

Introduction aux statistiques spatiales

Estimation du variogramme

Denis Allard

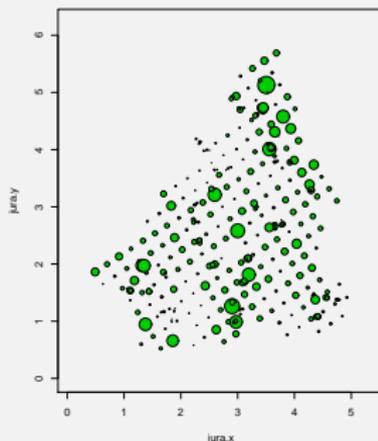
Biostatistique et Processus Spatiaux (BioSP), INRA, Avignon

14 décembre 2012

Calcul du variogramme expérimental

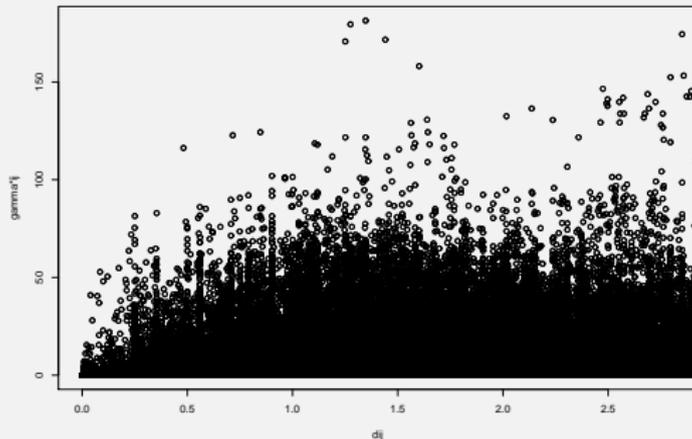
On utilise

- ▶ la stationnarité intrinsèque : les incréments $Z(x + h) - Z(x)$ est stationnaire
- ▶ l'ergodicité : la moyenne spatiale converge vers l'espérance mathématique



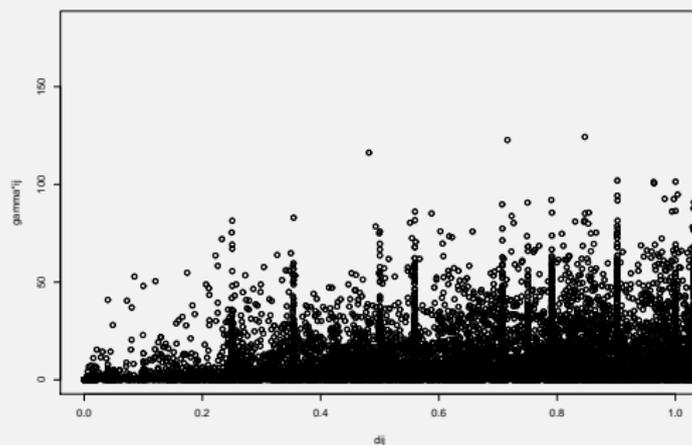
Nuée variographique

$$\gamma_{ij}^* = \frac{(z(s_i) - z(s_j))^2}{2} \quad d_{ij} = \|s_i - s_j\|$$



Nuée variographique

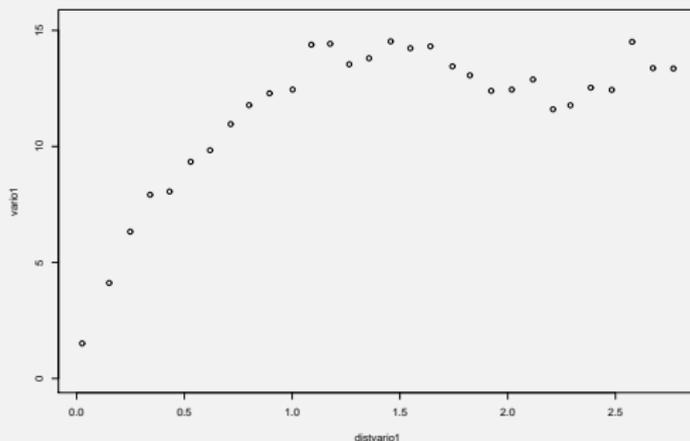
$$\gamma_{ij}^* = \frac{(z(s_i) - z(s_j))^2}{2} \quad d_{ij} = \|s_i - s_j\|$$



zoom entre $|h| = 0$ et $|h| = 1$.

