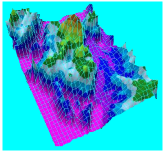
GEOESTADÍSTICA APLICADA

Tema: Estimación Espacial

Dr. Martín A. Díaz Viera,
Dr. Ricardo Casar González

UNIVERSIDAD NACIONAL
AUTÓNOMA DE MÉXICO
mdiazv@imp.mx



Contenido

1. Introducción
2. El método de estimación Kriging
   - El mejor estimador lineal insesgado
   - Supuestos del Kriging
   - Derivación de las ecuaciones del Kriging
   - Clasificación del Kriging
3. Kriging no paramétricos
   - Kriging Simple
   - Kriging Ordinario
   - Kriging Universal vs. Kriging Residual
   - Kriging Indicador
4. Aspectos prácticos del Kriging
   - Malla de estimación
   - Vecindad de búsqueda

Introducción

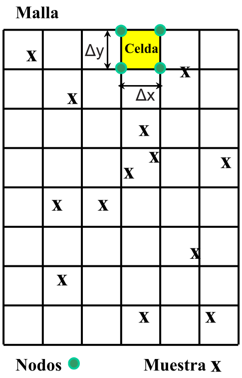


Figura 1: Malla de estimación espacial.

- **Problema:** A partir de información conocida de una propiedad, medida en ciertas ubicaciones, estimar el valor en localizaciones en donde se desconoce o se carece de muestreo, usualmente en una malla.
- En geoestadística el método de estimación espacial que se usa es el **Kriging**

Introducción

- El **Kriging** es un término que ha sido acuñado para designar al **"mejor estimador lineal insesgado"** (BLUE, en inglés).
- Esta es una técnica de estimación espacial desarrollada por G. Matheron en los sesentas a partir de los trabajos de D. G. Krige quién fue pionero en el uso de la correlación espacial para propósitos de predicción.
- Matheron le asigna el nombre de **Kriging** en honor a Krige.

Introducción

- El estimador **Kriging** se considera **óptimo** ya que:

    1. Es insesgado, es decir, el valor esperado del error es cero.
    2. Garantiza la mínima varianza de la estimación, es decir, reduce al mínimo la varianza del error de la estimación.

El mejor estimador lineal insesgado (BLUE)

- El mejor estimador lineal insesgado (BLUE = Best Linear Unbiased Estimator)
  - Estimador $\longrightarrow$ Z_k^*
  - Mejor $\longrightarrow$ $min\left\{Var\left[Z_k - Z_k^*\right]\right\}$
  - Lineal $\longrightarrow$ $Z_k^* = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i Z_i$
  - Insesgado $\longrightarrow$ $E[Z_k^*] = E[Z_k]$

Supuestos del Kriging

- Dada una función aleatoria $Z(\underline{x})$ estacionaria de segundo orden y definida en ciertos puntos muestrales $\{Z(\underline{x}_i), \quad i = 1, \ldots, n\}$ se cumple que:
  - Valor esperado

$$E[Z(\underline{x}_i)] = m; \qquad \forall \underline{x} \tag{1}$$

  - Función de covarianzas

$$C(\underline{h}) = E\left[Z(\underline{x}+\underline{h})Z(\underline{x})\right] - m^2 \tag{2}$$

  - Variograma

$$\gamma(\underline{h}) = \frac{1}{2} Var\left[Z(\underline{x}+\underline{h}) - Z(\underline{x})\right] \tag{3}$$

Derivación de las ecuaciones del Kriging

- Condición de insesgadez (valor esperado del error igual a cero)

$$E[Z^*(\underline{x}_k)] = E\left[\sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\underline{x}_i)\right] = E[Z(\underline{x}_k)] = m \tag{4}$$

  - Esto implica que

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \underbrace{E[Z(\underline{x}_i)]}_{m} = m \tag{5}$$

  - Entonces

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i m = m \Rightarrow \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1 \tag{6}$$

Derivación de las ecuaciones del Kriging

- Condición de que la varianza del error sea mínima
  - La varianza de la estimación se expresa de la siguiente manera:

$$\sigma_e^2 = Var\left[Z_k - Z_k^*\right] = E\left[\left(Z_k - Z_k^*\right)^2\right] \tag{7}$$

  - Entonces, para satisfacer la condiciones de varianza mínima y de insesgadez hay que minimizar la siguiente función objetivo:

$$F = \sigma_e^2 - 2\mu\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1\right) \tag{8}$$

donde μ es un multiplicador de Lagrange.

