

Um Modelo Geoestatístico Bivariado para a Análise de Dados Composicionais

Ana Beatriz Tozzo Martins - PPGMNE/LEG, UFPR e DES, UEM ^{1 2}

Paulo Justiniano Ribeiro Junior - LEG, UFPR

Wagner Hugo Bonat - LEG, UFPR

Antônio Carlos Andrade Gonçalves - DAG, UEM

Resumo: *Este trabalho é motivado pelo interesse em modelar o padrão espacial de dados composicionais tendo como exemplo de aplicação o estudo de frações granulométricas do solo. A categoria de problemas de interesse é, portanto, composta por dados onde as observações são partes de algum todo e que são referenciadas espacialmente. O interesse central está em prever conjuntamente o padrão espacial dos componentes na área de estudo respeitando a restrição das soma dos componentes corresponderem ao total. Neste sentido, combina-se a teoria de dados composicionais originalmente desenvolvida para observações independentes com métodos geoestatísticos multivariados. A abordagem proposta declara explicitamente um modelo paramétrico que descreve a espacialização das variáveis. Em particular neste trabalho, o objetivo é propor e implementar um modelo geoestatístico bivariado para dados composicionais obtendo inferências via verossimilhança e expressões para previsões espaciais, apresentando, discutindo e disponibilizando resultados e implementação computacional. A metodologia proposta é utilizada na análise de um conjunto de dados referentes às porcentagens de areia, silte e argila que formam as frações granulométricas do solo do campo experimental de irrigação do Departamento de Engenharia Rural da Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz (ESALQ-USP), possibilitando a obtenção de mapas de previsão de teores areia, silte e argila.*

Palavras-chave: *geoestatística multivariada, dados composicionais, verossimilhança, frações granulométricas.*

1 Introdução

Este estudo é motivado pelo interesse em modelar e descrever o padrão espacial de dados composicionais de frações granulométricas do solo. Neste sentido, combina-se a teoria de dados composicionais originalmente desenvolvida para observações independentes (AITCHISON, 1986) com métodos geoestatísticos (PAWLOWSKY-GLAHN; OLEA, 2004), adotando-se a declaração explícita do modelo que descreve a espacialização das variáveis (DIGGLE; RIBEIRO JR, 2007).

¹Agradecimento à CAPES pelo apoio financeiro. Esse trabalho foi parcialmente financiado pela FINEP projeto CT-INFRA/UFPR.

²Contato: abtmartins@uem.br

Dados composicionais consistem de vetores, denominados composições, cujos componentes X_1, \dots, X_B representam frações de algum “todo”, e satisfazem a restrição de que a soma dos componentes é igual a 1 (AITCHISON, 1986), ou seja,

$$X_1 \geq 0, X_2 \geq 0, \dots, X_B \geq 0, \quad \text{e} \quad X_1 + X_2 + \dots + X_B = 1.$$

O espaço amostral é o simplex unitário de dimensão igual ao número de componentes dado por

$$\mathbb{S}^B = \{\underline{X} \in \mathbb{R}^B; X_i > 0, i = 1, \dots, B; \underline{j}'\underline{X} = 1\},$$

sendo \underline{j}' um vetor com elementos iguais a 1.

Um vetor \underline{W} cujos componentes são positivos e medidos na mesma escala denomina-se base. Uma base pode se tornar uma composição através do operador fechamento, \mathcal{C} , que garante que a restrição de soma igual a 1 seja satisfeita:

$$\begin{aligned} \mathcal{C} : \mathbb{R}_+^B &\longrightarrow \mathbb{S}^B \\ \underline{W} &\longrightarrow \mathcal{C}(\underline{W}) = \frac{\underline{W}}{\underline{j}'\underline{W}}. \end{aligned}$$

Neste espaço amostral, o simplex, as operações matemáticas de soma e multiplicação definidas no espaço real equivalem às operações perturbação

$$\underline{X}_1 \oplus \underline{X}_2 = (X_{11}, X_{12}, \dots, X_{1B}) \oplus (X_{21}, X_{22}, \dots, X_{2B}) = \mathcal{C}(X_{11}X_{21}, X_{12}X_{22}, \dots, X_{1B}X_{2B}),$$

e potência

$$\alpha \odot (X_{11}, X_{12}, \dots, X_{1B}) = \mathcal{C}(X_{11}^\alpha, X_{12}^\alpha, \dots, X_{1B}^\alpha),$$

respectivamente, e a média passa a ser a média geométrica $g(\underline{X}_1) = \sqrt[B]{\prod_{j=1}^B X_{1j}}$.

Uma característica desse tipo de dados é que estes apresentam um efeito de correlação espúria. A restrição de que a soma dos componentes deve ser igual a 1, implica em correlação negativa entre os componentes fazendo com que as correlações não sejam diretamente interpretáveis (GRAF, 2006), ou seja, as covariâncias estão sujeitas a controles não estocásticos o que implica, segundo Pawlowsky-Glahn e Olea (2004), em singularidade da matriz de covariância de uma composição. Com isto, a aplicação de técnicas estatísticas padrão podem levar a resultados inconsistentes. Para contornar este problema, Aitchison (1986) propôs, dentre outras, a transformação razão log-aditiva (alr) que generaliza a transformação logística para um vetor composicional de duas partes e é dada por:

$$\begin{aligned} \text{alr} : \mathbb{S}^B &\longrightarrow \mathbb{R}^{B-1} \\ \underline{X} &\longrightarrow \text{alr}(\underline{X}) = \left(\ln \left(\frac{X_1}{X_B} \right), \dots, \ln \left(\frac{X_{B-1}}{X_B} \right) \right)'. \end{aligned}$$

Por outro lado, a transformação inversa denominada transformação logística generalizada aditiva

(agl) é dada por

$$\begin{aligned} \text{agl} : \mathbb{R}^{B-1} &\longrightarrow \mathbb{S}^B \\ \text{alr}(\underline{X}) &\longrightarrow \text{agl}(\text{alr}(\underline{X})) = \underline{X} = \left(\exp \left(\ln \left(\frac{X_1}{X_B} \right) \right), \dots, \exp(0) \right)'. \end{aligned}$$

A representação gráfica de uma amostra de composições pode ser feita através do diagrama ternário, por exemplo no caso em que $B = 3$, um triângulo equilátero cujos vértices representam os três componentes da composição (BUTLER, 2008).

A teoria de dados composicionais desenvolvida por Aitchison (1986) para amostras independentes, foi estendida por Pawlowsky-Glahn e Olea (2004) considerando a dependência espacial segundo métodos geoestatísticos em uma abordagem que evita declarar completa e explicitamente o modelo multivariado espacial associado às composições. Por outro lado, modelagens multivariadas espaciais são descritas em Diggle e Ribeiro Jr (2007), Schmidt e Gelfand (2003), Banerjee, Carlin e Gelfand (2004), Schmidt e Sansó (2006) garantindo, por construção, matrizes de covariância definidas positiva. Considera-se aqui o modelo Gaussiano bivariado de componentes comum proposto por Diggle e Ribeiro Jr (2007) e adotado por Bognola et. al. (2008) no contexto de inventário florestal utilizando uma variável física como informação secundária.