Variogramme expérimental

$$\hat{\gamma}(d_k) = \frac{1}{2n_k} \sum_{i,j; d_{ij} \approx d_k} (Z(s_i) - Z(s_j))^2$$

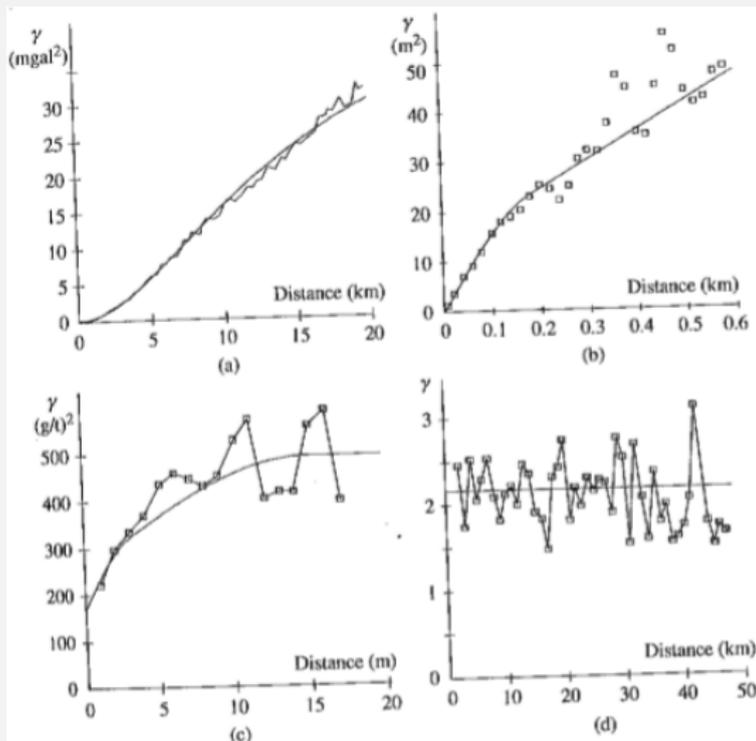


Propriétés du variogramme expérimental

- ▶ ne nécessite pas l'estimation de la moyenne
- ▶ est un estimateur sans biais de $\gamma(d_k)$ (contrairement à la covariance expérimentale)
- ▶ variance en $\frac{1}{n}$
- ▶ sous des conditions de mélange, loi limite gaussienne pour $\hat{\gamma}(d_k)$
- ▶ si $Z(\cdot)$ est gaussien, \sim somme de $\chi^2(1)$

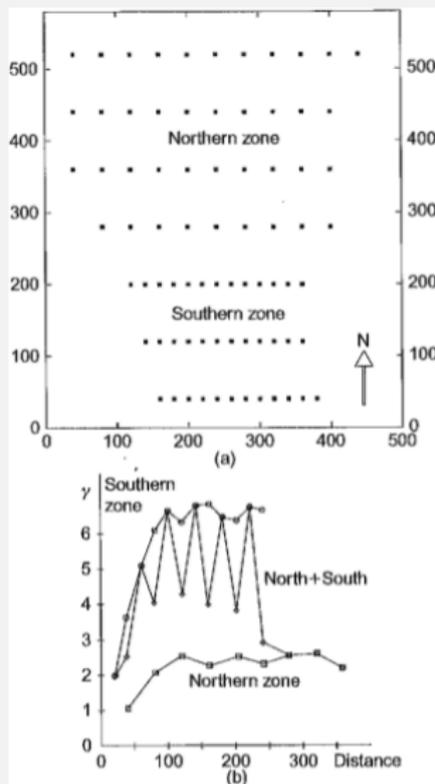
Le variogramme expérimental est l'outil de caractérisation de la variabilité spatiale

Variogramme expérimental et régularité



De haut en bas et de gauche à droite : microgravité ; profondeur d'une couche géologique (bassin parisien) ; teneur Au (Salsigne, France) ; log-perméabilité (bassin parisien). D'après Chilès et Delfiner (2012).

