

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE MINAS,
METALÚRGICA E DE MATERIAIS (PPGE3M)**

RAFAEL MONIZ CAIXETA

**CONTRIBUIÇÕES PARA O USO DE ANISOTROPIAS LOCAIS NA
GEOESTATÍSTICA**

Porto Alegre

2020

RAFAEL MONIZ CAIXETA

**CONTRIBUIÇÕES PARA O USO DE ANISOTROPIAS LOCAIS NA
GEOESTATÍSTICA**

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Engenharia

Orientador: Prof. Dr. João Felipe Coimbra Leite Costa

Porto Alegre

2020

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitor: Rui Vicente Oppermann

Vice-Reitora: Jane Fraga Tutikian

ESCOLA DE ENGENHARIA

Diretor: Luiz Carlos Pinto da Silva Filho

Vice-Diretora: Carla Schwengber ten Caten

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA

DE MINAS, METALÚRGICA E DE MATERIAIS

Coordenador: Afonso Reguly

Caixeta, Rafael Moniz

Contribuições para o uso de anisotropias locais na
geoestatística / Rafael Moniz Caixeta. -- 2020.

145 f.

Orientador: João Felipe Coimbra Leite Costa.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal do Rio
Grande do Sul, Escola de Engenharia, Programa de
Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de
Materiais, Porto Alegre, BR-RS, 2020.

1. Geoestatística. 2. Anisotropia local. I. Costa,
João Felipe Coimbra Leite, orient. II. Título.

RAFAEL MONIZ CAIXETA

**CONTRIBUIÇÕES PARA O USO DE ANISOTROPIAS LOCAIS NA
GEOESTATÍSTICA**

Esta tese foi analisada e julgada adequada para a obtenção do título de Doutor em Engenharia, área de concentração de Tecnologia Mineral, e aprovada em sua forma final pelo Orientador e pela Banca Examinadora designada pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Prof. Dr. João Felipe Coimbra Leite Costa

Orientador

Prof. Dr. Afonso Reguly

Coordenador do PPGE3M

Aprovado em: 03/07/2020

BANCA EXAMINADORA:

Dr. Diniz Tamantini Ribeiro – Vale S/A

Dr. Attila Leães Rodrigues – LPM

Prof. Dr. Diego Machado Marques – UFRGS

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. João Felipe Coimbra Leite Costa, pela orientação, revisões e contribuições ao longo de todo esse período entre meu início do mestrado e fim do doutorado.

À Nexa Resources, pelo apoio e fornecimento de dados para essa tese, em especial à equipe de Recursos Minerais com quem convivi e aprendi muito.

À toda minha família e amigos, pelo incentivo nesses últimos anos. Também pela compreensão, devido aos meus vários feriados e fins de semanas dedicados para desenvolver essa tese.

*Se você não mudar a direção,
terminará exatamente onde partiu.*

Provérbio chinês

RESUMO

O conceito de anisotropia está amplamente presente na geoestatística. Anisotropia é a característica de certos materiais terem propriedades com diferentes comportamentos de acordo com a direção analisada. Anisotropia local é o caso em que a anisotropia varia localmente no espaço e é uma característica quase sempre presente nos fenômenos espaciais. Por outro lado, ela é frequentemente simplificada na forma de uma anisotropia global para representar a continuidade por todo um domínio, de modo que as anisotropias locais são pouco utilizadas na geoestatística. A meta dessa tese de doutorado é contribuir para a difusão do uso de anisotropias locais na geoestatística, explorando seus benefícios, formas de caracterizá-las e aplicá-las em estimativas. Foram propostas algumas metodologias para guiar nessas tarefas. Foi observado que, com metodologias adequadas, é possível trabalhar com anisotropias locais eficientemente e sem grandes dificuldades. Anisotropias locais mostraram também ser úteis para contribuir junto a metodologias já consolidadas em geoestatística. A variografia experimental com base em anisotropias locais pode ajudar a, por exemplo, integrar domínios com diferentes orientações em um mesmo processo variográfico. O algoritmo proposto para gerar coordenadas geológicas (com processos semiautomáticos baseados em elementos de anisotropia local) tem potencial de simplificar significativamente uma transformação espacial que muitas vezes é evitada pela dificuldade de ser executada. Os dois estudos de caso apresentados demonstraram que o uso adequado de anisotropias locais geraram melhores resultados do que ao utilizar anisotropias globais. Dos métodos analisados para integrar anisotropias locais na estimativas, o uso de janelas móveis e convolução de kernels mostraram os melhores resultados, tanto qualitativamente como em termos operacionais (fácil implementação e boa eficiência computacional). Deformação espacial mostrou alguns resultados interessantes, mas geralmente com erros maiores e tempo de processamento elevado.

Palavras-chave: Geoestatística. Anisotropia local. Coordenadas geológicas. Modelos não-estacionários. Janelas móveis. Convolução de kernels. Deformação espacial.

ABSTRACT

The concept of anisotropy is widely present in geostatistics. Anisotropy is the characteristic of certain materials having properties with different behaviors according to the direction analyzed. Local anisotropy is the case where anisotropy varies locally in space and is a characteristic almost always present in spatial phenomena. Conversely, it is often simplified in the form of a global anisotropy to represent continuity across an entire domain, so that local anisotropies are not widely used in geostatistics. The goal of this thesis is to contribute to the spread of the use of local anisotropies in geostatistics, exploring its benefits, ways of characterizing them and applying them in estimates. Some methodologies have been proposed to guide these tasks. It was observed that, with adequate methodologies, it is possible to work with local anisotropies efficiently and without great difficulties. Local anisotropies have also proved to be useful for contributing to tasks already consolidated in geostatistics. Experimental variography based on local anisotropies can help, for example, to integrate domains with different orientations in the same variographic process. The proposed unfolding algorithm (with semi-automatic processes based on elements of local anisotropy) has the potential to significantly simplify a spatial transformation that is often avoided due to the difficulty of being performed. The two case studies presented demonstrated that the proper use of local anisotropies generated better results than when using global anisotropies. Regarding the methods analyzed to integrate local anisotropies in the estimates, the use of moving windows and kernel convolution showed the best results, both qualitatively and in operational terms (easy implementation and good computational efficiency). Spatial deformation showed some interesting results, but generally with larger errors and high processing time.

Keywords: Geostatistics. Local anisotropy. Unfolding. Non-stationary models. Moving windows. Kernel convolution. Spatial deformation.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Delta do rio Selenga, na Rússia.....	20
Figura 2 – Dobras tipo <i>kink</i> em rochas sedimentares oceânicas de Omã.....	21
Figura 3 – Zona de falhas no campo petrolífero de Gullfaks, Noruega. Estão em destaques diferentes populações de falhas, com anisotropias diversas de acordo com a escala e região analisadas.....	22
Figura 4 – Seção esquemática de um depósito de cobre, mostrando o típico padrão de alteração.	23
Figura 5 – Esquema ilustrando a mineralização de sulfetos vulcanogênicos. A percolação de fluidos ocorre nas zonas fraturadas e entra em convecção. Duas zonas mineralizadas principais ocorrem, cada qual com continuidade diferente: a zona de minério <i>stratabound</i> (junto às chaminés vulcânicas, subhorizontal na figura) e a zona de minério <i>stringer</i> (junto ao <i>stockwork</i> , subvertical na figura).	24
Figura 6 – Distribuição de algumas zonas mineralizadas em ouro (<i>pay streaks</i>) na bacia de Witwatersrand, África do Sul.	24
Figura 7 – Alguns exemplos de contextos geológicos que favorecem a acumulação de hidrocarbonetos. As flechas representam os caminhos mais favoráveis para migração do óleo, baseados na permeabilidade das rochas adjacentes e presença de falhas.	25
Figura 8 – Ilustração esquemática de como um conjunto limitado de informações podem gerar diversas interpretações de anisotropia dos dados.	25
Figura 9 – Exemplo de anisotropia geométrica. Os semivariogramas calculados apresentam diferentes continuidades de acordo com a direção analisada. A maneira tradicional de representar essa anisotropia é em forma de elipsoide.....	30
Figura 10 – Exemplo de anisotropia zonal na geologia. Nesse caso, lentes alongadas promovem uma variabilidade muito maior em N-S do que em E-W, causando diferenças nos <i>sills</i> dos semivariogramas.	31
Figura 11 – Função ANISOANG do software Datamine, que calcula direção e mergulho de cada uma das triangulações que formam a envoltória geológica modelada.	33
Figura 12 – Algoritmo de esqueletização, que identifica a direção principal ao longo do eixo interno de figuras 3D.	34
Figura 13 – Exemplo de uso de análise de componentes principais para definir direções locais. O PCA dos pontos em preto resultam no plano médio em azul, onde estão contidas as duas maiores componentes principais (em vermelho e verde).....	35

Figura 14 – Medidas estruturais feitas em campo e representadas em mapa.	35
Figura 15 – Ilustração esquemática do que são os gradientes, representados pelas setas vermelhas que indicam a direção em que ocorrem as maiores variações na imagem.	38
Figura 16 – Influência do parâmetro de <i>background</i> ε na suavização do kernel gaussiano.	42
Figura 17 – Correlogramas estimados utilizando diferentes valores de banda do kernel, mostrando a diferença em relação aos modelos de referência.	42
Figura 18 – Modelo de tendência de teores de prata (pontos vermelhos) em um furo de sondagem utilizando inverso da distância e kernel gaussiano.	43
Figura 19 – Ilustração esquemática da covariância construída por janelas móveis. As covariâncias locais são facilmente construídas nesse processo, no entanto, uma mesma covariância $Cov(A;B)$ apresenta valores diferentes de acordo com o ponto de referência.	46
Figura 20 – Ilustração esquemática da covariância construída por ponderadores de processos estacionários. Por meio dessa abordagem, a covariância se assemelha mais a da sub-região cujo centroide (O_1 ou O_2) esteja mais próximo dos pontos analisados.	47
Figura 21 – Ilustração esquemática da covariância construída por convolução de kernels. As covariâncias locais são deformadas de acordo com os parâmetros de anisotropia local. A distância anisotrópica entre dois pontos com diferentes anisotropias é calculada utilizando uma matriz de anisotropia média.	49
Figura 22 – Imagem de satélite do Rio Solimões entre Fonte Boa/AM e Porto Braga/AM.	50
Figura 23 – Deformação espacial do modelo, de modo a arranjar as informações isotropicamente.	51
Figura 24 - Exemplo de menor caminho entre a origem (em cinza) e o ponto p_1 considerando anisotropias locais.	53
Figura 25 – Ilustração das componentes do grafo em um <i>grid</i> de blocos.	54
Figura 26 – Exemplo de diferentes <i>offsets</i> para a definição das arestas. No primeiro caso, o vértice vermelho se liga apenas aos 8 vértices mais próximos. No segundo caso, com um <i>offset</i> maior, ele se liga a um total de 16 vértices.	55
Figura 27 – Pseudo-código do algoritmo de Dijkstra para encontrar a menor distância entre dois vértices.	56
Figura 28 – Ilustração mostrando a diferença entre o método de inverso da distância tradicional e o adaptado para utilizar anisotropias locais.	58
Figura 29 – Ilustração mostrando a diferença entre o método de inverso da distância com métrica Euclidiana e não-Euclidiana.	58

Figura 30 – Conjunto de dados e seus semivariogramas onidirecionais antes (a e b) e depois (c e d) da deformação espacial.....	60
Figura 31 – Exemplo de Simulação Sequencial Gaussiana com médias e anisotropias locais. À esquerda, mapa de uma realização simulada. À direita, comparação entre os histogramas das simulações (em cinza) e o dos dados originais (em preto).	62
Figura 32 – Linhas representando três possíveis superfícies de referência em uma seção ilustrativa. Superior em vermelha, central em azul e inferior em verde.....	63
Figura 33 – Representação do processo de esqueletização do modelo de blocos para gerar uma superfície de referência. À esquerda, uma visão em perspectiva de duas seções do modelo de blocos, em que o esqueleto extraído está representado em marrom. À direita, vista em planta de um conjunto de esqueletos (em marrom) extraídos do modelo.	68
Figura 34 – Representação do grafo sobre uma superfície de referência. Os vértices são os pontos vermelhos e as arestas são as linhas cinzas. A distância euclidiana seria representada apenas por uma linha reta entre dois vértices. A distância buscada nessa abordagem é a percorrida ao seguir o caminho mais curto via as arestas.	69
Figura 35 – Resultado do aplainamento da superfície de referência a partir do MDS em duas dimensões.	70
Figura 36 – Pseudo-código de como gerar as coordenadas transformadas dos dados originais.	71
Figura 37 – Dados em coordenadas reais e em coordenadas geológicas após o desdobramento.	71
Figura 38 – Estatística dos erros na reprodução das distâncias. À esquerda sem correções. À direita, após corrigir com os algoritmos de otimização. Nota-se que o 1% de erros extremos (em laranja) fica bem mais restrito após as correções.	73
Figura 39 – Convenção de rotação de elipsoide considerada, definida por três ângulos (ang1, ang2 e ang3).....	74
Figura 40 – Razões anisotrópicas calculadas para diferentes valores de semivariância. Considerando apenas uma estrutura variográfica (A) e considerando duas estruturas variográficas (B).	75
Figura 41 – Exemplo de como utilizando o semivariograma do eixo menor como referência (em azul), a melhor reprodução do semivariograma do eixo maior (em laranja) é com uma razão anisotrópica em torno de 65%.	76
Figura 42 –Um conjunto de imagens referências são geradas a partir das amostras (MM: médias móveis; ID: inverso da distância). Direções e magnitudes são extraídas via gradientes com	

diferentes janelas de suavização. Diferentes limites de magnitude são testados. Uma validação cruzada é realizada com os métodos de interesse e o melhor cenário combinado é selecionado.	79
Figura 43 – Ilustração exibindo pontos extraídos via esqueletização (à esquerda). E os planos de maior continuidade local gerados a partir desses pontos (à direita).	81
Figura 44 – Ilustração esquemática mostrando algumas dificuldades para se definir uma única direção de maior continuidade para a variografia. Nesse exemplo, há ao menos três possibilidades de direções que podem representar o eixo de maior continuidade dos pontos em vermelho.	82
Figura 45 – Exemplo de como a variografia pode ser realizada com base nas anisotropias locais. As direções locais são transferidas para as amostras mais próximas. A busca de pares de amostras para variografia utiliza as direções locais ao invés de uma única direção.	83
Figura 46 – Representação espacial da variável V. À esquerda, o conjunto de 470 amostras utilizadas para estimativa. À direita, o cenário exaustivo com 78.000 registros.	85
Figura 47 – Histogramas e estatísticas básicas das amostras (à esquerda) e do cenário exaustivo (à direita) do banco Walker Lake.	85
Figura 48 – Resumo das análises realizadas nesse estudo de caso.	86
Figura 49 – Imagens de referência geradas para extrair campos de anisotropia local. Geradas por inverso da distância com expoente 1 (à esquerda), 2 (ao centro) e 3 (à direita).	87
Figura 50 – Dois exemplos de campos de anisotropia extraídos da imagem de referência gerada a partir do inverso da distância ao cubo. À esquerda, com uma janela de suavização de 20x20 m. À direita, com uma janela de suavização de 40x40 m. A magnitude da anisotropia local foi limitada em [0.2;1.0] nos dois casos.	88
Figura 51 – Modelo variográfico com isotropia global para P1.	89
Figura 52 – Modelo variográfico com anisotropia global para P1. À esquerda para direção de maior continuidade (N157) e, à direita, para a direção de menor continuidade (N67).	89
Figura 53 – Modelo variográfico com anisotropia local para P1. À esquerda para direção de maior continuidade e, à direita, para a direção de menor continuidade.	90
Figura 54 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial para P1.	90
Figura 55 – Modelo variográfico com isotropia global para P2.	91
Figura 56 – Modelo variográfico com anisotropia global para P2. À esquerda para direção de maior continuidade (N157) e, à direita, para a direção de menor continuidade (N67).	91
Figura 57 – Modelo variográfico com anisotropia local para P2. À esquerda para direção de maior continuidade e, à direita, para a direção de menor continuidade.	91

Figura 58 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial para P2.....	92
Figura 59 – Exemplos de estimativas para cada método utilizando mesmo campo de anisotropia (inverso da distância ao cubo, suavizado em 20x20 m, com limite de razões anisotrópicas entre [0.3;1.0]). JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels; e AG: anisotropia global.....	93
Figura 60 – Análise dos erros das estimativas de P1 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.....	95
Figura 61 – Análise dos erros das estimativas de P1 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação exaustiva dos dados.....	96
Figura 62 – Análise dos erros das estimativas de P2 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.....	98
Figura 63 – Análise dos erros das estimativas de P2 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação exaustiva dos dados.....	99
Figura 64 – Mapa de localização do depósito (à esquerda) e representação espacial dos quatro corpos mineralizados utilizados nesse estudo, junto com as 41 sondagens (à direita).....	102
Figura 65 – Histogramas e estatísticas básicas de todas as amostras utilizadas (à esquerda) e número de amostras e furos de sondagem por corpo mineralizado (à direita). Nota-se que há furos de sondagem interceptando mais de um corpo.....	103
Figura 66 – Dois exemplos de campos de anisotropia extraídos do sólido geológico. À esquerda, com uma janela de suavização de 10 m. À direita, com uma janela de suavização de 30 m. A magnitude da anisotropia local foi limitada em [0.2;1.0] nos dois casos.....	104
Figura 67 – Modelo variográfico com isotropia global. Cenário utilizando coordenadas reais.....	106
Figura 68 – Modelo variográfico com anisotropia global. Cenário utilizando coordenadas reais. À esquerda, para o plano de maior continuidade (eixo maior e intermediário) e, à direita, para o eixo de menor continuidade.....	106
Figura 69 – Modelo variográfico com anisotropia local. Cenário utilizando coordenadas reais. À esquerda, para o plano de maior continuidade (eixo maior e intermediário) e, à direita, para o eixo de menor continuidade.....	106
Figura 70 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial. Cenário utilizando coordenadas reais.....	107
Figura 71 – Vista em planta do corpo 31 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.....	107

Figura 72 – Vista em planta do corpo 32 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.	108
Figura 73 – Vista em planta do corpo 40 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.	108
Figura 74 – Vista em planta do corpo 43 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.	109
Figura 75 – <i>Boxplots</i> do deslocamento entre pontos próximos após transformação de coordenadas. O erro absoluto é calculado pela diferença entre a distância calculada com coordenadas reais e coordenadas geológicas. Validação feita com as distâncias entre cada um dos 5 vizinhos mais próximos de todos os blocos e amostras.	109
Figura 76 – Algumas imagens de referência geradas para extrair campos de anisotropia local. Geradas por inverso da distância (acima) e inverso da distância ao cubo (abaixo).	110
Figura 77 – Exemplos de campos de anisotropia dos corpos 31 e 32, extraídos das imagens de referência (ID1: inverso da distância; ID3: inverso da distância ao cubo). À esquerda, com uma janela de suavização de 20 m. À direita, com uma janela de suavização de 40 m. ...	111
Figura 78 – Exemplos de campos de anisotropia dos corpos 40 e 43, extraídos das imagens de referência (ID1: inverso da distância; ID3: inverso da distância ao cubo). À esquerda, com uma janela de suavização de 20 m. À direita, com uma janela de suavização de 40 m. ...	111
Figura 79 – Modelo variográfico com isotropia global. Cenário utilizando coordenadas geológicas.	113
Figura 80 – Modelo variográfico com anisotropia global. Cenário utilizando coordenadas geológicas. Da esquerda para direita estão representados, respectivamente, os modelos nos eixos de maior continuidade, continuidade intermediária e menor continuidade.	113
Figura 81 – Modelo variográfico com anisotropia local. Cenário utilizando coordenadas geológicas. Da esquerda para direita estão representados, respectivamente, os modelos nos eixos de maior continuidade, continuidade intermediária e menor continuidade.	113
Figura 82 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial. Cenário utilizando coordenadas geológicas.	114
Figura 83 – Análise dos erros das estimativas do corpo 31 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.	116

Figura 84 – Análise dos erros das estimativas do corpo 32 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.	117
Figura 85 – Análise dos erros das estimativas do corpo 40 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.	118
Figura 86 – Análise dos erros das estimativas do corpo 43 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.	119
Figura 87 – Análise dos erros das estimativas em todos os corpos para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras, considerando o melhor campo por corpo e método.	122
Figura 88 – Estimativas realizadas no corpo 31, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.	123
Figura 89 – Estimativas realizadas no corpo 32, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.	124
Figura 90 – Estimativas realizadas no corpo 40, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.	125
Figura 91 – Estimativas realizadas no corpo 43, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.	126

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Métodos para integrar anisotropias locais à geoestatística, agrupados de acordo com objetivo e parâmetros necessários.	65
Tabela 2 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada e na validação exaustiva para P1. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para mostrar a magnitude dessas diferenças.	96
Tabela 3 – Lista dos campos de anisotropia que geraram melhores resultados de validação cruzada para P1, de acordo com método utilizado e erro avaliado. Foi então avaliada a performance desses campos ao realizar validação com os dados exaustivos. A diferença relativa se refere ao erro em relação ao campo anisotrópico com menor erro na validação exaustiva.	97
Tabela 4 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada e na validação exaustiva para P2. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para mostrar a magnitude dessas diferenças.	99
Tabela 5 – Lista dos campos de anisotropia que geraram melhores resultados de validação cruzada para P2, de acordo com método utilizado e erro avaliado. Foi então avaliada a performance desses campos ao realizar validação com os dados exaustivos. A diferença relativa se refere ao erro em relação ao campo anisotrópico com menor erro na validação exaustiva.	100
Tabela 6 – Elipsoides utilizados nos casos de anisotropia global para cada corpo em coordenadas reais.	105
Tabela 7 – Elipsoides utilizados nos casos de anisotropia global para cada corpo em coordenadas geológicas.	112
Tabela 8 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada com coordenadas reais. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para quantificar essas diferenças.	120
Tabela 9 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada com coordenadas geológicas. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para quantificar essas diferenças.	120

Tabela 10 – Lista da melhor estratégia de estimativa e melhor campo anisotrópico por corpo e método de estimativa.	121
Tabela 11 – Avaliação dos erros na validação cruzada considerando todos corpos conjuntamente e o campo anisotrópico/estratégia de estimativa que gerou menor REQM em cada corpo para cada método. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao erro dos outros métodos para quantificar essas diferenças.	122

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

2D	Duas dimensões
3D	Três dimensões
JM	Janelas móveis
CK	Convolução de kernels
DE	Deformação espacial
AG	Anisotropia global
IG	Isotropia global
REQM	Raiz do erro quadrático médio
MdEA	Média do erro absoluto
MnEA	Mediana do erro absoluto
ID	Inverso da distância
MDS	<i>Multidimensional scaling</i>
PCA	Análise de componentes principais

SUMÁRIO

1.	INTRODUÇÃO	20
1.1.	META.....	26
1.2.	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	26
1.3.	METODOLOGIA.....	27
1.4.	CONTRIBUIÇÕES DA TESE.....	27
1.5.	ORGANIZAÇÃO DA TESE	28
2.	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	29
2.1.	ESTACIONARIEDADE.....	29
2.2.	ANISOTROPIA NA GEOESTATÍSTICA	30
2.3.	IDENTIFICAÇÃO DE ANISOTROPIAS LOCAIS	32
2.3.1.	Interpolação de dados estruturais.....	32
2.3.2.	Gradientes	37
2.3.3.	Variografia local	40
2.4.	INTEGRAÇÃO DE ANISOTROPIAS LOCAIS NA FORMA DE PROCESSOS NÃO-ESTACIONÁRIOS	45
2.4.1.	Janelas móveis.....	45
2.4.2.	Ponderação de processos estacionários	46
2.4.3.	Convolução de kernels	47
2.4.4.	Deformação espacial.....	49
2.5.	ESTIMATIVAS CONSIDERANDO ANISOTROPIAS LOCAIS	57
2.5.1.	Inverso da distância.....	57
2.5.2.	Krigagem	59
2.6.	SIMULAÇÕES GEOESTATÍSTICAS CONSIDERANDO ANISOTROPIAS LOCAIS.....	60
2.7.	COORDENADAS GEOLÓGICAS	62
2.8.	COMENTÁRIOS	64
3.	COORDENADAS GEOLÓGICAS SEMI-AUTOMATIZADAS.....	66
3.1.	DADOS INICIAIS E SUPERFÍCIE DE REFERÊNCIA	67
3.2.	DISTÂNCIA ENTRE PONTOS DA SUPERFÍCIE DE REFERÊNCIA.....	68
3.3.	TRANSFORMAÇÃO PARA COORDENADAS GEOLÓGICAS	69
3.4.	COMENTÁRIOS	72
3.4.1.	Validações durante o processo	72

3.4.2.	Geoestatística no espaço transformado	73
4.	PARAMETRIZAÇÃO DA ANISOTROPIA LOCAL.....	74
4.1.	DIREÇÕES DA ANISOTROPIA LOCAL.....	74
4.2.	MAGNITUDE DA ANISOTROPIA LOCAL	75
4.3.	MODELO VARIOGRÁFICO DE REFERÊNCIA.....	76
4.4.	METODOLOGIAS PROPOSTAS PARA DEFINIR OS PARÂMETROS DE ANISOTROPIA LOCAL	77
4.4.1.	Direções e magnitudes em geometrias simples	77
4.4.2.	Direções e magnitudes em geometrias complexas	80
4.4.3.	Modelo variográfico de referência	81
4.5.	COMENTÁRIOS	83
5.	ESTUDO DE CASO 2-D.....	85
5.1.	DIREÇÕES E RAZÕES ANISOTRÓPICAS	86
5.2.	VARIOGRAFIA.....	88
5.2.1.	Conhecimento limitado da variabilidade espacial (P1).....	88
5.2.2.	Conhecimento amplo da variabilidade espacial (P2)	90
5.3.	ESTIMATIVAS	92
5.4.	RESULTADOS	93
5.4.1.	Conhecimento limitado da variabilidade espacial (P1).....	94
5.4.2.	Conhecimento amplo da variabilidade espacial (P2)	98
5.5.	COMENTÁRIOS	100
6.	ESTUDO DE CASO 3-D.....	102
6.1.	COORDENADAS REAIS	104
6.1.1.	Direções e razões anisotrópicas	104
6.1.2.	Variografia	105
6.2.	COORDENADAS GEOLÓGICAS	107
6.2.1.	Direções e razões anisotrópicas	109
6.2.2.	Variografia	112
6.3.	ESTIMATIVAS	114
6.4.	RESULTADOS	115
6.5.	COMENTÁRIOS	128
7.	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	129
7.1.	CONCLUSÃO.....	129

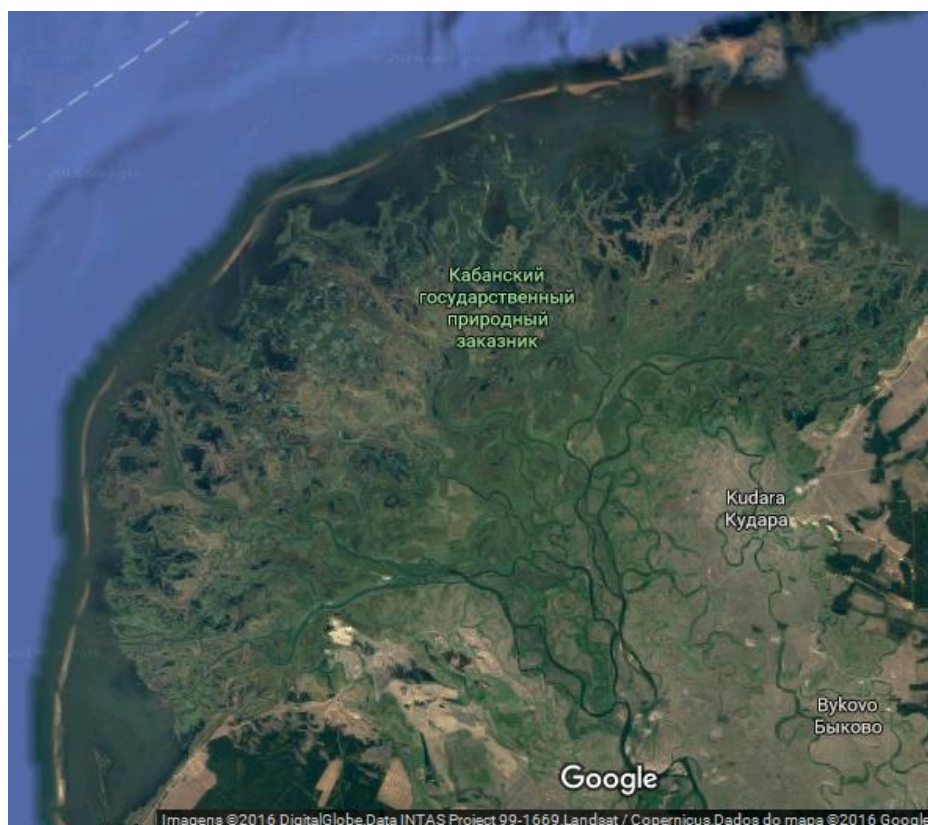
7.1.1.	Como identificar de modo rápido e adequado as anisotropias locais com base em qualquer conjunto de dados disponíveis?	129
7.1.2.	Quais as melhores maneiras para incorporar as informações locais de anisotropia em estimativas geoestatísticas?	130
7.1.3.	Conclusões adicionais.....	131
7.2.	RECOMENDAÇÕES DE TRABALHOS FUTUROS	131
	REFERÊNCIAS	133
	APÊNDICE A – ALGORITMOS DESENVOLVIDOS.....	138

1. INTRODUÇÃO

Anisotropia é a característica de certos materiais terem propriedades com diferentes comportamentos de acordo com a direção analisada. É uma propriedade amplamente presente nos fenômenos espaciais e variável de acordo com a escala analisada. Na geologia, a anisotropia é decorrente dos processos naturais, que envolvem formação de rochas, características estruturais, alterações petroquímicas, entre outros.

No processo de formação de rochas, a anisotropia pode ser bem marcada em alguns tipos de rochas. Por exemplo, derrames de lava apresentam continuidade diferenciada de acordo com o caminho do fluxo do material. Intrusões ígneas apresentam forma diferenciada localmente de acordo com as propriedades das rochas encaixantes e da fonte de calor. Diversos exemplos também ocorrem em rochas sedimentares, cuja sedimentação muitas vezes é diferenciada por variações na direção. Exemplo disso são rios meandantes e deltas, como o apresentado na Figura 1, que exhibe diversas variações de anisotropia dos canais do delta de acordo com a posição espacial analisada.

Figura 1 – Delta do rio Selenga, na Rússia.



Fonte: Google Earth

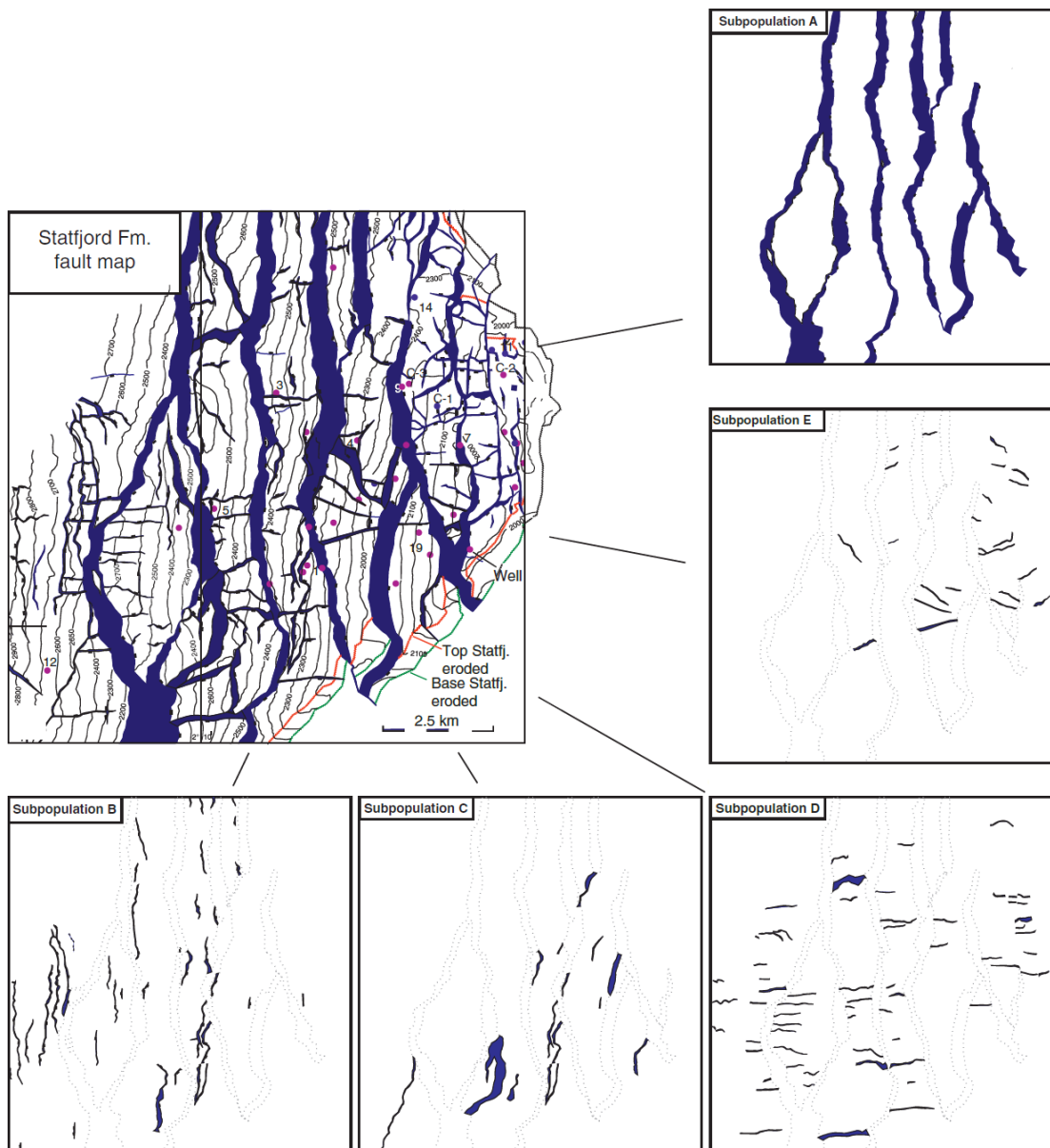
Processos estruturais são também responsáveis por diversos casos de anisotropia na geologia. Casos mais marcantes decorrem de dobramentos de camadas. Uma camada horizontal pode ter uma anisotropia facilmente representada. Mas ao sofrer dobramentos, essa anisotropia pode se tornar bastante complexa, como no caso da Figura 2. Fraturamentos e falhamentos associados a rotações e/ou translações de blocos também afetam significativamente a continuidade das rochas. A anisotropia também pode variar consideravelmente em estruturas dependendo da escala analisada. Por exemplo, na Figura 3, os materiais internos às falhas representadas em azul podem apresentar diferentes continuidades de acordo com a posição e escala analisada.

Figura 2 – Dobras tipo *kink* em rochas sedimentares oceânicas de Omã.



Fonte: Fossen (2010)

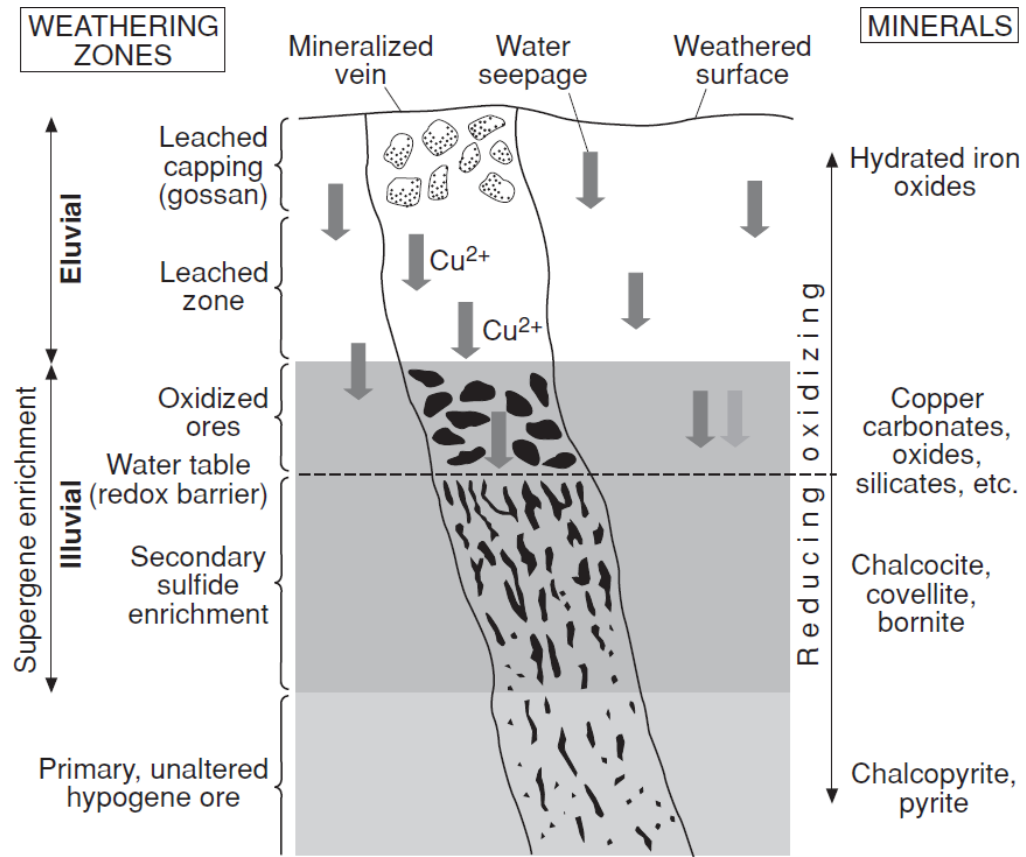
Figura 3 – Zona de falhas no campo petrolífero de Gullfaks, Noruega. Estão em destaques diferentes populações de falhas, com anisotropias diversas de acordo com a escala e região analisadas.



Fonte: Fossen (2010)

Processos de alteração também definem diferentes anisotropias. Por exemplo, processos supérgenos de alteração remobilizam certos elementos químicos e os concentram em zonas de alteração. Um exemplo esquemático desse processo está representado na Figura 4, o qual ilustra como o cobre de um veio mineralizado pode ser concentrado em zonas de iluviação.

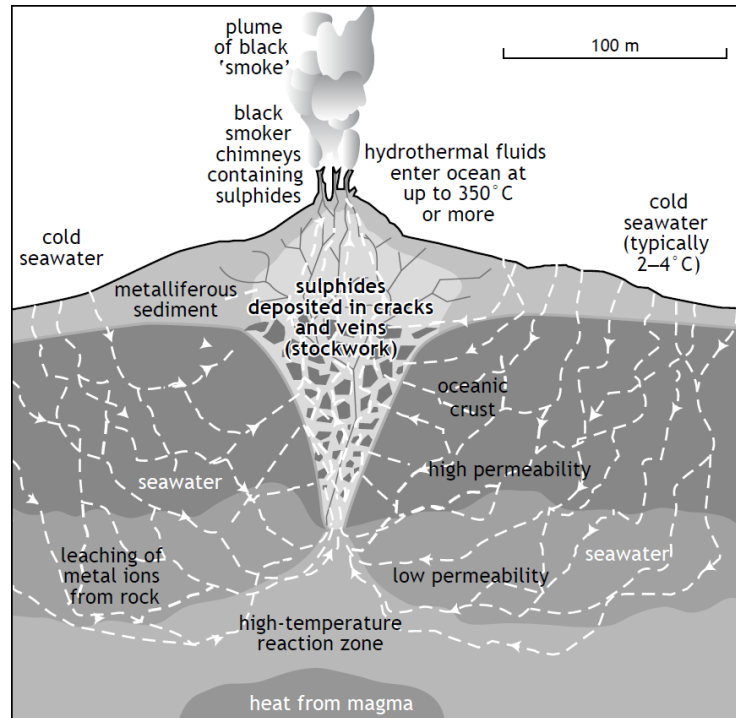
Figura 4 – Seção esquemática de um depósito de cobre, mostrando o típico padrão de alteração.



Fonte: Robb (2005)

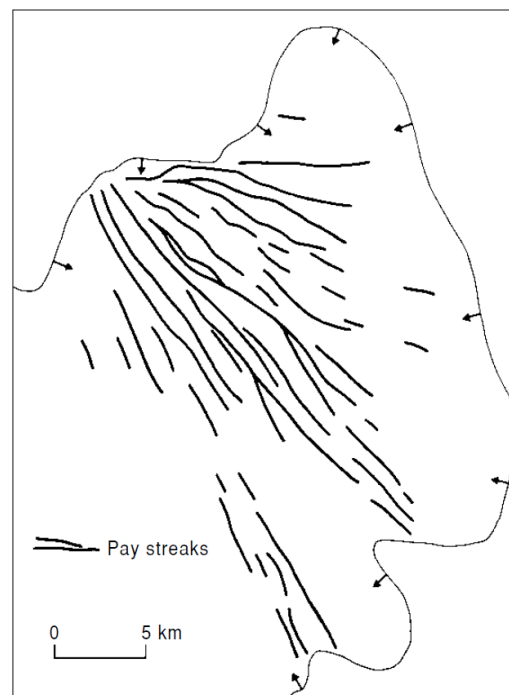
No caso da mineração, especialmente importantes são os processos de formação de minério. Eles são combinações de processos geológicos que favorecem a concentrações de minerais de interesse econômico. Casos em que são notáveis as variações na anisotropia estão a formação de depósitos pórfiros; depósitos de sulfetos vulcanogênicos (VMS – Figura 5); depósitos de ouro orogênico e em placers (Figura 6), entre diversos outros casos.

Figura 5 – Esquema ilustrando a mineralização de sulfetos vulcanogênicos. A percolação de fluidos ocorre nas zonas fraturadas e entra em convecção. Duas zonas mineralizadas principais ocorrem, cada qual com continuidade diferente: a zona de minério *stratabound* (junto às chaminés vulcânicas, subhorizontal na figura) e a zona de minério *stringer* (junto ao *stockwork*, subvertical na figura).



Fonte: Baker e German (2009)

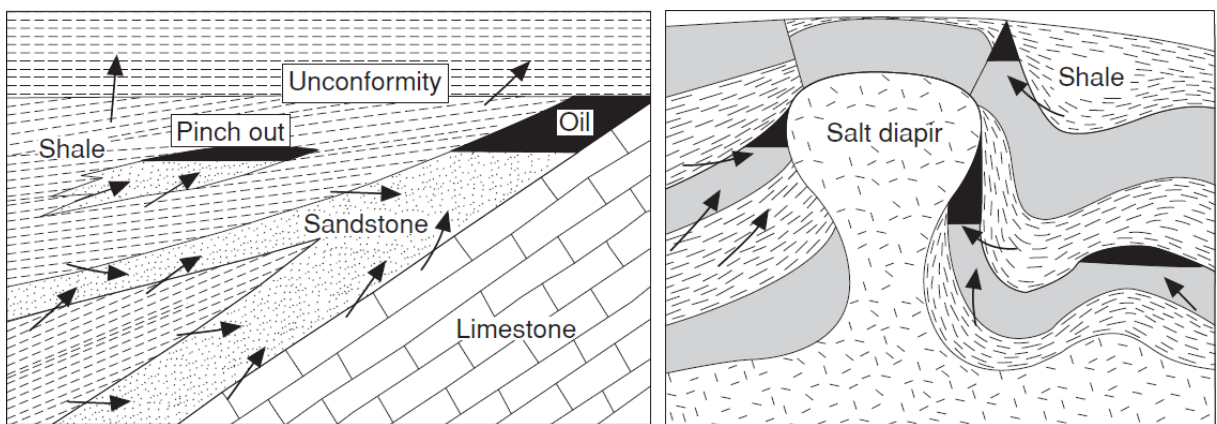
Figura 6 – Distribuição de algumas zonas mineralizadas em ouro (*pay streaks*) na bacia de Witwatersrand, África do Sul.



Fonte: Evans e Moon (2006)

Na geologia do petróleo, também há diversos exemplos em que a anisotropia é notavelmente importante. Campos petrolíferos podem estar por vezes associados a sedimentos deltaicos como os da Figura 1. E a permeabilidade das rochas, fundamentais para a migração do petróleo, apresentam diversas variações anisotrópicas dependendo das propriedades das rochas, conforme ilustrado na Figura 7.

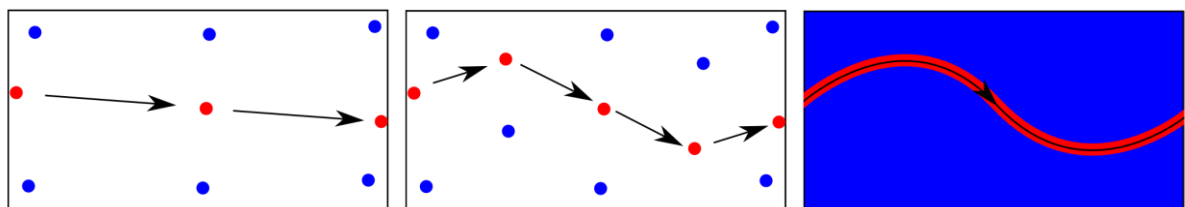
Figura 7 – Alguns exemplos de contextos geológicos que favorecem a acumulação de hidrocarbonetos. As flechas representam os caminhos mais favoráveis para migração do óleo, baseados na permeabilidade das rochas adjacentes e presença de falhas.



Fonte: Robb (2005)

O conjunto de exemplos apresentados ilustra a clara presença de anisotropia nos fenômenos naturais. No entanto, identificar adequadamente e em detalhe a anisotropia a partir de um conjunto limitado de dados pode não ser uma tarefa simples. A partir de um mesmo conjunto de informações, podem ser interpretadas diversas possibilidades de direções e magnitudes de anisotropia (Figura 8).

Figura 8 – Ilustração esquemática de como um conjunto limitado de informações podem gerar diversas interpretações de anisotropia dos dados.



Outra questão é como utilizar as informações detalhadas de anisotropia na geoestatística. Há abordagens mais simples e mais complexas. Mais rápidas ou que demandam maior tempo de processamento. No entanto, os resultados não são necessariamente melhores ao se utilizar as técnicas mais complexas.

Assim, essa tese é motivada na importância da anisotropia na modelagem correta dos fenômenos espaciais e busca complementar a bibliografia sobre o tema, de modo a auxiliar no uso adequado de dados anisotrópicos nas aplicações geoestatísticas.

