



**CERENA**

Centro de Recursos  
Naturais e Ambiente

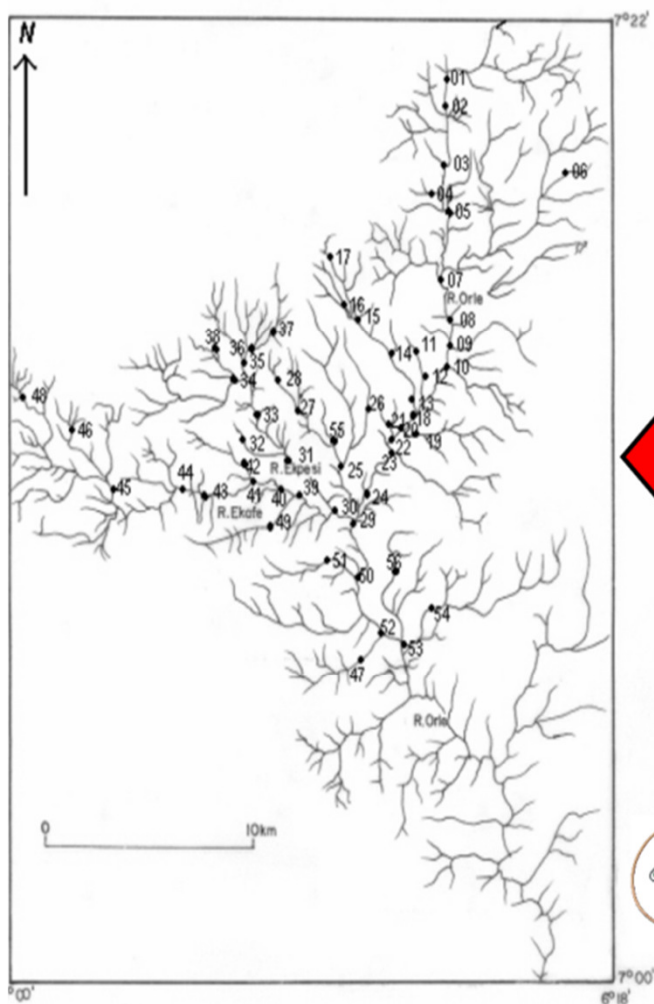
**30 ANOS**

de

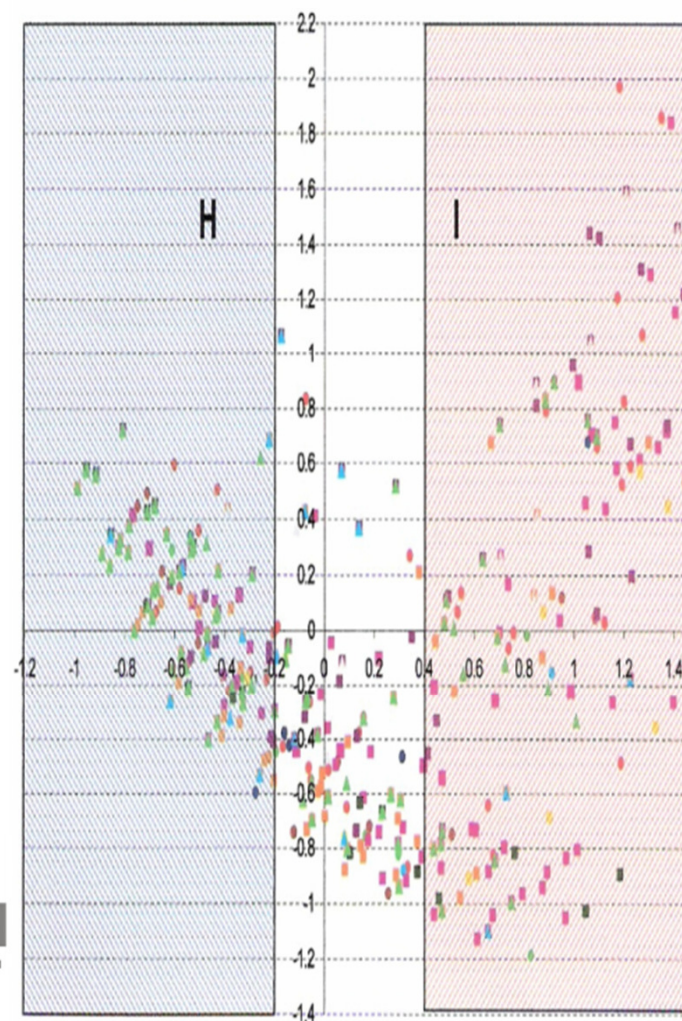
**GEOQUÍMICA MATEMÁTICA**



**CAPES**

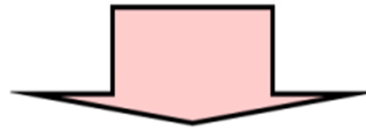


**Henrique  
Garcia Pereira**



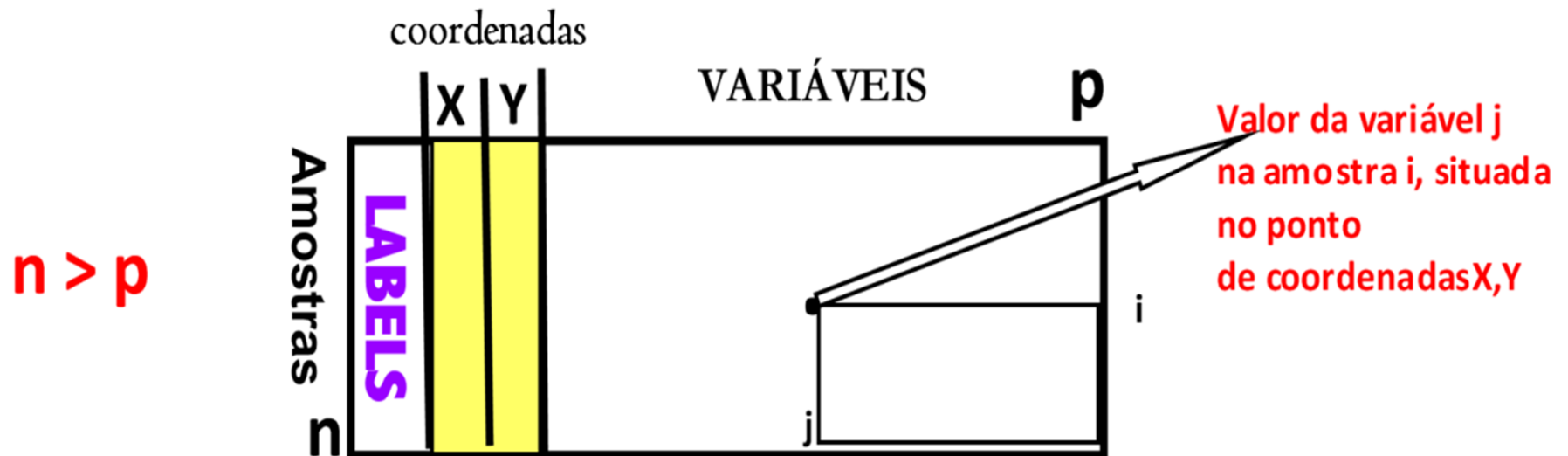
**XIII Congresso de  
geoquímica**  
dos países de Língua Portuguesa

