

**VARIABILIDADE ESPACIAL DE METAIS PESADOS: FUNDAMENTOS TEÓRICOS E
MODELAGEM GEOESTATÍSTICA***Spatial variability of heavy metals: theoretical foundations and geostatistical modeling*Sérgio Roberto Lemos de Carvalho¹

¹ UNIFACEMP – Centro Universitário de Ciências Empresariais, Santo Antônio de Jesus, Bahia, Brasil, 44430-104. Licenciado em Química – UFSC, Doutor em Geologia Ambiental – UFBA.
sergio.carvalho@facemp.edu.br, <https://orcid.org/0000-0003-3936-1113>

Resumo

A variabilidade espacial de metais pesados constitui elemento central na compreensão dos processos pedogenéticos e na avaliação ambiental. A geoestatística, fundamentada na teoria das variáveis regionalizadas, permite quantificar e modelar essa variabilidade por meio do semivariograma e da krigagem. Este estudo integra uma revisão teórica da geoestatística, enfatizando seus fundamentos matemáticos e epistemológicos, e discute sua aplicação à análise de metais pesados. São abordados os conceitos de continuidade espacial, efeito pepita, estacionariedade, modelos variográficos, grau de dependência espacial e métodos de interpolação, com destaque para a krigagem e suas extensões. A discussão é ancorada em autores clássicos e contemporâneos da estatística espacial, consolidando a geoestatística como instrumento teórico e metodológico essencial para estudos ambientais.

Palavras-chave: variabilidade espacial; semivariograma; krigagem; dependência espacial.

Abstract

The spatial variability of heavy metals is a key element in understanding pedogenic processes and environmental assessment. Geostatistics, based on the theory of regionalized variables, allows this variability to be quantified and modeled using semivariograms and kriging. This paper includes a theoretical review of geostatistics, emphasizing its mathematical and epistemological foundations, and discusses its application to the analysis of heavy metals. The concepts of spatial continuity, nugget effect, stationarity, variographic models, degree of spatial dependence, and interpolation methods are addressed, with emphasis on ordinary kriging and its extensions. The discussion is anchored in classical and contemporary authors of spatial statistics, consolidating geostatistics as an essential theoretical and methodological tool for environmental studies.

Keywords: spatial variability; semivariogram; kriging; spatial dependence.

INTRODUÇÃO

A heterogeneidade espacial do solo decorre da interação entre fatores de formação — material de origem, clima, relevo, organismos e tempo — produzindo padrões organizados, porém não determinísticos. A estatística clássica, ao pressupor independência entre observações, mostra-se limitada para representar fenômenos cuja estrutura depende explicitamente da posição espacial.

A geoestatística, formalizada por Georges Matheron, propõe uma abordagem probabilística espacial baseada na teoria das variáveis regionalizadas.

Diferentemente da estatística tradicional, ela incorpora explicitamente a noção de dependência espacial, permitindo descrever, modelar e prever a variabilidade contínua de atributos ambientais (CRESSIE; WIKLE, 2011; OLIVER; WEBSTER, 2014).

A geoestatística fornece, portanto, um meio eficiente de incorporar a dependência espacial na variabilidade das propriedades dos metais pesados (COELHO, 2003). A semivariância fornece uma medida quantitativa da variação espacial das propriedades estudadas, a qual é chamada de dissimilaridade. Quanto maior a semivariância, mais dissimilares são as propriedades em dois locais.

No ambiente tropical, a organização espacial de carbono e metais pesados reflete processos pedogenéticos estruturados. A modelagem geoestatística torna-se, assim, ferramenta indispensável tanto para fins científicos quanto para planejamento ambiental sustentável.

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DA GEOESTATÍSTICA

A TEORIA DAS VARIÁVEIS REGIONALIZADAS

Uma variável regionalizada é uma função no espaço que varia de uma posição \mathbf{x} para uma posição $\mathbf{x} + \mathbf{h}$, com uma “aparente” continuidade (VIEIRA et al., 1983). É aparente porque pode ocorrer descontinuidade, como mudança abrupta na média entre dois subconjuntos de dados.