O objetivo deste trabalho é estender o uso do modelo geoestatístico bivariado para estruturas de dados composicionais, derivando e implementando estimação baseada na verossimilhança e obtendo preditores espaciais, na escala original dos dados no simplex, que permitam a construção de mapas de predição das frações do solo, ou funcionais destas, na área de estudo.

2 Metodologia

Para $\underline{X} = (X_1, \dots, X_B)'$ uma composição com B componentes e $\underline{Y} = \left(\ln \left(\frac{X_1}{X_B} \right), \dots, \ln \left(\frac{X_{B-1}}{X_B} \right) \right)'$ um vetor com $B - 1$ elementos, o modelo geoestatístico com componente comum pode ser obtido seguindo a formulação dada em Diggle e Ribeiro Jr (2007). Por simplificação, neste trabalho, considera-se composições de apenas 3 componentes, $X_1 = \text{Areia}$, $X_2 = \text{Silte}$ e $X_3 = \text{Argila}$, que resultam em vetores bivariados.

A partir do modelo geoestatístico apresentado em Diggle e Ribeiro Jr (2007), propõe-se uma adaptação e o modelo pode ser escrito como:

$$\begin{cases} Y_1(\underline{x}_i) &= \mu_1(\underline{x}_i) + \sigma_1 U(\underline{x}_i; \phi) + Z_1(\underline{x}_i) \\ Y_2(\underline{x}_{i'}) &= \mu_2(\underline{x}_{i'}) + \sigma_2 U(\underline{x}_{i'}; \phi) + Z_2(\underline{x}_{i'}). \end{cases}$$

em que $\underline{x}_i, \underline{x}_{i'} \in \mathbb{R}^2$, são as localizações amostrais $i, i' : 1, \dots, n_1$, onde n_1 é o tamanho da amostra; $Y_1 = \ln(X_1/X_3)$, $Y_2 = \ln(X_2/X_3)$ são as variáveis resposta do modelo de modo que $\underline{Y}_{n \times 1} = (Y_1(\underline{x}_1), Y_2(\underline{x}_1), \dots, Y_1(\underline{x}_{n_1}), Y_2(\underline{x}_{n_1}))'$. Neste modelo, assume-se que U é um efeito aleatório de média zero e variância unitária com distribuição Gaussiana multivariada com correlações espaciais dadas pela função de correlação exponencial (ρ_U), caracterizada por um parâmetro ϕ que controla o decaimento da correlação como função da separação espacial entre duas localizações. No modelo bivariado geral as unidades de medida são preservadas nas constantes padronizadoras σ_1 e σ_2 , enquanto que no contexto considerado aqui são adimensionais. Os efeitos

aleatórios $Z_j \sim N(0; \tau_j)$, $j = 1, 2$ capturam a variabilidade não espacial incluindo a correlação (ρ) induzida pela estrutura composicional.

Sendo assim, $\underline{Y} \sim N_2(\underline{\mu}; \underline{\Sigma})$, com matriz de covariâncias $\underline{\Sigma}$ composta pelos elementos

$$\begin{aligned} Cov(Y_1(\underline{x}_i); Y_1(\underline{x}_i)) &= \sigma_1^2 + \tau_1^2 & Cov(Y_1(\underline{x}_i); Y_1(\underline{x}_{i'})) &= \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_i; \underline{x}_{i'}) \\ Cov(Y_2(\underline{x}_i); Y_2(\underline{x}_i)) &= \sigma_2^2 + \tau_2^2 & Cov(Y_2(\underline{x}_i); Y_2(\underline{x}_{i'})) &= \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_i; \underline{x}_{i'}) \end{aligned}$$

e

$$Cov(Y_1(\underline{x}_i); Y_2(\underline{x}_{i'})) = \sigma_1 \sigma_2 I_2(i, i') + \tau_1 \tau_2 I_3(i, i')$$

onde

$$I_2(i, i') = \begin{cases} 1 & , \text{ se } i = i' \\ \rho_U(\underline{x}_i; \underline{x}_{i'}) & , \text{ se } i \neq i' \end{cases} \quad I_3(i, i') = \begin{cases} \rho & , \text{ se } i = i' \\ 0 & , \text{ se } i \neq i' \end{cases}$$

ou seja,

$$\underline{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 + \tau_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 + \tau_1 \tau_2 \rho & \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) \cdots \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) \\ \sigma_1 \sigma_2 + \tau_1 \tau_2 \rho & \sigma_2^2 + \tau_2^2 & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) & \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) \cdots \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) & \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) \\ \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \sigma_1^2 + \tau_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 + \tau_1 \tau_2 \rho \cdots \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) \\ \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \sigma_1 \sigma_2 + \tau_1 \tau_2 \rho & \sigma_2^2 + \tau_2^2 \cdots \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) \sigma_1 \sigma_2 & \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \sigma_1^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) \cdots \sigma_1^2 + \tau_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 + \tau_1 \tau_2 \rho \\ \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \sigma_1 \sigma_2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) & \sigma_2^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) \cdots \sigma_1 \sigma_2 + \tau_1 \tau_2 \rho & \sigma_2^2 + \tau_2^2 \end{bmatrix}$$

Desta forma, a inferência sobre o vetor de parâmetros $\underline{\theta} = (\mu_1, \mu_2, \sigma_1, \sigma_2, \tau_1, \tau_2, \phi, \rho)'$ é feita usando a teoria da verossimilhança cuja função de verossimilhança é

$$L(\underline{\theta}, \underline{Y}) = (2\pi)^{-n/2} |\underline{\Sigma}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\underline{Y} - \underline{\mu}_Y)' \underline{\Sigma}^{-1} (\underline{Y} - \underline{\mu}_Y) \right\}.$$

Fazendo-se a reparametrização: $\eta = \sigma_2/\sigma_1$; $\nu_1 = \tau_1/\sigma_1$; $\nu_2 = \tau_2/\sigma_1$, pode-se escrever

$$\underline{\Sigma} = \sigma_1^2 \mathbf{R} + \tau_1^2 \mathbf{I}_b = \sigma_1^2 \mathbf{V}$$

em que

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_1) & \eta \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_1) & \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) & \eta \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) & \cdots & \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) & \eta \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) \\ \eta \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_1) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_1) & \eta \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_2) & \cdots & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_1, \underline{x}_n) \\ \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \eta \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_2) & \eta \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_2) & \cdots & \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) & \eta \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) \\ \eta \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_1) & \eta \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_2) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_2) & \cdots & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_2, \underline{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \eta \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) & \eta \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) & \cdots & \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_n) & \eta \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_n) \\ \eta \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_1) & \eta \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_2) & \cdots & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_n) & \eta^2 \rho_U(\underline{x}_n, \underline{x}_n) \end{bmatrix};$$