1.1. META

A meta dessa tese de doutorado é contribuir para a difusão do uso de anisotropias locais na geoestatística, explorando duas questões principais:

- i) Como identificar de modo rápido e adequado as anisotropias locais com base em qualquer conjunto de dados disponíveis?
- ii) Quais as melhores maneiras para incorporar as informações locais de anisotropia em estimativas geoestatísticas?

1.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Para atingir tal meta, alguns objetivos específicos foram traçados.

- i) Estudar as possíveis maneiras de gerar campos de anisotropia e de integrar anisotropias locais para o uso em estimativas geoestatísticas;
- ii) Desenvolver os algoritmos geoestatísticos necessários a essa tese, para dar flexibilidade ao uso e para entender em detalhe o funcionamento deles;
- iii) Desenvolver metodologias utilizando as técnicas consideradas mais interessantes;
- iv) Realizar estudos comparativos para identificar as vantagens e desvantagens das diferentes formas de integrar anisotropias locais na geoestatística.

1.3. METODOLOGIA

Estudos bibliográficos foram feitos durante todo o desenvolvimento desse trabalho, buscando de maneira crítica novas informações e ideias. A partir desses estudos bibliográficos foram consolidadas as bases teóricas para assim desenvolver essa tese.

Os algoritmos utilizados nessa tese foram escritos em Python e C++ (integrados ao software AR2GEMS) para dar flexibilidade ao uso dos algoritmos e para entender em detalhe o funcionamento deles. O AR2GEMS é um desenvolvimento do SGeMS (REMY *ET AL.*, 2009) e permite uma customização bastante eficiente de algoritmos geoestatísticos (em C++ ou Python) em uma interface gráfica que permite atender grandes bancos de dados e modelos 3-D. Quando possível, algoritmos foram desenvolvidos puramente em Python para evitar dependência de softwares externos.

Na sequência, foram elaboradas metodologias utilizando o que foi considerado mais pertinente e aplicável tanto em casos pequenos como em casos 3-D complexos. Para assim, guiar uma melhor caracterização e trabalho com anisotropias locais.

Estudos de caso foram então desenvolvidos a partir dos próprios algoritmos e metodologias desenvolvidos nessa tese. Escolheu-se realizar estudos de caso representativos, tanto para casos simples 2-D como casos que envolvessem modelos geológicos complexos e de grande porte, de modo a pôr à prova a operacionalidade dos métodos e seus resultados.

Por conveniência, os números apresentados nessa tese estão em formato americano, utilizando ponto como separador decimal e vírgula como separador de milhar.

1.4. CONTRIBUIÇÕES DA TESE

A tese busca contribuir nos seguintes pontos:

- i) Disponibilizar novas ideias para facilitar o trabalho com anisotropias locais na geoestatística, com foco principal em aplicações 3-D;
- ii) Desenvolver metodologias para definir, de maneira prática e efetiva, um campo de anisotropia local adequado a partir de um conjunto limitado de informações;
- iii) Avaliar de maneira crítica as vantagens e desvantagens das abordagens possíveis para se trabalhar com dados de anisotropia local na geoestatística, buscando assim definir as situações mais favoráveis e desfavoráveis para cada método.

1.5. ORGANIZAÇÃO DA TESE

Os capítulos seguintes estão organizados de modo a melhor apresentar o tema dessa tese.

O Capítulo 2 apresenta uma extensa revisão bibliográfica sobre o tema de anisotropia na geoestatística. Inicialmente, é apresentada uma base teórica envolvendo conceitos de estacionariedade e a representação tradicional de anisotropia como um elipsoide, seguido das principais maneiras de se identificar anisotropia localmente.

Na sequência, são introduzidas as quatro principais maneiras de incorporar essas anisotropias locais em modelos de covariância não-estacionários. São detalhados alguns procedimentos de como podem ser utilizadas distâncias anisotrópicas locais e covariâncias locais para realizar estimativas, simulações e agrupamento de dados multivariados. Para finalizar, é apresentada uma revisão bibliográfica sobre aplainamento de sólidos 3-D por meio do uso de coordenadas geológicas.

No Capítulo 3, é apresentada uma metodologia de aplainamento de sólidos geológicos combinando diversas ferramentas apresentadas no Capítulo 2. Sua aplicação é relativamente mais simples do que via outras metodologias disponíveis e funciona bem para casos muito dobrados.

No Capítulo 4, é realizada uma discussão sobre quais parâmetros de anisotropia local são necessários para cada tipo de aplicação e quais as melhores maneiras de obtê-los. São apresentadas algumas metodologias para melhor definir as direções e magnitude da anisotropia e para melhor realizar a variografia quando as direções de anisotropia local já são conhecidas.

No Capítulo 5, é realizado um estudo de caso com um banco de dados 2-D para demonstrar o uso das metodologias de como parametrizar as anisotropias locais apresentadas no Capítulo 4 e realizar comparações dos resultados gerados por meio das diferentes formas de integrar anisotropias na krigagem.

No Capítulo 6, é realizado um estudo de caso com dados 3-D do depósito de Aripuanã/MT para demonstrar e avaliar o conjunto das metodologias apresentadas nessa tese em um cenário bastante complexo geologicamente.

No Capítulo 7, são apresentadas conclusões e indicados trabalhos futuros a partir dessa tese.

2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1. ESTACIONARIEDADE

A estacionariedade é um conceito fundamental na geoestatística, uma vez que esse princípio está por trás dos principais métodos existentes. Um conjunto de variáveis regionalizadas é chamado de estritamente estacionário quando a distribuição de probabilidade conjunta das variáveis aleatórias é invariante com a translação. Em outras palavras, trata-se de um conjunto cuja média, variância e relações multivariadas são iguais por todo o domínio.

Na geoestatística clássica, é comum se trabalhar com uma estacionariedade menos rigorosa, chamada de estacionariedade de segunda ordem. Para esse caso, o conjunto de variáveis regionalizadas apresenta média constante e uma única função de autocorrelação para todo o domínio. Assim, assume-se que as relações entre as variáveis aleatórias (*i.e.* covariâncias) podem ser simplificada e caracterizadas em função da distância entre elas.

Desse modo, é mais fácil modelar os processos espaciais, uma vez que podem ser explicados apenas pela estatística básica e pelo semivariograma. No entanto, fenômenos espaciais são complexos e quase sempre não-estacionários. Por isso, é uma prática fundamental na geoestatística delimitar domínios para serem analisados separadamente buscando delimitar um subconjunto onde a hipótese de alguma forma de estacionariedade possa ser admitida.

No contexto geológico, um passo inicial é separar amostras de litologias diferentes, uma vez que costumam apresentar distribuições estatísticas de parâmetros físico-químicos diferentes. Por exemplo, a média e variância da porcentagem de sílica são completamente diferentes ao se comparar amostras vindas de um granito e de um quartzito.

Outro fator que afeta a estacionariedade da média é a presença de uma tendência espacial (*trend*) nos dados, a qual deve ser modelada e separada dos dados de modo a manter a estacionariedade dos resíduos livre da tendência. Por isso, é uma boa prática na geoestatística utilizar vizinhanças locais na interpolação dos dados espaciais, uma vez que tendem a ser localmente estacionárias.

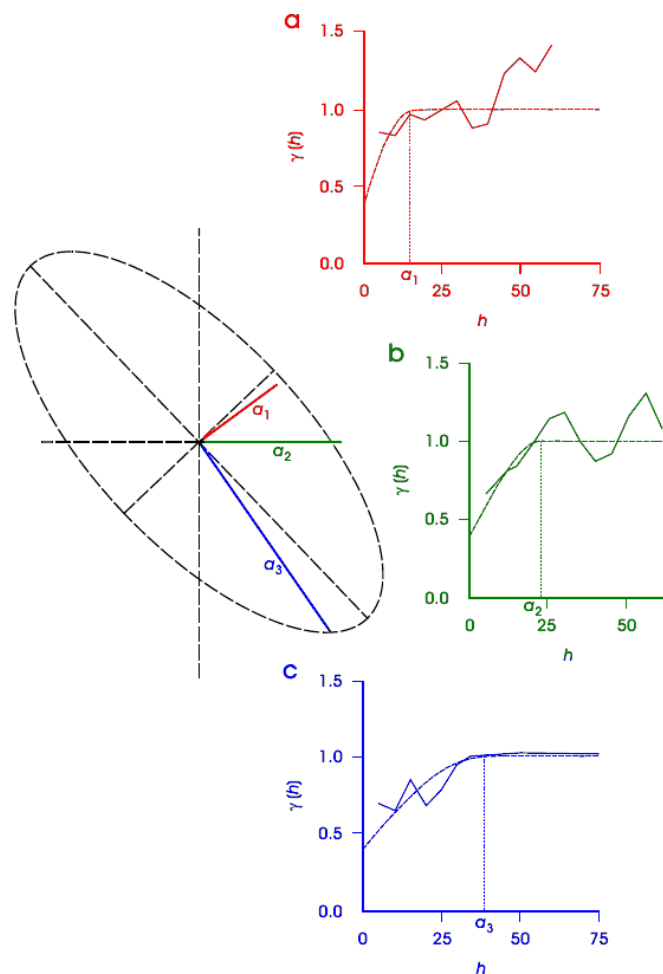
É preciso levar em conta também a continuidade espacial para se separar os domínios, uma vez que a estacionariedade assume semivariograma único para toda a área. Diferentes características locais podem influenciar significativamente na continuidade espacial. Associado a isso está o tema central dessa tese, que é a anisotropia. É essencial levar em conta as variações

anisotrópicas da continuidade espacial de modo que as aplicações geoestatísticas possam ser executadas da melhor maneira.

2.2. ANISOTROPIA NA GEOESTATÍSTICA

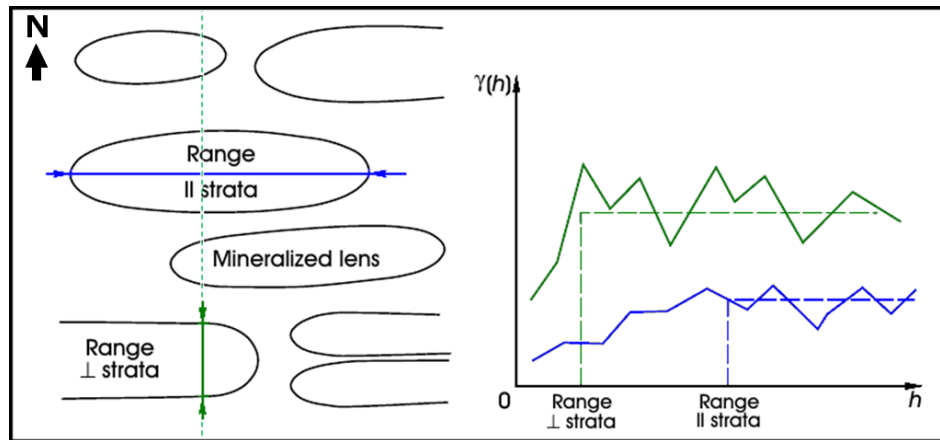
Na geoestatística clássica, o conceito de anisotropia está associado à análise de continuidade espacial. Isso porque, na construção de semivariogramas, é comum identificar-se direções mais contínuas que outras. Dois tipos principais de anisotropia são normalmente caracterizados: a anisotropia geométrica (Figura 9), que consiste em variações no alcance do semivariograma de acordo com a direção espacial; e a anisotropia zonal (Figura 10), que se trata da mudança na variância do fenômeno (*sill*) de acordo com a direção analisada.

Figura 9 – Exemplo de anisotropia geométrica. Os semivariogramas calculados apresentam diferentes continuidades de acordo com a direção analisada. A maneira tradicional de representar essa anisotropia é em forma de elipsoide.



Fonte: Adaptado de Sinclair e Blackwell (2002)

Figura 10 – Exemplo de anisotropia zonal na geologia. Nesse caso, lentes alongadas promovem uma variabilidade muito maior em N-S do que em E-W, causando diferenças nos *sills* dos semivariogramas.



Fonte: adaptado de Sinclair e Blackwell (2002)

Do ponto de vista prático, a anisotropia é levada em consideração na forma de um elipsoide. São definidos os três eixos principais de continuidade (maior, intermediário e menor) e em cada uma dessas três direções são modelados os respectivos alcances variográficos, de modo a levar em conta a anisotropia geométrica. A anisotropia zonal é levada em conta ao se adicionar uma última estrutura de alcance bastante alto na direção em que o *sill* é mais baixo.

Matematicamente, a anisotropia em forma de elipsoide é considerada por meio de transformações geométricas das distâncias, de acordo com a direção e com a magnitude da anisotropia. Esse processo consiste em transformar as coordenadas (x,y,z) de cada local por meio de sucessivas rotações e ponderações, baseadas nos parâmetros do elipsoide de anisotropia. A matriz R define as rotações e a matriz S carrega a magnitude da anisotropia:

$$R = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \cos(-\beta) & \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \cos(-\beta) & -\sin(-\beta) \\ \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \sin(-\beta) \cdot \sin\varphi - \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \cos\varphi & \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \sin(-\beta) \cdot \sin\varphi + \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \cos\varphi & \cos(-\beta) \cdot \sin\varphi \\ \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \sin(-\beta) \cdot \cos\varphi + \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \sin\varphi & \sin\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \sin(-\beta) \cdot \cos\varphi - \cos\left(\frac{\pi}{2} - \alpha\right) \cdot \sin\varphi & \cos(-\beta) \cdot \cos\varphi \end{bmatrix}, \quad (1)$$

$$S = \begin{bmatrix} \frac{1}{r1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r3} \end{bmatrix} \quad (2)$$

sendo α , β e φ os ângulos de rotação que definem a posição do elipsoide no espaço (conforme convenção GSLIB/SGeMS - NEUFELD E DEUTSCH, 2004), e $r1$, $r2$ e $r3$ são os respectivos alcances de cada eixo principal. Para se obter as coordenadas transformadas (x',y',z') em qualquer ponto u_i , basta realizar a seguinte operação:

$$\begin{bmatrix} x'_{u_i} \\ y'_{u_i} \\ z'_{u_i} \end{bmatrix} = S \cdot R \cdot \begin{bmatrix} x_{u_i} \\ y_{u_i} \\ z_{u_i} \end{bmatrix} \quad (3)$$

Com isso, a distância anisotrópica d' entre dois pontos u_1 e u_2 é obtida euclidianamente conforme:

$$d'(u_1, u_2) = \sqrt{(x'_{u_1} - x'_{u_2})^2 + (y'_{u_1} - y'_{u_2})^2 + (z'_{u_1} - z'_{u_2})^2} \quad (4)$$

2.3. IDENTIFICAÇÃO DE ANISOTROPIAS LOCAIS

De modo geral, a anisotropia é geralmente tratada de maneira global. Ou seja, o mesmo elipsoide de anisotropia é utilizado para todos os locais do domínio estacionário. Em casos com poucas informações ou sem muita complexidade espacial, essa abordagem é suficientemente apropriada. Mas em muitos outros casos, essa simplificação pode ser um problema, uma vez que não leva em consideração as distinções locais da anisotropia. Nesse capítulo, são apresentadas algumas metodologias que permitem um detalhamento maior da anisotropia dos dados.

2.3.1. Interpolação de dados estruturais

Uma das possibilidades para se obter anisotropias locais é interpolando dados estruturais. A fonte desses dados estruturais pode ser diversa. Uma alternativa é que geólogos ou outros especialistas desenhem as direções preferenciais de anisotropia por todo o modelo geológico. A vantagem dessa abordagem é que as informações vem de todo conhecimento e

experiência do especialista. Entretanto, é uma tarefa trabalhosa e subjetiva, além de ser particularmente difícil em casos 3D.

Há algumas ferramentas úteis para casos 3D, que permitem extrair informações estruturais das superfícies/*wireframes* desenhados nos softwares apropriados. A mais simples consiste em extrair ângulos de cada triangulação da envoltória do modelo geológico interpretado, a partir dos planos formados por cada conjunto de três pontos próximos (Figura 11). Outra opção são algoritmos de esqueletização, que identificam as direções ao longo dos eixos internos dos sólidos geológicos (LEE *ET AL.*, 1994; PALÁGYI E KUBA, 1999 – Figura 12).

Figura 11 – Função ANISOANG do software Datamine, que calcula direção e mergulho de cada uma das triangulações que formam a envoltória geológica modelada.

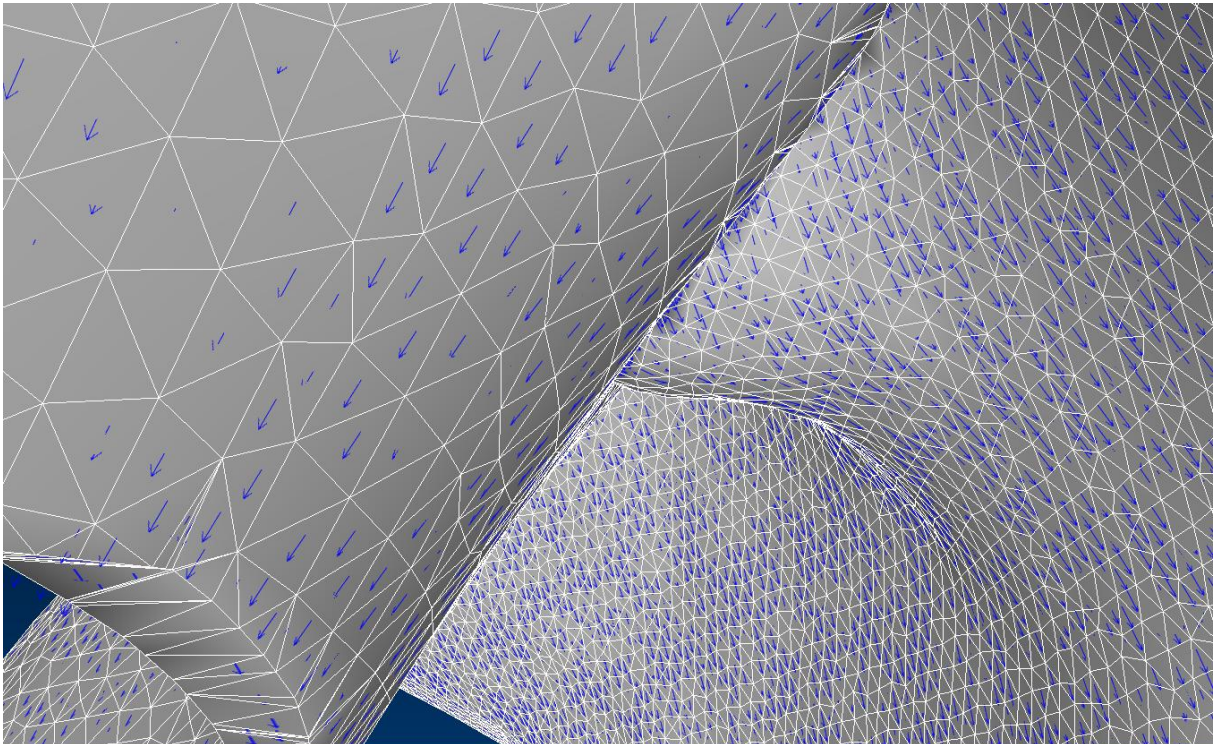
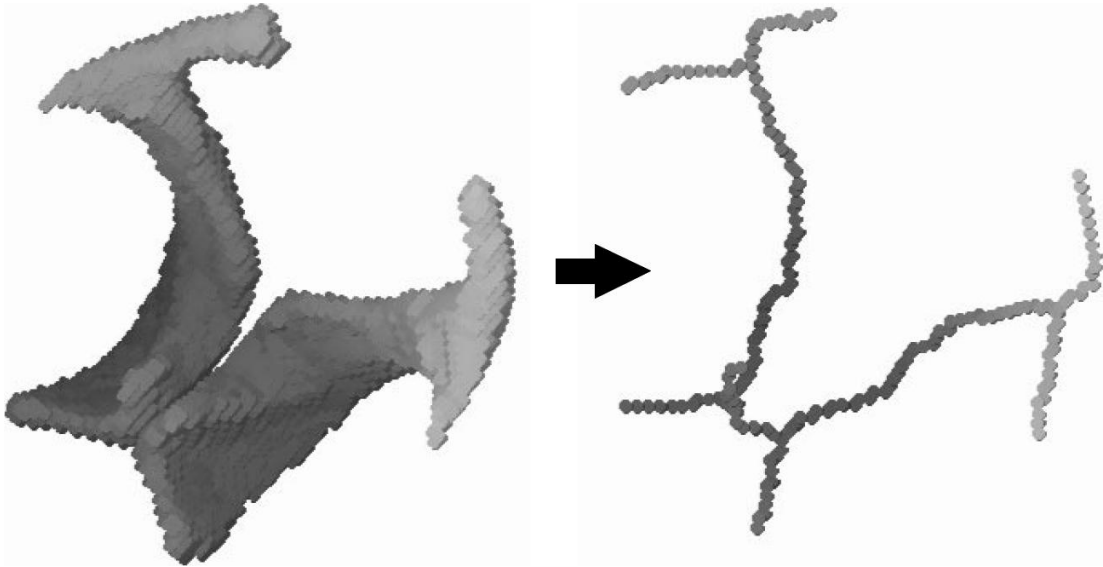


Figura 12 – Algoritmo de esqueletização, que identifica a direção principal ao longo do eixo interno de figuras 3D.

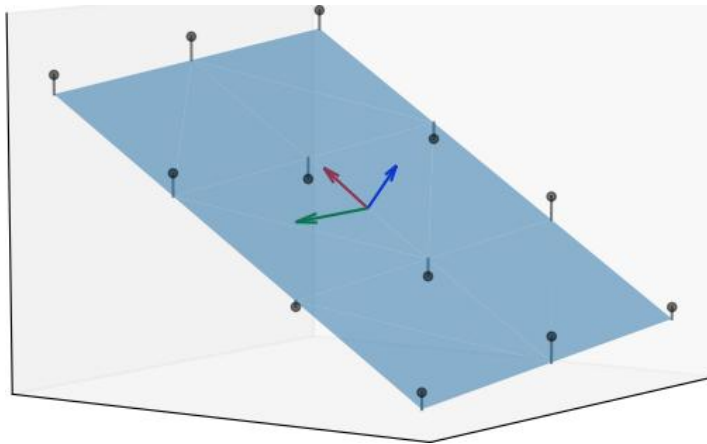


Fonte: adaptado de Palágyi e Kuba (1999)

Para extrair direções locais utilizando mais que três pontos, uma opção é realizar localmente a análise de componentes principais (PCA). O PCA (PEARSON, 1901) é uma técnica que busca representar um conjunto de dados multidimensionais na forma de componentes principais. Possui múltiplas aplicações e consiste em dois passos principais: calcular a matriz de covariância dos dados estandarizados e fatorizá-la na forma de autovetores e autovalores. Para definir anisotropias locais, a ideia consiste em aplicar o PCA para um conjunto local de coordenadas X, Y e Z (*e.g.* pontos de uma envoltória geológica), de modo que as três componentes principais representem os três eixos do elipsoide de orientação local.

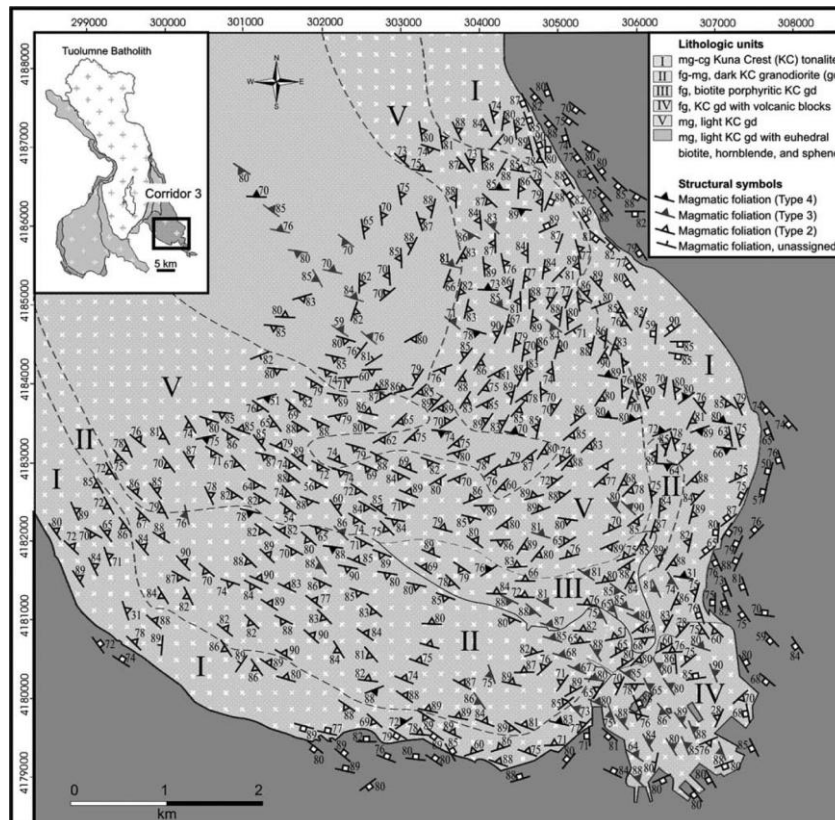
Em outras palavras, consiste em definir um plano aproximado que represente adequadamente o conjunto de pontos locais (Figura 13). Vale ressaltar que esse processo define bem o eixo menor e o plano principal (assumindo uma continuidade baseada na posição dos pontos), mas não diferencia adequadamente a posição do eixo maior e eixo intermediário sob o plano principal. Isso porque as duas maiores componentes representam apenas ao longo de qual vetor há uma maior concentração de pontos, o que não implica em uma maior continuidade.

Figura 13 – Exemplo de uso de análise de componentes principais para definir direções locais. O PCA dos pontos em preto resultam no plano médio em azul, onde estão contidas as duas maiores componentes principais (em vermelho e verde).



Outra fonte de dados estruturais são as medidas de direção e mergulho tomadas em campo por meio de bússolas geológicas (Figura 14) ou de testemunhos de sondagem por meio de procedimentos adequados. Para trabalhos de grande escala espacial, é possível utilizar também lineamentos estruturais obtidos em imagens de sensoriamento remoto.

Figura 14 – Medidas estruturais feitas em campo e representadas em mapa.



Fonte: Davis *et al.* (2012)

Com os dados estruturais disponíveis, eles são interpolados no modelo para que se tenha direções preferenciais de continuidade em cada local. No entanto, o processo de interpolação de dados estruturais é um pouco diferente, uma vez que trabalha com medidas angulares.

Para manipular dados direcionais é preciso transformar os dados. Imagine dois dados axiais representados em azimute: 0° e 180° . É fácil dizer que a direção média corresponde ao eixo N-S. No entanto, se fosse aplicada uma média aritmética escalar, o azimute médio seria de 90° (E-W). Por isso, o procedimento geral para trabalhar com dados direcionais é decompor o ângulo (α) em um vetor cartesiano (v), de modo que:

$$v = (\cos \alpha, \sin \alpha) \quad (5)$$

Como os senos e cossenos são dados escalares, eles podem ser interpolados por krigagem ou qualquer outro método similar. No entanto, é desejável que a correlação entre os termos seja mantida, por isso é recomendável a utilização de métodos multivariados, tais como a cokrigagem (BOISVERT, 2010). Para se obter o ângulo interpolado, basta realizar a transformação inversa:

$$\alpha = \arctan_2(v[y], v[x]) = \tan^{-1}\left(\frac{v[y]}{v[x]}\right), \quad (6)$$

na qual \arctan_2 é um operador que aplica o inverso da tangente, mas com condições que retornem sempre valores reais e o ângulo no quadrante adequado:

$$\arctan_2(y, x) = \begin{cases} \arctan\left(\frac{y}{x}\right) & \text{se } (x > 0), \\ \frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{y}{x}\right) & \text{se } (y > 0), \\ -\frac{\pi}{2} - \arctan\left(\frac{y}{x}\right) & \text{se } (y < 0), \\ \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \pm \pi & \text{se } (x < 0), \\ \text{indefinido} & \text{se } (x = y = 0). \end{cases} \quad (7)$$

Para dados axiais, tais como eixos variográficos, em que a direção independe dos sentidos (*i.e.* $0^\circ = 180^\circ$), recomenda-se trabalhar com dados entre $[0^\circ, 180^\circ]$ e, em seguida, multiplicar esses ângulos por 2. Esses ângulos são então decompostos e manipulados tal como anteriormente apresentado, com a diferença que o ângulo obtido com a retro-transformação deve ser dividido por 2 para representar o eixo final (MARDIA E JUPP, 2000).

No caso de vetores 3-D em que são definidos pelo ângulo da direção do mergulho (α) e o ângulo do mergulho (β), é possível trabalhar de maneira semelhante, decompondo o vetor como:

$$v = (\sin \alpha \cdot \cos \beta, \cos \alpha \cdot \cos \beta, \sin \beta) \quad (8)$$

Para dados axiais 3-D, deve-se garantir que os valores de direção e mergulho estejam na mesma metade da esfera para garantir resultados adequados (não basta multiplicar os ângulos inicialmente por 2). Para casos em que se interpolam eixos de um elipsoide e que são necessários três componentes angulares, Lillah e Boisvert (2015) recomendam trabalhar com quaterniões, normalmente utilizado para cálculos de rumo de aeronaves. Mais detalhes dessa abordagem podem ser encontrados no trabalho de Lillah e Boisvert (2015).

O resultado final pode variar dependendo dos diferentes caminhos que podem ser tomados no processo. Mas na maioria dos casos, tem-se ao final, a direção e mergulho de um dos três eixos de continuidade principal. Eventualmente, informações adicionais podem ser obtidas por meio de suposições, *e.g.* a partir de um eixo conhecido, definir um outro com azimute perpendicular a este e mergulho 0° e o terceiro eixo ortogonal a esses dois. A magnitude da anisotropia normalmente não é obtida no processo, ao menos que se saibam de valores locais dela *a priori* e estes sejam também interpolados.

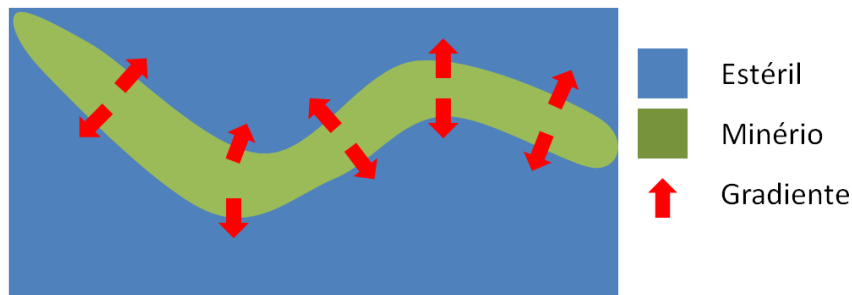
2.3.2. Gradientes

A aplicação de gradientes para identificar anisotropia na geoestatística é uma adaptação de uma técnica desenvolvida em processamento de imagens. Assim, essa técnica consiste em extrair as informações de anisotropia de uma imagem inicial. Algumas aplicações geoestatísticas desse processo podem ser encontradas nos trabalhos de Stroet e Snepvangers (2005) e Lillah e Boisvert (2015).

A imagem inicial é a base para o processo. Em outras palavras, essa imagem consiste em valores categóricos (*e.g.* minério ou estéril) ou contínuos (*e.g.* teores assinalados por meio de vizinho mais próximo, inverso da distância, entre outros) assinalados/interpolados ao modelo. Hassanpour e Deutsch (2007) apresenta também a opção de assinalar medidas de covariância aos blocos.

O primeiro passo do processamento da imagem é calcular os gradientes. Matematicamente, os gradientes de uma imagem são vetores que indicam o sentido e a direção em que ocorrem a maior variação nos valores vizinhos (Figura 15).

Figura 15 – Ilustração esquemática do que são os gradientes, representados pelas setas vermelhas que indicam a direção em que ocorrem as maiores variações na imagem.



As componentes do vetor são dadas pelas derivadas de imagem ao longo dos eixos X, Y e Z. Uma maneira prática e eficiente de se obter os gradientes da imagem inicial é aplicar uma convolução com o filtro Sobel. O filtro Sobel (ou Sobel-Feldman) é um operador discreto que computa o gradiente local de maneira aproximada por meio de convolução da imagem original com matrizes 3x3. Detalhes específicos desse operador podem ser encontrados em Alam (2012). Para casos 3D, são utilizados 9 matrizes de convolução 3x3, de modo que as 3 componentes do gradiente em um ponto (x,y,z) são dadas por:

$$\begin{aligned} \mathbf{g}[\mathbf{x}] = & I(x+1,y+1,z+1) + 2*I(x+1,y,z+1) + I(x+1,y-1,z+1) + 2*I(x+1,y+1,z) + \\ & 4*I(x+1,y,z) + 2*I(x+1,y-1,z) + I(x+1,y+1,z-1) + 2*I(x+1,y,z-1) + I(x+1,y-1,z-1) - \\ & I(x-1,y+1,z+1) + 2*I(x-1,y,z+1) + I(x-1,y-1,z+1) + 2*I(x-1,y+1,z) + 4*I(x-1,y,z) + \\ & 2*I(x-1,y-1,z) + I(x-1,y+1,z-1) + 2*I(x-1,y,z-1) + I(x-1,y-1,z-1); \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{g}[\mathbf{y}] = & I(x+1,y+1,z+1) + 2*I(x+1,y+1,z) + I(x+1,y+1,z-1) + 2*I(x,y+1,z+1) + \\ & 4*I(x,y+1,z) + 2*I(x,y+1,z-1) + I(x-1,y+1,z+1) + 2*I(x-1,y+1,z) + I(x-1,y+1,z-1) - \\ & I(x+1,y-1,z+1) + 2*I(x+1,y-1,z) + I(x+1,y-1,z-1) + 2*I(x,y-1,z+1) + 4*I(x,y-1,z) + \\ & 2*I(x,y-1,z-1) + I(x-1,y-1,z+1) + 2*I(x-1,y-1,z) + I(x-1,y-1,z-1); \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{g}[\mathbf{z}] = & I(x+1,y+1,z+1) + 2*I(x+1,y,z+1) + I(x+1,y-1,z+1) + 2*I(x,y+1,z+1) + \\
& 4*I(x,y,z+1) + 2*I(x,y-1,z+1) + I(x-1,y+1,z+1) + 2*I(x-1,y,z+1) + I(x-1,y-1,z+1) - \\
& I(x+1,y+1,z-1) + 2*I(x+1,y,z-1) + I(x+1,y-1,z-1) + 2*I(x,y+1,z-1) + 4*I(x,y,z-1) + \\
& 2*I(x,y-1,z-1) + I(x-1,y+1,z-1) + 2*I(x-1,y,z-1) + I(x-1,y-1,z-1);
\end{aligned} \tag{11}$$

sendo $g[x]$, $g[y]$ e $g[z]$ cada componente do vetor de gradiente $g(x,y,z)$ e $I(:, :, :)$ é o valor da imagem inicial nos pontos adjacentes ao ponto (x,y,z) .

Para se definir os três principais eixos de continuidade local, são utilizados tensores estruturais. Esses tensores são matrizes derivadas dos gradientes anteriormente calculados e expressam as direções principais dos gradientes em uma vizinhança. No caso 3D, o tensor T é representado pela seguinte matriz simétrica.

$$T = \begin{bmatrix} \sum_{i=0}^n (g[x]_i^2) & \sum_{i=0}^n (g[x]_i \cdot g[y]_i) & \sum_{i=0}^n (g[x]_i \cdot g[z]_i) \\ \sum_{i=0}^n (g[y]_i \cdot g[x]_i) & \sum_{i=0}^n (g[y]_i^2) & \sum_{i=0}^n (g[y]_i \cdot g[z]_i) \\ \sum_{i=0}^n (g[z]_i \cdot g[x]_i) & \sum_{i=0}^n (g[z]_i \cdot g[y]_i) & \sum_{i=0}^n (g[z]_i^2) \end{bmatrix}, \tag{12}$$

sendo n o número de gradientes adjacentes considerados para suavização dos vetores e $g[x]$, $g[y]$ e $g[z]$ os gradientes ao longo de cada eixo cartesiano.

Os autovetores dessa matriz representam os eixos principais de continuidade na vizinhança, enquanto que a razão entre os autovalores expressam as razões anisotrópicas da continuidade. Logo, a razão entre o menor autovalor pelo maior autovalor expressa a razão anisotrópica entre o eixo menor e o eixo maior, e assim por diante. Quanto mais próximos os autovalores, maior a incerteza nas direções locais, refletindo assim numa anisotropia mais fraca localmente.

O eixo maior é expresso pelo autovetor associado ao menor autovalor e a lógica segue para os outros eixos. Considerando autovetores unitários, os ângulos para definição do elipsoide de anisotropia local (segundo convenções GSLIB/SGeMS - NEUFELD E DEUTSCH, 2004) são definido como sendo:

$$\begin{aligned}
 \text{Ang } 1(\textit{strike}) &= \arctan \left(\frac{eigv_{MIN}[x]}{eigv_{MIN}[y]} \right) \\
 \text{Ang } 2(\textit{dip}) &= \arcsen \left(\frac{eigv_{MIN}[z]}{\sqrt{eigv_{MIN}[x]^2 + eigv_{MIN}[y]^2}} \right), \\
 \text{Ang } 3(\textit{rake}) &= \arcsen \left(\frac{eigv_{MED}[z]}{\cos(\arcsen(eigv_{MIN}[z]))} \right)
 \end{aligned} \tag{13}$$

sendo $eigv_{MIN}$, $eigv_{MED}$ e $eigv_{MAX}$ os autovetores correspondentes respectivamente aos autovalores de valor mínimo, intermediário e máximo. Enquanto que $[x, y$ e $z]$ são as três componentes de cada autovetor.

É necessário destacar que os resultados de anisotropia são obtidos de imagens e não por variografia, de modo que eles são apenas aproximações do efeito real sobre a continuidade dos dados. Uma abordagem para diminuir as suposições sobre a imagem é utilizá-las apenas para definir os eixos principais e então realizar a variografia local sobre eles, tal como feito por Stroet e Snepvangers (2005).

Sumarizando, como resultado final o método de gradientes fornece de uma maneira prática as direções de todos os eixos principais, além de informar também as razões anisotrópicas entre eles. No entanto, deve-se ter cautela com os resultados desse método, uma vez que as anisotropias locais identificadas são bastante sensíveis à imagem inicial utilizada e às dimensões da vizinhança para suavização dos gradientes.

2.3.3. Variografia local

A maneira mais rigorosa e correta de se identificar a anisotropia é por meio de uma variografia local em diversas direções, de modo a representar adequadamente a continuidade e anisotropia localmente.

Há duas abordagens principais para se realizar variografia local: por meio de janelas móveis (HAAS, 1990) ou por meio de ponderadores locais (MACHUCA-MORY, 2010; FOUEDJIO ET AL., 2016). Inicialmente, são selecionados alguns locais representativos e as variografias são realizadas nesses pontos.

No primeiro caso, em cada local é realizada uma variografia tradicional apenas com os dados contidos nas janelas móveis. A vantagem desse procedimento é sua simplicidade. No entanto, ele reduz o número de amostras de cada variografia, podendo afetar a qualidade dos modelos variográficos.

Outra possibilidade é utilizando ponderadores locais. A ideia é usar maiores pesos para as amostras mais próximas ao se realizar a variografia experimental. Desse modo, todas as

amostras podem ser utilizadas para os cálculos, mas são necessários definir ponderadores adequados para bons resultados.

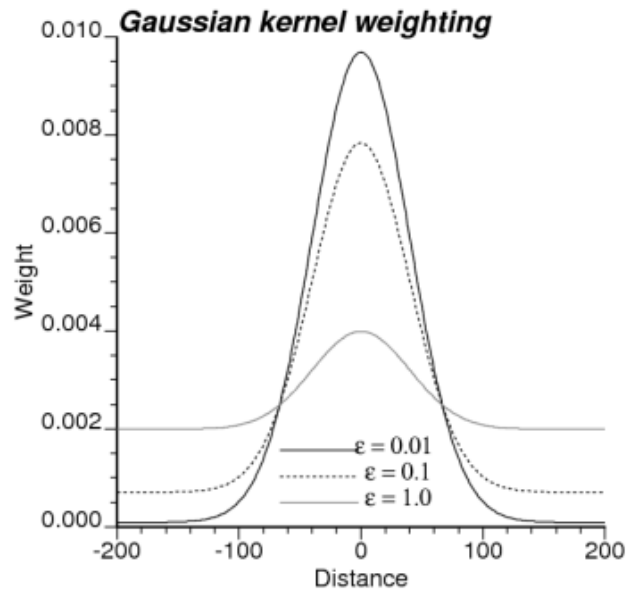
Os ponderadores da equação podem ser obtidos, por exemplo, por meio do método de inverso da distância, mas a forma recomendada de representar esses ponderadores é por meio de funções kernel. O termo “kernel” possui diversos significados em diferentes áreas de estudos. Na matemática, ele é geralmente utilizado para denotar uma função que expressa similaridades entre objetos, usualmente empregadas para ponderar somas ou integrais. Há diversos tipos de funções kernel e de maneira geral essas funções são positivas, simétricas, de média 0 e integral igual a 1. Um dos kernels mais utilizados é o gaussiano, cujos ponderadores $\omega_{GK}(u_i; o)$ são expressos por:

$$\omega_{GK}(u_i; o) = \frac{\varepsilon + \exp \left\{ - \frac{d(u_i; o)^2}{2s^2} \right\}}{n\varepsilon + \sum_{i=1}^n \exp \left\{ - \frac{d(u_i; o)^2}{2s^2} \right\}} \quad i = 1, \dots, n, \quad (14)$$

onde o é o ponto de origem, u_i se refere à amostra i do conjunto amostral $[1, \dots, n]$, $d(u_i; o)$ é a distância entre os dois pontos, ε é uma constante que controla a suavização do kernel e s é o valor de banda do kernel (*kernel bandwidth*). Esse ponderador é análogo ao suavizador kernel Nadaraya-Watson (WAND E JONES, 1994).

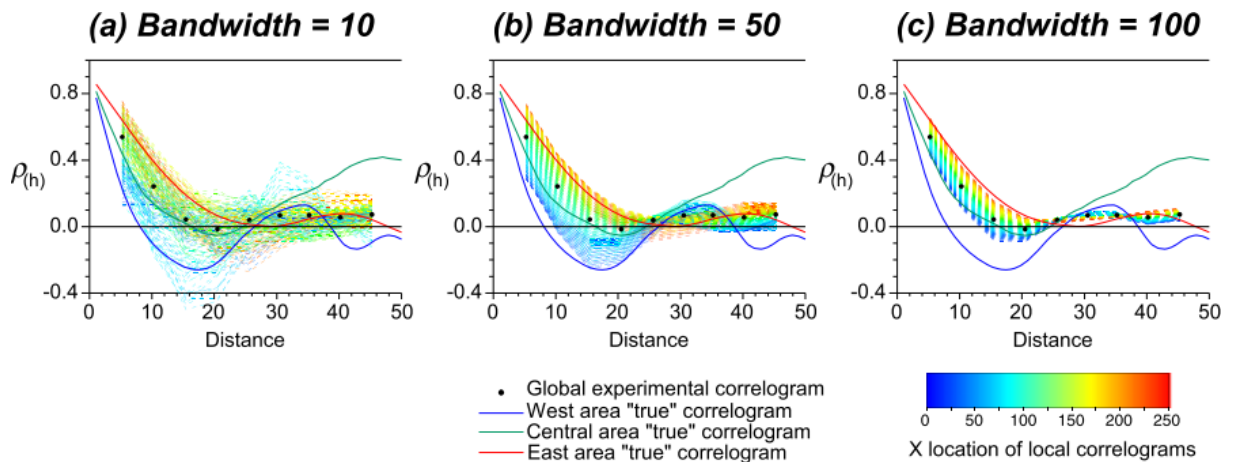
Como observado na equação (14), é necessário definir dois parâmetros para utilizar o kernel: o parâmetro ε e o valor de banda s . O primeiro parâmetro define a suavização do kernel, enquanto que a banda do kernel define o tamanho da vizinhança com maior influência nos ponderadores. Quanto menor esse parâmetro, mais detalhe e incerteza é incorporado ao processo, e vice-versa (Figura 16). De modo geral, esse parâmetro é arbitrário pois depende do número de dados e da área de influência da anisotropia local. Mas pode ser otimizado por métodos de validação cruzada (FOUEDJIO ET AL., 2016). Machuca-Mory (2010) apresenta diversas análises de sensibilidade desses parâmetros. Exemplos da sensibilidade dos resultados a esses parâmetros estão apresentados na Figura 16 e na Figura 17, mostrando a importância de uma avaliação criteriosa na seleção desses parâmetros.

Figura 16 – Influência do parâmetro de *background* ε na suavização do kernel gaussiano.



Fonte: Machuca-Mory (2010)

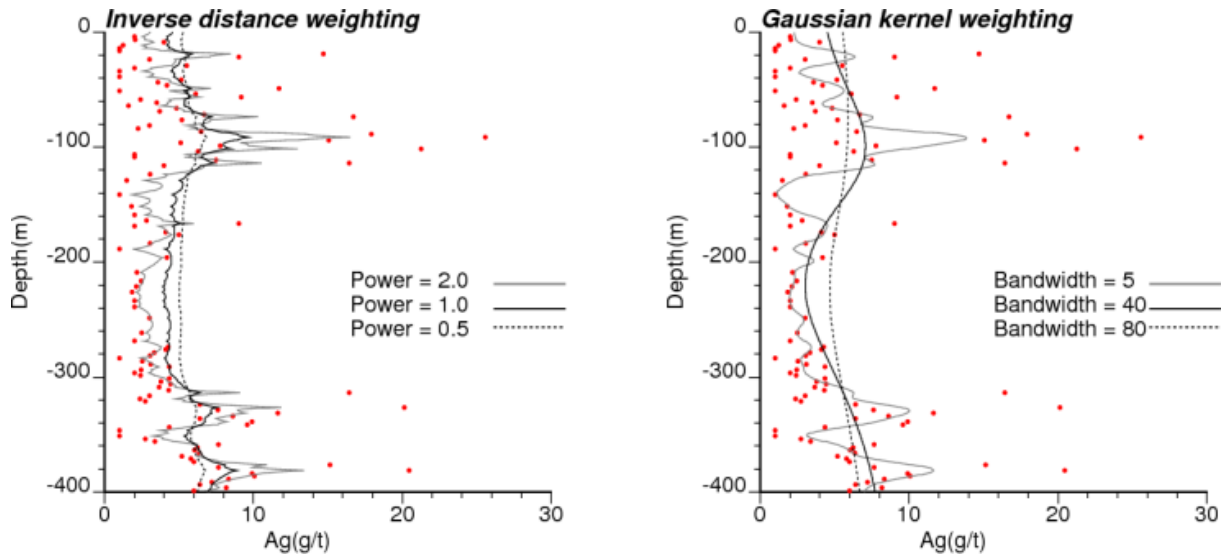
Figura 17 – Correlogramas estimados utilizando diferentes valores de banda do kernel, mostrando a diferença em relação aos modelos de referência.



