



**PETER DE MATOS CAMPOS**

**MÉTODO DE SELEÇÃO DE PREDITORES LINEARES  
GEOESTATÍSTICOS VIA ABORDAGEM DO CAMPO  
ALEATÓRIO GAUSSIANO**

**LAVRAS - MG**

**2018**

**PETER DE MATOS CAMPOS**

**MÉTODO DE SELEÇÃO DE PREDITORES LINEARES GEOESTATÍSTICOS VIA  
ABORDAGEM DO CAMPO ALEATÓRIO GAUSSIANO**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

Prof. Dr. Marcelo Silva de Oliveira  
Orientador

**LAVRAS - MG  
2018**

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

Campos, Peter de Matos.

Método de seleção de preditores lineares geoestatísticos via abordagem do campo aleatório gaussiano/ Peter de Matos Campos. – 2018.

142 p. : il.

Orientador: Marcelo Silva de Oliveira.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2018.

Bibliografia.

1. Correlações. 2. Gaussianidade local. 3. Índice de dependência espacial. 4. Krigagem. 5. Variáveis auxiliares. I. Oliveira, Marcelo Silva de. II. Título.

**PETER DE MATOS CAMPOS**

**MÉTODO DE SELEÇÃO DE PREDITORES LINEARES GEOESTATÍSTICOS VIA  
ABORDAGEM DO CAMPO ALEATÓRIO GAUSSIANO**

**METHOD OF SELECTION OF GEOSTATISTICAL LINEAR PREDITORS VIA  
THE GAUSSIAN RANDOM APPROACH**

Tese apresentado à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADO em 08 de fevereiro de 2018.

Prof. Dr. Gérson Rodrigues dos Santos	UFV
Prof. Dr. João Domingos Scalon	UFLA
Prof. Dr. Marx Leandro Naves Silva	UFLA
Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima	UFLA

Prof. Dr. Marcelo Silva de Oliveira  
Orientador

**LAVRAS - MG**

**2018**

À minha amada esposa Jane, companheira de todas as horas, pelo amor e compreensão, incondicional apoio e dedicação; aos meus queridos filhos Rafael e Isabella, maiores presentes de Deus em minha vida; à minha muito amada mãe Norma, exemplo de vida, de dedicação à Deus e aos filhos, por seu irrestrito apoio, sua acolhida e orações diárias; à meu pai César (*in memoriam*) e ao meu padrasto Ayalon (*in memoriam*) pelas lições de vida semeadas em meu coração, aos meus queridos sogros Jaime e Maura também pela acolhida e constante auxílio e aos meus irmãos Simone, Júnia, Débora, Pedro e Thaís.

**DEDICO.**

## AGRADECIMENTOS

Aos membros da banca Prof. Dr. Gérson Rodrigues dos Santos, Prof. Dr. João Domingos Scalon, Prof. Dr. Marx Leandro Naves Silva e Prof. Dr. Renato Ribeiro de Lima, por terem aceitado o convite para participarem da banca de minha defesa, terem dedicado seu precioso tempo para lerem minha tese e apresentarem críticas e valiosas contribuições que, sem dúvida, tornaram meu trabalho melhor. Ao meu orientador Prof. Dr. Marcelo Silva de Oliveira, meu amigo e irmão em Cristo, profissional exemplar, pela paciência e incontáveis horas dedicadas à minha orientação, pelos sábios conselhos científicos e de vida. Ao Prof. Dr. Joel Augusto Muniz, meu orientador de mestrado, pelas valiosas lições, sábios conselhos e constante interesse pelo nosso desenvolvimento.

À Universidade Federal de São João Del Rei (UFSJ) e ao Departamento de Matemática e Estatística da UFSJ (DEMAT/UFSJ) pela oportunidade de realizar o doutoramento em tempo integral e pelo apoio financeiro. Em especial aos meus colegas da área de Estatística: Andréa, Daniela, Luciane, Marcos e Rejane.

Aos Professores com quem cursei disciplinas: Augusto, Daniel, Devanil, Joel, Júlio, Lucas, Márcio, Marcelo Oliveira, Marcelo Cirillo, Scalon e Thelma pelo incentivo, inspiração e conhecimentos transmitidos.

Aos membros do Grupo de Pesquisa em Estatística Espacial da UFLA (GPS/UFLA), pela valiosa oportunidade de estudo conjunto, pelos inúmeros seminários e discussões, fundamentais para a minha formação e compreensão da teoria da Estatística Espacial.

Aos meus amigos e irmãos do grupo de oração da capela: Marcelo Oliveira, Ariana, Charles, Ismael, Leila, Paulinho, Rafael Ferreira, Rogério, Sérgio, Tatiana, Victor, pelos nossos encontros semanais que fizeram a diferença em minha vida espiritual, criando uma oportunidade para juntos orarmos, estudarmos a palavra de Deus e compartilharmos as bênçãos recebidas e dificuldades enfrentadas durante o doutorado.

Aos amigos de estudo Henrique, Tatiana, Ismael, Paulinho, Oscar, Saulo, Paulo Ossani, Hernandes, Pablo, Carolina, Elias, Alex, Kelly, Janaína, Lílian, Carlos, Fernando, Sérgio, Victor, Rodrigo, Rafael Ferreira, Rafael Bastos, Isabel, Ricardo e Lourenço. Aos demais colegas do programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária da UFLA (PPGEE/UFLA) pela ótima convivência, companheirismo e contínua troca de ideias.

Aos meus queridos Kezer e Débora pelo exemplo, orações, conselhos e constante apoio, ao também querido Marcello pelo carinho, troca de experiências, conselhos e otimismo. Às minhas queridas cunhadas Giana e Andréa pelo exemplo, bondade e apoio e ao meu cunhado

Jaime pelo apoio e amizade. Aos funcionários do Departamento de Estatística (DES/UFLA), do Departamento de Ciências Exatas (DEX/UFLA) e do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária (PPGEE/UFLA): Fernando, Josiane, Magali, Maria e Nádia pela amizade e profissionalismo. Às funcionárias terceirizadas Camila, Luciana e Kelly pela amizade e boa vontade. Aos funcionários da Biblioteca Universitária e do Restaurante Universitário da UFLA.

À CRISTO JESUS, meu criador:

E formou o Senhor Deus o homem do pó da terra, e soprou em suas narinas o fôlego da vida; e o homem foi feito alma vivente. Gênesis 2:7

Meu salvador:

E era já quase a hora sexta, e houve trevas em toda a terra até à hora nona, escurecendo-se o sol; E rasgou-se ao meio o véu do templo. E, clamando Jesus com grande voz, disse: Pai, nas tuas mãos entrego o meu espírito. E, havendo dito isto, expirou. Lucas 23:44-46

Meu redentor:

Mas o anjo, respondendo, disse às mulheres: Não tenhais medo; pois eu sei que buscais a Jesus, que foi crucificado. Ele não está aqui, porque já ressuscitou, como havia dito. Vinde, vede o lugar onde o Senhor jazia. Mateus 28:5,6

Infinito em amor:

Porque Deus amou o mundo de tal maneira que deu o seu Filho unigênito, para que todo aquele que nele crê não pereça, mas tenha a vida eterna. João 3:16

Minha maior esperança:

E vi um novo céu, e uma nova terra. Porque já o primeiro céu e a primeira terra passaram, e o mar já não existe. E eu, João, vi a santa cidade, a nova Jerusalém, que de Deus descia do céu, adereçada como uma esposa ataviada para o seu marido. E ouvi uma grande voz do céu, que dizia: Eis aqui o tabernáculo de Deus com os homens, pois com eles habitará, e eles serão o seu povo, e o mesmo Deus estará com eles, e será o seu Deus. E Deus limpará de seus olhos toda a lágrima; e não haverá mais morte, nem pranto, nem clamor, nem dor; porque já as primeiras coisas são passadas. Apocalipse 21:1-4.



## RESUMO

Compreender um fenômeno natural e fazer previsões a seu respeito tem sido uma das maiores motivações de pesquisadores e profissionais ligados às ciências da natureza e, sem dúvida, está entre as razões fundamentais da Ciência. Num contexto geoestatístico, o problema da predição sob dependência espacial foi a questão original e continua a figurar como um grande desafio devido à complexidade dos fenômenos estudados, grande disponibilidade de informação auxiliar, elevado número de métodos de interpolação espacial encontrados na literatura e, também, pela incipiência dos critérios para a escolha de qual método de interpolação seria mais adequado para cada situação particular. Quando apenas uma variável é considerada no estudo, a resposta é consagrada pela literatura geoestatística: fazendo-se krigagem, pois os preditores de krigagem são os melhores preditores lineares não-viesados (*Best Linear Unbiased Predictor* – BLUP). Entretanto, quando além da variável principal uma ou mais variáveis auxiliares são utilizadas não se encontra uma resposta consensual na literatura. Provavelmente por essas razões, técnicas alternativas têm sido adotadas por diversos pesquisadores para incluir variáveis auxiliares em seus estudos. Entretanto, apesar dessas técnicas alternativas seguirem uma lógica prática, não garantem que seus preditores sejam um BLUP. Como consequência, descaracteriza-se a natureza original dos preditores de krigagem, isto é, não se garante que esses sejam BLUP, pois sua teoria não é claramente definida sob os critérios de não-viés e de variância mínima. Assim, o objetivo geral deste trabalho é propor um critério geral para a seleção de preditores de krigagem linear que permaneçam sendo BLUP. Este critério geral é tratado neste estudo utilizando a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) e apesar de que o conceito de campo aleatório gaussiano (CAG) não é inédito, a *abordagem* da Geoestatística pela estrutura do CAG é inédita em suas premissas, pressupostos, modelo e resultados. Ao aplicar-se a ACAG, chegou-se aos mesmos preditores para as krigagens lineares ordinária, simples e universal, comprovado pela igualdade da forma e composição dos pesos de krigagem em cada um dos tipos de preditores lineares estudados. Dessa forma, a ACAG se mostrou equivalente à abordagem geoestatística clássica (AGC), como denominou-se nesse texto a teoria das variáveis regionalizadas formalizada por Matheron. Para a definição dos critérios teóricos, seis cenários decorrentes da combinação da partição do erro devido à dependência espacial  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  e pela existência ou não de autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS), sob um modelo geoestatístico em um CAG foram definidos e estudados, resultando em critérios simples. Destaca-se que somente pela ACAG é possível explicitar e, por conseguinte, particionar  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  e realizar o estudo proposto. Finalmente um critério prático baseado na classificação de um índice de dependência espacial  $IDE(\%)$  encontrado na literatura define para quais valores ou faixa de valores a AC, CC e CS são fortes, possibilitando a escolha do melhor preditor de krigagem linear, especialmente quando uma ou mais variáveis auxiliares são introduzidas no estudo.

**Palavras-chave:** Correlações. Gaussianidade local. Índice de dependência espacial. Krigagem. Variáveis auxiliares.

## ABSTRACT

Understanding a natural phenomenon and making predictions about it has been one of the major motivations of researchers and practitioners linked to the natural sciences and is undoubtedly among the fundamental reasons for science. In a geostatistical context, the problem of prediction under spatial dependence was the original question and continues to be a great challenge due to the complexity of the studied phenomena, great availability of auxiliary information, many of the spatial interpolation methods found in the literature, by the incipience of the criteria for choosing which method of interpolation would be most appropriate for each situation in particular. When only one variable is considered in the study, the answer is consecrated by the geostatistical literature: by doing kriging, since the predictors of kriging are the best linear unbiased predictors (BLUP). However, when one or more auxiliary variables are used in addition to the main variable, there is no consensus answer in the literature. Probably for these reasons, alternative techniques have been adopted by several researchers to include auxiliary variables in their studies. However, although these alternative techniques follow a practical logic, they do not guarantee that their predictors are BLUP. As consequence, the original nature of the kriging predictors is uncharacteristic, that is, they are not guaranteed to be BLUP, since their theory is not clearly defined under the non-bias and minimum variance criteria. Thus, the general objective of this work is to propose a general criterion for the selection of predictors of linear kriging that remain BLUP. This general criterion is treated in this study using the gaussian random field approach (GRFA) and although the concept of gaussian random field (GRF) is not unprecedented, the approach of Geostatistics by the GRF structure is unprecedented in its assumptions, model and results. When applying the GRFA, we reached the same predictors for the ordinary, simple and universal linear kriging, proved by the equality of the form and composition of the kriging weights in each of the linear predictor types studied. Thus, the GRFA proved to be equivalent to the classical geostatistical approach (CGA), as it was called in this text the theory of regionalized variables formalized by Matheron. For the definition of the theoretical criteria, six scenarios resulting from the combination of error partition due to spatial dependence  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  and by the existence or not of spatial autocorrelation (AC), spatial cross-correlation (CC) and simple non-spatial correlation (SC) under a geostatistical model in a GRF were defined and studied, resulting in simple criteria. It should be noted that only GRFA can explicitly, and therefore partition,  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  and perform the proposed study. Finally, a practical criterion based on the classification of a spatial dependency index SDI (%) found in the literature defines which values or range of values AC, CC and SC are strong, allowing the selection of the best predictor of linear kriging, especially when a or more auxiliary variables are introduced in the study.

**Keywords:** Correlations. Local Gaussianity. Index of spatial dependence. Kriging. Auxiliary variable.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - As 10 áreas do conhecimento com publicações em Geoestatística, registradas no <i>Web of Science</i> no período de 1967 a 2005.....	20
Figura 2.2 - Os países mais produtivos na área de Geoestatística registrados no <i>Web of Science</i> no período de 1967 a 2005. ....	20
Figura 2.3 - Frequência de aplicação de 32 métodos de interpolação espacial, comparados em 18 artigos analisados. ....	25
Figura 2.4 - Diagrama esquemático: Framework genérico para Krigagem com regressão .....	33
Figura 2.5 - Classificação de 25 métodos de interpolação espacial, baseada em uma análise de agrupamento hierárquico de cluster.....	35
Figura 2.6 - Árvore de decisão para seleção de métodos de interpolação espacial.....	36
Figura 2.7 - Exemplo de aplicação dos 5 primeiros critérios da árvore de decisão apresentada pela Figura 2.6. ....	37
Figura 2.8 - Exemplo de aplicação do critério 10*, 13* e 16* da Figura 2.6. ....	39
Figura 3.1 - Representação do problema fundamental da interpolação e/ou predição espacial. ....	44
Figura 3.2 - Espaço amostral $\Omega$ do exemplo. ....	47
Figura 3.3 - Comparação entre a representação gráfica gerada por um BUP( $Y/X = x$ ), uma regressão não-linear e um BLUP( $Y/X = x$ ), uma regressão linear.....	52
Figura 3.4 - Ilustração do comportamento da regressão de $Y$ sobre $X$ a medida que $\rho^2$ aumenta.....	53
Figura 3.5 - Representação de um campo aleatório com gaussianidade local ( $CAG_{local}$ ).....	55
Figura 3.6 - Gaussianidade local: observe que para um valor de distância $h = r$ “pequena”, a correlação espacial é próxima de 1. ....	56
Figura 3.7 - Parâmetros de um Semivariograma típico.....	60
Figura 5.1 - Esquema geral com os métodos e paradigmas utilizados para a definição de critérios para a escolha de preditores de krigagem.....	98
Figura 5.2 - Representação de uma amostragem espacial onde foram observados, além da variável principal $Z$ , outra variável auxiliar $U$ , coletadas em todos os pontos da malha regular. O ponto $s_0$ é um ponto onde $Z$ não foi observada, mas $U$ foi.....	100

Figura 5.3 - Ilustração das possíveis correlações existentes entre a variável principal $Z$ e a variável auxiliar $U$ , coletadas em dois pontos diferentes de uma amostra espacial. Note que, estas correlações podem existir entre quaisquer dois pontos de uma malha amostral e que esta figura é apenas ilustrativa. ....	103
Figura 5.4 - Síntese da forma de como o processo de modelagem de fenômenos espaciais se dá quando uma ou mais variáveis auxiliares, interna ou externa, são utilizadas.....	134

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Classificação dos Métodos de interpolação espacial encontrados em 53 artigos analisados por Li e Heap (2011, 2014), adaptado (*métodos não-lineares).....	27
Tabela 3.1 - Representação do modelo amostral (modelo para os dados observados).....	41
Tabela 3.2 - Tabela de contingência com os pesos amostrais $p(\omega_0)$ de cada evento e as probabilidades marginais e condicionadas para as três amostras realizadas com $n = 3$ .....	47
Tabela 5.1 - Dados obtidos da amostragem espacial representada pela figura 5.2 ( $n = 2$ ) ..	101
Tabela 5.2 - Possíveis cenários formados pelas combinações entre a existência ou não da autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS), como definidos na Figura 5.3. ....	105
Tabela 5.3 - Critérios teóricos para seleção de preditores lineares baseado nas combinações entre a existência ou não da autocorrelação espacial (AC), correlação espacial cruzada (CC) e correlação simples não espacial (CS).....	131
Tabela 5.4 - Faixa de valores para a classificação da correlação simples não espacial (CS). .....	132
Tabela 5.5 - Classificação da dependência espacial proposta por Seidel e Oliveira (2014, 2016) e Barbosa et al. (2017), para os modelos de semivariograma Esférico, Exponencial, Gaussiano e de Potência. ....	133

## LISTA DE ABREVIACOES

- ASTK:** Anlise de superfcie de tendncia combinada com krigagem.
- AST:** Anlise de superfcie de tendncia.
- ADR:** rvore de deciso reforada.
- AR:** rvore de regresso.
- ARK:** rvore de regresso combinada com krigagem.
- BLUP** (*Best linear unbiased predictor*): Melhor preditor linear no-viesado
- BUP** (*Best unbiased predictor*): Melhor preditor no-viesado
- CL:** Classificao.
- CKC:** Cokrigagem co-locada.
- CKI:** Cokrigagem indicadora.
- CKO:** Cokrigagem ordinria.
- CKOP:** Cokrigagem ordinria padronizada.
- CKS:** Cokrigagem simples.
- ADR-IDP/KO:** Combinao de ADR com IDP ou KO.
- FA-IDP/KO:** Combinao de FA com IDP ou KO.
- RNRG-IDP/KO:** Combinao de RNRG com IDP ou KO.
- SVM-IDP/KO:** Combinao de SVM com IDP ou KO.
- FA:** Floresta aleatria.
- GIQD:** Gradiente mais inverso do quadrado da distncia.
- IRIT:** Interpolaes de rede irregulares triangulares.
- IDP:** Inverso da distncia ponderada.
- KBM:** Krigagem baseada em modelos.
- KDE:** Krigagem com deriva externa.
- KCP:** Krigagem com Componente Principal.
- KD:** Krigagem disjuntiva.
- KDu:** Krigagem dupla.
- KB:** Krigagem em bloco.
- KE:** Krigagem em estratos.
- KFM:** Krigagem fatorial multivariada.

## LISTA DE ABREVIACOES

- KI:** Krigagem indicadora.
- KO:** Krigagem ordinria.
- KR:** Krigagem com regresso.
- KP:** Krigagem probabilstica.
- KS:** Krigagem simples.
- KU:** Krigagem universal.
- KSml:** KS com variao da mdia local.
- MLG:** Modelos lineares generalizados.
- MR:** Modelos de regresso.
- PNV:** Preditor no-viesado.
- RNF:** Redes neurais *Fuzzy*.
- RN:** Redes neurais.
- RNRG:** Redes neurais regresso geral.
- SF:** Sries de *Fourier*.
- STL:** Splines e Superfcie de tendncia local.
- Splines P:** Splines planos.
- SVM:** Support Vector machine.
- TL:** Taxa de lapso.
- TLK:** Taxa de Lapso combinado com Krigagem.
- VMP:** Vizinho mais prximo.
- VN:** Vizinhos Naturais.

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO .....	15
2	REVISÃO DE LITERATURA .....	19
2.1	Desafios e abrangência .....	19
2.2	Complexidade da realidade .....	21
2.3	Métodos de interpolação espacial .....	24
2.3.1	Tipos de métodos de interpolação espacial.....	24
2.3.2	Comparação entre métodos geoestatísticos e métodos combinados .....	26
2.3.3	Métodos de seleção de interpoladores espaciais .....	33
2.3.3.1	Primeira abordagem: framework genérico para atributos do solo .....	33
2.3.3.2	Segunda abordagem: árvore de decisão para seleção de métodos de interpolação.....	34
3	REFERENCIAL TEÓRICO .....	40
3.1	Modelo de regressão .....	40
3.2	Modelo geoestatístico .....	42
3.2.1	Campo aleatório .....	44
3.2.2	Campo aleatório gaussiano.....	45
3.2.3	Gaussianidade local.....	49
3.2.3.1	Alguns resultados sobre correlação de Pearson. ....	50
3.2.3.2	Teorema da gaussianidade local .....	55
3.3	Abordagem geoestatística clássica (AGC).....	56
3.3.1	Hipóteses de estacionaridade.....	57
3.3.2	Semivariograma.....	59
3.3.3	Melhor preditor linear não-viesado (BLUP).....	61
3.3.4	Predição linear univariada .....	64
3.3.4.1	Krigagem linear ordinária (KLO) .....	64
3.3.4.2	Krigagem linear simples (KLS).....	70
3.3.5	Predição linear multivariada.....	73
3.3.5.1	Krigagem linear universal (KLU).....	74
3.3.5.2	Krigagem com regressão (KR).....	78
3.3.5.3	Cokrigagem linear (CKL).....	83
3.3.5.3.1	Semivariograma cruzado.....	83
3.3.5.3.2	Cokrigagem linear ordinária (CKLO) .....	84
3.3.5.3.3	Cokrigagem linear simples (CKLS).....	91
4	METODOLOGIA .....	96
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO .....	98
5.1	Critérios para a decisão a respeito de um preditor .....	98
5.2	Abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) .....	100
5.2.1	Krigagem linear simples pela ACAG .....	106
5.2.2	Krigagem linear ordinária pela ACAG.....	107
5.2.3	Krigagem linear universal pela ACAG .....	110
5.3	Critérios para a utilização de variáveis auxiliares .....	112
5.4	Interpretação do coeficiente de correlação .....	132
6	CONCLUSÃO .....	136
	REFERÊNCIAS .....	139



## 1 INTRODUÇÃO

Compreender um fenômeno natural e, mais do que isso, ter a possibilidade de fazer previsões a seu respeito tem sido uma das maiores motivações de pesquisadores e profissionais ligados às ciências da natureza e, sem dúvida, está entre as razões fundamentais da Ciência. De fato, o estudo das relações existentes entre diversas características que descrevem um fenômeno natural, a sistematização de suas relações por meio de equações matemáticas e a escolha de um modelo estatístico que o explique, são atividades que fazem parte do cotidiano de muitos pesquisadores e de profissionais de uma maneira geral.

Mais especificamente em um contexto geostatístico, o problema da predição sob dependência espacial foi o ponto de partida, a questão original no surgimento desse ramo da Estatística. Desde o princípio, a questão fundamental resumia-se em como obter uma predição de tal forma que o erro de predição fosse mínimo e sem vícios. Para solucionar essa questão fundamental o matemático francês George Matheron, no início da década de 1960, formalizou a teoria para os preditores de krigagem linear, teoria que será denominada nesse texto de abordagem geostatística clássica (AGC). Alicerçados nos critérios de não-viés e de variância mínima, garante-se pela AGC que os preditores construídos sob essa abordagem serão não-viesados e terão variância mínima para o erro de predição, isto é, garante-se que a predição obtida por essa abordagem será a melhor predição linear não-viesada (*Best linear unbiased predictor* - BLUP).

Graças a essas características, a krigagem tem sido largamente aplicada às mais diversas áreas do conhecimento como: Geociências, Hidrologia, Ciências Ambientais, Agricultura, Ciência do solo, Matemática, Estatística, Engenharias, dentre outras. De fato, o problema fundamental da Geoestatística: fazer previsões em locais não amostrados com base em amostras georreferenciadas, continua a figurar como um grande desafio devido à complexidade dos fenômenos estudados, grande disponibilidade de informação auxiliar, elevado número de métodos de interpolação espacial encontrados na literatura e, também, pela incipiência dos critérios para a escolha de qual método de interpolação seria mais adequado para cada situação particular.

Considerando-se, ainda, que todos os métodos de interpolação espacial têm como principal produto a geração de um mapa, e que em cada ponto ou pixel desse mapa representasse os valores, preditos e amostrados, da variável numa região predefinida, chega-se a duas outras questões: o mapa gerado por esses métodos de interpolação espacial são os melhores

mapas possíveis de serem construídos? Mas como garantir que esses mapas sejam os melhores, isto é, sejam ótimos?

Quando apenas uma variável é considerada no estudo, a resposta é conhecida e consagrada pela literatura geoestatística: fazendo-se krigagem, pois como dito anteriormente, os preditores de krigagem são BLUP, os melhores preditores lineares não-viesados e de variância mínima. Entretanto, quando além da variável principal uma ou mais variáveis auxiliares são utilizadas não se encontra uma resposta consensual na literatura. Essa falta de consenso, de acordo com Isaaks e Srivastava (1989), é devido ao fato de que a seleção de um método de predição espacial apropriado quando se tem uma ou mais variáveis auxiliares disponíveis, é um tema crítico. Não há uma resposta simples quanto a essa escolha, exatamente porque um método é considerado "melhor" apenas para situações específicas.

Hengl, Heuvelink e Stein (2003, 2004) e Li e Heap (2011, 2014) afirmam que as maiores dificuldades encontradas na comparação de métodos estatísticos se deve, algumas vezes a apresentação do mesmo método com diferentes nomes em diferentes referências, outras vezes, símbolos matemáticos mudam com as referências, embora representem o mesmo conceito, ou ainda, a descrição dos métodos que muitas vezes não são claramente apresentadas em algumas referências. Esses autores corroboram, portanto, com a ainda reinante indefinição de como tratar o uso de variáveis auxiliares na krigagem. No capítulo dois, Revisão de literatura, esta problemática será retomada mais amplamente.

Provavelmente devido a razão apresentada por Isaaks e Srivastava (1989), é que técnicas alternativas têm sido adotadas por diversos pesquisadores para incluir variáveis auxiliares em seus estudos. Entretanto, apesar dessas técnicas alternativas seguirem uma lógica prática, não garantem a otimalidade de suas predições. Como consequência, descaracteriza-se a natureza original dos preditores de krigagem, isto é, não se garante sua otimalidade, pois sua teoria não é claramente definida sob os critérios de não-viés e de variância mínima.

Assim, o problema de pesquisa desta tese se resume em responder à questão: “como introduzir variáveis auxiliares na krigagem linear garantindo-se que os preditores de krigagem mantenham suas características? Isto é, como garantir que esses preditores sejam BLUP?”. Dado esse problema de pesquisa, o objetivo geral deste estudo é propor um critério geral para a seleção de preditores de krigagem linear que permaneçam sendo BLUP. Para solucionar o problema de pesquisa definem-se os seguintes objetivos específicos:

- a) Apresentar a teoria geoestatística proposta pela abordagem geoestatística clássica (AGC), isto é, as principais krigagens lineares univariadas e multivariadas.

- b) Apresentar uma abordagem alternativa, aqui denominada de abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG), a qual é baseada nas características da distribuição normal multivariada, mas não restrito a ela, explicitando a forma e a distribuição de probabilidades do erro devido à dependência espacial.
- c) Comprovar as equivalências entre a abordagem geoestatística clássica (AGC) e a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) no que tange à obtenção dos preditores de krigagem linear.
- d) Baseado nas características de um campo aleatório gaussiano, estudar os cenários estabelecidos pela partição do erro devido à dependência espacial e pela existência ou não de autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS).
- e) Com base nos resultados obtidos do estudo dos cenários estabelecidos pela partição do erro devido à dependência espacial e existência ou não de AC, CC e CS, propor critérios teóricos simples que permitam a escolha do melhor preditor de krigagem linear, quando uma ou mais variáveis auxiliares são introduzidas no estudo.
- f) Selecionar/buscar um critério prático que permita recomendar para quais valores a autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS) existem, isto é, são consideradas fortes.

Um aspecto importante é que o não conhecimento das médias paramétricas ( $\mu_Z(\mathbf{s}_0)$  e  $\mu_V$ ) e das variâncias e covariâncias paramétricas ( $\sigma$  e  $\Sigma$ ) exigiria sua estimação, o que, sem dúvida, também impactaria no aumento do erro de predição pela inclusão das incertezas de suas estimativas. Entretanto, neste trabalho, definiu-se que  $\mu_Z(\mathbf{s}_0)$ ,  $\mu_V$ ,  $\sigma$  e  $\Sigma$  sejam conhecidos e, por essa razão, será deixada essa questão da estimação desses parâmetros para ser enfrentada em outros trabalhos ou por outros pesquisadores. A seguir, será dada uma antevisão da tese.

No capítulo 2, foi realizada uma revisão bibliográfica de estudos que comparam métodos de interpolação espacial, mostrando a abrangência e a aplicabilidade da Geoestatística, mas também mostrando a dificuldade na escolha do melhor interpolador espacial que inclua variáveis auxiliares e a adoção de métodos alternativos para a inclusão das informações de variáveis auxiliares em estudos geoestatísticos. Finalizando o capítulo 2, será realizada uma breve descrição de dois métodos com critérios para a seleção de interpoladores espaciais referendados na literatura.

No capítulo 3, é apresentada a teoria necessária para alcançar os objetivos aqui definidos. Inicia-se com o modelo de regressão, sua expressão, características, pressuposições e

aplicações. Logo em seguida, o modelo geoestatístico, bem como o campo aleatório e o campo aleatório gaussiano são definidos e suas características são ressaltadas. Apresenta-se, ainda, detalhadamente, no capítulo 3, os principais métodos de krigagem linear uni e multivariados, finalizando-se com a apresentação do teorema da gaussianidade local e de alguns resultados sobre correlação de Pearson.

No capítulo 4, definiu-se o delineamento de pesquisa deste estudo, que consistirá basicamente de pesquisa bibliográfica aliada à pesquisa-ação, e demais metodologias utilizadas no seu desenvolvimento.

No capítulo 5, os critérios para a escolha dos métodos de interpolação espacial e paradigmas de predição são inicialmente discutidos, logo em seguida, a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) é apresentada, bem como os possíveis cenários formados pela partição do erro devido à dependência espacial e pelas combinações entre a existência ou não da autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS). Comprova-se ainda, no capítulo 5, a equivalência entre a ACAG e a AGC. Por fim, apresentam-se os resultados de cada cenário estudado, os critérios teóricos definidos para a escolha da melhor krigagem quando da utilização de variáveis auxiliares e os critérios práticos que permitem recomendar para quais valores a autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS) podem ser considerados fortes.

O capítulo 6, traz as conclusões descritas com base nos objetivos específicos e geral definidos para este estudo. Uma lista de figuras, bem como uma lista de tabelas e uma lista de abreviações (apresentadas no início) e as referências bibliográficas utilizadas neste trabalho completam esta tese.

## 2 REVISÃO DE LITERATURA

Nesta seção, além de mostrar a abrangência do tema e a complexidade imposta pela realidade, é apresentada uma classificação dos principais métodos de interpolação espacial encontrados na literatura, bem como uma revisão de literatura que compara esses métodos. Por fim, apresenta-se uma breve discussão dos trabalhos encontrados na literatura que apresentam critérios para a seleção de preditores lineares de krigagem. Por opção, as citações seguiram uma ordem lógica em vez de seguir uma ordem cronológica.

### 2.1 Desafios e abrangência

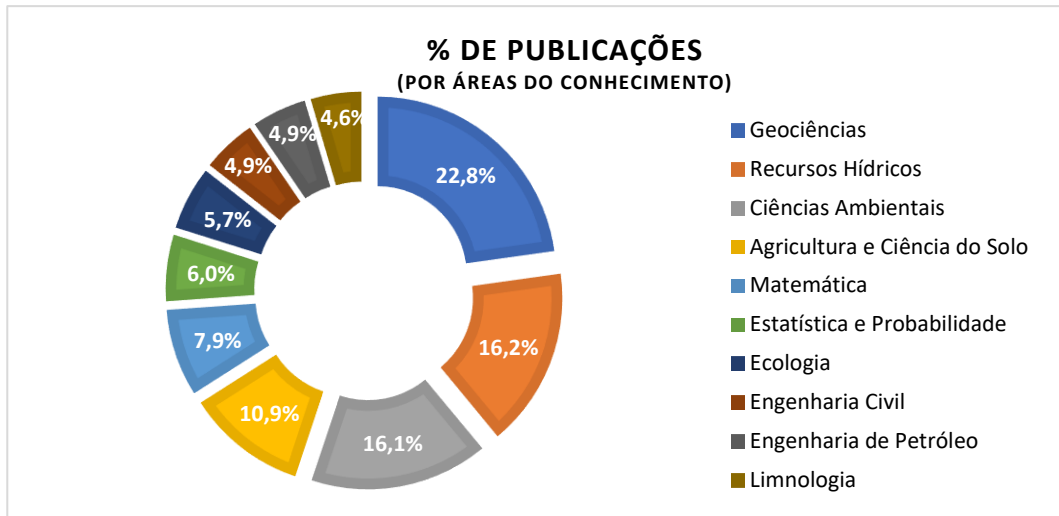
Quatro desafios são encontrados em uma revisão na qual se propõe a comparar métodos estatísticos em geral, a saber: 1) às vezes, o mesmo método é apresentado com diferentes nomes em diferentes referências, 2) outras vezes, diferentes metodologias são apresentadas com o mesmo nome em diferentes referências, 3) os símbolos matemáticos, muitas vezes, mudam com as referências, embora representem o mesmo conceito, e 4) os métodos não são descritos claramente em algumas referências (HENGL; HEUVELINK; STEIN, 2003, 2004; LI; HEAP, 2011, 2014).

Levar em conta a dependência espacial existente nos fenômenos naturais é fundamental no planejamento, avaliação de riscos e tomada de decisões na gestão de fenômenos ambientais. Entretanto, obter os atributos de interesse nem sempre é tarefa fácil, pois em muitos casos são de difícil acesso e/ou dispendiosos como, por exemplo, em regiões montanhosas ou em regiões profundas do oceano (LI; HEAP, 2014).

Zhou et al. (2007), por meio de análise cientométrica de pesquisas em Geoestatística, feita com a base de dados de indexação de citações *Web of Science* entre os anos de 1967 e 2005, classificaram as 2.866 publicações encontradas em 10 áreas do conhecimento, as quais foram sumarizadas na figura 2.1.

Nota-se que a maioria das pesquisas identificadas nesse levantamento tem relação direta com o meio ambiente. Além disso, destaca-se que as pesquisas em Geociências juntamente às pesquisas realizadas nas áreas de Recursos Hídricos, Ciências Ambientais, Agricultura e Ciência do Solo, representam 66% do total.

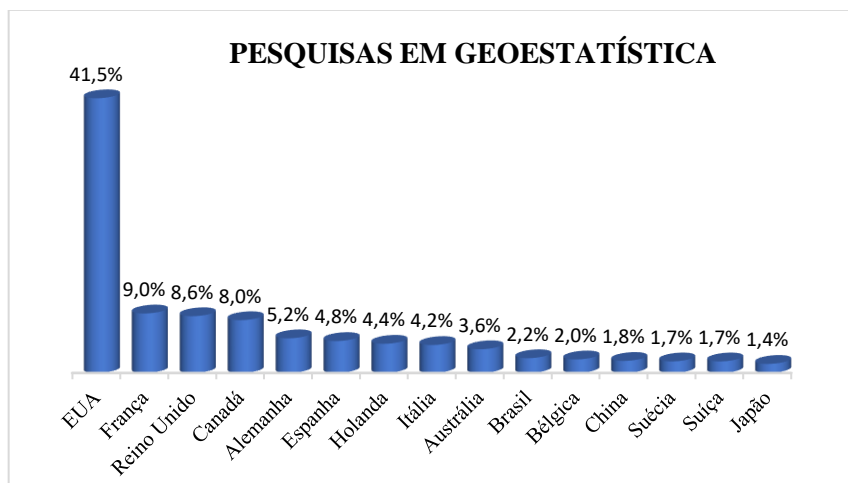
Figura 2.1 - As 10 áreas do conhecimento com publicações em Geoestatística, registradas no *Web of Science* no período de 1967 a 2005.



Fonte: Zhou et al. (2007).

Apresentaram-se, ainda, registros sobre os países mais produtivos em pesquisa geoestatística, nos quais o Brasil aparece na décima posição à frente de países como a China e Japão (Figura 2.2).

Figura 2.2 - Os países mais produtivos na área de Geoestatística registrados no *Web of Science* no período de 1967 a 2005.



Fonte: Zhou et al. (2007).

Da observação das Figuras 2.1 e 2.2 fica evidente a importância e a abrangência da aplicação das técnicas geoestatísticas, pois mostram o grande número de trabalhos publicados, a enorme gama de áreas de aplicação e os diversos países envolvidos nessas pesquisas, com destaque especial para o Brasil que figura como o 10º país mais produtivo do mundo,

responsável por 2,2% de toda a publicação mundial nessa área, dentro do período e base avaliada. Note que se objetiva, nesta subseção, apenas mostrar os desafios e abrangência da aplicação da Geoestatística. Apesar do trabalho de Zhou et al. ser de 2007 não se encontra na literatura outro trabalho que faça esta comparação, além disso, os desafios permanecem e a abrangência de aplicação da Geoestatística continua a se ampliar.

É importante salientar que os métodos de interpolação espacial são uma metodologia de natureza absolutamente geral, razão pela qual se pode verificar sua aplicação em tantas áreas do conhecimento. Entretanto, por conveniência, os exemplos e aplicações neste estudo se relacionam, em sua maioria, às áreas de Agricultura e Ciência do Solo.

## 2.2 Complexidade da realidade

Constata-se que nos percebemos em um mundo espacialmente tridimensional e que também somos restritos ao fluxo unidirecional do tempo. A Estatística, que é a ciência da incerteza, tenta modelar a ordem na desordem e é reconhecida como uma ferramenta de pesquisa extremamente poderosa. Mas, mesmo quando a desordem é descoberta, ter uma explicação perfeitamente racional em uma dada escala nem sempre é suficiente, pois há, muitas vezes, uma escala menor em que os dados não se ajustam exatamente à teoria e surge a necessidade de investigar o novo, a incerteza residual (CRESSIE, 1993). Alguns cientistas têm tentado medir o nível da desordem por, entre outras coisas, uma quantidade chamada Entropia (E), enquanto os Estatísticos geralmente utilizam-se da variância ( $\sigma^2$ ), a fim de quantificar a desordem. Entretanto, prova-se que E e  $\sigma^2$  estão intimamente relacionadas. Enfim, conclui-se que uma medida de variabilidade aleatória é inevitável em uma grande parcela dos fenômenos.

Por outro lado, a independência entre eventos é uma suposição, convenientemente assumida em uma considerável parcela dos métodos estatísticos em uso, os chamados métodos da Estatística Clássica, já que se torna muito mais tratável a teoria Matemática-Estatística de tais métodos. Enfim, conclui-se que a independência entre observações, tantas vezes assumida sem provas, nem sempre respeita a realidade do fenômeno. A Geoestatística, diferentemente, modela a dependência espacial em vez de negá-la por pressuposição, e é exatamente por essa razão que apresenta modelos mais realísticos (CRESSIE, 1993).

É fato que muitas teorias desenvolvidas pelas Ciências foram decorrentes de problemas reais que precisavam de respostas. No caso da Geoestatística, o problema original apresentado por Krige (1951), consistia em prever a quantidade de ouro em uma jazida, com base em poucos valores pontuais, visto que o custo de sondagem era extremamente elevado. Assim, ele

deveria prever a quantidade desse mineral precioso em um local não amostrado, com base em uma amostra não muito intensa. Notou-se, então, que a teoria da Estatística Clássica não permitia levar em consideração a dependência espacial em sua modelagem, uma vez que a dependência espacial era contabilizada no erro experimental do modelo. Portanto, a partir das ideias de Krige, Matheron (1962, 1963, 1971) formalizou a teoria das variáveis regionalizadas, admitindo quantificar separadamente a componente da dependência espacial que, retirada do componente do erro no modelo geoestatístico, resulta na diminuição desse erro.

Observa-se, especialmente nas Ciências Ambientais, Agricultura e Ciência do Solo, que o problema de prever, sob dependência espacial, continua a figurar como um grande desafio a pesquisadores, produtores e gestores (HENGL; MINASNY; GOULD, 2009; ZHOU et al., 2007).

Para confirmar a afirmação acima apresentam-se, como exemplos, três problemas estudados em trabalhos publicados recentemente:

- (i) **Problema:** caracterização da variabilidade espacial dos atributos químicos de um latossolo vermelho distrófico, no cerrado piauiense, para realização do manejo da fertilidade. **Atributos químicos avaliados:** pH, fósforo, potássio, cálcio, magnésio, alumínio trocável, acidez potencial, capacidade de troca de cátions total, capacidade de trocas de cátions efetiva, soma de bases, saturação por alumínio e saturação por bases. **Objetivo:** definir as zonas de manejo da fertilidade do solo, nas quais ocorrem os maiores e menores níveis dos atributos químicos avaliados, permitindo o diagnóstico da fertilidade e a recomendação de fertilizantes e corretivos (CARNEIRO et al., 2017).
- (ii) **Problema:** identificação dos fatores ambientais que influenciam a salinidade do solo, na parte Sul da Tunísia, tendo em vista índices de paisagem, com o fim de mapear sua distribuição espacial. **Atributos avaliados:** dados de emissão térmica espacial e radiômetro de reflexão para descrever os parâmetros geomorfológicos: elevação, declive, curvatura planar, curvatura do perfil e aspecto, além da condutividade elétrica do solo. **Objetivo:** identificar e classificar classes de solos salinos sobre a área de estudo (FOURATI et al., 2017).
- (iii) **Problema:** estimação da variabilidade espacial do volume de sortimentos de madeira e identificação de seus padrões espaciais em povoamentos de Teca (*Tectona grandis*<sup>1</sup>).

---

<sup>1</sup> *Tectona grandis*, popularmente Teca, é uma árvore de grande porte, nativa das florestas tropicais situadas no subcontinente índico e no sudeste asiático como na Índia e Tailândia, por exemplo.