Variogramme expérimental et sur-échantillonnage



Haut : localisation des échantillons. Bas : variogrammes. D'après Chilès et Delfiner (2012).

Variogramme expérimental non isotrope

On définit des classes de direction pour $h = r(\cos \omega, \sin \omega)$,

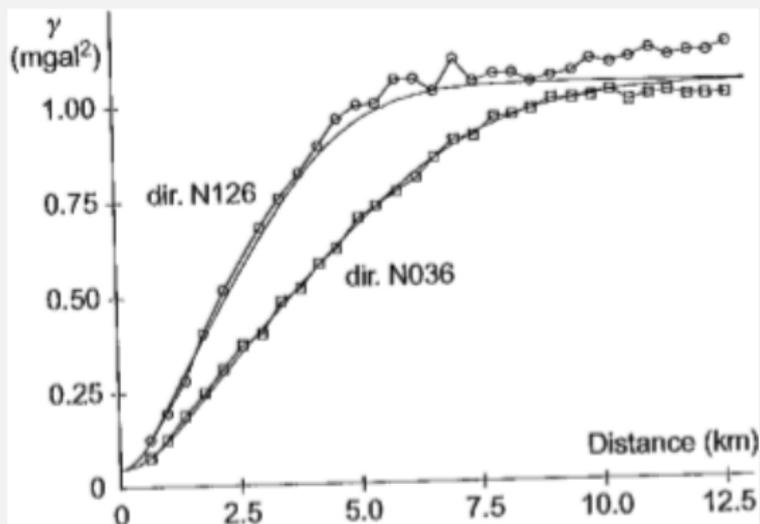
$$\begin{aligned}r &\in [r_k - a/2; r_k + a/2] \\ \omega &\in [\omega_j - \delta/2; \omega_j + \delta/2]\end{aligned}$$

où r_k est un ensemble de distances et ω_j est un ensemble de directions.

$$\hat{\gamma}(r_k, \omega_j) = \frac{1}{2n_k} \sum_{i,j; r \simeq r_k; \omega \simeq \omega_j} (Z(s_i) - Z(s_j))^2$$

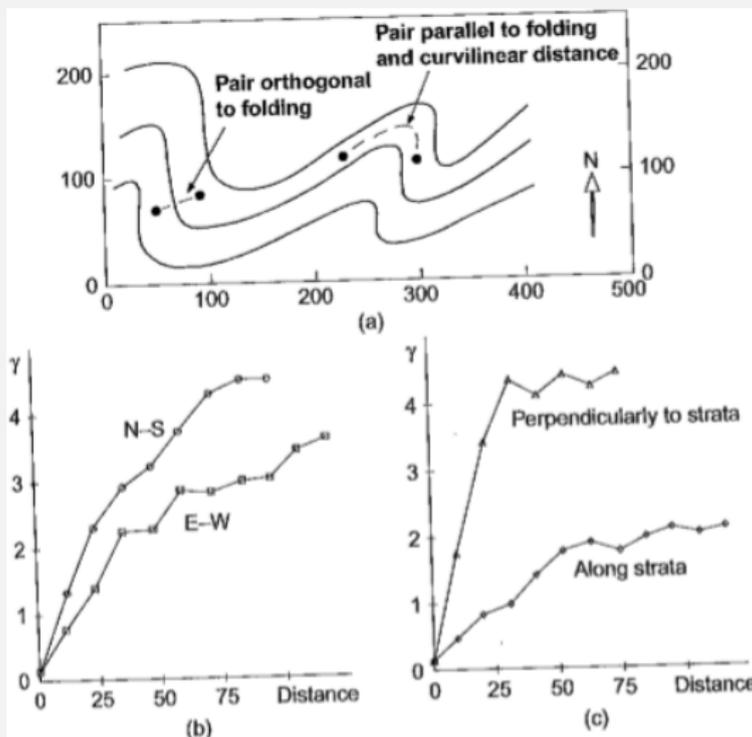
Ex : directions $0, \pi/4, \pi/2$ et $3\pi/4$.

