

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas,  
Metalúrgica e de Materiais (PPGE3M)

**ANÁLISE DE VIZINHANÇA DE KRIGAGEM:  
Estudo comparativo entre os métodos global, global otimizado e  
local otimizado**

Carlos Roberto Alves Fonseca Filho

Dissertação para obtenção do Título de  
Mestre em Engenharia

Porto Alegre (RS)  
2021

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas,  
Metalúrgica e de Materiais (PPGE3M)

**ANÁLISE DE VIZINHANÇA DE KRIGAGEM:  
Estudo comparativo entre os métodos global, global otimizado e  
local otimizado**

**Carlos Roberto Alves Fonseca Filho**

Geólogo, EMBA

Dissertação de Mestrado apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais (PPGE3M), como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia.

Área de Concentração: Tecnologia Mineral, Ambiental e Metalurgia  
Extrativa

Porto Alegre (RS)

2021

**Carlos Roberto Alves Fonseca Filho**

**ANÁLISE DE VIZINHANÇA DE KRIGAGEM:  
Estudo comparativo entre os métodos global, global otimizado e  
local otimizado**

Esta dissertação foi analisada e julgada adequada para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia 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.

---

Orientador: Prof. Dr. João Felipe Coimbra Leite Costa

---

Dr. Luciano Capponi

---

Dr. Ricardo José Hundelshausen

---

Prof. Dr. Marcel Antônio Arcari Bassani

Aprovado em 28/10/2021

Prof. Dr.  
Coordenador do PPGE3M

**VERSO DA FOLHA DE ROSTO (apagar estas instruções)**

Aqui é inserida a Ficha Catalográfica do seu trabalho. Segue o link disponibilizado pelo SBUFRGS: <https://www.ufrgs.br/bibliotecas/ferramentas-de-producao/ficha-catalografica/>

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitor:

Vice-Reitor:

ESCOLA DE ENGENHARIA

Diretor:

Vice-Diretor:

PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE MINAS,  
METALÚRGICA E DE MATERIAIS (PPGE3M)

Coordenador:

Vice-Coordenador:

S729e Souza, Fulano de  
Engenharia e suas competências : aspectos brasileiros /  
Adriano de Souza. — 2009.  
179 f. : il. ; 30 cm.

Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Rio  
Grande do Sul. Escola de Engenharia. Programa de Pós-  
Graduação, Porto Alegre, BR-RS, 2012.

Orientadora: Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Xxxxxx.

1. Xxxxxx. 2. Xxxxxxx. I. Xxxxxx. II. Título.

CDU XXX.XX

**ERRATA**

(opcional – se houver necessidade de alguma correção após a impressão final / encadernação do trabalho).

## **AGRADECIMENTOS**

Ao Prof. Dr. João Felipe Coimbra Leite Costa, pelos ensinamentos, pela orientação e por ter aberto muitas portas na minha vida acadêmica e profissional;

Ao Dr. Ricardo Hundelshausen, pela disponibilização do código do algoritmo e pelas críticas construtivas para a melhora deste trabalho;

Ao Prof. Dr. Marcel Antônio Arcari Bassani, pelos ensinamentos e pelo apoio nas publicações acadêmicas;

À Fundação Luiz Englert, pelo apoio financeiro;

A todos da Mosaic Fertilizantes, na pessoa do Dr. Luciano Nunes Capponi, pelo apoio com a disponibilização dos dados, apoio em operações com softwares e fomento à pesquisa acadêmica;

A todos os professores, professoras e colegas do PPGE3M, que contribuíram com um vasto conhecimento na minha jornada acadêmica. Todos os seus esforços fazem com que a UFRGS seja hoje uma referência na área de Geoestatística no Brasil e no mundo;

A todos os colegas de curso, em especial ao Gabriel Moreira pelo apoio em operações com softwares;

À minha família e amigos, pelo apoio incondicional e oportunidades de muitos bons momentos;

À minha esposa, Juliana, por estar sempre do meu lado e pelo apoio durante toda essa trajetória.

*"So let the farmers have for themselves the fruitful fields and cultivate the fertile hills for the sake of their produce; but let them leave to miners the gloomy valleys and sterile mountains, that they may draw forth from these, gems and metals which can buy, not only crops, but all things that are sold."*

Georgius Agricola

De Re Metallica

1556

## RESUMO

Para toda e qualquer estimativa por krigagem, seja ela ordinária, simples, multigaussiana ou indicadora, a vizinhança de krigagem engloba parâmetros que, dependendo de sua escolha, podem reduzir ou elevar significativamente a qualidade das estimativas. Tradicionalmente é muito comum que se utilize uma vizinhança de krigagem global nas estimativas, ou seja, todos os blocos de um domínio são interpolados com uma mesma estratégia de busca. O presente estudo desafia este conceito, ou seja, serão investigados os benefícios de se utilizar vizinhanças de krigagem locais, em uma abordagem bloco-a-bloco. Um estudo comparativo foi conduzido com objetivo de se avaliar o impacto dos parâmetros de krigagem nas estimativas. Para tanto, avaliou-se a performance de krigagem dos métodos que utilizam vizinhanças de krigagem globais, vizinhança de krigagem global otimizada (*Kriging Neighbourhood Analysis* ou KNA) e vizinhanças de krigagem locais otimizadas (*Localized Kriging Parameter Optimization* ou LKPO). Em cada uma delas foram avaliadas suas respectivas precisões e acurácias, conforme as principais métricas disponíveis na literatura, em especial, a eficiência de krigagem (KE) e inclinação do coeficiente de regressão (SR). De acordo com os resultados apresentados é possível concluir que a escolha da vizinhança de krigagem baseada na minimização do erro absoluto de validação cruzada melhora a qualidade da krigagem em relação aos métodos globais e de otimização baseados na eficiência de krigagem e inclinação do coeficiente de regressão. Os resultados mostram que a melhora pode ser observada em termos de precisão, erro quadrático médio e inclinação do coeficiente de regressão.

**Palavras-Chave:** Análise de vizinhança de krigagem, LKPO, parâmetros de krigagem, eficiência de krigagem, inclinação do coeficiente de regressão.



## **ABSTRACT**

*For any kriging estimate, whether it is ordinary, simple, multi-Gaussian or indicator, the kriging neighborhood encompasses some of the main parameters that, depending on its choice, can significantly reduce or increase the quality of the estimates. Currently, it is very common to use a global kriging neighborhood, that is, all blocks of a domain are estimated with the same kriging neighborhood. The present study challenges this concept, that is, the benefits of using local kriging neighborhoods will be investigated, in a block-by-block approach. A comparative study was carried out aiming the evaluation of the impact of kriging parameters on the estimates. Therefore, the kriging performance of methods that use global kriging neighborhoods, globally optimized kriging neighborhood (KNA) and locally optimized kriging neighborhoods were evaluated. The latter is known as Localized Kriging Parameter Optimization (LKPO). The kriging neighborhood choice and its optimization methodologies were evaluated according to the main available metrics in the literature, particularly, the kriging efficiency (KE) and slope of regression (SR). According to the presented results, it is possible to conclude that the choice of the kriging neighborhood based on the minimization of the absolute cross-validation error improves the quality of kriging estimates in relation to the global and globally optimized methods based on the kriging efficiency and slope of regression. The results illustrate that the improvement is translated to the estimates in terms of better precision, mean squared error and slope of regression.*

**Keywords:** *Kriging Neighborhood Analysis, LKPO, kriging parameters, kriging efficiency, slope of regression.*

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1-1 - Fluxograma ilustrativo da metodologia empregada na presente dissertação. ....	6
Figura 3-1 - Modelo variográfico esférico, também conhecido como “modelo de Matheron” (modificado de Sinclair e Blackwell, 2002). ....	25
Figura 3-2 - Representações gráficas de fenômenos espaciais isotrópico (A) e anisotrópico (B). Os números 1, 2, 3 e 4 indicam as direções dos variogramas (modificado de Sinclair e Blackwell, 2002). ....	26
Figura 3-3 - Representações gráficas de fenômenos espaciais anisotrópicos. Anisotropia geométrica (A), zonal ou estratificada (B) e mista (C). ....	27
Figura 3-4 - Relação dos suportes do testemunho de sondagem $v$ , bloco $V$ e depósito $V'$ (corte em planta - sem escala). ....	27
Figura 3-5 - Discretização de um bloco 2D (modificado de Sunday e Deutsch, 2020). ....	30
Figura 3-6 - Efeito da discretização no erro quadrático médio (modificado de Sunday e Deutsch, 2020). ....	31
Figura 3-7 - Desenho esquemático do raio de busca e do número de amostras selecionadas por octante. ....	32
Figura 3-8 -Vista em perspectiva das amostras. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor. ....	34
Figura 3-9 -Vista em perspectiva do modelo estimado. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor. ....	34
Figura 3-10 -Vista em perspectiva de uma seção do modelo estimado para comparação com os teores das amostras. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor. ....	35
Figura 3-11 -Efeito do suporte nos modelos estimados (modificado de Harding e Deutsch, 2019). ....	36
Figura 3-12 -Análise de deriva dos teores estimados ao longo do eixo Y. Comparação dos modelos desagrupado (NN), otimizado (LKPO) e krigagem ordinária tradicional (OK). ....	38

Figura 3-13 -Efeitos da krigagem na reta de regressão (modificado de Deutsch, 2007). .....39

Figura 3-14 -Exemplos de resultados de validação cruzada. Gráfico de dispersão (A) e histograma de erros (B). *Plots* gerados no GSLib® - *scatxval* e *histplt*. .....40

Figura 3-15 -Exemplos de viés condicional global, identificados através dos histogramas dos erros (modificado de Isaaks e Srivastava, 1989). .....41

Figura 3-16 -Exemplos de viés local presente (A) e não presente (B), identificados através dos gráficos de dispersão dos erros em função dos valores estimados (modificado de Isaaks e Srivastava, 1989). .....42

Figura 3-17 -Ilustração do *screen effect* (modificado de Sinclair e Blackwell, 2002). Bloco estimado com indicação das amostras com pesos positivos (+) e amostras com pesos negativos ( $\Delta$ ). .....43

Figura 3-18 -Efeito do número de amostras no erro quadrático médio (A), na eficiência de krigagem e *slope of regression* (B). Modificado de Deutsch e Deutsch (2012). .....44

Figura 4-1 - Ilustração do funcionamento do algoritmo LKNA (Coombes e Boamah, 2015). .....48

Figura 4-2 - Ilustração do funcionamento do algoritmo LKPO (de acordo com Hundelshausen *et al.*, 2018). .....49

Figura 4-3 - Ilustração do processo de definição das vizinhanças de krigagem a partir dos parâmetros de busca (modificado de Hundelshausen, 2018). .....50

Figura 4-4 - *Boxplots* das vizinhanças de krigagem geradas a partir das validações cruzadas. No eixo *y*, estão plotados os erros absolutos e no eixo *x* estão plotadas as vizinhanças de krigagem. .....51

Figura 4-5 - Destaque para uma amostra do *dataset* (círculo vermelho - I), avaliação dos erros absolutos de validação cruzada para várias estratégias de busca (II) e detalhe das vizinhanças de krigagem que minimizaram o erro absoluto (III). .....52

Figura 4-6 - Comparação das abordagens de aplicação de teores de corte locais nas curvas de teor-tonelagem (Coombes *et al.*, 2020). .....54

Figura 5-1 - Vista em perspectiva do <i>dataset</i> Copper.dat. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor. ....	57
Figura 5-2 - Vista em planta do <i>dataset</i> Copper.dat, com detalhe para as porções não amostradas (áreas hachuradas em vermelho) do depósito. .	57
Figura 5-3 - Histograma de frequência (barras) e acumulado (linha preta) do <i>dataset</i> Copper.dat - teores de cobre Cu (%).	58
Figura 5-4 - Análise de desagrupamento por célula da variável Cu(%). ..	59
Figura 5-5 - Histograma da variável Cu(%) desagrupada.	60
Figura 5-6 - Análise da influência dos números mínimo e máximo de amostras (eixo x) nas métricas de eficiência de krigagem (KE) e inclinação do coeficiente de regressão (SR) - eixos y. ....	63
Figura 5-7 - Histograma das vizinhanças de krigagem otimizadas - LKPO_A. ....	64
Figura 5-8 - Histograma das vizinhanças de krigagem otimizadas - LKPO_B. ....	64
Figura 5-9 - Comportamento individual das amostras do <i>dataset</i> em relação à otimização por LKPO (LKPO_A). Escala de cores referentes às vizinhanças otimizadas por LKPO. ....	65
Figura 5-10 - Comportamento individual das amostras do <i>dataset</i> em relação à otimização por LKPO (LKPO_B). Escala de cores referentes às vizinhanças otimizadas por LKPO. ....	66
Figura 5-11 - Volumes de influência gerados por vizinho mais próximo (LKPO_A e LKPO_B). Sem escala. ....	67
Figura 5-12 - Localização do jazimento de fosfato e os respectivos dados de sondagens (círculos verdes).	68
Figura 5-13 - Limite de lavra do ano de 2017.	69
Figura 5-14 - Limite de lavra do ano de 2018.	69
Figura 5-15 - Localização das províncias alcalinas das margens da Bacia do Paraná (Brod <i>et al.</i> , 2004). ....	70
Figura 5-16 - Detalhe da localização dos complexos alcalinos e carbonatíticos da APIP (Gomide, 2015). ....	71
Figura 5-17 - Detalhe do Complexo de Catalão I (Brod <i>et al.</i> , 2004). ....	72

Figura 5-18 - Seção esquemática do perfil de alteração de Catalão I (Oliveira e Imbernon, 1998). .....	73
Figura 5-19 - Seção esquemática das áreas mineralizadas de Catalão I (Brod <i>et al.</i> , 2004).....	74
Figura 5-20 - Histograma de frequência (barras) e acumulado (linha preta) do <i>dataset</i> Fosfato - teores de P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> e CaO (%). .....	75
Figura 5-21 - Análise de desagrupamento dos dados por célula. ....	76
Figura 5-22 - Histograma das variáveis P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> e CaO desagrupadas por célula (A e B) e por vizinho mais próximo (C e D). .....	76
Figura 6-1 - Histogramas dos erros de validação cruzada. ....	82
Figura 6-2 - Gráficos de dispersão entre os valores estimados (eixos x - "Est") e valores reais (eixos y - "true"), obtidos por validação cruzada. ..	84
Figura 6-3 - Performance em relação ao erro quadrático médio (MSE). ..	85
Figura 6-4 - Histogramas dos erros de validação cruzada para a variável P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> . .....	88
Figura 6-5 - Histogramas dos erros de validação cruzada para a variável CaO. ....	89
Figura 6-6 - Gráficos de dispersão entre os valores estimados (eixos x - "Est") e valores reais (eixos y - "true"), obtidos por validação cruzada para a variável P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> . ....	91
Figura 6-7 - Gráficos de dispersão entre os valores estimados (eixos x - "Est") e valores reais (eixos y - "true"), obtidos por validação cruzada para a variável CaO. ....	93
Figura 6-8 - Performance em relação ao erro quadrático médio (MSE). ..	95
Figura 6-9 - Teores médios de P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> AP medidos na base mensal (alimentação da usina). .....	96
Figura 6-10 - Ilustração de parte do fluxo de trabalho empregado para obtenção dos teores de P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> AP na base mensal. (A) Importação da nuvem de pontos, (B) importação das <i>strings</i> , (C) extrusão dos sólidos, (D) sólido lavrado na base mensal, (E) blocos selecionados e (F) blocos selecionados <i>versus</i> sólido lavrado na base mensal.....	97

Figura 6-11 - Performance dos modelos em relação à alimentação da usina (SMR). .....99

## LISTA DE TABELAS

Tabela 5-1 - Estatística descritiva do dataset Copper.dat. ....	58
Tabela 5-2 - Modelo de continuidade espacial da variável Cu (%). ....	60
Tabela 5-3 - Parâmetros de krigagem do dataset Cobre. ....	61
Tabela 5-4 - Resumo das vizinhanças de krigagem utilizadas no dataset Cobre.....	62
Tabela 5-5 - Tipologias de minério da mina de fosfato da Fosfertil (Ribeiro, 2008).....	74
Tabela 5-6 - Estatística descritiva do dataset Fosfato. ....	75
Tabela 5-7 - Modelos de continuidade espacial das variáveis P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> e CaO. ....	77
Tabela 5-8 - Parâmetros de krigagem do dataset Fosfato. ....	78
Tabela 5-9 - Resumo das vizinhanças de krigagem utilizadas no dataset Fosfato.....	78
Tabela 6-1 - Resultados das estimativas por krigagem ordinária para o dataset Cobre. ....	81
Tabela 6-2 - Resultados das estimativas por krigagem ordinária para o dataset Fosfato. ....	87
Tabela 6-3 - Resultados das estimativas por krigagem ordinária para o dataset Fosfato. ....	87
Tabela 6-4 - Resultados de performance dos modelos em relação à reconciliação mensal. SMR = alimentação da usina. ....	98
Tabela 6-5 - Diferenças relativas entre os teores de P <sub>2</sub> O <sub>5</sub> AP dos modelos em relação à alimentação da usina. ....	98

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

AE	Absolute Error (erro absoluto)
CV	Coeficiente de Variação
EDA	Exploratory Data Analysis (análise exploratória de dados)
CBRR	Comissão Brasileira de Recursos e Reservas
KNA	Kriging Neighborhood Analysis (análise de vizinhança de krigagem)
KE	Kriging Efficiency (eficiência de krigagem)
LKNA	Localized Kriging Neighborhood Analysis (análise local de vizinhança de krigagem)
LKNO	Localized Kriging Neighborhood Optimization (otimização local de vizinhança de krigagem)
LKPO	Localized Kriging Parameter Optimization (otimização local de parâmetros de krigagem)
MSE	Mean Squared Error (erro quadrático médio)
OK	Ordinary Kriging (krigagem ordinária)
QKNA	Quantitative Kriging Neighborhood Analysis (análise quantitativa de vizinhança de krigagem)
SL	Simple Kriging (krigagem simples)
SR	Slope of Regression (inclinação do coeficiente de regressão)



## Sumário

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO.....</b>	<b>1</b>
1.1	Motivação, meta e objetivos da dissertação .....	3
1.2	Metodologia .....	4
1.3	Organização da dissertação .....	6
<b>2</b>	<b>REVISÃO DA LITERATURA.....</b>	<b>8</b>
2.1	Breve histórico da Geoestatística .....	8
2.2	Vizinhança de krigagem e metodologias para sua definição.....	9
2.3	Validação cruzada .....	16
<b>3</b>	<b>CONCEITOS BÁSICOS.....</b>	<b>20</b>
3.1	Suporte.....	20
3.2	Variáveis regionalizadas .....	21
3.3	Variáveis aleatórias e função aleatória .....	22
3.4	Estacionariedade e hipótese intrínseca .....	22
3.5	Continuidade espacial .....	24
3.6	Variograma .....	25
3.7	Variância de dispersão .....	27
3.8	Krigagem .....	28
3.9	Discretização .....	30
3.10	Vizinhança de krigagem .....	31
3.11	Variância de krigagem.....	32

3.12	Validação do modelo estimado .....	33
3.12.1	Validação visual .....	33
3.12.2	Média global.....	35
3.12.3	Suavização de krigagem .....	35
3.12.4	Médias locais.....	38
3.12.5	Inclinação do coeficiente da reta de regressão .....	38
3.12.6	Validação cruzada .....	40
3.12.7	Erros de validação cruzada.....	41
3.12.8	Proporção de pesos negativos.....	43
3.12.9	Eficiência de krigagem.....	43

#### **4 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO DE VIZINHANÇA DE KRIGAGEM 45**

4.1	<i>Quantitative Kriging Neighborhood Analysis</i> - QKNA.....	45
4.2	<i>Localized Kriging Neighborhood Analysis</i> - LKNA.....	47
4.3	<i>Localized Kriging Parameter Optimization</i> - LKPO .....	49
4.4	<i>Local Kriging Neighborhood Optimization</i> - LKNO.....	53

#### **5 ESTUDOS DE CASO EM 3D ..... 56**

5.1	<i>Dataset 1 - Cobre</i> .....	56
5.1.1	Análise exploratória dos dados (EDA) .....	58
5.1.2	Análise da continuidade espacial.....	60
5.1.3	Definição dos parâmetros e das vizinhanças de krigagem - LKPO, KNA e métodos globais.....	61
5.2	<i>Dataset 2 - Fosfato</i> .....	68
5.2.1	Geologia regional e local.....	70
5.2.2	Análise exploratória dos dados (EDA) .....	75
5.2.3	Análise da continuidade espacial.....	77
5.2.4	Definição dos parâmetros e das vizinhanças de krigagem - LKPO, KNA e métodos globais.....	78

<b>6</b>	<b>RESULTADOS .....</b>	<b>80</b>
6.1	Resultados - <i>Dataset 1</i> - Cobre .....	80
6.2	Resultados - <i>Dataset 2</i> - Fosfato .....	87
<b>7</b>	<b>CONCLUSÕES .....</b>	<b>100</b>
<b>8</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>104</b>
	<b>Apêndice - Análise da continuidade espacial .....</b>	<b>110</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Para toda e qualquer estimativa por krigagem, seja ela ordinária ou simples (Matheron, 1963), multigaussiana (Verly, 1983) ou indicadora (Journel, 1982), os parâmetros de krigagem (também conhecidos como vizinhança de krigagem ou estratégia de busca) englobam alguns dos principais elementos que, dependendo de sua escolha, podem reduzir ou elevar a qualidade das estimativas.

Os principais parâmetros de krigagem são o mínimo e máximo de amostras, número de setores angulares e tamanho dos eixos do elipsoide de busca. Alguns softwares especializados incluem uma infinidade de parâmetros de krigagem, tais como número ótimo de amostras por setor angular e por furo, número máximo de setores angulares vazios consecutivos, teores de corte (*capping*), entre outros.

Recentes avanços tecnológicos, incluindo implementações de algoritmos de otimização ou métodos de análise de vizinhança de krigagem em *softwares* comerciais, atualmente são amplamente conhecidos e utilizados na indústria mineral. Além disso, recentes avanços regulatórios, que incluem atualizações nos códigos de mineração (nacional e internacionais), possuem princípios baseados na transparência, materialidade e competência (CBRR, 2016).

Nesse sentido observa-se, nos últimos anos, que maiores esforços têm sido direcionados no aumento da transparência e na qualidade dos *softwares* e dos algoritmos de estimativa, com o objetivo de tornarem os modelos mais robustos, confiáveis e rastreáveis.

Dessa forma vale destacar os esforços dos pesquisadores Rivoirard (1987), Vann *et al.* (2003), Coombes e Boamah (2015), Deutsch e Deutsch (2015) e Hundelshausen *et al.* (2018), que contribuíram com a introdução de

métricas para quantificar a qualidade da krigagem ou métodos de otimização de vizinhança de krigagem. Maiores detalhes sobre tais contribuições serão apresentadas no Capítulo 2.2 - Vizinhança de krigagem e metodologias para sua definição.

Atualmente existe uma tendência nos softwares comerciais em se utilizar duas métricas para a escolha da vizinhança de krigagem: a eficiência de krigagem (*kriging efficiency* - KE) e a inclinação do coeficiente de regressão (*slope of regression* - SR). Ambas métricas possuem uma desvantagem: a utilização da variância de krigagem ou do desvio-padrão de krigagem como elementos das equações. Uma vez que a variância de krigagem não corresponde a um índice de incerteza ou acurácia espacial, não se recomenda a sua utilização como parâmetro de escolha da vizinhança de krigagem.

Analisou-se, no presente trabalho, a utilização do erro absoluto de validação cruzada como métrica para escolha da vizinhança de krigagem, conforme metodologia proposta por Hundelshausen *et al.* (2018), denominada *Localized Kriging Parameter Optimization*, ou equivalente ao acrônimo LKPO.

Além disso, a metodologia também apresenta um desafio ao conceito de estimativa por krigagem ordinária: atualmente, a maioria dos métodos de otimização de vizinhança de krigagem utilizam parâmetros de krigagem globais, ou seja, os mesmos parâmetros de krigagem são aplicados a todos os blocos do domínio a ser estimado. A metodologia por LKPO, por sua vez, aplica parâmetros de krigagem otimizados em uma abordagem bloco-a-bloco.

## 1.1 Motivação, meta e objetivos da dissertação

A vizinhança de krigagem é tradicionalmente escolhida a partir de critérios subjetivos, como por exemplo, a experiência prévia do geoestatístico, *competent person* ou geomodelador, ou então é geralmente escolhida a partir de métodos consolidados, como o *Quantitative Kriging Neighborhood Analysis* (QKNA - Vann *et al.*, 2003) ou *Localized Kriging Neighborhood Analysis* (LKNA - Coombes e Boamah, 2015). Hundelshausen *et al.* (2018) introduziram uma metodologia baseada na otimização dos parâmetros locais de krigagem baseada no erro absoluto de validação cruzada (*localized kriging parameter optimization* - LKPO). Os autores concluíram que o LKPO apresentou resultados mais acurados e precisos do que os resultados obtidos pelo método LKNA.

A principal motivação para esta pesquisa reside no fato de não existir um consenso na literatura entre a escolha de alguns parâmetros da vizinhança de krigagem, tais como:

- Qual número mínimo de amostras deve ser utilizado?
- Qual número máximo de amostras deve ser utilizado?
- Qual número máximo de amostras por quadrante/octante deve ser utilizado?
- E sobre a elipsoide/raio de busca, deve ser coincidente ou diferente da isotropia/anisotropia?

Nesse sentido, o objetivo do trabalho consiste na avaliação das performances das metodologias de otimização de vizinhança de krigagem globais e global otimizado (KNA), e compará-las às metodologias de otimização locais, neste caso, o LKPO.

As metas do trabalho incluem:

- Alteração do código do algoritmo LKPO em linguagem Python®, pela substituição do kt3d pelo kt3dn (do pacote GSLib®) e edição do código, possibilitando o *output* do arquivo de validação cruzada do LKPO, incluindo as métricas KE, SR, variância de krigagem e número de amostras utilizadas na estimativa;
- Análise exploratória dos *datasets*;
- Análise da continuidade espacial das variáveis de interesse nos *datasets*;
- Definição das estratégias de krigagem a serem utilizadas nas diferentes metodologias;
- Estimativas por krigagem ordinária;
- Avaliação dos resultados no suporte de pontos e suporte de blocos:
  - Suporte de pontos: avaliação do erro médio (acurácia), variância dos erros (precisão), erro quadrático médio, coeficiente de correlação entre teor real versus teor estimado, KE e SR;
  - Suporte de blocos: avaliação da suavização (variância dos blocos versus variância regularizada), média global versus média dos dados desagrupados.

## 1.2 Metodologia

A metodologia para o desenvolvimento da dissertação envolveu uma revisão da literatura, um estudo sobre as metodologias de otimização de vizinhança de krigagem e suas métricas, a edição e compilação do código do algoritmo LKPO em linguagem de programação Python® e posterior reintrodução do *script* no *plugin* do *software* SGeMs®.

Para a avaliação dos métodos de otimização de vizinhança de krigagem, foram utilizados dois bancos de dados (*datasets*) tridimensionais, sendo um

deles disponível na obra de Clark e Harper (2000) e o outro baseado em uma jazida real de fosfato. Após a realização da análise dos *datasets* e de suas respectivas continuidades espaciais, prosseguiu-se então com as estimativas por krigagem ordinária no *software* SGeMs® de acordo com as seguintes premissas:

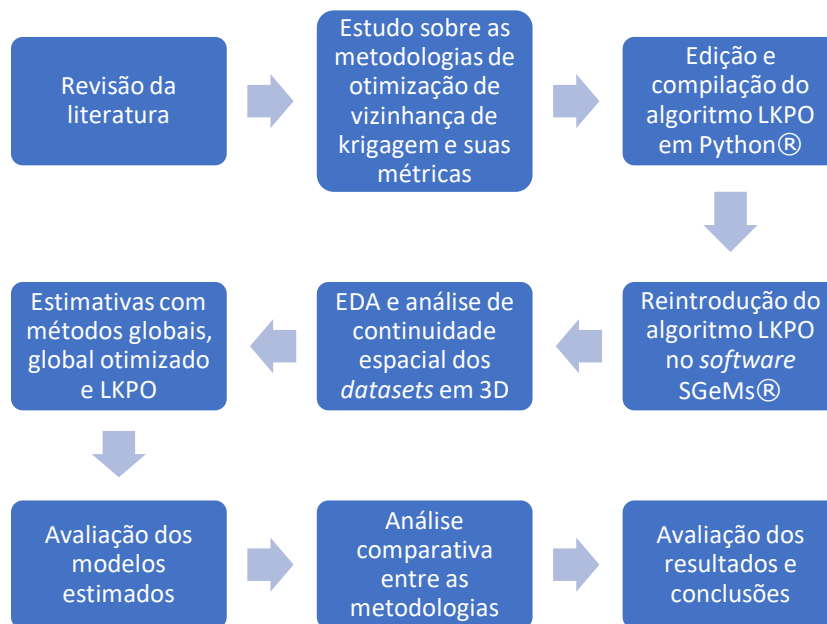
- Estimativas com métodos de vizinhança globais, ou seja, foram escolhidas vizinhanças de krigagem baseadas na sugestão de alguns autores, tais como Isaaks e Srivastava (1989), Goovaerts (1997), Olea (1999) e Deutsch e Deutsch (2015);
- Estimativa com método de vizinhança global otimizada, ou seja, foi escolhida uma vizinhança de krigagem baseada no método KNA;
- Estimativa com método de vizinhanças locais otimizadas, ou seja, foram escolhidas vizinhanças de krigagem otimizadas em relação ao erro absoluto, para cada amostra do *dataset*, baseadas no método LKPO (Hundelshausen *et al.*, 2018).

De acordo com os resultados obtidos nas estimativas por krigagem ordinária, os modelos foram avaliados de acordo com as métricas em vigência no setor mineral. Maiores detalhes sobre os quesitos de avaliação dos modelos serão apresentados no Capítulo 3.12 - Validação do modelo estimado.

A Figura 1-1 ilustra o fluxograma da metodologia utilizada para a elaboração da presente dissertação.



Figura 1-1 - Fluxograma ilustrativo da metodologia empregada na presente dissertação.



### 1.3 Organização da dissertação

A dissertação está subdividida em capítulos e organizada da seguinte maneira: o Capítulo 1 - INTRODUÇÃO inclui a introdução ao tema abordado, a motivação, metas e objetivos da dissertação, bem como a metodologia e sua organização.

No Capítulo 2 - REVISÃO DA LITERATURA apresenta-se uma breve revisão da literatura (revisão bibliográfica ou "estado da arte"), incluindo um breve histórico da Geoestatística e dos temas da vizinhança de krigagem, metodologias para sua definição e otimização, e validação cruzada.

O Capítulo 3 - CONCEITOS BÁSICOS inclui a introdução de alguns conceitos básicos da Geoestatística, considerados fundamentais para o entendimento dos temas abordados na dissertação.

O Capítulo 4 - MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO DE VIZINHANÇA DE KRIGAGEM apresenta as principais metodologias de otimização de vizinhança de krigagem. Embora o presente estudo tenha enfoque na metodologia LKPO,

são também apresentadas as metodologias conhecidas como QKNA, LKNA e LKNO.

O Capítulo 5 - ESTUDOS DE CASO EM 3D apresenta os estudos de caso tridimensionais, que consistem em dois *datasets*. O primeiro corresponde a um *dataset* de cobre, disponível na obra de Clark e Harper (2000). O segundo *dataset* corresponde à uma jazida real de fosfato, localizada no município de Catalão (GO).

No Capítulo 6 - RESULTADOS estão apresentados os resultados das estimativas de krigagem pelos métodos de vizinhanças globais, vizinhança global otimizada (KNA) e vizinhanças locais otimizadas (LKPO). As validações dos modelos estão em consonância com os quesitos apresentados no Capítulo 3.12 - Validação do modelo estimado.

O Capítulo 7 - CONCLUSÕES apresenta uma autocrítica em relação ao cumprimento das metas e objetivos propostos na presente dissertação, assim como as conclusões.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

Este capítulo consiste em um breve histórico da Geoestatística, além da revisão bibliográfica dos temas relacionados à vizinhança de krigagem, metodologias para sua definição e validação cruzada. Apesar dos temas estarem interrelacionados, optou-se por apresentá-los de maneira separada para fins de dissertação de cada tema.

### 2.1 Breve histórico da Geoestatística

Um dos primeiros pesquisadores a conciliar o estudo de dados espaciais com a Estatística foi Danie Krige (Krige, 1951). O autor sugeriu uma abordagem inédita, até então, para a indústria mineral, que consistiu na correlação dos teores de ouro de uma mina de Witwatersrand à uma distribuição lognormal (assimetria positiva e longa cauda em direção aos altos valores). Além de introduzir alguns conceitos fundamentais da Geoestatística, tais como o teorema de aditividade (de Krige), Krige ainda introduziria alguns estimadores baseados na teoria estatística.

A Geoestatística, como atualmente é reconhecida, só seria introduzida em nível internacional no início da década de 60, por Georges Matheron. De acordo com Matheron (1963), a Geoestatística tem como objetivo o estudo da distribuição espacial dos valores úteis (tais como teor, espessura, acumulação) de um empreendimento minerário. O autor ainda ressalta que qualquer avaliação de depósitos minerais e decisões críticas devem ser precedidas de estudos geoestatísticos, a fim de se evitar o fechamento precoce dos empreendimentos minerários.

Atualmente, a Geoestatística está difundida e consolidada em um amplo espectro das Ciências Exatas e da Terra, desde a agricultura, meio ambiente, produção de óleo e gás, ciência de dados, climatologia, entre outras.

## 2.2 Vizinhança de krigagem e metodologias para sua definição

A vizinhança de krigagem (*kriging neighborhood*), também conhecida como vizinhança de busca (*search neighborhood*), plano de krigagem (*kriging plan*), estratégia de krigagem (*kriging strategy*), estratégia de busca (*search strategy*), constitui-se como um tópico da Geoestatística que vem sendo foco de discussão há muito tempo. Diversos autores vêm debatendo o tema ao longo dos anos, porém ainda não existe um consenso sobre a matéria. Um breve histórico dessa discussão é apresentado sob a ótica de alguns dos principais autores do tema.

David (1977) identificou a vizinhança de krigagem sob o aspecto de octantes e número de amostras a ser considerado na estimativa. Para a questão do número de octantes, concluiu que representa um passo desnecessário na krigagem, uma vez que o estimador já possui o efeito desagrupador. O número de amostras a ser considerado foi relacionado à desnecessidade de se considerar amostras longínquas do bloco a ser estimado e ao esforço computacional de se resolver inúmeras equações de krigagem.

Rivoirard (1987) introduziu duas métricas para auxiliar na escolha da vizinhança de krigagem: o peso da média na krigagem simples e a inclinação da reta do coeficiente de regressão. O peso da média na krigagem simples determina a vizinhança mínima, ou seja, as amostras que são indispensáveis na manutenção da precisão da krigagem. O coeficiente de regressão entre os pontos conhecidos (amostras) e os pontos/blocos estimados é usado para se determinar o número máximo de amostras, ou seja, quando a inclinação da reta do coeficiente de regressão se aproxima de um.

Journel e Huijbregts (1989) limitaram a vizinhança de krigagem com a *quasi*-estacionariedade definida pelo variograma e definiram como objetivo

principal da vizinhança de krigagem a redução do viés condicional. Os autores reconheceram, no entanto, a necessidade de se buscar por amostras mais longínquas em casos de disponibilidade limitada de amostras.

Isaaks e Srivastava (1989) foram alguns dos primeiros autores a dedicar uma ampla discussão sobre a vizinhança de krigagem e a influência dos seus parâmetros. Os autores definiram um mínimo de quatro amostras e, em casos práticos, um mínimo de doze amostras para as estimativas. Em relação ao raio de busca, indicaram que parâmetros consistentes com a isotropia/anisotropia mapeada pelo variograma tendem a melhorar os resultados da distribuição dos erros da estimativa. Por outro lado, levantaram a hipótese de se customizar a orientação e anisotropia da vizinhança de krigagem para cada ponto/bloco estimado, resultando em melhorias ainda mais significativas. Recomendaram, ainda, que o raio de busca seja levemente maior que a distância média das amostras, dada pela raiz quadrada da área do depósito dividida pelo número total de amostras. Observaram, no entanto, que o aumento excessivo do raio de busca pode colocar em xeque o modelo estacionário da função aleatória.

Goovaerts (1997) recomendou o uso do raio de busca associado à anisotropia do variograma, bem como o uso de quadrantes/octantes. O autor salienta, no entanto, a possibilidade da criação de artefatos na utilização da busca por quadrantes/octantes nos casos os quais a malha de amostragem está alinhada ao *grid* de estimativa. Mencionou, ainda, para que se evite limitar o raio de busca ao maior alcance do variograma, nos casos de fenômenos isotrópicos. Para o caso de seleção de amostras, recomendou um mínimo de seis amostras e, em casos práticos (2D), um mínimo de dez amostras. O número máximo de amostras recomendado está em função do objetivo da estimativa: retratar feições locais (restringir o número máximo de amostras) e retratar feições de longo alcance (flexibilizar o número máximo de amostras). O autor recomenda, ainda, o

teste de diversas vizinhanças de busca em uma subárea/subvolume do depósito aliado à validação cruzada para medir quantitativamente o impacto dos parâmetros sobre os resultados produzidos.

Deutsch e Journel (1997) comentaram alguns aspectos da vizinhança de krigagem nas notas de aplicação da krigagem. A depender do objetivo da estimativa, como por exemplo mapear o *trend* global suavizado, uma vizinhança com um grande número de amostras é indicada. Nos casos os quais o objetivo é mapear o *trend* local, uma vizinhança de krigagem mais restrita é indicada. Os autores não recomendam a associação do raio de busca com o alcance do variograma. Para a utilização da busca por quadrantes/octantes, recomendam o aumento do número máximo de amostras para que se evite a criação de artefatos.

