J. SERRA

N-199

NOTE GEOSTATISTIQUE N° 111

LES INDETERMINATIONS DU VARIOGRAMME SOUS-JACENT

-=-=-=-=-=-=-

G. MATHERON

FONTAINEBLEAU SEPTEMBRE 1970

NOTE GEOSTATISTIQUE N° 111

LES INDETERMINATIONS DU VARIOGRAMME SOUS - JACENT

1 - L'Invariance des résidus pour les dérives aléatoires.

Soit $A_\ell = \lambda_\ell^\alpha Z_\alpha$ un estimateur (non optimal) des coefficients a_ℓ de la dérive, vérifiant la condition d'universalité :

$$(1) \qquad \lambda_\ell^\alpha \; f_\alpha^s = \delta_\ell^s \qquad (\ell, s = 0, 1 \ldots k)$$

Le résidu

$$R_\alpha = Y_\alpha - \lambda_\ell^\beta \; f_\alpha^\ell \, Y_\beta$$

ne dépend que de la partie aléatoire Y_α (et non de la dérive). Plus généralement, si je remplace Z_α par :

$$(2) \qquad Z'_\alpha = Z_\alpha + B_\ell \; f_\alpha^\ell$$

où les B_ℓ sont des variables aléatoires (et non plus des constantes), les nouveaux résidus seront :

$$R'_\alpha \; Z'_\alpha - \lambda_\ell^\beta \; f_\alpha^\ell \, Z'_\beta = Z_\alpha - \lambda_\ell^\beta \; f_\alpha^\ell \, Z_\beta + B_\ell \; f_\alpha^\ell -$$

$$- \lambda_\ell^\beta \; f_\alpha^\ell \, B_s \, f_\beta^s = Z_\alpha - \lambda_\ell^\beta \; f_\alpha^\ell \, Z_\beta = R_\alpha$$

à cause de la condition (1) d'universalité. Ainsi, pour un estimateur donné de la dérive, universel mais non nécessairement optimal, l'addition d'une dérive aléatoire laisse invariants les résidus R_α.

En particulier, cette addition va laisser invariante la covariance $E(R_\alpha\ R_\beta)$ des résidus (et toutes les quantités qui s'en déduisent), telle que l'espérance $E\big(\gamma^*(h)\big)$ du variogramme γ^* des résidus sur laquelle nous avons pris l'habitude de travailler). Or elle ne laisse pas invariants la covariance, ou le variogramme sous-jacent.

Par exemple, la covariance $\sigma_{\alpha\beta} = E(Y_\alpha\ Y_\beta)$ (si elle existe) est remplacée par :

$$(3) \qquad \sigma'_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} + D_{\beta\ell}\ f^\ell_\alpha + D_{\alpha\ell}\ f^\ell_\beta + K_{\ell s}\ f^\ell_\alpha\ f^s_\beta$$

où l'on a posé :

$$\begin{cases} D_{\beta\ell} = E(Y_\beta\ B_\ell) \\ K_{\ell s} = E(B_\ell\ B_s) \end{cases}$$

Pour le variogramme, la transformation serait de même :

$$(3') \qquad \gamma'_{\alpha\beta} = \gamma_{\alpha\beta} - 2(D_{\alpha\ell} - D_{\beta\ell})(f^\ell_\alpha - f^\ell_\beta) + K_{\ell s}(f^\ell_\alpha - f^\ell_\beta)(f^s_\alpha - f^s_\beta)$$

Il en résulte, en sens inverse, qu'à partir des résidus expérimentaux R_α ou de leur covariance $E(R_\alpha\ R_\beta)$ il ne sera jamais possible de déterminer le variogramme sous-jacent qu'à une indétermination près du type (3'), avec des matrices $D_{\alpha\ell}$ et $K_{\ell s}$ arbitraires.

On pourrait craindre que l'indétermination ne puisse être plus sévère encore. Nous allons voir qu'il n'en est rien, et que cette indétermination est exactement celle qui est représentée en (3) ou (3').

2 - Covariance des résidus, et indétermination du variogramme sous-jacent.

Avec les notations précédentes, on a :

$$E(R_\alpha R_\beta) = -(\delta_\alpha^{\alpha'} - \lambda_\ell^{\alpha'} f_\alpha^\ell)(\delta_\beta^{\beta'} - \lambda_s^{\beta'} f_\beta^s)\ \gamma_{\alpha'\beta'}$$

[Cette covariance des résidus existe toujours, même s'il n'existe qu'un variogramme sous-jacent, à cause des conditions d'universalité (2), qui donnent :

$$\sum_\alpha \lambda_o^\alpha = 1 \quad , \quad \sum_\alpha \lambda_\ell^\alpha = 0 \qquad (\ell = 1,2\ldots k)$$

d'où résulte que $Y_\alpha - \lambda_\ell^\beta f_\alpha^\ell Y_\beta$ est dans L^2]. Mettons ceci sous la forme :

$$(4) \qquad \begin{cases} E(R_\alpha R_\beta) = -U_\alpha^{\alpha'}\ U_\beta^{\beta'}\ \gamma_{\alpha'\beta'} \\ U_\alpha^{\alpha'} = \delta_\alpha^{\alpha'} - \lambda_\ell^{\alpha'}\ f_\alpha^\ell \end{cases}$$

Ce système n'est pas régulier, et ne permet pas de déterminer univoquement $\gamma_{\alpha'\beta'}$ à partir de $E(R_\alpha R_\beta)$. En effet, considérons le système sans second membre :

$$(5) \qquad \gamma_{\alpha'\beta'}\ U_\alpha^{\alpha'}\ U_\beta^{\beta'} = 0$$

et cherchons les solutions possibles de (5). Tout d'abord, à α

fixé, l'expression

$$g_{\beta'} = \gamma_{\alpha'\beta'} U^{\alpha'}_{(\alpha)}$$

doit vérifier $g_{\beta'} U^{\beta'}_{\beta} = 0$, c'est-à-dire, d'après (4) :

(5')
$$g_{\alpha} = g_{\beta'} \lambda^{\beta'}_{\ell} f^{\ell}_{\alpha}$$

D'après les conditions d'universalité (1), toute combinaison linéaire :