Variogramme expérimental et anisotropie



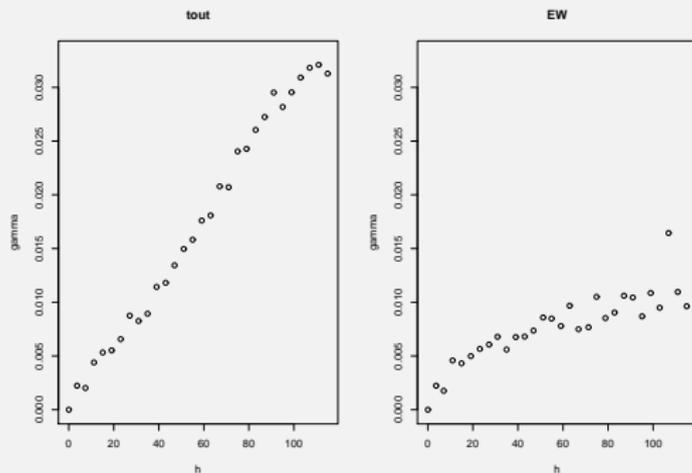
Résidus de micro-gravité. D'après Chilès et Delfiner (2012).

Variogramme expérimental et coordonnées curvilignes



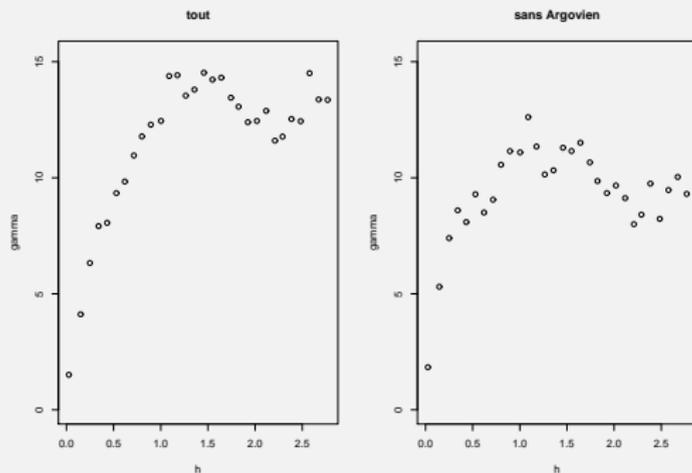
D'après Chilès et Delfiner (2012).

Variogramme expérimental et gradient



Taux de chlorophylle dans la méditerranée : existence d'un gradient N-S.

Variogramme expérimental et effet fixe



Co dans le Jura Suisse : effet "type de sol".

Inférence du variogramme théorique

- ▶ Pour réaliser la prédiction, il faudra connaître le variogramme à des distances pour lequel il n'a pas été calculé empiriquement selon les équations ci-dessus. Il nous faut donc un modèle pour ces distances.
- ▶ Le variogramme doit être une fonction conditionnellement définie négative ; il faut donc faire l'estimation à l'intérieure d'une classe paramétrique de fonctions vérifiant cette propriété.

⇒ Estimer les paramètres $\gamma(\cdot; \theta)$, $\theta \in \Theta$ d'un modèle paramétrique.

Estimation à partir du variogramme expérimental

Rappel : la quantité $\hat{\gamma}(h_k)$ est un estimateur sans biais de $\gamma(h_k)$.

