CGMM N-732

POUR UNE ANALYSE KRIGEANTE DES DONNEES REGIONALISEES

G. MATHERON

ÉCOLE DES MINES DE PARIS
CENTRE de MORPHOLOGIE MATHÉMATIQUE
N° 732

Fontainebleau Janvier 1982

Table des Matières

0 - PERSPECTIVES..... 1

I - LE CAS MONOVARIABLE..... 3

II - LE CAS MULTIVARIABLE ISOTOPIQUE..... 6

Analyse des matrices C^u_{ij}..... 7

Le cokrigeage..... 8

III - LE CAS MULTIVARIABLE HETEROTOPIQUE..... 10

IV - CHANGEMENT DE REPRESENTATION..... 12

V - POINT DE VUE DE L'INERTIE..... 16

Choix de la représentation..... 17

Analyse des résidus..... 18

Conséquences pour l'ajustement..... 20

POUR UNE ANALYSE KRIGEANTE DES DONNEES REGIONALISEES

G. Matheron

0 - PERSPECTIVES

S'agissant de variables régionalisées, les techniques habituelles d'analyse des données laissent échapper un aspect essentiel du phénomène, à savoir justement son caractère spatialisé. Notons que, dans le cas où il existe des dérives, on accomplirait sans doute déjà un progrès substantiel en analysant séparément dérives et résidus. Je pense que nos modèles topo-probabilistes nous permettent d'aller plus loin. Dans l'idéal, on pourrait envisager le recours à l'analyse harmonique, et des analyses de données de type classique (composantes principales) effectuées séparément sur chaque bande de fréquence. Malheureusement, les techniques d'analyse spectrale sont difficiles à mettre en oeuvre dans le cas de données irrégulièrement réparties dans un espace de dimension supérieure à 1. C'est pourquoi nous nous orientons vers des modèles plus simples, analogues aux "schémas polynomiaux" si utiles dans la mise en oeuvre des FAI-k. L'idée générale consistera à interpréter nos variables régionalisées $z_i(x)$ comme des réalisations (de représentations) de certaines FAI-k Z_i admettant une décomposition de la forme :

$$Z_i = A^p_{iu} \, Y^u_p \tag{0-1}$$

où les Y^u_p sont des FAI-k mutuellement orthogonales admettant des covariances généralisées $K^u(h)$ dépendant du seul indice u et non de l'indice p. En pratique, l'indice u prendrait au plus trois ou quatre valeurs : pour u=0, par exemple, K^0 représenterait un effet de pépite, tandis que l'on aurait $K^1(h) = -|h|$, $K^2(h) = |h|^2 \log|h|$, $K^3(h) = |h|^3$, etc... (d'autres modèles sont évidemment possibles, certains termes pouvant correspondre à des covariances stationnaires, et le modèle (0-1) lui-même peut être utilisé aussi dans le cas stationnaire). Cet indice u joue donc ici, en un sens large, le rôle d'indicateur d'une certaine "bande de fréquence". L'indice p, au contraire, u étant fixé repère les "composantes principales" de la corégionalisation dans le "domaine de fréquence" associé à u.

Ainsi, la matrice des covariances généralisées $K_{ij}(h)$ est, dans ce modèle, décomposée en une somme du type :

$$K_{ij}(h) = \sum_u C^u_{ij} \, K^u(h) \tag{0-2}$$

où chaque terme K^u est associé à une certaine échelle de structure. Dans ce modèle, les matrices C^u_{ij} sont obligatoirement définies positives (non nécessairement strictement), et le problème de la reconstitution des matrices A^p_{iu} du modèle (0-1) est équivalent à l'analyse classique en composantes principales de chacune de ces matrices C^u_{ij} : cette reconstitution dépend donc du choix de la métrique de référence, relativement à laquelle on diagonalise chacune des matrices C^u_{ij}. Il y a là, évidemment, un certain arbitraire, mais, on le sait, <u>cet arbitraire est inhérent à toutes les méthodes d'analyse des données</u>.

L'étape suivante devrait consister à <u>cartographier les différentes composantes</u> $Y^u_p(x)$, ou du moins les principales d'entre elles, c'est-à-dire, pour chaque indice u, celles qui sont associées aux plus grandes valeurs propres de la matrice C^u_{ij}. En réalité, ces composantes ne sont pas accessibles numériquement, même aux x points expérimentaux, puisque les inconnues sont toujours plus nombreuses que les données. Mais on pourra procéder par <u>cokrigeage</u>, et cartographier donc des estimations optimales des différents termes $Y^u_p(x)$, ou plutôt de leurs "résidus" relativement à une "dérive" convenablement choisie.

J'examinerai d'abord le cas monovariable, puis le cas multivariable "isotopique" (mêmes points expérimentaux pour les différentes variables) et le cas multivariable "hétérotopique" (points expérimentaux éventuellement différents pour les différentes variables). Je préciserai ensuite le statut que l'on peut envisager de choisir pour les termes de dérive.

I - LE CAS MONOVARIABLE

Commençons par le cas le plus simple où il n'y a qu'une seule variable régionalisée $z(x)$. Le modèle est :

$$Z(x) = a_u \, Y^u(x) \qquad (u = 1, 2, \ldots, N)$$

où $Z(x)$ et les $Y^u(x)$ sont des FAI de même ordre k, a_u des coefficients numériques (connus). On suppose les FAI Y^u mutuellement orthogonales, et on désigne par $K_u(h)$ la covariance généralisée de Y^u (en pratique: K_1 = pépite, $K_2 = -|h|$, etc...).