Olea (1999) recomendou, em termos gerais, que a vizinhança de krigagem contenha, no mínimo, três amostras e, no máximo, vinte e cinco amostras. O autor também analisou a sensibilidade da estimativa em função do número de amostras, indicando-a como uma ferramenta experimental válida. Para avaliar tal sensibilidade, comparou os pesos das amostras, o teor estimado e o resíduo (erro) quadrático. Ainda, em relação ao raio de busca, o autor recomendou o uso de quadrantes/octantes e elipse/elipsoide coincidente com a anisotropia da continuidade espacial.

Vann *et al.* (2003) foram talvez alguns dos primeiros autores a proporem uma metodologia, com critérios bem definidos, para a escolha objetiva da vizinhança de krigagem. Eles propuseram o método conhecido como análise quantitativa de vizinhança de krigagem (*quantitative kriging neighborhood analysis* - QKNA). A metodologia consiste na avaliação dos seguintes critérios (em ordem de prioridade): inclinação da reta do coeficiente de regressão entre os valores reais e estimados, peso da média de krigagem simples, distribuição dos pesos das amostras e variância de krigagem. Observa-se que os autores se basearam em algumas das métricas

propostas por Rivoirard (1981). Quanto mais próximo a inclinação da reta do coeficiente de regressão seja a um, mais aderente está o modelo estimado ao critério de não viés condicional. O peso da média de krigagem simples fornece uma medida da sobreposição de amostras (*screening effect*). Ou seja, quanto maior o peso da média de krigagem simples, mais relevante a sobreposição de amostras, e quanto menor o peso da média de krigagem simples, menos relevante a sobreposição de amostras. Os pesos das amostras devem ser bem pequenos, ou até mesmo levemente negativos, segundo os autores. Proporções de até cinco por cento de pesos negativos são aceitáveis. A variância de krigagem fornece uma ideia sobre a qualidade da configuração espacial das amostras. Os autores recomendaram um mínimo entre dez e doze amostras para a estimativa.

Boyle (2010) estudou a metodologia de análise de vizinhança de krigagem (*kriging neighborhood analysis* - KNA). O autor testou quatro cenários de raios de busca, mínimo de quatro amostras, sem número máximo de amostras e sem amostragem por quadrante. A determinação da vizinhança mínima (número mínimo de amostras) foi realizada de acordo com o proposto por Rivoirard (1981), ou seja, pelo peso da média de krigagem simples. A vizinhança máxima (número máximo de amostras) foi determinada de acordo com a inclinação da reta do coeficiente de regressão. O autor concluiu, no entanto, que a acurácia da krigagem é mais sensível aos domínios estacionários e à acurácia da amostragem do que à própria KNA.

Abedini *et al.* (2012) propuseram a escolha da vizinhança de krigagem (ou domínio de suporte) através de um algoritmo genético (*genetic algorithm* - GA). O algoritmo utiliza dois parâmetros para a escolha da vizinhança de krigagem: um global e outro local. O parâmetro global corresponde à somatória dos erros de validação cruzada e o parâmetro local corresponde ao erro individual de cada amostra. Além disso, os autores utilizaram variações no raio/elipsoide de busca, incluindo rotações, como variáveis de

decisão para otimização com o GA. Concluíram que os resultados foram superiores nos modelos estimados com GA em relação aos modelos estimados com krigagem “tradicional”.

Chilès e Delfiner (2012) indicaram que a vizinhança de krigagem deve obedecer uma estratégia que inclua amostras em todas as direções, o mais uniformemente possível e que retenha o menor número de amostras possível por quadrante/octante. Os autores indicam, ainda, a utilização da busca azimutal para que se previna o risco de viés condicional, além de propor de dezesseis a trinta e duas amostras para a estimativa, incluindo no mínimo cinco octantes ou quatro octantes não contíguos.

Sinclair e Blackwell (2012) indicaram que a vizinhança de krigagem deve ser consistente com a isotropia/anisotropia do variograma. Também recomendaram que, em casos bidimensionais, ao menos três quadrantes contenham amostras e, em casos tridimensionais, ao menos cinco octantes contenham amostras.

Khakestar *et al.* (2013) propuseram uma metodologia baseada na análise de sensibilidade da vizinhança de krigagem, mais especificamente do raio de busca, em relação às métricas de variância de krigagem, inclinação da reta do coeficiente de regressão e proporção de pesos negativos. O objetivo do método é encontrar um raio de busca otimizado em relação às métricas avaliadas. Foram também analisados raios de busca coincidentes com o alcance do variograma, dobro do alcance e dois terços do alcance. Os autores concluíram que os modelos que produziram as melhores métricas não foram necessariamente estimados com raios de busca maiores.

Rossi e Deutsch (2014) apontaram que a vizinhança de krigagem é um dos fatores que mais afetam os resultados da validação cruzada, até mais do que o modelo de continuidade espacial. Os autores enfatizam que a escolha da vizinhança de krigagem é baseada em considerações práticas e de



acordo com os domínios. O raio de busca, segundo os autores, deve ser limitado à confiança e eficiência do modelo variográfico, e não apenas ao seu alcance. A utilização de amostragem por setores (quadrantes/octantes) também é recomendada. Os números mínimo e máximo de amostras foram apontados como principais fatores na relação entre o viés condicional e a acurácia dos recursos lavráveis.

Coombes e Boamah (2015) propuseram uma metodologia baseada na otimização localizada das estratégias de busca, denominada análise local de vizinhança de krigagem (*localized kriging neighbourhood analysis* - LKNA). De acordo com os autores, uma prática comum na indústria mineral relaciona a escolha dos parâmetros da vizinhança de krigagem às áreas bem informadas e às áreas menos informadas, como ocorre na metodologia KNA, por exemplo. A metodologia LKNA foi introduzida com o intuito de se buscar parâmetros otimizados de vizinhança de krigagem em um contexto bloco-a-bloco. A escolha dos parâmetros de vizinhança de um bloco ocorre após testes exaustivos com várias combinações diferentes destes parâmetros. O “melhor” parâmetro de vizinhança de um bloco é aquele que maximiza a eficiência de krigagem e/ou inclinação da reta do coeficiente de regressão. Os autores concluíram, no entanto, que a metodologia era, na época, proibitiva do ponto de vista computacional.

Deutsch e Deutsch (2015) propuseram a escolha da vizinhança de krigagem em função do objetivo da estimativa: estimativa provisória, estimativa final, entre outros. Para a estimativa provisória, a vizinhança de krigagem pode ser restringida, com provável aumento do viés condicional. No caso da estimativa final, deve-se minimizar o erro quadrático médio e o viés condicional, ou seja, o número máximo de amostras deve ser elevado. Os autores indicaram um número de amostras equivalente a quarenta amostras (3D) e vinte e quatro (2D). O raio de busca deveria coincidir com a anisotropia e alcance do variograma, ou até mesmo ultrapassá-lo para incluir o número de amostras necessário.

Oliver e Webster (2015) propuseram alguns critérios para a seleção da vizinhança de krigagem. Para casos os quais a amostragem é densa, o variograma possui patamar e baixo efeito pepita, o raio de busca pode ser coincidente ou próximo ao alcance do variograma. Para casos os quais o variograma apresenta um alto efeito pepita, o raio de busca pode ser maior que o alcance do variograma, assim como nos casos os quais a amostragem é esparsa. Os autores recomendaram, no geral, a utilização de no mínimo sete amostras e, no máximo, vinte amostras, assim como a busca por quadrantes/octantes, com pelo menos duas amostras em cada.

Nowak e Leuangthong (2016) reconheceram que a escolha dos parâmetros de vizinhança de krigagem não é objetiva e que no centro desta discussão reside a questão do viés condicional. Os autores dividiram o estado da arte da discussão em duas escolas de pensamento: a primeira escola defende que o viés condicional deve ser o menor possível e a segunda escola defende que o viés condicional deve ser ignorado e que a variabilidade dos blocos estimados deve ser elevada como a variabilidade real dos blocos. Discutiuse a utilização da inclinação da reta do coeficiente de regressão e a eficiência de krigagem como métricas de otimização, uma vez que ambas não levam em conta a variância real dos erros de estimativa, pois são baseadas na variância de krigagem. Os autores concluem que a redução do viés condicional pode ser prejudicial quando o objetivo consiste na estimativa dos recursos globais acima de um determinado teor de corte, ou seja, é melhor obter-se um modelo não suavizado e enviesado condicionalmente.

Hundelshausen *et al.* (2018) introduziram uma metodologia baseada na otimização dos parâmetros locais de krigagem baseada no erro absoluto de validação cruzada (*localized kriging parameter optimization* - LKPO). O método consiste em uma variação da LKNA (Coombes e Boamah, 2015). Assim como na LKNA, a LKPO consiste em uma otimização bloco-a-bloco dos parâmetros de krigagem (número mínimo e máximo de amostras,

número de amostras por quadrante/octante). Os parâmetros de busca das vizinhanças são testados exaustivamente para cada amostra por validação cruzada. Os parâmetros otimizados são aqueles que minimizam o erro absoluto ( $|Z - Z^*|$ ) de cada amostra, e, cada bloco na vizinhança dessa amostra, é estimado com a sua respectiva vizinhança otimizada. Os autores concluíram que a LKPO apresentou resultados mais acurados e precisos do que os resultados obtidos pelo método LKNA.

Coombes *et al.* (2020) desafiaram a abordagem de se utilizar parâmetros globais na vizinhança de krigagem e propuseram a utilização de parâmetros locais nas estimativas. O método proposto pelos autores, denominado *Local Kriging Neighborhood Optimization* (LKNO), pode ser resumido em dois principais passos. O primeiro consiste na otimização do número de amostras da vizinhança de krigagem. O segundo passo corresponde à aplicação de um *capping*, seguido de uma avaliação do impacto na variabilidade. Os autores concluíram que a escolha de parâmetros locais aliada à aplicação de *cappings* locais pode trazer benefícios que refletem na reprodução de feições globais, assim como feições de variabilidade locais.

### 2.3 Validação cruzada

A validação cruzada (*cross validation* - XV), também conhecida como *leave-one-out method*, assim como no caso da vizinhança de krigagem, corresponde a um tema que vem sendo foco de debate há muitos anos. Um breve histórico desse debate é apresentado sob a ótica de alguns dos principais autores do tema.

Clark (1986) discutiu os usos e aplicações da validação cruzada na Geoestatística, além de apresentar um breve histórico do estado da arte, datado desde os anos 50 (Krige, 1959 *apud* Clark, 1986). Segundo a autora, foi a partir do final dos anos 70, no entanto, que a técnica começou a ser difundida com maior robustez na Geoestatística (David, 1977; Parker *et al.*,

1979; Rendu, 1979; Davis e Borgman, 1979; Verly *et al.*, 1983 *apud* Clark, 1986). A autora conclui, apresentando um caso prático de uso da validação cruzada, que a sua mera utilização não remove o fator subjetivo da escolha do modelo de continuidade espacial. Recomendou, porém, que a técnica seja utilizada como uma ferramenta de exploração dos dados.

Davis (1987) chamou a atenção para a confusão entre as técnicas de validação cruzada e o estimador de *jackknifing*, e mostrou alguns exemplos práticos. O estimador de *jackknifing* é utilizado para se reduzir o viés condicional, que é geralmente identificado através da técnica de validação cruzada. O autor aponta na técnica de validação cruzada uma forma de se obter o “melhor” modelo de continuidade espacial. Dentre os principais abusos no uso da validação cruzada estão, segundo o autor, a restrição de modelos avaliados e na confiança de que o modelo escolhido será o “melhor”.

Isaaks e Srivastava (1989) dedicaram uma ampla discussão sobre a técnica de validação cruzada em sua obra. Os autores reconheceram as limitações da técnica, que incluem as escolhas do “melhor” modelo de continuidade espacial e “melhor” vizinhança de krigagem. Apontaram, no entanto, a importância da avaliação dos erros (resíduos) de validação cruzada e como estes podem auxiliar em decisões quando o processo de estimativa apresenta problemas. Como uma técnica de análise quantitativa, a validação cruzada pode auxiliar na escolha do “melhor” modelo pela identificação do viés condicional global. Ou seja, plotando-se os valores reais e os valores estimados em um diagrama de dispersão e analisando-se o coeficiente de regressão. Por outro lado, como uma técnica de análise qualitativa, a validação cruzada pode auxiliar na escolha do “melhor” modelo pela identificação do viés condicional local. Isto é, plotando-se os resíduos (erros) em planta e observando-se se existem tendências ou agrupamentos em região (ou regiões) do depósito.

Goovaerts (1997) atribuiu ao objetivo da validação cruzada à comparação de diferentes modelos de continuidade espacial e sua influência nos modelos estimados. O autor alerta, no entanto, os seguintes aspectos para a utilização da técnica: a mudança do modelo de continuidade espacial, mantendo semelhança de forma, não influencia os pesos de krigagem; dados de regiões esparsamente amostradas podem não ser representativos da área de interesse e, portanto, os “melhores” resultados de validação cruzada podem não corresponder às melhores estimativas; fatores como vizinhança de krigagem e estimador (OK, SK etc.) também são críticos na avaliação dos modelos estimados. Ou seja, se os modelos estimados são insatisfatórios, não há clareza de qual dos fatores está ocasionando o problema.

Deutsch e Journel (1997) indicaram o uso de histogramas e gráficos de dispersão para a visualização e análise dos erros obtidos por validação cruzada. Os autores também indicaram a utilização de mapas de contorno dos erros, cujos resultados não devem apresentar tendências (*trends*). A modelagem da continuidade espacial do erro deve ilustrar um efeito pepita puro.

Armstrong (1998) recomendou o uso da validação cruzada para se avaliar o “melhor” modelo de continuidade espacial. A autora também sugeriu o cálculo de três parâmetros estatísticos para auxiliar na escolha do “melhor” modelo: o primeiro corresponde à somatória dos erros, calculado a partir da subtração do valor estimado do valor real; o segundo parâmetro corresponde à somatória da diferença entre o valor estimado do valor real, dividida pelo desvio padrão entre o valor real e o valor estimado; o terceiro parâmetro corresponde à somatória da diferença quadrática entre o valor estimado do valor real, dividida pela variância entre o valor real e o valor estimado (variância de krigagem). A autora alerta, no entanto, que os três parâmetros estatísticos são fortemente influenciados por valores extremos

(*outliers*) e que é comum que apontem para diferentes modelos como sendo o “melhor”.

Olea (1999) reconheceu as limitações da validação cruzada, porém ressalta que na ausência de uma melhor técnica, o uso da validação cruzada é bem-vindo e muito melhor do que se tomar decisões ou prerrogativas arbitrárias. O autor ilustra alguns exemplos, mostrando que a redução do erro quadrático médio de um dado modelo está associada ao aumento do número de amostras utilizado na estimativa (sensibilidade ao número de amostras) e também associada à anisotropia do modelo de continuidade espacial.

Deutsch (2010) ilustrou as formas de apresentação dos dados provenientes de validação cruzada e *jackknifing*. O autor reconhece, porém, a limitação da validação cruzada, no sentido de que a técnica não fornece a prova inequívoca de que o modelo de continuidade espacial é bom ou de que é mais adequado para um objetivo particular. Apesar de sua limitação, a técnica permite que o usuário identifique erros tolos e/ou dados problemáticos. Os resultados da validação cruzada também permitem comparar diferentes algoritmos de estimativa e escolhas de implementação (vizinhanças de krigagem).

Chilès e Delfiner (2012) mostraram a validação cruzada como uma poderosa técnica de checagem de *performance* do modelo de continuidade espacial. Os autores recomendam que os resultados da validação cruzada sejam expressos na forma de erros standardizados (resíduos divididos pelo desvio padrão de krigagem -  $E_a / \sigma_{ka}$ ), diagramas de dispersão ( $Z^*$ ,  $Z$  e  $Z^*$ ,  $e_a$ ) e histogramas dos erros standardizados.

Sinclair e Blackwell (2012) apontaram o uso da técnica da validação cruzada como útil na comparação entre diferentes métodos de estimativa, assim como na identificação do viés global e erro médio.

Rossi e Deutsch (2014) reconheceram a utilização da validação cruzada como uma forma de comparação entre modelos alternativos de continuidade espacial. Os autores apontaram, no entanto, algumas restrições ao uso da técnica, assim como outros autores (Davis, 1987; Isaaks e Srivastava, 1989; Goovaerts, 1997). As restrições da técnica incluem: a técnica não é sensível o bastante para detectar pequenas diferenças de um modelo de continuidade espacial para outro; a análise é realizada no suporte amostral, enquanto o interesse maior no momento de estimativa, seria no suporte de blocos.

Oliver e Webster (2015) recomendaram a utilização da validação cruzada como técnica para comparação de modelos de continuidade espacial. Os autores indicaram que os “melhores modelos” devem ser escolhidos a partir do erro médio, erro quadrático médio e, principalmente, do erro quadrático médio ponderado.

### **3 CONCEITOS BÁSICOS**

Será abordado neste capítulo alguns dos principais conceitos que fundamentam a Geoestatística. Alguns dos conceitos já foram brevemente introduzidos nos capítulos anteriores.

#### **3.1 Suporte**

Em Geoestatística, é comum se referir ao termo suporte (ou suporte amostral), que consiste no tamanho e volume de uma amostra ou de um bloco (Armstrong, 1998). Em mineração, é comum associar o suporte amostral com as amostras de um furo de sondagem, por exemplo. Entretanto, é comum que os intervalos de amostragem em campanhas de sondagem, ou até mesmo os diâmetros dos furos de sondagem não sejam constantes, o que torna necessária a regularização do suporte (*compositing*).

Rossi e Deutsch (2014) indicam que a regularização de suporte é tipicamente calculada por uma média ponderada dos comprimentos das amostras. Os diferentes critérios de regularização de suporte, que dependem do objetivo do estudo, incluem:

- Zonas litológicas;
- Zonas geometalúrgicas;
- Intervalo constante;
- Bancada ou seção;
- Zonas de alto teor;
- Zonas de baixo teor;
- Intervalo mínimo.

### 3.2 Variáveis regionalizadas

Segundo Armstrong (1998), uma vez que a informação disponível da variável de interesse é escassa, modelos são necessários para descrever quaisquer conclusões sobre os pontos que não foram amostrados. Uma das formas mais intuitivas de se desenvolver um modelo matemático é através da modelagem da gênese do fenômeno. Essa abordagem, no entanto, vem sendo provada como extremamente complexa em termos de implementação.

O termo "variáveis regionalizadas" (*regionalized variables* - ReV) foi introduzido por Matheron (1963) para enfatizar dois aspectos principais das variáveis: um aspecto aleatório, que corresponde às irregularidades locais, e um aspecto estruturado, que corresponde às tendências de larga escala. Uma variável regionalizada é, portanto, localizada, possui um determinado suporte (ou volume) e apresenta uma certa continuidade (ou estruturação) espacial. Matematicamente são expressas como  $Z(x)$ .



### 3.3 Variáveis aleatórias e função aleatória

De acordo com Armstrong (1998), o valor observado em cada ponto de um depósito pode ser considerado como o resultado (realização) de uma variável aleatória (*random variable* - RV), inclusive em pontos que não foram amostrados. Em termos matemáticos, o conjunto de variáveis aleatórias pode ser considerado como uma função aleatória (*random function* - RF).

Journel e Huijbregts (1989) indicam que tanto o aspecto aleatório quanto o aspecto estruturado de uma variável regionalizada são expressos pela linguagem probabilística das funções aleatórias. Por exemplo, uma variável regionalizada  $z(x)$  é considerada como uma realização particular da função aleatória  $Z(x)$ . Uma função aleatória  $Z(x)$  pode ser considerada como um conjunto de variáveis aleatórias  $Z(x_i)$ , definidas em cada ponto  $x_i$  do depósito  $D$ , conforme a equação abaixo:

$$D: Z(x) = \{Z(x_i), \forall x_i \in D\}$$

As variáveis aleatórias  $Z(x_i)$  estão correlacionadas e tal correlação depende do vetor  $h$  (módulo e direção) e da natureza da variável. Por exemplo, para cada ponto  $x_i$  de um depósito, o teor real  $z(x_i)$  é interpretado como uma realização da variável aleatória  $Z(x_i)$ . De forma similar, o conjunto dos teores reais  $\{z(x_i), \forall x_i \in D\}$ , que definem o depósito ou a zona  $D$  é considerado como uma realização da função aleatória  $\{Z(x_i), \forall x_i \in D\}$ .

### 3.4 Estacionariedade e hipótese intrínseca

Segundo Armstrong (1998), uma função aleatória estacionária é homogênea e repetitiva no espaço, ou seja, para qualquer incremento  $h$ , a distribuição de  $Z(x_1), Z(x_2), \dots, Z(x_k)$  é a mesma que  $Z(x_1+h), Z(x_2+h), \dots, Z(x_k+h)$ . Porém, como existe uma limitação em relação aos

dados amostrais, admite-se que apenas os dois momentos da função sejam constantes: a média e a covariância. Tal propriedade é conhecida como estacionariedade de segunda ordem ou “fraca”.

A covariância, em Geoestatística, mede a relação entre valores da mesma variável, separados por uma distância  $h$ , conforme uma determinada direção (Yamamoto e Landim, 2013).

De acordo com Journel e Huijbregts (1989), a estacionariedade de segunda ordem é expressa matematicamente por:

$$\begin{aligned} E\{Z(x)\} &= m, \forall x \\ C(h) &= E\{Z(x+h) \cdot Z(x)\} - m^2, \forall x \\ \text{Var}\{Z(x)\} &= E\{[Z(x) - m]^2\} = C(0), \forall x \\ \gamma(h) &= \frac{1}{2} E\{[Z(x+h) - Z(x)]^2\} = C(0) - C(h), \forall x \end{aligned}$$

Ou seja, a hipótese de estacionariedade de segunda ordem assume a existência de uma covariância e, portanto, de uma variância finita *a priori*,  $\text{Var}\{Z(x)\} = C(0)$ .

A função aleatória  $Z(x)$  é considerada como intrínseca quando a esperança matemática não depende do suporte  $x$ , ou seja:

$$E\{Z(x)\} = m, \forall x$$

Além disso, para todos os vetores  $h$ , o incremento  $[Z(x+h) - Z(x)]$  possui variância finita que não depende do suporte  $x$ , ou seja:

$$\text{Var}\{Z(x+h) - Z(x)\} = E\{[Z(x+h) - Z(x)]^2\} = 2\gamma(h), \forall x$$

A hipótese da estacionariedade de segunda ordem implica a coexistência da hipótese intrínseca, mas o inverso não é necessariamente verdadeiro. A hipótese intrínseca pode ser interpretada como uma limitação da estacionariedade de segunda ordem aos incrementos da função aleatória  $Z(x)$ .

### 3.5 Continuidade espacial

De acordo com Sinclair e Blackwell (2002), o conceito de continuidade (*continuity*) é utilizado em avaliação de depósitos/jazidas minerais para definir feições geológicas que controlam mineralizações e também teores, caracterizando ambiguidade no conceito.

A continuidade geológica consiste em uma feição espacial geométrica, tal como um depósito mineral ou domínio. Exemplos primários incluem veios, zonas de cisalhamento mineralizadas e estratos mineralizados. Exemplos secundários incluem falhas, metamorfismo, dobramentos e zonas de cisalhamento.

A continuidade de valores consiste na distribuição espacial de feições como teor, espessura, alvura, entre outros (geralmente atributos de interesse econômico), que estão incluídos na continuidade geológica (domínio geológico). Para a quantificação da continuidade desses atributos, são utilizados algoritmos da função autocorrelação (ex: semivariograma, covariograma, correlograma etc.).

Alguns autores associam o termo continuidade ou variabilidade espacial (*spatial continuity / spatial variability* - Matheron, 1963; Isaaks e Srivastava, 1989; Journel e Deutsch, 1998; Rossi e Deutsch, 2014), como sinônimos de análise estrutural (*structural analysis* - Journel e Huijbregts, 1989; Armstrong, 1998; Sinclair e Blackwell, 2002). No presente trabalho, será utilizado o termo "continuidade espacial".

### 3.6 Variograma

Como a análise da continuidade espacial é uma das primeiras tarefas em Geoestatística, Journel e Huijbregts (1989) indicam que o variograma é o instrumento operacional que descreve a variabilidade espacial da variável regionalizada.

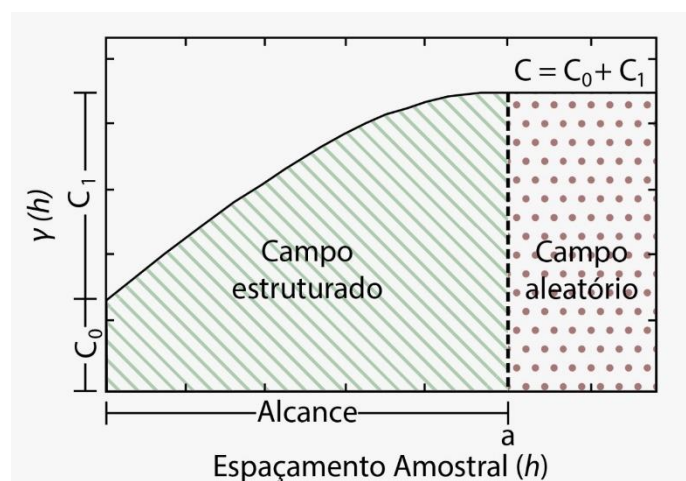
O variograma experimental pode ser calculado através da seguinte fórmula:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i + h) - Z(x_i)]^2$$

Onde N corresponde ao número de pares,  $Z(x_i)$  corresponde à realização da função aleatória na posição  $x_i$  e  $Z(x_i + h)$  equivale à realização da função aleatória na posição  $x_i + h$ .

A representação gráfica do variograma está ilustrada na Figura 3-1, com indicação dos seus principais elementos: o efeito pepita (*nugget effect* -  $C_0$  - variância aleatória), patamar (*sill* -  $C$  - variância espacial ou *a priori*) e alcance, amplitude ou zona de influência (*range of influence*-  $a$ ).

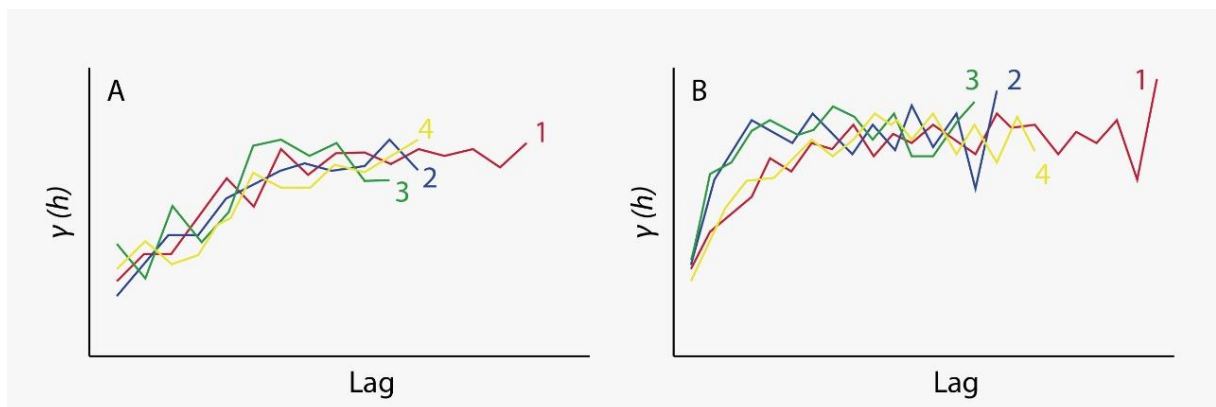
Figura 3-1 - Modelo variográfico esférico, também conhecido como "modelo de Matheron" (modificado de Sinclair e Blackwell, 2002).



De acordo com Matheron (1963), o variograma é uma função crescente de acordo com a distância  $h$  e expressa similaridades para pares de amostras próximos e dissimilaridades para pares de amostras longínquos. O espaçamento ou lag ( $h$ ) o qual o variograma atinge um valor constante ( $C$ ) corresponde à amplitude ( $a$ ) ou zona de influência.

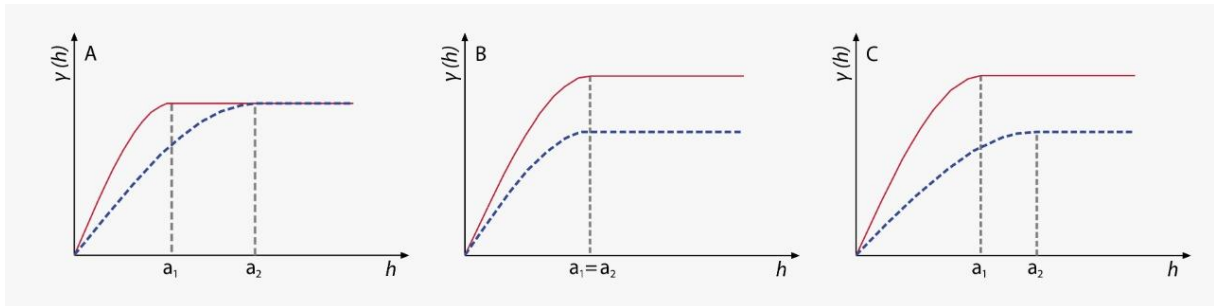
A construção de variogramas (ou outras funções de autocorrelação) em diferentes direções revelam variações de continuidade espacial, que podem indicar isotropia ou anisotropia, conforme ilustrado na Figura 3-2.

Figura 3-2 - Representações gráficas de fenômenos espaciais isotrópico (A) e anisotrópico (B). Os números 1, 2, 3 e 4 indicam as direções dos variogramas (modificado de Sinclair e Blackwell, 2002).



O fenômeno isotrópico indica que as similaridades/dissimilaridades são praticamente iguais em todas as direções. Inversamente, o fenômeno anisotrópico indica que as similaridades/dissimilaridades variam conforme as direções. As anisotropias mais comuns são a geométrica, zonal ou estratificada e mista, conforme ilustrado na Figura 3-3.

Figura 3-3 - Representações gráficas de fenômenos espaciais anisotrópicos. Anisotropia geométrica (A), zonal ou estratificada (B) e mista (C).

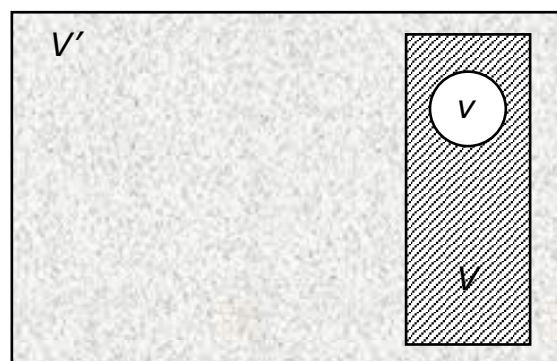


### 3.7 Variância de dispersão

O suporte impacta diretamente os histogramas e variogramas das variáveis regionalizadas. A variância de dispersão comprova os efeitos do suporte (amostral ou de blocos) nas variáveis regionalizadas.

Consideram-se suportes amostrais ou volumes  $v$ ,  $V$  e  $V'$ , conforme ilustrado na Figura 3-4, a escala de observação dos dados.

Figura 3-4 - Relação dos suportes do testemunho de sondagem  $v$ , bloco  $V$  e depósito  $V'$  (corte em planta - sem escala).



A variância de  $v$  em  $V$  ( $\sigma^2(v | V)$ ) pode ser calculada através da seguinte equação (Armstrong, 1998):

$$\sigma^2(v | V) = E \left( \frac{1}{v} \int_v (Z_v(x) - m_v)^2 dx \right)$$

$$\sigma^2(v | V) = \frac{1}{V^2} \iint_v \gamma(x - y) dx dy - \frac{1}{V^2} \iint_v \gamma(x - y) dx dy$$

$$\sigma^2(v | V) = \bar{\gamma}(V | V) - \bar{\gamma}(v, v)$$

Onde:

$\sigma^2(v | V)$  = Variância de  $v$  em  $V$

$Z_v(x)$  = Variável a ser estimada

$m_v$  = Média de  $v$

$\bar{\gamma}$  = Variograma médio (*gammabar*)

De maneira similar, a variância de dispersão de um “ponto” em  $V$  pode ser calculada como:

$$\sigma^2(\mathbf{0} | V) = \bar{\gamma}(V, V)$$

E o Teorema de Aditividade de Krige corresponde:

$$\sigma^2(v | V') = \bar{\gamma}(v | V) + \bar{\gamma}(V | V')$$

Ou seja,  $v$  pode ser considerado como um testemunho de sondagem,  $V$  um bloco e  $V'$  todo o depósito.

### 3.8 Krigagem

A estimativa por krigagem ordinária (*ordinary kriging* - OK) é geralmente associada ao acrônimo BLUE (*best linear unbiased estimator*), ou seja, corresponde ao melhor estimador linear não enviesado. Isaaks e Srivastava (1989) explicam as iniciais do acrônimo:

- Linear, pois os dados estimados por krigagem ordinária correspondem a combinações lineares ponderadas dos dados disponíveis;
- Não enviesado, pois a esperança matemática do erro é zero;
- Melhor, pois tem como objetivo minimizar a variância da estimativa (variância de krigagem).

Rossi e Deutsch (2014) enumeram uma infinidade de estimadores de krigagem, embora seja dada ênfase à krigagem simples e krigagem ordinária na presente dissertação.

Os estimadores de krigagem simples e krigagem ordinária são baseados nas seguintes suposições:

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

Onde  $Z^*(x)$  corresponde ao valor estimado no ponto ou bloco na posição  $x$ ,  $\lambda_i$  corresponde aos pesos calculados para as amostras e  $z(x_i)$  corresponde aos dados da vizinhança do ponto ou bloco a ser estimado ( $i = 1, \dots, n$ ). Os pesos  $\lambda_i$  devem obedecer à não tendenciosidade (não enviesamento), ou seja:

$$E \{Z^* - Z\} = 0$$

O estimador de krigagem simples (*simple kriging* - SK) é baseado na seguinte equação:

$$Z_{sk}^*(x) = m + \sum_{i=1}^n \lambda_i [z(x_i) - m]$$

Onde  $Z_{sk}^*(x)$  corresponde ao valor no ponto ou bloco a ser estimado na posição  $x$ ,  $\lambda_i$  corresponde aos pesos calculados para as amostras,  $z(x_i)$



corresponde aos dados da vizinhança do ponto ou bloco a ser estimado ( $i = 1, \dots, n$ ) e  $m$  corresponde à média local conhecida.

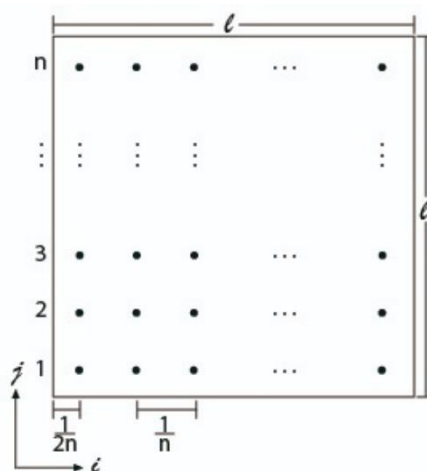
O estimador de krigagem ordinária (OK) é baseado na seguinte equação:

$$Z_{ok}^*(x) = \sum_{i=1}^n \lambda_i z(x_i)$$

### 3.9 Discretização

De acordo com Sunday e Deutsch (2020), discretização corresponde ao processo de subdivisão do espaço em uma série de pontos. Cada ponto ou nó de discretização representa um volume que corresponde a uma parte integrante do bloco. A Figura 3-5 ilustra um bloco em 2D com os pontos de discretização, ou seja, um bloco de dimensão  $l$ , discretizado de  $n$  por  $n$  pontos, onde  $z_{ij}$  corresponde ao valor da propriedade do bloco em cada ponto de discretização,  $i, j = 1, \dots, n$  correspondem à posição do bloco. Desta forma, a média da propriedade do bloco é obtida pela seguinte equação:

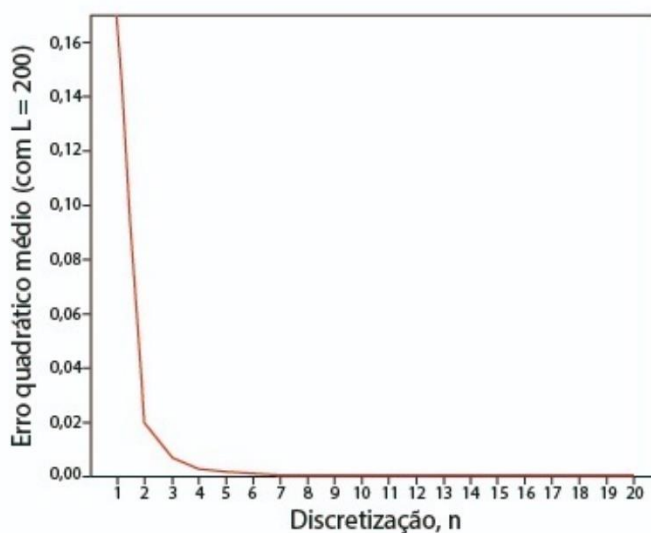
Figura 3-5 - Discretização de um bloco 2D (modificado de Sunday e Deutsch, 2020).



$$\bar{z}(n) = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n z_{i,j}$$

A Figura 3-6 ilustra o comportamento do erro quadrático médio (*mean squared error* - MSE) de 200 realizações ( $L = 200$ ) em relação à discretização. Observa-se que o erro quadrático médio tende a decrescer com o aumento da discretização.

Figura 3-6 - Efeito da discretização no erro quadrático médio (modificado de Sunday e Deutsch, 2020).



