Robustesse de l'estimation spatiale par krigeage simple et par régression PLS

Youssfi ELKETTANI et Driss MENTAGUI

Faculté des Sciences, Département de mathématiques
Laboratoire d'analyse convexe et variationnelle
systèmes dynamiques et processus stochastiques
BP133, Kénitra, Maroc

Email : elkettani_y@yahoo.fr , d_mentagui@hotmail.com

Résumé :

L'étude de la robustesse du krigeage, a montré que, dans le cas où la matrice de covariance est bien conditionnée, le krigeage est stable, dans le cas contraire il peut être instable par rapport aux perturbations de la fonction de covariance. Nous rappelons l'application de la régression PLS a un champ spatial stationnaire de moyenne connue, puis nous comparons la robustesse des coefficients du krigeage a celle de la prédiction spatiale par régression PLS, ainsi que la robustesse de la précision des deux prédicteurs quand des perturbations sont produites sur le paramètre de portée de la fonction de covariance.

Mots clés: prédiction spatiale, krigeage, régression PLS, robustesse.

Summary:

The study of kriging robustness has shown that, when the condition number of the covariance matrix is small, kriging is stable. Whereas when this number is too big kriging may be unstable with respect to perturbations of the covariance function parameter. In this paper, we recall the use of the PLS regression in the estimation of a stationnary spatial field with known mean, which has positive and meaningful weights. Then we compare robustness of the PLS regression estimation to the kriging one when the range parameter is perturbed. We will see that when the covariance matrix is well conditioned, kriging of all the area from the same observations set, is done with the same stability level. However, the PLS regression estimate is always stable even when the condition number of the covariance matrix is too big.

Key words: spatial estimation, kriging, PLS regression, robustness.

Introduction

Les méthodes de prédiction d'un champ spatial stationnaire passent par la phase préalable d'ajustement de la fonction de covariance. Différentes études ont porté sur l'impact d'une mauvaise modélisation de la fonction de covariance sur la qualité de krigeage. D'une part [13] puis [11] , ont étudié la stabilité de la prédiction quand le modèle de covariance théorique est approximé par une suite c_n de covariances ajustées à partir des observations, ou le nombre n d'observations tend vers l'infini. D'autre part [7] ont montré que la stabilité du krigeage ordinaire aux petites perturbations des paramètres du modèle de covariance est fonction du nombre de conditionnement de la matrice de covariance du champ étudié: plus le nombre de conditionnement est grand moins est stable le vecteur des coefficients du krigeage. Par une approche infinitésimale [16] a krigé sur un covariogramme perturbé et a calculé les perturbations de premier et de second ordre dans les coefficients de krigeage. Sans surprise, les grandes perturbations dans les prédictions ont lieu là où la variance de krigeage est grande. Pour tester son résultat [16] utilise deux covariogrammes isotropes dans R^2, le modèle exponentiel et le modèle gaussien. L'influence du modèle de covariance sur le krigeage est par ailleurs étudiée par [2] . Concernant la stabilité de la précision du krigeage, [7] établissent une majoration de la variation relative de la variance d'estimation du même type que les majorations qu'ils établissent pour les coefficients du krigeage, alors que [3] étudie l'impact du changement de l'effet de pépite sur la variance de l'estimateur. Par ailleurs la régression PLS (Partial Least Squares), est une méthode d'analyse multivariée particulièrement adaptée aux données multi-colinéaires. Introduite par [17], ses propriétés mathématiques sont développées dans [14] et son application à l'estimation d'un champs spatial dans [8] a présenté des coefficients proportionnels au vecteur des covariances et un algorithme facile pour la sélection d'une configuration pour l'estimation locale.

En statistique multivariée classique, la robustesse de la régression PLS est une source d'intérêt (voir [15] par exemple). Le principal objet de notre article ci-dessous est d'étendre la réflexion sur la stabilité de la prédiction spatiale locale à l'estimation par régression PLS. Nous étudions de façon théorique, et nous illustrons par un certain nombre d'exemples simples et représentatifs de différentes situations, la robustesse des coefficients d'estimation ainsi que celle de la précision des estimateurs, par régression PLS et par krigeage simple, quand des perturbations sont produites sur le paramètre de portée de la fonction de covariance.

Nous montrerons qu'il est plus intéressant, vis à vis de la robustesse des coefficients, de faire l'estimation par krigeage quand la matrice de covariance est bien conditionnée. Nous verrons qu'en effet, avec une même configuration de points d'observations le krigeage permet d'estimer tous les points du voisinage avec le même niveau de robustesse. Par contre quand la matrice de covariance est mal conditionnée la régression PLS reste stable et donc plus indiquée. Quand à la précision des estimations, nous verrons que si le nombre de conditionnement est très élevé, la variation relative de la variance de l'estimateur PLS peut être beaucoup plus faible que celle du krigeage, alors que quand la matrice k est bien conditionnée, les variances du krigeage et de la régression PLS ont des variations relatives de même intensité.

Après un rappel des méthodes d'estimation (chapitre 1), nous présentons les résultats sur la robustesse de chaque méthode (chapitre 2) suivis des exemples d'illustration des différentes situations (chapitre 3).

Par souci de clarté du texte, les démonstrations sont reportées en annexe de la version PDF.