A continuidade atribuída às variáveis regionalizadas, se manifesta, sobretudo, pela tendência de tomarem-se valores mais próximos em dois pontos amostrados, quanto menos afastados estejam os referidos pontos. Para Guerra (1988), estas variáveis têm em comum uma dupla característica: (a) **aleatória**, já que os valores numéricos observados podem variar consideravelmente de um ponto a outro do espaço e (b) **espacial**, já que apesar de muitas variáveis dentro do espaço, os valores numéricos observados não são inteiramente independentes.

Segundo Matheron, uma variável regionalizada $Z(x)$ é uma função aleatória dependente da posição espacial x . Sua natureza é dupla: apresenta componente estruturada (continuidade espacial) e componente aleatória (flutuação local).

Essa dualidade pode ser expressa por:

$$Z(x) = m(x) + \varepsilon(x)$$

Onde:

- $m(x)$ representa a tendência espacial (estrutura);
- $\varepsilon(x)$ representa a componente aleatória com dependência espacial.

Essa formulação afasta-se da hipótese de independência, reconhecendo que observações próximas tendem a ser mais semelhantes do que observações distantes (GOOVAERTS, 1997).

As ferramentas da geoestatística permitem a análise de dependência espacial, como também, a estimativa de dados, para locais não amostrados, através de um estimador sem tendenciosidade. A utilização deste tipo de metodologia permite analisar adequadamente dados de experimentos, com possibilidade de obter informações encobertas pela estatística clássica.

ESTACIONARIEDADE E HIPÓTESE INTRÍNSECA

A modelagem geoestatística exige hipóteses sobre a estrutura probabilística do processo espacial.

- **Estacionariedade de segunda ordem:** média constante e covariância dependente apenas da distância.
- **Hipótese intrínseca:** média constante e variância dos incrementos dependente apenas do vetor separação.

A hipótese intrínseca é menos restritiva e fundamenta o uso do semivariograma (WACKERNAGEL, 2003).

Variogramas

Levando em consideração que os fenômenos naturais não podem ser tratados como fenômenos aleatórios, surgiu a necessidade de se encontrar novas ferramentas matemáticas que permitissem estudar de um modo sintético as duas características essenciais das variáveis regionalizadas, quais sejam, o aspecto aleatório e o aspecto espacial.

Desse modo, de acordo com Guerra, a Geoestatística se propõe a estudar dois objetivos principais:

- a) tentar ser capaz de extrair da aparente desordem dos dados disponíveis, uma imagem da variabilidade dos mesmos, e uma medida da correlação existente entre os valores tomados em dois pontos do espaço. Este é o objetivo da análise estrutural e se consegue através do **variograma**.
- b) deve ser também capaz de medir a precisão de toda predição ou estimativa feita através de dados fragmentados, ou seja, há necessidade de uma teoria de estimativa destes dados. Isto é feito através da **interpolação** (GUERRA, 1988, p. 50-51).

As técnicas geoestatísticas podem ser usadas para descrever e modelizar padrões espaciais (variografia), para prever valores em locais não amostrados (krigagem), para obter a incerteza associada a um valor estimado em locais não amostrados (variância da krigagem) e para otimizar malhas de amostragem (REMACRE; UZIMAKI, 1996). Os autores ressaltam ainda a importância de um bom ajuste dos modelos para obtenção de resultados satisfatórios da krigagem. Trata-se de um método interpolador que permite a estimação de valores de variáveis, em locais não mensurados, por meio de funções de autocorrelação (BURROUGH, 1998). Por isto, se o modelo de semivariograma ajustado estiver errado, imperfeito ou com algum problema, todos os cálculos seguintes estarão comprometidos ainda que, segundo Andriotti (2003), os resultados obtidos por meio da krigagem são robustos, ou seja, pequenos erros ou diferenças nos parâmetros de ajuste do variograma geralmente não acarretam grandes diferenças nos valores estimados.

Semivariogramas

O semivariograma é um gráfico que relaciona a semivariância de uma variável qualquer com uma distância (h), utilizado para determinar o raio de influência, ou alcance, entre unidades de amostra, indicando a distância ideal para seleção de unidades de amostras independentes, exigidas pela teoria de amostragem para definição de intervalos de confiança (COSTA; FERNANDES FILHO, 2004). Para Silva et al., os semivariogramas apresentam três importantes parâmetros:

- (1) o efeito pepita (C_0), que se refere ao valor da semivariância para a distância zero e representa o componente da variação ao acaso, não removida por amostragens próximas;
- (2) o patamar ($C_0 + C_1$), que é o valor da semivariância em que a curva se estabiliza sobre um valor constante (é o máximo da semivariância). O patamar é atingido quando a variância dos dados se torna constante com as distâncias entre as amostras e esse parâmetro permite a determinação da distância limite entre a dependência e a independência entre as amostras; desta forma, marca o início da zona de pura aleatoriedade.
- (3) o alcance (a), que é a distância da origem até onde o patamar atinge valores estáveis, é considerado o limite da dependência espacial da grandeza medida (SILVA et al, 2003, p. 1014-1015).