# A matemática está no âmago da **GEOQUÍMICA 'EMPÍRICA'**



Numero elevado de amostras analisadas para muitas variáveis,  
cujas interdependências desenvolvidas no espaço geográfico  
é preciso pôr em claro para que sejam interpretadas teoricamente

## MODELO DOS DADOS



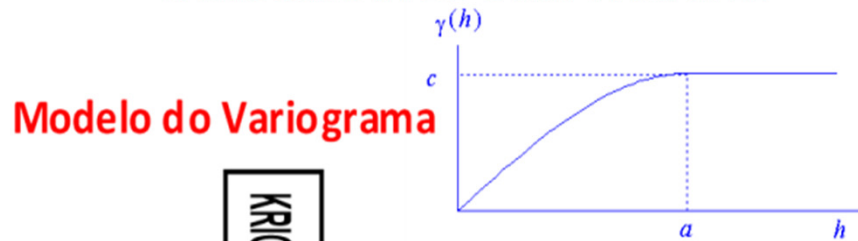
# Antes do desenvolvimento da GEOESTATÍSTICA MULTIVARIADA

que é a metodologia adequada para o tratamento dos resultados da  
GEOQUÍMICA EMPÍRICA  
privilegiava-se uma das vertentes:

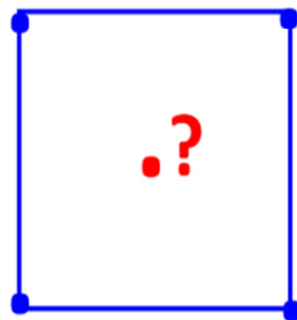
## ESPACIAL

tratando as variáveis uma a uma

### VARIOGRAFIA DE UMA VARIÁVEL



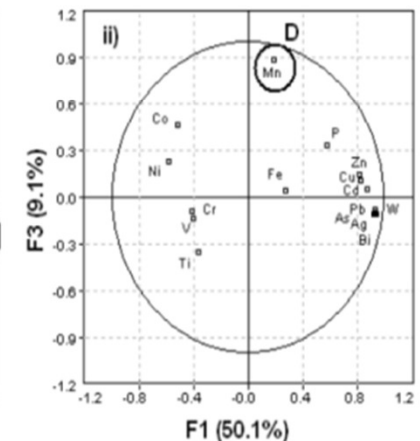
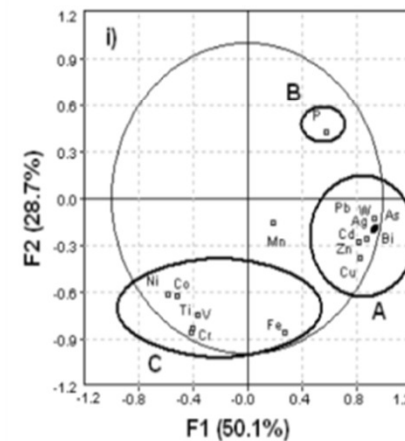
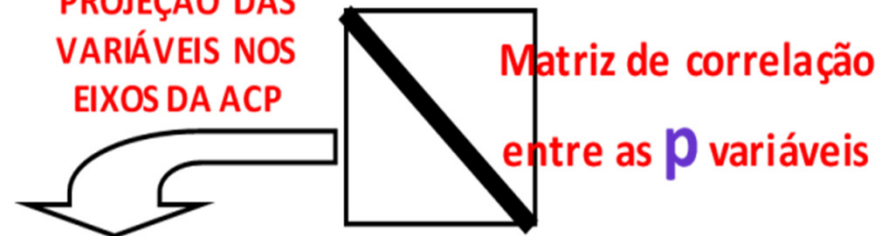
Média ponderada,  
em que os pesos  
dependem do  
variograma



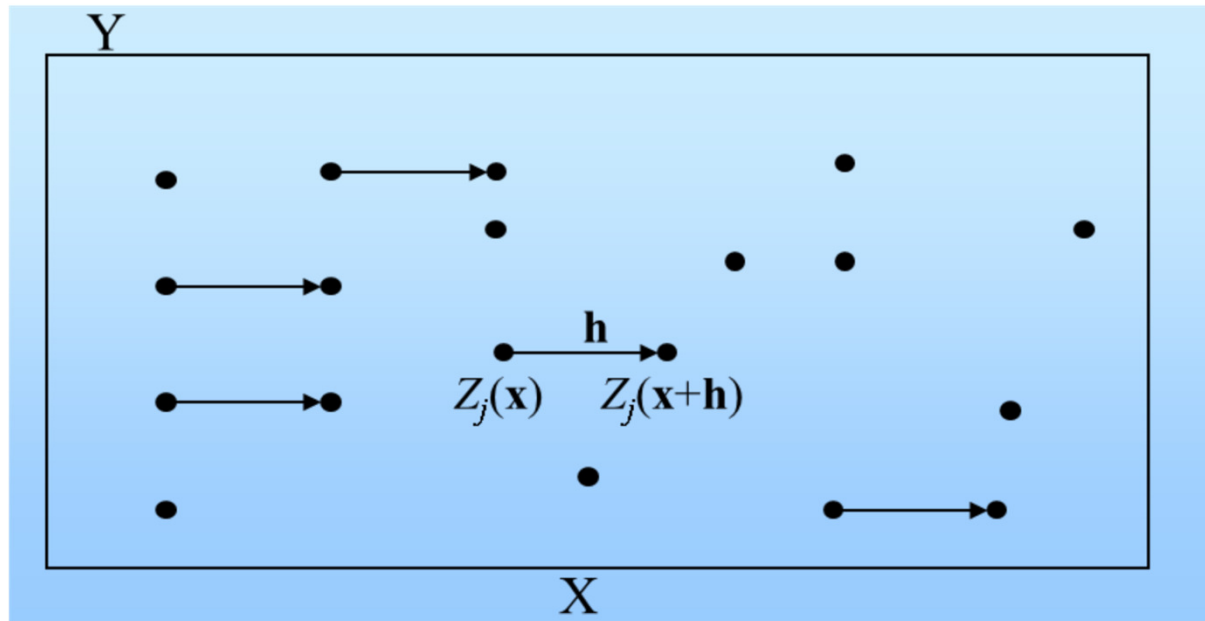
## MULTIVARIADA,

não tomando em conta o espaço

### PROJEÇÃO DAS VARIÁVEIS NOS EIXOS DA ACP



# MÉDIAS E VARIÂNCIAS ESPACIAIS



$$m_j^* = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Z_j(\mathbf{x}_i)$$

$$\sigma_j^{2*} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [Z_j(\mathbf{x}_i) - m_j]^2$$

$$m_j^*(-\mathbf{h}) = \frac{1}{N(\mathbf{h})} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{h})} Z_j(\mathbf{x}_i)$$

$$\sigma_j^{2*}(-\mathbf{h}) = \frac{1}{N(\mathbf{h})} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{h})} [Z_j(\mathbf{x}_i) - m_j(-\mathbf{h})]^2$$

$$m_{j'}^*(+\mathbf{h}) = \frac{1}{N(\mathbf{h})} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{h})} Z_{j'}(\mathbf{x}_i + \mathbf{h})$$

$$\sigma_{j'}^{2*}(+\mathbf{h}) = \frac{1}{N(\mathbf{h})} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{h})} [Z_{j'}(\mathbf{x}_i) - m_{j'}(+\mathbf{h})]^2$$