On se propose de cokriger (à une dérive près) les $Y^u(x)$ à l'aide des Z_α expérimentaux. En toute rigueur, seules les combinaisons linéaires autorisées $\int\lambda(dx)\, Y^u(x)$ ($\int\lambda(dx)\, f^\ell(x) = 0$) sont krigeables avec une variance finie. On peut néanmoins donner un sens à $Y^{*u}(x)$, à une dérive près. On le voit en remarquant que le système de krigeage, ainsi que son dual, ont tous deux une solution unique :

$$(K) \begin{cases} \lambda^\alpha K_{\alpha\beta} = R_\beta + \mu_\ell f^\ell_\beta \\ \lambda^\alpha f^\ell_\alpha = S^\ell \end{cases} \qquad (K^*) \begin{cases} b^\beta K_{\alpha\beta} + C_\ell f^\ell_\alpha = z_\alpha \\ b^\alpha f^\ell_\alpha = 0 \end{cases}$$

La solution de (K) donne un estimateur $Z^* = \lambda^\beta z_\beta$ de la quantité associée aux éléments R_β, S^ℓ du second membre. Or, en multipliant (K^*) par λ^α, on trouve identiquement :

$$(E) \qquad Z^* = \lambda^\beta z_\beta = b^\alpha R_\alpha + C_\ell S^\ell$$

Ainsi, le système (K^*) étant résolu une fois pour toutes, on stocke quelquepart les b^α et les C_ℓ, et la relation (E) donne la solution de (K) quel que soit le second membre (R_β, S^ℓ). Par exemple, le krigeage de $Z(x)$ est :

$$(I\text{-}1) \qquad z^*(x) = b^\alpha K_{\alpha x} + C_\ell f^\ell(x)$$

Il sera commode d'appeler <u>dérive</u> (conventionnelle) le terme $C_\ell f_x^\ell$ et <u>résidu</u> (conventionnel) le terme $b^\alpha K_{\alpha x}$.

Dérive et résidu ne sont pas définis de manière univoque. Si l'on ajoute à K(h) un polynome pair de degré $\leq 2k$, ou, plus généralement si l'on remplace K(x-y) par

$$\sigma(x,y) = K(x-y) + k_\ell(x) f^\ell(y) + k_\ell(y)\, f^\ell(x)$$

(en particulier, donc, si l'on adopte la covariance, non stationnaire, d'une représentation arbitrairement choisie) on voit facilement que <u>les termes b^α du système (K^*) restent invariants</u>, tandis que les C_ℓ sont modifiés selon une loi facile à expliciter. Le terme de "dérive" $b^\alpha K_{\alpha x}$ de l'expression (I-1) du krigeage devient ainsi :

$$b^\alpha \sigma_{\alpha,x} = b^\alpha K_{\alpha,x} + b^\alpha k_{\ell,\alpha}\, f^\ell(x)$$

autrement dit se voit imputer un terme polynomial bien défini (et facile à calculer). Corrélativement, le terme de dérive $C_\ell f^\ell(x)$ se voit retrancher ce même terme polynomial.

(Noter que, dans le cas où $\sigma(x,y)$ est la covariance non stationnaire d'une représentation définie de la FAI-k, le terme de dérive ainsi corrigé coïncide avec <u>l'estimateur optimal de la dérive</u>. dans le modèle correspondant, c'est-à-dire au sens du krigeage universel associé à la covariance $\sigma(x,y)$: il sera pourtant plus simple en pratique de résoudre le système (K^*) avec une covariance généralisée K(h), quitte à faire ensuite les corrections voulues - voir ci-dessous le paragraphe IV).

C'est pourquoi dérive et résidu doivent être dits conventionnels, bien que leurs expressions soient univoquement définies dès que l'on se donne une CG K(h) ou une covariance $\sigma(x,y)$. Seuls d'ailleurs les coefficients C_ℓ dépendent de ce choix, les b^α sont intrinsèques.

Plus généralement, dans la solution générale (E) du système (K), on pourra encore appeler dérive le terme $C_\ell S^\ell$, et résidu le terme $b^\alpha R_\alpha$. On restera cohérent (et, dans le cas $S^\ell = 0$, c'est-à-dire dans le cas où la grandeur à estimer est elle-même une combinaison linéaire autorisée, le terme $b^\alpha R_\alpha$ coïncide automatiquement avec le krigeage ou le cokrigeage de cette grandeur).

On peut aborder dans cette optique le problème de l'estimation des diverses composantes $Y^u(x)$. Il est clair que la ventilation d'une dérive entre ces composantes reste entachée d'un arbitraire irréductible. C'est pourquoi on estimera plutôt le <u>résidu</u> associé à chaque composante Y^u, ce qui revient à poser le système (K) avec

$$S^\ell = 0 \qquad R_\beta = a_{(u)} K^{(u)}_{x,\beta} \qquad \text{(sans sommation)}$$

Il vient donc, d'après (E) :

$$\text{(I-2)} \qquad y^{*u}(x) = a_{(u)} \, b^\alpha \, K^{(u)}_{\alpha,x}$$

On note que l'arbitraire introduit par le choix de la covariance se manifeste par un polynôme, automatiquement filtré pour toute combinaison linéaire autorisée. Ainsi, si λ est une combinaison linéaire autorisée, le krigeage de $\int \lambda(dx)\, Y^u(x)$ correspondra toujours à $\int \lambda(dx)\, y^{*u}(x)$.

