

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOMETRIA
NÍVEL: MESTRADO

**USO DA KRIGAGEM PARA CARACTERIZAÇÃO DA
VARIABILIDADE ESPACIAL DA CONDUTIVIDADE
HIDRÁULICA NO SEMI-ÁRIDO NORDESTINO COM
ENFOQUE BAYESIANO**

ARUNDO NUNES DA SILVA JÚNIOR

Recife-PE, Fevereiro de 2006.

UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DE PERNAMBUCO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM BIOMETRIA
NÍVEL: MESTRADO

**USO DA KRIGAGEM PARA CARACTERIZAÇÃO DA
VARIABILIDADE ESPACIAL DA CONDUTIVIDADE
HIDRÁULICA NO SEMI-ÁRIDO NORDESTINO COM
ENFOQUE BAYESIANO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Biometria em nível de Mestrado, como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre.

Área de concentração: Modelagem Estatística e Computacional (com ênfase nas áreas agrárias, biológicas e humanas)

Orientador: Prof. Abelardo Antônio Assunção Montenegro, PhD

Co-Orientador: Prof. Dr. Eufrázio de Souza Santos

Orientando: Arundo Nunes da Silva Júnior

Recife, Fevereiro de 2006.

Ficha catalográfica
Setor de Processos Técnicos da Biblioteca Central – UFRPE

S586u Silva Júnior, Arundo Nunes da
Uso da krigagem para caracterização da variabilidade espacial da condutividade hidráulica no semi-árido nordestino com enfoque Bayesiano / Arundo Nunes da Silva Júnior . – 2006.
74 f. : il.

Orientador : Abelardo Antônio de Assunção Montenegro
Dissertação (Mestrado em Biometria) -- Universidade Federal Rural de Pernambuco. Departamento de Estatística e Informática.
Inclui bibliografia.

CDD 574.0182

1. Krigagem
 2. Bayesiana
 3. Variabilidade espacial
- I. Montenegro, Abelardo Antônio de Assunção
 - II. Título

ARUNDO NUNES DA SILVA JÚNIOR

**USO DA KRIGAGEM PARA CARACTERIZAÇÃO DA VARIABILIDADE
ESPACIAL DA CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA NO SEMI-ÁRIDO
NORDESTINO COM UM ENFOQUE BAYESIANO**

Dissertação defendida e aprovada pela banca examinadora:

Orientador:

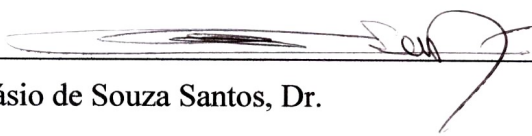


Prof. Abelardo Antônio de Assunção Montenegro, PhD.

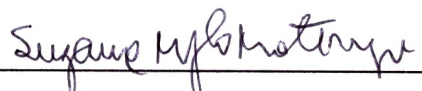
Examinadores:



Prof. Borko Stosic, Dr.



Prof. Eufrásio de Souza Santos, Dr.



Prof. Suzana Maria Gico Lima Montenegro, PhD.

Dedicatória

Aos meus pais **Arundo Nunes da Silva** e **Iva Alves da Silva** e a tia **Lady Nunes da Silva** minha segunda mãe, pelo amor que me deram e que foi fundamental importância para meu crescimento pessoal e profissional.

Ofereço

A minha filha **Aílla Ceres Santos Nunes**, que esta dissertação seja estímulo para sua vida profissional.

Agradecimentos

À Pró Reitoria de Pesquisa e Pós Graduação da Universidade Federal de Pernambuco pela ajuda financeira via CAPES.

Ao Programa de Pós Graduação em Biometria da Universidade Federal Rural de Pernambuco pela contribuição no meu desenvolvimento intelectual.

Ao meu orientador Prof^o. Abelardo Antônio Assunção Montenegro, PhD pela paciência e tempo dispensado, bem como a credibilidade e oportunidade para realização deste trabalho.

Ao meu co-orientador Prof^o. Dr^o. Eufrázio de Souza Santos, pela paciência e pela toda ajuda ao longo do curso e estímulo dispensado.

A todos os professores do Mestrado em Biometria e pessoal administrativo.

A Meu amigo Adriano Normandia, pela ajuda imprescindível. A todos que fazem engenharia agrícola, Eduardo, Thais, Tafnes, Sebastião, José Roberto, Meu amigo Manoel e Prof^o. Veronildo.

Ao Meu amigo e companheiro de curso Antônio Lopes Pessoa de fundamental importância na construção dessa dissertação.

Ao Meu amigo Dâmocles Aurélio por toda ajuda e amizade.

A todos os amigos da Fazenda Nossa Senhora do Rosário pela ajuda e recepção calorosa.

RESUMO

Este trabalho analisa a variabilidade espacial da condutividade hidráulica saturada com enfoque Bayesiano. Há um enorme interesse no campo da agricultura em se conhecer as medidas de condutividade hidráulica de um determinado local que receberá um plantio qualquer. Este interesse se deve principalmente a relação direta entre a condutividade hidráulica e a quantidade de irrigação que o local receberá. A área de estudo situa-se em um vale aluvial do semi-árido Pernambucano. Foi modelada espacialmente a propriedade condutividade hidráulica e, através da técnica de geoestatística conhecida como krigagem mapeou-se o vale. Foram analisados 98 pontos com medidas de condutividade hidráulica obtidas de teste de piezômetros na parte saturada do solo e slug tests. Utilizou-se tanto a estatística clássica, como a metodologia Bayesiana no estudo da variabilidade espacial. Foi observada a log-normalidade dos dados, e a estrutura de variabilidade estimada pela geoestatística clássica foi compatível com aquela estimada pela metodologia Bayesiana.

ABSTRACT

This work analyzes the spatial variability of the saturated hydraulic conductivity using the Bayesian approach. There is a large interest in agriculture on determining the hydraulic conductivity of a cultivated area. This interest is mainly due to the direct relationship between the hydraulic conductivity and the amount of irrigation that the place receives. The study area is located in an aluvial valley of the semi-arid zone of Pernambuco state. The Hydraulic conductivity was spatially modelled and, through the geostatistical kriging technique the valley was mapped. A total of 98 measurement points have been analysed, with hydraulic conductivity measurements from piezometer tests in the saturated part of the valley, using slug tests. Both classical statistics and Bayesian methodology have been used in the study of the spatial variability. It has been observed the log normality of the data, and the variability structure estimated by the classic geostatistical found to be compatible with that estimated by the Bayesian methodology.

LISTA DE TABELAS E GRÁFICOS

TABELA 1 – Estatística clássica.....	56
TABELA 2 – Estatística bayesiana.....	63
GRÁFICO 1 – Representação dos parâmetros do semivariograma.....	26

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 01	–	Mapa das instalações dos piezômetros	51
FIGURA 02	–	Piezômetros para testes hidráulicos	52
FIGURA 03	–	Escavação utilizando trado em campo para locação dos piezômetros	52
FIGURA 04	–	Fatores de forma F para metodologia de Hvorslev (1951)	54
FIGURA 05	–	Histograma com curva normal para o logaritmo condutividade hidráulica	56
FIGURA 06	–	Teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov para o logaritmo da condutividade hidráulica	57
FIGURA 07	–	Teste de log normalidade de Shapiro-Wilk para condutividade hidráulica	57
FIGURA 08	–	Dispersão da condutividade hidráulica na direção x	58
FIGURA 09	–	Dispersão da condutividade hidráulica na direção y	58
FIGURA 10	–	Construção do semivariograma	59
FIGURA 11	–	Modelo Gaussiano	59
FIGURA 12	–	Modelo Exponencial	

.....
60

FIGURA 13 – Modelo Esférico

.....
60

FIGURA 14 – Resultados para validação cruzada (Modelo esférico)

.....
61

FIGURA 15 – Resultados da validação cruzada (modelo Gaussiano)

.....
61

FIGURA 16 – Resultados para validação cruzada (Modelo exponencial)

.....
62

FIGURA 17a e 17b – Mapas de krigagem do desvio padrão da estimativa

.....
62

FIGURA 18 – Densidades para os parâmetros

.....
63

FIGURA 19 – Semivariâncias experimentais e teóricas, para as abordagens clássica e bayesiana

.....
64

FIGURA 20 – Mapa de Krigagem do log K

.....
64

FIGURA 21 – Semivariograma Exponencial teórico e semivariâncias experimentais (clássicos)

.....
65

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	14
2 OBJETIVOS.....	15
2.1 Geral.....	15
2.2 Específico.....	15
3 REVISÃO DA LITERATURA.....	16
3.1 Aspectos da variabilidade espacial e da geoestatística.....	16
3.2 Fundamentação teórica.....	20
3.2.1 Variáveis Regionalizadas e Função Aleatória.....	20
3.2.2 Momentos de uma Função Aleatória.....	21
3.2.3 Hipóteses de estacionaridade.....	22
3.2.4 Hipóteses restritivas.....	22
3.2.5 Semivariograma.....	25
3.2.6 Parâmetros do Semivariograma.....	26
3.2.7 Dependência espacial.....	27
3.2.8 Metodologia Geoestatística.....	27
3.2.9 Teste de Normalidade KS.....	28
3.2.10 Teste de Shapiro-Wilk.....	29
3.2.11 Krigagem.....	30
3.2.11.0 Krigagem Ordinária e equações.....	30
3.2.11.1 krigagem pontual.....	34
3.2.11.2 krigagem de bloco.....	34
3.2.11.3 krigagem simples (ks).....	34
3.2.11.4 Krigagem Bayesiana.....	36
3.2.11.4.1 Abordagem Bayesiana.....	36
3.2.11.4.2 Natureza da abordagem Bayesiana.....	37
3.2.11.4.3 Teorema de Bayes.....	37
3.2.11.4.4 Teorema de Bayes e a Função de Verossimilhança.....	38
3.2.11.4.5 Critério de Informação de Akaike.....	41
3.2.11.4.6 Distribuição subjetiva a priori.....	41
3.2.11.4.7 Contexto Bayesiano	42
3.2.11.4.8 Validação Cruzada.....	50
4 MATERIAIS E MÉTODOS.....	51
4.1 Localização da Área Experimental.....	51
4.2 Estimativa da condutividade hidráulica saturada.....	53

5 Resultados e Discussão	56
5.1 Análise Estatística Descritiva.....	56
5.2 Análise de Tendências.....	58
5.3 Análise Geoestatística, Verossilhança e Análise Bayesiana.....	59
6 CONCLUSÕES	66
7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	67
8 ANEXO	72

1 INTRODUÇÃO

A condutividade hidráulica é uma propriedade intrínseca do solo em deixar que a água o atravesse. Pode também ser entendida como a velocidade aparente por gradiente hidráulico unitário, e leva em conta as características do fluido que está escoando (viscosidade e massa específica). Há um enorme interesse no campo da agricultura em se conhecer as medidas de condutividade hidráulica de um determinado local que receberá um plantio qualquer. Este interesse se deve principalmente a relação direta entre a condutividade hidráulica e a quantidade de irrigação que solo receberá. Com esse intuito, o presente trabalho aborda a variabilidade espacial da condutividade hidráulica, de modo a realizar o mapeamento completo da área de estudo, situada no município de pesqueira, no Agreste pernambucano. Para isso, utilizou-se a técnica da geoestatística chamada de krigagem. Segundo Montenegro et al. (1999), a Geoestatística, ou Teoria das Variáveis Regionalizadas, é a ciência que estuda a variabilidade de uma medida através de um modelo probabilístico, associado à posição relativa das observações no espaço e possível correlações dessas observações em função da distância de separação entre elas. Essas variáveis regionalizadas apresentam um duplo aspecto contraditório: primeiro revelam uma característica aleatória que se manifesta na irregularidade e na variação imprevisível de um ponto qualquer a outro no espaço; por outro lado, as características estruturais, que refletem as ligações existentes entre os pontos no espaço, não são inteiramente independentes (Matheron, 1971). Dentro da técnica da geoestatística, foi possível fazer uma comparação entre a krigagem ordinária(clássica) e a krigagem Bayesiana. Foi constatada uma similaridade entre as krigagens. Na construção do mapa pela krigagem, as incertezas relativas às estimativas por krigagem podem ser diminuídas considerando-se um número maior de pontos, por exemplo através da inclusão de transectos ao longo do vale aluvial, complementando os dados de condutividade hidráulica obtidas por Montenegro et al.(1999).

2 OBJETIVOS

2.1 GERAL

Avaliar a estrutura de dependência espacial da condutividade hidráulica em área aluvial irrigada.

2.2 ESPECÍFICOS

Aplicar a geoestatística clássica para estudo da variabilidade da condutividade hidráulica.

- 1) Aplicar a metodologia Bayesiana e verificar o seu potencial de emprego.
- 2) Verificar o desempenho da geoestatística clássica considerando a incerteza nos parâmetros que descrevem a variabilidade espacial.

3 REVISÃO DA LITERATURA

3.1 Aspectos da variabilidade espacial e da geoestatística

O estudo da variabilidade espacial de algumas variáveis vem sendo objeto de preocupações de pesquisadores desde o princípio do século passado. Segundo Vieira (2000), os estudos sobre a variabilidade espacial foram iniciados por Smith (1910), estudando a disposição de parcelas no campo em experimentos de rendimento de variedades de milho, numa tentativa de eliminar o efeito de variações do solo. Para Queiroz (1995), variabilidade espacial é uma característica da maioria dos fenômenos naturais, podendo-se incluir, dentre eles, os parâmetros relacionados com o movimento da água no solo. Os procedimentos adotados na época baseavam-se na estatística clássica e utilizavam grandes quantidades de dados amostrais, visando caracterizar ou descrever a distribuição espacial da característica em estudo. Por estatística clássica entende-se aquela na qual se utilizam parâmetros como média e desvio padrão para representar um fenômeno, e se baseia na hipótese principal de que as variações de um local para outro são aleatórias e independentes.

O termo krigagem é derivado do nome de Daniel G. Krige, que foi o pioneiro a introduzir o uso de médias móveis para evitar a superestimação sistemática de reservas de mineração (Delfiner e Delhomme, 1975).

Inicialmente, o método de krigagem foi desenvolvido para solucionar problemas de mapeamentos geológicos, mas seu uso expandiu-se com sucesso no mapeamento de solos (Burgess e Webster, 1980a,b), mapeamento hidrológico (Kitanidis e Vomvoris, 1983), mapeamento atmosférico (Lajaunie, 1984) e outros campos correlatos.

Krige (1951), trabalhando com dados de concentração de ouro, concluiu que somente a informação dada pela variância seria insuficiente para explicar a variabilidade do fenômeno para tal, seria necessário levar em consideração a distância entre as observações. A partir daí, surge o conceito da geoestatística, que leva em consideração a localização geográfica e a dependência espacial.

A qualidade essencial de uma estimativa não é simplesmente associar um valor a um ponto ou a um bloco, mas também associar a essa avaliação uma idéia da qualidade da estimativa, inferindo o erro existente, ou seja, avaliando a discrepância entre o valor atribuído sobre e o valor real (Andriotti, 2004).

Segundo Brooker (1979), as técnicas geoestatísticas de estimativa, baseadas no estudo da estrutura de variabilidade espacial, são superiores aos estimadores clássicos, por que permite o cálculo do erro associado às estimativas, chamado variância de krigagem. Ainda conforme o mesmo autor, a krigagem é o procedimento que permite calcular os ponderadores para uma dada configuração amostral, com mínima variância de krigagem. A krigagem é feita após a conclusão dos estudos geoestatísticos, os quais poderão inclusive indicar a não aplicação deste método, caso o comportamento da variável regionalizada for totalmente aleatório. Os estudos geoestatísticos levam à definição de um modelo de variograma, que servirá para inferir os valores de variância e covariância a serem utilizados pelos métodos geoestatísticos de interpolação.

Segundo Oliver e Webster (1990), a krigagem linear engloba um conjunto de métodos de estimação, a saber: krigagem simples, krigagem ordinária, krigagem universal, co-krigagem, krigagem disjuntiva, dentre outras. Existem também krigagens não lineares, das quais se destaca a krigagem indicadora.

De acordo com Ribeiro Junior (1995) e Camargo (1997), o processo de krigagem se diferencia dos outros métodos de interpolação pela forma de atribuição de pesos aos valores amostrais, já que neste método não se utiliza a distância euclidiana entre os pontos, mas sim uma "distância estatística" que expressa tanto a distância como a estrutura de variabilidade (semivariância ou covariância). Não apenas a distância dos vizinhos ao ponto a ser estimado é considerada, mas também as distâncias entre os mesmos tem influência na distribuição dos pesos. Assim, os vizinhos agrupados têm importância individual relativamente menor do que aqueles isolados.

Para Mohanty, et al (1994), duas são as hipóteses básicas usadas em geoestatística: a ergodicidade, que diz que uma única realização do experimento possui a mesma distribuição de probabilidade da população; e a hipótese de estacionaridade dos dados, que considera que uma propriedade estatística da mediana não se altera com a translação, e sendo assim ela é estacionária no espaço.

Segundo Woodbury e Sudicky (1991), a estimação dos parâmetros para descrever a variação espacial de uma propriedade é sempre um problema de difícil resolução. Quando muitos dados são avaliados, a ênfase deve ser em como os vários modelos utilizados podem afetar o valor do parâmetro inferido. Em geoestatística, a construção de semivariogramas é uma etapa extremamente importante e vários artigos, livros e sites de Internet tratam deste assunto. “O variograma é um instrumento para a análise estrutural de dados com distribuição espacial”.(Journel, 1993).

Segundo Bailey e Gatrell (1995), a estatística espacial divide-se em quatro grandes áreas, de acordo com o tipo de dado analisado: análise de processos pontuais, análise de dados espacialmente contínuos (geoestatística), análise de dados de área, e análise de dados de interação espacial.

A estatística espacial está inserida em um contexto bem mais amplo, o da Análise Espacial, como bem destacam Fischer et al. (1994) e Bailey e Gatrell (1995).

