GML6402A : Géostatistique

Cours 3 : Krigeage

POLYTECHNIQUE
MONTRÉAL

UNIVERSITÉ
D'INGÉNIERIE

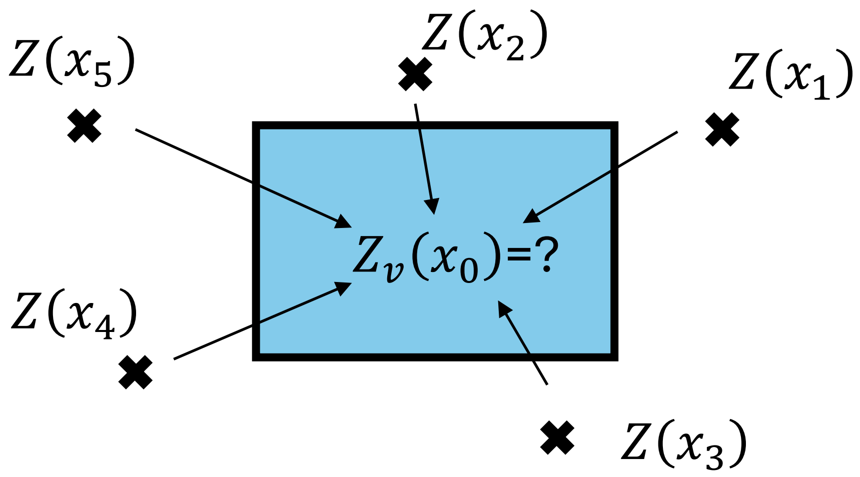
Objectifs

- Comprendre la notion de variance d'estimation;
- Identifier le lien entre patron d'échantillonnage et anisotropie du variogramme;
- Expliquer les différences entre krigeage simple, ordinaire, avec dérive externe et universel;
- Être capable de dériver les équations du krigeage;
- Construire et résoudre les systèmes de krigeage, calculer l’estimation et la variance;
- Expliquer les différentes propriétés du krigeage;
- Pouvoir utiliser et interpréter la validation croisée par krigeage en lien avec le modèle de variogramme.

Plan de cours

1. Variance d'estimation
2. Estimation linéaire
3. Krigeage
    1. Simple;
    2. Ordinaire
    3. Avec dérive
    4. Universel
4. Estimation de la covariance des résidus
5. Krigeage sous forme duale
6. Estimation d'une transformation linéaire de Z(x)

1. Variance d'estimation



Nous savons comment déterminer la continuité spatiale avec le variogramme;

Nous savons comment gérer le transfer de données ponctuelles à données sur blocs;

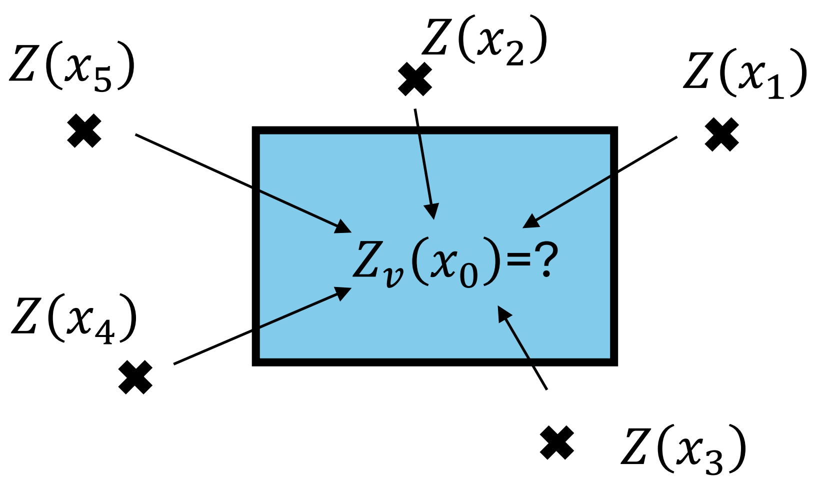
Nous savons comment calculer la variance de bloc;

Nous savons comment comparer l'efficacité entre différentes méthodes d'opération ;

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

1. Variance d'estimation

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 $Z_v(x)$?

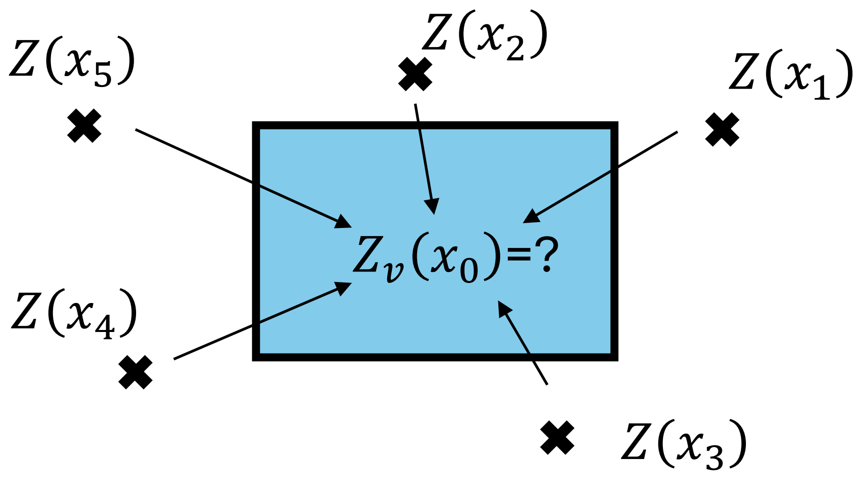
Comment ces erreurs varient-elles dans l'espace selon la configuration des données ?

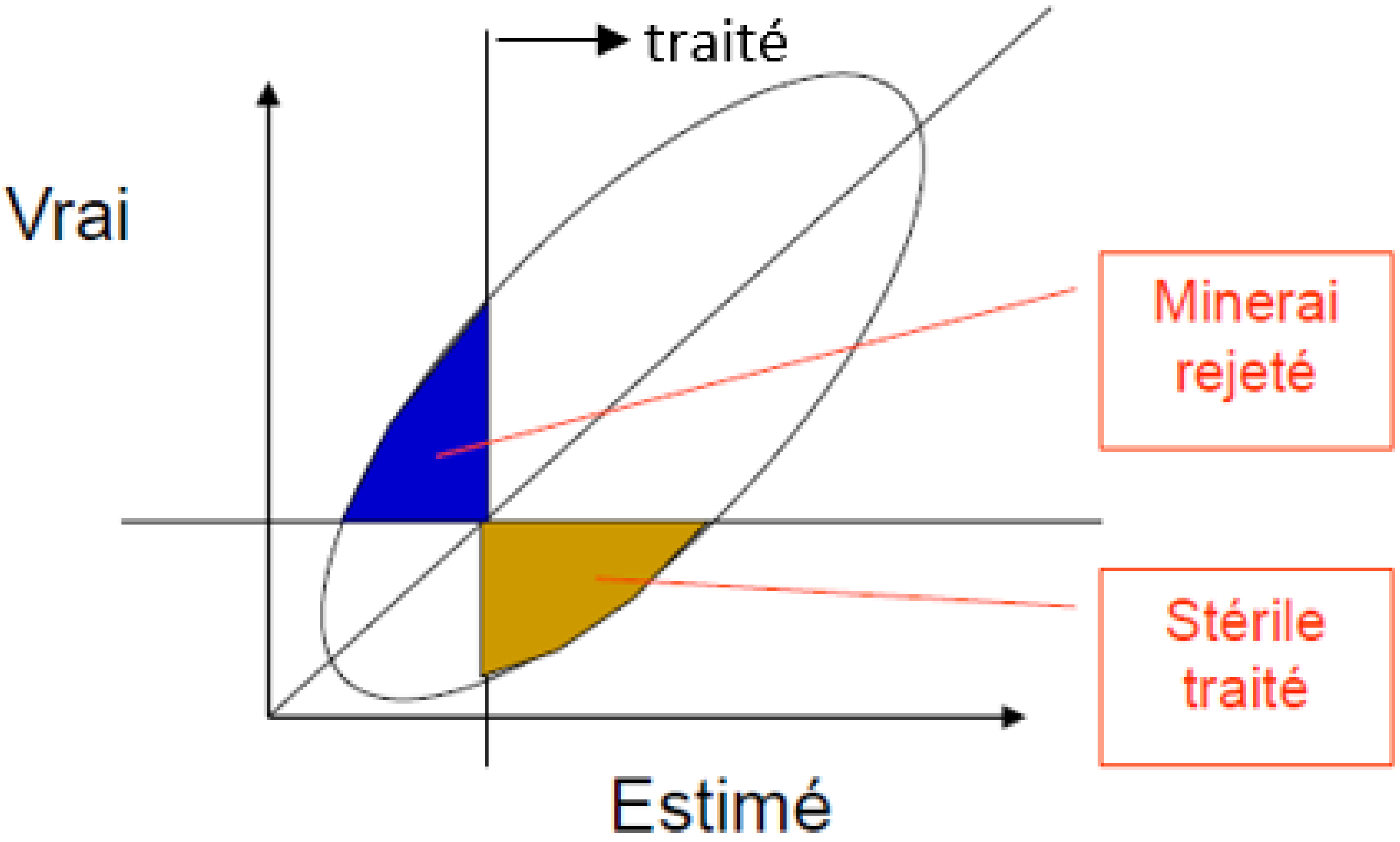
Quel sera l'impact sur l'évaluation des ressources ?

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 ?

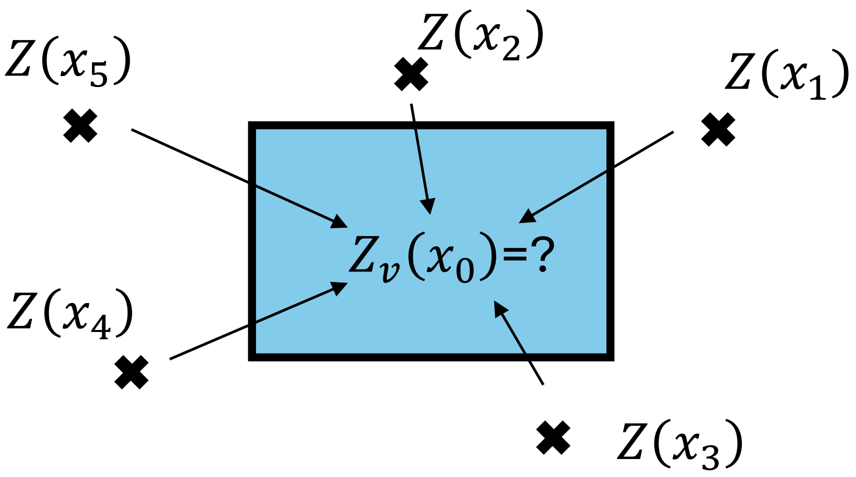
Conclusion : on cherche à maximiser notre effet d'information





1. Variance d'estimation

Équation :



<u>Estimation linéaire du bloc v :</u>

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

<u>Erreur d'estimation du bloc v :</u>

$$e = Z_v - Z_v^*$$

(erreur = réel – estimé)

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

1. Variance d'estimation

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 ?

1. Variance d'estimation

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.

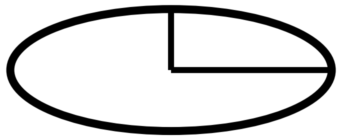
1. Variance d'estimation

Choix de la grille :

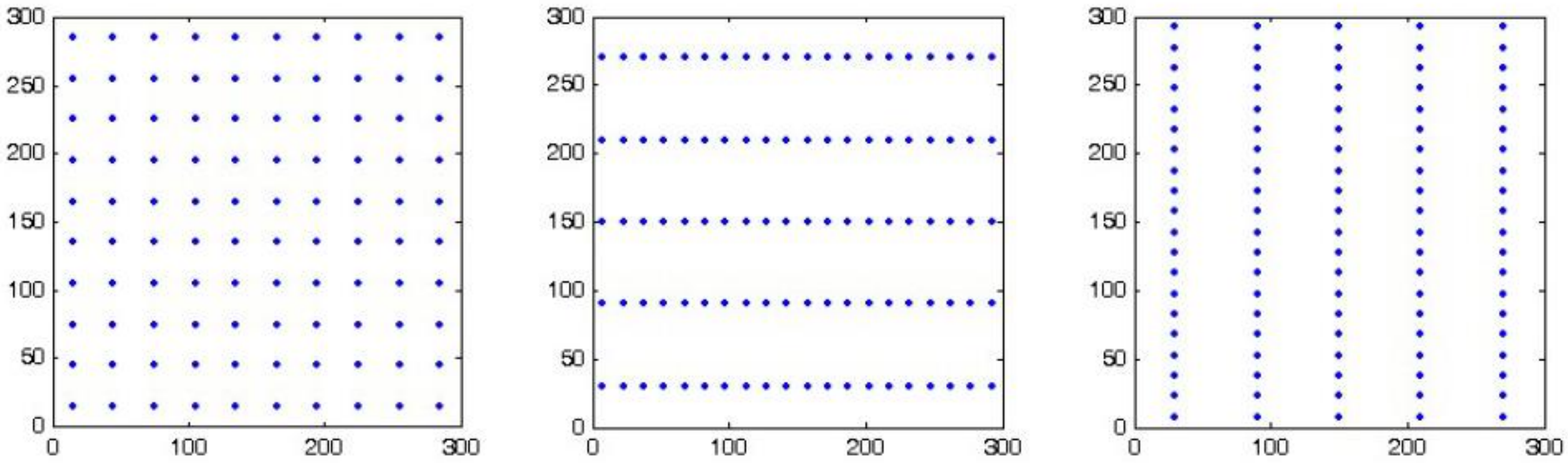
Variogramme sphérique $\left(a_x = 100, a_y = 25, C = 40, C_0 = 10\right)$

Domaine à estimer : 300×300

Portée variogramme



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



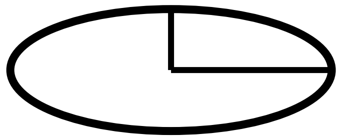
1. Variance d'estimation

Choix de la grille :

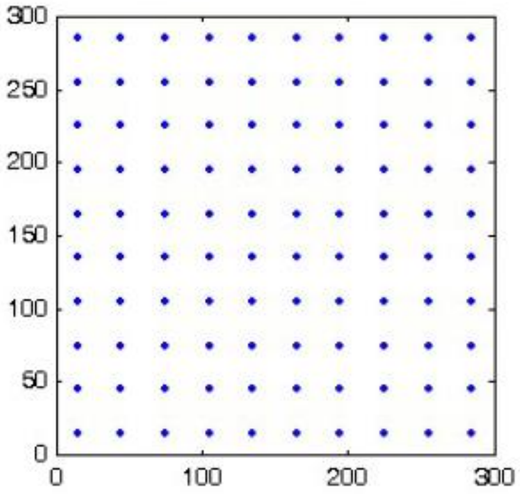
Variogramme sphérique $\left(a_x = 100, a_y = 25, C = 40, C_0 = 10\right)$

Domaine à estimer : 300×300

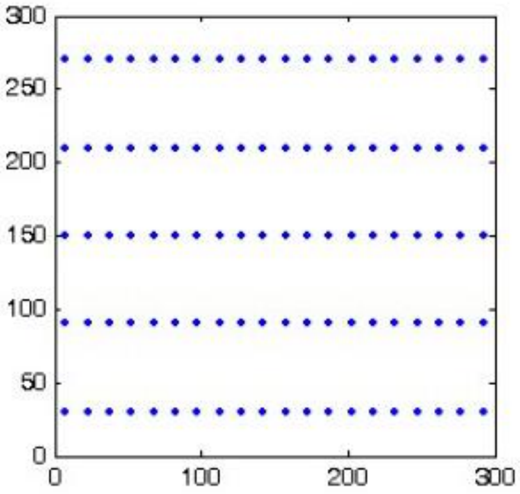
Portée variogramme



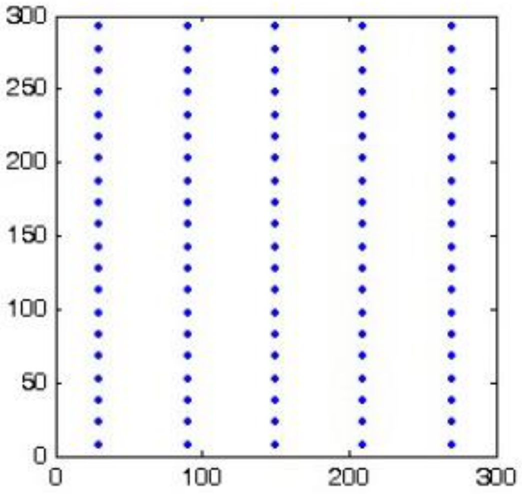
$Var(e) = 0.24$



$Var(e) = 0.36$



$Var(e) = 0.19$



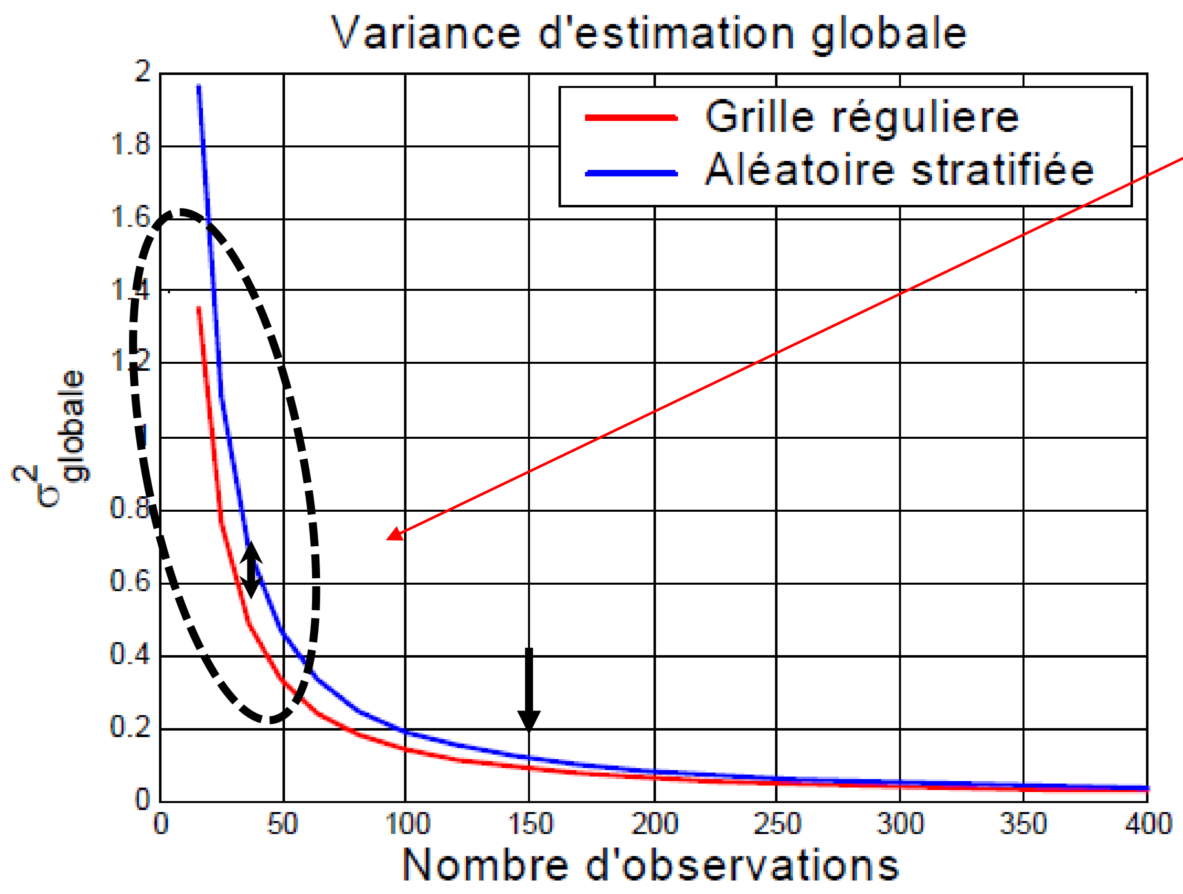
Densifier l'échantillonnage dans la direction de faible continuité spatiale

1. Variance d’estimation

Grille aléatoire versus grille regulière :

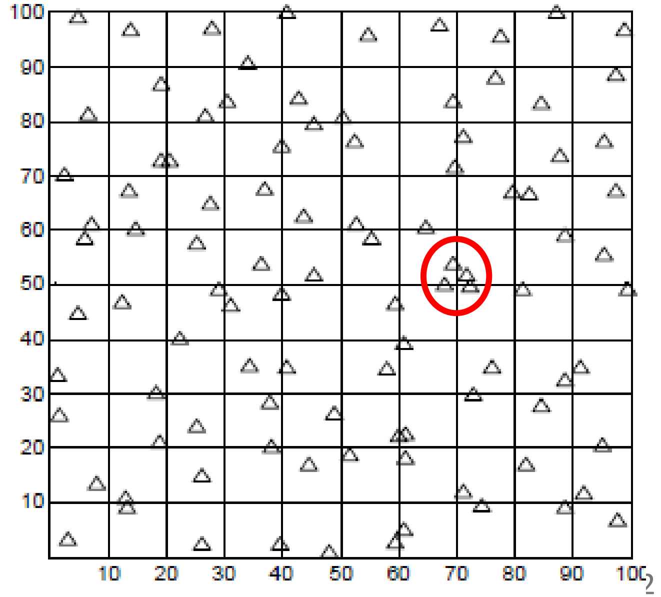
Variogramme sphérique $(a = 100, C = 40, C_0 = 10)$

Domaine à estimer : 300×300



Que constatez-vous ?