Notons enfin ceci : comme on a, dans ce modèle,

$$K_{\alpha,x} = \sum_u a_u^2 \, K^u_{\alpha,x}$$

<u>la condition de cohérence</u>

$$z^*(x) = \sum_u a_u \, y^{*u}(x) + C_\ell f^\ell(x)$$

est automatiquement réalisée.

II - LE CAS MULTIVARIABLE ISOTOPIQUE

Lorsqu'il y a plusieurs variables régionalisées $z_i(x)$, il y a lieu de distinguer deux cas, selon que les points expérimentaux x_α sont, ou non, les mêmes pour toutes les variables. Le premier cas (mêmes points expérimentaux) sera dit isotopique, le second (points expérimentaux éventuellement différents) hétérotopique.

Examinons d'abord le cas isotopique, qui est le plus simple, et soient x_α, $\alpha = 1, 2, \ldots, N_\ell$ les points expérimentaux, $z_i(x)$, $i = 1, 2, \ldots, N_V$ les variables régionalisées. Le modèle est :

$$Z_i = A^p_{iu} \; Y^u_p \tag{II-1}$$

avec un indice $u = 1, 2, \ldots, N_C$ (nombre de composantes) et, pour chaque u, un indice p variant de 1 à $N(u) \leq N_V$. On peut d'ailleurs toujours supposer $N(u) = N_V$, quitte à annuler certains termes de la matrice A^p_i u.

Dans ce modèle, les Y^u_p sont des FAI-k mutuellement orthogonales, et, pour chaque indice u, les termes Y^u_p $(p = 1, \ldots N_V)$ admettent la même covariance généralisée K^u (ou, si l'on raisonne sur des représentations, la même covariance non stationnaire $\sigma^u(x,y)$). Ainsi, les Z_i sont elles-mêmes des FAI-k, et admettent la matrice $K_{ij}(h)$, définie par

$$\text{(II-2)} \quad \begin{cases} K_{ij}(h) = \sum_u C^u_{ij} \; K^u(h) \\ C^u_{ij} = \; = \sum_p A^p_{iu} \; A^p_{ju} \end{cases}$$

comme matrice de C.G. Les C^u_{ij} sont donc des matrices symétriques définies positives (non nécessairement au sens strict : les valeurs propres sont ≥ 0). Expérimentalement, ce sont les C^u_{ij} qui sont (en principe) accessibles, et les A^p_{iu} doivent être reconstituées. Comme indiqué plus haut, cette reconstitution équivaut à faire l'analyse

en composantes principales des matrices C^u_{ij}. En particulier, elle ne sera pas univoque, mais dépendra du choix plus ou moins arbitraire d'une métrique de référence : mais c'est là, nous l'avons rappelé, un inconvénient inhérent à toutes les méthodes d'analyse des données.

Analyse des C^u_{ij}

Raisonnons avec un indice u fixé et sous entendu. Pour une matrice symétrique C_{ij} donnée, de type ≥ 0, on peut évidemment trouver une infinité de matrices A^p_i répondant à la question, i.e.:

$$C_{ij} = \sum_p A^p_i \, A^p_j$$

Mais nous avons en vue une analyse de données du type "composantes principales" de cette matrice C_{ij}. Ayant donc choisi (plus ou moins judicieusement) une métrique de référence g_{ij} (matrice symétrique de type > 0 strict), nous devons chercher les valeurs et vecteurs propres de C_{ij} relativement a g_{ij}, c'est-à-dire les solutions de

$$C_{ij} \, V^j = b \, g_{ij} \, V^j$$

Désignons par b_p $(p = 1,2,\ldots,N_V)$ les valeurs propres (obligatoirement positives ou nulles) de la matrice C par rapport à la matrice g, et par V_p les vecteurs propres correspondants, que l'on peut toujours choisir orthonormés (avec un arbitraire inessentiel si les valeurs propres ne sont pas toutes distinctes), soit :

$$V^i_p \, g_{ij} \, V^j_{p'} = \delta_{pp'}$$

Alors la matrice C se met sous la forme :

$$C_{ij} = \sum_p A^p_i \, A^p_j$$

avec

$$A_i^p = \sqrt{b_p}\ g_{ij}\ V_p^j$$

et cette écriture est, sinon unique, du moins entachée d'un arbitraire inessentiel seulement, une fois que l'on a choisi la métrique de référence g_{ij}.

En ce qui concerne le choix - irréductiblement arbitraire - de cette métrique g_{ij}, on se laisse guider par le sens physique et aussi par des raisons de simplicité. Le plus souvent on adopte une métrique diagonale (mais ce n'est nullement obligatoire). On pourrait aussi bien adopter par exemple la matrice S_{ij} des covariances expérimentales au même point d'appui, et ce choix pourrait présenter certains avantages). On prendra souvent, tout simplement, la matrice unité, soit

$$g_{ij} = \delta_{ij}$$

Si les différentes variables z_i ne sont pas de même nature, on peut aussi introduire des poids $W_i > 0$ (judicieusement choisis) et prendre

$$g_{ij} = W_i\ \delta_{ij}$$

Dans ce cas :

