

Géostatistique spatio-temporelle (1)

Denis Allard

Biostatistique et Processus Spatiaux (BioSP), MathNum, INRAE
Avignon, France

Option Géostatistique et Probabilités Appliquées, Mines Paris
17-18 Janvier 2023

Introduction

- ▶ Chercheur à **INRAE** – Institut national de recherche pour l'agriculture, l'alimentation et l'environnement: ~ 8200 permanents, ~ 2000 chercheurs
- ▶ Département **MathNum** – Mathématiques et Numérique: ~ 120 chercheurs
"Mathématique, informatique et intelligence artificielle; sciences et technologies des données et du numérique ; modélisation et systèmes complexes"
- ▶ Unité **BioSP** – Biostatistique et Processus Spatiaux: ~ 15 chercheurs; 35 membres permanents; ~ 10 doctorants, post-doctorants, CDD, ...
 - ▶ Objet commun à BioSP: **les phénomènes spatialisés (et spatio-temporels)**, avec des applications en environnement, climat, écologie, épidémiologie végétale, etc
 - ▶ Disciplines mobilisées: statistiques, mathématiques, informatique, écologie, épidémiologie,...
- ▶ Thèse en 1993 au Centre de Géostatistique, Mines de Paris (Fontainebleau)
- ▶ Thèmes de recherche: géostatistique et statistique spatiale → spatio-temporel. Applications en environnement et climat: précipitation et contexte multivarié
- ▶ RESSTE: RESeau Statistiques pour données Spatio-TEmporelles
<https://reseau-resste.mathnum.inrae.fr>
- ▶ Depuis 2022: Chaire **Geolearning** avec équipe Géostatistique à Mines Paris

Introduction

- ▶ Chercheur à **INRAE** – Institut national de recherche pour l'agriculture, l'alimentation et l'environnement: ~ 8200 permanents, ~ 2000 chercheurs
- ▶ Département **MathNum** – Mathématiques et Numérique: ~ 120 chercheurs
"Mathématique, informatique et intelligence artificielle; sciences et technologies des données et du numérique ; modélisation et systèmes complexes"
- ▶ Unité **BioSP** – Biostatistique et Processus Spatiaux: ~ 15 chercheurs; 35 membres permanents; ~ 10 doctorants, post-doctorants, CDD, ...
 - ▶ Objet commun à BioSP: **les phénomènes spatialisés (et spatio-temporels)**, avec des applications en environnement, climat, écologie, épidémiologie végétale, etc
 - ▶ Disciplines mobilisées: statistiques, mathématiques, informatique, écologie, épidémiologie,...
- ▶ Thèse en 1993 au Centre de Géostatistique, Mines de Paris (Fontainebleau)
- ▶ Thèmes de recherche: géostatistique et statistique spatiale → spatio-temporel. Applications en environnement et climat: précipitation et contexte multivarié
- ▶ RESSTE: RESeau Statistiques pour données Spatio-TEmporelles
<https://reseau-resste.mathnum.inrae.fr>
- ▶ Depuis 2022: Chaire **Geolearning** avec équipe Géostatistique à Mines Paris

Plan

▶ Jour 1

1. Introduction, premières notions et premier TP
2. Modèles de covariance spatio-temporelle, avec exercice
3. Présentation: modélisation de la précipitation à fine échelle

▶ Jour 2

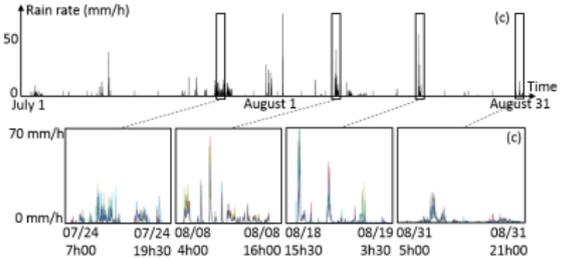
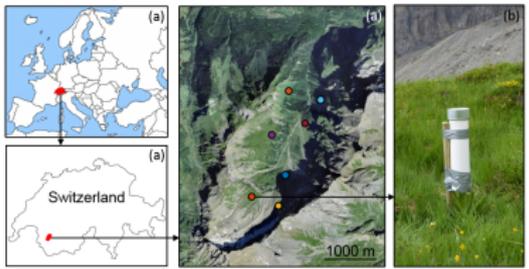
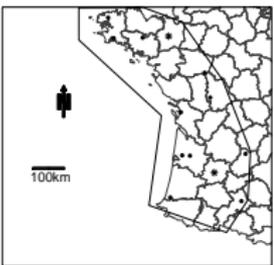
1. Estimation et TP estimation (ou J1, selon avancement)
2. Prédiction (et TP prédiction)
3. Méthode de simulation
4. Présentation: extension(s) au cadre multivarié

Données spatio-temporelles

- ▶ On collecte des données dans l'espace (S) et dans le temps (T)
- ▶ Il existe des dépendances à la fois dans le temps et dans l'espace
- ↪ généralisation des statistiques spatiales (géostatistique) et/ou des séries temporelles

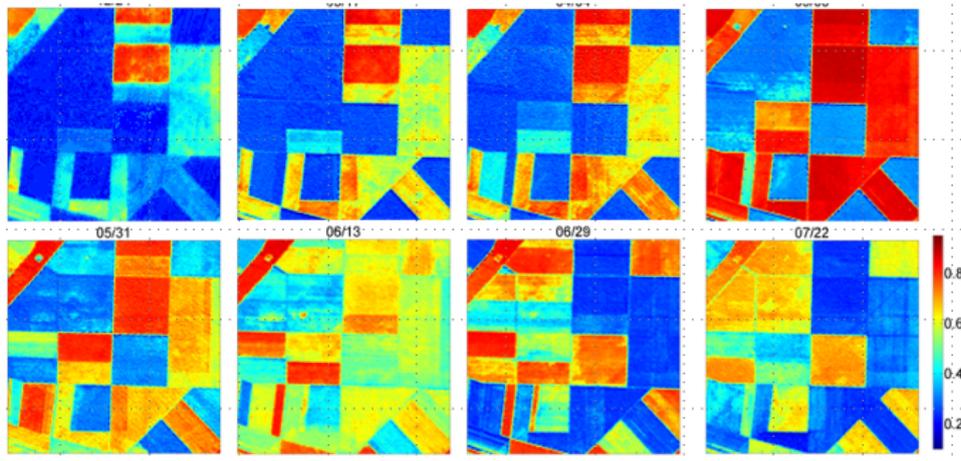
Plusieurs configurations spatio-temporelles des données sont possibles

Séries denses dans le temps, rares spatialement



- Séries temporelles multivariées ?
- Mais quel modèle spatial? comment interpoler en un nouveau site?