Fonte: Machuca-Mory e Deutsch (2013)

O kernel gaussiano costuma ser utilizado para variografias locais (MACHUCA-MORY, 2010; FOUEDJIO *ET AL.*, 2016) pois variam mais suavemente com a distância, condição necessária ao se assumir estacionariedades locais. A Figura 18 ilustra esse comportamento diferenciado: enquanto o inverso da distância se mostra mais sensível aos valores extremos, o kernel gaussiano apresenta uma tendência final muito mais suave.

Figura 18 – Modelo de tendência de teores de prata (pontos vermelhos) em um furo de sondagem utilizando inverso da distância e kernel gaussiano.



Fonte: Machuca-Mory (2010)

Para realizar a variografia local, deve-se levar em consideração o peso de duas amostras nos cálculos: $\omega(u_i; o)$ e $\omega(u_i+h; o)$, logo é necessário integrar os pesos entre as amostras. Machuca-Mory e Deutsch (2013) recomendam que isso seja feito conforme a seguinte equação, de modo a equilibrar os pesos das duas amostras:

$$\omega(u_i, u_i + h; o) = \sqrt{\omega(u_i; o) \cdot \omega(u_i + h; o)}, \quad (15)$$

Assim, é possível realizar a variografia experimental, seja por semivariogramas, covariâncias ou correlogramas. Machuca-Mory (2010) recomenda o uso de correlogramas por serem mais robustos e por poderem incorporar as médias e variâncias locais no cálculo. Utilizando ponderadores locais, o cálculo do semivariograma $\gamma(h; o)$ é adaptado segundo:

$$\gamma(h; o) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N(h)} \omega(u_i, u_i + h; o) \cdot [z(u_i) - z(u_i + h)]^2, \quad (16)$$

onde $z(u_i)$ é o valor da amostra u_i e $z(u_i+h)$ é o valor da amostra separada a uma distância h e $N(h)$ é o número de pares de amostras separadas pela distância h . Já a fórmula da covariância $C(h; o)$ passa a ser:

$$\begin{aligned}
C(h; o) &= \sum_{i=1}^{N(h)} \omega(u_i, u_i + h; o) \cdot [z(u_i) - m_{-h}(o)] \cdot [z(u_i + h) - m_{+h}(o)], \\
m_{-h}(o) &= \sum_{i=1}^{N(h)} \omega(u_i, u_i + h; o) \cdot z(u_i), \\
m_{+h}(o) &= \sum_{i=1}^{N(h)} \omega(u_i, u_i + h; o) \cdot z(u_i + h),
\end{aligned} \tag{17}$$

na qual $m_{-h}(o)$ e $m_{+h}(o)$ se referem respectivamente às médias das amostras na origem e separadas a uma distância h . Por fim, o correlograma $\rho(h; o)$ com ponderadores locais é dado por:

$$\begin{aligned}
\rho(h; o) &= \frac{C(h; o)}{\sqrt{\sigma_{-h}^2(o) \cdot \sigma_{+h}^2(o)}}, \\
\sigma_{-h}^2(o) &= \sum_{i=1}^{N(h)} \omega(u_i, u_i + h; o) \cdot [z(u_i) - m_{-h}(o)]^2, \\
\sigma_{+h}^2(o) &= \sum_{i=1}^{N(h)} \omega(u_i, u_i + h; o) \cdot [z(u_i + h) - m_{+h}(o)]^2,
\end{aligned} \tag{18}$$

na qual σ_{-h}^2 e σ_{+h}^2 são respectivamente as variâncias das amostras na origem e separadas a uma distância h .

Realizadas as variografias experimentais (seja por janelas móveis ou ponderadores locais), é necessário realizar um número significativo de modelagens. Por isso, normalmente são utilizados métodos (semi-) automáticos de ajustes para auxiliar no processo. A maneira mais comum de se fazer isso é de forma paramétrica, ajustando modelos definidos *a priori* (esférico, exponencial e outros) aos dados experimentais, de modo que seja minimizado o erro no ajuste. Alguns trabalhos que abordam esses tipos de ajustes são os de Cressie (1985), Pardo-Igúzquiza(1999), Larrondo *et al.* (2003), Emery (2010) e Desassis e Renard (2013).

Com os parâmetros conhecidos nos pontos modelados (*i.e.* ângulos de anisotropia e razões anisotrópicas), é necessário extrapolá-los para todo o modelo. Machuca e Mory (2010) e Fouedjio *et al.* (2016) fazem isso utilizando os próprios ponderadores do kernel gaussiano e mesmo valor de banda kernel.

Em suma, a variografia local é o método mais completo para extrair anisotropias locais. Em contrapartida, é o método mais trabalhoso. Ele pode ser utilizado em conjunto com o método de gradientes, que seleciona as direções principais de anisotropia, reduzindo a

variografia local para apenas três direções. Outro ponto de atenção é que, caso se utilize de kernel gaussiano, seus parâmetros devem ser definidos adequadamente para que se obtenha resultados adequados.

2.4. INTEGRAÇÃO DE ANISOTROPIAS LOCAIS NA FORMA DE PROCESSOS NÃO-ESTACIONÁRIOS

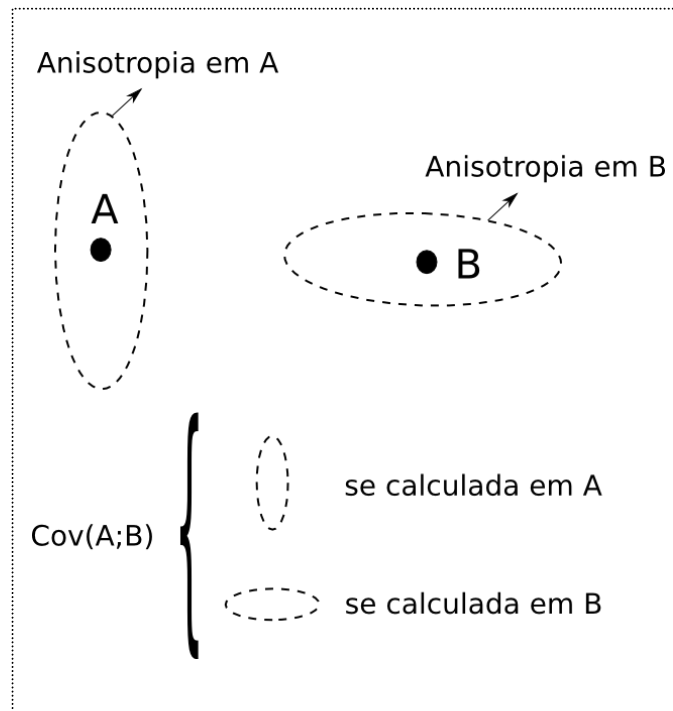
Essa seção aborda algumas formas de se integrar anisotropias locais no cálculo de covariâncias. A separação dos quatro temas aqui apresentados é baseada nas classificações apresentadas por Schabenberger e Gotway (2005) e Sampson (2010).

2.4.1. Janelas móveis

A maneira mais simples de incorporar anisotropias locais em modelos não-estacionários é assumir que cada ponto apresenta de forma independente sua anisotropia e modelo de covariância. Desse modo, a covariância entre quaisquer dois pontos irá depender apenas dos parâmetros do ponto central.

Um dos primeiros trabalhos a apresentar esse tipo de abordagem foi o de Haas (1990). Por ser bastante direto, rápido e facilmente adaptável, é o método mais presente em softwares (*e.g.* NEWTON, 2007; ISAAKS, 2017) e por isso o mais utilizado. Por outro lado, as covariâncias calculadas desse modo respeitam apenas os parâmetros do ponto a ser interpolado, não levando em consideração os parâmetros locais dos outros pontos (Figura 19).

Figura 19 – Ilustração esquemática da covariância construída por janelas móveis. As covariâncias locais são facilmente construídas nesse processo, no entanto, uma mesma covariância $Cov(A;B)$ apresenta valores diferentes de acordo com o ponto de referência.



Do ponto de vista operacional, os modelos de covariância são construídos localmente com base nas direções e magnitudes locais. Quando a magnitude da anisotropia está expressa em razões ao invés de alcances, é necessário definir preliminarmente o tipo de modelo e alcances de referências para poder construir as covariâncias localmente.

2.4.2. Ponderação de processos estacionários

Fuentes (2001) apresenta uma metodologia para integrar diferentes modelos de covariâncias locais ao definir a covariância entre dois pontos. Para isso, a covariância local das k sub-regiões modeladas são ponderadas semelhantemente ao apresentado no Capítulo 2.3.3, utilizando inverso da distância ou kernel gaussiano, por exemplo. Desse modo, a covariância não-estacionária C^{NS} entre dois pontos u_1 e u_2 é dada por:

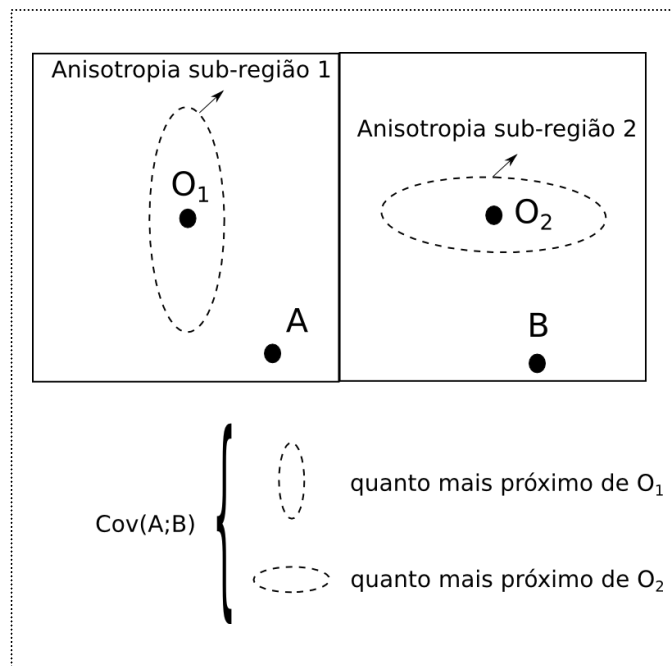
$$C^{NS}(u_1; u_2) = \sum_{i=0}^k \omega(u_1; o_i) \cdot \omega(u_2; o_i) \cdot C_i(u_1; u_2) \quad (19)$$

na qual, k é o número de sub-regiões modeladas, cada qual com seu modelo isotrópico C_i , e ω é o ponderador dada a distância entre a amostra u e o centroide o_i da sub-região i .

De acordo com Fuentes (2001), esse processo assume estacionariedade local e gera matrizes de covariâncias positivas definidas desde que os modelos de covariância variem suavemente no espaço.

Nos trabalhos iniciais, eram utilizados apenas modelos isotrópicos, sendo assim possível variar apenas os alcances dos modelos de continuidade. Fuentes *et al.* (2005) utilizam o método da mesma maneira, mas permitem que os modelos de algumas sub-regiões incorporem anisotropias próprias. Apesar de não estarem disponíveis tantos detalhes de como essas anisotropias são consideradas, provavelmente são utilizadas as distâncias anisotrópicas tanto em ω como em C , de acordo com os parâmetros da respectiva sub-região. Uma ilustração esquemática desse processo está representada na Figura 20.

Figura 20 – Ilustração esquemática da covariância construída por ponderadores de processos estacionários. Por meio dessa abordagem, a covariância se assemelha mais a da sub-região cujo centroide (O_1 ou O_2) esteja mais próximo dos pontos analisados.



2.4.3. Convolução de kernels

Esse método foi desenvolvido inicialmente por Higdon (1998) como uma convolução de kernels com ruído branco gaussiano. Para isso, o método se baseia em estacionariedades

locais, de modo que os parâmetros de anisotropia devem variar suavemente para que as covariâncias sejam válidas. Paciorek e Schervish (2006) estenderam essa ideia para permitir o uso de modelos de covariância do tipo Matérn (como exponenciais e gaussiano); enquanto que, Stein (2005) o desenvolveu de modo a permitir incorporar anisotropias locais. Assim, a covariância não-estacionária C^{NS} entre dois pontos u_1 e u_2 pode ser descrita como sendo:

$$C^{NS}(u_1; u_2) = \left| \Sigma_{u_1} \right|^{\frac{1}{4}} \cdot \left| \Sigma_{u_2} \right|^{\frac{1}{4}} \cdot \left| \frac{\Sigma_{u_1} + \Sigma_{u_2}}{2} \right|^{-\frac{1}{2}} \cdot C(\sqrt{Q}) \quad (20)$$

sendo $\Sigma_{u_i} = R_{u_i} \cdot \begin{bmatrix} r1_{u_i}^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & r2_{u_i}^{-2} & 0 \\ 0 & 0 & r3_{u_i}^{-2} \end{bmatrix} \cdot R_{u_i}^T$

na qual $|\Sigma_{u_1}|$ e $|\Sigma_{u_2}|$ são os determinantes das matrizes de transformação anisotrópica Σ , que são definidas a partir dos respectivos alcances $r1$, $r2$ e $r3$ de cada eixo anisotrópico e pela matriz de rotação anisotrópica R . C é um modelo de covariância isotrópico do tipo Matérn – para modelos esféricos, Liang e Marcotte (2016) apresentam adaptações nas fórmulas. Q é definido por:

$$Q = \Delta \cdot \left(\frac{\Sigma_{u_1} + \Sigma_{u_2}}{2} \right)^{-1} \cdot \Delta^T \quad (21)$$

sendo $\Delta = \begin{bmatrix} |x_{u_1}| & |x_{u_2}| \\ |y_{u_1}| & |y_{u_2}| \\ |z_{u_1}| & |z_{u_2}| \end{bmatrix}$

na qual x , y e z são as coordenadas dos respectivos pontos u_1 e u_2 .

Para manter as convenções angulares, a matriz de rotação utilizada na convolução de kernels é diferente da apresentada na equação (1):

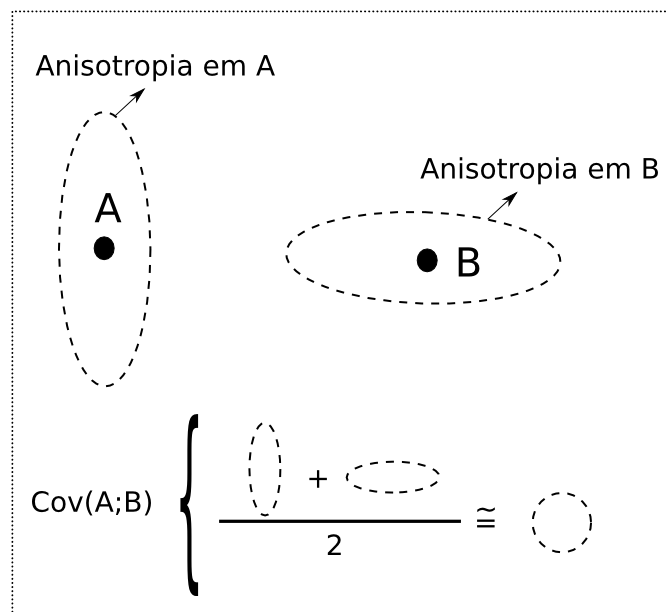
$$R = \begin{bmatrix} \cos\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \cos(\beta), & \sin\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \cos(-\varphi) + \cos\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin(\beta) \cdot \sin(-\varphi), & \sin\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin(-\varphi) - \cos\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin(\beta) \cdot \cos(-\varphi) \\ -\sin\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \cos(-\varphi), & \cos\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \cos(-\varphi) - \sin\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin(\beta) \cdot \sin(-\varphi), & \cos\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin(-\varphi) + \sin\left(\alpha - \frac{\pi}{2}\right) \cdot \sin(\beta) \cdot \cos(-\varphi) \\ \sin(\beta), & -\cos(\beta) \cdot \sin(-\varphi), & \cos(\beta) \cdot \cos(-\varphi) \end{bmatrix} \quad (22)$$

sendo α , β e φ os ângulos de rotação que definem a posição do elipsoide no espaço (conforme convenção GSLIB/SGeMS - NEUFELD E DEUTSCH, 2004).

Do ponto de vista prático, o grande diferencial dessa abordagem é que ela permite que as covariâncias entre dois pontos sejam calculadas levando em conta os parâmetros de anisotropia local dos dois pontos e que a matriz de covariância definida dessa maneira seja definida positivamente.

Em outras palavras, utiliza-se o mesmo modelo de covariância isotrópico em todos os locais, mas os ponderadores/kernels variam espacialmente e são os responsáveis por incorporar as anisotropias locais no processo (Figura 21).

Figura 21 – Ilustração esquemática da covariância construída por convolução de kernels. As covariâncias locais são deformadas de acordo com os parâmetros de anisotropia local. A distância anisotrópica entre dois pontos com diferentes anisotropias é calculada utilizando uma matriz de anisotropia média.



2.4.4. Deformação espacial

Na geoestatística clássica, são utilizadas distâncias Euclidianas para se calcular a covariância entre dois pontos. A distância Euclidiana é uma medida de dissimilaridade que considera que a distância d entre dois pontos a e b é dada por uma reta e é expressa pela equação a seguir, onde k é o número de dimensões espaciais.

$$d(a, b) = \sqrt{\sum_{p=1}^k (a_p - b_p)^2} \quad (23)$$

Ao se assumir o conhecimento das anisotropias locais, é possível considerar uma maior complexidade na distância entre os dados ao se usar outras métricas não-Euclidianas. Isso porque, diferentes direções implicam em diferentes distâncias de acordo com a região no espaço, o que faz com que o caminho mais “próximo” entre dois pontos possa ser curvilíneo e irregular.

A Figura 22 ilustra como diferenças de continuidade podem ser bem diferentes ao se considerar distâncias não-Euclidianas. Imagine que um poluente tenha sido despejado em Fonte Boa/AM e seja encontrado em Porto Braga/AM. É coerente afirmar que a linha amarela ao longo do Rio Solimões representa muito melhor a continuidade do poluente do que a linha vermelha.

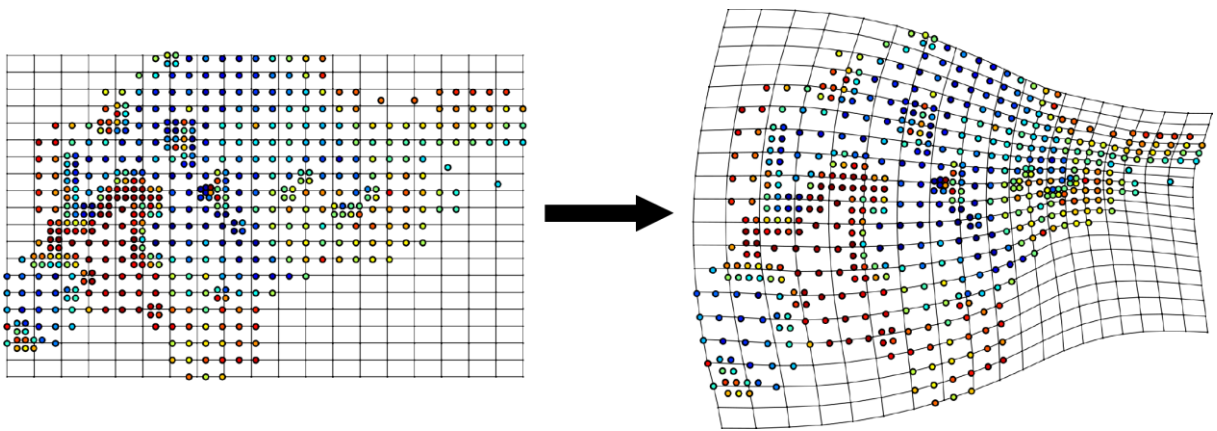
Figura 22 – Imagem de satélite do Rio Solimões entre Fonte Boa/AM e Porto Braga/AM.



Fonte: Google Earth

A ideia do método de deformação espacial é rearranjar os pontos no espaço de tal maneira que toda anisotropia seja eliminada. Essa metodologia é apresentada inicialmente por Sampson e Guttorp (1992). O procedimento apresentado pelos autores consiste em deformar o espaço Euclidiano utilizando *multidimensional scaling* (MDS), baseando-se em uma medida de dissimilaridade que já leve em consideração as anisotropias locais. Esse processo está exemplificado de forma gráfica na Figura 23.

Figura 23 – Deformação espacial do modelo, de modo a arranjar as informações isotropicamente.



Fonte: adaptado de Fouedjio *et al.* (2015)

O MDS é uma técnica que busca posicionar amostras em um espaço k -dimensional, de modo a respeitar (na medida do possível) as informações fornecidas em uma matriz de dissimilaridades. No MDS métrico clássico, o procedimento para realizar esse processo é o seguinte:

- i) Centraliza-se as medidas de dissimilaridades de modo que a origem do mapa seja igual a 0. O resultado é a matriz CM , expressa por:

$$CM = -\frac{1}{2} \cdot J \cdot D_2 \cdot J, \quad (24)$$

$$J(i, j) = \begin{cases} se(i = j), & J(i, j) = 1 - \frac{1}{n} \\ se(i \neq j), & J(i, j) = -\frac{1}{n} \end{cases}$$

$$D_2(i, j) = d'(u_i, u_j)^2$$

sendo J e D_2 duas matrizes (n,n) simétricas, da qual n é o número de pontos e $d'(u_i, u_j)$ é a medida de dissimilaridade entre os pontos u_i e u_j .

ii) Fatoriza-se a matriz anteriormente centralizada em seus autovalores e autovetores.

iii) Seleciona-se os maiores autovalores e seus respectivos autovetores. Para representação 2D, selecionam-se os dois maiores; para 3D, os três maiores e assim por diante.

iv) As coordenadas ao fim do processo são expressas na matriz L , que é a multiplicação da matriz (n, k) dos autovetores por uma matriz diagonal (k, k) composta pela raiz quadrada dos respectivos autovalores, que resulta em:

$$L = \begin{bmatrix} eigv_1[1] & \cdots & eigv_k[1] \\ \vdots & & \vdots \\ eigv_1[n] & \cdots & eigv_k[n] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{\lambda_1} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{\lambda_k} \end{bmatrix} \quad (25)$$

na qual k é o número de autovetores selecionados (igual ao número de dimensões escolhidas para as coordenadas de saída), sendo $eigv_1$ o autovetor com maior autovalor λ_1 e $eigv_k$ o autovetor com menor autovalor λ_k positivo.

Há diversas variações desse método, os quais buscam diferentes maneiras de minimizar o *stress* (medida de diferença entre as dissimilaridades desejadas e as obtidas ao final do processo). Esse MDS é chamado de métrico porque é válido apenas se as medidas de dissimilaridades são distâncias euclidianas ou seguem as seguintes condições:

- Dois pontos não podem apresentar distância menor que zero e só podem ser igual a zero quando os dois pontos são estritamente iguais;
- A distância entre dois pontos é igual nos dois sentidos;
- Considerando três pontos quaisquer formando um triângulo, a soma dos comprimentos de duas arestas desse triângulo é sempre maior ou igual ao comprimento da aresta remanescente.

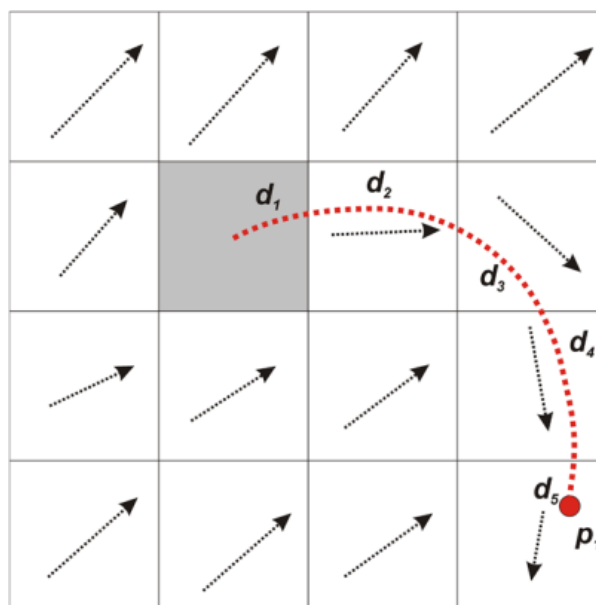
Quando as medidas de dissimilaridades não atendem essas condições, utiliza-se o MDS não-métrico. Nesse caso, o procedimento geral é aplicar um algoritmo iterativo de otimização, buscando posicionar os pontos no espaço de modo a minimizar o *stress* (mais detalhes em Borg e Groenen, 2005).

Do ponto de vista prático, a grande maioria dos trabalhos derivados de Sampson e Guttorp (1992) remetem à área ambiental e trabalham com bancos de dados 2D. Para modelos geológicos 3D com uma maior base de dados, poucos são os trabalhos que apresentam alternativas operacionais. Dois deles são os de Boisvert (2010) e Fouedjio (2016a).

Os trabalhos de Fouedjio (2016a) e Fouedjio *et al.* (2015) utilizam medidas de dissimilaridade baseadas em uma combinação entre a distância euclidiana e valores covariância não-estacionárias obtidas pelos métodos de convolução de kernels. Com essas medidas de dissimilaridade calculadas, o autor aplica o MDS não-métrico e obtém assim uma nova disposição espacial dos pontos, totalmente isotrópica.

Boisvert *et al.* (2009) e Boisvert (2010) buscam identificar e quantificar o menor caminho e distância entre os pontos, ao considerar todos os parâmetros de anisotropia local (direções e magnitude) estabelecidos pelos métodos do Capítulo 2.3. O procedimento é feito em duas etapas. Primeiramente, define-se as distâncias anisotrópicas locais conforme as equações (1), (2) e (4) e as conexões entre vizinhos. Para em seguida, poder quantificar a menor distância entre dois pontos quaisquer no espaço.

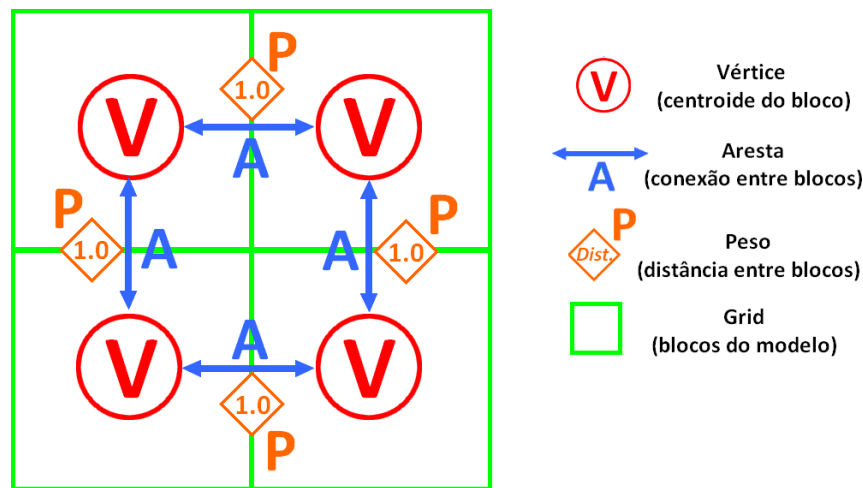
Figura 24 - Exemplo de menor caminho entre a origem (em cinza) e o ponto p_1 considerando anisotropias locais.



Fonte: Boisvert *et al.* (2009)

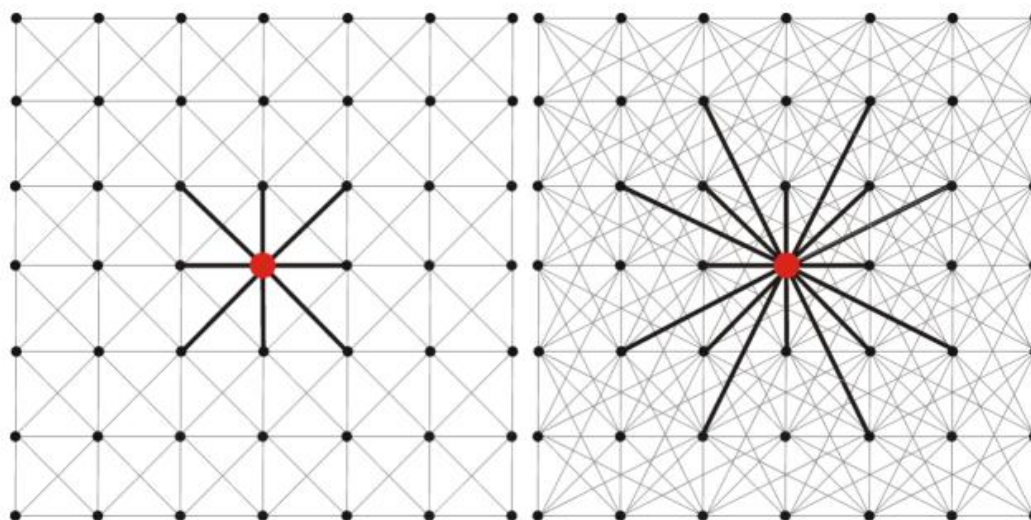
Esse processo pode ser feito utilizando grafos não-direcionados. Na matemática, grafos são estruturas de dados que relacionam pares de objetos. Ele é definido por um conjunto de vértices, arestas e pesos. No caso de um *grid* de blocos, a sua representação em forma de grafo (Figura 25) é determinada pelo centroide dos blocos (vértices), pelo número de conexões laterais de cada bloco (arestas) e pela distância entre os blocos (pesos associados a cada aresta). Ele é chamado não-direcional nesse caso pois a anisotropia local é assumida igual ao longo de uma mesma direção, independente do sentido.

Figura 25 – Ilustração das componentes do grafo em um *grid* de blocos.



O número de conexões (arestas) varia de acordo com a dimensão (2D ou 3D) e de acordo com o *offset* entre blocos (*i.e.* conectar dois blocos que não estão encostados diretamente entre si – Figura 26). Os pesos associados a cada aresta são definidos pelas distâncias anisotrópicas, que podem ser calculados por combinações das Equações (1), (2) e (4), de acordo com os parâmetros anisotrópicos do vértice mais próximo.

Figura 26 – Exemplo de diferentes *offsets* para a definição das arestas. No primeiro caso, o vértice vermelho se liga apenas aos 8 vértices mais próximos. No segundo caso, com um *offset* maior, ele se liga a um total de 16 vértices.



Fonte: Boisvert (2010)

Com o grafo construído, são necessárias as distâncias entre os pontos para construir a matriz de dissimilaridade. Na teoria de grafos, há diversos algoritmos que realizam essa tarefa, cada qual mais eficiente dependendo do objetivo. Por exemplo, o algoritmo A* (HART *ET AL.*, 1968) é mais eficiente quando se deseja saber a distância mais curta até uma única amostra. Já o algoritmo de Dijkstra (DIJKSTRA, 1959) é menos eficiente na tarefa de encontrar a distância até um único ponto, mas mais eficiente ao se determinar a distância a diversos pontos da vizinhança. Devido a isso, o Dijkstra é geralmente o preferido nas aplicações geoestatísticas (BOISVERT, 2010; PEREDO *ET AL.* 2015b).

O algoritmo de Dijkstra funciona da seguinte maneira. Parte-se do objetivo de saber a menor distância de um vértice de origem a todos os outros vértices do grafo. O processo está simplificado no pseudo-código da Figura 27. Partindo-se da origem, todas as arestas são verificadas para identificar qual o caminho mais curto a um próximo vértice. Identificado esse caminho, é estabelecida a menor distância a esse vértice no fim do caminho. São então verificadas todas as arestas conectadas a esse segundo vértice, repetindo o processo anterior, até que todos os vértices sejam checados.

Figura 27 – Pseudo-código do algoritmo de Dijkstra para encontrar a menor distância entre dois vértices.

```

Dijkstra(inputs: Grafo, origem) :

  Cria um conjunto de vértices -> Q
  Cria um vetor para armazenar as distâncias -> dist[vértice]

  LOOP1 Para cada vértice v do Grafo:
    dist[v] = INFINITO
    Adiciona o vértice v ao conjunto Q
  FIM DO LOOP1

  dist[origem] = 0

  LOOP2 Enquanto houver vértices no conjunto Q:

    u = vértice do conjunto Q mais próximo à origem (menor valor de dist[u])

    LOOP3 Para cada vértice v contido em Q que esteja conectado ao vértice u:
      Distância_provisória = dist[u] + Peso_da_aresta(u, v)
      SE Distância_provisória < dist[v]: dist[v] = Distância_provisória
      // Caso verdadeiro, um novo caminho mais curto foi encontrado
    FIM DO LOOP3

    Remove o vértice u do conjunto Q

  FIM DO LOOP2

  // Quando todos os vértices forem checados e eliminados de Q, o vetor dist[vértice] irá
  // conter as menores distâncias entre o vértice de origem e todos os outros vértices do
  // grafo.

```

Uma vez que se tem as menores distâncias entre os pontos, é possível montar a matriz de dissimilaridade para realizar o MDS. Como a distância dos grafos de um modelo geológico normalmente atendem as condições para um MDS métrico, ele é utilizado por ser mais rápido.

Tanto Boisvert (2010) como Fouedjio (2016a) utilizam de adaptações no processo de MDS, uma vez que é muitas vezes inviável operar uma matriz de dissimilaridade abrangendo todos os pontos amostrais e todos os pontos do *grid* do modelo geológico. Para contornar essa questão, utiliza-se de pontos de ancoragem para se realizar tanto o MDS métrico como o não-métrico. Os pontos de ancoragem são selecionados de forma a representar globalmente os dados, o MDS é aplicado apenas para esses pontos de ancoragem e os pontos restantes são alocados por trilateração (SILVA E TENENBAUM, 2004). Em termos matemáticos, as coordenadas u' dos pontos restantes são definidos por:

$$u'_a = -\frac{1}{2} \cdot \begin{bmatrix} \frac{eigv_1[1]}{\sqrt{\lambda_1}} & \dots & \frac{eigv_1[n]}{\sqrt{\lambda_1}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{eigv_k[1]}{\sqrt{\lambda_k}} & \dots & \frac{eigv_k[n]}{\sqrt{\lambda_k}} \end{bmatrix} \cdot \left\{ \begin{bmatrix} d'(u_a, u_1)^2 \\ \vdots \\ d'(u_a, u_n)^2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{\sum_{p=1}^n d'(u_1, u_p)^2}{n} \\ \vdots \\ \frac{\sum_{p=1}^n d'(u_n, u_p)^2}{n} \end{bmatrix} \right\} \quad (26)$$

sendo $a = [1, \dots, N]$, no qual N é o número de pontos que precisam ser alocados; $eigv$ e λ são, respectivamente, os k autovetores e autovalores obtidos anteriormente; d' é a distância euclidiana entre dois pontos; e n é o total de pontos de ancoragem.

Para uma discussão mais detalhada sobre o MDS e suas variedades, recomenda-se o livro de Borg e Groenen (2005).

2.5. ESTIMATIVAS CONSIDERANDO ANISOTROPIAS LOCAIS

2.5.1. Inverso da distância

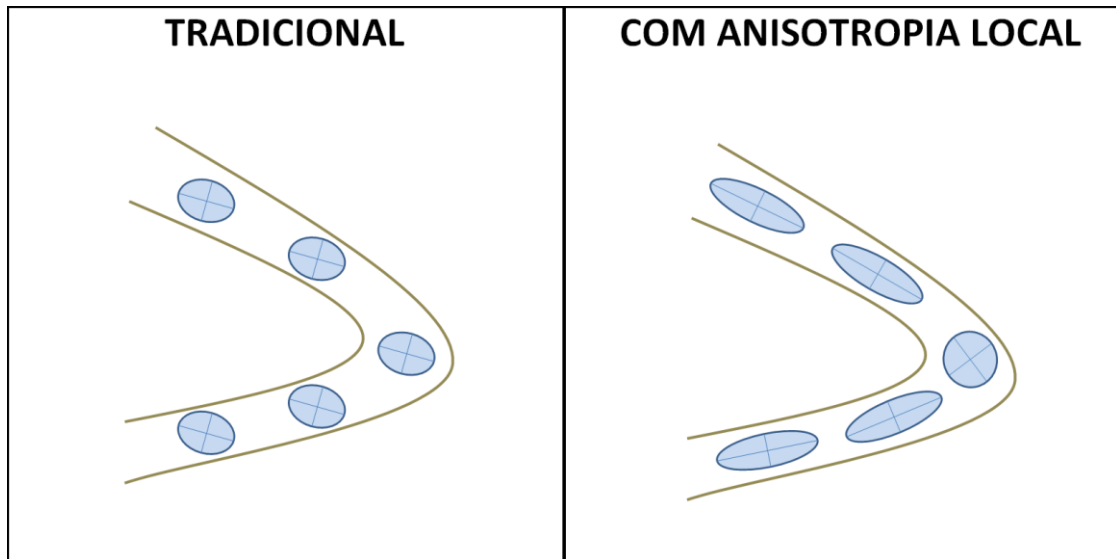
O inverso da distância é um método clássico e simples de interpolação espacial. Algumas adaptações do método para incorporar anisotropia local são apresentadas a seguir.

A primeira alternativa é utilizar as distâncias anisotrópicas obtidas a partir dos parâmetros locais. Como as distâncias utilizadas no processo são sempre do ponto a ser estimado até as amostras vizinhas, o mais simples é utilizar os parâmetros locais do ponto a ser estimado para calcular as distâncias anisotrópicas (Figura 28). Semelhantemente, esses parâmetros podem ser utilizados para definir elipsoides de busca locais. Assim, o estimador de inverso da distância (Z_{ID}^*) é o mesmo, sendo alterado apenas o modo como as medidas de distância são calculadas:

$$Z_{ID}^*(u_o) = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{Z(u_i)}{d(u_i, u_o)^b}}{\sum_{i=1}^N \frac{1}{d(u_i, u_o)^b}} \quad (27)$$

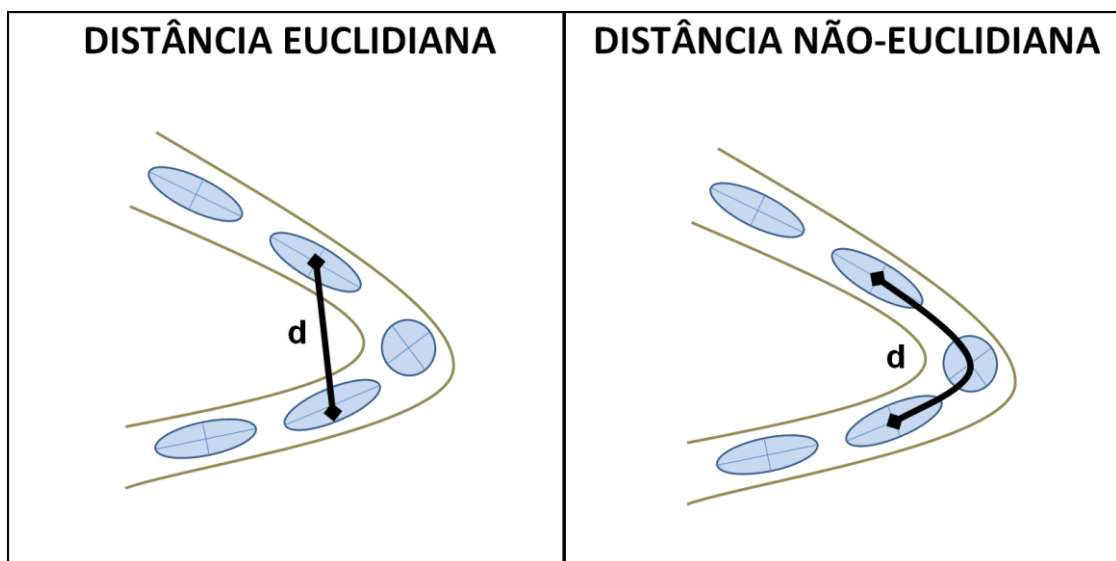
sendo N o número de amostras da vizinhança, u_o o ponto em que se deseja estimar, $Z(u_i)$ o valor da amostra u_i , $d(u_i, u_o)$ a distância entre os dois pontos e b o expoente utilizado no método para definir a maior ou menor influências das curtas/longas distâncias.

Figura 28 – Ilustração mostrando a diferença entre o método de inverso da distância tradicional e o adaptado para utilizar anisotropias locais.



Outra abordagem é utilizar distâncias não-Euclidianas obtidas por meio dos métodos de deformação espacial apresentados anteriormente no Capítulo 2.4.4. Para aplicar o inverso da distância, basta obter a matriz de distâncias/dissimilaridade, não sendo estritamente necessário realizar o MDS (Figura 29). O estimador também não é alterado nesse caso, sendo o mesmo da equação (27).

Figura 29 – Ilustração mostrando a diferença entre o método de inverso da distância com métrica Euclidiana e não-Euclidiana.



2.5.2. Krigagem

A krigagem é o estimador mais utilizado na geoestatística. Ele pode ser adaptado de diferentes maneiras para incorporar anisotropias locais. Em todos os casos, os estimadores da krigagem simples e ordinária se mantêm os mesmos, assim como a maneira de se calcular os pesos. As diferenças consistem apenas na maneira de como são determinadas as covariâncias não-estacionárias que são utilizadas no cálculo dos pesos da krigagem e na variância da krigagem, conforme os procedimentos apresentados no Capítulo 2.4:

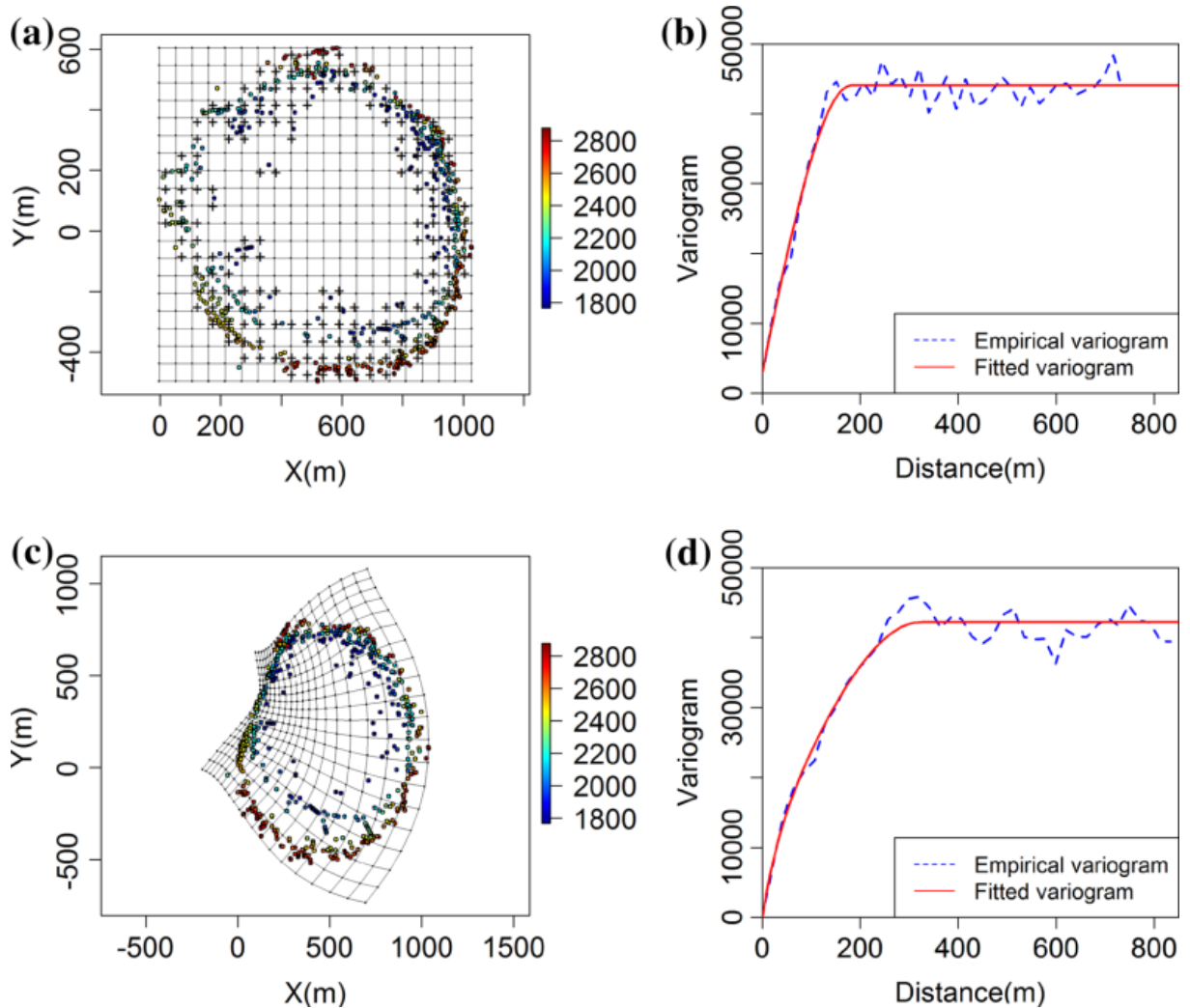
Janelas móveis: na estimativa de cada ponto, são utilizados os parâmetros anisotrópicos locais do ponto a ser estimado para definir o modelo $C(h)$ que é utilizado para definir as covariâncias válidas para o sistema de krigagem. Logo, as informações de anisotropia devem estar disponíveis em todos os nós do *grid* e a covariância depende apenas dos parâmetros do local a ser estimado.

Ponderação de processos estacionários: a covariância entre os pontos u_1 e u_2 é ponderada de acordo com as distâncias entre os pontos e os modelos $C(h)$ das sub-regiões adjacentes. Nesse caso, é possível variar os alcances e anisotropias dos modelos suavemente. É necessário apenas alguns modelos representativos de cada sub-região, mesmo porque muitas sub-regiões podem sobrecarregar o processo e não devem alterar significativamente os resultados.

Convolução de kernels: para esse caso, os parâmetros de anisotropia devem ser conhecidos em todos os locais, inclusive nas amostras $Z(u)$ utilizadas para estimativa. O alcance do modelo $C(h)$ é único para todos os locais, sendo variadas apenas as razões anisotrópicas de acordo com os pontos analisados. A covariância não-estacionária é dada pelas equações (20) e (21).

Deformação espacial: após o MDS, é necessário realizar uma nova variografia. Como as anisotropias locais já são levadas em consideração inicialmente, a variografia é simplificada a um modelo isotrópico (SAMPSON E GUTTTORP, 1992) e as distâncias entre amostras utilizadas no cálculo dos pontos experimentais consistem nas novas distâncias Euclidianas obtidas após o MDS. A Figura 30 mostra como dois semivariogramas podem diferir após a deformação espacial. A modelagem dos pontos experimentais é feita do mesmo modo. No caso de um MDS para mais de três dimensões, o modelo esférico pode se tornar instável e não retornar uma matriz de covariância positiva-definida (CURRIERO, 2006), sendo recomendado o uso do modelo exponencial para modelagem.