**Atributo avaliado:** volume de sortimentos de madeira em povoamentos de Teca.  
**Objetivo:** identificar os padrões espaciais para o volume de madeira e definir tratamentos silviculturais<sup>2</sup>, por exemplo, desbaste e poda, para o máximo rendimento florestal (PELISSARI et al., 2017).

Em todos esses exemplos, identificam-se: a) necessidade de fazer a predição de um atributo em uma área contínua, a partir de dados amostrados sob dependência espacial, e b) a possibilidade de utilizar informações adicionais que auxiliem na explicação do fenômeno de interesse.

Na perspectiva de análise de dados, no esforço de mostrar as dificuldades encontradas pelos pesquisadores, por efeito do tipo e disponibilidade de dados, é oportuno o estudo de caso apresentado por Ahmed e De Marsily (1987):

- a) **Objetivo:** gerar mapas da distribuição espacial da Transmissividade de um aquífero<sup>3</sup> de grande superfície localizado ao Norte da França.
- b) **Problema:** predição da Transmissividade de um aquífero em pontos não coletados, com base numa amostra.
- c) **Variáveis observadas:** (i) variável principal: Transmissividade (T) e (ii) variável auxiliar: Capacidade Específica (CE).
- d) **Tamanho da área de estudo:** 80 x 40 Km, ou seja, 3.200 Km<sup>2</sup>.
- e) **Disponibilidade de dados:** (i) Transmissividade (T), em  $m^2 \cdot h^{-1}$ , medida pelos Testes de Bombeamento (Testes de Vazão) em 72 pontos; e (ii) variável auxiliar: Capacidade Específica (CE), em  $m^3 \cdot h^{-1} \cdot m^{-1}$ , já conhecida em 235 poços, dentre os quais 56 eram comuns a ambas as variáveis.
- f) **Amplitude dos dados:** Transmissividade (T):  $0,61 m^2 \cdot h^{-1}$  a  $539,5 m^2 \cdot h^{-1}$  e Capacidade Específica (CE):  $0,25 m^3 \cdot h^{-1} \cdot m^{-1}$  a  $437,5 m^3 \cdot h^{-1} \cdot m^{-1}$ .
- g) **“Distribuição de dados” (Histograma):** baseados nos histogramas, os autores indicaram que as duas variáveis seguem, aproximadamente, uma distribuição lognormal, que levou os pesquisadores a trabalhar com dados transformados, uma escolha que não garante a otimalidade.

---

<sup>2</sup> Silvicultura é a ciência dedicada ao estudo dos métodos de regeneração dos povoamentos florestais para manutenção, aproveitamento e uso racional das florestas.

<sup>3</sup> Transmissividade de um aquífero é um parâmetro hidrogeológico que corresponde à capacidade de um meio para transmitir água.

Identificam-se dois problemas teóricos para esse caso: (i) a elevada amplitude dos dados; e (ii) a disponibilidade dos dados em que, na maioria dos locais, não há informação da variável principal mas há informação disponível da variável auxiliar. Esse caso é, sem dúvida, um bom exemplo de que uma única técnica de interpolação espacial seria insuficiente para descrever o fenômeno de interesse já que a informação da característica de interesse será obtida pela correlação existente com a variável auxiliar, o que pode ser feito de diferentes maneiras.

Logo, a escolha de um método ou a combinação de métodos poderá ser uma boa alternativa para uma melhor predição do atributo de interesse. Precisa-se, porém, saber quais critérios utilizar para essa escolha.

## **2.3 Métodos de interpolação espacial**

Um aspecto que merece nossa atenção é o aumento da disponibilidade de dados auxiliares para análise. Moreira (2012) comenta que, com a evolução do sensoriamento remoto, por exemplo, foram colocados em órbita satélites com sensores capazes de obter informações espectrais dos alvos da superfície da terra em várias bandas do espectro eletromagnético. Isso aumentou, consideravelmente, o número de dados espectrais sobre alvos a serem analisados e, conseqüentemente, o trabalho de análise de dados. Esse grande número de informações disponíveis de variáveis auxiliares motiva a utilização de métodos de interpolação combinados, já que a utilização dessa informação adicional possibilita melhorias no processo de predição espacial. Além disso, o desenvolvimento de softwares e pacotes, para análise estatística, tem contribuído para uma ampliação na criação e utilização de diferentes métodos de interpolação de dados espaciais.

### **2.3.1 Tipos de métodos de interpolação espacial**

Li e Heap (2011) categorizaram os métodos de interpolação espacial como: 1) métodos não geoestatísticos; 2) métodos geoestatísticos; e 3) métodos combinados.

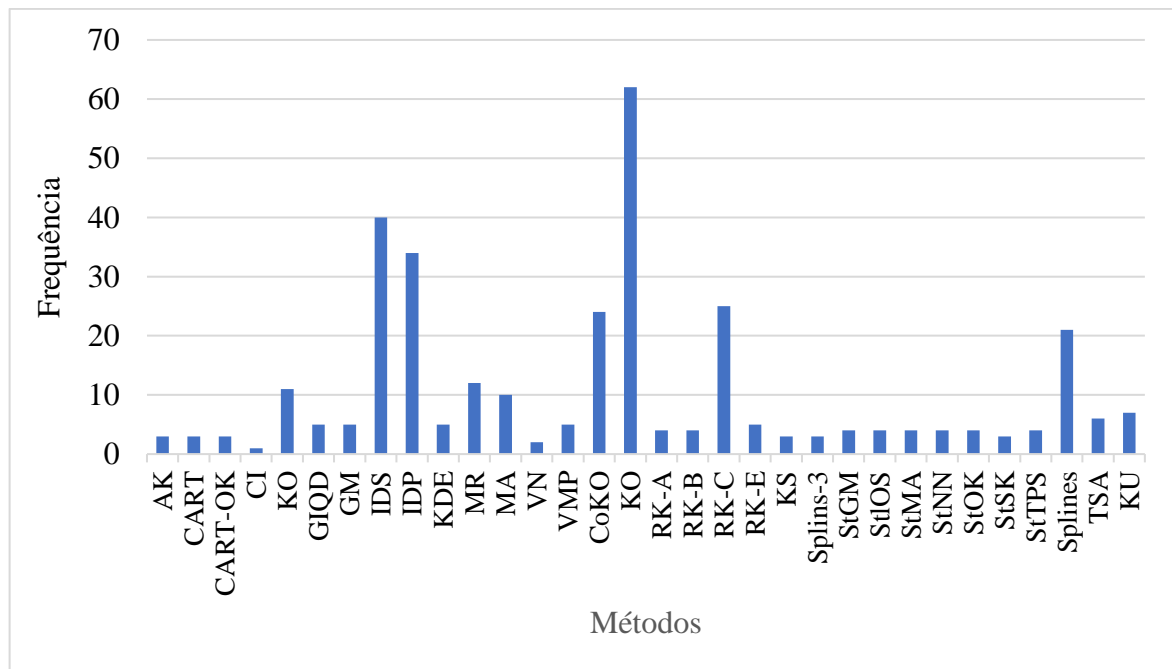
De maneira objetiva, os métodos não geoestatísticos são de fácil utilização, adotam modelos determinísticos que em sua maioria não apresenta medida de incerteza associada e, por essa razão, resultam em predições que não são seguramente ótimas. Métodos como o do vizinho mais próximo (VP) e o inverso do quadrado da distância (IQD) são exemplos desse tipo de método de interpolação espacial.

Por outro lado, os métodos geoestatísticos, que receberam o nome genérico de krigagem em homenagem a Daniel Krige, foram concebidos baseados no conceito de otimalidade, isto é, não viés do preditor e variância mínima do erro de predição. A krigagem leva em consideração, além da influência da vizinhança, o valor do atributo de interesse.

Devido à complexidade do fenômeno, à disponibilidade de informação auxiliar e ao objetivo de diminuir a variância do erro de predição, surge a possibilidade de se utilizar outros métodos aliados a krigagem, como é o caso da krigagem combinada com a regressão.

Para se ter uma dimensão do número de métodos de interpolação espacial existentes, Li e Heap (2011) analisaram 53 artigos, encontrando um total de 49 métodos de interpolação espacial diferentes, que estão apresentados na tabela 2.1. Esse grande número de métodos explica a grande dificuldade de se escolher qual deles utilizar. Definiram 5 informações essenciais para uma comparação metodológica: 1) delineamento da amostragem; 2) a média e coeficiente de variação (CV) da variável principal; 3) o tamanho da amostra; 4) a área da região estudada; e 5) medidas de qualidade de predição apropriadas. Relatam que apenas 18 dos 53 artigos apresentaram todas essas informações essenciais e que, por essa razão, somente 32 métodos de interpolação tiveram suas frequências observadas como mostra a Figura 2.3.

Figura 2.3 - Frequência de aplicação de 32 métodos de interpolação espacial, comparados em 18 artigos analisados.



Fonte: Li e Heap (2011).

É interessante observar, na figura 2.3, que o método mais frequentemente utilizado é a krigagem ordinária (KO), confirmando que esse método univariado é o método geoestatístico mais aplicado na prática.

Observa-se a existência de vários métodos combinados, evidenciando o interesse de pesquisadores por esses métodos. Porém, entre os três métodos mais frequentemente comparados dois são não geoestatísticos, o inverso do quadrado da distância (IQD) e o inverso da distância Ponderada (IDP), reforçando a impressão de que, muitas vezes, o pesquisador opta por métodos os quais domina, apesar de não serem métodos ótimos. Como descrito nos objetivos deste trabalho, nosso interesse recai sobre os métodos geoestatísticos e métodos combinados.

### **2.3.2 Comparação entre métodos geoestatísticos e métodos combinados**

Conforme Hengl, Heuvelink e Stein (2007), diversos estudos com técnicas combinadas foram desenvolvidos na década de 1990, comprovando que a utilização desses métodos combinados apresenta predições mais precisas do que a krigagem univariada.

Observa-se que não há dúvida quanto à escolha de métodos geoestatísticos univariados, Cressie (1993), Isaaks e Srisvastava (1989) e Journel e Huijbregts (1978), dentre outros, afirmam que atendidos os pressupostos de estacionaridade deve-se utilizar a krigagem simples (KS) nos casos nos quais a média paramétrica seja conhecida. É verdade que dificilmente se conhece a média paramétrica e, por essa razão, a utilidade da teoria que envolve a krigagem simples está relacionada à construção do arcabouço teórico para a krigagem. Recomenda-se preferir a krigagem ordinária (KO) à krigagem simples (KS) exatamente pelo fato de que a KO não requer o conhecimento da média paramétrica sobre a região de interesse. Então, além de se admitir que a média paramétrica seja desconhecida, impõe-se que esta seja constante. Dessa forma, nos casos em que a média é desconhecida e considerada constante deve-se utilizar a krigagem ordinária (KO).

Nos casos em que se encontra tendência na média, isto é, a média varia ao longo da região de interesse, Matheron (1969) propôs que fossem utilizadas as coordenadas como uma informação auxiliar, possibilitando, dessa forma, uma diminuição do erro de predição. O fato de incluir a informação das coordenadas para melhor explicar o fenômeno altera o sistema de equações de krigagem e, por essa razão, chega-se a um novo preditor para o caso. A essa nova krigagem, Matheron denominou de krigagem universal (KU). Como se utiliza informação

Tabela 2.1 - Classificação de 49 métodos de interpolação espacial encontrados em 53 artigos analisados por Li e Heap (2011, 2014), adaptado (\*métodos não-lineares)

Não geoestatístico	Geoestatístico		Outros métodos
	Univariado	Multivariado	
Vizinho mais próximo (VMP)	Krigagem simples (KS)	Krigagem universal (KU)	Análise de superfície de tendência combinada com krigagem. (ASTK)
Interpolações de rede irregulares triangulares (IRIT)	Krigagem ordinária (KO)	KS com variação da média local (KSml)	Taxa de lapso combinado com krigagem. (TLK)
Vizinhos naturais (VN)	Krigagem em bloco (KB)	Krigagem com deriva externa (KDE)	Modelos lineares generalizados (MLG)
Inverso da distância ponderada (IDP)	Krigagem fatorial (KF)	Cokrigagem simples (CKS)	Árvore de regressão combinada com krigagem (ARK)
Modelos de regressão (MR)	Krigagem dupla (KD)	Cokrigagem ordinária (CKO)	Preditor não-viesado (PNV)
Análise de superfície de tendência (AST)	Krigagem indicadora (KI)*	Cokrigagem ordinária padronizada (CKOP)	Krigagem com regressão (KR)
Splines e superfície de tendência local (STL)	Krigagem disjuntiva (KD)*	Krigagem componente principal (KCP)*	Gradiente com inverso do Quadrado da Distância (GIQD)
Splines planos (Splines P)	Krigagem baseada em modelos (KBM)*	Cokrigagem co-locada (CKC)*	Support vector machine (SVM)
Árvore de regressão (AR)		Krigagem em estratos (KE)*	Floresta aleatória (FA)
Séries de <i>Fourier</i> (SF)		Krigagem fatorial multivariada (KFM)*	Redes neurais (RN)
Taxa de lapso (TL)		Krigagem indicadora (KI)*	Redes neurais <i>fuzzy</i> (RNF)
		Cokrigagem indicadora (CKI)*	Árvore de decisão reforçada (ADR)
		Krigagem probabilística (KP)*	Combinação de SVM com IDP ou KO
			Combinação de FA com IDP ou KO
			Redes neurais regressão geral (RNRG)
			Combinação de RNRG com IDP ou KO
			Combinação de ADR com IDP ou KO

Fonte: Adaptado de Li e Heap (2011, 2014).

auxiliar para a predição, mesmo que esta informação seja da própria variável em estudo, incluí-se a KU entre as krigagens multivariadas.

Goovaerts (1997), Schabenberger e Gotway (2004) e Yamamoto e Landim (2015), mostram que quando a variável principal não está correlacionada com a variável auxiliar, a cokrigagem (CK), que é a krigagem multivariada, é um método equivalente a krigagem (K), isto é, as predições obtidas pela cokrigagem são idênticas às predições obtidas pela krigagem (K). Além disso, observa-se que a variância do erro de predição para a CK sempre será menor ou igual à variância de erro de predição para a K.

Hengl, Heuvelink e Stein (2003) argumentam que técnicas geoestatísticas com médias espaciais não constantes podem ser classificadas com base nas propriedades dos dados disponíveis em dois critérios: (i) se o número de variáveis auxiliares for pequeno e se todos os dados da malha amostral não estiverem disponíveis, recomendam utilizar a cokrigagem (CK) pontuando que essa técnica requer a estimação do variograma cruzado, isto é, maior esforço de modelização (ii) se a variável auxiliar for observada em todos os nós da malha amostral e for correlacionada à variável principal, sugerem a adoção da krigagem com média desconhecida. Ao apresentarem essa classificação, eles citam três nomes diferentes, a fim de denominar o método geoestatístico em questão, a saber: (i) krigagem com média desconhecida; (ii) krigagem com modelo de tendência e; (iii) krigagem com deriva externa, comprovando a multiplicidade de nomes, para um mesmo método, que, sem dúvida, gera conflito, justificando a busca por uma padronização e compreensão teórica deste método.

Hengl, Heuvelink e Stein (2003), ainda, baseados nas propriedades dos dados disponíveis, esclarecem que três métodos, computacionalmente adequados, podem ser utilizados: (i) krigagem universal (KU), em que a tendência é modelada como função das coordenadas; (ii) se, em vez de usar funções polinomiais, para modelar a tendência, por meio das coordenadas, esta for modelada por variáveis auxiliares externas, o termo krigagem com deriva externa (KDE) é utilizado; e (iii) krigagem com regressão (KR), em que se modela a tendência e o resíduo separadamente e, então, logo após, eles são somados. Estes autores, no intuito de diferenciar métodos computacionais confundem o leitor, pois, como será mostrado no referencial teórico (seção 3), a krigagem com deriva externa (KDE) é essencialmente igual à krigagem com regressão (KR) já que modelam a média com informação de uma variável auxiliar externa.

Eldeiry e Garcia (2010), com o objetivo de gerar mapas precisos de salinidade do solo, encontraram a combinação ótima de bandas espectrais de imagens de satélite (LANDSAT) para serem utilizadas como informação auxiliar. Logo em seguida, compararam as técnicas de

krigagem com regressão (KR) e cokrigagem (CK). Concluíram que a KR apresentou predições para a salinidade do solo mais precisas do que a CK, principalmente por ser capaz de capturar as pequenas variações na predição da salinidade do solo. Note que, neste caso tem-se uma variável externa, assim, a comparação entre CK e KR é correta. Entretanto, ao apresentarem a razão para um melhor desempenho obtido pela KR, não apresentaram um argumento que esclareça completamente (não convincente), por não compreenderem como as relações entre as variáveis se dão, isto é, não se faz menção às correlações existentes num campo aleatório.

Knotters, Brus e Voshaar (1995) compararam o desempenho da krigagem (K) versus krigagem combinada com regressão (KR) e cokrigagem (CK), concluindo que: (i) na KR, a relação entre a variável principal e a auxiliar pode ter qualquer forma e é fisicamente interpretável. Porém, na CK não se consegue utilizar relações fisicamente interpretáveis; e (ii) KR é computacionalmente menos exigente do que CK. Uma desvantagem da KR é que ela assume que os erros de previsão não são sistemáticos, não são autocorrelacionados e não são correlacionados com a variável.

Ahmed e De Marsily (1987) avaliaram quatro métodos: 1) krigagem combinada com regressão linear, definida como krigagem com regressão - tipo A (KR-A); 2) cokrigagem (CK); 3) krigagem com deriva externa (KDE); e 4) krigagem com regressão - tipo B, chamada de “*kriging with guess field*” (KR-B). De forma geral, a krigagem com regressão tipo A (KR-A) é baseada na regressão dos pontos onde a variável principal não foi amostrada, mas a variável auxiliar foi, seguida de uma krigagem ordinária sobre os valores regredidos; enquanto que na krigagem com regressão tipo B (KR-B), um procedimento muito semelhante é aplicado, isto é, é feita uma regressão como no tipo A, num segundo passo os resíduos são calculados e, finalmente, é feita separadamente a krigagem ordinária sobre os resíduos e a krigagem ordinária sobre os valores regredidos, somando estes dois valores em cada ponto para se obter os valores preditos. Tais autores concluíram que:

- a) a cokrigagem (CK) é um método mais rigoroso e requer um número menor de pressuposições. Entretanto todas as variáveis devem ter um número significativo de dados no mesmo ponto, para se ter uma boa estimativa dos variogramas cruzados. Além disso, demandam maior capacidade computacional.

Note que, estes autores recomendam que para a utilização da CK todas as variáveis devem ter dados no mesmo ponto, informação que é conflitante a apresentada por Hengl, Heuvelink e Stein (2003), o que gera confusão e dificulta a escolha do melhor método de krigagem.

- b) a krigagem combinada com regressão (KR-A) deve ser utilizada somente quando duas variáveis são avaliadas, quando os resíduos da regressão sejam não correlacionados espacialmente e quando os coeficientes de correlação entre as variáveis forem altos. Incluem, ainda, duas observações práticas: a) todas as variáveis devem ter um número significativo de dados no mesmo ponto e b) demandam esforço computacional mínimo.
- c) Afirmam que, da mesma maneira que a cokrigagem, a krigagem com deriva externa pode ser usada para um número ilimitado de variáveis e que a grande vantagem desse método é não precisar de nenhum valor coletado em um mesmo ponto entre as variáveis.

Como dito anteriormente a KDE é essencialmente igual à KR pois ambos modelam a tendência a partir de informações de uma variável auxiliar externa. Desta forma, mostra a confusão e a incompreensão teórica generalizada das técnicas de krigagem. Acrescenta-se a este fato a recomendação de não precisar de nenhum valor coletado em um mesmo ponto, o que é um contrassenso já que não é possível, sob essa condição, calcular a correlação simples não espacial (CS) entre a variável principal e a variável auxiliar. Uma correlação simples não espacial (CS) forte, como será visto, é a condição necessária para a utilização de variáveis auxiliares externas.

- d) Por fim, concluem que a krigagem com regressão - tipo B, chamada de “*kriging with guess field*” (KR-B), não mostrou, pelo menos para o caso estudado, nenhuma característica ou vantagem que justificasse sua utilização.

Os autores criaram casos muito particulares para um mesmo tipo de krigagem ao estabelecerem as krigagens com regressão tipo A e tipo B, e ainda no final concluem que em uma delas (tipo B), não é adequada para o caso em estudo. Este tipo de conclusão gera mais dúvidas em relação aos métodos do que o seu entendimento, mais uma razão para um estudo teórico que permita compreender a fundo os principais tipos de krigagem.

Odeh, McBratney e Chittleborough (1994, 1995) compararam a performance e a relação custo-benefício de sete métodos de interpolação espacial, utilizando variáveis auxiliares externas, obtidas de Modelos Digitais de Elevação (MDE), com o intuito de prever 4 diferentes atributos do solo. Os métodos testados foram: i) regressão linear múltipla (RLM); ii) krigagem ordinária (KO); iii) krigagem universal (KU); iv) cokrigagem (CK); v) krigagem com



regressão - Modelo A (KR-A); 6) krigagem com regressão - Modelo B (KR-B); e 7) krigagem com regressão - Modelo C (KR-C). A krigagem com regressão do tipo C (KR-C), é semelhante ao tipo B, mas apenas se calcula os resíduos e então soma-se os valores preditos e os valores obtidos por krigagem para obter o valor predito final. Os autores detectaram que tanto a cokrigagem como a krigagem com regressão podem ser recomendadas para estudos dessa natureza. Entretanto, a krigagem com regressão - Modelo C foi, de forma geral, a que melhores resultados apresentou, por ser mais flexível do que a cokrigagem. Entretanto, enfatizaram que não foi o melhor método para todas as variáveis em estudo. Dessa forma, recomendaram que cada caso deve ser cuidadosamente examinado antes de se decidir pelo melhor método. Note que, dentre os métodos comparados está a krigagem universal (KU) que utiliza informação auxiliar interna (coordenadas) para modelar a tendência, o que mostra mais uma vez a incompreensão sobre os métodos de krigagem utilizados, já que a variável auxiliar utilizada neste estudo é externa. Concluem corretamente que a CK ou a KR são métodos adequados para este caso, mas, ao concluir que a KR-C é mais flexível do que a CK, fazem uma particularização desnecessária já que a KR, independentemente do tipo, sempre será mais “flexível”, isto é, não exigirá a modelização de semivariogramas cruzados, como é o caso da CK.

As conclusões apresentadas pelos autores anteriormente mencionados são uma prova cabal de que não existe um critério objetivo de escolha de qual método de krigagem que seja mais adequado. De início, contradizem uma das conclusões apresentadas por Ahmed e De Marsily (1987), ao utilizarem mais de duas variáveis (empregaram 4 variáveis) para o método de KR-A; não conseguem definir qual é o melhor método dentre os estudados e, na conclusão final, afirmam que “cada caso é um caso”. Portanto, não chegam a uma conclusão que resolva o problema de apresentar critérios simples para a escolha de uma krigagem.

De acordo com Isaaks e Srivastava (1989), a seleção de um método de predição espacial apropriado para os dados disponíveis é uma questão crítica, não é uma tarefa fácil. Argumentam que essa dificuldade está ligada aos diversos fatores que interferem no desempenho dos interpoladores, incluindo: a variável em estudo, a configuração espacial dos dados e os pressupostos subjacentes dos métodos de interpolação espacial. Afirmam, ainda, que não há uma resposta simples quanto a essa escolha, exatamente porque um método é considerado "melhor" apenas para situações específicas. As afirmações de Isaaks e Srivastava (1989) reforçam novamente a necessidade da proposição de um método teórico e, se possível, de simples aplicação para auxiliar os pesquisadores na compreensão dos métodos de krigagem multivariados e, por consequência, auxilia-los na escolha do melhor método de krigagem para cada caso específico.

Como já dito, Li e Heap (2011) fizeram uma revisão bibliográfica dos métodos de interpolação espacial, selecionando 53 artigos que comparavam o desempenho dos referidos métodos. Destacaram duas questões: (i) os métodos de interpolação espacial são largamente aplicados em Ciências Ambientais, com 49 métodos empregados, incluindo os métodos combinados; (ii) em diferentes artigos compararam-se conjuntos de diferentes métodos, o que tornou difícil tirar conclusões gerais. Constataram que, dentre os métodos geoestatísticos, a krigagem ordinária (KO) e a cokrigagem ordinária (CKO) são os métodos mais frequentemente usados. Entretanto, não apresentaram novas conclusões quanto à indicação de critérios objetivos para a escolha do método de interpolação mais adequado. Dedicaram-se a estudar os fatores que afetam o desempenho dos métodos de interpolação espacial, conforme citação *ipsis litteris* abaixo:

Muitos fatores afetam o desempenho dos métodos de interpolação espacial, entre os quais se incluem:

- 1) **Densidade de amostragem** (BURROUGH; MCDONNELL, 1998; DIRKS et al., 1998; ENGLUND et al., 1992; HARTKAMP et al., 1999; ISAAKS; SRIVASTAVA, 1989; STAHL et al., 2006).
- 2) **Distribuição espacial da amostra** (COLLINS; BOLSTAD, 1996).
- 3) **Agrupamento de amostras** (ISAAKS; SRIVASTAVA, 1989; LASLETT, 1994; ZIMMERMAN et al., 1999).
- 4) **Tipo de superfície** (MACEACHREN; DAVIDSON, 1987; STEIN et al., 1988; VOLTZ; WEBSTER, 1990; ZIMMERMAN et al., 1999).
- 5) **Variância dos dados** (COLLINS; BOLSTAD, 1996; MARTÍNEZ-COB, 1996; SCHLOEDER et al., 2001).
- 6) **Normalidade dos dados** (CRESSIE, 1993; ROSSI et al., 1992; WEBER; ENGLUND, 1992).
- 7) **Qualidade da informação secundária** (AHMED; DE MARSILY, 1987; BISHOP; MCBRATNEY, 2001; COLLINS; BOLSTAD, 1996; GOOVAERTS, 1997, 2000; JUANG; LEE, 1998; MARTÍNEZ-COB, 1996).
- 8) **Estratificação** (BRUS et al., 1996; VOLTZ; WEBSTER, 1990).
- 9) **Tamanho ou resolução da grade** (HEN et al., 2005; HERNANDEZ-STEFANONI; PONCE-HERNANDEZ; GL, 2007).

Interações entre diferentes fatores, também, podem existir (ZIMMERMAN et al., 1999). As fontes de erros, em dados espacialmente contínuos e fatores que afetam a confiabilidade de dados, espacialmente contínuos, foram discutidas por Burrough e McDonnell (1998). Entretanto não existem estudos que mostrem resultados consistentes sobre como esses fatores afetam o desempenho dos interpoladores espaciais (LI; HEAP, 2011).

Por fim, Li e Heap (2011), ao estudarem esses fatores, vislumbram a possibilidade de propor um método, baseado nas características comuns e nas diferenças existentes entre os métodos de interpolação espacial, deixando espaço para estudos que objetivam definir critérios teóricos para a seleção de métodos ótimos de interpolação espacial.

### **2.3.3 Métodos de seleção de interpoladores espaciais**

Pôde-se observar na subseção anterior que, já em 2011, havia espaço para estudos visando a definir critérios para a escolha de krigagens. Após essa data, outros artigos tentaram preencher essa lacuna, porém, como será constatado, ainda de forma parcial e insipiente, permanecendo, assim, o espaço para a proposição de critérios mais abrangentes, que é um dos objetos deste estudo.

Nesta subseção, apresentam-se objetivamente dois instrumentos para a seleção de interpoladores espaciais encontrados na literatura. A primeira apresenta um fluxograma esquemático que auxilia na aplicação da krigagem com regressão. O outro apresenta uma árvore de decisão que permite escolher um método de interpolação espacial com base em diversas características metodológicas.

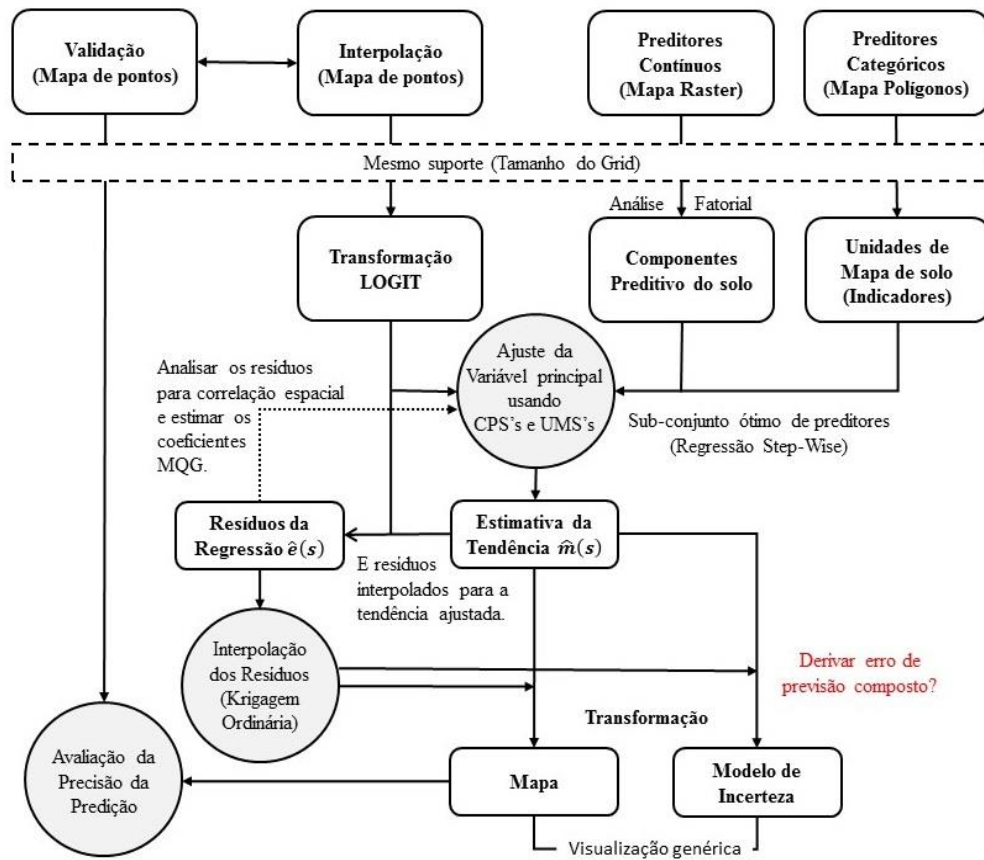
#### **2.3.3.1 Primeira abordagem: framework genérico para atributos do solo**

Um framework genérico para predição espacial de variáveis do solo, baseado em krigagem com regressão, foi proposto por Hengl, Heuvelink e Stein (2004). Para tanto, sua gênese foi estruturada sob quatro objetivos: (i) reduzir a multicolinearidade entre preditores; (ii) assegurar a normalidade dos resíduos; (iii) explorar o "melhor" dos dados, isto é, considerar conjuntamente a correlação entre mapas auxiliares e a dependência espacial; e (iv) evitar previsões fora da faixa de valores razoáveis.

A partir de então, esses autores selecionaram um conjunto de técnicas consideradas robustas que, utilizadas conjuntamente, permitem transformar, ajustar, interpolar e visualizar os dados. Um diagrama esquemático, mostrando o Framework genérico proposto, é apresentado na Figura 2.4.

Nota-se que, apesar de ser nomeado como um framework genérico, a proposta apresentada por esses autores é bastante restrita, pois aborda apenas o caso da krigagem com regressão, para predição espacial em variáveis de solo, não apresentando qualquer critério objetivo para a escolha dessa forma de krigagem.

Figura 2.4 - Diagrama esquemático: Framework genérico para krigagem com regressão



Fonte: Hengl, Heuvelink e Stein (2004).

### 2.3.3.2 Segunda abordagem: árvore de decisão para seleção de métodos de interpolação

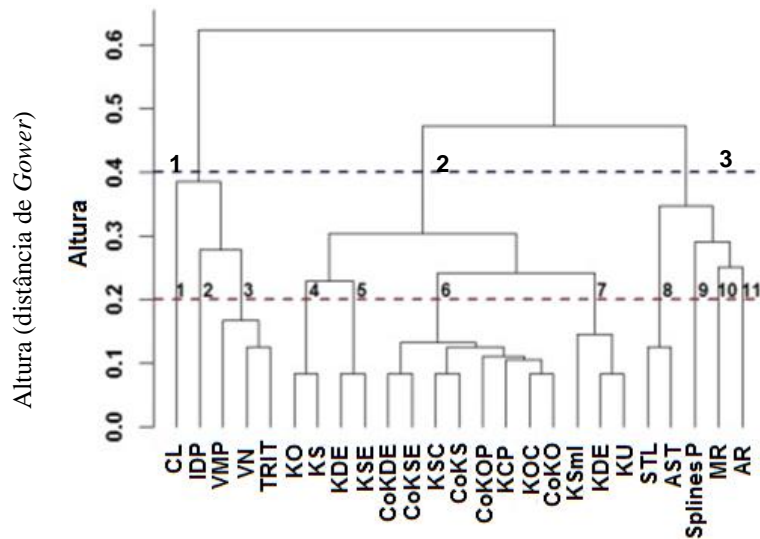
Conforme dito anteriormente, Li e Heap (2011) apresentaram a mais ampla revisão bibliográfica sobre comparação de métodos de interpolação espacial encontrada nesta revisão de literatura. Comparando 53 artigos, identificaram 49 diferentes métodos de interpolação espacial, entretanto, efetivamente, somente 18 desses artigos foram comparáveis.

Li e Heap (2014), dando continuidade ao trabalho anterior, propuseram um conjunto de critérios para a seleção de métodos de interpolação espacial. Para tanto, realizaram um estudo de similaridade inspirado na taxonomia, construindo uma árvore de classificação que, por sua vez, constituiu-se na base para a criação de uma árvore de decisão.

Em linhas gerais, da análise da similaridade entre 25 métodos de interpolação considerados comparáveis (dentro dos 49 métodos identificados) realizaram uma análise de

agrupamento hierárquico baseada na distância de *Gower*, cujos resultados são apresentados pela Figura 2.5.

Figura 2.5 - Classificação de 25 métodos de interpolação espacial, baseada em uma análise de agrupamento hierárquico de cluster.



Fonte: Li e Heap (2014).

Os autores consideram duas situações em que: (i) se uma linha tracejada for traçada à altura de 0,2 na figura 2.5, esses métodos podem ser classificados em 11 grupos, (ii) se essa linha tracejada for colocada à altura de 0,4 na figura 2.5 configuram-se três grandes grupos. O primeiro, contendo os grupos 1, 2 e 3 do nível 0,2, são métodos não geoestatísticos, determinísticos, univariados, locais e não utilizam coordenadas e informação secundária. O segundo consiste nos grupos 4, 5, 6 e 7 que são métodos geoestatísticos, estocásticos, locais, exatos e graduais. O último, formado pelos grupos 8, 9, 10 e 11, agrupa métodos não geoestatísticos, multivariados, estocásticos e inexatos. Assim, hierarquizadas as características dos métodos e definidos os critérios de seleção dos interpoladores, a escolha dos pesquisadores é direcionada pelos critérios definidos na árvore de decisão apresentada pela Figura 2.6.

De fato, o instrumento finalmente utilizado para a escolha do interpolador mais adequado para cada caso é a árvore de decisão para a seleção de interpoladores espaciais, reproduzido pela Figura 2.6. É com base nos critérios hierarquizados encontrados na Figura 2.6 que o pesquisador é direcionado ao método de interpolação espacial definido como mais adequado para cada caso por esse método.

Figura 2.6 - Árvore de decisão para seleção de métodos de interpolação espacial.

1. Dados ou resíduos com estrutura espacial ou variograma não linear	
2. Estimativa da variável contínua	
3. Não há informações de variáveis secundárias disponíveis	
4. Média global conhecida.....	KS
4.* Média global desconhecida e usando meios locais.....	KO
3.* Informação das variáveis secundárias disponíveis	
5. Média global conhecida	
6. A variável secundária é apenas categórica	
7. Estratificação.....	KSE
7.* Não estratificação.....	KSml
6.* A variável secundária não é apenas categórica	
8. Estratificação.....	CKSE
8.* Não estratificação	
9. Amostras escassas de variáveis secundárias e múltiplas amostras na janela de pesquisa	
9.* Amostras densas de variável secundária e única amostra na janela de busca.....	KSC
5.* Média global desconhecida e usando meios locais	
10. Informações secundárias disponíveis para cada ponto a ser estimado	
11. A tendência espacial é aparente e apenas as coordenadas disponíveis.....	KU
11.* Outras variáveis secundárias disponíveis	
12. Uma aparente relação global com a variável secundária .....	KSml
12.* A relação não é tão evidente.....	KDE
10.* Informações secundárias não disponíveis para cada ponto a ser estimado variáveis secundárias incluindo uma variável categórica	
14. Somente uma variável categórica disponível	
15. Amostras múltiplas na janela de pesquisa.....	KOE
15.* Amostras densas de variável secundária e amostra única em busca Janela	
14.* Outras informações secundárias disponíveis.....	CKDE
13.* Variáveis secundárias sem variável categórica	
16. Amostras escassas de variáveis secundárias e múltiplas amostras na janela de pesquisa	
17. Muitas variáveis secundárias e PCA necessário.....	KCP
17.* PCA não é necessário para reduzir o número de variáveis secundárias	
18. Evitar pesos negativos e limitar artificialmente o efeito de variável.....	CKOP
18.* Aceite acima de dois inconvenientes.....	CKD
16.* Amostras densas de variável secundária e amostra única em busca Janela.....	KOC
2.* Estimativa de variável categórica ou avaliação de incerteza.....	KI & suas variantes
1.* Dados ou resíduos não mostram estrutura espacial ou variograma linear ou o tamanho da amostra é muito pequeno para obter um variograma confiável	
19. Não há variáveis secundárias disponíveis	
20. Estimativa abrupta aceitável	
21. Utilização de amostra única para estimativa.....	VMP
21.* Usando amostras múltiplas para a estimativa	
22. Usando três amostras para estimativa.....	IRIT
22.* Usando mais de três amostras vizinhas naturais para estimativa.....	VN
20.* Estimativa abrupta inaceitável	
23. Utilização de mais de três amostras de vizinhos naturais ponderadas por área.....	VN
23.* Utilização das amostras mais próximas ponderadas por distância.....	IDP
19.* Variável secundária disponível	
24. Utilização de informações de coordenadas	
25. Só coordena informações usadas com estimativa inexata	
26. Usando amostra próxima.....	Splines & STL
26.* Usando todas as amostras.....	AST
25.* Pode usar outras variáveis com estimativa exata ou inexata.....	Splines P
24.* Não usar informações de coordenadas	
27. Apenas informações secundárias categóricas disponíveis	
28. Apenas uma variável disponível.....	CI
28.* Várias variáveis disponíveis .....	AR
27.* Informação secundária contínua disponível	
29. Informação univariada ou múltipla secundária.....	MR
29.* Exigir informações secundárias múltiplas.....	AR

Fonte: Li e Heap (2014).

Para ilustrar a aplicação da árvore de decisão, apresentada pela Figura 2.6, vai-se retornar ao caso apresentado por Ahmed e De Marsily (1987), cujo objetivo era gerar mapas da distribuição espacial da Transmissividade (T) de um aquífero. Serão comparados os critérios apresentados pela Figura 2.6 com as características do caso em estudo. Assim, temos:

- a) **Variável principal:** Transmissividade (T), em  $m^2 \cdot h^{-1}$ , medida pelos Testes de Bombeamento (Testes de Vazão) em 72 pontos.
- b) **Variável auxiliar:** Capacidade Específica (CE), em  $m^3 \cdot h^{-1} \cdot m^{-1}$ , já conhecida de 235 poços, dentre os quais 56 eram comuns a ambas as variáveis.

Para facilitar a aplicação do exemplo, divide-se a Figura 2.6 em outras duas figuras. A primeira é a Figura 2.7 que mostra o direcionamento feito pela árvore de decisão para definição dos cinco primeiros critérios escolhidos, obtidos em função das características do fenômeno estudado nesse exemplo. Já a Figura 2.8, mostra a sequência do direcionamento feito pela árvore de decisão até a definição do método de interpolação mais adequado para o exemplo.

Figura 2.7 - Exemplo de aplicação dos 5 primeiros critérios da árvore de decisão apresentada pela Figura 2.6.

1. Dados ou resíduos com estrutura espacial ou variograma não linear	
2. Estimativa da variável contínua	
3. Não há informações de variáveis secundárias disponíveis	
4. Média global conhecida.....	KS
4.* Média global desconhecida e usando meios locais.....	KO
3.* Informação das variáveis secundárias disponíveis	
5. Média global conhecida	
6. A variável secundária é apenas categórica	
7. Estratificação.....	KSE
7.* Não estratificação.....	KSml
6.* A variável secundária não é apenas categórica	
8. Estratificação.....	CKSE
8.* Não estratificação	
9. <u>Amostras esparsas</u> de variáveis secundárias e <u>múltiplas amostras</u> na janela de pesquisa	
9. * <u>Amostras densas</u> de variável secundária e única amostra na janela de busca.....	KSC
5.* Média global desconhecida e usando meios locais	
10. Informações secundárias disponíveis para cada ponto a ser estimado	
11. A tendência espacial é aparente e apenas as coordenadas disponíveis.....	KU
11.* Outras variáveis secundárias disponíveis	
12. Uma aparente relação global com a variável secundária .....	KSml
12.* A relação não é tão evidente.....	KDE
10.* Informações secundárias não disponíveis para cada ponto a ser estimado variáveis secundárias incluindo uma variável categórica.	

Fonte: Li e Heap (2014).

Admitindo que os dados de Transmissividade (T) apresentem estrutura espacial de natureza contínua e que exista informação de uma variável auxiliar, o pesquisador é dirigido à metade superior da Figura 2.7 até o critério **3\***. O próximo critério indicado pela árvore de decisão é o critério 5 que diz respeito ao conhecimento da média global. Como não se conhece a média paramétrica ou média global, o pesquisador é direcionado ao critério **5\***. Note que, ao se chegar a este ponto surge a dúvida: “deve-se seguir a sequência numérica ou o critério logo a seguir pulando de **5\*** para o critério **10\***?”, o que gera grande confusão. Admite-se que o correto seja seguir o critério logo em seguida, assim, passa-se para o critério 10. Como não se atende ao critério 10 e vai-se continuar na sequência, então, o critério 11 é verificado, isto é, existe tendência? Caso sim, a árvore de decisão recomenda a KU. A questão é que a tendência pode ser modelada tanto por informação de variáveis auxiliares internas (coordenadas) como que com base em informação de variáveis auxiliares externas (covariáveis), então por que deve-se utilizar a KU?