Données denses spatialement, peu nombreuses dans le temps

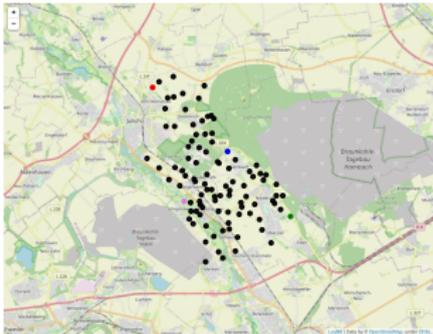


- ▶ champs spatiaux multivariés.
- ▶ Mais quelle évolution temporelle? quelle prédiction temporelle?
- ▶ Possibilité: champ spatial \otimes ARMA temporel

Autres configurations

Echantillonnages denses dans le temps et dans l'espace

- ▶ On ne privilégie ni l'interprétation spatiale ni l'interprétation temporelle
- ▶ On va chercher à modéliser correctement l'interaction espace × temps



Cas plus complexes:

- ▶ pas d'alignement temporel
- ▶ données mesurées le long de trajectoires par des capteurs mobiles
- ▶ ...



Particularités importantes liées aux données spatio-temporelles

- ▶ **Modélisation statistique**

Respect des lois physiques; modèles dynamiques; \Rightarrow modèles de covariance spécifiques

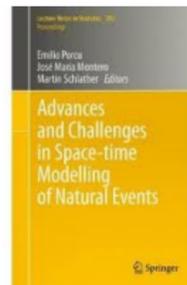
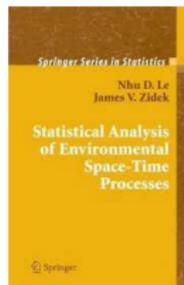
- ▶ **Volume des données**

$N_T \times N_S (\times p)$ devient très grand – "Big N problem": stockage, mémoire, visualisation, calculs

- ▶ **Estimation** (fitting) et **prédiction** (kriging): algorithmes spécifiques à revoir; max. vraisemblance difficilement praticable, voire parfois impraticable

- ▶ **Simulation**: quelques algorithmes – présentation demain

Quelques bons livres



Modèle statistique

En toute généralité: tendance + résidu aléatoire + bruit

$$Z(\mathbf{s}, t) = \mu(\mathbf{s}, t) + Y(\mathbf{s}, t) + \epsilon(\mathbf{s}, t), \quad (\mathbf{s}, t) \in D \times T \subset \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$$

- ▶ Par exemple:

$$h[\mu(\mathbf{s}, t)] = \sum_{k=1}^p \beta_k f_k(X_k(\mathbf{s})) + \sum_{l=1}^q \alpha_l g_l(X_l(t))$$

- ▶ $Y(\mathbf{s}, t)$ est un champ aléatoire, de moyenne nulle, d'ordre 2, supposé stationnaire:

$$C(\mathbf{h}, u) = \text{Cov}\{Y(\mathbf{s} + \mathbf{h}, t + u), Y(\mathbf{s}, t)\}$$

- ▶ $\epsilon(\mathbf{s}, t)$ bruit aléatoire de moyenne nulle (pépite)

Quelles fonctions de covariance $C(\mathbf{h}, u)$ **valides et pertinentes**?

Modèles de covariance

Fonctions de covariance $C(\mathbf{h}, u)$ valides et pertinentes

Fonction de covariance spatio-temporelle

▶ Si $u = 0$

$$C(\mathbf{h}, 0) := C_S(\mathbf{h})$$

▶ Si $\mathbf{h} = \mathbf{0}$

$$C(\mathbf{0}, u) := C_T(u)$$

Séparabilité

Définition

Une fonction de covariance est séparable si on peut écrire

$$C_{ST}(\mathbf{h}, u) = C_S(\mathbf{h})C_T(u)$$

ou encore

$$\rho_{ST}(\mathbf{h}, u) = \rho_S(\mathbf{h})\rho_T(u)$$

Résulte de la construction

$$Y(\mathbf{s}, t) = Y_S(\mathbf{s}) \cdot Y_T(t); \quad Y_S(\mathbf{s}) \perp Y_T(t)$$

Propriété

Dans le cas Gaussien, équivalent à

$$Y(\mathbf{s}, t') \perp Y(\mathbf{s}', t) \mid Y(\mathbf{s}, t) \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}' \in D; \quad \forall t, t' \in T$$

Rappels sur les vecteurs Gaussiens

$$\mathbf{X} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$$

$$\pi(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-n/2} |\boldsymbol{\Sigma}|^{-1/2} \exp\left(-0.5(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^t \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$$

Notons

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_A \\ \mathbf{x}_B \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_A \\ \boldsymbol{\mu}_B \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{AA} & \boldsymbol{\Sigma}_{AB} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{BA} & \boldsymbol{\Sigma}_{BB} \end{pmatrix}$$