$$\mathbf{I}_b = \begin{bmatrix} \nu_1^2 & \nu_1\nu_2\rho & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \nu_1\nu_2\rho & \nu_2^2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu_1^2 & \nu_1\nu_2\rho & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu_1\nu_2\rho & \nu_2^2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \nu_1^2 & \nu_1\nu_2\rho \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \nu_1\nu_2\rho & \nu_2^2 \end{bmatrix}$$

e, conseqüentemente,

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} 1 + \nu_1^2 & \eta + \nu_1\nu_2\rho & \rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & \rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ \eta + \nu_1\nu_2\rho & \eta^2 + \nu_2^2 & \eta\rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \eta^2\rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) & \cdots & \eta\rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) & \eta^2\rho_U(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_n) \\ \rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & 1 + \nu_1^2 & \eta + \nu_1\nu_2\rho & \cdots & \rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \eta\rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & \eta^2\rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1) & \eta + \nu_1\nu_2\rho & \eta^2 + \nu_2^2 & \cdots & \rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) & \eta^2\rho_U(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_n) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \cdots & 1 + \nu_1^2 & \eta + \nu_1\nu_2\rho \\ \eta\rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \eta^2\rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_1) & \eta\rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \eta^2\rho_U(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_2) & \cdots & \eta + \nu_1\nu_2\rho & \eta^2\nu_2^2 \end{bmatrix}.$$

A função de log-verossimilhança reparametrizada é dada por

$$l(\underline{\theta}, \underline{Y}) = -\frac{1}{2} \left(n \ln(2\pi) + 2n \ln(\sigma_1) + \ln(|\mathbf{V}|) + \frac{1}{\sigma_1^2} Qe \right). \quad (1)$$

Considerando $\underline{\mu}_Y = \mathbf{D}\underline{\mu}$ em que \mathbf{D} é a matriz do delineamento de ordem $n \times 2$, tem-se

$$Qe = (\underline{Y} - \underline{\mu}_Y)' \mathbf{V}^{-1} (\underline{Y} - \underline{\mu}_Y) = \underline{Y}' \mathbf{V}^{-1} \underline{Y} - 2(\underline{Y}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{D}) \underline{\mu} + \underline{\mu}' (\mathbf{D}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{D}) \underline{\mu}.$$

Expressões analíticas fechadas podem ser obtidas para os estimadores de máxima verossimilhança de $\underline{\mu} = (\mu_1, \mu_2)'$ e σ_1 diferenciando a função (1) em relação aos respectivos parâmetros e estes são dados por

$$\hat{\underline{\mu}} = (\mathbf{D}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{D}' \mathbf{V}^{-1} \underline{Y}) \quad \text{e} \quad \hat{\sigma}_1 = \sqrt{\hat{Q}e/n}. \quad (2)$$

É importante notar que $\hat{Q}e$ pode ser escrita como

$$\hat{Q}e = \underline{Y}' \mathbf{V}^{-1} \underline{Y} - (\underline{Y}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{D}) (\mathbf{D}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{D})^{-1} (\mathbf{D}' \mathbf{V}^{-1} \underline{Y}).$$

Ao substituir as expressões (2) em (1) obtém-se a função de log-verossimilhança concentrada

$$l(\underline{\theta}^*, \underline{Y}) = -\frac{1}{2} \left[\ln(|\mathbf{V}|) + n \left(\ln(2\pi) + \ln(\hat{Q}e) - \ln(n) + 1 \right) \right],$$

que é uma função do vetor de parâmetros desconhecidos $\underline{\theta}^* = (\eta, \nu_1, \nu_2, \phi, \rho)'$, e pode ser maximizada numericamente.

Os algoritmos de otimização testados no processo de maximização foram “L-BFGS-B”, método de Byrd et al. (1995) que permite informar os limites inferior e superior de busca no espaço paramétrico; “Nelder-Mead”, uma implementação do método de Nelder e Mead (1965); “Gradiente Conjugado”, baseado no método de Fletcher e Reeves (1964) e “BFGS”, um método

quasi-Newton. Todos encontram-se implementados no ambiente estatístico R (R development Core Team, 2008).

Do processo de maximização obtém-se $\hat{\theta}^* = (\hat{\eta}, \hat{\nu}_1, \hat{\nu}_2, \hat{\phi}, \hat{\rho})'$ e as respectivas variâncias através da matriz Hessiana numérica. A matriz Informação de Fisher observada é definida como o negativo da matriz Hessiana e é dada por

$$\mathbf{I}_o(\hat{\theta}^*) = -\frac{\partial^2 l(\hat{\theta}^*)}{\partial \hat{\theta}^* \partial (\hat{\theta}^*)'} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta^2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta \partial \nu_1} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta \partial \nu_2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta \partial \phi} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta \partial \rho} \\ \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1 \partial \eta} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1^2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1 \partial \nu_2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1 \partial \phi} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1 \partial \rho} \\ \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2 \partial \eta} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2 \partial \nu_1} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2^2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2 \partial \phi} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2 \partial \rho} \\ \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi \partial \eta} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi \partial \nu_1} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi \partial \nu_2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi^2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi \partial \rho} \\ \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho \partial \eta} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho \partial \nu_1} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho \partial \nu_2} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho \partial \phi} & \frac{\partial l(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho^2} \end{bmatrix}.$$

Para se obter $\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2$, e $\hat{\sigma}_1$, basta substituir $\hat{\theta}^*$ nas equações em (2).

Como o interesse está na obtenção de $\hat{\theta} = (\hat{\mu}_1, \hat{\mu}_2, \hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \hat{\tau}_1, \hat{\tau}_2, \hat{\phi}, \hat{\rho})'$ e suas respectivas variâncias, o método delta (DEGROOT, 2002, p.284; COX e HINKLEY, 1974, p.302; AZZALINI, 1996, p.73; PAWITAN, 2001, p.226) é aplicado para obter uma aproximação da distribuição de $\hat{\theta}$. Assintoticamente, a distribuição de $\hat{\theta}$ será aproximadamente multivariada Gaussiana com vetor de médias $\hat{\theta} = g(\hat{\theta}^*)$ e variância

$$\text{Var}(\hat{\theta}) = \mathbf{I}_E(\hat{\theta}) \geq \nabla g(\hat{\theta}^*)' \mathbf{I}_E(\hat{\theta}^*)^{-1} \nabla g(\hat{\theta}^*),$$

em que

$$\nabla g(\hat{\theta}^*) = \left(\frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta}, \frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1}, \frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2}, \frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi}, \frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho} \right)'$$

é a função escore $U(\hat{\theta}^*)$. Assim, dado que:

- $\eta = \frac{\sigma_2}{\sigma_1} \Rightarrow \sigma_2 = \eta \sigma_1$, se $g(\hat{\theta}^*) = \sigma_2$, então $\frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \eta} = (\sigma_1, 0, 0, 0, 0)'$
- $\nu_1 = \frac{\tau_1}{\sigma_1} \Rightarrow \tau_1 = \nu_1 \sigma_1$, se $g(\hat{\theta}^*) = \tau_1$, então $\frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_1} = (0, \sigma_1, 0, 0, 0)'$
- $\nu_2 = \frac{\tau_2}{\sigma_1} \Rightarrow \tau_2 = \nu_2 \sigma_1$, se $g(\hat{\theta}^*) = \tau_2$, então $\frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \nu_2} = (0, 0, \sigma_1, 0, 0)'$
- $\phi = \phi$, se $g(\hat{\theta}^*) = \phi$, então $\frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \phi} = (0, 0, 0, 1, 0)'$
- $\rho = \rho$, se $g(\hat{\theta}^*) = \rho$, então $\frac{\partial g(\hat{\theta}^*)}{\partial \rho} = (0, 0, 0, 0, 1)'$,

tem-se

$$\nabla g(\hat{\underline{\theta}}^*) = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

e a matriz Informação de Fisher esperada para $\hat{\underline{\theta}}$, baseada nos dados \underline{Y} , é substituída pela matriz $\mathbf{I}_o(\hat{\underline{\theta}}^*)$ que é assintoticamente equivalente, de modo que

$$\text{Var}(\hat{\underline{\theta}}) \geq \nabla g(\hat{\underline{\theta}}^*)' \mathbf{I}_o(\hat{\underline{\theta}}^*)^{-1} \nabla g(\hat{\underline{\theta}}^*).$$

Para encontrar as variâncias para $\hat{\underline{\mu}}$ e $\hat{\sigma}_1$, através da função (1), obtém-se

$$\mathbf{I}_o(\underline{\mu}) = -\frac{\partial^2 l(\underline{\theta})}{\partial \underline{\mu}^2} = \frac{1}{\sigma_1^2} (\mathbf{D}' \mathbf{V}^{-1} \mathbf{D})' \quad \text{e} \quad \mathbf{I}_o(\sigma_1) = -\frac{\partial^2 l(\underline{\theta})}{\partial \sigma_1^2} = -\frac{n}{\sigma_1} + \frac{3Qe}{\sigma_1^3},$$

e portanto,

$$\begin{aligned} \text{Var}(\hat{\underline{\mu}}) &= \mathbf{I}_o(\hat{\underline{\mu}})^{-1} = \hat{\sigma}_1^2 (\mathbf{D}' \hat{\mathbf{V}}^{-1} \mathbf{D})^{-1} \\ \text{Var}(\hat{\sigma}_1) &= \mathbf{I}_o(\hat{\sigma}_1)^{-1} = \frac{\hat{\sigma}_1^3}{3Qe - n\hat{\sigma}_1}. \end{aligned}$$

O próximo passo é a realização da predição espacial (cokrigagem) de \underline{Y}_0 em localizações não amostradas $\underline{x}_0 = (\underline{x}_{10}, \underline{x}_{20}, \dots, \underline{x}_{n_20})$. O vetor de valores esperados correspondentes às variáveis Y_1 e Y_2 para todas as localizações de predição e a matriz de covariância são dadas pelo seguinte resultado da distribuição Gaussiana multivariada:

Teorema: Seja $\underline{Y} = (\underline{Y}_0, \underline{Y})'$ um vetor bivariado com distribuição Gaussiana multivariada conjunta com vetor de médias $\underline{\mu} = (\underline{\mu}_{Y_0}, \underline{\mu}_Y)'$ e matriz de covariância

$$\underline{\Sigma} = \begin{bmatrix} \underline{\Sigma}_{Y_0 Y_0} & \underline{\Sigma}_{Y_0 Y} \\ \underline{\Sigma}_{Y Y_0} & \underline{\Sigma}_{Y Y} \end{bmatrix}$$

isto é, $\underline{Y} \sim N(\underline{\mu}; \underline{\Sigma})$. Então, a distribuição condicional de \underline{Y}_0 dado \underline{Y} é também Gaussiana multivariada,

$$\underline{Y}_0 | \underline{Y} \sim N(\underline{\mu}_{Y_0 | \underline{Y}}; \underline{\Sigma}_{Y_0 | \underline{Y}})$$

onde

$$\underline{\mu}_{Y_0 | \underline{Y}} = \underline{\mu}_{Y_0} + \underline{\Sigma}_{Y_0 Y} \underline{\Sigma}_{Y Y}^{-1} (\underline{Y} - \underline{\mu}_Y) \quad \text{e} \quad \underline{\Sigma}_{Y_0 | \underline{Y}} = \underline{\Sigma}_{Y_0 Y_0} - \underline{\Sigma}_{Y_0 Y} \underline{\Sigma}_{Y Y}^{-1} \underline{\Sigma}_{Y Y_0}.$$

Sendo desconhecidos os valores de $\underline{\mu}_{Y_0}$, estes são substituídos pelo vetor de médias estimadas obtidas no processo de otimização. A matriz $\underline{\Sigma}$, de onde se extrai as matrizes $\underline{\Sigma}_{Y_0 Y_0}$, $\underline{\Sigma}_{Y_0 Y}$, $\underline{\Sigma}_{Y Y_0}$ e $\underline{\Sigma}_{Y Y}$, é obtida substituindo-se os valores estimados para os outros parâmetros na matriz \mathbf{V} multiplicada por $\hat{\sigma}_1^2$.

Uma vez que a transformação alr foi aplicada aos dados originais e o procedimento de estima-

ção e cokrigagem foi realizada com os dados transformados em \mathbb{R}^2 , deve-se fazer a transformação de volta do vetor de médias e da matriz de covariância para o espaço amostral original, o simplex \mathbb{S}^3 , como descrito em Pawlowsky e Olea (2004).

O objetivo é calcular para cada localização uma estimativa de

$$\mu_{\underline{X}} = E(\underline{X}) = \int_{\mathbb{S}^B} \underline{X} f(\underline{X}) d\underline{X} \quad (3)$$

e

$$\Sigma_{\underline{X}} = Cov(\underline{X}, \underline{X}) = \int_{\mathbb{S}^B} (\underline{X} - \mu_{\underline{X}})(\underline{X} - \mu_{\underline{X}})' f(\underline{X}) d\underline{X}. \quad (4)$$

Sabe-se que

$$f(\underline{Y}) = (2\pi)^{-\frac{b}{2}} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\underline{Y} - \mu_{\underline{Y}})' \Sigma_{\underline{Y}}^{-1} (\underline{Y} - \mu_{\underline{Y}}) \right\},$$

$b = B - 1$, segue uma distribuição Gaussiana multivariada e $\underline{Y} = \text{alr}(\underline{X})$. Assim, para voltar a escala original, $\underline{X} = \text{agl}(\underline{Y})$, é necessário usar o método do jacobiano cujo jacobiano da transformação é dado por

$$J_{\text{alr}(\underline{X})} = \left| \frac{\partial \underline{Y}}{\partial \underline{X}} \right| = \left(\prod_{i=1}^B X_i \right)^{-1} \quad (5)$$

de modo que $f(\underline{X})$ é dada por

$$f(\underline{X}) = (2\pi)^{-\frac{b}{2}} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{-\frac{1}{2}} \left(\prod_{i=1}^B X_i \right)^{-1} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\text{alr}(\underline{X}) - \mu_{\underline{Y}})' \Sigma_{\underline{Y}}^{-1} (\text{alr}(\underline{X}) - \mu_{\underline{Y}}) \right\}.$$

