UNE CONJECTURE SUR LA COVARIANCE D'UN ENSEMBLE ALEATOIRE

Conférence de G. Matheron du 26 Mai 1993
notes prises par E. Castelier

Motivations

La fonction indicatrice d'un ensemble aléatoire s'introduit naturellement dans de nombreux problèmes :

Soit, par exemple, une fonction aléatoire $Z(x)$. Dans un problème d'estimation non linéaire, la seule fonction de covariance ne suffit plus. On peut avoir besoin du système de probabilité complet de tout couple de points. Ce système s'écrit :

$$F_{x_1, x_2}(z_1, z_2) = P(Z(x_1) < z_1, Z(x_2) < z_2) = E\{\mathbf{1}_{Z(x_1) < z_1} \mathbf{1}_{Z(x_2) < z_2}\}$$

On reconnaît la covariance croisée des ensembles aléatoires $A(z_1) = \{x \mid Z(x) < z_1\}$ et $A(z_2) = \{x \mid Z(x) < z_2\}$.

On utilise ce résultat dans la méthode du cokrigeage des indicatrices appelée aussi krigeage disjonctif.

Il se pose le problème d'une modélisation convenable d'une covariance d'indicatrice (CI) car une CI ne peut pas être quelconque parmi les fonctions de covariance :

- On sait que la fonction aléatoire indicatrice d'un ensemble aléatoire n'est pas dérivable en moyenne quadratique, ce qui se traduit sur sa fonction de covariance.
- Une indicatrice d'ensemble aléatoire ne prend comme valeurs que des 0 ou des 1. Les variogrammes d'ordre 1 et 2 sont donc égaux, ce qui implique pour les variogrammes des inégalités triangulaires du type :

$$\gamma(x_1, x_2) \leq \gamma(x_1, x_0) + \gamma(x_0, x_2) \quad \forall x_0, x_1, x_2$$

Nous allons voir une condition nécessaire et qu'on espère suffisante pour qu'une fonction de covariance soit de plus une CI.

1 Préliminaires

Le théorème de Bochner permet de caractériser les fonctions de covariance des fonctions aléatoires (FA) stationnaires. C'est un théorème très fort. Si on ne suppose plus la FA

sationnaire, la caractérisation d'une fonction de covariance devient plus aisée à établir. Elle s'écrit :

$$C(x, y) \text{ est la fonction de covariance d'une fonction aléatoire} \quad \Leftrightarrow \quad \forall N \in \mathbb{N}, \forall x_1, \dots, x_N, \forall \lambda_1, \dots, \lambda_N \in \mathbb{R}^N \\ \sum_{i, j \in [1 \dots N]^2} \lambda_i \lambda_j C(x_i, x_j) \geq 0$$

Pour caractériser la covariance d'une indicatrice, nous nous placerons de même dans le cas d'un ensemble aléatoire A non nécessairement stationnaire.

Soient

- N points $x_1, \dots, x_N$
- Un ensemble aléatoire A défini sur ces N points.
- La FA indicatrice de A : $Z_i = Z(x_i) = \mathbf{1}_A(x_i)$
- $C_{i,j} = E\{Z_i Z_j\}$, $\gamma_{ij} = \frac{1}{2} E\{(Z_i - Z_j)^2\}$

On trouve les relations :

$$p_i = E\{Z_i\} = E\{Z_i^2\} = C_{ii} \quad C_{ij} = \frac{p_i + p_j}{2} - \gamma_{ij}$$

qui permettent de retrouver les covariances C_{ij} à l'aide des variogrammes γ_{ij} et des espérances p_i et réciproquement.

En fait nous allons montrer que les valeurs γ_{ij} suffisent à retrouver les covariances pourvu qu'on rajoute un point au système.

Deux points de vue équivalents

Un dénombrement montre que

- les covariances $C_{ij} \ i \leq j$ pour N points sont au nombre de $\frac{N(N+1)}{2}$.
- les variogrammes $\gamma_{ij} \ i < j$ pour $N + 1$ points sont au nombre de $\frac{N(N+1)}{2}$.

Montrons maintenant la propriété:

Propriété: *Il est équivalent de se donner les covariances de N points ou les variogrammes de $N + 1$ points.*

a) On se donne $\gamma_{ij} \ i < j$ pour $N + 1$ points $x_0, \dots, x_N$.