1 L'estimation spatiale locale linéaire

Soit F un processus spatial stationnaire gaussien, d'espérance m et de fonction de covariance c(h) = cov(F(M + h), F(M)), et σ^2 = var (F (M)) . Le processus F est supposé être observé en n points M_1, ..., M_n d'un domaine physique D c R^p, p=1, 2 ou 3. On note Fi = F(Mi), i = 1, ..., n les variables observées et F_o = F(M_o) la variable à estimer, M_o un point de D. Notons c = $(c_1,...,c_n)'$ le vecteur colonne ou c_i = cov(F_o,Fi), k la matrice nxn dont l'élément (i,j) est k_{ij} = cov (Fi,Fj) , $Z_i = \frac{1}{\sigma}(F_i\text{-m}),i=1,...,n$; $Z_0 = \frac{1}{\sigma}(F_0\text{-m})$ et Z = (Z_1, ..., Z_n). Dans toute la suite nous utiliserons la norme

$$L_2{:}\|c\| = c'c \text{ et } \|k\| = \sup \frac{\|Kx\|}{\|x\|}$$

L'estimation spatiale consiste à prédire, la variable aléatoire Z_o par une combinaison linéaire des observations *zo = Z'w* où $w=(w_i)_{i=1,...,n} \in R^n$ est le vecteur des coefficients d'estimation. Alors $f_0 = m + \sigma\, z_0$ est un estimateur sans biais de $\boldsymbol{F_o}$.

1.1 Le krigeage simple

La méthode du krigeage stationnaire à moyenne connue, dit krigeage simple (ks), consiste à chercher le vecteur des coefficients $x=(x_i)_{i=1,...,n}$ tel que la combinaison linéaire x'Z minimise l'erreur quadratique. E=E(z_o-x'Z)². La résolution de cette équation donne:

$$x = k^{-1}c. \tag{1}$$

L'estimateur de Z_o est z_{ks} = Z'x = Z'k^{-1}c ; et F_0 est estimé sans biais par $f_{ks} = m + \sigma z_{ks}$. La variance de l'estimateur *fks* est

$$\sum{}_{ks}^{2} = c' k^{-1} c \tag{2}$$

et l'erreur quadratique moyenne est: $\Phi^2(f_{ks})$ = E(f_0 - f_{ks})²= $\sigma^2 - c'k^{-1}c$

1.2 La régression PLS

La régression PLS (partial least square) est une méthode explicative d'analyse de données multivariées proposée par [17]. Ses propriétés mathématiques sont présentées dans [14]. La régression PLS de Z_o sur $Z = (z_1,...,z_n)$ consiste à chercher la combinaison linéaire *t = λ'Z* , avec ‖ λ‖ = 1 telle que *cov (Zo, t)* soit maximale. L'expression de l'estimateur PLS z_{pls} est donnée par:

$$z_{pls} = (C'C/C'KC)C'Z = \lambda'Z$$

en notant λ le vecteur des coefficients :

$$\lambda = (C'C/C'KC)C \tag{3}$$

Z_o est estimé par z_{pls} =(C'C/C'KC)C'Z= λ'Z et F_o est estimé par $f_{pls} = m + \sigma z_{pls}$

La variance de l'estimateur f_{pls} est

$$\sum_{pls}{}^{2} = \text{C'CC'C/C'KC} \tag{4}$$

et l'erreur quadratique moyenne est: $\Phi^2(f_{pls}) = E(f_0 - f_{pls})^2 = \sigma^2 -$ C'CC'C/C'KC

Ici les coefficients, proportionnels au vecteur λ, sont facilement interprétables et sont positifs quand la fonction de covariance l'est. Par ailleurs, [8] propose un algorithme de sélection d'une configuration d'observations pour l'estimation locale. Il consiste à supprimer les observations qui ont un faible coefficient par la régression PLS.

2 Etude de la robustesse

Nous allons étudier les variations relatives des coefficients d'estimation ainsi que les variations relatives des variances des estimateurs après perturbation des coefficients du vecteur c et de la matrice K.

2.1 Comparaison des normes des vecteurs des coefficients

On suppose toujours que k est symétrique définie positive, et nous notons $\tau(\kappa) = \|k\| \, \|k^{-1}\|$ le nombre de conditionnement de k. Il est égal au rapport de la plus grande à la plus petite valeur propre de K.

Théorème 1:

Les vecteurs x et λ donnés par (1) et (3) vérifient:

$$\frac{\|x\|}{\tau(\kappa)} \le \|\lambda\| \le \tau(\kappa)\,\|x\|$$

Nous remarquons donc que si K est bien conditionnée (τ(k) de l'ordre de l'unité), $\|x\|$ et $\|\lambda\|$ sont du même ordre de grandeur.

2.2 Voisinage d'une fonction de covariance

Soit Λ une classe de fonctions de covariance c(h), h > 0, et δ un réel dans]0,1[. On dit qu'une covariance q est dans le δ-voisinage, Nδ(c) de c si:

$$1 - \delta < \frac{q(h)}{c(h)} < 1 + \delta \,, \; h > 0 \tag{6}$$

Supposons que F(.) soit stationnaire de fonction de covariance c, et qu'on désire estimer $F_o = F(M_o)$ sur la base de n observations $F(M_1)$, ...,$F(M_n)$. Les coefficients des estimateurs par krigeage et par régression PLS sont alors données par les équations (1) et (3). Si maintenant l'estimation se fait à partrir d'une covariance q, les équations (1) et (3) deviennent respectivement :

$$Q\, x_q = b \tag{7}$$

$$b'Qb\,\lambda_q = b'b.b \tag{8}$$

où Q et b sont respectivement la matrice et le vecteur de covariances obtenus à partir de q ; x_q et λ_q étant les vecteurs des coefficients du krigeage et de la régression PLS associés au choix q.