Aitchison (1986), Pawlowsky e Olea (2004) afirmam que para se resolver as integrais (3) e (4) estas devem ser expressas como

$$\mu_{\underline{X}} = \int_{\mathbb{R}^{B-1}} g_1(\underline{Z}) f(-\underline{Z}'\underline{Z}) d\underline{Z} \quad (6)$$

e

$$\Sigma_{\underline{X}} = \int_{\mathbb{R}^{B-1}} g_2(\underline{Z}) f(-\underline{Z}'\underline{Z}) d\underline{Z} \quad (7)$$

em que \underline{Z} é a transformação e \mathbf{R} é a decomposição Cholesky de $\Sigma_{\underline{Y}}$, uma matriz triangular superior,

$$\underline{Z} = \frac{\text{alr}(\underline{X}) - \mu_{\underline{Y}}}{\sqrt{2}\mathbf{R}'} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{R}')^{-1} (\text{alr}(\underline{X}) - \mu_{\underline{Y}}), \quad (8)$$

podendo, então, ser aproximadas pela integração de Gauss-Hermite multivariada de ordem k :

$$\int_{\mathbb{R}^{B-1}} g(\underline{Z}) f(-\underline{Z}'\underline{Z}) d\underline{Z} \approx \sum_{i_1=1}^k \sum_{i_2=1}^k \cdots \sum_{i_b=1}^k \omega_{i_1} \omega_{i_2} \cdots \omega_{i_b} g(Z_{i_1}, Z_{i_2}, \dots, Z_{i_b}). \quad (9)$$

Nesta aproximação, os pesos $\omega_{i_1}\omega_{i_2}\cdots\omega_{i_b}$ e as abscissas $Z_{i_1}, Z_{i_2}, \dots, Z_{i_b}$ são conhecidos e seus valores podem ser encontrados, por exemplo, em Abramowitz e Stegun (1972, p. 924). Segundo Gammernan (1997) ordens de quadratura de 6 a 8 são suficientes.

Explicitando o procedimento, observa-se que a integral (3) pode ser reescrita como

$$\mu_{\underline{X}} = \int_{\mathbb{S}^B} g(\underline{X}) \left((2\pi)^{-\frac{b}{2}} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\text{alr}(\underline{X}) - \mu_{\underline{Y}})' \Sigma_{\underline{Y}}^{-1} (\text{alr}(\underline{X}) - \mu_{\underline{Y}}) \right\} \right) d\underline{X}$$

onde

$$g(\underline{X}) = \underline{X} \left(\prod_{i=1}^B X_i \right)^{-1}. \quad (10)$$

Considere que $\Sigma_{\underline{Y}} = R'R$ e $\Sigma_{\underline{Y}}^{-1} = (R'R)^{-1} = R^{-1}(R')^{-1} = R^{-1}(R^{-1})'$. Da transformação (8), tem-se

$$\underline{X} = \text{agl}(\mu_{\underline{Y}} + \sqrt{2}R'\underline{Z}) = \text{agl}(\underline{Y})$$

e de (5),

$$\partial \underline{X} = \left(\prod_{i=1}^B X_i \right) \partial \underline{Y}. \quad (11)$$

Além disso,

$$J = \left| \frac{\partial \underline{Y}}{\partial \underline{Z}} \right| = \left| \frac{\partial(\mu_{\underline{Y}} + \sqrt{2}R'\underline{Z})}{\partial \underline{Z}} \right| = \left| \sqrt{2}R' \right| = (\sqrt{2})^b |R'|;$$

sendo R a decomposição cholesky de $\Sigma_{\underline{Y}}$,

$$|R'| = |R| = |\Sigma_{\underline{Y}}|^{\frac{1}{2}},$$

e

$$J = \left| \frac{\partial \underline{Y}}{\partial \underline{Z}} \right| = 2^{\frac{b}{2}} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{\frac{1}{2}} \Rightarrow \partial \underline{Y} = 2^{\frac{b}{2}} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{\frac{1}{2}} \partial \underline{Z}. \quad (12)$$

Substituindo a equação (12) em (11) tem-se

$$\partial \underline{X} = \left(\prod_{i=1}^B X_i \right) 2^{\frac{b}{2}} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{\frac{1}{2}} \partial \underline{Z} \Rightarrow \partial \underline{Z} = 2^{-\frac{b}{2}} \left(\prod_{i=1}^B X_i \right)^{-1} |\Sigma_{\underline{Y}}|^{-\frac{1}{2}} \partial \underline{X}.$$

Por outro lado, de (10) tem-se $g(\text{agl}(\mu_{\underline{Y}} + \sqrt{2}R'\underline{Z})) = \text{agl}(\mu_{\underline{Y}} + \sqrt{2}R'\underline{Z}) \left(\prod_{i=1}^B X_i \right)^{-1}$ que substituída em (6) produz

$$\mu_{\underline{X}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \pi^{-\frac{b}{2}} \text{agl}(\mu_{\underline{Y}} + \sqrt{2}R'\underline{Z}) \exp\{\underline{Z}'\underline{Z}\} d\underline{Z} \quad (13)$$

com $g_1(\underline{Z}) = \pi^{-\frac{b}{2}} \text{agl}(\mu_{\underline{Y}} + \sqrt{2}R'\underline{Z})$. Logo, a aproximação de Gauss-Hermite (9) de ordem 3,

por exemplo, para $\underline{\mu}_X$ é

$$\begin{aligned}\underline{\mu}_X &\approx \sum_{i_1=1}^3 \sum_{i_2=1}^3 \omega_{i_1} \omega_{i_2} g_1(\mathbf{Z}_{i_1}, \mathbf{Z}_{i_2}) \\ &\approx \omega_1^2 g_1(\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_1) + \omega_1 \omega_2 [g_1(\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_2) g_1(\mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_1)] + \omega_1 \omega_3 [g_1(\mathbf{Z}_1, \mathbf{Z}_3) g_1(\mathbf{Z}_3, \mathbf{Z}_1)] + \\ &\quad + \omega_2^2 g_1(\mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_2) + \omega_2 \omega_3 [g_1(\mathbf{Z}_2, \mathbf{Z}_3) g_1(\mathbf{Z}_3, \mathbf{Z}_2)] + \omega_3^2 g_1(\mathbf{Z}_3, \mathbf{Z}_3).\end{aligned}$$

Lembrando que $\underline{\mu}_X$ representa a média da composição em cada localização, esta é um vetor trivariado. Então na função g_1 , $\underline{\mu}_Y$ é um vetor bivariado extraído de $\underline{\mu}_{Y_0|Y}$, cujo primeiro elemento corresponde à média da cockrigagem para a variável Y_1 , o segundo para a variável Y_2 e \mathbf{R}' de ordem 2×2 será a correspondente matriz de variância/covariâncias de Y_1, Y_2 , extraída do bloco diagonal da matriz $\Sigma_{Y_0|Y}$. Assim, em cada localização a resolução de (13) implica na resolução de 3 integrais.