Alors,

- ▶ $\mathbf{X}_A \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_A, \boldsymbol{\Sigma}_{AA})$
- ▶ $\boldsymbol{\Sigma}_{AB} = 0 \iff \mathbf{x}_A$ et \mathbf{x}_B sont indépendants
- ▶

$$\pi(\mathbf{x}_A | \mathbf{x}_B) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_{A|B}, \boldsymbol{\Sigma}_{A|B}),$$

- ▶ $\boldsymbol{\mu}_{A|B} = \boldsymbol{\mu}_A + \boldsymbol{\Sigma}_{AB} \boldsymbol{\Sigma}_{BB}^{-1} (\mathbf{x}_B - \boldsymbol{\mu}_B)$
- ▶ $\boldsymbol{\Sigma}_{A|B} = \boldsymbol{\Sigma}_{AA} - \boldsymbol{\Sigma}_{AB} \boldsymbol{\Sigma}_{BB}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{BA}$

Séparabilité

Propriété

Sous hypothèse Gaussienne, $C(\mathbf{h}, u)$ séparable équivalent à

$$Y(\mathbf{s}, t') \perp Y(\mathbf{s}', t) \mid Y(\mathbf{s}, t) \quad \forall \mathbf{s}, \mathbf{s}' \in D; \quad \forall t, t' \in T$$

Preuve:

1. Ecrire $\mathbf{Y}_{A|B}$ pour deux ensembles A et B bien choisis
2. En déduire $\boldsymbol{\Sigma}_{A|B}$
3. Conclure

Sur les modèles séparables

Avantages

- ▶ Modèle simple à comprendre
- ▶ Simplifie le code et nécessite moins de mémoire
- ▶ Calcul matriciel rapide grâce au produit de Kronecker

Mais

- ▶ Pas d'interaction complexe entre espace et temps
- ▶ Modèle trop simpliste pour être réaliste dans beaucoup d'applications

Enjeux méthodologique

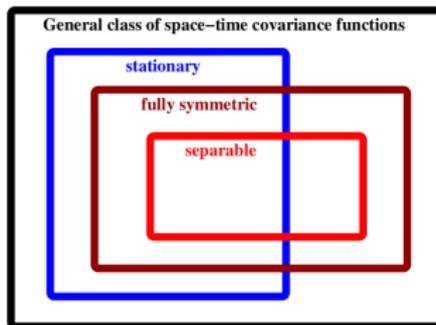
Proposer des modèles **non séparables**, pertinents et utilisables

Symétrie

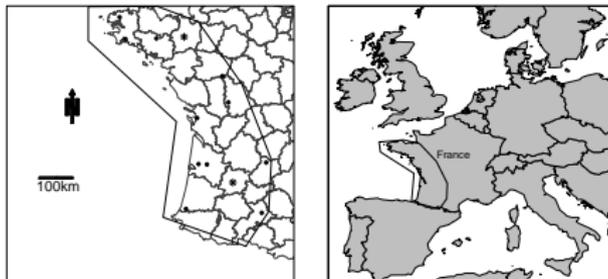
Symétrie complète (Gneiting, 2002, Stein 2005)

$$C(\mathbf{h}, u) = C(\mathbf{h}, -u) = C(-\mathbf{h}, u) = C(-\mathbf{h}, -u)$$

Séparabilité \Rightarrow symétrie complète



TP 1: données climatiques en France



- ▶ Trois variables mesurées durant 10 ans: R, T, H
- ▶ sélectionner le(s) mois de janvier: 10 répétitions indépendantes
- ▶ Pour éviter des effets locaux, on centre et on standardise pour chaque (\mathbf{s}, t)

TP 1: données climatiques en France

1. Charger les données; sélectionner une variable
2. Calculer les variogrammes expérimentaux spatial, temporel et spatio-temporel, notées $\hat{\gamma}(\mathbf{h}, u)$.
3. En déduire les covariances expérimentales $\hat{C}(\mathbf{h}, u)$
4. Pour $u \in \{1, 2, 3\}$, calculer la fonction de séparabilité

$$f_u(\mathbf{h}) = \hat{C}(\mathbf{h}, u)\hat{C}(\mathbf{0}, 0) - \hat{C}(\mathbf{0}, u)\hat{C}(\mathbf{h}, 0)$$

Cette fonction est nulle en cas de séparabilité.

Modèles non séparables: quelques cas simples

- ▶ Modèle somme-produit (De Iaco, Myers, Posa, 2001)

$$C(\mathbf{h}, u) = a_0 C_{S,0}(\mathbf{h}) \cdot C_{T,0}(u) + a_1 C_{S,1}(\mathbf{h}) + a_2 C_{T,2}(u)$$

avec $a_0, a_1, a_2 > 0$ (et quelques autres cas).

- ▶ "Frozen model" (Briggs, 1968)

$$C(\mathbf{h}, u) = C_S(\mathbf{h} - \mathbf{v}u)$$

où \mathbf{v} est une vitesse. En EDP, on parle de fronts d'onde **Non symétrique !**

- ▶ Généralisation (Cox and Isham, 1988; Schlather, 2010)

$$C(\mathbf{h}, u) = E[C_S(\mathbf{h} - \mathbf{V}u)]$$

où \mathbf{V} est un vecteur vitesse aléatoire. Exemple: $\mathbf{V} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{D}^2)$, alors

$$C(\mathbf{h}, u) = \frac{1}{\det\{\mathbf{1} + u^2\mathbf{D}\}^{1/2}} C_S \left\{ (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu})^t (\mathbf{1} + u^2\mathbf{D})^{-1} (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu}) \right\}$$

Dans quel cas cette fonction est-elle symétrique ? Séparable ?

Modèles non séparables: quelques cas simples

- ▶ Modèle somme-produit (De Iaco, Myers, Posa, 2001)

$$C(\mathbf{h}, u) = a_0 C_{S,0}(\mathbf{h}) \cdot C_{T,0}(u) + a_1 C_{S,1}(\mathbf{h}) + a_2 C_{T,2}(u)$$

avec $a_0, a_1, a_2 > 0$ (et quelques autres cas).

