MÉTODOS GEOESTATÍSTICOS BIVARIADOS: INTRODUÇÃO

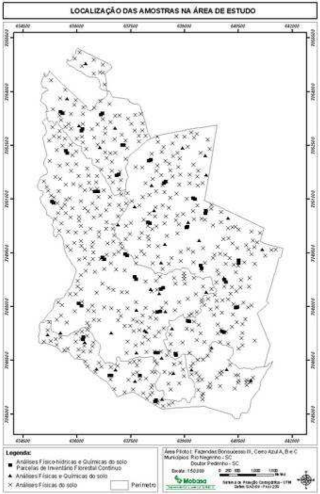
Edson Antonio A. Silva (Unioeste)
Prof. PhD. Paulo J. Ribeiro Jr. (UFPr)
Eng° Itamar A. Borgnola (EMBRAPA)

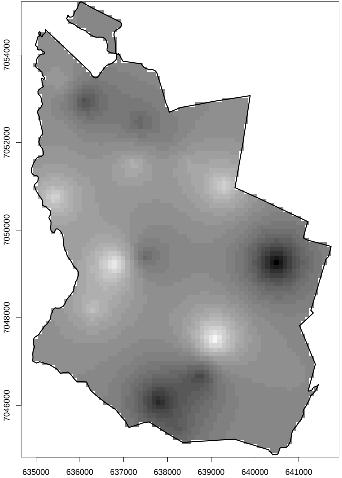
Universidade Federal do Paraná
Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia

26 de julho de 2007

Área de reflorestamento com estudo em parcelas de inventários florestais contínuos, com plantio de Pinus da espécie P.Taeda L., localizada no município de Rio Negrinho-SC, com área de $2.252, 11ha$, onde foram levantados dados pedológicos, amostras para análises físicas e químicas do solo e dados relacionados ao rendimento produtivo.

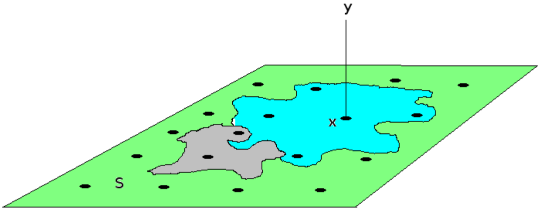
PROBLEMA GEOESTATÍSTICO





$$\left\{(x_i; y_i) : x \in \mathbb{R}^2, y \in \mathbb{R}, i = 1, 2, \ldots, n\right\}$$

- x_i: Localização espacial de uma coordenada (geo) referenciada
- y_i: Medida escalar ou vetorial de uma variável, em uma coordenada.



PREMISSAS

- Definimos o processo estocástico S como um conjunto infinito da variáveis aleatórias que descrevem um fenômeno em uma região do espaço. Esse processo é desconhecido.
- Y é um conjunto finito de observações nessa região do espaço e corresponde a uma realização parcial do processo S.
- Para os propósitos desse trabalho Y é uma v. a. contínua.
- As observações da variável Y são autocorrelacionadas. As observações mais próximas são mais similares entre si do que as observações mais distantes, geograficamente;
- O conjunto de observações y_i nas localizações x_i corresponde a uma única observação do processo estocástico Y.
- Como o processo estocástico Y envolve um conjunto de variáveis da mesma natureza, dizemos que o processo é univariado.

$$Y(x_i) = \mu(x_i) + S(x_i) + \delta_i \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

- $Y(x_i)$ é uma v. a. com distribuição normal de média $E[Y(x_i)|S(x_i)] = \mu(x_i) + S(x_i)$ e variância $Var[Y(x_i)|S(x_i)] = \tau^2$;
- $\mu(x_i) = \alpha + \beta_1 d_1(x_i) + \beta_2 d_2(x_i) + \ldots + \beta_p d_p(x_i)$ é uma tendência espacial associada às variáveis externas $d_k(x_i), k = 1, 2, \ldots, p$. α e β_k são constantes a serem determinadas;
- $\{S(x_i) : x_i \in \mathbb{R}^2\}$ é um processo gaussiano multivariado desconhecido com média zero, variância σ^2 e função de correlação $\rho(\cdot)$;
- δ_i são erros aleatórios i.i.d. tal que $\delta_i \sim N(0; \tau^2)$.

