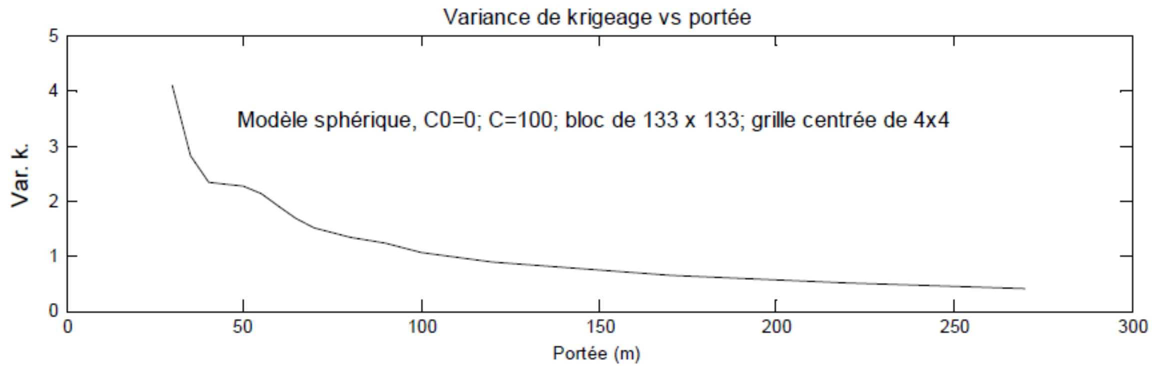


6. Tiens compte de la continuité spatiale du phénomène étudié :

Influence de
l'effet de pépite

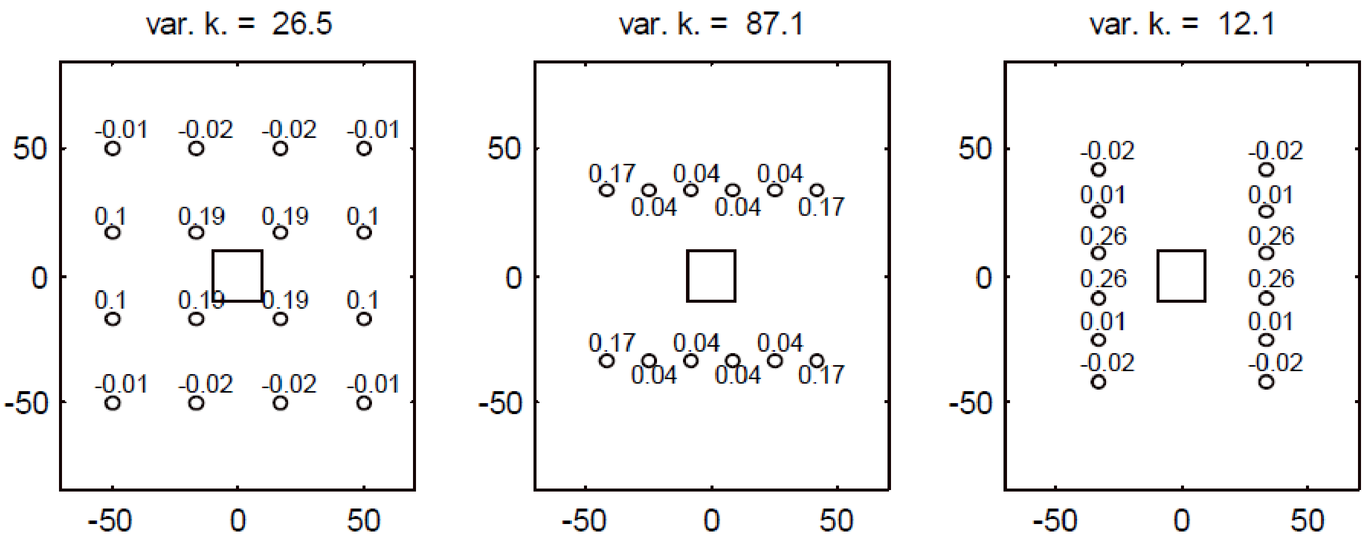


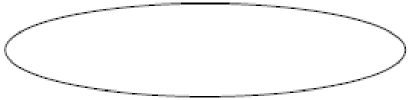
Influence
de la portée



6. Tiens compte de la continuité spatiale du phénomène étudié :

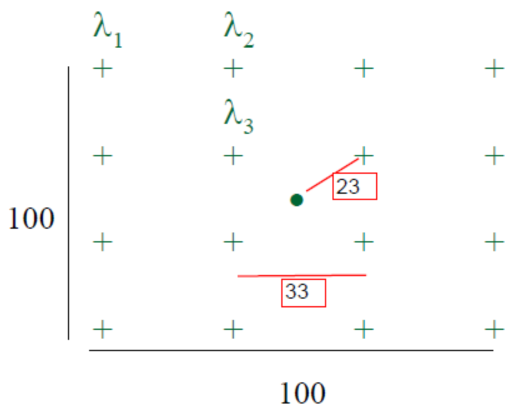
Influence de l’anisotropie :