- ▶ “Frozen model” (Briggs, 1968)

$$C(\mathbf{h}, u) = C_S(\mathbf{h} - \mathbf{v}u)$$

où \mathbf{v} est une vitesse. En EDP, on parle de fronts d'onde **Non symétrique !**

- ▶ Généralisation (Cox and Isham, 1988; Schlather, 2010)

$$C(\mathbf{h}, u) = E[C_S(\mathbf{h} - \mathbf{V}u)]$$

où \mathbf{V} est un vecteur vitesse aléatoire. Exemple: $\mathbf{V} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{D}^2)$, alors

$$C(\mathbf{h}, u) = \frac{1}{\det\{\mathbf{1} + u^2\mathbf{D}\}^{1/2}} C_S \left\{ (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu})^t (\mathbf{1} + u^2\mathbf{D})^{-1} (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu}) \right\}$$

Dans quel cas cette fonction est-elle symétrique ? Séparable ?

Modèles non séparables: quelques cas simples

- ▶ Modèle somme-produit (De Iaco, Myers, Posa, 2001)

$$C(\mathbf{h}, u) = a_0 C_{S,0}(\mathbf{h}) \cdot C_{T,0}(u) + a_1 C_{S,1}(\mathbf{h}) + a_2 C_{T,2}(u)$$

avec $a_0, a_1, a_2 > 0$ (et quelques autres cas).

- ▶ “Frozen model” (Briggs, 1968)

$$C(\mathbf{h}, u) = C_S(\mathbf{h} - \mathbf{v}u)$$

où \mathbf{v} est une vitesse. En EDP, on parle de fronts d'onde **Non symétrique !**

- ▶ Généralisation (Cox and Isham, 1988; Schlather, 2010)

$$C(\mathbf{h}, u) = E[C_S(\mathbf{h} - \mathbf{V}u)]$$

où \mathbf{V} est un vecteur vitesse aléatoire. Exemple: $\mathbf{V} \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{D}^2)$, alors

$$C(\mathbf{h}, u) = \frac{1}{\det\{\mathbf{1} + u^2\mathbf{D}\}^{1/2}} C_S \left\{ (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu})^t (\mathbf{1} + u^2\mathbf{D})^{-1} (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu}) \right\}$$

Dans quel cas cette fonction est-elle symétrique ? Séparable ?

Anisotropie

Isotropie

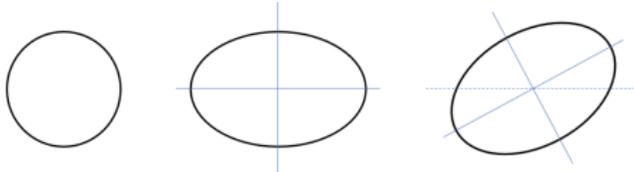
Une fonction de covariance spatiale est isotrope si il existe une fonction $c(r)$ telle que

$$C(\mathbf{h}) = c(r), \quad r = \|\mathbf{h}\|$$

- ▶ On peut modéliser une anisotropie pour C_S . Par exemple:

$$C_S(\mathbf{h}) = c_S(\|\mathbf{A}\mathbf{h}\|)$$

où \mathbf{A} est une matrice de dilatation - rotation.



- ▶ L'isotropie n'a pas de réelle signification pour C_{ST} en raison de la différence de nature entre espace et temps.

Anisotropie ST

- ▶ L'isotropie n'a pas de réelle signification pour C_{ST} en raison de la différence de nature entre espace et temps.
- ▶ Espace et temps peuvent être reliés l'un à l'autre grâce à un **vecteur de vitesse**, \mathbf{v} .

Anisotropie géométrie généralisée (Schlather, 2010)

Soit $C_{d+1}(\|\mathbf{h}\|)$ une fonction de covariance dans \mathbb{R}^{d+1} et soit

$$\mathbf{M} : (\mathbf{h}, u) \mapsto \begin{pmatrix} \mathbf{A} & -\mathbf{v} \\ \mathbf{a}^\top & \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{h} \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}\mathbf{h} - \mathbf{v}u \\ \mathbf{a}^\top\mathbf{h} + \tau u \end{pmatrix}$$

Alors la fonction

$$C_{ST}(\mathbf{h}, u) = C_{d+1}(\|\mathbf{M}(\mathbf{h}, u)^\top\|)$$

est une fonction de covariance spatio-temporelle valide.

Anisotropie ST

$$M(\mathbf{h}, u) = \begin{pmatrix} \mathbf{A}\mathbf{h} - \mathbf{v}u \\ \mathbf{a}^\top \mathbf{h} + \tau u \end{pmatrix}$$

$$C_{ST}(\mathbf{h}, u) = C_{d+1}(\|M(\mathbf{h}, u)\|)$$

Exemples

- ▶ "Metric model": $\mathbf{a} = \mathbf{v} = \mathbf{0}$

$$C_{ST}(\mathbf{h}, u) = C_{d+1}(\|\mathbf{A}\mathbf{h}, \tau u\|)$$

- ▶ "Frozen model": $\mathbf{A} = \mathbf{I}_d$, $\mathbf{a} = \mathbf{0}$; $\tau = 0$

$$C_{ST}(\mathbf{h}, u) = C_{d+1}(\|\mathbf{h} - \mathbf{v}u\|)$$

- ▶ "Cox and Isham" (1988) $\mathbf{A} = \mathbf{I}_d$, $\mathbf{a} = \mathbf{0}$; $\tau = 0$, $\mathbf{v} = R\mathbf{V}$, où R et \mathbf{V} sont aléatoires

Et les variogrammes?