No caso em estudo não existe a tendência espacial, então, deve-se ir para **11\*** e o critério pergunta se outras variáveis secundárias estão disponíveis. Caso sim, passa-se para o critério 12 que pergunta se existe “aparente relação global” com a variável auxiliar anterior. Caso sim, recomenda-se krigagem simples com média local, caso não, a árvore de decisão recomenda a KDE. O grande problema dos critérios 11 e 12 se deve a imprecisão do que seja relação. O que é uma aparente relação ou o que significa relação evidente? Primeiro não se explicita como as diferentes relações em um campo aleatório são medidas, por outro lado, caso estas relações existam a partir de que valores deve-se considera-las? Ou seja este critério, além de confuso é impreciso.

Retornando ao critério de disponibilidade de dados da variável auxiliar, caso não haja informação da variável auxiliar para cada ponto a ser predito, o pesquisador será direcionado para **10\***. Esse é o caso em estudo, pois somente 56 dos 72 pontos são comuns. Como também, as variáveis não são categóricas, o pesquisador é direcionado ao critério **13\*** na árvore de decisão, agora na Figura 2.8.

Observa-se que o próximo critério traz consigo 3 conceitos imprecisos: amostras esparsas, múltiplas amostras e amostras densas, dificultando sua utilização. Mas, se o pesquisador tiver à mão muitas variáveis secundárias (o que são “muitas?”), recomenda-se krigagem combinada com a análise de componentes principais. Mas qual krigagem? Krigagem simples, ordinária, universal? Outra? Ou seja, a árvore de decisão apresentada pela Figura 2.6, é um método confuso e impreciso.



Figura 2.8 - Exemplo de aplicação do critério 10\*, 13\* e 16\* da Figura 2.6.

10.*	Informações secundárias não disponíveis para cada ponto a ser estimado	
13.	Variáveis secundárias incluindo uma variável categórica	
14.	Somente uma variável categórica disponível	
15.	Amostras múltiplas na janela de pesquisa.....	KOE
15.*	Amostras densas de variável secundária e amostra única em busca Janela	
14.*	Outras informações secundárias disponíveis.....	CoKDE
13.*	Variáveis secundárias sem variável categórica	
16.	Amostras esparsas de variáveis secundárias e múltiplas amostras na janela de pesquisa	
17.	Muitas variáveis secundárias e PCA necessário.....	KCP
17.*	PCA não é necessário para reduzir o número de variáveis secundárias	
18.	Evitar pesos negativos e limitar artificialmente o efeito de variável.....	CoKOP
18.*	Aceite acima de dois inconvenientes.....	CoKD
16.*	Amostras densas de variável secundária e amostra única em busca Janela.....	CKOCC
2.*	Estimativa de variável categórica ou avaliação de incerteza.....	KI & suas variantes

Fonte: Li e Heap (2014).

No exemplo aqui desenvolvido, só uma variável secundária está disponível com 235 pontos. Assim, se for considerada densa, finalmente chega-se ao método recomendado pela árvore de decisão para analisar a Transmissividade de um aquífero: cokrigagem ordinária colocada (CKCC). Observe que apesar de o método indicado pela árvore de decisão proposta por Li e Heap (2014) coincidir com um dos 4 métodos comparados por Ahmed e De Marsily (1987), os critérios apresentados por estes autores são confusos, imprecisos e não são baseados em critérios teóricos.

Motivados pelas questões discutidas nesta revisão de literatura fica evidente:

- a) A abrangência e aplicabilidade da Geoestatística.
- b) A dificuldade na escolha do melhor interpolador espacial que inclua variáveis auxiliares e garanta que esse interpolador tenha variância do erro de predição mínima.
- c) A evidente confusão presente na literatura quanto ao preditor que deve ser usado para incorporar informações das variáveis auxiliares.
- d) A inexistência de um critério geral teórico simples, que auxilie pesquisadores na escolha de preditores de krigagem linear multivariados ou na escolha de métodos combinados.
- e) A adoção de métodos alternativos para a inclusão das informações de variáveis auxiliares em estudos geoestatísticos.
- f) A necessidade de estudos teóricos para mostrar que estas técnicas alternativas, mesmo lógicas, não garantem o menor erro de predição como é o caso da krigagem, desvirtuando a natureza original dos preditores de krigagem.

### 3 REFERENCIAL TEÓRICO

Conhecer os efeitos que algumas variáveis exercem, ou que parecem exercer, sobre outras é uma das estratégias mais utilizadas pela Ciência para compreender os fenômenos que a cerca. Para a Geoestatística não é diferente, pois se pode resumir suas atividades ao esforço de modelar a relação entre variáveis, levando em consideração a existência de dependência espacial. Nessa seção, apresentam-se alguns aspectos da teoria de regressão sob a perspectiva da Geoestatística, seguidos da definição de campo aleatório e da caracterização de um campo aleatório gaussiano, finalizando-se com o detalhamento da abordagem geoestatística clássica (AGC) e alguns resultados sobre correlação de Pearson, em especial o teorema da gaussianidade local.

#### 3.1 Modelo de regressão

De acordo com Draper e Smith (2014), Graybill (1976) e Hoffman (2016), um modelo de regressão é aquele que pode ser utilizado, para determinar uma variável  $Y$ , pelo conhecimento de uma variável  $X$  e é usualmente escrito na forma da equação (3.1):

$$Y = \mu(X) + \varepsilon, \quad (3.1)$$

em que  $Y$ ,  $X$  e  $\varepsilon$  são variáveis aleatórias,  $\mu(X)$  é função de  $X$ , definida num domínio  $D$ .  $Y$  é chamada de variável dependente ou variável resposta, enquanto  $X$  recebe o nome de variável independente, variável regressora ou ainda variável preditora. O modelo dado em (3.1) pode ser dividido em dois componentes: (i) determinístico, que é definido pela função  $\mu(X)$  cuja forma funcional é conhecida, podendo ser linear ou não linear, mas nessa tese apenas a forma linear será considerada, a saber  $\mu(X) = \beta_0 + \beta_1 X$ , em que  $\beta_0$  e  $\beta_1$  são denominados parâmetros, sempre desconhecidos; e (ii) componente aleatório ou estocástico, formado por  $\varepsilon$  não observável e com  $E(\varepsilon) = 0$ . Além disso, alguma pressuposição sobre sua distribuição pode ser feita e considerada como parte do modelo. Se  $Y$  representa, digamos, a produtividade de uma cultura e, se  $X$  representa, por exemplo, quantidade de adubo, então  $\mu(X)$  é o valor predito da produtividade dada a quantidade de adubo.

Em relação ao número de variáveis, o modelo de regressão linear é denominado simples, como já mostrado acima, quando apenas uma variável preditora é considerada no modelo. Dessa forma o modelo será:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X + \varepsilon, \quad (3.2)$$

em que  $\beta_0$  e  $\beta_1$  são os parâmetros desconhecidos como já dito.

Quando se admite que o valor da variável dependente é função linear de duas ou mais variáveis regressoras ou preditoras, temos uma regressão linear múltipla e o modelo estatístico com  $p$  variáveis preditoras  $(X_1, X_2, \dots, X_p)$  ficará:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_p X_p + \varepsilon. \quad (3.3)$$

Esses modelos, (3.1), (3.2) e (3.3), também são chamados de modelo populacional.

Outra possibilidade é considerar o modelo amostral, representado ilustrativamente pela Tabela 3.1, em que: # identifica o ponto observado;  $Y$  é a variável resposta e  $X_i, i = 1, \dots, p$  são as  $p$  variáveis preditoras.

Tabela 3.1 - Representação do modelo amostral (modelo para os dados observados).

#	$Y$	$X_1$	$X_2$	...	$X_p$
1	$Y_1$	$x_{11}^*$	$x_{12}$	...	$x_{1p}$
2	$Y_2$	$x_{21}$	$x_{22}$	...	$x_{2p}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
$n$	$Y_n$	$x_{n1}$	$x_{n2}$	...	$x_{np}$

\* $x_{ij}$  é o termo geral representando a  $i$ -ésima observação da  $j$ -ésima variável preditora.

Fonte: Do autor (2018).

Uma maneira mais simples e elegante de descrever o modelo de regressão linear amostral é em sua forma matricial. Quando se considera a Geoestatística, cujos modelos são naturalmente múltiplos, essa forma é preferível. Este modelo tem os seguintes vetores e matrizes:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ \vdots \\ Y_n \end{bmatrix}; \quad \mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1p} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{np} \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix}; \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}.$$

$\mathbf{Y}$  é o vetor  $(n \times 1)$  da variável aleatória  $Y$ ,  $\mathbf{X}$  a matriz  $(n \times (p + 1))$  com as  $n$  realizações das  $p$  variáveis preditoras,  $\boldsymbol{\beta}$  o vetor  $((n + 1) \times 1)$  de parâmetros desconhecidos e  $\boldsymbol{\varepsilon}$  o vetor

$(n \times 1)$  com os erros não observáveis. Dessa maneira, o modelo de regressão linear amostral na sua forma matricial é:

$$Y = X\beta + \varepsilon. \quad (3.4)$$

Um caso particular do modelo amostral dado em (3.4) frequentemente adotado na Estatística não espacial, também chamada de Estatística clássica, é:

- a) A variável resposta  $Y$  é função linear das variáveis preditoras.
- b) Após a amostra ser realizada os valores das variáveis explicativas ou preditoras serão conhecidos e portanto, são fixados.
- c)  $E[\varepsilon] = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{0}$  é um vetor de zeros de dimensão  $(n \times 1)$ .
- d) Os erros são homoscedásticos, isto é,  $E(\varepsilon_i) = E(\varepsilon_i^2) = \sigma^2$ .
- e) Os erros são independentes, isto é,  $Cov(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = E(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = 0, i \neq j$ .
- f) Os erros têm distribuição normal.

Essas suposições são feitas para a regressão linear simples e não apenas para a regressão linear múltipla, no caso não espacial.

Veja que, combinando-se d) e e) tem-se que a  $Var(\varepsilon_i) = E(\varepsilon\varepsilon') = I\sigma^2$ ,  $I$  é uma matriz identidade de ordem  $n$ . Portanto, considerando-se, também, f) tem-se  $\varepsilon \sim N(\mathbf{0}, I\sigma^2)$  e  $Y \sim N(X\beta, I\sigma^2)$ , pois,  $E(Y) = \mu = X\beta$  e a  $Var(Y) = Var(\varepsilon) = I\sigma^2$ .

Na Geoestatística as exigências d), e) e f) não serão feitas, fazendo o vetor  $Y$  ter uma distribuição qualquer com média  $X\beta$  e matriz de covariâncias  $\Sigma$ , como será visto na próxima seção.

Outros objetivos, para a aplicação de modelos de regressão, além de fazer previsões em locais não amostrados, podem ser: (i) estimar parâmetros, (ii) realizar inferências sobre eles, tais como intervalos de confiança e testes de hipóteses, e (iii) selecionar variáveis, no caso de se ter um número elevado de variáveis regressoras que influenciam o modelo.

### 3.2 Modelo Geoestatístico

Para a Geoestatística, o local onde a variável aleatória é observada interessa, pois, o valor que ela assume depende de sua localização no espaço. Assim, conhecer a estrutura de

dependência espacial de um fenômeno possibilita previsões com menores erros (MATHERON, 1963). Alguns exemplos ilustrativos de aplicação prática dessas ideias são:

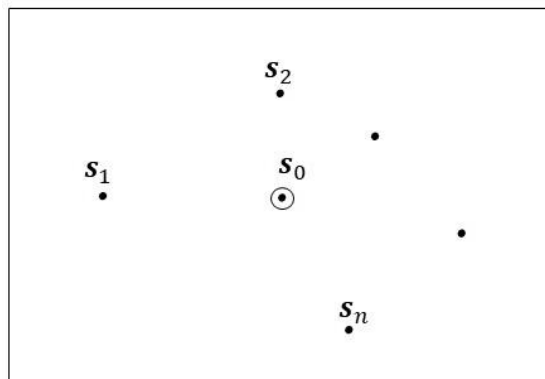
- a) Vaziri, Hamidi e Sayadi (2018) utilizaram a Geoestatística para desenvolver um modelo de avaliação de risco geológico-geotécnico em minas de carvão subterrâneas, em que o objetivo é a identificação de possíveis áreas de alto risco geológico-geotécnico, usando um sistema GIS integrado no módulo geoestatístico presente no software ArcGIS. (Iniciou-se com um exemplo em Engenharia de Minas, já que foi onde surgiram as ideias da Geoestatística)
- b) Xu et. al. (2018) utilizaram krigagem com regressão (KR) para mapear o teor de nutrientes presentes no solo, a fim de auxiliar pequenos agricultores a implementar manejos de solo, específicos para cada área de estudo. Para tanto, analisaram os efeitos da resolução espacial entre diferentes imagens de sensoriamento remoto em modelos de previsão de nitrogênio total (NT) do solo, em duas aldeias de pequenos agricultores, Kothapally e Masuti, no sul da Índia.
- c) Avaliação da variabilidade espaço-temporal de poluentes atmosféricos no Egito utilizando-se médias mensais da rede de monitoramento da qualidade do ar de 2011 a 2015. Mapas geoestatísticos foram feitos com o pacote gstat do R se considerando as médias mensais de dióxido de Nitrogênio do ano de 2015. Tais mapas foram fundamentais na tomada de decisão para se entender e visualizar a variabilidade espacial e temporal do poluente medido e, porconsequente, para executar as políticas públicas necessárias para a diminuição da poluição atmosférica (AHMED et al., 2018).
- d) Predição da variabilidade espacial do volume de sortimentos de madeira e identificação de seus padrões espaciais em povoamentos de Teca (*Tectona grandis*). A identificação desses padrões espaciais pode ser utilizada para se definir tratamentos silviculturais como o desbaste e a poda, obtendo-se o máximo rendimento florestal (PELLISSARI et al., 2017).

- e) Utilização de mapas geoestatísticos para a caracterização da variabilidade espacial dos atributos químicos de um latossolo vermelho distrófico, definindo-se as zonas de manejo da fertilidade do solo, nas quais ocorrem os maiores e menores níveis dos atributos químicos avaliados, permitindo-se o diagnóstico da fertilidade e a recomendação de fertilizantes e corretivos (CARNEIRO et al., 2017), e muitos outros casos que mostram a ampla aplicação da Geoestatística.

### 3.2.1 Campo aleatório

Dados  $n$  pontos  $\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2, \dots, \mathbf{s}_n$  no espaço que foram, ou podem ser, amostrados, deseja-se prever um outro ponto  $\mathbf{s}_0$  que não foi, ou não pode ser, amostrado (Figura 3.1). A variável de interesse é  $Z$ , uma variável contínua ou discreta.

Figura 3.1 - Representação do problema fundamental da interpolação e/ou predição espacial.



Fonte: Do autor (2018).

O conjunto de variáveis aleatórias que se está lidando é  $Z(\mathbf{s}_0), Z(\mathbf{s}_1), Z(\mathbf{s}_2), \dots, Z(\mathbf{s}_n)$ , que por simplificação faremos  $Z(\mathbf{s}_i) = Z_i$ , com  $i = 0, 1, 2, \dots, n$ . Quando um conjunto de variáveis aleatórias tem seus elementos indexados de acordo com alguma métrica recebe o nome de campo aleatório ou processo estocástico.

Dessa forma, conforme Cressie (1993), Oliveira (1991), Schabenberger e Gotway (2005), uma coleção de variáveis aleatórias  $Z(\mathbf{s})$ , indexadas pelas coordenadas espaciais  $\mathbf{s}$  é um campo aleatório, isto é:

$$\{Z(\mathbf{s}): \mathbf{s} \in D \subset \mathbb{R}^d\}, \quad (3.5)$$

em que  $D$  representa um domínio contínuo e  $d$  é a dimensão do espaço cartesiano de índices  $\mathbb{R}^d$ . Um domínio é considerado contínuo se a variável aleatória em estudo existe e pode ser coletada em qualquer um dos infinitos pontos pertencentes a  $D$ ,  $D$  é um espaço contínuo. Já o espaço cartesiano de índices poderá ter qualquer dimensão  $d = 1, 2, 3, 4, \dots$ . Por exemplo, será  $d = 2$  se o estudo for no plano, se a aplicação for em uma área sob um pivô central, por exemplo. Entretanto se o interesse está em se conhecer a variabilidade em uma jazida de minério, isto é, sobre um volume, a dimensão do espaço de índices será  $d = 3$ , por exemplo.

### 3.2.2 Campo aleatório gaussiano

Um campo aleatório é gaussiano se a distribuição conjunta de  $\{Z_0, Z_1, Z_2, \dots, Z_n\}$  for uma normal multivariada, para quaisquer escolhas de  $n$  e qualquer escolha das localizações  $\{s_i, i = 0, 1, \dots, n\}$ . Isso implica que cada variável aleatória  $Z_i$ , com  $i = 0, 1, \dots, n$  segue uma distribuição normal e qualquer distribuição conjunta dentro desse conjunto será também normal. Note que, se o vetor de médias e a matriz de covariâncias são conhecidos temos que a distribuição normal  $n$ -variada é completamente especificada (FERREIRA, 2011; TONG, 2012).

Frisa-se que neste trabalho admitiu-se que tanto o vetor de médias quanto a matriz de covariâncias sejam conhecidos.

Por conveniência, define-se  $\mathbf{Z}^*$  como um vetor aleatório de dimensões  $(n + 1) \times 1$ , que inclui a variável aleatória não observada  $Z_0$  e o vetor aleatório  $\mathbf{Z}$ , o qual será considerado possuir distribuição normal multivariada com média  $\boldsymbol{\mu}^*$  e matriz de covariâncias  $\boldsymbol{\Sigma}^*$ . Assim,  $\mathbf{Z}^* \sim N_{n+1}(\boldsymbol{\mu}^*, \boldsymbol{\Sigma}^*)$  é obtido de um campo aleatório gaussiano. Considere a partição de  $\mathbf{Z}^*$ ,  $\boldsymbol{\mu}^*$  e  $\boldsymbol{\Sigma}^*$  como indicado em (3.6):

$$\mathbf{Z}^* = \begin{bmatrix} Z_0 \\ \mathbf{Z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Z_0 \\ Z_1 \\ \vdots \\ Z_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}^* = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \boldsymbol{\mu} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \mu_1 \\ \vdots \\ \mu_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}^* = \begin{bmatrix} \sigma_{00} & \boldsymbol{\sigma}' \\ \boldsymbol{\sigma} & \boldsymbol{\Sigma} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{00} & \sigma_{01} & \cdots & \sigma_{0n} \\ \sigma_{10} & \sigma_{11} & \cdots & \sigma_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n0} & \sigma_{n1} & \cdots & \sigma_{nn} \end{bmatrix}, \quad (3.6)$$

em que  $Z_0, \mu_0$  e  $\sigma_{00}$  são escalares,  $\mathbf{Z}$  e  $\boldsymbol{\mu}$  são vetores  $(n \times 1)$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}^*$  é uma matriz positiva definida  $(n + 1) \times (n + 1)$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  é um vetor  $(n \times 1)$ . Além disso,  $\sigma_{i0} = \sigma_{0i}$  são as covariâncias  $Cov(Z_i, Z_0) = Cov(Z_0, Z_i)$ , respectivamente, entre a variável  $Z$  no ponto  $s_i$  observado e a

variável  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_0$  não observado, e  $\sigma_{ij} = Cov(Z_i, Z_j)$  são as covariâncias entre as variáveis  $Z$  nos pontos observados  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$ .

Graybill (1976) afirma que a distribuição marginal de  $Z_0$  é normal, com média  $\mu_0$  e variância  $\sigma_{00} = Var(Z_0)$ , que  $\mathbf{Z}$  tem distribuição normal  $n$  variada com vetor de médias  $\boldsymbol{\mu}$  e matriz de covariâncias  $\boldsymbol{\Sigma}$  e que a distribuição condicional da variável aleatória condicional realizada ( $Z_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n$ ) também é normal com  $E[(Z_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n)] = \mu_0 + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{z} - \boldsymbol{\mu})$  e  $Var[(Z_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n)] = \sigma^2 = \sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}$ .

Observe que o resultado acima é válido para a variável aleatória condicionada realizada ( $Z_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n$ ). Porém, deseja-se estender este resultado para a variável aleatória marginal  $Z_0$  (ou equivalentemente a variável aleatória condicional não realizada). O teorema seguinte faz essa extensão.

**Teorema 1:** A variável aleatória condicionada não realizada  $Z_0 / \underbrace{Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n}_{\text{Amostra Aleatória (AA)}}$  tem a mesma distribuição de probabilidades da variável aleatória marginal  $Z_0$ , isto é,  $Z_0/AA \sim F_{Z_0/AA} = F_{Z_0} \sim Z_0$ . Em outras palavras, as duas variáveis aleatórias, condicional não realizada e marginal, são equivalentes em distribuição.

**Demonstração:** cada possível resultado do vetor aleatório  $[Z_0 \ Z_1 \ \dots \ Z_n]'$  é anotado como  $\omega$  no espaço amostral  $\Omega$  relativo a este dado vetor. O evento  $[Z_0 = z_0]$  é anotado como  $\omega_0$ . Nesse espaço amostral  $\Omega$ , seu elemento  $\omega$  pode ser numerável (isto é, discreto) ou não numerável (isto é, contínuo).

Define-se  $P[Z_0 = z_0]$  como  $p_0$ , no caso discreto, e como  $f_{Z_0}(z)dz$ , no caso contínuo.

Ambas são denotadas também como  $p(\omega_0)$ , o peso amostral de  $\omega_0$ :  $\Omega = \left[ \begin{matrix} \omega_0 \\ \vdots \end{matrix} \right] \rightarrow p(\omega_0)$ .

Uma possível realização da amostra aleatória  $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$  é dada por:  $\left[ \begin{matrix} Z_1 = z_1 \\ \vdots \\ Z_n = z_n \end{matrix} \right] =$

$RA(z_1, \dots, z_n)$ . Cada realização diferente dessa amostra delimita um particular subconjunto dentro de  $\Omega$ , anotado de realização amostral (RA). RA é um evento com probabilidade dada por  $P[RA]$ .

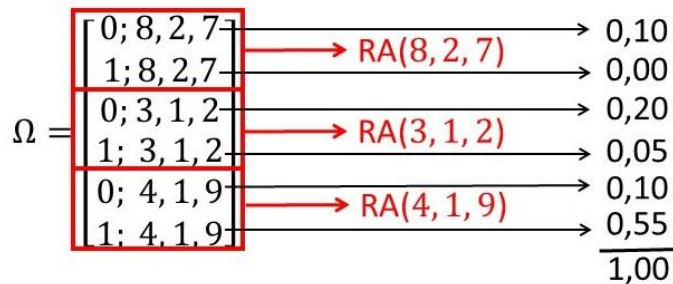
Fixado uma particular realização da amostra (RA), digamos  $RA'$ , a probabilidade de selecionar  $z_0$  dentro de  $RA'$  é dada por  $P[z_0/RA']$ .



Se uma particular realização amostral (RA) não é fixada, isto é, não é realizada, qual seria  $P[Z_0 = z_0]$ ? A resposta é a soma dos pesos dos elementos deste evento:  $P[z_0, RA'] + P[z_0, RA''] + \dots$ . Porém,  $P[z_0, RA] = P[z_0/RA] \times P[RA]$ . Mas  $P[RA]$  é a probabilidade do evento RA, isto é, do sorteio de um particular subconjunto RA. A multiplicação acima equivale a uma amostragem em 2 estágios/etapas: 1º sorteia-se a RA, e depois sorteia-se o  $z_0$  dentro da RA sorteada, o que mostra a equivalência apresentada pelo Teorema 1. Esta equivalência também pode ser verificada através do seguinte exemplo.

Exemplo: considere o espaço amostral  $\Omega$ , dado pelas combinações entre os valores que  $z_0$  assume (considere apenas 0 e 1) e as três realizações amostrais (RA) de tamanho  $n = 3$ : (8, 2, 7), (3, 1, 2) e (4, 1, 9), veja Figura 3.2. Deseja-se mostrar que sem fixar um particular subconjunto RA as probabilidades marginal e condicionada não realizada produzem o mesmo resultado. Os pesos amostrais  $p(\omega_0)$ , bem como as probabilidades marginais e condicionais são dados na Tabela 3.2.

Figura 3.2 – Espaço amostral  $\Omega$  do exemplo.



Fonte: Do autor (2018).

Tabela 3.2 - Tabela de contingência com os pesos amostrais  $p(\omega_0)$  de cada evento e as probabilidades marginais e condicionadas para as três amostras realizadas com  $n = 3$ .

Ponto a ser predito		Realização Amostral (RA)			Totais
		RA(8, 2, 7)	RA(3, 1, 2)	RA(4, 1, 9)	
$Z_0 = z_0$	0	0,10	0,20	0,10	0,40
	1	0,00	0,05	0,55	0,60
<b>Totais</b>		0,10	0,25	0,65	1,00

Fonte: Do autor (2018).

Sem fixar um particular subconjunto RA, calcula-se a probabilidade marginal quando  $z_0 = 1$ , dada por:

$$P(Z_0 = 1) = P(1, RA(8,2,7)) + P(1, RA(3,1,2)) + P(1, RA(4,1,9))$$

$$P(Z_0 = 1) = 0,00 + 0,05 + 0,55$$

$$P(Z_0 = 1) = 0,60$$

Já as probabilidades condicionais realizadas  $P(Z_0 = 1/RA(8,2,7))$ ,  $P(Z_0 = 1/RA(3,1,2))$  e  $P(Z_0 = 1/RA(4,1,9))$  são dadas por:

$$P(Z_0 = 1/RA(8,2,7)) = \frac{P(1, RA(8,2,7))}{P(RA(8,2,7))} = \frac{0,00}{0,10 + 0,00} = \frac{0,00}{0,10} = 0,00$$

$$P(Z_0 = 1/RA(3,1,2)) = \frac{P(1, RA(3,1,2))}{P(RA(3,1,2))} = \frac{0,05}{0,20 + 0,05} = \frac{0,05}{0,25} = 0,20$$

$$P(Z_0 = 1/RA(4,1,9)) = \frac{P(1, RA(4,1,9))}{P(RA(4,1,9))} = \frac{0,55}{0,10 + 0,55} = \frac{0,55}{0,65} = 0,8461$$

Assim, a  $P(Z_0 = 1)$  será:

$$\begin{aligned} P(Z_0 = 1) &= P(Z_0 = 1/RA(8,2,7))P(RA(8,2,7)) \\ &\quad + P(Z_0 = 1/RA(3,1,2))P(RA(3,1,2)) \\ &\quad + P(Z_0 = 1/RA(4,1,9))P(RA(4,1,9)) = \end{aligned}$$

$$P(Z_0 = 1) = (0,00 \times 0,10) + (0,20 \times 0,25) + (0,8461 \times 0,65) = 0,60.$$

Estes resultados falam por si só, já que equivalem ao cálculo da variável aleatória condicionada não realizada. Assim, verifica-se que o resultado obtido pela probabilidade marginal é equivalente ao resultado obtido pela probabilidade condicionada não realizada.

Assim, substituindo esses resultados, dados pelo Teorema 1 na esperança da variável condicional realizada, teremos o modelo de regressão linear para o campo aleatório gaussiano dado por:

$$Z_0 = \mu_0 + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}) + \varepsilon. \quad (3.7)$$

Reescrevendo-se (3.7) como  $Z_0 = \mu_0 - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Z} + \varepsilon$ , e se chamarmos  $\lambda_0 = \mu_0 - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}$  e  $\boldsymbol{\lambda}' = \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ , então pode-se escrever (3.7) como:

$$Z_0 = \lambda_0 + \boldsymbol{\lambda}'\mathbf{Z} + \varepsilon, \quad (3.8)$$

ou, ainda, na forma escalar como:

$$Z_0 = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i + \varepsilon. \quad (3.9)$$

De fato, é pela equação de regressão  $E(Z_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n) = \lambda_0 + \boldsymbol{\lambda}'\mathbf{Z} = \hat{Z}_0$ , a esperança condicionada, que as previsões de  $Z_0$  são feitas. Além disso, demonstra-se que a  $Var[Z_0] \geq Var[(Z_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n)]$ . Deve-se ressaltar que essa esperança condicionada sempre produz preditores uniformemente não viesados de variância mínima (UMVUP), isto é, sempre produz os melhores preditores entre todos, lineares e não lineares, porém, é necessário normalidade para que essa esperança condicionada seja linear.

Uma objeção que poderia ser feita ao uso de um campo aleatório gaussiano é de que nem todos os fenômenos serão modelados por um campo aleatório gaussiano. Um resultado que pode justificar o uso dessa abordagem de modo mais confortável é a gaussianidade local, assunto que será tema da próxima subseção.

### 3.2.3 Gaussianidade local

Nesta subseção serão apresentados alguns resultados que mostrarão o fenômeno da gaussianidade local e o que isso significa.

### 3.2.3.1 Alguns resultados sobre correlação de Pearson.

Dado um vetor aleatório  $\begin{bmatrix} Y \\ X \end{bmatrix}$  qualquer, para o qual existem  $E[X^2]$ ,  $E[Y^2]$ , e  $E[XY]$ , deseja-se prever  $Y$ .

- **Proposição 1:**  $\mu_Y$  é um preditor não-tendencioso e de variância mínima para  $Y$ , ou seja,  $MVUP(Y) = \mu_Y$ .

#### Demonstração:

Observe que, para que  $\mu_Y$  seja não-tendencioso, a esperança matemática da diferença entre o preditor e  $Y$  deve ser nula, assim:  $E[MVUP(Y) - Y] = E[\mu_Y - Y] = \mu_Y - \mu_Y = 0$ .

Isto é,  $MVUP(Y) = \mu_Y$  é um preditor não tendencioso para  $Y$ . Tem-se que mostrar que  $Var(\hat{Y} - Y)$  é mínima para algum preditor  $\hat{Y} = a$ .

Logo,

$$\begin{aligned} Var(a - Y) &= EQM(a - Y) = E[(a - Y)^2] = \\ E[a^2 - 2aY + Y^2] &= a^2 - 2a\mu_Y + E[Y^2] = f(a) \end{aligned}$$

Como  $f(a)$  deve ser mínimo, então:

$$\begin{aligned} \frac{df(a)}{da} &= 2a - 2\mu_Y = 0 \Rightarrow a = \mu_Y \\ \frac{d^2f(a)}{da^2} &= \frac{d}{da} \left( \frac{df(a)}{da} \right) = 2 > 0 \\ \Rightarrow a = \mu_Y &\text{ é ponto de mínimo. (c.q.d.)} \end{aligned}$$

- **Proposição 2:**  $E[Y/X = x]$  é um preditor não tendencioso e de variância mínima para  $Y$ , deseja-se utilizar a informação contida no evento  $[X = x]$ . Então,  $MVUP(Y/X = x) = BUP(Y/X = x) = E[Y/X = x]$ .

#### Demonstração:

Deve-se provar que  $E\{E[Y/X = x]\} = E[Y] = \mu_Y$ . Para a prova da variância mínima, veja também Graybill (1976).

- **Proposição 3:** Deseja-se dar uma estrutura linear ao preditor de  $Y$  que utiliza a informação  $X = x$ , isto é, deseja-se que  $(Y/X = x) = \beta_0 + \beta_1 x$ , tal que esse preditor linear mantenha a não-tendenciosidade e variância mínima. Então  $(\hat{Y}/X = x) = \beta_0 + \beta_1 x = BLUP(Y/X = x)$  será construído usando  $\beta_1 = \rho_{XY} \frac{\sigma_Y}{\sigma_X}$  e  $\beta_0 = \mu_Y - \rho_{XY} \frac{\sigma_Y}{\sigma_X} \mu_X$

em que:

- $\sigma_X = \sqrt{\sigma_X^2} = \sqrt{Var(X)} = \sqrt{E(X - \mu_X)^2}$
- $\sigma_Y = \sqrt{\sigma_Y^2} = \sqrt{Var(Y)} = \sqrt{E(Y - \mu_Y)^2}$
- $E[X] = \mu_X$
- $E[Y] = \mu_Y$

A correlação entre as variáveis aleatórias  $X$  e  $Y$  é dada por:

$$\rho_{XY} = Corr(X, Y) = \frac{Cov(X, Y)}{DP(X)DP(Y)} = \frac{E[(X - \mu_X)(Y - \mu_Y)]}{\sigma_X \sigma_Y} = \frac{\sigma_{XY}}{\sigma_X \sigma_Y} = \rho,$$

com  $-1 \leq \rho \leq 1$ .

**Demonstração:** veja Graybill (1976).

Observe que:

- $BUP(Y/X) = E[Y/X]$  em que  $X$  não se realiza, é uma variável aleatória, e que,
- $BLUP(Y/X) = \beta_0 + \beta_1 X$ , em que também  $X$  não se realiza, também é uma variável aleatória.
- O  $BUP(Y/X)$  é a regressão de  $Y$  sobre  $X$  e  $BLUP(Y/X)$  é a regressão linear de  $Y$  sobre  $X$ . Por exemplo, para um dado vetor  $\begin{bmatrix} Y \\ X \end{bmatrix}$ , pode-se ter a situação descrita na Figura 3.3.

- **Proposição 4:** Dado um erro  $\varepsilon > 0$  qualquer:

$$(i) P[|BUP(Y/X) - Y| < \varepsilon] \geq 1 - \frac{(1-\rho^2)}{\varepsilon^2}$$

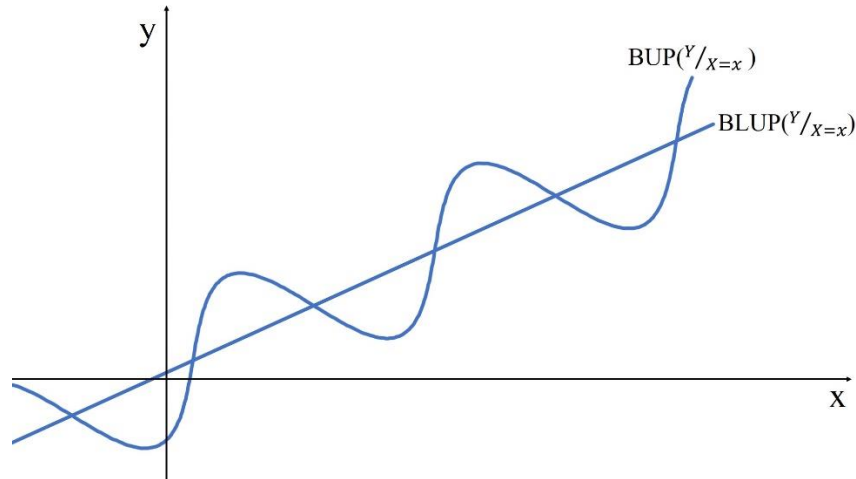
$$(ii) P[|BLUP(Y/X) - Y| < \varepsilon] \geq 1 - \frac{(1-\rho^2)}{\varepsilon^2}$$

$$(iii) P[|BUP(Y/X) - BLUP(Y/X)| < \varepsilon] \geq 1 - \frac{(1-\rho^2)}{\varepsilon^2}$$

$$(iv) P[|BUP(Y/X) - Y| < \varepsilon \text{ e } |BLUP(Y/X) - Y| < \varepsilon] \geq 1 - \frac{2(1-\rho^2)}{\varepsilon^2}$$

**Demonstração:** veja Meyer (2013).

Figura 3.3 - Comparação entre a representação gráfica gerada por um  $BUP(Y/X = x)$ , uma regressão não-linear e um  $BLUP(Y/X = x)$ , uma regressão linear.



Fonte: Do autor (2018).

- **Proposição 5:** Se  $\rho^2 \rightarrow 1$  (Convergência matemática) isto é, se  $\rho \rightarrow 1$  ou se  $\rho \rightarrow -1$ , então as desigualdades dadas na Proposição 4 implicam que:

1.  $BUP(Y/X) \rightarrow Y$  (Convergência em probabilidade)

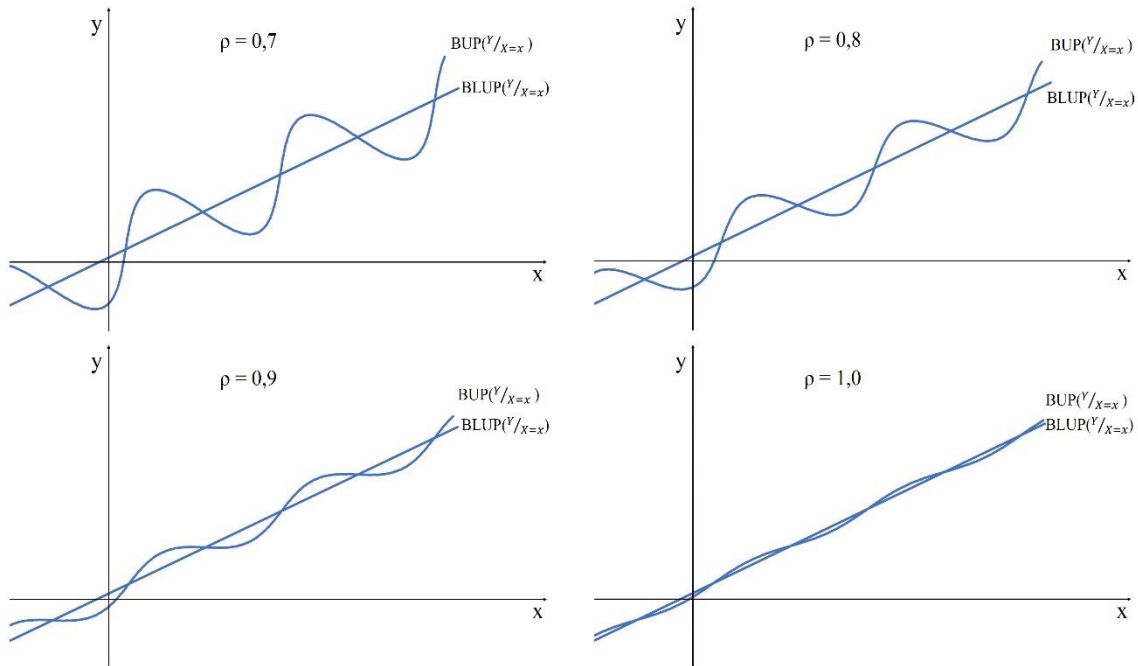
Isto é, o preditor mais geral (a regressão de  $Y$  sobre  $X$ ) converge em probabilidade para  $Y$ . Em outras palavras:  $Var[BUP(Y/X) - Y] \rightarrow 0$ . (Convergência matemática)

A regressão de  $Y$  sobre  $X$  fica cada vez melhor, isto é, cada vez erra-se menos para predizer  $Y$ , a medida que  $\rho^2$  aumenta.

2.  $BLUP(Y/X) \rightarrow BUP(Y/X)$  (Convergência em probabilidade)

A regressão linear de  $Y$  sobre  $X$  fica cada vez mais próxima da regressão de  $Y$  sobre  $X$  à medida que  $\rho^2$  aumenta. Como a regressão linear de  $Y$  sobre  $X$  é uma aproximação linear da regressão de  $Y$  sobre  $X$ , esses resultados mostram que a medida que  $\rho^2$  aumenta a regressão de  $Y$  sobre  $X$  fica cada vez mais linear. Pode-se observar esse comportamento nas ilustrações da Figura 3.4.

Figura 3.4 - Ilustração do comportamento da regressão de  $Y$  sobre  $X$  a medida que  $\rho^2$  aumenta.



Fonte: Do autor (2018).

### 3. $BLUP(Y/X) \rightarrow Y$ (Convergência em probabilidade)

A aproximação linear da regressão de  $Y$  sobre  $X$  fica cada vez melhor para prever  $Y$ , à medida que  $\rho^2$  aumenta. Dois casos especiais são:

1. Se  $\rho^2 = 1$  então:

$$P[Y = \beta_0 + \beta_1 X] = 1$$

$$BLUP(Y/X) = \mu_Y - \rho_{XY} \frac{\sigma_Y}{\sigma_X} \mu_X + \rho_{XY} \frac{\sigma_Y}{\sigma_X} X$$

2. Se  $\rho^2 = 0$ , então não existe uma regressão linear de  $Y$  sobre  $X$ , mas pode existir uma regressão (não linear) de  $Y$  sobre  $X$ .

Se  $\rho^2 = 0$ , então  $BLUP(Y/X) = \mu_Y$ , isto é, a informação de  $X$  não auxilia linearmente na definição de  $Y$ .

Antes de entrar na Proposição 6 devemos definir  $\sigma_{Y/X=x}^2 = Var[Y/X = x]$ .

**Demonstração:** Todos os resultados desta Proposição 5 são corolários imediatos da Proposição 4.

**Proposição 6:** o vetor aleatório  $\begin{bmatrix} Y \\ X \end{bmatrix}$  tem uma distribuição normal bivariada com  $0 < \rho^2 < 1$  se, e somente, se, duas condições ocorrem simultaneamente, a saber:

1. A regressão de  $Y$  sobre  $X$  e a regressão de  $X$  sobre  $Y$  são ambas lineares, ambas são diferentes de uma regressão constante (iguais à  $\mu_X$  e à  $\mu_Y$ ).
2. A variância  $\sigma_{Y/X=x}^2$  é constante e diferente de zero  $\forall x$ , isto é, as variâncias condicionais são homogêneas.

**Demonstração:** Kendall e Stuart (1973, 1977).

- **Proposição 7:** Para qualquer vetor aleatório  $\begin{bmatrix} Y \\ X \end{bmatrix}$  com momentos de 2ª ordem existentes (isto é, finitos), se as duas condições abaixo se verificarem simultaneamente:

- a) A regressão de  $Y$  sobre  $X$  é linear, isto é,  $BUP(Y/X) = BLUP(Y/X) = \beta_0 + \beta_1 X$ .
- b)  $Var[Y/X = x] = \sigma_{Y/X=x}^2 = \sigma^2$ , constante  $\forall x$ .

