

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 (PPGEM)

**ESTUDO DAS METODOLOGIAS ALTERNATIVAS  
DA GEOESTATÍSTICA MULTIVARIADA  
APLICADAS A ESTIMATIVA DE TEORES DE DEPÓSITOS DE  
FERRO**

MARÍA NOEL MORALES BOEZIO

TESE PARA A OBTENÇÃO DO TÍTULO DE  
DOUTOR EM ENGENHARIA

PORTO ALEGRE, RS  
2010

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 (PPGEM)

**ESTUDO DAS METODOLOGIAS ALTERNATIVAS  
DA GEOESTATÍSTICA MULTIVARIADA  
APLICADAS A ESTIMATIVA DE TEORES DE DEPÓSITOS DE  
FERRO**

MARÍA NOEL MORALES BOEZIO  
ENGENHEIRA QUÍMICA

Trabalho realizado no Departamento de Engenharia de Minas da Escola de Engenharia da UFRGS, dentro do Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e Materiais (PPGEM), como requisito para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Metalúrgica Extrativa e Tecnologia Mineral

PORTO ALEGRE, RS  
2010

Esta Tese foi julgada adequada para a obtenção do título de Doutor em Engenharia, área de concentração de Metalurgia Extrativa e Tecnologia Mineral e aprovada em sua forma final pelo Orientado e a Banca Examinadora do Curso de Pós-Graduação.

Orientador:

Prof. Dr. João Felipe Coimbra Leite Costa

Banca Examinadora:

Dr. Miguel Armony

Prof. Dr. Giorgio Di Tomi

Prof. Dr. Jair Carlos Koppe

Prof. Dr. Carlos Bergmann  
Coordenador do PPGEM

“Is simplicity best  
Or simply the easiest  
The narrowest path  
Is always the holiest”.

Martin L. Gore

Aos meus pais

## Agradecimentos

Ao Prof. Dr. João Felipe C. L. Costa, pela orientação nessa tese, a compreensão e o incentivo para eu chegar ao máximo das minhas possibilidades.

Aos Professores Dr. João Felipe C. L. Costa e Dr. Jair C. Koppe, por terem me recebido no LPM e nas suas vidas, me fazendo sentir parte integrante das suas famílias.

À companhia VALE pela disponibilização do banco de dados e auxílio financeiro, em especial ao Dr. Geol. Diniz Ribeiro pelos comentários e material enriquecedores para o meu trabalho.

Ao Prof. Dr. Raimon Tolosana-Delgado, da Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona, Espanha, por ter me apresentado a abordagem da geoestatística aplicada a dados composicionais durante o congresso GEOSTATS 2008, disponibilizando sua tese, artigos e material sobre o assunto e respondendo às minhas dúvidas de forma amável e didática.

Ao Conselho Nacional de Pesquisa e Desenvolvimento Tecnológico CNPq pela bolsa concedida.

Aos colegas e professores do LPM, por gerar um ambiente de trabalho adequado. Em especial a Diego Marques, Hélder Pasti, e os Bolsistas e Iniciação Científica.

Aos colegas e amigos Gustavo Pilger, Luiz Eduardo De Souza, Fernando Gambin, Daiane Folle, Vanessa Koppe e Leandro Oliveira, pelas enriquecedoras conversas sobre os nossos diversos assuntos de pesquisa na área da Geoestatística.

Às minhas queridas amigas do LPM, Daiane Folle, Vanessa Koppe, Vlândia De Souza e Luciana Abichéquer, por serem as minhas companheiras de caminho em Porto Alegre.

Às minhas amigas de Montevideu, pelo carinho, apoio e compreensão das minhas atividades profissionais longe de casa.

Aos meus pais e o meu esposo Nicolás, pelo apoio e amor incondicionais.

Aos meus filhos, Bruno, Mateo y Manuela, que nasceram durante o transcurso dessa tese, dando um sentido completamente diferente à minha vida.

À Deus e Nossa Senhora por terem me acompanhado e dado forças nos momentos difíceis.

## Sumário

|                        |        |
|------------------------|--------|
| Lista de Figuras ..... | xii    |
| Lista de Tabelas ..... | xxviii |
| Resumo .....           | xxxii  |
| Abstract .....         | xxxiv  |

## Capítulo 1

|   |          |
|---|----------|
| <b>Introdução .....</b>   | <b>1</b> |
| 1.1 Cokrigagem .....  | 2        |
| 1.1.1 Simplificações da Cokrigagem .....                              | 3        |
| 1.1.2 Aspectos práticos.....  | 5        |
| 1.2 Metodologias alternativas .....                                   | 8        |
| 1.2.1 Decomposição em Componentes Principais .....                    | 8        |
| 1.2.2 Decomposição em Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos ..... | 9        |
| 1.2.3 Geoestatística de Dados Composicionais .....                    | 11       |
| 1.3 Problema.....   | 15       |
| 1.4 Meta.....   | 15       |
| 1.5 Contribuição da tese.....   | 16       |
| 1.6 Objetivos.....  | 17       |
| 1.7 Metodologia.....  | 17       |
| 1.8 Organização da tese.....  | 18       |

## Capítulo 2

|   |           |
|---|-----------|
| <b>Metodologias da Geoestatística Multivariada: Cokrigagem, Decomposição<br/>MAF, Decomposição PCA e Geoestatística de Dados Composicionais .....</b> | <b>19</b> |
| 2.1 Cokrigagem .....  | 19        |

|         |  |    |
|---------|--|----|
| 2.1.1   | Cokrigagem ordinária .....                                     | 20 |
| 2.1.2   | Modelagem da correionalização .....                            | 22 |
| 2.1.2.1 | Modelo Linear de Correionalização (MLC) .....                  | 22 |
| 2.1.2.2 | Modelo de Correlação Intrínseca (MCI) .....                    | 23 |
| 2.2     | Decomposição em Fatores Independentes .....                    | 25 |
| 2.2.1   | Conceitos básicos de Álgebra .....                             | 25 |
| 2.2.1.1 | Autovalores e autovetores .....                                | 25 |
| 2.2.1.2 | Decomposição espectral.....                                    | 26 |
| 2.2.1.3 | Vetor de médias e matriz de covariâncias.....                  | 26 |
| 2.2.2   | Decomposição em componentes principais (PCA).....              | 29 |
| 2.2.2.1 | Krigagem das Componentes Principais (KPCA).....                | 31 |
| 2.2.2.2 | Ortogonalidade das componentes principais.....                 | 33 |
| 2.2.3   | Fatores de Autocorrelação Mínimos e Máximos (MAF).....         | 34 |
| 2.2.4   | Decomposição MAF: Transformações não lineares .....            | 41 |
| 2.3     | Geoestatística de dados composicionais.....                    | 42 |
| 2.3.1   | Razões logarítmicas .....                                      | 43 |
| 2.3.2   | Razão-logarítmica aditiva (alr).....                           | 44 |
| 2.3.3   | Razão-logarítmica centrada (clr).....                          | 45 |
| 2.3.4   | Variabilidade espacial .....                                   | 46 |
| 2.3.4.1 | Correlação espacial espúria .....                              | 46 |
| 2.3.4.2 | Variabilidade espacial das razões logarítmicas .....           | 47 |
| 2.3.4.3 | Funções de covariâncias da razão logarítmica aditiva alr ..... | 48 |
| 2.3.4.4 | Variabilidade espacial sob a hipótese intrínseca.....          | 49 |
| 2.3.5   | Cokrigagem de razões logarítmicas aditivas alr .....           | 50 |
| 2.3.6   | Presença de zeros no banco de dados .....                      | 51 |

## Capítulo 3

### Abordagem Clássica: apresentação do banco de dados, análise estatística

#### exploratória e cokrigagem ordinária.....52

|     |  |    |
|-----|--|----|
| 3.1 | Descrição da área de estudo .....                | 52 |
| 3.2 | Tipos de minério de ferro no Complexo Pico ..... | 55 |
| 3.3 | Análise estatística exploratória .....           | 58 |



|     |   |    |
|-----|---|----|
| 3.4 | Análise da variabilidade espacial conjunta e cokrigagem ordinária ..... | 67 |
| 3.5 | Pós-processamento das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária..... | 73 |

## Capítulo 4

### **Krigagem ordinária de fatores independentes: Fatores de Autocorrelação**

#### **Mínimos/Máximos (MAF) e Componentes Principais (PCA).....77**

|       |   |    |
|-------|---|----|
| 4.1   | Metodologias de fatorização MAF e PCA .....   | 77 |
| 4.1.1 | Krigagem Ordinária de Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF) .....                 | 78 |
| 4.1.2 | Krigagem Ordinária de Componentes Principais (PCA).....                                     | 90 |
| 4.2   | Análise parcial dos resultados provenientes das decomposições em fatores MAF e<br>PCA ..... | 99 |

## Capítulo 5

### **Geoestatística de Dados Composicionais: Cokrigagem de Razões-**

#### **Logarítmicas Aditivas (alr) .....102**

|       |   |     |
|-------|---|-----|
| 5.1   | Condições de soma constante .....   | 102 |
| 5.2   | Definição da rota de cálculo .....  | 104 |
| 5.2.1 | Transformação em razões-logarítmicas aditivas (alr) .....   | 104 |
| 5.2.2 | Alternativas de rotas de cálculo .....  | 105 |
| 5.3   | Estimativa das variáveis de interesse nas faixas 1, 2, 3 e global: Cokrigagem<br>Ordinária das razões-logarítmicas aditivas (alr) ..... | 108 |
| 5.3.1 | Estimativa das massas das partições granulométricas.....  | 108 |
| 5.3.2 | Estimativa dos teores de ferro .....  | 113 |
| 5.3.3 | Estimativa dos teores de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e<br>sílica .....  | 115 |
| 5.3.4 | Estimativa dos teores globais .....   | 118 |
| 5.4   | Estimativa das variáveis de interesse nas faixas 21 e 22: caso particular do banco<br>de dados do estudo de caso .....                  | 121 |
| 5.4.1 | Estimativa das massas das partições granulométricas.....  | 121 |
| 5.4.2 | Estimativa dos teores nas faixas 21 e 22 .....  | 122 |
| 5.5   | Análise parcial dos resultados .....  | 125 |

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 5.5.1 | Fechamentos dos balanços utilizados para a estimativa dos teores nas faixas 1, 2, 3 e global ..... | 126 |
| 5.5.2 | Fechamentos dos balanços utilizados para a estimativa dos teores nas faixas 21e 22 .....           | 134 |

## Capítulo 6

|   |  |     |
|---|--|-----|
| <b>Análise e Discussão de Resultados.....</b> | <b>141</b>   |     |
| 6.1   | Blocos pós-processados.....                                    | 142 |
| 6.2   | Reprodução da média global .....                               | 144 |
| 6.3   | Análise de deriva.....   | 148 |
| 6.3.1   | Teores globais .....   | 148 |
| 6.3.2   | Massa das frações granulométricas .....                        | 149 |
| 6.3.3   | Teores e massa na faixa 1 .....                                | 156 |
| 6.4   | Estimativas bloco a bloco: diagramas de dispersão .....        | 161 |
| 6.4.1   | Teores globais .....   | 161 |
| 6.4.2   | Massa das frações granulométricas .....                        | 165 |
| 6.4.3   | Teores e massa na faixa 1 .....                                | 167 |
| 6.5   | Mapas das estimativas.....                                     | 171 |
| 6.5.1   | Teores globais .....   | 172 |
| 6.5.2   | Massas das frações granulométricas.....                        | 189 |
| 6.5.3   | Teores e massa na fração 1 .....                               | 198 |
| 6.6   | Fechamento dos balanços estequiométricos.....                  | 207 |
| 6.7   | Discussão comparativa das metodologias utilizadas.....         | 213 |
| 6.7.1   | Cokrigagem ordinária .....                                     | 214 |
| 6.7.2   | Decomposição em Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos..... | 215 |
| 6.7.3   | Cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas .....    | 217 |
| 6.7.4   | Considerações gerais .....                                     | 217 |

## Capítulo 7

### **Conclusões .....219**

|       |  |     |
|-------|--|-----|
| 7.1   | Conclusões .....                                   | 219 |
| 7.1.1 | Problema.....                                      | 219 |
| 7.1.2 | Conclusão Inicial .....                            | 220 |
| 7.1.3 | Conclusões referentes aos objetivos propostos..... | 221 |
| 7.2   | Recomendações para trabalhos futuros .....         | 225 |
| 7.3   | Considerações finais .....                         | 227 |

### **Referências Bibliográficas .....229**

### **Apêndices .....235**

- Apêndice A: Análise estatística exploratória: histogramas, diagramas de dispersão e coeficientes de correlação
- Apêndice B: Análise e modelagem da continuidade espacial para a abordagem clássica da Cokrigagem
- Apêndice C: Histogramas, Análise da Correlação Espacial e Modelos Variográficos dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos MAF
- Apêndice D: Histogramas, Análise da Correlação Espacial e Modelos Variográficos das Componentes Principais PCA
- Apêndice E: Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores MAF e por Krigagem Ordinária das Componentes Principais PCA
- Apêndice F: Histogramas e Modelos Lineares de Corregionalização das Razões-Logarítmicas Aditivas (alr)
- Apêndice G: Gráficos Correspondentes à Análise e Discussão de Resultados
- Apêndice H: Análise da Presença de Viés nas estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos

## Lista de Figuras

- Figura 1.1 – Configuração espacial dos dados no caso de cokrigagem colocada estrita com dados secundários presentes nos nós da malha (a) e cokrigagem multicolocada com dados secundários presentes nos nós da malha e nos locais amostrados para a variável primária (b)..... 4
- Figura 1.2 –Variáveis dos depósitos poli-metálicos complexos presentes em q faixas granulométricas. A correlação para uma mesma espécie presente em diferentes faixas granulométricas (quadro vermelho, a) é maior que para as diferentes espécies na mesma fração granulométrica (quadro azul, b)..... 6
- Figura 1.3 – Variáveis dos depósitos polimetálicos apresentam dependência linear entre si dada pelas relações estequiométricas entre as espécies químicas presentes em cada faixa granulométrica (vermelho) e pelos balanços de massa entre as frações granulométricas (azul). ..... 6
- Figura 3.1 – Mapa de localização do Complexo Pico, formado pelas minas de Galinheiro, Pico e Sapecado, no setor oeste do Quadrilátero Ferrífero, no estado de Minas Gerais..... 53
- Figura 3.2 – Planta no plano XY das áreas estimadas do Complexo Pico, realizado em coordenadas locais, rotadas em relação as coordenadas UTM, alinhados com a direção principal do corpo de minério. .... 54
- Figura 3.3 – Exemplificação do modelo de blocos da litologia (10 x 10 x 10m) e do modelo de blocos para a estimativa de teores (50 x 20 x 10 m), indicando, a modo de exemplo, a porcentagem das litologias HM, IB e IBLI que conformam os blocos de teores (30, 40 e 30%, respectivamente)..... 56
- Figura 3.4- Mapas de localização das amostras no domínio geoestatístico IB, projetados nos planos (a) XY, (b) XZ e (c) YZ do sistema de coordenadas rotado na direção principal do corpo de minério, mostrando o teor global correspondente ao ferro (FET) em porcentagem..... 60
- Figura 3.5 - Mapas de localização das amostras no domínio geoestatístico IB, na faixa 21, projetados nos planos (a) XY, (b) XZ e (c) YZ do sistema de coordenadas rotado na

|   |    |
|---|----|
| direção principal do corpo de minério, mostrando o teor correspondente ao ferro sem acumular, (FE21D) em percentagem (letra D, teor desacumulado).....  | 61 |
| Figura 3.6 – Histograma dos dados desagrupados correspondentes ao teor global de ferro (FET).....   | 62 |
| Figura 3.7 - Diagramas de dispersão das variáveis originais no global (ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT). .....  | 65 |
| Figura 3.8 - Diagramas de dispersão da alumina acumulada nas diferentes faixas granulométricas e no global (AL1, AL2, AL21, AL22C, AL3 e ALT). .....  | 66 |
| Figura 3.9 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para a alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global (AL2, AL21, AL3 e ALT, respectivamente) e a equação do modelo correspondente, indicando os alcances de cada estrutura esférica ( <i>Sph</i> ) nas principais direções de anisotropia. .... | 71 |
| Figura 3.10 – Esquema de obtenção das estimativas por cokrigagem ordinária das variáveis nos subgrupos considerados, posterior determinação dos teores da faixa 1 e pós-processamento das estimativas nos blocos incorretos (fora do intervalo original das amostras).....  | 76 |
| Figura 4.1 – Histograma do fator MAF1_AL_IB, obtido a partir dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global.....  | 82 |
| Figura 4.2 – Variogramas diretos (na diagonal principal) e cruzados dos fatores MAF obtidos a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global. ....   | 83 |
| Figura 4.3 – Diagramas de dispersão para os fatores MAF obtidos a partir da decorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando a correlação nula ( $\rho=0,000$ ) para o vetor de separação nulo ( $h=0$ ). ....  | 84 |
| Figura 4.4 – Variogramas direcionais, experimentais e modelados, correspondentes aos fatores MAF, obtidos a partir da decorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, junto com as Equações dos variogramas, constituídos por um efeito pepita e duas estruturas esféricas <i>Sph</i> . ....                                   | 85 |
| Figura 4.5 – Esquema das etapas para a obtenção das estimativas a partir da krigagem individual de fatores MAF ou de componentes principais PCA.....  | 89 |
| Figura 4.6 – Histograma do fator PCA1_FE_IB, obtido a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.....  | 93 |
| Figura 4.7 – Variogramas diretos (na diagonal principal) e cruzados das componentes PCA obtidas a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.....  | 94 |

- Figura 4.8 – Diagramas de dispersão para as componentes principais PCA obtidas a partir da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando a correlação nula ( $\rho=0,000$ ) para o vetor de separação nulo ( $h=0$ ). ..... 95
- Figura 4.9 – Variogramas direcionais, experimentais e modelados, correspondentes às componentes PCA, obtidas a partir da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, junto com as Equações dos variogramas, constituídos por um efeito pepita e duas estruturas esféricas *Sph*. ..... 96
- Figura 4.10 - Diagrama de dispersão do teor de ferro global (FET) obtido por krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF) vs. o teor obtido por krigagem ordinária das componentes principais PCA (FET\_PCA). ..... 100
- Figura 5.1 – Rota de cálculo para a determinação dos teores de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação, sílica e massa das partições granulométricas nas faixas 1, 2, 3 e global, utilizando a análise de dados composicionais. Os teores de ferro globais FET(u) e FET2(u) são diferentes, escolhendo-se o teor FET(u) como válido, satisfazendo o balanço de massa..... 107
- Figura 5.2 – Rota de cálculo para determinar os teores de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação, sílica e as massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 21 e 22. .... 108
- Figura 5.3 - Rota de cálculo hipotética para a determinação dos teores de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação, sílica e massa das partições granulométricas nas faixas 1, 2, 21, 22, 3 e global, utilizando a análise de dados composicionais, se o banco de dados fosse isotópico e o ferro não estivesse expresso como complementar ao teor máximo. .... 109
- Figura 5.4 – Histogramas das razões-logarítmicas (a)  $Y_{1BW}(u)$  e (b)  $Y_{2BW}(u)$ . ..... 110
- Figura 5.5 - Modelo de correção ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logartítmicas alr  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$ , correspondentes à massa das partições granulométricas das faixas 1, 2 e 3, utilizando a massa na fração 3 ( $W3(u)$ ) no denominador e as massas nas faixas 1 e 2 ( $W1(u)$  e  $W2(u)$ ) no numerador, respectivamente. .... 112
- Figura 5.6 – Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, das massas das partições granulométricas nas faixas 1, 2 e 3,  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (3.1). .... 128

- Figura 5.7 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de ferro nas faixas 1, 2, 3 e global  $FE1YD(u)$ ,  $FE2YD(u)$ ,  $FE3YD(u)$  e  $FETY(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (5.6). ..... 129
- Figura 5.8 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores globais de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica  $ALTY(u)$ ,  $FETY2(u)$ ,  $MNTY(u)$ ,  $PTY(u)$ ,  $PPCTY(u)$  e  $SITY(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (3.15). ..... 130
- Figura 5.9 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores globais de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica  $ALTY(u)$ ,  $MNTY(u)$ ,  $PTY(u)$ ,  $PPCTY(u)$  e  $SITY(u)$ , respectivamente, e o teor de ferro  $FETY(u)$ , segundo a Equação (3.15). ..... 130
- Figura 5.10 – Diagrama de dispersão dos teores globais de ferro  $FETY(u)$  vs.  $FETY2(u)$  determinados a partir dos balanços das Equações (5.6) e (5.13), respectivamente. 131
- Figura 5.11 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de alumina nas faixas 1, 2 e 3,  $AL1YD(u)$ ,  $AL2YD(u)$  e  $AL3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.8) que incorpora o teor global  $ALTY(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ . ..... 131
- Figura 5.12 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de manganês nas faixas 1, 2 e 3,  $MN1YD(u)$ ,  $MN2YD(u)$  e  $MN3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.9) que incorpora o teor global  $MNTY(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ . ..... 132
- Figura 5.13 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de fósforo nas faixas 1, 2 e 3,  $P1YD(u)$ ,  $P2YD(u)$  e  $P3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.10) que incorpora o teor global  $PTY(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ . ..... 132
- Figura 5.14 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores das perdas por calcinação nas faixas 1, 2 e 3,  $PPC1YD(u)$ ,  $PPC2YD(u)$  e  $PPC3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.11), que incorpora o teor global  $PPC_TY(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ . ..... 133

- Figura 5.15 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de sílica nas faixas 1, 2 e 3,  $SI1YD(u)$ ,  $SI2YD(u)$  e  $SI3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.12), que incorpora o teor global  $SI_{TY}(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ . ..... 133
- Figura 5.16 - Histograma da soma das estimativas ( $BW21\_2$ ), obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, das massas das partições granulométricas nas faixas 1, 21, 22 e 3,  $W1Y2(u)$ ,  $W21Y(u)$ ,  $W22Y(u)$  e  $W3Y2(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (3.8). ..... 134
- Figura 5.17 - Histograma da soma das estimativas ( $BW21$ ), obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, das massas das partições granulométricas nas faixas 1, 21, 22 e 3,  $W1Y(u)$ ,  $W21Y(u)$ ,  $W22Y(u)$  e  $W3Y(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (5.7). ..... 135
- Figura 5.18 – Diagramas de dispersão das massas estimadas a partir dos balanços das Equações (3.1) e (5.7): (a)  $W1Y(u)$  vs.  $W1Y2(u)$ , (b)  $W3Y(u)$  vs.  $W3Y2(u)$ . ..... 136
- Figura 5.19 - Diagramas de dispersão dos teores de alumina na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.1) ( $AL2YD$ ) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.9) ( $AL2YD2$ ). ..... 137
- Figura 5.20 - Diagramas de dispersão dos teores de ferro na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.6) ( $FE2YD$ ) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.10) ( $FE2YD2$ ). ..... 137
- Figura 5.21 - Diagramas de dispersão dos teores de manganês na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.2) ( $MN2YD$ ) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.11) ( $MN2YD2$ ). ..... 138
- Figura 5.22 - Diagramas de dispersão dos teores de fósforo na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.3) ( $P2YD$ ) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.12) ( $P2YD2$ ). ..... 138
- Figura 5.23 - Diagramas de dispersão das perdas por calcinação na faixa 2, estimadas a partir do balanço da Equação (5.4) ( $PPC2YD$ ) e calculadas a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.13) ( $PPC2YD2$ ). ..... 139
- Figura 5.24 - Diagramas de dispersão dos teores de sílica faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.5) ( $SI2YD$ ) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.14) ( $SI2YD2$ ). ..... 139