Variogramme spatio-temporel

$$\gamma_{ST}(\mathbf{h}, u) = \frac{1}{2} E \left[(Y(\mathbf{s}, t) - Y(\mathbf{s} + \mathbf{h}, t + u))^2 \right]$$

- ▶ Si $C_{ST}(\mathbf{h}, u)$ est séparable, on a

$$\gamma_{ST}(\mathbf{h}, u) = C_{ST}(\mathbf{0}, 0) - C_S(\mathbf{h})C_T(u) \neq \gamma_S(\mathbf{h})\gamma_T(u)$$

- ▶ Par ailleurs, le produit de deux variogrammes n'est pas nécessairement un variogramme.

⇒ la notion de séparabilité prend un sens différent pour les variogrammes:

$$\gamma_{ST}(\mathbf{h}, u) \text{ séparable} \Leftrightarrow \gamma_{ST}(\mathbf{h}, u) = \gamma_S(\mathbf{h}) + \gamma_T(u)$$

En géostatistique spatio-temporelle, **on se restreint (presque toujours) à l'utilisation de fonctions de covariance.**

Les non-stationnarités du premier ordre (en moyenne) sont modélisées dans les termes de tendance

Quelques rappels théoriques

Définie positive

Une fonction $C : (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R})^2 \mapsto \mathbb{R}$ est une fonction de covariance ssi C est une fonction (semi-) **définie positive** : $\forall n, \forall \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_n \in \mathbb{R}^d, \forall t_1, \dots, t_n \in \mathbb{R}$ et $\forall a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i C(\mathbf{s}_i, t_i; \mathbf{s}_j, t_j) a_j \geq 0$$

Stabilité

Les fonctions définies positives sont stables pour le produit, les sommes positives et par la continuité \Rightarrow **stables pour les mélanges positifs**.

Quelques rappels théoriques

Définie positive

Une fonction $C : (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R})^2 \mapsto \mathbb{R}$ est une fonction de covariance ssi C est une fonction (semi-) **définie positive** : $\forall n, \forall \mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_n \in \mathbb{R}^d, \forall t_1, \dots, t_n \in \mathbb{R}$ et $\forall a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}$

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i C(\mathbf{s}_i, t_i; \mathbf{s}_j, t_j) a_j \geq 0$$

Stabilité

Les fonctions définies positives sont stables pour le produit, les sommes positives et par la continuité \Rightarrow **stables pour les mélanges positifs**.

Représentation spectrale

Théorème de Bochner

C est une fonction def. pos. sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ ssi

$$C(\mathbf{h}, u) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}} e^{i\boldsymbol{\omega}^t \mathbf{h} + i\tau u} dF(\boldsymbol{\omega}; \tau)$$

où $F(\boldsymbol{\omega}, \tau)$ est une mesure positive finie.

Spécification au cas réel \rightarrow transformée de Hankel

Posons $r = \|\mathbf{h}\|$ et u en lien et place de $|u|$. Alors,

$$C(r, u) = \int_{\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+} H_d(r\xi) \cos(\tau u) dG(\xi, \tau)$$

où

$$H_d(x) = \Gamma(d/2) \frac{J_{d/2-1}(x)}{(x/2)^{d/2-1}}$$

Représentation spectrale

Théorème de Bochner

C est une fonction def. pos. sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ ssi

$$C(\mathbf{h}, u) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}} e^{i\boldsymbol{\omega}^t \mathbf{h} + i\tau u} dF(\boldsymbol{\omega}; \tau)$$

où $F(\boldsymbol{\omega}, \tau)$ est une mesure positive finie.

Spécification au cas réel \rightarrow transformée de Hankel

Posons $r = \|\mathbf{h}\|$ et u en lien et place de $|u|$. Alors,

$$C(r, u) = \int_{\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^+} H_d(r\xi) \cos(\tau u) dG(\xi, \tau)$$

où

$$H_d(x) = \Gamma(d/2) \frac{J_{d/2-1}(x)}{(x/2)^{d/2-1}}$$

Covariances isotropiques et fonctions complètement monotones

Fonction complètement monotone

Une fonction $\varphi : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}$ est **complètement monotone** si $\forall n, \varphi^{(n)}$ existe avec $(-1)^n \varphi^{(n)}(t) \geq 0$. Alors,

$$\varphi(t) = \int_0^\infty \exp(-rt) dF(r) \Leftrightarrow \varphi = \mathcal{L}(F)(t),$$

avec $\varphi(0) = 1$.

Exemples

Fonction	Param.
$\varphi(t) = \exp(-ct^\gamma)$	$c > 0, 0 < \gamma \leq 1$
$\varphi(t) = (1 + ct^\gamma)^{-\nu}$	$c > 0, 0 < \gamma \leq 1, \nu > 0$
$\varphi(t) = [2^{\nu-1} \Gamma(\nu)]^{-1} (ct^{1/2})^\nu K_\nu(ct^{1/2})$	$c > 0, \nu > 0$
...	...

Théorème Schoenberg, 1938

$C(\mathbf{h}) = \varphi(\|\mathbf{h}\|^2)$ est def. pos. dans $\mathbb{R}^d, \forall d > 0 \iff \varphi(\|\mathbf{h}\|)$ est complètement monotone.

Mélanges de Gaussiennes \Leftrightarrow Fonctions de covariance dans $\mathbb{R}^d, \forall d$.

Covariances isotropiques et fonctions complètement monotones

Fonction complètement monotone

Une fonction $\varphi : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}$ est **complètement monotone** si $\forall n, \varphi^{(n)}$ existe avec $(-1)^n \varphi^{(n)}(t) \geq 0$. Alors,

$$\varphi(t) = \int_0^\infty \exp(-rt) dF(r) \Leftrightarrow \varphi = \mathcal{L}(F)(t),$$

avec $\varphi(0) = 1$.

Exemples

Fonction	Param.
$\varphi(t) = \exp(-ct^\gamma)$	$c > 0, 0 < \gamma \leq 1$
$\varphi(t) = (1 + ct^\gamma)^{-\nu}$	$c > 0, 0 < \gamma \leq 1, \nu > 0$
$\varphi(t) = [2^{\nu-1} \Gamma(\nu)]^{-1} (ct^{1/2})^\nu K_\nu(ct^{1/2})$	$c > 0, \nu > 0$
...	...