D'après (6), on a $(1 - \delta)\,\|c\| < \|b\| < (1 + \delta)\,\|c\|$. De même, puisque les matrices K et Q ont toutes les deux, tous les termes de même signe, on a

$$(1 - \delta)\,\|k\| < \|Q\| < (1 + \delta)\,\|k\|$$

2.3 Variations relatives des vecteurs des coefficients

Supposons que les équations (7) et (8) soient obtenues à partir de (1) et (3) par des petites perturbations de la covariance et posons:

$$b = c + \Delta c \text{ et } Q = k + \Delta k$$

pour les éléments de la covariance. Et pour les vecteurs des coefficients on pose:

$$x_q = x + \Delta x \text{ et } \lambda_q = \lambda + \Delta\lambda$$

Pour le krigeage simple, une majoration de la variation relative du vecteur des coefficients est donnée par une expression similaire à celle obtenue par [7] dans le cas du krigeage ordinaire:

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{2\delta\tau(\kappa)}{(1-\delta\tau(\kappa))}$$

Ce qui montre que si $\delta\tau(k) < \dfrac{\varepsilon}{2+\varepsilon}$ alors $\dfrac{\|\Delta x\|}{\|x\|} < \varepsilon$.

Les théorèmes 2 et 3 qui suivent établissent des majorations similaires de la variation relative du vecteur des coefficients de l'estimation par régression PLS. Leurs démonstrations figurent en annexe 1 de la version PDF.

Théorème 2:

Si $0 < \delta < \dfrac{1}{4\tau(\kappa)}$, alors

$$\frac{\|\Delta\lambda\|}{\|\lambda\|} \leq \frac{4\delta(1+\tau(\kappa))}{(1-4\delta\tau(\kappa))} \tag{9}$$

et on a aussi

$$\left|\frac{\|\Delta\lambda\|}{\|\lambda\|}-\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}\right|\leq\frac{6\delta\left(1+\tau\left(\kappa\right)\right)}{(1-4\delta\tau\left(\kappa\right))}$$

Ce qui montre que si $\delta < \frac{1}{4\left(1+\tau+\varepsilon\tau\right)}$ alors $\frac{\|\Delta\lambda\|}{\|\lambda\|} < \varepsilon$. Par ailleurs dans une situation de matrice bien conditionnée, les variations relatives des vecteurs des coefficients du krigeage et de la régression PLS sont du même ordre de grandeur.

Le théorème 3 donne un résultat encore plus fort pour la régression PLS car il améliore la condition $0 < 4\delta < \frac{1}{\tau\left(\kappa\right)}$

du théorème 2. Posons r = c' kc, la norme de c relative à la matrice symétrique définie positive K, et $\alpha = \frac{r}{\| c\|^2}$ le

rapport des deux normes dans L_z.

Théorème 3:

Quel que soit la valeur de $\delta\tau(k)$, on a

$$\frac{\|\Delta\lambda\|}{\|\lambda\|}\leq\frac{\frac{|\Delta\alpha|}{\alpha}+\delta}{1+\frac{\Delta\alpha}{\alpha}}.$$

Cette inégalité donne une majoration de $\frac{\|\Delta\lambda\|}{\|\lambda\|}$, valable sans condition sur $\delta\tau(k)$, ce qui garantit la stabilité de l'estimation spatiale par régression PLS même quand K est mal conditionnée.

Enfin le théorème suivant va nous montrer que la variation relative des coefficients du krigeage reste bornée, avec une borne supérieure ne dépendant que de k, et ce quelle que soit la perturbation effectuée sur le vecteur c. Cette propriété qui n'est pas vraie pour la régression PLS signifie qu'à partir de la même configuration d'observations , les estimations par krigeage, faites en différents points de l'espace (k fixé et c variable), auront la même variation relative des vecteurs des coefficients, et donc le même niveau de stabilité.

Théorème 4:

Si $\delta\tau(k) < 1$ alors

$$\left|\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}-\frac{\|\Delta k^{-1}\|}{\|k^{-1}\|}\right|\leq\frac{3\delta\tau\left(\kappa\right)}{(1-\delta\tau\left(\kappa\right))}$$

2.4 Variations relatives des variances des estimateurs

Dans cette partie nous allons établir des majorations des variations relatives des variances ce qui permettra de délimiter les variations des bornes des intervalles de confiance pouvant être obtenus. Nous énonçons les résultats dans les théorèmes 5 et 6, leurs démonstration figurent en annexe 2 de la version PDF.

Le théorème 5 concerne les résultats sur le krigeage. Soit $\sum_{\kappa s}{}^{2}$ =c'x la variance du krigeage simple.

Théorème 5:

Notons $b = \frac{2\delta\tau(\kappa)(\tau(\kappa)+1)}{(1-\delta\tau(\kappa))}$ et soit δ suffisamment petit de sorte que b $\in[0,1]$,

alors l'une des deux expressions suivantes est vraie:

$$-1 \le -1+\sqrt{1-b} \le \frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}} \le -1+\sqrt{1+b} \le -1+\sqrt{2}$$

ou bien

$$-1-\sqrt{2} \le -(1+\sqrt{1+b}) \le \frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}} \le (-1+\sqrt{1-b}) \le -2$$

Et si b > 1, alors $|\frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}}| \le 1+\sqrt{1+b}$

L'encadrement de la variation relative de l'écart-type

de l'estimateur par régression PLS est donné par le théorème 6. Notons $\sum_{pls}{}^{2}$ = $c'\lambda$ la variance de l'estimateur PLS.

Théorème 6:

Notons d= $\frac{2\delta(3+\tau 2(\kappa))}{(1-4\delta\tau(\kappa))}$, et soit δ suffisamment petit de sorte que d$\in[0,1]$, alors l'une des deux expressions suivantes est vraie:

$$-1 \le -1+\sqrt{1-d} \le \frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}} \le -1+\sqrt{1+d} \le -1+\sqrt{2}$$

ou bien

$$-1-\sqrt{2} \le -(1+\sqrt{1+d}) \le \frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}} \le (-1+\sqrt{1-d}) \le -2$$

Et si d>1, alors $|\frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}}| \le 1+\sqrt{1+d}$

Ainsi si k est bien conditionnée, une faible perturbation va conduire à des variations relatives des écarts-type, de l'estimateur PLS et du krigeage, bornées et du même ordre de grandeur. Par contre si le nombre de conditionnement est très élevé, alors b de l'ordre de τ^2 est beaucoup plus grand que d qui est de l'ordre de τ. Et ceci peut induire une variation relative de l'écart-type de l'estimateur PLS beaucoup plus faible que celle du krigeage.

