N-43

BUREAU DE RECHERCHES GEOLOGIQUES
ET MINIERES

Département des Réserves

NOTE GEOSTATISTIQUE N° 45

CALCUL DES VARIANCES D'ESTIMATION TRANSITIVES

Avril 1963.

G. MATHERON

N O T E   G E O S T A T I S T I Q U E   N ° 4 5

CALCUL DES VARIANCES D'ESTIMATION TRANSITIVES

Pour rendre opératoires les méthodes générales de la NOTE 42, il faut disposer d'un procédé de calcul commode des variances d'estimation transitives. Nous nous limiterons aux problèmes à une et à deux dimensions pour un covariogramme $g(r)$ isotrope. A une dimension, la variance d'estimation affectée à une maille a est donnée par la relation :

$$(1) \quad \sigma_1^2(a) = a\, g(o) + 2\, a \sum_{n=1}^{\infty} g(na) - 2\int_0^{\infty} g(r)\,dr$$

A deux dimensions, la variance attachée à la maille rectangulaire $a_1\, a_2$ est donnée par :

$$(2) \left\{ \begin{aligned} \sigma_2^2(a_1, a_2) = a_1\, a_2 \Big[g(0) &+ 2\sum_{n=1}^{\infty} g(n\, a_1) + 2\sum_{n=1} g(na_2) \\ &+ 4\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{p=1}^{\infty} g\left(\sqrt{n^2 a_1^2 + p^2 a_2^2}\right)\Big] - 2\pi\int_0^{\infty} g(r)\,r\,dr \end{aligned} \right.$$

L'intégrale qui figure aux deuxièmes membres de (1) et (2) est égale au terme Q^2, carré de la quantité de métal à estimer. Si la maille est grande vis-à-vis de la portée du phénomène étudié, seul le terme $g(0)$ subsiste dans la série du deuxième membre. Les équations (1) et (2) prennent alors la forme " aléatoire " :

$$(3) \left\{ \begin{aligned} \sigma_1^2(a) &= a\, g(0) - Q_1^2 \\ \sigma_2^2(a_1\, a_2) &= a_1\, a_2\, g(0) - Q_2^2 \end{aligned} \right.$$

dont l'interprétation est immédiate : la maille étant plus grande que la portée, il y a au plus un seul échantillon positif, et tout se passe comme si cet échantillon unique était prélevé au hasard dans un rectangle $a_1 \times a_2$ contenant le gisement.

Lorsque la maille est petite vis-à-vis de la portée, au contraire, nous verrons que les variances d'estimation admettent des développements limités en puissances non entières de a_1 et a_2. Dans le cas intermédiaire, où la maille est du même ordre de grandeur que la portée, on devra souvent se contenter d'une simple interpolation graphique. Nous allons examiner successivement les cas à une et deux dimensions, correspondant aux formules (1) et (2).

I.- VARIANCES D'ESTIMATION A UNE DIMENSION

L'étude directe de l'équation (1) par la formule d'Euler Mac Laurin va nous permettre de mettre en évidence un terme d'extension, lié au comportement du $g(r)$ au voisinage de l'origine, et un terme fluctuant, ou Zitter-bewegung, lié au comportement du $g(r)$ autour du point de raccordement $r = b$, b désignant la portée. Nous nous limiterons ensuite aux $g(r)$ sans Zitter-bewegung, et nous établirons à leur sujet un principe d'équivalence, et une règle de correspondance permettant de calculer la variance terme à terme. L'expression explicite de cette règle sera enfin déduite à l'aide du clavier de Bessel.

1./- Terme fluctuant et terme d'extension.

La formule (1) se présente comme le reste d'Euler Mac Laurin dans le calcul numérique approché de l'intégrale $2\int_0^\infty g(r)dr$. Il faut prendre garde que des irrégularités analytiques peuvent apparaître dans le comportement de $g(r)$ au voisinage de $r = 0$, et aussi, dans le cas où le phénomène a une portée finie b, au voisinage de $r = b$.

Désignons, comme dans la formule (61) de la NOTE 42, par k le plus grand entier tel que ka soit inférieur à b

$$ka < b \leq (k+1)a.$$

La variance d'estimation apparaît comme la somme de 3 termes R_1, R_2 et R_3

$$(4)\quad \begin{cases} R_1 = a\left[g(0) + g(a)\right] - 2\int_0^a g(x)dx \\ R_2 = 2\,a\left[\frac{1}{2}\,g(a) + g(2a) + \dots + g\left[(k-1)a\right] + \frac{1}{2}\,g(ka)\right] - 2\int_a^{ka} g(x)dx \\ R_3 = a\ \ g(ka) - 2\int_{ka}^b g(x)dx \end{cases}$$

Le terme R_2 peut se calculer par la formule d'Euler Mac-Laurin, puisque le variogramme est régulier en $r = a$ et $r = ka$. Il vient :

$$R_2 = 2\,a^2\,\frac{B_1}{2!}\left[g'(ka) - g'(a)\right] - 2\,a^4\,\frac{B_2}{4!}\left[g'''(ka) - g'''(a)\right] + \dots$$

En regroupant avec R_1 les termes en a et avec R_3 les termes en ka, on met la variance sous la forme $T_0 + T_Z$, avec

$$(5)\quad \begin{cases} T_0 = a\left[g(0) + g(a)\right] - 2\int_0^a g(x)dx - 2\,a^2\,\frac{B_1}{2!}\,g'(a) + 2a^4\,\frac{B_2}{4!}\,g'''(a) - \dots \\ T_Z = a\,g(ka) - 2\int_{ka}^b g(x)dx + 2\,a^2\,\frac{B_1}{2!}\,g'(ka) - 2\,a^4\,\frac{B_2}{4!}\,g'''(ka) + \dots \end{cases}$$

T_0 s'appelle le <u>terme d'extension.</u> Il ne dépend que du comportement analytique au voisinage de l'origine. Le terme T_Z, au contraire, est lié à la manière dont le $g(r)$ se raccorde à l'axe des abscisses en $r = b$. Il porte le nom de <u>Zitter bewegung</u>, ou <u>terme fluctuant</u>. Nous verrons dans un instant la raison de cette terminologie.