Définition Un Ensemble Aléatoire A est dit **autodual** si il est équivalent en loi à son complémentaire noté A^c .

$$A \stackrel{\mathcal{L}}{\equiv} A^c$$

- On peut toujours construire un ensemble aléatoire autodual A' à partir de A qui laisse inchangés les variogrammes. Remarquons déjà que les variogrammes de A^c sont les même que ceux de A . Construisons A' par :

$$\begin{cases} A' = A & \text{avec la probabilité } \frac{1}{2} \\ A' = A^c & \text{avec la probabilité } \frac{1}{2} \end{cases}$$

A' ainsi construit est autodual et conserve les variogrammes. On peut donc supposer A autodual.

- On fixe $Z_0 = 1$. A étant autodual, cela ne change pas les variogrammes γ_{ij} pour $(i, j \neq 0)$. On trouve par le calcul suivant :

$$2\gamma_{0i} = E\{(Z_i - Z_0)^2\} = E\{Z_i^2 + Z_0^2 - 2Z_i Z_0\} = 1 + E\{Z_i^2\} - 2E\{Z_i\} = 1 - p_i$$

les p_i qui permettent de remonter aux C_{ij} .

- b) On se donne N points $x_1, \dots, x_N$, les p_i et les γ_{ij} correspondants.

- On peut ajouter un point x_0 et on pose $Z_0 = 1$. On obtient alors $2\gamma_{0i} = 1 - p_i$, ce qui nous donne les variogrammes pour $N + 1$ points.

On vient de montrer l'équivalence a) $\Leftrightarrow$ b). De plus on peut supposer A autodual.

2 Formulation géométrique équivalente

Soit A un ensemble aléatoire autodual sur $N + 1$ points $x_0, \dots, x_N$, de variogrammes $\gamma_{ij} \ i < j$. On a la propriété :

Propriété La loi de l'ensemble aléatoire autodual A sur $\{x_0, \dots, x_N\}$ est parfaitement définie par la loi de l'ensemble aléatoire $A' = \{A \mid x_0 \notin A\}$, l'ensemble A conditionné par $x_0 \notin A$.

Démonstration Des relations :

$$1 = P\{x_0 \in A\} + P\{x_0 \in A^c\} \quad \text{et} \quad P\{x_0 \in A\} = P\{x_0 \in A^c\}$$

on tire $P\{x_0 \notin A\} = P\{x_0 \in A^c\} = \frac{1}{2}$

Soit α un sous-ensemble déterministe de $\{x_0, \dots, x_N\}$. On pose $p(\alpha) = P\{A = \alpha\}$. A étant autodual, on trouve $p(\alpha) = p(\alpha^c)$, ce qui entraîne :

$$\begin{aligned} p(\alpha) &= P\{A = \alpha \mid x_0 \notin A\}P\{x_0 \notin A\} + P\{A = \alpha \mid x_0 \in A\}P\{x_0 \in A\} \\ p(\alpha) = p(\alpha^c) &= P\{A = \alpha^c \mid x_0 \notin A\}P\{x_0 \notin A\} + P\{A = \alpha^c \mid x_0 \in A\}P\{x_0 \in A\} \end{aligned}$$

Si $x_0 \in \alpha$, $P\{A = \alpha \mid x_0 \notin A\} = 0$, sinon $P\{A = \alpha^c \mid x_0 \notin A\} = 0$; de plus $P\{x_0 \notin A\} = \frac{1}{2}$ d'où :

$$p(\alpha) = \begin{cases} \frac{1}{2}P\{A = \alpha^c \mid x_0 \notin A\} & \text{si } x_0 \in \alpha \\ \frac{1}{2}P\{A = \alpha \mid x_0 \notin A\} & \text{si } x_0 \notin \alpha \end{cases}$$

La loi de A est bien déterminée par celle de $A' = \{A \mid x_0 \notin A\}$.

On fixe donc $Z_0 = 0$.

Un sous-ensemble α de $\{x_0, \dots, x_N\}$ tel que $x_0 \notin \alpha$ peut être identifié à un élément de $[0, 1]^N$, qu'on note α par abus, et défini par :

$$\begin{cases} \alpha_i = 1 & \text{si } x_i \in \alpha \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad \forall i = 1 \dots N$$

L'ensemble aléatoire $A' = \{A \mid x_0 \notin A\}$ prend la configuration α avec la probabilité $p(\alpha) \geq 0$. On trouve bien sûr $\sum_{\alpha \in [0,1]^N} p(\alpha) = 1$.