Então os resultados abaixo são verdadeiros:

- (a)  $\rho_{XY} = 0 \Leftrightarrow X$  e  $Y$  são independentes.
- (b)  $Var[BUP(Y/X)] = \rho^2 \sigma_Y^2$
- (c)  $Var[Y - BUP(Y/X)] = (1 - \rho^2) \sigma_Y^2$ .

**Demonstração:** veja Graybill (1976) e Kendall e Stuart (1973, 1977).

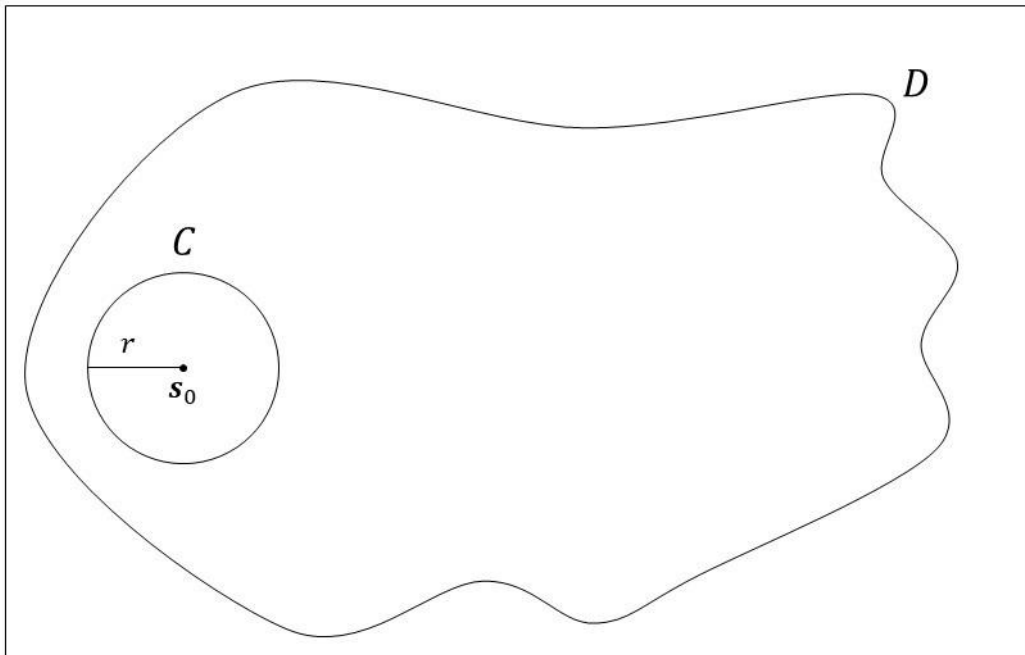
Esses resultados serão usados na subseção seguinte para demonstrar o Teorema da gaussianidade local.



### 3.2.3.2 Teorema da gaussianidade local

Com o intuito de definir o que seja um campo aleatório localmente gaussiano, o qual denotaremos por  $(CAG_{\text{local}})$ , considere  $C$  uma sub-região dentro do domínio  $D$  (Figura 3.5) de tal maneira que  $\{Z(\mathbf{s}): \mathbf{s} \in C \subset D \subset \mathbb{R}^d\}$ .

Figura 3.5 - Representação de um campo aleatório com gaussianidade local ( $CAG_{\text{local}}$ )



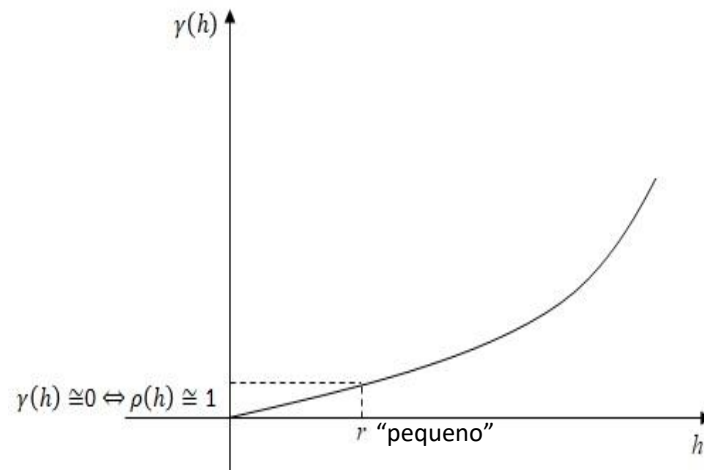
Fonte: Do autor (2018).

Para tanto, aplicando as proposições 5, 6 e 7, se a correlação entre  $Z(\mathbf{s})$  e  $Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})$  tende a um e o campo aleatório for estacionário de 2ª ordem, então, sem perda de generalidade, pressupondo isotropia, dentro do campo aleatório da região  $C$ , as regressões de  $Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})$  sobre  $Z(\mathbf{s})$  e de  $Z(\mathbf{s})$  sobre  $Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})$  são lineares e suas variâncias  $Var[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})/Z(\mathbf{s}) = z]$  são homogêneas. Consequentemente, o vetor aleatório  $\begin{bmatrix} Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) \\ Z(\mathbf{s}) \end{bmatrix}$  tem distribuição normal bivariada, desde que  $r$  seja pequeno. Como dentro de  $C$  todos os pares  $\begin{bmatrix} Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) \\ Z(\mathbf{s}) \end{bmatrix}$  têm distribuição normal bivariada, então, pode-se supor, com um grau de razoabilidade, que o campo aleatório dentro de  $C$  será bivariado gaussiano: isto é, um campo aleatório gaussiano local ( $CAG_{\text{local}}$ ). Resumidamente:

- a) Se  $\rho^2 \rightarrow 1$  e o campo aleatório (CA) é de 2ª ordem  $\Rightarrow$  CA está dentro de  $C$ ,  
 $BLUP(Y/X) \rightarrow BUP(Y/X)$  e  $Var[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})/Z(\mathbf{s}) = z] = \sigma^2, \quad \forall \mathbf{s} \Leftrightarrow$   
 $\begin{bmatrix} Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) \\ Z(\mathbf{s}) \end{bmatrix} \sim N_2 \Leftrightarrow$  o campo aleatório dentro de  $C$  é um campo aleatório gaussiano  
 local ( $CAG_{local}$ ).
- b) se  $\rho^2 \rightarrow 1$  e o CA é de 2ª ordem  $\Rightarrow$  o campo aleatório dentro de  $C$  é um  $CAG_{local}$ .

Veja Figura 3.6

Figura 3.6 - Gaussianidade local: observe que para um valor de distância  $h = r$  “pequena”, a correlação espacial é próxima de 1.



Fonte: Do autor (2018).

Em suma, é razoável admitir que, em campos aleatórios estacionários de 2ª ordem, o campo aleatório dentro de uma região próxima de um ponto  $\mathbf{s}$  qualquer é gaussiano. Esse enunciado é o Teorema da gaussianidade local, e os argumentos de plausibilidade acima desenvolvidos evidenciam sua razoabilidade.

Logo, mesmo que um campo aleatório não seja gaussiano na sua totalidade, este teorema evidencia que pelo menos localmente (isto é, para distância  $h = r$  “pequena”) o campo poderá ser gaussiano, justificando mais ainda a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG).

### 3.3 Abordagem geoestatística clássica (AGC)

Objetiva-se então encontrar uma função  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n)$  tal que  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = \hat{Z}_0$ , isto é,  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n)$  seja um preditor de  $Z_0$  desconhecido.

É interessante notar que desde a formalização da teoria da krigagem, como é conhecido o método de interpolação espacial geostatístico proposto por Matheron (1962), o objetivo era encontrar uma função  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n)$  tal que  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = \hat{Z}_0$ , isto é, encontrar um preditor para  $Z_0$  desconhecido.

Entretanto, Chilès e Delfiner (2012), assim como Cressie (1993), Journel e Huijbregts (1978) e Matheron (1971), afirmam que os fenômenos espaciais são geralmente únicos, isto é, representam apenas uma realização do campo aleatório, impedindo, a princípio, a tratativa por métodos estatísticos, os quais necessitam de pelo menos duas realizações do campo aleatório para estimação de momentos de segunda ordem. Dessa forma, para que seja possível a aplicação da teoria estatística e conseqüentemente se realize a predição dos valores em  $\mathbf{s}_0$ , será necessário o estabelecimento de hipóteses de estacionaridade, que contornarão essa restrição de apenas uma realização.

### 3.3.1 Hipóteses de estacionaridade

Formalmente, um campo aleatório é estacionário se os momentos estatísticos das variáveis aleatórias  $Z(\mathbf{s})$  forem os mesmos para qualquer vetor  $\mathbf{h}_{ij} = |\mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i|$ . De acordo com o número  $k$  de momentos estatísticos que são constantes, a variável é chamada de estacionária de ordem  $k$  (VIEIRA; NOVAIS, 2000). Chilès e Delfiner (2012) acrescentam que os métodos geostatísticos geralmente são baseados no primeiro e segundo momentos do campo aleatório os quais não são realmente conhecidos a priori e, por essa razão, precisam ser estimados. Entretanto, como dito antes, neste estudo esses parâmetros serão considerados conhecidos.

Segundo Cressie (1993) e Journel e Huijbregts (1978) pode-se definir duas hipóteses de estacionaridade para um campo aleatório: 1ª) hipótese de estacionaridade de segunda ordem e 2ª) hipótese intrínseca e, pelo menos, uma delas deve ser satisfeita para que a análise geostatística possa ser corretamente realizada. Note que cada uma dessas hipóteses busca representar a estrutura natural do fenômeno de interesse, principalmente em relação ao comportamento dos dois primeiros momentos, a média e medidas da variabilidade espacial das características sob estudo.

Dessa maneira a **hipótese de estacionaridade de 2ª ordem** admite:

- a) a existência de esperança matemática constante em todo o domínio, ou seja, a média é a mesma independentemente de sua localização geográfica, e

b) a função de covariância existe e é função apenas do vetor  $\mathbf{h}$ .

Em linguagem matemática, têm-se:

1.  $E[Z(\mathbf{s})] = \mu, \forall \mathbf{s} \in D$ .
2.  $Cov[Z(\mathbf{s}), Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})] = \kappa(\mathbf{s} + \mathbf{h} - \mathbf{s}) = \kappa(\mathbf{h}), \forall \mathbf{s} \in D, \forall \mathbf{h}$ .

Dado que a função covariância é uma função positiva definida, então, pode-se escrever as seguintes relações:

$$\kappa(\mathbf{h}) = \kappa(-\mathbf{h}) \quad \text{e} \quad |\kappa(\mathbf{h})| \geq \kappa(\mathbf{0}).$$

Já para a definição da **hipótese intrínseca (HI)**, admite-se que:

- a) a esperança matemática existe e não depende de sua localização no espaço, e
- b) a semivariância para o incremento  $\{Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{s})\}$  existe e só depende de  $\mathbf{h}$ .

Em linguagem matemática, têm-se:

- a)  $E[Z(\mathbf{s})] = \mu, \forall \mathbf{s} \in D$ .
- b)  $\frac{1}{2} Var\{Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{s})\} = \gamma(\mathbf{s} + \mathbf{h} - \mathbf{s}) = \gamma(\mathbf{h}), \forall \mathbf{s} \in D, \forall \mathbf{h}$ .

Dado que a variância do incremento foi dividida por dois,  $\gamma(\mathbf{h})$  foi denominada de semivariância. Pode-se demonstrar que  $\gamma(\mathbf{h})$  é uma função par, não-negativa e quando  $\mathbf{h} = \mathbf{0}$ , também será nula. Assim:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \gamma(-\mathbf{h}), \quad \gamma(\mathbf{h}) \geq 0 \quad \text{e} \quad \gamma(\mathbf{0}) = 0.$$

Então, sob HI a relação entre  $\gamma(\mathbf{h})$  e  $\kappa(\mathbf{h})$  será dada por:

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{h}) &= \frac{1}{2} Var\{Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}) - Z(\mathbf{s})\} = \\ &= \frac{1}{2} Var[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})] + \frac{1}{2} Var[Z(\mathbf{s})] - Cov[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}), Z(\mathbf{s})]. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Pode-se demonstrar que sob estacionaridade de segunda ordem, a  $\text{Var}[Z(\mathbf{s})] = \text{Cov}[Z(\mathbf{s}), Z(\mathbf{s})] = \kappa[\mathbf{0}]$ , e que, portanto:

$$\gamma(\mathbf{h}) = \frac{1}{2} \underbrace{\text{Var}[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h})] + \text{Var}[Z(\mathbf{s})]}_{\kappa[\mathbf{0}]} - \frac{\text{Cov}[Z(\mathbf{s} + \mathbf{h}), Z(\mathbf{s})]}{\kappa(\mathbf{h})}$$

$$\gamma(\mathbf{h}) = \kappa[\mathbf{0}] - \kappa(\mathbf{h}). \quad (3.11)$$

Observa-se que a hipótese intrínseca é mais geral do que a hipótese de segunda ordem e, por essa razão, é a hipótese preferida na Geoestatística. De fato, não há necessidade de se impor a estacionaridade de 2ª ordem, então, para a apresentação da abordagem geoestatística clássica (AGC) somente a HI será pressuposta. Para a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) também não é necessário impor-se a estacionaridade de segunda ordem, visto que a definição de  $\sigma_{ij} = \text{Cov}[Z_i, Z_j]$  é dada por:  $\text{Cov}[Z_i, Z_j] = \frac{1}{2} \text{Var}[Z_i] + \frac{1}{2} \text{Var}[Z_j] - \gamma(\mathbf{h}_{ij})$ . Observe apenas que seria necessário conhecer  $\text{Var}[Z_i], \forall \mathbf{s}_i$ . Para evitar que as demonstrações desta tese exijam o conhecimento de  $\text{Var}[Z_i]$ , o que é irreal na prática, será adotada, sem perda de generalidade, a estacionaridade de 2ª ordem, em vez da HI.

### 3.3.2 Semivariograma

A principal ferramenta para se realizar a análise estrutural, isto é, para se analisar a dependência espacial, é o semivariograma, que é a função das semivariâncias em função dos  $\mathbf{h}$ 's. Dessa forma, conhecer suas características se torna primordial em qualquer estudo geoestatístico.

Com já dito, a semivariância  $\gamma(\mathbf{h})$  é uma estatística que mede a dependência espacial de uma variável  $Z$ , calculada entre dois pontos separados por um vetor distância  $\mathbf{h}_{ij} = \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i$ :

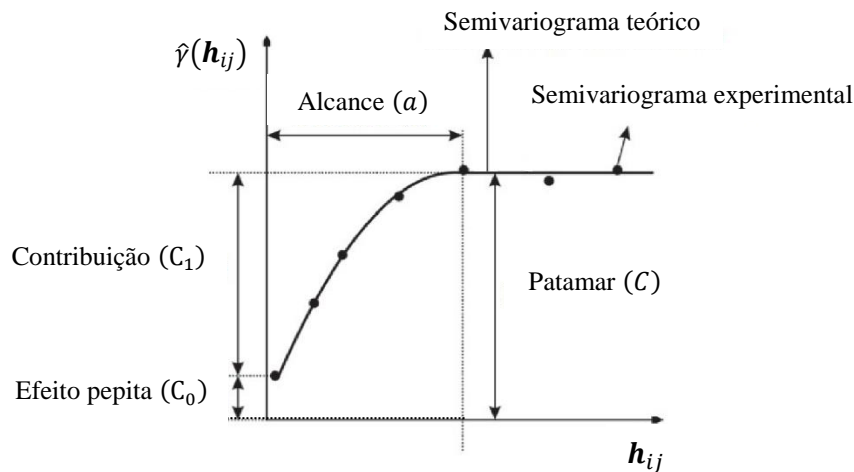
$$\gamma(\mathbf{h}_{ij}) = \frac{1}{2} E \{ [Z_j - Z_i]^2 \} = \frac{1}{2} \text{Var}\{Z_j - Z_i\}. \quad (3.12)$$

Esta pode ser estimada através do método dos momentos pelo estimador clássico de Matheron (1963) dado por:

$$\hat{\gamma}(\mathbf{h}_{ij}) = \frac{1}{2N(\mathbf{h}_{ij})} \sum_{\substack{\forall s_i, s_j \\ \text{tal que} \\ |s_j - s_i| = \mathbf{h}_{ij}}} [Z_j - Z_i]^2, \quad (3.13)$$

em que  $N(\mathbf{h}_{ij})$  é o número de pares de valores medidos entre  $Z_i$  e  $Z_j$  separados por um vetor  $\mathbf{h}_{ij}$  (JOURNEL; HUIJBREGTS, 1978). O semivariograma também é a denominação da representação gráfica da função semivariância dada em função das distâncias. Um exemplo para um semivariograma típico, com características muito próximas da ideal, pode ser observado pela Figura 3.7.

Figura 3.7 - Parâmetros de um semivariograma típico.



Fonte: Journel e Huijbregts (1978).

Na Figura 3.7 podem ser observados os seguintes parâmetros:

- Efeito pepita** ( $C_0$ ) - é o valor da semivariância na origem ( $\mathbf{h}_{ij} = 0$ ), sendo que deveria ser zero já que a variância de um valor amostrado com ele mesmo, teoricamente, é zero. Entretanto, nem sempre o semivariograma próximo à origem é zero, já que em alguns casos essa semivariância sofre uma descontinuidade. As razões para essa variação podem ser erros no processo de amostragem ou ainda a existência de uma variabilidade em uma escala menor do que a amostrada, entre outros fatores;
- Contribuição** ( $C_1 = C - C_0$ ) - é a diferença entre o patamar ( $C$ ) e o efeito pepita ( $C_0$ ), ou em termos práticos, é o percentual da variação dos dados que é explicado pelo semivariograma.

- c) **Patamar** ( $C = C_0 + C_1$ ) - é o valor no qual a semivariância tende a alcançar seu valor máximo e se estabilizar, sendo uma estimativa da variância dos dados.
- d) **alcance (a)** - é a distância limite para a dependência espacial, ou seja, ponto a partir do qual não existe mais dependência espacial entre as amostras.

As razões para a escolha da função semivariograma são:

- a) a função semivariograma  $\gamma(\mathbf{h})$  é uma função mais geral do que a função covariograma  $\kappa(\mathbf{h})$ , conforme demonstrado na seção 3.3.1.
- b) A função semivariograma  $\gamma(\mathbf{h})$ , ao contrário da função covariograma  $\kappa(\mathbf{h})$ , não depende do conhecimento da média.

Apesar de que a ACAG pode ser feita pressupondo-se a hipótese intrínseca, por simplicidade e por facilidade matemática, todas as deduções apresentadas nessa tese serão feitas com base na  $\kappa(\mathbf{h})$ , isto é, pressupondo-se estacionaridade de segunda ordem. Deve-se ressaltar que restringindo as deduções para o caso da estacionaridade de segunda ordem esta produzirá fórmulas que serão válidas somente para esse caso, mas que, as ideias apresentadas terão validade geral, isto é, serão válidas, também, para o caso da hipótese intrínseca.

### 3.3.3 Melhor preditor linear não-viesado (BLUP)

Dando-se continuidade à busca por uma função  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n)$  que seja um preditor de  $Z_0$  desconhecido,  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = \hat{Z}_0$ , interessa que esse preditor seja o melhor preditor possível e, por essa razão, algumas restrições se fazem necessárias. A princípio, a função  $f$  poderia ser de qualquer tipo, linear ou não linear. Por exemplo, poderia ser:

$$f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = Z_1 e^{Z_2} + \cos Z_3 \dots (Z_{n-1})^{Z_n}.$$

O problema de  $f$  ser de qualquer tipo é que seria muito difícil, senão impossível, achar a melhor função  $f$  para prever  $Z_0$ . Por causa disso, restringe-se este estudo ao conjunto das funções  $f$  que são combinações lineares dos  $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$ , isto é:

$$f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = a_0 + a_1 Z_1 + a_2 Z_2 + \dots + a_n Z_n \text{ ou}$$

$$f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i Z_i. \quad (3.14)$$

Uma segunda restrição a ser imposta é a condição de não-tendenciosidade para  $\hat{Z}_0$ . Isso implica que o erro de predição  $\varepsilon = Z_0 - \hat{Z}_0$ , que é a diferença entre o valor real e o valor predito, seja em média zero, isto é:

$$E[\varepsilon] = E[Z_0 - \hat{Z}_0] = 0 \Rightarrow E[Z_0] = E[\hat{Z}_0]. \quad (3.15)$$

Finalmente, vai-se aplicar a terceira restrição: a variância do erro de predição deve ser mínima, isto é,  $\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0] = \text{mínima}$ . Geralmente utiliza-se o Erro Quadrático Médio (EQM) para avaliar a qualidade de preditores, entretanto, quando um preditor é não-viesado o EQM é simplificado e se iguala à variância desse preditor (MOOD; GRAYBILL; BOES, 1974). Senão veja-se:

$$\text{EQM}(Z_0 - \hat{Z}_0) = E[Z_0 - \hat{Z}_0]^2 \quad (3.16)$$

Note que:

$$\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0] = E[Z_0 - \hat{Z}_0]^2 - \underbrace{\left[ E[Z_0 - \hat{Z}_0] \right]^2}_0 = E[Z_0 - \hat{Z}_0]^2, \text{ ou seja, pelo fato de } \hat{Z}_0$$

ser não-viesado, a variância do erro de estimação é igual ao erro quadrático médio EQM.

Logo:

$$\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0] = E[Z_0 - \hat{Z}_0]^2 \text{ é mínimo.}$$

Vai-se desenvolver a  $\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0]$  para ver como é sua expressão em função dos pesos  $a_i$ 's. Então, substituindo-se a equação (3.14) em (3.16), tem-se:

$$\text{Var}(a_0, \dots, a_n) = E[Z_0 - \hat{Z}_0]^2 = E \left[ Z_0 - \left( a_0 + \sum_{i=1}^n a_i Z_i \right) \right]^2$$

$$\text{Var}(a_0, \dots, a_n) = E \left[ Z_0^2 - 2Z_0 \left( a_0 + \sum_{i=1}^n a_i Z_i \right) + \left( a_0 + \sum_{i=1}^n a_i Z_i \right)^2 \right]$$



$$\text{Var}(a_0, \dots, a_n) = E \left[ Z_0^2 - 2a_0Z_0 - 2 \sum_{i=1}^n a_i Z_i Z_0 + a_0^2 + 2a_0 \sum_{i=1}^n a_i Z_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j Z_i Z_j \right]$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(a_0, \dots, a_n) &= E[Z_0^2] - 2a_0E[Z_0] - 2 \sum_{i=1}^n a_i E[Z_i Z_0] + E[a_0^2] + \\ &+ 2a_0 \sum_{i=1}^n a_i E[Z_i] + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j E[Z_i Z_j]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Sabe-se que:

$$\text{Cov}[Z_i, Z_j] = E[Z_i Z_j] - E[Z_i]E[Z_j]. \quad (3.18)$$

Como  $E[Z_i] = \mu_i$  e  $E[Z_j] = \mu_j$ , então, pode-se reescrever a equação (3.18) da seguinte forma:

$$E[Z_i Z_j] = \text{Cov}[Z_i, Z_j] + \mu_i \mu_j. \quad (3.19)$$

Substituindo-se a expressão (3.19) na equação (3.17) e considerando que  $\text{Cov}[Z_i, Z_j] = \kappa(\mathbf{h}_{ij}) = \sigma_{ij}$ ,  $\text{Cov}[Z_i, Z_0] = \sigma_{i0}$ , que  $\text{Cov}[Z_0, Z_0] = \sigma_{00}$  e que  $E[Z_0] = \mu_0$ , temos:

$$\begin{aligned} \text{Var}(a_0, \dots, a_n) &= \sigma_{00} + \mu_0 \mu_0 - 2a_0 \mu_0 - 2 \sum_{i=1}^n a_i \{ \sigma_{i0} + \mu_i \mu_0 \} + a_0^2 + 2a_0 \sum_{i=1}^n a_i \mu_i + \\ &+ \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \{ \sigma_{ij} + \mu_i \mu_j \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Var}(a_0, \dots, a_n) &= \sigma_{00} + \mu_0^2 - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{i0} - 2\mu_0 \sum_{i=1}^n a_i \mu_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij} + \\ &+ \sum_{i=1}^n a_i \mu_i \sum_{j=1}^n a_j \mu_j - 2a_0 \mu_0 + a_0^2 + 2a_0 \sum_{i=1}^n a_i \mu_i. \end{aligned}$$

Como  $\sum_{i=1}^n a_i \mu_i = \sum_{j=1}^n a_j \mu_j$ , chega-se a expressão geral para o EQM dada em (3.20):

$$\begin{aligned} \text{Var}(a_0, \dots, a_n) = & \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij} + \left( \sum_{i=1}^n a_i \mu_i \right)^2 - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{i0} - 2\mu_0 \sum_{i=1}^n a_i \mu_i + \\ & + \mu_0^2 - 2a_0 \mu_0 + a_0^2 + 2a_0 \sum_{i=1}^n a_i \mu_i. \end{aligned} \quad (3.20)$$

É importante destacar que somente pela imposição da linearidade, da não-tendenciosidade e da variância mínima é que a AGC pode garantir que o preditor seja um preditor linear não-viesado de variância mínima, ou seja, que a função  $f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = \hat{Z}_0$  seja um BLUP.

### 3.3.4 Predição linear univariada

É a partir da expressão (3.20), expressão geral para a  $\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0]$  dado em função dos ponderadores  $a_i$ , com  $i = 0, \dots, n$  e das características do campo aleatório em estudo, que se deduzirá pela AGC os sistemas de krigagem para as krigagens univariadas: krigagem linear ordinária (KLO) e krigagem linear simples (KLS), apresentadas nessa seção.

#### 3.3.4.1 Krigagem linear ordinária (KLO)

A krigagem linear ordinária (KLO) é caracterizada por um campo aleatório no qual a variável principal  $Z$  possui média desconhecida e é considerada constante. Assim, assumindo-se a primeira parte da hipótese intrínseca (HI), tem-se que:  $\mu_i = \mu_j = \mu_0 = \mu$ , e como consequência a expressão (3.20) ficará igual a:

$$\begin{aligned} \text{Var}(a_0, \dots, a_n) = & \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij} + \left( \sum_{i=1}^n a_i \mu \right)^2 - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{i0} - 2\mu \sum_{i=1}^n a_i \mu + \\ & + \mu^2 - 2a_0 \mu + a_0^2 + 2a_0 \sum_{i=1}^n a_i \mu \\ \text{Var}(a_0, \dots, a_n) = & \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij} + \mu^2 \left( \sum_{i=1}^n a_i \right)^2 - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{i0} - 2\mu^2 \sum_{i=1}^n a_i + \end{aligned}$$

$$+\mu^2 - 2a_0\mu + a_0^2 + 2a_0\mu \sum_{i=1}^n a_i.$$

A inclusão da primeira parte da HI mais a imposição da não-tendenciosidade implica que  $\sum_{i=1}^n a_i = 1$ , assim:

$$\text{Var}(a_0, \dots, a_n) = \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{i0} + a_0^2 = f(a_0, \dots, a_n). \quad (3.21)$$

Deve-se minimizar a expressão (3.21), mas há uma restrição sob os  $a_i$ 's:  $\sum_{i=1}^n a_i = 1$ . Logo, deve-se fazer essa minimização sob tal restrição. A técnica utilizada é multiplicadores de Lagrange, ou seja, cria-se uma nova função  $g$  que engloba a  $f$  e a restrição ao mesmo tempo, e minimiza-se  $g$ :

$$g(a_0, \dots, a_n, b) = f(a_0, \dots, a_n) - 2b \left( \sum_{i=1}^n a_i - 1 \right),$$

ou seja, a nova função  $g(a_0, \dots, a_n, b)$  pode ser escrita como em (3.22):

$$\text{Var}(a_0, \dots, a_n, b) = \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{i0} - 2b \left( \sum_{i=1}^n a_i - 1 \right) + a_0^2. \quad (3.22)$$

Agora, sim, minimiza-se (3.22) em relação à  $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$  e  $b$ . Note que, os pesos serão trocados de  $a_i$ 's para  $\lambda_i$ 's e de  $b$  para  $v$ , porque serão igualados a zero, isto é, os  $\lambda_i$ 's e o  $v$  serão os pesos que minimizarão.

Para que a variância de predição seja mínima calcula-se a primeira derivada parcial da função  $\text{Var}(a_0, \dots, a_n, b)$  em relação a  $a_0$ , igualando-a a zero:

$$\frac{\partial \text{Var}(a_0, \dots, a_n, b)}{\partial a_0} = 0,$$

de onde  $\lambda_0 = 0$ . Novamente calcula-se a primeira derivada parcial da função  $\text{Var}(a_0, \dots, a_n, b)$  agora em relação a  $a_1$ .



em que  $\lambda_j$  é o peso de krigagem para o ponto  $\mathbf{s}_j$ ,  $\sigma_{ij} = Cov(Z_i, Z_j)$  são as covariâncias entre as variáveis  $Z$  nos pontos observados  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$ ;  $\sigma_{i0} = Cov(Z_i, Z_0)$  são respectivamente, as covariâncias entre as variáveis  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_i$  observados e a variável  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_0$  não observado, e  $\nu$  é o multiplicador de Lagrange. Observe que os pesos  $\lambda_i$ 's de krigagem são apresentados acima numa forma escalar, pela resolução do sistema de equações pode-se também escrever o sistema dado em (3.23) em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} & 1 \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2n} & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{nn} & 1 \\ 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 \end{bmatrix}_{(n+1) \times (n+1)} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ -\nu \end{bmatrix}_{(n+1) \times 1} = \begin{bmatrix} \sigma_{10} \\ \sigma_{20} \\ \vdots \\ \sigma_{n0} \\ 1 \end{bmatrix}_{(n+1) \times 1}.$$

Assim, para encontrar-se os pesos de krigagem, é preciso inverter a matriz  $(n+1) \times (n+1)$ . Para tanto, particiona-se as matrizes acima:

$$\Sigma^* = \begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}' & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} & | & 1 \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2n} & | & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & | & \vdots \\ \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{nn} & | & 1 \\ \hline 1 & 1 & \cdots & 1 & | & 0 \end{bmatrix}, \lambda^* = \begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ -\nu \end{bmatrix}, \sigma^* = \begin{bmatrix} \sigma \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{10} \\ \sigma_{20} \\ \vdots \\ \sigma_{n0} \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Pode-se, então, reescrever o sistema para a KLO em linguagem matricial como  $\Sigma^* \lambda^* = \sigma^*$ , isto é:

$$\begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}' & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma \\ 1 \end{bmatrix}$$

em que  $\Sigma$  é a matriz  $(n \times n)$  de covariâncias,  $\lambda$  é o vetor  $(n \times 1)$  com os pesos da krigagem linear ordinária,  $\sigma$  é o vetor coluna  $(n \times 1)$  respectivamente, com as covariâncias entre as variáveis  $Z$  nos pontos observados  $\mathbf{s}_i$  e as variáveis  $Z$  no ponto não observado  $\mathbf{s}_0$  e  $\nu$  é o multiplicador de Lagrange. Os pesos de krigagem são obtidos resolvendo-se o sistema matricial dado por:

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}' & 0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017) apresentam todos os detalhes da técnica de inversão de matrizes particionadas, por essa razão apresenta-se aqui apenas o seu resultado, ou seja,

$$(\mathbf{\Sigma}^*)^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1}' & 0 \end{bmatrix}^{-1} = \left[ \begin{array}{c|c} \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{\Sigma}^{-1} - \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} & \frac{\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} \\ \hline \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} & -\frac{1}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} \end{array} \right]$$

Substituindo esse resultado no sistema de equações matriciais,

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \left[ \begin{array}{c|c} \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{\Sigma}^{-1} - \mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} & \frac{\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} \\ \hline \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} & -\frac{1}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} \end{array} \right] \begin{bmatrix} \sigma \\ 1 \end{bmatrix},$$

resulta em

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \left[ \begin{array}{c|c} \sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1} - \frac{\sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} + \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} & \\ \hline \frac{\sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} & -\frac{1}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} \end{array} \right]$$

e os pesos para o preditor de krigagem ordinária serão:

$$\lambda'_{KLO} = \sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1} - \frac{\sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} + \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}}. \quad (3.25)$$

Ressalta-se que para se comparar a AGC com a ACAG vai-se explicitar a forma dos  $\lambda$ 's. Dessa maneira, o preditor de krigagem linear ordinária obtido pela abordagem geoestatística clássica (AGC) será:

$$\hat{Z}_{0(KLO)} = \lambda'_{KLO}\mathbf{Z} = \left( \sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1} - \frac{\sigma'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} + \frac{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{1}'\mathbf{\Sigma}^{-1}\mathbf{1}} \right) \mathbf{Z}. \quad (3.26)$$

Note que, a função dada em (3.26) é o preditor que se está buscando, isto é, para um campo aleatório sob HI, com média paramétrica desconhecida e constante, o melhor preditor linear de variância mínima (BLUP) é  $\hat{Z}_{0(KLO)}$ .

O próximo passo será obter a variância para o erro de predição da KLO, que denotaremos por  $\sigma_{0(KLO)}^2$ . Assim, rearranja-se as primeiras  $n$  equações do sistema linear dado em (3.23), isto é:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \sigma_{ij} = \sigma_{i0} + v. \quad (3.27)$$

Substitui-se (3.27) na expressão (3.22) tem-se:

$$\begin{aligned} \sigma_{0(KLO)}^2 &= \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \sum_{j=1}^n \lambda_j \sigma_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \lambda_0^2 \\ \sigma_{0(KLO)}^2 &= \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \lambda_i [\sigma_{i0} + v] - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \lambda_0^2 \\ \sigma_{0(KLO)}^2 &= \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \sum_{i=1}^n \lambda_i v - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \lambda_0^2. \end{aligned}$$

Como  $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$  e  $\lambda_0 = 0$ , tem-se:

$$\sigma_{0(KLO)}^2 = \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + v - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0}.$$

Então, a variância para a krigagem linear ordinária será:

$$\sigma_{0(KLO)}^2 = \sigma_{00} - \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + v \quad (3.28)$$

ou em notação matricial:

$$\sigma_{0(KLO)}^2 = \sigma_{00} - \lambda'_{KLO} \sigma + v. \quad (3.29)$$





uma vez que os pesos  $\lambda_i$ 's de krigagem são apresentados acima numa forma escalar, pela resolução do sistema de equações pode-se também escrever o sistema dado em (3.31) em forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ 0 & \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ 0 & \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{nn} \end{bmatrix}_{(n+1) \times (n+1)} \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix}_{(n+1) \times 1} = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \sigma_{10} \\ \sigma_{20} \\ \vdots \\ \sigma_{n0} \end{bmatrix}_{(n+1) \times 1}.$$

Assim, para encontrar-se os pesos de krigagem, é preciso inverter a matriz  $(n + 1) \times (n + 1)$ . Para tanto, particiona-se as matrizes acima:

$$\Sigma^* = \begin{bmatrix} 1 & \mu_1 & \mu_2 & \cdots & \mu_n \\ 0 & \sigma_{11} & \sigma_{12} & \cdots & \sigma_{1n} \\ 0 & \sigma_{21} & \sigma_{22} & \cdots & \sigma_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \sigma_{n1} & \sigma_{n2} & \cdots & \sigma_{nn} \end{bmatrix}, \lambda^* = \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \end{bmatrix}, \sigma^* = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \sigma \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \sigma_{10} \\ \sigma_{20} \\ \vdots \\ \sigma_{n0} \end{bmatrix}.$$

Dessa forma, o sistema de krigagem simples em linguagem matricial será  $\Sigma^* \lambda^* = \sigma^*$ , ou ainda:

$$\begin{bmatrix} 1 & \mu' \\ 0 & \Sigma \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \sigma \end{bmatrix}, \quad (3.32)$$

em que  $\Sigma$  é a matriz  $(n \times n)$  de covariâncias,  $\lambda$  é o vetor coluna  $(n \times 1)$  com os pesos da krigagem linear simples,  $\sigma$  é o vetor coluna  $(n \times 1)$  com as covariâncias entre o ponto não observado  $s_0$  e os pontos observados na amostra,  $\mu_0$  e  $\lambda_0$  são a média e o peso de krigagem no ponto  $s_0$ .

Para se achar os pesos de krigagem é preciso inverter a matriz  $\Sigma^*$ , cuja técnica de inversão pode ser encontrada em Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017), como dito anteriormente. Assim,  $(\Sigma^*)^{-1}$  será:

$$(\Sigma^*)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & \mu' \\ 0 & \Sigma \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & -\mu' \Sigma^{-1} \\ 0 & \Sigma^{-1} \end{bmatrix}.$$

Portanto, a solução do sistema (3.32) será:

$$\begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -\boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_0 \\ \boldsymbol{\sigma} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \lambda_0 \\ \boldsymbol{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mu_0 - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu} \\ \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \end{bmatrix}$$

$$\therefore \lambda_0 = \mu_0 - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu} \text{ e } \boldsymbol{\lambda}_{KLS} = \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}. \quad (3.33)$$

Dessa forma, o preditor de krigagem linear simples obtido pela abordagem geoestatística clássica (AGC) será:

$$\hat{Z}_{0(KLS)} = \lambda_0 + \boldsymbol{\lambda}'_{KLS}\mathbf{Z} = \mu_0 - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Z}. \quad (3.34)$$

As primeiras  $n$  equações do sistema linear dado em (3.22) podem ser rearranjadas como:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \sigma_{ij} = \sigma_{i0}. \quad (3.35)$$

Substituindo (3.35) na expressão (3.31) chega-se a:

$$\sigma_{0(KLS)}^2 = \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \sum_{j=1}^n \lambda_j \sigma_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \lambda_0^2$$

$$\sigma_{0(KLS)}^2 = \sigma_{00} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} - 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \lambda_0^2$$

$$\sigma_{0(KLS)}^2 = \sigma_{00} - \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0} + \lambda_0^2.$$

Como  $\lambda_0 = 0$ , a variância para o preditor de krigagem simples será:

$$\sigma_{0(KLS)}^2 = \sigma_{00} - \sum_{i=1}^n \lambda_i \sigma_{i0}, \quad (3.36)$$

que em notação matricial é dada por

$$\sigma_{0(KLS)}^2 = \sigma_{00} - \boldsymbol{\lambda}' \boldsymbol{\sigma}.$$

Substituindo o  $\boldsymbol{\lambda}'_{KLS} = \boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$  nessa expressão tem-se:

$$\sigma_{0(KLS)}^2 = \sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.37)$$

Journal e Huijbregts (1978) e Santos (2010) demonstram geometricamente que a seguinte desigualdade é verdadeira:

$$\sigma_{0(KLO)}^2 = \underbrace{\sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\sigma}}_{\sigma_{0(KLS)}^2} + \underbrace{\frac{\boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1} \mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}} - \frac{\mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}}}_{\text{Termo}} \geq \sigma_{0(KLS)}^2. \quad (3.38)$$

Logo, tem-se que:

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1} \mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}} - \frac{\mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{1}' \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}} \geq 0,$$

isto é, o termo é não negativo.

### 3.3.5 Predição linear multivariada

A principal questão que se busca responder com este estudo é: “como introduzir variáveis auxiliares na krigagem garantindo-se que os preditores de krigagem mantenham suas características? Isto é, como garantir que esses preditores sejam no mínimo um BLUP?”. Sabe-se que estudos reais normalmente envolvem mais do que uma variável, pois a informação disponível em um fenômeno natural raramente é limitada por valores assumidos por uma única variável.

Uma razão de natureza prática para a utilização de variáveis auxiliares, apontada por Journal e Huijbregts (1978), é o fato de que nem sempre a densidade de amostragem da variável principal é suficiente para garantir predições com uma precisão aceitável. Afirmam que a inclusão de variáveis auxiliares espacialmente correlacionadas e mais densamente amostradas podem garantir a precisão exigida.

Entretanto, Isaacks e Srivastava (1998) asseveram que as variáveis auxiliares, normalmente, são espacialmente correlacionadas com a variável principal e que esta é uma informação útil. Assim, parece ser razoável que a utilização dessa informação adicional, de uma variável auxiliar espacialmente correlacionada, possa reduzir a variância do erro de predição. Esta é, sem dúvida, a razão para a inclusão de variáveis auxiliares na krigagem. No entanto, resta a dúvida de como incluir essa informação auxiliar de tal modo que se garanta uma predição ótima.

Nesta subseção, serão apresentados três caminhos apontados pela literatura Geoestatística para a inclusão de variáveis auxiliares, a saber: krigagem linear universal (KLU), krigagem com regressão (KR) e cokrigagem (CK).