## MEDIDAS DE INTERACÇÃO ESPACIAL PARA UMA SÓ VARIÁVEL

- Covariância Espacial

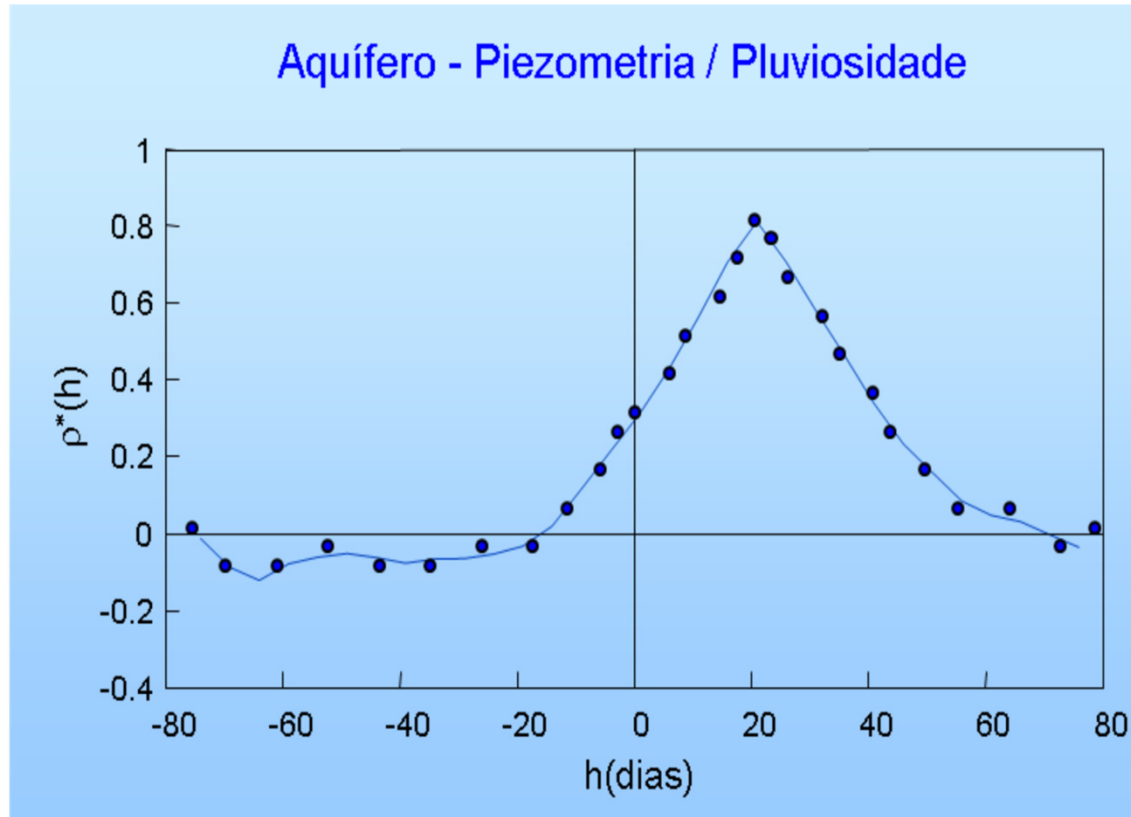
$$C(\mathbf{h}) = \frac{1}{N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} Z(\mathbf{x}_i) Z(\mathbf{x}_i + \mathbf{h}) - m(-\mathbf{h}) m(+\mathbf{h})$$

- Correlação Espacial (Correlograma)

$$\rho(\mathbf{h}) = \frac{1}{N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} \frac{C(\mathbf{h})}{\sqrt{\sigma^2(-\mathbf{h}) \sigma^2(+\mathbf{h})}}$$

# CORRELOGRAMA

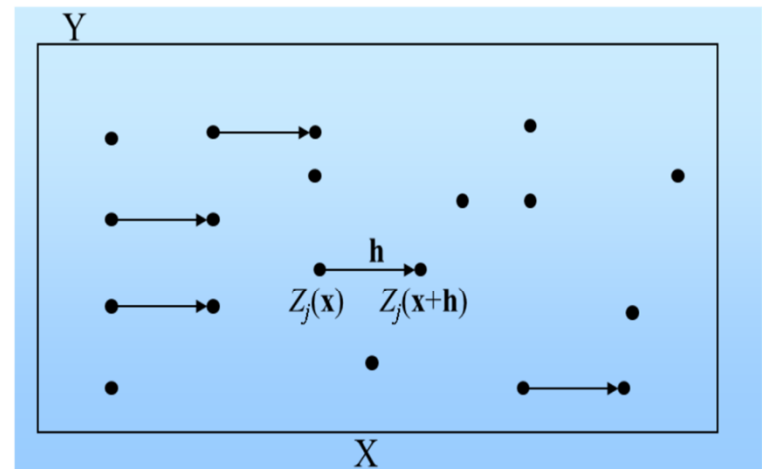
a covariância e o CORRELOGRAMA não são funções simétricas (-h e h)  
EXEMPLO DE UM CORRELOGRAMA TEMPORAL em que o coeficiente de correlação habitual é de 0.3 e o correlograma para passo  $h = 20$  dias é 0.8



# GEOESTATÍSTICA MULTIVARIADA

É o método mais geral para o tratamento de dados geoquímicos  
Toma em conta as correlações entre as variáveis no seu desenvolvimento espacial

Como existem  $p$  variáveis (indexadas por  $j$ ) por amostra (indexada por  $i$ ) podem considerar-se dois tipos de variogramas :  
**SIMPLES** (relacionando a variável consigo própria para o passo  $h$ ) e **CRUZADO** (ou **COVARIOGRAMA**), relacionando duas variáveis ( $j$  e  $j'$ ) para o passo  $h$



Variograma 'simples' - mede a autocorrelação de cada variável  $j$ , para cada passo  $h$

