

## Capítulo 4

# Kriging con Tendencia

Kriging con Tendencia es una extensión de Kriging Ordinario donde la media desconocida no es constante y se asume que es una combinación lineal de funciones base, fijas, definidas para todo punto del dominio.

En lo que sigue se considera que la muestra  $A = \{(z_1, x_1), \dots (z_j, x_j), \dots (z_n, x_n)\}$ ,  $C$ ,  $w$ ,  $L$  etc, tienen idéntico significado que el que tienen en Kriging Ordinario.

### 4.1. Hipótesis

Se presupone que el proceso en cada punto del dominio es la suma de un modelo determinístico de Tendencia (regresión) más un proceso estacionario de segundo orden de media 0. Más precisamente:

$$z(x_j) = \sum_{k=1}^p f_k(x_j)\beta_k + e(x_j) \quad (4.1)$$

donde  $e(x_j)$  es estacionario de segundo orden con  $E(e(x_j)) = 0$ . Luego, la aleatoriedad de  $z_j$  está dada por el último término y las  $p$  funciones,  $f$ , representan aportes a la Tendencia existente en cada punto del campo; este aporte es determinístico. Luego,

$$E(z_j) = \sum_{k=1}^p f_k(x_j)\beta_k = m(x_j)$$

donde  $m$  es la Tendencia(trend) en el punto  $x_j$ .

Como la tendencia en ecu. 4.1 es determinística la estructura de covarianza de  $z$  es la de  $e$ . Luego,  $C = Cov(Z) = Cov(E)$  con  $E = (e_1, \dots e_j, \dots e_n)^T$ . Se asume, además, que la Tendencia se capta con un número pequeño de funciones  $p \ll n$ .

### 4.2. Propósitos de Kriging con Tendencia

Dada la muestra  $A$  y un punto arbitrario  $x_0$ , donde se desconoce  $z_0$ :

### 4.3. ESTIMACIÓN DE LA MEDIA DEL PROCESO

---

1. construir un predictor **lineal insesgado**  $\hat{z}_0$  de  $z_0$  de modo de **minimizar la varianza del error (BLUP)**, donde se entiende por *error* la variable aleatoria  $Error = z_0 - \hat{z}_0$ , diferencia entre  $z_0$  y el predictor  $\hat{z}_0$ ; y **simultáneamente**:
2. estimar el vector  $\beta$  de los coeficientes de la combinación lineal que definen la Tendencia  $m$ .

Para simplificar la notación las componentes de la Tendencia se incluyen en una matriz  $F : n \times p$ :

$$F = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \dots & f_p(x_1) \\ f_1(x_2) & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_1(x_n) & \dots & \dots & f_p(x_n) \end{bmatrix}$$

donde cada fila está formada por los valores de las componentes de la Tendencia en un punto  $x_j$  de la muestra.

### 4.3. Estimación de la media del proceso

Una primera aproximación al problema de estimación de la media  $m(x_0)$  es su formulación como un problema de regresión generalizado:

$$Z = F\beta + E \quad Var(E) = C \quad E(E) = 0 \quad (4.2)$$

Sea  $F_0$  el vector de los componentes  $f_k(x_0)$  de Tendencia en  $x_0$ .

$$F_0^T = [f_1(x_0), f_2(x_0), \dots, f_p(x_0)]$$

Si la estructura de covarianza  $C$  es conocida la Ec. 4.2 expresa un modelo lineal generalizado cuya solución es:

$$\hat{\beta} = inv(F^T inv(C) F) F^T inv(C) Z \quad (4.3)$$

Luego, el valor esperado de la media del proceso en un punto  $x_0$  arbitrario es:

$$m(x_0) = F_0^T \hat{\beta} = F_0^T inv(F^T inv(C) F) F^T inv(C) Z$$

Lo que sigue es la solución del problema de regresión generalizado que puede omitirse.

#### NOTA: Solución del modelo lineal generalizado 4.2

▼Si el modelo es  $Z = F\beta + E \quad Var(E) = C \quad E(E) = 0$ , sea una matriz  $A$  raíz cuadrada de la inversa,  $A = inv(C)^{-\frac{1}{2}}$  que existe por ser  $C$  definida positiva; entonces si se premultiplica por  $A$ :  $AZ = AF\beta + AE \quad con \quad Var(AE) = I$ . Se

#### 4.4. PREDICCIÓN DE $Z_0$ Y VARIANZA DEL ERROR

---

tiene así un modelo lineal clásico  $Y = X\beta + \epsilon$  con  $AZ = Y$   $AF = X$   $AE = \epsilon$  cuya solución clásica es:

$$\hat{\beta} = \text{inv}(X^T X) X^T Y$$

o su equivalente:

$$\hat{\beta} = (F^T A^T A F)^{-1} (F^T A^T) A Z = (F^T \text{inv}(C) F)^{-1} F^T \text{inv}(C) Z$$

▲

#### 4.4. Predicción de $z_0$ y varianza del error

La proposición que sigue muestra que el predictor óptimo tiene una estructura similar al de Kriging Ordinario; en la ecu. 4.6 el primer término tiene los mismos pesos  $w^T \text{inv}(C)$  que premultiplican el desvío de los valores de la muestra,  $Z$ , respecto del modelo de Tendencia  $F\hat{\beta}$  y el segundo término es simplemente el valor de la Tendencia en  $x_0$ . En cuanto a la varianza, es la misma de Kriging Simple más un término positivo asociado a la incertidumbre en la determinación de la Tendencia.