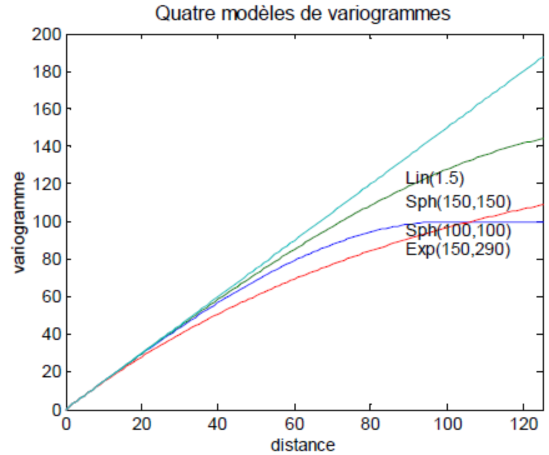


Var. anisotrope 

6. Tiens compte de la continuité spatiale du phénomène étudié :

Influence du modèle :





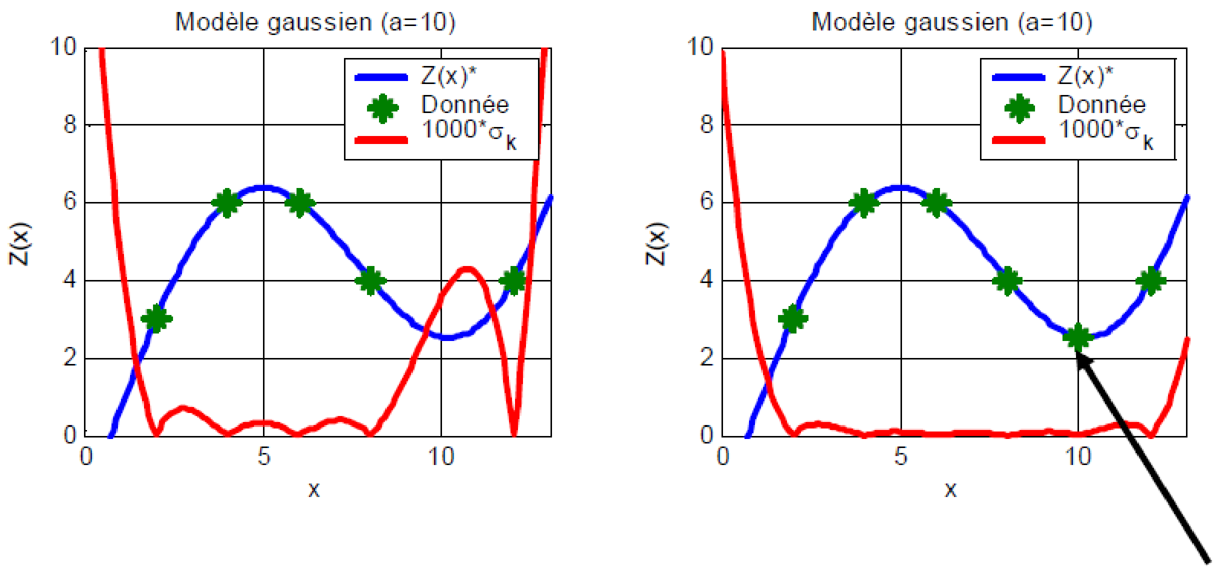
	λ_1	λ_2	λ_3	σ_k^2
Sphérique, C=100, a=100	-.02	-.01	.29	28.0
Sphérique, C=150, a=150	-.01	-.01	.29	27.8
Exp. C=150, a_{eff}=290	-.01	-.01	.28	28.2
Linéaire, pente=1.5	-.01	-.01	.28	27.6

