

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA NATUREZA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ESTATÍSTICA

FERNANDA DE BASTIANI

***INFLUÊNCIA LOCAL EM MODELOS ESPACIAIS LINEARES COM
DISTRIBUIÇÃO DA FAMÍLIA DE CONTORNOS ELÍPTICOS***

Orientadora: Dra. Audrey Helen Mariz de Aquino Cysneiros

Co-orientador: Dr. Miguel Angel Uribe Opazo

RECIFE - PE
FEVEREIRO - 2012

FERNANDA DE BASTIANI

***INFLUÊNCIA LOCAL EM MODELOS ESPACIAIS LINEARES COM
DISTRIBUIÇÃO DA FAMÍLIA DE CONTORNOS ELÍPTICOS***

Dissertação submetida como requisito parcial
para obtenção do grau de Mestre em Estatística
pela Universidade Federal de Pernambuco.

Orientadora: Dra. Audrey Helen Mariz de
Aquino Cysneiros

Co-orientador: Dr. Miguel Angel Uribe Opazo

RECIFE - PE
FEVEREIRO - 2012

Catálogo na fonte
Bibliotecária Jane Souto Maior, CRB4-571

De Bastiani, Fernanda

Influência local em modelos espaciais lineares com
distribuição da família de contornos elípticos / Fernanda
De Bastiani - Recife: O Autor, 2012.

xv, 137 folhas: il., fig., tab.

Orientador: Audrey Helen Mariz de Aquino Cysneiros.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN, Estatística, 2012.

Inclui bibliografia e apêndice.

1. Processos Estocásticos. 2. Estatística Espacial. 3.
Distribuições Elípticas. 4. Outliers. I. Cysneiros, Audrey Helen
Mariz de Aquino (orientadora). II. Título.

519.23

CDD (23. ed.)

MEI2012 - 016

Universidade Federal de Pernambuco
Pós-Graduação em Estatística

16 de fevereiro de 2012

Nós recomendamos que a dissertação de mestrado de autoria de

Fernanda De Bastiani

intitulada

"Influência local em modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos"

seja aceita como cumprimento parcial dos requerimentos para o grau de Mestre em Estatística.

Coordenador da Pós-Graduação em Estatística

Banca Examinadora:

Miguel Angel Uribe Opazo (UNIOESTE) co-orientador

Gauss Moutinho Cordeiro

Francisco José de Azevedo Cysneiros

Este documento será anexado à versão final da dissertação.

Dedico este trabalho com muito amor aos meus avós (em memória), aos meus pais Nelson e Angélica e ao meu irmão Felipe.

Agradecimentos

A Deus, que concebeu a vida e a inspiração necessária para terminar este trabalho.

À minha orientadora Prof. Dra. Audrey Helen Mariz de Aquino Cysneiros os maiores e mais sinceros agradecimentos pela confiança em mim depositada e pelo incentivo durante esta etapa de minha vida. Ao meu co-orientador Prof. Dr. Miguel Angel Uribe Opazo por me incentivar a seguir a área de estatística, por acreditar em meu trabalho e especialmente pelo constante apoio durante o desenvolvimento deste trabalho. Agradeço muito aos meus dois orientadores que sabiamente souberam exigir de mim e tornaram possível escrever esta dissertação.

Aos professores do Departamento de Estatística da UFPE, que contribuíram para minha formação. À professora Claudia Lima que me incentivou e soube me dar força nos momentos de dificuldade. Ao professor Manuel Galea, pelo seu apoio e incentivo.

À secretária Valéria, por sua atenção e carinho, por sempre estar disposta em colaborar para que tudo corresse bem, mesmo nos momentos em que eu estava distante.

Aos colegas do Laboratório de Estatística Espacial da Unioeste/Cascavel/PR e aos colegas da pós-graduação em estatística da UFPE/Recife/PE, que compartilharam comigo diversos momentos do desenvolvimento do meu trabalho. À CAPES pelo apoio financeiro.

À banca examinadora pelas sugestões e contribuições não só para este trabalho, mas também como ideais para trabalhos futuros.

Ao Marcio e Auxiliadora, que tenho muito carinho e admiração, que me deram muito apoio. Talvez eles não imaginem o quanto foram importante na minha caminhada do mestrado. E agradeço também aos demais colegas e amigos que não são citados aqui.

Em forma muito especial, aos meus pais e meu irmão, que sempre me incentivaram a continuar, principalmente nos momentos difíceis, e que souberam compreender os momentos em que fiquei ausente do seu convívio. E não poderia deixar de lembrar dos meus queridos avós (em memória), principalmente da minha amável Vó Rosalina.

Na verdade, faltariam as palavras para expressar o grande amor e gratidão que sinto por vocês. Simplesmente, obrigada por existirem em minha vida.

Sumário

Lista de Figuras	viii
Lista de Tabelas	xiii
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvi
1 INTRODUÇÃO	1
2 DISTRIBUIÇÕES DA FAMÍLIA DE CONTORNOS ELÍPTICOS	3
3 GEOESTATÍSTICA	8
3.1 Teoria das Variáveis Regionalizadas	9
3.2 Modelos Espaciais Lineares	10
3.2.1 Modelos Teóricos	14
3.2.1.1 Modelo Esférico	14
3.2.1.2 Modelo Exponencial	15
3.2.1.3 Modelo Gaussiano	15
3.2.1.4 Modelo Exponencial Potência.....	16
3.2.1.5 Modelo Família Matérn	16
3.3 Modelos Espaciais Lineares com Distribuição da Família de Contornos Elípticos	18
3.3.1 Matriz de Informação Observada	20
3.3.2 Erro Padrão das Estimativas dos Parâmetros	21
3.4 Krigagem	22
3.4.1 Krigagem Ordinária	22
3.4.2 Krigagem Universal	25
3.5 Critérios de Validação do Modelo	26
3.5.1 Validação Cruzada	26
3.5.2 Máximo valor do logaritmo da função de verossimilhança	27
4 DIAGNÓSTICOS DE INFLUÊNCIA	29
4.1 Influência Local.....	29
4.1.1 Influência Local em Modelos Espaciais Lineares com Distribuição da Família de Contornos Elípticos	33

4.1.2	Influência Local na Resposta	34
4.1.2.1	Perturbação Aditiva	34
4.1.2.2	Perturbação de Zhu	35
4.1.3	Influência Local na Matriz de Covariância	35
4.1.4	Influência Local no Preditor Linear	36
4.2	Alavanca Generalizada	37
4.3	Curvatura Normal Conformal	39
5	CONSIDERAÇÕES COMPUTACIONAIS	40
5.1	Estimação de Parâmetros por Máxima Verossimilhança	40
5.1.1	Distribuição Normal	41
5.2	Método de Otimização Não-Linear	42
5.2.1	BFGS	43
5.2.2	L-BFGS-B	44
5.3	Processos Espaciais	44
6	SIMULAÇÕES	46
6.1	Distribuição Normal	47
6.1.1	Modelo Exponencial para a Estrutura da Matriz Σ	47
6.1.2	Modelo Gaussiano para a Estrutura da Matriz Σ	50
6.1.3	Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 0$ para a estrutura da matriz Σ	52
6.1.4	Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 5$ para a estrutura da matriz Σ	55
6.2	Distribuição t -Student	58
6.2.1	Modelo Exponencial para a estrutura da matriz Σ	59
6.2.2	Modelo Gaussiano para a Estrutura da Matriz Σ	61
6.2.3	Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 0$ para a Estrutura da Matriz Σ	64
6.2.4	Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 5$ para a Estrutura da Matriz Σ	67
6.3	Distribuição Exponencial Potência	70
6.3.1	Modelo Exponencial para a Estrutura da Matriz Σ	71
6.3.2	Modelo Gaussiano para a Estrutura da Matriz Σ	73
6.3.3	Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 0$ para a Estrutura da Matriz Σ	76
6.3.4	Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 5$ para a Estrutura da Matriz Σ	79
6.4	Considerações gerais	82
7	APLICAÇÕES A DADOS EXPERIMENTAIS	85
7.1	Conjunto de dados do teor de Ferro - Ano agrícola de 2010/2011	86
7.1.1	Distribuição Normal	89
7.1.1.1	Influência Local - perturbação aditiva	90

7.1.1.2	Influência Local - perturbação de Zhu	91
7.1.1.3	Alavanca Generalizada	92
7.1.1.4	Ajuste sem observação influente	93
7.1.1.5	Mapas Temáticos	94
7.1.2	Distribuição <i>t</i> -Student multivariada com 5 graus de liberdade	96
7.1.2.1	Influência Local - perturbação aditiva	96
7.1.2.2	Influência Local - perturbação de Zhu	97
7.1.2.3	Alavanca Generalizada	98
7.1.3	Análise sem o ponto #96	99
7.1.4	Mapas tempáticos	99
7.1.5	Distribuição Exponencial Potência com $\lambda = 0,8$	101
7.1.5.1	Influência Local - perturbação aditiva	101
7.1.5.2	Influência Local - perturbação de Zhu	102
7.1.5.3	Alavanca Generalizada	103
7.1.5.4	Mapas Temáticos	104
7.1.6	Considerações gerais	106
7.2	Conjunto de dados de Produtividade com covariáveis - Ano agrícola de 2010/2011	106
7.2.1	Distribuição Normal	108
7.2.1.1	Influência Local - perturbação aditiva	109
7.2.1.2	Influência Local - perturbação de Zhu	110
7.2.1.3	Alavanca Generalizada	111
7.2.1.4	Mapas temáticos	111
7.2.2	Distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade	112
7.2.2.1	Influência Local - perturbação aditiva	113
7.2.2.2	Influência Local - perturbação de Zhu	114
7.2.2.3	Alavanca Generalizada	115
7.2.3	Mapas Temáticos	115
7.2.4	Exponencial Potência com $\lambda = 0,8$	117
7.2.4.1	Influência Local - perturbação aditiva	117
7.2.4.2	Influência Local - perturbação de Zhu	118
7.2.4.3	Alavanca Generalizada	119
7.2.4.4	Mapas Temáticos	120
7.2.5	Considerações Gerais	121

CONSIDERAÇÕES FINAIS 122

Apêndice A. Matriz de Informação Observada 123

Apêndice B. Derivadas para algumas funções de covariância	125
Apêndice C. Esquemas de Perturbação	127
Apêndice D. Derivada da Raiz Quadrada $\Sigma^{1/2}$	130
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	131

Lista de Figuras

Figura 1	Direções utilizadas na geoestatística em análises de dependência espacial. . .	10
Figura 2	Relação entre a covariância espacial $C(\delta)$ e a semivariância $\gamma(\delta)$	12
Figura 3	Gráficos da função covariância (a) para diferentes modelos e (b) para os modelos da família Matérn para diferentes valores de κ	18
Figura 4	Gráfico de Influência (Verbeke e Molenberghs, 2000).	31
Figura 5	Grade amostral base para o conjunto de dados simulados.	46
Figura 6	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição normal.	47
Figura 7	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.	48
Figura 8	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura da matriz de Σ do modelo exponencial e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.	49
Figura 9	Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição normal.	49
Figura 10	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial.	50
Figura 11	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.	51
Figura 12	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.	52
Figura 13	Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal.	52
Figura 14	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$).	53
Figura 15	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.	54
Figura 16	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.	55
Figura 17	Gráfico da alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ com distribuição normal.	55
Figura 18	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do	

	modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$).	56
Figura 19	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.	57
Figura 20	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1$, e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.	58
Figura 21	Gráficos da alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição normal.	58
Figura 22	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ graus de liberdade.	59
Figura 23	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura Σ do modelo exponencial e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.	60
Figura 24	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.	61
Figura 25	Gráficos de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ graus de liberdade.	61
Figura 26	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ graus de liberdade.	62
Figura 27	Gráficos de influência local para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo modelo gaussiano e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.	63
Figura 28	Gráficos de influência local para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo modelo gaussiano e distribuição <i>t-Student</i> $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.	64
Figura 29	Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ graus de liberdade.	64
Figura 30	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ graus de liberdade.	65
Figura 31	Gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.	66
Figura 32	Gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição <i>t-Student</i> com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.	67
Figura 33	Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo família	

	Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade. . .	67
Figura 34	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.	68
Figura 35	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.	69
Figura 36	Gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.	70
Figura 37	Gráficos de alavanca generalizada para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.	70
Figura 38	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência $\lambda = 0, 8$	71
Figura 39	Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação aditiva.	72
Figura 40	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu.	73
Figura 41	Gráficos de alavanca generalizada com estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$	73
Figura 42	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$	74
Figura 43	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação aditiva.	75
Figura 44	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu.	76
Figura 45	Gráfico de alavanca generalizada com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência $\lambda = 0, 8$	76
Figura 46	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com estrutura da matriz Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$).	77
Figura 47	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação aditiva.	78
Figura 48	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do mo-	

	delo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu.	79
Figura 49	Gráfico de alavanca generalizada para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$	79
Figura 50	(a) <i>Boxplot</i> e (b) <i>Postplot</i> para os dados simulados com com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$	80
Figura 51	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação aditiva.	81
Figura 52	Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu.	82
Figura 53	Gráficos de alavanca generalizada com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$	82
Figura 54	grade amostral.	85
Figura 55	(a) Gráfico <i>boxplot</i> e (b) <i>postplot</i> dos dados de teor de Ferro.	87
Figura 56	Semivariogramas direcionais do teor de Ferro.	88
Figura 57	Envelope Simulado por Monte Carlo.	89
Figura 58	Gráficos de influência para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.	91
Figura 59	Gráficos de influência para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.	92
Figura 60	Gráfico da alavanca generalizada (GL) para o modelo gaussiano com distribuição normal.	92
Figura 61	Mapa temático do Ferro para a distribuição normal considerando cinco classes de mesma amplitude.	95
Figura 62	Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade considerando a perturbação aditiva.	97
Figura 63	Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu.	98
Figura 64	Gráfico da alavanca generalizada para o modelo exponencial e distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade.	98
Figura 65	Mapa temático do Ferro para a distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade considerando cinco clases de mesma amplitude.	100
Figura 66	Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$, considerando a perturbação aditiva.	102

Figura 67	Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando a perturbação de Zhu.	103
Figura 68	Gráfico da alavanca generalizada para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$	103
Figura 69	Mapas temáticos do Ferro para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando cinco clases de mesma amplitude (a) com todos os pontos (b) sem a observação #96.	105
Figura 70	Grade amostral para o estudo da Produtividade com covariáveis.	107
Figura 71	Envelope simulado para os dados de produtividade (<i>Prod</i>) em função das covariáveis <i>Ca</i> , <i>K</i> e <i>P</i>	108
Figura 72	Gráficos de influência para o modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.	110
Figura 73	Gráficos de influência para o modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.	111
Figura 74	Gráfico da alavanca generalizada para o modelo gaussiano com distribuição normal.	111
Figura 75	Mapa temático da <i>Prod</i> para a distribuição normal considerando quatro clases de mesma amplitude.	112
Figura 76	Gráficos de influência para o modelo gaussiano e distribuição <i>t</i> -Student com $v = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação aditiva.	114
Figura 77	Gráficos de influência para os dados simulados com o modelo gaussiano e distribuição <i>t</i> -Student com $v = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu.	115
Figura 78	Gráfico da alavanca generalizada para o modelo gaussiano com distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade.	115
Figura 79	Mapa temático da <i>Prod</i> para a distribuição <i>t</i> -Student com 5 graus de liberdade considerando 4 clases de mesma amplitude.	116
Figura 80	Gráficos de influência para os dados simulados com o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$ e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando a perturbação aditiva.	118
Figura 81	Gráficos de influência para os dados simulados com o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$ e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando a perturbação de zhu.	119
Figura 82	Gráfico da alavanca generalizada para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$ e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$	119
Figura 83	Mapa temático da <i>Prod</i> para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando 4 classes de mesma amplitude.	120

Lista de Tabelas

Tabela 1	Distribuições pertencentes à classe das distribuições de contornos elípticos, onde c é uma constante normalizadora.	5
Tabela 2	Valor de ξ para algumas distribuições de contornos elípticos.	6
Tabela 3	Valores de $-2V_{g(u)}$ para algumas distribuições de contornos elípticos.	19
Tabela 4	Pontos detectados pelos gráficos de influência referentes aos dados simulados com distribuição normal.	83
Tabela 5	Pontos detectados pelos gráficos de influência referentes aos dados simulados com distribuição t -Student com $v = 5$ graus de liberdade.	83
Tabela 6	Pontos detectados pelos gráficos de influência referentes aos dados simulados com distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$. .	83
Tabela 7	Estimativa por MV dos parâmetros obtidos no ajuste dos modelos espaciais para os dados simulados.	84
Tabela 8	Estatísticas descritivas dos dados de teor de Fe	86
Tabela 9	Resumo das informações sobre o semivariograma em uma distância δ semivariância $\gamma(\delta)$ e número de pares $N(\delta)$	88
Tabela 10	Estimativa dos parâmetros obtidos por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe	90
Tabela 11	Critérios para seleção do melhor ajuste para a variável Fe	90
Tabela 12	Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe considerando a distribuição normal, sem a observação #96.	93
Tabela 13	Critérios para seleção do melhor ajuste para a variável Fe considerando a distribuição normal, sem a observação #96.	93
Tabela 14	Parâmetros estimados por MV escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe	94
Tabela 15	Matriz de Erros da quantidade de área em ha para a variável Fe	94
Tabela 16	Medidas de Exatidão para a variável Fe considerando a distribuição normal.	96
Tabela 17	Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.	96
Tabela 18	Parâmetros estimados por MV obtidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe sem a observação #96, considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.	99
Tabela 19	Parâmetros estimados por MV escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe	100
Tabela 20	Matriz de Erros para a variável Fe	101

Tabela 21	Medidas de Exatidão para a variável Fe considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.	101
Tabela 22	Parâmetros estimados obtidos por MV escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$	104
Tabela 23	Matriz de Erros para a variável Fe	105
Tabela 24	Medidas de Exatidão para a variável Fe considerando a distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$	105
Tabela 25	Estatísticas descritivas dos dados de $Prod [t ha^{-1}]$ e suas covariáveis Ca, K e P	107
Tabela 26	Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais lineares para a variável $Prod [t ha^{-1}]$ em função das covariáveis Ca, K e P , considerando a distribuição normal.	108
Tabela 27	Crítérios para seleção do melhor ajuste para a variável $Prod [t ha^{-1}]$ em função das covariáveis Ca, K e P , considerando a distribuição normal.	109
Tabela 28	Parâmetros estimados no ajuste dos modelos espaciais para a variável $Prod$ em função das covariáveis Ca, K e P , e a distribuição normal.	112
Tabela 29	Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável $Prod$ em função das covariáveis Ca, K e P , considerando a distribuição t -Student com $v = 5$ graus de liberdade.	113
Tabela 30	Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável $Prod$ considerando as covariáveis Ca, K e P , considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.	116
Tabela 31	Medidas de Exatidão para a variável $Prod$ em função das covariáveis Ca, K e P e a distribuição t -Student com $v = 5$ graus de liberdade.	117
Tabela 32	Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável $Prod$ e as covariáveis Ca, K e P , considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$	117
Tabela 33	Parâmetros escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável $Prod$ considerando as covariáveis Ca, K e P , considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$	120
Tabela 34	Medidas de Exatidão para a variável $Prod$ considerando as covariáveis Ca, K e P e a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$	121

RESUMO

O estudo de modelos estatísticos que possam levar em consideração as diversas características de fenômenos cada vez mais complexos, são de grande importância. Os modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos constituem uma alternativa muito atrativa para explicar a estrutura de variabilidade espacial, além de ter a flexibilidade de estender a classe dos erros para outras distribuições além da normal, que podem acomodar melhor as observações atípicas. Apesar disto, os modelos ainda assim podem sofrer efeito de observações influentes, sendo necessário estudos de sensibilidade nesta classe. Esses procedimentos também permitem selecionar modelos dentro da classe de contornos elípticos que se comportam adequadamente de acordo com o tipo de perturbação considerada, o que é fundamental para a modelagem da estrutura de dependência espacial na área de geoestatística, estimando os parâmetros que a definem e que são utilizados na interpolação de valores em locais não amostrados pela técnica de krigagem possibilitando a construção de mapas temáticos. O objetivo deste trabalho foi desenvolver métodos de influência local em modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos para dois tipos de perturbação na variável resposta, bem como avaliar a influência na matriz de covariância, no preditor linear e a alavanca generalizada. Realizaram-se estudos de simulação e aplicação a dados reais utilizando diferentes distribuições e diferentes modelos na estrutura da matriz de covariância, possibilitando avaliar a importância da metodologia desenvolvida.

Palavras chave: máxima verossimilhança, geoestatística, variabilidade espacial.

ABSTRACT

The study of statistical models that can take into account the various characteristics of increasingly complex phenomena are of great importance. Spatial linear models with distribution of the family of elliptical contours are a very attractive alternative to explain the structure of spatial variability, and they have the flexibility to extend the class of errors for other distributions besides the normal, which can better accommodate the atypical observations. Nevertheless, the models can still be affected by influential observations, so sensitivity studies are needed in this class. These procedures also allow to select models within the class of elliptical contours that behaviour properly according to the type of perturbation considered, which is essential for modeling the structure of spatial dependence in geostatistics, estimating the parameters that define this structure and are used in the interpolation of values at unsampled locations by kriging technique allowing the construction of thematic maps. The objective of this study was to develop methods of local influence in spatial linear models with distribution of the family of elliptical contours for two types of perturbation in the response variable and to assess the influence on the covariance matrix, the linear predictor and the generalized leverage. Were carried out simulation studies and application to real data using different models and different distributions in the structure of the covariance matrix, allowing you to evaluate the importance of the methodology developed.

Keywords: maximum likelihood, geostatistics, spatial variability.

1 INTRODUÇÃO

A noção de métodos geoestatísticos é utilizada em muitas áreas do conhecimento para avaliar dados correlacionados espacialmente. A geoestatística se apresenta como um método que usa procedimentos estatísticos aplicados a problemas cujos dados provem de fenômenos naturais e que são espacialmente distribuídos e autocorrelacionados. Isto é, além do valor obtido para determinada variável, leva-se em consideração a sua posição que pode ser expressa por um sistema de coordenadas. Desta maneira, descreve-se o comportamento do evento estatístico pelas diferenças entre as informações obtidas em função da distância entre os elementos amostrais.

Existem na literatura diversos estudos geoestatísticos baseados na estimação dos parâmetros e escolha do modelo por meio de métodos de ajuste. Sabe-se que estes métodos podem fornecer informação sobre os dados somente até certo ponto, isto é, não é possível por exemplo, fazer estudos de inferência estatística e nem mesmo análise de diagnósticos de influência. Mas, já é possível encontrar estudos que assumem que os dados tem distribuição normal e para solucionar as situações nas quais esta suposição não é satisfeita, tem-se utilizado como alternativa a transformação das variáveis. No entanto, isto pode gerar alguns problemas como a interpretação das variáveis transformadas na análise.

Sendo assim, é importante o estudo de novas distribuições que possam levar em consideração as diversas características dos estudos de fenômenos cada vez mais complexos. Os modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos constituem uma alternativa muito atrativa para explicar a estrutura de variabilidade espacial, além de ter a flexibilidade de estender a classe dos erros para outras distribuições além da normal, que permitem reduzir a influência de observações atípicas incorporando parâmetros adicionais que ajustam a curtose da distribuição dos dados, isto é, acomodam melhor estas observações.

Apesar desta característica das distribuições da família de contornos elípticos, ainda assim os modelos podem sofrer efeito de pontos influentes, havendo então a necessidade de realizar estudos de sensibilidade nesta classe, por meio da técnica conhecida como influência local, que consiste em verificar a existência de pontos que sob pequenas perturbações no modelo ou nos dados causam variações desproporcionais nos resultados. Esses procedimentos também permitem selecionar modelos dentro da classe de contornos elípticos que se comportam adequadamente de acordo com o tipo de perturbação considerada.

Neste contexto, o objetivo deste trabalho é propor o estudo da estrutura de dependência espacial por meio dos modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos, bem como aplicar a metodologia de influência local nestes modelos para avaliar a sen-

sibilidade das estimativas de máxima verossimilhança sob diferentes esquemas de perturbação.

O trabalho está organizado da seguinte forma. O capítulo 2 visa descrever as características principais da família de distribuições de contornos elípticos. O capítulo 3 apresenta os conceitos fundamentais da geoestatística, os principais modelos estudados, assim como os cálculos para a função escore e a matriz de informação de Fisher e as técnicas para validação dos modelos e construção dos mapas temáticos. O capítulo 4 traz o desenvolvimento do método de influência local para os modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos considerando diferentes esquemas de perturbação na variável resposta. O capítulo 5 descreve em detalhes a idéia e os elementos essenciais para construir um procedimento adequado, que permita estimar todos os parâmetros envolvidos nos modelos em estudo. Os capítulos 6 e 7 apresentam respectivamente, resultados de simulação e aplicação a dados experimentais considerando as distribuições normal, t -Student e exponencial potência. Finalmente, encontram-se as conclusões gerais e as perspectivas futuras deste trabalho.

2 DISTRIBUIÇÕES DA FAMÍLIA DE CONTORNOS ELÍPTICOS

Estudos de inferência estatística baseados na distribuição normal são sensíveis a observações atípicas e erros que tem distribuição com caudas mais pesadas do que a mesma. Assim, é de grande interesse estudar famílias de distribuições capazes de modelar diferentes graus de assimetria e curtose, sendo uma alternativa no modelamento de conjuntos de dados envolvendo erros com distribuição diferente da normal. Rogers e Tukey (1972) apresentam um estudo sobre distribuições simétricas com caudas mais longas. Lange *et al.* (1989) modelam estatísticas robustas utilizando a distribuição *t*-Student. Kashid e Kulkarni (2003) tratam da seleção de subconjuntos em regressão linear múltipla com erros de distribuição com caudas mais pesadas do que a normal.

A família de distribuições de contornos elípticos ocupam um importante e crescente lugar na teoria estatística, e formam uma classe de famílias de distribuições que preservam a estrutura simétrica da distribuição normal, e que podem ser úteis na construção de modelos quando a suposição de normalidade não pode ser aplicada. As distribuições como a *t*-Student, Slash e Exponencial Potência, são exemplos de distribuições de contornos elípticos que possuem diferentes graus de assimetria e curtose.

Apesar do interesse relativamente recente, as famílias de distribuições de contornos elípticos tem sido bastante abordada na literatura estatística por diversos autores, por exemplo; Kelker (1970), Cambanis *et al.* (1981), Fang e Zhang (1990), Fang *et al.* (1990), Gupta e Varga (1993), Arellano-Valle e Bolfarine (1995), Galea *et al.* (2003), Osório *et al.* (2007) e Ibacache-Pulgar (2011).

Definição 1.1 O vetor aleatório $\mathbf{Z} \in \mathbb{R}^n$ ($n \geq 2$) segue uma distribuição de contornos elípticos se sua função característica pode ser expressa por

$$E[\exp(it^\top \mathbf{Z})] = \exp(it^\top \boldsymbol{\mu})\psi(\mathbf{t}^\top \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{t}), \quad (2.1)$$

em que $E[.]$ denota o valor esperado, $i = \sqrt{-1}$, $\mathbf{t} = (t_1, \dots, t_n)^\top \in \mathbb{R}^n$, $\boldsymbol{\mu} (n \times 1)$ denota o vetor de parâmetros de posição, $\boldsymbol{\Sigma} (n \times n)$ denota a matriz escala (simétrica e positiva semidefinida), $\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ é uma função geradora de funções características.

Se \mathbf{Z} tem distribuição da família de contornos elípticos com função característica dada por (2.1), escreve-se $\mathbf{Z} \sim El_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \psi)$. Isso indica que sua distribuição pertence à classe de distribuições elípticas *n*-variadas. Quando $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$ e $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{I}_n$, a distribuição de \mathbf{Z} é denominada de esférica *n*-variada e denota-se $\mathbf{Z} \sim S_n(\psi)$.

O vetor aleatório \mathbf{Z} não necessariamente possui uma função densidade, mas quando tem

é da forma

$$f(x) = |\Sigma|^{-1/2}g(u),$$

em que $u = (\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu})^\top \Sigma^{-1}(\mathbf{Z} - \boldsymbol{\mu})$ é conhecida como distância de Mahalanobis, $g(\cdot)$ é uma função escalar contínua e diferenciável, $g : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$, chamada de função geradora de densidades que satisfaz a condição $\int_0^\infty u^{n/2-1}g(u)d(u) < \infty$. Denota-se $\mathbf{Z} \sim El_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, g(u))$ quando $g(\cdot)$ existe.

Alguns exemplos de distribuições elípticas são dados a seguir:

Distribuição Exponencial Potência. (Gómez *et al.*, 1998) Seja \mathbf{Z} a distribuição Exponencial Potência n -variada com parâmetro de posição $\boldsymbol{\mu}$, matriz de escala Σ e parâmetro de forma λ , escreve-se $\mathbf{Z} \sim PE_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, \lambda)$. A função densidade de \mathbf{Z} é dada por

$$f(\mathbf{z}) = \pi^{n/2} \frac{\lambda \Gamma(\frac{n}{2})}{\Gamma(\frac{n}{2\lambda}) 2^{n/2\lambda}} |\Sigma|^{-1/2} \exp\{-u^\lambda/2\},$$

em que $\Gamma(\cdot)$ é a função gama: $\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt$.

A *distribuição normal* é um caso particular da distribuição exponencial potência quando $\lambda = 1$. Esta apresenta caudas mais leves que a normal, quando $\lambda > 1$, e mais pesadas quando $\lambda < 1$.

Distribuição Normal Contaminada. (Little, 1988) Seja \mathbf{Z} com distribuição normal contaminada n -variada em que $\boldsymbol{\mu}$ denota o parâmetro de posição, Σ matriz de escala, $0 \leq v \leq 1$ denota a porcentagem de “contaminação” e $\gamma > 0$ corresponde a um fator de inflação de escala, escreve-se $\mathbf{Z} \sim NC_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, v, \gamma)$. A função densidade de \mathbf{Z} é dada por

$$f(\mathbf{z}) = (2\pi)^{-m/2} |\Sigma|^{-1/2} \{v\gamma^{n/2} e^{-\gamma u/2} + (1-v)e^{-u/2}\}.$$

Distribuição Slash. (Rogers e Tukey, 1972) Considere $\mathbf{Z} \sim Slash_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, v)$ a distribuição Slash n -variada com parâmetro de posição $\boldsymbol{\mu}$, matriz de escala Σ e parâmetro de forma $v > 0$, então sua função densidade é dada por

$$f(\mathbf{z}) = v(2\pi)^{-m/2} |\Sigma|^{-1/2} \int_0^1 x^{m/2+v-1} \exp(-xu/2) dx.$$

Distribuição t -Student Generalizada. Seja $\mathbf{Z} \sim Gt_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, v, \gamma)$ a distribuição t -Student generalizada em que $\boldsymbol{\mu}$ denota o parâmetro de posição, Σ matriz de escala e $v, \gamma > 0$ o parâmetro de posição. A função densidade de \mathbf{Z} é dada por

$$f(\mathbf{z}) = \frac{\Gamma(\frac{n+v}{2})}{\Gamma(\frac{v}{2})(\pi\gamma)^{n/2}} |\Sigma|^{-1/2} \left(1 + \frac{u}{\gamma}\right)^{-(n+v)/2}.$$

A distribuição t -Student, $t_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, v)$, é um caso particular da distribuição t -Student generalizada, quando $\gamma = v$, e converge a distribuição normal quando $v \rightarrow \infty$. A distribuição Cauchy também é um caso particular quando $\gamma = v = 1$.

Na Tabela 1 são apresentadas, de maneira sucinta, algumas distribuições que pertencem à classe das distribuições de contornos elípticos.

Tabela 1: Distribuições pertencentes à classe das distribuições de contornos elípticos, onde c é uma constante normalizadora.

Distribuição	$g(u)$	
Exponencial Potência	$c \exp(-u^\lambda/2)$	$\lambda > 0$
Logística I	$c(e^{-u})/(1 + e^{-u})^2$	
Logística II	$c(e^{-\sqrt{u}})/(1 + e^{-\sqrt{u}})^2$	
Mistura de escala	$c \int_0^\infty x^{-n/2} \exp(-u/2x) dG(x)$	$G(x)$:f.d.a.
Normal Contaminada	$c\{v\gamma^{n/2}e^{-\gamma u/2} + (1 - v)e^{-u/2}\}$	$0 \leq v \leq 1, \gamma > 0$
Normal	$c \exp(-u/2)$	
Slash	$cv \int_0^1 x^{m/2+v-1} \exp(-xu/2) dx$	
t -Student	$v^{-n/2}(1 + u/v)^{(n+v)/2}$	$v > 0$
t -Student generalizada	$\gamma^{-n/2}(1 + u/\gamma)^{(n+v)/2}$	$v, \gamma > 0$
Tipo Kotz	$cu^{N-1} \exp(-\gamma u^v)$	$\gamma, v > 0$ e $2N + n > 2$

A seguir são apresentadas algumas das principais propriedades das distribuições de contornos elípticos.

Propriedade 1.1 Se o valor esperado e a variância do vetor aleatório \mathbf{Z} existirem, então

(i) $E[\mathbf{Z}] = \boldsymbol{\mu}$

e

(ii) $\text{Var}(\mathbf{Z}) = \xi \Sigma$, em que a constante $\xi > 0$ é dada por

$$\xi = -2 \left. \frac{\partial \psi(u)}{\partial u} \right|_{u=0}.$$

Isto é, a matriz de escala Σ coincide com a matriz de covariância a menos de uma constante. Em particular, para a distribuição t -Student, tem-se que $\xi = \nu/(\nu - 2)$ ($\nu > 2$), em que ν denota os grau de liberdade da distribuição. E se $\mathbf{Z} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$, então $\xi = 1$. Na Tabela 2 são apresentados os valores de ξ para algumas distribuições da família de contornos elípticos.

Tabela 2: Valor de ξ para algumas distribuições de contornos elípticos.

Distribuição	ξ	
Exponencial Potência	$2^{(1+\lambda)} \frac{\Gamma(\frac{3}{2}(\lambda+1))}{\Gamma(\frac{\lambda+1}{2})}$	$v > 0$
Logística I	0,79569	
Logística II	$\frac{\pi^2}{3}$	
Normal	1	
Normal Contaminada	$1 + v(\gamma^2 - 1)$	$0 \leq v \leq 1, \gamma > 0$
Slash	$(2\pi)^{-n/2}$	
t -Student	$v/(v-2)$	$v > 2$
t -Student generalizada	$\gamma/(v-2)$	$\gamma > 0, v > 2$
Tipo Kotz	$[\Gamma(\frac{2N+1}{2v})/\Gamma(\frac{2N-1}{2v})] \gamma^{-1/v}$	$\gamma, v > 0$ e $N \geq 1$

A propriedade a seguir trata do fato de que uma transformação linear de um vetor aleatório com distribuição de contorno elíptico também segue uma distribuição de contorno elíptico. Além disso, pode-se observar que cada elemento do vetor aleatório \mathbf{Z} tem distribuição marginal de contorno elíptico.

Propriedade 1.2 Se $\mathbf{Z} \sim El_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \psi)$, com $rank(\boldsymbol{\Sigma}) = r < n$. Se \mathbf{B} é uma matriz $n \times m$ e $\boldsymbol{\varpi}$ é um vetor ($m \times 1$), então

$$\Lambda = \boldsymbol{\varpi} + \mathbf{B}^\top \mathbf{Z} \sim El_m(\boldsymbol{\varpi} + \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\mu}, \mathbf{B}^\top \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{B}, \psi).$$

Em particular, considerando a partição

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{Z}^{(1)} \\ \mathbf{Z}^{(2)} \end{pmatrix}, \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}^{(1)} \\ \boldsymbol{\mu}^{(2)} \end{pmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

obtem-se as seguintes distribuições marginais:

$$(i) \mathbf{Z}^{(1)} \sim El_m(\boldsymbol{\mu}^{(1)}, \boldsymbol{\Sigma}_{11}, \psi)$$

$$(ii) \mathbf{Z}^{(2)} \sim El_{n-m}(\boldsymbol{\mu}^{(2)}, \boldsymbol{\Sigma}_{22}, \psi)$$

Propriedade 1.3 Assuma que $\mathbf{Z} \sim El_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \psi)$ com $\boldsymbol{\Sigma} \geq 0$. Considerando a partição (2.2), tem-se que

$$(\mathbf{Z}^{(1)} | \mathbf{Z}_0^{(2)}) \sim El_m(\boldsymbol{\mu}_{1.2}, \boldsymbol{\Sigma}_{11.2}, \psi_{q(\mathbf{Z}_0^{(2)})}),$$

em que

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_{1.2} &= \boldsymbol{\mu}^{(1)} + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{Z}_0^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}), \\ \boldsymbol{\Sigma}_{11.2} &= \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} \quad \mathbf{e} \\ q(\mathbf{Z}_0^{(2)}) &= (\mathbf{Z}_0^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^\top \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{Z}_0^{(2)} - \boldsymbol{\mu}^{(2)}).\end{aligned}$$

Analogamente,

$$(\mathbf{Z}^{(2)}|\mathbf{Z}_0^{(1)}) \sim El_m\left(\boldsymbol{\mu}_{2.1}, \boldsymbol{\Sigma}_{22.1}, \psi_{q(\mathbf{Z}_0^{(1)})}\right),$$

em que

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_{2.1} &= \boldsymbol{\mu}^{(2)} + \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\mathbf{Z}_0^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)}), \\ \boldsymbol{\Sigma}_{22.1} &= \boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21}\boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{12} \quad \mathbf{e} \\ q(\mathbf{Z}_0^{(1)}) &= (\mathbf{Z}_0^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)})^\top \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1}(\mathbf{Z}_0^{(1)} - \boldsymbol{\mu}^{(1)}).\end{aligned}$$

Pode existir situações nas quais o vetor aleatório \mathbf{Z} não necessariamente possui uma função densidade. Isto acontece por exemplo, quando $rank(\boldsymbol{\Sigma}) = r(< n)$ (caso singular), a função densidade não existe em todo o espaço \mathbb{R}^n . Mas, sempre é possível definir a função densidade em um espaço de dimensão menor ou igual ao posto da matriz escala. Se $rank(\boldsymbol{\Sigma}) = n$ (caso não singular), a função de densidade existe em relação à medida de Lebesgue sobre todo o espaço \mathbb{R}^n .

Portanto, a importância do estudo envolvendo a família de distribuições de contornos elípticos é devido ao fato de possuir propriedades que são muito úteis no estudo, além de ser uma família com distribuições mais flexíveis, que podem ser uma alternativa na modelagem de conjuntos de dados envolvendo maior grau de assimetria e curtose.

3 GEOESTATÍSTICA

A geoestatística surgiu para o estudo de variáveis regionalizadas, ou seja, o estudo de uma função espacial numérica, que varia de um local para outro, com continuidade aparente e cujos valores são relacionados com a posição espacial que ocupam. Oferece técnicas para elaboração de mapas do comportamento de variáveis georreferenciadas, utilizando o método de interpolação de informações a partir de dados obtidos em locais convenientemente amostrados e modelados por uma função de covariância. Matheron e Kleingeld (1987) traçaram a evolução da geoestatística através de três gerações, e em conclusão, algumas questões importantes foram levantadas sobre o estado das áreas temáticas em 1987 e de possíveis pesquisas.

O geógrafo e estatístico Waldo Tobler resumiu um componente chave que afetam qualquer análise de dados espacialmente referenciados através de sua amplamente citada e parafraseada Primeira Lei da Geografia: *“Todas as coisas estão relacionadas, mas coisas mais próximas são mais parecidas do que coisas mais distantes”* (Tobler, 1970). Esta lei define de forma sucinta a estatística noção de autocorrelação espacial (positiva), na qual pares de observações tomadas próximas são mais semelhantes do que as tomadas mais distantes. Com observações independentes, diversos padrões espaciais podem ser o resultado de uma tendência espacial dos valores probabilísticos esperados de cada observação. Permitindo correlação espacial, observa-se a similaridade espacial em observações que pode ser devido a uma tendência espacial, autocorrelação espacial, ou ambos. Assim, a geoestatística é utilizada quando é verificada a existência de dependência espacial entre elementos amostrais, e o uso de medidas de dispersão tais como o desvio padrão, não tem sentido de serem estudadas se não for levado em consideração as distâncias entre os elementos amostrais.

A geoestatística vem ocupando um importante e crescente lugar na teoria estatística, e pode ser utilizada para elucidar questões importantes em diversas áreas do conhecimento como: epidemiologia, socioeconomia, meio ambiente, geologia, agronomia, zoneamento agrícola, geociências, entre outras. Embora o interesse pela geoestatística seja relativamente recente, muitos autores tem utilizado e desenvolvido métodos. Rendu (1978) apresentou uma introdução para métodos geoestatísticos para avaliação mineral. Chappell e Oliver (1997) distinguiram diferentes processos de erosão do solo a partir de resoluções espaciais das mesmas propriedades do solo em duas regiões adjacentes com fisiografia diferentes. Ribeiro Jr (2002) desenvolveu estudos estatísticos espaciais com modelos e métodos para análise de dados georreferenciados. Mercante *et al.* (2003) estudaram a variabilidade espacial de atributos do solo utilizando métodos estatísticos com semivariogramas escalonados. Guedes *et al.* (2008) realizaram a análise da anisotropia no estudo da variabilidade espacial de alguns atributos quími-

cos do solo espacialmente referenciadas. Borssoi *et al.* (2009, 2011a, 2011b) apresentaram técnicas de diagnóstico de influência local na análise espacial da produtividade da soja. Uribe-Opazo *et al.* (2012) desenvolveram métodos de diagnósticos de influência local no caso do estudo de modelos espaciais lineares com distribuição gaussiana.

3.1 Teoria das Variáveis Regionalizadas

O estudo de variabilidade espacial que atualmente é chamado de geoestatística originou-se na África do Sul em 1951, segundo Cressie (1993). Matheron (1963) transformou este conhecimento em teoria chamada “Teoria das Variáveis Regionalizadas”, a qual define uma variável regionalizada com uma função espacial numérica, que varia de um local para outro, com uma continuidade. São variáveis cujos valores são relacionados de algum modo com a posição espacial que ocupam.

A teoria das variáveis regionalizadas consolida o alicerce da geoestatística. Se $z(s_i)$ é o valor de uma variável Z no ponto s_i , é possível descrever a variabilidade da função $f(z(s_i))$ no espaço, com Z variando dependentemente do local da amostragem. Cada valor do atributo em estudo, amostrado na localização s_i , isto é, $z(s_i)$ representa uma realização de uma variável aleatória $Z(s_i)$ e, considerando as n observações mensuradas nas localizações s_1, \dots, s_n na região $D \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$), tem-se uma realização de um conjunto de variáveis aleatórias $Z(s) = \{Z(s_1), \dots, Z(s_n)\}$ chamado de processo estocástico ou função aleatória (Schabenberger; Pierce, 2002). Desta maneira, cada conjunto de valores amostrados $z(s) = \{z(s_1), \dots, z(s_n)\}$ é uma realização aleatória e representa na prática a variável regionalizada. As variáveis regionalizadas possuem características extremamente ligadas à estrutura do fenômeno natural que elas representam, são elas:

- a) **Localização-** A determinação do campo geométrico onde serão realizadas as medições da variável, deve ser feita com cuidado, respeitando certas condições de homogeneidade física. É muito importante a experiência do pesquisador para determinar a grade amostral, visto que a variável regionalizada somente faz sentido ser estudada no espaço geométrico em que a variável é suscetível de tomar valores definidos e no interior do qual serão estudadas suas variações;
- b) **Continuidade-** Fundamenta-se que a esperança da média amostral, para amostras próximas no espaço, sejam similares entre si, perdendo esta similaridade em função da distância (Isaaks e Srivastava, 1989). Denomina-se efeito pepita puro quando a continuidade espacial não é identificada;
- c) **Isotropia-** Refere-se a possibilidade de não existência de uma direção privilegiada, ao longo da qual os valores variam de forma acentuada. Quando a variabilidade espacial em uma área não apresenta comportamento semelhante para diferentes direções, tem-se

anisotropia (Guedes *et al.*, 2008). Geralmente, estudam-se as direções 0° , 45° , 90° e 135° , conforme Figura 1.

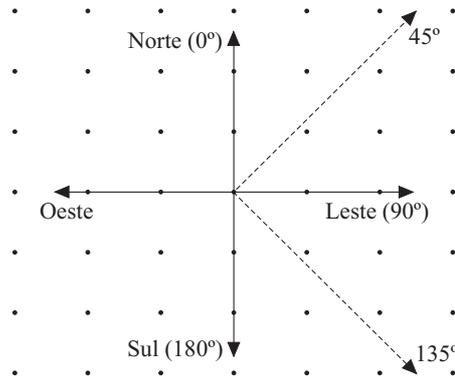


Figura 1: Direções utilizadas na geoestatística em análises de dependência espacial.

3.2 Modelos Espaciais Lineares

Para modelar conjuntos de dados com estrutura de dependência espacial considerou-se, segundo Mardia e Marshall (1984), um processo estocástico $Z = \{Z(s_i), s_i \in D\}$, em que D é um subconjunto de \mathbb{R}^d , o espaço euclidiano d -dimensional ($d \geq 1$).

Suponha-se que $Z(s_1), \dots, Z(s_n)$ deste processo são observações de localizações espaciais conhecidas s_i , para $i = 1, \dots, n$ em que s_i é um vetor d -dimensional da localização das coordenadas espaciais, e geradas pelo modelo

$$Z(s_i) = \mu(s_i) + \epsilon(s_i), \quad (3.1)$$

em que tanto o termo determinístico $\mu(s_i)$ quanto o termo estocástico $\epsilon_i = \epsilon(s_i)$ dependem da localização espacial em que $Z(s_i)$ é observada. Assume-se que o erro estocástico tem média zero, $E[\epsilon(s_i)] = 0$, e que a variação espacial entre os pontos é determinada por uma função de covariância $C(s_i, s_j) = cov[\epsilon(s_i), \epsilon(s_j)]$. Suponha que para algumas funções conhecidas de s_i , $x_1(s_i), \dots, x_p(s_i)$, a média do processo estocástico é

$$\mu(s_i) = \sum_{j=1}^p x_j(s_i)\beta_j,$$

em que β_1, \dots, β_p são parâmetros desconhecidos a serem estimados. E ainda, cada família de funções de covariância $C(s_i, s_j)$ é completamente especificada por um vetor de parâmetros q -dimensional $\varphi = (\varphi_1, \dots, \varphi_q)^T$. Equivalentemente em notação matricial, tem-se

$$\mathbf{Z} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}$$

$$\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$$

sendo \mathbf{X} uma matriz $n \times p$ com i -ésima linha $x_i^\top = (x_i(s_i), \dots, x_p(s_i))$, $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^\top$ e $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon_1, \dots, \epsilon_n)^\top$. A matriz escala de $\boldsymbol{\epsilon}$ é dada por $\boldsymbol{\Sigma} = [(\sigma_{ij})]$, em que $\sigma_{ij} = C(s_i, s_j)$. Assume-se que $\boldsymbol{\Sigma}$ é não-singular em que \mathbf{X} é de posto coluna completo.

Uma particular forma paramétrica para a matriz escala é dada por

$$\boldsymbol{\Sigma} = \varphi_1 \mathbf{I}_n + \varphi_2 \mathbf{R}(\varphi_3), \quad (3.2)$$

em que $\mathbf{R}(\varphi_3) = [(r_{ij})]$ é uma matriz $n \times n$ simétrica com elementos da diagonal $r_{ii} = 1$, para $i = 1, \dots, n$, com elementos $r_{ij} = (1/\varphi_2) \sigma_{ij}$ para $i \neq j = 1, \dots, n$ e $\varphi_2 \neq 0$, e $r_{ij} = 0$ para $i \neq j = 1, \dots, n$ e $\varphi_2 = 0$. Esta forma paramétrica ocorre para vários processos isotrópicos, em que $C(s_i, s_j)$ é definida por meio da função $C(s_i, s_j) = C(\delta_{ij}) = \varphi_2 r_{ij}$, com $\delta_{ij} = \|s_i - s_j\|$ sendo a distância euclidiana entre os pontos s_i e s_j , para $i \neq j = 1, \dots, n$.

Os parâmetros que definem a estrutura de dependência espacial apresentada na Equação (3.2) são:

- *Efeito Pepita* ($\varphi_1 \geq 0$): Cressie (1993) interpreta o efeito pepita como um erro de medição ou de variabilidade em pequena escala. O efeito pepita revela a descontinuidade do semivariograma para distâncias menores do que a menor distância entre os elementos amostrais. Segundo Isaaks e Srivastava (1989), parte da descontinuidade pode ser devido a erros de medição, mas é impossível quantificar se a maior contribuição provem dos erros de medição ou da variabilidade de pequena escala não captada pela amostragem. Em inglês usa-se o termo *nugget effect*;
- *Contribuição* ($\varphi_2 \geq 0$): conhecida como variância de dispersão ou ainda como *sill*, representa as diferenças espaciais entre os valores de uma variável tomada em dois pontos separados por distâncias cada vez maiores;
- *Alcance* ($a > 0$): é a distância dentro da qual as amostras apresentam autocorrelação espacial, ou seja, determina o raio de dependência espacial. O alcance é função do parâmetro $\varphi_3 > 0$ ($a = g(\varphi_3)$);
- *Patamar* ($P = \varphi_1 + \varphi_2$): é uma função da variância total da variável em estudo. É o valor máximo do semivariograma correspondente ao seu alcance, a partir do qual o semivariograma se estabiliza.

Suponha-se que o processo estocástico $Z(s_i)$ tem valor esperado

$$E[Z(s_i)] = \mu(s_i) \quad \text{e} \quad E[Z(s_i + \delta)] = \mu(s_i + \delta)$$

e variâncias

$$\text{Var}[Z(s_i)] \quad \text{e} \quad \text{Var}[Z(s_i + \delta)],$$

respectivamente, para as localizações $s_i, s_i + \delta$ e qualquer vetor de distâncias δ . Então, a função de covariância espacial é definida por

$$C(s_i, s_i + \delta) = C(\delta) = E[Z(s_i)Z(s_i + \delta)] - E[Z(s_i)]E[Z(s_i + \delta)], \quad (3.3)$$

e a função de semivariância definida por

$$\gamma(\delta) = \gamma(s_i, s_i + \delta) = \frac{1}{2}E[(Z(s_i) - (s_i + \delta))^2]. \quad (3.4)$$

Com um único elemento amostral em cada ponto, o que se sabe de um processo estocástico $Z(s_i)$ é uma única realização. Então, se deseja-se estimar valores para locais não amostrados, é necessário introduzir a restrição de que a variável regionalizada seja estacionária. Sob a hipótese de estacionariedade, Isaaks e Srivastava (1989) e Wackernagel (2003) demonstraram a partir das definições apresentadas em (3.3) e (3.4) que

$$\gamma(\delta) = C(0) - C(\delta). \quad (3.5)$$

A função semivariância possui as seguintes propriedades:

- i) $\gamma(0) = 0$;
- ii) $\gamma(\delta) = \gamma(-\delta) \geq 0$, ou seja, a função de semivariância é par e sempre produz valores positivos;
- iii) $\lim_{|\delta| \rightarrow \infty} \frac{\gamma(\delta)}{|\delta|^2} = 0$, isto é, $\gamma(\delta)$ cresce mais lentamente que δ^2 .

O gráfico de $\gamma(\delta)$ *versus* o valor correspondente δ , é chamado de semivariograma, e é função da distância δ . A Figura 2 apresenta um exemplo gráfico da relação entre a covariância espacial $C(\delta)$ e a semivariância $\gamma(\delta)$.

