

EDMARY SILVEIRA BARRETO ARAÚJO

ANÁLISE ESPACIAL ESPECTRAL EM PROCESSOS PONTUAIS

LAVRAS-MG 2013

EDMARY SILVEIRA BARRETO ARAÚJO

ANÁLISE ESPACIAL ESPECTRAL EM PROCESSOS PONTUAIS

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa 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. João Domingos Scalon Coorientador Dr. Lurimar Smera Batista

LAVRAS-MG 2013

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

Araújo, Edmary Silveira Barreto.

Análise espacial espectral em processos pontuais / Edmary Silveira Barreto Araújo. – Lavras : UFLA, 2013. 77 p. : il.

Tese (doutorado) – Universidade Federal de Lavras, 2013. Orientador: João Domingos Scalon. Bibliografia.

1. Espectro polar. 2. Aleatoriedade espacial. 3. Processos pontuais. 4. Método de Monte Carlo. I. Universidade Federal de Lavras. II. Título.

CDD - 519.23

EDMARY SILVEIRA BARRETO ARAÚJO

ANÁLISE ESPACIAL ESPECTRAL EM PROCESSOS PONTUAIS

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa 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 18 de Julho de 2013.

Dra. Giovana Oliveira	UFBA
Dr. Daniel Furtado Ferreia	UFLA
Dra. Denise Nunes Viola	UFBA
Dr. Julio S. S. Bueno Filho	UFLA
Dr. Lurimar Smera Batista	IFBA

Dr. João Domingos Scalon Orientador

LAVRAS-MG 2013

Ao meu amado Deus eterno, Jesus Cristo, Senhor da minha vida. Ao meu esposo, Fábio e meu amado filho Davi. Aos meus pais, Romil e Etelvina. Aos meus irmãos, Rita, Robson, Romilson e Roque. Aos meus sobrinhos. Dedico.

AGRADECIMENTOS

Ao Deus eterno, Jesus Cristo, Senhor da minha vida. A Ele todo louvor!

Ao meu lindo e amado filho, Davi, alegria que contagia a minha vida, motivo para prosseguir.

Ao meu esposo, que contribuiu para minha perseverança e superar desafios.

Ao Instituto Federal da Bahia (IFBA) pela oportunidade e aos professores da coordenação de matemática pelo apoio.

À Universidade Federal de Lavras (UFLA), em especial aos professores do Departamento de Ciências exatas (DEX), um verdadeiro centro de excelência.

À Josi, funcionária do DEX, pelo carinho e atenção em servir.

À Coordenação e Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CA-PES), pelo apoio financeiro.

Ao meu orientador, Dr. João Domingos Scalon, excelente orientador, uma pessoa amiga possuidora de imenso saber.

Ao meu coorientador, Dr. Lurimar Smera Batista, pela competência e presteza, valiosos ensinamentos e convivência amiga.

Aos membros da banca examinadora, pelas críticas e sugestões que tanto contribuíram para o engrandecimento deste trabalho.

Aos colegas de doutorado (DINTER), em especial a minha gratidão às amigas Azly, Cleide e Norma pelo companheirismo.

Ao meu pai e minha mãe pelo exemplo de vida, força, incentivo e dedicação.

Aos meus irmãos, pela amizade, carinho e incentivo.

Aos meus irmãos em Cristo que oraram por mim.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram de alguma forma para a realização deste trabalho, sou muito grata.

Edmary Silveira Barreto Araújo

"Bendize, oh minha alma, ao SENHOR, e tudo que há em mim bendiga o teu Santo Nome." Salmos 103:1

RESUMO

A análise espacial de processos pontuais tem lugar de destaque em diversas áreas do conhecimento. A maior parte dos métodos disponíveis, para esse tipo de análise, tem como base as técnicas focadas no "domínio do espaço" que envolve a análise da distância entre pontos. A análise espectral, apesar de ser aplicada em várias áreas, ainda, não é muito difundida na análise de processos pontuais espaciais. A análise espectral tem como base a função de autocovariância e sua transformada de Fourier (o espectro). Objetivou-se nesta tese explorar a análise espectral para analisar processos pontuais no plano e volume. Tendo como base a teoria para a análise espectral bidimensional disponível na literatura, foram desenvolvidos programas utilizando o software R. Os métodos espectrais foram aplicados em configurações pontuais clássicas e em amostras de um material compósito. Nesta tese também, é desenvolvida a teoria para a análise espectral tridimensional. Os métodos espectrais tridimensionais são aplicados em configurações tridimensionais simuladas utilizando programas construídos no software R. O espectro polar e métodos de Monte Carlo são usados para testar a hipótese de completa aleatoriedade espacial bidimensional e tridimensional. Os resultados mostram que a análise espectral é uma boa ferramenta para a investigação da completa aleatoriedade espacial, pois não assume qualquer suposição estrutural (ex. isotropia) sobre o processo estocástico que gerou a configuração pontual.

Palavras-chave: Espectro polar. Aleatoriedade espacial. Processos pontuais. Método de Monte Carlo.

ABSTRACT

The spatial analysis of point processes has a prominent placing in many knowledge areas. Most of the methods available for this type of analysis are based on techniques focused on "space domain" which involve the analysis between points. The spectral analysis, though applied in various areas, is not yet widespread in the analysis of space point processes. The spectral analysis is based on the autocovariance function and its Fourier transformation (the spectrum). The objective of this dissertation is to explore the spectral analysis in order to analyze the point processes in plane and volume. Basing on the two-dimensional spectral analysis theory available in literature, we developed programs using the R software. The spectral methods were applied in classic point configurations and in composite material samples. This dissertation also developed a theory for three-dimensional spectral analysis. The three-dimensional spectral methods are applied in three-dimensional configurations simulated using programs constructed in the R software. The polar spectrum and Monte Carlo methods are used to test the complete two and threedimensional spatial randomness hypothesis. The results showed that the spectral analysis is a good tool to investigate the complete spatial randomness, since it does not assume any structural disposition (ex. isotropy) over the stochastic process which generated the point configuration.

Keywords: Polar spectrum. Spatial randomness. Point processes. Monte Carlo Method.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	Padrões de dados pontuais. (a) Aleatório; (b) Agrupado; (c) Regular	17
Figura 2	Padrão formado por $N_x = 65$ mudas de pinheiro negro japonês no quadrado unitário	31
Figura 3	Padrão formado pelos centros de $N_x = 42$ células biológicas no guadrado unitário	37
Figura 4	Padrão formado por $N_x = 62$ mudas de árvores no quadrado unitário	22
Figura 5	Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC.	33
Figura 6	 (a) 780 coordenadas dos centros das partículas. (b) 980 coordenadas dos centros das partículas	34
	(a) 997 coordenadas dos centros das particulas. (b) 1025 coordenadas dos centros das partículas	35
Figura 7	Distribuição espacial das particulas do material composito Al/SiC da amostra S_1 . (a) 512×512 pixels. (b) quadrado unitário	36
Figura 8	Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC da amostra S_2 . (a) 512×512 pixels. (b) quadrado unitário	36
Figura 9	Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC na amostra S_2 , (a) 512 × 512 pixels, (b) quadrado unitário	37
Figura 10	Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC $C_{\rm est} = C_{\rm est}$	27
Figura 11	Periodograma do padrão da distribuição espacial das mudas de	51
Figura 12	pinheiro negro japonês	40
Figura 13	pinheiro negro japonês. (a) R -espectro. (b) θ -espectro Periodograma do padrão da distribuição espacial de células bio-	41
Eiguro 14	lógicas	42
	lógicas. (a) R -espectro. (b) θ -espectro	43
Figura 15	O Periodograma do padrão da distribuição espacial de mudas de árvores	44
Figura 16	O espectro polar do padrão da distribuição espacial de Mudas de árvores. (a) <i>R</i> -espectro. (b) θ -espectro	45
Figura 17	Periodograma das partículas do material compósito Al/SiC da	.0
	amosua \mathcal{S}_1	40

Figura 18	Periodograma das partículas do material compósito Al/SiC da amostra S_2	46
Figura 19	Periodograma das partículas do material compósito Al/SiC da amostra S_3	47
Figura 20	Periodograma das partículas do material compósito Al/SiC da amostra S_4	47
Figura 21	O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_1 . (a) <i>R</i> -espectro. (b) θ -espectro	48
Figura 22	O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_2 . (a) R -espectro. (b) θ -espectro	49
Figura 23	O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_3 , (a) <i>R</i> -espectro, (b) θ -espectro	50
Figura 24	O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_{4} , (a) <i>R</i> -espectro, (b) θ -espectro	51
Figura 25	Um ponto (p, q, t) no espaço tridimensional representado pelas coordenadas esféricas	58
Figura 26	Realização de uma configuração com 21 eventos distribuidos ale-	67
Figura 27	Realização de uma configuração com 2310 eventos distribuidos	62
Figura 28	Realização de uma configuração com 817 eventos distribuídos, regularmente, com distância de inibição $\delta = 0,05$ no espaço	03
Figura 29	tridimensional	63
Figura 30	dimensional	64
Figura 31	O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de da-	66
Figura 32	dos aleatórios 3D. (a) <i>R</i> -espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional	67
Figura 33	de agrupamento	68
Figura 34	dos agrupados 3D. (a) R -espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional	69
Figura 35	regular	70
0	dos regulares 3D. (a) R-espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro	71

Figura 36	Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional	
	regular	72
Figura 37	O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de da-	
	dos regulares 3D ($\delta = 0, 1$). (a) R-espectro. (b) θ -espectro. (c)	
	ϕ -espectro	73

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	CONFIGURAÇÕES ESPACIAIS	16
2.1	Configurações espaciais no plano	16
2.2	Configurações pontuais em volumes	21
3	ANÁLISE ESPECTRAL BIDIMENSIONAL	24
3.1	Referencial teórico	24
3.1.1	Análise espectral aplicada a uma rede bidimensional	28
3.2	Materiais e métodos	30
3.2.1	Modelos clássicos	30
3.2.2	Material Compósito Al/SiC	33
3.2.3	Intervalo de confiança baseado em Monte Carlo (MC)	38
3.2.4	Software	39
3.3	Resultados e discussão	39
3.3.1	Configurações clássicas	39
3.3.2	Materiais compósitos	45
4	ANÁLISE ESPECTRAL TRIDIMENSIONAL	53
4.1	Referencial teórico	53
4.1.1	Análise espectral aplicada a uma grade tridimensional	60
4.2	Materiais e métodos	61
4.2.1	Configurações tridimensionais	61
4.2.2	Métodos	64
4.2.3	Software	65
4.2.4	Resultados e discussão	65
5	CONCLUSÕES	74
	REFERÊNCIAS	76

1 INTRODUÇÃO

A análise espacial é um conjunto de procedimentos que tem por finalidade a escolha de um modelo inferencial que considere o relacionamento espacial presente no fenômeno. Os problemas de análise espacial considera três tipos de dados: as superfícies contínuas (dados geoestatísticos) que são dados provenientes de fenômenos distribuídos de forma contínua no espaço. Dados de área que são associados à unidade de análise, usualmente delimitadas por polígonos fechados. Dados pontuais são dados provenientes de fenômenos que se localizam em pontos no espaço.

No estudo de processos pontuais espaciais, cada evento pode ser idealizado como um ponto e a distribuição dos eventos em uma região é considerada como uma configuração espacial de pontos. O pesquisador poderá utilizar duas abordagens para fazer a análise da configuração espacial dos eventos, dependendo do tipo de informação disponível na área observada.