Théorème Schoenberg, 1938

$C(\mathbf{h}) = \varphi(\|\mathbf{h}\|^2)$ est def. pos. dans $\mathbb{R}^d, \forall d > 0 \iff \varphi(\|\mathbf{h}\|)$ est complètement monotone.

Mélanges de Gaussiennes \Leftrightarrow Fonctions de covariance dans $\mathbb{R}^d, \forall d$.

Covariances isotropiques et fonctions complètement monotones

Fonction complètement monotone

Une fonction $\varphi : \mathbb{R}^+ \mapsto \mathbb{R}$ est **complètement monotone** si $\forall n, \varphi^{(n)}$ existe avec $(-1)^n \varphi^{(n)}(t) \geq 0$. Alors,

$$\varphi(t) = \int_0^\infty \exp(-rt) dF(r) \Leftrightarrow \varphi = \mathcal{L}(F)(t),$$

avec $\varphi(0) = 1$.

Exemples

Fonction	Param.
$\varphi(t) = \exp(-ct^\gamma)$	$c > 0, 0 < \gamma \leq 1$
$\varphi(t) = (1 + ct^\gamma)^{-\nu}$	$c > 0, 0 < \gamma \leq 1, \nu > 0$
$\varphi(t) = [2^{\nu-1} \Gamma(\nu)]^{-1} (ct^{1/2})^\nu K_\nu(ct^{1/2})$	$c > 0, \nu > 0$
...	...

Théorème Schoenberg, 1938

$C(\mathbf{h}) = \varphi(\|\mathbf{h}\|^2)$ est def. pos. dans $\mathbb{R}^d, \forall d > 0 \iff \varphi(\|\mathbf{h}\|)$ est complètement monotone.

Mélanges de Gaussiennes \Leftrightarrow Fonctions de covariance dans $\mathbb{R}^d, \forall d$.

Construction de Gneiting

Théorème (Gneiting, 2002; étendu dans Zastavny et Porcu, 2011)

Soit

$$C(\mathbf{h}, u) = \frac{\sigma^2}{(1 + \gamma(u))^{d/2}} \varphi \left(\frac{\|\mathbf{h}\|^2}{1 + \gamma(u)} \right), \quad (\mathbf{h}, u) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$$

La fonction C est une fonction de covariance sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ ssi

- ▶ $\varphi(t) : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ une fonction complètement monotone
- ▶ $\gamma(u) : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$ un variogramme sur \mathbb{R}
- ▶ Pour que $C_T(u) \rightarrow 0$ il faut et il suffit que $\gamma(u) \rightarrow \infty$

- ▶ $C_S(\mathbf{h}) = C(\mathbf{h}, 0) = \sigma^2 \varphi(\|\mathbf{h}\|^2)$
- ▶ $C_T(u) = C(\mathbf{0}, u) = \sigma^2 (1 + \gamma(u))^{-d/2}$

Éléments de Preuve

Résultat original (Gneiting, 2002)

Soit

- ▶ $\varphi(t) : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ une fonction complètement monotone
- ▶ $\psi(u) : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ une fonction strictement positive telle que $\psi'(u)$ est c.m.

Alors,

$$C(\mathbf{h}, u) = \frac{\sigma^2}{\psi(|u|^2)^{d/2}} \varphi\left(\frac{\|\mathbf{h}\|^2}{\psi(|u|^2)}\right), \quad (\mathbf{h}, u) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$$

est une fonction de covariance sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$.

Théorème de Cressie-Huang (1999)

On définit

$$C_\omega(u) = \int e^{-i\omega^\top \mathbf{h}} C(\mathbf{h}, u) d\mathbf{h}, \quad u \in \mathbb{R},$$

Théorème Une fonction continue, bornée, symétrique et intégrable $C(\mathbf{h}, u)$ définie sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$ est une fonction de covariance spatio-temporelle ssi $C_\omega(u)$ est une fonction de covariance (temporelle) pour presque tout $\omega \in \mathbb{R}^d$.

Éléments de preuve

Gneiting 2002

1. Montrer que

$$C(\mathbf{h}, u) = \exp(-au^2) \frac{\sigma^2}{\psi(u^2)^{d/2}} \varphi\left(\frac{\|\mathbf{h}\|^2}{\psi(u^2)}\right)$$

est définie positive par le critère de Cressie-Huang

2. Pour cela utiliser que φ est un mélange de covariance Gaussiennes
3. Faire tendre $a \rightarrow 0$

Exemple: Gneiting-Matérn

Gneiting-Matérn

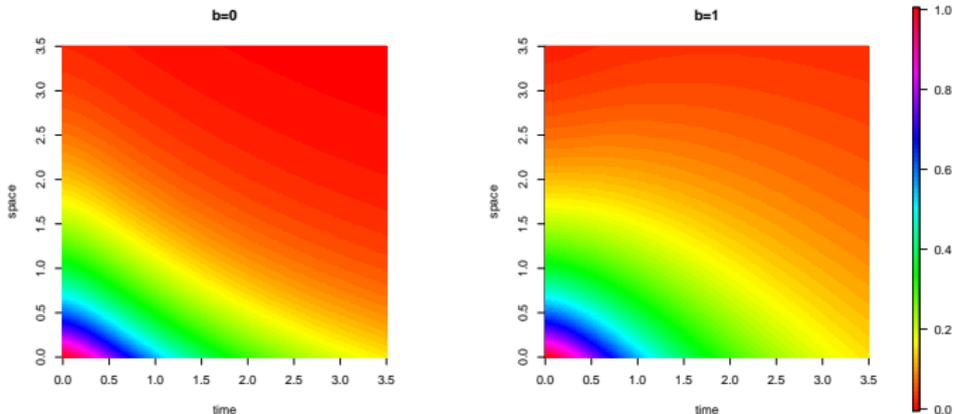
Sur \mathbb{R}^2 :

$$\varphi(\|\mathbf{h}\|) = \mathcal{M}(\mathbf{h}; r, \nu); \quad \gamma(u) = (\alpha|u|^a + 1)^b - 1$$

avec $\alpha, r, \nu > 0, 0 < a \leq 1, 0 \leq b \leq 1$.