$$A_i^p = \sqrt{b_p}\ W_i\ V_p^i \qquad \text{(sans sommation)}$$

<u>Le cokrigeage</u>

Introduisant l'indice ℓ (variant de 1 à N_k) pour repérer les fonctions de base f^ℓ (monomiales) associées à la définition des FAI-k, les systèmes (K) et (K^*) du cas monovariable deviennent ici :

$$(K) \quad \begin{cases} \lambda^{\alpha i} K_{\alpha i,\beta j} = R_{\beta j} + \mu_{\ell j} f^{\ell}_{\beta} \\ \lambda^{\alpha i} f^{\ell}_{\alpha} = S^{i\ell} \end{cases}$$

$$(K^*) \quad \begin{cases} b^{\beta j} K_{\beta j,\alpha i} + C_{\ell i} f^{\ell}_{\alpha} = z_{\alpha i} \\ b^{\alpha i} f^{\ell}_{\alpha} = 0 \end{cases}$$

et l'"estimateur" $z^* = \lambda^{\alpha i} z_{\alpha i}$ associé au système (K) s'écrit alors:

$$(E) \qquad z^* = b^{\beta j} R_{\beta j} + C_{\ell i} S^{i\ell}$$

Ici encore, donc, il suffira de mémoriser une fois pour toutes les $N_\ell N_V$ quantités $b^{\beta j}$ et les $N_k N_V$ quantités $C_{\ell i}$, pour obtenir très simplement ensuite, grâce à (E), n'importe quel cokrigeage.

Ainsi, le cokrigeage $z^*_i(x)$ de la variable z_i au point x correspond à un second membre défini par :

$$R_{\beta j} = K_{xi,\beta j} \quad ; \quad S^{j\ell} = \delta^j_i f^{\ell}(x)$$

et par suite :

$$(II\text{-}3) \qquad z^*_i(x) = b^{\beta j} K_{\beta j,xi} + C_{\ell i} f^{\ell}(x)$$

Ici encore, on appellera conventionnellement <u>dérive</u> le terme $C_{\ell i} S^{i\ell}$ de l'estimateur (E) et <u>résidu</u> le terme $b^{\beta j} R_{\beta j}$ (et, si l'on travaille avec la matrice des covariances d'une représentation spécifiée, le terme $C_{\ell i} f^{\ell}(x)$ représentera encore l'estimateur optimal de la dérive de la variable $z_i(x)$ - optimal au sens du cokrigeage universel associé à cette représentation).

En ce qui concerne les composantes Y_p^u du modèle (II-1), on procédera, exactement comme dans le cas monovariable, au cokrigeage de leurs résidus. Le second membre de (K) est alors

$$\begin{cases} S^{i\ell} = 0 \\ R_{\beta j} = A^p_{j(u)} \, K^{(u)}_{x\beta} \end{cases} \qquad \text{(sans sommation en u)}$$

et par suite ce cokrigeage est donné par :

$$\text{(II-4)} \qquad \boxed{y_p^{*u}(x) = b^{\beta j} A^p_{j(u)} \, K^{(u)}_{x\beta}}$$

(toujours sans sommation en u). La <u>relation de cohérence</u>

$$\text{(II-5)} \qquad z_i^*(x) = A^p_{iu} \, y_p^{*u}(x) + C_{\ell i} \, f^{\ell}(x)$$

(avec sommation cette fois) sera automatiquement vérifiée.

On voit que ce procédé permettra la cartographie de chacune des composantes $y_p^{*u}(x)$, ou (en pratique), pour chaque indice u, des termes associés aux plus grandes valeurs propres.

III - <u>LE CAS MULTIVARIABLE HETEROTOPIQUE</u>

Le modèle est le même que ci-dessus, mais, les points expérimentaux ne coïncidant plus nécessairement, il convient de réarranger la définition des fonctions de base f^{ℓ}. Conceptuellement, au lieu de considérer N_V variables régionalisées $z_i(x)$ définies sur le même espace euclidien $\mathbb{R}^n$, il convient plutôt de raisonner sur une V.R. <u>unique</u> $z(x,i)$ définie sur l'espace produit $\mathbb{R}^n \times I$, où $I=\{1,2,\ldots N_V\}$ est l'ensemble des indices i. Les points expérimentaux où la variable z_i est donnée peuvent encore être désignés par x_α, étant entendu que l'indice α parcourt un ensemble A_i dépendant de l'indice i. Si l'on

convient de toujours considérer l'écriture (x,i) ou (α,i) comme représentant un point ou un indice unique (et non pas deux indices indépendants), la notation (α,i) représente sans équivoque l'ensemble des points expérimentaux de la V.R. $z(x,i)$ sur $\mathbb{R}^n \times I$. Une écriture telle que $b^{\alpha i} R_{\alpha i}$ et $\lambda^{\alpha i} z_{\alpha i}$ doit évidemment toujours être être explicitée sous la forme :

$$\lambda^{\alpha i} z_{\alpha i} = \sum_{i=1}^{N_V} \sum_{\alpha \in A_i} b^{\alpha i} z_{\alpha i}$$