Moindre carré ordinaire Pour K classes de distance :

$$\hat{\theta}_{MCO} = \arg \min_{\eta \in \Theta} \sum_{k=1}^K \{\hat{\gamma}(h_k) - \gamma(h_k; \eta)\}^2$$

Peu efficace : effectifs variables ; variances différentes

Estimation à partir du variogramme expérimental (suite)

Moindre carré pondéré

$$\hat{\theta}_{MCP} = \arg \min_{\eta \in \Theta} \sum_{k=1}^K w_k \{\hat{\gamma}(h_k) - \gamma(h_k; \eta)\}^2$$

- ▶ Si $Z(\cdot)$ est un champ Gaussien, alors

$$0.5\{Z(x_\alpha) - Z(x_\beta)\}^2 \simeq \chi_1^2$$

d'espérance $\gamma(h_{\alpha\beta})$ et de variance $\gamma^2(h_{\alpha\beta})$

- ▶ En négligeant les corrélations entre incréments,

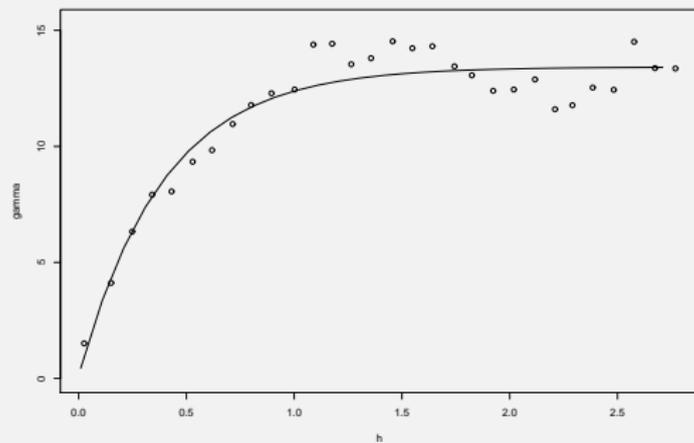
$$\text{Var}\{\hat{\gamma}(h_k)\} \simeq \gamma^2(h_k; \theta) / N(h_k).$$

On pose $w_k = N(h_k) / \gamma^2(h_k; \theta)$, et donc

$$\hat{\theta}_{MCP} = \arg \min_{\eta \in \Theta} \sum_{k=1}^K \frac{N(h_k)}{\gamma^2(h_k; \eta)} \{\hat{\gamma}(h_k) - \gamma(h_k; \eta)\}^2, \quad (1)$$

Bonne

Estimation à partir du variogramme expérimental (exemple)



Estimation par maximum de vraisemblance

Hypothèse distributionnelle complète :

$$\mathbf{Z} = (Z_1, \dots, Z_n) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

avec $\boldsymbol{\mu} = \mu \mathbf{1}$.

$$\begin{aligned}\hat{\theta} &= \arg \max I_n(\theta) \\ &= \arg \min \frac{1}{2} \left\{ \ln \det(\boldsymbol{\Sigma}(\theta)) + (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\theta) (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}) \right\}\end{aligned}$$

- ▶ uniquement sous hypothèse stationnaire d'ordre 2 ; variogrammes non bornés \Rightarrow MCP
- ▶ questions de robustesse si non Gaussien
- ▶ minimisation numérique \Rightarrow nombreux calculs de $\det(\boldsymbol{\Sigma}(\theta))$ et $\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\theta)$
 $\Rightarrow n$ pas trop grand

Vraisemblance composite

Principe général

- ▶ Matrice Σ trop grande pour MV.
- ▶ Vraisemblance composite : produit de vraisemblances pour des vecteurs de plus petites dimensions, p.ex. de dimension 2.
- ▶ On pondère éventuellement les vraisemblance des paires
- ▶ On cherche les paramètres maximisant la (log-) vraisemblance composite

$$cl(\theta) = \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n w_{ij} l_{ij}(\theta)$$

Vraisemblance composite (suite)

Notons

$$W_{ij} = Z(x_i) - Z(x_j), \quad i \neq j.$$

Alors, sous hypothèse bi-Gaussienne et sta-2

$$E[W_{ij}] = 0 \quad \text{et} \quad \text{Var}(W_{ij}) = 2\gamma_{ij}(\theta).$$

Ainsi

$$cl(\theta) = \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i} 9nw_{ij} \left\{ \frac{\ln \gamma_{ij}(\theta)}{2} + \frac{W_{ij}^2}{4\gamma_{ij}(\theta)} \right\}.$$

avec, p.ex. $w_{ij} = 1$ si $\|x_i - x_j\| \leq d$ et 0 sinon. \Rightarrow réduit la dimension du problème.