Derivación de las ecuaciones del Kriging

- Derivando a F respecto a λ_i y μ resulta el sistema de ecuaciones del Kriging:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial F}{\partial \lambda_i} = -2\sigma_{ki} + 2\sum_{j=1}^{n} \lambda_j \sigma_{ij} - 2\mu = 0 \quad i = 1, \ldots, n \\ \dfrac{\partial F}{\partial \mu} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i - 1 = 0 \end{cases} \tag{9}$$

donde $\sigma_{ij} = C\left(\underline{x}_i, \underline{x}_j\right)$ es la covarianza.

Ecuaciones del Kriging

- Finalmente el sistema de ecuaciones resultante $(n+1) \times (n+1)$ se escribe como:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \sigma_{ij} - \mu = \sigma_{ki} \quad i = 1, \ldots, n \\ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1 \end{cases} \tag{10}$$

- La varianza del error de la estimación se expresa como:

$$\sigma_e^2 = \sigma^2 - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \sigma_{ki} + \mu \tag{11}$$

Ecuaciones del Kriging en forma matricial

- El sistema de ecuaciones del Kriging en forma matricial es como sigue:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \dots & \sigma_{1n} & 1 \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \dots & \sigma_{2n} & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \dots & \sigma_{nn} & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_n \\ -\mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{k1} \\ \sigma_{k2} \\ \dots \\ \sigma_{kn} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

- Observación: Las covarianzas σ_{ij} en la matriz del kriging bajo la *Hipótesis Intrínseca* pueden ser reemplazadas por las semivarianzas γ_{ij} usando la siguiente relación

$$\sigma_{ij} = \sigma^2 - \gamma_{ij} \tag{13}$$

Ecuaciones del Kriging por Bloques

- En lugar de estimar el valor en un punto $\underline{x}_k$ se considera una región V_k de área A_k con centro en el punto $\underline{x}_k$. La estimación por bloques resulta más suave que la estimación puntual.
- El estimador tiene la siguiente forma:

$$Z^*_{V_k} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z\left(\underline{x}_i\right) \tag{14}$$

- Las semivarianzas γ_{ij} son reemplazadas por las semivarianzas promedios con respecto al bloque V_k como sigue:

$$\gamma_{V_k,i} = \frac{1}{A_k} \int_{V_K} \gamma(\underline{x} - \underline{x}_i) d\underline{x} \tag{15}$$

Ecuaciones del Kriging por Bloques

- Entonces las ecuaciones del Kriging por bloques serán:

$$\begin{bmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \dots & \gamma_{1n} & 1 \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \dots & \gamma_{2n} & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \dots & \gamma_{nn} & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma_{V_k,1} \\ \gamma_{V_k,2} \\ \dots \\ \gamma_{V_k,n} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{16}$$

- La varianza de la estimación se expresa como

$$\sigma^2_{V_k} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \gamma_{V_k,i} + \mu - \gamma_{V_k,V_k} \tag{17}$$

donde $\gamma_{V_K V_K} = \frac{1}{A_k^2} \int_{V_K} \int_{V_K} \gamma(\underline{x} - \underline{y}) d\underline{x} d\underline{y}$

Clasificación del Kriging

- **Según el soporte de la medición de los datos**

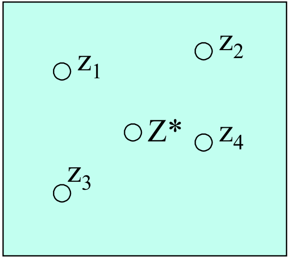


Figura 2: Kriging puntual.

