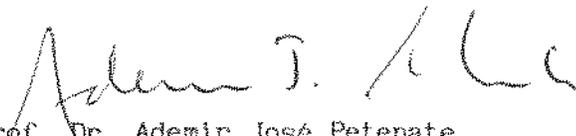


MÉTODO MULTIQUÁDRICO COMO ALTERNATIVA
PARA PREDIÇÃO DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

Este exemplar corresponde a redação final da tese devidamente corrigida e defendida por Myrian Ottoni de Almeida Lana e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 15 de setembro de 1989


Prof. Dr. Ademir José Petenate
Orientador

Dissertação apresentada ao Instituto de Matemática, Estatística e Ciência da Computação, UNICAMP, como requisito parcial para obtenção do Título de Mestre em Estatística.

A *Mário Marcos* (Tuto),
DEDICO.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. *Ademir José Petenate*, pela idéia, sugestões e confiança.

Aos professores do Departamento de Estatística, pelos ensinamentos.

Aos professores da Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, em especial a *José Francisco Soares*, pelo incentivo.

Ao Prof. *Job Jesus Batista*, pelo conjunto de dados da jazida de carvão de Cerquilho.

Ao CNPq, CAPES, FAPESP e UNICAMP, pelo apoio financeiro.

Aos funcionários do IMECC, principalmente:

A *Iara*, pela amizade, paciência e datilografia;

A *Izabel, Cida e Luiz*, pelo atendimento e atenção.

Aos amigos *José Ramos e Célia*, pelo constante apoio.

Aos colegas, pelo convívio.

Resumo

Em diversas áreas aplicadas tem-se como interesse a interpolação de uma função $Z(x)$, $x \in \mathbb{R}^p$, a partir de um conjunto de pontos observados $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$. Em várias situações práticas é possível supor que $Z(x)$ é uma realização de um processo estocástico e utiliza-se o método conhecido como Kriging para estimar a função. Outra técnica que é utilizada com o objetivo de interpolação é o Método Multiquádrico.

Neste trabalho inicia-se um estudo do Método Multiquádrico, sob a suposição de que a função a ser interpolada é uma realização de um processo estocástico. Para tal, realizações de processos estocásticos de covariância estacionária $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^2\}$ são simuladas, sendo abordado o método de simulação conhecido como Bandas Rotativas. Os dois métodos de predição, Kriging e Multiquádrico, são aplicados em amostras dessas simulações. O método Multiquádrico é comparado com o Kriging, mostrando-se bastante competitivo em termos de facilidade de uso e qualidade da interpolação. A comparação entre os dois métodos é também feita através de um conjunto de dados geológicos pertencentes a jazida de carvão de Cerquilha - SP.

ÍNDICE

Capítulo 1. INTRODUÇÃO	01
1.1. Processo estocástico	02
1.2. Funções de predição	09
Capítulo 2. MÉTODOS DE PREDIÇÃO	13
2.1. Método Kriging	13
2.2. Método Multiquádrico	23
Capítulo 3. SIMULAÇÃO DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS	28
3.1. Método de Bandas rotativas	29
3.2. Simulação de processos bidimensionais utilizando o método spectral de geração unidimensional	36
3.3. Exemplos de simulações bidimensionais	41
Capítulo 4. DESEMPENHO DO MÉTODO MULTIQUÁDRICO	44
4.1. Metodologia	44
4.2. Resultados e conclusões	46
Capítulo 5. APLICAÇÃO DOS MÉTODOS DE PREDIÇÃO A UM CONJUNTO DE DADOS REAIS	52
5.1. Descrição dos dados	52
5.2. Aplicação dos métodos de predição	53
5.2.1. Método Kriging	54
5.2.2. Método Multiquádrico	64
5.2.3. Nota sobre os cálculos	73
5.3. Conclusão	73
Apêndice A	74
Apêndice B	79
Apêndice C	82
Referências Bibliográficas	91

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Um problema de grande interesse em áreas aplicadas é o do traçado de uma função em \mathbb{R}^p (em geral $p=1,2$ ou 3) a partir de um conjunto de valores observados dessa função. A questão é antiga e muitos métodos estão disponíveis para resolvê-la. Os métodos utilizados consistem basicamente em utilizar a informação do valor da função nos pontos observados e combiná-los de alguma forma para prever o valor da função em um ponto não observado.

Existem métodos puramente determinísticos. Uma abordagem mais recente considera a função a ser predita como sendo uma realização de um processo estocástico. Utiliza-se então os resultados de predição estocástica para o mapeamento da função. A vantagem dessa abordagem, quando tal modelagem pode ser justificada, é que se dispõe de meios de avaliar o erro de predição.

A modelagem estocástica tem produzido excelentes resultados nos mais diversos campos da Ciências da Terra. Como exemplo podemos citar o mapeamento de reservas minerais, de propriedades do solo e de precipitação pluviométrica, a determinação de cartas de fundos submarinos e densidade de árvores sobre uma área geográfica.

Uma técnica de predição aplicável ao tipo de problema descrito acima é o método conhecido com o nome de *Kriging*. Outro método que tem despertado a atenção ultimamente é o Método *Multiquádrico*, proposto inicialmente para representar equações topográficas.

Nesse trabalho, realizou-se um primeiro estudo do método multiquádrico como alternativa para a predição de processos estocásticos. Inicialmente, são introduzidos alguns conceitos básicos de processo estocástico e função de predição. No Capítulo

2, os métodos Kriging e multiquádrico são apresentados. No Capítulo 3, introduz-se o Método de Bandas Rotativas utilizado na simulação de processos estocásticos. Simulando-se realizações de processos estocásticos, fez-se, no Capítulo 4, um estudo para avaliar o desempenho do método multiquádrico, em relação ao Kriging, em termos de predição. No Capítulo 5, a comparação entre os dois métodos de predição é feita através da aplicação dos métodos a um conjunto de dados reais.

1.1. Processo Estocástico

Um processo estocástico é uma coleção de variáveis aleatórias $\{Z(x), x \in X\}$ indexada por um conjunto X . Aqui nosso conjunto X será o espaço real p -dimensional isto é, $X = \mathbb{R}^p$.

Um processo estocástico é caracterizado pela distribuição conjunta de qualquer conjunto de variáveis aleatórias $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$, para todo inteiro n e $x_i \in \mathbb{R}^p$, $i=1,2,\dots,n$.

Para um $x \in \mathbb{R}^p$ fixo, $Z(x)$ é uma variável aleatória. Definimos a média do processo estocástico como

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

quando a esperança existe. Para um par de pontos $(x_1, x_2) \in \mathbb{R}^p \times \mathbb{R}^p$ definimos a função de covariância do processo estocástico como

$$C(x_1, x_2) = \text{cov}[Z(x_1), Z(x_2)] = E\{[Z(x_1) - m(x_1)][Z(x_2) - m(x_2)]\}$$

quando a covariância existe. Portanto, para $x \in \mathbb{R}^p$,

$$C(x, x) = E\{[Z(x) - m(x)]^2\} = \text{Var}[Z(x)].$$

A função variograma do processo estocástico é definida como a variância do incremento $[Z(x_1) - Z(x_2)]$, e é escrita como

$$2\gamma(x_1, x_2) = \text{Var}[Z(x_1) - Z(x_2)] .$$

A função $\gamma(x_1, x_2)$ é então o *semi-variograma*.

Em situações práticas, desconhecemos a lei de probabilidade que define o processo estocástico do qual a realização $z(x)$ é disponível. Torna-se necessário inferir tal distribuição, ou pelo menos alguns de seus momentos. Assim, várias realizações $z_1(x), z_2(x), \dots, z_n(x)$ do processo estocástico $Z(x)$ são necessárias. Mas, na prática, apenas uma simples realização $\{z(x_i)\}$ de $Z(x)$ nos pontos x_i 's é disponível, o que requer, portanto, a adoção de algumas suposições a respeito do processo estocástico para que a inferência estatística seja possível. A suposição usual na teoria de processo estocástico é a de *estacionariedade*. Mais precisamente,

Definição 1.1.1. Um processo estocástico é dito *estritamente estacionário* se a distribuição conjunta de $\{Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)\}$ é a mesma de $\{Z(x_1 + h), Z(x_2 + h), \dots, Z(x_n + h)\}$ para qualquer conjunto de pontos $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ e qualquer vetor $h \in \mathbb{R}^p$.

O conceito de estacionariedade introduzido na definição acima envolve todas as distribuições finita-dimensionais do processo. Em algumas situações é desejável ter disponível um conceito mais fraco, envolvendo apenas os dois primeiros momentos.

Definição 1.1.2. Um processo estocástico $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ é dito de *covariância estacionária* (ou fracamente estacionário) quando:

- (1) a esperança $E[Z(x)]$ existe e não depende do ponto x , isto é,

$$E[Z(x)] = m , \forall x \in \mathbb{R}^p ;$$

(ii) para cada par de variáveis aleatórias $\{Z(x), Z(x+h)\}$ a função de covariância existe e depende apenas do vetor h , $h \in \mathbb{R}^p$,

$$C(x, x+h) = E\{Z(x+h) \cdot Z(x)\} - m^2 = C(h), \quad \forall x \in \mathbb{R}^p.$$

A estacionariedade da covariância implica na estacionariedade da variância e do semi-variograma, como pode ser visto através das seguintes relações:

$$\text{Var}[Z(x)] = E\{[Z(x) - m]^2\} = C(0), \quad \forall x \in \mathbb{R}^p ;$$

$$\begin{aligned} \gamma(x, x+h) = \gamma(h) &= \frac{1}{2} \text{Var} [Z(x) - Z(x+h)] = \\ &= \frac{1}{2} \{ \text{Var}[Z(x)] + \text{Var}[Z(x+h)] - \\ &\quad - 2 \text{cov}[Z(x), Z(x+h)] \} = \\ &= \frac{1}{2} \{ C(0) + C(0) - 2C(h) \} = \\ &= C(0) - C(h) , \quad \forall x \in \mathbb{R}^p . \end{aligned}$$

A hipótese de covariância estacionária assume a existência de uma função de covariância e então de uma variância finita, $\text{Var}[Z(x)] = C(0)$. A existência de uma função variograma representa uma hipótese mais fraca que a existência da função de covariância. Assim, a hipótese de covariância estacionária pode ser levemente reduzida quando assumimos apenas a existência e estacionariedade do variograma.

Definição 1.1.3. Um processo estocástico $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ é dito *intrínseco* quando:

(i) a esperança $E[Z(x)]$ existe e não depende do ponto x , isto é,

$$E[Z(x)] = m, \quad \forall x \in \mathbb{R}^p;$$

(ii) para todo vetor $h \in \mathbb{R}^p$, o incremento $[Z(x+h) - Z(x)]$ tem variância finita que depende apenas do vetor h ,

$$\begin{aligned} \text{Var}[Z(x+h) - Z(x)] &= E\{[Z(x+h) - Z(x)]^2\} = \\ &= 2\gamma(h), \quad \forall x \in \mathbb{R}^p. \end{aligned}$$

Então, um processo estocástico de covariância estacionária é também intrínseco, mas o inverso não ocorre. Por exemplo, se $\{Z(x), x \geq 0\}$ é um processo estocástico Browniano, a variável incremento $[Z(x+h) - Z(x)]$ é normalmente distribuída com média zero e variância $\sigma^2 h$, σ é um parâmetro fixo, e $x \geq 0$. Então, $\{Z(x), x \geq 0\}$ é intrínseco. Mas $\text{Var}[Z(x)] = \sigma^2 x$, implicando que $\{Z(x), x \geq 0\}$ não é um processo estocástico de covariância estacionária.

Definição 1.1.4. Um processo estocástico de covariância estacionária $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ é dito *isotrópico* se a função de covariância não depende da direção do vetor h , $h \in \mathbb{R}^p$, mas apenas do seu comprimento $\|h\|$. Então, podemos escrever

$$C(h) = C(r)$$

onde $r = \|h\|$.

Seja $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ um processo estocástico de covariância estacionária com esperança m e função de covariância $C(h)$. Assuma, sem perda de generalidade, que $m = 0$. A seguir, daremos três resultados que caracterizam a função de covariância $C(h)$.

1. Sabemos que a variância de uma variável aleatória, quando é definida, é não-negativa. Assim,

$$0 \leq \text{Var} \left[\sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \right] = E \left[\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j Z(x_i) Z(x_j) \right] = \\ = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j C(x_i - x_j)$$

onde $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ é um conjunto qualquer de números reais. Então, a função de covariância deve ser tal que garanta que a variância de $\sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i)$ seja sempre positiva ou nula. Por definição, uma função $f(x)$, $x \in [a, b]$ é dita ser positiva semi-definida se ela satisfaz

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \lambda_i \lambda_j f(x_i - x_j) \geq 0$$

para qualquer conjunto de números reais $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ e para qualquer conjunto (x_1, x_2, \dots, x_n) tal que $(x_i - x_j) \in [a, b]$ para todo (i, j) .

Assim, a função de covariância $C(h)$ é *positiva semi-definida*.

2. Pela estacionariedade, $E[Z(x).Z(x+h)] = C(h)$ para todo x e $x+h$ pertencentes a \mathbb{R}^p . Então, tomando $x_1 = x_2 - h$,

$$C(h) = E[Z(x_1).Z(x_1+h)] = E[Z(x_2-h).Z(x_2)] = C(-h) .$$

Então, a função de covariância $C(h)$ é uma *função par*.

3. Pela desigualdade de Schwarz,

$$2|Z(x).Z(x+h)| \leq |Z(x)|^2 + |Z(x+h)|^2$$

$$2E\{Z(x).Z(x+h)\} \leq E\{Z(x)^2\} + E\{Z(x+h)^2\}$$

$$2|\text{cov}(x, x+h)| \leq |\text{Var}[Z(x)]| + |\text{Var}[Z(x+h)]|$$

$$|C(h)| \leq C(0).$$

Então, a função de covariância $C(h)$ é limitada pela variância de $Z(x)$.

Em geologia utilizam-se alguns modelos de função de covariância. Para processos estocásticos de covariância estacionária e isotrópicos, os modelos mais utilizados são:

(i) Modelo esférico

$$C(r) = \begin{cases} \sigma^2 \left[1 - \frac{3}{2a} r + \frac{1}{2a^3} r^3 \right] & 0 \leq r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$$

onde a é chamado de alcance (range),

$$\sigma^2 = \text{Var}[Z(x)].$$

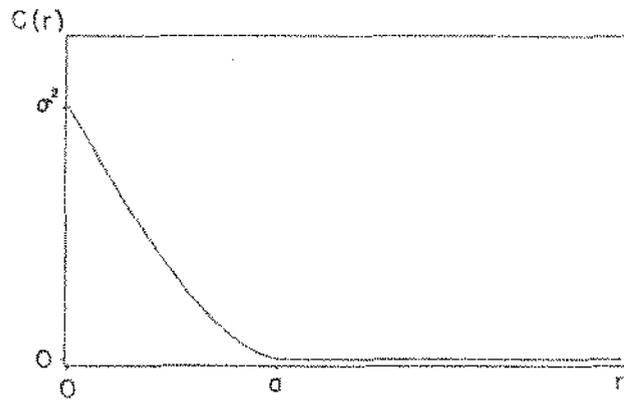
(ii) Modelo exponencial

$$C(r) = \sigma^2 \exp \left[-\frac{1}{a} r \right], \quad a > 0$$

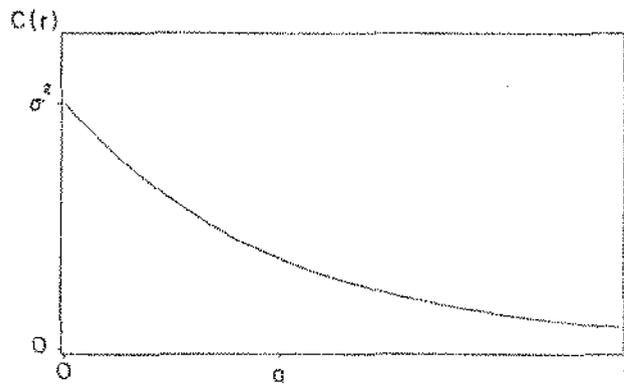
(iii) Modelo gaussiano

$$C(r) = \sigma^2 \exp \left[-\frac{1}{a^2} r^2 \right], \quad a > 0$$

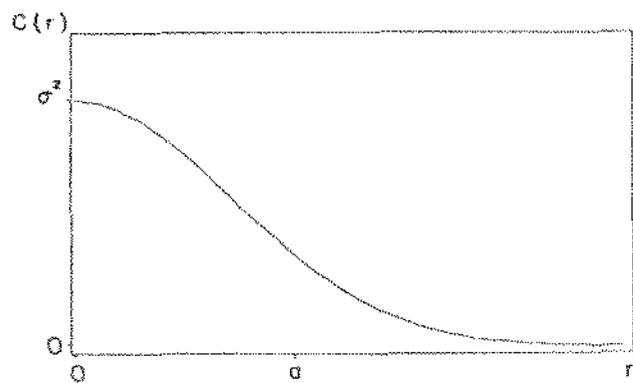
A Figura 1.1.1 ilustra esses modelos de função de covariância.



(i) Modelo Esférico



(ii) Modelo Exponencial



(iii) Modelo Gaussiano

Figura 1.1.1. Modelos de função de covariância.

1.2. Função de Predição

Seja $z(x)$ a realização de um processo estocástico e suponha que observamos $z(x)$ em alguns pontos x_1, x_2, \dots, x_n , $x_i \in D \subset \mathbb{R}^p$, $x_i \neq x_j$ obtendo os valores $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$. Um problema comum é prever (estimar) o valor de $z(x)$ em pontos $x = x_0 \in D$ que não foram observados, com base nos valores de $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$.

Assim, uma função real $g[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)]$ é construída e chamada de *função de predição* para $Z(x_0)$. Seja

$$\hat{Z}(x_0) = g[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)]$$

o preditor de $Z(x_0)$. O *erro de predição* é definido como $\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)$. O critério utilizado para medir a 'qualidade' de $\hat{Z}(x_0)$ é o *erro quadrático médio*

$$EQM[\hat{Z}(x_0)] = E[\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)]^2.$$

Definiremos agora a melhor função de predição de $Z(x_0)$ baseada em $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$.

Definição 1.2.1. Seja H o conjunto de todas as funções que são quadrados integráveis de $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$. A função $g_0 \in H$ é definida como a *melhor função de predição* (BPF) de $Z(x_0)$ baseada em $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$ se

$$\begin{aligned} E \{g_0[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] - Z(x_0)\}^2 &\leq \\ &\leq E \{g[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] - Z(x_0)\}^2 \end{aligned}$$

para toda a função $g \in H$.

O problema é então encontrar uma função $g[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)]$ tal que o EQM $\{g[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)]\}$ seja mínimo. Tal função é dada pelo seguinte teorema,

Teorema 1.2.1. A melhor função de predição de $Z(x_0)$ baseada em $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$ é dada pela esperança condicional de $Z(x_0)$ dado $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$, isto é

$$g_0[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] = E[Z(x_0) | Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)].$$

Prova: Graybill (1976).

O BPF g_0 é a projeção ortogonal de $Z(x_0)$ no subespaço H .

Para determinar o BPF é necessário conhecer a distribuição conjunta de $Z(x_0), Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$. Em geral, esta informação não é disponível (não se conhece a distribuição e nem é possível inferi-la). Nestas situações, torna-se necessário restringir a classe de funções de predição H para uma particular H^* e encontrar a melhor função de predição dentro dessa classe. Se considerarmos apenas as funções de predição que são combinações lineares de $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$ temos a seguinte definição,

Definição 1.2.2. Seja H^* o conjunto de todas as funções que são combinações lineares de $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$, $H^* \subset H$. A função $g_0^*[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)]$ é definida como a melhor função linear de predição (BLP) de $Z(x_0)$ se

$$(1) \quad g_0^*[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] \in H^*, \text{ isto é}$$

$$g_0^*[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i), \quad \lambda_i \in \mathbb{R}, \quad i=1, 2, \dots, n;$$

$$(ii) E\{g_0^*[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] - Z(x_0)]^2\} \leq \\ \leq E\{g_0^*[Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)] - Z(x_0)]^2\}$$

para toda função $g^* \in H^*$.

Sejam a matriz $K: n \times n$ e os vetores $n \times 1$ $Z(\underline{x})$, k_0 e μ definidos como

$$(i) Z'(\underline{x}) = (Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)) ;$$

(ii) K : matriz de covariância de $Z(\underline{x})$, isto é

$$K_{ij} = \text{cov}[Z(x_i), Z(x_j)] = C(x_i, x_j) \quad i, j=1, 2, \dots, n ;$$

(iii) k_0 : vetor de covariâncias entre $Z(x_0)$ e $Z(x_i)$ $i=1, 2, \dots, n$, isto é

$$k_{0i} = C(x_0, x_i) \quad i=1, 2, \dots, n ;$$

(iv) μ : vetor de esperanças de $Z(\underline{x})$, isto é

$$\mu_i = E[Z(x_i)] = m(x_i) \quad i=1, 2, \dots, n.$$

Definimos também $\mu_0 = E[Z(x_0)]$.

Teorema 1.2.2. Se K , k_0 e $E[Z(x)]$ são conhecidos para um dado conjunto de pontos $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, então a *melhor função linear de predição* de $Z(x_0)$ baseada em $Z(\underline{x})$ é dada por

$$g_0^*[Z(\underline{x})] = \mu_0 + k_0' K^{-1} [Z(\underline{x}) - \mu].$$

Prova: Graybill (1976).

O BLP de $Z(x_0)$ é a projeção ortogonal de $Z(x_0)$ em H^* .

Quando o processo estocástico $Z(x)$ é Gaussiano, a esperança condicional de $Z(x_0)$ dado as observações $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_n)$ tem a mesma forma da expressão do BLP de $Z(x_0)$ do Teorema 1.2.2.

Uma qualidade desejável em uma função de predição $g[Z(\underline{x})]$ é a de que seja não viciada em média, isto é

$$E\{g[Z(\underline{x})] - Z(x_0)\} = 0 .$$

Sob as condições do Teorema 1.2.2 temos que

$$\begin{aligned} E\{g_0^*[Z(\underline{x})] - Z(x_0)\} &= E\{\mu_0 + k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) - k_0'K^{-1}\mu - Z(x_0)\} = \\ &= \mu_0 + k_0'K^{-1}\mu - k_0'K^{-1}\mu - \mu_0 = 0. \end{aligned}$$

Logo, o BLP de $Z(x_0)$ é não viciado. Assim, a função $g^*[Z(\underline{x})]$ é a *melhor função linear de predição não viciada* (BLUP) de $Z(x_0)$ baseada em $Z(\underline{x})$.

Capítulo 2

MÉTODOS DE PREDIÇÃO

Neste capítulo estaremos interessados em, dado um conjunto de observações $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$ da função $Z(x)$ nos pontos $x_1, x_2, \dots, x_n, x_i \in D \subset \mathbb{R}^p$, predizer (estimar) a função $z(x)$ para todo $x \in D$. Vários métodos estão disponíveis para resolver esse problema e consistem basicamente em utilizar a informação do valor da função nos pontos observados e combiná-los de alguma forma para predizer o valor da função em um ponto não observado.

Existem métodos puramente numéricos, dentre os quais pode-se citar interpolações polinomiais, médias ponderadas por uma função da distância, splines, polígonos de influência. Esses métodos são descritos por Ripley (1981).

Em muitas situações práticas é possível supor que $Z(x)$ é uma realização de um processo estocástico e utiliza-se preditores pertencentes à classe dos BLUP's para predizer a função. Um elemento dessa classe é o método conhecido como *Kriging*.

Outro método que tem despertado a atenção ultimamente é o *Método Multiquádrico*, que tem sido usado com sucesso em interpolação de funções.

Nas seções 2.1 e 2.2 são apresentados, respectivamente, os métodos *Kriging* e *Multiquádrico*. Na seção 2.2 também são feitas algumas considerações sobre a comparação entre os dois métodos.

2.1. Método *Kriging*

Kriging é um método de predição que foi desenvolvido em geologia e consiste essencialmente em encontrar a *melhor função de*

predição não viciada.

O termo Kriging provem do nome de K.G. Krige, um especialista em mineração que introduziu em 1951 o uso de tal procedimento em reservas minerais. O desenvolvimento formal da teoria deve-se a G. Matheron em 1962.

A idéia básica do Kriging é assumir que o teor de minério, $Z(x)$, de um depósito D é uma realização de um processo estocástico. O teor de minério é medido em n pontos x_1, x_2, \dots, x_n , $x_i \in D$, obtendo-se os valores $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$. Com base em tais observações, constrói-se a melhor função de predição não viciada para $Z(x_0)$ em um ponto $x_0 \in D$ não observado.