Primeiro, caso a configuração pontual represente apenas uma amostra dos eventos da região (amostragem esparsa), o primeiro interesse do pesquisador e da análise estatística, usualmente, concentra-se em obter estimativas do número médio de eventos por unidade de área (intensidade), ou seja, a estimativa de eventos dentro de uma particular região. Métodos de contagem de eventos em quadrantes e de mensuração de distâncias entre eventos têm sido utilizados com frequência, não somente para estimar a intensidade de eventos, mas também para testar a hipótese de completa aleatoriedade espacial dentro da área de estudo. Esses métodos são apresentados, analisados e discutidos por Diggle (2003).

Segundo, caso a configuração pontual apresente todos os eventos do plano (mapeamento completo), o principal interesse é testar a hipótese de completa aleatoriedade espacial (CAE) para a configuração dos eventos. Os mais populares testes da hipótese de CAE são aqueles com base nas funções $F, G \in K$ propostas por Ripley (1977). Lieshou e Baddeley (1996) propuseram uma nova função, denominada J aparentemente o poder do teste é equivalente às funções F, G eK. Todas essas funções são no 'domínio espacial', pois envolvem a análise das distâncias entre pontos. Independentemente da função utilizada, os testes estatísticos permitem avaliar se uma configuração pontual pode ser considerada como regular, aleatória ou agrupada na região de estudo. Uma vez rejeitada a hipótese nula de CAE, pode-se ajustar um modelo paramétrico, ou não paramétrico, para a configuração espacial pontual.

Apesar da teoria para análise de configurações pontuais no plano, com mapeamento completo, estar bem desenvolvida e apresentar lugar de destaque em diversas áreas do conhecimento tais como ecologia, silvicultura, geografia, medicina e meteorologia, entre outras, essa teoria ainda é incipiente quando se trata da análise em três dimensões.

A análise espectral tem sido utilizada em várias áreas da estaística, principalmente, na análise de séries temporais. Entretanto, o seu uso, ainda, não é muito difundido na análise de processos pontuais espaciais. A análise espectral tem como base a função de autocovariância e sua transformada de Fourier e, consequentemente, a análise é realizada sobre a estrutura do periodograma gerado pela configuração observada. A análise espectral é uma ferramenta poderosa para a investigação de padrões pontuais espaciais, uma vez que não assume as características estruturais do processo estocástico espacial que gerou a configuração pontual observada, como é o caso da isotropia.

A teoria da análise espectral bidimensional em processos pontuais encontrase, relativamente, bem desenvolvida, porém, dispersa na literatura. Entretanto, a aplicação desta teoria em situações práticas, ainda, é muito limitada, tendo em vista a complexidade teórica dos métodos e a inexistência de programas computacionais desenvolvidos, especificamente, para esse tipo de análise. Por outro lado, a teoria da análise espectral tridimensional, em processos pontuais, ainda não está, salvo melhor juízo, desenvolvida.

Tendo como base o exposto anteriormente, pode-se afirmar que o desenvolvimento de resultados teóricos espectrais para processos pontuais espaciais e os respectivos programas computacionais são, claramente, problemas desafiadores para a Estatística. Neste sentido, os objetivos principais da presente tese são:

- a) Sistematizar a teoria da análise espectral bidimensional e desenvolver programas computacionais para que essa teoria seja mais utilizada na prática.
- b) Desenvolver a teoria e programas computacionais para a análise espectral espacial em três dimensões; e

c) Testar os métodos da análise espectral e seus respectivos programas, desenvolvido no software R, em configurações pontuais

Para atingir os objetivos propostos, é feita uma breve apresentação sobre a teoria das configurações espaciais no plano e no volume.

Apresenta-se a teoria da análise espectral bidimensional e os materiais e métodos utilizados na análise de configurações reais e simuladas. Apresentam-se, também, os resultados encontrados e as discussões dos mesmos. Terminando com uma breve conclusão.

É desenvolvida a teoria e os métodos para a análise espectral em espaços tridimensionais. Os resultados obtidos a partir da aplicação dos métodos em configurações simuladas são discutidos. Finalmente, é feita uma pequena conclusão.

A tese é encerrada apresentando as principais conclusões do presente trabalho e realizadas projeções para futuros trabalhos.

2 CONFIGURAÇÕES ESPACIAIS

2.1 Configurações espaciais no plano

Um processo estocástico, com domínio no espaço, é chamado processo espacial. Definido por

$$\{Z(s): s \in D \subset \mathbb{R}^2\},\tag{1}$$

em que D é um conjunto de índices e Z(s) é o atributo de interesse na localização s (CRESSIE,1993).

Um processo espacial pontual Z(s); $s \in D$, em que D é um conjunto aleatório de índices, é um processo estocástico que governa a distribuição (localização) e o número de realizações de um fenômeno nesta região do espaço. O componente estocástico primário deste processo é a própria localização espacial das observações. O conjunto das localizações espaciais observadas $z = \{Z_1, ..., Z_n\}$ é chamado de configuração pontual e cada uma delas é, usualmente, chamada de evento, para distingui-las de pontos arbitrários no plano, denotados por s. Cada evento é denotado por Z_i , em que cada Z_i é o vetor de coordenadas (X_i, Y_i) do evento i em uma particular região R. São exemplos de configurações pontuais: localização de partículas em um material, ocorrências de doenças e localização de espécies vegetais.

A observação de interesse em processos pontuais é a própria localização espacial dos eventos na área de estudo. Estudar a distribuição espacial destes pontos, testando a hipótese de completa aleatoriedade espacial do padrão observado, é um dos principais objetivos da análise.

A Figura 1 apresenta os três padrões de configuração espacial de eventos mais comuns observados na prática, ou seja, completa aleatoriedade, agrupamento e regularidade.



Figura 1 Padrões de dados pontuais. (a) Aleatório; (b) Agrupado; (c) Regular

O processo de Poisson homogêneo é o modelo básico para a configuração espacial de eventos. Na prática, pode-se dizer que os eventos são distribuídos aleatoriamente na região R com intensidade λ , ou equivalentemente, que a localização dos eventos em R é uma amostra aleatória de uma distribuição uniforme dentro de R. Assim, o modelo de Poisson homogêneo é, frequentemente, denominado modelo da completa aleatoriedade espacial (CAE) dos eventos. Observa-se que é necessário apenas um parâmetro (intensidade λ) para definir o processo de Poisson homogêneo.

Uma particular realização de uma configuração CAE é gerada da seguinte maneira. Simulam-se dois conjuntos (X_i, Y_i) de pseudo número aleatórios, de acordo com uma distribuição uniforme (a, b), em que cada localização do par ordenado, Z_i , representa um evento aleatório dentro de R com área $a \times b$.

O processo de Poisson homogêneo é um importante modelo na análise estatística espacial, pois é o ponto natural de partida para trabalhos práticos e teóricos já que representa a ausência de causa na determinação da configuração espacial. Entretanto, existem outros modelos alternativos que podem ser úteis para explicar configurações espaciais. Mais detalhes teóricos sobre o processo de Poisson homogêneo podem ser encontrados em Diggle (2003) e Cressie (1993).

O processo de Poisson agrupado, ou modelo de agrupamentos, assume um mecanismo em que os eventos tendem a ficar próximos um dos outros, formando assim, sub-regiões com uma grande densidade de eventos dentro da região R. Mais

formalmente, temos o processo matriz (ou paterno) P, usualmente um processo de Poisson homogêneo com intensidade λ por unidade de área, e o processo filial D. Uma amostra do processo paterno produz, independentemente, um número aleatório de processos filiais com uma variabilidade radial igual a σ . Cada processo filial é, independentemente e espacialmente distribuído para o correspondente processo paterno. Observa-se que são necessários três parâmetros para definir o processo de Poisson agrupado: intensidade λ , o número de elementos do processo paterno (P) e a variabilidade radial da distribuição dos processos filiais ao redor dos elementos paternos (σ). O processo de Poisson agrupado é particularmente útil quando existe uma causa para a configuração espacial dos eventos na região.

Uma particular realização do processo de Poisson agrupado pode ser gerada da seguinte maneira: (i) um número m de eventos paternos $P_1, ..., P_m$ em que $P_i = (X_i, Y_i)$ é gerado de acordo com a distribuição uniforme (a, b) conforme visto anteriormente; (ii) geram-se n-m eventos filiais Y_l (l = m+1, ..., n) seguindo uma distribuição normal com média zero e desvio padrão σ ; (iii) Podem-se gerar n - m eventos filiais D_l (l = m + 1, ..., n) da seguinte maneira. Cada n - meventos Y_l é designado aleatoriamente para um dos eventos paternos com localização dada por $D_l = P_i + Y_l$. Este procedimento pode gerar eventos fora da área de interesse. Para evitar este problema pode-se utilizar o método dos toros proposto por Diggle (1979). Finalmente, cada configuração agrupada pode ser resultado da superposição dos eventos paternos e filiais ou apenas resultados da geração dos eventos filiais. Maiores detalhes teóricos sobre o processo de Poisson agrupado podem ser encontrados em Diggle (2003) e Cressie (1993).

Outro processo alternativo ao Poisson homogêneo é representado pelo processo regular. Uma configuração regular espacial aparece naturalmente pela imposição de uma distância mínima permitida (δ) entre quaisquer dois eventos. Esta distância mínima pode ser consequência, por exemplo, de algum mecanismo de competição observado em algumas espécies de vegetais que levam os indivíduos a ficarem separados uns dos outros.

Uma particular realização do processo regular pode ser gerada da seguinte maneira: (i) um evento aleatório Z_i é gerado dentro de R de acordo com a distribuição uniforme (a, b), conforme visto anteriormente; (ii) um segundo evento aleatório Z_2 , também, é gerado dentro de R. (iii) mede-se a distância (d) entre o evento Z_i e o evento Z_2 . (iv) caso d for maior que a distância mínima permitida (δ) , o evento é mantido na configuração, caso contrário é eliminado. (v) eventos são gerados aleatoriamente e sequencialmente dentro de R e são medidas as distâncias entre este evento e todos os outros eventos em R. (vi) caso este evento esteja localizado dentro da distância mínima permitida (δ) de qualquer outro evento, ele é mantido na configuração, caso contrário é eliminado. (vii) o processo continua até que a configuração tenha a intensidade desejada λ . Esta realização de uma configuração regular é denominada por Diggle (2003) de Simple Sequential Inhibition (SSI). Maiores detalhes teóricos sobre o processo regular podem ser encontrados em Diggle (2003) e Cressie (1993).

O processo pontual é modelado, considerando sub-regiões S em R por meio de sua esperança E[N(S)] e a covariância $C[N(S_i), N(S_j)]$, em que N(S)denota o número de eventos em S. Sendo o objetivo da análise estimar as localizações prováveis de ocorrência de determinados eventos, essas estatísticas devem ser inferidas, considerando o valor limite da quantidade de eventos por área. Este valor limite corresponde à esperança de N(S) para uma pequena região ds em torno do ponto s, quando essa região tende a zero.

Podem-se distinguir diferentes padrões espaciais de pontos comparando suas propriedades de primeira e segunda ordem. Uma propriedade de primeira ordem refere-se ao número médio de eventos por unidade de área. Diggle (2003) descreve a primeira ordem de um processo espacial de pontos pela função intensidade de primeira ordem dada por

$$\lambda(s) = \lim_{|ds| \to 0} \left[\frac{E[N(ds)]}{|ds|} \right],\tag{2}$$

em que E[N(ds)] denota o valor esperado do número de eventos em ds, ds é uma região infinitesimal em torno do ponto $s = (s_i, s_j)$ e |ds| é a área desta região.

Diggle (2003) descreve a segunda ordem de um processo espacial de pontos pela função de intensidade de segunda ordem como sendo,

$$\lambda(s,r) = \lim_{|ds|,|dr|\to 0} \left[\frac{E[N(ds)N(dr)]}{|ds||dr|} \right],\tag{3}$$

em que E[N(ds)N(dr)] denota o valor esperado do número de eventos em S, dsé uma região infinitesimal em torno do ponto $s = (s_i, s_j)$ e |ds| é a área desta região; dr é uma região infinitesimal em torno do ponto $r = (r_i, r_j)$ e |dr| é a área desta região.