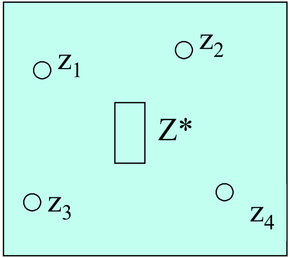


Figura 3: Kriging por bloques o celdas.

Clasificación del Kriging

- **Según la forma del estimador**
  - lineales:
    - ⇒ Simple
    - ⇒ Ordinario
    - ⇒ Universal
    - ⇒ Residual
  - no lineales:
    - ⇒ Disyuntivo
    - ⇒ Indicador
    - ⇒ Probabilístico

Clasificación del Kriging

- **Según el supuesto de la distribución de probabilidad**
  - paramétrico:
    - ⇒ Multigaussiano
    - ⇒ Disyuntivo
    - ⇒ Lognormal
  - no paramétrico:
    - ⇒ Simple
    - ⇒ Ordinario
    - ⇒ Universal
    - ⇒ Residual
    - ⇒ Indicador

Tipos de Kriging lineales

- Kriging Simple
- Kriging Ordinario
- Kriging Universal
- Kriging Residual

Kriging Simple

- Kriging lineal con valores esperados conocidos
  - Requisitos:

⇒ Conocer valores esperados de la función aleatoria.

$$m(\underline{x}_i) = E[Z(\underline{x}_i)], \qquad \forall \quad i = 0, \ldots, n \tag{18}$$

⇒ Conocer la función de covarianzas de la función aleatoria.

$$\sigma_{ij} \tag{19}$$

Kriging Simple

- Sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \sigma_{ij} = \sigma_{i0} & i = 1, \ldots, n \\ \lambda_0 = m(\underline{x}_0) - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i m(\underline{x}_i) \end{cases} \tag{20}$$

- Estimador y varianza de la estimación

$$Z_0^* = \lambda_0 + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\underline{x}_i) \quad y \quad \sigma_{K_s}^2 = \sigma_{00}^{'} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \sigma_{i0}^{'} \tag{21}$$

Kriging Ordinario

- Kriging lineal con valor esperado estacionario pero desconocido
  - Requisitos:

⇒ El valor esperado de la función aleatoria sea constante

$$m(\underline{x}_i) = E[Z(\underline{x}_i)] = m, \qquad \forall \quad i = 0, \ldots, n \tag{22}$$

⇒ Conocer la función de covarianzas o el semivariograma de la función aleatoria

$$\sigma_{ij} \quad ó \quad \gamma_{ij} \tag{23}$$

Kriging Ordinario

- Sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \sigma_{ij} - \mu = \sigma_{0i} \quad i = 1, \ldots, n \\ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = 1 \end{cases} \tag{24}$$

- Estimador y varianza de la estimación

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\underline{x}_i) \quad y \quad \sigma_{K_0}^2 = \sigma_{00} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \sigma_{i0} + \mu \tag{25}$$

Kriging Universal

- Kriging lineal en presencia de tendencia
  - Requisitos:

⇒ Conocer la forma de la tendencia expresada usualmente mediante polinomios.

$$m(\underline{x}) = E[Z(\underline{x}_i)] = \sum_{l} a_l \phi_l(\underline{x}) \tag{26}$$

⇒ Conocer la función de covarianzas o el semivariograma de la función aleatoria sin tendencia, es decir

$$\sigma_{ij} \quad ó \quad \gamma_{ij} \quad para \quad \{Z(\underline{x}) - m(\underline{x})\} \tag{27}$$

Kriging Universal

- Sistema de ecuaciones:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \sigma_{ij} - \sum_{l=1}^{L} \mu_l \phi_l(\underline{x}_i) = \sigma_{0i} & i = 1, \ldots, n \\ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \phi_l(\underline{x}_i) = \phi_l(\underline{x}_0) & l = 1, \ldots, L \end{cases} \tag{28}$$

- Estimador y varianza de la estimación

$$Z_0^* = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i Z(\underline{x}_i) \quad y \quad \sigma_{K_U}^2 = \sigma_{00} - \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \sigma_{i0} + \sum_{l=1}^{L} \mu_l \phi_l(\underline{x}_0) \tag{29}$$

Kriging Universal

- Dificultades prácticas

  $\Rightarrow$ El orden del polinomio que mejor describe o explica la tendencia $m(\underline{x})$ nunca es conocido, hay que adivinarlo.

