

DIOGO FRANCISCO ROSSONI

TESTES BOOTSTRAP PARA DETECÇÃO DE ANISOTROPIA ESPACIAL EM FÊNOMENOS CONTÍNUOS

LAVRAS – MG 2014

DIOGO FRANCISCO ROSSONI

TESTES BOOTSTRAP PARA DETECÇÃO DE ANISOTROPIA ESPACIAL EM FÊNOMENOS CONTÍNUOS

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

Orientador Dr. Renato Ribeiro de Lima

Coorientador Dr. Marcelo Silva de Oliveira

> LAVRAS - MG 2014

Ficha Catalográfica Elaborada pela Coordenadoria de Produtos e Serviços da Biblioteca Universitária da UFLA

Rossoni, Diogo Francisco.

Testes Bootstrap para detecção de anisotropia espacial em fenômenos contínuos / Diogo Francisco Rossoni. – Lavras : UFLA, 2014.

80 p. : il.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Lavras, 2014. Orientador: Marcelo Silva de Oliveira. Bibliografía.

1. Geoestatística. 2. Anisotropia. 3. Isotropia. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD-519.54

DIOGO FRANCISCO ROSSONI

TESTES BOOTSTRAP PARA DETECÇÃO DE ANISOTROPIA ESPACIAL EM FÊNOMENOS CONTÍNUOS

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

APROVADA em 29 de janeiro de 2014.

Dr. Marcelo Silva de Oliveira	UFLA
Dr. Daniel Furtado Ferreira	UFLA
Dr. Denismar Alves Nogueira	UNIFAL
Dr. Ednaldo Carvalho Guimarães	UFU
Dr. Márcio Balestre	UFLA

Dr. Renato Ribeiro de Lima Orientador

LAVRAS – MG 2014

AGRADECIMENTOS

À minha querida *mamma* Valdira, por ter acreditado e me apoiado desde o início dessa jornada.

Ao meu pai Arlindo, que mesmo não estando mais presente, me transmitiu valores e ideais que são imortais.

À minha esposa Giceli, a quem devo grande parte dessa conquista. Obrigado por caminhar ao meu lado nessa estrada.

À Camilinha: estimada irmã e imprescindível amiga.

Ao meu orientador Renato, pelos ensinamentos e conhecimentos compartilhados. Mas acima de tudo pelos seus conselhos; verdadeiras orientações.

Ao meu coorientador Marcelo, por me mostrar um novo e fascinante mundo chamado Geoestatística.

Ao professor Daniel, pela paciência em partilhar os conhecimentos estatísticos e computacionais.

Ao Luciano "Fritz" Sturm, um valoroso amigo com o coração de aço.

Aos grandes amigos que cultivei durante os anos que estive na UFLA. Não preciso elencá-los, pois fazem parte do meu dia-a-dia.

Aos meus sogros João e Mari, pela confiança e apoio.

Aos colegas do Departamento de Estatística da UEM, pelo apoio e incentivo ao longo de 2013.

A todos os colegas e professores da Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária da UFLA e aos funcionários do Departamento de Ciências Exatas (DEX).

Ao CNPQ, pelo apoio financeiro indispensável em grande parte dessa etapa.

"Science as a candle in Dark" Carl Sagan

RESUMO

A anisotropia é uma característica em que dados espacialmente dependentes apresentam comportamentos diferenciados em determinadas direções. Quando o comportamento da variável aleatória é similar em todas as direções, dizemos que o fenômeno é isotrópico. Caso não seja detectada a anisotropia e, consequentemente, sua correção não seja feita, o fenômeno pode ser interpretado de maneira equivocada. A falta de um teste estatístico consolidado para detecção de anisotropia corrobora a dificuldade dos pesquisadores em corrigir tal característica do fenômeno. Propõe-se, neste trabalho, dois testes para detectar a anisotropia espacial: um teste baseado em área e outro teste baseado em distâncias euclidianas. Para verificar a eficácia dos testes, foram computadas as taxas de erro tipo I e o poder do teste. Em todas as configurações simuladas, o teste baseado em área obteve melhor desempenho que o teste baseado em distâncias euclidianas.

Palavras-chave: Geoestatística. Anisotropia. Isotropia.

ABSTRACT

Anisotropy is a trait in which spatially dependent data show different behaviors in certain directions. When the behavior of the random variable is similar in all directions, we say that the phenomenon is isotropic. In case anisotropy is not detected and, consequently, its correlation is not made, the phenomenon can be wrongly interpreted. But the lack of a consolidated statistical test for detecting anisotropy corroborated the difficulty the researcher faces to correct this characteristic of the phenomenon. This work proposes two tests to detect spatial anisotropy: one based on the area and another based on Euclidean distances. To verify the efficacy of the tests, we computed the Type I error rates and power of the test. In all simulated configurations, the test based on the area obtained better performance than the test based on Euclidean distances.

Keywords: Geostatistics. Anisotropy. Isotropy

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Semivariograma empírico
Figura 2	Parâmetros do semivariograma25
Figura 3	Modelo potência com b<1, b=1 e b>127
Figura 4	Modelos teóricos de semivariograma com patamar29
Figura 5	Semivariograma com anisotropia zonal31
Figura 6	Semivariograma com anisotropia geométrica32
Figura 7	Elipse de anisotropia
Figura 8	Semivariograma com anisotropia de efeito pepita
Figura 9	Semivariograma com anisotropia de inclinação35
Figura 10	Semivariogramas empíricos estimados nas direções de 0º, 30º
	e 70°42
Figura 11	Semivariogramas empíricos estimados nas direções de 0º, 30º
	e 70º comparados com o semivariograma omnidirecional43
Figura 12	Comparação individual dos semivariogramas direcionais (0º,
	30°, 70°) com o semivariograma omnidirecional ajustado44
Figura 13	Área formada entre o semivariograma omnidirecional ajustado
	e um semivariograma direcional ajustado45
Figura 14	Localização das áreas direcionais estimadas sob uma
	distribuição empírica de n áreas aleatórias47
Figura 15	Localização das áreas direcionais estimadas sob uma
	distribuição empírica de B áreas aleatórias (área máxima
	pertencendo à região de rejeição)49
Figura 16	Esquema representativo do procedimento do teste TArea51
Figura 17	Semivariograma empírico omnidirecional, semivariograma
	omnidirecional ajustado e semivariogramas direcionais
	ajustados do exemplo 1

Figura 18	Distribuição das áreas aleatórias do exemplo 15	54
Figura 19	Semivariogramas empírico omnidirecional, semivariograma	
	omnidirecional ajustado e semivariogramas direcionais	
	ajustados do exemplo 25	56
Figura 20	Distribuição das áreas aleatórias do exemplo 25	57
Figura 21	Distribuição das áreas aleatórias do exemplo 2 (localização da	
	área máxima)5	58
Figura 22	Distância euclidiana entre o semivariograma omnidirecional	
	ajustado e as semivariâncias direcionais	50
Figura 23	Esquema representativo do procedimento do teste TDe	52
Figura 24	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(10/100/30)	55
Figura 25	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(10/100/60)	56
Figura 26	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(50/100/30)6	57
Figura 27	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(50/100/60)6	58
Figura 28	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(90/100/30)6	59
Figura 29	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(90/100/60)	70
Figura 30	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(10/100/30)	71
Figura 31	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(10/100/60)	2
Figura 32	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de	
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(50/100/30)7	73

Figura 33	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(50/100/60)74
Figura 34	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(90/100/30)75
Figura 35	Poder dos testes para os níveis nominais de significância de
	10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(90/100/60)75

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Configurações da simulação40
Tabela 2	Taxas de erro tipo 1 dos testes de anisotropia TDe e TArea
	para os níveis nominais de 10%, 5% e 1%, em função das
	configurações de dependência espacial da Tabela 164

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	13
REFERENCIAL TEÓRICO	15
Geoestatística, uma introdução	15
Descrição e modelagem da estrutura de variabilidade espacial	17
Momentos e estacionaridade	18
Esperança matemática, ou momento de primeira ordem	18
Momentos de segunda ordem	18
A hipótese de estacionaridade	19
Estacionaridade de segunda ordem	20
Hipotese intrínseca	21
Semivariância e semivariograma	22
Parâmetros do semivariograma	24
Modelos teóricos de semivariograma	26
Isotropia e anisotropia	29
Anisotropia de patamar (anisotropia zonal)	31
Anisotropia de alcance (anisotropia geométrica)	32
Anisotropia de efeito pepita	33
Anisotropia de inclinação	34
METODOLOGIA	36
Simulação	37
Desempenho dos testes	39
RESULTADOS E DISCUSSÃO	41
Resultados metodológicos	41
Primeira proposta de teste para detecção de anisotropia	41
Teste de hipóteses e valor p	45
Esquematização do teste.	50
Exemplo 1	52
Exemplo 2	55
Segunda proposta de teste para detecção de anisotropia	58
Esquematização do TDe.	61
Observações pertinentes aos dois testes	62
Validação dos testes	63
Taxa de Erro tipo I	63
Poder dos testes	64
CONCLUSÕES	77
REFERÊNCIAS	78
	INTRODUÇÃO

1 INTRODUÇÃO

A anisotropia é uma característica na qual dados espacialmente dependentes apresentam comportamentos diferenciados em determinadas direções. Quando o comportamento da variável aleatória é similar em todas as direções, dizemos que o fenômeno é isotrópico.

