

3. METODOLOGIAS ESTATÍSTICAS E GEOESTATÍSTICAS

3.1. Análise Estatística

A execução de análises estatísticas básicas é tarefa praticamente obrigatória no tratamento de amostragens e no processamento de quantidades significativas de dados ou de variáveis. Além de possibilitarem classificação e depuração do conjunto amostral, permitem também análises interpretativas quanto aos modelos de distribuição de probabilidades, correlações e ajustes de funções de regressão.

3.1.1. Estatística Descritiva

Os dados obtidos por amostragem podem ser descritos e analisados através de estatísticas que são úteis para a caracterização das distribuições de frequência e para a realização de inferências sobre a população. As medidas estatísticas que descrevem as distribuições de frequência podem ser classificadas em 3 grupos:

3.1.1.1. Medidas de localização na distribuição

Média aritmética(m).-Valor típico de um conjunto de n dados X_i , representada por :

$$m = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (3-1)$$

Moda. - Valor que ocorre com mais frequência em um conjunto de dados, ou seja, o valor mais comum. A moda pode não existir, e mesmo que exista, pode não ser única.

Mediana(M).- valor médio de um conjunto de dados ordenados por ordem de grandeza. Metades dos valores estão acima da mediana e metade dos valores abaixo. A mediana dos dados ordenados pode ser calculada como:

Se n é ímpar

$$M = X_{\frac{n+1}{2}} \quad (3-2)$$

Se n é par

$$M = \frac{1}{2} \left(X_{\frac{n}{2}} + X_{\frac{n}{2}+1} \right) \quad (3-3)$$

Tanto a média quanto a mediana são medidas de localização do centro de distribuição. A média, no entanto, é muito mais sensível a presença de altos ou baixos valores erráticos.

Quartis (Q_1 Q_2 Q_3). - Da mesma forma que a mediana divide o conjunto de dados ordenados em duas metades, os quartis o dividem em 4 partes iguais. São representados por Q_1 , Q_2 e Q_3 , correspondentes ao primeiro, segundo e terceiro quartil, respectivamente. Notar que $M = Q_2$, podendo-se definir, de maneira similar, decis e percentis que dividem o conjunto de dados em 10 ou 100 partes iguais, respectivamente.

3.1.1.2.

Medidas de dispersão

Variância (σ^2) - Corresponde à média das diferenças quadráticas dos valores observados em relação à sua média,

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - m)^2 \quad (3-4)$$

Por envolver diferenças ao quadrado, a variância é sensível a altos valores erráticos.

Desvio padrão (σ) - Representado pela raiz quadrada da variância. É frequentemente usado em vez da variância porque sua unidade é a mesma das variáveis sendo descritas.

Amplitude semi-interquartílica (Q). - Definida por

$$Q = \frac{1}{2} (Q_3 - Q_1) \quad (3-5)$$

A amplitude semi-interquartílica, ao contrário da variância e do desvio-padrão, não usa a média como centro da distribuição, podendo ser escolhida como medida de dispersão nos casos em que valores erráticos extremos influenciam a média do conjunto.

Outras medidas de dispersão podem também ser definidas, como a amplitude interquartílica ($Q3 - Q1$), a amplitude total (diferença entre os valores extremos da distribuição) e a amplitude entre os percentis 10 e 90.

3.1.1.3. Medidas de forma

Coefficiente de assimetria - Indica a simetria da distribuição de freqüências, definido por:

$$Assimetria = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(X_i - m)^3}{\sigma^3} \quad (3-6)$$

O coeficiente de assimetria sofre a influência de valores erráticos extremos mais do que a média ou a variância. Frequentemente não se usa o valor do coeficiente de assimetria, mas apenas o seu sinal como medida de forma da distribuição.

Assimetria positiva: com cauda da distribuição mais longa à direita do valor máximo, tornando a mediana menor do que a média.

Assimetria negativa: se o inverso ocorrer.

Assimetria nula: io histograma é (aproximadamente) simétrico e a média e mediana são (aproximadamente) coincidentes.

Medidas de assimetria também podem ser definidas em relação à diferença entre a média e a moda (primeiro coeficiente de assimetria de Pearson) ou entre a média e a mediana (segundo coeficiente de assimetria de Pearson).

Coefficiente de curtose. - Avalia o grau de achatamento de uma distribuição em relação a uma distribuição normal.

$$Curtose = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{(X_i - m)^4}{\sigma^4} \quad (3-7)$$

Curtose > 3, distribuição apresentando pico relativo mais alto (leptocúrtica);

Curtose < 3 , distribuição com topo achatado (platicúrtica);

Curtose $= 3$, distribuição com a mesma forma da distribuição normal.

Outra medida de curtose também pode ser empregada, baseada na amplitude semi- interquartílica Q e nos percentis $10 (P_{10})$ e $90 (P_{90})$, e conhecida como coeficiente percentílico de curtose (k).

$$k = \frac{Q}{P_{90} - P_{10}} \quad (3-8)$$

Para uma distribuição normal $k = 0,263$.

Coefficiente de variação (CV): constitui uma medida de dispersão relativa e também é uma alternativa para avaliar a simetria das distribuições, primariamente usada nas distribuições cujos valores sejam todos positivos e cuja assimetria seja também positiva.

$$CV = \frac{\sigma}{m} \quad (3-9)$$

Valores de $CV > 1$ podem indicar a presença de valores erráticos extremos nas amostras, com significativo impacto nas estimativas finais.

Os coeficientes que avaliam a forma da distribuição, são usualmente empregados para verificar a configuração da amostra em relação à distribuição normal.

Se os dados apresentarem uma distribuição lognormal, as principais estatísticas devem ser calculadas considerando a assimetria da distribuição dos dados. Para estes casos, a média geométrica (MG) e o desvio geométrico (DG) são mais representativos como medidas de tendência central e de dispersão, respectivamente,

$$MG = e^{m_{y_i}} \quad (3-10)$$

$$DG = e^{\sigma_{y_i}} \quad (3-11)$$

onde m_{y_i} e σ_{y_i} são a média aritmética e o desvio padrão, respectivamente, dos dados originais (X_i) transformados por:

$$y_i = Ln(X_i) \quad (3-12)$$

3.1.2. Modelos de distribuição de probabilidades

3.1.2.1. Modelos para variáveis discretas

Se uma variável X pode assumir um conjunto discreto de valores X_1, X_2, \dots, X_n com probabilidades p_1, p_2, \dots, p_n , sendo $p_1 + p_2 + \dots + p_n = 1$, diz-se que está definida uma distribuição de probabilidades discreta de X . Como X pode assumir certos valores com dadas probabilidades, esta é conhecida como variável aleatória discreta e a função $p(X)$ é denominada função de probabilidade.

Os principais modelos de distribuição de probabilidades para variáveis discretas são:

Distribuição binomial

Proposta por Bernouilli no fim do século 17, esta distribuição corresponde aos termos sucessivos do desenvolvimento, ou fórmula, binomial.

Se p é a probabilidade de um evento acontecer em tentativa única (probabilidade de sucesso) e $q = 1 - p$ é a de que o evento não ocorra em qualquer tentativa única (probabilidade de fracasso), então a probabilidade do evento ocorrer k vezes em N tentativas é dada por:

$$p(k) = \frac{N!}{k!(N-k)!} p^k q^{N-k} \quad (3-13)$$

Distribuição de Poisson

Proposta por Poisson no começo do século XIX (equação 3.14), pode ser considerada como um caso limite da distribuição binomial quando o número de tentativas N for grande e a probabilidade p da ocorrência do evento for próxima de zero, de modo que $q = 1 - p$ tende para 1 (evento raro).

Na prática, um evento pode ser considerado raro quando $N \geq 50$ com $(N \cdot p) < 5$; nestes casos, a distribuição binomial é muito próxima da distribuição de Poisson considerando,

$$\lambda = N \cdot p.$$

$$p(X) = \frac{e^{-\lambda} \lambda^X}{X!} \quad (3-14)$$

3.1.2.2. Modelo para variáveis contínuas

Se a variável aleatória X assumir um conjunto contínuo de valores, o polígono de frequências relativas de uma amostra torna-se, no caso teórico ou limite de uma população, uma curva contínua $f(X)$ designada como função densidade de probabilidade ou apenas função densidade.

Distribuição normal

Uma das mais importantes distribuições contínuas de probabilidade é a distribuição normal, ou distribuição de Gauss, definida pela equação:

$$f(X) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-0.5\left(\frac{X-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (3-15)$$

onde μ e σ representam a média e o desvio padrão da variável contínua X .

A distribuição binomial (discreta) pode ser aproximada pela distribuição normal (contínua) quando N for grande e nem p ou q estiverem muito próximos de zero. À medida que N aumenta, a assimetria e a curtose da distribuição binomial tendem para as da distribuição normal, coincidindo no limite. Na prática a aproximação é boa para $Np > 5$.

Distribuição lognormal

Quando o logaritmo da variável aleatória contínua segue o modelo da distribuição normal, isto é

$$f(X) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-0.5\left(\frac{\log X - \mu}{\sigma}\right)^2} \quad (3-16)$$

onde μ e σ representam a média e o desvio padrão dos logaritmos da variável contínua X .

3.2. Análise Geoestatística

Matheron em 1962, define a geoestatística como “a aplicação do formalismo das funções aleatórias ao reconhecimento e estimação de fenômenos naturais”.

A geoestatística considera em suas análises não somente o valor da variável no ponto onde foi amostrada, mas também a posição do ponto no corpo mineral ou geológico e seu relacionamento com outras amostras.

Segundo Royle, os principais argumentos para o uso dos métodos geoestatísticos são: a) a geoestatística é completamente baseada na prática de uma boa estimativa fundamentada em uma teoria racional, diferentemente das técnicas empíricas tradicionais; b) o reconhecimento de que a variabilidade total é parte aleatória e parte espacial, o que conduz a estimativas que não tem viés e influenciadas por pequenos erros.