Matheron (1963, 1971), baseado nas observações de Krige, desenvolveu a teoria das variáveis regionalizadas ou metodologia geoestatística. Uma variável regionalizada é uma função numérica com distribuição espacial, que varia de um ponto a outro com continuidade aparente, a cujas variações devem ser ajustadas funções teóricas.

A geoestatística, por intermédio da Krigagem, fornece uma estimativa de ponto ou bloco e, juntamente com ela, uma medida de acurácia dessa estimativa. Com o avanço de técnicas de simulação estocásticas e, paralelamente, de ferramentas computacionais, o uso de modelos altamente estruturados nas diversas áreas da estatística tem-se em particular, a área de estatística espacial vem recebendo grande atenção por parte de renomados pesquisadores e modelos mais realistas têm sido propostos (Shimidt, 2001).

Segundo Box e Tiao (1973) discutiram as idéias de Jeffreys (1961), sobre a distribuição a priori para representar o estado de ausência de informação ou ignorância a respeito do comportamento probabilístico dos parâmetros. O estudo abrangeu os casos uniparamétricos e multiparamétricos. É talvez, a discussão mais difundida sobre prioris não-informativas. Trabalhando com esse tipo de priori para os parâmetros, os autores desenvolveram a teoria Bayesiana para o modelo com um fator, abordando duas situações: o fator de efeito fixo, e o fator de efeito

aleatório. Também desenvolveram a teoria Bayesiana para um modelo hierárquico de efeito aleatório, com três componentes de variância.

Leandro (1994) apresentou maneiras de escolha da distribuição a priori para os parâmetros, a saber:

i) Distribuição Ajustada à Frequência Relativa; baseada em distribuições de frequências de valores Θ observados previamente; a partir daí, pode-se escolher uma distribuição a priori para o vetor de parâmetros Θ apropriadamente, que ao ser combinada com a verossimilhança, gera uma densidade a posteriori para Θ , que pertence à mesma família de densidades de probabilidade.

ii) Distribuição Ajustada à Expectativa Subjetiva: aplicada quando não se tem uma base objetiva sólida para a escolha da distribuição a priori de Θ . Neste caso, $p(\Theta)$ representará apenas a expectativa subjetiva do pesquisador, devendo-se avaliar as implicações de sua escolha na distribuição a posteriori.

iii) Distribuições Objetivas: utilizadas quando o conhecimento do pesquisador sobre Θ não for suficiente para avaliar a distribuição probabilística do parâmetro Θ . Neste caso, deve ser admitida prioris não informativas.

Lindley (1965), fez uma abordagem Bayesiana dos conceitos da teoria das probabilidades, com ênfase à interpretação do teorema de Bayes e suas aplicações. Comparou os resultados bayesianos aos da inferência clássica. Adicionalmente Antelman (1997). Apresentou o Teorema de Bayes, e suas relações com as distribuições e as funções de verossimilhança adotadas na geoestatística. Por sua vez, Clarker e Wasserman (1993) abordaram o conflito entre prioris que são não-informativas para todos os parâmetros de interesse, versus prioris que são não-informativas apenas para alguns parâmetros envolvidos no modelo. A pesquisa levou os autores a maximizar uma função composta de dois termos: uma aproximação assintótica para a distância de Kullback-Leibler esperada padronizada entre a priori marginal e marginal posteriori dos parâmetros de interesse, e um termo penalizador medindo a distância da priori a priori de Jeffreyes. Uma constante positiva multiplicando os parâmetros de interesse e a não informação para todos os parâmetros do modelo. Os autores constataram que conforme aumentaram a constante, a priori tornava-se degenerada. Exceto para alguns casos especiais, essa priori não teria uma forma fechada, ou seja forma analítica complexa com soluções através de de

simulações estocásticas, mas os autores desenvolveram um algoritmo para determiná-la.

Chou (1984) apresenta uma abordagem sobre os métodos de inferência estatística em particular sobre o método Bayesiano. Neste sentido, apresenta uma forma especial de distribuição a priori para representar a informação que se obtém a partir de experimentos anteriores, que é chamada de priori conjugada a qual tem a característica de que, ao ser combinada com verossimilhança, gera uma densidade a posteriori.

O método de máxima verossimilhança, proposto por Hartley & Rao (1967), é um método iterativo o qual consiste em maximizar a função de densidade de probabilidades, em relação aos efeitos fixos e aos componentes de variâncias dos efeitos aleatórios do modelo, fornecendo estimativa “mais verossímil” de parâmetros.

Diggle & Ribeiro Junior (2000) afirmam que ao utilizar a estimação de parâmetros de modelos baseados em verossimilhança, deve-se considerar a pressuposição gaussiana, e apresentam um modelo de regressão linear gaussiano com tendência linear.

3.2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.2.1 Variáveis Regionalizadas e Função Aleatória

Por definição, uma variável aleatória $Z(x)$ é aquela que pode assumir uma certa quantidade de valores possíveis associados a uma determinada lei de probabilidade.

De acordo com Ribeiro Junior (1995), o conjunto de valores $z(x_i)$ para todos os pontos x_i de uma determinada região é considerado uma realização particular do conjunto das variáveis aleatórias $\{ Z(x_i) \dots \}$. Uma função aleatória $Z(x)$ é um conjunto infinito de variáveis aleatórias.

A teoria das variáveis regionalizadas pressupõe que uma variável aleatória pode ser expressa pela soma de três componentes: uma componente estrutural, associada a um valor médio constante ou a uma tendência constante; uma componente aleatória, espacialmente correlacionada; e um ruído aleatório ou erro residual (Burrough, 1987).

Pode-se, então, escrever:

$$Z(x) = m(x) + w(x) + \varepsilon \quad 01$$

Em que: $Z(x)$ é uma função dos valores da variável resposta nas posições (x_1, x_2, \dots, x_i) , $m(x)$ é uma função determinística que descreve a componente estrutural de Z em x ; $w(x)$ é um termo estocástico, que varia localmente e depende espacialmente de $m(x)$; ε é um ruído aleatório não correlacionado, com distribuição normal de média zero e variância σ^2 .

3.2.2 Momentos de uma Função Aleatória

No estudo da geoestatística, em que as estimativas de pontos não amostrados são obtidas por meio de combinação linear, é suficiente a estimativa dos dois primeiros momentos da distribuição de $Z(x)$.

O momento de primeira ordem de uma função aleatória $Z(x)$ é a esperança matemática, definida por:

$$E[Z(x)] = m(x) \quad 02$$

Além deste, existem três momentos de segunda ordem considerados em geoestatística, conforme destacado por Braga (1990), os quais são apresentados como:

a) variância

A variância de $Z(x)$, σ^2 , quando existe, pode ser definida como o momento de segunda em relação à média $m(x)$. Tem-se:

$$\sigma^2 = \text{Var}[Z(x)] = E\{[Z(x) - m(x)]^2\} \quad 03$$

b) covariância

Sejam duas variáveis aleatórias $Z(x_i)$ e $Z(x_j)$, nos pontos x_i e x_j , e possuindo variância finita. A expressão da covariância é dada por:

$$C(x_i, x_j) = E\{[Z(x_i) - m(x_i)][Z(x_j) - m(x_j)]\} \quad 0504$$

A covariância deve ser definida positiva para assegurar a existência de todas as distribuições acumuladas.

c) semivariograma $\gamma(x_i, x_j)$

Pode-se definir semivariograma γ pela expressão:

$$\gamma(x_i, x_j) = \frac{1}{2} E\{[Z(x_i) - Z(x_j)]^2\} \quad 05$$

Tanto a variância quanto o semivariograma são sempre positivos, enquanto que a covariância pode apresentar valores negativos.

3.2.3 Hipótese de estacionaridade

Uma variável é estacionária se ocorrer de maneira aproximadamente homogênea, com oscilações aleatórias contínuas em torno de um valor médio. A hipótese de estacionaridade permite a repetição de um experimento, mesmo que as amostras sejam observadas em pontos diferentes em relação ao experimento inicial. Com isto, a hipótese de estacionaridade assegura que o primeiro e o segundo momentos são constantes.

3.2.4 Hipóteses restritivas

a) Estacionaridade restrita

Uma função aleatória é estritamente estacionária se sua função de distribuição de probabilidade, dada por:

$$F_{Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_k)}(Z_1, Z_2, \dots, Z_k) = \text{Prob}\{Z(x_1) \leq Z_1, Z(x_2) \leq Z_2, \dots, Z(x_k) \leq Z_k\} \quad 0706$$

É invariante em relação a qualquer translação do vetor \mathbf{h} , ou então, se a função de distribuição do vetor aleatório:

$$[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_k)] \quad 08 \quad 07$$

é idêntica à do vetor:

$$[Z(x_1 + h), Z(x_2 + h), \dots, Z(x_k + h)] \quad 09 \quad 08$$

para qualquer \mathbf{h} .

Embora a geoestatística empírica baseie-se nos dois primeiros momentos da função aleatória, é suficiente supor que estes momentos existam, e adotar as hipóteses de estacionaridade dos dois primeiros momentos.

b) Estacionaridade de primeira ordem

Uma função aleatória é estacionária de primeira ordem caso se admita que todas as variáveis aleatórias $Z(x_i)$, $i=1, \dots, N$, têm a mesma média para todos os locais da região de estudo. Esta hipótese, discutida por Trangenin et al. (1985), é expressa por:

$$E[Z(x_1)] = E[Z(x_2)] = \dots = E[Z(x_i)] = E[Z(x)] = m \quad 10 \quad 09$$

c) Estacionaridade de segunda ordem

Uma hipótese de estacionaridade menos restritiva, ou seja, uma hipótese fraca de estacionaridade, utiliza o segundo momento.

Uma função aleatória $Z(x)$ é estacionária de segunda ordem se, além de atender à estacionaridade de primeira ordem, apresentar a característica de que, para cada par de valores $z(x)$ e $z(x+h)$, a covariância existe e depende apenas da distância \mathbf{h} (Journel & Huijbregts, 1978). As equações relacionadas a esta hipótese, especificamente a esperança matemática, covariância e variância são:

$$E[Z(x)] = m, \quad \forall x \quad 11 \quad 10a$$

$$C(x+h, x) = C(h) = E[Z(x+h)Z(x)] - m^2 \quad 12 \quad 10b$$

$$C(h) = E[Z(x) - m][Z(x+h) - m] \quad 13 \quad 10c$$

A hipótese de estacionaridade de segunda ordem pressupõe a existência de covariância e, em consequência, uma variância a priori finita. A expressão para variância, neste caso, será:

$$\text{Var}[Z(x)] = E[Z(x) - m]^2 = C(0) \quad 14 \quad 11$$

Esta hipótese de variância finita é muito forte e raramente assumida, sendo usualmente substituída por uma hipótese mais fraca chamada de hipótese intrínseca.

d) Hipótese intrínseca

De acordo com esta hipótese, a função semivariograma $2\gamma(x, h)$ depende somente do vetor de separação \mathbf{h} (módulo e direção), e não da localização de x . Então, é possível estimar o semivariograma $2\gamma(h)$ com os dados disponíveis e aplicá-lo a todo domínio. Esta hipótese não é mais definida através das distribuições das variáveis aleatórias pontuais, e sim através das diferenças entre elas, também chamada de estacionaridade dos incrementos ou estacionaridade fraca (Ribeiro Junior, 1995).

A hipótese intrínseca é definida pelas seguintes condições:

a) o incremento da variável entre dois pontos tem esperança nula

$$E[Z(x+h) - Z(x)] = 0 \quad 15 \quad 12$$

b) para qualquer vetor \mathbf{h} , o incremento tem uma variância finita, independente da posição x .

$$\text{Var}[z(x+h) - z(x)] = E[z(x+h) - z(x)]^2 = 2\gamma(h) \quad 16 \quad 13$$

Sendo $[2\gamma(h)]$ a definição de semivariograma.

A hipótese intrínseca é mais freqüentemente utilizada na geoestatística por ser mais abrangente; portanto, o semivariograma é mais empregado porque exige apenas a hipótese intrínseca.

3.2.5 Semivariograma

O semivariograma experimental clássico pode ser expresso, segundo Landin (1998), por:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2.N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [z(x_i) - z(x_{i+h})]^2 \quad 14$$

Onde: $N(h)$ = número de pares de pontos

$z(x_i)$ = valor da variável no ponto x_i

$z(x_i + h)$ = valor da variável no ponto $x_i + h$

3.2.6 Parâmetros do Semivariograma

Os parâmetros do semivariograma, ilustrados na Figura 1, são:

- Alcance (a ou ϕ): distância dentro da qual as amostras apresentam-se correlacionadas espacialmente.

- Patamar (C ou $\tau^2 + \sigma^2$): é o valor do semivariograma correspondente a seu alcance (a). Deste ponto em diante, considera-se que não existe mais dependência espacial entre as amostras, porque a variância da diferença entre pares de amostras ($\text{Var}[z(x) - z(x+h)]$) torna-se invariante com a distância.

- Efeito Pepita (C_0 ou τ^2): por definição, $\gamma(0) = 0$; entretanto, à medida que h tende para 0 (zero), $\gamma(h)$ se aproxima de um valor positivo chamado Efeito Pepita (C_0).
- Contribuição ou variância estruturada (C_1 ou σ^2): é a diferença entre o patamar (C) e o Efeito Pepita (C_0).

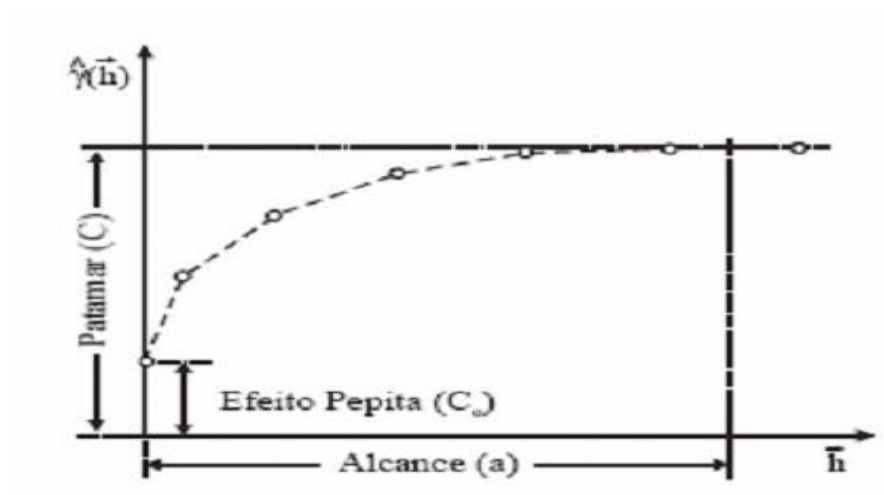


Figura – 1 Representação gráfica dos Parâmetros do semivariograma, (Isaaks e Srivastava, 1989).

Após a construção do semivariograma experimental, deve ser escolhido um semivariograma teórico que melhor se ajuste ao semivariograma experimental. Definido o melhor modelo teórico, realiza-se a interpolação por krigagem.

A escolha do melhor modelo teórico baseia-se no melhor ajuste entre os que forem testados, usualmente se adotando o coeficiente de determinação R^2 .

Os modelos teóricos mais utilizados, segundo Landim (1998), são os seguintes:

$$\text{Modelo exponencial } \gamma(h) = C_0 + C_1 \left\{ 1 - \text{Exp} \left(\frac{-h}{a} \right) \right\} \quad \text{para } h \leq a \quad 15a$$

$$\gamma(h) = C_0 + C_1 \quad \text{para } h > a \quad 15b$$

$$\text{Modelo gaussiano } \gamma(h) = C_0 + C_1 \left\{ 1 - \text{Exp} - \left(\frac{h}{a} \right)^2 \right\} \quad \text{para } h \leq a \quad 16a$$

$$\gamma(h) = C_0 + C_1 \quad \text{para } h > a \quad 16b$$

$$\text{Modelo esférico} \quad \gamma(h) = C_0 + C_1 \left\{ 1,5 \frac{h}{a} - 0,5 \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right\} \quad \text{para } h \leq a \quad 17a$$

$$\gamma(h) = C_0 + C_1 \quad \text{para } h > a \quad 17b$$

Onde: $a =$

alcance, $h =$ distância, $C_0 =$ efeito pepita, $C_1 =$ patamar (perda de correlação).

3.2.7 Dependência espacial

Se os valores próximos não são independentes entre si, pode-se utilizar o processo de krigagem para interpolar e estimar valores em lugares não medidos (Isaaks & Srivastava, 1989).

A análise estrutural deve ser realizada após ajuste de um modelo teórico ao semivariograma experimental.

O uso da porcentagem (%) da semivariância do Efeito Pepita foi proposto por Trangmar et al. (1985), para determinar a dependência espacial.

Cambardella et al. (1994) propuseram o Índice de Dependência Espacial (IDE) que é dado por:

$$IDE(\%) = \frac{C_0}{C_0 + C_1} 100 \quad 18$$

Sendo:

$IDE \leq 25\%$ - forte dependência espacial

$25\% < IDE < 75\%$ - moderada dependência espacial

$75\% \leq IDE < 100\%$ - fraca dependência espacial

$IDE = 100\%$ - variável independente

3.2.8 Metodologia Geoestatística

A análise de dados considerando a geoestatística clássica, em sua metodologia admite as seguintes suposições:

- A normalidade da variável;

- A homoscedasticidade (homogeneidade) de variância;
- A independência de erros.

A pressuposição de Fisher em 1935 exige que, para estimar as semivariâncias, a variável a ser analisada deva ter uma distribuição aproximada normal.

3.2.9 Teste de Normalidade KS

Este teste de aderência avalia a concordância entre a distribuição observada da amostra e uma distribuição normal teórica, verificando assim se os dados amostrais aproximam-se razoavelmente de uma determinada distribuição. Para isso, utiliza-se a função distribuição acumulada observada, a qual é comparada com uma teórica. Verifica-se, portanto, se a discrepância que ocorre é aleatória ou não. Para que se faça este teste, os dados devem seguir uma escala ordinal.