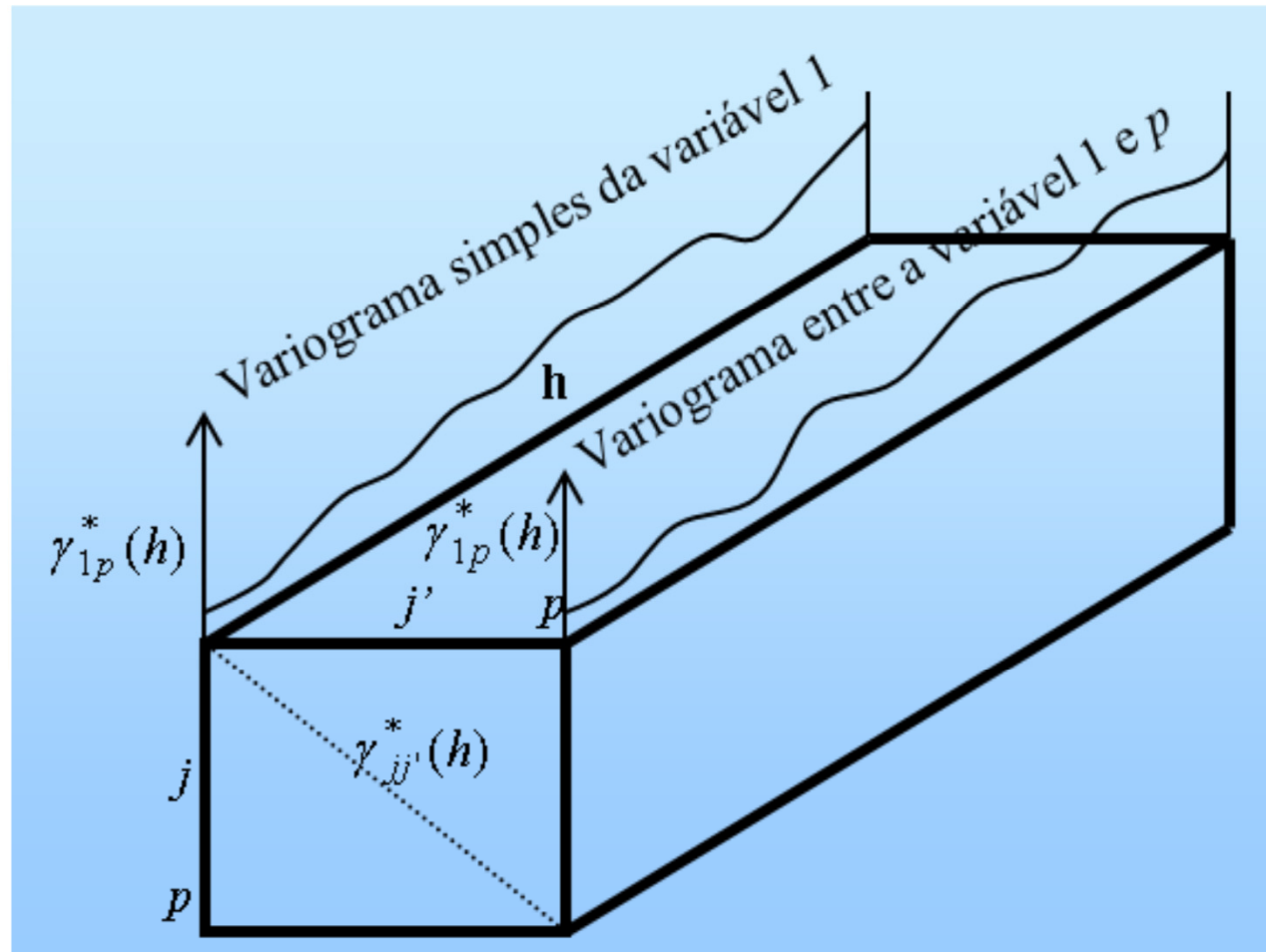
$$\gamma_j^*(\mathbf{h}) = \frac{1}{2N(\mathbf{h})} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{h})} [Z_j(x_i + \mathbf{h}) - Z_j(x_i)]^2$$

Variograma 'cruzado' - mede a correlação entre as variáveis  $j$  e  $j'$ , para cada passo  $h$

$$\gamma_{jj'}^*(\mathbf{h}) = \frac{1}{2N(\mathbf{h})} \sum_{i=1}^{N(\mathbf{h})} [Z_j(x_i + \mathbf{h}) - Z_j(x_i)][Z_{j'}(x_i + \mathbf{h}) - Z_{j'}(x_i)]$$

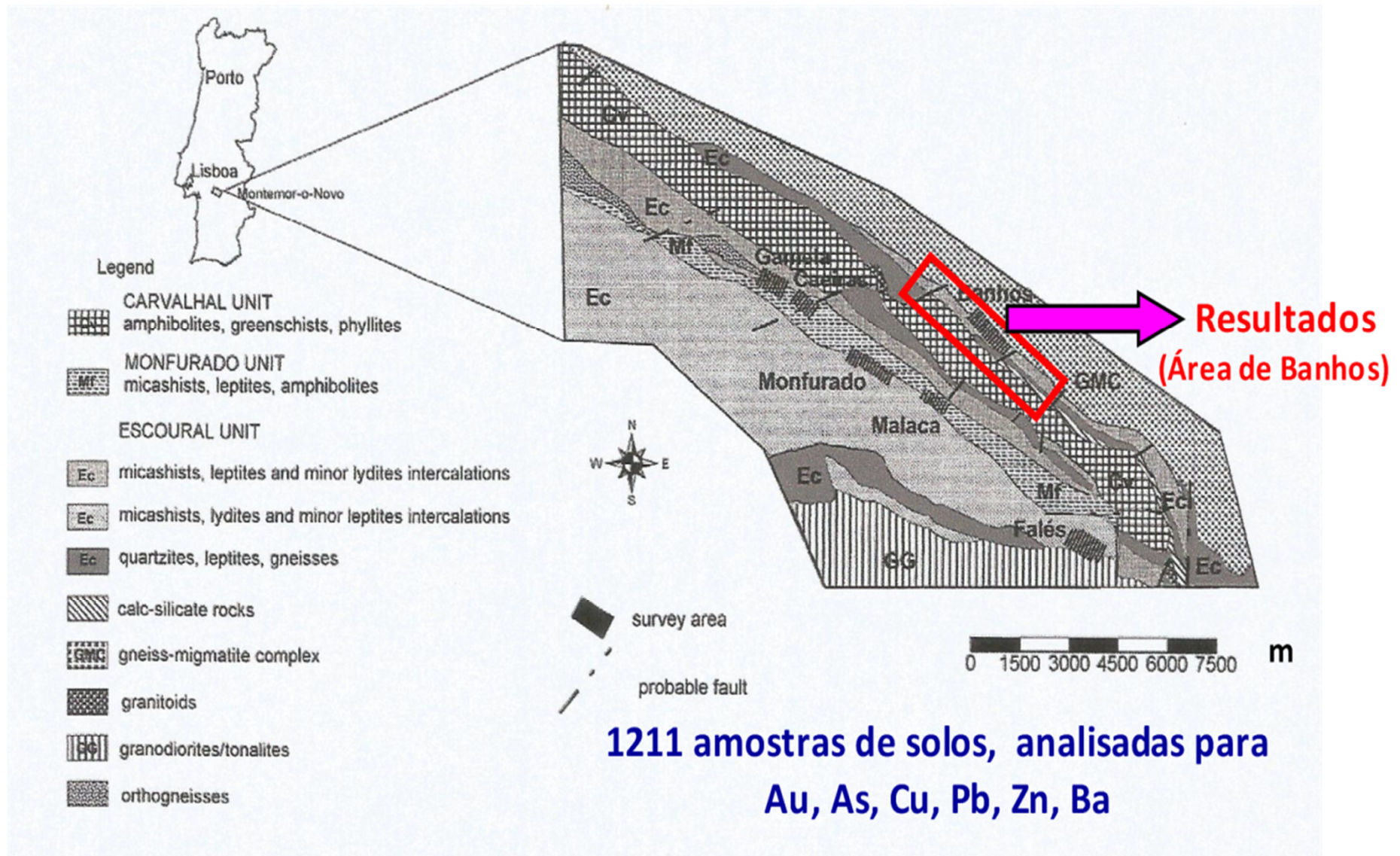
# PILHA DE MATRIZES

cada matriz dá o valor dos variogramas para cada valor do passo  $h$   
na diagonal principal encontram-se os variogramas simples  
nos elementos não diagonais encontram-se os variogramas cruzados