- Figura 5.25 - Diagramas de dispersão das massas da faixa 2, estimadas a partir do balanço da Equação (3.1) ( $W2Y$ ) e calculadas a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.8) ( $W2cY$ ). ..... 140
- Figura 6.1 – Média desagrupada do teor de sílica global (SIT), dependendo do tamanho da célula escolhida no arquivo de parâmetros do programa DECLUS da biblioteca GSLIB (Deutsch e Journel, 1998) (anisotropia da célula:  $X=1$ ,  $Y=0,4$  e  $Z=0,2$ ). ..... 148
- Figura 6.2 – Diagramas de análise de deriva para o teor global de alumina (ALT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 151
- Figura 6.3 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de ferro (FET) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 151
- Figura 6.4 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de manganês (MNT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 152
- Figura 6.5 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de fósforo (PT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 152
- Figura 6.6 - Diagramas de análise de deriva para o teor global das perdas por calcinação (PPCT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 153
- Figura 6.7 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de sílica (SIT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das

estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.) ..... 153

Figura 6.8 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 2 (W2) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 154

Figura 6.9 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 21 (W21) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 154

Figura 6.10 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 3 (W3) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 155

Figura 6.11 - Diagramas de análise de deriva para o teor de alumina na faixa 1 (AL1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 157

Figura 6.12 - Diagramas de análise de deriva para o teor de ferro na faixa 1 (FE1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 157

Figura 6.13 - Diagramas de análise de deriva para o teor de manganês na faixa 1 (MN1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 158

- Figura 6.14 - Diagramas de análise de deriva para o teor de fósforo na faixa 1 (P1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 158
- Figura 6.15 - Diagramas de análise de deriva para o teor das perdas por calcinação na faixa 1 (PPC1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 159
- Figura 6.16 - Diagramas de análise de deriva para o teor de sílica na faixa 1 (SI1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 159
- Figura 6.17 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 1 (W1) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.). ..... 160
- Figura 6.18 – Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de alumina obtidas por cokrigagem ordinária (ALT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (ALT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY). ..... 162
- Figura 6.19 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de ferro obtidas por cokrigagem ordinária (FET\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FET\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY). ..... 162
- Figura 6.20 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de manganês obtidas por cokrigagem ordinária (MNT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MNT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY). ..... 163

- Figura 6.21 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de fósforo obtidas por cokrigagem ordinária (PT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY). ..... 163
- Figura 6.22 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global das perdas por calcinação obtidas por cokrigagem ordinária (ALT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (ALT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY). ..... 164
- Figura 6.23 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de sílica obtidas por cokrigagem ordinária (SIT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SIT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY). ..... 164
- Figura 6.24 - Diagramas de dispersão das estimativas da massa da fração 2, obtidas por cokrigagem ordinária (W2\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W2\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2TY). ..... 165
- Figura 6.25 - Diagramas de dispersão das estimativas da massa da fração 21, obtidas por cokrigagem ordinária (W21\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W21\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21TY). ..... 166
- Figura 6.26 - Diagramas de dispersão das estimativas da massa da fração 3, obtidas por cokrigagem ordinária (W3\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W3\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3TY). ..... 166
- Figura 6.27 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de alumina na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (AL1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (AL1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (AL1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL1YD). ..... 167
- Figura 6.28 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de ferro na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (FE1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FE1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FE1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE1YD). ..... 168

- Figura 6.29 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de manganês na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (MN1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MN1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MN1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN1YD). ..... 168
- Figura 6.30 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de fósforo na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (P1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (P1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (P1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P1YD). .. 169
- Figura 6.31 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor das perdas por calcinação na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (PPC1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PPC1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PPC1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC1YD). ..... 169
- Figura 6.32 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor da sílica na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (SI1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SI1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (SI1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI1YD).. 170
- Figura 6.33 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) da massa da faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (W1C\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W1C\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W1C\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y). .... 170
- Figura 6.34 – Planos escolhidos para apresentar os mapas das estimativas: (a) plano XY em Z=1345m, (b) plano XZ em Y=1360m, (c) plano YZ em X=-6350m. .... 171
- Figura 6.35 – Mapas das estimativas do teor de alumina global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (ALT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (ALT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY), e (e) o mapa das amostras (ALT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m). ..... 173
- Figura 6.36 - Mapas das estimativas do teor de alumina global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (ALT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (ALT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY), e (e) o mapa das amostras (ALT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m). ..... 173

- Figura 6.37 - Mapas das estimativas do teor de alumina global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (ALT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (ALT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY), e (e) o mapa das amostras (ALT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ )..... 174
- Figura 6.38 - Mapas das estimativas do teor de ferro global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FET\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY), e (e) o mapa das amostras (FET) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ). ..... 175
- Figura 6.39 - Mapas das estimativas do teor de ferro global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FET\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY), e (e) o mapa das amostras (FET) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ )..... 176
- Figura 6.40 - Mapas das estimativas do teor de ferro global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FET\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY), e (e) o mapa das amostras (FET) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ )..... 177
- Figura 6.41 - Mapas das estimativas do teor de manganês global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MNT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MNT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY), e (e) o mapa das amostras (MNT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ). ..... 178
- Figura 6.42 - Mapas das estimativas do teor de manganês global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MNT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MNT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY), e (e) o mapa das amostras (MNT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ )..... 179
- Figura 6.43 - Mapas das estimativas do teor de manganês global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MNT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MNT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária

das razões-logarítmicas aditivas (MNTY), e (e) o mapa das amostras (MNT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=6350\text{m}$ )..... 180

Figura 6.44 - Mapas das estimativas do teor de fósforo global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY), e (e) o mapa das amostras (PT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ). ..... 181

Figura 6.45 - Mapas das estimativas do teor de fósforo global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY), e (e) o mapa das amostras (PT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ )..... 182

Figura 6.46 - Mapas das estimativas do teor de fósforo global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY), e (e) o mapa das amostras (PT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=6350\text{m}$ )..... 183

Figura 6.47 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação globais, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPCT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPCT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPCT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPCTY), e (e) o mapa das amostras (PPCT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ )..... 184

Figura 6.48 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação globais, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPCT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPCT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPCT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPCTY), e (e) o mapa das amostras (PPCT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ )..... 185

Figura 6.49 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação globais, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPCT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPCT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPCT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPCTY), e (e) o mapa das

- amostras (PPCT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350m$ )..... 186
- Figura 6.50 - Mapas das estimativas do teor de sílica global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SIT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SIT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY), e (e) o mapa das amostras mais próximas (SIT) à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345m$ ). ..... 187
- Figura 6.51 - Mapas das estimativas do teor de sílica global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SIT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SIT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY), e (e) o mapa das amostras mais próximas (SIT) à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360m$ ). ..... 188
- Figura 6.52 - Mapas das estimativas do teor de sílica global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SIT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SIT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY), e (e) o mapa das amostras mais próximas (SIT) à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350m$ ). ..... 189
- Figura 6.53 - Mapas das estimativas da massa da fração 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W2\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W2\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2Y), e (e) o mapa das amostras (W2) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345m$ ). ..... 190
- Figura 6.54 - Mapas das estimativas da massa da fração 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W2\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W2\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2Y), e (e) o mapa das amostras (W2) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360m$ ). ..... 191
- Figura 6.55 - Mapas das estimativas da massa da fração 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W2\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W2\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2Y), e (e) o mapa das amostras (W2) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350m$ ). ..... 192
- Figura 6.56 - Mapas das estimativas da massa da fração 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W21\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W21\_MAF), (c)



krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21Y), e (e) o mapa das amostras (W21) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m). ..... 193

Figura 6.57 - Mapas das estimativas da massa da fração 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W21\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W21\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21Y), e (e) o mapa das amostras (W21) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m). ..... 194

Figura 6.58 - Mapas das estimativas da massa da fração 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W21\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W21\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21Y), e (e) o mapa das amostras (W21) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada (X=-6350m). ..... 195

Figura 6.59 - Mapas das estimativas da massa da fração 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W3\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W3\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3Y), e (e) o mapa das amostras (W3) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m). ..... 196

Figura 6.60 - Mapas das estimativas da massa da fração 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W3\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W3\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3Y), e (e) o mapa das amostras (W3) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m). ..... 197

Figura 6.61 - Mapas das estimativas da massa da fração 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W3\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W3\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3Y), e (e) o mapa das amostras (W3) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada (X=-6350m). ..... 198

Figura 6.62 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (AL1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (AL1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (AL1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL1YD), e (e) o mapa das amostras (AL1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m). ..... 199

- Figura 6.63 - Mapas das estimativas do teor de ferro na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FE1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FE1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FE1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE1YD), e (e) o mapa das amostras (FE1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m)..... 200
- Figura 6.64 - Mapas das estimativas do teor de manganês na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MN1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MN1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MN1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN1YD), e (e) o mapa das amostras (MN1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m)..... 201
- Figura 6.65 - Mapas das estimativas do teor de fósforo na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (P1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (P1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (P1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P1YD), e (e) o mapa das amostras (P1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m)..... 202
- Figura 6.66 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPC1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPC1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPC1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC1YD), e (e) o mapa das amostras (PPC1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m)..... 203
- Figura 6.67 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SI1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SI1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SI1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI1YD), e (e) o mapa das amostras (SI1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m)..... 204
- Figura 6.68 - Mapas das estimativas da massa da fração 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W1\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W1\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W1\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y), e (e) o mapa das amostras (W1) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m). ..... 205

- Figura 6.69 - Mapas das estimativas da massa da fração 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W1\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W1\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W1\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y), e (e) o mapa das amostras (W1) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m)..... 206
- Figura 6.70 - Mapas das estimativas da massa da fração 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W1\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W1\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W1\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y), e (e) o mapa das amostras (W1) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada (X=-6350m)..... 207
- Figura 6.71 – Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores globais obtidos por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr..... 209
- Figura 6.72 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores estimados na faixa 2 por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr..... 210
- Figura 6.73 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores estimados na faixa 21 por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr..... 211
- Figura 6.74 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores estimados na faixa 3 por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr..... 212
- Figura 6.75 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado com os teores da faixa 1 calculados a partir das estimativas obtidas por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr..... 213
- Figura 6.76 – Diagrama ternário para a composição de três partes [W1(u), W2(u),W3(u)], representada pelo ponto P..... 215

## Lista de Tabelas

|  |    |
|--|----|
| Tabela 3.1 – Denominações dos diferentes tipos de minério de ferro presentes no Complexo Pico, e o intervalo de valores do teor de cabeça do ferro (global), indicando em cinza os litotipos que compõem o domínio geoestatístico IB. Adaptado de Spier et. al (2004)..... | 57 |
| Tabela 3.2 – Frações granulométricas e tamanhos de partículas associados.....  | 58 |
| Tabela 3.3 – Variáveis analisadas no domínio IB, e a sua denominação ao longo da tese, onde o subíndice i corresponde-se com as frações granulométricas 1, 2, 21, 22 e 3 e o global (i=1, 2, 21, 22, 3 eT), respectivamente. ....  | 59 |
| Tabela 3.4 – Estatísticas básicas dos dados originais e dos dados desagrupados, sem acumular (letra D), nas faixas granulométricas 1, 2, 21, 22 (calculado, letra C), 3 e total T (teor global). ....  | 63 |
| Tabela 3.5 - Estatísticas básicas dos dados originais e dos dados desagrupados, acumulados, nas faixas granulométricas 1, 2, 21, 22 (calculado, letra C) e 3.....  | 64 |
| Tabela 3.6 - Coeficientes de correlação das variáveis originais no global (ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT). ....  | 65 |
| Tabela 3.7 - Coeficientes de correlação da alumina acumulada nas diferentes faixas granulométricas e no global (AL1, AL2, AL21, AL22C, AL3 e ALT). ....  | 67 |
| Tabela 3.8 – Subgrupos de variáveis utilizadas nos sistemas de cokrigagem ordinária. ....  | 69 |
| Tabela 3.9 - Matrizes de correionalização para o modelo linear de correionalização ( $C_0$ , $C_1$ e $C_2$ ) da alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global (AL2, AL21, AL3 e ALT, respectivamente).....   | 72 |
| Tabela 3.10 – Parâmetros das vizinhança e estratégia de busca para os sistemas de cokrigagem ordinária.....  | 72 |
| Tabela 3.11 – Estatísticas das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), desacumuladas (letra D), sem pós-processar (sub-índice s/pp), indicando o número de blocos que estão fora do intervalo original das amostras, incluso com                                |    |

|   |    |
|---|----|
| valores negativos (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados.....   | 74 |
| Tabela 3.12 – Estatísticas das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), desacomuladas (letra D), pós-processadas substituindo os valores incorretos (fora dos intervalos originais) por médias locais.....  | 75 |
| Tabela 4.1 – Subgrupos de variáveis consideradas para descorrelacionar até $h=\Delta$ , utilizando a decomposição em fatores MAF.....   | 80 |
| Tabela 4.2 – Estatísticas básicas dos fatores MAF obtidos a partir dos dados originais, nos diferentes subgrupos.....   | 81 |
| Tabela 4.3 – Estatísticas das estimativas desacomuladas (letra D), sem pós-processar (sub-índice s/pp), obtidas por krigagem independente dos fatores MAF, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C), indicando o número de blocos fora do intervalo original das amostras, incluso com valores negativos (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados.....                 | 87 |
| Tabela 4.4 – Estatísticas das estimativas desacomuladas (letra D), pós-processadas, obtidas por krigagem independente dos fatores MAF, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C).....   | 88 |
| Tabela 4.5 – Subgrupos de variáveis consideradas para descorrelacionar para $h=0$ , utilizando a decomposição em componente principais, PCA. ....   | 91 |
| Tabela 4.6 – Estatísticas básicas das componentes PCA obtidas a partir dos dados originais, nos diferentes subgrupos. ....  | 92 |
| Tabela 4.7 – Estatísticas das estimativas desacomuladas (letra D), sem pós-processar (sub-índice s/pp), obtidas por krigagem independente das componentes principais PCA, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C), indicando o número de blocos fora do intervalo original das amostras, incluso com valores negativos (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados. .... | 97 |
| Tabela 4.8 – Estatísticas das estimativas desacomuladas (letra D), pós-processadas, obtidas por krigagem independente das componentes PCA, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C).....   | 98 |
| Tabela 5.1 – Matrizes de correionalização para o modelo linear de correionalização das razões-logartítmicas alr $Y1BW(u)$ e $Y2BW(u)$ , correspondentes à massa das partições granulométricas nas faixas 1, 2 e 3, utilizando a massa na fração 3   |    |

|  |     |
|--|-----|
| (W3(u)) no denominador e as massas nas faixas 1 e 2 (W1(u) e W2(u)) no numerador, respectivamente.....   | 111 |
| Tabela 5.2 – Parâmetros das vizinhança e estratégia de busca para os sistemas de cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas Y1BW(u) e Y2BW(u), alinhado com o elipsóide de anisotropia nas direções N68º, N158º e D-90º.....  | 113 |
| Tabela 5.3 – Estatísticas das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, desacomuladas (letra D), indicando o número de blocos que estão fora do intervalo original das amostras, (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados. .... | 127 |
| Tabela 6.1 – Número e porcentagens de blocos incorretos (fora do intervalo original das amostras ou negativos) para as metodologias cokrigagem (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF e krigagem ordinária das componentes PCA. O subíndice s/pp indica que as variáveis estimadas estão sem pós-processar. ....     | 146 |
| Tabela 6.2 – Porcentagens de afastamento das médias das estimativas da média original desagrupada (CK – cokrigagem ordinária, MAF – krigagem ordinária dos fatores MAF, PCA – krigagem ordinária das componentes principais, Y – cokrigagem ordinária das razões logarítmicas aditivas alr.....                        | 147 |

## Resumo

Os investimentos e o planejamento econômico na mineração requerem o entendimento, quantificação e avaliação de riscos na determinação de teores e tonelagens de minério. O planejamento de lavra e as operações em usinas de beneficiamento também requerem a estimativa de teores e tonelagens.

A geoestatística proporciona as ferramentas necessárias para realizar essas estimativas utilizando adaptações das técnicas clássicas de regressão.

O minério de ferro, assim como o de manganês, são exemplos de casos nos quais é necessário determinar múltiplas variáveis para a caracterização do minério, de modo tal, que os teores nos modelos de blocos dos depósitos satisfaçam os balanços de massa entre as frações granulométricas e a estequiometria para as espécies químicas dos dados originais.

Esses sistemas são altamente complexos, apresentando múltiplas variáveis correlacionadas e sendo, portanto, apropriados para serem abordados com a utilização de técnicas geoestatísticas multivariadas.

Apesar de a cokrigagem apresentar um estimador que desde o ponto de vista teórico é não tendencioso e que minimiza a variância do erro, nos casos de depósitos complexos, com um número elevado de variáveis relacionadas por várias somas constantes, apresenta uma série aspectos problemáticos: (i) estimativas fora do intervalo original das amostras e/ou negativas que precisam ser pós-processadas; (ii) a não satisfação, por parte dos teores estimados, dos balanços de massa e estequiométricos (somas constantes), sendo necessária a distribuição do erro ou carregá-lo em uma variável que seja determinada a partir dessas relações; (iii) dificuldades na modelagem da correogionalização que faz necessários softwares que consigam dar satisfação às condições de definição positiva impostas pelo Modelo Linear de Correogionalização e (iv) modelos variográficos que não se ajustam adequadamente aos variogramas experimentais diretos e cruzados.

Essa tese aborda metodologias da geoestatística multivariada, alternativas à cokrigagem, no caso de um depósito de ferro, com um número elevado de variáveis presentes em diversas faixas granulométricas, correlacionadas espacialmente e que satisfazem várias relações de soma constante simultaneamente.

Inicialmente, é aplicada a decomposição em Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF), uma metodologia semelhante à decomposição em Componentes Principais (PCA), que propõe descorrelacionar as variáveis até um vetor de separação pequeno, geralmente coincidente com o espaçamento amostral ou com o alcance da primeira estrutura do variograma, evitando assim a modelagem da correionalização, determinando cada fator de forma independente e posteriormente retro-transformando-o ao espaço original. Nessa tese os fatores são estimados por krigagem ordinária como uma metodologia de estimativa simples e rápida, porém aproximada, já que a transformação MAF inclui uma etapa de normalização das informações originais, o que constitui uma transformação não linear.

A metodologia fornece resultados adequados, não sendo necessária a utilização de softwares específicos para a modelagem da correionalização já que o problema se remete à modelagem de variogramas de variáveis independentes, e, ao incluir uma etapa de normalização e retro-transformação ao espaço original, as estimativas permanecem dentro do intervalo original das amostras, não havendo a necessidade de pós-processá-las. Compara-se com a metodologia clássica da krigagem das componentes principais (PCA), que descorrelaciona as variáveis só para o vetor de separação nulo, com resultados superiores para os fatores MAF. Porém, não dá uma solução ao problema do fechamento dos balanços, devendo-se também, distribuir o erro ou carregá-lo numa variável que é determinada por diferença, para satisfazê-los.

Em segunda instância, implementa-se a cokrigagem de razões-logarítmicas aditivas (alr), sendo uma metodologia desenvolvida para dados composicionais (que apresentam uma soma constante). Essa metodologia fornece resultados superiores aos obtidos por cokrigagem direta das variáveis originais, com estimativas dentro do intervalo original das amostras e uma satisfação dos balanços considerados para a totalidade dos valores determinados.



A consideração mais importante dessa metodologia é que as variáveis que constituem uma composição regionalizada, como é o caso das variáveis consideradas nos depósitos de ferro, têm um espaço amostral que está restringido ao simplex no qual a soma constante é satisfeita.

Porém, não oferece uma solução para o problema da modelagem da variabilidade espacial conjunta (modelo linear de correção regionalização). No entanto, diminui numa unidade a ordem de magnitude dos sistemas de cokrigagem sendo, portanto, mais simples de modelar.

## Abstract

Determination of grades and tonnages, directly affect the comprehension, quantification and risks evaluation in the investment and economic planning for mining projects.

Adapting the classic regression techniques, Geostatistics provide the needed methodologies for these determinations.

Iron and manganese ores, are examples of cases in which multiple variables need to be determined for ore characterization, simultaneously satisfying the original mass balances and stoichiometry among granulometric fractions and chemical species, respectively.

These highly complex systems, with multiple correlated variables, are appropriate for the utilization of multivariate geostatistics.

Although the cokriging provides an unbiased estimator that minimizes the error variance, in the case of complex deposits, with a high number of correlated variables, related by multiple constrained sums, it leads to some problematic aspects: (i) estimates outside the original data interval of values and/or negative values, that need to be pos-processed; (ii) estimates that do not satisfy the mass balances and stoichiometry, with the error having to be distributed among variables or assigned to a single variable determined by difference; (iii) impositions of the Linear Model of Correogionalization in presence of multiple variables, need to be achieved by the utilization of specific softwares and (iv) variogram models that do not adhere to experimental direct and cross-variograms.

In this thesis, methodologies of multivariate geostatistics, other than cokriging, are evaluated in the frame of an iron ore deposit, with multiple correlated variables, present in various granulometric fractions, simultaneously satisfying diverse closed sum constraints.

In first place, decomposition in Minimum/Maximum Autocorrelation Factors (MAF), a methodology similar to Principal Components decomposition (PCA) is

performed. This methodology decorrelates variables up to a small separation vector, generally coincident with sampling spacing or with the range of the first structure of the variogram, thus, allowing estimating each factor individually, avoiding modeling the correlogram. In this thesis, the MAF factors are estimated through ordinary kriging as it is simple and easily implemented, although it provides approximated estimates because of the nscore transformation of the original data that is embedded in the MAF decomposition and back-transformation, which is a non-linear transformation.

It provides adequate results, without specific softwares needed for modeling the correlogram, because the problem is simplified to modeling and estimating individual variables. It is compared with the classical methodology of kriging the Principal Components (PCA) which decorrelates the variables only for a separation vector equal to zero, with superior results for MAF decomposition.

The nscore transformation and back-transformation, leads to estimates restricted to the original samples interval, eliminating the pos-processing step.

Nevertheless, MAF decomposition does not provide a solution to the closure of mass balances and stoichiometry and the error has to be distributed among variables or assigned to a single variable obtained by difference, as in the case of cokriging of the original data.

Secondly, additive log-ratio (alr) cokriging is implemented, being a methodology developed for compositional data (with closed constant sum). This methodology provides better results when compared to the ones obtained by cokriging of the original data, with all estimates within the original data values interval and satisfying the considered balances.

The most important consideration of this methodology is that the variables that conform a regionalized composition, as it is the case of variables considered in iron ore, have a sample space that is restricted to the simplex in which the constant sum condition is satisfied.

However, it does not provide a solution for modeling the spatial joint correlation (Linear Model of Correlogram). But, it leads to cokriging systems that are one unit smaller than the original ones and consequently easier to model.

# Capítulo 1

## Introdução

Os investimentos e o planejamento econômico na mineração requerem o entendimento, quantificação e avaliação de riscos na determinação de teores e tonelagens de minério. O planejamento de lavra e as operações em usinas de beneficiamento também requerem a estimativa de teores e tonelagens.

A geoestatística proporciona as ferramentas necessárias para realizar essas estimativas utilizando adaptações das técnicas clássicas de regressão. Também, permite avaliar os riscos envolvidos pela geração de diferentes cenários equiprováveis por meio de simulações estocásticas.

Nas investigações geológicas que proporcionam as informações para a avaliação de depósitos, geralmente são amostradas múltiplas variáveis, seja pelo seu interesse econômico, por serem de importância no posterior processo de beneficiamento ou porque auxiliam no entendimento e definição do modelo geológico. Em muitas ocasiões, algumas dessas variáveis apresentam correlação entre si e a consideração conjunta delas nas estimativas ou na determinação do espaço de incerteza, proporciona um modelo mais consistente com a natureza do fenômeno estudado.

O minério de ferro, assim como o de manganês, são exemplos de casos nos quais é necessário determinar múltiplas variáveis para a caracterização do minério. No caso do minério de ferro, com uma demanda em constante aumento, dada pelo crescimento da indústria siderúrgica, a qualidade final do produto não está dada somente pelo teor de ferro, mas também pelos teores de outros componentes que intervêm no posterior processo siderúrgico. Além disso, as frações granulométricas devem ser estritamente controladas para atender as

especificações do produto. Portanto, múltiplas variáveis devem ser estimadas de modo tal, que os teores nos modelos de blocos dos depósitos satisfaçam os balanços de massa entre as frações granulométricas e a estequiometria para as espécies químicas.