##### 4.4.1. Proposición

Los pesos  $\hat{\alpha}$  del predictor lineal óptimo de  $z_0$ ,  $\alpha^T Z$ , están dados por:

$$\hat{\alpha} = \text{inv}(C) (I - FhF^T \text{inv}(C)) w + \text{inv}(C) FhF_0 \quad (4.4)$$

con

$$h = (F^T \text{inv}(C) F)^{-1} \quad (4.5)$$

El predictor óptimo:

$$\hat{\alpha}^T Z = w^T \text{inv}(C) (Z - F\hat{\beta}) + F_0^T \hat{\beta} \quad (4.6)$$

donde  $\hat{\beta}$  es la expresión ecu. 4.3 que representa la Tendencia en  $x_0$ .

La varianza del error asociada:

$$\text{Var}(\text{Error}) = \sigma_0^2 - w^T \text{inv}(C) w + h \|F_0 - F^T \text{inv}(C) w\|^2 \quad (4.7)$$

#### Demostración

▼

1. Que sea insesgado **para todo**  $\beta$ ,  $E(\hat{z}_0) = E(z_0) \Leftrightarrow \alpha^T E(Z) = \alpha^T F\beta = F_0^T \beta$ ; luego, para que sea válido para todo  $\beta$  se debe cumplir:

$$\alpha^T F = F_0^T$$

#### 4.4. PREDICCIÓN DE $Z_0$ Y VARIANZA DEL ERROR

---

Si  $Error = z_0 - \alpha^T Z$  se desea minimizar la varianza del Error:

$$Min Var(Error) = Min Var(z_0 - \alpha^T Z)$$

La primera condición es un sistema de  $p$  ecuaciones en  $\alpha$  que tendrá múltiples soluciones en la medida que  $n > p$ .

El proceso de minimización tendrá que satisfacer estas ecuaciones así que su formulación por Lagrange incluye un vector multiplicador  $\lambda$ , de dimensión  $p$  (un multiplicador por cada restricción) :

$$min H(\alpha, \lambda) = Var(z_0 - \alpha^T Z) + 2(\alpha^T F - F_0^T)\lambda$$

desarrollando el primer término

$$min H(\alpha, \lambda) = Var(z_0) + \alpha^T C \alpha - 2\alpha^T w + 2(\alpha^T F - F_0^T)\lambda$$

Anulando su gradiente respecto de  $\alpha$  queda:

$$C\alpha + F\lambda = w$$

y respecto de  $\lambda$  queda :

$$F^T \alpha = F_0$$

Ambas ecuaciones conforman un sistema de ecuaciones de  $n + p$  incógnitas  $\begin{pmatrix} \alpha \\ \lambda \end{pmatrix}$  que se puede expresar matricialmente:

$$\begin{bmatrix} C & F \\ F^T & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w \\ F_0 \end{pmatrix}$$

luego la solución es:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} C & F \\ F^T & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} w \\ F_0 \end{pmatrix}$$

y aplicando la fórmula de inversión de una matriz particionada de ese tipo, queda:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} inv(C) (I - FhF^T inv(C)) & inv(C) Fh \\ hF^T inv(C) & -h \end{bmatrix} \begin{pmatrix} w \\ F_0 \end{pmatrix} \quad (4.8)$$

$$\hat{\alpha} = inv(C) (I - FhF^T inv(C)) w + inv(C) FhF_0$$

$$\hat{\lambda} = h (F^T inv(C) w - F_0) \quad (4.9)$$

De donde el predictor óptimo de  $z_0$  es:

$$\hat{\alpha}^T Z = w^T inv(C) (I - FhF^T inv(C)) Z + F_0^T hF^T inv(C) Z$$

#### 4.4. PREDICCIÓN DE $Z_0$ Y VARIANZA DEL ERROR

---

y sustituyendo la estimación del parámetro Ec. 4.3  $\hat{\beta} = hF^T inv(C) Z$

$$\hat{\alpha}^T Z = w^T inv(C) (Z - F\hat{\beta}) + F_0^T \hat{\beta}$$

el resultado buscado. En cuanto a la varianza del error, sustituyendo el valor de la estimación de  $\alpha$  en

$$Var(z_0 - \alpha^T Z) = Var(z_0) + \alpha^T C \alpha - 2\alpha^T w$$

queda expresada como:

$$Var(Error) = \sigma_0^2 - w^T inv(C) w + (F_0^T - w^T inv(C) F) h (F_0 - F^T inv(C) w)$$

o su expresión equivalente dada en la ecu. 4.7.▲

#### Corolario

Si  $x_0$  está alejado de la muestra,  $w = 0$ , entonces se predice con la Tendencia  $F_0^T \hat{\beta}$  y la varianza del error es mayor o igual a la del proceso  $Var(Error) \geq \sigma_0^2$ .