4 ajustements équivalents h<30

=> mêmes poids λ

=> même σ_k^2

7. Transitif (cohérence des estimations) :



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.

6. Aspects pratiques

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

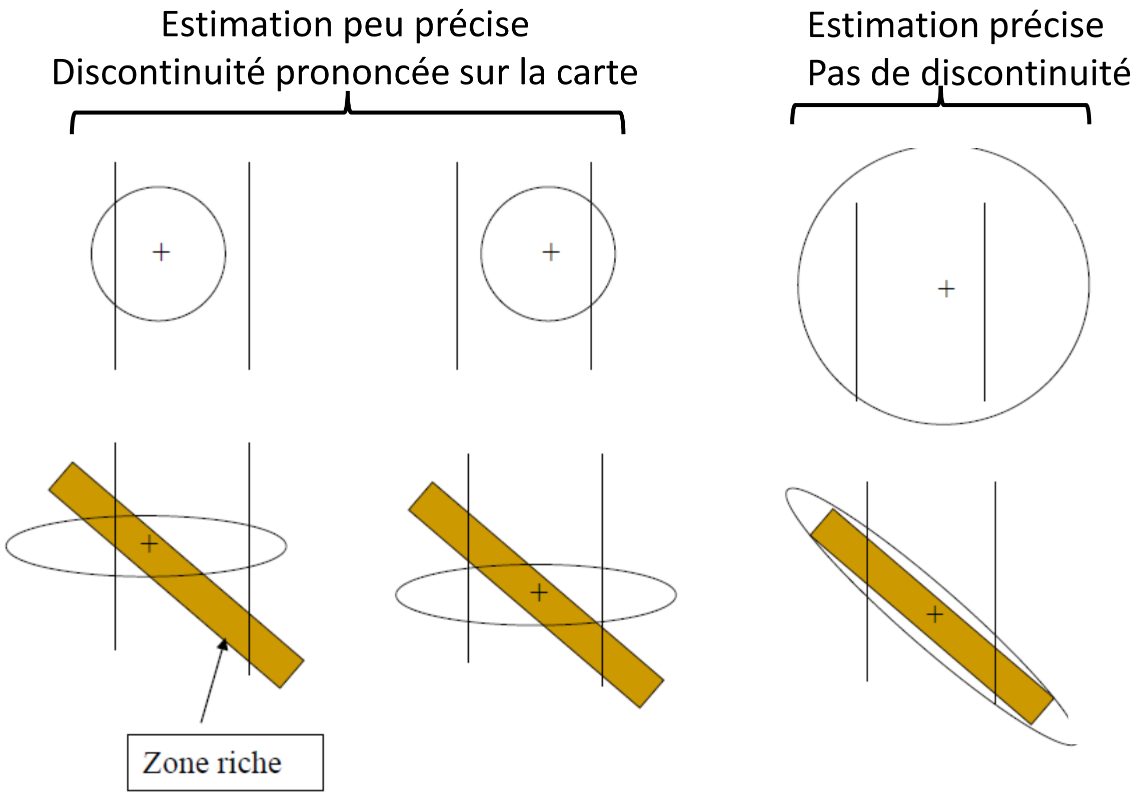
  « m » est estimée implicitement → voisinage glissant (ou local) permet de relaxer l'hypothèse de stationnarité (« m » peut fluctuer d'un voisinage à l'autre)