### 3.10 Vizinhaça de krigagem

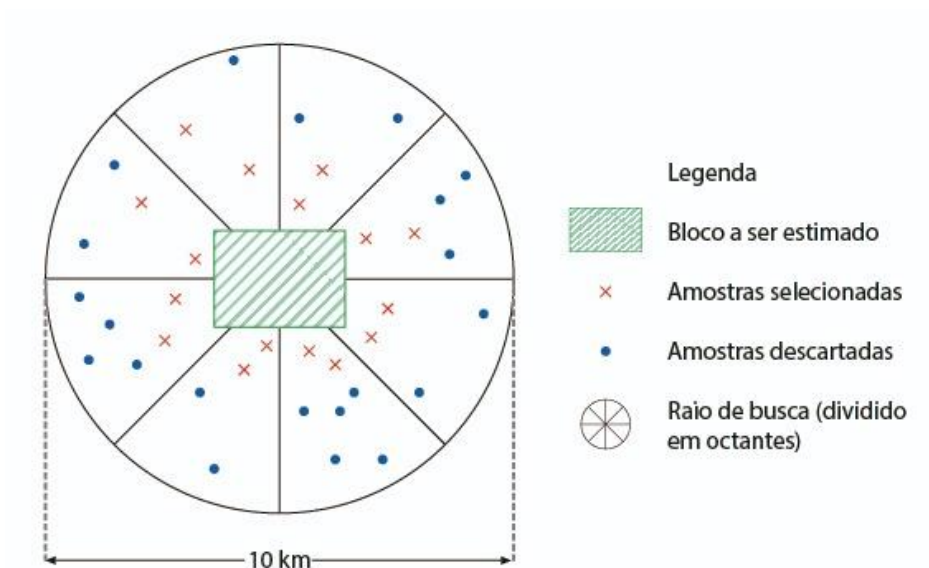
Em termos práticos, a vizinhaça de krigagem é comumente associada a um círculo (2D) ou esfera (3D) em casos isotrópicos; elipse (2D) ou elipsoide (3D) em casos anisotrópicos, cujos centros coincidem com o as coordenadas do ponto/bloco a ser estimado.

O seu raio de busca diz respeito às amostras que serão incluídas ou excluídas na estimativa. Nos casos isotrópicos, o raio de busca está associado ao raio do círculo/esfera. Nos casos anisotrópicos, o raio de busca

está associado aos eixos de maior e menor continuidade espacial da elipse, ou nos eixos de maior, média e menor continuidade espacial do elipsoide.

Alguns dos elementos que integram a vizinhança de krigagem, e que estão invariavelmente presentes nos *softwares* de estimativas, são: mínimo de amostras, máximo de amostras, raio de busca, busca por quadrante/octante, número mínimo e máximo de amostras por quadrante/octante. A Figura 3-7 ilustra o raio de busca e o número máximo de amostras por octante.

Figura 3-7 - Desenho esquemático do raio de busca e do número de amostras selecionadas por octante.



### 3.11 Variância de krigagem

A variância de krigagem (*kriging variance*, KV ou  $\sigma_{ok}^2$ ) pode ser obtida da seguinte forma:

$$\sigma_{ok}^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i \bar{\gamma}(x_i, V) - \bar{\gamma}(V, V) + \mu$$

Tal expressão, quando derivada e igualada a zero, minimiza a variância da estimativa e suas raízes correspondem aos pesos necessários:  $\lambda_i$  são os pesos de krigagem ordinária;  $\bar{\gamma}(x_i, V)$  é a média dos variogramas entre as amostras e o bloco estimado;  $\bar{\gamma}(V, V)$  é a média dos variogramas dos dados usados na estimativa do bloco;  $\mu$  é o multiplicador Lagrangeano.

Armstrong (1998) identificou a variância de krigagem como um parâmetro razoavelmente insensível à vizinhança de krigagem. Deutsch e Journel (1997), Goovaerts (1997), Yamamoto e Landim (2013), e Rossi e Deutsch (2014) classificaram a variância de krigagem como um índice de qualidade da configuração espacial dos dados e do modelo de variograma. Os autores ressaltaram, ainda, que o valor da variância de krigagem é independente dos dados e seu uso não indicado, em geral, como medida de acurácia espacial.

### 3.12 Validação do modelo estimado

A validação é um passo essencial e muito importante na verificação da qualidade e da confiabilidade do modelo estimado. Nos itens a seguir, estão uma série de validações sugeridas para o modelo estimado, em consonância com o proposto por Rossi e Deutsch (2014).

#### 3.12.1 Validação visual

A validação visual (ou gráfica) do modelo é tipicamente executada por meio de comparações visuais entre o modelo estimado e entre os dados amostrais compostos (teores, zonas geológicas, zonas geometalúrgicas etc.). Técnicas utilizadas para tal objetivo incluem seções verticais e seções planares.

A Figura 3-8, Figura 3-9 e Figura 3-10 ilustram alguns exemplos de validação visual.

Figura 3-8 -Vista em perspectiva das amostras. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor.

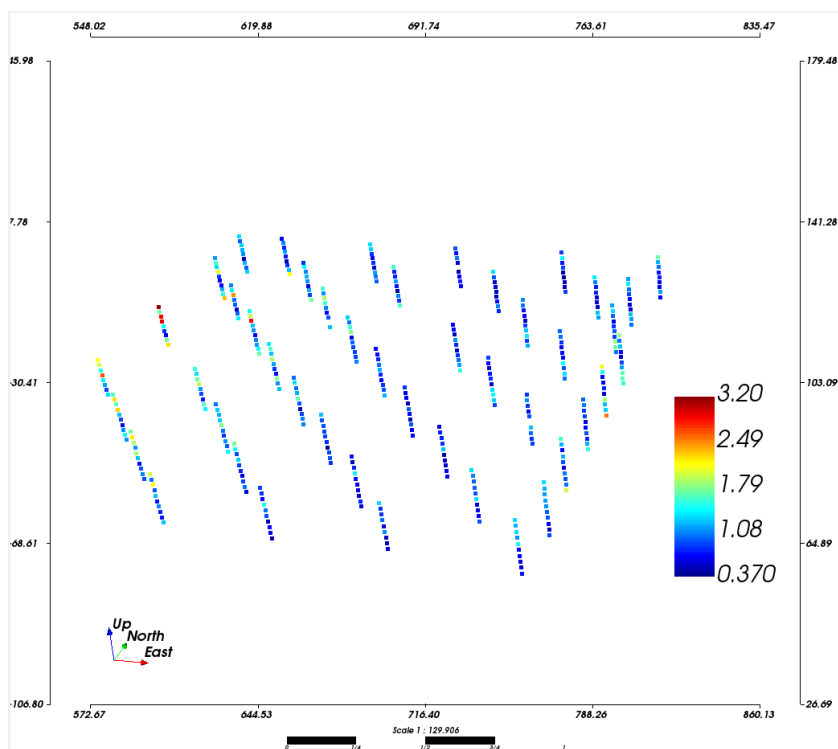


Figura 3-9 -Vista em perspectiva do modelo estimado. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor.

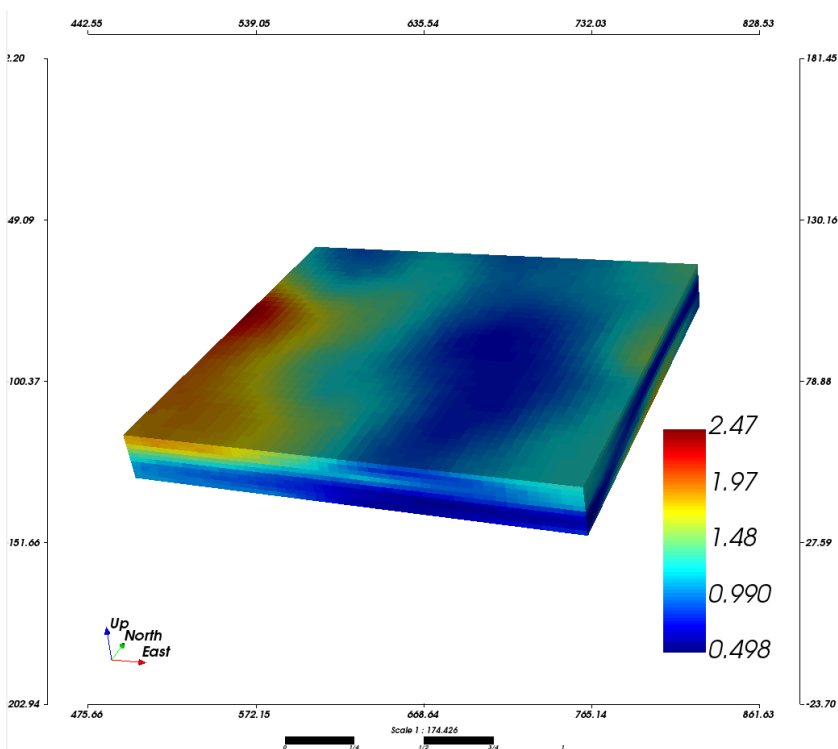
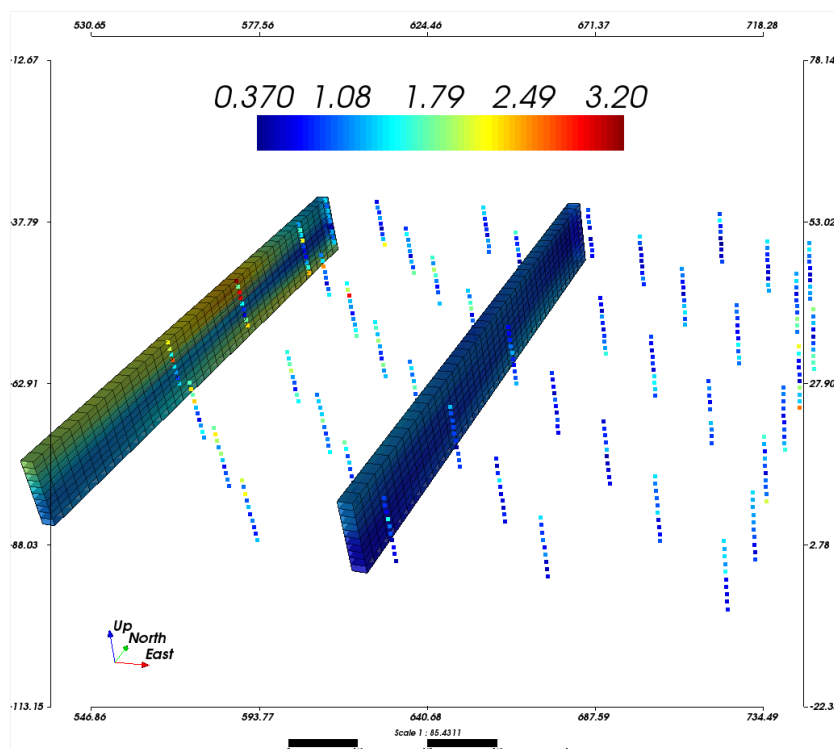


Figura 3-10 -Vista em perspectiva de uma seção do modelo estimado para comparação com os teores das amostras. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor.



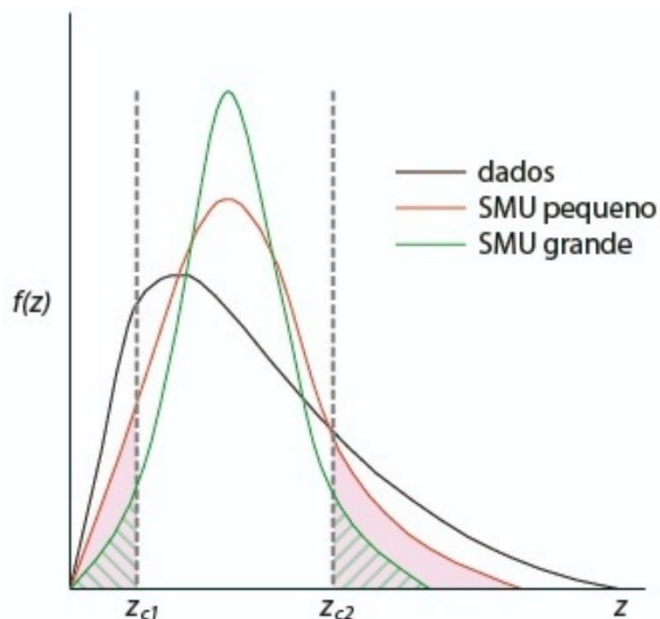
### 3.12.2 Média global

A validação da média global do modelo estimado consiste na comparação entre a média desagrupada dos dados amostrais compostos e a média global do modelo estimado, propriamente dita. Diferenças entre  $\pm 5\%$  e  $\pm 10\%$  são geralmente aceitas.

### 3.12.3 Suavização de krigagem

A suavização da krigagem (*smoothing effect*), também conhecida como efeito do suporte (*support effect*) e relação volume-variância (*volume-variance relation*), está diretamente relacionada com a variância de dispersão. O efeito do suporte amostral na estimativa requer uma avaliação da mudança de suporte, ou seja, do suporte amostral para o suporte de blocos. A Figura 3-11 ilustra o efeito do suporte nos modelos estimados por krigagem.

Figura 3-11 -Efeito do suporte nos modelos estimados (modificado de Harding e Deutsch, 2019).



No caso ilustrado, observa-se que as variâncias dos dados e dos blocos são bem distintas ( $\sigma^2$  dos dados  $>$   $\sigma^2$  *small* SMU  $>$   $\sigma^2$  *large* SMU). Por outro lado, a média das distribuições é a mesma. Caso o teor de corte esteja acima da média, como é o caso do teor de corte  $z_{c2}$ , a tonelagem estimada que excede o teor de corte vai diminuir conforme o aumento do suporte. Caso o teor de corte esteja abaixo da média, como no caso do teor  $z_{c1}$ , a tonelagem estimada que excede o teor de corte vai aumentar conforme o aumento do suporte. O caso ilustrado indica a importância de se antecipar a correção (ou regularização) do suporte na escala do bloco estimado.

Segundo Zagayevskiy e Deutsch (2011), a variância de dispersão pode ser expressa da seguinte forma:

$$D^2(v_1, v_2) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [x_i(v_1) - m(v_2)]^2, v_1 < v_2$$

Onde  $D^2(v_1, v_2)$  corresponde à variância dos dados nos suportes  $v_1$  e  $v_2$ ,  $n$  corresponde ao número de dados,  $x_i(v_1)$  equivale ao  $i$ ésimo dado no suporte  $v_1$  e  $m(v_2)$  corresponde à média dos dados no suporte  $v_2$ . A variância de

dispersão pode ser ainda calculada através do variograma médio para um suporte de blocos específico (*gammabar* - Zagayevskiy e Deutsch, 2011):

$$D^2(\cdot, V) = \bar{\gamma}(V, V) \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \gamma(h_{ij})$$

Onde  $\bar{\gamma}(V, V)$  corresponde ao variograma médio dos dados no suporte  $V$ ,  $N$  equivale à discretização no suporte  $V$ ,  $\gamma(h_{ij})$  corresponde ao modelo variográfico no lag  $h_{ij}$ , calculado entre as discretizações  $i$  e  $j$  no suporte  $V$ .

O ajuste do histograma para um determinado suporte ocorre através do ajuste das variâncias, mais especificamente pelo fator de redução  $f$ . O fator  $f$  corresponde à razão entre a variância no suporte do bloco para o suporte pontual e também pode ser calculado a partir do modelo variográfico e do *gammabar*, conforme abaixo:

$$f = \frac{D^2(B, A)}{D^2(\cdot, A)} \in [0, 1]$$

$$f = 1 - \frac{\bar{\gamma}(B, B)}{\bar{\gamma}(A, A)}, \bar{\gamma}(A, A) = \sigma^2$$

Onde  $f$  corresponde ao fator de ajuste de variância,  $D^2(B, A)$  equivale à variância entre os blocos e o depósito,  $D^2(\cdot, A)$  é a variância entre os pontos e o depósito,  $\bar{\gamma}(B, B)$  é o variograma médio no suporte dos blocos,  $\bar{\gamma}(A, A)$  é o variograma médio no suporte do depósito e  $\sigma^2$  corresponde à variância de dispersão no suporte de pontos ou à variância global dos dados.

De acordo com Rossi e Deutsch (2014), uma forma de se corrigir o efeito da mudança do suporte é através dos métodos conhecidos como *Affine Correction*, *Indirect Lognormal* e *Discrete Gaussian Method*, e todos eles

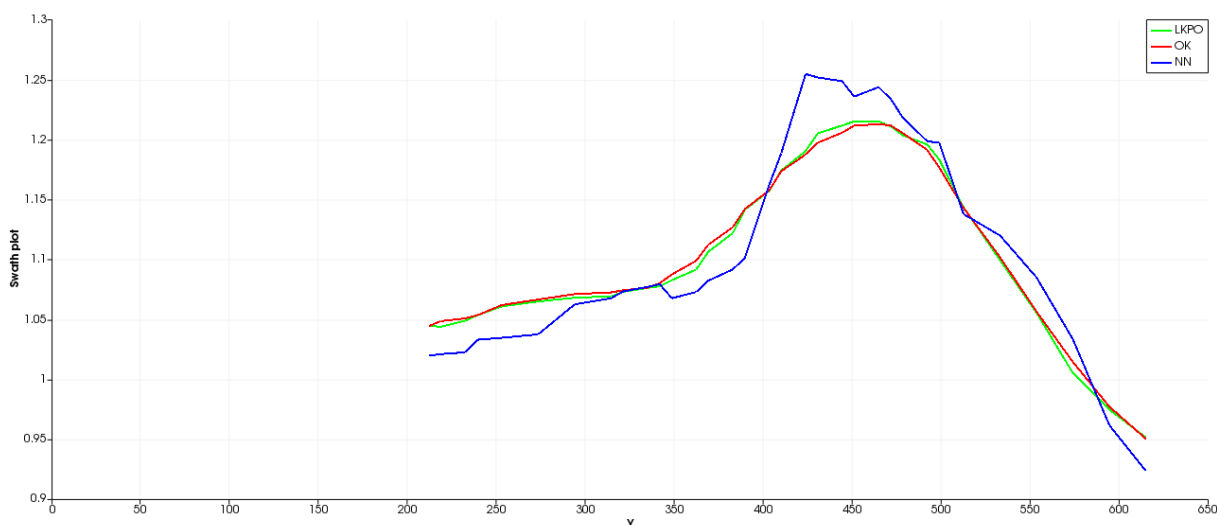


ajustam o histograma de distribuição da variável de interesse (geralmente teor) de um suporte amostral (pontual) para um suporte SMU (bloco).

### 3.12.4 Médias locais

A verificação da aderência do modelo estimado em relação às médias locais é realizada através da análise de deriva (*swath plots*), que correspondem às seções, geralmente associadas aos eixos X, Y e Z. As seções englobam, portanto, a variável desagrupada e a variável estimada, para fins de comparação visual e quantitativa. Os *swath plots* podem também ser utilizados para se comparar diferentes métodos de estimativa. A Figura 3-12 ilustra um exemplo de *swath plot*.

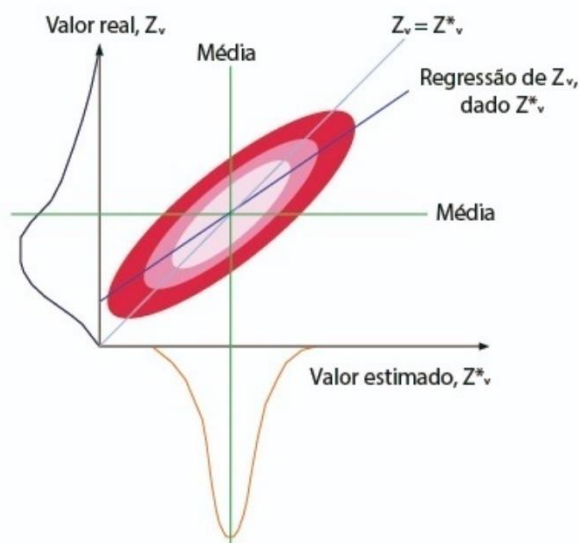
Figura 3-12 -Análise de deriva dos teores estimados ao longo do eixo Y. Comparação dos modelos desagrupado (NN), otimizado (LKPO) e krigagem ordinária tradicional (OK).



### 3.12.5 Inclinação do coeficiente da reta de regressão

A inclinação do coeficiente da reta de regressão (*slope of regression* - SR) foi introduzido por Rivoirard (1987) e corresponde a uma medida quantitativa da qualidade do modelo estimado em relação ao viés condicional. A Figura 3-13 ilustra os efeitos da krigagem inclinação da reta de regressão.

Figura 3-13 -Efeitos da krigagem na reta de regressão (modificado de Deutsch, 2007).



Para o caso ilustrado acima, o cálculo do coeficiente de regressão linear é dado pela seguinte equação:

$$SR = \frac{Cov(z_v, z_v^*)}{Var(z_v^*)} = \rho \frac{\sigma_v}{\sigma_v^*}$$

Onde  $Z_v$  corresponde ao valor real da amostra,  $Z_v^*$  equivale ao valor estimado,  $\rho$  corresponde ao coeficiente linear de Pearson,  $\sigma_v$  equivale ao desvio padrão das amostras e  $\sigma_v^*$  corresponde ao desvio padrão dos valores estimados.

Uma inclinação do coeficiente de regressão (SR) próxima a um significa que o modelo estimado apresenta uma ótima aderência com os dados. Valores de SR menores que um indicam presença de superestimativa e, por outro lado, valores de SR maiores que um indicam subestimativa. No entanto, de acordo com Deutsch (2007), existe a impossibilidade de se atingir três objetivos simultâneos: coeficiente de regressão próximo de um, estimativa da média local aderente e mínima suavização. Os dois últimos objetivos estão em conflito direto com o primeiro, ou seja, espera-se que um modelo estimado com inclinação do coeficiente de regressão próximo de um esteja demasiadamente suavizado.

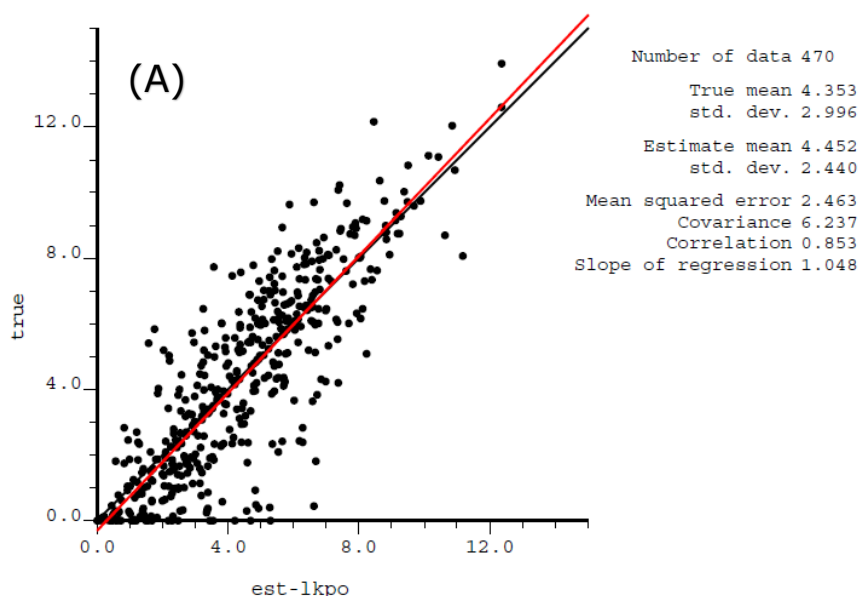
### 3.12.6 Validação cruzada

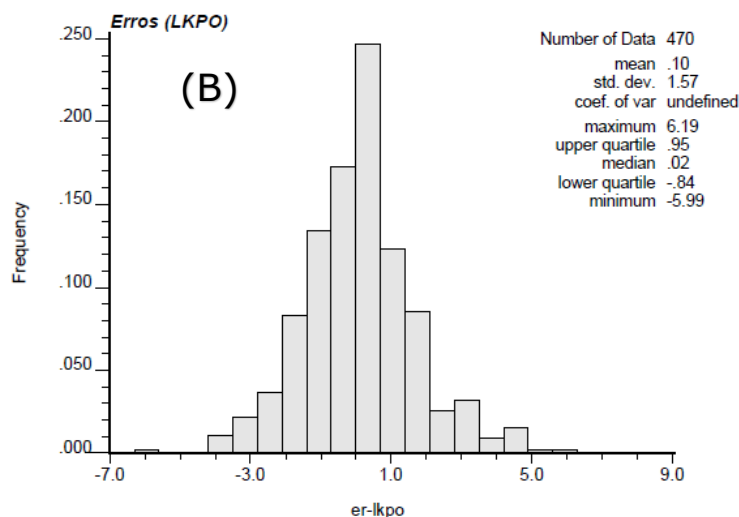
A validação cruzada (*cross validation* - XV) consiste em uma técnica amplamente conhecida e utilizada na Geoestatística, cujo funcionamento é bem objetivo:

- Uma amostra é "eliminada" do conjunto de dados, para os casos bidimensionais. Para os casos tridimensionais, todo o furo de sondagem é removido;
- As amostras vizinhas são utilizadas para produzir uma estimativa no local cuja amostra fora "eliminada"; e
- O erro (ou resíduo) é calculado a partir da subtração entre o valor real e o valor estimado.

Os resultados da validação cruzada são geralmente expostos sob a forma de gráficos de dispersão e histogramas. São úteis para a determinação dos erros e para a comparação de estratégias de krigagem, assim como validação dos modelos de continuidade espacial. A Figura 3-14 ilustra alguns exemplos de resultados de validação cruzada.

Figura 3-14 -Exemplos de resultados de validação cruzada. Gráfico de dispersão (A) e histograma de erros (B). Plots gerados no GSLib® - scatxval e histplt.

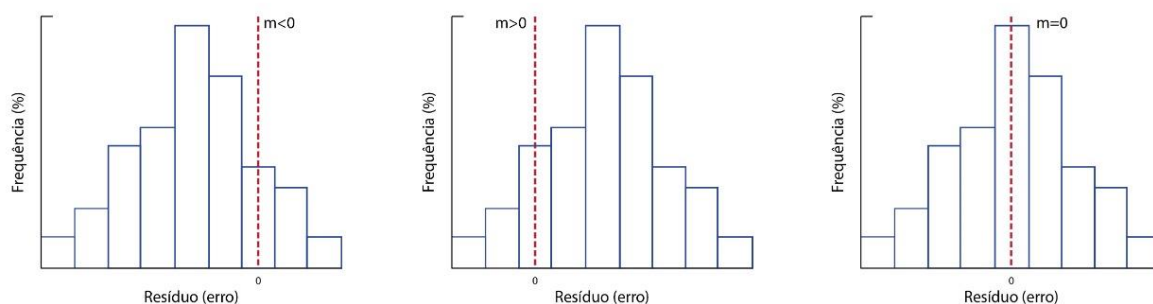




### 3.12.7 Erros de validação cruzada

A análise dos erros (resíduos) de validação cruzada permite avaliar o modelo estimado em relação ao viés global e local. A Figura 3-15 ilustra alguns casos de viés global introduzido nos modelos estimados.

Figura 3-15 -Exemplos de viés condicional global, identificados através dos histogramas dos erros (modificado de Isaaks e Srivastava, 1989).

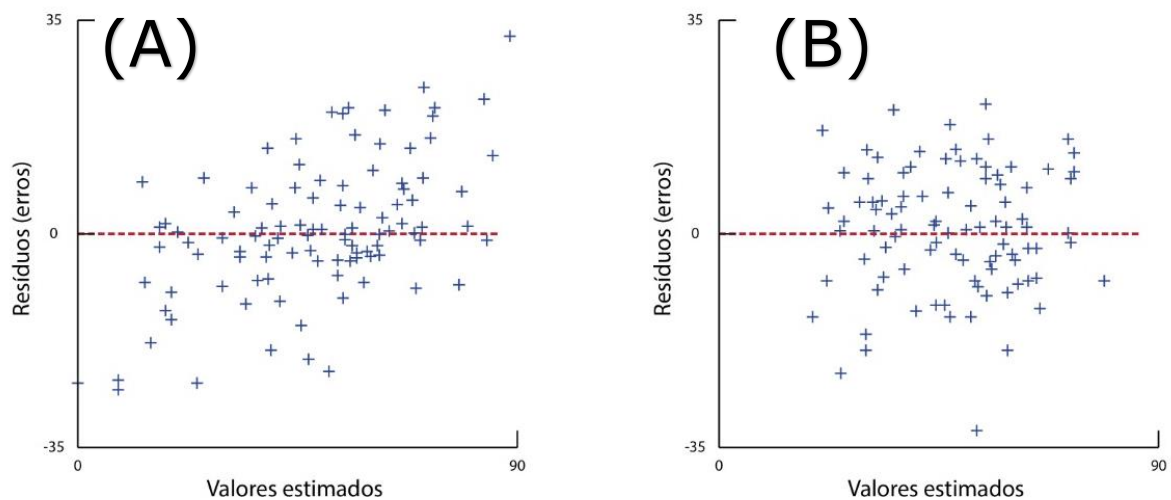


Conforme observa-se na Figura 3-15, o viés global pode ser identificado pelo histograma dos erros de validação cruzada. No caso o qual a média é menor que zero, o viés global é considerado negativo (tendência de subestimativa dos valores). No caso o qual a média é maior que zero, o viés global é considerado positivo (tendência de superestimativa dos valores). E, finalmente, no caso o qual a média equivale a zero, não há presença de

viés global (tendência de equilíbrio entre subestimativas e superestimativas).

Uma forma de se identificar o viés local é através do gráfico de dispersão dos erros em função dos valores estimados. Conforme ilustrado na Figura 3-16, observa-se um caso de viés local presente (A) e um caso de não viés local (B).

Figura 3-16 -Exemplos de viés local presente (A) e não presente (B), identificados através dos gráficos de dispersão dos erros em função dos valores estimados (modificado de Isaaks e Srivastava, 1989).



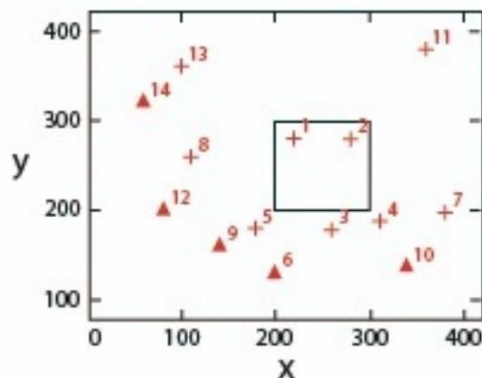
Para o caso do viés local presente (A) ocorre que os menores valores estimados tendem a apresentar erros negativos, ou seja, foram subestimados e, por outro lado, os maiores valores estimados tendem a apresentar erros positivos, ou seja, foram superestimados. Para o caso do viés local não presente (B) ocorre que para qualquer faixa dos valores estimados existe uma tendência de equilíbrio entre subestimativas e superestimativas, ou seja, o erro médio entre qualquer faixa é zero.

### 3.12.8 Proporção de pesos negativos

Os pesos negativos representam um problema na estimativa por krigagem, apesar de sua presença ser, até um certo ponto, defendida por alguns autores (Vann *et al.*, 2003).

A problemática dos pesos negativos está diretamente relacionada ao *screen effect*, ou seja, nos casos onde existem sobreposição de amostras em relação ao bloco a ser estimado, conforme ilustrado na Figura 3-17.

Figura 3-17 -Ilustração do *screen effect* (modificado de Sinclair e Blackwell, 2002). Bloco estimado com indicação das amostras com pesos positivos (+) e amostras com pesos negativos ( $\Delta$ ).



A combinação de *screen effect* com valores extremos pode ocasionar o aparecimento de valores negativos na estimativa.

### 3.12.9 Eficiência de krigagem

A eficiência de krigagem (*kriging efficiency* ou  $KE_{DK}$ ) corresponde a uma métrica introduzida por Krige (1997) cujo objetivo é avaliar a performance dos blocos estimados em relação ao viés condicional. A  $KE_{DK}$  pode ser obtida através da seguinte fórmula:

$$KE_{DK} = \frac{BV - KV}{BV}$$

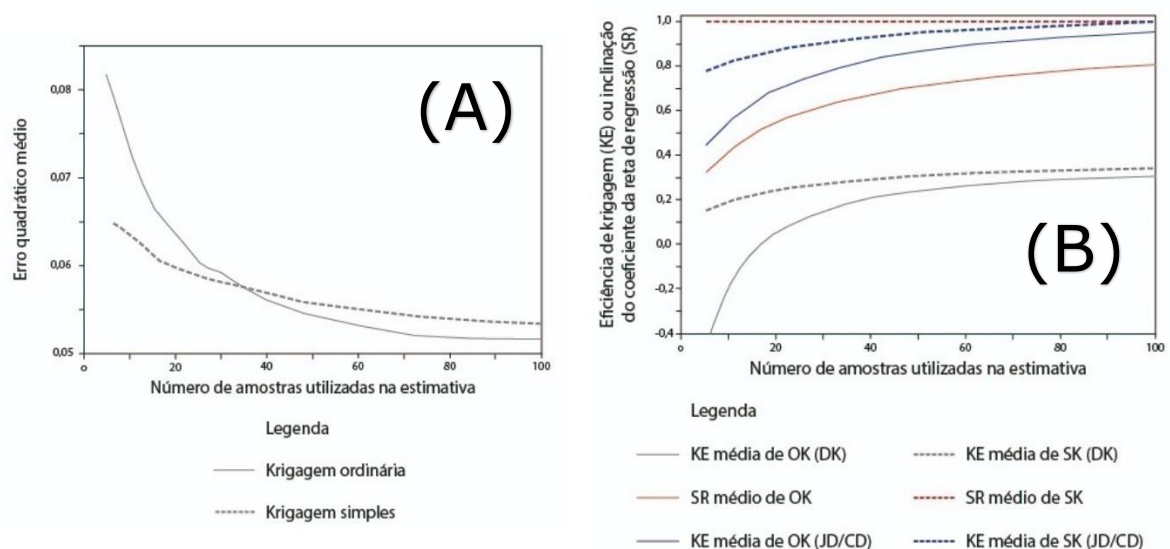
BV corresponde à variância dos blocos, KV corresponde à variância de krigagem e a  $KE_{DK}$  é expressa em porcentagem. Para casos de estimativas perfeitas,  $KE_{DK}$  equivale a 100%. A métrica pode apresentar resultados negativos, nos casos os quais a variância de krigagem é superior à variância dos blocos.

Nesse contexto, Deutsch e Deutsch (2012) propuseram uma alternativa ao cálculo da eficiência de krigagem baseada na variância global de krigagem simples (GSK), conforme:

$$KE_{JD/CD} = \frac{GSKV}{KV}$$

Os autores ainda ilustraram o efeito do número de amostras no erro quadrático médio (MSE) e na eficiência de krigagem ( $KE_{DK}$  e  $KE_{JR/CD}$ ), conforme ilustrado na Figura 3-18. Observa-se que o incremento de amostras nas estimativas tende a reduzir o MSE e aumentar o SR e KE.

Figura 3-18 -Efeito do número de amostras no erro quadrático médio (A), na eficiência de krigagem e *slope of regression* (B). Modificado de Deutsch e Deutsch (2012).



## 4 MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO DE VIZINHANÇA DE KRIGAGEM

Será dada ênfase, no presente capítulo, para os métodos de otimização de vizinhança de krigagem. Assim como introduzido no Capítulo 2.2 - Vizinhança de krigagem e metodologias para sua definição, uma das primeiras manifestações de interesse em relação à vizinhança de krigagem e métricas para sua definição foi registrada por Rivoirard (1987).

Após um período de dezesseis anos, Vann *et al.* (2003) vieram a definir a metodologia conhecida como QKNA. Doze anos depois, Coombes e Boamah (2015) definiram a metodologia conhecida como LKNA. Hundelshausen *et al.* (2018) introduziram a metodologia conhecida como LKPO e, mais recentemente, Coombes *et al.* (2020) definiram a metodologia conhecida como LKNO. Os capítulos a seguir detalharão cada uma das metodologias citadas.

### 4.1 *Quantitative Kriging Neighborhood Analysis* - QKNA

A metodologia conhecida como QKNA pode ser traduzida livremente como Análise Quantitativa de Vizinhança de Krigagem. Vann *et al.* (2003) indicam que o principal motivador da utilização da metodologia corresponde ao aproveitamento máximo da minimização da variância do erro.

Os autores apontam, ainda, que equívocos comuns em relação à vizinhança de krigagem incluem a configuração do raio de busca coincidente à configuração do variograma. Argumentam que a escolha do raio de busca deveria estar condicionada às características de pequena escala dos modelos variográficos, ou seja, à inclinação do modelo variográfico à pequenas distâncias e ao efeito pepita relativo (razão entre o efeito pepita e a variância total, expressa como porcentagem).



Para o caso de variogramas com alcances curtos, os autores relatam que mais amostras serão necessárias para uma boa estimativa. Ou seja, para o caso de um efeito pepita puro, o maior número possível de amostras produzirá a melhor estimativa, isto é, a estimativa com menor variância do erro. No entanto, os autores não comentam sobre o provável aumento de pesos negativos na estimativa. Por outro lado, para os casos de variogramas com alcances longos, poucas amostras serão necessárias para uma boa estimativa.

Vizinhanças de krigagem muito restritas (ex: poucas amostras e/ou reduzidos raios de busca) podem, no entanto, resultar em modelos viesados (viés condicional). A metodologia de QKNA tem como objetivo, em sua essência, reduzir ou eliminar o viés condicional, através da escolha dos parâmetros de busca e do tamanho de bloco. Os autores ressaltam que a redução ou eliminação do viés condicional ocorre em detrimento da suavização (redução excessiva da variância).

A QKNA é baseada nos seguintes critérios, em ordem de prioridade:

- i. Inclinação do coeficiente de regressão (SR);
- ii. Peso da média de krigagem simples (WOM);
- iii. Distribuição dos pesos negativos, incluindo a sua proporção;
- iv. Variância de krigagem.