Esses sistemas são altamente complexos apresentando múltiplas variáveis correlacionadas sendo, portanto, apropriados para serem abordados com a utilização de técnicas geoestatísticas multivariadas.

A geoestatística multivariada proporciona uma série de metodologias para a determinação simultânea de múltiplas variáveis regionalizadas (Matheron, 1965), assim como, também para a determinação de uma determinada variável de interesse utilizando variáveis auxiliares como informação secundária. Em depósitos poli-metálicos complexos, como no caso do minério de ferro, nos quais cada espécie química está presente em uma ou em diversas faixas granulométricas, é desejável a determinação simultânea das variáveis envolvidas satisfazendo, ao mesmo tempo, os balanços de massa e as relações estequiométricas.

## **1.1 Cokrigagem**

A cokrigagem (Marechal, 1970) é uma metodologia clássica apropriada para satisfazer esse objetivo. Fornece, do mesmo modo que a krigagem, estimativas não tendenciosas minimizando a variância do erro (Wackernagel, 1994) e permite modelar as variáveis de uma forma coerente, globalmente. A sua principal vantagem é a incorporação da variabilidade espacial conjunta das variáveis nos sistemas de cokrigagem. Porém, essa variabilidade espacial dos dados co-regionalizados deve ser previamente modelada para ser introduzida nos modelos de regressão, sendo o maior impedimento para uma ampla utilização da metodologia.

Vários modelos de correção foram desenvolvidos para dar solução ao problema da modelagem da variabilidade espacial conjunta. O mais difundido é o modelo linear de correção (MLC) (Wackernagel, 1994; Goovaerts, 1997; Chilès e Delfiner, 1999). Nele, todos os variogramas diretos e cruzados são expressos como combinações lineares das mesmas estruturas básicas. Uma variante simplificada desse modelo é o modelo de correção intrínseca

(MCI) (Wackernagel, 1994; Goovaerts, 1997; Chilès e Delfiner, 1999) no qual todos os variogramas diretos e cruzados são proporcionais a um mesmo variograma o qual pode ter uma ou mais estruturas básicas.

Apesar de estes modelos permitirem incorporar a correlação espacial entre as diferentes variáveis nos sistemas de cokrigagem, o ajuste dos variogramas experimentais, satisfazendo ao mesmo tempo as condições de definição positiva, apresenta uma dificuldade que cresce com o número de variáveis consideradas.

O ajuste desses modelos no caso de uma quantidade elevada de variáveis é altamente complexo, fazendo necessária a utilização de softwares profissionais especialmente desenvolvidos com tal fim e que não são corriqueiramente disponíveis aos usuários. Mesmo com a utilização desses softwares, ainda permanece a dificuldade de obter-se um adequado ajuste do modelo de coregionalização que inclui todos os variogramas diretos e cruzados envolvidos.

### **1.1.1 Simplificações da Cokrigagem**

Diversas simplificações do modelo linear de coregionalização foram introduzidas. A maioria é aplicável nos casos de cokrigagem colocada (Xu et al., 1992). A cokrigagem colocada é vantajosa quando as variáveis secundárias estão mais densamente amostradas que a variável de interesse (Wackernagel, 1994). Porém, se a densidade amostral das variáveis auxiliares for muito elevada, os dados mais próximos ao local onde se está estimando filtram a influência de dados mais afastados. Também, a elevada covariância entre dados muito próximos provoca instabilidade nos sistemas de cokrigagem no processo de inversão das matrizes. Assim, Xu et al. (1992) desenvolveram a cokrigagem colocada propondo reter somente o dado secundário colocado com o nó da malha onde se deseja estimar a variável primária (Figura 1.1 (a)). Para essa configuração dos dados, a cokrigagem colocada é chamada de cokrigagem colocada estrita (Rivoirard, 2002; Chilès e Delfiner, 1999). Nos sistemas de cokrigagem colocada estrita, a covariância da variável secundária não aparece. Ainda, Almeida (1993) desenvolveu um modelo de covariâncias, denominando de Modelo de Markov (MM1), no qual a covariância cruzada entre as variáveis é proporcional à covariância da variável primária. É chamado de modelo de Markov pela hipótese de filtragem que utiliza. Esse modelo é de fácil modelagem, porém,

excessivamente simplista. Também, a sua hipótese constitutiva não é a adequada à configuração espacial das amostras nos casos de cokrigagem colocada (Journel, 1999). Dessa forma, Journel (1999) desenvolveu outro modelo chamado Modelo de Markov 2 (MM2). No MM2, a covariância cruzada é proporcional à covariância da variável secundária, mais densamente amostrada. A hipótese constitutiva nesse caso é adequada à configuração espacial dos dados. Porém, os sistemas de cokrigagem colocada, utilizam a covariância da variável primária, a qual deve ser modelada satisfazendo as condições de definição positiva. Assim, o MM2 também deixa sem resolver eficientemente a modelagem da correionalização, sendo um caso particular do MLC.

Outra configuração possível é quando se dispõe, também, dos dados secundários nos locais onde a informação primária está disponível (informação secundária exaustiva (Goovaerts, 1997)) levando à chamada cokrigagem multicolocada (Rivoirard, 2002; Chilès e Delfiner, 1999). Para esse tipo de configuração dos dados (Figura 1.1 (b)), demonstra-se que a krigagem do resíduo (calculado como a diferença dos dados primários e os obtidos por regressão a partir da variável secundária) leva aos mesmos resultados que a cokrigagem completa, sem perda de informação (Rivoirard, 2002). Foram propostos outros modelos e configurações dos dados, que resultam em simplificações da cokrigagem (Rivoirard, 2004) com o propósito de determinar as situações nas quais a cokrigagem colocada não leva a uma perda de informação.

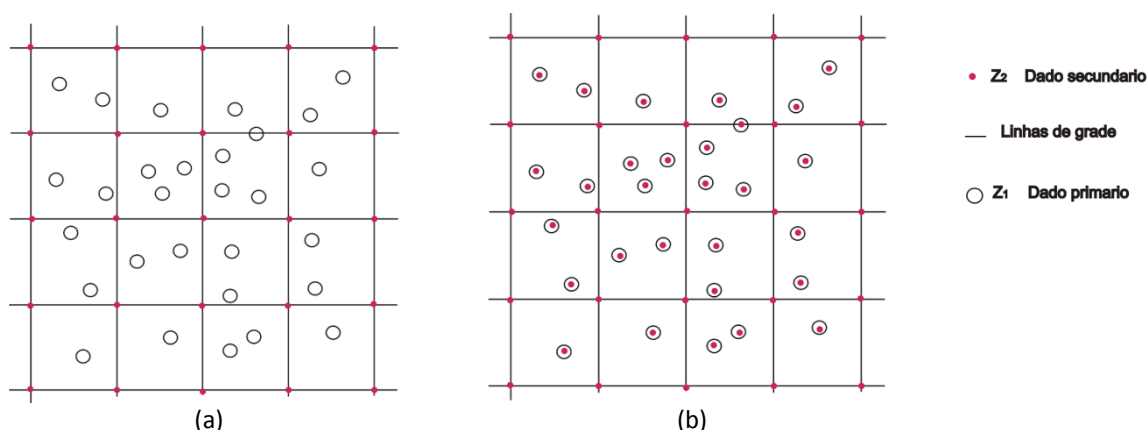


Figura 1.1 – Configuração espacial dos dados no caso de cokrigagem colocada estrita com dados secundários presentes nos nós da malha (a) e cokrigagem multicolocada com dados secundários presentes nos nós da malha e nos locais amostrados para a variável primária (b).

Apesar das simplificações nos sistemas de cokrigagem e dos modelos de correionalização utilizáveis nesses casos, cabe ressaltar que as mesmas foram desenvolvidas para duas variáveis (primária e secundária) e para a situação na qual a variável secundária está densamente amostrada.

Essa situação não é a encontrada nos sistemas complexos de depósitos como os de minério de ferro nos quais aparecem várias espécies químicas (ferro e contaminantes) em diversas faixas granulométricas, fazendo com que o número de variáveis seja muito maior do que dois. Além disso, geralmente a configuração dos dados é isotópica, com todas as variáveis presentes nos mesmos locais, ou parcialmente heterotópicas (Wackernagel, 1994) com uma ampla maioria do banco de dados sendo isotópico. Portanto, as simplificações antes apresentadas não são adequadas e a metodologia aplicável nesses casos volta a se remeter à cokrigagem completa com o modelo linear de correionalização (MLC) ou o modelo de correionalização intrínseca (MCI).

### **1.1.2 Aspectos práticos**

As variáveis que são utilizadas para a caracterização desses depósitos apresentam correlação (Goovaerts, 1997) entre elas e também entre as mesmas nas diversas faixas granulométricas. Porém, a cokrigagem completa da totalidade dos dados torna-se difícil de ser implementada. Portanto, a cokrigagem completa acaba sendo realizada em subgrupos de variáveis. Esses subgrupos são escolhidos de forma de aproveitar as melhores correlações. Estas estão geralmente dadas para um mesmo componente (Fe ou contaminantes) nas diferentes faixas granulométricas (Figura 1.2 – quadro vermelho a). Outra opção seria escolher o subgrupo das diferentes variáveis presentes numa mesma faixa granulométrica (Figura 1.2– quadro azul b).

As variáveis envolvidas apresentam dependência linear entre si dada pelas relações estequiométricas entre as diferentes espécies químicas e pelos balanços de massa entre as diferentes frações granulométricas (Figura 1.3).



| Espécie Química (EQ) | Faixa Granulométrica (FG) |                  |                  |     |                  |     |                  |
|----------------------|---------------------------|------------------|------------------|-----|------------------|-----|------------------|
|                      | FG <sub>1</sub>           | FG <sub>2</sub>  | FG <sub>3</sub>  | ... | FG <sub>i</sub>  | ... | FG <sub>q</sub>  |
| EQ <sub>1</sub>      | EQ <sub>11</sub>          | EQ <sub>12</sub> | EQ <sub>13</sub> | ... | EQ <sub>1i</sub> | ... | EQ <sub>1q</sub> |
| EQ <sub>2</sub>      | EQ <sub>21</sub>          | EQ <sub>22</sub> | EQ <sub>23</sub> | ... | EQ <sub>2i</sub> | ... | EQ <sub>2q</sub> |
| EQ <sub>3</sub>      | EQ <sub>31</sub>          | EQ <sub>32</sub> | EQ <sub>33</sub> | ... | EQ <sub>3i</sub> | ... | EQ <sub>3q</sub> |
| ⋮                    | ⋮                         | ⋮                | ⋮                | ... | ⋮                | ... | ⋮                |
| EQ <sub>i</sub>      | EQ <sub>i1</sub>          | EQ <sub>i2</sub> | EQ <sub>i3</sub> | ... | EQ <sub>ij</sub> | ... | EQ <sub>iq</sub> |
| ⋮                    | ⋮                         | ⋮                | ⋮                | ... | ⋮                | ... | ⋮                |
| EQ <sub>n</sub>      | EQ <sub>n1</sub>          | EQ <sub>n2</sub> | EQ <sub>n3</sub> | ... | EQ <sub>ni</sub> | ... | EQ <sub>nq</sub> |

b

Figura 1.2 – Variáveis dos depósitos poli-metálicos complexos presentes em  $q$  faixas granulométricas. A correlação para uma mesma espécie presente em diferentes faixas granulométricas (quadro vermelho, a) é maior que para as diferentes espécies na mesma fração granulométrica (quadro azul, b).

Ao considerar essa dependência linear entre as variáveis conjuntamente com os sistemas de cokrigagem, tem-se uma situação na qual o número de Equações é maior que o número de variáveis a determinar. Nesses casos, recomenda-se (Goovaerts, 1997) não incluir nos sistemas de cokrigagem todas as variáveis a serem determinadas, excluindo um número de variáveis dado pela quantidade de relações lineares entre as mesmas, permanecendo um número de variáveis igual ao número de Equações. Posteriormente à cokrigagem, as variáveis não determinadas são calculadas por meio dessas relações.

| Espécie Química (EQ) | Faixa Granulométrica (FG) |                  |                  |     |                  |     |                  |
|----------------------|---------------------------|------------------|------------------|-----|------------------|-----|------------------|
|                      | FG <sub>1</sub>           | FG <sub>2</sub>  | FG <sub>3</sub>  | ... | FG <sub>i</sub>  | ... | FG <sub>q</sub>  |
| EQ <sub>1</sub>      | EQ <sub>11</sub>          | EQ <sub>12</sub> | EQ <sub>13</sub> | ... | EQ <sub>1i</sub> | ... | EQ <sub>1q</sub> |
| EQ <sub>2</sub>      | EQ <sub>21</sub>          | EQ <sub>22</sub> | EQ <sub>23</sub> | ... | EQ <sub>2i</sub> | ... | EQ <sub>2q</sub> |
| EQ <sub>3</sub>      | EQ <sub>31</sub>          | EQ <sub>32</sub> | EQ <sub>33</sub> | ... | EQ <sub>3i</sub> | ... | EQ <sub>3q</sub> |
| ⋮                    | ⋮                         | ⋮                | ⋮                | ... | ⋮                | ... | ⋮                |
| EQ <sub>i</sub>      | EQ <sub>i1</sub>          | EQ <sub>i2</sub> | EQ <sub>i3</sub> | ... | EQ <sub>ij</sub> | ... | EQ <sub>iq</sub> |
| ⋮                    | ⋮                         | ⋮                | ⋮                | ... | ⋮                | ... | ⋮                |
| EQ <sub>n</sub>      | EQ <sub>n1</sub>          | EQ <sub>n2</sub> | EQ <sub>n3</sub> | ... | EQ <sub>ni</sub> | ... | EQ <sub>nq</sub> |

**BALANÇOS ESTEQUIOMETRICOS**

**BALANÇOS DE MASSA**

Figura 1.3 – Variáveis dos depósitos polimetálicos apresentam dependência linear entre si dada pelas relações estequiométricas entre as espécies químicas presentes em cada faixa granulométrica (vermelho) e pelos balanços de massa entre as frações granulométricas (azul).

Outra alternativa é que os sistemas de cokrigagem incluam todas as variáveis de interesse. Porém, posteriormente é necessária uma correção das mesmas distribuindo o erro, de modo de satisfazer as relações lineares dos balanços de massa e relações estequiométricas (Boezio et al., 2006).

No que se refere à modelagem da correção regionalização, muitas vezes é utilizado o MCI associado à preocupação com o fechamento estequiométrico e dos balanços de massa. A utilização de um mesmo MCI em todos os subgrupos a serem cokrigados, assegura que os pesos outorgados em cada local sejam os mesmos para cada subgrupo e, de essa forma, atinge-se o fechamento dos balanços. Outra variante dessa metodologia, com o mesmo objetivo do fechamento dos balanços, consiste na utilização da krigagem ordinária com um mesmo variograma base, re-escalando as contribuições à variância global para cada variável (ou utilizando um mesmo correlograma para todas as variáveis). Assim, evitam-se as dificuldades da modelagem conjunta dos variogramas diretos e cruzados.

A utilização dessas duas alternativas é equivalente na teoria, já que numa situação de isotopia qualquer variável é autokrigável (Wackernagel, 1994) se pertence a um conjunto de variáveis intrinsecamente correlacionadas, de modo que a krigagem direta de qualquer variável é equivalente a sua cokrigagem frente às restantes. Cabe salientar, que a utilização do MCI é muito pouco flexível, já que se utiliza um mesmo modelo de variograma (re-escalado) tanto direto como cruzado e a adequação desses modelos aos variogramas experimentais pode ser altamente insatisfatória.

Outra alternativa para esse tipo de depósitos é o ajuste de diferentes MLC para cada subconjunto de variáveis utilizadas nos sistemas de cokrigagem. Assim, a adequação aos variogramas experimentais tende a ficar melhor. Dessa forma, também são respeitadas as diferentes escalas de correlação espacial existentes em cada caso introduzindo-as posteriormente nos sistemas de cokrigagem. Porém, nesse caso, está em compromisso o fechamento dos balanços de massa e relações estequiométricas.

A obtenção de um ajuste adequado para todos os variogramas diretos e cruzados é um processo complexo que demanda tempo. Portanto, os modelos obtidos geralmente não apresentam uma aderência adequada para todos os variogramas diretos e cruzados, o que vai a detrimento do aproveitamento da

correlação espacial existente entre as variáveis. Isso provoca outra dificuldade prática que provém do fato de que algumas estimativas obtidas são negativas ou ficam fora do intervalo dos valores dos dados originais. Isso leva ao não fechamento dos balanços de massa e as relações estequiométricas. Para corrigir esse problema, as estimativas incorretas são substituídas por outras, obtidas por metodologias de interpolação que não proporcionam estimativas não tendenciosas ou ótimas, utilizando um modelo variográfico arbitrário (média local, inverso ao quadrado da distância, etc.).

## **1.2 Metodologias alternativas**

Dadas as dificuldades na modelagem da correionalização surge a motivação para a busca de outras metodologias para o tratamento geoestatístico de múltiplas variáveis regionalizadas. O maior desenvolvimento nesse sentido vem se dando com metodologias alternativas nas quais as funções randômicas, que caracterizam as múltiplas variáveis, são fatorizadas em fatores ortogonais entre si e assumidos independentes para um vetor de separação  $h$ , permitindo, portanto, que os mesmos sejam estimados independentemente (Boucher, 2003; Dimitrakopoulos e Desbarats, 2000). O desafio, nesses casos, é que na rotação que leva os fatores independentes estimados ao espaço original (retro-transformação ao domínio das variáveis originais), sejam mantidas as relações lineares entre as variáveis envolvidas (balanços de massa e estequiometria).

Por outra parte, a análise de dados composicionais (Aitchison, 1986), nos quais os dados estão restringidos por uma soma fechada, tem se estendido aos dados regionalizados (Olea e Pawlowsky, 2004), sendo apropriada para o tratamento de múltiplas variáveis como as do minério de ferro, nos quais os balanços de massa e as relações estequiométricas apresentam-se como somas fechadas, onde as correlações podem ser espúrias (artificiais), induzidas pelos fechamentos.

### **1.2.1 Decomposição em Componentes Principais**

A análise das componentes principais (PCA) é uma metodologia clássica da estatística multivariada (Johnson e Wichern, 1998). Nela, a variância-covariância

de um conjunto de variáveis é explicada por meio de combinações lineares ortogonais, chamadas de componentes principais. O objetivo da sua utilização na estatística multivariada está relacionado com a redução do número de variáveis que podem ser consideradas e também com a interpretação da relação entre as mesmas.

A PCA foi introduzida na geoestatística por Davis e Greenes (1983) na krigagem das componentes principais (KPCA). Também, David et al. (1984) ampliaram a sua utilização à simulação. A maior vantagem dessa metodologia é que não é necessária a modelagem da corregeionalização. Cada componente principal pode ser variografada e krigada independentemente. Posteriormente, realiza-se uma transformação inversa das componentes krigadas ao espaço original. Mas a transformação só ortogonaliza as variáveis, para todos os vetores de separação, quando as mesmas apresentam correlação intrínseca (Wackernagel et al., 1989, Goovaerts, 1993). Nas restantes situações, a ortogonalidade da transformação introduzida na PCA remete-se somente ao vetor de separação nulo ( $h=0$ ). Assume-se a ortogonalidade para vetores de separação diferentes de zero, mas essa hipótese deve ser verificada. Nos casos nos quais isso não acontece, a reconstituição das correlações originais não está garantida.

### **1.2.2 Decomposição em Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos**

Como uma alternativa à PCA, Desbarats e Dimitrakopoulos (2000) utilizaram a metodologia da decomposição em fatores de autocorrelação mínimos/máximos (MAF) a qual foi desenvolvida para sensoriamento remoto por Switzer e Green (1984). Desbarats e Dimitrakopoulos (2000) mostraram que a vantagem mais importante que o MAF tem frente à PCA é que descorrelaciona as variáveis para um vetor de separação  $h$  se o variograma corresponde a um modelo linear de corregeionalização com um máximo de duas estruturas. Boucher (2003) estendeu a descorrelação para um modelo linear de corregeionalização com três estruturas. Esses modelos de corregeionalização não devem ser modelados, sendo considerados como hipóteses constitutivas da metodologia.

A principal vantagem prática dos métodos baseados na decomposição em fatores é que os mesmos podem ser modelados independentemente, não requerendo um modelo linear de corregeionalização para assegurar a definição

positiva. Mas a correlação cruzada entre os fatores pode não ser nula, devendo ser verificada.

Vários autores têm incorporado o MAF em aplicações geoestatísticas. Desbarats e Dimitrakopoulos (2000) utilizam a metodologia para a modelagem da distribuição do tamanho dos poros em tufo vulcânico. Dimitrakopoulos e Fonseca (2003) também utilizaram o MAF na simulação conjunta de múltiplas variáveis num depósito complexo de cobre. Dimitrakopoulos e Boucher (2005) e Boucher (2003) aplicaram o MAF também na simulação conjunta de múltiplas variáveis, mas num depósito de ferro. Vargas-Guzman e Dimitrakopoulos (2003) apresentam aspectos relativos a algoritmos que utilizam essa metodologia nos casos de simulação. Porém, aplicações para a estimativa de teores não foram encontradas na revisão bibliográfica.

A transformação em fatores MAF, inclui uma etapa de normalização, a que constitui uma transformação não linear. Chillés e Delfiner (1999) alertam sobre a utilização de variáveis normalizadas. Apesar de que o modelo Gaussiano seja reconhecido por muitas propriedades positivas, é difícil encontrar variáveis com essa distribuição, pelo que muitas vezes são transformadas em Gaussianas.

Se a variável original é estacionária localmente, com uma média que varia suavemente na zona de interesse, a mesma situação é esperada para a variável transformada. Portanto, poderia se substituir a krigagem ordinária por krigagem simples. Nesse caso, a estimativa por krigagem não coincide com a expectativa condicional (Chilès e Delfiner, 1999), introduzindo um viés.

Em Deutsch e Journel (1998), é mencionada a krigagem dos valores normalizados como uma generalização da krigagem lognormal (Journel e Huijbregts, 1978), a qual, na retro-transformação, que envolve uma transformação exponencial, introduz um viés nas estimativas.

Os autores que utilizaram previamente a decomposição MAF, mapearam o espaço de incerteza por simulação estocástica dos fatores MAF, sem a necessidade de obter uma estimativa não tendenciosa. Assim, uma alternativa à estimativa por krigagem ordinária, é determinar o E-Type (média dos valores simulados em cada bloco) (Deutsch e Journel, 1998) proveniente das simulações estocásticas realizadas nos fatores, já que os mesmos apresentam distribuição normal. Assim, a determinação do E-Type, pode ser considerada uma

metodologia alternativa à krigagem ordinária dos fatores MAF, sem introduzir um viés.

Outros métodos de fatorização diferentes da PCA e do MAF também podem ser utilizados para ortogonalizar vetores de funções randômicas. Tecran (1999) comparou várias metodologias entre as quais estão as decomposições espectrais e a de Cholesky, não incluindo a decomposição MAF no seu estudo. No seu trabalho, concluiu que a de melhor desempenho foi para a decomposição combinada Cholesky-espectral. O método é muito semelhante à decomposição MAF. Dada a semelhança entre os dois métodos de fatorização, essa decomposição não será inicialmente considerada na presente tese.

### **1.2.3 Geoestatística de Dados Composicionais**

Por outra parte, os dados provenientes dos depósitos de minério de ferro são considerados dados composicionais. Os dados composicionais (Aitchison, 1986) são representados como vetores com componentes não negativas, sendo proporções ou percentagens de um total, que carregam somente informação relativa, com uma soma constante (Tolosana-Delgado et al., 2008).

No que se refere à covariância de pares de variáveis composicionais, as mesmas são espúrias (artificiais), no sentido de que podem não estar relacionadas a nenhum processo físico e sim induzidas pelo fechamento da soma constante (Pearson, 1897).

