



Evaluation des incertitudes associées aux méthodes géostatistiques

Rapport final

***Laboratoire Central de Surveillance
de la Qualité de l'Air***

Convention n°115/03

*Giovanni CARDENAS
Unité Informatique et instrumentation pour l'environnement (2IEN)*

*Laure MALHERBE
Unité Modélisation et analyse économique pour la gestion des
risques (MECO)*

Direction des Risques Chroniques (DRC)

Décembre 2003

Evaluation des incertitudes associées aux méthodes géostatistiques

Rapport final

**Laboratoire Central de Surveillance
de la Qualité de l'Air**

Convention n°115/03

**financée par la Direction des Préventions et des Risques
(DPPR)**

Décembre 2003

GIOVANNI CARDENAS

LAURE MALHERBE

Ce document comporte 54 pages (hors couverture et annexes).

	Rédaction	Vérification	Approbation
NOM	Giovanni CARDENAS Laure MALHERBE	Claude MEUNIER Laurence ROUÏL	Martine RAMEL
Qualité	Ingénieurs Etudes et Recherches Direction des Risques Chroniques	Responsable d'unité Ingénieur Etudes et Recherches Direction des Risques Chroniques	Coordination LCSQA Direction des Risques Chroniques
Visa			

TABLE DES MATIÈRES

1. RÉSUMÉ.....	3
2. INTRODUCTION - CONTEXTE.....	4
3. CONTRÔLE DE LA QUALITÉ D’UNE ESTIMATION EN GÉOSTATISTIQUE LINÉAIRE ...	7
3.1 CONTRÔLE DU MODÈLE : LA VALIDATION CROISÉE	15
3.1.1 <i>Principe et résultats</i>	15
3.1.2 <i>Limites de la validation croisée</i>	18
3.1.3 <i>Autre procédure</i>	19
3.2 VARIANCE DE L’ERREUR DE KRIGEAGE	7
3.2.1 <i>Définition</i>	7
3.2.2 <i>Interprétation</i>	8
4. ANALYSE DE SENSIBILITÉ AUX PARAMÈTRES DU MODÈLE ET DE L’ESTIMATION .	21
4.1 SENSIBILITÉ AU NOMBRE DE POINTS	21
4.2 SENSIBILITÉ À LA TAILLE DE LA MAILLE D’ESTIMATION	28
4.3 SENSIBILITÉ À LA PORTÉE	30
4.4 SENSIBILITÉ À L’EFFET DE PÉPITE.....	33
5. ESTIMATION D’UN INTERVALLE DE CONFIANCE EN GÉOSTATISTIQUE LINÉAIRE ET NON LINÉAIRE.....	36
5.1 GÉOSTATISTIQUE LINÉAIRE.....	37
5.2 GÉOSTATISTIQUE NON LINÉAIRE.....	40
5.2.1 <i>Introduction aux méthodes de la géostatistique non linéaire</i>	40
5.2.2 <i>L’espérance conditionnelle</i>	41
5.2.3 <i>Les simulations conditionnelles</i>	43
5.3 COMPARAISON ENTRE LES MÉTHODES – BILAN	44
6. SYNTHÈSE - RECOMMANDATIONS	48
7. RÉFÉRENCES.....	52
8. LISTE DES ANNEXES.....	54

1. RESUME

Conformément aux exigences de l'arrêté du 17 mars 2003, les données de qualité de l'air, qu'elles soient issues de mesures, d'estimations objectives ou de modèles doivent satisfaire aux objectifs de qualité fixés par les directives européennes

Cette contrainte s'applique en particulier aux résultats des méthodes d'estimation géostatistiques : étant donné une carte de concentration établie par krigeage, comment peut-on s'assurer que l'incertitude des estimations (définie comme l'écart relatif entre valeurs observées et modélisées) est inférieure à la limite fixée (celle-ci varie entre 30% et 50% selon le polluant considéré et la durée sur laquelle les moyennes sont calculées) ?

Cette étude constitue une première approche de la question. Elle aborde le problème de l'incertitude liée à l'interpolation spatiale.

Différents types d'incertitude entachent en réalité la carte finale. Pour évaluer leur impact sur les résultats, une analyse de sensibilité aux paramètres d'échantillonnage, de modélisation et de calcul est réalisée.

Les outils proposés par la géostatistique linéaire pour apprécier la qualité du modèle et la précision de la carte finale sont également passés en revue (validation croisée, carte de variance de krigeage). Ces différents moyens de contrôle fournissent des indications intéressantes sur la fiabilité des résultats, mais ils se révèlent insuffisants pour quantifier rigoureusement l'incertitude dans le domaine d'étude. Ces limites nous ont donc conduit à faire appel aux techniques de la géostatistique non linéaire (espérance conditionnelle, simulations conditionnelles). Ces deux méthodes permettent d'estimer point par point, ou bloc par bloc, un intervalle de confiance autour de la concentration vraie mais inconnue.

Toutes les méthodes étudiées ont été appliquées sur un jeu de données d'ozone fourni par AIR NORMAND. Particulièrement riche en données, ce jeu a favorisé la réalisation d'une analyse approfondie et la mise en œuvre des différents calculs présentés dans ce rapport.

L'évaluation des incertitudes, pour être rigoureuse, nécessite un travail minutieux et la réalisation de calculs supplémentaires à l'aide des méthodes non linéaires. Elle n'a été ici considérée que d'un point de vue spatial. L'incertitude liée à l'éventuelle extrapolation dans le temps des données de concentration n'a pas été abordée : soit elle vient s'ajouter aux incertitudes sur les données de concentration et se situe donc en amont du problème spatial, soit elle doit être traitée conjointement à ce dernier par une approche spatio-temporelle, ce qui nécessite des développements hors du cadre de la présente étude.

Un principe général demeure : avant même de produire une carte et d'en évaluer l'incertitude, il est impératif de chercher à réduire les causes de cette incertitude par une analyse détaillée des données.

2. INTRODUCTION - CONTEXTE

Les directives filles européennes (1999/30/CE, 2000/69/CE, 2002/3/CE) fixent des objectifs de qualité des données, qui concernent non seulement les données de mesure mais aussi les données de modélisation. **Dans tout le domaine d'étude, l'incertitude de ces dernières, exprimée comme la différence relative entre valeurs estimées et valeurs observées, ne doit pas excéder une valeur d_{max} qui varie de 30% à 60%** selon le polluant et l'échelle temporelle considérés (Tableau 1).

Tableau 1 – Objectifs de qualité pour les données issues de la modélisation

Polluant	Objectif de qualité pour la modélisation	Support temporel
SO ₂ , NO ₂ , NO _x	50%-60%	Moyennes horaires
	50%	Moyennes journalières
	30%	Moyennes annuelles
Particules et plomb	50%	Moyennes journalières
Benzène	50%	Moyennes annuelles
CO	50%	Moyennes sur huit heures
O ₃	50%	Moyennes sur une heure (la journée)
	50%	Maximum quotidien sur huit heures

Soit donc x un point du domaine considéré. Mathématiquement, cette contrainte se traduit par la relation suivante :

$$\frac{|Z^*(x) - Z(x)|}{Z(x)} \leq d_{max} (\%/100), \text{ où } Z(x) \text{ est la concentration observée au point } x \text{ et } Z^*(x) \text{ la concentration estimée en ce même point.}$$

Notons que **les directives ne font pas mention du support spatial**. Aussi pourrait-on écrire plus généralement :

$$\frac{|Z^*(v) - Z(v)|}{Z(v)} \leq d_{max} (\%/100), \text{ où } Z(v) \text{ est la concentration moyenne observée sur une surface donnée } v \text{ et } Z^*(v) \text{ la concentration estimée dans ce même bloc.}$$

Mais à la différence la précédente, cette inégalité n'est vérifiable que par la théorie, puisque la mesure délivre uniquement des observations ponctuelles.

Les exigences des Directives s'appliquent en particulier aux résultats des méthodes d'estimation géostatistiques dont l'analyse fait l'objet du présent rapport. Dans ce contexte, il est proposé de développer et de mettre en œuvre une démarche qui permette d'appréhender l'incertitude liée à ces méthodes au moment de leur utilisation.

L'incertitude sur la cartographie finale découle de plusieurs types d'incertitudes.

D'un point de vue spatial, on distingue

- *l'incertitude sur les données d'entrée :*

L'incertitude sur les données de concentration comprend l'incertitude liée à l'échantillonnage spatial, qui n'offre qu'une connaissance imparfaite du phénomène, et l'incertitude de mesure (elle-même bornée par les Directives Européennes).

Dans l'approche géostatistique cette erreur se traduit par deux aspects :

- La perte de précision loin des données d'observation est représentée par une augmentation de **l'écart-type de l'erreur de krigeage** qui accompagne l'estimation (celui-ci est encore appelé *écart-type de krigeage*).
- L'incertitude de mesure peut être prise en compte par l'intermédiaire de la variance de l'erreur de mesure ou d'un effet de pépite, se répercutant elle aussi sur l'écart-type de krigeage.

A notre connaissance, l'incertitude sur les données des variables auxiliaires (émissions, population...) est toujours ignorée.

- *l'incertitude sur l'ajustement du modèle de variogramme :*

Elle englobe l'incertitude sur le choix des sites à prendre en compte dans le calcul du variogramme (suppression ou non de certains sites, sélection de certains types de sites ou mélange de tous les types...) et sur les paramètres du modèle (choix des structures de base, effet de pépite, portée, palier, isotropie).

Cette incertitude n'est pas considérée dans le krigeage ordinaire. Néanmoins, l'adéquation du modèle avec les données expérimentales peut être contrôlée grâce à une **validation croisée**. D'autre part, une **analyse de sensibilité** peut se révéler utile pour apprécier quantitativement les conséquences d'un mauvais ajustement des paramètres.

- *l'incertitude sur le choix des paramètres de l'estimation :*

Il s'agit en particulier de la définition du voisinage de krigeage. De la même manière, la pertinence du voisinage choisi et l'influence de ce choix peuvent être appréciées par une validation croisée et une analyse de sensibilité.

- *l'incertitude liée au processus d'interpolation spatiale :*

Elle est due au caractère aléatoire de la variable régionalisée. Elle transparaît notamment dans **l'écart-type de l'erreur de krigeage**.

D'un point de vue temporel, s'ajoute parfois une *incertitude associée à l'extrapolation dans le temps* (sur la saison ou sur l'année) des informations issues de campagnes de mesure. Le plus souvent en effet, les cartes sont établies à partir de données d'échantillonnage, recueillies pendant quelques semaines en hiver et/ou en été. Ces données n'offrent qu'une connaissance partielle des situations saisonnières ou annuelles.

Cette incertitude n'est actuellement pas quantifiée. Toutefois, les stations fixes situées dans le domaine d'étude peuvent fournir une indication de son importance (on calcule à cette fin l'écart relatif entre la moyenne des mesures en continu sur la période d'échantillonnage et la moyenne des mesures sur la saison ou l'année).

Le présent travail traite de l'évaluation des incertitudes qui relèvent du problème spatial. Il se décompose en trois parties.

1. La première partie s'appuie sur une synthèse bibliographique et sur des résultats d'étude. Elle fait le point sur les outils de la géostatistique linéaire qui permettent d'apprécier la qualité du modèle géostatistique et des estimations qui en découlent : il s'agit de la **validation croisée** et de la **carte d'écart-type de krigeage** qui ont été évoquées précédemment. Elle met en exergue l'intérêt et les limites de ces outils.
2. La deuxième partie s'attache à évaluer l'impact des principales sources d'incertitude sur les résultats de l'estimation (sur les valeurs de concentration et d'écart-type de krigeage). Elle présente les résultats d'une **analyse de sensibilité** à l'échantillonnage, aux paramètres du modèle variographique et à la maille de calcul.
3. La troisième partie a pour but d'offrir une réponse plus complète à la question de l'évaluation de l'incertitude et traite du calcul d'intervalles de confiance. Divers modes de calcul sont présentés, dont ceux qui procèdent de la géostatistique non linéaire.

Ces diverses notions théoriques sont mises en pratique à l'aide du logiciel Isatis (Géovariances) dans un cas d'étude joint en annexe (données fournies par AIRNORMAND). L'objet de cette application est de montrer comment l'évaluation des incertitudes peut s'insérer dans une étude géostatistique.

Quant au problème temporel, il sera développé dans une étude prévue pour l'année 2004.

Dans tout ce qui suit, les principales notions de la géostatistique sont supposées acquises (cf. Malherbe et Rouil, 2003. Représentation de la qualité de l'air - Guide d'utilisation des méthodes de la géostatistique linéaire, rapport LCSQA).

3. CONTROLE DE LA QUALITE D'UNE ESTIMATION EN GEOSTATISTIQUE LINEAIRE

Les outils de la géostatistique linéaire permettent-ils, une fois que la carte d'estimation a été obtenue par krigeage (krigeage ordinaire ou intrinsèque, krigeage avec dérive externe, cokrigeage), de quantifier l'incertitude associée aux concentrations estimées, et qui résulte de l'ensemble des sources citées en introduction ?

Au préalable, il est important de faire remarquer que s'il est demandé d'évaluer a posteriori les incertitudes sur les cartes, il est tout aussi indispensable de chercher à réduire ces incertitudes durant l'analyse et la modélisation. Un examen détaillé des données disponibles, tel qu'il est décrit en annexe, en est une condition nécessaire.

Dans ce chapitre, nous présentons deux moyens proposés par la géostatistique linéaire pour contrôler la qualité d'une estimation :

- la carte de la variance de l'erreur d'estimation, qui, après que le krigeage a été effectué, renseigne sur la précision de l'estimation.
- la validation croisée, qui, avant même qu'on mette en œuvre le krigeage, permet d'apprécier les erreurs auxquelles le modèle ajusté et le krigeage peuvent conduire ;

Pour chacun d'eux, les informations recueillies sont comparées aux informations attendues par les directives.

3.1 VARIANCE DE L'ERREUR DE KRIGEAGE

3.1.1 Définition

L'avantage des méthodes géostatistiques est d'associer aux cartes de krigeage une indication sur la précision de cette estimation grâce aux cartes de variance de l'erreur de krigeage (plus simplement appelée variance de krigeage). **La précision de l'estimation est entendue au sens de l'écart quadratique entre valeur estimée et valeur vraie.**

La *variance de krigeage* mesure ainsi la variance de la différence entre Z , variable à estimer, inconnue en dehors des points expérimentaux, et Z^* son estimateur par krigeage :

$$\sigma_K^2 = \text{Var}(Z^* - Z)$$

Le krigeage, par définition, rend minimale cette quantité qui dans le cas d'une fonction aléatoire stationnaire d'ordre 2 ou strictement intrinsèque s'écrit :

Avec la covariance :

$$\text{- Krigeage ponctuel : } \sigma_K^2 = C_{00} - 2 \sum_i \lambda_i C_{0i} + \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j C_{ij} = C_{00} - \sum_i \lambda_i C_{0i} - \mu$$

avec λ_i, μ , solutions du système de krigeage.

C_{0i} : covariance entre s_0 (point cible) et s_i (point de mesure)

C_{ij} : covariance entre s_i et s_j

$$\text{- Krigeage par blocs : } \sigma_K^2 = \text{Var}(Zv) - \sum_i \lambda_i C(s_i, v) - \mu$$

$C(s_i, v)$: covariance entre le bloc cible v et s_i

$\text{Var}(Z_v)=C(v,v)$: variance du bloc v

Avec le variogramme :

- Krigeage ponctuel : $\sigma_K^2 = 2 \sum_i \lambda_i \gamma_{oi} - \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j \gamma_{ij} = \sum_i \lambda_i \gamma_{oi} - \mu$
- Krigeage par blocs : $\sigma_K^2 = \sum_i \lambda_i \bar{\gamma}(s_i, v) - \bar{\gamma}(v, v) - \mu$

$\bar{\gamma}(s_i, v)$ est la moyenne du variogramme entre s_i et le volume v .

Le paramètre μ est un multiplicateur de Lagrange qui intervient dans la résolution du système de krigeage.

La variance de krigeage ne dépend que du modèle de variogramme (ou de covariance) et de la configuration relative du point ou du bloc à estimer et des données expérimentales à l'intérieur du voisinage d'estimation. Son calcul ne fait pas intervenir les valeurs numériques de ces données.

3.1.2 Interprétation

Si la carte de variance de krigeage (ou de sa racine carrée, l'écart-type de krigeage) nous renseigne sur la précision de l'estimation, elle ne peut être assimilée à une carte d'incertitude. Aussi faut-il veiller à ne pas en faire une interprétation trop hâtive.

Dans un premier point, nous examinerons en détail les informations apportées par la variance de krigeage. Dans un second point, nous passerons en revue les sources de variabilité et d'incertitude que la variance de krigeage ne permet pas ou pas totalement d'appréhender. Celles-ci feront l'objet d'études plus approfondies dans les chapitres qui suivent.

3.1.2.1 Informations apportées par la variance de krigeage

La variance de krigeage, par définition, quantifie la dispersion possible de la valeur vraie autour de la valeur estimée.

Comme on l'a fait remarquer et ainsi qu'en témoignent les formules qui précèdent, elle est fonction du modèle de variogramme d'une part, de la configuration relative des points expérimentaux et du point –ou bloc- cible d'autre part. Par suite, elle contient deux types d'information :

- Le premier relève **de la structure et de la variabilité spatiales du phénomène étudié** :

Moins ce phénomène est structuré et plus sa variabilité est grande, plus la variance de krigeage augmente.

Prenons l'exemple de deux situations de pollution qui présentent une même configuration spatiale d'échantillonnage et des niveaux de concentration similaires. Chacune d'elle est décrite par son variogramme.

- A paliers identiques, la variance de krigeage associée au variogramme de plus courte portée (peu de structure) est en général supérieure à la variance de krigeage associée au variogramme de plus grande portée (Emery et Arnaud, 1999).
- A portées identiques, la variance de krigeage associée au variogramme de palier total le plus élevé est supérieure à la variance de krigeage associée au variogramme de palier total le plus faible (celui-ci est la somme de l'effet de pépite et des paliers de chacune des structures qui composent le modèle variographique).

☞ *Rapportée ainsi à la carte d'estimation, la carte d'écart-type de krigeage indique la plus ou moins grande facilité avec laquelle le krigeage peut fournir des estimations précises, compte tenu du caractère plus ou moins structuré et plus ou moins variable du phénomène en jeu. Il s'agit d'une **information moyenne sur la zone considérée**. On rappelle en effet que le modèle de variogramme représente une variabilité moyenne dans l'espace (ajustée sur la variabilité calculée à partir d'un ensemble de couples de points).*

- Le second relève de l'**implantation des données expérimentales** :

La variance de krigeage augmente dans les endroits plus pauvres en données de mesure. Elle traduit ainsi la perte de précision lorsqu'on s'éloigne des points expérimentaux.

☞ *La carte d'écart-type de krigeage fait donc ressortir les zones où la grande densité de points de mesure rend l'estimation fiable et les zones où le manque de données détériore la précision de l'estimation. Il s'agit d'une **information locale, fonction du point ou du bloc où l'on se trouve**.*

Remarque sur le krigeage ponctuel et le krigeage de bloc

Dans un krigeage ponctuel, les concentrations sont estimées aux points de la grille de calcul. Les variances de krigeage associées mesurent la précision avec laquelle ces concentrations ponctuelles sont estimées.

Dans un krigeage de blocs, les concentrations sont estimées en moyenne à l'intérieur de chaque maille. Les variances de krigeage associées mesurent la précision avec laquelle ces concentrations moyennes par maille sont estimées. Plus la maille est grande, meilleure est la précision; **dans ce cas, il est indispensable d'adjoindre à la carte de variance une information sur les dimensions de la maille d'estimation**. En revanche, si on estime la concentration en un point par la concentration moyenne du bloc qui le contient, on n'obtient pas d'information sur la précision de cette estimation.

Notons que **si les objectifs de qualité imposés par les directives dépendent du support temporel des données, aucune instruction sur le support spatial n'est fournie**.

La variance de krigeage demeure néanmoins insuffisante pour quantifier rigoureusement l'incertitude associée à la concentration estimée et de ce fait, elle doit être interprétée avec prudence.

3.1.2.2 Les limites de la variance de krigeage

a) La variance d'estimation prend-elle en compte l'incertitude sur les données de concentration ?