O mesmo procedimento é aplicado para a obtenção de Σ_X dada pela integral (7), agora reescrita como

$$\Sigma_X = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \pi^{-\frac{b}{2}} \left(\text{agl}(\underline{\mu}_Y + \sqrt{2}\mathbf{R}'\underline{Z}) - \underline{\mu}_X \right) \left(\text{agl}(\underline{\mu}_Y + \sqrt{2}\mathbf{R}'\underline{Z})' - \underline{\mu}_X \right)' \exp\{\underline{Z}'\underline{Z}\} d\underline{Z} \quad (14)$$

com g_2 dada por $g_2(\underline{Z}) = \pi^{-\frac{b}{2}} \left(\text{agl}(\underline{\mu}_Y + \sqrt{2}\mathbf{R}'\underline{Z}) - \underline{\mu}_X \right) \left(\text{agl}(\underline{\mu}_Y + \sqrt{2}\mathbf{R}'\underline{Z}) - \underline{\mu}_X \right)'$ e, neste caso, sendo Σ_X uma matriz de ordem 3×3 , a resolução da integral (14) para cada localização implica na resolução de 9 integrais. Portanto, a estimação do vetor de médias e variâncias em n_2 localizações implica na resolução de $n_2 \times 12$ integrais.

Uma outra maneira de se fazer a transformação de volta do vetor de médias e da matriz de covariância para o simplex \mathbb{S}^3 é através de simulação. Neste caso, geram-se dados de uma distribuição Gaussiana multivariada com vetor de médias e matriz de covariância iguais ao vetor de médias e matriz de covariância obtidos por cokrigagem. Desta forma, se obtém a distribuição dos valores simulados em cada localização a partir do qual se calculam a média e variância para as variáveis Y_1 e Y_2 .

3 Análise de Frações Granulométricas de Um Solo

Como exemplo de aplicação da metodologia proposta analisou-se um conjunto de dados provenientes de Gonçalves (1997) cujo trabalho foi conduzido no campo experimental de irrigação do Departamento de Engenharia Rural da Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz (ESALQ-USP) situado nas coordenadas $22^\circ 42'$ de latitude sul, longitude oeste de $47^\circ 38'$ e altitude média de 546 m acima do nível do mar. Esta área em estudo consistiu de um quadrante irrigado por um sistema pivô-central, com declividade média de aproximadamente 2% na sua direção bissetriz. Esse quadrante correspondeu ao topo da encosta onde foi instalado o pivô. Construiu-se uma malha quadrada ou grade de amostragem de 20 em 20 m onde foram coletadas 76 amostras de solo e nas quais foram medidos os percentuais de areia, silte e argila, dentre os valores de outras variáveis físico-químicas não consideradas aqui.

A Figura 1 apresenta a configuração das 76 localizações na área de estudo correspondente ao primeiro quadrante do sistema de coordenadas, irrigado pelo sistema pivô-central.

Em cada uma destas localizações são medidos os percentuais de areia, silte e argila e pelos his-

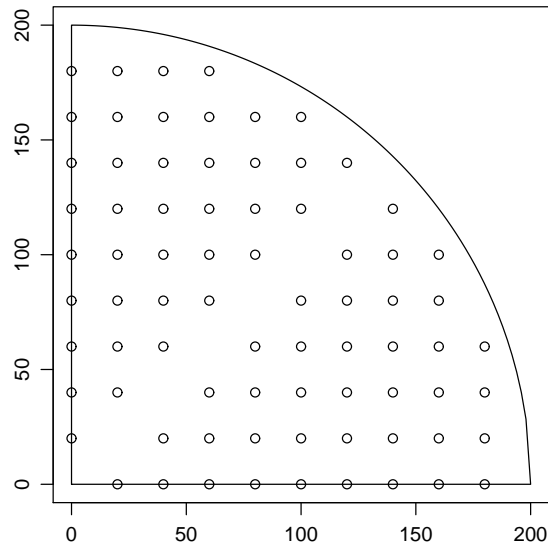


Figura 1: Distribuição das localizações na área de estudo.

togramas da Figura 2, pode-se observar que a distribuição destes conteúdos é aproximadamente Gaussiana. Também, pelo diagrama ternário observa-se que nas composições amostradas, o silte é o componente que se apresenta em menor proporção e uma região de confiança de 4-sigma é necessária para contemplar todas as amostras.

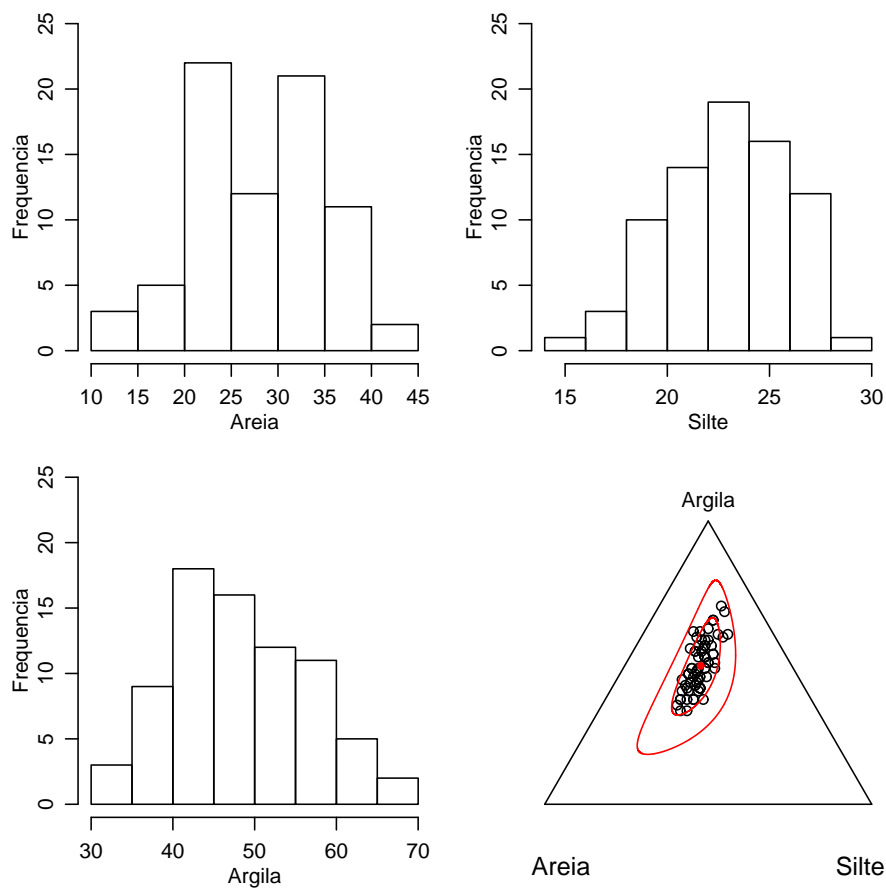


Figura 2: Distribuição de areia, silte e argila e diagrama ternário das composições.