Si l'espace des dérives associées à nos FAI-k Z_i ou Y_p^u est de dimension N_k, avec une base $f^{\ell}(x)$, $\ell = 1,2,\ldots N_k$, l'espace des dérives associées à la FAI $Z(x,i)$ sur $\mathbb{R}^n \times I$ sera (en l'absence de contrainte algébrique portant sur les dérives) évidemment de dimensions $N_k \times N_V$. Pour obtenir une base de cet espace des dérives sur $\mathbb{R}^n \times I$, nous introduirons donc un indice L variant de 1 à $N_k \times N_V$, et nous prendrons les fonctions f^L définies sur $\mathbb{R}^n \times I$ en posant :

$$\begin{cases} f^L(x,i) = f^{\ell}(x) & \text{si } L = (i-1)N_k + \ell \\ f^L(x,i) = 0 & \text{autrement.} \end{cases}$$

Avec ces notations (moins compliquées qu'il ne semble au premier coup d'oeil) nos systèmes (K) et (K^*) deviennent :

$$(K) \qquad \begin{cases} \lambda^{\alpha i} K_{\alpha i,\beta j} = R_{\beta j} + \mu_L f^L_{\beta j} \\ \lambda^{\alpha i} f^L_{\alpha i} = S^L \end{cases}$$

$$(K^*) \qquad \begin{cases} b^{\beta j} K_{\beta j,\alpha i} + C_L f^L_{\alpha i} = z_{\alpha i} \\ b^{\alpha i} f^L_{\alpha i} = 0 \end{cases}$$

En ce qui concerne l'estimateur z^*, on a encore la relation

$$(E) \qquad z^* = \lambda^{\alpha i} z_{\alpha i} = b^{\beta j} R_{\beta j} + C_L S^L$$

Ainsi, le cokrigeage de $Z(x,i) = Z_i(x)$ s'écrira

$$z^*(x,i) = b^{\beta j} K_{\beta j, xi} + C_L f^L(x,i)$$

et de même, pour le cokrigeage des résidus associés à la composante $Y_p^u(x)$, on trouvera :

$$\boxed{y_p^{*u}(x) = b^{\beta j} A^p_{j(u)} K^{(u)}_{\beta x}}$$

(sans sommation en u), c'est-à-dire, sous forme explicitée :

$$y_p^{*u}(x) = \sum_{j=1}^{N_V} \sum_{\beta \in A_j} b^{\beta j} A^p_{ju} K^u_{\beta x}$$

avec, évidemment, la relation de cohérence :

$$z^*(x,i) = A^p_{iu} y_p^{*u}(x) + C_L f^L(x,i)$$

IV - CHANGEMENT DE REPRESENTATION

Au lieu de travailler avec la matrice $K_{ij}(h)$ des covariances généralisées des FAI-k Z_i, on peut aussi, comme on l'a vu plus haut, travailler directement avec les covariances $\sigma_{ij}(x,y)$ de représentations convenablement choisies (par exemple les représentations associées aux moindres carrés sur le domaine qui nous intéresse). Sous réserve, évidemment, d'adopter pour chacune des FAI Z_i et Y_p^u la

représentation associée aux <u>mêmes</u> mesures λ_ℓ (vérifiant $\int \lambda_\ell f^s = \delta^s$), on obtiendra la décomposition

$$\sigma_{ij}(x,y) = \sum_u C^u_{ij}\ \sigma^u(x,y)$$

avec les <u>mêmes</u> matrices C^u_{ij} que dans le modèle (0-2) : du point de vue de l'analyse des données, c'est-à-dire de la reconstitution des matrices A^p_{iu}, il n'y aura donc rien de changé. Par contre les cokrigeages $y^{*u}_p(x)$ seront modifiés d'un polynôme bien défini. Tout se passe passe, en somme, comme si dans la relation de cohérence

$$z^*(x,i) = A^p_{iu}\ y^{*u}_p(x) + C_L\ f^L(x,i)$$

une partie de la dérive $C_L\ f^L$ se trouvait ventilée entre les différentes composantes $y^{*u}_p(x)$.

Notons que le terme de dérive, qui s'écrit dans le cas hétérotopique (qui est le cas le plus général) sous la forme $C_L\ f^L(x,i)$, peut toujours se réécrire sous la forme $C_{\ell i}\ f^\ell(x)$: il suffit de poser $C_{\ell i} = C_L$ pour $L = N_k(i-1) + \ell$. C'est pourquci nous ne ne perdrons nullement en généralité en adoptant les notations du cas isotopique :

$$z^*(x,i) = A^p_{iu}\ y^{*u}_p(x) + C_{\ell i}\ f^\ell(x)$$

Considérons donc les représentations

$$\begin{cases} \tilde{Z}_i(x) = Z(\delta_x - f^\ell_x\ \lambda_\ell) \\ \tilde{Y}^u_p(x) = Y^u_p(\delta_x - f^\ell_x\ \lambda_\ell). \end{cases}$$

et la matrice des covariances des $\tilde{Z}_i$:

$$\begin{cases} \sigma_{ij}(x,y) = K_{ij}(x-y) - f_y^\ell \, k_{\ell,ij}(x) - f_x^\ell \, k_{\ell,ji}(y) \\ \qquad\qquad + f_x^\ell \, T_{\ell i,sj} \, f_y^s \\ k_{\ell,ij}(x) = \int \lambda_\ell(d\eta) \, K_{ij}(x-\eta) \\ T_{\ell i,sj} = \iint \lambda_\ell(d\xi) \, K_{ij}(\xi-\eta) \, \lambda_s(d\eta) \end{cases}$$

ainsi que les covariances $\sigma^u(x,y)$ associées aux $Y_p^u(x)$ selon des formules analogues. Ecrivons les systèmes (K^*) et $(\tilde{K}^*)$ associés respectivement aux covariances généralisées et aux covariances des représentations :

$$(K^*) \begin{cases} b^{\beta j} \, K_{\beta j,\alpha i} + C_{\ell i} \, f_\alpha^\ell = z_{\alpha i} \\ b^{\alpha i} \, f_\alpha^\ell = 0 \end{cases}$$

$$(\tilde{K}^*) \begin{cases} \tilde{b}^{\beta j} \, \sigma_{\beta j,\alpha i} + \tilde{C}_{\ell i} \, f_\alpha^\ell = z_{\alpha i} \\ \tilde{b}^{\alpha i} \, f_\alpha^\ell = 0 \end{cases}$$