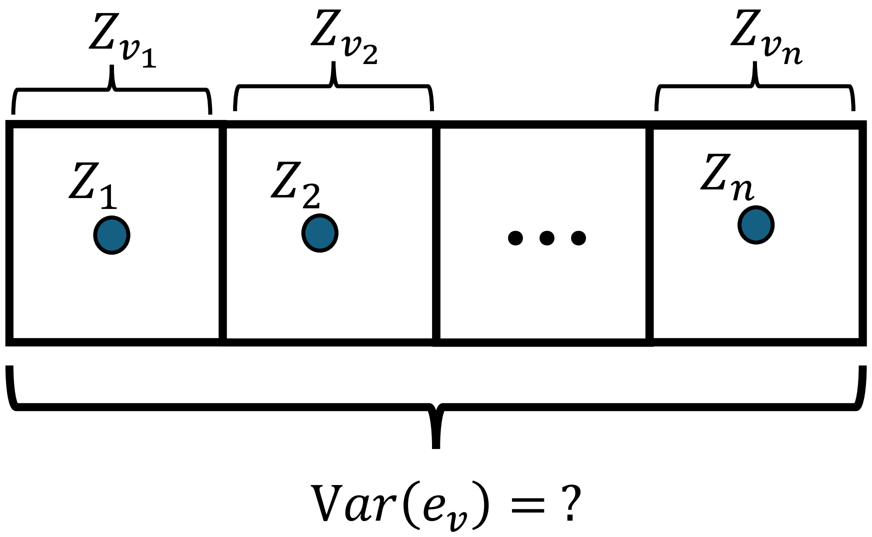
Grille aléatoire stratifiée



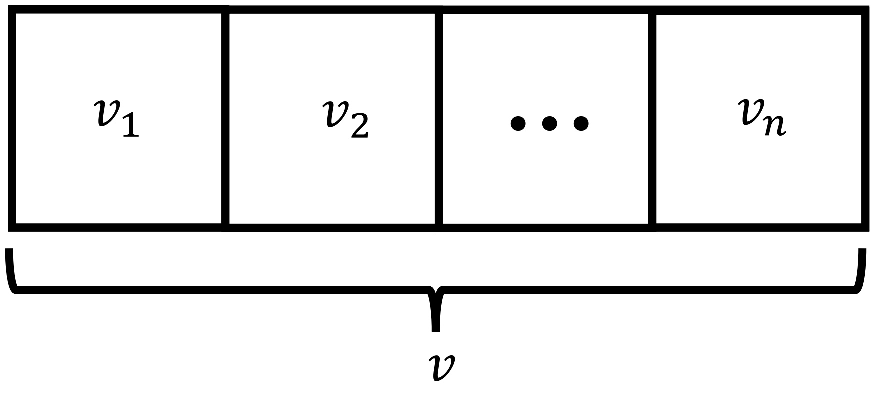
1. Variance d’estimation

Contexte :

Teneur :



Volume :



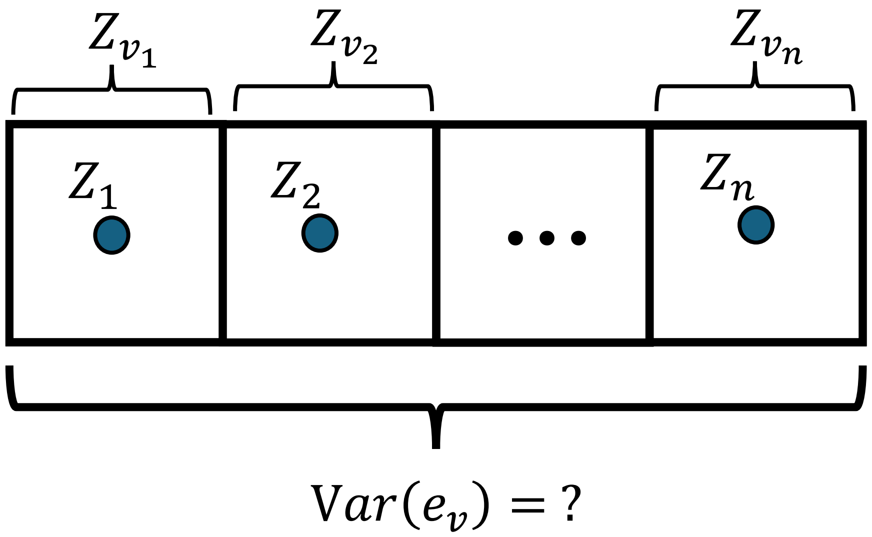
Question :

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

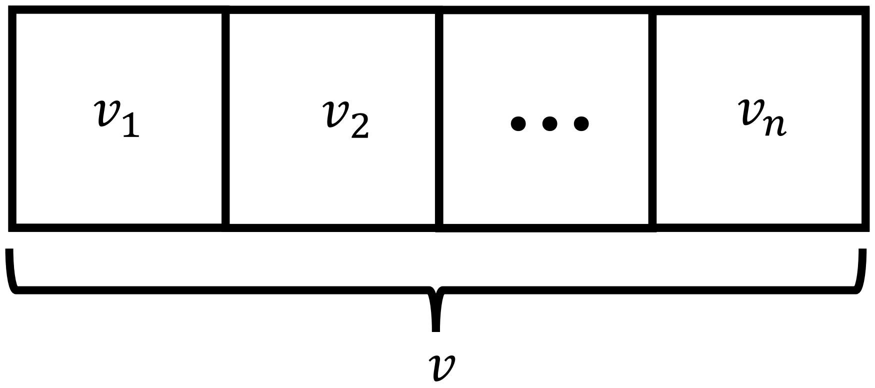
1. Variance d'estimation

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 :

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

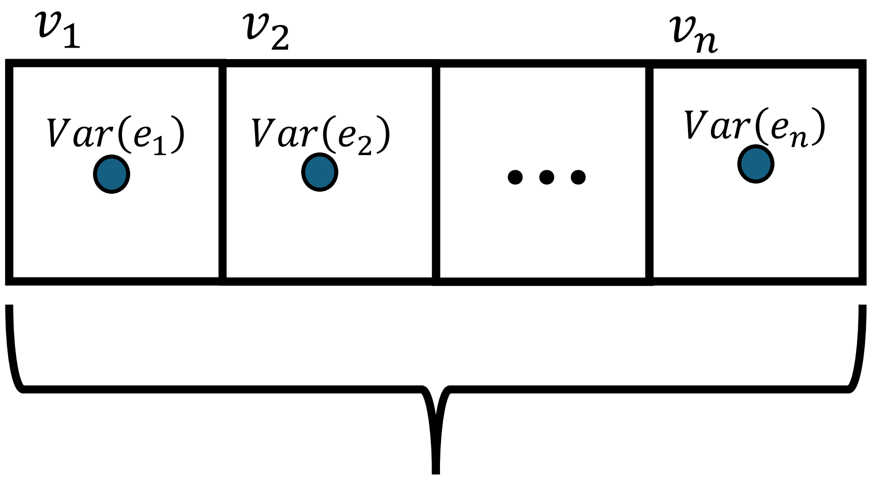
Variance d'estimation du bloc v :

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

1. Variance d'estimation

Relation :

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



$Var(e_v) = ?$

Démonstration :

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

$$\begin{aligned}
Var(e_v) &= Var\left(\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i Z_{v_i} - \frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i Z_i\right) \\
&= Var\left(\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i (Z_i - Z_{v_i})\right) \\
&= Var\left(\frac{1}{v}\sum_{i=1}^{n} v_i \times e_i\right) \\
&= \frac{1}{v^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} v_i v_j Cov(e_i, e_j) \\
&\approx \frac{1}{v^2}\sum_{i=1}^{n} v_i^2 Var(e_i)
\end{aligned}$$

?

1. Variance d’estimation

Condition d’application :

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

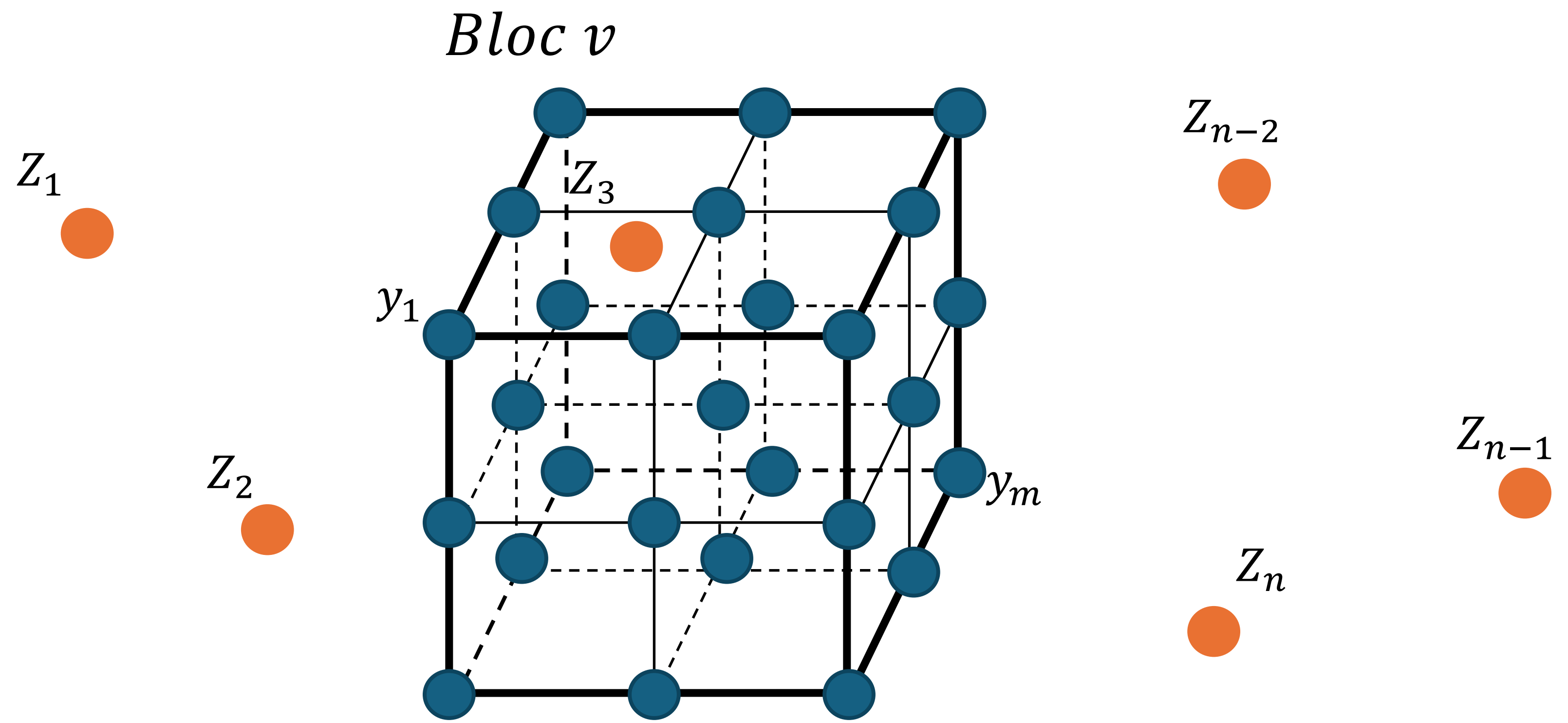
- Se généralise à autant de zones quelconques que nécessaire ;
- $Var(e_i)$ peut être obtenu soit directement soit par composition des erreurs élémentaires (échantillonnage régulier ou aléatoire stratifié) ;
- On peut toujours recourir au calcul exact de $Var(e)$, mais l’approche par composition des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

Complément d'information

Approximation numérique :

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

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

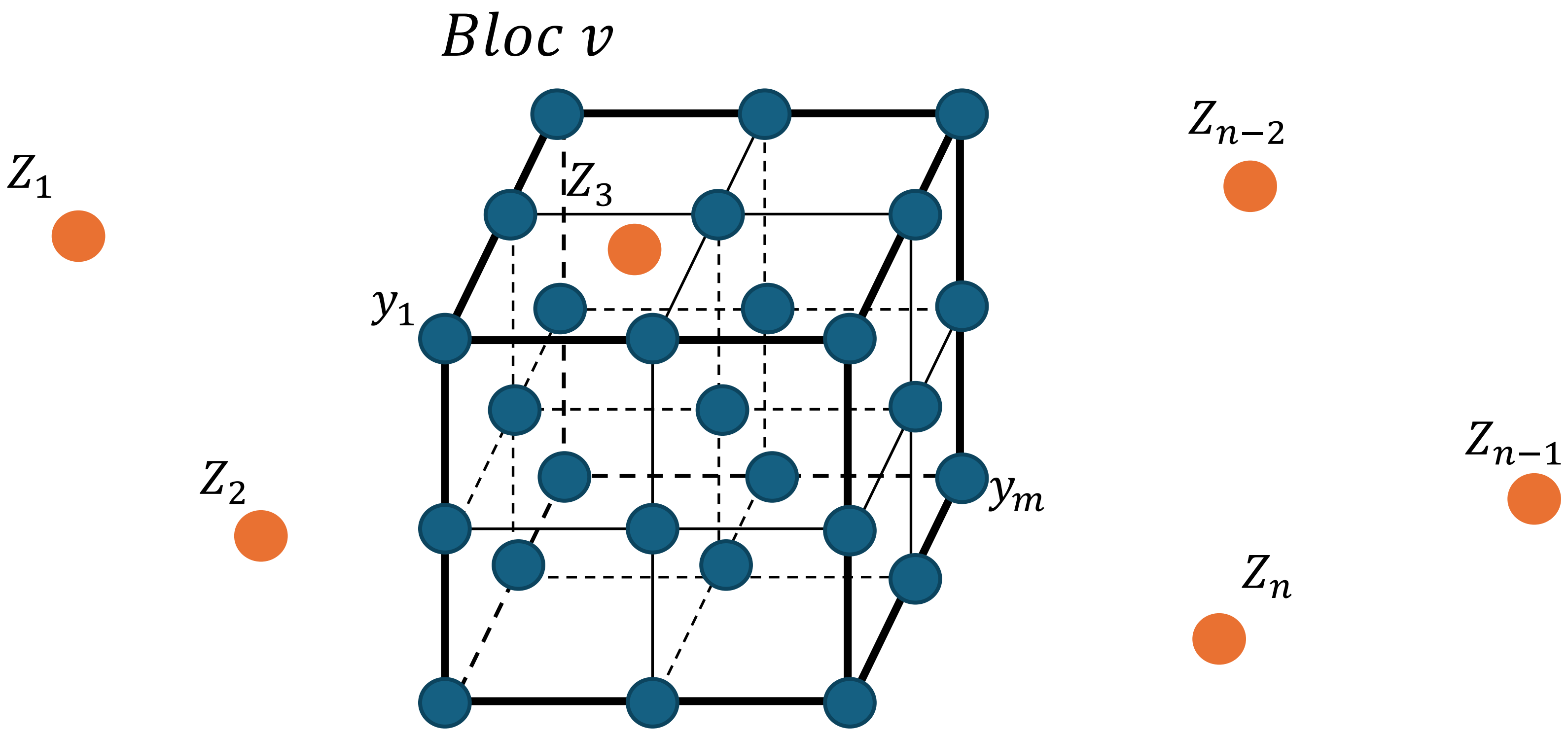


Complément d'information

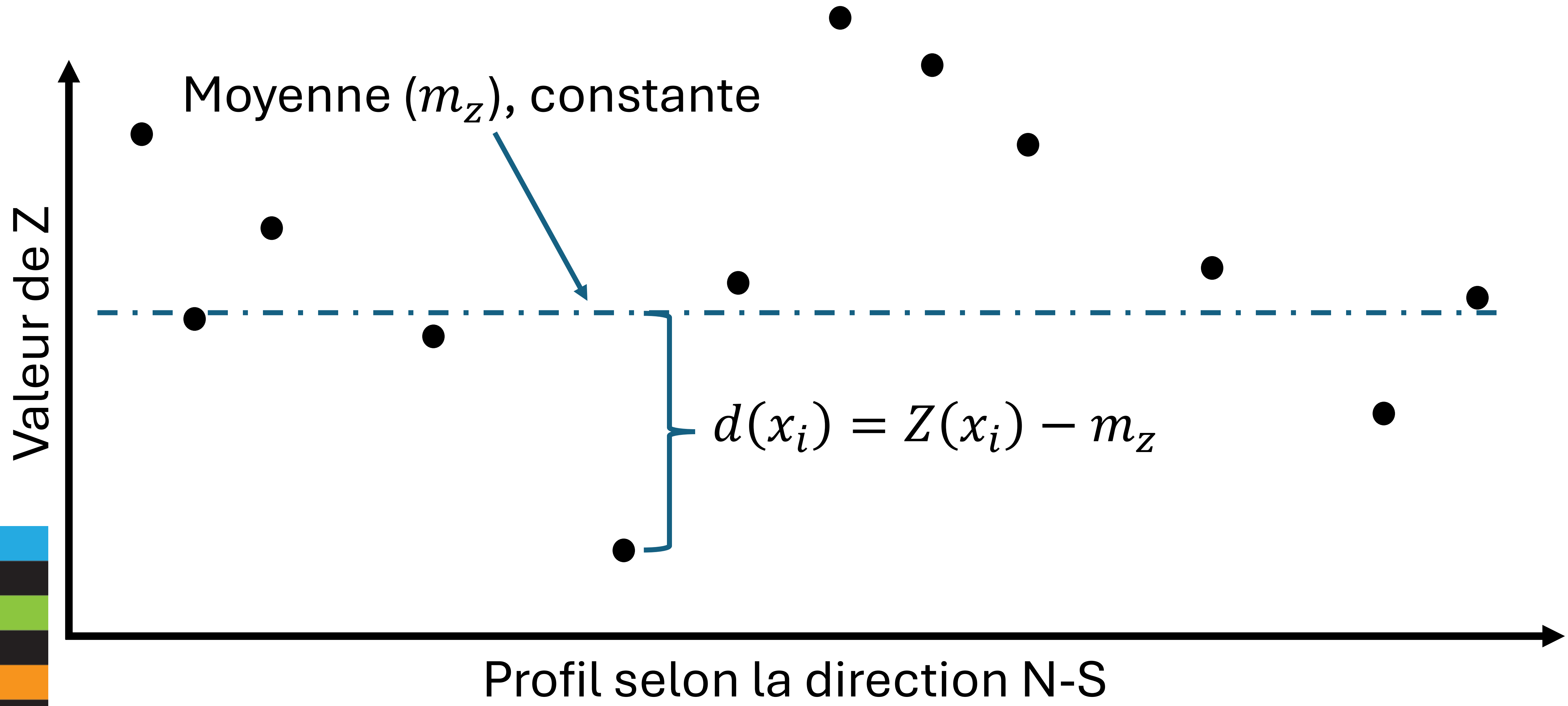
Approximation numérique :