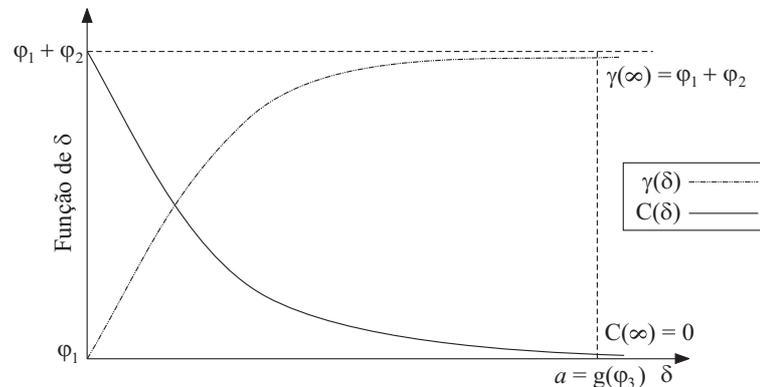


Figura 2: Relação entre a covariância espacial $C(\delta)$ e a semivariância $\gamma(\delta)$.

Como consequência de (3.5), para $C(0) \neq 0$

$$\rho(\delta) = \frac{C(\delta)}{C(0)} = 1 - \frac{\gamma(\delta)}{C(0)}, \quad (3.6)$$

em que $\rho(\delta)$ é a função de correlação espacial que possui as seguintes características:

- é monótona não crescente, isto é, a correlação entre duas observações decresce ou permanece constante com o aumento da sua respectiva distância;
- $\rho(\delta) \rightarrow 0$ quando $\delta \rightarrow \infty$, ou seja, a correlação tende a zero para distâncias δ grandes;
- pelo menos um parâmetro controla a razão de decaimento de ρ para 0.

Segundo Isaaks e Srivastava (1989), sob a hipótese de estacionariedade de segunda ordem, o gráfico da função de covariância, a função de correlação e a função de semivariância fornecem exatamente a mesma informação apresentados de uma forma levemente diferenciada. O gráfico da função de correlação e a função de covariância tem a mesma forma, sendo o gráfico da função de correlação limitado por um valor máximo igual a um. O semivariograma também tem a mesma forma do gráfico da função de covariância, exceto que é invertido; enquanto o gráfico da função de covariância inicia a partir de um valor de máximo σ^2 em $\delta = 0$ e decresce para zero, o semivariograma inicia em zero e cresce até um máximo σ^2 .

A existência de estacionariedade possibilita a repetição de um experimento mesmo que as amostras sejam coletadas em pontos diferentes, pois as mesmas são consideradas pertencentes a populações com o mesmo momento estatístico. Em alguns casos, a hipótese de estacionariedade de segunda ordem pode não ser satisfeita para alguns fenômenos os quais tem uma capacidade infinita de dispersão. Para tais situações uma hipótese menos restritiva, a hipótese intrínseca, requer apenas a estacionariedade do semivariograma, sem nenhuma restrição quanto a existência de variância finita. A hipótese intrínseca é na verdade, a mais frequente usada em geoestatística, principalmente por ser menos restrita. É importante destacar que se um processo estocástico $Z(s)$ é estacionário de ordem k ($k \in \mathbb{R}_+^*$), então também será estacionário de ordem menor, desde que os primeiros momentos existam.

Um processo estocástico $Z(s)$ é intrínseco se:

- a) $E[Z(s_i) - Z(s_i + \delta)] = 0$;
- b) $E[(Z(s_i) - Z(s_i + \delta))^2] = 2\gamma(\delta)$,
isto é, para todo $s \in D \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$), o incremento $Z(s_i) - Z(s_i + \delta)$ tem variância finita, e não depende de s para qualquer δ ;
- c) $C(s, s + \delta) = C(\delta)$,
 $C(s + h, s + \delta) = C(\delta - h)$

Não existe um método fácil de testar para qual tipo de estacionariedade os dados se enquadram. Segundo Vieira (1996), semivariogramas que tem um patamar claro e definido provavelmente serão estacionários de segunda ordem. E segundo Schabenberger e Pierce (2002), se as semivariâncias $\gamma(\delta)$ crescerem mais rapidamente do que δ^2 , tem-se indícios de que a variável não é intrinsecamente estacionária.

3.2.1 Modelos Teóricos

Os modelos teóricos mais utilizados em geoestatística para definir a estrutura de variabilidade espacial, podem ser encontrados em Isaaks e Srivastava (1989), Cressie (1993), Webster e Oliver (1998), Diggle e Ribeiro Jr (2007), entre outros. Este modelos são divididos em modelos não transitivos, que não possuem patamar e modelos transitivos, que possuem patamar, sendo estes utilizados no desenvolvimento do trabalho. Os principais modelos transitivos são: esférico, exponencial, gaussiano, família Matérn e exponencial potência. De acordo com Journel e Huijbregts (1978), estes modelos consideram que a variável em estudo possui um mesmo padrão de continuidade espacial em todas as direções (isotropia), em consequência, o semivariograma deve ter características estruturais parecidas em todas as direções do espaço.

3.2.1.1 Modelo Esférico

O modelo esférico é válido em \mathbb{R}^d para $d = 1, 2, 3$. Apresenta crescimento rápido na origem e atinge o patamar a $2/3$ do alcance. Sua função de semivariância tem expressão

$$\gamma_0(\delta) = \begin{cases} 0, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_1 + \varphi_2 \left[\frac{3}{2} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right)^3 \right], & \text{se } 0 < \delta \leq \varphi_3 \\ \varphi_1 + \varphi_2, & \text{se } \delta > \varphi_3. \end{cases}$$

A função de covariância dada por

$$C(\delta) = \begin{cases} \varphi_1 + \varphi_2, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_2 \left[1 - \frac{3}{2} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right)^3 \right], & \text{se } 0 < \delta \leq \varphi_3, \\ 0, & \text{se } \delta > \varphi_3, \end{cases}$$

e sua função de correlação é expressa por

$$\rho(\delta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \delta = 0 \\ 1 - \frac{3}{2} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right)^3, & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

3.2.1.2 Modelo Exponencial

O modelo exponencial é válido em \mathbb{R}^d para $d = 1, 2, 3$ e tem função de semivariância expressa por

$$\gamma_0(\delta) = \begin{cases} 0, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_1 + \varphi_2 \left[1 - e^{\left(\frac{-\delta}{\varphi_3}\right)} \right], & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

Apresenta comportamento aproximadamente linear na origem e atinge o patamar assintoticamente. O alcance prático para este modelo é dado por $a = 3\varphi_3$. Segundo Isaaks e Srivastava (1989), este modelo atinge o patamar assintoticamente, com alcance prático definido como a distância na qual o valor do modelo é 95% do patamar. Sua função de covariância definida como

$$C(\delta) = \begin{cases} \varphi_1 + \varphi_2, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_2 e^{\left(\frac{-\delta}{\varphi_3}\right)}, & \text{se } \delta > 0, \end{cases}$$

e sua função de correlação é dada por

$$\rho(\delta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \delta = 0 \\ e^{\left(\frac{-\delta}{\varphi_3}\right)}, & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

3.2.1.3 Modelo Gaussiano

O que caracteriza o modelo gaussiano é seu comportamento parabólico na origem e é utilizado para modelar fenômenos extremamente contínuos (Isaak e Srivastava, 1989). Atinge o patamar assintoticamente e seu alcance prático é $a = \sqrt{3}\varphi_3$. Assim como para o modelo exponencial, é válido em \mathbb{R}^d para $d = 1, 2, 3$. Sua função de semivariância pode ser expressa por

$$\gamma_0(\delta) = \begin{cases} 0, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_1 + \varphi_2 \left[1 - e^{-\left(\frac{\delta}{\varphi_3}\right)^2} \right], & \text{se } \delta > 0, \end{cases}$$

e sua função de covariância expressa por

$$C(\delta) = \begin{cases} \varphi_1 + \varphi_2, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_2 \left[1 - e^{-\left(\frac{\delta}{\varphi_3}\right)^2} \right], & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

A função de correlação é dada por

$$\rho(\delta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \delta = 0 \\ 1 - e^{-\left(\frac{\delta}{\varphi_3}\right)^2}, & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

3.2.1.4 Modelo Exponencial Potência

O modelo exponencial potência tem função de semivariância expressa por

$$\gamma(\delta) = \begin{cases} 0, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_1 + \varphi_2 (1 - e^{-|\delta/\varphi_3|^p}), & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

$0 < p \leq 2$ é o parâmetro de forma do modelo exponencial potência. A função de covariância é dada por

$$C(\delta) = \begin{cases} \varphi_1 + \varphi_2, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_2 e^{-|\delta/\varphi_3|^p}, & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

Para o modelo exponencial potência, a relação entre o alcance prático e o parâmetro φ_3 depende do valor do parâmetro de forma p . Nota-se que quanto maior o valor de p , menor é o valor do alcance. Por exemplo, o valor do alcance é aproximadamente $8,97\varphi_3$, $4,69\varphi_3$, $3,00\varphi_3$, $2,08\varphi_3$ e $1,74\varphi_3$ para a exponencial potência com $p = 0,5$, $p = 0,7$, $p = 1,0$, $p = 1,5$ e $p = 2,0$, respectivamente. Sob um processo estocástico Gaussiano, a família de modelos exponencial potência é contínua mas não diferenciável para $0 < p < 2$, somente infinitamente diferenciável quando $p = 2$, o seu máximo valor legítimo, e neste caso é equivalente ao modelo gaussiano.

O modelo exponencial potência tem como função de correlação a expressão

$$\rho(\delta) = \begin{cases} e^{-|\frac{\delta}{\varphi_3}|^p}, & \text{se } \delta \geq 0. \end{cases}$$

3.2.1.5 Modelo Família Matérn

Matérn (1986) apresentou uma função que ficou conhecida como família Matérn. Em termos do modelo teórico do semivariograma, pode ser expressa por

$$\gamma_0(\delta) = \begin{cases} 0, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_1 + \varphi_2 \left[1 - (2^{\kappa-1} \Gamma(\kappa))^{-1} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right)^\kappa K_\kappa \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right) \right], & \text{se } \delta > 0, \end{cases}$$

em que K_κ é a função de Bessel modificada do terceiro tipo de ordem κ , sendo $K_\kappa(u) = \frac{1}{2} \int_0^\infty x^{\kappa-1} e^{-\frac{1}{2}u(x+\frac{1}{x})} dx$. Esta função é válida para $\varphi_3, \kappa > 0$. Na Família Matérn, o parâmetro k , chamado de ordem, é um parâmetro de forma que determina a suavização analítica do processo subjacente $Z(s)$. Especificamente, $Z(s)$ é $[\kappa - 1]$ vezes diferenciável, em que $[\kappa]$ denota o menor inteiro maior ou igual a κ . Defini-se a função de covariância por

$$C(\delta) = \begin{cases} 0, & \text{se } \delta = 0 \\ \varphi_2 \left[(2^{\kappa-1}\Gamma(\kappa))^{-1} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right)^\kappa K_\kappa \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right) \right], & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

O modelo exponencial pode ser visto como um caso particular do modelo família Matérn, que coincidem quando $\kappa = 0,5$. Conforme aumenta-se o valor de κ , o comportamento deste modelo assemelha-se ao do modelo gaussiano. Assim como para a família de modelos exponencial potência, a relação entre o alcance prático e o parâmetro φ_3 depende do valor do parâmetro de forma κ . Mas ao contrário do que acontece para o modelo exponencial potência, para a família Matérn, nota-se que aumentando o valor de κ , o valor de a/φ_3 aumenta. Por exemplo, o valor do alcance é aproximadamente $3\varphi_3$, $3,45\varphi_3$, $4,00\varphi_3$, $4,75\varphi_3$, $5,37\varphi_3$ e $5,92\varphi_3$ para a família Matérn com $\kappa = 0,5$, $\kappa = 0,7$, $\kappa = 1,0$, $\kappa = 1,5$, $\kappa = 2,0$ e $\kappa = 2,5$, respectivamente.

A função de correlação é expressa por

$$\rho(\delta) = \begin{cases} 1, & \text{se } \delta = 0 \\ (2^{\kappa-1}\Gamma(\kappa))^{-1} \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right)^\kappa K_\kappa \left(\frac{\delta}{\varphi_3} \right), & \text{se } \delta > 0. \end{cases}$$

Os modelos apresentados devem ser suficientes para a modelagem geoestatística, embora existam mais exemplos de modelos geoestatísticos como o circular, Cauchy, wave, entre outros. Modelos mais elaborados são difíceis de identificar, a menos que os dados disponíveis sejam abundantes (Diggle e Ribeiro Jr, 2007). Geralmente, é aconselhável o uso do modelo da família Matérn por sua flexibilidade, juntamente com a interpretação concreta do parâmetro de forma κ como uma medida da diferenciabilidade do processo subjacente $Z(s)$. Pela dificuldade de identificar todos os parâmetros deste modelo empiricamente, usualmente fixa-se cada valor de κ de acordo com o contexto da aplicação, ou escolhe-se entre um conjunto limitado de valores de κ .

A Figura 3 mostra exemplos do comportamento da função de covariância. A Figura 3a apresenta a função de covariância para os modelos esférico, exponencial, gaussiano, exponencial potência ($p = 1,5$) e Matérn ($\kappa = 0,7$), em que nota-se que o modelo esférico é o que apresenta menor alcance prático. Na Figura 3b pode ser verificado o comportamento da função de covariância da família Matérn considerando diferentes valores de κ . Observa-se que fixando o valor de φ_3 fixo e aumentando o valor de κ , o valor de a/φ_3 também aumenta.

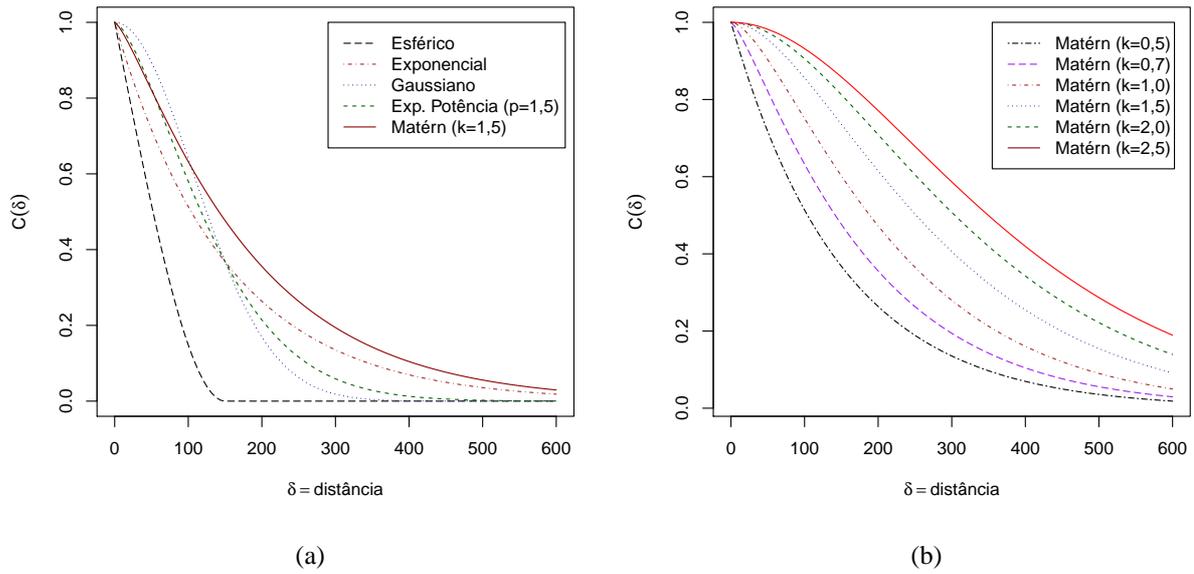


Figura 3: Gráficos da função covariância (a) para diferentes modelos e (b) para os modelos da família Matérn para diferentes valores de κ .

3.3 Modelos Espaciais Lineares com Distribuição da Família de Contornos Elípticos

Sabe-se que modelos estatísticos permitem incorporar relações matemáticas existentes entre dados e parâmetros de interesse. Portanto é importante o estudo de novos modelos que possam levar em consideração as diversas características dos estudos de fenômenos cada vez mais complexos. Os modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos constituem uma alternativa muito atrativa para explicar a estrutura de variabilidade espacial, além de ter a flexibilidade de estender a classe dos erros para outras distribuições além da normal, que podem acomodar melhor as observações atípicas.

Considere o que foi apresentado na Seção 3.2, isto é, considere $\{Z(s), s \in D\}$ um processo estocástico estacionário em que $D \subset \mathbb{R}^d$ e \mathbb{R}^d é um espaço euclidiano d -dimensional ($d \geq 1$). Suponha que \mathbf{Z} tem função de distribuição de contorno elíptico, $\mathbf{Z} \sim El_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g(u))$, em que $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$, \mathbf{X} é uma matriz de modelo $n \times p$. Os parâmetros desconhecidos do modelo, $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}^\top, \boldsymbol{\varphi}^\top)^\top$, com $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \dots, \beta_p)^\top$ e $\boldsymbol{\varphi} = (\varphi_1, \dots, \varphi_q)^\top$ podem ser estimados maximizando o logaritmo da função de verossimilhança que é dado por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{2} \log |\boldsymbol{\Sigma}| + \log(g(u)). \quad (3.7)$$

em que a matriz escala $\boldsymbol{\Sigma} = \varphi_1 \mathbf{I}_n + \varphi_3 \mathbf{R}(\varphi_3)$, isto é, tem a estrutura de dependência espacial e $u = (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$.

Assumindo que $g(\cdot)$ é contínua e diferenciável, podem ser definidas as quantidades

$$V_{g(u)} = \frac{\partial \log g(u)}{\partial u} = \frac{g'(u)}{g(u)} \quad \text{e} \quad V'_{g(u)} = \frac{\partial V_{g(u)}}{\partial u}$$

que dependem da distribuição de contorno elíptico com a qual se está trabalhando. A Tabela 3 mostra os valores de $-2V_{g(u)}$ para algumas distribuições da família de contornos elípticos.

Tabela 3: Valores de $-2V_{g(u)}$ para algumas distribuições de contornos elípticos.

Distribuição	$-2V_{g(u)}$	
Exponencial Potência	$\lambda u^{\lambda-1}$	$\lambda \neq 1/2$
Normal	1	
Logística I	$2 \tanh(u/2)$	
Logística II	$u^{1/2} \tanh(u^{1/2}/2)$	
Normal Contaminada	$f_1(u)/f_0(u)^*$	
t -Student generalizada	$(v+n)/(\gamma+u)$	$v, \gamma > 0$
t -Student	$(v+n)/(v+u)$	$v > 0$

$$*f_i(u) = 1 - v + v\gamma^{n/2+i}e^{(1-\gamma)u/2}, i = 0, 1.$$

A quantidade $v(\boldsymbol{\theta}) = -2V_{g(u)}$ pode ser interpretada como um peso. Sendo $g(u)$ uma função decrescente, tem-se que $v(\boldsymbol{\theta}) > 0$ para a maioria dos modelos de contornos elípticos. Segundo Osorio (2006), para as distribuições t -Student e exponencial potência $\lambda < 1$, $v(\boldsymbol{\theta})$ é inversamente proporcional à distância de Mahalanobis. Assim, observações com distâncias u grandes, receberão pesos $v(\boldsymbol{\theta})$ pequenos, e portanto o procedimento de estimação dos parâmetros tende a produzir estimativas mais robustas contra observações aberrantes do que o modelo normal.

A função score desempenha um papel importante em vários aspectos da inferência estatística, como na formulação de uma estatística de teste para um teste localmente mais poderoso, na aproximação do erro em uma estimativa de máxima verossimilhança (MV), em demonstrar a suficiência assintótica de uma estimativa de máxima verossimilhança, na formulação de intervalos de confiança, além de ser de grande importância na parte computacional no cálculo das estimativas de máxima verossimilhança.

As funções score para $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}^\top, \boldsymbol{\varphi}^\top)^\top$ para os modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos são dadas por

$$U(\boldsymbol{\beta}) = \frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = -2V_{g(u)} \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \quad \text{e}$$

$$U(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}},$$

com elementos

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_j} = -\frac{1}{2} \operatorname{tr} \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right) - V_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \quad j = 1, \dots, q,$$

em que $\boldsymbol{\epsilon} = \mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$. No Apêndice B são apresentados os cálculos das derivadas $\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j}$ para diferentes modelos geoestatísticos.

Para as distribuições de contornos elípticos, $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ tem forma fechada e é dado por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} \mathbf{Z}.$$

Mas, $\hat{\boldsymbol{\varphi}}$ não tem forma fechada e é encontrado mediante a maximização do logaritmo da função de verossimilhança. Nota-se que a forma de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ é a mesma para qualquer distribuição que pertença a família de distribuições de contornos elípticos. Mais informações sobre a estimação dos parâmetros por máxima verossimilhança podem ser encontrados na Seção 5.1.

3.3.1 Matriz de Informação Observada

A matriz de informação observada é definida por $\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = -\ddot{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\theta})$ e deve ser avaliada em $\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}$. Sua forma particionada pode ser encontrada a partir de $-\mathbf{I}(\boldsymbol{\theta}) = \ddot{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\theta})$, sendo

$$\ddot{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\theta}) = \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\theta}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \boldsymbol{\theta}^\top} = \begin{pmatrix} \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}} & \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\varphi}} \\ \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\beta}} & \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\varphi}} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

e, usando resultados de diferenciação de matrizes obtem-se para os modelos espaciais com distribuição da família de contornos elípticos que

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top} = 2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V_{g(u)} \boldsymbol{\Sigma} + 2V'_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}^\top \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X},$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\varphi}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\varphi}^\top},$$

com elementos

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \beta \partial \varphi_j} = 2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V'_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} + V_{g(u)} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \quad \text{para } j = 1, \dots, q,$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\beta}} = \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\varphi}}^\top,$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\varphi}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi} \partial \boldsymbol{\varphi}^\top},$$

com elementos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} &= \frac{1}{2} \text{tr} \left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} - \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} \right) \right] + \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left[V'_{g(u)} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right. \\ &+ \left. V_{g(u)} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} - \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} + \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \right) \right] \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \text{ para } j = 1, \dots, q. \end{aligned}$$

Para este estudo que considera a estrutura de variabilidade espacial apresentada em (3.2), tem-se que $q = 3$.

3.3.2 Erro Padrão das Estimativas dos Parâmetros

Os erros padrões assintóticos podem ser calculados a partir da matriz de informação de Fisher ($\mathbf{K}(\boldsymbol{\theta})$), a qual tem forma bloco diagonal (Lange *et al.*, 1989; Mitchell, 1989).

A matriz de informação esperada é dada por

$$\mathbf{K}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbb{E}[I(\boldsymbol{\theta})] = \begin{pmatrix} \mathbb{E}[-\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}}] & \mathbb{E}[-\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\varphi}}] \\ \mathbb{E}[-\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\beta}}] & \mathbb{E}[-\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\varphi}}] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{K}(\boldsymbol{\beta}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{K}(\boldsymbol{\varphi}) \end{pmatrix},$$

em que

$$\mathbf{K}(\boldsymbol{\beta}) = \frac{4d_g}{n} \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X},$$

e o elemento (i, j) da matriz $\mathbf{K}(\boldsymbol{\varphi})$ é dado por

$$k_{ij}(\boldsymbol{\varphi}) = \frac{b_{ij}}{4} \left(\frac{4f_g}{n(n+2)} - 1 \right) + \frac{2f_g}{n(n+2)} \text{tr} \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right),$$

em que $d_g = \mathbb{E}[V_{g(U)}^2 U]$, $f_g = \mathbb{E}[V_{g(U)}^2 U^2]$, com $U = \|\mathbf{Z}\|^2$, $\mathbf{Z} \sim El_n(\mathbf{0}, \mathbf{I}_n; g(u))$ e $b_{ij} = \text{tr} \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \right) \text{tr} \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right)$. Para algumas distribuições de contorno elíptico é possível obter expressões fechadas das esperanças d_g e f_g . A seguir são apresentadas as expressões de d_g e f_g para a distribuição t -Student, exponencial potência e normal.

- t -Student, $\mathbf{Z} \sim t_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \nu)$

$$d_g = \frac{n}{4} \frac{\nu + n}{\nu + n + 2} \quad \text{e} \quad f_g = \frac{n(n+2)}{4} \frac{\nu + n}{\nu + n + 2}.$$

- Exponencial Potência, $\mathbf{Z} \sim PE_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, \lambda)$

$$d_g = \frac{\lambda^2}{2^{1/\lambda}} \frac{\Gamma(\frac{n-2}{2\lambda} + 2)}{\Gamma(\frac{n}{2\lambda})} \quad \text{e} \quad f_g = \frac{n(n+2\lambda)}{4}.$$

- Normal, $\mathbf{Z} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$

$$d_g = \frac{n}{4} \quad \text{e} \quad f_g = \frac{n(n+2)}{4}.$$

Para obter as expressões de d_g e f_g da distribuição normal, pode-se usar a expressão da exponencial potência quando $\nu = 1$. Ainda, para a distribuição normal, a variância do

processo é equivalente a $C(0) = \varphi_1 + \varphi_2$, a qual coincide com o patamar dos modelos.

3.4 Krigagem

Uma etapa importante em geoestatística para a descrição e análise da variabilidade espacial de uma variável de interesse é a construção de mapas temáticos desta variabilidade espacial. A construção dos mesmos pode ser feita por meio de métodos de interpolação geoestatísticos. A interpolação é um procedimento de estimação do valor de um atributo em locais não amostrados com base em pontos amostrados na mesma área ou região. Uma interpolação espacial converte dados de observações pontuais em campos contínuos e produz padrões espaciais que podem ser comparados com outras entidades espaciais contínuas.

A predição geoestatística difere da estimativa clássica em um detalhe importante: ela se baseia em modelos espaciais, enquanto os métodos clássicos não. Em estudos para dados espaciais, uma medida de predição para obter valores para a variável regionalizada em pontos não-amostrados é a krigagem. Termo este criado por G. Matheron em reconhecimento ao trabalho do engenheiro de minas D. G. Krige (Krige, 1951). Landim (2000), ao comparar e avaliar as técnicas de interpolação, classificou a krigagem como sendo o melhor método, por ser um método que oferece estimativas lineares, não viciadas e pelos erros de estimação apresentarem-se com variância mínima. A krigagem é um estimador BLUE - *best linear unbiased estimator* - melhor estimador linear não viesado. Esta técnica atribui os pesos às diferentes amostras baseando-se na estimação dos parâmetros obtidos pela modelagem da variabilidade espacial, portanto é especificamente desenvolvida para a geoestatística.

Segundo Assunção (2001), “Mapas por si mesmos não são úteis ao menos que possamos descrevê-los, compará-los e interpretá-los.” Portanto, é importante utilizar técnicas que forneçam um mapa mais próximo da realidade possível. De acordo com Mello *et al.* (2005), a função semivariância é importante na interpolação de valores por krigagem, obtendo erros mínimos na interpolação e viabilizando a construção de mapas temáticos de superfície.

3.4.1 Krigagem Ordinária

De acordo com Journel (1989) e Câmara e Medeiros (1998), a krigagem ordinária é baseada na idéia de regressão linear, em que a predição de um valor desconhecido $Z(s_0)$ é obtida pela combinação linear de n valores conhecidos $Z(s_i)$ adicionada a um parâmetro λ_0 , pelo preditor

$$\hat{Z}(s_0) = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(s_i), \quad (3.9)$$

em que $\hat{Z}(s_0)$ é o valor predito na posição não amostrada s_0 , λ_i são os pesos, os quais são baseados nas distâncias entre os pontos vizinhos ao ponto predito e também na distância entre

estes, e $Z(s_i)$ são os valores conhecidos da variável nos locais amostrados.

Segundo Schabenberger e Pierce (2002), deseja-se um preditor não tendencioso, no sentido de que:

$$E[Z(s_0) - \hat{Z}(s_0)] = 0 \Rightarrow E[Z(s_0)] = E[\hat{Z}(s_0)].$$

Como em krigagem ordinária assume-se que $E[Z(s_i)] = m$ (constante) tanto para $i = 1, \dots, n$ quanto para valores obtidos em localizações não amostradas s_0 , obtém-se

$$E[Z(s_0)] = E[\lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(s_i)] \Rightarrow m = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i m,$$

sendo satisfeita, se e somente se,

$$\lambda_0 = 0 \quad \text{e} \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1. \quad (3.10)$$

Então, a Equação (3.9) pode ser expressa por

$$\hat{Z}(s_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(s_i).$$

Considerando $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$, espera-se que o erro quadrático médio de predição, também chamado de variância do erro, descrito na Equação (3.11) seja mínimo.

$$\text{Var}[\hat{Z}(s_0) - Z(s_0)] = E[(\hat{Z}(s_0) - Z(s_0))^2] - \left\{ E[\hat{Z}(s_0) - Z(s_0)] \right\}^2. \quad (3.11)$$

Na Equação (3.11), o primeiro termo corresponde ao erro quadrático médio e o segundo termo corresponde ao viés. Como o preditor da krigagem é não tendencioso, tem-se que viés é igual a zero e a variância do erro pode ser escrita como

$$\text{Var}[\hat{Z}(s_0) - Z(s_0)] = E[(\hat{Z}(s_0) - Z(s_0))^2].$$

Como pode ser encontrado em Isaaks e Srivastava (1989) e em Sherman (2011), chega-se na expressão

$$E[(\hat{Z}(s_0) - Z(s_0))^2] = 2 \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma(\delta_{i0}) - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j \gamma(s_{ij}). \quad (3.12)$$

Como minimizar a expressão da Equação (3.12) é extremamente difícil (Isaaks e Srivastava, 1989), deve-se usar o multiplicador de Lagrange (α), para transformar o problema de minimização com restrição em um problema de minimização sem restrição. Desenvolvendo a expressão resultante e minimizando-a em relação a λ_i , tem-se que os pesos são então obtidos a

partir do sistema de equações chamado de sistema de krigagem ordinária dado por

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma_{ij} + \alpha = \gamma_{i0} \\ \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1, \end{cases}$$

com $\gamma_{ij} = \gamma(s_{ij})$, sendo $s_{ij} = \|s_i - s_j\|$. O sistema de krigagem ordinária pode ser escrito em forma matricial como:

$$\gamma \lambda = \mathbf{A}$$

com solução

$$\lambda = \gamma^{-1} \mathbf{A} \quad (3.13)$$

em que

$$\gamma = \begin{bmatrix} \gamma(s_{11}) & \gamma(s_{12}) & \dots & \gamma(s_{1n}) & 1 \\ \gamma(s_{21}) & \gamma(s_{22}) & \dots & \gamma(s_{2n}) & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \gamma(s_{n1}) & \gamma(s_{n2}) & \dots & \gamma(s_{nn}) & 1 \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix}, \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \gamma(s_{10}) \\ \gamma(s_{20}) \\ \vdots \\ \gamma(s_{n0}) \\ 1 \end{bmatrix} \text{ e } \boldsymbol{\lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_n \\ \alpha \end{bmatrix}.$$

A partir de (3.13), os coeficientes $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_n)^\top$ são dados por

$$\boldsymbol{\lambda}^\top = \left(\boldsymbol{\gamma} + \mathbf{1} \frac{\mathbf{1}^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\gamma}}{\mathbf{1}^\top \mathbf{A}^{-1} \mathbf{1}} \right) \mathbf{A}^{-1}$$

e

$$\alpha = - \left(\frac{\mathbf{1} - \mathbf{1}^\top \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\gamma}}{\mathbf{1}^\top \mathbf{A}^{-1} \mathbf{1}} \right).$$

Além de fazer previsões do valor da variável regionalizada em um ponto, a krigagem possibilita associar a essa previsão, uma medida de precisão ou confiabilidade da previsão, denominada variância da krigagem, que de acordo com Cressie (1993) é dada por

$$\sigma_0^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma_{i0} + \alpha.$$

ou ainda, em termos função de covariância é dada por

$$\sigma_0^2 = C(0) - \boldsymbol{\lambda}^\top \mathbf{C}_0 + \alpha$$

em que $\boldsymbol{\lambda}^\top$ e α passam a ser dados por

$$\lambda^\top = \left(\mathbf{C}_0 + \mathbf{1} \frac{\mathbf{1}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{C}_0}{\mathbf{1}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \quad \text{e} \quad \alpha = - \left(\frac{\mathbf{1} - \mathbf{1}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{c}}{\mathbf{1}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{1}} \right).$$

Aqui, $\mathbf{C}_0 = (C(\delta_{10}), \dots, C(\delta_{n0}))^\top$.

Segundo Vieira (1998), quanto maior for a diferença entre o efeito pepita e o patamar no semivariograma, maior será a continuidade espacial e a confiança que se pode ter na estimativa, conseqüentemente, menor será a variância da estimativa. A variância da krigagem, assim como seu interpolador, depende apenas das localizações dos pontos amostrados e das semivariâncias. Assim, a variância será máxima em locais mais distantes de valores medidos em relação ao local de predição.

3.4.2 Krigagem Universal

A krigagem universal é também um interpolador linear uniformemente não viesado, utilizado para prever o valor de Z em locais s_0 não amostrados. As diferentes formas de tratar $\mu(s)$ caracterizam diferentes métodos de Krigagem. Na krigagem ordinária, esse termo é uma constante simples desconhecida enquanto que na tendência krigagem universal varia (por exemplo, pode ser uma tendência polinomial de segunda ordem) e os coeficientes da equação de regressão que descreve esta tendência são desconhecidos. Em outras palavras, a krigagem ordinária assume a média é um valor determinístico desconhecido, enquanto a krigagem universal usa uma função para estimar a média e utiliza coeficientes diferentes para cada ponto em que a predição é feita, $\mu(s)$ é alguma *função* determinística. Ou ainda pode-se dizer que krigagem ordinária é usada quando a suposição de estacionariedade de segunda ordem é satisfeita, em que se tem a média é constante para todos os valores e na krigagem universal já não se assume mais que a média é constante.

Métodos geoestatísticos para interpolação Krigagem universal começam justamente com este reconhecimento de que a variação espacial de qualquer atributo contínuo é muitas vezes demasiado irregular para ser modelado por uma simples função suave matemática. Muitas vezes, a média da variável regionalizada não é constante em toda a área de estudo e toda a variável é dita ser não-estacionários. Uma variável não-estacionária regionalizada pode ser considerado como tendo dois componentes (Davis, 1973):

- *drift* que consiste no valor médio ou esperado da variável regionalizada;
- o resíduo sendo a diferença entre as medidas reais e o *drift*.

Ao invés de remover a variação lenta de antemão, subtraindo a tendência local ou *drift* a partir dos dados, pode-se usar o método de krigagem universal.

Em krigagem ordinária considera-se $E([Z(s)]) = \mu$ constante. Em krigagem universal a média é uma função do local das coordenadas. Então, $\mu(s)$ na Equação (3.1) passa a ser

$$\mu(s) = \sum_{k=1}^p \beta_k f_k(s)$$

em que β_k é a tendência local ou *drift* dos coeficientes, $f_k(s)$ são funções do local das coordenadas (equações de tendência), e $s \in D \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$).

O valor estimado em s_0 é obtidos por:

$$\hat{Z}(s_0) - \sum_{k=1}^p \beta_k f_k(s) = \sum_{u=1}^n \lambda_u \left[Z(s_u) - \sum_{k=1}^p \beta_k f_k(s_u) \right],$$

isto é,

$$\hat{Z}(s_0) = - \sum_{u=1}^n \lambda_u Z(s_u) + \sum_{k=1}^p \beta_k \left[f_k(s_0) - \sum_{u=1}^n \lambda_u f_k(s_u) \right].$$

Para se calcular os coeficientes e derivar β_k por meio do estimador (3.4.2) é imposta a seguinte restrição

$$\sum_{u=1}^n \lambda_u f_k(s_u) = f_k(s_0), \quad k = 1, \dots, p.$$

Este interpolador visa obter valores para a variável regionalizada em pontos não amostrados, para a construção de mapas temáticos. Para uma tendência simples a krigagem universal se reduz a krigagem ordinária (Christensen *et al.*, 1993 e Renard, 1998).

Em situações como por exemplo, quando se trabalha com covariáveis, a krigagem ordinária não é mais viável, pois a média deixa de ser constante, então a krigagem universal é um interpolador ideal para ser utilizado.

3.5 Critérios de Validação do Modelo

Os métodos de validação dos modelos comparam os valores empíricos obtidos na amostragem com os valores teóricos do modelo espacial escolhido. Os principais critérios para validação do modelo são a validação cruzada e o máximo valor do logaritmo da função de verossimilhança (*LMV*). Estas técnicas ajudam a escolher um entre os diferentes modelos, baseando-se na análise dos erros de estimação. Os resíduos da validação dos modelos têm importantes informações e um estudo minucioso da sua distribuição pode caracterizar problemas no procedimento da estimação dos parâmetros.

3.5.1 Validação Cruzada

O critério de validação cruzada, segundo Isaaks e Srivastava (1989), é uma técnica de avaliação de erros de estimativas que permite comparar os valores estimados com os amostrados. Os valores da amostra em certa localização $Z(s_i)$, um a um, é temporariamente descartado

do conjunto de dados e estima-se por krigagem, o valor nesta localização $\hat{Z}(s_{(i)})$ é utilizando-se dos demais valores conhecidos. Compara-se o valor estimado com o valor coletado e repete-se este procedimento para todos os valores da amostra disponíveis. As características dos erros de estimação, além de indicar a qualidade do ajuste, indicam também a avaliação de estacionariedade e do peso da presença de dados atípicos.

O erro médio por validação cruzada (EM) é obtido da Equação (3.14),

$$EM = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(Z(s_i) - \hat{Z}(s_{(i)}) \right) \quad (3.14)$$

em que n é o número de dados; $Z(s_i)$, valor observado no ponto s_i ; e $\hat{Z}(s_{(i)})$, valor predito por krigagem no ponto s_i , sem considerar a observação $Z(s_i)$. Mcbratney e Webster (1986) e Cressie (1993) apresentam erro médio reduzido \overline{ER} , desvio padrão dos erros médios (S_{EM}), desvio-padrão dos erros reduzidos (S_{ER}) e do erro absoluto (EA), como instrumento para avaliar modelos. O erro médio reduzido é definido pela equação (3.15):

$$\overline{ER} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\left(Z(s_i) - \hat{Z}(s_{(i)}) \right)}{\sigma(\hat{Z}(s_{(i)}))} \quad (3.15)$$

em que, $\sigma(\hat{Z}(s_{(i)}))$ é o desvio padrão da krigagem no ponto s_i , sem considerar a observação $Z(s_i)$. O desvio padrão dos erros reduzidos é denotado por (S_{ER}).

Aplicando-se a condição de não tendenciosidade, o valor populacional para o erro médio reduzido deve ser zero e o do desvio padrão do erro reduzido igual a 1, de acordo com Mcbratney e Webster (1986), Cressie (1993), Mello *et al.* (2005) e Faraco *et al.* (2008). Assim, para a escolha do melhor modelo ajustado o interesse está no valor de EM e \overline{ER} mais próximos de zero, no menor S_{EM} e no valor de S_{ER} mais próximo de um. Conhecendo o conjunto de valores medidos e preditos por krigagem $Z(s_i)$ e $\hat{Z}(s_{(i)})$, respectivamente, é possível definir o erro absoluto (EA) na unidade da variável estudada, pela equação (3.16):

$$EA = \sum_{i=1}^n \left| Z(s_i) - \hat{Z}(s_{(i)}) \right| \quad (3.16)$$

O erro absoluto é a magnitude da diferença entre o valor real e o estimado, é uma medida da magnitude dos erros na unidade da variável, e o interesse está no modelo ajustado que apresentar menor valor para EA .

3.5.2 Máximo valor do logaritmo da função de verossimilhança

O interesse está no vetor $\hat{\theta}$ que faz a probabilidade de obter-se a amostra já obtida a maior possível, ou seja, encontrar o $\hat{\theta}$ que maximize a função de verossimilhança. Na maioria dos casos é mais simples maximizar o logaritmo natural da função de verossimilhança ($\log \mathcal{L}(\theta)$), que produz os mesmos resultados da maximização da função original. Portanto,

escolhe-se o modelo que apresentar o maior valor para o máximo valor do logaritmo da função de verossimilhança (LMV).

4 DIAGNÓSTICOS DE INFLUÊNCIA

Uma importante etapa na análise de um ajuste é a verificação de possíveis afastamentos das suposições feitas para o modelo, bem como a existência de observações atípicas que causam interferência desproporcional nos resultados. Existem diferentes métodos para avaliar a influência de perturbações em um conjunto de dados e no modelo dado os parâmetros estimados. Existem algumas maneiras para avaliar a influência de perturbações nos dados e nos modelos estatísticos.

A deleção de pontos é uma técnica muito conhecida para avaliar o impacto da retirada de uma observação particular nas estimativas dos parâmetros. Originalmente desenvolvida para modelos normais lineares, a distância de Cook (1987) foi rapidamente assimilada e estendida para diversas classes de modelos. Um problema que pode ocorrer com a deleção individual de pontos é o que se denomina *masking effect* ou seja, deixar de detectar pontos conjuntamente discrepantes. Para isto, existe alguns procedimentos de retirada múltipla de pontos, mas que são menos populares em virtude do custo computacional envolvido. Trabalhos em diagnóstico de influência por meio da eliminação de pontos podem ser vistos em Belsley *et al.* (1980), Cook e Weisberg (1982) e Chatterjee e Hadi (1988).

Uma proposta muito interessante na área de diagnósticos foi apresentada por Cook (1986), conhecida como influência local, consiste em avaliar a robustez das estimativas dos parâmetros mediante pequenas perturbações aplicada no modelo ou nos dados, ao invés da avaliação pela retirada individual ou conjunta de pontos.

4.1 Influência Local

O método de influência local proposto por Cook (1986) é um dos mais utilizados em diagnóstico, e verifica a existência de pontos que sob pequenas perturbações no modelo causam variações desproporcionais nos resultados. Esta metodologia não exige a eliminação de observações e permite avaliar a influência conjunta de todos os pontos. Por exemplo, se o interesse é estudar a influência local no ajuste, a sugestão de Cook é perturbar as covariáveis ou a variável resposta e utilizar alguma medida adequada para quantificar a influência das observações. Por outro lado, se o interesse é estudar pontos que interferem principalmente na modelagem da estrutura de escala assim como indicar aqueles pontos influentes na estimação dos parâmetros, sugere-se perturbar a matriz escala. Resultados sobre influência local e aplicações em modelos de regressão linear e modelos mistos podem ser encontrados em Beckman *et al.* (1987), Galea *et al.* (1997, 2003, 2005), Lesaffre e Verbeke (1998), Liu (2000, 2002) e Díaz-García *et al.*

(2003).

Seja $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ o logaritmo da função de verossimilhança em que $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{p+q}$ é um vetor que contém os parâmetros do modelo. Seja $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)$ o logaritmo da função verossimilhança perturbada, em que $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \dots, \omega_n)^T$ é o vetor de perturbações, $\omega \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$. Existe ω_0 (vetor de perturbação) tal que $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega_0) = \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$.

Para avaliar os efeitos das perturbações nas estimativas fornecidas pelo modelo, Cook (1986) sugere estudar o comportamento do afastamento da verossimilhança definido por

$$LD(\omega) = 2\{\mathcal{L}(\hat{\boldsymbol{\theta}}) - \mathcal{L}(\hat{\boldsymbol{\theta}}|\omega)\}$$

em que $LD(\omega) \geq 0$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega$ são as estimativas de máxima verossimilhança dos modelos não perturbado $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ e perturbado $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)$, respectivamente. Em particular, $LD(\omega_0) = 0$.

Segundo Cook (1987) o sentido da distância entre $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega$, baseado em $LD(\omega)$, pode depender da concavidade do logaritmo da função de verossimilhança, de maneira que se $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ é suficientemente achatada, pode-se dizer que $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega$ estão próximos entre si, enquanto que se $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})$ for suficientemente concentrada em torno de $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, estas estimativas podem estar distantes entre si.

A idéia de influência local é estudar o comportamento da função $LD(\omega)$ numa vizinhança de ω_0 . Para tanto, considera-se a superfície geométrica $(n + 1)$ -dimensional formada pelos valores do vetor

$$\alpha(\omega) = \begin{bmatrix} \omega \\ LD(\omega) \end{bmatrix}$$

quando ω varia em Ω . Essa superfície é denominada gráfico de influência.

O estudo de influência local consiste em analisar como a superfície $\alpha(\omega)$ desvia-se do seu plano tangente (T_0) em $\omega_0(T_0)$. Essa análise pode ser feita estudando-se as curvaturas das seções normais da superfície $\alpha(\omega)$ em ω_0 , chamadas de curvaturas normais, que são interseções de $\alpha(\omega)$ com planos contendo o vetor normal com seu plano tangente em ω_0 , ver Figura 4.

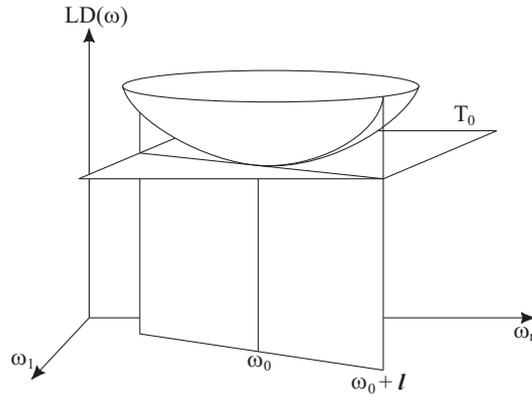


Figura 4: Gráfico de Influência (Verbeke e Molenberghs, 2000).

A intersecção entre a seção normal e o plano tangente é denominada linha projetada, que pode ser obtida por meio do gráfico de $LD(\omega_0 + a\mathbf{l})$ versus a , $a \in \mathbb{R}$. A curvatura normal da linha projetada, denotada por C_l , é definida como sendo a curvatura de $(a, LD\{\omega(a)\})$ em $a = 0$, em que $\omega(a) = \omega_0 + a\mathbf{l}$, ou seja, C_l é a curvatura normal da superfície $\alpha(\omega)$ em ω_0 e na direção unitária \mathbf{l} .

Após manipulações algébricas Cook (1986) mostra que a curvatura normal na direção unitária \mathbf{l} fica dada por

$$C_l(\boldsymbol{\theta}) = 2|\mathbf{l}^\top \ddot{\mathbf{F}}\mathbf{l}|,$$

em que

$$\ddot{\mathbf{F}} = \left. \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega)}{\partial \boldsymbol{\omega} \partial \boldsymbol{\omega}^\top} \right|_{\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{\omega}_0}.$$

Em notação matricial pode-se escrever

$$\ddot{\mathbf{F}} = \mathbf{J}^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}} \mathbf{J}, \quad (4.1)$$

em que \mathbf{J} é uma matriz $p \times n$ cujos elementos são dados por $J_{ij} = \left. \frac{\partial \mathcal{L}(\hat{\theta}_i \boldsymbol{\omega})}{\partial \omega_j} \right|_{\boldsymbol{\omega}=\boldsymbol{\omega}_0}$, sendo $\hat{\theta}_i \boldsymbol{\omega}$ a i -ésima componente do vetor $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega$, enquanto que $\ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}$ é a matriz de informação observada definida em (3.8), avaliada em $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ e $\boldsymbol{\omega}_0$.

Usando o fato de que $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega$ é um ponto de máximo local do logaritmo da função de verossimilhança perturbada $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)$, usando a simetria da matriz $\ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}$ e após manipulações algébricas, segue-se que

$$\mathbf{J} = -\ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \boldsymbol{\Delta}.$$

$\boldsymbol{\Delta}$ é uma matriz $(p+q) \times n$ com elementos $\Delta_{ij} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)}{\partial \theta_j \partial \omega_i}$.

Substituindo \mathbf{J} na equação (4.1) obtém-se

$$\begin{aligned}\ddot{\mathbf{F}} &= \mathbf{J}^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \mathbf{J} \\ &= (-\Delta^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1}) \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}} (-\ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \Delta) \\ &= \Delta^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \Delta.\end{aligned}\quad (4.2)$$

Desta forma, a curvatura normal da superfície $\alpha(\omega)$, na direção de um vetor unitário \mathbf{l} , é dada por

$$C_l(\boldsymbol{\theta}) = 2|\mathbf{l}^\top \Delta^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \Delta \mathbf{l}|, \quad (4.3)$$

em que $\|\mathbf{l}\| = 1$. Os componentes individuais de (4.3) são muitas vezes simples de obter uma vez que o esquema de perturbação foi definido. Segundo Cook (1986), existem diversas maneiras onde (4.3) pode ser utilizada para estudar $\alpha(\omega)$ na prática. Os extremos $C_{max} = \max C_l$ e $C_{min} = \min C_l$, para $l = 1, \dots, n$, são duas possibilidades. Claramente, C_{max} e C_{min} correspondem ao máximo e mínimo valor absoluto dos autovalores de $\ddot{\mathbf{F}}$ em (4.2). O interesse particular está na direção que produz maior influência local. A máxima curvatura C_{max} , que é o maior autovalor absoluto de $2\ddot{\mathbf{F}}$, e L_{max} , o vetor correspondente a essa direção, geralmente são utilizados para identificar observações localmente influentes. Com o vetor L_{max} é possível identificar os fatores mais influentes para o esquema de perturbação em análise.

O gráfico dos elementos $|L_{max}|$ versus i (ordem dos dados) pode revelar qual o tipo de perturbação que tem maior influência em $LD(\omega)$, na vizinhança de ω_0 (Cook, 1986). Ainda considerando-se $C_i = 2 * |f_{ii}|$, em que f_{ii} são os elementos da diagonal principal da matriz $\ddot{\mathbf{F}}$, pode-se usar o gráfico de C_i versus i (ordem dos dados) para avaliar a existência de observações influentes.

Fung e Kwan (1997) apresentam uma interessante discussão sobre a aplicação de influência local para outras medidas de influência diferentes do afastamento da verossimilhança. A fórmula geral para a curvatura da normal (Cook, 1986) é

$$C_l = \left| \frac{\mathbf{l}^\top \ddot{\Gamma} \mathbf{l}}{(1 + \dot{\Gamma}^\top \dot{\Gamma}) \mathbf{l}^\top (\mathbf{I} + \dot{\Gamma} \dot{\Gamma}^\top) \mathbf{l}} \right|, \quad (4.4)$$

em que $\dot{\Gamma} = \partial \hat{T}_\omega / \partial \omega|_{\omega=\omega_0}$, $\ddot{\Gamma} = \partial^2 \hat{T}_\omega / \partial \omega \omega^\top|_{\omega=\omega_0}$ e \hat{T}_ω é a função objeto avaliada sob o modelo perturbado.

Fung e Kwan (1997) mostraram que uma medida de influência, \hat{T}_ω , é invariante de escala se $\dot{\Gamma} = \partial \hat{T}_\omega / \partial \omega|_{\omega=\omega_0} = 0$. Quando esta derivada é diferente de zero a ordem entre os componentes de L_{max} não é necessariamente preservada sob mudanças de escala. Em particular, para o afastamento do logaritmo da função de verossimilhança tem-se $\dot{\Gamma} = \partial LD(\omega) / \partial \omega|_{\omega=\omega_0} = 0$, portanto é uma medida de influência invariante com mudanças de escala nos dados. Esta

propriedade segue também, por exemplo, para as medidas de influência propostas por Cook e Thomas (1990) e Paula (1993), porém ela não vale para outras medidas de influência discutidas por Fung e Kwan (1997).