3.2.1. Funções aleatórias estacionárias

Para se efetuar medidas em locais não amostrados, é necessário dispor-se de um modelo do comportamento do fenômeno natural que deu origem às variáveis em estudo. Entretanto, o conhecimento em detalhe dos fenômenos naturais é geralmente muito difícil, bastando para isto imaginar, por exemplo, a formação de solos e a complexidade da interação entre os agentes que participaram deste processo.

Caso houvesse um perfeito conhecimento dos processos físicos e/ou químicos atuantes, seria então possível a elaboração de modelos determinísticos que simulariam o processo de acordo com uma lei bem definida, onde todos os fatores estariam bem caracterizados e a influência dos mesmos bem conhecida.

Este não é o caso em geociências, onde as variáveis de interesse são, em geral, resultado de um vasto número de processos complexos, tornando muito difícil a sua descrição quantitativa.

Os modelos probabilísticos tratam os dados como resultado de um processo aleatório, o que muitas vezes não corresponde à realidade. Nossa compreensão sobre o fenômeno é muitas vezes tão pobre e limitada que sua complexidade parece ter um comportamento aparentemente aleatório.

A teoria das variáveis regionalizadas (Matheron, 1962) está baseada em modelos probabilísticos onde as variáveis são consideradas como a realização única de uma determinada função aleatória. Variáveis regionalizadas apresentam uma distribuição no espaço, juntamente com um determinado grau de correlação espacial, aparecendo frequentemente em geociências como, por exemplo, na representação do topo de uma formação geológica, profundidade de camadas de solo, pluviometria, teores geoquímicos, profundidade do lençol freático, etc.

Os métodos geostatísticos mais frequentemente usados para a estimativa de variáveis regionalizadas estão baseados em funções aleatórias estacionárias.

Seja $V(x)$ uma função unidimensional que descreve um fenômeno aleatório associado à determinada lei probabilística. Se todos os pares de variáveis aleatórias separadas por uma distância h entre $(V(x), V(x+h))$ apresentarem a mesma distribuição de probabilidade conjunta, independentemente de suas localizações, mas dependendo apenas da distância h entre elas, então a função $V(x)$ é referida como função aleatória estacionária.

Os comportamentos de funções aleatórias estacionárias são geralmente descritos por três parâmetros, interrelacionados: o variograma $\gamma(h)$, o correlograma $\rho(h)$ e a função de covariância $C(h)$.

3.2.2.

Analises da variabilidade espacial

Um fenômeno natural pode ser caracterizado pela distribuição no espaço de uma ou mais variáveis chamadas “variáveis regionalizadas”. Elas apresentam alguma correlação entre si, indicando a existência de dependência dos valores entre amostras contíguas, já que nada é ao acaso na natureza e as variáveis costumam possuir um padrão de distribuição (Canchaya, 2003).

Uma das principais características das variáveis regionalizadas é a sua continuidade espacial, cuja avaliação está fundamentada nos princípios da regressão linear que, na estatística, investiga a dependência entre variáveis de um fenômeno.

Em geoestatística, procura-se avaliar a dependência da variável com ela própria, avaliada em diferentes posições separadas por um vetor \vec{h} . Esta continuidade espacial pode ser descrita em função dos coeficientes de correlação (função de correlação ou

correlograma), das variâncias (função covariância) ou através do semivariograma ou simplesmente variograma.

A geoestatística interpreta a variável regionalizada como uma realização de uma função aleatória, o que permite levar em conta os aspectos erráticos e estruturados da regionalização.

3.2.2.1.

Função covariância $\tilde{C}_v(h)$

Uma importante diferença entre os parâmetros de um modelo conceitual e as estatísticas que podem ser calculadas a partir de valores experimentais necessita neste ponto ser convenientemente esclarecida. Para enfatizar a diferença com valores medidos, o símbolo \sim (til) será utilizado para referenciar parâmetros do modelo; assim m significa a média aritmética entre valores observados e \tilde{m} corresponde à média dos valores definidos como realizações de uma função aleatória. Os valores estimados em pontos não-amostrados também serão distinguidos pelo símbolo $\hat{}$ (acento circunflexo).

A função covariância, como o nome indica, representa a variação espacial entre variáveis separadas pela distância h .

$$\tilde{C}_v(h) = Cov\{V(x), V(x+h)\} \quad (3-17)$$

$$\tilde{C}_v(h) = E\{V(x).V(x+h)\} - E\{V(x)\}.E\{V(x+h)\} \quad (3-18)$$

onde o valor esperado da variável aleatória $E\{V(x)\}$ denota sua média \tilde{m} . Para funções aleatórias estacionárias, $E\{V(x)\} = E\{V(x+h)\}$, resultando em

$$\tilde{C}_v(h) = E\{V(x).V(x+h)\} - E\{V(x)\}^2 \quad (3-19)$$

3.2.2.2.

Função correlação ou correlograma

Indica a continuidade espacial dos coeficientes de correlação, sendo matematicamente expressa por:

$$\tilde{\rho}_v(h) = \frac{Cov\{V(x), V(x+h)\}}{\sqrt{Var\{V(x)\}.Var\{V(x+h)\}}} \quad (3-20)$$

Como a covariância entre variáveis na mesma posição é a variância da função aleatória,

$$\tilde{C}_v(o) = Cov\{V(x), V(x)\} = Var\{V(x)\} \quad (3-21)$$

$$\tilde{C}_v(o) = E\{V^2(x)\} - E\{V(x)\}^2 \quad (3-22)$$

então

$$\tilde{\rho}_v(h) = \frac{\tilde{C}_v(h)}{\tilde{C}_v(0)} \quad (3-23)$$

observando-se que $\tilde{\rho}_v(0) = 1$

3.2.2.3.

Função variograma $\tilde{\gamma}_v(h)$

Definido como a metade do quadrado das diferenças esperadas entre variáveis aleatórias distanciadas de h,

$$\tilde{\gamma}_v(h) = \frac{1}{2} E\{[V(x) - V(x+h)]^2\} \quad (3-24)$$

$$\tilde{\gamma}_v(h) = \frac{1}{2} E\{V^2(x)\} - E\{V(x)V(x+h)\} + \frac{1}{2} E\{V^2(x+h)\} \quad (3-25)$$

Considerando que para funções aleatórias estacionárias $E\{V^2(x)\} = E\{V^2(x+h)\}$, a expressão acima pode ser escrita como:

$$\tilde{\gamma}_v(h) = E\{V^2(x)\} - E\{V(x)V(x+h)\} \quad (3-26)$$

Adicionando e subtraindo $E\{V(x)\}^2$ ao segundo termo da equação,

$$\tilde{\gamma}_v(h) = E\{V^2(x)\} - E\{V(x)\}^2 - [E\{V(x)V(x+h)\} - E\{V(x)\}^2] \quad (3-27)$$

Finalmente resulta com auxílio das equações (3-19) e (3-22)

$$\tilde{\gamma}_v(h) = \tilde{C}_v(0) - \tilde{C}_v(h) \quad (3-28)$$

Observando-se que $\tilde{\gamma}_v(0) = 0$.

Para a maioria das funções aleatórias usadas em análises geoestatísticas, pares de variáveis muito separadas são praticamente independentes entre si. A função

covariância e o correlograma tendem a zero com o aumento da distância h , enquanto o variograma converge para um valor máximo, referenciado como patamar (“sill”), que também representa a variância da função aleatória estacionária.

A equação (3-28) pode ser escrita como

$$\tilde{\gamma}_v(h) = \tilde{C}_v(0) - \tilde{\gamma}_v(h) \quad (3-29)$$

$$\tilde{\gamma}_v(h) = \tilde{\gamma}_v(\infty) - \tilde{\gamma}_v(h) \quad (3-30)$$

Considerando que $\tilde{\gamma}_v(\infty) = \tilde{C}_v(0)$ ou $\tilde{\gamma}_v(\infty) = \text{Var}\{V(x)\}$.

As funções covariância, correlograma e variograma fornecem as mesmas informações mas de maneira ligeiramente diferente entre si (figura 3.2). O correlograma inicia com o valor 1, tendendo a zero com o crescimento de h , enquanto que a função covariância decresce de forma similar a partir do valor inicial $\tilde{C}(0) = \sigma^2$. O variograma inicia em 0 aumentando até o valor máximo $\tilde{\gamma}(\infty) = \sigma^2$. Normalmente os variogramas são construídos ao longo das direções em que a variável apresenta maior e menor continuidade espacial. Para obtê-los, vários variogramas direcionais são testados em uma fase preliminar da definição do modelo geoestatístico.

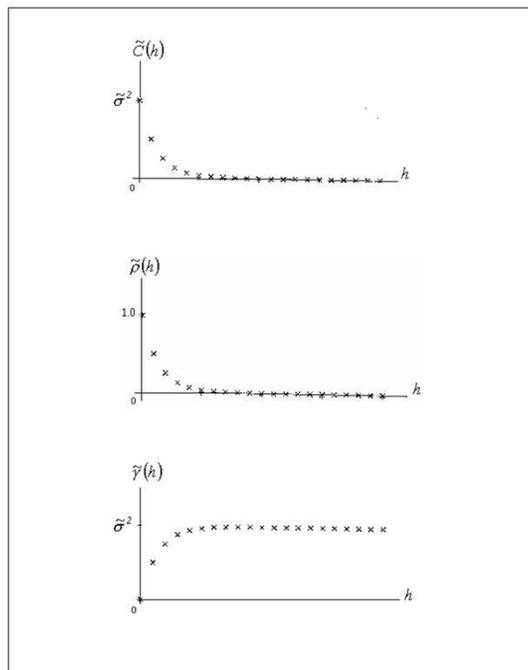


Figura 3-1 Comportamento das medidas de correlação $\tilde{C}(h)$, $\tilde{\rho}(h)$, $\tilde{\gamma}(h)$ de uma variável aleatória $V(x)$.