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

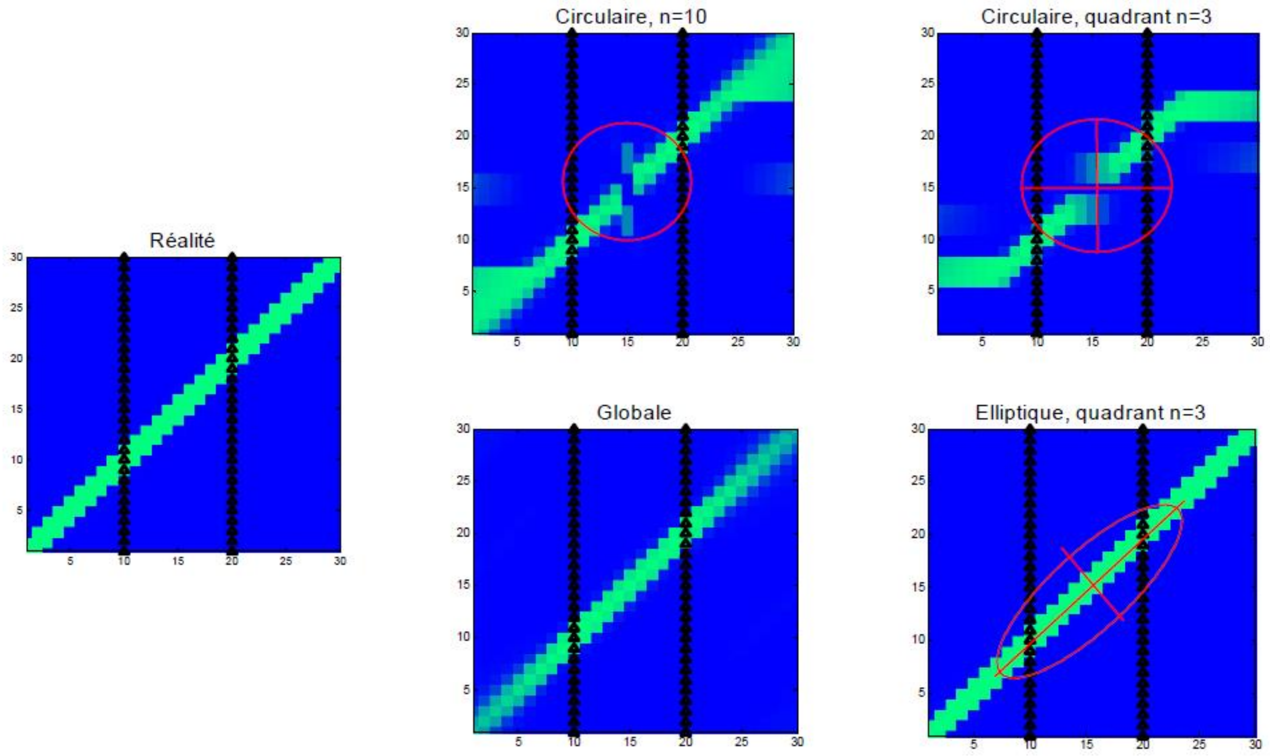
- Voisinage utilisé pour le krigeage:
  - Habituellement en voisinages glissants.
  - Nombre de points suffisant (>10; peut atteindre jusqu'à 50-100).
    - Zone de recherche assez grande pour assurer un minimum de points.
    - Recherche par quadrants (2D) ou octants (3D) (min 2 ou 3 points par quadrant/octant)

6. Aspects pratiques

Importance du voisinage :



Importance du voisinage : Exemple



7. Validation croisée

Objectifs :

Permets de valider un modèle de variogramme
Permets de valider le voisinage utilisé pour le krigeage

Technique du ‘*leave-one-out*’ :

Consiste à retirer une observation pour ensuite l’estimer par krigeage à partir des autres données observées. Cela est répété pour tous les points.