4.1.1 Influência Local em Modelos Espaciais Lineares com Distribuição da Família de Contornos Elípticos

Nos estudos geoestatísticos, também é fundamental que seja feito um estudo sobre a robustez dos resultados obtidos com o ajuste de um modelo, principalmente no que se trata da formulação e estimativas dos parâmetros. Um dos principais motivos de estudar influência local em modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos vem do fato de que, apesar da classe elíptica envolver várias de distribuições com caudas mais pesadas do que a normal, podendo acomodar melhor as observações atípicas, ainda assim, os modelos podem sofrer efeito de observações influentes, havendo então a necessidade de realizar estudos de sensibilidade nesta classe. Esses procedimentos também permitem selecionar modelos dentro da classe elíptica que se comportam adequadamente de acordo com o tipo de perturbação considerada. Galea *et al.* (2003) apresentaram estudos de influência local em modelos elípticos lineares, Liu (2002) e Díaz-García *et al.* (2003) discutiram diagnósticos de influência em modelos de contornos elípticos lineares multivariados, Osório *et al.* (2007) avaliaram a curvatura de influência local sobre vários esquemas de perturbação para modelos lineares elípticos com estrutura longitudinal, Riquelme *et al.* (2011) estudaram diagnósticos de influência local do coeficiente de variação das distribuições de contornos elípticos.

Existem alguns trabalhos na literatura sobre diagnósticos de influência em modelos espaciais lineares. Diamond e Armstrong (1984) e Warnes (1986) observaram a sensibilidade de predições para perturbações na função de covariância. Christensen *et al.* (1992) examinaram diagnósticos com a deleção de pontos para a predição baseada em krigagem universal, enquanto Christensen *et al.* (1993) consideraram diagnósticos com a deleção de pontos para estimativas dos parâmetros da função de covariância pelo método de máxima verossimilhança restrita. Militino *et al.* (2004) exploraram dois diferentes métodos para detectar pontos influentes, que envolve a eliminação de observações. Borssoi *et al.* (2011a, 2011b) e Uribe-Opazo *et al.* (2012) utilizaram técnicas de diagnóstico para avaliar a sensibilidade dos estimadores de máxima verossimilhança, das funções de covariância e do preditor linear sob pequenas perturbações nos dados e/ou no modelo espacial linear com distribuição normal.

Considere $\{Z(s), s \in D\}$ um processo estocástico estacionário e que Z tem função de distribuição de contorno elíptico, $Z \sim El_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g(u))$, sendo $\boldsymbol{\mu}$ o parâmetro de locação e $\boldsymbol{\Sigma}$ a matriz escala definidos em (3.2) (3.2), respectivamente.

O logaritmo da função de verossimilhança para o modelo não perturbado é dado por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}) = -\frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}| + \log(g(u))$$

em que $u = (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$. A matriz de informação observada $I(\boldsymbol{\theta}) = -\ddot{\mathbf{L}}(\boldsymbol{\theta})$ é dada em (3.8).

O logaritmo da função de verossimilhança perturbada $\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)$ depende da perturbação em estudo. Considerando a perturbação na variável resposta, é dado em (4.5) por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega) = -\frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}| + \log(g(u_\omega)) \quad (4.5)$$

em que $u_\omega = (\mathbf{Z}_\omega - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Z}_\omega - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$ e \mathbf{Z}_ω pode assumir diferentes formas. Nesta dissertação são considerados dois diferentes esquemas de perturbação da variável resposta, $\mathbf{Z}_\omega = \mathbf{Z} + \boldsymbol{\omega}$ (Esquema 1), conhecido como perturbação aditiva da resposta e $\mathbf{Z}_\omega = \mathbf{Z} + \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{\omega}$ (Esquema 2) proposto por Zhu *et. al* (2007) e denominado esquema de perturbação de Zhu.

A seguir, são apresentadas algumas técnicas em análises de diagnósticos: influência local na resposta considerando a perturbação aditiva, influência local na resposta considerando a perturbação de Zhu, influência local na matriz de covariâncias e no preditor linear, e a alavanca generalizada.

4.1.2 Influência Local na Resposta

4.1.2.1 Perturbação Aditiva

Seja o logaritmo da função de verossimilhança perturbada dado por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega) = -\frac{1}{2}\log|\boldsymbol{\Sigma}| + \log(g(u_\omega))$$

em que $u_\omega = (\mathbf{Z}_\omega - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{Z}_\omega - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$ e $\mathbf{Z}_\omega = \mathbf{Z} + \boldsymbol{\omega}$ com $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \dots, \omega_n)^\top$ vetor de perturbação das respostas pertencente a um espaço de perturbações Ω ($\boldsymbol{\omega} \in \Omega$).

Para estudar o comportamento de $LD(\omega)$ em torno de ω_0 , utilizando a curvatura normal $C_l LD(\omega)$ em ω_0 na direção de algum vetor unitário \mathbf{l} , dada na Equação (4.3), é necessário conhecer os valores da matriz de informação observada avaliada em $\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}$ (ver seção 3.3.1), e os valores da matriz $\boldsymbol{\Delta}$, os quais dependem do tipo de perturbação em estudo.

A matriz $\boldsymbol{\Delta}$ considerando a perturbação aditiva da resposta é dada por (ver Anexo C)

$$\boldsymbol{\Delta}_\beta = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\omega}^\top}$$

$$\boldsymbol{\Delta}_\beta = -2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\Sigma} + 2V'_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$$

$$\text{e } \boldsymbol{\Delta}_\varphi = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega)}{\partial \boldsymbol{\varphi} \partial \boldsymbol{\omega}^\top}$$

tem elementos,

$$\Delta_{\varphi_j} = -2\epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} \frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_j} \Sigma^{-1} \left(V'_{g(u_{\omega})} \epsilon_{\omega} \epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} + V_{g(u_{\omega})} \mathbf{I}_n \right) \quad j = 1, \dots, q.$$

As derivadas de primeira e segunda ordem da matriz de escala Σ , para o caso particular com $q = 3$, isto é, para o caso de se considerar a forma paramétrica da matriz escala dada em (3.2), são apresentadas no Apêndice B.

Como L_{max1} é o maior autovetor associado ao maior autovalor da matriz $\ddot{\mathbf{F}}$, apresentada na Equação (4.2), pode-se avaliar a existência de observações influentes por meio do gráfico dos elementos $|L_{max}|_1$ versus i (ordem dos dados). Ou ainda, quando C_{max} não for muito maior que o segundo autovalor, pode ser informativo olhar também os componentes do segundo maior autovetor associado ao segundo maior autovalor da matriz $\ddot{\mathbf{F}}$, denominado L_{max2} , e então utilizar o gráfico dos elementos $|L_{max}|_2$ versus i (ordem dos dados) (Paula, 2010). Considerando-se $C_i = 2 * |f_{ii}|$, em que f_{ii} são os elementos da diagonal principal da matriz $\ddot{\mathbf{F}}$, pode-se usar o gráfico de C_i versus i (ordem dos dados) para avaliar a existência de observações influentes.

4.1.2.2 Perturbação de Zhu

Considere o logaritmo da função de verossimilhança perturbada dado por

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\omega) = -\frac{1}{2} \log|\Sigma| + \log(g(u_{\omega}))$$

em que $u_{\omega} = (\mathbf{Z}_{\omega} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^{\top} \Sigma^{-1} (\mathbf{Z}_{\omega} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})$ e neste caso, $\mathbf{Z}_{\omega} = \mathbf{Z} + \Sigma^{-1/2} \boldsymbol{\omega}$ com $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \dots, \omega_n)^{\top}$ vetor de perturbação das respostas pertencente a um espaço de perturbações Ω ($\boldsymbol{\omega} \in \Omega$).

A matriz Δ considerando a perturbação de Zhu é dada por (ver Anexo C)

$$\Delta_{\beta} = -2\mathbf{X}^{\top} \Sigma^{-1} [V_{g(u_{\omega})} \mathbf{I} + 2V'_{g(u_{\omega})} \epsilon_{\omega} \epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1}] \Sigma^{-1/2}$$

e Δ_{φ} tem elementos:

$$\Delta_{\varphi_j} = -2\epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} \left[V'_{g(u_{\omega})} \frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_j} \Sigma^{-1} \epsilon_{\omega} \epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} + V_{g(u_{\omega})} \left(\frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_j} \Sigma^{-1} + \Sigma^{-1/2} \frac{\partial \Sigma^{1/2}}{\partial \varphi_j} \right) \right] \Sigma^{-1/2}$$

4.1.3 Influência Local na Matriz de Covariância

Da mesma que Cook (1986), Cadigan e Farrell (2002) estudaram o comportamento local de gráficos influência formados a partir de perturbações para os componentes do modelo. No entanto, segundo os próprios autores, os diagnósticos que eles desenvolveram são mais gerais e permite concentrar as análises de influência sobre resultados importantes, produzindo diagnósticos que sejam interessantes aos profissionais.

A influência local da matriz de covariância avalia a influência de observações em determinar a estrutura do modelo que define a variabilidade espacial. A função de covariância $C(\delta)$ depende do vetor de parâmetros $\boldsymbol{\theta}$, e para uma distância δ fixa, denota-se $C_\delta(\boldsymbol{\theta})$. Segundo Cadiogan e Farrell (2002), a sensibilidade das estimativas de máxima verossimilhança, dados $C_\delta(\boldsymbol{\theta})$, pode ser feita utilizando a direção de máxima inclinação.

A influência local de primeira ordem que depende da perturbação em estudo, pode ser medida usando a inclinação na direção \boldsymbol{l} , denotada como $S(\boldsymbol{l})$, do gráfico de influência de $C_l(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\omega)$ versus ω . Neste caso, tem-se

$$S(\boldsymbol{l}) = \boldsymbol{l}^\top \dot{\mathbf{C}}_\delta,$$

em que $\dot{\mathbf{C}}_\delta$ é um vetor $n \times 1$ dado por

$$\dot{\mathbf{C}}_\delta = \left\{ -\boldsymbol{\Delta}_\omega^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}}\hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_\delta(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta}=\hat{\boldsymbol{\theta}}} \right\},$$

com $\frac{\partial \mathbf{C}_\delta(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}^\top} = \left(0^\top, \frac{\mathbf{C}_\delta(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}^\top} \right)$ e $\frac{\mathbf{C}_\delta(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}^\top} = \left(\frac{\mathbf{C}_\delta(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_1}, \dots, \frac{\mathbf{C}_\delta(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_q} \right)$.

A direção de máxima inclinação local é dada por

$$l_\delta = \frac{\dot{\mathbf{C}}_\delta}{\|\dot{\mathbf{C}}_\delta\|}.$$

Utiliza-se o gráfico l_δ versus i (ordem dos dados) para avaliar a sensibilidade da função de covariância. Outra direção de interesse é $\boldsymbol{l} = \boldsymbol{e}_{in}$, que corresponde ao i -ésimo vetor unitário em \mathbb{R}^n . Neste caso a inclinação é dada por $S(\boldsymbol{e}_{in}) = S_{ic} = \dot{C}_{i\delta}$, em que $\dot{C}_{i\delta}$ é o i -ésimo elemento de $\dot{\mathbf{C}}_\delta$, $i = 1, \dots, n$. Além de l_δ versus i , também pode-se usar S_{ic} versus i para avaliar a sensibilidade da função de covariância para pequenas perturbações no modelo estatístico.

4.1.4 Influência Local no Preditor Linear

Em geoestatística, uma etapa essencial é a construção dos mapas temáticos que permitem uma visualização da variabilidade espacial. Para tanto, é utilizada a técnica de krigagem para fazer a predição dos valores em locais não amostrados. Com a medida de influência local no preditor linear, pode-se avaliar a presença de observações influentes na predição destes valores.

Seja $Z_0 = Z(s_0)$, o preditor da krigagem na localização $s_0 \in D \subset \mathbb{R}^d$ ($d \geq 1$). A média de Z_0 é dada por $\mathbf{x}_0^\top \boldsymbol{\beta}$, em que $\mathbf{x}_0^\top = (x_{01}, \dots, x_{0p})$ e $x_{0j} = x_j(s_0)$ para $j = 1, \dots, p$.

O preditor do menor erro quadrático médio é dado por

$$\mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{x}_0^\top \boldsymbol{\beta} + \mathbf{C}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}),$$

em que $\mathbf{C}_0 = (C(\delta_{10}), \dots, C(\delta_{n0}))^\top$, com $\delta_{i0} = \|s_i - s_0\|$ para $i = 1, \dots, n$. Dessa forma, um estimador pontual para $\hat{Z}_0 = \mathbf{p}(s_0, \hat{\boldsymbol{\theta}}) = \mathbf{x}_0^\top \hat{\boldsymbol{\beta}} + \mathbf{C}_0^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}})$

De acordo com Cadigan e Farrell (2002), da mesma maneira que para a matriz de covariância, para o preditor linear $\mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})$ tem-se

$$S(l) = \mathbf{l}^\top \dot{\mathbf{p}}(s_0, \boldsymbol{\theta}),$$

sendo

$$\dot{\mathbf{p}}(s_0, \boldsymbol{\theta}) = \left\{ -\boldsymbol{\Delta}^\top \ddot{\mathbf{L}}_{\hat{\boldsymbol{\theta}} \hat{\boldsymbol{\theta}}}^{-1} \frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} \Big|_{\boldsymbol{\theta} = \hat{\boldsymbol{\theta}}} \right\}, \quad \text{um vetor } n \times 1, \quad (4.6)$$

em que

$$\frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\theta}} = \left(\frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}^\top}, \frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}^\top} \right)^\top,$$

$$\text{com } \frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = \mathbf{x}_0 - \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{C}_0 \text{ e}$$

$$\frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}} = \left[\left(\frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_j} \right) \right]$$

$$\text{tendo como elemento } \left(\frac{\partial \mathbf{p}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_j} \right) = \left\{ \frac{\partial \mathbf{C}_0^\top}{\partial \varphi_j} - \mathbf{C}_0^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right\} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \boldsymbol{\beta}) \text{ e}$$

$$\frac{\partial \mathbf{C}_0^\top}{\partial \varphi_j} = \left(\frac{\partial C_{\delta_{10}}^\top}{\partial \varphi_j}, \dots, \frac{\partial C_{\delta_{n0}}^\top}{\partial \varphi_j} \right), \text{ para } j = 1, \dots, q.$$

A direção de maior inclinação é $l_p = \frac{\dot{\mathbf{p}}(s_0, \boldsymbol{\theta})}{\|\dot{\mathbf{p}}(s_0, \boldsymbol{\theta})\|}$, e a inclinação na direção $l = e_{in}$ é $S(e_{in}) = S_{ip} = \dot{p}_i(s_0, \boldsymbol{\theta})$, em que $\dot{p}_i(s_0, \boldsymbol{\theta})$ é o i -ésimo elemento de $\dot{\mathbf{p}}(s_0, \boldsymbol{\theta})$, para $i = 1, \dots, n$.

4.2 Alavanca Generalizada

Outro conceito importante em técnicas de diagnóstico em modelos de regressão é a alavanca, veja por exemplo Hoaglin e Welsh (1978), Ross (1987) e Laurent e Cook (1992). Esta idéia foi generalizada para modelos mais complexos. Por exemplo, Wei *et al.* (1998) estenderam o método da alavanca para modelos não lineares. A proposta consiste em medir a influência que a resposta observada exerce sobre o seu próprio valor predito. Isto é, o conceito de alavanca está relacionado à influência de um determinado valor observado Z_i , sobre o valor ajustado correspondente \hat{Z}_i . Osório (2006) mostra a conexão entre o método de alavanca generalizado e o procedimento de influência local na variável resposta quando considerada a perturbação aditiva e afirma que esta ligação é interessante pois oferece uma justificativa para o esquema de perturbação da resposta e permite estudar a influência que respostas aberrantes dentro de cada indivíduo exercem sobre os valores preditos.

Baseando-se na alavanca generalizada apresentada por Wei *et al.* (1998), que é definida como

$$GL(\hat{\theta}) = \frac{\partial \hat{\mathbf{Z}}}{\partial \mathbf{Z}^\top}$$

em que, θ é um $(p + q)$ -vetor tal que $E(Z) = \mu(\theta)$ e $\hat{\theta}$ é um estimador de θ , com $\hat{Z} = \mu(\hat{\theta})$. O elemento (i, μ) do $GL(\hat{\theta})$, isto é, a alavanca generalizada do estimador $\hat{\theta}$ de (i, μ) , é a taxa instantânea de mudança no i -ésimo valor predito com respeito ao μ -ésimo valor da resposta.

Seja $\hat{\theta}$ o estimador de máxima verossimilhança de θ , assumindo que existe e é único, e assumindo que o logaritmo da função de verossimilhança tem segundas derivadas contínuas com respeito à θ e \mathbf{Z} . Wei *et al.* (1998) mostraram que a alavanca generalizada é obtida avaliando

$$GL(\theta) = D_{\theta}(-\ddot{\mathbf{L}}_{\theta\theta})^{-1}\ddot{\mathbf{L}}_{\theta\mathbf{z}} \quad (4.7)$$

em $\hat{\theta}$, com

$$D_{\theta} = \frac{\partial \mu}{\partial \theta^\top} = (\mathbf{X}, \mathbf{0})$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\theta\mathbf{z}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\theta)}{\partial \theta \partial \mathbf{Z}^\top} = (\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\mathbf{z}}^\top, \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\mathbf{z}}^\top)^\top \text{ com}$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\mathbf{z}} = -2\mathbf{X}^\top \Sigma^{-1} \left[V_{g(u)} \Sigma + 2V'_{g(u)} \epsilon \epsilon^\top \right] \Sigma^{-1} \mathbf{e}$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\mathbf{z}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\theta)}{\partial \varphi \partial \mathbf{Z}^\top},$$

com elementos

$$\frac{\partial^2 \mathcal{L}(\theta)}{\partial \varphi_j \partial \mathbf{Z}^\top} = -2\epsilon^\top \Sigma^{-1} \frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_j} \Sigma^{-1} \left[V'_{g(u)} \epsilon \epsilon^\top + V_{g(u)} \Sigma \right] \Sigma^{-1} \text{ para } j = 1, \dots, q.$$

Após algumas manipulações algébricas (Anexo C) mostra-se que

$$GL(\theta) = \mathbf{X}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\beta} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\beta})^{-1}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\mathbf{z}} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\mathbf{z}}) = GL_1 + GL_2 \quad (4.8)$$

em que

$$GL_1 = \mathbf{X}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\beta} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\beta})^{-1}(-\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\mathbf{z}}) \mathbf{e}$$

$$GL_2 = \mathbf{X}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\beta} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\beta})^{-1}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1} \ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\mathbf{z}}).$$

Nota-se que se $\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi} \approx \mathbf{0}$ ou se usada a matriz de informação de Fisher, $\mathbf{K}(\theta)$, ao invés de $\ddot{\mathbf{L}}_{\theta\theta}$, tem-se

$$GL(\theta) \approx \mathbf{X}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\beta})^{-1}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\mathbf{z}}).$$

Em particular para a distribuição normal

$$GL(\boldsymbol{\theta}) \approx \mathbf{X}(\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X})^{-1}(\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1}),$$

que coincide com a matriz de alavanca generalizada proposta por (Martin, 1992). Os elementos da diagonal da matriz $GL(\hat{\boldsymbol{\theta}})$, isto é, os elementos GL_{ii} para $i = 1, \dots, n$, são usados como diagnósticos de influência no vetor $\hat{\mathbf{Z}}$.

4.3 Curvatura Normal Conformal

Poon e Poon (1999) introduziram uma curvatura normal conformal

$$\mathbf{A} = \frac{C_l}{\|\ddot{\mathbf{F}}\|_F}$$

em que $\|\cdot\|_F$ é conhecida como a norma de Frobenius, assim

$$\mathbf{A} = -\frac{\ddot{\mathbf{F}}}{\sqrt{\text{tr}(\ddot{\mathbf{F}}^\top \ddot{\mathbf{F}})}}$$

Uma propriedade interessante da curvatura conformal é que, para qualquer direção unitária l , tem-se que $0 \leq A \leq 1$. Isto permite, por exemplo, a comparação da curvatura entre diferentes modelos.

5 CONSIDERAÇÕES COMPUTACIONAIS

As linguagens de programação R e \LaTeX constituem a plataforma computacional usada no desenvolvimento deste trabalho. As avaliações realizadas foram feitas utilizando a linguagem de programação R em sua versão 2.12.2 para o sistema operacional Windows, que se encontra disponível gratuitamente em <http://www.r-project.org>. Para redação dessa dissertação, foi utilizado o TeXnicCenter na linguagem \LaTeX . Detalhes sobre o sistema de tipografia \LaTeX podem ser encontrados em Mittelbach *et al.* (2004) ou no sítio <http://www.tex.ac.uk/CRAN/latex>.

5.1 Estimação de Parâmetros por Máxima Verossimilhança

O método de máxima Verossimilhança (MV) é um método estatístico muito utilizado, com boas propriedades assintóticas. Consiste em adotar, os valores que maximizam a probabilidade da amostra observada ter sido obtida. Para obter estimadores de máxima verossimilhança, é necessário conhecer a distribuição da variável em estudo.

Mardia e Marshall (1984) concluíram por meio de experimentos de simulação com variáveis regionalizadas, que a estimação por MV para pequenas amostras produz estimativas viesadas, principalmente para o patamar, mas que quando utilizada para grandes amostras, produz estimativas não viesadas, consistentes e eficientes. Cressie (1993) e Diggle e Ribeiro Jr (2007) comentam que sua maior desvantagem é a necessidade de inversão de matrizes complexas, podendo gerar dificuldades computacionais.

Para obter os estimadores de MV de $\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\beta}^\top, \boldsymbol{\varphi}^\top)^\top$ tem-se

$$\begin{aligned} U(\boldsymbol{\beta}) &= \frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0 \\ U(\boldsymbol{\varphi}) &= \frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}} = 0 \end{aligned}$$

Como mencionado na Seção 3.3, $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ tem forma fechada e é dado por

$$\hat{\boldsymbol{\beta}} = (\mathbf{X}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \hat{\boldsymbol{\Sigma}}^{-1} \mathbf{Z},$$

sendo o mesmo para qualquer distribuição pertencente a família de distribuições de contornos elípticos. Isto é, a distribuição considerada não interfere diretamente na estimativa de $\hat{\boldsymbol{\beta}}$, no entanto, nota-se que a forma de $\boldsymbol{\beta}$ está em função da matriz escala $\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ que depende do vetor de parâmetros estimados $\hat{\boldsymbol{\varphi}}$, os quais sofrem interferência de acordo com a distribuição em estudo.

A partir dos iniciais $\boldsymbol{\beta}^{(0)}$ e $\boldsymbol{\Sigma}^{(0)} = \varphi_1^{(0)}\mathbf{I} + \varphi_2^{(0)}\mathbf{R}(\varphi_3^{(0)})$, por processos iterativos tem-se

$$\boldsymbol{\beta}^{(i+1)} = (\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1(i+1)} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1(i+1)} \mathbf{Z}.$$

E assim, mediante a maximização do logaritmo da função de verossimilhança

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}^{(i+1)}, \boldsymbol{\varphi})$$

com $\boldsymbol{\epsilon}^{(i+1)} = (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}^{(i+1)})$ e $u = \boldsymbol{\epsilon}^{(i+1)} \boldsymbol{\Sigma}^{-1(i+1)} \boldsymbol{\epsilon}^{(i+1)}$, atualiza-se $\boldsymbol{\varphi}^{(i+1)}$ como

$$\boldsymbol{\varphi}^{(i+1)} = \arg \max \left(\mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}^{(i+1)}, \boldsymbol{\varphi}) \right).$$

A seguir são apresentados comentários adicionais sobre o procedimento para obtenção dos estimadores de MV para a distribuição normal. Segundo Diggle e Ribeiro Jr (2007), a implementação da estimativa MV, no contexto da geoestatística, é apenas direta quando os dados são gerados por um modelo espacial linear com distribuição gaussiana, mas apesar disso, os obstáculos à implementação da estimativa de máxima verossimilhança em modelos não gaussianos são apenas computacionais.

5.1.1 Distribuição Normal

Considere $\{Z(s), s \in D\}$ um processo estocástico estacionário em que $D \subset \mathbb{R}^d$ e \mathbb{R}^d é um espaço euclidiano d -dimensional ($d \geq 1$). Suponha que \mathbf{Z} tem função de distribuição normal, $\mathbf{Z} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}, g(u))$, sendo $\boldsymbol{\mu}$ especificada linearmente por um modelo espacial. Para $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}$,

$$\mathbf{Z} \sim N_n(\mathbf{X}\boldsymbol{\beta}, \varphi_1\mathbf{I} + \varphi_2\mathbf{R}(\varphi_3))$$

em que \mathbf{X} é uma matriz de planejamento que contém as covariáveis, $\boldsymbol{\beta}$ é o vetor dos parâmetros correspondentes, e \mathbf{R} depende do valor de φ_3 . O logaritmo da função de verossimilhança é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\boldsymbol{\beta}, \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) &= -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{1}{2} \log(|\varphi_1\mathbf{I} + \varphi_2\mathbf{R}(\varphi_3)|) - \\ &\quad \frac{1}{2} (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top (\varphi_1\mathbf{I} + \varphi_2\mathbf{R}(\varphi_3))^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}), \end{aligned} \quad (5.1)$$

sendo a maximização de (5.1) produz as estimativas dos parâmetros do modelo.

De acordo com Diggle e Ribeiro Jr (2007), um algoritmo para a maximização do logaritmo da verossimilhança para a distribuição normal apresentando em (5.1), pode ser feito da seguinte maneira:

Primeiramente, reparametrize fazendo $\nu = \varphi_1/\varphi_2$ e escreva $V = \nu\mathbf{I} + \mathbf{R}(\varphi_3)$. Dado \mathbf{V} ,

o logaritmo da função de verossimilhança é maximizado para

$$\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V}) = (\mathbf{X}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^\top \mathbf{V}^{-1} \mathbf{Z} \quad (5.2)$$

e

$$\hat{\varphi}_2(\mathbf{V}) = \frac{1}{n} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V}))^\top (\mathbf{V})^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X} \hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V})) \quad (5.3)$$

Observe que $\hat{\boldsymbol{\beta}}(\mathbf{V})$ reduz a estimativa de mínimos quadrados generalizados para \mathbf{V} conhecido.

Substituindo as expressões (5.2) e (5.3) em (5.1), obtem-se a verossimilhança concentrada

$$\mathcal{L}(\nu, \varphi_3) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(\hat{\varphi}_2(\mathbf{V})) - \log(|\mathbf{V}|) - n,$$

que deve ser maximizada numericamente com respeito a φ_3 e ν , seguido de substituição de volta para obter $\hat{\varphi}_2$ e $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.

Os detalhes práticos para a otimização dependem particularmente da família de modelos que está sendo levada em consideração. Por exemplo, para a função de covariância da família Matérn, o parâmetro de forma κ é geralmente mal identificado. Sendo então preferível, escolher o valor de κ para um conjunto discreto, por exemplo 0, 5; 1, 0; 1, 5; 2, 0, ao invés de tentar otimizar todos os valores positivos para κ (Diggle e Ribeiro Jr, 2007).

É importante ressaltar que diferentes valores de \mathbf{V} devem afetar a convergência da otimização numérica. Sabe-se ainda que os parâmetros φ_3 e κ não são ortogonais nos seus efeitos na estrutura da matriz de covariância. O mesmo acontece com os parâmetros φ_3 e p da família exponencial potência. Como consequência, os estimadores de máxima verossimilhança para φ_3 e κ ou p tendem a ser fortemente correlacionados. Uma alternativa para isto é fazer o que já foi mencionado, isto é, considerar um número pequeno de candidatos para os valores de κ ou p . Mais informações podem ser encontradas em Handcock e Wallis (1994) e Zhang (2004).

5.2 Método de Otimização Não-Linear

Este trabalho utiliza os métodos quasi-Newton BFGS e L-BFGS-B com derivadas analíticas. Estes métodos fazem parte de uma classe chamada métodos gradiente.

O objetivo dos métodos gradientes, é localizar o ponto de máximo de uma função $f(\boldsymbol{\theta})$. As iterações são iniciadas em $\boldsymbol{\theta}_0$ e o próximo valor de $\boldsymbol{\theta}$ no esquema iterativo é dado por

$$\boldsymbol{\theta}_{i+1} = \boldsymbol{\theta}_i + \lambda_i \mathbf{M}_i f_i,$$

em que \mathbf{M}_i é uma matriz positiva-definida, f_i é o gradiente de $f(\boldsymbol{\theta})$, ambos na iteração i , e λ_i é o tamanho do passo.

5.2.1 BFGS

Uma classe de algoritmos eficientes, também conhecida como classe de métodos de métricas variáveis, é a classe dos algoritmos quasi-Newton que eliminam a necessidade do cálculo das segundas derivadas. São um conjunto de procedimentos numéricos que visam minimizar uma função $f(\boldsymbol{\theta})$ em relação a $\boldsymbol{\theta}$, em que $f(\boldsymbol{\theta})$ é uma função real não-linear e $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^{p+q}$. Nesta classe, usa-se a sequência de matrizes:

$$\mathbf{M}_{i+1} = \mathbf{M}_i + \mathbf{N}_i,$$

em que \mathbf{N}_i é uma matriz positiva definida.

O método BFGS é o método quasi-Newton mais utilizado, e foi proposto independentemente pelos autores Broyden (1970), Fletcher (1970), Goldfarb (1970) e Shanno (1970). A metodologia é encontrada em Press *et al.* (1992) e em Frery e Cribari-Neto (2009).

Baseado em Dai (2002), a seguir são apresentados os procedimentos do algoritmo BFGS:

Passo 0. Faça $i = 0$ e atribua valores iniciais para o vetor $\boldsymbol{\theta}_0 \in \mathbb{R}^{p+q}$ e para a matriz $\mathbf{M}_0 \in \mathbb{R}^{(p+q) \times (p+q)}$;

Passo 1. Calcule $\mathbf{g}_i = \nabla f(\boldsymbol{\theta}_i)$, o gradiente de f . Se $\mathbf{g}_i = 0$, pare. O vetor $\boldsymbol{\theta}_i$ é o mínimo. Caso contrário, faça $\mathbf{d}_i = (-\mathbf{M}_i)^{-1} \mathbf{g}_i$;

Passo 2. Calcule:

$$\lambda_i = \arg \min_{\lambda > 0} f(\boldsymbol{\theta}_i + \lambda \mathbf{d}_i)$$

$$\boldsymbol{\theta}_{i+1} = \boldsymbol{\theta}_i + \lambda_i \mathbf{d}_i$$

Passo 3. Atualize a matriz \mathbf{M} :

$$\mathbf{M}_{i+1} = \mathbf{M}_i - \frac{\mathbf{M}_i \mathbf{s}_i \mathbf{s}_i^\top \mathbf{M}_i}{\mathbf{s}_i^\top \mathbf{M}_i \mathbf{s}_i} + \frac{\mathbf{y}_i \mathbf{y}_i^\top}{\mathbf{s}_i^\top \mathbf{y}_i},$$

em que

$$\mathbf{s}_i = \lambda_i \mathbf{d}_i$$

$$\mathbf{y}_i = \mathbf{g}_{i+1} - \mathbf{g}_i$$

Passo 4. Faça $i = i + 1$ e volte ao passo 1.

A matriz \mathbf{M} é sempre positiva-definida, desde que a matriz \mathbf{M}_0 fornecida no passo 0 tenha esta propriedade. Isto supera uma das limitações do método Newton-Raphson, em que a matriz $\mathbf{M}_i = -\mathbf{H}_i^{-1}$, \mathbf{H} a matriz hessiana, pode não ser positiva-definida caso se esteja longe do ponto ótimo. Segundo Frery e Cribari-Neto (2009), em muitas situações práticas o método BFGS tem desempenho superior ao de Newton-Raphson.

5.2.2 L-BFGS-B

O L-BFGS-B (Byrd *et al.*, 1995) é um algoritmo de memória limitada para resolver grandes problemas de otimização não linear sujeitas a limites simples nas variáveis. É uma extensão do algoritmo de memória limitada L-BFGS para otimização sem restrição descrito em Liu e Nocedal (1989). O objetivo do algoritmo L-BFGS-B é minimizar uma função não linear de n variáveis,

$$\min f(x)$$

sujeita a

$$\mathbf{x}_l \leq x \leq \mathbf{x}_u,$$

em que os vetores \mathbf{x}_l and \mathbf{x}_u representam os limites inferior e superior das variáveis. Nem todas as variáveis precisam ter limites, na verdade o algoritmo também é adequado e eficiente para resolver problemas sem restrições. O usuário deve fornecer o gradiente g , mas o conhecimento sobre a matriz Hessiana de f não é necessária.

Como apresentado por Zhu *et al.* (1997), o algoritmo procede aproximadamente da seguinte maneira:

A cada iteração é atualizada uma aproximação da memória limitada BFGS para a matriz Hessiana. Esta matriz de memória limitada é usada para definir um modelo quadrático da função objetivo f .

A direção de busca é então calculada usando uma abordagem em duas fases: primeiro, a projeção do método gradiente (Bertsekas, 1982; Conn *et al.*, 1988; Levitin e Polyak, 1966; Moré e Toraldo, 1989) é usado para identificar um conjunto de variáveis ativas, ou seja, variáveis que serão analisadas em seus limites, então o modelo quadrático é aproximadamente minimizado com relação às variáveis livres.

A direção de busca é definido para ser o vetor principal da iteração atual para esta minimização aproximada. Finalmente uma pesquisa de linha é realizada ao longo desta direção, usando a rotina descrita em Moré e Thuente (1994). A característica inovadora do algoritmo é que as matrizes BFGS de memória limitada são representados em uma forma compacta que é eficiente para problemas com restrição.

5.3 Processos Espaciais

O trabalho foi desenvolvido com o auxílio de simulações de conjuntos de dados espacialmente correlacionados $\{Z(s_1), \dots, Z(s_n)\}$, em que cada conjunto representa uma realização de um processo estocástico da família de distribuições de contorno elíptico, isotrópico e com estrutura de dependência espacial conhecida. Segundo Cressie (1993), a simulação de processos espaciais estacionários de segunda ordem pode ser feita pelo método de decomposição

de Cholesky.

De acordo com esta metodologia, escolhido o vetor $n \times 1$ que representa a média do processo $\boldsymbol{\mu} = (E[Z(s_1)], \dots, E[Z(s_n)])^\top$, e a matriz escala $\boldsymbol{\Sigma}$, $n \times n$, que está em função da covariância entre as variáveis, $\boldsymbol{\Sigma} = [C(Z(s_i), Z(s_j))]$, pode-se obter o vetor \mathbf{Z} , $\mathbf{Z} = (Z(s_1), \dots, Z(s_n))^\top$ por meio da relação

$$\mathbf{Z} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{L}\boldsymbol{\epsilon}, \quad (5.4)$$

em que \mathbf{L} é uma matriz triangular inferior tal que $\mathbf{L}\mathbf{L}^\top = \boldsymbol{\Sigma}$ e $\boldsymbol{\epsilon} = (\epsilon(s_1), \dots, \epsilon(s_n))^\top$ é um vetor de variáveis aleatórias não correlacionadas. A média $\boldsymbol{\mu}$ do processo não influencia na análise do semivariograma e, sem perda de generalidade, pode ser escolhida igual a zero.

Uribe-Opazo e Kavanagh (2006) utilizaram este procedimento para um estudo da estimação de parâmetros no ajuste de modelos teóricos a semivariogramas experimentais para processos estocásticos gaussianos. Gribov *et al.* (2006) propuseram alguns novos métodos para a computação de semivariogramas empíricos e covariâncias, e após converter o semivariograma esférico para uma função de covariância, o método de decomposição de Cholesky foi aplicado para simular 200 dados Gaussianos.

Mais detalhes sobre métodos de estimação, de inferência e aplicações, podem ser encontrados em Journel e Huijbregts (1978), Isaaks e Srivastava (1989), Cressie (1993) e Schabenberger e Gotway (2005).

6 SIMULAÇÕES

Para avaliar a capacidade da metodologia apresentada neste trabalho na detecção de pontos influentes, foram realizados estudos de simulação. Nestes estudos considerou-se a distribuição normal, t -Student com grau de liberdade $\nu = 5$ fixo, e exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$ fixo. Utilizou-se o método de estimação de máxima verossimilhança com estrutura na matriz escala dos modelos exponencial, gaussiano e da família Matérn para diferentes valores do parâmetro de forma κ . Para a estimação dos parâmetros considerando a distribuição gaussiana, foi utilizado o método de otimização não linear L-BFGS-B (Byrd *et al.*, 1995) e para as demais distribuições foi utilizado o BFGS (Broyden, 1970; Fletcher, 1970; Goldfarb, 1970; Shanno, 1970).

Estudos de simulação foram realizados gerando $n = 100$ observações, em um gride regular com distância de 1 *u.m.* entre pontos, feita pelo método de decomposição de Cholesky. Para cada distribuição mencionada, gerou-se inicialmente um conjunto de dados e posteriormente, como em Galea *et al.* (2008), após gerar Z_i , para $i = 1, \dots, n$, perturbou-se o máximo valor das observações, $Z_{max} = Z_{max} + b\sqrt{\mathbf{Z}^T \mathbf{Z}}$, para diferentes valores de b no intervalo $[0, 1]$.

Os procedimentos para análise de influência local em modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos foram feitos utilizando o *software* livre R na sua versão 2.12.2 (R Development Core Team, 2010).

Na Figura 5 está disposta a grade amostral de base utilizada em todas as simulações, em que pode ser verificada a localização de cada elemento amostral.

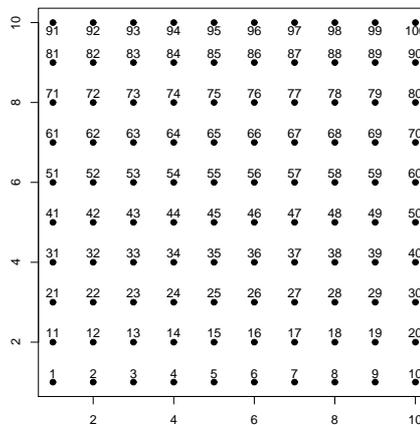


Figura 5: Grade amostral base para o conjunto de dados simulados.

6.1 Distribuição Normal

O conjunto de dados foi gerado, por decomposição de Cholesky (Cressie, 1993; Uribe-Opazo e Kavanagh, 2006), de uma distribuição normal com média zero e matriz de escala Σ , com vetor de parâmetros $\varphi = (0, 1, 3)^\top$, isto é, efeito pepita $\varphi_1 = 0$, contribuição $\varphi_2 = 1$ e parâmetro $\varphi_3 = 3$, $\mathbf{Z} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}\mathbf{1}, \Sigma)$, e perturbou-se o máximo valor da amostra; $Z_{max} = Z_{max} + b\sqrt{\mathbf{Z}^\top\mathbf{Z}}$, com $b = 0,1$, $b = 0,5$, $b = 0,8$ e $b = 1,0$. A seguir são apresentados os resultados da simulação para a perturbação $Z_{max} = Z_{max} + 0,5\sqrt{\mathbf{Z}^\top\mathbf{Z}}$, em que para os modelos exponencial, gaussiano e família Matérn com $\kappa = 1,0$ perturbou-se o ponto #62, e para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$ o ponto #75.

6.1.1 Modelo Exponencial para a Estrutura da Matriz Σ

A Figura 6 apresenta o gráfico *boxplot*, que identificou o ponto #62 como discrepante, e também apresenta o gráfico *postplot* dividido por quartis, para o modelo exponencial para a estrutura da matriz de escala Σ , e distribuição normal para os dados simulados. Com este gráfico torna-se possível identificar onde estão localizados o(s) ponto(s) discrepantes detectados pelo gráfico *boxplot* e ainda, se os seus pontos vizinhos possuem valores muito distintos. Na Figura 6b nota-se que a região norte apresenta valores mais altos e a região central valores mais baixos.

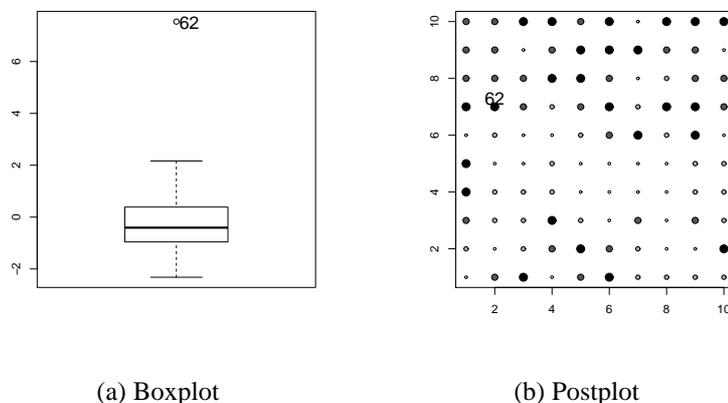


Figura 6: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição normal.

Após a perturbação, as estimativas encontradas dos parâmetros do modelo espacial linear e da estrutura da matriz Σ , com os respectivos desvios padrões entre parênteses foram $\hat{\beta} = -0,1516 (0,1543)$, indicando o valor da média do conjunto de dados simulados em estudo, $\hat{\varphi}_1 = 0,0000 (6,6501)$, $\hat{\varphi}_2 = 1,5412 (6,6537)$ e $\hat{\varphi}_3 = 0,4324 (0,7993)$. Assim, determina-se o raio de dependência espacial de $\hat{a} = 1,2972$ u.m. (alcance) e o valor de $LMV = -162,60$.

Perturbação Aditiva

São exibidos na Figura 7 os gráficos de influência local para o modelo exponencial na estrutura da matriz de escala Σ , e distribuição normal quando considerada a perturbação aditiva. Observa-se que o ponto #62 foi detectado pelos gráficos C_i vs ordem, $|L_{max}|_1$ vs ordem e $|L_{max}|_2$ vs ordem apresentados nas Figuras 7a, 7b e 7c, sendo assim um forte candidato a ponto influente na variável resposta. Os gráficos l_δ e l_p da Figura 7d detectou o ponto #73 e 7e detectou o ponto #72 como possível ponto influente na matriz de covariância e no preditor linear, respectivamente. Salienta-se que as observações #72 e #73 são vizinhas a observação #62, o que tem relevância para dados com dependência espacial.

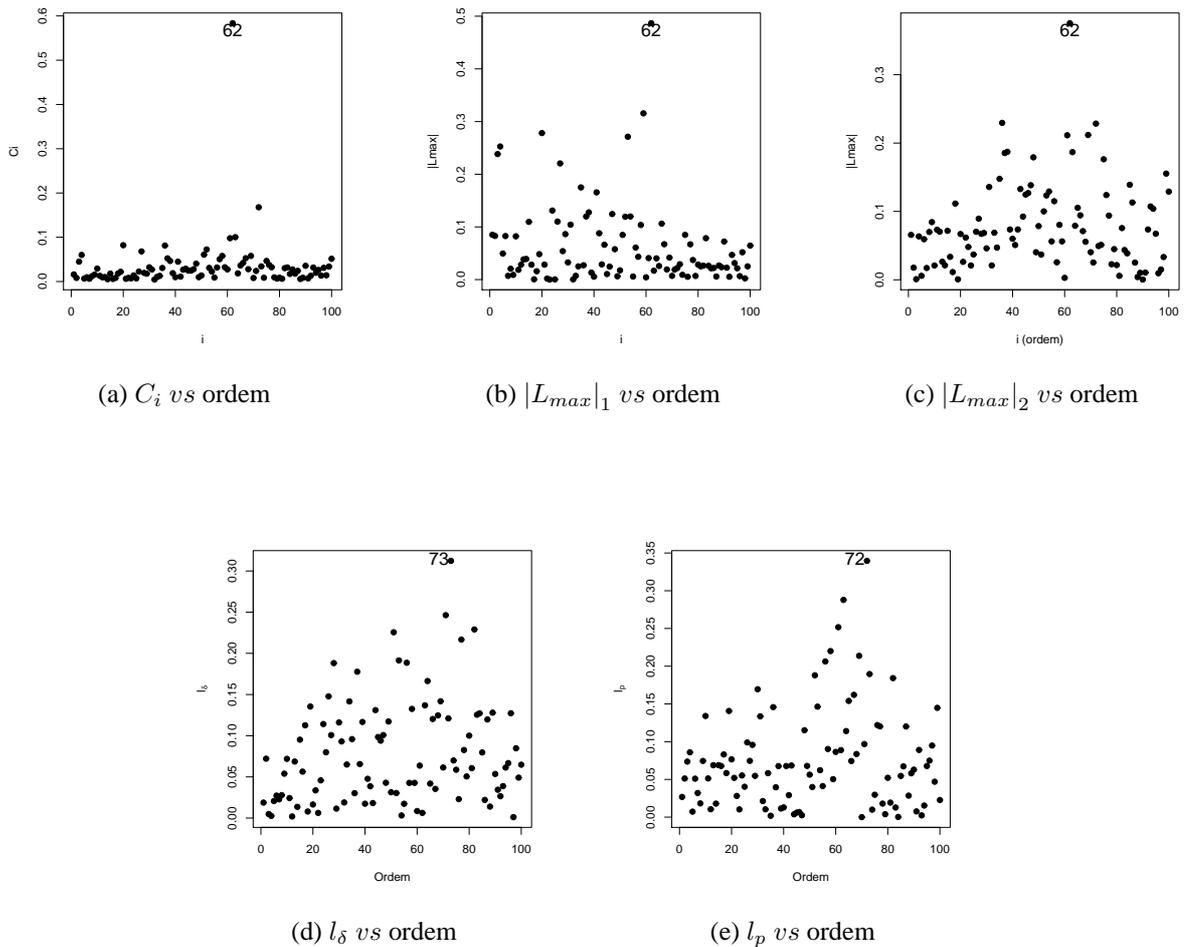


Figura 7: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Apresenta-se na Figura 8 os gráficos de influência local para a estrutura da matriz Σ do modelo exponencial e distribuição normal quando considerada a perturbação de Zhu. Observa-se que o ponto #62 foi detectado pelos gráficos das Figuras 8a, 8d e 8e (C_i , l_δ e l_p , respectivamente), mas não foi detectado pelos gráficos L_{max}_1 e L_{max}_2 . Mesmo assim, um possível ponto influente na variável resposta e ainda, na matriz de covariância e no preditor linear.

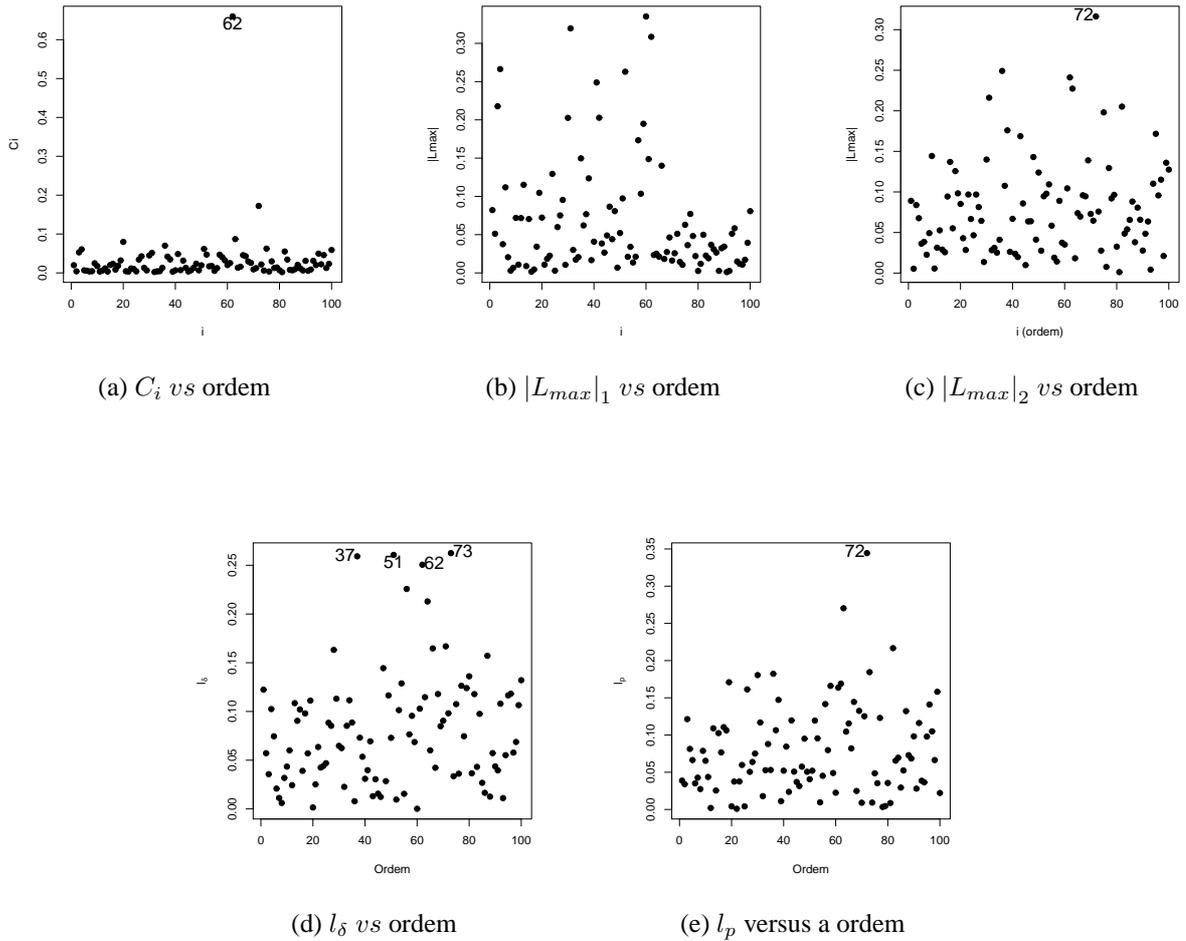
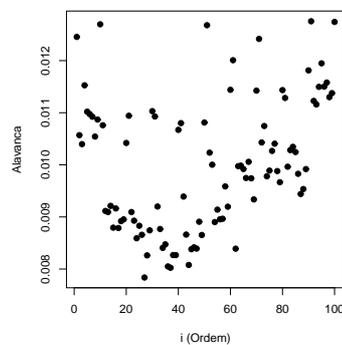


Figura 8: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura da matriz de Σ do modelo exponencial e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada GL apresentado na Figura 9 não destacou observações influentes no próprio valor ajustado.



(a) GL

Figura 9: Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição normal.

6.1.2 Modelo Gaussiano para a Estrutura da Matriz Σ

O gráfico *boxplot* da Figura 10a para o modelo gaussiano na estrutura da matriz de escala Σ , e distribuição normal para os dados simulados, indica o ponto #62 como discrepante, e o gráfico *postplot* é apresentado na Figura 10b indicando a localização deste ponto.

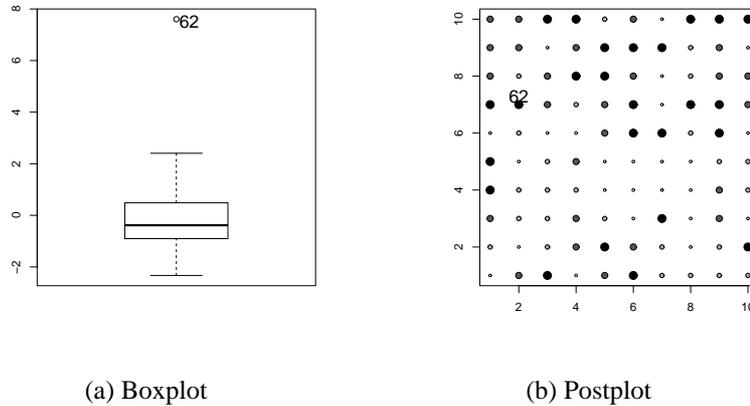


Figura 10: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial.