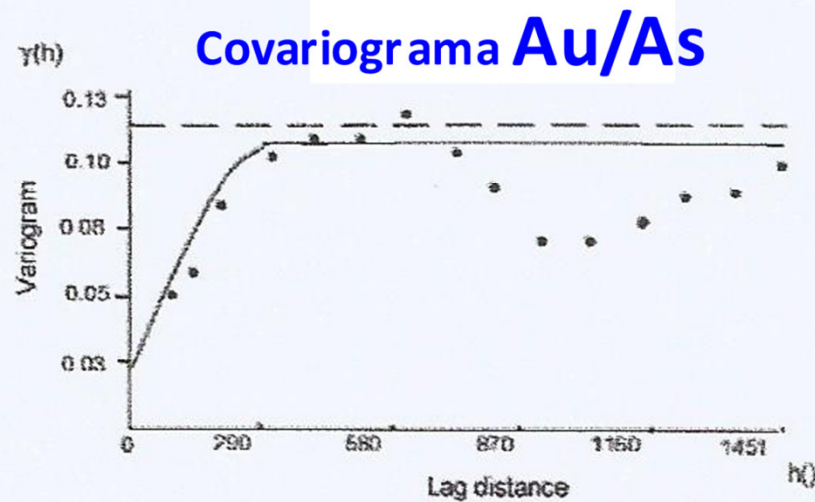
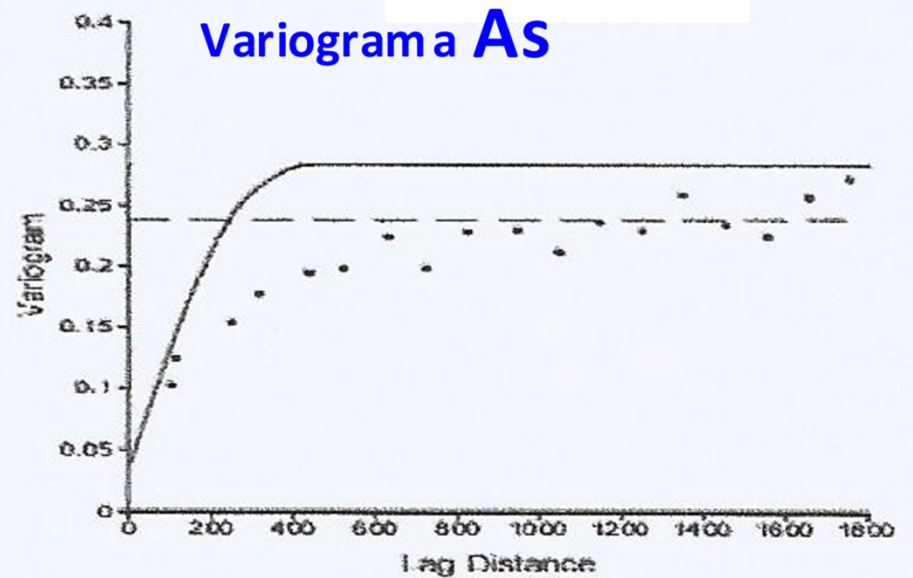
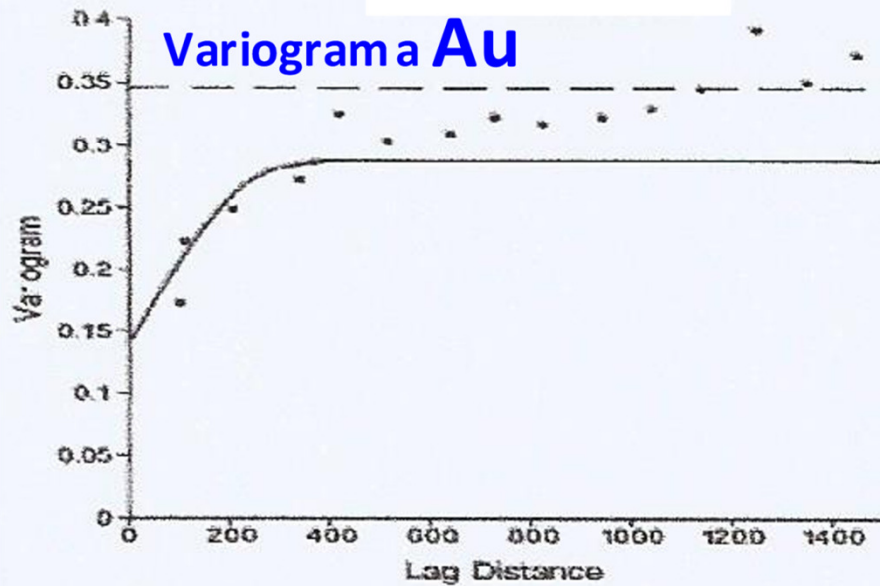


# APLICAÇÃO DA GEOESTATÍSTICA MULTIVARIADA À IDENTIFICAÇÃO GEOQUÍMICA DE ANOMALIAS DE Au



# EXEMPLOS DE VARIOGRAMAS SIMPLES E CRUZADOS

## PARA Au/As

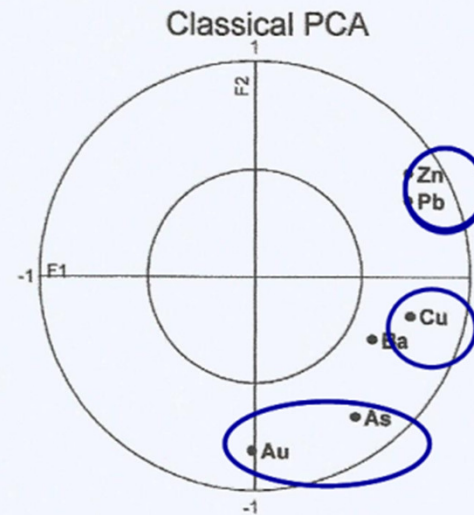




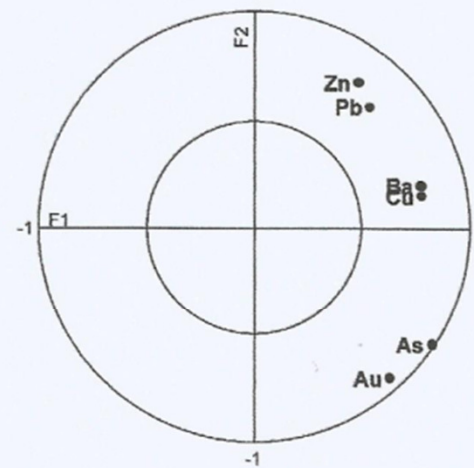
**A ACP sobre os dados brutos sugere uma associação do Au com o As, do Zn com o Pb, do Cu, Ba**