Comme on a :

$$\sigma_{\beta j,\alpha i} = K_{\beta j,\alpha i} - f_\alpha^\ell \, k_{\ell,ji}(x_\beta) - f_\beta^\ell \, k_{\ell,ij}(x_\alpha) + f_\alpha^\ell \, T_{\ell i,sj} \, f_\beta^s$$

et en tenant compte de la deuxième relation $(\tilde{K}^*)$, la première relation peut aussi s'écrire :

$$\tilde{b}^{\beta j} \, K_{\beta j,\alpha i} + (\tilde{C}_{\ell i} - k_{\ell,ji}(x_\beta) \, \tilde{b}^{\beta j}) f_\alpha^\ell = z_{\alpha i}$$

En comparant avec (K^*), on conclut :

$$(IV\text{-}1)\quad \begin{cases} \tilde{b}^{\beta j} = b^{\beta j} \\ \tilde{C}_{\ell i} = C_{\ell i} + k_{\ell,ji}(x_\beta)\ b^{\beta j} \end{cases}$$

Telles sont les formules du changement de représentation. Pour le cokrigeage de $z_i(x)$, il vient identiquement :

$$(IV\text{-}2)\quad \begin{cases} z_i^*(x) = b^{\beta j}\ K_{\beta j,xi} + C_{\ell i}\ f^{\ell}(x) \\ \qquad\quad = b^{\beta j}\ \sigma_{\beta j,xi} + \tilde{C}_{\ell i}\ f^{\ell}(x) \end{cases}$$

Une certaine partie de la dérive initiale - à savoir $(C_{\ell i} - \tilde{C}_{\ell i})f_x^{\ell}$ - se trouve ainsi incorporée dans le terme de résidu calculé à l'aide de la covariance de la représentation.

De même, pour les cokrigeages des résidus associés aux Y_p^u, il vient :

$$(IV\text{-}3)\quad \begin{cases} y^{*u}_p(x) = b^{\beta j}\ A^p_{j(u)}\ K^{(u)}_{x\beta} \\ \tilde{y}^{*u}_p(x) = b^{\beta j}\ A^p_j(u)\ \sigma^u_{x\beta} \end{cases}$$

Mais $\sigma^u_{x\beta}$ peut s'expliciter comme suit

$$\begin{cases} \sigma^u_{x\beta} = K^u_{x\beta} - f^{\ell}_x\ k^u_{\ell\beta} - f^{\ell}_\beta\ k^u_{\ell x} + T^u_{\ell s}\ f^{\ell}_x\ f^s_\beta \\ k^u_{\ell\beta} = \int \lambda_\ell(d\xi)\ K^u(x_\beta - \xi) \end{cases}$$

Donc, compte tenu de

$$b^{\beta j}\ f^{\ell}_\beta = 0$$

on obtient :

$$\text{(IV-4)} \qquad \tilde{y}^{*u}_{p}(x) = y^{*u}_{p}(x) - f^{\ell}_{x}\, b^{\beta j}\, A^{p}_{j(u)}\, k^{(u)}_{\ell\beta}$$

et il est facile de voir, compte tenu des secondes relations (IV-1), que la relation de cohérence :

$$z^{*}_{i}(x) = A^{p}_{iu}\, y^{*u}_{p}(x) + C_{\ell i}\, f^{\ell}_{x}$$

$$= A^{p}_{iu}\, \tilde{y}^{*u}_{p}(x) + \tilde{C}_{\ell i}\, f^{\ell}_{x}$$

est bien respectée : la formule de transformation (IV-4) réalise donc bien, comme annoncé, la ventilation d'une partie de la dérive entre les composantes $y^{*u}_{p}(x)$.

En pratique, il y aura probablement intérêt à calculer les b^{α} et les $C_{\ell i}$ avec les covariances généralisées, et à effectuer ensuite les corrections (IV-1) et (IV-4) si l'on veut se caler sur une représentation spécifiée.

V - POINT DE VUE DE L'INERTIE

Si nous voulons nous raccorder au point de vue classique de la ventilation de l'inertie entre les différentes composantes, nous rencontrons certaines difficultés dues au fait que si les composantes $Y^{u}_{p}(x)$ et $Y^{u'}_{p'}(x)$ sont orthogonales (dans le modèle) dès que $u \neq u'$ ou $p \neq p'$, il n'en est malheureusement plus de même en général de leurs cokrigeages $Y^{*u}_{p}(x)$ et $Y^{*u'}_{p'}(x)$. D'autre part, l'orthogonalité de l'analyse classique se réfère à un produit scalaire défini par une intégrale d'espace, et n'a donc pas le même sens que l'orthogonalité du modèle probabiliste, qui se rapporte à une espérance mathématique.