Examinons, en premier lieu, le <u>terme d'extension.</u> Supposons qu'au voisinage de $x = 0$, le $g(x)$ admette un développement limité de la forme :

$$(6)\quad g(x) = \sum C_\lambda\, x^\lambda$$

où les exposants λ ne sont pas nécessairement entiers. La formule (6) doit, en réalité, être complétée par un reste d'ordre supérieur au dernier terme retenu. Le développement (6) permet de calculer T_0 terme à terme. Désignons par $T_0(x^\lambda)$ la contribution à T_0 du terme monome x^λ :

$$T_0 = \sum C_\lambda\, T_0\,(x^\lambda)$$

... / ...

On déduit immédiatement de (5) :

$$(7)\quad T_0(x^\lambda) = a^{1+\lambda}\left[1 - \frac{2}{\lambda+1} - 2\lambda\,\frac{B_1}{2!} + 2\,\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\,\frac{B_2}{4!} - 2\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)(\lambda-3)(\lambda-4)\,\frac{B_3}{6!} + \dots\right.$$

D'où l'importante conclusion : la contribution du monome x^λ est un terme monome en $a^{1+\lambda}$, et le calcul de T_0 peut se faire terme à terme en appliquant la règle de correspondance (7). L'équation (7) se prête mal aux applications pratiques, et nous en donnerons ultérieurement une expression plus synthétique. Remarquons déjà, compte tenu des valeurs numériques des nombres de Bernouilli :

$$B_1 = \frac{1}{6} \quad B_2 = \frac{1}{30} \quad B_3 = \frac{1}{42} \quad B_4 = \frac{1}{30}$$

que $T_0(x^\lambda)$ s'annule lorsque λ est un entier pair $2k$

$$(8)\qquad T_0(x^{2k}) = 0$$

Par dérivation de (7) en λ, on peut obtenir la contribution $T_0(x^\lambda \log x)$ des termes logarithmiques $x^\lambda \log x$. Passant à la limite $\lambda = 2k$, on peut voir que les termes $x^{2k} \log x$ apportent une contribution non nulle : nous établirons plus loin leur expression exacte par un procédé plus direct.

Passons maintenant au Zitter-Bewegung T_Z. Au voisinage de $x = b$, et pour $x < b$, le $g(x)$ peut se mettre sous la forme d'un développement limité :

$$(9)\quad g(x) = \sum C_\lambda (b-x)^\lambda$$

avec, ici encore, un reste d'ordre supérieur au dernier terme retenu. Si les exposants λ sont entiers, le calcul terme à terme de T_Z est possible. Si λ n'est pas entier, les dérivées successives au point ka deviennent des infiniment grands en $(b-ka)^{\lambda-p}$. On est alors conduit à arrêter la somme de Mac-Laurin, dans l'expression (4) de R_2, au terme $g\left[(k-1)a\right]$, et à remplacer (5) par :

$$(10)\quad T_Z = a\,g\left[(k-1)a\right] + 2ag(ka) - 2\int_{(k-1)a}^{b} g(x)dx + 2a^2\,\frac{B_1}{2!}\,g'\left[(k-1)a\right] - 2a^4\,\frac{B_2}{4!}\,g'''\left[(k-1)a\right] + \dots$$

On obtient ainsi la contribution de $(b-x)^\lambda$:

$$(11) \quad T_Z\left[(b-x)^\lambda\right] = a^{1+\lambda}\left[(1-\varepsilon)^\lambda + 2\varepsilon^\lambda - \frac{2}{\lambda+1}(1+\varepsilon)^{\lambda+1} - 2\,\lambda\frac{B_1}{2!}(1+\varepsilon)^{\lambda-1}\right.$$

$$\left. + 2\lambda(\lambda-1)(\lambda-2)\frac{B_2}{4!}(1+\varepsilon)^{\lambda-3} - \ldots\right.$$

On a posé :

$$a\varepsilon = b - ka$$

$a\varepsilon$, compris entre 0 et a, est le reste de la division de b par a. On voit que T_Z va fluctuer entre deux valeurs extrêmes correspondant à $\varepsilon = 0$ et $\varepsilon = 1$. L'amplitude de ces fluctuations est en $a^{1+\lambda}$. Elle est donc liée à l'ordre du contact du $g(x)$ avec l'axe des x, en $x = b$.

A titre d'illustration, considérons le covariogramme particulier :

$$\begin{cases} g(x) = b - x & (x < b) \\ g(x) = 0 & (x \geqslant b) \end{cases}$$

Les formules (10) et (11) donnent (pour $a \leqslant b$)

$$\begin{cases} T_0 = \dfrac{a^2}{6} \\ T_Z = a^2\left(\varepsilon - \varepsilon^2 - \dfrac{1}{6}\right) \end{cases}$$

Lorsque ε varie de 0 à 1, le terme fluctuant passe de valeurs négatives à des valeurs positives, puis s'annule à nouveau et redevient négatif. Sa valeur moyenne est nulle

$$\int_0^1 T_Z(\varepsilon)d\varepsilon = 0$$

La variance d'estimation résultante est :

$$\sigma^2(a) = T_0 + T_Z = a^2\,\varepsilon(1-\varepsilon)$$

Dans les applications pratiques, ε n'est jamais connu. On est conduit à remplacer le terme fluctuant par sa valeur moyenne, qui est ici 0, et il reste :

$$\sigma^2(a) = T_0 = \frac{a^2}{6}$$

De même, pour le g(x) parabolique :

$$g(x) = (b-x)^2$$

on trouve :

$$\begin{cases} T_0 = \frac{1}{3}\, b\, a^2 \\ T_Z = \left[-\frac{1}{3}\varepsilon + \varepsilon^2 - \frac{2}{3}\varepsilon^3\right] a^3 \end{cases}$$

Le terme fluctuant est du troisième ordre. Sa valeur moyenne en ε est nulle.