Se as esperanças e covariâncias do processo estocástico são conhecidas, então o problema de predição está resolvido conforme o Teorema 1.2.2. Na prática, a função de covariância não é conhecida e é necessário introduzir a hipótese de estacionariedade para que a estimação seja possível. Mesmo assim, é necessário estimar a função de covariância, que não é trivial. Na seção 5.2.1 do capítulo 5 este assunto é abordado.

Suponha que $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ é um processo estocástico de covariância estacionária. Para n pontos x_1, x_2, \dots, x_n , $x_i \in \mathbb{R}^p$, observa-se o valor de $Z(x)$ obtendo-se $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$. O preditor Kriging de $Z(x_0)$, $x_0 \in D$, é dado por

$$\hat{Z}(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) = \lambda' Z(\underline{x})$$

onde $\lambda' = (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ é tal que $\hat{Z}(x_0)$

(i) seja não viciado : $E[\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)] = 0$

(2.1.1)

(ii) tenha EQM mínimo dentre todas as combinações lineares de $Z(x)$ não viciadas.

Kriging Ordinário

Com a suposição de esperança de $Z(x)$ estacionária, o termo Kriging ordinário é designado para representar o procedimento de predição.

Assim,

$$E[Z(x)] = m, \text{ desconhecido } \forall x \in D$$

e portanto,

$$E[\lambda'Z(\underline{x}) - Z(x_0)] = m \sum_{i=1}^n \lambda_i - m = m \left(\sum_{i=1}^n \lambda_i - 1 \right).$$

Então, a condição (i) implica que $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$.

Se $\lambda'Z(\underline{x})$ é uma combinação linear de $Z(\underline{x})$ que satisfaz (i), o seu erro quadrático médio é igual a

$$\begin{aligned} \text{EQM}[\lambda'Z(\underline{x})] &= E[\lambda'Z(\underline{x}) - Z(x_0)]^2 = \\ &= \text{Var}[\lambda'Z(\underline{x}) - Z(x_0)] = \\ &= \lambda'K\lambda + C(0) - 2\lambda'k_0 \end{aligned} \quad (2.1.2)$$

onde $K:n \times n$ é a matriz de covariância de $Z(\underline{x})$,

$k_0:n \times 1$ é o vetor de covariâncias entre $Z(x_0)$ e $Z(x_i)$,
 $i=1, 2, \dots, n$.

Portanto, (2.1.1) é equivalente a

$$(i) \sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad (2.1.3)$$

(ii) $\lambda'K\lambda - 2\lambda'k_0$ mínimo.

Com o objetivo de minimizar a quantidade acima, introduzimos um multiplicador de Lagrange ρ e definimos o vetor $l:n \times 1$ como o vetor composto de n 1's.

Assim,

$$L = \lambda'K\lambda - 2\lambda'k_0 - 2(l'\lambda - 1) \rho.$$

$$\frac{\partial L}{\partial \lambda} = 2K\lambda - 2k_0 - 2l\rho = 0$$

$$\rightarrow K\lambda = k_0 + l\rho$$

$$\rightarrow \lambda = K^{-1}k_0 + K^{-1}l\rho$$

$$\rightarrow l'\lambda = l'K^{-1}k_0 + l'K^{-1}l\rho$$

Como $\sum_{i=1}^n \lambda_i = l'\lambda = 1$ temos

$$l'K^{-1}k_0 + l'K^{-1}l\rho = 1 \rightarrow \rho = \frac{(1 - l'K^{-1}k_0)}{l'K^{-1}l}$$

Então, o vetor λ que satisfaz (2.1.3.) é dado por

$$\lambda^* = K^{-1}k_0 + K^{-1}l \frac{(1 - l'K^{-1}k_0)}{l'K^{-1}l} \quad (2.1.4)$$

e o preditor Kriging ordinário de $Z(x_0)$ é

$$\hat{Z}(x_0) = k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) + \frac{(1 - l'K^{-1}k_0)}{l'K^{-1}l} l'K^{-1}Z(\underline{x}). \quad (2.1.5)$$

Substituindo (2.1.4) em (2.1.2) temos que o erro quadrático médio utilizando o Kriging ordinário é

$$\text{Var}[\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)] = C(0) - k_0'K^{-1}k_0 + \frac{(1 - l'K^{-1}k_0)^2}{l'K^{-1}l}. \quad (2.1.6)$$

Como foi visto anteriormente, um processo estocástico de covariância estacionária é também intrínseco. Sejam a matriz $V:n \times n$ e o vetor $v_0:n \times 1$ definidos como

(i) V : matriz de semi-variograma de $Z(\underline{x})$, isto é

$$V_{ij} = \gamma(x_i, x_j) \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad ;$$

(ii) v_0 : vetor de semi-variograma entre $Z(x_0)$ e $Z(x_i)$,
 $i=1, 2, \dots, n$, isto é

$$v_{0i} = \gamma(x_0, x_i) \quad i=1, 2, \dots, n .$$

Utilizando a relação $\gamma(h) = C(0) - C(h)$, temos

$$k_0 = C(0)1 - v_0 \quad \text{e} \quad K = C(0)11' - V .$$

Assim, podemos escrever o erro quadrático médio (2.1.2) em termos da função semi-variograma como

$$\begin{aligned} \text{EQM}[\lambda'Z(\underline{x})] &= \lambda'[C(0)11' - V]\lambda + C(0) - 2\lambda'[C(0)1 - v_0] = \\ &= C(0)\lambda'11'\lambda - \lambda'V\lambda + C(0) - 2C(0)\lambda'1 + 2\lambda'v_0 . \end{aligned}$$

Como $\lambda'1 = 1$,

$$\text{EQM}[\lambda'Z(\underline{x})] = 2\lambda'v_0 - \lambda'V\lambda .$$

Minimizando o EQM acima, sujeito a $\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$ chegamos a

$$\lambda^* = V^{-1}v_0 + V^{-1}1 \frac{(1 - 1'V^{-1}v_0)}{1'V^{-1}1} . \quad (2.1.7)$$

Então, o preditor Kriging ordinário $\hat{Z}(x_0)$ pode ser escrito em termos do semi-variograma como

$$\hat{Z}(x_0) = v_0'V^{-1}Z(\underline{x}) + \frac{(1 - 1'V^{-1}v_0)}{1'V^{-1}1} 1'V^{-1}Z(\underline{x}) \quad (2.1.8)$$

e seu erro quadrático médio é

$$\text{Var}[\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)] = v_0'V^{-1}v_0 - \frac{(1 - 1'V^{-1}v_0)^2}{1'V^{-1}1} . \quad (2.1.9)$$

Kriging Universal

Suponha agora que a suposição de estacionariedade na esperança de $Z(x)$ é violada. Assim, $E\{Z(x)\} = m(x) \forall x \in D$, uma função de x , e não mais uma constante. A função $m(x)$ é chamada de deriva (drift) e assumimos a hipótese de que

$$m(x) = \sum_{j=1}^s \alpha_j f_j(x) \quad x \in D \quad (2.1.10)$$

onde α_j , $j=1,2,\dots,s$ são parâmetros desconhecidos e f_j , $j=1,2,\dots,s$ são funções conhecidas de x . Funções $f_j(x) = x^{j-1}$ são usadas com frequência na deriva $m(x)$.

No caso de não estacionariedade na esperança de $Z(x)$, o procedimento de predição é denominado de Kriging universal.

Como foi visto anteriormente, o preditor Kriging $\hat{Z}(x_0) = \lambda'Z(\underline{x})$ para $Z(x_0)$, $x_0 \in D$, deve satisfazer as condições (2.1.1).

Definimos os vetores $s \times 1$ f'_0 e α e a matriz $F: s \times n$ como

$$f'_0 = (f_1(x_0), f_2(x_0), \dots, f_s(x_0)) ;$$

$$\alpha' = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_s) ;$$

$$F = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_1(x_2) & \dots & f_1(x_n) \\ f_2(x_1) & f_2(x_2) & \dots & f_2(x_n) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f_s(x_1) & f_s(x_2) & \dots & f_s(x_n) \end{bmatrix}$$

$$\text{Então, } E\{Z(\underline{x})\} = F'\alpha \quad \text{e} \quad E\{Z(x_0)\} = f'_0 \alpha .$$

A condição de não viciado, $E\{\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)\} = 0$, implica que

$$\lambda'F'\alpha = f'_0\alpha \quad \text{para todo } \alpha .$$

$$\text{Então, } F\lambda = f'_0 .$$

O erro quadrático médio de $\hat{Z}(x_0)$ é o mesmo daquele

derivado para o caso de esperança de $Z(x)$ estacionária, dado pela expressão (2.1.2).

Então, para encontrar o BLUP de $Z(x_0)$ devemos resolver o seguinte sistema

$$(i) F\lambda = f_0 \quad (2.1.11)$$

$$(ii) \lambda'K\lambda - 2\lambda'k_0 \text{ mínimo.}$$

Procedendo de maneira análoga a resolução do sistema (2.1.3), onde agora o multiplicador de Lagrange ρ é um vetor $s \times 1$, o vetor λ que satisfaz (2.1.11) é

$$\lambda^* = K^{-1}k_0 - K^{-1}F'(FK^{-1}F')^{-1}(FK^{-1}k_0 - f_0) \quad (2.1.12)$$

e o preditor Kriging universal de $Z(x_0)$ é

$$\hat{Z}(x_0) = k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) - (k_0'K^{-1}F' - f_0') (FK^{-1}F')^{-1}FK^{-1}Z(\underline{x}). \quad (2.1.13)$$

O erro quadrático médio utilizando esse preditor é dado por

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)] &= C(0) - k_0'K^{-1}k_0 + \\ &+ (FK^{-1}k_0 - f_0)'(FK^{-1}F')^{-1}(FK^{-1}k_0 - f_0). \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

Algumas propriedades do Kriging

(i) Observa-se, através das expressões para o erro quadrático médio do preditor Kriging, que a variância do erro de predição depende apenas do segundo momento do processo estocástico, e das funções conhecidas f_j 's no caso do Kriging universal, não

dependendo da esperança $E[Z(x)]$ nem das observações $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$. Então, é possível conhecer a precisão do preditor antes de observar o processo.

(ii) O preditor Kriging nos pontos observados é igual ao valor da função nesses pontos, isto é $\hat{Z}(x_i) = Z(x_i)$, $i=1,2,\dots,n$. Isso ocorre pois, se $x_0 = x_i$, temos que o vetor k_0 é a i -ésima coluna da matriz K e então $K^{-1}k_0$ é a i -ésima coluna da matriz identidade. Assim,

$$1'K^{-1}k_0 = 1 \quad e \quad FK^{-1}k_0 = f_0$$

e através das expressões (2.1.4) e (2.1.12) temos

$$\lambda^* = K^{-1}k_0.$$

Então, $\hat{Z}(x_i) = k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) = Z(x_i)$.

Como consequência temos $\text{Var}[\hat{Z}(x_i) - Z(x_i)] = 0$, $i=1,2,\dots,n$.

(iii) Considere o seguinte modelo

$$Z(x) = m(x) + Y(x) \quad x \in D \quad (2.1.15)$$

onde $Y(x)$ é um processo estocástico de covariância estacionária com média zero e função de covariância conhecida.

Suponha $m(x)=m$, conhecido, $\forall x \in D$. Pelo Teorema 1.2.2 o preditor Kriging de $Y(x_0)$ é dado por

$$\begin{aligned} \hat{Y}(x_0) &= k_0^{-1}K^{-1}Y(\underline{x}) = k_0'K^{-1}[Z(\underline{x}) - 1m] = \\ &= k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) - k_0'K^{-1}1m, \end{aligned}$$

$$e \quad \hat{Z}^*(x_0) = m + \hat{Y}(x_0) = k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) + (1 - k_0'K^{-1}1)m \quad (2.1.16)$$

é o preditor Kriging de $Z(x_0)$. O erro quadrático médio de $\hat{Z}^*(x_0)$ é dado por

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{Z}^*(x_0) - Z(x_0)] &= \text{Var}[\mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{x}) - Z(x_0)] = \\ &= \mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_0 + C(0) - 2\mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_0 = \\ &= C(0) - \mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_0 . \end{aligned}$$

Suponha agora $m(x)=m$ desconhecido, $\forall x \in D$. O estimador de mínimos quadrados ponderados de m , \hat{m} é dado por

$$\hat{m} = (\mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{x})$$

e

$$\text{Var}(\hat{m}) = (\mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{1})^{-1}.$$

Substituindo \hat{m} em (2.1.16) temos

$$\begin{aligned} \tilde{Z}(x_0) &= \mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{x}) + (1 - \mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{1})(\mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{x}) \\ &= \mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{x}) + \frac{(1 - \mathbf{k}'_0 \mathbf{K}^{-1} \mathbf{1})}{\mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{1}} \mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{x}), \end{aligned}$$

que é exatamente o preditor Kriging ordinário dado em (2.1.5). Então, o método Kriging estima a média m . Através da equação (2.1.6) temos

$$\text{Var}[\tilde{Z}(x_0) - Z(x_0)] = \text{Var}[\hat{Z}^*(x_0) - Z(x_0)] + (1 - \mathbf{1}' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{k}_0)^2 \text{Var}(\hat{m}),$$

onde o segundo termo à direita é a perda da precisão envolvida quando precisamos estimar m .

Suponha que $m(x) = \sum_{j=1}^s \alpha_j f_j(x)$, com α_j e f_j , $j=1,2,\dots,s$ definidos anteriormente.

O modelo 2.1.15 pode ser escrito como

$$Z(\underline{x}) = F'\alpha + Y(\underline{x}).$$

Quando α é conhecido, o BLUP de $Y(x_0)$ é dado por

$$\hat{Y}(x_0) = k_0'K^{-1}[Z(\underline{x}) - F'\alpha],$$

e o BLUP de $Z(x_0)$ é dado por

$$\begin{aligned} \hat{Z}^*(x_0) &= f_0'\alpha + k_0'K^{-1}[Z(\underline{x}) - F'\alpha] \\ &= k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) - (k_0'K^{-1}F' - f_0')\alpha. \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

O estimador de mínimos quadrados ponderados de α , $\hat{\alpha}$, é dado por

$$\hat{\alpha} = (FK^{-1}F')^{-1}FK^{-1}Z(\underline{x}),$$

e

$$\text{Var}(\hat{\alpha}) = (FK^{-1}F')^{-1}.$$

Substituindo $\hat{\alpha}$ em (2.1.17) temos

$$\tilde{Z}(x_0) = k_0'K^{-1}Z(\underline{x}) - (k_0'K^{-1}F' - f_0')(FK^{-1}F')^{-1}FK^{-1}Z(\underline{x}),$$

que é o preditor Kriging universal dado em (2.1.13). Portanto, o método Kriging estima os parâmetros α_j , $j=1,2,\dots,s$ durante o processo de encontrar $\hat{Z}(x_0)$. Através da equação (2.1.14) temos

$$\begin{aligned} \text{Var}[\hat{Z}(x_0) - Z(x_0)] &= \text{Var}[\hat{Z}^*(x_0) - Z(x_0)] + \\ &+ (FK^{-1}k_0 - f_0)' \text{Var}(\hat{\alpha}) (FK^{-1}k_0 - f_0). \end{aligned}$$

De maneira análoga ao preditor Kriging ordinário, o termo $(FK^{-1}k_0 - f_0)' \text{Var}(\hat{\alpha}) (FK^{-1}k_0 - f_0)$ é a perda da precisão envolvida quando estimamos o vetor α .

2.2. Método Multiquádrico

Para representar superfícies topográficas, Hardy (1971) propôs um procedimento de interpolação conhecido como método multiquádrico, e que tem sido utilizado com sucesso em outras áreas das ciências aplicadas.

Seja $z(x)$ uma função real definida em $D \subset \mathbb{R}^p$ e $z(x_1), z(x_2), \dots, z(x_n)$ os valores observados da função nos pontos $x_1, x_2, \dots, x_n, x_0 \in D$. Aproximamos $z(x_0), x_0 \in D$, pela função $\tilde{z}(x_0)$ dada por

$$\tilde{z}(x_0) = \sum_{i=1}^n \beta_i q(x_0, x_i) \quad (2.2.1)$$

onde β_i 's são parâmetros desconhecidos a serem estimados e $q(\dots)$ é uma função conhecida, definida em $D \times D$.

Impõe-se a condição de que

$$\tilde{z}(x_k) = z(x_k) = \sum_{i=1}^n \beta_i q(x_k, x_i) \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (2.2.2)$$

Se definirmos os vetores $n \times 1$ β e q_0 e a matriz $Q: n \times n$ como

$$\begin{aligned} \text{(i)} \quad \beta' &= (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n) \\ \text{(ii)} \quad q_0' &= (q(x_0, x_1), q(x_0, x_2), \dots, q(x_0, x_n)) \\ \text{(iii)} \quad Q &= \begin{bmatrix} q(x_1, x_1) & q(x_1, x_2) & \dots & q(x_1, x_n) \\ q(x_2, x_1) & q(x_2, x_2) & \dots & q(x_2, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q(x_n, x_1) & q(x_n, x_2) & \dots & q(x_n, x_n) \end{bmatrix} \end{aligned}$$

podemos escrever (2.2.1) e (2.2.2) na forma matricial, respectivamente

$$\tilde{z}(x_0) = q_0' \beta \quad \text{e} \quad z(\underline{x}) = Q\beta.$$

Se Q é não singular, podemos obter β através de

$$\beta = Q^{-1}z(\underline{x}) \quad (2.2.3)$$

e a fórmula de interpolação para $z(x_0)$ será dada por

$$\tilde{z}(x_0) = q_0' Q^{-1}z(\underline{x}) . \quad (2.2.4)$$

Hardy sugere superfícies quádricas para representar a função $q(\dots)$. Algumas de suas sugestões são:

$$(i) \quad q_1(x, y) = \sum_{i=1}^p (x_i - y_i)^2 + b ,$$

$$(ii) \quad q_2(x, y) = \sqrt{q_1(x, y)} ,$$

onde $x' = (x_1, x_2, \dots, x_p)$ e $y' = (y_1, y_2, \dots, y_p)$ são elementos de D e b é uma constante arbitrária, frequentemente indicada como *fator de alisamento* (Wolf, 1981).

Recomenda-se utilizar ou b igual a zero ou a valores pequenos, escolhidos em função da ordem de grandeza da distância entre os pontos dados. Isso porque, se essa constante for grande, ocorrerá o mau condicionamento da matriz Q (Yamamoto, 1988). Se a escolha de $b = 0$ for feita, então q_1 e q_2 são, respectivamente, o quadrado da distância euclidiana e a distância euclidiana entre x e y . Conseqüentemente, a diagonal principal da matriz Q será composta de zeros.

Quanto à escolha da classe de superfícies quádricas, Hardy (1972) obteve bons resultados experimentais utilizando a

função q_2 . Com relação a função q_1 , existe uma restrição quanto ao seu uso no espaço bidimensional ($p=2$), pois a matriz $Q: nxn$ é singular para $b = 0$ e $n \leq 5$ ou $b \neq 0$ e $n > 5$. A prova desse resultado encontra-se no Apêndice A.

Franke (1982) avalia diversos métodos numéricos de interpolação de superfícies em \mathbb{R}^2 , incluindo o método multiquádrico com função q_2 . Suas conclusões sobre o método multiquádrico são que, em termos de capacidade de ajuste e suavidade visual, o método é o mais impressionante dentre aqueles por ele testados, e que o método é bastante estável em relação à constante b .

Se é razoável assumir que a resposta funcional $z(x)$, $x \in D$ é uma realização de um processo estocástico, então os métodos multiquádrico e Kriging podem ser comparados.

Assim, suponha que a função $z(x)$, $x \in D$, é uma realização de um processo estocástico $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ com esperança e função de covariância conhecidas. Assuma, sem perda de generalidade, que $E[Z(x)] = 0$. Então, como visto na seção 2.1, o preditor Kriging de $Z(x_0)$ é dado pelo Teorema 1.2.2, isto é

$$\hat{Z}(x_0) = \mathbf{k}_0' \mathbf{K}^{-1} \mathbf{Z}(\underline{\mathbf{x}}) \quad (2.2.5)$$

onde \mathbf{k}_0 , \mathbf{K} e $\mathbf{Z}(\underline{\mathbf{x}})$ estão definidas na seção 1.2.

Uma comparação entre (2.2.4) e (2.2.5) mostra que o método multiquádrico pode ser interpretado como Kriging em termos do modelo funcional: é necessário apenas trocar a matriz \mathbf{K} por \mathbf{Q} e o vetor \mathbf{k}_0 por \mathbf{q}_0 . A diferença está, entretanto, no modelo estocástico, isto é, nas propriedades de \mathbf{Q} quando comparada com \mathbf{K} . Observa-se que, para qualquer função $q(\dots)$ sugerida por Hardy,

$$q(x, x + h) \geq q(x, x).$$

Assim, $q(\dots)$ não possui a propriedade de função de covariância vista na seção 1.1 (Hardy, 1977).

Petenate (1983) compara os dois métodos de predição sob a suposição de que $z(x)$ é uma realização de um processo estocástico de covariância estacionária com esperança m e função semi-variograma dada por

$$\gamma(x,y) = \|x - y\|.$$

Neste caso, se tomarmos a função q_2 com $b = 0$, então o vetor q_0 e a matriz Q do método multiquádrico são, respectivamente, o mesmo que o vetor v_0 e a matriz V do método Kriging.

Portanto, pela expressão (2.1.8), o preditor Kriging para $Z(x_0)$, escrito em termos de Q e q_0 , é dado por

$$\hat{Z}(x_0) = \tilde{Z}(x_0) + \frac{(1 - q_0'Q^{-1}1)}{1'Q^{-1}1} 1'Q^{-1}Z(\underline{x}), \quad (2.2.6)$$

onde $\tilde{Z}(x_0)$ é o preditor multiquádrico.

Sob tais suposições sobre $\{Z(x), x \in R^p\}$, a esperança de $\tilde{Z}(x_0)$ é dada por

$$E[\tilde{Z}(x_0)] = E[q_0'Q^{-1}Z(\underline{x})] = q_0'Q^{-1}1m,$$

e $\tilde{Z}(x_0)$ é um preditor não viciado para $Z(x_0)$ se $q_0'Q^{-1}1 = 1$. Neste caso, $\tilde{Z}(x_0) = \hat{Z}(x_0)$, como pode ser visto através da expressão (2.2.6), ou seja, o preditor multiquádrico é equivalente ao preditor Kriging.

Vamos comparar o erro quadrático médio dos preditores Kriging e multiquádrico. Para o preditor Kriging, por (2.1.9), temos

$$EQM [\hat{Z}(x_0)] = q_0'Q^{-1}q_0 - \frac{(1 - 1'Q^{-1}q_0)^2}{1'Q^{-1}1},$$

e para o preditor multiquádrico, temos

$$\text{EQM} [\tilde{Z}(x_0)] = \text{Var}[\tilde{Z}(x_0) - Z(x_0)] + [\text{vicio}]^2,$$

$$\text{onde vicio} = E[\tilde{Z}(x_0) - Z(x_0)] = (1'Q^{-1}q_0 - 1)m.$$

Assim,

$$\text{EQM} [\tilde{Z}(x_0)] = q_0'Q^{-1}q_0 + (1 - 1'Q^{-1}q_0)^2[C(0) + m^2],$$

$$\text{onde } C(0) = \text{Var} [Z(x)].$$

Então,

$$\text{EQM} [\tilde{Z}(x_0)] = \text{EQM} [\hat{Z}(x_0)] + c,$$

$$\text{onde } c = (1 - 1'Q^{-1}q_0)^2 \left[C(0) + m^2 + \frac{1}{1'Q^{-1}1} \right].$$

A eficiência do preditor multiquádrico com relação ao preditor Kriging é dada por

$$E_f = \frac{\text{EQM} [\tilde{Z}(x_0)]}{\text{EQM} [\hat{Z}(x_0)]} = 1 + \frac{c}{\text{EQM} [\hat{Z}(x_0)]} \geq 1.$$

Se $q_0'Q^{-1}1$ está muito próximo de 1, então o método multiquádrico produz predições com pequeno vício e E_f está muito próxima de 1.

A comparação entre o erro quadrático médio dos dois preditores não fica tão simples sem a suposição de que a função semi-variograma de $Z(x)$ é dada por $\gamma(x,y) = \|x - y\|$. No caso de $z(x)$ ser uma realização de um processo estocástico de covariância estacionária com esperança m e função semi-variograma $\gamma(x,y)$, o erro quadrático médio do preditor multiquádrico é

$$\text{EQM} [\tilde{Z}(x_0)] = 2q_0'Q^{-1}v_0 - q_0'Q^{-1}VQ^{-1}q_0 + (1 - q_0'Q^{-1}1)^2[C(0) + m^2],$$

onde v_0 e V estão definidos na seção 2.1.

SIMULAÇÃO DE PROCESSOS ESTOCÁSTICOS

O objetivo desse capítulo é apresentar o Método de Bandas Rotativas utilizado para simular uma realização $z_s(x)$ de um processo estocástico $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$, com interesse principal no caso em que $p=2$.