**Na primeira estrutura, revelada pela interpretação dos variogramas simples e cruzados, o Zn vem associado ao Ba**

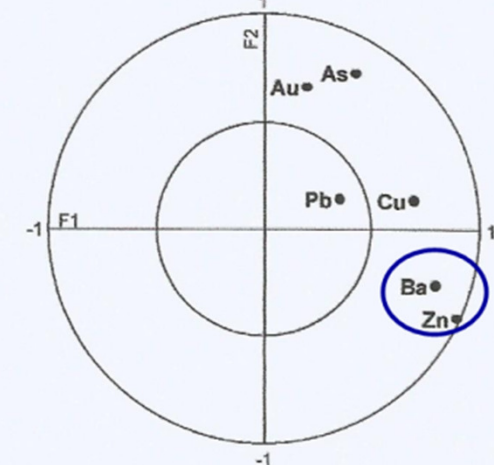
**Uma configuração semelhante á dos dados brutos surge para a segunda e terceira estruturas**



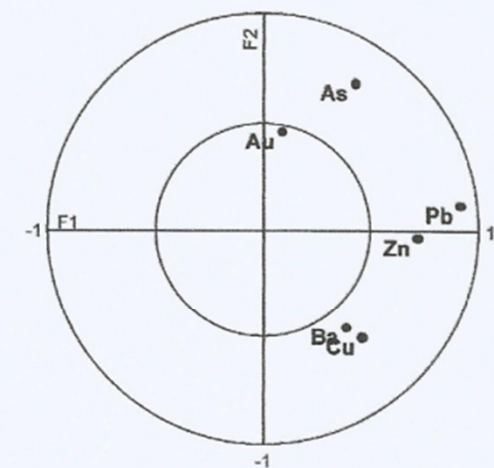
2<sup>nd</sup> Structure – C1



1<sup>st</sup> Structure – C0

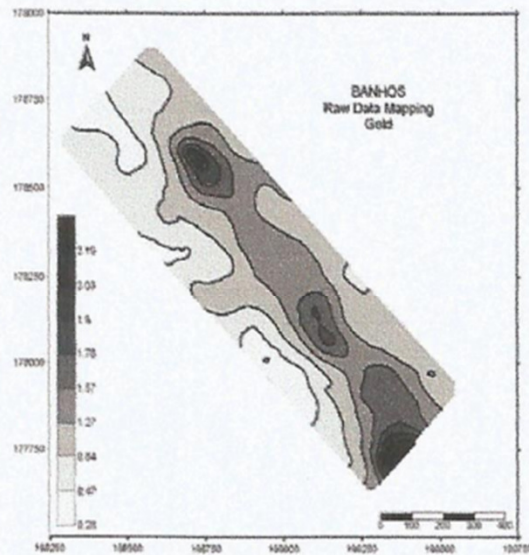


3<sup>rd</sup> Structure – C2

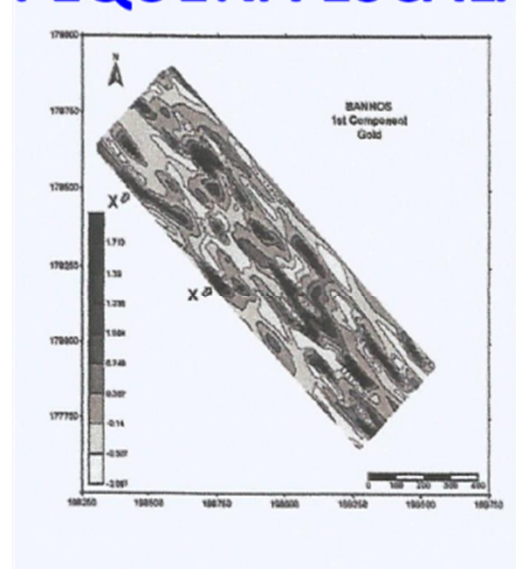


# RESULTADOS DA ESTIMAÇÃO DA GEOESTATÍSTICA MULTIVARIADA PARA A VARIÁVEL CONCENTRAÇÃO EM AU PARA UMA ZONA (BANHOS) E PARA 3 MODELOS DE ESTIMAÇÃO