Dans la suite, nous négligerons purement et simplement le Zitter-bewegung. La courbe réelle donnant la variance en fonction de 0, qui présente des fluctuations T_Z de part et d'autre de T_0 est implicitement remplacée par la courbe moyenne T_0.

2./- Principe d'équivalence et règle de correspondance.

Le Zitter bewegung étant négligé, la variance d'estimation, pour une maille a petite, se réduit à T_0. Si le covariogramme admet un développement limité

$$g(x) = \sum C_\lambda x^\lambda$$

on en déduit, pour a petit, le développement limité de $\sigma^2(a)$:

$$\sigma^2(a) = \sum C_\lambda T_0(x^\lambda) \tag{12}$$

Cette relation exprime une règle de correspondance terme à terme. Les termes entiers pairs $\lambda = 2k$ apportent, d'après (8), une contribution nulle. En particulier, si g(x) est une fonction analytique paire $g_1(x^2)$:

$$(13) \quad g_1(x^2) = C_0 + \sum_{n=1}^{\infty} C_{2n}\, x^{2n}$$

La règle précédente conduirait à une variance nulle : en réalité, pour a non nul, la variance n'est certainement pas nulle. Le résultat précédent signifie seulement que $\sigma^2(a)$ s'annule en $a = 0$ ainsi que ses dérivées de tous les ordres, de sorte que tous les développements limités à un nombre fini quelconque de termes s'évanouissent.

Pour illustrer ce point par un exemple, prenons :

$$g_1(x^2) = e^{-u x^2} = \sum (-)^n \frac{(u x^2)^n}{n!}$$

La variance d'estimation est donnée par :

$$\sigma^2(a) = a \left[1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-u n^2 a^2} \right] - \sqrt{\frac{\pi}{u}}$$

La formule d'échange des fonctions theta (voir deuxième partie) permet de mettre la variance sous la forme :

$$\sigma^2(a) = 2 \sqrt{\frac{\pi}{u}} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \frac{\pi^2}{u a^2}}$$

Elle n'est pas nulle pour $a \neq 0$. Mais elle s'annule effectivement, ainsi que ses dérivées de tous les ordres, en $a = 0$. Elle ne peut donc prendre, pour a petit, que des valeurs numériques extraordinairement faibles.

Du point de vue pratique, on est amené à décomposer tout $g(x)$ en une partie régulière $g_1(x^2)$ regroupant tous les termes d'ordre entier pair, et une partie irrégulière du type

$$g_2(x) = \sum C^\lambda x^\lambda$$

où aucun exposant λ n'est un entier pair.

Deux covariogrammes seront <u>dits analytiquement équivalents</u> s'ils ont même partie irrégulière $g_2(x)$, c'est-à-dire s'ils ne diffèrent que par leurs composantes régulières (analytiques paires). D'après les résultats précédents, deux covariogram-

... / ...

mes équivalents conduisent, pour la variance d'estimation, au même développement limité (12), c'est-à-dire, pratiquement, aux mêmes variances d'estimation pour les mailles a petites.

On peut remarquer qu'à une équivalence analytique près l'opération de montée peut s'effectuer terme à terme. En effet, la formule (128) de la NOTE 42 montre que la montée d'ordre λ effectuée sur r^{α} a pour résultat :

$$(14) \quad \pi^{\frac{\alpha}{2}} \Gamma(-\tfrac{\alpha}{2})\, M_{\lambda}(r^{\alpha}) = \pi^{\frac{\lambda+\alpha}{2}} \Gamma(-\tfrac{\lambda+\alpha}{2})\, r^{\lambda+\alpha} + g_1(r^2)$$

où $g_1(r^2)$ est une fonction régulière paire.

D'ailleurs, toujours à une équivalence près, on peut remplacer $\Gamma(-\frac{\alpha}{2})r^{\alpha}$ par l'expression $\Gamma(-\frac{\alpha}{2})\left[r^{\alpha} - r^{2k}\right]$ où $2k$ est un entier pair. Si α tend vers $2k$, on pose :

$$\alpha = 2k + 2\varepsilon$$

et on écrit :

$$\Gamma(-\frac{\alpha}{2}) = -\frac{\pi}{\Gamma(1+\frac{\alpha}{2})\sin \pi \frac{\alpha}{2}} = \frac{(-1)^{k+1}\pi}{\Gamma(k+1+\varepsilon)\sin \varepsilon\pi} \sim \frac{(-1)^{k+1}}{\varepsilon k!}$$

De sorte que l'on a :

$$(15) \quad \Gamma(-\frac{\alpha}{2})\left[r^{\alpha} - r^{2k}\right] \sim \frac{(-1)^{k+1}}{k!}\, 2\, r^{2k} \log r$$

Cette notion d'équivalence nous permettra de calculer l'apport à la variance d'estimation des termes logarithmiques $r^{2k}\log r$ en prenant la limite, lorsque α tend vers $2\,k$, de la contribution du terme $\Gamma(-\frac{\alpha}{2})\, r^{\alpha}$:

$$(16) \quad T_0\left[r^{2k}\log r\right] = \frac{(-1)^{k+1}\, k!}{2} \lim_{\alpha \to 2k} \Gamma(-\frac{\alpha}{2})\, T_0(r^{\alpha})$$

3./- <u>Forme explicite de la règle de correspondance.</u>

Le calcul de $T_0(x^{\lambda})$ peut être fait sur un covariogramme particulier, admettant un terme en x^{λ} comme terme irrégulier d'ordre le plus bas. Il est commode d'utiliser le clavier de Bessel de 2ème espèce. Le covariogramme :

.../...