De acordo com Kreysig (1970), considerando-se uma distribuição teórica acumulada $F_0(x)$ e uma distribuição observada $F_1(x)$ em uma amostra de n observações, a normalidade pode ser testada através dos seguintes passos:

Determina-se o maior valor das diferenças (desvio máximo) entre $F_0(x)$ e $F_1(x)$, utilizando a expressão:

$$d = \max | F_0(x) - F_1(x) | \quad 19$$

Em que: d é o desvio entre $F_0(x)$ e $F_1(x)$, sendo $F(x)$ a função de distribuição da população e $F_1(x)$ a função de distribuição da amostra.

Posteriormente, compara-se este valor com o valor crítico obtido de tabelas. Se o valor de d obtido for maior do que o tabelado, o resultado será significativo e a hipótese é rejeitada.

As vantagens do teste de Kolmogorov-Smirnov em relação a outros testes é que ele pode ser aplicado para pequenas amostras, e trata os dados

individualmente, sem perder informações. Na maioria dos casos, é mais poderoso Kreysig (1970).

3.2.10 Teste de Shapiro-Wilk

O método de Shapiro-Wilk (1965) tem como resultado o valor favorecido pela estatística W , podendo variar de 0 a 1, e a probabilidade (p-valor) que descreve a hipótese da normalidade também varia de 0 a 1.

Segundo Cordeiro (1987) e Lima Neto (2004), a estatística W do teste de Shapiro-Wilk é dada por:

$$W = \frac{\left\{ \sum_{i=1}^n a_i z(i) \right\}^2}{\left\{ \sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z})^2 \right\}} \quad 20$$

Em que: $z(1) \leq z(2) \leq \dots \leq z(n)$ são os dados ordenados, em ordem crescente, e os a_i 's são constantes tabuladas com níveis de significância para W .

O procedimento para aplicação do teste de normalidade Shapiro-Wilk (1965) segue os seguintes passos:

- i) Ordenam-se as observações amostrais (n) em ordem crescente;
- ii) Calcula-se a soma do quadrado do erro associado à amostra

$$\left\{ \sum_{i=1}^n (z_i - \bar{z})^2 \right\}; \quad 21$$

- iii) Calcula-se o valor de k , quando n é par, ou seja, $k = 2n$, quando n é

$$\text{ímpar, } k = 2n + 1, \text{ em seguida encontra-se o valor de: } \left\{ \sum_{i=1}^k a_i z(i) \right\};$$

Os valores de a_i 's, são obtidos em tabelas especiais. Quando o número de observações é ímpar, o valor da mediana não entra nos cálculos;

- iv) Calcula-se a estatística W e compara-se o valor encontrado com o valor obtido em tabelas, caso $W < W_{\text{tab}}$; o teste rejeita a hipótese de nulidade, indicando a normalidade das observações.

O teste de normalidade de Shapiro-Wilk (1965) é comumente empregado para pequenas amostras.

3.2.11 Krigagem

A diferença entre a krigagem e outros métodos de interpolação é a maneira como os pesos são atribuídos às diferentes amostras. No caso de interpolação linear simples, por exemplo, os pesos são todos iguais a $1/N$ (N = número de amostras); na interpolação baseada no inverso do quadrado das distâncias, os pesos são definidos como o inverso do quadrado da distância que separa o valor interpolado dos valores observados. Na krigagem, o procedimento é semelhante ao de interpolação por média móvel ponderada, exceto que aqui os pesos são determinados a partir de uma análise espacial, baseada no semivariograma experimental. Além disso, a krigagem fornece, em média, estimativas não tendenciosas e com variância mínima.

3.2.11.0 Krigagem ordinária e suas equações

A krigagem é um método que permite estimar o valor desconhecido associado a um ponto, área ou volume, a partir de um conjunto de n dados $\{Z(x_i), i=1,n\}$ disponíveis. O estimador poderá ser obtido como uma combinação linear dos dados disponíveis, conforme:

$$Z^*(X_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot Z(X_i) \quad 22$$

onde:

$Z^*(X_0)$ -o valor desconhecido a ser estimado;

$\lambda_i (i=1,n)$ - ponderadores obtidos pela resolução do sistema linear de equações';

$Z(x_i) (i=1,n)$ - conjunto de n dados disponíveis.

A construção do estimador, na krigagem ordinária, não requer o conhecimento inicial da média estacionária da amostragem (Landim, 1998) mas requer que a soma dos pesos $\sum \lambda_i$ seja igual a 1 (Uzumaki, 1994).

Os ponderadores ($\lambda_i, i=1, n$) são obtidos da resolução de um sistema linear de equações, denominado sistema de equações de krigagem. Para que o estimador não seja tendencioso, segundo Journel & Huijbregts (1978), basta garantir que:

$$E[Z(x_o) - Z^*(x_o)] = 0 \text{ fazendo } E[Z(x_o)] = m \text{ e tendo que:}$$

$$E[Z^*(x_o)] = E\left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i)\right] = \sum_{i=1}^n \lambda_i E[Z(x_i)] \quad \text{e} \quad E[Z^*(x_o)] = m \sum_{i=1}^n \lambda_i$$

$$\text{assim, a condição de não tendenciosidade para } Z^*(x_o) \text{ fica: } \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad 23$$

Como toda técnica de estimativa, a krigagem procura fazê-la com mínima variância. A variância do erro da krigagem é dada pela equação (3) a seguir:

$$\sigma_E^2 = \text{Var}\{Z(x_o) - Z^*(x_o)\} \quad 24$$

A variância do erro pode ser expandida de acordo com Isaaks & Srivastava (1989). Expandindo a variância do erro, de acordo com Isaaks & Srivastava (1989), tem-se:

$$\sigma_E^2 = \text{Cov}\{Z(x_o), Z(x_o)\} - 2\text{Cov}\{Z^*(x_o), Z(x_o)\} + \text{Cov}\{Z^*(x_o), Z^*(x_o)\} \quad 25$$

Desenvolvendo cada termo do lado direito de 25, conforme Isaak & Srivastava (1989), chega-se a:

$$\begin{aligned} \text{Cov}\{Z(x_o), Z(x_o)\} &= \text{Var}\{Z(x_o)\} \\ &= C(0) \end{aligned} \quad 26$$

$$\begin{aligned} 2\text{Cov}\{Z^*(x_o), Z(x_o)\} &= 2\text{Cov}\left\{\left[\sum_i \lambda_i Z(x_i)\right], Z(x_o)\right\} \\ &= 2E\left\{\sum_i \lambda_i Z(x_i) Z(x_o)\right\} - 2E\left\{\sum_i \lambda_i Z(x_i)\right\} E\{Z(x_o)\} \\ &= 2\sum_i \lambda_i E\{Z(x_i) Z(x_o)\} - 2\sum_i \lambda_i E\{Z(x_i)\} E\{Z(x_o)\} \\ &= 2\sum_i \lambda_i [E\{Z(x_i) Z(x_o)\} - E\{Z(x_i)\} E\{Z(x_o)\}] \\ &= 2\sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) \end{aligned} \quad 27$$

$$\begin{aligned}
\text{Cov}\{Z^*(x_o)Z^*(x_o)\} &= \text{Var}\{Z^*(x_o)\} \\
&= \text{Var}\left\{\sum_i \lambda_i Z(x_i)\right\} \\
&= \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j)
\end{aligned}
\tag{28}$$

Assim, a expressão 25 torna-se:

$$\sigma_E^2 = C(0) - 2\sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j)
\tag{29}$$

O objetivo da krigagem é buscar o melhor conjunto de ponderadores, de tal modo que a variância do erro seja a mínima possível. Trata-se, portanto, de encontrar o mínimo da função variância do erro, dada pela equação 23. Entretanto, como tal função tem n variáveis, o ponto de mínimo poderá ser determinado após aplicação da técnica dos multiplicadores de Lagrange (Converse, 1970),

A colocação do problema a seguir de krigagem pode ser expresso como:

- minimizar a função:

$$\sigma_E^2 = C(0) - 2\sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j)$$

- restrito a:

$$\sum_j \lambda_j = 1 \text{ ou } \sum_j \lambda_j - 1 = 0$$

Forma-se então o lagrangiano:

$$L(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \mu) = C(0) - 2\sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j) - 2\mu \left(\sum_j \lambda_j - 1 \right)$$

onde: $L(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, \mu)$ é o lagrangiano; μ é o multiplicador de Lagrange.

Para minimizar o lagrangiano, faz-se cada uma das derivadas parciais dL/d

λ_i , iguais a zero:

$$\frac{dL}{d\lambda_i} = -2C(x_o - x_i) + 2\sum_j \lambda_j C(x_i - x_j) - 2\mu = 0$$

para $i=1, n$

e fazendo-se $dL/d\mu$ igual a zero:

$$\frac{dL}{d\mu} = \sum_j \lambda_j - 1 = 0$$

Assim, a minimização da variância do erro, sujeita à condição de não tendenciosidade, resulta nas de equações de krigagem ou sistema de krigagem:

$$\begin{cases} \sum_j \lambda_j C(x_i - x_j) - \mu = C(x_o - x_i) & \text{para } i=1,n \\ \sum_j \lambda_j = 1 \end{cases} \quad 30$$

Em termos matriciais, as equações 30 são representadas como segue:

$$\begin{bmatrix} C(x_1 - x_1) & C(x_1 - x_2) & \dots & C(x_1 - x_n) & 1 \\ C(x_2 - x_1) & C(x_2 - x_2) & \dots & C(x_2 - x_n) & 1 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ C(x_n - x_1) & C(x_n - x_2) & \dots & C(x_n - x_n) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C(x_o - x_1) \\ C(x_o - x_2) \\ \vdots \\ C(x_o - x_n) \\ 1 \end{bmatrix}$$

A minimização da variância do erro resulta na variância de estimativa ou de krigagem ordinária, expresso como:

$$\sigma_{k0}^2 = C(0) - 2 \sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) + \sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j)$$

o termo $\sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j)$ pode ser derivado do primeiro conjunto de equações 22, conforme Isaak & Srivastava (1989):

$$\sum_j \lambda_j C(x_i - x_j) - \mu = C(x_o - x_i) \quad \text{para } i=1,n$$

escrevendo-se as n equações para $i=1,n$ e somando:

$$\sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j) - \mu \sum_i \lambda_i = \sum_i \lambda_i C(x_o - x_i)$$

e lembrando que $\sum_i \lambda_i = 1$, tem-se:

$$\sum_i \sum_j \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j) = \sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) + \mu$$

substituindo-se este resultado na expressão da variância de krigagem ordinária, chega-se:

$$\sigma_{k0}^2 = C(0) - \sum_i \lambda_i C(x_o - x_i) + \mu$$

31

O sistema de equações (6) também pode ser escrito em termos da função semivariograma, visto que esta e a função covariância estão relacionadas conforme a equação 32:

$$\begin{cases} \sum_j \lambda_j \gamma(x_i - x_j) + \mu = \gamma(x_0 - x_i) & \text{para } i=1,n \\ \sum_j \lambda_j = 1 \end{cases} \quad 32$$

Nesses termos, a variância de krigagem torna-se:

$$\sigma_{k0}^2 = \sum_i \lambda_i \gamma(x_0 - x_i) + \mu \quad 33$$

As equações de krigagem permitem estimar o conjunto de ponderadores $\{\lambda_i, i=1,n\}$ associados ao conjunto de dados disponíveis $\{Z(x_i), i=1,n\}$, que combinados conforme a equação (1), resulta na estimativa do valor desconhecido $Z^*(X_0)$.

Conforme o domínio que se estima, tem-se as seguintes metodologias:

3.2.11.1 krigagem pontual: a krigagem pontual é utilizada para se estimar a variável de interesse em um ponto não amostrado. Contudo, a aplicação prática da krigagem pontual é voltada para a representação gráfica de dados geológicos, seja por mapas de isovalores, bem como por meio de superfícies tridimensionais, obtidas pela projeção perspectiva da malha regular.

3.2.11.2 krigagem de bloco: é uma técnica de estimativa do teor médio em painéis ou blocos de mineração. Trata-se portanto de uma técnica desenvolvida particularmente para mineração. A estimativa de painéis ou blocos é muito diferente da estimativa pontual, à medida que áreas ou volumes maiores devem ser representados pelos pontos de amostragem e, assim, é obvio que apenas a estimativa de um único ponto no centro daquelas unidades não será suficiente para representá-los, devendo haver uma diferença composicional entre o ponto estimado e a unidade lavrada. A essa diferença composicional denomina-se erro de estimativa que depende fundamentalmente da amostragem, e esta por sua vez é função da variabilidade natural do depósito que está se avaliando. Certamente o erro de estimativa associado à krigagem de bloco será menor que aquele associado à krigagem pontual (ponto calculado no centro do bloco para representá-lo).

3.2.11.3 krigagem simples (ks)

Considere uma superfície sobre a qual se observe alguma propriedade do solo, Z , em n pontos distintos, com coordenadas representadas pelo vetor \mathbf{x} . Assim, tem-se um conjunto de valores $\{z(\mathbf{x}_i), i=1, \dots, n\}$, onde \mathbf{x}_i , identifica uma posição em duas dimensões representada pelos pares de coordenadas (x_i, y_i) . Suponha que se objetive estimar o valor de Z no ponto \mathbf{x}_0 . O valor desconhecido de $Z(\mathbf{x}_0)$ pode ser estimado a partir de uma combinação linear dos n valores observados, adicionado a um parâmetro, λ_0 (Journel, 1988):

$$Z_{\mathbf{x}_0}^* = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{x}_i) \quad 34$$

Deseja-se um estimador não tendencioso, isto é,

$$E[Z_{\mathbf{x}_0} - Z_{\mathbf{x}_0}^*] = 0. \quad 35$$

Esta relação impõe que as duas médias sejam iguais, isto é,

$$E[Z_{\mathbf{x}_0}] = E[Z_{\mathbf{x}_0}^*]. \quad 36$$

$$\text{Com } E[Z_{\mathbf{x}_0}^*] = E\left[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{x}_i)\right] = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i E[Z(\mathbf{x}_i)]. \quad 37$$

O parâmetro λ_0 é obtido substituindo-se a Equação 37 em 36, produzindo:

$$\lambda_0 = E[Z(\mathbf{x}_0)] - \sum_{i=1}^n \lambda_i E[Z(\mathbf{x}_i)] \quad 38$$

Substituindo-se o valor de λ_0 na Equação 34, obtem-se o estimador:

$$Z_{\mathbf{x}_0}^* = E[Z(\mathbf{x}_0)] - \sum_{i=1}^n \lambda_i E[Z(\mathbf{x}_i)] + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{x}_i) \quad 39$$

O método de krigagem simples supõe que a média (m) é conhecida e constante a priori, então:

$$E[Z(\mathbf{x}_0)] = E[Z(\mathbf{x}_i)] = m \quad 40$$

Substituindo a Equação 40 em 41, o estimador de krigagem simples fica:

$$Z_{\mathbf{x}_0}^* = m + \sum_{i=1}^n \lambda_i [Z(\mathbf{x}_i) - m] \quad 41$$

Journel (1988) mostra que, minimizando a variância do erro ($\text{Var}[Z_{\mathbf{x}_0} - Z_{\mathbf{x}_0}^*]$), os pesos λ_i são obtidos a partir do seguinte sistema de equações, denominado sistema de krigagem simples:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_0) \quad \text{para } i = 1, \dots, n \text{ (n equações)} \quad 42$$

onde,

$C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ refere-se à função covariância correspondente a um vetor, \mathbf{h} , com origem em \mathbf{x}_i e extremidade em \mathbf{x}_j .

$C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_0)$ refere-se a função covariância correspondente a um vetor, \mathbf{h} , com origem em \mathbf{x}_i e extremidade no ponto a ser estimado \mathbf{x}_0 .

Por exemplo, para $n = 2$, o sistema de krigagem simples constitui-se de 2 equações a 2 incógnitas (λ_1, λ_2), a saber:

$$\begin{cases} \lambda_1 C_{11} + \lambda_2 C_{12} = C_{10} \\ \lambda_1 C_{21} + \lambda_2 C_{22} = C_{20} \end{cases}$$

A correspondente variância minimizada do erro, denominada variância de krigagem simples (σ_{ks}^2), é dada por (Journal, 1988):

$$\sigma_{ks}^2 = \text{Var}[Z_{\mathbf{x}_0} - Z_{\mathbf{x}_0}^*] = C(\mathbf{0}) - \sum_{i=1}^n \lambda_i C(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_0) \quad 43$$

Em notação matricial, o sistema de krigagem simples é escrito como

$$\mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{k} \Rightarrow \boldsymbol{\lambda} = \mathbf{K}^{-1} \cdot \mathbf{k}, \quad \text{com} \quad 44$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ C_{n1} & C_{n2} & \dots & C_{nn} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{k} = \begin{bmatrix} C_{10} \\ C_{20} \\ \vdots \\ C_{n0} \end{bmatrix}$$

onde, \mathbf{K} e \mathbf{k} são matrizes das covariâncias e $\boldsymbol{\lambda}$ o vetor dos pesos.

A variância de krigagem simples é dada por (Journal, 1988):

$$\sigma_{ks}^2 = C(\mathbf{0}) - \boldsymbol{\lambda}^T \cdot \mathbf{k} \quad 45$$

adicionado a um parâmetro, λ_0 (Journal, 1988):

$$Z_{\mathbf{x}_0}^* = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(\mathbf{x}_i) \quad 46$$

3.2.11.4 Krigagem Bayesiana

3.2.11.4.1 Abordagem Bayesiana

É importante observar que a crença a priori sobre um parâmetro pode desempenhar papel chave quando este é estimado. A teoria Bayesiana é o meio de considerar se formalmente tal informação a priori. Não só é útil por si mesma, com também aprofundada a compreensão das limitações da Estatística Clássica, especialmente a estimativa de máxima verossimilhança. Deve-se também observar que a inferência Bayesiana pode ser feita somente com a “informação a priori” sozinha, ou ambas, a priori e a informação. O termo “informação a priori” implica o tipo de informação com a qual o estatístico ou o pesquisador tem em um problema inferencial antes de alguma amostragem ser conduzida. Quando se inclui tal informação na análise, esta informação deverá ser expressa em termos probabilísticos. Entretanto, informação a priori frequentemente consiste de um julgamento pessoal de uma situação. Os Bayesianos seguem a interpretação subjetivas da probabilidade, a qual é definida para representar o grau de crença de um indivíduo em várias proposições.