As estimativas para os parâmetros por MV considerando o modelo gaussiano na estrutura da matriz Σ são $\hat{\beta} = -0,1052 (0,1359)$, $\hat{\varphi}_1 = 0,0000 (37,8347)$, $\hat{\varphi}_2 = 1,5259 (37,8341)$ e $\hat{\varphi}_3 = 0,5885 (0,0615)$. Sendo o alcance $a = 1,0193 u.m.$, com $LMV = -162,70$. Nota-se que para este modelo temos um alto valor do desvio padrão para as estimativas dos parâmetros $\hat{\varphi}_1$ e $\hat{\varphi}_2$, fato que deve ser melhor investigado, mas acredita-se que esteja sendo causado porque provavelmente a estimativa de φ_1 não deveria ter sido igual a zero, de acordo com o que pode ser visto no comportamento deste modelo ao ajustá-lo em um semivariograma experimental.

Perturbação Aditiva

A Figura 12 apresenta os gráficos de influência local para a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal quando considerada a perturbação aditiva. Observa-se que o ponto #62 foi detectado pelo gráfico C_i vs ordem da Figura 11a e pelo gráfico $|L_{max}|_1$ vs ordem da Figura 11b. Os demais gráficos não forneceram muita informação.

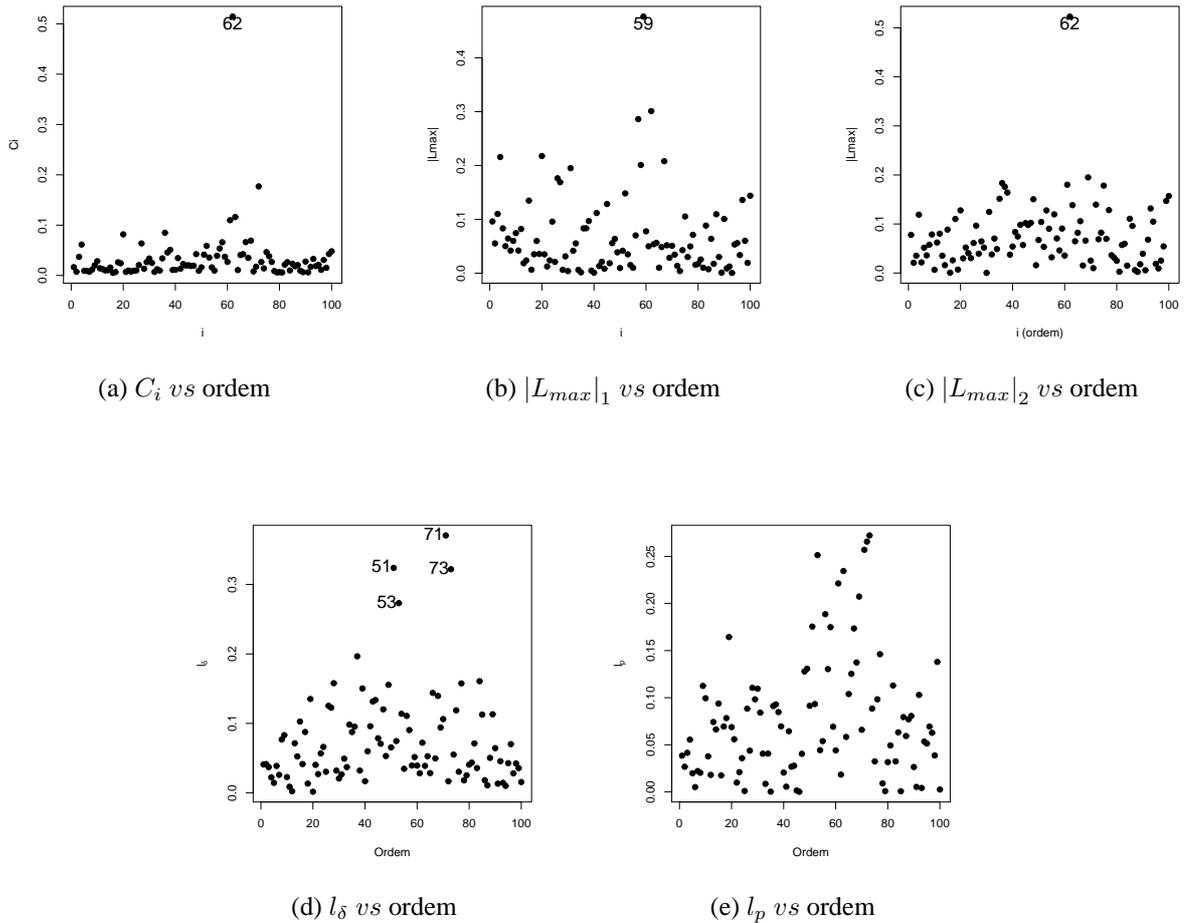
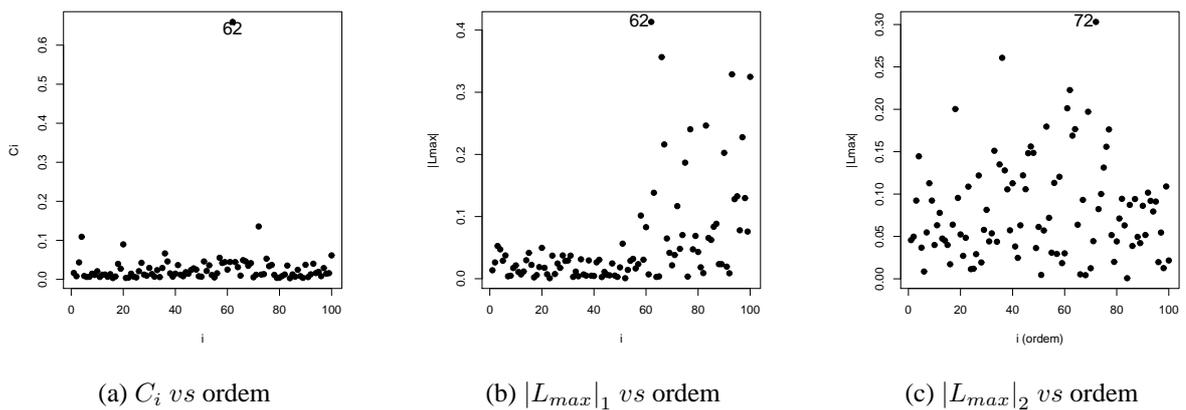


Figura 11: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Na Figura 12 são apresentados os gráficos de influência local para a estrutura Σ do modelo gaussiano e distribuição normal quando considerada a perturbação de Zhu. Análogo ao caso em que se considerou a perturbação aditiva, o gráfico C_i vs ordem da Figura 12a evidenciou o ponto #62, e também o gráfico da Figura 12b deu um destaque a esta observação. Nos gráficos $|L_{max}|_2$ vs ordem e l_p vs ordem das Figuras 12c aparece a observação #72 destacada.



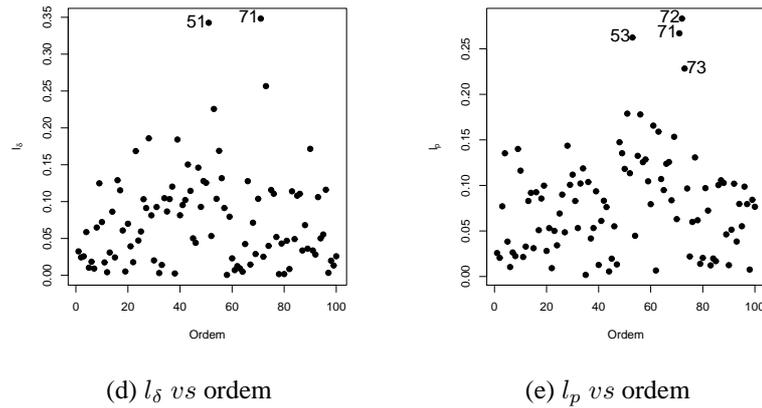
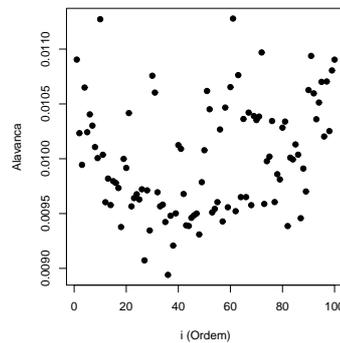


Figura 12: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

A Figura 13 mostra o gráfico GL de alavanca generalizada que não mostrou forte evidência para alguma observação.



(a) GL

Figura 13: Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição normal.

6.1.3 Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 0$ para a estrutura da matriz Σ

Utilizando o modelo da família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 1, 0$ para a estrutura da matriz Σ , o ponto detectado como discrepante continua sendo o #62, conforme mostra a Figura 14a, e a região em torno do ponto discrepante apresenta valores que estão abaixo do terceiro quartil.

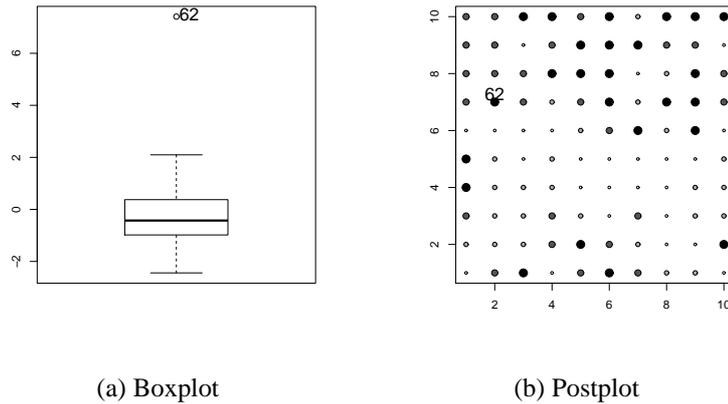
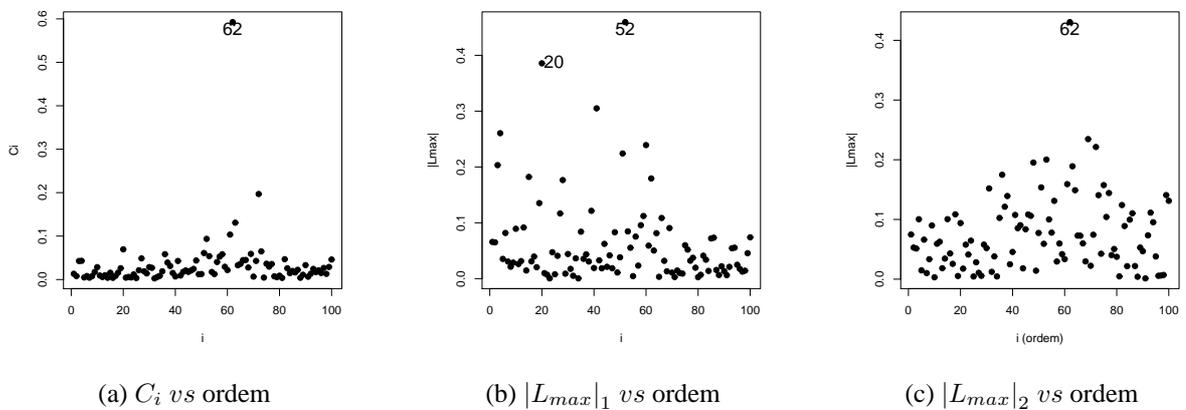


Figura 14: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$).

As estimativas da média e dos parâmetros que definem a estrutura de dependência espacial da matriz Σ por MV foram $\hat{\beta} = -0,2082 (0,1753)$, $\hat{\varphi}_1 = 0,0000 (2,9489)$, $\hat{\varphi}_2 = 1,5518 (2,9510)$ e $\hat{\varphi}_3 = 0,3927 (0,3611)$, apresentando distância máxima de dependência espacial estimada de $1,5708 u.m.$, e $LMV = -161,00$.

Perturbação Aditiva

Os gráficos para avaliar a influência local na variável resposta, na matriz de covariância e no preditor linear para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ para a estrutura da matriz Σ , distribuição normal quando considerada a perturbação aditiva, são apresentados na Figura 15, sendo que o ponto #62 ficou em evidência nas Figuras 15a e 15c. O gráfico de l_δ da Figura 15d e l_p da Figura 15e não identificaram observações influentes na matriz de covariância e no preditor linear, respectivamente.



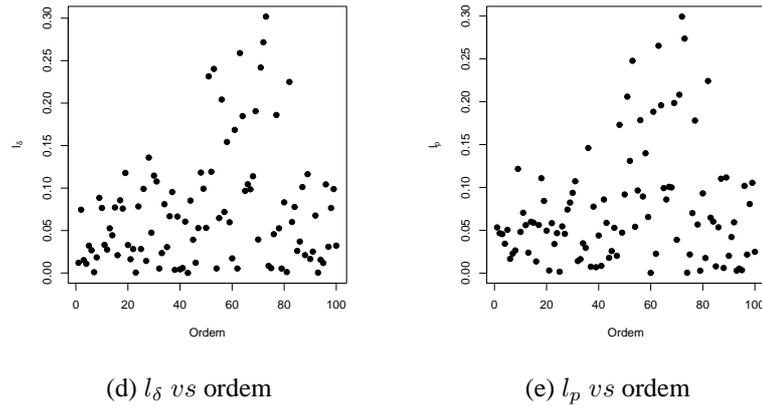
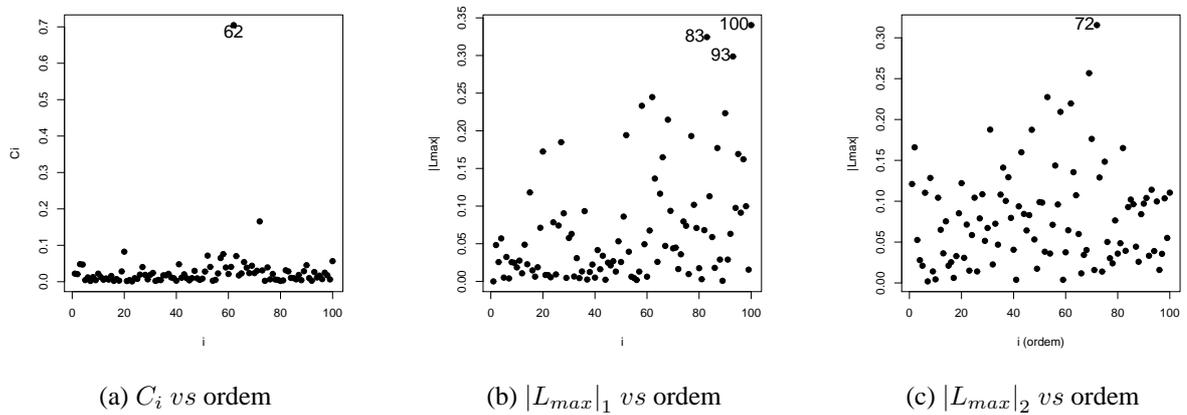


Figura 15: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

A Figura 16 apresenta os gráficos de influência para os dados simulados com o modelo da família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 1, 0$ para Σ e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu, onde somente o gráfico da Figura 16a evidenciou o ponto #62. Os gráficos $|L_{max}|_2$, l_δ e l_p das Figuras 59c, 16d e curiosamente não destacaram a observação #62 e sim, a #72. Como os dados tem dependência espacial, as observações vizinhas podem provocar algum tipo de influência.



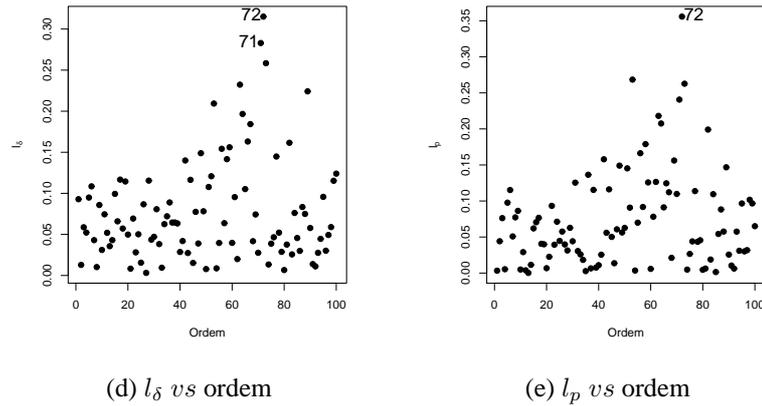
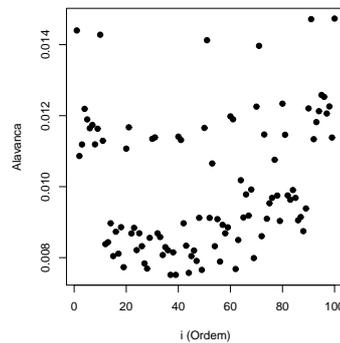


Figura 16: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada GL para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ com distribuição normal exibido na Figura 17 deu destaque para nenhum ponto especificamente.



(a) GL

Figura 17: Gráfico da alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 0$ com distribuição normal.

6.1.4 Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 5$ para a estrutura da matriz Σ

Diferentemente dos modelos exponencial, gaussiano e família Matérn com $\kappa = 1, 0$ para Σ , o ponto perturbado para o modelo da família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 1, 5$ foi o #75, que é detectado como discrepante conforme Figura 18a, o qual, segundo a Figura 18b é cercado de pontos com valores mais altos na região nordeste e de pontos com valores inferiores na região sudoeste.

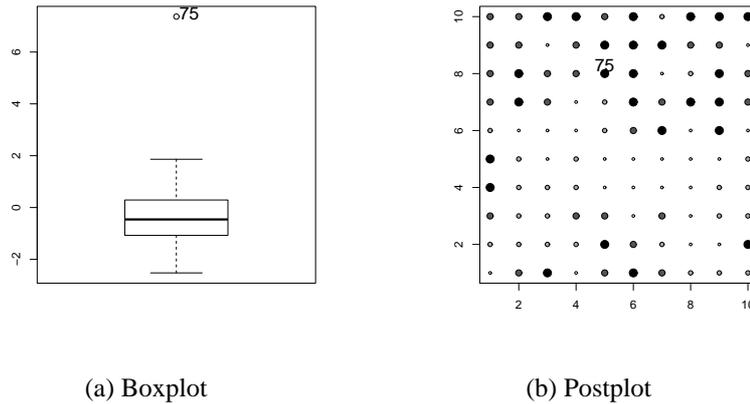
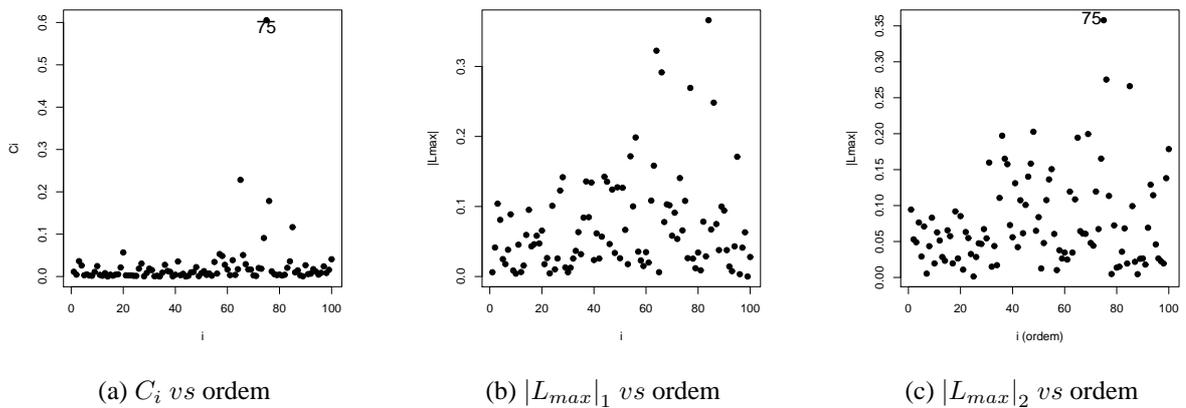


Figura 18: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$).

Para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ foram obtidas as estimativas dos parâmetros que definem a estrutura de Σ por MV, sendo $\hat{\beta} = -0,2506 (0,2264)$, $\hat{\varphi}_1 = 0,2916 (0,7221)$, $\hat{\varphi}_2 = 1,2588 (0,7398)$ e $\hat{\varphi}_3 = 0,4548 (0,2161)$, fornecendo alcance $\hat{a} = 2,1576$ e $LMV = -156,40$.

Perturbação Aditiva

Os gráficos de influência para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ para a distribuição normal considerando a perturbação aditiva, são apresentados na Figura 19. Os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_2$ vs ordem das Figuras 19a e 19c, respectivamente, detectaram o ponto perturbado #75 como possível influente na resposta. Já os demais gráficos não destacaram em especial alguma observação.



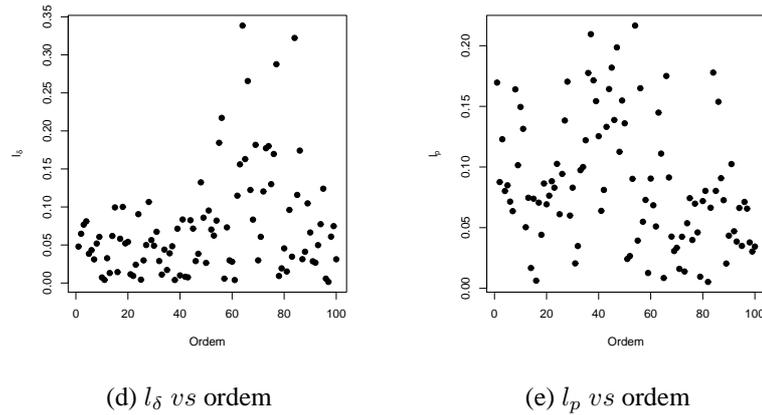
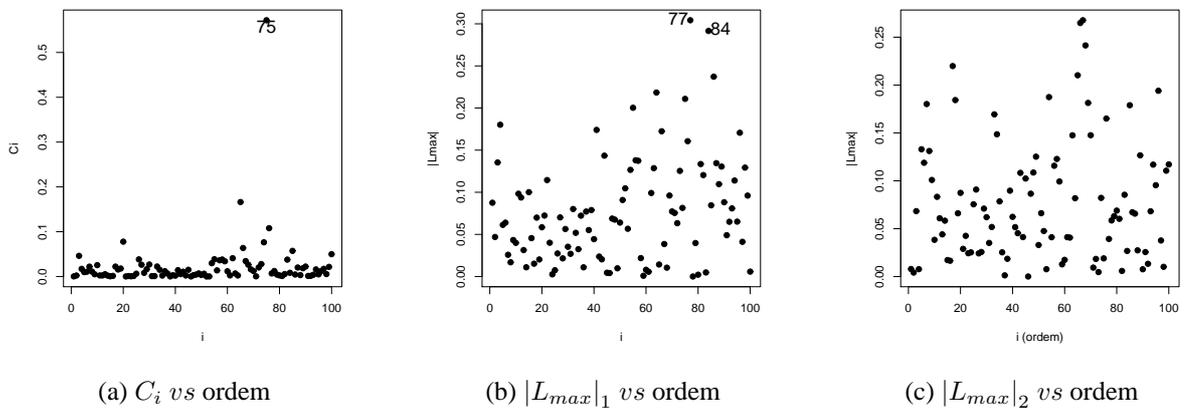


Figura 19: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

A Figura 20 apresenta os gráficos de influência para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ para a distribuição normal considerando a perturbação de Zhu, onde nota-se que as Figuras 20a e 20e destacaram a observação #75 como influente na resposta e no preditor linear, respectivamente. Os gráficos das Figuras 20b e 20e destacaram as observações #77 e #84 como influentes na resposta e na matriz de covariâncias, respectivamente.



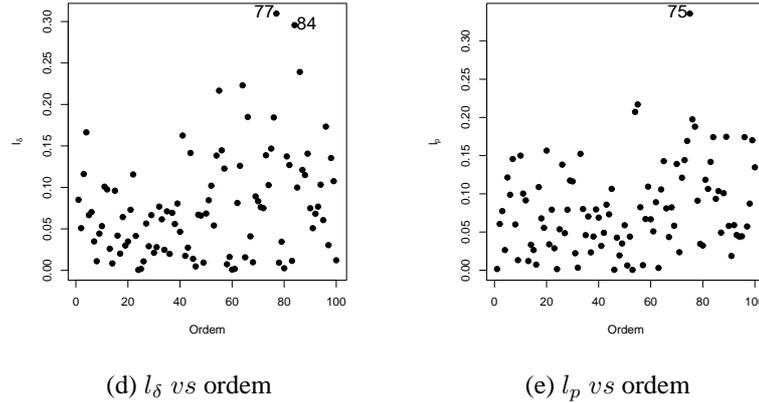


Figura 20: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo da família Matérn com $\kappa = 1$, e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada GL é exibido na Figura 21, o qual evidenciou os pontos #1, #10, #91 e #100, como influentes no seu próprio valor ajustado.

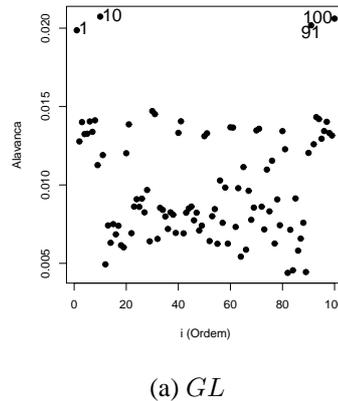


Figura 21: Gráficos da alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição normal.

6.2 Distribuição t -Student

O conjunto de dados foi gerado, por decomposição de Cholesky de uma distribuição t -Student com média zero e diferentes estruturas da matriz de escala Σ com parâmetros $\varphi = (0, 1, 3)^\top$, e grau de liberdade fixo $v = 5$, $\mathbf{Z} \sim t_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, v)$. O máximo valor da amostra foi perturbado: $Z_{max} = Z_{max} + 0,5\sqrt{Z^\top Z}$. Para os modelos exponencial, família Matérn com $\kappa = 1, 0$ e $\kappa = 1, 5$ perturbou-se o ponto #96, mas para o modelo gaussiano o ponto perturbado foi o #20.

6.2.1 Modelo Exponencial para a estrutura da matriz Σ

O gráfico *boxplot* da Figura 22a mostra os pontos #20, #52, #53 e #96 como discrepantes. Na Figura 22b observa-se que a diagonal secundária apresenta valores mais altos para os dados simulados, e valores mais baixo na região do canto superior direito e canto inferior esquerdo.

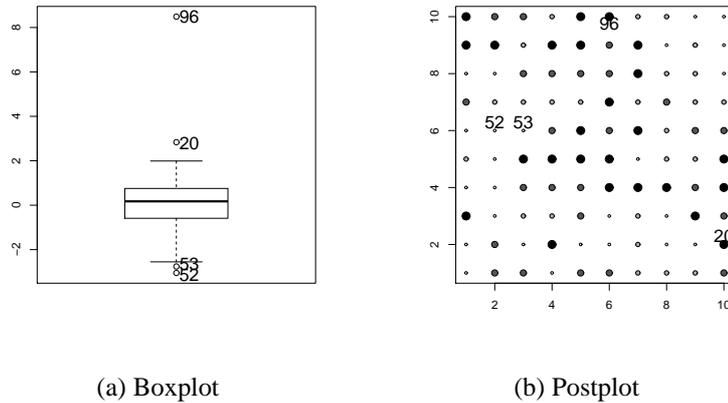
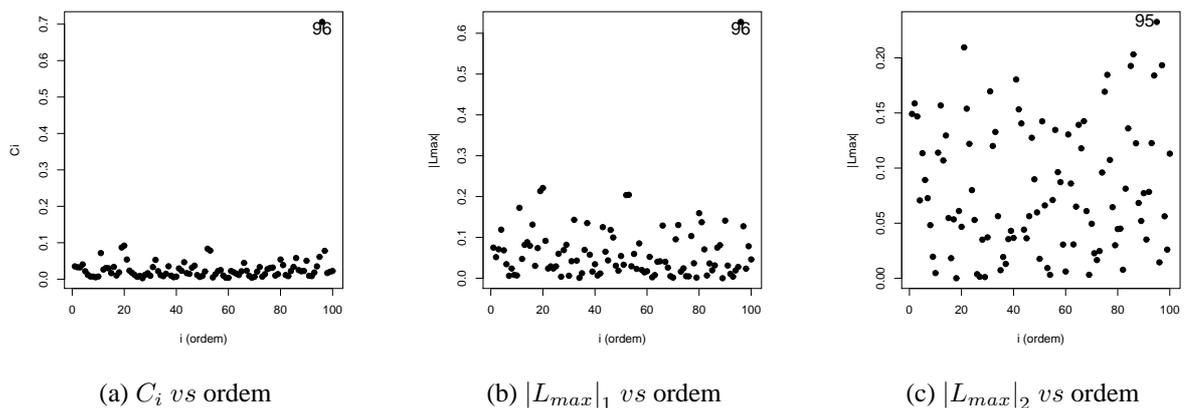


Figura 22: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição *t-Student* com $\nu = 5$ graus de liberdade.

As estimativas por MV encontradas para os parâmetros do modelo espacial linear com estrutura na matriz de escala Σ do modelo exponencial com distribuição *t-Student* com $\nu = 5$ gaus de liberdade foram $\hat{\beta} = 0,0886 (0,1266)$, $\hat{\varphi}_1 = 0,6313 (0,5190)$, $\hat{\varphi}_2 = 1,0895 (0,3417)$ e $\hat{\varphi}_3 = 1,3863 (0,3307)$, com os respectivos desvios-padrões entre parênteses. O alcance que determina o raio de dependência máxima é $\hat{a} = 3,5463$ u.m., e os demais valores calculados foram $LMV = -173,29$.

Perturbação Aditiva

Dentre os gráficos apresentados na Figura 23, os que detectaram o ponto #96 como possível ponto influente foram o C_i vs ordem, $|L_{max}|_1$ vs ordem e l_p vs ordem, apresentados nas Figuras 23a, 23c e 23e, respectivamente.



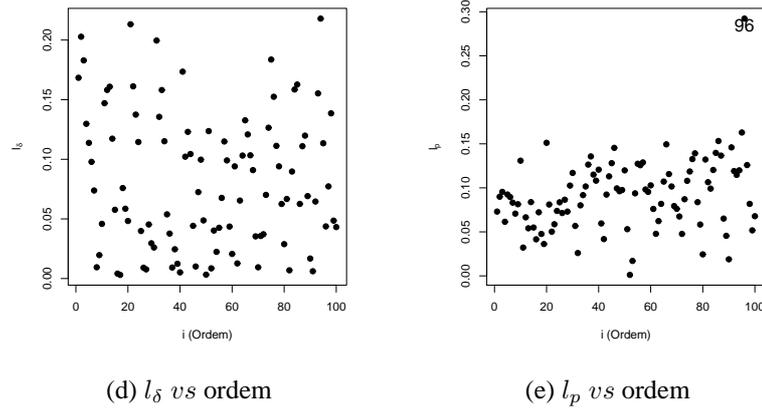
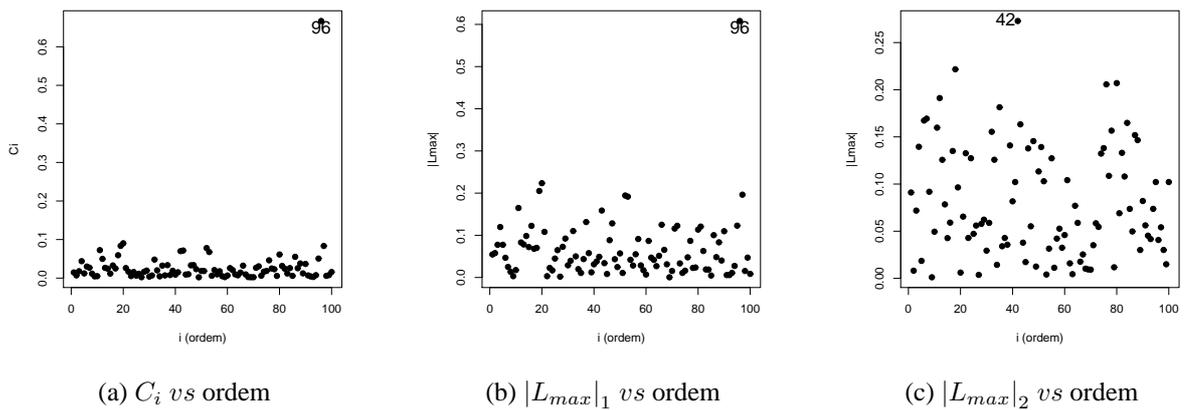


Figura 23: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura Σ do modelo exponencial e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Para o modelo exponencial com distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade, o comportamento dos gráficos C_i vs ordem, $|L_{max}|_1$ vs ordem e l_p vs ordem das Figuras 24a, 24b e 24e para a perturbação de Zhu, foram parecidos aos seus correspondentes gráficos quando considerada perturbação aditiva. Para a perturbação de Zhu, ainda verificou-se que o gráfico l_δ vs ordem da Figura 24d detectou o ponto #18 e #42 como possível ponto influente na matriz de covariância, sendo que a observação #42 também foi detectada pelo gráfico $|L_{max}|_2$ vs ordem da Figura 24c.



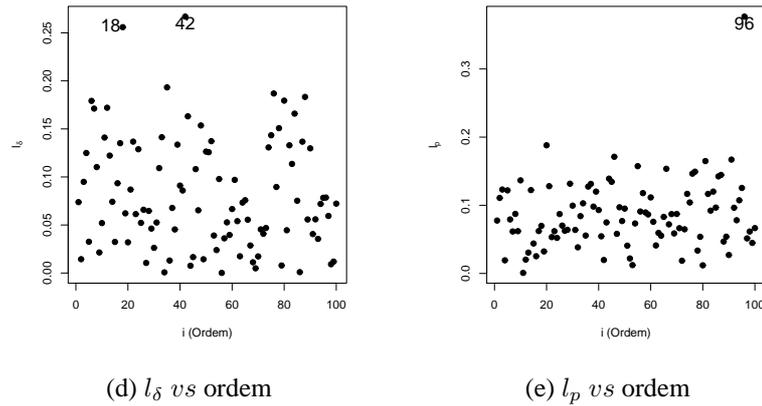
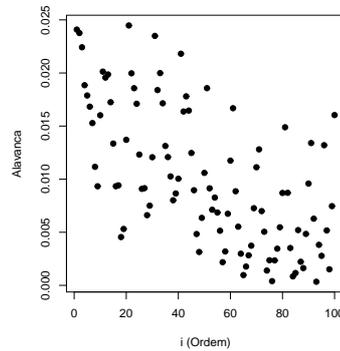


Figura 24: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada GL apresentado na Figura 25 é importante na avaliação da importância individual de cada observação no próprio valor ajustado, no entanto para este caso, ele não detectou observações.



(a) GL

Figura 25: Gráficos de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

6.2.2 Modelo Gaussiano para a Estrutura da Matriz Σ

A Figura 26 apresenta os gráficos boxplot e postplot para o modelo gaussiano e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade. Os pontos do gráfico apresentado na Figura 26a que estão abaixo do limite inferior são os pontos #52 e #53, e os que estão acima do limite superior são os pontos #96 e #20, sendo este último o máximo. A localização destes pontos pode ser vista no gráfico *postplot* da Figura 26b.

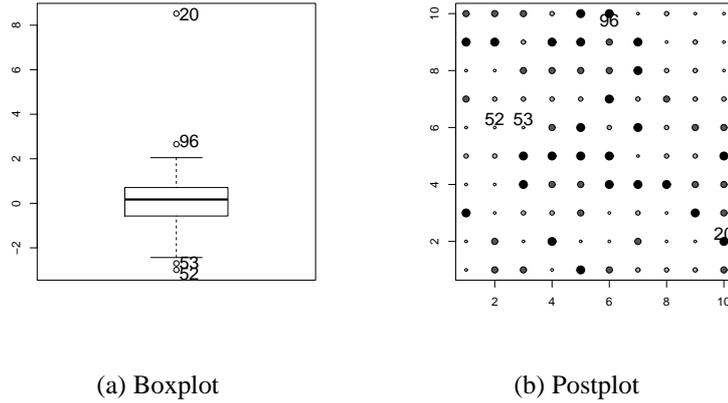
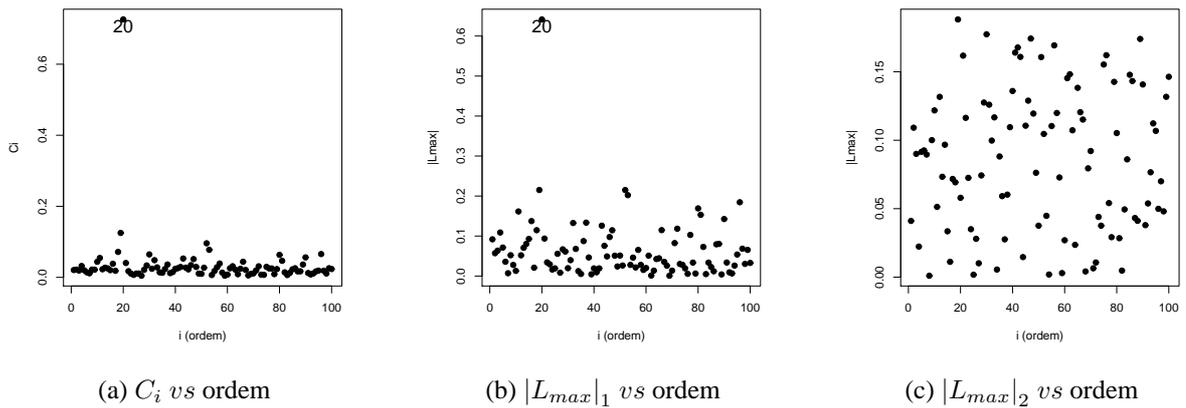


Figura 26: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição *t*-Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

As estimativas dos parâmetros para os dados simulados por MV foram $\hat{\beta} = 0,0853$ (0,1020), $\hat{\varphi}_1 = 0,6372$ (0,6724), $\hat{\varphi}_2 = 0,8937$ (0,1869) e $\hat{\varphi}_3 = 1,4667$ (0,1901), com $\hat{a} = 2,5404$, $LMV = -173,97$.

Perturbação Aditiva

A Figura 27 mostra os gráficos de influência local para os dados simulados pelo modelo modelo gaussiano e distribuição *t*-Student com $\nu = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação aditiva. Observa-se que somente o gráfico $|L_{max}|_2$ vs ordem da Figura 27c não destacou a observação #20 como influente.



(a) C_i vs ordem

(b) $|L_{max}|_1$ vs ordem

(c) $|L_{max}|_2$ vs ordem

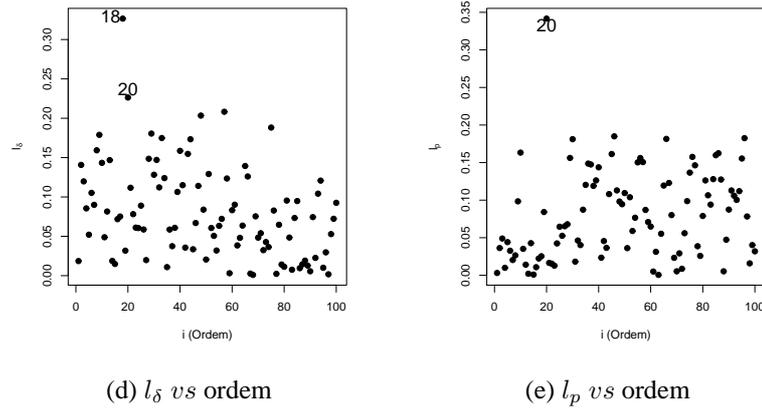
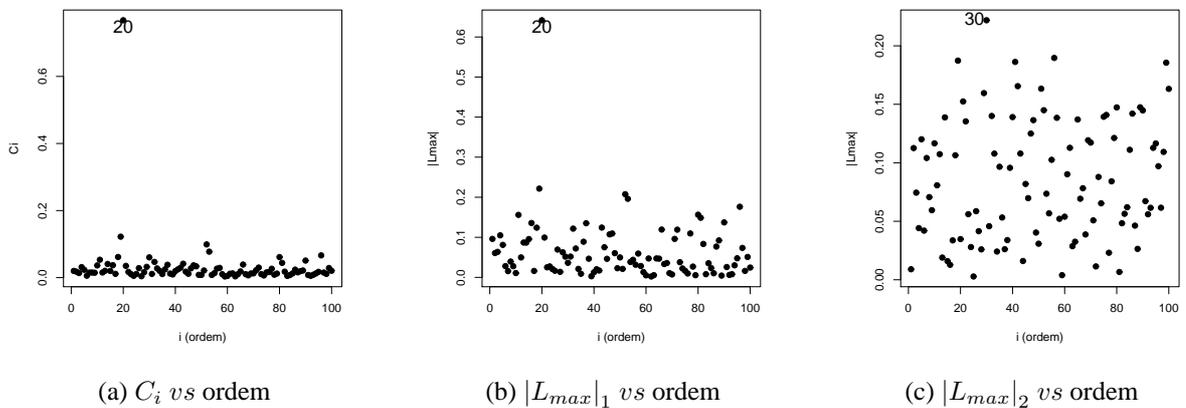


Figura 27: Gráficos de influência local para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo modelo gaussiano e distribuição t -Student com $v = 5$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Na Figura 28 são exibidos os gráficos de influência local para os dados simulados pelo modelo modelo gaussiano e distribuição t -Student com $v = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu. Todos os gráficos de influência local do estudo, com excessão do gráfico da Figura 28c, destacaram o ponto #20, ou seja, esta observação é possivelmente influente na resposta, na matriz de covariâncias e no preditor linear.



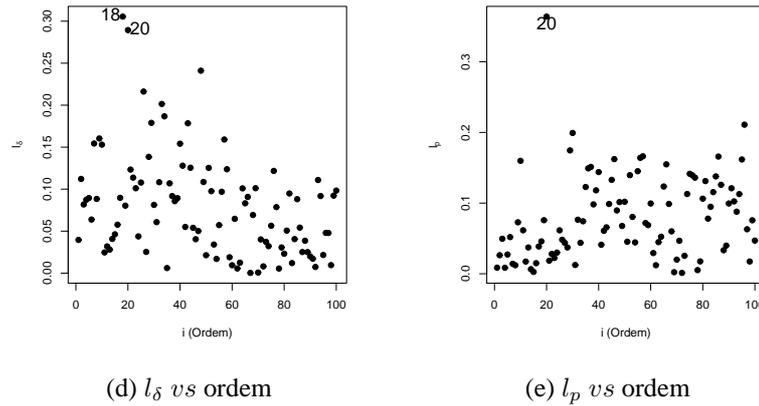


Figura 28: Gráficos de influência local para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição t -Student $v = 5$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico de alavanca generalizada GL para o modelo gaussiano e distribuição t -Student apresentado na Figura 29 evidenciou a observação #20 como influente no seu próprio valor ajustado. Fato este que era esperado, já que existe uma relação entre a alavanca generalizada e a perturbação aditiva da resposta.

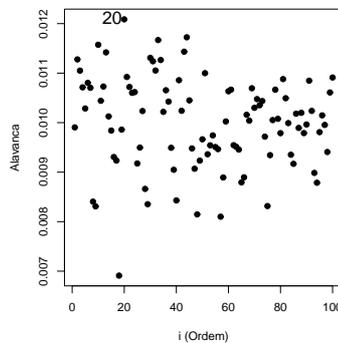


Figura 29: Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição t -Student com $v = 5$ graus de liberdade.

6.2.3 Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 0$ para a Estrutura da Matriz Σ

O boxplot da Figura 30a mostra dois pontos discrepantes, o menor deles é o ponto #52 e o maior deles, o qual foi perturbado, é o ponto #96. A Figura 26b localiza estes pontos e nota-se que o ponto de máximo é rodeado por valores altos, e o ponto de mínimo tem vizinhos também com valores baixos.

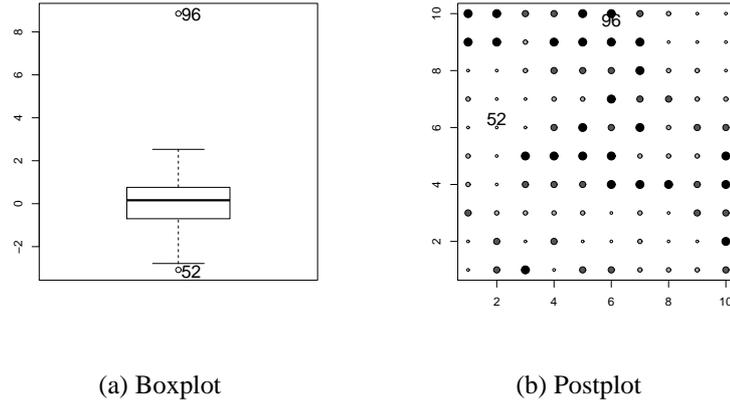
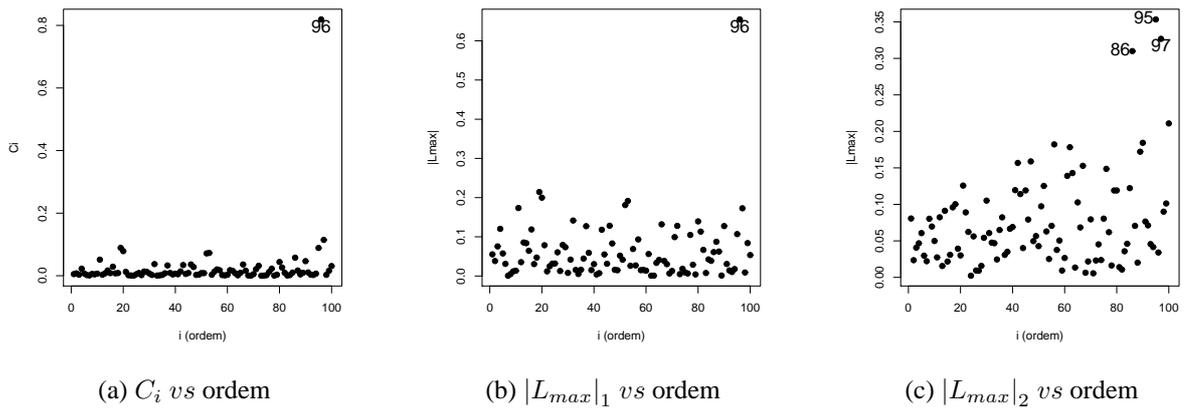


Figura 30: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição *t*-Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

As estimativas dos parâmetros encontradas por MV foram $\hat{\beta} = 0,0922$ (0,1545), $\hat{\phi}_1 = 0,7034$ (0,3472), $\hat{\phi}_2 = 0,9520$ (0,2253) e $\hat{\phi}_3 = 1,6888$ (0,3230), com $\hat{\alpha} = 6,7552$ e $LMV = -172.89$.

Perturbação Aditiva

Os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_1$ vs ordem mostrados nas Figuras 31a e 31b respectivamente, destacaram a observação perturbada #96, já os gráficos $|L_{max}|_2$ e l_p das Figuras 31c e 31e destacaram observações vizinhas àquela perturbada. O gráfico l_δ vs da Figura 31d detectou a observação #1 como influente na matriz de covariâncias.



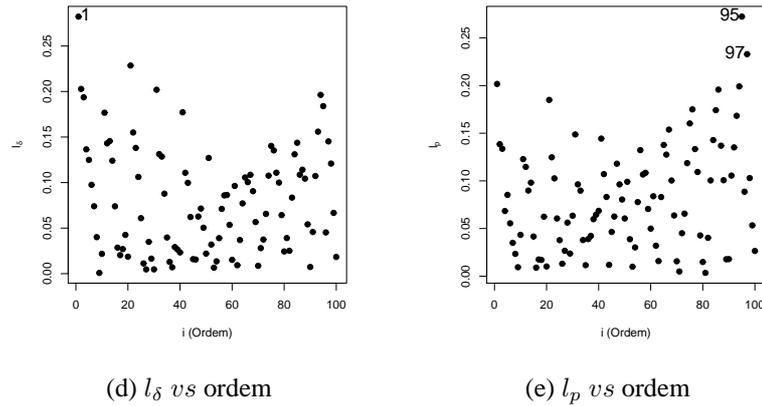
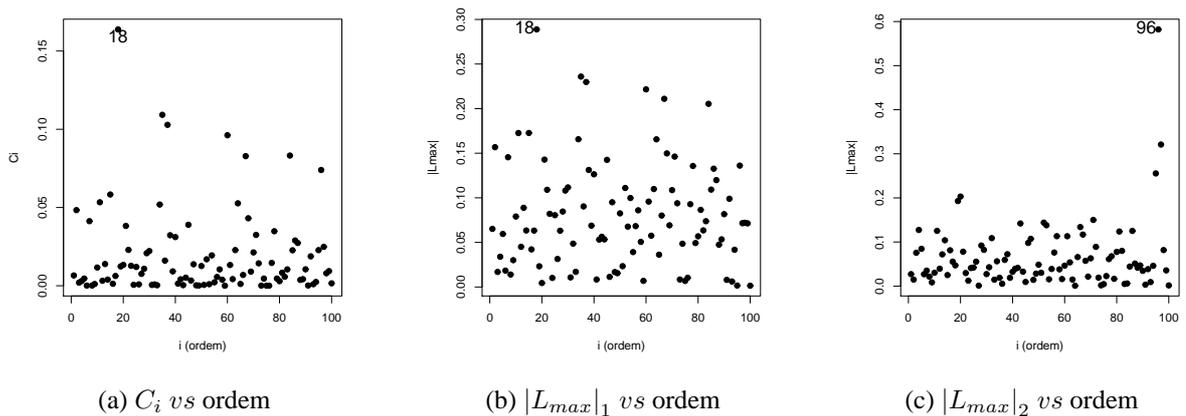


Figura 31: Gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Os gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu são apresentados na Figura 32, e dentre eles, apenas $|L_{max}|_2$ vs ordem da Figura 32c, destacou o ponto perturbado #96, mas isto não aconteceu para os demais gráficos C_i vs, $|L_{max}|_1$, l_δ e l_p das Figuras 32a, 32b, 32d e 32e, respectivamente, que destacaram a observação #18, isto é, segundo a perturbação de Zhu tem-se que esta observação é influente na resposta, na matriz de covariâncias e no preditor linear.



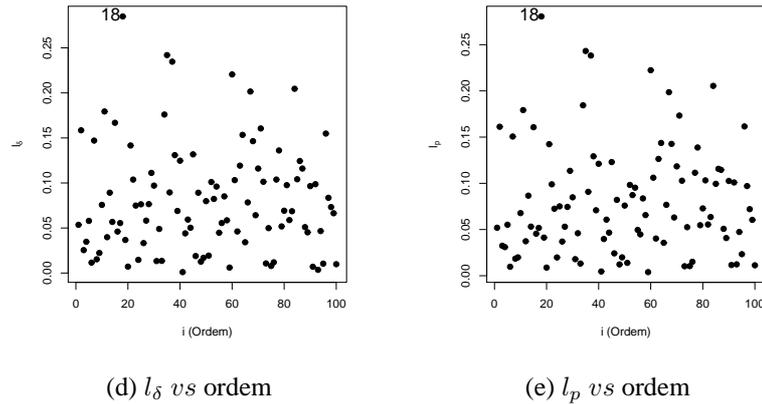
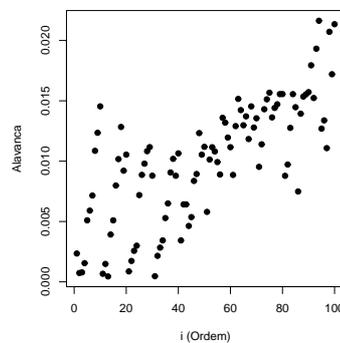


Figura 32: Gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O Gráfico de alavanca generalizada GL para o modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade da Figura 33 não deu destaque para alguma observação em específico.