Les données expérimentales sont généralement entachées d'une erreur de mesure. Celle-ci peut être considérée comme une variable régionalisée de moyenne nulle, dotée d'une structure de corrélation spatiale, et dont le champ se superpose à celui de la variable de concentration :

$$Z_e(s_\alpha) = Z(s_\alpha) + \varepsilon(s_\alpha)$$

Z_e : variable régionalisée dont la réalisation aux points de mesure est l'ensemble des données expérimentales

Z : variable régionalisée sous-jacente, non entachée d'erreur

ε : erreur de mesure inconnue, telle que $E(\varepsilon_\alpha) = 0$

La variable quantitative qui nous renseigne sur cette incertitude est la variance de l'erreur de mesure, désormais désignée par le sigle VEM dans le reste du document. Pour l'inclure dans le modèle géostatistique, deux méthodes sont possibles :

1^{ère} méthode :

Comme c'est le cas lorsqu'on ne dispose pas d'information précise sur l'erreur de mesure, aucune distinction n'est faite entre Z et Z_e . La VEM, supposée constante dans le champ, est représentée dans le modèle variographique par un effet de pépité σ_ε^2 . Le krigeage revient alors à estimer la variable Z_e à partir des données de mesure $Z_e(s_i)$.

- Dans un krigeage ponctuel, la variance de krigeage inclut intégralement le terme σ_ε^2 dans sa composante C_{00} . **Plus la VEM contribue à augmenter la variabilité totale du phénomène, plus grand est l'écart-type de krigeage.**

$$\sigma_K^2 = C_{00} - 2 \sum_i \lambda_i C_{oi} + \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j C_{ij}$$

- Dans un krigeage de blocs, l'effet de pépité disparaît du terme $C(v,v)$. Comme, cependant, il agit sur le calcul des pondérateurs du krigeage, il est pris indirectement en compte dans la variance d'estimation. En revanche, son influence est moins aisée à prédire. Ce point sera discuté dans l'analyse de sensibilité.

$$\sigma_{Kv}^2 = C(v,v) - 2 \sum_i \lambda_i C(s_i, v) + \sum_{i,j} \lambda_i \lambda_j C_{ij}$$

2^e méthode :

L'effet de pépité apparent dû aux erreurs de mesure est soustrait du variogramme avant l'estimation mais la VEM évaluée en chaque point expérimental est introduite dans l'algorithme de krigeage. Dans ce cas, **la variable que l'on estime est la concentration Z non entachée d'erreur.**

- Dans un krigeage ponctuel, l'effet de pépité apparent σ_ε^2 , soustrait du variogramme, n'entre pas dans la composante C_{00} de la variance de krigeage. Celle-ci est donc plus faible.

Cette différence avec la première méthode n'est pas gênante en soi, si l'on a conscience du fait que l'on ne travaille pas sur la même variable que précédemment. Les valeurs de la VEM interviennent uniquement dans le terme $\sum_i \lambda_i^2 V_i$.

$$\sigma_K^2 = (C_{00} - \sigma_\varepsilon^2) + \sum_i \lambda_i^2 V_i - 2 \sum_i \lambda_i C_{oi} + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j C_{ij}$$

Pour obtenir l'erreur quadratique moyenne de prédiction aux points de mesure, c'est à dire la quantité $E(Z_\varepsilon - \sum_i \lambda_i Z_\varepsilon(x_i))^2$ telle qu'on a coutume de la calculer, il faut additionner la variance de krigeage et la VEM.

$$E(Z_\varepsilon - \sum_i \lambda_i Z_\varepsilon(x_i))^2 = \sigma_K^2 + V_i$$

- Dans un krigeage de blocs, la composante $C(v,v)$ demeure inchangée. Comme dans un krigeage ponctuel, la VEM agit sur la variance de krigeage par l'intermédiaire des pondérateurs λ_i .

$$\sigma_{Kv}^2 = C(v,v) + \sum_i \lambda_i^2 V_i - 2 \sum_i \lambda_i C(s_i, v) + \sum_{i \neq j} \lambda_i \lambda_j C_{ij}$$

La méthode avec VEM est intéressante si la variance de l'erreur de mesure prend des valeurs très différentes d'un point à un autre et si donc, localement, l'effet de pépité ne rend pas toujours bien compte de cette variance.

La variance de krigeage intègre donc une information relative à l'incertitude des données de concentration mais la façon dont elle est influencée par cette incertitude dépend du type de krigeage et du support d'estimation choisis (krigeage avec effet de pépité ou VEM, ponctuel ou de blocs).

b) La variance de krigeage reflète-t-elle la variabilité locale des données ?

L'erreur que l'on commet dans une prédiction renvoie à deux types de variabilité (Switzer, 1993) :

- la première est liée à la configuration spatiale des données dans le voisinage d'estimation ;
- la seconde est due à la variabilité du processus sous-jacent dans le domaine d'intérêt.

Comme il a été mentionné, la variance de krigeage dépend du variogramme et de la configuration relative du point à estimer et des données expérimentales, mais pas de la valeur numérique de ces données : on dit qu'elle est *inconditionnelle*. Cette indépendance par rapport aux données est encore désignée sous le terme d'*homoscédasticité*. Pour un même modèle variographique, deux configurations identiques de données conduisent à la même variance de krigeage quelles que soient les valeurs prises par ces dernières. Cette variance a le sens d'une moyenne spatiale, dans la mesure où le variogramme dont elle est fonction représente une moyenne de différentes situations observées dans le domaine d'étude (Ces situations correspondent aux points de la nuée variographique). Elle se trouve donc fortement influencée par les cas les plus fréquemment rencontrés (qui pèsent le plus dans le variogramme) et peut surestimer ou sous-estimer l'incertitude d'estimation (au sens de variance de l'erreur) au point considéré (Chilès et Delfiner, 1999, pp 177-178).

Soit deux configurations de points identiques dans un domaine D caractérisé par un certain variogramme (Figure 1). Les estimations aux points x_1 et x_2 sont égales. L'erreur potentielle d'estimation au point x_1 , qui est entouré de valeurs contrastées, devrait être plus grande qu'au point x_2 et pourtant, la variance de krigeage est la même.

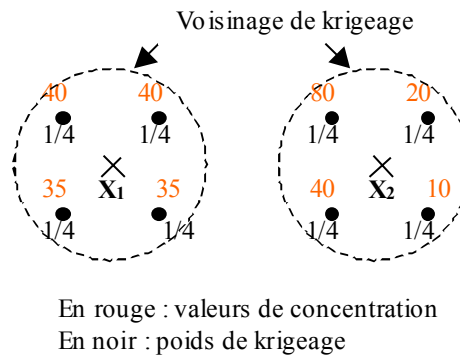


Figure 1 - Variance de krigeage et variabilité locale

☞ Si donc un seul variogramme est employé dans tout le domaine d'étude, alors les variations spatiales de la variance de krigeage reflètent principalement celles de la densité d'échantillonnage. En revanche, elles ne reproduisent pas la variabilité locale des données (Goovaerts, 1999, Lloyd et Atkinson, 2001).

☞ Si les paramètres du variogramme sont ajustés régionalement, la variance de krigeage, sans être conditionnelle, devient un indicateur intéressant d'incertitude (Yamamoto, 2000, Chilès et Delfiner, 1999). Ce point a été déjà abordé par Switzer (1993), qui fait remarquer que les erreurs estimées sont d'autant plus utiles et aisées à interpréter qu'elles sont liées plus fortement à la variabilité locale des données, et moins fortement à la variabilité globale qui dépend du domaine d'étude défini parfois arbitrairement.

Ce problème est également posé par Goovaerts (1999). Comment peut-on prendre en compte la coexistence dans le domaine d'étude de zones de forte et de faible variabilité ? Plusieurs propositions sont faites. Il est ainsi possible :

- de diviser le domaine en zones homogènes. Mais quelles limites doit-on donner à ces zones ? En outre, il est rare de pouvoir disposer de données suffisamment nombreuses pour construire un modèle dans chaque zone.

Dans l'étude sur le NO₂ à Montpellier (*Etude exploratoire du dioxyde d'azote sur l'agglomération de Montpellier*, ENSMP, rapport 2003), il est proposé, en raison de l'effet déterminant de l'environnement urbain sur les relations entre variables, de découper le domaine d'étude en fonction de la densité de population et de construire un modèle géostatistique dans chaque sous-partie du domaine.

- d'ajuster localement le palier du variogramme (effet proportionnel), de telle sorte que ce palier soit égal à la variance des données dans le voisinage. Cela ne change pas les poids de krigeage mais produit une variance de krigeage plus représentative de la véritable erreur d'estimation.
- de transformer les données pour stabiliser leur variance, en particulier lorsque l'histogramme des données est fortement dissymétrique. Une transformation fréquente est la transformation logarithmique ($y(x_i) = \ln(z(x_i))$). La difficulté vient de la transformation inverse (qui rigoureusement est la suivante : $z(x) = \exp[y(x) + \sigma_K^2(x)/2]$) et qui rend les résultats finaux très sensibles au modèle de variogramme.

☞ Faut-il utiliser un autre indicateur ?

Yamamoto (2000) propose d'employer comme indicateur ce qu'il appelle la *variance d'interpolation*. A la différence de la variance de krigeage, celle-ci dépend de la valeur numérique des données expérimentales à l'intérieur du voisinage. Elle s'exprime de la façon suivante :

$$s^2 = \sum_1^n \lambda_i [z(x_i) - z^*(x_0)]^2 \quad \text{pour un krigeage ponctuel}$$

$$s_v^2 = \sum_1^n \lambda_i [z(x_i) - z^*(v_0)]^2 \quad \text{pour un krigeage de bloc}$$

λ_i : poids calculé par le krigeage

$z(x_i)$: valeurs de concentration aux points de mesure

z^* : valeur de concentration estimée au point cible x_0 ou au bloc cible v_0

Cet indicateur tient compte de la variabilité locale des données et fournit ainsi une mesure de l'incertitude locale. Yamamoto a évalué sa pertinence par validation croisée.

L'utilisation de la variance d'interpolation ne va cependant pas sans contrainte : les poids de krigeage sont interprétés comme des probabilités conditionnelles associées aux données et à ce titre, ils doivent être positifs. Cette exigence nécessite d'appliquer une correction pour rendre tous les poids de krigeage positifs. Plusieurs procédures sont proposées à cette fin.

Cet indicateur a été appliqué dans l'étude présentée en annexe. Les concentrations ont été estimées par krigeage ordinaire avec effet de pépité ou avec variance de l'erreur de mesure en trois points et trois blocs du domaine de calcul. Les différences entre la variance de krigeage et la variance d'interpolation sont significatives. Contrairement à la première, la seconde reflète effectivement la variabilité locale des concentrations. Sensible à la valeur des données proches du point cible ainsi qu'à la méthode de correction des poids, elle doit être toutefois manipulée avec précaution. Son calcul n'est pas implanté dans les logiciels courants de géostatistique.

c) La variance de krigeage intègre-t-elle l'incertitude sur les paramètres du modèle ?

Les méthodes de krigeage classiquement employées ne permettent pas de prendre en compte l'incertitude sur l'ajustement du variogramme. Ainsi peut-on obtenir de faibles valeurs de variance, même avec un modèle mal adapté. De surcroît, **à la différence des estimations, la variance de krigeage se montre très sensible au modèle de variogramme.**

Des méthodes se sont ainsi développées afin d'incorporer dans les prédictions l'incertitude sur les paramètres du modèle.

C'est notamment le cas de l'approche bayésienne (Goria S., 2003, Moyeed et Papritz, 2002, Chilès et Delfiner, 1999, p176). Cette technique, coûteuse numériquement, ne s'est pas encore généralisée et n'est pas encore implantée dans les logiciels usuels de géostatistique. Une étude comparative entre plusieurs méthodes de krigeage, conduite par Moyeed et Paritz (avec utilisation d'un important jeu de validation), n'a pas démontré la supériorité du krigeage bayésien par rapport aux autres techniques non linéaires (krigeage lognormal, krigeage disjonctif, krigeage d'indicatrice).

D'autres approches théoriques ont vu le jour, telle celle de Todini (2001), fondée sur des développements en séries de Taylor, ou encore l'usage de variogrammes flous qui permet de séparer l'incertitude liée à l'imprécision sur les paramètres du modèle de l'incertitude d'interpolation. Ces méthodes, comme le krigeage bayésien, sont peu répandues et ne peuvent être mises en œuvre avec les logiciels usuels.

Une autre approche, beaucoup plus pragmatique, est l'**analyse de sensibilité**. Elle consiste à faire varier progressivement l'un des paramètres du modèle (effet de pépite, portée, palier, fonctions de base...), et à quantifier l'effet de cette modification sur les résultats de l'estimation. Une telle procédure est mise en pratique au chapitre suivant.

Notons enfin que si elle n'est pas incluse en tant que telle dans l'écart-type de krigeage, l'incertitude sur le modèle est néanmoins prise en compte grâce à la validation croisée. En effet, entre plusieurs modèles possibles, on cherchera, par la validation croisée, à retenir celui qui conduit aux erreurs les plus faibles. En ce sens, la validation croisée est un moyen de sélectionner le modèle le plus adapté aux données expérimentales, donc un moyen de réduire l'incertitude sur le modèle.

d) La variance de krigeage permet-elle de fournir un intervalle de confiance autour de la valeur estimée ?

La loi de distribution de l'erreur est inconnue en pratique, mais en supposant qu'elle suit une loi normale, ce qu'admettent certains auteurs en appliquant le théorème de la limite centrale, alors les bornes inférieure et supérieure de l'intervalle de confiance à 95% s'écrivent (Monteiro da Rocha et Yamamoto, 2000, Pardo-Igúzquiza, 1998) :

$$I^- = Z^* - 1,96 \cdot \sigma_K$$

$$I^+ = Z^* + 1,96 \cdot \sigma_K$$

La validité de l'intervalle ainsi calculé n'est cependant pas assurée. Dans une étude sur le NO₂ à Rouen, C. Roth (1999) fait remarquer que les intervalles de confiance obtenus par ce mode de calcul contiennent des valeurs négatives. De plus, en comparant les intervalles de confiance calculés de cette façon avec ceux qui résultent plus rigoureusement de simulations conditionnelles, Bobbia (2001) montre les inexactitudes auxquelles ce mode de calcul peut conduire.

Selon des études théoriques (Chilès et Delfiner, 1999, p 177), il suffit d'ajouter plus ou moins 3 fois l'écart-type à la valeur estimée pour que l'intervalle de confiance corresponde à un taux de couverture d'au moins 95%. L'hypothèse sous-jacente, moins restrictive que la précédente, est celle d'une distribution des erreurs continue et unimodale. Elle n'est toutefois pas vérifiable et les intervalles de confiance obtenus ne sont pas nécessairement plus réalistes.

Pour une estimation plus rigoureuse de l'intervalle de confiance à 95%, il est nécessaire de recourir aux techniques de la géostatistique non linéaire (Goovaerts, 1999). D'un point de vue théorique, certaines méthodes fréquemment employées à l'étranger et fondées notamment sur ce qu'on appelle le krigeage d'indicatrice (Cattle et al., 2002., Barabás et al., 2001) révèlent leurs limites. Il convient donc de les appliquer avec prudence.

Les méthodes non linéaires retenues pour notre analyse sont l'espérance conditionnelle et les simulations conditionnelles. Elles sont étudiées et mises en pratique au chapitre 5.

3.2 VALIDATION CROISEE

La validation croisée, réalisée avant d'entreprendre le krigeage sur la grille d'estimation, fournit des critères statistiques de sélection dans le choix d'un modèle de variogramme. Les statistiques d'erreurs relatives peuvent être utilisées en complément pour évaluer la qualité des estimations associées au modèle.

3.2.1 Principe et résultats

La validation croisée consiste à éliminer temporairement un point de l'ensemble des données puis à estimer sa valeur par krigeage à l'aide des données restantes et du modèle de variogramme qui a été ajusté. Cette opération est répétée pour tous les points.

Ainsi, en tout point s_i de concentration mesurée Z_i , on obtient une valeur estimée Z_i^* et un écart-type de krigeage σ_i^K .

- L'erreur d'estimation est $Z_i^* - Z_i$. Elle est sensible à l'éloignement entre sites.
- L'erreur standardisée (ou erreur réduite) qui lui correspond est $(Z_i^* - Z_i)/\sigma_i^K$. La standardisation permet de corriger l'effet de la configuration des sites.

On peut alors [Figure 2, Tableau 2] :

- calculer les statistiques de ces erreurs (moyenne, variance) ;
- étudier la corrélation entre valeurs estimées et valeurs mesurées : $\rho = \text{corr}(Z, Z^*)$;

Un modèle est d'autant meilleur que :

- la moyenne des erreurs d'estimation et des erreurs standardisées est plus proche de 0. Ce critère assure l'absence de biais ;

- la variance des erreurs d'estimation est plus faible. Ce critère assure la robustesse de l'estimateur et renseigne sur la précision de l'estimation.
- la variance des erreurs standardisées est plus proche de 1. Une variance de l'erreur standardisée très différente de 1 indique que l'écart-type de krigeage est peu représentatif de l'erreur d'estimation commise.
- le nombre de données robustes, c'est-à-dire de données pour lesquelles l'erreur standardisée est inférieure à 2,5 en valeur absolue, est plus grand ;
- ρ est plus proche de 1 (ce critère varie généralement dans le même sens que celui de la variance de l'erreur).

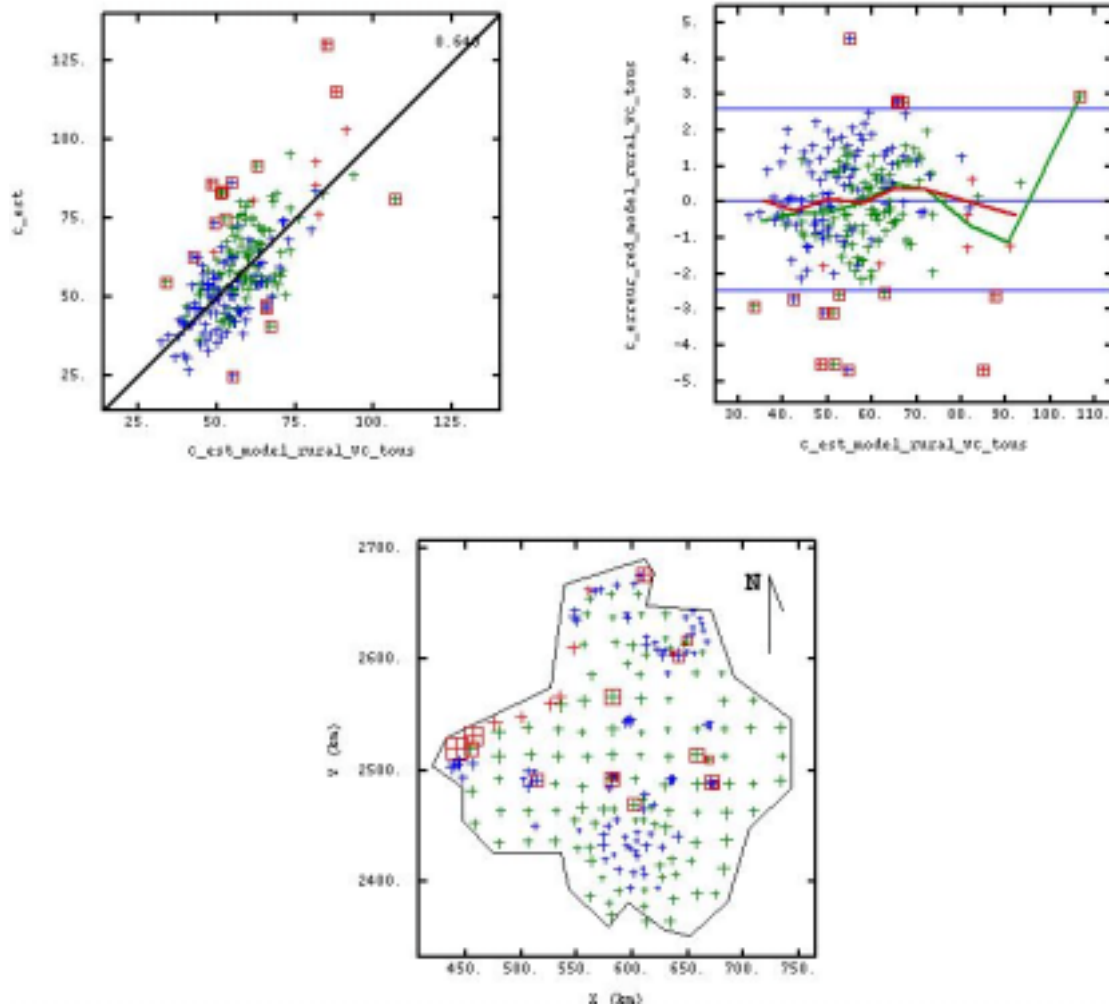
Marcotte (2003) juge également intéressante l'étude de la variance des erreurs standardisées et distingue trois situations :

- Cette variance est proche de 1. La variance de krigeage prédit correctement la précision des estimations.
- Cette variance est inférieure à 1. Le modèle variographique ajusté décrit un phénomène plus variable que le phénomène réel. La variance de krigeage surestime la variance des erreurs.
- Cette variance est supérieure à 1. Le modèle variographique ajusté décrit un phénomène moins variable que le phénomène réel. La variance de krigeage sous-estime la variance des erreurs.