O conceito de variograma a uma variável pode ser estendido para descrever a continuidade espacial entre duas variáveis, isto é, em vez de se considerar pares da mesma variável em locais diferentes trabalham-se com variáveis diferentes situadas em posições diferentes, distanciadas pelo vetor-posição \vec{h} (variograma cruzado).

$$\gamma_{uv}(h) = E\{V(x) - V(x+h)\}E\{U(x) - U(x+h)\} \quad (3-31)$$

É prática comum em geoestatística proceder a maioria dos cálculos iniciais em termos de variogramas. No entanto, no método da krigagem ordinária, a ser discutido em próxima seção, recorre-se frequentemente às covariâncias, subtraindo-se os valores calculados da constante σ^2 . Utilizando-se a matriz de covariância, os maiores elementos estão localizados em sua diagonal principal, o que facilita a resolução numérica do sistema de equações pelo método de eliminação de Gauss sem a estratégia de pivotamento numérico.

Características do variograma

Com base na Figura 3-2 abaixo são descritas as principais características de um variograma

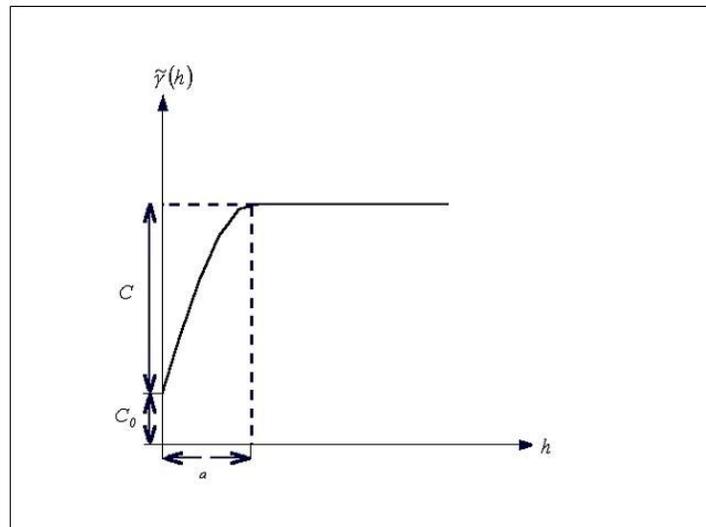


Figura 3-2 Esquema básico de uma função variograma.

a) Amplitude variográfica a (“range”) - distância a partir da qual os valores do variograma (ou da função covariância) permanecem essencialmente constantes.

b) Patamar $C + C_0$ (“sill”) - valor máximo do variograma para distâncias muito grandes $\tilde{\gamma}(\infty)$. É também o valor da função covariância para $h = 0$ ou, simplesmente, a variância $\tilde{\sigma}^2$ da variável aleatória.

C) Efeito pepita C_0 - representa descontinuidades na origem causada por vários fatores como erros de amostragem, erros de medida, micro-regionalizações da variável estudada, etc.

De acordo com Garcia (1988) a relação $E=C_0/(C_0+C)$, denominada de efeito pepita relativo, expressa o grau de aleatoriedade do fenômeno regionalizado, sendo classificado como:

$E < 0.15$, componente aleatória pequena

$0.15 < E < 0.30$, componente aleatória significativa

$E > 0.30$, componente aleatória muito significativa

Na Figura 3-3, descrevem-se os parâmetros requeridos para o cálculo do variograma. O “lag” ou distância (h) do variograma é um dado que se requer para a determinação do variograma. Janela é a zona de influência do variograma direcional. O número de intervalos ou “range” é o número total de intervalos utilizados no cálculo do variograma.

Para a obtenção dos variogramas experimentais, os trabalhos tipicamente se iniciam com a elaboração do variograma omnidirecional para o qual a tolerância direcional é grande o suficiente para tornar a influência da direção do vetor posição \vec{h} muito pequena. Com todas as possíveis direções combinadas em um único variograma, somente o módulo de \vec{h} (distância h) é importante.

A construção do variograma omnidirecional, não implica em aceitar a hipótese de que a continuidade espacial da variável investigada seja a mesma em todas as direções. Sua utilidade advém basicamente das seguintes razões:

a) como os efeitos de direção não são considerados neste tipo de variograma, a análise pode se concentrar na pesquisa das distâncias h , e em suas respectivas tolerâncias, que produzam uma estrutura de clara interpretação.

b) se a estrutura obtida no variograma global for confusa, é pouco provável que resultados melhores possam ser obtidos em variogramas direcionais construídos com

menor número de amostras. O comportamento verificado no variograma global, nesta fase preliminar dos trabalhos, pode então indicar a presença de amostras com valores erráticos no conjunto investigado ou que as amostras pertençam a zonas específicas que contenham valores extremos da variável.

Uma vez obtidos os variogramas omnidirecionais, pode-se então explorar os padrões de anisotropia (direções de máxima ou mínima continuidade) nos variogramas direcionais. Esta etapa pode ser facilitada se alguma informação sobre os eixos de anisotropia for conhecida a partir de observações em campo. Caso contrário, pode-se recorrer à plotagem de mapas de isovalores ou, mais comumente, calcular-se variogramas direcionais em várias direções e plotando-se na roseta de variogramas o valor da distância, naquela direção, na qual determinado valor de $\tilde{\gamma}(h)$ é atingido. No caso que o corpo mineral ou geológico tiver uma direção de mergulho pré-determinada, então o cálculo dos variogramas se realizara na direção do mergulho e também perpendicularmente.

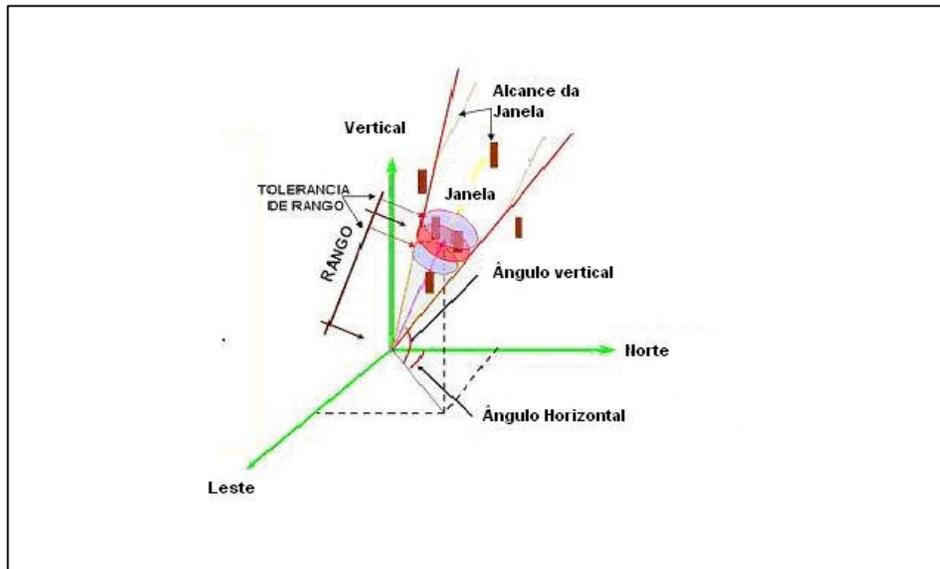


Figura 3-3 Características do variograma.

Isotropia

Um fenômeno diz-se isotrópico quando a magnitude do vetor \vec{h} permanecer constante, qualquer que seja a direção (θ) do vetor, e sua variabilidade é simétrica. Neste caso é suficiente definir um variograma omnidirecional.

Anisotropia

Na natureza é muito raro encontrar um fenômeno isotrópico, sendo mais freqüente os fenômenos anisotrópicos.

Anisotropia direcional (geométrica ou zonal) aparece quando os variogramas são diferentes em distintas direções. Para obter a morfologia do fenômeno convém calcular vários variogramas em diferentes direções. Existem dois grandes tipos de anisotropia:

a) Anisotropia zonal - tanto os valores do patamar quanto da amplitude variográfica variam com as direções, indicando possível zoneamento espacial da variável ou associação entre populações distintas (Figura 3-4 b). Na prática, casos de anisotropia zonal pura raramente são encontrados, mas sim associações de anisotropia zonal e geométrica.

b) Anisotropia geométrica - os variogramas construídos em diferentes direções apresentam o mesmo patamar, mas diferentes amplitudes variográficas (Figura 3-4 a). Este tipo de fenômeno é muito comum em depósitos aluviais, onde o alcance na direção vertical é muito menor que na direção principal do depósito, conservando sua variabilidade em ambos os casos (mesmo patamar).

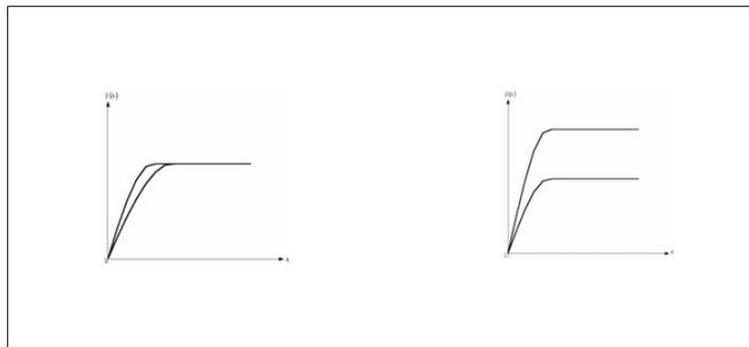


Figura 3-4 Tipos de anisotropia variográfica; a) geométrica; b) zonal.

Modelos variográficos

Nos métodos de estimativas e simulações geoestatísticas, valores de $\gamma(h)$ ao longo de direções e em distâncias para as quais não se dispõem de observações experimentais serão requisitados. Daí, a necessidade de se adotar um modelo

variográfico $\tilde{\gamma}(h)$ que melhor se ajuste ao comportamento espacial da variável estudada.

Como os resultados das estimativas devem existir e serem únicos, o sistema de equações lineares gerados pela krigagem necessita possuir uma matriz positivo-definida que, por sua vez, impõe a condição de que modelos variográficos sejam construídos com auxílio de funções positivo-definidas. Dentre os principais modelos podem ser citados:

Modelos com patamar

Nesse tipo de modelo a função variograma cresce com h até um valor máximo, correspondente à variância da população, permanecendo então constante (Figura 3-5).