$$g(x) = x^{\lambda} K_{-\lambda}(x)$$

admet la composante irrégulière :

$$g_2(x) = \frac{-\pi}{2 \sin \lambda\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{2^{-\lambda-2k}}{k! \, \Gamma(1+k+\lambda)} x^{2(\lambda+k)}$$

et on a vu dans la NOTE 42 que la variance d'estimation était :

$$\sigma^2(a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Gamma(\lambda+k+\frac{1}{2})}{2^{\lambda+2k} \pi^{2\lambda+2k} \sqrt{\pi} \; k!} S_{1+2(\lambda+k)} \; a^{1+2(\lambda+k)}$$

avec la notation

$$S_\alpha = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\alpha}$$

On en déduit immédiatement la règle de correspondance explicite :

$$(17) \quad T_0(x^\lambda) = \frac{2\,\Gamma(\frac{1+\lambda}{2})}{\pi^\lambda \sqrt{\pi}\, \Gamma(-\frac{\lambda}{2})} S_{1+\lambda} \; a^{1+\lambda}$$

Pour simplifier cette expression, on introduit les nombres de Bernouilli généralisés :

$$(18) \quad B_{\frac{\alpha}{2}} = \frac{\Gamma(1+\alpha)}{\pi^\alpha \, 2^{\alpha-1}} S_\alpha$$

et on utilise les propriétés classiques de la fonction eulérienne :

$$(19) \quad \begin{cases} \Gamma(x)\,\Gamma(1-x) = \dfrac{\pi}{\operatorname{Sin} \pi x} \\ 2^{2x-1}\,\Gamma(x)\,\Gamma(x+\frac{1}{2}) = \sqrt{\pi}\;\Gamma(2x) \end{cases}$$

La règle (17) peut se mettre sous l'une ou l'autre des deux formes suivantes :

$$(20) \quad \begin{cases} T_0(x^\lambda) = -\dfrac{2 \sin \frac{\lambda\pi}{2}}{1+\lambda} B_{\frac{1+\lambda}{2}} \; a^{1+\lambda} \\ \Gamma(-\frac{\lambda}{2})\, T_0(x^\lambda) = \dfrac{2\pi}{(1+\lambda)\,\Gamma(1+\frac{\lambda}{2})} B_{\frac{1+\lambda}{2}} \; a^{1+\lambda} \end{cases}$$

... / ...

Sous la première forme, on obtient en prenant $\lambda = 2k$ et $2k-1$:

$$(21)\quad \begin{cases} T_0(x^{2k}) = 0 \\ T_0(x^{2k-1}) = \dfrac{(-1)^k}{k}\, B_k\, a^{2k} \end{cases}$$

La première de ces relations confirme que les termes pairs n'apportent aucune contribution. Sous la deuxième forme, et compte tenu de (16), on trouve pour les termes logarithmiques en $x^{2k}\log x$:

$$(22)\quad T_0(x^{2k}\log x) = (-1)^{k+1}\,\frac{\pi}{1+2k}\, B_{k+\frac{1}{2}}\, a^{1+2k}$$

A titre d'exemple, considérons le clavier de Laguerre de deuxième espèce

$$g_{n-\lambda,\alpha}(r) = B\int_1^{\infty} e^{-ur^2}(u-1)^{\frac{\alpha}{2}-1}\, u^{-\frac{\alpha}{2}}\, du$$

dont la partie non régulière est :

$$g_2(r) = B\,\Gamma\!\left(\frac{\alpha-\lambda}{2}\right) r^{\lambda-\alpha}\, F\left[1-\frac{\alpha}{2},\, 1+\frac{\lambda-\alpha}{2},\, -r^2\right]$$

L'application de la règle (20) donne :

$$(23)\quad \sigma^2(a) = \frac{B}{\Gamma(1-\frac{\alpha}{2})}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{\Gamma(1+k-\frac{\alpha}{2})}{(1+\lambda-\alpha+2k)\,(1+k+\frac{\lambda-\alpha}{2})}\, B_{k+\frac{\lambda-\alpha+1}{2}}\, a^{1+\lambda-\alpha+2k}$$

Si l'on prend, comme dans la NOTE 42,

$$B = \frac{\pi^{\frac{\lambda}{2}}}{\Gamma(\frac{\alpha}{2})}$$

Le coefficient de la somme prend une expression simple :

$$\frac{B}{\Gamma(1-\frac{\alpha}{2})} = \pi^{\frac{\lambda}{2}-1}\sin\alpha\frac{\pi}{2}$$

On n'oubliera pas que le développement (23) n'est utilisable que pour a petit. Lorsque a devient grand, la formule (3) conduit à l'expression asymptotique suivante :

$$(24) \quad \sigma_a^2 = B\,\Gamma\left(\frac{\alpha}{2}\right)\left[a\,\frac{\Gamma\left(\frac{\lambda-\alpha}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda}{2}\right)} - \sqrt{\pi}\,\frac{\Gamma\left(\frac{1+\lambda-\alpha}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1+\lambda}{2}\right)}\right]$$

Pour une maille intermédiaire, il y a lieu d'interpoler graphiquement entre les équations (23) et (24).

II.- VARIANCES D'ESTIMATION A DEUX DIMENSIONS

Le calcul des séries doubles du type (2) est un peu plus délicat. Nous nous contenterons de dégager des formules d'approximation suffisantes pour les besoins de la pratique. Dans tout ce qui suit, nous négligerons un éventuel Zitter bewegung, ce qui revient à admettre que le covariogramme s'annule ainsi que toutes ses dérivées en $x = b$, b étant la portée, finie ou infinie. En premier lieu, nous rappellerons les propriétés classiques des fonctions théta, et nous en déduirons des méthodes de calcul approchées dans le cas où le covariogramme peut être mis sous la forme d'une représentation de Gauss, au sens de la NOTE 42. Les règles pratiques s'en déduisent enfin par une méthode approchée mixte, utilisant à la fois les propriétés des représentations de Gauss et les résultats de la première partie.

1/- Les fonctions Théta.