$$e_i = Z_v(x_i) - Z_v^*(x_i) \ ; \ n_i = \frac{e_i}{\sigma_{K,i}}$$

Statistique pour comparaison :

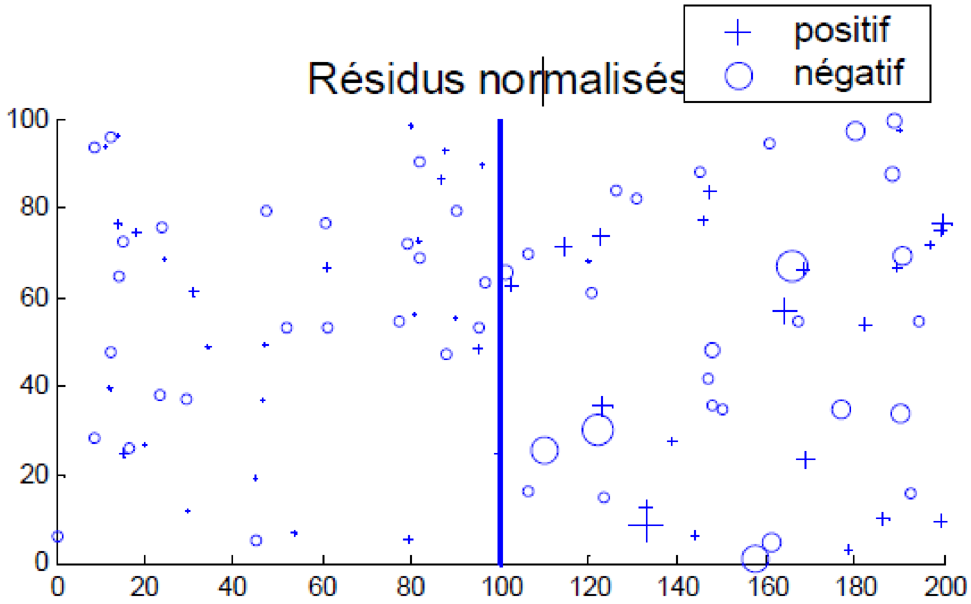
$$\sum_i e_i \approx 0 \ et \sum_i n_i \approx 0$$

$$\min\left(\sum_i |e_i|\right) ou \min\left(\sum_i e_i^2\right) \ ou \sqrt{\frac{1}{N}\sum_i n_i^2} \approx 1$$

7. Validation croisée

Comparaison visuelle :

- Histogramme des résidus et résidus normalisés
- Carte des résidus et résidus normalisés



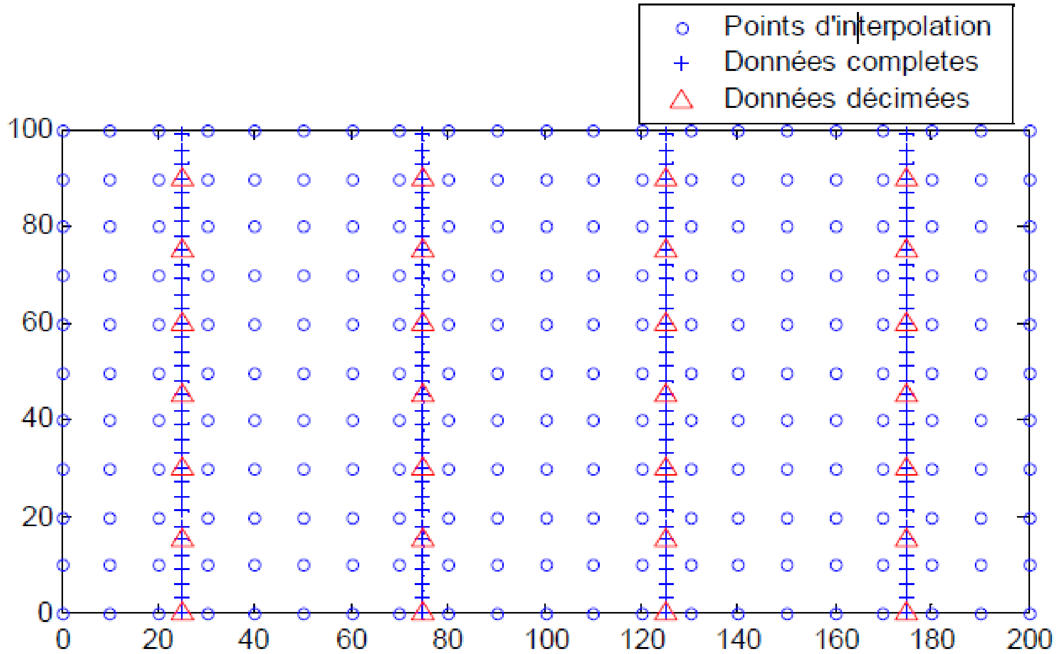
Diviser en deux zones distinctes ?