A função Densidade de Covariância é útil para descrição teórica de propriedades de segunda ordem e é definida por:

$$\gamma(s,r) = \lim_{|ds|, |dr| \to 0} \left[\frac{E[\{N(ds) - \lambda(ds)\}\{N(dr) - \lambda(dr)\}]}{|ds||dr|} \right],$$
(4)

para $s, r \in \mathbb{R}^2$ Diggle (2003).

A Equação 4 está relacionada com a função intensidade de segunda ordem via a expressão

$$\gamma(s,r) = \lambda(s,r) - \lambda(s)\lambda(r).$$
(5)

A definição de função densidade de covariância na Equação 4 aplica-se quando $s \neq r$. Esta pode ser extendida para incluir o caso s = r assumindo que o processo é ordenado, ou seja, P[N(ds) > 1] = 0, tal que $E[N(ds)^2] =$ $E[N(ds)] = \lambda(s)|ds|$ (MUGGLESTONE; RENSHAW, 1996a). Esse termo é incorporado no que Bartlett (1964) chama de Função Densidade de Covariância Completa e que é definida como

$$k(s,r) = \lambda(s)\delta(s_i - r_i)\delta(s_j - r_j) + \gamma(s,r),$$
(6)

em que δ é a Delta de Dirac.

Métodos para testar a hipótese de completa aleatoriedade espacial dos eventos no plano e para ajustar modelos estão bem desenvolvidos para o domínio do espaço, mas totalmente em aberto no domínio da frequência. Assim, nesta tese, concentra-se na abordagem espectral da análise de configurações pontuais no espaço bidimensional.

2.2 Configurações pontuais em volumes

A metodologia para configurações pontuais em volume apresentada nesta seção ainda não foi explorada completamente, sendo ligeiramente abordada por Baddeley, Moyeed e Howard (1993). A metodologia pode ser desenvolvida como uma extensão da teoria em processos pontuais vista na Seção 2.1. Essa nova metodologia foi desenvolvida para ser aplicada em configurações pontuais tridimensionais.

Assim como no plano, podem-se distinguir diferentes processos espaciais de pontos comparando suas propriedades de primeira e segunda ordem.

A função intensidade de primeira ordem tridimensional, expandindo o caso bidimensional (Equação 2), é definida como:

$$\lambda(s) = \lim_{vol(B)\to 0} \left[\frac{E[N(B)]}{vol(B)} \right],\tag{7}$$

em que E[] denota o valor esperado, $B \subset R^3$ é uma região infinitesimal em torno do ponto $s = (s_i, s_j, s_k)$ e vol(B) é o volume desta região.

A função intensidade de segunda ordem tridimensional, tendo como definição para o caso bidimensional a Equação 3 para $s \neq r$, fica definida na forma:

$$\lambda(s,r) = \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[N(B)N(C)]}{vol(B)vol(C)} \right].$$
(8)

em que $B, C \subset \mathbb{R}^3$, B é uma região infinitesimal em torno do ponto $s = (s_i, s_j, s_k)$ com vol(B) o volume desta região. C é uma região infinitesimal em torno do ponto $r = (r_i, r_j, r_k)$ com vol(C) o volume desta região.

A função densidade de covariância para o caso tridimensional está definida na Equação 9. Também expandindo o caso bidimensional, tem-se

$$\gamma(s,r) = \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[\{N(B) - \lambda(B)\}\{N(C) - \lambda(C)\}]}{vol(B)vol(C)} \right], \quad (9)$$

onde $s \in B \subset R^3$ e $r \in C \subset R^3$.

Desenvolvendo a Equação 9, tem-se

$$\gamma(s,r) = \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[N(B)N(C)-N(B)\lambda(C)-\lambda(B)N(C)+\lambda(B)\lambda(C)]}{vol(B)vol(C)} \right].$$
(10)

Usando a propriedade do limite da soma e a propriedade da esperança matemática da soma de duas variável aleatório, ou seja, E[X+Y] = E[X] + E[Y] na Equação 10, tem-se

$$\gamma(s,r) = \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[N(B)N(C)]}{vol(B)vol(C)} \right] - \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[N(B)\lambda(C)]}{vol(B)vol(C)} \right] - \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[\lambda(B)N(C)]}{vol(B)vol(C)} \right] + \lim_{vol(B)\to 0vol(C)\to 0} \left[\frac{E[\lambda(B)\lambda(C)]}{vol(B)vol(C)} \right].$$
(11)

Observe que na Equação 11 o primeiro limite corresponde à Equação 8, considerando que as regiões são disjuntas. Tem-se que,

$$E[N(B)\lambda(C)] = E[N(B)]E[\lambda(C)],$$
$$E[\lambda(B)N(C)] = E[\lambda(B)]E[N(C)] \quad e \quad E[\lambda(B)\lambda(C)] = E[\lambda(B)]E[\lambda(C)]$$

em razão das regiões serem independentes.

Quando vol(B) tende a 0 e vol(C) tende a 0, tem-se que $\lambda(B)$ tende a $\lambda(s)$ e $\lambda(C)$ tende a $\lambda(r)$, respectivamente.

E, também, considerando o fato que

$$\lambda(s) = \lim_{vol(B) \to 0} \left[\frac{E[N(B)]}{vol(B)} \right],$$

e

$$\lambda(r) = \lim_{vol(C)\to 0} \left[\frac{E[N(C)]}{vol(C)} \right],$$

a Equação 11 fica, então:

$$\gamma(s,r) = \lambda(s,r) - \lambda(s)\lambda(r) - \lambda(s)\lambda(r) + \lambda(s)\lambda(r).$$

Ou ainda,

$$\gamma(s,r) = \lambda(s,r) - \lambda(s)\lambda(r).$$
(12)

A equação 9 está relacionada com equação 7 e equação 8 via equação 12.

A definição de função densidade de covariância na equação 9 aplica-se quando $s \neq r$. Esta pode ser extendida para incluir o caso s = r assumindo que o processo é ordenado, ou seja, P[N(B) > 1] = 0 tal que,

$$E[N(B)^{2}] = E[N(B)] = \lambda(s)vol(B).$$
⁽¹³⁾

Assim, a Função Densidade de Covariância Completa é dada por

$$k(s,r) = \lambda(s)\delta(s_i - r_i)\delta(s_j - r_j)\delta(s_k - r_k) + \gamma(s,r),$$
(14)

em que δ é a Delta de Dirac.

Os objetivos da análise espacial tridimensional são os mesmos da análise bidimensional, ou seja, testa-se a hipótese nula de completa aleatoriedade espacial dos eventos no volume e, uma vez rejeitada essa hipótese, pode-se ajustar um modelo paramétrico, ou não paramétrico, para a configuração espacial pontual. Os métodos, para atingir esses objetivos, estão em aberto tanto no domínio do espaço como no domínio da frequência. Nesta tese, inicia-se a abordagem no domínio da frequência.

3 ANÁLISE ESPECTRAL BIDIMENSIONAL

3.1 Referencial teórico

Esta seção tem início com uma apresentação da teoria da análise espectral espacial. A seguir, são apresentadas diversas configurações pontuais no plano em que a teoria será aplicada e mais detalhes dos métodos para testar a hipótese de completa aleatoriedade espacial. Após apresentar os resultados e discussão das análises espectrais nas configurações pontuais, a seção é encerrado com uma breve conclusão.

Diversos métodos são indicados para a realização de análise espectral, entretanto nenhum deles é tão difundido e tão largamente aplicado quanto a transformada de Fourier.

A transformada de Fourier Bidimensional $\Im \left\{ f(p,q) \right\} = F(w_p,w_q)$ de uma função contínua f(p,q) é definida por:

$$F(w_p, w_q) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(p, q) e^{-i(w_p p + w_q q)} dp dq$$

=
$$\int_{R^2} f(p, q) e^{-i(w_p p + w_q q)} dp dq,$$
 (15)

em que w_p e w_q são as frequências.

O Espectro de potências da transformada de Fourier é definido por:

$$P = \{\Re\{F(w_p, w_q)\}\}^2 + \{Im\{F(w_p, w_q)\}\}^2 = |F(w_p, w_q)|^2,$$
(16)

com ângulo de fase

$$\phi = \arctan\left\{\frac{Im\{F(w_p, w_q)\}}{\Re\{F(w_p, w_q)\}}\right\}.$$
(17)

Para realizar a análise espectral, Bartlett (1964) propõe a função densidade da completa covariância como uma alternativa útil para descrever um processo espacial de pontos.

A função de densidade espectral de um processo pontual (ou ponto espec-

tro) é definida como sendo a transformada de Fourier da função de densidade da completa covariância. No espaço bidimensional, a definição formal é dada por

$$f(w_p, w_q) = \int_{R^2} \int_{R^2} k(s, r) e^{-i(w_p^\top s + w_q^\top r)} ds dr,$$
(18)

em que $w_p \in R^2, \, w_q \in R^2$ e inversa

$$k(s,r) = \int_{R^2} \int_{R^2} f(w_p, w_q) e^{i(w_p^\top s + w_q^\top r)} dw_p dw_q,$$
(19)

em que $s \in R^2$, $r \in R^2$ e \top denota transposta.

Substituindo a Equação 6 na Equação 18 tem-se a Função Densidade Espectral mais geral da seguinte forma:

$$f(w_p, w_q) = \int_{R^2} \int_{R^2} \{\lambda(s)\delta(s_i - r_i)\delta(s_j - r_j) + \gamma(s, r)\} e^{-i(w_p^\top s + w_q^\top r)} ds dr$$
(20)

O caso isotrópico de um processo pontual tem intensidade de primeira ordem constante, ou seja, $\lambda(s) = \lambda$, para $s = (s_i, s_j)$ e a função de covariância só depende da distância e não da direção, isto é, $\gamma(s, r) = \gamma(c)$, em que c = s - r(MUGGLESTONE; RENSHAW, 1996a).

A Equação 20 para o caso isotrópico apresenta-se da seguinte forma,

$$f(w) \equiv f(w_p, w_q) = \lambda + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \gamma(c_i, c_j) e^{\{-i(w_p c_i + w_q c_j)\}} dc_i dc_j, \quad (21)$$

em que $c = (c_i, c_j)$, $(w_p, w_q) \in R^2$, ou ainda,

$$f(w) = \lambda + 2\pi \int_0^\infty t\gamma(t) J_0(tw) dt,$$
(22)

em que $t=\sqrt{c_i^2+c_j^2},\,w=\sqrt{w_p^2+w_q^2}$ e J_0 é a função de Bessel (WAT-SON,1944) definida como

$$J_0(tw) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(n!)^2} \left(\frac{tw}{2}\right)^{2n}.$$

Suponha que um padrão observado consiste de N_x eventos em uma região retangular de lados l_1 e l_2 e { $(x_{1j}, x_{2j}), j = 1, ..., N_x$ } denota a localização dos eventos. Mugglestone e Renshaw (1996a) definem a transformada discreta de Fourier das coordenadas como

$$F(p,q) = \sum_{j=1}^{N_x} e^{-2\pi i \left(\frac{px_{1j}}{l_1} + \frac{qx_{2j}}{l_2}\right)} = A(p,q) + iB(p,q).$$
(23)

O periodograma, também chamado de função espectral amostral, pode ser calculado como o espectro de potências da Transformada discreta de Fourier das coordenadas como

$$\hat{f}(w_p, w_q) = |F(p, q)|^2 = \{A(p, q)\}^2 + \{B(p, q)\}^2,$$
 (24)

em que $(w_p, w_q) = \left(\frac{2\pi p}{l_1}, \frac{2\pi q}{l_2}\right)$ e $p = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ e $q = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ A coordenada A(p, q) do periodograma ou parte real da transformada dis-

creta de Fourier tem distribuição Normal assintótica $(N_x \to \infty)$ com média zero e variância igual a função espectral no ponto (w_p, w_q) dividida por 2 (MUGGLES-TONE; RENSHAW, 1996a). Portanto,

$$A(p,q) \sim N\left(0, \frac{f(w_p, w_q)}{2}\right), \quad (w_p, w_q) \neq (0,0).$$
 (25)

A parte imaginária da transformada de Fourier Discreta B(p,q) tem, também, distribuição Normal assintótica com média zero e variância igual à função espectral no ponto (w_p, w_q) dividida por 2. Assim,

$$B(p,q) \sim N\left(0, \frac{f(w_p, w_q)}{2}\right), \quad (w_p, w_q) \neq (0,0).$$
 (26)

Além disso, A(p,q) e B(p,q) são assintoticamente independentes.