O mesmo acontece com as covariâncias cruzadas de composições regionalizadas (Pawłowsky, 1984). Assim, a cokrigagem pode ser utilizada como um procedimento de interpolação, mas nada assegura que os resultados obtidos sejam positivos. Walwoort e de Gruijter (2001), propuseram complementar os sistemas de cokrigagem com restrições que forçassem as estimativas a serem zero quando as mesmas forem negativas. Desse modo, resolve-se o problema dos valores negativos, porém, continua-se utilizando covariâncias que não tem sentido físico e que, portanto, não se pode utilizar hipóteses Gaussianas para simulação ou para determinar intervalos de confiança, já que muitas das probabilidades obtidas são atribuíveis a valores de composições negativas (Tolosana-Delgado, 2008).

O tratamento dado às composições não regionalizadas, como foi estabelecido por Aitchison e Egozcue (2005), atravessou quatro fases:

a primeira, anterior a 1960, coincide com o momento de maior desenvolvimento da análise estatística multivariada clássica. O vetor composicional está sujeito à restrição de soma constante e, portanto, é completamente diferente de um vetor não restrito e a sua análise estatística multivariada. Apesar disso, os vetores posicionais foram sujeitos aos tratamentos da análise estatística multivariada clássica, em particular a análise de correlação.

a segunda fase começa em 1960, com o geólogo Chayes (1960) quem critica a aplicação da análise estatística multivariada clássica aos dados posicionais, fundamentalmente o que se refere à interpretação da correlação entre componentes de composições geoquímicas, por causa da presença de um viés negativo, geralmente referido como problema de fechamento. Porém, aplicaram-se modificações às metodologias multivariadas clássicas existentes, em vez de desenvolver uma nova metodologia.

a terceira fase se estabelece nos anos 80, quando Aitchison introduz a idéia de que as composições provem informação relativa e não absoluta, sobre os valores das componentes. Portanto, qualquer enunciado sobre uma composição pode ser expresso em termos de quocientes de componentes (Aitchison, 1981, 1982, 1983 e 1984), ou em termos de quocientes logarítmicos (razão-logarítmica), que são mais simples desde o ponto de vista matemático. A transformação em razões-logarítmicas permite a utilização da análise estatística multivariada nos dados transformados, permitindo trasladar as inferências ao domínio original dos dados posicionais.

O princípio na transformação em razões-logarítmicas está baseado no fato de que existe uma correspondência um a um entre os vetores posicionais e os vetores das razões-logarítmicas associadas. A vantagem dessa transformação é que retira o problema de um espaço amostral restringido (o simplex) para um espaço não restringido, multivariado, o espaço real. As principais transformações em razões-logarítmicas utilizadas são a razão-logarítmica aditiva (Aitchison, 1986), a razão-logarítmica centrada (Aitchison, 1986) e a razão-logarítmica isométrica (Egozcue et al., 2003).

a quarta fase aparece com a aplicação da operação simplicial interna da perturbação, a operação externa da potência, e a métrica simplicial, que definem um espaço vetorial métrico, mais especificamente um espaço de Hilbert, que é a generalização do espaço Euclidiano com múltiplas dimensões (Billheimer et al., 1997, 2001; Pawlowsky-Glahn e Egozcue, 2001). Portanto, muitos problemas composicionais podem ser tratados nesse espaço que tem a sua estrutura algebraica-geométrica específica. Aparece a abordagem de *permanecer-no-simplex* para a solução de muitos problemas composicionais (Mateu-Figueiras, 2003; Pawlowsky-Glahn, 2003), representando as composições pelas suas coordenadas no espaço Euclidiano e interpretando as suas relações a partir das suas representações no simplex. Conseqüentemente, o espaço amostral de composições randômicas é tratado no simplex, com uma métrica simplicial, diferente da métrica Euclidiana no espaço real.

Apesar de que, na atualidade, a análise dos dados composicionais esteja nessa quarta fase, a utilização das razões-logarítmicas ainda remanesce como uma metodologia que permite a utilização de ferramentas clássicas da estatística multivariada.

A partir da utilização das razões-logarítmicas em composições não regionalizadas (Aitchison, 1986), Pawlowsky, (1986) propôs a utilização de ferramentas geoestatísticas nos dados transformados em razões-logarítmicas aditivas, e posteriormente, retro-transformar as estimativas interpoladas ao espaço original. Pawlowsky-Glahn e Olea (2004) apresentam essas metodologias em detalhe, e mostram que os resultados são positivos e que a condição da soma constante é mantida.

Uma das críticas para a transformação em razões-logarítmicas é que não permite trabalhar com valores de zero. Porém, existem alternativas que permitem trabalhar com essas informações (Martín Fernandez et al., 2000; Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004) dependendo do sentido físico desses zeros (limite de detecção, dados não analisados, etc.). Outra crítica é que a metodologia fornece uma estimativa tendenciosa, enviesada. Mas Pawlowsky-Glahn e Egozcue (2002) demonstraram que os resultados são não enviesados em respeito a uma escala relativa, no caso de composições não regionalizadas, e Tolosana-Delgado (2006), estendeu o conceito ao caso de composições regionalizadas.



Tolosana-Delgado (2006) utiliza essas técnicas geoestatísticas em dados de poluição ambiental em água e ar. Tozzo Martins et al. (2008) aplicou métodos geoestatísticos a dados composicionais para a classificação de solos. Martín-Fernandez (2001) comparara o desempenho da krigagem ordinária e a cokrigagem ordinária de dados composicionais, provenientes de um reservatório de petróleo. Porém, na bibliografia, não tem se encontrado aplicações em depósitos complexos como os de minério de ferro, onde o fechamento é dado tanto pelos balanços de massa quanto pelas relações estequiométricas.

A krigagem lognormal, que também introduz uma transformação logarítmica, é apresentada como uma metodologia clássica da geoestatística não linear. Journel e Huijbregts (1978) alertam sobre a tendenciosidade do estimador, propondo outro estimador de tipo exponencial que atenua esse problema (Journel e Huijbregts, 1978; Chilès e Delfiner, 1999).

Paralelamente, a transformação em razões-logarítmicas foi amplamente aceita pela comunidade estatística (Aitchison, 1982). Porém, tem sido muito resistida por outras disciplinas, em especial por setores da comunidade geológica (Cartas ao Editor da revista *Mathematical Geology* no período 1988 a 2002), (Pawłowsky-Glahn et. al, 2007).

Uma das maiores objeções a essa abordagem é a ausência de não tendenciosidade e minimização da variância do erro dado por outros estimadores por lidar com variáveis obtidas por transformação não linear.

Porém, Pawłowsky-Glahn e Egozcue (2002) apresentam uma abordagem geométrica, introduzindo os conceitos de variância métrica e estimador composicional não tendencioso, mostrando que a média geométrica fechada é um estimador c-BLU (melhor estimador linear composicional não tendencioso com respeito à geometria do simplex) do centro da distribuição de uma composição randômica. Dessa forma, satisfaz as propriedades análogas à média aritmética como estimador não tendencioso (BLU) do valor esperado no espaço real. A abordagem geométrica proporciona um significado mais apropriado para a medida da tendência central e da dispersão.

Esses conceitos são estendidos às determinações realizadas utilizando essas metodologias em dados regionalizados.

Portanto, uma avaliação ou discussão referente à não tendenciosidade e minimização da variância do erro dos estimadores que utilizam as razões-logarítmicas aditivas não será considerada. Ao mesmo tempo, Pawlowsky e Olea (2004) alertam sobre a singularidade da matriz de covariâncias cruzadas no caso de dados composicionais e também sobre a condição de viés negativo ao considerar covariâncias diretas. Essas afirmações fazem com que a cokrigagem não possa ser considerada um estimador não tendencioso no caso de dados composicionais, cujo espaço amostral está restringido pela soma constante.

### **1.3 Problema**

Na estimativa de teores para a caracterização de depósitos complexos como os de minério de ferro, é necessário determinar múltiplas variáveis, presentes em diferentes faixas granulométricas, o que faz apropriado a aplicação de técnicas da geoestatística multivariada.

Apesar da metodologia clássica da cokrigagem fornecer a estimativa mais apropriada desde o ponto de vista teórico, acontece que a modelagem da correogionalização, através do modelo linear de correogionalização (MLC) ou do modelo de correogionalização intrínseco (MCI), não é completamente adequada por não se aderir de forma correta aos variogramas experimentais. Também, esse tipo de correlações espaciais pode carecer de sentido físico e ser consequência das relações existentes entre as variáveis envolvidas (fechamento da soma constante: balanços de massa e relações estequiométricas).

Desse modo, as estimativas obtidas muitas vezes são negativas ou ficam fora do intervalo dos valores dos dados originais e não satisfazem as relações de fechamento, devendo ser pós-processadas, substituindo o seu valor por outro obtido por outras técnicas de interpolação (por exemplo: média local, inverso ao quadrado da distância, etc.).

### **1.4 Meta**

Considerando as atuais dificuldades que apresenta a estimativa de teores em depósitos multivariados complexos, como os de minério de ferro, dadas fundamentalmente pela impossibilidade da implementação de técnicas

geoestatísticas que provejam uma solução acabada ao problema da modelagem conjunta da correionalização para um número elevado de variáveis, o presente trabalho propõe analisar metodologias alternativas, comparando-as por meio de um estudo de caso, com as metodologias clássicas existentes.

Uma metodologia ideal para o tratamento dos depósitos multivariados complexos deveria ter as seguintes características:

fornecer estimativas positivas, não tendenciosas, no intervalo dos dados originais, minimizando a variância do erro;

aproveitar as correlações espaciais entre as variáveis para obter estimativas mais coerentes e consistentes com o fenômeno sob estudo;

reproduzir as correlações e relações originais (fechamentos) das variáveis;

ser de rápida e fácil implementação computacional.

Essas condições não são satisfeitas por completo pelas metodologias consideradas. Porém, a meta desse trabalho é, num balanço final, determinar as vantagens e os custos da utilização de cada uma de elas, visando concluir que uma delas seja a mais apropriada para o tratamento desses depósitos.

## **1.5 Contribuição da tese**

A contribuição da tese, é dada pela avaliação de metodologias implementadas em outros âmbitos, aplicadas ao caso dos depósitos polimetálicos complexos, nos quais não só o número de variáveis é muito elevado e cada variável está envolvida em duas ou mais relações matemáticas com as outras, devendo, essas relações, serem satisfeitas nos modelos obtidos.

Por outra parte, a modelagem da correionalização por médio do MLC tem, como foi mencionado anteriormente, aspectos que não são completamente satisfatórios. Portanto, as metodologias de fatorização, como a decomposição MAF e a KPCA são pertinentes a serem aplicadas, fundamentalmente nesses casos de um elevado número de variáveis. A krigagem ordinária dos fatores MAF é apresentada como uma metodologia aproximada para a estimativa de teores em depósitos polimetálicos, sem introduzir um viés apreciável.

## 1.6 Objetivos

Para atingir a meta proposta, propõem-se os seguintes objetivos específicos:

- i. obtenção de um modelo de blocos utilizando a metodologia clássica da cokrigagem na estimativa de teores para múltiplas variáveis e considerar esse modelo como o padrão de comparação para as outras metodologias;
- ii. investigar a metodologia MAF para a estimativa de teores, e comparativamente a metodologia de KPCA para observar as diferenças nos resultados e nas dificuldades operacionais;
- iii. implementar a transformação em razões-logarítmicas e realizar a cokrigagem das mesmas para a obtenção de teores que satisfaçam as relações de estequiometria e balanços de massa;
- iv. análise comparativa dos resultados obtidos utilizando as diferentes metodologias, comparando coerência e reprodução das características originais, o fechamento de balanços massa e relações estequiométricas e a simplicidade na utilização.

## 1.7 Metodologia

Para atingir os objetivos da tese, utiliza-se um banco de dados proveniente de um depósito de ferro do tipo BIF (banded iron formation), pertencente à empresa Vale, localizado em Belo Horizonte, Minas Gerais.

Nesse banco de dados, aplica-se, em primeiro lugar, a metodologia de cokrigagem em subgrupos da mesma espécie química presentes em diferentes frações granulométricas e no teor global (crude), deixando o teor numa das faixas fora do sistema de cokrigagem, determinando o mesmo numa etapa posterior, a partir das relações do balanço de massa.

Posteriormente, implementa-se a decomposição em fatores de autocorrelação mínimos/máximos (MAF), no mesmo subgrupo de variáveis, e também determina-se, numa etapa posterior, o teor na outra faixa a partir das relações do balanço de massa.

A metodologia da krigagem das componentes principais (KPCA) também é aplicada, em função de ser muito semelhante à da decomposição MAF, com fins comparativos.

Finalmente, aplica-se a metodologia de transformação em razões-logarítmicas, que serão posteriormente cokrigadas, de modo de obter um modelo de blocos no qual esteja garantido o fechamento do balanço de massa, e as relações estequiométricas sejam mantidas.

## **1.8 Organização da tese**

A tese está estruturada da seguinte forma:

o Capítulo 2 apresenta uma revisão das metodologias a serem aplicadas: uma breve revisão de cokrigagem, conceitos básicos de álgebra que permitam entender a decomposição em fatores de autocorrelação mínimos/máximos (MAF) e a metodologia de transformação em razões-logarítmicas.

o Capítulo 3 introduz o estudo de caso que será utilizado para a aplicação das diferentes metodologias. Também, é realizada uma análise estatística inicial das variáveis envolvidas, domínios geoestatísticos, e demais parâmetros do depósito poli-metálico complexo, que no caso será um depósito de ferro. Nesse capítulo, também, são apresentados os resultados provenientes da cokrigagem.

no Capítulo 4, são apresentados os resultados provenientes da decomposição MAF e a KPCA junto com uma análise parcial dos resultados obtidos.

o Capítulo 5 apresenta a transformação em razões-logarítmicas, e também uma análise parcial dos resultados obtidos.

no Capítulo 6, apresenta-se uma discussão comparativa dos métodos utilizados e dos resultados obtidos.

no Capítulo 7, são apresentadas as conclusões obtidas a partir do trabalho realizado, assim como, recomendações para trabalhos futuros.

## Capítulo 2

### **Metodologias da Geoestatística Multivariada: Cokrigagem, Decomposição MAF, Decomposição PCA e Geoestatística de Dados Composicionais**

Esse capítulo apresenta uma breve revisão da metodologia clássica de cokrigagem ordinária, alguns conceitos de álgebra que permitem um melhor entendimento da decomposição em componentes principais (PCA) e em fatores de autocorrelação mínimos/máximos (MAF) e também uma revisão da metodologia de transformação em razões logarítmicas, correspondente à geoestatística de dados composicionais.

#### **2.1 Cokrigagem**

A cokrigagem (Marechal, 1970) fornece, do mesmo modo que a krigagem, estimativas não tendenciosas minimizando a variância do erro (Wackernagel, 1994). Permite modelar as variáveis de uma forma coerente, globalmente.

Revisões completas sobre esta metodologia podem ser encontradas em Journel e Huijbregts (1978); Wackernagel (1994); Goovaerts (1997) e em Chilès e Delfiner (1999), entre outros.

A seguir, apresenta-se a cokrigagem ordinária, considerando flutuações locais sobre a média, limitando a hipótese de estacionariedade a uma vizinhança local.

### 2.1.1 Cokrigagem ordinária

O estimador de cokrigagem ordinária consiste numa combinação linear de pesos  $\lambda_{\alpha_i}$  atribuídos aos dados de  $N_v$  variáveis diferentes, localizadas na vizinhança do local no qual se deseja estimar. Cada variável está definida num conjunto de locais  $n_i$  que pode ser igual (configuração isotópica) ou diferente (configuração heterotópica) para todas as variáveis. Assim, o estimador para uma variável de interesse  $Z_1(u)$  pode ser expresso como:

$$Z_{CKO_1}^*(u) = \sum_{i=1}^{N_v} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} Z_i(u_{\alpha_j}) \quad (2.1)$$

onde,

$Z_{CKO_1}^*(u)$  é o estimador de cokrigagem ordinária da variável de interesse  $Z_1(u)$  no local  $u$ ,

$N_v$  é o número de variáveis,

$n_i$  é o número de dados de cada variável  $i$ , presente na vizinhança do local  $u$ ,

$\lambda_{\alpha_i}^{CKO}$  são os pesos de cokrigagem ordinária atribuídos a cada dado  $Z_i(u_{\alpha})$  presentes nos  $n_i$  locais  $u_{\alpha}$  da vizinhança.

O estimador é não tendencioso, portanto, a média do erro da estimativa deve ser igual a zero. Essa condição de não tendenciosidade é satisfeita se a soma dos pesos da variável de interesse for igual a um (1) e a soma dos pesos das variáveis auxiliares for zero (0):

$$\begin{aligned}
E[Z_{CKO_1}^*(u) - Z_1(u)] &= E\left[\sum_{i=1}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} Z_i(u_{\alpha_j}) - Z_1(u)\right] \\
&= E\left[\sum_{\alpha_1=1}^{m_1} \lambda_{\alpha_1}^{CKO} Z_1(u_{\alpha_1}) + \sum_{i=2}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} Z_i(u_{\alpha_j}) - Z_1(u)\right] \\
&= \sum_{\alpha_1=1}^{m_1} \lambda_{\alpha_1}^{CKO} m_1 + \sum_{i=2}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} m_j - m_1 \\
&= m_1 \left[ \underbrace{\sum_{\alpha_1=1}^{m_1} \lambda_{\alpha_1}^{CKO} - 1}_0 \right] + m_j \left[ \underbrace{\sum_{i=2}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO}}_0 \right] = 0 \Rightarrow \\
&\left| \begin{array}{l} \sum_{\alpha_1=1}^{m_1} \lambda_{\alpha_1}^{CKO} = 1 \\ \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} = 0 \quad i = 2, \dots, Nv \end{array} \right.
\end{aligned} \tag{2.2}$$

A condição nos pesos expressa na equação (2.2) é chamada de tradicional. Na prática, a condição sobre os pesos da variável secundária provoca a ocorrência de pesos negativos ou muito pequenos, os quais podem levar a estimativas negativas ou subestimadas. Para solucionar esse problema, outra relação nos pesos foi proposta (Isaaks e Srivastava, 1989; Goovaerts, 1997). Nela, o somatório do total dos pesos da variável de interesse e das variáveis auxiliares é igual a um (1):

$$\sum_{i=1}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} = 1 \tag{2.3}$$

Mas, para a utilização dessa condição é necessário re-escalar o estimador da Equação (2.1) pelas médias das variáveis envolvidas (Goovaerts, 1997):

$$Z_{CKO_1}^*(u) = \sum_{\alpha_1=1}^{m_1} \lambda_{\alpha_1}^{CKO} Z_1(u_{\alpha_1}) + \sum_{i=2}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} [Z_i(u_{\alpha_j}) - m_i + m_1] \tag{2.4}$$

Por outra parte, a variância do erro da estimativa  $\sigma_\varepsilon^2$  tem a seguinte expressão:

$$\sigma_\varepsilon^2(u) = E\left[\left(\sum_{i=1}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} Z_i(u_{\alpha_j}) - Z_1(u)\right)^2\right] \tag{2.5}$$



Como a cokrigagem minimiza a variância do erro, tomando as derivadas parciais da expressão anterior e igualando-as a zero, chega-se na expressão que resolve os pesos de cokrigagem ordinária. Para considerar as condições de não tendenciosidade nos pesos, utilizam-se  $Nv$  parâmetros de Lagrange  $\mu_i$  no sistema de cokrigagem ordinária:

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^{Nv} \sum_{\beta_j=1}^{n_j} \lambda_{\beta_j}^{CKO} C_{ij}(u_{\alpha_i} - u_{\beta_j}) + \mu_i = C_{i1}(u_{\alpha_1} - u) & i=1, \dots, Nv \quad \alpha_i = 1, \dots, n_i \\ \sum_{\alpha_1=1}^{n_1} \lambda_{\alpha_1}^{CKO} = 1 \\ \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} = 0 & i=2, \dots, Nv \end{cases} \quad (2.6)$$

A variância de cokrigagem é menor que a variância de krigagem:

$$\sigma_{CKO}^2 = C_{11}(0) - \sum_{i=1}^{Nv} \sum_{\alpha_j=1}^{n_j} \lambda_{\alpha_j}^{CKO} C_{i1}(u_{\alpha_j} - u) - \mu_1 \quad (2.7)$$

A implementação computacional da cokrigagem pode ser realizada em vários softwares comerciais e em outros de uso acadêmico. Porém, a maior dificuldade está dada pela modelagem da variabilidade espacial conjunta. Para um número elevado de variáveis, a mesma torna-se muito complexa.

## 2.1.2 Modelagem da correionalização

Nos sistemas de cokrigagem, é necessário informar a covariância direta das  $Nv$  variáveis assim como também a covariância cruzada entre elas. Nessa seção, são apresentados o Modelo Linear de Correionalização (MLC) e o Modelo de Correionalização Intrínseca (MCI). Uma leitura mais completa desses dois modelos clássicos está disponível em Wackernagel (1994), Chilès e Delfiner (1999), Goovaerts (1997), entre outros.

### 2.1.2.1 Modelo Linear de Correionalização (MLC)

Nesse modelo, cada função de covariância (ou variograma) pode ser expressa como uma combinação linear de correlogramas (ou variogramas normalizados).

Considere-se um conjunto de funções randômicas estacionárias de segunda ordem  $\{Z_i(u), i=1, \dots, N_v\}$ . O mesmo pode ser decomposto em conjuntos de componentes  $\{Z_i^l(u), l=0, \dots, L\}$  espacialmente não correlacionadas.

$$Z_i(u) = \sum_{l=0}^L Z_i^l(u) + m_i \quad (2.8)$$

Para todos os valores de  $i, j, l$  e  $l'$ :

$$\begin{aligned} E[Z_i(u)] &= m_i \\ E[Z_i^l(u)] &= 0 \end{aligned} \quad (2.9)$$

e

$$\begin{aligned} \text{Cov}(Z_i^l(u), Z_j^l(u+h)) &= E[Z_i^l(u)Z_j^l(u+h)] = C_{ij}^l(h) \\ \text{Cov}(Z_i^l(u), Z_j^{l'}(u+h)) &= 0 \quad \text{se } l \neq l' \end{aligned} \quad (2.10)$$

As covariâncias cruzadas  $C_{ij}^l(h)$  associadas com as componentes são consideradas simétricas, compostas por coeficientes  $b_{ij}^l$  e são proporcionais aos correlogramas  $\rho^l(h)$ :

$$C_{ij}(h) = \sum_{l=0}^L C_{ij}^l(h) = \sum_{l=0}^L b_{ij}^l \rho^l(h) \quad (2.11)$$

As matrizes de correionalização  $\mathbf{B}_l$  de ordem  $N_v \times N_v$  podem ser construídas e assim teremos um modelo de covariância multivariado:

$$\mathbf{C}(h) = \sum_{l=0}^L \mathbf{B}_l \rho^l(h) \quad (2.12)$$

As matrizes de correionalização  $\mathbf{B}_l$  devem estar definidas positivamente (Johnson e Wichern, 1998), sendo essa condição uma das mais difíceis de serem satisfeitas na prática sem o auxílio de softwares específicos quando o número de variáveis é maior do que duas ou três.

### 2.1.2.2 Modelo de Correlação Intrínseca (MCI)

Quando a correlação de um conjunto de variáveis é independente da escala espacial, disse-se que as mesmas estão intrinsecamente correlacionadas. Nesse caso, as relações espaciais entre as variáveis podem ser descritas utilizando a matriz de variâncias-covariâncias  $\mathbf{\Sigma}$  e uma mesma função de correlação  $\rho(h)$ :

$$\mathbf{C}(h) = \mathbf{\Sigma}\rho(h) \quad (2.13)$$

O modelo é chamado de correlação intrínseca porque a correlação entre duas variáveis não depende da escala espacial:

$$r_{ij}(h) = \frac{C_{ij}(h)}{\sqrt{C_{ii}(h)C_{jj}(h)}} \frac{b_{ij}\rho(h)}{\sqrt{b_{ii}\rho(h)b_{jj}\rho(h)}} = \frac{b_{ij}}{\sqrt{b_{ii}b_{jj}}} = \text{constante} \in [-1,1] \quad (2.14)$$

onde,

$C_{ii}(h)$  é a covariância da variável de interesse,

$C_{jj}(h)$  é a covariância da variável auxiliar,

$C_{ij}(h)$  é a covariância cruzada entre as duas variáveis,

$\rho(h)$  é o correlograma comum a todas as variáveis,

$r_{ij}(h)$  é o coeficiente de correlação regionalizado, que no modelo de correlação intrínseca é independente da escala espacial.