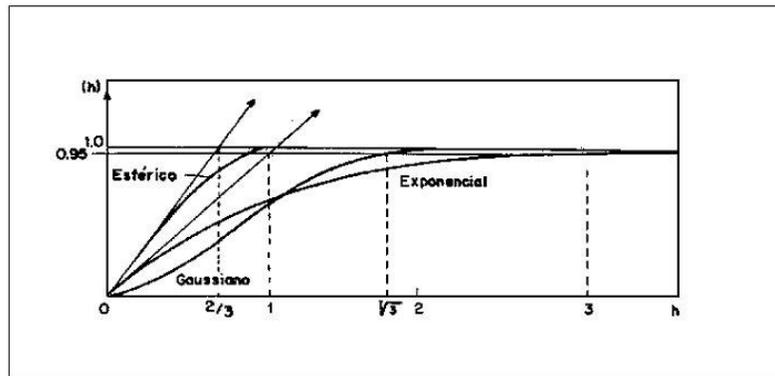


Figura 3-5 Modelos variográficos com patamar.

- a) Modelo esférico ou de Matheron - Modelo mais frequentemente usado e expresso por:

$$\tilde{\gamma}(h) = \begin{cases} (C)1.5\left[\frac{h}{a}\right] - 0.5\left[\frac{h}{a}\right]^3 & \dots\dots h \leq a \\ C & \dots\dots h > a \end{cases} \quad (3-32)$$

No ajuste do modelo ao variograma experimental é útil lembrar-se que a tangente pela origem atinge o valor do patamar a aproximadamente $2/3$ da amplitude variográfica.

- b) Modelo exponencial - neste modelo o patamar é atingido pela função assintoticamente. A amplitude variográfica prática deste modelo é determinada quando o variograma alcançar $0,95C$.

$$\tilde{\gamma}(h) = C \left(1 - e^{-\left(\frac{3h}{a}\right)} \right) \quad (3-33)$$

No ajuste do modelo ao variograma experimental é útil lembrar que a tangente pela origem atinge o patamar C a aproximadamente $1/3$ da amplitude variográfica. Em muitas publicações, este modelo é apresentado sob forma genérica como,

$$\tilde{\gamma}(h) = C \left(1 - e^{-\left(\frac{h}{a}\right)} \right) \quad (3-34)$$

onde o parâmetro a neste caso não representa a amplitude variográfica prática associada ao valor $\tilde{\gamma}(h) = 0,95C$.

- c) Modelo Gaussiano - modelo frequentemente usado para fenômenos naturais com elevada continuidade.

$$\tilde{\gamma}(h) = C \left(1 - e^{-\left(\frac{3h^2}{a^2}\right)} \right) \quad (3-35)$$

À semelhança do modelo exponencial, o valor máximo $\tilde{\gamma}(h) = C$ é atingido assintoticamente. A amplitude variográfica prática (a) é definida na distância onde o valor do variograma alcançar 95% do patamar.

O modelo Gaussiano apresenta um comportamento parabólico próximo à origem, como também um ponto de inflexão da função.

Nos modelos esféricos, exponencial e gaussiano o efeito de pepita é, via de regra, somando ao modelo variográfico como uma constante C_0 .

- d) Modelo aleatório - caracterizado pelo efeito pepita puro (C_0), é representativo de fenômenos naturais de elevada descontinuidade. O efeito pepita poderia ser considerado como um caso particular de um modelo esférico de alcance infinitamente pequeno. Porém, do ponto de vista físico, existe uma diferença fundamental entre ambos os modelos. O modelo aleatório representa uma regionalização descontínua, onde os valores mudam rapidamente de um ponto a outro, entanto que o modelo esférico descreve uma regionalização contínua.

$$\tilde{\gamma}(h) = \begin{cases} 0 & \dots\dots\dots h = 0 \\ C & \dots\dots\dots h > 0 \end{cases} \quad (3-36)$$

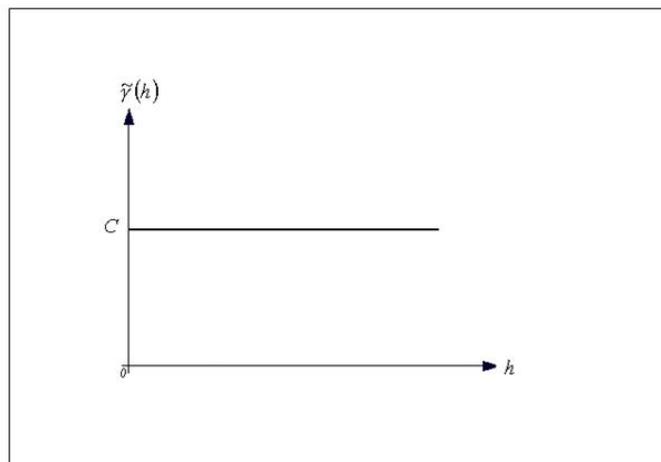


Figura 3-6 Modelo aleatório.

Modelos sem patamar

Apresentam um aumento constante da variabilidade à medida que a distância cresce (Figura 3-7).

$$\tilde{\gamma}(h) = ah^\theta \quad (3-37)$$

onde $0 \leq \theta \leq 2$ e α representa a inclinação do modelo linear quando $\theta = 1$.

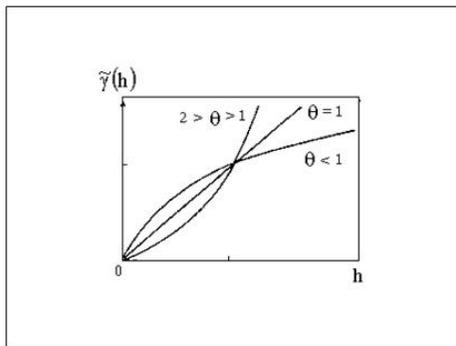


Figura 3-7 Modelo sem patamar.

Outros modelos

a) Modelo cúbico:

$$\tilde{\gamma}(h) = \begin{cases} C \left[\frac{7.h^2}{a^2} - \frac{35.h^3}{4.a^3} + \frac{7.h^5}{2.a^5} - \frac{3.h^7}{4.a^7} \right] & 0 \leq h \leq a \\ C & h \geq a \end{cases} \quad (3-38)$$

b) Modelo seno-cardinal que pode representar o efeito buraco (hole effect).

$$\tilde{\gamma}(h) = C \left\{ 1 - \frac{\text{sen}(h/a)}{(h/a)} \right\} \quad (3-39)$$

c) Modelo Gama

$$\tilde{\gamma}(h) = C \left\{ 1 - \frac{1}{(1 + (h/a))^\alpha} \right\} \quad (3-40)$$

onde o alcance prático é definido como $a(\alpha\sqrt{20} - 1)$.

O modelo Gama com parâmetro $\alpha = 1$ é denominado modelo hiperbólico.

3.2.2.4. Dessegregação de um conjunto de dados

Efeitos de segregação também influem na forma do módulo variográfico, porém é possível ajustá-lo com auxílio de métodos de dessegregação, como os métodos da poligonal e das células. Segundo De Souza (2002), os dois métodos apresentam resultados estatísticos semelhantes, porém distintos dos parâmetros estatísticos calculados para as amostras segregadas. O método das células ou blocos será empregado neste trabalho, devido à semelhança com o modelo de blocos utilizado nos processos de estimativa e de simulação.

Método das células ou blocos - a área total é dividida em regiões de paralelepípedos chamadas de células (2D) ou blocos (3D).

Cada amostra recebe um peso inversamente proporcional ao número de amostras contidas no mesmo bloco. Assim, é evidente que as amostras segregadas recebem um fator de ponderação menor porque o bloco em que se encontram o número de amostras é mais alto. Note que o peso total das amostras no mesmo bloco deve somar 1.

O método de dessegregação por blocos ou células envolve os seguintes passos:

- a) utilização de todas as amostras do bloco para cálculo da média local dos blocos móveis;
- b) utilização desta média local para o cálculo da média global de toda a área estudada.

A estimativa obtida por este método depende do tamanho da célula ou bloco. Blocos muito pequenos fazem com que cada amostra tenda a cair em seu próprio bloco com fator de ponderação 1. Blocos muito grandes, a ponto de compreender toda a área global, fazem com que as amostras se situem em único bloco, recebendo iguais fatores de ponderação $p = 1/n$.

Se houver uma malha espacial de amostragem ou de produção mineira, usualmente este espaçamento observado na malha representará uma boa estimativa para o tamanho do bloco. Caso contrário, é prática comum tentar vários tamanhos de blocos e escolher aquele que produz a menor estimativa da média global, calculada a partir da equação ((3-56)).

Este procedimento é justificado para o caso em que as amostras segregadas ocorram em regiões onde se observam altos valores da variável $V(x)$. O efeito esperado

da dessegregação neste caso é melhorar a estimativa da média global (sob a suposição de que a segregação é alta).

Para casos onde puder ser observada a inexistência de malha de amostragem (caso de mineração), com segregação de amostras em regiões de altos ou baixos valores da variável $V(x)$, o método da dessegregação por blocos usualmente se comporta melhor. Segundo De Souza (2002), a amostragem é freqüentemente adensada em áreas que são julgadas críticas, por exemplo, com altos teores ou grande concentração de metais.

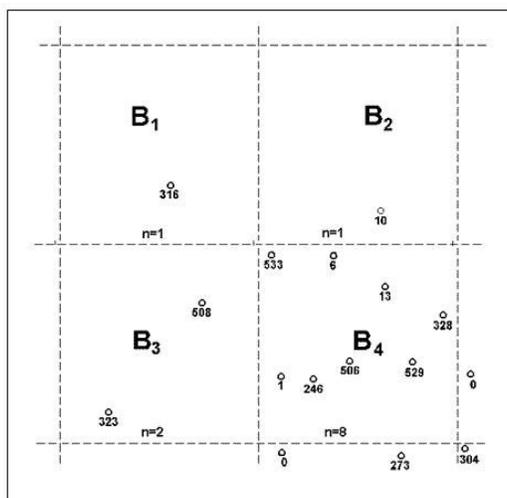


Figura 3-8 Dessegregação em células (Isaaks & Srivastava, 1989).