(6)
$$g_{\beta} = C_s f^s_{\beta}$$

vérifie (5'), et inversement (5') lui-même exprime que g_{α} est de la forme (6) avec

$$C_s = g_{\beta'} \lambda^{\beta'}_s$$

Ainsi, la relation (5) est vérifiée si et seulement si $\gamma_{\alpha'\beta'} U^{\alpha'}_{\alpha}$ est combinaison linéaire des f^{ℓ}_{α} :

$$\gamma_{\alpha'\beta'} U^{\alpha'}_{\alpha} = C_{\alpha,\ell} f^{\ell}_{\beta'}$$

soit, explicitement :

$$\gamma_{\alpha\beta} = C_{\alpha,\ell} f^{\ell}_{\beta} + \gamma_{\alpha'\beta} \lambda^{\alpha'}_{\ell} f^{\ell}_{\alpha}$$

Si l'on tient compte de la condition de symétrie $\gamma_{\alpha\beta} = \gamma_{\beta\alpha}$, on voit que les solutions du système (5) sans second membre sont de la forme :

(7) $$\gamma_{\alpha\beta} = C_{\alpha \ell} \, f_{\beta}^{\ell} + C_{\beta \ell} \, f_{\alpha}^{\ell}$$

Par conséquent <u>l'indétermination sur le variogramme sous-jacent obtenu en résolvant</u> (4) <u>est exactement celle qui est exprimée en</u> (3) <u>ou en</u> (3').

<u>3 - Introduction d'une hypothèse intrinsèque.</u>

Le système (4) comporte n(n-1)/2 inconnues (les $\gamma_{\alpha\beta}$ pour $\alpha \neq \beta$). D'après (7), sa solution générale dépend de n k paramètres arbitraires, les n(k+1) $C_{\alpha\ell}$, de la relation (7), liés par les n conditions

(7') $$C_{(\alpha)\ell} \, f_{(\alpha)}^{\ell} = 0$$

Si l'on admet de plus que <u>le variogramme sous-jacent est du type intrinsèque</u>, soit :

$$\gamma(x;y) = \gamma(x-y)$$

on introduit des conditions supplémentaires qui vont réduire le degré d'indétermination du problème. La géométrie des points expérimentaux joue évidemmentnici un rôle important. J'examinerai seulement le cas particulier où <u>les n points expérimentaux sont alignés et équidistants</u>. L'hypothèse intrinsèque s'exprime par les $\sum(n-k) = \frac{n(n-1)}{2}$ relations :

(8) $$\gamma_{1,1+k} = \gamma_{2,2+k} = \dots = \gamma_{n-k,n} \qquad (k = 1,2,\dots n-1)$$

qui devrait suffire en principe à lever l'indétermination pourvu que :

$$\frac{n(n-1)}{2} \geq nk$$

soit $n \geq 2k+1$. Ceci, toutefois, mériterait une discussion.

4 - Propriété de la matrice U.

Indiquons quelques propriétés remarquables de la matrice U définie par :

$$U_{\alpha}^{\alpha'} = \delta_{\alpha}^{\alpha'} - \lambda_{\ell}^{\alpha'} f_{\alpha}^{\ell} \tag{9}$$

En raison de la condition d'universalité (1), les k+1 vecteurs f^{ℓ} sont vecteurs propres à gauches pour la valeur propre 0, et les k+1 vecteurs λ_s sont vecteurs propres à droite, également pour la valeur propre 0, soit :

$$\left\{\begin{array}{l} f_{\alpha'}^{s} \, U_{\alpha}^{\alpha'} = 0 \\ U_{\alpha}^{\alpha'} \, \lambda_{s}^{\alpha} = 0 \end{array}\right. \tag{10}$$

On remarque d'ailleurs que la première relation (10), est équivalente à la condition d'universalité. En effet, les vecteurs f^s étant linéairement indépendants, on a :

$$f_{\alpha'}^{s} \, U_{\alpha}^{\alpha'} = f_{\alpha}^{s} - f_{\alpha'}^{s} \, \lambda_{\ell}^{\alpha'} \, f_{\alpha}^{\ell} = (\delta_{\ell}^{s} - f_{\alpha'}^{s} \, \lambda_{\ell}^{\alpha'}) \, f_{\alpha}^{\ell} = 0$$

si et seulement si (1) est vérifié.

De (10) résulte aussitôt que la matrice U est idempotente

$$U_{\beta}^{\alpha} \, U_{\gamma}^{\beta} = U_{\gamma}^{\alpha} \tag{11}$$

et que la covariance $R_{\alpha\beta} = E(R_{\alpha} R_{\beta})$ des résidus admet les vecteurs λ_{ℓ} comme vecteurs propres pour la valeur propre 0

$$\lambda_{\ell}^{\alpha} \, R_{\alpha\beta} = 0 \tag{12}$$

5 - Solution générale du système (4)

Cherchons la forme générale de la solution $\gamma_{\alpha'\beta'}$ de l'équation :

$$(4) \qquad R_{\alpha\beta} = - U_\alpha^{\alpha'} \gamma_{\alpha'\beta'} U_\beta^{\beta'}$$

Remarquons d'abord que $-R_{\alpha'\beta'}$ lui-même vérifie la relation (4). En effet, d'après l'idempotence (11) de la matrice U, on a :

$$U_\alpha^{\alpha'} R_{\alpha'\beta'} U_\beta^{\beta'} = -U_\alpha^{\alpha'} U_{\alpha'}^{\alpha''} \gamma_{\alpha''\beta''} U_{\beta'}^{\beta''} U_\beta^{\beta'} =$$

$$= U_\alpha^{\alpha''} \gamma_{\alpha''\beta''} U_\beta^{\beta''} = R_{\alpha\beta}$$

d'où la relation :

$$(13) \qquad R_{\alpha\beta} = U_\alpha^{\alpha'} R_{\alpha'\beta'} U_\beta^{\beta'}$$

Il résulte alors du paragraphe 2 que la <u>solution générale</u> de (4) est de la forme :

$$(14) \qquad \gamma_{\alpha\beta} = -R_{\alpha\beta} + D_{\alpha\ell} f_\beta^\ell + D_{\beta\ell} f_\alpha^\ell$$

avec une matrice $D_{\alpha\ell}$ assujettie seulement à la condition :

$$(14') \qquad R_{\alpha\alpha} = 2 D_{\alpha\ell} f_\alpha^\ell \quad \text{(sans sommation en } \alpha)$$

qui exprime $\gamma_{\alpha\alpha} \doteq 0$, (et à une autre condition exprimant que $-\gamma_{\alpha\beta}$ est de type positif conditionnel : mais cette dernière condition ne conduit qu'à des inégalités, et ne permet pas de diminuer l'indétermination).

