

Artigo 1 - Francisco Chiaravalloti Neto

Artigo: Queiroz JCB, Sturaro JR, Saraiva ACF, Landim PMB. Geochemical characterization of heavy metal contaminated area using multivariate factorial kriging. Environ Geol 2008, 55: 95-105.

A. Resenha

1. Objetivos: aplicar krigagem fatorial para avaliar o potencial de contaminação de metais pesados no solo, água superficiais e subterrâneas.

2. Metodologia

a) Área de estudo: área de mineração localizada no distrito de Santana, entre 50° e 55° W e 0° e 5° N. A cidade tinha um população de 80.439 habitantes em 2000

b) Amostragem: a meta inicial de 80 amostras de água não foi atingida, sendo obtidas 42. Foram acrescentadas de sete amostras utilizadas, pela mineradora, para controle.

c) Métodos geoestatísticos.

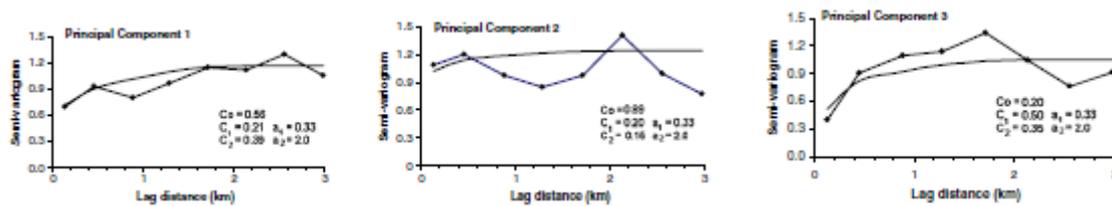
Os autores dizem que esses métodos são baseados na teoria das variáveis regionalizadas que estabelece que variáveis em uma área exibem tanto propriedades aleatórias como espacialmente estruturadas. A pressuposição geral em geoestatística espacial é que uma variável regionalizada tem estacionariedade de segunda ordem. A partir dessas pressuposições os autores apresentam o vetor de valor médio, a matriz de covariância, a matriz do semivariograma e uma expressão para um semivariograma experimental. O variograma experimental é ajustado através da combinação de modelos teóricos e que isso pode ocorrer quando os dados estão disponíveis para uma grande extensão. Assim, o variograma pode revelar várias escalas de variabilidade espacial. Cada escala de variabilidade pode ser representada por um modelo de semivariograma, de modo que a variabilidade espacial seja modelada por uma soma de variogramas (aninhados).

Os autores afirmam que a krigagem fatorial múltipla permite analisar a relação entre as variáveis presentes na escala espacial detectada no semivariograma aninhado. Neste caso os autores propuseram reduzir as várias analisadas a fatores utilizando componentes principais. As variáveis analisadas foram (oito elementos que mostraram níveis de concentração acima dos estabelecidos pela legislação ambiental brasileira): alumínio, selênio, ferro, manganês, arsênico, cádmio, chumbo e cobre (mg/l).

3. Resultados e Discussão

A análise descritiva das variáveis mostrou que elas não tinham distribuição normal e a maioria delas apresentou acentuada assimetria positiva. As oito variáveis de estudo (correspondentes a oito elementos químicos) foram submetidas a uma análise de krigagem fatorial multivariada. Os autores apresentam a matriz de correlação entre estas oito variáveis, que mostrou forte correlação entre chumbo e selênio e entre ferro e cádmio. Os autores padronizaram as oito variáveis (média = 0 e desvio padrão = 1) e estudaram a relação entre elas utilizando o método das componentes principais, sendo que os três primeiros fatores obtidos foram responsáveis por 74,1% da variância total. Os autores utilizaram um modelo linear de coregionalização (“linear coregionalization model” – não entendi direito do que se trata) para ajustar os semivariogramas aos três componentes principais. Os autores ajustaram semivariogramas unidirecionais, com efeito pepita e dois modelos esféricos com alcances de 0,33 e 2,0 km, respectivamente. Os autores identificaram tanto as estruturas de pequeno como grande alcance no semivariograma do primeiro componente, mas concluíram que a estrutura de pequeno

alcance tinha um papel mais importante para os segundo e terceiros componentes (Figura abaixo) (**não concordei muito com essa última conclusão**). Esses três componentes foram denominados de fatores regionalizados.