$$\begin{aligned} C(\mathbf{h}, u) &= \frac{1}{(\alpha|u|^{2a} + 1)^\tau} \times \frac{\sigma^2}{(\alpha|u|^{2a} + 1)^{bd/2}} \mathcal{M}\left(\frac{\mathbf{h}}{(\alpha|u|^{2a} + 1)^b}; r, \nu\right) \\ &= \frac{\sigma^2}{(\alpha|u|^{2a} + 1)^\delta} \mathcal{M}\left(\frac{\mathbf{h}}{(\alpha|u|^{2a} + 1)^b}; r, \nu\right) \end{aligned}$$

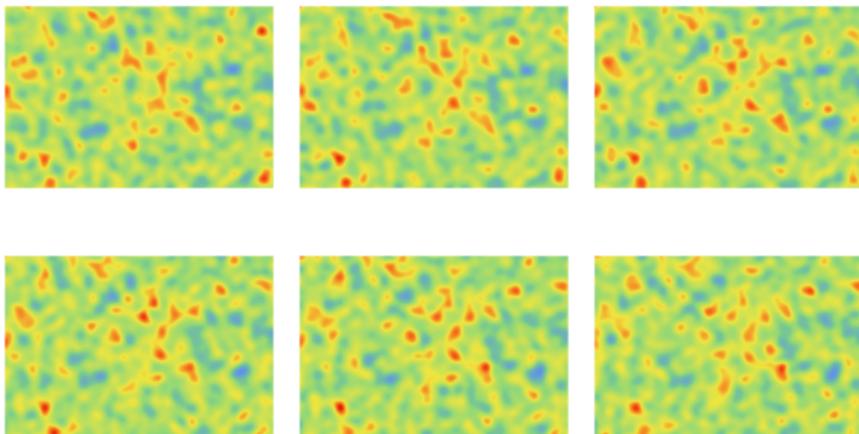
avec $\tau \geq 0 \Leftrightarrow \delta \geq bd/2$.



Illustration

Simulation d'un champ aléatoire Gaussien avec la covariance de Gneiting

$$C(\mathbf{h}, u) = (1 + |u|)^{-1/2} \exp\left(-0.01 |\mathbf{h}|^2 (1 + |u|)^{-1/2}\right)$$



Encore plus général (!!!) — Quelques minutes de science-fiction

Schlather, 2010

Soit

- ▶ $\mathbf{G} : \mathbb{R}^{(d+1) \times (d+1)} \mapsto \mathbb{R}^{\rho \times \rho}$ une matrice de variogrammes croisés;
- ▶ $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{\rho \times \rho}$ une matrice définie positive, t.q. $\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}')$ est s.d.p.
 $\forall (\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}') \in \mathbb{R}^{d+1} \times \mathbb{R}^{d+1}$;
- ▶ $\mathbf{H} : \mathbb{R}^{d+1} \mapsto \mathbb{R}^{\rho}$:

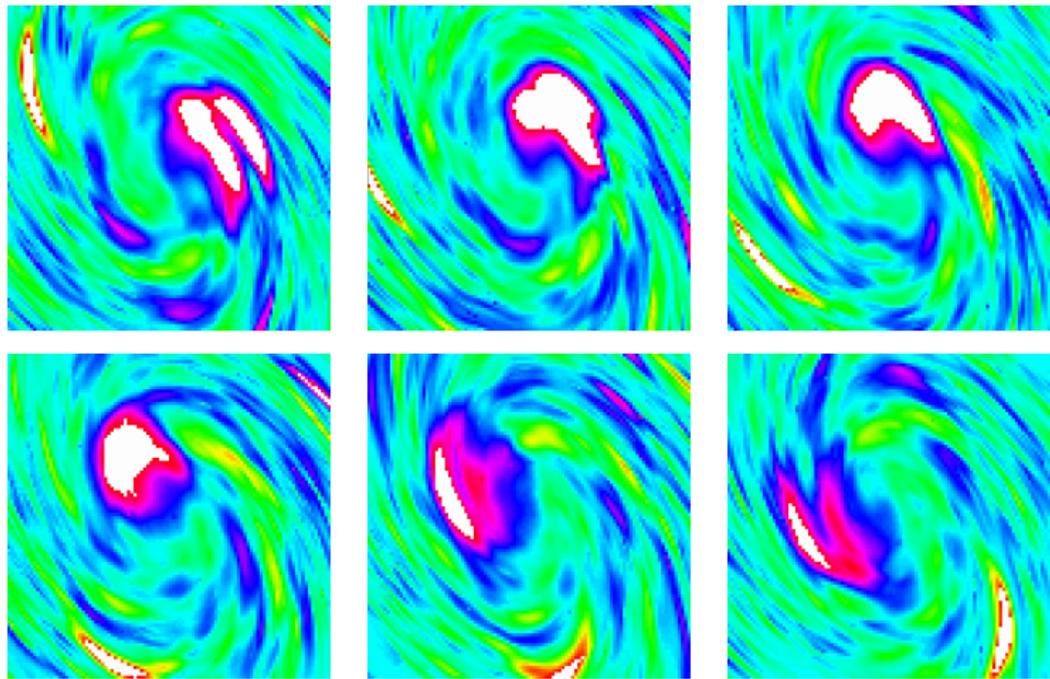
Alors,

$$C((\mathbf{s}, t), (\mathbf{s}', t')) = \frac{\varphi \left\{ [(\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))^\top (\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))^{-1} (\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))]^{1/2} \right\}}{\sqrt{\det(\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))}}$$

est une fonction de covariance sur $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}$, avec $\boldsymbol{\xi} = (\mathbf{s}, t)$.