Existem vários métodos de simulação multidimensional, baseados, geralmente, em extensões de métodos de simulação unidimensional. Tais métodos são, na sua maioria, proibitivos em termos computacionais.

A originalidade do método conhecido como *Bandas Rotativas* (TBM), introduzido por Matheron (1973), deriva da redução de uma simulação multidimensional em várias simulações unidimensionais equivalentes, fornecendo portanto, simulações com razoáveis custos computacionais.

O Método de Bandas Rotativas tem sido amplamente utilizado em simulações tridimensionais. Processos estocásticos bidimensionais possuem equivalência unidimensional mais complicada que nos processos tridimensionais, e assim são mais difíceis de simular por meio do TBM. Para solucionar esse problema, Mantoglou e Wilson (1982) introduziram a equivalência spectral de processos estocásticos bidimensionais e unidimensionais, permitindo assim a simulação por "Bandas Rotativas" de processos estocásticos estacionários com qualquer função de covariância bidimensional.

A seção 3.1 introduz o Método de Bandas Rotativas, mostrando a dificuldade em se obter simulações bidimensionais. Uma alternativa, apresentada na seção 3.2, é utilizar o Método Spectral de geração unidimensional. Fontes de erros introduzidos pelo uso da simulação são considerados. Na seção 3.3 são apresentados alguns exemplos de simulação bidimensional utilizando o Método Spectral.

3.1 Método de Bandas Rotativas (TBM)

O Método de Bandas Rotativas assume que a realização a ser simulada provém de um processo estocástico $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^p\}$ de covariância estacionária e isotrópico. É também assumido que, para cada ponto $x \in \mathbb{R}^p$ fixo, $Z(x)$ é normalmente distribuído com média zero. Se este não for o caso, uma transformação Gaussiana é feita (Journel e Huijbregts, 1978). Por fim, assume-se que a função de covariância $C(r)$, $r = \|h\|$, do processo estocástico é conhecida.

Ao invés de simular uma realização de um processo estocástico bidimensional ou tridimensional diretamente, no TBM são realizadas simulações ao longo de várias retas, usando uma função de covariância unidimensional correspondente à dada função de covariância bi ou tridimensional. Então, em cada ponto $x \in \mathbb{R}^p$ do processo estocástico $Z(x)$, uma soma ponderada dos valores correspondentes ao processo unidimensional é assumida.

Seja D uma região no espaço bi ou tridimensional onde deseja-se simular uma realização $z_s(x)$ de um processo estocástico. Essa simulação é gerada em pontos discretos de D . A Figura 3.1.1 ilustra um exemplo bidimensional. Escolhe-se a origem O em \mathbb{R}^p e gera-se retas tais que os correspondentes vetores de direção \underline{u} sejam uniformemente distribuídos no círculo ou esfera unitária, no caso de duas ou três dimensões, respectivamente. No caso bidimensional, por exemplo, o ângulo θ_1 formado entre a reta l e um eixo fixado χ (Figura 3.1.1) tem distribuição uniforme entre 0 e 2π .

Ao longo de cada reta l , gera-se um processo estocástico unidimensional discreto de covariância estacionária, com média zero e função de covariância $C_1(\xi)$, onde ξ é coordenada na reta l .

Projeta-se ortogonalmente na reta l , os pontos da região D onde deseja-se gerar valores, e atribui a eles, os valores correspondentes do processo discreto unidimensional. Se \underline{x}_p é o vetor correspondente ao ponto P da região D , então o valor atribuído da reta l para o ponto P é $z_1(\xi_{p1})$ onde $\xi_{p1} = \underline{x}_p' \underline{u}_1$ é a

projeção do vetor \underline{x}_p na reta i , \underline{u}_i é o vetor unitário da reta i , e $\underline{x}_p' \underline{u}_i$ representa o produto interno dos vetores \underline{x}_p e \underline{u}_i . Toma-se L retas tais como i . Para cada reta gera-se uma realização unidimensional independente usando $C_i(\xi)$ como a função de covariância. Então, para cada ponto P da região, existem L valores atribuídos $z_i(\xi_{pi}) = z_i(\underline{x}_p' \underline{u}_i)$, $i=1,2,\dots,L$, das realizações unidimensionais.

Finalmente, atribue-se para o ponto P , o valor $z_S(\underline{x}_p)$ dado por

$$z_S(\underline{x}_p) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{i=1}^L z_i(\underline{x}_p' \underline{u}_i) \quad (3.1.1)$$

como a realização de um processo estocástico bi ou tridimensional.

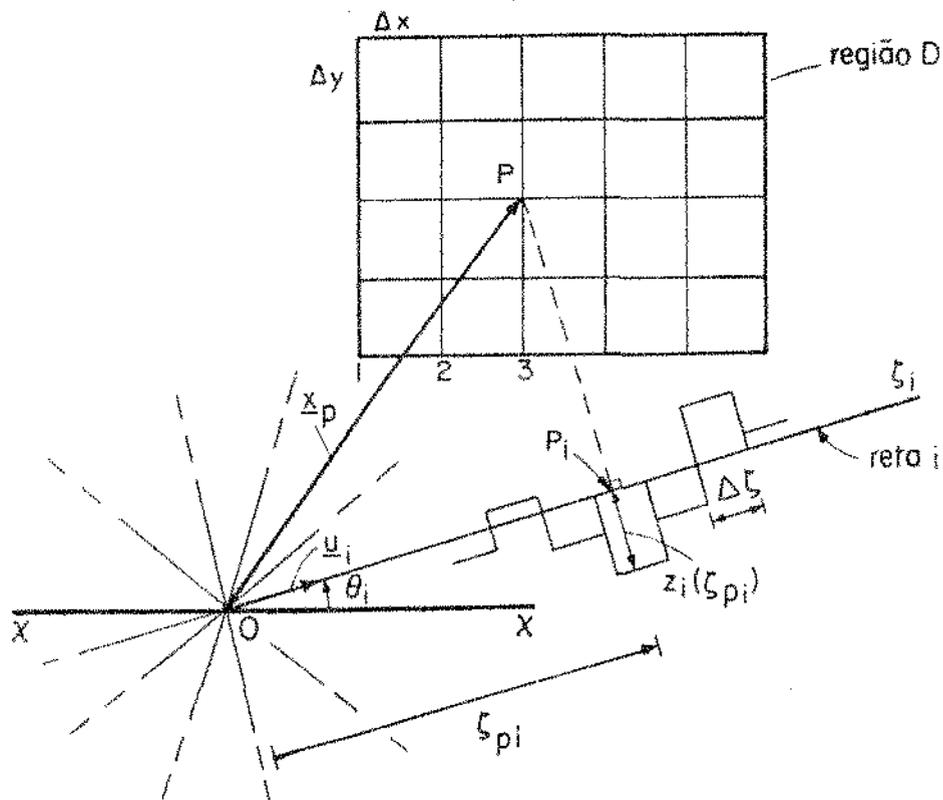


Figura 3.1.1. Representação esquemática do método de Bandas Rotativas.

Como dito anteriormente, o processo unidimensional é gerado discretamente. Os pontos da reta i onde o processo será gerado são escolhidos como sendo o ponto médio dos segmentos definidos pelas bandas de comprimento $\Delta\xi$. O valor gerado em um ponto da reta i é então estendido a todos os pontos interiores à banda, como mostra a Figura 3.1.2.

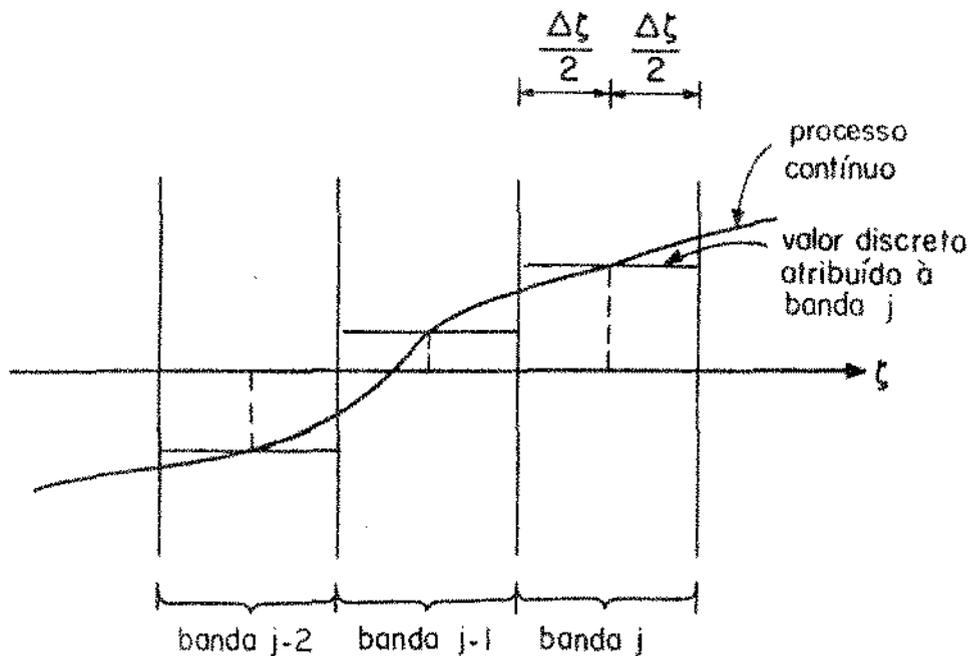


Figura 3.1.2. Representação esquemática do processo contínuo e discreto em uma reta do método de Bandas Rotativas.

Os valores $z_g(x)$, $x \in D$, obtidos através de (3.1.1) constituem uma realização de um processo estocástico de covariância estacionária e isotrópico $Z(x)$, com esperança nula. No caso de $E[Z(x)] = m \neq 0$, para obter a esperança desejada, basta adicionar uma constante, igual ao valor especificado m , para cada um dos valores previamente simulados, $z_g(x)$. A adição dessa constante não altera a função de covariância do processo estocástico. Este

procedimento pode ser usado para a simulação de um processo estocástico cuja suposição de esperança estacionária seja violada. Neste caso, $Z(x) = m(x) + Y(x)$, onde $m(x)$ é a deriva e $Y(x)$ é um processo estocástico de covariância estacionária com média zero e função de covariância conhecida. Então, $Y_S(x)$ é simulado através do TBM e para cada ponto dessa simulação, a simulação $m_S(x)$ da deriva $m(x)$ é adicionada. A simulação $m_S(x)$ pode ser baseada, por exemplo, na expansão de $m(x)$ como uma série de funções conhecidas conforme (2.1.10).

A questão que surge é "qual a forma da função de covariância unidimensional $C_1(\xi)$ tal que a realização definida por (3.1.1) tenha a função de covariância bi ou tridimensional desejada?". Sejam x_1 e x_2 os vetores correspondentes a dois pontos da região D. Pode ser mostrado (por exemplo, em Mantoglou e Wilson, 1982) que a função de covariância do processo estocástico simulado, quando $L \rightarrow \infty$, é dada por

$$C_S(x_1, x_2) = C_S(r) = \int_C C_1(\underline{h}'\underline{u}) f(\underline{u}) d\underline{u} \quad (3.1.2)$$

onde C representa o círculo ou esfera unitária, $f(\underline{u})$ é a função de densidade de probabilidade de \underline{u} , $r = \|\underline{h}\| = \|x_2 - x_1\|$, e $\underline{h}'\underline{u}$ representa o produto interno entre os vetores \underline{h} e \underline{u} . Então, a equação (3.1.2), para o caso bidimensional ($p=2$), torna-se

$$C_S(r) = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{circulo unitario}} C_1(\underline{h}'\underline{u}) d\underline{u} \quad (3.1.3)$$

enquanto que para o caso tridimensional ($p = 3$) temos

$$C_S(r) = \frac{1}{4\pi} \int_{\text{esfera unitaria}} C_1(\underline{h}'\underline{u}) d\underline{u} . \quad (3.1.4)$$

A seguir, examinaremos o caso de simulação bi e tridimensional separadamente.

Simulação Tridimensional

Através de coordenadas esféricas, conforme a Figura 3.1.3, a integral (3.1.4) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 C_S(r) &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi C_1(r \cos\phi) \operatorname{sen}\phi \, d\phi \, d\theta \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\pi/2} C_1(r \cos\phi) \operatorname{sen}\phi \, d\phi \\
 &= \frac{1}{r} \int_0^r C_1(\xi) \, d\xi \qquad (3.1.5)
 \end{aligned}$$

onde $\xi = r \cos\phi$.

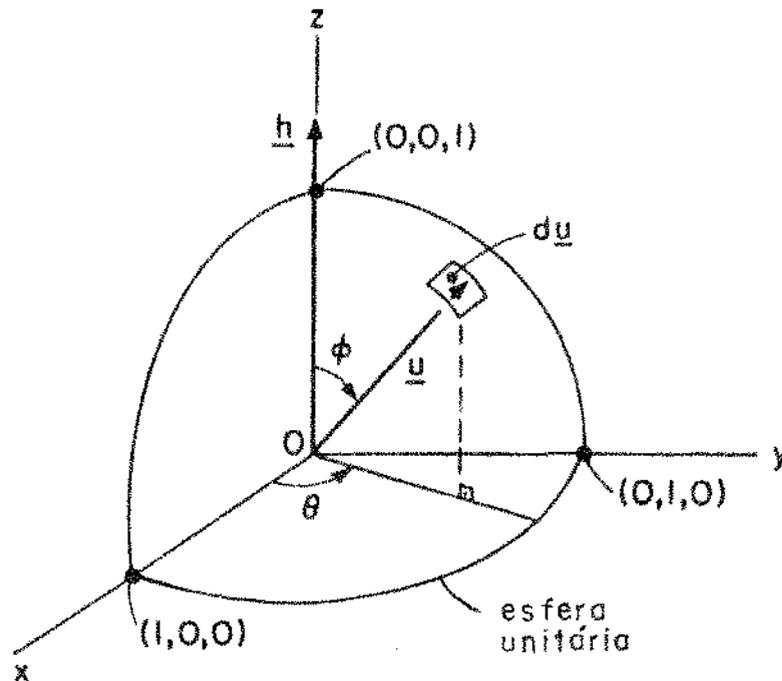


Figura 3.1.3. Esboço da esfera unitária para o caso tridimensional.

Diferenciando a equação (3.1.5) chegamos à relação entre as covariâncias uni e tridimensional

$$C_1(\xi) = \frac{d}{d\xi} [\xi C(\xi)] \quad (3.1.6)$$

onde a troca de notação, $C_s(\xi) = C(\xi)$ foi utilizada a fim de preservar a covariância tridimensional conhecida durante a simulação. Essa simples relação pode ser facilmente aplicada para o cálculo de $C_1(\xi)$. A Tabela 3.1.1 traz as funções de covariância unidimensionais correspondentes a modelos de covariância tridimensional que são utilizados frequentemente. Todas essas funções de covariância unidimensional compartilham da propriedade de que podem ser modeladas como um processo de média móvel, levando a uma maneira simples e direta de gerar realizações ao longo das retas (Journel e Huijbregts, 1978).

Tabela 3.1.1. Correspondência entre as funções de covariância uni e tridimensionais para alguns modelos de covariância.

Modelo Cov.	Função Cov. Tridimensional, $C(r)$	Função Cov. Unidimensional $C_1(\xi)$
Exponencial	$\sigma^2 \cdot \exp\left[-\frac{1}{a} r\right]$	$\sigma^2 \left[1 - \frac{1}{a} \xi\right] \exp\left[-\frac{1}{a} \xi\right]$
Gaussiano	$\sigma^2 \cdot \exp\left[-\frac{1}{a^2} r^2\right]$	$\sigma^2 \left[1 - \frac{2}{a^2} \xi^2\right] \exp\left[-\frac{1}{a^2} \xi^2\right]$
Esférico	$\begin{cases} \sigma^2 \left[1 - \frac{3}{2a} r + \frac{1}{2a^3} r^3\right] & 0 \leq r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$	$\begin{cases} \sigma^2 \left[1 - \frac{3}{a} \xi + \frac{2}{a^3} \xi^3\right] & 0 \leq \xi \leq a \\ 0 & \xi > a \end{cases}$

Simulação bidimensional

Define-se eixos ortogonais (x,y) no plano da região, com origem no ponto x_1 e o eixo y na direção do vetor $h = x_2 - x_1$ como

mostrado na Figura 3.1.4. Através de coordenadas polares, a equação (3.1.3) torna-se

$$\begin{aligned}
 C_S(r) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} C_1(r \operatorname{sen}\theta) d\theta \\
 &= \frac{2}{\pi} \int_0^r \frac{C_1(\xi)}{(r^2 - \xi^2)^{1/2}} d\xi \quad (3.1.7)
 \end{aligned}$$

onde $\xi = r \operatorname{sen}\theta$. Substituindo $C_S(r) = C(r)$ a fim de preservar a função de covariância conhecida, temos

$$\int_0^r \frac{C_1(\xi)}{(r^2 - \xi^2)^{1/2}} d\xi = \frac{\pi}{2} C(r) \quad (3.1.8)$$

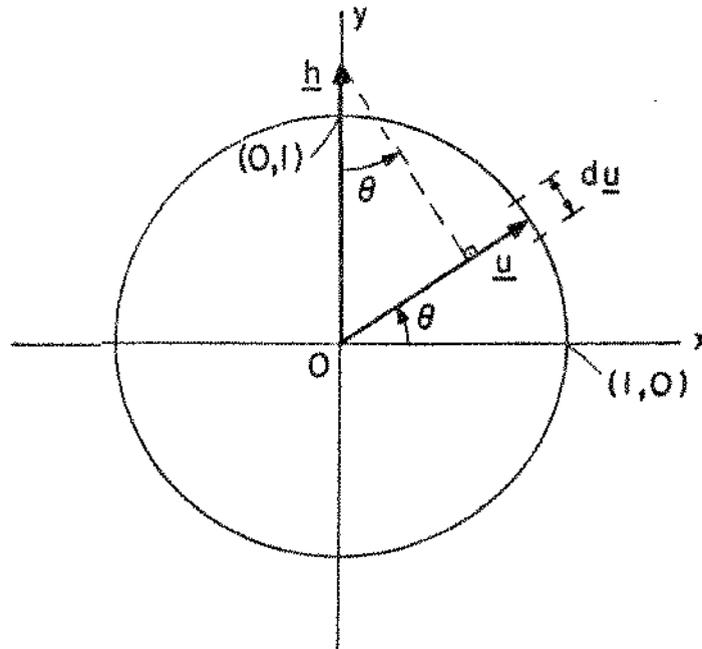


Figura 3.1.4. Esboço do círculo unitário para o caso bidimensional.

Essa equação relaciona a função de covariância bidimensional $C(r)$ com a correspondente função de covariância unidimensional $C_1(\xi)$ ao longo das retas. Não é conhecida uma solução analítica para $C_1(\xi)$ expressa como função de $C(r)$, sendo necessário proceder numericamente.

Observações

(i) Se $C(r)$ é uma função de covariância bi ou tridimensional, pode ser mostrado por meio do Teorema de Bochner que a função $C_1(\xi)$ dada por (3.1.6) ou (3.1.8) é uma função positiva definida unidimensional e pode portanto ser usada como uma função de covariância (Mantoglou e Wilson, 1982).

(ii) A covariância do processo estocástico bi ou tridimensional só é atingida para um número infinito de retas, conforme a expressão (3.1.2). É assumido que essas retas possuem orientação aleatória, com distribuição uniforme no círculo ou esfera unitária. Em três dimensões, pode-se obter convergência satisfatória considerando as 15 retas que unem os pontos médios das arestas opostas de um icosaedro regular (Journal e Huijbregts, 1978). No caso de duas dimensões, 4 - 16 retas igualmente espaçadas são suficientes, dependendo da precisão desejada (Mantoglou e Wilson, 1982).

3.2. Simulação de processos bidimensionais utilizando o Método Spectral de geração unidimensional

Para solucionar a dificuldade de se obter a função de covariância unidimensional $C_1(\xi)$ expressa em termos da função de covariância bidimensional $C(r)$, Mantoglou e Wilson (1982) apresentam uma equação relacionando a função de densidade spectral

de um processo unidimensional com a função de densidade spectral radial de um processo bidimensional. O processo unidimensional pode então ser gerado nas retas TBM utilizando um método spectral.

Equivalência spectral de processos estocásticos uni e bidimensionais

Seja $s_1(w)$ a função de densidade spectral de um processo estocástico unidimensional tendo função de covariância $C_1(\xi)$. A representação spectral de $C_1(\xi)$ é dada por (Cramér e Leadbetter, 1967)

$$C_1(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i w \xi} s_1(w) dw = 2 \int_0^{\infty} \cos(w\xi) s_1(w) dw \quad (3.2.1)$$

onde a frequência w é um escalar, e $s_1(w)$ é uma função real, simétrica e positiva. Substituindo essa representação spectral de $C_1(\xi)$ na equação (3.1.7) e mudando a ordem de integração chega-se a

$$\begin{aligned} C(r) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} s_1(w) \left[\int_0^{2\pi} \cos(wr \operatorname{sen}\theta) d\theta \right] dw = \\ &= 2 \int_0^{\infty} s_1(w) J_0(wr) dw \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

onde $J_0(\cdot)$ é a função Bessel do 1^o tipo de ordem zero, dada por (Gradshteyn - Ryzhik, 1965)

$$J_0(z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \cos(z \operatorname{sen}\theta) d\theta .$$

A função de densidade spectral do processo unidimensional é dada pela transformada de Hankel de $C(r)$ em (3.2.2), isto é

$$s_1(w) = \frac{1}{2} w \int_0^{\infty} C(r) J_0(wr) r dr \quad (3.2.3)$$

No caso bidimensional, a função de covariância de um processo estocástico isotrópico pode ser escrita como (Shoenberg, 1938)

$$C(r) = C(0) \int_0^{\infty} f(w) J_0(wr) dw \quad (3.2.4)$$

onde $C(0)$ é a variância do processo, e $f(w)$ é a função de densidade spectral radial do processo definida como

$$f(w) = \frac{1}{C(0)} \int_{c_w} s(w) dw \quad (3.2.5)$$

onde c_w é um círculo de raio w e $s(w)$ é a função de densidade spectral do processo estocástico isotrópico bidimensional.

Utilizando a transformada de Hankel de $C(r)$ da expressão (3.2.4) temos

$$f(w) = \frac{w}{C(0)} \int_0^{\infty} C(r) J_0(wr) r dr \quad (3.2.6)$$

Portanto, se a função de covariância bidimensional $C(r)$ é conhecida, através de (3.2.6) a função de densidade spectral radial pode ser calculada. A Tabela 3.2.1 traz essa relação para algumas funções de covariância bidimensional.

Comparando as expressões (3.2.3) e (3.2.6) obtém-se

$$s_1(w) = \frac{C(0)}{2} f(w), \quad (3.2.7)$$

o que significa que a função de densidade spectral do processo unidimensional nas retas TBM é igual a metade da função de densidade spectral radial do processo bidimensional multiplicado pela variância.

Tabela 3.2.1. Função de densidade spectral radial de processos estocásticos bidimensionais isotrópicos para alguns modelos de covariância.

Modelo Cov.	Função Cov. Bidimensional $C(r)$	Função Dens. Spectral radial $f(w)$
Exponencial	$\sigma^2 \cdot \exp\left[-\frac{1}{a} r\right]$	$\frac{a^2 w}{[1 + (aw)^2]^{3/2}}$
Gaussiano	$\sigma^2 \cdot \exp\left[-\frac{1}{a^2} r^2\right]$	$\frac{1}{2} a^2 w \exp\left[-\left(\frac{aw}{2}\right)^2\right]$
Esférico	$\begin{cases} \sigma^2 \left[1 - \frac{3}{2a} r + \frac{1}{2a^3} r^3\right] & 0 \leq r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases}$	$\frac{a^3 w^2}{4} J_1(aw) \left\{ {}_1F_2\left[1; 2, 2; -\frac{(aw)^2}{4}\right] - \frac{2}{3} {}_1F_2\left[1; \frac{5}{2}, \frac{5}{2}; -\frac{(aw)^2}{4}\right] + \frac{2}{25} {}_1F_2\left[1; \frac{7}{2}, \frac{7}{2}; -\frac{(aw)^2}{4}\right] \right\}$

J_1 é a função Bessel de 1^o tipo de ordem um (Abramowitz e Stegun, 1970).

${}_1F_2(a; b, c; d)$ é uma série hipergeométrica generalizada definida por Bailey (1972).