A Figura 3-8, mostra um caso particular de dessegregação 2D, onde as amostras das células superiores (B_1 e B_2) por estarem sozinhas têm um fator de ponderação igual a 1 ($n = 1$), enquanto que as amostras nas células inferiores (B_3 e B_4) têm um fator de ponderação de $\frac{1}{2}$ e $\frac{1}{8}$ ($n \neq 1$). Os fatores de ponderação ou pesos permitem suavizar o efeito de amostragem em malha irregular no momento da determinação do variograma e do histograma. Os mesmos conceitos são aplicados para a dessegregação em blocos.

$$Média.Global.Estimada = \frac{\sum_{i=1}^n (p_i \cdot V_i)}{\sum_{i=1}^n p_i} \quad (3-41)$$

onde V_i é o valor da amostra e p_i é o peso ou fator de ponderação de cada amostra.

3.2.3. Estimativas clássicas

Os principais métodos de estimativa clássica são as distâncias ponderadas e o método da poligonal. Os dois métodos têm uma grande desvantagem, que sobrestima as zonas com valores altos e subestima as zonas com valores baixos (viés condicional).

3.2.3.1. Distâncias Ponderadas (IQD)

Este método está baseado no fato que a influencia dos valores amostrais num determinado ponto decrescem à medida que se afastam do ponto, de tal maneira que o valor estimado varia de acordo com uma função inversa da distância.

Neste método o estimador do bloco V_s^* é uma combinação linear ponderada das amostras v_i . Os ponderadores λ são determinados pelas distâncias das amostras d_i , ao centro do bloco. A menor distância do centro do bloco será o peso que se dá à amostra.

$$V_s^* = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{v_i}{d_i^\beta}}{\sum_{i=1}^n \frac{1}{d_i^\beta}} \quad (3-42)$$

O valor do índice da ponderação β é importante no processo de estimativa, mas ao mesmo tempo é arbitraria, já que não se conhecem métodos que permitam obter um valor adequado, situado de modo geral entre os valores 1 a 5. O valor de β igual a 5, segundo Barnes 1980, torna o método similar ao método do polígono e se o valor for muito baixo (como 0.5, por exemplo) cresce a importância das amostras que estão mais distantes do centro do bloco.

Observações quanto ao método:

Adapta-se com muita facilidade para a realização de estimativas locais e globais, além de considerar o agrupamento das amostras. As amostras perto do centro do bloco têm maior peso no processo de estimativa.

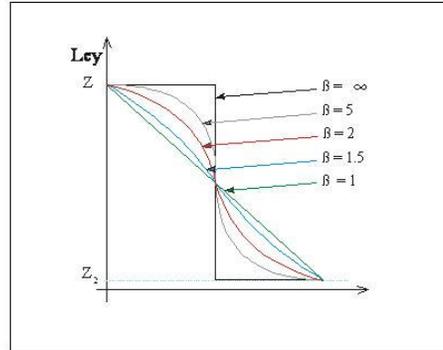


Figura 3-9 Potencia β do método IQD (Villanueva, 2000).

3.2.3.2. Método da poligonal

Consiste em atribuir ao ponto amostral uma área de influência, no interior da qual a variável em estudo tem valor constante e igual àquele determinado experimentalmente no ponto. Os polígonos são construídos por perpendiculares traçadas nos pontos médios dos segmentos de reta que unem amostras vizinhas.

Segundo Villanueva (2000), as áreas de influência quase sempre geram uma sobreavaliação quando existe uma correlação positiva entre os valores e uma subestimativa quando a correlação é negativa.

A cada amostra v_i corresponde um polígono de influência com área s_i , de tal maneira que o valor estimado do bloco V_s^* , é o resultado da ponderação das amostras contidas no polígono. Os fatores de ponderação λ_i são determinados por uma área, em casos 2D, e por um volume, nas análises 3D.

$$V_s^* = \frac{\sum_{i=1}^n s_i \cdot v_i}{S} \quad (3-43)$$

$$S = \sum_{i=1}^n s_i \quad (3-44)$$

Os polígonos podem ser construídos através de mediatrizes ou bissetrizes. No primeiro caso, perpendiculares são desenhadas pelo ponto médio da distância que une dois valores amostrais, i.e. constroem-se as mediatrizes; no segundo, traçam-se

bissetrizes através dos pontos médios dos ângulos formados com os pontos amostrais, conforme Figura 3-10.

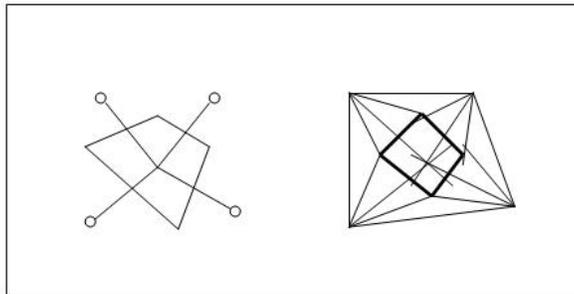


Figura 3-10 Método da poligonal a) mediatrizes; b) bissetrizes.

3.2.4. Estimativas geoestatísticas

Para a previsão (ou estimativa) dos valores da variável em posições não amostradas, vários métodos existem, dentre os clássicos (ou tradicionais) e os geoestatísticos.

A grande maioria dos métodos de estimativa envolve combinações lineares da forma

$$\hat{V} = \sum_{i=1}^n w_i \cdot v_i \quad (3-45)$$

onde v_1, v_2, \dots, v_n representa os n valores amostrados e w_i um fator de ponderação associado a cada valor v_i . Os métodos diferenciam-se basicamente no processo de escolha de w_i para $i = 1, 2, \dots, n$.

No caso de métodos estatísticos baseados em funções aleatórias estacionárias, os valores $V(x_i)$ são considerados realizações de variáveis aleatórias, com distribuição de probabilidade conjunta dependendo apenas da distância entre elas, mas não de suas localizações x_i .

Logo, a estimativa $\hat{V}(x_i)$, combinação linear de $V(x_i)$ para $i = 1, 2, \dots, n$ pode ser também considerada aleatória.

$$\hat{V}(x_0) = \sum_{i=1}^n w_i \cdot V(x_i) \quad (3-46)$$

Assim como o erro de estimação

$$R(x_0) = \hat{V}(x_0) - V(x_0) \quad (3-47)$$

onde $V(x_0)$ representa a modelagem aleatória do valor verdadeiro em x_0 .

O valor esperado do erro em qualquer particular posição é frequentemente referido como viés (“bias”), podendo ser definido como:

$$E\{R(x_0)\} = E\{\hat{V}(x_0)\} - E\{V(x_0)\} \quad (3-48)$$

$$E\{R(x_0)\} = E\left\{\sum_{i=1}^n w_i \cdot V(x_i)\right\} - E\{V(x_0)\} \quad (3-49)$$

$$E\{R(x_0)\} = \sum_{i=1}^n w_i \cdot E\{V(x_i)\} - E\{V(x_0)\} \quad (3-50)$$

Para a função aleatória estacionária,

$$E\{V(x_i)\} = E\{V(x_0)\} = E\{V\} \quad (3-51)$$

então

$$E\{R(x_0)\} = E\{V\} \left(\sum_{i=1}^n w_i - 1 \right) \quad (3-52)$$

Gerando a condição para que o método de estimativa não apresente viés,

$$\sum_{i=1}^n w_i = 1 \quad (3-53)$$

3.2.4.1. Krigagem ordinária (OK)

O método de krigagem ordinária é também conhecido, em língua inglesa, pela sigla B.L.U.E. significando “the best linear unbiased estimator”. Linear porque suas estimativas são feitas por combinações lineares, “unbiased” (sem viés) porque o erro de estimação esperado no modelo é nulo e “best” porque seu objetivo é minimizar a variância destes erros σ_R^2 .

O erro de estimação foi anteriormente expresso por

$$R(x_0) = \hat{V}(x_0) - V(x_0) \quad (3-54)$$

e sua variância pode ser definida como:

$$Var\{R(x_0)\} = Var\left\{\hat{V}(x_0) - V(x_0)\right\} \quad (3-55)$$

$$Var\{R(x_0)\} = Cov\left\{\hat{V}(x_0), \hat{V}(x_0)\right\} - 2Cov\left\{\hat{V}(x_0), V(x_0)\right\} + Cov\{V(x_0), V(x_0)\} \quad (3-56)$$

O primeiro termo da direita da equação ((3-56) representa a própria variância de $\hat{V}(x_0)$, ou seja

$$Cov\left\{\hat{V}(x_0).\hat{V}(x_0)\right\} = Var\left\{\hat{V}(x_0)\right\} \quad (3-57)$$

Considerando que

$$\hat{V}(x_0) = \sum_{i=1}^n w_i.V(x_i) \quad (3-58)$$

resulta em

$$Cov\left\{\hat{V}(x_0).\hat{V}(x_0)\right\} = Var\left\{\sum_{i=1}^n w_i.V(x_i)\right\} \quad (3-59)$$

$$Cov\left\{\hat{V}(x_0).\hat{V}(x_0)\right\} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i.w_j.Cov\{V(x_i).V(x_j)\} \quad (3-60)$$

$$Cov\left\{\hat{V}(x_0).\hat{V}(x_0)\right\} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i.w_j.\tilde{C}_{ij} \quad (3-61)$$

O segundo termo da direita da equação ((3-56) pode ser escrito como

$$2Cov\left\{\hat{V}(x_0).V(x_0)\right\} = 2Cov\left\{\left(\sum_{i=1}^n w_i.V(x_i)\right).V(x_0)\right\}$$

$$2Cov\left\{\hat{V}(x_0).V(x_0)\right\} = 2E\left\{\sum_{i=1}^n w_i.V(x_i).V(x_0)\right\} - 2E\left\{\sum_{i=1}^n w_i.V(x_i)\right\}.E\{V(x_0)\}$$

$$2Cov\left\{\hat{V}(x_0).V(x_0)\right\} = 2\sum_{i=1}^n w_i.[E\{V(x_i).V(x_0)\} - E\{V(x_i)\}.E\{V(x_0)\}]$$

$$2Cov\left\{\hat{V}(x_0).V(x_0)\right\} = 2\sum_{i=1}^n w_i.\tilde{C}_{i0}$$

O terceiro termo da direita da equação (3-56) pode ser expresso como

$$Cov\{V(x_0).V(x_0)\} = Var\{V(x_0)\}$$

$$Cov\{V(x_0).V(x_0)\} = \tilde{\sigma}^2$$

Então a equação (3-56) pode ser finalmente escrita como

$$\sigma_{OK}^2 = \tilde{\sigma}^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i.w_j.\tilde{C}_{ij} - 2\sum_{i=1}^n w_i.\tilde{C}_{i0} \quad (3-62)$$

Uma vez selecionado o modelo do variograma (ou da função covariância) é possível determinar-se $\tilde{\sigma}^2$ e todas as covariâncias \tilde{C}_{ij} .