3 Exemples:

Afin d'apprécier la robustesse des estimateurs par krigeage et par régression PLS, nous allons considérer divers exemples simples et représentatifs. Après quelques remarques sur les fonctions de covariance (chapitre 3.1), nous commençons par présenter des situations de matrices mal conditionnées (chapitre 3.2). Puis nous illustrerons la stabilité des estimateurs quand la matrice de covariance est bien conditionnée (chapitre 3.3). A travers l'exemple 7, nous verrons que la variation relative $\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|}$ dépent peu de Δc quand k est bien conditionnée. Enfin nous illustrerons ces résultats également à travers un cas réel (chapitre 3.4).

Dans les exemples de 1 à 6, Z est une fonction aléatoire gaussienne sur R^2 stationnaire de moyenne m = 0 et de covariance c, avec c(0) = σ^2 = 1. La fonction de covariance *q,* est obtenue en perturbant le paramètre de la portée p de c. Les points d'observation sont dans le voisinage de l'origine M_o (0, 0). La v.a à estimer est z_o = Z(X0).

3.1 Fonction de covariance

Nous étudierons trois familles de modèles de covariance usuels sur R^2: la covariance exponentielle définie par

$$c\ (h) = c(0)\ \exp -(h/a),\ \ a > 0 \qquad (10)$$

la covariance sphérique définie par

$$c\ (h) = c(0)(1\text{-}1.5\left(\frac{h}{a}\right)+0.5*\left(\frac{h}{a}\right)^3)x(h<a)\ ,\ a > 0 \qquad (11)$$

*o*ù x est la fonction indicatrice; et la covariance gaussienne définie par :

$$c\ (h) = c(0)\ \exp -(h^2/a),\ \ a > 0 \qquad (12)$$

La covariance sphérique présente une portée finie a, distance au delà de laquelle le processus n'est plus autocorrélé. Pour les modèles exponentiels et gaussiens, a reste un paramètre de portée de la covariance.

Dans trois exemples nous avons utilisé la même configuration de huit points. Dans l'exemple 4, avec la covariance gaussienne, on a obtenu pour nombre de conditionnement τ = 202. Puis dans l'exemple 6, avec la covariance exponentielle on a eu τ = 3.02. Enfin dans l'exemple 7, avec la covariance sphérique, τ = 5.86. Cette différence de la valeur de τ, d'une covariance à l'autre, et qui se traduit par une différence dans la stabilité des résultats d'estimation, s'explique théoriquement par le théorème de Jaffard qui établit la stabilité pour les matrices dont les termes décroissent de manière hyperbolique en s'éloignant de la diagonale [9]. Le théorème de Jaffard a été généralisé par Coeurjolly au cas des matrices à décroissance exponentielle [5]. La matrice K d'une covariance sphérique, respectivement exponentielle, vérifie la propriété de decroissance hyperbolique, respectivement exponentielle, et présente donc pour la même configuration, un nombre de conditionnement relativement faible par rapport au nombre de conditionnement obtenu avec la covariance gaussienne.

3.2 Exemples 1 à 4: Situations avec K mal conditionnée

Le 1er exemple est repris de [7] qui avaient constaté l'instabilité des coefficients du krigeage. Les coefficients de l'estimateur par régression PLS est lui plus stable. L'exemple 2 qui présente également une matrice mal conditionnée, conduit aux mêmes conclusions de krigeage instable alors que l'estimateur par régression PLS est stable. L'exemple 3 montre que ce n'est pas toujours le krigeage qui est instable puisque nous avons dans cet exemple une très faible variation relative des coefficients du krigeage alors que celle de la PLS est bien plus importante sans toutefois dépasser la variation relative du vecteur des covariances c. Dans l'exemple 4, les deux estimateurs sont stables alors que la matrice des covariances k est mal conditionnée, ce qui montre que dans le cas de matrice de covariance mal conditionnée, toutes les situations de stabilité ou non peuvent se produire. Toutefois la variation relative du vecteur des coefficients de la PLS reste toujours du même ordre de grandeur que celle de c.

Enfin dans ces quatre exemples, la précision des estimations a été très stable car la variation relative des variances des estimateurs a été très faible.

Exemple 1

Z est obsérvée sur trois points, deux sont très proches. Dans cette situation, [12] montre que le krigeage attribue un faible coefficient à l'un des points redondants. C'est précisemment la variation de cette faible valeur dans les coefficients du krigeage qui s'avère relativement importante. Les modèles de covariance sont gaussiens donnés par (12) de paramètre a = $\sqrt{3}$ pour la fonction de covariance c, et a = $0.9\sqrt{3}$ pour la covariance perturbée q. Cette variation de a induit des variations relatives du vecteur c et de la matrice k de l'ordre de δ = 5%. Les coordonnées des observaions, les coefficients x et λ du krigeage et de la régression PLS, leurs variations relatives, le vecteur β des valeurs propres de la matrice de covariance, et la variation relative du vecteur c conséquente à la perturbation de la fonction de covariance, sont présentés au tableau 1.