  $\Rightarrow$ El variograma tampoco es conocido y hay que estimarlo a partir de los residuales $R(\underline{x})$ (datos-deriva)

Kriging Residual

- El **Kriging Residual** fue propuesto por [Volpi and Gambolati, 1978] y [Volpi et al., 1979].
- Es una alternativa para manejar la no estacionaridad.
- El modelo consiste en considerar la descomposición

$$Z(\underline{x}) = m(\underline{x}) + R(\underline{x}) \tag{30}$$

  donde $m(\underline{x})$ es la tendencia y $R(\underline{x})$ son los residuos
- La tendencia $m(\underline{x})$ se estima usando mínimos cuadrados ordinarios
- A los residuos $R(\underline{x})$ sin tendencia se les aplica el *Kriging Ordinario*.

Kriging Residual

- El algoritmo se puede resumir en los siguientes pasos:
  1. Obtener el orden k del polinomio que mejor representa a la deriva o tendencia.
  2. Ajustar la deriva mediante MCO $m_k^*(\underline{x})$
  3. Calcular los residuos $R(\underline{x}_i) = Z(\underline{x}_i) - m_k^*(\underline{x}_i), i = 1, ..., n$
  4. Estimar y modelar el semivariograma de los residuos $R(\underline{x}_i), i = 1, ..., n$.
  5. Aplicar Kriging Ordinario a los residuos $R(\underline{x}_i)$ usando el semivariograma obtenido.
  6. Se obtiene la estimación en un punto no observado como

$$Z^*(\underline{x}_j) = m_k^*(\underline{x}_j) + R^*(\underline{x}_j) \tag{31}$$

Kriging Indicador

- Función Indicador de una FA

$$I(\underline{x}, z_c) = \begin{cases} 1 & si \quad Z(\underline{x}) \leq z_c \\ 0 & si \quad Z(\underline{x}) > z_c \end{cases} \tag{32}$$

donde z_c es el valor de corte.

- La distribución espacial

$$\Phi(A, z_c) = \frac{1}{A} \int\limits_{\underline{x} \in A} I(\underline{x}, z_c) dx \tag{33}$$

Kriging Indicador

- La distribución espacial (continuación ...)

$$E[\Phi(A,z_c)] = \frac{1}{A}E\left[\int\limits_{\underline{x}\in A} I(\underline{x},z_c)dx\right] = \frac{1}{A}\int_{\underline{x}\in A} E[I(\underline{x},z_c)]d\underline{x} \tag{34}$$

$$E[\Phi(A,z_c)] = \frac{1}{A}\int\limits_{\underline{x}\in A} \{(1)Pr[Z(\underline{x}) \le z_c] + (0)Pr[Z(\underline{x}) > z_c]\}\, d\underline{x} \tag{35}$$

- Función de distribución de $Z(\underline{x})$

$$E[\Phi(A,z_c)] = Pr[Z(\underline{x}) \le z_c] = F_Z(z_c) \tag{36}$$

Kriging Indicador

- La distribución de probabilidad de variables indicador es una distribución de Bernoulli y sus momentos están dados por:
  - Valor esperado

$$E[I(\underline{x}, z_c)] = F_Z(z_c) \tag{37}$$

  - Varianza

$$Var[I(\underline{x}, z_c)] = F_Z(z_c)[1 - F_Z(z_c)] \tag{38}$$

Kriging Indicador

- Momentos de variables indicador (continuación ...):
  - Función de covarianzas

$$C_i(\underline{h}, z_c) = F_{\underline{x},\underline{x}+\underline{h}}(z_c, z_c) - \{F_Z(z_c)\}^2 \tag{39}$$