Se $(w_p, w_q) = 0$ então, A(0, 0) tem distribuição Normal assintótica com média λ e variância a função espectral em $(w_p, w_q) = (0, 0)$ dividida por 2 (MUGGLES-TONE; RENSHAW, 1996a). Logo,

$$A(0,0) \sim N\left(\lambda, \frac{f(0,0)}{2}\right) e B(0,0) = 0.$$

Os resultados 25, 26 e sabendo que A(p,q) e B(p,q) são assintoticamente independentes em conjunto implicam que

$$\frac{2\hat{f}(w_p, w_q)}{f(w_p, w_q)} \sim \chi_2^2, \quad (w_p, w_q) \neq (0, 0).$$
(27)

Em que χ_2^2 é a distribuição qui-quadrado com dois graus de liberdade.

Analogamente, os resultados 38 e B(0,0) = 0 implicam que

$$\frac{2\hat{f}(0,0) - \lambda}{f(0,0)} \sim \chi_1^2, \quad (w_p, w_q) = (0,0).$$
(28)

Em que χ_1^2 é a distribuição qui-quadrado com um grau de liberdade.

Uma ferramenta que a análise espectral apresenta é avaliar o padrão em meio à escala e direção. O periodograma em coordenadas polares define dois resumos uni-dimensional. Cada $\hat{f}(w_p, w_q)$ pode ser representado na forma polar usando a notação $\hat{g}(w_r, w_\theta)$, em que $r = \sqrt{p^2 + q^2}$ e $\theta = \tan^{-1}\left(\frac{p}{q}\right)$ (MUG-GLESTONE; RENSHAW, 1996a).

Os valores médios das ordenadas do periodograma para valores similares de r, investiga escalas de padrão sob a hipótese de isotropia. O R-espectro, $\hat{f}_R(r)$, é definido como

$$\hat{f}_R(r) = \frac{1}{n_r} \sum_{r'} \sum_{\theta} \hat{g}(w_{r'}, w_{\theta}), \quad r = 1, 2, ...,$$
(29)

em que a soma total é dividida por n_r ordenadas do periodograma e $r-1 < r' \leq r$.

Os valores médios das ordenadas do periodograma para valores similares de θ , investiga características direcionais de padrão. O θ -espectro, $\hat{f}_{\theta}(\theta)$, \hat{e} definido como

$$\hat{f}_{\theta}(\theta) = \frac{1}{n_{\theta}} \sum_{r} \sum_{\theta'} \hat{g}(w_r, w_{\theta'}), \quad \theta = 0^0, 10^0, 20^0, ..., 170^0,$$
(30)

em que a soma total é dividida por n_{θ} coordenadas do periodograma para os quais $\theta - 5^0 < \theta' \le \theta + 5^0$.

Usando a aditividade de variáveis aleatórias com distribuição χ^2 , tem-se

$$\sum_{r'} \sum_{\theta} \frac{\hat{g}(w_{r'}, w_{\theta})}{g(w_{r'}, w_{\theta})} \sim \frac{\chi_{2n_r}^2}{2n_r},\tag{31}$$

em que $r = 1, 2, \dots$

$$\sum_{r} \sum_{\theta'} \frac{\hat{g}(w_r, w_{\theta'})}{g(w_r, w_{\theta'})} \sim \frac{\chi_{2n_{\theta}}^2}{2n_{\theta}},\tag{32}$$

em que $\theta = 0^0, 10^0, 20^0, ..., 170^0$.

A teoria apresentada anteriormente pode ser expandida e utilizada de diversas maneiras para detectar a presença de configurações espaciais não aleatórias tais como configurações regulares e com agrupamentos. Por exemplo, o modelo para a completa aleatoriedade espacial é o processo homogêneo bidimensional de Poisson, no qual os pontos (eventos) são distribuídos uniformemente e independentemente uns dos outros no plano.

Caso os pontos sejam distribuídos de modo independente, a função intensidade de segunda ordem é dada por $\lambda(r, s) \equiv \lambda(t) = \lambda_P^2$. Pode-se mostrar que se $\gamma(r, s) \equiv \gamma(t) = 0$ e $f(\mathbf{w}) \equiv f(w) = \lambda_P$, então o espectro do processo homogêneo bidimensional de Poisson contém todas as frequências para o mesmo grau. Para detectar rejeição de H_0 , Hipótese Nula: Padrão espacial aleatório basta verificar a forma do periodograma. Se o mesmo é plano, pode-se concluir que a configuração é aleatória, caso contrário pode ser agrupada ou regular (MUGGLES-TONE; RENSHAW, 1996a). Testes de hipóteses tendo como base a distribuição de qui-quadrado ou métodos de Monte Carlo, também, podem ser desenvolvidos.

3.1.1 Análise espectral aplicada a uma rede bidimensional

Renshaw e Ford (1983) mostram que a análise espectral também pode ser aplicada a uma rede bidimensional de dados. As posições aproximadas de eventos de um padrão espacial pontual podem ser representadas pela interseção de uma malha fina sobreposta na área de estudo. Neste trabalho constroi-se uma malha (grade) com o número de pontos por eixo igual a $m \times n$.

A autocovariância amostral com retardo (j, k) é definida como

$$C_{jk} = \frac{1}{mn} \sum_{s=1}^{m-j} \sum_{\Omega_t} X_{st} X_{s+j,t+k},$$
(33)

em que $\Omega_t = \{1, ..., n - k; k \ge 0\}, \quad \Omega_t = \{-k + 1, ..., n; k < 0\}$ e X_{st} ($s = 1, ..., m; \quad t = 1, ..., n$) é a matriz bidimensional de observações corrigida para a média (RENSHAW; FORD, 1984).

A matriz de autocorrelação é dada por $\left\{\frac{C_{jk}}{s^2}\right\}$, em que s^2 é a variância da amostra $\{X_{st}\}$.

A matriz completa de autocorrelação espacial tem um valor central de $\frac{C_{00}}{s^2} = 1$, ou seja, correlaciona os dados perfeitamente entre si.

$$C_{00} = \frac{1}{mn} \sum_{s=1}^{m} \sum_{t=1}^{n} X_{st}^2.$$
(34)

Uma descrição mais compacta do padrão espacial em processos pontuais é obtida pelo periodograma ou função espectral amostral.

O periodograma calculado via a autocovariância amostral vista na Equação 33 fica definido por Renshaw e Ford (1983) como

$$\hat{f}(w_p, w_q) = \sum_{j=-m+1}^{m-1} \sum_{k=-n+1}^{n-1} C_{jk} \cos(jw_p + kw_q),$$
(35)

Substituindo na Equação 35 o valor da frequência $(w_p, w_q) = (\frac{2\pi p}{m}, \frac{2\pi q}{n}),$

tem-se

$$P_{pq} \equiv \hat{f}\left(\frac{2\pi p}{m}, \frac{2\pi q}{n}\right) = m.n(a_{pq}^2 + b_{pq}^2),\tag{36}$$

em que a_{pq} é a parte real e b_{pq} é a parte imaginária da Equação 37 definida como

$$a_{pq} + ib_{pq} = \frac{1}{mn} \sum_{s=1}^{m} \sum_{t=1}^{n} X_{st} e^{2\pi i \left(\frac{ps}{m} + \frac{qt}{n}\right)}.$$
(37)

Desenvolvendo a Equação 37, pode-se encontrar os valores

$$a_{pq} = \left(\frac{1}{m.n}\right) \sum_{s=1}^{m} \sum_{t=1}^{n} X_{st} cos \left[2\pi \left(\frac{ps}{m} + \frac{qt}{n}\right)\right]$$
(38)

e

$$b_{pq} = \left(\frac{1}{m.n}\right) \sum_{s=1}^{m} \sum_{t=1}^{n} X_{st} sen\left[2\pi \left(\frac{ps}{m} + \frac{qt}{n}\right)\right]$$
(39)

A ampla gama de frequência é sobre

$$p = 0, ..., m - 1; q = 0, ..., n - 1,$$

mas em decorrência da relação de simetria, Renshaw e Ford (1984) recomendam considerar somente parte do periodograma, ou seja,

$$p = 0, ..., \frac{m}{2}; q = -\frac{n}{2}, ..., \frac{n}{2} - 1.$$

3.2 Materiais e métodos

Uma ferramanta que pode ser últil, para uma primeira análise exploratória da distribuição espacial, é o diagrama de pontos. Nesta seção serão apresentadas configurações espaciais reais clássicas que estão descritas em várias fontes e que foram analisadas, extensivamente, usando técnicas no domínio do espaço por Diggle (2003). Também será apresentado um conjunto de dados reais que trata da distribuição de partículas em um material composito Al/SiC que foi analisado usando técnicas no domínio do espaço por Scalon et al. (2003). Essas configurações serão submetidas à análise espectral bidimensional descritas anteriormente.

3.2.1 Modelos clássicos

Um exemplo clássico de configuração espacial de pontos que vem sendo analisado por diversos pesquisadores (MUGGLESTONE; RENSHAW, 1996; DIG-GLE, 2003) é a distribuição das coordenadas das mudas de pinheiro negro japonês coletadas por Numata (1961). As coordenadas originais referem-se a um quadrado $5,7 \times 5,7 m^2$ e elas foram escaladas para o quadrado da unidade para a análise conforme pode ser visto na Figura 2. Este padrão é usado, frequentemente, como exemplo de completa aleatoriedade espacial (CAE).



Figura 2 Padrão formado por $N_x = 65$ mudas de pinheiro negro japonês no quadrado unitário

A distribuição das coordenadas das células biológicas apresentada na Figura 3, também, é um exemplo que vem sendo analisado por diversos autores tais como Crick e Lawrence(1975), Ripley (1977) e Mugglestone e Renshaw (1996a). Os dados da Figura 3 fornecem um bom exemplo de uma configuração exibindo regularidade.



Figura 3 Padrão formado pelos centros de $N_x = 42$ células biológicas no quadrado unitário

Os dados da Figura 4 representam os locais de 62 mudas de árvores da Califórnia em uma região de amostragem quadrada. Eles foram, primeiramente, analisados por Strauss (1975). Os dados utilizados nesta tese são um subconjunto extraído por Ripley (1977) de uma sub-região que foi redimensionada a um quadrado unitário conforme mostra a Figura 4. Esta configuração é frequentemente usada como um exemplo de um padrão que apresenta agrupamentos (DIGGLE, 1983).