Abs	ord.	KS (x)	PLS (λ)	$\frac{\Delta x}{x}$ (en%)	$\frac{\Delta \lambda}{\lambda}$ (en%)	β	$\frac{\Delta c}{c}$ (en%)
-0.4	0	0.5567	0.3603	1.15	0.55	0.6822	3.82
0.4	0	0.4552	0.3603	2.41	0.55	0.0124	3.82
0.39	0.1	0.1044	0.3596	14.54	0.50	2.3054	3.88

Tableau 1

On obtient τ(K) = 185.92. Le 3ème coefficient du krigeage a

une variation relative de 14.54% dépassant largement δ alors que les coefficients de la régression PLS sont stables. Enfin la variation relative des écarts-type des estimateurs est, respectivement pour le krigeage et la régression PLS: 1.29% et 1.63%.

Exemple 2 :

Z est obsérvée en quatre points. Les fonctions c, et q sont les mêmes que dans l'exemple 1. L'instabilité du krigeage dûe à la variation de très faibles pondérations est encore plus marquée, comme le montre le tableau 2. Le nombre de conditionnement est τ = 4285.44. Et la variation des écarts-type des estimateurs est de 0.1% pour le ks contre 0.01 pour la PLS. Cette dernière est plus faible que celle du krigeage car τ est trop élevé.

Abs.	ord.	ks(x)	pls(λ)	$\frac{\Delta x}{x}$ (en%)	$\frac{\Delta \lambda}{\lambda}$ (en%)	β	$\frac{\Delta c}{c}$ (en%)
-0.1	-0.1	$4.77\text{x } 10^{-15}$	0.2524	90.55	0.21	0.0009	0.47
0.1	0.1	$3.69\text{x } 10^{-15}$	0.2524	92.7	0.21	0.0183	0.47
0	0.1	0.5049	0.2550	0.22	0.45	0.1239	0.23
0	-0.1	0.5049	0.2550	0.22	0.45	3.8569	0.23

Tableau 2

Exemple 3 :

Z est obsérvée sur cinq points, dont un est relativement éloigné de l'origine, alors que les quatres autres sont autour et proches de l'origine. La covariance est sphérique donnée par (11) de paramètre a = $\sqrt{3}$ pour c et a = $0.9\sqrt{3}$ pour la covariance perturbée q.

Les deux portées recouvrent les cinq points d'observation. Le tableau 3 montre que le krigeage est stable malgré un nombre de conditionnement assez élevé τ = 45, alors que la variation relative des coefficients de la régression

PLS est importante, et dûe principalement à celle du vecteur des covariances c. Les variances des estimateurs sont très stables puisque on a $\frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}}$ = 0.5% et $\frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}}$ =0.4%.

absc.	ord.	KS (x)	PLS (λ)	$\frac{\Delta x}{x}$ (en%)	$\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (en%)	β	$\frac{\Delta c}{c}$ (en%)
0.62	0.60	-0.0066	0.0861	1.45	20.24	0.0788	23.57
-0.1	-0.1	0.1276	0.2402	0.41	1.17	0.1056	1.56
0.1	0.1	0.1323	0.2402	0.18	1.17	0.3187	1.56
0	0.1	0.3789	0.2500	0.08	1.66	0.9327	1.06
0	-0.1	0.3784	0.2500	0.09	1.66	3.5642	1.06

Tableau 3

Exemple 4 :

Z est obsérvée sur huit points qui forment les sommets et les milieux des côtés d'un carré centré en l'origine. Les fonctions de covariance sont gaussiennes de paramètre a= $\sqrt{3}$, pour c et a = 0.9$\sqrt{3}$ pour q. Ces valeurs rendent les huit observations corrélées entre elles et avec la variable à estimer. Le tableau 4 montre que dans cet exemple aussi bien le krigeage que les coefficients de la régression PLS sont stables malgré un nombre de conditionnement élevé τ = 202. Et les écarts-type des estimateurs sont $\frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}}$ = 0.15% et $\frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}}$ = 1.24%.

absc.	ord.	KS (x)	PLS (λ)	$\frac{\Delta x}{x}$ (en%)	$\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ (en%)	β	$\frac{\Delta c}{c}$ (en%)
-0.4	0	0.5579	0.1615	1.17	4.29	0.1065	3.82
0.4	0	0.5579	0.1615	1.17	4.29	0.0241	3.82
0	0.4	0.5579	0.1615	1.17	4.29	0.0241	3.82
0	-0.4	0.5579	0.1615	1.17	4.29	1.3161	3.82
-0.4	-0.4	-0.3113	0.1376	2.33	0.63	1.3161	7.80
0.4	0.4	-0.3113	0.1376	2.33	0.63	0.0462	7.80
-0.4	0.4	-0.3113	0.1376	2.33	0.63	0.2983	7.80
0.4	-0.4	-0.3113	0.1376	2.33	0.63	4.8683	7.80

Tableau 4

A travers ces quatre exemples, il ressort que dans le cas d'une matrice de covariance mal conditionnée, toutes les situations de stabilité des coefficients ou non, peuvent avoir lieu pour chacun des deux estimateurs étudiés. Toutefois la variation relative des coefficients de la PLS reste du même ordre de grandeur que ceux de c, et donc de δ; alors que la variation relative des coefficients du krigeage peut être beaucoup plus importante. Par contre dans les quatre exemples traités, les deux méthodes ont eu des variances d'estimation robustes.

3.3 Exemples 5 à 7: Situations avec K bien conditionnée:

Dans les exemples 5 et 6 nous verrons des situations de stabilité des coefficients en commençant par le cas trival d'observations indépendantes, nous verrons également la proximité de $\frac{||\Delta x||}{||x||}$ et de $\frac{||\Delta k^{-1}||}{||k^{-1}||}$, ainsi que les encadrements des variations relatives des variances. L'exemple 7 illustre le faible impact de Δc sur $\frac{||\Delta x||}{||x||}$ quand la matrice K est bien conditionnée et l'intensité de la perturbation δ est faible, compte tenu de la proximité de $\frac{||\Delta x||}{||x||}$ et de $\frac{||\Delta k^{-1}||}{||k^{-1}||}$.