Il y a plus : <u>pour un estimateur universel</u> λ_ℓ^α donné, <u>on peut toujours trouver une matrice</u> $D_{\alpha\ell}$ tel que cet estimateur soit optimal pour le $\gamma_{\alpha\beta}$ <u>compatible avec la covariance</u> des résidus que l'on en déduit selon (14), et l'on peut même s'arranger pour que la matrice des covariances $E(A_\ell A_s)$ soit une matrice $\mu_{\ell s}$ choisie d'avance.

En effet, λ^{β}_{ℓ} est optimal pour le variogramme (14) si l'on a :

$$\lambda^{\beta}_{\ell}(R_{\alpha\beta} + D_{\alpha s}\, f^{s}_{\beta} + D_{\beta s}\, f^{s}_{\alpha}) \equiv \lambda^{\beta}_{\ell}\,(R_{\alpha\beta} + D_{\beta s}\, f^{s}_{\alpha}) + D_{\alpha\ell} = \mu_{\ell s}\, f^{s}_{\alpha}$$

D'après (12) cette condition ne fait pas réellement intervenir $R_{\alpha\beta}$, et se réduit à :

$$D_{\alpha\ell} + \lambda^{\beta}_{\ell}\, D_{\beta s}\, f^{s}_{\alpha} = \mu_{\ell s}\, f^{s}_{\alpha} \tag{15}$$

Elle entraine donc que $D_{\alpha\ell}$ est combinaison linéaire des f^{s}_{α}, soit

$$D_{\alpha\ell} = C_{\ell s}\, f^{s}_{\alpha} \tag{15'}$$

Inversement, si $D_{\alpha\ell}$ est de la forme (15'), on a :

$$D_{\alpha\ell} + \lambda^{\beta}_{\ell}\, D_{\beta s}\, f^{s}_{\alpha} = C_{\ell s}\, f^{s}_{\alpha} + \lambda^{\beta}_{\ell}\, C_{su}\, f^{u}_{\beta}\, f^{s}_{\alpha} =$$

$$C_{\ell s}\, f^{s}_{\alpha} + C_{s\ell}\, f^{s}_{\alpha}$$

et (15) est vérifié avec :

$$\mu_{\ell s} = C_{\ell s} + C_{s\ell}$$

Autrement dit, pour un $\mu_{\ell s}$ donné, l'estimateur λ^{β}_{ℓ} est optimal pour le variogramme :

$$\gamma_{\alpha\beta} = - R_{\alpha\beta} + \mu_{\ell s}\, f^{\ell}_{\alpha}\, f^{s}_{\beta}$$

($\mu_{\ell s}$ est seulement soumis à la condition $\mu_{\ell s}\, f^{\ell}_{\alpha}\, f^{s}_{\alpha} = R_{\alpha\alpha}$, et aussi à celle de stricte positivité).

Ces résultats inquiétants montrent qu'<u>il faut de toute nécessité introduire des hypothèses supplémentaires</u>, physiquement plausibles, (par exemple, le caractère intrinsèque du variogramme sous-jacent) en vue de lever ces indéterminations fondamentales.

6 - Comparaison de deux estimateurs universels

Soient λ_ρ^α et μ_ρ^α deux estimateurs universels distincts, vérifiant donc :

$$\lambda_\rho^\alpha f_\alpha^s = \mu_\rho^\alpha f_\alpha^s = \delta_\rho^s$$

et soient U et V les matrices :

$$\begin{cases} U_{\alpha'}^{\alpha} = \delta_{\alpha'}^{\alpha} - \lambda_\rho^\alpha f_{\alpha'}^\rho \\ V_{\alpha'}^{\alpha} = \delta_{\alpha'}^{\alpha} - \mu_\rho^\alpha f_{\alpha'}^\rho \end{cases}$$

A partir d'une même réalisation, ces estimateurs conduisent à des résidus R_α et R'_α différents, dont les covariances sont respectivement, d'après (4) :

$$\begin{cases} R_{\alpha\beta} = - U_\alpha^{\alpha'} \gamma_{\alpha'\beta'} U_\beta^{\beta'} \\ R'_{\alpha\beta} = - V_\alpha^{\alpha'} \gamma_{\alpha'\beta'} V_\beta^{\beta'} \end{cases}$$

Les matrices R et R' ne sont pas identiques, et l'on pourrait espérer lever l'indétermination en utilisant simultanément plusieurs estimateurs universels. En fait, il n'en est rien, et les équations ci-dessus admettent la même solution générale.

En fait, on remarque d'abord que l'on a :

$$(16) \qquad U_\alpha^{\alpha'} V_{\alpha'}^{\alpha''} = U_\alpha^{\alpha'} (\delta_{\alpha'}^{\alpha''} - \mu_\rho^{\alpha''} f_{\alpha'}^\rho) = U_{\alpha'}^{\alpha''}$$

d'après la relation (10) (soit V U = U en notation matricielle). Il en résulte que $- R'_{\alpha\beta}$ vérifie le système (4) :

$$R_{\alpha\beta} = U_\alpha^{\alpha'} R'_{\alpha'\beta'} U_\beta^{\beta'}$$

comme on le voit immédiatement, donc que $R'_{\alpha\beta}$ est de la forme générale :

(17) $$R'_{\alpha\beta} = R_{\alpha\beta} + D_{\alpha\ell}\, f^{\ell}_{\beta} + D_{\beta\ell}\, f^{\ell}_{\alpha}$$

Par suite aussi les systèmes construits à partir de (λ,R) et de (μ,R') admettent la même solution générale, et l'usage d'un second estimateur universel ne diminue en rien l'indétermination.