O modelo de correlação intrínseca é obtido quando as covariâncias diretas e cruzadas são escolhidas de modo que sejam proporcionais à mesma função de correlação básica:

$$C_{ij}(h) = b_{ij}\rho(h) \quad (2.15)$$

Expresso em função de variogramas, o modelo de correlação intrínseca é definido como o produto da matriz de correogionalização ( $\mathbf{B}=[b_{ij}]$ ) e de um variograma padronizado:

$$\mathbf{\Gamma}(h) = \mathbf{B}\gamma(h) \quad (2.16)$$

O modelo de correlação intrínseco é um caso particular do MLC. O aspecto mais importante na sua aplicação é determinar se o mesmo é ou não apropriado para um problema em particular. Uma possibilidade para esta verificação é analisar a função de co-dispersão  $cc(h)$ , análoga ao coeficiente de correlação regionalizado, determinada como o quociente do variograma cruzado  $\gamma_{ij}(h)$  e a raiz do produto dos variogramas diretos da variável de interesse  $\gamma_{ii}(h)$  e da variável auxiliar  $\gamma_{jj}(h)$ :

$$cc(h) = \frac{\gamma_{ij}(h)}{\sqrt{\gamma_{ii}(h)\gamma_{jj}(h)}} \quad (2.17)$$

Se o coeficiente de co-dispersão for constante para todo  $h$ , a correlação entre as variáveis não depende da escala espacial. Outro teste para determinar a correlação intrínseca baseia-se na análise das componentes principais (PCA). Se os variogramas cruzados entre as componentes principais são diferentes de zero para algum vetor de separação  $h$ , então as componentes principais não estão descorrelacionadas para todas as escalas espaciais e o modelo de correlação intrínseca não é apropriado (Goovaerts, 1993; Wackernagel, 1994).

## 2.2 Decomposição em Fatores Independentes

A seguir, apresentam-se brevemente, alguns conceitos básicos de álgebra e de estatística multivariada para um melhor entendimento da decomposição em componentes principais (PCA) e em fatores de autocorrelação mínimos/máximos (MAF). Para uma revisão mais detalhada desses conceitos pode-se consultar Johnson e Wichern (1998) entre outros autores.

### 2.2.1 Conceitos básicos de Álgebra

A seguir são apresentados alguns conceitos básicos de álgebra necessários para o entendimento das metodologias utilizadas.

#### 2.2.1.1 Autovalores e autovetores

Uma matriz quadrada  $\mathbf{A}$  de dimensões  $k \times k$ , têm  $k$  pares de autovalores e autovetores. Matematicamente, existem dois tipos de autovetores: autovetores direitos e esquerdos. Geralmente, especifica-se o tipo de autovetor para os autovetores esquerdos.

Considerando o conjunto de autovalores  $\lambda = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k\}$  e o correspondente autovetor (direito)  $\mathbf{X}$  pode-se escrever:

$$\mathbf{AX} = \lambda\mathbf{X} \quad (2.18)$$

No caso de autovetores esquerdos ( $\mathbf{X}'$ ), os mesmos aparecem à esquerda no produto de matrizes:

$$\mathbf{X}'\mathbf{A} = \lambda\mathbf{X}' \quad (2.19)$$

Se a matriz  $\mathbf{A}$  é simétrica, os autovetores direitos e esquerdos são transpostos.

Por definição, os autovalores satisfazem a seguinte equação característica, onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade:

$$|\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}| = 0 \quad (2.20)$$

Geralmente, os autovetores são normalizados de modo de que tenham comprimento unitário ( $1 = \mathbf{e} \mathbf{e}^T$ ) sendo denotados como  $\mathbf{e}$ .

Os autovetores são escolhidos de forma que sejam mutuamente perpendiculares (ortogonais):

$$\mathbf{e} \mathbf{e}^T = \mathbf{I} \quad (2.21)$$

### 2.2.1.2 Decomposição espectral

A decomposição espectral é a fatorização de uma matriz simétrica, definida positivamente, no produto das matrizes de autovetores e autovalores da seguinte forma:

$$\mathbf{A} = \mathbf{P} \mathbf{\Lambda} \mathbf{P}^T = \sum_{i=1}^k \lambda_i \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T \quad (2.22)$$

onde,

$\mathbf{A}$  é uma matriz quadrada de dimensões  $k \times k$ , simétrica e definida positivamente,

$\mathbf{P}$  é a matriz de autovetores de  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{P} = [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_k]$ ,

e  $\mathbf{\Lambda}$  é a matriz de autovalores de  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{\Lambda} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_k \end{bmatrix}$ .

### 2.2.1.3 Vetor de médias e matriz de covariâncias

Consideremos um vetor de funções randômicas  $\mathbf{Z} = [Z_1, Z_2, \dots, Z_{N_V}]$ . Cada elemento de  $\mathbf{Z}$  é uma variável randômica e tem a sua própria distribuição de probabilidade. Assim, as médias  $m_i$  e as variâncias  $\sigma_i^2$  são definidas respectivamente como:

$$m_i = E(Z_i)$$

$$\sigma_i^2 = E(Z_i - m_i)^2 \quad i = 1, \dots, Nv \quad (2.23)$$

A covariância entre duas variáveis randômicas  $Z_i$  e  $Z_j$  se expressa como:

$$C_{ij} = E(Z_i - m_i)(Z_j - m_j) \quad (2.24)$$

As médias podem ser expressas como um vetor:

$$\mathbf{m} = \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{Nv} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E(Z_1) \\ E(Z_2) \\ \vdots \\ E(Z_{Nv}) \end{bmatrix} = E(\mathbf{Z}) \quad (2.25)$$

E a matriz simétrica de variâncias e covariâncias é:

$$\Sigma = C(\mathbf{Z}) = E(\mathbf{Z} - \mathbf{m})(\mathbf{Z} - \mathbf{m})^T = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1Nv} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2Nv} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{1Nv} & C_{2Nv} & \dots & C_{NvNv} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^2 & C_{12} & \dots & C_{1Nv} \\ C_{21} & \sigma_{22}^2 & \dots & C_{2Nv} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{1Nv} & C_{2Nv} & \dots & \sigma_{NvNv}^2 \end{bmatrix} \quad (2.26)$$

O coeficiente de correlação, definido em termos de covariâncias e variâncias é dado por:

$$\rho_{ij} = \frac{C_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}^2 \sigma_{jj}^2}} \quad (2.27)$$

Portanto, a matriz de correlação é dada por:

$$\rho = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{11}^2}{\sqrt{\sigma_{11}^2 \sigma_{11}^2}} & \frac{C_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}^2 \sigma_{22}^2}} & \dots & \frac{C_{1Nv}}{\sqrt{\sigma_{11}^2 \sigma_{NvNv}^2}} \\ \frac{C_{12}}{\sqrt{\sigma_{11}^2 \sigma_{22}^2}} & \frac{\sigma_{22}^2}{\sqrt{\sigma_{22}^2 \sigma_{22}^2}} & \dots & \frac{C_{2Nv}}{\sqrt{\sigma_{22}^2 \sigma_{NvNv}^2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{C_{1Nv}}{\sqrt{\sigma_{11}^2 \sigma_{NvNv}^2}} & \frac{C_{2Nv}}{\sqrt{\sigma_{22}^2 \sigma_{NvNv}^2}} & \dots & \frac{C_{NvNv}}{\sqrt{\sigma_{NvNv}^2 \sigma_{NvNv}^2}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \rho_{12} & \dots & \rho_{1Nv} \\ \rho_{12} & 1 & \dots & \rho_{2Nv} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{1Nv} & \rho_{2Nv} & \dots & 1 \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

E a matriz dos desvios padrões é:

$$\mathbf{v}^{1/2} = \begin{bmatrix} \sqrt{\sigma_{11}^2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{\sigma_{22}^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sqrt{\sigma_{NvNv}^2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{NvNv} \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

Pode-se, então, verificar a relação:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{V}^{1/2} \boldsymbol{\rho} \mathbf{V}^{1/2} \quad (2.30)$$

Consideremos, agora, combinações lineares das funções randômicas  $Z_1, Z_2, \dots, Z_{N_V}$ . Se, por exemplo, a variável randômica  $Z_1$  for multiplicada por uma constante  $c$ , então:

$$E(cZ_1) = cE(Z_1) = cm_1 \quad (2.31)$$

e

$$\sigma^2(cZ_1) = E(cZ_1 - cm_1)^2 = c^2 \sigma^2(Z_1) = c^2 \sigma_{11}^2 \quad (2.32)$$

Se considerarmos, também, que  $a$  e  $b$  são constantes, pode-se expressar que:

$$\begin{aligned} C(aZ_1, bZ_2) &= E(aZ_1 - am_1)(bZ_2 - bm_2) \\ &= abE(Z_1 - m_1)(Z_2 - m_2) \\ &= abC(Z_1, Z_2) = ab\sigma_{12} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Para a combinação linear  $aZ_1 + bZ_2$  temos:

$$\begin{aligned} E(aZ_1 + bZ_2) &= aE(Z_1) + bE(Z_2) = am_1 + bm_2 \\ \sigma^2(aZ_1 + bZ_2) &= E[(aZ_1 + bZ_2) - (am_1 + bm_2)]^2 \\ &= E[a(Z_1 - m_1) + b(Z_2 - m_2)]^2 \\ &= E[a^2(Z_1 - m_1)^2 + b^2(Z_2 - m_2)^2 + 2ab(Z_1 - m_1)(Z_2 - m_2)] \\ &= a^2 \text{Var}(Z_1) + b^2 \text{Var}(Z_2) + 2ab \text{Cov}(Z_1, Z_2) \\ &= a^2 \sigma_{11}^2 + b^2 \sigma_{22}^2 + 2ab\sigma_{12} \end{aligned} \quad (2.34)$$

Fazendo  $\mathbf{c}^T = [a, b]$ ,  $aZ_1 + bZ_2$  pode ser escrito como:

$$[a \quad b] \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \end{bmatrix} = \mathbf{c}^T \mathbf{Z} \quad (2.35)$$

Também,  $E[aZ_1 + bZ_2] = am_1 + bm_2$  pode ser expressa como:

$$[a \quad b] \begin{bmatrix} m_1 \\ m_2 \end{bmatrix} = \mathbf{c}^T \mathbf{m} \quad (2.36)$$

Considerando que a matriz de variâncias-covariâncias  $\boldsymbol{\Sigma}$  seja:

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{11}^2 & C_{12} \\ C_{12} & \sigma_{22}^2 \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

Então, a variância na Equação (2.34) pode-se expressar como:

$$\sigma^2(aZ_1 + bZ_2) = \sigma^2(\mathbf{c}^T \mathbf{Z}) = \mathbf{c}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{c} \quad (2.38)$$

Estendendo as Equações acima para uma combinação linear de  $N_V$  variáveis randômicas  $\mathbf{c}^T \mathbf{Z} = c_1 Z_1 + \dots + c_{N_V} Z_{N_V}$ :

$$\begin{aligned} E(\mathbf{c}^T \mathbf{Z}) &= \mathbf{c}^T \mathbf{m} \\ \sigma^2(\mathbf{c}^T \mathbf{Z}) &= \mathbf{c}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{c} \end{aligned} \quad (2.39)$$

Considere  $q$  combinações lineares de  $N_V$  funções randômicas  $Z_1, Z_2, \dots, Z_{N_V}$ :

$$\begin{aligned} X_1 &= c_{11}Z_1 + c_{12}Z_2 + \dots + c_{1N_V}Z_{N_V} \\ X_2 &= c_{21}Z_1 + c_{22}Z_2 + \dots + c_{2N_V}Z_{N_V} \\ &\vdots \\ X_q &= c_{q1}Z_1 + c_{q2}Z_2 + \dots + c_{qN_V}Z_{N_V} \end{aligned} \quad (2.40)$$

ou expresso em forma matricial:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{N_V} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \dots & c_{1N_V} \\ c_{21} & c_{22} & \dots & c_{2N_V} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{N_V1} & c_{N_V2} & \dots & c_{N_VN_V} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Z_1 \\ Z_2 \\ \vdots \\ Z_{N_V} \end{bmatrix} = \mathbf{CZ} \quad (2.41)$$

Assim, a combinação linear  $\mathbf{X} = \mathbf{CZ}$  tem:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_X &= E(\mathbf{X}) = E(\mathbf{CZ}) = \mathbf{Cm}_Z \\ \boldsymbol{\Sigma}_X &= C(\mathbf{X}) = C(\mathbf{CZ}) = \mathbf{C}\boldsymbol{\Sigma}_Z\mathbf{C}^T \end{aligned} \quad (2.42)$$

onde,

$\mathbf{m}_X$  e  $\mathbf{m}_Z$  são os vetores das médias dos vetores  $X$  e  $Z$  respectivamente,

$\boldsymbol{\Sigma}_X$  e  $\boldsymbol{\Sigma}_Z$  são as matrizes de variâncias-covariâncias de  $X$  e  $Z$  respectivamente.

### 2.2.2 Decomposição em componentes principais (PCA)

As componentes principais são combinações lineares das funções randômicas  $Z_1, Z_2, \dots, Z_{N_V}$ . Geometricamente, essas combinações lineares representam a seleção de um novo sistema de coordenadas, obtido rotacionando o sistema original, no qual  $Z_1, Z_2, \dots, Z_{N_V}$  são considerados os eixos de coordenadas. Os novos eixos representam as direções de maior variabilidade. As componentes principais não apresentam correlação entre si para um vetor de



separação zero e dependem somente da matriz de covariância  $\Sigma$  (ou da matriz de correlação  $\rho$ ) de  $Z_1, Z_2, \dots, Z_{Nv}$ .

Consideremos a matriz de variâncias-covariâncias  $\Sigma$  associada com o vetor randômico  $\mathbf{Z}=[Z_1, Z_2, \dots, Z_{Nv}]$ . Sejam  $(\lambda_1, \mathbf{e}_1), (\lambda_2, \mathbf{e}_2), \dots, (\lambda_{Nv}, \mathbf{e}_{Nv})$  os pares de autovalores e autovetores de  $\Sigma$  de modo que  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_{Nv} \geq 0$ . A componente principal  $i$ -ésima  $Y_i$  está dada por:

$$Y_i = \mathbf{e}_i^T \mathbf{Z} = e_{i1}Z_1 + e_{i2}Z_2 + \dots + e_{iNv}Z_{Nv} \quad i = 1, 2, \dots, Nv \quad (2.43)$$

Assim, pode-se demonstrar (Johnson e Wichern, 1998, p. 460) que a variância da componente principal é:

$$\sigma^2(Y_i) = \mathbf{e}_i^T \Sigma \mathbf{e}_i = \lambda_i \quad i = 1, 2, \dots, Nv \quad (2.44)$$

Ao mesmo tempo, as componentes principais são independentes entre si, portanto:

$$C(Y_i, Y_k) = \mathbf{e}_i^T \Sigma \mathbf{e}_k = 0 \quad i \neq k \quad (2.45)$$

A proporção da variância total explicada pela  $i$ -ésima componente principal  $Y_i$  então é:

$$\% \text{Variância total}_{Y_i} = \frac{\lambda_i}{\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_{Nv}} \cdot 100 \quad i = 1, 2, \dots, Nv \quad (2.46)$$

Geralmente, as primeiras componentes representam uma parte importante da variância total, podendo substituir-se a totalidade das variáveis sem uma perda muito importante de informação (redução dimensional).

Demonstra-se (Johnson e Wichern, 1998, p. 462) que o coeficiente de correlação entre uma componente principal  $Y_i$  e uma dada função randômica  $Z_k$ , se expressa pela seguinte relação:

$$\rho_{Y_i, Z_k} = \frac{e_{ik} \sqrt{\lambda_i}}{\sqrt{\sigma_{kk}^2}} \quad i, k = 1, 2, \dots, Nv \quad (2.47)$$

As componentes principais geralmente são obtidas de variáveis estandardizadas  $X_1, X_2, \dots, X_{Nv}$ , para independê-las dos fatores de escala:

$$\begin{aligned}
X_1 &= \frac{(Z_1 - m_1)}{\sqrt{\sigma_{11}^2}} \\
X_2 &= \frac{(Z_2 - m_2)}{\sqrt{\sigma_{22}^2}} \\
&\vdots \\
X_{Nv} &= \frac{(Z_{Nv} - m_{Nv})}{\sqrt{\sigma_{NvNv}^2}}
\end{aligned} \tag{2.48}$$

ou em notação matricial:

$$\mathbf{X} = (\mathbf{V}^{1/2})^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{m}) \tag{2.49}$$

Assim,

$$\begin{aligned}
E[\mathbf{X}] &= \mathbf{0} \\
C(\mathbf{X}) = \boldsymbol{\rho} &= (\mathbf{V}^{1/2})^{-1} \boldsymbol{\Sigma} (\mathbf{V}^{1/2})^{-1}
\end{aligned} \tag{2.50}$$

As componentes principais de  $\mathbf{X}$  podem ser obtidas a partir dos autovetores da matriz de correlação  $\boldsymbol{\rho}$  de  $\mathbf{Z}$ . Assim, as Equações anteriores são aplicáveis com algumas simplificações já que a variância de cada variável estandardizada  $X$  é unitária. É importante salientar que os autovetores e autovalores da matriz de correlação  $\boldsymbol{\rho}$  são diferentes daqueles da matriz de variâncias-covariâncias  $\boldsymbol{\Sigma}$ .

Portanto, a  $i$ -ésima componente principal  $Y_i$  das variáveis estandardizadas  $\mathbf{X}^T = [X_1, X_2, \dots, X_{Nv}]$  é:

$$Y_i = \mathbf{e}_i^T \mathbf{X} = \mathbf{e}_i^T (\mathbf{V}^{1/2})^{-1} (\mathbf{Z} - \mathbf{m}) \quad i = 1, 2, \dots, Nv \tag{2.51}$$

Analogamente,

$$\sum_{i=1}^{Nv} \sigma^2(Y_i) = \sum_{i=1}^{Nv} \sigma^2(X_i) = Nv \tag{2.52}$$

e o coeficiente de correlação entre a  $i$ -ésima componente principal  $Y_i$  e a variável estandardizada  $X_k$  é:

$$\rho_{Y_i X_k} = e_{ik} \sqrt{\lambda_i} \quad i, k = 1, 2, \dots, Nv \tag{2.53}$$

### 2.2.2.1 Krigagem das Componentes Principais (KPCA)

Com a decomposição em componentes principais, pode-se trasladar um vetor de variáveis regionalizadas  $\mathbf{Z}(u) = [Z_1(u), Z_2(u), \dots, Z_{Nv}(u)]$  a uma série de

combinações lineares das variáveis originais  $Z_i(u)$ , as quais não estão correlacionadas para  $|h| = 0$ .

A krigagem das componentes principais KPCA (Davis e Greenes, 1983) capitaliza a ortogonalidade dessas componentes para simplificar a cokrigagem de  $N_v$  variáveis na krigagem de  $N_v$  componentes principais não correlacionadas. Com isso, diminuem-se o esforço computacional e as dificuldades da modelagem da correionalização necessária na cokrigagem.

A krigagem das componentes principais é realizada em cinco passos:

- i. A matriz de correlação  $\rho$  das  $N_v$  variáveis  $Z_i(u)$  é determinada a partir dos dados presentes em  $n$  locais onde todos os  $N_v$  atributos são conhecidos (configuração isotópica).
- ii. Em cada local amostral  $u_\alpha$  são determinadas as  $N_v$  componentes principais  $Y_k(u_\alpha)$  calculadas a partir dos  $N_v$  atributos estandardizados nesse local:

$$Y_k(u_\alpha) = \sum_{i=1}^{N_v} e_{ki} \left( \frac{z_i(u_\alpha) - m_i}{\sigma_{ii}} \right) \quad k = 1, \dots, N_v \quad (2.54)$$

onde,

$e_{ki}$  é o autovetor correspondente à variável  $Z_i(u)$  na componente principal  $k$ ,  $Y_k(u)$ ,

$m_i$  e  $\sigma_{ii}$  são a média e o desvio padrão dos dados de  $Z_i(u)$ .

A matriz dos valores  $e_{ki}$  é  $\mathbf{Q}=[e_{ki}]$  é originada na decomposição espectral da matriz de correlação  $\rho$ :

$$\rho = \mathbf{Q}\mathbf{\Lambda}\mathbf{Q}^T \quad \text{com} \quad \mathbf{Q}^T\mathbf{Q} = \mathbf{I} \quad (2.55)$$

onde,

$\mathbf{Q}$  é a matriz de autovetores de  $\rho$ ,

$\mathbf{\Lambda}=[\lambda_k]$  é a matriz diagonal de autovalores da matriz  $\rho$ ,

e  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade de dimensão  $N_v \times N_v$ .

- iii. Computa-se e modela-se os variogramas diretos  $\gamma_{kk}(h)$  das  $N_v$  componentes principais a partir dos valores  $Y_k(u_\alpha)$ .
- iv. Estima-se separadamente cada uma das  $N_v$  componentes principais  $Y_k(u)$ . O estimador de krigagem ordinária da  $k$ -ésima componente  $Y_{OKk}^*(u)$  pode-se escrever como:

$$Y_{OK_k}^*(u) = \sum_{\alpha=1}^{n(u)} \lambda_{\alpha k}^{OK} \cdot Y_k(u_\alpha) \quad (2.56)$$

onde,

$\lambda_{\alpha k}^{OK}$  são os pesos de krigagem ordinária atribuídos aos valores da componente principal k nos locais  $u_\alpha$ .

- v. A estimativa de  $Z_i(u)$  em cada local  $u$   $Z_{KPCA_i}^*(u)$ , é obtida pela combinação linear das estimativas das componentes principais nesse local adicionada à média do atributo  $m_i$  (retro-transformação):

$$Z_{KPCA_i}^*(u) = \sum_{k=1}^K a_{ki} \cdot Y_{OK_k}^*(u) \cdot \sigma_{ii} + m_i \quad (2.57)$$

vi.

onde

a matriz de coeficientes de transformação  $\mathbf{A}=[a_{ki}]$  é a inversa da matriz dos autovetores:  $\mathbf{A}=\mathbf{Q}^{-1}$ .

### 2.2.2.2 Ortogonalidade das componentes principais

Os estimadores de krigagem e de cokrigagem são idênticos se as  $N_v$  variáveis envolvidas na estimativa são mutuamente espacialmente independentes.

Na decomposição em componentes principais, as  $N_v$  componentes  $Y_k(u)$  são, por construção, ortogonais para um vetor de separação nulo  $|h|=0$ :

$$C\{Y_k(u), Y_{k'}(u)\} = 0 \quad k \neq k' \quad (2.58)$$

Na KPCA, assume-se que essa ortogonalidade é trasladável a todos os outros vetores de separação  $h$ :

$$C\{Y_k(u), Y_{k'}(u+h)\} = 0 \quad k \neq k' \quad (2.59)$$

Na teoria, a condição acima é satisfeita só se as  $N_v$  variáveis estão intrinsecamente correlacionadas (Goovaerts, 1993). Na prática, essa condição pode ser verificada observando os variogramas cruzados entre as componentes principais (Goovaerts, 1993; Goovaerts, 1997).

Um aspecto importante na KPCA é que são considerados somente os locais amostrais onde todos os  $N_v$  atributos  $Z_i(u)$  são medidos conjuntamente (configuração isotópica). Os bancos de dados com configuração heterotópica

podem ser completados previamente utilizando alguma técnica de interpolação como exemplo krigagem ordinária ou por simulação estocástica.