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

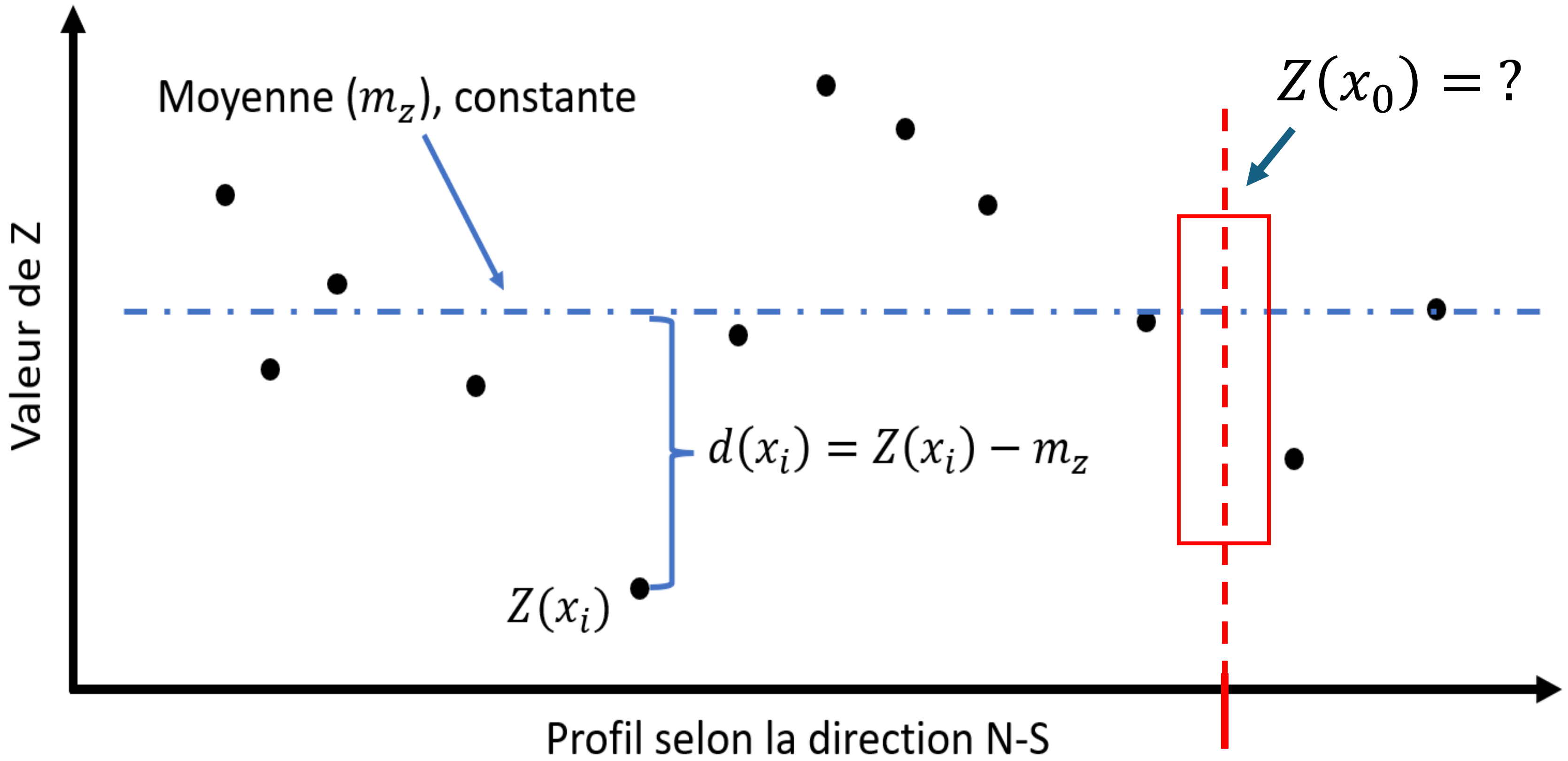
$$Var(e) = \sigma_e^2 \approx Var(Z_v) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j \, Cov(Z_i, Z_j) - 2 \sum_i \lambda_i Cov(Z_i, Z_v)$$



2. Estimation linéaire



2. Estimation linéaire



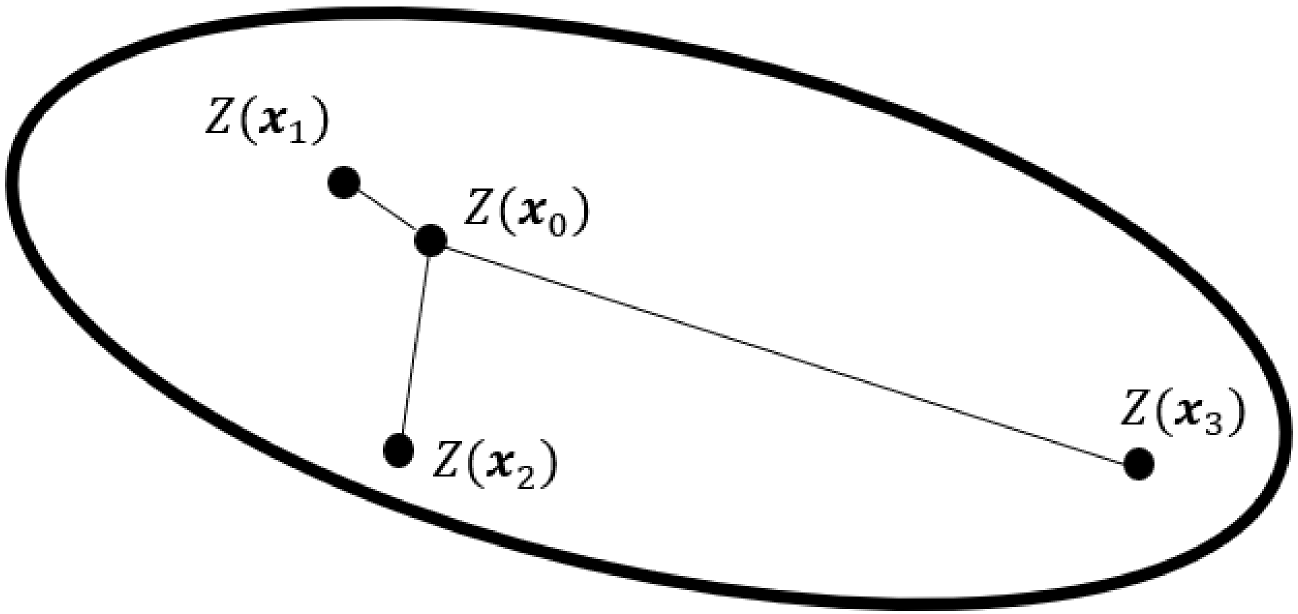
$Z(\boldsymbol{x}_0)$: à estimer
$Z(\boldsymbol{x}_i)$: Données connues

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

Contrainte : sans biais

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

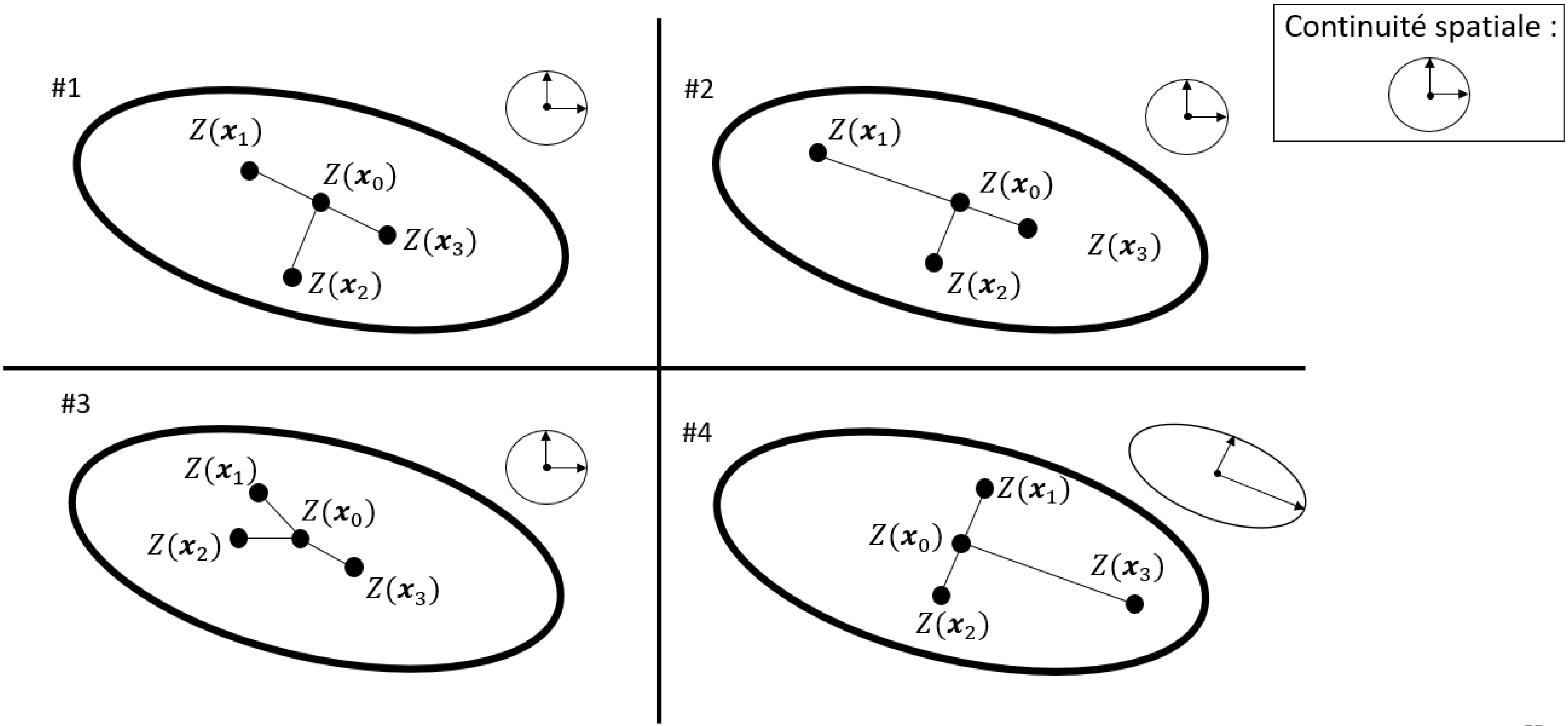
Mise en situation (2D)



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

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

Mise en situation (2D)



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 ?

3. Krigeage

Krigeage :

- 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.

3. Krigeage

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

3.1 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.

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

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

3.1 Krigeage Simple

Dérivées partielles :

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

<u>Système d'équations à n inconnus :</u>

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

<u>Variance du krigeage simple :</u>

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

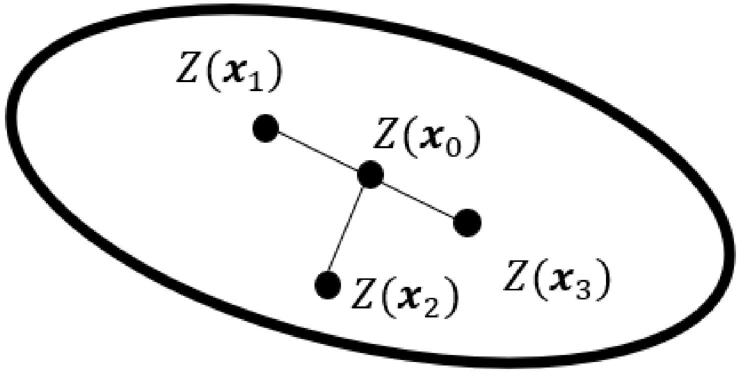
<u>Estimée par krigeage simple :</u>

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

3.1 Krigeage Simple

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

$$\sigma_{KS}^2 = \sigma_v^2 - \lambda_s' k_s$$



$$cov(Z_n, Z_n) = var(Z_n) = \sigma^2$$
$$cov(Z_n, Z_m) = cov(Z_m, Z_n)$$

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

3.2 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.

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

3.2 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>

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

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

3.2 Krigeage Ordinaire

Estimateur et variance :

Variance du krigeage ordinaire :

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

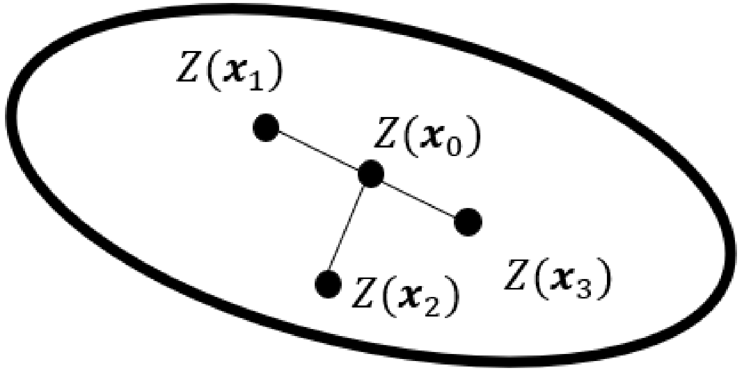
Estimée par krigeage ordinaire :

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

3.2 Krigeage Ordinaire

Forme matricielle :

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

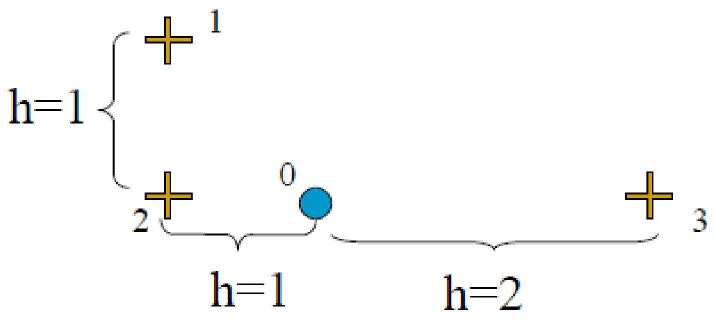


$$\sigma_{KO}^2 = \sigma_v^2 - \lambda_O k_O$$

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

3. Krigeage (exemple)

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

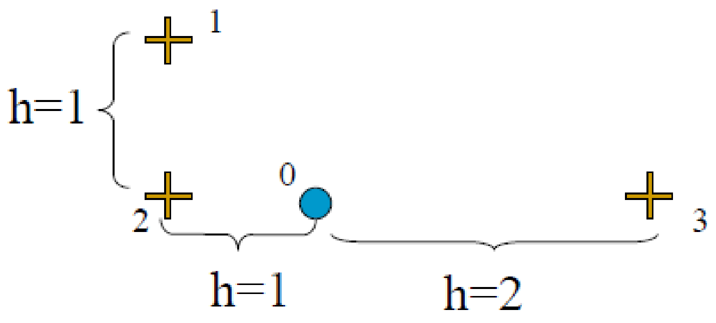
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

Comment solutionner un système de krigeage ?

Approche en 6 étapes

3. Krigeage (exemple)

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

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

Données observées

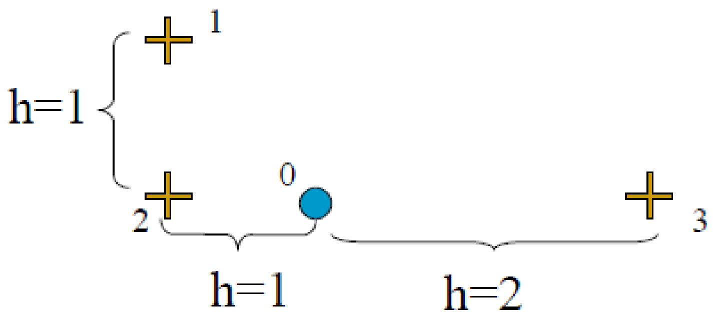
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

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

3. Krigeage (exemple)

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

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

Données observées

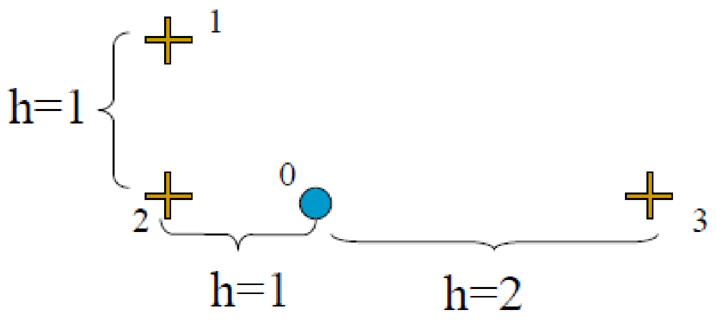
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

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

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

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

Données observées

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

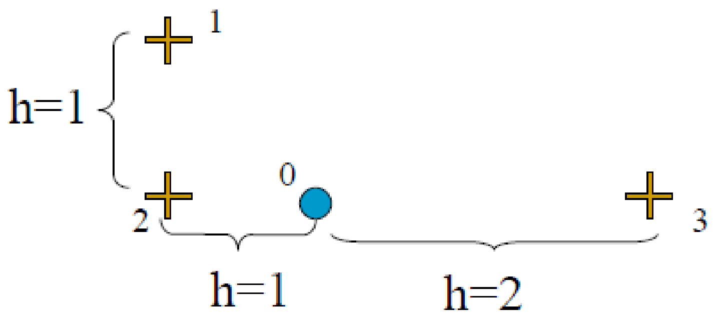
Étape 3) Transformer la matrice de variogramme en matrice de covariance

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

3. Krigeage (exemple)

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

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

Données observées

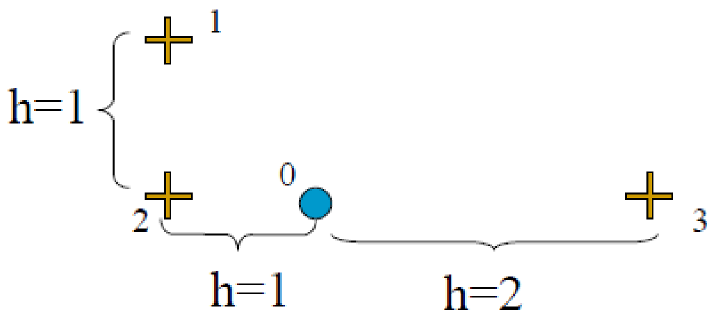
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

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

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 11 & 5.19 & 0 \\ 5.19 & 11 & 0 \\ 0 & 0 & 11 \end{matrix}} & \begin{matrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 \end{matrix} & 0 \end{bmatrix}}_{K_O} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ \mu \end{bmatrix}}_{\lambda_O} = \underbrace{\begin{bmatrix} \boxed{\begin{matrix} 3.45 \\ 5.19 \\ 1.48 \end{matrix}} \\ 1 \end{bmatrix}}_{k_O}$$

3. Krigeage (exemple)

Cas simple (3 observations et 1 estimation) :



Modèle de variogramme :

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

Données observées

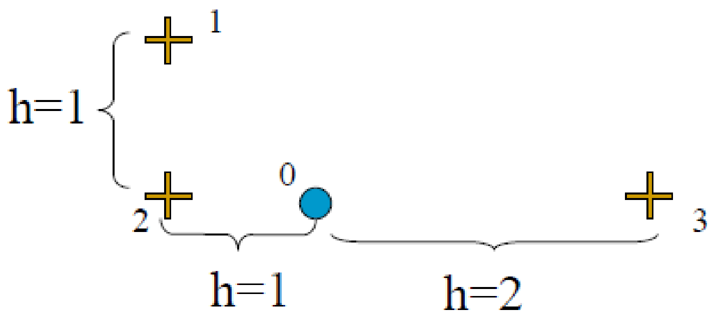
- $Z_1 = 9, Z_2 = 3, Z_3 = 4$

Étape 5) Résoudre le système d'équations

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

3. Krigeage (exemple)

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

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

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

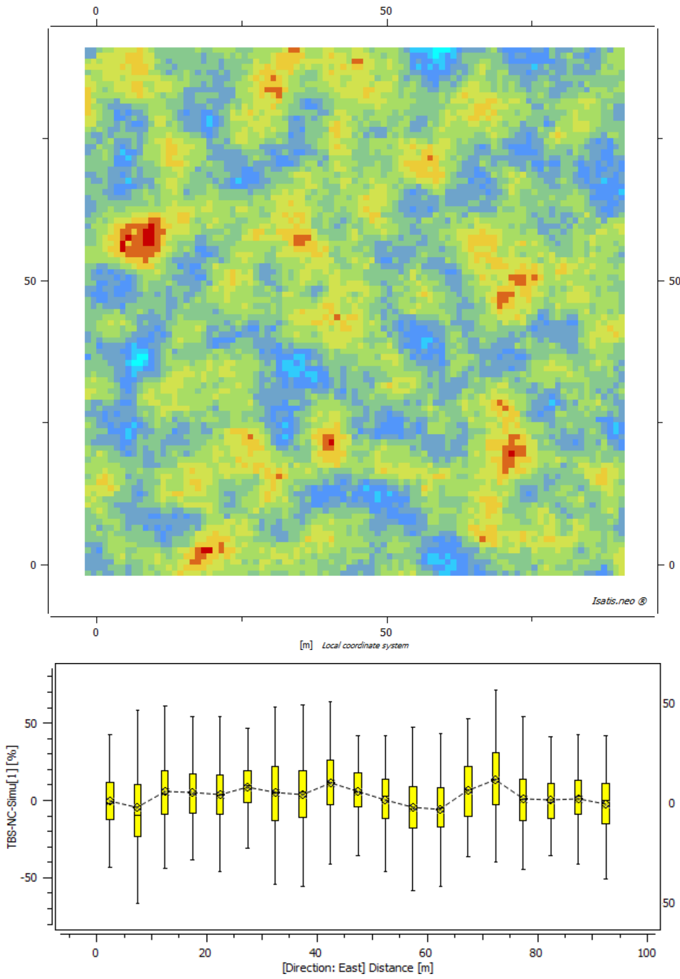
3.3 Krigeage avec dérive

Stationnarité et non-stationnarité:

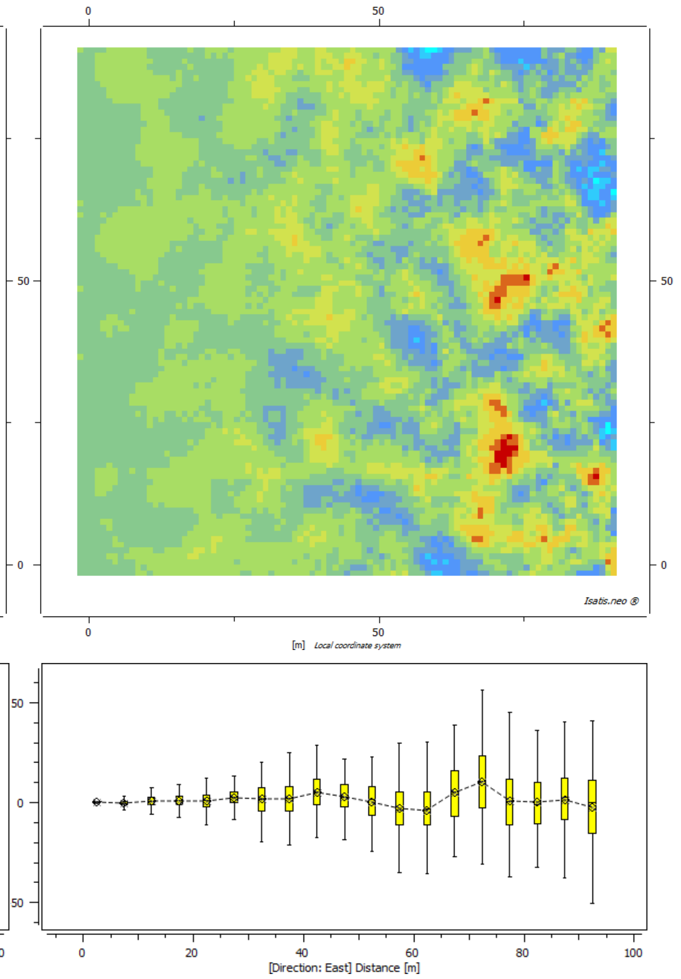
3.3 Krigeage avec dérive

Stationnarité et non-stationnarité:

Stationnarité du 2ième ordre



Stationnarité intrinsèque



Une fonction aléatoire intrinsèque non stationnaire d'ordre 2 est dite strictement intrinsèque

3.3 Krigeage avec dérive

Moyenne non stationnaire:

$$E[Z(x)] = m(x) \rightarrow \text{dépend de la localisation}$$

Plusieurs cas de figures, en voici deux :

1- $m(x)$ fonction des coordonnées $$m(x) = \sum_{k=1}^{nc} a_k f_k(x)$$ Krigeage avec dérive

2- $m(x)$ fonction d'une autre variable $$m(x) = a_0 + a_1 Y(x)$$ Krigeage avec dérive externe

3.3 Krigeage avec dérive

Exemples:

1- $m(x)$ fonction des coordonnées

- Gradient régional pour une charge hydraulique
- Forme logarithmique induite par un pompage sur la charge hydraulique
- Pente le long d'un talus continental
- Gradient géothermique

2- $m(x)$ fonction d'une autre variable Y(x)

- Type de roches différentes
- Carte de temps sismiques à un réflecteur
- Variable indicatrice indiquant la position par rapport à une faille connue
- Le temps(phénomène ayant une dérive dans le temps ou une composante cyclique)
- <u>Note : Y(x) doit être connue en tout point</u>

3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

$$m(x) = \sum_{k=1}^{nc} a_k f_k(x)$$

- Les $f_k(x)$ sont des fonctions de bases (monômes, fonctions trigonométriques, logarithme,...)

- Les coefficients a_k sont inconnus. Ils peuvent être estimés soit explicitement, soit implicitement (préférable)

Explicitement : On déduit les coefficients par régression linéaire
Implicitement : On impose des contraintes assurant le non-bais dans le système de krigeage

Ex.

$$Z(x_0)^* = \sum_i \lambda_i Z_i \longrightarrow E[Z(x_o)^*] = \sum_i \lambda_i E[Z_i] = \sum_i \lambda_i \sum_k a_k f_k(x_i) = \sum_k a_k \sum_i \lambda_i f_k(x_i)$$

3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

On a :

$$E[Z(x_o)^*] = \sum_k a_k \sum_i \lambda_i f_k(x_i)$$

D'autre part :

$$E[Z(x_o)] = \sum_k a_k f_k(x_0)$$

Si l'on pose les conditions suivantes:

$$\boxed{\sum_i \lambda_i f_k(x_i) = f_k(x_0)}$$

Alors on a l'égalité recherchée indiquant l'absence de biais

$$\boldsymbol{E[Z(x_o)] = E[Z(x_o)^*]}$$

3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

Contraintes additionnelles de non-biais

⇒ lagrangien augmenté

⇒ système d'équations linéaires à (n+nc) inconnues et (n+nc) équations, nc: nombre de contraintes de non-biais

Solution unique si:

- n ≥ nc
- les fk(xi) sont linéairement indépendantes

Sous forme matricielle:

$$K_t \lambda_t = k_t$$
$$\sigma_{kt}^2 = \sigma_v^2 - \lambda_t' k_t$$

3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

Sous forme matricielle:

$$K_t \lambda_t = k_t$$
$$\sigma_{kt}^2 = \sigma_v^2 - \lambda_t' k_t$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} K_s & F \\ F' & 0 \end{bmatrix}}_{K_t} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix}}_{\lambda_t} = \underbrace{\begin{bmatrix} k_s \\ f \end{bmatrix}}_{k_t}$$

où F est la matrice $n\ x\ nc$ des fonctions de base évaluées aux points x_i
f est le vecteur $nc\ x\ 1$ des fonctions de bases évaluées à x_0
μ est le vecteur $nc\ x\ 1$ des multiplicateurs de Lagrange

3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

Exemples:

i- Le krigeage ordinaire ($m(x)= m$)

$$F = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ . \\ 1 \end{bmatrix} \quad f = 1$$

ii- Dérive linéaire en 1D : $m(x)=a+b*x$

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ 1 & . \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \quad f = \begin{bmatrix} 1 \\ x_0 \end{bmatrix}$$

iii- Dérive linéaire en 2D : $m(x)=a+b*x+c*y$

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ . & . & . \\ 1 & x_n & y_n \end{bmatrix} \quad f = \begin{bmatrix} 1 \\ x_0 \\ y_0 \end{bmatrix}$$

iv- Dérive quadratique en 2D : $m(x)=a+b*x+c*y+d*x^2+e*x*y+f*y^2$

$$F = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & x_1^2 & x_1 y_1 & y_1^2 \\ 1 & x_2 & y_2 & x_2^2 & x_2 y_2 & y_2^2 \\ . & . & . & . & . & . \\ 1 & x_n & y_n & x_n^2 & x_n y_n & y_n^2 \end{bmatrix} \quad f = \begin{bmatrix} 1 \\ x_0 \\ y_0 \\ x_0^2 \\ x_0 y_0 \\ y_0^2 \end{bmatrix}$$

Exemples:

v- Écoulement régional (linéaire) + écoulement radial vers un puits :

$m(x)=a+b^*x+c^*y+d^*\log((x-x_{puits})^2+(y-y_{puits})^2)=a+b^*x+c^*y+d^*\ln(|h_{i,puits}|)$

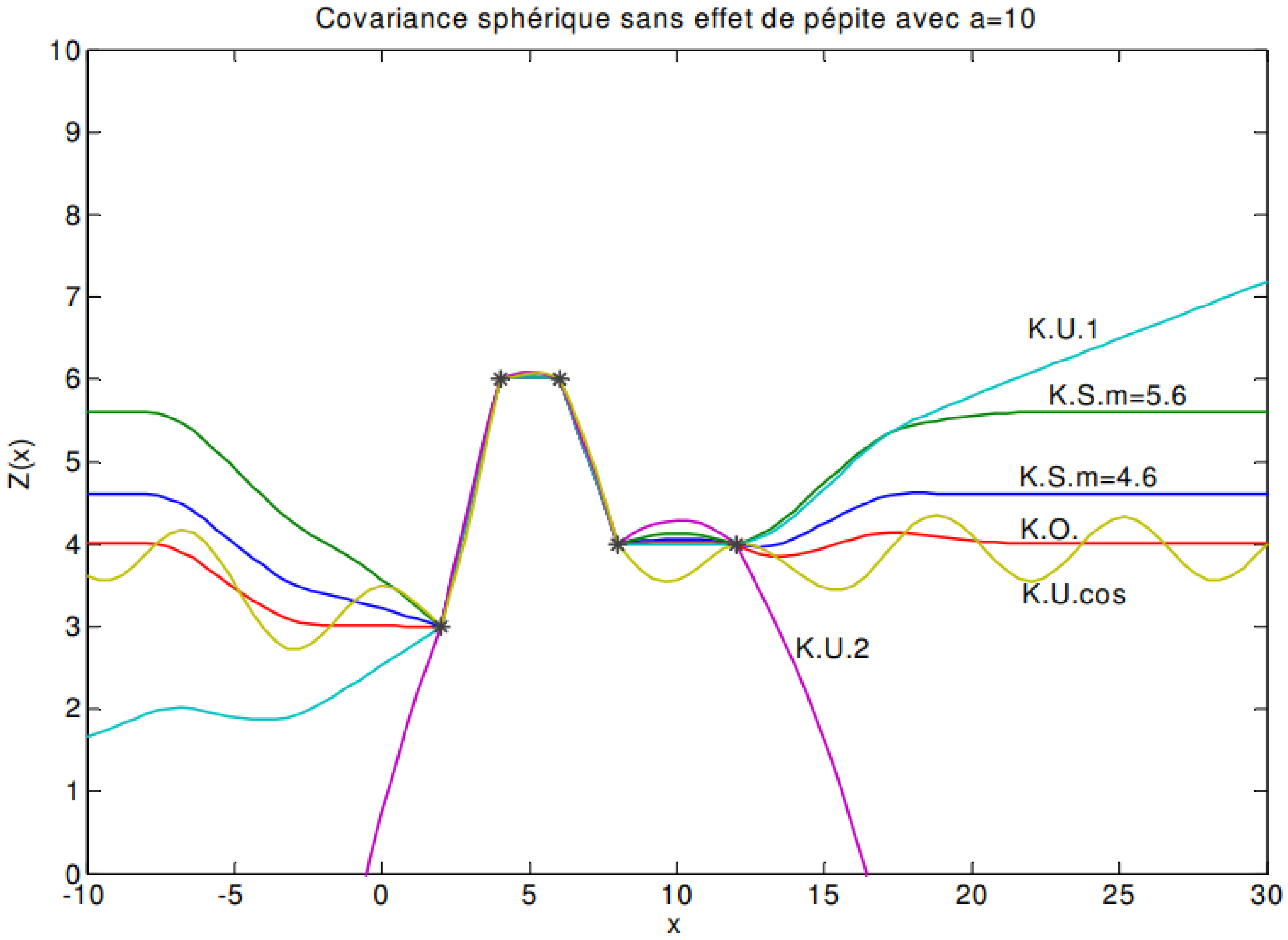
où « $h_{i,puits}$ » est la distance entre le point et le puits

$$F=\begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & \ln(|h_{1,puits}|) \\ 1 & x_2 & y_2 & \ln(|h_{2,puits}|) \\ . & . & . & . \\ 1 & x_n & y_n & \ln(|h_{n,puits}|) \end{bmatrix} \qquad f=\begin{bmatrix} 1 \\ x_0 \\ y_0 \\ \ln(|h_{0,puits}|) \end{bmatrix}$$

3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

Influence de la dérive

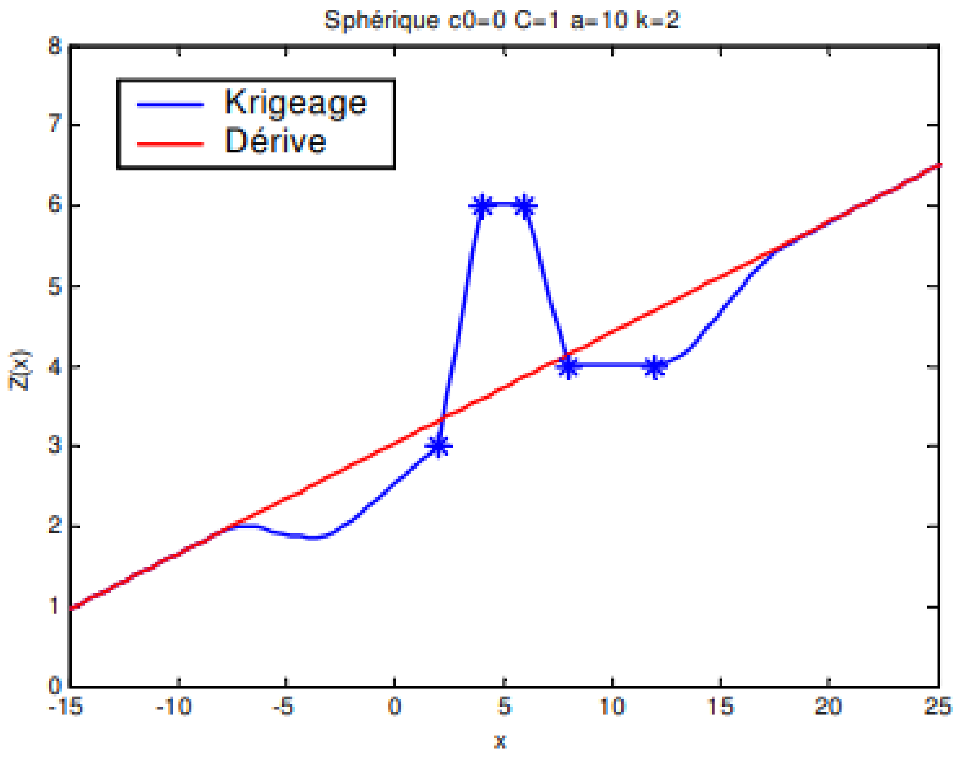
Influence de la dérive



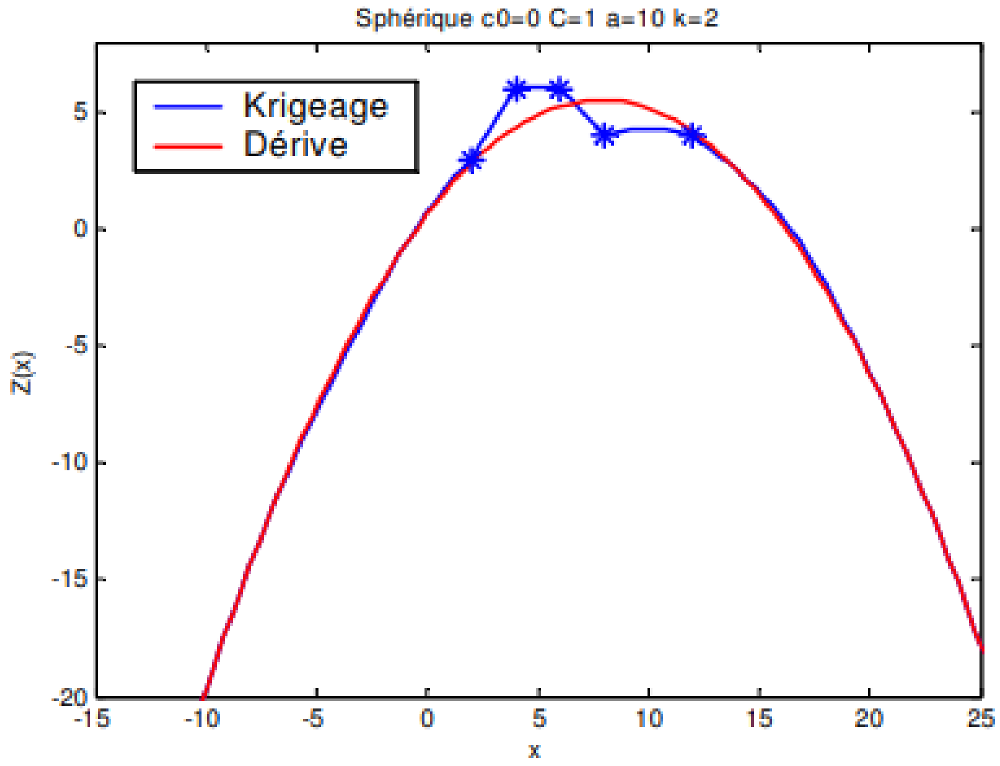
3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

À grande distance des données, l'estimation coïncide avec la dérive estimée

Dérive linéaire

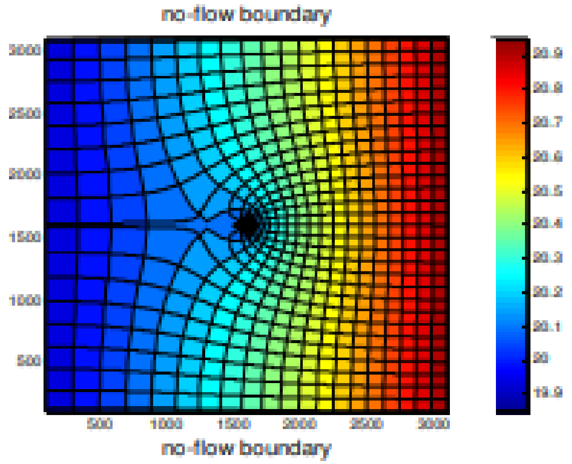


Dérive quadratique



3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

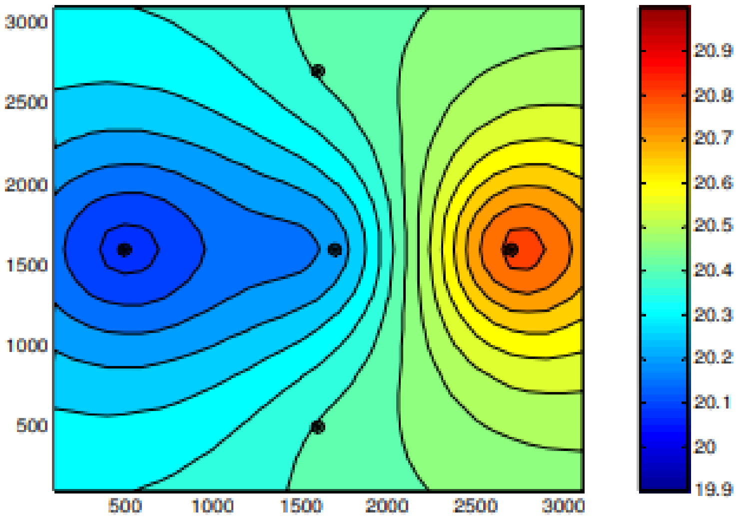
Parfois, l'inclusion d'une dérive aide à produire des cartes plus fidèles à la physique du phénomène