Ao fazer a transformação \ln nos dados originais, obtém-se as variáveis $Y_1 = \ln(\text{Areia}/\text{Argila})$, $Y_2 = \ln(\text{Silte}/\text{Argila})$ cuja distribuição (Figura 3) apresenta-se aproximadamente Gaussiana e o diagrama de dispersão evidencia uma possível correlação linear positiva.

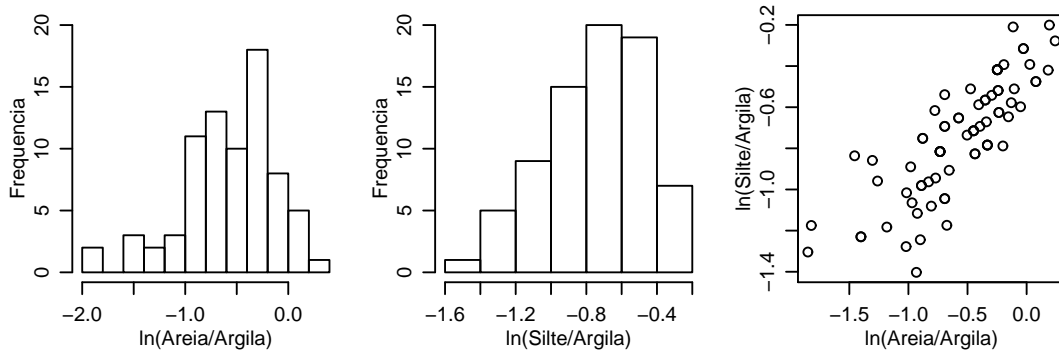


Figura 3: Distribuição das log-razão e correspondente diagrama de dispersão.

Dentre os métodos de otimização testados adotou-se o método "L-BFGS-B", por não apresentar problemas de convergência e, para este método, as estimativas obtidas para os parâmetros do modelo proposto são dados na Tabela 1.

Tabela 1: Estimativas, erros padrão e intervalos de confiança pelo método delta via método de otimização "L-BFGS-B".

Parâmetros	Estimativas	Erro Padrão	LI. Delta	LS. Delta
μ_1	-0,7598748	0,44029631	-1,20017113	-0,3195785
μ_2	-0,7941109	0,22857184	-1,02268277	-0,5655391
σ_1	0,4504836	0,12080170	0,32968188	0,5712853
σ_2	0,1152904	0,05153622	0,06375416	0,1668266
τ_1	0,2870196	0,04510491	0,24191470	0,3321245
τ_2	0,2669836	0,03142454	0,23555903	0,2984081
ϕ	66,9084688	42,55386352	24,35460526	109,4623323
ρ	0,9544251	0,06803953	0,88638554	1,0224646

O valor da log-verossimilhança concentrada, $-42,5541$, é calculado considerando-se as estimativas obtidas através da amostra com ρ coeficiente de correlação de Pearson e $\phi = \min + 0.2(\max - \min)$, onde "min" e "max" são, respectivamente, a menor e maior distância entre duas localizações e o valor da log-verossimilhança otimizada é $0,8292$.

A Figura 4 apresenta o mapa de predição para os três componentes considerando-se a volta dos valores preditos em \mathbb{R}^2 para o simplex S^3 por aproximação de Gauss-Hermite (gráficos (A), (B) e (C)) e por simulação (gráficos (D), (E) e (F)). No caso da aproximação de Gauss-Hermite, a ordem de quadratura é igual a 7 e são realizadas 200 simulações. A grade é constituída de 2500 pontos.

Dados os resultados mostrados na Figura 4 conclui-se que os mapas de predição pelos dois métodos são muito similares e os componentes areia e argila se complementam na área de estudo. Uma comparação dos métodos é apresentada na Figura 5.

Todo o trabalho foi realizado utilizando recursos de *software* livre em ambiente operacional GNU/Linux; no ambiente estatístico R (R development Core Team, 2008), utilizando o pacote *geoR* (RIBEIRO JR; DIGGLE, 2001), *compositions* (BOOGAART; TOLOSANA; BREN,

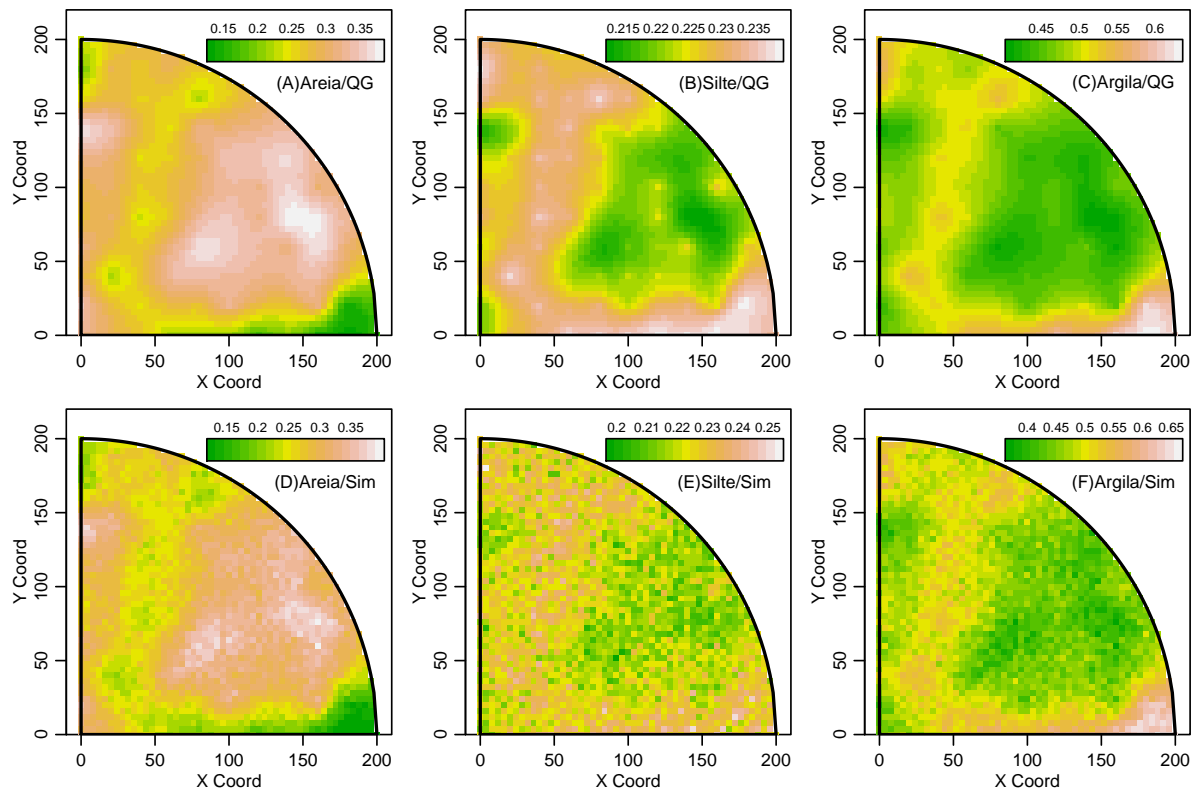


Figura 4: Mapas das porcentagens de areia, silte e argila obtidos por quadratura de Gauss-Hermite (A-B) e por simulação (D-F).