La matrice $D_{\alpha\ell}$ qui permet, en (17), de passer d'une covariance à l'autre vérifie certaines relations intéressantes. Si nous multiplions (17) par μ^{β}_{s}, nous obtenons 0 à gauche, d'après (12), d'où :

$$\mu^{\beta}_{s}\, R_{\alpha\beta} + D_{\alpha s} + \mu^{\beta}_{s}\, D_{\beta\ell}\, f^{\ell}_{\alpha} = 0$$

De même, en multipliant à nouveau par λ^{α}_{i}, il vient :

$$\lambda^{\alpha}_{i}\, D_{\alpha s} + \mu^{\beta}_{s}\, D_{\beta i} = 0$$

7 - Encore l'hypothèse intrinsèque

Plaçons-nous dans le cas où les n points expérimentaux sont alignés et équidistants, et cherchons à déterminer le variogramme sous jacent :

(18) $$\gamma_{\alpha\beta} = - R_{\alpha\beta} + D_{\alpha\ell}\, f^{\ell}_{\beta} + D_{\beta\ell}\, f^{\ell}_{\alpha}$$

en lui imposant d'être "aussi intrinsèque que possible". S'il est rigoureusement intrinsèque, les relations (8) doivent être vérifiées. Mais, en fait, on ne connaît jamais la vraie matrice $R_{\alpha\beta}$, mais seulement une estimation $R^{*}_{\alpha\beta}$ qui en diffère plus ou moins, et, même si le vrai variogramme était intrinsèque, il ne serait pas possible en général de trouver une matrice $\gamma_{\alpha\beta}$ vérifiant rigoureusement les relations (8) pour $n \geqslant 2k+1$. Il faut donc s'orienter vers une solution du type "compensation des erreurs".

Considérons les relations (8), soit :

(8) $$\gamma_{1,1+i} = \gamma_{2,2+i} = \cdots = \gamma_{n-i,n} \qquad (i = 1,2,\ldots\, n-1)$$

Pour chaque i, posons :

$$\begin{cases} g_i = \dfrac{1}{n-i} \displaystyle\sum_{j=1}^{n-i} \gamma_{j,i+j} \\ \\ s_i^2 = \dfrac{1}{n-i} \displaystyle\sum_{j=1}^{n-i} (\gamma_{j,i+j} - g_i)^2 \end{cases}$$

D'après (18), ces quantités s'expriment en fonction des R_{ij} (connus) et des D_{il} (que l'on cherche à déterminer). Choisissant ensuite des poids p_i, on peut définir la forme quadratique :

$$Q = \sum_{i=1}^{n-2} p_i \, s_i^2$$

et déterminer les D_{il} par la condition de minimiser Q. Les poids p_i sont évidemment arbitraires (il faudrait une étude assez approfondie de statistiques mathématiques pour déterminer les meilleurs poids p_i possibles : plus généralement, d'ailleurs, la forme Q devrait contenir des termes rectangles s_{ij}, mais nous n'en sommes pas là). Une méthode simple consiste à prendre $p_i = r-i$, puisqu'il paraît naturel d'attribuer un plus grand poids aux indices les mieux représentés, ce qui revient à prendre :

(19) $$Q = \sum_{i=1}^{n-2} \sum_{j=1}^{n-i} (\gamma_{i,i+j} - g_i)^2$$

D'autre part, il ne faut pas oublier les n conditions :

(19') $$D_{\alpha l} \, f_\alpha^l = \frac{1}{2} R_{\alpha\alpha}$$

Ecrivons donc que Q est minimum compte tenu de (19'). On obtient n(k+1) équations :

(20) $$\frac{\partial Q}{\partial D_{\alpha l}} + \mu_\alpha \, f_\alpha^l = 0 \qquad \text{(sans sommation en } \alpha)$$

avec n paramètres de Lagrange μ_α que les n conditions (19') permettent de déterminer.

Pour expliciter (20), écrivons d'abord Q sous la forme :

$$Q = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^{n-i} \gamma^2_{i,i+j} - \sum_{i=1}^{n-1} (n-i)\ g_i{}^2 =$$

$$\sum_{i\ j} \gamma^2_{ij} - \sum_{i=1}^{n-1} (n-i)\ g_i{}^2$$

On note ensuite, d'après (18)

$$\frac{\partial\gamma_{is}}{\partial D_{\alpha l}} = \delta^i f^l_j + \delta^j_\alpha\ f^l_i$$

Compte tenu de $\gamma_{ii} = 0$, ceci donne :

$$\frac{\partial}{\partial D_{\alpha l}} \sum_{i\ j} \gamma^2_{ij} = 2 \sum_{i=1}^{n} \gamma_{i\alpha}\ f^l_i$$

8 - Estimateurs quadratiques universels

soit :

$$Q = Q^{\alpha\beta}\ z_\alpha\ z_\beta$$

une forme quadratique relativement aux données expérimentales. Nous dirons que Q vérifie la condition d'inversalité (ou est un estimateur quadratique universel), si E(Q) ne dépend pas du vecteur dérive a_ρ. Il n'y a pas de difficultés particulière à voir que Q vérifie cette condition si et seulement si on a :

$$(21) \qquad Q^{\alpha\beta}\ f^\rho_\alpha\ f^s_\beta = 0$$

Essayons de caractériser la classe des matrices $Q^{\alpha\beta}$ vérifiant la condition d'universalité (21).

a/ Un vecteur θ^α vérifie la condition $\theta^\alpha\ f^\rho_\alpha = 0$ si et seulement si on a $\theta^\alpha = U^\alpha_{\alpha'}\ \theta^{\alpha'}$, avec la matrice $U^\alpha_{\alpha'}$ définie en (9) (pour un estimateur universel λ^α_ρ donné quelconque), soit :

$$\theta^{\alpha} f_{\alpha}^{\ell} = 0 \iff \theta^{\alpha} = U_{\alpha'}^{\alpha} \theta^{\alpha'}$$

En effet, l'implication dans le sens $\Leftarrow$ résulte du fait que les f^{s} sont vecteurs propres à gauches pour la valeur propre 0, selon la relation (10). Inversement, il suffit d'expliciter

$$U_{\alpha'}^{\alpha} \theta^{\alpha'} = \theta^{\alpha} - \lambda_{\ell}^{\alpha} f_{\alpha'}^{\ell} \theta^{\alpha'}$$

pour obtenir l'implication dans le sens $\Rightarrow$.

b/ Ainsi, la condition d'universalité (21) est remplie si et seulement si on a :

$$(21') \qquad Q^{\alpha\beta} f_{\alpha}^{\ell} = U_{\gamma}^{\beta} Q^{\alpha\gamma} f_{\alpha}^{\ell}$$

comme on le voit en prenant $\theta^{\beta} = Q^{\alpha\beta} f_{\alpha}^{\ell}$ à ℓ fixé.