### 3.3.5.1 Krigagem linear universal (KLU)

Caso o campo aleatório não atenda a hipótese de estacionaridade de primeira ordem, isto é, exista tendência, a informação das coordenadas espaciais pode ser utilizada como informação auxiliar (MATHERON, 1969). Geralmente, a tendência ou deriva é representada por um modelo linear polinomial nas coordenadas e, por essa razão, recebe o nome de deriva interna (*Internal Drift*). Portanto, admitindo uma função de grau  $k$  das coordenadas conhecidas em qualquer ponto do domínio, define-se tendência ou deriva como:

$$\mu_i = \sum_{k=0}^p a_k f_{ki}, \quad (3.39)$$

em que  $f_{ki}$  é a função de grau  $p$  e  $a_k$  é o  $k$ -ésimo coeficiente desconhecido. O preditor para a krigagem linear universal (KLU) é:

$$\hat{Z}_{0(KLU)} = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i. \quad (3.40)$$

Aplicando-se o critério de não-viés tem-se:

$$E[\hat{Z}_{0(KLU)} - Z_0] = E[\hat{Z}_{0(KLU)}] - E[Z_0]$$

$$E[\hat{Z}_{0(KLU)} - Z_0] = E\left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i\right] - E[Z_0] = \sum_{i=1}^n \lambda_i E[Z_i] - E[Z_0]$$

$$E[\hat{Z}_{0(KLU)} - Z_0] = \sum_{i=1}^n \lambda_i \mu_i - \mu_0 = 0 \quad (3.41)$$

Substituindo (3.39) na expressão (3.41) tem-se:

$$E[\hat{Z}_{0(KLU)} - Z_0] = \sum_{i=1}^n \lambda_i \sum_{k=0}^p a_k f_{ki} - \sum_{k=0}^p a_k f_{k0}$$

$$E[\hat{Z}_{0(KLU)} - Z_0] = \sum_{k=0}^p a_k \left[ \sum_{i=1}^n \lambda_i f_{ki} - f_{k0} \right] = 0.$$

Então a condição de não-viés será assegurada pelas  $p + 1$  restrições de (3.42):

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i f_{ki} = f_{k0}, \quad k = 0, 1, \dots, p. \quad (3.42)$$

Para a minimização da  $\text{Var}(Z_0 - \hat{Z}_{0(KLU)})$ , deve-se levar em consideração as  $p + 1$  restrições obtidas em (3.42). O que será feito pelo formalismo de Lagrange, então, incluem-se as  $p + 1$  restrições na expressão da  $\text{Var}(Z_0 - \hat{Z}_{0(KLU)})$  da seguinte forma:

$$\text{Var}(Z_0 - \hat{Z}_{0(KLU)}) = E\left[(Z_0 - \hat{Z}_{0(KLU)})^2\right] + \sum_{k=0}^p a_k \left[ \sum_{i=1}^n \lambda_i f_{ki} - f_{k0} \right]. \quad (3.43)$$

Obtêm-se as  $n + p + 1$  equações do sistema de equações para a krigagem linear universal (KLU) dado em (3.44):



A solução para o sistema de krigagem linear universal (KLU)  $\Sigma^* \lambda^* = \sigma^*$ , será dada por:

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{F} \\ \mathbf{F}' & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma \\ f \end{bmatrix}. \quad (3.45)$$

Apesar da inversão de uma matriz particionada não ser direta apresenta-se apenas sua solução, para detalhes consulte Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017). Dessa forma,

$$(\Sigma^*)^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{F} \\ \mathbf{F}' & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} & \Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1} \\ (\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} & (-\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1} \end{bmatrix}.$$

Substituindo-se  $(\Sigma^*)^{-1}$  em (3.45), tem-se:

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} & \Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1} \\ (\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} & (-\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ f \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ -\nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma'\Sigma^{-1} - \sigma'\Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} + f'(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} \\ \sigma'\Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1} - f'(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1} \end{bmatrix}.$$

Assim, o vetor de pesos para a krigagem linear universal  $\lambda'_{KLU}$ , será:

$$\lambda'_{KLU} = \sigma'\Sigma^{-1} - \sigma'\Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} + f'(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} \quad (3.46)$$

e o preditor linear de krigagem universal será:

$$\hat{Z}_{0(KLU)} = \lambda'_{KLU} \mathbf{Z} = \underbrace{\left[ \sigma'\Sigma^{-1} - \sigma'\Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} + f'(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} \right]}_{\lambda'_{KLU}} \mathbf{Z}. \quad (3.47)$$

A variância de krigagem para a krigagem linear universal é obtida de forma equivalente a utilizada para obter a variância de predição para a krigagem linear ordinária. Dessa forma, apenas apresentamos seu resultado dado pela expressão (3.48).

$$\sigma_{0(KLU)}^2 = \sigma_{00} - \sigma'\Sigma^{-1}\sigma + \sigma'\Sigma^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1} - f'(\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma^{-1}\sigma. \quad (3.48)$$

De igual maneira, Journel e Huijbregts (1978) e Santos (2010) demonstram geometricamente que a seguinte desigualdade é verdadeira:

$$\sigma_{0(KLU)}^2 = \underbrace{\sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}}_{\sigma_{0(KLS)}^2} + \underbrace{\frac{\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}} - \frac{\mathbf{f}'\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}}}_{\text{Termo}} \geq \sigma_{0(KLO)}^2 \geq \sigma_{0(KLS)}^2.$$

Logo, tem-se que:

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}} - \frac{\mathbf{f}'\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}} \geq \frac{\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{I}\mathbf{I}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\mathbf{I}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{I}} - \frac{\mathbf{I}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}}{\mathbf{I}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{I}} \geq 0,$$

isto é, o termo é não negativo e  $\sigma_{0(KLU)}^2 \geq \sigma_{0(KLO)}^2 \geq \sigma_{0(KLS)}^2$ . Note então que, o preditor de krigagem linear com menor variância de krigagem é o da KLS, seguido pelo da KLO e depois pelo preditor de KLU.

### 3.3.5.2 Krigagem com regressão (KR)

O preditor de krigagem linear ordinária (KLO), apresentado a seguir, é um exemplo de um preditor linear univariado:

$$\hat{Z}_0 = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i.$$

Hengl, Heuvelink e Stein (2004) ponderam que a utilização de técnicas de regressão podem ser uma alternativa a krigagem, pois modela a relação entre a variável principal e uma variável auxiliar que seja correlacionada nos locais onde somente a variável auxiliar é conhecida. Geralmente essa variável auxiliar é uma variável ambiental também medida na região amostrada e, por essa razão pode ser utilizada como informação auxiliar externa para implementar a precisão no processo de predição. Conforme McKenzie e Ryan (1999), variáveis ambientais comumente utilizadas como variáveis auxiliares são: modelos de elevação digital, imagens de sensoriamento remoto e mapas geológicos, do solo e de uso terrestre, dentre outras.

Observe pela expressão a seguir, que a predição feita pela regressão também é uma média ponderada, só que neste caso das variáveis auxiliares, assim,



$$\hat{Z}_0 = \sum_{k=0}^p \hat{\beta}_k \cdot f_{ki}; \quad f_{00} = 1. \quad (3.49)$$

Hengl, Heuvelink e Stein (2004), ainda, afirmam que a krigagem com regressão (KR) combina essas duas abordagens nas quais a regressão é utilizada para ajustar a variação relativa à tendência, parte determinística do modelo, e a krigagem linear simples (KLS) com esperança nula é utilizada para ajustar os resíduos de regressão, parte estocástica do modelo de regressão linear geoestatístico. Assim, a predição é feita separadamente para a tendência e para os resíduos e, logo em seguida, esses componentes são somados. Então, o preditor para a krigagem com regressão será:

$$\hat{Z}_{0(KR)} = \hat{\mu}_0 + \hat{\varepsilon}_0 \quad (3.50)$$

na qual  $\hat{\mu}_0$  é o componente determinístico ajustado e  $\hat{\varepsilon}_0$  é o resíduo interpolado. O preditor para krigagem com regressão, ainda, pode ser escrito como:

$$\hat{Z}_{0(KR)} = \sum_{k=0}^p \hat{\beta}_k f_{k0} + \sum_{i=1}^n \lambda_i \varepsilon_i; \quad f_{00} = 1; \quad i = 1, \dots, n, \quad (3.51)$$

em que  $\hat{\beta}_k$  são os coeficientes do modelo de tendência estimados pela regressão,  $f_{k0}$  é o valor da  $k$ -ésima variável auxiliar em local não amostrado,  $p$  é o número de variáveis auxiliares,  $\lambda_i$  são os pesos de krigagem para os resíduos de regressão e  $\varepsilon_i$  são os resíduos de regressão.

Se os coeficientes do modelo de tendência são obtidos pelo método de estimação de mínimos quadrados ordinários, a covariância entre os resíduos e a tendência estimada é considerada zero. Isso é razoável desde que os resíduos de regressão (obtidos por MQO) sejam ortogonais, isto é, quando as variáveis aleatórias são normais com média zero e variância constante.

Entretanto, para os demais casos, conforme Cressie (1993) para que a correlação espacial dos resíduos seja levada em conta no processo de estimação dos coeficientes para o modelo de tendência e se tenha um preditor ótimo, o método de estimação adotado deve ser o de mínimos quadrados generalizados (MQG), assim:

$$\hat{\beta}_{MQG} = (\mathbf{F}'\Sigma_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\Sigma_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{Z}, \quad (3.52)$$

em que  $\Sigma_{\varepsilon}$  é a matriz de covariâncias dos resíduos, dada por

$$\Sigma_{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \text{Cov}(\varepsilon_1, \varepsilon_1) & \text{Cov}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) & \cdots & \text{Cov}(\varepsilon_1, \varepsilon_n) \\ \text{Cov}(\varepsilon_2, \varepsilon_1) & \text{Cov}(\varepsilon_2, \varepsilon_2) & \cdots & \text{Cov}(\varepsilon_2, \varepsilon_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{Cov}(\varepsilon_n, \varepsilon_1) & \text{Cov}(\varepsilon_n, \varepsilon_2) & \cdots & \text{Cov}(\varepsilon_n, \varepsilon_n) \end{bmatrix}. \quad (3.53)$$

Assim, em notação matricial o preditor linear para a krigagem com regressão será:

$$\hat{Z}_{0(KR)} = \mathbf{f}' \hat{\boldsymbol{\beta}}_{MQG} + \boldsymbol{\lambda}'_{KR} \boldsymbol{\varepsilon}, \quad (3.54)$$

ou, ainda,

$$\hat{Z}_{0(KR)} = \mathbf{f}' \hat{\boldsymbol{\beta}}_{MQG} + \boldsymbol{\lambda}'_{KR} (\mathbf{Z} - \mathbf{F}' \hat{\boldsymbol{\beta}}_{MQG}), \quad (3.55)$$

em que  $\boldsymbol{\lambda}'_{KR} = \boldsymbol{\sigma}' \Sigma_{\varepsilon}^{-1}$ ,  $\mathbf{f}$  é o vetor com  $(p + 1) \times 1$  observações das variáveis auxiliares no local não amostrado,  $\hat{\boldsymbol{\beta}}_{MQG}$  é o vetor com  $(p + 1) \times 1$  coeficientes de regressão estimados por MQG para o modelo de tendência,  $\boldsymbol{\lambda}_{KR}$  é o vetor com os  $n$  pesos de krigagem usados para interpolar os resíduos e  $\boldsymbol{\varepsilon}$  é o vetor com os  $n$  resíduos de regressão. Portanto, somente com uma estimação de mínimos quadrados generalizados (MQG) teremos o melhor preditor linear não-viesado e de variância mínima (BLUP).

É importante destacar que a estimação dos resíduos é um processo iterativo devido ao desconhecimento das verdadeiras covariâncias. Assim, primeiro o modelo de tendência é obtido pelo método de mínimos quadrados ordinário (MQO); então, a função covariância dos resíduos é utilizada para obter os coeficientes pelo método de mínimos quadrados generalizados (MQG). Estes são utilizados para recalculer os resíduos e assim sucessivamente. Caso o processo de estimação da tendência feita por MQO não seja repetido usando MQG, tem-se estimativas viesadas.

De acordo com Chilès e Delfiner (2012), a variância do erro de predição para a krigagem com regressão pode ser escrita como:

$$\sigma_{0(KR)}^2 = \sigma_0^2 \{\hat{\mu}_0\} + \sigma_0^2 \{\hat{\varepsilon}_0\}, \quad (3.56)$$

em que  $\sigma_0^2\{\hat{\mu}_0\}$  é o erro de predição referente a tendência,  $\sigma_0^2\{\hat{\varepsilon}_0\}$  é a variância de krigagem para os resíduos da regressão,  $\sigma_{00} = (C_0 + C_1)$  e cuja expressão será:

$$\sigma_{0(KR)}^2 = \frac{\mathbf{f}'(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{f}}{\sigma_0^2\{\hat{\mu}_0\}} + \frac{\sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{\sigma}}{\sigma_0^2\{\hat{\varepsilon}_0\}}, \quad (3.57)$$

em que  $\mathbf{f}$  é o vetor  $(p + 1) \times 1$  com as observações das variáveis auxiliares no ponto  $\mathbf{s}_0$  e  $\mathbf{c}_0$  é o vetor  $(p \times 1)$  com as covariâncias entre os resíduos da variável  $Z$  nos pontos observados  $\mathbf{s}_i$  e a variável  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_0$ , ou seja,

$$\mathbf{q}_0 = [\mathbf{q}_{00}, \mathbf{q}_{01}, \mathbf{q}_{02}, \dots, \mathbf{q}_{0n}]' \text{ e } \mathbf{c}_0 = [\mathbf{c}_{01}, \mathbf{c}_{02}, \dots, \mathbf{c}_{0n}]'.$$

A expressão mais utilizada para calcular a variância de predição para o resíduo e a tendência, levando-se em consideração a covariância entre a estimativa da tendência e os resíduos, é a variância da KLU (CRESSIE, 1993), ou seja,

$$\sigma_{0(KR)}^2 = \sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{\sigma} + (\mathbf{f}' - \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{\sigma})'(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{f}(\mathbf{f}' - \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{\sigma}). \quad (3.58)$$

Hengl, Heuvelink e Rossiter (2007) provam a equivalência entre a krigagem com regressão (KR) e a krigagem linear universal (KLU), partindo da krigagem com deriva externa (KDE), a qual de acordo com Wackernagel (2013) é um caso particular de krigagem linear universal (KLU).

Dado que o preditor de krigagem com deriva externa é dado por  $\hat{Z}_{0(KDE)} = \boldsymbol{\lambda}'_{KDE} \mathbf{Z}$ , os pesos de krigagem ( $\boldsymbol{\lambda}_{KDE}$ ) são obtidos pela solução do sistema dado em (3.58) (WACKERNAGEL, 2013):

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1} & \mathbf{F} \\ \mathbf{F}' & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\lambda}_{KDE} \\ \mathbf{v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{f} \end{bmatrix}, \quad (3.59)$$

em que  $\mathbf{v}$  é o vetor com os multiplicadores de Lagrange. Este sistema resulta:

$$\begin{cases} \boldsymbol{\Sigma}_\varepsilon^{-1}\boldsymbol{\lambda}_{KDE} + \mathbf{F}\mathbf{v} = \boldsymbol{\sigma} \text{ e} \\ \mathbf{F}'\boldsymbol{\lambda}_{KDE} = \mathbf{f}. \end{cases} \quad (3.60)$$

Observe que o sistema mostrado em (3.59) é equivalente ao sistema obtido pela KLU em (3.45). Disso segue que:

$$\mathbf{F}'\boldsymbol{\lambda}_{KDE} = \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{\sigma} - \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F}\mathbf{v} \quad (3.61)$$

e, portanto

$$\mathbf{v} = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{\sigma} - (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{f}, \quad (3.62)$$

em que a identidade  $\mathbf{F}'\boldsymbol{\lambda}_{KDE} = \mathbf{f}$  foi utilizada. Substituindo  $\mathbf{v}$  na equação (3.60) mostra-se que os pesos para a krigagem por deriva externa são:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}_{KDE} &= \boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F}[(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{\sigma} - (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{f}], \\ \boldsymbol{\lambda}_{KDE} &= \boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}[\boldsymbol{\sigma} + \mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}(\mathbf{f} - \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{\sigma})]. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Voltando a krigagem com regressão. Retomando a equação (3.54), o vetor dos coeficientes de regressão estimados por mínimos quadrados generalizados (MQG) que é dado por:

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}_{mqg} = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{Z}$$

e os pesos para os resíduos da regressão dados por  $\boldsymbol{\lambda}'_{KR} = \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}$ . Substituindo estes na expressão (3.55) do preditor de krigagem com regressão (KR) resulta:

$$\begin{aligned} \hat{Z}_{0(KR)} &= \mathbf{f}'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{mqg} + \boldsymbol{\lambda}'_{KR}(\mathbf{Z} - \mathbf{F}'\hat{\boldsymbol{\beta}}_{MQG}) \\ \hat{Z}_{0(KR)} &= [\mathbf{f}'(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}]\mathbf{Z} \\ \hat{Z}_{0(KR)} &= \boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}[\boldsymbol{\sigma}' + \mathbf{f}'(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}' - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}']\mathbf{Z} \\ \hat{Z}_{0(KR)} &= \boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}[\boldsymbol{\sigma}' + \mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\mathbf{F})^{-1}(\mathbf{f} - \mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}_{\varepsilon}^{-1}\boldsymbol{\sigma})]\mathbf{Z}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Observe que a parte esquerda da equação é igual à equação (3.50), o que prova que as predições obtidas pela krigagem com deriva externa (KED) serão as mesmas predições resultantes de uma krigagem com regressão (KR), isso se estas entradas forem usadas.

### 3.3.5.3 Cokrigagem linear (CKL)

Diferentemente da krigagem linear universal (KLU) em que as variáveis auxiliares são incluídas pela utilização da informação das coordenadas espaciais, a cokrigagem (CK) inclui a informação auxiliar pela inclusão de variáveis auxiliares externas (*External Drift*).

Visto que a cokrigagem é uma extensão multivariada do método de krigagem, isto é, em cada local amostrado podendo-se ter um vetor com os valores da variável principal e de uma ou mais variáveis auxiliares, o preditor linear dado em (3.34) é diretamente estendido pela incorporação da informação auxiliar (GOOVAERTS, 1997) e pode ser definido como:

$$\hat{Z}_{0(CK)} = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_{zi} Z_i + \sum_{k=1}^p \sum_{i=1}^m \lambda_{ki} U_{ki} \quad (3.65)$$

em que  $\lambda_{zi}$  são os pesos atribuídos à variável principal  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_i$  e  $\lambda_{ki}$ , são os pesos atribuídos à  $k$ -ésima variável auxiliar  $U$  no ponto  $\mathbf{s}_i$ . Todos os preditores de cokrigagem são variantes da expressão (3.65) e todos eles, a exemplo dos casos univariados, devem ser não-viesados e de variância mínima.

Por simplicidade vai-se desenvolver o caso em que apenas uma variável auxiliar  $U$  será utilizada e, logo em seguida o caso geral será mostrado.

#### 3.3.5.3.1 Semivariograma cruzado

Como dito anteriormente, a principal ferramenta geoestatística para se realizar a análise da dependência espacial, é o semivariograma. Quando uma ou mais variáveis auxiliares, além da variável principal, são consideradas na krigagem, isto é, quando em todos os pontos da malha amostral mede-se, além da variável principal, uma ou mais variáveis auxiliares, para se medir a dependência espacial entre estas variáveis em pontos separados por uma distância  $\mathbf{h}_{ij}$ , utiliza-se o semivariograma cruzado. Então, o semivariograma cruzado entre  $Z$  e  $U$  quaisquer será:

$$\gamma_{ZUij} = \gamma_{ZU}(\mathbf{h}_{ij}) = \frac{1}{2} E\{[Z_j - Z_i][U_j - U_i]\} \quad (3.66)$$

e pode ser estimado através do método dos momentos pelo estimador clássico de Matheron (1962) dado por:

$$\hat{\gamma}_{ZUij} = \hat{\gamma}_{ZU}(\mathbf{h}_{ij}) = \frac{1}{2N(\mathbf{h}_{ij})} \sum_{\substack{\forall \mathbf{s}_i, \mathbf{s}_j \\ \text{tal que} \\ |\mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i| = \mathbf{h}_{ij}}} E\{[Z_j - Z_i][U_j - U_i]\}, \quad (3.67)$$

em que  $N(\mathbf{h}_{ij})$  é o número de pares de valores medidos entre as variáveis  $Z_i$  e  $Z_j$  e  $U_i$  e  $U_j$  separados por um mesmo vetor  $\mathbf{h}_{ij} = \mathbf{s}_j - \mathbf{s}_i$ .

Um semivariograma cruzado ideal teria a mesma aparência mostrada na figura 3.7, desde que a relação entre  $Z$  e  $U$  seja direta, mas com significados diferentes pelo simples fato de envolver o produto das diferenças de duas variáveis distintas. O alcance nesse caso representa o final ou a distância máxima de dependência espacial entre as variáveis. O patamar, se existir, deve aproximar-se do valor da covariância entre as duas variáveis. Assim, quando as duas forem de correlação inversa o semivariograma cruzado será negativo. Os modelos teóricos utilizados para o semivariograma cruzado são os mesmos já requeridos para o semivariograma (SOARES, 2006).

Entretanto, a grande dificuldade dessa técnica está no elevado número de ajuste dos semivariogramas resultantes das combinações entre as variáveis principal e auxiliar, isto é, o número total de semivariogramas será igual a  $n \frac{(n+1)}{2}$ , em que  $n$  são os semivariogramas diretos, e  $n \frac{(n-1)}{2}$  refere-se aos semivariogramas cruzados (YAMAMOTO; LANDIM, 2015).

De acordo com Vieira e Novaes (2000), não importa que uma das variáveis tenha milhares de pontos amostrados, pois o semivariograma cruzado só será calculado usando as informações existentes para posições espaciais coincidentes. Isso significa que  $Z_i$  e  $U_i$  têm de ser, necessariamente, definidos para os mesmos locais, e as informações excedentes deverão ser excluídas dos cálculos.

Deve-se ressaltar que toda a teoria apresentada para o semivariograma continua válida e que para se avaliar a dependência espacial de cada variável individualmente, a construção do semivariograma continua necessária.

### 3.3.5.3.2 Cokrigagem linear ordinária (CKLO)

Como no caso univariado admite-se estacionaridade tanto para a média da variável principal como para a média da variável auxiliar. Porém, essas médias são desconhecidas, ou seja,  $E[Z] = \mu_Z$  e  $E[U] = \mu_U$ , com  $\mu_Z$  e  $\mu_U$  desconhecidas  $\forall \mathbf{s} \in D$ . Além disso, a variável

principal  $Z$  foi observada em  $n$  pontos, isto é,  $Z_i, i = 1, \dots, n$ . Da mesma maneira, a variável auxiliar  $U$  foi observada em  $m$  pontos, ou seja,  $U_j, j = 1, \dots, m$ . Dado que ambas as variáveis foram coletadas conjuntamente em todos os pontos, logo  $n = m$ .

O preditor para a cokrigagem linear ordinária, denotado por  $\hat{Z}_{0(CKLO)}$ , pode ser descrito como uma combinação linear entre os pesos  $a_i$  e  $b_j$  e valores observados  $Z_i$  e  $U_j$ , ou seja,

$$\hat{Z}_{0(CKLO)} = \sum_{i=1}^n a_i Z_i + \sum_{j=1}^m b_j U_j. \quad (3.68)$$

Semelhantemente ao caso univariado, o preditor de cokrigagem linear ordinário deve ser não-viesado e possuir variância mínima. Dessa forma, a condição de não-viés implica a esperança de erro nula:

$$\begin{aligned} E[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= E\left[\sum_{i=1}^n a_i Z_i + \sum_{j=1}^m b_j U_j - Z_0\right] = 0 \\ E[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= E\left[\sum_{i=1}^n a_i Z_i\right] + E\left[\sum_{j=1}^m b_j U_j\right] - E[Z_0] = 0 \\ E[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= \sum_{i=1}^n a_i E[Z_i] + \sum_{j=1}^m b_j E[U_j] - E[Z_0] = 0. \end{aligned}$$

Como  $E[Z_0] = E[Z_i] = \mu_Z$  e  $E[U_j] = \mu_U$ ,

$$\begin{aligned} E[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= \sum_{i=1}^n a_i \mu_Z + \sum_{j=1}^m b_j \mu_U - \mu_Z = 0 \\ \sum_{j=1}^m b_j \mu_U &= \mu_Z - \sum_{i=1}^n a_i \mu_Z \\ \sum_{j=1}^m b_j \mu_U &= \mu_Z \left(1 - \sum_{i=1}^n a_i\right) \end{aligned}$$

Portanto, o critério de não-viés para o preditor de cokrigagem linear ordinária só é atendido se e, somente se, as seguintes restrições forem impostas:

$$\sum_{i=1}^n a_i = 1 \quad e \quad \sum_{j=1}^m b_j = 0, \quad (3.69)$$

ou seja, para que a estimativa seja não tendenciosa, a soma dos pesos associados à variável principal  $Z$  deve ser 1 e a soma dos pesos associados com a variável auxiliar  $U$  deve ser nula, qualquer que seja a distribuição dos pesos. Aplicando-se o critério de variância mínima tem-se:

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= E[(\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0)^2] = E\left[\left(\sum_{i=1}^n a_i Z_i + \sum_{j=1}^m b_j U_j - Z_0\right)^2\right] \\ &= E\left[\left(\sum_{i=1}^n a_i Z_i + \sum_{j=1}^m b_j U_j - Z_0\right)\left(\sum_{i=1}^n a_i Z_i + \sum_{j=1}^m b_j U_j - Z_0\right)\right] \\ &= E\left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j Z_i Z_j + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m b_i b_j U_i U_j + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_i b_j Z_i U_j - 2 \sum_{i=1}^n a_i Z_i Z_0 + \right. \\ &\quad \left. - 2 \sum_{j=1}^m b_j U_j Z_0 + Z_0 Z_0\right] \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j E[Z_i Z_j] + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m b_i b_j E[U_i U_j] + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_i b_j E[Z_i U_j] - 2 \sum_{i=1}^n a_i E[Z_i Z_i] + \\ &\quad - 2 \sum_{j=1}^m b_j E[U_j Z_0] + E[Z_0 Z_0] \\ \text{Var}[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ZZij} + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m b_i b_j \sigma_{UUij} + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_i b_j \sigma_{ZUij} + \\ &\quad - 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{ZZi0} - 2 \sum_{j=1}^m b_j \sigma_{UUj0} + \sigma_{ZZ00}, \quad (3.70) \end{aligned}$$



em que  $\sigma_{ZZij} = Cov(Z_i, Z_j)$  e  $\sigma_{UUij} = Cov(U_i, U_j)$  são as autocovariâncias espaciais (AC), respectivamente, das variáveis  $Z$  e  $U$  nos pontos  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$ ;  $\sigma_{ZUij} = Cov(Z_i, U_j)$  são as covariâncias espaciais cruzadas (CC) entre as variáveis  $Z$  e  $U$  nos pontos  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$  e;  $\sigma_{ZUii} = Cov(Z_i, U_i)$  são as covariâncias simples não espaciais (CS) entre as variáveis  $Z$  e  $U$  no mesmo ponto  $\mathbf{s}_i$ .

Considerando que a aplicação do critério de não-tendência impôs duas restrições  $\sum_{i=1}^n a_i = 1$  e  $\sum_{j=1}^m b_j = 0$ , a minimização da expressão da  $Var[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0]$  deve ser obtida também sob estas restrições, assim, o formalismo de Lagrange será aplicado sob esta nova função dada por:

$$\begin{aligned} Var[\hat{Z}_{0(CKLO)} - Z_0] &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j \sigma_{ZZij} + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m b_i b_j \sigma_{UUij} + 2 \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m a_i b_j \sigma_{ZUij} + \\ &- 2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{ZZi0} - 2 \sum_{j=1}^m b_j \sigma_{UUj0} + \sigma_{ZZ00} + 2c_1 \left( \sum_{i=1}^n a_i - 1 \right) + 2c_2 \left( \sum_{j=1}^m b_j \right) \end{aligned} \quad (3.71)$$

A minimização de (3.71) resume-se ao cálculo das  $n + m + 2$  derivadas parciais com respeito aos pesos  $a_i$ ,  $b_j$  e aos multiplicadores de Lagrange  $c_1$  e  $c_2$  igualadas a zero. Assim, primeiro obtemos as derivadas em relação a  $a_i$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Var[\hat{Z}_{0(CKO)} - Z_0]}{\partial a_i} &= 0, \quad i = 1, \dots, n, \\ 2 \sum_{i=1}^n a_j \sigma_{ZZij} + 2 \sum_{j=1}^m b_j \sigma_{ZUij} - 2\sigma_{ZZi0} - 2v_1 &= 0, \end{aligned}$$

que após minimizadas fornecem as  $n$  primeiras equações do sistema de equações para a cokrigagem linear ordinária (CKLO):

$$\sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} \sigma_{ZZij} + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \sigma_{ZUij} - v_1 = \sigma_{ZZ0j}, \quad j = 1, \dots, n.$$

São  $\lambda_{zi}$  os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_i$  e  $\lambda_{Uj}$  os pesos de krigagem para a variável auxiliar  $U$ , no ponto  $\mathbf{s}_j$ . Note que as variáveis  $Z$  e  $U$  são amostradas conjuntamente em todos os pontos, assim, os pontos de  $\mathbf{s}_i$  são os mesmos pontos de  $\mathbf{s}_j$ , diferenciam-se esses índices para evitar confusão no momento de se fazer as deduções.

Em um segundo passo, obtêm-se as derivadas em relação à  $b_j$ ,

$$\frac{\partial Var [\hat{Z}_{0(CKO)} - Z_0]}{\partial b_j} = 0, \quad j = 1, \dots, m$$

$$2 \sum_{i=1}^n a_i \sigma_{ZUij} + 2 \sum_{j=1}^m b_j \sigma_{ZUij} - 2\sigma_{ZU0j} - 2c_2 = 0.$$

Após minimização adiciona-se  $m$  equações ao sistema:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_{zi} \sigma_{ZUij} + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \sigma_{ZUij} - v_2 = \sigma_{ZU0j}.$$

Logo em seguida, realiza-se a derivada em relação a  $c_1$ ,

$$\frac{\partial Var [\hat{Z}_{0(CKO)} - Z_0]}{\partial c_1} = 2 \left( \sum_{i=1}^n a_i - 1 \right) = 0,$$

que minimizada gera a equação relativa a primeira restrição:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_{zi} = 1.$$

Por fim, iguala-se a zero a primeira derivada obtida em relação a  $c_2$ :

$$\frac{\partial Var [\hat{Z}_{0(CKO)} - Z_0]}{\partial c_2} = 2 \left( \sum_{j=1}^m b_j \right) = 0,$$

e assim, a equação devido à segunda restrição é obtida.

$$\sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} = 0.$$

Note que, assim como no caso univariado, os pesos foram trocados de  $a_i$ 's e  $b_j$ 's para  $\lambda'_{Zi}$ 's e  $\lambda'_{Uj}$ 's e de  $c_1$  e  $c_2$  para  $v_1$  e  $v_2$  porque igualou-se a zero, isto é, os  $\lambda'_{Zi}$ 's,  $\lambda'_{Uj}$ 's,  $v_1$  e  $v_2$  são os pesos que minimizam.

O que conduz ao sistema de cokrigagem linear ordinária com  $n + m + 2$  equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{Z1}\sigma_{ZZ11} + \lambda_{Z2}\sigma_{ZZ12} + \dots + \lambda_{Zn}\sigma_{ZZ1n} + \lambda_{U1}\sigma_{ZU11} + \lambda_{U2}\sigma_{ZU12} + \dots + \lambda_{Um}\sigma_{ZU1m} - v_1 = \sigma_{ZZ01} \\ \lambda_{Z1}\sigma_{ZZ21} + \lambda_{Z2}\sigma_{ZZ22} + \dots + \lambda_{Zn}\sigma_{ZZ2n} + \lambda_{U1}\sigma_{ZU21} + \lambda_{U2}\sigma_{ZU22} + \dots + \lambda_{Um}\sigma_{ZU2m} - v_1 = \sigma_{ZZ02} \\ \vdots \\ \lambda_{Z1}\sigma_{ZZn1} + \lambda_{Z2}\sigma_{ZZn2} + \dots + \lambda_{Zn}\sigma_{ZZnn} + \lambda_{U1}\sigma_{ZUn1} + \lambda_{U2}\sigma_{ZUn2} + \dots + \lambda_{Um}\sigma_{ZUnm} - v_1 = \sigma_{ZZ0n} \\ \lambda_{Z1}\sigma_{ZU11} + \lambda_{Z2}\sigma_{ZU12} + \dots + \lambda_{Zn}\sigma_{ZU1n} + \lambda_{U1}\sigma_{UU11} + \lambda_{U2}\sigma_{UU12} + \dots + \lambda_{Um}\sigma_{UU1m} - v_2 = \sigma_{ZU01} \\ \lambda_{Z1}\sigma_{ZU21} + \lambda_{Z2}\sigma_{ZU22} + \dots + \lambda_{Zn}\sigma_{ZU2n} + \lambda_{U1}\sigma_{UU21} + \lambda_{U2}\sigma_{UU22} + \dots + \lambda_{Um}\sigma_{UU2m} - v_2 = \sigma_{ZU02} \\ \vdots \\ \lambda_{Z1}\sigma_{ZUn1} + \lambda_{Z2}\sigma_{ZUn2} + \dots + \lambda_{Zn}\sigma_{ZUnn} + \lambda_{U1}\sigma_{UUn1} + \lambda_{U2}\sigma_{UUn2} + \dots + \lambda_{Um}\sigma_{UUnm} - v_2 = \sigma_{ZU0m} \\ \lambda_{Z1} + \lambda_{Z2} + \dots + \lambda_{Zn} = 1 \\ \lambda_{U1} + \lambda_{U2} + \dots + \lambda_{Um} = 0, \end{array} \right.$$

ou ainda,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi}\sigma_{ZZij} + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj}\sigma_{ZUij} - v_1 = \sigma_{ZZ0j}, \quad j = 1, \dots, n \\ \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi}\sigma_{ZUij} + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj}\sigma_{UUij} - v_2 = \sigma_{ZU0j}, \quad j = 1, \dots, m \\ \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} = 1 \\ \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} = 0, \end{array} \right. \quad (3.72)$$

em que  $v_1$  e  $v_2$  são os multiplicadores de Lagrange. A variância mínima para a cokrigagem linear ordinária (CKLO) é:

$$\sigma_{0(CKLO)}^2 = \sigma_{ZZ00} - \mu_Z - \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi}\sigma_{ZZi0} - \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj}\sigma_{UZj0}. \quad (3.73)$$

De (3.72) definimos as matrizes  $\Sigma^*$ ,  $\lambda^*$  e  $\sigma^*$ , particionadas da seguinte maneira:

$$\Sigma^* = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ12} & \cdots & \sigma_{ZZ1n} & \sigma_{ZU11} & \sigma_{ZU12} & \cdots & \sigma_{ZU1m} & 1 & 0 \\ \sigma_{ZZ21} & \sigma_{ZZ22} & \cdots & \sigma_{ZZ2n} & \sigma_{ZU21} & \sigma_{ZU22} & \cdots & \sigma_{ZU2m} & 1 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{ZZn1} & \sigma_{ZZn2} & \cdots & \sigma_{ZZnn} & \sigma_{ZUn1} & \sigma_{ZUn2} & \cdots & \sigma_{ZUnm} & 1 & 0 \\ \hline \sigma_{UZ11} & \sigma_{UZ12} & \cdots & \sigma_{UZ1n} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} & \cdots & \sigma_{UU1n} & 0 & 1 \\ \sigma_{UZ21} & \sigma_{UZ22} & \cdots & \sigma_{UZ2n} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} & \cdots & \sigma_{UU2n} & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_{UZm1} & \sigma_{UZm2} & \cdots & \sigma_{UZmn} & \sigma_{UUm1} & \sigma_{UUm2} & \cdots & \sigma_{UUm n} & 0 & 1 \\ \hline 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 1 & 1 & \cdots & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

em que  $\sigma_{ZZij} = Cov(Z_i, Z_j)$  e  $\sigma_{UUij} = Cov(U_i, U_j)$  são as autocovariâncias espaciais (AC), respectivamente, das variáveis  $Z$  e  $U$  entre os pontos  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$ ;  $\sigma_{ZUij} = Cov(Z_i, U_j)$  são as covariâncias cruzadas espaciais (CC) entre as variáveis  $Z$  e  $U$  entre os pontos  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$  e;  $\sigma_{ZUii} = Cov(Z_i, U_i)$  são as covariâncias simples não espaciais (CS) entre as variáveis  $Z$  e  $U$  no mesmo ponto  $\mathbf{s}_i$ . A matriz  $\Sigma^*$  também pode ser escrita como:

$$\Sigma^* = \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ} & \Sigma_{ZU} & \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \Sigma_{UZ} & \Sigma_{UU} & \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \hline \mathbf{1}' & \mathbf{0}' & 0 & 0 \\ \mathbf{0}' & \mathbf{1}' & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{I} \\ \mathbf{I}' & \Phi \end{bmatrix},$$

em que  $\Sigma$  é a matriz de matrizes  $(n + m) \times (n + m)$  de autocovariâncias espaciais (AC) e covariâncias cruzadas espaciais (CC), na qual  $\Sigma_{ZZ}$  e  $\Sigma_{UU}$  são respectivamente as matrizes com as AC da variável  $Z$  e da variável  $U$ ,  $\Sigma_{ZU}$  é a matriz com as CC entre  $Z$  e  $U$ ;  $\mathbf{1}$  é um vetor  $(n \times 1)$  de 1's,  $\mathbf{0}$  é um vetor  $(n \times 1)$  de 0's,  $\Phi$  é uma matriz  $(2 \times 2)$  de zeros e  $\mathbf{I}$  é uma matriz identidade  $(2 \times 2)$ . Assim,

$$\lambda^{*'} = [\lambda'_Z \mid \lambda'_U \mid \mathbf{v}'] = [\lambda_{Z1} \quad \lambda_{Z2} \quad \cdots \quad \lambda_{Zn} \mid \lambda_{U1} \quad \lambda_{U2} \quad \cdots \quad \lambda_{Um} \mid \nu_1 \quad \nu_2]$$

em que  $\lambda_Z$  é o vetor  $(n \times 1)$  com os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$ ,  $\lambda_U$  é o vetor  $(m \times 1)$  com os pesos de krigagem para a variável auxiliar  $U$  e  $\mathbf{v}$  é o vetor com os multiplicadores de Lagrange, e

$$\sigma^{*'} = [\sigma'_{0Z} \mid \sigma'_{0U} \mid \mathbf{1} \ 0] = [\sigma_{ZZ01} \quad \sigma_{ZZ02} \quad \cdots \quad \sigma_{ZZ0n} \mid \sigma_{ZU01} \quad \sigma_{ZU02} \quad \cdots \quad \sigma_{ZU0m} \mid 1 \quad 0]$$

em que  $\sigma_{0Z}$  é o vetor  $(n \times 1)$  com as AC,  $\sigma_{ZZ0j} = Cov(Z_0, Z_j)$ , e  $\sigma_{0U}$  é o vetor  $(n \times 1)$  com as CC,  $\sigma_{ZU0j} = Cov(Z_0, U_j)$ .

Utilizando a notação matricial, a solução para o sistema de cokrigagem ordinária dado em (3.72) pode ser escrito como:

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{I} \\ \mathbf{I}' & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma \\ \mathbf{I} \end{bmatrix}.$$

Considerando que a inversão de matrizes particionadas não é direta, para obtê-la recorreremos à Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017), onde pode-se obter mais detalhes. Dessa forma:

$$\begin{bmatrix} \Sigma & \mathbf{I} \\ \mathbf{I}' & \mathbf{0} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} + \Sigma^{-1}\mathbf{I}(\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1}\mathbf{I}'\Sigma^{-1} & \Sigma^{-1}\mathbf{I}(\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1} \\ \hline (\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1}\mathbf{I}'\Sigma^{-1} & (-\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1} \end{bmatrix}.$$

Substituindo no sistema da CKLO, teremos:

$$\begin{bmatrix} \lambda \\ \nu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma^{-1} - \Sigma^{-1}\mathbf{I}(\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1}\mathbf{I}'\Sigma^{-1} & \Sigma^{-1}\mathbf{I}(\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1} \\ \hline (\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1}\mathbf{I}'\Sigma^{-1} & (-\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ \mathbf{I} \end{bmatrix}.$$

Assim, os pesos para a CKLO, denotada por  $\lambda'_{CKLO}$  será:

$$\lambda'_{CKLO} = \sigma'\Sigma^{-1} + \frac{\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I}}{\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I}} - \frac{\sigma'\Sigma^{-1}\mathbf{I}\mathbf{I}'\Sigma^{-1}}{\mathbf{I}'\Sigma^{-1}\mathbf{I}}. \quad (3.74)$$

Observe que, ao comparar  $\lambda'_{CKLO}$  dado em (3.74), com  $\lambda'_{KLO}$  dado em (3.25) verifica-se sua equivalência já que  $\mathbf{I}$  é uma matriz identidade.