Todos os critérios, com exceção do peso da média de krigagem simples, estão detalhados nas seções 3.12.5 - Inclinação do coeficiente da reta de regressão, 3.12.8 - Proporção de pesos negativos e 3.11 - Variância de krigagem.

O peso da média de krigagem simples funciona como um indicador de suavização. Desenvolvendo a equação do estimador de krigagem simples, temos que:

$$Z_{sk}^*(x) = m + \sum_{i=1}^n \lambda_i [Z(x_i) - m]$$

O peso da média de krigagem simples (WOM) pode ser calculado com:

$$\lambda_m = 1 - \sum \lambda_i$$

Ou seja, o WOM de uma dada vizinhança de krigagem fornece uma ideia da qualidade da estimativa, uma vez que corresponde a uma medida do *screen effect*. Quanto maior o WOM, menor se espera que seja o *screen effect*. Os autores sugerem, no entanto, a preferência por WOM's mais próximos de zero.

Quanto à questão operacional da metodologia, os autores recomendam testes com arranjos típicos de dados, como por exemplo: locais bem informados, locais moderadamente informados e locais pobremente informados. Na sequência, especial atenção é dada às dimensões dos blocos a serem estimados, assim como a sensibilidade dos blocos à discretização.

Os autores concluem que a QKNA é um passo obrigatório em qualquer estimativa por krigagem, incluindo aquelas utilizadas para simulações condicionais.

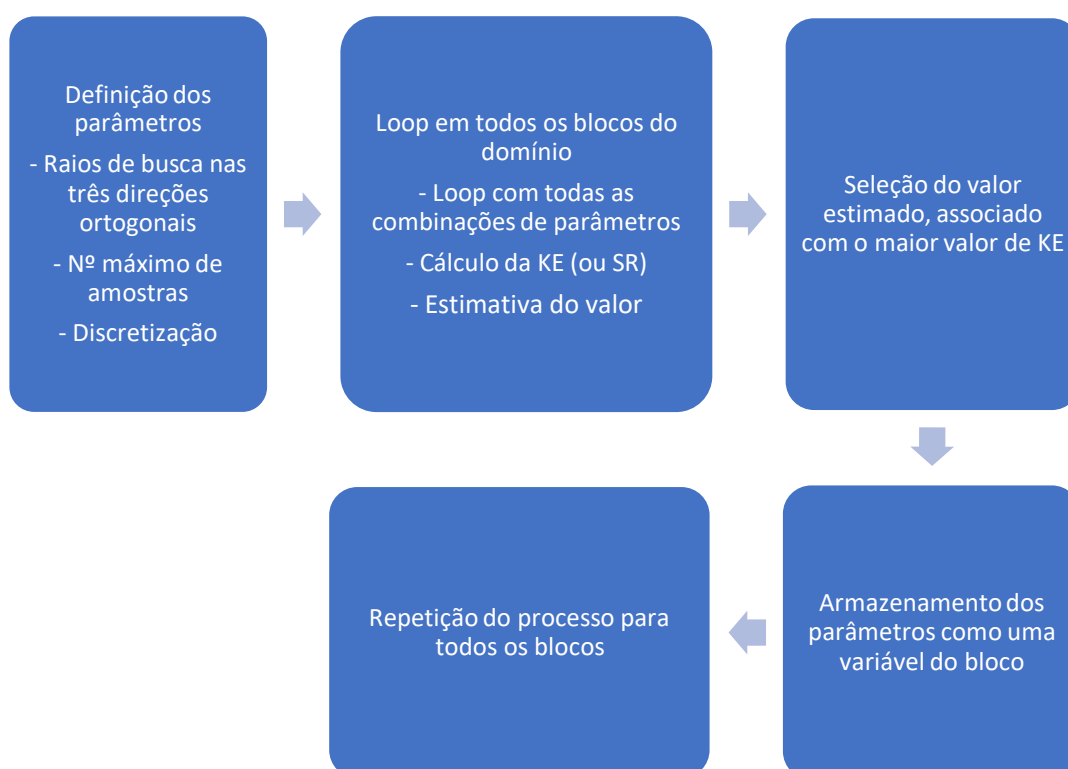
#### 4.2 *Localized Kriging Neighborhood Analysis* - LKNA

Coombes e Boamah (2015) propuseram a metodologia conhecida como LKNA, que pode ser traduzida livremente como Análise Local de Vizinhança de Krigagem. A proposta é baseada na eficiência de krigagem (KE) e na inclinação do coeficiente de regressão (SR), que, segundo os autores, asseguram estimativas eficientes, críticas para o planejamento de curto, médio e longo prazo, além de previsões financeiras.

Os critérios de KE e SR estão detalhados nas seções 3.12.9 - Eficiência de krigagem e 3.12.5 - Inclinação do coeficiente da reta de regressão, respectivamente.

A inovação da metodologia proposta reside na aplicação em uma abordagem bloco-a-bloco, ou seja, cada bloco é estimado com os seus parâmetros de krigagem independentemente dos outros blocos do domínio. O funcionamento do algoritmo pode ser simplificado como ilustrado na Figura 4-1.

Figura 4-1 - Ilustração do funcionamento do algoritmo LKNA (Coombes e Boamah, 2015).



Os autores concluíram que a aplicação da metodologia era proibitiva do ponto de vista computacional. Os resultados, no entanto, foram considerados promissores: a abordagem global, como a QKNA, por exemplo, limita a qualidade final do modelo. A abordagem local da LKNA foi considerada superior, para o caso estudado.

### 4.3 Localized Kriging Parameter Optimization - LKPO

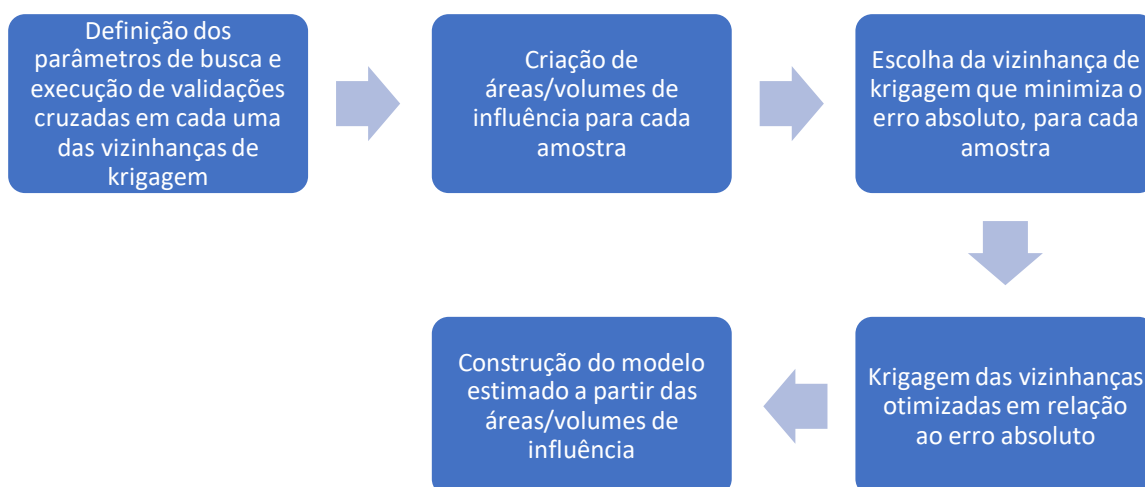
Hundelshausen *et al.* (2018) introduziram a metodologia conhecida como LKPO, traduzida como Otimização de Parâmetros de Krigagem Localizada, baseada no método proposto por Hundelshausen (2018).

Os autores apresentaram a metodologia LKPO como uma variação da metodologia LKNA, onde cada bloco, contido no modelo de blocos (dentro da área/volume de influência de cada amostra), é interpolado utilizando-se uma vizinhança de krigagem que minimiza o erro absoluto, obtido por validação cruzada.

Assumindo-se estacionariedade intrínseca, ou seja, um modelo de continuidade espacial para cada domínio, foram investigados os benefícios de se usar vizinhanças de krigagem locais em termos de precisão e acurácia do modelo estimado.

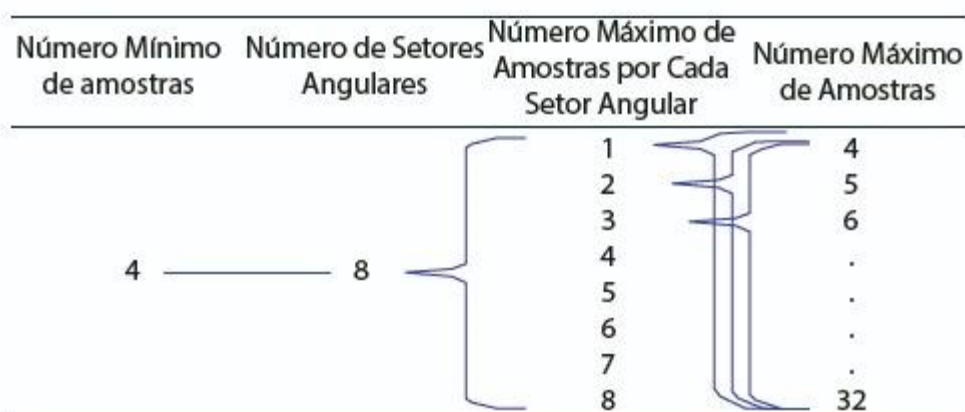
O funcionamento do algoritmo pode ser simplificado conforme ilustrado na Figura 4-2.

Figura 4-2 - Ilustração do funcionamento do algoritmo LKPO (de acordo com Hundelshausen *et al.*, 2018).



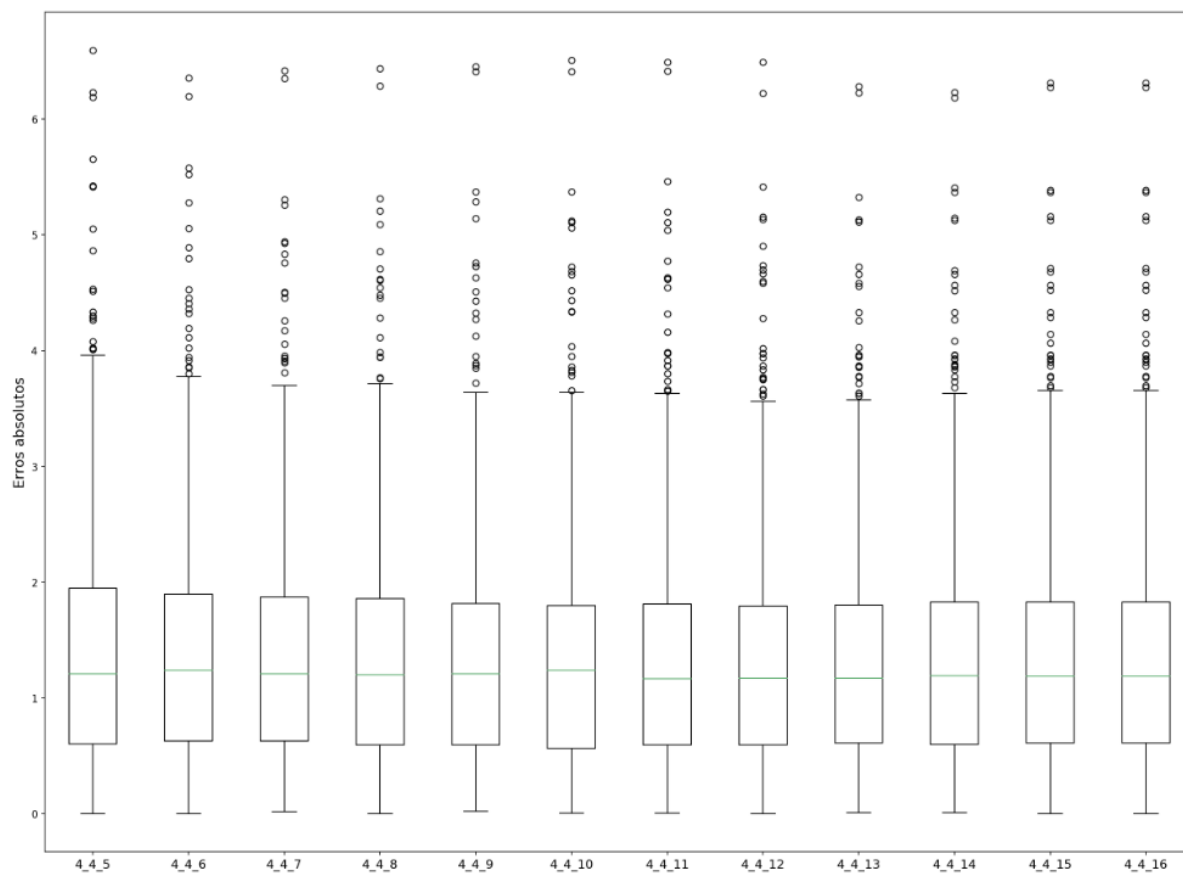
Conforme ilustrado na Figura 4-2., o funcionamento do LKPO se inicia pela escolha dos parâmetros de busca, ou seja, números mínimo e máximo de amostras, além do número de amostras por setor angular (quadrante/octante). A Figura 4-3 ilustra o processo de definição dos parâmetros de busca. Para o caso ilustrado, foram geradas 256 vizinhanças de krigagem, resultado das combinações entre os números mínimo e máximo de amostras, e número de amostras por setor angular.

Figura 4-3 - Ilustração do processo de definição das vizinhanças de krigagem a partir dos parâmetros de busca (modificado de Hundelshausen, 2018).



Com as vizinhanças de krigagem definidas, executam-se validações cruzadas em cada vizinhança (SNs) para obtenção dos erros absolutos. Esse processo é executado em cada amostra com cada vizinhança de krigagem a ser testada, ou seja, considerando-se um *dataset* com 200 amostras e 256 vizinhanças de krigagem, o processo é executado 51.200 vezes. As validações cruzadas permitem a otimização dos parâmetros de krigagem, em relação aos erros absolutos, para cada amostra do *dataset*. A Figura 4-4 ilustra uma sequência de vizinhanças de krigagem geradas a partir das validações cruzadas.

Figura 4-4 - *Boxplots* das vizinhanças de krigagem geradas a partir das validações cruzadas. No eixo y, estão plotados os erros absolutos e no eixo x estão plotadas as vizinhanças de krigagem.



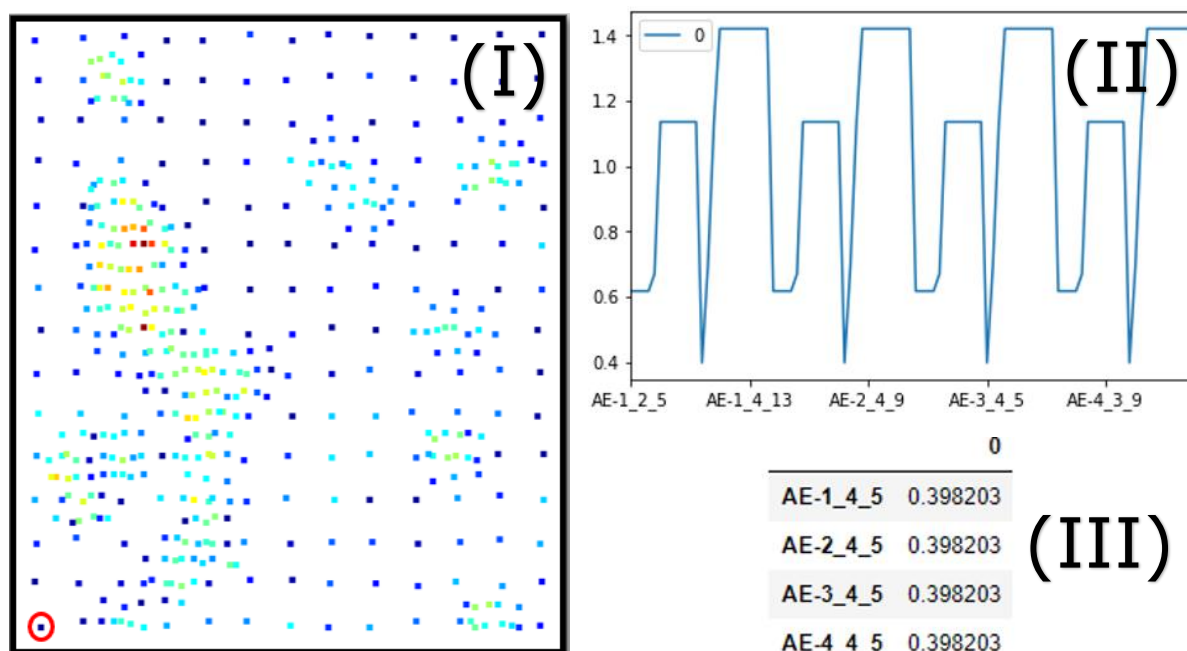
No eixo x da Figura 4-4, observam-se as vizinhanças de krigagem, como por exemplo, a vizinhança "4\_4\_5". O primeiro número corresponde ao mínimo de amostras, o segundo corresponde ao máximo de amostras por setor angular e o terceiro corresponde ao máximo de amostras.

Dando sequência no processo de otimização por LKPO, criam-se as áreas (2D) ou volumes (3D) de influência ao redor de cada amostra do *dataset*, a partir do algoritmo conhecido como vizinho mais próximo (ou *nearest neighbor* - NN). De acordo com Rossi e Deutsch (2014), a metodologia NN é uma variante do método dos polígonos, ou até mesmo do método do inverso da distância elevada à uma potência. A metodologia NN é utilizada comumente no cálculo de recursos minerais e no desagrupamento de dados. Para o caso do LKPO, as vizinhanças de krigagem criadas pelo NN

tem como objetivo a definição de setores de estacionariedades locais no entorno dos dados.

O próximo passo consiste na escolha das vizinhanças de krigagem, associadas à cada amostra do *dataset*, que minimizem o erro absoluto de validação cruzada. A Figura 4-5 ilustra as vizinhanças de krigagem que minimizam o erro absoluto de uma amostra do *dataset*.

Figura 4-5 - Destaque para uma amostra do *dataset* (círculo vermelho - I), avaliação dos erros absolutos de validação cruzada para várias estratégias de busca (II) e detalhe das vizinhanças de krigagem que minimizaram o erro absoluto (III).



Conforme observa-se na Figura 4-5, a amostra com índice 0 (zero) do *dataset* foi objeto de otimização em relação ao erro de validação cruzada (I). Quatro vizinhanças de krigagem, cujos parâmetros correspondem a "1\_4\_5", "2\_4\_5", "3\_4\_5" e "4\_4\_5", e equivalem, respectivamente, ao mínimo de amostras, máximo de amostras por setor angular e máximo de amostras (II). Neste caso, observa-se que todas as vizinhanças de krigagem otimizadas resultaram em um erro absoluto equivalente a 0,398203, e que o número mínimo de amostras não teve muita relevância no processo de otimização.

Dessa maneira, otimizando-se todas as amostras do *dataset*, a otimização por LKPO segue para a construção do modelo global, contendo todos os blocos otimizados localmente.

Hundelshausen *et al.* (2018) aplicaram a metodologia de otimização por LKPO em dois *datasets* e compararam os resultados com a metodologia de otimização por LKNA. Os autores concluíram que a metodologia LKPO melhorou as estimativas em termos de acurácia e precisão em relação às metodologias de otimização disponíveis.

#### 4.4 *Local Kriging Neighborhood Optimization* - LKNO

Coombes *et al.* (2020) propuseram a metodologia que pode ser traduzida livremente por Otimização de Vizinhança Local de Krigagem (LKNO). Os autores apontam como principal motivador da criação da metodologia o desafio à abordagem global de estimativa por krigagem, que usa “parâmetros globais” para se estimar todos os blocos de um certo domínio.

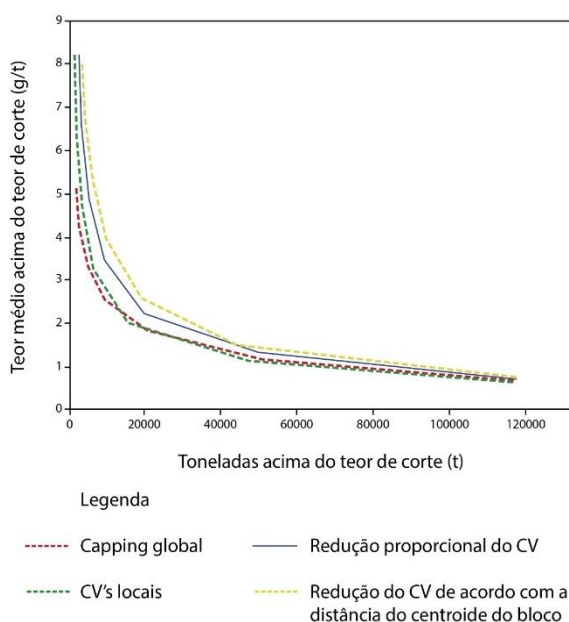
Como na maioria dos métodos de otimização de vizinhança, as métricas mais comuns na avaliação dos parâmetros de krigagem correspondem à eficiência de krigagem (KE) e inclinação do coeficiente de regressão (SR). Os autores interpretam a eficiência de krigagem como uma medida de espalhamento dos valores dos blocos estimados em relação à variância real dos blocos, expressa em porcentagem. Ou seja, espera-se que quanto mais alto o valor de eficiência de krigagem (mais próximo de 100%), melhor representados serão os blocos estimados. A inclinação do coeficiente de regressão fornece uma medida em relação ao viés condicional, conforme indicado na seção 3.12.5 - Inclinação do coeficiente da reta de regressão.



Os autores reconhecem, no entanto, a problemática em se utilizar apenas a eficiência de krigagem e a inclinação do coeficiente de regressão como métricas para otimização dos parâmetros: estimativas em dados com assimetria pronunciada podem gerar estimativas negativas e, em casos extremos, subestimativas excessivas. Por esta razão, sugerem a utilização de uma terceira métrica, que corresponde à somatória dos pesos negativos (ou *sum of negative weights* - SNW) que, segundo os autores, impede que a otimização ocorra em decorrência do aumento excessivo de amostras na estimativa.

Os autores também investigaram o efeito do coeficiente de variação (CV) nas estimativas, através de uma abordagem de aplicação de teores de corte nos dados que apresentam valores elevados de CV. Três abordagens de teores de corte foram aplicadas: CV's locais (Local CoV Topcut), redução proporcional dos CV's (Local Proportional) e redução dos CV's de acordo com a distância do centroide do bloco em relação às amostras (Local Transitional TC). A sensibilidade da variância do modelo estimado está ilustrada na Figura 4-6.

Figura 4-6 - Comparação das abordagens de aplicação de teores de corte locais nas curvas de teor-tonelagem (Coombes *et al.*, 2020).



Concluiu-se que, além da otimização dos parâmetros de krigagem em relação às métricas e KE, SR e SNW, as estimativas podem ser ainda melhoradas com a utilização de teores de corte locais.

## 5 ESTUDOS DE CASO EM 3D

No presente capítulo, serão apresentados estudos de caso em 3D, incluindo dois *datasets* com diferentes características. O primeiro *dataset*<sup>1</sup> - Copper.dat - corresponde a um banco de dados de cobre sintético, disponível na obra de Clark e Harper (2000). O segundo *dataset* corresponde a um banco de dados de uma jazida real de fosfato, localizada em Catalão (GO).

### 5.1 *Dataset* 1 - Cobre

O banco de dados “cobre” compreende uma simulação baseada na disposição de uma pilha de minério em uma jazida da antiga União Soviética (Clark e Harper, 2000). Os quarenta e seis (46) furos de sondagens possuem intervalos de análises químicas de cobre e cobalto a cada cinco metros (suporte amostral) e possuem um total de quatrocentos e trinta e nove amostras.

Além disso, os furos de sondagem abrangem uma área de aproximadamente 445 m x 405 m (eixos x e y), totalizando uma área de 180.225 m<sup>2</sup>, e estende-se por 45 m na vertical (eixo z), totalizando um volume de 8.110.125 m<sup>3</sup>.

A Figura 5-1 ilustra o banco de dados em vista perspectiva. Observa-se um espaçamento aproximadamente regular entre os 46 furos de sondagem. O espaçamento médio entre os furos é de aproximadamente 63 metros (XY) e de 5 metros (Z). No entanto, observa-se que algumas porções do depósito não foram amostradas, conforme ilustrado na Figura 5-2.

---

<sup>1</sup> Disponível para *download* em <http://www.kriging.com/datasets/Copper.dat>

Figura 5-1 - Vista em perspectiva do *dataset* Copper.dat. Teores de cobre (Cu%) expressos na escala de cor.

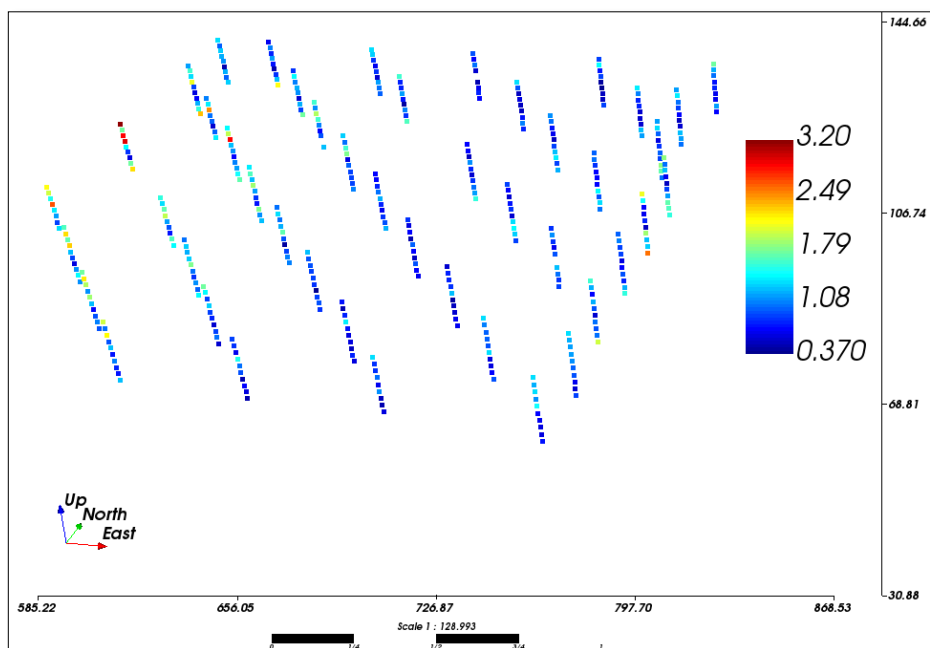
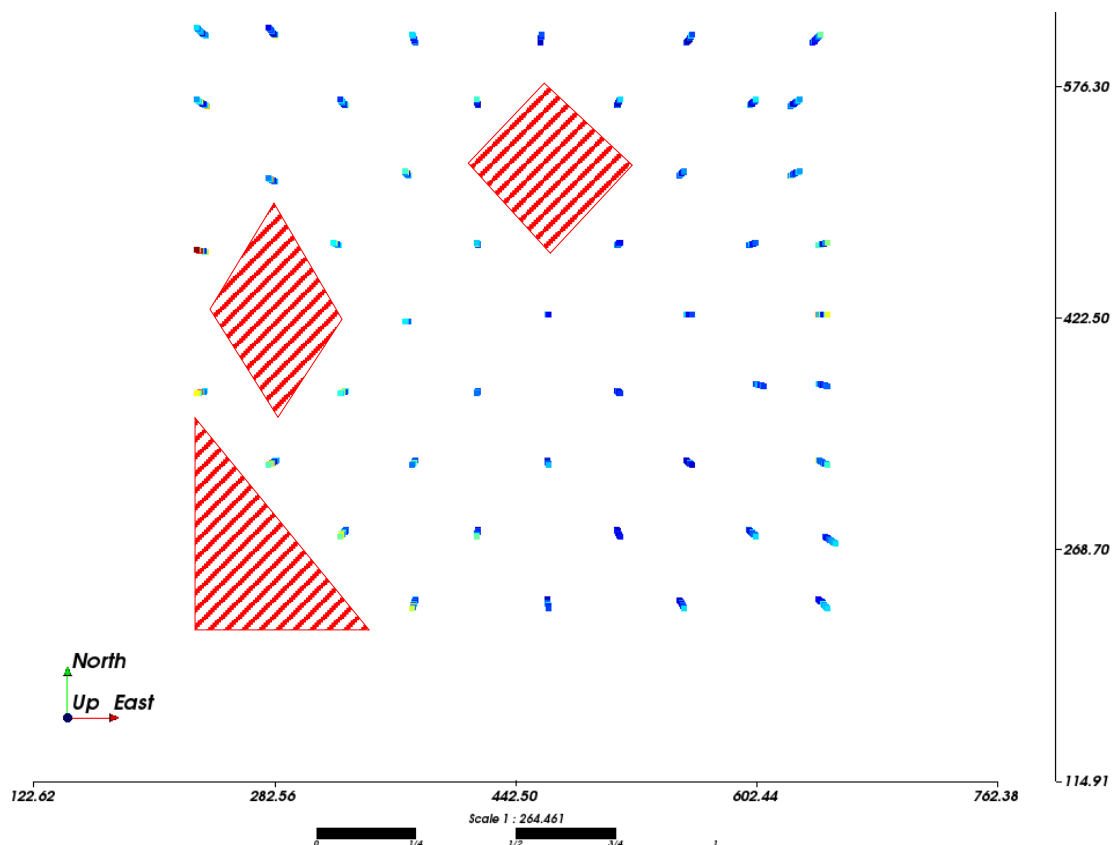


Figura 5-2 - Vista em planta do *dataset* Copper.dat, com detalhe para as porções não amostradas (áreas hachuradas em vermelho) do depósito.



### 5.1.1 Análise exploratória dos dados (EDA)

Dando seqüência à análise exploratória dos dados (*exploratory data analysis* - EDA), elaborou-se o histograma de frequência e acumulado, conforme ilustrado na Figura 5-3. Elaborou-se também uma tabela resumo incluindo a estatística básica dos dados, conforme ilustrado na Tabela 5-1.

Figura 5-3 - Histograma de frequência (barras) e acumulado (linha preta) do *dataset* Copper.dat - teores de cobre Cu (%).

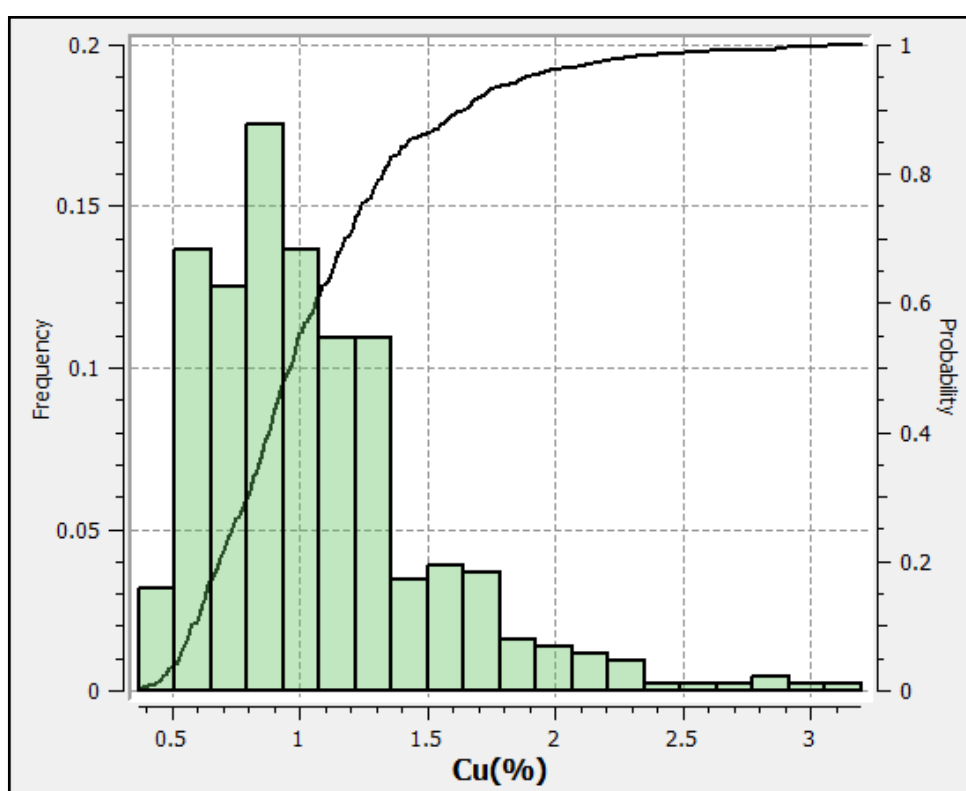


Tabela 5-1 - Estatística descritiva do *dataset* Copper.dat.

N	Média	Mediana	Variância	CV	Mín.	1Q	3Q	Máx.	Assimetria	Curtose
439	1,06	0,97	0,20	0,42	0,37	0,74	1,24	3,2	1,45	3,03

Observa-se que os dados apresentam uma média de teor (%) de cobre de 1,06, variando de 0,37 a 3,20. A distribuição apresenta elevada assimetria positiva (1,45), além de um coeficiente de variação ( $\sigma / \bar{x}$ ) de 0,42.

Como observa-se na Figura 5-1 e Figura 5-2, os dados não apresentam agrupamento de amostras/sondagens pronunciados. Mesmo assim, realizou-se uma análise de desagrupamento, conforme ilustrado na Figura 5-4 e Figura 5-5. Observa-se que não há diferença significativa nas estatísticas dos dados agrupados em relação aos dados desagrupados.

Figura 5-4 - Análise de desagrupamento por célula da variável Cu(%).

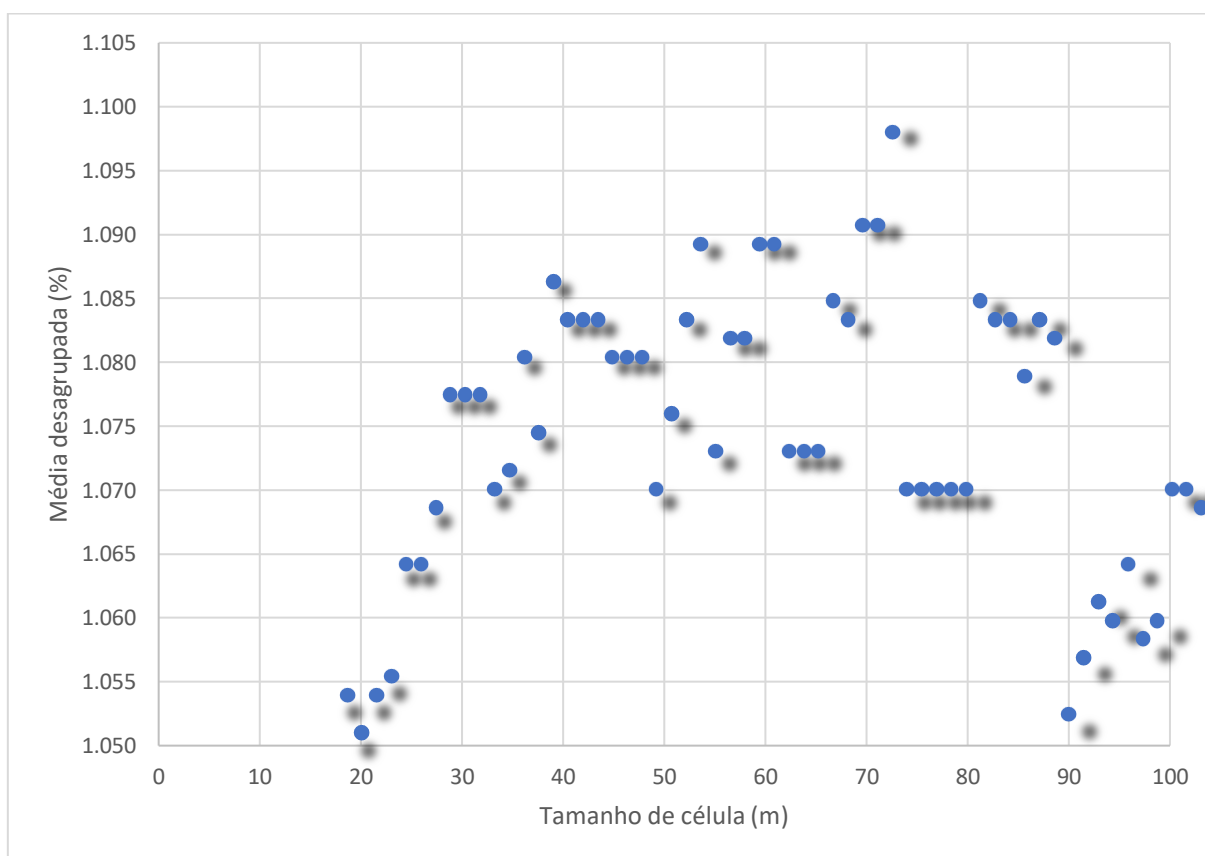
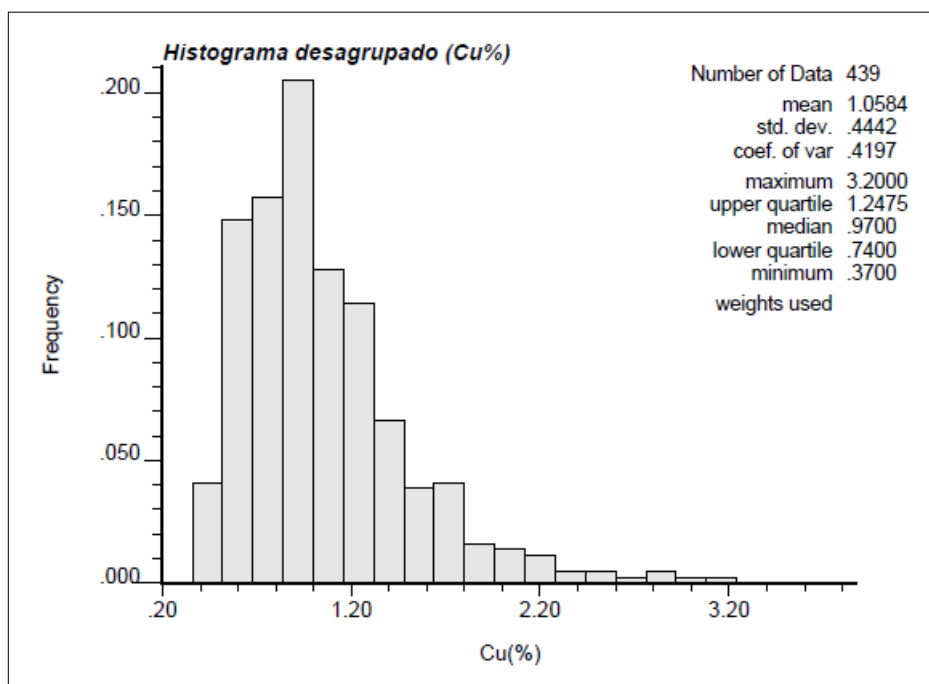


Figura 5-5 - Histograma da variável Cu(%) desagrupada.