### 2.2.3 Fatores de Autocorrelação Mínimos e Máximos (MAF)

A decomposição em fatores de autocorrelação mínimos e máximos (MAF) está baseada na decomposição em componentes principais, incorporando a decorrelação espacial além do vetor de separação nulo.

A metodologia foi desenvolvida por Switzer e Green (1984) para o processamento de imagens multi-espectrais provenientes de sensoriamento remoto.

Como é apresentado em Desbarats e Dimitrakopoulos (2000) e em Boucher (2003), a idéia é transformar um vetor de observações multivariadas normalizadas  $\mathbf{Z}(u)=[Z_1(u), Z_2(u), \dots, Z_{Nv}(u)]^T$  num conjunto de  $Nv$  combinações lineares ortogonais:

$$Y_i(u) = \mathbf{a}_i^T \cdot \mathbf{Z}(u) \quad i = 1, \dots, Nv \quad (2.60)$$

onde

$Y_i(u)$  é o  $i$ -ésimo fator MAF,

$\mathbf{a}_i^T$  é a matriz de transformação.

Cada transformação  $Y_i(u)$  é definida de modo de exibir uma correlação espacial maior do que qualquer uma das transformações previamente determinadas  $Y_j(u)$  e ao mesmo tempo sendo ortogonal a todas elas. Considerando que  $\rho_i(\Delta)$  é o coeficiente de correlação espacial entre  $Y_i(u)$  e  $Y_i(u+h)$  para um vetor de separação pequeno  $h=\Delta$ , os coeficientes  $\mathbf{a}=[\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_{Nv}]^T$  são definidos de modo tal que:

$$\begin{aligned} \rho_1(\Delta) &= C(\mathbf{a}_1^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}_1^T \mathbf{Z}(u + \Delta)) = \min_a C(\mathbf{a}^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)) \\ \rho_i(\Delta) &= C(\mathbf{a}_i^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}_i^T \mathbf{Z}(u + \Delta)) = \min_a C(\mathbf{a}^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)) \\ \rho_{Nv}(\Delta) &= C(\mathbf{a}_{Nv}^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}_{Nv}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)) = \max_a C(\mathbf{a}^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)) \end{aligned} \quad (2.61)$$

Sujeito à condição de ortogonalidade:

$$C(\mathbf{a}_i^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{a}_j^T \mathbf{Z}(u)) = 0 \quad \text{com } j < i \quad (2.62)$$

Pode-se demonstrar (Switzer e Green, 1984; Berman, 1985) que os vetores de coeficientes  $a_i$  que levam ao ranking de transformações MAF são obtidos como os autovetores esquerdos da matriz não simétrica  $\mathbf{B}_\Delta \mathbf{B}^{-1}$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{B}_\Delta &= C[(\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta)), (\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta))] = 2\Gamma_Z(\Delta) \\ \mathbf{B} &= C[\mathbf{Z}(u), \mathbf{Z}(u)] \end{aligned} \quad (2.63)$$

onde,

$\mathbf{B}_\Delta$  é a matriz de covariâncias para uma diferença do vetor de separação  $\Delta$ ,

$\mathbf{B}$  é a matriz de variâncias-covariâncias de  $\mathbf{Z}(u)$

e  $\Gamma_Z(\Delta)$  é a matriz de variogramas para o vetor de separação  $\Delta$ .

Considere o vetor de funções randômicas multivariado  $\mathbf{Z}(u) = [Z_1(u), \dots, Z_{N_V}(u)]^T$ , com  $N_V$  dimensões, estacionário, de modo tal que:

$$\mathbf{Z}(u) = \mathbf{S}(u) + \mathbf{N}(u) \quad (2.64)$$

onde  $\mathbf{S}(u)$  e  $\mathbf{N}(u)$  são as componentes ortogonais sinal e ruído, respectivamente.

As matrizes de variância-covariância de  $\mathbf{N}(u)$ ,  $\mathbf{S}(u)$  e  $\mathbf{Z}(u)$  são, portanto,

$$\begin{aligned} C[\mathbf{N}(u), \mathbf{N}(u)] &= \mathbf{C}_N(0) = \mathbf{B}_0 \\ C[\mathbf{S}(u), \mathbf{S}(u)] &= \mathbf{C}_S(0) = \mathbf{B}_1 \\ C[\mathbf{Z}(u), \mathbf{Z}(u)] &= \mathbf{C}_Z(0) = \mathbf{B}_0 + \mathbf{B}_1 = \mathbf{B} \end{aligned} \quad (2.65)$$

Assumindo um modelo de correionalização intrínseco para  $\mathbf{N}(u)$  e  $\mathbf{S}(u)$ ,  $\mathbf{Z}(u)$  é representado utilizando um modelo linear de correionalização de duas estruturas (Goovaerts, 1993). As matrizes de covariância espacial são escritas:

$$\begin{aligned} C[\mathbf{N}(u), \mathbf{N}(u+h)] &= \mathbf{C}_N(h) = \mathbf{B}_0 \rho_0(h) \\ C[\mathbf{S}(u), \mathbf{S}(u+h)] &= \mathbf{C}_S(h) = \mathbf{B}_1 \rho_1(h) \\ C[\mathbf{Z}(u), \mathbf{Z}(u+h)] &= \mathbf{C}_Z(h) = \mathbf{B}_0 \rho_0(h) + \mathbf{B}_1 \rho_1(h) \end{aligned} \quad (2.66)$$

onde  $\rho_0(h)$  e  $\rho_1(h)$  são as funções de correlação espacial de modo tal que  $\rho_1(h) > \rho_0(h)$  para todo  $h > 0$ .

Dessas definições, a matriz de variância-covariância da diferença  $(\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta))$ , para vetores de separação pequenos  $\Delta$  é

$$\begin{aligned} C[(\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta)), (\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta))] \\ = 2\Gamma_Z(\Delta) = 2(1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{B} + 2(\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))\mathbf{B}_0 \end{aligned} \quad (2.67)$$

$$\begin{aligned}
C[(\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta)), (\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta))] &= C[(\mathbf{Z}(u)^2 + \mathbf{Z}(u + \Delta)^2 - 2 \cdot \mathbf{Z}(u) \cdot \mathbf{Z}(u + \Delta))] \\
&= \sigma^2[\mathbf{Z}(u)] + \sigma^2[\mathbf{Z}(u + \Delta)] - 2C[\mathbf{Z}(u), \mathbf{Z}(u + \Delta)] = \mathbf{B} + \mathbf{B} - 2(\mathbf{B}_0 \rho_0(h) + \mathbf{B}_1 \rho_1(h)) = \\
&= 2\mathbf{B} - 2\mathbf{B}_0 \rho_0(h) - 2(\mathbf{B} - \mathbf{B}_0) \rho_1(h) = 2\mathbf{B} - 2\mathbf{B}_0 \rho_0(h) - 2\mathbf{B} \rho_1(h) + 2\mathbf{B}_0 \rho_1(h) = \\
&= 2\mathbf{B}(1 - \rho_1(h)) + 2\mathbf{B}_0(\rho_1(h) - \rho_0(h)) \\
h = \Delta &\Rightarrow C[(\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta)), (\mathbf{Z}(u) - \mathbf{Z}(u + \Delta))] = 2\mathbf{B}(1 - \rho_1(\Delta)) + 2\mathbf{B}_0(\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))
\end{aligned}$$

onde  $\Gamma_Z(\Delta)$  é a matriz de semivariogramas de  $\mathbf{Z}(u)$  para um vetor de separação pequeno  $h = \Delta$ .

Multiplicando a Equação (2.67) por  $\mathbf{B}^{-1}$  obtém-se:

$$2\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1} = 2(1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{I} + 2(\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))\mathbf{B}_0\mathbf{B}^{-1} \quad (2.68)$$

O produto pode ser expresso em termos da matriz dos autovetores esquerdos  $\mathbf{A}^T$  (autovetores de  $(2\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1})$ ) e a matriz diagonal dos autovalores  $\Lambda$  (autovalores de  $(2\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1})$ ):

$$\mathbf{A}^T (\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1}) = (1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{A}^T + (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))\mathbf{A}^T \mathbf{B}_0\mathbf{B}^{-1} = \left(\frac{\Lambda}{2}\right)\mathbf{A}^T \quad (2.69)$$

As colunas da matriz  $\mathbf{A}^T$  estão compostas pelos autovetores ortogonais. Os elementos que conformam a matriz diagonal  $\Lambda$  são os correspondentes autovalores em ordem decrescente de magnitude.

Considerando que  $\mathbf{Y}(u) = \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u)$  e que  $E[\mathbf{Z}(u)] = 0$  (variáveis normalizadas), a variância de  $\mathbf{Y}(u)$  é expressa por:

$$C[\mathbf{Y}(u), \mathbf{Y}(u)] = E[\mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u)^2 \mathbf{A}] = \mathbf{A}^T E[\mathbf{Z}(u)^2] \mathbf{A} = \mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{A} = \mathbf{I} \quad (2.70)$$

Portanto, ao multiplicar-se a Equação (2.69) pelo produto de matrizes  $\mathbf{B} \mathbf{A}$  obtém-se:

$$(1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{I} + (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))\mathbf{A}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} = \frac{\Lambda}{2} \quad (2.71)$$

A partir das Equações (2.70) e (2.71) observa-se que os autovetores de  $2\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1}$  e de  $\mathbf{B}_0\mathbf{B}^{-1}$  são os mesmos e são independentes do valor do vetor de separação  $\Delta$ :

$$\mathbf{A}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{B}^{-1} = \frac{\left[\frac{\Lambda}{2} \mathbf{A}^T - (1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{A}^T\right]}{(\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))} = \frac{1}{(\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))} \underbrace{\left[\frac{\Lambda}{2} - (1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{I}\right]}_{\Lambda^*} \mathbf{A}^T = \Lambda^* \mathbf{A}^T \quad (2.72)$$

A matriz de correlação espacial de  $\mathbf{Y}(u)$  para o vetor de separação  $\Delta$  é:

$$C[\mathbf{Y}(x), \mathbf{Y}(x + \Delta)] = \rho_1(\Delta) \mathbf{I} - (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta)) \mathbf{A}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \quad (2.73)$$

$$\mathbf{Y}(u) = \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u)$$

$$\mathbf{Y}(u + \Delta) = \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)$$

$$C[\mathbf{Y}(u), \mathbf{Y}(u + \Delta)] = C[\mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)]$$

$$C[a, b] = \frac{C(a, b)}{\sqrt{\sigma^2(a)} \sqrt{\sigma^2(b)}}$$

$$C[\mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u), \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u + \Delta)] = C[(\mathbf{A}^T)^2 \mathbf{Z}(u) \mathbf{Z}(u + \Delta)] = (\mathbf{A}^T)^2 C[\mathbf{Z}(u), \mathbf{Z}(u + \Delta)] =$$

$$(\mathbf{A}^T)^2 (\mathbf{B}_0 \rho_0(\Delta) + \mathbf{B}_1 \rho_1(\Delta))$$

$$\left. \begin{array}{l} \sigma^2(a) = (\mathbf{A}^T)^2 \mathbf{B} \\ \sigma^2(b) = (\mathbf{A}^T)^2 \mathbf{B} \end{array} \right\} \Rightarrow C[a, b] = \frac{(\mathbf{A}^T)^2 (\mathbf{B}_0 \rho_0(\Delta) + \mathbf{B}_1 \rho_1(\Delta))}{(\mathbf{A}^T)^2 \mathbf{B}} = \mathbf{B}_0 \rho_0(\Delta) \mathbf{B}^{-1} + \mathbf{B}_1 \rho_1(\Delta) \mathbf{B}^{-1}$$

$$\mathbf{B}_0 \rho_0(\Delta) \mathbf{B}^{-1} + (\mathbf{B} - \mathbf{B}_0) \rho_1(\Delta) \mathbf{B}^{-1} = \mathbf{B}_0 \rho_0(\Delta) \mathbf{B}^{-1} + \mathbf{B} \rho_1(\Delta) \mathbf{B}^{-1} - \mathbf{B}_0 \rho_1(\Delta) \mathbf{B}^{-1} =$$

$$\rho_1(\Delta) \mathbf{I} - \mathbf{B}_0 \mathbf{B}^{-1} (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta)) \quad (*)$$

$$\mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{A} = \mathbf{I}$$

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{B}) \mathbf{A} = \mathbf{A} (\mathbf{A}^T \mathbf{B}) = \mathbf{A} \mathbf{A}^T \mathbf{B} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^T \underbrace{\mathbf{B} \mathbf{B}^{-1}}_{\mathbf{I}} = \mathbf{B}^{-1} \Rightarrow \mathbf{A} \mathbf{A}^T = \mathbf{B}^{-1}$$

$$\text{Substituindo em (*): } \rho_1(\Delta) \mathbf{I} - \mathbf{B}_0 \mathbf{A} \mathbf{A}^T (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))$$

Combinando as Equações (2.71) e (2.73):

$$C[\mathbf{Y}(u), \mathbf{Y}(u + \Delta)] = \mathbf{I} - \frac{\Lambda}{2} \quad (2.74)$$

$$\mathbf{I} - \rho_1(\Delta) \mathbf{I} + (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta)) \mathbf{A}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} = \frac{\Lambda}{2} \Rightarrow \mathbf{I} - \frac{\Lambda}{2} = \rho_1(\Delta) \mathbf{I} + (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta)) \mathbf{A}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A}$$

$$\Rightarrow C[\mathbf{Y}(u), \mathbf{Y}(u + \Delta)] = \mathbf{I} - \frac{\Lambda}{2}$$

Portanto, a correlação espacial de  $\mathbf{Y}(u)$  é uma matriz diagonal para todos os vetores de separação  $h \geq 0$ , indicando a ortogonalidade dos fatores de autocorrelação MAF independentemente do modelo de correionalização.

Os autovetores  $\lambda_i$  em  $\Lambda$ , por definição diminuem o seu valor ao aumentar o valor do índice  $i$ . Assim, a equação (2.74) demonstra que as transformações  $\mathbf{Y}_i(u)$  estão definidas em ordem crescente de correlação espacial.

Resumindo, as transformações MAF são definidas por:

$$\mathbf{Y}(u) = \mathbf{A}^T \mathbf{Z}(u) \quad (2.75)$$



onde  $\mathbf{A}^T$  é a matriz de autovetores normalizados de  $(2\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1})$ , sendo  $\Gamma_Z(\Delta)$  a matriz de semivariogramas de  $\mathbf{Z}(u)$  para um vetor de separação pequeno  $h=\Delta$  e  $\mathbf{B}$  a matriz de variâncias-covariâncias de  $\mathbf{Z}(u)$ .

Para evitar a decomposição espectral da matriz não simétrica  $(2\Gamma_Z(\Delta)\mathbf{B}^{-1})$ , Switzer e Green (1984) definiram os MAF em termos de componentes principais derivados da decomposição espectral de uma matriz simétrica. Assim, a transformação MAF é equivalente a duas decomposições espectrais sucessivas da matriz de variância-covariância dos dados originais e dos dados fatorizados.

Seja  $\mathbf{V}(u)=\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{Z}(u)$  o vetor das componentes principais de  $\mathbf{Z}(u)$  onde  $\mathbf{W}\mathbf{T}=\mathbf{H}\mathbf{D}^{1/2}$  e  $\mathbf{H}$  é a matriz de autovetores da decomposição espectral da matriz de variâncias-covariâncias de modo tal que  $\mathbf{B}=\mathbf{H}\mathbf{D}\mathbf{H}^T$ .

Para um modelo linear de correionalização com duas estruturas, a matriz de variogramas para o vetor de separação  $h=\Delta$  do vetor de funções randômicas  $\mathbf{V}(u)$  pode-ser expresso como:

$$\begin{aligned}\Gamma_V(\Delta) &= \mathbf{C}[\mathbf{V}(u) - \mathbf{V}(u + \Delta), \mathbf{V}(u) - \mathbf{V}(u + \Delta)] = \\ &= 2(1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{I} + 2(\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))\mathbf{W}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{W}\end{aligned}\quad (2.76)$$

A decomposição espectral de  $\Gamma_V(\Delta)$  numa matriz de autovetores ortogonais  $\mathbf{C}$  e uma matriz diagonal de autovalores  $\mathbf{\Lambda}$  é:

$$\Gamma_V(\Delta) = \mathbf{C} \frac{\mathbf{\Lambda}}{2} \mathbf{C}^T \quad (2.77)$$

Combinando as Equações (2.76) e (2.77), a matriz de variogramas de  $\mathbf{Y}(u)=\mathbf{C}^T\mathbf{V}(u)=\mathbf{C}^T\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{Z}(u)$  pode ser expressa como:

$$(1 - \rho_1(\Delta))\mathbf{I} + (\rho_1(\Delta) - \rho_0(\Delta))\mathbf{C}^T \mathbf{W}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{W}\mathbf{C} = \frac{\mathbf{\Lambda}}{2} \quad (2.78)$$

Finalmente, substituindo  $\mathbf{A}=\mathbf{W}\mathbf{C}$  na equação (2.78) obtém-se a equação (2.71) que descreve a covariância de  $\mathbf{Z}(u)$  no caso de duas estruturas.

Essa simplificação, na qual não é necessária a decomposição espectral de uma matriz não simétrica, é importante, já que é facilmente implementável computacionalmente. Assim, a decomposição MAF é realizada segundo as seguintes etapas:

- i. Realizar a decomposição espectral da matriz simétrica  $\mathbf{B}$  em uma matriz de autovetores ortonormais  $\mathbf{H}$  e uma matriz diagonal de autovalores  $\mathbf{D}$ , de modo que  $\mathbf{B}=\mathbf{H}\mathbf{D}\mathbf{H}^T$ .

- ii. Calcular as variáveis transformadas  $\mathbf{V}(u)=\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{Z}(u)$  onde  $\mathbf{W}=\mathbf{H}\mathbf{D}^{-1/2}$  é tal que  $\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{B}\mathbf{W}=\mathbf{I}$ .
- iii. Calcular a matriz de variogramas para o vetor de separação  $\Delta$ ,  $\Gamma_V(\Delta)$  de  $\mathbf{V}(u)$ .
- iv. Calcular a decomposição espectral de  $\Gamma_V(\Delta)$  numa matriz de autovetores ortonormais  $\mathbf{C}$  e uma matriz diagonal de autovalores  $\mathbf{\Lambda}$ , tal que  $\Gamma_V(\Delta)=\mathbf{C}(\mathbf{\Lambda}/2)\mathbf{C}^T$ .
- v. Transformar  $\mathbf{Z}(u)$  com o vetor  $\mathbf{A}^T$ , tal que  $\mathbf{A}=\mathbf{W}\mathbf{C}$ .

A matriz de transformação  $\mathbf{A}^T$  que leva aos MAF e a correspondente matriz de autovalores são calculadas utilizando o procedimento antes apresentado. O ponto mais delicado é a estimativa do variograma para o vetor de separação  $\Delta$  para  $\mathbf{V}(u)$ . Isso acontece, já que em muitos casos, é difícil obter um valor de variograma experimental adequado para curtas distâncias devido à pequena quantidade de amostras disponíveis em casos de dados não densamente amostrados.

É interessante examinar os resultados do procedimento MAF quando são considerados outros modelos de correionalização para  $\mathbf{Z}(u)$ .

Se a variabilidade espacial de  $\mathbf{Z}(u)$  pode ser representada por um modelo de correionalização intrínseco, demonstra-se que uma decomposição em componentes principais é suficiente para descorrelacionar  $\mathbf{Z}(u)$  para todos os vetores de separação (Goovaerts, 1993).

Supondo que  $\mathbf{Z}(u)$  pode ser representado por um modelo de correionalização mais complexo, por exemplo, com três estruturas:

$$\mathbf{Z}(u) = \mathbf{N}(u) + \mathbf{S}_1(u) + \mathbf{S}_2(u) \quad (2.79)$$

Como anteriormente, as componentes são independentes, com a seguinte covariância:

$$\begin{aligned} C[\mathbf{N}(u), \mathbf{N}(u+h)] &= \mathbf{C}_N(h) = \mathbf{B}_0\rho_0(h) \\ C[\mathbf{S}_1(u), \mathbf{S}_1(u+h)] &= \mathbf{C}_{S_1}(h) = \mathbf{B}_1\rho_1(h) \\ C[\mathbf{S}_2(u), \mathbf{S}_2(u+h)] &= \mathbf{C}_{S_2}(h) = \mathbf{B}_2\rho_2(h) \\ C[\mathbf{Z}(u), \mathbf{Z}(u+h)] &= \mathbf{C}_Z(h) = \mathbf{B}_0\rho_0(h) + \mathbf{B}_1\rho_1(h) + \mathbf{B}_2\rho_2(h) \end{aligned} \quad (2.80)$$

Aplicando as mesmas operações matemáticas que no caso de duas estruturas chega-se a:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T \boldsymbol{\Gamma}_Z(\Delta) \mathbf{A} &= (1 - \rho_2(h)) \mathbf{I} + (\rho_2(h) - \rho_0(h)) \mathbf{A}^T \mathbf{B}_0 \mathbf{A} + \\ &+ (\rho_2(h) - \rho_1(h)) \mathbf{A}^T \mathbf{B}_1 \mathbf{A} = \frac{\Lambda}{2} \end{aligned} \quad (2.81)$$

Para que a expressão anterior seja verdadeira, o segundo e o terceiro termo (ou a soma deles) devem ser diagonais.

Se  $\mathbf{B}_0$  é igual a  $\mathbf{B}_1$  (o que não significa que  $\rho_0(h) = \rho_1(h)$ ), a equação acima pode ser escrita como:

$$\mathbf{A}^T \boldsymbol{\Gamma}_Z(\Delta) \mathbf{A} = (1 - \rho_2(\Delta)) \mathbf{I} + (2\rho_2(h) - \rho_1(h) - \rho_0(h)) \mathbf{A}^T \mathbf{B}_{01} \mathbf{A} = \frac{\Lambda}{2} \quad (2.82)$$

Num caso mais geral, a transformação MAF ortogonaliza completamente as variáveis, quando a sinal e o ruído são modeladas com um MCI (modelo de correlação intrínseca) com quantas estruturas forem necessárias:

$$\begin{aligned} C[\mathbf{N}(x), \mathbf{N}(x+h)] &= \mathbf{B}_0 \left( \sum_{l=0}^{K_N} a_l \rho_l^N(h) \right) \quad \text{onde } \sum_{l=0}^{K_N} a_l = 1 \\ C[\mathbf{S}(x), \mathbf{S}(x+h)] &= \mathbf{B}_1 \left( \sum_{j=0}^{K_S} a_j \rho_j^S(h) \right) \quad \text{onde } \sum_{j=0}^{K_S} a_j = 1 \\ C[\mathbf{Z}(x), \mathbf{Z}(x+h)] &= \mathbf{B}_0 \left( \sum_{l=0}^{K_N} a_l \rho_l^N(h) \right) + \mathbf{B}_1 \left( \sum_{j=0}^{K_S} a_j \rho_j^S(h) \right) \end{aligned} \quad (2.83)$$

Utilizando o mesmo desenvolvimento que com duas estruturas, a matriz  $2\boldsymbol{\Gamma}_Z(\Delta) \mathbf{B}^{-1}$  pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} 2\boldsymbol{\Gamma}_Z(\Delta) \mathbf{B}^{-1} &= 2 \left( 1 - \left( \sum_{j=0}^{K_S} \alpha_j \rho_j^S(h) \right) \right) \mathbf{I} + \\ &+ 2 \left( \left( \sum_{j=0}^{K_S} \alpha_j \rho_j^S(h) \right) - \left( \sum_{l=0}^{K_N} a_l \rho_l^N(h) \right) \right) \mathbf{B}_0 \mathbf{B}^{-1} \end{aligned} \quad (2.84)$$

Seguindo a mesma metodologia antes desenvolvida pode-se provar, pela equação acima, que os fatores que resultam da decomposição espectral de  $2\boldsymbol{\Gamma}_Z(\Delta) \mathbf{B}^{-1}$  são independentes para todos os vetores de separação (Goovaerts, 1993). Também, os autovetores de  $\mathbf{B}_0 \mathbf{B}^{-1}$  são independentes do vetor de separação e os mesmos que para  $2\boldsymbol{\Gamma}_Z(\Delta) \mathbf{B}^{-1}$ .