A minimização de uma função a n variáveis produz então um sistema de n equações a n incógnitas (fatores de ponderação w_1, w_2, \dots, w_n) que, em princípio, poderia ser resolvido por um método de álgebra linear.

Como existe uma condição de restrição que garante que a solução não apresente viés ($\sum_{i=1}^n w_i = 1$), então o problema de otimização com restrição poderá então ser resolvido pelo método do multiplicador de Lagrange, resultando:

$$\tilde{\sigma}_k^2 = \tilde{\sigma}^2 + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_i w_j \tilde{C}_{ij} - 2 \sum_{i=1}^n w_i \tilde{C}_{i0} - 2\mu \left(\sum_{i=1}^n w_i = 1 \right) \quad (3-63)$$

O multiplicador de Lagrange μ introduz uma nova incógnita no problema, agora expresso sem restrição já que a condição de não viés é automaticamente satisfeita por (3-63).

A minimização desta equação

$$\frac{\partial \tilde{\sigma}_R^2}{\partial w_i} = 0 \dots \dots \dots i = 1, \dots, n \quad (3-64)$$

$$\frac{\partial \tilde{\sigma}_R^2}{\partial \mu} = 0 \quad (3-65)$$

Produz um sistema de $(n+1)$ equações que pode ser expresso sob forma matricial da seguinte maneira:

$$\begin{pmatrix} \tilde{C}_{11} & \dots & \tilde{C}_{1n} & 1 \\ \tilde{C}_{21} & \dots & \tilde{C}_{2n} & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \tilde{C}_{n1} & \dots & \tilde{C}_{nn} & 1 \\ 1 & \dots & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ w_n \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{C}_{10} \\ \tilde{C}_{20} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \tilde{C}_{n0} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3-66)$$

ou

$$[C][W] = [D]$$

Possibilitando que as incógnitas w_1, w_2, \dots, w_n sejam obtidas sem maiores dificuldades através do método de eliminação de Gauss, por exemplo:

O valor da variância do erro minimizada pode enfim ser calculada como:

$$\tilde{\sigma}_R^2 = \tilde{\sigma}^2 - \{W\}^T \cdot \{D\} \quad (3-67)$$

A variância de estimativa ou variância de krigagem foi proposta como uma medida da incerteza associada à estimativa feita por meio da krigagem ordinária.

3.2.4.2. Krigagem Simples (SK)

A variável primária V (variável aleatória) pode ser estimada pela seguinte combinação linear

$$\hat{V}(x_0) = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n w_i \cdot V(x_i) \quad (3-68)$$

onde w_i são pesos associados à função aleatória $V(x_i)$ e λ_0 um fator de ajuste da estimativa (“shift parameter”).

Para uma estimativa sem viés, o valor esperado de $R(x_0) = \hat{V}(x_0) - V(x_0)$, deve ser nulo, ou como sabemos:

$$E\{R(x_0)\} = E\{\hat{V}(x_0)\} - E\{V(x_0)\} \quad (3-69)$$

$$E\{R(x_0)\} = E\left\{\lambda_0 + \sum_{i=1}^n w_i \cdot V(x_i)\right\} - E\{V(x_0)\} \quad (3-70)$$

$$E\{R(x_0)\} = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n w_i \cdot E\{V(x_i)\} - E\{V(x_0)\} \quad (3-71)$$

$$E\{R(x_0)\} = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n w_i \cdot E\{V(x_i)\} - E\{V(x_0)\} = 0 \quad (3-72)$$

$$E\{R(x_0)\} = \lambda_0 + \sum_{i=1}^n w_i \cdot \tilde{m}_i - \tilde{m}_0 = 0 \quad (3-73)$$

Logo,

$$\lambda_0 = \tilde{m}_0 - \sum_{i=1}^n w_i \cdot \tilde{m}_i \quad (3-74)$$

Na equação (3-68)

$$\hat{V}(x_0) = \tilde{m}_0 - \sum_{i=1}^n w_i \cdot \tilde{m}_i + \sum_{i=1}^n w_i \cdot V(x_i) \quad (3-75)$$

ou

$$\hat{V}(x_0) = \tilde{m}_0 - \sum_{i=1}^n w_i \cdot (V(x_i) - \tilde{m}_i) \quad (3-76)$$

O erro da estimativa $R(x_0)$ pode ser escrito como

$$R(x_0) = \hat{V}(x_0) - V(x_0) = \left(\hat{V}(x_0) - \tilde{m}_0 \right) - \left(V(x_0) - \tilde{m}_0 \right) \quad (3-77)$$

$$R(x_0) = \hat{V}(x_0) - V(x_0) = \sum_{i=1}^n w_i \cdot \left(\hat{V}(x_i) - \tilde{m}_i \right) - \left(V(x_0) - \tilde{m}_0 \right) \quad (3-78)$$

$$R(x_0) = \hat{V}(x_0) - V(x_0) = \sum_{i=0}^n w_i \cdot \left(\hat{V}(x_i) - \tilde{m}_i \right) \quad (3-79)$$

A variância do erro pode ser expressa, como vimos na krigagem ordinária, por:

$$Var\{R\} = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n w_i \cdot w_j \cdot \tilde{C}_{ij} \quad (3-80)$$

Os pesos w_i para $i=1, \dots, n$ obtidas pela minimização de $Var\{R(x_0)\}$ em relação a w_i , $i=1, \dots, n$ podem ser obtidos por:

$$\sum_{i=1}^n w_i \cdot \tilde{C}_{ij} = \tilde{C}_{0i} \dots \dots \dots j = 1, \dots, n \quad (3-81)$$

A correspondente variância minimizada dos erros, mais conhecida como variância da krigagem simples $\tilde{\sigma}_{sk}^2$, é dada por:

$$\tilde{\sigma}_{sk}^2 = \tilde{C}_{00} - \sum_{i=1}^n w_i \cdot \tilde{C}_{0i} \geq 0 \quad (3-82)$$

$\tilde{C}_{00} = \sigma^2$ é a variância da função aleatória $V(x)$.

As equações da krigagem simples são também conhecidas como equações de regressão linear na estatística tradicional.

Na krigagem simples a média \tilde{m} deve ser conhecida antes da aplicação do algoritmo para estimativa.

3.2.4.3. Krigagem em bloco

Frequentemente se necessita da estimativa do valor médio de uma variável $V(x)$ em um determinado volume A .

Uma maneira de se obter tal estimativa é pela discretização do volume. A em vários pontos e então determinar-se a média das estimativas individuais destes pontos calculados por os diversos processos de krigagem (KO, SK).

$$\tilde{V}_A = \frac{1}{K} \sum_{j=1}^k \hat{V}(x_j) \dots \dots \dots V_j \in A \quad (3-83)$$

O processo é simples, mas computacionalmente ineficiente por envolver soluções desnecessárias de sistemas de equações (equações de krigagem).

No caso da krigagem ordinária o sistema de equações é escrito como $[C][W] = [D]$. Observe que a matriz $[C]$, que contém as covariâncias entre os valores amostrais, não depende da localização espacial da estimativa, seja ela considerada em apenas um ponto (x_0) ou sobre um volume A .

No caso do vetor $[D]$, no entanto, as covariâncias dependem da posição (x_0) da estimativa.

No caso da estimativa envolver um valor médio da variável $V(x)$ no volume A , poderíamos escrever que:

$$\tilde{C}_{iA} = Cov\left\{\tilde{V}_A, V(x_i)\right\} \quad (3-84)$$

$$\tilde{C}_{iA} = E\left\{\tilde{V}_A \cdot V(x_i)\right\} - E\left\{\tilde{V}_A\right\} \cdot E\left\{V(x_i)\right\} \quad (3-85)$$

$$\tilde{C}_{iA} = E\left\{\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k V(x_j) \cdot V(x_i)\right\} - E\left\{\frac{1}{k} \sum_{j=1}^k V(x_j)\right\} \cdot E\left\{V(x_i)\right\} \quad (3-86)$$

$$\tilde{C}_{iA} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k E\left\{V(x_j) \cdot V(x_i)\right\} - \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k E\left\{V(x_j)\right\} \cdot E\left\{V(x_i)\right\} \quad (3-87)$$

$$\tilde{C}_{iA} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k \left[E\left\{V(x_j) \cdot V(x_i)\right\} - E\left\{V(x_j)\right\} \cdot E\left\{V(x_i)\right\} \right] \quad (3-88)$$

$$\tilde{C}_{iA} = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k Cov(V(x_i), V(x_j)) \dots \dots \dots V_j \in A \quad (3-89)$$

A covariância entre a variável aleatória $V(x_i)$ e a variável V_A , que representa o valor medido do fenômeno sobre o volume local A, é o mesmo do que a média das covariâncias ponto a ponto da variável aleatória $V(x_j)$ situados no interior do volume ou bloco A.

A variância do erro da estimativa é dada por

$$\tilde{\sigma}_{ok}^2 = \tilde{C}_{AA} - \left(\sum_{i=1}^n w_i \cdot \tilde{C}_{iA} + \mu \right) \quad (3-90)$$

onde \tilde{C}_{AA} representa a covariância entre os pontos localizados no volume A.

$$\tilde{C}_{AA} = \frac{1}{k^2} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^k \tilde{C}_{ij} \dots\dots\dots V(x_i) \in A \wedge V(x_j) \in A \quad (3-91)$$

Na prática, a covariância \tilde{C}_{AA} é aproximada pela discretização do volume A em vários pontos (k). Mas, é importante garantir que os valores de $\tilde{\sigma}_{ok}^2$ sejam sempre positivos, por isso, os pontos utilizados para o cálculo da covariância \tilde{C}_{AA} devem ser os mesmos empregados na determinação das covariâncias ponto a bloco \tilde{C}_{iA} .