### 5.1.2 Análise da continuidade espacial

A análise da continuidade espacial da variável de interesse é a principal tarefa a ser executada que precede a estimativa por krigagem ordinária. Para o caso do *dataset* em questão, foram avaliados os variogramas em todas as direções de anisotropia, conforme ilustrado no Apêndice - Análise da continuidade espacial. Os parâmetros dos modelos variográficos estão resumidos na Tabela 5-2.

Tabela 5-2 - Modelo de continuidade espacial da variável Cu (%).

Variável	Modelo de continuidade espacial
Cu(%)	$\gamma(h) = 0.06 + 0.14 \text{ Sph} \left( \frac{N157}{270m} \frac{N67}{230m} \frac{Vert}{26m} \right)$

Observando-se os modelos variográficos da variável Cu(%) conclui-se que existe anisotropia geométrica no fenômeno espacial. Ou seja, a anisotropia geométrica ocorre quando o patamar (*sill* -  $C_1$ ) é atingido em todas as direções de anisotropia, porém com diferentes alcances (*ranges* -  $a$ ).

### 5.1.3 Definição dos parâmetros e das vizinhanças de krigagem - LKPO, KNA e métodos globais

Os parâmetros iniciais correspondem ao tamanho dos blocos a serem estimados, bem como sua discretização. Estes parâmetros serão comuns para todas as aplicações de krigagem ordinária. A Tabela 5-3 resume os parâmetros de krigagem que serão utilizados nas estimativas.

Tabela 5-3 - Parâmetros de krigagem do *dataset* Cobre.

Tamanho dos blocos (X x Y x Z - metros)	Discretização (nº de pontos em X, Y e Z)
10 x 10 x 5	5 x 5 x 2

As vizinhanças de krigagem, que serão aplicadas às estimativas, estão indicadas na Tabela 5-4, bem como seus respectivos parâmetros. Observe-se que OK\_I, OK\_II e OK\_III são os "métodos globais", ou seja, correspondem às vizinhanças globais de krigagem cujos parâmetros serão aplicados em todos os blocos do grid. A metodologia KNA apresenta parâmetros que foram otimizados globalmente, ou seja, correspondem à vizinhança global otimizada que será aplicada em todos os blocos do grid. Já o método LKPO, utiliza os parâmetros de krigagem que foram otimizados localmente (ou bloco-a-bloco) em relação ao erro absoluto, e que serão aplicados nos volumes de influência de cada amostra do *dataset*.



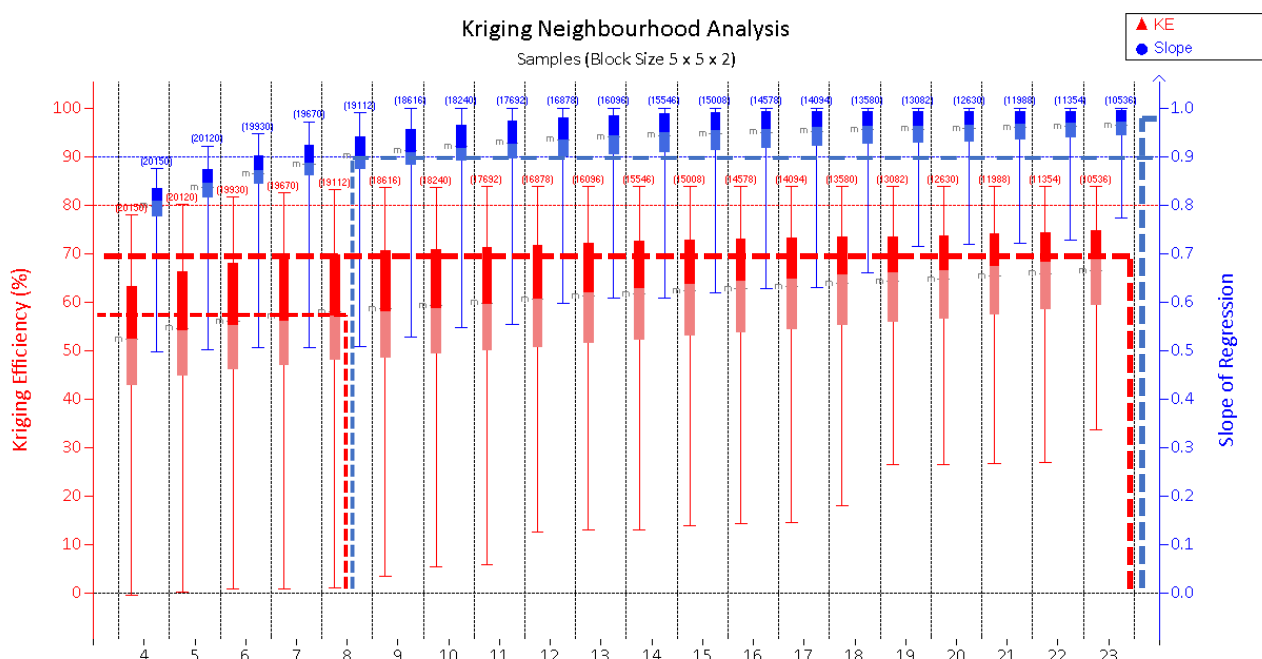
Tabela 5-4 - Resumo das vizinhanças de krigagem utilizadas no *dataset* Cobre.

Método	Mínimo de amostras	Máximo de amostras	Máximo de amostras por octante	Elipsoide de busca* (X x Y x Z - metros)	Total de vizinhanças
OK_I	4	12	2	270 x 230 x 26	1
OK_II	6	24	3	270 x 230 x 26	1
OK_III	4	24	3	270 x 230 x 26	1
KNA	8	24	3	270 x 230 x 26	1
LKPO_A	2-6	8-16	2-4	270 x 230 x 26	135
LKPO_B	2-8	16-22	2-6	270 x 230 x 26	245

As vizinhanças de krigagem “globais” foram escolhidas a partir de sugestões encontradas na literatura Geoestatística, tais como Isaaks e Srivastava (1989), Goovaerts (1997), e Deutsch e Deutsch (2014). Vale ressaltar que as indicações das vizinhanças de krigagem “globais” devem ser consideradas apenas como sugestões, referências ou guias.

Para a vizinhança de krigagem “global otimizada”, ou seja, àquela otimizada por KNA, foi utilizado um *software* comercial para se ilustrar os seus parâmetros. A Figura 5-6 apresenta um típico exemplo de identificação de parâmetros de vizinhança de krigagem por KNA. Neste caso, foi utilizado o *software* Supervisor® da Snowden®, recentemente adquirida pela Datamine®. Observa-se que, para um mínimo de 8 amostras, o algoritmo prevê que a eficiência de krigagem (Krige, 1997) apresentará uma média global de 57% e uma inclinação do coeficiente de regressão global de 0,9. Similarmente, observa-se que para um máximo de 24 amostras, o algoritmo prevê que a eficiência de krigagem (Krige, 1997) apresentará uma média global de 68% e uma inclinação do coeficiente de regressão global de 0,98.

Figura 5-6 - Análise da influência dos números mínimo e máximo de amostras (eixo x) nas métricas de eficiência de krigagem (KE) e inclinação do coeficiente de regressão (SR) - eixos y.



A metodologia de otimização por LKPO, por sua vez, testa uma infinidade de vizinhanças de krigagem. Neste estudo, por exemplo, foram testadas vizinhanças de krigagem com 8 até 16 amostras (LKPO\_A) e de 16 até 22 amostras (LKPO\_B). Os mínimos de amostras também foram testados, de 2 até 6 amostras (LKPO\_A) e de 2 até 8 amostras (LKPO\_B).

Em relação ao máximo de amostras por octante, foram utilizadas entre 2 e 4 amostras (LKPO\_A) e entre 2 e 6 amostras (LKPO\_B).

A Figura 5-7 e Figura 5-8 ilustram os histogramas das vizinhanças de krigagem que foram otimizadas em relação ao erro absoluto por LKPO.

Figura 5-7 - Histograma das vizinhanças de krigagem otimizadas - LKPO\_A.

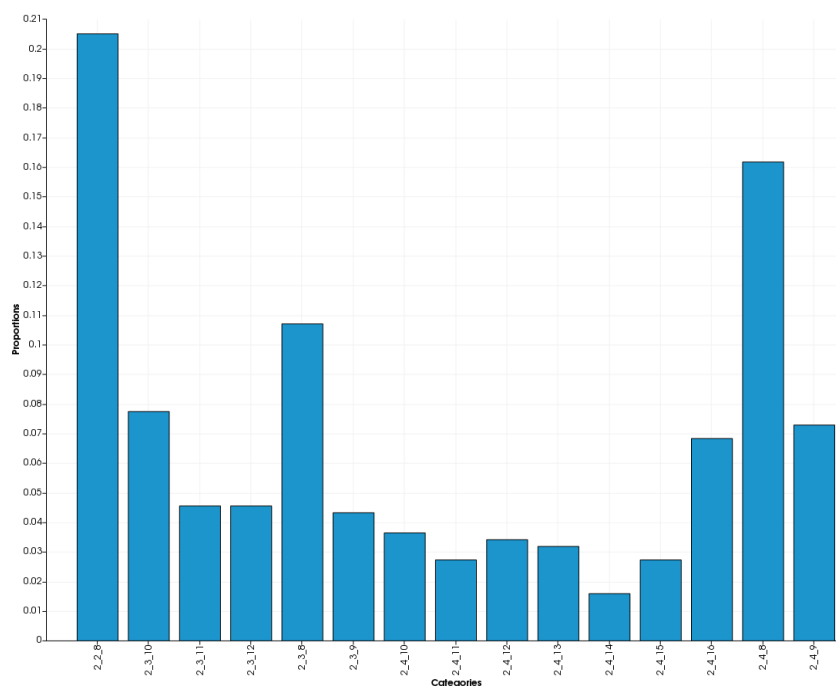
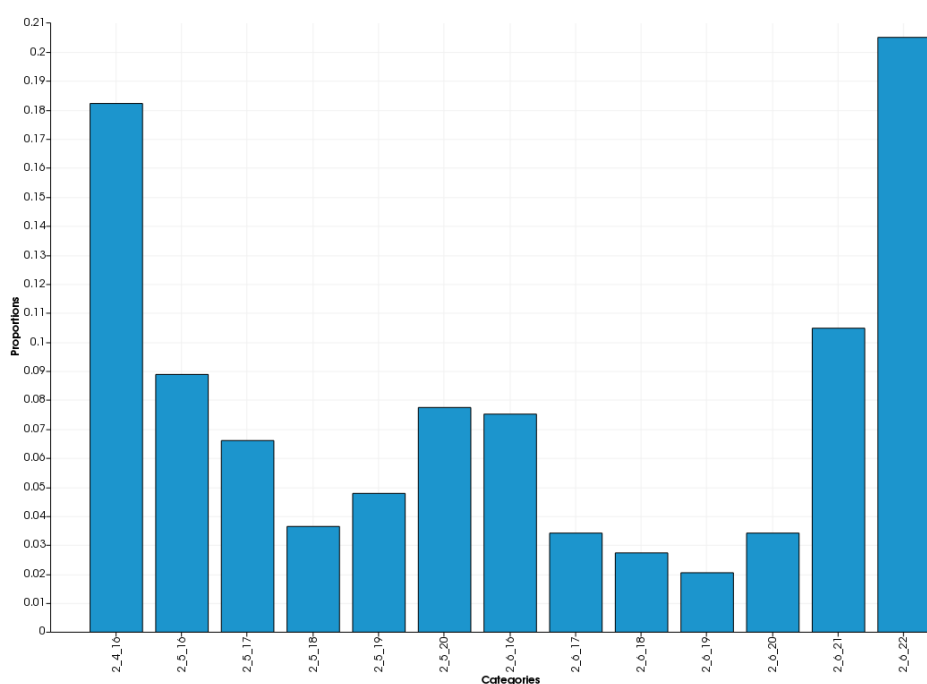


Figura 5-8 - Histograma das vizinhanças de krigagem otimizadas - LKPO\_B.



Observa-se que a otimização por LKPO obedece às premissas detalhadas na Tabela 5-4, ou seja, o LKPO\_A apresenta tendência de vizinhanças de krigagem com menos amostras, e o LKPO\_B, por sua vez, apresenta tendência de vizinhanças de krigagem com mais amostras.

A Figura 5-9 e Figura 5-10 ilustram o comportamento individual das amostras do *dataset* em relação à otimização por LKPO, nos dois métodos. Observa-se ainda, que não existe clara correlação entre as vizinhanças de krigagem e as posições das amostras.

Figura 5-9 - Comportamento individual das amostras do *dataset* em relação à otimização por LKPO (LKPO\_A). Escala de cores referentes às vizinhanças otimizadas por LKPO.

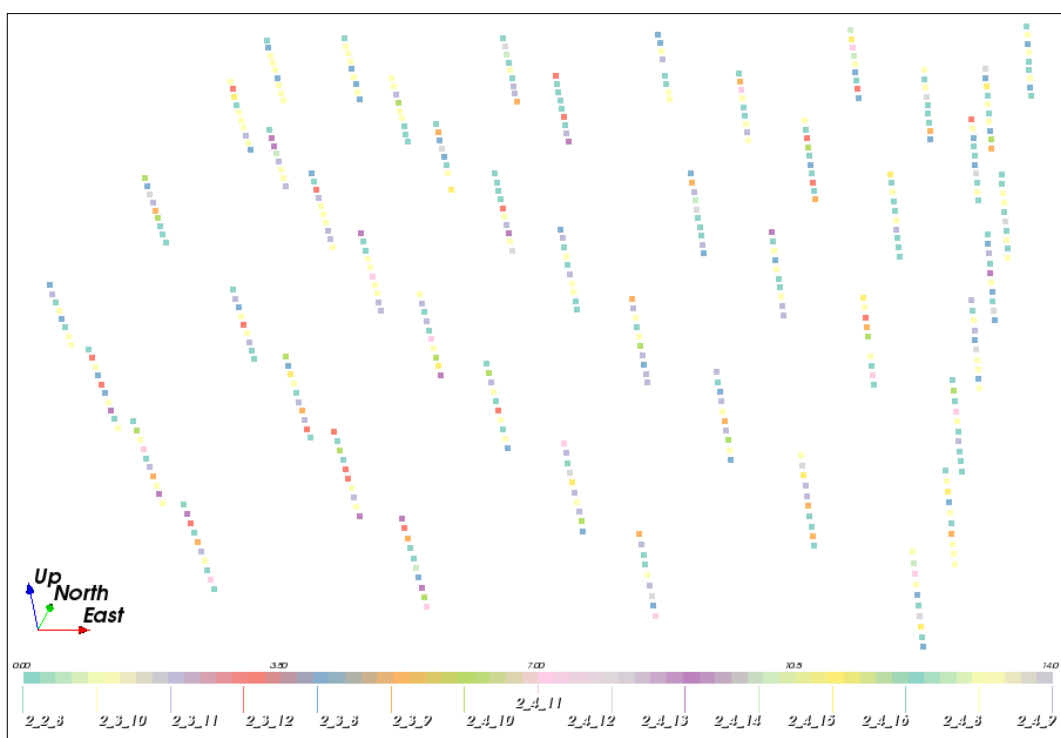
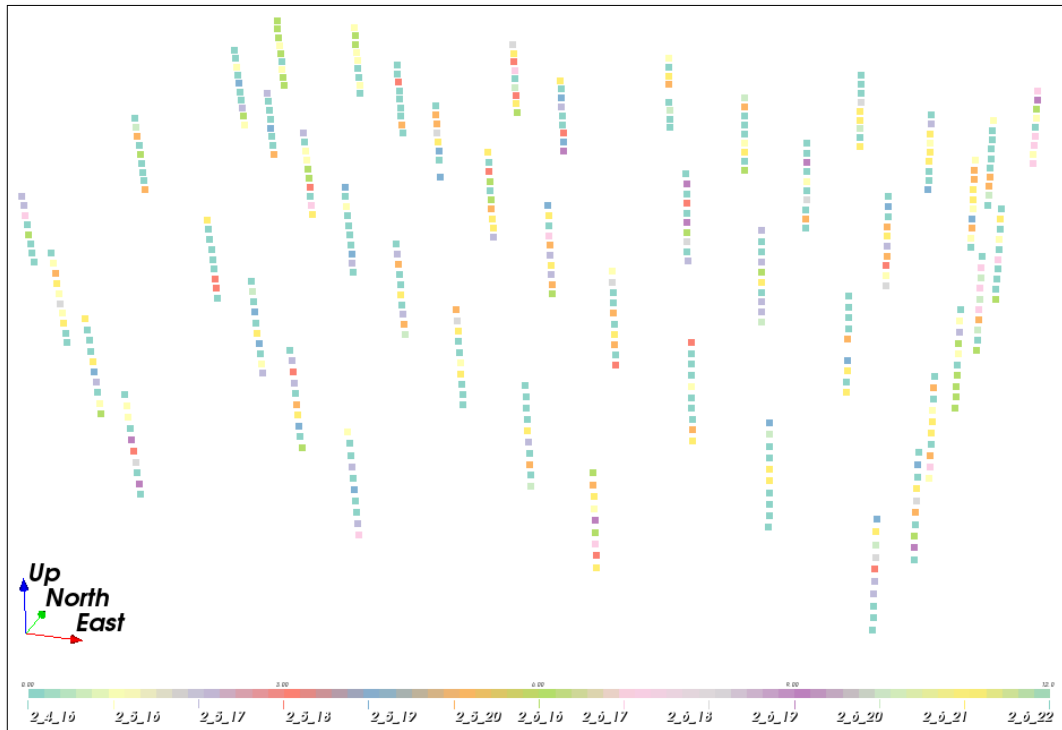
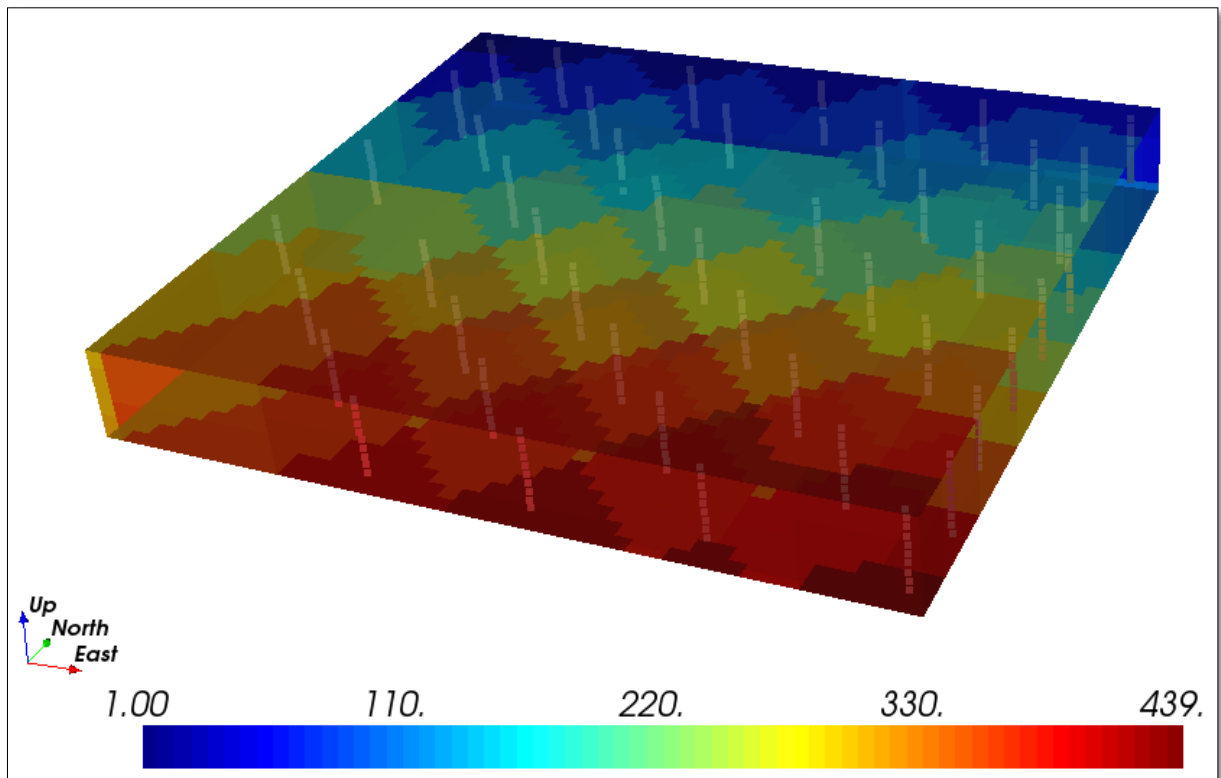


Figura 5-10 - Comportamento individual das amostras do *dataset* em relação à otimização por LKPO (LKPO\_B). Escala de cores referentes às vizinhanças otimizadas por LKPO.



Dando sequência na otimização por LKPO, no que tange às vizinhanças de krigagem, o próximo passo é a definição dos volumes de influência estacionários por vizinho mais próximo (NN). A Figura 5-11 ilustra os volumes de influência gerados por NN.

Figura 5-11 - Volumes de influência gerados por vizinho mais próximo (LKPO\_A e LKPO\_B). Sem escala.



## 5.2 Dataset 2 - Fosfato

O banco de dados “fosfato” compreende um jazimento real do bem mineral fosfato, localizado no município de Catalão (GO). A Figura 5-12 ilustra a localização dos collars das sondagens em uma imagem de satélite.

Figura 5-12 - Localização do jazimento de fosfato e os respectivos dados de sondagens (círculos verdes).



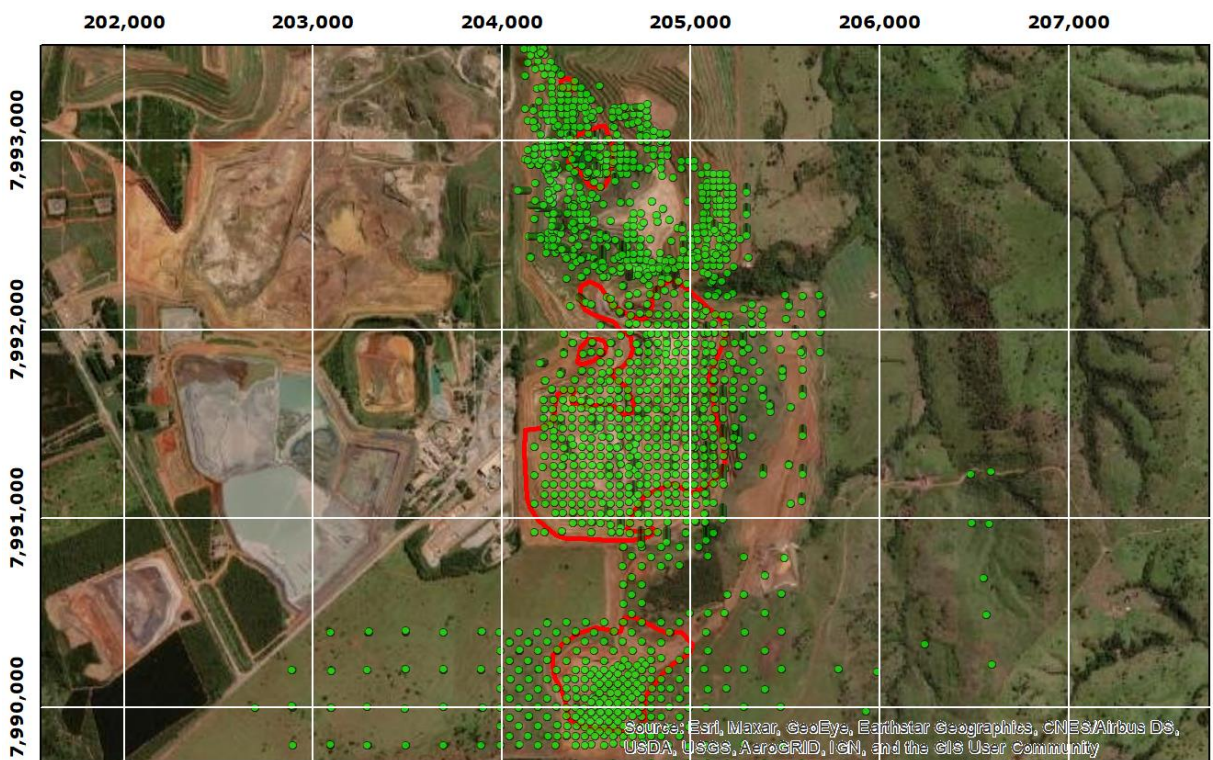
As sondagens do banco de dados apresentam um espaçamento regular aproximado de 50 x 50 metros, com adensamento em algumas regiões. A Figura 5-13 e a Figura 5-14 ilustram os limites de lavra dos anos de 2017 e 2018, respectivamente.

A seção seguinte (5.2.1 - Geologia regional e local) apresenta uma breve descrição da geologia regional e local da área de interesse.

Figura 5-13 - Limite de lavra do ano de 2017.



Figura 5-14 - Limite de lavra do ano de 2018.

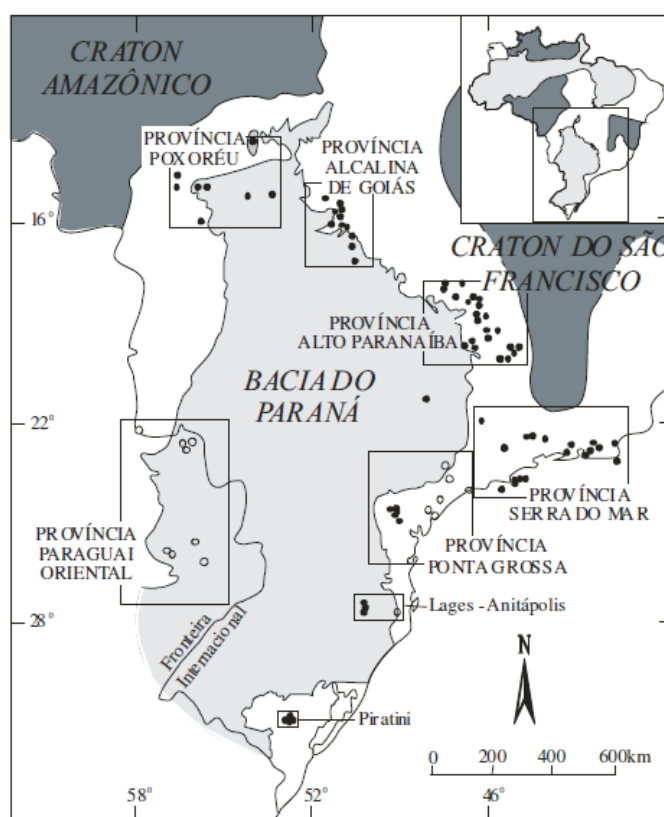




### 5.2.1 Geologia regional e local

A área de interesse está localizada na Província Ígnea do Alto Paranaíba (APIP - *Alto Paranaíba Igneous Province*), que corresponde à uma estrutura alongada segundo NW-SE, no limite nordeste da Bacia do Paraná, conforme ilustrado na Figura 5-15.

Figura 5-15 - Localização das províncias alcalinas das margens da Bacia do Paraná (Brod *et al.*, 2004).



A APIP ocorre como resultado de um intenso magmatismo máfico-ultramáfico alcalino e ultrapotássico, manifestando-se sob a forma de corpos intrusivos (como diques, condutos, diatremas e complexos plutônicos) e extrusivos (como lavas e rochas piroclásticas). Datações sugerem que a APIP se formou entre 80 e 90 M.a.

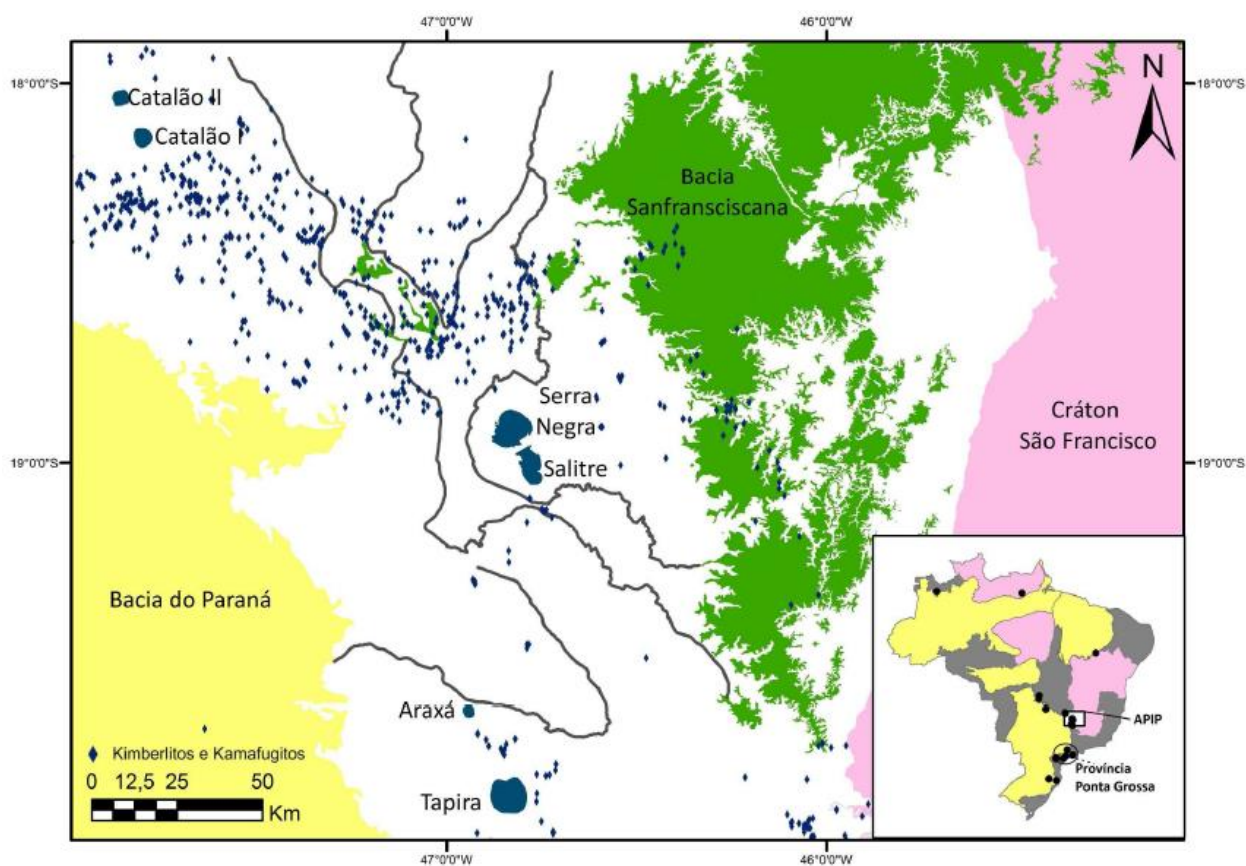
Os kamafugitos são os representantes mais abundantes da província, seguidos dos olivina lamproitos madupíticos, que são restritos à porção

noroeste da província, seguidos dos *pipes* kimberlíticos diamantíferos contendo xenólitos de granada lherzolito, que ocorrem no norte da província.

O magmatismo alcalino ocorre sob a forma de extensos kamafugitos vulcânicos. Tais lavas e rochas piroclásticas contêm, localmente, abundantes xenólitos de dunito, piroxenito, melilitito e sienito, associação comum nos complexos carbonatíticos da APIP.

De acordo com Gomide (2015), ao longo da APIP podem ser observados diferentes complexos alcalinos e carbonatíticos, como ilustrado na Figura 5-16. São eles os Complexos de Catalão I, Catalão II, Serra Negra, Salitre, Araxá e Tapira.

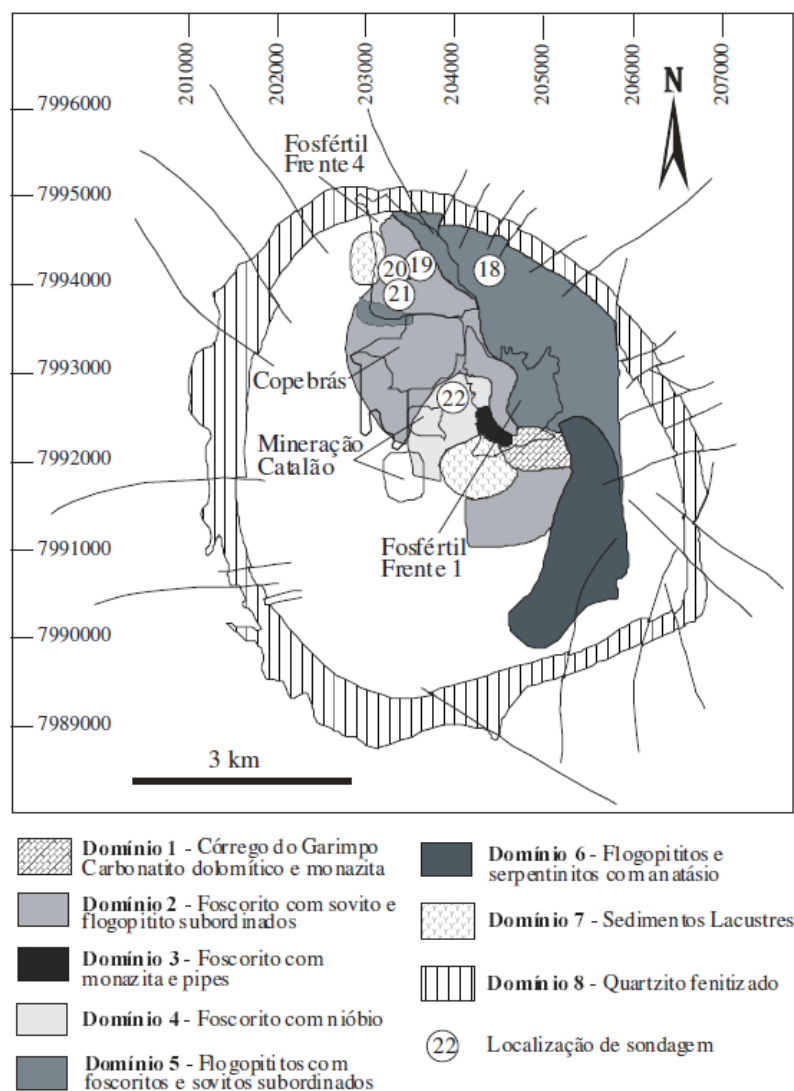
Figura 5-16 - Detalhe da localização dos complexos alcalinos e carbonatíticos da APIP (Gomide, 2015).



Nesse sentido, a área de interesse está localizada no Complexo de Catalão I, que ocorre como um domo alcalino carbonatítico com uma área circular aflorante de aproximadamente 27 km<sup>2</sup> à nordeste da cidade de Catalão/GO (Ribeiro, 2008). A intrusão do complexo ocorreu em várias fases, com idades K-Ar que sugerem formação entre  $85 \pm 6.9$  M.a.

A intrusão do complexo provocou uma deformação dômica dos xistos e quartzitos encaixantes do Grupo Araxá. Os tipos litológicos de Catalão I incluem dunitos, clinopiroxenitos, bebedouritos, carbonatitos e foscorititos, além de abundantes flogopititos metassomáticos, conforme ilustrado na Figura 5-17.

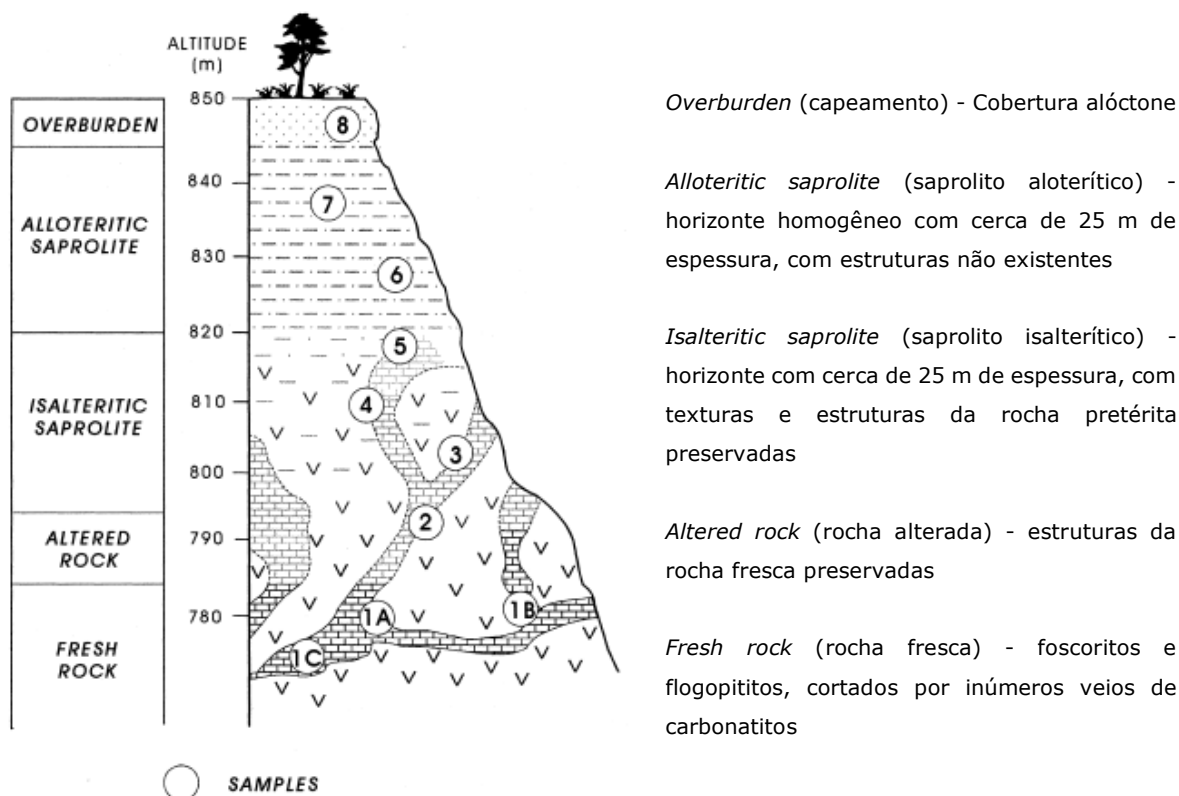
Figura 5-17 - Detalhe do Complexo de Catalão I (Brod *et al.*, 2004).