Após a seleção do variograma da variável em estudo e havendo dependência espacial, podem-se interpolar valores em qualquer posição na área estudada, sem tendência e com variância mínima.

Definição formal

O semivariograma experimental é definido por:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_i + h)]^2, \text{ onde } h \text{ é o vetor distância.}$$

Ele mede o grau médio de dissimilaridade entre pares de pontos separados por h .

Parâmetros variográficos

- **Efeito pepita (C_0):** variância não explicada estruturalmente.
- **Patamar ($C_0 + C$):** variância total.
- **Alcance (a):** distância a partir da qual não há dependência espacial.

O grau de dependência espacial (GDE) é dado por:

$$GDE = \frac{C}{C_0 + C}$$

Valores elevados indicam forte estrutura espacial (CAMBARDELLA et al., 1994).

Modelos teóricos

Os modelos esférico, exponencial e gaussiano são os mais utilizados. Cada um implica diferente comportamento da continuidade espacial:

- Esférico: transição abrupta;
- Exponencial: continuidade gradual;
- Gaussiano: alta suavidade próxima da origem.

A escolha deve respeitar condições de permissibilidade matemática (CRESSIE; WIKLE, 2011).

VALIDAÇÃO CRUZADA

A validação cruzada é uma ferramenta destinada a avaliar modelos alternativos de semivariogramas que efetuarão a krigagem. Na sua análise, cada ponto contido dentro do domínio espacial é removido individualmente, sendo seu valor estimado por meio de krigagem como se ele não existisse. Desta forma, pode-se construir um gráfico de valores estimados *versus* valores medidos para todos os pontos. O coeficiente de correlação representa uma medida da eficiência do ajuste, dado pela técnica da soma dos quadrados dos desvios, representando a equação de regressão linear. Para Faraco et. al. (2008), dentre vários métodos de avaliação de ajustes estudados, o da Validação Cruzada é o mais adequado para escolha do melhor ajuste do modelo de variabilidade espacial, proporcionando, assim, mapas temáticos mais acurados.

A validação cruzada remove cada ponto sucessivamente, estimando-o a partir dos demais.

Critérios (LARK, 2012):

- Erro médio ≈ 0
- Erro quadrático médio reduzido ≈ 1
- Correlação observado vs estimado elevada

KRIGAGEM: FUNDAMENTOS TEÓRICOS E FORMULAÇÃO MATRICIAL

CONCEITO GERAL

A krigagem é o estimador linear não tendencioso de variância mínima (BLUE). Baseia-se na estrutura de dependência espacial descrita pelo variograma.

A estimativa em um ponto x_0 é:

$$Z^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i)$$

Com restrição:

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1$$

SISTEMA MATRICIAL DA KRIGAGEM ORDINÁRIA

$$\begin{bmatrix} \gamma(x_1, x_1) & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \vdots \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \gamma(x_1, x_0) \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}, \text{ onde } \mu \text{ é o multiplicador de Lagrange.}$$

A solução fornece pesos ótimos dependentes apenas da estrutura espacial (DEUTSCH; JOURNAL, 1998).

TIPOS DE KRIGAGEM

- Krigagem simples
- Krigagem ordinária
- Krigagem universal
- Co-krigagem
- Krigagem indicadora

A krigagem ordinária é a mais empregada em estudos ambientais, por exigir apenas média local constante.

VARIÂNCIA DE KRIGAGEM

A variância associada à estimativa é:

$$\sigma_k^2 = \sum \lambda_i \gamma(x_i, x_0) + \mu$$

Ela expressa incerteza associada à estimativa espacial (BRUS; HEUVELINK, 2007).

APLICAÇÃO A ATRIBUTOS DO SOLO E METAIS PESADOS

A forte dependência espacial observada para carbono reflete organização pedogenética estruturada.