Illustration "Cyclone"

©Martin Schlather. Simulé grâce au package `RandomFields` (Schlather, 2015, 2020).



Encore plus général (!!!) — Quelques minutes de science-fiction

Schlather, 2010

Soit

- ▶ $\mathbf{G} : \mathbb{R}^{(d+1)} \times (d+1) \mapsto \mathbb{R}^{p \times p}$ une matrice de variogrammes croisés;
- ▶ $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ une matrice définie positive, t.q. $\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}')$ est s.d.p.
 $\forall (\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}') \in \mathbb{R}^{d+1} \times \mathbb{R}^{d+1}$;
- ▶ $\mathbf{H} : \mathbb{R}^{d+1} \mapsto \mathbb{R}^p$:

$$C((\mathbf{s}, t), (\mathbf{s}', t')) = \frac{\varphi \left\{ [(\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))^\top (\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))^{-1} (\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))]^{1/2} \right\}}{\sqrt{\det(\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))}}$$

Construction de Gneiting (2002)

$p = d$, $G((\mathbf{s}, t), (\mathbf{s}', t')) = \gamma(t' - t)\mathbf{I}_d$, $\mathbf{M} = m.\mathbf{I}_d$, $\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{s}$ et

$$\Rightarrow C(\mathbf{h}, u) = \frac{\sigma^2}{[m + \gamma(u)]^{d/2}} \varphi \left(\frac{\|\mathbf{h}\|^2}{m + \gamma(u)} \right)$$

Encore plus général (suite)

Schlather, 2010

Soit

- ▶ $\mathbf{G} : \mathbb{R}^{(d+1) \times (d+1)} \mapsto \mathbb{R}^{p \times p}$ une matrice de variogrammes croisés;
- ▶ $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ une matrice définie positive, t.q. $\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}')$ est s.d.p.
 $\forall (\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}') \in \mathbb{R}^{d+1} \times \mathbb{R}^{d+1}$;
- ▶ $\mathbf{H} : \mathbb{R}^{d+1} \mapsto \mathbb{R}^p$:

$$C((\mathbf{s}, t), (\mathbf{s}', t')) = \frac{\varphi \{ [(\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))^\top (\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))^{-1} (\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))]^{1/2} \}}{\sqrt{\det(\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))}}$$

Construction de Cox and Isham (1988)

$$\mathbf{M} = \mathbf{I}_{d+1}, \mathbf{H}(\mathbf{s}, t) = \mathbf{s} + \boldsymbol{\mu}t \text{ et } \mathbf{G}((\mathbf{s}, t); (\mathbf{s}', t')) = (t - t')^2 \mathbf{D}$$

$$C(\mathbf{h}, u) = \frac{1}{\det\{\mathbf{1} + u^2 \mathbf{D}\}^{1/2}} \varphi \left\{ (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu})^\top (\mathbf{1} + u^2 \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{h} - u\boldsymbol{\mu}) \right\}$$

Encore plus général (suite)

Schlather, 2010

Soit

- ▶ $\mathbf{G} : \mathbb{R}^{(d+1)} \times \mathbb{R}^{(d+1)} \mapsto \mathbb{R}^{\rho \times \rho}$ une matrice de variogrammes croisés;
- ▶ $\mathbf{M} \in \mathbb{R}^{\rho \times \rho}$ une matrice définie positive, t.q. $\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}')$ est s.d.p
 $\forall (\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}') \in \mathbb{R}^{d+1} \times \mathbb{R}^{d+1}$;
- ▶ $\mathbf{H} : \mathbb{R}^{d+1} \mapsto \mathbb{R}^{\rho}$:

$$C((\mathbf{s}, t), (\mathbf{s}', t')) = \frac{\varphi \{ [(\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))^\top (\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))^{-1} (\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) - \mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}'))]^{1/2} \}}{\sqrt{\det(\mathbf{M} + \mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}'))}}$$

Construction de Paciorek and Schervish (2006)

$p = d$, $\mathbf{H}(\boldsymbol{\xi}) = \mathbf{s}$, $\mathbf{M} = 0$ et $\mathbf{G}(\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\xi}') = \mathbf{G}^*(\mathbf{s}) + \mathbf{G}^*(\mathbf{s}')$, où \mathbf{G}^* est une matrice strictement d.p.

$$C(\mathbf{s}, \mathbf{s}') = \frac{\varphi \{ [(\mathbf{s} - \mathbf{s}')^\top (\mathbf{G}^*(\mathbf{s}) + \mathbf{G}^*(\mathbf{s}'))^{-1} (\mathbf{s} - \mathbf{s}')]^{1/2} \}}{\sqrt{\mathbf{G}^*(\mathbf{s}) + \mathbf{G}^*(\mathbf{s}')}}}$$

Retour sur la séparabilité

- ▶ Covariance **positivement** non séparable si

$$\rho_{ST}(\mathbf{h}, u) > \rho_S(\mathbf{h})\rho_T(u)$$

- ▶ Covariance **négativement** non séparable si

$$\rho_{ST}(\mathbf{h}, u) < \rho_S(\mathbf{h})\rho_T(u)$$

- ▶ Certaines (la plupart) fonctions de covariance ne sont ni uniformément positivement ni uniformément négativement non-séparables.

Exercice

Démontrer mathématiquement:

1. La classe de Gneiting ne peut pas être négativement non séparable
2. La classe somme-produit ne peut pas être positivement non séparable

Indice: Poser $\sigma^2 = 1$ et calculer $C(\mathbf{h}, u)C(\mathbf{0}, 0) - C(\mathbf{h}, 0)C(0, u)$.