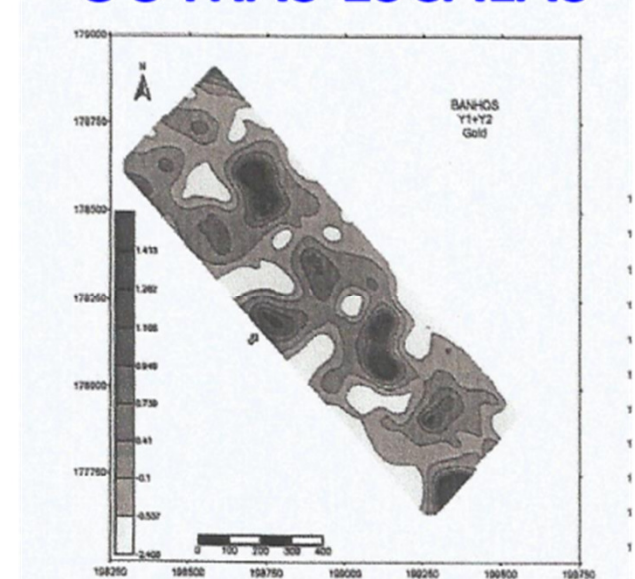
## MODELO 1 DADOS BRUTOS



## MODELO 2 PEQUENA ESCALA



## MODELO 3 OUTRAS ESCALAS





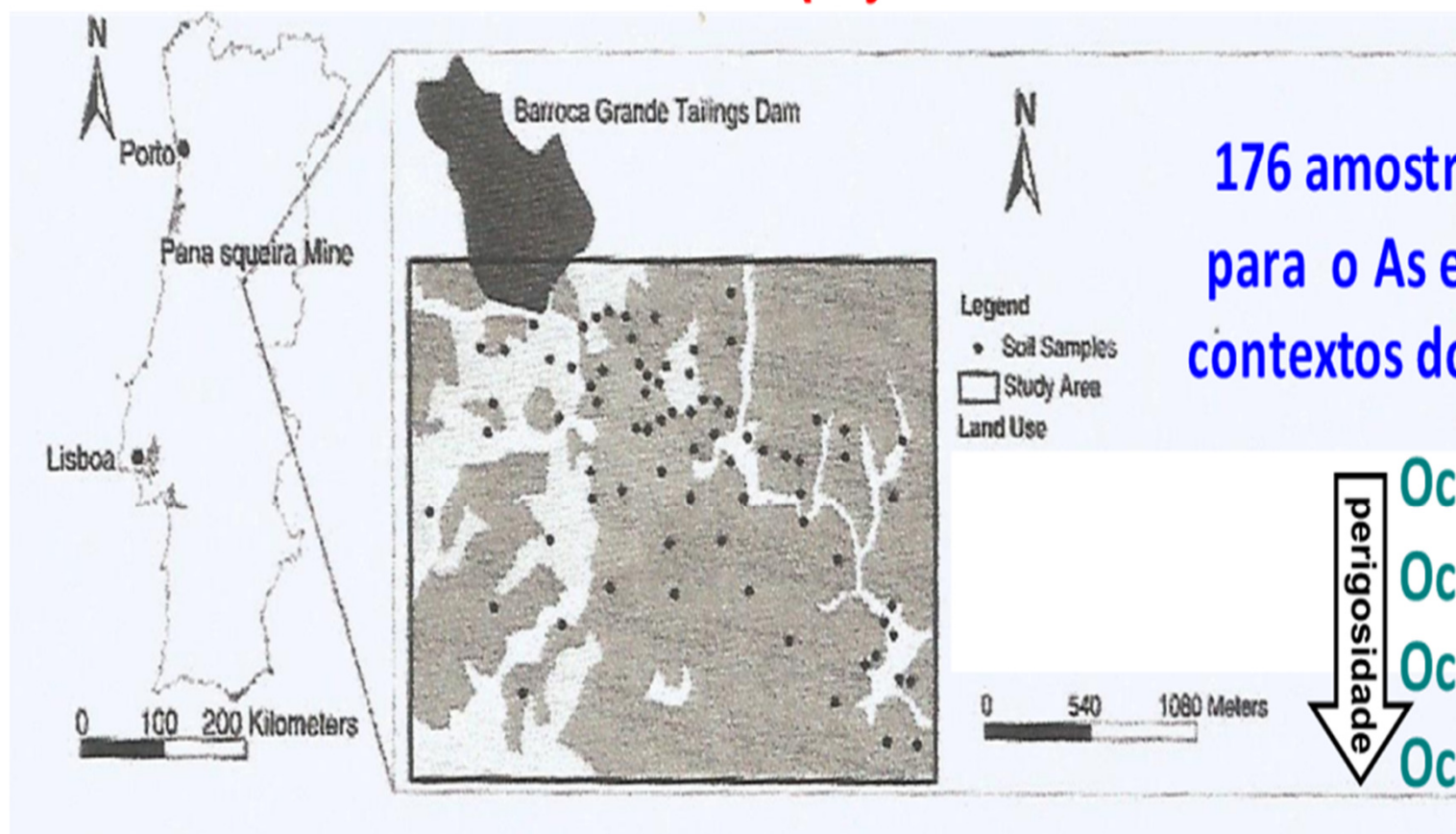
# **GEOQUÍMICA AMBIENTAL**

Os mesmos procedimentos algorítmicos usados na prospeção estão na base da geoquímica ambiental

**Trata-se agora da identificação de ANOMALIAS provocadas pela actividade humana**



## Combinação entre a concentração em As e o uso do solo a jusante de uma fonte contaminante (rejeitados da mina da Panasqueira)

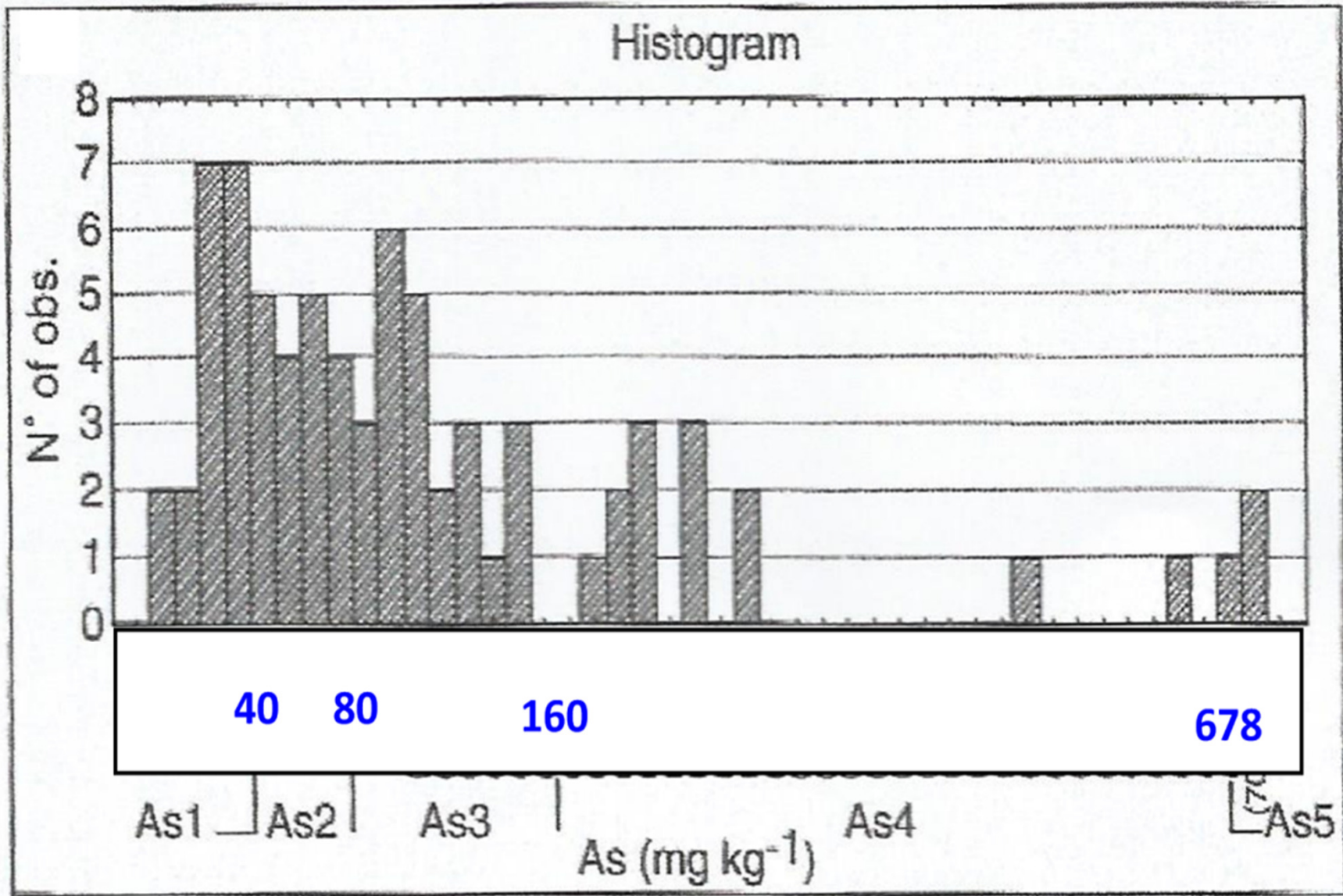


176 amostras analisadas para o As em diferentes contextos do uso do solo :

- perigosidade ↓
- Oc2 - descampado
  - Oc3 - floresta
  - Oc4 - agricultura
  - Oc5 - zonas urbanas