Metais como Pb, Cu e Co podem apresentar efeito pepita puro, sugerindo:

- Escala inadequada;
- Controle litológico difuso;
- Processos microespaciais.

Minasny & McBratney (2016) ressaltam que solos tropicais frequentemente exibem alta estrutura espacial em atributos químicos associados à mineralogia de argilas e óxidos.

IMPLICAÇÕES PARA PLANEJAMENTO AMOSTRAL

O alcance variográfico define o espaçamento ideal entre amostras.

Espaçamentos maiores que o alcance compromete a detecção da estrutura espacial.

A geoestatística permite otimizar densidade amostral e reduzir custos sem perda de informação.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A geoestatística constitui arcabouço teórico robusto para análise da variabilidade espacial do solo. O semivariograma traduz matematicamente a continuidade espacial, enquanto a krigagem fornece estimativas ótimas e quantifica a incerteza associada.

O instrumento mais indicado que mostra a estimativa de dependência entre as amostras é a análise de autocorrelação, sendo que o semivariograma é a função que traduz a semivariância em função das distâncias entre os pontos amostrais.

A escolha dos modelos matemáticos é definida observando-se o RSS (*reduced sums of squares*), que determina uma medida exata de quão o modelo de variograma ajusta os dados avaliados (ROBERTSON, 1998), analisando-se ainda o coeficiente de correlação (R^2) (CORÁ et al., 2004), a proporção da estrutura espacial e os dados estimados pelo semivariograma escolhido, técnica esta chamada de validação cruzada. Para Robertson (1998) e Andriotti (2003), o RSS é um parâmetro mais robusto do que o R^2 e o programa GS⁺® utiliza a combinação de parâmetros do semivariograma para minimizar o RSS para cada modelo.

Quanto aos metais pesados, o teor destes elementos em uma amostra ambiental também é uma variável regionalizada, cujos valores são dependentes da localização dos pontos amostrais.

No trabalho em análise, o comportamento dos metais pesados apresenta singularidades no que se refere à dependência espacial. O chumbo, o cobre, o cromo, o cobalto e o titânio praticamente não apresentaram variância estrutural, caracterizando, desta forma, uma dependência espacial nula. Quanto aos outros metais, os semivariogramas, tanto para o níquel como para o manganês, apresentou melhor ajuste com o modelo exponencial, enquanto que o zinco apresentou melhor ajuste com o modelo gaussiano e o ferro e o alumínio com o modelo esférico.

De acordo com o critério adotado por Zimback (2001), a dependência espacial para o manganês, ferro e o alumínio mostrou-se forte, enquanto que o zinco e o níquel apresentaram moderada dependência.

REFERÊNCIAS

ANDRIOTTI, J. L. S. **Fundamentos de Estatística e Geoestatística**, São Leopoldo: Unisinos, 2003, 165 p.

BRUS, D. J.; HEUVELINK, G. B. M. **Sampling for Natural Resource Monitoring**. Springer, 2007.

BURROUGH, P. A. **Principles of geographic information systems for land resources assessment**. Oxford: Oxford University Press, 1986, 193p.

CAMBARDELLA, C. A. et al. Field-scale variability of soil properties. **Soil Science Society of America Journal**, 1994.

CRESSIE, N.; WIKLE, C. K. **Statistics for Spatio-Temporal Data**. Wiley, 2011.

DEUTSCH, C. V.; JOURNEL, A. G. **GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide**. Oxford University Press, 1998.

GOOVAERTS, P. **Geostatistics for Natural Resources Evaluation**. Oxford University Press, 1997.

LARK, R. M. Spatial analysis of soil properties. **European Journal of Soil Science**, 2012.

MINASNY, B.; McBRATNEY, A. B. Digital soil mapping. **Geoderma**, 2016.

OLIVER, M. A.; WEBSTER, R. **A Primer on Spatial Analysis**. Oxford University Press, 2014.

REMACRE, A. Z.; UZUMAKI, E. T. Variogramas para interpolação em geofísica. **Geociências**, 15:17-39, 1996.

ROBERTSON, G. P. **GS⁺: Geostatistics for the environmental sciences – GS+ User's Guide**. Plainwell, Gamma Design Software, 1989. 152p

WACKERNAGEL, H. **Multivariate Geostatistics**. Springer, 2003.