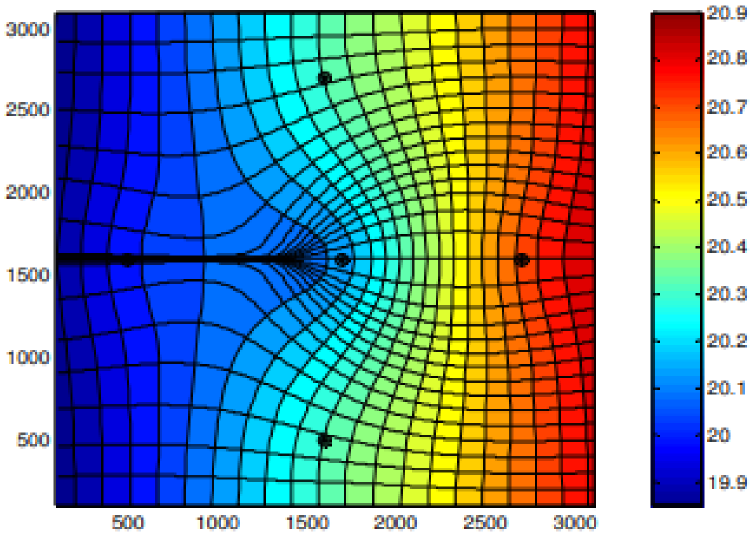
Exemple: carte de charge hydraulique

Différents krigeages avec 5 données

K. ordinaire



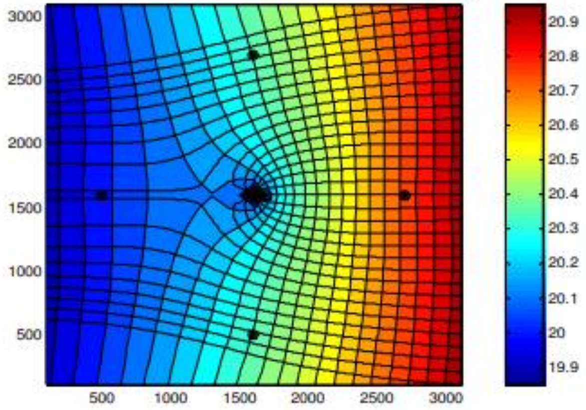
K. Dérive ordre 1



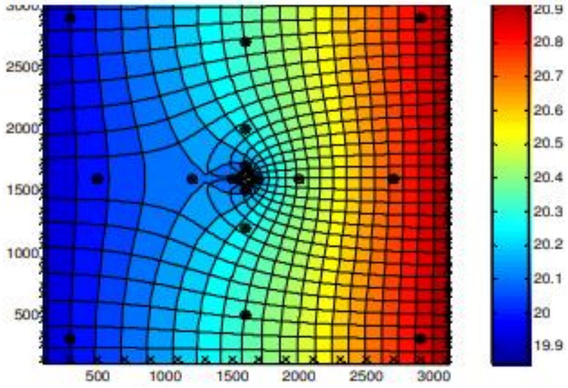
3.3 Krigeage avec dérive (coordonnées)

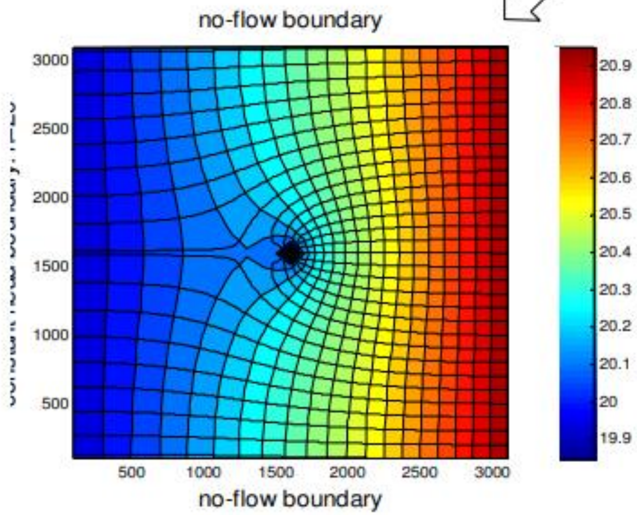
Parfois, l'inclusion d'une dérive aide à produire des cartes plus fidèles à la physique du phénomène

K. dérive ordre 1 + dérive puits



K. dérive ordre 1 + dérive puits + contrainte gradients aux frontières N et S



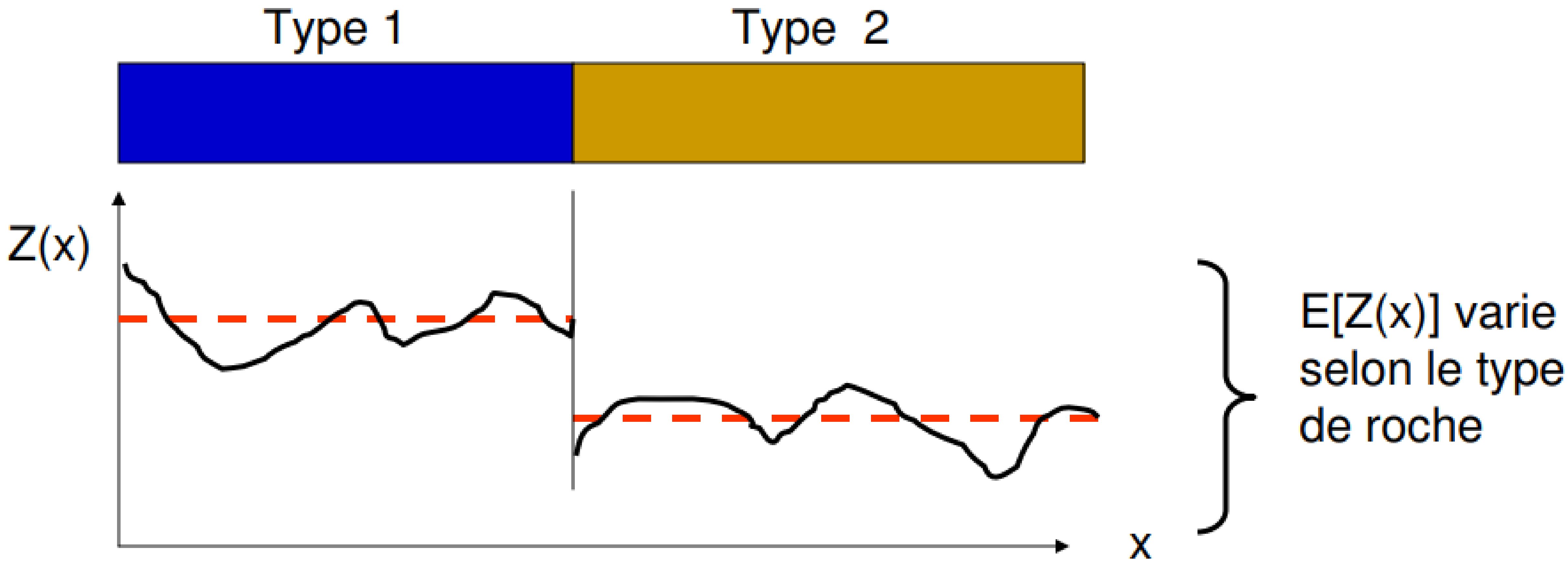


Réalité numérique avec frontières imperméables au nord et au sud

3.3 Krigeage avec dérive (externe)

Lorsque la dérive est liée à une autre variable

Exemple : variable indicatrice du type de roche



3.3 Krigeage avec dérive (externe)

Lorsque la dérive est liée à une autre variable

On peut écrire : $m(x) = m + aI(x);$ $\quad (I(x) = 0 \; si \; type \; 1, I(x) = 1, si \; type \; 2)$

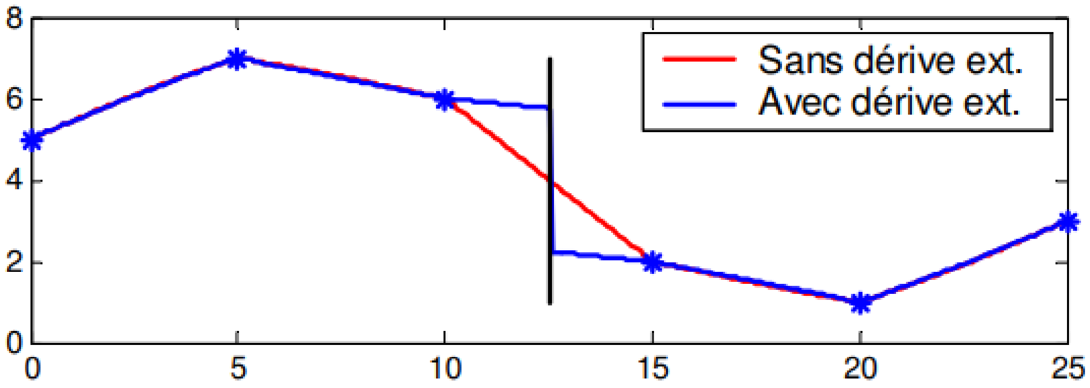
3 points dans roche 1

3 points dans roche 2

$$\Rightarrow \quad F = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \qquad f = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ ou } \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

X_0 dans roche 2

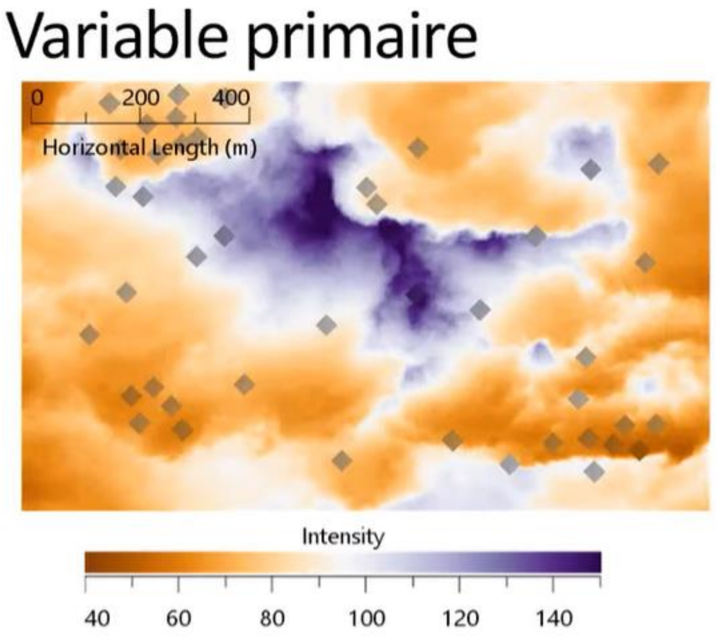
X_0 dans roche 1

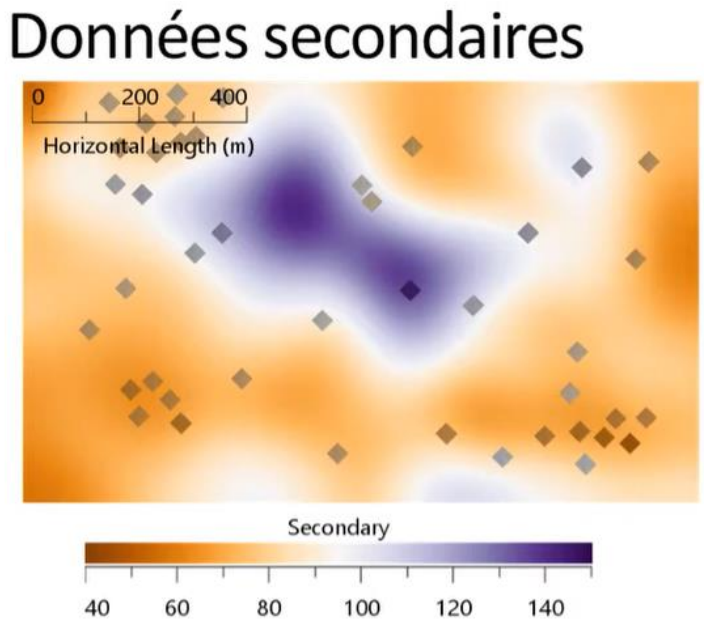


3.3 Krigeage avec dérive (externe)

Lorsque la dérive est liée à une autre variable

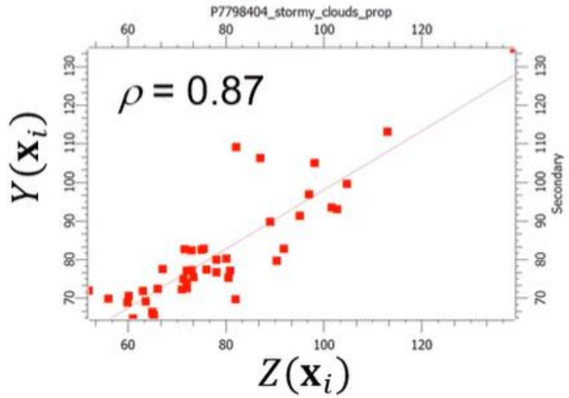
Autre exemple : Tiré de Guillaume Caumon, professeur ENSG





Echantillons $Z(\mathbf{x}_i)$

Image $Y(\mathbf{x})$
(ex: image géophysique)



4. Estimation de la covariance des résidus

$$Z(x) = m(x) + Y(x) \longrightarrow Cov\big(Z(x), Z(x+h)\big) = cov\big(Y(x), Y(x+h)\big)$$

⇒ Pour effectuer le krigeage avec dérive, on doit connaître la covariance des résidus $Y(x)$

<u>Méthodes :</u>

i. Estimer la dérive, calculer les résidus puis le variogramme des résidus (biais sur le variogramme, surtout à grande distance ⇒ sous-estimation des variances d'estimation)
ii. Calculer le variogramme selon une direction non affectée par la dérive et supposer l'isotropie du modèle (ou imposer une anisotropie ad hoc)
iii. Initier un processus itératif : modèle ⇒ dérive ⇒ résidus ⇒ modèle ⇒… Les changements au modèle se font par une méthode de type gradient basée sur les résultats d'une validation croisée.
iv. Lorsque la dérive est de faible amplitude, on peut utiliser directement le variogramme de $Z(x)$ à faible distance.

4. Estimation de la covariance des résidus

Note :

- krigeage simple $\Rightarrow$ variogramme avec palier;

- krigeage ordinaire peut être réalisé avec un variogramme possédant un palier ou non;

- krigeage avec dérive peut être réalisé avec fonction de covariance, variogramme (avec ou sans palier) ou « covariance généralisée »;

5. Krigeage sous forme dual

Krigeage primal : $$\begin{bmatrix} K_s & F \\ F' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} k_s \\ f \end{bmatrix}$$

Valeur estimée : $$Z^* = \begin{bmatrix} Z' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ \mu \end{bmatrix}$$

$$Z^* = \begin{bmatrix} Z' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} K_s & F \\ F' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} k_s \\ f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a' & b' \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_s \\ f \end{bmatrix}$$

6. Estimation d'une transformation linéaire

Soit $L(Z_0)$ une transformation linéaire et l'estimation optimale $L(Z_0)^* = \Sigma\lambda_i Z_i$ minimisant $Var(L(Z_0) - L(Z_0)^*)$

Par la linéarité de l'opérateur « E » et de la transformation « L », on obtient le système de krigeage suivant :

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_j Cov(Z_i, Z_j) + \mu = L[Cov(Z_0, Z_i)], \qquad \forall i = 1, \dots, n$$

$$\sum_{j=1}^{n} \lambda_j F_t(x_j) = L[f_t(x_0)], \qquad \forall t = 1, \dots, nc$$

Sous forme matricielle: $K\lambda = L(k) \Rightarrow \lambda = K^{-1}L(k)$

$L(Z_0)^* = [a'\ b']\ L(k)$ (forme duale)

$L(Z_0)^* = L\{[a'\ b']\ k\} = L(Z_0^*)$

$\Rightarrow$ L'estimateur optimal d'une transformation linéaire est égal à la transformation appliquée à l'estimation obtenue par krigeage!

6. Estimation d’une transformation linéaire

Estimer dZ(x)/dx en 1D par KO avec Z(x)

$$\frac{dZ(x)}{dx} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{Z(x+\varepsilon) - Z(x)}{\varepsilon}$$

$$\Longrightarrow$$

$$\mathrm{Cov}\left(Z_i, \frac{dZ(x_0)}{dx} \right) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\mathrm{Cov}(Z_i, Z(x_0+\varepsilon)) - \mathrm{Cov}(Z_i, Z(x_0))}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{C(h_{i0}+\varepsilon) - C(h_{i0})}{\varepsilon} = dC(h_{i0})/dh$$

$$\Longrightarrow$$

$$\left(\frac{dZ(x_0)}{dx} \right)^* = \sum_{i=1}^{n} a_i dC(h_{i0})/dh = \lim_{\varepsilon \to 0} \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} a_i C(h_{i0}+\varepsilon) - \sum_{i=1}^{n} a_i C(h_{i0})}{\varepsilon} \right) = \lim_{\varepsilon \to 0} \left(\frac{Z(x_0+\varepsilon)^* - Z(x_0)^*}{\varepsilon} \right) = \frac{dZ(x_0)^*}{dx}$$

7. Autres informations (Aspects pratiques)

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

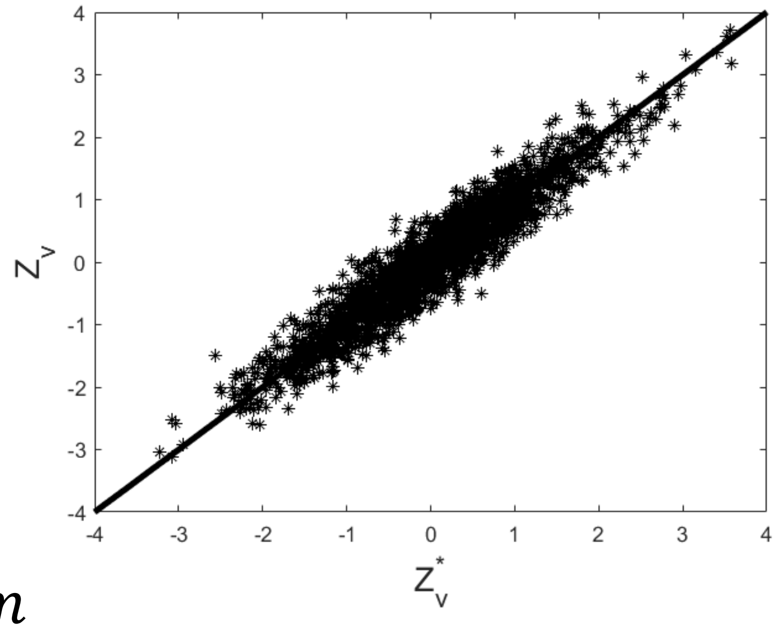
1. Presque sans biais conditionnel
2. Effet de lissage
3. Interpolateur exact
4. Effet d'écran
5. Tiens compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux.
6. Tiens compte de la continuité spatiale du phénomène étudié
7. Transitif (cohérence des estimations)

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

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

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

7. Autres informations (Aspects pratiques)

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.