3.2.11.4.2 Natureza da abordagem Bayesiana

Segundo BOX e TIAO (1973), a natureza da abordagem Bayesiana compreende, dentre outros, os seguintes aspectos:

3.2.11.4.3 Teorema de Bayes

Supõe-se que $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$ é um vetor de observações cuja distribuição de probabilidade $p(y/\theta)$ depende dos valores de K parâmetros $(\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k)$. Supõe-se também, que θ tem uma distribuição de probabilidade $p(\theta)$. Então,

$$p(y/\theta) p(\theta) = p(y, \theta) p(y) \quad 47$$

Dadas ás observações de y , a distribuição condicional de θ é dada pela expressão:

$$P(\theta / y) = \frac{p(y/\theta) p(\theta)}{p(y)} \quad 48$$

Na expressão (49) $p(y) = K^{-1}$ é chamada constante normalizadora e é dada por:

$$p(y) = E[p(y/\Theta)] = K^{-1} = \int p(y/\Theta)p(\Theta)d\Theta, \Theta \text{ contínuo}$$

$$p(y) = E[p(y/\Theta)] = K^{-1} = \sum p(y/\Theta)p(\Theta), \Theta \text{ discreto} \quad 49$$

onde a integral ou a soma é tomada sobre a amplitude admissível de Θ , e onde $E[f(\Theta)]$ é a esperança matemática de $f(\Theta)$ relativa à distribuição $p(\Theta)$. Dessa forma, pode-se escrever (49), alternativamente, pela seguinte expressão:

$$p(\Theta/y) = K.p(y/\Theta)p(\Theta) \quad 50$$

A expressão 48 ou equivalente em 50, é normalmente conhecida como o Teorema de Bayes. Nestas expressões, $p(\Theta)$, representa o que é conhecido sobre Θ sem o conhecimento dos dados, e é chamada distribuição a priori de Θ , ou a distribuição de Θ a priori. Por outro lado, $p(\Theta/y)$ indica o que é conhecido sobre Θ , dado o conhecimento das observações, e é chamada distribuição a posteriori de Θ , dado y . A posteriori $p(\Theta/y)$ encerra todo o conhecimento acerca de Θ . É com base nesta distribuição que os estatísticos bayesianos fazem todas as inferências sobre o vetor de parâmetros Θ . A quantidade K é meramente uma constante de normalização necessária para assegurar que a distribuição a posteriori, $p(\Theta/y)$, seja uma função de densidade própria, isto é, $\int p(y/\Theta)p(\Theta)d\Theta / K = 1$;

$$\sum p(y/\Theta)p(\Theta) / k = 1.$$

3.2.11.4.4 Teorema de Bayes e a Função de Verossimilhança

Dadas às observações y , $p(y/\Theta)$ em 50 pode ser considerada uma função não de y , mas, sim de Θ . Quando for assim considerada é chamada função de verossimilhança de Θ dado y e pode ser escrito como $L(\Theta/y)$. Assim, a fórmula de Bayes pode ser escrita pela seguinte expressão:

$$P(\Theta/y) \propto L(\Theta/y)p(\Theta) \quad 51$$

Em outras palavras, o teorema de Bayes diz que a distribuição de probabilidade de Θ a posteriori para um dado y é proporcional ao produto da verossimilhança pela distribuição a priori de Θ .

A Função de verossimilhança $L(\Theta)$ representa, na fórmula de Bayes, a função através da qual os dados modificam o conhecimento a priori sobre Θ . Ela pode ser compreendida como representante da informação sobre o parâmetro Θ

proveniente dos dados. Portanto, a função de verossimilhança conecta a priori com a posteriori, usando para isso os dados do experimento. Segundo Cordeiro (1987) a verossimilhança informa a ordem natural de preferência entre diversas possibilidades de Θ , é interpretada como função do vetor de parâmetros para um conjunto de dados fixos, servindo para medir o quanto aqueles dados suportam uma hipótese sobre Θ .

A função de verossimilhança é denotada por:

$$L(\theta) = \prod_{i=1}^n f(y_i; \theta) \quad 52$$

A predição e avaliação de tendências no estudo de modelos lineares necessitam do conhecimento dos componentes de variâncias e da covariância das observações. Os avanços da computação e o desenvolvimento de algoritmos iterativos na estimativa de parâmetros de modelos com dependência espacial permitem solucionar tais questões através do estimador de máxima verossimilhança.

Um conjunto de observações (z_1, z_2, \dots, z_n) geradas a partir de um modelo linear gaussiano pode ser explicada pela soma de três componentes: uma componente determinística, uma componente estocástica e um erro aleatório, como apresentado na equação 53

$$Z(x_i) = \mu(x_i) + S(x_i) + \varepsilon_i \quad : \quad i = 1, \dots, n \quad 53$$

Em que: $Z(x_i)$ é a variável resposta; $\mu(x)$ é uma função determinística que descreve a componente estrutural de Z em x ; $S(x_i)$ é a componente estocástica que explica o comportamento espacial autocorrelacionado da variável Z e segue um processo gaussiano com variância estruturada σ^2 e função de correlação $\rho(h) = \text{Corr}\{S(x), S(x-h)\}$, e $h_{ij} = \|x_i - x_j\|$ é a distância euclidiana entre dois pontos; ε é o erro aleatório não correlacionado espacialmente, mutuamente independente e identicamente distribuído, seguindo uma distribuição normal com média zero e variância τ^2 , ou seja, $N(0, \tau^2)$.

Uma formulação equivalente para o modelo gaussiano é expressa por:

$$z(x_i) = \mu + s(x_i) + \varepsilon_i \quad : \quad i = 1, \dots, n \quad 53.1$$

Em que: $z(x_i)$ é o valor observado no ponto x_i ; μ é uma constante determinística na condição da hipótese intrínseca; $S(x_i)$ é a componente estocástica e ε é o erro aleatório.

Por conveniência, escreve-se o modelo denotado na equação 54 em forma matricial. Portanto, a componente determinística $\mu(x)$ é representada pelo modelo linear:

$$\mu(x_i) = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} = \sum_{j=1}^k f_j(x_i) \beta_j \quad 54$$

Em que: \mathbf{X} é a matriz de valores das funções f_k . O conjunto de k funções (z_1, z_2, \dots, z_k) são variáveis referenciadas espacialmente que descrevem deterministicamente a variável Z a partir das coordenadas espaciais (x_1, x_2, \dots, x_k); $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor de parâmetros do modelo linear.

Na definição da matriz de covariância dos dados observados (z_1, z_2, \dots, z_n), utilizando-se o modelo de dependência espacial com o vetor de parâmetros $\theta = (\tau^2, \sigma^2, \phi)$, tendo-se a covariância matricialmente descrita por:

$$\text{Var}(Z) = K = \sigma^2 \Sigma + \tau^2 I \quad 55$$

Em que: σ^2 é a variância estruturada; Σ é a matriz de covariâncias baseada no modelo de dependência espacial; τ^2 é a variância dos erros aleatórios e I é a matriz identidade.

Segundo Diggle & Ribeiro Junior (2000), na estimação por máxima verossimilhança, assume-se que os dados seguem uma distribuição multivariada gaussiana, na qual a função de densidade de probabilidades da variável resposta é dada por:

$$f(\underline{z}) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2} |K|^{1/2}} e \left[-\frac{1}{2} (\underline{z} - \underline{u})^t K^{-1} (\underline{z} - \underline{u}) \right] \quad 56$$

Em que: \underline{z} vetor da variável resposta; \underline{u} vetor de média constante na condição da hipótese intrínseca; \mathbb{K} é igual a $\sigma^2 \Sigma + \tau^2 I$.

A função de distribuição segue uma distribuição conjunta multivariada normal definida pela equação:

$$Z \sim MNV \left(\underline{\mu}, \sigma^2 \Sigma + \tau^2 I \right) \quad 57$$

Em que: $\underline{\mu}$ é a média; I é o vetor unitário; σ^2 é a variância estruturada; Σ é a matriz de correlação definida conforme os parâmetros do modelo.

3.2.11.4.5 Critério de Informação de Akaike

Na avaliação do desempenho dos modelos, o Critério de Informação de Akaike - Akaike's Information Criterion (AIC), tem sido bastante utilizado para diferentes estruturas de covariâncias. Akaike (1973) relacionou a discrepância, existente entre o modelo verdadeiro e o modelo aproximado, com a máxima verossimilhança.

O princípio do Critério de Informação de Akaike é selecionar uma combinação de variáveis explanatórias e modelos para a função de correlação que minimize o valor do AIC. É importante observar que, em muitas situações clássicas, tais como regressão linear ou em modelos de séries temporais, o AIC não é uma condição consistente para a seleção de modelos. Ou seja, com o crescente aumento do tamanho das amostras, há uma alta probabilidade de que um modelo selecionado pelo AIC não corresponda ao verdadeiro modelo.

O AIC é definido por:

$$AIC = -2l + 2p \quad 58$$

Em que: l é o logaritmo da verossimilhança e p é o número de parâmetros do modelo considerado.

O uso do critério de informação de Akaike constitui-se em importante instrumento para a escolha do melhor modelo para ajuste do semivariograma, eliminando a subjetividade que permeia o processo e influenciando diretamente na melhoria da confiança dos valores interpolados (Vendrusculo, 2003). De acordo com Webster (1985), o melhor ajuste teórico do semivariograma experimental é aquele que apresenta o menor valor de AIC.

3.2.11.4.6 Distribuição subjetiva a priori

Como já foi ressaltado, este é o único elemento novo na análise Bayesiana com relação à estatística clássica. O único compromisso é que esta distribuição represente o conhecimento sobre a quantidade desconhecida, antes de se realizar um experimento. Seja Θ uma quantidade desconhecida e considere os seus possíveis valores. Se ela for discreta, a probabilidade a priori de cada valor possível de Θ pode ser avaliada associando-se probabilidade a cada valor possível de Θ . No caso contínuo, GAMERMAN e MIGON (1993) apresentam a abordagem do histograma. Inicialmente divide-se o espaço de variação de Θ em intervalos e especifica-se as probabilidades a priori de Θ pertencer a cada um dos intervalos. Com isso, constrói-se um histograma para Θ e procura-se a partir daí ajustar uma curva contínua ao histograma, que será tomada como a densidade a priori de Θ . Essas idéias podem conduzir a uma abordagem sistemática para determinação de distribuições a priori. O caso mais importante é o da distribuição conjugada se basear no núcleo de sua verossimilhança. Vale salientar que famílias conjugadas naturais são úteis por facilitar a interpretação dos parâmetros da priori.

3.2.11.4.7 Contexto Bayesiano:

Considere um conjunto de observações (y_1, y_2, \dots, y_k) referenciadas espacialmente, e que descrevem deterministicamente a variável y a partir das coordenadas espaciais (x_1, x_2, \dots, x_k) . O conjunto das variáveis aleatórias é considerado um processo estocástico, descrito da forma:

$$\{Y(x_i): x_i \in T \subset \mathbb{R}^2 : i = 1, \dots, k\} \quad 59$$

Em que: $Y(x_i)$ a variável aleatória, que varia continuamente em T , T é a região de estudo, x_i é a posição da variável, considerada fixa, \mathbb{R}^2 é o espaço bidimensional.

Segundo Almeida & Ribeiro Jr. (1996), para cada ponto amostrado e referenciado x , pode-se avaliar uma determinada característica de interesse $y(x)$, realização da variável aleatória Y no ponto x .

A teoria dos modelos desenvolvida por Henderson foi baseada em modelos lineares que contêm efeitos fixos e aleatórios (Henderson, 1975).

Um modelo linear gaussiano para quaisquer locações tais que $x_i \in T$ é denotado por:

$$y = X\beta + S(x) + \varepsilon \quad 60$$

Em que: y é um vetor de observações, X é uma matriz de incidência dos efeitos fixos, β é um vetor de efeitos fixos, representa os efeitos das covariáveis X sobre a média de y , $S(x)$ é uma matriz de incidência dos efeitos aleatórios, ε é um vetor de resíduos. Esta componente descreve um erro de medida, caso sejam feitas diversas observações, o resultado vai flutuar em torno do verdadeiro valor (Cressie, 1993). Na literatura geoestatística, essa componente é conhecida como efeito pepita.

O modelo linear pode ser reescrito como:

$$Y = X\beta + Zu + \varepsilon \quad 60.1$$

Em que: y é o vetor de observações; X é a matriz de incidência dos efeitos fixos; β é o vetor de efeitos fixos; Z é uma matriz de incidência dos efeitos aleatórios; u é um vetor de efeitos aleatórios a serem preditos e ε é um vetor de resíduos.

Geralmente assume-se que $\beta \sim N(0, \sigma_\beta^2)$, onde σ_β^2 é uma quantidade fixa conhecida. Quanto maior o valor de σ_β^2 , mais vaga a informação a priori sobre β , $u \sim N(0, \psi \sigma^2)$, em que σ^2 é a variância dos efeitos aleatórios e ψ é a matriz de vizinhança, que possui elementos que descrevem os coeficientes das covariâncias entre os efeitos aleatórios. Assume-se também que ε , o erro aleatório, $\varepsilon \sim N(0, I\tau^2)$, em que τ^2 é a variância residual e I é a matriz identidade.

O critério para a estimação de β foi proposto por Henderson, de maneira a minimizar o erro quadrático da predição, conduzindo ao melhor estimador linear de β , do inglês Best Linear Unbiased Estimator – BLUE, o qual é expresso por:

$$\hat{\beta} = \left(X^T (\sigma^2 \Sigma + \tau^2 I)^{-1} X \right)^{-1} X^T (\sigma^2 \Sigma + \tau^2 I)^{-1} y \quad 61$$

sendo $\sigma^2 \Sigma + \tau^2 I$ a matriz de covariâncias de y .

Na especificação da metodologia bayesiana comumente associa-se as distribuições a priori para os parâmetros ao vetor $\theta = (\beta, \sigma^2, \phi, \tau^2)$. Para os parâmetros ϕ , σ^2 e τ^2 , geralmente associa-se uma priori gama com determinada média e variância, enquanto o parâmetro β segue uma distribuição normal.

Os parâmetros ϕ representam aqueles que estão de acordo com a função de correlação escolhida para o modelo. Uma priori usualmente escolhida para o parâmetro ϕ é uma distribuição gama.

Seguindo o teorema de Bayes (Box & Tiao, 1973), a distribuição posteriori de θ é dada por:

distribuição posteriori \propto verossimilhança \times distribuição priori

Assumindo-se que a distribuição condicional dos dados (y) segue uma distribuição normal multivariada em que cada componente tem a forma:

$$(Y | \beta, u, \sigma^2) \sim N(X\beta + Zu, I\sigma^2) \quad 62$$

Então, a função de verossimilhança é representada por:

$$L(y | \beta, u, \sigma^2, \tau^2) \propto \left(\frac{1}{\omega^2}\right)^{\frac{n}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2\omega^2}(y - X\beta - Yu)^T (y - X\beta - Zu)\right\} \quad 63$$

Em que: ω^2 é a matriz de variâncias e covariâncias das n observações.

Na definição das distribuições a priori, admitindo-se que não haja informações prévias à respeito dos efeitos fixos, assume-se que $P(\beta) \sim$ constante e para a variância σ^2 . Pode-se considerar a priori uma distribuição qui-quadrado inversa dada por:

$$P(\sigma^2) \propto \left(\frac{1}{\omega_u^2}\right)^{\left(\frac{v_u}{2}+1\right)} \exp\left[-\frac{v_u s_u^2}{2\omega_u^2}\right] \quad 64$$

Para a variância τ^2 também pode-se considerar uma distribuição qui-quadrado inversa dada por:

$$P(\tau^2) \propto \left(\frac{1}{\omega_\varepsilon^2}\right)^{\left(\frac{v_\varepsilon}{2}+1\right)} \exp\left[-\frac{v_\varepsilon s_\varepsilon^2}{2\omega_\varepsilon^2}\right] \quad 65$$

Supondo-se $v_u = v_\varepsilon = -2$ e também que $s_u^2 = s_\varepsilon^2 = 0$, tem-se para as variâncias σ^2 e τ^2 funções constantes caracterizando prioris não-informativas, dadas por:

$$\text{Para a variância } \sigma^2: \sigma^2 \propto \frac{1}{\omega_u} \quad 66$$

$$\text{Para a variância } \tau^2: \tau^2 \propto \frac{1}{\omega_\varepsilon} \quad 67$$

Para os efeitos aleatórios considera-se uma distribuição Normal como priori dada por:

$$P(u) \propto \left(\frac{1}{\omega_u^2} \right)^{\left(\frac{q}{2} \right)} \exp \left(- \frac{1}{2\omega_u^2} (u^t \psi^{-1} u) \right) \quad 68$$

Em que: σ^2 é a variância dos efeitos aleatórios e ψ é a matriz de vizinhança que possui elementos que descrevem os coeficientes das covariâncias entre os efeitos aleatórios. Aplicando o teorema de Bayes, o produto da função de verossimilhança pelas distribuições prioris de cada parâmetro simultaneamente resulta na distribuição posteriori conjunta, dada por:

$$P(u, \beta, \sigma^2, \tau^2 | y) \propto L(y | \beta, u, \sigma^2, \tau^2) P(\beta) P(\sigma^2) P(\tau^2) P(u) \quad 69$$

Substituindo-se, tem-se:

$$P(u, \beta, \sigma^2, \tau^2 | y) \propto \left(\frac{1}{\omega_\epsilon^2} \right)^{\left(\frac{v_\epsilon + n + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_\epsilon^2} [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) + v_\epsilon s_\epsilon^2] \right\} \quad 70$$

$$\left(\frac{1}{\omega_u^2} \right)^{\left(\frac{v_u + q + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_u^2} [(u^t \psi^{-1} u) + v_u s_u^2] \right\}$$

A partir da distribuição posteriori conjunta, podem ser obtida as distribuições condicionais para cada parâmetro: σ^2 , τ^2 , β e u .