On peut définir une fonction γ par :

$$\begin{aligned} \gamma : [0, 1]^N &\rightarrow \mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}} \\ \alpha &\mapsto \gamma(\alpha) : \gamma_{ij}(\alpha) = \frac{(\alpha_i - \alpha_j)^2}{2} \quad \forall 0 \leq i < j \leq N \end{aligned}$$

Pour calculer les termes du type γ_{0i} on étend α à $[0, 1]^{N+1}$ en posant $\alpha_0 = 0$. On trouve que les variogrammes de A sont définis par :

$$\gamma_{ij} = \sum_{\alpha \in [0,1]^N} p(\alpha) \gamma_{ij}(\alpha) \quad \text{avec } p(\alpha) \geq 0 \text{ et } \sum_{\alpha \in [0,1]^N} p(\alpha) = 1$$

Comme le système de probabilité définit l'ensemble aléatoire A , cette condition est nécessaire et suffisante pour que les variogrammes γ_{ij} soient ceux d'un ensemble aléatoire. Géométriquement cette condition exprime qu'un variogramme γ_{ij} est celui d'un ensemble aléatoire si et seulement si le point γ_{ij} de $\mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}}$ appartient à l'enveloppe convexe formée par les 2^N points¹ $\{\gamma(\alpha)\}_{\alpha \in [0,1]^N}$.

La condition nécessaire et suffisante pour qu'un variogramme soit admissible s'obtient donc en trouvant les inégalités correspondantes aux hyperfaces du polyèdre. Elles ont la forme :

$$\sum t_{ij} \gamma_{ij} \leq \phi(t)$$

Regardons dans des cas simples à quoi correspondent ces inégalités.

Trois points

Z_0	Z_1	Z_2	$2\gamma_{12}$	$2\gamma_{02}$	$2\gamma_{01}$
0	0	0	0	0	0
0	0	1	1	1	0
0	1	0	1	0	1
0	1	1	0	1	1

Les 4 configurations de $[0, 1]^2$ constituent un polyèdre régulier dans $\mathbb{R}^3$: c'est le tétraèdre régulier. On trouve les inégalités suivantes :

$$\begin{cases} \gamma_{ik} \leq \gamma_{ij} + \gamma_{jk} & (3 \text{ inégalités}) \\ \gamma_{01} + \gamma_{12} + \gamma_{20} \leq 1 \end{cases}$$

qui constituent 4 CNS.

Quatre points

La figure se complique : c'est l'enveloppe convexe de 8 points dans $\mathbb{R}^6$. On y met un peu d'ordre en rangeant les sommets par classes telles que $\sum \gamma_{ij} = \text{constante}$.

1. Nous avons ici $N + 1$ points. Pour N points on considère un polyèdre à 2^{N-1} sommets dans $\mathbb{R}^{\frac{N(N-1)}{2}}$

Z_0	Z_1	Z_2	Z_3	$2 \times$	γ_{01}	γ_{02}	γ_{03}	γ_{23}	γ_{31}	γ_{12}	$2 \sum \gamma_{ij}$
0	0	0	0		0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1		0	0	1	1	1	0	3
0	0	1	0		0	1	0	1	0	1	3
0	1	0	0		1	0	0	0	1	1	3
0	1	1	1		1	1	1	0	0	0	3
0	0	1	1		0	1	1	0	1	1	4
0	1	0	1		1	0	1	1	0	1	4
0	1	1	0		1	1	0	1	1	0	4

Une face est un hyperplan défini par 6 points au moins. On en dénombre donc $C_8^6=28$ au plus. Parmi les $C_7^5=21$ passant par le point 0,

- 12 sont construites avec le point 0, 3 points de classe 3 et 2 points de classe 4; elles fournissent les inégalités $\gamma_{ik} \leq \gamma_{ij} + \gamma_{jk}$.
- 6 sont construites avec le point 0, 2 points de classe 3 et 3 points de classe 4; ce ne sont pas des faces extérieures car les quantités du type $\gamma_{02} + \gamma_{03} - \gamma_{12} - \gamma_{13}$ ne sont pas de signe constant.
- 4 sont construites avec le point 0, 4 points de classe 3 et 1 points de classe 4; ce ne sont pas des faces extérieures car les quantités du type $\gamma_{02} + \gamma_{13} - \gamma_{03} - \gamma_{12}$ ne sont pas de signe constant.