7. Autres informations (Aspects pratiques)

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

7. Autres informations (Aspects pratiques)

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

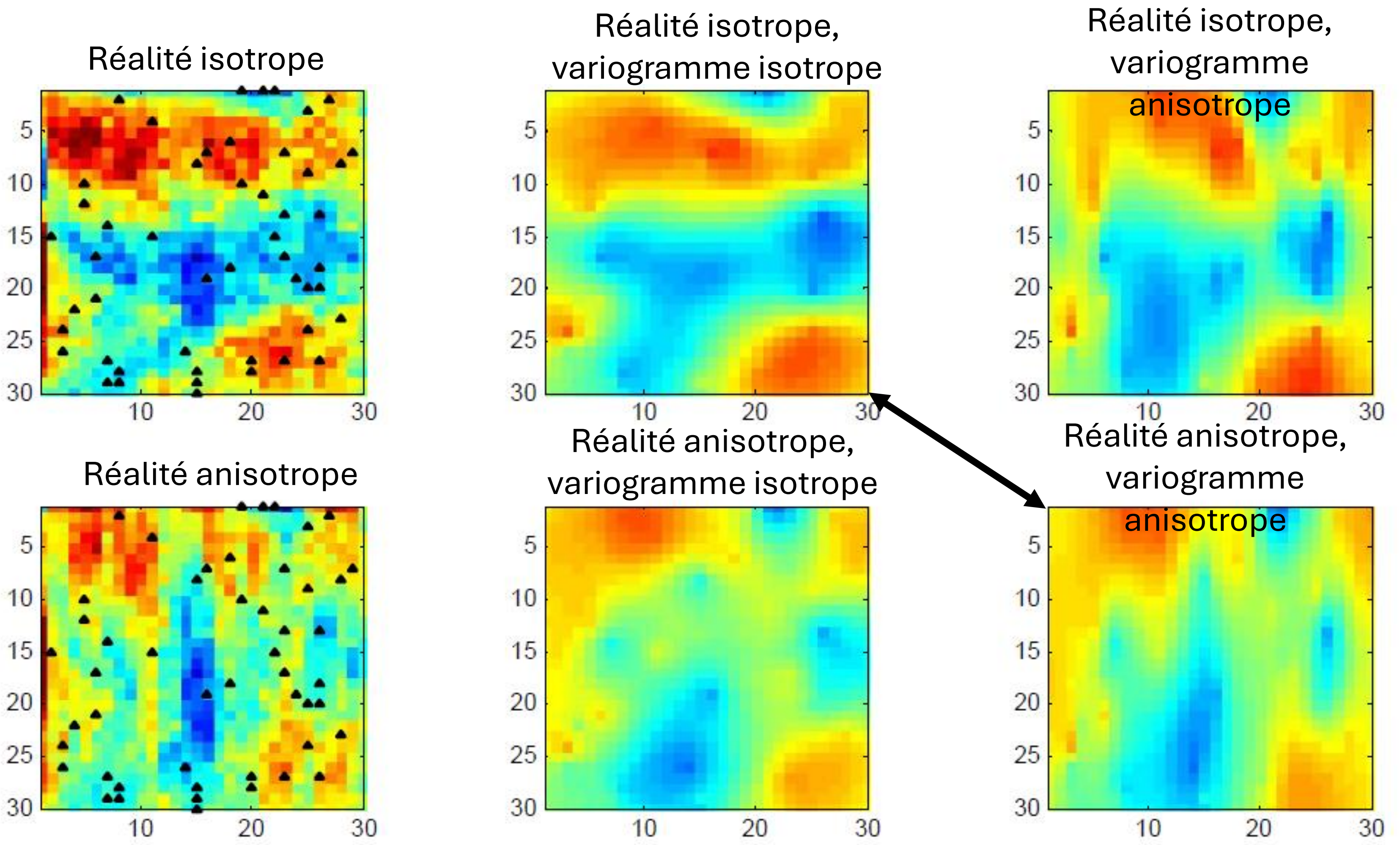
Krigeage ordinaire : $Var(Z_v) = Var(Z_v^*) + \sigma_{KO}^2 + 2\mu$

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 :



2. Effet de lissage :

Lien entre le lissage et le biais conditionnel :

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

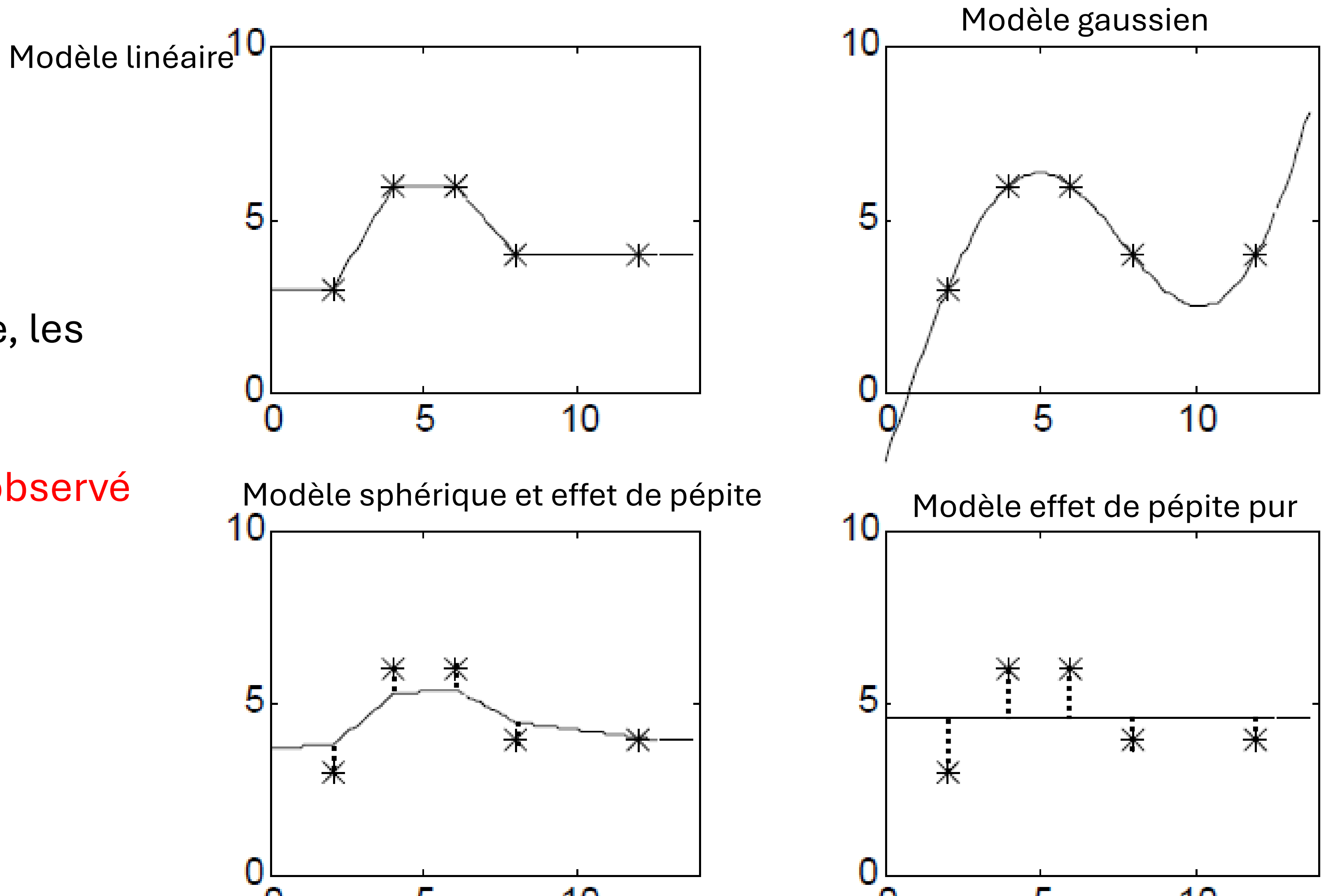
Une absence de biais conditionnel implique que $b = 1$, alors $\sigma_v^* \leq \sigma_v$

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

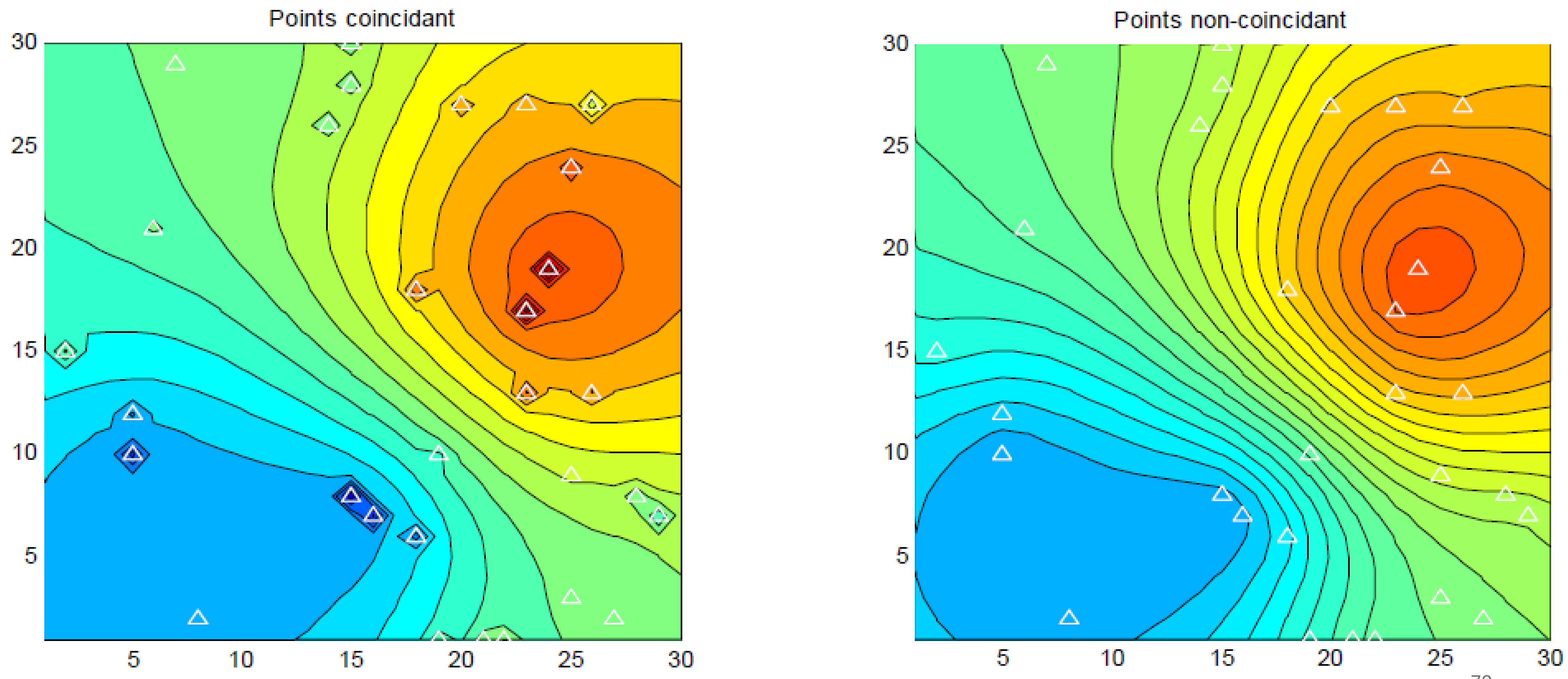
3. Interpolateur exact :

Estime les données observées avec exactitude

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

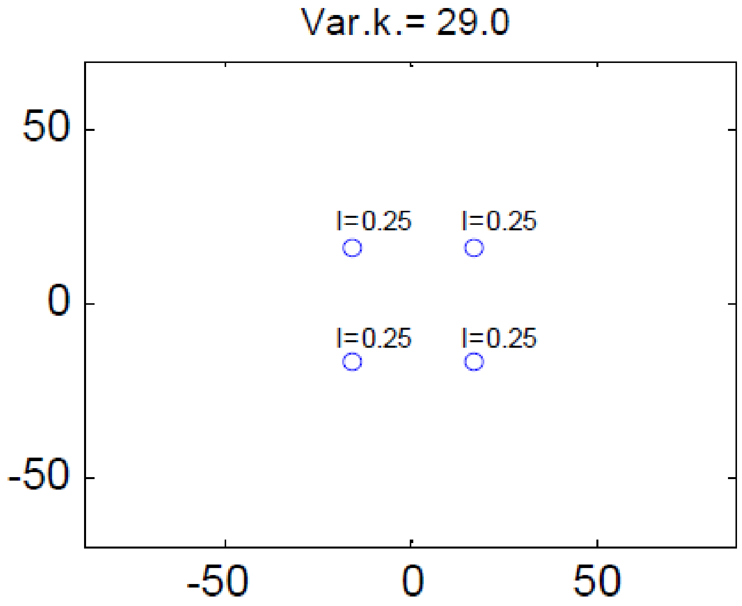


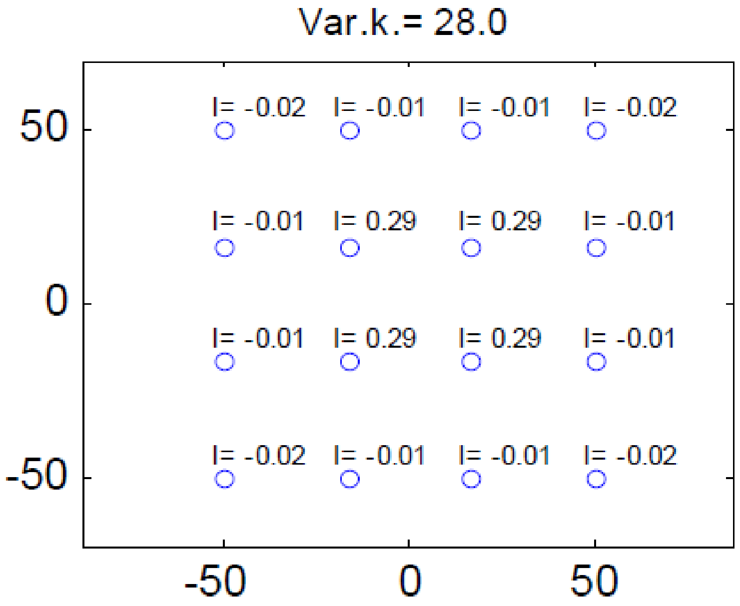
3. Interpolateur exact :



4. Effet d'écran :

- Les poids des points périphériques sont faibles.
- Les poids des points proches sont forts.

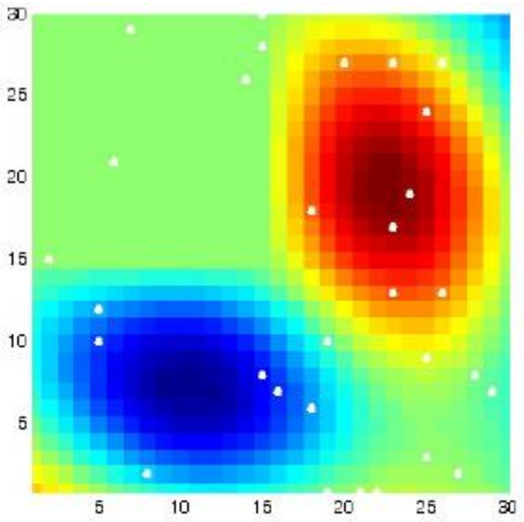


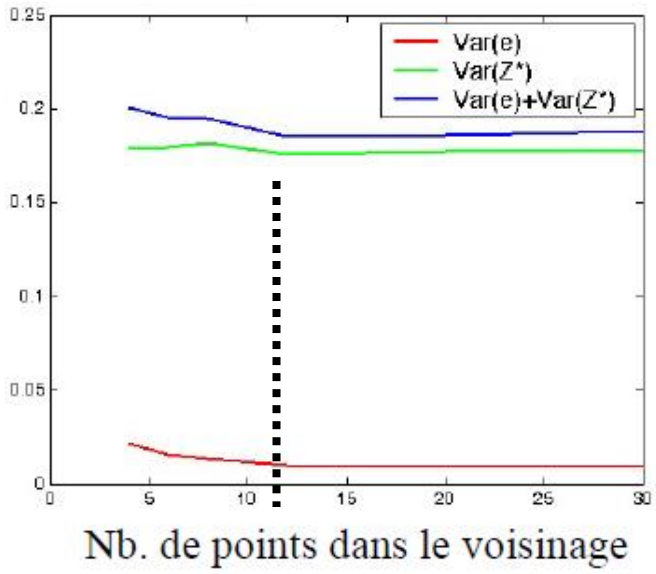


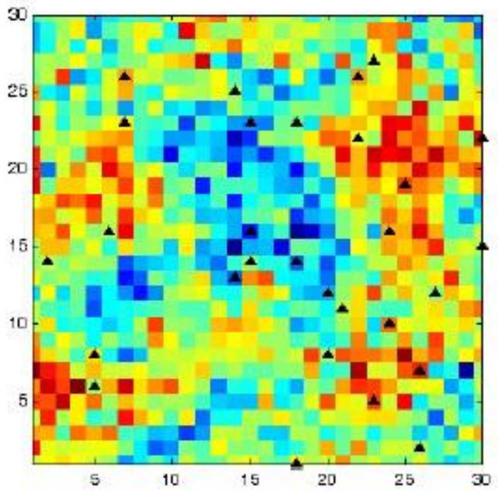
Limiter l'estimation d'un point par son voisinage

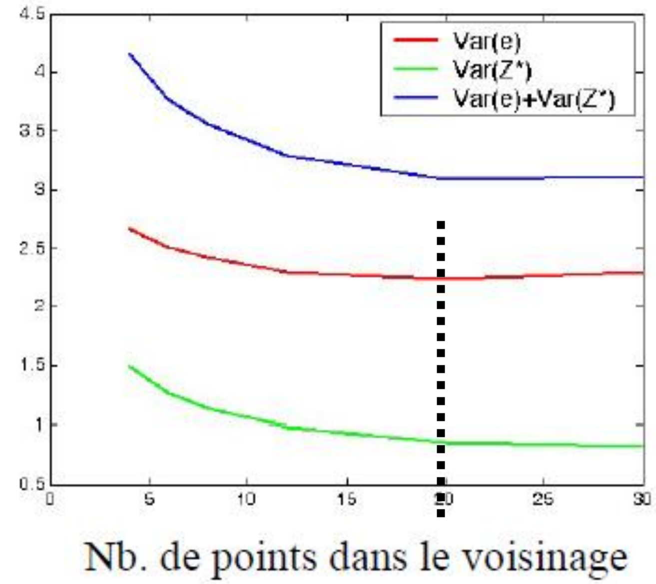
7. Autres informations (Aspects pratiques)

4. Effet d’écran :



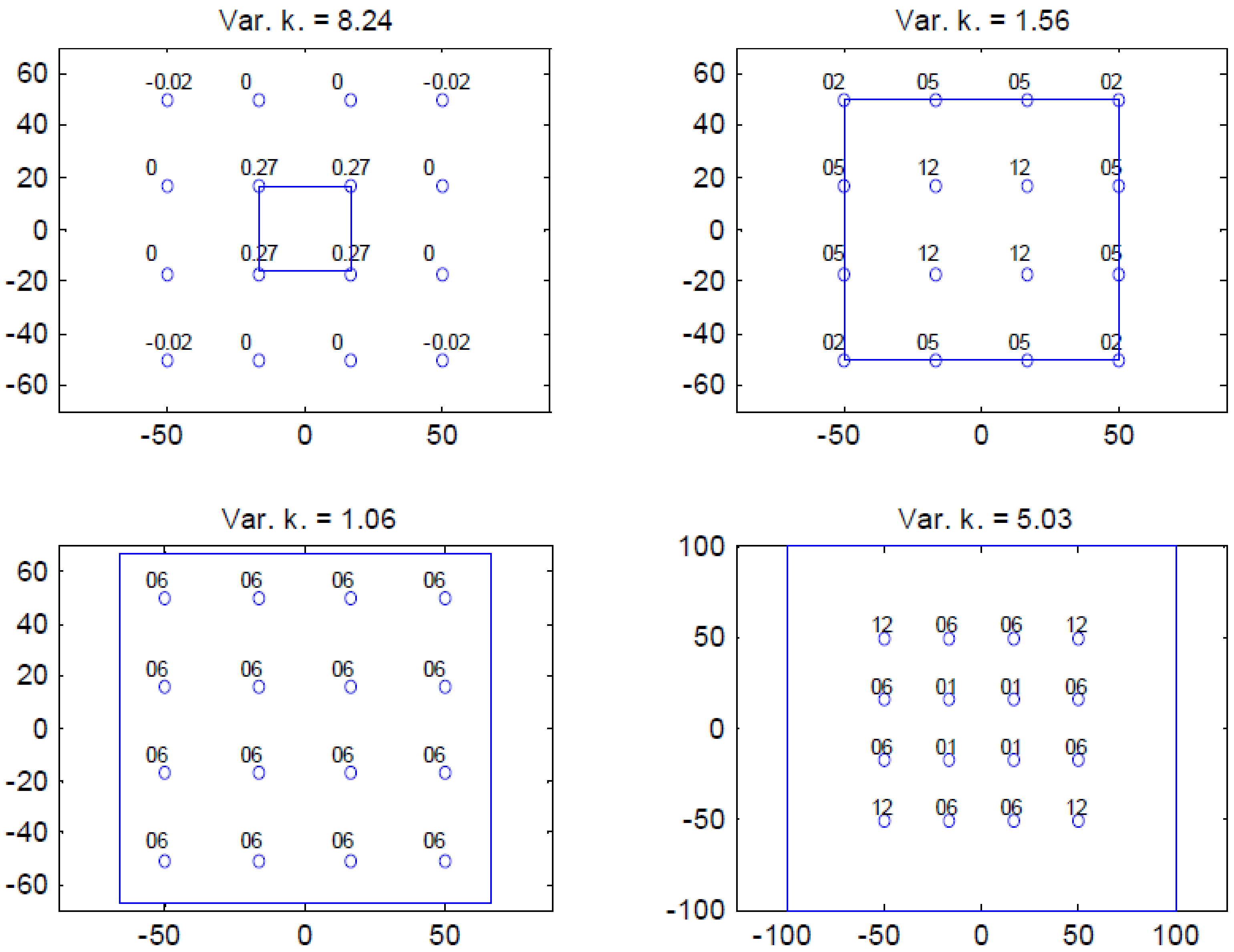






7. Autres informations (Aspects pratiques)

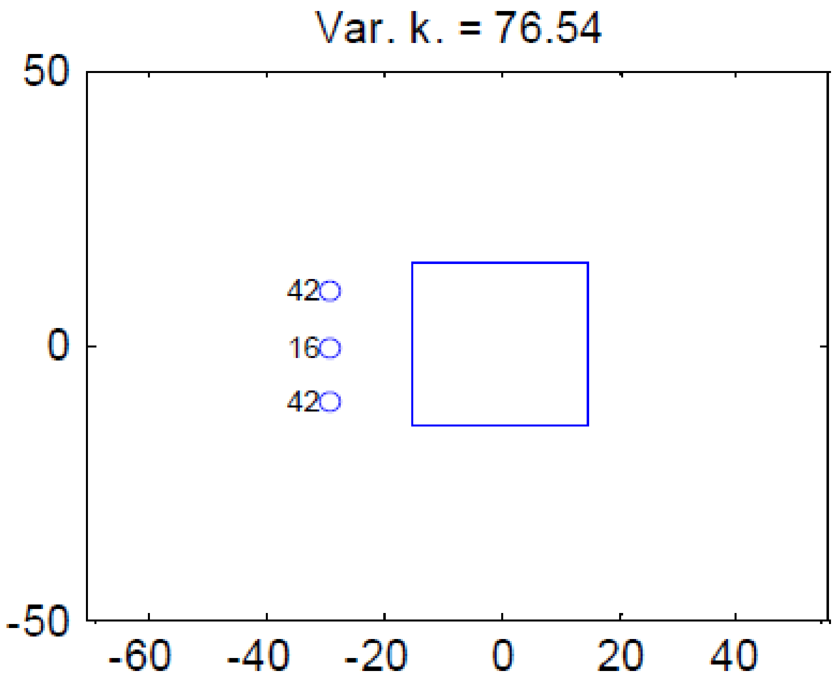
5. Tiens compte de la taille du champ à estimer et de la position des points entre eux :