  - Función de semivarianzas

$$\gamma(\underline{x}, z_c) = F_Z(z_c) - F_{\underline{x},\underline{x}+\underline{h}}(z_c, z_c) \tag{40}$$

Kriging Indicador

- **Variograma Indicador**
  - Se estiman para cada valor de corte y son menos sensibles a la presencia de valores extremos (outliers)
  - El variograma indicador siempre alcanza una meseta

$$S(z_c) = C_I(\underline{0}, z_c) \tag{41}$$

  - $S(z_c)$ es una función creciente en $(-\infty, z_M)$ y decreciente en (z_M, ∞), donde z_M es la mediana.
  - Una vez conocida la meseta $S(z_c)$ del variograma se puede calcular la función de probabilidad acumulativa:

$$F_Z(z_c) = 0.5 + signo(z_c - z_M)\sqrt{0.25 - S(z_c)} \tag{42}$$

Kriging Indicador

- Uno de los propósitos de usar la variable indicador es para estimar la función de probabilidad acumulativa.
- Las funciones de probabilidad estimadas se obtienen mediante combinaciones lineales de la función indicador.
- Esta función es la proporción exacta de valores menores que el valor de corte de una variable, dentro de un área A.
- El valor estimado mediante kriging indicador representa la probabilidad de que el valor estimado de la función aleatoria sea menor que el valor de corte $(Z(\underline{x}) \leq z_c)$.
- El Kriging indicador genera un mapa por cada valor de corte (categoría indicador), en donde se muestran regiones con diferente probabilidad de ocurrencia para dicho valor de corte (categoría indicador).

Kriging Indicador

- La forma del estimador

$$\phi^*(A, z_c) = \sum_{\alpha=1}^{n} \lambda_\alpha(z_c) i(x_\alpha, z_c) \tag{43}$$

con la condición para el no sesgo

$$\sum_{\alpha=1}^{n} \lambda_\alpha(z_c) = 1 \tag{44}$$

Kriging Indicador

- El Kriging Simple puede ser aplicado para hallar los pesos usando las variables indicador y el variograma indicador.
- Las ecuaciones del Kriging Indicador se resuelven en la práctica para un número finito, usualmente menor que 10, de valores de corte.
- Si la estimación de cada valor de se realiza por separado no se puede garantizar que se cumplan las relaciones de orden de una función de distribución válida.

Aspectos prácticos del Kriging

- Definición de la **malla de estimación**:
  - Si bien no hay restricciones para la malla de estimación usualmente se eligen mallas regulares debido a que su geometría facilita la representación gráfica de los resultados en forma de mapas de contornos, relieves, etc.
  - Una recomendación práctica respecto al tamaño de la celda de la malla es que debe ser de un orden aproximadamente igual a la distancia mínima de separación de los datos, puesto que ésta es la resolución de la información que se dispone.

Aspectos prácticos del Kriging

- Ejemplo de malla de estimación rectangular:

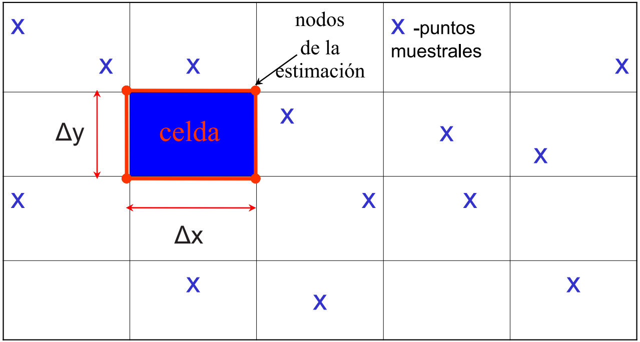


Figura 4: Malla de estimación rectangular.