Para o parâmetro σ^2 , tem-se:

$$P(\sigma^2 | u, \beta, \tau^2, y) \propto \left(\frac{1}{\omega_u^2} \right)^{\left(\frac{v_u + q + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_u^2} [(u^t \psi^{-1} u) + v_u s_u^2] \right\} \quad 71$$

Com isso, a variância de σ^2 segue uma distribuição gama inversa dada por:

$$(\sigma^2 | u, \beta, \tau^2, y) \sim GI \left(\frac{v_u + q}{2}, \frac{u^t \psi^{-1} u + v_u s_u^2}{2} \right) \quad 72$$

Para o parâmetro τ^2 tem-se:

$$P(\tau^2 | u, \beta, \sigma^2, y) \propto \left(\frac{1}{\theta_\varepsilon^2} \right)^{\left(\frac{v_\varepsilon + n + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\theta_\varepsilon^2} [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) + v_\varepsilon s_\varepsilon^2] \right\} \quad 73$$

A variância de τ^2 também segue uma distribuição gama inversa dada por:

$$(\tau^2 | u, \beta, \sigma^2, y) \sim GI \left(\frac{v_\varepsilon + n}{2}, \frac{(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) + v_\varepsilon s_\varepsilon^2}{2} \right) \quad 74$$

Para o parâmetro β retorna-se à função de verossimilhança, e tem-se:

$$P(u, \beta, \sigma^2, \tau^2 | y) \propto \left(\frac{1}{\theta_\varepsilon^2} \right)^{\left(\frac{v_\varepsilon + n + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\theta_\varepsilon^2} [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) + v_\varepsilon s_\varepsilon^2] \right\}$$

75

$$\left(\frac{1}{\theta_u^2} \right)^{\left(\frac{v_u + q + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\theta_u^2} [(u^t \psi^{-1} u) + v_u s_u^2] \right\}$$

Fazendo;

$$D = (u^t \psi^{-1} u) + v_u s_u^2$$

$$\begin{aligned} B &= (y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) = [(y - Zu)^t - (X\beta)^t] [(y - Zu) - (X\beta)] = \\ &= (y - Zu)^t (y - Zu) - (y - Zu)^t (X\beta) - (X\beta)^t (y - Zu) + (X\beta)^t (X\beta) \end{aligned} \quad 76$$

Definindo C como:

$$C = - (y - Zu)^t (X\beta) - (X\beta)^t (y - Zu) + (X\beta)^t (X\beta) =$$

$$- (y - Zu)^t X\beta - \beta^t X^t (y - Zu) + X^t \beta^t (X\beta) \quad 77$$

Expandindo C tem-se:

$$C = \left[\beta - (X^t X)^{-1} X^t (y - Zu) \right]^t (X^t X) \left[\beta - (X^t X)^{-1} X^t (y - Zu) \right] - (y - Zu)^t X (X^t X) X^t (y - Zu) \quad 78$$

Retornando para B tem-se:

$$B = \left[(y - Zu)^t (y - Zu) \right] + C \quad 79$$

$$B = \left[(y - Zu)^t (y - Zu) \right] - \left[(y - Zu)^t X (X^t X)^{-1} X^t (y - Zu) \right] + \quad 80$$

$$\left[\beta - (X^t X)^t X^t (y - Zu) \right]^t (X^t X)^t \left[\beta - (X^t X)^t X^t (y - Zu) \right]$$

Ou ainda, para B tem-se:

$$B = \left[(y - Zu)^t \left[1 - X (X^t X)^t X^t \right] (y - Zu) \right] + \quad 81$$

$$\left[\beta - (X^t X)^{-1} X^t (y - Zu) \right]^t (X^t X) \left[\beta - (X^t X)^t X^t (y - Zu) \right]$$

Daí, a distribuição posteriori condicional para o parâmetro β é dada por:

$$P(\beta | u, \sigma^2, \tau^2, y) \propto \left(\frac{1}{\omega_\epsilon^2} \right)^{\left(\frac{p}{2} \right)} \quad 82$$

$$\exp \left\{ - \frac{1}{\omega_\epsilon^2} \left[\beta - (X^t X)^{-1} X^t (y - Zu) \right]^t \left(\frac{X^t X}{\omega_\epsilon^2} \right) \left[\beta - (X^t X)^{-1} X^t (y - Zu) \right] \right\}$$

Ou seja, o parâmetro β da distribuição condicional posteriori segue uma distribuição normal denotada por:

$$(\beta | u, \sigma^2, \tau^2, y) \sim N \left[(X^t X)^{-1} X^t (y - Zu); (X^t X)^{-1} \omega_\epsilon^2 \right] \quad 83$$

Então à função de verossimilhança para obter-se o parâmetro u , tem-se:

$$P(u, \beta, \sigma^2, \tau^2 / y) \propto \left(\frac{1}{\omega_\varepsilon^2} \right)^{\left(\frac{v_\varepsilon + n + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_\varepsilon^2} [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) + v_\varepsilon s_\varepsilon^2] \right\}$$

84

$$\left(\frac{1}{\omega_u^2} \right)^{\left(\frac{v_u + q + 2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_u^2} [(u^t \psi^{-1} u) + v_u s_u^2] \right\}$$

Quando: $K = \tau^2 / \sigma^2$, a verossimilhança pode ser reescrita como:

$$P(u, \beta, \sigma^2, \tau^2 / y) \propto \left(\frac{1}{\omega_\varepsilon^2} \right)^{\left(\frac{n+2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_\varepsilon^2} [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu)] \right\}$$

85

$$\left(\frac{1}{\omega_u^2} \right)^{\left(\frac{q+2}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_u^2} [(u^t (\psi^{-1} K) u)] \right\}$$

$$P(u, \beta, \sigma^2, \tau^2 / y) \propto \left(\frac{1}{\omega_\varepsilon^2} \right)^{\left(\frac{n+2}{2} \right)} \left(\frac{1}{\omega_u^2} \right)^{\left(\frac{q+2}{2} \right)}$$

=

86

$$\exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_\varepsilon^2} [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu) + [(u^t (\psi^{-1} K) u)]] \right\}$$

Quando:

$$E = [(y - X\beta - Zu)^t (y - X\beta - Zu)] + [(u^t (\psi^{-1} K) u)] \quad 87$$

Reescrevendo E tem-se:

$$E = [(y - X\beta)^t - (Zu)^t] [(y - X\beta) - (Zu)] + [(u^t (\psi^{-1} K) u)] \quad 88$$

$$E = (y - X\beta)^t (y - X\beta) - (y - X\beta)^t Zu - u^t Z^t (y - X\beta) + u^t Z^t Zu + u^t (\psi^{-1} K) u \quad 89$$

$$\text{Quando: } F = - (y - X\beta)^t Zu - u^t Z^t (y - X\beta) + u^t Z^t Yu + u^t (\psi^{-1} K) u \quad 90$$

$$F = \left[u - (y^t y + \psi^{-1} K)^{-1} z^t (y - X\beta) \right]^t (y^t y + \psi^{-1} K) \left[u - (y^t y + \psi^{-1} K)^{-1} z^t (y - X\beta) \right] - \left[y^t (y - X\beta) \right]^t (y^t y + \psi^{-1} K)^{-1} \left[y^t (y - X\beta) \right]$$

91

Retornando para E, tem-se

$$E = (y - X\beta)^t (y - X\beta) + F$$

92

Daf:

$$E = (y - X\beta)^t (y - X\beta) - \left[y^t (y - X\beta) \right]^t (y^t y + \psi^{-1} K)^{-1} \left[y^t (y - X\beta) \right] + \left[u - (y^t y + \psi^{-1} K)^{-1} z^t (y - X\beta) \right]^t (y^t z + \psi^{-1} K) \left[u - (y^t y + \psi^{-1} K)^{-1} z^t (y - X\beta) \right]$$

93

A distribuição posteriori condicional para o parâmetro u é dada por:

$$P(u | \sigma^2, \tau^2, \beta, y) \propto \left(\frac{1}{\omega_\varepsilon^2} \right)^{\left(\frac{n}{2} \right)} \exp \left\{ - \frac{1}{2\omega_\varepsilon^2} \left[u - (Z^T Z + \psi^{-1} K)^{-1} Z^T (y - X\beta) \right]^t \left(\frac{Z^T Z + \psi^{-1} K}{\omega_\varepsilon^2} \right) \left[u - (Z^T Z + \psi^{-1} K)^{-1} Z^T (y - X\beta) \right] \right\}$$

94

Ou seja, o parâmetro u da distribuição condicional posteriori segue uma distribuição normal denotada por:

$$(u | \sigma^2, \tau^2, \beta, y) \sim N \left\{ (Z^T Z + \psi^{-1} K)^{-1} Z^T (y - X\beta); (Z^T Z + \psi^{-1} K)^{-1} \omega_\varepsilon^2 \right\}$$

95

3.2.11.4.8 Validação cruzada

Para a comparação dos métodos de interpolação alguns critérios são utilizados, como por exemplo: quadrado média do erro (Warrick et al., 1988), quadrado da soma dos erros (Laslett et al., 1987) e coeficiente de correlação entre os valores observados e estimados obtidos pela Validação Cruzada (cross-validation) proposto por Leenaers et al.(1990).

O processo de validação cruzada, de acordo com Myers (1997), é bastante simples: remove-se um dado do conjunto de dados amostrais e, usando-se um estimador e função ponderada relacionada com a distância, estima-se o valor retirado, utilizando-se as amostras remanescentes. Tem-se, agora, dois valores para o mesmo ponto, o real e o estimado. O erro da

estimação pode ser calculado pela diferença entre o valor real e o estimado, sendo repetido para cada local amostrado.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

Os dados foram provenientes de medições de condutividade hidráulica na parte saturada do solo. Foram utilizados programas computacionais, tanto para a análise estatística descritiva como para a análise geoestatística.

4.1 Localização da Área Experimental

O estudo da condutividade hidráulica foi efetuado na Fazenda Nossa Senhora do Rosário, propriedade situada no município de Pesqueira, região Agreste do Estado de Pernambuco, na bacia hidrográfica do Rio Ipanema e situada entre as coordenadas geográficas 8° 15' e 8° 30' de Latitude Sul, 31° 45' e 37° 00' de Longitude Oeste de Greenwich e 650 m de altitude.

Segundo a classificação de KÖPPEN, o clima da região é semi-árido quente tipo estepe, com uma precipitação média anual de 730 mm (Hargreaves, 1974). A temperatura média mensal oscila entre de 20 a 30°C.

Foram ensaiados 29 pontos quanto a sua condutividade hidráulica, no período de novembro de 2004 á abril de 2005. Destes 29 pontos, e com 59 já existentes, foi possível mapear toda região do vale aluvial, segui abaixo o mapa esquemático das instalações dos piezômetros tanto na longitudinal bem como na transversal ao longo de todo o vale figura 01. Na figura 02 temos fotos de piezômetros instalados na fazenda Nossa Senhora do Rosário, já na figura 03 temos o processo de instalações de piezômetros utilizando trado.

Mapa esquemático das seções transversais

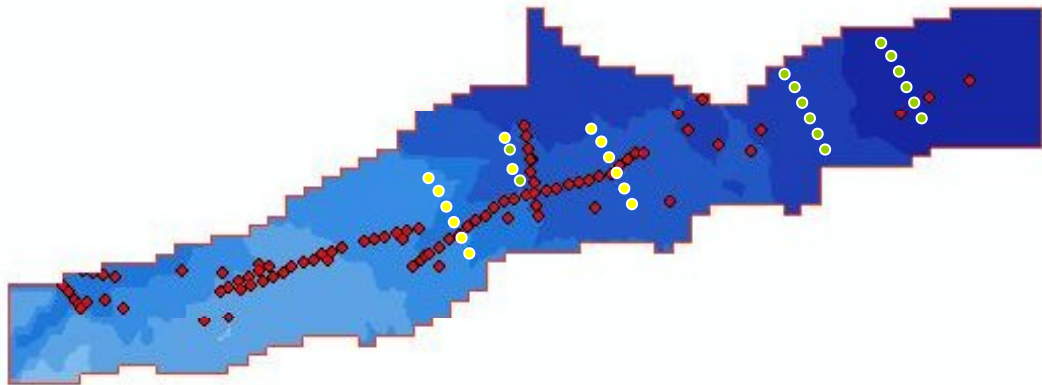


Figura 01 – Mapa das instalações dos piezômetros. Em vermelho instalados anteriormente; verde, Pz instalados; em amarelo, Pz complementares.



Figura 02 – Piezômetros para testes hidráulicos.



Figura 03 – Escavação utilizando trado em campo para locação dos piezômetros.

4.2 Estimativa da condutividade hidráulica saturada

Vários são os métodos de campo para avaliação da condutividade hidráulica saturada. Dentre os métodos de avaliação local da condutividade, merecem destaque os “slug tests”.

Os “Slug-tests” são métodos para avaliação “in-situ” da condutividade hidráulica de um aquífero, a partir de medidas em piezômetros ou em furos de sondagem. Tais testes são adequados tanto para piezômetros pontuais, os quais estão abertos apenas em um pequeno intervalo, quanto para piezômetros completamente abertos, os quais expõem a espessura total da formação geológica. A estimativa da condutividade hidráulica pode ser obtida a partir da taxa de recuperação do nível d’água após a retirada instantânea de um volume de água, ou por intermédio do rebaixamento da superfície livre decorrente de um volume introduzido.

Segundo Montenegro e Montenegro (2004), o método é capaz de produzir estimativas de condutividade hidráulica com alta precisão. A precisão do teste depende da ausência de zonas de desenvolvimento e desmoronamento nas vizinhanças da posição de teste, bem como do método escolhido para sua análise e interpretação. Em função de sua simplicidade e baixo custo, o método pode ser realizado em várias locações. Desse modo, representa uma técnica importante para análise da variabilidade espacial de propriedades hidráulicas.

No tocante à análise matemática dos testes, o método de Hvorslev (1951), foi escolhido conforme recomendação de Montenegro e Montenegro (2004). O método de Hvorslev (1951) será detalhado a seguir.

Usualmente, o volume de água deslocado pelos “slug-tests” é reduzido, conseqüentemente pouco perturbando a superfície freática do aquífero, Sua formulação geral pode ser expressa como:

$$K = \frac{A}{F(t_2 - t_1)} \ln\left(\frac{h_1}{h_2}\right) \quad 48$$

Em que: **K** a condutividade hidráulica saturada da região testada [LT^{-1}]; **A** representa a área transversal do furo de sondagem [L^2]; **F** é um fator de forma [L], que depende da geometria e das condições de contorno do teste (Figura 4); **h₁** é a carga medida no tempo t_1 após início do teste [L]; **h₂** representa a carga medida no tempo t_2 após o início do teste [L]. O fator de forma **F** foi discutido por Hvorslev (1951) após análise de soluções analíticas para várias geometrias de teste. As configurações possíveis estão reproduzidas em Montenegro e Montenegro (2004).

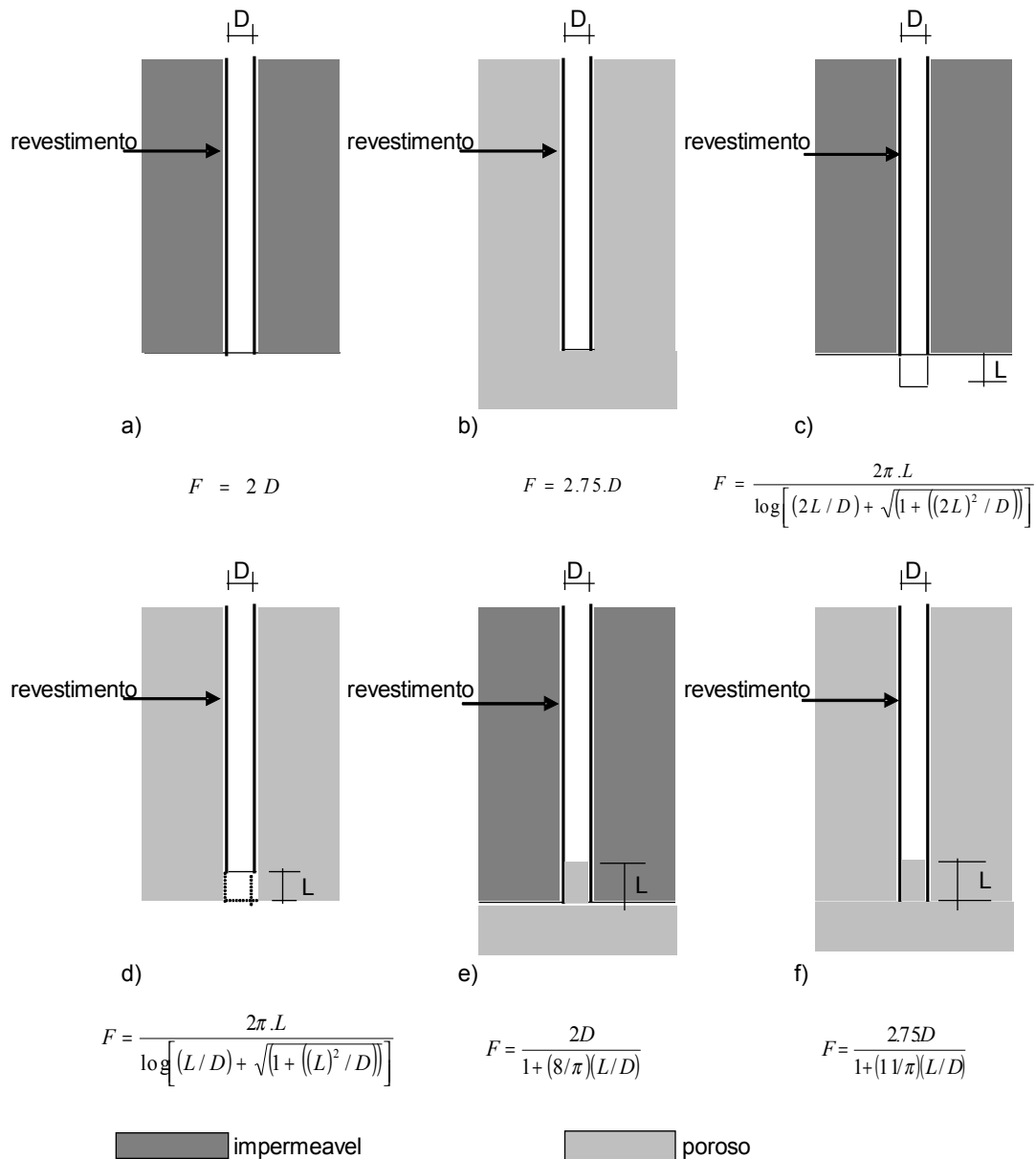


Figura 04 – Fatores de forma **F** para metodologia de Hvorslev (1951). Fonte: BS 5930 (1981), adaptado por Montenegro e Montenegro (2004).