Des 21 faces passant par 0, 12 seulement sont des hyperplans d'appui et fournissent des inégalités. Il reste 7 faces qui ne passent pas par 0:

- 4 sont construites avec 3 points de classe 3 et 3 de classe 4. Elles fournissent les inégalités du type $\gamma_{02} + \gamma_{03} + \gamma_{23} \leq 1$.
- 3 sont construites avec 4 points de classe 3 et 2 de classe 4. Elles fournissent les inégalités du type $\gamma_{01} + \gamma_{02} + \gamma_{23} + \gamma_{13} \leq 2$.

Ces 7 inégalités se réduisent à 4 inégalités car

$$\begin{aligned} \gamma_{01} + \gamma_{02} + \gamma_{12} &\leq 1 \\ \gamma_{23} + \gamma_{13} + \gamma_{12} &\leq 1 \end{aligned} \Rightarrow \gamma_{01} + \gamma_{02} + \gamma_{23} + \gamma_{13} \leq 2$$

Finalement les CNS sont les suivantes:

$$\begin{cases} \gamma_{ik} \leq \gamma_{ij} + \gamma_{jk} & (12 \text{ inégalités}) \\ \gamma_{ij} + \gamma_{jk} + \gamma_{ki} \leq 1 & (4 \text{ inégalités}) \end{cases}$$

Le polyèdre est un polyèdre régulier à 16 faces. Chaque face comprend 6 sommets et est un simplexe de $\mathbb{R}^5$. En considérant 4 points, on n'a rajouté aucune inégalité par rapport au cas des 3 points.

Cinq points

La configuration se complique encore. Il est maintenant fastidieux d'exposer en détail ce cas. Voici les résultats qu'on en tire si on prend la peine de l'étudier en détail:

On a un polyèdre à 16 sommets dans $\mathbb{R}^{10}$ avec $C_{16}^{10}=8008$ hyperplans possibles dont $C_{15}^9=5005$ passent par 0. Ce polyèdre ne possède, comme hyperplans d'appui, que

- 40 faces à 12 sommets (non simpliciales)

– 16 faces à 10 sommets (simplexes)

Considérons les faces passant par 0. Nous verrons plus loin qu'on pourra toujours ramener une face à une face passant par 0. Ces faces fournissent 40 inégalités :

$$\begin{cases} \gamma_{ik} \leq \gamma_{ij} + \gamma_{jk} & (30 \text{ inégalités}) \\ \gamma_{01} + \gamma_{12} + \gamma_{02} + \gamma_{34} \leq \gamma_{03} + \gamma_{04} + \gamma_{13} + \gamma_{14} + \gamma_{23} + \gamma_{24} & (10 \text{ inégalités}) \end{cases}$$

On remarque que dans les trois cas considérés les inégalités provenant des faces passant par 0 peuvent s'écrire sous une forme compacte :

$$\boxed{\sum \varepsilon_i \varepsilon_j \gamma_{ij} \leq 0 \text{ avec } \varepsilon_i \in \{-1, 0, 1\} \text{ et } \sum \varepsilon_i = 1} \quad (1)$$

On conjecture que cette forme décrit toutes les inégalités des faces passant par 0 quel que soit le nombre de points considéré.

3 Théorie des groupes

On cherche ici à ramener l'ensemble des faces du polyèdre à celles passant par le sommet 0. Pour cela, on introduit :

$$Y_i = 1 - 2Z_i = \begin{cases} -1 & \text{si } i \in A \\ 1 & \text{si } i \notin A \end{cases}$$

ce qui nous permet de passer d'un groupe pour l'addition de $(\mathbf{Z}/2\mathbf{Z})$ à un groupe multiplicatif.

Posons $\rho_{ij} = E\{Y_i Y_j\}$. On remarque qu'on a :

$$4(Z_i - Z_j)^2 = (Y_i - Y_j)^2 = 2 - 2Y_i Y_j \quad \Leftrightarrow \rho_{ij} = 1 - 4\gamma_{ij}$$

On passe de la représentation des γ_{ij} à celle des ρ_{ij} par simple homothétie sur l'espace $\mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}}$.

Un ensemble α déterministe s'identifie à un élément de $\{-1, 1\}^N$ avec

$$\begin{cases} \alpha_i = -1 & \text{si } x_i \in \alpha \\ \alpha_i = 1 & \text{si } x_i \notin \alpha \end{cases}$$

On peut construire :

$$\begin{aligned} \rho : \{-1, 1\}^N &\rightarrow \mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}} \\ \alpha &\mapsto \rho(\alpha) : \rho(\alpha)_{ij} = \alpha_i \alpha_j \quad \forall 0 \leq i < j \leq N \end{aligned}$$

On trouve bien sûr $\rho_{ij}(\alpha) = 1 - 4\gamma_{ij}(\alpha)$. Les 2^N $\rho(\alpha)$ constituent dans $\mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}}$ un polyèdre homothétique de celui des $\gamma(\alpha)$.