Figura 30 – Conjunto de dados e seus semivariogramas onidirecionais antes (a e b) e depois (c e d) da deformação espacial.



Fonte: Fouedjio (2016a)

2.6.SIMULAÇÕES GEOESTATÍSTICAS CONSIDERANDO ANISOTROPIAS LOCAIS

Simulações condicionais podem ser realizadas também de modo semelhante à maneira tradicional. Os métodos mais simples para isso são os sequenciais, como a Simulação Sequencial Gaussiana. Por ser baseada em grande parte na krigagem simples, as mudanças no método consistem apenas em utilizar a krigagem simples adaptada conforme apresentado no Capítulo 2.5.2. Em resumo, a simulação é feita pelos seguintes passos:

- i) Realizar a transformação gaussiana dos dados;
- ii) Selecionar aleatoriamente um ponto no *grid* a ser simulado;
- iii) Realizar a krigagem simples local (Capítulo 2.5.2) nesse ponto usando os dados originais e também os previamente simulados. Gerar uma distribuição de probabilidade local com o valor estimado e a variância da krigagem.
- iv) Selecionar aleatoriamente um valor da distribuição de probabilidade local. Esse é o valor simulado no local.
- v) Incluir o valor simulado na base de dados para as krigagens dos próximos pontos.
- vi) Repetir os passos (ii) – (v) até que todos os pontos sejam simulados.
- vii) Retro-transformar os dados para as unidades originais.

Para incorporar melhor a não-estacionariedade dos dados, Machuca-Mory (2010) recomenda o uso de transformação gaussianas locais com base em ponderadores locais. Para isso, as distribuições acumuladas são construídas em cada local utilizando os pesos fornecidos pelos kernels.

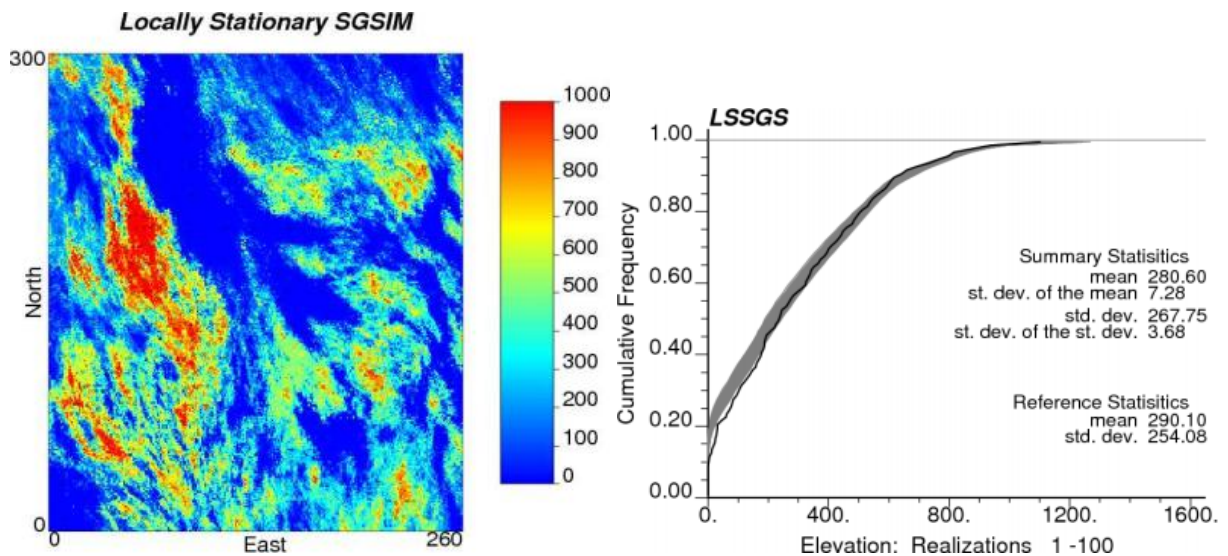
Essa distribuição é utilizada como referência para as transformações das amostras utilizadas localmente. A transformação gaussiana é aplicada tal como tradicionalmente, sendo a transformação *n-scores* (transformação quantil-quantil) e via polinômios de Hermite (CHILÈS E DELFINER, 1999) os métodos mais comuns.

Como é necessário armazenar os parâmetros de transformação para posterior retro-transformação, é necessário levar em conta algumas questões operacionais. No caso da transformação *n-score*, pode ser inviável armazenar as tabelas de transformações em cada local, uma vez que se recomenda utilizar ao menos 100-200 quantis (MACHUCA-MORY, 2010). Por isso, é mais recomendável utilizar a transformação por polinômios de Hermite nesses casos, que requer apenas os 20-40 polinômios utilizados em cada transformação.

Uma alternativa para evitar transformações locais é trabalhar com Simulação Sequencial Direta adaptada para utilizar anisotropias locais. Horta *et al.* (2010) utilizam essa abordagem, adaptando elipsoides de busca locais e covariâncias baseadas em janelas móveis.

Como a Simulação Sequencial Gaussiana é bastante sensível à estacionariedade do fenômeno espacial, ela pode apresentar problemas na reprodução da distribuição estatística e na continuidade global, uma vez que são utilizadas diferentes anisotropias locais. Mas isso não impede a geração de bons resultados, como em Machuca-Mory (2010).

Figura 31 – Exemplo de Simulação Sequencial Gaussiana com médias e anisotropias locais. À esquerda, mapa de uma realização simulada. À direita, comparação entre os histogramas das simulações (em cinza) e o dos dados originais (em preto).



Fonte: adaptado de Machuca-Mory (2010)

Por isso, os métodos mais tradicionais, como Simulação Sequencial e Simulação por Bandas Rotativas, são mais adequados para serem aplicados junto aos métodos de deformação espacial, uma vez que a deformação busca uma disposição estacionária dos dados em termos de anisotropia.

Para os outros casos, Fouedjio *et al.* (2016) recomendam a simulação com métodos alternativos, tal como o baseado em Amostragem de Gibbs apresentado por Lantuejoul e Desassis (2012).

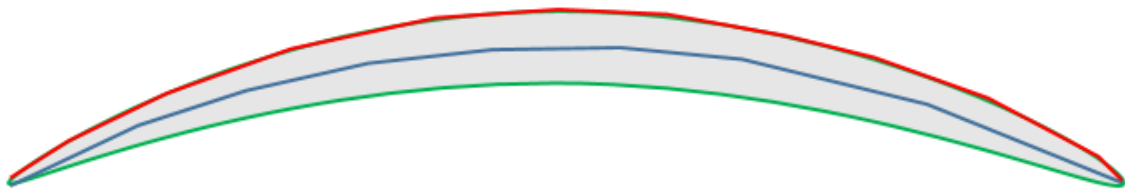
2.7.COORDENADAS GEOLÓGICAS

Uma maneira de simplificar anisotropias locais na geoestatística é utilizando coordenadas geológicas. Essa metodologia também é conhecida como aplainamento (*unfolding*) ou coordenadas estratigráficas e buscam aplainar sólidos geológicos ondulados. Alguns trabalhos que abordam o tema na geoestatística são Deutsch (2005), Koppe *et al.* (2006), Poudret *et al.* (2012), Rubio *et al.* (2015) e Garrido *et al.* (2016).

A técnica consiste em inicialmente definir uma superfície de referência, a qual é atribuída coordenada vertical transformada $Z' = 0$. Com base nela, as coordenadas do sólido geológico são cartesianamente reposicionadas.

A superfície de referência é definida por meio de interpretação de seções (manual ou semi-automática) ou interpolação de pontos. Essa superfície deve ter uma significância geológica (*e.g.* superfície de deposição ao invés de superfície erosiva), preferencialmente representando a maior continuidade espacial. Superfícies superiores, inferiores ou centrais são geralmente selecionadas para esse fim (Figura 32).

Figura 32 – Linhas representando três possíveis superfícies de referência em uma seção ilustrativa. Superior em vermelha, central em azul e inferior em verde.



Deutsch (2005) rotaciona o sólido de modo que essa superfície esteja aproximadamente paralela ao plano cartesiano XY . Assim, ao definir a coordenada transformada $Z' = 0$ para a superfície, as coordenadas X' e Y' transformadas da superfície de referência são aproximadamente iguais às originais X e Y em casos pouco dobrados.

O aplainamento do sólido fechado é então realizado de forma fragmentada. As triangulações são projetadas na superfície de referência e a coordenada vertical é dada pela distância entre a triangulação e a superfície de referência. As amostras pontuais são projetadas semelhantemente.

Os trabalhos geoestatísticos são então realizados nesse espaço transformado, desde a variografia até a estimativa/simulação. E os resultados são posteriormente representados no espaço original após retro-transformação.

Esse procedimento funciona bem para sólidos levemente ondulados. Quando há muitas irregularidades, a tendência de ocorrer intersecções entre triangulações é maior e a magnitude das distorções também é maior. Em todos os casos, há alguma distorção espacial e por isso os cálculos volumétricos devem ser sempre feitos no espaço original.

Relacionados ao tema, há diversos trabalhos na área de computação gráfica que abordam o problema de parametrizar superfícies 3-D em 2-D. Floater e Hormann (2004)

discutem as principais metodologias existentes. Dentre eles, destaca-se aqui a de Zigelman *et al.* (2002), que realizam a representação 2-D da superfície 3-D por meio de MDS.

2.8.COMENTÁRIOS

O tema de anisotropia local na geoestatística é amplo e envolve vários trabalhos. Nesse capítulo de fundamentação teórica, o objetivo foi apresentar os diversos tópicos de uma maneira mais integrada e com dois principais objetivos práticos:

i) Como caracterizar a anisotropia localmente: foram apresentadas as três principais metodologias para se definir os parâmetros de anisotropia local - via interpolação de dados estruturais, via gradientes e via variografia local.

ii) Como aplicar a geoestatística utilizando parâmetros de anisotropia local: foram apresentadas maneiras de se integrar anisotropias locais no cálculo de covariâncias (janelas móveis, ponderação de processos estacionários, convolução de kernels e deformação espacial) e as formas de se adaptar métodos geoestatísticos tais como krigagem e simulação para considerar essas informações locais.

Desses métodos principais, dois não são desenvolvidos no decorrer dessa tese: variografia local e ponderação de processos estacionários. A variografia local não foi explorada adiante por ser pouco operacional. O processo de realizar múltiplas variografias em diversas direções e regiões é bastante laborioso, mesmo em casos univariados. E ajustes automáticos de modelos variográficos são muito dependentes da qualidade dos dados experimentais, por isso essa técnica não foi priorizada. Já a ponderação de processos estacionários não foi explorada por ser uma técnica mais voltada a casos mais simples em que não se busca caracterizar a anisotropia local em detalhe, mas apenas em uma escala mais regional.

É possível agrupar todos os métodos apresentados conforme a maneira como lidam com as anisotropias locais. E organizar, do ponto de vista aplicado, quais parâmetros são necessários para seu uso em cada caso (Tabela 1).

Tabela 1 – Métodos para integrar anisotropias locais à geoestatística, agrupados de acordo com objetivo e parâmetros necessários.

Objetivo	Método	Parâmetros principais
Trabalhar se adaptando às anisotropias locais existentes, sem transformação de coordenadas	- janelas móveis - convolução de kernels - ponderação de processos estacionários	- direções dos eixos de anisotropia - magnitude relativa dos eixos de anisotropia - modelo variográfico de referência associado a um dos eixos de anisotropia
Transformação de coordenadas para remover anisotropias locais em todas as três dimensões para então trabalhar num espaço sem anisotropia	- deformação espacial	- direções dos eixos de anisotropia - magnitude relativa dos eixos de anisotropia
Transformação de coordenadas para normalizar anisotropia local em uma das três dimensões para então trabalhar num espaço em que um dos eixos das anisotropias locais seja sempre o mesmo	- coordenadas geológicas (aplainamento)	- pontos de controle para o desdobramento

Com base nesses três casos, os próximos capítulos desenvolvem metodologias para permitir o uso de cada uma dessas aplicações. O Capítulo 3 desenvolve uma metodologia para um uso robusto de coordenadas geológicas. E o Capítulo 4 aborda diversas formas recomendadas para obter direções e magnitudes locais.

3. COORDENADAS GEOLÓGICAS SEMI-AUTOMATIZADAS

O uso de coordenadas geológicas (*unfolding*) busca simplificar a geometria de um sólido complexo. Está diretamente relacionado ao uso de anisotropias locais, uma vez que busca transformar coordenadas a fim de que a direção do eixo menor de anisotropia (geralmente ao longo da espessura) seja localmente sempre a mesma.

O procedimento tradicional de transformar coordenadas não funciona bem para sólidos com muitas irregularidades (DEUTSCH, 2005), além de depender de uma série de parâmetros e pontos de controle desenhados manualmente. Aqui, é apresentada uma metodologia para ajudar a trabalhar com sólidos muito dobrados e simplificar o uso de coordenadas geológicas em alguns casos.

O material inicial consiste em apenas um *grid* (dentro de um sólido dobrado) e suas amostras. É recomendável que os blocos do *grid* sejam regulares e de mesmas dimensões para simplificar o processo. O algoritmo segue os passos apresentados na sequência. Cada etapa é detalhada nas subseções a seguir.

Passo 1: Gerar pontos de uma superfície de referência

- O *grid* é escaneado em seções para identificar pontos de uma superfície de referência para o desdobramento.

Passo 2: Calcular distâncias não-euclidianas entre pontos da superfície de referência

- Distâncias apenas entre os pontos mais próximos da superfície de referência são tomadas. Com essas distâncias, é construído um grafo e as distâncias não-euclidianas mais curtas entre os pontos é calculada.

Passo 3: Aplicar *multidimensional scaling* (MDS) para criar uma representação 2-D da superfície de referência e gerar coordenadas geológicas para todos os blocos e amostras.

- O MDS é aplicado utilizando as distâncias definidas no passo anterior para representá-las em duas dimensões. O resultado é a superfície de referência estendida em duas dimensões. Os pontos do *grid* e suas amostras são então alocados no espaço transformado. Isso é feito via algoritmos de otimização, de forma a minimizar o erro entre as distâncias originais entre pontos próximos e a superfície de referência.

3.1. DADOS INICIAIS E SUPERFÍCIE DE REFERÊNCIA

O primeiro passo consiste em gerar pontos de uma superfície de referência. Ela consiste na superfície que representa a direção de menor continuidade localmente (ortogonal à superfície). No caso desses dados já estarem disponíveis por outras vias, esse passo não é necessário.

Considerando um sólido dobrado, a superfície de referência pode estar localizada em diferentes posições de acordo com as características de continuidade do fenômeno espacial. De modo geral, assume-se que uma das superfícies do sólido (superior, central ou inferior – Figura 32) esteja melhor associada a continuidade espacial local e ela é selecionada como referência para o desdobramento.

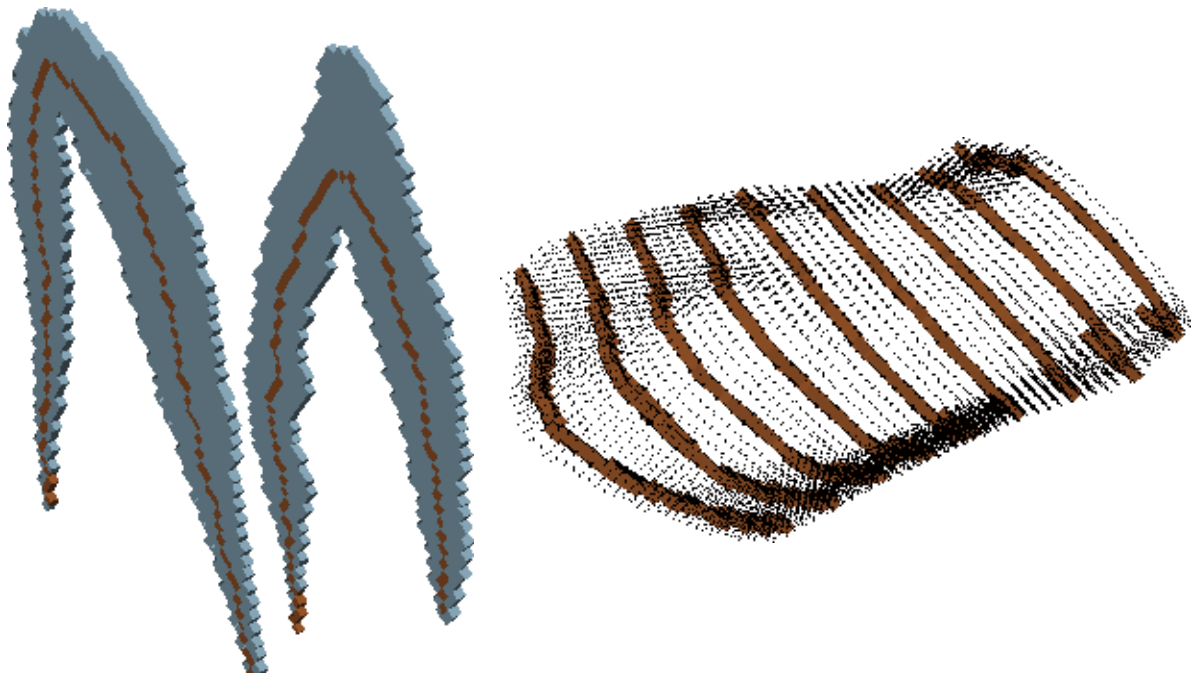
Aqui a superfície central é considerada como de referência. No caso de se desejar considerar outras superfícies, a central pode ser utilizada como base para separar qual é a superfície superior e inferior de um sólido fechado.

Uma maneira de obter pontos da superfície de referência central é via algoritmos de esqueletização. Esses algoritmos realizam sucessivos escaneamentos na imagem para identificar bordas e removê-las, mantendo apenas o “esqueleto” central. Aqui é utilizado o algoritmo de Lee *et al.* (1994).

Os passos para gerar pontos de uma superfície de referência com esses algoritmos são descritos a seguir e ilustrados na Figura 33.

- i) Gerar uma seção do *grid* ao longo de um dos três eixos cartesianos principais
- ii) Aplicar algoritmo de esqueletização nessa seção, retornando um conjunto de pontos que fazem parte da superfície de referência
- iii) Repetir (i) e (ii) por um número suficiente de seções para gerar uma quantidade representativa de pontos

Figura 33 – Representação do processo de esqueletização do modelo de blocos para gerar uma superfície de referência. À esquerda, uma visão em perspectiva de duas seções do modelo de blocos, em que o esqueleto extraído está representado em marrom. À direita, vista em planta de um conjunto de esqueletos (em marrom) extraídos do modelo.



Um ponto importante é que para a esqueletização funcionar bem, a resolução do *grid* deve ser compatível com a espessura do sólido. Quanto mais discretizado o *grid*, melhor a definição dos pontos de referência.

3.2. DISTÂNCIA ENTRE PONTOS DA SUPERFÍCIE DE REFERÊNCIA

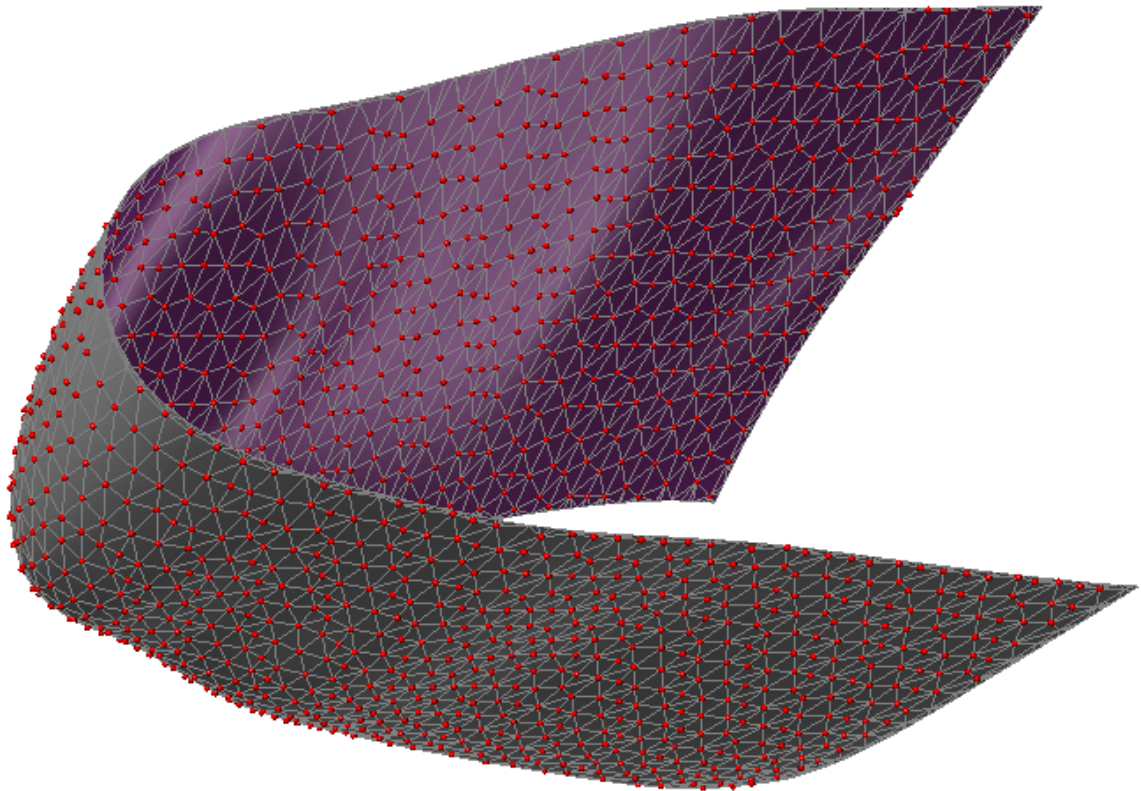
O próximo passo consiste em obter as distâncias entre os pontos da superfície de referência. Em uma superfície plana, essa tarefa consiste em apenas calcular a distância euclidiana entre os pontos (uma linha reta). Porém, obter as distâncias ao longo de uma superfície irregular e dobrada requer uma abordagem diferente.

O procedimento nesse caso é similar ao apresentado no Capítulo 2.4.4:

i) Construir um grafo não-direcionado, em que cada ponto da superfície de referência é um vértice. As arestas entre os vértices são definidas por um número reduzido de vizinhos mais próximos, de modo a respeitar as oscilações mais bruscas da superfície. O peso das arestas consistem nas distâncias euclidianas entre os pares de vértices conectados. Esses elementos estão representados graficamente na Figura 34.

ii) Aplicar o algoritmo de Dijkstra para calcular as distâncias não-euclidianas entre os vértices, utilizando os caminhos mais próximos dentro da estrutura do grafo.

Figura 34 – Representação do grafo sobre uma superfície de referência. Os vértices são os pontos vermelhos e as arestas são as linhas cinzas. A distância euclidiana seria representada apenas por uma linha reta entre dois vértices. A distância buscada nessa abordagem é a percorrida ao seguir o caminho mais curto via as arestas.



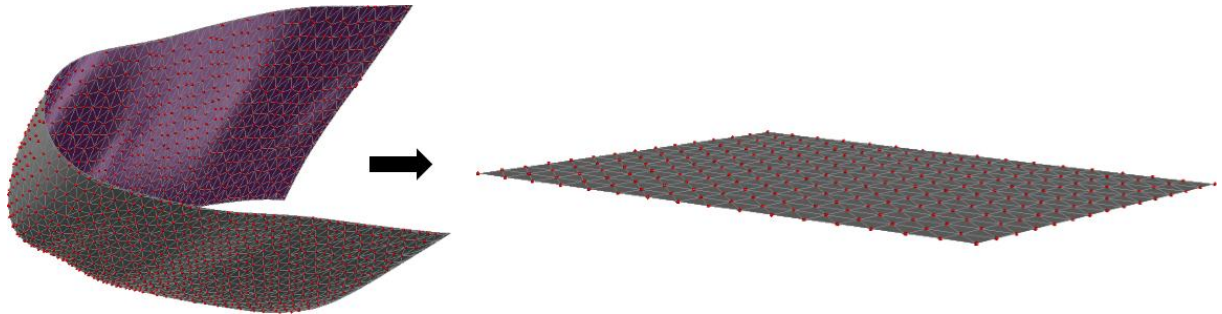
Como alertado por Zigelman *et al.* (2002), há uma distorção nas distâncias ao definir poucas arestas por vértice. Por isso, aqui é proposto trabalhar com ao menos 12 arestas por vértice. Ou então, é possível utilizar correções no cálculo das distâncias mais curtas entre pontos tal como proposto pelos autores.

3.3. TRANSFORMAÇÃO PARA COORDENADAS GEOLÓGICAS

O próximo passo é gerar uma representação plana da superfície de referência. Isso é feito aplicando MDS nos pontos da superfície de referência, utilizando como base a matriz de distâncias entre pontos obtidas no passo anterior. Como se deseja uma representação plana da

superfície, o MDS é aplicado de modo a representar em duas dimensões as distâncias conhecidas, gerando assim coordenadas transformadas X' e Y' para cada ponto.

Figura 35 – Resultado do aplainamento da superfície de referência a partir do MDS em duas dimensões.



Quanto maior o número de pontos da superfície de referência, mais memória RAM é necessária para realizar o MDS. Assim, dependendo do tamanho dos sólido a ser desdobrado, é necessário realizar o MDS apenas em pontos de ancoragem. Os pontos restantes são então alocados na sequência (ver Capítulo 2.4.4).

A parte final do processo é gerar as coordenadas transformadas dos dados iniciais (*grid* e amostras), utilizando como referência os pontos já transformados por MDS. A maneira aqui proposta para isso é utilizar algoritmos de otimização para gerar coordenadas transformadas que reproduzam da melhor maneira as distâncias originais entre pontos mais próximos com a superfície de referência.

Algoritmos de otimização são utilizados para buscar a melhor solução para uma função objetivo. A solução nesse caso são as coordenadas (X' , Y' e Z') do ponto v' a ser alocado no espaço transformado, que busca minimizar o valor da função objetivo $f(v')$ abaixo:

$$f(v') = \frac{\sum_{i=1}^n (dist(v', i') - dist(v, i))^2}{n} \quad (28)$$

onde v é a representação de v' no espaço original; n são os pontos próximos a v a serem utilizados como referência, dos quais se conhece tanto as coordenadas originais como as transformadas; e a função *dist* retorna a distância euclidiana entre os pontos.

Nesse trabalho, a otimização é realizada utilizando o L-BFGS (NOCEDAL E WRIGHT, 2006), que é um algoritmo da família dos métodos Quasi-Newton que suporta funções objetivo com um grande número de variáveis a um baixo custo computacional.

O processo de otimização é executado para todos os pontos restantes, com base nas coordenadas da superfície de referência. O resumo do processo está na Figura 36 e uma ilustração do resultado final na Figura 37.

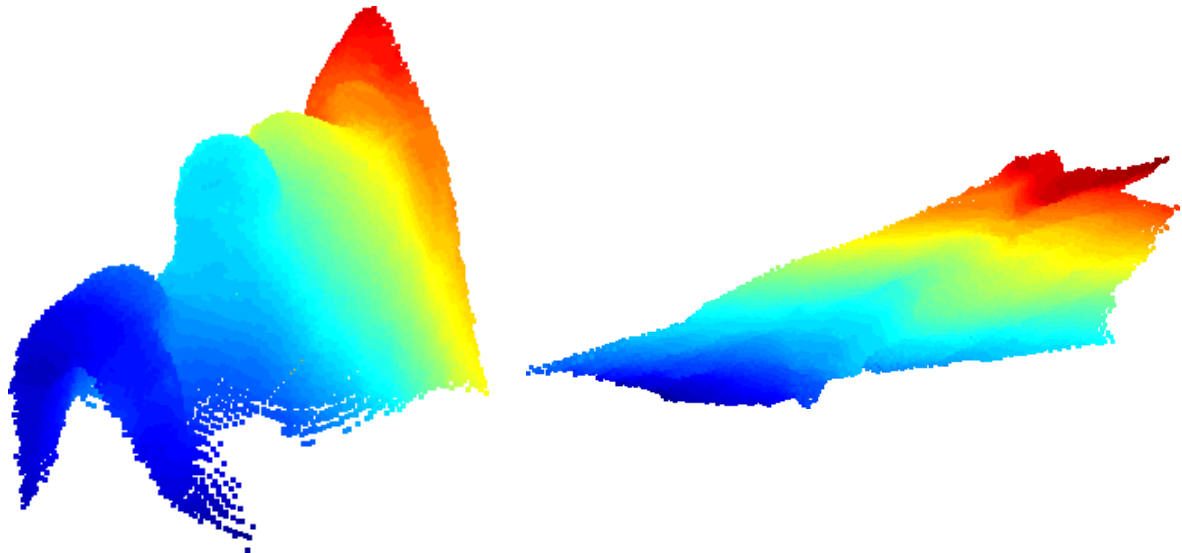
Figura 36 – Pseudo-código de como gerar as coordenadas transformadas dos dados originais.

```
n -> número de pontos de referência provenientes da superfície transformada
LOOP Para cada ponto v a ser realocado:
  T -> vetor para armazenar coordenadas de referência no espaço transformado
  D -> vetor para armazenar as distâncias de v até pontos de referência

  Buscar no espaço original os n pontos da superfície de referência mais próximos a v
  -> Adicionar coordenadas transformadas dos pontos encontrados em T
  -> Adicionar distâncias associadas em D

  Executar algoritmo de minimização do erro para definir as coordenadas transformadas
  X', Y' e Z' do ponto v que, em relação a T, melhor reproduzem as distâncias D
```

Figura 37 – Dados em coordenadas reais e em coordenadas geológicas após o desdobramento.



Ao se utilizar apenas a superfície aplainada como referência, é necessário definir um palpite inicial coerente da posição do ponto v ao se iniciar a otimização da função objetivo, de modo a impedir que pontos abaixo ou acima da superfície se confundam. Isso pode ser feito definindo inicialmente a coordenada transformada Z' como sendo a distância do ponto v à

superfície de referência – sendo ela positiva caso esteja acima da superfície de referência, ou vice-versa.

3.4. COMENTÁRIOS

A metodologia apresentada nesse capítulo apresenta bons resultados práticos, como é apresentado mais adiante nos estudos de caso dessa tese. Sua aplicação é bastante simples e não necessita de controles manuais via linhas e pontos. Outra vantagem do método é que pode ser executado em Python com bibliotecas gratuitas.

Pode ser utilizado em quase qualquer corpo 3-D tabular dobrado. Casos em que não é possível utilizar adequadamente coordenadas geológicas são em corpos esferoidais, por exemplo.

Alguns detalhes operacionais são abordados aqui nessa seção para garantir o bom uso de coordenadas geológicas.

3.4.1. Validações durante o processo

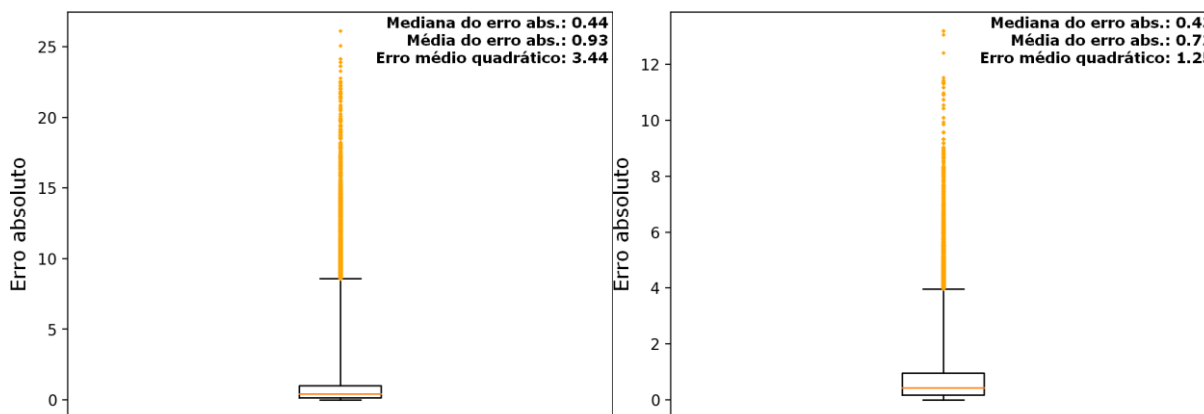
Algumas partes do processo podem gerar distorções nas distâncias, por isso é importante validar as transformações durante o processo. Nesse caso, a principal característica que se deseja é a que as distâncias entre pontos próximos no espaço original, se mantenha no espaço transformado.

O MDS, por exemplo, busca respeitar globalmente as distâncias, mas localmente pode haver diferenças. A esqueletização não costuma gerar artefatos significativos, mas caso gere, também pode afetar a reprodução das distâncias.

Para evitar esses problemas, uma boa prática é validar as distâncias ao longo do processo, tanto na primeira transformação da superfície de referência, como na transformação final de todos os demais pontos.

No caso de serem encontrados problemas, eles podem ser corrigidos de diversas maneiras: aumentar resolução ou remover artefatos da superfície de referência; aumentar número de vizinhos para a otimização das distâncias finais. Uma maneira simples e automática de corrigir a maioria desses problemas é identificar os pares com problemas (por exemplo, pares com erros maiores que 5 m) e realocá-los com os mesmos algoritmos de minimização do erro utilizados para gerar as coordenadas geológicas finais (Figura 38).

Figura 38 – Estatística dos erros na reprodução das distâncias. À esquerda sem correções. À direita, após corrigir com os algoritmos de otimização. Nota-se que o 1% de erros extremos (em laranja) fica bem mais restrito após as correções.



3.4.2. Geoestatística no espaço transformado

Com o *grid* e amostras em coordenadas geológicas, os processos geoestatísticos como variografia, estimativa e simulação podem ser então realizados no espaço transformado.

O resultado das transformações é um conjunto de pontos irregularmente distribuídos no espaço, logo é necessário criar um novo *grid* que envolva esses pontos. Como a transformação deforma o *grid* original, é recomendável estimar/simular pontualmente no espaço transformado. Caso se deseje trabalhar no suporte de blocos, basta discretizar os blocos antes do processo de aplainamento, estimar/simular pontualmente, para enfim reblocar o resultado final.

O aplainamento pode ainda favorecer o uso dos métodos de geoestatística com anisotropias locais em 3-D, uma vez que pode ser difícil definir três direções principais em sólidos complexos. No espaço transformado, o processo é simplificado a definir apenas duas direções principais, uma vez que a de menor continuidade estará sempre paralela ao eixo vertical.

Seja de forma global ou local, a continuidade espacial das variáveis é mais fielmente representada e os processos geoestatísticos apresentam melhores resultados com o uso de coordenadas geológicas.

4. PARAMETRIZAÇÃO DA ANISOTROPIA LOCAL

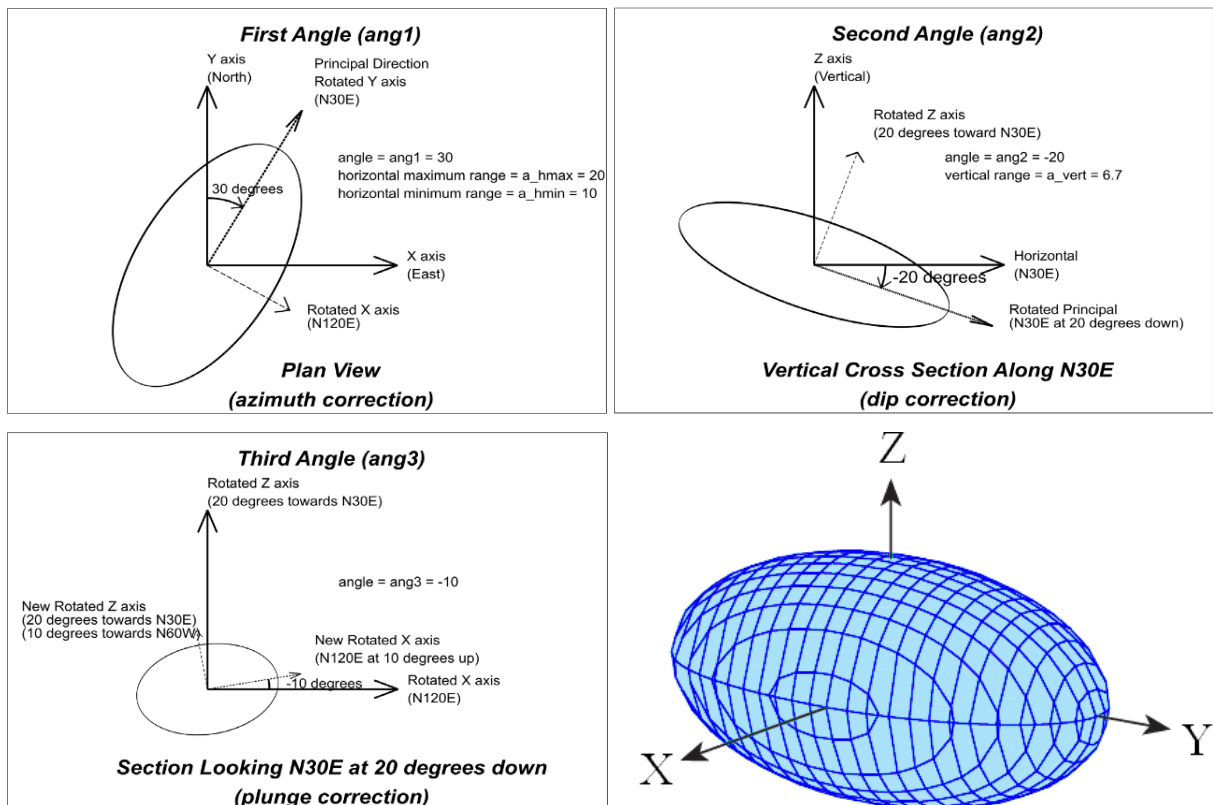
Para qualquer utilização de anisotropias locais, a parametrização é a parte mais importante a ser definida. Os três principais parâmetros são: direções locais, magnitudes locais e modelo variográfico de referência.

A seguir, são apresentados alguns detalhes de cada um desses parâmetros necessários para poder integrar as anisotropias locais a métodos geoestatísticos, seguido da metodologia proposta para melhor caracterizá-los e validá-los.

4.1. DIREÇÕES DA ANISOTROPIA LOCAL

As direções de anisotropia local são definidas em 3-D por três eixos ortogonais. Esses eixos costumam ser representados por meio de três ângulos de rotação que definem a posição de um elipsoide no espaço. Aqui é utilizada a mesma convenção de rotação de elipsoide do GSLIB (NEUFELD E DEUTSCH, 2004), conforme Figura 39.

Figura 39 – Convenção de rotação de elipsoide considerada, definida por três ângulos (ang_1 , ang_2 e ang_3).



Fonte: Neufeld e Deutsch (2004)

As direções dependem da variabilidade espacial da variável e em vários casos está associada à geometria do domínio. É importante que elas respeitem esses elementos, sem criar mudanças bruscas nas orientações de cada eixo.

4.2. MAGNITUDE DA ANISOTROPIA LOCAL

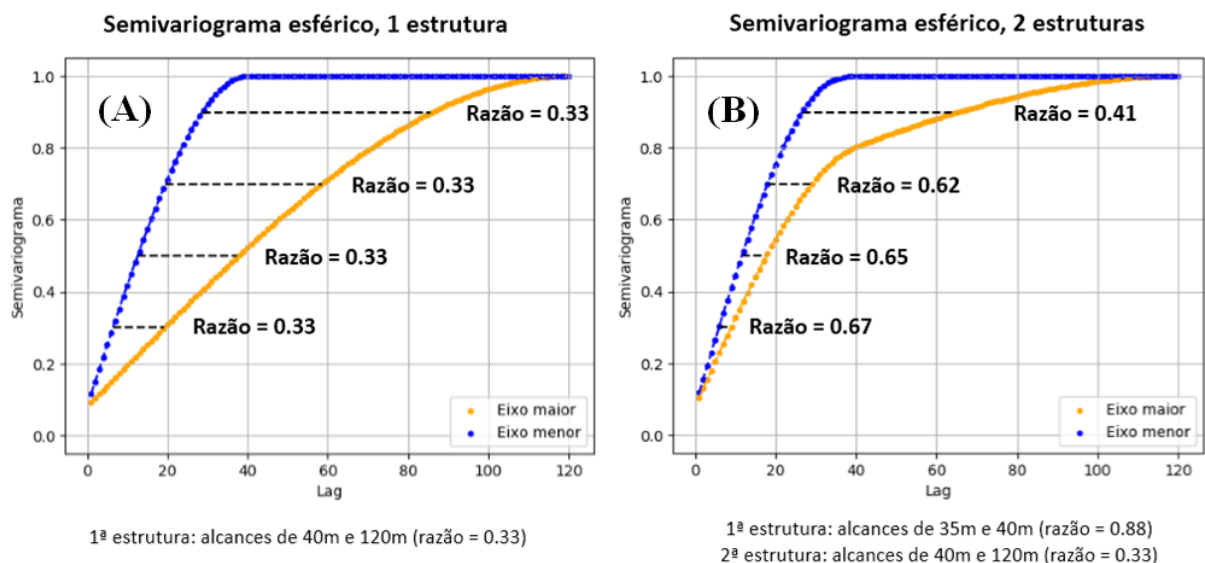
A magnitude da anisotropia está diretamente relacionada à diferença de continuidade espacial ao longo das direções principais e é expressa na forma de razões anisotrópicas entre distâncias. Em 3-D, ela pode ser expressa localmente por dois valores escalares (r_1 e r_2), aqui consideradas dessa forma:

$$r_1 = \frac{c_2}{c_1} \quad e \quad r_2 = \frac{c_3}{c_1} \quad (29)$$

sendo c_1 , c_2 e c_3 a continuidade em cada um dos três eixos.

A razão anisotrópica é simples de ser definida ao se considerar dois semivariogramas esféricos com apenas uma estrutura, uma vez que a razão entre as distâncias é a mesma independentemente do valor da autocorrelação (valores de c_1 , c_2 e c_3 iguais aos alcances variográficos). No entanto, ao se considerar mais estruturas (que é a situação mais comum), a razão pode ser mais difícil de ser definida em apenas um valor (Figura 40).

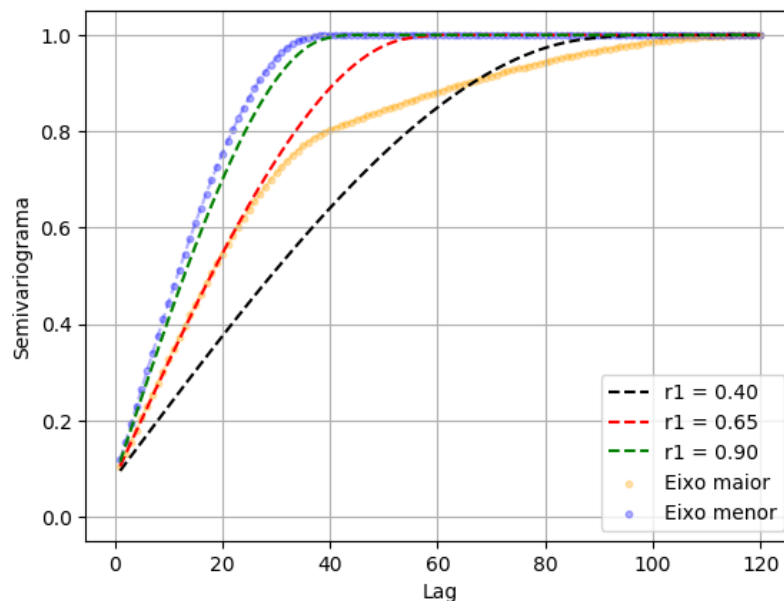
Figura 40 – Razões anisotrópicas calculadas para diferentes valores de semivariância. Considerando apenas uma estrutura variográfica (A) e considerando duas estruturas variográficas (B).



No exemplo da Figura 40-B, nota-se que combinando as duas estruturas é gerada uma anisotropia mais fraca entre amostras mais correlacionadas e mais forte entre amostras mais distantes. Reduzir a anisotropia a apenas um valor escalar nesse caso se torna mais interpretativo.

Um ponto importante a se levar em conta nesses casos é que essas razões anisotrópicas são utilizadas no contexto de anisotropias locais geralmente para “ponderar” um modelo variográfico de referência. Com base no exemplo anterior, caso a intenção seja que o semivariograma em laranja seja aproximadamente reproduzido ao combinar o semivariograma em azul com um valor de razão anisotrópica, a melhor opção é utilizar uma razão em torno de 65% (Figura 41).

Figura 41 – Exemplo de como utilizando o semivariograma do eixo menor como referência (em azul), a melhor reprodução do semivariograma do eixo maior (em laranja) é com uma razão anisotrópica em torno de 65%.



4.3. MODELO VARIOGRÁFICO DE REFERÊNCIA

Para integrar as anisotropias locais no cálculo de covariâncias, é necessário ao menos um modelo variográfico de referência. Isso porque a razão anisotrópica por si só não define a continuidade local. Uma razão 100:50 é igual à 2:1 em termos relativos e para fins de cálculo das distâncias anisotrópicas retornam o mesmo resultado. No entanto, dois semivariogramas com alcances de 100 m e 2 m, respectivamente, representam uma continuidade muito distinta.

Considerando os métodos apresentados no Capítulo 2.4 para integrar as anisotropias locais no cálculo de covariâncias, o modelo variográfico de referência pode variar localmente apenas no uso do método de janelas móveis. Para a ponderação de processos estacionários e para a convolução de kernels, é necessário que o modelo variográfico de referência seja igual em todos os locais. Ou seja, um dos três eixos de anisotropia deve possuir os mesmos parâmetros variográficos em todos os locais do domínio e apenas os outros dois eixos podem variar proporcionalmente a continuidade local de acordo as razões anisotrópicas locais.

4.4. METODOLOGIAS PROPOSTAS PARA DEFINIR OS PARÂMETROS DE ANISOTROPIA LOCAL

Como apresentado no Capítulo 2, há diferentes maneiras de determinar os parâmetros da anisotropia localmente. Todas dependem da densidade de informações disponível e é importante que haja uma coerência espacial do fenômeno local.

As metodologias mais adequadas para extrair as direções e magnitudes locais vão sempre depender do contexto dos dados. Aqui são apresentadas três metodologias que buscam integrar as principais técnicas disponíveis, de forma a permitir extrair as informações locais da melhor maneira. Para todas as metodologias, as informações iniciais necessárias são os dados amostrais e um *grid* englobando o domínio de interesse.