Método Spectral de geração de processos estocásticos unidimensionais

Após obter a função de densidade spectral do processo unidimensional, o processo estocástico ao longo das retas TBM pode ser gerado utilizando qualquer método spectral. Mantoglou e Wilson (1982) utilizam o método proposto por Shinozuka e Jan (1972) devido a sua boa precisão e baixo custo computacional. Se a função de covariância unidimensional é $C_1(\xi)$ e a função de densidade spectral correspondente, obtida em (3.2.7), é $s_1(w)$, então o processo unidimensional na reta i pode ser gerado por

$$z_1(\xi) = 2 \sum_{k=1}^M [s_1(w_k) \cdot \Delta w]^{1/2} \cos(w_k' \xi + \phi_k) \quad (3.2.8)$$

onde ϕ_k são ângulos aleatórios independentes uniformemente distribuídos entre 0 e 2π , $w_k = \left[k - \frac{1}{2}\right]\Delta w$ e $w'_k = w_k + \delta w$ para $k=1,2,\dots,M$. É assumido que a função de densidade spectral $s_1(w)$ é insignificante fora da região $[-\Omega, +\Omega]$. A frequência de discretização Δw é definida como $\Delta w = \Omega/M$, onde M é o número de harmônicos usado. A frequência δw é uma pequena frequência aleatória adicionada a fim de evitar periodicidades e é uniformemente distribuída entre $-\Delta w'/2$ e $+\Delta w'/2$, onde $\Delta w'$ é uma pequena frequência, $\Delta w' \ll \Delta w$.

O processo dado por (3.2.8) tem média zero e função de covariância $C_1(\xi)$ quando $M \rightarrow \infty$, $\Omega \rightarrow \infty$ e $\Delta w \rightarrow 0$ (Shinozuka e Jan, 1972). Na prática, temos $M < \infty$, $\Omega < \infty$ e $\Delta w > 0$, de forma que algum erro é introduzido. Mantoglou e Wilson (1982) comparam a função de covariância unidimensional teórica com a função de covariância dada pelo método spectral no caso do modelo de covariância exponencial e concluem que para $\Omega = 40/a$ e $M = 100$ o método preserva tanto variância quanto covariância para distâncias grandes em relação ao alcance a . Uma outra fonte de erro é a discretização ao longo das retas (comprimento da banda, $\Delta\xi$). Segundo os mesmos autores, para a função de covariância exponencial, com $\Delta\xi = 0.05a$ ou $0.1a$ a precisão é excelente, e sugerem que se utilize em aplicações práticas $\Delta\xi < \min(\Delta x, \Delta y)$ onde Δx e Δy são os espaçamentos entre os pontos da região a ser simulada. Uma maneira de se eliminar esse tipo de erro é gerar os valores $z_1(\xi)$ diretamente nos pontos ξ que são projeções dos pontos da região a ser simulada. Entretanto, essa mudança acarreta um aumento no custo, uma vez que o número de pontos gerados ao longo das retas é igual ao número de pontos da região a ser simulada.

Resumindo, podemos dizer que as etapas necessárias para simular uma realização $z_s(x)$ de um processo estocástico bidimensional isotrópico com função de covariância $C(r)$ são:

(i) Encontrar a função de densidade spectral do processo unidimensional $s_1(w)$ através de (3.2.7), usando a função de

densidade spectral radial do processo bidimensional $f(w)$ obtida da expressão (3.2.6) como na Tabela 3.2.1.

(ii) Para cada reta i , $i=1,2,\dots,L$, gerar o processo unidimensional através de (3.2.8), escolhendo o número de harmônicos M , o comprimento da banda $\Delta\xi$ e a frequência máxima Ω . Atribuir o valor simulado $z_i(\xi)$ a todos os pontos pertencentes à banda $[\xi - \Delta\xi/2, \xi + \Delta\xi/2]$ conforme a Figura 3.1.2.

(iii) Em cada reta i , $i=1,2,\dots,L$, projetar ortogonalmente os pontos da região onde se pretende obter valores simulados, e atribuir a eles os valores correspondentes dos processos unidimensionais gerados em (ii), como na Figura 3.1.1.

(iv) Para cada ponto da região, combinar os L valores atribuídos em (iii) conforme a expressão (3.1.1).

3.3. Exemplos de Simulações Bidimensionais

As Figuras 3.3.1 e 3.3.2 ilustram realizações de processos estocásticos simuladas através do TBM, usando o método spectral para a geração unidimensional nas retas. O programa de simulação foi desenvolvido em linguagem Turbo Pascal e encontra-se no Apêndice C. As figuras foram obtidas através do software SAS GRAPH.

Os processos estocásticos possuem média zero, variância unitária ($C(0) = 1$) e função de covariância exponencial com alcance $a = 0.2$ e $a = 1.0$ (respectivamente, Figuras 3.3.1 e 3.3.2).

As dimensões da região são $x_{\max} = 0.19$ e $y_{\max} = 0.19$. Simulações foram feitas em pontos discretos, com espaçamento uniforme, $\Delta x = \Delta y = 0.01$, perfazendo um total de 400 pontos.

Dezesseis retas igualmente espaçadas ($L = 16$), um comprimento de banda igual a $\Delta\xi = 0.01$, $M = 100$ harmônicos ao longo das retas e uma frequência máxima $\Omega = 40/a$ foram utilizados no gerador unidimensional.

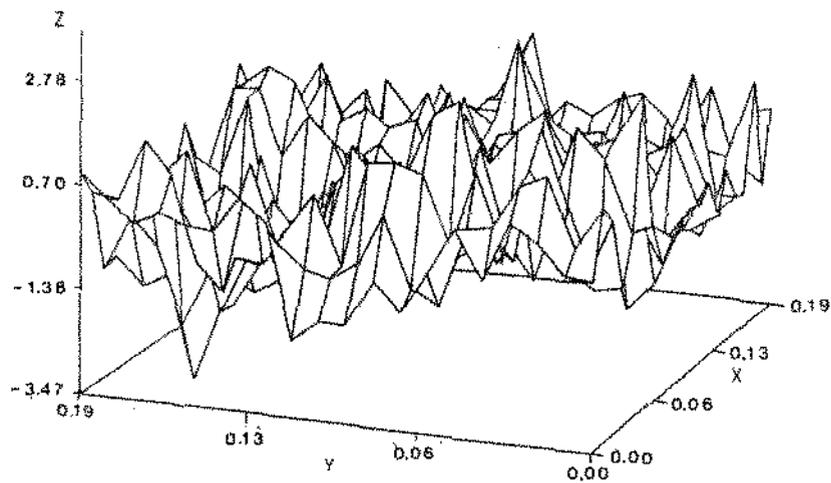
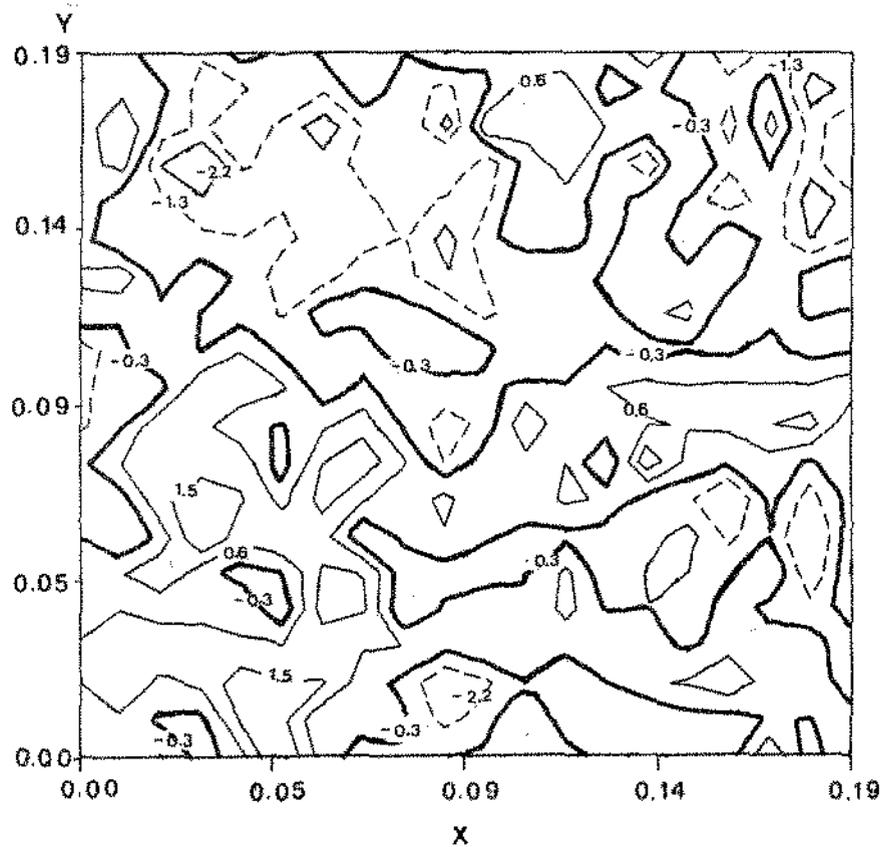


Figura 3.3.1. Realização de um processo estocástico $Z(x,y)$ com média zero e função de covariância exponencial com parâmetros $C(0)=1$ e $a=0.2$, simulada através do TBM, usando o método spectral para a geração unidimensional.

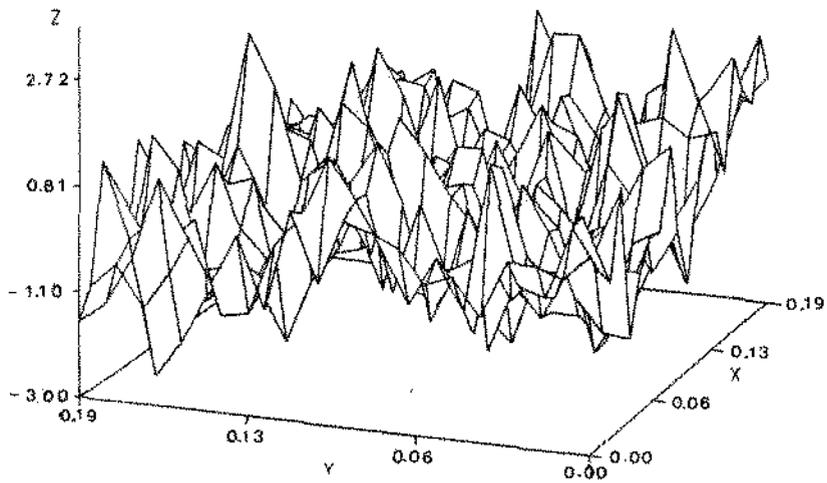
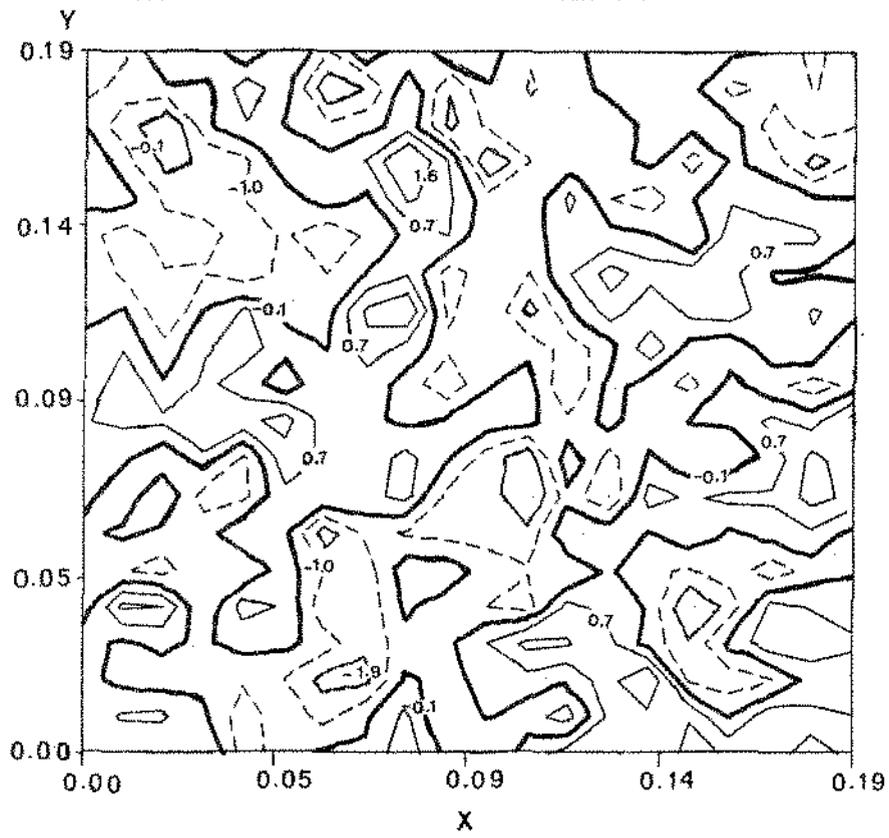


Figura 3.3.2. Realização de um processo estocástico $Z(x,y)$ com média zero e função de covariância exponencial com parâmetros $C(0)=1$ e $a=1.0$, simulada através do TBM, usando o método spectral para a geração unidimensional.

DESEMPENHO DO MÉTODO MULTIQUÁDRICO

Inicia-se, neste capítulo, um estudo para avaliar o desempenho do método multiquádrico, em relação ao método Kriging, na predição de um processo estocástico $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^2\}$. A avaliação do método será feita sob a suposição de que o processo estocástico é de covariância estacionária e isotrópico, com função de covariância exponencial. Para isso, realizações de processos estocásticos são simuladas e os dois métodos de predição são aplicados em amostras dessas simulações.

A seção 4.1 traz a metodologia utilizada para o estudo e a seção 4.2 apresenta os resultados e conclusões.

4.1. Metodologia

Utilizando o método de Bandas Rotativas exposto no capítulo anterior, realizações de processos estocásticos $\{Z(x), x \in \mathbb{R}^2\}$ de covariância estacionária e isotrópico foram simuladas. Considerou-se processos estocásticos com média zero e função de covariância exponencial,

$$C(r) = \sigma^2 \exp\left[-\frac{1}{a} r\right], \quad a > 0.$$

Foram utilizadas doze diferentes combinações dos parâmetros, cujos valores foram $\sigma^2 = 1, 2, 9, 25$ e $a = 0.1, 0.5, 1.0$. As simulações foram feitas em pontos discretos com espaçamento uniforme de 0.01, em uma área de 0.19×0.19 , perfazendo um total de 400 pontos. Para cada uma das doze simulações, três amostras aleatórias foram selecionadas, com tamanhos $n=30, 50$ e 100 . Para

cada amostra, a predição de $z(x_0)$ nos pontos x_0 não amostrados foi realizada utilizando os métodos multiquádrico e Kriging. A Figura 4.1.1 ilustra a metodologia utilizada.

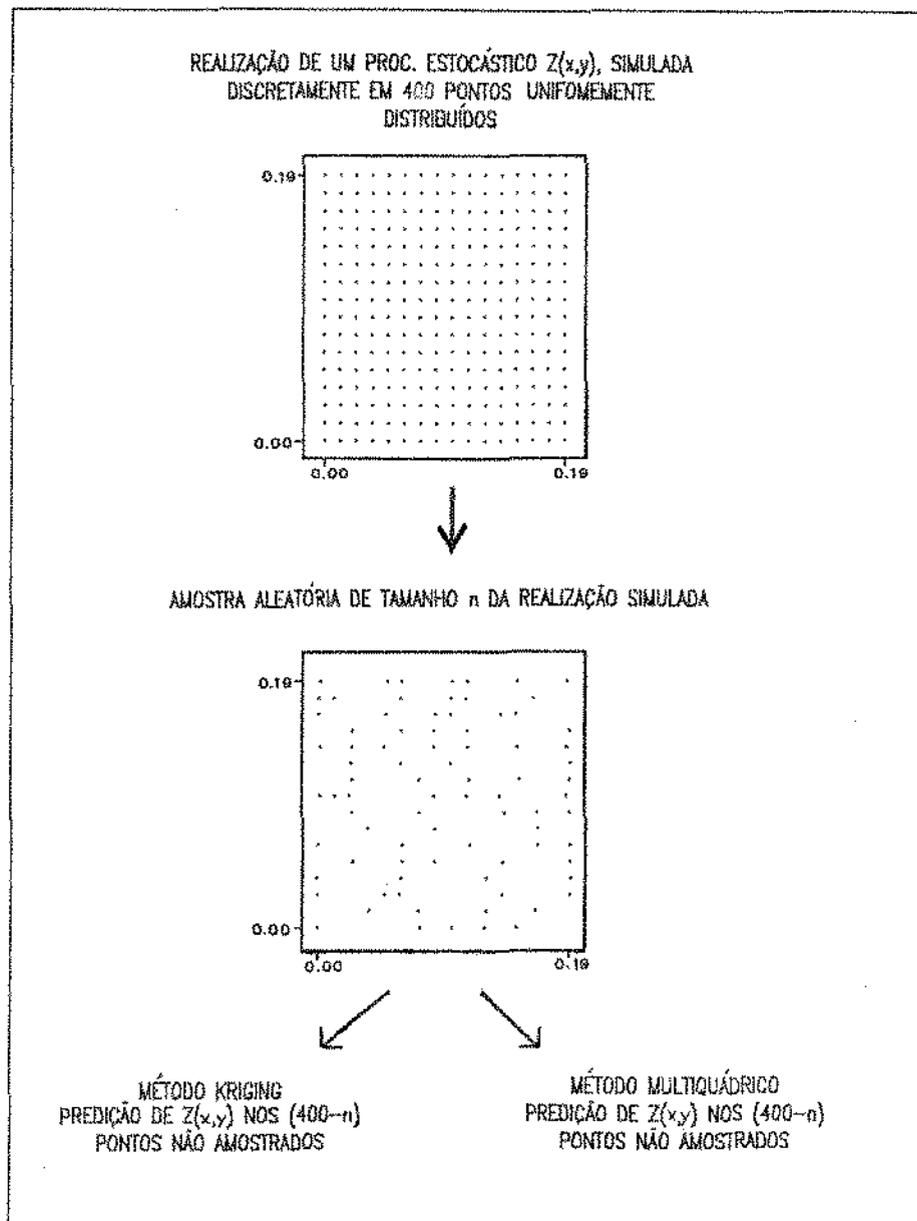


Figura 4.1.1. Esquema mostrando a metodologia utilizada no estudo de desempenho do método multiquádrico em relação ao método Kriging.

Na predição pelo método Kriging, foi suposto que a média e função de covariância do processo estocástico eram conhecidos, dados pelos valores utilizados na simulação. Para o método multiquádrico utilizou-se a função q_2 sugerida por Hardy, devido à restrição quanto ao uso da função q_1 em \mathbb{R}^2 (Capítulo 2 - Seção 2.2). Com respeito a constante b , diversos valores foram utilizados, com o objetivo de se conhecer o seu efeito na predição de $z(x_0)$.

Para avaliação dos resultados, foi considerado o erro quadrático médio, estimado por

$$\hat{EQM} = \frac{1}{400} \sum_{i=1}^{400} [z(x_i) - \hat{z}(x_i)]^2,$$

onde $z(x_i)$ é o valor simulado e

$\hat{z}(x_i)$ é o valor predito por um dos métodos.

4.2. Resultados e Conclusões

Com respeito ao efeito da constante b , quando a função de covariância do processo estocástico é $C(r) = \exp(-r)$, o resultado do \hat{EQM} obtido para o método multiquádrico, baseada em uma amostra de tamanho 30, é mostrado na Figura 4.2.1. Pode-se observar que o \hat{EQM} aumenta quando o valor da constante b aumenta. Comportamento semelhante foi verificado para todas as simulações estudadas. Observou-se também que, utilizando valores grandes para b (no caso do processo estocástico com função de covariância acima, por exemplo $b=0.5$), $\det Q \approx 0$, mostrando o mau condicionamento da matriz Q , conforme havia citado Yamamoto (Capítulo 2). Assim, a escolha de $b=0$ na função q_2 do método multiquádrico parece-nos uma boa opção.

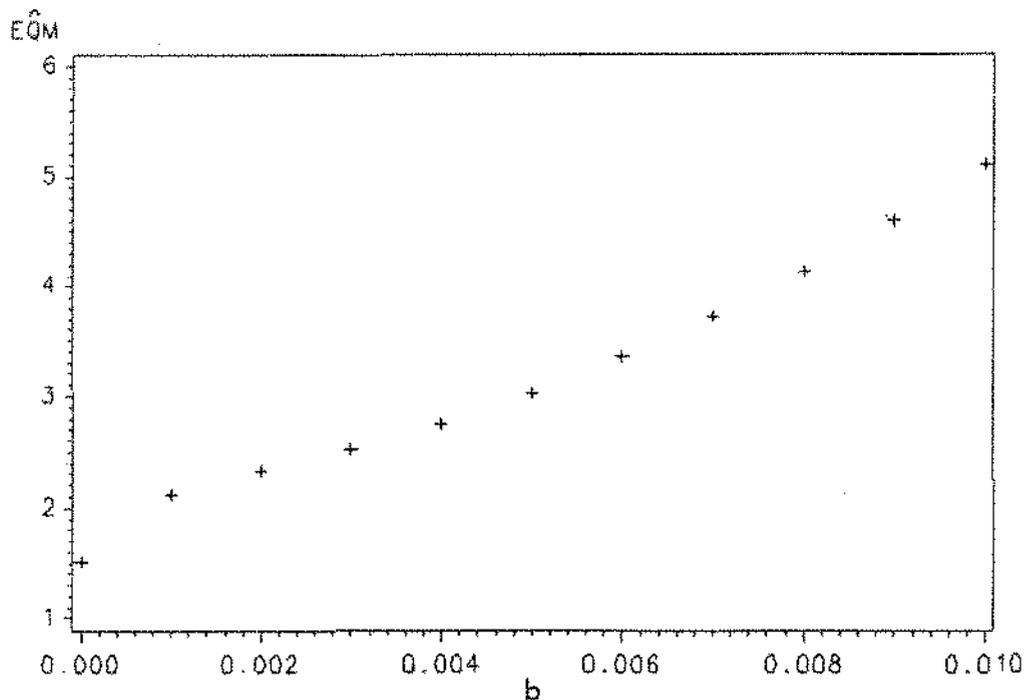


Figura 4.2.1. Resultado do EQM do preditor multiquádrico em função da constante b, quando o processo estocástico possui função de covariância $C(r) = \exp(-r)$.

Os resultados dos EQM's obtidos para os dois métodos de predição, Kriging e multiquádrico (com $b=0$) são apresentados nas Tabelas 4.2.1 e 4.2.2, respectivamente.

Como era de se esperar, o EQM diminui com o aumento do tamanho da amostra para os dois métodos de predição. Observa-se também que, fixado o tamanho da amostra e o parâmetro σ^2 , o comportamento do EQM do preditor multiquádrico ao se variar o parâmetro a é semelhante ao do preditor Kriging.

Tabela 4.2.1. EQM do preditor Kriging para cada tamanho de amostra e em cada combinação dos parâmetros.

n	σ^2 \ a		0.1	0.5	1.0
	σ^2	a			
30	1		1.2017	1.2426	1.5066
	2		2.5127	2.7104	2.5790
	9		8.8721	8.4581	7.3095
	25		25.1885	27.7163	34.4040
50	1		0.8992	0.8317	0.8780
	2		1.8939	2.4759	2.1374
	9		8.1176	8.9211	7.8215
	25		25.5157	24.2721	27.7824
100	1		0.6600	0.7801	0.7801
	2		1.4314	1.3686	1.4816
	9		7.7021	6.5679	7.7998
	25		16.3078	20.3087	19.8224

Tabela 4.2.2. EQM do preditor multiquádrico para cada tamanho de amostra e em cada combinação dos parâmetros.