Os autores modelaram 36 semivariogramas experimentais diretos e cruzados considerando os dois esquemas esféricos com alcance de 0,33 e 2,0 km (resultados são apresentados na Tese de Doutorado de JCB Queiroz). (**não entendi de onde saíram os 36 variogramas**). Os autores apresentam os semivariogramas para ferro, cádmio, chumbo e selênio e apontam o contraste entre os dois primeiros (dominados por estrutura de pequeno alcance) e os dois últimos (dominados por estrutura de longo alcance) e dizem que as contribuições relativas de ambas as estruturas para os semivariogramas diretos refletem o papel desempenhado pelo homem e por fatores geológicos no padrão espacial mostrado por cada elemento (no artigo, os autores fazem a hipótese de que o papel do homem estaria relacionado com os efeitos de pequena escala (0,33 km) e o dos fatores geológicos relacionados com os efeitos de grande escala (2,0 km)). Os fatores regionalizados e as componentes espaciais foram mapeadas por cokrigagem (**o que é?**). Os valores dos fatores foram igualados a zero em distâncias maiores que 0,33 km para pequeno alcance e em distâncias maiores para grande alcance. Após análise dos mapas de krigagem, concluíram que em estrutura de pequeno escala (0,33km), manganês, arsênico, ferro e cádmio estavam associados com atividades humanas derivadas da mineração, enquanto que para a estrutura de longo alcance, altas concentrações de alumínio, selênio, cobre e chumbo estavam relacionadas com o ambiente natural. Outras conclusões dos autores:

- 1 - a krigagem fatorial multivariada produziu um conjunto de fatores que sumarizaram as principais características dos dados em cada uma das escalas espaciais (pequeno e grande alcance), permitindo a identificação das fontes e dos padrões dos poluentes e fornecendo medidas quantitativas da interação complexa entre as variáveis analisadas.
- 2 - a modelagem permitiu distinguir entre variações de pequena e de grande escala, relacionadas, respectivamente, a atividades humanas e ao ambiente natural.

B. Identificação dos elementos básicos dos problemas de geoestatística (slide 5)

1 - Estrutura dos dados: o formato dos dados é (x_i, Y_i) , sendo x_i fixos ou estocasticamente independente de Y_i (transparência 17) - No artigo os pontos (ou as suas coordenadas) escolhidos para coleta dos dados eram independentes das concentrações dos vários elementos químicos analisados.

2 - Processo subjacente: $[S, Y] = [S] [Y|S]$ - S é modelado como processo gaussiano (slide 17). No caso do artigo, os autores construíram superfícies a partir da coleta de informações sobre as concentrações dos vários elementos químicos. Supuseram estacionariedade de segunda ordem.

3 - Objetivos científicos: O objetivo do artigo está relacionado com a realização de inferência sobre o processo que ocorreu no local estudado, isto é, os autores pretenderam realizar uma predição.

4 – Natureza das variáveis resposta e potenciais covariadas: os autores trabalharam com oito variáveis (concentrações de cada elemento químico em mg/l de água), todas consideradas como variáveis resposta. Utilizaram análise de componentes principais para reduzir a dimensionalidade do problema (em vez das oito variáveis, trabalharam com três fatores, que foram responsáveis por 74,1% da variância total).

5 – Combinação de elementos e características para um possível modelo estatístico: na modelagem estatística os autores combinaram várias metodologias para obtenção do modelo: análise de componentes principais, modelagem variográfica multifatorial e cokrigagem (não entendi esta última).

(Olá Paulo

Fiquei com algumas dúvidas (grifadas em verde) e não sei se identifiquei corretamente os elementos básicos. Podemos conversar sobre isso na aula?

Um abraço

Francisco)