Par contre $\frac{||\Delta \lambda||}{||\lambda|}$ est toujours fortement lié à $\frac{||\Delta c||}{||c||}$.

Exemple 5:

Cet exemple est celui de quatre observations indépendantes. La fonction de covariance est sphérique, de portée p = a de sorte que la distance de l'origine aux points d'observation soit plus petite que a et que les distances mutuelles entre les points d'observation soient toutes supérieures à a. Il est trivial que le nombre de conditionnement de la matrice de covariance vaut 1 et que les variations relatives de x, de λ et de c sont égales. En effet, K étant égal à l'identité, on déduit de (1) et (3) que $x = \lambda = c$.

Exemple 5bis :

Dans cet exemple la matrice de covariance est très proche de l'identité. Elle est obtenue en modifiant légèrement la configuration précédente des points d'observation de sorte à créer une petite covariance entre deux points d'observation. La fonction de covariance est encore sphérique, de portée p = a = 0.495 pour q et p=a = 0.5 pour c. Le nombre de conditionnement de la matrice de covariance est égal à 1.09. Le tableau 5 présente les résultats de cette situation.

absc.	ord.	ks(x)	pls(λ)	$\frac{\|\|\Delta x\|\|}{\|\|x\|\|}$ (en%)	$\frac{\|\|\Delta\lambda\|\|}{\|\|\lambda\|}$ (en%)	β	$\frac{\|\|\Delta c\|\|}{\|\|c\|\|}$ (en%)
0.	0.4	0.056	0.055	8.29	8.06	1	8.29
0.1	-0.4	0.042	0.043	9.54	9.67	1.0434	9.9
-0.3	-0.3	0.031	0.032	11.56	11.78	0.9566	12.02
0.45	0.	0.014	0.014	20.62	20.37	1	20.62

Tableau 5

On constate que les variations relatives des vecteurs des coefficients d'estimations sont très proches: $\frac{||\Delta x||}{||x||}$ = 9.755%, et $\frac{||\Delta\lambda||}{||\lambda|}$ = 9.753%, et tous les deux sont del'ordre de δ puisque $\frac{||\Delta c||}{||c||}$ = 9.979% et $\frac{||\Delta k||}{||k||}$ = 0.376%. Les variations relatives observées sont de 9.63% pour le ks et de 9.62% pour la pls, c. a .d. de l'ordre de δ.

Exemple 6 :

Nous reprenons la configuration de 8 points de l'exemple 4, mais avec une fonction de covariance exponentielle donnée par (10) de paramètre a= 3 pour c et a = 2.7 pour q. Le nomobre de conditionnement vaut τ = 3, 02. On constate que les variations relatives de x et de λ sont faibles, de l'ordre respectivement de 7% et 9%, et les variations relatives des variances sont de 0.9% pour le ks et de 1.28% pour la pls, et ce malgré une perturbation qui a induit une variation relative de c de l'ordre de 20%. Le tableau 6 présente les résultats obtenus pour cet exemple.

absc.	ord.	KS (x)	PLS (λ)	$\frac{\|\|\Delta x\|\|}{\|\|x\|\|}$ (en %)	$\frac{\|\|\Delta\lambda\|\|}{\|\|\lambda\|}$ (en%)	β	$\frac{\|\|\Delta c\|\|}{\|\|c\|\|}$ (en%)
-0.4	0	0.1883	0.1471	7.16	4.00	0.7660	14.26
0.4	0	0.1883	0.1471	7.16	4.00	0.6518	14.26
0	0.4	0.1883	0.1471	7.16	4.00	0.6518	14.26
0	-0.4	0.1883	0.1471	7.16	4.00	1.2557	14.26
-0.4	-0.4	0.0363	0.0895	2.09	9.90	1.2557	20.75
0.4	0.4	0.0363	0.0895	2.09	9.90	0.6300	20.75
-0.4	0.4	0.0363	0.0895	2.09	9.90	0.8841	20.75
0.4	-0.4	0.0363	0.0895	2.09	9.90	1.9049	20.75

Tableau 6

Exemple 7 :

Cet exemple illustre la faible influence de Δc sur les variations relatives du vecteur des coefficients $\frac{||\Delta x||}{||x||}$. Nous reprenons la configuration de 8 points de l'exemple 6 et une fonction de covariance sphérique de paramètre a = 1, pour c et a = 0.95 pour q. Le nombre de conditionnement obtenu est τ = 5.86. Nous allons procéder à l'estimation de trois variables: Z_0^1 = Z(0, 0), Z_0^2 =Z(0.2, 0.3) et Z_0^3 = Z(-0.3, 0.2). D'une estimation à l'autre c et Δc varient, k et Δk restent inchangés. Enfin les variations relatives des variances d'estimation, présentées au tableau 7, ont été très faibles pour les 3 points estimés et pour les deux méthodes d'estimation étudiées. Les variations relatives $\frac{\Delta c}{c}$, $\frac{\Delta x}{x}$ et $\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$ pour Z_0^1, Z_0^2 et Z_0^3 sont présentées au tableau 8.