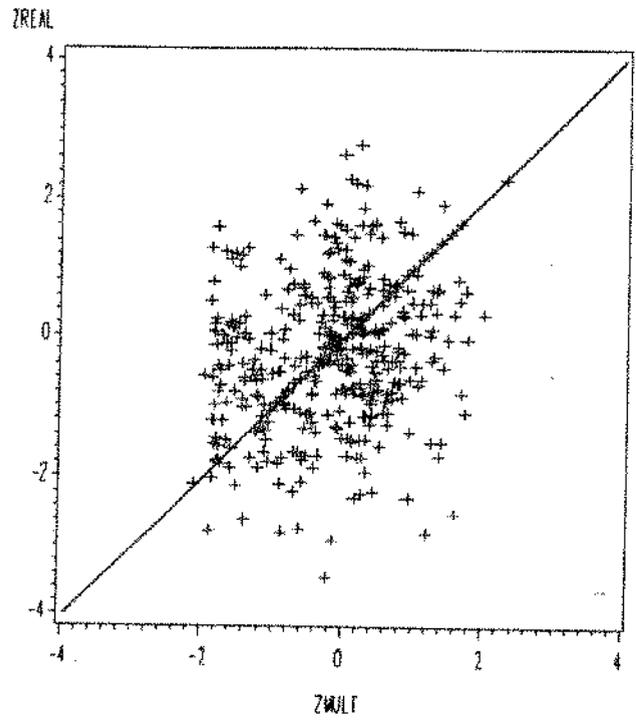
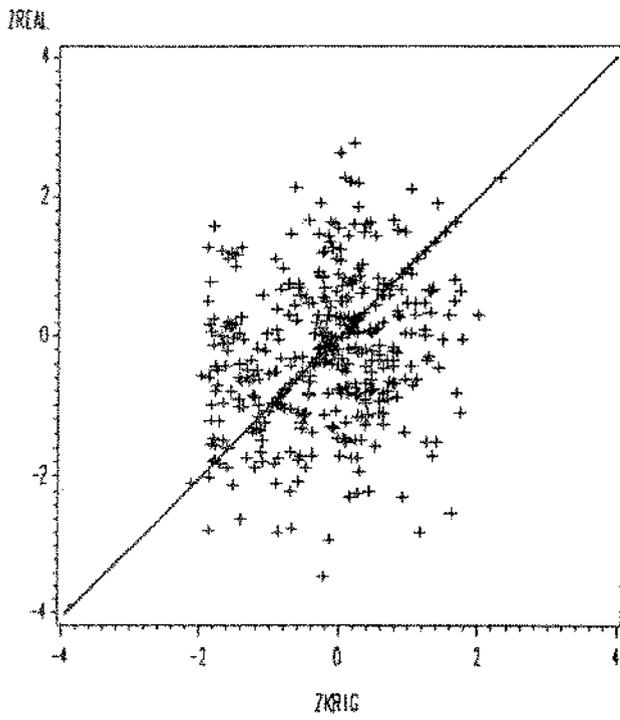
n	σ^2 \ a		0.1	0.5	1.0
	σ^2	a			
30	1		1.3753	1.2532	1.5083
	2		2.6368	2.7191	2.5790
	9		9.0879	8.6352	7.7196
	25		28.4760	27.9956	34.6847
50	1		0.9419	0.8401	0.8817
	2		1.9345	2.5161	2.1429
	9		8.4876	8.9594	7.9911
	25		26.4296	24.3783	28.2937
100	1		0.6597	0.7807	0.7808
	2		1.4320	1.3688	1.4826
	9		7.8590	6.5846	7.9026
	25		16.3645	20.8536	19.8750

A estimação pelo método multiquádrico é quase indistinguível daquela feita pelo Kriging em termos do erro quadrático médio, conforme a Tabela 4.2.3. A razão entre os EQM's do preditor Kriging e multiquádrico é superior a 0.87 para $n=30$, sendo que, para $n=50$ e $n=100$, é superior a 0.95 e 0.98, respectivamente. Para a maioria das realizações estudadas, o aumento do tamanho da amostra implica em um aumento da razão entre os EQM's, parecendo indicar que quanto maior o tamanho da amostra, menor será a diferença entre a estimação feita pelos dois métodos.

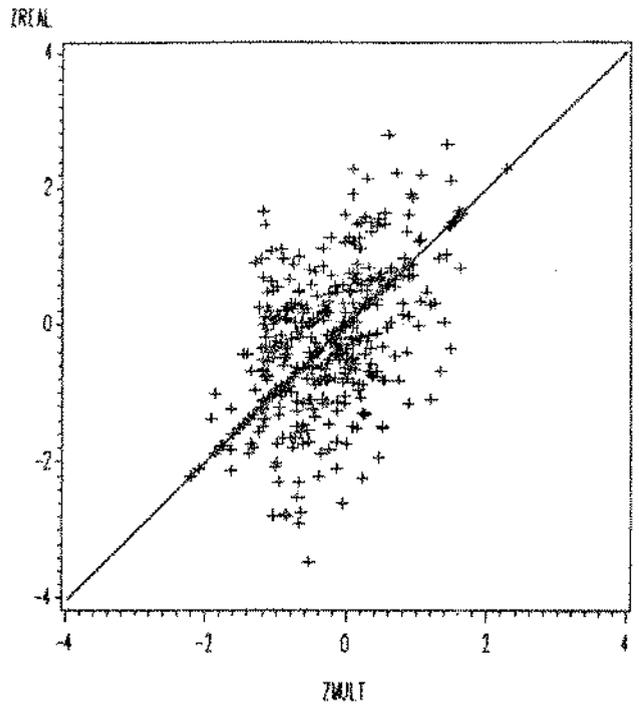
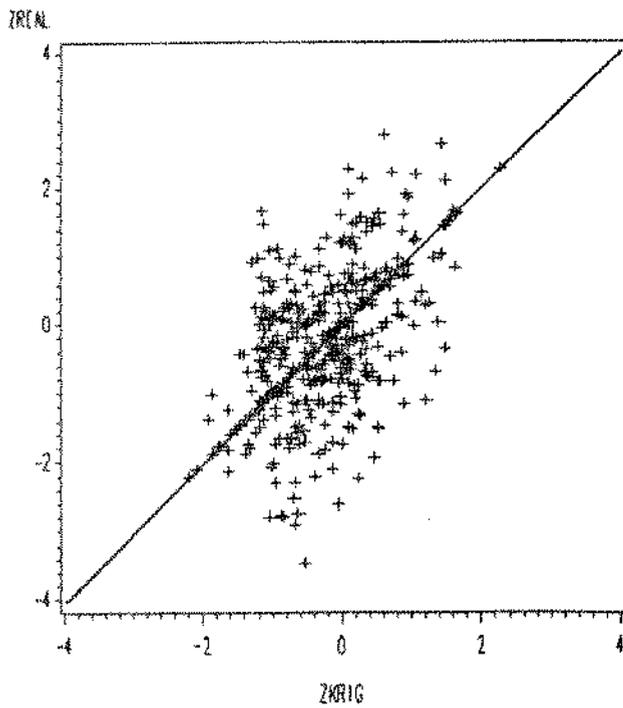
Tabela 4.2.3. Razão entre os EQM's do preditor Kriging e multiquádrico para cada tamanho de amostra e em cada combinação dos parâmetros.

n	σ^2 \ a	0.1	0.5	1.0
30	1	0.8738	0.9915	0.9989
	2	0.9529	0.9968	1.0000
	9	0.9763	0.9795	0.9469
	25	0.8846	0.9900	0.9919
50	1	0.9547	0.9900	0.9958
	2	0.9790	0.9840	0.9975
	9	0.9564	0.9957	0.9788
	25	0.9654	0.9956	0.9819
100	1	1.0000	0.9991	0.9991
	2	0.9996	0.9999	0.9993
	9	0.9800	0.9975	0.9870
	25	0.9965	0.9978	0.9941

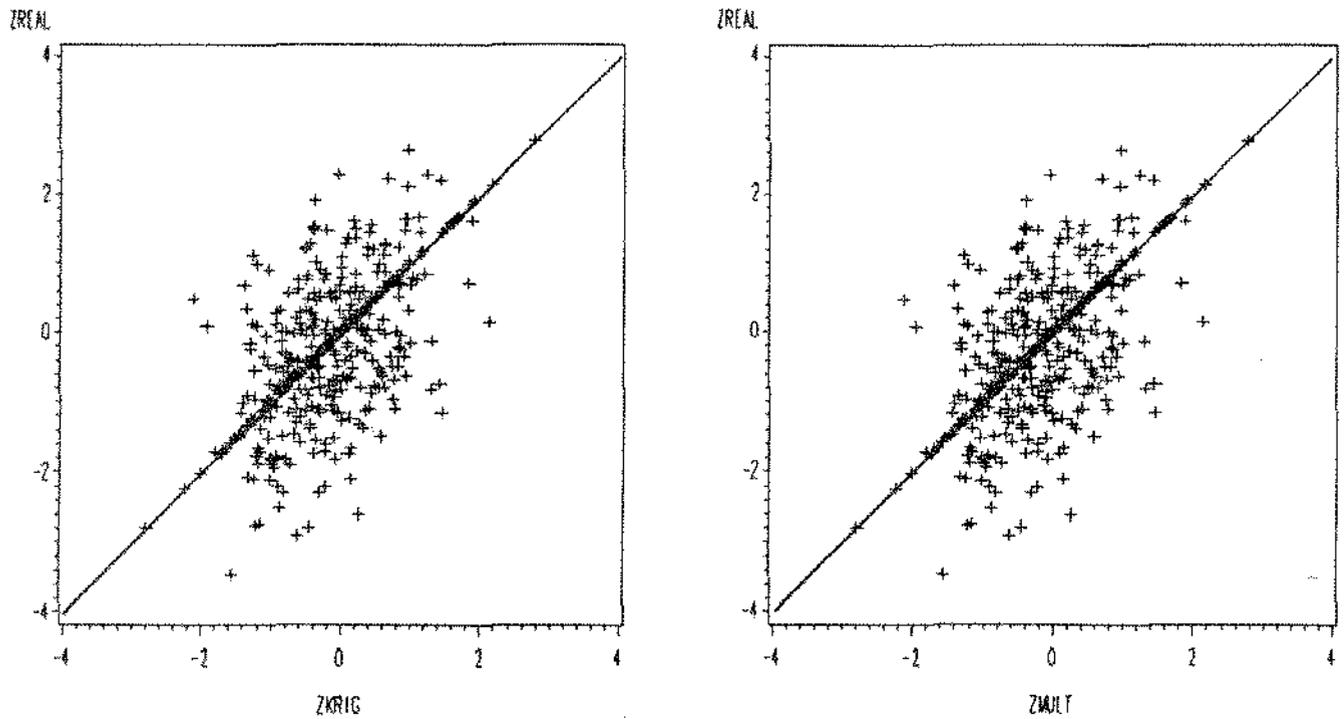
As estimativas obtidas com os preditores Kriging e multiquádrico em relação aos valores simulados quando o processo estocástico possui função de covariância $C(r)=\exp(-r)$, são mostradas na Figura 4.2.2. Pode-se observar que a dispersão em torno da reta valor predito=valor simulado é semelhante para os dois métodos.



(a) n=30



(b) n=50



(c) n=100

Figura 4.2.2. Estimativas obtidas com os preditores Kriging e multiquádrico em relação aos valores simulados, quando o processo estocástico possui função de covariância $C(r) = \exp(-r)$.

Portanto, quando o processo estocástico é de covariância estacionária e isotrópico, com função de covariância exponencial, o desempenho do método multiquádrico em relação ao Kriging mostrou-se bastante satisfatório. Neste caso, o método multiquádrico pode ser utilizado como método alternativo ao Kriging.

APLICAÇÃO DOS MÉTODOS DE PREDIÇÃO A UM CONJUNTO DE DADOS REAIS

Apresenta-se, neste capítulo, uma aplicação desenvolvida a partir da metodologia descrita no Capítulo 2.

Para tal, utilizou-se um conjunto de dados geológicos, pertencentes a Jazida de Carvão de Cerquilha (S.P.), cedido pelo Prof. Dr. Job Jesus Batista do Instituto de Geociências da UNICAMP.

A seção 5.1 traz uma breve descrição dos dados utilizados. Na seção 5.2 os dois métodos de predição, Kriging e multiquádrico, são aplicados ao conjunto de dados, sendo abordada a estimação da função de covariância de um processo estocástico. A seção 5.3 apresenta algumas conclusões obtidas.

5.1. Descrição dos dados

Os dados aqui utilizados são referentes à espessura da camada total de minério e espessura de carvão na camada (em ms) obtidos através de furos de sondagens, poços, trincheiras ou bocas de galeria em 81 locais de depósito de Cerquilha. Os locais de observação são dados em coordenadas UTM (N-S e E-W).

Denotaremos a espessura da camada total de minério e espessura de carvão na camada no i -ésimo ponto de observação por, respectivamente, $z(x_i, y_i)$ e $w(x_i, y_i)$, onde (x_i, y_i) $i=1, 2, \dots, 81$ representa as coordenadas UTM, sendo x a coordenada leste-oeste (E-W) e y a coordenada norte-sul (N-S).

O conjunto de dados é apresentado no Apêndice B e a

localização dos 81 pontos de observação pode ser visto na Figura 5.1.1.

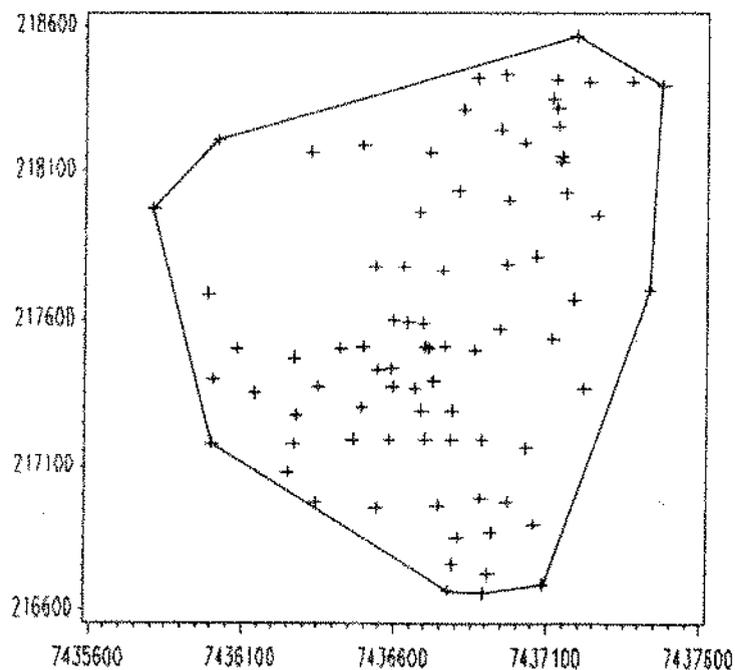


Figura 5.1.1. Localização dos 81 pontos de observação das espessuras de minério de Cerquilha com o desenho da envoltória convexa dos mesmos.

5.2. Aplicação dos métodos de predição

Com base nos valores das espessuras nos pontos observados (x_i, y_i) $i=1,2,\dots,81$ desejamos prever o valor das espessuras num ponto (x_0, y_0) não observado. Torna-se importante definir uma área de interesse D , que seria o domínio dos pontos amostrados. Assim, a predição das espessuras será feita para pontos $(x_0, y_0) \in D$.

A esta área de interesse denomina-se envoltória convexa. Segundo Eddy (1977), a envoltória convexa de um conjunto planar é o

polígono convexo de área mínima que engloba o conjunto planar. Um polígono convexo é claramente determinado pelos seus vértices. Assim, para o conjunto de pontos (x_i, y_i) $i=1,2,\dots,81$ do depósito de Cerquilho, utilizamos o algoritmo proposto por Eddy (1977) para determinar que pontos do conjunto planar são vértices do polígono convexo. A envoltória convexa obtida é apresentada na Figura 5.1.1.

Definida a envoltória convexa D dos dados, é preciso saber se o ponto (x_0, y_0) pertence ou não a D . Yamamoto (1988) testa dois algoritmos que determinam a posição de um ponto em relação a um polígono: um proposto por Hall (1975) e outro por Anderson (1976). Sua conclusão é de que o primeiro é sempre mais preciso e confiável em relação ao segundo. Assim, utilizamos o algoritmo de Hall (1975) para a determinação da posição do ponto (x_0, y_0) com a área de interesse D .

Passaremos agora à predição das espessuras de minério do depósito de Cerquilho através dos métodos Kriging e multiquádrico. As predições foram feitas em 220 pontos dentro da área de interesse D , regularmente distribuídos, sendo que a distância entre dois pontos consecutivos, fixada uma das coordenadas UTM (N-S ou E-W), é de 100m.

5.2.1. Método Kriging

Conforme a literatura de geostatística, é razoável assumir que a espessura de uma camada de minério, que no nosso caso é o carvão, é uma realização de um processo estocástico.

Portanto, suponha que $z(x,y)$ e $w(x,y)$ sejam realizações de processos estocásticos de covariância estacionária $\{Z(x,y), (x,y) \in \mathbb{R}^2\}$ e $\{W(x,y), (x,y) \in \mathbb{R}^2\}$, respectivamente. Utilizaremos então o preditor Kriging ordinário, definido na seção 2.1 para a predição de $Z(x_0, y_0)$ e $W(x_0, y_0)$, $(x_0, y_0) \in D$.

O primeiro problema que surge na predição pelo método Kriging é o fato de que a função de covariância, e conseqüentemente a função semi-variograma, não é conhecida. É necessário então estimá-la.

Estimação da função de covariância

Suponha, inicialmente, que os pontos amostrados no plano se distribuam em uma malha regular. Em geologia, estima-se a função semi-variograma $\gamma(h)$ na direção θ através do semi-variograma amostral

$$\hat{\gamma}_{\theta}(h) = \frac{1}{2N(h_{\theta})} \sum_{i=1}^{N(h_{\theta})} [z(x_i) - z(x_i+h)]^2, \quad x_i \in \mathbb{R}^2 \quad (5.2.1)$$

onde $N(h_{\theta})$ é o número de pares de pontos distanciados de h segundo a direção θ .

A estimação do semi-variograma em várias direções tem por objetivo revelar as anisotropias que possam existir na jazida investigada. Em geral, utiliza-se as 4 direções principais (N-S, E-W, NW-SE e NE-SW).

Na prática, os pontos amostrados se encontram distribuídos irregularmente sobre a área pesquisada. O semi-variograma amostral terá então de ser calculado a partir de uma regularização angular e por classes de distância, segundo o esquema da Figura 5.2.1. Tomando-se um ponto qualquer (x_1, y_1) , considera-se segundo a direção θ , um cone de abertura $2\delta\theta$ e procura-se os pontos que caíam 'dentro' do cone nas classes de distância $h \pm \epsilon(h)$. A seleção de quais pontos pertencem a um determinado cone pode ser feita usando a tangente do ângulo, conforme mostra a Figura 5.2.2, no caso de utilizar-se quatro direções (Delfiner, 1979).

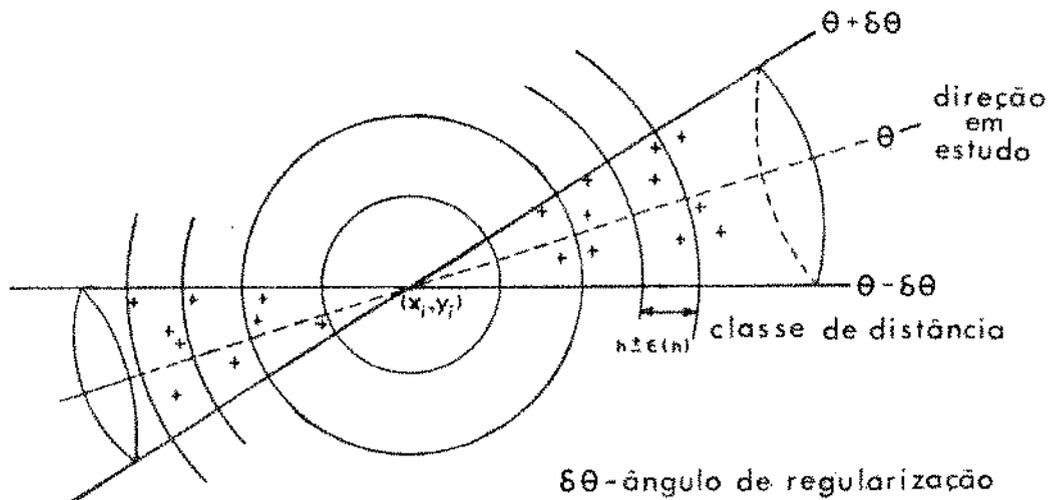


Figura 5.2.1. Esquema mostrando a regularização angular e classes de distâncias utilizadas no cálculo do semi-variograma amostral.

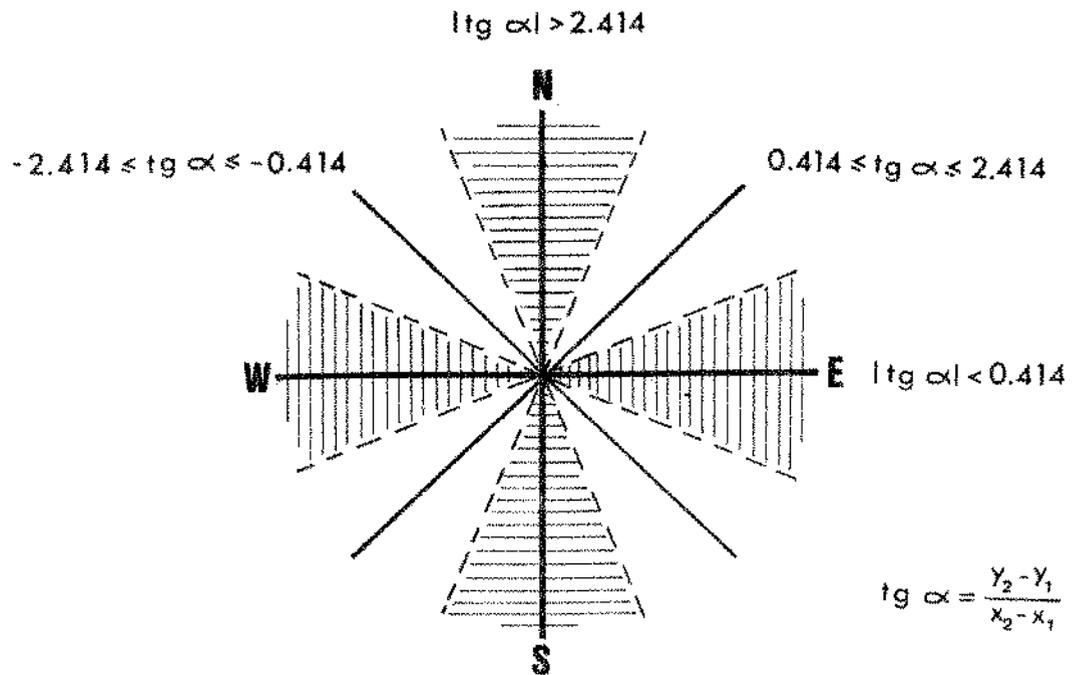


Figura 5.2.2. Esquema mostrando a utilização da tangente do ângulo na regularização angular.

Uma vez estimados os valores de $\gamma(h)$, constrói-se um gráfico dos pontos $(h, \hat{\gamma}_\theta(h))$, para cada direção θ . Com base neste gráfico, ajusta-se um modelo para a função semi-variograma, e conseqüentemente um modelo para a função de covariância, uma vez que

$$C(h) = C(0) - \gamma(h),$$

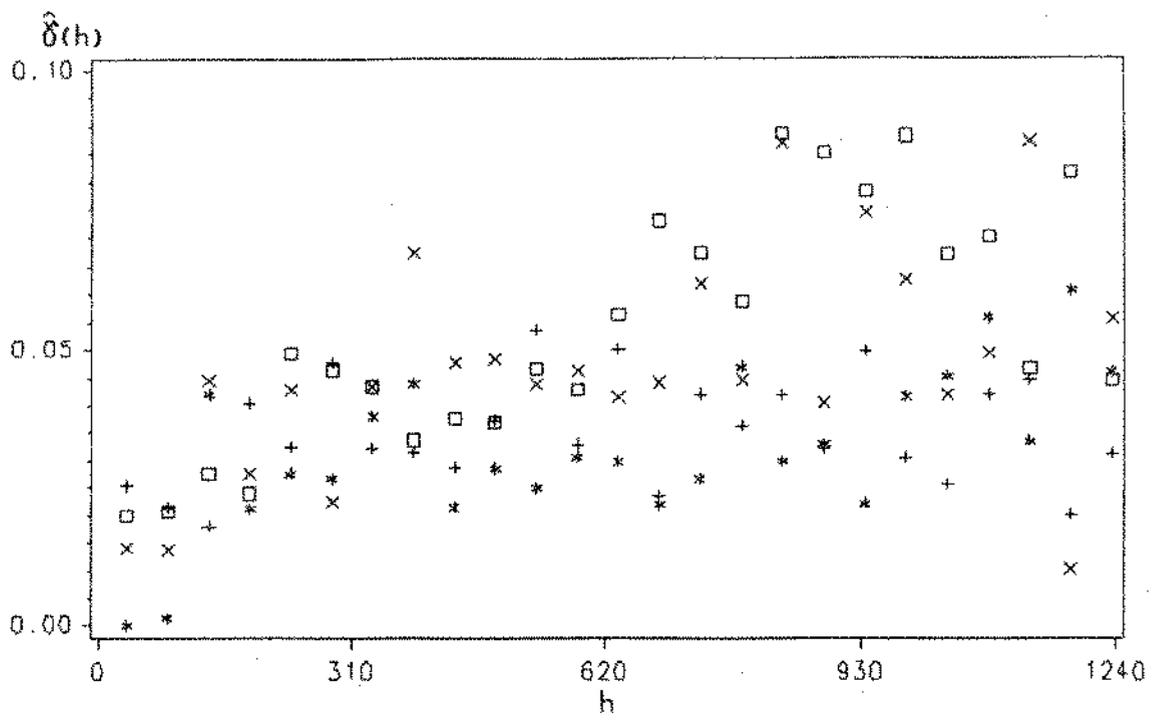
conforme visto na seção 1.1 do Capítulo 1.