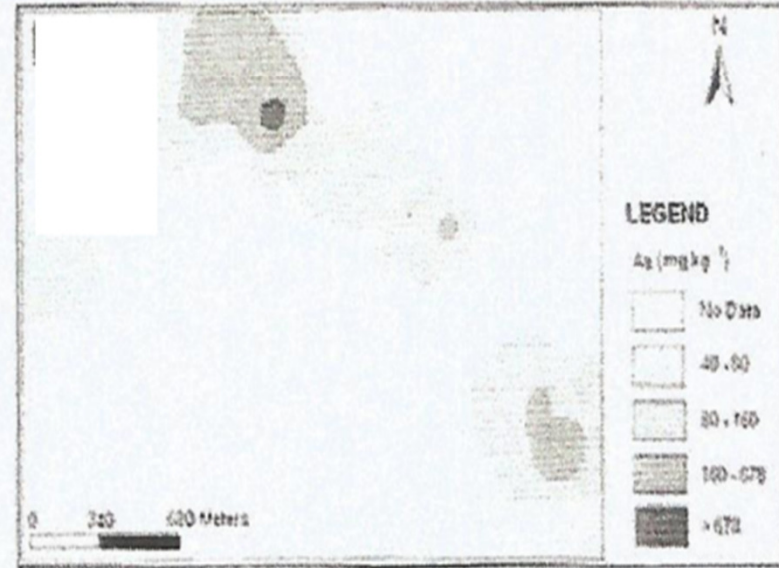
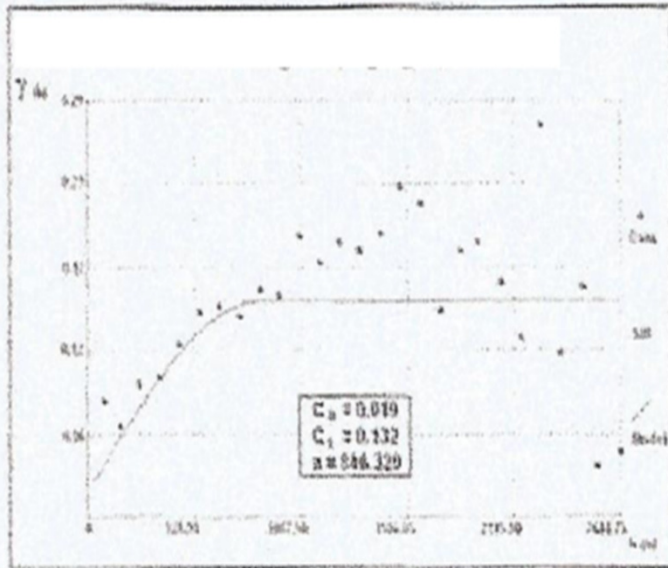


## CONCENTRAÇÃO DOS SOLOS EM As PARA CLASSES SIGNIFICATIVAS (usando limites legais)



# Variografia e Krigagem da concentração em As nos solos

## CARTOGRAFIA DAS CLASSES SIGNIFICATIVAS





# ANÁLISE DE CORRESPONDÊNCIAS COMBINANDO A CONCENTRAÇÃO EM As COM O USO DO SOLO

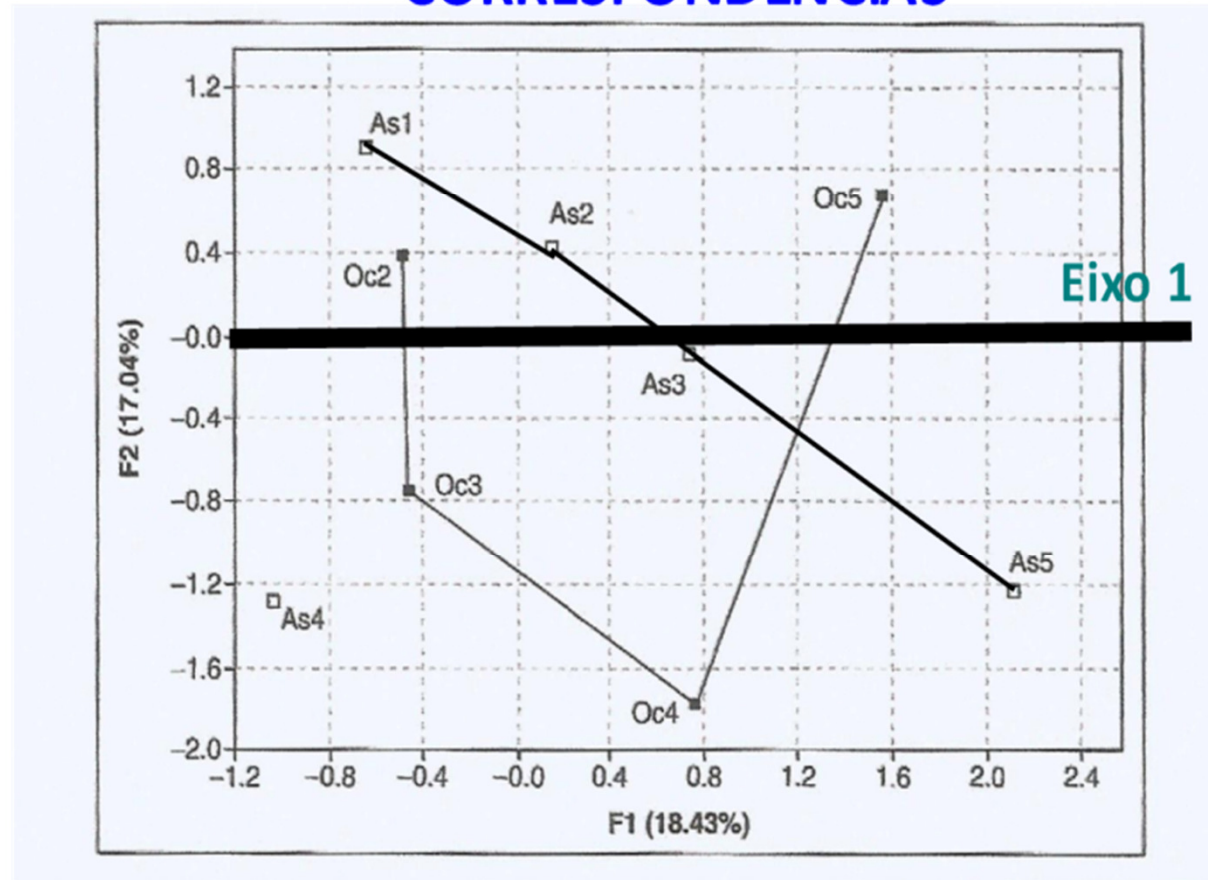
Modelo de dados de input para a ANÁLISE DAS CORRESPONDÊNCIAS

Output da ANÁLISE DAS CORRESPONDÊNCIAS

VARIABLES

	As Concentration					Land Use			
	As1	As2	As3	As4	As5	Oc2	Oc3	Oc4	Oc5
Samples	0	1	0	0	0	1	0	0	0
	1	0	0	0	0	0	0	0	1

n=76







# KRIGAGEM DAS COORDENADAS DAS AMOSTRAS EM F1 CARTOGRAFIA DAS CLASSES SIGNIFICATIVAS