Aspectos prácticos del Kriging

- Definición de la **vecindad de búsqueda**:
  - La vecindad de búsqueda se define con respecto al punto a estimar y determina cuales puntos vecinos potencialmente serán incluidos en la estimación.
  - Caso isotrópico: tomar una circunferencia con centro en el punto a estimar y radio igual o menor al alcance del variograma.
  - Caso anisotrópico: tomar una elipse con centro en el punto a estimar y semiejes iguales o menores a los alcances del variograma anisotrópico.

Aspectos prácticos del Kriging

- **Vecindad de búsqueda:**
  - El radio de búsqueda igual al rango
  - Mayor que el rango no tiene sentido, ya no existe correlación

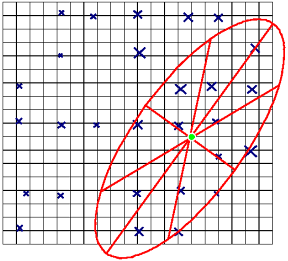


Figura 5: Ejemplo de vecindad de búsqueda para el caso anisotrópico

Aspectos prácticos del Kriging

- Definición de la **cantidad de puntos** de la estimación:
  - Una vez definida la vecindad de búsqueda hay que especificar cuantos puntos intervendrán en la estimación. Esto determina el tamaño de la matriz del Kriging.
  - En general, se pueden tomar como valores prácticos:

    ⇒ Mínimo de puntos: entre 4 y 6 puntos.

    ⇒ Máximo de puntos: entre 10 y 25 puntos.

    ⇒ También se pueden establecer cantidades mínimas y máximas por cuadrante, octante, etc.

Aspectos prácticos del Kriging

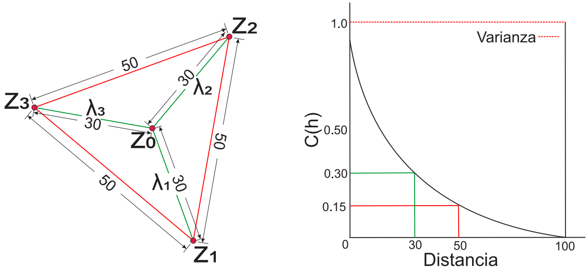


Figura 6: Ejemplo de estimación con Kriging en el centro de un triángulo equilátero

Aspectos prácticos del Kriging

Ecuaciones del Kriging en el centro de un triángulo equilátero

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} & 1 \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} & 1 \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \\ -\mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{01} \\ \sigma_{02} \\ \sigma_{03} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{45}$$

donde

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= \sigma_{22} = \sigma_{33} = 1.00 \\ \sigma_{12} &= \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0.15 \\ \sigma_{21} &= \sigma_{31} = \sigma_{32} = 0.15 \\ \sigma_{01} &= \sigma_{02} = \sigma_{03} = 0.30 \end{aligned} \tag{46}$$