Depósitos importantes de fosfato, nióbio, terras raras, titânio e vermiculita ocorrem em Catalão I. A distribuição das rochas hospedeiras da mineralização apresenta variação de flogopititos na borda para foscóritos e carbonatitos para o centro do domo.

Oliveira e Imbernon (1998) descreveram um perfil de alteração típico de Catalão I, incluindo cinco horizontes, conforme ilustrado na Figura 5-19.

Figura 5-18 - Seção esquemática do perfil de alteração de Catalão I (Oliveira e Imbernon, 1998).



Ribeiro (2008) identificou sete (7) tipologias de minério na mina de fosfato da (então) Fosfertil em Catalão I. Quatro tipologias de minério estão ilustradas na Figura 5-19. A Tabela 5-5 ilustra as sete tipologias de minério descritas por Ribeiro (2008).

Figura 5-19 - Seção esquemática das áreas mineralizadas de Catalão I  
(Brod *et al.*, 2004).

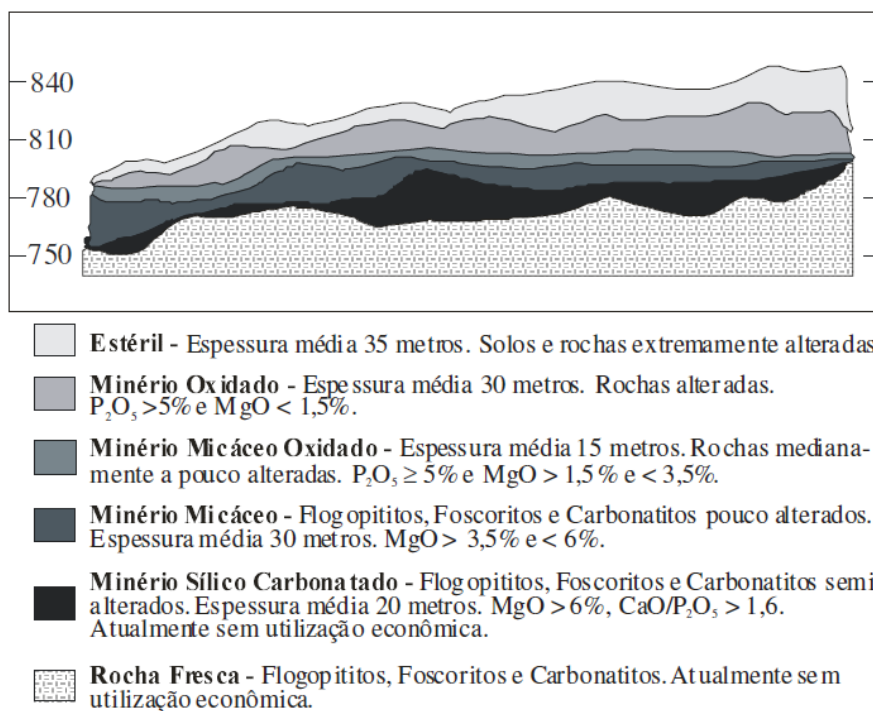


Tabela 5-5 - Tipologias de minério da mina de fosfato da Fosfertil (Ribeiro, 2008).

Minério	$P_2O_5$ (%)	MgO (%)	CaO: $P_2O_5$	Observações
Oxidado (ox)	$\geq 5,0$	$< 0,5$	0,50 a 1,25	Argiloso a arenoso
Micáceo oxidado (mox)	$\geq 5,0$	$> 0,5$	1,25 a 1,35	Areno-argiloso
Micáceo de topo (mict)	$\geq 5,0$	$> 1,5$ e $< 2,5$	1,32 a 1,35	Argiloso
Micáceo médio (micm)	$\geq 5,0$	$> 2,5$ a $< 3,5$	1,35 a 1,45	Argiloso
Micáceo de base (micb)	$\geq 5,0$	$> 3,5$ a $< 6,0$	1,45 a 1,60	Argiloso
Silico-carbonatado rico (msicr)	$> 5,0$	$> 6,0$	$\geq 1,60$	Semi-argiloso
Silico-carbonatado pobre (msicp)	$\leq 8,0$	$> 6,0$	$\geq 1,60$	Semi-argiloso

### 5.2.2 Análise exploratória dos dados (EDA)

Os histogramas de frequência e acumulado estão ilustrados na Figura 5-20, para visualização dos teores de  $P_2O_5$  e  $CaO$ . Elaborou-se também uma tabela resumo incluindo a estatística básica dos dados, conforme ilustrado na Tabela 5-6.

Figura 5-20 - Histograma de frequência (barras) e acumulado (linha preta) do *dataset* Fosfato - teores de  $P_2O_5$  e  $CaO$  (%).

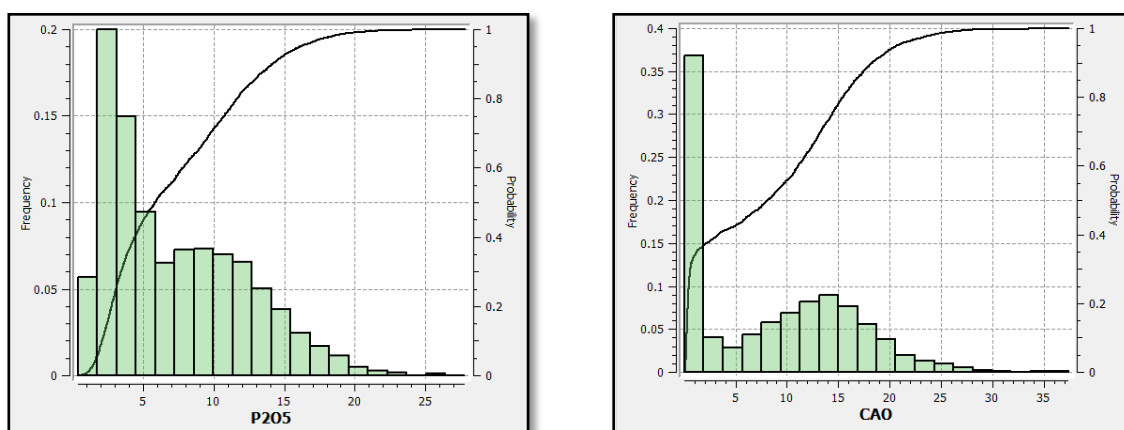
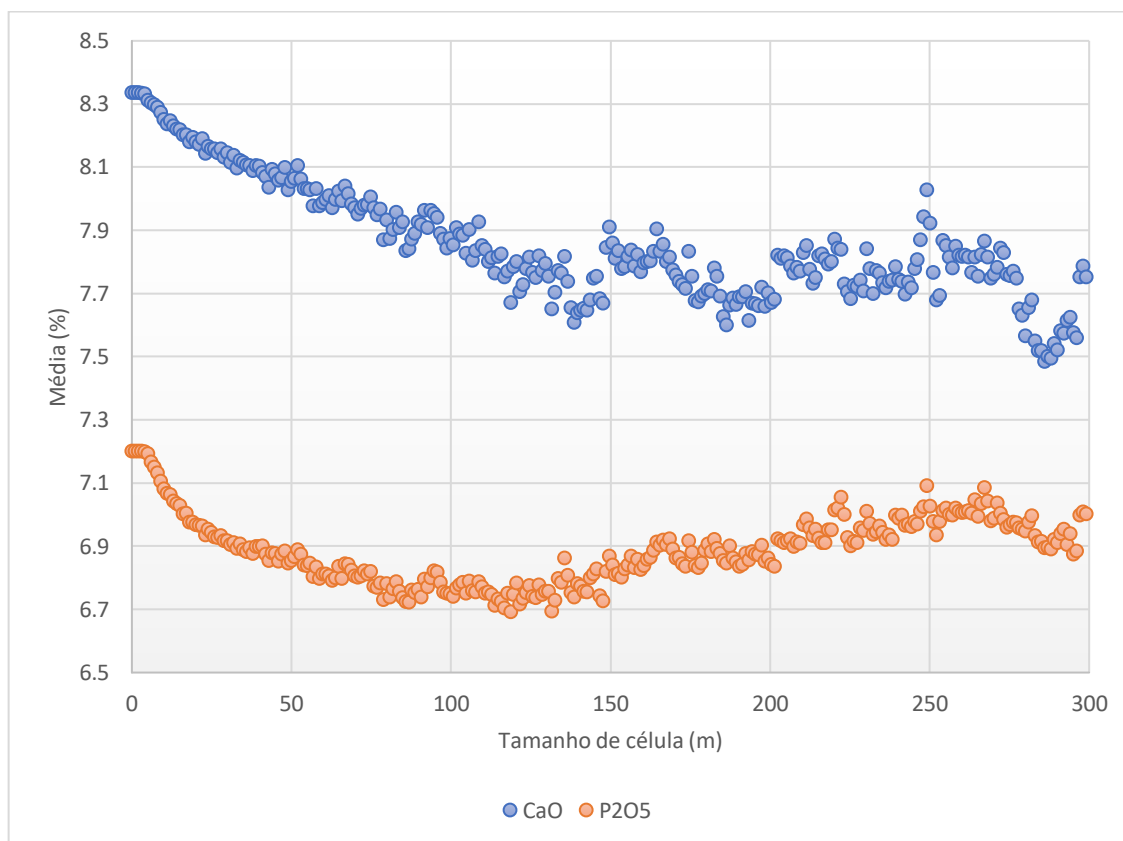


Tabela 5-6 - Estatística descritiva do *dataset* Fosfato.

Var.	N	Média	Mediana	Variância	CV	Mín.	1Q	3Q	Máx.	Assimetria	Curtose
$P_2O_5$	5.207	7,20	5,84	23,19	0,68	0,37	3,07	10,75	27,80	0,79	-0,13
$CaO$		8,34	8,12	56,70	0,83	0,02	0,46	14,38	37,40	0,46	-0,79

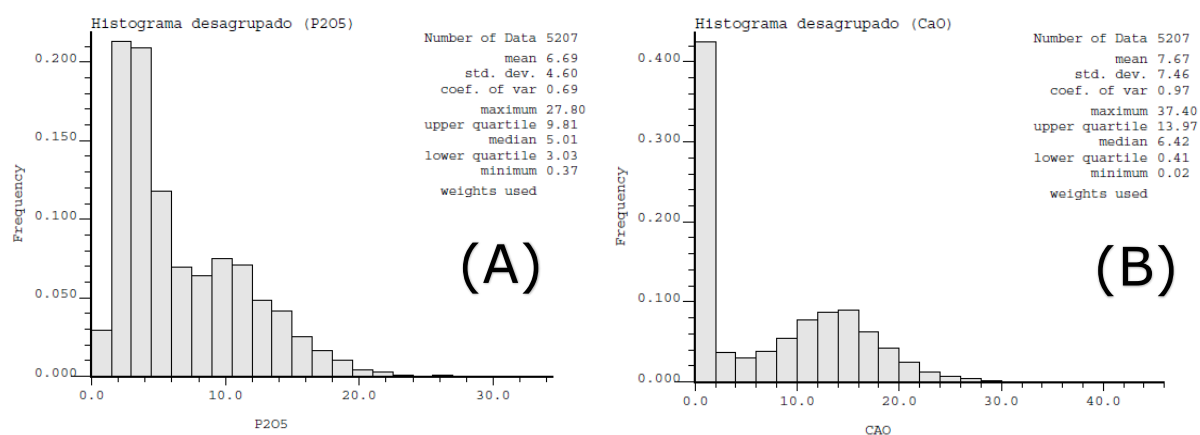
Realizou-se também uma análise de desagrupamento dos dados, conforme ilustrado na Figura 5-21.

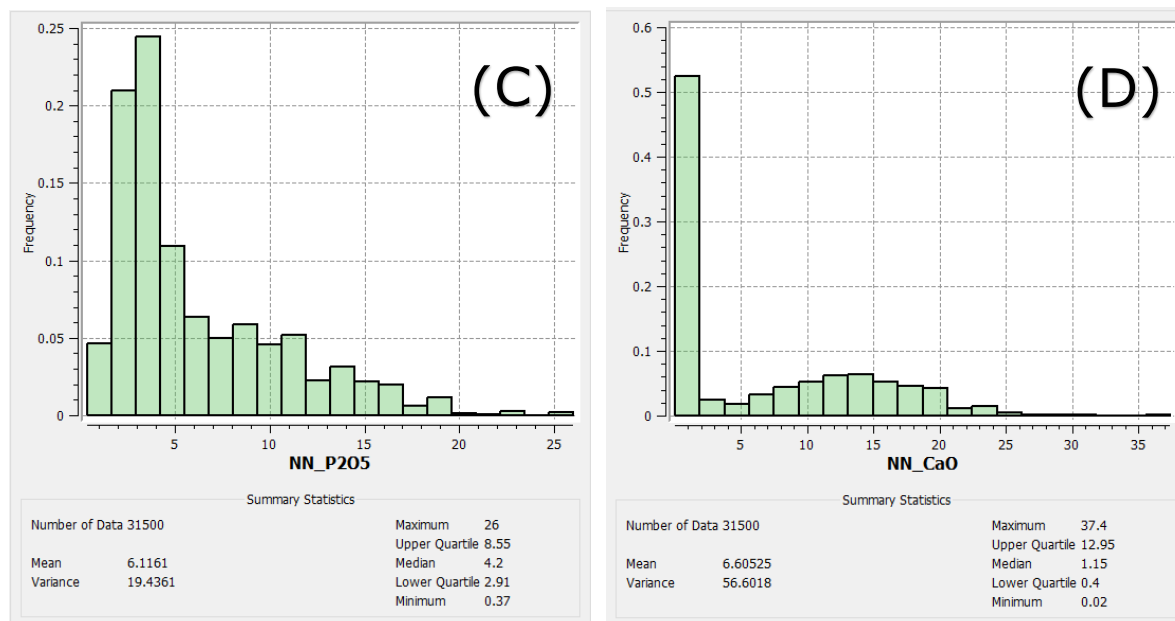
Figura 5-21 - Análise de desagrupamento dos dados por célula.



A Figura 5-22 ilustra os histogramas desagrupados das variáveis  $P_2O_5$  e CaO.

Figura 5-22 - Histograma das variáveis  $P_2O_5$  e CaO desagrupadas por célula (A e B) e por vizinho mais próximo (C e D).





### 5.2.3 Análise da continuidade espacial

A análise da continuidade espacial da variável de interesse é a principal tarefa a ser executada que precede a estimativa por krigagem ordinária. Para o caso do *dataset* em questão, foram avaliados os variogramas em todas as direções de anisotropia, conforme ilustrado no Apêndice - Análise da continuidade espacial. Os parâmetros dos modelos variográficos estão resumidos na Tabela 5-7.

Tabela 5-7 - Modelos de continuidade espacial das variáveis P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> e CaO.

Variável	Modelo de continuidade espacial
<b>P<sub>2</sub>O<sub>5</sub></b>	$\gamma(h) = 2.0 + 9.0 \text{ Sph} \left( \frac{N22}{100m} \frac{N112}{100m} \frac{Vert}{20m} \right) + 14.0 \text{ Sph} \left( \frac{N22}{250m} \frac{N112}{180m} \frac{Vert}{30m} \right) + 0.1 \text{ Sph} \left( \frac{N22}{1100m} \frac{N112}{312m} \frac{Vert}{30m} \right)$
<b>CaO</b>	$\gamma(h) = 2.5 + 42.5 \text{ Sph} \left( \frac{N67}{162m} \frac{N157}{162m} \frac{Vert}{62m} \right) + 11.7 \text{ Sph} \left( \frac{N67}{1100m} \frac{N157}{750m} \frac{Vert}{37m} \right)$

Observando-se os modelos variográficos das variáveis P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> e CaO conclui-se que existem anisotropias geométricas nos fenômenos espaciais. Ou seja, a anisotropia geométrica ocorre quando o patamar (*sill* - C<sub>1</sub>) é atingido em todas as direções de anisotropia, porém com diferentes alcances (*ranges* - a).



#### 5.2.4 Definição dos parâmetros e das vizinhanças de krigagem - LKPO, KNA e métodos globais

Os parâmetros iniciais correspondem ao tamanho dos blocos a serem estimados, bem como sua discretização. Estes parâmetros serão comuns para todas as aplicações de krigagem ordinária. A Tabela 5-8 resume os parâmetros de krigagem que serão utilizados nas estimativas.

Tabela 5-8 - Parâmetros de krigagem do *dataset* Fosfato.

Tamanho dos blocos (X x Y x Z - metros)	Discretização (nº de pontos em X, Y e Z)
25 x 25 x 10	5 x 5 x 2

As vizinhanças de krigagem, que serão aplicadas às estimativas, estão indicadas na Tabela 5-9, bem como seus respectivos parâmetros.

Tabela 5-9 - Resumo das vizinhanças de krigagem utilizadas no *dataset* Fosfato.

Método	Mínimo de amostras	Máximo de amostras	Máximo de amostras por octante	Elipsoide de busca* (X x Y x Z - metros)	Total de vizinhanças
OK_I	8	16	2	1.000 x 500 x 90	1
OK_II	8	24	3	1.000 x 500 x 90	1
OK_III	8	40	5	1.000 x 500 x 90	1
KNA	8	24	Não utilizado	1.000 x 500 x 90	1
LKPO_A	4-8	22-28	Variável	1.000 x 500 x 90	120
LKPO_B	2-6	20-24	Variável	1.000 x 500 x 90	130
LKPO_C	4-8	38-42	Variável	1.000 x 500 x 90	65

Observa-se que OK\_I, OK\_II e OK\_III são os “métodos globais”, ou seja, correspondem às vizinhanças globais de krigagem cujos parâmetros serão aplicados em todos os blocos do grid. A metodologia KNA apresenta

parâmetros que foram otimizados globalmente, ou seja, correspondem à vizinhança global otimizada que será aplicada em todos os blocos do grid. Já o método LKPO, utiliza os parâmetros de krigagem que foram otimizados localmente (ou bloco-a-bloco) em relação ao erro absoluto, e que serão aplicados nos volumes de influência de cada amostra do *dataset*.

As vizinhanças de krigagem “globais” foram escolhidas a partir de sugestões encontradas na literatura Geoestatística, tais como Isaaks e Srivastava (1989) e Deutsch e Deutsch (2014), além de uma vizinhança global geralmente utilizada pelo departamento técnico da empresa de mineração de fosfato. Vale ressaltar que as indicações das vizinhanças de krigagem “globais” devem ser consideradas apenas como sugestões, referências ou guias.

Para a vizinhança de krigagem “global otimizada”, ou seja, àquela otimizada por KNA, foi utilizado um *software* comercial para se obter os seus parâmetros.

A metodologia de otimização por LKPO, por sua vez, testa uma infinidade de vizinhanças de krigagem. Neste estudo, por exemplo, foram testadas vizinhanças de krigagem com no máximo entre 22 e 28 amostras (LKPO\_A), entre 20 e 24 amostras (LKPO\_B) e entre 38 e 42 amostras (LKPO\_C). Os mínimos de amostras também foram testados, ou seja, 4 e 8 amostras (LKPO\_A e LKPO\_C) e de 2 até 6 amostras (LKPO\_B).

## 6 RESULTADOS

Serão apresentados, nesse capítulo, os resultados obtidos pelas estimativas por krigagem ordinária, de acordo com as metodologias de definição de vizinhanças de krigagem.

Para o caso do *Dataset 1 - Cobre*, as estimativas foram realizadas baseadas nos métodos de definição de vizinhança de krigagem OK\_I, OK\_II, OK\_III, KNA, LKPO\_A e LKPO\_B, conforme detalhado na seção 5.1.3 - Definição dos parâmetros e das vizinhanças de krigagem - LKPO, KNA e métodos globais.

Para o caso do *Dataset 2 - Fosfato*, as estimativas foram realizadas baseadas nos métodos de definição de vizinhança de krigagem OK\_I, OK\_II, OK\_III, KNA, LKPO\_A, LKPO\_B e LKPO\_C, conforme detalhado na seção 5.2.4 - Definição dos parâmetros e das vizinhanças de krigagem - LKPO, KNA e métodos globais.

Para a avaliação da performance de krigagem, os modelos estimados foram avaliados em relação à reprodução das estatísticas básicas, validação cruzada, suavização de krigagem, eficiência de krigagem, inclinação do coeficiente de regressão e erro quadrático médio.

### 6.1 Resultados - *Dataset 1 - Cobre*

A primeira análise dos resultados consiste na checagem da reprodução das estatísticas básicas. Além disso, foram também analisadas as métricas de suavização de krigagem (variância de krigagem), eficiência de krigagem ( $KE_{JD/CV}$ ), inclinação do coeficiente de regressão (SR) e erros de validação cruzada (média dos erros e variância dos erros).

A Tabela 6-1 apresenta os resultados de cada estimativa por krigagem ordinária para cada metodologia empregada.

Tabela 6-1 - Resultados das estimativas por krigagem ordinária para o *dataset* Cobre.

	Suporte de blocos		Suporte de pontos					
	Média*	Variância**	Erro médio	Variância do erro	SR***	KE	$\rho$	MSE
<i>Dados</i>	1.05840	0.12880						
LKPO_A	1.10129	<b>0.12041</b>	-0.00407	<b>0.07261</b>	<b>0.8367</b>	0.9808	<b>0.81</b>	<b>0.072</b>
LKPO_B	1.10348	0.11149	<b>0.00058</b>	0.08479	0.8217	<b>0.9855</b>	0.76	0.085
KNA	<b>1.09832</b>	0.11759	0.00060	0.09586	0.7671	0.9505	0.73	0.096
OK_I	1.10173	0.11923	-0.00402	0.10180	0.7376	0.9418	0.71	0.101
OK_II	1.10113	0.11937	0.00378	0.09586	0.7564	0.9653	0.73	0.096
OK_III	1.10112	0.11934	0.00377	0.09586	0.7565	0.9653	0.73	0.096

(\*): Média desagrupada; (\*\*): Variância regularizada para o suporte 10 m x 10 m x 5 m; (\*\*\*) : SR ou inclinação do coeficiente de correlação teórico.

Observa-se que as estimativas por LKPO apresentaram os melhores resultados em relação à variância (suavização de krigagem), erro médio, variância dos erros, inclinação do coeficiente de regressão (SR), eficiência de krigagem (KE) e erro quadrático médio (MSE) em comparação com os métodos de vizinhanças de krigagem globais (OK\_I, OK\_II e OK\_III) e pelo método de vizinhança de krigagem global otimizada (KNA).

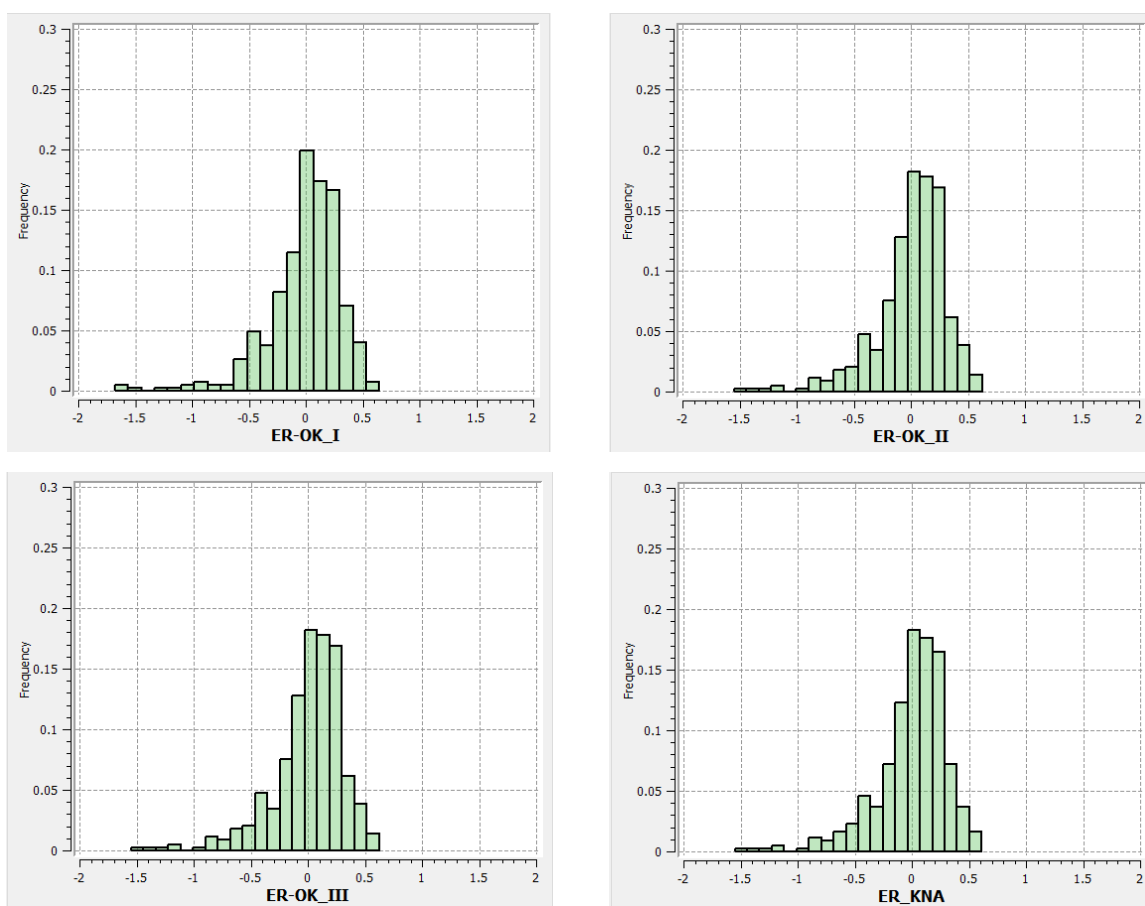
A estimativa por LKPO\_B apresentou resultados satisfatórios, no entanto ligeiramente superiores aos resultados dos métodos de vizinhanças de krigagem globais, no quesito de variância dos erros. Em relação ao erro médio e eficiência de krigagem, apresentou performance superior à estimativa por LKPO\_A.

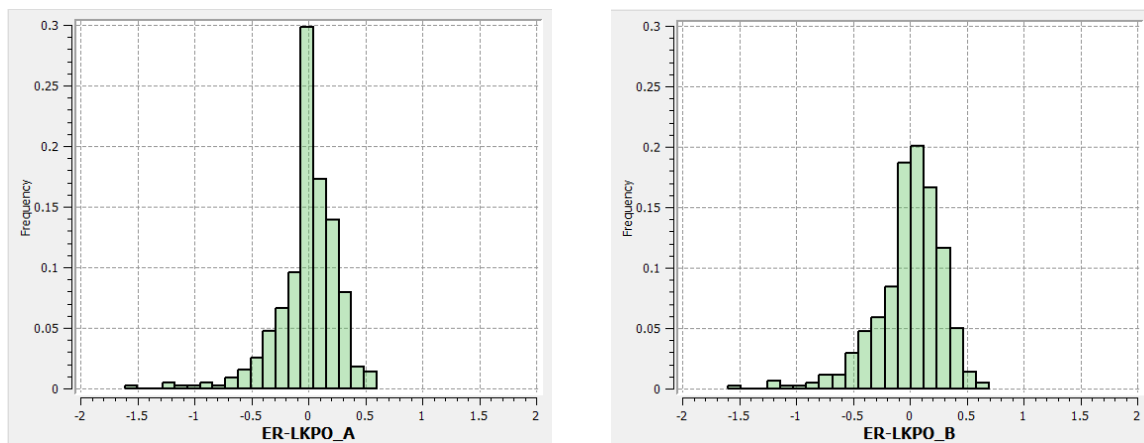
A estimativa por KNA também apresentou resultados satisfatórios, no entanto similares aos resultados dos métodos de vizinhanças de krigagem globais, nos quesitos variância (suavização de krigagem), variância dos

erros, inclinação do coeficiente de regressão e eficiência de krigagem. O quesito o qual a KNA mais se destacou foi a maior aderência em relação à média desagrupada.

Dando sequência na análise dos resultados, procedeu-se na avaliação dos erros de validação cruzada dos modelos estimados. Os resultados estão ilustrados na Figura 6-1.

Figura 6-1 - Histogramas dos erros de validação cruzada.

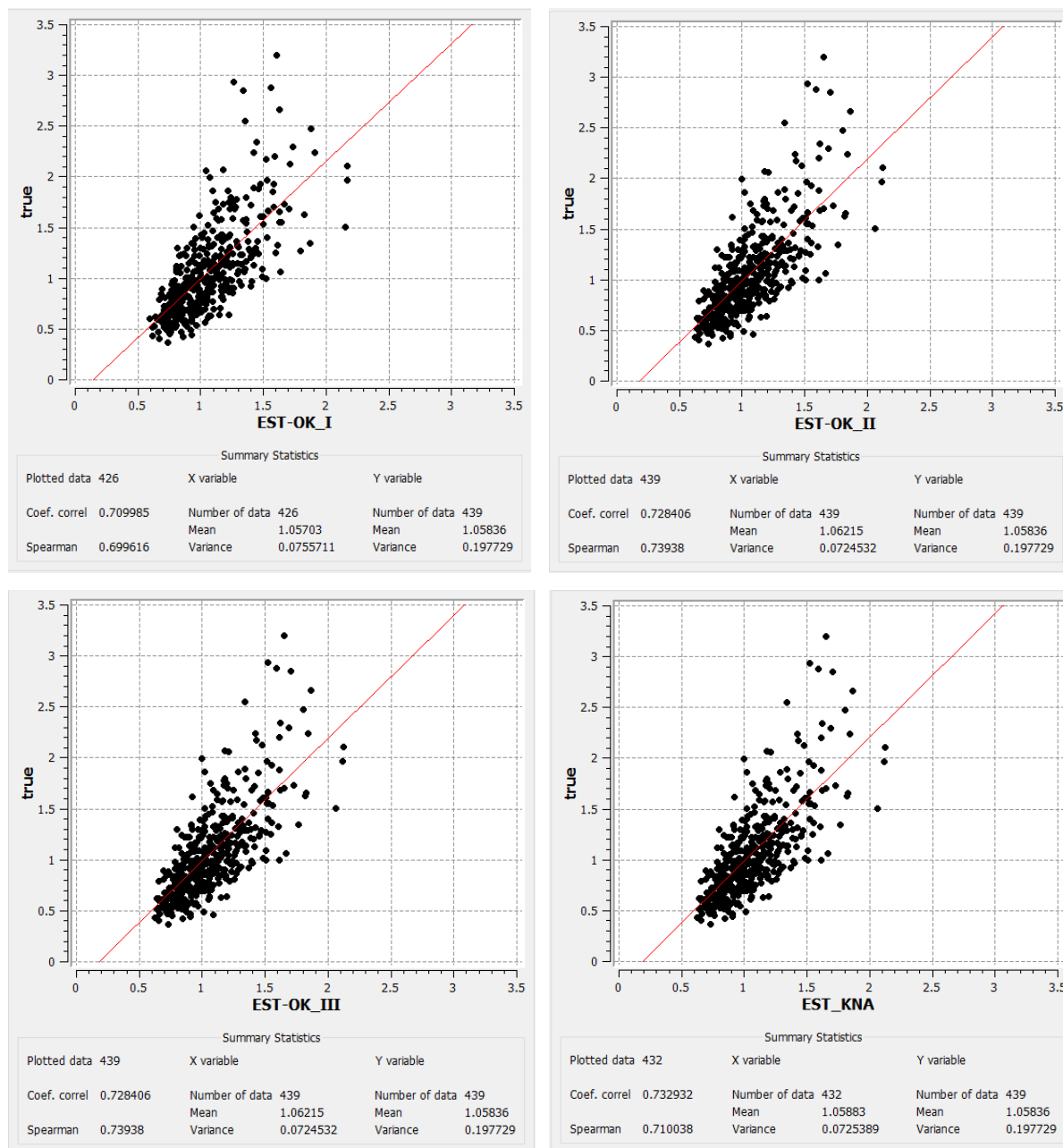


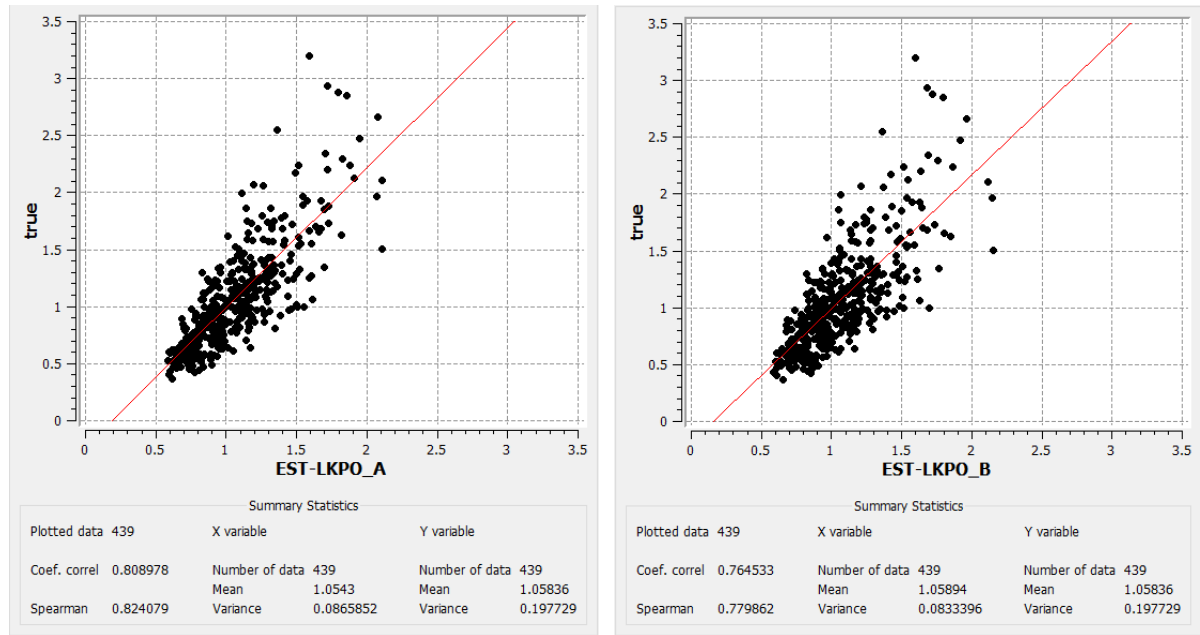


Os histogramas dos erros de validação cruzada ilustram de forma bem clara a otimização dos erros absolutos, principalmente no caso do LKPO\_A. Tal otimização apresentou os melhores resultados, ou seja, observa-se uma maior frequência de erros próximos de zero e menor espalhamento. A estimativa por LKPO\_B também produziu resultados superiores aos métodos globais e global otimizado. Vale destacar, no entanto, uma ligeira superioridade do OK\_I em relação aos demais métodos globais e global otimizado.

A validação cruzada também permite a comparação dos métodos de estimativa com os valores reais, realizada através de gráficos de dispersão (*scatter plots*), pelos quais é possível verificar-se os coeficientes de correlação de Pearson. A partir dos coeficientes de correlação é possível calcular-se a inclinação do coeficiente de regressão (SR) teórico, conforme indicado na equação da seção 3.12.5 - Inclinação do coeficiente da reta de regressão e resultados consolidados na Tabela 6-1. A Figura 6-2 ilustra os gráficos de dispersão dos valores estimados por cada método de estimativa em comparação com os valores reais.

Figura 6-2 - Gráficos de dispersão entre os valores estimados (eixos x - "Est") e valores reais (eixos y - "true"), obtidos por validação cruzada.