On pose

$$\hat{\theta}_{cl} = \arg \max cl(\theta)$$

Vraisemblance composite (suite)

Notons

$$\mathbf{H}(\theta) = -E[cl^{(2)}(\theta)] = 0.5 \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n \mathbf{w}_{ij} \frac{\gamma_{ij}^{(1)}(\theta) \gamma_{ij}^{(1)}(\theta)^t}{\gamma_{ij}^{(2)}(\theta)}$$

et

$$\mathbf{J}(\theta) = -E[cl^{(1)}(\theta) cl^{(1)}(\theta)^t] = 0.5 \sum_{i=1}^n \sum_{j \neq i}^n 0.5 \sum_{k=1}^n \sum_{l \neq i}^n \mathbf{w}_{ij} \mathbf{w}_{kl} \frac{\gamma_{ij}^{(1)}(\theta) \gamma_{kl}^{(1)}(\theta)^t}{\gamma_{ij}(\theta) \gamma_{kl}(\theta)}$$

Alors, pour un champ Gaussien stationnaire et sous certaines conditions de régularité, lorsque $n \rightarrow \infty$

$$\text{Var}(\hat{\theta}_n) \rightarrow \mathbf{H}^{-1}(\theta_0) \mathbf{J}(\theta_0) \mathbf{H}^{-1}(\theta_0)^t$$

Anisotropie géométrique

Principe

1. on peut transformer les coordonnées $x = (x_1, x_2)$ qui décrivent D en un nouveau système de coordonnées, $x' = (x'_1, x'_2)$ dans lequel le variogramme est isotropique.
2. Les paramètres du variogramme isotrope sont alors estimés dans ce nouveau système de coordonnées.

Anisotropie géométrique

$$x' = \sqrt{D}Qx$$

où

$$\sqrt{D} = \begin{pmatrix} \sqrt{d_1} & 0 \\ 0 & \sqrt{d_2} \end{pmatrix} \text{ et } Q = \begin{pmatrix} \cos \tau & \sin \tau \\ -\sin \tau & \cos \tau \end{pmatrix}$$

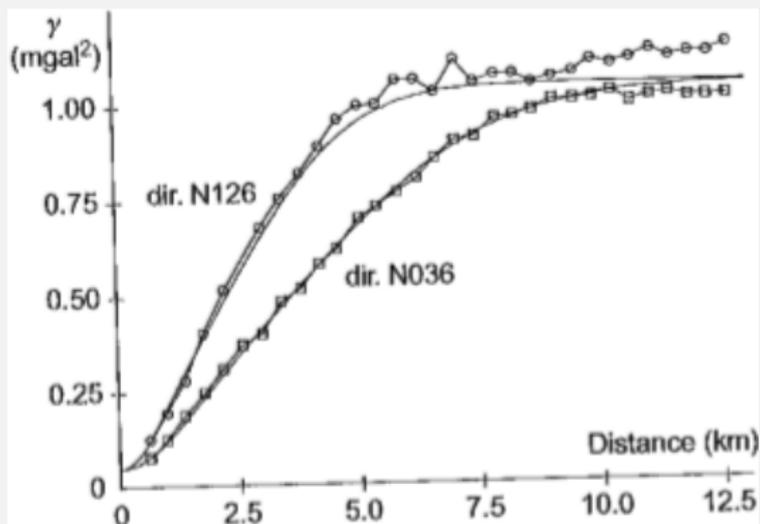
Ainsi

$$\gamma_{\text{aniso}}(h) = \gamma_{\text{iso}}(r)$$

avec

$$r = \|h'\| = \sqrt{(h')^t h'} = \sqrt{h^t Q^t D Q h}$$

Variogramme expérimental et anisotropie



Résidus de micro-gravité. D'après Chilès et Delfiner (2012).