Figura 4 Padrão formado por $N_x = 62$ mudas de árvores no quadrado unitário

3.2.2 Material Compósito Al/SiC

A análise estatística teve como base quatro amostras metalográficas $(S_1,$ $S_2, S_3 \in S_4$) de um material compósito (Al/SiC - Carboneto de silício na liga de alumínio) produzido pelo Departamento de Engenharia de Materiais, Universidade de Sheffield, Inglaterra, em que as partículas de segunda fase de carboneto de silício tinham uma fração de volume igual a 11 %. As áreas das amostras metalográficas foram, aproximadamente, $192 \times 288 \ \mu$ m. As amostras metalógrafas foram colocadas em um analisador de fase óptico do microscópio controlado por computador (Polyvar), o que permitiu o ajuste totalmente automático, a focagem, o posicionamento e a digitalização das amostras. A ampliação do microscópio total utilizada foi de 600 vezes, obtendo-se um tamanho de pixel de 0, 375 μ m. Assim, o Polyvar produziu quadros de imagens digitais com área igual a 512×767 pixels quadrados. As imagens digitais bidimensionais foram analisadas, usando técnicas de processamento de imagem, para extrair as coordenadas (centros) de cada partícula dentro das imagens. As imagens reais foram de 512×767 pixels, dos quais usamos apenas as partículas de 512×512 pixels, produzindo 419 partículas em amostras S_1 , 594 partículas na amostra S_2 , 738 partículas em amostras S_3 e 646 partículas na amostra S_4 . Os 512×512 imagens foram transformadas em áreas

quadradas com uma unidade para facilitar a análise (SCALON et al., 2003). A ferramenta para a visualização de uma distribuição espacial das partículas é plotar sua localização na matriz como um mapa de pontos.

Os mapas de pontos das amostras dão uma impressão visual da distribuição das partículas ao longo da matriz. Padrão formado pelas coordenadas que representam os centros das partículas de SiC. Os mapas de pontos das Figura 5(a), Figura 5(b), Figura 6(a) e Figura 6(b) representam as 730, 980, 997 e 1023 coordenadas dos centros das partículas do material compósito Al/SiC, respectivamente.



Figura 5 Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC. (a)
 780 coordenadas dos centros das partículas. (b) 980 coordenadas dos centros das partículas



Figura 6 Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC. (a)
 997 coordenadas dos centros das partículas. (b) 1023 coordenadas dos centros das partículas

Os mapas de pontos das amostras metalográficas S_1 , S_2 , S_3 e S_4 com áreas de 512 × 512 pixels são apresentados nas Figuras 7(*a*), 8(*a*), 9(*a*) e 10(*a*), enquanto as Figuras 7(*b*), 8(*b*), 9(*b*) e 10(*b*) mostram os mapas de pontos para o quadrado unitário. Esses mapas fornecem uma impressão visual dos padrões formados pelas coordenadas dos centros das partículas de SiC no compósito.


Figura 7 Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC da amostra S_1 . (a) 512×512 pixels. (b) quadrado unitário



Figura 8 Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC da amostra S_2 . (a) 512×512 pixels. (b) quadrado unitário



Figura 9 Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC na amostra S_3 . (a) 512×512 pixels. (b) quadrado unitário



Figura 10 Distribuição espacial das partículas do material compósito Al/SiC na amostra S_4 . (a) 512×512 pixels. (b) quadrado unitário

A análise visual dos mapas de pontos das amostras metalográfica apresentados anteriormente não permitem identificar qualquer tipo de padrão na distribuição espacial das partículas de SiC na base de alumínio. Essa análise é muito subjetiva e, dependendo de quem faz a análise, poder-se-ia concluir por qualquer um dos padrões típicos, ou seja, aleatoriedade, agrupamento ou regularidade. O uso do método de Monte Carlo combinado com a teoria da análise espectral espacial, apresentados a seguir, fornecerá uma decisão sobre o padrão das configurações pontuais apresentadas anteriormente.

3.2.3 Intervalo de confiança baseado em Monte Carlo (MC)

Para a construção do periodograma foi, primeiramente, desenvolvida uma função (gradeMxN.r) que gera uma malha fina (grade 2D) com MxN divisões regulares. Em seguida foram obtidas as coordenadas das entradas da matriz de observações corrigidas para a média, apresentadas na Equação 33. O desenvolvimento desse algorítmo foi com base na teoria proposta por Renshaw e Ford (1983), afirmando que as posições aproximadas de eventos de um ponto espacial padrão podem ser representadas pela intersecção de uma malha fina sobreposta na área de estudo.

Os valores das ordenadas do periodograma 2D foram obtidos a partir das equações 36, 38 e 39.

Os valores do *R*-Espectro 2D e θ -Espectro 2D foram obtidos a partir das equações 29 e 30.

Para contrução do intervalo de confiança, são gerados os valores de Respectro e θ -espectro para as configurações observadas. A seguir, são gerados n configurações sobre a hipótese de completa aleatoriedade espacial e calculase o R-espectro e o θ -espectro para cada uma dessas configurações. Para cada escala tem-se uma distribuição que tem n valores para R-espectros e, também, para cada ângulo tem n valores para θ -espectros. Em seguida, ordena os n valores R-espectro para cada escala do menor para o maior e também, ordena os n valores θ -espectro para cada ângulo. Para $(1 - \frac{i}{100})$ de confiança, o limite inferior do intervalo é obtido pelo *i*-ésimo n-quantil e o limite superior pelo (n - i)-ésimo n-quantil. Nesta tese, foram geradas 100 simulações sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial.

3.2.4 Software

Todo trabalho de simulação e análise de dados foram realizados utilizandose programas desenvolvidos no software R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2012).

3.3 Resultados e discussão

Nesta seção são apresentados os resultados e discussão da aplicação da análise espectral nas configurações clássicas e do material compósito Al/SiC.

3.3.1 Configurações clássicas

A distribuição espacial das mudas de pinheiro negro japonês é, frequentemente, apresentada por diversos autores como um exemplo de uma configuração que exibe completa aleatoriedade espacial (CAE). Diggle (2003) usa testes considerando as funções $F, G \in K$ para comprovar a hipótese de CAE. Em um outro artigo, Mugglestone e Renshaw (1996) usam técnicas de análise espectral e a função qui-quadrado para, também, comprovar a hipótese de CAE.

A Figura 11 mostra o periodograma que representa porções da variância dos dados em diferentes frequências. Observa-se que a forma do periodograma não apresenta grandes variações, refletindo a ausência de estrutura espacial na configuração observada.



Figura 11 Periodograma do padrão da distribuição espacial das mudas de pinheiro negro japonês

A Figura 12 apresenta o espectro polar do padrão da distribuição espacial das mudas de pinheiro negro japonês juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial. A partir da inspeção visual do gráfico do *R*-espetro observado e θ -espetro nas Figuras 12(a) e 12(b), respectivamente, pode-se observar que os mesmos se encontram dentro do intervalo com 0, 99 de confiança. Esta análise visual do comportamento do gráfico mostra que o padrão da distribuição espacial das mudas de pinheiro negro japonês é típica da completa aleatoriedade espacial, o que corrobora os resultados obtidos por Mugglestone e Renshaw (1996a) e Diggle (2003).



Figura 12 O espectro polar do padrão da distribuição espacial das mudas de pinheiro negro japonês. (a) R-espectro. (b) θ -espectro

A distribuição espacial das células biológicas é um exemplo clássico de uma configuração exibindo regularidade. Ripley (1977) e Diggle (2003) usam testes de Monte Carlo e a função K, para rejeitar a hipótese de CAE, em favor da regularidade espacial das células. Mugglestone e Renshaw (1996a) usam análise espectral para chegarem à mesma conclusão.

A Figura 13 mostra o periodograma para o padrão de células biológicas. O gráfico do periodograma mostra uma região de pequenos valores em baixas frequências e é, relativamente, plano em outros lugares. Esta estrutura sugere que o padrão é formado por um processo de inibição, caracterizando regularidade.



Figura 13 Periodograma do padrão da distribuição espacial de células biológicas

O espectro polar do padrão da distribuição espacial células biológicas juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial são apresentados na Figura 14. Os gráficos das funções *R*-espectro (Figura 14(*a*)) e θ espectro (Figura 14(*b*)) apresentaram um pequeno declive abaixo do limite inferior do intervalo de confiança, levando a rejeição da hipótese de CAE. Estas análises levam a concluir que a distribuição espacial das células biológicas é regular, o que corrobora os resultados obtidos por Ripley (1977), Mugglestone e Renshaw (1996) e Diggle (2003). O Espectro polar do padrão da distribuição espacial células biológicas juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial.



Figura 14 O espectro polar do padrão da distribuição espacial células biológicas. (a) R-espectro. (b) θ -espectro

Na última configuração clássica, a distribuição das mudas de árvores é frequentemente usada como um exemplo de padrão de pontos com agrupamentos (DIGGLE, 1983).

A Figura 15 mostra o periodograma da configuração em que se podem observar regiões de altas frequências e grandes quantidades de baixas frequências o que poderiam ser indícios da presença de agrupamentos.



Figura 15 O Periodograma do padrão da distribuição espacial de mudas de árvores

A Figura 16 apresenta o espectro polar do padrão da distribuição espacial de Mudas de árvores juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial. Os gráficos de *R*-espetro e θ -espectro observados em (*a*) e (*b*), respectivamente, encontram-se fora dos limites do intervalo de confiança. Estes resultados corroboram os resultados obtidos por Mugglestone e Renshaw (1996a), indicando agrupamentos na distribuição das mudas de árvores.



Figura 16 O espectro polar do padrão da distribuição espacial de Mudas de árvores. (a) R-espectro. (b) θ -espectro

3.3.2 Materiais compósitos

A distribuição espacial da segunda fase (partículas) é um dos fatores mais importantes das propriedades mecânicas de materiais compósitos. Por exemplo, a tenacidade à fratura deste material depende não só da forma e da fração de volume, mas também da distribuição espacial do reforço de partículas na matriz e, portanto, a caracterização de tais distribuições é de primordial importância na ciência dos materiais. O ideal é que a distribuição das partículas seja aleatória ou apresente uma pequena regularidade. Agrupamentos de partículas é um forte indicador que o material possa apresentar fraturas nesse agrupamentos (CHAWLA, 2012). Scalon et al. (2003) analisaram a distribuição espacial das partículas no material compósito utilizando as funções F e G e chegaram à conclusão de que estas exibem uma leve tendência para se distribuírem de maneira regular.

Observando os periodogramas apresentados nas Figuras 17, 18, 19 e 20 pode-se notar que os espectros apresentam-se em diferentes frequências. Assim, pode-se dizer que o padrão da distribuição espacial das partículas de carboneto de silício é compatível com o padrão da CAE nas quatro amostras metalográficas.



Figura 17 Periodograma das partículas do material compósitoAl/SiCda amostra S_1



Figura 18 Periodograma das partículas do material compósitoAl/SiCda amostra S_2



Figura 19 Periodograma das partículas do material compósitoAl/SiCda amostra S_3



Figura 20 Periodograma das partículas do material compósitoAl/SiCda amostra S_4

O exame visual do espectro das quatro amostras metalográficas, conforme Figura 21, Figura 22, Figura 23, Figura 24 mostram que as funções R-espectro e θ -espectro encontram-se dentro dos envelopes de completa aleatoriedade espacial com 0, 99 de confiança. Esses resultados são bons indicadores da boa qualidade do material. O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_1 do Material Al/SiC juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de 99 simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial.



Figura 21 O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_1 . (a) *R*-espectro. (b) θ -espectro

O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_2 do Material Al/SiC juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de 99 simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial.



Figura 22 O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_2 . (a) *R*-espectro. (b) θ -espectro

O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_3 do Material Al/SiC juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de 99 simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial.



Figura 23 O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_3 . (a) *R*-espectro. (b) θ -espectro

O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_4 do Material Al/SiC juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de 99 simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial.