Aspectos prácticos del Kriging

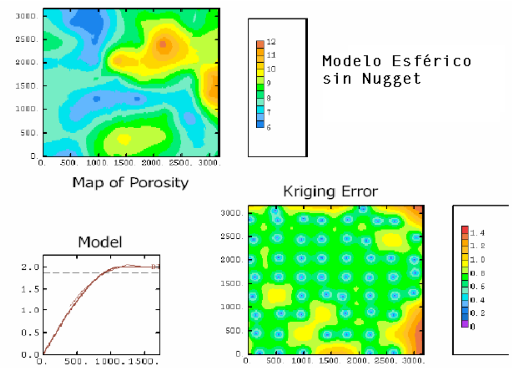


Figura 7: Kriging con variograma esférico sin efecto nugget

Aspectos prácticos del Kriging

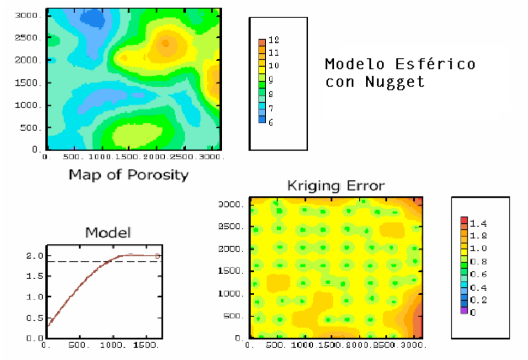


Figura 8: Kriging con variograma esférico con efecto nugget

Aspectos prácticos del Kriging

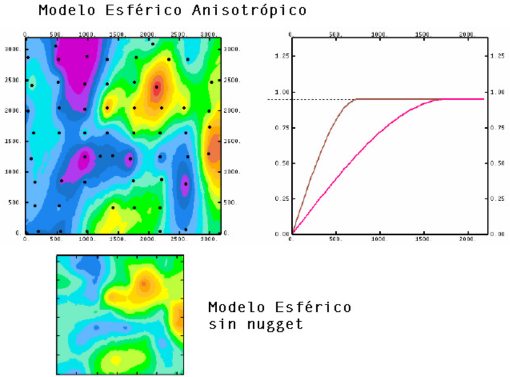


Figura 9: Kriging con variograma esférico con anisotropía geométrica

Aspectos prácticos del Kriging

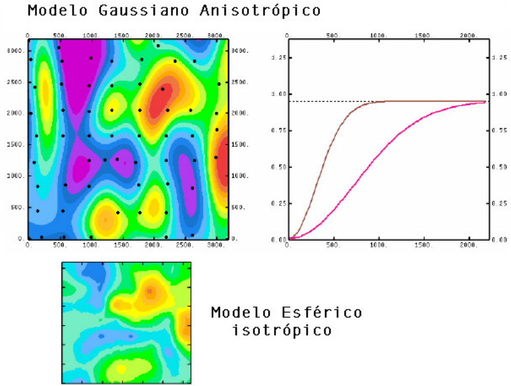


Figura 10: Kriging con variograma Gaussiano con anisotropía geométrica

Aspectos prácticos del Kriging

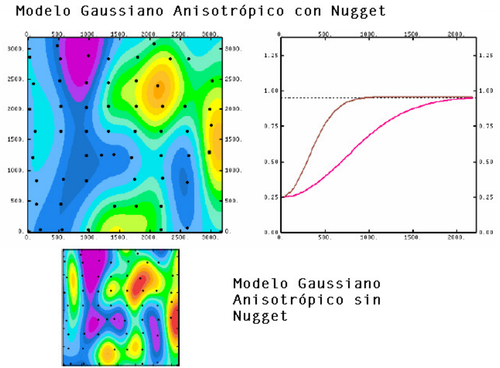


Figura 11: Kriging con variograma Gaussiano con anisotropía geométrica y efecto nugget

Características del estimador Kriging

- Es un interpolador "exacto"
- Incorpora el modelo de variabilidad espacial (obtenido mediante el análisis estructural o variográfico).
- Proporciona una medida de la precisión de la estimación mediante la varianza de estimación.
- La varianza de estimación tiene aplicaciones: diseño de muestreo.
- La precisión depende de varios factores: del número de muestras, su localización, la distancia entre las muestras y el punto o bloque a estimar, de la calidad del modelo de variación espacial (variograma).

Referencias

[Myers, 1984] Myers, D. E. (1984).
Co-Kriging — New Developments, pages 295–305.
Springer Netherlands, Dordrecht.

[Volpi and Gambolati, 1978] Volpi, G. and Gambolati, G. (1978).
On the use of a main trend for the kriging technique in hydrology.
Advances in Water Resources, 1(6):345–349.

[Volpi et al., 1979] Volpi, G., Gambolati, G., Carbognin, L., Gatto, P., and Mozzi, G. (1979).
Groundwater contour mapping in venice by stochastic interpolators. 2. results.
Water Resources Research, 15:291–297.

Agradecimiento especial

Al estudiante de doctorado M. en C. Daniel Vázquez Ramírez, por su desinteresado apoyo en la conversión de esta presentación del curso de Powerpoint a Latex con Beamer.

Siguiente tema: Geoestadística Multivariada