De uma forma geral, a anisotropia é tratada em segundo plano nas análises geoestatísticas. Sistemas de busca de periódicos, como o Google Acadêmico e o Portal Periódico Capes, mostram uma relação de menos de 10% dos trabalhos que tratam de anisotropia, isso no contexto de Geoestatística.

Logo, constata-se que os autores pressupõem que a variável é isotrópica e procedem com a modelagem do fenômeno – e posterior predição – sem efetuarem a devida correção da anisotropia.

Rossoni e Lima (2012) apresentam resultados que comprovam a influência da anisotropia, na predição de um fenômeno contínuo. Em todas as configurações anisotrópicas simuladas no trabalho, os modelos que utilizaram a correção da anisotropia foram mais precisos do que os modelos que não corrigiram a anisotropia. Logo, caso a correção não seja feita, o fenômeno pode ser interpretado de maneira equivocada.

A falta de um teste estatístico consolidado para detecção de anisotropia corrobora a dificuldade dos pesquisadores em corrigir tal característica nos estudos do fenômeno. A literatura lista alguns testes para detecção de anisotropia ou isotropia: Guan et al. (2004) propõem um teste não paramétrico para testar isotropia espacial, através de subamostras; Chorti e Hristopulos (2008) utilizam uma abordagem de amostras bases, estimadas por meio de derivadas espaciais, relacionadas diretamente com os parâmetros da anisotropia; Cheng (2004) propõe um modelo para quantificar a escala de anisotropia; Maity e Sherman (2012) apresentam um teste para isotropia, utilizando a função de covariância. Todavia, esses testes necessitam de uma gama de pré-requisitos para serem aplicados: dados regularmente espaçados, normalidade dos dados, dados estacionários de segunda ordem.

Objetivou-se, neste estudo, propor dois testes para detecção de anisotropia. Além disso, pretende-se verificar a eficácia desses testes, por meio da avaliação da taxa de erro tipo I e do poder dos testes.

2 REFERENCIAL TEÓRICO

2.1 Geoestatística, uma introdução

Etimologicamente, o termo Geoestatística designa o estudo estatístico de fenômenos naturais. De uma maneira mais objetiva, a Geoestatística é um ramo da Estatística Espacial que usa o conceito de funções aleatórias para incorporar a dependência espacial nas análises estatísticas. Inicialmente, isso se deve ao fato de que Krige (1951), ao trabalhar com dados de concentração de ouro, concluiu que somente a informação dada pela variância era insuficiente para explicar o fenômeno em estudo. Para tal, é necessário levar em consideração a distância entre as observações, ou seja, considerar a localização geográfica e a dependência espacial.

George Matheron foi o primeiro a usar extensivamente o termo Geoestatística (JOURNEL; HUIJBREGTS, 1978), e sua definição ainda permanece: "Geoestatística é a aplicação do formalismo das funções aleatórias para reconhecer e estimar um fenômeno natural".

Segundo Clark (1979), uma medida tomada em um ponto em \mathbb{R}^n (espaço n-dimensional) guarda relações de dependência com medidas tomadas em pontos adjacentes, sugerindo uma estrutura de correlação.

Dessa forma, a Geoestatística pressupõe que uma variável aleatória (v.a), tomada em um ponto qualquer, pode ser expressa pela soma de três componentes:

- a) um componente estrutural, correspondente a um valor médio ou a uma tendência;
- b) um componente aleatório, espacialmente correlacionado;
- c) um ruído aleatório.

Assim, seja Z(x) uma variável aleatória em que x denota uma posição em uma, duas ou mais dimensões $x \in \mathbb{R}^n$, então

$$Z(x) = \mu(x) + \varepsilon'(x) + \varepsilon''(x), \qquad (1)$$

em que:

 $\mu(x)$ é uma função determinística que representa o componente estrutural;

 $\varepsilon'(x)$ é um termo estocástico que varia localmente e é espacialmente correlacionado;

 $\varepsilon''(x)$ é um ruído aleatório, não correlacionado.

Todavia, se pensarmos na coleção de realizações da v.a. Z(x) em inúmeros pontos x_i teremos um processo estocástico. Segundo Louzada (2011), a maneira mais simples de se compreender o conceito de processos estocásticos é pensá-lo como uma coleção de variáveis aleatórias $Z(x_i)$, indexadas segundo um conjunto de índices i=1,2,3,...,n. Essa indexação i pode estar relacionada com um ponto bidimensional no espaço, um momento do tempo, ou até uma composição espaço-temporal.

A Geoestatística se propõe a desenvolver estudos com dois objetivos principais (JOURNEL; HUIJBREGTS, 1978):

- a) ser capaz de extrair da aparente desordem dos dados disponíveis, uma imagem da variabilidade dos mesmos e uma medida da correlação existente entre os valores tomados em dois pontos do espaço, que é feita por meio do semivariograma;
- b) ser capaz de medir a precisão de toda predição ou estimação através de dados fragmentados, ou seja, através de um processo discreto de amostragem, obter uma estimativa contínua da área amostrada através da técnica de krigagem.

2.2 Descrição e modelagem da estrutura de variabilidade espacial

Para a aplicação da estatística espacial, espera-se que a associação das variáveis em pontos distintos seja maior à medida que esses pontos estejam mais próximos um do outro, a fim de descrever e modelar essas relações entre distâncias e associação espacial (CLARK, 1979).

Os fenômenos espaciais geralmente apresentam as seguintes características:

- a) únicos, não replicáveis;
- b) definidos (geralmente) no domínio de 2 ou 3 dimensões;
- c) muito complexos para serem modelados por um processo determinístico;
- d) conhecidos por amostras tomadas em localizações distintas.

Várias medidas prestam-se para a descrição dessa relação, tais como a autocovariância e autocorrelação, usuais na análise de séries temporais. Em Geoestatística, a medida normalmente utilizada é a semivariância. Ao contrário da covariância e correlação, a semivariância é uma medida de dissimilaridade, ou seja, o valor da semivariância é maior à medida que as variáveis estão menos associadas.

2.3 Momentos e estacionaridade

Na Geoestatística, os dois primeiros momentos são suficientes para prover uma solução aproximada aceitável para a maioria dos problemas encontrados (JOURNEL; HUIJBREGTS, 1978). Os dois primeiros momentos, segundo Journel e Huibredgts, são definidos como:

2.3.1 Esperança matemática, ou momento de primeira ordem

Considere uma v.a Z(x) no ponto x. Se a função de distribuição de Z(x) possuir uma esperança, então

$$E[Z(x)] = m(x).$$

2.3.2 Momentos de segunda ordem

Os três momentos de segunda ordem, considerados em Geoestatística, são:

a) a variância de Z(x): a variância é definida como o segundo momento sobre a esperança m(x) da v.a. Z(x), isto é,

$$Var[Z(x)] = E[(Z(x) - m(x))^{2}];$$

b) a covariância: se duas v.a. Z(x₁) e Z(x₂) possuírem variâncias nos pontos x₁ e x₂, então elas também possuirão uma covariância, que é uma função das duas localizações x₁ e x₂, sendo escrita como:

$$Cov(x_1, x_2) = E\left\{ \left[Z(x_1) - m(x_1) \right] \left[Z(x_2) - m(x_2) \right] \right\},\$$

c) o variograma: é definido como a variância do incremento $\left[Z(x_1) - Z(x_2)\right]$ e é definida por:

$$2\gamma(x_1, x_2) = Var[Z(x_1) - Z(x_2)]$$

A função $\gamma(x_1, x_2)$ é definida como semivariância.

2.4 A hipótese de estacionaridade

As funções de covariância e semivariância dependem, simultaneamente, de dois pontos de suporte x_1 e x_2 . Se esse for realmente o caso, então muitas realizações do par de v.a. $Z(x_1)$ e $Z(x_2)$ precisam ser analisadas para que uma inferência estatística seja possível.