Les **erreurs relatives de validation croisée** représentent l'écart relatif entre estimation et mesure :

$$ER_i = 100 * (Z_i^* - Z_i) / Z_i \text{ (\%)}$$

Les statistiques de ces erreurs constituent un élément supplémentaire de comparaison entre modèles. De plus, en se restreignant au problème spatial, ces erreurs relatives correspondent à la définition des incertitudes mentionnée par les directives européennes. Elles n'ont toutefois qu'une valeur indicative en raison du caractère partiel de la validation (cf. paragraphe suivant). Elles donnent un ordre de grandeur des erreurs relatives d'estimation commises par le krigeage dans l'enveloppe convexe des observations.



Croix vertes : Sites ruraux. Croix bleues : Sites périurbains et urbains.
 Croix rouges : Sites du littoral. Carres rouges : Les sites dont l'erreur réduite est supérieure à +/- 2.5.

Figure 2 : Exemple de validation croisée (données d'ozone, une semaine de mesure, été 2000, Nord de la France). Validation croisée du modèle ajusté sur les données rurales. La validation a utilisé l'ensemble des données (rurales, littorales, urbaines, périurbaines).

En haut à gauche : nuage de corrélation entre valeurs mesurées et valeurs estimées.
 En haut à droite : valeur de l'erreur réduite en fonction de la concentration mesurée
 En bas : carte d'implantation des données

	Nb	Moyenne	Variance
Erreur	209	-0.66367	146.42
Erreur réduite	209	-0.04592	1.99
Erreur relative(%)	209	17,1	14,3

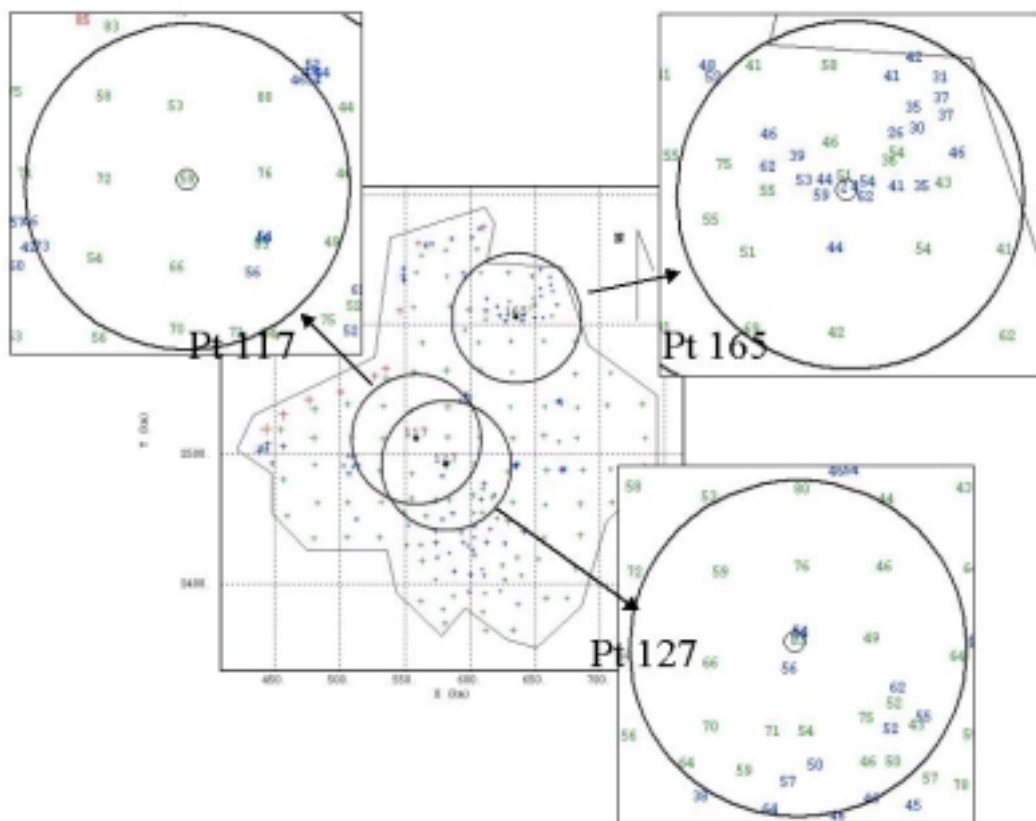
Tableau 2 : statistiques d'erreur de la validation croisée

3.2.2 Limites de la validation croisée

La validation croisée permet de comparer la qualité des estimations associées à différents modèles de variogrammes avant de mettre en œuvre le krigeage. La variance des erreurs réduites permet de vérifier si les écarts-types de krigeage mesurent correctement la précision de l'estimation.

Il faut néanmoins faire un usage prudent des résultats de la validation croisée (Pardo-Igúzquiza, 1998) qui ne constitue qu'une validation partielle du modèle. La validation croisée ne porte en effet que sur les points qui ont servi à construire le modèle. De plus, et c'est une conséquence de ce qui précède, elle n'utilise le variogramme qu'aux distances entre points de mesure. Selon la configuration de l'échantillonnage, elle ne permet pas nécessairement d'apprécier l'adéquation du modèle géostatistique dans toute la gamme des distances considérées. La méthode révèle là ses limites.

D'autre part, comme il est mis en évidence dans l'étude jointe en annexe, les regroupements de données affectent les résultats de l'estimation en certains points d'échantillonnage, à cause des effets d'écran (les points de mesure les plus proches du point cible masquent les autres données expérimentales et interviennent quasi-exclusivement dans l'estimation). Ainsi, pour juger la pertinence d'un modèle par validation croisée, il est préférable que les données utilisées dans cette validation se répartissent régulièrement dans l'espace.



Les valeurs numériques correspondent à la concentration de l'ozone.

La couleur verte représente les sites ruraux et la couleur bleue les sites urbains et périurbains.

Figure 3 : Validation croisée pour les points :117, 127 et 165. Alors que la concentration au point 117 est bien réestimée (erreur d'estimation : $3,8 \mu\text{g}/\text{m}^3$), la concentration aux points 127 et 165 est fortement surestimée (erreur : $+31,2 \mu\text{g}/\text{m}^3$), respectivement sous-estimée (erreur : $-30,5 \mu\text{g}/\text{m}^3$).

Enfin, les statistiques de la validation croisée **reflètent principalement la qualité du modèle dans les zones les plus riches en données**, là où les points de mesure sont proportionnellement plus nombreux.

Avant de conclure sur la qualité d'un modèle, il convient de s'interroger sur les zones dans lesquelles on souhaite que ce modèle soit le plus fiable : centre de l'agglomération ? périphérie de l'agglomération ? zones rurales ? Si les zones d'intérêt ne sont pourvues que d'un petit nombre de points de mesure, la validation croisée est insuffisante pour y évaluer le modèle géostatistique.

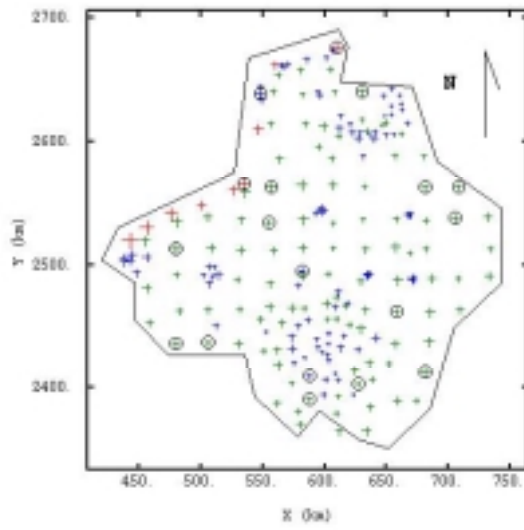
Dans tous les cas, on ne peut étendre les résultats de la validation croisée au-delà de l'enveloppe convexe des points de données.

La solution la plus satisfaisante pour pallier ces inconvénients serait de disposer d'un **jeu de validation indépendant** suffisamment riche en données et bien réparti dans l'espace, comme Cattle et al. qui travaillent sur un jeu de 807 données de pollution de sol dont 100 réservées à la validation ou Moyeed et Papritz qui disposent de 3000 données d'analyse de sol dont près de 2200 pour la validation.

Dans notre cas, les données d'échantillonnage sont la plupart du temps trop peu nombreuses pour que l'on puisse en garder certaines pour la validation. Les données de moyens mobiles pourraient jouer ce rôle, mais la difficulté est qu'elles correspondent à des périodes de temps plus brèves que la durée totale d'exposition des tubes (le camion s'est déplacé d'un point à un autre pendant la campagne de mesure) ou bien qu'elles ne sont disponibles qu'en un ou deux points (un ou deux moyens de mesure mobiles ont stationné au même endroit pendant toute la campagne).

3.2.3 Autre procédure

Une autre procédure (illustrée en annexe) consiste à supprimer les points non pas un par un mais par groupe. Par exemple, on pourra tirer aléatoirement une dizaine de groupes de points parmi les données initiales. Pour chaque ensemble ainsi sélectionné, les concentrations sont réestimées à l'aide des données restantes et les statistiques d'erreur sont calculées (Figure 4). Comparée à la validation croisée, qu'elle complète efficacement, cette procédure permet de limiter l'influence de la configuration des données sur les statistiques d'erreur.



Item	Nb	Moyenne	Variance
Erreurs	19	-5.10	140.89
Erreurs Réduites		-0.52	1.71

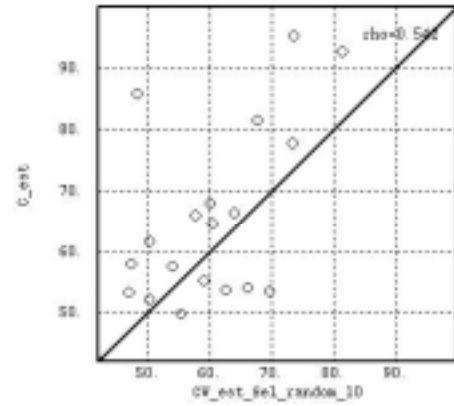


Figure 4 : Exemple d'un jeu de données sélectionné aléatoirement (cercles noirs) et résultats de la validation croisée

4. ANALYSE DE SENSIBILITE AUX PARAMETRES DU MODELE ET DE L'ESTIMATION

Ce chapitre a pour objet de montrer l'influence de l'échantillonnage, des paramètres du modèle de variogramme et de la maille de calcul sur les résultats de l'estimation.

Il s'agit de mieux appréhender :

- l'impact des diverses sources d'incertitude (échantillonnage, modèle variographique) sur la carte finale ;
- la manière dont le choix des paramètres se répercute sur l'écart-type de krigeage.

Cette analyse est réalisée sur un jeu de données d'ozone constitué de 209 points de mesure. Ces données ont été collectées à l'occasion d'une campagne interrégionale conduite par ATMO Picardie, AIRPARIF, AIR NORMAND, OPAL'AIR, AREMA LM, AREMARTOIS, du 26 juin au 4 septembre 2000. La première semaine de mesure est choisie comme exemple dans les calculs.

4.1 SENSIBILITE AU NOMBRE DE POINTS

A partir du jeu de données initial, des échantillons de taille plus réduite sont tirés de façon aléatoire stratifiée, afin de conserver une bonne couverture du domaine d'étude.

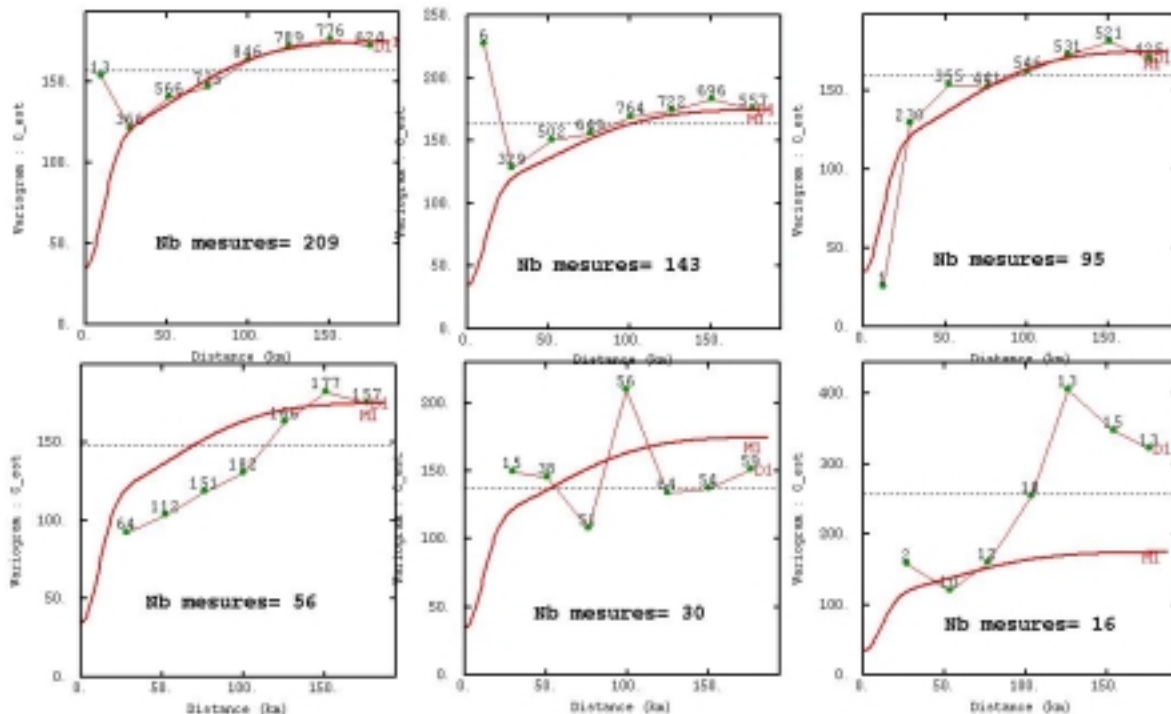


Figure 5: Analyse de la sensibilité au nombre des points : évolution des variogrammes expérimentaux

Le modèle de variogramme établi à partir des 209 données initiales est pris pour référence. Comme ce modèle repose sur un échantillonnage de grande taille, on considère qu'il décrit correctement la structure spatiale de la variable régionalisée. En deçà de 95 points de donnée, le variogramme expérimental s'éloigne de ce modèle et ne reproduit pas exactement la variabilité réelle du phénomène (Figure 5). La dégradation du variogramme expérimental est d'autant plus marquée que le nombre de points est inférieur à 40.

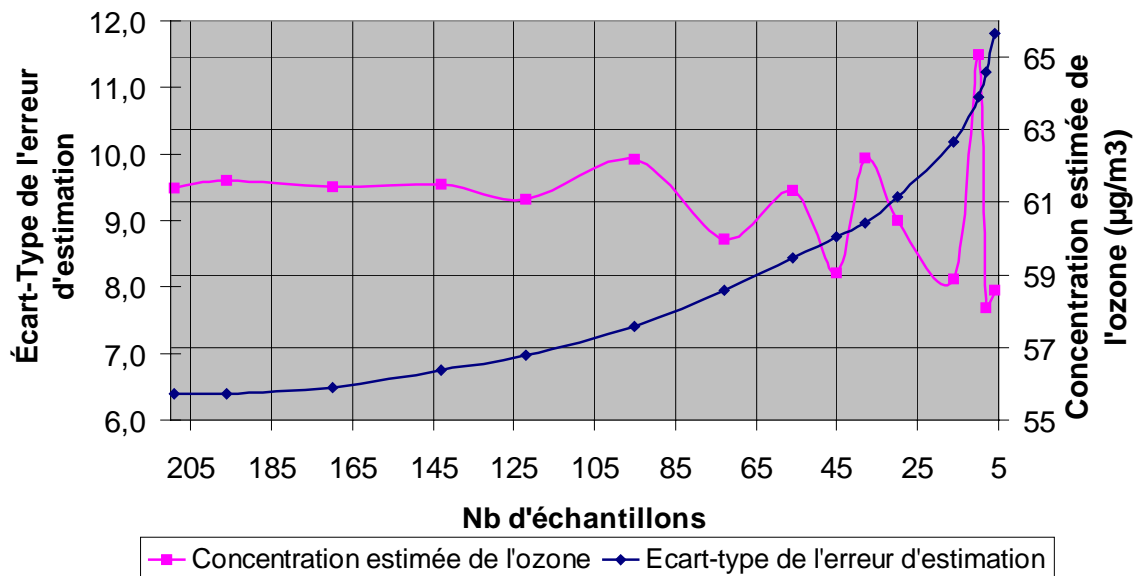


Figure 6 : Analyse de la sensibilité au nombre de points : évolution des moyennes, calculées sur l'ensemble du domaine, de l'écart-type de l'erreur d'estimation et de la concentration d'ozone, pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc, avec effet de pente (maille d'estimation : 5km x 5 km)

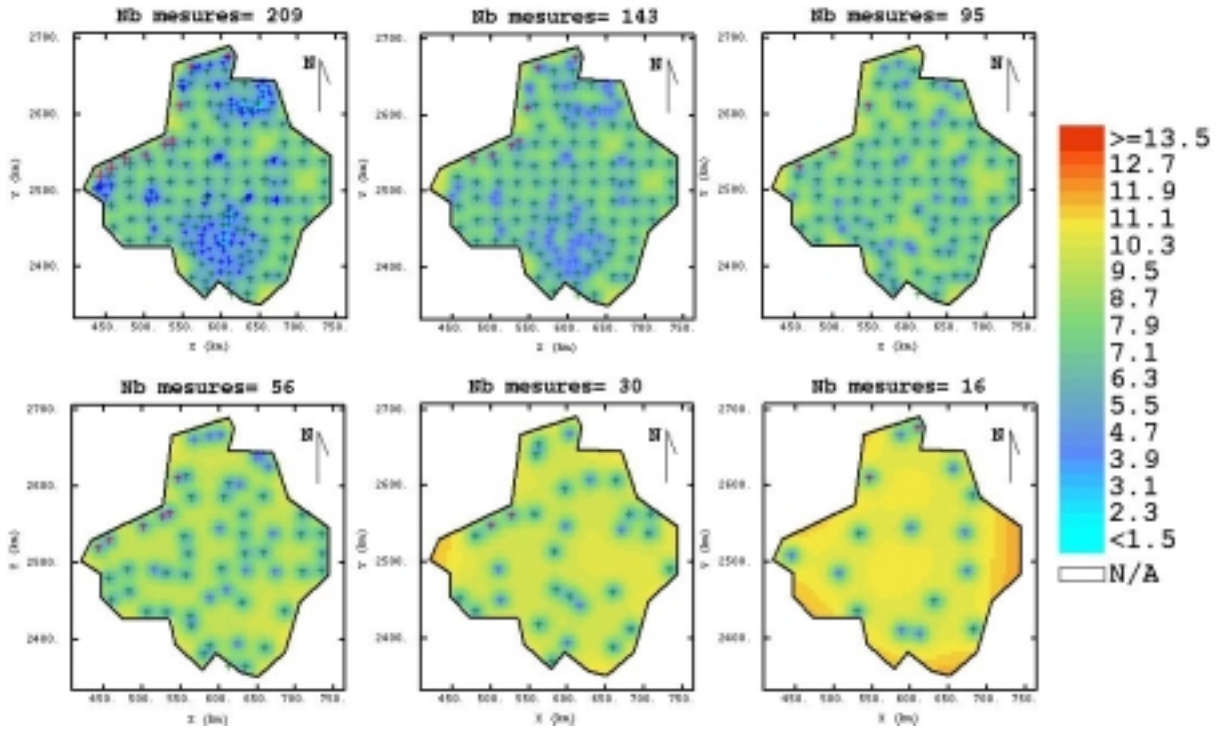


Figure 7 : Analyse de la sensibilité au nombre de points : évolution de l'écart-type de l'erreur d'estimation pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépète

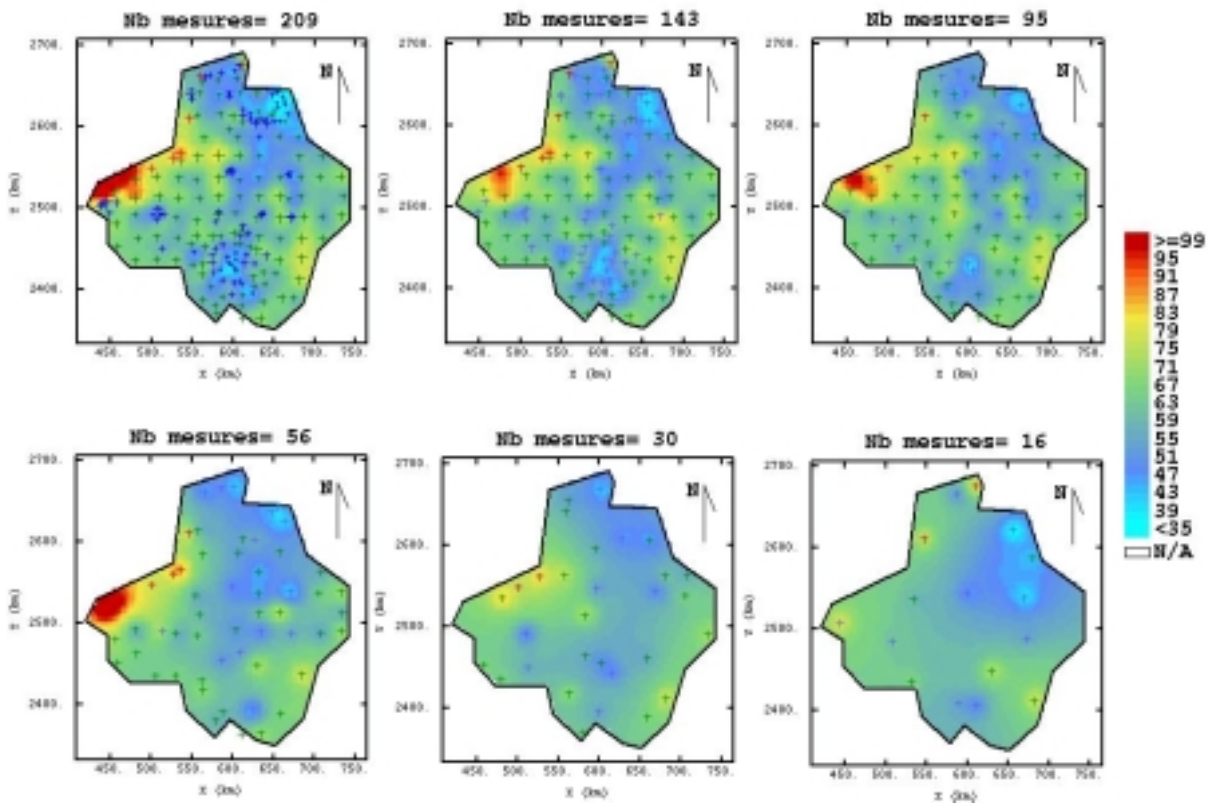


Figure 8 : Analyse de la sensibilité au nombre de points : évolution de la concentration d'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépète

Toutes les estimations sont effectuées par krigeage de blocs, en utilisant le modèle de référence, c'est à dire le modèle ajusté sur le variogramme expérimental des 209 données rurales. Seul varie le nombre de points introduit dans le krigeage. Tant qu'il est supérieur à 95, la concentration moyenne estimée dans le domaine reste stable. En deçà, elle se met à fluctuer et l'écart-type moyen de krigeage croît rapidement, traduisant une moindre précision de l'estimation (Figure 6, Figure 7).