Duas metodologias são para extrair as direções e magnitudes locais da anisotropia, das quais a primeira é recomendada para casos 2-D ou 3-D de geometria simples, enquanto que a segunda é recomendada para casos 3-D de geometria mais complexas, cuja continuidade local pode ser associada à forma do domínio. Por fim, é detalhada uma metodologia para definir o modelo variográfico de referência com base nas direções locais já conhecidas.

4.4.1. Direções e magnitudes em geometrias simples

O uso de gradientes é aqui considerada a maneira mais completa e viável para extrair direções e magnitudes locais em casos 2-D ou em 3-D mais regulares (no uso de coordenadas geológicas, por exemplo).

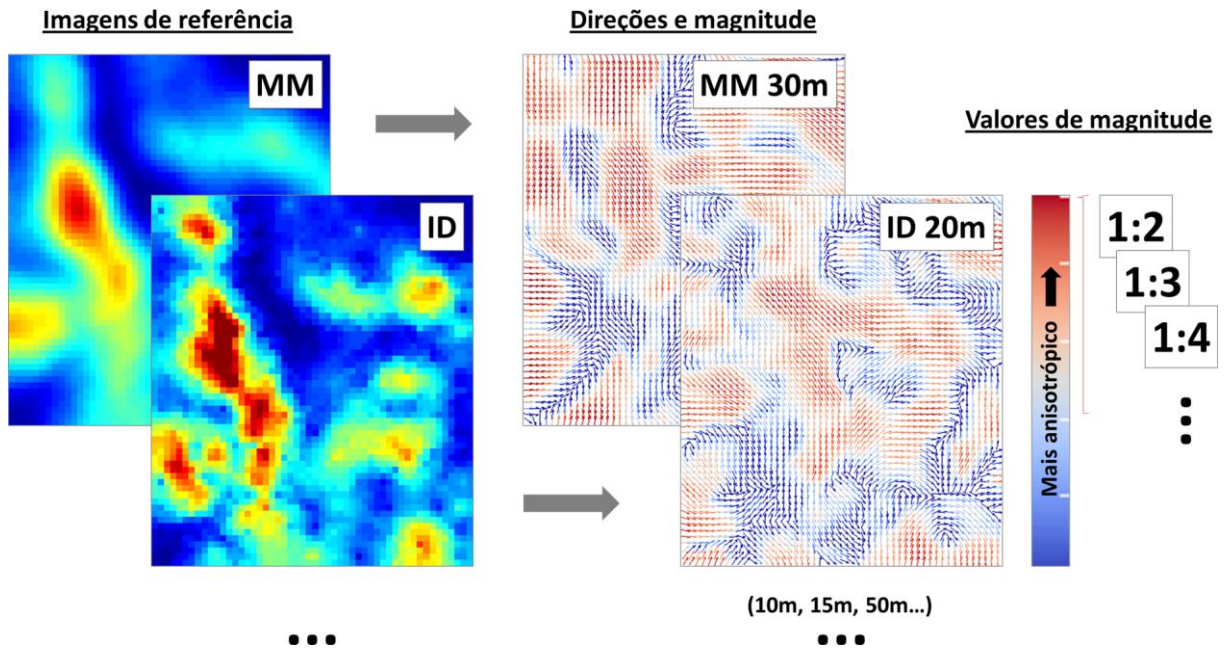
A principal dificuldade ao usar gradientes é que os parâmetros de anisotropia gerados variam consideravelmente de acordo com o modelo de referência inicial e o tamanho da janela

de suavização dos gradientes. Ao mesmo tempo, isso se torna uma vantagem no processo, uma vez que permite gerar diversos cenários possíveis para serem avaliados.

Por isso, a metodologia aqui proposta consiste em testar um conjunto de cenários gerados via gradientes para, ao fim, selecionar ou montar um cenário que represente adequadamente as anisotropias locais. Os passos são descritos a seguir e ilustrados na Figura 42:

- i) Gerar modelos de referência para extrair direções de anisotropia (*e.g.* inverso da distância com diferentes expoentes e número de amostras);
- ii) Obter eixos de anisotropia local e razão anisotrópica preliminar dos modelos de (i) via gradientes, utilizando diferentes janelas de suavização;
- iii) Filtrar cenários gerados em (ii), selecionando apenas os que apresentam coerência visual;
- iv) Definir possíveis valores máximos e mínimos para as razões anisotrópicas preliminares e reescalonar razões geradas para esses limites. Levar em conta o modelo variográfico dos dados para definir esses valores;
- v) Realizar uma validação cruzada nos locais conhecidos, utilizando:
 - Todas as possíveis direções geradas em (iii);
 - Todas as possíveis combinações de razões anisotrópicas em (iv);
 - Todos os métodos desejados para incorporar anisotropia local na estimativa;
- vi) Com base nos resultados, selecionar o melhor cenário de direções e magnitudes das anisotropias locais.

Figura 42 –Um conjunto de imagens referências são geradas a partir das amostras (MM: médias móveis; ID: inverso da distância). Direções e magnitudes são extraídas via gradientes com diferentes janelas de suavização. Diferentes limites de magnitude são testados. Uma validação cruzada é realizada com os métodos de interesse e o melhor cenário combinado é selecionado.



Um ponto importante no processo é como definir os “melhores resultados” na parte final. Há diversas métricas que podem ser usadas para mensurar uma validação cruzada. Nesse trabalho, são utilizadas três medidas de erro para avaliar uma validação cruzada:

- Raiz do erro quadrático médio (REQM): é a raiz quadrada da média das diferenças quadráticas entre valor real e valor estimado;
- Média do erro absoluto (MdEA): é a média das diferenças absolutas entre valor real e valor estimado;
- Mediana do erro absoluto (MnEA): é a mediana das diferenças absolutas entre valor real e valor estimado.

As três métricas são similares. A principal diferença entre elas é a sensibilidade a erros grosseiros, sendo a REQM a mais sensível e a MnEA a menos sensível. Logo, quanto mais próximos esses valores, mais homogêneos são os erros. E quanto maior a diferença, maior a quantidade de erros de maior magnitude.

4.4.2. Direções e magnitudes em geometrias complexas

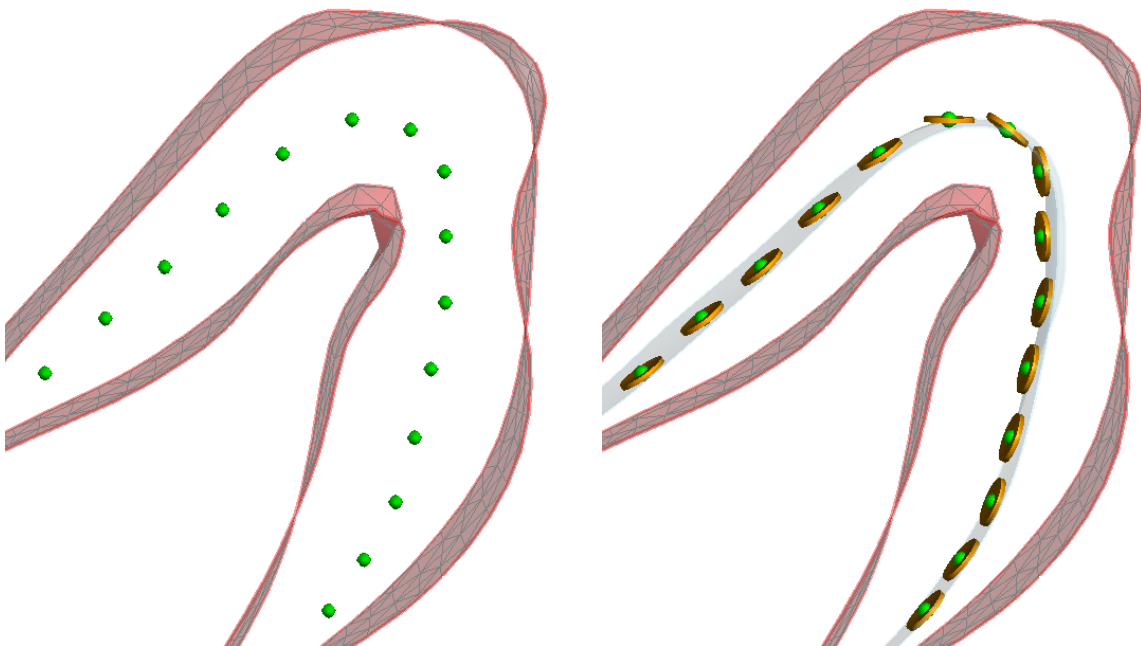
O uso de gradientes gera bons resultados ao se trabalhar em 2-D ou em geometrias 3-D regulares onde um dos eixos é pouco variável. No caso de se ter que definir três eixos locais, ele se torna mais instável. Pode gerar ainda assim bons resultados, mas em muitos casos gera uma variabilidade excessiva na direção dos três eixos locais. Assim, não atende dois pontos importantes para a parametrização do campo de anisotropia: a coerência visual e a variabilidade suave das anisotropias locais.

Por isso, a metodologia aqui proposta nesses casos é diferente e se baseia em uma suposição de que a geometria do domínio está associada à continuidade local. Os planos de maior continuidade são definidos com base nos pontos que definem as triangulações do sólido 3-D ou em pontos de referência gerados a partir de um processo de esqueletização do modelo de blocos, semelhante ao detalhado no Capítulo 3.1. Ortogonal à esse plano está o eixo de menor continuidade (ao longo da espessura). Os passos da metodologia estão descritos a seguir e ilustrados na Figura 43:

- i) Para *grid* de blocos: escanear o *grid* inicial aplicando algoritmo de esqueletização em cada seção, retornando assim um conjunto de pontos de referência (tal como feito no Capítulo 3.1); para sólidos 3-D: utilizar diretamente os pontos que definem as triangulações do sólido.
- ii) Utilizar pontos gerados em (i) para definir planos locais. É aplicado PCA utilizando as coordenadas espaciais dos n vizinhos mais próximos de cada ponto. Os três autovetores e três autovalores desse processo são guardados para os próximos passos;
- iii) O elipsoide é definido de modo que o autovetor de menor autovalor é o eixo menor; o vetor de maior mergulho sobre o plano consiste no eixo maior ou intermediário; ortogonal aos dois eixos já definidos está o terceiro eixo;
- iv) As razões anisotrópicas preliminares são calculadas localmente por meio das razões entre os três autovalores;
- v) Os elipsoides e magnitudes definidos junto aos pontos de referência são interpolados para todo o *grid* (*e.g.* vizinho mais próximo);
- vi) Definir possíveis valores máximos e mínimos para as razões anisotrópicas preliminares e reescalonar razões geradas para esses limites. Levar em conta a variografia dos dados para definir esses valores;

- vii) Realizar uma validação cruzada nos locais conhecidos, utilizando todas as possíveis combinações de razões anisotrópicas e todos os métodos desejados para incorporar anisotropia local na estimativa. É possível ainda variar o número de vizinhos n do PCA para gerar múltiplos cenários de direções locais;
- viii) Com base nos resultados, selecionar o melhor cenário de direções e magnitudes das anisotropias locais.

Figura 43 – Ilustração exibindo pontos extraídos via esqueletização (à esquerda). E os planos de maior continuidade local gerados a partir desses pontos (à direita).



Essa metodologia compartilha diversas semelhanças à metodologia apresentada anteriormente. Em ambos os casos, as direções e razões locais são obtidas via processamento de autovetores e autovalores. E o processo de validação cruzada para encontrar os melhores parâmetros é o mesmo para as duas metodologias. A principal diferença é que o método anterior se baseia em gradientes locais como referência inicial, enquanto esse se baseia predominantemente na geometria 3-D do domínio.

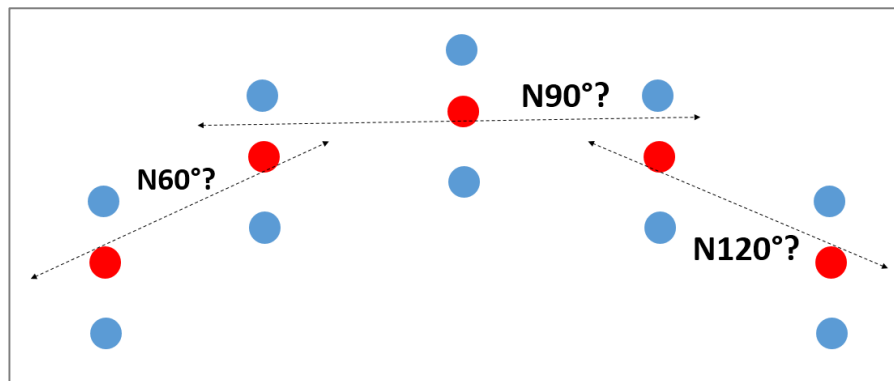
4.4.3. Modelo variográfico de referência

A variografia é um dos pilares da geoestatística clássica. O cálculo do semivariograma experimental é realizado analisando pares de amostras dentro de determinados intervalos de

distâncias. Caso exista anisotropia global, uma tolerância ao longo das direções principais é considerada para melhor caracterizar a continuidade de cada eixo.

Mas em um cenário de anisotropias locais algumas complicações podem surgir durante a variografia, como no exemplo da Figura 44. Nesse caso, é difícil definir em quais direções realizar a variografia.

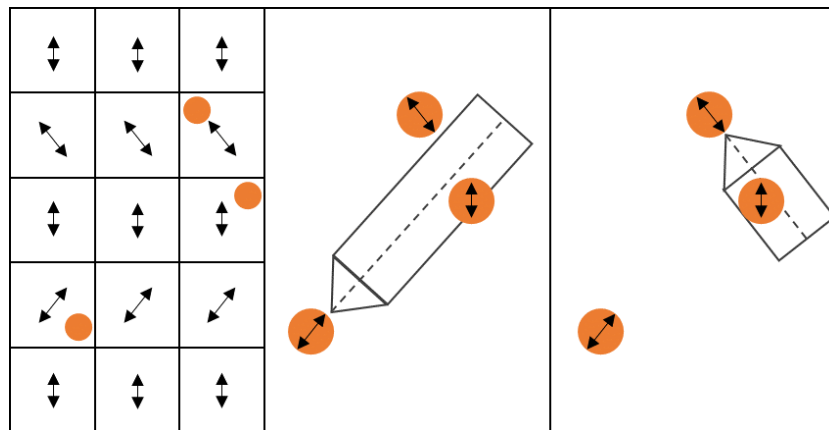
Figura 44 – Ilustração esquemática mostrando algumas dificuldades para se definir uma única direção de maior continuidade para a variografia. Nesse exemplo, há ao menos três possibilidades de direções que podem representar o eixo de maior continuidade dos pontos em vermelho.



Para essas situações, a metodologia a seguir é aqui proposta para realizar a variografia nas direções principais. Assume-se que as direções de anisotropia local são conhecidas e já foram extraídas via uma das metodologias anteriores. A Figura 45 resume o processo:

- i) Passar as informações de anisotropia local para as amostras;
- ii) Para cada amostra, encontrar seus pares ao longo de cada um dos seus eixos locais;
- iii) Agrupar pares de amostra ao longo do eixo maior, intermediário e menor;
- iv) Realizar variografia experimental para cada um dos três eixos, considerando os pares identificados com base nas direções locais;
- v) Ajustar modelo variográfico com base nos pontos experimentais de cada um dos três eixos.

Figura 45 – Exemplo de como a variografia pode ser realizada com base nas anisotropias locais. As direções locais são transferidas para as amostras mais próximas. A busca de pares de amostras para variografia utiliza as direções locais ao invés de uma única direção.



Vale ressaltar que nesse caso a correlação entre pares não é simétrica. Um par A-B pode ser utilizado na variografia experimental do eixo de maior continuidade com base na anisotropia do ponto A. Ao levar em conta a anisotropia do ponto B, esse mesmo par pode ser também utilizado para os cálculos no eixo de menor continuidade.

Com base nessa variografia, é possível ter uma boa ideia da magnitude da anisotropia entre os eixos. E o modelo ao longo de um dos três eixos é selecionado como referência para ser utilizado nos cálculos subsequentes. Recomenda-se que o modelo variográfico de referência seja com base nos eixos menores, uma vez que costuma haver maior certeza sobre sua orientação (*e.g.* ao longo da espessura) e uma melhor caracterização da correlação espacial a menores distâncias.

4.5. COMENTÁRIOS

Parametrizar as anisotropias locais não é uma tarefa simples. As metodologias deste capítulo são propostas com o intuito de simplificar e direcionar o processo de parametrização, uma vez que há muitos caminhos porém poucos algoritmos bem desenvolvidos para isso.

A complexidade da parametrização aumenta consideravelmente de um caso 2-D para 3-D. Ao ter que se parametrizar apenas dois eixos, é possível detalhar e analisar muitos mais cenários para melhor caracterizar os fenômenos locais. Além disso, permite diferenciar localmente a magnitude da anisotropia.

Complementarmente, ainda é possível compor o campo de anisotropia utilizando metodologia semelhante a de Hundelshausen *et al.* (2018). A partir das múltiplas validações

cruzadas, é possível definir melhores cenários por região de influência. A vantagem dessa extensão da metodologia é que permite incluir diferentes escalas de detalhe em um único campo de anisotropia de uma forma bastante robusta.

A metodologia para casos 3-D gera elipsoides com coerência espacial e contribui consideravelmente para gerar melhores resultados. Porém, é mais simplista e as várias suposições necessárias para a metodologia 3-D gera algumas limitações à ela. Por exemplo, é difícil caracterizar variações locais suaves entre as duas direções de maior continuidade sem atrelar essas direções à geometria do domínio. Por outro lado, há ainda espaço para desenvolvimento de melhorias nesse aspecto.

Quando a geometria 3-D permite e há uma boa quantidade de amostras, uma forma de flexibilizar o detalhamento da anisotropia local é primeiramente aplainando o domínio utilizando coordenadas geológicas (Capítulo 3) para então parametrizar a anisotropia local apenas dos dois eixos maiores com a metodologia do Capítulo 4.4.1.

A variografia proposta é uma simples adaptação da variografia tradicional. Sua vantagem é a melhor integração entre direções locais e análise da continuidade espacial. Ela tende a melhor caracterizar a correlação entre amostras à curtas distâncias. Assim como na variografia tradicional, à longas distâncias pode haver problemas no caso de grandes variações na anisotropia local. Mas como as estimativas locais são posteriormente feitas com essas mesmas direções, tende a ser mais coerente usá-las também para a modelagem da continuidade espacial.

As razões obtidas na variografia são a referência para definir a magnitude das anisotropias locais, mas nada impede de haver razões anisotrópicas maiores ou menores que elas. Por isso, são sugeridos testes de diferentes limites nas razões anisotrópicas, de modo a avaliar diferentes cenários possíveis.

5. ESTUDO DE CASO 2-D

O primeiro estudo de caso foi realizado com o banco de dados 2-D do Walker Laker (Isaaks e Srivastava, 1989), composto por um conjunto de 470 amostras da variável V e seu cenário exaustivo com todas as 78.000 amostras (Figura 46 e Figura 47). A variável original V teve seus valores divididos por 100 para melhor representação.

Figura 46 – Representação espacial da variável V . À esquerda, o conjunto de 470 amostras utilizadas para estimativa. À direita, o cenário exaustivo com 78.000 registros.

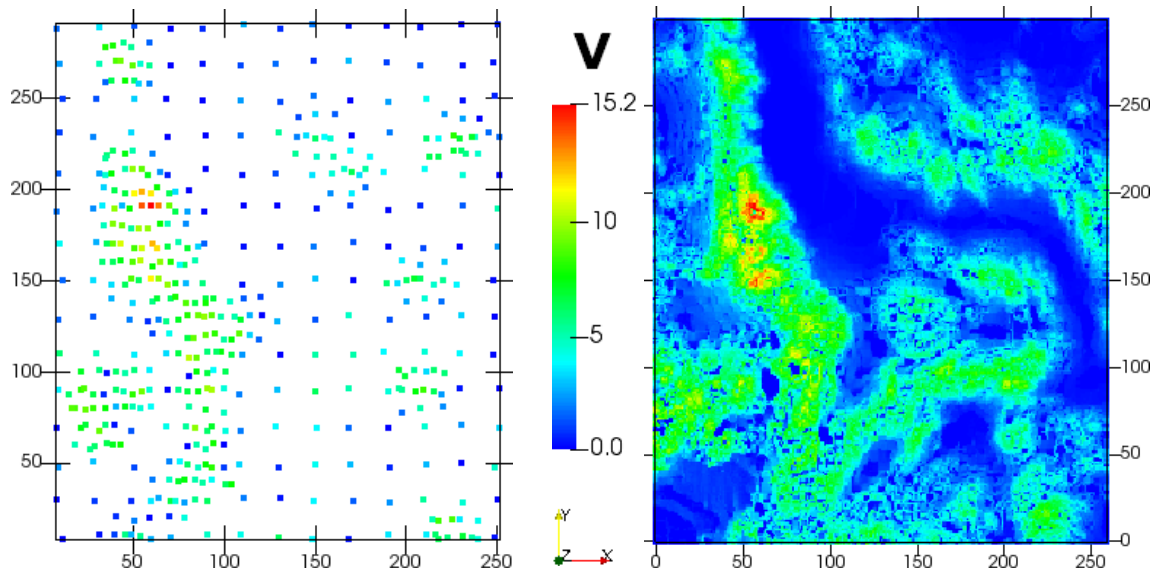
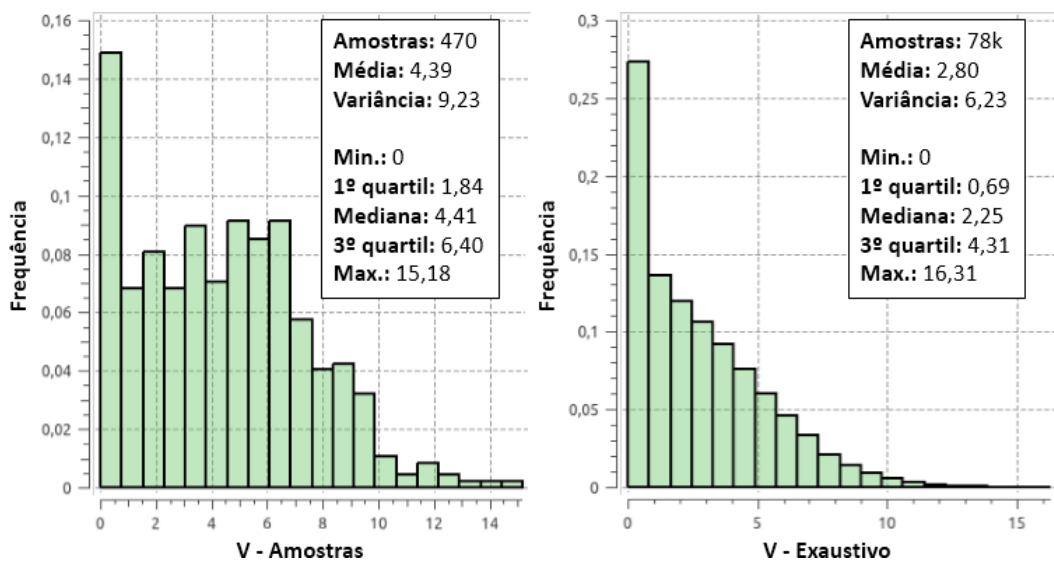


Figura 47 – Histogramas e estatísticas básicas das amostras (à esquerda) e do cenário exaustivo (à direita) do banco Walker Lake.

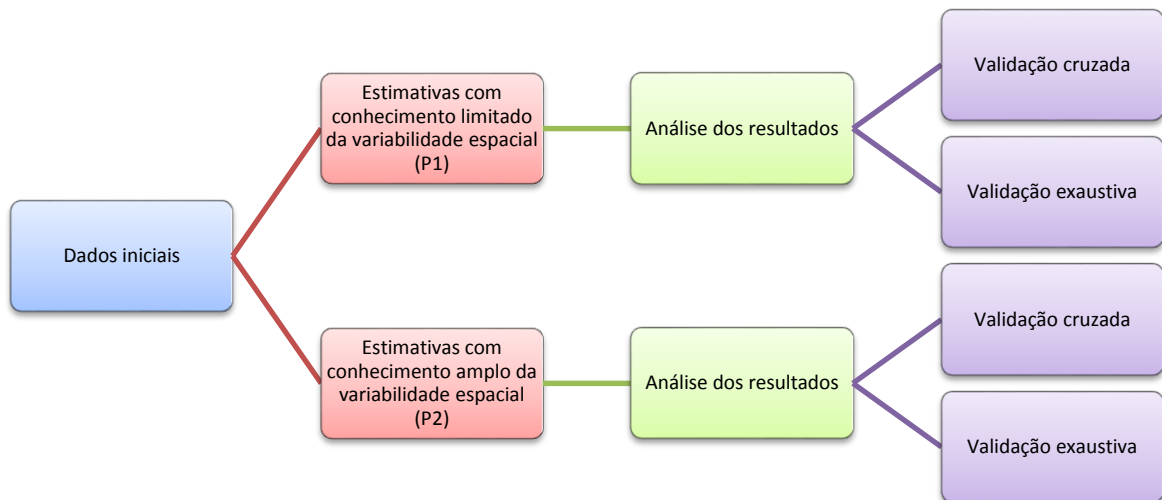


Os objetivos desse estudo foram:

- Demonstrar como parametrizar as anisotropias locais para ilustrar a metodologia proposta no Capítulo 4.
- Usar anisotropias locais para realizar estimativas via krigagem ordinária.
- Realizar comparações dos resultados gerados por meio de diferentes formas de integrar anisotropias na krigagem: isotropia global, anisotropia global, janelas móveis, convolução de kernels e deformação espacial.

O estudo foi feito sob duas perspectivas. A primeira considerando que há informações limitadas para extrair a anisotropia local, que é o caso mais comum, chamado aqui de P1. A segunda considerando que há um alto conhecimento da variabilidade espacial na área, chamado aqui de P2. As seções seguintes detalham o procedimento (resumido na Figura 48) e os resultados obtidos.

Figura 48 – Resumo das análises realizadas nesse estudo de caso.

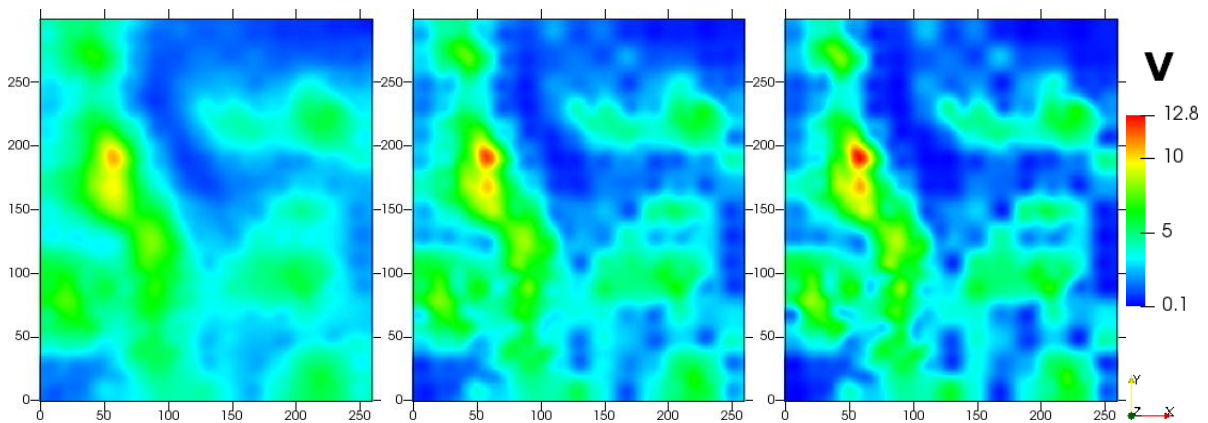


5.1. DIREÇÕES E RAZÕES ANISOTRÓPICAS

Todo o estudo foi realizado em um *grid* de 1x1 m que coincide com a posição dos dados exaustivos. O primeiro passo foi gerar imagens de referência para extrair as direções e

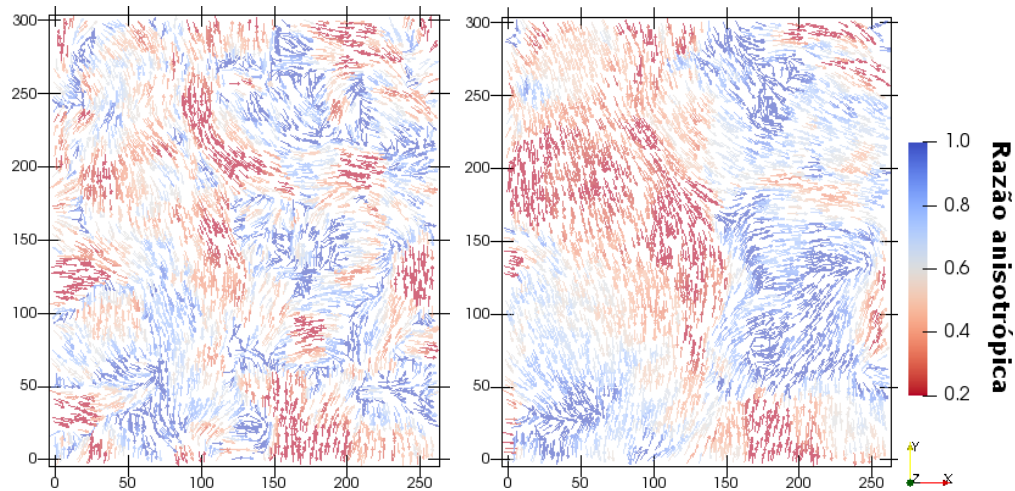
magnitude da anisotropia da área. Para isso, as amostras foram interpoladas via inverso da distância, com um máximo de 16 amostras em um raio de 60 m. As interpolações foram realizadas com diferentes expoentes (1, 2 e 3), resultando em três modelos para inferir a anisotropia local no caso P1 (Figura 49). Para P2, os dados exhaustivos foram utilizados como referência.

Figura 49 – Imagens de referência geradas para extrair campos de anisotropia local. Geradas por inverso da distância com expoente 1 (à esquerda), 2 (ao centro) e 3 (à direita).



Na sequência, o algoritmo de gradientes foi utilizado para gerar diferentes campos de anisotropia local. Para cada uma das imagens de referência, o algoritmo foi aplicado com cinco diferentes janelas de suavização (20 m, 25 m, 30 m, 35 m e 40 m), gerando 15 campos preliminares. Nesses campos, a magnitude da anisotropia foi processada de modo a limitar as razões anisotrópicas dentro de sete possíveis intervalos: $[0.2;1.0]$, $[0.3;1.0]$, $[0.4;1.0]$, $[0.5;1.0]$, $[0.6;1.0]$, $[0.7;1.0]$ e $[0.8;1.0]$. Dessa maneira, foram totalizados 105 campos de anisotropia local para P1 e 35 para P2. A Figura 50 mostra dois desses campos de anisotropia como exemplo.

Figura 50 – Dois exemplos de campos de anisotropia extraídos da imagem de referência gerada a partir do inverso da distância ao cubo. À esquerda, com uma janela de suavização de 20x20 m. À direita, com uma janela de suavização de 40x40 m. A magnitude da anisotropia local foi limitada em [0.2;1.0] nos dois casos.



5.2. VARIOGRAFIA

Para realizar todas as estimativas desejadas, foi necessário modelar quatro modelos variográficos para P1 e outros quatro para P2, totalizando oito modelos variográficos. Eles são referentes aos seguintes casos:

- Isotropia global.
- Anisotropia global.
- Anisotropia local para janelas móveis e convolução de kernels.
- Isotropia global após deformação espacial.

Para a variografia considerando anisotropia local, foi utilizada a metodologia do Capítulo 4.4.3. Nos outros casos, a variografia segue o procedimento padrão. A seguir são apresentados os modelos para os cenários com baixa e alta informação de variabilidade espacial.

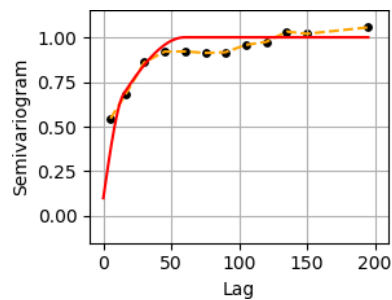
5.2.1. Conhecimento limitado da variabilidade espacial (P1)

A variografia experimental foi realizada a partir das 470 amostras disponíveis. Foram considerados 10 *lags* de 15 m (tolerância de $\pm 7,5$ m). Para os dois casos de isotropia global,

não se aplicam tolerâncias angulares e limites de bandas horizontais. Para os outros casos, foram fixadas tolerância angular de 45° e banda horizontal de 10 metros.

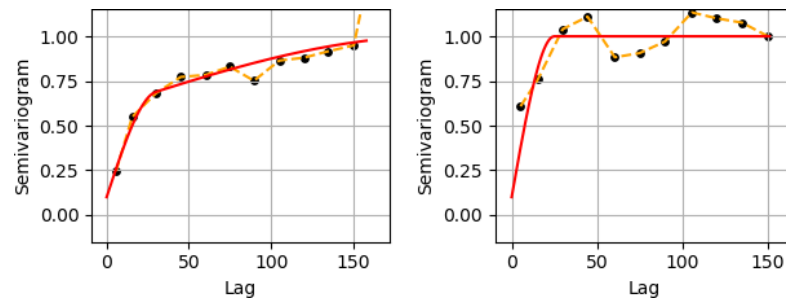
Para os casos de anisotropia local e deformação espacial, foi utilizado como referência o campo de anisotropia local gerado em cima do modelo de inverso da distância ao cubo, com janela de suavização de 20×20 m e razão anisotrópica limitada em $[0.5;1;0]$. Os modelos variográficos são apresentados a seguir (Figura 51 até Figura 54).

Figura 51 – Modelo variográfico com isotropia global para P1.



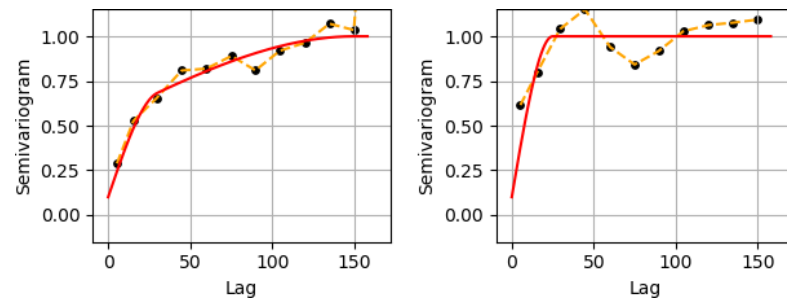
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.4 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{15\text{ m}}\right) + 0.5 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{60\text{ m}}\right)$$

Figura 52 – Modelo variográfico com anisotropia global para P1. À esquerda para direção de maior continuidade (N157) e, à direita, para a direção de menor continuidade (N67).



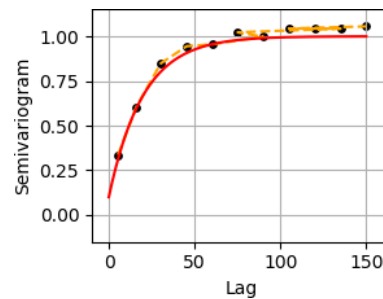
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.5 \cdot Sph\left(\frac{N\ 157}{30\text{ m}}, \frac{N\ 67}{25\text{ m}}\right) + 0.4 \cdot Sph\left(\frac{N\ 157}{200\text{ m}}, \frac{N\ 67}{25\text{ m}}\right)$$

Figura 53 – Modelo variográfico com anisotropia local para P1. À esquerda para direção de maior continuidade e, à direita, para a direção de menor continuidade.



$$\gamma(h) = 0.1 + 0.45 \cdot Sph\left(\frac{Max}{30\text{ m}}, \frac{Min}{25\text{ m}}\right) + 0.45 \cdot Sph\left(\frac{Max}{150\text{ m}}, \frac{Min}{25\text{ m}}\right)$$

Figura 54 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial para P1.



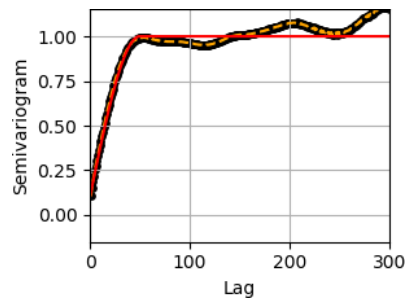
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.9 \cdot Exp\left(\frac{Iso}{60\text{ m}}\right)$$

5.2.2. Conhecimento amplo da variabilidade espacial (P2)

A variografia experimental foi realizada a partir do modelo exaustivo de 78 mil amostras. Foram considerados 300 lags de 1 m (tolerância de ± 0.5 m). Para os dois casos de isotropia global, não se aplicam tolerâncias angulares e limites de bandas horizontais. Para os outros casos, foram fixadas tolerância angular de 45° e banda horizontal de 10 metros.

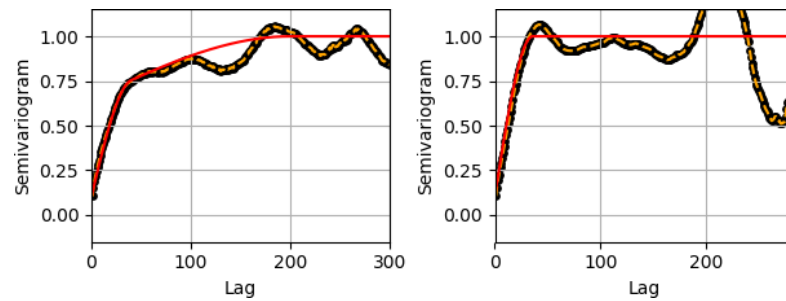
Para os casos de anisotropia local e deformação espacial, foi utilizado como referência o campo de anisotropia local gerado em cima do modelo exaustivo, com janela de suavização de 20x20 m e razão anisotrópica limitada em [0.5;1.0]. Os modelos variográficos são apresentados a seguir (Figura 55 até Figura 58).

Figura 55 – Modelo variográfico com isotropia global para P2.



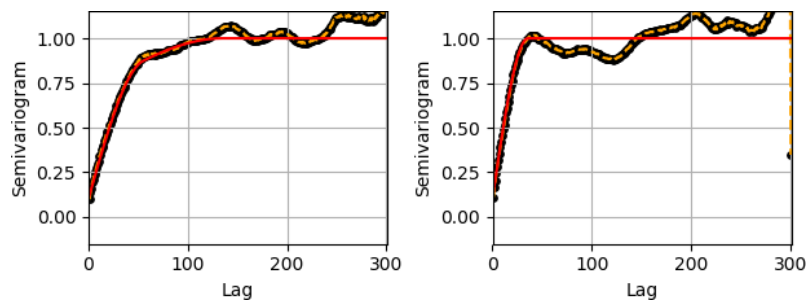
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.9 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{50\text{ m}}\right)$$

Figura 56 – Modelo variográfico com anisotropia global para P2. À esquerda para direção de maior continuidade (N157) e, à direita, para a direção de menor continuidade (N67).



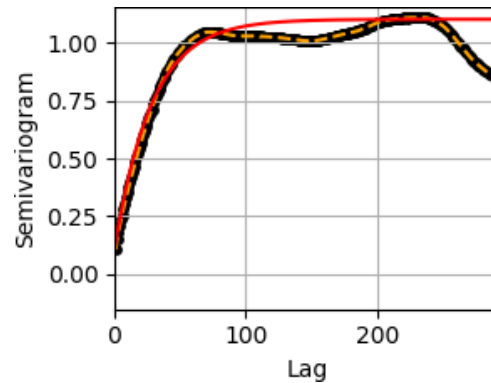
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.55 \cdot Sph\left(\frac{N\ 157}{40\text{ m}}, \frac{N\ 67}{36\text{ m}}\right) + 0.35 \cdot Sph\left(\frac{N\ 157}{200\text{ m}}, \frac{N\ 67}{36\text{ m}}\right)$$

Figura 57 – Modelo variográfico com anisotropia local para P2. À esquerda para direção de maior continuidade e, à direita, para a direção de menor continuidade.



$$\gamma(h) = 0.1 + 0.6 \cdot Sph\left(\frac{Max}{55\text{ m}}, \frac{Min}{36\text{ m}}\right) + 0.3 \cdot Sph\left(\frac{Max}{135\text{ m}}, \frac{Min}{36\text{ m}}\right)$$

Figura 58 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial para P2.



$$\gamma(h) = 0.1 + 1.0 \cdot \text{Exp} \left(\frac{Iso}{85 \text{ m}} \right)$$

5.3. ESTIMATIVAS

Com todos os parâmetros consolidados, as estimativas foram realizadas utilizando as 470 amostras. Para cada campo de anisotropia local, foram realizadas três estimativas utilizando as seguintes formas de incorporar a anisotropia local na matriz de krigagem ordinária:

- Janelas móveis (JM);
- Convolução de kernels (CK);
- Deformação espacial (DE).

Adicionalmente, foram realizadas krigagens ordinárias utilizando as formas tradicionais de isotropia global (IG) e anisotropia global (AG). Dessa forma, foram totalizadas 317 estimativas para P1 e 107 estimativas para P2.

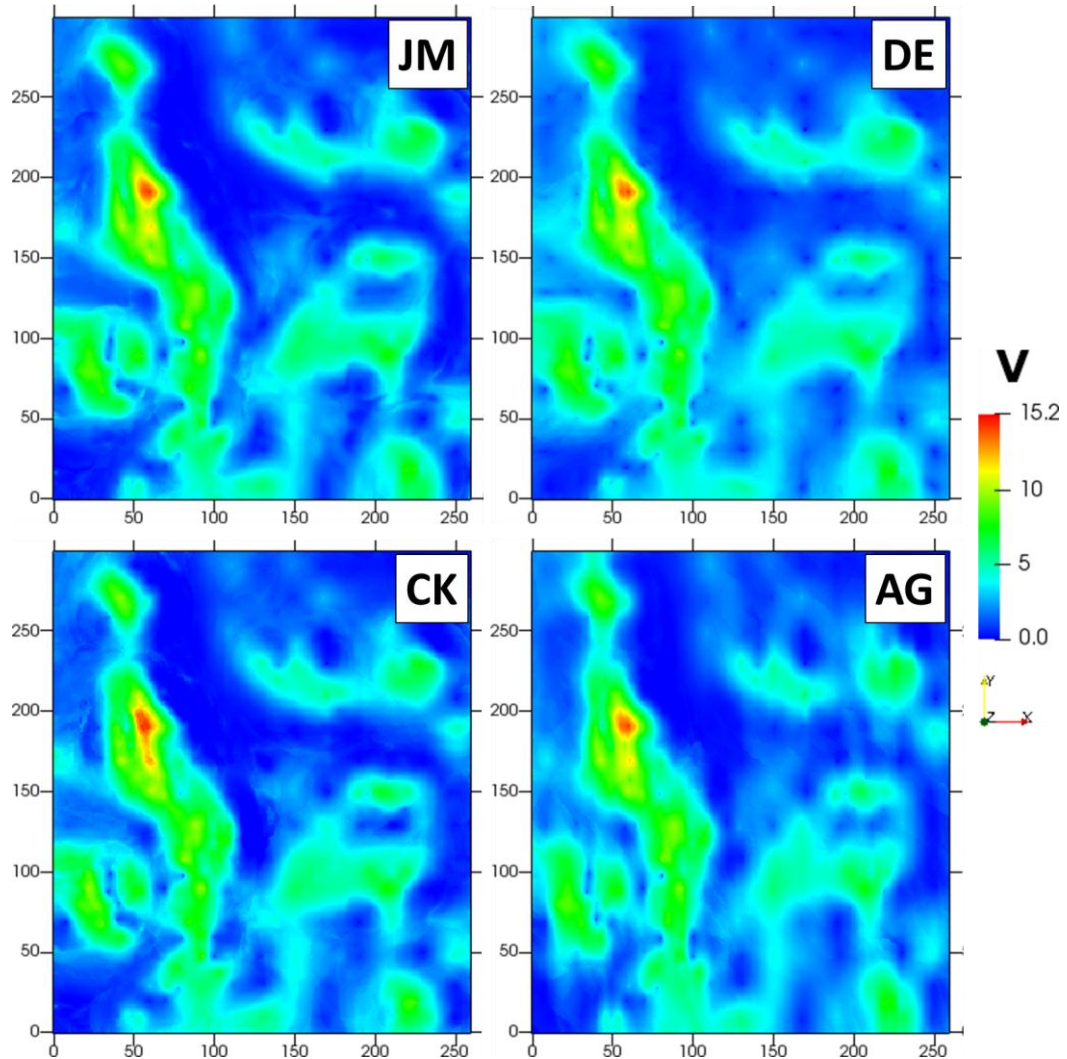
Como nesse caso há informações exaustivas para validação, todas essas estimativas foram feitas tanto no *grid* de 1x1 m como em forma de validação cruzada (*leave-one-out*) nas amostras, de modo a poder comparar os resultados. Em um caso real, todas essas estimativas seriam feitas apenas em modo de validação cruzada, do qual seria selecionado apenas o melhor campo de anisotropia local para estimativa no *grid*.

A estratégia de estimativa foi semelhante em todos os casos, com uma busca com máximo de 16 amostras dentro de uma elipse de 60x30 m para os casos anisotrópicos ou 60x60 m para os casos isotrópicos. Para JM e CK, a rotação do elipsoide de busca foi definida localmente pelo campo de anisotropia utilizado.

5.4. RESULTADOS

Todas as estimativas apresentam coerência visual. A Figura 59 mostra um cenário estimado por cada método de anisotropia local e um cenário de anisotropia global. Observa-se que são visualmente semelhantes, apenas com variações em feições locais. Nota-se claramente que há uma constante presença de feições a N157 no cenário de anisotropia global, enquanto os outros casos apresentam maior variabilidade.

Figura 59 – Exemplos de estimativas para cada método utilizando mesmo campo de anisotropia (inverso da distância ao cubo, suavizado em 20x20 m, com limite de razões anisotrópicas entre [0.3;1.0]). JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels; e AG: anisotropia global.



Os erros das estimativas foram analisados tanto via validação cruzada como contra os dados exaustivos. As métricas utilizadas para avaliação foram:

- Raiz do erro quadrático médio (REQM);
- Média do erro absoluto (MdEA);
- Mediana do erro absoluto (MnEA).

Os resultados foram representados graficamente em *boxplots*, de forma a mostrar a variação do erro para todos os cenários de anisotropia testados. Os melhores resultados foram organizados em tabela para mostrar a diferença relativa entre os métodos. Foi avaliada também como a seleção do melhor campo de anisotropia local via validação cruzada impacta no resultado final. As análises para P1 e P2 são apresentadas a seguir.