Todavia, se essas funções dependessem apenas da distância entre dois pontos suporte quaisquer, isto é, da distância $h = x_1 - x_2$, então a inferência estatística torna-se possível: cada par de dados $\{z(x_k), z(x_{k'})\}$, separados pela distância h, em que $h = x_k - x_{k'}$, pode ser considerado como diferentes realizações do par de v.a. $\{Z(x_k), Z(x_{k'})\}$. Assim, a correlação existente entre dois pontos amostrais não depende de sua localização, mas sim da distância existente entre eles.

2.4.1 Estacionaridade de segunda ordem

Uma função aleatória é dita estacionária de segunda ordem, se:

a) a esperança matemática E[Z(x)] existe e não depende do ponto x; então

$$E[Z(x)]=m, \quad \forall x;$$

b) para cada par de v.a. $\{Z(x), Z(x+h)\}$ a covariância existe e depende da distância h. Assim,

$$Cov(h) = E[Z(x+h).Z(x)] - m^2, \quad \forall x.$$

A estacionariedade da covariância implica na estacionariedade da variância e da semivariância. Logo, as seguintes relações são válidas:

$$Var[Z(x)] = E[(Z(x) - m)^{2}] = Cov(0), \quad \forall x;$$

$$\gamma(h) = \frac{1}{2}E[(Z(x + h) - Z(x))^{2}] = Cov(0) - Cov(h), \quad \forall x$$

Desta forma, sob a hipótese de estacionariedade de segunda ordem, a covariância e o semivariância são duas ferramentas equivalentes para caracterizar a autocorrelação entre as duas variáveis Z(x+h) e Z(x), separadas pela distância h. Pode-se definir também uma terceira ferramenta: o correlograma, dado por:

$$\rho(h) = \frac{Cov(h)}{Cov(0)} = 1 - \frac{\gamma(h)}{Cov(0)}.$$

A hipótese de estacionariedade de segunda ordem assume a existência de uma covariância e, consequentemente, uma variância finita (Var[Z(x)] = Cov(0)). Todavia, existe uma gama de fenômenos físicos e funções aleatórias que possuem uma capacidade infinita de dispersão, que não possuem uma variância finita, nem uma covariância, mas para os quais ainda pode ser definida uma semivariância. Logo, a hipótese de estacionariedade de segunda ordem pode ser levemente reduzida quando assume-se apenas a existência e estacionariedade da semivariância. Temos assim a hipótese intrínseca.

2.4.2 Hipotese intrínseca

Um processo estocástico atende à hipótese intrínseca se:

a) a esperança matemática existe e não depende do ponto x,

$$E\left[Z(x)\right] = m, \quad \forall x ; \tag{2}$$

b) para todas as distâncias h, o incremento $\left[Z(x+h)-Z(x)\right]$ possui uma variância finita que não depende de x, ou seja,

$$Var[Z(x+h)-Z(x)] = E\left\{ [Z(x+h)-Z(x)]^{2} \right\} = 2\gamma(h), \quad \forall x.$$
(3)

A hipótese de estacionariedade de segunda ordem implica na hipótese intrínseca, todavia, o contrário não é verdade.

2.5 Semivariância e semivariograma

A semivariância é a medida do grau de dependência espacial entre duas amostras. A magnitude da semivariância entre dois pontos depende da distância entre eles. O gráfico das semivariâncias em função da distância h é chamado de semivariograma. O semivariograma é uma ferramenta que permite representa, quantitativamente, a variação de um fenômeno regionalizado no espaço (JOURNEL; HUIJBREGTS, 1978).

O estimador clássico da semivariância, proposto por Matheron (1963), é dado pela equação,

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} \left[z(x_i) - z(x_i + h) \right]^2,$$
(4)

em que:

 $\hat{\gamma}(h)$ é o estimador da semivariância;

N(h) é o número de pares de valores medidos, $Z(x_i)_e Z(x_i+h)$, separados pela distância *h*;

 $z(x_i) e^{z(x_i+h)}$ são realizações do processo estocástico Z(x), isto é, valores da i-ésima observação da variável regionalizada, coletados nos pontos $x_i e x_i + h$, com i = 1, 2, ..., n, separados pela distância h.

O gráfico das semivariâncias, estimadas em função da distância h, é chamado de semivariograma empírico ou experimental (Figura 1).



Figura 1 Semivariograma empírico

Existem outros estimadores da semivariância, como o estimador robusto, proposto por Cressie e Hawkins (1980), o qual é adequado para dados que apresentam *outliers*. Sua função de estimação é dada por:

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{\left\{\frac{1}{2N(h)}\sum_{i=1}^{N(h)} \left[\left|z(x_i+h)-z(x_i)\right|^{\frac{1}{2}}\right]^{\frac{1}{2}}\right\}}{\left\{0,475+\frac{0,494}{2N(h)}\right\}}.$$
(5)

Além desses dois estimadores, ainda existem o estimador da mediana, o estimador de Haslett, o estimador de Genton, entre outros. Teixeira (2013) apresenta uma vasta revisão sobre os estimadores, bem como uma avaliação sobre sua aplicabilidade prática.

2.5.1 Parâmetros do semivariograma

Na Figura 2, tem-se a representação de um semivariograma. O seu padrão representa o que, intuitivamente, se espera de dados com dependência espacial contínua, isto é, que as diferenças $\left[Z(x_i) - Z(x_i + h)\right]^2$ decresçam à medida que *h* tende a zero. É esperado que observações mais próximas, geograficamente, apresentem um comportamento mais semelhante entre si do que aquelas separadas por maiores distâncias.



Figura 2 Parâmetros do semivariograma

Os parâmetros do semivariograma podem ser observados diretamente na representação gráfica da Figura 2 e que, conforme Isaaks e Srivastava (1989), são definidos por:

- a) Alcance(a): distância dentro da qual as amostras apresentam-se correlacionadas espacialmente.
- b) Patamar(C): é o valor da semivariância correspondente ao valor do alcance (a), isto é, γ(a) = C. Desse ponto em diante, considera-se que não existe mais dependência espacial entre as amostras, porque a variância da diferença entre os pares de amostras (Var[z(x_i)-z(x_i+h)]) torna-se invariante com a distância;

- c) Efeito Pepita (C_0) : teoricamente $\gamma(0) = 0$. Entretanto, na prática, a medida que *h* tende para 0 (zero), $\gamma(h)$ se aproxima de um valor positivo chamado Efeito Pepita (C_0) , que revela a descontinuidade do semivariograma para distâncias menores que a menor distância entre as amostras. Parte dessa descontinuidade pode ser ocasionada por erros de medição, mas é impossível quantificar se a mesma provém de erros de medição ou da variabilidade de pequena escala, não captada pela amostragem;
- d) Contribuição(C₁): é a diferença entre o patamar (C) e o efeito pepita (C₀).

2.5.2 Modelos teóricos de semivariograma

A sensibilidade dos semivariogramas para detectar a variabilidade espacial das amostras está diretamente ligada ao melhor ajuste de algum modelo teórico ao semivariograma empírico. Modelos teóricos de semivariogramas são superpostos à sequência de pontos obtidos no semivariograma empírico, de modo que a curva que melhor se ajusta aos pontos representa a magnitude, o alcance e a intensidade da variabilidade espacial da variável estudada.

Existem diversos métodos de ajuste de modelos de semivariograma. McBratney e Webster (1986) descrevem sobre o ajuste de semivariogramas, abordando os métodos de mínimos quadrados (ordinários, ponderados e generalizados) e de máxima verossimilhança. A escolha de determinado método está diretamente ligada à busca da melhor descrição do fenômeno através do modelo. Na Geoestatística, uma das maneiras de se verificar qual modelo de semivariograma melhor se ajusta é através da técnica de validação cruzada. Os principais modelos descritos na literatura contemplam semivariogramas com e sem patamar. Segundo Santos (2010), os modelos sem patamar são próprios para estimação de parâmetros em fenômenos com dispersão infinita (aqueles que não atendem à hipótese intrínseca).

O modelo sem patamar mais utilizado é chamado potência (Figura 3), dado por

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & , h = 0 \\ C_0 + C_1 . h^b & , h \neq 0 \end{cases}$$
(6)

em que b, tal que 0 < b < 2, é o parâmetro de intensidade da dispersão, ou seja, se b > 1 a dispersão é mais acentuada que b = 1 e b < 1.