(a) GL

Figura 33: Gráfico de alavanca generalizada para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

6.2.4 Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 5$ para a Estrutura da Matriz Σ

A Figura 34 para o modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) mostra os pontos #52 e #96 como discrepantes, sendo este último o ponto perturbado, o qual segundo a Figura 30 está cercado também de valores altos.

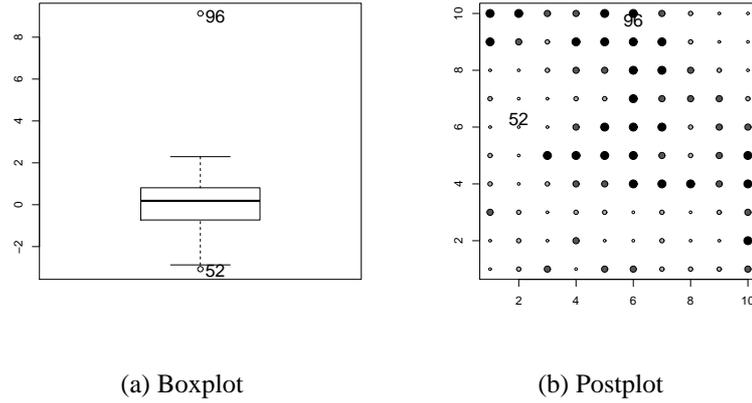
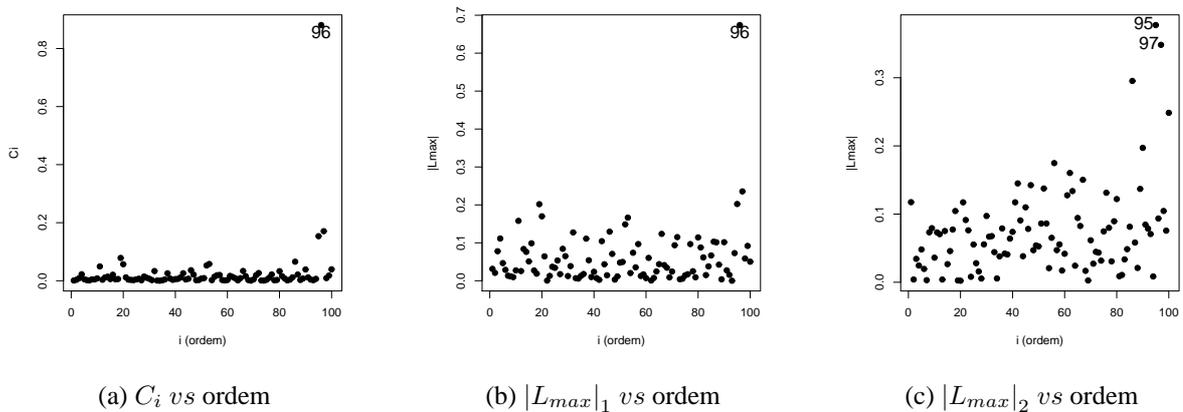


Figura 34: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição *t*-Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

As estimativas dos parâmetros obtidas por MV foram $\hat{\beta} = 0,0944 (0,1803)$, $\hat{\varphi}_1 = 0,5734 (0,2136)$, $\hat{\varphi}_2 = 1,0540 (0,2277)$ e $\hat{\varphi}_3 = 1,6176 (0,2908)$, $\hat{a} = 7,6836$, com $LMV = -171,75$.

Perturbação Aditiva

Os gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição *t*-Student com $\nu = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação aditiva são apresentados na Figura 35. Os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_1$ vs ordem destacaram a observação #96. Os demais gráficos destacaram as observações #95 e #97, sendo que o gráfico l_δ vs ordem ainda destacou a observação #1 e o gráfico l_p vs ordem destacou a observação #86.



(a) C_i vs ordem

(b) $|L_{max}|_1$ vs ordem

(c) $|L_{max}|_2$ vs ordem

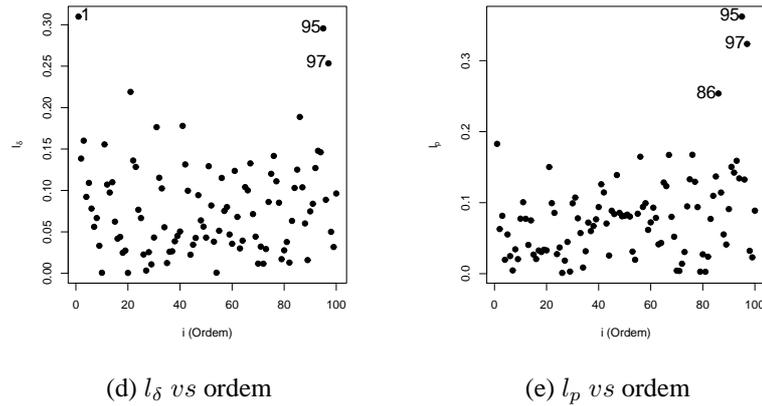
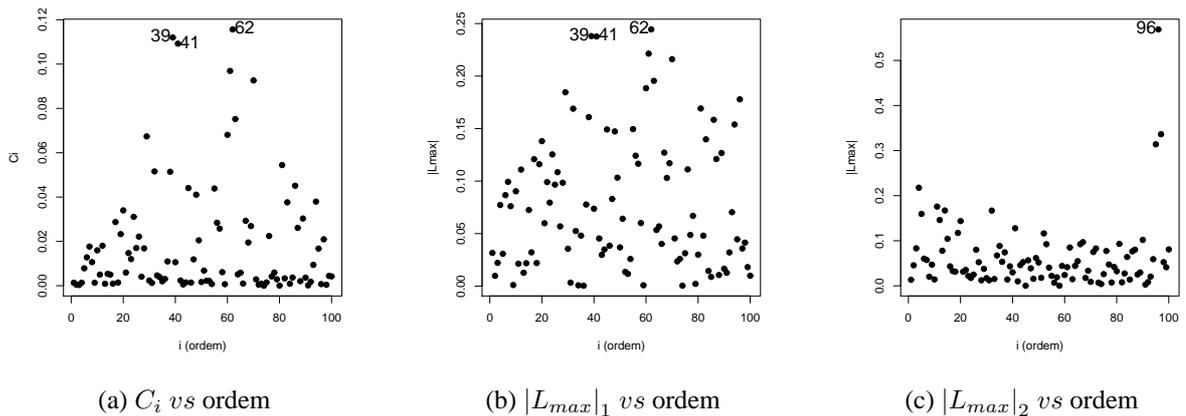


Figura 35: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

A Figura 36 mostra os gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu, onde é possível observar que o ponto #96 somente é destacado nos gráficos das Figuras 36c e 36d. Além da observação #96, tem-se que as observações #39 e #62 são candidatos a serem influentes na resposta e na matriz de covariâncias, conforme as Figuras 36a, 36b e 36d. Tem-se ainda que a observação #20 pode ser influente no preditor linear, de acordo com a Figura 36e.



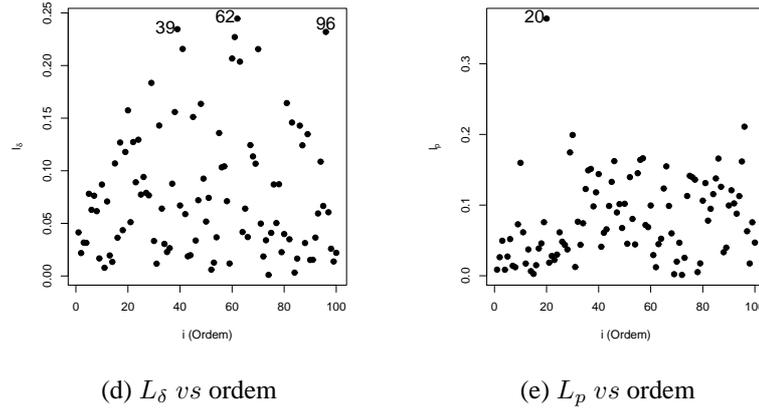


Figura 36: Gráficos de influência para os dados simulados para a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráficos de alavanca generalizada GL para os dados simulados para o o modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student (Figura 37) evidenciou a observação #100.

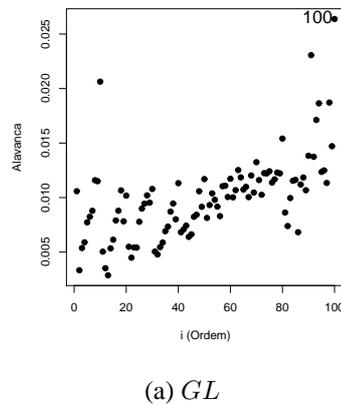


Figura 37: Gráficos de alavanca generalizada para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

6.3 Distribuição Exponencial Potência

O conjunto de dados foi gerado, por decomposição de Cholesky de uma distribuição exponencial potência com média zero e diferentes estruturas da matriz de escala Σ com parâmetros $\hat{\varphi}_n = (0, 1, 3)^\top$, e parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$ fixo ν , $\mathbf{Z} \sim PE_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma, \lambda)$. O máximo valor da amostra foi perturbado: $Z_{max} = Z_{max} + 0, 5\sqrt{\mathbf{Z}^\top \mathbf{Z}}$. Para todos os modelos estudados perturbou-se a observação #49.

6.3.1 Modelo Exponencial para a Estrutura da Matriz Σ

A Figura 38a apresenta o *boxplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo $\lambda = 0,8$, onde quatro pontos estão abaixo do limite inferior (#12, #66, #82 e #92), e três pontos estão acima do limite superior (#49, #65 e #95). A localização destes pontos pode ser vista no *postplot* apresentado na Figura 38b. O ponto de máximo, o qual foi perturbado, é o #49.

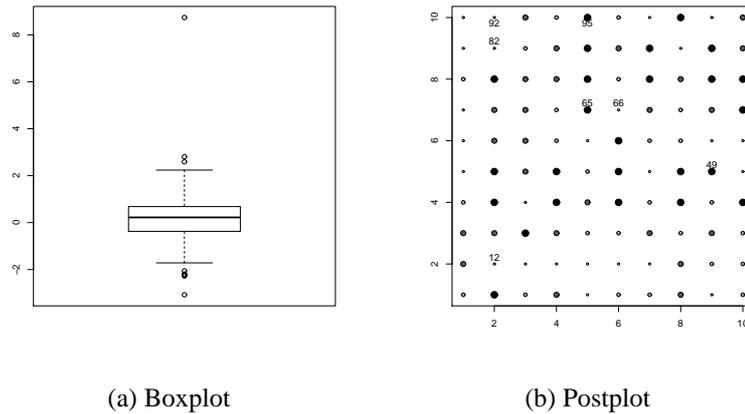
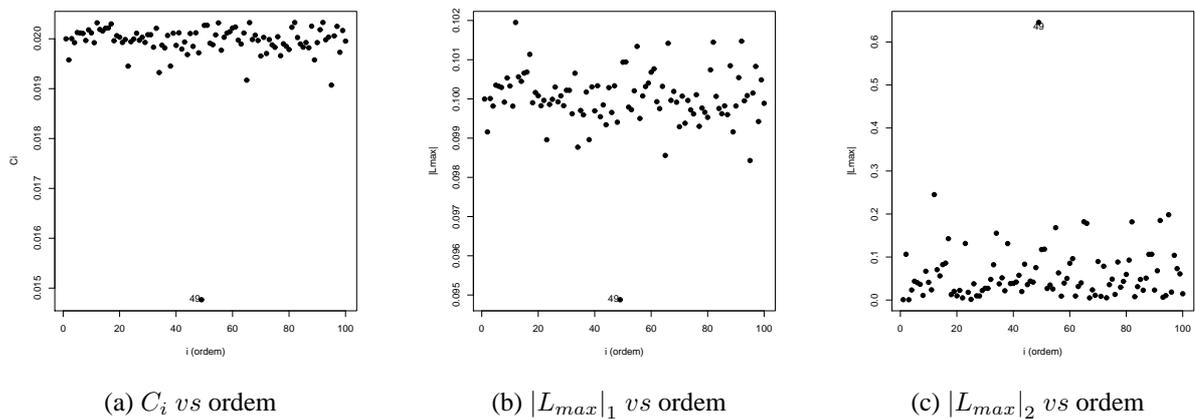


Figura 38: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência $\lambda = 0,8$.

As estimativas obtidas por MV para os parâmetros do modelo exponencial para a distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ foram $\hat{\beta} = 0,1889$ (0,1318), $\hat{\varphi}_1 = 0,3244$ (9,8545), $\hat{\varphi}_2 = 0,0906$ (9,8543) e $\hat{\varphi}_3 = 0,0003$ (0,0003), $\hat{a} = 0,0010$ e $LMV = -170,26$.

Perturbação Aditiva

Gráficos de influência para os dados simulados para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência considerando a perturbação aditiva são apresentados na Figura 39. Nota-se que em todos os gráficos a observação #19 ficou em destaque.



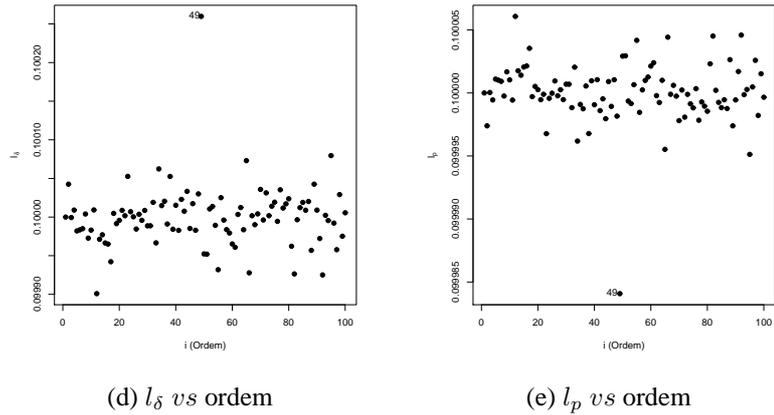
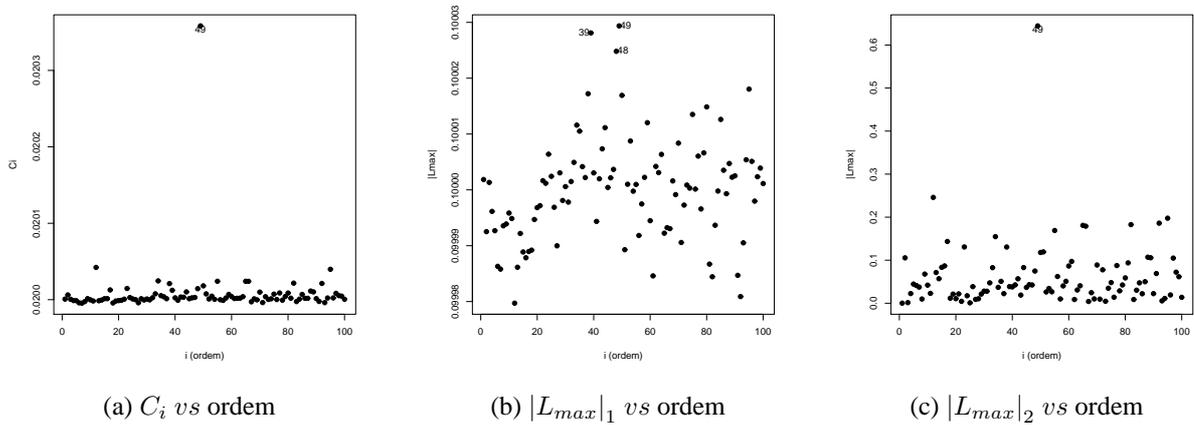


Figura 39: Gráficos de influência para os dados simulados com a estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Os gráficos de influência para os dados simulados para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação de Zhu são apresentados na Figura 40, onde os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_2$ vs ordem (Figuras 40a e 40c, respectivamente) destacaram a observação #49 como possível ponto influente na resposta. O gráfico $|L_{max}|_1$ vs ordem da Figura 40b, destacou além da observação #49, as observações #39 e #48. Os gráficos l_δ vs ordem e l_p vs ordem das Figuras 40d e 40e não destacaram observações.



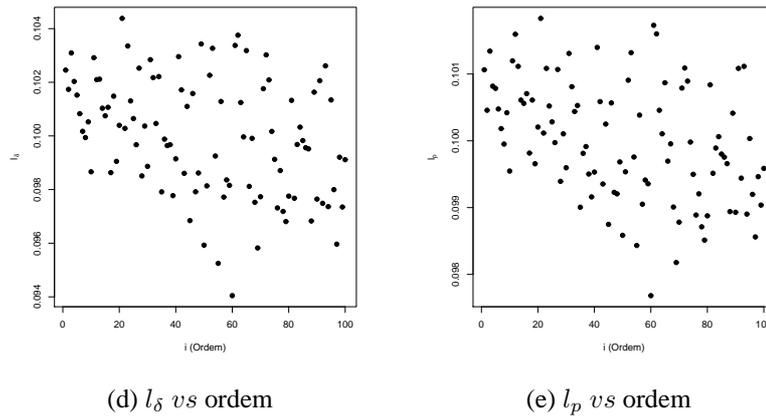


Figura 40: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

A Figura 41 mostra o gráfico de alavanca generalizada GL para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$, onde verifica-se um destaque para as observações #39, #48 e #49 como influentes no próprio valor ajustado.

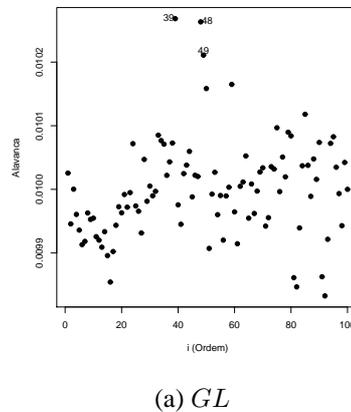


Figura 41: Gráficos de alavanca generalizada com estrutura de Σ do modelo exponencial e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$.

6.3.2 Modelo Gaussiano para a Estrutura da Matriz Σ

A Figura 42 apresenta os gráficos *boxplot* e *postplot* para o modelo gaussiano e distribuição exponencial potência $\lambda = 0,8$. O *boxplot* da Figura 42a detectou seis pontos discrepantes, três destes estão abaixo do limite inferior (#12, #66 e #82), e três acima do limite superior (#49, #65 e #95), sendo #49 o ponto de máximo. O *postplot* da Figura 42b localiza os pontos discrepantes.

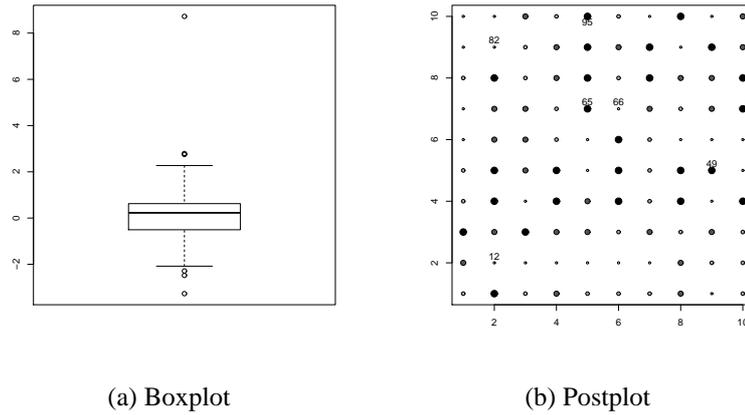
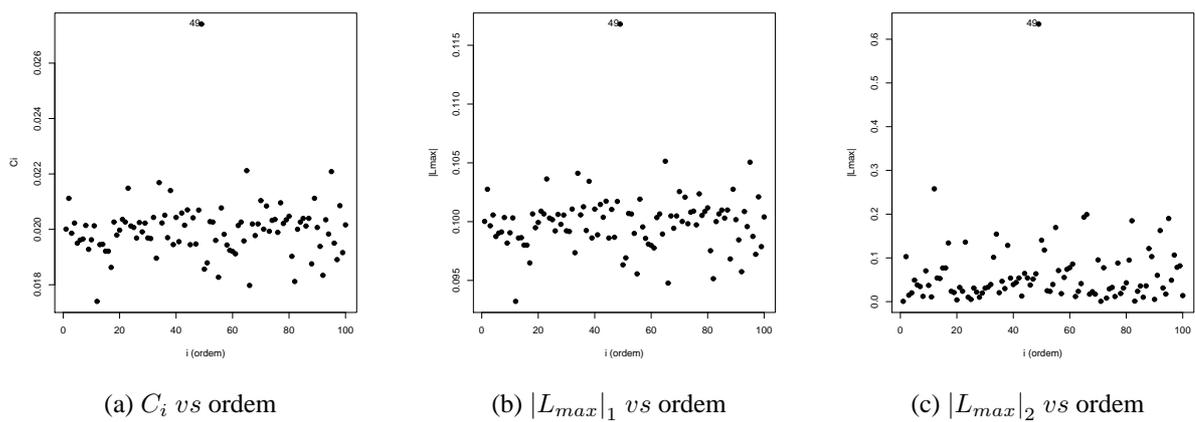


Figura 42: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$.

Para os parâmetros de Σ com estrutura do modelo gaussiano com distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$, os valores das estimativas por MV são $\hat{\beta} = 0,1894$ (0,1261), $\hat{\varphi}_1 = 0,2981$ (15,8418), $\hat{\varphi}_2 = 0,0817$ (15,8417) e $\hat{\varphi}_3 = 0,3976$ (0,0001), $\hat{a} = 0,6887$, com $LMV = -171,88$.

Perturbação Aditiva

Todos os gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação aditiva, apresentados na Figura 43, evidenciaram o ponto perturbado (#49), isto é, é um forte candidato a ser influente na resposta, na matriz de covariâncias e no preditor linear.



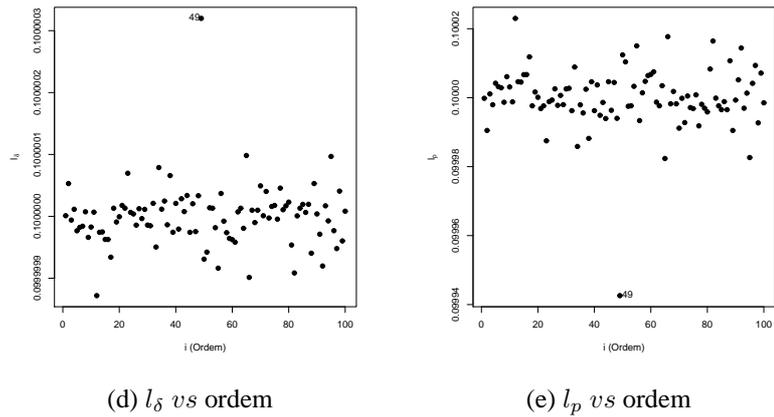
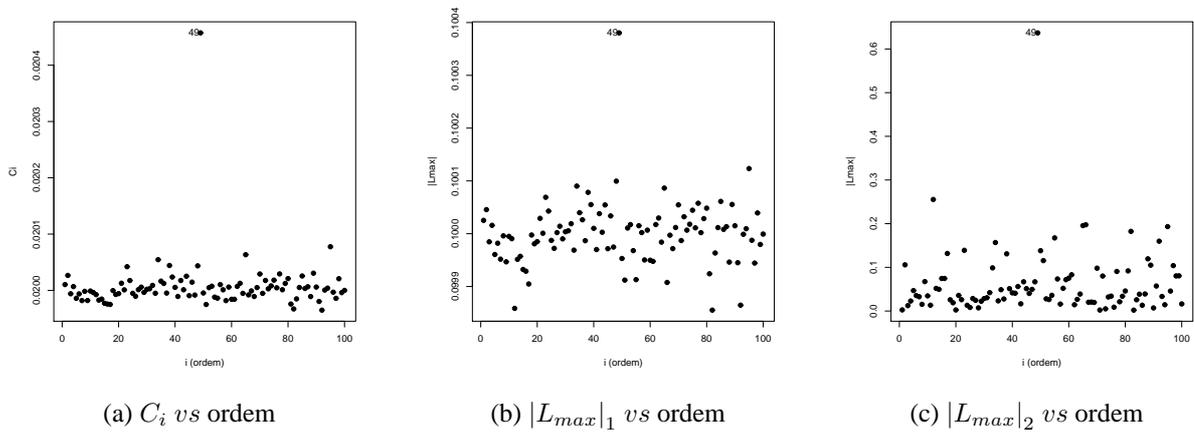


Figura 43: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

De acordo com os gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação de Zhu, exibidos na Figura 44, a observação #49 é candidata a ponto influente na resposta, de acordo com os gráficos das Figuras 44a, 44b e 44c. Os gráficos l_δ vs ordem e l_p vs ordem das Figuras 44d e 44e destacaram a observação #43 como influente na matriz de covariância e no preditor linear, respectivamente.



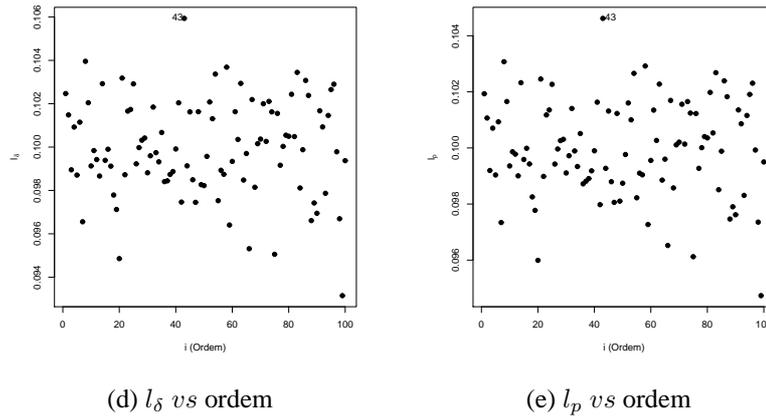
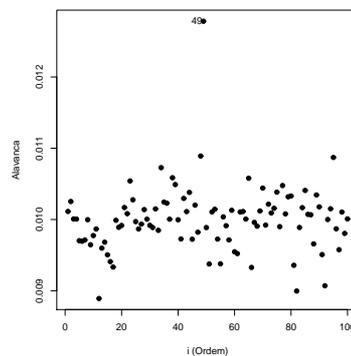


Figura 44: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico de alavanca generalizada GL para o modelo gaussiano e distribuição exponencial potência $\lambda = 0,8$ evidenciou a observação perturbada (#49) como influente no seu próprio valor ajustado.



(a) GL

Figura 45: Gráfico de alavanca generalizada com estrutura de Σ do modelo gaussiano e distribuição exponencial potência $\lambda = 0,8$.

6.3.3 Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 0$ para a Estrutura da Matriz Σ

O *boxplot* apresentado na Figura 46 apresenta os mesmos *outliers* acima do limite interquartílico superior do que o *boxplot* apresentado na Figura 38, mas ambos possuem diferentes *outliers* com valores abaixo do limite interquartílico inferior. A Figura 46b mostra a localização dos *outliers* mostrados pelo *boxplot* para os dados simulados com estrutura da matriz Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$).

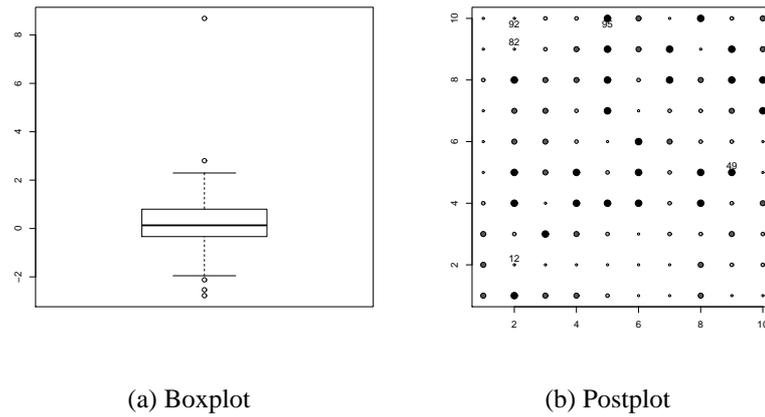
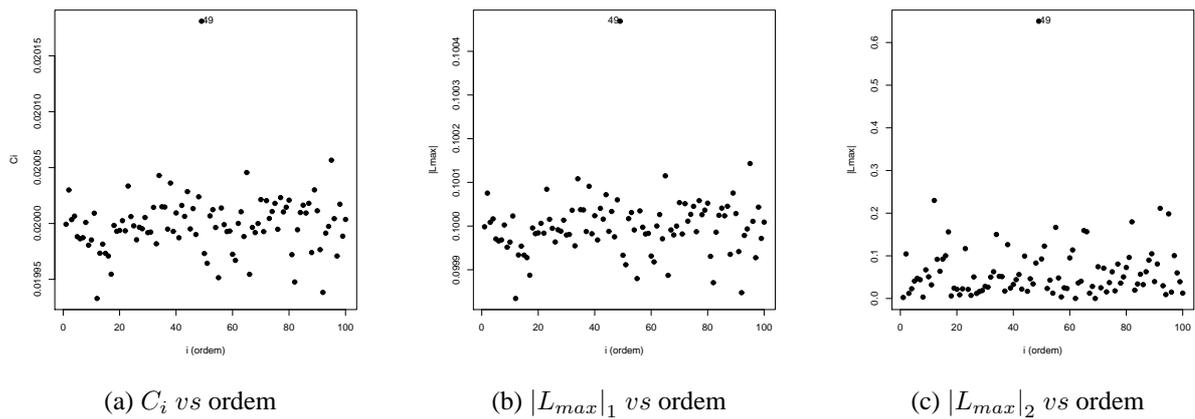


Figura 46: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com estrutura da matriz Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$).

Obteve-se as seguintes estimativas para os parâmetros de estrutura de Σ do modelo da família Matérn ($\kappa = 1, 0$) por MV: $\hat{\beta} = -0,1899 (0,1255)$, $\hat{\varphi}_1 = 0,2955 (0,1909)$, $\hat{\varphi}_2 = 0,0805 (0,1814)$ e $\hat{\varphi}_3 = 0,3598 (0,0003)$, $\hat{a} = 1,2413$ e $LMV = -168,62$.

Perturbação Aditiva

Assim como ocorreu para estrutura de Σ do modelo gaussiano, todos os gráficos de influência para os dados simulados para o modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação aditiva, apresentados na Figura 43, evidenciaram a observação perturbada (#49).



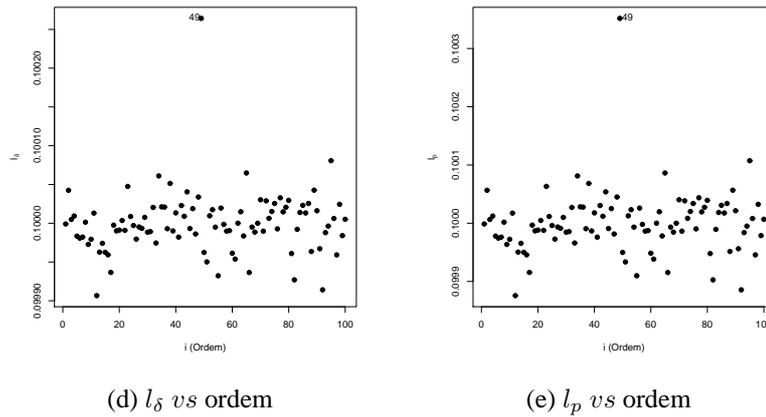
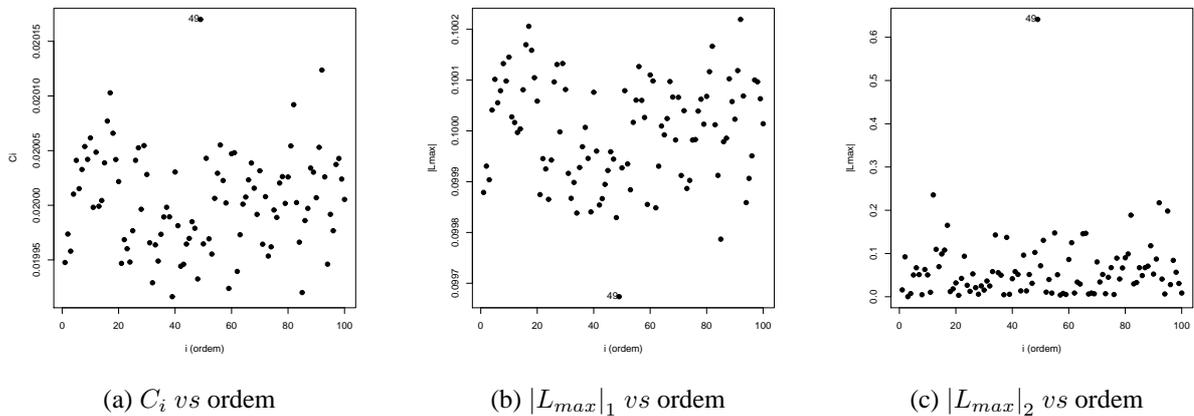


Figura 47: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

Para os gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação de Zhu são apresentados na Figura 48. Os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_2$ vs ordem destacaram a observação #49 como influente na variável resposta, mas os demais gráficos não deram destaque para observações.



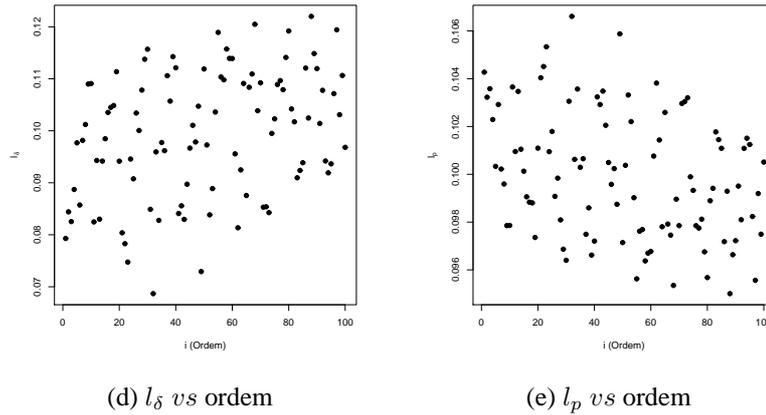


Figura 48: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico de alavanca generalizada GL para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ é exibido na Figura 49 onde não verifica-se observação em destaque.

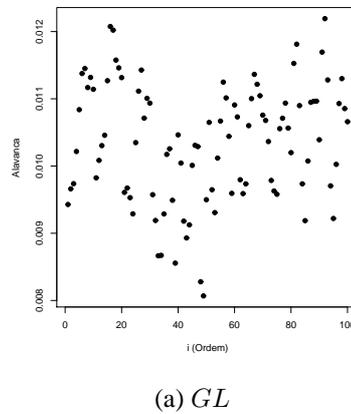


Figura 49: Gráfico de alavanca generalizada para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 0$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$.

6.3.4 Modelo Família Matérn $\kappa = 1, 5$ para a Estrutura da Matriz Σ

Pode-se observar na Figura 50a a presença de quatro pontos discrepantes, sendo o mínimo correspondente a observação #12 e os demais correspondentes as observações #49, #92 e #95. A observação #49 é o máximo valor da amostra e portanto foi o ponto perturbado.

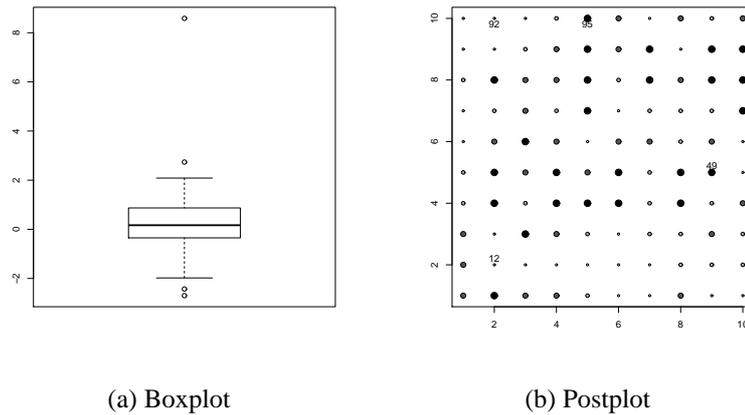
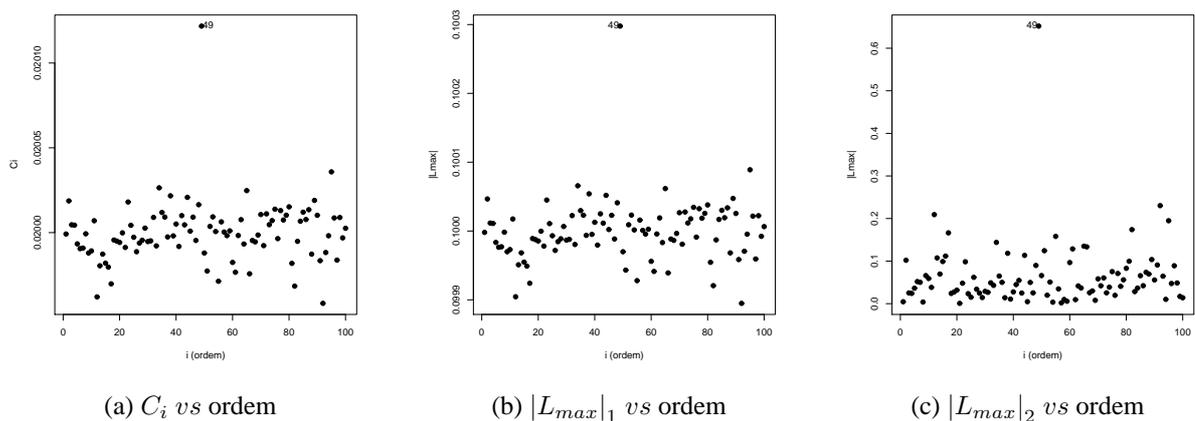


Figura 50: (a) *Boxplot* e (b) *Postplot* para os dados simulados com com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$.

As estimativas encontradas por MV para os parâmetros de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) com distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ foram $\hat{\beta} = -0, 1900 (0,1246)$, $\hat{\varphi}_1 = 0, 2807 (0,0799)$, $\hat{\varphi}_2 = 0, 0902 (0,0543)$ e $\hat{\varphi}_3 = 0, 5232 (0,0001)$, $\hat{a} = 2, 0928$ e $LMV = -166, 77$.

Perturbação Aditiva

Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação aditiva são apresentados na Figura 51, onde nota-se que em todos os gráficos destacaram a observação #49.



(a) C_i vs ordem

(b) $|L_{max}|_1$ vs ordem

(c) $|L_{max}|_2$ vs ordem

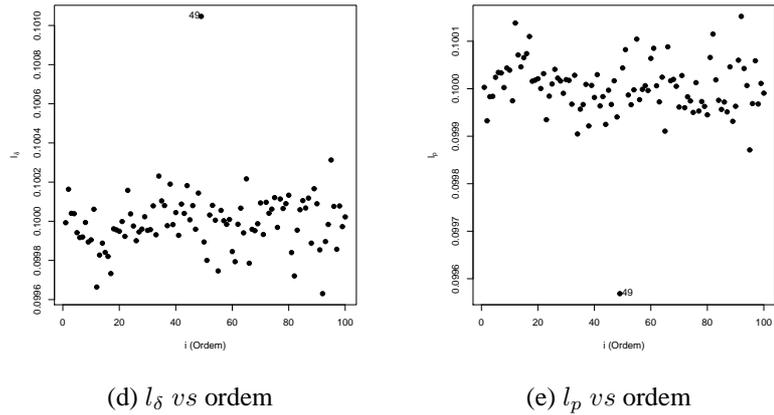
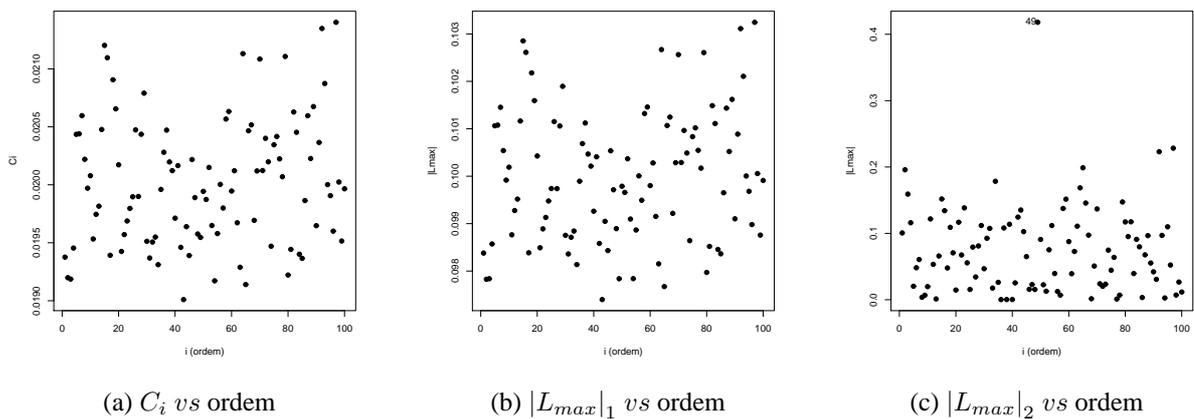


Figura 51: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação aditiva.

Perturbação de Zhu

A Figura 52 apresenta os gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu, onde nota-se que somente os gráficos $|L_{max}|_2$ vs ordem da Figura 52c e o gráfico l_δ vs ordem da Figura 52d deram destaque para alguma observação, sendo esta a própria observação perturbada. Com isto, o ponto #49 torna-se um ponto influente na resposta e na matriz de covariâncias, para este cenário.



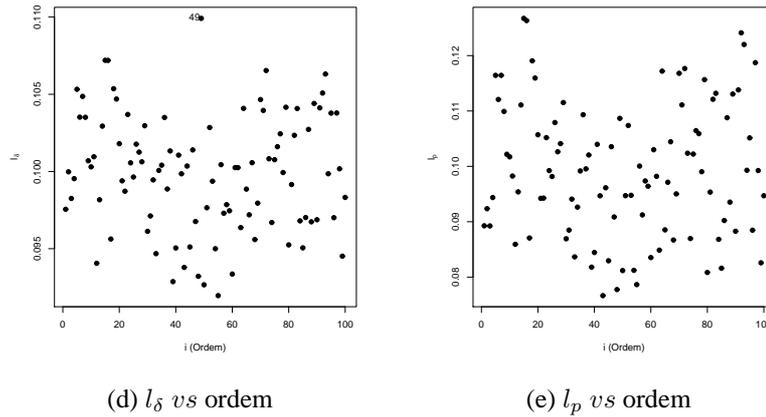


Figura 52: Gráficos de influência para os dados simulados com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu.

Alavanca Generalizada

O gráfico de alavanca generalizada GL para o modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$, apresentado na Figura 53 não deu destaque para observações.

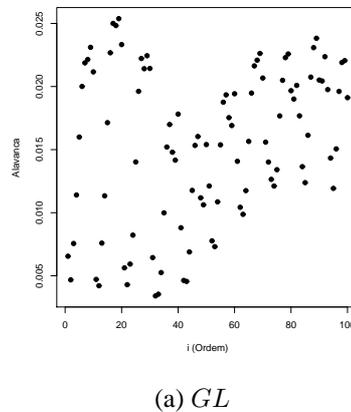


Figura 53: Gráficos de alavanca generalizada com estrutura de Σ do modelo família Matérn ($\kappa = 1, 5$) e distribuição exponencial potência com $\lambda = 0, 8$.

6.4 Considerações gerais

Um resumo dos pontos detectados pelos gráficos de influência para os dados simulados com as distribuições normal, t -Student com $v = 5$ graus de liberdade e exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$, considerando diferentes modelos na estrutura da matriz de escala, são apresentados nas Tabelas 4, 5 e 6, respectivamente.

Tabela 4: Pontos detectados pelos gráficos de influência referentes aos dados simulados com distribuição normal.

Estrutura de Σ do Modelo	Ponto Perturbado	Tipo Perturbação	Gráficos de influência					
			C_i	$ L_{max} _1$	$ L_{max} _2$	l_p	l_δ	GL
Exponencial	62	Aditiva	62	72	62	73	72	-
		Zhu	62	-	72	37, 51, 62 e 73	72	
Gaussiano	62	Aditiva	62	59	62	51, 53, 71 e 73	-	-
		Zhu	62	62	72	51 e 71	53, 71, 72 e 73	
Matérn ($\kappa = 1, 0$)	62	Aditiva	62	20 e 62	62	-	-	-
		Zhu	62	83, 93 e 100	72	71 e 72	72	
Matérn ($\kappa = 1, 5$)	75	Aditiva	75	-	75	-	-	1, 10, 91 e 100
		Zhu	75	75 e 84	-	77 e 84	75	

Tabela 5: Pontos detectados pelos gráficos de influência referentes aos dados simulados com distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

Estrutura de Σ do Modelo	Ponto Perturbado	Tipo Perturbação	Gráficos de influência					
			C_i	$ L_{max} _1$	$ L_{max} _2$	l_p	l_δ	GL
Exponencial	96	Aditiva	96	96	95	-	96	-
		Zhu	96	96	42	18 e 42	96	
Gaussiano	20	Aditiva	20	20	-	18 e 20	20	20
		Zhu	20	20	30	18 e 20	20	
Matérn ($\kappa = 1, 0$)	96	Aditiva	96	96	85, 95 e 97	1	95 e 97	-
		Zhu	18	18	96	18	18	
Matérn ($\kappa = 1, 5$)	96	Aditiva	96	96	95 e 97	1, 95 e 97	86, 95 e 97	100
		Zhu	39, 41 e 62	39, 41 e 62	96	39, 62 e 96	20	

Tabela 6: Pontos detectados pelos gráficos de influência referentes aos dados simulados com distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$.

Estrutura de Σ do Modelo	Ponto Perturbado	Tipo Perturbação	Gráficos de influência					
			C_i	$ L_{max} _1$	$ L_{max} _2$	l_p	l_δ	GL
Exponencial	49	Aditiva	49	49	49	49	49	39, 48 e 49
		Zhu	49	39, 48 e 49	49	-	-	
Gaussiano	49	Aditiva	49	49	49	49	49	49
		Zhu	49	49	49	43	43	
Matérn ($\kappa = 1, 0$)	49	Aditiva	49	49	49	49	49	-
		Zhu	49	49	49	-	-	
Matérn ($\kappa = 1, 5$)	49	Aditiva	49	49	4	49	49	49
		Zhu	-	-	49	49	-	

Na Tabela 7 é apresentado um resumo dos parâmetros estimados para os diferentes cenários considerados na simulação.

Tabela 7: Estimativa por MV dos parâmetros obtidos no ajuste dos modelos espaciais para os dados simulados.

Distribuição	Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	LMV
Normal	exponencial	-0,1516	0,0000	1,5412	0,4324	1,2972	-162,60
		(0,1543)	(6,6501)	(6,6537)	(0,7993)	(2,3979)	
	gaussiano	-0,1052	0,0000	1,5259	0,5885	1,0193	-162,70
		(0,1359)	(37,8347)	(37,8341)	(0,0615)	(0,1065)	
	Matérn $\kappa = 1,0$	-0,2082	0,0000	1,5518	0,3927	1,5703	-161,00
		(0,1753)	(2,9489)	(2,9510)	(0,3611)	1,4444	
Matérn $\kappa = 1,5$	-0,2506	0,2916	1,2588	0,4548	2,1576	-156,40	
	(0,2264)	(0,7221)	(0,7398)	(0,2161)	(1,0265)		
t -Student ($\nu = 5$)	exponencial	0,0886	0,6313	1,0991	1,3863	3,5463	-173,29
		(0,1266)	(0,5190)	(0,3417)	(0,3307)	(0,9921)	
	gaussiano	0,0853	0,6372	0,8937	1,4667	2,5404	-173,97
		(0,1020)	(0,6724)	(0,1869)	(0,1901)	(0,3293)	
	Matérn $\kappa = 1,0$	0,0922	0,7034	0,9520	1,6888	6,7552	-172,89
		(0,1545)	(0,3472)	(0,2253)	(0,3230)	(1,2920)	
Matérn $\kappa = 1,5$	0,0944	0,5734	1,0540	1,6176	7,6836	-171,75	
	(0,1803)	(0,2136)	(0,2277)	(0,2908)	(1,3813)		
Exponencial Potência ($\lambda = 0,8$)	exponencial	0,1889	0,3244	0,09063	0,0003	0,0010	-170,26
		(0,1318)	(9,8545)	(9,8543)	(0,0003)	(0,0009)	
	gaussiano	0,1894	0,2981	0,0817	0,3976	0,6887	-171,88
		(0,1261)	(15,84)	(15,8417)	(0,0001)	(0,0002)	
	Matérn $\kappa = 1,0$	-0,1899	0,2981	0,0805	0,3976	0,6887	-168,62
		(0,1255)	(0,1909)	(0,1814)	(0,0003)	(0,0012)	
Matérn $\kappa = 1,5$	-0,1900	0,2807	0,0902	0,5232	2,0928	-171,88	
	(0,1246)	(0,0799)	(0,0543)	(0,0001)	(0,0005)		

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

Observou-se que para os dados gerados com diferentes distribuições de probabilidade e com diferentes estruturas na matriz de escala, os comportamentos e o valor das estimativas dos parâmetros foram bem distintos devido a perturbação no valor máximo.

O gráfico C_i vs ordem detectou o ponto perturbado em todos, quando foi considerada a perturbação aditiva e também em todos os casos quando considerada a distribuição normal. Somente não detectou para a perturbação de Zhu, e distribuição t -Student com $\nu = 5$ e modelo da família Matérn para $\kappa = 1,0$ e $\kappa = 1,5$ e para a distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ e modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$.

O gráfico de alavanca generalizada GL que avalia a influência de cada observação no seu próprio valor ajustado, não indentificou na maioria dos casos o ponto perturbado e também o ponto detectado pelos gráficos C_i vs ordem e L_{max} vs ordem quando considerada pela perturbação aditiva. Ressalta-se que para cada situação foi considerado somente um cenário e que para um estudo futuro seria interessante aumentar o número de simulações para cada caso.

Na Tabela 7 nota-se que os modelos exponencial e gaussiano apresentaram os maiores valores do desvio padrão para os parâmetros estimados φ_1 e φ_2 . Os valores dos alcances variaram de 0,6887 m a 6,7552 m .

7 APLICAÇÕES A DADOS EXPERIMENTAIS

Aplicação de métodos estatísticos em um ambiente espacial levanta vários desafios, principalmente em se tratando de determinar os parâmetros que definem a estrutura de variabilidade espacial. Neste capítulo, foram analisados dois conjuntos de dados reais coletados em 2010/2011. Toda a parte computacional foi realizada utilizando o *software* livre R.

A Figura 54 apresenta a grade amostral da área em estudo de 167,35 *ha*, localizada na cidade de Cascavel- Pr, Brasil, com coordenadas geográficas aproximadas de Latitude 24° 57' 21" S e 53° 34' 32" W, localizados com um aparelho receptor de sinal GPS (*Global Positioning System*), com *datum* WGS84. Foi realizada uma amostragem sistemática centrada com pares de pontos próximos (*lattice plus close pairs*), com distância máxima de 141 *m* entre pontos, e em alguns locais aleatórios com distâncias menores, de 75 e 50 *m* entre pontos, e a diferença entre as mesmas.

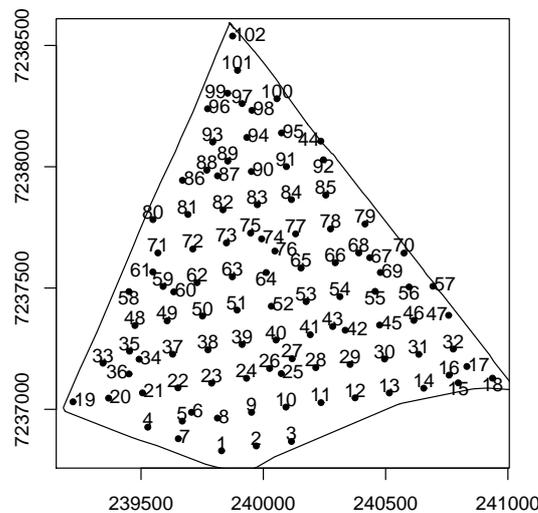


Figura 54: grade amostral.