La fonction théta, qui intervient dans la théorie des fonctions elliptiques, est définie comme la somme :

$$(25) \qquad \Theta(x) = \sum_{-\infty}^{+\infty} e^{-n^2 x} = 1 + 2\sum_{1}^{\infty} e^{-n^2 x}$$

La formule sommatoire classique de Poisson :

$$(26) \qquad \sum_{-\infty}^{+\infty} f(na) = \frac{1}{a}\sum_{-\infty}^{\infty} \varphi\left(\frac{2\pi n}{a}\right)$$

où ϕ est la transformée de Fourier de f conduit, avec

$$\begin{cases} f(u) = e^{-xu^2} \\ \phi(v) = \sqrt{\dfrac{\pi}{x}}\; e^{-\frac{v^2}{4x}} \end{cases}$$

à la formule d'échange des fonctions Θ, soit :

$$(27) \quad \Theta(x) = \sqrt{\frac{\pi}{x}}\ \Theta\left(\frac{\pi^2}{x}\right)$$

Outre son intérêt théorique, la formule d'échange a l'avantage de permettre un calcul numérique très rapide des fonctions théta. En effet, si x est plus grand que π, on peut calculer $\Theta(x)$ avec une précision très grande, en se limitant aux premiers termes de l'expression. Par exemple, l'expression $1 + 2e^{-x}$ conduit à une erreur de l'ordre de $2\,e^{-4x} < 2\,e^{-4\pi} \# 6\ 10^{-6}$. Si, au contraire, x est inférieur à π, la formule d'échange permet d'avoir une erreur relative du même ordre en se limitant au même nombre de termes. Par exemple, l'expression $\sqrt{\frac{\pi}{x}}\left[1 + 2\,e^{-\frac{\pi^2}{x}}\right]$ donne une valeur approchée à 6.10^{-6} au plus en erreur relative.

Nous utiliserons deux approximations. En première approximation, nous évaluerons la fonction théta (avec une erreur relative inférieure à $2\,e^{-\pi} = 0,087$) par les formules :

$$(28) \quad \begin{cases} \Theta(x) = 1 & \text{pour } x > \pi \\ \Theta(x) = \sqrt{\frac{\pi}{x}} & \text{pour } x < \pi \end{cases}$$

En deuxième approximation, et avec une erreur relative inférieure à 10^{-5}, nous utiliserons les formules :

$$(29) \quad \begin{cases} \Theta(x) = 1 + 2\,e^{-x} & \text{pour } x > \pi \\ \Theta(x) = \sqrt{\frac{\pi}{x}}\left[1 + 2\,e^{-\frac{\pi^2}{x}}\right] & \text{pour } x < \pi \end{cases}$$

2./- Variance d'estimation en représentation de Gauss.

Supposons qu'un covariogramme $g(r)$ admette la représentation de Gauss :

$$g(r) = \int_0^\infty e^{-ur^2} f(u)du$$

Toute variance d'estimation peut s'exprimer à l'aide d'intégrales portant sur la fonction théta. Dans la suite, nous désignerons par $\sigma_1^2(a)$ la variance d'estimation à une dimension calculée pour la maille a, et par $\sigma_2^2(a_1, a_2)$ la variance d'estimation à deux dimensions calculée pour la maille rectangulaire $a_1 \; a_2$. Compte tenu de (30), les formules (1) et (2) nous donnent immédiatement :

$$(30) \quad \begin{cases} \sigma_1^2(a) = a\displaystyle\int_0^{\infty} \textcircled{H}(u\, a^2)\, f(u)du - \sqrt{\pi}\int_0^{\infty} f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}} \\ \sigma_2^2(a_1 a_2) = a_1 a_2 \displaystyle\int_0^{\infty} \textcircled{H}(ua_1^2)\;\textcircled{H}(ua_2^2)\, f(u)du - \pi\int_0^{\infty} f(u)\,\frac{du}{u} \end{cases}$$

Le principe de la méthode d'approximation va consister à séparer le champ d'intégration en deux intervalles (de $u = 0$ à $u = \frac{\pi}{a^2}$ et de $u = \frac{\pi}{a^2}$ à l'infini), et à remplacer dans chacun de ces intervalles la fonction $\textcircled{H}$ par l'une ou l'autre des deux expressions approchées (29).

Examinons en premier lieu le cas le plus simple de la variance à une seule dimension. On écrit :

$$\sigma_1^2(a) = \sqrt{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{a^2}} \textcircled{H}\left(\frac{\pi^2}{ua^2}\right) f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}} + a\int_{\frac{\pi}{a^2}}^{\infty} \textcircled{H}(ua^2)\, f(u)du - \sqrt{\pi}\int_0^{\infty} f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}}$$

A l'approximation (29) ceci se réduit à :

$$(31) \quad \sigma_1^2(a) = 2\sqrt{\pi}\int_0^{\frac{\pi}{a^2}} e^{-\frac{\pi^2}{ua^2}} f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}} + a\int_{\frac{\pi}{a^2}}^{\infty}\left[1 + 2\, e^{-ua^2}\right] f(u)du - \sqrt{\pi}\int_{\frac{\pi}{a^2}} f(u)\frac{du}{\sqrt{u}}$$

A l'approximation plus grossière (28), il reste la formule très simple :

$$(32) \quad \sigma_1^2(a) = a\int_{\frac{\pi}{a^2}}^{\infty} f(u)du - \sqrt{\pi}\int_{\frac{\pi}{a^2}}^{\infty} f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}}$$

Sur les exemples numériques, on peut voir que la formule (32) donne un résultat acceptable pour les covariogrammes peu réguliers à l'origine (terme en r^{λ} avec λ de l'ordre de 1). Pour un covariogramme plus régulier (λ = 3 ou 4 ou davantage),

... / ...

la formule (32) sous estime la variance de manière inadmissible, et le recours à (31) s'imposerait - si l'on ne disposait pas par ailleurs des résultats de la première partie. En effet, la formule (32), appliquée à la représentation de Gauss du clavier de Bessel ou de Laguerre, conduit à la règle de correspondance :

$$\Gamma\left(-\frac{\lambda}{2}\right) T'_0\left(x^{\lambda}\right) = \frac{2}{\lambda(\lambda+1)\, \pi^{\frac{\lambda}{2}}}\, a^{1+\lambda}$$

que l'on comparera à (17) ou à (20). A l'aide de (17), par exemple, il vient :

$$\frac{T_0(x^{\lambda})}{T'_0(x^{\lambda})} = \frac{\lambda(\lambda+1)\, \Gamma\left(\frac{1+\lambda}{2}\right)}{\pi^{\frac{\lambda}{2}} \sqrt{\pi}}\, S_{1+\lambda}$$

Ce rapport est une fonction très rapidement croissante de λ.