Figura 3 Modelo potência com b<1, b=1 e b>1

Alguns modelos com patamar mais utilizados - sendo que alguns desses alcançam seu patamar assintoticamente - segundo definição de Journel e Huijbregts (1978), são:

 a) Modelo Esférico (Sph): também chamado de modelo de Matheron, é um dos modelos mais utilizados. Destaca-se dos demais porque o patamar alcançado pelo modelo é definitivamente real, isto é, o patamar não possui comportamento assintótico (LOUZADA, 2011). É definido por:

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & , \quad h = 0 \\ C_0 + C_1 \left[1, 5 \left(\frac{h}{a} \right) - 0, 5 \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right] & , \quad 0 < h \le a \\ C_o + C_1 & , \quad h > a \end{cases}$$
(7)

b) Modelo Exponencial (Exp): outro modelo bastante utilizado que atinge o patamar assintoticamente. É definido por:

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & , \quad h = 0\\ C_0 + C_1 \left[1 - \exp\left(-\frac{h}{a}\right) \right] & , \quad h \neq 0 \end{cases}$$
(8)

c) Modelo Gaussiano (Gauss): muito semelhante ao modelo exponencial, o modelo gaussiano também atinge o patamar assintoticamente. Esse modelo é diferenciado pela sua forma parabólica próxima da origem e por possuir ponto de inflexão. É definido por:

$$\gamma(h) = \begin{cases} 0 & , \quad h = 0 \\ C_0 + C_1 \left[1 - \exp\left(-\left(\frac{h}{a}\right)^2\right) \right] & , \quad h \neq 0 \end{cases}$$
(9)

Exemplos de curvas referentes aos três modelos citados, estão apresentados na Figura 4.



Figura 4 Modelos teóricos de semivariograma com patamar

2.6 Isotropia e anisotropia

A anisotropia é uma característica na qual dados espacialmente dependentes apresentam comportamentos diferenciados em determinadas

direções. Quando o comportamento da variável aleatória é similar em todas as direções, dizemos que o fenômeno é isotrópico.

A maioria dos textos acadêmicos cita apenas três tipos de anisotropia:

- a) quando os semivariogramas direcionais apresentam diferentes alcances;
- b) quando os semivariogramas direcionais apresentam diferentes patamares;
- c) uma combinação dos dois casos anteriores.

Essas três definições básicas, comumente chamadas de anisotropia geométrica, anisotropia zonal e anisotropia combinada; respectivamente, são apresentadas por vários autores (JOURNEL; HUIJBREGTS, 1978; CRESSIE, 1993; ISAAKS; SRIVASTAVA, 1989; CHILÈS; DELFINER, 1999; GOOVAERTS, 1997; MCBRATNEY; WEBSTER, 1986; DIGGLE; RIBEIRO JÚNIOR, 2007).

Todavia, considerando-se a definição inicial de anisotropia - uma característica na qual dados espacialmente dependentes apresentam comportamentos diferenciados, em determinadas direções – podemos verificar que existem lacunas na definição desses três tipos de anisotropia, ou seja, podem existir outros tipos de anisotropia. E quanto a diferentes efeitos pepita? E quanto a modelos sem patamar? Eles não existem ou não são abordados na literatura?

Zimmerman (1993), em seu trabalho intitulado *Another look at anisotropy in Geostatistic* expõe algumas conjecturas sobre os possíveis tipos de anisotropia e sua classificação.

2.6.1 Anisotropia de patamar (anisotropia zonal)

Se o patamar existe, então o processo estocástico Z(x) é estacionário de segunda ordem e a relação $\gamma(h) = Cov(0) - Cov(h)$ é válida. Considere $Cov(h_{\alpha})$ como a covariância da distância h na direção α . Assim, dizemos que o processo estocástico Z(x) apresenta anisotropia zonal se $Cov(h_{\alpha}) \neq Cov(h)$ para pelo menos um α . Um exemplo de anisotropia zonal é apresentado na Figura 5.



Figura 5 Semivariograma com anisotropia zonal

2.6.2 Anisotropia de alcance (anisotropia geométrica)

Segundo Clark (1979), a anisotropia que frequentemente ocorre na prática é a anisotropia geométrica. Nesse tipo de anisotropia, o comportamento do semivariograma apresenta diferentes alcances para as direções estudadas.

Visualmente, pode-se verificar através dos semivariogramas direcionais, a variabilidade do alcance para cada direção (Figura 6). Na Figura 6, estão apresentados os semivariogramas para as direções 0°, 45°, 90° e 135°. As quatro direções possuem três alcances distintos para o mesmo modelo de semivariograma.



Figura 6 Semivariograma com anisotropia geométrica

Outra forma muito comum de verificar o comportamento direcional do alcance é através do diagrama de rosa (Figura 7). Nesse diagrama, o valor do

alcance, para cada semivariograma direcional, é inserido em um gráfico de coordenadas polares. Se esse diagrama apresentar um formato elíptico, dizemos que o processo estocástico Z(x) apresenta anisotropia geométrica. Vale salientar que esse método é visual e não possui rigor estatístico.



Figura 7 Elipse de anisotropia

2.6.3 Anisotropia de efeito pepita

Quando os semivariogramas direcionais apresentam diferentes efeitos pepitas, definimos tal comportamento como anisotropia de efeito pepita. A Figura 8 apresenta o comportamento teórico de tal fenômeno.



Figura 8 Semivariograma com anisotropia de efeito pepita

2.6.4 Anisotropia de inclinação

Este tipo de anisotropia dificilmente é visto na literatura. Até o presente momento, foram apresentados apenas tipos de anisotropia para modelos com patamar. Todavia, pela definição inicial de anisotropia, dizemos que um fenômeno é anisotrópico se o comportamento do semivariograma difere direcionalmente. Logo, caso um semivariograma sem patamar apresente um comportamento diferente em ,pelo menos, uma direção podemos concluir que o mesmo é anisotrópico (Figura 9).

Como sugestão, uma adaptação do diagrama de rosas pode ser feito para esse tipo de anisotropia. Todavia, ao invés de considerar o alcance a, utilizar-se-ia o coeficiente angular da reta.



Figura 9 Semivariograma com anisotropia de inclinação
3 METODOLOGIA

Neste trabalho, serão apresentados dois testes para verificar a existência de anisotropia espacial em fenômenos contínuos.

O primeiro teste é baseado na área formada entre o semivariograma omnidirecional ajustado e os demais semivariogramas direcionais ajustados. O segundo teste é baseado na distância euclidiana entre o semivariograma omnidirecional ajustado e os demais semivariogramas direcionais empíricos. Estes resultados metodológicos serão apresentados na seção Resultados e Discussão.

A validação desses testes dar-se-á por meio de simulação de Monte Carlo, através da análise da taxa de erro tipo I e poder do teste. Para tal, os seguintes cenários foram testados.

Duas etapas foram usadas para validar os testes. A primeira etapa consistiu em simulações sob H_0 com intuito de verificar a taxa de erro tipo I dos testes, uma vez que o erro tipo I é cometido em um teste de hipóteses, ao se rejeitar a hipótese nula quando essa é verdadeira. A probabilidade de se cometer esse erro, se o teste for exato, é denotada por α e chamado de nível de significância.

A segunda etapa consistiu em avaliar o poder dos testes. O erro tipo II é cometido em um teste, quando a hipótese nula não é rejeitada, sendo essa, falsa. Denota-se por β a probabilidade de ocorrer esse erro, sendo o poder de um teste o valor complementar, em relação à unidade, dessa probabilidade (PEREIRA FILHO; FERREIRA, 2012).

Para tal, foram simuladas amostras de populações anisotrópicas, para cada processo estocástico da Tabela 1.

3.1 Simulação

Para simular o vetor aleatório Gaussiano, com matriz de covariância Σ , inicialmente, simula-se um vetor $Y \sim N(0,1)$, e então calcula-se $Z = \Sigma^{1/2} Y$, em que a matriz Σ , simétrica e não negativa, é dada por:

$$\Sigma = \begin{bmatrix} Cov(x_1 - x_1) & Cov(x_2 - x_1) \\ Cov(x_2 - x_1) & Cov(x_2 - x_2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Cov(x_n - x_1) & Cov(x_n - x_n) \end{bmatrix}.$$

em que $Cov(x_k - x_{k'}) = Cov(0) - \gamma(x_k - x_{k'})$, com k = 1, 2, ..., n.

A semivariância γ é definida , de acordo com o modelo de interesse. Utilizamos os modelos Esférico e Gaussiano.

Para a obtenção de $\Sigma^{1/2}$, utiliza-se o método de raiz quadrada de Cholesky. Todavia, a aplicabilidade desse método está restrita a grides,com um número pequeno de observações.

Logo, nossa simulação do campo aleatório estacionário Gaussiano seguiu o procedimento proposto por Wood e Chan (1997), que é descrito como um algoritmo de simulação rápido e eficiente para malhas finas (gride com grande densidade de pontos referenciados), dada um função de covariância prescrita. Este é baseado na idéia da "incorporação circulante", proposto implicitamente por Davies e Harte (1987) (uma dimensão) e estendido para n-dimensões, independentemente, por Dietrich e Newsam (1993) e Wood e Chan (1994).

Os detalhes desse método não serão apresentados nesse trabalho. Para maiores informações consulte Wood e Chan (1994).