Testes como o da Figura 04 foram reproduzidos e replicados em transecção no vale aluvial, permitindo inferir o semi-variograma dos logaritmos da condutividade hidráulica saturada. Para a presente dissertação será utilizada uma equação simplificada para o cálculo da condutividade hidráulica, segundo Fetter (1994).

$$K: \left(\frac{r^2 \ln \frac{R}{L_e}}{2L_e T_0} \right) \dots \dots \dots 4.9. \quad 49$$

Em que: K – condutividade hidráulica (L/T); r – raio do envoltório do poço (L); R – raio do crivo do poço (L); L_e – comprimento do crivo do poço (L); T₀ – tempo de leva para o nível da água subir ou baixar a 37% da variação inicial (T) (representa 37% de recuperação).

Para esse estudo, os seguintes valores foram utilizados:

R= r = 0,94cm; L_e=16cm

5. Resultados e Discussão

5.1 Análise Estatística Descritiva

A Tabela 1 apresenta a estatística descritiva dos logaritmos das medidas de condutividade hidráulica (ver anexo), em cm/s, obtidas em campo.

Tabela 1. Estatística Clássica.

	Erro		Desvio								
Média	Padrão	Mediana	Padrão	Variância	Curtose	Assimetria	Intervalo	Mín	Máx.	Soma	Pontos
2.49	0.11	2.43	0.63	0.40	-0.85	-0.01	2.12	1.38	3.50	72.20	98

As medidas estudadas foram: média, mediana, desvio padrão, variância, coeficiente de variação, assimetria e curtose.

A normalidade da variável estudada foi testada através do programa estatístico Minitab, por meio do teste KS proposto por Kolmogorov-Smirnov e do teste W proposto por Shapiro-Wilk.

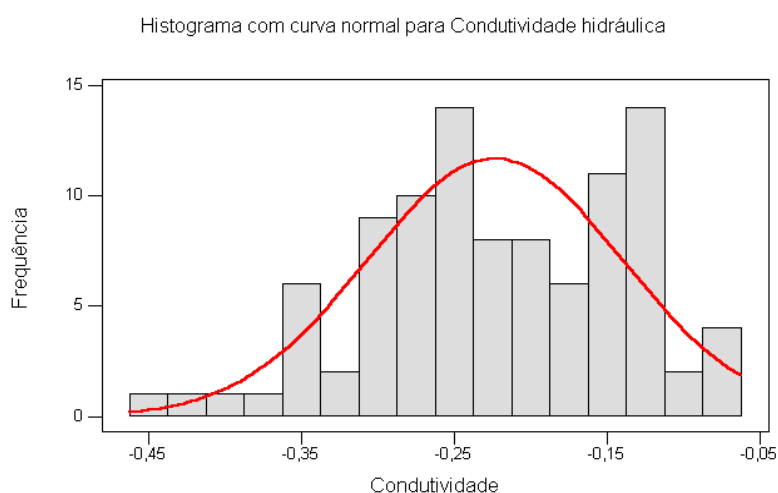


Figura 05 – Histograma com curva normal para o logaritmo condutividade hidráulica.

A Figura 06 apresenta o teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov, teste KS, obtido através do software Minitab, para os dados observados aplicados ao nível de significância de 4.8%. Reforça-se a aceitação da hipótese de log normalidade dos dados da condutividade hidráulica.

Teste de normalidade para condutividade hidráulica

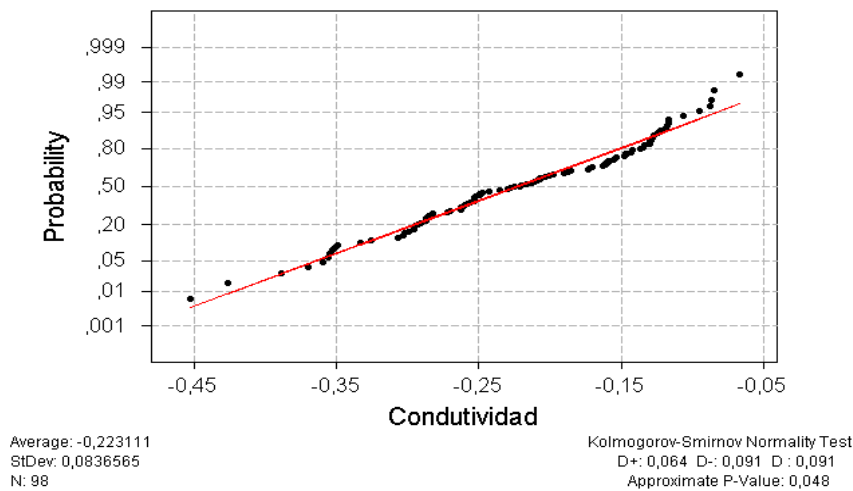


Figura 06 – Teste de normalidade de Kolmogorov-Smirnov para o logaritmo da condutividade hidráulica.

A Figura 07 apresenta o teste de normalidade de Shapiro-Wilk., teste W, obtido através do software Minitab, para os dados observados aplicados ao nível de significância de 9%.

Teste de normalidade para condutividade hidráulica

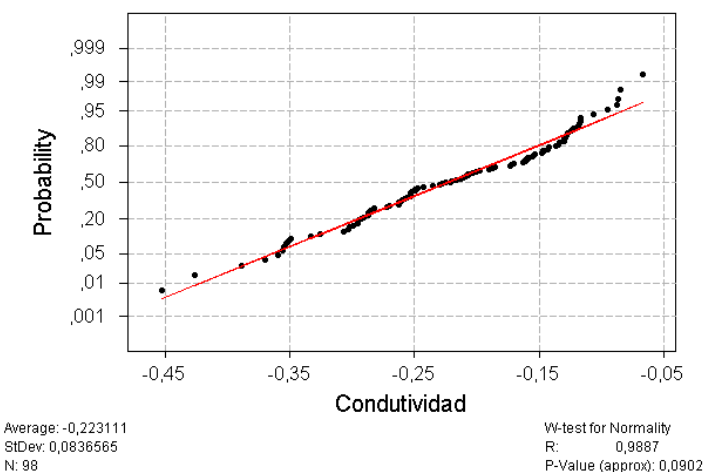


Figura 07 – Teste de log normalidade de Shapiro-Wilk para condutividade hidráulica.

Os gráficos dos testes de normalidade da condutividade hidráulica teste KS e teste W mostram a maioria dos valores das observações sobre a reta de tendências, com poucos pontos periféricos.

5.2 Análise de Tendências

As medidas de dispersão média e a variância não são suficientes para medir a continuidade espacial ou avaliar as hipóteses de estacionaridade. Tem-se ainda que avaliar a presença de tendência linear da dependência espacial, a qual indica a não existência de estacionaridade.

As figuras mostram a dispersão dos dados de condutividade hidráulicas em relação às coordenadas x e y.

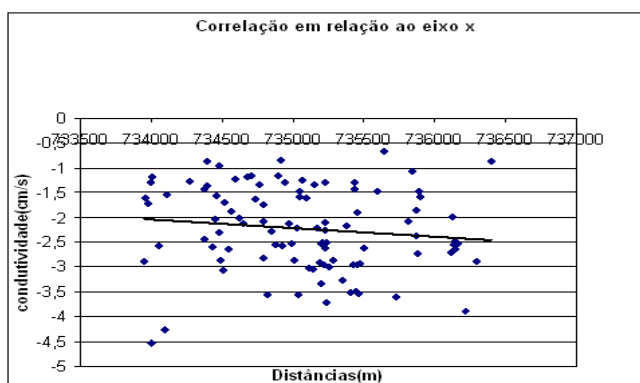


Figura 08 – Dispersão da condutividade hidráulica na direção x.

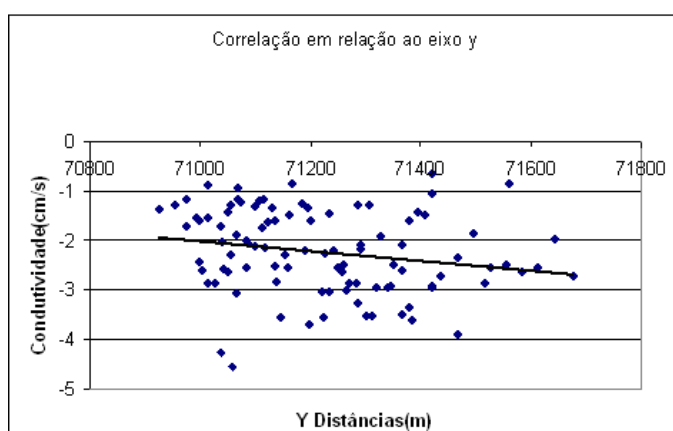


Figura 09 – Dispersão da Condutividade hidráulica na direção y.

Os dados apresentam-se mais dispersos na direção x que na direção y. Observou-se ainda a existência de baixas correlações entre a condutividade hidráulica e as direções x e y. Tem-se $R^2_x = 0,0164$ e $R^2_y = 0,0429$.

De acordo com Landim (1998), somente os valores de correlação maiores do que 0,70 são relevantes na existência de tendência nos dados.

5.3 Análise Geoestatística, Verossilhança e Análise Bayesiana

A análise geoestatística foi procedida a partir da construção do semivariograma experimental.

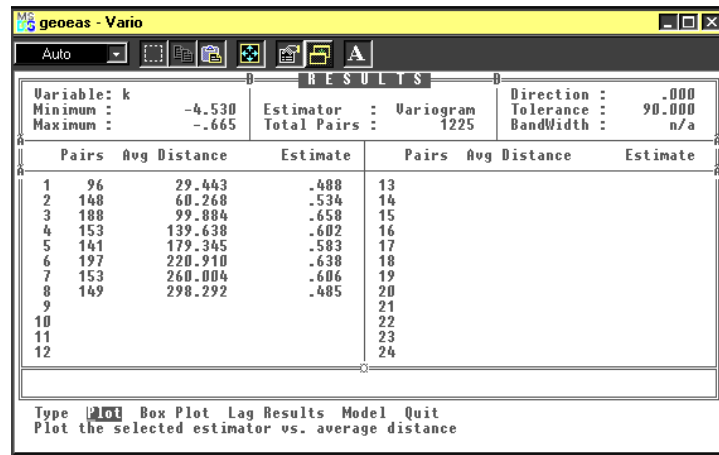


Figura 10 – Construção do semivariograma.

Três modelos teóricos foram analisados: o modelo gaussiano, exponencial, o esférico conforme apresentado nas Figuras 10, 11 e 12, respectivamente.

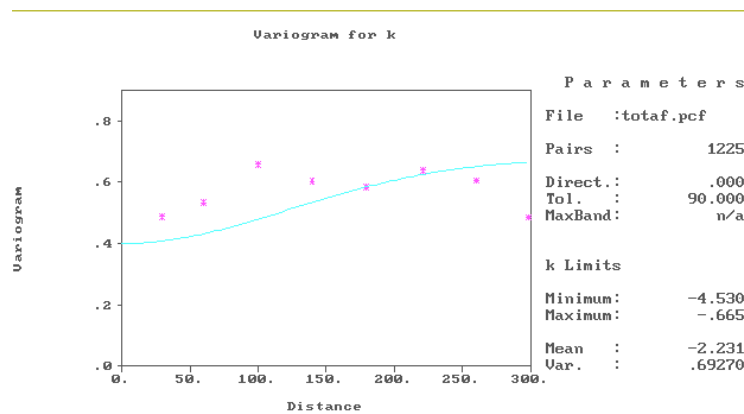


Figura 11 – Modelo Gaussiano.

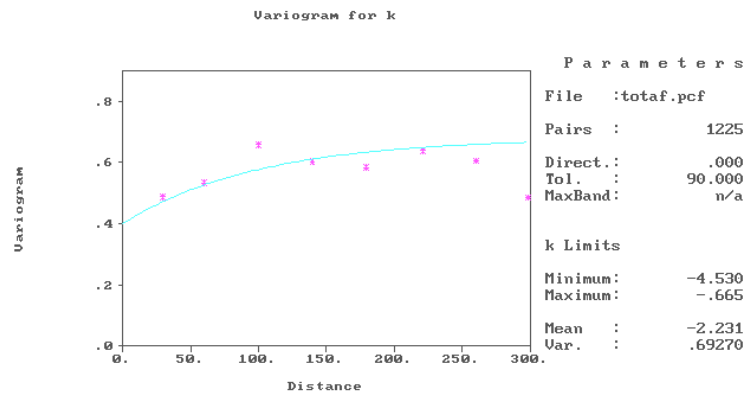


Figura 12 – Modelo Exponencial.

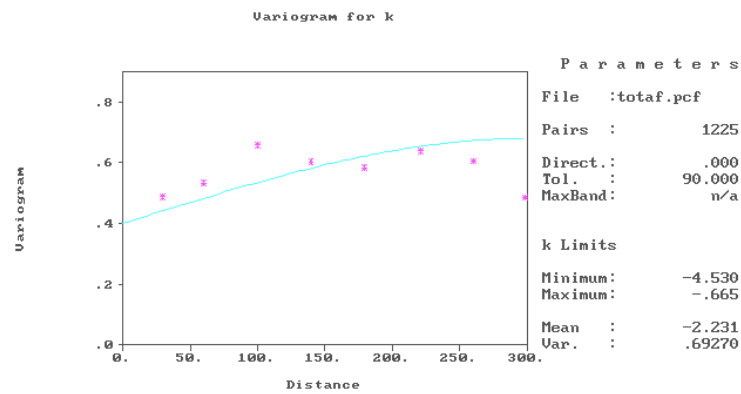


Figura 13 – Modelo Esférico

Foi plotado o semivariograma experimental e ajustado aos modelos teóricos dos quais o modelo exponencial teve melhor ajuste devido a menor diferença entre Z^* (escore) e Z (estimativa), ou seja, quanto menor esta diferença em módulo, melhor o ajuste. A dependência espacial, segundo a classificação proposta por Cambardella et al. (1994), considera o efeito pepita como uma porcentagem do patamar e permite comparar o grau de dependência espacial da variável estudada. Segundo esta classificação, com base na relação efeito pepita(C_0) versus patamar($C_0 + C_1$), a dependência espacial considerada é representada por:

$$25\% < \frac{C_0}{(C_0 + C_1)} < 75\%$$

Para o modelo escolhido (Figura 12) tem-se o efeito pepita de 0.4 e patamar de 0.6. Daí, o grau de dependência é de 66,6%, mostrando uma fraca dependência espacial da condutividade hidráulica. A estimativa da log verossimilhança foi de -120.2 e o critério de AIC foi de 248,3 para o modelo exponencial (ver anexo para saída do programa geo R).

De posse dos modelos teóricos, foi realizada a validação cruzada dos semivariogramas, e escolhido o modelo exponencial, conforme apresentado nas Figuras 14 a 16.

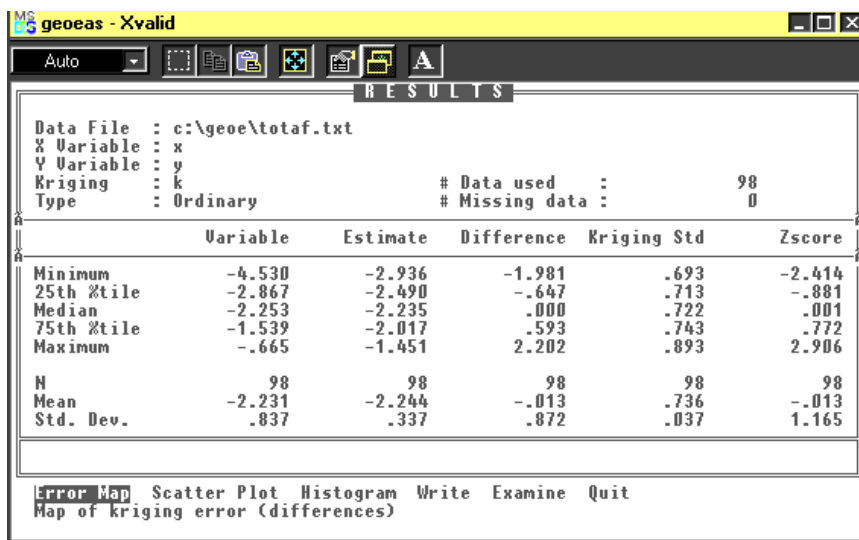


Figura 14 – Resultados para validação cruzada (Modelo esférico).