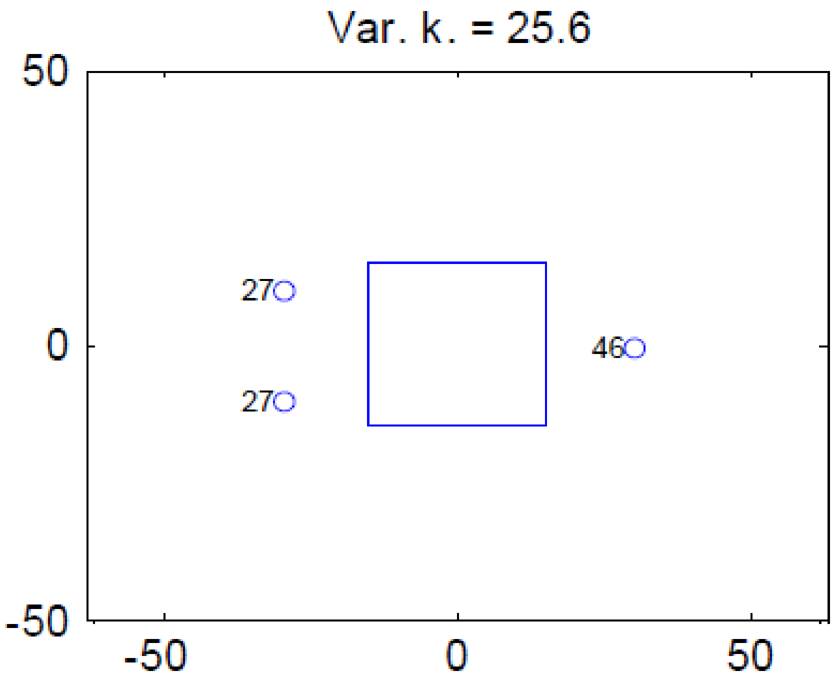


7. Autres informations (Aspects pratiques)

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

Redondance des données :

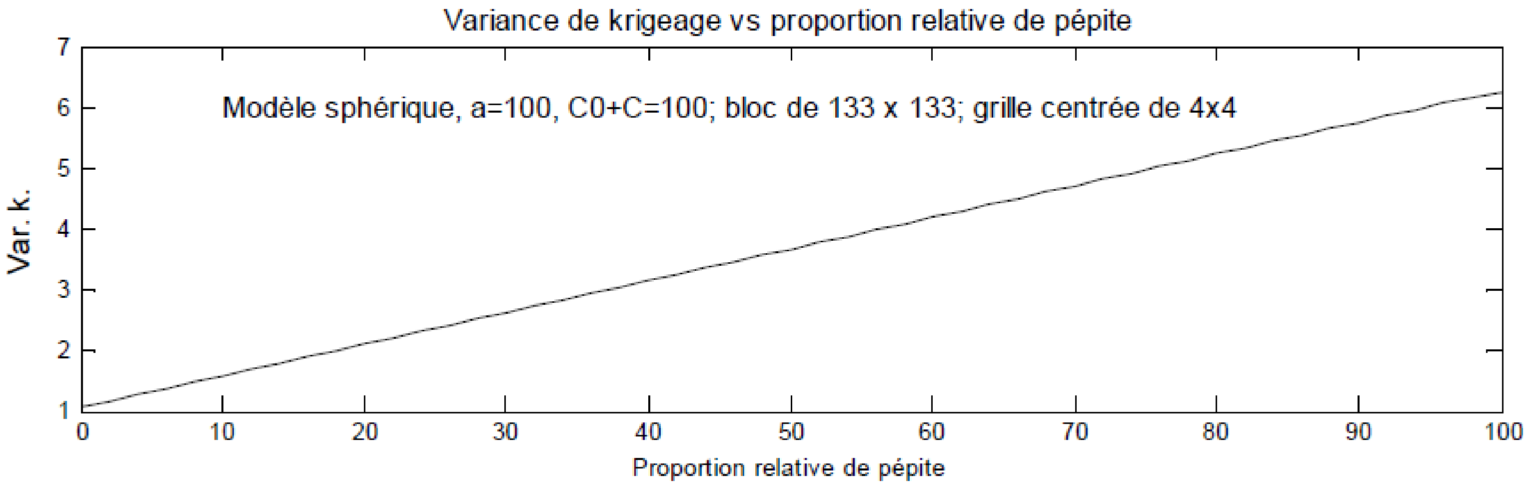




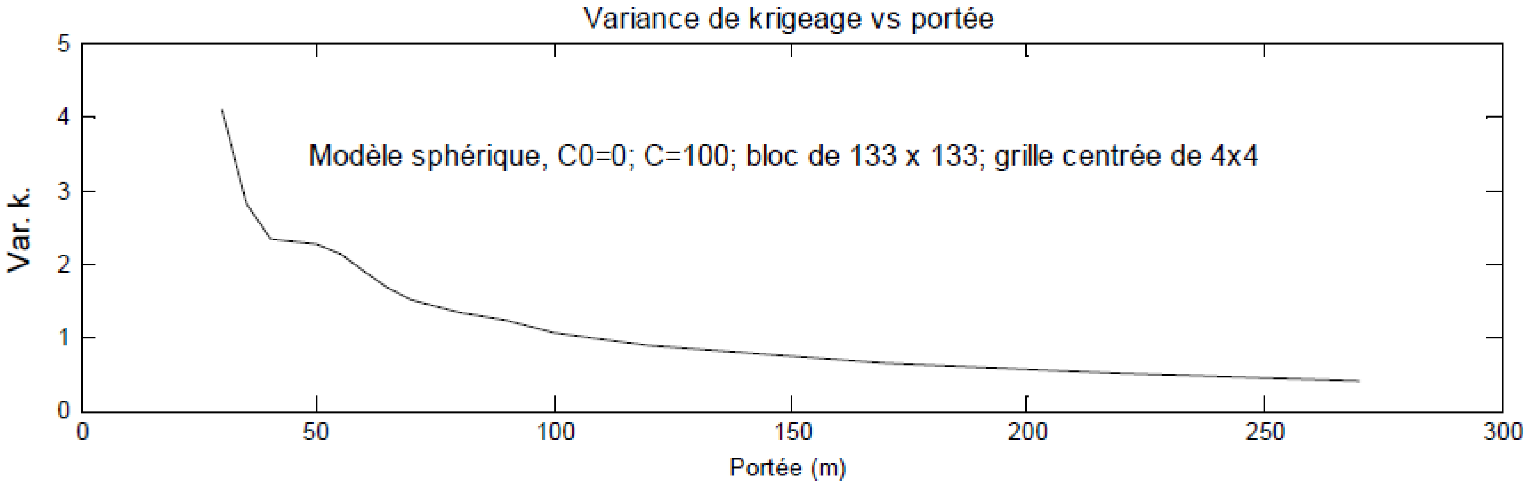
7. Autres informations (Aspects pratiques)

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

Influence de l'effet de pépite

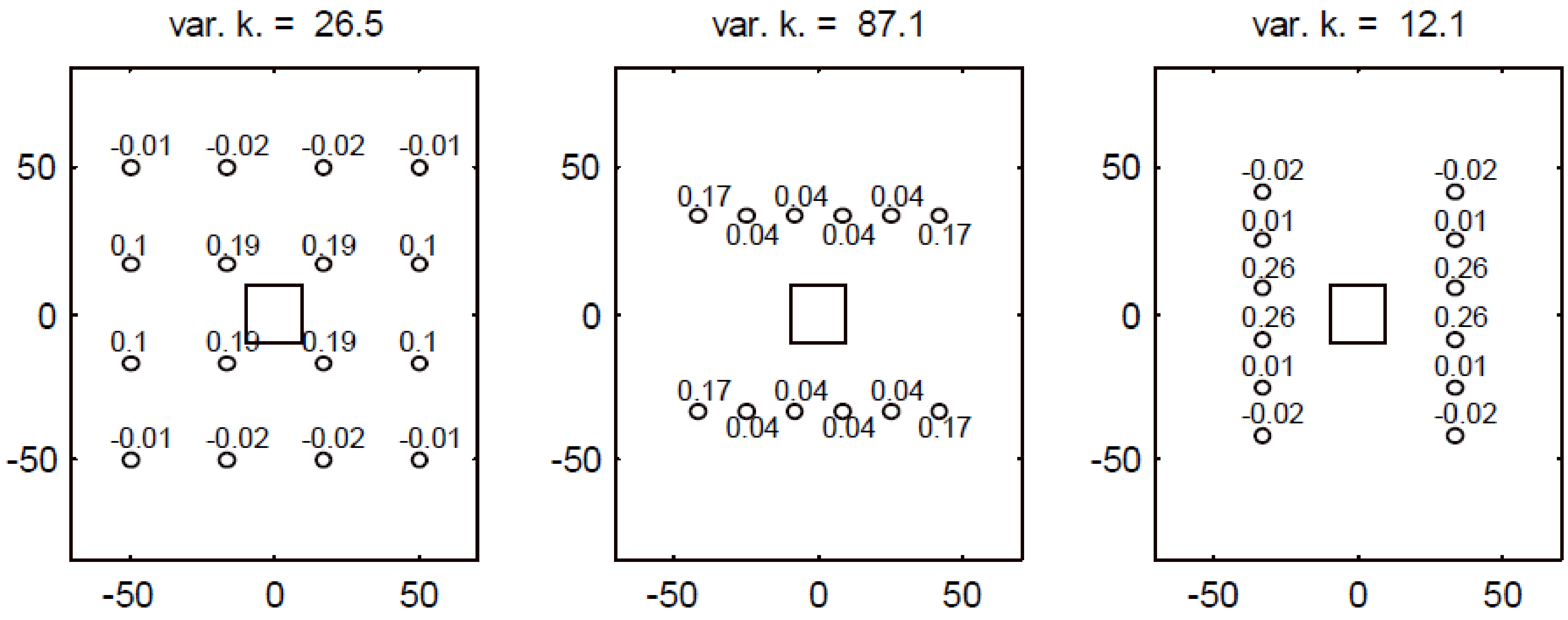


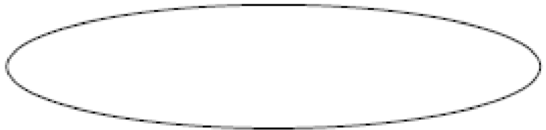
Influence de la portée



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

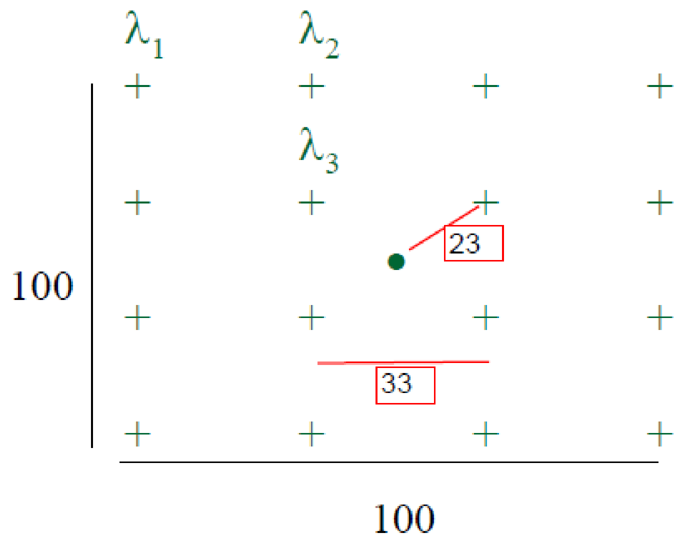
Influence de l'anisotropie :

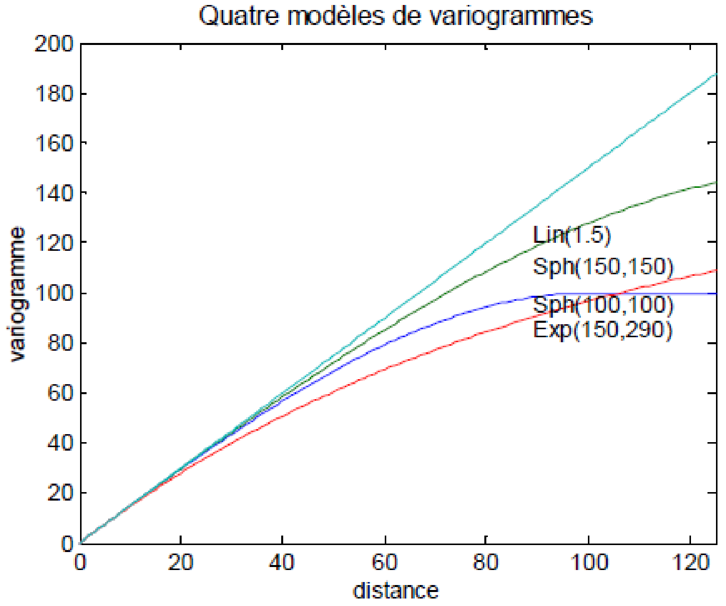


Var. anisotrope 

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

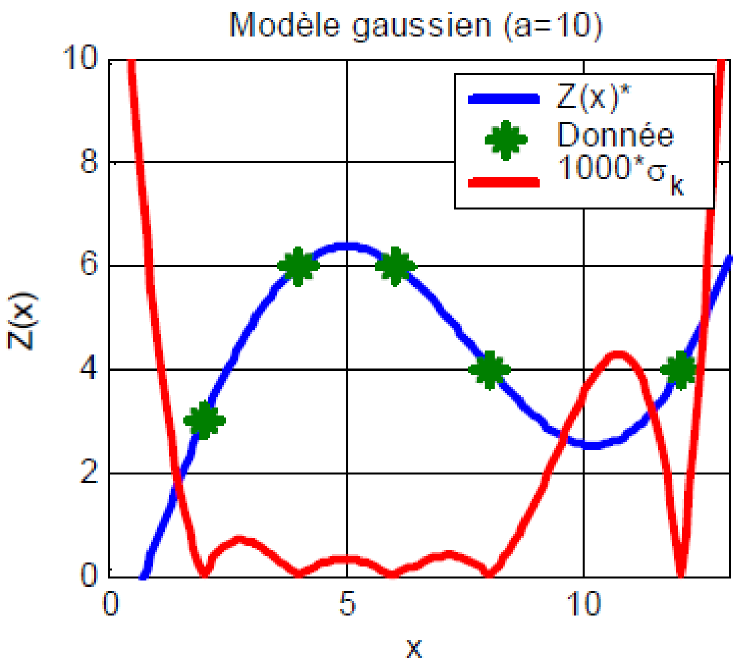
4 ajustements équivalents h<30

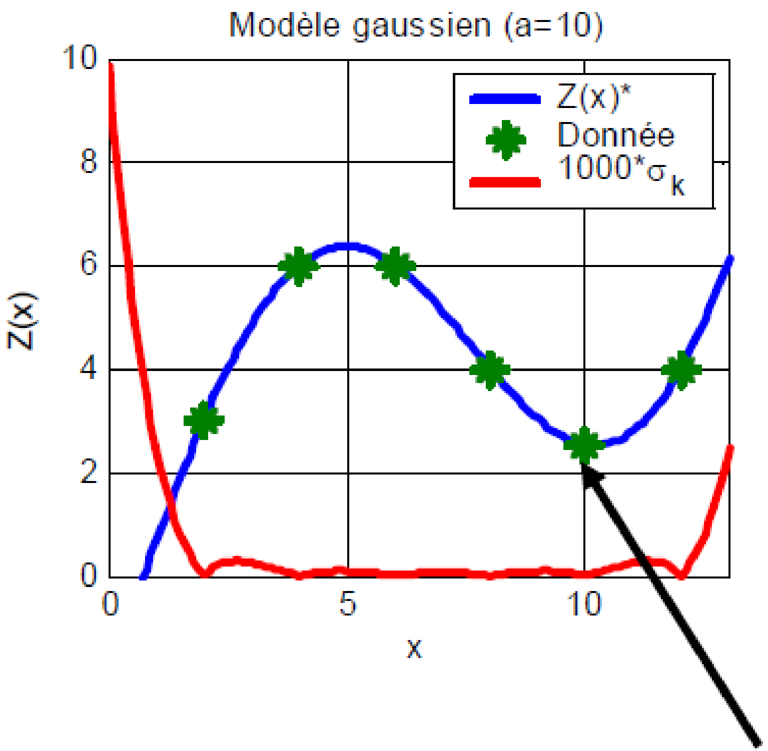
=> mêmes poids λ

=> même σ_k^2

7. Autres informations (Aspects pratiques)

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.

7. Autres informations (Aspects pratiques)

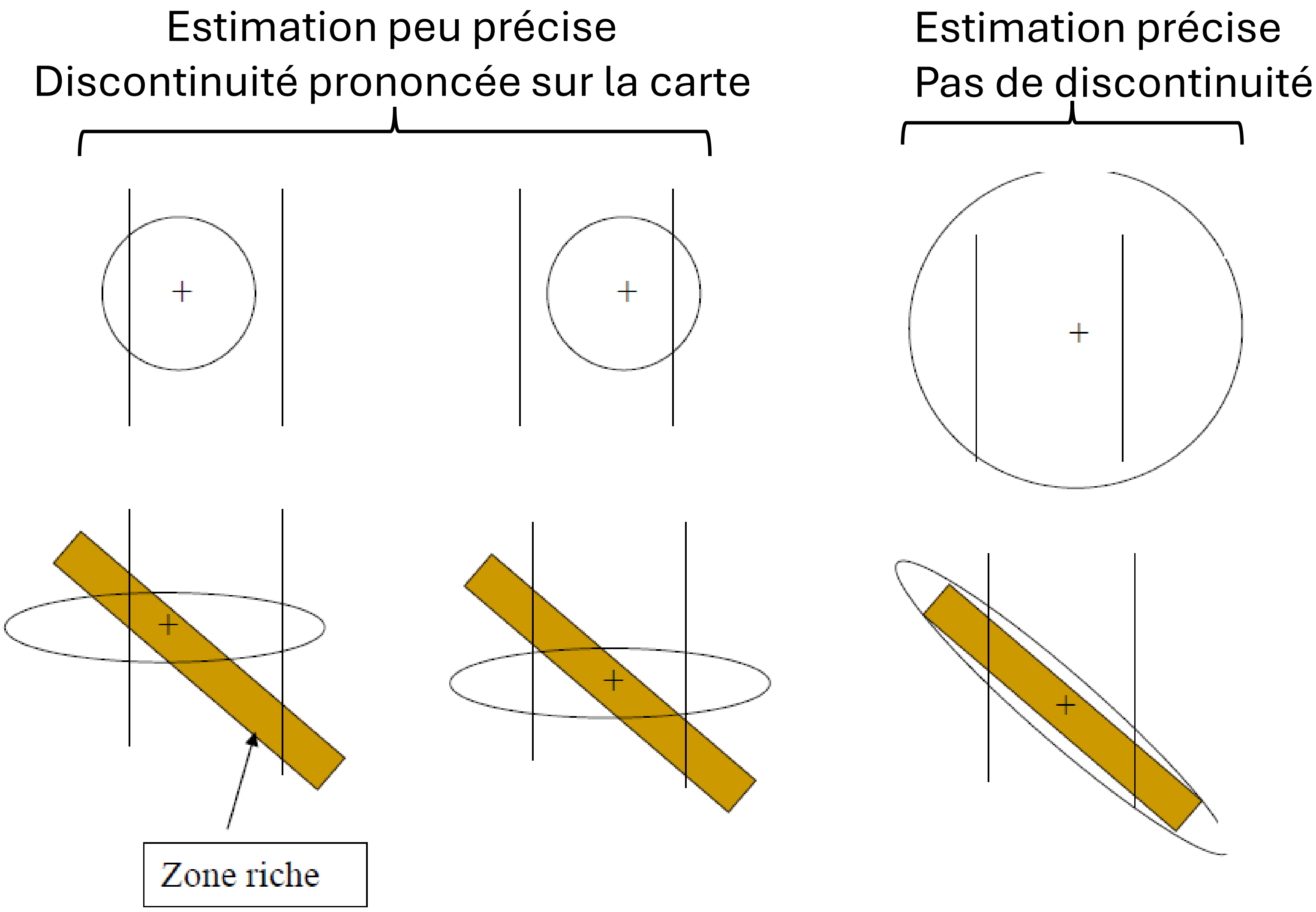
- Krigeage ordinaire : syst. d'éq. linéaire (n+1) équations et (n+1) inconnues
  → limite pratique sur « n »

  « 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.