O único tipo de anisotropia que permite uma quantificação é a anisotropia geométrica, em que essa quantificação é denotada pela razão de anisotropia ($F_a = a_{\text{max}} / a_{\text{min}}$). As razões de anisotropia utilizadas nas simulações foram 1,5; 2; 2,5; 3; 6 e 10. Vale salientar que a razão 1 consiste em um fenômeno isotrópico, pois indica que os dois eixos da elipse têm o mesmo tamanho. Logo, as razões começam em valores próximos de um valor isotrópico e se distanciam, até o caso em que o eixo maior tem 10 vezes o tamanho do eixo menor.

Para a simulação de um processo anisotrópico geométrico, é necessário uma série de transformações das coordenadas. Segundo Budrikaite e Ducinskas (2005), seja $X_{n\times 2}$ a matriz de coordenadas, R a matriz de rotação , equação (10) , e T a matriz de dilatação, equação (11). O algoritmo de simulação seleciona um grid regular isotrópico e o transforma em um grid anisotrópico, através de $X^* = X(RT)^{-1}$. Após a geração da variável aleatória Z, faz-se a transformação inversa $X = X^*RT$.

$$R = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$
(10)

$$T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1/F_a \end{pmatrix}$$
(11)

3.2 Desempenho dos testes

Duas etapas foram usadas para verificar o desempenho dos testes. A primeira etapa consistiu em simulações sob H_0 com intuito de verificar a taxa de erro tipo I dos testes. Logo, para cada configuração da Tabela 1 foram simuladas M = 2000 amostras de um campo aleatório gaussiano , de tamanho 100 *u.m.* × 100 *u.m.* em um gride regularmente espaçado, contendo 1000 observações. Foram analisados 8 ângulos de incidência de anisotropia (0°; 22,5°; 45°; 67,5°; 90°; 112,5°; 135° e 157,5°).

A segunda etapa consistiu em simulações sob H_0 com intuito de verificar-se o poder dos testes. Logo, para cada configuração da Tabela 1 foram geradas M = 2000 amostras de um campo aleatório gaussiano de tamanho 100 *u.m.* × 100 *u.m.*, em um gride regularmente espaçado, contendo 1000 observações; e assumindo seis razões de anisotropia: 1,5; 2; 2,5; 3; 6 e 10. Foram analisados 8 ângulos de incidência de anisotropia (0°; 22,5°; 45°; 67,5°; 90°; 112,5°; 135° e 157,5°).

Todas as simulações foram feitas no software R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2012), com a utilização dos pacotes geoR (RIBEIRO JÚNIOR; DIGGLE, 2001) e RandonField (SCHLATHER et al., 2012).

					Grau de	
Nomenclatura	Modelo	Efeito Pepita	Patamar	Alcance	espacial	
Sph(10/100/30)	Esférico	10	100	30	Forte	
Sph(10/100/60)	Esférico	10	100	60	Forte	
Sph(50/100/30)	Esférico	50	100	30	Moderada	
Sph(50/100/60)	Esférico	50	100	60	Moderada	
Sph(90/100/30)	Esférico	90	100	30	Fraca	
Sph(90/100/60)	Esférico	90	100	60	Fraca	
Gauss(10/100/30)	Gaussiano	10	100	30	Forte	
Gauss(10/100/60)	Gaussiano	10	100	60	Forte	
Gauss(50/100/30)	Gaussiano	50	100	30	Moderada	
Gauss(50/100/60)	Gaussiano	50	100	60	Moderada	
Gauss(90/100/30)	Gaussiano	90	100	30	Fraca	
Gauss(90/100/60)	Gaussiano	90	100	60	Fraca	

Tabela 1 Configurações da simulação

O grau de dependência espacial segue a classificação proposta por Cambardella et al. (1994). Quanto menor a razão de dependência espacial (RD), maior o grau de dependencia espacial. A definição de RD é dada por:

$$RD = \left(\frac{C_0}{C_0 + C_1}\right),\tag{12}$$

em que C_0 é o efeito pepita e C_1 é a contribuição.

Seidel (2012) mostra que o alcance do semivariograma também influencia na dependência espacial. Esse índice não é levado em consideração no índice RD. Logo, duas distâncias foram implementadas na simulação, ou seja, trabalhou-se com amostras com alcance 30 u.m. e 60 u.m.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste trabalho são propostos dois testes para detecção da anisotropia: o primeiro é baseado na área formada entre os semivariogramas direcionais ajustados e o semivariograma omnidirecional; o segundo é baseado na distância euclidiana entre os semivariogramas direcionais empíricos e o semivariograma omnidirecional.

4.1 Resultados metodológicos

Nas seções 4.2 e 4.3 serão apresentados os dois testes propostos neste trabalho, bem como exemplificações de aplicação.

4.2 Primeira proposta de teste para detecção de anisotropia

Como já dito anteriormente, um fenômeno é isotrópico se seu comportamento é idêntico em todas as direções. Isso, na Geoestatística, acarreta em semivariogramas com comportamento idêntico em todas as direções.

$$\gamma(h_{0^{\circ}}) = \gamma(h_{1^{\circ}}) = \gamma(h_{1^{\circ}}); \text{ para } \alpha = 1^{\circ}, 2^{\circ}, ..., 360^{\circ}$$

Todavia, cada um desses semivariogramas apresenta um erro aleatório inerente à amostra do qual foi tomado, pois são estimativas do processo estocástico. Logo, temos um comportamento semelhante em cada uma das direções, ou seja,

$$\hat{\gamma}(h_{0^{\circ}}) \cong \hat{\gamma}(h_{1^{\circ}}) \cong (1, 2^{\circ}, \dots, 360^{\circ}); \text{ para } \alpha = 1^{\circ}, 2^{\circ}, \dots, 360^{\circ}$$

Na Figura 10, apresentam-se semivariogramas direcionais para três direções distintas (0°, 30°, 70°). O comportamento é similar, mas fica evidente que existem pequenas diferenças entre os semivariogramas. Como podemos quantificar essas pequenas diferenças? Uma ideia seria comparar cada um dos semivariogramas direcionais com o semivariograma omnidirecional, pois o mesmo representa o comportamento médio das semivariâncias (Figura 11).



Figura 10 Semivariogramas empíricos estimados nas direções de 0º, 30º e 70º



Figura 11 Semivariogramas empíricos estimados nas direções de 0º, 30º e 70º comparados com o semivariograma omnidirecional

Mas devemos comparar toda a extensão do semivariograma? Pela definição dos parâmetros do semivariograma, considera-se que existe independência espacial após o semivariograma atingir o alcance *a*. Logo, parece interessante proceder a uma comparação apenas até o alcance do semivariograma omnidirecional. Para isso é necessário ajustar um semivariograma teórico ao semivariograma empírico.

Na Figura 12, apresenta-se o modelo teórico de semivariograma ajustado ao semivariograma omnidirecional, juntamente com os semivariogramas direcionais. Para quantificar o erro existente entre a estimativa média e a estimativa omnidirecional podemos trabalhar com a área formada entre as duas curvas teóricas: o modelo teórico do semivariograma omnidirecional e o modelo teórico do semivariograma direcional. Um exemplo é apresentado na Figura 13.



Figura 12 Comparação individual dos semivariogramas direcionais (0°, 30°, 70°) com o semivariograma omnidirecional ajustado



Figura 13 Área formada entre o semivariograma omnidirecional ajustado e um semivariograma direcional ajustado

Dessa maneira, poderíamos quantificar o erro de estimatição com relação ao semivariograma omnidirecional para cada uma das direções de interesse, tendo assim uma distribuição empírica das áreas entre as curvas. Como a área entre as curvas possui valor mínimo de zero (curvas sobrepostas), os valores dessas áreas estimadas estariam no intervalo $[0, \infty_{+})$.

4.2.1 Teste de hipóteses e valor p

Como poderíamos definir, se a variabilidade das áreas formadas entre as curvas é devida apenas ao acaso ou é influenciada por outro fator?

O processo estocástico Z(x) possui parâmetros desconhecidos. Todavia, podemos estimar os parâmetros do processo estocástico através do ajuste de semivariogramas a uma realização desse processo, isto é, através de uma amostra, podemos inferir sobre o processo estocástico Z(x).

Tendo obtido essas informações (efeito pepita, patamar, alcance, modelo de dispersão espacial), podemos, através da técnica de bootstrap paramétrico, replicar *B* realizações do processo estocástico Z(x) e obter novas estimativas. Assim, temos um semivariograma omnidirecional da amostra inicial mais *B* semivariogramas omnidirecionais das novas realizações do processo estocástico. Obtendo-se as áreas entre cada um dos novos semivariogramas (seguindo o mesmo raciocínio dos semivariogramas direcionais), com o semivariograma omnidirecional da amostra (semivariograma original), teremos uma distribuição das áreas com característica aleatória.