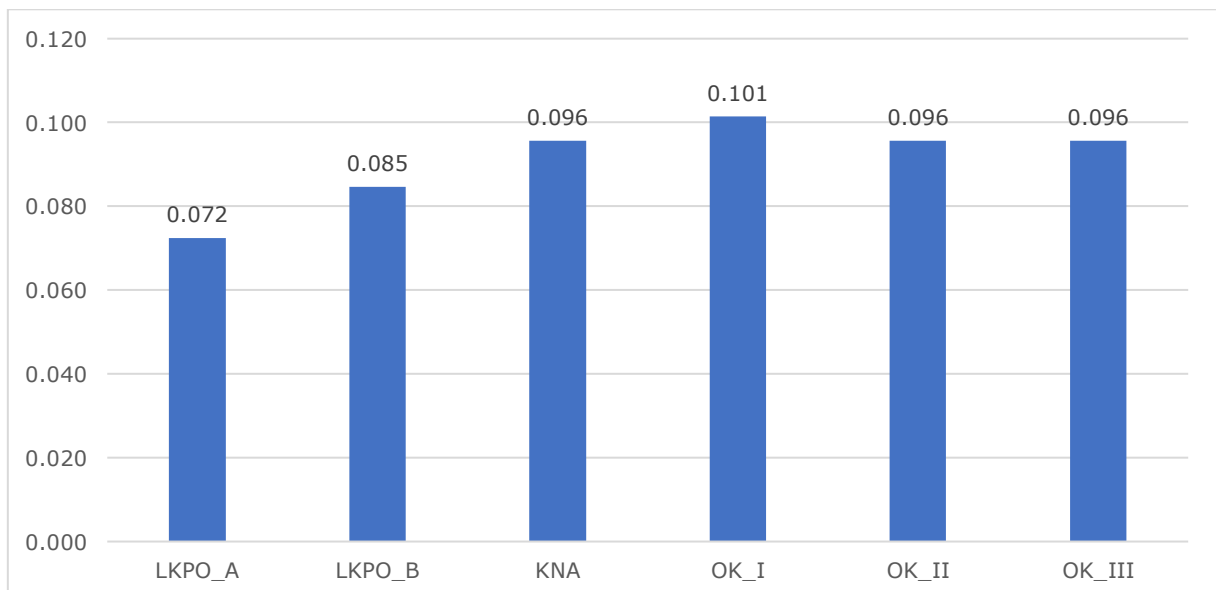




Observa-se pelos gráficos de dispersão que os modelos estimados por LKPO apresentaram resultados superiores aos demais métodos, em relação ao coeficiente de correlação de Pearson (LKPO\_A = 0,81 e LKPO\_B = 0,76). O método KNA, por sua vez, se mostrou ligeiramente superior às metodologias de estimativa por vizinhanças globais (KNA = 0,73).

A Figura 6-3 resume a performance das metodologias em relação aos erros quadráticos médios.

Figura 6-3 - Performance em relação ao erro quadrático médio (MSE).





A comparação entre os erros quadráticos médios dos modelos também ressalta a superioridade das metodologias locais de otimização (LKPO\_A e LKPO\_B) em relação às metodologias globais (OK\_I, OK\_II e OK\_III) e globais otimizadas (KNA). Comparando-se o melhor resultado obtido por metodologia local de otimização (LKPO\_A) e o melhor resultado de metodologia global (OK\_III), observa-se uma redução de 16% do erro quadrático médio.

## 6.2 Resultados - *Dataset 2* - Fosfato

As Tabela 6-2 e Tabela 6-3 apresentam os resultados de cada estimativa por krigagem ordinária para cada metodologia empregada para o *dataset* Fosfato, para as variáveis  $P_2O_5$  e CaO, respectivamente.

Tabela 6-2 - Resultados das estimativas por krigagem ordinária para o *dataset* Fosfato.

$P_2O_5$	Suporte de blocos		Suporte de pontos					
	Média*	Variância**	Erro médio	Variância do erro	SR***	KE	$\rho$	MSE
<i>Dados</i>	6.12	12.99						
LKPO_A	6.18	10.07	-0.04	14.31	<b>0.7155</b>	0.9825	<b>0.63</b>	14.31
LKPO_B	6.17	10.55	-0.03	<b>14.28</b>	0.6991	0.9811	<b>0.63</b>	<b>14.28</b>
LKPO_C	6.20	10.26	-0.03	15.15	0.6864	0.9884	0.61	15.15
KNA	6.19	<b>10.93</b>	-0.02	15.60	0.6541	0.9757	0.60	15.44
OK_I	6.22	9.93	0.05	15.33	0.6862	0.9792	0.60	15.42
OK_II	6.16	9.70	<b>0.01</b>	15.28	0.6943	0.9905	0.60	15.36
OK_III	<b>6.13</b>	9.55	<b>-0.01</b>	15.55	0.6998	<b>0.9964</b>	0.60	15.62

(\*): Média desagrupada; (\*\*): Variância regularizada para o suporte 25 m x 25 m x 10 m; (\*\*\*): SR ou inclinação do coeficiente de correlação teórico.

Tabela 6-3 - Resultados das estimativas por krigagem ordinária para o *dataset* Fosfato.

CaO	Suporte de blocos		Suporte de pontos					
	Média*	Variância**	Erro médio	Variância do erro	SR***	KE	$\rho$	MSE
<i>Dados</i>	6.61	46.85						
LKPO_A	6.57	39.61	-0.03	<b>24.85</b>	<b>0.8157</b>	0.9695	<b>0.75</b>	<b>24.84</b>
LKPO_B	6.57	39.85	-0.02	25.06	0.8132	0.9677	<b>0.75</b>	25.06
LKPO_C	<b>6.61</b>	39.10	-0.03	25.82	0.8100	0.9768	0.74	25.82
KNA	6.81	<b>40.74</b>	-0.01	27.52	0.7721	0.9402	0.72	27.51
OK_I	6.73	40.26	0.03	27.88	0.7767	0.9805	0.72	27.88
OK_II	6.71	40.14	0.02	27.80	0.7779	0.9920	0.72	27.80
OK_III	6.82	39.49	<b>0.004</b>	27.47	0.7951	<b>0.9960</b>	0.73	27.46

(\*): Média desagrupada; (\*\*): Variância regularizada para o suporte 25 m x 25 m x 10 m; (\*\*\*): SR ou inclinação do coeficiente de correlação teórico.

Observa-se que as estimativas por LKPO apresentaram os melhores resultados em relação à variância dos erros, inclinação do coeficiente de regressão (SR) e erro quadrático médio (MSE) em comparação com os métodos de vizinhanças de krigagem globais (OK\_I, OK\_II e OK\_III) e pelo método de vizinhança de krigagem global otimizada (KNA).

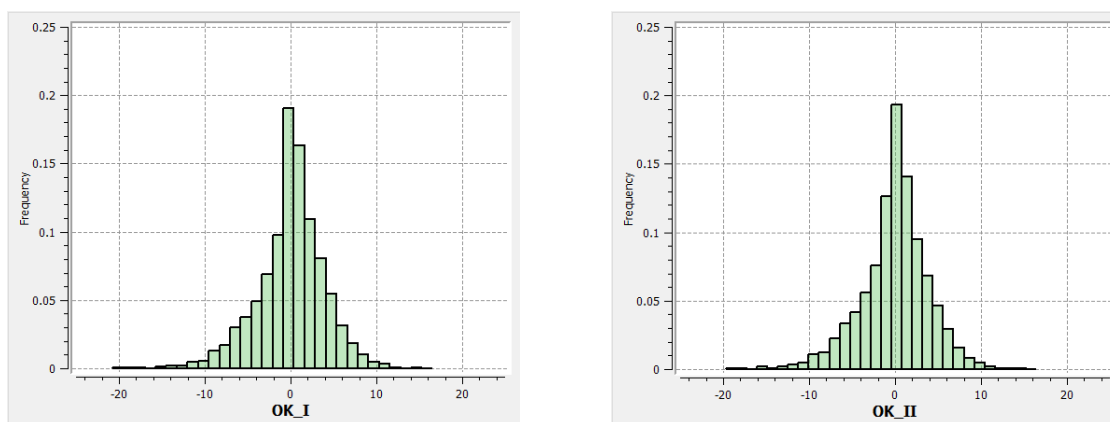
A estimativa por KNA apresentou resultados satisfatórios, principalmente em relação à suavização de krigagem. Em contrapartida, como era de se esperar, a inclinação do coeficiente de regressão (SR) foi a mais penalizada em relação às demais metodologias.

Os métodos globais (OK\_II e OK\_III) destacaram-se pelos resultados em relação às médias dos erros e eficiência de krigagem (KE - OK\_III).

Em relação à aderência com as médias desagrupadas, vale o destaque para o LKPO\_C, no caso da variável CaO, e OK\_III, no caso da variável P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.

Dando sequência na análise dos resultados, procedeu-se na avaliação dos erros de validação cruzada dos modelos estimados. Os resultados estão ilustrados nas Figura 6-4 e Figura 6-5.

Figura 6-4 - Histogramas dos erros de validação cruzada para a variável P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>.



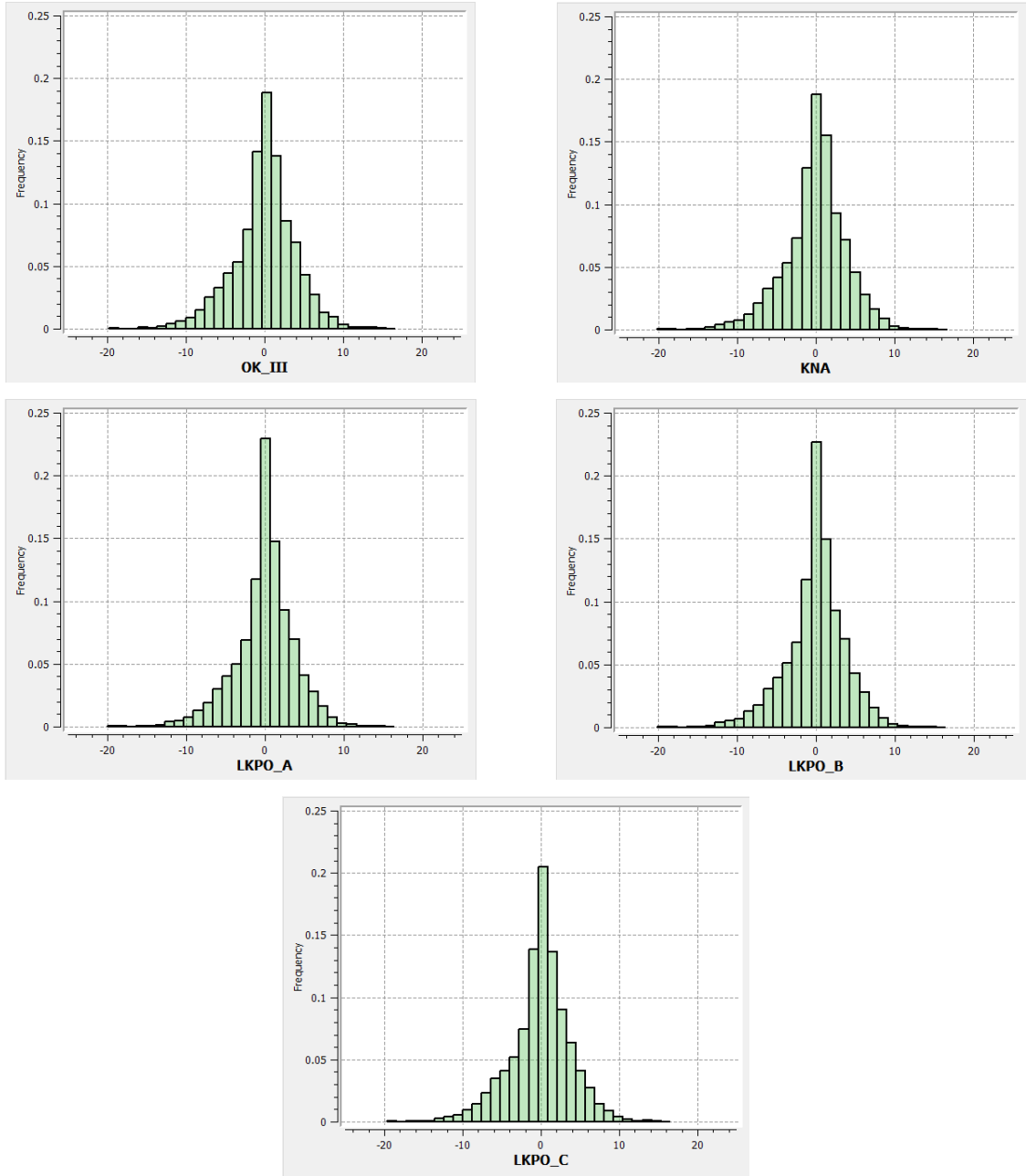
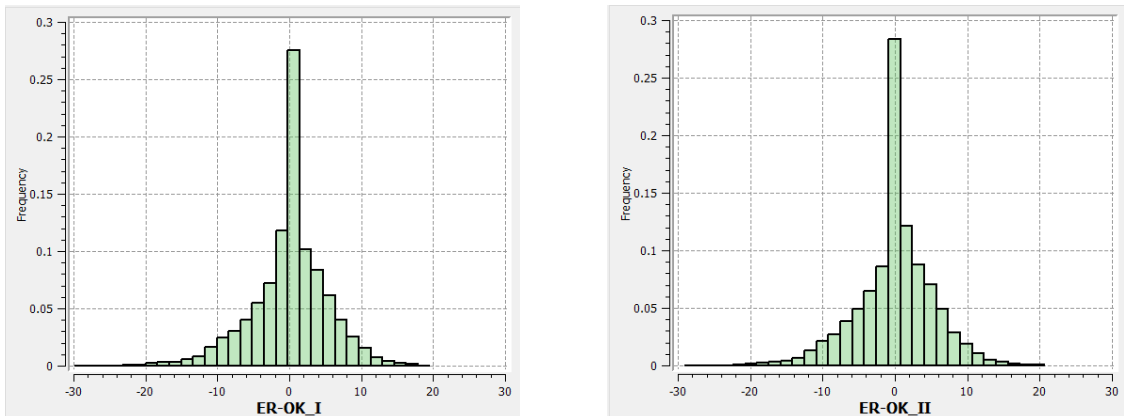
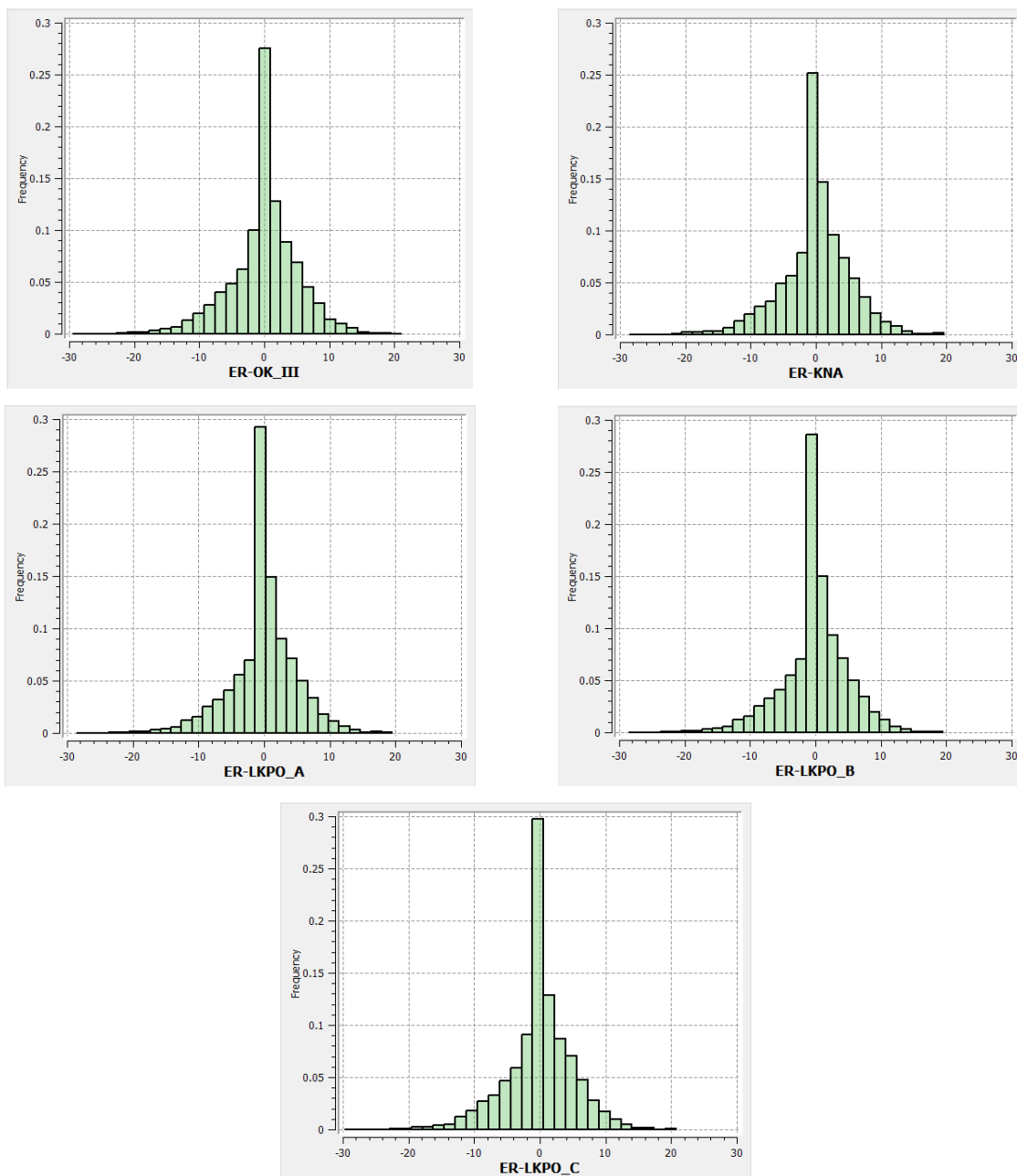


Figura 6-5 - Histogramas dos erros de validação cruzada para a variável CaO.

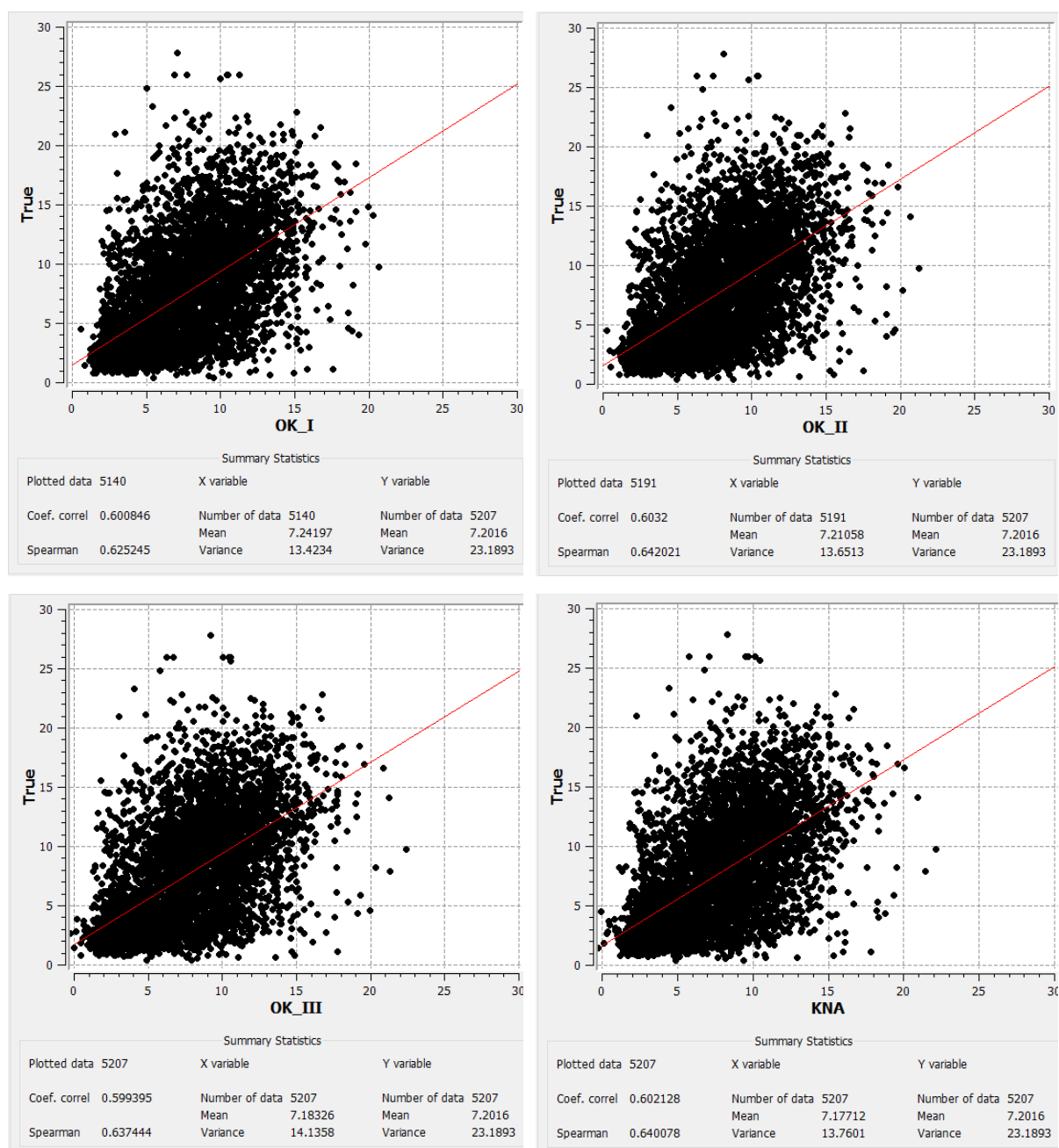




Os histogramas dos erros de validação cruzada ilustram de forma bem clara a otimização dos erros absolutos, principalmente no caso do LKPO\_A e LKPO\_B. Tal otimização apresentou os melhores resultados, ou seja, observa-se uma maior frequência de erros próximos de zero. A estimativa por LKPO\_C também produziu resultados superiores aos métodos globais e global otimizado. Os resultados dos métodos globais e global otimizado apresentaram resultados bastante similares.

As Figura 6-6 e Figura 6-7 ilustram os gráficos de dispersão dos valores estimados por cada método de estimativa em comparação com os valores reais.

Figura 6-6 - Gráficos de dispersão entre os valores estimados (eixos x - "Est") e valores reais (eixos y - "true"), obtidos por validação cruzada para a variável  $P_2O_5$ .



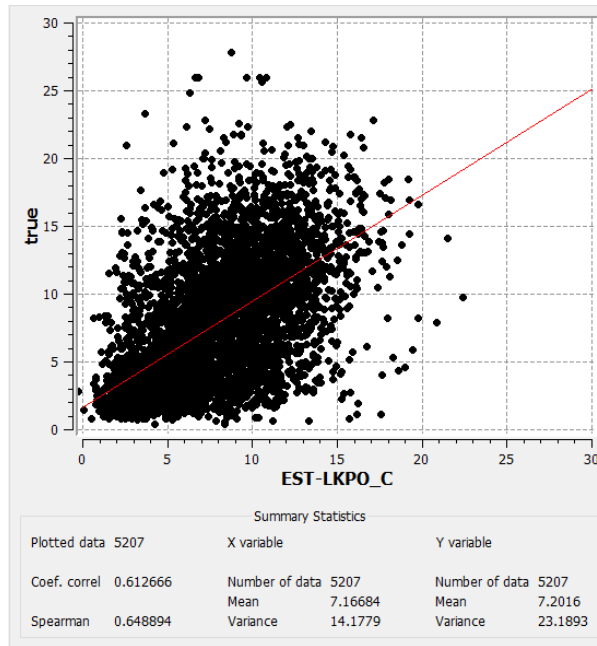
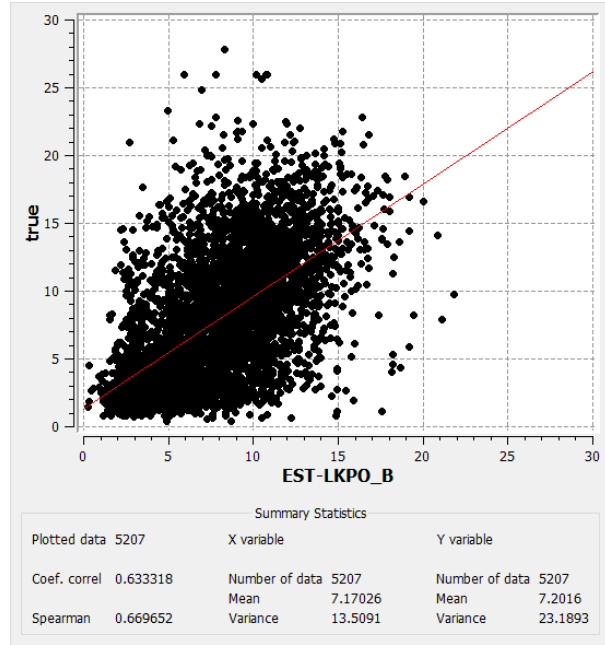
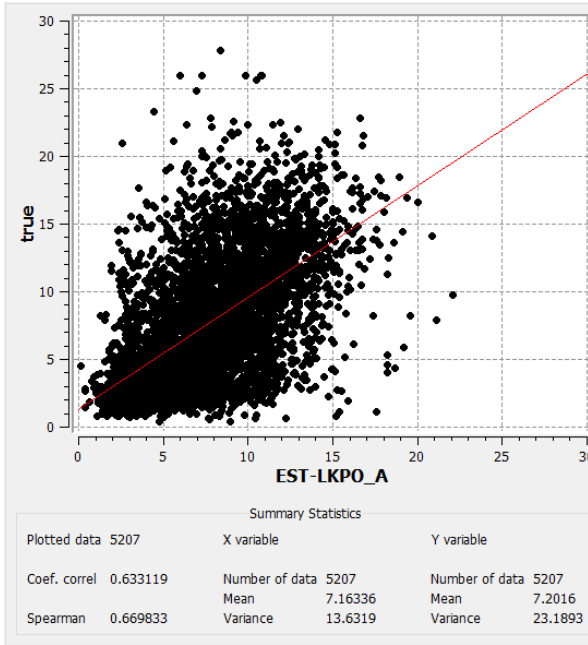
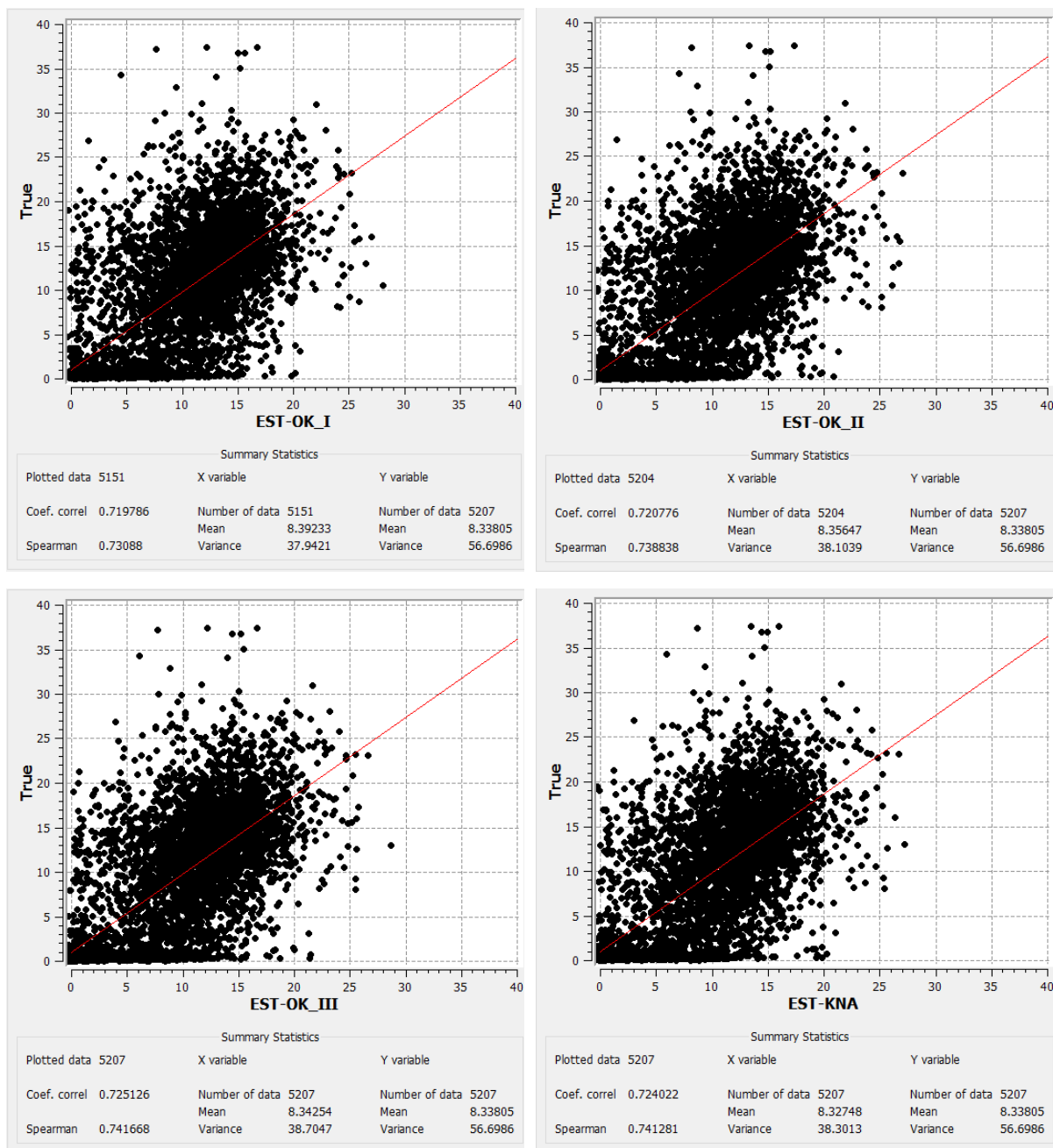
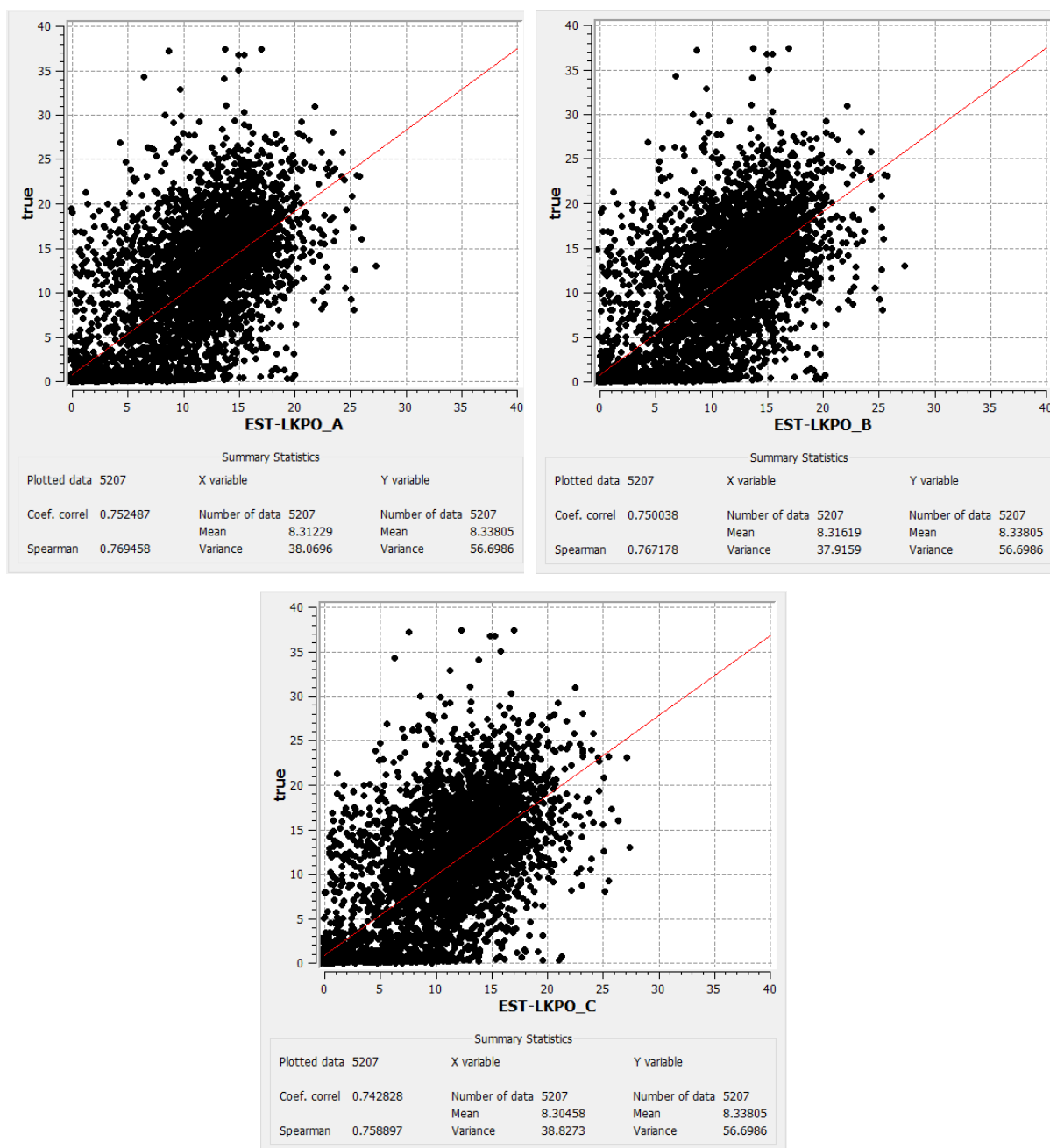


Figura 6-7 - Gráficos de dispersão entre os valores estimados (eixos x - "Est") e valores reais (eixos y - "true"), obtidos por validação cruzada para a variável CaO.



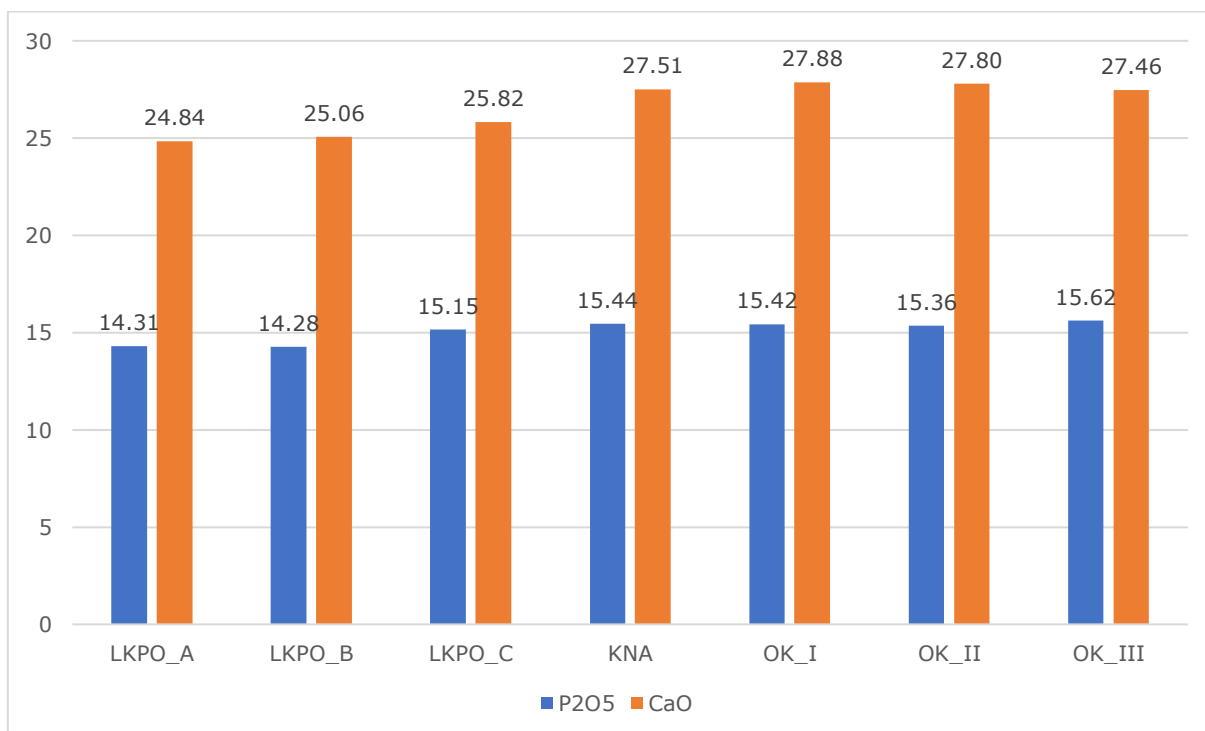




Observa-se, pelos gráficos de dispersão, que os modelos estimados por LKPO apresentaram resultados superiores aos demais métodos, em relação ao coeficiente de correlação de Pearson. O método KNA, por sua vez, apresentou resultado similar às metodologias de estimativa por vizinhanças globais.

A Figura 6-8 resume a performance das metodologias em relação aos erros quadráticos médios.

Figura 6-8 - Performance em relação ao erro quadrático médio (MSE).



A comparação entre os erros quadráticos médios dos modelos também ressalta a superioridade das metodologias locais de otimização (LKPO\_A, LKPO\_B e LKPO\_C) em relação às metodologias globais (OK\_I, OK\_II e OK\_III) e global otimizada (KNA). Comparando-se o melhor resultado obtido por metodologia local de otimização e o melhor resultado de metodologia global, observam-se reduções na ordem de 7% (P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>) e 9,5% (CaO) do erro quadrático médio.

Para o caso deste *dataset*, foi realizada uma análise adicional, que incluiu a comparação das performances dos modelos estimados em relação à reconciliação. Para tanto, foram comparados os teores de P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>AP obtidos na alimentação da usina, e os teores de P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>AP obtidos através dos teores estimados, por meio das equações que seguem.