5.4.1. Conhecimento limitado da variabilidade espacial (P1)

Os resultados obtidos após as estimativas com um conhecimento limitado da variabilidade espacial na área estão representados na Figura 60, Figura 61 e Tabela 3. Algumas observações desses resultados:

- As estimativas utilizando anisotropias locais geraram menores erros do que utilizando anisotropias globais. A integração das anisotropias via JM mostrou os melhores resultados, seguido da CK.

- A estimativa via DE mostrou algumas instabilidades, com piores resultados que as outras estimativas em vários testes. Mostrou baixo REQM, mas altos MdEA e MnEA, indicando poucos erros grosseiros, mas um erro sistemático maior do que os demais.

Figura 60 – Análise dos erros das estimativas de P1 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.

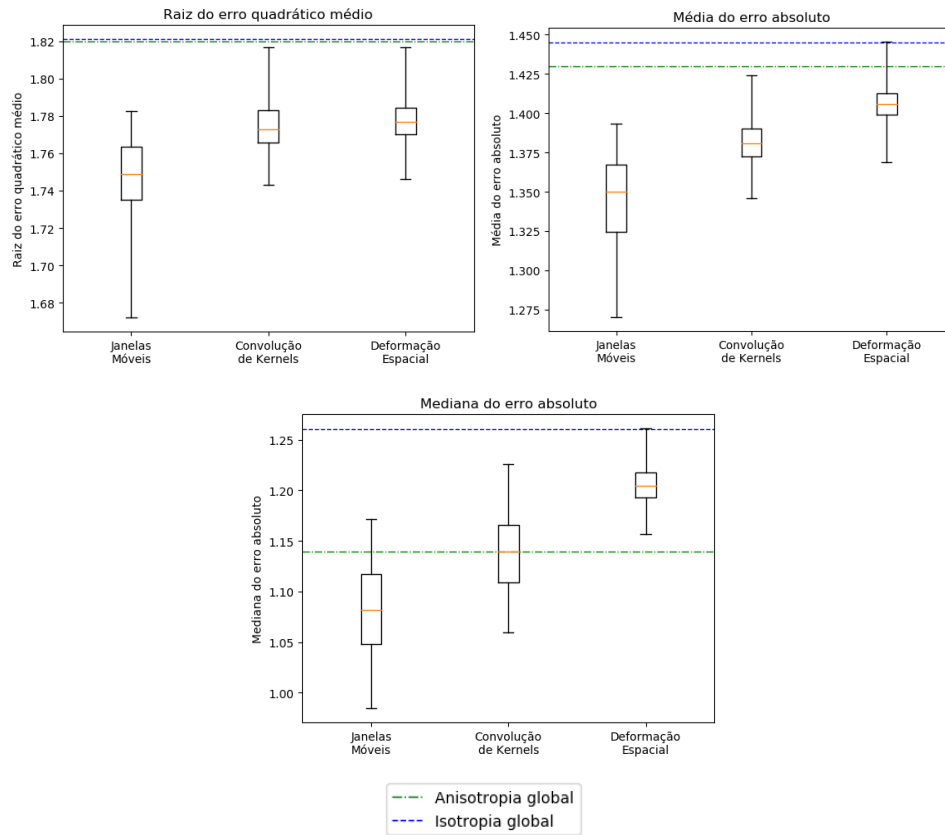


Figura 61 – Análise dos erros das estimativas de P1 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação exaustiva dos dados.

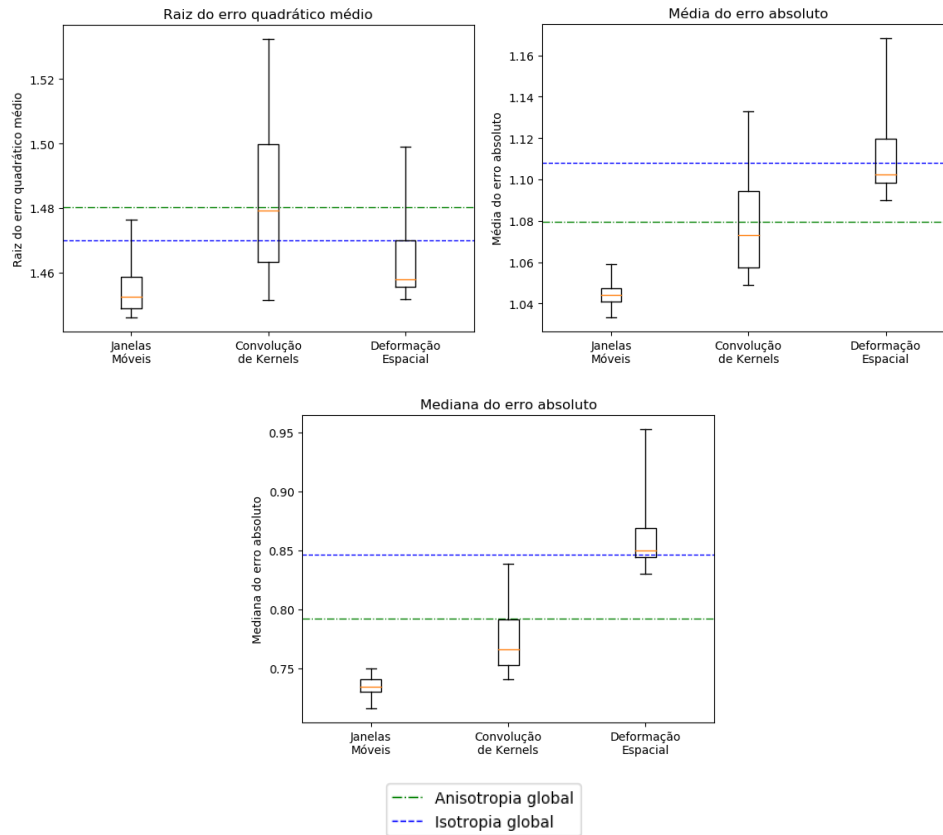


Tabela 2 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada e na validação exaustiva para P1. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para mostrar a magnitude dessas diferenças.

ERRO AVALIADO	TIPO DE VALIDAÇÃO	RANKING DOS MELHORES RESULTADOS					DIFERENÇA RELATIVA PARA O MELHOR (%)				
		JM	CK	DE	AG	IG	JM	CK	DE	AG	IG
REQM	XV	1	2	3	4	5	0.0	4.3	4.5	8.8	8.9
REQM	EX	1	2	3	5	4	0.0	0.4	0.4	2.4	1.7
MnEA	XV	1	2	4	3	5	0.0	7.6	17.5	15.7	28.0
MnEA	EX	1	2	4	3	5	0.0	3.5	16.0	10.7	18.2
MdEA	XV	1	2	3	4	5	0.0	6.0	7.8	12.6	13.7
MdEA	EX	1	2	4	3	5	0.0	1.5	5.5	4.5	7.3

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; AG: anisotropia global; IG: isotropia global; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto; XV: validação cruzada; EX: validação exaustiva.

Como forma de avaliar se a seleção dos melhores campos de anisotropia via validação cruzada seria efetiva nesse caso, foi verificado se os campos que geraram melhores resultados na validação cruzada também geraram os melhores resultados ao realizar a validação contra o cenário exaustivo. A Tabela 3 sumariza os resultados.

Tabela 3 – Lista dos campos de anisotropia que geraram melhores resultados de validação cruzada para P1, de acordo com método utilizado e erro avaliado. Foi então avaliada a performance desses campos ao realizar validação com os dados exaustivos. A diferença relativa se refere ao erro em relação ao campo anisotrópico com menor erro na validação exaustiva.

MÉTODO	ERRO AVALIADO	CAMPO ANISOTRÓPICO SELECIONADO POR XV			RANK APÓS VALIDAÇÃO EXAUSTIVA	DIFERENÇA RELATIVA (%)
		IR	JS	RA		
JM	REQM	ID3	20x20	[0.2-1.0]	80/105	0.9
JM	MnEA	ID3	20x20	[0.3-1.0]	1/105	0.0
JM	MdEA	ID3	20x20	[0.2-1.0]	12/105	0.5
CK	REQM	ID2	20x20	[0.4-1.0]	60/105	2.3
CK	MnEA	ID3	35x35	[0.4-1.0]	70/105	5.3
CK	MdEA	ID2	20x20	[0.3-1.0]	70/105	3.6
DE	REQM	ID3	20x20	[0.4-1.0]	60/105	0.5
DE	MnEA	ID2	20x20	[0.4-1.0]	22/105	1.5
DE	MdEA	ID2	20x20	[0.4-1.0]	43/105	1.1

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto; IR: imagem de referência; JS: janela de suavização; RA: limites da razão anisotrópica; ID2: inverso da distância ao quadrado; ID3: inverso da distância ao cubo; XV: validação cruzada.

Observa-se que os melhores campos de anisotropia da validação cruzada estão, em grande parte, longe dos melhores campos ao validar contra o cenário exaustivo. Por outro lado, a diferença relativa para os melhores campos é baixa, exceto para CK, que apresentou maior sensibilidade à seleção dos campos.

5.4.2. Conhecimento amplo da variabilidade espacial (P2)

Os resultados obtidos após as estimativas que assumiram um conhecimento amplo da variabilidade espacial na área estão representados na Figura 62, Figura 63 e Tabela 4. As observações feitas para P1 se aplicam também para P2: JM com melhores resultados e DE com MdAE e MnAE mais altos. Algumas diferenças extras:

- Os erros absolutos foram menores em relação às validações de P1.
- Contrário a P1, o cenário de isotropia global mostrou sistematicamente melhores resultados que o cenário de anisotropia global.

Figura 62 – Análise dos erros das estimativas de P2 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.

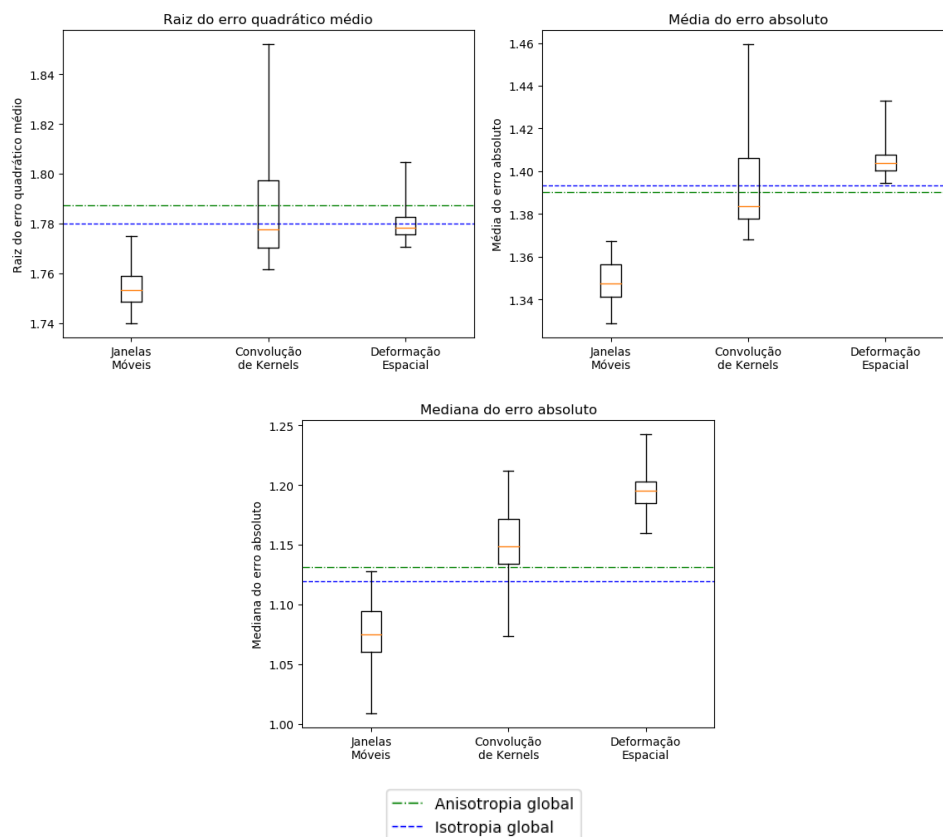


Figura 63 – Análise dos erros das estimativas de P2 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação exaustiva dos dados.

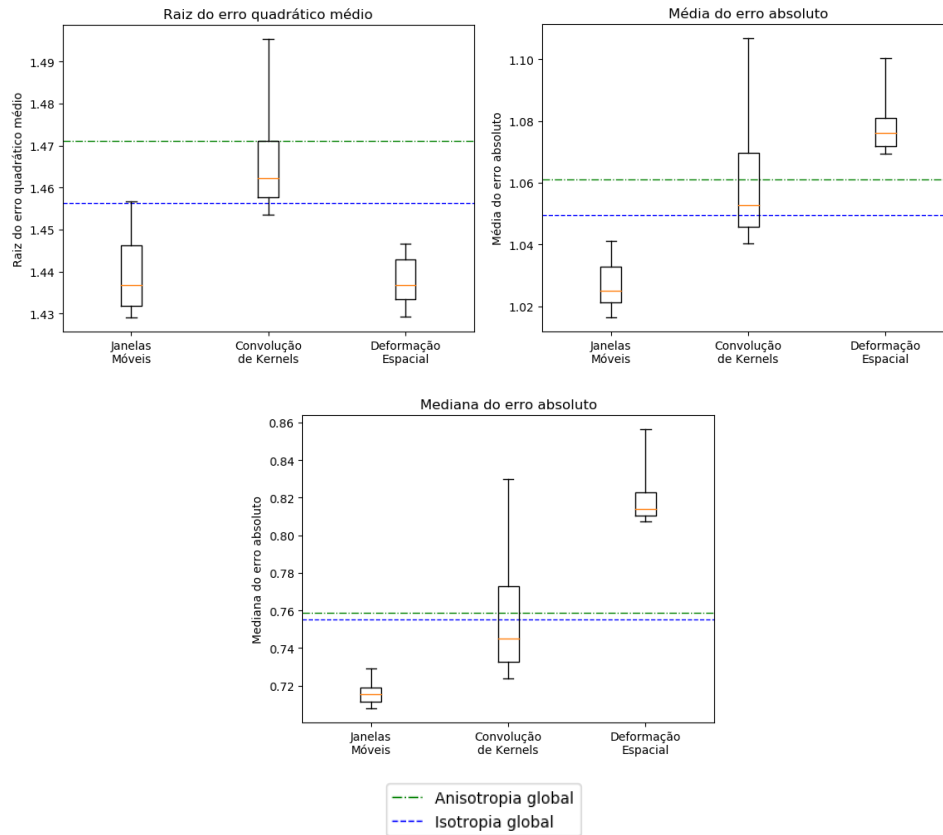


Tabela 4 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada e na validação exaustiva para P2. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para mostrar a magnitude dessas diferenças.

ERRO AVALIADO	TIPO DE VALIDAÇÃO	RANKING DOS MELHORES RESULTADOS					DIFERENÇA RELATIVA PARA O MELHOR (%)				
		JM	CK	DE	AG	IG	JM	CK	DE	AG	IG
REQM	XV	1	2	3	5	4	0.0	1.3	1.8	2.7	2.3
REQM	EX	1	3	2	5	4	0.0	1.7	0.0	2.9	1.9
MnEA	XV	1	2	5	4	3	0.0	6.4	15.0	12.2	11.0
MnEA	EX	1	2	5	4	3	0.0	2.3	14.1	7.2	6.7
MdEA	XV	1	2	5	3	4	0.0	3.0	5.0	4.6	4.9
MdEA	EX	1	2	5	4	3	0.0	2.4	5.2	4.4	3.3

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; AG: anisotropia global; IG: isotropia global; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto; XV: validação cruzada; EX: validação exaustiva.

Semelhantemente ao feito em P1, foi verificado se a seleção dos melhores campos de anisotropia via validação cruzada seria efetiva nesse caso. A Tabela 5 sumariza os resultados. Observa-se que a seleção dos melhores campos seria adequada, com baixos erros relativos em relação ao melhor cenário, exceto para DE.

Tabela 5 – Lista dos campos de anisotropia que geraram melhores resultados de validação cruzada para P2, de acordo com método utilizado e erro avaliado. Foi então avaliada a performance desses campos ao realizar validação com os dados exaustivos. A diferença relativa se refere ao erro em relação ao campo anisotrópico com menor erro na validação exaustiva.

MÉTODO	ERRO AVALIADO	CAMPO ANISOTRÓPICO SELECIONADO POR XV		RANK APÓS VALIDAÇÃO EXAUSTIVA	DIFERENÇA RELATIVA (%)
		JS	RA		
JM	REQM	20x20	[0.2-1.0]	6/35	0.1
JM	MnEA	20x20	[0.2-1.0]	5/35	0.3
JM	MdEA	20x20	[0.2-1.0]	3/35	0.1
CK	REQM	40x40	[0.8-1.0]	3/35	0.1
CK	MnEA	40x40	[0.6-1.0]	6/35	0.8
CK	MdEA	40x40	[0.7-1.0]	3/35	0.0
DE	REQM	40x40	[0.6-1.0]	16/35	0.4
DE	MnEA	40x40	[0.3-1.0]	21/35	1.2
DE	MdEA	35x35	[0.5-1.0]	7/35	0.1

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto; JS: janela de suavização; RA: limites da razão anisotrópica; XV: validação cruzada.

5.5. COMENTÁRIOS

Considerando todos os resultados de P1 e P2 integradamente, é possível chegar a algumas conclusões nesse estudo de caso:

- Estimativas com anisotropias locais geraram melhores resultados que ao utilizar anisotropia ou isotropia global.
- Mesmo sendo a maneira mais simples e menos sofisticada de integrar anisotropias locais, janelas móveis gerou consistentemente os melhores resultados em todos os cenários
- Dentre os métodos de anisotropia local, a convolução de kernels mostrou-se como mais sensível à seleção adequada do campo de anisotropia, enquanto o método das janelas móveis mostrou-se menos sensível que os demais.

- Quanto melhor o conhecimento da variabilidade espacial, melhor foi a seleção do melhor campo de anisotropia local via validação cruzada.
- Quanto melhor o conhecimento da variabilidade espacial, menores foram os erros nas estimativas.
- O método de deformação espacial gerou uma baixa quantidade de erros grosseiros, mas um erro sistemático maior que os demais.

Há também algumas ressalvas quanto a esses resultados. Eles refletem dados específicos e não devem ser generalizados para todos os casos. Por outro lado, estudos recentes reforçam algumas tendências, como a de que outros métodos de anisotropia local costumam gerar melhores resultados que a deformação espacial (MARTIN *ET AL.*, 2019; FOUEDJIO E SEGURET, 2016).

Esse estudo buscou explorar uma variada combinação de parâmetros para os testes. Ainda assim, há outros parâmetros que podem ser testados e que podem resultar em novas observações: escala do *grid*, número de amostras para estimativa, outras imagens de referência, diferentes modelos variográficos de referência, entre outros.

Por fim, os resultados foram considerados bastante satisfatórios. Foi possível demonstrar em detalhes a metodologia proposta para se extrair e utilizar as anisotropias locais nas estimativas, gerando consistentemente bons resultados. E foi possível mostrar a importância de um bom conhecimento do fenômeno espacial para uma boa estimativas.

6. ESTUDO DE CASO 3-D

Esse estudo de caso foi realizado com base em dados 3-D de sondagem do depósito mineral de Aripuanã, localizado ao norte do estado de Mato Grosso, Brasil. É um depósito de sulfetos vulcanogênicos (VMS) hospedado entre rochas metavulcânicas e metassedimentares, operado pela Nexa Resources. A mineralização é caracterizada por uma zona *stratabound* rica em Zn-Pb e uma zona *stringer* rica em Cu-Au.

Para esse estudo de caso, foram usados os intervalos mineralizados de 41 furos de sondagem feitos na região central do depósito (Figura 64 e Figura 65). Os 4 corpos *stratabound* modelados a partir desses furos foram utilizados como domínio para as estimativas. O espaçamento de sondagem nesses corpos é irregular, de modo que a distância ao furo mais próximo é de 20 m em média, chegando até 50 m. Foi utilizada apenas a variável Zn nesse estudo, que foi transformada em distribuição gaussiana de média 0 e variância 1 (total 1039 amostras, já regularizadas em 1 m).

Figura 64 – Mapa de localização do depósito (à esquerda) e representação espacial dos quatro corpos mineralizados utilizados nesse estudo, junto com as 41 sondagens (à direita).

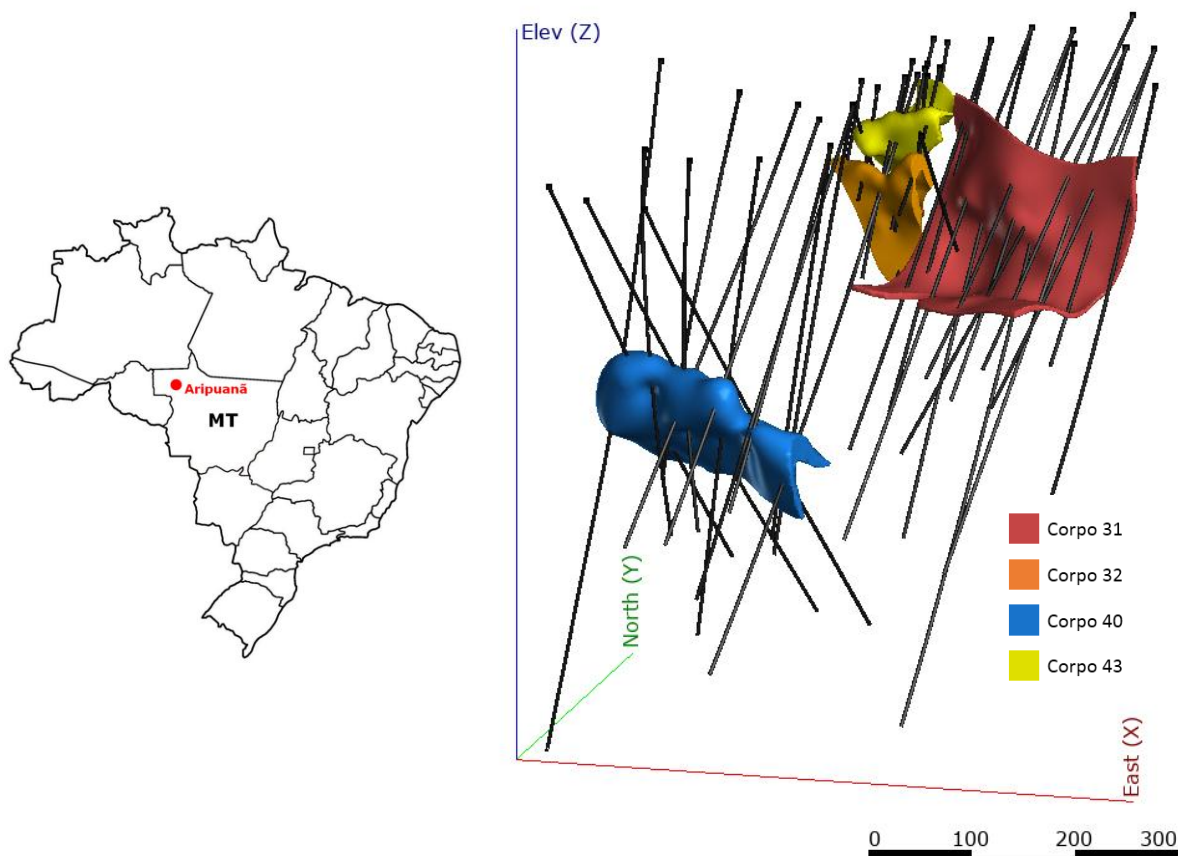
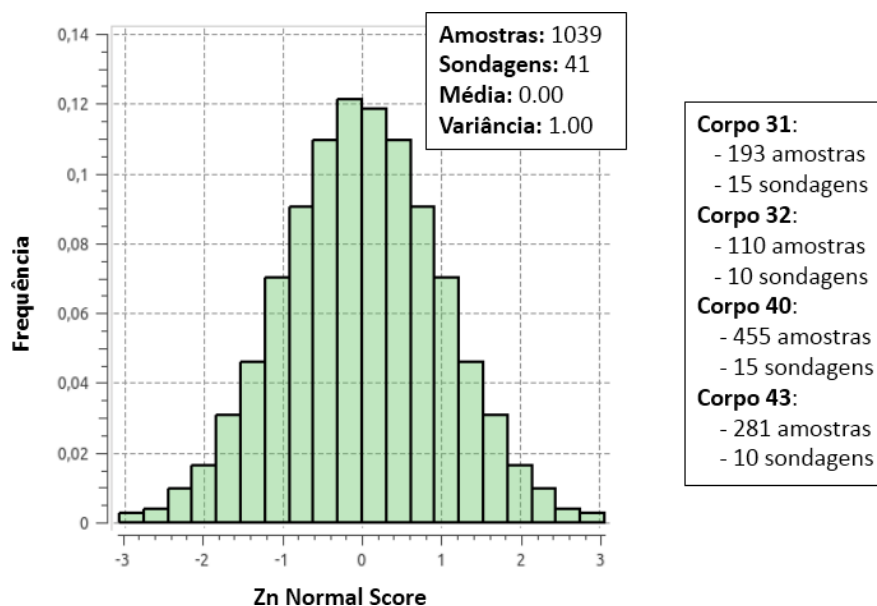


Figura 65 – Histogramas e estatísticas básicas de todas as amostras utilizadas (à esquerda) e número de amostras e furos de sondagem por corpo mineralizado (à direita). Nota-se que há furos de sondagem interceptando mais de um corpo.



Os objetivos desse estudo foram:

- Avaliar o uso de anisotropias locais em um cenário complexo geologicamente.
- Aplainar os corpos mineralizados por meio do algoritmo de coordenadas geológicas proposto no Capítulo 3.
- Demonstrar como parametrizar as anisotropias locais em 3-D, para ilustrar as metodologias propostas no Capítulo 4.
- Realizar estimativas via krigagem ordinária usando anisotropias locais em 3-D.
- Comparar os resultados gerados por meio de diferentes formas de integrar anisotropias na krigagem: isotropia global, anisotropia global, janelas móveis, convolução de kernels e deformação espacial.

O estudo foi feito em duas partes. A primeira utilizando as coordenadas reais para parametrizar as anisotropias locais e realizar as estimativas. Na segunda parte, a parametrização e estimativas foram feitas com base nas coordenadas geológicas geradas no processo de aplainamento. As seções seguintes detalham os procedimentos e os resultados obtidos.

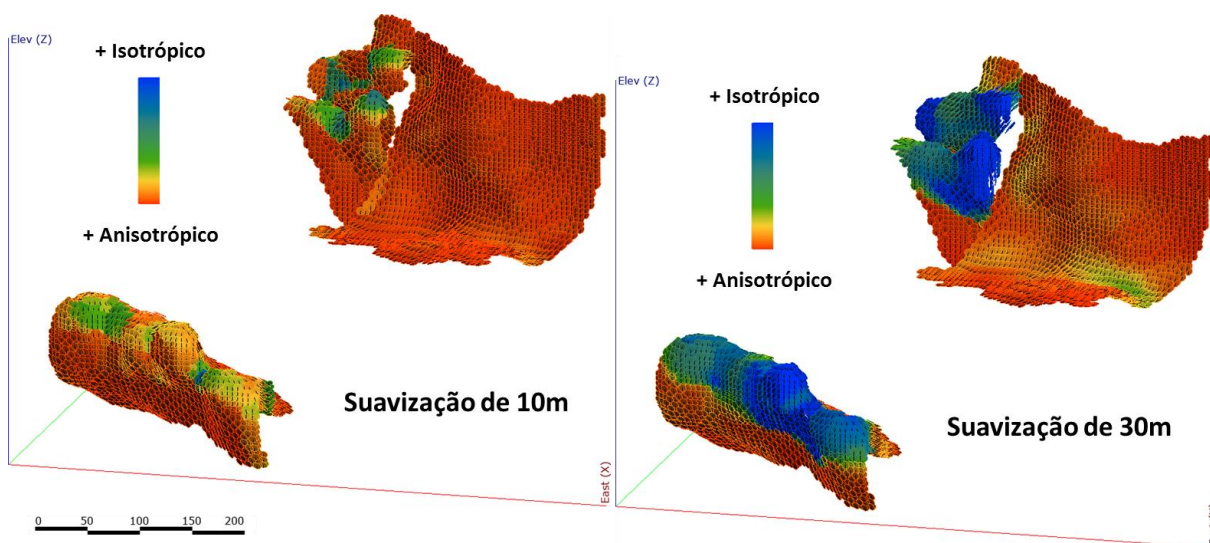
6.1. COORDENADAS REAIS

6.1.1. Direções e razões anisotrópicas

A anisotropia local foi extraída a partir do modelo de blocos dos corpos mineralizados, conforme procedimento apresentado no Capítulo 4.4.2. O modelo de blocos utilizado nesse caso foi discretizado em 1x1x1 m para que a extração da anisotropia fosse realizada em uma boa resolução.

Foi aplicado o algoritmo de esqueletização no *grid* de blocos (sobre o plano YZ, de metro em metro) para obter os pontos da superfície de referência central de cada corpo mineralizado. O PCA foi então aplicado utilizando esses pontos para encontrar o plano de maior continuidade e estimar a razão anisotrópica entre os eixos de anisotropia. Ele foi aplicado dentro de janelas de 10 m, 20 m e 30 m de modo a gerar múltiplos cenários para avaliação (Figura 66). Assumiu-se uma magnitude da anisotropia igual nos dois eixos maiores. E a razão dos eixos maiores com o eixo menor foi limitada dentro de três possíveis intervalos: [0.05;1.0], [0.15;1.0], [0.25;1.0]. Dessa maneira, foram totalizados 9 campos de anisotropia local para serem avaliados via validação cruzada mais adiante.

Figura 66 – Dois exemplos de campos de anisotropia extraídos do sólido geológico. À esquerda, com uma janela de suavização de 10 m. À direita, com uma janela de suavização de 30 m. A magnitude da anisotropia local foi limitada em [0.2;1.0] nos dois casos.



6.1.2. Variografia

Foram ajustados quatro modelos variográficos para realizar as estimativas desejadas. Eles são referentes aos seguintes casos:

- Isotropia global.
- Anisotropia global.
- Anisotropia local para janelas móveis e convolução de kernels.
- Isotropia global após deformação espacial.

Para a variografia considerando anisotropia local, foi utilizada a metodologia do Capítulo 4.4.3. Nos outros casos, a variografia segue o procedimento padrão.

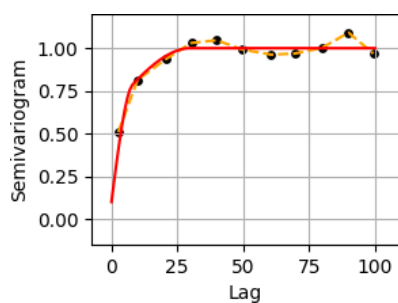
As amostras dos quatro corpos mineralizados foram utilizadas conjuntamente na variografia, porém foram ignorados pares de amostras de corpos diferentes. Foram considerados 10 *lags* de 10 m (tolerância de ± 5 m). Para os casos anisotrópicos, a variografia sobre o plano de maior continuidade foi feita considerando uma tolerância angular vertical de 45° , uma banda vertical de 5 m e não foram aplicadas restrições horizontais (tolerância de 90°); para o eixo menor, foram considerados 50 *lags* de 1 m (tolerância de ± 0.5 m), uma tolerância angular de 45° e uma banda de 5 m.

Para os casos de anisotropia local e deformação espacial, foi utilizado como referência o campo de anisotropia local gerado com a janela de suavização de 30 m. Para os cenários de anisotropia global, foram utilizadas as os elipsoides definidos na Tabela 6. Os modelos variográficos são apresentados a seguir (Figura 67 até Figura 70).

Tabela 6 – Elipsoides utilizados nos casos de anisotropia global para cada corpo em coordenadas reais.

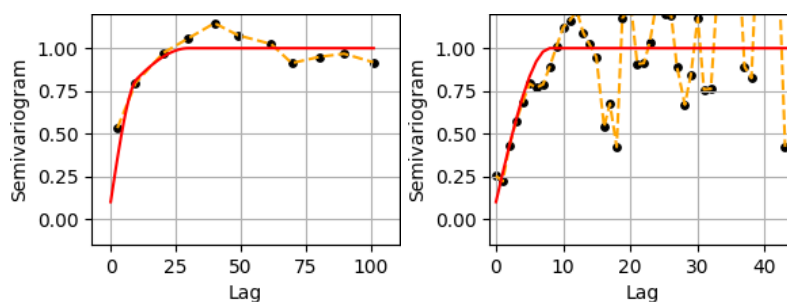
Domínio	Ângulos de rotação do elipsoide (ang1/ang2/ang3)
Corpo 31	211/-58/0
Corpo 32	36/-81/0
Corpo 40	32/-53/0
Corpo 43	232/-52/0

Figura 67 – Modelo variográfico com isotropia global. Cenário utilizando coordenadas reais.



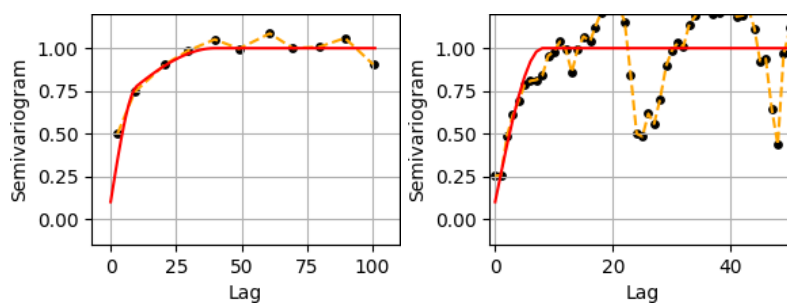
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.55 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{8m}\right) + 0.35 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{30m}\right)$$

Figura 68 – Modelo variográfico com anisotropia global. Cenário utilizando coordenadas reais. À esquerda, para o plano de maior continuidade (eixo maior e intermediário) e, à direita, para o eixo de menor continuidade.



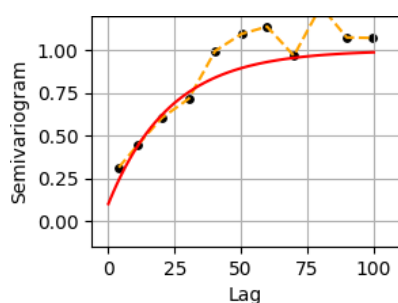
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.55 \cdot Sph\left(\frac{Max}{10m}, \frac{Med}{10m}, \frac{Min}{8m}\right) + 0.35 \cdot Sph\left(\frac{Max}{30m}, \frac{Med}{30m}, \frac{Min}{8m}\right)$$

Figura 69 – Modelo variográfico com anisotropia local. Cenário utilizando coordenadas reais. À esquerda, para o plano de maior continuidade (eixo maior e intermediário) e, à direita, para o eixo de menor continuidade.



$$\gamma(h) = 0.1 + 0.55 \cdot Sph\left(\frac{Max}{10m}, \frac{Med}{10m}, \frac{Min}{8m}\right) + 0.35 \cdot Sph\left(\frac{Max}{40m}, \frac{Med}{40m}, \frac{Min}{8m}\right)$$

Figura 70 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial. Cenário utilizando coordenadas reais.



$$\gamma(h) = 0.1 + 0.9 \cdot \text{Exp} \left(\frac{Iso}{70 \text{ m}} \right)$$

6.2. COORDENADAS GEOLÓGICAS

O processo de gerar coordenadas geológicas para aplanar os corpos mineralizados foi feito conforme procedimento apresentado no Capítulo 3. Cada um dos quatro corpos mineralizados foram tratados separadamente. As informações iniciais para o algoritmo foram o *grid* de blocos do corpo (em 1x1x1 m) e as suas respectivas amostras.

A esqueletização inicial foi realizada sobre o plano YZ (de metro em metro) e a superfície central foi usada como referência para o aplainamento. O MDS foi aplicado com 800 pontos de ancoragem e os demais pontos foram alocados espacialmente via algoritmo de otimização (L-BFGS) para minimizar o erro e preservar as distâncias originais entre as oito amostras mais próximas. O resultado visual das transformações estão ilustrados a seguir (Figura 71 até Figura 74). A Figura 75 resume os erros entre amostras próximas após transformação de coordenadas.

Figura 71 – Vista em planta do corpo 31 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.

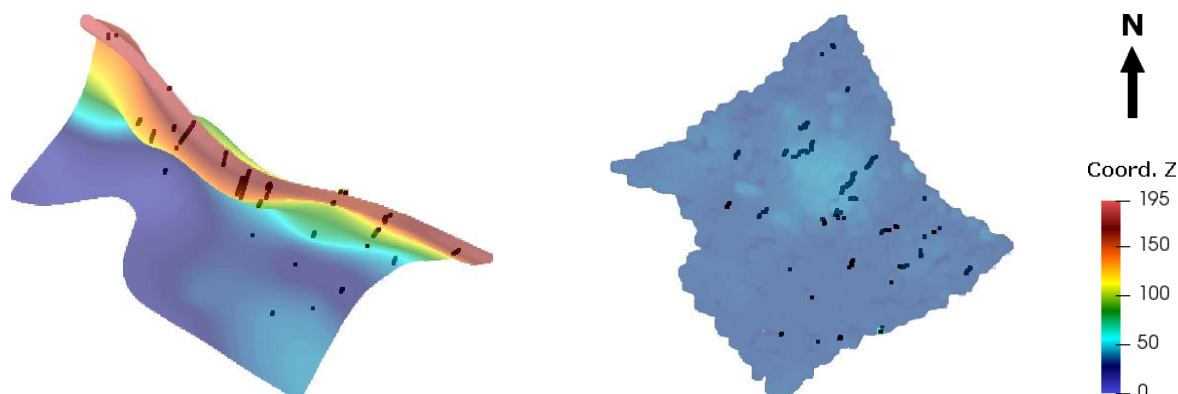


Figura 72 – Vista em planta do corpo 32 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.

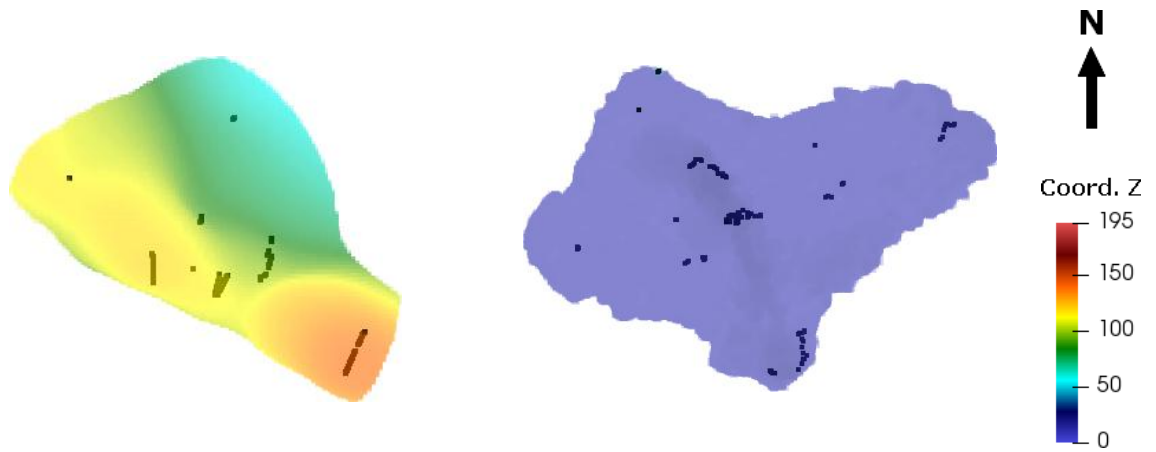


Figura 73 – Vista em planta do corpo 40 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.

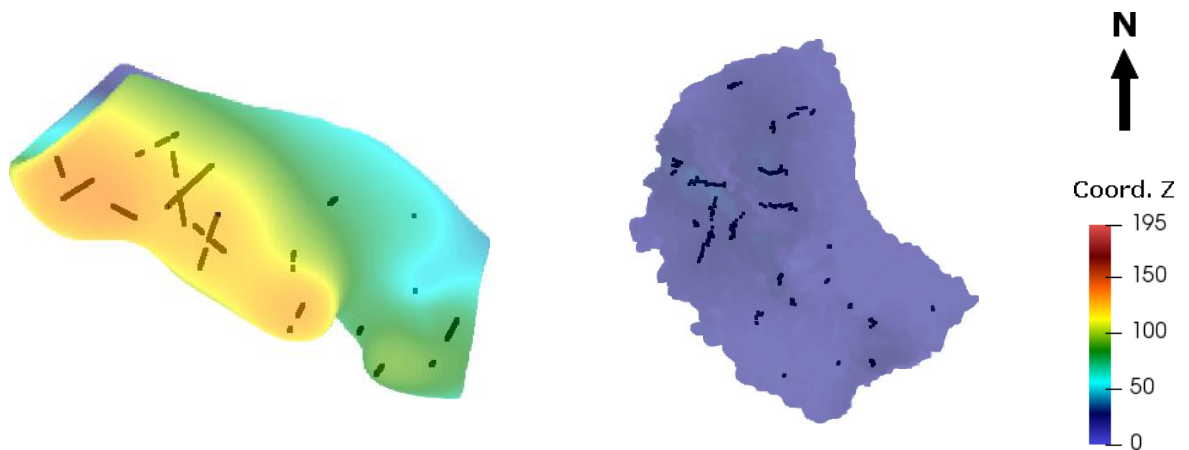


Figura 74 – Vista em planta do corpo 43 em coordenadas reais (à esquerda) e em coordenadas geológicas (à direita). A coordenada Z mínima foi ajustada para zero nos dois casos para ajudar na visualização. Os pontos pretos representam as amostras de sondagem.

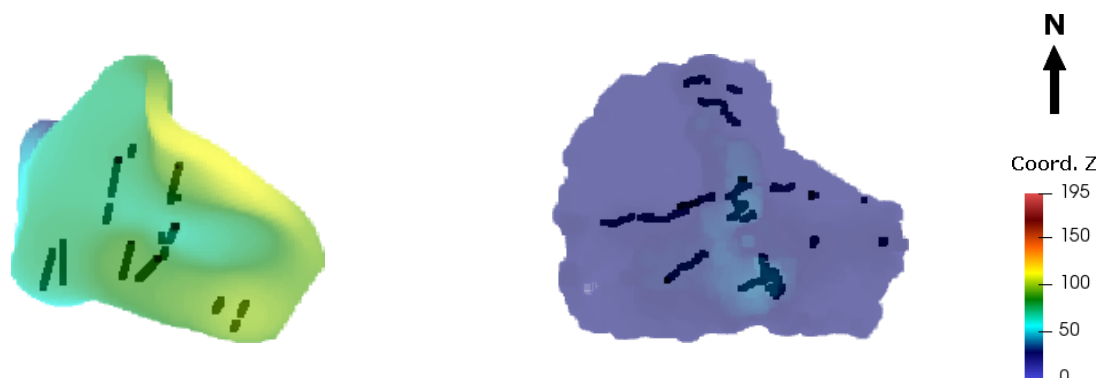
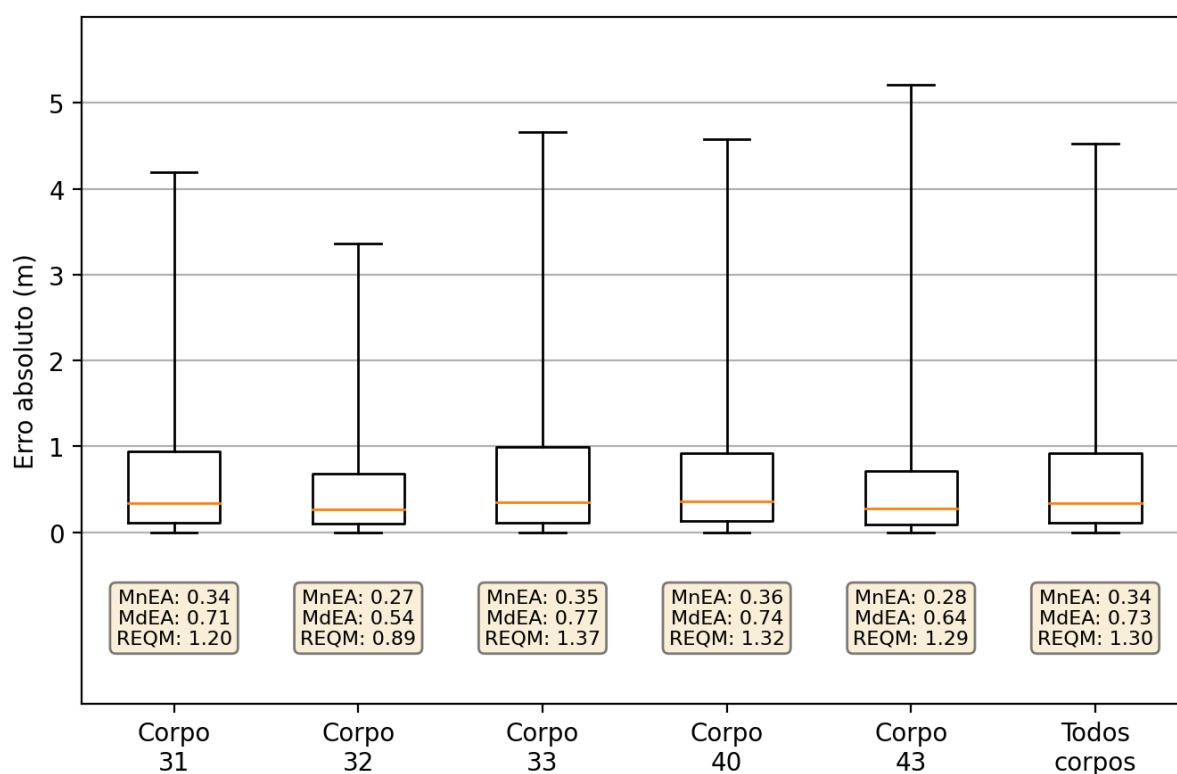


Figura 75 – *Boxplots* do deslocamento entre pontos próximos após transformação de coordenadas. O erro absoluto é calculado pela diferença entre a distância calculada com coordenadas reais e coordenadas geológicas. Validação feita com as distâncias entre cada um dos 5 vizinhos mais próximos de todos os blocos e amostras.