Como podemos verificar se as áreas direcionais estimadas são iguais à distribuição aleatória das áreas, obtidas através da técnica de bootstrap paramétrico?

Para verificar se ambas são iguais, devemos construir um teste de hipótese baseado em uma estatística.

Muitos testes de comparação múltipla utilizam valores máximos como estatística do teste ou como parte dessa estatística do teste. Por exemplo, um dos testes de comparações múltiplas mais utilizado é o teste de Tukey. Nesse teste, a amplitude é calculada através da diferença dos valores máximos e mínimos obtidos na amostra.

Em nosso caso particular, a área mínima, teoricamente, já é conhecida e seu valor é zero. Isso é, há sobreposição entre o semivariogramas original e algum dos B semivariogramas aleatórios.

Para nossa hipótese utilizaremos a área máxima dos semivariogramas direcionais como sendo a estatística do teste. Se a área máxima pertencer à

distribuição aleatória das áreas, todas as demais áreas direcionais também pertencerão, pois são menores.

Para ilustrar, considere a Figura 14 como sendo a distribuição de um conjunto de áreas aleatórias definidas no intervalo $[0, +\infty)$. A parte clara do gráfico é a nossa região de interesse, sendo que a parte hachurada do gráfico seria nossa região crítica (em outras palavras, estaríamos com uma região de não rejeição e outra de rejeição). O * representa o valor da área máxima calculada. Nota-se que, consequentemente, todas as demais áreas (definidas por °) estão mais próximas da origem. Logo, se * pertencer à região de interesse, todas as demais áreas também pertencerão.

Todavia, se a área máxima pertencer à região em que não temos interesse, pelo menos um valor de área estará na região de rejeição (Figura 15).



Figura 14 Localização das áreas direcionais estimadas sob uma distribuição empírica de n áreas aleatórias

Considere então o vetor A de tamanho $B \times 1$ como o vetor que contém as distâncias entre as curvas das B realizações do processo estocástico e o semivariograma omnidirecional, ou seja, áreas com variação devida totalmente ao acaso. Esse vetor pode ser representado por

$$A = \{A_1, A_2, \dots, A_B\}$$

Considera-se A_{\max} como a área máxima entre os semivariogramas direcionais e o semivariograma ominidirecional, logo, o valor-p de um teste bootstrap paramétrico, baseado nas áreas, pode ser definido por

$$valor - p = \frac{\sum_{i=1}^{B+1} I(A_i \ge A_{\max})}{B+1}.$$



Figura 15 Localização das áreas direcionais estimadas sob uma distribuição empírica de *B* áreas aleatórias (área máxima pertencendo à região de rejeição)

Sendo que a hipótese testada é:

 H_0 : As áreas direcionais são estatisticamente iguais as áreas aleatórias H_1 : Pelo menos uma área direcional é estatisticamente diferente das áreas aleatórias

Em outras palavras, o que estamos dizendo é: se as áreas direcionais são fruto apenas do acaso, logo possuirão as mesmas características das B realizações do processo estocástico. Logo, o fenômeno em estudo pode ser considerado isotrópico, do contrário, o fenômeno é anisotrópico.

Assim, podemos reescrever as hipóteses da seguinte maneira:

 H_0 : Isotrópico H_1 : Anisotrópico

Não rejeitamos
$$H_0$$
 se $\frac{\sum_{i=1}^{B+1} I(A_i \ge A_{\max})}{B+1} \ge \alpha$, sendo α o nível nominal

de significância e rejeitamos H_0 em caso contrário.

O nível nominal de significância deve ser definido, de acordo com o interesse do pesquisador. Usualmente, adota-se $\alpha = 0,05$.

4.2.2 Esquematização do teste.

Para facilitar as referências futuras, o teste proposto terá a denominação de *TArea* . Na Figura 16, está apresentado um esquema do procedimento do teste.



Figura 16 Esquema representativo do procedimento do teste TArea

A seguir serão apresentados dois exemplos para ilustrar a aplicação do *TArea*.

4.2.3 Exemplo 1

Considere uma amostra simulada com as seguintes características:

- a) Gride: regular de tamanho 100m x 100m;
- b) Tamanho da amostra: 2000;
- c) Modelo de dependência espacial: Esférico;
- d) Parâmetros: $C_0 = 0$, C = 120 e a = 30;
- e) $F_a = 1$ (isotrópico).

Os seguintes passos são executados:

- 1. Simula-se uma amostra de tamanho 2000;
- 2. Estimam-se as semivariâncias através da equação (4);
- 3. Ajusta-se um modelo teórico às semivariâncias empíricas;
- 4. O modelo ajustado foi o esférico com parâmetros: efeito pepita=6,77; patamar=122; alcance=31,20;
- 5. Estima<u>m</u>-se as semivariâncias nas direções 0°; 22,5°; 45°; 67,5°; 90°; 112,5°; 135° e 157,5°;
 Obs.: Poderíamos utilizar quaisquer ângulos. Oito direções conseguem representar bem o comportamento direcional (geralmente utilizam-se apenas 4 direções).

6. Ajusta-se um modelo teórico para cada um dos semivariogramas direcionais (Figura 17).



Figura 17 Semivariograma empírico omnidirecional, semivariograma omnidirecional ajustado e semivariogramas direcionais ajustados do exemplo 1

- Calcula-se a área entre cada semivariograma direcional e o semivariograma omnidirecional, no intervalo [0, alcance=31,20]
- 8. Obtive mos assim $A_{\text{max}} = 5,82$;

- 9. Através do processo de simulação, descrito na Figura 16, gera-se B = 2000 realizações do processo estocástico, com parâmetros definidos no passo 4.
- 10. Calcula-se a área entre o semivariograma omnidirecional original e os novos semivariogramas omnidirecionais no intervalo, obtendo-se o vetor A.Temos como resultado o gráfico de densidades apresentado na Figura 18. A linha tracejada representa a área máxima direcional.



Figura 18 Distribuição das áreas aleatórias do exemplo 1

11. Testamos a hipótese nula de isotropia. Adotando um nível de significância de 5%, temos que o valor-p, para esse exemplo, é de 0,274. Logo, não rejeitamos a hipótese de H₀.

4.2.4 Exemplo 2

Vamos considerar agora uma situação similar ao exemplo 1, todavia, a simulação irá possuir uma anisotropia geométria com razão de anisotropia 3.

Considere uma amostra simulada com as seguintes características:

- a) Gride: regular de tamanho 100m x 100m;
- b) Tamanho da amostra: 2000;
- c) Modelo de dependência espacial: Esférico;
- d) Parâmetros: $C_0 = 0$, C = 120 e a = 30;
- e) $F_a = 3$.

Repetindo os passos anteriores, temos:

- 1. Simula-se uma amostra de tamanho 2000;
- 2. Estimam-se as semivariâncias através da equação (4).
- 3. Ajusta-se um modelo teórico às semivariâncias empíricas
- O modelo de ajuste é o esférico com parâmetros: efeito pepita=30,09; patamar=132; alcance=28,10.
- Estimam-se as semivariâncias nas direções 0°, 22,5°, 45°, 67,5°, 90, 112,5°, 135°, 157,5°
- 6. Ajusta-se um modelo teórico para cada um dos semivariogramas direcionais (Figura 19).



Figura 19 Semivariogramas empírico omnidirecional, semivariograma omnidirecional ajustado e semivariogramas direcionais ajustados do exemplo 2

- 7. Calculando a área entre cada semivariograma direcional e o semivariograma omnidirecional, no intervalo [0, alcance=28,10]
- 8. Obtemos assim $A_{\text{max}} = 160,24$
- 9. Através do processo de simulação, descrito na Figura 16, gera-se B = 2000 realizações do processo estocástico com parâmetros definidos no passo 4.

- 10. A Figura 20 mostra o gráfico de densidade das áreas aleatórias.
 Podemos perceber que os valores estão entre 0 e 25. Todavia, a maior área direcional teve o valor de 160,24 (Figura 21).
- 11. Testando a hipótese de H_0 , obtemos um valor-p de zero. Ou seja, a hipótese de isotropia é rejeitada. Isso vai ao encontro do que foi previsto na simulação.



Figura 20 Distribuição das áreas aleatórias do exemplo 2



Figura 21 Distribuição das áreas aleatórias do exemplo 2 (localização da área máxima)

4.3 Segunda proposta de teste para detecção de anisotropia

Um problema que pode ocorrer com o *TArea* é a falta de ajuste de um semivariograma teórico para cada semivariograma direcional. Dependendo da natureza dos dados, o comportamento, ou até mesmo a existência de um semivariograma para cada direção, pode ser um empecilho para a execução do teste.