Para um modelo geoestatístico básico temos:

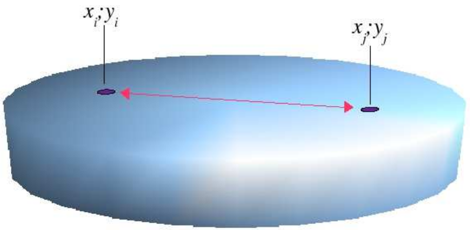
$$\mathbf{Y} \sim MVN(\mathbf{D}\boldsymbol{\beta}, \sigma^2\mathbf{R}(\phi) + \tau^2\mathbf{I})$$

- $\mathbf{D}\boldsymbol{\beta} = \alpha + \beta_1 d_1(x_i) + \beta_2 d_2(x_i) + \ldots + \beta_p d_p(x_i)$;
- σ^2 é a variância (constante no processo);
- $\mathbf{R}_{n \times n}$ é uma matriz de correlação onde os elementos $[r_{ij}]_{n \times n} = \rho(\|x_i - x_j\|) = \rho(u_{ij})$;
- τ^2 é a variância do erro aleatório δ_i.

Se $\mathbf{D}\boldsymbol{\beta} = \mu\mathbf{1}$ dizemos que o processo é estacionário no sentido amplo

QUANTIFICANDO A DEPENDÊNCIA ESPACIAL

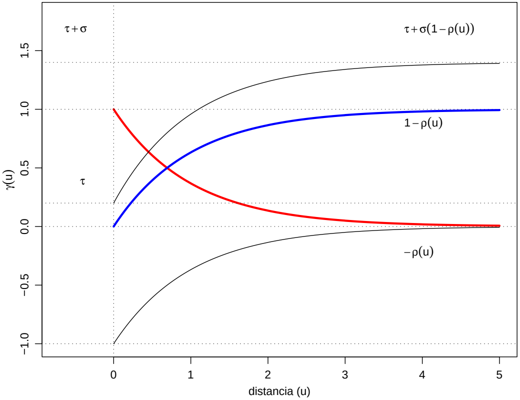
- A **VARIÂNCIA** mede, de certa maneira, o quão diferentes são essas duas medidas.
- $(Y(x_i) - Y(x_j))$ dá a diferença de duas observações separadas por uma distância $u_{ij} = \|x_i - x_j\|$
- A variância da diferença das medidas irá descrever as similaridades e dissimilaridades entre variáveis tomadas em localizações diferentes.



AS CONTAS

- $Var(Y(x_i) - Y(x_j)) = Var(Y(x_i)) + Var(Y(x_j)) - 2\ Cov(Y(x_i); Y(x_j))$
  - $Var(Y(x_i)) = Var(\mu_i + S(x_i) + \delta_i) = \sigma^2 + \tau^2$
  - $Cov(Y(x_i); Y(x_j)) = \sigma^2 \rho(u_{ij})$
- $Var(Y(x_i) - Y(x_j)) = 2(\tau^2 + \sigma^2(1 - \rho(u_{ij})))$
- $\frac{1}{2} Var(Y(x_i) - Y(x_j)) = \tau^2 + \sigma^2(1 - \rho(u_{ij}))$
- $\gamma(u_{ij}) = \tau^2 + \sigma^2(1 - \rho(u_{ij}))$ **SEMIVARIÂNCIA**

SEMIVARIÂNCIA E SEMIVARIOGRAMA



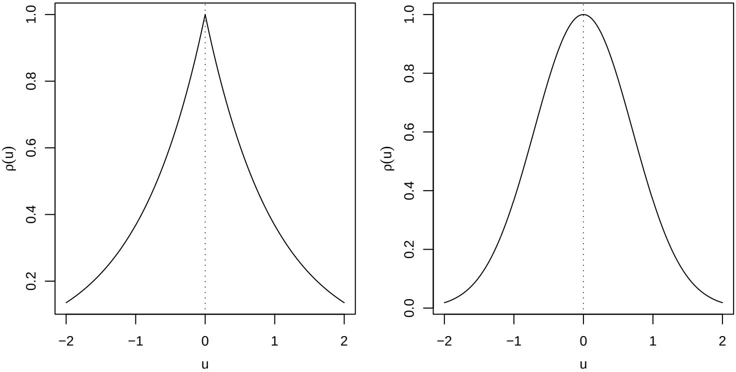
$$\gamma(u_{ij}) = \tau^2 + \sigma^2(1 - \rho(u_{ij}))$$

A FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO

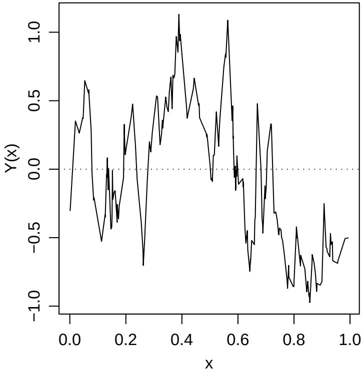
No modelo $Y(x_i) = \mu_i + S(x_i) + \delta_i$, a função de correlação é a **LEI** que estabelece a associabilidade entre os pares observações geográficas do processo em estudo. Os principais aspectos dessa função são:

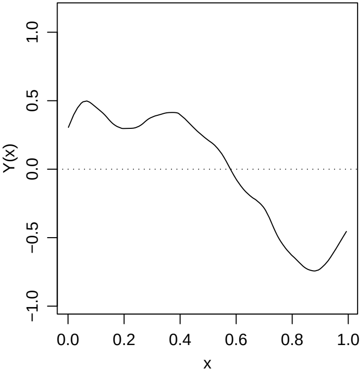
- CONTINUIDADE
- DIFERENCIABILIDADE
- $\rho(0) \leq 1$ e $\lim_{u \to \infty} \rho(u) = 0$, tipicamente

A FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO: DIFERENCIABILIDADE



A forma da função de correlação determina o quão suave pode ser a variação da informação ao se dela afastar.



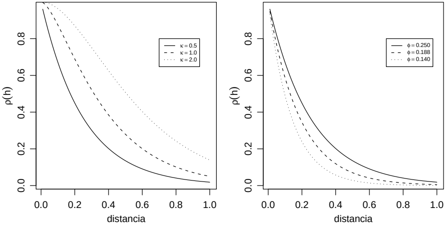


TRANSEÇÃO (Ex. Canaleta de irrigação)

FUNÇÃO DE CORRELAÇÃO DE MATÉRN

$$\rho(u,\phi,\kappa) = \frac{1}{2^{\kappa-1}\Gamma(\kappa)} \left(\frac{u}{\phi}\right)^2 K_\kappa\left(\frac{u}{\phi}\right)$$

onde K_κ é a função modificada de Bessel (ver Abramowitz, 1965)



- κ é um parâmetro de diferenciabilidade da função;
- ϕ é um parâmetro de alcance prático para a função.

MÉTODOS DE ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO

- **EXPLORATÓRIO**:
  Feito sobre os pontos de um semivariograma experimental;
- **MÍNIMOS QUADRADOS**:
  Feito sobre os pontos de um semivariograma experimental;
- **MÁXIMA VEROSSIMILHANÇA**:
  Feito sobre o conjunto de observações;
- **BAYESIANO**:
  Método computacionalmente intensivo;

O método consiste em maximizar a função de log-Verossimilhança para a função distribuição conjunta $f_Y(y_1, y_2, \ldots, \; y_n)$

$$
\begin{aligned}
l(\beta, \tau^2, \sigma^2, \phi, y) \quad \propto \quad & -\frac{n}{2}\log(\sigma^2\mathbf{R}(\phi) + \tau^2\mathbf{I}) - \\
& -\frac{1}{2}(\mathbf{y} - \mathbf{D}\beta)^T(\sigma^2\mathbf{R}(\phi) + \tau^2\mathbf{I})^{-1}(\mathbf{y} - \mathbf{D}\beta)
\end{aligned}
$$

- $\mathbf{Y} \sim MVN(\mathbf{D}\beta, \sigma^2\mathbf{R}(\phi) + \tau^2\mathbf{I})$
  Processo gaussiano multivariado.