D'autre part, plus le nombre de points diminue, plus la carte d'estimation et d'écart-type de krigeage est lissée (Figure 7, Figure 8). Les grandes tendances des concentrations sont néanmoins respectées.

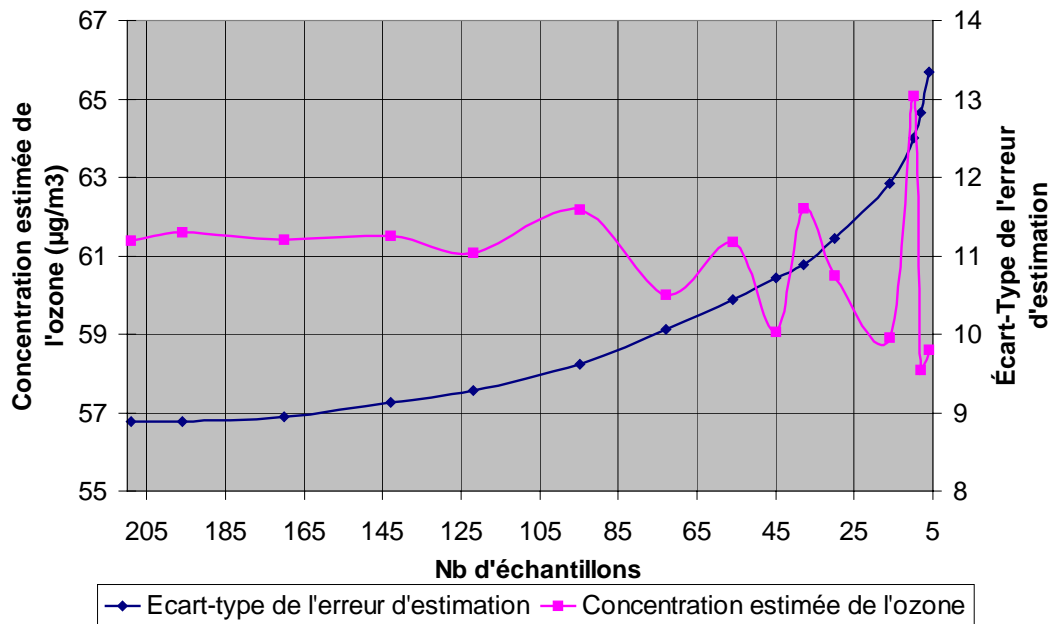
En revanche, la différence entre les cartes construites avec 143 et 209 données est minimale (aussi bien pour la concentration que pour l'écart-type). Cette observation laisse supposer que si une campagne de grande ampleur permettait de bien identifier la structure spatiale d'un phénomène de pollution dans une région donnée, on pourrait, l'année suivante, et sous réserve que les évolutions des émissions et de la météorologie ne modifient pas notablement cette structure, réduire l'échantillonnage sans grande perte de précision. Cette hypothèse mériterait bien sur d'être testée.

Afin de juger si la nature du support d'estimation et la typologie des sites n'influencent pas ces résultats, une analyse de sensibilité a été réalisée de la même manière:

- pour un krigeage ordinaire **ponctuel** (Figure 9);
- pour un krigeage ordinaire de blocs, en ne sélectionnant que des **données rurales** (Figure 10, Figure 11, Figure 12).

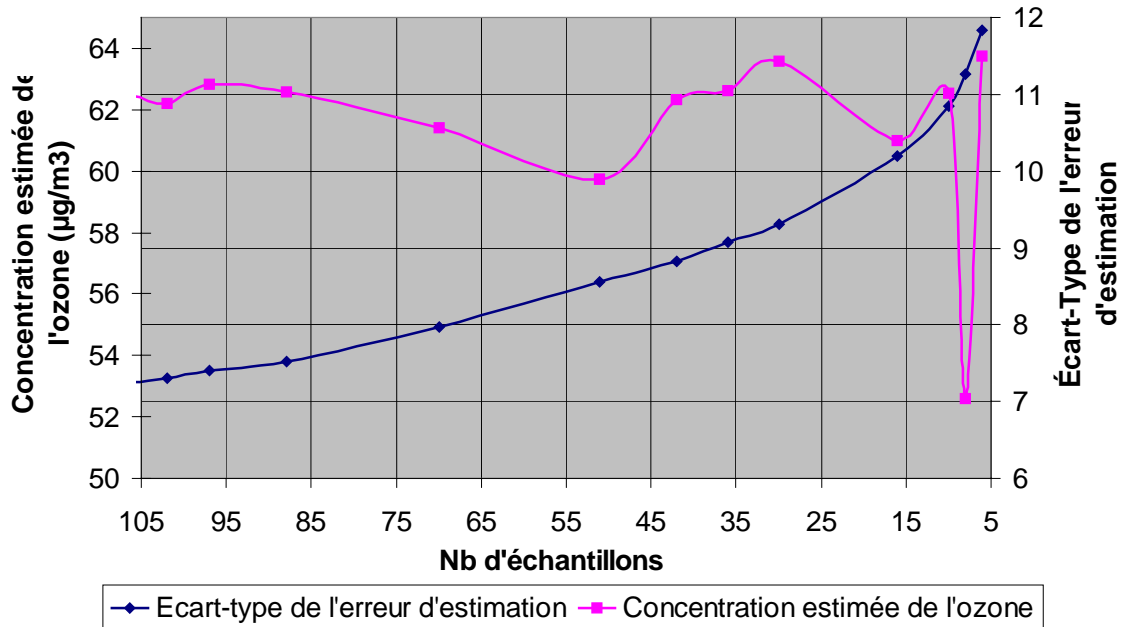
Comparée avec la figure 6, la figure 9 montre une évolution similaire de la concentration moyenne d'ozone et de l'écart-type moyen de krigeage en fonction du nombre de données.

De même, pour une estimation réalisée à partir des seules observations rurales, l'écart-type de krigeage augmente sensiblement quand le nombre de ces données diminue (figure 10). En ce qui concerne les concentrations estimées, le passage de 108 à 88 données a un impact limité (figures 10 et 11). Avec moins de 88 données, leur moyenne devient instable (figure 10).



Nb échantillons	209	196	170	143	122	95	73	56	45	38	30	16	10	8	6
Ecart-type de l'erreur d'estimation	8,9	8,9	8,9	9,1	9,3	9,6	10,1	10,5	10,7	10,9	11,2	11,9	12,5	12,8	13,3
Concentration estimée de l'ozone	61,4	61,6	61,4	61,5	61,1	62,2	60,0	61,3	59,1	62,2	60,5	58,9	65,1	58,1	58,6
Rapport (Ecart/Estimation) par cent	14,5	14,4	14,6	14,8	15,2	15,5	16,8	17,0	18,1	17,5	18,5	20,2	19,2	22,1	22,8

Figure 9 : Analyse de sensibilité au nombre des points : évolution des moyennes de l'écart-type de l'erreur d'estimation et de la concentration de l'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire punctuel avec effet de pépite (maille d'estimation : 5km x 5 km)



Nb d'échantillons	108	106	102	97	88	70	51	42	36	30	16	10	8	6
Ecart-type de l'erreur d'estimation (Rural)	7,3	7,3	7,3	7,4	7,5	8,0	8,6	8,8	9,1	9,3	10,2	10,9	11,3	11,8
Concentration estimée de l'ozone (Rural)	62,3	62,5	62,2	62,8	62,6	61,4	59,8	62,3	62,6	63,6	61,0	62,5	52,6	63,7
Rapport (Ecart/Estimation) %	11,6	11,6	11,8	11,8	12,0	13,0	14,3	14,2	14,5	14,6	16,7	17,4	21,4	18,6

Figure 10 : Analyse de sensibilité au nombre de points (mesures rurales): évolution des moyennes de l'écart-type de l'erreur d'estimation et de la concentration d'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépité (maille : 5km x 5km)

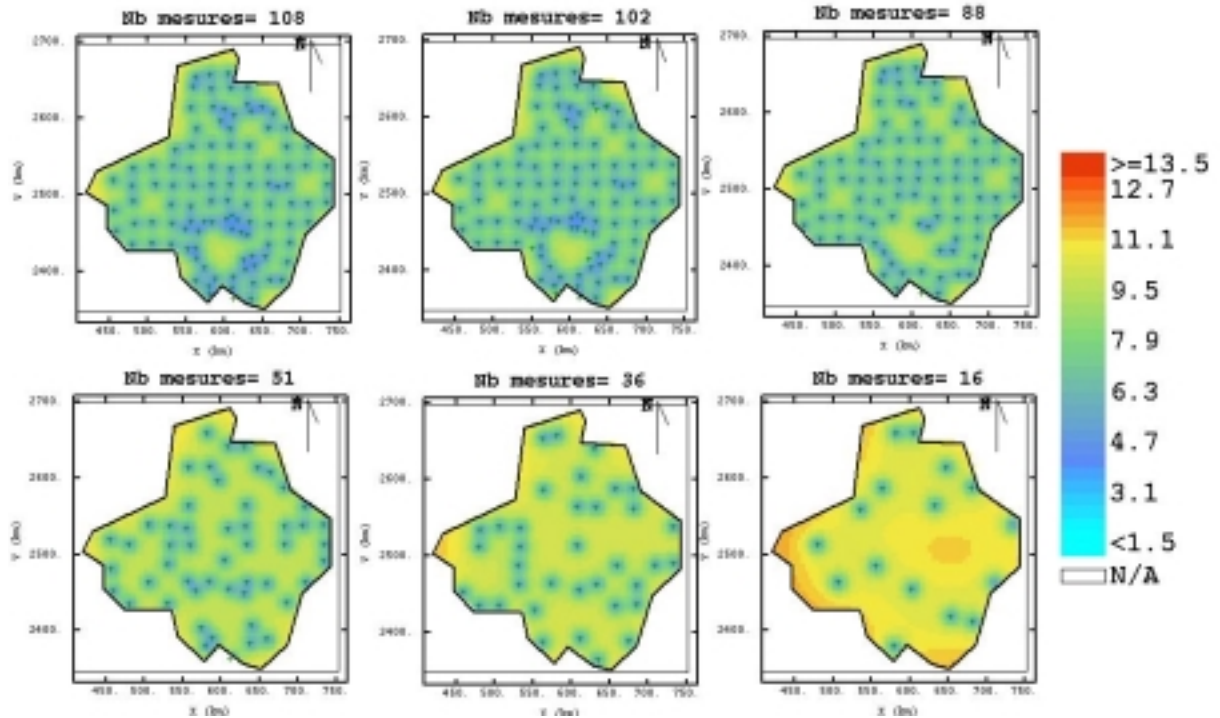


Figure 11 : Analyse de sensibilité au nombre des points (*mesures rurales*) : Evolution de l'écart-type de l'erreur d'estimation pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

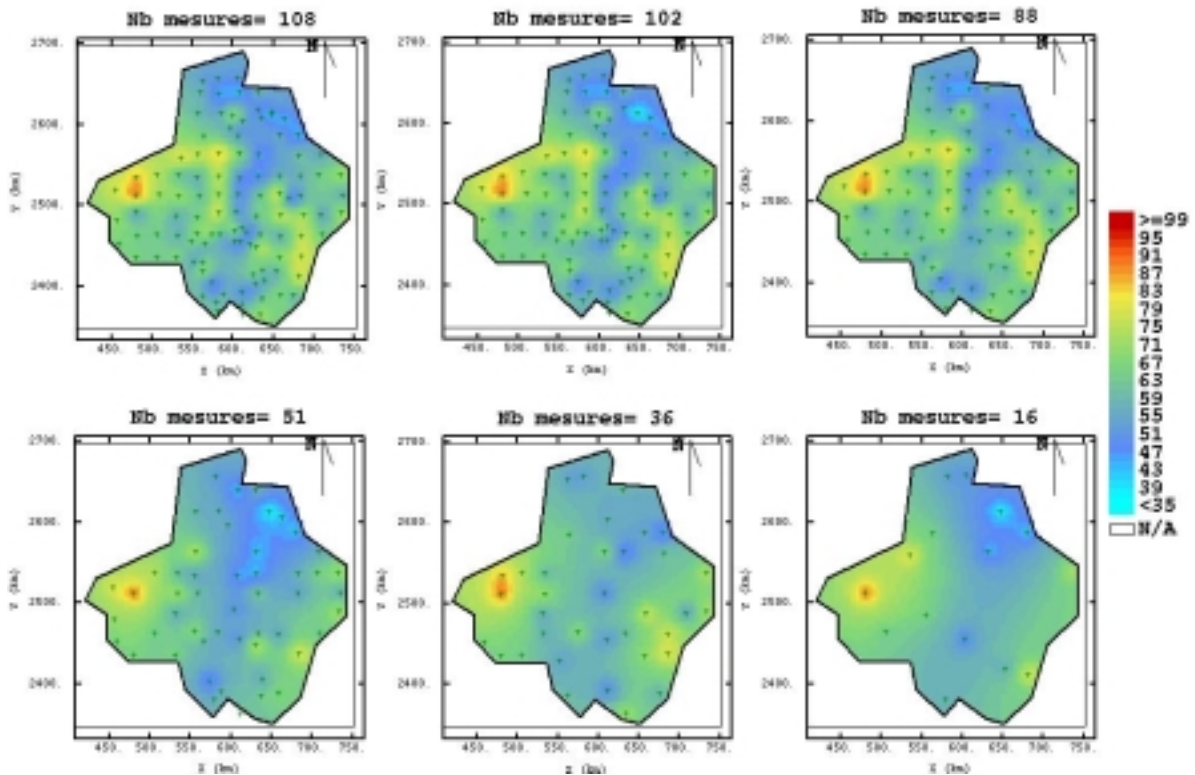


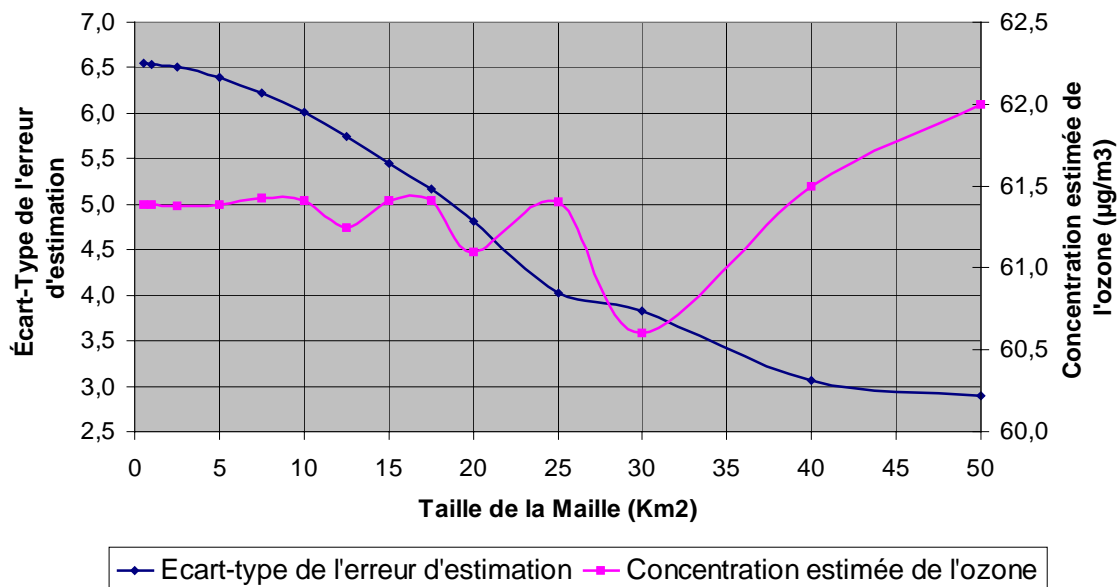
Figure 12 : Analyse de sensibilité au nombre des points (*mesures rurales*) : Evolution de la concentration de l'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

4.2 SENSIBILITE A LA TAILLE DE LA MAILLE D'ESTIMATION

Dans un krigeage ponctuel, les concentrations sont estimées en chaque point du maillage défini par l'utilisateur. Les écarts-types qui leur sont associés sont indépendants de la taille de la maille.

Dans un krigeage de blocs, on estime des concentrations moyennes à l'intérieur de chaque maille. Le support de l'estimation n'est donc plus ponctuel mais surfacique. Dans ce cas, l'écart-type de krigeage, dépendra de la maille considérée. Quel effet a la taille de cette maille sur la précision de l'estimation ?

Dans les calculs qui suivent, un krigeage de blocs a été mis en œuvre pour des mailles allant de 500 m x 500 m à 50 km x 50 km (Figure 13, Figure 14, Figure 15).