Além disso, caso existam poucos pontos amostrais em determinada direção, isso acarretará em poucos pontos para o semivariograma experimental. Dessa forma, um ajuste de um semivariograma teórico pode não ser possível.

Pensando nisso, propomos o *TDe*, um outro teste para verificação da hipótese de isotropia. A ideia original é similar ao *TArea*, todavia, ao invés de utilizarmos a área formada entre o semivariograma omnidirecional e o

semivariograma direcional (ambos com ajuste de um modelo teórico), vamos utilizar a distância euclidiana entre cada ponto do semivariograma direcional empírico e o semivariograma omnidirecional ajustado.

Podemos pensar no *TDe* como o erro ou falta de ajuste de uma regressão. A distância euclidiana mostrará quão distante ou perto estamos do semivariograma de referência, que no nosso caso é o omnidirecional ajustado.

Considera-se DE_{max} como a distância euclidiana máxima entre os semivariogramas direcionais e o semivariograma ominidirecional, logo, o valorp de um teste bootstrap paramétrico baseado nas distâncias pode ser definido por

$$valor - p = \frac{\sum_{i=1}^{B+1} I(DE_i \ge DE_{\max})}{B+1}$$

em que DE_i é a distância euclidiana aleatória de cada realização do processo estocástico, calculada entre o semivariograma omnidirecional e os semivariogramas omnidirecionais aleatórios.

Na Figura 22 temos um semivariograma omnidirecional ajustado (linha cheia). Os pontos são as semivariâncias nas distâncias *h*, para uma direção qualquer. As linhas verticais são as distâncias euclidianas com relação ao semivariograma omnidirecional, nas distâncias *h* definidas.



Figura 22 Distância euclidiana entre o semivariograma omnidirecional ajustado e as semivariâncias direcionais

Logo, para o TDe, temos a seguinte hipótese:

 H_0 : As DE's directionais são estatísticamente iguais as DE's aleatórias H_1 : Pelo menos uma DE directional é estatísticamente diferente das DE's aleatórias

De forma análoga ao *TArea*, o que estamos dizendo é: se as DE's direcionais são fruto apenas do acaso, logo possuirão as mesmas características das B realizações do processo estocástico. Logo, o fenômeno em estudo pode ser considerado isotrópico, do contrário, o fenômeno é anisotrópico.

Assim, podemos reescrever as hipóteses da seguinte maneira:

 H_0 : Isotrópico H_1 : Anisotrópico

Não rejeitamos
$$H_0$$
 se $\frac{\sum_{i=1}^{B+1} I(DE_i \ge DE_{\max})}{B+1} \ge \alpha$, sendo α o nível

nominal de significância e rejeitamos H_0 em caso contrário.

O nível nominal de significância deve ser definido de acordo com o interesse do pesquisador. Usualmente adota-se $\alpha = 0,05$.

4.3.1 Esquematização do TDe.

Para facilitar as referências futuras, o teste proposto terá a denominação de *TDe* . Na Figura 23 está apresentado um esquema do procedimento do teste.



Figura 23 Esquema representativo do procedimento do teste TDe

4.4 Observações pertinentes aos dois testes

 a) O gride que deverá ser utilizado na simulação é o mesmo do gride original, ou seja, com base na localização da amostra inicial, realizamos simulações com os parâmetros estimados e nas localizações observadas;

b) Nos exemplos utilizamos 8 direções. A escolha da quantidade de direções é a critério do pesquisador. Vários testes podem ser construídos aumentando ou diminuindo a quantidade de direções. Todavia, vale ressaltar que usualmente calcula-se o semivariograma com uma tolerância angular de 12,5°. Logo, aumentar demasiadamente o número de direções acarretará em sobreposição desnecessária de estimativas (além de perda da otimização computacional).

4.5 Validação dos testes

As seções 4.5.1 e 4.5.2 contêm os resultados da validação dos testes propostos.

4.5.1 Taxa de Erro tipo I

Os resultados obtidos para os dois testes propostos estão apresentados na Tabela 2. Ambos os testes obtiveram taxas de erro tipo I próximas dos níveis nominais de significância, isso é, de um modo geral, os dois testes apresentaram um controle adequado do erro tipo I. Através do teste Binomial exato, apenas um valor foi estatisticamente diferente do nominal. Temos então que ambos os testes podem ser considerados exatos.

	$\alpha = 0,10$		$\alpha = 0,05$		$\alpha = 0,01$	
Configuração	TDe	TArea	TDe	TArea	TDe	TArea
Sph(10/100/30)	0,084	0,094	0,047	0,045	0,008	0,010
Sph(10/100/60)	0,087	0,085	0,051	0,050	0,008	0,009
Sph(50/100/30)	0,082*	0,091	0,048	0,048	0,010	0,007
Sph(50/100/60)	0,091	0,098	0,051	0,049	0,009	0,010
Sph(90/100/30)	0,084	0,104	0,049	0,049	0,010	0,007
Sph(90/100/60)	0,102	0,087	0,050	0,047	0,007	0,007
Gauss(10/100/30)	0,098	0,096	0,049	0,050	0,010	0,008
Gauss(10/100/60)	0,103	0,087	0,051	0,048	0,009	0,007
Gauss(50/100/30)	0,084	0,102	0,049	0,047	0,008	0,008
Gauss(50/100/60)	0,100	0,086	0,050	0,045	0,008	0,009
Gauss(90/100/30)	0,087	0,084	0,049	0,051	0,008	0,008
Gauss(90/100/60)	0,091	0,099	0,046	0,049	0,009	0,007

Tabela 2Taxas de erro tipo 1 dos testes de anisotropia TDe e TArea para os
níveis nominais de 10%, 5% e 1%, em função das configurações de
dependência espacial da Tabela 1

* o valor é estatisticamente diferente do valor nominal α , pelo teste Binomial exato.

4.5.2 Poder dos testes

Os resultados referentes ao poder dos testes, considerando-se as simulações baseadas no modelo gaussiano, estão apresentados nas Figura 24 a Figura 29.

Verifica-se na Figura 24 que os teste *TDe* e o *TArea* apresentaram basicamente o mesmo poder de teste. O crescimento do poder de ambos foi esperado, todavia até a razão 10 apenas o *TArea* atingiu o valor assintótico de 1. Nota-se um crescimento rápido e acentuado para configuração Sph(10/100/30). Ou seja, os testes possuem grande poder para situações de forte dependência espacial.



Figura 24 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(10/100/30)

A Figura 25 apresenta um resultado deveras interessante. Enquanto o poder do teste para o *TArea* logo atingiu o valor assintótico de 1, o *TDe* não se aproximou do valor assintótico de 1, ficando próximo do valor 0,8. A única diferença de configuração dos resultados apresentados na Figura 24 e Figura 25, com relação à simulação, foi o parâmetro alcance. O *TDe* foi severamente afetado pelo incremento do alcance. Embora, pela definição de grau de dependência, as duas simulações apresentem o mesmo grau de dependência espacial (forte), o resultado do poder diferiu consideravelmente. Podemos conjecturar que as distâncias euclidianas sofreram forte impacto com o aumento do alcance, enquanto que a área da figura permaneceu menos inconstante.



Figura 25 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(10/100/60)

Para as configurações com moderada dependência espacial, o comportamento foi similar ao apresentado na Figura 24. Quando o alcance foi de 30, ambos os testes foram similares. O crescimento do poder foi um pouco mais lento do que nas configurações de forte dependência espacial. Mesmo assim, o *TArea* novamente atingiu o valor assintótico de 1 na Figura 26. O *TDe* teve um desempenho um pouco inferior.

Com o incremento do alcance para 60, novamente, o *TDe* apresentou menor poder se comparado com o *TArea* (Figura 27)



Figura 26 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(50/100/30)



Figura 27 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(50/100/60)

Considerando as configurações com fraca dependência espacial, quando o alcance foi de 30, ambos os testes foram similares (Figura 28). O crescimento do poder foi um pouco mais lento do que nas configurações com moderada e forte dependência espacial. Conclui-se que o grau de dependência espacial influi diretamente no poder do teste.

Mesmo assim, o *TArea* novamente atingiu o valor assintótico de 1 (Figura 28). O *TDe* teve um desempenho um pouco inferior.

Todavia, quando ocorre o incremento da distância, novamente o *TDe* apresenta menor poder se comparado com o *TArea* (Figura 29).

Portanto, para simulações baseadas no modelo esférico, o *TArea* apresentou, em todas as configurações, maior poder do teste se comparado ao *TDe*. Essa diferença ficou acentuada quando modificou-se o valor do alcance.



Figura 28 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(90/100/30)



Figura 29 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Sph(90/100/60)

Os resultados referentes ao poder dos testes, considerando-se as simulações baseadas no modelo gaussiano, estão apresentados nas Figura 30 a Figura 35.