Figura 24 O espectro polar do padrão da distribuição espacial da amostra S_4 . (a) *R*-espectro. (b) θ -espectro

Os resultados apresentados, anteriormente, utilizando análise espectral bidimensional, levaram a não rejeição da hipótese de CAE sobre o comportamento da distribuição espacial das partículas de carboneto de silício na liga de alumínio. Este resultado é o que os engenheiros de materiais esperam de qualquer material, pois é um indicador da boa qualidade do material. Entretanto, esses resultados divergem, ligeiramente, dos resultados obtidos por Scalon et al. (2003) que mostram, utilizando análises considerando distâncias entre pontos, que as partículas dessas amostras metalográfica apresentam uma distribuição regular. Na verdade, Scalon et al. (2003) afirmam que a pequena regularidade detectada nos padrões espaciais é devida aos tamanhos das partículas que não foram levados em consideração na análise com base nos centros das partículas.

Seria prematuro tirar conclusões definitivas sobre o valor comparativo da técnica espectral com outras técnicas estatísticas disponíveis tendo como base apenas algumas configurações pontuais. Entretanto, apesar da análise espectral não ser de fácil uso, como as análises com base em distâncias entre eventos, a mesma se apresenta como uma ferramenta alternativa e poderosa para investigar padrões pontuais, uma vez que não assume qualquer suposição estrutural dos dados antes da análise, como a isotropia, que é difícil de ser observada em diversas situações práticas como observam alguns pesquisadores como Bartelett (1964), Diggle (1983), Mugglestone e Renshaw (1996a).

A análise espectral aplicada às configurações pontuais clássicas e às configurações dos centros de partículas de carboneto de silício na liga de alumínio corroborou com os resultados obtidos por outros pesquisadores, utilizando métodos espaciais, considerando distâncias. Os resutados indicam que a análise espacial espectral pode ser ferramenta alternativa, para investigar padrões de configurações pontuais no espaço, quando a suposição de isotropia do processo estocástico, que gerou a configuração pontual, não pode ser aceita.

4 ANÁLISE ESPECTRAL TRIDIMENSIONAL

Esta seção tem início com o desenvolvimento da teoria da análise espectral espacial para espaçoes tridimensionais. A seguir, são apresentadas diversas configurações pontuais simuladas em três dimensões em que a teoria será aplicada. Também são fornecidos outros detalhes dos métodos para testar a hipótese de completa aleatoriedade espacial nessas configurações pontuais. Após apresentar os resultados e discussão das análises espectrais nas configurações pontuais tridimensionais, a seção é encerrado com uma breve conclusão.

4.1 Referencial teórico

A função densidade espectral tridimensional é definida como a transformada de Fourier da função de completa covariância e pode ser obtida a partir da expanção da teoria apresentada em Bartlett (1964).

Para uma função integrável $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{C}$, a transformada de Fourier tridimensional $\Im \{f(p,q,t)\} = F(w_p, w_q, w_t)$ é definida por:

$$F(w_p, w_q, w_t) = \int_{R^3} f(p, q, t) e^{-i(w_p p + w_q q + w_t t)} dp dq dt$$
(40)

em que w_p , w_q e w_t são as frequências e C é o conjunto dos números complexos.

O espectro de potências da transformada de Fourier tridimensional é definido por:

$$P = \{\Re \{F(w_p, w_q, w_t)\}\}^2 + \{Im \{F(w_p, w_q, w_t)\}\}^2 = |F(w_p, w_q, w_t)|^2,$$
(41)

com ângulo de fase

$$\phi = \arctan\left\{\frac{Im\{F(w_p, w_q, w_t)\}}{\Re\{F(w_p, w_q, w_t)\}}\right\}.$$
(42)

Para realizar a análise espectral, Bartlett (1964) propõe a função densidade da completa covariância como uma alternativa útil para descrever um processo

espacial de pontos. A função de densidade espectral de um processo pontual (ou ponto espectro) é definida como sendo a transformada de Fourier da função de densidade da completa covariância. No espaço tridimensional, pode ser definida formalmente como

$$f(w_p, w_q) = \int_{R^3} \int_{R^3} k(s, r) e^{-i(w_p^\top s + w_q^\top r)} ds dr,$$
(43)

 $s \in R^3$, $r \in R^3$, com inversa dada por

$$k(s,r) = \int_{R^3} \int_{R^3} f(w_p, w_q) e^{i(w_p^\top s + w_q^\top r)} dw_p dw_q,$$
(44)

em que $w_p \in P \subset R^3$ e $w_q \in Q \subset R^3$ e \top denota transposta.

Substituindo a Equação 14 na Equação 43 temos a Função Densidade Espectral mais geral da seguinte forma:

$$f(w_p, w_q) = \int_{R^3} \int_{R^3} \lambda(s) \delta(s_i - r_i) \delta(s_j - r_j) \delta(s_k - r_k) e^{-i(w_p^\top s + w_q^\top r)} ds dr$$

+
$$\int_{R^3} \int_{R^3} \gamma(s, r) e^{-i(w_p^\top s + w_q^\top r)} ds dr$$
(45)

O caso isotrópico de um processo pontual tem intensidade de primeira ordem constante, ou seja, $\lambda(s) = \lambda$. A função de covariância só depende da distância e não da direção, isto é, $\gamma(s,r) = \gamma(c)$, em que c = s - r, para $s = (s_i, s_j, s_k)$ e $r = (r_i, r_j, r_k)$. Logo, a Equação 45 fica então,

$$f(w_p, w_q, w_t) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \lambda \delta(s_i - r_i) \delta(s_j - r_j) \delta(s_k - r_k)$$

$$\cdot e^{\{-i(w_p c_i + w_q c_j + w_t c_k)\}} dc_i dc_j dc_k$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \gamma(c) e^{\{-i(w_p c_i + w_q c_j + w_t c_k)\}} dc_i dc_j dc_k, (46)$$

em que $(w_p, w_q, w_t) \in R^3$. A transformada de Fourier da função Delta de Dirac é

igual a 1, logo, a Equação 46 pode ser escrita como:

$$f(w_p, w_q, w_t) = \lambda + \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \gamma(c) e^{\{-i(w_p c_i + w_q c_j + w_t c_k)\}} dc_i dc_j dc_k,$$
(47)

em que $(w_p, w_q, w_t) \in \mathbb{R}^3$.

A transformada discreta de Fourieir tridimensional das coordenadas é definida como:

$$F(p,q,t) = \sum_{j=1}^{N_x} e^{-2\pi i \left(\frac{px_{1j}}{l_1} + \frac{qx_{2j}}{l_2} + \frac{qx_{3j}}{l_3}\right)} = A(p,q,t) + iB(p,q,t), \quad (48)$$

em que N_x é o número de eventos no volume do paralelepípedo de lados l_1 , l_2 e l_3 , (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j}) denota a localização dos eventos e $j = 1, ..., N_x$.

O periodograma, também chamado de função espectral amostral, pode ser calculado como o espectro de potências da Transformada discreta de Fourier das coordenadas como

$$\hat{f}(w_p, w_q, w_t) = |F(p, q, t)|^2 = \{A(p, q, t)\}^2 + \{B(p, q, t)\}^2,$$
 (49)

em que $(w_p, w_q, w_t) = \left(\frac{2\pi p}{l_1}, \frac{2\pi q}{l_2}, \frac{2\pi t}{l_3}\right).$

A coordenada do periodograma ou parte real da transformada discreta de Fourier tem distribuição Normal assintótica $(N_x \to \infty)$ com média $(\mu(A))$ zero e variância (V(A)) igual à função espectral dividida por 2 (MUGGLESTONE; RENSHAW, 1996). Assim, para o caso tridimensional, fica:

$$A(p,q,t) \sim N\left(0, \frac{f(w_p, w_q, w_t)}{2}\right), \quad (w_p, w_q, w_t) \neq (0, 0, 0).$$
(50)

Se $(w_p, w_q, w_t) = (0, 0, 0)$ então, A(0, 0, 0) tem distribuição Normal assintótica com média $(\mu(A)) \lambda$ e variância (V(A)) à função espectral dividida por 2 em $(w_p, w_q, w_t) = (0, 0, 0)$. Logo,

$$A(0,0,0) \sim N\left(\lambda, \frac{f(0,0,0)}{2}\right).$$

A parte imaginária da transformada de Fourier Discreta tem, também, distribuição Normal assintótica com média ($\mu(B)$) zero e variância (V(B)) igual à função espectral dividida por 2. Para o caso tridimensional,

$$B(p,q,t) \sim N\left(0, \frac{f(w_p, w_q, w_t)}{2}\right), \quad (w_p, w_q, w_t) \neq (0, 0, 0).$$
(51)

B(0, 0, 0) = 0.

Além disso, A(p,q,t) e B(p,q,t) são assintoticamente independentes.

Se A(p,q,t) e B(p,q,t) têm distribuição conforme 50 e 51, respectivamente. Então

$$\frac{A(p,q,t) - \mu(A)}{\sqrt{Var(A)}} \sim N(0,1)$$
(52)

e

$$\frac{B(p,q,t) - \mu(B)}{\sqrt{Var(B)}} \sim N(0,1).$$
(53)

Se $Z_1, Z_2, ..., Z_n$ é uma amostra aleatória com distribuição normal padrão, então

$$\sum_{i=1}^{n} Z_i^2 \sim \chi_n^2.$$
 (54)

Observa-se, também, que se duas variáveis aleatórias têm funções geradoras de momentos que existem e são iguais, então, elas têm a mesma função de distribuição (MAGALHÃES, 2006).

Seja

$$U = \sum_{i=1}^{n} Z_i^2.$$
 (55)

A função geradora de momentos de U é dada por

$$E(e^{t}U) = E(e^{t}\sum_{i=1}^{n} Z_{i}^{2}) = E(e^{t}Z_{1}^{2})...E(e^{t}Z_{n}^{2})$$

$$= \prod_{i=1}^{n} E(e^{tZ_{i}^{2}}) = \prod_{i=1}^{n} \left(\frac{1}{\sqrt{(1-2t)}}\right)$$

$$= \left(\frac{1}{1-2t}\right)^{\frac{n}{2}}, t < \frac{1}{2},$$
(56)

em que $\left(\frac{1}{1-2t}\right)^{\frac{n}{2}}, t<\frac{1}{2}$ é a função geradora de momento da distribuição $\chi^2_n.$

Portanto,

$$\frac{\hat{f}(w_p, w_q, w_t)}{\frac{f(w_p, w_q, w_t)}{2}} = \frac{\{A(p, q, t) - 0\}^2}{\frac{f(w_p, w_q, w_t)}{2}} + \frac{\{B(p, q, t)\}^2}{\frac{f(w_p, w_q, w_t)}{2}} = Z_1^2 + Z_2^2.$$
(57)

Ou seja,

$$\frac{2\hat{f}(w_p, w_q, w_t)}{f(w_p, w_q, w_t)} \sim \chi_2^2, \quad (w_p, w_q, w_t) \neq (0, 0, 0)$$
(58)

Seja $(w_p, w_q, w_t) = (0, 0, 0)$, então:

$$\frac{2\hat{f}(w_p, w_q, w_t)}{f(0, 0, 0)} = \frac{\hat{f}(0, 0, 0)}{\frac{f(0, 0, 0)}{2}} = \frac{\{A(0, 0, 0) - \lambda\}^2 + \{B(0, 0, 0)\}^2}{\frac{f(0, 0, 0)}{2}}.$$
 (59)

Mas, B(0, 0, 0) = 0, logo

$$\frac{\hat{f}(0,0,0)}{\frac{f(0,0,0)}{2}} = \frac{\{A(0,0,0) - \lambda\}^2}{\frac{f(0,0,0)}{2}}.$$
(60)

Portanto,

$$\frac{\{A(0,0,0) - \lambda\}^2}{\frac{f(0,0,0)}{2}} = Z_1^2,$$
(61)

ou seja,

$$\frac{2\hat{f}(0,0,0) - \lambda}{f(0,0,0)} \sim \chi_1^2.$$
(62)

Uma ferramenta que a análise espectral apresenta é avaliar o padrão em meio à escala e direção. Mugglestone e Renshaw (1996a) utilizam o periodograma em coordenadas polares para definirem dois resumos uni-dimensionais do periodograma conforme expressões 29 e 30. No caso tridimensional tem-se que cada $\hat{f}(w_p, w_q, w_t)$ pode ser representado em coordenadas esféricas usando a notação $\hat{g}(w_r, w_{\theta}, w_{\phi})$, em que $r = \sqrt{p^2 + q^2 + t^2}$, $\theta = \tan^{-1}\left(\frac{q}{p}\right)$ e $\phi = \tan^{-1}\left(\frac{\sqrt{p^2 + q^2}}{t}\right)$ estão representados conforme Figura 25.