Nous concluons donc qu'il n'est pas possible de se contenter de l'approximation (28). C'est donc l'approximation (29) qui va nous servir à calculer <u>la variance à deux dimensions</u> $\sigma_2^2(a_1, a_2)$.

Pour calculer cette variance à deux dimensions, nous supposerons $a_1 \geqslant a_2$, et nous mettrons la deuxième formule (30) sous la forme :

$$\left\{ \begin{aligned} \sigma_2^2(a_1 a_2) = {} & \pi \int_0^{\frac{\pi}{a_1^2}} Ⓗ\left(\frac{\pi^2}{u a_1^2}\right) Ⓗ\left(\frac{\pi^2}{u a_2^2}\right) f(u) \frac{du}{u} + \sqrt{\pi}\, a_1 \int_{\frac{\pi}{a_1^2}}^{\frac{\pi}{a_2^2}} Ⓗ(u a_1^2)\, Ⓗ\left(\frac{\pi^2}{u a_2^2}\right) f(u) \frac{du}{\sqrt{u}} \\ & + a_1 a_2 \int_{\frac{\pi}{a_2^2}}^{\infty} Ⓗ(u a_1^2)\, Ⓗ(u a_2^2)\, f(u)\, du - \pi \int_0^{\infty} f(u) \frac{du}{u} \end{aligned} \right.$$

Avec l'approximation (29), il va rester :

$$(33)\quad \begin{cases} \sigma_2^2(a_1a_2) = 2\pi\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{a_1^2}}\left[e^{-\frac{\pi^2}{ua_1^2}} + e^{-\frac{\pi^2}{ua_2^2}}\right] f(u)\,\frac{du}{u} \\ + a_1\sqrt{\pi}\displaystyle\int_{\frac{\pi}{a_1^2}}^{\frac{\pi}{a_2^2}}\left[1 + 2e^{-ua_1^2} + 2e^{-\frac{\pi^2}{ua_2^2}}\right] f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}} \\ + a_1a_2\displaystyle\int_{\frac{\pi}{a_2^2}}^{\infty}\left[1 + 2e^{-ua_1^2} + 2e^{-ua_2^2}\right] f(u)\,du - \pi\displaystyle\int_{\frac{\pi}{a_1^2}}^{\infty} f(u)\,\frac{du}{u} \end{cases}$$

Pour interpréter cette formule, nous la mettrons sous la forme suivante :

$$(34)\quad \sigma_2^2(a_1a_2) = \sigma_2^2(a_1,0) + a_1\,\sigma_1^2(a_2) + R(a_1a_2)$$

Le premier terme $\sigma_2^2(a_1,0)$ s'obtient en faisant $a_2 = 0$ dans (33). C'est le <u>terme de tranche</u>, égal à la variance à une dimension obtenue en appliquant (31) au covariogramme déduit de $g(r)$ par montée d'ordre 1. Le deuxième terme est le <u>terme de ligne</u> (extension des sondages dans les lignes parallèles à a_2). Il se calcule en appliquant (31) à $g(r)$ lui-même. Enfin le reste $R(a_1a_2)$ admet l'expression suivante :

$$(35)\quad \begin{cases} R(a_1a_2) = 2\pi\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{a_1^2}} e^{-\frac{\pi^2}{ua_2^2}} f(u)\,\frac{du}{u} - 2a_1\sqrt{\pi}\displaystyle\int_{\frac{\pi}{a_2^2}}^{\infty} e^{-ua_1^2} f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}} \\ - 2a_1\sqrt{\pi}\displaystyle\int_0^{\frac{\pi}{a_1^2}} e^{-\frac{\pi^2}{ua_2^2}} f(u)\,\frac{du}{\sqrt{u}} + 2a_1a_2\displaystyle\int_{\frac{\pi}{a_2^2}}^{\infty} e^{-ua_1^2} f(u)\,du \end{cases}$$

... / ...

A l'approximation utilisée, qui est celle des équations (29), ce reste est négligeable pour $a_2 \leqslant \frac{a_1}{2}$. Ainsi, le principe de composition des termes de tranche et de ligne peut être appliqué avec la même approximation : nous écrirons :

$$
(36) \quad \begin{cases} \sigma_2^2\,(a_1, a_2) = \sigma_2^2(a_1, 0) + a_1\,\sigma_1^2(a_2) \\[2ex] \qquad\qquad \text{pour} \quad a_2 \leqslant \dfrac{a_1}{2} \end{cases}
$$

Pour calculer les termes de tranches et de section, nous n'utiliserons pas, en fait, la formule approchée (31), mais la règle exacte de correspondance établie dans la première partie. En désignant par $T_0(r^{\mu})$ la contribution du terme r^{μ} à la variance à deux dimensions $(a_1\ a_2)$, on obtient la règle de correspondance suivante, qui peut s'écrire sous deux formes équivalentes :

$$
(37) \quad \begin{cases} \Gamma\left(-\frac{\mu}{2}\right) T_0(r^{\mu}) = \dfrac{2\pi\sqrt{\pi}}{(2+\mu)\,\Gamma(3+\mu)}\, B_{1+\frac{\mu}{2}}\; a_1^{2+\mu} + \dfrac{2\pi}{(1+\mu)\Gamma\left(1+\frac{\mu}{2}\right)}\, B_{\frac{1+\mu}{2}}\; a_1 a_2^{1+\mu} \\[3ex] T_0(r^{\mu}) = -\dfrac{2^{1-\mu} \sin \mu\frac{\pi}{2}\,\Gamma(\mu)}{\left(1+\frac{\mu}{2}\right)\left[\Gamma\left(\frac{1+\mu}{2}\right)\right]^2}\, B_{1+\frac{\mu}{2}}\; a_1^{2+\mu} - \dfrac{2 \sin \mu\frac{\pi}{2}}{1+\mu}\, B_{\frac{1+\mu}{2}}\; a_1 a_2^{1+\mu} \end{cases}
$$