7. Validation croisée

Reproduire des situations réalistes d'estimation :

- Grille complète des données → valider le variogramme à petite échelle
- Grille décimée → valider le variogramme à des distances plus grandes

Pourquoi ?

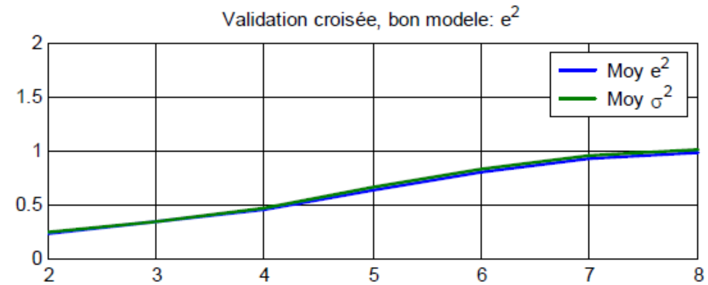


7. Validation croisée

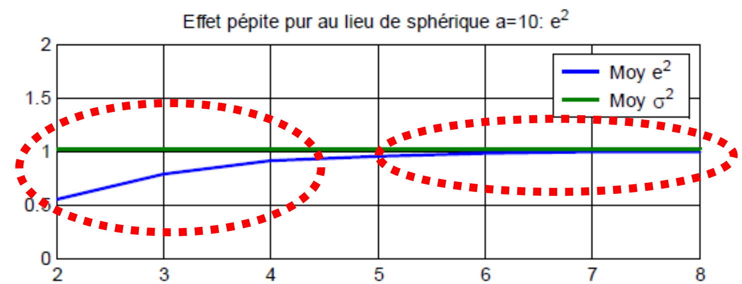
Exemple de validation croisée:

- Grille de dimension 40 x 40 (1 600 points)
- Modèle de variogramme : sphérique isotrope $(a = 10, C = 1, C_0 = 0)$
- Voisinage : 50 points

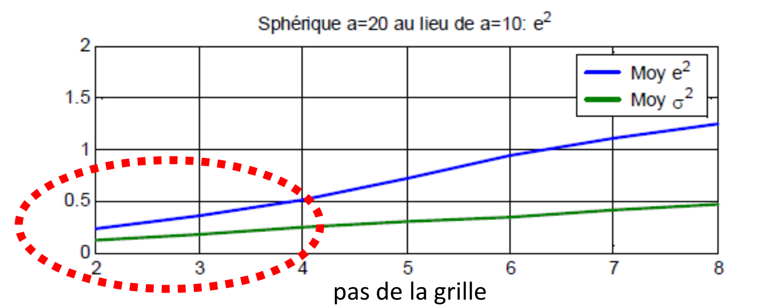
1) Modèle fourni : sphérique isotrope $(a = 10, C = 1, C_0 = 0)$



2) Modèle fourni : effet de pépite pur (C_0 =0)