Figura 25 Um ponto (p, q, t) no espaço tridimensional representado pelas coordenadas esféricas

Os valores médios das ordenadas do periodograma para valores similares de r, investiga as escalas de padrão sob a hipótese de isotropia. O R-espectro, $\hat{f}_R(r)$, é definido como

$$\hat{f}_{R}(r) = \frac{1}{n_{r}} \sum_{r'} \sum_{\theta} \sum_{\phi} \hat{g}(w_{r'}, w_{\theta}, w_{\phi}), \quad r = 1, 2, ...,$$
(63)

em que a soma total é dividida por n_r ordenadas do periodograma e $r-1 < r' \leq r$.

Os valores médios das ordenadas do periodograma para valores similares de θ , investiga características direcionais de padrão. O θ -espectro, $\hat{f}_{\theta}(\theta)$, \acute{e} definido como

$$\hat{f}_{\theta}(\theta) = \frac{1}{n_{\theta}} \sum_{r} \sum_{\theta'} \sum_{\phi} \hat{g}(w_r, w_{\theta'}, w_{\phi}), \theta = 0^0, 10^0, 20^0, ..., 170^0,$$
(64)

em que a soma total é dividida por n_{θ} coordenadas do periodograma para os quais $\theta - 5^0 < \theta' \le \theta + 5^0$.

Os valores médios das ordenadas do periodograma para valores similares de ϕ , investiga características direcionais de padrão. O ϕ -espectro, $\hat{f}_{\phi}(\phi)$, \acute{e} definido como

$$\hat{f}_{\phi}(\phi) = \frac{1}{n_{\phi}} \sum_{r} \sum_{\theta} \sum_{\phi'} \hat{g}(w_r, w_{\theta}, w_{\phi'}), \quad \phi = 0^0, 10^0, 20^0, ..., 170^0, \quad (65)$$

em que a soma total é dividida por n_{ϕ} coordenadas do periodograma para os quais $\phi - 5^0 < \phi' \le \phi + 5^0$.

Usando a aditividade de variáveis aleatórias com distribuição $\chi^2,$ tem-se que

$$\sum_{r'} \sum_{\theta} \sum_{\phi} \frac{\hat{g}(w_{r'}, w_{\theta}, w_{\phi})}{g(w_{r'}, w_{\theta}, w_{\phi})} \sim \frac{\chi_{2n_r}^2}{2n_r},$$
(66)

em que r = 1, 2, ...

$$\sum_{r} \sum_{\theta'} \sum_{\phi} \frac{\hat{g}(w_r, w_{\theta'}, w_{\phi})}{g(w_r, w_{\theta'}, w_{\phi})} \sim \frac{\chi_{2n_{\theta}}^2}{2n_{\theta}},\tag{67}$$

em que $\theta=0^0, 10^0, 20^0, ..., 170^0.$

$$\sum_{r} \sum_{\theta} \sum_{\phi'} \frac{\hat{g}(w_r, w_\theta, w_{\phi'})}{g(w_r, w_\theta, w_{\phi})} \sim \frac{\chi^2_{2n_\phi}}{2n_\phi},\tag{68}$$

em que $\phi=0^0, 10^0, 20^0, ..., 170^0.$

4.1.1 Análise espectral aplicada a uma grade tridimensional

A idéia de Renshaw e Ford (1983), em relação à análise espectral ser aplicada a uma rede bidimensional de dados, pode ser expandida para uma rede tridimensional. Neste caso, considera-se que as posições aproximadas de eventos de um padrão espacial pontual podem ser representadas pela interseção de uma grade tridimensional fina sobreposta no volume em estudo.

A autocovariância amostral é definida como

$$C_{ijk} = \frac{1}{mno} \sum_{r=1}^{m-i} \sum_{s=1}^{n-j} \sum_{\Omega_u} X_{rsu} X_{r+i,s+j,u+k}$$
(69)

em que $\Omega_u = 1, ..., o - k; k \ge 0$ ou $\Omega_u = -k + 1, ..., o; k < 0$ e X_{rsu} a "matriz" de observações corrigida para a média, em que r = 1, ..., m; s = 1, ..., n; u = 1, ..., o.

No caso tridimensional a matriz é obtida subtraindo o valor da média amostral em cada elemento da matriz $M.O \times N$.

O periodograma pode ser calculado via a autocovariância amostral vista na equação 69, expandindo o caso bidimensional apresentado por Renshaw e Ford (1983). Portanto, o periodograma pode ser definido como

$$\hat{f}(w_p, w_q, w_t) = \sum_{i=-m+1}^{m-1} \sum_{j=-n+1}^{n-1} \sum_{k=-o+1}^{o-1} C_{ijk} \cos(iw_p + jw_q + kw_t).$$
(70)

A matriz de autocorrelação espacial é dada por $\left\{\frac{C_{ijk}}{s^2}\right\}$ em que s^2 denota a variância amostral de $\{X_{rsu}\}$. A matriz de autocorrelação espacial tem valor central de $\frac{C_{000}}{s^2} = 1$, ou seja, correlaciona os dados perfeitamente entre si.

A Equação 70 para o valor de frequência $(w_p, w_q, w_t) = \left(\frac{2\pi p}{m}, \frac{2\pi q}{n}, \frac{2\pi t}{o}\right)$, fica sendo:

$$\hat{f}\left(\frac{2\pi p}{m}, \frac{2\pi q}{n}, \frac{2\pi t}{o}\right) = m.n.o(a_{pqt}^2 + b_{pqt}^2),$$
(71)

em que a_{pqt} é a parte real e b_{pqt} é a parte imaginária da equação 72 como

$$a_{pqt} + ib_{pqt} = \frac{1}{mno} \sum_{r=1}^{m} \sum_{s=1}^{n} \sum_{u=1}^{o} X_{rsu} e^{2\pi i \left(\frac{pr}{m} + \frac{qs}{n} + \frac{tu}{o}\right)}$$
(72)

Desenvolvendo a Equação 72, tem-se:

$$a_{pqt} + ib_{pqt} = \frac{1}{mno} \sum_{r=1}^{m} \sum_{s=1}^{n} \sum_{u=1}^{o} X_{rsu} \{ \cos\left[2\pi i\left(\frac{pr}{m} + \frac{qs}{n} + \frac{tu}{o}\right)\right] + isen\left(2\pi i\left(\frac{pr}{m} + \frac{qs}{n} + \frac{tu}{o}\right)\right) \}.$$
(73)

Logo,

$$a_{pqt} = \frac{1}{mno} \sum_{r=1}^{m} \sum_{s=1}^{n} \sum_{u=1}^{o} X_{rsu} cos \left[2\pi i \left(\frac{pr}{m} + \frac{qs}{n} + \frac{tu}{o} \right) \right]$$
(74)

e

$$b_{pqt} = \frac{1}{mno} \sum_{r=1}^{m} \sum_{s=1}^{n} \sum_{u=1}^{o} X_{rsu} sen\left[2\pi i \left(\frac{pr}{m} + \frac{qs}{n} + \frac{tu}{o}\right)\right].$$
 (75)

A ampla gama de frequência é sobre $p=0,...,m-1;\quad q=0,...,$
 $n-1;\quad t=0,...,o-1.$

4.2 Materiais e métodos

Nesta seção são apresentadas configurações espaciais tridimensionais, geradas por algorítmos construídos a partir do uso do software R. Essas configurações espaciais simuladas serão submetidas à análise espectral tridimensional descritas ao longo desta tese.

4.2.1 Configurações tridimensionais

Uma ferramenta que pode ser útil para a uma primeira análise exploratória da distribuição espacial das partículas é o diagrama de pontos.

O volume de pontos apresentado na Figura 26 é um exemplo da distribuição de 21 eventos simulados seguindo o processo de Poisson homogêneo em três dimensões. A realização é gerada dentro de um cubo unitário com intensidade $\lambda=21.$



Figura 26 Realização de uma configuração com 21 eventos distribuidos aleatoriamente no espaço tridimensional

O volume de pontos da amostra apresentado na Figura 27 dá uma impressão visual da distribuição de eventos simulados e distribuidos de forma agrupada no espaço tridimensional.



Figura 27 Realização de uma configuração com 2310 eventos distribuidos em agrupamentos no espaço tridimensional

O mapa de pontos da amostra apresentado na Figura 28 dá uma impressão visual da distribuição de 817 eventos simulados e distribuídos, regularmente no espaço tridimensional com distância de inibição $\delta = 0,05$.



Figura 28 Realização de uma configuração com 817 eventos distribuídos, regularmente, com distância de inibição $\delta=0,05$ no espaço tridimensional

A Figura 29 apresenta o mapa de pontos da amostra de 1000 eventos simulados e distribuídos de forma regular no espaço tridimensional com distância de inibição $\delta = 0, 1$.



Figura 29 Realização de uma configuração com 1000 eventos distribuídos, regularmente, com distância de inibição $\delta = 0, 1$ no espaço tridimensional

4.2.2 Métodos

Para a construção do periodograma foi, primeiramente, desenvolvida uma função que gera uma malha fina (grade 3D) com MxNxO divisões regulares. Em seguida foram obtidas as coordenadas das entradas da matriz de observações corrigida para a média, apresentadas na Equação 33. O desenvolvimento desse algorítmo foi com base na teoria de Renshaw e Ford (1983), afirmando que as posições aproximadas de eventos de um ponto espacial padrão podem ser representadas pela intersecção de uma malha fina sobreposta na área de estudo.

Para a análise tridimensional foi criada uma função que gera uma grade fina 3D com MxNxO divisões regulares (gradeMxNxO.r). Em seguida foram obtidas as coordenadas das entradas da matriz de observações corrigida para a média, apresentadas na Equação 69.

Os valores das ordenadas do periodograma 3D foram gerados pela fun-

ção construida, para esse fim, utilizando as Equações 71, 74 e 75. Para gerar o histograma 3D, utilizou-se, também, do software Scilab com os dados gerados do periodograma 3D pelo software R. (SCILAB-5.2.2, 2011)

Os valores do *R*-Espectro 3D, θ -Espectro 3D e o ϕ -Espectro 3D foram obtidos pelas funções desenvolvidas para esse fim considerando as equações 63, 64 e 65, respectivamente.

Para obter os intervalos de Monte Carlo com $(1-\alpha)$ de confiança para o *R*-Espectro, θ -Espectro e ϕ -Espectro 3D, seguiu-se o mesmo procedimento adotado no caso bidimensional. Para tal, foram geradas 100 simulações sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial no volume utilizando as funções construidas, especificamente, para esse fim.

4.2.3 Software

Todo trabalho de simulação e análise de dados foi realizado utilizando programas desenvolvidos no software R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2012).