Pour $\mu = 2k - 1$ et $\mu = 2k$, entier impair ou pair, on trouve :

$$
(38) \quad \begin{cases} T_0(r^{2k-1}) = \dfrac{(-1)^k\, 2^{2-2k}\,(2k-2)!}{\left(k+\frac{1}{2}\right)\overline{(k-1)!}^{\,2}}\, B_{k+\frac{1}{2}}\; a_1^{1+2k} + \dfrac{(-1)^k}{k}\, B_k\, a_1\, a_2^{2k} \\[3ex] T_0(r^{2k} \log r) = \dfrac{(-1)^{k+1}\, 2^{2+2k}\,(k!)^2}{(2k+3)!}\,\pi\; B_{1+k}\; a_1^{2+2k} + \dfrac{(-1)^{k+1}\pi}{1+2k}\, B_{k+\frac{1}{2}}\; a_1 a_2^{1+2k} \end{cases}
$$

Et, naturellement,

$$
T_0(r^{2k}) = 0
$$

... / ...

On n'oubliera pas que ces formules ne sont utilisables que pour a_1 et a_2 petits, et $a_2 \leq \frac{a_1}{2}$. Si cette dernière condition n'est pas remplie, il faut, en principe, tenir compte du reste (35). Pour le calcul de ce reste, il est permis d'appliquer le principe de correspondance terme à terme, et il suffit pour cela d'évaluer la contribution, d'ordre $2 + \mu$ en a_1 et a_2, du terme r^{μ} à ce reste, contribution que nous noterons $R(r^{\mu})$. Toujours d'après le même principe, il est permis de calculer $R(r^{\mu})$ à l'aide d'un covariogramme particulier. Nous choisirons le covariogramme de LAGUERRE avec $\alpha = 2$ et $\mu = \lambda - \alpha = \lambda - 2$, soit :

$$(39) \qquad g(r) = \int_1^{\infty} e^{-ur^2} \, u^{-1-\frac{\mu}{2}} \, du$$

La partie irrégulière de ce $g(r)$ se réduit au terme monome $\Gamma(-\frac{\mu}{2})r^{\mu}$, de sorte que les résultats que nous allons établir nous donnerons directement la règle de correspondance sous la forme $\Gamma(-\frac{\mu}{2})\, R(r^{\mu})$.

L'équation (35) nous montre que $R(a_1, a_2)$ se présente comme la somme de quatre termes R_1, R_2, R_3 et R_4, que nous allons évaluer successivement en prenant $f(u) = u^{-1-\frac{\mu}{2}}$. Pour simplifier les écritures, nous introduirons les fonctions intégro-exponentielles $H_{\alpha}(x)$, qui sont du reste un cas particulier des fonctions de LAGUERRE.

$$H_{\alpha}(x) = \int_x^{\infty} e^{-u} \, u^{\alpha-1} \, du$$

Calculons explicitement le premier terme R_1 de (35). Il vient :

$$R_1 = 2\pi \int_1^{\frac{\pi}{a_1^2}} e^{-\frac{\pi^2}{ua_2^2}} \, u^{-2-\frac{\mu}{2}} \, du$$

En posant $v = \frac{\pi^2}{ua_2^2}$, on trouve facilement :

$$R_1 = \frac{2\, a_2^{2+\mu}}{\pi^{1+\mu}} \int_{\pi\frac{a_1^2}{a_2^2}}^{\frac{\pi^2}{a_2^2}} e^{-v} \, v^{\frac{\mu}{2}} dv = \frac{2\, a_2^{2+\mu}}{\pi^{1+\mu}} \left[H_{1+\frac{\mu}{2}}\left(\pi \frac{a_1^2}{a_2^2}\right) - H_{1+\frac{\mu}{2}}\left(\frac{\pi^2}{a_2^2}\right) \right]$$

... / ...

En fait - a_1 et a_2 étant petits tous les deux et d'ordre de grandeur comparables - le terme $H_{1+\frac{\mu}{2}}\left[\frac{\pi^2}{a_2^2}\right]$ est toujours négligeable. Une simplification analogue a lieu pour R_3. Nous obtenons finalement :

$$
(40)\quad
\begin{cases}
R_1 = \dfrac{2\, a_2^{2+\mu}}{\pi^{1+\mu}}\, H_{1+\frac{\mu}{2}}\left(\pi \dfrac{a_1^2}{a_2^2}\right) \\[2ex]
R_2 = -2\, a_1^{2+\mu}\, H_{-\frac{1+\mu}{2}}\left(\pi \dfrac{a_1^2}{a_2^2}\right) \\[2ex]
R_3 = -\dfrac{2 a_1\, a_2^{1+\mu}}{\pi^{\mu+\frac{1}{2}}}\, H_{\frac{1+\mu}{2}}\left(\pi \dfrac{a_1^2}{a_2^2}\right) \\[2ex]
R_4 = 2\, a_1^{1+\mu}\, a_2\, H_{-\frac{\mu}{2}}\left(\dfrac{\pi a_1^2}{a_2^2}\right)
\end{cases}
$$

Récapitulons les résultats obtenus. De (37) et de (40) résulte que le terme $\Gamma(-\frac{\mu}{2})\, T_0(r^{\mu})$ peut se mettre sous la forme suivante, avec $a_1 \geqslant a_2$

$$
(41)\qquad \Gamma\left(-\frac{\mu}{2}\right)\, T_0(r^{\mu}) = a_1^{2+\mu}\, \Phi\left(\frac{a_2}{a_1}\right)
$$

Pour abréger l'écriture nous poserons dans toute la suite :

$$
(42)\qquad \frac{a_2}{a_1} = t \leqslant 1
$$

La fonction Φ ainsi introduite se présente comme une somme :

$$
(43)\qquad \Phi(t) = \Phi_0(t) + \Phi_R(t)
$$

Le terme Φ_0 représente la contribution de (37), et subsiste seul pour $t \leqslant \frac{1}{2}$. On peut l'écrire sous la forme :

$$
(44)\quad
\begin{cases}
\Phi_0(t) = \sqrt{\pi}\; A_{1+\mu} + A_{\mu}\; t^{1+\mu} \\[1ex]
A_{\mu} = \dfrac{2\pi}{(1+\mu)\,\Gamma(1+\frac{\mu}{2})}\; B_{\frac{1+\mu}{2}}
\end{cases}
$$

... / ...