A vantagem da krigagem por bloco é que a estimativa do valor médio da variável aleatória de um volume A é obtida pelas soluções de um sistema de equações. Quanto menor o número de pontos em que se discretize o bloco, menor será o tempo de cálculo, mas menor também será a precisão da estimativa.

A Figura 3-11, mostra como um bloco, discretizado em quatro subblocos, é estimado.

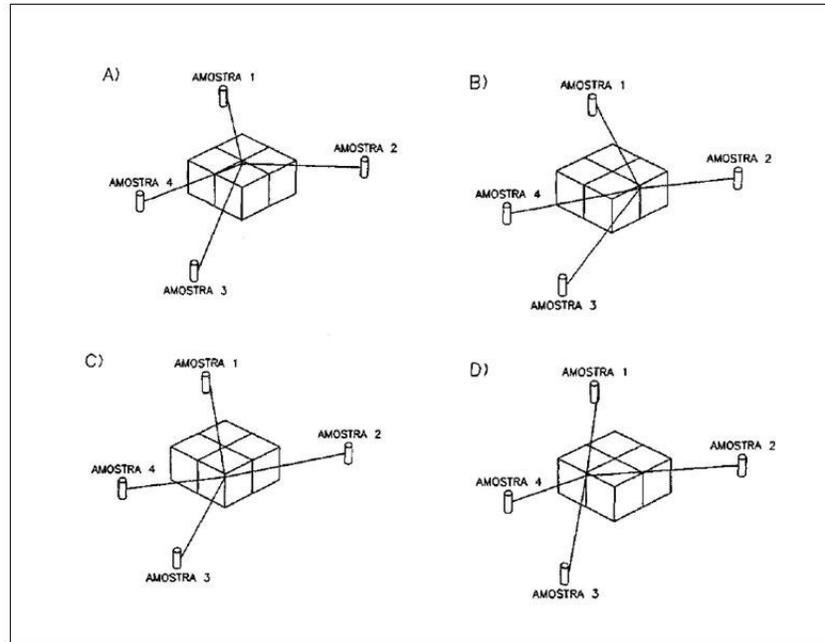


Figura 3-11 Avaliação de um bloco sub-dividido em 4 sub-blocos (Yamamoto, 1999).

3.2.5. Incertezas Geoestatísticas

Através dos métodos geoestatísticos apresentados anteriormente, estimativas da variável V podem ser feitas, ainda que incorporando algum erro. O valor exato destas não é possível de ser calculado, pelo simples fato de que o valor verdadeiro da variável na posição desejada é desconhecido. No entanto, seria bastante útil se ao menos alguma indicação de sua magnitude pudesse ser estabelecida.

Vários fatores podem influenciar o erro de estimação, dentre os quais, o número de amostras, a proximidades das amostras ao ponto de estimativa, a configuração espacial das amostras e a natureza do próprio fenômeno natural sendo estudado.

Em princípio, estimativas mais confiáveis podem ser feitas com um número maior de amostras, próximas ao ponto de interesse, ainda que uma eventual segregação das amostras possa prejudicar a exatidão da estimativa.

A influência dos outros fatores é menos óbvia, porém não menos importante. Estimativas produzidas no caso de fenômenos naturais bem comportados, com suave variação espacial, são mais confiáveis do que aquelas obtidas onde a variável primária exibe comportamento errático. Além disso, é importante reconhecer e ter em mente que

a natureza do fenômeno pode variar na região de interesse, com áreas de alta variabilidade local.

Questões comuns em geociências como, por exemplo, em qual configuração espacial de amostras as estimativas são mais confiáveis, podem ser tratadas por um índice de incerteza que, embora não garantido que uma estimativa seja melhor do que outra, fornece indicações da possível magnitude dos erros envolvidos.

O índice que mais amplamente considera os fatores que afetam a incerteza é a variância do erro de estimação $R(x_0)$, anteriormente definido por:

$$\tilde{\sigma}_R^2 = Cov\{V(x_0).V(x_0)\} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m Cov\{V(x_i).V(x_j)\} - 2 \sum_{i=1}^n w_i Cov\{V(x_i).V(x_0)\} \quad (3-92)$$

onde:

- $Cov\{V(x_0).V(x_0)\}$ - representa a variância do ponto estudado e considera, em parte, o comportamento errático da variável de interesse. Quanto mais errática, maior o valor deste termo e, portanto, maior o índice de incerteza relativo expresso por $\tilde{\sigma}_R^2$.
- $\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m Cov\{V(x_i).V(x_j)\}$ - soma ponderada das covariâncias que diminui à medida em que as distâncias aumentam. Se as amostras estão bastante separadas entre si, então a influência deste termo será relativamente pequena.
- $\sum_{i=1}^n w_i Cov\{V(x_i).V(x_0)\}$ - soma ponderada das covariâncias entre as amostras e o ponto sendo estimado. Se as amostras estão próximas ao ponto, as covariâncias aumentam e, devido ao sinal negativo na equação (3-92), o índice de incerteza diminui.

O índice de incerteza também incorpora os efeitos dos fatores de ponderação que, nos métodos geoestatísticos, garantem estimativas sem viés $\left(\sum_{i=1}^n w_i = 1 \right)$.

A classificação por índices de incerteza relativa pode não ser suficiente em muitos problemas que pedem por medidas de incerteza em valores absolutos. Por exemplo, é frequentemente importante estabelecer intervalos de confiança dentro dos quais o valor verdadeiro da variável possa estar situado.

A maneira mais tradicional de estabelecer tais intervalos de confiança requer que as 2 seguintes hipóteses sejam satisfeitas pelo problema:

- Os erros verdadeiros sigam uma distribuição normal de probabilidades (distribuição de Gauss).
- A variância dos erros do modelo baseado em funções aleatórias $\left(\tilde{\sigma}_R^2\right)$ seja uma medida precisa da variância dos erros de estimação verdadeiros.

A primeira destas hipóteses é geralmente aceita, mesmo para conjunto de dados com alta assimetria, pois os erros de estimação tendem a ser simétricos (teorema do limite central).

A segunda hipótese, no entanto, depende fortemente, do modelo variográfico selecionado. Na prática, é muitas vezes difícil interpretar a variância dos erros do modelo como a variância dos erros verdadeiros.

Segundo Yamamoto & Conde (1999), a variância da krigagem mede apenas a configuração espacial dos pontos dados e, por isso, não reconhece a dispersão local dos mesmos. A dispersão local é de importância vital principalmente para a classificação de recursos minerais. Por isso, diversos autores propõem outras relações para calcular medidas que melhor representem o erro associado à estimativa e levem em consideração os efeitos da dispersão local (regiões de alta e baixa variabilidade).

3.2.6. Simulações Geoestatísticas

Em muitos casos, a estimação do valor de um bloco simples não é suficiente para abordar todas as questões surgidas em um projeto novo. A krigagem produz a melhor estimativa do valor de um bloco, considerando somente valores amostrais ao redor do bloco e ignorando a influência dos demais.

As estimações produzidas geram uma representação suavizada da distribuição real da variável. Em termos estatísticos, isto significa que a variância das estimativas é menor do que a variância dos valores reais. Em termos práticos, que o valor previsto está condicionalmente com viés, subestimando os valores altos e sobrestimando os valores baixos (Sullivan, 2006).

As simulações mostram um maior detalhe da variabilidade espacial, já que seu objetivo é reproduzir a maior quantidade possível das propriedades do conjunto original

dos dados, enquanto que as estimativas são realizadas para determinar propriedades médias.

A simulação reproduz o histograma e variograma dos dados originais, além de estar condicionada aos dados. Por meio do condicionamento, quando uma variável é simulada em uma região amostrada, a estimativa igualará exatamente o valor da amostra. As simulações podem ser realizadas muitas vezes e em cada vez produzirá superfícies diferentes. Cada uma das superfícies simuladas reproduz as características conhecidas e modeladas dos dados, com cada superfície representando uma possível imagem de como a variável se comportará espacialmente.

Em resumo, quando se quiser a melhor estimativa do valor de uma propriedade, deve-se usar a krigeagem, mas quando se requer a informação da variabilidade, há que criar simulações.

Fundamentos da simulação

Uma simulação geoestatística bem construída reproduzirá muita das características originais dos dados. Algumas das características reproduzidas são: o histograma dos dados, a correlação espacial dos dados e suas propriedades locais. Existem muitos algoritmos para gerar uma simulação condicional, Porém, todos os algoritmos relacionam-se em quatro etapas importantes (Figura 3-12). Iniciando com uma série de números aleatórios, impõe-se a correlação espacial. Os valores correlacionados são “condicionados” aos dados reais e obrigados a se conformar à distribuição dos dados originais.

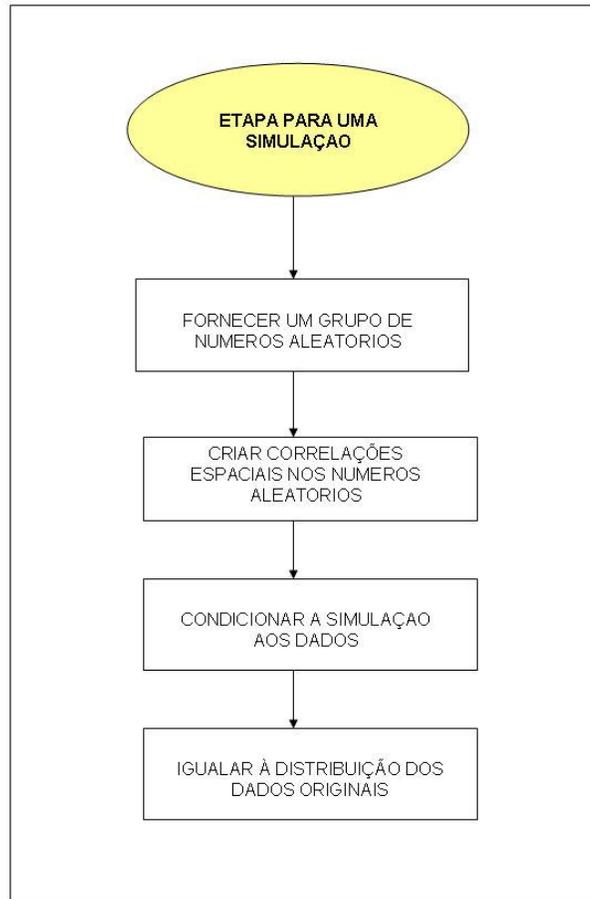


Figura 3-12 Passos para uma simulação.