Groupe agissant sur $\mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}}$

Les éléments de $\{-1, 1\}^N$ forment un groupe commutatif pour la **différence symétrique** Δ :

$$\begin{aligned} \forall \alpha, \beta \in \{-1, 1\}^N \quad \alpha \Delta \beta &= (\alpha \cap \beta^c) \cup (\alpha^c \cap \beta) \\ (\alpha \Delta \beta)_i &= \alpha_i \beta_i \end{aligned}$$

Ce groupe possède un élément neutre, qui est l'ensemble vide $\emptyset$ et chaque élément α est son propre inverse : $\alpha\Delta\alpha = \emptyset$. On peut faire agir ce groupe sur $\mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}}$ au moyen d'une fonction

$$\begin{aligned} \Phi : \{-1, 1\}^N \times \mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}} &\rightarrow \mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}} \\ (\alpha, x) &\mapsto \Phi(\alpha, x)_{ij} = \alpha_i \alpha_j x_{ij} \quad \forall 0 \leq i < j \leq N \end{aligned}$$

Sur $\mathbb{R}^{\frac{N(N+1)}{2}}$ $\Phi(\alpha, \cdot)$ est une isométrie involutive : $\Phi(\alpha, \cdot)^{-1} = \Phi(\alpha, \cdot)$.

On remarque que $\Phi(\beta, \rho(\alpha)) = \rho(\beta\Delta\alpha)$, c'est à dire que $\Phi(\beta, \cdot)$ permute les faces du polyèdre. On voit qu'on peut ne s'intéresser qu'à un des sommets du polyèdre. Les autres sommets sont obtenu en faisant agir le groupe $\{-1, 1\}^N$.

Ainsi, connaissant les inégalités décrivant les hyperplans d'appui passant par un des sommets sous la forme $\sum t_{ij} \rho_{ij} \leq \phi(t)$, on en déduit les autres par :

$$\forall \alpha \in \{-1, 1\}^N \quad \sum \alpha_i \alpha_j t_{ij} \rho_{ij} \leq \phi(t)$$

4 Conditions nécessaires et conjecturées suffisantes

Montrons que les conditions (1) :

$$\boxed{\sum \varepsilon_i \varepsilon_j \gamma_{ij} \leq 0 \quad \text{avec } \varepsilon_i \in \{-1, 0, 1\} \text{ et } \sum \varepsilon_i = 1}$$

sont nécessaires pour qu'on ait affaire à un variogramme d'indicatrice.

Soit les variables aléatoires Y_i définies plus haut. Ces variables valent soit 1, soit -1. Dans $(\mathbb{Z}/2\mathbb{Z})$ on a donc :

$$Y_i \equiv 1 [2] \quad \Rightarrow \quad \forall N_i \in \mathbb{N}^N \quad \sum N_i Y_i \equiv \sum N_i [2]$$

En prenant des entiers N_i tels que $\sum N_i$ est impaire, alors $\sum N_i Y_i$ est impaire, ce qui entraine $(\sum N_i Y_i)^2 \geq 1$. En passant à l'espérance, on obtient :

$$\boxed{\forall N_i \in \mathbb{N}^N \text{ tels que } \sum N_i \text{ est impaire} \quad \Rightarrow \quad \sum_{0 \leq i < j \leq N} N_i N_j \rho_{ij} \geq 1}$$

Comme $\rho_{ij} = 1 - 4\gamma_{ij}$, l'inégalité devient :

$$\left(\sum N_i\right)^2 - 4 \sum_{i,j} \gamma_{ij} N_i N_j \geq 0$$

En choisissant $N_i = \varepsilon_i \in \{-1, 0, 1\}$ tels que $\sum \varepsilon_i = 1$ on retrouve les conditions annoncées.

Conjecture On pense que toutes les inégalités relatives au sommet 0 sont contenues dans l'expression (1). Les autres inégalités s'en déduisent en faisant agir le groupe $\{-1, 1\}^N$ qui transforme ρ_{ij} en $\alpha_i \alpha_j \rho_{ij}$.