Ces difficultés méritent une réflexion plus approfondie, et je me contente ici de jeter quelques jalons, en me plaçant exclusivement dans le cas <u>isotopique</u>.

Choix de la représentation

La première question concerne le choix de la représentation, c'est-à-dire le choix des mesures λ_ℓ telles que

$$\int \lambda_\ell \, f^s = \delta_\ell^s$$

Elle doit correspondre, sans aucun doute, à une notion de moindres carrés. Mais il peut s'agir soit des moindres carrés sur le domaine S tout entier qui nous intéresse, soit aux moindres carrés sur les seuls points expérimentaux x_α.

Le premier point de vue conduit à prendre

$$\lambda_\ell(dx) = \varphi_\ell(x) \, dx$$

où les $\varphi_\ell(x)$ sont les polynômes univoquement associés aux f^ℓ par les relations de dualité

$$\int_S \varphi_\ell(x) \, f^s(x) \, dx = \delta_\ell^s$$

(On peut aussi, en pareil cas, adopter comme base f^ℓ un système orthonormé sur S, auquel cas $\varphi_\ell = f^\ell$).

Le second point de vue, au contraire, consiste à prendre les $\lambda_\ell = \lambda_\ell^\alpha \, \delta_{x\alpha}$ concentrées sur les points expérimentaux, avec

$$\begin{cases} \lambda_\ell^\alpha = H_{\ell s} \, f_\alpha^s \\ \lambda_\ell^\alpha \, f_\alpha^s = \delta_\ell^s \end{cases}$$

Le premier point de vue est certainement plus satisfaisant quant à son contenu physique. Il est certain que si l'on connaissait les $z_i(x)$ en tout $x \in S$, il serait naturel de définir la notion de

dérive par un ajustement de moindres carrés sur S. Mais cette dérive est inaccessible expérimentalement, et nous disposons seulement de son cokrigeage $\tilde{C}_{\ell i}\, f^{\ell}(x)$ (qui coïncide, comme on sait, avec le résultat des moindres carrés appliqués au cokrigeage $z_i^*(x)$), et ce passage au cokrigeage ne conserve évidemment pas l'orthogonalité (spatiale) entre dérive et résidu.

Cet inconvénient disparait dans le second point de vue, à condition de limiter l'analyse aux seuls points expérimentaux, puisqu'en tout y_α le terme de dérive

$$\tilde{C}_{\ell i}\, f_\alpha^{\ell} = f_\alpha^{\ell}\, \lambda_\ell^\beta\, z_{\beta i}$$

est numériquement connu : les termes de dérive, $\tilde{C}_{\ell i}\, f_\alpha^{\ell}$, et de résidus $(z_{\alpha j} - \tilde{C}_{\ell j}\, f_\alpha^{\ell})$ sont effectivement orthogonaux (au sens spatial) :

$$\sum_\alpha \tilde{C}_{\ell i}\, f_\alpha^{\ell}\, (z_{\alpha j} - \tilde{C}_{\ell j}\, f_\alpha^{\ell}) = 0$$

de sorte que les <u>inerties</u> associées aux matrices des dérives et des résidus :

$$\text{(V-1)} \qquad \begin{cases} S_{ij}^D = \sum_\alpha \tilde{C}_{\ell i}\, f_\alpha^{\ell}\, \tilde{C}_{sj}\, f_\alpha^{s} \\ S_{ij}^R = \sum_\alpha (z_{\alpha i} - \tilde{C}_{\ell i}\, f_\alpha^{\ell})(z_{\alpha j} - \tilde{C}_{sj}\, f_\alpha^{s}) \end{cases}$$

sont additives : on peut donc faire l'analyse classique de ces deux matrices et ventiler l'inertie.

<u>Analyse des résidus</u>

Dans cette première analyse, le modèle probabiliste n'intervient à aucun moment, et d'ailleurs la dérive $\tilde{C}_{\ell i}\, f_\alpha^{\ell}$ ainsi que la matrice S_{ij}^D ne sont liées qu'à une technique de moindres carrés.

Par contre, nous souhaitons, évidemment, dans la matrice des résidus S^R_{ij} analyser séparément l'influence de chacune des composantes Y^u_p. Or, aux points expérimentaux, le cokrigeage $z^*_{\alpha i}$ coïncide bien avec les valeurs vraies $z_{\alpha i}$, mais cela n'entraine nullement l'orthogonalité (dans le modèle, ni d'ailleurs non plus au sens spatial) des $\tilde{Y}^{*u}_{p\alpha}$. Ainsi, l'analyse (au sens classique) des différents termes en lesquels se décompose le cokrigeage :

$$\tilde{z}_{\alpha i} = A^p_{iu}\, \tilde{y}^{*u}_{p\alpha} + C_{\ell i}\, f^{\ell}_{\alpha}$$

ne présentera que peu d'intérêt. Il vaut mieux lui substituer l'analyse (dans le modèle) des résidus "vrais" $\tilde{Y}^u_p(x_\alpha)$, évidemment différents de leur cokrigeage. La décomposition des résidus sous la forme :

$$\text{(V-2)} \qquad \tilde{z}_{\alpha i} - C_{\ell i}\, f^{\ell}_{\alpha} = A^p_{iu}\, \tilde{y}^u_p(x_\alpha)$$

a un sens dans le modèle (bien qu'on ne connaisse pas les valeurs numériques des $\tilde{y}^u_p(x_\alpha)$). Dans le modèle, on aura ainsi :

$$< \tilde{Z}_{\alpha i} - \tilde{C}_{\ell i}\, f^{\ell}_{\alpha}\, ,\, \tilde{Z}_{\alpha j} - \tilde{C}_{sj}\, f^{s}_{\alpha} > = \sum_u C^u_{ij}\, \sigma^u_{\alpha\alpha}$$

et par suite (au moins en espérance, et, si le modèle est bon, avec une bonne approximation numérique) :

$$\text{(V-3)} \qquad S^R_{ij} = \sum_u C^u_{ij} \sum_u \sigma^u_{\alpha\alpha}$$