- Suposição ou conjectura sobre um resultado geo-localizado Y, desconhecido, que poderá ou não ocorrer conforme o valor predito;
- Prever um resultado em uma localização, com base em um número discreto (normalmente pequeno) de observações obtidas dispersamente na área (Krige, 1951);
- Estimar, por regressão linear, baseado naquele modelo proposto inicialmente (Goovaerts, 1997).

$$\hat{Y}(x_0) = \sum_{i=1}^{n} \omega_i Y(x_i) \qquad \text{onde } \omega_{nx1} = C^{-1}_{n\ x\ n} D_{n\ x\ 1}$$

- C: matriz de autocovariância/autocorrelação baseada nos pontos conhecidos do processo Y;
- D: vetor de correlações entre os pontos conhecidos e um ponto x_0 onde se deseja ser estimado $\hat{Y}(x_0)$;
- ω: peso aplicado a cada ponto $Y(x_0)$ tal que $\sum_{i=1}^{n} \omega_i = 1$.

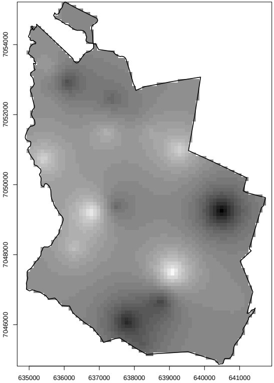
Journel & Huijbregts (1978) e Isaaks & Srivastava (1989)

$$E(\hat{Y}(x_0)|Y) = \mu + \mathbf{r}'(\tau^2\mathbf{I} + \sigma^2\mathbf{R}(\phi))^{-1}(\mathbf{y} - \mu\mathbf{1})$$

- μ: média dos valores observados;
- $\mathbf{r}$: vetor de correlações entre os pontos conhecidos e um ponto x_0 onde se deseja que seja estimado $\hat{y}(x_0)$;
- $\mathbf{y}$: valores observados do processo **Y**

Stein (1999); Schabenberger & Gotway (2005) e Diggle & Ribeiro Jr. (2006)

MAPA DE PREDIÇÃO (MOBASA)



Mapa de predição por krigagem ordinária em 7176 coordenadas a partir de 18 locais observados.

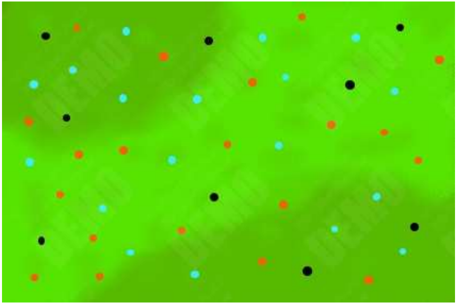
GEOESTATÍSTICA

MULTIVARIADA

Principais aplicações ...

- Associar a variação espacial de uma variável primária com um conjunto de variáveis secundárias, não necessariamente posicionadas nas mesmas coordenadas;
- Útil para ampliar a quantidade de informações de uma variável primária de difícil medição com informações de variáveis "baratas" que sejam correlacionadas com ela.

Dados geoestatísticos multivariados não precisam estar localizados nas mesmas coordenadas para todas as variáveis.



Pontos azuis representam locais onde foi medida a variável Y_1;

Pontos vermelhos representam locais onde foi medida a variável Y_2;

Pontos pretos representam locais onde foram medidas as variáveis Y_1 e Y_2;

Para Journel e Huijbregts (1978) um fenômeno regionalizado por ser representado através de algumas variáveis intercorrelacionadas, estudando-as simultaneamente.
Sob a hipótese de estacionariedade, define a covariância cruzada e o variograma cruzado como:

- $C_{kk'}(h) = E\left\{Z_{k'}(x+h)\ Z_k(x)\right\} - \mu_{k'}\mu_k$
- $2\gamma_{kk'} = E\left\{[Z_{k'}(x+h) - Z_{k'}(x)][Z_k(x+h) - Z_k(x)]\right\}$

Para Isaaks e Srivastava (1989) e Goovaerts (1997) a covariância cruzada e a função de correlação cruzada descrevem a relação espacial entre duas variáveis. Seus estimadores são:

- $C_{uv}(h) = \frac{1}{N(h)} \sum_{(ij)|h_{ij}=h} u_i v_j - m_{u_{(-h)}} m_{v_{(+h)}}$

  $m_{u_{(-h)}} = \frac{1}{N(h)} \sum_{i|h_{ij}=h} u_i$ e $m_{v_{(+h)}} = \frac{1}{N(h)} \sum_{j|h_{ij}=h} v_j$

- $\gamma_{uv}(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{(ij)|h_{ij}=h} (u_i - u_j)(v_i - v_j)$

Para Diggle e Ribeiro Jr (2007)

Y_1: Processo gaussiano estacionário primário.