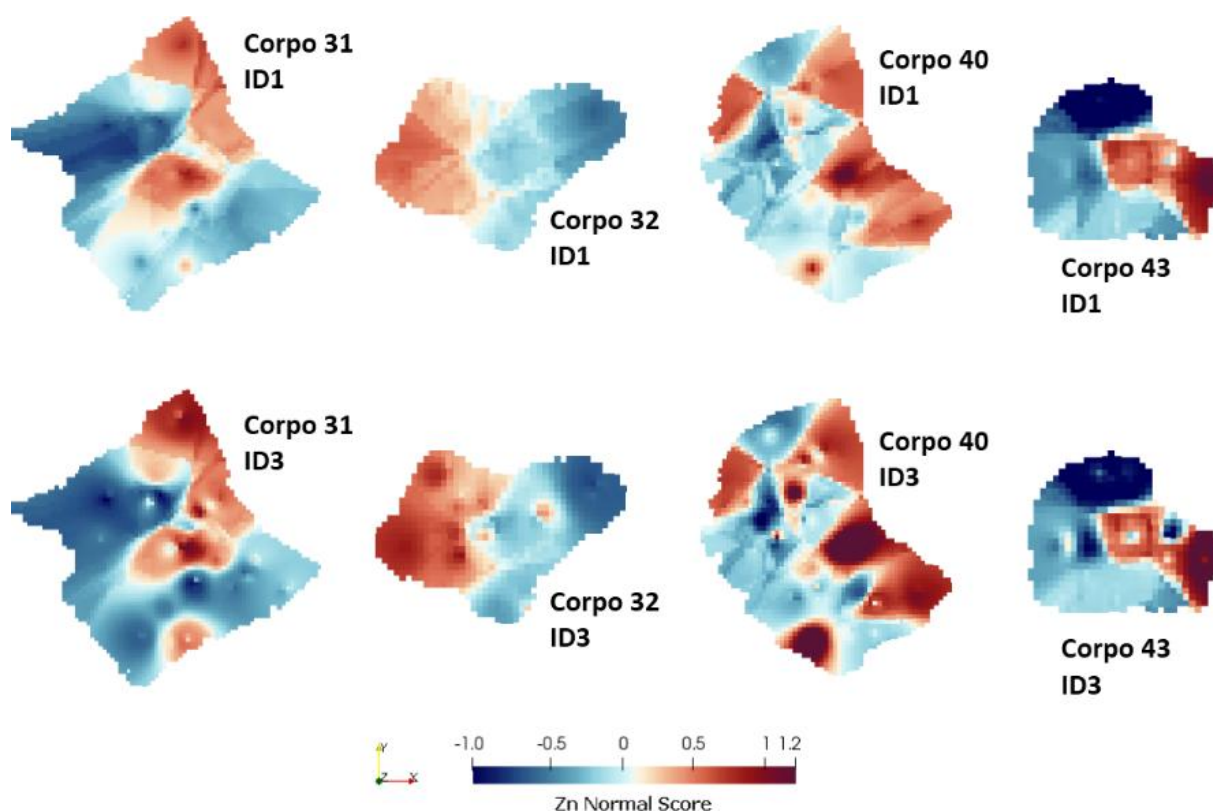


6.2.1. Direções e razões anisotrópicas

Inicialmente, foi criado um novo *grid* 5x5x5 m para cobrir todas os dados em coordenadas geológicas (após transformação, o *grid* original perde sua estruturação regular).

Esse novo *grid* foi utilizado para gerar imagens de referência e extrair as direções e magnitude da anisotropia via gradientes. Para isso, as amostras foram interpoladas via inverso da distância, com um máximo de 36 amostras em um raio de 80 m. As interpolações foram realizadas com diferentes expoentes (1, 2 e 3), resultando em três modelos para inferir a anisotropia local (Figura 76).

Figura 76 – Algumas imagens de referência geradas para extrair campos de anisotropia local. Geradas por inverso da distância (acima) e inverso da distância ao cubo (abaixo).



Na sequência, o algoritmo de gradientes foi utilizado para gerar diferentes campos de anisotropia local. Para cada uma das imagens de referência, o algoritmo foi aplicado com três diferentes janelas de suavização (20 m, 30 m e 40 m), gerando 9 campos preliminares. Nesses campos, a magnitude da anisotropia foi processada de modo a limitar as razões anisotrópicas entre eixo maior e intermediário dentro de quatro possíveis intervalos: [0.2;1.0], [0.3;1.0], [0.4;1.0] e [0.5;1.0]. A razão anisotrópica entre o eixo menor e maior foi fixada em 0.2. Dessa maneira, foram totalizados 36 campos de anisotropia local. A Figura 77 e a Figura 78 mostram exemplos desses campos de anisotropia para cada um dos quatro corpos mineralizados.

Figura 77 – Exemplos de campos de anisotropia dos corpos 31 e 32, extraídos das imagens de referência (ID1: inverso da distância; ID3: inverso da distância ao cubo). À esquerda, com uma janela de suavização de 20 m. À direita, com uma janela de suavização de 40 m.

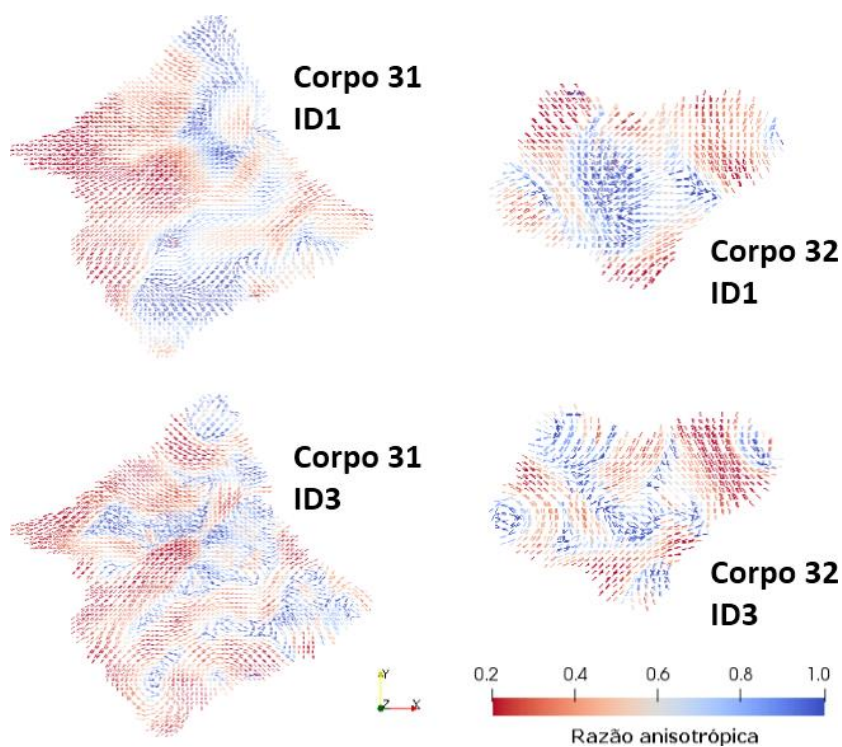
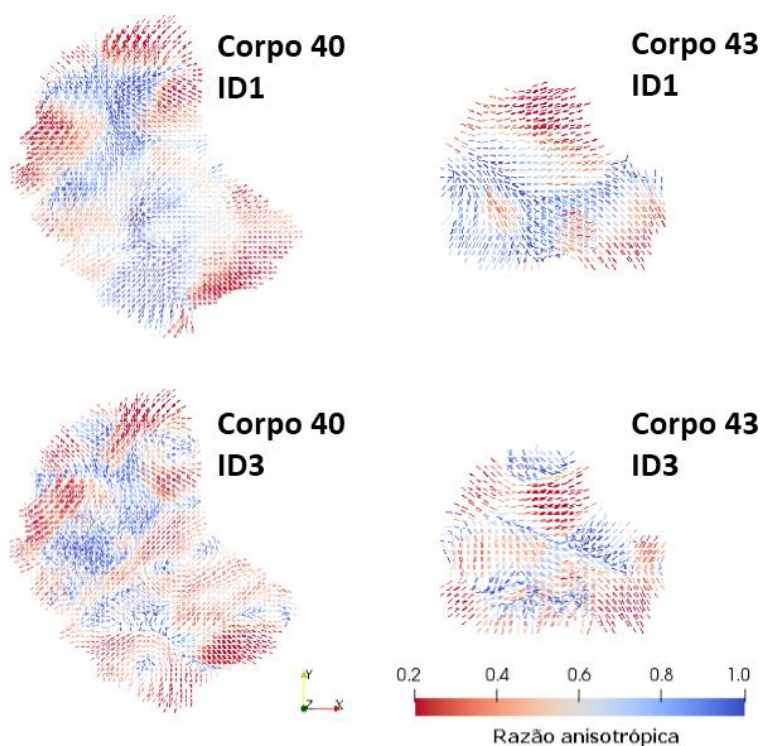


Figura 78 – Exemplos de campos de anisotropia dos corpos 40 e 43, extraídos das imagens de referência (ID1: inverso da distância; ID3: inverso da distância ao cubo). À esquerda, com uma janela de suavização de 20 m. À direita, com uma janela de suavização de 40 m.



6.2.2. Variografia

Foram ajustados quatro modelos variográficos para realizar as estimativas desejadas. Eles são referentes aos seguintes casos:

- Isotropia global.
- Anisotropia global.
- Anisotropia local para janelas móveis e convolução de kernels.
- Isotropia global após deformação espacial.

Para a variografia considerando anisotropia local, foi utilizada a metodologia do Capítulo 4.4.3. Nos outros casos, a variografia segue o procedimento padrão.

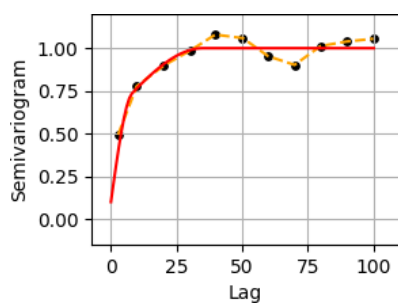
As amostras dos quatro corpos mineralizados foram utilizadas conjuntamente na variografia, porém foram ignorados pares de amostras de corpos diferentes. Foram considerados 10 *lags* de 10 m (tolerância de ± 5 m). Para os casos anisotrópicos, a variografia nos dois eixos de maior continuidade foi feita considerando uma tolerância angular horizontal de 30° , banda horizontal de 10 m, tolerância angular vertical de 30° e uma banda vertical de 5 m; para o eixo menor, foram considerados 50 *lags* de 1 m (tolerância de ± 0.5 m), uma tolerância angular de 45° e uma banda de 5 m

Para os casos de anisotropia local e deformação espacial, foi utilizado como referência o campo de anisotropia local gerado em cima do modelo de inverso da distância ao quadrado, com janela de suavização de 30 m. Para os cenários de anisotropia global, foram utilizadas as elipsóides definidas na Tabela 7. Os modelos variográficos são apresentados a seguir (Figura 67 até Figura 70).

Tabela 7 – Elipsóides utilizados nos casos de anisotropia global para cada corpo em coordenadas geológicas.

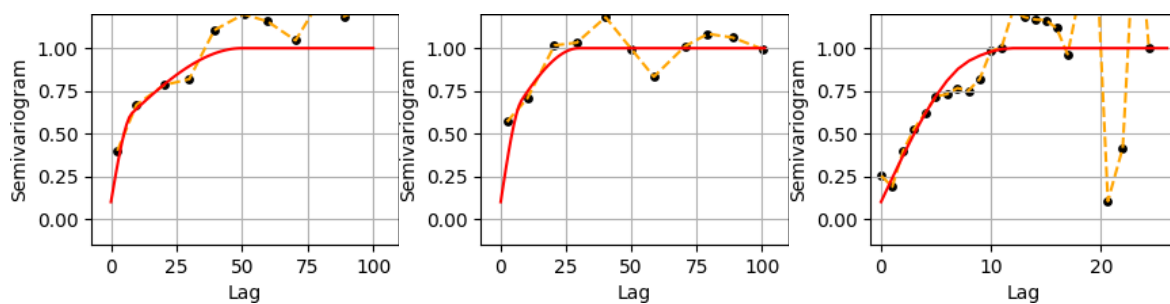
Domínio	Ângulos de rotação do elipsoide (ang1/ang2/ang3)
Corpo 31	86/0/0
Corpo 32	60/0/0
Corpo 40	44/0/0
Corpo 43	145/0/0

Figura 79 – Modelo variográfico com isotropia global. Cenário utilizando coordenadas geológicas.



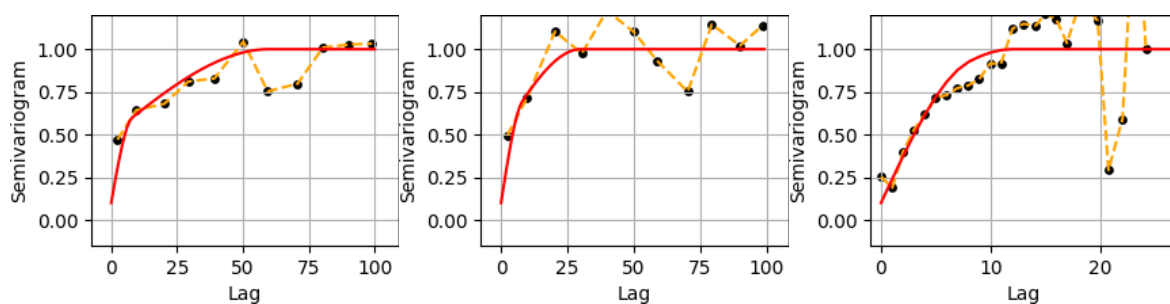
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.5 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{8m}\right) + 0.4 \cdot Sph\left(\frac{Iso}{35m}\right)$$

Figura 80 – Modelo variográfico com anisotropia global. Cenário utilizando coordenadas geológicas. Da esquerda para direita estão representados, respectivamente, os modelos nos eixos de maior continuidade, continuidade intermediária e menor continuidade.



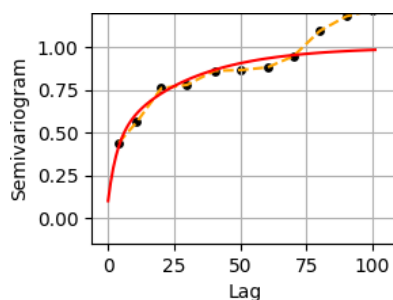
$$\gamma(h) = 0.1 + 0.4 \cdot Sph\left(\frac{Max}{8m}, \frac{Med}{8m}, \frac{Min}{8m}\right) + 0.5 \cdot Sph\left(\frac{Max}{50m}, \frac{Med}{30m}, \frac{Min}{12m}\right)$$

Figura 81 – Modelo variográfico com anisotropia local. Cenário utilizando coordenadas geológicas. Da esquerda para direita estão representados, respectivamente, os modelos nos eixos de maior continuidade, continuidade intermediária e menor continuidade.



$$\gamma(h) = 0.1 + 0.4 \cdot Sph\left(\frac{Max}{8m}, \frac{Med}{8m}, \frac{Min}{8m}\right) + 0.5 \cdot Sph\left(\frac{Max}{60m}, \frac{Med}{30m}, \frac{Min}{12m}\right)$$

Figura 82 – Modelo variográfico com isotropia global após deformação espacial. Cenário utilizando coordenadas geológicas.



$$\gamma(h) = 0.1 + 0.35 \cdot \text{Exp} \left(\frac{Iso}{10 \text{ m}} \right) + 0.55 \cdot \text{Exp} \left(\frac{Iso}{80 \text{ m}} \right)$$

6.3. ESTIMATIVAS

Com todos os parâmetros consolidados, as estimativas foram realizadas na forma de validação cruzada, estimando cada amostra já conhecida. Para isso, foram consideradas todas as outras amostras disponíveis do corpo mineralizado, exceto as amostras do mesmo furo que estivessem a uma distância menor que 5 m da amostra a ser estimada.

Para cada campo de anisotropia local gerado nos cenários de coordenadas reais e coordenadas geológicas, foram realizadas estimativas utilizando as seguintes formas de incorporar a anisotropia local na matriz de krigagem ordinária:

- Janelas móveis (JM);
- Convolução de kernels (CK);
- Deformação espacial (DE).

Adicionalmente, foram realizadas krigagens ordinárias utilizando as formas tradicionais de isotropia global (IG) e anisotropia global (AG).

Foram testadas diferentes estratégias de estimativa, com máximo de 12, 24 e 36 amostras dentro de um elipsoide de 80x80x20 m para os casos anisotrópicos ou 80x80x80 m para os casos isotrópicos. Para JM e CK, a rotação do elipsoide de busca foi definida localmente pelo campo de anisotropia utilizado e em AG os elipsoides foram rotacionados tal como informado nas Tabela 6 e Tabela 7.

Ao fim, foram totalizadas 417 estimativas em validação cruzada, das quais 87 foram feitas com coordenadas reais e 330 com coordenadas geológicas. Após analisar os melhores

resultados de validação cruzada, foi realizada a estimativa de todos corpos mineralizado em um *grid* de blocos 5x5x5 m utilizando os parâmetros dos melhores cenário de validação cruzada.

6.4. RESULTADOS

Os resultados das validações cruzadas foram analisados considerando as seguintes métricas para avaliar o erro da estimativa:

- Raiz do erro quadrático médio (REQM);
- Média do erro absoluto (MdEA);
- Mediana do erro absoluto (MnEA).

Os resultados foram representados graficamente em *boxplots*, de forma a mostrar a variação do erro para todos os cenários de anisotropia testados (Figura 83 a Figura 86). As análises foram feitas para cada corpo separadamente. Os melhores resultados foram organizados em tabelas para mostrar a diferença relativa entre os métodos (Tabela 8 e Tabela 9).

Para cada corpo e método de estimativa, foram selecionados os campos anisotrópicos e estratégias de estimativa com melhores resultados na validação cruzada. Como critério de seleção, foi selecionada a estratégia que minimizou o REQM (Tabela 10). Foi feita uma análise comparativa dos erros semelhante a anterior, mas agora considerando todos corpos conjuntamente e já considerando o melhor cenário por método. Os resultados são apresentados na Tabela 11 e Figura 87.

Na sequência, as estratégias e campos anisotrópicos apresentados na Tabela 10 foram utilizados para estimar cada corpo por completo para análise visual (Figura 88 até Figura 91).

Figura 83 – Análise dos erros das estimativas do corpo 31 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.

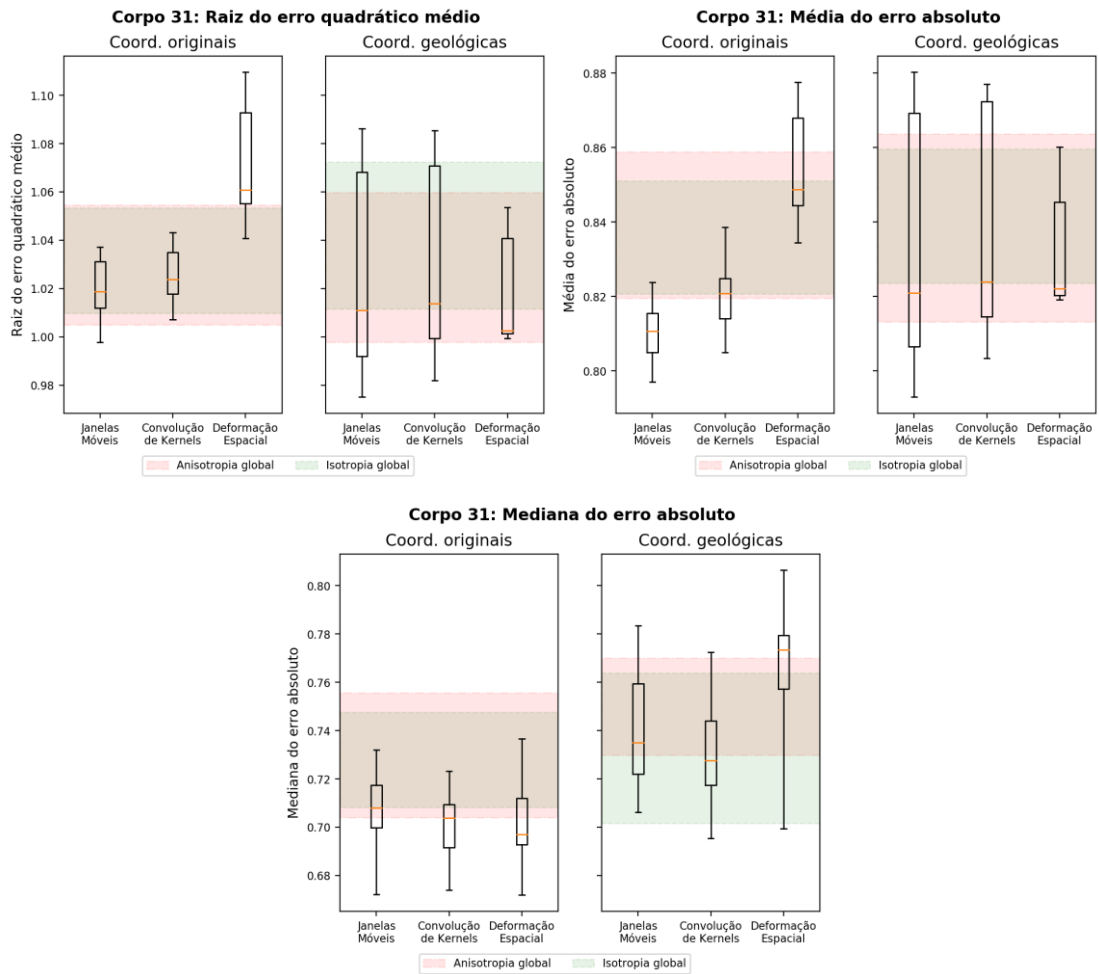


Figura 84 – Análise dos erros das estimativas do corpo 32 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.

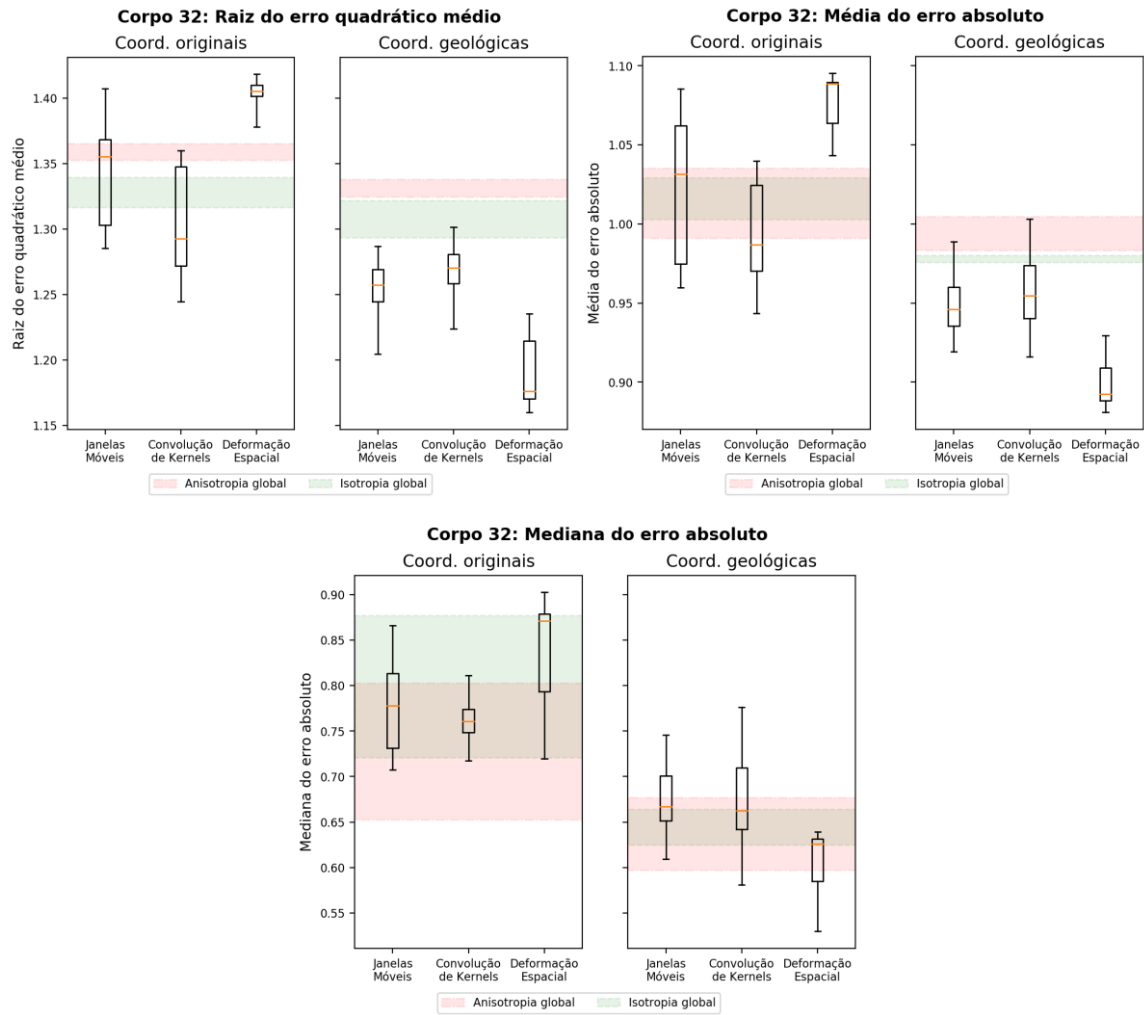


Figura 85 – Análise dos erros das estimativas do corpo 40 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.

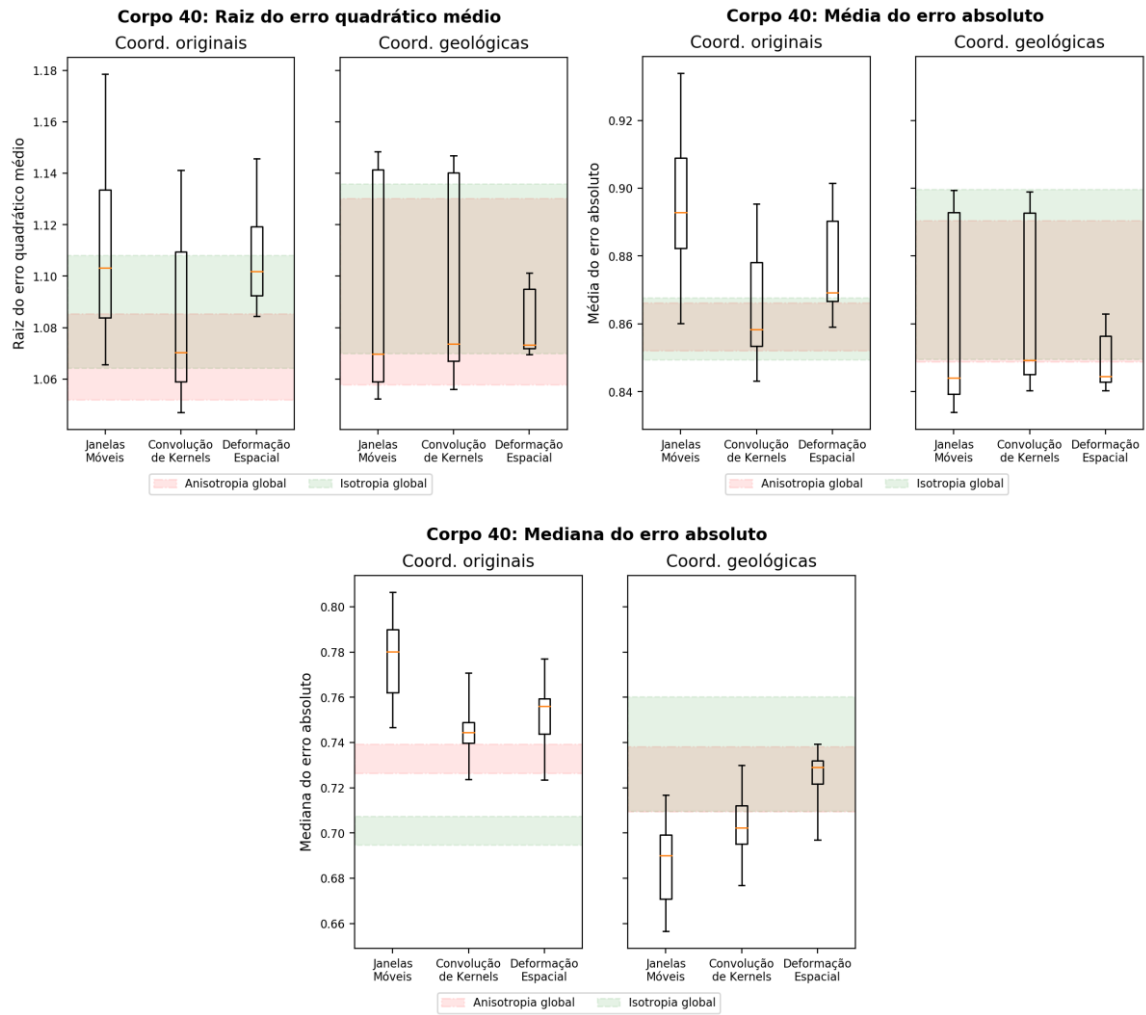


Figura 86 – Análise dos erros das estimativas do corpo 43 para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras.

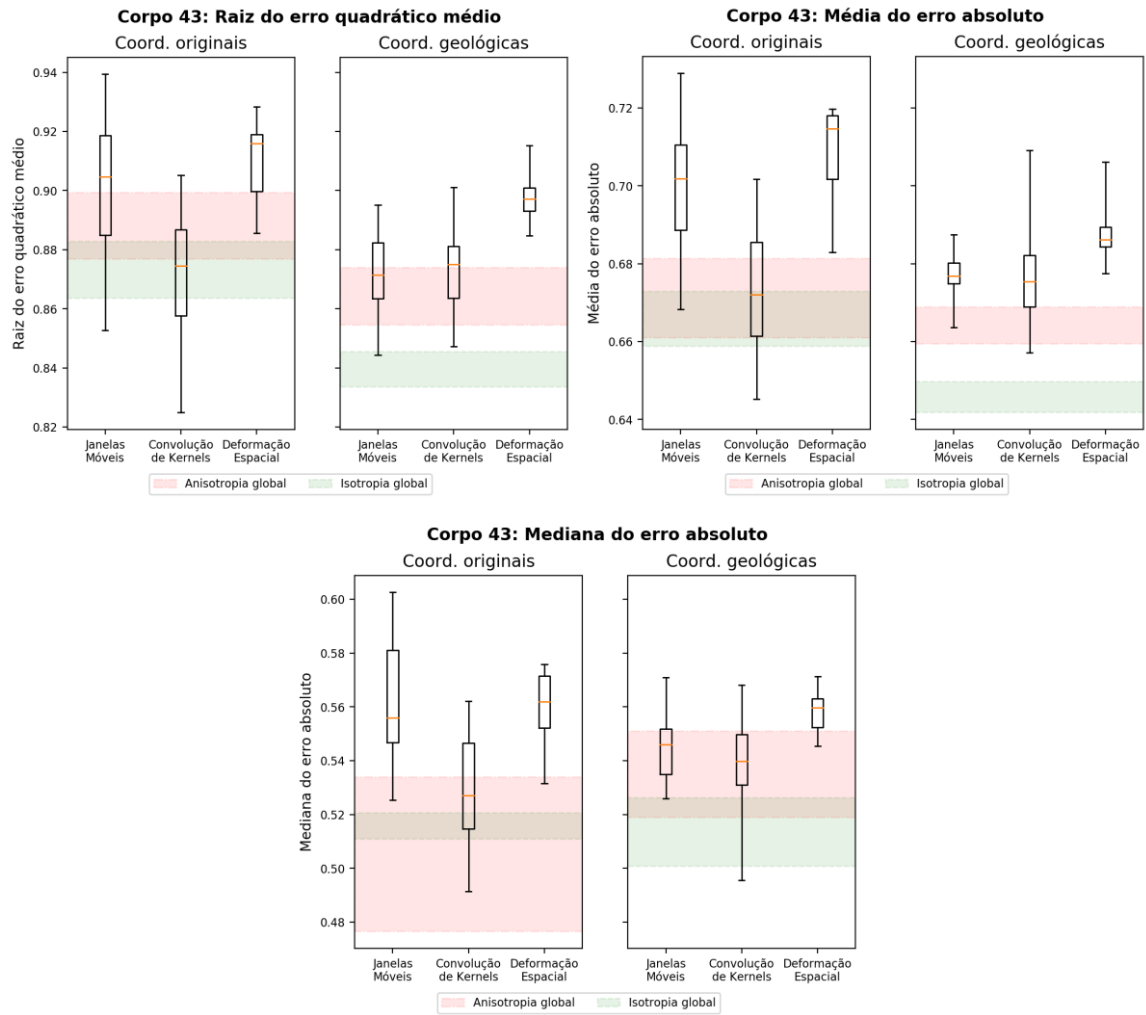


Tabela 8 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada com coordenadas reais. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para quantificar essas diferenças.

CORPO	ERRO AVALIADO	TIPO DE COORD.	RANKING DOS MELHORES RESULTADOS					DIFERENÇA RELATIVA PARA O MELHOR (%)				
			JM	CK	DE	AG	IG	JM	CK	DE	AG	IG
31	REQM	Real	1	3	5	2	4	0.0	1.0	4.3	0.7	1.2
	MdEA	Real	1	2	5	3	4	0.0	1.0	4.7	2.8	3.0
	MnEA	Real	2	3	1	4	5	0.0	0.3	0.0	4.8	5.4
32	REQM	Real	2	1	5	4	3	3.3	0.0	10.7	8.7	5.8
	MdEA	Real	2	1	5	3	4	1.7	0.0	10.6	5.0	6.3
	MnEA	Real	2	3	4	1	5	8.5	10.0	10.3	0.0	10.5
40	REQM	Real	4	1	5	2	3	1.8	0.0	3.6	0.5	1.7
	MdEA	Real	5	1	4	3	2	2.0	0.0	1.9	1.1	0.7
	MnEA	Real	5	3	2	4	1	7.5	4.2	4.1	4.6	0.0
43	REQM	Real	2	1	5	4	3	3.4	0.0	7.3	6.3	4.7
	MdEA	Real	4	1	5	3	2	3.6	0.0	5.8	2.5	2.1
	MnEA	Real	4	2	5	1	3	10.2	3.1	11.5	0.0	7.2

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; AG: anisotropia global; IG: isotropia global; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto.

Tabela 9 – Avaliação dos métodos que geraram menores erros na validação cruzada com coordenadas geológicas. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao menor erro dos outros métodos para quantificar essas diferenças.

CORPO	ERRO AVALIADO	TIPO DE COORD.	RANKING DOS MELHORES RESULTADOS					DIFERENÇA RELATIVA PARA O MELHOR (%)				
			JM	CK	DE	AG	IG	JM	CK	DE	AG	IG
31	REQM	Geológica	1	2	4	3	5	0.0	0.7	2.5	2.3	3.8
	MdEA	Geológica	1	2	4	3	5	0.0	1.3	3.3	2.5	3.9
	MnEA	Geológica	4	1	2	5	3	1.6	0.0	0.6	5.0	0.9
32	REQM	Geológica	2	3	1	5	4	3.8	5.5	0.0	14.2	11.5
	MdEA	Geológica	3	2	1	5	4	4.4	4.0	0.0	11.6	10.7
	MnEA	Geológica	4	2	1	3	5	15.0	9.6	0.0	12.7	17.9
40	REQM	Geológica	1	2	4	3	5	0.0	0.4	1.6	0.5	1.7
	MdEA	Geológica	1	2	3	4	5	0.0	0.8	0.8	1.8	1.9
	MnEA	Geológica	1	2	3	4	5	0.0	3.1	6.2	8.1	8.1
43	REQM	Geológica	2	3	5	4	1	1.3	1.6	6.1	2.5	0.0
	MdEA	Geológica	4	2	5	3	1	3.4	2.4	5.6	2.8	0.0
	MnEA	Geológica	4	1	5	3	2	6.1	0.0	10.1	4.7	1.1

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; AG: anisotropia global; IG: isotropia global; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto.

Tabela 10 – Lista da melhor estratégia de estimativa e melhor campo anisotrópico por corpo e método de estimativa.

Tipo de coord.	Corpo	Método	Máx. Amostras	Imagem de referência	Janela de suavização	Máx. razão anisotrópica
Real	31	JM	12	-	10	0.25
		CK	12	-	10	0.25
		DE	24	-	30	0.05
		AG	24	-	-	-
		IG	36	-	-	-
	32	JM	36	-	20	0.05
		CK	36	-	30	0.25
		DE	12	-	30	0.15
		AG	24	-	-	-
		IG	36	-	-	-
	40	JM	24	-	30	0.25
		CK	24	-	30	0.25
		DE	24	-	20	0.25
		AG	36	-	-	-
		IG	36	-	-	-
	43	JM	24	-	20	0.25
		CK	24	-	20	0.25
		DE	12	-	20	0.05
		AG	36	-	-	-
		IG	36	-	-	-
Geológica	31	JM	36	ID3	40	0.3
		CK	36	ID1	40	0.4
		DE	36	ID2	40	0.2
		AG	36	-	-	-
		IG	24	-	-	-
	32	JM	24	ID1	20	0.2
		CK	24	ID1	40	0.2
		DE	36	ID1	40	0.2
		AG	36	-	-	-
		IG	24	-	-	-
	40	JM	36	ID3	40	0.2
		CK	36	ID1	40	0.2
		DE	24	ID3	20	0.2
		AG	36	-	-	-
		IG	36	-	-	-
	43	JM	36	ID3	20	0.2
		CK	36	ID1	20	0.2
		DE	12	ID2	20	0.2
		AG	24	-	-	-
		IG	24	-	-	-

Tabela 11 – Avaliação dos erros na validação cruzada considerando todos corpos conjuntamente e o campo anisotrópico/estratégia de estimativa que gerou menor REQM em cada corpo para cada método. Resultados listados de 1-5, sendo 1 o com menor erro. Foi calculada também a diferença relativa entre o menor erro do melhor método em relação ao erro dos outros métodos para quantificar essas diferenças.

CORPO	ERRO AVALIADO	TIPO DE COORD.	RANKING DOS MELHORES RESULTADOS					DIFERENÇA RELATIVA PARA O MELHOR (%)				
			JM	CK	DE	AG	IG	JM	CK	DE	AG	IG
Todos	REQM	Real	2	1	5	4	3	1.8	0.0	5.4	2.8	2.6
	MdEA	Real	3	1	5	2	4	1.9	0.0	4.1	1.9	2.0
	MnEA	Real	5	3	4	2	1	1.9	0.6	1.2	0.5	0.0
	REQM	Geológica	1	2	3	5	4	0.0	0.6	1.6	2.5	2.4
	MdEA	Geológica	1	2	3	5	4	0.0	0.5	1.0	2.2	1.5
	MnEA	Geológica	2	3	4	5	1	0.5	0.9	1.1	2.5	0.0

JM: janelas móveis; CK: convolução de kernels; DE: deformação espacial; AG: anisotropia global; IG: isotropia global; REQM: raiz do erro quadrático médio; MdEA: média do erro absoluto; MnEA: mediana do erro absoluto.

Figura 87 – Análise dos erros das estimativas em todos os corpos para cada método e métrica utilizados. Comparação com base na validação cruzada das amostras, considerando o melhor campo por corpo e método.

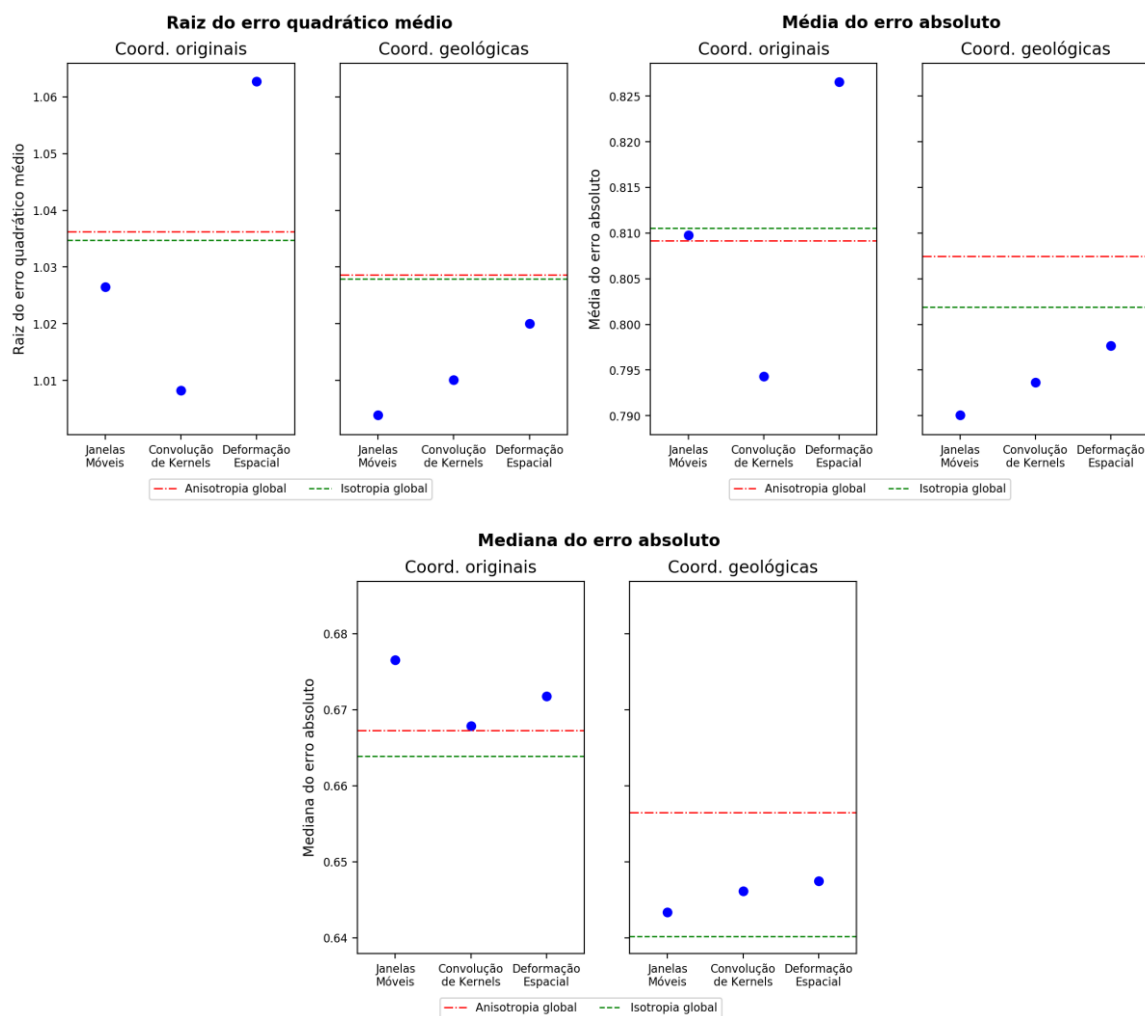


Figura 88 – Estimativas realizadas no corpo 31, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.

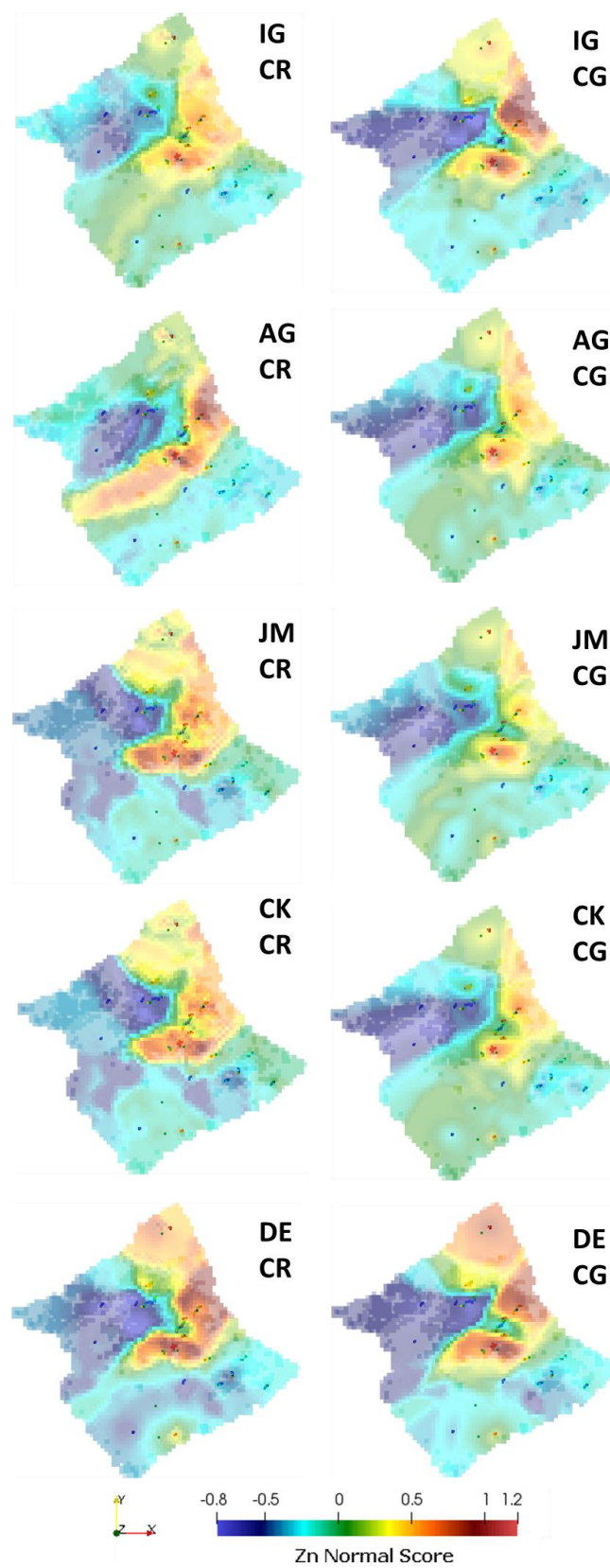


Figura 89 – Estimativas realizadas no corpo 32, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.