Mais en mettant (21') sous la forme :

$$(Q^{\alpha\beta} - U_{\gamma}^{\beta} Q^{\alpha\gamma}) f_{\alpha}^{\ell} = 0$$

et en appliquant à nouveau a/ avec $\theta^{\alpha} = Q^{\alpha\beta} - U_{\gamma}^{\beta} Q^{\alpha\gamma}$, on voit que (21') équivaut à :

$$Q^{\alpha\beta} - U_{\gamma}^{\beta} Q^{\alpha\gamma} = U_{\alpha'}^{\alpha} (Q^{\alpha'\beta} - U_{\gamma}^{\beta} Q^{\alpha'\gamma})$$

Or ceci entraine que $Q^{\alpha\beta}$ est de la forme :

$$(21'') \qquad Q^{\alpha\beta} = U_{\gamma}^{\beta} Q^{\alpha\gamma} + U_{\gamma}^{\alpha} G^{\gamma\beta}$$

avec une certaine matrice G qu'il n'est plus utile d'expliciter. Inversement, si $Q^{\alpha,\beta}$ est de la forme (21"), la première relation (10) nous garantit que (21) est vérifiée, de sorte que (21") apparaît comme une condition nécessaire et suffisante pour que Q vérifie la condition d'universalité.

Lorsque cette condition est remplie, la forme Q se met donc sous la forme :

$$Q = Q^{\alpha\gamma} R_{\gamma} z_{\alpha} + G^{\gamma\beta} R_{\gamma} z_{\beta}$$

puisque le résidu R_γ est, par définition, $R_\gamma = U_\gamma^\beta Z_\beta$.

c/ Il suit de là que l'on obtient toute l'information que les estimateurs quadratiques universels sont susceptibles de nous apporter dès lors que l'on connaît la matrice (dissymétrique) :

$$T_{\alpha\beta} = E(R_\alpha \, Z_\beta)$$

S'il existe une covariance $\sigma_{\alpha\beta}$, on a :

$$(22) \qquad T_{\alpha\beta} = U_\alpha^{\alpha'} \sigma_{\alpha'\beta} = - U_\alpha^{\alpha'} \gamma_{\alpha'\beta}$$

S'il n'existe qu'un covariogramme des résidus $\gamma_{\alpha\beta}$, mais non une covariance $\sigma_{\alpha\beta}$, l'existence de $E(R_\alpha Z_\beta)$ n'est pas évidente dans le cas général, bien que son écriture formelle ne dépende que de la matrice $\gamma_{\alpha\beta}$, et ne peut probablement être affirmée que sous des hypothèses supplémentaires qu'il conviendra de préciser. Je n'examinerai pas ce point ici, et me limiterai au cas où il existe une covariance

9/ Solution générale de (22)

Cherchons la forme générale de la solution du système :

$$(22) \qquad U_\alpha^{\alpha'} \sigma_{\alpha'\beta} = T_{\alpha\beta}$$

doit être symétrique. On note, en premier lieu, que $T_{\alpha\beta}$

compte tenu du fait que la matrice $\sigma_{\alpha\beta}$ lui-même est une solution, à cause de l'idem potence de la matrice U :

$$U_\alpha^{\alpha'} T_{\alpha'\beta} \equiv U_\alpha^{\alpha'} \, U_\alpha^{\alpha''} \, \sigma_{\alpha''\beta} = U_\alpha^{\alpha''} \, \sigma_{\alpha''\beta}$$

D'autre part, la solution générale de l'équation sans second membre :

$$(23) \qquad U_\alpha^{\alpha'} s_{\alpha'\beta} = 0$$

est de la forme :

$$s_{\alpha'\beta} = S_{\beta\rho} \, f_{\alpha'}^{\rho}$$

En effet, un $s_{\alpha'\beta}$ de cette forme vérifie (23) à cause de (10), et, inversement, (23) lui-même s'explicite sous la forme :

$$s_{\alpha\beta} = \lambda_{\ell}^{\alpha'} \; s_{\alpha'\beta} \; f_{\alpha}^{\ell}$$

On en déduit que la solution générale de (22) est de la forme :

$$\sigma_{\alpha\beta} = T_{\alpha\beta} + S_{\beta\ell} \; f_{\alpha}^{\ell} \tag{22'}$$

Mais on sait de plus que la matrice $\sigma_{\alpha\beta}$ est <u>symétrique</u>. On peut donc trouver une matrice $S^{o}_{\beta\ell}$ particulière telle que l'on ait :

$$\sigma^{o}_{\alpha\beta} = \sigma^{o}_{\beta\alpha}$$

avec

$$\sigma^{o}_{\alpha\beta} = T_{\alpha\beta} + S^{o}_{\beta\ell} \; f_{\alpha}^{\ell}$$

La solution générale symétrique de (22) est alors du type :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma^{o}_{\alpha\beta} + S_{\beta\ell} \; f_{\alpha}^{\ell}$$

avec une matrice $S_{\beta\ell}$ vérifiant :

$$S_{\beta\ell} \; f_{\alpha}^{\ell} = S_{\alpha\ell} \; f_{\beta}^{\ell} \tag{24}$$

En multipliant (24) par λ_{s}^{α} et en tenant compte de la condition d'universalité, on trouve :

$$S_{\beta s} = \lambda_{s}^{\alpha} \; S_{\alpha\ell} \; f_{\beta}^{\ell} = K_{s\ell} \; f_{\beta}^{l}$$

et, inversement, si cette condition est remplie, (24) est vérifiée. On peut même supposer la matrice $K_{\ell s}$ symétrique. Finalement, la solution générale de (22) est de la forme :

$$\sigma_{\alpha\beta} = \sigma^{o}_{\alpha\beta} + K_{\ell s} \; f_{\alpha}^{\ell} \; f_{\beta}^{s} \tag{25}$$

<u>avec une matrice symétrique $K_{\ell s}$ arbitraire</u>. On note que l'indétermination est plus faible que celle à laquelle conduisait la consi-

dération de la seule matrice $R_{\alpha\beta} = E(R_\alpha R_\beta)$.