4.2.4 Resultados e discussão

Observando o periodograma apresentado na Figura 30 pode-se notar que os espectros apresentam-se de forma relativamente plano. Assim, pode-se dizer que o padrão da distribuição espacial é compatível com o padrão da CAE.



Figura 30 Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional aleatório

O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados aleatórios 3D (*R*-espectro, θ -espectro e ϕ -espectro) juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial são apresentados na Figura 31. Considerando o exame visual do espectro da amostra de dados aleatórios 3D, conforme Figura 31(*a*), Figura 31(*b*) e 31(*c*), as funções *R*-espectro, θ -espectro e ϕ -espectro encontram-se dentro do envelope de completa aleatoriedade espacial.



Figura 31 O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados aleatórios 3D. (a) R-espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro

Observando o periodograma apresentado na Figura 32 pode-se notar que os espectros apresentam-se em regiões de altas frequências e grandes valores de baixas frequências o que poderia ser indícios da presença de agrupamentos.



Figura 32 Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional de agrupamento

A Figura 33 apresenta o espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados agrupados 3D (*R*-espectro, θ -espectro e ϕ -espectro) juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial. O gráfico da função *R*-espectro da amostra de dados agrupados 3D, conforme Figura 33(*a*), obteve um pico em r = 4 acima do intervalo de completa aleatoriedade espacial. Observa-se, também, que a função θ -espectro em $\theta = 5$ encontra-se acima do envelope de completa aleatoriedade espacial e em $\theta = 14$ abaixo conforme Figura 33(*b*). A Figura 33(*c*) em $\phi = 10$ mostra o gráfico da função ϕ -espectro acima do envelope de CAE. Os resultados apresentados rejeitam a hipótese de completa aleatoriedade espacial.



Figura 33 O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados agrupados 3D. (a) R-espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro

Observando o periodograma apresentado na Figura 34 pode-se notar que os espectros apresentam-se em região de pequenos valores em baixas frequências e é relativamente plano em outros lugares. Esta estrutura para o padrão sugere que o padrão é formado por um processo de inibição.



Figura 34 Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional regular

O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados regulares 3D (*R*-espectro, θ -espectro e ϕ -espectro) juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial são apresentados na Figura 35. Considerando o exame visual do espectro da amostra de dados regular 3D, a função *R*-espectro apresenta-se abaixo do envelope de completa aleatoriedade na posição r = 12 conforme Figura 35(a). A Figura 35(b) mostra a função θ -espectro em $\theta = 14$ abaixo do envelope de CAE. O gráfico da função ϕ -espectro em $\phi = 20$ apresentou-se acima do intervalo de confiança, conforme Figura 35(c), rejeitando a hipótese nula de completa aleatoriedade espacial.



Figura 35 O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados regulares 3D. (a) R-espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro

Observando o periodograma apresentado na Figura 36 pode-se notar que os espectros apresentam-se em região de pequenos valores em baixas frequências e é relativamente plano em outros lugares. Esta estrutura para o padrão sugere que o padrão é formado por um processo de inibição.


Figura 36 Periodograma do padrão da distribuição espacial tridimensional regular

A Figura 37 mostra o espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados regulares 3D ($\delta = 0, 1$) (*R*-espectro, θ -espectro e ϕ -espectro) juntamente com os intervalos de confiança (linhas tracejadas) construídos a partir de simulações de Monte Carlo sob a hipótese de completa aleatoriedade espacial. A função *R*-espectro conforme Figura 37(*a*) encontra-se em r = 11 abaixo do envelope de CAE e em r = 13 acima. A Figura 37(*b*) mostra a função θ -espectro em $\theta = 15$, também, acima do envelope de completa aleatoriedade espacial. Em $\phi = 17$ a função ϕ -espectro apresentou valor acima do intervalo de confiança, conforme a Figura 37(*c*)), rejeitando a hipótese nula de completa aleatoriedade espacial.



Figura 37 O espectro do padrão da distribuição espacial da amostra de dados regulares 3D ($\delta = 0, 1$). (a) *R*-espectro. (b) θ -espectro. (c) ϕ -espectro

Os resultados da análise espectral tridimensional em configurações simuladas típicas, representando os principais padrões espaciais (aleatoriedade, regularidade e agrupamentos), mostraram que os métodos espectrais conseguiram caracterizar de maneira correta todos os três padrões típicos. Evidentemente, seriam necessários mais estudos, considerando diferentes configurações com graus de agrupamento e regularidade espacial, para uma completa análise do poder dos métodos apresentados.

5 CONCLUSÕES

Os resultados obtidos na análise espectral bidimensional de configurações clássicas e reais corroboraram todos os resultados obtidos por outros pesquisadores utilizando técnicas do domínio do espaço. Os métodos da análise espectral tridimensional conseguiram identificar corretamente as configurações simuladas típicas.

Apesar dos resultados obtidos mostrarem que a análise espectral pode ser competitiva com a análise considerando o domínio do espaço para a caracterização de configurações pontuais, deve-se ter em mente alguns problemas que poderão limitar uma difusão mais ampla da aplicação dos métodos espectrais na prática. Primeiro, a teoria espectral é, em geral, mais difícil de ser entendida do que a teoria no domínio do espaço. Além disso, a teoria espectral para análise espacial pontual está dispersa na literatura, enquanto a teoria no domínio do espaço está em consolidade e disponível em diversos livros. Um segundo problema refere-se à ausência de programas computacionais disponíveis para a realização da análise espectral. Nesta tese foram desenvolvidos vários programas, utilizando o software R, que podem minimizar esse problema. Assim, um dos futuros trabalhos a serem desenvolvidos é disponibilizar esses programas é por meio de uma biblioteca de funções depositada no CRAN para realização da análise espectral espacial. Para isso, essas funções precisam ser polidas e ajustadas aos critérios do CRAN. Um terceiro problema refere-se à região ou volume em análise. Enquanto os métodos no domínio do espaço permitem analisar regiões de diferentes formas, os métodos espectrais permitem análises apenas em regiões quadradas ou retangulares. Estender a teoria espectral, para analisar qualquer forma de região e/ou volume, é um caminho totalmente aberto que vai exigir muito esforco teórico e computacional.

O pouco desenvolvimento da análise espectral tridimensional é, facilmente, explicado pela dificuldade de obter dados em três dimensões. Até alguns poucos anos atrás, imagens em três dimensões era coisa de ficção científica. Atualmente, essa realidade começa a mudar. Em diversas áreas do conhecimento, como medicina e materiais, já é possível obter imagens em três dimensões e extrair informações como, por exemplo, coordenadas de eventos dessas imagens. Pode ser que, nesses casos, a análise espectral seja mais útil, apesar de mais difícil do que a análise no domínio do espaço. Neste sentido, esta tese e os artigos que dela originarão serão trabalhos seminais.

Nesta tese apenas introduziu-se um problema de interesse teórico e prático, mas não se teve a intenção de esgotar o assunto. Muitos trabalhos necessitam ser conduzidos para que a análise espectral torne-se uma realidade na análise de configurações pontuais no espaço. Por exemplo, nesta tese foi abordada a análise contra a hipótese de completa aleatoriedade espacial (CAE), utilizando inspeção visual de periodogramas e gráficos construídos utilizando o método de Monte Carlo. Apesar do procedimento de Monte Carlo, combinado com análise espectral, ter apresentado um bom comportamento, existem outras possibilidade de testar formalmente a hipótese de CAE utilizando distribuições amostrais. Na verdade, Mugglelstone e Renshal (2001) apresentaram diversos testes para configurações bidimensionais. Ainda existe a possibilidade de novas propostas de testes contra CAE para configurações bidimensionais. Além disso, não existem testes formais contra a hipótese de CAE em configurações tridimensionais. Pretende-se, no futuro, trabalhar na construção desses testes.

Finalmente, pode-se afirmar que a análise espacial espectral, mais que uma ferramenta competitiva com os outros métodos, é uma ferramenta alternativa que pode ser usada concomitantemente, com outros métodos para investigar padrões de configurações pontuais no espaço. Entretanto, nesta tese mostrou-se que para a análise espectral ser usada efetivamente na análise de configurações pontuais no espaço, ainda, existe um longo caminho de teoria e programação a ser percorrido pelos pesquisadores da área.

REFERÊNCIAS

BARTTLET, M. S. The spectral analysis of two-dimensional point processes. **Biometrika**, London, v. 51, n. 3/4, p. 299-311, Dec. 1964.

BADDELEY, A. J.; MOYEED, R., A., HOWARD, C., V. Analysis of a three-dimensional point pattern with replication. **Royal statistical society**, London, v. 42, n. 4, p. 641-668, 1993.

CHAWLA, K. K. **Composite materials**: science and engineering. New York: Springer, 2012.

CRESSIE, N. Statistics for spatial data. New York: J. Wiley, 1993, 900p.

CRICK, F. H. C.; LAWRENCE, P. A. Compartments and polychones in insect development. Science, New York, v. 189, p. 340-347, 1975.

DIGGLE, P. J. **Statistical analysis of spatial point patterns**. Oxford: Oxford University, 2003.

DIGGLE, P. J. Statistical analysis of spatial point patterns. New York: Academic, 1983.

DIGGLE, P. J. On parameter estimation and goodness of fit testing for spatial point patterns. **Biometrics**, Washington, v. 35, n. 1, p.87-101, 1979.

LIESHOUT, M. N. M. van; BADDELEY, A. J. A nonparametric measure of interactionin point patterns. **Statistica Neerlandica**, v. 50, n. 3, p. 344-361, Nov. 1996.

MAGALHÃES, M. N. **Probabilidade e variáveis aleatórias**. 2. ed. São Paulo: Edusp, 2006.

MUGGLESTONE, M. A.; RENSHAW, E. Spectral tests of randomness for spatial point patterns. **Environmental and Ecological Statistic**, v. 8, p. 237-251, 2001.

MUGGLESTONE, M. A.; RENSHAW, E. A practical guide to the spectral analysis of spatial point processes. **Computational Statistics and Data Analysis**, v. 21, p. 43-65, 1996a.

MUGGLESTONE, M. A.; RENSHAW, E. The exploratory analysis of bivariate spatial poit patterns using Cross-Spectra. **Environmetrics**, v. 7, p. 361-377, 1996b.

NUMATA, M. Forest vegetation in the vicinity of Choshi. Coastal flora and vegetation at Choshi, Chiba Prefecture IV. **Bulletin of the Choshi Marine Laboratory**, Chiba, v. 3, p. 28-48, 1961.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R**: a language and environment for statistical computing. Vienna, 2012. Software.

RENSHAW, E.; FORD, D. The description of spatial pattern using two-dimensional spectral analysis. **Vegetatio**, v. 56, n. 2, p. 75-85, june 1984.

RENSHAW, E.; FORD, D. The interpretation of process from pattern using two-dimensional spectral analysis: methods and problems of interpretation. **Royal Statistical Society**, v. 32, n. 1, p. 51-63, 1983.

RIPLEY, B. D. Modelling spatial patterns (with discussion). Journal of the Royal Statistical Society, B 39, p. 172-212, 1977.

SCALON, J. D.et al. Spatial pattern analysis of second-phase particles in composite materials. **Materials Science and Engineering**, v. A356, p. 245-257, 2003.

SCILAB-5.2.2: Software de códico aberto para comunicação numérica. WebSite Scilab, URL. Disponível em: http://www.scilab.org>. Acesso em: 10 nov. 2011.

STRAUSS, D. J. A model for clustering. **Biometrika**, London, v. 63, p. 467-475, 1975.

WATSON, G.N. A treatise on the theory of Bessel functions. 2^{nd} ed. London: Cambridge University, 1944.