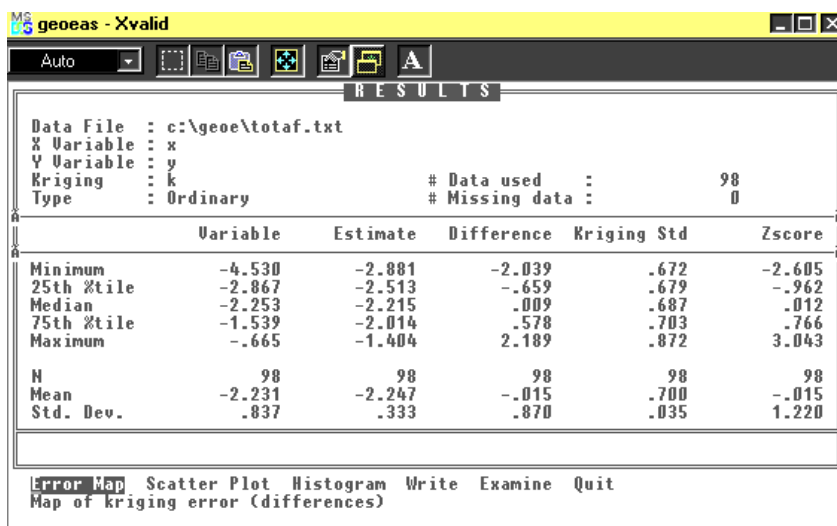


Figura 15 – Resultados da validação cruzada (modelo Gaussiano).

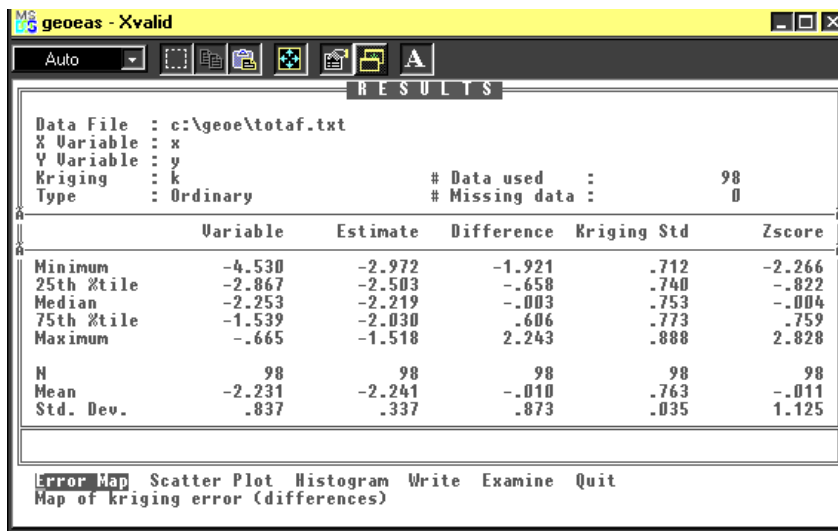
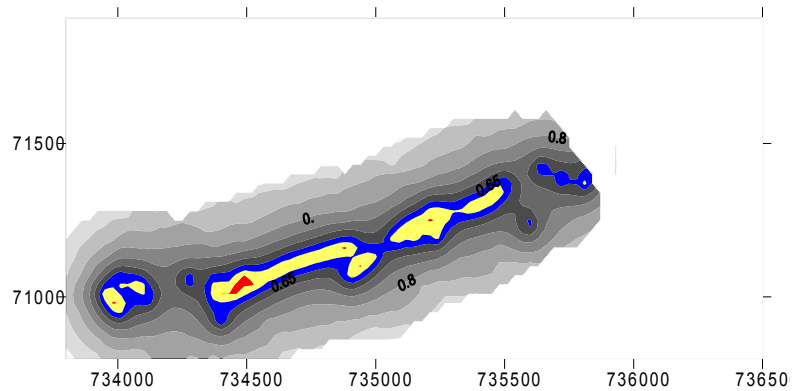
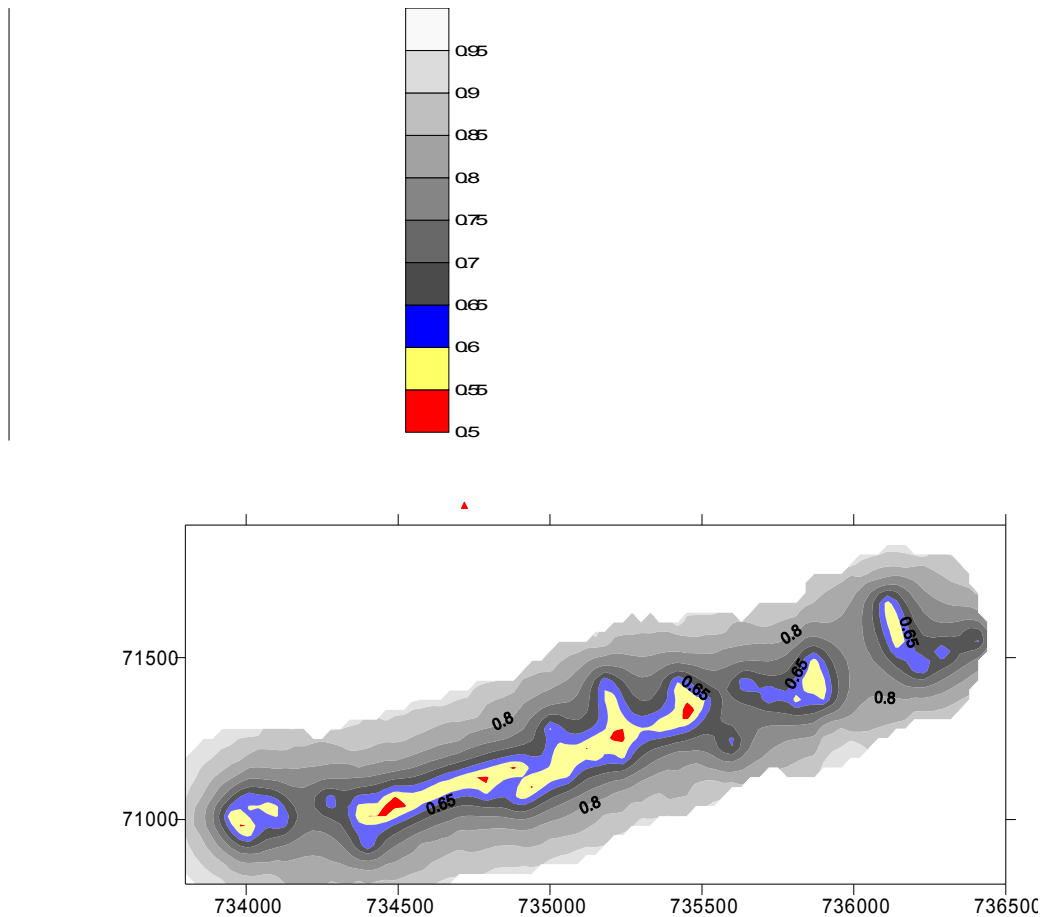


Figura 16 – Resultados para validação cruzada (Modelo exponencial).

Após a validação do semivariograma, foi feita a krigagem, onde foi confeccionado o mapa da condutividade hidráulica da Fazenda diminuídas as incertezas em relação às estimas de krigagem (Figuras 17a e 17b).





Figuras 17a e 17b – Mapas de krigagem do desvio padrão da estimativa.

A Figura 18 mostra as posteriores das distribuições das funções de probabilidade para os parâmetros β, ϕ, σ^2 , podendo-se notar que a natureza das priores não foi mudada, de forma que para β uma Normal, ϕ, σ^2 gamas inversas.

Se for adotado o critério de dependência na análise Bayesiana, pode-se notar uma menor independência nos dados. A Tabela 02 apresenta as estatísticas da análise Bayesiana. Os semivariogramas bayesianos foram similares para moda, média e mediana, que estão plotados junto com os teóricos clássicos e experimentais na Figura 19.

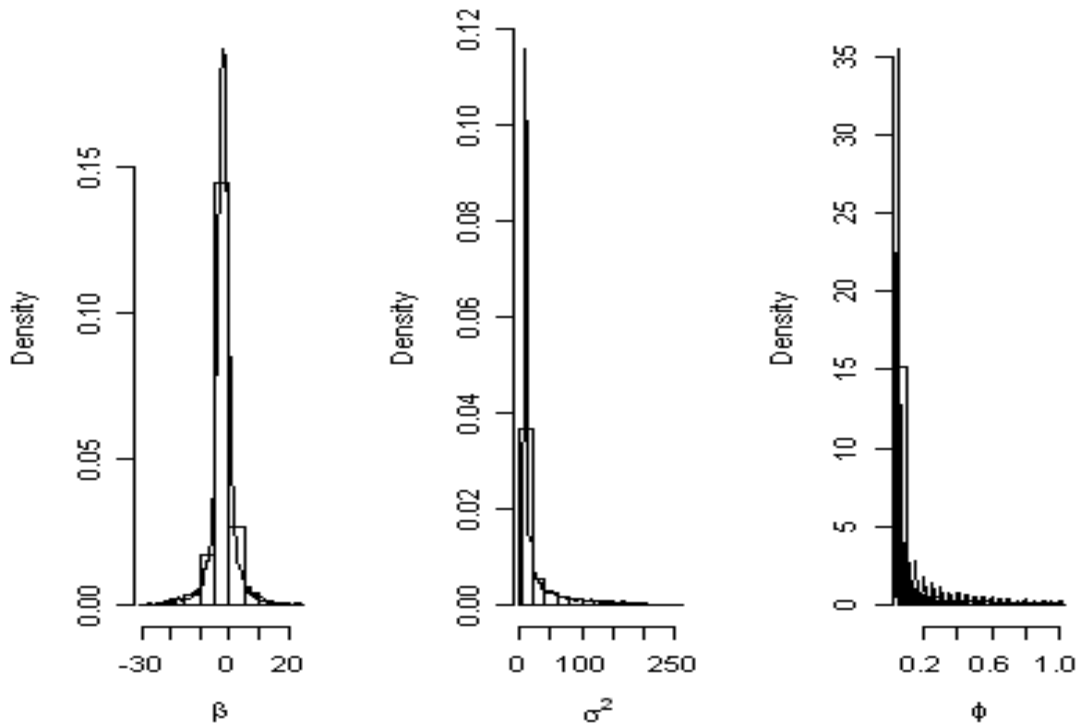


Figura 18 – Densidades para os parâmetros β , σ^2 , ϕ .

Tabela 2. Estatística Bayesiana.

β	σ^2	ϕ
-2.221	0.0834	0.013

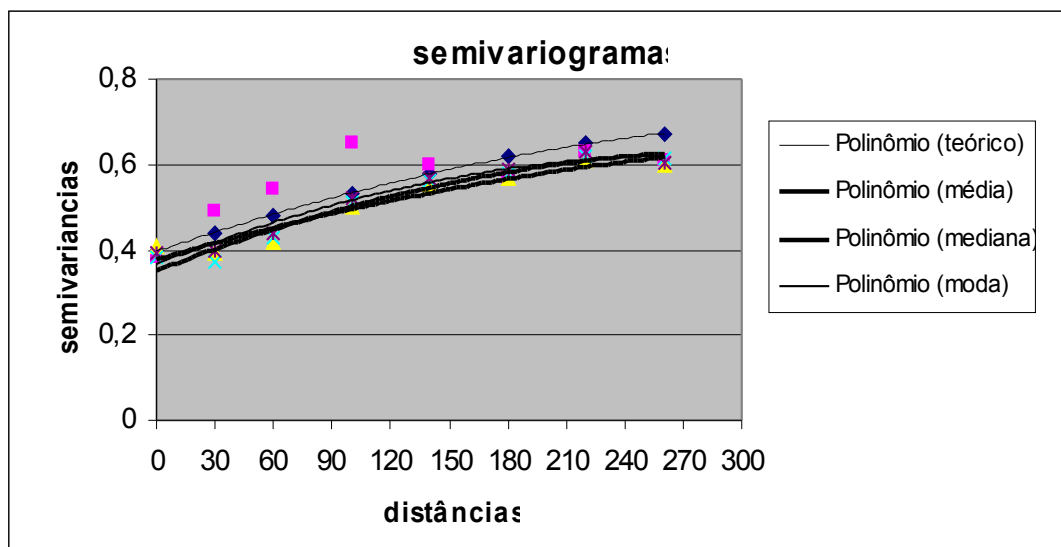


Figura 19 – Semivariâncias experimentais e teóricas, para as abordagens clássica e bayesiana.

Na Figura 20, pode-se encontrar o mapeamento do logaritmo da condutividade hidráulica, utilizando o semivariograma teórico exponencial, que foi testado e validado através da metodologia clássica, bem como comprovado pela metodologia bayesiana.

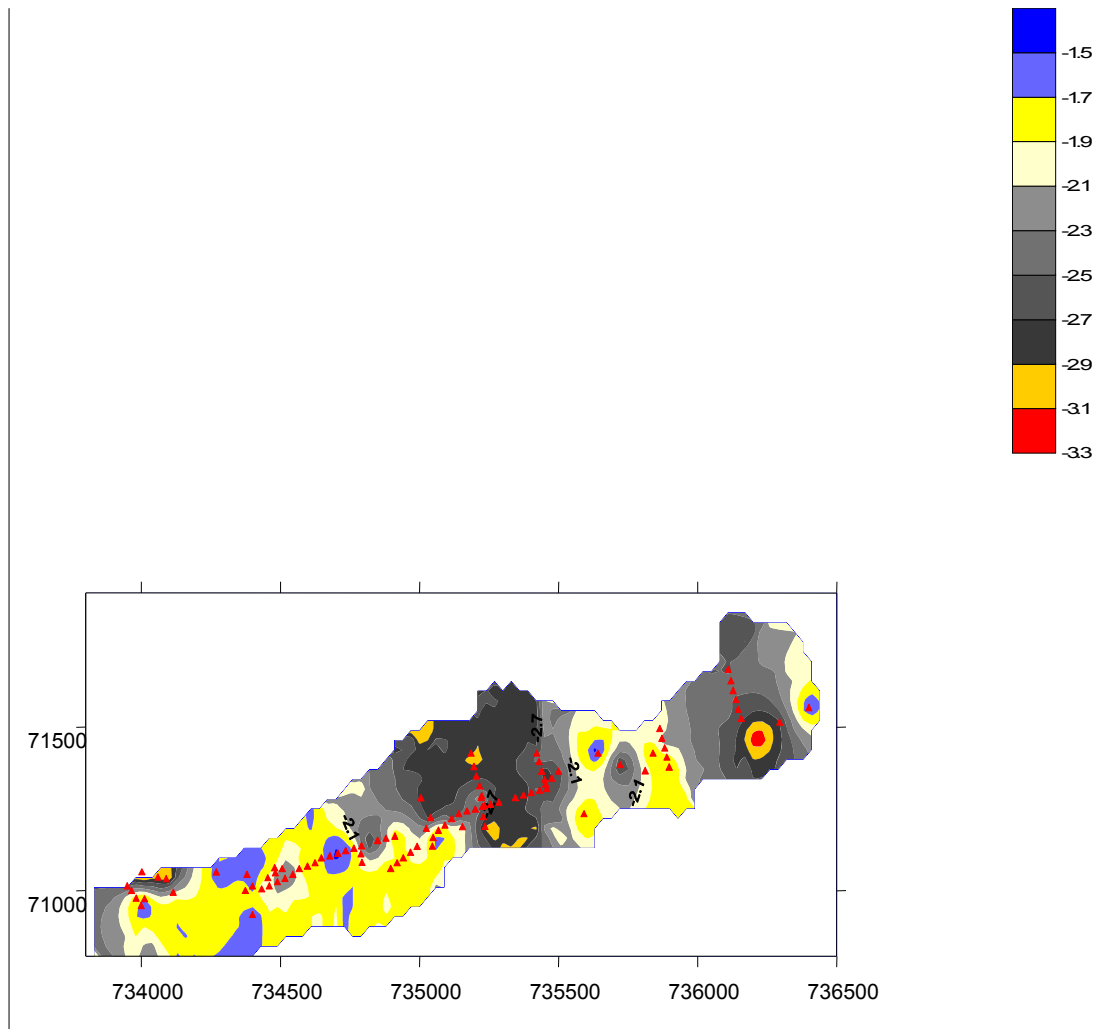


Figura 20 – Mapa de Krigagem do log K.

Cabe salientar que semivariâncias experimentais obtidas com a malha completa deste estudo é consistente com as semivariâncias estimadas por Montenegro (1997), utilizando apenas pontos na direção longitudinal. A Figura 21 ilustra este resultado.

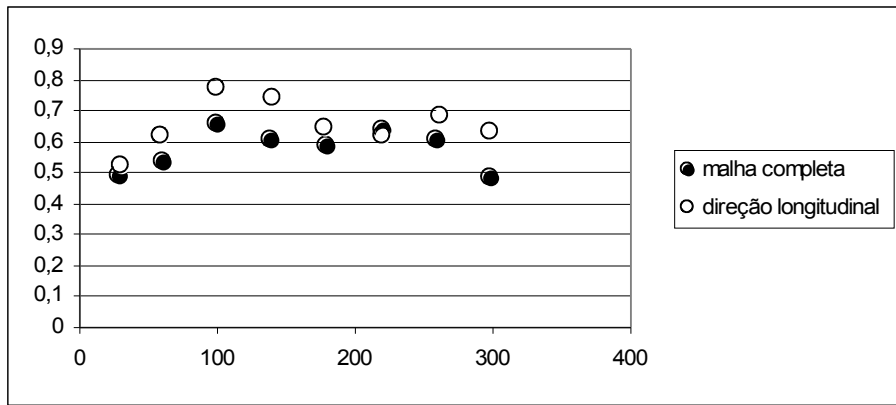


Figura 21 – Semivariograma Exponencial teórico e semivariâncias experimentais (clássicos).

6 CONCLUSÕES

- A estrutura de variabilidade espacial da condutividade hidráulica no vale aluvial na Fazenda Nossa Senhora do Rosário pode ser descrita por um modelo exponencial;
- A adoção de pontos de amostragem adicionais reduziu as incertezas no mapeamento, porém não alterou a estimativa da estrutura de variabilidade previamente inferida;
- Os semivariogramas ajustados apresentaram diferenças não significativas na validação da metodologia geoestatística e na abordagem bayesiana.
- A análise de tendência dos dados de condutividade hidráulica indicou a inexistência de tendência relevante.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AKAIKE, H. Information theory and an extension of maximum likelihood principle. In Petrox, B. And Caski, F., editors, second International symposium on Information Theory, 267p, 1973.