10 - Invariance des estimateurs optimaux

Supposons que $\sigma_{\alpha\beta}$ soit connue à l'indétermination près qu'exprime la relation (25) - ce qui est théoriquement possible, d'après ce qui précède, aux erreurs d'estimation près quientachent la matrice des $T_{\alpha\beta}$. Considérons alors le système :

$$(D) \qquad \begin{cases} \nu^\beta_\ell \, \sigma_{\alpha\beta} = \mu_{\ell s} \, f^s_\alpha \\ \\ \nu^\beta_\ell \, f^s_\beta = \delta^s_\ell \end{cases}$$

associé à l'estimation de la dérive, optimale pour la covariance $\sigma_{\alpha\beta}$. D'après (25), ce système s'écrit aussi bien :

$$(D') \qquad \begin{cases} \nu^\beta_\ell \, \sigma^o_{\alpha\beta} = (\mu_{\ell s} - \nu^\beta_\ell \, K_{ts} \, f^t_\beta) \, f^\ell_\alpha = \mu'_{\ell s} \, f^\ell_\alpha \\ \\ \nu^\beta_\ell \, f^s_\beta = \delta^s_\ell \end{cases}$$

Autrement dit, l'estimateur optimal $A_\ell = \nu^\beta_\ell \, Z_\beta$ n'est pas affecté par l'indétermination (25) qui entache la covariance $\sigma_{\alpha\beta}$.

Cette indétermination ne se répercute que sur les paramètres de Lagrange $\mu_{\ell s}$, c'est-à-dire sur la matrice des covariances des estimateurs optimaux A_ℓ. On voit ainsi apparaître la conclusion générale de cette étude, qui n'est peut-être pas sans importance méthodologique :

A partir des seules données expérimentales, et sans introduire d'hypothèse particulière supplémentaire (comme le caractère intrinsèque du variogramme sous-jacent), il n'est théoriquement pas impossible de déterminer l'estimateur optimal de la dérive, mais la variance attachée à cette estimation reste indéterminée. Dans les applications, on pourra toujours lever cette dernière indétermination en choisissant la matrice $\sigma_{\alpha\beta}$ la „plus intrinsèque possible„ parmi celle qui sont compatibles avec les données expérimentales, et obtenir ainsi une valeur numérique de la variance d'estimation.

La situation est à peu près la même en ce qui concerne le krigeage, avec cette différence que pour résoudre le système

$$(K) \qquad \begin{cases} \nu^{\beta}\ \sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha x} + \mu_{\ell}\ f_{\alpha}^{\ell} \\ \nu^{\beta}\ f_{\beta}^{\ell} = f_{x}^{\ell} \end{cases}$$

il est nécessaire d'extrapoler $\sigma_{\alpha\beta}$ par une fonction $\sigma_{\alpha x}$, $x \notin S$. Si $\sigma^{o}_{\alpha x}$ extrapole ainsi la solution particulière $\sigma^{o}_{\alpha\beta}$, on peut ensuite prendre :

$$(26) \qquad \sigma_{\alpha x} = \sigma^{o}_{\alpha x} + K_{\ell s}\ f_{\alpha}^{\ell}\ f_{x}^{s} \qquad (x \notin S)$$

et vérifier que les ν^{β} (c'est-à-dire l'estimateur associé au krigeage) ne dépendent pas de la matrice $K_{\ell s}$. Par contre la variance de cette estimation dépendra de $K_{\ell s}$, et ici encore, on ne pourra lever l'indétermination qui pèse sur la variance de krigeage qu'en introduisant une hypothèse supplémentaire. A dire vrai, cette hypothèse supplémentaire est probablement déjà nécessaire pour choisir d'une manière plausible l'extropolation (26), qui, autrement, resterait elle aussi largement indéterminée. Dans les applications, on cherchera donc une fonction de covariance (25), et c'est cette covariance (ou covariogramme) qui servira à construire l'extrapolation (26) et à résoudre le système (K).

A N N E X E

Un exemple réconfortant

Du point de vue épistémologique, l'indétermination fondamentale qui entache l'estimation du variogramme sous-jacent, et qu'on ne peut lever qu'en introduisant des hypothèses supplémentaires plus ou moins plausibles, paraîtra peut-être troublante. Mais il faut bien voir que la situation est fondamentalement la même au niveau de la statistique la plus classique.

En effet, le problème type que l'on rencontre à ce niveau est le suivant : connaissant n valeurs numériques :

$$(x_1, x_2, \ldots x_n)$$

trouver la loi de la variable vectorielle $(X_1, X_2, \ldots X_n)$ dont ces n valeurs numériques sont censées constituer une réalisation particulière. En toute généralité, ce problème est beaucoup plus indéterminé que celui que pose l'identification du variogramme sous-jacent. Pour le résoudre, les statisticiens introduisent une hypothèse supplémentaire, plus ou moins plausible selon les cas d'espèce, mais en tout cas <u>beaucoup plus forte</u> que celle dont nous avons besoin pour identifier notre variogramme sous-jacent, hypothèse qui consiste en général à admettre que les X_i sont des V.A. <u>indépendantes</u> obéïssant à la même loi de distribution.