Normalmente, a escolha de um modelo para o ajuste da função semi-variograma é feita visualmente dentre os modelos semi-variográficos mais comuns, embora existam testes, não muito divulgados, que visam determinar se os dados experimentais se conformam com o modelo teórico específico que estamos ajustando (Valente, 1982). Uma outra observação, feita pelo mesmo autor, é que, na prática, calcula-se o semi-variograma amostral apenas para distâncias que não excedam 1/4 (em alguns casos 1/2) das dimensões do campo. Isso porque, quando h cresce em demasia, diminui-se o número de pares de pontos considerados, e por conseqüência, fica prejudicada a precisão dos resultados obtidos.

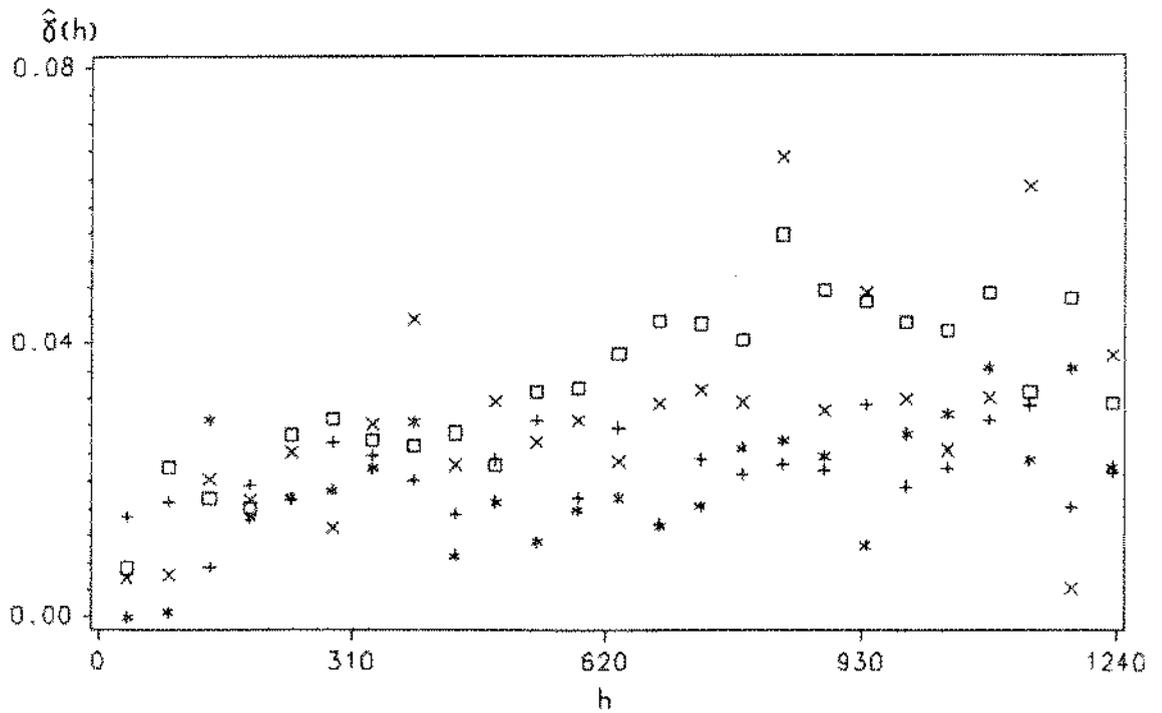
A partir da metodologia exposta acima, faremos a estimação da função de covariância de $Z(x,y)$ e $W(x,y)$.

O cálculo dos semi-variogramas amostrais foram feitos nas 4 direções principais: N-S, E-W, NW-SE e NE-SW. Os gráficos encontram-se na Figura 5.2.3, onde observa-se uma isotropia nas 4 direções "variografadas". Desta forma, assumiu-se que os processos estocásticos geradores das espessuras do minério são isotrópicos. Assim, foram calculados os semi-variogramas amostrais considerando-se apenas o comprimento r do vetor h (Figura 5.2.4).

Para o ajuste dos modelos semi-variográficos utilizou-se o método iterativo de Gauss-Newton, onde foram considerados os modelos esférico e exponencial (Capítulo 1 - seção 1.1).

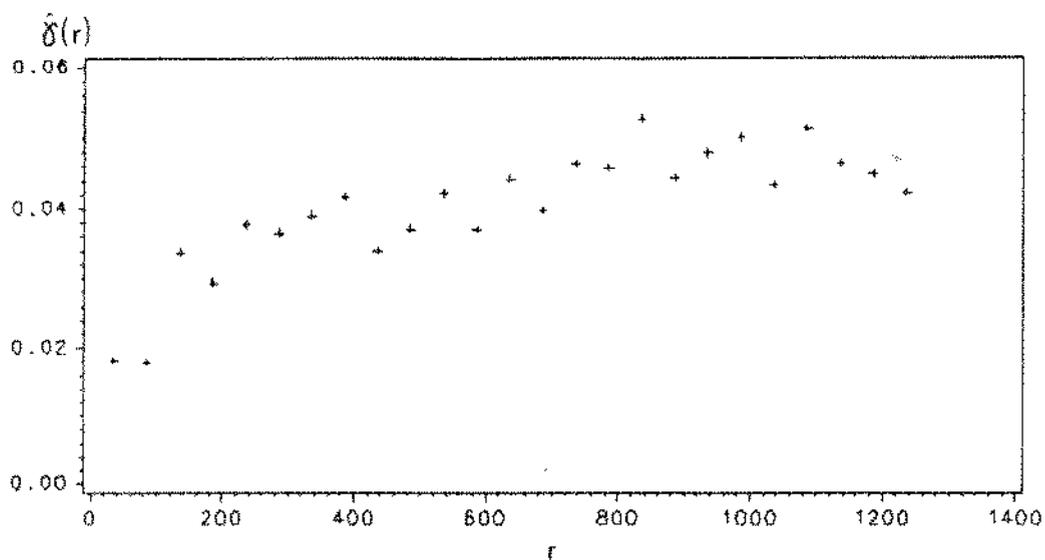


(a)

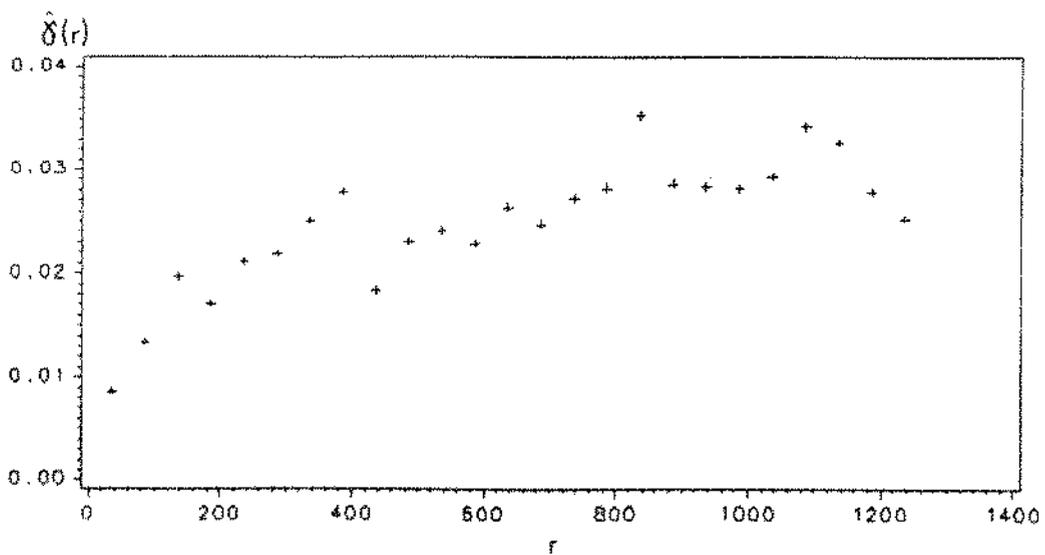


(b)

Figura 5.2.3. Semi-variogramas amostrais para (a) espessura da camada total de minério e (b) espessura de carvão na camada, nas direções (X) E-W, (+) N-S, (*) NW-SE e (□) NE-SW.



(a)



(b)

Figura 5.2.4. Semi-variogramas amostrais para (a) espessura da camada total de minério e (b) espessura de carvão na camada, assumindo isotropia dos processos estocásticos geradores.

A Soma de Quadrados do Erro (SQE) obtida para cada modelo semi-variográfico considerado, segundo o critério de convergência $(SQE_{i-1} - SQE_i)/(SQE_i + 10^{-6}) < 10^{-8}$, é apresentada na Tabela 5.2.1.

Tabela 5.2.1. Soma de Quadrados do Erro obtida pelo método iterativo de Gauss-Newton.

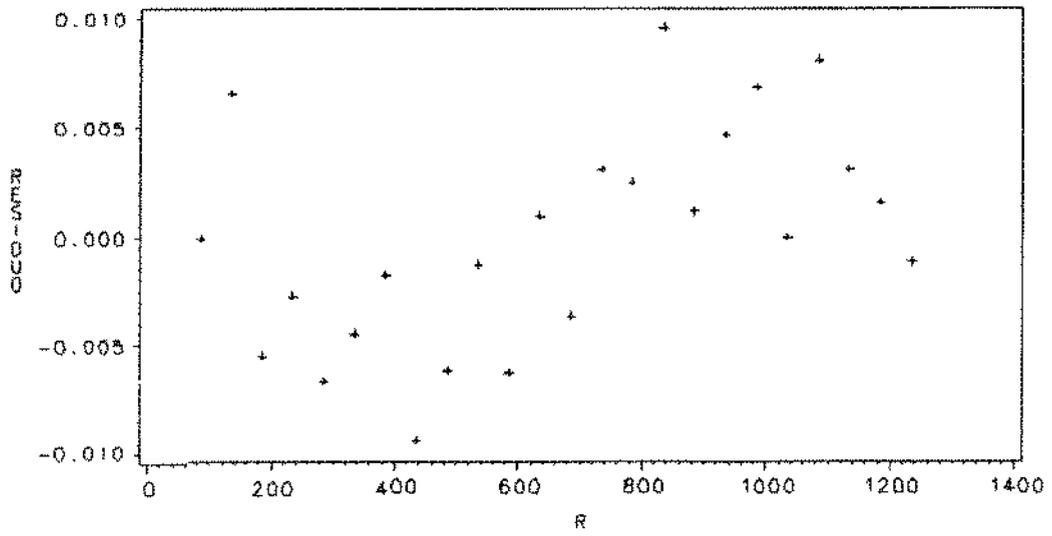
	Soma de Quadrados do Erro ($\times 10^{-4}$)	
	Modelo Esférico	Modelo Exponencial
Espessura da camada total de minério	6,98	4,92
Espessura de carvão na camada	3,78	2,77

Através dos gráficos de resíduos (Figuras 5.2.5 e 5.2.6), observa-se, para o caso do modelo esférico, uma possível inadequação de modelo teórico adotado.

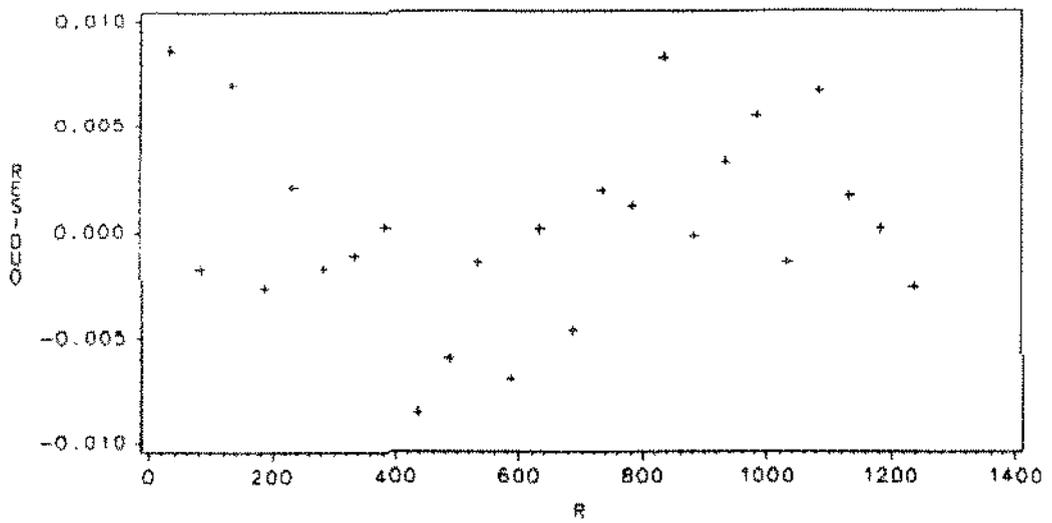
Optou-se portanto, pelo modelo semi-variográfico exponencial sendo que as estimativas dos parâmetros encontram-se na Tabela 5.2.2, onde o valor entre parêntesis é o desvio padrão assintótico de estimativa.

Tabela 5.2.2. Estimativas dos parâmetros do modelo semi-variográfico exponencial encontrados através do método iterativo de Gauss-Newton.

	Parâmetros	
	σ^2	$c=1/a$
Espessura da camada total de minério	0.0448 (0.0012)	0.0067 (0.0010)
Espessura de carvão na camada	0.0282 (0.0010)	0.0058 (0.0010)

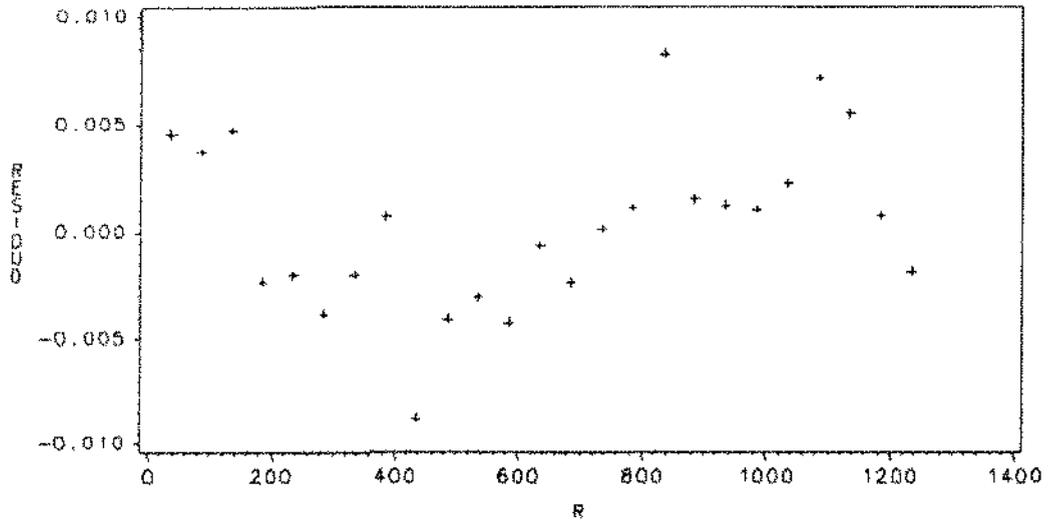


(a)

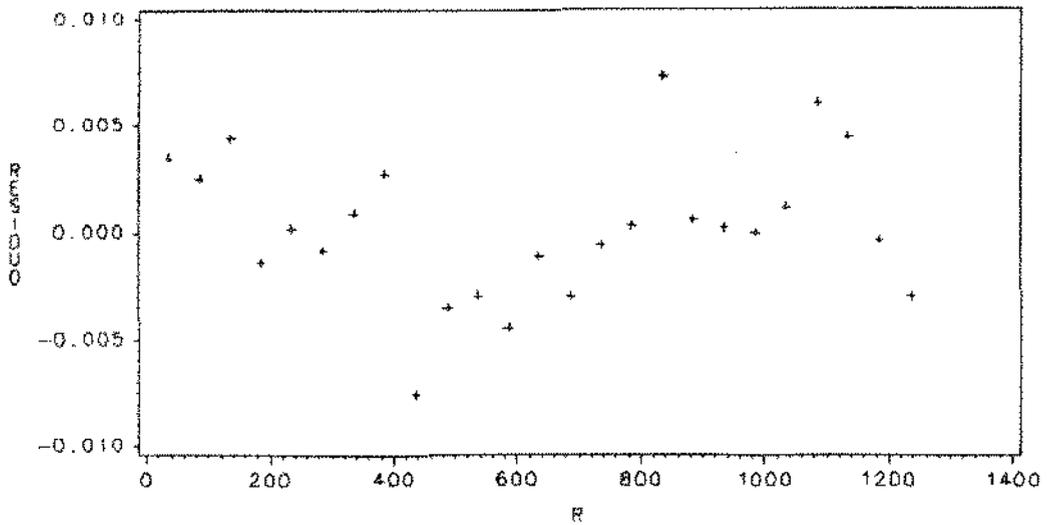


(b)

Figura 5.2.5. Gráfico de resíduos do ajuste do modelo semi-variográfico (a) esférico e (b) exponencial para a espessura da camada total de minério.



(a)



(b)

Figura 5.2.6. Gráfico de resíduos do ajuste do modelo semi-variográfico (a) esférico e (b) exponencial para a espessura de carvão na camada.

É importante salientar que o nosso objetivo é obter uma estimativa 'razoável' da função semi-variograma para fins de predição pelo método Kriging e não para examinação de características geológicas estruturais (Análise Estrutural) da jazida de Cerquilho. Para uma análise com essas características, a adoção de um modelo semi-variográfico deveria ser mais criterioso, envolvendo um maior conhecimento da jazida em estudo. Já para a estimação pelo método Kriging, uma deficiência na escolha do modelo semi-variográfico vai ter menores consequências uma vez que o preditor correspondente é relativamente robusto (Petenate, 1983 e Valente, 1982).

Predição de $Z(x_0, y_0)$ e $W(x_0, y_0)$, $(x_0, y_0) \in D$

O preditor Kriging ordinário de $Z(x_0, y_0)$, baseado nas 81 observações $Z(x_1, y_1), Z(x_2, y_2), \dots, Z(x_{81}, y_{81})$ das espessuras da camada total de minério é dada, conforme a expressão (2.1.5), por

$$\hat{Z}(x_0, y_0) = k_0' K^{-1} Z(\underline{x}, \underline{y}) + \frac{1 - 1' K^{-1} k_0}{1' K^{-1} 1} 1' K^{-1} Z(\underline{x}, \underline{y})$$

onde $Z'(\underline{x}, \underline{y}) = (Z(x_1, y_1), Z(x_2, y_2), \dots, Z(x_{81}, y_{81}))$.

A variância deste preditor é

$$\text{Var}[\hat{Z}(x_0, y_0)] = k_0' K^{-1} k_0 + \frac{(1 - k_0' K^{-1} 1)^2}{1' K^{-1} 1}$$

Utilizando o modelo semi-variográfico estimado, obteve-se as predições para a espessura da camada total de minério nos pontos $(x_0, y_0) \in D$. A Figura 5.2.7 apresenta essas predições, onde o valor entre parêntesis é o desvio padrão do preditor.

De maneira análoga, obteve-se as predições para a espessura de carvão na camada, mostradas na Figura 5.2.8.

A representação gráfica dessas predições pode ser feita através de mapas de contorno (Figuras 5.2.9 e 5.2.10).

5.2.2. Método Multiquádrico

Para o método multiquádrico não é necessário que se faça suposições a respeito da função $z(x,y)$ a ser estimada. Assim, as predições para a espessura da camada total de minério nos pontos $(x_0, y_0) \in D$ foram feitas através da expressão (2.2.4), onde utilizou-se a função q_2 com $b=0$, devido aos resultados encontrados no Capítulo 4.

Se considerarmos a função $z(x,y)$ como uma realização de um processo estocástico de covariância estacionária, a variância do preditor multiquádrico é dada por

$$\text{Var}[\tilde{Z}(x_0, y_0)] = \mathbf{q}_0' \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{K} \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{q}_0.$$

As Figuras 5.2.11 e 5.2.12 apresentam as predições encontradas para a espessura da camada total de minério e espessura de carvão na camada nos pontos $(x_0, y_0) \in D$, respectivamente, onde o desvio padrão do preditor (valor entre parêntesis) foi calculado utilizando-se a função de covariância estimada no item anterior.

A representação gráfica dessas predições através de mapas de contorno encontra-se nas Figuras 5.2.13 e 5.2.14.

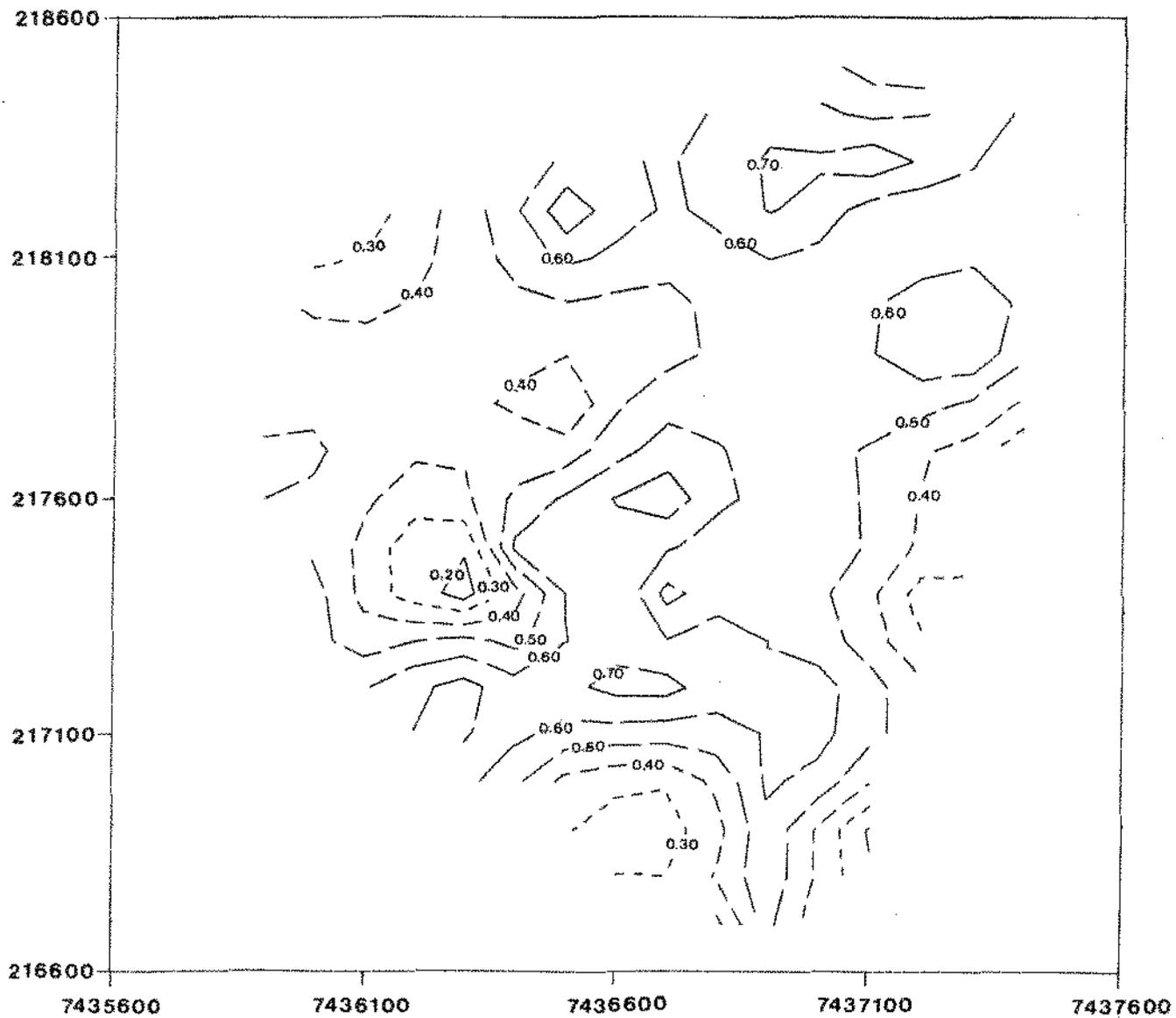


Figura 5.2.9. Mapa de contorno para a espessura da camada total de minério estimada pelo método Kriging.