Largeur de la Maille (Km)	0,5	1	2,5	5	7,5	10	12,5	15	17,5	20	25	30	40	50
Écart-type de l'erreur d'estimation	6,6	6,5	6,5	6,4	6,2	6,0	5,7	5,5	5,2	4,8	4,0	3,8	3,1	2,9
Concentration estimée de l'ozone	61,4	61,4	61,4	61,4	61,4	61,4	61,3	61,4	61,4	61,1	61,4	60,6	61,5	62,0
Rapport : (Ecart/Estimation)*100	10,7	10,7	10,6	10,4	10,1	9,8	9,4	8,9	8,4	7,9	6,5	6,3	5,0	4,7

Figure 13 : Analyse de sensibilité à la taille de la maille: évolution des moyennes de l'écart-type de l'erreur d'estimation et de la concentration d'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

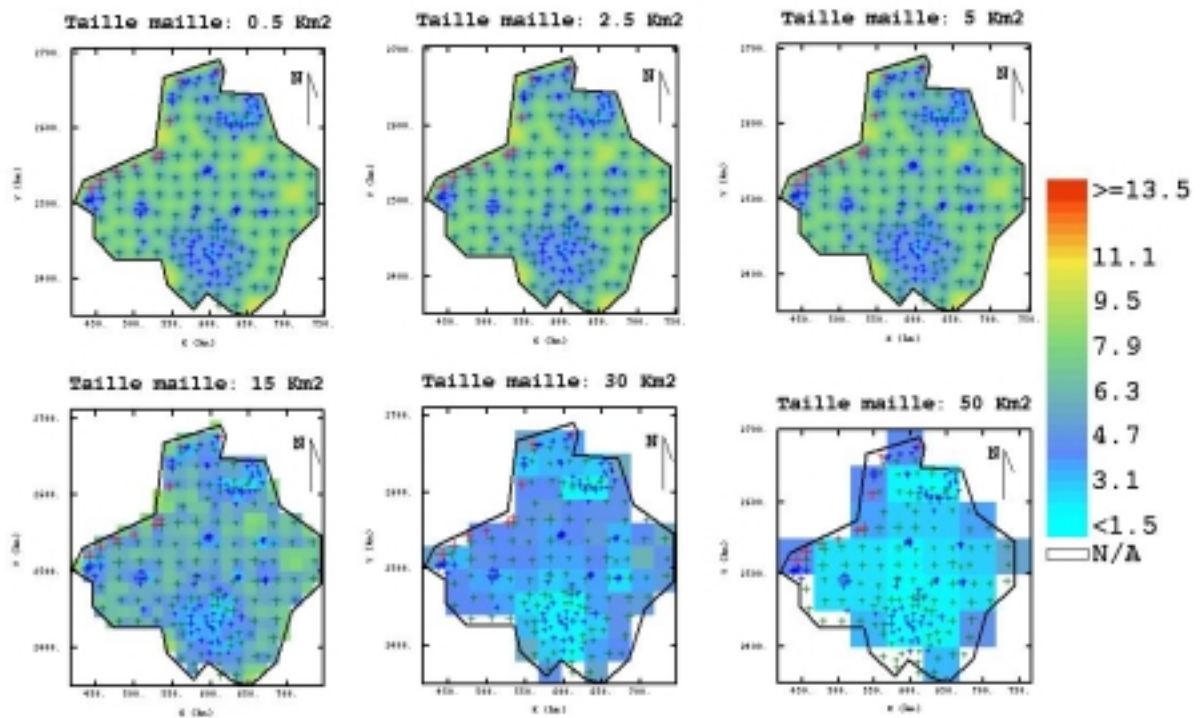


Figure 14 : Analyse de sensibilité à la taille de la maille : évolution de l'écart-type de krigeage pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

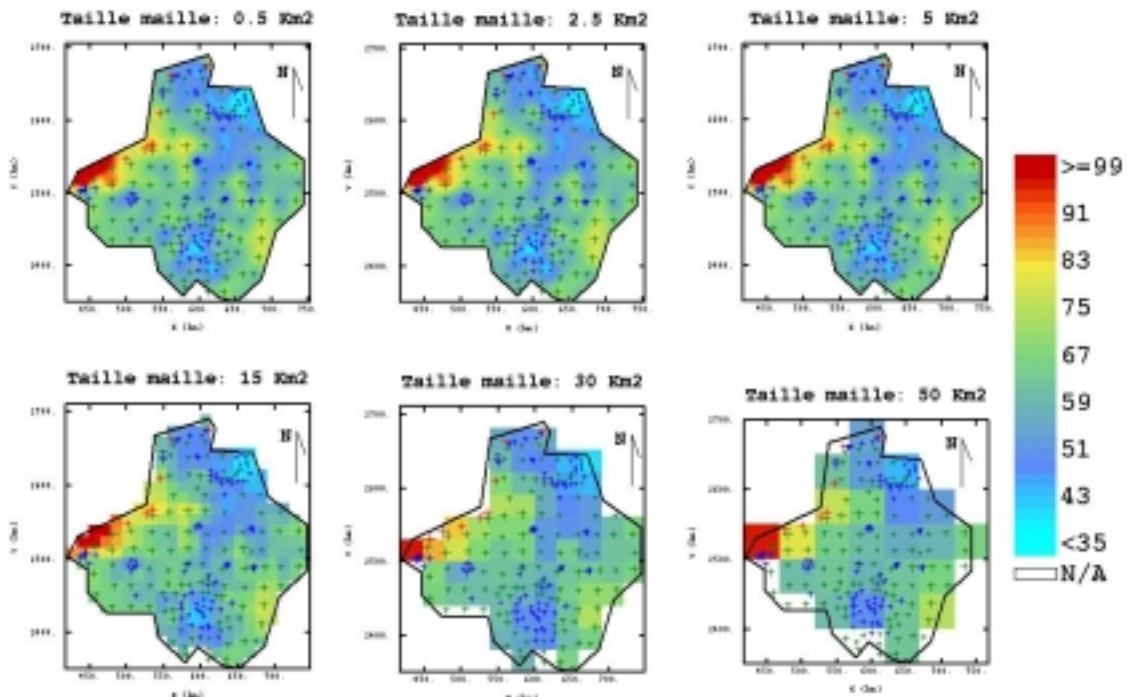


Figure 15 : Analyse de sensibilité à la taille de la maille : évolution de la concentration d'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

De façon logique, plus la taille de la maille augmente, moins la carte de concentration est détaillée. En raison des effets de bords - comme le montrent les cartes, les différents domaines de calcul ne coïncident pas exactement -, il n'est pas pertinent de comparer les concentrations moyennes estimées dans le champ. Théoriquement, ces concentrations devraient être identiques puisqu'on sait que la valeur moyenne estimée dans un bloc est égale à la moyenne des valeurs ponctuelles estimées dans ce même bloc.

L'étude de l'écart-type de krigeage est plus intéressante. Plus la taille de la maille augmente, plus cet écart-type diminue. L'influence du support d'estimation est particulièrement marquée dès que le côté de la maille devient supérieur à 5 km, ce qui met en évidence ces effets de lissage et rappelle la prudence dont il faut faire preuve dans l'interprétation de l'écart-type de krigeage.

4.3 SENSIBILITE A LA PORTEE

Si la validation croisée peut aider au choix d'un modèle, une certaine latitude demeure dans l'ajustement des paramètres. Toutefois, le modélisateur n'est pas assuré qu'il a fait l'ajustement le plus pertinent. Cette incertitude peut se révéler problématique lorsque l'échantillonnage ne permet pas de caractériser la variabilité aux courtes distances.

Dans ce paragraphe et le suivant, on s'intéresse donc à la sensibilité des estimations à la modélisation du début du variogramme et à l'effet de pépité.

Le modèle variographique pris comme référence est la somme de trois composantes :

- un effet de pépité,
- une structure gaussienne de courte portée,
- une structure gaussienne de grande portée.

Dans un premier temps l'analyse consiste à augmenter progressivement la portée de la première structure (Figure 16). Dans le cas extrême, elle se confond avec la portée de la seconde structure (136 km).

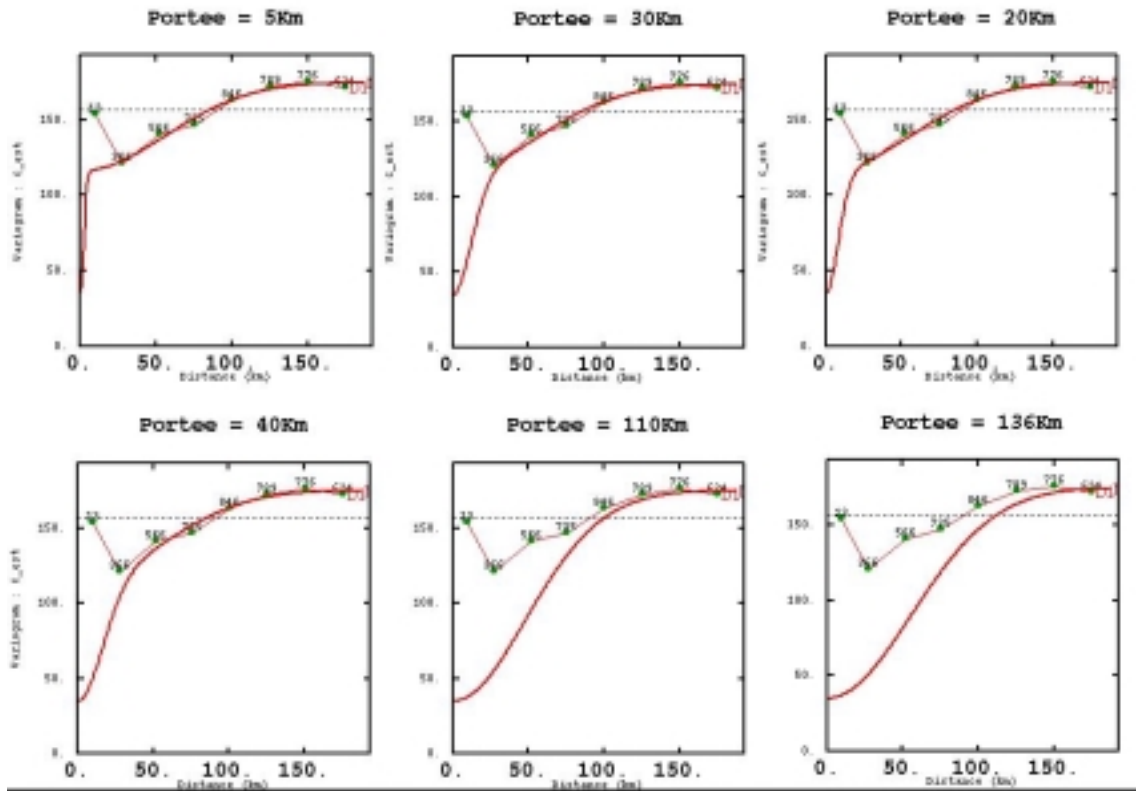


Figure 16 : Analyse de sensibilité à la portée: évolution de la portée de la première structure gaussienne du modèle de la concentration d’ozone

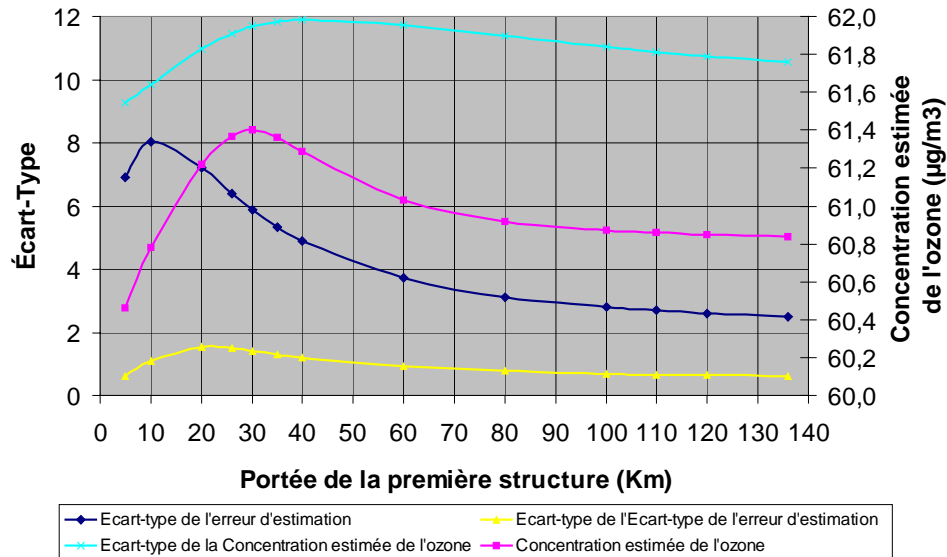


Figure 17 : Analyse de sensibilité à la portée: évolution des moyennes des 3 écart-types (de l’erreur d’estimation, de la concentration estimée et de l’écart-type de l’erreur d’estimation,) et de la concentration de l’ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite (maille d’estimation : 5km x 5 km)

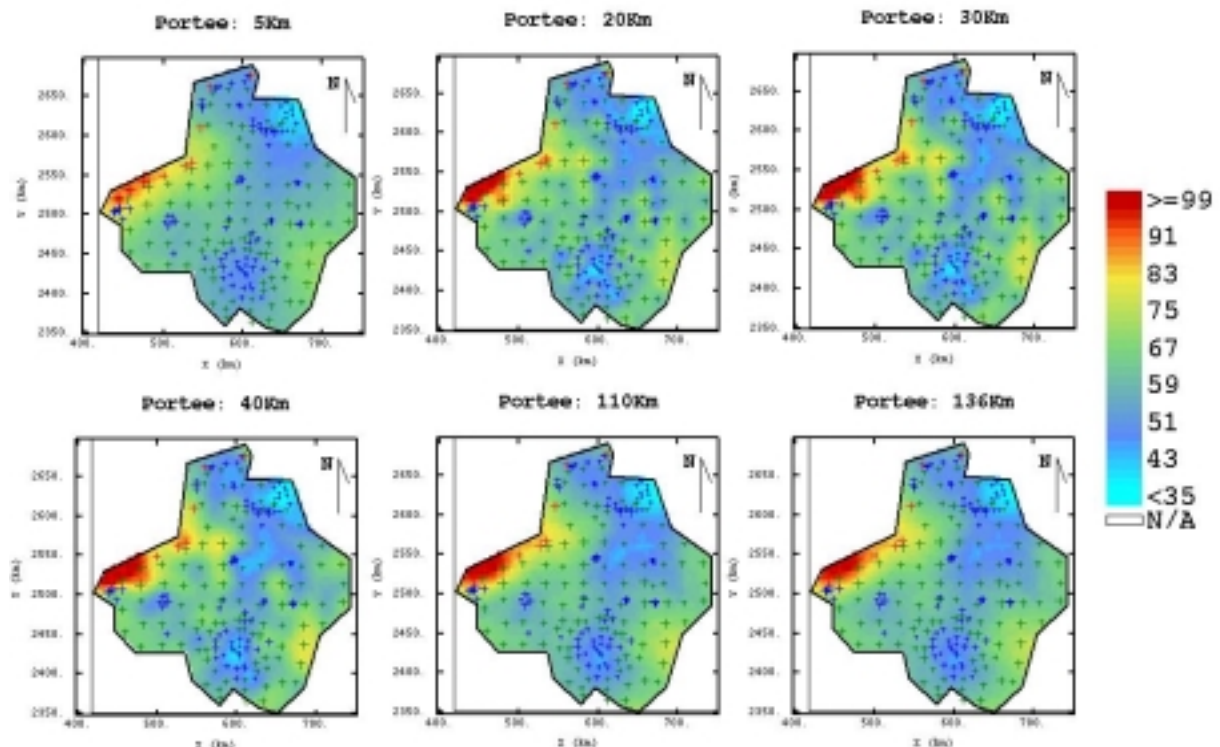


Figure 18 : Analyse de sensibilité à la portée: cartes d'estimation de la concentration d'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

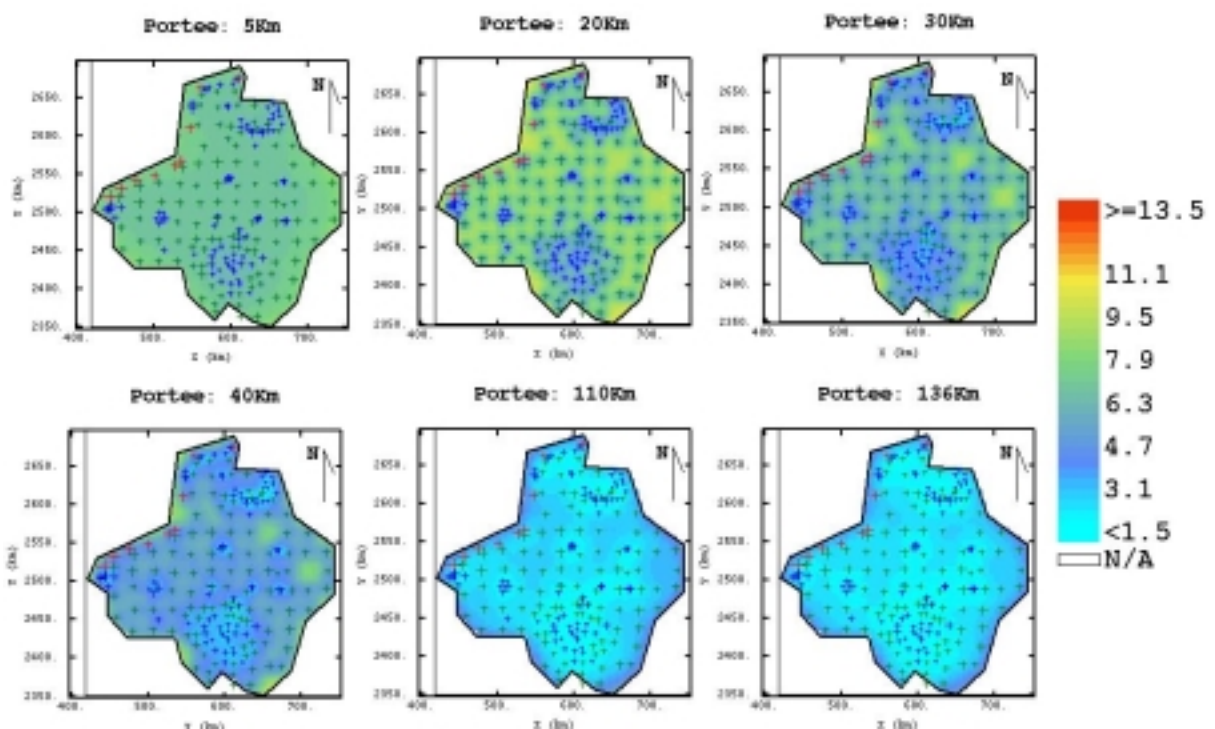


Figure 19 : Analyse de sensibilité à la portée: cartes de l'écart-type de l'erreur d'estimation pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc avec effet de pépite

Jusqu'à 30 km, la concentration moyenne estimée dans le domaine d'étude s'accroît (Figure 17). En effet, la zone d'influence des données du littoral (fortes concentrations) augmente avec la portée de la première structure (Figure 18). Au delà de 30 km, cet effet s'atténue. La concentration moyenne d'ozone diminue puis se stabilise. On observe un léger effet de lissage (l'écart-type des concentrations estimées décroît).

L'écart-type de l'erreur de krigeage se montre sensible à la portée. Il augmente tout d'abord légèrement puis diminue au fur et à mesure que la portée s'allonge (phénomène de plus en plus structuré). Ce gain de précision n'est toutefois qu'apparent puisque le modèle s'éloigne de plus en plus du variogramme expérimental.

4.4 SENSIBILITE A L'EFFET DE PEPITE

On fait varier l'effet de pépite entre $5 (\mu\text{g}/\text{m}^3)^2$ (la variabilité des concentrations entre deux points très proches est supposée quasi-nulle) et $100 (\mu\text{g}/\text{m}^3)^2$ (la variabilité des concentrations entre deux points très proches est estimée par extrapolation du variogramme expérimental). Le cas sans effet de pépite n'est pas considéré car il induit des instabilités numériques, pour des modèles gaussiens.