Z_0^1 = Z(0, 0)		Z_0^2 = Z(0.2, 0.3)		Z_0^3 = Z(-0.3, 0.2)	
$\frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}}$	$\frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}}$	$\frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}}$	$\frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}}$	$\frac{\Delta\Sigma_{ks}}{\Sigma_{ks}}$	$\frac{\Delta\Sigma_{pls}}{\Sigma_{pls}}$
3.55	4.36	1.47	1.04	1.47	1.04

Tableau 7

Z_0^1 = Z(0, 0)			Z_0^2 = Z(0.2, 0.3)			Z_0^3 = Z(-0.3, 0.2)		
$\frac{\Delta c}{c}$	$\frac{\Delta x}{x}$	$\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$	$\frac{\Delta c}{c}$	$\frac{\Delta x}{x}$	$\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$	$\frac{\Delta c}{c}$	$\frac{\Delta x}{x}$	$\frac{\Delta\lambda}{\lambda}$
6.47	0.94	0.8	23.83	21.61	16.56	2.56	0.77	3.46
6.47	0.94	0.8	5.36	1.36	0.82	33.61	19.57	25.76
6.47	0.94	0.8	2.56	0.77	3.46	5.36	1.36	0.82
6.47	0.94	0.8	33.61	19.57	25.76	23.83	21.61	16.56
13.94	38.81	6.15	587.48	23.8	547.11	17.15	11.99	10.27
13.94	38.81	6.15	2.56	0.52	3.46	33.61	12.64	25.76
13.94	38.81	6.15	17.15	11.99	10.27	2.56	0.52	3.46
13.94 Tableau 8	38.81	6.15	33.61	12.64	25.76	587.48	23.8	547.11

Tableau 8

Nous constatons que les variations relative du vecteur c, qui sont considérables pour certaines composantes n'influent pas, dans cette situation de matrice bien conditionnée, sur la variation relative du vecteur des coefficients du krigeage $\frac{||\Delta x||}{||x||}$. Cette dernière quantité qui vaut 3.58% en M0 et 2.13% en M1 et en M2 reste constamment proche de $\frac{||\Delta k^{-1}||}{||k^{-1}||} = 7.77\%$. Par contre la variation relative du vecteur des coefficients de la régression PLS est fortement liée à celle de c.

3.4 Cas du taux de cadmium dans le sol :

La variable étudiée représente le taux de cadmium dans le sol en ppm; les mesures ont été effectuées en 60 sites dans le plan horizontal.

absc.	ord.	KS (x)	PLS (λ)	$\frac{\Delta x}{x}$ (en %)	Δλ/λ (en %)	Δc/c (en %)
432	252	0,0009	0,02	32960,94	3,14	5,36
360	315	-0,0007	0,01	140,03	5,55	14,80
334	163	0,0001	0,02	115,63	0,17	8,58
434	312	-0,0001	0,02	80,13	0,48	9,29
334	271	0,0004	0,01	50,45	4,38	13,53
281	249	-0,0011	0,01	49,29	6,44	15,77
370	165	-0,0043	0,02	38,27	2,56	5,99
350	203	-0,0023	0,02	31,10	1,11	7,56
254	172	0,0071	0,01	30,89	4,39	13,54
413	150	-0,0074	0,03	27,60	4,29	4,10
254	128	-0,0047	0,01	24,98	7,35	16,76
254	216	-0,0035	0,01	23,82	5,99	15,29
346	216	-0,0044	0,02	23,12	0,02	8,79
254	299	0,0008	0,01	22,28	11,74	21,54
274	231	-0,0038	0,01	21,02	5,71	14,98
254	257	0,0005	0,01	20,61	8,80	18,33
360	195	0,0143	0,02	19,69	2,21	6,37
355	291	0,0017	0,01	18,93	4,27	13,41
334	194	0,0126	0,02	17,44	0,61	8,10

278	119	-0,008	0,01	17,29	6,33	15,65
334	216	-0,0065	0,02	16,64	0,79	9,62
437	240	0,0129	0,03	14,88	4,17	4,24
492	216	0,0108	0,02	14,65	3,14	5,36
334	301	0,0007	0,01	14,61	6,39	15,71
307	216	-0,0053	0,01	14,40	2,49	11,48
492	315	-0,0045	0,01	13,92	3,16	12,20
293	137	-0,0101	0,01	12,91	4,16	13,30
353	226	-0,0083	0,02	12,26	0,20	8,98
451	295	0,0165	0,02	10,67	0,75	7,95
413	216	-0,0158	0,03	10,46	4,17	4,24
281	216	-0,007	0,01	10,04	4,23	13,37

Tableau 9 : Points aux coefficients du krigeage instables

absc	ord.	KS (x)	PLS (λ)	$\frac{\Delta x}{x}$ (en %)	Δλ/λ (en %)	Δc/c (en %)
367	272	-0,0106	0,01	9,47	2,23	11,20
367	250	-0,0146	0,02	7,70	0,81	9,65
286	182	0,052	0,02	7,52	1,69	10,60
449	268	0,0278	0,02	6,74	2,59	5,95
286	288	-0,0013	0,01	6,50	8,78	18,32
442	228	0,0411	0,03	5,88	5,19	3,13
492	282	-0,0063	0,02	5,58	1,02	9,87
413	285	-0,016	0,02	5,09	0,13	8,91
355	118	-0,0209	0,02	5,05	1,33	10,21
432	140	0,035	0,03	5,01	4,85	3,50
288	164	-0,009	0,01	4,48	2,70	11,71
444	190	0,3092	0,04	4,39	7,59	0,51
444	119	0,0685	0,03	4,07	4,30	4,09
466	216	0,0407	0,03	3,37	4,75	3,60

288	311	-0,0005	0,01	3,19	10,22	19,88
439	216	0,0544	0,03	3,18	5,76	2,50
360	216	-0,0134	0,02	3,02	0,89	7,80
492	150	0,0384	0,03	2,89	3,26	5,22
358	139	-0,0181	0,02	2,75	0,17	8,58
442	160	0,1596	0,04	2,67	6,62	1,56
413	172	0,1126	0,03	2,03	5,62	2,66
386	216	-0,0171	0,02	1,41	2,54	6,00
274	269	0,0009	0,01	1,20	8,30	17,79
276	206	-0,0086	0,01	1,10	3,88	12,99
442	204	0,123	0,04	0,57	6,62	1,56
370	180	0,0979	0,03	0,42	3,48	4,98
492	249	-0,0059	0,02	0,38	1,08	7,59
346	210	-0,0039	0,02	0,27	0,36	8,37