Um aspecto importante na metodologia MAF é que os dados são previamente normalizados. Essa transformação diminui a influência de valores extremos e torna mais robusta a determinação das matrizes de covariância e os

variogramas experimentais. Esse tipo de transformação é não linear e, portanto, afeta a transformação MAF realizada posteriormente.

O procedimento MAF leva a fatores ordenados segundo a sua correlação espacial. Os fatores MAF com o menor índice apresentam um efeito pepita quase puro. Os MAF com os maiores índices apresentam uma correlação espacial mais significativa. Essa correlação espacial diferenciada pode servir de apoio para uma redução do número de variáveis envolvidas no estudo de caso considerado.

#### **2.2.4 Decomposição MAF: Transformações não lineares**

A cokrigagem provém um estimador não tendencioso, que minimiza a variância do erro e garante estimativas apropriadas. Porém, na prática, em depósitos poli-metálicos, com somas fechadas, isso não acontece, tendo estimativas fora do intervalo original das amostras e até negativas, e os modelos lineares de correlogramas distam de estarem aderidos aos variogramas experimentais diretos e cruzados.

Assim, diversas aproximações e metodologias de pós-processamento aplicam-se para que as estimativas estejam dentro do intervalo original e satisfaçam as condições da soma fechada.

No entanto, a decomposição em fatores MAF inclui uma etapa de normalização prévia, a qual não é necessária no caso da decomposição em componentes principais PCA, porém também implementada com fins comparativos.

A normalização é uma transformação não linear, que tem a vantagem de diminuir a influência de valores extremos e torna mais robusta a determinação das matrizes de covariância e variogramas experimentais (Goovaerts, 1997). Porém, o estimador de krigagem é linear, e ao ser combinado com transformações não lineares, não garante a não tendenciosidade das estimativas do modo que acontece na krigagem das variáveis sem transformar.

A adequação dessa abordagem será avaliada realizando simulações estocásticas dos dados transformados em fatores MAF, posteriormente retro-transformando as realizações de cada cenário ao espaço original e determinado o E-Type (Goovaerts, 1997) dos mesmos (média das realizações em cada bloco), e comparando os resultados obtidos com os determinados por krigagem ordinária.

### 2.3 Geoestatística de dados composicionais

A geoestatística de dados composicionais é uma extensão dos conceitos da análise estatística de dados composicionais ao caso de variáveis regionalizadas. A seguir são apresentados alguns conceitos referentes a essa abordagem metodológica. Revisões mais detalhadas são apresentadas em Aitchison (1986), e Pawlowsky-Glahn e Olea (2004).

O conceito básico está dado pelo vetor randômico de  $D$  componentes (escreve-se  $D$  em lugar de  $N_v$  para diferenciar a notação correspondente aos dados composicionais), chamado de composição regionalizada (composição-r):

$$\mathbf{Z}(u) = [Z_1(u), Z_2(u), \dots, Z_D(u)]^T \quad (2.85)$$

A composição-r cumpre com as seguintes condições:

Todas as componentes são positivas:  $Z_i(u) > 0$ ,  $i=1, 2, \dots, D$ ;

A soma de todas as componentes é constante, geralmente igual a um ou 100:

$$\sum_{i=1}^D Z_i(u) = \mathbf{j}^T \mathbf{Z}(u) = 1 \quad \mathbf{j} = (1, 1, \dots, 1)^T \quad (2.86)$$

onde  $\mathbf{j}$  é um vetor de 1s, no caso da soma fechada seja um (1).

Portanto, em cada local  $u$ ,  $\mathbf{Z}(u)$  é um vetor randômico que satisfaz a soma constante.

O espaço amostral para  $\mathbf{Z}(u)$  é o  $D$ -simplex ( $S^D$ ) no espaço real de  $D$  dimensões  $R^D$ :

$$S^D = \left\{ \mathbf{Z}(u); Z_i(u) > 0, \quad i = 1, 2, \dots, D; \quad \mathbf{j}^T \mathbf{Z}(u) = 1 \right\} \quad (2.87)$$

Em geometria, um simplex de  $n$  dimensões é o análogo a um triângulo em duas dimensões. É a envoltória convexa de um conjunto de  $(n+1)$  pontos independentes num espaço Euclidiano de dimensão  $n$  ou maior. Por exemplo, o 0-simplex é um ponto, 1-simplex uma linha, 2-simplex um triângulo, 3-simplex um tetraedro e o 4-simplex um pentaedron (Hatcher, 2002).

### 2.3.1 Razões logarítmicas

A análise estatística das composições apresenta o problema das covariâncias estarem controladas pela condição da soma constante, apresentando uma correlação espacial espúria.

Outro problema vem dado pela singularidade da matriz de covariâncias das composições, por causa da condição da soma constante. Dessa forma, a cokrigagem de todas as componentes só pode ser realizada utilizando inversos generalizados ou deixando uma componente fora do sistema. Porém, a soma dos valores estimados difere do valor constante correspondente à composição inteira, mesmo que os valores individuais sejam apropriados (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004).

Apesar das técnicas de estimativa para variáveis co-regionalizadas sejam assumidas como independentes do modelo utilizado, a ausência de restrições no espaço amostral implica que as componentes da correionalização possam estar compreendidas na totalidade do espaço real (intervalo menos infinito  $(-\infty)$ , mais infinito  $(+\infty)$ ).

No caso das composições-r, as estimativas válidas devem pertencer ao simplex. Portanto, é necessária uma metodologia que considere as restrições no espaço amostral das composições-r, estendendo os conceitos da análise estatística desenvolvidos por Aitchison (1986) ao caso de variáveis regionalizadas (Matheron, 1965).

A idéia de Aitchison é considerar um vetor randômico  $\mathbf{W}$ , que não seja uma composição:

$$\mathbf{W}(u) = [W_1(u), W_2(u), \dots, W_D(u)]^T \quad (2.88)$$

Uma composição  $Z(u)$  pode ser obtida a partir de  $W$ , dividindo cada componente individual pela soma das componentes:

$$Z_i(u) = \frac{W_i(u)}{W_1(u) + \dots + W_D(u)} \quad (2.89)$$

Assim, a relação

$$\frac{W_i(u)}{W_j(u)} = \frac{Z_i(u)}{Z_j(u)} \quad \forall i, j = 1, \dots, D \quad (2.90)$$

é válida, desde que  $W_j(u)$  e  $Z_j(u)$  sejam  $>0$ .

Essa propriedade salienta o fato de que os dados composicionais contêm informação sobre magnitudes relativas e não absolutas. Porém, as razões são difíceis de manipular matematicamente, pelo que Aitchison (1986) sugere a transformação em razões-logarítmicas em vez de trabalhar com a composição original.

A utilização de razões-logarítmicas define um novo espaço amostral, no qual o simplex é projetado no espaço real, onde é possível utilizar as metodologias geoestatísticas multivariadas clássicas.

São definidas três razões-logarítmicas: razão-logarítmica aditiva (alr), razão-logarítmica centrada (clr) e a razão-logarítmica isométrica (ilr). A razão-logarítmica isométrica (ilr) (Egozcue et al., 2003) foi desenvolvida após as duas primeiras, de utilização clássica, introduzidas por Aitchison (1986). A ilr capitaliza algumas propriedades da clr e tem a sua maior utilidade na abordagem de *permanecer-no-simplex* (Mateu-Figueiras, 2003; Pawlowsky-Glahn, 2003), mencionada no Capítulo 1, pertencente à quarta fase de desenvolvimento na análise dos dados composicionais. Essa transformação não será apresentada nessa tese.

De forma teórica, as três transformações devem fornecer os mesmos resultados, o que está demonstrado em Egozcue et al. (2003).

### 2.3.2 Razão-logarítmica aditiva (alr)

A transformação em razões-logarítmicas aditivas (alr) é definida como (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004):

$$\begin{aligned}
 alr : S^D &\rightarrow R^{D-1} \\
 \mathbf{Z}(u) &\rightarrow alr(\mathbf{Z}(u)) = \mathbf{Y}(u) = \mathbf{F} \cdot \ln(\mathbf{Z}(u)) \\
 \mathbf{F} = (\mathbf{I} : -\mathbf{j}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & -1 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (2.91)
 \end{aligned}$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz identidade de dimensões  $(D-1) \times (D-1)$  e  $\ln$  é a função logarítmica natural (base e).

Para cada componente, a transformação alr implica a divisão pela D-ésima componente, e a transformação do quociente utilizando logaritmos naturais:

$$alr(\mathbf{Z}(u)) = \mathbf{Y}(u) = \left( \ln\left(\frac{Z_1(u)}{Z_D(u)}\right) \cdots \ln\left(\frac{Z_{D-1}(u)}{Z_D(u)}\right) \right)^T \quad (2.92)$$

O vetor  $\mathbf{Y}(u)$  tem uma componente menos que a composição- $r$   $\mathbf{Z}(u)$

$$\mathbf{Y}(u) = (Y_1(u) Y_2(u) \cdots Y_{D-1}(u))^T \quad (2.93)$$

Portanto, o vetor  $\mathbf{X}(u)$

$$\mathbf{X}(u) = (Y_1(u) Y_2(u) \cdots Y_{D-1}(u) 0)^T \quad (2.94)$$

é definido de modo auxiliar para definir a transformação logística aditiva generalizada (agl) (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004; Tolosana-Delgado, 2006):

$$\begin{aligned} agl : R^{D-1} &\rightarrow S^D \\ \mathbf{Y}(u) &\rightarrow \mathbf{Z}(u) = \frac{\exp(\mathbf{X}(u))}{\mathbf{j}^T \exp(\mathbf{X}(u))} \end{aligned} \quad (2.95)$$

Onde

$$\exp(\mathbf{X}(u)) = (\exp(Y_1(u)) \exp(Y_2(u)) \cdots \exp(Y_{D-1}(u)) 1)^T \quad (2.96)$$

Se a soma constante da composição  $\mathbf{Z}(u)$  é  $c \neq 0$ , a retro-transformação é dada por:

$$\mathbf{Z}(u) = c \cdot agl(\mathbf{Y}(u)) \quad (2.97)$$

### 2.3.3 Razão-logarítmica centrada (clr)

A transformação em razões-logarítmicas centradas (clr) é definida como (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004):



$$clr : S^D \rightarrow R^D$$

$$\mathbf{Z}(u) \rightarrow clr(\mathbf{Z}(u)) = \ln\left(\frac{\mathbf{Z}(u)}{g(\mathbf{Z}(u))}\right) = \mathbf{G} \cdot \ln(\mathbf{Z}(u)) \quad (2.98)$$

$$\mathbf{G} = (\mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{J}) = \begin{pmatrix} 1-1/D & -1/D & \dots & -1/D \\ -1/D & 1-1/D & \dots & -1/D \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -1/D & -1/D & \dots & 1-1/D \end{pmatrix}$$

onde  $g(\mathbf{Z}(u))$  é a média geométrica das componentes da composição-r  $\mathbf{Z}(u)$

$$g(\mathbf{Z}(u)) = \left(\prod_{i=1}^D Z_i(u)\right)^{1/D} \quad (2.99)$$

e  $\mathbf{J}$  é a matriz composta por uns (1), de dimensão  $D \times D$ .

### 2.3.4 Variabilidade espacial

A seguir, descreve-se a correlação espacial espúria das variáveis que constituem uma composição-r, apresenta-se algumas particularidades relativas à variabilidade espacial das razões logarítmicas e definem-se a covariância das razões logarítmicas aditivas e os variogramas sob a hipótese intrínseca.

#### 2.3.4.1 Correlação espacial espúria

A análise da variabilidade espacial das composições-r não pode ser realizada de forma direta devido ao conceito da correlação espacial espúria (Pawlowsky, 1984). Este aparece por causa da restrição da soma constante, que é expressa pela seguinte equação:

$$\sum_{i=1}^D Z_i(u) = c \quad (2.100)$$

A soma das médias aritméticas  $\bar{Z}_i(u)$  também satisfaz a condição da soma constante:

$$\sum_{i=1}^D \bar{Z}_i(u) = c \quad (2.101)$$

Subtraindo as Equações (2.100) e (2.101)

$$\sum_{i=1}^D Z_i(u) - \sum_{i=1}^D \bar{Z}_i(u) = \sum_{i=1}^D (Z_i(u) - \bar{Z}_i(u)) = 0 \quad (2.102)$$

Multiplicando a Equação (2.102) por  $(Z_j(u+h) - \bar{Z}_j(u+h))$ :

$$\sum_{i=1}^D (Z_i(u) - \bar{Z}_i(u))(Z_j(u+h) - \bar{Z}_j(u+h)) = 0 \quad (2.103)$$

E considerando a esperança matemática:

$$\sum_{i=1}^D C(Z_i(u), Z_j(u+h)) = 0 \quad (2.104)$$

A Equação (2.104) mostra que a matriz de covariâncias é singular para qualquer vetor de separação  $h$ , o que não a faz apropriada para sua utilização na cokrigagem (Yao e Journel, 1998).

Também, é observada a condição de viés negativo, no qual se  $i$  é igual a  $j$ , a função de covariância é a direta, correspondente a  $Z_i(u)$ , que é positiva por definição. Como a soma das covariâncias diretas deve ser zero, pelo menos uma delas deverá ser negativa, o que não é possível.

Essas covariâncias cruzadas induzidas numericamente são as chamadas correlações espaciais espúrias (Pawlowsky, 1984) e são a razão para a busca de uma metodologia alternativa à cokrigagem, baseada em razões logarítmicas.

#### 2.3.4.2 Variabilidade espacial das razões logarítmicas

A dependência espacial entre as variáveis de uma composição podem ser analisadas no espaço real, analisando a estrutura da covariância das razões-logarítmicas.

Num contexto multivariado, a metodologia que aparece como mais apropriada para ser utilizada é a cokrigagem, ou alguma das metodologias alternativas apresentadas anteriormente (decomposição em componentes principais (PCA), decomposição em fatores de autocorrelação mínimos e máximos (MAF)). Porém, numa primeira instância será considerada a utilização da cokrigagem para avaliar os efeitos da transformação em razões logarítmicas numa metodologia mais clássica e difundida. A decomposição MAF envolve duas decomposições sucessivas dos dados previamente transformados em razões

logarítmicas, o que leva a uma difícil interpretação dos resultados numa primeira aplicação da metodologia.

A cokrigagem requer que as funções de covariância cruzada sejam simétricas (Myers, 1982).

A utilização da transformação alr tem a desvantagem de ser assimétrica nas componentes já que depende da componente que seja escolhida no divisor, levando a funções de covariância cruzada assimétricas (efeito de retardo (Wackernagel, 1994)). A transformação clr não tem essa desvantagem, já que é simétrica nas componentes. Porém, não é conveniente para ser utilizada com a metodologia de cokrigagem por levar a uma matriz de variâncias-covariâncias que é singular (Yao e Journel, 1998), o que pode ser resolvido utilizando inversos generalizados de Moore-Penrose (Campbell e Meyer, 1991). Esta última não tem implementação computacional disponível.

Portanto, a transformação alr é considerada a mais apropriada para ser utilizada na cokrigagem, utilizando a média das funções de covariância cruzada para  $(-h)$  e  $(+h)$ , como é explicado em Wackernagel (1994). A assimetria nas componentes não é considerada uma desvantagem importante já que a cokrigagem é invariante ao permutar as componentes (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004).

#### 2.3.4.3 Funções de covariâncias da razão logarítmica aditiva alr

A estrutura da covariância cruzada de uma composição-r  $\mathbf{Z}(u)$  é dada pelo conjunto de  $D^4$  funções

$$C_{ij \cdot kl}(h) = C \left[ \ln \left( \frac{Z_i(u)}{Z_k(u)} \right), \ln \left( \frac{Z_j(u+h)}{Z_l(u+h)} \right) \right] \quad i, j, k, l \in \{1, 2, \dots, D\} \quad (2.105)$$

No caso da covariância da razão logarítmica alr, o denominador é sempre o mesmo,  $Z_D(u)$ , e portanto a expressão da covariância cruzada é

$$\Sigma(h) = C_{ij}(h) = C_{ij \cdot DD}(h) = C \left[ \ln \left( \frac{Z_i(u)}{Z_D(u)} \right), \ln \left( \frac{Z_j(u+h)}{Z_{DI}(u+h)} \right) \right] \quad (2.106)$$

$$i, j \in \{1, 2, \dots, D\}$$

No caso de  $i=j$ , a função da covariância é direta.

A matriz de covariâncias  $\Sigma(h)$  tem dimensões (D-1) x (D-1) já que a transformação alr reduz em uma unidade os graus de liberdade, e tem as seguintes propriedades (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004):

$$\begin{aligned}\Sigma(h) &\neq \Sigma^T(h) \\ \Sigma(h) &\neq \Sigma(-h) \\ \Sigma(h) &\neq \Sigma^T(-h) \\ C_{ij \cdot DD} &= C_{ij}(h) + C_{DD}(h) - C_{iD}(h) - C_{Dj}(h)\end{aligned}\tag{2.107}$$

#### 2.3.4.4 Variabilidade espacial sob a hipótese intrínseca

Considerando estacionariedade de segunda ordem (Journel e Huijbregts, 1978; Goovaerts, 1997), a variabilidade espacial de uma composição-r  $Z(u)$ , é dada pelo conjunto de funções

$$\gamma_{ij \cdot kl}(h) = \frac{1}{2} C \left[ \ln \left( \frac{Z_i(u)}{Z_k(u)} \right) - \ln \left( \frac{Z_i(u+h)}{Z_k(u+h)} \right), \ln \left( \frac{Z_j(u)}{Z_l(u)} \right) - \ln \left( \frac{Z_j(u+h)}{Z_l(u+h)} \right) \right]\tag{2.108}$$

$i, j, k, l \in \{1, 2, \dots, D\}$

que satisfazem o seguinte conjunto de propriedades:

$$\begin{aligned}\gamma_{ij \cdot kl}(0) &= 0 \\ \gamma_{ij \cdot kl}(h) &= \gamma_{ji \cdot lk}(h) = \gamma_{ij \cdot kl}(-h) \\ \gamma_{ij \cdot il}(h) &= \gamma_{ij \cdot kj}(h) = \gamma_{ij \cdot ij}(h) = \gamma_{ii \cdot ii}(h) = 0 \\ \gamma_{ij \cdot kl}(h) &= -\gamma_{kj \cdot il}(h) = \gamma_{kl \cdot ij}(h) = -\gamma_{il \cdot kj}(h) \\ |\gamma_{ij \cdot kl}(h)| &\leq \sqrt{\gamma_{ii \cdot kk}(h)} \sqrt{\gamma_{jj \cdot ll}(h)}\end{aligned}\tag{2.109}$$

No caso da razão logarítmica aditiva alr, essas Equações traduzem-se nas seguintes:

$$\Psi(h) = \psi_{ij}(h) = \gamma_{ij \cdot DD}(h)\tag{2.110}$$

o que constitui uma matriz de dimensões (D-1) x (D-1).

Os semivariogramas das razões logarítmicas aditivas têm as seguintes propriedades:

$$\begin{aligned}
\Psi(0) &= 0 \\
\Psi(h) &= \Psi^T(h) = \Psi(-h) \\
|\Psi_{ij}(h)| &\leq \sqrt{\Psi_{ii}(h)}\sqrt{\Psi_{jj}(h)} \\
\Psi_{iD}(h) &= \Psi_{Di}(h) = \Psi_{DD}(h) = 0
\end{aligned} \tag{2.111}$$

Do mesmo modo que no caso de variáveis regionalizadas ordinárias, as funções de medida da variabilidade espacial das razões logarítmicas aditivas satisfazem relações entre si:

$$\Psi(h) = \Sigma(0) - \frac{1}{2}(\Sigma(h) + \Sigma^T(h)) \tag{2.112}$$

### 2.3.5 Cokrigagem de razões logarítmicas aditivas alr

Seja  $\mathbf{Z}(u)$  uma composição-r com D componentes, com uma distribuição logarítmica aditiva (Pawlowsky-Glahn e Olea, 2004) normal. Portanto,  $\mathbf{Y}(u)=\text{alr}(\mathbf{Z}(u))$  é multigaussiana.

O objetivo é estimar o vetor  $\mathbf{Z}(u)$  no local  $u$ , com um estimador linear, utilizando a razão logarítmica aditiva:

$$\mathbf{Z}_{CK}^*(u) = \text{agl} \left( c + \sum_{\alpha_j=1}^n \lambda_{\alpha_j}^{CK} \text{alr}(\mathbf{Z}(u_{\alpha_j})) \right) \tag{2.113}$$

A cokrigagem estima a razão logarítmica aditiva no local  $u$ :

$$\mathbf{Y}_{CK}^*(u) = c + \sum_{\alpha_j=1}^n \lambda_{\alpha_j}^{CK} \text{alr}(\mathbf{Z}(u_{\alpha_j})) \tag{2.114}$$

Um problema dessa metodologia, apontado por Aitchison (1986), é que não é possível expressar matematicamente o valor esperado e a variância de  $\mathbf{Z}^*(u)$  em termos do valor esperado e a variância de  $\mathbf{Y}^*(u)$ . Portanto, não é possível realizar afirmações referentes ao viés e variância das estimativas de  $\mathbf{Z}^*(u)$ . Porém, na nova abordagem de *permanecer no simplex*, essas afirmações podem ser feitas (Pawlowsky-Glahn e Egozcue, 2002; Tolosana-Delgado et al., 2008). Nessa abordagem, que não é aplicada na presente tese, trabalha-se numa estrutura espacial Euclidiana diferente, utilizando as operações matemáticas de multiplicação, divisão e potência em vez de soma, subtração e multiplicação.

A retro-transformação, dada pela Equação (2.113), leva a um vetor  $\mathbf{Z}^*(u)$  que conforma novamente uma composição- $r$ , cujas componentes satisfazem a condição da soma da composição- $r$  original.

### 2.3.6 Presença de zeros no banco de dados

Uma transformação que utiliza logaritmos não pode ser utilizada para valores de zero (0). Pawlowsky-Glahn (2004) apresentam alternativas nesses casos, considerando que só uma das componentes apresenta os valores nulos, distinguindo as seguintes situações:

- Valores nulos que correspondem à ausência da variável. Nesses casos, são definidas duas populações, uma definida no simplex  $S^D$  e outra definida no simplex  $S^{D-1}$ , e os dados são divididos em dois subconjuntos.
- Valores nulos que correspondem a valores inferiores ao limite de detecção. Os valores nulos devem ser substituídos por valores de traço, seguindo algum tipo de critério, como os apresentados por Martín-Fernández et al. (2000).
- Valores nulos que correspondem a valores faltantes. Isto significa que a variável é considerada no resíduo não medido, de modo tal que a condição da soma constante seja satisfeita, determinando o valor faltante por diferença. Nesses casos, recomenda-se um tratamento do valor faltante segundo Martín-Fernández et al. (1997).

Quando várias componentes são afetadas pela presença de zeros, a seleção de uma solução apropriada é mais complexa. Trabalhos mais recentes foram apresentados por Martín-Fernández et al. (2003), Tolosana-Delgado e Von Eynatten (2009) e Tolosana-Delgado et al. (2009).

No próximo capítulo, introduze-se o estudo de caso utilizado para a avaliação das diferentes metodologias apresentadas nesse capítulo. No banco de dados, proveniente de um depósito de ferro, será realizada uma análise estatística inicial das variáveis envolvidas, domínios geoestatísticos, e demais parâmetros, assim como também, serão apresentados os resultados provenientes da metodologia clássica da cokrigagem ordinária aplicada diretamente nas variáveis sem que as mesmas sejam transformadas.

## Capítulo 3

### **Abordagem Clássica: apresentação do banco de dados, análise estatística exploratória e cokrigagem ordinária**

Nesse capítulo, apresenta-se o banco de dados proveniente de um depósito de ferro que é utilizado para o estudo de caso por meio do qual são avaliadas as diferentes metodologias apresentadas no capítulo anterior. Inicialmente, será realizada uma análise estatística exploratória das variáveis envolvidas no domínio geoestatístico de interesse, assim como, serão apresentados os resultados provenientes da metodologia clássica da cokrigagem ordinária aplicada diretamente nas variáveis originais, i.e. sem prévia transformação.