Y_2: Processo gaussiano estacionário secundário.

Modelo Bivariado plausível

$$\begin{cases} Y_{1i} = \mu_1 + \sigma_{01} R_0(\phi_a) + \sigma_1 R_1(\phi_b) + \tau_1 & i = 1, 2, \ldots, m \\ Y_{2i} = \mu_2 + \sigma_{02} R_0(\phi_a) + \sigma_2 R_2(\phi_c) + \tau_2 & j = 1, 2, \ldots, n \end{cases}$$

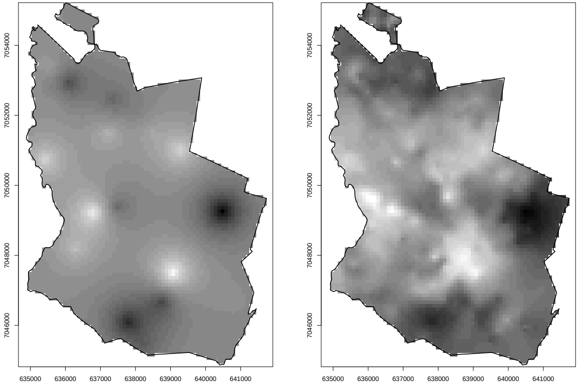
$$\mathbf{\Sigma} = \left(\begin{array}{c|c} Cov(Y_1; Y_1) & Cov(Y_1; Y_2) \\ \hline Cov(Y_2; Y_1) & Cov(Y_2; Y_2) \end{array} \right)$$

PREDIÇÃO ESPACIAL BIVARIADA

- Predição de uma variável Y_1 com o "apoio" de uma segunda variável Y_2 (co-variável) tomada nas mesmas coordenadas na primeira. (região, p.ex.);
- Predição de uma variável de interesse primário Y_1 em coordenadas de uma segunda variável Y_2, sabidamente correlacionada com a primeira (Co-Krigagem).

- Estimar a função a função de correlação e os parâmetros de um modelo bivariado (likBGCC) – *Bivariate Gaussian Common Componente Model* (no geoR);
- Predizer valores da variável primária nas coordenadas da variável secundária (ampliação);
- Predizer valores da variável primária em coordenadas compatíveis com a produção de um mapa.

MAPA DE PREDIÇÃO (MOBASA)



Mapa de predição por krigagem ordinária em 7176 coordenadas a partir de 18 locais observados (esquerda) e por co-krigagem, a partir de 555 locais da segunda variável.

TOOLBOX

- Linguagem e ambiente operacional **R**;
- Pacote geoestatístico **geoR**;
- Sistema operacional GNU/Linux.

Recursos computacionais sob licença GPL (*General Public Licence*)

REFERÊNCIAS

- ABRAMOWITZ, M. & STEGUN I., *Handbook of Mathematical Functions*. 9.ed., New York: Dover, 1965.
- DIGGLE, P. J. & RIBEIRO Jr P. J., *Model-based Geostatistics*. USA: Springer Series in Statistics, 2006.
- GOOVAERTS, P., *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. Oxford:, Oxford University Press, 1997.
- ISAAKS, E. H. & R. SRIVASTAVE, M., *Applied GEostatistics*. New York: Oxford University, 1989.
- JOURNEL A. G. & HUIJBREGTS Ch. J., *Mining Geostatistics*. London: Academic Press, 1978.
- KRIGE D. G., *A Statistical Approach to Some Mine Valuations and Allied Problems at Witwatersrand*. University of Witwatersrand, 1951. Master's thesis.

REFERÊNCIAS

- *R: A Language and Environment for Statistical Computing*, R Foundation for Statistical Computing, Vienna:, 2006, http://www.R-project.org.
- RIBEIRO Jr, P. J. & DIGGLE P. J., geoR: A package for geostatistical analysis, *R-NEWS*, v01, n2, 2001, http://cran.r-project.org/doc/Rnews.
- SCHABENBERGER O. & GOTWAY, A., *Statistical Methods for Spatial Data Analysis*, New York: Chapman-Hall, 2005.
- STEIN, M. L. *Interpolation of Spatial Data: Some Theory for Kriging*. New York: Springer series in statistics. 1999.
- WAKERNAGEL, H., *Multivariate geostatistics: an introduction with applications*, 3.ed., Germany: Springer series in statistics, 2003.