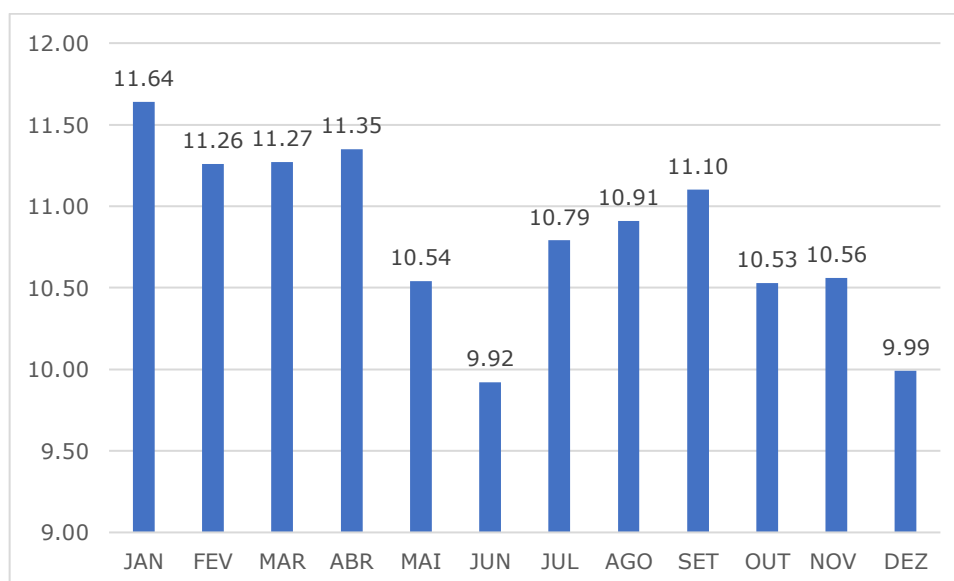
$$RCP = \frac{CaO}{P_2O_5}$$

Se  $RCP \geq 1.34$ , então  $P_2O_5AP = P_2O_5$

$$\text{Se } RCP < 1.34, \text{ então } P_2O_5AP = \frac{CaO}{1.34}$$

Dessa forma, de posse dos dados de P2O5AP, analisou-se os dados de reconciliação na base mensal (ano de 2018), conforme indicado na Figura 6-9.

Figura 6-9 - Teores médios de P2O5AP medidos na base mensal (alimentação da usina).

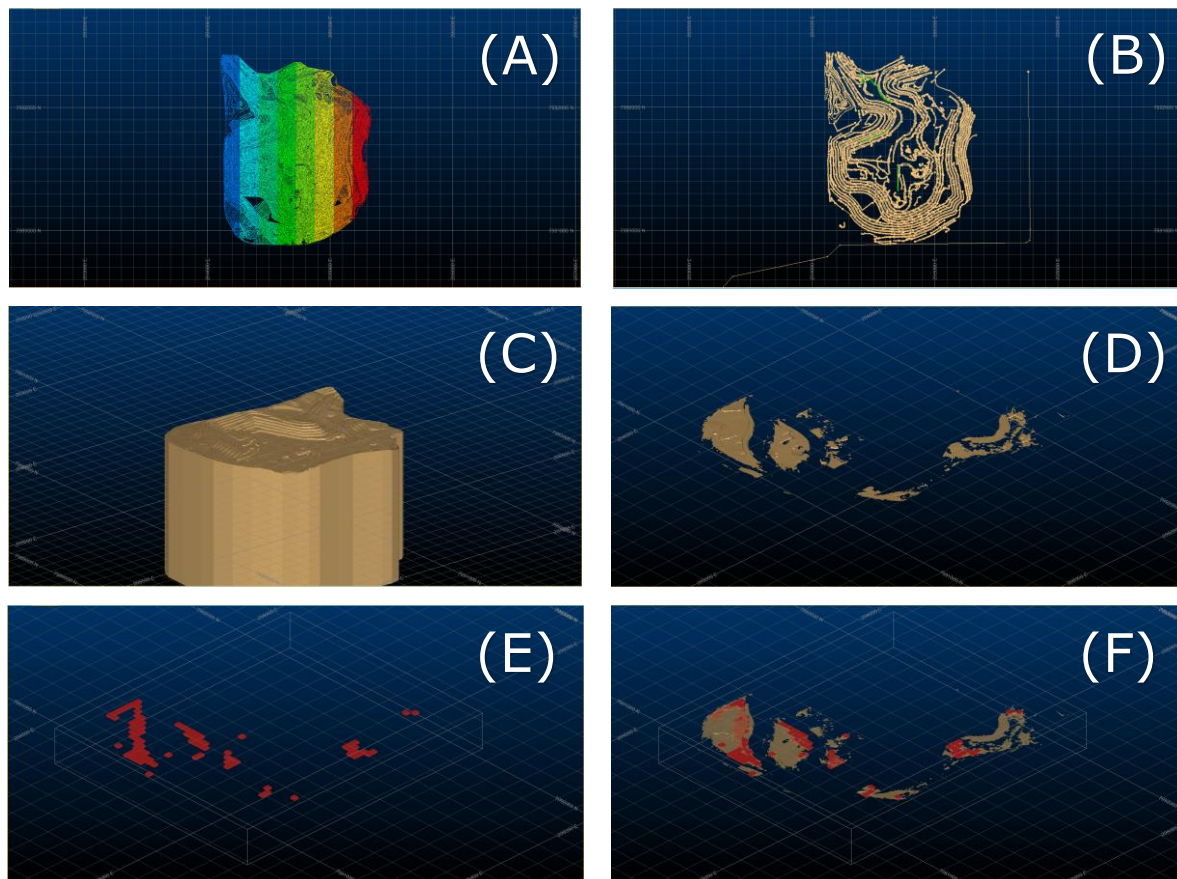


Para a determinação dos teores de P2O5AP nos modelos estimados (base mensal), seguiu-se o seguinte fluxo de trabalho:

- Importação da nuvem de pontos de superfície;
- Importação das *strings* (curvas de nível);
- Atualização topográfica;
- Criação do *Digital Terrain Model* (DTM);
- Extrusão do sólido;
- Seleção dos blocos estimados por período, no caso, em base mensal.

A Figura 6-10 ilustra algumas etapas do fluxo de trabalho utilizado para seleção dos blocos estimados na base mensal.

Figura 6-10 - Ilustração de parte do fluxo de trabalho empregado para obtenção dos teores de P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>AP na base mensal. (A) Importação da nuvem de pontos, (B) importação das *strings*, (C) extrusão dos sólidos, (D) sólido lavrado na base mensal, (E) blocos selecionados e (F) blocos selecionados *versus* sólido lavrado na base mensal.



Dessa forma, de posse dos blocos lavrados na base mensal, foi possível medir a performance dos modelos estimados, conforme resumido na Tabela 6-4.

Similarmente, a Tabela 6-5 e a Figura 6-11 ilustram as diferenças relativas entre os modelos estimados e alimentação da usina, e as respectivas performances na base mensal.

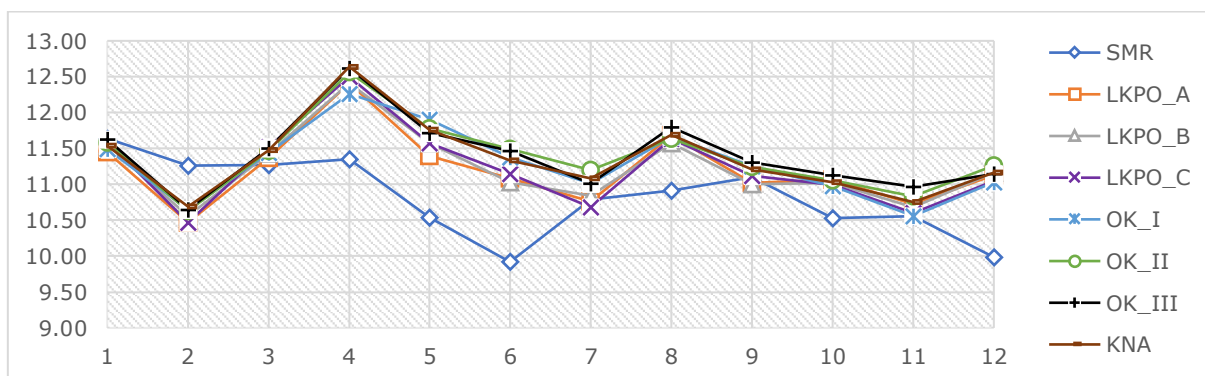
Tabela 6-4 - Resultados de performance dos modelos em relação à reconciliação mensal.  
SMR = alimentação da usina.

P2O5AP	SMR	LKPO_A	LKPO_B	LKPO_C	OK_I	OK_II	OK_III	KNA
JAN	<b>11.64</b>	11.45	11.55	11.60	11.49	11.58	11.63	11.54
FEV	<b>11.26</b>	10.47	10.56	10.47	10.65	10.63	10.65	10.69
MAR	<b>11.27</b>	11.37	11.43	11.52	11.44	11.47	11.50	11.48
ABR	<b>11.35</b>	12.41	12.41	12.50	12.26	12.56	12.62	12.64
MAI	<b>10.54</b>	11.40	11.57	11.57	11.90	11.78	11.72	11.76
JUN	<b>9.92</b>	11.08	11.03	11.15	11.38	11.49	11.47	11.33
JUL	<b>10.79</b>	10.76	10.84	10.68	11.01	11.20	11.01	11.08
AGO	<b>10.91</b>	11.68	11.57	11.64	11.66	11.64	11.80	11.69
SET	<b>11.10</b>	11.02	11.00	11.12	11.25	11.24	11.31	11.21
OUT	<b>10.53</b>	11.07	11.02	10.99	10.98	11.06	11.13	11.03
NOV	<b>10.56</b>	10.73	10.68	10.60	10.56	10.83	10.97	10.75
DEZ	<b>9.99</b>	11.13	11.16	11.05	11.03	11.26	11.15	11.16

Tabela 6-5 - Diferenças relativas entre os teores de P2O5AP dos modelos em relação à alimentação da usina.

	LKPO_A	LKPO_B	LKPO_C	OK_I	OK_II	OK_III	KNA
JAN	-1.63%	-0.77%	-0.34%	-1.29%	-0.52%	<b>-0.09%</b>	-0.86%
FEV	-7.02%	-6.22%	-7.02%	-5.42%	-5.60%	-5.42%	<b>-5.06%</b>
MAR	<b>0.89%</b>	1.42%	2.22%	1.51%	1.77%	2.04%	1.86%
ABR	9.34%	9.34%	10.13%	<b>8.02%</b>	10.66%	11.19%	11.37%
MAI	<b>8.16%</b>	9.77%	9.77%	12.90%	11.76%	11.20%	11.57%
JUN	11.69%	<b>11.19%</b>	12.40%	14.72%	15.83%	15.63%	14.21%
JUL	<b>-0.28%</b>	0.46%	-1.02%	2.04%	3.80%	2.04%	2.69%
AGO	7.06%	<b>6.05%</b>	6.69%	6.87%	6.69%	8.16%	7.15%
SET	-0.72%	-0.90%	<b>0.18%</b>	1.35%	1.26%	1.89%	0.99%
OUT	5.13%	4.65%	4.37%	<b>4.27%</b>	5.03%	5.70%	4.75%
NOV	1.61%	1.14%	0.38%	<b>0.00%</b>	2.56%	3.88%	1.80%
DEZ	11.41%	11.71%	10.61%	<b>10.41%</b>	12.71%	11.61%	11.71%

Figura 6-11 - Performance dos modelos em relação à alimentação da usina (SMR).



Observa-se que os modelos estimados por LKPO obtiveram bons resultados, apresentando melhores reconciliações em 6 dos 12 meses analisados (Março, Maio, Junho, Julho, Agosto e Setembro). O modelo estimado por OK\_I também merece destaque, ou seja, apresentou melhores reconciliações em 4 dos 12 meses analisados (Abril, Outubro, Novembro e Dezembro). O modelo estimado por KNA apresentou a melhor reconciliação no mês de Fevereiro, assim como o modelo estimado por OK\_III, que apresentou a melhor reconciliação no mês de Janeiro. O modelo estimado por OK\_II não apresentou resultados que superassem a performance das demais metodologias.

## 7 CONCLUSÕES

A meta da dissertação consistiu na investigação das metodologias de otimização de vizinhança de krigagem globais e compará-las às metodologias de otimização locais. Os objetivos incluíram a avaliação das vantagens e desvantagens na aplicação de metodologias locais *versus* metodologias globais, além da avaliação de suas respectivas performances.

Foram realizados dois estudos de caso com *datasets* tridimensionais, incluindo um depósito de cobre sintético e uma jazida real de fosfato. Os resultados obtidos nos experimentos realizados com Otimização Local de Parâmetros de Krigagem (LKPO) em comparação aos métodos globais e método global otimizado (KNA), permitem destacar as principais vantagens de aplicação da metodologia LKPO:

- Maior precisão (menor variância do erro) dos modelos estimados, isto é, a metodologia LKPO melhorou a precisão do modelo numa ordem de 25% (*dataset* Cobre), 6,5% e 9,5% (*dataset* Fosfato, variáveis  $P_2O_5$  e CaO, respectivamente), em relação aos melhores resultados dos métodos globais e global otimizado;
- Melhor performance em relação à métrica de inclinação do coeficiente de regressão (SR). Ou seja, espera-se que modelos estimados com SR mais próximos de 1 tenderão a apresentar menos erros em relação classificação de minério como estéril e vice-versa. Tal relação foi demonstrada com sucesso através da análise de reconciliação no *dataset* Fosfato, uma vez que os modelos estimados com LKPO apresentaram melhores resultados em 6 dos 12 meses analisados;
- No caso do *dataset* Cobre, apresentou melhor performance em relação à variância do modelo ou suavização. O modelo estimado pelo método LKPO apresentou a variância mais próxima à real (redução de 6,5% em relação à variância real dos blocos) e, por outro lado, o

melhor resultado dos métodos globais e globais otimizados apresentou uma redução de 7,3%;

- Melhor performance em relação ao erro quadrático médio (MSE), ou seja, os modelos estimados pela metodologia LKPO reduziram o MSE na ordem de 25% (*dataset* Cobre), 7% e 9,5% (*dataset* Fosfato, variáveis  $P_2O_5$  e CaO, respectivamente), em relação aos melhores resultados dos métodos globais e global otimizado;
- Como a metodologia LKPO testa uma infinidade de vizinhanças de krigagem, é incomum que existam blocos não estimados em razão de vizinhanças muito restritas ou disponibilidade de amostras.

Por outro lado, a aplicação das metodologias globais e global otimizada apresentaram as seguintes vantagens em relação à metodologia LKPO:

- Os modelos estimados pelos métodos globais e global otimizado apresentaram melhor acurácia dos modelos estimados (aderência em relação à média global). A metodologia KNA apresentou melhor acurácia numa ordem de aproximadamente 0,3% em relação ao melhor resultado do LKPO para o caso do *dataset* Cobre. Em relação ao *dataset* Fosfato (variável  $P_2O_5$ ), o modelo estimado por OK\_III apresentou o melhor resultado, ou seja, aproximadamente 0,6% superior ao melhor resultado do LKPO. Finalmente, para a variável CaO, o LKPO apresentou o melhor resultado, cerca de 1,5% em relação ao melhor resultado de métodos globais e global otimizado;
- O tempo de processamento das metodologias globais e global otimizada é significativamente menor do que o tempo de processamento pelo método LKPO;
- A implementação das metodologias globais está difundida praticamente em todos os *softwares* conhecidos na indústria. Já a metodologia global otimizada (KNA, QKNA etc.) se encontra difundida em alguns *softwares* (Datamine®, Supervisor®, Isatis® e outros). A



metodologia LKPO, no entanto, encontra-se restrita à implementação no *software* SGeMs®.

É possível concluir, avaliando-se as vantagens e as desvantagens da aplicação da metodologia LKPO, que a sua utilização em relação aos métodos “convencionais” é muito vantajosa. Em termos gerais, as vantagens incluem melhor performance em relação à precisão, erro quadrático médio e inclinação do coeficiente de regressão. Em alguns casos, como demonstrado no presente trabalho, a otimização por LKPO também melhorou os resultados de acurácia e suavização de krigagem.

A utilização da técnica de validação cruzada se mostrou muito adequada para a análise e otimização de parâmetros de vizinhança de krigagem, além da comparação entre modelos de continuidade espacial e visualização de erros, como muitos autores da literatura defendem. Os parâmetros de krigagem otimizados pelo algoritmo LKPO, que incluem mínimo, máximo e máximo de amostras por setor angular, aliados à otimização bloco-a-bloco do algoritmo, apresentaram uma forte influência positiva nos resultados em comparação aos métodos globais e global otimizado.

Além disso, os resultados obtidos sugerem que a escolha entre um modelo não enviesado e um modelo não suavizado, como defendem alguns autores, pode ser abordada de uma maneira equilibrada com o método de otimização local (LKPO). Os resultados obtidos pelo método LKPO sugerem a existência de um equilíbrio entre a inclinação do coeficiente de regressão (SR - viés condicional) e a suavização de krigagem (variância). Ou seja, é possível se melhorar significativamente a inclinação do coeficiente de regressão sem a penalização excessiva da variância do modelo estimado (suavização excessiva).

A performance do LKPO em comparação com as metodologias global e global otimizada no quesito reconciliação (base mensal), também se demonstrou muito satisfatória. Uma vez que os modelos estimados com o método LKPO tendem a apresentar melhoras significativas em relação à inclinação do coeficiente de regressão (SR), menos erros de classificação de minério como estéril e *vice-versa* são esperados.

Sugere-se que futuros estudos incluam parâmetros de vizinhança de krigagem adicionais a serem otimizados, tais como variações no raio/elipse de busca. Melhorias em relação à implementação do algoritmo do LKPO incluem uma melhor definição das estratégias de krigagem, uma vez que se observou que diversas estratégias minimizam o erro absoluto. Assim, uma “filtragem” dos parâmetros imputados pelo usuário, poderia melhorar a eficiência computacional do algoritmo.

Outros parâmetros a serem investigados, para fins de otimização, podem incluir limitação com número máximo de amostras por furo (*string effect*), teores de corte (*capping*), rotação do elipsoide de busca etc. Existe também uma afinidade natural entre o LKPO o LVA (*Local Varying Anisotropy*), e sua combinação pode render melhoras ainda mais significativas nos modelos estimados.

## 8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abedini, M. J.; Nasser, M.; Burn, D. H. - 2012 - The use of a genetic algorithm-based search strategy in geostatistics: application to a set of anisotropic piezometric head data. *Computers e Geosciences*. Vol. 41. pp. 136-146.

Abzalov, M. - 2016 - Applied mining geology. *Modern Approaches in Solid Earth Sciences 12*. Springer International. 448 p.

Armstrong, M. - 1998 - Basic linear Geostatistics. Springer. 153 p.

Boyle, C. - 2010 - Kriging neighborhood analysis by slope of regression and weight of mean: evaluation with the Jura data set. *Mining Technology*. Vol. 119 (2). pp. 49-58.

Brod, J. A.; Ribeiro, C. C.; Gaspar, J. C.; Junqueira-Brod, T. C.; Barbosa, E. S. R.; Riffel, B. F.; Silva, J. F.; Chaban, N.; Ferrari, A. J. D. - 2004 - Geologia e mineralizações dos Complexos Alcalino-Carbonatíticos da Província Ígnea do Alto Paranaíba. 42º Congresso Brasileiro de Geologia. Guias de excursões. pp. 1-29.

Chilès, J. P.; Delfiner, P. - 2012 - Geostatistics: Modeling spatial uncertainty. Wiley. 2<sup>nd</sup> Edition. 699 p.

Clark, I. - 1986 - The art of cross validation in geostatistical applications. *APCOM Proceedings*. pp 221-220.

Clark, I.; Harper, W. V. - 2000 - Practical Geostatistics 2000. Ecosse North America. 342 p.

Comissão Brasileira de Recursos e Reservas (CBRR) - 2016 - Guia para declaração de resultados de exploração, recursos e reservas minerais. Arquivo obtido em 05/08/2020 através do site [http://www.cbrr.org.br/docs/guia\\_declaracao.pdf](http://www.cbrr.org.br/docs/guia_declaracao.pdf)

Coombes, J.; Boamah, P. - 2015 - Local kriging neighbourhood optimization. Proceedings of the Africa Australia Technical Mining Conference. Australasian Institute of Mining and Metallurgy. pp. 27-35.

Coombes, J.; Tran, T.; Earl, A. - 2020 - Going local: innovating resource estimates to improve investment decisions. Mineral Processing and Extractive Metallurgy. Vol. 129 (1). pp. 1-11

David, M. - 1977 - Geostatistical ore reserve estimation. Developments in Geomathematics 2. Elsevier. 364 p.

Davis, B. M. - 1987 - Uses and abuses of cross-validation in Geostatistics. Mathematical Geology. Vo. 19 (3). pp. 241-248.

Deutsch, C. V. - 2007 - The slope of regression for kriging estimators. Centre for Computational Geostatistics.

Deutsch, C. V. - 2010 - Display of cross validation / jackknife results. Technical Report 406. Centre for Computational Geostatistics Annual Report 12. University of Alberta. pp. 406-1-406-4.

Deutsch, C. V.; Deutsch, J. L. - 2015 - Introduction to choosing a kriging plan. In J. L. Deutsch (ed.), Geostatistics Lessons. Acesso em <http://www.geostatisticslessons.com/lessons/introkrigingplan>

Deutsch, J. L.; Deutsch, C. V. - 2012 - Kriging, stationarity and optimal estimation: measures and suggestions. Centre for Computational Geostatistics Annual Report 12. University of Alberta. pp. 306-1-306-8.

Deutsch, C. V.; Journel, A. G. - 1997 - GSLIB: Geostatistical software library and user's guide. 2<sup>nd</sup> Ed. Oxford University Press. 369 p.

Gomide, C. S. - 2015 - Geoquímica e química mineral de carbonatitos e isótopos estáveis em carbonatitos da Província Ígnea do Alto Paranaíba. Tese de Doutorado. Instituto de Geociências, Universidade de Brasília. 253 p.

Goovaerts, P. - 1997 - Geostatistics for natural resources evaluation. Applied Geostatistics Series. Oxford University Press. 483 p.

Harding, B. E.; Deutsch, C. V. - 2019 - Change of support and the volume variance relation. In J. L. Deutsch (ed.), Geostatistics Lessons. Acesso em <http://geostatisticslessons.com/lessons/changeofsupport>

Hundelshausen, R. J. R. - 2018 - Otimização de parâmetros de krigagem baseada na minimização do erro absoluto e o erro quadrático. Tese de Doutorado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul. 104 p.

Hundelshausen, R. J. R.; Costa, J. F. C. L.; Marques, D. M.; Bassani, M. A. A. - 2018 - Localised kriging parameter optimization based on absolute error minimization. Applied Earth Science. Vol. 127 (4). pp. 153-162.

Isaaks, E. H.; Srivastava, R. M. - 1989 - Introduction to applied Geostatistics. Oxford University Press. 592 p.

Journel, A. G. - 1982 - The indicator approach to estimation of spatial distributions. Proceedings of the 17<sup>th</sup> APCOM International Symposium. Society of Mining Engineers of AIME. New York. pp. 793-806.

Journel, A. G.; Huijbregts, C. J. - 1989 - Mining Geostatistics. Academic Press. 600 p.

Khakestar, M. S.; Madani, H.; Hassani, H.; Moarefvand, P. - 2013 - Determining the best search neighborhood in reserve estimation, using geostatistical method: a case study anomaly no 12A iron deposit in central Iran. Journal of the Geological Society of India. Vol. 81. pp. 581-585.

Krige, D. G. -1951 - A statistical approach to some basic mine valuation problems on the Witwatersrand. The Journal of the South African Institute of Mining and Metallurgy. Vol. 52, no. 6. pp. 119-139.

Krige, D. G. - 1997 - A practical analysis of the effects of spatial structure and of data available and accessed, on conditional biases in ordinary kriging. Geostatistics Wollongong 1996. 5<sup>th</sup> International Geostatistics Congress, Australia. Vol. 1. pp. 799-810.

Matheron, G. - 1963 - Principles of Geostatistics. Economic Geology. Vol. 58. pp. 1.246-1.266.

Nowak, M.; Leuangthong, O. - 2016 - Conditional bias in kriging: let's keep it. Geostatistics Valencia 2016. Quantitative Geology and Geostatistics 19. Springer International Publishing. pp. 303-318.

Olea, R. A. - 1999 - Geostatistics for engineers and Earth scientists. Springer. 303 p.

Oliveira, S. M. B.; Imbernon, R. A. L. - 1998 - Weathering alteration and related REE concentration in the Catalão I carbonatite complex, central Brazil. *Journal of South American Earth Sciences*. Vol. 11. No. 4. pp. 379-388.

Oliver, M. A.; Webster, R. - 2015 - Basic steps in geostatistics: The variogram and kriging. *Springer Briefs in Agriculture*. 100 p.

Ribeiro, C. C. - 2008 - Geologia, geometalurgia, controles e gênese dos depósitos de fósforo, terras raras e titânio do Complexo Carbonatítico Catalão I, GO. Tese de Doutorado. Instituto de Geociências, Universidade de Brasília. 473 p.

Rivoirard, J. - 1987 - Two key parameters when choosing the kriging neighborhood. *Mathematical Geology*. Vol. 19. No. 8. pp. 851-856.

Rossi, M. E.; Deutsch, C. V. - 2014 - Mineral resource estimation. Springer. 332 p.

Sinclair, A. J.; Blackwell, G. H. - 2002 - Applied mineral inventory estimation. Cambridge University Press. 381 p.

Sunday, C. A.; Deutsch, C. V. - 2020 - Choosing the discretization level for block property estimation. In J. L. Deutsch (ed.), *Geostatistics Lessons*. Acesso em <http://geostatisticslessons.com/lessons/discretization>

Vann, J.; Jackson, S.; Bertoli, O. - 2003 - Quantitative kriging neighborhood analysis for the mining geologist: a description of the method with worked case examples. 5<sup>th</sup> International Mining Geology Conference. Vol. 8. pp. 215-223.

Verly, G. - 1983 - The Multigaussian approach and its applications to the estimation of local reserves. *Mathematical Geology*. Vol. 15 (2). pp. 259-286.

Yamamoto, J. K.; Landim, P. M. B. - 2013 - *Geoestatística: Conceitos e Aplicações*. Oficina de Textos. São Paulo. 215 p.

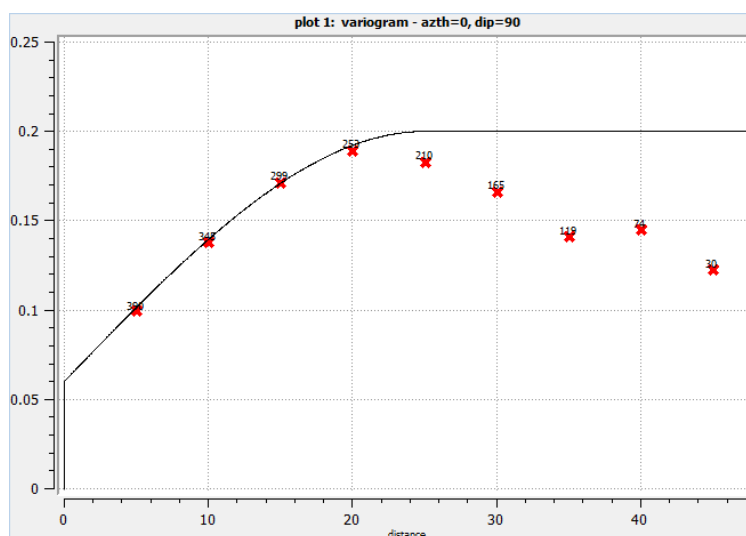


## Apêndice - Análise da continuidade espacial

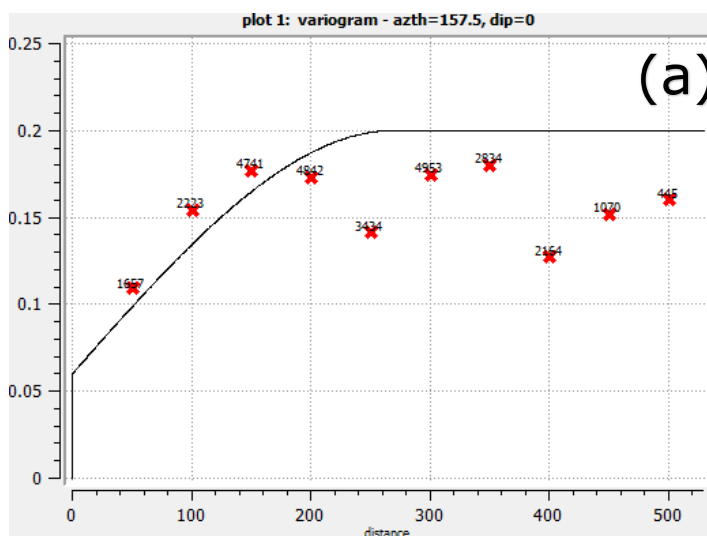
Aqui estão ilustradas as análises de continuidade espacial dos *datasets* do Capítulo 5 - ESTUDOS DE CASO EM 3D.

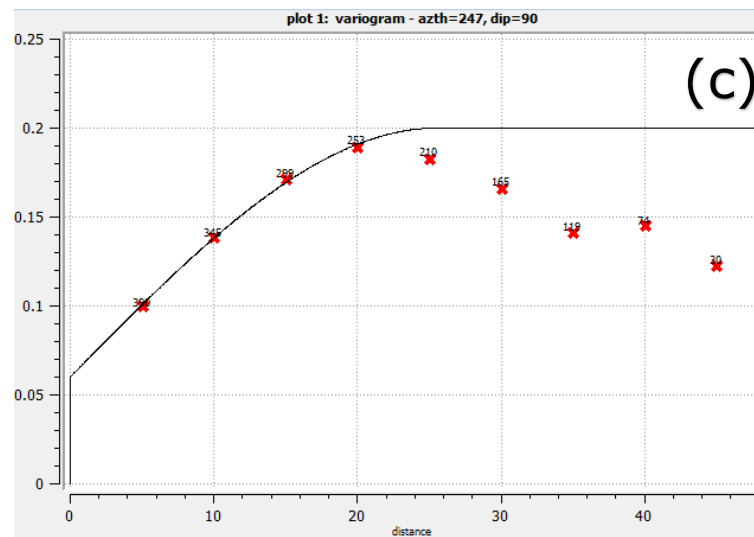
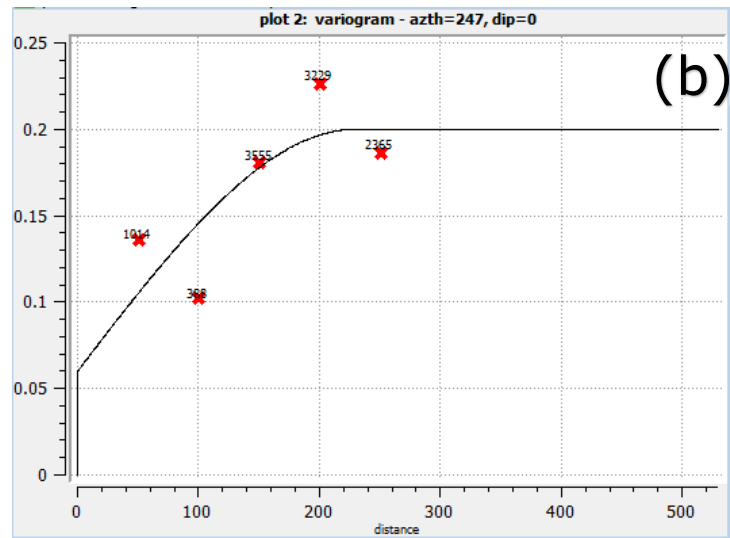
### Capítulo 5.1 - *Dataset 1* -

- 1) Modelagem do efeito pepita (*nugget effect*) pelo variograma experimental *down the hole*:



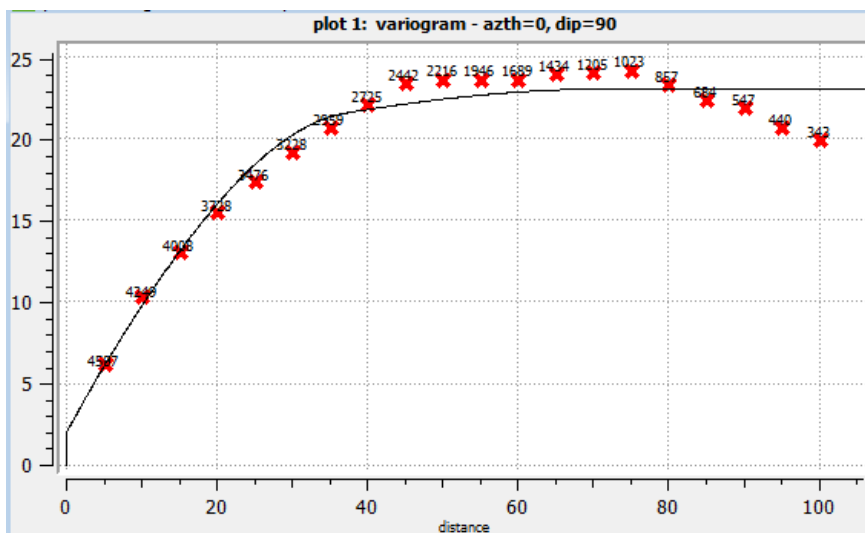
- 2) Modelagem dos variogramas experimentais de maior (a), média (b) e menor (c) continuidade espacial:



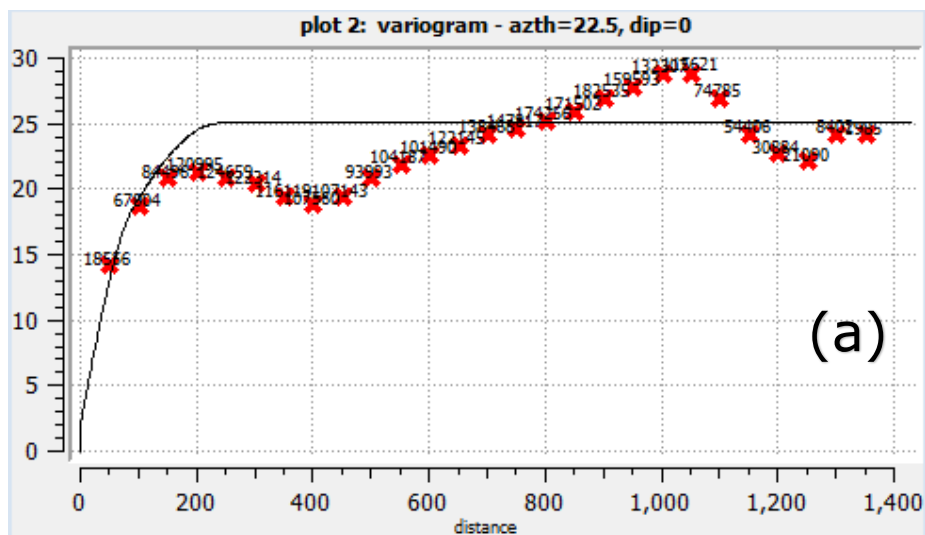


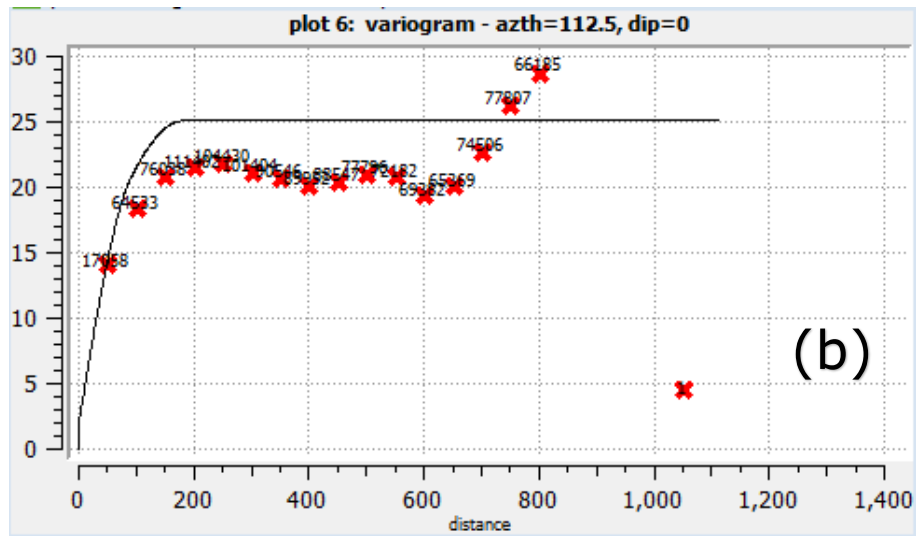
## Capítulo 5.2 - Dataset 2 - Fosfato

- 1) Modelagem do efeito pepita (*nugget effect*) pelo variograma experimental *down the hole* ( $P_2O_5$ ):

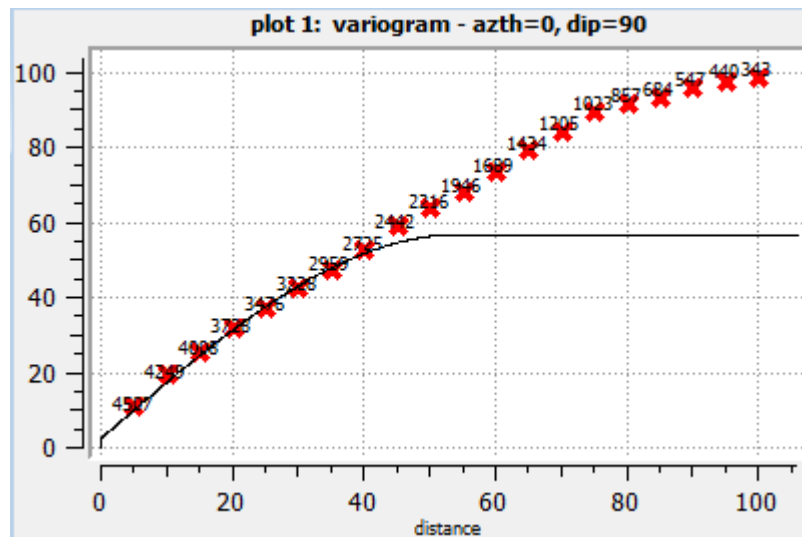


- 2) Modelagem dos variogramas experimentais de maior (a) e média (b) continuidade espacial ( $P_2O_5$ ):





3) Modelagem do efeito pepita (*nugget effect*) pelo variograma experimental *down the hole* (CaO):



4) Modelagem dos variogramas experimentais de maior (a) e média (b) continuidade espacial (CaO):