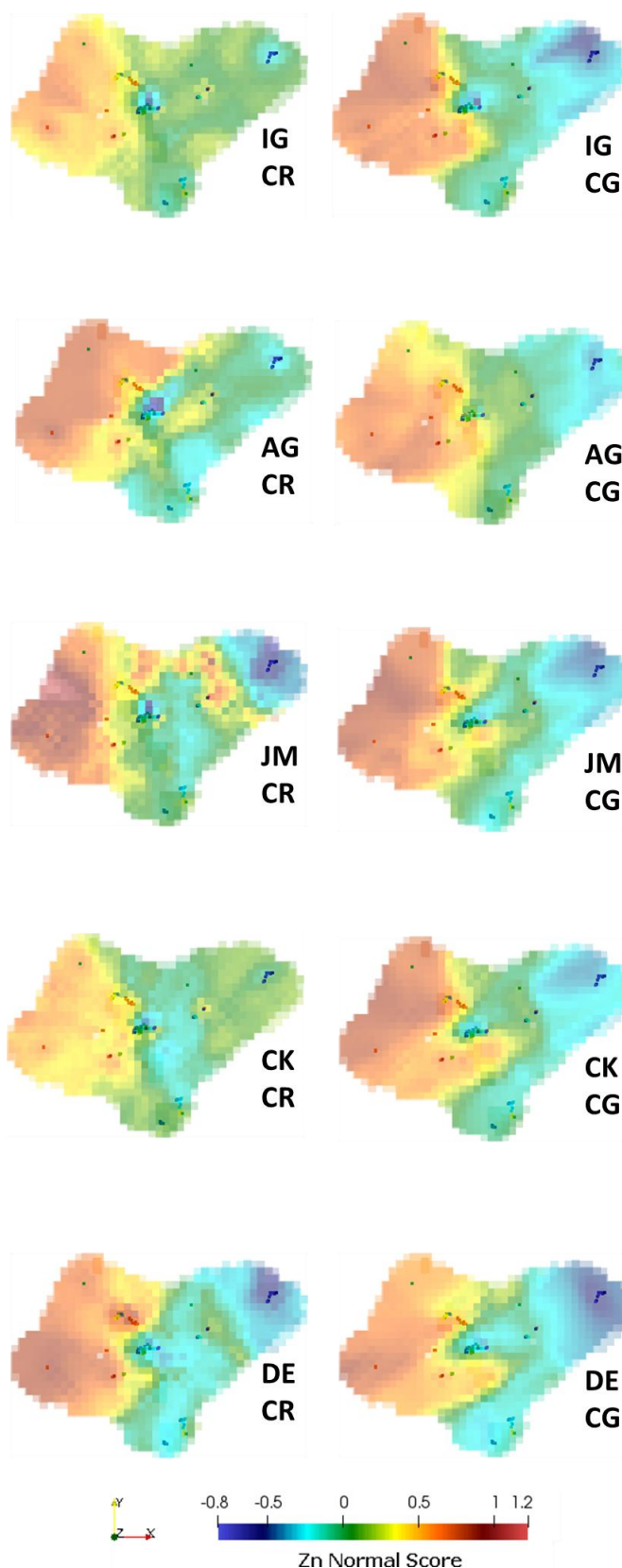


Figura 90 – Estimativas realizadas no corpo 40, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.

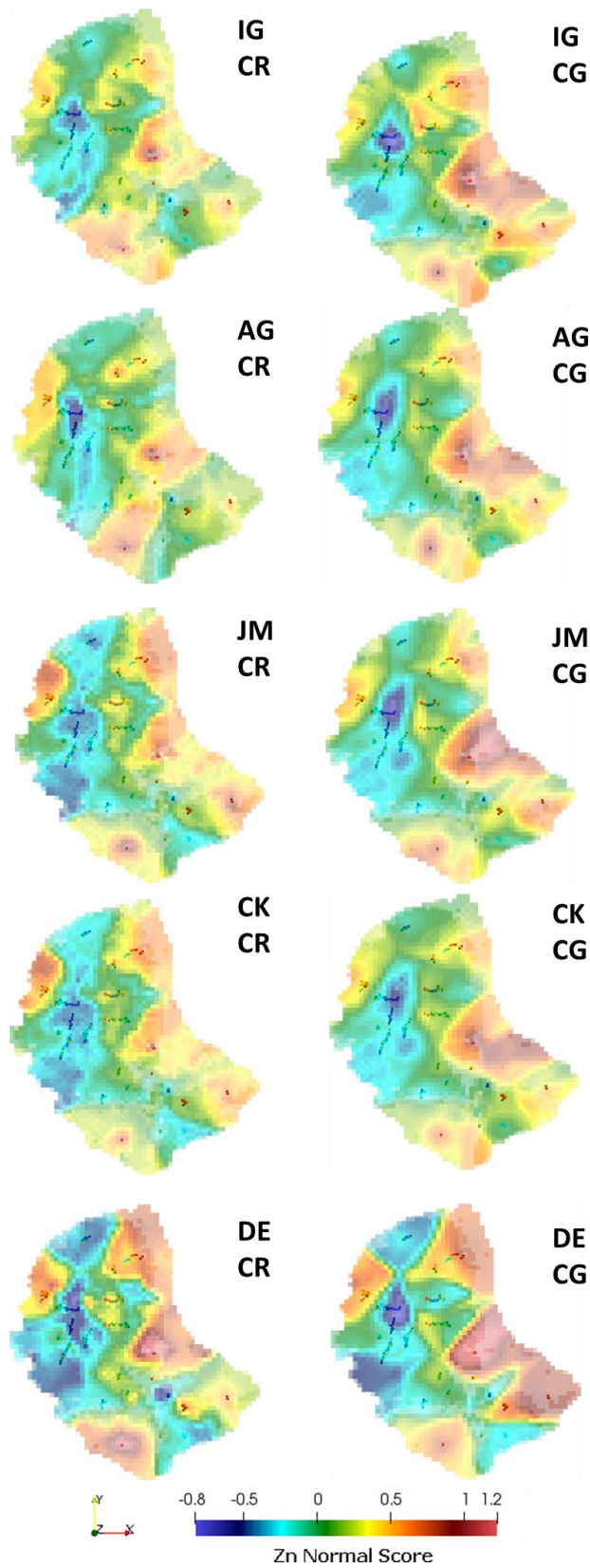
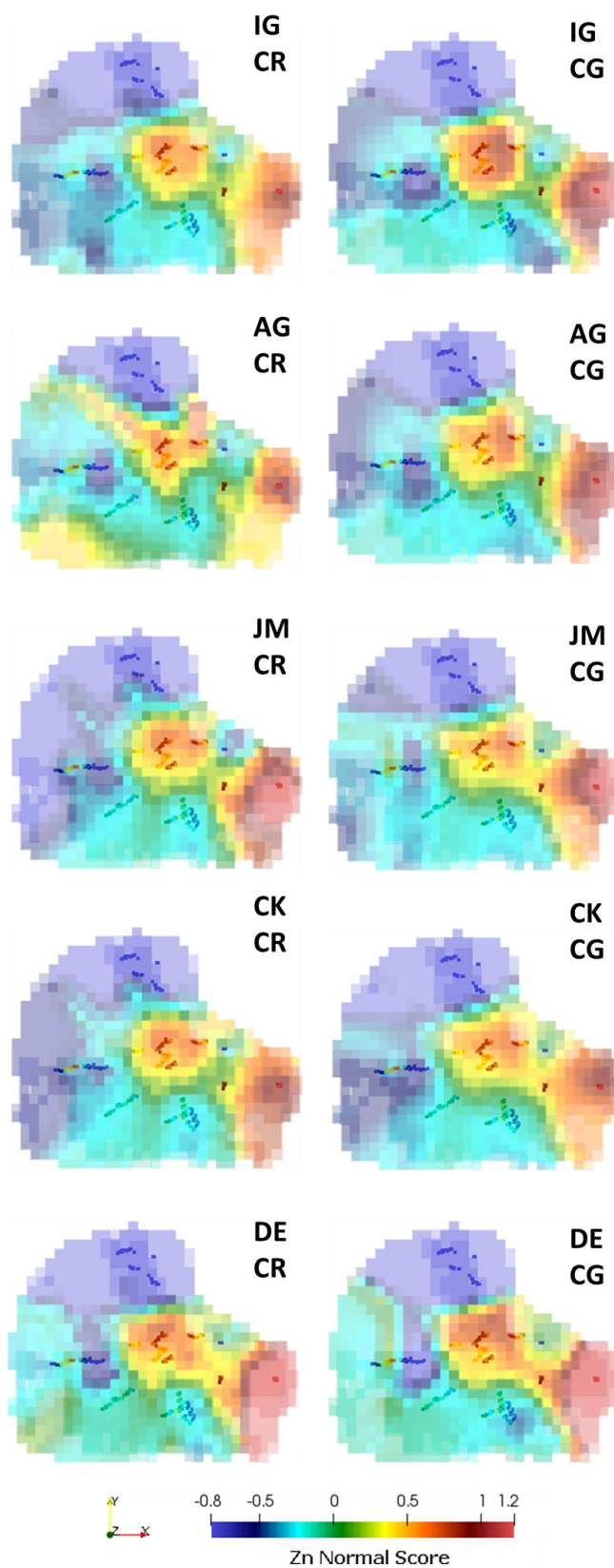


Figura 91 – Estimativas realizadas no corpo 43, vista em coordenadas geológica, em planta. Amostras representadas como pontos. CR: coordenadas reais; CG: coordenadas geológicas; IG: isotropia global; AG: anisotropia global; JM: janelas móveis; DE: deformação espacial; CK: convolução de kernels.



Algumas observações sobre os resultados:

- Os resultados variaram consideravelmente de corpo a corpo. Mas considerando todos corpos conjuntamente, os erros relativos entre os métodos são baixos (em torno de 2%)
- Todas as estimativas apresentaram coerência visual, mas nota-se uma variabilidade razoável entre elas.
- As estimativas com coordenadas geológicas tiveram melhores resultados do que com coordenadas reais em 67% dos casos

Acerca dos resultados com coordenadas reais:

- O uso de anisotropias locais gerou melhores resultados do que com anisotropia/isotropia global em 75% dos casos.
- CK apresentou os melhores resultados em 50% dos testes. Seguido de JM (17%), AG (17%), DE (8%) e IG (8%).
- Anisotropia/isotropia global gerou melhores resultados quanto a MnEA (75% dos casos). Enquanto o uso de anisotropias locais gerou melhores resultados de REQM e MdEA em todos os casos.

Dos resultados com coordenadas geológicas:

- O uso de anisotropias locais gerou melhores resultados do que com anisotropia/isotropia global em 83% dos casos.
- JM apresentou os melhores resultados em 42% dos testes. Seguido de DE (25%), CK (17%), IG (17%) e AG (0%).
- Anisotropias locais geraram melhores resultados de MnEA em todos os casos e de REQM e MdEA em 75% dos casos, em comparação com o uso de anisotropia/isotropia global.

6.5. COMENTÁRIOS

Considerando todos os resultados apresentados, é possível chegar a algumas conclusões nesse estudo de caso:

- As estimativas com anisotropias locais geraram melhores resultados do que ao utilizar anisotropia ou isotropia global.
- As estimativas com coordenadas geológicas geraram melhores resultados do que com coordenadas reais.
- O uso de convolução de kernels gerou os melhores resultados com coordenadas reais.
- O uso de janelas móveis gerou os melhores resultados com coordenadas geológicas.

Os resultados do estudo de caso 2-D foram mais homogêneos, convergindo para melhores resultados ao utilizar anisotropias locais com JM. Em 3-D, dada a maior complexidade e variabilidade do fenômeno espacial, os resultados foram bem mais heterogêneos. Os métodos de estimativa responderam de forma variada dependendo das métricas e domínios envolvidos.

Nesse estudo, o uso de coordenadas geológicas mostrou consistentemente melhores resultados. Mas ressalta-se que esse comportamento, de fato, era esperado nesse contexto estruturalmente complexo, com bastante dobramentos. Em corpos com menores variações estruturais, esse efeito nos resultados não deve ser tão significativo.

Isso tudo reforça a ressalva que esses resultados refletem uma situação específica e não devem ser generalizados para todos os casos. Cada fenômeno espacial deve ser analisado independentemente para poder melhor selecionar os campos anisotrópicos e métodos de estimativa mais adequados.

Do ponto de vista de eficiência computacional, não foram feitas análises detalhadas da velocidade de processamento dos métodos. Mas notou-se que o tempo de estimativa via JM e CK são semelhantes a uma krigagem comum, sendo CK um pouco mais demorado que os demais. Por outro lado, DE foi o que notavelmente tomou mais tempo de processamento, o que pode tornar seu uso mais difícil em grandes modelos.

Os resultados foram considerados bastante satisfatórios. Foi possível demonstrar em detalhes as metodologias propostas para se criar coordenadas geológicas, extrair e utilizar as anisotropias locais nas estimativas, gerando consistentemente bons resultados mesmo em um cenário 3-D bastante complexo.

7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

7.1. CONCLUSÃO

Anisotropia local é uma característica quase sempre presente nos fenômenos espaciais. Sabe-se que é possível utilizá-la em geoestatística há muitos anos, mas ainda hoje não é utilizada e difundida amplamente. Talvez pela baixa disponibilidade de softwares desenvolvidos para identificá-la e incorporá-la. Talvez por parecer ser muito complicado trabalhar com campos de anisotropias. Essa tese auxiliou a mostrar que é possível caracterizar e utilizar anisotropias locais eficientemente com as ferramentas adequadas. As seções seguintes respondem às questões levantadas nas metas dessa tese e complementa com algumas conclusões adicionais.

7.1.1. Como identificar de modo rápido e adequado as anisotropias locais com base em qualquer conjunto de dados disponíveis?

As opções consideradas mais rápidas e adequadas para caracterizar as anisotropias locais foram: o uso de gradientes (extrair direções e magnitudes em casos 2-D ou 3-D simples), a interpolação de dados estruturais (extrair direções e magnitudes em casos 3-D complexos) e a variografia utilizando direções locais (calcular modelo variográfico de referência em todos os casos).

Gradientes permitem extrair muito bem as direções e magnitudes das anisotropias locais em 2-D ou em geometrias 3-D aplainadas. A algoritmo é rápido e identifica áreas com maior variabilidade nos gradientes (*i.e.* áreas onde a anisotropia é mais incerta), permitindo utilizar buscas e continuidade espacial mais isotrópicas nessas regiões. As imagens de referência para parametrizar a anisotropia local podem ser geradas via interpolação simples dos dados ou por métodos mais elaborados, permitindo assim testar diversos cenários para obter uma boa estimativa.

Para permitir o melhor uso de gradientes em geometrias 3-D mais complexas, é recomendado (quando possível) o uso de coordenadas geológicas para aplainar esses domínios espaciais. Sabe-se que o processo de gerar coordenadas geológicas pode ser trabalhoso ou inviável em alguns casos. O algoritmo proposto nessa tese busca auxiliar e simplificar esse processo na medida do possível.

No caso de se trabalhar diretamente com geometrias complexas em 3-D, a interpolação de dados estruturais se mostra como um método mais robusto, uma vez que a técnica de gradientes tende a gerar variações muito abruptas das direções em situações como essa. Aliado à suposição que a espessura do corpo é a direção de menor continuidade espacial, é possível extrair os planos de maior continuidade via superfícies 3-D ou via esqueletização do modelo de blocos. O PCA aplicado a esses pontos estruturais permite identificar, semelhantemente ao caso anterior, quais áreas possuem direções de anisotropia mais incertas, permitindo utilizar buscas e continuidade espacial mais isotrópicas nessas regiões.

Como parte final da parametrização das anisotropias locais, é necessário um modelo variográfico de referência. Para tornar a variografia mais integrada às direções locais, foi considerado mais adequado utilizar as direções locais durante a variografia experimental. De modo geral, essa abordagem gera resultados semelhantes ao de uma variografia tradicional. Porém, como as estimativas locais são posteriormente feitas com as direções locais, tende a ser mais coerente usar essas mesmas direções para modelar a continuidade espacial.

7.1.2. Quais as melhores maneiras para incorporar as informações locais de anisotropia em estimativas geoestatísticas?

Com base nos estudos de casos, o uso de janelas móveis e convolução de kernels mostraram os melhores resultados para incorporar anisotropias locais na krigagem ordinária, tanto qualitativamente como em termos operacionais (fácil implementação e boa eficiência computacional).

Janelas móveis é o método mais simples e mostrou consistentemente os melhores resultados quando associado ao uso de gradientes (tanto em 2-D como em 3-D após aplainamento com coordenadas geológicas) e resultados ligeiramente piores em casos 3-D mais complexos.

A convolução de kernels trata de uma maneira mais elaborada o cálculo das covariâncias entre os pontos com diferentes anisotropias locais. Não apresentou resultados tão bons como janelas móveis em 2-D, mas apresentou bons resultados de modo geral, principalmente nos casos 3-D mais complexos, em que apresentou os melhores resultados dentre todos os métodos.

A deformação espacial apresenta um arcabouço teórico muito interessante e mostrou alguns bons resultados nos estudos realizados. Mas de modo geral, foi o método menos atraente para um uso prático. Ele apresenta tempo de processamento consideravelmente mais elevado

que os demais métodos e geralmente com maiores erros nas validações realizadas nos estudos de casos.

7.1.3. Conclusões adicionais

Além de responder a essas questões, os dois estudos de caso apresentados demonstraram que o uso de anisotropias locais, seguindo metodologias adequadas, podem gerar consistentemente melhores resultados que ao utilizar anisotropias globais. Em praticamente todas as validações realizadas, nos dois estudos de caso, isso se confirmou.

Anisotropias locais mostraram também ser úteis para contribuir junto a metodologias já consolidadas em geoestatística. A variografia experimental com base em anisotropias locais pode ajudar a, por exemplo, integrar domínios semelhantes mas com diferentes orientações em um mesmo processo variográfico. O algoritmo proposto para gerar coordenadas geológicas (com processos semiautomáticos baseados em elementos de anisotropia local) tem potencial de simplificar significativamente uma transformação espacial que muitas vezes é evitada pela dificuldade de ser executada.

Como destacado algumas vezes ao longo da tese, é sempre importante avaliar caso a caso para definir qual melhor método (com anisotropia local ou não) deve ser utilizado. Cada um pode responder melhor dependendo do tipo de fenômeno espacial e da quantidade/qualidade da informação para caracterizar os campos de anisotropia local.

Por fim, acredita-se que o uso de anisotropia locais tende a evoluir e se difundir cada vez mais na geoestatística, tanto pela crescente busca para aproveitar e utilizar melhor toda a informação espacial disponível, como pela constante evolução de novos softwares e algoritmos.

7.2. RECOMENDAÇÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Ao longo dessa tese, surgiram várias ideias que podem ser exploradas em trabalhos futuros. Algumas delas:

- (i) Avaliar o uso de anisotropia locais em simulação geoestatística e avaliar o impacto nos resultados. No Capítulo 2.6, foram citadas algumas maneiras de implementar as anisotropias locais em simulações. Seria interessante avaliar, por exemplo, o quanto seria impactada a análise de retorno financeiro de um projeto realizado com dois

conjuntos de modelos simulados: um com anisotropias globais e outro com anisotropias locais.

- (ii) Explorar melhorias na parametrização de anisotropia locais. Como já sugerido no Capítulo 4.5, é possível utilizar partes de diferentes campos de anisotropia para compor um campo de anisotropia que responda melhor dependendo da região do domínio. É possível também explorar maneiras mais elaboradas de se gerar imagens de referência para melhorar os resultados finais, como por exemplo, utilizando geoestatística de múltiplos pontos para gerar imagens de referência iniciais mais elaboradas.
- (iii) Desenvolver o algoritmo proposto para gerar coordenadas geológicas (Capítulo 3) para ser usado em grandes modelos. Para essa tese, ele foi implementado sem buscar eficiência computacional, mas tudo indica ser possível sua aplicação eficiente em modelos muito grandes.

REFERÊNCIAS

- ALAM, A. **Parallelization of the estimation algorithm of the 3D structure tensor**. 2012. 48 f. Dissertação de mestrado - School of Information Science, Computer and Electrical Engineering, Halmstad University, Halmstad, 2012.
- AYACHIT, U. **The ParaView guide: a parallel visualization application**. New York: Kitware, 2015.
- BAKER, M. C.; GERMAN, C. R. Going for gold! Who will win in the race to exploit ores from the deep sea? **Ocean Challenge**, Amersham, v. 16, n. 3, p. 10-17, Out. 2009.
- BOISVERT, J. B.; MANCHUK, J. G.; DEUTSCH, C. V. Kriging in the presence of locally varying anisotropy using non-Euclidean distances. **Mathematical Geosciences**, New York, v. 41, n. 5, p. 585-601, Jul. 2009.
- BOISVERT, J.B. **Geostatistics with locally varying anisotropy**. 2010. 175 f. Tese (PhD) – Department of Civil and Environmental Engineering, University of Alberta, Edmonton, 2010.
- BORG, I.; GROENEN, P.J.F. **Modern multidimensional scaling: theory and applications**. New York: Springer-Verlag, 2005.
- CHILES, J. P.; DELFINER, P. **Geostatistics: modeling spatial uncertainty**. 2. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 1999.
- CRESSIE, N. Fitting variogram models by weighted least squares. **Mathematical Geology**, New York, v. 17, n. 5, p. 563-586, Jul. 1985.
- CURRIERO, F.C. On the use of non-Euclidean distance measures in geostatistics. **Mathematical Geology**, New York, v. 38, n. 8, p. 907-926, Nov. 2006.
- DAVIS, G.H.; REYNOLDS, S.J.; KLUTH, C.F. **Structural geology of rocks and regions**. 3. ed. New Jersey: John Wiley & Sons, 2012.
- DESASSIS, N.; RENARD, D. Automatic variogram modeling by iterative least squares: univariate and multivariate cases. **Mathematical Geosciences**, New York, v. 45, n. 4, p. 453-470, Maio 2013.
- DEUTSCH, C.V. Practical unfolding for geostatistical modeling of vein type and complex tabular mineral deposits. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON THE APPLICATION OF COMPUTERS AND OPERATIONS RESEARCH IN THE MINERAL INDUSTRY, 32., 2004, Tucson. **Proceedings...** Boca Raton: CRC Press, 2005. p. 197-202.
- DIJKSTRA, E.W. A note on two problems in connexion with graphs. **Numerische mathematik**, New York, v. 1, n. 1, p. 269-271, Dez. 1959.
- EMERY, X. Iterative algorithms for fitting a linear model of coregionalization. **Computers & Geosciences**, Amsterdam, v. 36, n. 9, p. 1150-1160, Set. 2010.

EVANS, A.M.; MOON, C.J. Mineral deposit geology and models. In: MOON, C.J.; WHATELEY M.K.G.; EVANS, A.M. **Introduction to mineral exploration**. 2. ed. Oxford: Blackwell Publishing, 2006. cap. 3, p. 33-51.

FLOATER, M.S.; HORMANN, K. Surface parameterization: a tutorial and survey. In: DODGSON, N; FLOATER, M.S.; SABIN, M. **Advances in multiresolution for geometric modelling**. Heidelberg: Springer, 2005. p. 157-186.

FOSSSEN, H. **Structural geology**. New York: Cambridge University Press, 2010.

FOUEDJIO, F. Space deformation non-stationary geostatistical approach for prediction of geological objects: case study at El Teniente Mine (Chile). **Natural Resources Research**, New York, v. 25, n. 3, p. 283-296, Set. 2016a.

FOUEDJIO, F.; DESASSIS, N.; ROMARY, T. Estimation of space deformation model for non-stationary random functions. **Spatial Statistics**, Amsterdam, v. 13, p. 45-61, Ago. 2015.

FOUEDJIO, F.; DESASSIS, N.; RIVOIRARD, J. A generalized convolution model and estimation for non-stationary random functions. **Spatial Statistics**, Amsterdam, v. 16, p. 35-52, Maio 2016.

FOUEDJIO, F.; SÉGURET, S. Predictive geological mapping using closed-form non-stationary covariance functions with locally varying anisotropy: case study at El Teniente Mine (Chile). **Natural Resources Research**, New York, v. 25, n. 4, p. 431-443, Dez. 2016.

FUENTES, M. A new high frequency kriging approach for nonstationary environmental processes. **Environmetrics**, Medford, v. 12, p. 469-483, Ago. 2001.

FUENTES, M.; CHEN, L.; DAVIS, J.M.; LACKMANN, G.M. Modeling and predicting complex space-time structures and patterns of coastal wind fields. **Environmetrics**, Medford, v. 16, n. 5, p. 449-464, Ago. 2005.

GARRIDO, M.; NAVARRO, F.; ORTIZ, J.; MOREIRA, J. Resource assessment with unfolding methodology: A case study. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON INNOVATION IN MINE OPERATIONS, 6., 2016, Santiago. **Proceedings...** Santiago: Gecamin, 2016. p. 1-9.

HAAS, T.C. Kriging and automated variogram modeling within a moving window. **Atmospheric Environment Part A General Topics**, Amsterdam, v. 24, n. 7, p. 1759-1769, 1990.

HART, P.E.; NILSSON, N.J.; RAPHAEL, B. A formal basis for the heuristic determination of minimum cost paths. **IEEE transactions on Systems Science and Cybernetics**, New York, v. 4, n. 2, p. 100-107, Jul. 1968.

HASSANPOUR, R. M.; DEUTSCH, C. V. Determination of locally varying direction through mass moment of inertia tensor. **Centre for Computational Geostatistics Annual Report**, Edmonton, v. 9, n. 112, p. 1-8, Set. 2007.

HIGDON, D. A process-convolution approach to modelling temperatures in the North Atlantic Ocean. **Environmental and Ecological Statistics**, New York, v. 5, n. 2, p. 173-190, Jun. 1998.

HORTA, A.; CAEIRO, M.H.; NUNES, R.; SOARES, A. Simulation of continuous variables at meander structures: application to contaminated sediments of a lagoon. In: **GEOSTATISTICS FOR ENVIRONMENTAL APPLICATIONS**, 7., 2010, Southampton. **geoENV VII – Geostatistics for Environmental Applications**. Dordrecht: Springer Netherlands, 2010. p. 161-172.

KOPPE, V.C.; COSTA, J.F.C.L.; KOPPE, J.C. Coordenadas cartesianas x coordenadas geológicas em geoestatística: aplicação à variável vagarosidade obtida por perfilagem acústica. **Rem: Revista Escola de Minas**, Ouro Preto, v. 59, n. 1, p. 25-30, Mar. 2006.

ISAAKS, E. **Local anisotropy kriging**. Disponível em: <<http://www.isaaks.com/software-lak.html>>. Acesso em: 08 setembro 2017.

LANTUÉJOUL, C.; DESASSIS, N. Simulation of a Gaussian random vector: a propagative version of the Gibbs sampler. In: **INTERNATIONAL GEOSTATISTICS CONGRESS**, 9., 2012, Oslo. **Digital Proceedings...** Dordrecht: Springer, 2012. Disponível em: <<http://geostats2012.nr.no/pdfs/1747181.pdf>>. Acesso em: 08 setembro 2017.

LARRONDO, P.F.; NEUFELD, C.T.; DEUTSCH, C.V. VARFIT: A program for semiautomatic variogram modeling. **Centre for Computational Geostatistics Annual Report**, Edmonton, v. 5, n. 112, p. 1-17, Set. 2003.

LEE, T.C.; KASHYAP, R.L.; CHU, C.N. Building skeleton models via 3-D medial surface axis thinning algorithms. **CVGIP: Graphical Models and Image Processing**, Amsterdam, v. 56, n. 6, p. 462-478, Nov. 1994.

LIANG, M.; MARCOTTE, D. A class of non-stationary covariance functions with compact support. **Stochastic Environmental Research and Risk Assessment**, Basel, v. 30, n. 3, p. 973-987, Mar. 2016.

LILLAH, M; BOISVERT, J.B. Inference of locally varying anisotropy fields from diverse data sources. **Computers & Geosciences**, Amsterdam, v. 82, p. 170-182, Set. 2015.

MACHUCA-MORY, D.F. **Geostatistics with location-dependent statistics**. 2010. 199 f. Tese (PhD) – Department of Civil and Environmental Engineering, University of Alberta, Edmonton, 2010.

MACHUCA-MORY, D.F.; DEUTSCH, C.V. Non-stationary geostatistical modeling based on distance weighted statistics and distributions. **Mathematical Geosciences**, New York, v. 45, n. 1, p. 31-48, Jan. 2013.

MARDIA, K.V.; JUPP, P.E. **Directional statistics**. Chichester: John Wiley & Sons, 2000.

MARTIN, R.; MACHUCA-MORY, D.; LEUANGTHONG, O.; BOISVERT, J.B. Non-stationary geostatistical modeling: a case study comparing LVA estimation frameworks. **Natural Resources Research**, New York, v. 28, n. 2, p. 291-307, Abr. 2019.

NEUFELD, C.; DEUTSCH, C.V. Angle rotations in GSLIB. **Centre for Computational Geostatistics Annual Report**, Alberta, v.6, n. 403, p. 1-7, Set. 2004.

NEWTON, M.J. **Dynamic anisotropy user guide**: a guide to using the dynamic anisotropy options in Studio 3. Wells: Datamine Software Limited, 2007. 38 p. Studio 3 User Guide.

NOCEDAL, J.; WRIGHT, S.J. **Numerical optimization**. New York: Springer Science & Business Media, 2006.

PACIOREK, C.J.; SCHERVISH, M.J. Spatial modelling using a new class of nonstationary covariance functions. **Environmetrics**, Medford, v. 17, n. 5, p. 483-506, 2006.

PALÁGYI, K; KUBA, A. A parallel 3D 12-subiteration thinning algorithm. **Graphical Models and Image Processing**, Amsterdam, v. 61, n. 4, p. 199-221, Jul. 1999.

PARDO-IGÚZQUIZA, E. VARFIT: a Fortran-77 program for fitting variogram models by weighted least squares. **Computers & Geosciences**, Amsterdam, v. 25, n. 3, p. 251-261, Abr. 1999.

PEARSON, K. LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. **The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science**, London, v. 2, n. 11, p. 559-572, 1901.

PEREDO, O.; NAVARRO, F.; GARRIDO, M.; ORTIZ, J.M. Incorporating distributed Dijkstra's algorithm into variogram calculation with locally varying anisotropy. In: INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON THE APPLICATION OF COMPUTERS AND OPERATIONS RESEARCH IN THE MINERAL INDUSTRY, 37., 2015, Fairbanks. **Proceedings...** Englewood: SME, 2015. p. 1162-1170.

POUDRET, M.; BENNIS, C.; DUMONT, C.; LERAT, O.; RAINAUD, J.F. New flattening-based methodology for more accurate geostatistical reservoir populating. In: SPE EUROPEC/EAGE ANNUAL CONFERENCE, 74., 2012, Copenhagen. **Proceedings...** Richardson: Society of Petroleum Engineers, 2012. p. 1-13.

REMY, N.; BOUCHER, A.; WU, J. **Applied geostatistics with SGeMS**: a user's guide. New York: Cambridge University Press, 2009.

ROBB, L. **Introduction to ore-forming processes**. Oxford: Blackwell Publishing, 2005.

RUBIO, R.H.; KOPPE, V.C.; COSTA, J.F.C.L.; CHERCHENEVSKI, P.K. How the use of stratigraphic coordinates improves grade estimation. **Rem: Revista Escola de Minas**, Ouro Preto, v. 68, n. 4, p. 471-477, Dez. 2015.

SAMPSON, P.D. Constructions for nonstationary spatial processes. In: GELFAND, A.E.; DIGGLE, P.J.; FUENTES, M; GUTTORP, P. **Handbook of spatial statistics**. Boca Raton: CRC Press, 2010. cap. 9, p. 119-130.

SAMPSON, P.D.; GUTTORP, P. Nonparametric estimation of nonstationary spatial covariance structure. **Journal of the American Statistical Association**, Alexandria, v. 87, n. 417, p. 108-119, Mar. 1992.

SCHABENBERGER, O; GOTWAY, C.A. **Statistical methods for spatial data analysis**. Boca Raton: CRC press, 2005.

SIEK, J.; LEE, L.Q.; LUMSDAINE, A. **Boost graph library**. Taramani: Pearson India, 2001.

SILVA, V.D.; TENENBAUM, J.B. **Sparse multidimensional scaling using landmark points**. Stanford: Stanford University, 2004. 41 p. Technical report.

SINCLAIR, A.J.; BLACKWELL, G.H. **Applied mineral inventory estimation**. New York: Cambridge University Press, 2002.

STEIN, M.L. **Nonstationary spatial covariance functions**. Chicago: University of Chicago, 2005. 8 p. Technical Report 21, Center for Integrating Statistical and Environmental Science.

STROET, C.B.T; SNEPVANGERS, J.J. Mapping curvilinear structures with local anisotropy kriging. **Mathematical Geology**, New York, v. 37, n. 6, p. 635-649, 2005.

WAND, M.P.; JONES, M.C. **Kernel smoothing**. Boca Raton: CRC Press, 1994.

ZIGELMAN, G; KIMMEL, R; KIRYATI, N. Texture mapping using surface flattening via multidimensional scaling. **IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics**, Washington, v. 8, n. 2, p. 198-207, 2002.

APÊNDICE A – ALGORITMOS DESENVOLVIDOS

Para realizar essa tese, não haviam algoritmos prontos para executar todas as metodologias necessárias. Com base no estudo bibliográfico e em novas adaptações, foram desenvolvidos os seguintes algoritmos listados na Tabela A1.

Tabela A1 - Lista dos algoritmos desenvolvidos.

OBJETIVO DO ALGORITMO	MÉTODO	PLATAFORMA	INCORPORAÇÃO DA ANISOTROPIA
Caracterização das anisotropias locais	Gradientes	AR2GEMS	-
Estimativa com anisotropias locais	Inverso da distância	AR2GEMS	Janelas móveis
Estimativa com anisotropias locais	Inverso da distância	AR2GEMS	Deformação espacial
Estimativa com anisotropias locais	Krigagem	AR2GEMS	Janelas móveis
Estimativa com anisotropias locais	Krigagem	AR2GEMS	Ponderação de processos estacionários
Estimativa com anisotropias locais	Krigagem	AR2GEMS	Convolução de kernels
Estimativa com anisotropias locais	Krigagem	AR2GEMS	Deformação espacial
Variografia de distâncias não-Euclidianas	Variografia	AR2GEMS	Deformação espacial
Simulação com anisotropias locais	Simulação Sequencial Gaussiana	AR2GEMS	Janelas móveis
Aplainamento de corpos geológicos	Coordenadas geológicas	Python	-
Variografia com direções locais	Variografia	Python	-

Esses algoritmos estão operacionais e permitiram realizar todos os estudos apresentados nessa tese. Mas alguns ainda estão em fase de desenvolvimento e necessitam maiores ajustes para um uso completo. De um modo geral, os algoritmos estão funcionando de forma paralelizada em múltiplos processadores, mas o desempenho dos algoritmos pode ser ainda consideravelmente melhorado.

Quanto aos algoritmos para AR2GEMS, eles estão organizados na janela lateral, sob a categoria LPM-LOCAL-ANISOTROPY, conforme apresentado na Figura A1. Os algoritmos em Python possuem, em sua maioria, uma interface gráfica simples para entrada dos dados.

Figura A1 – Plugins desenvolvidos no AR2GEMS.

Algorithm	Description
▶ Utilities	
▶ Simulation	
▼ LPM-LOCAL-ANISOTROPY-PLUGINS	
aniso_field_calc	Local anisotropic field calculator
local_aniso_idw	Local anisotropy IDW
local_aniso_krig	Local anisotropy kriging
local_aniso_sgs	Local anisotropy SGS
non_euclid_idw	Non-Euclidean IDW
non_euclid_krig	Non-Euclidean kriging
▶ Estimation	
▶ Python	

A1. GRADIENTES

O plugin para gradientes (*aniso_field_calc*) pode ser aplicado tanto em 2-D como em 3-D. Os dados iniciais são fornecidos pelo usuário no campo “*Reference image to get anisotropy parameters*” e a suavização é feita utilizando os vizinhos presentes no elipsoide definido em seguida (Figura A2). Como resultado, são gerados os três ângulos de rotação do elipsoide de anisotropia e as razões anisotrópicas referentes aos eixos intermediário/máximo (*ratio1*) e mínimo/máximo (*ratio2*). Não é possível visualizar os eixos dentro do AR2GEMS, mas uma solução alternativa e gratuita para visualização é o ParaView (AYACHIT, 2015).

Figura A2 – Parâmetros do plugin de gradientes.

A2. KRIGAGEM

Há dois módulos para executar krigagem com anisotropias locais. O primeiro módulo (*local_aniso_krig*) permite estimar com janelas móveis, ponderação de processos estacionários e convolução de kernels (Figura A3). Esse algoritmo fornece algumas opções interessante de

customização do processo, como permitir aplicar os parâmetros da anisotropia local seja apenas nas buscas, apenas nos cálculos das covariâncias ou utilizar ambas as opções em conjunto.

Figura A3 – Parâmetros do plugin de krigagem local.

The figure displays two screenshots of the local kriging plugin interface. The left screenshot shows the 'General and Data' tab, and the right screenshot shows the 'Variogram' tab.

General and Data (Left Screenshot):

- Kriging Grid:** Set to '<- None ->'. New Property Name field is empty.
- Hard Data:** Set to '<- None ->'. A file selection button is visible.
- Cross-validation mode:** Leave-one-out cross validation.
- Local Anisotropy Parameters (ratios are optional):** Strike, Dip, Rake, Ratio 1, Ratio 2, and Fixed range (Max.) are all set to '<- None ->'. Limit ratios.
- Local Covariance Method:** Moving Windows, Kernel Convolution, Weighted Stationarity.
- Kriging Type:** Ordinary kriging, Simple Kriging.
- Block Kriging:** Block Kriging.
- Search Ellipsoid:** Use local angles, Use local ranges (need the ratio parameters).
- Conditioning data:** Min: 1, Max: 12. Range1: 1.00, Range2: 1.00, Range3: 1.00. Azimuth: 0.00, Dip: 0.00, Rake: 0.00.
- Advanced search options.

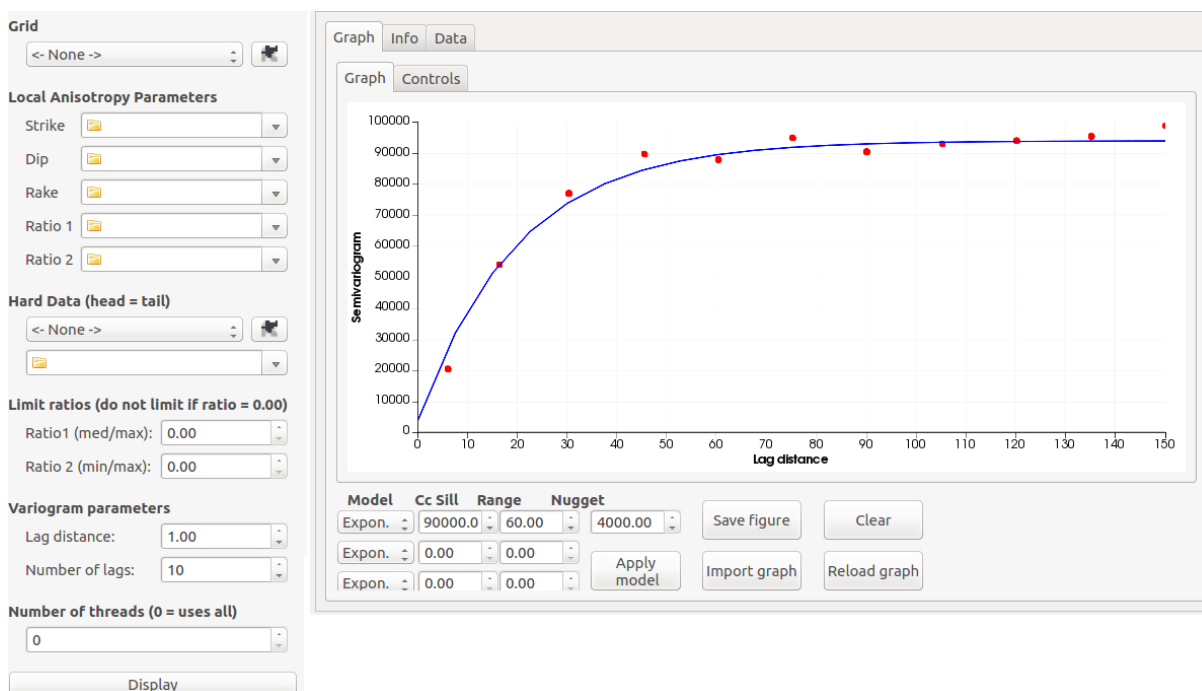
Variogram (Right Screenshot):

- Variogram parameters:** Use local angles, Use local ranges (need the ratio parameters). Load existing model... button.
- Exponential Covariance:** Contribution: 1.0000.
- Nugget Covariance:** Contribution: 1.0000.
- Exponential Covariance (second instance):** Contribution: 1.0000. Range1: 100.00, Range2: 100.00, Range3: 100.00. Azimuth: 0.00, Dip: 0.00, Rake: 0.00.

O segundo módulo (*non_euclid_krig*) é usado para aplicar deformação espacial, em que são consideradas distâncias não-Euclidianas por meio do algoritmo de Dijkstra, semelhante a abordagem de Boisvert (2010). O Dijkstra é aplicado utilizando a Boost Graph Library (SIEK *ET AL.* 2001) em C++. Nesse caso, a diferença é que a deformação espacial é feita por vizinhança, de modo a economizar memória RAM e simplificar o código; no entanto compromete a eficiência do algoritmo em modelos muito grandes.

Na krigagem com deformação espacial, os parâmetros necessários são semelhantes aos da krigagem local. Complementando esse algoritmo, está disponível a variografia para os dados deformados espacialmente, que é feita em uma janela à parte (Figura A4). Nessa janela, é calculada o semivariograma omnidirecional a partir das distâncias não-euclidianas (calculadas nesse caso de maneira global) e permite uma modelagem interativa dos pontos experimentais.

Figura A4 – Parâmetros do plugin de variografia de distâncias não-Euclidianas.



A3. INVERSO DA DISTÂNCIA

O inverso da distância com janelas móveis (*local_aniso_idw*) opera de forma simples, sendo necessário informar as direções e razões de anisotropia, além dos parâmetros convencionais como amostras, modelo e elipsoide de busca (Figura A5). O inverso da distância com deformação espacial está disponível em um módulo separado (*non_euclid_idw*) e os parâmetros necessários são os mesmos da Figura A5.

Figura A5 – Parâmetros do plugin de inverso da distância local.

Algorithm: local_aniso_idw

General and Data

IDW Grid

<- None ->

New Property Name

Hard Data

<- None ->

Power

1.00

Cross-validation mode

Leave-one-out cross validation

Local Anisotropy Parameters

Strike

Dip

Rake

Ratio 1

Ratio 2

Limit ratios (do not limit if ratio = 0.00)

Ratio 1 (med/max): 0.00

Ratio 2 (min/max): 0.00

Search Ellipsoid

Conditioning data

Min 1 Max 12

Range1 Range2 Range3

1.00 1.00 1.00

Azimuth Dip Rake

0.00 0.00 0.00

Advanced search options

Number of processors: -2

A4. SIMULAÇÃO SEQUENCIAL GAUSSIANA

Apesar de não ter sido aplicada nos estudos de caso, foi também desenvolvida a Simulação Sequencial Gaussiana utilizando anisotropia em janelas móveis (*local_aniso_sgs*). Os parâmetros necessários para ela são similares ao da simulação tradicional e aos da krigagem local (Figura A6).

Figura A6 – Parâmetros do plugin de simulação sequencial gaussiana local.

The screenshot displays the 'local_aniso_sgs' plugin interface, divided into several sections:

- General and Data:** Includes 'Simulation Grid' (set to '<- None ->'), 'New Property Name' (empty), 'Hard Data' (set to '<- None ->'), 'Cross-validation mode' (unchecked), 'Local Anisotropy Parameters' (Strike, Dip, Rake), 'Kriging Type' (Simple Kriging selected), 'Search Ellipsoid' (Use local angles checked), and 'Conditioning data' (Max conditioning data: 12).
- Variogram:** Contains 'Variogram parameters' (Use local angles and Use local ranges unchecked), 'Exponential Covariance' (Contribution: 1.0000), and 'Nugget Covariance' (Contribution: 1.0000). It also features three 'Exponential Covariance' blocks with Range1, Range2, and Range3 (all 100.00) and Azimuth, Dip, and Rake (all 0.00).
- Options:** Includes 'Number of realizations' (1), 'Make normal score implicitly' (unchecked), 'Seed' (9772638), and 'Number of processors' (-2).

A5. VARIOGRAFIA COM DIREÇÕES LOCAIS

A variografia com direções locais foi desenvolvida em Python. Está dividida em três módulos (Figura A7). O primeiro módulo é utilizado para transferir os dados direcionais para as amostras mais próximas. O segundo módulo é utilizado para a variografia experimental e os parâmetros são semelhantes aos tradicionais (*lag*, tolerância angular, banda horizontal e vertical, etc), sendo necessário adicionalmente os parâmetros de rotação do elipsoide local para cada amostra. Por padrão, a variografia experimental é aqui feita com correlogramas. O terceiro módulo é utilizado para exibir graficamente os pontos experimentais e para ajustar modelos variográficos (esféricos ou exponenciais de até 3 estruturas). Na parte gráfica, os correlogramas são exibidos invertidos, como se fossem variogramas.

Figura A7 – Interface gráfica dos três módulos para variografia com direções locais.



A6. COORDENADAS GEOLÓGICAS

O algoritmo de coordenadas geológicas foi também desenvolvido em Python. Nele, é necessário informar o arquivo de modelo de blocos e as respectivas amostras. Ao longo do processo, é possível customizar os parâmetros principais, como quantidade de pontos de ancoragem para o MDS e números de amostras para otimização das distâncias.

Esse algoritmo ainda necessita maior desenvolvimento para um uso geral (Figura A8), uma vez que ainda não possui uma interface gráfica e foi desenvolvido nesse caso para atender aos formatos específicos do modelo de blocos e das amostras do estudo de caso realizado.

Figura A8 – Trecho inicial do algoritmo de coordenadas geológicas.

```

# Reading SAMPLES and BLOCKS
t0 = time.time()

reading_columns_samples = ['X','Y','Z',est_dom]+variables
reading_columns_blocks = ['XC','YC','ZC','XINC','YINC','ZINC',est_dom]#+variables

dfd_full=pd.read_csv(samples, na_values='-', usecols=reading_columns_samples)
dfb_full=pd.read_csv(block_model, na_values='-', usecols=reading_columns_blocks)

dfd_full['TYPE']=['DH' for i in range(len(dfd_full))]
dfb_full['TYPE']=['BM' for i in range(len(dfb_full))]

dfb_full.rename(columns={'XC': 'X', 'YC': 'Y', 'ZC': 'Z'}, inplace=True)

doms_to_est = [ibody]

for body in doms_to_est:

    dfd=dfd_full[dfd_full[est_dom]==body].reset_index(drop=True)
    dfb=dfb_full[dfb_full[est_dom]==body].reset_index(drop=True)

    df = pd.concat([dfd,dfb],ignore_index=True)

### READING BLOCKMODEL

xcell = dfb['XINC'].iloc[0]
ycell = dfb['YINC'].iloc[0]
zcell = dfb['ZINC'].iloc[0]

### MAKING BLOCKS INTO IMAGE FOR 3D-SKELETONIZATION
i = dfb['X'].values
j = dfb['Y'].values
k = dfb['Z'].values

```