A titre d'exercice, examinons l'exemple suivant : Nous supposons que $(X_1, X_2 \ldots X_n)$ est une V.A. gaussienne dont la loi dépend de 3 paramètres m, σ^2 et ρ :

$$m = E(X_i), \quad \sigma^2 = E(X_i^2) - m^2, \quad \rho\,\sigma^2 = E(X_i X_j) - m^2 \qquad (i \neq j)$$

autrement dit que les X_i sont n variables de Gauss <u>non indépendantes</u> admettant la même espérance m, la même variance σ^2, et un seul et même coefficient de corrélation :

$$\rho_{ij} = \rho \quad (i \neq j)$$

Le cas particulier $\rho = 0$ correspond à l'hypothèse habituelle des statisticiens.

Examinons ce que donne la méthode du maximum de vraisemblance en ce qui concerne l'estimation <u>simultanée</u> des trois paramètres inconnus m, σ^2 et ρ à partir d'une réalisation unique $(x_1, x_2, .. x_n)$. Nous allons voir qu'elle aboutit à une indétermination.

a/ Par hypothèse, la matrice σ_{ij} des covariances est :

$$\sigma_{ij} = [(1 - \rho)\ \delta_{ij} + \rho]\ \sigma^2$$

Elle admet comme inverse la matrice :

$$B_{ij} = \frac{1}{(1 - \rho)\sigma^2} \left[\delta_{ij} - \frac{\rho}{1 + (n - 1)\rho}\right]$$

et son déterminant est :

$$\mathrm{Det}(\sigma) = \frac{1}{\mathrm{Det}(B)} = (1 - \rho)^{n-1}\ [1+(n-1)\rho]\ \frac{1}{\sigma^2}$$

(les valeurs propres de σ_{ij} sont $\lambda = (1-\rho)\sigma^2$, avec l'ordre de multiplicité n-1, les vecteurs propres associés étant ceux qui vérifient $\Sigma\ a_i = 0$, et $\lambda = 1+(n-1)\rho$ avec l'ordre 1 et le vecteur propre $a_i = 1$: en particulier σ_{ij} est de type positif et constitue une covariance si et seulement si ρ est compris entre $-1/n-1$ et $+1$).

b/ Le logarithme de la densité de probabilité gaussienne, une fois changé de signe, s'écrit :

$$(b) \quad \left\{ \begin{aligned} -\ 2 \log \psi = n \log \sigma^2 + (n-1) \log (1-\rho) + \log[1+(n-1)\rho] + \\ + \frac{1}{(1-\rho)\sigma^2} \left(S_2 - \frac{\rho}{1+(n-1)\rho}\ S_1^2\right) \end{aligned} \right.$$

avec :

$$S_1 = \sum_{i=1}^{n} (x_i - m)$$

$$S_2 = \sum_{i=1}^{m} (x_i - m)^2$$

Les équations du maximum de vraisemblance en ρ, σ^2 et m conduiraient à :

$$\frac{\partial^2 \log \psi}{\partial m} = \frac{\partial^2 \log \psi}{\partial \sigma^2} = \frac{\partial^2 \log \psi}{\partial \rho} = 0$$

c/ <u>Equation en m</u>. De :

$$\frac{\partial S_1}{\partial m} = - n, \quad \frac{\partial S_2}{\partial m} = - S_1$$

résulte que l'équation en m se réduit à :

$$\frac{(1 - \rho) S_1}{1+(n-1)\rho} = 0$$

Si on élimine la solution singulière $\rho = 1$, il reste donc $S_1 = 0$, c'est-à-dire :

(c) $$m^* = \bar{x} = \frac{1}{n} \Sigma x_i$$

L'estimateur de la moyenne est donc le même que dans le cas classique.

d/ <u>Equation en σ^2</u> - Compte tenu de (c), c'est-à-dire de $S_1 = 0$, il reste à choisir les estimateurs r et s^2 de ρ et σ^2 de manière à minimiser l'expression :

$$n \log s^2 + (n-1) \log (1-r) + \log (1+(n-1)r) + \frac{1}{1-r} \frac{S_2}{s^2}$$

L'équation en s^2 conduit immédiatement à :

(d) $$(1-r) s^2 = \frac{1}{n} S_2$$

e/ <u>Equation en r</u> Compte tenu de (d), la quantité que l'on doit minimiser en r est :

$$\log \frac{1+(n-1)r}{1-r}.$$

Elle ne dépend plus des données expérimentales, et (sur l'intervalle autorisé, qui est $(-1/n-1, +1)$ devient infinie positive pour $r = 1$. On aboutit ainsi à une impasse totale.

f/ Plus simplement, posons $C = (1-\rho)\sigma^2$, et cherchons à estimer C. Compte tenu de l'équation C, on doit minimiser l'expression :

$$n \log C + \frac{S_2}{C} + \log \frac{1+(n-1)r}{1-r}$$

L'équation en C donne comme en (d) :

$$C = \frac{1}{n} S_2$$

et l'équation en r aboutit à une impasse.

g/ Ainsi, les seuls paramètres que l'on puisse estimer (encore que dans des conditions assez mauvaises) sont l'espérance m et l'expression $C = (1-\rho)\sigma^2$. Il n'est pas possible d'estimer séparément ρ et σ^2 à partir des données disponibles.

Ce résultat se comprend assez bien si l'on introduit la notion d'universalité relativement à la dérive ici réduite à la constante inconnue m. Par raison de symétrie, l'estimateur universel optimal de la dérive m est nécessairement égal à la moyenne arithmétique, ce qui correspond à la relation (c). Les estimateurs quadratiques universels Q sont de la forme :

$$Q = Q^{ij} x_i x_j$$

avec une matrice Q^{ij} telle que E(Q) ne dépende pas de m. Or on trouve :

$$E(Q) = Q^{ij}(\sigma_{ij} + m^2)$$

d'où la condition

$$\sum_{i,j} Q^{ij} = 0$$

Mais on a alors :

$$E(Q) = Q^{ij}\,\sigma_{ij} = (1-\rho)\sigma^2 \sum_i Q^{ii} + \rho\,\sigma^2 \sum_{ij} Q^{ij}$$

soit :

$$E(Q) = (1-\rho)\sigma^2 \sum_i Q^{ii}$$

Ainsi les estimateurs quadratiques universels permettent d'estimer $(1-\rho)\sigma^2$, mais non pas séparément ρ et σ^2.