### 3.3.5.3.3 Cokrigagem linear simples (CKLS)

O preditor para a cokrigagem linear simples (CKLS), como na CKLO, também é uma extensão multivariada agora da KLS. Dessa forma, a média para cada campo aleatório é conhecida, isto é, a média para a variável principal  $Z$ ,  $E[Z_i] = \mu_Z$  é conhecida e a média para a

variável auxiliar  $U$ ,  $E[U_i] = \mu_U$ , também é conhecida. O preditor de cokrigagem linear simples será:

$$\hat{Z}_{0(CKLS)} = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} Z_i + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} U_j. \quad (3.75)$$

Os  $n + m$  pesos para CKLS são determinados de modo a garantir um preditor não-viesado e de variância mínima. Assim, a condição de não-viés implica na esperança de erro nula:

$$\begin{aligned} E[\hat{Z}_{0(CKLS)} - Z_0] &= E\left[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} Z_i + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} U_j - Z_0\right] = 0 \\ E[\hat{Z}_{0(CKLS)} - Z_0] &= \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} E[Z_i] + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} E[U_j] - E[Z_0] = 0 \\ E[Z_0] &= \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} E[Z_i] + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} E[U_j] \\ \mu_0 &= \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} \mu_Z + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \mu_U, \end{aligned}$$

que em função de  $\lambda_0$  fica igual a:

$$\lambda_0 = \mu_0 - \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} \mu_Z - \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \mu_U. \quad (3.76)$$

Substituindo a expressão (3.76) em (3.75), temos:

$$\hat{Z}_{0(CKLS)} = \mu_0 - \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} \mu_Z - \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \mu_U + \sum_{i=1}^n \lambda_{Zi} Z_i + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} U_j.$$

Portanto, o preditor de cokrigagem linear simples (CKLS), para o caso no qual apenas uma variável auxiliar  $U$  é utilizada, além da variável principal  $Z$ , será:

$$\hat{Z}_{0(CKLS)} = \mu_0 - \sum_{i=1}^n \lambda_{zi} \mu_Z + \sum_{i=1}^n \lambda_{zi} Z_i - \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \mu_U + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} U_j. \quad (3.77)$$

Considerando que a sistemática de obtenção do sistema de equações para a CKLS é semelhante à apresentada para a CKLO, isto é, obtida pela minimização da função dada por  $Var[\hat{Z}_{0(CKLS)} - Z_0]$ , limita-se a apresentar o sistema com as  $n + m$  equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_{z1} \sigma_{ZZ11} + \lambda_{z2} \sigma_{ZZ12} + \cdots + \lambda_{zn} \sigma_{ZZ1n} + \lambda_{u1} \sigma_{ZU11} + \lambda_{u2} \sigma_{ZU12} + \cdots + \lambda_{um} \sigma_{ZU1m} = \sigma_{ZZ01} \\ \lambda_{z1} \sigma_{ZZ21} + \lambda_{z2} \sigma_{ZZ22} + \cdots + \lambda_{zn} \sigma_{ZZ2n} + \lambda_{u1} \sigma_{ZU21} + \lambda_{u2} \sigma_{ZU22} + \cdots + \lambda_{um} \sigma_{ZU2m} = \sigma_{ZZ02} \\ \vdots \\ \lambda_{z1} \sigma_{ZZn1} + \lambda_{z2} \sigma_{ZZn2} + \cdots + \lambda_{zn} \sigma_{ZZnn} + \lambda_{u1} \sigma_{ZUn1} + \lambda_{u2} \sigma_{ZUn2} + \cdots + \lambda_{um} \sigma_{ZUnm} = \sigma_{ZZ0n} \\ \lambda_{z1} \sigma_{ZU11} + \lambda_{z2} \sigma_{ZU12} + \cdots + \lambda_{zn} \sigma_{ZU1n} + \lambda_{u1} \sigma_{UU11} + \lambda_{u2} \sigma_{UU12} + \cdots + \lambda_{um} \sigma_{UU1m} = \sigma_{UU01} \\ \lambda_{z1} \sigma_{ZU21} + \lambda_{z2} \sigma_{ZU22} + \cdots + \lambda_{zn} \sigma_{ZU2n} + \lambda_{u1} \sigma_{UU21} + \lambda_{u2} \sigma_{UU22} + \cdots + \lambda_{um} \sigma_{UU2m} = \sigma_{UU02} \\ \vdots \\ \lambda_{z1} \sigma_{ZUn1} + \lambda_{z2} \sigma_{ZUn2} + \cdots + \lambda_{zn} \sigma_{ZUnn} + \lambda_{u1} \sigma_{UU1n} + \lambda_{u2} \sigma_{UU2n} + \cdots + \lambda_{um} \sigma_{UUnm} = \sigma_{UU0m} \end{array} \right.$$

ou ainda,

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{j=1}^n \lambda_{zj} \sigma_{ZZij} + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \sigma_{ZUij} = \sigma_{ZZ0i}, \quad i = 1, \dots, n, \\ \sum_{j=1}^n \lambda_{zj} \sigma_{ZUij} + \sum_{j=1}^m \lambda_{Uj} \sigma_{UUij} = \sigma_{UU0i}, \quad i = 1, \dots, m. \end{array} \right. \quad (3.78)$$

O preditor de cokrigagem linear simples (CKLS), pode ser facilmente estendido para o caso no qual  $p$  variáveis auxiliares  $U$  são utilizadas, além da variável principal  $Z$ , ou seja,

$$\hat{Z}_{0(CKLS)} - \mu_Z = \sum_{i=1}^n \lambda_{zi} [Z_i - \mu_Z] + \sum_{k=1}^p \sum_{j=1}^m \lambda_{kj} [Z_{U_{kj}} - \mu_{U_{kj}}]. \quad (3.79)$$

Utilizando a notação matricial, o sistema de cokrigagem linear simples dado em (3.78) pode ser escrito como  $\Sigma^* \lambda^* = \sigma^*$ , ou ainda:

$$\begin{bmatrix} \lambda_Z \\ \lambda_U \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ} & \vdots & \Sigma_{ZU} \\ \Sigma_{UZ} & \vdots & \Sigma_{UU} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sigma_{0Z} \\ \sigma_{0U} \end{bmatrix},$$

em que:

$$\Sigma^* = \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ} & \Sigma_{ZU} \\ \Sigma_{UZ} & \Sigma_{UU} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ12} & \cdots & \sigma_{ZZ1n} & \sigma_{ZU11} & \sigma_{ZU12} & \cdots & \sigma_{ZU1n} \\ \sigma_{ZZ21} & \sigma_{ZZ22} & \cdots & \sigma_{ZZ2n} & \sigma_{ZU21} & \sigma_{ZU22} & \cdots & \sigma_{ZU2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{ZZn1} & \sigma_{ZZn2} & \cdots & \sigma_{ZZnn} & \sigma_{ZUn1} & \sigma_{ZUn2} & \cdots & \sigma_{ZUnn} \\ \hline \sigma_{UZ11} & \sigma_{UZ12} & \cdots & \sigma_{UZ1n} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} & \cdots & \sigma_{UU1n} \\ \sigma_{UZ21} & \sigma_{UZ22} & \cdots & \sigma_{UZ2n} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} & \cdots & \sigma_{UU2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{UZn1} & \sigma_{UZn2} & \cdots & \sigma_{UZnn} & \sigma_{UUn1} & \sigma_{UUn2} & \cdots & \sigma_{UUnn} \end{bmatrix},$$

sendo que  $\sigma_{ZZij} = Cov(Z_i, Z_j)$  e  $\sigma_{UUij} = Cov(U_i, U_j)$  são as autocovariâncias espaciais (AC), respectivamente, das variáveis  $Z$  e  $U$  entre os pontos  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$ ;  $\sigma_{ZUij} = Cov(Z_i, U_j)$  são as covariâncias espaciais cruzadas (CC) entre as variáveis  $Z$  e  $U$  entre os pontos  $\mathbf{s}_i$  e  $\mathbf{s}_j$  e;  $\sigma_{ZUii} = Cov(Z_i, U_i)$  são as covariâncias simples não espaciais (CS) entre as variáveis  $Z$  e  $U$  no mesmo ponto  $\mathbf{s}_i$ . Onde,

$$\lambda^* = [\lambda_Z \mid \lambda_U]' = [\lambda_{Z1} \quad \lambda_{Z2} \quad \cdots \quad \lambda_{Zn} \mid \lambda_{U1} \quad \lambda_{U2} \quad \cdots \quad \lambda_{Um}]'$$

sendo que  $\lambda_Z$  é o vetor ( $n \times 1$ ) com os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  e  $\lambda_U$  é o vetor ( $m \times 1$ ) com os pesos de krigagem para a variável auxiliar  $U$ , e

$$\sigma'^* = [\sigma'_{0Z} \mid \sigma'_{0U}] = [\sigma_{ZZ01} \quad \sigma_{ZZ02} \quad \cdots \quad \sigma_{ZZ0n} \mid \sigma_{UZ01} \quad \sigma_{UZ02} \quad \cdots \quad \sigma_{UZ0m}]$$

sendo que  $\sigma_{0Z}$  é o vetor ( $n \times 1$ ) com as AC,  $\sigma_{ZZ0j} = Cov(Z_0, Z_j)$ , e  $\sigma_{0U}$  é o vetor ( $n \times 1$ ) com as CC,  $\sigma_{ZU0j} = Cov(Z_0, U_j)$ .

Dessa forma, para obter-se a solução para o sistema matricial da CKLS será necessário inverter a matriz  $\Sigma^*$ , cujo resultado é apresentado a seguir:

$$(\Sigma^*)^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ} & \Sigma_{ZU} \\ \Sigma_{UZ} & \Sigma_{UU} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ}^{-1} - \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} & -\Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \\ \hline -\mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} & \mathbf{B}^{-1} \end{bmatrix}.$$

Se  $\mathbf{B} = \Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU}$ , chega-se ao seguinte resultado para o sistema de CKLS:

$$\begin{bmatrix} \lambda_Z \\ \lambda_U \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} - \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} - \sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} \\ \hline \sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} - \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \end{bmatrix}.$$



Observe que, as expressões (3.80) e (3.81) representam, respectivamente, os pesos de krigagem devido à variável principal  $Z$  e os pesos de krigagem devido à variável auxiliar  $U$ .

$$\lambda_Z = \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} - \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} - \sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}. \quad (3.80)$$

$$\lambda_U = \sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} - \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1}. \quad (3.81)$$

Com a explicitação dos pesos para a cokrigagem linear simples (CKLS) conclui-se este capítulo do referencial teórico.

## 4 METODOLOGIA

Para definir quais caminhos trilhar ou qual instrumento metodológico utilizar neste estudo, retornou-se ao problema de pesquisa, qual seja: “como introduzir variáveis auxiliares na krigagem linear garantindo-se que os preditores de krigagem mantenham suas características? Isto é, como garantir que esses preditores sejam no mínimo um BLUP?”. Somase a essa questão a enorme confusão existente na literatura quando se propõe utilizar variáveis auxiliares, provavelmente pela dificuldade computacional e complexidade dos problemas reais.

Diante disso, definiu-se adotar nesta tese como estratégia para atacar esse problema, realizar um estudo teórico sobre os preditores de krigagem linear objetivando-se propor critérios baseados na teoria Geoestatística. Portanto, o delineamento de pesquisa consistiu de pesquisa bibliográfica e, segundo prática empregada, foi feito um levantamento de referências, publicadas por meios escritos ou eletrônicos, principalmente em livros e artigos científicos.

Por princípio metodológico, a pesquisa bibliográfica foi feita, prioritariamente, em fontes primárias, clássicas, que tenham reconhecida credibilidade no meio científico, como, por exemplo, os livros de Cressie (1993), Goovaerts (1997), Isaaks e Srivastava (1989) e Journel e Huijbregts (1978). No caso de artigos científicos, citamos, como exemplo, os periódicos: *Computers & Geosciences*, *Geoderma*, *Mathematical Geology* e *Water Resources Research*.

Efetivamente a busca foi feita através do portal de periódicos da Capes, que possui 249 bases, das quais 130 são bases referenciais como *SciELO*, *SCOPUS* e *web of Science*, por exemplo, onde encontra-se mais de 25 mil periódicos com texto completo. Outro aspecto importante diz respeito ao estado da arte quanto aos métodos de seleção de interpoladores espaciais em especial, dado que foi feito um esforço para se levantar os trabalhos existentes na área.

Além da pesquisa bibliográfica, o desenvolvimento deste estudo contou com a proposição de teoremas e enunciados sobre krigagens às quais foram demonstradas matematicamente e/ou tiveram argumentos de plausibilidade apresentados ou tiveram citações que embasam tais proposições.

Também foram realizados vários seminários com o orientador e outros doutorandos do programa, visando à elucidação de partes específicas deste estudo. Ocasionalmente, consultorias e análises geoestatísticas foram prestadas aos pós-graduandos de outros programas da universidade visando suscitar ideias para a introdução de variáveis auxiliares para a krigagem. Essas consultorias e os seminários em conjunto com o orientador podem ser entendidas como um delineamento de pesquisas do tipo pesquisa-ação.

Finalmente, não foi necessário neste trabalho apresentar caracterizações de software porque para o desenvolvimento deste estudo não foi necessário nem cálculos computacionais, nem simulações. Também a apresentação de exemplos ilustrativos não foi feita por não ser o foco desta tese, tornando mais ainda desnecessário o uso de softwares.

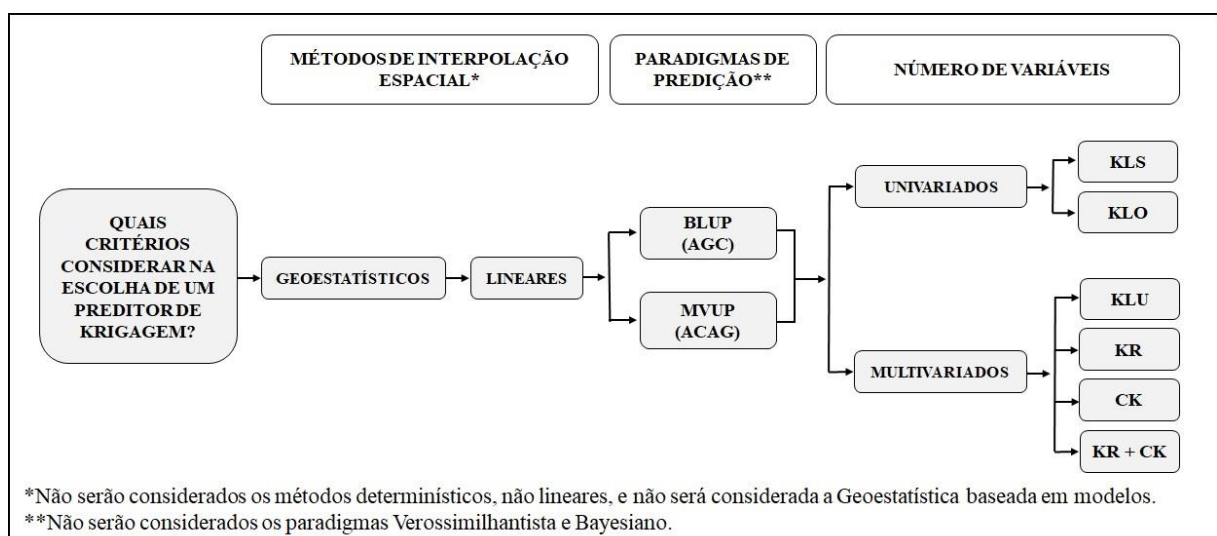
## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Inicialmente, nesta seção, apresenta-se as razões para a escolha dos métodos de interpolação espacial e paradigmas de predição. Logo em seguida, a abordagem do campo ‘aleatório gaussiano (ACAG) é apresentada, bem como os possíveis cenários formados pela partição do erro devido à dependência espacial e pelas combinações entre a existência ou não da autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS). Comprova-se ainda, a equivalência entre a ACAG e a AGC. Por fim, apresentam-se os resultados de cada cenário estudado, o critério teórico geral proposto por esta tese para a escolha do melhor preditor de krigagem linear nos casos em que se utiliza variáveis auxiliares e um critério prático que define para quais valores a AC, CC e a CS são forte e, portanto, se deve considera-las como existentes.

### 5.1 Critérios para a decisão a respeito de um preditor

Antes de definirmos a função ou o interpolador, faremos uma breve discussão sobre as razões que nos levaram a escolher os métodos e paradigmas de interpolação adotados neste estudo e representados pela figura 5.1.

Figura 5.1 - Esquema geral com os métodos e paradigmas utilizados para a definição de critérios para a escolha de preditores de krigagem.



Fonte: Do autor (2018).

Associada à questão fundamental da Geoestatística que é: “Como prever o valor da variável  $Z$  no ponto não amostrado  $\mathbf{s}_0$ ?” surge outra questão, que é “Como medir a relação ou a influência conjunta existente entre os pontos amostrados e o ponto não amostrado?”. É intuitivo que quanto mais próximos estiverem esses pontos, mais semelhantes serão entre si e quanto maior a distância entre eles, maiores serão suas diferenças. Por isso, a distância entre pontos é utilizada para fazer a interpolação espacial, estimando-se  $Z_0$ . Entretanto, os métodos não-geoestatísticos (determinísticos) se limitam à medida dessa distância e, geralmente, não medem a incerteza associada a essa interpolação e, mesmo os que calculam o erro associado à predição, não garantem que esse erro seja mínimo. Já os métodos geoestatísticos, por concepção, garantem a não tendenciosidade e que a variância do erro de predição seja mínima e, por isso, seus preditores são preditores ótimos, razão pela qual são nosso objeto de interesse.

Outro aspecto discutido anteriormente diz respeito à forma da função  $f$ , que a princípio, poderia ser de qualquer tipo, linear ou não linear. Por exemplo, poderia ser:

$$f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) = Z_1 e^{Z_2} + \cos Z_3 \dots (Z_{n-1})^{Z_n}.$$

O problema de  $f$  ser de qualquer tipo é que seria muito difícil, senão impossível, achar a melhor função  $f$  para prever  $Z_0$ . Por causa disso, nós nos restringiremos ao conjunto das funções  $f$  que são combinações lineares dos  $Z_1, Z_2, \dots, Z_n$ :

$$\begin{aligned} f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) &= a_1 Z_1 + a_2 Z_2 + \dots + a_n Z_n \\ f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n) &= \sum_{i=1}^n a_i Z_i. \end{aligned} \quad (5.1)$$

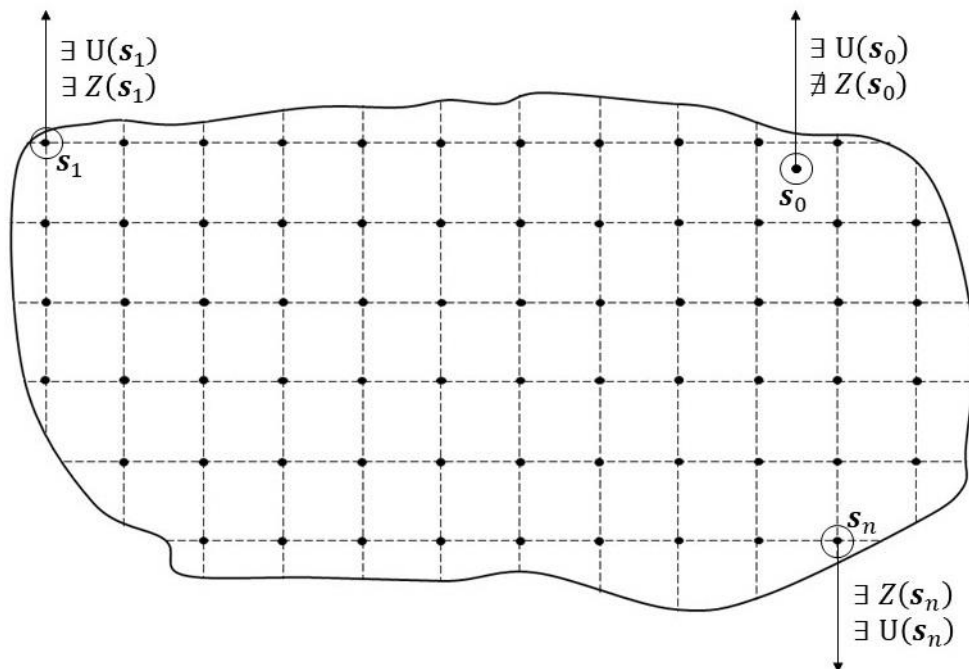
Se levarmos em conta o paradigma para a construção de um preditor  $\hat{Z}_0$ , poderíamos optar pelos paradigmas de: Máxima Verossimilhança, Bayesiano ou UMVUP (Preditor uniformemente não-viesado de variância mínima). Entretanto para aplicar tanto o paradigma de Máxima Verossimilhança quanto o paradigma Bayesiano, é necessário o conhecimento prévio da distribuição de probabilidades para  $\hat{Z}_0/Z_1 = z_1, \dots, Z_n = z_n$  e para a priori subjetiva, respectivamente, o que efetivamente não sabemos, enquanto que no caso do paradigma UMVUP não se faz qualquer exigência sobre a distribuição de probabilidades para a esperança condicional.

Portanto, este estudo se enquadra dentro do escopo da abordagem geoestatística clássica, focando os preditores lineares construídos sob o paradigma de mínima variância e não viés, uni e multivariados. Propõe a abordagem do campo aleatório gaussiano do qual decorrem critérios teóricos para a escolha de qual preditor linear geoestatístico é mais adequado para cada situação.

## 5.2 Abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG)

Para apresentar a abordagem do campo aleatório gaussiano considerou-se uma amostragem espacial na qual foram observados, além da variável principal  $Z$ , também uma variável auxiliar  $U$ , coletadas em todos os pontos da malha regular mostrada pela figura 5.2. O ponto  $\mathbf{s}_0$  é um ponto no qual  $Z$  não foi observada, mas  $U$  foi.

Figura 5.2 - Representação de uma amostragem espacial onde foram observados, além da variável principal  $Z$ , uma variável auxiliar  $U$ , coletadas em todos os pontos da malha regular. O ponto  $\mathbf{s}_0$  é um ponto onde  $Z$  não foi observada, mas  $U$  foi.



Fonte: Do autor (2018).

Dessa forma, o campo aleatório considerado é  $\{Z(\mathbf{s}): \mathbf{s} \in D \subset \mathbb{R}^d\}$  e admitindo que esse campo aleatório seja gaussiano, pode-se representá-lo pelo modelo populacional:

$$Z(\mathbf{s}_0) = \mu_Z(\mathbf{s}_0) + \varepsilon'(\mathbf{s}_0) + \varepsilon''(\mathbf{s}_0), \quad (5.2)$$

em que  $\mu_Z(\mathbf{s}_0)$  é a média de  $Z$  no ponto  $\mathbf{s}_0$ , também chamada de tendência,  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  é o erro devido à dependência espacial e  $\varepsilon''(\mathbf{s}_0)$  é o erro aleatório, ambos no ponto  $\mathbf{s}_0$ . O campo é gaussiano, tem-se que  $Z(\mathbf{s}_0) \sim N(\mu_Z(\mathbf{s}_0); \sigma_{00})$ ,  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0) \sim N(0, \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma})$  e  $\varepsilon''(\mathbf{s}_0) \sim N(0, \sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma})$ . Demonstra-se que os erros  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  e  $\varepsilon''(\mathbf{s}_0)$  são independentes, isto é,  $Cov[\varepsilon'(\mathbf{s}_0), \varepsilon''(\mathbf{s}_0)] = 0$ .

O modelo amostral é:

$$\begin{aligned} Z(\mathbf{s}_1) &= \mu_Z(\mathbf{s}_1) + \varepsilon'(\mathbf{s}_1) + \varepsilon''(\mathbf{s}_1) \\ Z(\mathbf{s}_2) &= \mu_Z(\mathbf{s}_2) + \varepsilon'(\mathbf{s}_2) + \varepsilon''(\mathbf{s}_2) \\ &\vdots \\ Z(\mathbf{s}_n) &= \mu_Z(\mathbf{s}_n) + \varepsilon'(\mathbf{s}_n) + \varepsilon''(\mathbf{s}_n), \end{aligned}$$

como já foi mostrado. Pode-se escrever, então:  $Z(\mathbf{s}_0) = \mu_Z(\mathbf{s}_0) + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{V} - \boldsymbol{\mu}_V) + \varepsilon''(\mathbf{s}_0)$ , em que  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0) = \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{V} - \boldsymbol{\mu}_V)$ . O vetor aleatório  $\mathbf{V} \sim N_{2n+1}(\boldsymbol{\mu}_V, \boldsymbol{\Sigma})$ , tem distribuição normal multivariada cuja dimensão é igual a  $2n + 1$ , onde 2 representa o número de variáveis estudadas, isto é, a variável principal  $Z$  e a variável auxiliar  $U$ ;  $n$  é o número de pontos coletados na amostra espacial para cada variável; observe que as duas variáveis  $Z$  e  $U$  foram coletadas em todos os pontos da malha, exceto no ponto  $\mathbf{s}_0$  onde  $Z$  não foi observada, mas  $U$  foi, e por esta razão, soma-se mais 1. Assim, a dimensão do vetor  $\mathbf{V}$  é igual a  $2n + 1$ .

Um caso especial da amostragem espacial representada pela figura 5.2 é apresentado na tabela 5.1, considerando  $n = 2$ . Essa definição de uma amostra com  $n = 2$  serve para simplificar a discussão, sem perda de generalidade.

Tabela 5.1 - Dados obtidos da amostragem espacial representada pela figura 5.2 ( $n = 2$ )

$i$	$\mathbf{s} = (x, y)$	$Z$	$U$	$W$
0	$\mathbf{s}_0 = (x_0, y_0)$	NA*	$u_0$	$w_0$
1	$\mathbf{s}_1 = (x_1, y_1)$	$z_1$	$u_1$	$w_1$
2	$\mathbf{s}_2 = (x_2, y_2)$	$z_2$	$u_2$	$w_2$

\*NA – representa ponto não amostrado.

Fonte: Do autor (2018).

Note que podem haver mais variáveis auxiliares, e não apenas  $U$ , e o número de pontos coletados na amostra espacial ( $n$ ), pode ser maior do que 2, mas essas simplificações não comprometeram a generalidade das ideias apresentadas.

Dessa maneira, os vetores aleatórios  $\mathbf{V} \sim N_5(\boldsymbol{\mu}_V, \boldsymbol{\Sigma})$ ,  $\boldsymbol{\mu}_V$  e  $\boldsymbol{\sigma}$ , e a matriz de covariâncias  $\boldsymbol{\Sigma}$  serão:

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} Z(\mathbf{s}_1) = Z_1 \\ Z(\mathbf{s}_2) = Z_2 \\ U(\mathbf{s}_0) = U_0 \\ U(\mathbf{s}_1) = U_1 \\ U(\mathbf{s}_2) = U_2 \end{bmatrix}_{5 \times 1}, \quad \boldsymbol{\mu}_V = \begin{bmatrix} \mu_Z(\mathbf{s}_1) = \mu_{Z1} \\ \mu_Z(\mathbf{s}_2) = \mu_{Z2} \\ \mu_U(\mathbf{s}_0) = \mu_{U0} \\ \mu_U(\mathbf{s}_1) = \mu_{U1} \\ \mu_U(\mathbf{s}_2) = \mu_{U2} \end{bmatrix}_{5 \times 1},$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ} & \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} & \boldsymbol{\Sigma}_{UU} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ12} & \sigma_{ZU10} & \sigma_{ZU11} & \sigma_{ZU12} \\ \sigma_{ZZ21} & \sigma_{ZZ22} & \sigma_{ZU20} & \sigma_{ZU21} & \sigma_{ZU22} \\ \sigma_{UZ01} & \sigma_{UZ02} & \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UZ11} & \sigma_{UZ12} & \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} \\ \sigma_{UZ21} & \sigma_{UZ22} & \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix}_{5 \times 5} e$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{0Z} \\ \boldsymbol{\sigma}_{0U} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Cov[Z(\mathbf{s}_0), Z(\mathbf{s}_1)] = \sigma_{ZZ01} \\ Cov[Z(\mathbf{s}_0), Z(\mathbf{s}_2)] = \sigma_{ZZ02} \\ Cov[Z(\mathbf{s}_0), U(\mathbf{s}_0)] = \sigma_{ZU00} \\ Cov[Z(\mathbf{s}_0), U(\mathbf{s}_1)] = \sigma_{ZU01} \\ Cov[Z(\mathbf{s}_0), U(\mathbf{s}_2)] = \sigma_{ZU02} \end{bmatrix}_{5 \times 1}.$$

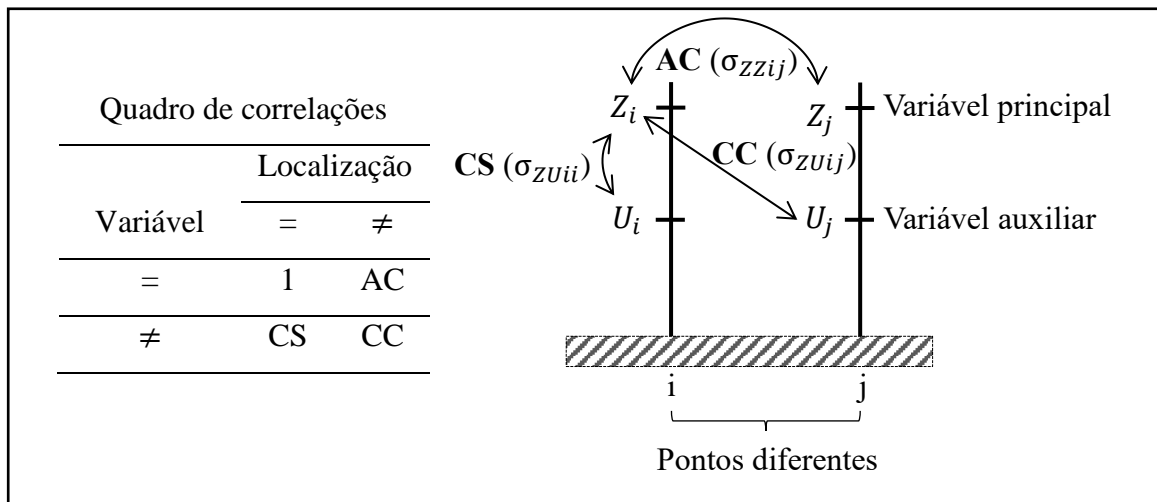
Sendo que  $\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}$  e  $\boldsymbol{\Sigma}_{UU}$  são as matrizes de autocovariâncias espaciais para as variáveis  $Z_i$  e  $U_i$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}$  é a matriz com as covariâncias espaciais cruzadas e as covariâncias simples não espaciais entre as variáveis  $Z_i$  e  $U_i$ ,  $\boldsymbol{\sigma}_{0Z}$  é o vetor coluna com as autocovariâncias espaciais entre  $Z_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ) e  $Z_0$  e  $\boldsymbol{\sigma}_{0U}$  é o vetor coluna com as covariâncias espaciais cruzadas entre  $U_i$  ( $i = 0, 1, \dots, n$ ) e  $Z_0$ .

Observe ainda, que em um campo aleatório como o representado pela Figura 5.2 possui três possíveis tipos de correlação a se considerar: (i) autocorrelação espacial (AC), medida sob a mesma variável em pontos diferentes; (ii) correlação cruzada espacial (CC), medida sob variáveis diferentes e em pontos diferentes; e (iii) correlação simples não espacial (CS), medida no mesmo ponto em variáveis diferentes; vide Figura 5.3.



Então, dada a amostra espacial apresentada pela Tabela 5.1 e considerando-se a existência das três possíveis correlações apresentadas pela Figura 5.3, deseja-se escrever a expressão geral para o preditor de krigagem,  $\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \sigma' \Sigma^{-1}(\mathbf{V} - \mu_V)$ , em função da existência da AC, CC e da CS.

Figura 5.3 - Ilustração das possíveis correlações existentes entre a variável principal  $Z$  e a variável auxiliar  $U$ , coletadas em dois pontos diferentes de uma amostra espacial. Note que, estas correlações podem existir entre quaisquer dois pontos de uma malha amostral e que esta figura é apenas ilustrativa.



Fonte: Do autor (2018).

Para tanto, temos que solucionar a expressão apresentada em (5.3), a qual depende da inversa da matriz de covariâncias ( $\Sigma^{-1}$ ).

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + (\sigma'_{0z} \mid \sigma'_{0u}) \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ} & \Sigma_{ZU} \\ \Sigma_{UZ} & \Sigma_{UU} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} Z - \mu_Z \\ U - \mu_U \end{bmatrix}, \quad (5.3)$$

em que  $\Sigma^{-1}$  é simétrica e não singular e particionada como:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{ZZ} & \Sigma_{ZU} \\ \Sigma_{UZ} & \Sigma_{UU} \end{bmatrix}.$$

De acordo com Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017) se  $\mathbf{B} = \mathbf{A}_{22} - \mathbf{A}_{21} \mathbf{A}_{11}^{-1} \mathbf{A}_{12}$ , então admitindo que  $\mathbf{A}_{11}^{-1}$  e que  $\mathbf{B}^{-1}$  existam, a inversa de  $\mathbf{A}$  é dada por:

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11}^{-1} - \mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} & -\mathbf{A}_{11}^{-1}\mathbf{A}_{12}\mathbf{B}^{-1} \\ -\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}_{21}\mathbf{A}_{11}^{-1} & \mathbf{B}^{-1} \end{bmatrix}.$$

Neste estudo,  $\mathbf{B} = \boldsymbol{\Sigma}_{UU} - \boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}$ . Substituindo em  $\mathbf{A}^{-1}$  os elementos de  $\boldsymbol{\Sigma}$ , então:

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} - \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} & -\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1} \\ -\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} & \mathbf{B}^{-1} \end{bmatrix}. \quad (5.4)$$

Substituindo o resultado obtido de (5.4) em (5.3):

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + (\boldsymbol{\sigma}'_{0Z} \mid \boldsymbol{\sigma}'_{0U}) \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} + \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} & -\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1} \\ -\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} & \mathbf{B}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) \\ (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U) \end{bmatrix}$$

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + [\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}[\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} + \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}] - \boldsymbol{\sigma}'_{0U}[\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}] \mid -\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'_{0U}\mathbf{B}^{-1}] \begin{bmatrix} (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) \\ (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U) \end{bmatrix}$$

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + [\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU0}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ0}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'_{0U}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ0}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \mid -\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU0}\mathbf{B}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'_{0U}\mathbf{B}^{-1}] \begin{bmatrix} (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) \\ (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U) \end{bmatrix}$$

resulta em:

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + [\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} - \boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} - \boldsymbol{\sigma}'_{0U}\mathbf{B}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{UZ}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}](\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + [\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{ZU}\mathbf{B}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'_{0U}\mathbf{B}^{-1}](\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U). \quad (5.5)$$

Observa-se na expressão (5.5) que, além de  $\mu_Z(\mathbf{s}_0)$ , a soma entre colchetes do segundo termo são exatamente os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  e que a soma nos colchetes do terceiro termo são exatamente os pesos de krigagem para a variável auxiliar  $U$ , conforme se pode comprovar comparando-se o resultado acima com as expressões (3.80) e (3.81) obtidas para a CKLS. Pode-se então, escrever a expressão (5.5) em função destes pesos, isto é:

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \lambda_Z(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \lambda_U(\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U). \quad (5.6)$$

Deseja-se desenvolver a expressão (5.5) de tal forma a explicitar todas as correlações entre  $Z$  e  $U$  possíveis, ou seja, autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS). Substituindo-se, então,  $\mathbf{B}^{-1}$  no resultado apresentado pela expressão (5.5) chega-se a expressão (5.7) que apresenta o preditor de krigagem linear com o que se chamará de “erro para dependência espacial pleno” já que incorpora todas as possíveis relações entre duas variáveis em um campo aleatório, ou seja,

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z}\Sigma_{ZZ}^{-1}}{I}}_I - \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z}\Sigma_{ZZ}^{-1}\Sigma_{ZU}(\Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ}\Sigma_{ZZ}^{-1}\Sigma_{ZU})^{-1}\Sigma_{UZ}\Sigma_{ZZ}^{-1}}{II}}_{II} + \right. \\ \left. - \underbrace{\frac{\sigma'_{0U}(\Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ}\Sigma_{ZZ}^{-1}\Sigma_{ZU})^{-1}\Sigma_{UZ}\Sigma_{ZZ}^{-1}}{III}}_{III} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\ + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z}\Sigma_{ZZ}^{-1}\Sigma_{ZU}(\Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ}\Sigma_{ZZ}^{-1}\Sigma_{ZU})^{-1}}{IV}}_{IV} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0U}(\Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ}\Sigma_{ZZ}^{-1}\Sigma_{ZU})^{-1}}{V}}_V \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U). \quad (5.7)$$

Note que as expressões (5.5) e (5.7) são equivalentes, então, por facilidade o estudo dos cenários propostos na Tabela 5.2 serão feitos com base na equação obtida em (5.5). Observe ainda que o erro para dependência espacial está particionado e também é pleno em (5.5), assim, pode-se chegar aos tipos de krigagem linear discutidos neste estudo.

Tabela 5.2 - Possíveis cenários formados pelas combinações entre a existência ou não da autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS), como definidos na Figura 5.3.

AC	CC	CS	Cenário	Tipo de krigagem	
∄	∄	∄	1	Estatística clássica univariada	Estatística não espacial
		∃	2	Regressão linear simples ou múltipla	
	∃	∄	-	“Não tem nome dado ainda”	
∃	∄	∄	3	Krigagem simples ou ordinária	Estatística espacial
		∃	4	Krigagem universal ou Krigagem com regressão	
	∃	∄	5	Cokrigagem	
		∃	6	“Cokrigagem com regressão”	

Fonte: Do autor (2018).

De fato, é importante destacar que somente sob a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) que é possível explicitar a fórmula do erro devido à dependência espacial, isto é, somente se for admitido um CAG é que pode-se saber suas distribuições probabilísticas, marginais e conjuntas e, conseqüentemente, é possível verificar a influência e as inter-relações

existentes entre AC, CC e CS. Além disso, como dito anteriormente, demonstra-se que sob normalidade,  $\varepsilon'_0$  e  $\varepsilon''_0$  são independentes, ou seja,  $\varepsilon'_0 \sim N(0, \sigma' \Sigma^{-1} \sigma)$ ,  $\varepsilon''_0 \sim N(0, \sigma_{00} - \sigma' \Sigma^{-1} \sigma)$  e  $Cov[\varepsilon'_0, \varepsilon''_0] = 0$ .

Um outro resultado interessante é que pela ACAG chega-se aos mesmos preditores para as krigagens lineares apresentadas pela AGC. Para comprovar essa afirmação, na próxima subseção será verificada a equivalência da forma do preditor e a composição dos pesos de krigagem obtidos para cada caso.

### 5.2.1 Krigagem linear simples pela ACAG

Para aplicar a abordagem do campo aleatório gaussiano e obter o preditor de krigagem linear simples, é necessário estabelecer-se apenas uma pressuposição: que as médias  $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  são conhecidas.

Partindo-se da estrutura de  $Z_0$  sob CAG:

$Z_0 = \mu_0 - \sigma' \Sigma^{-1} \mu + \sigma' \Sigma^{-1} Z + \varepsilon''_0$ . A média é dada por  $\mu_0 - \sigma' \Sigma^{-1} \mu + \sigma' \Sigma^{-1} Z$ . Como a média é a componente determinística de um modelo, o preditor deve ser ela mesma. Logo,

$$\hat{Z}_{0(KLS)} = \mu_0 - \lambda' \mu + \lambda' Z, \quad (5.8)$$

em que  $\lambda' = \sigma' \Sigma^{-1}$ . Essa é a forma do preditor para a krigagem linear simples pela abordagem do campo aleatório gaussiano.

De acordo com Journel e Huijbregts (1978), o preditor de krigagem simples obtido pela AGC, é dado por:

$$\hat{Z}_{0(KLS)} = \mu_0 - \sum_{i=1}^n \lambda_i \mu_i + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i \quad (5.9)$$

e o sistema para a KLS obtido pela AGC é dado por:

$$\begin{cases} \lambda_0 = \mu_0 - \sum_{i=1}^n \lambda_i \mu_i \\ \sum_{j=1}^n \lambda_j \sigma_{ij} = \sigma_{i0}, i = 1, \dots, n \end{cases} \quad \text{ou} \quad \begin{cases} \text{Em linguagem matricial:} \\ \lambda_0 = \mu_0 - \lambda' \mu \\ \Sigma \lambda = \sigma \Rightarrow \lambda' \Sigma = \sigma' \Rightarrow \lambda'_{KLS} = \sigma' \Sigma^{-1} \end{cases} \quad (5.10)$$

Observando o sistema de krigagem simples dado em (5.10) é fácil ver que a equivalência para a forma e para obtenção dos  $\lambda$ 's é imediata, pois é apenas uma questão de notação, a expressão (5.9) se apresenta na forma escalar e que a expressão (5.8) apresenta sua forma matricial.

Verificada a equivalência na maneira de se obter os pesos de krigagem, a equivalência para a forma do preditor é clara e direta, pois,  $\sum_{i=1}^n \lambda_i Z_i$  é a forma escalar para  $\lambda'Z$  e  $\sum_{i=1}^n \lambda_i \mu_i$  é a forma escalar para  $\lambda'\mu$ , assim, chega-se à mesma expressão obtida pela abordagem do campo aleatório gaussiano. Dessa forma, pode-se apresentar as consequências de adotar essa abordagem:

- a)  $\hat{Z}_{0(KLS)}$  é naturalmente não-viesado.
- b) Se o campo aleatório é gaussiano,  $\hat{Z}_{0(KLS)}$  é um preditor uniformemente não-viesado de variância mínima (*Uniform Minimum Variance Unbiased Predictor - UMVUP*), caso contrário,  $\hat{Z}_{0(KLS)}$  será o melhor preditor linear não-viesado (*Best Linear Unbiased Predictor - BLUP*).
- c) A variância para o erro de predição para a KLS, denotada por  $\sigma_{0(KLS)}^2$  será:

$$\begin{aligned}\sigma_{0(KLS)}^2 &= [Z_0 - \hat{Z}_{0(KLS)}]^2 \\ \sigma_{0(KLS)}^2 &= \sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma} = \text{Var}[\varepsilon_0''] \\ \therefore Z_0 &= \hat{Z}_{0(KLS)} + \varepsilon_0''.\end{aligned}$$

### 5.2.2 Krigagem linear ordinária pela ACAG

As pressuposições necessárias para aplicar a abordagem do campo aleatório gaussiano para a krigagem linear ordinária são:

- a) As médias  $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  são desconhecidas.
- b)  $\mu_0 = \mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_n = \mu$

Partindo do preditor para a krigagem linear mais geral, temos:

$$\hat{Z}_{0(KLS)} = \mu_0 - \lambda'\mu + \lambda'Z.$$

Note que, nesse caso, não se conhecem as médias, então, é necessário plugar um estimador para  $\mu$ , já que as médias são consideradas iguais. Assim, será imposto que o preditor para a krigagem ordinária seja um estimador do preditor de krigagem simples, ou seja:

$$\hat{Z}_{0(KLO)} = \hat{Z}_{0(KLS)} = \hat{\mu}_0 - \lambda' \hat{\mu} + \lambda' Z. \quad (5.11)$$

Essa imposição gera dois casos, um definido pela possibilidade do estimador da média ser viesado e outro que define que o estimador da média deve ser não-viesado. Portanto, vai-se avaliar as imposições necessárias e suas consequências naturais para cada um desses casos.

**Caso 1:** o estimador da média pode ser viesado.

- a) Imposição 1:  $\hat{\mu}$  pode ser viesada, ou seja,  $E[\hat{\mu}] = \nu \neq \mu$ .
- b) Imposição 2:  $\hat{Z}_{0(KLO)}$  tem que ser não-viesado.

Para atender a imposição 2,  $E[\hat{Z}_{0(KLO)}] = \mu$ , como a estimativa da média pode ser viesada, tem-se:

$$E[\hat{Z}_{0(KLO)}] = E[\hat{\mu}_0 - \lambda' \hat{\mu} + \lambda' Z] = \nu - \nu \lambda' \mathbf{1} + \mu \lambda' \mathbf{1}. \quad (5.12)$$

- a) Consequência natural 1: a esperança dada pela equação (5.12) só será igual a  $\mu$ , se, e somente se:  $\lambda' \mathbf{1} = 1$ .
- b) Consequência natural 2:  $\hat{\mu}$  pode ser qualquer um, inclusive um estimador viesado, portanto,  $\hat{\mu}$  não precisa ser conhecida.