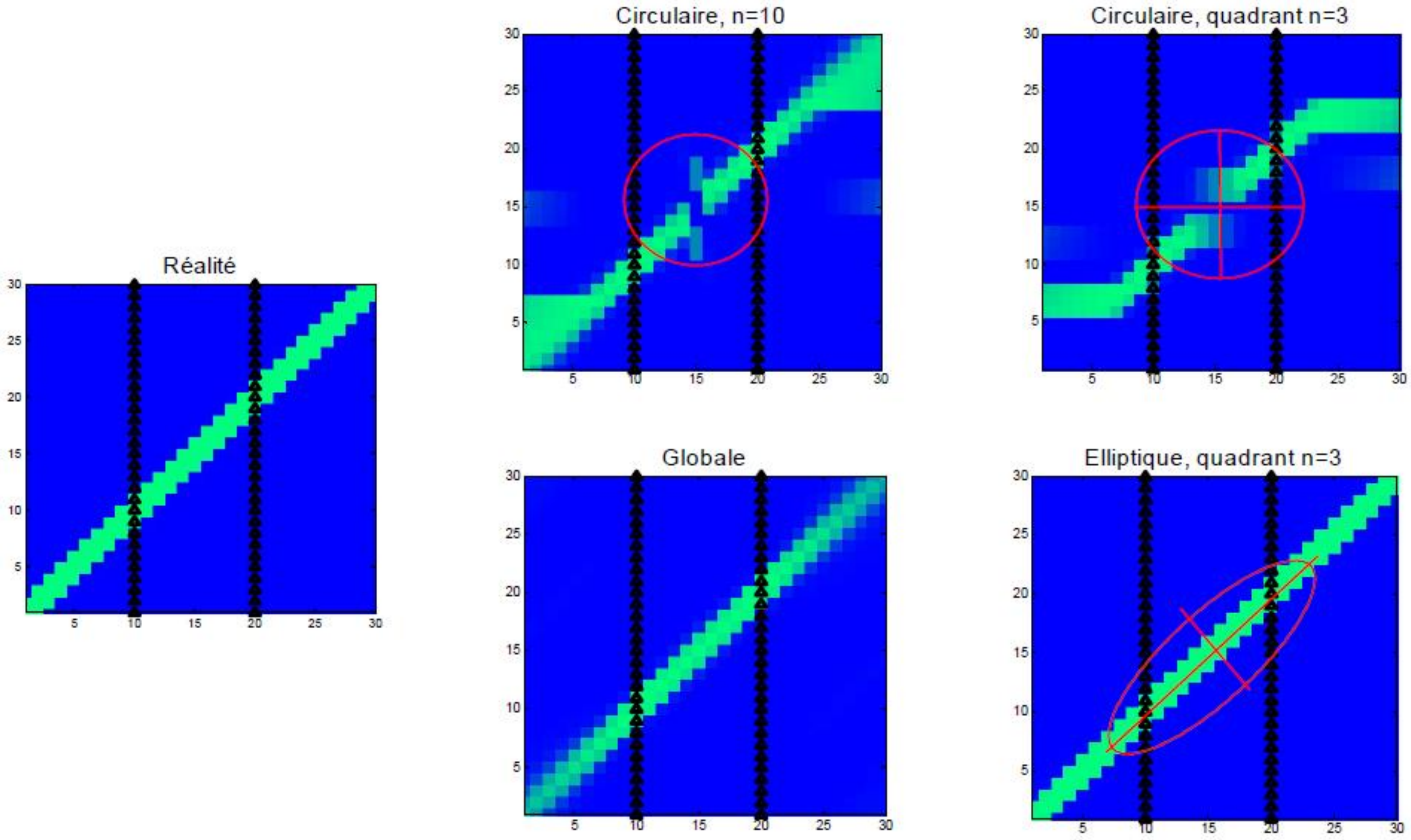
- Voisinage utilisé pour le krigeage:
  - Habituellement en voisinages glissants.
  - Nombre de points suffisant (>10; peut atteindre jusqu'à 50-100).
    - Zone de recherche assez grande pour assurer un minimum de points.
    - Recherche par quadrants (2D) ou octants (3D) (min 2 ou 3 points par quadrant/octant)

Importance du voisinage :



7. Autres informations (Aspects pratiques)

Importance du voisinage : Exemple



7. Autres informations (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 :

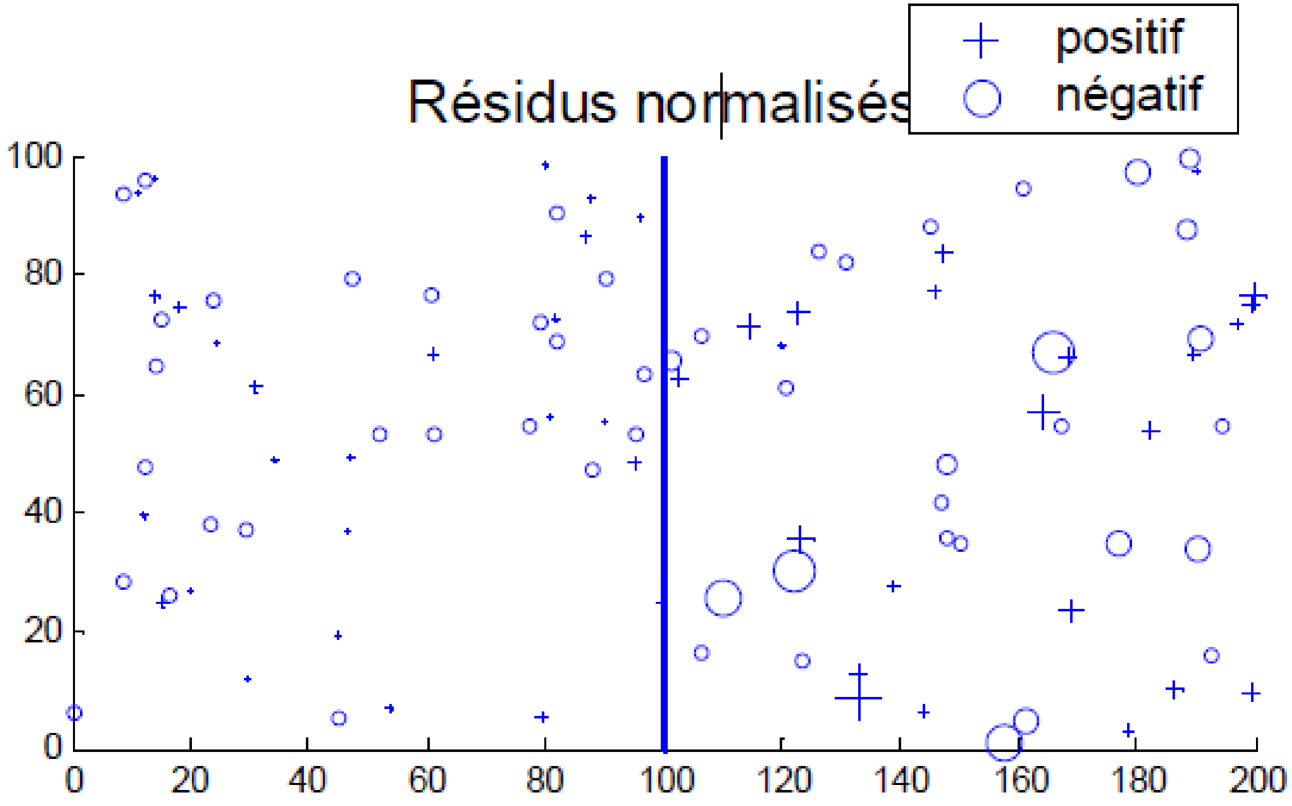
$$\sum_i e_i \approx 0 \ et \sum_i n_i \approx 0$$

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

7. Autres informations (Validation croisée)

Comparaison visuelle :

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



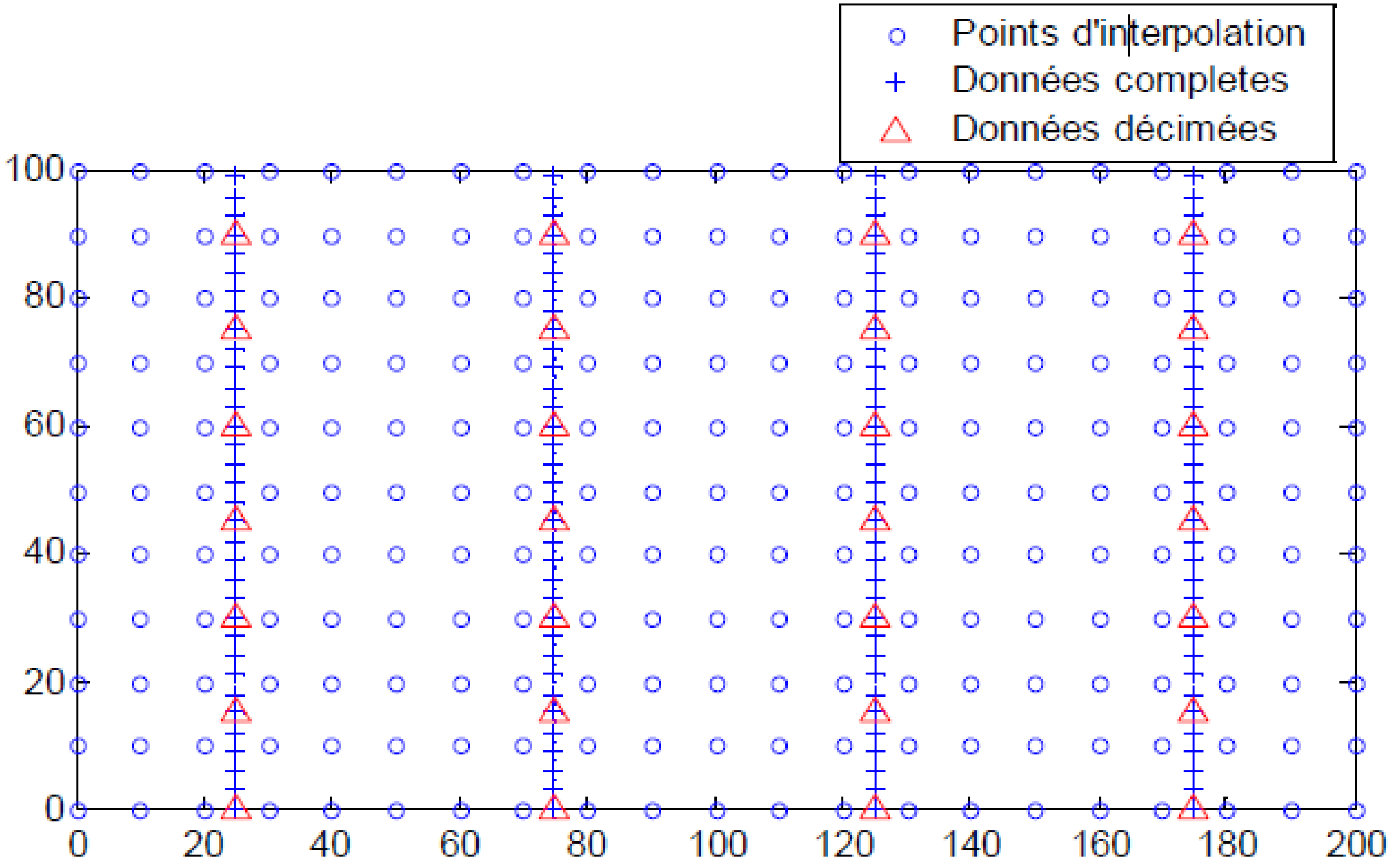
Diviser en deux zones distinctes ?

7. Autres informations (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 ?

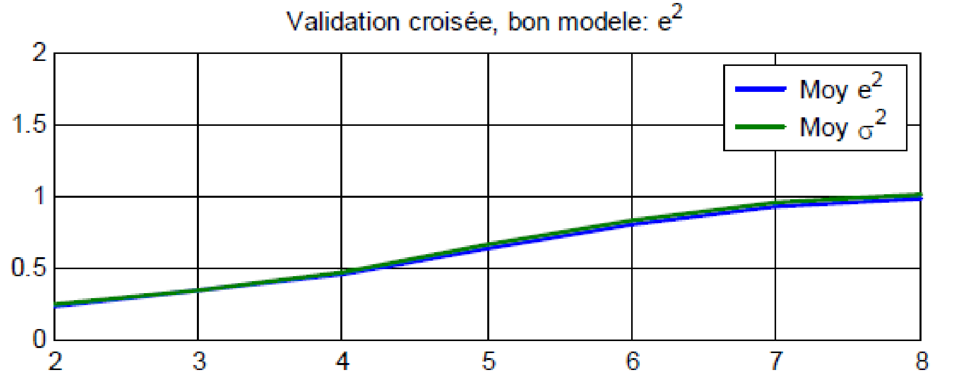


7. Autres informations (Validation croisée)

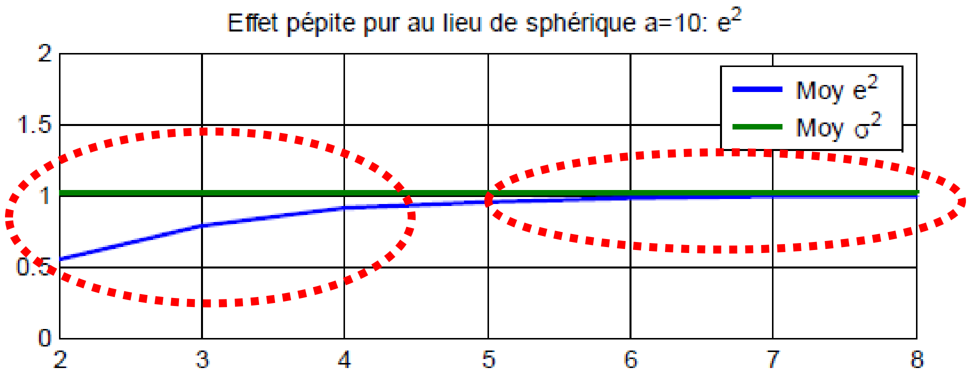
Exemple de validation croisée:

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

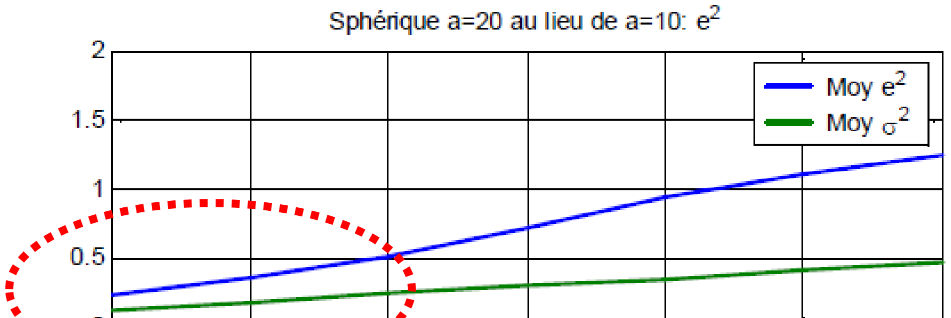
1) Modèle fourni : sphérique isotrope $(a = 10, C = 1, C_0 = 0)$



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

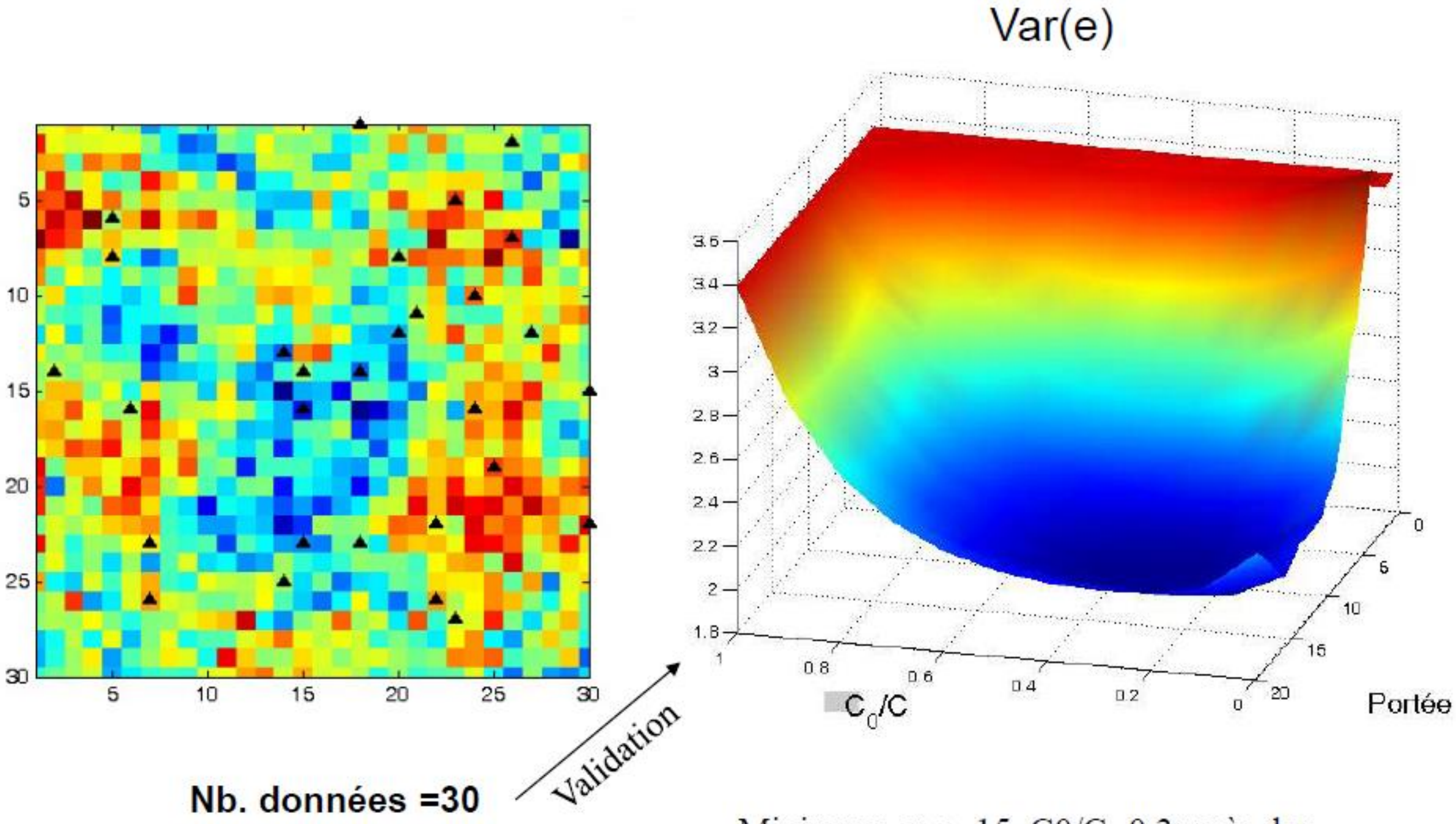


3) Modèle fourni : sphérique isotrope $(a = 20, C = 1, C_0 = 0)$



7. Autres informations (Validation croisée)

Exemple simulé de validation croisée:



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