Trabalhou-se com diferentes distribuições de probabilidade e a escolha do melhor modelo para a estrutura da matriz de escala Σ , por meio da técnica de validação cruzada (Faraco *et al.*, 2008) e valores de *LMV*. Após o estudo de influência local, foram construídos mapas temáticos com e sem os pontos influentes por meio de krigagem ordinária ou universal (caso com covariáveis), com a finalidade de mostrar como estes pontos afetam na construção destes mapas em estudo. Também são apresentadas métricas de comparação de mapas temáticos.

7.1 Conjunto de dados do teor de Ferro - Ano agrícola de 2010/2011

O Ferro (Fe) é um micronutriente do solo, e é um atributo importante a ser considerado no estudo de uma área agrícola. Solos com altos teores de óxidos de ferro têm sido relacionados na literatura como sendo altamente resistentes à erosão.

Os solos com tonalidades avermelhadas ou amareladas estão associadas aos diferentes tipos de óxidos de ferro existentes no solo. Os solos do tipo Latossolo são os solos predominantes no Brasil e o teor de óxidos de ferro decresce do Latossolo Roxo para o Latossolo Amarelo.

Na Tabela 8 são apresentadas as estatísticas descritivas dos dados de teor de Ferro, denotado por Fe . O valor mínimo do nível de Fe é de $19,00 \text{ mg dm}^{-3}$ e o nível máximo de 88 mg dm^{-3} , a média igual $33,83 \text{ mg dm}^{-3}$, o que mostra, que em média os valores de Fe estão abaixo no nível considerado bom, que é na faixa de $40,1$ a $60,00 \text{ mg dm}^{-3}$, de acordo com informações da Cooperativa Central de Pesquisa Agrícola, Tecnologia da Nossa Terra (COODETEC, 2007), local onde foram feitas as análises químicas laboratoriais do solo. Segundo o coeficiente de variação ($CV=23,97\%$) existe média homogeneidade dos dados pois, $20\% < CV < 30\%$. Segundo os coeficientes de assimetria e curtose a variável Fe têm características levemente assimétricas e platicúrtica, de acordo com os critérios apresentados em Jones (1969) considerando um nível de confiança de 95%, visto que os intervalos de simetria e curtose que caracterizam a distribuição normal são $-0,466 \leq \text{Coef. Assimetria} \leq 0,466$ e $2,26 \leq \text{Coef. Curtose} \leq 4,03$ para amostras com 102 elementos.

Tabela 8: Estatísticas descritivas dos dados de teor de Fe .

n	102
Média	33,83
Mediana	33,00
Quartil 1	29,00
Quartil 3	36,75
Mínimo	19,00
Máximo	88,00
Desvio Padrão	8,11
Coef. de variação %	23,97
Coef. Assimetria	3,11
Coef. Curtose	18,89

n : tamanho da amostra.

O gráfico *boxplot* apresentado na Figura 55a) detectou dois *outliers*. Verificou-se que o maior destes *outliers* é o elemento amostral #96 sendo seu valor medido igual a 88,00 (máximo),

e de acordo com o gráfico *postplot* apresentado na Figura 55b, ele está cercado de pelos pontos #93 #94, #97, #98 e #99, os quais apresentam valores de Fe inferiores variando de 26 a 33 $mg\ dm^{-3}$, de tal forma que este ponto torna-se um fortíssimo candidato a ser influente. Pode-se notar que do centro do mapa em direção a região Sudoeste, há valores mais elevados de Fe , mais próximos do intervalo em que o teor de Ferro é considerado bom (COODETEC, 2007), e que a região norte apresenta valores mais baixos.

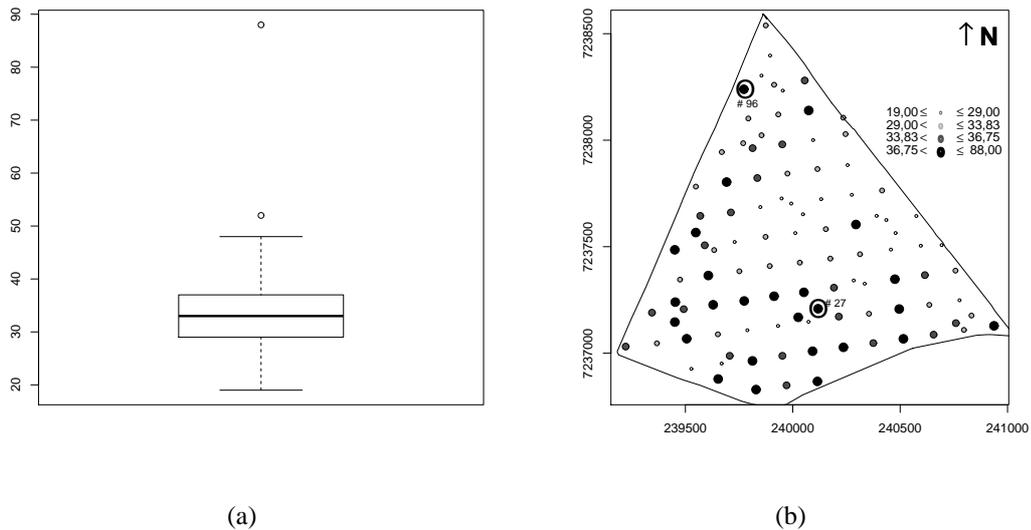


Figura 55: (a) Gráfico *boxplot* e (b) *postplot* dos dados de teor de Ferro.

Para o estudo de anisotropia foi construído os semivariogramas direcionais nas direções: 0° , 45° , 90° e 135° (Guedes *et al.*, 2008), considerando o *cutoff* um pouco menor de 50% (Clark, 1979), isto é, como o conjunto amostral apresentou distância máxima é de 1765,962 m , a distância a ser considerada é de 800 m . A Figura 56 apresenta os semivariogramas direcionais em que verifica-se um padrão da estrutura de dependência espacial para todas as direções, indicando isotropia e conseqüentemente pode-se utilizar o semivariograma omnidirecional.

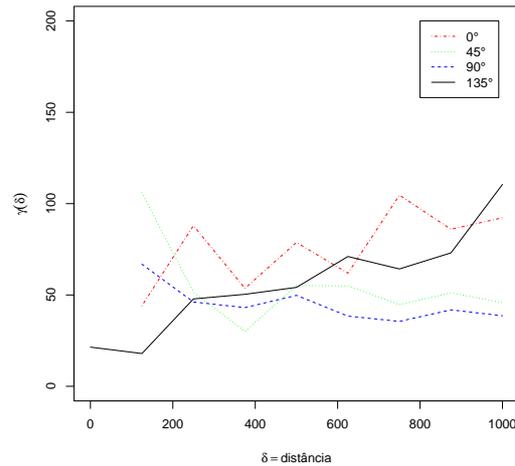


Figura 56: Semivariogramas direcionais do teor de Ferro.

Um resumo das informações sobre a função semivariância $\gamma(\delta)$ em uma distância δ , e número de pares $N(\delta)$ é apresentado na Tabela 9, onde nota-se que o menor número de pares foi de 208 e o maior foi 613, sendo respectivamente, das distâncias 100,875 e 600,250 m. Observa-se que o número de pares com que foi calculado o semivariograma experimental não só satisfaz as recomendações de Journel e Huijbregts (1978) e Wollenhaupt *et al.* (1997), de pelo menos um mínimo de 30 pares, mas também satisfaz as recomendações de Webster e Oliver (1990), de um número mínimo de 100 pares. Para a escolha do *lag* fez-se um estudo com diversos valores, e o número de *lags* igual a 8 mostrou-se o mais adequado. O estimador clássico utilizado foi o de Matheron e o ângulo de tolerância foi de $\pi/8$. Para calcular os valores de $C(\delta)$ e $\rho(\delta)$ para cada distância δ apresentada na Tabela 9, pode-se usar as relações $C(\delta) = C(0) - \gamma(\delta)$ e $\rho(\delta) = 1 - \gamma(\delta)/C(0)$, em que $C(0) = (\varphi_1 + \varphi_2)$.

Tabela 9: Resumo das informações sobre o semivariograma em uma distância δ semivariância $\gamma(\delta)$ e número de pares $N(\delta)$.

	δ	$\hat{\gamma}(\delta)$	$N(\delta)$
1	100,875	51,00000	208
2	200,750	63,51502	233
3	300,625	51,54651	473
4	400,500	44,24700	500
5	500,375	60,74239	394
6	600,250	57,25041	613
7	700,125	60,31613	465
8	800,000	61,96146	467

Os envelopes obtidos por permutação das semivariâncias são apresentados na Figura 57.

Para cada simulação valores de dados são alocados para a localização espacial. O variograma empírico é calculado para cada simulação, utilizando os mesmos *lags* do semivariograma inicialmente computado para os dados. Os envelopes são calculados tomando, em cada intervalo, os valores máximos e mínimos dos variogramas para os dados simulados. O fato de existir ponto fora do envelope indica a existência de dependência espacial, a qual pode ser ainda verificada com os valores do efeito pepita relativo $EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$.

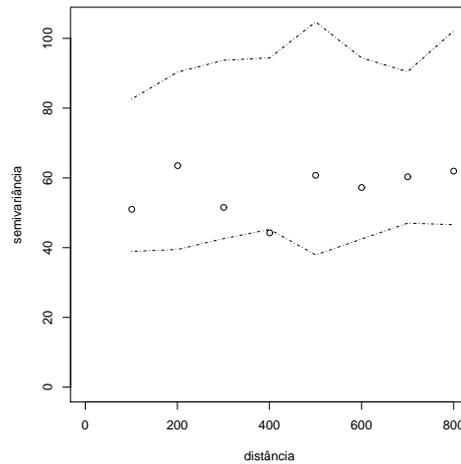


Figura 57: Envelope Simulado por Monte Carlo.

7.1.1 Distribuição Normal

A Tabela 10 apresenta os parâmetros estimados pelo método de máxima verossimilhança (MV) considerando os modelos exponencial, gaussiano e família Matérn para $\kappa = 0,7$, $\kappa = 1,0$ e $\kappa = 1,5$. Os modelos esférico e exponencial potência não foram tratados pois apresentam restrições quanto a segunda derivada, fato este que é importante no estudo da técnica de influência local em estudo.

Observa-se que os valores dos alcances foram aumentado conforme aumentou-se o valor do parâmetro de forma κ para o modelo Matérn, e que os modelos apresentaram baixos valores para φ_2 em relação aos valores de φ_1 , fato este que implica em valores mais altos do EPR , e conseqüentemente em fraca dependência espacial, segundo a escala de classificação de Cambardella *et al.* (1994) onde considera uma dependência espacial forte para $EPR \leq 0,25$, moderada para $0,25 < EPR \leq 0,75$ e fraca para $EPR > 0,75$.

Tabela 10: Estimativa dos parâmetros obtidos por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe .

Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	EPR^1
exponencial	34,36	52,53	13,61	297,01	889,7687	0,79
	(2,9802)	(5,2338)	(21,8799)	(659,7258)	(1979,1774)	
Gaussiano	34,52	56,56	11,10	540,61	935,699	0,84
	(2,9802)	(5,2338)	(21,8799)	(659,7258)	(1142,6786)	
Matérn $\kappa = 0,7$	34,39	54,42	11,93	285,57	984,3288	0,82
	(1,6826)	(10,5617)	(9,9831)	(308,2464)	(1063,4501)	
Matérn $\kappa = 1,0$	34,43	55,61	11,06	265,15	1060,60	0,83
	(1,7555)	(9,6109)	(8,9731)	(257,3537)	(1029,4148)	
Matérn $\kappa = 1,5$	34,47	56,28	10,79	232,81	1104,42	0,84
	(1,8348)	(9,0810)	(8,6400)	(198,8692)	(944,6287)	

$$^1EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$$

De acordo com os critérios estabelecidos, escolheu-se o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$ (Tabela 10), o qual em todos os casos de validação cruzada apresentou valores entre os dois melhores modelos, apresentou maior valor de LMV e ainda menores valores dos desvios padrões, sendo as estimativas dos parâmetros com os respectivos desvios padrão entre parêntesis dadas por: $\hat{\beta} = 34,52$, $\hat{\varphi}_1 = 56,56$, $\hat{\varphi}_2 = 11,10$ e $\hat{\varphi}_3 = 540,61$, e o raio de dependência espacial estimado de $935,699 m$ ($\hat{a} = 935,6990$).

Tabela 11: Critérios para seleção do melhor ajuste para a variável Fe .

Modelo	EM^1	ER^2	S_{EM}^3	S_{ER}^4	EA^5	LMV
exponencial	0,01543	0,00099	7,92392	1,00977	500,8248	-355,8
gaussiano	0,00780	0,00050	7,86644	1,00993	492,9177	-355,8
Matérn $\kappa = 0,7$	0,01298	0,00083	7,91883	1,00962	500,0124	-355,8
Matérn $\kappa = 1,0$	0,01102	0,00070	7,91156	1,00954	498,8181	-355,7
Matérn $\kappa = 1,5$	0,00955	0,00061	7,90156	1,00955	497,1747	-355,7

¹erro médio

²erro médio reduzido

³desvio padrão do erro médio

⁴desvio padrão dos erros reduzidos

⁵erro absoluto

7.1.1.1 Influência Local - perturbação aditiva

Os gráficos de influência para a perturbação aditiva considerando a distribuição normal são apresentados na Figura 58. O gráfico C_i vs ordem da Figura 58a apontou a observação #96 como influente na resposta, o gráfico da Figura 58b identificou as observações #9 e #10 como influentes na resposta e o gráfico l_p vs ordem da Figura 58e identificou o ponto #102 como influente no preditor linear.

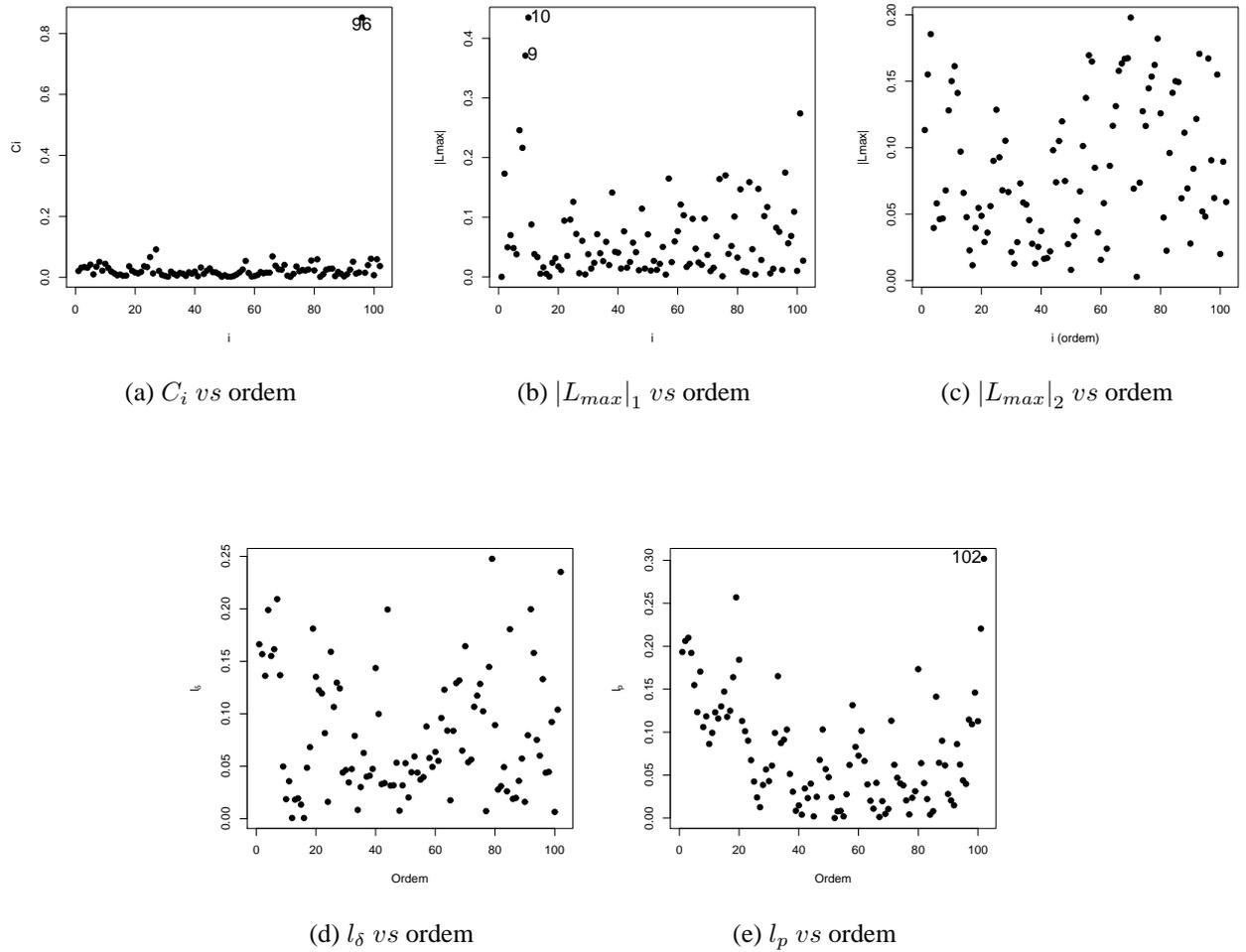


Figura 58: Gráficos de influência para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$ e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.

7.1.1.2 Influência Local - perturbação de Zhu

Na Figura 59 são apresentados os gráficos de influência para a perturbação de Zhu considerando a distribuição normal. Assim como para a perturbação aditiva, o gráfico C_i vs ordem da Figura 59a evidenciou a observação #96. Já o gráfico da Figura 59b destacou as observações #2, #3 e #96, o gráfico da Figura 59c destacou a observação #47 e o gráfico da Figura 59e evidenciou o ponto #101 como influente no preditor linear.

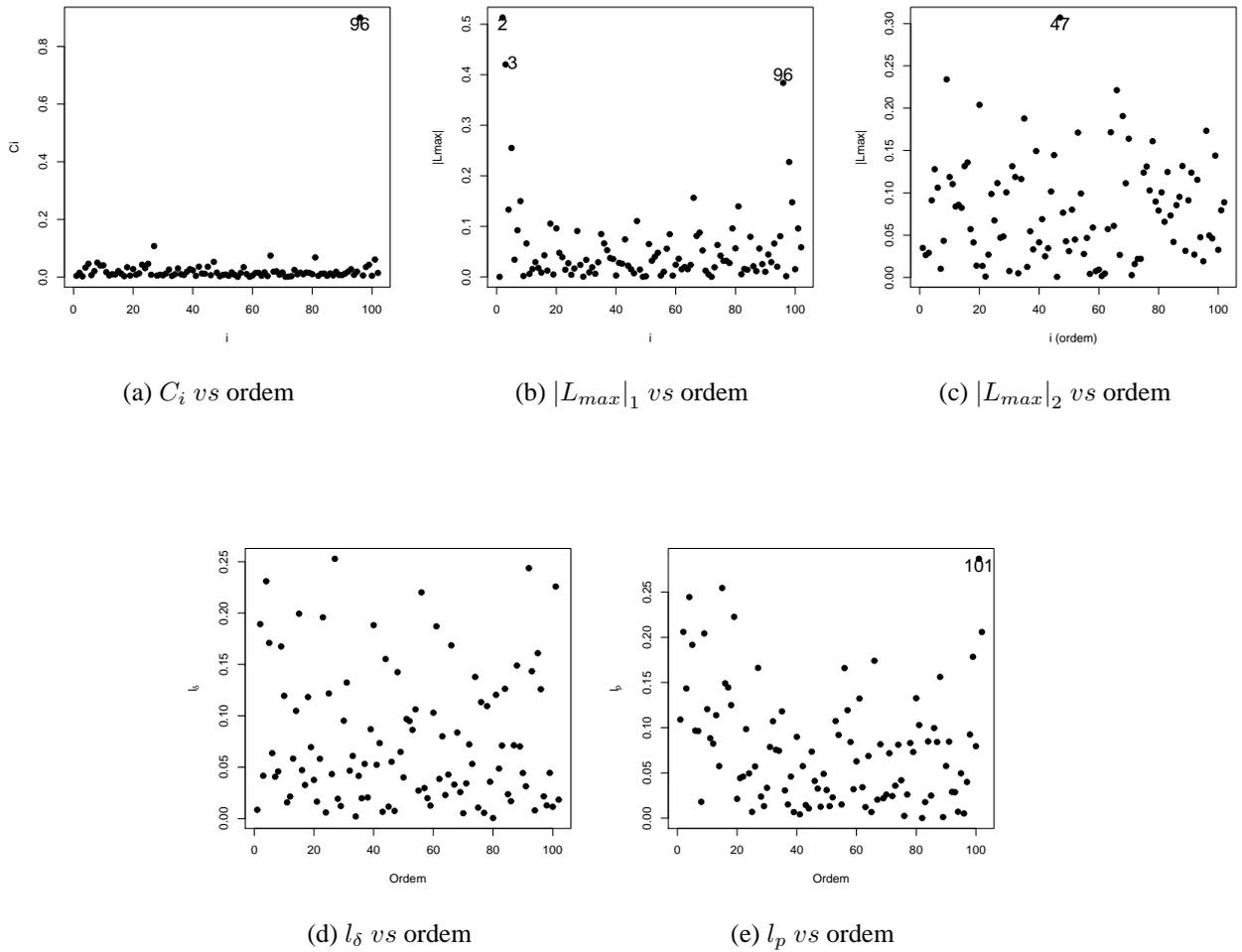


Figura 59: Gráficos de influência para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.

7.1.1.3 Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada (GL), que avalia a influência individual de cada observação no próprio valor ajustado, é apresentado na Figura 60 e destacou os pontos #19 e #102.

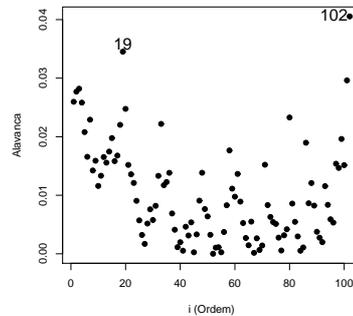


Figura 60: Gráfico da alavanca generalizada (GL) para o modelo gaussiano com distribuição normal.

7.1.1.4 Ajuste sem observação influente

A análise do conjunto de dados foi realizada sem a observação #96 para apresentar o que pode acontecer sem este ponto na análise, e as estimativas dos parâmetros obtidas são apresentadas na Tabela 12. A observação #96 era o ponto de máximo do conjunto de dados seu valor era de $88,00 \text{ mg dm}^{-3}$, bem acima da média. Sendo assim, ao eliminar está observação a média da variável Fe diminuiu, e é bem próxima de 33,70 para todos os modelos estudados. Todos os casos apresentam dependência espacial moderada e o raio de dependência espacial varia de 974,42 a 1378,52 m.

Tabela 12: Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe considerando a distribuição normal, sem a observação #96.

Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	EPR^1
exponencial	33,71	24,23	13,76	458,04	1374,12	0,64
	(2,8578)	(1,8126)	(16,5257)	(680,8378)	(2042,5134)	
Matérn $\kappa = 0,7$	33,72	25,43	12,81	399,57	1378,52	0,66
	(1,9211)	(4,8906)	(8,0506)	(330,2204)	(1139,2604)	
Matérn $\kappa = 1,0$	33,74	26,25	12,26	339,00	1356,00	0,68
	(1,9448)	(4,5554)	(7,9917)	(244,0241)	(976,0964)	
Matérn $\kappa = 1,5$	33,75	26,80	11,98	275,13	1306,87	0,69
	(1,9586)	(4,3633)	(8,0470)	(171,0469)	(812,4728)	

$$^1EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$$

Os valores dos critérios para seleção do melhor ajuste para a variável Fe considerando a distribuição normal, sem a observação #96 estão dispostos na Tabela 13. Segundo os critérios de validação cruzada e LMV o modelo escolhido continuou sendo o da família Matérn com $\kappa = 1,5$, mas com diferentes estimativas dos parâmetros da estrutura de variabilidade espacial, Como para o modelo gaussiano não foi possível calcular os desvios padrões para os parâmetros, pois a matriz de informação esperada de Fisher é inversível, o mesmo foi desconsiderado.

Tabela 13: Critérios para seleção do melhor ajuste para a variável Fe considerando a distribuição normal, sem a observação #96.

Modelo	EM^1	ER^2	S_{EM}^3	S_{ER}^4	EA^5	LMV
exponencial	0,01445	0,00131	5,47512	1,00363	413,4752	317,9
Matérn $\kappa = 0,7$	0,01170	0,00106	5,47359	1,00372	413,1589	-317,8
Matérn $\kappa = 1,0$	0,00931	0,00084	5,47162	1,00378	412,9516	-317,8
Matérn $\kappa = 1,5$	0,00745	0,00067	5,46862	1,00383	412,8194	-317,7

¹erro médio

²erro médio reduzido

³desvio padrão do erro médio

⁴desvio padrão dos erros reduzidos

⁵erro absoluto

7.1.1.5 Mapas Temáticos

Um resumo dos parâmetros estimados no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe com e sem o ponto influente, são apresentados na Tabela 14. Seja $\hat{\theta} = (\hat{\beta}_1, \dots, \hat{\beta}_p, \hat{\varphi}_1, \dots, \hat{\varphi}_q)^\top = (\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_p, \hat{\theta}_{p+1}, \dots, \hat{\theta}_{p+q})$, e $\hat{\theta}_i$ o parâmetro i de $\hat{\theta}$ e $\hat{\theta}_i^*$ o parâmetro i de θ sem o ponto influente, então a variação relativa (VR) é definida por $VR(\hat{\theta}^*) = \left| (\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i) / \hat{\theta}_i \right| \times 100$, para $i = 1, \dots, p+q$. Observa-se na Tabela 14 que $VR(\hat{\varphi}_1) = -52,38\%$, isto é, a retirada do ponto influente provocou a diminuição em 52,38% no valor da estimativa do parâmetro φ_1 , o qual já foi mencionado ser um parâmetro de muita importância na construção dos mapas temáticos. Houve também mudanças consideráveis para os demais parâmetros que também definem a estrutura de dependência espacial.

Tabela 14: Parâmetros estimados por MV escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe .

	Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
Com todos os pontos	Matérn $\kappa = 1,5$	34,47	56,28	10,79	232,81	1104,42
		(1,8348)	(9,0810)	(8,6400)	(198,8692)	(944,6287)
Sem o ponto #96	Matérn $\kappa = 1,5$	33,75	26,80	11,98	275,13	1306,87
		(1,9586)	(4,3633)	(8,0470)	(171,0469)	(812,4728)
VR($\hat{\theta}^*$)		-2,09	-52,38	11,03	18,18	18,33

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões;

$$VR(\hat{\theta}^*) = \left| (\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i) / \hat{\theta}_i \right| \times 100, \text{ para } i = 1, \dots, p+q.$$

Na Tabela 15 apresenta-se a matriz de erros que fornece a quantidade de área em ha de cada mapa temático construído, bem como as áreas em ha coincidentes para a comparação dos mapas temáticos com e sem o ponto influente. Observa-se que a classe (34,6-36,8] foi a que apresentou maior quantidade de área na mesma região entre os dois mapas.

Tabela 15: Matriz de Erros da quantidade de área em ha para a variável Fe .

Mapa sem ponto #96	Mapa com todos os pontos					Total
	[28,0-30,2]	(30,2-32,4]	(32,4-34,6]	(34,6-36,8]	(36,8-39,0]	
[28,0-30,2]	13,79	11,40	0	0	0	25,19
(30,2-32,4]	0	20,41	12,72	6,76	1,03	40,92
(32,4-34,6]	0	0	26,06	5,67	0,91	32,64
(34,6-36,8]	0	0	1,86	50,83	0	52,69
(36,8-39,0]	0	0	0	8,05	7,86	15,91
Total	13,79	31,81	40,64	71,31	9,80	167,35

Os mapas temáticos do Fe dividido em cinco classes de mesma amplitude são apresentados na Figura 61. No gráfico da Figura 61a encontra-se o mapa considerando todos os pontos,

e da Figura 61b o mapa considerando a análise sem a observação #96 considerada influente. Observa-se que os menores valores de Fe encontram-se na região leste do mapa, na região de cor branca.

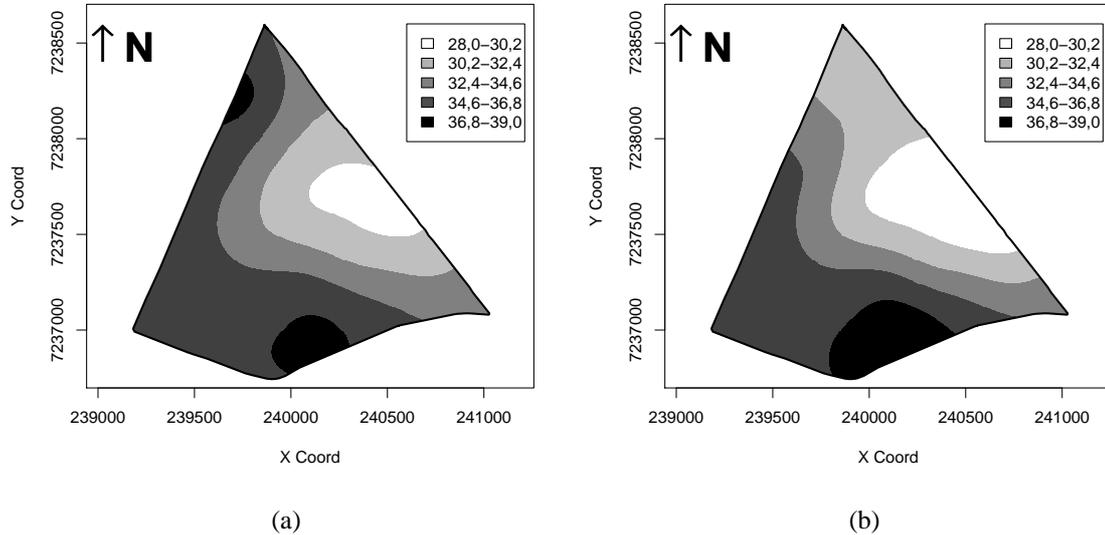


Figura 61: Mapa temático do Ferro para a distribuição normal considerando cinco classes de mesma amplitude.

Na Tabela 16 são apresentados os índices de exatidão global (EG), Kappa (K) e Tau (T) com seus respectivos intervalos de confiança, para comparação de mapas temáticos para a variável Fe considerando a distribuição normal. O índice de EG considera somente os valores da diagonal principal da matriz de erros. Segundo Anderson *et al.* (2001), o índice de exatidão global (EG) de 0,711 indica que os mapas não podem ser considerados similares pois $EG < 0,85$. Segundo Gong e Howarth (1990), o índice Kappa (K) é uma estatística recomendada com uma medida apropriada de exatidão por utilizar todos os elementos da matriz de erros. De acordo com Krippendorff (1980), o índice K apresenta baixa exatidão pois $K < 0,67$. Ma e Redmond (1995) apresentaram o índice Tau (T), que fornece uma medida quantitativa relativamente precisa e intuitiva sobre a acurácia da classificação. A classificação deste índice pode seguir a mesma classificação de Kripendorf (1980), assim o índice $T=0,421$ também indica baixa similaridade entre os mapas apresentados na Figura 61. Dessa maneira, temos que a observação #96 é influente na construção dos mapas temáticos que mostram a variabilidade espacial.

Tabela 16: Medidas de Exatidão para a variável Fe considerando a distribuição normal.

Medidas	Resultados	Intervalos de Confiança	Valores
Exatidão Global - EG	0,711	IC[EG,95%]	[0,707;0,714]
Kappa - K	0,616	IC[K,95%]	[0,611;0,622]
Tau - T	0,421	IC[T,95%]	[0,406;0,437]

7.1.2 Distribuição t -Student multivariada com 5 graus de liberdade

A Tabela 17 apresenta os parâmetros estimados no ajuste dos modelos considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade, a qual apresenta caudas mais pesadas que a distribuição normal. Os modelos considerados no estudo foram exponencial, gaussiano e família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 0,7$, $\kappa = 1,0$ e $\kappa = 1,5$ e o método de MV para estimação dos parâmetros. De acordo com os critérios de Cambardella *et al.* (2000), todos os cenários considerados apresentam dependência espacial moderada, pois $0,25 \leq EPR < 0,75$.

Tabela 17: Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.

Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	EPR^1
exponencial	34,20	41,15	36,69	100,85	302,55	0,53
	(0,8833)	(61,6183)	(35,7963)	(67,1132)	(201,3396)	
gaussiano	34,38	32,76	43,91	106,03	183,65	0,43
	(0,8750)	(57,5295)	(28,2319)	(32,3518)	(56,0350)	
Matérn $\kappa = 0,7$	34,35	35,58	43,58	69,81	240,84	0,45
	(0,8897)	(67,9006)	(44,4068)	(43,4886)	(150,0357)	
Matérn $\kappa = 1,0$	34,63	22,55	44,08	54,29	217,16	0,34
	(0,8160)	(57,4267)	(37,6391)	(26,6059)	(106,4236)	
Matérn $\kappa = 1,5$	33,85	48,00	53,00	73,64	349,79	0,48
	(1,0073)	(69,5581)	(24,1736)	(22,9937)	(109,2201)	

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$^1EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$$

Segundo os critérios de validação cruzada (Faraco *et al.*, 2008) bem como o valor de LMV para os modelos ajustados, escolheu-se o modelo exponencial com parâmetros estimados $\hat{\beta} = 34,20$, $\hat{\varphi}_1 = 41,15$, $\hat{\varphi}_2 = 36,69$ e $\hat{\varphi}_3 = 100,85$ para a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade. O modelo escolhido tem raio de dependência espacial estimada de 302,55 m .

7.1.2.1 Influência Local - perturbação aditiva

A Figura 62 apresenta os gráficos de influência local para a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade considerando a perturbação aditiva. Todos os gráficos, exceto o apresentado

na Figura 62c, identificaram a observação #96 como influente, sendo esta influente na resposta, na matriz de covariâncias e no preditor linear.

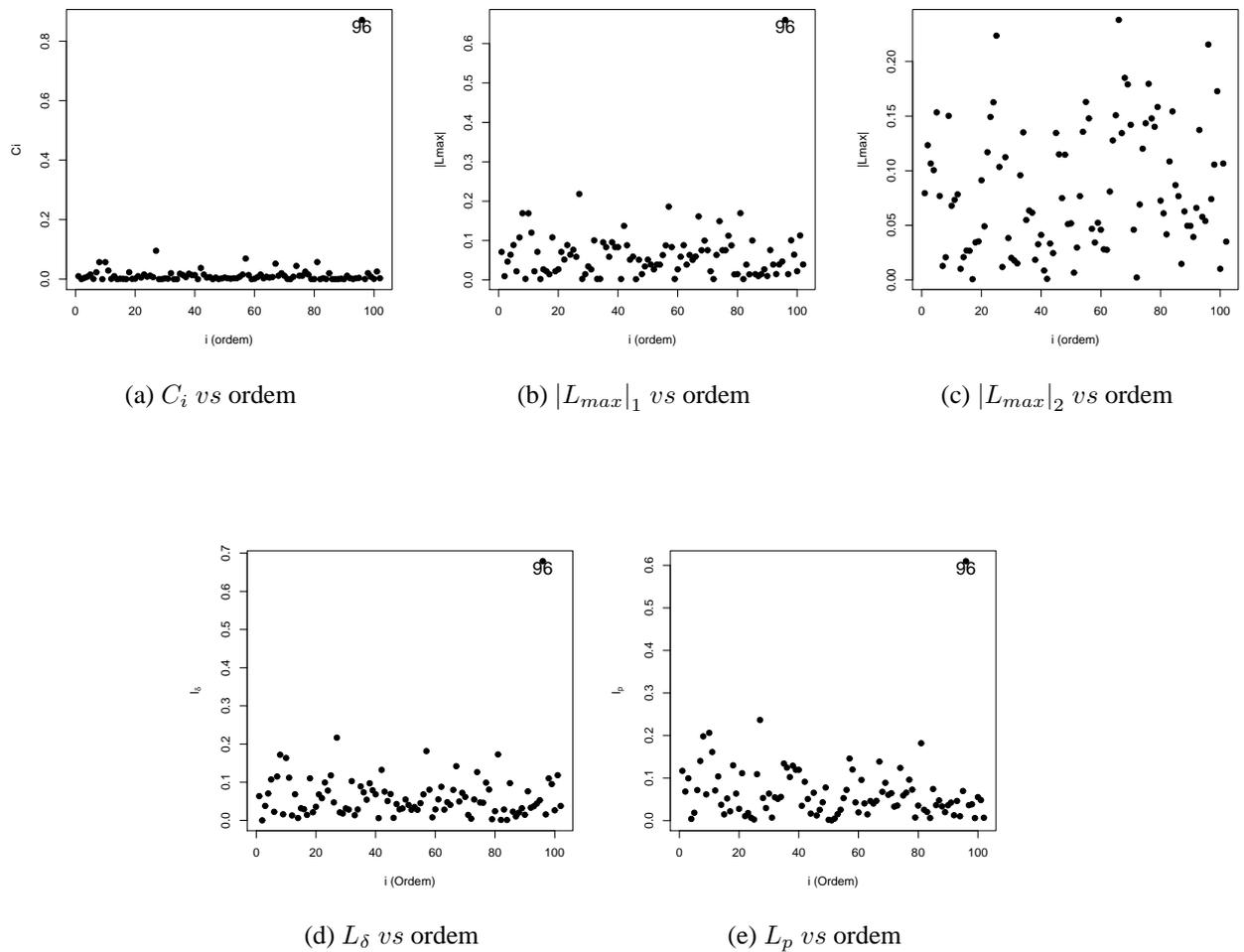


Figura 62: Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição t -Student com 5 graus de liberdade considerando a perturbação aditiva.

7.1.2.2 Influência Local - perturbação de Zhu

Na Figura 63 são apresentados os gráficos de influência local para a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu. Os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_1$ vs ordem das Figuras 63a e 63b identificaram o ponto #96 como possível influente na resposta e o gráfico l_δ vs ordem da Figura 63d também indentificou este mesmo ponto #96 como possível influente na matriz de covariâncias. O gráfico da Figura 63c destacou a observação #66 e o gráfico da Figura 63e não apresentou observações influentes no preditor linear.

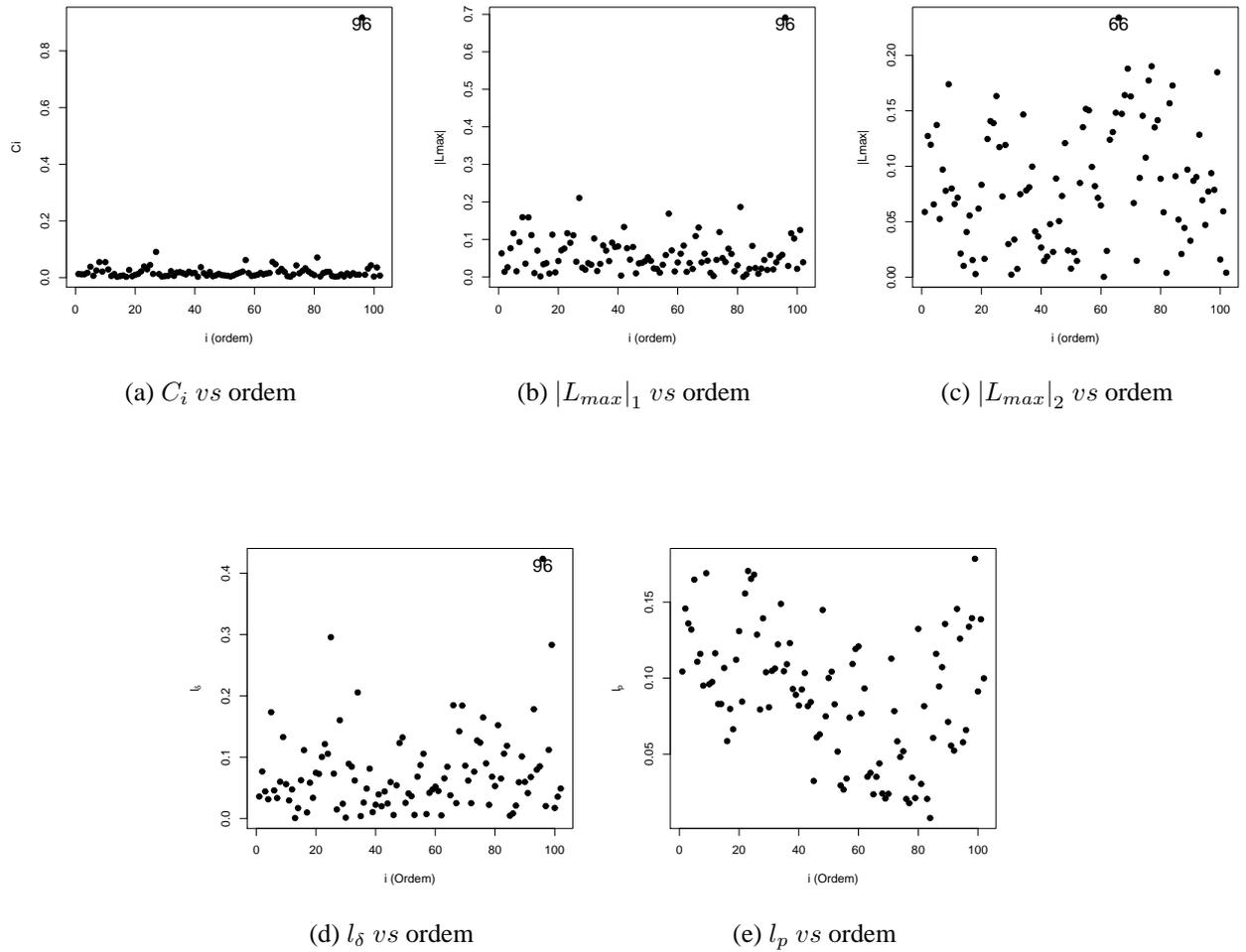


Figura 63: Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição t -Student com 5 graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu.

7.1.2.3 Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada (GL) apresentado na Figura 64 não identificou observações influentes no próprio valor ajustado.

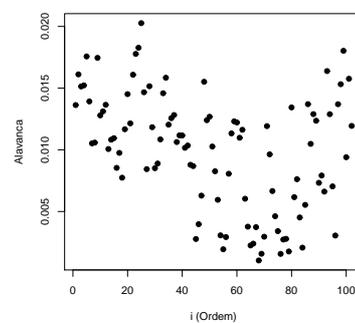


Figura 64: Gráfico da alavanca generalizada para o modelo exponencial e distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.

7.1.3 Análise sem o ponto #96

Na Tabela 18 são apresentados os parâmetros estimados no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe sem a observação #96, considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade. Com a retirada do ponto, a dependência espacial continua sendo moderada, no entanto observa-se uma considerável mudança entre os valores obtidos para as estimativas dos parâmetros φ_1 , φ_2 e φ_3 , sendo que a mudança neste último implicou um aumento na distância máxima de dependência espacial. Nota-se ainda que os desvios padrões também diminuíram.

Tabela 18: Parâmetros estimados por MV obtidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe sem a observação #96, considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.

Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	EPR^1
exponencial	33,63	27,46	30,63	204,65	613,95	0,47
	(0,7860)	(37,4183)	(10,7146)	(60,7889)	(182,3667)	
gaussiano	33,58	26,17	36,06	150,44	260,57	0,42
	(0,7925)	(43,0713)	(14,2250)	(34,3206)	(59,4450)	
Matérn $\kappa = 0,7$	33,73	26,39	28,35	231,27	867,26	0,48
	(0,7857)	(33,0875)	(6,8391)	(49,9871)	(172,4555)	
Matérn $\kappa = 1,0$	33,75	20,23	24,80	100,93	403,72	0,45
	(0,6780)	(30,5652)	(10,22330)	(30,3818)	(121,5272)	
Matérn $\kappa = 1,5$	33,97	20,03	29,98	71,95	341,76	0,40
	(0,7124)	(34,5822)	(12,4657)	(20,3059)	(96,4530)	

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$^1EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$$

Os valores obtidos para os critérios para seleção do melhor ajuste para a variável Fe sem a observação #96, alterou a escolha do modelo que deixou de ser exponencial e passou a ser da família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 0,7$, segundo os critérios de validação cruzada e LMV .

7.1.4 Mapas tempáticos

A Tabela 19 apresenta um resumo para as estimativas dos parâmetros obtidas para os modelos escolhidos com todas as observações e sem a observação #96. A variação relativa também chamada de taxa de variação mostra que a retirada do ponto diminuiu em 35,87 % a estimativa do parâmetro φ_1 , o qual determina a variância para pequenas distâncias, e ainda, mostra que a estimativa de φ_2 diminuiu em 22,73% e o raio de dependência espacial praticamente triplicou. Com todos os pontos o modelo escolhido foi o exponencial e sem o ponto #96 o modelo escolhido foi da família Matérn com $\kappa = 0,7$, isto é, este ponto é influente na escolha do modelo de variabilidade espacial.

Tabela 19: Parâmetros estimados por MV escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe .

	Modelo	$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
Com todos os pontos	exponencial	34,20	41,15	36,69	100,85	302,55
		(0,8833)	(61,6183)	(35,7963)	(67,1132)	(201,3396)
Sem o ponto #96	Matérn $\kappa = 0,7$	33,73	26,39	28,35	231,27	867,26
		(0,7857)	(33,0875)	(6,8391)	(49,9871)	(172,4555)
VR($\hat{\theta}^*$)		1,39	35,87	22,73	129,32	186,65

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$VR(\hat{\theta}^*) = \left| (\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i) / \hat{\theta}_i \right| \times 100, \text{ para } i = 1, \dots, p + q.$$

A Figura 65 apresenta os mapas temáticos para a variável Fe para a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade considerando cinco classes de mesma amplitude. Na Figura 65a é apresentado o mapa temático com todos os pontos e na Figura 65b, o mapa temático sem a observação #96. Ambos os mapas foram construídos com a mesma escala, e visualmente é possível notar diferenças, mas que são menores que para os mapas construídos assumindo a distribuição normal para os dados.

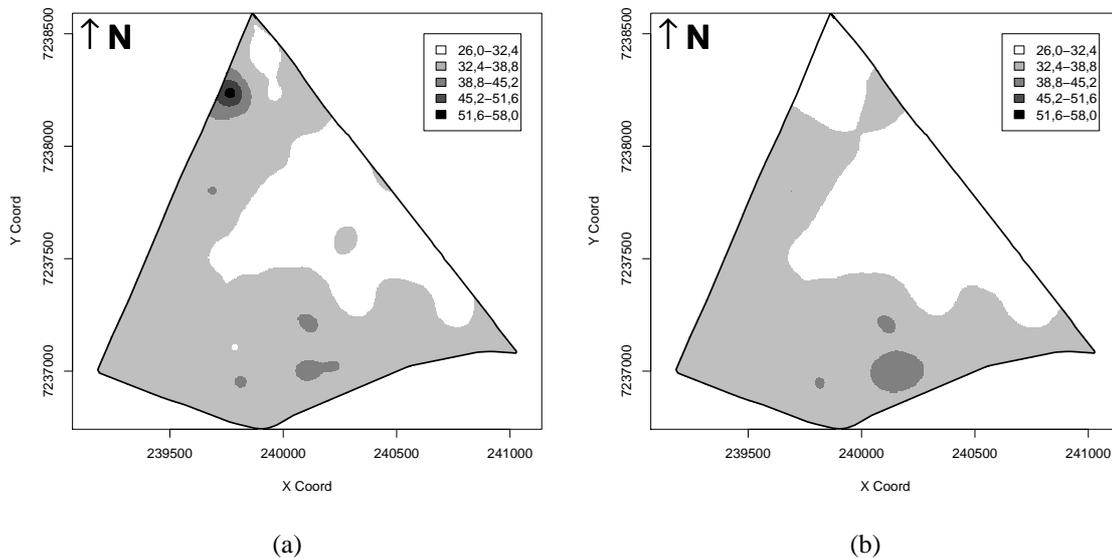


Figura 65: Mapa temático do Ferro para a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade considerando cinco classes de mesma amplitude.

Na Tabela 20 apresenta-se a matriz de erros que contem o total de área de cada classe para cada mapa temático e as áreas comuns, para a comparação dos mesmos. Observa-se que a classe (32,4-38,8] foi a que apresentou maior quantidade de área comum entre os dois mapas.

Tabela 20: Matriz de Erros para a variável Fe .

Mapa sem ponto #96	Mapa com todos os pontos					Total
	[26,0-32,4]	(32,4-38,8]	(38,8-45,2]	(45,2-51,6]	(51,6-58,0]	
[26,0-32,4]	50,24	12,76	1,48	0,83	0,17	65,48
(32,4-38,8]	0,31	96,21	0,84	0	0	97,36
(38,8-45,2]	0	2,99	1,52	0	0	4,51
(45,2-51,6]	0	0	0	0	0	0
(51,6-58,0]	0	0	0	0	0	0
Total	50,55	111,96	3,84	0,83	0,17	167,35

As medidas de exatidão para os mapas temáticos da variável Fe são apresentados na Tabela 21, onde o índice de exatidão global (EG) indicou alta exatidão, isto é, alta similaridade entre os mapas, e os índices K e T indicaram média exatidão.

Tabela 21: Medidas de Exatidão para a variável Fe considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.

Medidas	Resultados	Intervalos de Confiança	Valores
Exatidão Global - EG	0,884	IC[EG,95%]	[0,882;0,887]
Kappa - K	0,765	IC[K,95%]	[0,756;0,773]
Tau - T	0,768	IC[T,95%]	[0,763;0,774]

7.1.5 Distribuição Exponencial Potência com $\lambda = 0,8$

Os modelos ajustados para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$ foram o exponencial, gaussiano, família Matérn com $\kappa = 0,7$, $\kappa = 1,0$ e $\kappa = 1,5$. Para a escolha do modelo foram utilizadas a técnica de validação cruzada e o valor de LMV .

Segundo os critérios mencionados, o modelo escolhido foi o exponencial com parâmetros estimados $\hat{\beta} = 34,1658 (0,2297)$, $\hat{\varphi}_1 = 4,1127 (2,2035)$, $\hat{\varphi}_2 = 14,880 (2,4670)$ e $\hat{\varphi}_3 = 56,7015 (113,3159)$, e entre parênteses os respectivos valores do desvio padrão da estimativa dos parâmetros. Este modelo apresentou raio de dependência espacial estimado de $170,1045 m$.

7.1.5.1 Influência Local - perturbação aditiva

A Figura 66 apresenta os gráficos de influência local para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando a perturbação aditiva. Os gráficos das Figuras 66a e 66b indentificaram o ponto #96 como possível influente na variável resposta e o gráfico da Figura e 66d identificou a mesma observação como influente na matriz de covariâncias. Os gráficos da Figura 66c e 66e detectou a observação #25 como influente na variável resposta e no preditor linear, respectivamente.