19 - Identification du variogramme sous-jacent

Indiquons maintenant comment procéder à l'estimation de ce qu'il est possible de connaître. Soit

$$A_\ell = \lambda_\ell^\alpha\, Z_\alpha, \qquad \lambda_\ell^\alpha\, f_a^s = \delta_\ell^s$$

un estimateur universel (ℓ, 1 = 0, 1, 2, ... k, α = 1, 2,..n, n > k+1.

Il est possible de compléter les (λ_ℓ) et les (f^ℓ) par des (λ_u), (f^u), u = k+1,..n de manière à obtenir deux bases duales de $\mathbb{R}^{n+1}$, soit

(9-1) $$\lambda_i^\alpha\, f_\alpha^j = \delta_i^j \qquad (i,\ j = 0,\ 1\ ..\ n)$$

Or ceci entraine

$$f_\alpha^i\,\lambda_i^\beta = f_\alpha\,\lambda_\ell^\beta + f_\alpha^u\,\lambda_u^\beta = \delta_\alpha^\beta$$

Posons :

$$\Lambda_\alpha^\beta = f_\alpha^\ell\,\lambda_\ell^\beta\ , \qquad \mho_\alpha^\beta = f_\alpha^u\,\lambda_u^\beta = \delta_\alpha^\beta - \Lambda_\alpha^\beta$$

Nous dirons qu'un élément $C^\alpha Z_\alpha$ est <u>universel</u> s'il est d'espérance nulle quels que soient les a_ℓ. L'espace vectoriel des éléments universels est engendré par les $\lambda_u^\alpha Z_\alpha$. Parmi les moments d'ordre 2, seuls seront accessibles les combinaisons d'éléments de la forme :

(9-2) $$S_{u\beta} = \lambda_u^\alpha\,\sigma_{\alpha\beta} = E(\lambda_u^\alpha\, Z_\alpha\, Z_\beta)$$

qui ne dépendent pas des a_ℓ. Au contraire, les :

$$S_{\ell\beta} = \lambda_\ell^\alpha \, \sigma_{\alpha\beta} = E(\lambda_\ell^\alpha \, (Z_\alpha - m_\alpha) \, (Z_\beta - m_\beta) \,)$$

seront inaccessibles. Le système

$$S_{i\beta} = \lambda_i^\alpha \, \sigma_{\alpha\beta}$$

admet, d'après (9-1), la solution $\sigma_{\alpha\beta} = f_\alpha^i \, S_{i\beta}$, soit explicitement

$$\sigma_{\alpha\beta} = f_\alpha^u \, S_{u\beta} + f_\alpha^\ell \, S_{\ell\beta} \tag{9-3}$$

avec n(k+1) paramètres inconnus $S_{\ell\beta}$. Mais $\sigma_{\alpha\beta} = \sigma_{\beta\alpha}$ est symétrique. On doit donc avoir aussi :

$$\sigma_{\alpha\beta} = f_\beta^u \, S_{u\alpha} + f_\beta^\ell \, S_{\ell\alpha}$$

En multipliant par λ_s^α, ceci donne :

$$S_{s\beta} = \lambda_s^\alpha \, \sigma_{\alpha\beta} = f_\beta^u \, \lambda_s^\alpha \, S_{u\alpha} + f_\beta^\ell \, \lambda_s^\alpha \, S_{\ell\alpha}$$

soit aussi :

$$S_{\ell\beta} = f_\beta^u \, \lambda_\ell^\alpha \, S_{u\alpha} + f_\beta^s \, \lambda_\ell^\alpha \, S_{s\alpha}$$

Portons dans (9-3), en notant :

$$f_\alpha^\ell \, S_{\ell\beta} = f_\beta^u \, f_\alpha^\ell \, \lambda_\ell^\gamma \, S_{u\gamma} + f_\beta^s \, f_\alpha^\ell \, \lambda_\ell^\gamma \, S_{s\gamma}$$

$$= f_\beta^u \, S_{u\gamma} \, \Lambda_\alpha^\gamma + D_{\ell s} \, f_\alpha^\ell \, f_\beta^s$$

(avec $D_{\ell s} = \lambda_\ell^\gamma \, S_{s\gamma}$). Il vient :

$$\sigma_{\alpha\beta} = f_\alpha^u \, S_{u\beta} + f_\beta^u \, S_{u\gamma} \, \Lambda_\alpha^\gamma + D_{\ell s} \, f_\alpha^\ell \, f_\beta^s \tag{9-4}$$

Les deux premiers termes sont accessibles :

$$f_\alpha^u S_{u\beta} + f_\beta^u S_{u\gamma} \Lambda_\alpha^\gamma = f_\alpha^u \lambda_u^\gamma E(Z_\beta Z_\gamma) + f_\beta^u \Lambda_\alpha^\gamma \lambda_u^{\gamma'} E(Z_\gamma Z_{\gamma'})$$

$$= E(Z_\alpha Z_\beta) - E(m_\alpha^* Z_\beta) + E(m_\alpha^* Z_\beta) - E(m_\alpha^* m_\beta^*)$$

D'où :

$$(9\text{-}5) \qquad \sigma_{\alpha\beta} = E[Z_\alpha Z_\beta - m_\alpha^* m_\beta^*] + D_{\ell s} f_\alpha^\ell f_\beta$$

avec des $D_{\ell s} = \text{Cov } A_\ell A_s$ indéterminables.

Dans le cas où il n'existe qu'un variogramme, (9-5) sera remplacée par :

$$(9\text{-}6) \qquad \gamma_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} E[(Z_\alpha - Z_\beta)^2 + (m_\alpha^* - m_\beta^*)^2] + \frac{1}{2} D_{\ell s}(f_\alpha^\ell - f_\beta^\ell)(f_\alpha^s - f_\beta^s)$$

avec, ici encore, $D_{\ell s} = \text{Cov } A_\ell A_s$ (indéterminable), pour ℓ, s = 1,2..k (à l'exclusion de $\ell = 0$ et s = 0).