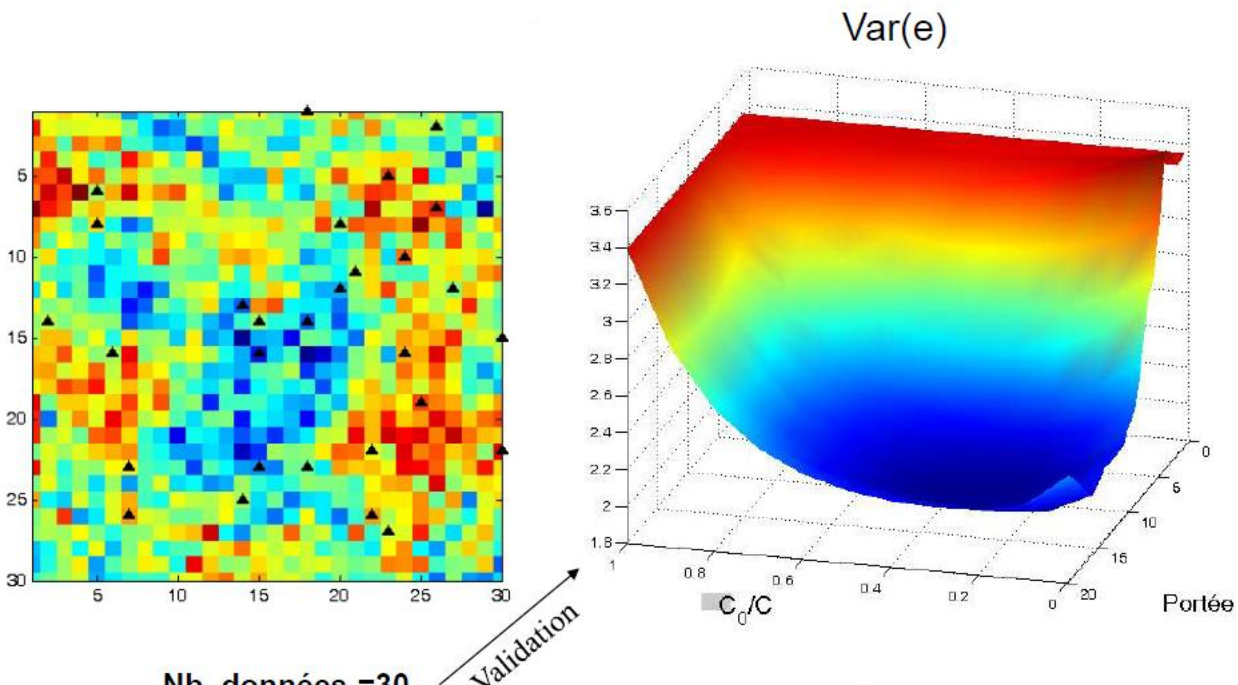


3) Modèle fourni : sphérique isotrope $(a = 20, C = 1, C_0 = 0)$



7. Validation croisée

Exemple simulé de validation croisée:



Nb. données =30

Minimum en a=15, C0/C=0.3; près des valeurs utilisées pour la simulation (C0/C=0.33; a=10)

pas de la grille

8. Lien entre krigeage simple et krigeage ordinaire

Soit v le domaine d'étude :

- On peut estimer m par KO et utiliser cette moyenne pour KS.

On obtient ainsi :

Estimation de m par KO : $\lambda_{m,i}$; μ_m ; $\sigma^2_{KO,m} = -\mu_m$

Estimation de $Z_v(x)$ par KO : $\lambda_{KO,i}$; μ ; σ^2_{KO}

Estimation de $Z_v(x)$ par KS avec m estimée par KO : $\lambda_{KS,i}$; σ^2_{KS} ; $S_s = \left(1 - \sum_{i=1}^{n} \lambda_{KS,i}\right)$

$$\lambda_{KO,i} = \lambda_{KS,i} + S_s \lambda_{m,i}$$

$$\mu = S_s \mu_m$$

$$\sigma^2_{KO} = \sigma^2_{KS} + S_s^2 \sigma^2_{KO,m}$$