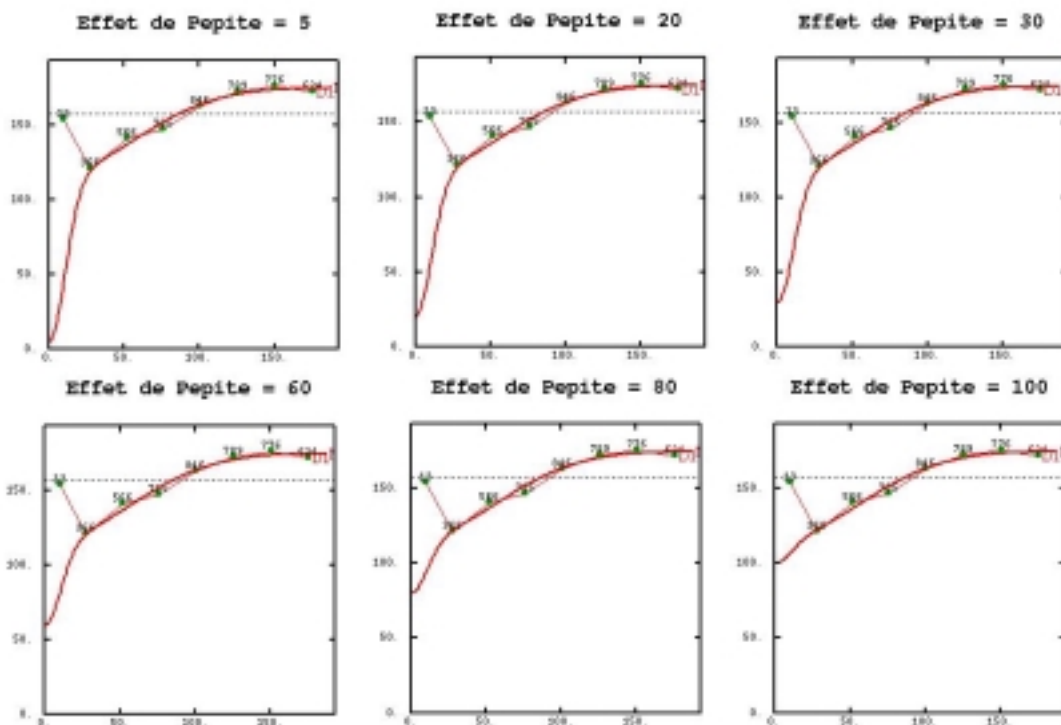
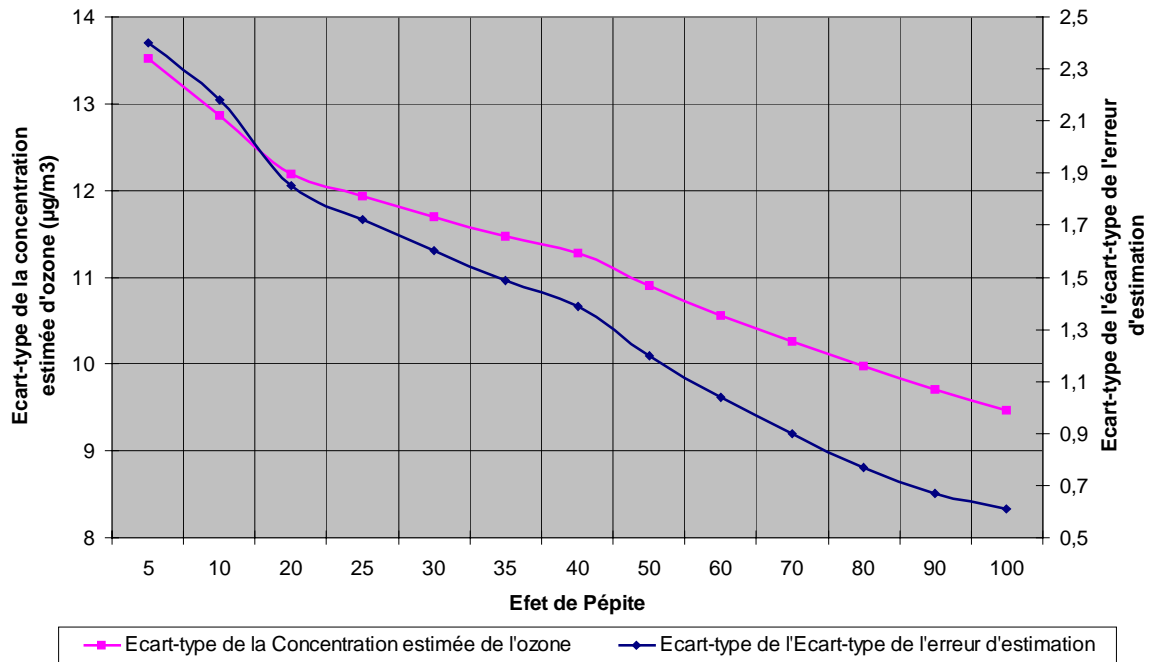


Figure 20 : Analyse de sensibilité à l'effet de pépite: évolution de l'effet de petite et du palier de la première structure gaussienne du modèle de la concentration de l'ozone

Les estimations comme les écarts-types de krigeage se révèlent très sensibles à l'effet de pépite. Plus l'effet de pépite est grand, plus la carte d'estimation et la carte d'écart-type sont lissées.



<i>effet de pépite</i>	5	10	20	25	30	35	40	50	60	70	80	90	100
Concentration estimée de l'ozone	62	62	62	62	61	61	61	61	61	61	61	61	60
Ecart-type de la concentration estimée	14	13	12	12	12	11	11	11	11	10	10	10	9
Ecart-type de l'erreur d'estimation	5,9	6,1	6,3	6,4	6,4	6,4	6,4	6,3	6,1	5,9	5,6	5,1	4,6
Ecart-type de l'écart-type de l'erreur d'estimation	2,4	2,2	1,9	1,7	1,6	1,5	1,4	1,2	1,0	0,9	0,8	0,7	0,6

Figure 21 : Analyse de sensibilité à l'effet de pépite: Evolution de l'écart-type de krigeage et de l'écart-type de l'écart-type de l'erreur d'estimation pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc (maille d'estimation : 5km x 5 km)

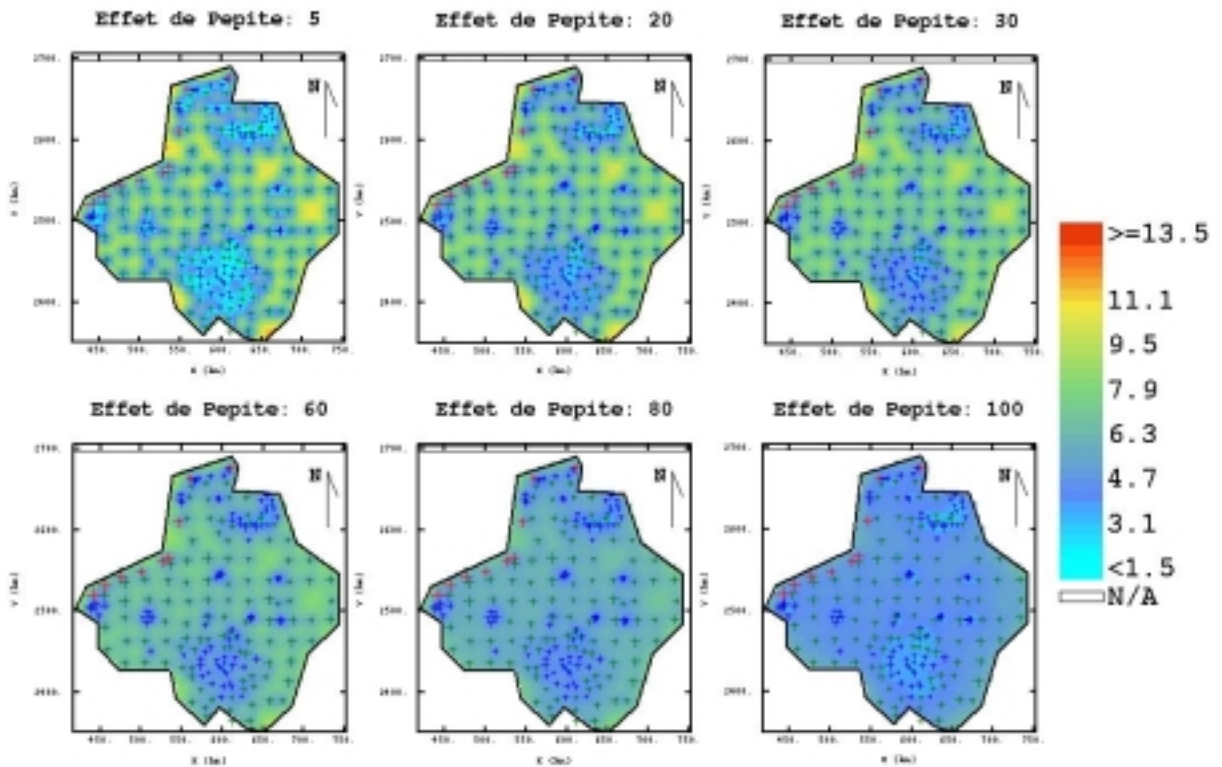


Figure 22 : Analyse de la sensibilité à l'effet de pépite: cartes de l'écart-type de l'erreur d'estimation pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc

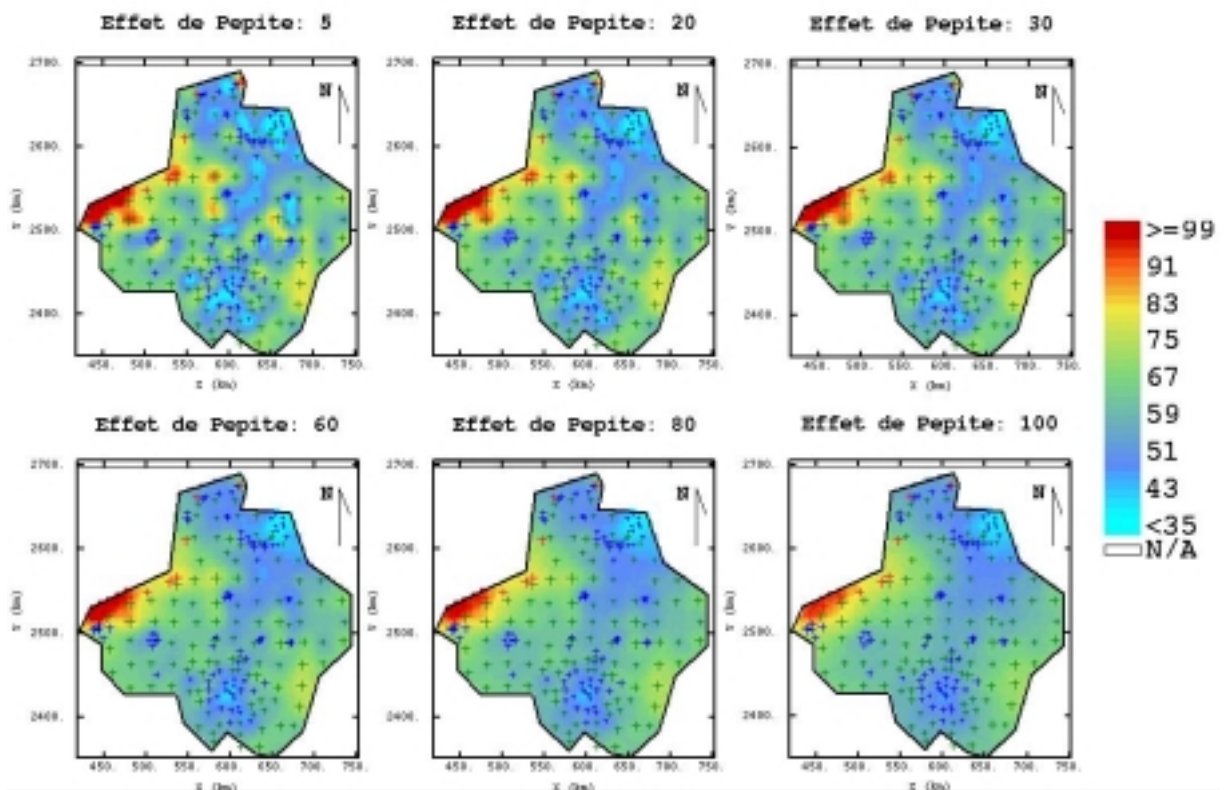


Figure 23 : Analyse de sensibilité à l'effet de pépite: cartes de la concentration d'ozone pour des estimations par krigeage ordinaire de bloc

5. ESTIMATION D'UN INTERVALLE DE CONFIANCE EN GEOSTATISTIQUE LINEAIRE ET NON LINEAIRE

Comme on l'a vu, la validation croisée et la carte d'écart-type de krigeage apportent, malgré leurs limites, des informations utiles pour apprécier la fiabilité du modèle et la précision de la carte d'estimation. D'autre part, l'analyse de sensibilité présentée au chapitre précédent a permis de prendre la mesure de l'influence de certains paramètres sur les résultats du krigeage et, par suite, des conséquences que peuvent avoir les incertitudes associées à ces paramètres.

Dans ce chapitre nous proposons de compléter ces informations, en cherchant à répondre plus exactement à la question initialement posée : les concentrations estimées satisfont-elles, d'un point de vue spatial, au critère d'incertitude fixé par les directives ?

Nous nous intéressons à cette fin **au calcul d'intervalles de confiance**, qui a été déjà introduit au chapitre 3.

Soit Z^* la concentration estimée en un point quelconque du domaine et Z la concentration vraie mais inconnue en ce même point. Soient a et b les bornes inférieure et supérieure de l'intervalle qui encadre Z avec un taux de confiance X .

Il y a $X\%$ de chances pour que la concentration Z soit comprise entre a et b :

$$a \leq Z \leq b \text{ au taux de confiance } X \quad (1)$$

$$\text{Or, } \frac{|Z^* - Z|}{Z} \leq d_{\max} \Leftrightarrow -d_{\max} \leq \frac{Z^* - Z}{Z} \leq d_{\max} \Leftrightarrow \frac{1}{1 + d_{\max}} Z^* \leq Z \leq \frac{1}{1 - d_{\max}} Z^* \quad (2)$$

$$(0 < d_{\max} < 1)$$

Une **condition suffisante** pour que les inégalités de (2) soient vérifiées est donc, au taux de confiance X :

$$\left\{ \begin{array}{l} a \geq \frac{1}{1 + d_{\max}} Z^* \\ \text{et} \\ b \leq \frac{1}{1 - d_{\max}} Z^* \end{array} \right. \Leftrightarrow \boxed{(1 - d_{\max}) \cdot b \leq Z^* \leq (1 + d_{\max}) \cdot a} \quad (3)$$

Plus le taux de confiance imposé est élevé, plus a diminue et b augmente, donc plus les conditions sur la concentration estimée Z^* sont restrictives.

En toute rigueur, il conviendrait de prescrire $X=100\%$. Néanmoins un taux de 95% est couramment utilisé dans les évaluations d'incertitudes. Cette valeur a été retenue dans l'exemple traité mais la méthodologie développée en géostatistique non linéaire s'applique à n'importe quel degré de confiance.

Dans toute la suite, on considère des estimations ponctuelles.

5.1 GEOSTATISTIQUE LINEAIRE

L'évaluation d'intervalles de confiance à partir de l'écart-type de krigeage a été évoquée au chapitre 3, avec toutes les réserves qu'on peut émettre sur ce calcul.

En supposant que la distribution des erreurs suit une loi gaussienne (hypothèse 1), l'intervalle de confiance à 95% est donné par:

$$Z^* - 1,96\sigma_K \leq Z \leq Z^* + 1,96\sigma_K \text{ (Chilès et Delfiner, 1999)}$$

Par simplification, on écrit généralement :

$$Z^* - 2\sigma_K \leq Z \leq Z^* + 2\sigma_K$$

La condition (3) devient donc :

$$(1 - d_{\max})(Z^* + 2\sigma_K) \leq Z \leq (1 + d_{\max})(Z^* - 2\sigma_K) \Leftrightarrow$$

$$\Leftrightarrow \frac{\sigma_K}{Z^*} \leq \frac{d_{\max}}{2(1 - d_{\max})} \text{ et } \frac{\sigma_K}{Z^*} \leq \frac{d_{\max}}{2(1 + d_{\max})}$$

$$\Leftrightarrow \boxed{\frac{\sigma_K}{Z^*} \leq \frac{d_{\max}}{2(1 + d_{\max})}}$$

puisque $\frac{d_{\max}}{2(1 + d_{\max})} \leq \frac{d_{\max}}{2(1 - d_{\max})}$

Avec l'hypothèse moins contraignante que cette distribution est continue et unimodale (hypothèse 2), l'intervalle de confiance à 95% devient :

$$Z^* - 3\sigma_K \leq Z \leq Z^* + 3\sigma_K \text{ (Chilès et Delfiner, 1999)}$$

La condition (3) s'écrit alors :

$$\boxed{\frac{\sigma_K}{Z^*} \leq \frac{d_{\max}}{3(1 + d_{\max})}}$$

L'observation de l'histogramme des erreurs de validation croisée est un moyen empirique de contrôler si les hypothèses 1 ou 2 sont raisonnables. Toutefois, rien ne permet rigoureusement de vérifier ces hypothèses.

En admettant que l'une ou l'autre est valide, alors le calcul du rapport σ_K/Z^* en tout point de la grille d'estimation nous fournit les informations suivantes :

Tableau 3 – Ecart-type de krigeage et incertitude d'estimation

Hypothèse	Valeur du rapport σ_K/Z^*	Conclusion sur l'incertitude
En tout point x, l'erreur d'estimation a une distribution gaussienne	$\sigma_K/Z^* \leq d_{max}/2(1+d_{max})$	$ Z^*-Z /Z \leq d_{max}$
	$\sigma_K/Z^* \geq d_{max}/2(1+d_{max})$	On ne peut pas conclure. L'incertitude peut dépasser d_{max}
En tout point x, l'erreur d'estimation a une distribution continue et unimodale	$\sigma_K/Z^* \leq d_{max}/3(1+d_{max})$	$ Z^*-Z /Z \leq d_{max}$
	$\sigma_K/Z^* \geq d_{max}/3(1+d_{max})$	On ne peut pas conclure. L'incertitude peut dépasser d_{max} .

La carte du rapport σ_K/Z^* permet donc de repérer les zones où les concentrations sont correctement estimées et celles où le respect des objectifs de qualité n'est pas garanti.

Exemple :

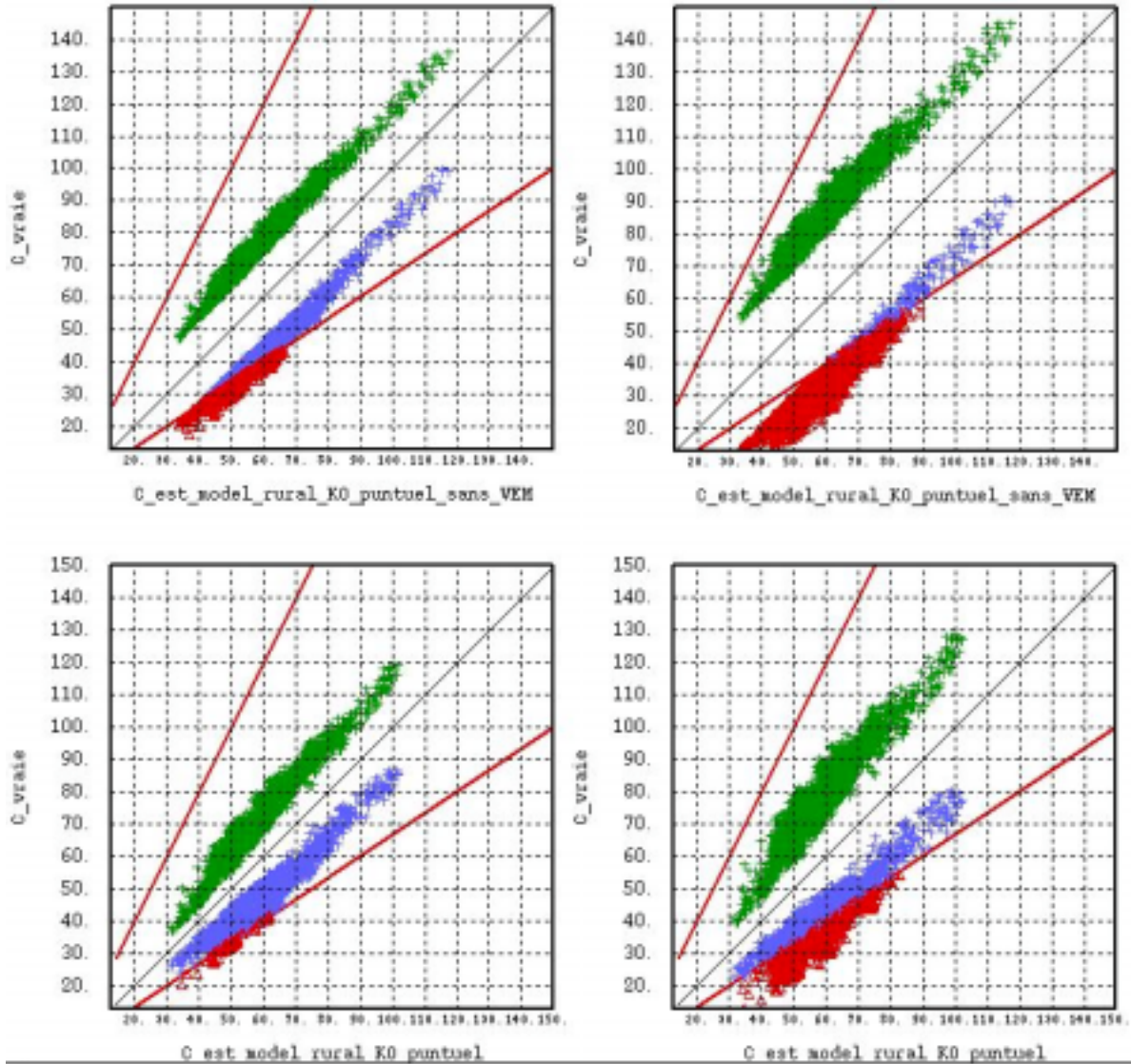
Le calcul des intervalles de confiance à l'aide de l'écart-type de krigeage a été effectué dans l'étude présentée en annexe (Figure 24, Figure 25).

Il n'existe pas d'objectif de qualité pour l'évaluation de la concentration hebdomadaire d'ozone. Une valeur de 50%, qui correspond à l'objectif de qualité pour des moyennes horaires d'ozone et pour des moyennes journalières de NO₂, a été retenue.

On obtient alors les critères suivants :

- Avec l'hypothèse de distribution gaussienne, l'objectif est respecté si $\sigma_K/Z^* \leq 1/6$
- Avec l'hypothèse de distribution continue et unimodale, l'objectif est respecté si $\sigma_K/Z^* \leq 1/9$.

Les zones susceptibles d'enfreindre le critère sont moins étendues dans le cas d'un krigeage de blocs. Ce résultat ne surprend pas, puisque l'écart-type de krigeage est plus faible. De même, dans un krigeage ponctuel avec variance de l'erreur de mesure (VEM), les zones de dépassement potentiel sont plus restreintes que dans un krigeage avec effet de pépité, en raison du mode de calcul de la variance de krigeage. De plus, la largeur des intervalles de confiance semble croître avec les concentrations, ce qui peut s'expliquer par la dépendance de la VEM vis à vis de ces dernières.