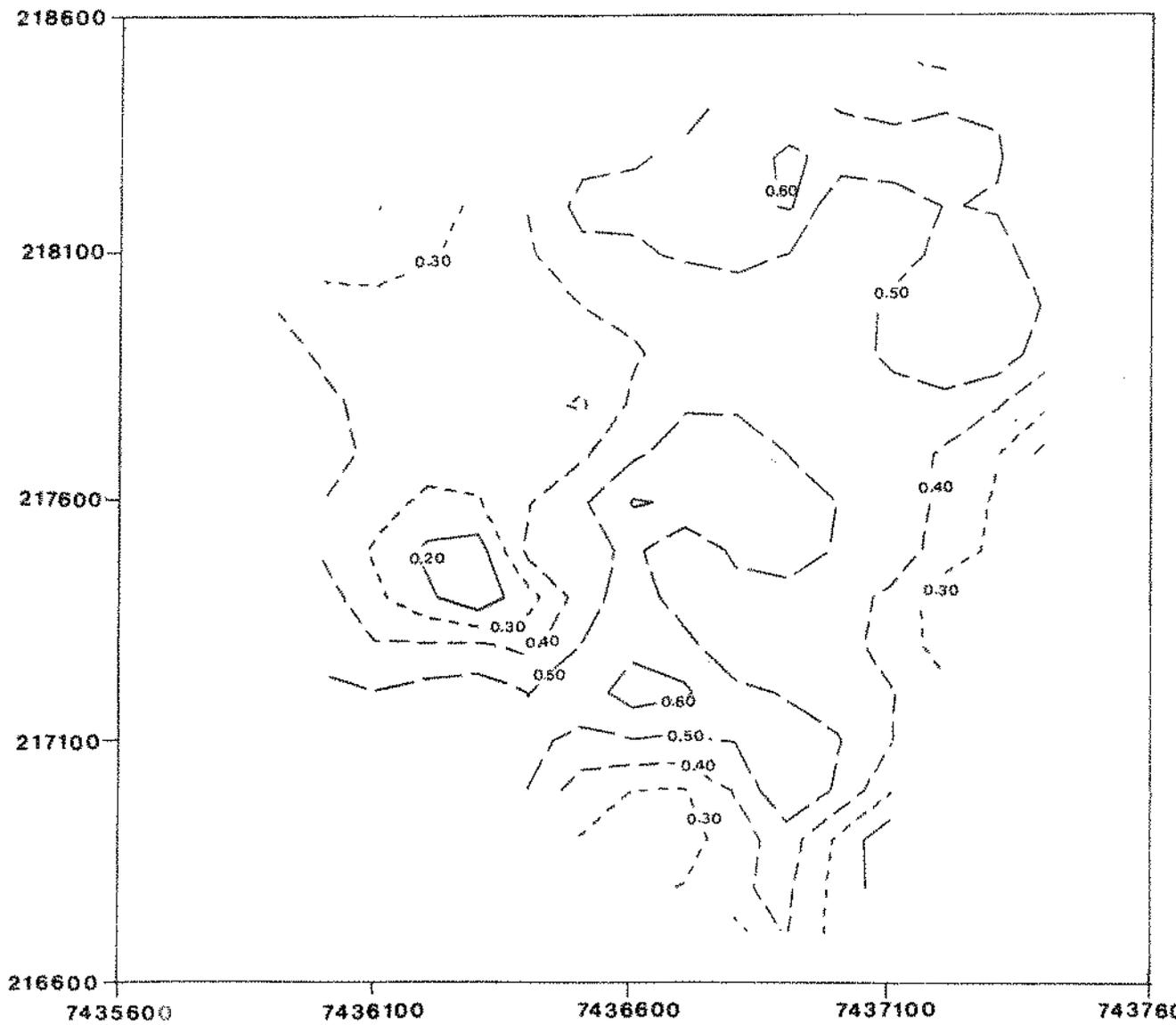


Figura 5.2.10. Mapa de contorno para a espessura de carvão na camada estimada pelo método Kriging.

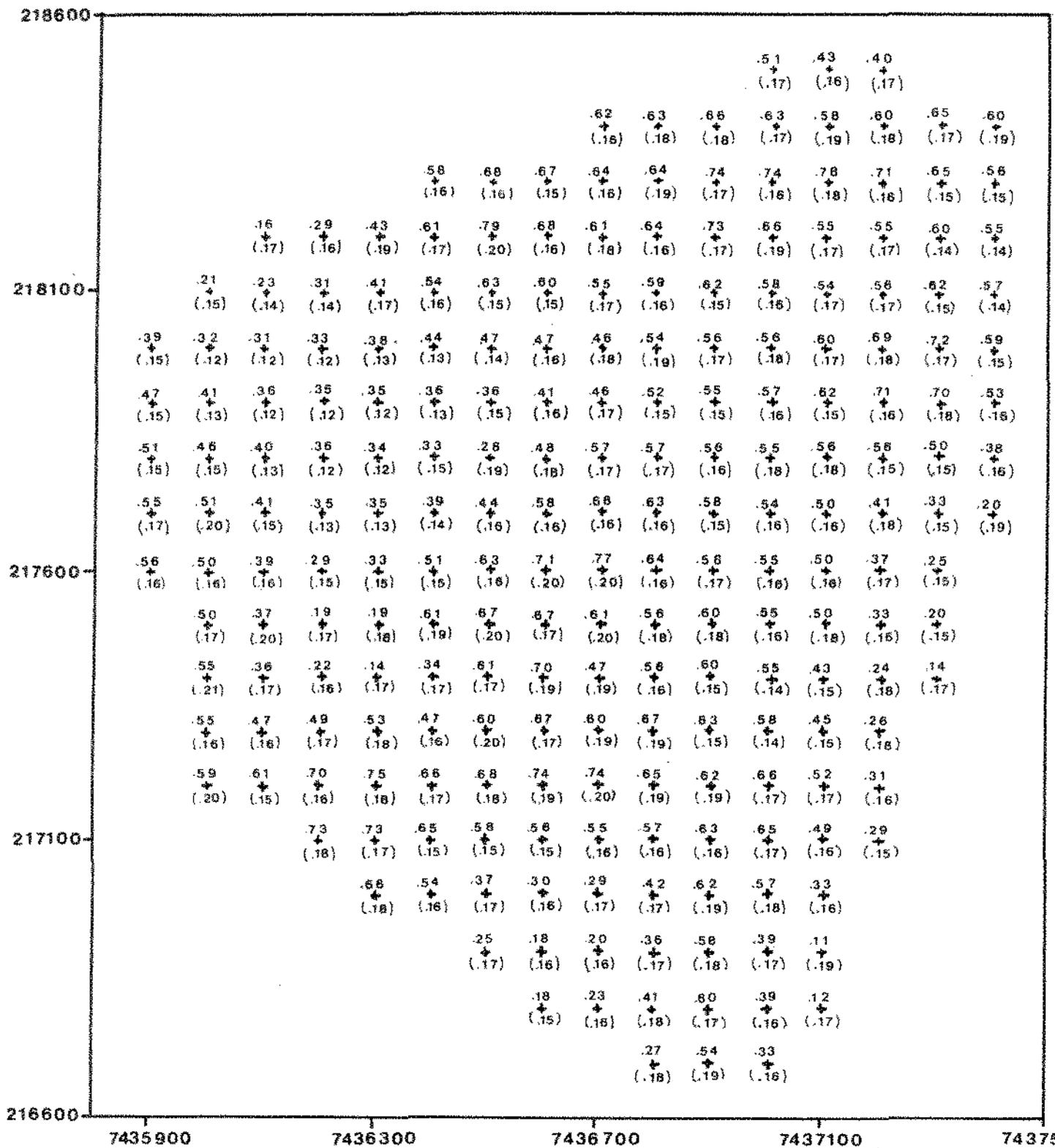


Figura 5.2.11. Predições para a espessura da camada total de minério pelo método Multiquádrico.

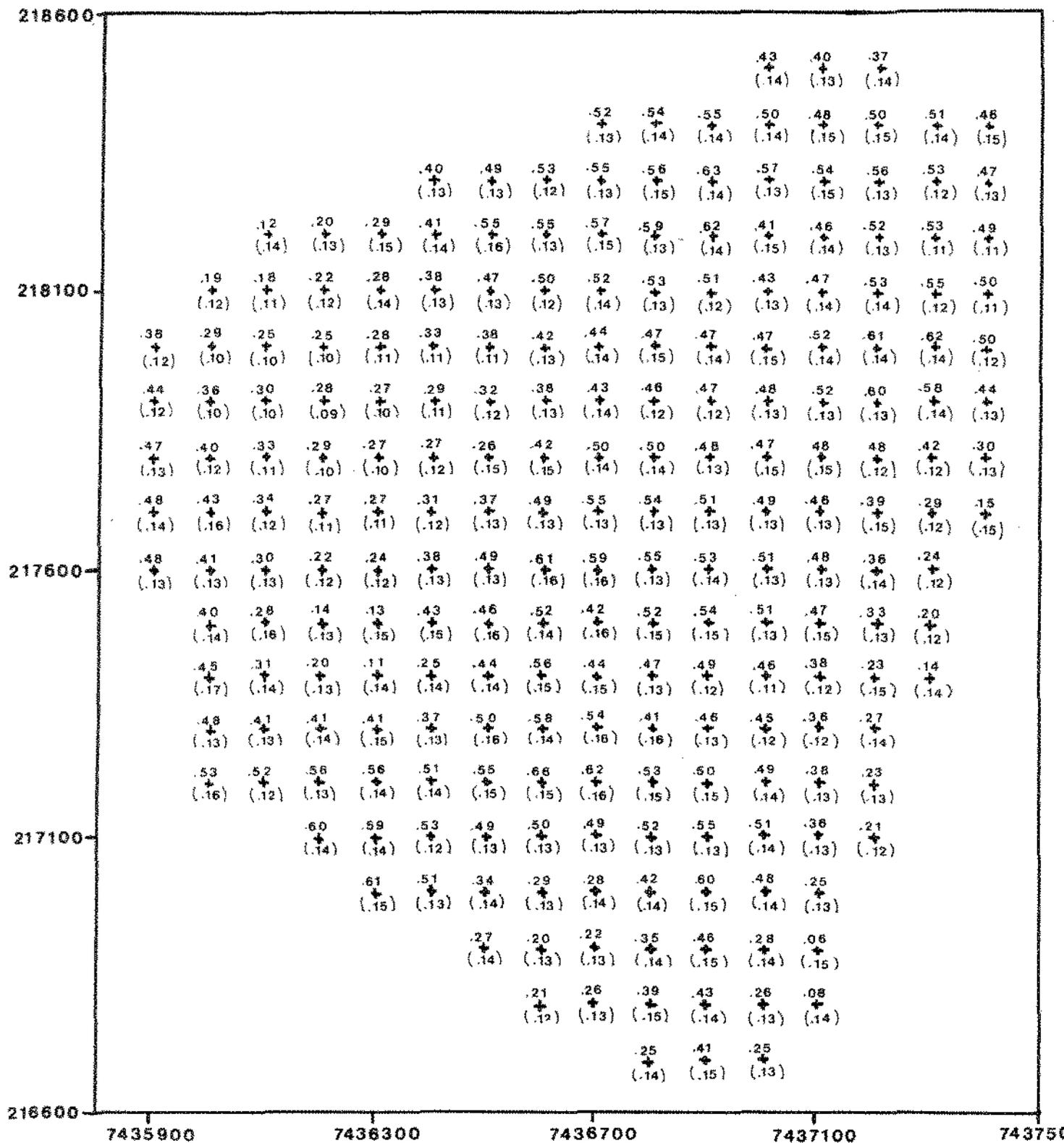


Figura 5.2.12. Predições para a espessura de carvão na camada pelo método multiquádrico.

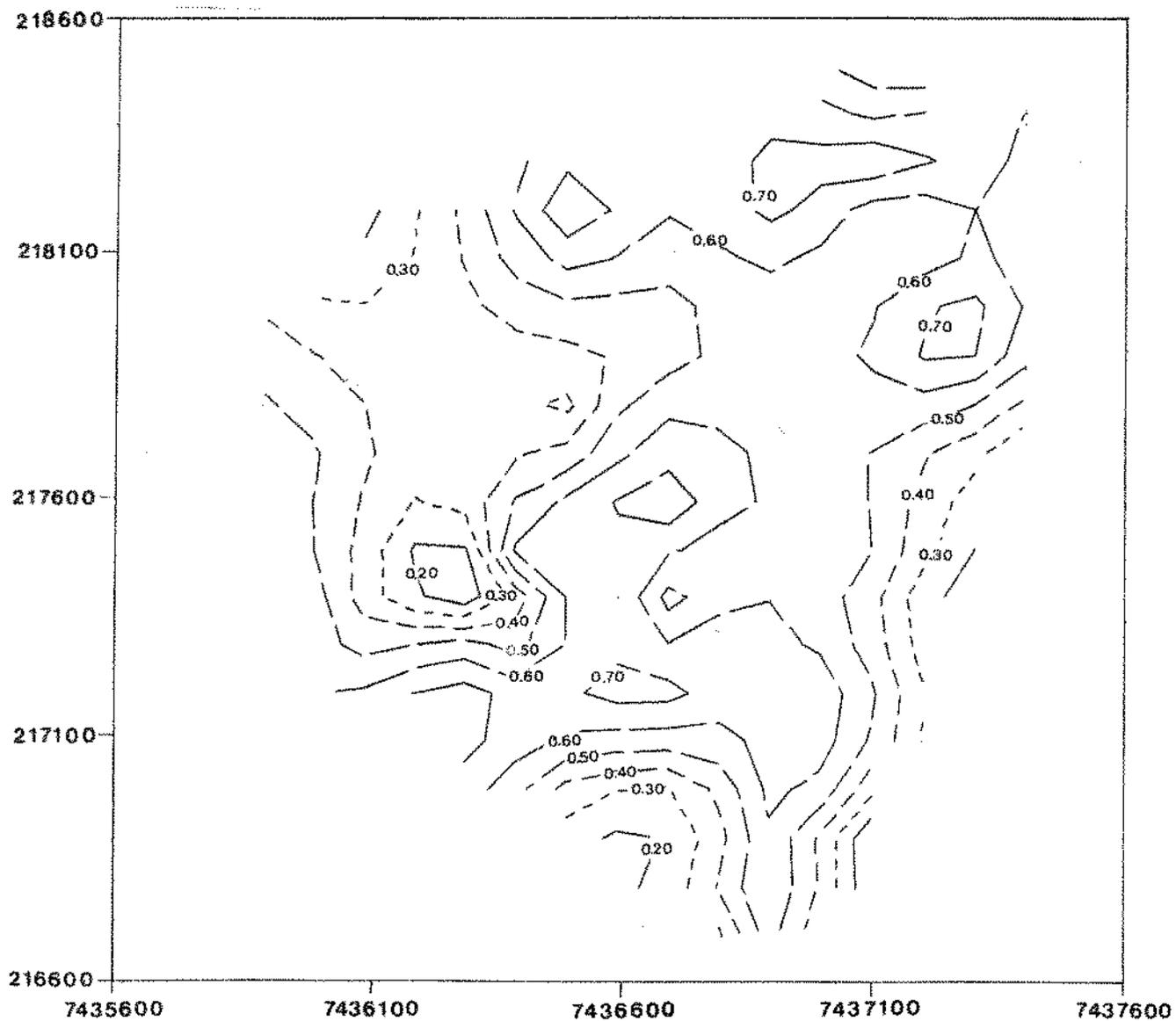


Figura 5.2.13. Mapa de contorno para a espessura da camada total de minério estimada pelo método multiquádrico.

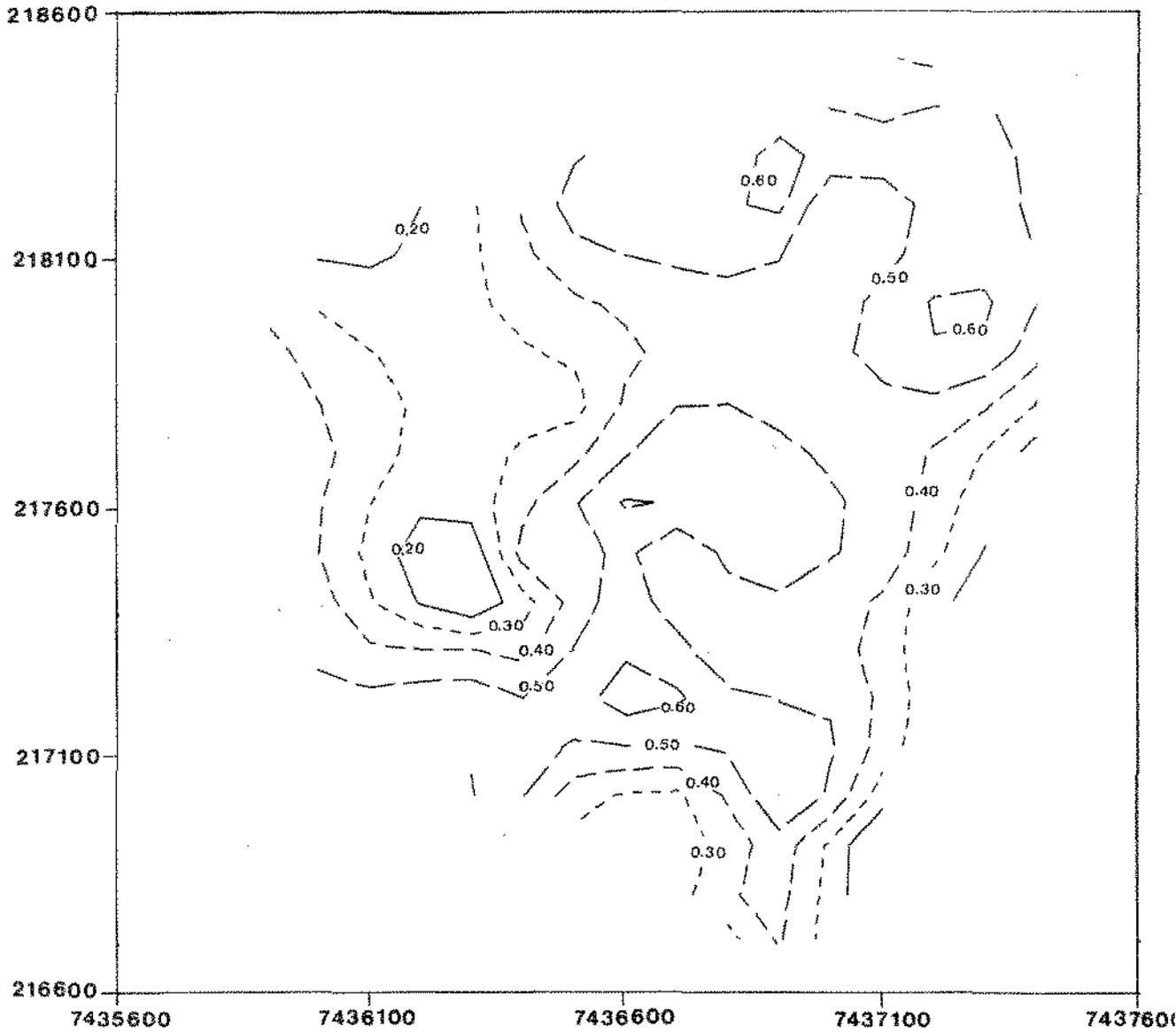


Figura 5.2.14. Mapa de contorno para a a espessura de carvão na camada estimada pelo método multiquadrático.

5.2.3. Nota sobre os cálculos

Com exceção da estimação do semi-variograma amostral, calculada através de um programa desenvolvido em linguagem Turbo Pascal, a ferramenta utilizada para os cálculos e gráficos foi o software SAS. Para o ajuste do modelo semi-variográfico através do método iterativo de Gauss-Newton foi utilizado o procedimento NLIN. As predições das espessuras pelos dois métodos, Kriging e multiquádrico, nos pontos $(x_0, y_0) \in D$ foram feitas através de um programa SAS IML (Interactive Matrix Languages). Com relação aos gráficos, utilizou-se o SAS GRAPH para gerá-los.

5.3. Conclusão

Tanto na predição da espessura da camada total quanto na predição da espessura de carvão na camada, as estimativas pelos dois métodos não diferem significativamente. Observa-se que o método multiquádrico fornece estimativas um pouco maiores das fornecidas pelo Kriging para valores acima da média estimada ($\hat{m}_Z = 0.53\text{m}$ e $\hat{m}_W = 0.44\text{m}$, para a espessura da camada total de minério e espessura de carvão na camada, respectivamente), e menores para valores abaixo dela.

Uma vantagem do método multiquádrico é que nenhuma suposição a respeito do processo estocástico é exigida. O mesmo não ocorre com o Kriging, que ainda possui o inconveniente da estimação da função de covariância quando esta não é conhecida.

Apêndice A

Na seção 2.2 foi feita uma restrição ao uso da função q_1 porque, em geral, a matriz $Q:n \times n$ correspondente é singular quando $p=2$. Esse resultado é provado a seguir.

Teorema. Dado n pontos P_1, P_2, \dots, P_n em \mathbb{R}^2 , seja $D:n \times n$ a matriz cujo elemento (i, j) é dado pelo quadrado da distância entre os pontos P_i e P_j . Isto é $d^2(P_i, P_j) = (x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2$, onde (x_i, y_i) é a coordenada do ponto P_i , $i=1, 2, \dots, n$, e seja $W = D + b^2 \mathbf{1}\mathbf{1}'$, onde $\mathbf{1}$ é um vetor coluna composto de n 1's e b uma constante qualquer. Então,

$$n \geq 5 \text{ implica que } \det D = 0$$

e

$$n > 5 \text{ implica que } \det W = 0 .$$

A prova do teorema acima utiliza dois lemas elementares.

Lema 1. Dado quatro pontos P_1, P_2, P_3, P_4 em \mathbb{R}^2 , $\det D = 0$ se e somente se P_1, P_2, P_3, P_4 pertencem a uma circunferência.

Prova: A equação da circunferência que passa pelos pontos P_1, P_2 e P_3 pode ser escrita em termos de determinantes da seguinte forma

$$\begin{vmatrix} x_1^2 + y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ x_2^2 + y_2^2 & x_2 & y_2 & 1 \\ x_3^2 + y_3^2 & x_3 & y_3 & 1 \\ x^2 + y^2 & x & y & 1 \end{vmatrix} = 0$$

Como $P_4 = (x_4, y_4)$ pertence à circunferência, ele satisfaz a equação acima. Seja

$$M = \begin{vmatrix} x_1^2 + y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ x_2^2 + y_2^2 & x_2 & y_2 & 1 \\ x_3^2 + y_3^2 & x_3 & y_3 & 1 \\ x_4^2 + y_4^2 & x_4 & y_4 & 1 \end{vmatrix}$$

e portanto,

$$-4M = \begin{vmatrix} 1 & -2x_1 & -2y_1 & x_1^2 + y_1^2 \\ 1 & -2x_2 & -2y_2 & x_2^2 + y_2^2 \\ 1 & -2x_3 & -2y_3 & x_3^2 + y_3^2 \\ 1 & -2x_4 & -2y_4 & x_4^2 + y_4^2 \end{vmatrix}$$

Utilizando as propriedades $\det(AB) = \det A \cdot \det B$ e $\det B' = \det B$ temos,

$$-4M^2 = \begin{vmatrix} \begin{bmatrix} x_1^2 + y_1^2 & x_1 & y_1 & 1 \\ x_2^2 + y_2^2 & x_2 & y_2 & 1 \\ x_3^2 + y_3^2 & x_3 & y_3 & 1 \\ x_4^2 + y_4^2 & x_4 & y_4 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ -2x_1 & -2x_2 & -2x_3 & -2x_4 \\ -2y_1 & -2y_2 & -2y_3 & -2y_4 \\ x_1^2 + y_1^2 & x_2^2 + y_2^2 & x_3^2 + y_3^2 & x_4^2 + y_4^2 \end{bmatrix} \end{vmatrix}$$

A multiplicação da i -ésima linha da primeira matriz pela j -ésima coluna da segunda matriz é igual a

$$\begin{aligned} & x_1^2 + y_1^2 - 2x_1x_j - 2y_1y_j + x_j^2 + y_j^2 \\ & = (x_j - x_1)^2 + (y_j - y_1)^2 = d^2(P_1, P_j) \quad i, j=1, 2, 3, 4. \end{aligned}$$

Logo,

$$-4M^2 = \det D \quad .$$

Portanto, se os pontos P_1, P_2, P_3 e P_4 estão sob uma circunferência isto é $M = 0$, então $\det D = 0$. Por outro lado, se $\det D = 0$ então $M = 0$, ou seja P_1, P_2, P_3 e P_4 pertencem a uma circunferência.