Ainsi, l'analyse séparée de chacune des échelles de structures u conduit à nouveau à la diagonalisation des mêmes matrices C^u_{ij} que ci-dessus. Le rapprochement avec les techniques classiques est donc possible. En particulier, l'inertie qu'il convient d'attribuer à une

composante Y_p^u donnée sera :

$$b_p^u \sum_\alpha \sigma_{\alpha\alpha}^u$$

où b_p^u est la valeur propre correspondante de la matrice C_{ij}^u. De cette manière, on pourra apprécier l'inertie des différents termes.

Conséquences pour l'ajustement.

Sans préjuger de la technique qu'il conviendra d'utiliser pour ajuster le modèle probabiliste (c'est-à-dire pour identifier les matrices C_{ij}^u à partir des données expérimentales $z_{\alpha i}$), la relation (V-3) apparait comme une contrainte que nous aurons tout intérêt à respecter, lors du choix du modèle, puiqu'elle assure automatiquement la cohérence entre les notions d'inertie au sens spatial et au sens probabiliste. Il est entendu que nous nous plaçons uniquement dans le cas isotopique. Les coefficients λ_ℓ^α associés aux moindres carrés sur l'ensemble des points expérimentaux sont donc les mêmes pour les différentes variables z_i. Ils sont donnés par le système habituel :

$$\begin{cases} \lambda_\ell^\alpha = H_{\ell s} \, f_\alpha^s \\ \lambda_\ell^\alpha \, f_\alpha^s = \delta_\ell^s \end{cases}$$

de sorte que la matrice $H_{\ell s}$ est simplement l'inverse de la matrice :

$$T^{\ell s} = \sum_\alpha f_\alpha^\ell \, f_\alpha^s$$

Les coefficients $\tilde{C}_{\ell i}$ sont alors donnés par :

$$\tilde{C}_{\ell i} = \lambda_\ell^\alpha \, z_{\alpha i}$$

pourvu que l'on adopte les représentations :

$$\tilde{Z}_i(x) = Z_i(\delta_x - f_x^{\ell} \lambda_{\ell}^{\alpha} \delta_{x\alpha})$$

associées aux moindresccarrés. En particulier, on aura identiquement

$$\tilde{C}_{\ell i} T^{\ell s} = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{s} z_{\alpha i}$$

Par suite, on a bien l'orthogonalité spatiale des polynômes de moindres carrés et des résidus correspondant :

$$\sum_{\alpha} (z_{\alpha i} - \tilde{C}_{\ell i} f_{\alpha}^{\ell}) \tilde{C}_{sj} f_{\alpha}^{s} = 0$$

et les matrices S_{ij}^{R} et S_{ij}^{D} sont respectivement

$$\text{(V-4)} \qquad \begin{cases} S_{ij}^{D} = \tilde{C}_{\ell i} T^{\ell s} \tilde{C}_{sj} \\ S_{ij}^{R} = \sum_{\alpha} z_{\alpha i} z_{\alpha j} - \tilde{C}_{\ell i} T^{\ell s} \tilde{C}_{sj} \end{cases}$$

Numériquement, on a aussi :

$$S_{ij}^{R} = \sum_{\alpha} (z_{\alpha i} - f_{\alpha}^{\ell} \lambda^{\beta} z_{\beta i})(z_{\alpha j} - f_{\alpha}^{s} \lambda_{s}^{\gamma} z_{\gamma j})$$

Pour que la contrainte (V-3) soit respectée, il faut donc que la matrice du modèle soit définie par :

$$\sigma_{\alpha i,\beta j} = K_{\alpha i,\beta j} - f_{\alpha}^{\ell} \lambda^{\alpha'} K_{\alpha' i,\beta j} - f_{\beta}^{s} \lambda_{s}^{\beta'} K_{\alpha i,\beta' j} + f_{\alpha}^{\ell} \lambda^{\alpha'} K_{\alpha' i,\beta' j} \lambda_{s}^{\beta'} f_{\beta}^{s}$$

vérifie numériquement pour tous les couples (i,j)

$$\text{(V-5)} \qquad S_{ij}^{R} = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha i,\alpha j} = \sum_{\alpha,u} C_{ij}^{u} \sigma_{\alpha\alpha}^{u}$$

Soit $\frac{n(n+1)}{2}$ conditions.

Pour la pratique de l'ajustement, cela revient à dire que, parmi les combinaisons linéaires autorisées utilisées pour ajuster le modèle, doivent obligatoirement figurer les résidus des moindres carrés :

$$z_{\alpha i} - f_{\alpha}^{\ell} \lambda_{\ell}^{\beta} z_{\beta i}$$

et que l'ajustement des C_{ij}^{u} doit être effectué sous la contrainte (V-5).