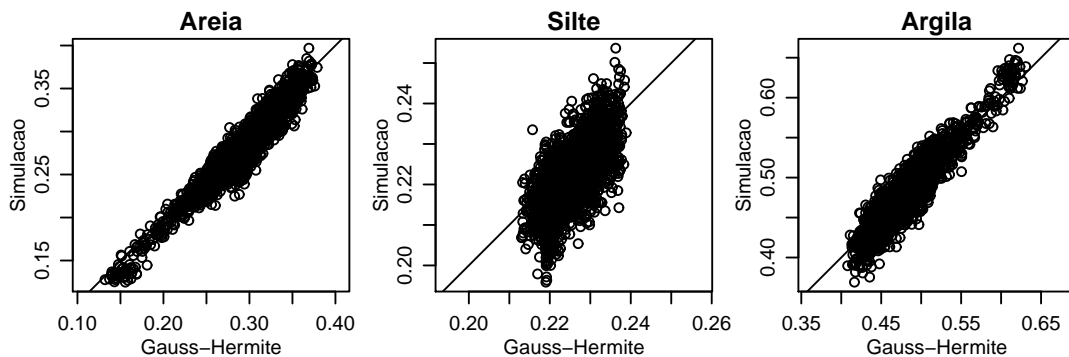


Figura 5: Porcentagens de areia, silte e argila obtidos por quadratura de Gauss-Hermite versus simulação.

2008), *statmod* (SMYTH; HU; DUNN, 2009) e rotinas desenvolvidas especificamente para o desenvolvimento deste trabalho.

4 Conclusão

Os procedimentos adotados permitiram a construção de mapas de areia, silte e argila por uma metodologia que implicitamente garante a restrição de que as frações somem 1, não só nos pontos observados como nos pontos preditos. O modelo proposto captura variações espaciais, induzidas pelas composições e não estruturadas. A declaração explícita do modelo permite que

sejam feitas inferências sobre parâmetros de forma usual. Abre-se ainda a possibilidade de tratamento Bayesiano a fim de se considerar nas predições a incerteza associada à estimação dos parâmetros do modelo. As análises podem ser expandidas para estimação de outros funcionais que não necessariamente resultem em mapas de teores médios. Há a necessidade de se investigar alternativas para computação mais eficiente e considerar outras formas de especificação do modelo multivariado para o caso de maiores números de componentes.

Referências

- [1] ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I.A., *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*, USA: Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, 1972.
- [2] AITCHISON, J., *The statistical analysis of compositional data*, New Jersey: The Blackburn Press, 1986.
- [3] AZZALINI, A., *Statistical inference based in the likelihood*, London: Chapman & Hall, 1996.
- [4] BANERJEE, S.; CARLIN, B.P.; GELFAND, G.E., *Hierarchical modelling and analysis for spatial data*, Boca Raton: Chapman and Hall, 2004.
- [5] BOGNOLA, I.A.; RIBEIRO Jr, P.J.; SILVA, E.A.A; LINGNAU, C.; HIGA, A.R. Modelagem uni e bivariada da variabilidade espacial de rendimento de pinus taeda l., *Floresta*, v. 38, n. 2, p. 373-385, 2008.
- [6] BOOGAART, G.v.d.; TOLOSANA, R.;BREN, M., *compositions: compositional data analysis*. Disponível em:<<http://www.stat.boogaart.de/compositions>>. Acesso em 25 maio 2009.
- [7] BUTLER, A.; GLASBEY, C., A latent Gaussian model for compositional data with zeros, *Journal of the Royal Statistical Society, Series C*, v. 57, n. 5, p. 505-520, 2008.
- [8] BYRD, R.H.; LU, P.; NOCEDAL, J.; ZHU, C., A limited memory algorithm for bound constrained optimization. *SIAM J. Scientific Computing*, v. 16, p. 1190-1208, 1995.
- [9] COX, D.R.;HINKLEY, D.V., *Theoretical Statistics*, London: Chapman & Hall, 1974.
- [10] DEGROOT, M.H.; SCHERVISH, M.J., *Probability and Statistics*, USA: Addison-Wesley, Third Edition, 2002.
- [11] DIGGLE, P.J.; RIBEIRO JR, P.J., *Model-based geostatistics*, USA: Springer Series in Statistics, 2007.
- [12] FLETCHER, R.; REEVES, C.M., Function minimization by conjugate gradients, *Computer Journal*, v. 7, 148-154, 1964.
- [13] GAMMERMAN, D., *Markov chain monte carlo*, London: Chapman and Hall, 1997.
- [14] GONÇALVES, A.C.A., *Variabilidade espacial de propriedades físicas do solo para fins de manejo da irrigação*. 1997. 119p., Tese (Doutorado em Agronomia) - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 1997.

- [15] GRAF, M., Precision of compositional data in a stratified two-stage cluster sample: comparison of the swiss earnings structure survey 2002 and 2000. *Survey Research Methods Section, ASA*, Session 415: Sample Survey Quality V, p. 3066–3072, 2006.
- [16] NELDER, J.A., MEAD, R., A simplex algorithm for function minimization, *Computer Journal*, v. 7, 308 – 313, 1965.
- [17] PAWITAN, Y., *In all likelihood: statistical modelling and inference using likelihood*, New York: Oxford University Press, 2001.
- [18] PAWLOWSKY-GLAHLN, V.; OLEA, R.A., *Geostatistical analysis of compositional data*, New York: Oxford University Press, Inc., 2004.
- [19] R Development Core Team., *R: a language and environment for statistical computing*, Vienna, Austria, 2009. Disponível em:<<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 25 maio 2009.
- [20] RIBEIRO JR, P.J.; DIGGLE, P.J., geoR: a package for geostatistical analysis, *R-NEWS*, v. 1, n. 2, p. 14-18, 2001. Disponível em:<<http://CRAN.R-project.org/doc/Rnews/>>. Acesso em 25 maio 2009.
- [21] SCHMIDT, A.M.; GELFAND, A.E., A bayesian coregionalization approach for multivariate pollutant data, *Journal of Geophysical Research*, v. 108, p. 10-1-18-8, 2003.
- [22] SCHMIDT, A.M.; SANSÓ, B., Modelagem bayesiana da estrutura de covariância de processos espaciais e espaço temporais, In: *17 SINAPE e ABE-Associação Brasileira de Estatística*, Caxambu: Associação Brasileira de Estatística, 2006. Minicurso.
- [23] SMYTH, G.; HU, Y.; DUNN, P., *statmod: statistical modeling*. Disponível em:<<http://www.statsci.org/r>>. Acesso em 25 maio 2009.