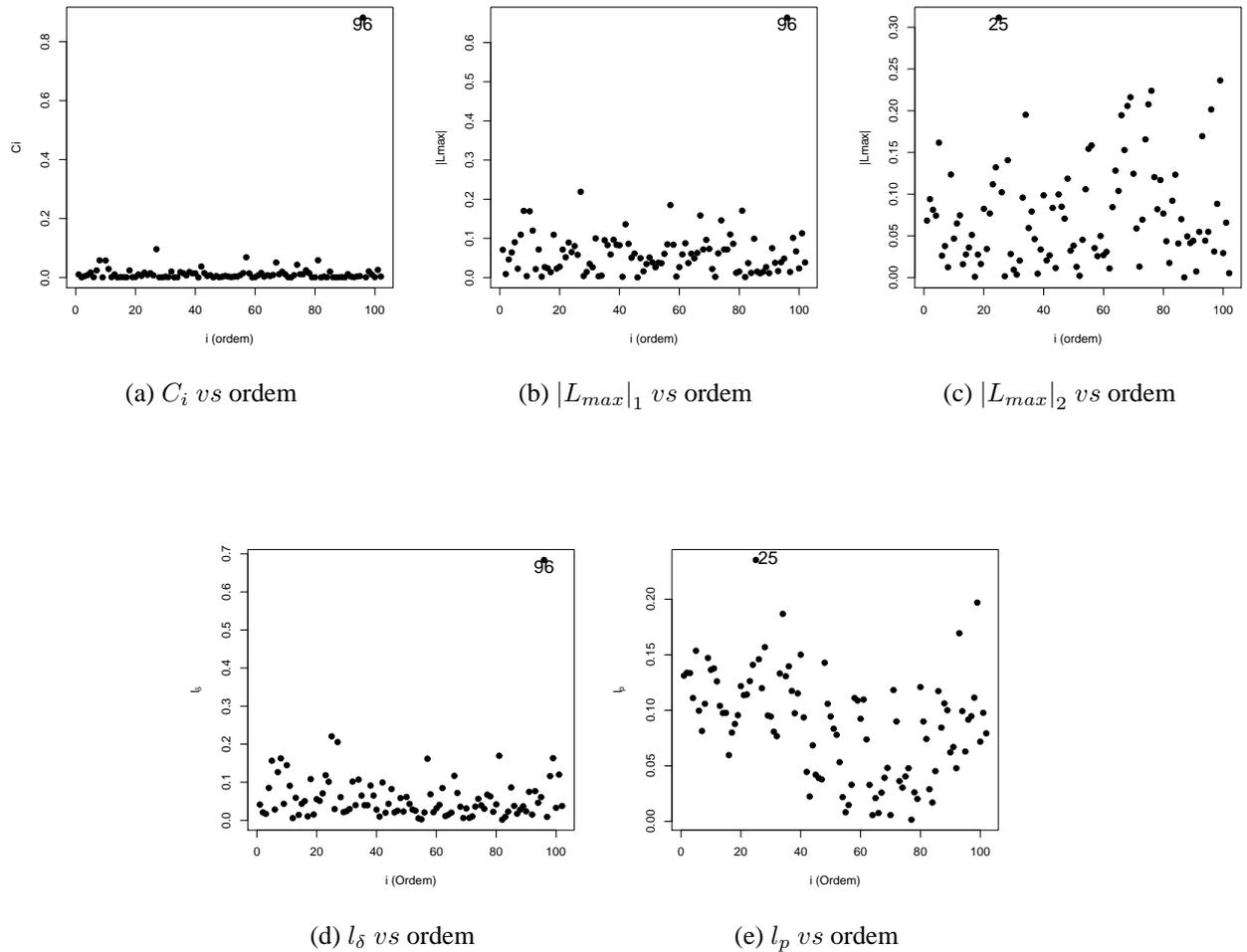


Figura 66: Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando a perturbação aditiva.

7.1.5.2 Influência Local - perturbação de Zhu

Na Figura 67 são apresentados os gráficos de influência local para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$ considerando a perturbação de Zhu. Assim como para a perturbação aditiva, os gráficos C_i vs ordem e $|L_{max}|_1$ vs ordem das Figuras 67a e 67b identificaram a observação #96 como influente, e o gráfico l_p vs ordem da Figura 67e destacou a observação #25 como influente no preditor linear. O gráfico l_δ vs ordem da Figura 67d, além de identificar a observação #96 como influente na matriz de covariâncias, identificou a observação #25.

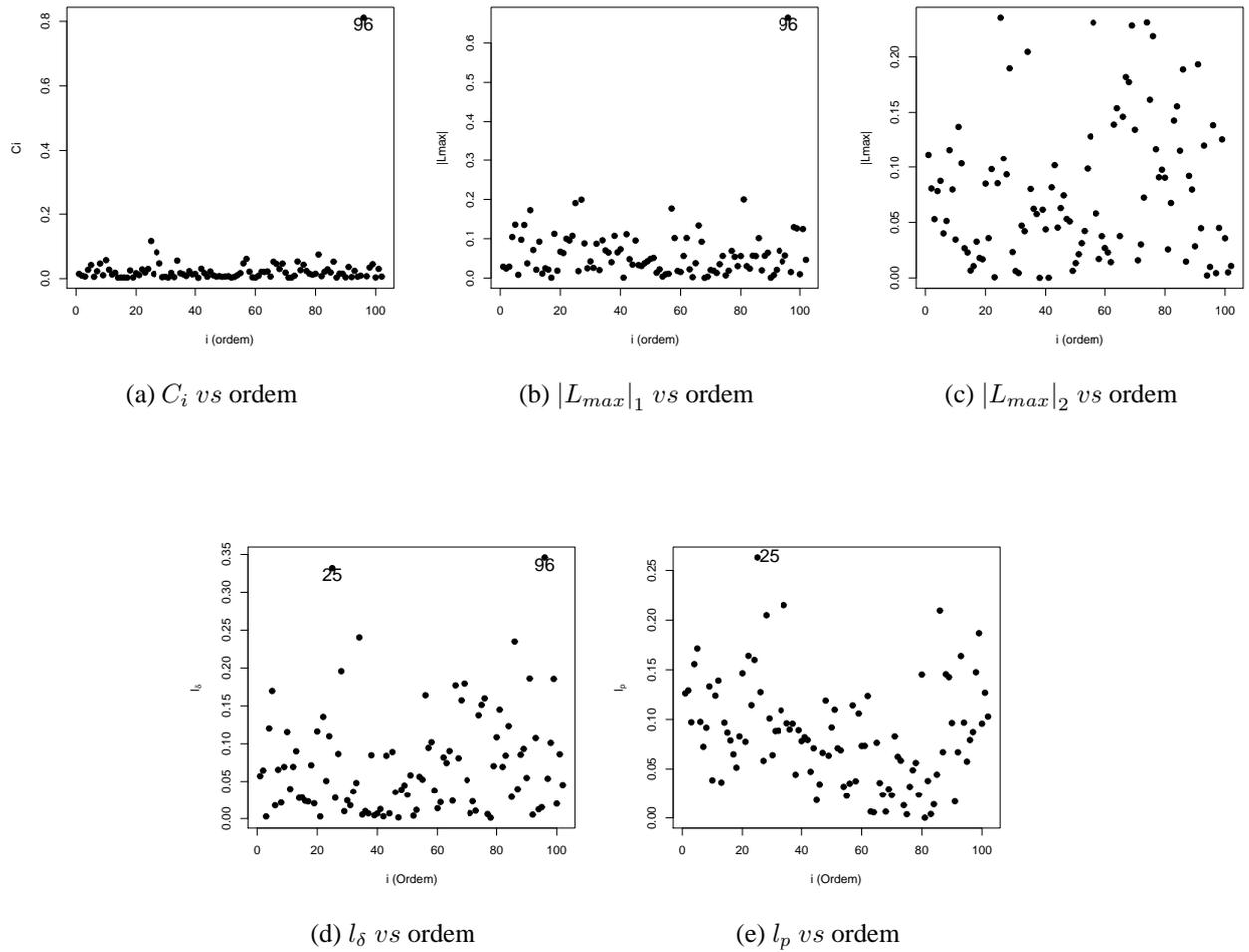


Figura 67: Gráficos de influência para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$, considerando a perturbação de Zhu.

7.1.5.3 Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada apresentado na Figura 68, identificou a observação #25 como influente no próprio valor ajustado, a qual foi também detectada como influente na variável resposta pelo gráfico da Figura 66c, quando considerada a perturbação aditiva.

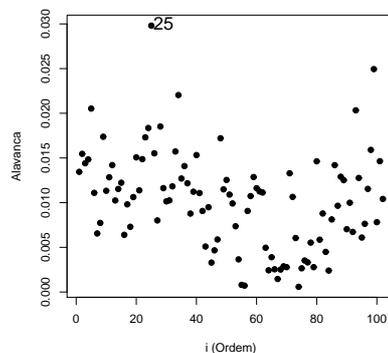


Figura 68: Gráfico da alavanca generalizada para o modelo exponencial e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$.

7.1.5.4 Mapas Temáticos

A análise do conjunto de dados foi refeita sem a presença da observação #96. Na Tabela 22 estão dispostos os parâmetros obtidos pelos modelos escolhidos para a construção dos mapas temáticos com todos os pontos e sem o ponto #96. Observa-se que houve mudança para as estimativas dos parâmetros, principalmente para $\hat{\varphi}_1$ que aumentou em 94,16% e para $\hat{\varphi}_2$ que reduziu em 87,50%. O raio de dependência espacial estimado aumentou em 44,35%.

Tabela 22: Parâmetros estimados obtidos por MV escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável Fe considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$.

Modelo		$\hat{\beta}$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
Com todos os pontos	exponencial	34,17 (0,2297)	4,11 (2,2035)	14,88 (2,4670)	56,70 (113,3159)	170,10 (339,9477)
Sem o ponto #96	Matérn $\kappa = 0,7$	33,38 (0,1130)	7,98 (5,4070)	1,86 (5,2966)	71,17 (125,0461)	245,54 (431,4090)
VR($\hat{\theta}^*$)		-2,31	94,16	-87,50	25,52	44,35

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$\text{VR}(\hat{\theta}^*) = \left| (\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i) / \hat{\theta}_i \right| \times 100, \text{ para } i = 1, \dots, p + q.$$

A Figura 69 apresenta os mapas temáticos para a variável Fe para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$ considerando cinco classes de mesma amplitude. Na Figura 69a é apresentado o mapa temático com todos os pontos e na Figura 69b, o mapa temático sem a observação #96. Nota-se que o mapa sofreu mudanças com a retirada da observação #96, principalmente no local onde foi coletada esta observação.

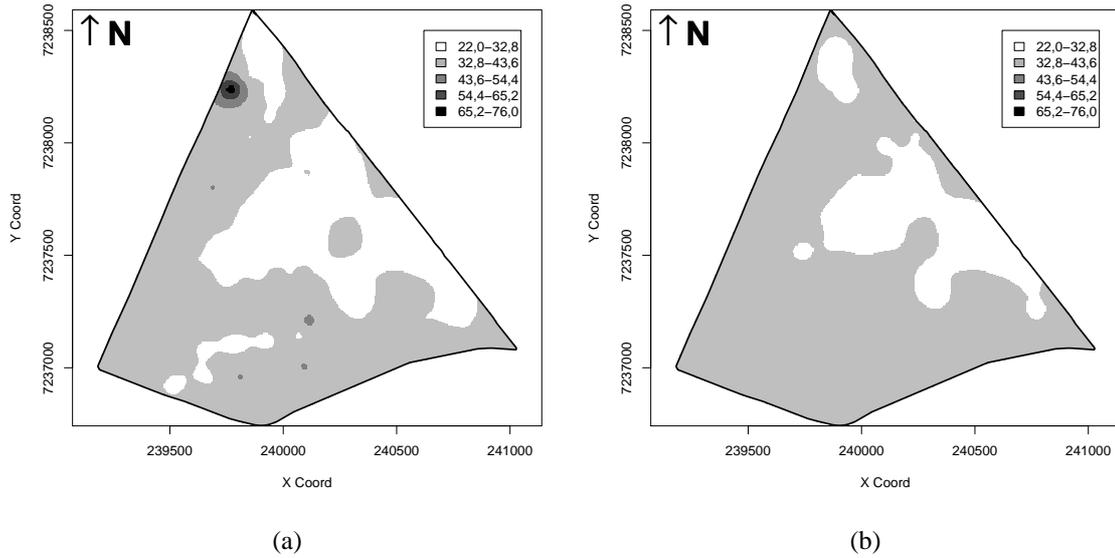


Figura 69: Mapas temáticos do Ferro para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando cinco classes de mesma amplitude (a) com todos os pontos (b) sem a observação #96.

Na Tabela 23 é apresentada a matriz de erros da variável Fe , para a comparação dos mapas temáticos com e sem o ponto influente.

Tabela 23: Matriz de Erros para a variável Fe .

Mapa sem ponto #96	Mapa com todos os pontos					Total
	[22,0-32,8]	(32,8-43,6]	(43,6-54,4]	(54,4-65,2]	(65,2-76,0]	
[22,0-32,8]	47,01	2,55	0,25	0,01	0	49,82
(32,8-43,6]	13,96	101,96	1,07	0,44	0,10	117,53
(43,6-54,4]	0	0	0	0	0	0
(54,4-65,2]	0	0	0	0	0	0
(65,2-76,0]	0	0	0	0	0	0
Total	60,97	104,51	1,32	0,45	0,10	167,35

As medidas de exatidão para os mapas temáticos da variável Fe considerando a distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ são apresentados na Tabela 24, onde os índices de acurácia indicaram baixa similaridade entre os mapas temáticos.

Tabela 24: Medidas de Exatidão para a variável Fe considerando a distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$.

Medidas	Resultados	Intervalos de Confiança	Valores
Exatidão Global - EG	0,362	IC[EG,95%]	[0,359;0,366]
Kappa - K	0,247	IC[K,95%]	[0,242;0,252]
Tau - T	-0,275	IC[T,95%]	[-0,307; -0,243]

7.1.6 Considerações gerais

Pelos métodos da geoestatística foi possível verificar a variabilidade espacial dos teores de Fe na área em estudo. Foi possível notar que ao considerar diferentes distribuições de probabilidade obteve-se também diferentes estimativas dos parâmetros conforme pode ser visto, por exemplo, ao comparar as Tabelas 10 e 17. No entanto, todas as distribuições consideradas detectaram a observação #96 como influente, isto é, pode alterar na construção dos mapas temáticos que mostram a variabilidade espacial do teor de Ferro da área em estudo.

Sabe-se que os mapas temáticos construídos são importantes ferramentas para realizar zoneamento das áreas onde é necessário aplicar técnicas para amenizar o problema de deficiência de ferro no solo, portanto, visto que a observação #96 foi detectada por todas as distribuições em estudo como influente e realmente está alterando na construção dos mapas temáticos, então deve-se ter cuidado com esta observação para as necessidades de aplicação de correção do solo a serem repassadas ao agricultor.

Pelas medidas de exatidão EG, K e T apresentadas nas Tabelas 15, 20 e 23, pode-se observar que a mudança nos mapas temáticos com e sem o ponto influente foi maior quando considerada a distribuição normal do que quando consideradas as distribuições t -student com $v = 5$ graus de liberdade e exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$. Como a variação nos mapas foi menor para a distribuição t -student com $v = 5$ graus de liberdade, então o mapa referente a esta distribuição seria o escolhido para ser repassado como informação da variabilidade espacial do teor de Ferro da área em estudo.

7.2 Conjunto de dados de Produtividade com covariáveis - Ano agrícola de 2010/2011

O Brasil é o segundo maior produtor mundial de grão, segundo dados da CONAB (2011). Sua produção no ano agrícola de 2010/2011 foi de 75,0 milhões de toneladas, tendo uma área plantada de 24,2 milhões de hectares e produtividade de $3,106 t ha^{-1}$. O estado do Paraná é o segundo produtor brasileiro de soja, com produção de 15,4 milhões de toneladas, área plantada de 4,6 milhões de ha e produtividade de $3,360 t ha^{-1}$. Sendo assim, observa-se na Tabela 25 que em média, a produtividade da soja da área em estudo é de $3,563 t ha^{-1}$ foi maior que a média estadual e nacional de $3,360$ e $3,106 t ha^{-1}$, respectivamente. De acordo com coeficiente de variação, os dados de produtividade da soja ($Prod$) e teor de cálcio (Ca) tem média heterogeneidade e os dados do teor de potássio (K) e fósforo (P) tem alta heterogeneidade (acima de 30%).

Tabela 25: Estatísticas descritivas dos dados de $Prod [t ha^{-1}]$ e suas covariáveis Ca , K e P .

	$Prod$	Ca	K	P
n	89	89	89	89
Média	3,563	5,223	0,1989	10,71
Mediana	3,550	5,050	0,1900	10,10
Quartil 1	3,230	4,170	0,1400	7,00
Quartil 3	3,850	6,130	0,2300	13,20
Mínimo	2,120	2,370	0,0800	2,90
Máximo	5,130	11,760	0,6000	24,60
Desvio Padrão	0,538	1,411	0,0819	5,267
Coef. de variação %	15,102	27,025	41,182	49,158
Coef. Assimetria	0,314	1,070	1,676	0,901
Coef. Curtose	0,984	3,939	5,748	0,403

Foram realizados estudos de anisotropia e continuidade espacial para $prod$, Ca , K e P e concluiu-se que os dados são isotrópicos e que existe dependência espacial, para cada variável estudada.

A grade amostral da área em estudo para a produtividade com covariáveis é apresentada na Figura 70.

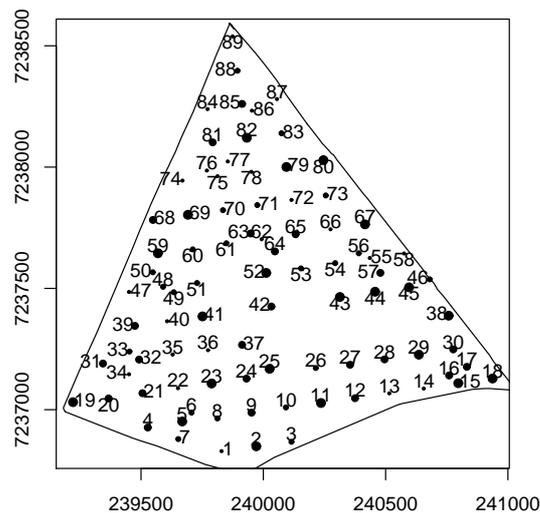


Figura 70: Grade amostral para o estudo da Produtividade com covariáveis.

7.2.1 Distribuição Normal

A Tabela 26 apresenta os parâmetros estimados no ajuste dos modelos. Os modelos considerados foram exponencial, gaussiano e família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 0, 7$, $\kappa = 1, 0$ e $\kappa = 1, 5$. Para a análise considerando a distribuição normal, foi utilizado o pacote `geoR` do *software* R (R Development Core Team, 2010). Nota-se que para todos os modelos os valores de $\hat{\varphi}_1$ são iguais a zero, e que os alcances variaram entre 108,0256 e 116,4730 *m*. Os demais parâmetros estimados são semelhantes nos diferentes modelos.

Tabela 26: Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais lineares para a variável *Prod* [$t\ ha^{-1}$] em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P*, considerando a distribuição normal.

Modelo	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
exponencial	3,7989	-0,0425	0,6280	-0,0116	0,0000	0,2764	38,5953	115,7859
	(0,2315)	(0,0472)	(0,7757)	(0,0111)	(0,6608)	(0,6639)	(50,9812)	(152,9436)
gaussiano	3,8085	-0,0502	0,7948	-0,0115	0,0000	0,2784	62,3686	108,0256
	(0,2238)	(0,0458)	(0,7687)	(0,0107)	(0,2585)	(0,26455)	(34,7784)	(60,2380)
Matérn $\kappa = 0,7$	3,8009	-0,0433	0,6447	-0,0116	0,0000	0,2764	33,7603	116,4730
	(0,2304)	(0,0471)	(0,7765)	(0,0111)	(0,5985)	(0,6012)	(38,9643)	(134,4268)
Matérn $\kappa = 1,0$	3,8027	-0,0443	0,6639	-0,0116	0,0000	0,2765	29,1110	116,4440
	(0,2294)	(0,0469)	(0,7767)	(0,0111)	(0,5427)	(0,5446)	(29,5690)	(118,2760)
Matérn $\kappa = 1,5$	3,8045	-0,0454	0,6866	-0,0115	0,0000	0,2767	24,3838	115,8230
	(0,2287)	(0,0468)	(0,7764)	(0,0111)	(0,4908)	(0,4919)	(21,8573)	(103,8222)

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

Pode-se dizer que existe dependência espacial na produtividade da soja, já que o gráfico da Figura 71 apresenta um ponto fora do envelope.

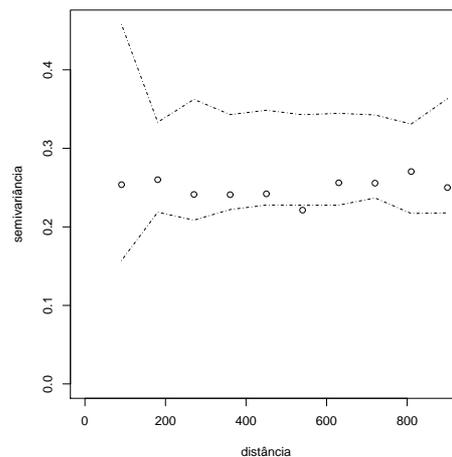


Figura 71: Envelope simulado para os dados de produtividade (*Prod*) em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P*.

Os critérios para seleção do melhor ajuste para a variável *Prod* [$t\ ha^{-1}$] em função das

covariáveis Ca , K e P por meio de um modelo espacial linear, considerando a distribuição normal, são apresentados na Tabela 27. Entre os modelos considerados, o escolhido para foi o gaussiano (Tabela 26) por apresentar menores valores de S_{EM} , EA e maior LMV .

Tabela 27: Critérios para seleção do melhor ajuste para a variável $Prod [t ha^{-1}]$ em função das covariáveis Ca , K e P , considerando a distribuição normal.

Modelo	EM^1	ER^2	S_{EM}^3	S_{ER}^4	EA^5	LMV
exponencial	0,002647	0,002572	0,5493414	1,0273839	36,98570	-68,57
gaussiano	0,005209	0,005213	0,545206	1,033830	36,61649	-67,76
Matérn k=0,7	0,003014	0,002933	0,5485426	1,0276147	36,95054	-68,45
Matérn k=1,0	0,003404	0,003322	0,5477863	1,0280543	36,90809	-68,33
Matérn k=1,5	0,003818	0,003742	0,5470625	1,0287546	36,85733	-68,2
Matérn k=2,0	0,004076	0,004007	0,5466413	1,0293316	36,81972	-68,11
Matérn k=2,5	0,004251	0,004190	0,5463666	1,0297963	36,79089	-68,06

¹erro médio

²erro médio reduzido

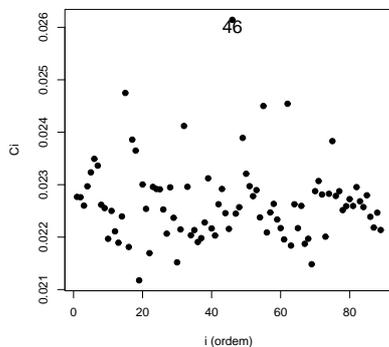
³desvio padrão do erro médio

⁴desvio padrão dos erros reduzidos

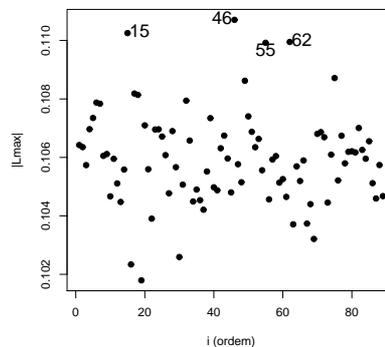
⁵erro absoluto

7.2.1.1 Influência Local - perturbação aditiva

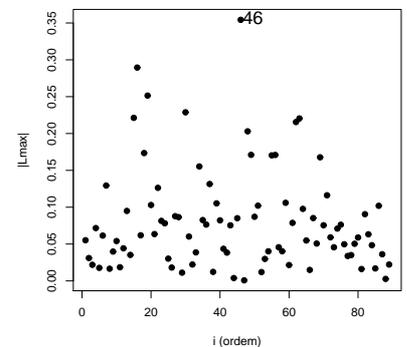
Os gráficos de influência para a perturbação aditiva considerando a distribuição normal são apresentados na Figura 72. Os gráficos das Figuras 72a, 72b e 72c apontaram o ponto #46 como ponto influente na variável resposta. A Figura 72b ainda apontou os pontos #15, #55 e #62 como influentes na variável resposta. O gráfico l_δ vs ordem da Figura 72d apontou a observação #62 como influente na matriz de covariâncias e o gráfico l_p vs ordem da Figura 72e identificou a observação #46 como influente no preditor linear.



(a) C_i vs ordem



(b) $|L_{max}|_1$ vs ordem



(c) $|L_{max}|_2$ vs ordem

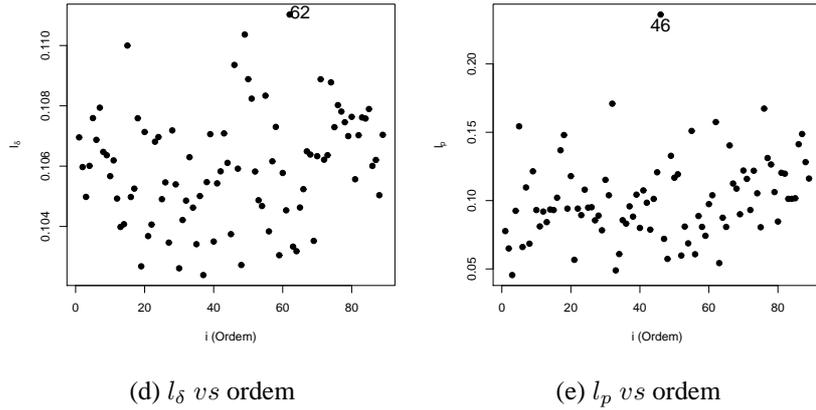
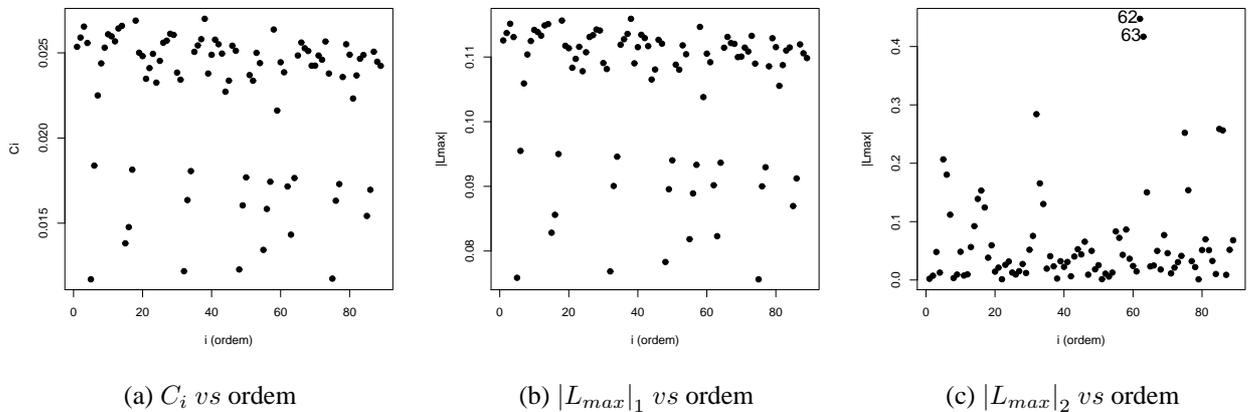


Figura 72: Gráficos de influência para o modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação aditiva.

7.2.1.2 Influência Local - perturbação de Zhu

Na Figura 73 são apresentados os gráficos de influência para a perturbação de Zhu considerando a distribuição normal. Para esta perturbação, os gráficos de influência não apontaram observações influentes na matriz de covariância e no preditor linear. Somente o gráfico da Figura 73c evidenciou os pontos #62 e #63 como possíveis pontos influentes no preditor linear.



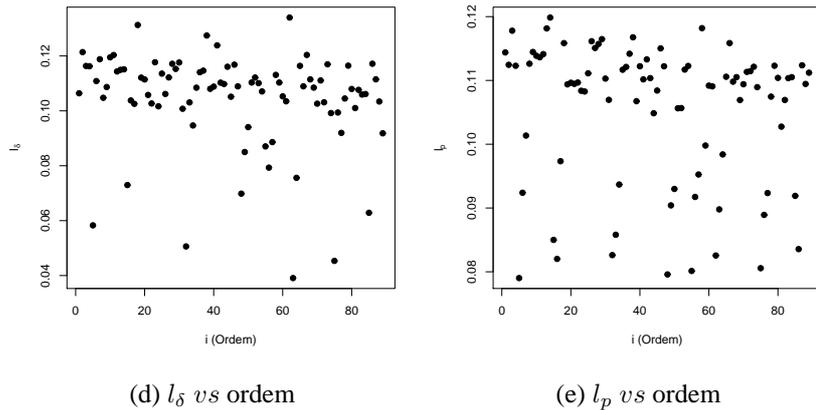


Figura 73: Gráficos de influência para o modelo gaussiano e distribuição normal considerando a perturbação de Zhu.

7.2.1.3 Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada é apresentado na Figura 74, que destacou o ponto #46 como influente no seu próprio valor ajustado. Este resultado mostra a relação entre a perturbação aditiva da resposta e da alavanca generalizada comentado em Osorio *et al.* (2006).

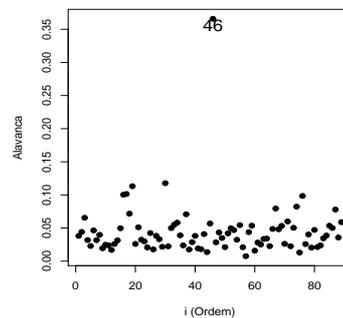


Figura 74: Gráfico da alavanca generalizada para o modelo gaussiano com distribuição normal.

7.2.1.4 Mapas temáticos

Realizou-se a análise do conjunto de dados sem a observação #46 considerada influente, e o modelo escolhido continuou sendo o gaussiano, variando a estimativa dos parâmetros mas mantendo o alcance de 108 *m*. Um resumo dos parâmetros estimados no ajuste dos modelos espaciais para a variável *Prod* da soja em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P* em um modelo espacial linear, considerando a distribuição normal, é apresentado na Tabela 28.

Tabela 28: Parâmetros estimados no ajuste dos modelos espaciais para a variável $Prod$ em função das covariáveis Ca , K e P , e a distribuição normal.

	Modelo	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
Com todos os pontos	gaussiano	3,8085 (0,2238)	-0,0502 (0,0458)	0,7948 (0,7687)	-0,0115 (0,0107)	0,0000 (0,2585)	0,2784 (0,26455)	62,3686 (34,7784)	108,0256 (60,2380)
Sem o ponto #46	gaussiano	3,7678 (0,2523)	-0,0442 (0,0492)	0,9009 (0,8235)	-0,0123 (0,0110)	0,0000 (0,2577)	0,2814 (0,2639)	62,6766 (34,8141)	108,5591 (60,2998)
$VR(\hat{\theta}^*)$		-1,07	11,54	13,35	-6,96	0,00	1,08	0,49	0,49

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$VR(\hat{\theta}^*) = \left| \frac{\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i}{\hat{\theta}_i} \right| \times 100, \text{ para } i = 1, \dots, p + q.$$

A Figura 75 apresenta os mapas temáticos com 4 classes de mesma amplitude da variável $Prod$ da soja considerando Ca , K e P como covariáveis, e que os dados tem distribuição normal. No mapa da Figura 75a foram considerados todos os pontos, e o mapa da Figura 75b é referente a análise sem a observação #46 considerada influente. Os mapas mostraram-se bem semelhantes. No entanto, sugere-se refazer a análise considerando diferentes distribuições de probabilidade.

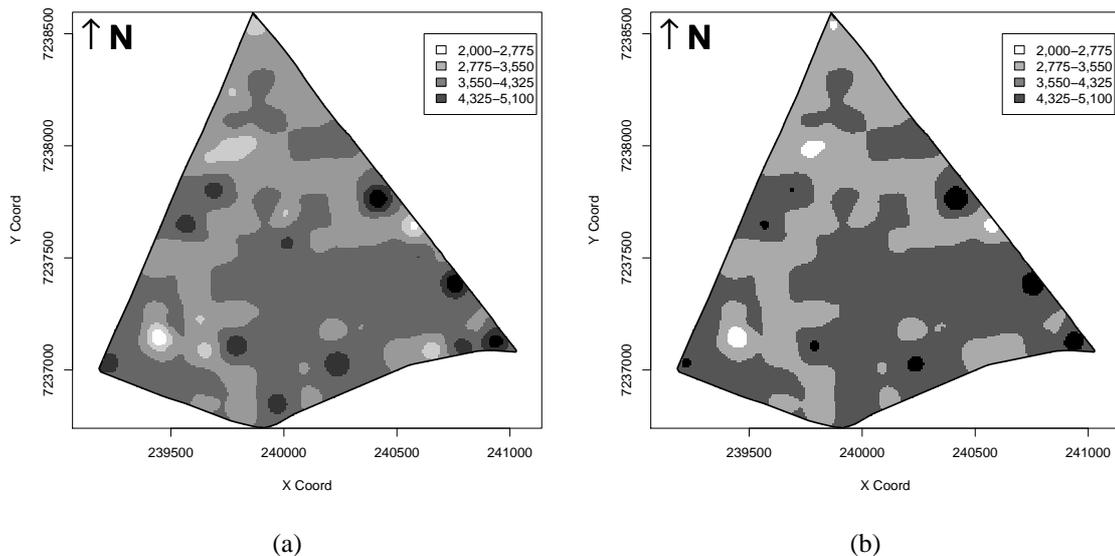


Figura 75: Mapa temático da $Prod$ para a distribuição normal considerando quatro clases de mesma amplitude.

7.2.2 Distribuição t -Student com 5 graus de liberdade

A Tabela 29 apresenta os parâmetros estimados no ajuste dos modelos exponencial, gaussiano e família Matérn para $\kappa = 0,7$, $\kappa = 1,0$ e $\kappa = 1,5$ considerando a distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade. Nota-se que os valores dos alcances estimados foram bem maiores do que os apresentados pela distribuição normal variando de 484 a 973 m , apesar dos valores do EPR indicarem fraca dependência espacial.

Tabela 29: Parâmetros estimados por *MV* no ajuste dos modelos espaciais para a variável *Prod* em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P*, considerando a distribuição *t*-Student com $\nu = 5$ graus de liberdade.

Modelo	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	EPR^1
exponencial	3,7823 (0,2387)	-0,0361 (0,0476)	0,4913 (0,7777)	-0,0110 (0,0112)	0,2673 (0,0561)	0,0113 (0,0411)	303,2588 (393,5037)	909,7764 (1180,511)	0,96
gaussiano	3,7808 (0,2346)	-0,0372 (0,0475)	0,5290 (0,7781)	-0,0113 (0,0112)	0,2709 (0,0497)	0,0077 (0,0304)	279,9737 (493,7689)	484,9287 (855,2328)	0,97
Matérn $\kappa = 0,7$	3,7838 (0,2336)	-0,0367 (0,0304)	0,5067 (0,4730)	-0,0112 (0,0069)	0,2668 (0,0205)	0,0122 (0,0799)	184,9927 (405,0014)	638,2248 (1397,2550)	0,96
Matérn $\kappa = 1,0$	3,7819 (0,2161)	-0,0364 (0,0203)	0,4992 (0,3241)	-0,0111 (0,0047)	0,2703 (0,0062)	0,0088 (0,0953)	194,8970 (391,6678)	779,5880 (1566,6710)	0,97
Matérn $\kappa = 1,5$	3,7803 (0,2252)	-0,0359 (0,0094)	0,4889 (0,1588)	-0,0110 (0,0023)	0,2720 (0,0009)	0,0071 (0,1137)	205,0071 (312,9069)	973,7837 (1486,308)	0,97

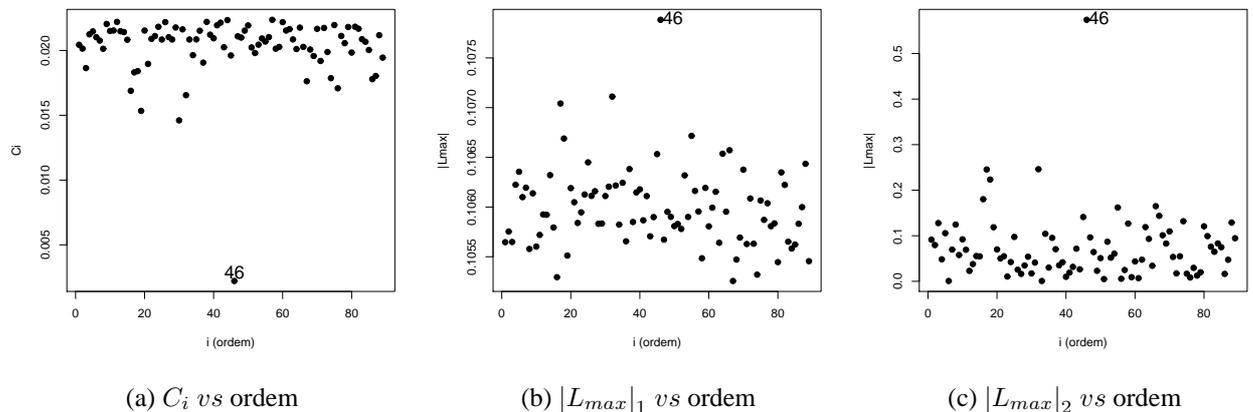
Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$^1EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$$

De acordo com os critérios para seleção do melhor ajuste para a variável *Prod* em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P*, considerando a distribuição *t*-Student com 5 graus de liberdade, o modelo escolhido foi o da família Matérn com $\kappa = 1,5$ e estimativas apresentadas na Tabela 29.

7.2.2.1 Influência Local - perturbação aditiva

Os gráficos de influência para a perturbação aditiva considerando a distribuição *t*-Student com 5 graus de liberdade são apresentados na Figura 76, sendo que todos os gráficos identificaram a observação #96 como influente, isto é, influente na variável resposta, na matriz de covariâncias e no preditor linear.



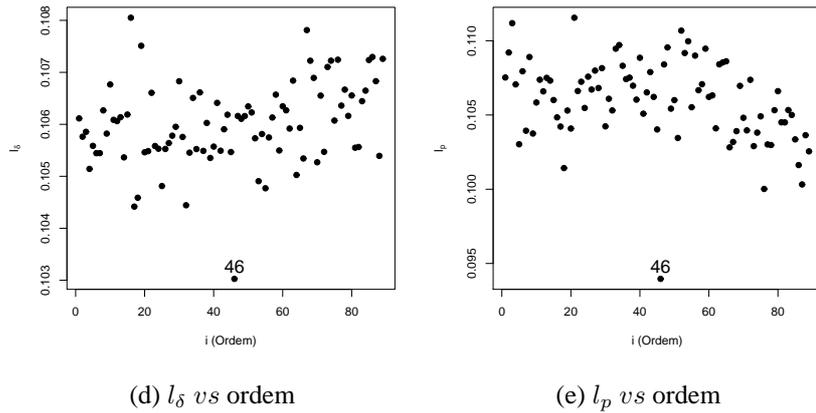
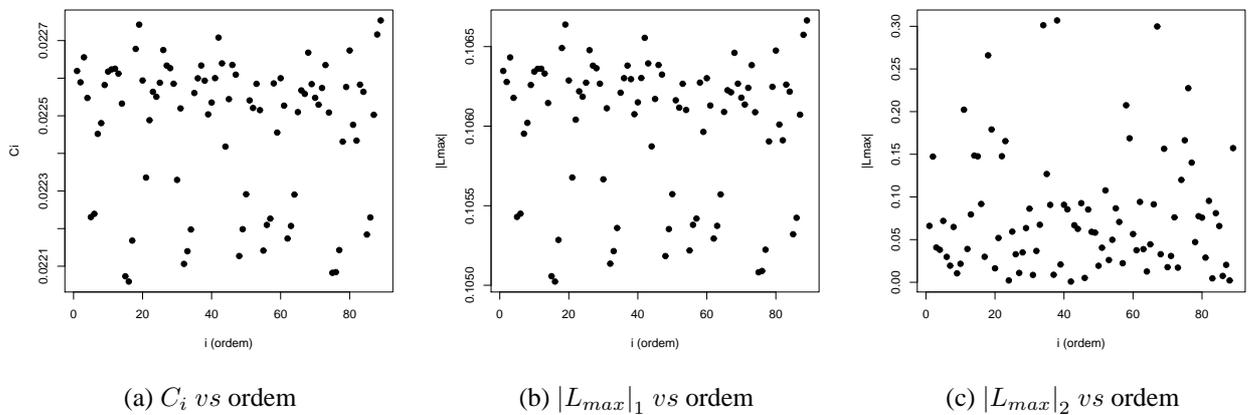


Figura 76: Gráficos de influência para o modelo gaussiano e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação aditiva.

7.2.2.2 Influência Local - perturbação de Zhu

Na Figura 73 são apresentados os gráficos de influência para a perturbação de Zhu considerando a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade. Segundo esta perturbação, não se detectou pontos influentes na variável resposta, nem na matriz de covariâncias e no preditor linear.



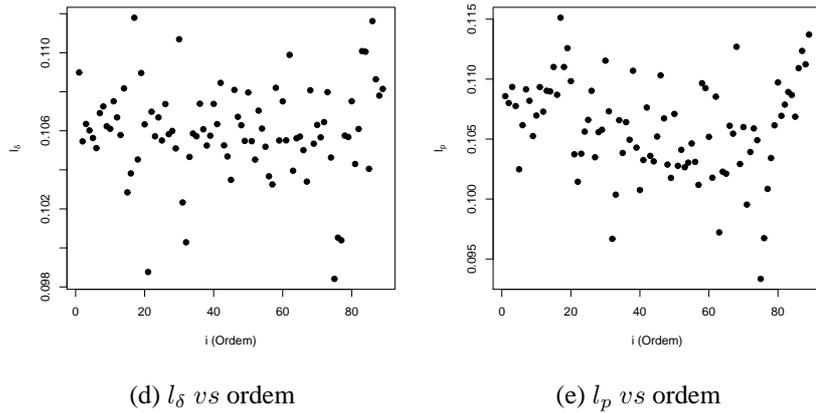


Figura 77: Gráficos de influência para os dados simulados com o modelo gaussiano e distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade considerando a perturbação de Zhu.

7.2.2.3 Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada é apresentado na Figura 78, que destacou o ponto #46 como influente no seu próprio valor ajustado.

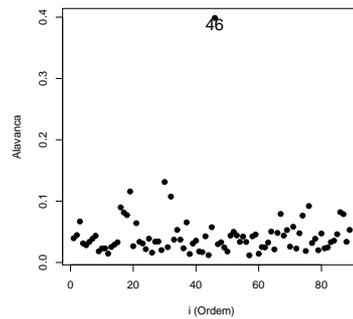


Figura 78: Gráfico da alavanca generalizada para o modelo gaussiano com distribuição t -Student com 5 graus de liberdade.

7.2.3 Mapas Temáticos

Retirou-se a observação #46 do conjunto de dados e então foi refeita toda a análise geoestatística, o que acabou alterando a escolha do modelo para a variável resposta. O nosso ajuste passou a ser para o modelo da família Matérn com parâmetro de forma $\kappa = 0,7$, fornecendo novas estimativas dos parâmetros. Um resumo das estimativas obtidas no ajuste dos modelos para a distribuição t -Student com 5 graus de liberdade, com todos os pontos e sem o ponto #46, é apresentado na Tabela 30. Observa-se que houve alteração de mais de 25% nas estimativas dos parâmetros que definem a estrutura de variabilidade espacial.

Tabela 30: Parâmetros estimados por MV no ajuste dos modelos espaciais para a variável *Prod* considerando as covariáveis *Ca*, *K* e *P*, considerando a distribuição *t*-Student com 5 graus de liberdade.

Modelo		$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
Com todos os pontos	Matérn $\kappa = 1, 5$	3,7803	-0,0359	0,4889	-0,0110	0,2720	0,0071	205,0071	973,7837
		(0,2252)	(0,0094)	(0,1588)	(0,0023)	(0,0009)	(0,1137)	(312,9069)	(1486,308)
Sem o ponto #96	Matérn $\kappa = 0, 7$	3,7409	-0,0299	0,5966	-0,0119	0,2723	0,0097	150,0052	517,5179
		(0,2334)	(0,0366)	(0,5511)	(0,0078)	(0,0294)	(0,0734)	(410,7586)	(1417,117)
VR($\hat{\theta}^*$)		-1,04	16,71	22,03	-8,18	0,11	36,62	-26,83	-46,85

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$VR(\hat{\theta}^*) = \left| \frac{\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i}{\hat{\theta}_i} \right| \times 100, \text{ para } i = 1, \dots, p + q.$$

Os mapas temáticos para a variável *Prod* em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P* e um modelo espacial linear, considerando a distribuição *t*-Student com 5 graus de liberdade, são apresentados na Figura 79. Os mapas foram construídos com 4 classes de mesma amplitude, seguindo os mesmos intervalos utilizados para a distribuição normal. Observa-se que a região sudoeste é a que mais apresentou mudanças com a retirada do ponto, sendo que diminuiu o valor da produtividade nesta região, deixando de pertencer a classe de (3,550-4,325] e passando a pertencer a classe (2,775-3,550].

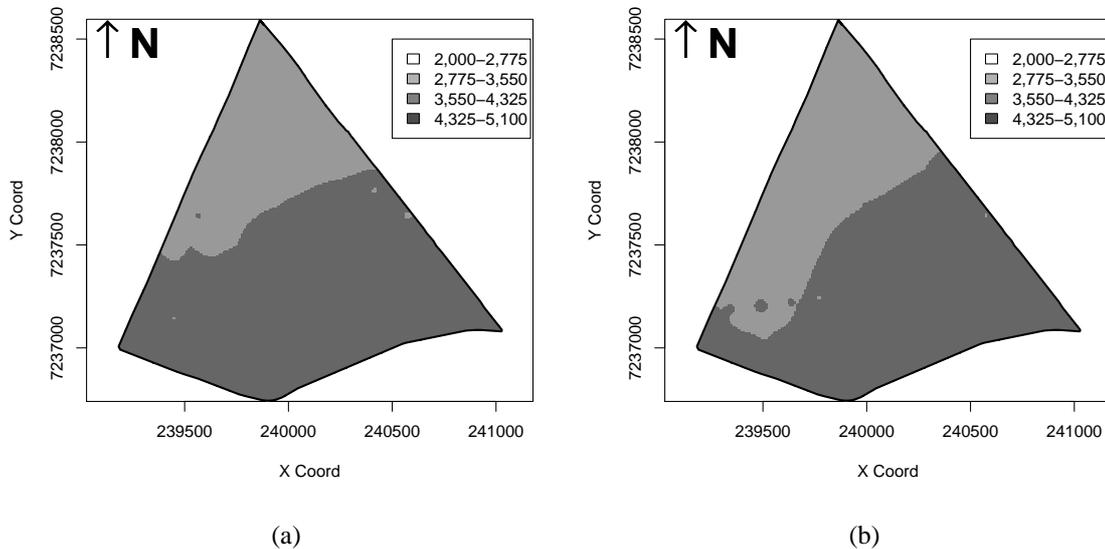


Figura 79: Mapa temático da *Prod* para a distribuição *t*-Student com 5 graus de liberdade considerando 4 clases de mesma amplitude.

As medidas de exatidão para os mapas temáticos da variável *Prod* em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P* são apresentados na Tabela 31, onde o índice de exatidão global indicou alta exatidão e os índices Kappa e Tau indicaram média exatidão global, de acordo com Krippendorff (1980), mostrando variação nos mapas construídos com e sem o ponto influente.

Tabela 31: Medidas de Exatidão para a variável *Prod* em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P* e a distribuição *t*-Student com $v = 5$ graus de liberdade.

Medidas	Resultados	Intervalos de Confiança	Valores
Exatidão Global - EG	0,870	IC[EG,95%]	[0,867;0,872]
Kappa - K	0,739	IC[K,95%]	[0,729;0,750]
Tau - T	0,739	IC[T,95%]	[0,739;0,746]

7.2.4 Exponencial Potência com $\lambda = 0,8$

A Tabela 32 apresenta os parâmetros estimados obtidos no ajuste dos modelos exponencial, gaussiano e família Matérn para $\kappa = 0,7$, $\kappa = 1,0$ e $\kappa = 1,5$ considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$.

Tabela 32: Parâmetros estimados por *MV* no ajuste dos modelos espaciais para a variável *Prod* e as covariáveis *Ca*, *K* e *P*, considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$.

Modelo	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$	EPR^1
exponencial	3,7830	-0,0361	0,4890	-0,0110	0,0659	0,0029	299,9962	899,9886	0,96
	(0,0425)	(0,0087)	(0,1430)	(0,0021)	(0,0193)	(0,0179)	(65,3434)	(196,0302)	
gaussiano	3,7843	-0,0378	0,5407	-0,0116	0,0660	0,0027	200,3542	347,0237	0,96
	(0,0423)	(0,0086)	(0,1428)	(0,0021)	(0,0224)	(0,0212)	(30,2873)	(52,4591)	
Matérn $\kappa = 0,7$	3,7819	-0,0358	0,4841	-0,0110	0,0664	0,0023	300,0037	1035,0128	0,97
	(0,0422)	(0,0086)	(0,1428)	(0,0020)	(0,0364)	(0,0357)	(0,7573)	(2,6127)	
Matérn $\kappa = 1,0$	3,7812	-0,0355	0,4751	-0,0109	0,0668	0,0021	300,0138	1200,0552	0,97
	(0,0423)	(0,0086)	(0,1430)	(0,0021)	(0,0267)	(0,0256)	(0,3542)	(1,4168)	
Matérn $\kappa = 1,5$	3,7809	-0,0351	0,4631	-0,0107	0,0669	0,0020	280,0302	1330,1434	0,97
	(0,0423)	(0,0086)	(0,1430)	(0,0021)	(0,0212)	(0,0198)	(0,0845)	(0,4014)	

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$^1 EPR = \hat{\varphi}_1 / (\hat{\varphi}_1 + \hat{\varphi}_2)$$

De acordo com os critérios de validação cruzada e valor de *LMV*, o modelo escolhido foi o modelo da família Matérn com $\kappa = 1,5$, o qual apresentou raio de dependência espacial estimado de 1330,1434 *m*.

7.2.4.1 Influência Local - perturbação aditiva

A Figura 80 apresenta os gráficos de influência local para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando a perturbação aditiva. Todos os gráficos evidenciaram a observação #46, sendo portanto, uma observação influente na variável resposta, na matriz de covariâncias e no preditor linear.