3.2.6.1. Simulação seqüencial gaussiana (SSG)

Atualmente é o algoritmo mais conhecida de simulação condicional, permitindo uma solução eficiente das etapas de simulação. A aproximação da simulação seqüencial gaussiana utiliza ao máximo as propriedades da distribuição gaussiana.

Uma das propriedades é quando os dados são (multi) normalmente distribuídos, então a variância da krigagem é equivalente à variância condicional e o valor estimado descreve por completo a distribuição condicional em um ponto não amostrado. Conhecendo esta distribuição, é portanto muito simples estabelecer previsões. No entanto, como a seleção aleatória de amostras de um número de distribuições condicionais independentes não garante que o variograma dos dados seja reproduzido

pela simulação, então os teores simulados são somadas ao grupo dos dados condicionantes conforme são gerados (Sullivan, 2006).

Em termos matemáticos, uma simulação condicional procura fornecer realizações de N variáveis aleatórias condicionais aos n dados disponíveis. Aqui N (o número de pontos simulados) é geralmente maior que n (o número de dados disponíveis). Como a distribuição multivariável adequada para este tipo de problema é geralmente muito complexa, necessita-se de um método que simplifique a solução. Esta simplificação é feita com auxílio do axioma de Bayes para probabilidades condicionais. Para eventos discretos, o axioma é dado por:

$$\Pr(A/B) = \Pr(A \wedge B) / \Pr(B) \quad (3-93)$$

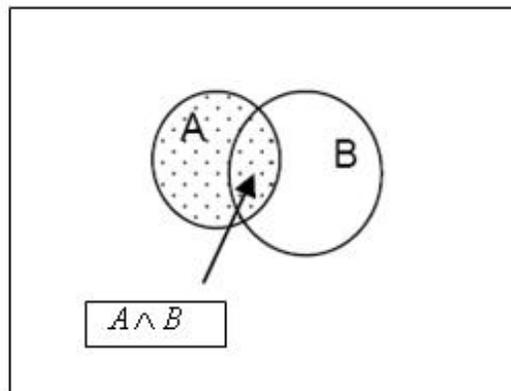


Figura 3-13 Diagrama de Venn.

Os círculos representados na Figura 3-13 representam os eventos A e B . A interseção dos círculos representa a ocorrência de A e de B ao mesmo tempo. O termo $\Pr(A/B)$ representa “qual é a probabilidade de que ocorra A quando já tenha acontecido B ”. Se já ocorreu o evento B , todos os eventos adicionais estão limitados ao círculo que representa B , ou seja, “se já ocorreu B , a única maneira de que ocorra A é que ocorram A e B ao mesmo tempo”. Ao juntar esta informação, a probabilidade de que ocorra A e B ($\Pr(A/B)$) é igual à probabilidade de que ambos os dois A e B ocorram ($\Pr(A \wedge B)$) dividido pela probabilidade de que ocorra B ($\Pr(B)$).

Também podemos escrever a equação (3-93) como:

$$\Pr(A \wedge B) = \Pr(A/B) \cdot \Pr(B) \quad (3-94)$$

Esta equação resulta mais adequada nas simulações de distribuições de múltiplas variáveis, onde a probabilidade conjunta de A e B é o produto de duas distribuições. Esta

relação pode ser expandida para que se possa formar a partir do produto de variáveis N , a distribuição conjunta de qualquer variável N .

Por exemplo, considerando $D = B \wedge C$

$$\Pr(A \wedge B \wedge C) = \Pr(A \wedge D) \quad (3-95)$$

Aplicando o axioma de Bayes

$$\Pr(A \wedge D) = \Pr(A/D) \cdot \Pr(D) \quad (3-96)$$

Substituindo novamente D

$$\Pr(A \wedge B \wedge C) = \Pr((A/B) \wedge C) \cdot \Pr(B \wedge C) \quad (3-97)$$

Aplicando novamente o axioma de Bayes

$$\Pr(A \wedge B \wedge C) = \Pr((A/B) \wedge C) \cdot \Pr(B/C) \cdot \Pr(C) \quad (3-98)$$

Na simulação existem n dados e N pontos a simular. Os n pontos simulados devem ser uma realização da função aleatória $V(x)$. Logo, os pontos simulados devem seguir as leis da probabilidade conjunta para as N variáveis aleatórias (N variáveis aleatórias nos pontos que estão sendo simulados). Uma realização que segue as leis de probabilidade conjunta é definida aplicando sequencialmente o axioma de Bayes.

Primeiro, um ponto de partida aleatório que será simulado é selecionado dentre os N nós de uma malha. Neste momento, a distribuição dos teores condicionados aos n dados é definida e um teor simulado selecionado aleatoriamente a partir da distribuição condicional. Logo depois, este teor simulado é adicionado ao conjunto de dados condicionantes e visita-se outro dos nós da malha. A distribuição condicional é definida neste ponto e um teor simulado é selecionado aleatoriamente com base nesta distribuição.

Segundo, a distribuição dos teores esta condicionada de maneira importante aos n dados e ao teor simulado. Este processo sequencial continua até que todos os pontos N tenham sido simulados, já que todos os teores simulados são selecionados de uma distribuição de teores condicionados à informação disponível (simulado e real); A simulação resultante é uma realização da função aleatória $V(x)$.

É importante garantir que os dados tenham uma distribuição normal, já que a aplicação da krigagem simples define por completo a distribuição condicional dos teores. Neste caso, o procedimento de simulação condicional consiste em:

- Visitar um nó de simulação.
- Realizar uma krigagem simples para definir a distribuição condicional.
- Selecionar aleatoriamente um teor da distribuição condicional.

- Somar o valor simulado ao conjunto dos dados condicionados.
- Visitar outro nó e repetir o processo.
- Este processo continua até que todos os nós tenham sido simulados.

$$\tilde{V}_{sim}(x) = V_{UCSim}(x) + (\tilde{V}_{dados}(x) - \tilde{V}_{UCSim}(x)) \quad (3-99)$$

onde $\tilde{V}_{sim}(x)$ é o valor simulado, $V_{UCSim}(x)$ é o teor do dado simulado não condicionado, $\tilde{V}_{dados}(x)$ o teor estimado com krigagem simples a partir das amostras e $\tilde{V}_{UCSim}(x)$ o teor estimado com krigagem simples a partir dos dados não condicionalmente simulados.

Nas posições onde existam dados, a simulação condicional $\tilde{V}_{sim}(x)$ será igual aos dados, já que a krigagem é um estimador exato. Em um nó onde haja uma amostra $\left(V_{UCSim}(x) = \tilde{V}_{UCSim}(x) \right)$ e $\left(V_{sim}(x) = \tilde{V}_{dados}(x) \right)$.

Segundo Sullivan (2006), a variância da krigagem e a variância condicional não são as mesmas em uma distribuição que não seja normal (Gaussiana), por exemplo em uma distribuição log-normal onde existe um efeito proporcional. A variância condicional é uma função do valor médio local (efetivamente $S^2 = \sigma \cdot m^2$ onde S^2 é a variância local e m é a média local). Neste caso, quando a krigagem é realizada, a variância da krigagem é somente condicional com a posição dos dados, já que os pesos da krigagem são função apenas da posição dos dados. Devido que a variância condicional depende das médias locais, a variância condicional depende tanto da posição dos dados quanto dos valores destes.

Para aplicar a teoria de simulação sequencial gaussiana os dados devem estar distribuídos normalmente, o que ocorre quase nunca na prática. A solução deste problema está na transformação dos dados a uma distribuição normal. Sem importar seu teor de distribuição inicial, com uma média de 0 e um desvio padrão de 1 criam-se valores normalmente distribuídos. Logo depois, a simulação é realizada sobre estes dados transformados e os pontos simulados são novamente transformados a seus respectivos valores originais.

A transformação dos dados se baseia na distribuição acumulativa dos dados e na distribuição normal.

Implementação da Simulação Seqüencial Gaussiana

- Revisar os dados originais para assegurar-se que a distribuição dos teores seja estacionária em relação ao volume que será simulado. Particularmente, revisar as tendências dos teores ou das áreas de valores altos e baixos. Se for necessário subdividir o volume de simulação para obter regiões admitidas estacionárias.
- Revisar se existem grupos de dados. Se os dados estão segregados ou agrupados, é provável que a distribuição não dessegregada dos dados não seja representativa. Determine os pesos por um método de dessegregação.
- Transforme os dados para que sigam uma distribuição normal.
- Modele o variograma dos dados transformados.
- Defina o caminho aleatório através da malha dos pontos que serão simulados.
- Visite cada um dos nós e realize a krigagem simples sob os dados transformados.
- A krigagem simples define a média e a variância (estimativa da krigagem e variância da krigagem) da distribuição condicional, pois os dados são distribuídos normalmente.
- Usando um gerador de números aleatórios, selecione um ponto da distribuição condicional Gaussiana. Este é o valor simulado para o ponto.
- Adicione o valor simulado ao grupo de dados condicionantes.
- Visite o próximo nó a ser simulado e repita a krigagem e os passos de seleção.
- Uma vez que todos os pontos tenham sido simulados, transforme os valores simulados sob distribuição normal para obter os teores simulados reais.
- Os valores simulados finais devem ser revisados e contrastados com os dados originais para garantir que o variograma e o histograma tenham sido reproduzidos adequadamente.