Figures du haut: Intervalles de confiance pour une estimation par krigeage ordinaire – modèle avec effet de pépite

Figures du bas: Intervalles de confiance pour une estimation par krigeage ordinaire avec VEM

Figures à gauche : Intervalles de confiance en prenant en compte deux fois l'écart-type

Figures à droite : Intervalles de confiance en prenant en compte trois fois l'écart-type

Croix bleues : Limite inférieure de l'intervalle de confiance à 95%.

Croix vertes: Limite supérieure de l'intervalle de confiance à 95%.

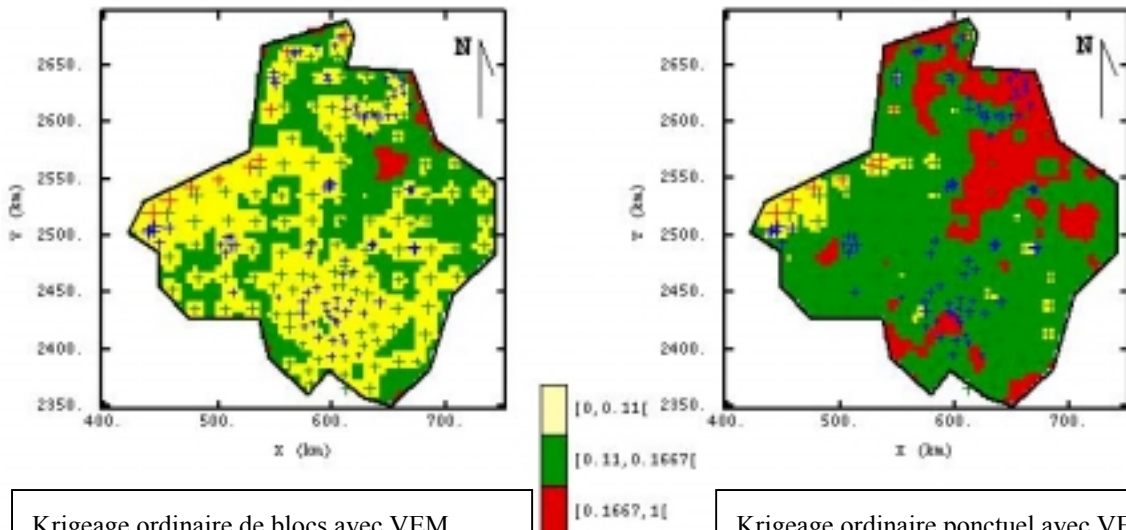
Lignes épaisses rouges : elles délimitent la zone à l'intérieur de laquelle le critère de 50% est respecté, avec un taux de confiance de 95%.

Triangles rouges : Valeurs pour lesquelles le critère de 50% d'erreur n'est pas garanti.

Figure 24 – Calcul d'intervalles de confiance en tout point de la grille d'estimation à l'aide de l'écart-type de krigeage.

Krigeage ordinaire de blocs avec effet de pépité

Krigeage ordinaire ponctuel avec effet de pépité



Krigeage ordinaire de blocs avec VEM

Krigeage ordinaire ponctuel avec VEM

Figure 25 – Cartes du rapport écart-type/estimation

5.2 GEOSTATISTIQUE NON LINEAIRE

La géostatistique non linéaire propose différentes méthodes pour calculer des intervalles de confiance. Dans cette étude, nous nous attacherons à l'espérance conditionnelle et aux simulations conditionnelles.

5.2.1 Introduction aux méthodes de la géostatistique non linéaire

En géostatistique linéaire, la valeur de la concentration en tout point du domaine d'étude est estimée par une combinaison linéaire des mesures expérimentales. A cette valeur est associée la variance (ou écart-type) de l'erreur d'estimation.

Dans l'exemple traité en annexe, prenons au hasard la concentration d'un des blocs estimée par krigeage ordinaire avec variance de l'erreur de mesure : $75.54 \mu\text{g}/\text{m}^3$, et l'écart-type de l'erreur qui lui est associé : $3.25 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Comme cet écart-type est faible, la valeur vraie a de plus grandes chances d'approcher la valeur estimée (sous réserve d'un ajustement correct du modèle variographique) et d'être inférieure à $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Prenons en revanche une valeur estimée de $71.9 \mu\text{g}/\text{m}^3$ avec un écart-type de $9.2 \mu\text{g}/\text{m}^3$. Dans ce cas, la valeur estimée ne fournit qu'une tendance moyenne. Le fait qu'elle soit inférieure à $80 \mu\text{g}/\text{m}^3$ n'implique pas qu'il en aille de même pour la valeur vraie.

Cette remarque est essentielle si on cherche à estimer en un point x (ou sur un bloc v) le dépassement par la concentration d'un seuil réglementaire, événement représenté par l'indicatrice par $I_{Z(x) > \text{seuil}}$.

$$I_{Z(x) > \text{seuil}} = 1 \text{ si } Z(x) > \text{seuil}$$

$$I_{Z(x) \leq \text{seuil}} = 0 \text{ sinon}$$

Par suite, réaliser une estimation par krigeage de la concentration ne répond pas au problème de l'estimation de fonctions de $Z(x)$ comme les indicatrices. Il convient de faire appel aux méthodes non linéaires, telles que l'espérance conditionnelle, le krigeage disjonctif ou les simulations conditionnelles.

5.2.2 L'espérance conditionnelle

Principe

Le meilleur estimateur de l'indicatrice $I(Z(x) \geq \text{seuil})$ conditionnée par les données $Z(x_i)$ est l'espérance conditionnelle :

$$E[I_{Z(x) \geq \text{seuil}}] = P[Z(x) \geq \bar{s} / Z(x_i) = z_i, i = 1, \dots, N]$$

Cette espérance conditionnelle n'est calculable que si la fonction aléatoire est multigaussienne. La loi (multivariable) des variables $Z(x), Z(x_1), \dots, Z(x_N)$ est alors multigaussienne (i.e. toute combinaison linéaire de ces variables est encore gaussienne).

En conséquence de cette propriété, la loi de $Z(x)$ conditionnellement aux données $Z(x_i)$ est une loi gaussienne ayant pour moyenne le krigeage simple de $Z(x)$ ($Z(x)^{KS}$) et pour variance, la variance de krigeage simple de $Z(x)$ (σ_{KS}^2).

Notons :

$[Z(x) / Z(x_i) = z_i, i = 1 \dots N]$, la loi gaussienne de moyenne $Z(x)^{KS}$ et d'écart-type σ_{KS}

$$U = \frac{[Z(x) / Z(x_i) = z_i, i = 1, \dots, N] - Z(x)^{KS}}{\sigma_{KS}}, \text{ la gaussienne réduite}$$

$$G(x) = P[U \leq x] = \frac{1}{\sqrt{2 * \pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{U^2}{2}} * dU, \text{ la fonction de répartition de cette gaussienne}$$

La probabilité de dépassement du seuil s s'écrit :

$$P[Z(x) \geq \text{seuil}] = E[1_{Z(x) \geq \text{seuil}}] = 1 - G\left(\frac{\text{seuil} - Z(x)^{KS}}{\sigma_{KS}}\right)$$

Et la probabilité d'être inférieur au seuil vaut :

$$P[Z(x) \leq \text{seuil}] = E[1_{Z(x) \leq \text{seuil}}] = G\left(\frac{\text{seuil} - Z(x)^{KS}}{\sigma_{KS}}\right)$$

Cette formule est encore valable si l'on s'intéresse à des blocs mais cela nécessite au préalable un changement de support spatial.

Afin d'assurer que $Z(x)$ possède une distribution gaussienne, il est nécessaire de transformer la variable originale. On note ainsi plus couramment $Z(x)$ cette variable brute et $Y(x)$ sa transformée gaussienne. Le calcul de l'espérance s'applique donc à $Y(x)$, avec, pour seuil, la transformée gaussienne du seuil associé à $Z(x)$.

La méthode choisie pour ces transformations est appelée **anamorphose gaussienne**.

En résumé, il suffit donc :

- de réaliser
 - l'anamorphose gaussienne de la variable de concentration (Z),
 - l'analyse variographique de la variable transformée (Y),
- puis de calculer successivement :
 - le krigeage simple et l'écart-type de krigeage de Y ,
 - le rapport $U_0 = [(\text{seuil} - Y^{KS}) / \sigma_{KS}]$,
 - et enfin la valeur normale $[G(U_0)]$.

Calcul d'intervalles de confiance

Pour estimer un intervalle de confiance, on procède de façon inverse. En effet, il ne s'agit plus de calculer la probabilité à partir d'un seuil donné mais de calculer le seuil à partir d'une probabilité P donnée

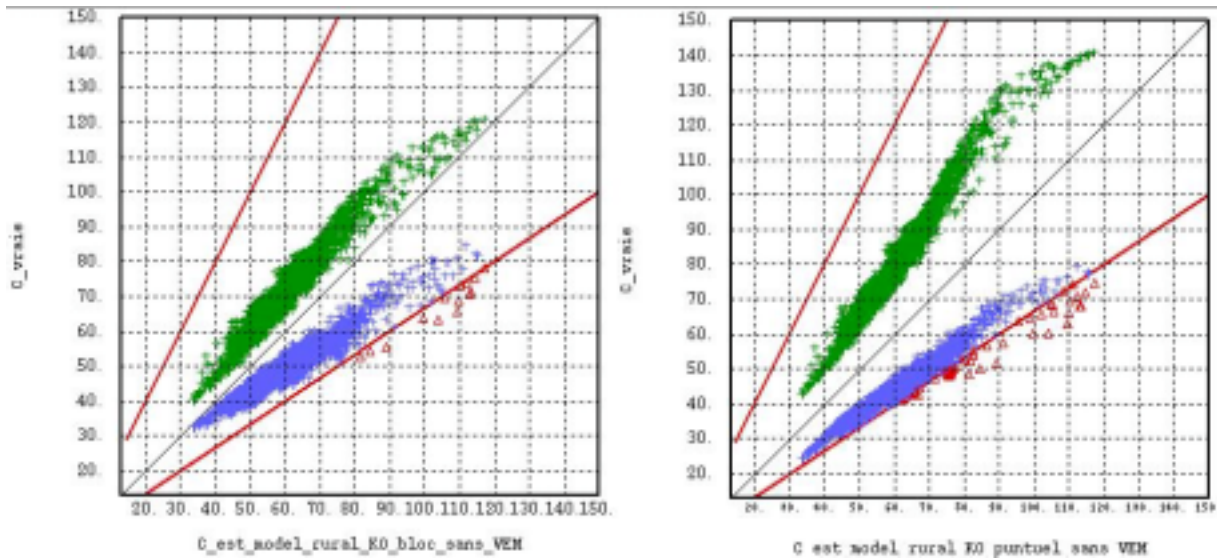
$$\text{seuil}_{\text{inf}} = G^{-1}\{P[Y(x) \leq \text{seuil}]\} * \sigma_{KS} + Y(x)^{KS} \quad \text{seuil}_{\text{sup}} = G^{-1}\{1 - P[Y(x) \geq \text{seuil}]\} * \sigma_{KS} + Y(x)^{KS}$$

Ces expressions permettent d'évaluer une valeur de centile et d'en déduire l'intervalle de confiance au taux souhaité. La valeur inférieure d'un intervalle de confiance à 95% est le seuil dont la probabilité de dépassement est de 97.5% (soit $95 + [100 - 95] / 2$) et la valeur supérieure est le seuil dont la probabilité de dépassement est de 2.5% (soit $[100 - 95] / 2$) :

$$\text{seuil}_{\text{inf}} = -1.96 * \sigma_{KS} + Y(x)^{KS} \quad \text{seuil}_{\text{sup}} = -1.96 * \sigma_{KS} + Y(x)^{KS}$$

Ces seuils s'écrivent de la même manière que les bornes de l'intervalle de confiance obtenues pour la variable $Z(x)$ à partir de l'écart-type de krigeage ordinaire. Mais les formules s'appliquent ici à $Y(x)$, variable gaussienne, et elles n'exigent aucune hypothèse sur la loi de distribution de l'erreur.

Finalement, les seuils calculés pour $Y(x)$ sont transformés par l'inverse de la fonction d'anamorphose, fournissant les bornes de l'intervalle de confiance associé à $Z(x)$.



Intervalles de confiance obtenus par espérance conditionnelle sans VEM (avec effet de pépite), pour chaque point (à gauche) ou chaque bloc (à droite) de la grille d'estimation

Croix bleues : Limite inférieure de l'intervalle de confiance à 95%.

Croix vertes: Limite supérieure de l'intervalle de confiance à 95%.

Lignes épaisses rouges : elles délimitent la zone à l'intérieur de laquelle le critère de 50% est respecté, avec un taux de confiance de 95%.

Triangles rouges : Valeurs pour lesquelles le critère de 50% d'erreur n'est pas garanti.

Figure 26 – Calcul d'intervalles de confiance en tout point de la grille d'estimation à l'aide des simulations conditionnelles.

Les intervalles de confiance ainsi obtenus ne sont plus nécessairement centrés sur les valeurs estimées (Figure 26). Leur largeur augmente visiblement avec la concentration.

Le nombre de valeurs dont l'incertitude peut dépasser 50% diminue. En outre, ces concentrations sont localisées en périphérie du domaine de calcul où, comme on sait, le krigeage est moins précis.

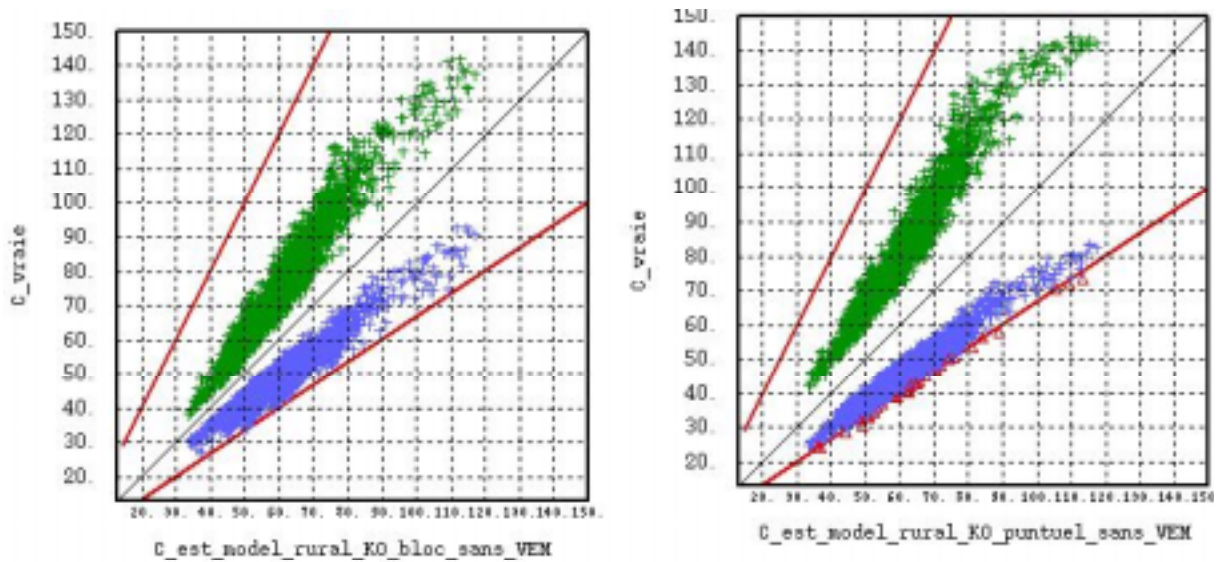
5.2.3 Les simulations conditionnelles

Cette technique, comme la précédente, suppose de transformer la variable originale $Z(x)$ par une fonction d'anamorphose gaussienne.

La différence avec l'espérance conditionnelle réside dans la seconde étape. Celle-ci consiste à simuler en tout point de la grille d'estimation plusieurs réalisations possibles (quelques dizaines ou quelques centaines) de la variable gaussienne $Y(x)$.

De ces simulations on déduit n'importe quel quantile pour $Y(x)$ et, par transformation inverse, n'importe quel intervalle de confiance pour $Z(x)$.

Dans l'exemple qui suit, deux cents simulations ont été réalisées afin d'estimer en tout point de grille l'intervalle de confiance à 95%.



Intervalle de confiance obtenus par simulations conditionnelles sans VEM (avec effet de pépite), pour chaque point (à gauche) ou chaque bloc (à droite) de la grille d'estimation

Croix bleues : Limite inférieure de l'intervalle de confiance à 95%.

Croix vertes: Limite supérieure de l'intervalle de confiance à 95%.

Lignes épaisses rouges : elles délimitent la zone à l'intérieur de laquelle le critère de 50% est respecté, avec un taux de confiance de 95%.

Triangles rouges : Valeurs pour lesquelles le critère de 50% d'erreur n'est pas garanti.

Figure 27 – Calcul d'intervalles de confiance en tout point de la grille d'estimation à l'aide des simulations conditionnelles.

Les résultats ressemblent logiquement à ceux de l'espérance conditionnelle (Figure 27). Quelques différences apparaissent pour les plus fortes concentrations.

5.3 COMPARAISON ENTRE LES METHODES – BILAN

Dans la suite, nous désignons par :

- $IC_{\pm 2\sigma}$, l'intervalle de confiance obtenu en ajoutant à l'estimation plus ou moins deux fois l'écart-type de krigeage,
- $IC_{\pm 3\sigma}$, l'intervalle de confiance obtenu en ajoutant à l'estimation plus ou moins trois fois l'écart-type de krigeage,
- IC_{EC} , l'intervalle de confiance obtenu par espérance conditionnelle,
- IC_{SC} , l'intervalle de confiance obtenu par simulations conditionnelles.

Comparaison entre $IC_{\pm 2\sigma}$ (ou $IC_{\pm 3\sigma}$) et IC_{EC} (ou IC_{SC})

En krigeage ordinaire, la largeur des intervalles $IC_{\pm 2\sigma}$ ne dépend pas de la valeur numérique des concentrations. Comparés aux IC_{EC} (ou aux IC_{SC}), les $IC_{\pm 2\sigma}$ sont plus larges pour les faibles valeurs et plus resserrés pour les fortes valeurs.

Cette remarque vaut aussi pour les $IC_{\pm 3\sigma}$, qui n'englobent pas nécessairement les IC_{EC} (ou les IC_{SC}), ainsi qu'on aurait pu s'y attendre (Figure 28, Figure 29).

Si les méthodes de la géostatistique non linéaire exigent de se placer dans le cadre multigaussien, elles ne requièrent aucune hypothèse sur la loi de distribution des erreurs. En particulier, elles ne supposent pas que cette distribution est symétrique autour de zéro. Les intervalles de confiance ainsi calculés sont plus réalistes que les intervalles déduits de l'écart-type de krigeage ordinaire.