Um outro resultado interessante dessa análise, é que, ao verificar a imposição 2, fica explícito que a soma dos  $\lambda$ 's tem que ser 1, o que pelo método tradicional não ocorre naturalmente.

**Caso 2:** o estimador da média é não-viesado.

- a) Imposição 1:  $\hat{\mu}$  deve ser não-viesada, ou seja,  $E[\hat{\mu}] = \mu$ .

$$E[\hat{Z}_{0(KLO)}] = E[\hat{\mu}_0 - \lambda' \hat{\mu} + \lambda' Z] = \mu - \mu \lambda' \mathbf{1} + \mu \lambda' \mathbf{1} = \mu. \quad (5.13)$$

- b) Consequência natural 1:  $\hat{Z}_{0(KLO)}$  é naturalmente não-viesado.

- c) Consequência natural 2:  $\lambda' \mathbf{1} \neq 1$ , ou seja, a soma dos  $\lambda$ 's pode ser qualquer, não interferindo no viés do preditor da krigagem ordinária. Entretanto, surge uma outra questão: qual estimador não-viesado para  $\hat{\mu}$  utilizar?
- d) Imposição 2: vai-se adotar o estimador de mínimos quadrados generalizados (MQG), por ser o mais adequado para estudar fenômenos com dependência espacial. Dessa forma, para verificar a equivalência do formato  $\lambda' \mathbf{Z}$ , obrigatoriamente, tem-se que fazer a imposição de que  $\lambda' \mathbf{1} = 1$ .

Note que, para que  $\hat{Z}_{0(KLO)}$  seja não-viesado, ou impõe-se que ele seja não-viesado, como no caso 1 ou que o estimador de  $\mu$  seja não-viesado, como no caso 2. É evidente que o caso 2 é menos elegante do que o 1 pois se faz um número maior de imposições. Contudo, fazendo o caminho inverso, impondo de imediato que  $\lambda' \mathbf{1} = 1$ , mostra-se que a abordagem geoestatística clássica (AGC) é a mais elegante, pois, necessita de apenas 1 imposição. Entretanto, só é possível chegar a essa conclusão pela aplicação da abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG).

Aplicando ou plugando o estimador de mínimos quadrados generalizados para a média, ou seja,  $\hat{\mu} = (\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z}$ , na equação (5.11), temos:

$$\begin{aligned} \hat{Z}_{0(KLO)} &= \hat{\mu}_0 - \lambda' \hat{\mu} + \lambda' \mathbf{Z} \\ \hat{Z}_{0(KLO)} &= (\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z} - (\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z} \sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{1} + \sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{Z} \\ &= \frac{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z}}{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1}} - \frac{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z}}{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1}} \sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{1} + \sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{Z} = \frac{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z}}{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1}} - \frac{\sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{1} \mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{Z}}{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1}} + \sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{Z} \end{aligned}$$

$$\hat{Z}_{0(KLO)} = \underbrace{\left[ \frac{\mathbf{1}' \Sigma^{-1}}{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1}} - \frac{\sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{1} \mathbf{1}' \Sigma^{-1}}{\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1}} + \sigma' \Sigma^{-1} \right]}_{\lambda'_{KLO}} \mathbf{Z} = \lambda'_{KLO} \mathbf{Z},$$

ou seja

$$\lambda'_{KLO} = \sigma' \Sigma^{-1} - \frac{\sigma' \Sigma^{-1} \mathbf{1} \mathbf{1}' \Sigma^{-1}}{(\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1})} + \frac{\mathbf{1}' \Sigma^{-1}}{(\mathbf{1}' \Sigma^{-1} \mathbf{1})}. \quad (5.14)$$

Portanto, verifica-se a equivalência das abordagens, pois foi obtido um lambda pela ACAG, específico para a krigagem linear ordinária, denotada por  $\lambda'_{KLO}$  igual a obtida pela AGC, isto é, a expressão (3.25) obtida pela AGC é igual a expressão (5.14) obtida pela ACAG.

### 5.2.3 Krigagem linear universal pela ACAG

As pressuposições necessárias para aplicar a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) para a krigagem linear universal (KLU) são:

- As médias  $\mu_0, \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n$  são desconhecidas.
- A média, também chamada de tendência, é modelada utilizando a informação auxiliar das coordenadas espaciais, ou seja, impõe-se aos  $\mu$ 's um modelo linear polinomial nas coordenadas (*Internal Drift*).

Partindo da equação (5.8) do preditor para a krigagem linear simples:

$$\hat{Z}_{0(KLS)} = \mu_0 - \lambda' \mu + \lambda' Z.$$

Para esse caso, sabe-se que a média, além de ser desconhecida, não é constante, como para o cenário da krigagem ordinária, tornando-se necessário a modelagem da média ou tendência. Assim, o procedimento aqui adotado consiste de plugar um modelo para  $\mu$  no preditor para a krigagem universal. Note que, por imposição, o preditor de krigagem universal, assim como o preditor da krigagem ordinária, também é um estimador do preditor de krigagem simples, ou seja:

$$\hat{Z}_{0(KLU)} = \hat{Z}_{0(KLS)} = \hat{\mu}_0 - \lambda' \hat{\mu} + \lambda' Z. \quad (5.15)$$

Modelar a média por um modelo linear significa que podemos escrever a média em função de suas coordenadas, ou seja,

$$Z(\mathbf{s}) = Z\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right) = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y + \beta_3 xy + \beta_4 x^2 + \beta_5 y^2 + \dots + \varepsilon\left(\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}\right). \quad (5.16)$$

Escrevendo o modelo em sua forma amostral, temos:

$$\begin{cases} z\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}\right) = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 y_1 + \beta_3 x_1 y_1 + \beta_4 x_1^2 + \beta_5 y_1^2 + \dots + \varepsilon_1\left(\begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix}\right) \\ z\left(\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}\right) = \beta_0 + \beta_1 x_2 + \beta_2 y_2 + \beta_3 x_2 y_2 + \beta_4 x_2^2 + \beta_5 y_2^2 + \dots + \varepsilon_2\left(\begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix}\right) \\ \vdots \\ z\left(\begin{bmatrix} x_n \\ y_n \end{bmatrix}\right) = \beta_0 + \beta_1 x_n + \beta_2 y_n + \beta_3 x_n y_n + \beta_4 x_n^2 + \beta_5 y_n^2 + \dots + \varepsilon_n\left(\begin{bmatrix} x_n \\ y_n \end{bmatrix}\right). \end{cases}$$



Que em notação matricial, será:

$$\begin{bmatrix} Z \left( \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \end{bmatrix} \right) \\ Z \left( \begin{bmatrix} x_2 \\ y_2 \end{bmatrix} \right) \\ \vdots \\ Z \left( \begin{bmatrix} x_n \\ y_n \end{bmatrix} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 & \cdots \\ 1 & x_2 & y_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots \\ 1 & x_n & y_n & \cdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix},$$

ou ainda:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon},$$

Com o objetivo de se mostrar que os pesos de krigagem para a krigagem linear universal são diferentes, mesmo tendo a mesma forma de  $\hat{Z}_{0(KLO)}$ , será deduzido o preditor de krigagem universal com base na abordagem do campo aleatório gaussiano. Lembrando que  $\mathbf{Z}^* \sim N_{n+1}(\boldsymbol{\mu}^*, \boldsymbol{\Sigma}^*)$  e que  $\boldsymbol{\lambda}' = \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ , o preditor para krigagem universal pode ser escrito por

$$\hat{Z}_{0(KLU)} = \hat{\mu}_0 - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\hat{\boldsymbol{\mu}} + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Z}, \quad (5.17)$$

Se a matriz  $\mathbf{X}$  for chamada de  $\mathbf{F}$ , matriz função de coordenadas, a estimativa da média desse modelo será dada por:

$$E[\mathbf{Z}] = \hat{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{F}\hat{\boldsymbol{\beta}}.$$

Assumindo estimação por mínimos quadrados generalizados  $\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{Z}$  e considerando que:

$$\hat{\mu}_0 = \frac{(1 \ x_0 \ y_0 \ \cdots)}{\mathbf{F}'_0} \underbrace{\begin{bmatrix} \hat{\beta}_0 \\ \hat{\beta}_1 \\ \vdots \end{bmatrix}}_{\hat{\boldsymbol{\beta}}},$$

pode-se escrever a expressão do preditor da krigagem universal plugando a estimativa da média, da seguinte maneira:

$$\hat{Z}_{0(KLU)} = \frac{[\mathbf{F}'_0(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F}(\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{F})^{-1}\mathbf{F}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1} + \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}]}{\boldsymbol{\lambda}'_{KLU}} \mathbf{Z}$$

$$\hat{Z}_{0(KLU)} = \boldsymbol{\lambda}'_{KLU} \mathbf{Z}. \quad (5.18)$$

Observa-se que, nesse caso, os pesos para a krigagem linear universal,  $\boldsymbol{\lambda}'_{KLU}$ , incorporam informações das coordenadas pela inserção da matriz  $\mathbf{F}$  na estimativa de  $\mu$ , implicando que, dessa forma, os pesos de krigagens sejam diferentes dos pesos obtidos para a KLO e KLS. Comparando a expressão (5.18) com a (3.47) verifica-se que  $\boldsymbol{\lambda}'_{KLU}$  obtido pela AGC é igual a obtida pela ACAG, comprovando a equivalência entre a ACAG e a AGC também para a KLU.

Note ainda que, a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) é estabelecida sob a pressuposição de que o campo aleatório tenha uma distribuição normal multivariada e, de fato, nem todos os fenômenos de interesse podem ser explicados ou são adequadamente modelados por uma distribuição gaussiana multivariada e, nesses casos, aplicar a ACAG poderia não ser razoável. Entretanto, caso a pressuposição de normalidade multivariada para o campo aleatório não seja atendida, a consequência é que os preditores deixam de ser uniformemente não viesados e de variância mínima (UMVUP), isto é, o melhor preditor de todos, lineares e não lineares, e passa a ser o melhor preditor linear não viesado e de variância mínima (BLUP), ou seja, o melhor preditor entre os lineares.

Para identificar o atendimento a essa pressuposição, se sugere a aplicação do teste de normalidade multivariada para dados espacialmente contínuos, proposto por Louzada (2011), denominado de Teste Gaussiano para Geoestatística (TGGeo).

### 5.3 Critérios para a utilização de variáveis auxiliares

Até o momento mostrou-se que pela abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) chega-se aos mesmos preditores de krigagem linear (KLS, KLO e KLU) obtidos pela abordagem geoestatística clássica (AGC). Nesta seção, o foco será introduzir variáveis auxiliares na krigagem. Para tanto, serão estudados os cenários estabelecidos pela combinação da existência das autocorrelações espaciais (AC), correlações espaciais cruzadas (CC) e correlações simples não espaciais (CS), apresentados pela tabela 5.2.

Contudo, antes de prosseguir, explicita-se mais uma vez a razão pela qual se justifica a introdução de variáveis auxiliares na krigagem: não há motivo mais importante senão para a

diminuição do erro de predição. Sem dúvida, a principal razão se deve à possibilidade de diminuir o erro de predição obtido pela variância deste erro, dado por

$$\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0] = \sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}. \quad (5.19)$$

**Argumento de plausibilidade:** para evidenciar que a introdução de variáveis auxiliares pode diminuir a variância dada em (5.19):

- a) A introdução de variáveis auxiliares sempre será feita a partir de variáveis auxiliares que são intrinsecamente correlacionadas com  $Z_0$ .
- b) Como  $\hat{Z}_0$  é uma função dessas variáveis auxiliares, é razoável admitir que  $\hat{Z}_0$  também se tornará mais correlacionada com  $Z_0$ .
- c) A covariância  $\text{Cov}[Z_0, \hat{Z}_0]$  é igual à  $\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}$ . Logo, se  $\text{Cov}[Z_0, \hat{Z}_0]$  aumenta,  $\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}$  também aumenta.
- d) Logo, como  $\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0]$  é igual a  $\sigma_{00} - \boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}$  e  $\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\sigma}$  aumenta, então, a  $\text{Var}[Z_0 - \hat{Z}_0]$  diminuirá.

Note, ainda, que se introduz a informação da variável auxiliar em  $\varepsilon'_0$ , tanto nos vetores

$$\mathbf{V} \text{ e } \boldsymbol{\sigma}' \text{ quanto através da matriz } \boldsymbol{\Sigma}, \hat{Z}_0 = \mu_{Z_0} + \frac{\boldsymbol{\sigma}'\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{V} - \boldsymbol{\mu}_V)}{\varepsilon'_0}.$$

Como apresentado anteriormente e ilustrado pela Figura 5.3, existem três tipos de correlações possíveis em um campo aleatório no qual se tenha pelo menos uma variável auxiliar, além da variável principal. Considerando que o esforço neste estudo está em compreender a influência da existência desses três tipos de correlação em fenômenos ligados às ciências da natureza, definiu-se na Tabela 5.2 oito possíveis configurações, dentre as quais estudou-se os seis cenários que se acredita representarem situações reais. Portanto, nas próximas páginas, apresenta-se os resultados do estudo dos cenários de 1 a 6 definidos na Tabela 5.2, discutindo-se suas implicações. Para facilitar esta análise, numera-se com algarismos romanos os três primeiros termos da expressão (5.5) relativos aos pesos da variável principal  $Z$  e os outros dois termos relativos a variável auxiliar  $U$ .

Define-se para fins de dedução que as correlações são consideradas existentes ou inexistentes, isto é, existentes se não são zero e inexistente se forem iguais a zero.

**Cenário 1:**  $\nexists$  AC,  $\nexists$  CC e  $\nexists$  CS

Esse cenário representa uma condição em que as amostras são independentes e não existe qualquer tipo de relação entre as variáveis. Portanto, dado esse cenário, a solução consagrada pela literatura consiste em utilizar-se da Estatística Clássica Univariada, isto é, a média pode ser utilizada como o preditor.

De toda maneira, foi verificado o que ocorre com a expressão (5.5). Aplicando essa configuração sobre os vetores e matrizes de covariância temos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \sigma &= \begin{bmatrix} \sigma_{0Z} \\ \sigma_{0U} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Cov[Z(s_0), Z(s_1)] = \sigma_{ZZ01} = 0 \\ Cov[Z(s_0), Z(s_n)] = \sigma_{ZZ0n} = 0 \\ Cov[Z(s_0), U(s_0)] = \sigma_{ZU00} = 0 \\ Cov[Z(s_0), U(s_1)] = \sigma_{ZU01} = 0 \\ Cov[Z(s_0), U(s_n)] = \sigma_{ZU0n} = 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}; & \quad \bullet \quad \sigma_{0Z} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}; \\
 \bullet \quad \Sigma_{ZZ} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Phi; & \quad \bullet \quad \sigma_{0U} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZU00} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}; \\
 \bullet \quad \Sigma_{ZU} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \Phi; & \quad \bullet \quad \Sigma_{UU} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \Phi; \\
 & & \bullet \quad \Sigma_{UZ} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Phi.
 \end{aligned}$$

Sendo  $\Phi$  uma matriz de zeros. Esses resultados têm a seguinte implicação sobre a expressão geral (5.5) do preditor de krigagem linear:

$$\begin{aligned}
 \hat{Z}_0 &= \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_I - \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{II} - \underbrace{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{III} \right] (\mathbf{Z} - \mu_Z) + \\
 &+ \left[ \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}_{IV} + \underbrace{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}_V \right] (\mathbf{U} - \mu_U)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \hat{Z}_0 &= \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\mathbf{0} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{I=0} - \underbrace{\mathbf{0} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{II=0} - \underbrace{\mathbf{0} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{III=0} \right] (\mathbf{Z} - \mu_Z) + \\
 &+ \left[ \underbrace{\mathbf{0} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}_{IV=0} + \underbrace{\mathbf{0} \mathbf{B}^{-1}}_{V=0} \right] (\mathbf{U} - \mu_U)
 \end{aligned}$$

$$\therefore \hat{Z}_0 = \mu_{z0}. \tag{5.20}$$

Diante do resultado da expressão (5.20) comprova-se que, para esse cenário, a Estatística Clássica Univariada pode ser utilizada para fazer a predição dos pontos não

amostrados, sem prejuízos para a variância do erro de predição. Isto é, já que não existe autocorrelação espacial ou qualquer outro tipo de relação entre as variáveis, então a média poderá ser utilizada como o preditor mais adequado para a predição de valores desconhecidos no domínio.

**Cenário 2:**  $\nexists$  AC,  $\nexists$  CC e  $\exists$  CS

Sob essa configuração, a variável principal não apresenta correlação entre os pontos em que esta é medida, ou seja, ela não possui autocorrelação espacial ( $\nexists$ AC), também não existe relação entre a variável principal e a variável secundária em pontos distintos, isto é, não existe correlação espacial cruzada ( $\nexists$ CC), mas existe correlação simples não espacial ( $\exists$ CS) (relação entre a variável principal e a variável auxiliar nos pontos nos quais ambas são medidas). Assim, temos os seguintes resultados nos vetores e matrizes de covariância:

$$\begin{aligned} \bullet \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{0Z} \\ \sigma_{0U} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} = 0 \\ \sigma_{ZZ02} = 0 \\ \sigma_{ZU00} \\ \sigma_{ZU01} = 0 \\ \sigma_{ZU02} = 0 \end{bmatrix}; & \quad \bullet \quad \boldsymbol{\sigma}_{0Z} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}; \\ & & \bullet \quad \boldsymbol{\sigma}_{0U} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZU00} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \\ \bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & 0 \\ 0 & \sigma_{ZZ22} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{UU} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{UU11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{UU22} \end{bmatrix}; \\ \bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} &= \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{ZU11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{ZU22} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_{ZU11} & 0 \\ 0 & \sigma_{ZU22} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Esses resultados tem a seguinte implicação sobre a expressão geral (5.5) do preditor de krigagem:

$$\begin{aligned} \hat{Z}_0 &= \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{\text{I}} - \frac{\sigma'_{0Z} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{\text{II}} - \frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{\text{III}} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\ &\quad + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}{\text{IV}} + \frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}{\text{V}} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U) \\ \hat{Z}_0 &= \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\frac{\mathbf{0} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{\text{I} = 0} - \frac{\mathbf{0} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{\text{II} = 0} - \frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{\text{III} \neq 0} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\ &\quad + \left[ \underbrace{\frac{\mathbf{0} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}{\text{IV} = 0} + \frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}{\text{V} \neq 0} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U) \end{aligned}$$

$$\hat{Z}_0 = \mu_{Z0} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z)}{\text{III}}}_{\text{III}} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U)}{\text{V}}}_{\text{V}}.$$

Como

$$\mathbf{B}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_{UU00}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(\sigma_{UU11} - \sigma_{ZU11})} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(\sigma_{UU22} - \sigma_{ZU22})} \end{bmatrix}$$

substituindo  $\mathbf{B}^{-1}$  em III tem-se:

$$\text{III} = [\sigma_{ZU00} \quad 0 \quad 0] \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_{UU00}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(\sigma_{UU11} - \sigma_{ZU11})} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(\sigma_{UU22} - \sigma_{ZU22})} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_{UZ11} & 0 \\ 0 & \sigma_{UZ22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_{ZZ11}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_{ZZ22}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 - \mu_{Z1} \\ Z_2 - \mu_{Z2} \end{bmatrix}$$

$$\text{III} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_{UZ11} & 0 \\ 0 & \sigma_{UZ22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_{ZZ11}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sigma_{ZZ22}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 - \mu_{Z1} \\ Z_2 - \mu_{Z2} \end{bmatrix}$$

$$\text{III} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \frac{\sigma_{ZU11}}{\sigma_{ZZ11}} & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_{ZU22}}{\sigma_{ZZ22}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 - \mu_{Z1} \\ Z_2 - \mu_{Z2} \end{bmatrix}$$

$$\text{III} = [0 \quad 0] \begin{bmatrix} Z_1 - \mu_{Z1} \\ Z_2 - \mu_{Z2} \end{bmatrix}$$

$\therefore \text{III} = 0.$

substituindo  $\mathbf{B}^{-1}$  em V tem-se:

$$V = \sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U)$$

$$V = [\sigma_{ZU00} \quad 0 \quad 0] \begin{bmatrix} \frac{1}{\sigma_{UU00}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{(\sigma_{UU11} - \sigma_{ZU11})} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{(\sigma_{UU22} - \sigma_{ZU22})} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (U_0 - \mu_{U0}) \\ (U_1 - \mu_{U1}) \\ (U_2 - \mu_{U2}) \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (U_0 - \mu_{U0}) \\ (U_1 - \mu_{U1}) \\ (U_2 - \mu_{U2}) \end{bmatrix}$$

$$\therefore V = \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} (U_0 - \mu_{U0}).$$

Assim, substituindo III e V na expressão do preditor finalmente tem-se que:

$$\hat{Z}_0 = \mu_{Z0} + \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} (U_0 - \mu_{U0})$$

$$\hat{Z}_0 = \mu_{Z0} - \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} \mu_{U0} + \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} U_0.$$

Se chamamos  $\beta_0 = \mu_{Z0} - \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}} \mu_{U0}$  e  $\beta_1 = \frac{\sigma_{ZU00}}{\sigma_{UU00}}$ , tem-se a expressão (5.21) que representa uma regressão linear simples.

$$\therefore \hat{Z}_0 = \beta_0 + \beta_1 U_0. \quad (5.21)$$

Note que, por simplicidade, definiu-se trabalhar com apenas uma variável auxiliar e, somente por esta razão, chegou-se a expressão para a regressão linear simples. Entretanto, se várias variáveis auxiliares forem introduzidas no modelo, a expressão (5.21) representará uma regressão linear múltipla, veja por exemplo, Draper e Smith (2014), Graybill (1976), Kendall e Stuart (1973,1977). Esses autores estabelecem como condição necessária para se realizar uma análise de regressão que exista correlação simples não espacial (CS).

Como não existe dependência espacial não há necessidade de se usá-la. Portanto, como neste cenário existe correlação simples não espacial (CS) pode-se recomendar a utilização da regressão linear simples ou múltipla para obter predições adequadas.

**Cenário 3:**  $\exists$  AC,  $\nexists$  CC e  $\nexists$  CS

Nesse cenário admitimos a não existência de correlação cruzada ( $\nexists$  CC) e nem de correlação simples ( $\nexists$  CS). Assim, temos os seguintes resultados nos vetores e matrizes de covariância:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{0Z} \\ \sigma_{0U} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ0n} \\ \sigma_{ZU00} = 0 \\ \sigma_{ZU01} = 0 \\ \sigma_{ZU0n} = 0 \end{bmatrix}; \quad \begin{array}{l} \sigma_{0Z} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ0n} \end{bmatrix}; \\ \sigma_{0U} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \mathbf{0}; \end{array}$$

$$\begin{array}{l} \Sigma_{ZZ} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ1n} \\ \sigma_{ZZn1} & \sigma_{ZZnn} \end{bmatrix}; \\ \Sigma_{UU} = \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU0n} \\ \sigma_{UU10} & 0 & \sigma_{UU1n} \\ \sigma_{UUn0} & \sigma_{UUn1} & 0 \end{bmatrix}; \\ \Sigma_{ZU} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \Phi; \\ \Sigma_{UZ} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \Phi. \end{array}$$

Sendo  $\Phi$  uma matriz de zeros. Aplicando os resultados obtidos do cenário 3 na expressão (5.5) teremos:

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{\text{I}} - \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{\text{II}} - \underbrace{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{\text{III}} \right] (\mathbf{Z} - \mu_Z) + \left[ \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}_{\text{IV}} + \underbrace{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}_{\text{V}} \right] (\mathbf{U} - \mu_U)$$

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{\text{I} \neq 0} - \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Phi \mathbf{B}^{-1} \Phi \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{\text{II} = 0} - \underbrace{\mathbf{0} \mathbf{B}^{-1} \Phi \Sigma_{ZZ}^{-1}}_{\text{III} = 0} \right] (\mathbf{Z} - \mu_Z) + \left[ \underbrace{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Phi \mathbf{B}^{-1}}_{\text{IV} = 0} + \underbrace{\mathbf{0} \mathbf{B}^{-1}}_{\text{V} = 0} \right] (\mathbf{U} - \mu_U)$$

$$\therefore \hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} (\mathbf{Z} - \mu_Z). \quad (5.22)$$

De fato, quando não existe correlação simples (CS) a informação da variável auxiliar é inútil na explicação do fenômeno medido pela variável principal, pois essas não se relacionam linearmente. O fato de também não existir correlação espacial cruzada (CC) frustra qualquer outra expectativa de utilização da variável auxiliar para a explicação do fenômeno medido por Z. De fato, se comprova que as krigagens univariadas: krigagem linear simples (KLS) e



krigagem linear ordinária (KLO) são as krigagens que minimizarão a variância do erro de predição para esta configuração. Note que, esse resultado apenas confirma o que já está estabelecido pela literatura geoestatística (veja por exemplo, Cressie (1993), Goovaerts (1997), Isaaks e Srivastava (1989), Soares (2006) e Wackernagel (2013)) uma vez que a expressão (5.22) é equivalente a expressão (3.34) expressão mais geral obtida pela abordagem geoestatística clássica (AGC) para as krigagens univariadas.

Retomando o esforço de compreensão do que ocorre com o preditor de krigagem dada a existência ou não de AC, CC e CS, será necessário que a partir do próximo cenário se avalie duas novas características: a estrutura e a composição dos pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  e para a variável auxiliar  $U$ , já que nenhum dos termos da equação (5.5) é nulo. Portanto, obter-se-á o preditor de krigagem linear e, logo em seguida, será feita uma avaliação da estrutura e composição dos pesos de krigagem, indicando o melhor preditor para cada um dos respectivos cenários, 4, 5 e 6.

**Cenário 4:**  $\exists$  AC,  $\nexists$  CC e  $\exists$  CS

A não existência de correlação espacial cruzada ( $\nexists$  CC) combinada com a existência de autocorrelação espacial ( $\exists$  AC) e de correlação simples não espacial ( $\exists$  CS) caracterizam o cenário 4, que apresenta os seguintes resultados para os vetores e matrizes de covariância:

$$\begin{aligned} \bullet \quad \sigma &= \begin{bmatrix} \sigma_{0Z} \\ \sigma_{0U} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ02} \\ \sigma_{ZU00} \\ \sigma_{ZU01} = 0 \\ \sigma_{ZU02} = 0 \end{bmatrix}; & \bullet \quad \sigma_{0Z} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ02} \end{bmatrix}; \\ \bullet \quad \Sigma_{ZZ} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ12} \\ \sigma_{ZZ21} & \sigma_{ZZ22} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \sigma_{0U} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZU00} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}; \\ \bullet \quad \Sigma_{ZU} &= \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{ZU11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{ZU22} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \Sigma_{UU} &= \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} \\ \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix}; \\ & & \bullet \quad \Sigma_{UZ} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_{UZ11} & 0 \\ 0 & \sigma_{UZ22} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Tomando-se a expressão (5.5) e aplicando-se os resultados dos vetores e matrizes apresentados para este cenário, para cada um dos termos I, II e III, relativos ao peso da variável principal  $Z$ , e os termos IV e V, relativos ao peso da variável auxiliar  $U$ , tem-se o seguinte desenvolvimento:

$$\hat{Z}_0 = \mu_{Z0} + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1}}{I \neq 0}}_{\text{I} \neq 0} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}{II \neq 0}}_{\text{II} \neq 0} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}{III \neq 0}}_{\text{III} \neq 0} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}{IV \neq 0}}_{\text{IV} \neq 0} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}{V \neq 0}}_{\text{V} \neq 0} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U).$$

Para encontrar-se  $\hat{Z}_0$  para esse cenário calcula-se  $\Sigma_{ZZ}^{-1}$  e  $\mathbf{B}^{-1}$ . Dado que o  $\det(\Sigma_{ZZ}) = (\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZZ22} - \sigma_{ZZ12}\sigma_{ZZ12})$  então:

$$\Sigma_{ZZ}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZZ22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} & -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \\ -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} & \frac{\sigma_{ZZ11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \end{bmatrix}.$$

Sendo  $\mathbf{B} = \Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU}$ , então:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} \\ \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \sigma_{UZ11} & 0 \\ 0 & \sigma_{UZ22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZZ22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} & -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \\ -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} & \frac{\sigma_{ZZ11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & \sigma_{ZU11} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{ZU22} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] & \sigma_{UU02} + \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ21} \sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] & \sigma_{UU12} + \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ21} \sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \\ \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} + \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ21} \sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] & \sigma_{UU22} - \left[ \frac{\sigma_{UZ22} \sigma_{ZZ11} \sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix}.$$

Para se obter a inversa de  $\mathbf{B}$  opta-se por particioná-la, aplicando-se a técnica de inversão de matrizes particionadas descrita por Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017), em que se pode encontrar todos os detalhes dessa técnica. A essa nova matriz particionada denomina-se de  $\mathbf{C}$ .

$$\text{Fazendo } \mathbf{B} = \mathbf{C} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}_{11} & \mathbf{c}_{12} \\ (\mathbf{c}_{12})' & c_{22} \end{bmatrix},$$

$$\text{em que: } \mathbf{C}_{11} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \end{bmatrix}, \mathbf{c}_{12} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UU12} + \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ21} \sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \end{bmatrix}$$

$$e \ c_{22} = b_{33} = \sigma_{UU22} - \left[ \frac{\sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right].$$

Então, desde que exista  $\mathbf{C}_{11}^{-1}$ , a inversa da matriz  $\mathbf{C}$  será dada por:

$$\mathbf{C}^{-1} = \frac{1}{e} \left[ \begin{array}{c|c} e\mathbf{C}_{11}^{-1} + \mathbf{C}_{11}^{-1}\mathbf{c}_{12}(\mathbf{c}_{12})'\mathbf{C}_{11}^{-1} & -\mathbf{C}_{11}^{-1}\mathbf{c}_{12} \\ \hline -(\mathbf{c}_{12})'\mathbf{C}_{11}^{-1} & 1 \end{array} \right],$$

$$\text{em que: } \mathbf{C}_{11}^{-1} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{ZU11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] & -\frac{\sigma_{UU10}}{\det(\mathbf{C}_{11})} \\ -\frac{\sigma_{UU10}}{\det(\mathbf{C}_{11})} & \frac{\sigma_{UU00}}{\det(\mathbf{C}_{11})} \end{bmatrix} e$$

$$e = c_{22} - (\mathbf{c}_{12})'\mathbf{C}_{11}^{-1}\mathbf{c}_{12}$$

$$\begin{aligned} e &= \left( \sigma_{UU22} - \left[ \frac{\sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \right) + \\ &- \left( \sigma_{UU02} - \left[ \frac{\sigma_{ZU01}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ22} - \sigma_{ZU20}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \right) \left( \frac{\sigma_{UU11}\det(\Sigma_{ZZ}) - \sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ11}}{\det(\Sigma_{ZZ})\det(\mathbf{C}_{11})} \right) \\ &\left( \sigma_{UU02} - \left[ \frac{\sigma_{ZU01}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ22} - \sigma_{ZU02}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \right) + \left( \sigma_{UU12} - \left[ \frac{\sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \right) \\ &\left( \frac{\sigma_{UU01}\det(\Sigma_{ZZ}) - \sigma_{ZU02}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ11} + \sigma_{ZU01}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})\det(\mathbf{C}_{11})} \right) \left( \sigma_{UU12} + \left[ \frac{\sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] \right). \end{aligned}$$

Desta forma o preditor de krigagem linear para o cenário 4 terá a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \hat{Z}_0 &= \mu_{Z0} + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z}\mathbf{C}_{11}^{-1}}{\text{I}} + \frac{\sigma'_{0Z}\mathbf{C}_{11}^{-1}\mathbf{c}_{12}(\mathbf{c}_{12})'\mathbf{C}_{11}^{-1}}{\text{II}} - \frac{\sigma'_{0U}(\mathbf{c}_{12})'\mathbf{C}_{11}^{-1}}{\text{III}}}_{\lambda_Z} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\ &- \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z}\mathbf{C}_{11}^{-1}\mathbf{c}_{12}}{\text{IV}} + \frac{\sigma'_{0U}}{\text{V}}}_{\lambda_U} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U). \end{aligned} \quad (5.23)$$

Obtido o preditor de krigagem linear para o cenário 4 (expressão (5.23)), dois novos aspectos devem ser observados: a estrutura dos pesos de krigagem e a composição destes pesos relativos à variável principal  $Z$  e a variável secundária  $U$ .

Quanto à estrutura dos pesos de krigagem note que, dado que o ponto de partida foi a expressão (5.5) para todos os preditores, a estrutura dos pesos  $\lambda_Z$  e  $\lambda_U$  se mantém inalterada. O que diferencia a forma do preditor do cenário 4 para os cenários 1, 2 e 3 é a composição que se deve a existência ou não da AC, CC e CS, o que, inclusive, caracteriza o tipo de preditor que deve ser utilizado para cada caso.

Por outro lado, a avaliação da composição dos pesos será feita sobre os termos relativos a cada um dos pesos,  $\lambda_Z$  e  $\lambda_U$ . De fato, ao se observar a matriz  $\mathbf{C}_{11}^{-1}$  encontra-se somente autocorrelações espaciais (AC) e correlações simples não espaciais (CS). Da mesma forma ao observar-se o vetor  $\mathbf{c}_{12}$  encontra-se somente autocorrelações espaciais (AC) e correlações simples não espaciais (CS). No caso do vetor  $\sigma'_{0Z}$  só se encontra autocorrelações espaciais (AC), enquanto que para o vetor  $\sigma'_{0U}$  só se encontra correlações simples não espaciais (CS).

Dado que os termos I, II e III são combinações da matriz  $\mathbf{C}_{11}^{-1}$  e dos vetores  $\mathbf{c}_{12}$ ,  $\sigma'_{0Z}$  e  $\sigma'_{0U}$  e que, de fato, somente encontrou-se AC e CS nesta matriz e vetores, logo, os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  somente são impactadas por autocorrelações espaciais (AC) e correlações simples não espaciais (CS). De modo análogo os pesos para a variável auxiliar  $U$ , cujo termos IV e V são combinações da matriz  $\mathbf{C}_{11}^{-1}$  e dos vetores  $\mathbf{c}_{12}$ ,  $\sigma'_{0Z}$  e  $\sigma'_{0U}$ , também são impactados somente por autocorrelações espaciais (AC) e correlações simples não espaciais (CS).

Como dito anteriormente na análise do cenário 2, a condição necessária para se realizar uma análise de regressão é que exista a correlação simples não espacial (CS). Considerando que no cenário 4, além da correlação simples não espacial (CS) que indica a realização de uma regressão, existe também a autocorrelação espacial (AC), que conforme visto no cenário 3, a krigagem linear univariada é o método indicado quando se tem apenas autocorrelação espacial (AC). Logo, para uma configuração onde  $\exists$  AC,  $\nexists$  CC e  $\exists$  CS, recomenda-se a combinação da krigagem linear com a regressão (KR). Um caso especial desta configuração ocorre quando ao invés de se utilizar uma variável externa como variável auxiliar, utiliza-se uma variável interna, isto é, utiliza-se as coordenadas espaciais como variável auxiliar. Neste caso especial a krigagem com regressão (KR) transforma-se na krigagem linear universal (KLU).

**Cenário 5:**  $\exists$  AC,  $\exists$  CC e  $\nexists$  CS

Essa configuração, a princípio, por não admitir a existência de correlação simples não espacial ( $\nexists$  CS) parece não muito provável na prática. Entretanto, dado que existe correlação espacial cruzada ( $\exists$  CC) entende-se que a variável auxiliar pode acrescentar informação útil diminuindo o erro de predição. Dessa forma, a implicação nos vetores e matrizes de covariância desse cenário será:

$$\begin{aligned}
 \bullet \quad \sigma &= \begin{bmatrix} \sigma_{0Z} \\ \sigma_{0U} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ02} \\ \sigma_{ZU00} = 0 \\ \sigma_{ZU01} \\ \sigma_{ZU02} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \sigma_{0Z} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ02} \end{bmatrix}; \\
 \bullet \quad \Sigma_{ZZ} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ1n} \\ \sigma_{ZZn1} & \sigma_{ZZnn} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \sigma_{0U} &= \begin{bmatrix} 0 \\ \sigma_{ZU01} \\ \sigma_{ZU02} \end{bmatrix}; \\
 \bullet \quad \Sigma_{ZU} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZU10} & 0 & \sigma_{ZU12} \\ \sigma_{ZU20} & \sigma_{ZU21} & 0 \end{bmatrix}; & \bullet \quad \Sigma_{UU} &= \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU0n} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU1n} \\ \sigma_{UUn0} & \sigma_{UUn1} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix}; \\
 & & \bullet \quad \Sigma_{UZ} &= \begin{bmatrix} \sigma_{UZ01} & \sigma_{UZ02} \\ 0 & \sigma_{UZ12} \\ \sigma_{UZ21} & 0 \end{bmatrix}.
 \end{aligned}$$

Ocorrendo o cenário 5, outra vez a expressão geral do preditor dado em (5.5) é dividida em termos separados em que os termos I, II, III, são relativos ao peso da variável principal  $Z$ , e os termos IV e V, são relativos ao peso da variável auxiliar  $U$ . Entretanto, observando as matrizes  $\Sigma$ 's e o vetor  $\sigma$  percebe-se uma composição de covariâncias diferente dos demais cenários, assim, os pesos também são diferentes dos demais cenários. Aplicando-se a composição das matrizes e vetores do cenário 5 acima na expressão (5.5) tem-se:

$$\begin{aligned}
 \hat{Z}_0 &= \mu_{Z0} + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1}}{I \neq 0}}_{\text{I}} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}{II \neq 0}}_{\text{II}} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1}}{III \neq 0}}_{\text{III}} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\
 &+ \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}{IV \neq 0}}_{\text{IV}} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}{V \neq 0}}_{\text{V}} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U).
 \end{aligned}$$

Calculando-se  $\mathbf{B} = \Sigma_{UU} - \Sigma_{UZ} \Sigma_{ZZ}^{-1} \Sigma_{ZU}$ , chega-se ao seguinte resultado:

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} \\ \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sigma_{UZ01} & \sigma_{UZ02} \\ 0 & \sigma_{UZ12} \\ \sigma_{UZ21} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZZ22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} & -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \\ -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} & \frac{\sigma_{ZZ11}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{ZU10} & 0 & \sigma_{ZU12} \\ \sigma_{ZU20} & \sigma_{ZU21} & 0 \end{bmatrix},$$

em que

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix}, \text{ sendo que cada elemento de } \mathbf{B} \text{ ser\'a igual a:}$$

- $b_{11} = \sigma_{UU00} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU10} + \sigma_{UU02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU02} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU20}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right],$
- $b_{12} = \sigma_{UU01} - \left[ \frac{\sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU21}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] = b_{21},$
- $b_{13} = \sigma_{UU02} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU12} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] = b_{31},$
- $b_{22} = \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right],$
- $b_{23} = \sigma_{UU12} + \left[ \frac{\sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right] = b_{32},$
- $b_{33} = \sigma_{UU22} - \left[ \frac{\sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU12}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right].$

Repetindo-se o procedimento para o c\'alculo da inversa particionada descrita por Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017). Note que apesar do procedimento ser o mesmo, como as matrizes resultantes s\~ao diferentes, ser\~ao denominadas por diferentes letras.

Ent\~ao tem-se que  $\mathbf{B} = \mathbf{D} = \left[ \begin{array}{c|c} \mathbf{D}_{11} & \mathbf{d}_{12} \\ \hline (\mathbf{d}_{12})' & d_{22} \end{array} \right]$ , onde  $\mathbf{D}_{11} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}$ ,  $\mathbf{d}_{12} = \begin{bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \end{bmatrix}$  e  $d_{22} = b_{33}$ .

Desde que exista  $\mathbf{D}_{11}^{-1}$ , a inversa da matriz  $\mathbf{D}$  ser\'a dada por:

$$\mathbf{D}^{-1} = \frac{1}{h} \left[ \begin{array}{c|c} h\mathbf{D}_{11}^{-1} + \mathbf{D}_{11}^{-1}\mathbf{d}_{12}(\mathbf{d}_{12})'\mathbf{D}_{11}^{-1} & -\mathbf{D}_{11}^{-1}\mathbf{d}_{12} \\ \hline -(\mathbf{d}_{12})'\mathbf{D}_{11}^{-1} & 1 \end{array} \right],$$

em que  $\mathbf{D}_{11}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{b_{22}}{\det(\mathbf{D}_{11})} & -\frac{b_{12}}{\det(\mathbf{D}_{11})} \\ -\frac{b_{21}}{\det(\mathbf{D}_{11})} & \frac{b_{11}}{\det(\mathbf{D}_{11})} \end{bmatrix}$ , sendo:

$$\begin{aligned}
\blacksquare \quad \frac{b_{22}}{\det(\mathbf{D}_{11})} &= \frac{\sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right]}{\det(\mathbf{D}_{11})}, \\
\blacksquare \quad -\frac{b_{12}}{\det(\mathbf{D}_{11})} &= -\frac{b_{21}}{\det(\mathbf{D}_{11})} = \frac{\sigma_{UU01} - \left[ \frac{\sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right]}{\det(\mathbf{D}_{11})}, \\
\blacksquare \quad \frac{b_{11}}{\det(\mathbf{D}_{11})} &= \frac{\sigma_{UU00} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU10} + \sigma_{UU02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU02} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU20}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right]}{\det(\mathbf{D}_{11})},
\end{aligned}$$

com  $h = d_{22} - (\mathbf{d}_{12})' \mathbf{D}_{11}^{-1} \mathbf{d}_{12}$ , ou seja,

$$\begin{aligned}
h &= \left( \sigma_{UU22} - \left[ \frac{\sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right) + \\
&- \left( \sigma_{UU02} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU12} - \sigma_{UZ20}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right) \left( \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ11}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})\det(\mathbf{D}_{11})} \right] \right) \\
&\left( \sigma_{UU02} - \left[ \frac{\sigma_{ZU01}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ22} - \sigma_{ZU02}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right) + \left( \sigma_{UU12} - \left[ \frac{\sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right) \\
&\left( \frac{\sigma_{UU01}\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}) - \sigma_{ZU02}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ11} + \sigma_{ZU01}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})\det(\mathbf{D}_{11})} \right) \left( \sigma_{UU12} + \left[ \frac{\sigma_{ZU12}\sigma_{ZU12}\sigma_{ZZ12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right).
\end{aligned}$$

Desta forma o preditor de krigagem para o cenário 5 terá a seguinte forma:

$$\begin{aligned}
\hat{Z}_0 &= \mu_{Z0} + \left[ \underbrace{\frac{\lambda_Z}{\sigma'_{0Z} \mathbf{D}_{11}^{-1}}}_{\text{I}} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \mathbf{D}_{11}^{-1} \mathbf{d}_{12} (\mathbf{d}_{12})' \mathbf{D}_{11}^{-1}}{h}}_{\text{II}} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} (\mathbf{d}_{12})' \mathbf{D}_{11}^{-1}}{h}}_{\text{III}} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\
&- \left[ \underbrace{\frac{\lambda_U}{\sigma'_{0Z} \mathbf{D}_{11}^{-1} \mathbf{d}_{12}}}_{\text{IV}} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0U}}{h}}_{\text{V}} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U). \tag{5.24}
\end{aligned}$$

Obtida a expressão (5.24) do preditor de krigagem linear para o cenário 5, passa-se para a verificação da composição dos pesos relativos à variável principal  $Z$  e relativos a variável secundária  $U$ , já que a estrutura dos pesos de krigagem se manteve inalterada.