Tableau 10 Points aux coefficients du krigeage stables

Les données figurent parmi ceux qui illustrent le logiciel Variowin de Pannatier, 1996 [10]. Le taux de cadmium varie entre 0 et 17.5 ppm. La fonction c(h) ajustée aux données est une covariance exponentielle isotrope définie par: c (h) = 13.25 exp(-h/b), h étant la distance euclidienne dans le plan horizontal, et b = 142.89 est un paramètre de la portée. La variance est σ^z = 16.3 et la valeur moyenne du processus est m = 6.65. La covariance perturbée q est obtenue à partir de c en faisant augmenter la portée de 10%. Nous nous proposons d'estimer la valeur de la variable aléatoire au point observé Mo(xo = 492, yo = 150) à partir des 59 autres observations. Le nombre de conditionnement obtenu est 85. Les tableaux 9 et 10 présentent les coordonnées des points estimés, les coefficients du krigeage et de la régression PLS, ainsi que les variations relatives des coeffients exprimées en pourcentages, puis en dernière colonne la variation relative du vecteur c. Concernant la précision des estimateurs, on obtient 0.63 pour le ks et 1.2 pour la pls. On constate que malgré le nombre de conditionnement assez élevé, nous avons une stabilité dans la précision pour les deux estimateurs étudiées ; par contre la variation relative des coefficients du krigeage est supérieure à 10% pour 28 points estimés (tableau 9) et inférieure à 10% pour les 31 autres (tableau 10) alors que les coefficients de l'estimation par régression PLS sont tous stables.

4 Conclusions:

Dans cette étude de la robustesse nous avons montré que quand la matrice des covariances est bien conditionnée, avec un nombre de conditionnement de l'ordre de l'unité, le krigeage et la régression PLS ont des coefficients d'estimation stables vis à vis de petites perturbations effectuées sur le paramètre de la portée de la fonction de covariance. Par ailleurs, la variation relative des coefficients du krigeage dépend peu du vecteur c. Le krigeage permet ainsi, quand la matrice des covariances est bien conditionnée, comme le montre l'exemple 7, d'estimer avec la même stabilité, différents points à partir de la même configuration des observations. Par contre, l'estimateur par régression PLS présente une variation relative des coefficients d'estimation bornée et du même ordre de grandeur que celle du vecteur des covariances, et ce indépendamment du conditionnement de la matrice de covariances. Dans le cas où cette matrice est mal conditionnée, l'estimateur par régression PLS est plus intéressant que le krigeage qui peut être alors très instable comme l'ont montré différents exemples . Quand à la précision de l'estimation, elle a été robuste dans tous les exemples traités, et ce aussi bien pour le krigeage que pour la régression PLS. Théoriquement cette dernière méthode peut avoir une variation relative de la variance plus faible que celle du krigeage quand le nombre de conditionnement $\tau(K)$ est très élevé.

Enfin, cette étude consolide l'apport de l'estimation spatiale par régression PLS et confirme son intérêt comme méthode complémentaire à l'estimateur optimal au sens des moindres carrés qu'est le krigeage.

Références :

[1] Ajerame M.1997 : Géostatistique appliquée à la quantification du risque; thèse de doctorat à la faculté des sciences agronomiques de LOUVAIN

[2] Armstrong M. et Wackernagel H.1988 : The influence of the covariance function on the kriged estimator; Sciences de la terre, série informatique géologique, Nancy, 27, 245-262.

[3] Bardossy A. 1988 : Notes on the robustness of the kriging system. Mathematical Geology, 20, 189-203.

[4] Chilès J.P. and Delfiner P. 1999 : Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty, Wiley, New York, USA.

[5] Coeurjolly J. F. 2000: Inférence statistique pour les mouvementsBrowniens fractionnaires et multifrac tionnaires Thèse de Doctorat de l'Université Joseph Fourier, Laboratoire de modélisation et Calcul.

[6] Cressie 1991 : Statistics for spatial data; John Wiley & sons, Inc.

[7] Diamong P. et Armstrong M. 1984 : Robustness of variogramsand conditioninig of kriging matrices, Mathematical Geology, 16, 809-822.

[8] Elkettani M.Y. 2001 : Analyse des redondances et régression PLS appliquées aux données spatiales. Comparaison avec l'estimation par krigeage et par inverse de la distance. Revue de Statistique Appliquée; 49, 2, 67-82.

[9] Jaffard S. 1990 Propriétés des matrices bien localisées près de leur diagonale et quelques applications. Ann. Inst. Henri Poincaré, vol 7, no 5, p 461 - 476.

[10] Pannatier 1996) Data Analysis in 2D, Springer-Verlag.

[11] Putter H.et Young G.A. 2001 : On the effect of covariance function estimation on the accuracy of kriging predictors Bernoulli, 7, 421-438.

[12] Rivoirard 1984 : Le comportement des poids de krigeage; thèse de Docteur-Ingénieur, Ecole des mines de Paris.

[13] Stein, M.L. 1988 Asymptotically efficient prediction of a random field with a mispecified variance function, Ann. Stat.; 16, 55-63.

[14] Tenenhaus, M.1998 : La régression PLS, théorie et pratique; éditions TECHNIP.

[15] K. Vanden Branden et M. Hubert 2003 : Robustness properties of a robust PLS regression, site internet du CEMAGREF, Publications-du projet VISHNU-CAPORAL.

[16] Warnes, J.J. 1986 : A sensitivity analysis for universal kriging, Mathematical Geology, 18, 653-676.

[17] Wold, Albano et al 1983 : Pattern recognition: Finding and using regularities in multivariate data; Proc IUFOST conf. "Food research and data analysis" , Martens J. ed, Applied sciences publications. London.2