ALLAN D, WOODBURY e E.A.SUDICKY. The Geoestatistical Characteristics of the Borden Aquifer. Water Resources Research, v. 27, n.2, p 535 – 546, 1991.

ANDRIOTTI, J. L. Fundamentos de estatística e geoestatística. São Paulo: Unisinos, 2004.165p.

ANTELMAN, G. Elementary Bayesian Statistic. Cheltenham: Edward Elgar, 1997. 112p.

ANDERSON, T. An Introduction to Multivariate Statistical Analysis. John Wiley & Sons, inc. 1984. 374p.

BOUWER, H.; RICE, R. C. A Slug test for determining Hydraulic conductivity of unconfined aquifers with completely or partially penetrating wells. Water Resources Research, v. 12, n.3, p.423-428, 1976.

BURROUGH, P., Principles of geographical information systems for land resources assessment. Oxford: Clarendon Press, 1987. 193p.

BOX, G.E.P.;TIAO,G.C. Bayesian Inference in Statistical Analysis. New York: Addison Wesley. 1973. 588p.

CAMBARDELLA, C.A.; MOORMAN, T.B.; NOVAK, J.M.;PARKIN, T.B.; KERLEN, D.L.; TURCO, R.F.; KONOPKA, A.E. Field scale variability of soil properties in Central Iowa soils. Soil Science Society America Journal, Madison, v.47, n.2, p.1501-1511, 1994.

CORDEIRO, G. M. – On the corrections to the likelihood ratio statistics. Biometrika, v 74, n.3, p.265-274, 1987

CHOU, YA-LUN. Statistical analysis. Second edition. Reino Unido. 1984. 828p.

CLARK, B.; WASSERMAN, L. Non – informative priors and nuisance parameters. Journal of the Statistical Association, v, 88, n.4, p. 1427 – 1432.

CRESSIE, N.A.C. () Statistics for Spatial Data. Revised Edition. John Wiley & Sons, Inc. 1993. 900p.

ENGLUND, E. & SPARKS, A. – GEO-EAS 1.2.1., Geostatistical Environmental Assessment Software. User's Guide. United States Environmental Protection Agency, 1991. 185 p.

FISHER, R. A., *The design of experiments*. Oliver and Boyd, Edinburgh, 1935.252p,

FREEZE, R. A.; CHERRY, J.A. Groundwater. Prentice-Hall Inc. USA. 1979. 604p,.

HARGREAVES, G.; Climatic zoning for agricultural production in Northeast Brazil. Farm Water Management Research Program, Utah State University, 1974. 6p.

HARTLEY, H. O., RAO, J. N. K., Maximum-likelihood estimation for the mixed analysis of variance model. Biometrika, v.54, n.3, p.93-108, 1967.

HVORSLEV, M.J. Time lag and soil permeability in groundwater measurements, Bull. 36, U. S. Army Corps of Eng. Waterways Exp. Stn., Vicksburg, Miss., 50p, 1951

ISAAKS, E., SRIVASTAVA, R. An Introduction to Applied Geostatistics. Oxford University Press, 1989. 572p.

JEFFREYS, H. Theory of probability. 3. ed. Oxford: Clarendon Press, 1961, 578p.

JOURNEL, A. G., HUIJBREGTS, C. Mining Geostatistics. Academic Press, 1978. 207p.

JOURNEL, A. G.. Nonparametric estimation of spatial distributions. Mathematical Geology. v.15, n.3, p. 445-468. 1983

KLEINMAN, K.P.; IBRAHIM, J.G.. A Semiparametric Bayesian Approach to the Random Effects Model. Biometrics, v.54, n.3, p. 921 – 938, 1998.

LANDIM, P. M. B. Análise Estatística de Dados Geológicos. São Paulo, 1998. 226p.

LEANDRO, R. C. Introdução à Inferência Bayesiana. (seminário apresentado no curso de pós-graduação em estatística e experimentação agrônômica). Piracicaba: ESALQ, 1994, 50p.

MATHERON, G. Trité de Geoestatistique Appliqueé. Technip. 2v., The Theory of Regionalized Variables and its Applications. Centre Geoestatistique (Fontainebleau, France), 1971.

MOHANTY, B. P.; ANKENY, M. D; HORTON, R; KANWAR, R. S. Spatial analysis of hydraulic conductivity measured using disc infiltrometers, *Water Resources Research*, v.30, n.3, p.2489–2498, 1994.

MATHERON, G. *Principles of geostatistics*. Economic Geology, vol. 58, n.2, p.1246-1266, 1963.

MATHERON, G. *The theory of regionalized variables and its application*. Les Cahiers du centre de Morphologie Mathématique, fas.5, C.G. Fontainebleu. 1971. 211p

MILLHAM. N. P., HOWES, B. L. A comparison of methods to determine K in a shallow coastal aquifer. *Ground Water*, v. 33, n.1, p.49-53, 1995.

MONTENEGRO, M. G. S.; MONTENEGRO A. A. A.; MACKAY, R. Caracterização da Variabilidade Espacial de Parâmetros Hidráulicos em Solos Aluviais no Estado de Pernambuco. RBRH. v. 4, n.2. 1999.

RIBEIRO JR, P.J. and Diggle, P.J. (2001) geoR: A Package For Geostatistical Analysis. R-NEWS,1, n. 2, 1518.

RIBEIRO JR, P.J. Métodos geoestatísticos no estudo da variabilidade espacial dos parâmetros do solo, 1995, Piracicaba. 99p. Dissertação (Mestrado) - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", Universidade de São Paulo.

RIBEIRO Jr., P. J. & DIGGLE, P. J. A package for geostatistical analysis. R-NEWS, v.1, n.2, p.15-18. 2001

SCHIMIDT, A.M.(2001) Bayesian Spatial Interpolation of environmental monitoring Stations. Tese de Doutorado – Department of Probability and Statistics, University of Sheffield.

SILVA, VÁLTER DE ANDRADE, Uma abordagem Bayesiana para estimativa da densidade populacional de animais de vida livre. Recife, 2002. 44p. Dissertação (Mestrado em Biometria). Universidade Federal de Pernambuco.

SURFER for Windows (2002) – Golden Software, Inc., versão 8.0.

Van ROOY, D. Conditional stochastic simulation of groundwater contamination- a case study. Technical University of Denmark, Series Paper 42, 154 p, 1987.

VENDRUSCULO, L.G.; Uso de Índice de desempenho e do critério de Akaike para ajuste de modelo de semivariograma. Embrapa, comunicado Técnico 58, 5p, 2003.

WEBSTER, R. Quantitative spatial analysis of soil in the field. Advances in Soil Science, New York, p.1-70. 1985.

8 Anexo

Dados da condutividade totais (Longitudinal e transversal)

Condutividade Hidráulica (cm/s)

736110	71676	-2,7046
736120	71642	-1,9767
736128	71612	-2,5359
736138	71584	-2,6279
736146	71554	-2,4751
736156	71526	-2,5303
735864	71496	-1,8576
735872	71466	-2,3571
735882	71436	-2,7158
735890	71408	-1,4748
735898	71378	-1,5897
735005	71284	-2,8506
735040	71224	-3,5545
735025	71190	-2,204
735049	71162	-1,4717
735047	71136	-1,5953
734790	71112	-1,7343
734793	71086	-2,0698
735186	71420	-2,9045
735196	71380	-3,3343
735204	71350	-2,4983
735216	71320	-2,9507
735224	71290	-2,0913
735234	71260	-2,4916
735422	71420	-2,9519
735430	71394	-1,4292
735440	71366	-3,4917
735450	71340	-2,9455
735458	71312	-3,5242
733950	71015	-2,86934
733965	71000	-1,61186
733982	70977	-1,72024
734000	70955	-1,28417
734002	71058	-4,53
734060	71042	-2,57675
734090	71037	-4,26
734507	71067	-3,06702
734482	71055	-2,29303

734455	71040	-2,03236
734400	71014	-0,87193
734374	71000	-2,42794
735500	71365	-2,60607
735475	71345	-2,92372
735454	71327	-1,9041
735432	71307	-1,28554
735402	71300	-3,50585
735374	71292	-2,16197
735345	71285	-3,25885
735286	71270	-2,84894
735256	71264	-2,99268
735227	71257	-2,62269
735222	71285	-1,29524
735230	71226	-2,25313
735236	71197	-3,69897
735201	71250	-2,53224
735171	71243	-2,20796
735142	71235	-3,03245
735116	71220	-3,01728
735092	71200	-1,61089
735068	71185	-1,24378
734992	71135	-2,52158
734968	71117	-2,13036
734942	71100	-1,30385
734920	71085	-2,55627
734896	71068	-1,1713
734850	71154	-2,27482
734822	71145	-3,54668
734792	71138	-2,82102
734765	71130	-1,3359
734735	71122	-1,62925
734707	71115	-1,17166
734678	71107	-1,18732
734647	71100	-2,11126
734625	71085	-2,00218
734598	71075	-1,22233
734568	71067	-1,87393
734545	71050	-2,6269
734517	71038	-1,7027
734490	71027	-2,86678

734460	71015	-1,55683
734433	71005	-2,59843
734880	71160	-2,53626
734912	71167	-0,84851
735642	71420	-0,66475
735722	71385	-3,59346
735812	71367	-2,07248
736217	71467	-3,88606
736295	71515	-2,87031
734012	70975	-1,18064
734115	70995	-1,53857
734270	71057	-1,27376
734380	71050	-1,418
734480	71070	-0,95424
734400	70927	-1,36831
736400	71560	-0,86327
735840	71420	-1,06852
735592	71235	-1,46478
735155	71195	-1,3497

Entrada com os dados no programa geo R:

```
"y98" <-  
structure(list(coords =  
matrix(c(0.611,0.612,0.6128,0.6138,0.6146,0.6156,0.5864,0.5872,0.5882,0.589,  
0.5898,0.5005,0.504,0.5025,0.5049,0.5047,0.479,0.4793,0.5186,0.5196,0.5204,0.  
5216,0.5224,0.5234,  
0.5422,0.543,0.544,0.545,0.5458,0.395,0.3965,0.3982,0.4,0.4002,0.406,0.409,0.4  
507,0.4482,0.4455,  
0.44,0.4374,0.55,0.5475,0.5454,0.5432,0.5402,0.5374,0.5345,0.5286,0.5256,0.52  
27,0.5222,0.523,  
0.5236,0.5201,0.5171,0.5142,0.5116,0.5092,0.5068,0.4992,0.4968,0.4942,0.492,  
0.4896,0.485,  
0.4822,0.4792,0.4765,0.4735,0.4707,0.4678,0.4647,0.4625,0.4598,0.4568,0.4545  
,0.4517,0.449,  
0.446,0.4433,0.488,0.4912,0.5642,0.5722,0.5812,0.6217,0.6295,0.4012,0.4115,0.  
427,0.438,0.448,  
0.44,0.64,0.584,0.5592,  
0.5155,0.1676,0.1642,0.1612,0.1584,0.1554,0.1526,0.1496,0.1466,0.1436,0.1408  
,0.1378,0.1284,  
0.1224,0.119,0.1162,0.1136,0.1112,0.1086,0.142,0.138,0.135,0.132,0.129,0.126,  
0.142,0.1394,  
0.1366,0.134,0.1312,0.1015,0.1,0.0977,0.0955,0.1058,0.1042,0.1037,0.1067,0.10  
55,0.104,0.1014,0.1,  
0.1365,0.1345,0.1327,0.1307,0.13,0.1292,0.1285,0.127,0.1264,0.1257,0.1285,0.1  
226,0.1197,0.125,  
0.1243,0.1235,0.122,0.12,0.1185,0.1135,0.1117,0.11,0.1085,0.1068,0.1154,0.114  
5,0.1138,0.113,  
0.1122,0.1115,0.1107,0.11,0.1085,0.1075,0.1067,0.105,0.1038,0.1027,0.1015,0.1  
005,0.116,0.1167,  
0.142,0.1385,0.1367,0.1467,0.1515,0.0975,0.0995,0.1057,0.105,0.107,0.0927,0.1  
56,0.142,0.1235,  
0.1195),ncol=2),  
  data = c(-2.70460,-1.97600,-2.53590,-2.62790,-2.47510,-2.53030,  
-1.85760,-2.35710,  
-2.71580,  
-1.47480,  
-1.58970,-2.85060,-3.55450,-2.20400,-1.47170,-1.59530,-1.73430,-2.06980,  
-2.90450,-3.33430,  
-2.49830,-2.95070,-2.09130,-2.49160,-2.95190,-1.42920,-3.49170,-2.94550,  
-3.52420,-2.86934,  
-1.61186,-1.72024,-1.28417,-4.53000,-2.57675,-4.26000,-3.06702,-2.29303,  
-2.03236,-0.87193,  
-2.42794,-2.60607,-2.92372,-1.90410,-1.28554,-3.50585,-2.16197,-3.25885,  
-2.84894,-2.99268,  
-2.62269,-1.29524,-2.25313,-3.69897,-2.53224,-2.20796,-3.03245,-3.01728,  
-1.61089,-1.24378,  
-2.52158,-2.13036,-1.30385,-2.55627,-1.17130,-2.27482,-3.54668,-2.82102,  
-1.33590,-1.62925,  
-1.17166,-1.18732,-2.11126,-2.00218,-1.22233,-1.87393,-2.62690,-1.70270,
```

```
-2.86678,-1.55683,
-2.59843,-2.53626,-0.84851,-0.66475,-3.59346,-2.07248,-3.88606,-2.87031,
-1.18064,-1.53857,
-1.27376,-1.41800,-0.95424,-1.36831,-0.86327,-1.06852,-1.46478,-1.34970,),
  cov.model = "exponential", nugget = 0, cov.pars = c(1.,
  0.29999), kappa = 0.5, lambda=1), class="geodata")
```

Saída da Verrosimilhança e da Krigagem Bayesiana

krige.bayes: no prediction locations provided.

Only samples of the posterior for the parameters will be returned.

The following object(s) are masked from package:utils :

data

The following object(s) are masked from package:base :

kappa

krige.bayes: computing the discrete posterior of phi/tausq.rel

krige.bayes: computing the posterior probabilities.

Number of parameter sets: 21

1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21,

krige.bayes: sampling from posterior distribution

krige.bayes: sample from the (joint) posterior of phi and tausq.rel

	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
phi	0.05	0.1	0.15	0.2	0.25	0.3	0.35	0.4	0.45	0.5	0.55	0.6	0.65	0.7
tausq.rel	0.00	0.0	0.00	0.0	0.00	0.0	0.00	0.0	0.00	0.0	0.00	0.0	0.00	0.00
0.0														
frequency	3265.00	537.0	254.00	157.0	122.00	107.0	72.00	70.0	61.00	45.0	44.00			
42.0	38.00	38.0												
	16	17	18	19	20	21								
phi	0.75	0.8	0.85	0.9	0.95	1								
tausq.rel	0.00	0.0	0.00	0.0	0.00	0								
frequency	21.00	32.0	22.00	26.0	23.00	24								

krige.bayes: done!

```
> par(mfrow=c(1,3))
```

```
> hist(bsp4)
```

```
> ml<-likfit(y98,ini=c(0,1))
```

The following object(s) are masked from package:utils :

data

The following object(s) are masked from package:base :

kappa

likfit: likelihood maximisation using the function optim.

likfit: Use control() to pass additional arguments for the maximisation function.

For further details see documentation for optim.

likfit: It is highly advisable to run this function several times with different initial values for the parameters.

likfit: WARNING: This step can be time demanding!

Erro em optim(par = ini, fn = .negloglik.GRF, method = "L-BFGS-B", lower = lower.optim, :

valor não finito fornecido por optim

> ml<-likfit(y98,ini=c(1,0.5))

The following object(s) are masked from package:utils :

data

The following object(s) are masked from package:base :

kappa

likfit: likelihood maximisation using the function optim.

likfit: Use control() to pass additional arguments for the maximisation function.

For further details see documentation for optim.

likfit: It is highly advisable to run this function several times with different initial values for the parameters.

likfit: WARNING: This step can be time demanding!

likfit: end of numerical maximisation.

> ml

likfit: estimated model parameters:

beta tausq sigmasq phi

"-2.2212" " 0.4103" " 0.0834" " 0.0130"

likfit: maximised log-likelihood = -120.2

> summary(y98)

Number of data points: 98

Coordinates summary

Coord.X Coord.Y

min 0.395 0.0927

max 0.640 0.1676

Distance summary

min	max
0.0005385165	0.2509885456

Data summary

Min.	1st Qu.	Median	Mean	3rd Qu.	Max.
-4.5300	-2.8500	-2.2310	-2.2310	-1.4910	-0.6647

Other elements in the geodata object

```
[1] "cov.model" "nugget" "cov.pars" "kappa" "lambda"
> ml
```

likfit: estimated model parameters:

beta	tausq	sigmasq	phi
"-2.2212"	" 0.4103"	" 0.0834"	" 0.0130"

likfit: maximised log-likelihood = -120.2

> summary(ml)

Summary of the parameter estimation

Estimation method: maximum likelihood

Parameters of the mean component (trend):

beta
-2.2212

Parameters of the spatial component:

correlation function: exponential

(estimated) variance parameter sigmasq (partial sill) = 0.0834

(estimated) cor. fct. parameter phi (range parameter) = 0.013

anisotropy parameters:

(fixed) anisotropy angle = 0 (0 degrees)

(fixed) anisotropy ratio = 1

Parameter of the error component:

(estimated) nugget = 0.4103

Transformation parameter:

(fixed) Box-Cox parameter = 1 (no transformation)

Maximised Likelihood:

log.L	n.params	AIC	BIC
"-120.2"	"4"	"248.3"	"258.7"

non spatial model:

log.L	n.params	AIC	BIC
"-121.1"	"2"	"246.1"	"251.3"

Call:

likfit(geodata = y98, ini.cov.pars = c(1, 0.5))