Lema 2. Seja P_1, P_2, P_3, P_4 quatro pontos em \mathbb{R}^2 não pertencentes a uma circunferência. Para qualquer ponto $P = (x, y)$ seja

$$d_P = \begin{bmatrix} d^2(P, P_1) \\ d^2(P, P_2) \\ d^2(P, P_3) \\ d^2(P, P_4) \end{bmatrix} .$$

Então, para quaisquer P_A e $P_B \in \mathbb{R}^2$,

$$d_{P_A}^T D^{-1} d_{P_B} = d^2(P_A, P_B) .$$

Prova: Fixado P_B define-se

$$\phi(P_A) = d_{P_A}^T D^{-1} d_{P_B} - d^2(P_A, P_B) .$$

$\phi(P_A)$ é função das coordenadas (x_A, y_A) da seguinte forma

$$\alpha(x_A^2 + y_A^2) + \beta x_A + \gamma y_A + \delta .$$

Além disso, $\phi(P_1) = \phi(P_2) = \phi(P_3) = \phi(P_4) = 0$. Então, $\alpha = \beta = \gamma = \delta = 0$ a não ser que P_1, P_2, P_3, P_4 estejam sob uma circunferência (ou em linha

reta); mas isso é eliminado por hipótese. Portanto,

$$\phi(P_A) = 0 .$$

Prova do Teorema: Considere P_1, P_2, \dots, P_n , $n \geq 5$. Podemos supor que existem quatro pontos entre eles que não pertencem a uma circunferência, pois caso contrário, P_1, P_2, \dots, P_n estão todos sob a mesma circunferência e, $\det D = 0$ é uma consequência do Lema 1.

Então suponha que P_1, P_2, P_3, P_4 não pertencem a uma circunferência, e decomponha D como

$$D = \left[\begin{array}{c|c} D_1 & d \\ \hline d' & \Omega \end{array} \right]$$

onde $D_1: 4 \times 4$, $d: 4 \times (n-4)$ e $\Omega: (n-4) \times (n-4)$.

Então,

$$\det D = \det D_1 \cdot \det(\Omega - d' D_1^{-1} d) .$$

Mas pelo Lema 2,

$$\Omega = d' D_1^{-1} d .$$

Portanto,

$$\det D = 0 .$$

Finalmente, para provar que $\det W = 0$ quando $n \geq 6$, utiliza-se a seguinte decomposição do determinante de uma soma:

Se $A = [A_1 \ A_2 \ \dots \ A_n]$ e $B = [B_1 \ B_2 \ \dots \ B_n]$ onde os A_i 's e B_i 's são vetores coluna, então

$$\begin{aligned} \det(A + B) &= \det A + \det(A_1 \ A_2 \ \dots \ A_{n-1} \ B_n) + \\ &\quad + \det(A_1 \ A_2 \ \dots \ B_{n-1} \ A_n) + \dots + \\ &\quad + \det(A_1 \ B_2 \ \dots \ B_n) + \det B \ . \end{aligned}$$

Fazendo $A = D$ e $B = b^2 11'$ temos que todos os determinantes com duas ou mais colunas de B são iguais a zero. Por outro lado, aqueles tendo uma ou zero colunas de B , têm cinco ou mais colunas de A , e por uma adaptação da primeira parte do teorema eles devem ser iguais a zero também.

Portanto,

$$\det W = 0 \ .$$

O resultado do Teorema pode ser generalizado para \mathbb{R}^p , através da generalização da mesma sequência de lemas para \mathbb{R}^p . A chave dessa generalização é o fato de que uma esfera \mathbb{R}^p é determinada unicamente por $p + 1$ pontos distintos. Portanto, dado n pontos $P_1, P_2, \dots, P_n \in \mathbb{R}^p$, $n \geq p + 3$ implica que $\det D = 0$ e $n > p + 3$ implica que $\det W = 0$.

Apêndice B

Dados referentes a Jazida de Carvão de Cerquilho, S.P.

Local de Observação (i)	Coordenada UTM (em m)		Espessura (em m)	
	N - S (y_1)	E - W (x_1)	carvão na camada $w(x_1, y_1)$	camada total de minério $z(x_1, y_1)$
1	217775.00	7436624.90	0.50	0.60
2	217597.13	7436592.43	0.63	0.73
3	217364.58	7436664.02	0.40	0.40
4	217501.35	7436711.64	0.50	0.75
5	217590.46	7436641.26	0.50	0.60
6	217589.65	7436691.25	0.60	0.80
7	217289.69	7436686.44	0.58	0.63
8	217509.77	7436761.75	0.50	0.53
9	217288.09	7436786.43	0.40	0.70
10	217188.10	7436784.80	0.55	0.65
11	217186.50	7436884.80	0.50	0.60
12	216986.50	7436881.60	0.60	0.60
13	216848.07	7436804.80	0.36	0.36
14	217956.74	7436679.15	0.40	0.40
15	217776.46	7436532.70	0.25	0.25
16	217433.54	7436588.80	0.60	0.73
17	217389.06	7436726.40	0.45	0.45
18	217190.80	7436699.60	0.62	0.74
19	216867.00	7436915.80	0.41	0.61
20	216665.50	7436775.12	0.10	0.10
21	217159.35	7437030.37	0.50	0.70
22	218021.40	7437154.50	0.55	0.60
23	217944.80	7437259.20	0.70	0.85
24	218414.80	7437125.90	0.52	0.55
25	217430.80	7436544.60	0.46	0.65

(continuação)

26	218408.90	7437231.70	0.50	0.60
27	218146.87	7437142.43	0.30	0.30
28	218314.79	7437128.21	0.50	0.85
29	218353.00	7437114.75	0.42	0.63
30	218192.50	7437023.00	0.30	0.60
31	218407.42	7437370.74	0.51	0.70
32	218395.24	7437470.50	0.35	0.35
33	218128.80	7437140.25	0.53	0.53
34	218252.07	7437129.98	0.72	0.72
35	218563.00	7437188.44	0.25	0.25
36	217507.27	7436700.03	0.38	0.55
37	216756.00	7436788.00	0.40	0.40
38	216722.50	7436907.50	0.50	0.70
39	216657.50	7436890.00	0.25	0.25
40	216975.00	7436967.50	0.57	0.65
41	217370.40	7436347.47	0.08	0.08
42	217762.95	7436755.14	0.52	0.60
43	216962.70	7436740.00	0.20	0.20
44	216970.30	7436339.90	0.60	0.60
45	217397.70	7436004.14	0.45	0.55
46	217687.36	7435987.23	0.45	0.53
47	218207.60	7436015.46	0.05	0.05
48	218163.49	7436323.76	0.30	0.45
49	218161.09	7436712.06	0.57	0.57
50	217996.80	7436968.30	0.46	0.55
51	217568.06	7436941.88	0.52	0.56
52	217189.69	7436579.74	0.67	0.75
53	216955.02	7436539.60	0.20	0.20
54	217782.47	7436965.27	0.47	0.54
55	217370.94	7436592.14	0.58	0.75
56	217366.06	7437218.40	0.17	0.17
57	217667.08	7437183.98	0.38	0.38

(continuação)

58	218028.04	7436804.43	0.48	0.56
59	217495.35	7436861.32	0.56	0.61
60	217350.00	7436140.00	0.30	0.30
61	217509.28	7436493.90	0.46	0.67
62	217500.50	7436420.70	0.51	0.73
63	217810.00	7437063.18	0.48	0.57
64	216688.27	7437085.29	0.10	0.10
65	217533.74	7437114.76	0.50	0.52
66	217300.34	7436490.14	0.49	0.58
67	217696.32	7437430.64	0.10	0.15
68	218432.61	7436959.22	0.48	0.61
69	217971.25	7435806.25	0.50	0.50
70	218241.73	7436941.14	0.73	0.83
71	218185.40	7436492.72	0.55	0.81
72	217500.59	7436082.41	0.30	0.40
73	217472.29	7436269.07	0.03	0.05
74	218313.55	7436823.16	0.55	0.64
75	217272.45	7436274.95	0.56	0.74
76	218419.40	7436862.80	0.55	0.65
77	216895.16	7437056.90	0.05	0.10
78	217077.50	7436247.50	0.61	0.75
79	217178.75	7436000.00	0.54	0.60
80	217191.25	7436462.50	0.51	0.67
81	217176.25	7436267.50	0.58	0.77

Fonte: Job Jesus Batista, Instituto de Geociências, UNICAMP.

Apêndice C

```

(*****)
(*
(*          SIMULACAO DE UM PROCESSO ESTOCASTICO BIDIMENSIONAL          *)
(*          ATRAVES DO METODO DE BANDAS ROTATIVAS                       *)
(*          UTILIZANDO O METODO SPECTRAL PARA GERACAO                   *)
(*          DO PROCESSO UNIDIMENSIONAL                                  *)
(*
(* O processo a ser simulado é de covariancia estacionaria e *)
(* isotropico, sendo possivel a escolha do modelo de covariancia *)
(* exponencial ou gaussiana. É tambem assumido que os valores *)
(* do processo em cada ponto sao normalmente distribuidos tendo *)
(*          media zero.                                               *)
(*
(*****)

program SIMULACAO;

const
  N = 89;
type
  matriz1 = array[1..N,1..N] of integer;
  matriz2 = array[1..N,1..N] of real;
var
  Modelo : byte;      (* modelo de covariancia do processo *)
                      (* estocastico, onde: 0 = mod. exponencial*)
                      (*          1 = mod. gaussiano *)
  Nx, Ny,            (* numero de pontos no eixo x e eixo y *)
  NRetas,           (* numero de retas utilizadas no metodo *)
                      (* de bandas rotativas *)
  NHarm,            (* numero de harmonicos ao longo das retas *)
  NCsi,            (* numero de pontos Csi na reta i *)
  Erro,            (* auxilia na verificacao da existencia *)
                      (* ou nao do arquivo de saida a ser criado *)
  A1, A2, A3,      (* auxiliares na geracao de numeros *)
                      (* aleatorios entre 0 e 1 *)
  I, J, K, L: integer; (* auxiliares *)

  DeltaX,          (* espacamento horizontal *)
  DeltaY,          (* espacamento vertical *)

```

```

DeltaCsi,      (* comprimento da banda      *)
Omega,         (* frequencia maxima      *)
Variancia,    (* variancia do processo estocastico *)
Alcance,      (* alcance do modelo de covariancia *)
Teta,         (* angulo da reta i formado com o eixo x *)
X, Y,         (* coordenadas de um ponto da regio a *)
              (* ser simulada          *)
Projecao,     (* projecao de um ponto da regio na *)
              (* reta i                *)
Csi,          (* ponto na reta i onde o proc. unidim. *)
              (* sera simulado        *)
CsiMin,       (* valor minimo de Csi      *)
CsiMax,       (* valor maximo de Csi      *)
NCsiReal,     (* auxiliar para o numero de pontos Csi *)
              (* na reta i            *)
Zs      : real; (* valor do proc. unidim. no ponto Csi da *)
              (* reta i                *)

Contador: matriz1; (* auxiliar *)
ZSimul  : matriz2; (* matriz com os valores do processo *)
              (* bidimensional simulado *)

DadosDeSaida : text;

Escolha : char; (* opcao de apagar ou nao o arquivo de *)
              (* saida ja existente *)

Sai : string[12]; (* nome do arquivo de saida *)

```

```

procedure VARIACAO_CSI(Nx, Ny: integer; DeltaX, DeltaY,
DeltaCsi,
                    Angulo: real; var Menor, CsiMax: real);
(* calcula os valores de Csi onde simula-se o proc. unidim. *)

```

```

var
  Xmax, Ymax,          (* valor maximo de X e Y          *)
  X, Y,                (* coordenadas de um ponto da regio a *)
                        (* ser simulada                                *)
  Projecao,           (* projecao de um ponto da regio na *)
                        (* reta i                                          *)
  Maior,              (* valor maximo das projecoes dos *)
                        (* pontos na reta i                              *)
  AmplitudeCsi,       (* comprimento entre a menor e maior *)
                        (* projecao                                        *)
  Intervalo,          (* divisao entre AmplitudeCsi e *)
                        (* DeltaCsi                                       *)
  Resto,              (* resto da divisao entre AmplitudeCsi *)
                        (* e DeltaCsi                                    *)
  Metade      : real; (* metade da largura da banda DeltaCsi *)
  I, J        : integer;

begin
  Xmax := (Nx-1)*DeltaX;
  Ymax := (Ny-1)*DeltaY;
  X := 0.0;
  Menor := 0.0; Maior := 0.0;
  for I:=1 to 2 do
    begin
      Y := 0.0;
      for J:=1 to 2 do
        begin
          if (I<>1) or (J<>1) then
            begin
              Projecao := X*cos(Angulo) + Y*sin(Angulo);
              if Projecao < Menor then Menor := Projecao;
              if Projecao > Maior then Maior := Projecao;
            end;
          Y := Y + Ymax;
        end;
      X := X + Xmax;
    end;
  AmplitudeCsi := Maior - Menor;
  Intervalo := AmplitudeCsi/DeltaCsi;
  Resto := Frac(Intervalo)*DeltaCsi;
  Metade := DeltaCsi/2;
  if Resto <> 0 then
    if Resto <= Metade then CsiMax := Maior - Resto

```

```

else CsiMax := Maior - Resto + Deltacsi
else CsiMax := Maior;
end; (* procedure VARIACAO_CSI *)

```

```

procedure UNIDIMENSIONAL(Modelo: byte; Variancia, Csi, Omega: real;
M: integer; var Z: real);

```

```

(* gera o valor do proc. unidimensional no ponto Csi da reta i *)

```

```

var
DeltaOmega,          (* frequencia de discretizacao *)
Wk,                 (* definido por (k-0.5)*DeltaOmega *)
Sl,                 (* funcao densidade spectral do *)
                    (* processo unidimensional *)
F,                  (* funcao dens. radial spectral do *)
                    (* processo bidimensional *)
DeltaOmegaLinha,    (* pequena frequencia: << DeltaOmega*)
Ws,                 (* pequena frequencia aleatoria *)
                    (* uniformemente distribuida em *)
                    (* [-DeltaOmegaLinha/2 , *)
                    (* +DeltaOmegaLinha/2] *)
WkLinha,            (* definido por Wk + Ws *)
Fi,                 (* angulo aleatorio uniformemente *)
                    (* distribuido em [0 , 2*PI] *)
Angulo,             (* auxiliar *)
RaizQuadrada,       (* auxiliar *)
Cosseno,            (* auxiliar *)
Somatorio : real;   (* auxiliar *)
K : integer;

```

```

function Aleat : real; (* gerador portatil de Wichmann e Hill *)
var Auxiliar : real;
begin
A1 := 171*(A1 mod 177) - 2*(A1 div 177);

```

```

A2 := 172*(A2 mod 176) - 35*(A2 div 176);
A3 := 170*(A3 mod 178) - 63*(A3 div 178);
if A1<0 then A1 := A1 + 30269;
if A2<0 then A2 := A2 + 30307;
if A3<0 then A3 := A3 + 30323;
Auxiliar := A1/30269 + A2/30307 + A3/30323;
Aleat := Auxiliar - Trunc(Auxiliar);
end; (* function Aleat *)

```

```

function Dens_CovExp(Wk : real): real;
var Hk, Quadrado, Potencia : real;
begin
  Hk := Wk * Alcance;
  Quadrado := Sqr(Hk);
  Potencia := Exp(ln(1+Quadrado)*1.5);
  Dens_CovExp := (Hk * Alcance)/Potencia;
end; (* function Dens_CovExp *)

```

```

function Dens_CovGaussiana(Wk : real):real;
var Hk, Quadrado, Exponencial : real;
begin
  Hk := Wk * Alcance;
  Quadrado := Sqr(Hk);
  Exponencial := Exp(-Quadrado/4);
  Dens_CovGaussiana := (Hk * Exponencial * Alcance)/2;
end; (* function Dens_CovGaussiana *)

```

```

begin
  Z := 0.0;
  DeltaOmega := Omega/M;
  for K:=1 to M do
    begin
      Wk := (K-0.5)*DeltaOmega;
      if Modelo=0 then F := Dens_CovExp(Wk)
      else
        if Modelo=1 then F := Dens_CovGaussiana(Wk);
      S1 := (Variancia/2) * F;
      DeltaOmegaLinha := DeltaOmega/100;
      Ws := DeltaOmegaLinha * Aleat - (DeltaOmegaLinha/2);
      WkLinha := Wk + Ws;
      F1 := 2 * PI * Aleat;
      Angulo := (WkLinha*Cs1) + F1;
      RaizQuadrada := Sqrt(S1*DeltaOmega);
      Cosseno := cos(Angulo);
      Somatorio := RaizQuadrada*Cosseno;
      Z := Z + Somatorio;
    end;
  end;

```

```

        Z := 2*Z;
end; (* procedure UNIDIMENSIONAL *)

procedure CRIA_ARQUIVO(Nx, Ny, NRetas: integer; DeltaX, DeltaY:
                    real; Resultado: matriz2);

(* guarda os resultados da simulacao em um arquivo *)

var
    X, Y: real;      (* coordenadas de um ponto da regioa a ser *)
                    (* simulada *)
    I, J: integer;

begin
    X := 0.0;
    for I:=1 to Nx do
        begin
            Y := 0.0;
            for J:=1 to Ny do
                begin
                    Resultado[I, J] := Resultado[I, J]/(Sqrt(NRetas));
                    writeln (DadosDeSaida, X:15:6, Y:15:6,
                            Resultado[I, J]:15:6);
                    Y := Y + DeltaY;
                end;
                X := X + DeltaX;
            end;
        end;
end; (* procedure CRIA_ARQUIVO *)

begin
    (***** LEITURA DOS DADOS *****)

    ClrScr;
    writeln ('SIMULACAO DE PROC. ESTOCASTICO {Z(x), x E D C R2}');
    writeln;
    writeln ('**** Escolha do Processo Estocastico ****');
    writeln;
    write ('Entre com o valor da variancia: ');

```

```

readln (Variancia);
writeln ('Entre com o mod. de covariancia: 0 = Exponencial');
writeln ('
                                     1 = Gaussiana' );
readln (Modelo);
write ('Entre com a amplitude ou alcance = a = 1/b: ');
readln (Alcance);
writeln;
writeln ('**** Escolha da regioao D ****');
writeln;
write ('Entre com o numero de pontos no eixo x (max = 89): ');
readln (Nx);
write ('Entre com o numero de pontos no eixo y (max = 89): ');
readln (Ny);
write ('Entre com o espacamento horizontal: ');
readln (DeltaX);
write ('Entre com o espacamento vertical: ');
readln (DeltaY);
writeln;
writeln ('**** Escolha dos Parametros do Gerador ****');
writeln;
write ('Entre com o numero de retas TBM (de 4 a 16): ');
readln (NRetas);
write ('Entre com a largura da banda ( < min [espac.horiz,
                                     espac.vert] ): ');
readln (DeltaCsi);
write ('Entre com o numero de harmonicos ao longo das retas
      (M): ');
readln (NHarm);
write ('Entre com a frequencia maxima (OMEGA): ');
readln (Omega);

ClrScr;
write ('Entre com o nome do arquivo de saida : ');
readln(Sai);

(*****

A1 := 25536;
A2 := 6073;
A3 := 19264;

for I:=1 to Nx do
  for J:=1 to Ny do
    begin
      Contador[I,J] := 0;
      ZSimul[I,J] := 0.0;
    end;

```

```

Teta := 0.0;

for I:=1 to NRetas do
  begin
    VARIACAO_CSI(Nx,Ny, DeltaX, DeltaY, DeltaCsi, Teta,
                CsiMin, CsiMax);

    Csi := CsiMin;
    NCsiReal := ((CsiMax - CsiMin)/DeltaCsi) + 1;
    NCsi := Trunc(NCsiReal);

    for J:=1 to NCsi do
      begin
        UNIDIMENSIONAL(Modelo, Variancia, Csi, Omega, NHarm, Zs);

        X:=0.0;
        for K:=1 to Nx do
          begin
            Y := 0.0;
            for L:=1 to Ny do
              begin
                if Contador[K,L] <> I then
                  begin
                    Projecao := X*cos(Teta) + Y*sin(Teta);
                    if (Projecao <= (Csi + DeltaCsi/2)) and
                       (Projecao > (Csi - DeltaCsi/2)) then
                      begin
                        ZSimul[K,L] := ZSimul[K,L] + Zs;
                        Contador[K,L] := Contador[K,L] +1;
                      end;
                    end;
                    Y := Y + DeltaY;
                  end;
                X := X + DeltaX;
              end;
            Csi := Csi + DeltaCsi;
          end;
        Teta := Teta + (PI/NRetas);
      end;
    end;

  Assign(DadosDeSaida, Sai);

  {$I-}
  reset(DadosDeSaida);
  Erro := IoResult;
  {$I+}

```

```

if Erro=0 then          (* se erro=0 o programa ja existe *)
begin
  ClrScr;
  write ('ARQUIVO DE SAIDA: ', Sai, ' JA EXISTE. Quer apaga-lo
        (S/N): ');
  readln (Escolha);
  if UpCase(Escolha) = 'S' then
    begin
      close(DadosDeSaida);
      rewrite(DadosDeSaida);
      CRIA_ARQUIVO(Nx, Ny, NRetas, DeltaX,
                  DeltaY, ZSimul);
    end
    else
      writeln ('MUDE O NOME DO ARQUIVO DE
              SAIDA');
end

else          (* o arquivo nao existe *)
begin
  rewrite(DadosDeSaida);
  CRIA_ARQUIVO(Nx, Ny, NRetas, DeltaX, DeltaY, ZSimul);
end;
close(DadosDeSaida);

end.

```

Referências Bibliográficas

- Abramowitz, M. e I.A. Stegun. (1970). *Handbook of Mathematical Functions, Appl. Math. Ser. 55*, National Bureau of Standards, Washington, D.C.
- Anderson, K.R. (1976). Simple algorithm for positioning a point close to a boundary. *Math. Geol.*, 8(1): 105-106.
- Bailey, W.N. (1972). *Generalized Hypergeometric Series*. Hafner Publishing Company, New York.
- Cabannes, A.F. (1979). Estimation of random fields from network observations. *Tech. Rep. 26*, Dep. of Statistics, Stanford University, Stanford, California.
- Cramér, H. e M.R. Leadbetter. (1967). *Stationary and Related Stochastic Processes*. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Delfiner, P. (1979). *Basic Introduction to Geostatistics*. Fontainebleau/CGMM. Ecole d'Eté.
- Eddy, W.F. (1977). A new convex hull algorithm for planar sets. *ACM Trans. Math. Software*, 3(4): 348-403.
- Franke, R. (1982). Scattered data interpolation: test of some methods. *Math. Comput.*, 38(157): 181-200.
- Fuller, W.A. (1976). *Introduction to Statistical Time Series*. John Wiley & Sons, New York.
- Gradshteyn, I.S. e I.M. Ryzhik. (1965). *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, Inc., New York.

- Graybill, F.A. (1976). *Theory and Application of the Linear Model*. Duxbury Press, North Scituate, Massachusetts.
- Hall, J.K. (1975). PTLOC - A FORTRAN subroutine for determining the position of a point relative to a closed boundary. *Math Geol.*, 7(1): 75-79.
- Hardy, R.L. (1971). Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces. *J. Geophys. Res.*, 76(8): 1905-1915.
- Hardy, R.L. (1972). Analytical topographic surfaces by spatial intersection. *Photogram. Eng.*, 38(5): 452-458.
- Hardy, R.L. (1977). Least squares prediction. *Photogram. Eng. and Remote Sens.*, 43(4): 475-492.
- Journel, A.G. e Ch. J. Huijbregts. (1978). *Mining Geostatistics*. Academic Press, New York.
- Karlin, S. e H.M. Taylor. (1975). *A First Course in Stochastic Processes*. Academic Press, New York.
- Mantoglou, A. e J.L. Wilson. (1982). The turning bands method for simulation of random fields using line generation by a spectral method. *Water Resour. Res.*, 18(5): 1379-1394.
- Matheron, G. (1973). The intrinsic random functions and their applications. *Advan. Appl. Prob.*, 5:439-468.
- Pereira, B.B. e A.P. Sant'Anna (1984). Entendendo Krigeagem. *Ata do 6^o Simpósio Nac. de Probab. e Estat.*, p. 148-155. UFRJ, Rio de Janeiro.

- Petenate, A.J. (1983). *Optimal allocation and other aspects of Kriging on a line*. Ph. D. Thesis, Iowa State University, Iowa.
- Puente, C.E. e R.L. Bras. (1986). Disjunctive Kriging, universal Kriging, or no Kriging: small sample results with simulated fields. *Math. Geol.*, 18(3): 287-305.
- Ripley, B.D. (1981). *Spatial Statistics*. John Wiley & Sons, New York.
- Shinozuka, M. e C.-M. Jan. (1972). Digital simulation of random processes and its applications, *J. Sounds Vib*, 25(1):111-128.
- Shoenberg, I.J. (1938). Metric spaces and completely monotone functions, *Ann. Math.*, 39: 811-841.
- Valente, J.M.G.P. (1982). *Geomatemática - Lições de Geoestatística*, vol. III e IV. Fundação Gorceix, Ouro Preto.
- Wolf, B.V.H. (1981). (A) Multiquadratische methode and kollokation. *Avn allgemeine vermessungs - nachrichtew*, S 89-95 Marz.
- Yamamoto, J.K. (1988). Representações gráficas espaciais em geociências auxiliadas por computador. *Revista Brasileira de Geociências*, 18(1): 3-26.