Na Figura 30, observa-se que os testes *TDe* e o *TArea* apresentaram o mesmo comportamento em relação ao poder. Ambos atingiram o valor assintótico de 1 com uma razão de anisotropia próxima de 3. Portanto, verifica-se um alto poder dos mesmos.



Figura 30 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(10/100/30)

Na Figura 31, observa-se o poder do teste para a configuração Gauss(10/100/60), que possui forte dependência espacial. Diferentemente do que ocorreu com a configuração Sph(10/100/60) (Figura 25), aqui, o teste *TDe* não foi tão afetado pelo incremento do alcance. O *TArea* ainda possui maior poder, mas o *TDe* ficou relativamente próximo. Podemos atribuir esse desempenho similar a um parâmetro inerente do modelo gaussiano. Enquanto no modelo esférico, o alcance paramétrico e o alcance prático são os mesmos, no modelo gaussiano o alcance paramétrico é $1/\sqrt{3}$ do alcance prático. Logo, o alcance teve menor influência no *TDe*.


Figura 31 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(10/100/60)

A Figura 32 e Figura 33 apresentam o poder dos testes para o modelo gaussiano com moderada dependência espacial. Novamente o *TArea* possui melhor desempenho do que o *TDe*. Nessa configuração, fica mais evidente a influência do parâmetro alcance, no poder do *TDe* (Figura 33). O poder dos testes também demora mais para aumentar se comparado com a configuração anterior, que possuía forte dependência espacial.



Figura 32 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(50/100/30)



Figura 33 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(50/100/60)

Finalmente, para a configuração de fraca dependência espacial, temos mais uma vez que o *TArea* apresenta maior poder do que o *TDe*, tanto para o alcance de 30, quanto para o alcance de 60 (Figura 34 e Figura 35). Novamente, o *TDe* apresenta um resultado inferior quando influenciado pela incremento do alcance. Embora seja uma configuração de fraca dependência espacial, o aumento do poder do teste ficou similar ao que ocorreu com a moderada dependência espacial.

Portanto, para simulações baseadas no modelo gaussiano, o *TArea*, novamente, apresentou em todas as configurações maior poder do teste se comparado ao *TDe*. Todavia, essa diferença foi menos acentuada do que quando trabalhou-se com o modelo esférico.



Figura 34 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(90/100/30)



Figura 35 Poder dos testes para os níveis nominais de significância de 10%, 5% e 1% relativo a configuração Gauss(90/100/60)

Para uma melhor verificação da eficácia, sugere-se que um estudo futuro seja desenvolvido, comparando-se computacionalmente, por meio de simulação intensiva, os dois testes propostos, com os demais, presentes na literatura.

Também é interessante desenvolver esses testes em outra linguagem computacional, buscando melhor desempenho.

5 CONCLUSÕES

Foram apresentados dois testes para detectar a anisotropia: *TArea* e *TDe*. Ambos os testes propostos, *TArea* e *TDe*, apresentaram um bom controle do erro tipo I, visto que podem ser considerados testes exatos.

Quanto ao poder do teste, o *TArea* apresentou maior poder se comparado com o *TDe*. Além disso, não sofreu influência do incremento do alcance, o que por outro lado, contribuiu para o decréscimo do poder do teste *TDe*.

Os dois testes obtiveram um crescimento de poder menor para configurações com moderada e fraca dependência espacial.

REFERÊNCIAS

BUDRIKAITE. L.; DUCINSKAS.K. Modelling of geometric anisotropic spatial variation. In: INTERNATIONAL CONFERENCE MATHEMATICAL MODELLING AND ANALYSIS, 10., 2005, Trakai. **Proceedings...** Trakai: MMA, 2005. p. 361-366.

CAMBARDELLA, C. A. et al. Field-scale variability of soil proprieties in central Iowa soils. **Soil Science Society America Journal**, Medison, v. 58, n. 5, p. 1240-1248, Sept. 1994.

CHENG, Q. A new model for quantifying anisotropic scale invariance and for decomposition of mixing patterns. **Mathematical Geology,** New York, v. 36, n. 3, p. 345-360, Apr. 2004.

CHILÈS, J.; DELFINER, P. **Geostatistics:** modeling spatial uncertainty. New York: Wiley Interscience, 1999.

CHORTI, A.; HRISTOPULOS. D. T. Nonparametric identification of anisotropic (elliptic) correlations in spatially distributed data sets. **IEEE Transactions on Signal Processing**, New York, v. 56, n. 10, p. 4738-4751, Oct. 2008.

CLARK, I. Practical geostatistics. London: Applied Science, 1979.

CRESSIE, N. Statistics for spatial data. 2. ed. New York: John Wiley, 1993.

CRESSIE, N.; HAWKINS, D. M. Robust estimation of the variogram: I. **Mathematical Geology**, New York, v. 12, n. 2, p. 115-125, Apr. 1980.

DAVIES, R. B.; HARTE, D. S. Tests for Hurst effect. **Biometrika**, London, v. 74, n. 1, p. 95-101, 1987.

DIETRICH, C. R.; NEWSAM, G. N. A fast and exact method for multidimensional Gaussian stochastic simulations. **Water Resources Research**, Washington, v. 29, n. 8, p. 2861-2869, Aug. 1993.

DIGGLE, P. J.; RIBEIRO JÚNIOR, P. J. Model-based geostatistics. New York: Springer, 2007.

GOOVAERTS, P. Geostatistics for natural resources evaluation. New York: Oxford University, 1997.

GUAN, Y. et al. A nonparametric test for spatial isotropy using subsampling **Journal of the American Statistical Association**, New York, v. 99, n. 467, p. 810-821, Sept. 2004.

ISAAKS, E. H.; SRIVASTAVA, R. M. An introduction to applied geostatistics. New York: Oxford University, 1989.

JOURNEL, A. G.; HUIJBREGTS, C. J. **Mining geostatistics.** San Diego: Academic Press, 1978.

KRIGE, D. G. A. Statistical approach to some basic mine valuation problems on the witwatersrand. Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa, Johannesburg, v. 6, n. 52, p. 119-139, June 1951.

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. MAITY. A.; SHERMAN. M. Testing for spatial isotropy under general designs. **Journal of Statistical Planning and Inference,** Amsterdam, v. 142, n. 5, p. 1081–1091, May 2012.

MATHERON, G. Principles of geostatistics. **Economy Ecology**, Lancaster, v. 58, n. 8, p. 1246-1266, 1963.

MCBRATNEY, A. B.; WEBSTER, R. Choosing functions for semivariograms of soil properties and fitting them to sampling estimates. **The Journal of Soil Science**, Oxford, v. 37, n. 6, p. 617-639, July 1986.

PEREIRA FILHO, N. A.; FERREIRA, D. F. Teste Monte Carlo de normalidade univariado baseado em distâncias. **Revista Brasileira de Biometria,** São Paulo, v. 30, n. 3, p. 401-416, 2012.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. R: A language and environment for statistical computing: versão 2.15.1. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2012. Disponível em: http://www.r-project.org>. Acesso em: 22 jun. 2012.

RIBEIRO JÚNIOR, P. J.; DIGGLE, P. J. GeoR: a package for geostatistical analysis. **R-News**, Oxford, v. 1, n. 2, p. 15-18, 2001.

ROSSONI D. F.; LIMA R. R. A importância da correção da anisotropia em análises geoestatísticas. **Revista da Estatística da Universidade Federal de Ouro Preto**, Ouro Preto, v. 2, p. 217-221, 2012.

SANTOS; G. R dos. **Hierarquização geométrica dos preditores geoestatísticos**. 2010. 200 p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuaria) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2010.

SCHLATHER, M. et al. **RandomFields:** simulation and analysis of random fields. New York: RM Wave, 2012. Disponível em: http://CRAN.R-project.org/package=RandomFields>. Acesso em: 22 jun. 2012.

SEIDEL, E. J. Novas contribuições para avaliação e descrição da estrutura de dependência espacial em Geoestatística. 2012. 145 p. Tese (Doutorado em Estatística e Experimentação Agropecuaria) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2012.

TEIXEIRA, M. B. R. **Comparação entre estimadores de semivariância**. 2013. 122 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária) – Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2013.

WOOD, A. T. A.; CHAN, G. An algorithm for simulating stationary gaussian random fields. Journal of the Royal Statistical Society. Series C. Applied Statistics, London, v. 46, n. 1, p. 171-181, 1997.

WOOD, A. T. A.; CHAN, G. Simulation of stationary gaussian processes in $[0,1]^d$. Journal of Computational and Graphical Statistics, Alexandria, v. 3, n. 4, p. 409-432, Dec. 1994.

ZIMMERMAN, D. L. Another look at anisotropy in Geostatistics. **Mathematical Geology,** New York, v. 25, n. 4, p. 453-454, May 1993.