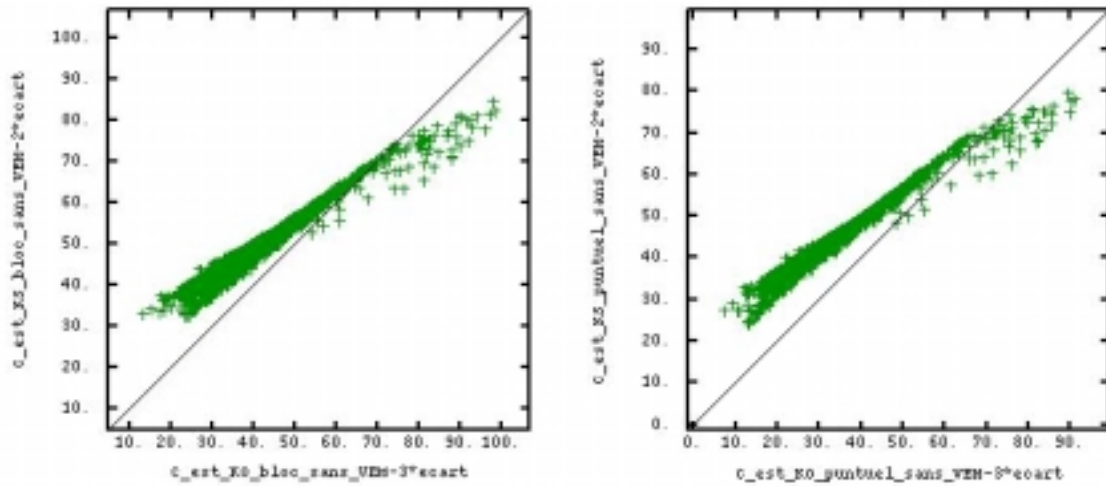


Figure 28 : Nuages de corrélation entre la borne inférieure de l'IC95%, calculée par espérance conditionnelle (axe Y), et la borne inférieure de l'IC95%, calculée soustrayant à l'estimation trois fois l'écart-type de krigeage (axe X)

A gauche : krigeage de bloc (maille de 5 km), à droite : krigeage ponctuel

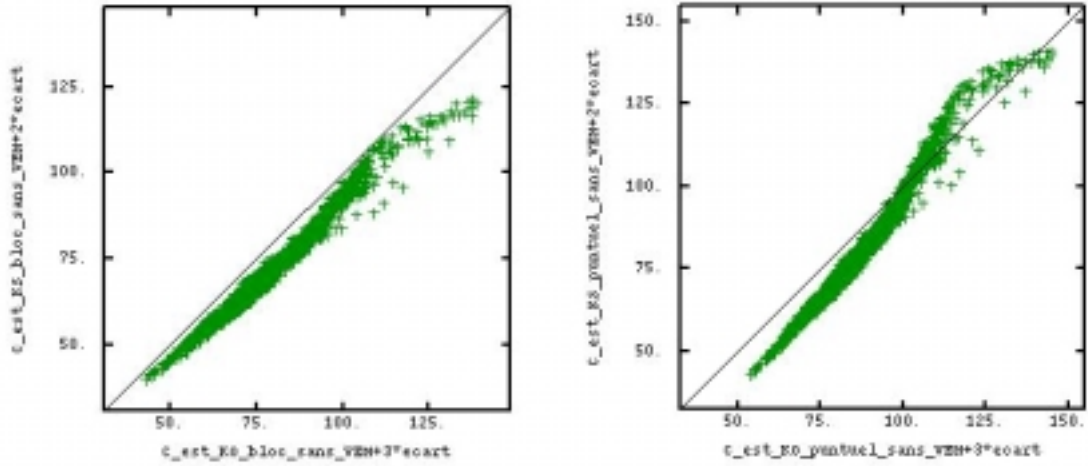


Figure 29 : Nuages de corrélation entre la borne supérieure de l'IC95%, calculée par l'espérance conditionnelle (axe Y), et la borne supérieure de l'IC95%, calculée ajoutant à l'estimation trois fois l'écart-type de krigeage (axe X)

A gauche : krigeage de bloc (maille de 5 km), à droite : krigeage ponctuel

Comparaison entre IC_{EC} et IC_{SC}

Comme l'indiquent les nuages de corrélation (Figure 30, Figure 31), les intervalles de confiance calculés par espérance conditionnelle et par simulations conditionnelles se ressemblent. Les écarts les plus sensibles entre ces deux méthodes s'observent dans la gamme des plus fortes concentrations.

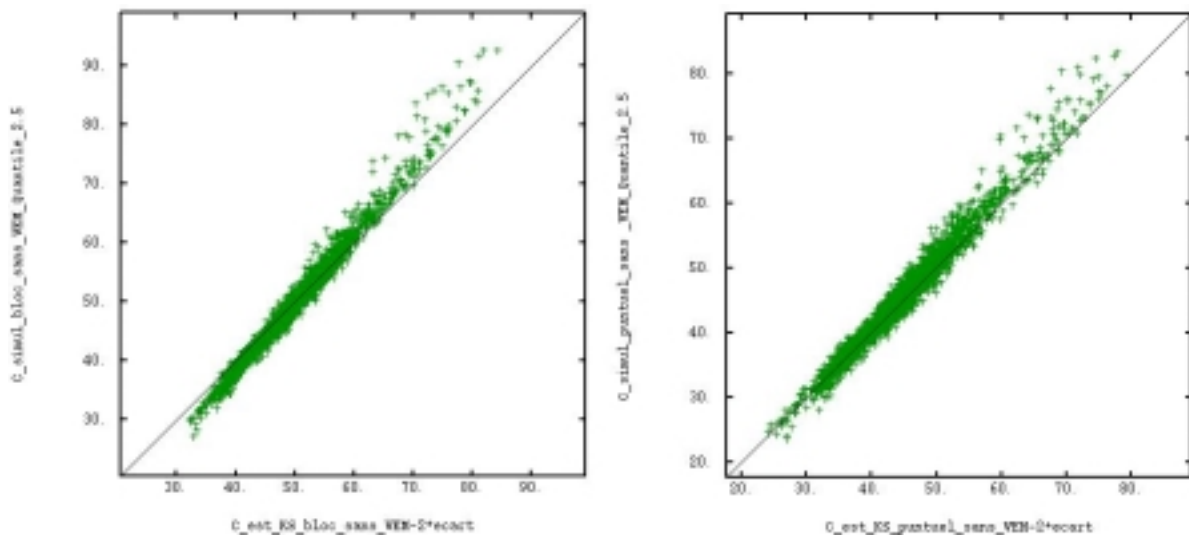


Figure 30 : Nuages de corrélation entre la borne inférieure de l'IC95%, calculée par simulations conditionnelles (axe Y), et la borne inférieure de l'IC95%, calculée par espérance conditionnelle (axe X)

A gauche : krigeage de bloc (maille de 5 km), à droite : krigeage ponctuel

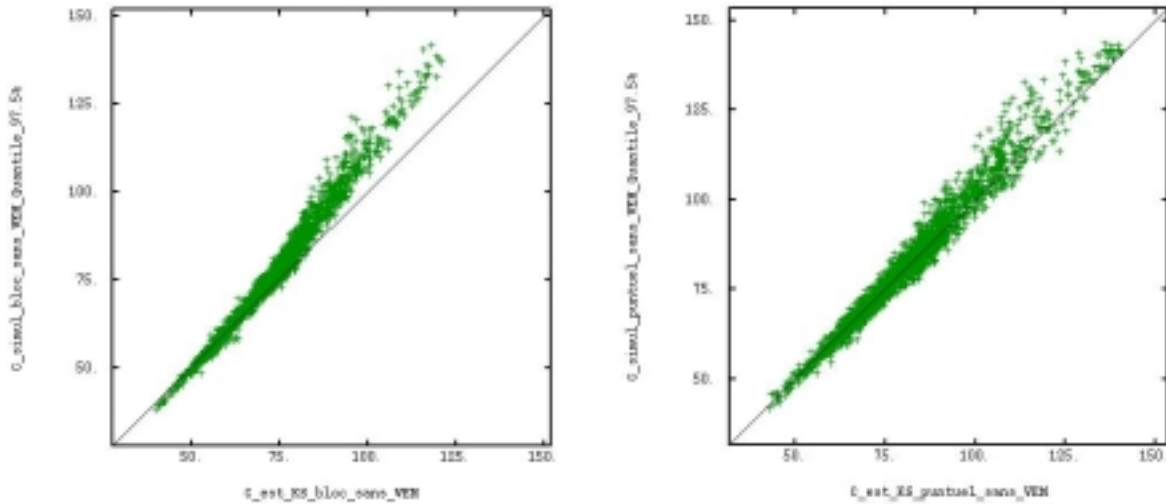


Figure 31 : Nuages de corrélation entre la borne supérieure de l'IC95%, calculée par simulations conditionnelles (axe Y), et la borne supérieure de l'IC95%, calculée par espérance conditionnelle (axe X)

A gauche : krigeage de bloc (maille de 5 km), à droite : krigeage ponctuel

Bilan

L'utilisation des méthodes non linéaires entraîne des calculs supplémentaires par rapport au krigeage ordinaire et se révèle plus coûteuse que la simple exploitation des écarts-types d'estimation. En présence de variables auxiliaires, l'espérance ou les simulations conditionnelles s'appliquent encore mais une analyse multivariable doit être conduite dans l'espace de la variable gaussienne Y.

Pour une évaluation plus précise des intervalles de confiance, le recours à ces méthodes est néanmoins préférable. L'espérance conditionnelle a l'avantage d'une plus grande simplicité de mise en œuvre.

6. SYNTHÈSE – RECOMMANDATIONS

L'objet de ce document était de fournir des éléments méthodologiques permettant d'évaluer l'incertitude finale de la carte d'estimation.

Nous nous sommes exclusivement consacré à l'incertitude associée à l'interpolation spatiale. L'incertitude due à l'éventuelle extrapolation dans le temps des données d'échantillonnage n'a pas été considérée. Ce problème sera plus particulièrement étudié en 2004.

- ✎ Les directives européennes définissent des objectifs de qualité pour les résultats de la modélisation, qu'il s'agisse de modélisation déterministe ou d'estimation géostatistique. Ces objectifs s'expriment comme la différence relative maximale entre concentration modélisée et observée. Ils dépendent du polluant et du support temporel des données. Il n'existe pas de prescription particulière quant au support spatial.
- ✎ De multiples sources d'incertitude contribuent à l'incertitude finale sur la carte d'estimation :
 - L'incertitude liée à la technique de mesure (tube passif, analyseur automatique) et à l'échantillonnage (dans l'espace et le temps)
 - L'incertitude sur les paramètres du modèle
 - L'incertitude sur les paramètres de l'estimation (voisinage de krigeage, support de l'estimation)
 - L'incertitude due au caractère aléatoire de la variable de pollution.
- ✎ S'il est demandé d'évaluer a posteriori l'incertitude sur les cartes de concentration, il est tout aussi indispensable de chercher à contrôler ou à réduire au maximum les différents types d'incertitudes qui se présentent, de l'échantillonnage jusqu'à l'estimation.

Ainsi peut-on émettre les recommandations suivantes :

- Echantillonnage : veiller à ce qu'il couvre l'ensemble de la zone d'étude et compte un nombre relativement important de points. Resserer les points dans des zones de forts gradients de concentrations.
L'analyse de sensibilité aux paramètres de l'échantillonnage constitue un moyen utile pour déterminer *a posteriori* le meilleur compromis entre précision de l'estimation et nombre de tubes.
- Paramètres du modèle :
 - Pour définir le modèle de variogramme, sélectionner les types de sites dont les mesures décrivent effectivement le phénomène étudié (mais conserver l'ensemble des sites au moment de l'estimation)
 - Ajuster le variogramme à l'origine en s'aidant de la variance de l'erreur de mesure, estimée grâce aux tubes multiples et aux stations fixes
 - Vérifier que le variogramme ajusté aux courtes distances est compatible avec la variabilité des concentrations observée à petite échelle (par exemple dans les zones urbanisées si l'on réalise une cartographie régionale)

- Voisinage de krigeage : s'assurer qu'il englobe suffisamment de données mais avoir à l'esprit qu'en raison de l'effet d'écran, les données les plus lointaines ont peu de poids dans l'estimation. En pratique, on veillera à ce que le voisinage de chaque point de grille contienne au moins deux auréoles de données.
 - Support d'estimation : Le krigeage de blocs fournit une estimation de la concentration moyenne par maille. La précision de l'estimation à l'intérieur de chaque maille est supérieure à celle d'un krigeage ponctuel. Plus la taille du bloc augmente, meilleure est la précision ; en revanche, la résolution de la carte se détériore. Il s'agit de trouver un compromis entre ces deux effets.
 - L'analyse de sensibilité aux paramètres du modèle variographique et de l'estimation permet d'évaluer leur influence sur les résultats du krigeage.
- ✎ La validation croisée (qui consiste à réestimer la concentration en chaque point de mesure, à l'aide du variogramme et des autres données) ou les méthodes analogues (même procédé mais les points sont éliminés par groupes) sont des moyens d'évaluer comparativement la qualité des estimations associées à différents modèles de variogramme. Ils permettent de disposer en chaque point d'échantillonnage d'une valeur estimée Z^* et de la valeur observée Z .
- Parmi les statistiques d'erreur qui en résultent, on s'intéressera particulièrement à la variance, qui doit être la plus faible possible, et à la variance de l'erreur réduite, qui doit être proche de 1.
 - Les erreurs relatives d'estimation : $|Z_i^* - Z_i|/Z_i$ (i varie de 1 à N où N est le nombre de points de mesure) correspondent à la définition réglementaire de l'incertitude. Elles délivrent une indication sur cette incertitude à l'intérieur de la zone d'échantillonnage mais ne permettent pas de la quantifier dans l'ensemble du domaine.
 - La validation croisée ne constitue toutefois qu'une validation partielle du modèle. Elle ne porte que sur les points qui ont servi à construire le variogramme. D'autre part, les statistiques d'erreur sont sensibles à la configuration de l'échantillonnage. A cause de cela, il est conseillé de réaliser la validation croisée sur plusieurs jeux de données choisis aléatoirement parmi les données initiales (ex : 10% des données), et de comparer les statistiques d'erreur associées à chaque jeu.
- ✎ La variance de krigeage fournit une mesure de la dispersion possible de la valeur vraie autour de la valeur estimée.
- Par l'intermédiaire de la variance de l'erreur de mesure ou de l'effet de pépite, elle tient compte de la variabilité due aux erreurs sur les données de concentration. La façon dont cette variabilité agit sur la variance de krigeage n'est cependant pas aisément prévisible ; elle dépend à la fois du support d'estimation (point, bloc) et du type de modélisation choisi (VEL ou effet de pépite).
 - Elle intègre l'incertitude liée à l'échantillonnage spatial, augmentant dans les zones pauvres en données, diminuant dans les zones riches en points de mesure.

- Elle inclut également l'effet du voisinage de krigeage.
- Elle reflète, en moyenne dans le domaine, l'incertitude liée à la variabilité du phénomène de pollution et augmente avec cette variabilité.
- La carte du rapport entre écart-type de krigeage et estimation (σ_K/Z^*) est un moyen visuel efficace pour apprécier qualitativement la précision de l'estimation.

La variance de krigeage se révèle néanmoins sensible à certains paramètres du modèle (effet de pépite, palier, portée) et au support d'estimation (point ou bloc, dimensions du bloc).

En outre, l'information apportée par la variance de krigeage ne répond pas exhaustivement au problème de l'évaluation des incertitudes.

- Elle ignore l'incertitude sur les paramètres du modèle.
- Elle ne dépend pas de la valeur numérique des données à l'intérieur du voisinage de krigeage, donc ne tient pas compte de l'incertitude due à la variabilité locale des concentrations.
- Elle permet d'estimer un intervalle de confiance à 95% autour de la concentration vraie mais inconnue, moyennant des hypothèses plus ou moins restrictives sur la loi de distribution des erreurs, hypothèses invérifiables par le calcul.
- Elle a donc principalement une valeur qualitative.

Le calcul d'intervalles de confiance, nécessaire à la vérification du respect des critères de qualité réglementaires, implique de faire appel aux outils de la géostatistique non linéaire.

- ✎ Les méthodes de la géostatistique non linéaire (espérance conditionnelle, simulations conditionnelles) permettent d'estimer, pour n'importe quel taux de confiance, les bornes a et b de l'intervalle qui encadre Z et, ainsi, de s'assurer que la carte d'estimation est en accord, au taux de confiance choisi, avec les objectifs de qualité fixés.

Il suffit de vérifier les inégalités :

$$(1 - d_{\max}) \cdot b \leq Z^* \leq (1 + d_{\max}) \cdot a$$

Z^* : estimation issue du krigeage

a : borne inférieure de l'intervalle de confiance au taux X choisi

b : borne supérieure de l'intervalle de confiance au taux X choisi

d_{\max} : incertitude relative maximale autorisée ($0,3 < d_{\max} < 0,6$ selon le polluant et le support temporel considéré)

- Ces méthodes exigent de transformer au préalable la variable Z par une technique dite d'anamorphose.
- L'usage de ces méthodes ne requiert aucune hypothèse sur la loi de distribution des erreurs. mais la transformée de Z doit être multi-gaussienne.

- Les intervalles de confiance à 95 % obtenus par la géostatistique non linéaire et les intervalles déduits de l'écart-type de krigeage se recouvrent en partie. Les premiers ne supposent pas que la distribution des erreurs d'estimation est symétrique et sont plus réalistes.
 - L'espérance conditionnelle et les simulations fournissent des résultats similaires. Si ces deux méthodes nécessitent le même travail préparatoire (anamorphose gaussienne), l'espérance conditionnelle est plus aisée à appréhender (moins de paramètres à définir).
 - Ces méthodes peuvent être employées en présence de variables auxiliaires, ce qui suppose un travail d'analyse multivariée. Ce point sera abordé en 2004, à l'occasion d'une étude sur les probabilités de dépassement de seuil.
- ✎ L'évaluation rigoureuse de l'incertitude, telle qu'elle est requise par les directives européennes, est loin d'être immédiate. Du seul point de vue spatial, elle implique d'aller au-delà du krigeage linéaire (quel que soit le krigeage mis en œuvre : ordinaire, avec dérive externe, cokrigeage...) et de recourir aux méthodes de la géostatistique non linéaire, comme l'espérance conditionnelle. De ce fait, elle induit une analyse et des calculs additionnels.
- ✎ A l'incertitude purement spatiale, peut s'ajouter l'incertitude liée à l'établissement de cartes annuelles à partir de campagnes de mesure temporaires. Or l'incertitude maximale autorisée pour la moyenne annuelle de SO₂, de NO₂ ou de NO_x (30%) est plus contraignante que dans le cas d'estimations horaires ou journalières. Ce type d'incertitude sera analysé dans une étude sur le problème temporel, prévue pour l'année 2004.

7. REFERENCES

- ARNAUD M. et EMERY X., 2000. Estimation et interpolation spatiale - *Méthodes déterministes et méthodes géostatistiques*. Hermès Science Publication.
- Arrêté du 17 mars 2003 relatif aux modalités de surveillance de la qualité de l'air et à l'information du public.
- BARABÁS N., GOOVAERTS P., ADRIAENS P., 2001. Geostatistical assessment and validation of uncertainty for three-dimensional dioxin data from sediments in an estuarine river. *Environmental Science and Technology*, 35, 3294-3301.
- CATTLE J.A., McBRATNEY A.B., MINASNY B., 2002. Kriging method for assessing the spatial distribution of urban soil lead contamination. *Journal of Environmental Quality*, 31, 1576-1588.
- CHILÈS J.-P., DELFINER P., 1999. *Modeling spatial uncertainty*. John Wiley & Sons, 720 pp.
- Directive du Conseil n° 1999/30/CE du 22 avril 1999 relative à la fixation de valeurs limites pour le dioxyde de soufre, le dioxyde d'azote, les oxydes d'azote, les particules et le plomb dans l'air ambiant
- Directive 2000/69/CE du Parlement et du Conseil du 16 novembre 2000 concernant les valeurs limites pour le benzène et le monoxyde de carbone
- Directive 2002/3/CE du Parlement européen et du Conseil du 12 février 2002 relative à l'ozone dans l'air ambiant
- GOOVAERTS P., 1999. Geostatistics in soil science : state-of-the art and perspectives. *Geoderma*, 89, 1-45.
- GORIA S., 2003. Evaluation de projets miniers et pétroliers dans un cadre bayésien. Thèse de doctorat. Centre de Géostatistique, Ecole des Mines de Paris.
- LOYD C.D., ATKINSON P.M., 2001. Assessing uncertainty in estimates with ordinary and indicator kriging. *Computers & Geosciences*, 27, 929-937.
- MARCOTTE D. Cours de l'Ecole Polytechnique de Montréal. Géologie et géostatistique minières (partie géostatistique). <http://geo.polymtl.ca/~marcotte/g1q3401geo.html>
- MONTEIRO DA ROCHA M., YAMAMOTO J.K., 2000. Comparison between kriging variance and interpolation variance as uncertainty measurements in the Capanema Iron Mine, State of Minas Gerais-Brazil. *Natural Resources Research*, vol. 9, n°3, 2000.
- MOYEED R.A., PAPRITZ A., 2002. An empirical comparison of kriging methods for nonlinear spatial point prediction. *Mathematical geology*, vol. 34, n°4, 365-386.
- PARDO-IGÚZQUIZA E., 1998. Comparison of geostatistical methods for estimating the areal average climatological rainfall mean using data on precipitation and topography. *International Journal of Climatology*, 18, 1031-1047.
- RIVOIRARD J., 1999. *Introduction to disjunctive kriging and non-linear geostatistics*. Clarendon Press: Oxford, 180 pp.
- SCHNABEL U., TITJE O., SCHOLTZ R.W., 2002. Using the power of information of sparse data for soil improvement management. ETH-UNS, working paper, 33, 27 pp.
- SWITZER P., 1993. The spatial variability of prediction errors. In *Geostatistics Tróia '92*, Volume 1, Quantitative Geology and Geostatistics, pp 261-272. Kluwer Academic Publishers.

TODINI E., 2001. Influence of parameter estimation uncertainty in kriging : part 1 - theoretical development. *Hydrology and Earth System Sciences*, 5(2), 215-223.

YAMAMOTO J.K., 2000. An alternative measure of the reliability of ordinary kriging estimates. *Mathematical Geology*, vol. 32, n°4, 489-509.

8. LISTE DES ANNEXES

Repère	Désignation précise	Nb/N° pages
A	Méthodologie de calcul des intervalles de confiance et de l'incertitude spatiale	5
B	Etude de cas sur des données d'ozone (campagne de mesure régionale dans le Nord de la France, été 2001) Analyse des données, estimation et évaluation des incertitudes spatiales	67