Le deuxième terme représente la contribution de (40), et ne prend de valeurs appréciables que pour $t > \frac{1}{2}$. On peut l'écrire sous la forme :

$$(45) \quad \Phi_R(t) = \frac{2t^{2+\mu}}{\pi^{1+\mu}} H_{1+\frac{\mu}{2}}\left(\frac{\pi}{t^2}\right) - \frac{2t^{1+\mu}}{\pi^{\mu+\frac{1}{2}}} H_{\frac{1+\mu}{2}}\left(\frac{\pi}{t^2}\right) + 2t\, H_{-\frac{\mu}{2}}\left[\frac{\pi}{t^2}\right] - 2H_{-\frac{1+\mu}{2}}\left(\frac{\pi}{t^2}\right)$$

La fonction $\Phi(t)$ peut être déterminée par tabulation directe de Φ_0 et Φ_R. En ce qui concerne Φ_R, on peut, en première approximation, se contenter de calculer sa valeur pour $t = 1$. De la valeur $\Phi(1)$ prise par (43) en $t = 1$, on déduit en effet la dérivée $\Phi'(1)$ au même point, en remarquant que (41) est une fonction symétrique en $a_1 a_2$, ce qui implique :

$$a_1^{2+\mu}\, \Phi\left(\frac{a_2}{a_1}\right) = a_2^{2+\mu}\, \Phi\left(\frac{a_1}{a_2}\right)$$

soit

$$\Phi(t) = t^{2+\mu}\, \Phi\left(\frac{1}{t}\right)$$

et en dérivant

$$\Phi'(t) = (2+\mu)t^{1+\mu}\, \Phi\left(\frac{1}{t}\right) - t^{\mu}\, \Phi'\left(\frac{1}{t}\right)$$

et, pour $t = 1$

$$(46) \quad \Phi'(1) = \left(1 + \frac{\mu}{2}\right) \Phi(1)$$

La fonction $\Phi(t)$ est ainsi graphiquement déterminée par la connaissance de $\Phi_0(t)$, suffisante de $t = 0$ à $t = \frac{1}{2}$, à quoi l'on ajoute $\Phi(1)$ et la tangente à la courbe en $t = 1$.

On n'oubliera pas que la formule (41) ne reste vraie que pour des mailles a_1 a_2 petites. Si a_1 et a_2 sont grands, on devra utiliser la formule de type aléatoire(3). Pour des valeurs intermédiaires, on pourra se contenter d'une interpolation graphique.

... / ...

3./- Valeurs numériques

Les premiers nombres de Bernouilli d'ordre entier et demi entier ont les valeurs numériques suivantes :

$$(47)\quad \begin{cases} B_1 = \frac{1}{6} = 0.166667 \\ B_{\frac{3}{2}} = 0.058153 \\ B_2 = \frac{1}{30} = 0.033333 \\ B_{\frac{5}{2}} = 0.025413 \\ B_3 = \frac{1}{42} = 0.023809 \\ B_{\frac{7}{2}} = 0.026921 \\ B_4 = \frac{1}{30} = 0.033333 \end{cases}$$

Ces valeurs permettent le calcul des coefficients A_μ et $\sqrt{\pi}\ A_{1+\mu}$ de l'équation (44). Les résultats numériques sont les suivants :

μ	A_μ	$\sqrt{\pi}\ A_{1+\mu}$
1	0.59082	0.21587
2	0.12179	0.069813
3	0.039388	0.028302
4	0.015968	0.013298
5	0.007502	0.006971
6	0.003933	0.003989
7	0.002507	-

.../...

Afin de juger de l'importance du terme correctif en $\Phi_R(t)$, nous avons calculé ses valeurs dans le cas le plus défavorable d'une maille carrée ($t = 1$, ou $a_1 = a_2$). Le tableau suivant donne les résultats :

μ	$\Phi_R(1)$	$\Phi(1)$
1	0.00378	0.81047
2	0.00216	0.19376
3	0.00127	0.06896
4	0.00077	0.03004
5	0.00049	0.01461
6	0.00033	0.00826

En fait, il sera tout à fait admissible de négliger purement et simplement le terme complémentaire $\Phi_R(1)$, et de prendre dans tous les cas :

$$(48) \quad \begin{cases} \Gamma(-\frac{\mu}{2})\, T_0\, (r^{\mu}) = \sqrt{\pi}\, A_{1+\mu} \quad a_1^{2+\mu} + A_{\mu}\, a_1\, a_2^{1+\mu} \\ a_2 \leq a_1 \end{cases}$$

Du point de vue pratique, on utilisera sourtout les trois termes $T_0(r)$, $T_0(r^3)$ et $T_0(r^2 \log r)$, qui sont donnés sous forme numérique, par :

$$(49) \quad \begin{cases} T_0(r) = -\frac{1}{6}\, a_1\, a_2^2 - 0{,}0609\, a_1^3 \\ T_0(r^3) = \frac{1}{60}\, a_1\, a_2^4 + 0{,}01198\, a_1^5 \\ T_0(r^2 \log r) = 0{,}0609\, a_1\, a_2^3 + 0{,}03490\, a_1^4 \end{cases}$$

De telles fomules ne sont utilisables que pour a_1 et a_2 petits. Elles doivent être raccordées graphiquement aux formules (3).

Avril 1963. G. MATHERON.