Equivalentemente ao que foi feito para o cenário 4, vai-se avaliar a composição dos pesos de krigagem,  $\lambda_Z$  e  $\lambda_U$ , no que diz respeito à existência ou não da AC, CC e CS.

De fato, ao se observar os elementos da matriz  $\mathbf{D}_{11}^{-1}$  e do vetor  $\mathbf{d}_{12}$  só se encontra autocorrelações espaciais (AC) e correlações cruzadas espaciais (CC). No caso do vetor  $\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}$  só se encontra autocorrelações espaciais (AC). Já ao se observar os elementos do vetor  $\boldsymbol{\sigma}'_{0U}$  verifica-se apenas a existência de correlações cruzadas espaciais (CC). Portanto, evidencia-se matematicamente apenas a existência de AC e CC para este cenário, como estabelecido por antevisão.

Dado que os termos I, II e III são combinações da matriz  $\mathbf{D}_{11}^{-1}$  e dos vetores  $\mathbf{d}_{12}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}$  e  $\boldsymbol{\sigma}'_{0U}$  e que, de fato, somente se encontrou autocorrelações espaciais (AC) e correlações cruzadas espaciais (CC) nesta matriz e nestes vetores, logo, os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  somente serão impactados por autocorrelações espaciais (AC) e correlações cruzadas espaciais (CC). De modo análogo os pesos para a variável auxiliar  $U$ , cujo termos IV e V são combinações da matriz  $\mathbf{D}_{11}^{-1}$  e dos vetores  $\mathbf{d}_{12}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}'_{0Z}$  e  $\boldsymbol{\sigma}'_{0U}$ , também são impactados somente por autocorrelações espaciais (AC) e correlações cruzadas espaciais (CC).

Verificada a existência de AC e CC na composição dos pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  e para a variável auxiliar  $U$ , e que a existência de autocorrelação espacial (AC) indica a adoção da krigagem linear univariada, então, só resta entender qual a influência da CC. Considerando que a correlação cruzada espacial (CC) mede a relação entre variáveis diferentes em pontos diferentes, semelhantemente à autocorrelação espacial (AC) que mede a relação da mesma variável em pontos diferentes, é razoável utilizar a CC para medir a relação de dependência espacial entre a variável principal e a variável auxiliar. Desta forma, pode-se estabelecer que a correlação cruzada espacial (CC) deve existir e, caso exista, o melhor método para predição linear para uma configuração onde  $\exists$  AC,  $\exists$  CC e  $\nexists$  CS, sob CAG, será o da cokrigagem linear (CKL).

**Cenário 6:**  $\exists$  AC,  $\exists$  CC e  $\exists$  CS

O sexto cenário admite a existência dos três tipos de correlação possíveis em um campo aleatório, levando às seguintes matrizes e vetores:

$$\begin{aligned} \bullet \quad \boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\sigma}_{0Z} \\ \boldsymbol{\sigma}_{0U} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ02} \\ \sigma_{ZU00} \\ \sigma_{ZU01} \\ \sigma_{ZU02} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \boldsymbol{\sigma}_{0Z} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ01} \\ \sigma_{ZZ02} \end{bmatrix}; \\ & & \bullet \quad \boldsymbol{\sigma}_{0U} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZU00} \\ \sigma_{ZU01} \\ \sigma_{ZU02} \end{bmatrix}; \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
\bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZZ11} & \sigma_{ZZ12} \\ \sigma_{ZZn1} & \sigma_{ZZ22} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{UU} &= \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} \\ \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix}; \\
\bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} &= \begin{bmatrix} \sigma_{ZU10} & \sigma_{ZU11} & \sigma_{ZU12} \\ \sigma_{ZU20} & \sigma_{ZU21} & \sigma_{ZU22} \end{bmatrix}; & \bullet \quad \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} &= \begin{bmatrix} \sigma_{UZ01} & \sigma_{UZ02} \\ \sigma_{UZ11} & \sigma_{UZ12} \\ \sigma_{UZ21} & \sigma_{UZ22} \end{bmatrix}.
\end{aligned}$$

Esta configuração foi denominada de “condição plena” já que admite a existência de todas as correlações espaciais e não espaciais possíveis entre duas variáveis pertencentes a um campo aleatório, isto é, AC, CC e CS. Aplicando as expressões acima na equação (5.5), tem-se:

$$\begin{aligned}
\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + & \left[ \frac{\sigma'_{0Z} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{I \neq 0} - \frac{\sigma'_{0Z} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{II \neq 0} - \frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1}}{III \neq 0} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \\
& + \left[ \frac{\sigma'_{0Z} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU} \mathbf{B}^{-1}}{IV \neq 0} + \frac{\sigma'_{0U} \mathbf{B}^{-1}}{V \neq 0} \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U).
\end{aligned}$$

Para encontrar-se o preditor  $\hat{Z}_0$  para o cenário pleno repete-se o procedimento adotado para o cenário 5. Sendo  $\mathbf{B} = \boldsymbol{\Sigma}_{UU} - \boldsymbol{\Sigma}_{UZ} \boldsymbol{\Sigma}_{ZZ}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{ZU}$ :

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} \sigma_{UU00} & \sigma_{UU01} & \sigma_{UU02} \\ \sigma_{UU10} & \sigma_{UU11} & \sigma_{UU12} \\ \sigma_{UU20} & \sigma_{UU21} & \sigma_{UU22} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \sigma_{UZ01} & \sigma_{UZ02} \\ \sigma_{UZ11} & \sigma_{UZ12} \\ \sigma_{UZ21} & \sigma_{UZ22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{ZZ22}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} & -\frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \\ \frac{\sigma_{ZZ12}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} & \frac{\sigma_{ZZ11}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{ZU10} & \sigma_{ZU11} & \sigma_{ZU12} \\ \sigma_{ZU20} & \sigma_{ZU21} & \sigma_{ZU22} \end{bmatrix}.$$

Se  $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix}$  então:

$$\begin{aligned}
\bullet \quad b_{11} &= \sigma_{UU00} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ02} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU10} + \sigma_{UZ02} \sigma_{ZZ11} \sigma_{ZU02} - \sigma_{UZ01} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU20}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right], \\
\bullet \quad b_{12} &= \sigma_{UU01} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ02} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ02} \sigma_{ZZ11} \sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ01} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right], \\
\bullet \quad b_{13} &= \sigma_{UU02} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU12} - \sigma_{UZ02} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU12} + \sigma_{UZ02} \sigma_{ZZ11} \sigma_{ZU22} - \sigma_{UZ01} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU22}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right], \\
\bullet \quad b_{21} &= \sigma_{UU10} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ22} \sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ12} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU10} + \sigma_{UZ12} \sigma_{ZZ11} \sigma_{ZU20} - \sigma_{UZ11} \sigma_{ZZ12} \sigma_{ZU20}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right],
\end{aligned}$$

- $b_{22} = \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU21}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right],$
- $b_{23} = \sigma_{UU12} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU12} - \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU12} + \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU22} - \sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right],$
- $b_{31} = \sigma_{UU20} - \left[ \frac{\sigma_{ZU21}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU10} + \sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU20} - \sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU20}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right],$
- $b_{32} = \sigma_{UU21} - \left[ \frac{\sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU21}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right],$
- $b_{33} = \sigma_{UU22} - \left[ \frac{\sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU12} - \sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU12} + \sigma_{UZ22}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU22} - \sigma_{UZ21}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU22}}{\det(\Sigma_{ZZ})} \right].$

Note que por esse cenário possuir todas as correlações possíveis,  $\exists$  AC,  $\exists$  CC e  $\exists$  CS, então, os elementos da matriz  $\mathbf{B}$  são “completos” e diferentes de todos os casos anteriores. Para se obter  $\mathbf{B}^{-1}$ , aplica-se novamente a técnica de inversão de matrizes particionadas descrita por Rencher e Schaalje (2008) e Searle e Khuri (2017), na qual se pode encontrar todos os detalhes dessa técnica. Essa nova matriz particionada será denominada de  $\mathbf{F}$  a qual terá a seguinte configuração:

$$\text{Fazendo } \mathbf{B} = \mathbf{F} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{11} & \mathbf{f}_{12} \\ (\mathbf{f}_{12})' & f_{22} \end{bmatrix},$$

em que  $\mathbf{F}_{11} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}$ ,  $\mathbf{f}_{12} = \begin{bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \end{bmatrix}$  e  $f_{22} = b_{33}$ .

Então, a inversa da matriz  $\mathbf{F}$  será dada por:

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{1}{k} \begin{bmatrix} k\mathbf{F}_{11}^{-1} + \mathbf{F}_{11}^{-1}\mathbf{f}_{12}(\mathbf{f}_{12})'\mathbf{F}_{11}^{-1} & -\mathbf{F}_{11}^{-1}\mathbf{f}_{12} \\ -(\mathbf{f}_{12})'\mathbf{F}_{11}^{-1} & 1 \end{bmatrix}$$

em que  $\det(\mathbf{F}_{11}) = b_{11}b_{22} - b_{21}b_{12}$ , ou ainda:

$$\det(\mathbf{F}_{11}) = \left( \sigma_{UU00} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU10} + \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU02} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU20}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right)$$

$$\left( \sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right)$$

$$- \left( \sigma_{UU01} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right)$$

$$\left( \sigma_{UU10} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU10} + \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU20} - \sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU20}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right)$$

e  $\mathbf{F}_{11}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{b_{22}}{\det(\mathbf{F}_{11})} & -\frac{b_{12}}{\det(\mathbf{F}_{11})} \\ -\frac{b_{21}}{\det(\mathbf{F}_{11})} & \frac{b_{11}}{\det(\mathbf{F}_{11})} \end{bmatrix}$  ou ainda:

- $\frac{b_{22}}{\det(\mathbf{F}_{11})} = \frac{\sigma_{UU11} - \left[ \frac{\sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ12}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ11}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right]}{\det(\mathbf{F}_{11})},$

- $-\frac{b_{12}}{\det(\mathbf{F}_{11})} = -\frac{\left( \sigma_{UU01} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU11} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU11} + \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU21} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU21}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right] \right)}{\det(\mathbf{F}_{11})},$

- $-\frac{b_{21}}{\det(\mathbf{F}_{11})} = -\frac{b_{12}}{\det(\mathbf{F}_{11})},$

- $\frac{b_{11}}{\det(\mathbf{F}_{11})} = \frac{\sigma_{UU00} - \left[ \frac{\sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ22}\sigma_{ZU10} - \sigma_{UZ02}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU10} + \sigma_{UU02}\sigma_{ZZ11}\sigma_{ZU02} - \sigma_{UZ01}\sigma_{ZZ12}\sigma_{ZU20}}{\det(\boldsymbol{\Sigma}_{ZZ})} \right]}{\det(\mathbf{F}_{11})}.$

e  $k = f_{22} - (\mathbf{f}_{12})' \mathbf{F}_{11}^{-1} \mathbf{f}_{12}$ , ou seja,

$$k = b_{33} - [b_{31} \quad b_{32}] \begin{bmatrix} \frac{b_{22}}{\det(\mathbf{F}_{11})} & -\frac{b_{12}}{\det(\mathbf{F}_{11})} \\ -\frac{b_{21}}{\det(\mathbf{F}_{11})} & \frac{b_{11}}{\det(\mathbf{F}_{11})} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \end{bmatrix}$$

$$k = b_{33} - \frac{b_{31}b_{22}b_{13} + b_{32}b_{11}b_{23} - 2b_{32}b_{12}b_{13}}{\det(\mathbf{F}_{11})}.$$

Desta forma o preditor de krigagem para o cenário 6 terá a seguinte forma:

$$\hat{Z}_0 = \mu_{z0} + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \mathbf{F}_{11}^{-1}}{I}}_I + \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \mathbf{F}_{11}^{-1} \mathbf{f}_{12} (\mathbf{f}_{12})' \mathbf{F}_{11}^{-1}}{k}}_{II} - \underbrace{\frac{\sigma'_{0U} (\mathbf{f}_{12})' \mathbf{F}_{11}^{-1}}{k}}_{III} \right] (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu}_Z) + \left[ \underbrace{\frac{\sigma'_{0Z} \mathbf{F}_{11}^{-1} \mathbf{f}_{12}}{k}}_{IV} + \underbrace{\frac{\sigma'_{0U}}{k}}_V \right] (\mathbf{U} - \boldsymbol{\mu}_U). \quad (5.25)$$

Por fim, chega-se a expressão (5.25) do preditor de krigagem linear para o último cenário: o cenário 6. Note que a expressão (5.25) é diferente da expressão (5.5), mas não deveria ser igual dado que esse é o caso “pleno”? A razão para essa diferença se deve ao fato de se ter encontrado as inversas das matrizes  $\boldsymbol{\Sigma}$  e  $\mathbf{B}$ , e tê-las substituído na expressão de  $\hat{Z}_0$ . Dessa forma, as expressões (5.5) e (5.25) são equivalentes e a estrutura dos pesos de krigagem é mantida.

Pode-se verificar a existência de autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS) nos elementos da matriz  $\mathbf{F}_{11}^{-1}$  e do vetor  $\mathbf{f}_{12}$ . O vetor  $\sigma'_{0Z}$  é um vetor de autocorrelações espaciais (AC) e o vetor  $\sigma'_{0U}$  possui uma correlação simples não espacial (CS) e correlações cruzadas espaciais (CC). Portanto, evidencia-se matematicamente a existência das três correlações possíveis em um campo aleatório nesta matriz e nestes vetores, como foi antevisto.

Dado que os termos I, II e III são combinações da matriz  $\mathbf{F}_{11}^{-1}$  e dos vetores  $\mathbf{f}_{12}$ ,  $\sigma'_{0Z}$  e  $\sigma'_{0U}$  e que, de fato, todas as correlações foram encontradas nesses vetores, logo, os pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  são impactados pelos três tipos de correlação, isto é, AC, CC e CS. De modo análogo, os pesos para a variável auxiliar  $U$ , cujo termos IV e V são combinações da matriz  $\mathbf{F}_{11}^{-1}$  e dos vetores  $\mathbf{f}_{12}$ ,  $\sigma'_{0Z}$  e  $\sigma'_{0U}$ , também são impactados por todos os três tipos de correlação, ou seja, AC, CC e CS. Dessa forma, verificou-se a existência de todas as correlações na composição dos pesos de krigagem para a variável principal  $Z$  e para a variável auxiliar  $U$ .

Recorrendo-se aos argumentos e recomendações apresentados nos cenários 2 e 5, desde que exista correlação simples não espacial (CS) e correlação cruzada espacial (CC), o melhor método para predição linear para uma configuração onde  $\exists$  AC,  $\exists$  CC e  $\exists$  CS, sob CAG, será o da cokrigagem linear com regressão (CKL + KR).

Observe que, o ponto de partida para o preditor de krigagem linear é sempre o mesmo: a expressão (5.5). Logo, todos os preditores de krigagem linear avaliados nos 6 cenários possuem a mesma estrutura. O que varia é a composição dos pesos de krigagem para a variável

principal  $Z$  e para a variável secundária  $U$ , o que pode ser comprovado pela composição das matrizes e vetores de covariâncias.

Destaca-se ainda que, quando se estabeleceu os cenários resultantes da combinação da existência ou não da AC, CC e CS, apresentados na Tabela 5.2, estes foram estabelecidos por antevisão. Entretanto, ao admitir-se que o campo aleatório é gaussiano, particionando-se o  $\varepsilon'_0$  e se aplicando na expressão (5.5) os resultados de cada cenário, é criada uma evidência matemática que confirma essa antevisão. Dessa forma, a configuração estabelecida nos 6 cenários estudados transforma-se nos critérios teóricos para seleção de preditores lineares que estão resumidos na Tabela 5.3.

Tabela 5.3 - Critérios teóricos para seleção de preditores lineares baseado nas combinações entre a existência ou não da autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS).

AC	CC	CS	Tipo de krigagem
$\nexists$	$\nexists$	$\nexists$	Estatística clássica univariada (ECU)
		$\exists$	Regressão linear simples ou múltipla (RLS ou RLM)
$\exists$	$\nexists$	$\nexists$	Krigagem linear simples (KLS) ou krigagem linear ordinária (KLO)
		$\exists$	Krigagem linear universal (KLU) ou Krigagem com regressão (KR)
	$\exists$	$\nexists$	Cokrigagem linear (CKL)
		$\exists$	Cokrigagem linear com regressão (CKLR)

Fonte: Do autor (2018).

Dos critérios teóricos decorrentes do estudo dos cenários estabelecidos neste estudo é possível definir qual o melhor preditor de krigagem linear utilizar, principalmente quando se tem uma ou mais variáveis auxiliares  $U$ , além da variável principal  $Z$ .

Entretanto, não foi objeto desta tese o estudo de uma medida prática que descreva a dependência espacial e que permita saber a partir de que valores ou faixa de valores para a autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS) recomenda-se na prática cada um dos preditores de krigagem linear aqui estudados.

Por essa razão, surge naturalmente a questão: “Como aplicar os critérios teóricos propostos por este estudo sem saber a partir de que valores ou faixa de valores práticos para a AC, CC e CS essas correlações existem?”. Na próxima seção vai-se responder a essa questão.

## 5.4 Interpretação do coeficiente de correlação

Diversos autores apresentam diretrizes para a interpretação de um coeficiente de correlação. Entretanto, todos esses critérios são de certa forma arbitrários, isto é, a interpretação de um coeficiente de correlação depende do contexto e dos propósitos definidos para a sua medição. Uma correlação de 0,8 pode ser muito baixa se alguém está verificando uma lei física usando instrumentos de alta precisão, mas pode ser considerado muito alto nas ciências ambientais, por exemplo, onde existem diversas variáveis não controláveis que dificultam sua predição. Portanto, para responder à questão feita no final da seção anterior, vai-se buscar referências dentro do contexto da Geoestatística.

Para que correlações espaciais e não espaciais sejam expressadas de maneira equivalente, vai-se estabelecer três faixas de valores, isto é: correlação ou dependência espacial fraca, correlação ou dependência espacial moderada e correlação ou dependência espacial forte.

Como dito anteriormente, para fins de dedução as correlações foram simplesmente consideradas existentes ou inexistentes, isto é, existentes se não são zero e inexistente se forem iguais a zero. Define-se para fins de recomendação prática que as correlações inexistentes, fraca e moderada, serão consideradas inexistentes e que as correlações fortes serão consideradas existentes.

Dessa forma, de posse do valor estimado pela correlação simples não espacial (CS) basta compará-lo com os valores estabelecidos na Tabela 5.4 para verificar a sua existência.

Tabela 5.4 - Faixa de valores para a classificação da correlação simples não espacial (CS).

<b>Correlação simples não espacial (CS)</b>	<b>Interpretação</b>
$ CS  \leq 0,40$	Correlação simples não espacial fraca
$0,40 <  CS  < 0,70$	Correlação simples não espacial moderada
$ CS  \geq 0,70$	Correlação simples não espacial forte

Fonte: adaptado de Laboratório de Estatística e Geoinformação - LEG (2018).

Para avaliar a autocorrelação espacial (AC), isto é, a dependência espacial, vai-se adotar o Índice de Dependência Espacial  $IDE(\%)$  proposto por Seidel e Oliveira (2014) e a classificação para o  $IDE(\%)$  proposta por Seidel e Oliveira (2016) e Barbosa et. al. (2017).

Estes autores propuseram uma medida auxiliar numérica de dependência espacial que resume todo o conjunto de informações semivariográficas, levando-se em consideração o efeito pepita ( $C_0$ ), a contribuição ( $C_1$ ), o alcance ( $a$ ), o fator de modelo ( $FM$ ) e a distância máxima

( $MD$ ) entre pares de pontos da amostra espacial. O fator de modelo ( $FM$ ), de acordo com Seidel, Oliveira (2014), pode ser entendido como um valor que expressa a força da dependência espacial que o modelo pode alcançar, uma vez que quanto maior seu valor, maior a força da dependência espacial do modelo. O índice de dependência espacial  $IDE(\%)$  é, então, dado pela seguinte equação:

$$IDE_{Modelo}(\%) = FM \times \left( \frac{C_1}{C_0 + C_1} \right) \times \left( \frac{a}{q \times MD} \right) \times 100. \quad (5.26)$$

No estudo de validação da  $IDE(\%)$ , Seidel e Oliveira (2014) consideram  $q = 0,5$ , gerando um denominador  $q \times MD$  equivalente à metade da maior distância entre os pontos da amostra espacial.

De acordo com Seidel e Oliveira (2016), os valores respectivos do fator do modelo ( $FM$ ) são: 0,375 (para semivariograma esférico), 0,317 (para semivariograma exponencial) e 0,504 (para o semivariograma gaussiano). Para outros modelos, novos artigos têm sido produzidos, ainda (Barbosa et.al. (2017), por exemplo).

Dessa forma, basta calcular-se o índice de dependência espacial  $IDE(\%)$  para o semivariograma ajustado e compará-lo com as faixas de valores definidos na Tabela 5.5.

Tabela 5.5 - Classificação da dependência espacial proposta por Seidel e Oliveira (2014, 2016) e Barbosa et al. (2017), para os modelos de semivariograma Esférico, Exponencial, Gaussiano e de Potência.

(Continua)

<b>Modelo de semivariograma</b>	<b>Índice de dependência espacial – <math>IDE(\%)</math></b>	<b>Interpretação da dependência espacial</b>
Esférico	$IDE(\%) \leq 7\%$	Dependência espacial fraca
	$7\% < IDE(\%) \leq 15\%$	Dependência espacial moderada
	$IDE(\%) > 15\%$	Forte dependência espacial
Exponencial	$IDE(\%) \leq 6\%$	Dependência espacial fraca
	$6\% < IDE(\%) \leq 13\%$	Dependência espacial moderada
	$IDE(\%) > 13\%$	Forte dependência espacial
Gaussiano	$IDE(\%) \leq 9\%$	Dependência espacial fraca
	$9\% < IDE(\%) \leq 20\%$	Dependência espacial moderada
	$IDE(\%) > 20\%$	Forte dependência espacial

Tabela 5.5 - Classificação da dependência espacial proposta por Seidel e Oliveira (2014, 2016) e Barbosa et al. (2017), para os modelos de semivariograma Esférico, Exponencial, Gaussiano e de Potência.

(Conclusão)

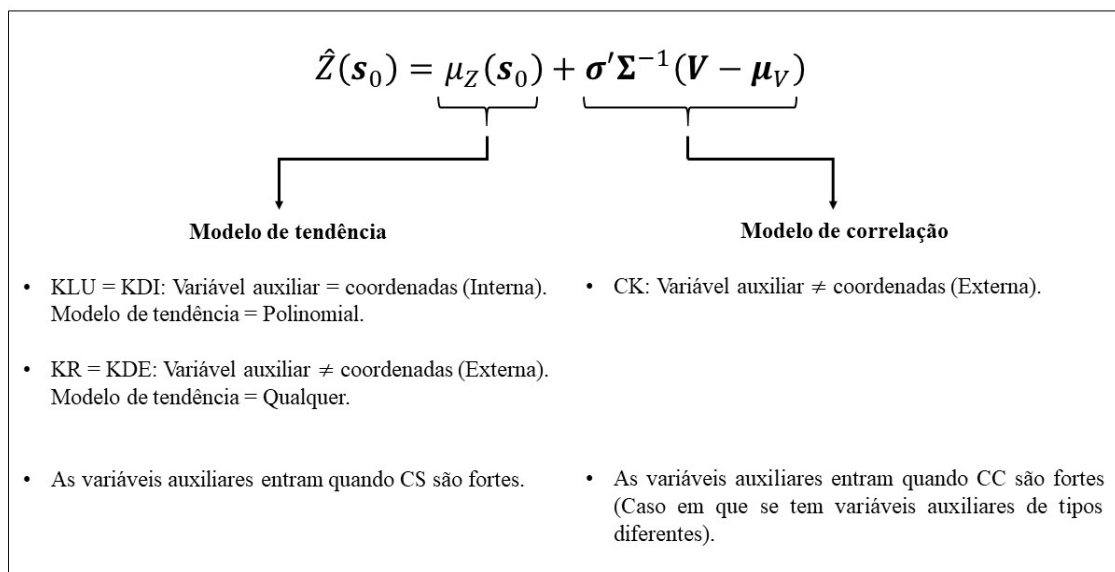
Modelo de semivariograma	Índice de dependência espacial – $IDE(\%)$	Interpretação da dependência espacial
Potência	$0 \leq IDE(\%) \leq 0,25 \times FM \times 100\%$	Dependência espacial fraca
	$0,25 \times FM \times 100\% \leq IDE(\%) \leq 0,75 \times FM \times 100\%$	Dependência espacial moderada
	$IDE(\%) > 0,75 \times FM \times 100\%$	Forte dependência espacial

Fonte: Seidel e Oliveira (2014, 2016) e Barbosa et al. (2017).

Note que, para calcular-se o índice de dependência espacial  $IDE(\%)$  dado em (5.26) utiliza-se estimativas de vários parâmetros do semivariograma, já que o interesse está sobre a autocorrelação espacial (AC), medida que é feita sobre a mesma variável em pontos diferentes.

No caso de se verificar a existência da correlação cruzada espacial (CC), medida da relação entre duas variáveis em pontos diferentes, seria necessário utilizar-se informações do semivariograma cruzado. Entretanto, nenhuma classificação para o  $IDE(\%)$  foi encontrada na literatura para o caso onde uma ou mais variáveis auxiliares são utilizadas, além da variável principal. Por essa razão, sugere-se que para classificar a existência da correlação cruzada espacial (CC) se utilize a mesma classificação apresentada por Seidel e Oliveira (2014, 2016) e Barbosa et al. (2017) e apresentada na Tabela 5.5.

Figura 5.4 – Síntese da forma de como o processo de modelagem de fenômenos espaciais se dá quando uma ou mais variáveis auxiliares, interna ou externa, são utilizadas.



Fonte: Do autor (2018).



Finalmente, apresenta-se na Figura 5.4 uma síntese da forma como o processo de modelagem de fenômenos espaciais se dá quando uma ou mais variáveis auxiliares são utilizadas. Observa-se que, a informação auxiliar pode ser interna (coordenadas) ou externa como já se apresentou e se discutiu nesta tese. Mas, a Figura 5.4 mostra que a modelagem da variável auxiliar pode entrar no modelo de tendência ou a que a variável auxiliar pode ser incluída pelo vetor e pela matriz de covariâncias, isto é, que pode ser incluída por um modelo de correlação. Desta maneira, a Figura 5.4 apresenta mais uma forma de se compreender como a informação impacta ou modifica os preditores de krigagem linear.

## 6 CONCLUSÃO

Retomando os objetivos específicos definidos para este estudo, pode-se concluir:

- a) Apresentar a teoria geoestatística proposta pela abordagem geoestatística clássica (AGC), isto é, as principais krigagens lineares univariadas e multivariadas.

Foi apresentada uma teoria bastante detalhada para as principais krigagens lineares pela abordagem geoestatística clássica (AGC), quais sejam: para o caso univariado a krigagem linear ordinária (KLO) e krigagem linear simples (KLS); para o caso multivariado a krigagem linear universal (KLU), krigagem com regressão (KR) e cokrigagem linear ordinária (CKLO) e cokrigagem linear simples (CKLS). Destaca-se que não se encontra na literatura especializada, teoria para a AGC, compilada conjuntamente como foi apresentada neste estudo. Além disso, explicitou-se a forma dos pesos de krigagem para cada uma das krigagens estudadas, outra informação difícil de se encontrar na literatura especializada.

- b) Apresentar uma abordagem alternativa, aqui denominada de abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG), a qual é baseada nas características da distribuição normal multivariada, mas não restrito a ela, explicitando a forma e a distribuição de probabilidades do erro devido à dependência espacial.

Apesar de que o conceito de campo aleatório gaussiano (CAG) não é inédito, foi apresentada neste estudo uma *abordagem* inédita para Geoestatística usando a noção de CAG, isto é, a *abordagem* da Geoestatística pela estrutura do CAG é inédita em suas premissas, pressupostos, modelo e resultados. A nova *abordagem* mostrou-se simples e coesa, além de apresentar os melhores preditores lineares entre todos os preditores, lineares e não lineares, caso o campo aleatório seja gaussiano. Destaca-se ainda, a proposição do Teorema da gaussianidade local, que idealiza que em campos estacionários de 2ª ordem mesmo que um campo aleatório não seja gaussiano na sua totalidade, pelo menos localmente (isto é, para distância  $h = r$  “pequena”) o campo poderá ser gaussiano, justificando mais ainda a *abordagem* do campo aleatório gaussiano (ACAG).

- c) Comprovar as equivalências entre a abordagem geoestatística clássica (AGC) e a abordagem do campo aleatório gaussiano (ACAG) no que tange à obtenção dos preditores de krigagem linear.

Ao aplicar-se a abordagem do campo aleatório gaussiano, chegou-se como era esperado, aos mesmos preditores para as krigagens lineares ordinária, simples e universal, comprovado

pela igualdade dos pesos de krigagem em cada um dos tipos de preditores lineares estudados. Dessa forma, a ACAG se mostrou equivalente à AGC, o que é um resultado inédito.

- d) Baseado nas características de um campo aleatório gaussiano, estudar os cenários estabelecidos pela partição do erro devido à dependência espacial e pela existência ou não de autocorrelação espacial (AC), correlação espacial cruzada (CC) e correlação não espacial simples (CS).

Seis cenários decorrentes da combinação da partição do erro devido à dependência espacial  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  e pela existência ou não de AC, CC e CS foram definidos e estudados permitindo-se compreender a fundo as principais krigagens lineares. Destaca-se, ainda, que somente pela ACAG é possível explicitar e, por conseguinte, particionar  $\varepsilon'(\mathbf{s}_0)$  e realizar o estudo proposto por esta tese, o que é mais um ineditismo que justifica a proposição da ACAG.

- e) Com base nos resultados obtidos do estudo dos cenários estabelecidos pela partição do erro devido à dependência espacial e existência ou não de AC, CC e CS, propor critérios teóricos simples e objetivos que permitam a escolha do melhor preditor de krigagem linear, quando uma ou mais variáveis auxiliares são introduzidas no estudo.

Um critério geral foi definido com base em critérios teóricos sob um modelo geoestatístico em um campo aleatório gaussiano, isto é, com base em correlações, as medidas estatísticas mais amplamente utilizadas não só na Estatística Espacial para avaliar a relação entre duas variáveis, foi definido um critério geral teórico, simples e claro que permite escolher o melhor preditor de krigagem linear, quando uma ou mais variáveis auxiliares são introduzidas no estudo. Esse critério geral inédito foi sistematizado e é apresentado pela Tabela 5.4.

- f) Selecionar/buscar um critério prático que permita recomendar para quais valores a autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS) existem, isto é, são consideradas fortes.

Propôs-se como critério prático para se definir quais valores de autocorrelação espacial (AC), correlação cruzada espacial (CC) e correlação simples não espacial (CS) são fortes, a classificação da dependência espacial proposta na literatura. Esta classificação se baseia no índice de dependência espacial  $IDE(\%)$ , definido para os modelos de semivariograma Esférico, Exponencial, Gaussiano e de Potência.

Assim, entende-se que o problema de pesquisa deste estudo foi plenamente respondido atendendo-se, dessa forma, ao objetivo geral que era propor um critério geral para a seleção de preditores de krigagem linear que se mantivessem como BLUP.

## REFERÊNCIAS

- AHMED, S.; DE MARSILY, G. Comparison of geostatistical methods for estimating transmissivity using data on transmissivity and specific capacity. **Water Resources Research**, Washington, v. 23, n. 9, p. 1717-1737, 1987.
- AHMED, S. O.; MAZLOUM, R.; ABOU-ALI, H. Spatiotemporal interpolation of air pollutants in the Greater Cairo and the Delta, Egypt. **Environmental research**, v. 160, p. 27-34, 2018.
- BARBOSA, I. C. et al. Proposal of the spatial dependence evaluation from the power semivariogram model. **Boletim de Ciências Geodésicas**, v. 23, n. 3, p. 461-475, 2017.
- CARNEIRO, J. S. da S. et al. Diagnóstico da variabilidade espacial e manejo da fertilidade do solo no Cerrado. **Scientia Agraria**, Piracicaba, v. 17, n. 3, p. 38-49, 2017.
- CEDDIA, M. B. et al. Soil carbon stock and particle size fractions in the Central Amazon predicted from remotely sensed relief, multispectral and radar data. **Remote Sensing**, Basel, v. 9, n. 2, p. 124, 2017.
- CHILÈS, J. P.; DELFINER, P. **Geostatistics: modeling spatial uncertainty**. 2<sup>nd</sup> ed. New York: Wiley, 2012. 734 p.
- CRESSIE, N. The origins of kriging. **Mathematical Geology**, New York, v. 22, n. 3, p. 239-252, Sept. 1989.
- CRESSIE, N. **Statistics for spatial data: Wiley series in probability and statistics**. **Wiley-Interscience**, New York, v. 15, p. 105-209, 1993.
- DRAPER, N. R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. New York: J. Wiley, 2014.
- ELDEIRY, A. A.; GARCIA, L. A. Comparison of ordinary kriging, regression kriging, and cokriging techniques to estimate soil salinity using LANDSAT images. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, New York, v. 136, n. 6, p. 355-364, 2010.
- FERREIRA, D. F. **Estatística multivariada**. 2. ed., rev. e ampl. Lavras: Ed. UFLA, 2011. 676 p.
- FOURATI, H. T. et al. Detection of terrain indices related to soil salinity and mapping salt-affected soils using remote sensing and geostatistical techniques. **Environmental Monitoring and Assessment**, Dordrecht, v. 189, n. 4, p. 177, Apr. 2017.
- GOOVAERTS, P. **Geostatistics for natural resources evaluation**. Oxford: Oxford University Press on Demand, 1997.

GRAYBILL, F. A. **Theory and application of the linear model**. Stanford: Cengage Learning, 1976.

HENGL, T.; HEUVELINK, G. B. M.; ROSSITER, D. G. About regression-kriging: from equations to case studies. **Computers & Geosciences**, New York, v. 33, n. 10, p. 1301-1315, 2007.

HENGL, T.; HEUVELINK, G. B. M.; STEIN, A. **Comparison of kriging with external drift and regression-kriging**. Copenhagen: ITC, 2003. (Technical Note, 51).

HENGL, T.; HEUVELINK, G. B. M.; STEIN, A. A generic framework for spatial prediction of soil variables based on regression-kriging. **Geoderma**, Amsterdam, v. 120, n. 1, p. 75-93, 2004.

HENGL, T.; MINASNY, B.; GOULD, M. A geostatistical analysis of geostatistics. **Scientometrics**, Amsterdam, v. 80, n. 2, p. 491-514, 2009.

HOFFMANN, R. **Análise de regressão: uma introdução à econometria**. Piracicaba: FEALQ, 2016. 393 p.

ISAAKS, E. H.; SRIVASTAVA, R. M. **Applied geostatistics**. Oxford: Oxford University Press, 1989. 561 p.

JOURNEL, A. G.; HUIJBREGTS, J. C. H. **Mining geostatistics**. New York: Academic, 1978. 600 p.

KENDALL, M.; STUART, A. **The advanced theory of statistics**. London: Griffin, 1973. v. 2.

KENDALL, M.; STUART, A. **The advanced theory of statistics: distribution theory**. 4<sup>th</sup> ed. London: Griffin, 1977. v. 1.

KNOTTERS, M.; BRUS, D. J.; VOSHAAR, J. H. O. A comparison of kriging, co-kriging and kriging combined with regression for spatial interpolation of horizon depth with censored observations. **Geoderma**, Amsterdam, v. 67, n. 3/4, p. 227-246, 1995.

KRIGE, D. G. **A statistical approach to some mine valuation and allied problems on the Witwatersrand**. 1951. 272 p. Thesis (Ph.D. in Engineering)-University of the Witwatersrand, Johannesburg, 1951.

LI, J.; HEAP, A. D. A review of comparative studies of spatial interpolation methods in environmental sciences: performance and impact factors. **Ecological Informatics**, New York, v. 6, n. 3, p. 228-241, 2011.

LI, J.; HEAP, A. D. Spatial interpolation methods applied in the environmental sciences: a review. **Environmental Modelling & Software**, Oxfordshire, v. 53, p. 173-189, 2014.

LOUZADA, J. M. **Teste de normalidade multivariada em Geoestatística utilizando bootstrap**. 2011. 167 p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2011.

MATHERON, G. **Le Krigeage universel**: recherche d'opérateurs optimaux en presence d'une derive: n° 1 in les Cahiers du Centre de Morphologie Mathématique. Fontainebleau: Ecole des Mines de Paris, 1969.

MATHERON, G. Principles of geostatistics. **Economic Geology**, Lancaster, v. 58, n. 8, p. 1246-1266, 1963.

MATHERON, G. **The theory of regionalized variables and its applications**. Paris: École national Supérieure des Mines, 1971.

MATHERON, G. **Traité de géostatistique appliquée**: tome I, memoires du Bureau de Recherches Geologiques et Minières. Paris: Technip, 1962.

MCKENZIE, N. J.; RYAN, P. J. Spatial prediction of soil properties using environmental correlation. **Geoderma**, Amsterdam, v. 89, n. 1, p. 67-94, 1999.

MEYER, P. L. **Probabilidade**: aplicações em estatística. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013.

MOOD, A. M.; GRAYBILL, F. A.; BOES, D. C. **Introduction to the theory of statistics**. 3<sup>rd</sup> ed. New York: McGraw-Hill, 1974. 564 p.

MOREIRA, M. A. **Fundamentos do sensoriamento remoto e metodologias de aplicação**. 4. ed. Viçosa, MG: Ed. UFV, 2005. 422 p.

ODEHA, I. O. A.; MCBRATNEY, A. B.; CHITTLEBOROUGH, D. J. Further results on prediction of soil properties from terrain attributes: heterotopic cokriging and regression-kriging. **Geoderma**, Amsterdam, v. 67, n. 3/4, p. 215-226, 1995.

ODEHA, I. O. A.; MCBRATNEY, A. B.; CHITTLEBOROUGH, D. J. Spatial prediction of soil properties from landform attributes derived from a digital elevation model. **Geoderma**, Amsterdam, v. 63, n. 3/4, p. 197-214, 1994.

OLIVEIRA, M. S. **Planos amostrais para variáveis espaciais utilizando geoestatística**. 1991. 100 p. Dissertação (Mestrado em Estatística)-Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1991.

PELLISSARI, A. L. et al. Geostatistical modeling of timber volume spatial variability for *Tectona grandis* LF precision forestry. **Cerne**, Lavras, v. 23, n. 1, p. 115-122, 2017.

RENCHER, A. C.; SCHAALJE, G. B. **Linear models in statistics**. New York: J. Wiley, 2008.

SANTOS, G. R. **Hierarquização geométrica dos preditores geoestatísticos**. 2010. 200 p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuária)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2010.

SCHABENBERGER, O.; GOTWAY, C. A. **Statistical methods for spatial data analysis**. Boca Raton: CRC, 2004.

SEARLE, S. R.; KHURI, A. I. **Matrix algebra useful for statistics**. 2<sup>nd</sup> ed. New York: Wiley, 2017. 480 p.

SEIDEL, E. Jr., OLIVEIRA, M. S. Novo índice geoestatístico para a mensuração da dependência espacial. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v.38, n.3, pp.699-705, 2014.

SEIDEL, E. Jr; OLIVEIRA, M. S. A classification for a geostatistical index of spatial dependence. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 40, 2016.

SOARES, A. **Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente**. 2. ed. Lisboa: Instituto Superior Técnico, 2006. 213 p.

TONG, Y. L. **The multivariate normal distribution**. New York: Springer Science & Business Media, 2012.

VAZIRI, V.; HAMIDI, J. K.; SAYADI, A. R. An integrated GIS-based approach for geohazards risk assessment in coal mines. **Environmental Earth Sciences**, v. 77, n. 1, p. 29, 2018.

VIEIRA, S. R.; NOVAIS, R. F. de. Geoestatística em estudos de variabilidade espacial do solo. **Tópicos em Ciência do Solo**, Viçosa, MG, v. 1, p. 1-54, 2000.

WACKERNAGEL, H. **Multivariate geostatistics: an introduction with applications**. New York: Springer Science & Business Media, 2013.

WEBSTER, R.; OLIVER, M. A. **Geostatistics for environmental scientists**. New York: J. Wiley, 2007.

YAMAMOTO, J. K.; LANDIM, P. M. B. **Geoestatística: conceitos e aplicações**. São Paulo: Oficina de Textos, 2015.

XU, Y. et al. Estimating soil total nitrogen in smallholder farm settings using remote sensing spectral indices and regression kriging. **CATENA**, v. 163, p. 111-122, 2018.

ZHOU, F. et al. Scientometric analysis of geostatistics using multivariate methods. **Scientometrics**, Amsterdam, v. 73, n. 3, p. 265-279, 2007.