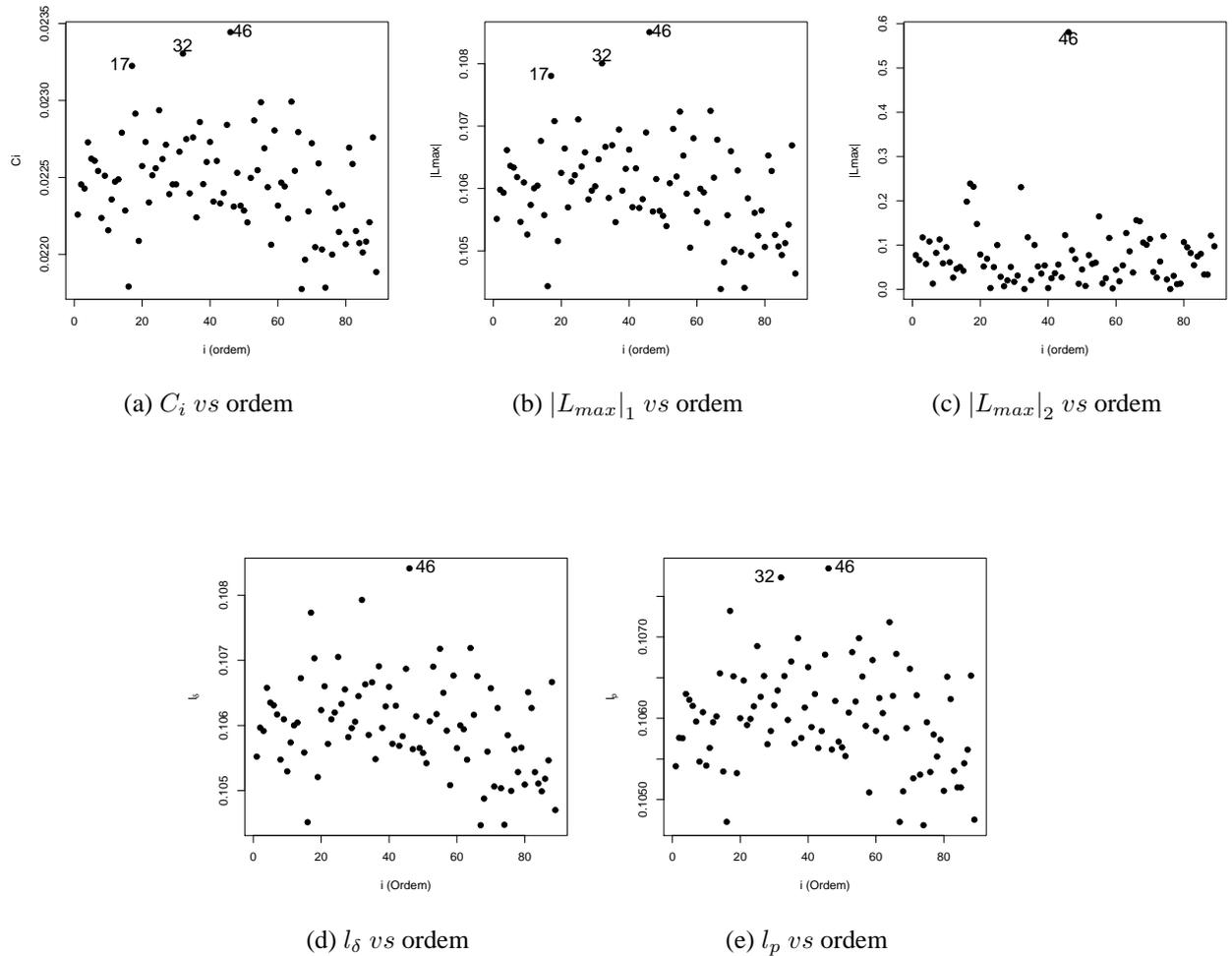


Figura 80: Gráficos de influência para os dados simulados com o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$, considerando a perturbação aditiva.

7.2.4.2 Influência Local - perturbação de Zhu

Na Figura 81 são apresentados os gráficos de influência local para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$ considerando a perturbação de Zhu. Os gráficos da Figura 81a, e 81d identificaram as observações #38 e #67 como influente na resposta e na matriz de covariâncias e o gráfico l_p vs ordem da Figura 81e identificou a observação #58 como influente no preditor linear.

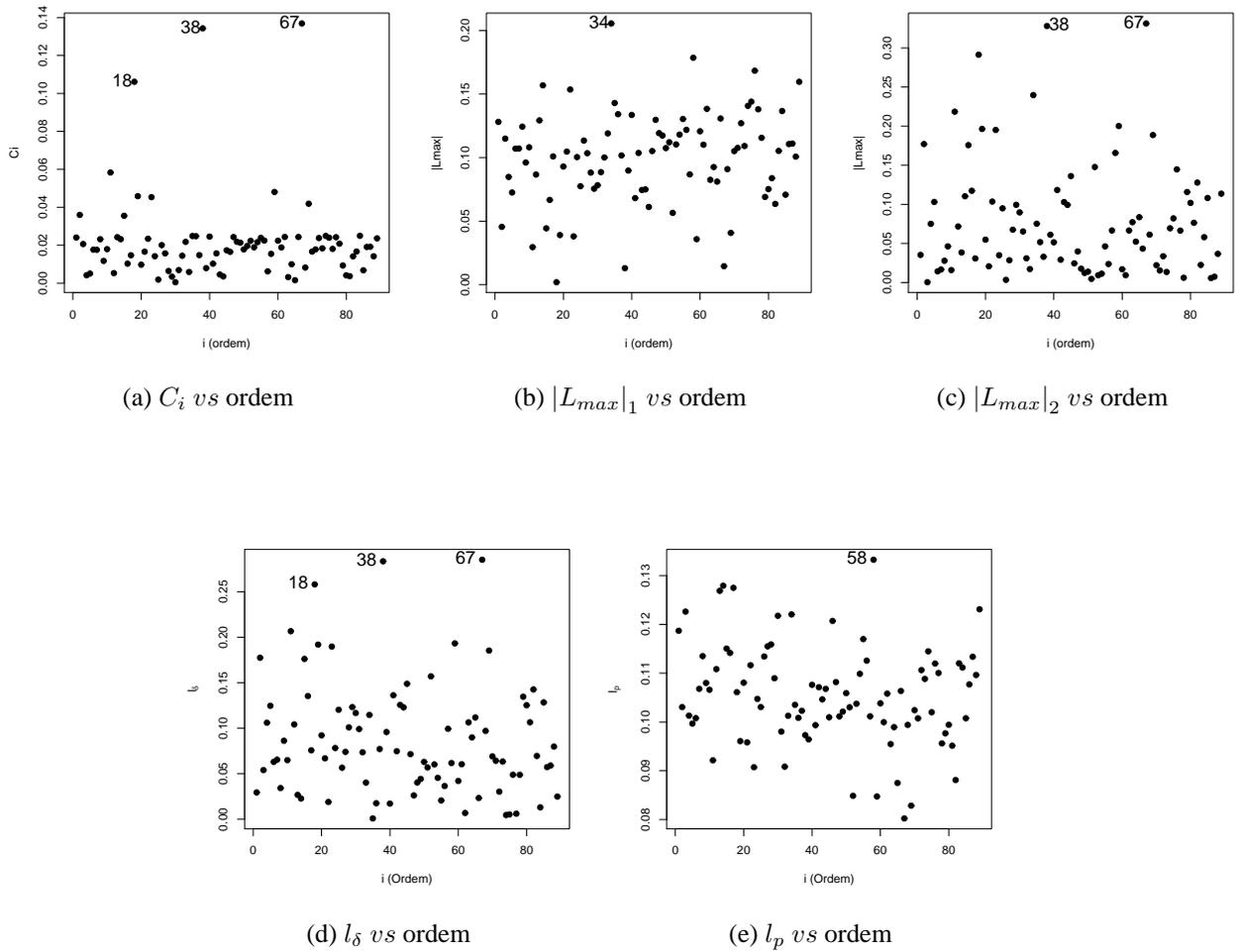


Figura 81: Gráficos de influência para os dados simulados com o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$, considerando a perturbação de zhu.

7.2.4.3 Alavanca Generalizada

O gráfico da alavanca generalizada apresentado na Figura 82, identificou a observação #46 como possível influente no seu próprio valor ajustado. Esta mesma observação foi detectada quando considerada a perturbação aditiva.

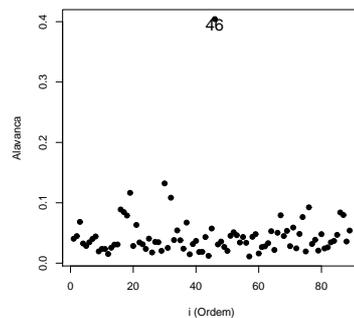


Figura 82: Gráfico da alavanca generalizada para o modelo da família Matérn com $\kappa = 1, 5$ e distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0, 8$.

7.2.4.4 Mapas Temáticos

A retirada da observação #46 do conjunto de dados para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$ não alterou a escolha do modelo para a variável resposta (*Prod*), nem o raio de dependência espacial. No entanto, os parâmetros estimados $\hat{\beta}_2$, $\hat{\beta}_3$ e $\hat{\varphi}_2$ apresentaram VR igual ou superior a 20%, de acordo com a Tabela 33.

Tabela 33: Parâmetros escolhidos no ajuste dos modelos espaciais para a variável *Prod* considerando as covariáveis *Ca*, *K* e *P*, considerando a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$.

	Modelo	$\hat{\beta}_1$	$\hat{\beta}_2$	$\hat{\beta}_3$	$\hat{\beta}_4$	$\hat{\varphi}_1$	$\hat{\varphi}_2$	$\hat{\varphi}_3$	$\hat{a} = g(\hat{\varphi}_3)$
Com todos os pontos	Matérn $\kappa = 1,5$	3,7809 (0,0423)	-0,0351 (0,0086)	0,4633 (0,1430)	-0,0107 (0,0021)	0,0669 (0,0212)	0,0020 (0,0198)	280,0302 (0,0845)	1330,1434 (0,4014)
Sem o ponto #46	Matérn $\kappa = 1,5$	3,7360 (0,1339)	-0,0275 (0,0258)	0,5574 (0,4246)	-0,0115 (0,0058)	0,0675 (0,0796)	0,0024 (0,0206)	280,0008 (0,0743)	1330,0038 (0,3529)
VR($\hat{\theta}^*$)		1,19	21,65	20,31	7,48	0,90	20,00	-0,01	-0,01

Entre parênteses encontram-se os desvios padrões.

$$VR(\hat{\theta}^*) = \left| \frac{\hat{\theta}_i^* - \hat{\theta}_i}{\hat{\theta}_i} \right| \times 100, \text{ para } i = 1, \dots, p + q.$$

Os mapas foram construídos para a variável *Prod* em função das covariáveis *Ca*, *K* e *P* e um modelo espacial linear, considerando a distribuição exponencial potência com $\lambda = 0,8$ (Figura 83) foram construídos com 4 classes de mesma amplitude, seguindo os mesmos intervalos utilizados para a distribuição normal e para a distribuição *t*-Student com 5 graus de liberdade. Observa-se que a região sudoeste apresentou uma pequena queda nos valores da produtividade.

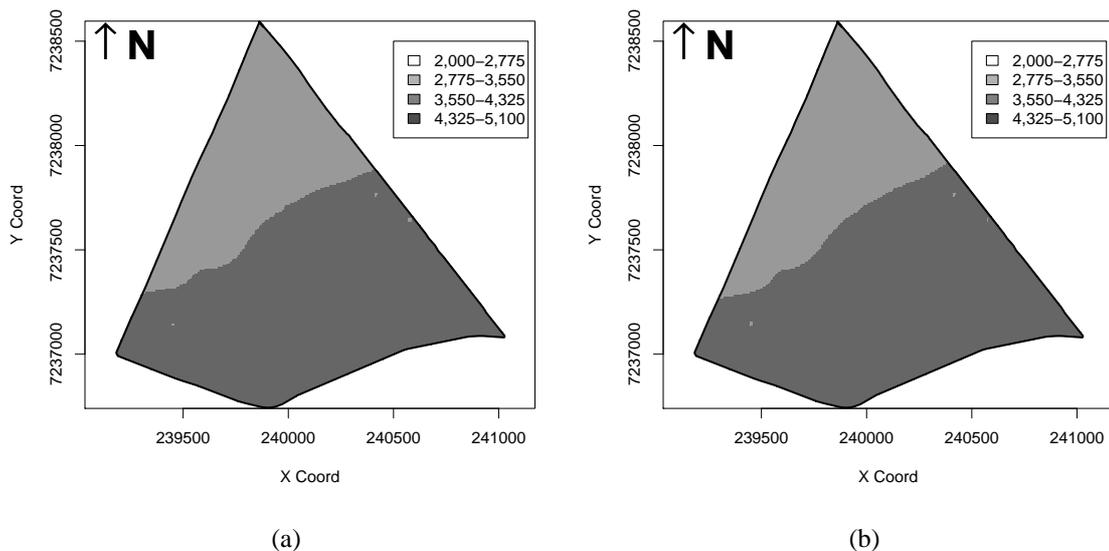


Figura 83: Mapa temático da *Prod* para a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$, considerando 4 classes de mesma amplitude.

De acordo com as medidas de exatidão para os mapas temáticos da variável *Prod* em

função das covariáveis Ca , K e P apresentadas na Tabela 34, os mapas são muito semelhantes, isto é, apresentam alta exatidão.

Tabela 34: Medidas de Exatidão para a variável $Prod$ considerando as covariáveis Ca , K e P e a distribuição exponencial potência com parâmetro de forma $\lambda = 0,8$.

Medidas	Resultados	Intervalos de Confiança	Valores
Exatidão Global - EG	0,975	IC[EG,95%]	[0,974;0,976]
Kappa - K	0,950	IC[K,95%]	[0,947;0,953]
Tau - T	0,950	IC[Tau,95%]	[0,948;0,953]

7.2.5 Considerações Gerais

Os modelos espaciais lineares possibilitaram verificar a variabilidade espacial da produtividade da soja na área em estudo em função de suas covariáveis. Identificou-se as regiões onde se tem as taxas mais baixas de produtividades, em função dos atributos químicos do solo. Desta forma, obtem-se a informação que deve ser feita uma análise química mais cautelosa nestas regiões. Observou-se ainda, que a retirada da observação #46 provocou a mudança da escolha do modelo que define a estrutura de dependência espacial quando considera a distribuição t -Student com $\nu = 5$ graus de liberdade. No entanto, a retirada desta observação não provocou grandes mudanças nos mapas temáticos para as distribuições t -Student e exponencial potência, como pode ser observado nas medidas de exatidão apresentadas nas Tabelas 31 e 34. Ao observar o conjunto de dados nota-se que a observação #46 possui valores atípicos para as covariáveis Ca e K , sendo assim, é interessante um estudo de influência nas covariáveis neste caso.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Nesta dissertação estudou-se distribuições de probabilidade para modelos espaciais lineares abordando a classe de distribuições da família de contornos elípticos. Essa classe torna possível a análise de dados de experimentos relacionados a fenômenos em que precisa-se modelar a dependência espacial estendendo a modelagem estatística a outras distribuições da família de contornos elípticos além da distribuição normal, o que é muito importante dado o caráter dinâmico da modelagem de fenômenos cada vez mais complexos.

Do ponto de vista teórico, as principais contribuições na geoestatística são a proposta de um novo modelo estatístico com novas distribuições de probabilidade, a obtenção de um procedimento para estimar os parâmetros do modelo por meio do método de máxima verossimilhança, e o desenvolvimento do método de diagnósticos de influência local para detectar observações influentes e avaliar a sensibilidade das estimativas sob esta nova classe de modelos. As curvaturas normais da influência local foram derivadas por meio da medida de afastamento pela verossimilhança utilizando dois esquemas de perturbação e analisando a influência na variável resposta, na matriz de covariâncias, no preditor linear e a alavanca generalizada, sendo realizados também estudos de simulação. Do ponto de vista prático, as principais contribuições são a aplicabilidade dos modelos espaciais lineares com distribuição da família de contornos elípticos a conjuntos de dados reais, a obtenção de evidências empíricas que revelam a capacidade do método de influência local para detectar observações influentes, e a visualização destas influências por meio da construção de mapas temáticos.

A estimação dos parâmetros para os modelos espaciais lineares com distribuição normal está implementada no *software* livre R por meio do pacote `geoR` (Ribeiro Jr e Diggle, 2001), o qual estima os parâmetros por meio do algoritmo não linear L-BFGS-B. No entanto, para as demais distribuições pertencentes a família elíptica não se encontram pacotes disponíveis, tornando necessário a implementação do processo iterativo. Além disso, implementou-se a análise de diagnóstico de influência local para a classe de distribuições da família de contornos elípticos.

Perspectivas para trabalhos futuros são, inicialmente a construção de um pacote para o *software* R a partir dos resultados teóricos obtidos neste trabalho. Pretende-se ainda dar continuidade aos estudos de influência local utilizando outras medidas de influência, além de estudo de inferência em modelos espaciais lineares.

Apêndice A. Matriz de Informação Observada

No modelo espacial linear com distribuição da família de contornos elípticos, o logaritmo da função de verossimilhança é dado em (3.7).

Usando resultados de diferenciação é possível obter os seguintes resultados:

$$\begin{aligned}\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\beta}} &= -2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \\ \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\varphi}} &= -(\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta})^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \boldsymbol{\varphi}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{X}\boldsymbol{\beta}).\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta}} &= V_{g(u)} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\beta}} \\ &= -2V_{g(u)} \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}\end{aligned}$$

$$\frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\varphi}},$$

tem como elementos

$$\begin{aligned}\frac{\partial \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_j} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial (\log |\boldsymbol{\Sigma}|)}{\partial \varphi_j} + V_{g(u)} \frac{\partial u}{\partial \varphi_j} \\ &= -\frac{1}{2} \text{tr} \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right) - V_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \quad j = 1, \dots, q.\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}} &= V_{g(u)} \frac{\partial^2 u}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top} + \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\beta}} V'_{g(u)} \frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\beta}^\top} \\ &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\beta}^\top} = 2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V_{g(u)} \boldsymbol{\Sigma} + 2V'_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}^\top \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{X};\end{aligned}$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\varphi}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\varphi}^\top}$$

com elementos

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \varphi_j} &= -2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \frac{\partial u}{\partial \varphi_j} V'_{g(u)} + 2V_{g(u)} \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\epsilon} \\ &= 2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V'_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} + V_{g(u)} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \quad \text{para } j = 1, \dots, q;\end{aligned}$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\varphi}\boldsymbol{\beta}} = \ddot{\mathbf{L}}_{\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\varphi}}^\top;$$

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi \partial \varphi^\top},$$

com elementos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta})}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} &= -\frac{1}{2} \text{tr} \left[- \left(\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right) + \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j^\top} \right] - V'_{g(u)} \frac{\partial u}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \\ &\quad + V_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} - V_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} + V_{g(u)} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\ &\quad \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \\ &= \frac{1}{2} \text{tr} \left[\boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} - \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} \right) \right] + \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left[V'_{g(u)} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \boldsymbol{\epsilon}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \right. \\ &\quad \left. + V_{g(u)} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} - \frac{\partial^2 \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i \partial \varphi_j} + \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_i} \right) \right] \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}, \quad \text{para } j = 1, \dots, q. \end{aligned}$$

Apêndice B. Derivadas para algumas funções de covariância

A matriz escala é da forma $\Sigma = \varphi_1 \mathbf{I} + \varphi_2 \mathbf{R}(\varphi_3)$, em que $\mathbf{R}(\varphi_3)$ depende do modelo geoestatístico. A seguir são apresentadas as primeiras e segundas derivadas de Σ com respeito a φ_1 , φ_2 e φ_3 . Estes resultados podem ser vistos em Uribe-Opazo *et al.* (2011).

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_1} = \mathbf{I}, \quad \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \varphi_1^2} = \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_2} = \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_3} = \mathbf{0}$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_2} = \mathbf{R}, \quad \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \varphi_2^2} = \mathbf{0} \text{ e } \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \varphi_2 \partial \varphi_3} = \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \varphi_3} = \left[\left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial \varphi_3} \right) \right],$$

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_3} = \varphi_2 \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \varphi_3}, \text{ e } \frac{\partial^2 \Sigma}{\partial \varphi_3^2} = \varphi_2 \frac{\partial^2 \mathbf{R}}{\partial \varphi_3^2} = \varphi_2 \left[\left(\frac{\partial^2 r_{ij}}{\partial \varphi_3^2} \right) \right], \text{ para } i, j = 1, \dots, n.$$

A primeira e a segunda derivadas de r_{ij} com respeito a φ_3 , para as funções de covariância do modelo Exponencial, Gaussiano e Família Matérn são apresentadas a seguir.

Modelo Exponencial

$$\frac{\partial r_{ij}}{\partial \varphi_3} = \frac{r_{ij} \delta_{ij}}{\varphi_3^2} \text{ e } \frac{\partial^2 r_{ij}}{\partial \varphi_3^2} = \left(\frac{r_{ij} \delta_{ij}}{\varphi_3^3} \right) \left\{ \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right) - 2 \right\},$$

para $i, j = 1, \dots, n$.

Modelo Gaussiano

$$\frac{\partial r_{ij}}{\partial \varphi_3} = \frac{2r_{ij} \delta_{ij}^2}{\varphi_3^3} \text{ e } \frac{\partial^2 r_{ij}}{\partial \varphi_3^2} = \left(\frac{2r_{ij} \delta_{ij}^2}{\varphi_3^4} \right) \left\{ 2 \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right)^2 - 3 \right\},$$

para $i, j = 1, \dots, n$.

Modelo Família Matérn

$$\frac{\partial r_{ij}}{\partial \varphi_3} = - \left(\frac{1}{\varphi_3} \right) \left[\kappa r_{ij} + \frac{1}{2^{\kappa-1} \Gamma(\kappa)} \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right)^{\kappa+1} K'_\kappa \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right) \right],$$

e

$$\frac{\partial^2 r_{ij}}{\partial \varphi_3^2} = \left(\frac{\kappa(\kappa+1)r_{ij}}{\varphi_3^2} \right) + \left(\frac{1}{\varphi_3^2 2^{\kappa-1} \Gamma(\kappa)} \right) ()^{\kappa+1} \\ \times \left[2(\kappa+1)K'_\kappa \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right) + \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right) K''_\kappa \left(\frac{\delta_{ij}}{\varphi_3} \right) \right],$$

para $i, j = 1, \dots, n$; em que

$$K'_\kappa = \frac{\partial K_\kappa(y)}{\partial y} = -\frac{1}{2} [K_{\kappa-1}(y) + K_{\kappa+1}(y)] \mathbf{e}$$

$$K''_\kappa = \frac{\partial^2 K_\kappa(y)}{\partial y^2} = \frac{1}{4} [K_{\kappa-2}(y) + 2K_\kappa(y) + K_{\kappa+2}(y)].$$

Apêndice C. Esquemas de Perturbação

Para cada esquema de perturbação considerado, avaliando em $\theta = \hat{\theta}$ e $\omega = \omega_0$, foi obtido a matriz $\Delta = (\Delta_{\beta}^{\top}, \Delta_{\varphi}^{\top})^{\top}$.

Seja $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n)^{\top}$ vetor de perturbações, pertencente a um espaço de perturbações $\Omega(\omega \in \Omega)$, e $u_{\omega} = (\mathbf{Z}_{\omega} - \mathbf{X}\beta)^{\top} \Sigma^{-1} (\mathbf{Z}_{\omega} - \mathbf{X}\beta)$ para esquemas de perturbação na variável resposta. Então, para qualquer esquema da resposta, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{u_{\omega}}{\partial \omega^{\top}} &= \frac{\partial u_{\omega}}{\partial (\mathbf{Z}_{\omega} - \mathbf{X}\beta)^{\top}} \frac{\partial (\mathbf{Z}_{\omega} - \mathbf{X}\beta)}{\partial \omega^{\top}} \\ &= 2\epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} \frac{\epsilon_{\omega}}{\partial \omega^{\top}} \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}(\theta|\omega)}{\partial \omega^{\top}} &= V_{g(u_{\omega})} \frac{u_{\omega}}{\partial \omega^{\top}} \\ &= 2V_{g(u_{\omega})} \epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} \frac{\epsilon_{\omega}}{\partial \omega^{\top}} \end{aligned}$$

Perturbação da Resposta - Esquema 1

Para a perturbação aditiva da resposta, isto é, para $\mathbf{Z}_{\omega} = \mathbf{Z} + \omega$ a matriz Δ é dada por

$$\begin{aligned} \Delta_{\beta} &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\theta|\omega)}{\partial \beta \partial \omega^{\top}} = 2 \left(\frac{\partial V_{g(u_{\omega})}}{\partial \beta} \epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} + V_{g(u_{\omega})} \frac{\partial \epsilon_{\omega}^{\top}}{\partial \beta} \Sigma^{-1} \right) \\ &= 2 \left[\left(\frac{\partial u_{\omega}}{\partial \beta^{\top}} \right)^{\top} \frac{\partial V_{g(u_{\omega})}}{\partial u_{\omega}} \epsilon_{\omega}^{\top} \Sigma^{-1} + V_{g(u_{\omega})} \frac{\partial \epsilon_{\omega}^{\top}}{\partial \beta} \Sigma^{-1} \right] \\ &= -2\mathbf{X}^{\top} \Sigma^{-1} \left(V_{g(u_{\omega})} \Sigma + 2V'_{g(u_{\omega})} \epsilon_{\omega} \epsilon_{\omega}^{\top} \right) \Sigma^{-1} \end{aligned}$$

$$\Delta_{\varphi} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\theta|\omega)}{\partial \varphi \partial \omega^{\top}}$$

tem como elementos

$$\begin{aligned}
\Delta_{\varphi_j} &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\omega})}{\partial \varphi_j \partial \boldsymbol{\omega}^\top} = \frac{\partial V_{g(u_\omega)}}{\partial \varphi_j} 2\boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - 2V_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\
&= \left(\frac{\partial u_\omega}{\partial \varphi_j} \right)^\top \frac{\partial V_{g(u_\omega)}}{\partial u_\omega} 2\boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} - 2V_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \\
&= -2\boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V'_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} + V_{g(u_\omega)} \mathbf{I}_n \right), \quad j = 1, \dots, q.
\end{aligned}$$

Perturbação da Resposta - Esquema 2

Para a perturbação de Zhu, para $\mathbf{Z}_\omega = \mathbf{Z} + \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \boldsymbol{\omega}$, a matriz $\boldsymbol{\Delta}$ é dada por

$$\begin{aligned}
\Delta_{\boldsymbol{\beta}} &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\omega})}{\partial \boldsymbol{\beta} \partial \boldsymbol{\omega}^\top} = 2 \left[\left(\frac{\partial u_\omega}{\partial \boldsymbol{\beta}^\top} \right)^\top \frac{\partial V_{g(u_\omega)}}{\partial u_\omega} \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} + V_{g(u_\omega)} (-\mathbf{X}^\top) \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \right] \\
&= -2\mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V_{g(u_\omega)} \mathbf{I}_n + 2V'_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}
\end{aligned}$$

$$\Delta_{\boldsymbol{\varphi}} = \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\omega})}{\partial \boldsymbol{\varphi} \partial \boldsymbol{\omega}^\top}$$

tem como elementos

$$\begin{aligned}
\Delta_{\varphi_j} &= \frac{\partial^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|\boldsymbol{\omega})}{\partial \varphi_j \partial \boldsymbol{\omega}^\top} = \left(\frac{\partial u_\omega}{\partial \varphi_j^\top} \right)^\top \frac{\partial V_{g(u_\omega)}}{\partial u_\omega} 2\boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} - 2V_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \\
&\quad - 2V_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \\
&= -2\boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(V'_{g(u_\omega)} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\epsilon}_\omega \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \right. \\
&\quad \left. + V_{g(u_\omega)} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} + V_{g(u_\omega)} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}}{\partial \varphi_j} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}, \quad j = 1, \dots, q.
\end{aligned}$$

Para a distribuição normal em que $V_{g(u_\omega)} = -\frac{1}{2}$ e $V'_{g(u_\omega)} = 0$:

$$\Delta_{\boldsymbol{\beta}} = \mathbf{X}^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}$$

e o elemento j de Δ_{φ_j} é da forma

$$\Delta_{\varphi_j} = \boldsymbol{\epsilon}_\omega^\top \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \left(\frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}}{\partial \varphi_j} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} + \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2} \frac{\partial \boldsymbol{\Sigma}^{1/2}}{\partial \varphi_j} \right) \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}, \quad j = 1, \dots, q.$$

Alavanca Generalizada

A alavanca generalizada apresentada por Wei *et al.* (1998) é dada em (4.7). Para obter a expressão apresentada em (4.8), seja

$$\ddot{\mathbf{L}}_{\theta\theta}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \\ \mathbf{L}_3 & \mathbf{L}_4 \end{pmatrix}$$

Então,

$$\begin{aligned} GL(\boldsymbol{\theta}) &= -(\mathbf{X}, \mathbf{0}) \begin{pmatrix} \mathbf{L}_1 & \mathbf{L}_2 \\ \mathbf{L}_3 & \mathbf{L}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{L}_{\beta\mathbf{z}} \\ \mathbf{L}_{\varphi\mathbf{z}} \end{pmatrix} \\ &= -(\mathbf{X}\mathbf{L}_1\mathbf{L}_{\beta\mathbf{z}} + \mathbf{X}\mathbf{L}_2\mathbf{L}_{\varphi\mathbf{z}}) \end{aligned}$$

Sendo $\ddot{\mathbf{L}}_{\theta\theta}^{-1}$ uma matriz não singular e usando resultado para matrizes particionadas apresentado em Magnus e Neudecker (2007), \mathbf{L}_1 e \mathbf{L}_2 são dadas por

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{E}^{-1}$$

$$\mathbf{L}_2 = -\mathbf{E}^{-1}\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1}$$

$$\text{em que } \mathbf{E}^{-1} = \left(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\beta} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\beta} \right)^{-1}.$$

Portanto,

$$GL(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{X}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\beta} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\beta})^{-1}(\ddot{\mathbf{L}}_{\beta\varphi}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\varphi}^{-1}\ddot{\mathbf{L}}_{\varphi\mathbf{z}} - \ddot{\mathbf{L}}_{\beta\mathbf{z}})$$

Apêndice D. Derivada da Raiz Quadrada $\Sigma^{1/2}$

Correspondente a qualquer matriz Σ $n \times n$ simétrica e não negativada definida, existe uma matriz simétrica não negativa definida $\Sigma^{1/2} = \mathbf{W}$, tal que $\Sigma = \Sigma^{1/2}\Sigma^{1/2} = \mathbf{W}^2$. Além disso, \mathbf{W} é única e pode ser expressa por

$$\mathbf{W} = \mathbf{V}\mathbf{A}^{1/2}\mathbf{V}^\top,$$

em que $\mathbf{A}^{1/2} = \text{diag}(\sqrt{\alpha_1}, \dots, \sqrt{\alpha_n})$, com $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ os autovalores de Σ e \mathbf{V} é uma matriz $n \times n$ ortogonal ($\mathbf{V}\mathbf{V}^\top = \mathbf{I}_n$) tal que $\mathbf{V}\Sigma\mathbf{V}^\top = \mathbf{A}$, com $\mathbf{A} = \text{diag}(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$. Então a derivada de Σ com respeito ao escalar φ_i é dada por

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_i} = \mathbf{W} \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \varphi_i} + \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \varphi_i} \mathbf{W}, \quad \text{para } i = 1, \dots, q. \quad D1$$

Esta equação pode ser escrita como $\dot{\mathbf{C}}_i = \mathbf{W}\dot{\mathbf{W}}_i + \dot{\mathbf{W}}_i\mathbf{W}$, em que $\dot{\mathbf{C}}_i = \frac{\partial \Sigma}{\partial \varphi_i}$ e $\dot{\mathbf{W}}_i = \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \varphi_i}$. $\dot{\mathbf{W}}_i$, a qual tem sido extensivamente estudada na literatura, veja por exemplo Jameson (1968). Note que $\dot{\mathbf{C}}_i$, \mathbf{W} e $\dot{\mathbf{W}}_i$ são matrizes simétricas. Seja $\mathbf{G}_i = \mathbf{V}^\top \dot{\mathbf{C}}_i \mathbf{V}$ e $\mathbf{Q} = [(q_{rs})]$, matrizes simétricas $n \times n$, com $q_{rs} = (\sqrt{\alpha_r}, \dots, \sqrt{\alpha_s})^{-1}$, para $r, s = 1, \dots, n$. Então, a solução para a Equação (D1) é dada por

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \varphi_i} = \frac{\partial \Sigma^{1/2}}{\partial \varphi_i} = \mathbf{V}(\mathbf{G}_i \oplus \mathbf{Q})\mathbf{V}^\top$$

em que \oplus denota o produto de Hadamard para $i = 1, \dots, q$.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Anderson, J. F.; Hardy, E. E.; Roach, J. T.; Witmer, R. E. (2001) A land use and land cover classification system for use with remote sensor data, U. S. Geological Survey Professional Paper 964, Washington, DC.
- Arellano-Valle, R.; Bolfarine, H. (1995) On some characterizations of the t-student. *Statistics & Probability Letters*, 25, 79-85.
- Assunção, R. M. (2001) *Estatística espacial com aplicações em epidemiologia, economia e sociologia*. São Carlos, Universidade de São Carlos.
- Beckman, R.; Nachtsheim, C.; Cook, R. D. (1987) Diagnostics for mixed-model analysis of variance, *Technometrics*, 29, 413-426.
- Belsley, D. A. Kuh, E.; Welsh, R. E. (1980) *Regression Diagnostics: Identifying Influential Data and Sources of Collinearity*. John Wiley, New York.
- Bertsekas, D. P. (1982) Projected Newton methods for optimization problems with simple constraints. *SIAM J. Contr. Optim.* 20, 221-246.
- Borssoi, J. A.; Uribe-Opazo, M. A.; Galea M. (2009) Diagnostic techniques applied in geostatistics for agricultural data analysis. *Revista Brasileira de Ciência do Solo* Viçosa, 39, 1561-1570.
- Borssoi, J. A.; De Bastiani, F.; Uribe-Opazo, M. A.; Galea M. (2011a) Local influence of explanatory variables in Gaussian spatial linear models, *Chilean Journal of Statistics*, 2 (2), 29-38.
- Borssoi, J. A.; Uribe-Opazo, M. A.; Galea, M. (2011b) Técnicas de Diagnóstico de Influência Local na Análise Espacial da Produtividade da Soja. *Engenharia Agrícola*, 31, 376-387.
- Broyden, C. G. (1970) The convergence of a class of double-rank minimization algorithms, *J. of the Inst. of Math. and Its Applications* 6, 76-90.
- Byrd, R. H.; Lu, P.; Nocedal, J.; Zhu, C. (1995) A limited memory algorithm for bound constrained optimization, *SIAM J. Scientific Computing*, 16, 1190-1208.
- Cadigan, N. G.; Farrel, P. J. (2002) Generalized local influence with applications to fish stock cohort analysis. *Journal of the Royal Statistical Society*, London, 51, 469-483.
- Câmara, G.; Medeiros, J. S. (1998) GIS para meio ambiente. *Sistemas de Informações Geográficas*, Curitiba: Sagres, 140-180.
- Cambanis, S.; Huang, S.; Simons, G. (1981) On the theory of elliptically contoured distributions, *J. Multivariate Anal.* 11, 368-385.
- Cambardella, C. A.; Moorman, T. B.; Novak, J. M.; Parkin, T. B.; Karlen, D. L.; Turco, R. F.; Konopka, A. E. (1994) Field-scale variability of soil properties in Central Iowa Soils. *Soil Science Society of America Journal*, Madison, 58 (5), 1501-1511.

- Chappell, A.; Oliver, M.A. (1997) Geostatistical analysis of soil redistribution in SW Niger, West Africa. *Quantitative Geology and Geostatistics*, 8(2), 961-972.
- Chatterjee, S.; Hadi, A. (1988) *Sensitivity Analysis in Linear Regression*. John Wiley, New York.
- Christensen, R.; Johnson, W.; Pearson, L. (1992) Prediction diagnostics for spatial linear models, *Biometrika*, 79, 583-591.
- Christensen, R.; Johnson, W.; Pearson, L. (1993) Covariance function diagnostics for spatial linear models, *Mathematical Geology*, 25, 145-160.
- Clark, I. (1979) The semivariogram - Part I. *Eng. & Min. J.*, 180 (7), 90-94.
- Conab - Companhia Nacional de Abastecimento. Levantamentos de safra: 11º levantamento de grãos - agosto/2011. Disponível em: http://www.conab.gov.br/olalaCMS/uploads/arquivos/11_08_09_11_44_03_boletim_agosto-2011.pdf.
- Conn, A. R.; Gould, N. I. M.; Toint, PH. L. (1988) *Testing a class of methods for solving minimization problems with simple bounds on the variables*. *Mathematics of Computation*. 50, 182, 399-430.
- Coodetec (2007) Manual Técnico: Fertilidade do solo e nutrição de plantas, Coodetec - Cooperativa Central de Pesquisa Agrícola.
- Cook, R.D. e Weisberg, S. (1982) *Residuals and Influence in Regression*. Chapman and Hall, New York.
- Cook, R.D. (1986) Assessment of local influence, *Journal of the Royal Statistical Society*, B, 48(2), 133-169.
- Cook, R.D. (1987) Influence Assessment. *Journal of Applied Statistics*, 14, 117-131.
- Cook, R.D.; Thomas, W. (1990) Assessing Influence on Predictions from Generalized Linear Models. *Technometrics*, 32, 59-66.
- Cressie, N. (1993) *Statistics for Spatial Data*, John Wiley & Sons.
- Dai, Y. H. (2002) Convergence properties of the begs algorithm. *Siam J. Optim.*, 13 (3), 693-701.
- Davis, J.C. (1973) *Statistics and Data Analysis in Geology*. 1ed, John Wiley and Sons.
- Diamond, P.; Armstrong, M. (1984) Robustness of variograms and conditioning of kriging matrices, *Mathematical Geology*, 16, 809-822.
- Díaz-García, J.; Galea, M.; Leiva, V. (2003) *Influence Diagnostics for elliptical multivariate linear regressions models*, *Communication in Statistics - Theory and Methods*, 32, 625-641.
- Diggle, P. J.; Ribeiro Jr, P. J. (2007) *Model-based geoestistics*, Hardcover.
- Fang, K. T.; Kotz, S.; Ng, K. W. (1990) *Symmetric Multivariate and Related Distribution*. Chapman and Hall, London.
- Fang, K. T.; Zhang, Y. T. (1990). *Generalized Multivariate Analysis*, Springer-Verlag e Science Press, Berlin e Beijing.

- Faraco, M. A.; Uribe-Opazo, M. A.; Silva, E. A. A.; Johann, J. A.; Borssoi, J. A. (2008) Seleção de modelos de variabilidade espacial para elaboração de mapas temáticos de atributos físicos do solo e produtividade da soja, *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, 32 (2), 463-476.
- Fletcher, R. (1970) A New Approach to Variable Metric Algorithms, *Computer Journal*, 13(3), 317-322.
- Frery, A. C.; Cribari-Neto, F. (2009) *Elementos de estatística computacional usando plataformas de software livre/gratuito*, IMPA.
- Fung, W. K.; Kwan, C. W. (1997) A note on local influence based on normal curvature, *Journal of Royal Statistics Society*, 59 (4), 839-843.
- Galea, M.; Paula, G.; Bolfarine, H. (1997) Local influence in elliptical linear regression models. *The Statistician*, 46, 71-79.
- Galea, M.; Paula, G.; Uribe-Opazo, M. A. (2003) On influence diagnostics in univariate elliptical linear regression models, *Statistical Papers*, 44, 23-45.
- Galea, M.; Bolfarine, H.; Vilca, F. (2005) Local influence in comparative calibration models under elliptical t-distributions. *Biometrical Journal*, 47, 691-706.
- Galea, M.; Díaz-García, J. A.; Vilca, F. (2008) Influence diagnostics in the capital asset pricing model under elliptical distributions, *Journal of Applied Statistics*, 35, 179-192.
- Goldfarb D. (1970), A Family of Variable Metric Updates Derived by Variational Means, *Mathematics of Computation* 24(109), 23-26.
- Gómez, E.; Gómez-Villegas, M. A.; Marín, J. M. (1998) A multivariate generalization of the power exponential family of distributions. *Communications in Statistics - Theory & Methods*, 27, 589-600.
- Gong, P.; Howarth, P. J. (1990) An assessment of some factors influencing multispectral land-cover classification. *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing*, Bethesda, 56(5), 597-603.
- Gribov, A., Krivoruchko, K.; Ver Hoef, J.M. (2006) Modeling the semivariogram: New approach, methods comparison, and simulation study. In T.C. Coburn, J.M. Yarus, and R.L. Chambers, eds., *Stochastic modeling and geostatistics: Principles, methods, and Case Studies*, Volume II: AAPG Computer Applications in Geology 5, 45-57.
- Gupta, A. K.; Varga, T. (1993) Elliptically Contoured Models in Statistics, *Kluwer Acad. Publ.*
- Guedes, L. P. C.; Uribe-Opazo, M. A.; Johann, J. A.; Souza, E. G. (2008) Anisotropia no estudo da variabilidade espacial de algumas variáveis químicas do solo. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, Viçosa, v. 32, n. 6, p. 2217-2226.
- Handcock, M. S.; Wallis, J. R. (1994) An approach to statistical temporal modeling of meteorological fields, *Journal of the American Statistical Association*, 89, 368-390.
- Hoaglin, D.; Welsh, R. (1978) The hat matrix in regression and ANOVA. *The American Statistician Journal*, Alexandria, 32, 17-22.
- Ibacache-Pulgar, G. M. (2011) *Modelos mistos aditivos semiparamétricos de contornos elípticos*. Tese de Doutorado, Departamento de Estatística, Universidade de São Paulo.

- Isaaks, E.; Srivastava, R. (1989) *An Introduction to Applied Geostatistics*, Oxford University Press, New York.
- Jameson, A. (1968) Solution of the Equation $AX + XB = C$ by Inversion of an $M \times M$ or $N \times N$ Matrix, *SIAM J. Appl. Math.*, 16, 1020-1023.
- Jones, T. A. (1969) Skewness and Kurtosis as criteria of normality in observed frequency distributions. *Journal Sedimentary Petrology*, Salida, 39 (4), 1622-1627.
- Journel, A. G.; Huijbregts, C. H. (1978) *Mining Geostatistics*, Academic Press, New York.
- Journel, A. G. (1989) Fundamentals of geostatistics in five lessons short course in *Geology American Geophysical Union*, Washington, 8.
- Kashid, D. N.; Kulkarni, S. R. (2003) Subset selection in multiple linear regression with heavy tailed error distribution, *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 73 (11), 791-805.
- Kelker, D. (1970) Distribution Theory of Spherical and a location-scale parameter generalization. *Sankhya A*, 32, 4, 19-430.
- Krige, D. G. (1951) A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand, *Journal of the Chemical, Metallurgical and Mining Society of South Africa* 52: 119-139.
- Krippendorff, K. (1980) *Content analysis: an introduction to its methodology*, Beverly Hills: Sage Publications.
- Landim, P. M. B. (2000) Introdução aos métodos de estimação espacial para confecção de mapas. *DGA, IGCE, UNESP/Rio Claro, Lab. Geoestatística, Texto Didático*.
- Lange, K. L.; Little, R. J. A.; Taylor, J. M. G. (1989) Robust statistical modeling using the t distribution, *Journal of the American Statistics*, 84, 881-896.
- Lesaffre, E.; Verbeke, G. (1998) Local influence in linear mixed models. *Biometrics*, 54, 570-582
- Levitin, E. S.; Polyak, B. T. (1966) Constrained minimization problems. *USSR Comput. Math. Math. Phys.* 6, 1-50.
- Little, R. J. A. (1988) Robust estimation of the mean and covariance matrix from data with missing values. *Applied Statistics*, 37, 23-38.
- Liu, D. C.; Nocedal, J. (1989) On the limited memory BFGS method for large scale optimization. *Math. Program.* 45 (3), 503-528.
- Liu, S. (2000) On local influence for elliptical linear models, *Statistical Papers*, 41, 211-224.
- Liu, S. (2002) Local influence in multivariate elliptical linear regression models, *Linear Algebra and its Applications*, 354, 159-174.
- Ma, Z.; Redmond, R. L. (1995) Tau coefficients for accuracy assessment of classification of remote sensing data. *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing*. Bethesda, 61 (4), 453-439.
- Magnus, J. R.; Neudecker, H. (2007) *Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics*. Wiley, Chichester.

- Mardia, K. V.; Marshall, R. J. (1984) Maximum likelihood models for residual covariance in special regression. *Biometrika*, Oxford, 71 (1), 319-332.
- Martin, R. (1992) Leverage, influence and residuals in regression models when observations are correlated, *Communications in Statistics - Theory and Methods*, 21, 1183-1212.
- Matérn, B. (1986) Spatial Variation. *Lecture notes in Statistics*, 2ed. New York: Springer, 151p.
- Matheron, G. (1963) Principles of Geostatistics. *Economic Geology*, Lancaster, 58, 1246-1266.
- Matheron, G.; Kleingeld, W.J. (1987) The Evolution of Geostatistics. *APCOM 87. Proceedings of the Twentieth International Symposium on the Application of Computers and Mathematics in the Mineral Industries*. Volume 3. Geostatistics. Johannesburg, SAIMM, 9-12.
- Mcbratney, A. B.; Webster, R. (1986) Choosing functions for semi-variograms of soil properties and fitting them to sampling estimates, *Soil Sci.*, 37, 617-39.
- Mello J. M.; Batista, J. L. F.; Ribeiro Jr, P. J.; Oliveira, M. S. (2005) Ajuste e seleção de modelos espaciais de semivariograma visando à estimativa volumétrica de *Eucalyptus grandis*. **Scientia Florestalis**, Piracicaba, n. 69, 25-37.
- Mercante, E.; Uribe-Opazo, M. A.; Souza, E. G. (2003) Variabilidade espacial e temporal da resistência mecânica do solo à penetração em áreas com e sem manejo químico localizado. *Revista Brasileira de Ciência do Solo*, Viçosa, 27 (6), 1149-1159.
- Militino, A. F.; Palacios, M. B.; Ugarte, M. D. (2004) Outliers detection in multivariate spatial linear models. *Journal Statistical Planning and Inference*, 136, 125-146.
- Mitchell, A. F. S. (1989) The information matrix, skewness tensor and α -connections for the general multivariate elliptic distribution, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, 41, 289-304.
- Mittelbach, F.; Goossens, M.; Braams, J.; Carlist, D.; Rowley, C. (2004) *The LATEX Companion. Tools and techniques for computer typesetting*. Addison Wesley, Boston.
- Moré, J. J.; Toraldo, G. (1989) Algorithms for bound constrained quadratic programming problems. *Numer. Math.* 55, 377-400.
- Moré, J. J.; Thuente, D. J. (1994) Line search algorithms with guaranteed sufficient decrease. *ACM Trans. Math. Softw.* 20 (3), 286-307.
- Osorio, F. (2006) *Diagnósticos de influência em modelos mistos elípticos com efeitos aleatórios*. Tese de Doutorado, Departamento de Estatística, Universidade de São Paulo.
- Osorio, F.; Paula, G. A.; Galea, M. (2007) Assessment of Local Influence in Elliptical Linear Models with Longitudinal Structure *Computational Statistics & Data Analysis*, 51 (9), 4354-4368.
- Paula, G. A. (1993) Assessing local influence in restricted regression models. *Computational Statistics and Data Analysis*, 16, 63-79.
- Paula, G. A. (2010) *Modelos de regressão com apoio computacional*, IME-USP.

- Poon, W. e Poon, Y. S. (1999) Conformal normal curvature and assessment of local influence. *Journal of the Royal Statistical Society B*, 61, 51-61.
- Press, W. H.; Vetterling, S. A.; Flannery, B. P. (1992) *Numerical recipes in C: the art of scientific computing*. New York: Cambridge University Press.
- R Development Core Team. (2010) *R: A language and environment for statistical computing*, R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria, <http://www.R-project.org>.
- Renard, D. (1998) Notal del curso geoestadística no estacionaira. *CFSG - Ciclo de Formación Especializada en Geoestadística*, Curso: 1997-98, Centro de Geoestadística de la Escuela Superior de Minas de Paris, Fontainebleau, Francia.
- Rendu, J. M. (1978) An Introduction to Geostatistical Methods of Mineral Evaluation: South African Inst. Min. Metall., Monograph Series, Geostatistics 2.
- Ribeiro Jr., P. J.; Diggle, P. J. (2001) GeoR: a package for geostatistical analysis. *R-news*, 1 (2), 15-18.
- Ribeiro Jr, P. J. (2002) Estatística no espaço: modelos e métodos para análise de dados georreferenciados. *Anais 33ª Reunião Regional da Associação Brasileira de Estatística - ABE, Curitiba-PR*.
- Riquelme, M.; Leiva, V.; Galea, M.; Sanhueza, A. (2011) Influence diagnostics on the coefficient of variation of elliptically contoured distributions, *Journal of Applied Statistics*, 38 (3), 513-532.
- Rogers, W. H.; Tuckey, J. W. (1972) Understanding some long-tailed distributions. *Statistica Neerlandica*, 26, 211-226.
- Ross, W. (1987) The geometry of case deletion and the assessment of influence in nonlinear regression. *The Canadian Journal of Statistics*, Canadá, 15, 91-103.
- Schabenberger, O.; Pierce, F. J. (2002) *Contemporary Statistical Models: for the plant and soil sciences*. Ed. CRC Press, Florida.
- Schabenberger, O.; Gotway, C. (2005) *Statistical Methods for Spatial Data Analysis*, Chapman & Hall, London.
- Shanno D. F. (1970) Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization, *Math. Comput.* 24, 647-656.
- Sherman, M. (2011) *Spatial Statistics and Spatio-Temporal Data: Covariance Functions and Directional Properties*, John Wiley & Sons.
- St. Laurent, R. T.; Cook, R. D. (1992) Leverage and superleverage in nonlinear regression. *J. Amer. Stat. Assoc.* 87, 985-990.
- Tobler, W. (1970) A computer movie simulating urban growth in the Detroit region. *Economic Geography* 46, 234-240.
- Uribe-Opazo, M.A.; Kavanagh, C. R. (2006) Estimaco de Parmetros no Ajuste de Modelos Tericos a Semivariogramas Experimentais. *Revista Brasileira de Estatística*, Rio de Janeiro, 67, 97-122.

- Uribe-Opazo, M. A.; Borssoi, J. A.; Galea, M. (2011) Influence Diagnostics in Gaussian Spatial Linear Models, *Journal of Applied Statistics*, 39 (3), 615-630.
- Verbeke, G.; Molenberghs, G. (2000) *Linear Mixed for Longitudinal Data*. New York: Springer. 306 p.
- Vieira, S. R. (1996) *Geoestatística*, Curso de Extensão Universitária, Botucatu, UNESP, 71p.
- Vieira, S. R. (1998) Geoestatística Aplicada á Agricultura de Precisão. In: GIS Brasil'98. Curitiba: [s.n.].
- Wackernagel, H. (2003) *Multivariate Geostatistics: an introduction with applications*. Germany: Springer.
- Warnes, J. A. (1986) Sensitivity Analysis for Universal Kriging, *Mathematical Geology*, 18, 653-676.
- Webster, W.; Oliver, M. (1998) Generalized leverage and its applications. *Scandinavian Journal of Statistics*, 25, 25-37.
- Wei, B.; Hu, Y.; Fung, W. (1998) Generalized leverage and its applications, *Scandinavian Journal of Statistics*, 25, 25-37.
- Wollenhaupt, N. C.; Mulla, D. J.; Crawford, G. (1997) Soil sampling and interpolation techniques for mapping spatial variability of soil properties. The Site-Specific Management for Agricultural Systems. ASA-CSSA-SSSA, 777. S.Segoe Rd, Madison, W153711, USA 19-53.
- Zhang, H. (2004) Inconsistent estimation and asymptotically equal interpolations in model-based geostatistics, *Journal of the American Statistical Association*, 99, 250-261.
- Zhu X.; Byrd, R. H.; Nocedal. J. (1997) L-BFGS-B: Algorithm 778: L-BFGS-B, FORTRAN routines for large scale bound constrained optimization, *ACM Transactions on Mathematical Software*, 23 (4), 550-560.
- Zhu, H.; Ibrahim, J. G.; Lee, S.; Zhang, H. (2007) Perturbation selection and influence measures in local influence analysis, *The Annals of Statistics*, 35 (6), 2565-2588.