#### **3.1 Descrição da área de estudo**

As minas de ferro de Galinheiro, Pico e Sapecado, pertencentes à VALE (Companhia Vale do Rio Doce), conformam o Complexo Pico, localizado no setor oeste do Quadrilátero Ferrífero na região central do estado de Minas Gerais (Figura 3.1).

As unidades litoestratigráficas mais importantes do Quadrilátero Ferrífero são os granitos-gneiss correspondentes ao Arqueano-Paleoproterozoico, as seqüências de rochas verdes do Supergrupo Rio das Velhas, o Supergrupo Minas do Paleoproterozoico e as rochas intrusivas post-Minas (Dorr, 1969).

O depósito de ferro do Quadrilátero Ferrífero está hospedado nos itabiritos do Supergrupo Minas, conformado por três grupos: o grupo inferior é o Grupo Caraça, o intermédio é o Grupo Itabira, formado pelas Formações Cauê e

Gandarela. Acima do Grupo Itabira, ocorre o Grupo Piracicaba e na parte superior o Grupo Sabará (Dorr, 1969).

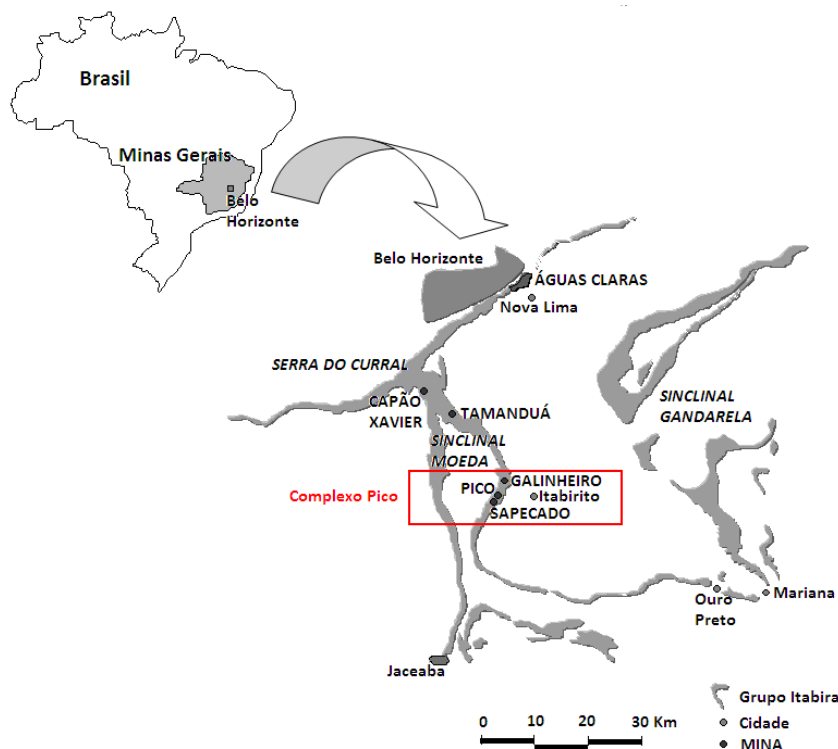


Figura 3.1 – Mapa de localização do Complexo Pico, formado pelas minas de Galinheiro, Pico e Sapecado, no setor oeste do Quadrilátero Ferrífero, no estado de Minas Gerais.

Os itabiritos do Grupo Itabira, de maior interesse econômico, são formações ferríferas bandeadas (BIFs banded iron formations) do tipo silicoso, com o ferro presente na forma de hematita, magnetita ou martita. Também, existem itabiritos dolomíticos, nos quais se têm uma alternância de carbonatos vermelhos com bandas de óxido de ferro com tamanhos que variam de 1 mm até 50 cm de espessura. Estão presentes também, itabiritos anfibolíticos, constituídos de bandas de vários tipos de anfibólios, alternados com bandas de óxidos de ferro (Dorr, 1969).

Os depósitos de Galinheiro, Pico e Sapecado seguem a linha geral da formação Cauê, numa direção de azimute 0 a 45 graus, estando localizados no setor leste da Sinclinal Moeda (Figura 3.1), separados por falhas transversais (Almeida, 1977).



Para aproveitar o alinhamento dos depósitos com a direção principal do corpo de minério, os modelos geológicos foram construídos em coordenadas locais (Figura 3.2), rotadas em relação às coordenadas UTM.

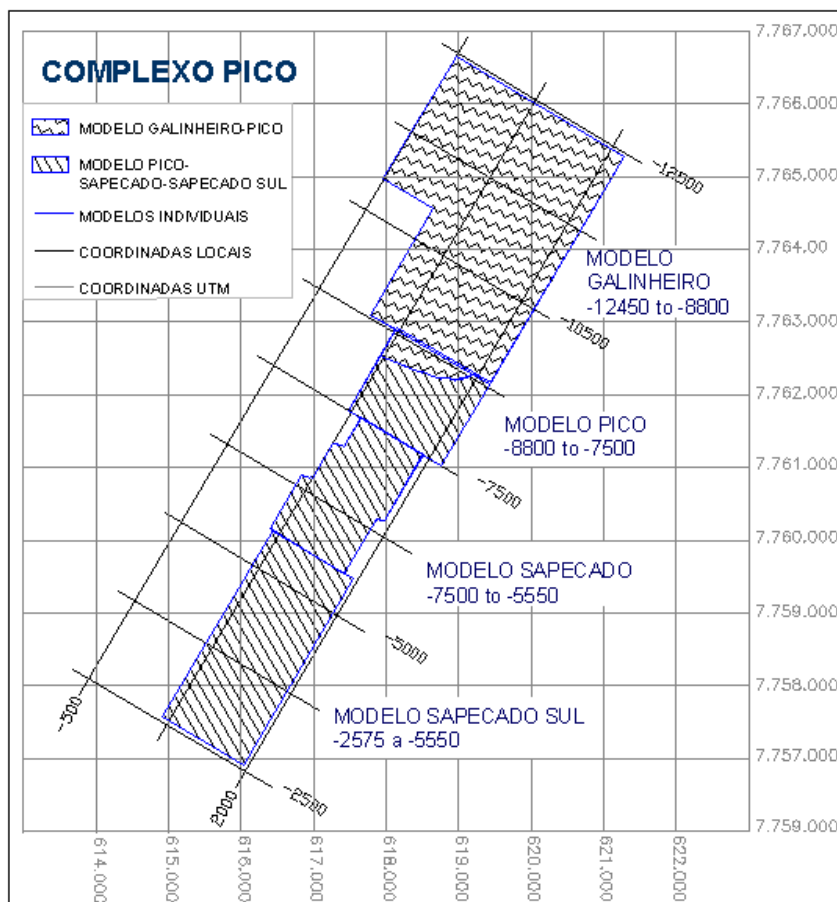


Figura 3.2 – Planta no plano XY das áreas estimadas do Complexo Pico, realizado em coordenadas locais, rotadas em relação as coordenadas UTM, alinhados com a direção principal do corpo de minério.

Na Figura 3.2, também se observam os diferentes domínios usados na estimativa. O Modelo Galinheiro esta compreendido entre os valores -12500 e -8800 m no eixo das abscissas. O Modelo Pico entre -8800 e -7500 m, o Modelo Sapecado entre -7500 e -5550m e o Modelo Sapecado Sul entre -5550 e -2575 m, no eixo das abscissas.

O modelo de Sapecado e Sapecado Sul, fornecidos pela empresa, foram construídos por meio de krigagem dos indicadores (Goovaerts, 1997; Chilès e Delfiner, 1999) a partir de uma malha de 10 x 10 m proveniente da interpretação

de seções verticais e horizontais e do modelo geológico, incorporando as informações provenientes das sondagens (Spier et. al, 2004).

O modelo completo das litologias de Sapecado e Sapecado Sul foi obtido adicionando o modelo de blocos interpolados, os blocos da superfície da área minerada (shell model) e os blocos de estéril. Nesse modelo, os blocos possuem uma dimensão de 10 x 10 x 10 m, nas direções X, Y e Z, respectivamente.

No modelo de blocos da litologia, dispõe-se de informação mais adensada proveniente das amostras e da interpretação do modelo geológicos. Porém, no caso da estimativa de teores é utilizada unicamente a informação proveniente das amostras. Portanto, os blocos desse modelo são maiores para diminuir o erro de estimativas (Isaaks e Srivastava, 1989), com um tamanho de 50 x 20 x 10 m, nas direções X, Y e Z, respectivamente.

Os dois modelos coexistem e estão superpostos, de modo tal que cada bloco de 50 x 20 x 10 m é formado por 10 blocos 10 x 10 x 10 m e diferentes porcentagens das litologias consideradas (Figura 3.3).

Portanto, uma vez obtidas as estimativas de teores no modelo de blocos de 50 x 20 x 10 m, utilizando as diferentes metodologias propostas na tese, seria necessário preencher o modelo de blocos da litologia de 10 x 10 x 10 m, com os teores correspondentes, utilizando a porcentagem da litologia correspondente.

As estimativas apresentadas nessa tese, determinadas pelas diferentes metodologias, correspondem ao modelo de blocos de 50 x 20 x 10 m, e a análise dos resultados e conclusões serão realizadas para esse suporte.

O tamanho dos blocos é consistente com a regra empírica na qual a malha de estimativa não pode discretizar mais o espaçamento amostral médio (Isaaks e Srivastava, 1989) em mais do que quatro unidades.

### **3.2 Tipos de minério de ferro no Complexo Pico**

No Complexo Pico, diferenciam-se dois tipos de minério de ferro: o de alto teor (>64%) chamado de hematítico e o de baixo teor (30%<Fe<64%), chamado de itabiritos.

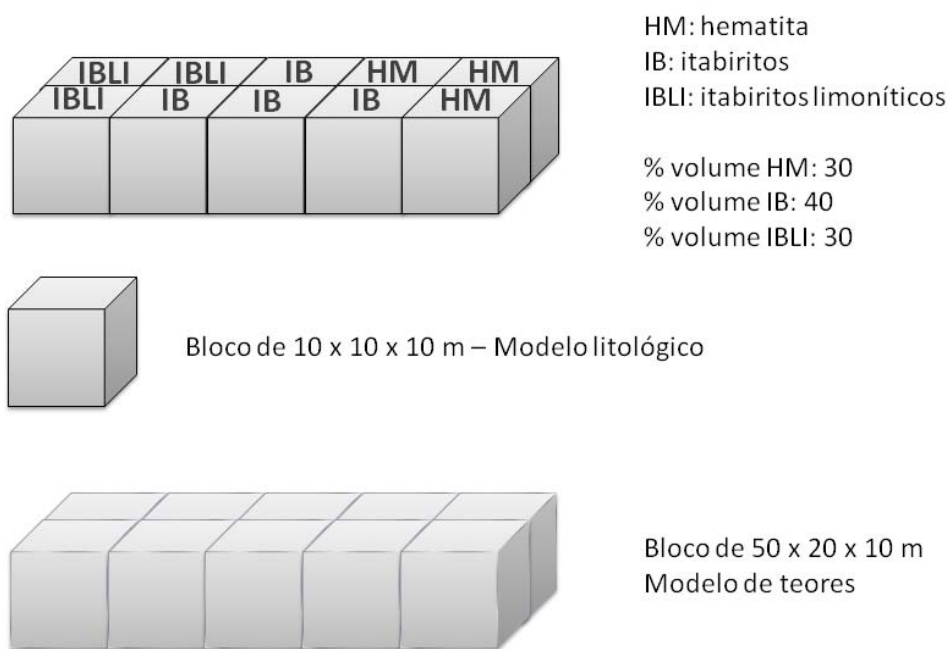


Figura 3.3 – Exemplificação do modelo de blocos da litologia (10 x 10 x 10m) e do modelo de blocos para a estimativa de teores (50 x 20 x 10 m), indicando, a modo e exemplo, a porcentagem das litologias HM, IB e IBLI que conformam os blocos de teores (30, 40 e 30%, respectivamente).

Esses dois tipos recebem novas denominações dependendo das análises físicas e químicas, o que é apresentado de forma simplificada na Tabela 3.1 (Spier et. al, 2004).

O minério de alto teor pode ser compacto (HO), friável (SO) ou do tipo intermediário (MO). O minério de alto teor compacto (HO) é formado por aglomerados de cristais de hematita e martita. O friável (SO) consiste de agregados de hematita com uma porosidade variável.

O minério de baixo teor tem uma maior quantidade de quartzo. Dependendo da quantidade de hematita, goetita e óxidos de manganês, são chamados de itabiritos ricos (RSIB), itabiritos (SIB), itabiritos limoníticos (IBLI) ou itabiritos manganésíferos (IBMN).

Nas minas do Complexo Pico, os minérios de alto e baixo teor ocorrem intercalados. As minas foram desenvolvidas inicialmente nos setores de alto teor e progressivamente tem avançado aos setores de baixo teor, devido ao aumento na demanda do minério de ferro no mercado internacional.

Tabela 3.1 – Denominações dos diferentes tipos de minério de ferro presentes no Complexo Pico, e o intervalo de valores do teor de cabeça do ferro (global), indicando em cinza os litotipos que compõem o domínio geoestatístico IB. Adaptado de Spier et. al (2004).

|            | LITOTIPOS                     | Denominação | Fe Crude (%)    |                 |
|------------|-------------------------------|-------------|-----------------|-----------------|
|            |                               |             | Limite inferior | Limite superior |
| HEMATITA   | Hematita dura                 | HO          | 64              | -               |
|            | Hematita média-dura           | MO          | 64              | -               |
|            | Hematita firável              | SO          | 64              | -               |
|            | Hematita muito friável        | VSO         | 64              | -               |
|            | Hematita Manganífera          | HMMN        | 64              | -               |
|            | Hematita                      | HM          | 64              | -               |
| ITABIRITOS | Itabiritos duros              | HIB         | 30              | 52              |
|            | Itabiritos médios             | MIB         | 30              | 52              |
|            | Itabiritos friáveis           | SIB         | 30              | 52              |
|            | Itabiritos ricos médio-duros  | RIB         | 52              | 64              |
|            | Itabiritos ricos friáveis     | RSIB        | 52              | 64              |
|            | Itabiritos argilosos          | AIF         | 30              | 58              |
|            | Itabiritos ricos argilosos    | RAIF        | 58              | 64              |
|            | Itabiritos limoníticos        | IBLI        | 30              | 64              |
|            | Itabiritos limoníticos médios | LMIB        | 30              | 52              |
|            | Itabiritos limoníticos duros  | LHIB        | 30              | 52              |
|            | Itabiritos Manganíferos       | IBMN        | -               | 54              |
|            | Itabiritos                    | IB          | 30              | 64              |

O minério de ferro remanescente nas minas do Complexo Pico, para lavra após o ano 2008, é fundamentalmente de baixo teor, formado pelos itabiritos silicosos e limoníticos (Spier et. al, 2004). Desses itabiritos, somente os friáveis são considerados como minério de ferro. Os itabiritos médios e duros são considerados rocha estéril (Spier et. al, 2004).

Nessa tese, são considerados, para análise do estudo de caso, os dados provenientes dos itabiritos que formam o minério de ferro de interesse, incluindo: itabiritos friáveis (SIB), itabiritos ricos médio-duros (RIB) e os itabiritos ricos friáveis (RSIB) dos depósitos Sapecado e Sapecado Sul (coordenada local  $X \geq -7600\text{m}$ , considerando 100 m do modelo Pico). A análise estatística exploratória e estimativas apresentadas correspondem a esse domínio geoestatístico, denominado IB (itabiritos).

### 3.3 Análise estatística exploratória

Os mapas de localização das amostras, projetados nos planos XY, YZ e XZ, mostrando o teor global correspondente ao ferro ( $Fe_T$ ), são apresentados na Figura 3.4.

As amostras são regularizadas em intervalos constantes de 10 m de comprimento a partir da boca do furo.

Nos mapas, são observadas duas regiões: desde aproximadamente a coordenada X -7600 até -5500 m a malha é de 50 por 50 metros. Para valores da coordenada X maiores do que -5500 m, a malha de sondagem é menos adensada apresentando espaçamentos de aproximadamente 200 por 100m em X e Y, respectivamente.

As amostras coletadas são submetidas a ensaios de cominuição, peneiramento e análise química.

O tamanho das partículas é reduzido por moagem a -50 milímetros. Posteriormente, realiza-se o peneiramento para a classificação em quatro frações granulométricas.

A fração granulométrica *sinter feed* é peneirada e dividida em duas sub-frações: *sinter feed* grosso (fração 21) de 6,3 a 1 mm e *sinter feed* fino (fração 22) de 1 a 0,15 milímetros. A separação nessas duas sub-frações não é realizada na totalidade das amostras, levando assim, a uma situação de heterotopia do banco de dados.

Os mapas de localização das amostras na faixa 21, projetada nos planos XY, XZ e YZ é apresentada na Figura 3.5, onde se aprecia a menor densidade amostral respeito ao mapa da Figura 3.4

Tabela 3.2 – Frações granulométricas e tamanhos de partículas associados.

| Fração | Denominação               | Tamanho (mm) |
|--------|---------------------------|--------------|
| 1      | Granulada                 | 50 – 6,3     |
| 2      | <i>Sinter feed</i>        | 6,3 – 0,15   |
| 21     | <i>Sinter feed</i> grosso | 6,3 – 1,0    |
| 22     | <i>Sinter feed</i> fino   | 1,0 – 0,15   |
| 3      | <i>Pellet feed</i>        | < 0,15       |

Nas análises químicas, determinam-se o ferro (Fe), fósforo (P), sílica (SiO<sub>2</sub>), alumina (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>), óxido de cálcio (CaO), óxido de magnésio (MgO), manganês (Mn), dióxido de titânio (TiO<sub>2</sub>) e as perdas por calcinação (PPC).

Porém, as variáveis de interesse são a massa retida da fração granulométrica, os teores de ferro, alumina, sílica, fósforo e manganês e as perdas por calcinação, sendo denominadas W<sub>i</sub>, FE<sub>i</sub>, AL<sub>i</sub>, SI<sub>i</sub>, PI, MNI e PPC<sub>i</sub>, respectivamente. A letra i corresponde-se com a fração granulométrica detalhada acima, i=1, 2, 21, 22 e 3 e o teor global i=T (Tabela 3.3).

Tabela 3.3 – Variáveis analisadas no domínio IB, e a sua denominação ao longo da tese, onde o subíndice i corresponde-se com as frações granulométricas 1, 2, 21, 22 e 3 e o global (i=1, 2, 21, 22, 3 e T), respectivamente.

| Variável Analisada                        | Denominação      |
|---|------------------|
| Ferro (Fe)                                | FE <sub>i</sub>  |
| Sílica (SiO <sub>2</sub> )                | SI <sub>i</sub>  |
| Alumina (Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ) | AL <sub>i</sub>  |
| Manganês (Mn)                             | MNI              |
| Fósforo (P)                               | PI               |
| Massa (W)                                 | W <sub>i</sub>   |
| Perdas por calcinação (PPC)               | PPC <sub>i</sub> |

Para corrigir o efeito de diferentes suportes das amostras, por terem diferentes massas, acumulam-se os teores pela massa. A variável acumulada é o produto de duas variáveis e se uma delas tem um coeficiente de variação muito maior que a outra, a de menor variabilidade atuará como uma constante no produto, resultando que a distribuição da variável acumulada seja semelhante à da variável de maior variabilidade.

O número de variáveis a determinar é de 41: sete variáveis presentes em cinco faixas granulométricas e os respectivos teores globais, excetuando a massa total (WT) cujo valor é 100%.

Na Figura 3.6 é apresentado o histograma desagrupado do teor global de ferro (FET). No Apêndice A, são apresentados os histogramas desagrupados de todas as variáveis originais e acumuladas. O separador decimal, nas próximas figuras apresentadas no documento, é o ponto em vez de vírgula, não assim nas tabelas.

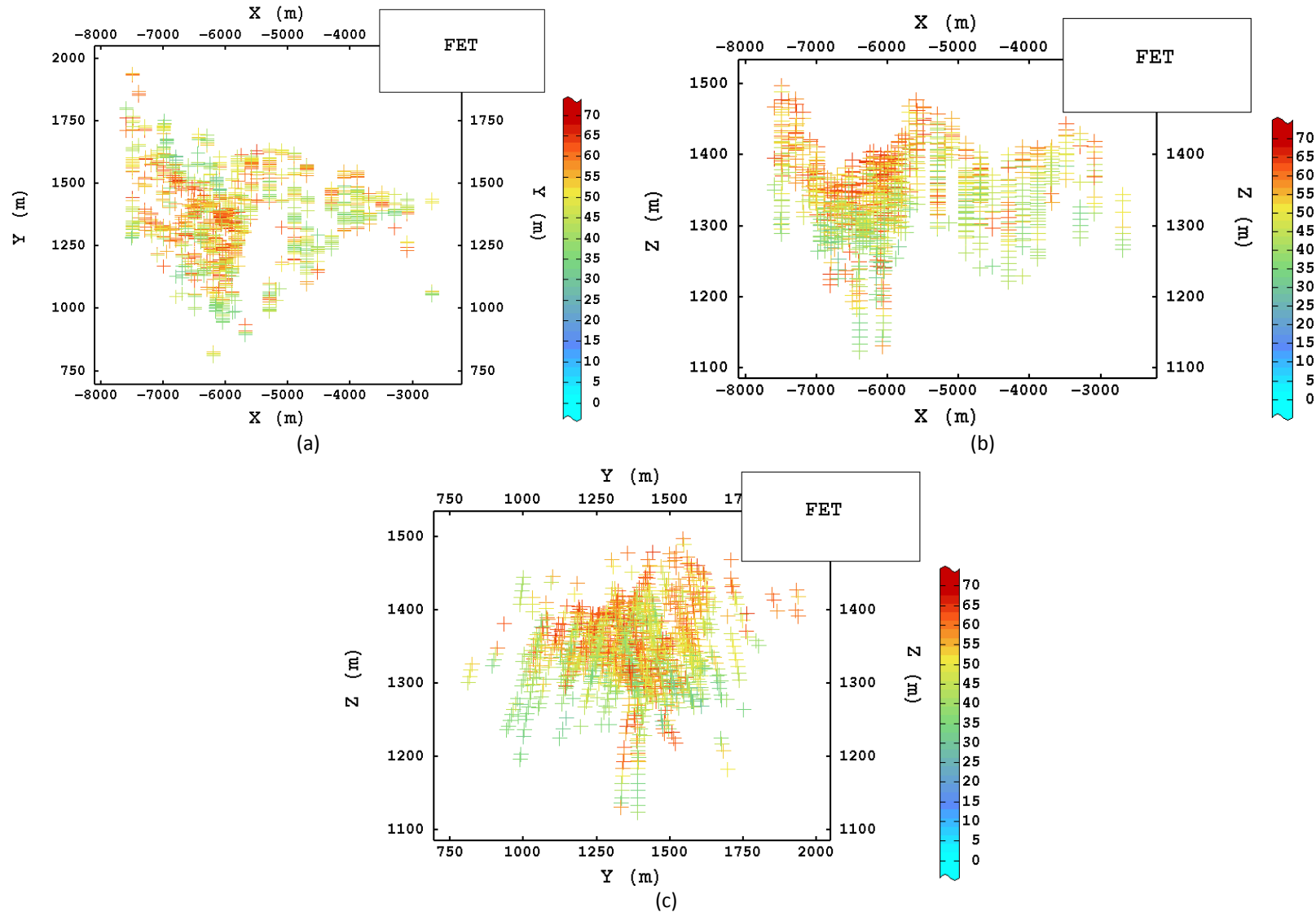


Figura 3.4- Mapas de localização das amostras no domínio geoestatístico IB, projetados nos planos (a) XY, (b) XZ e (c) YZ do sistema de coordenadas rotado na direção principal do corpo de minério, mostrando o teor global correspondente ao ferro (FET) em percentagem.

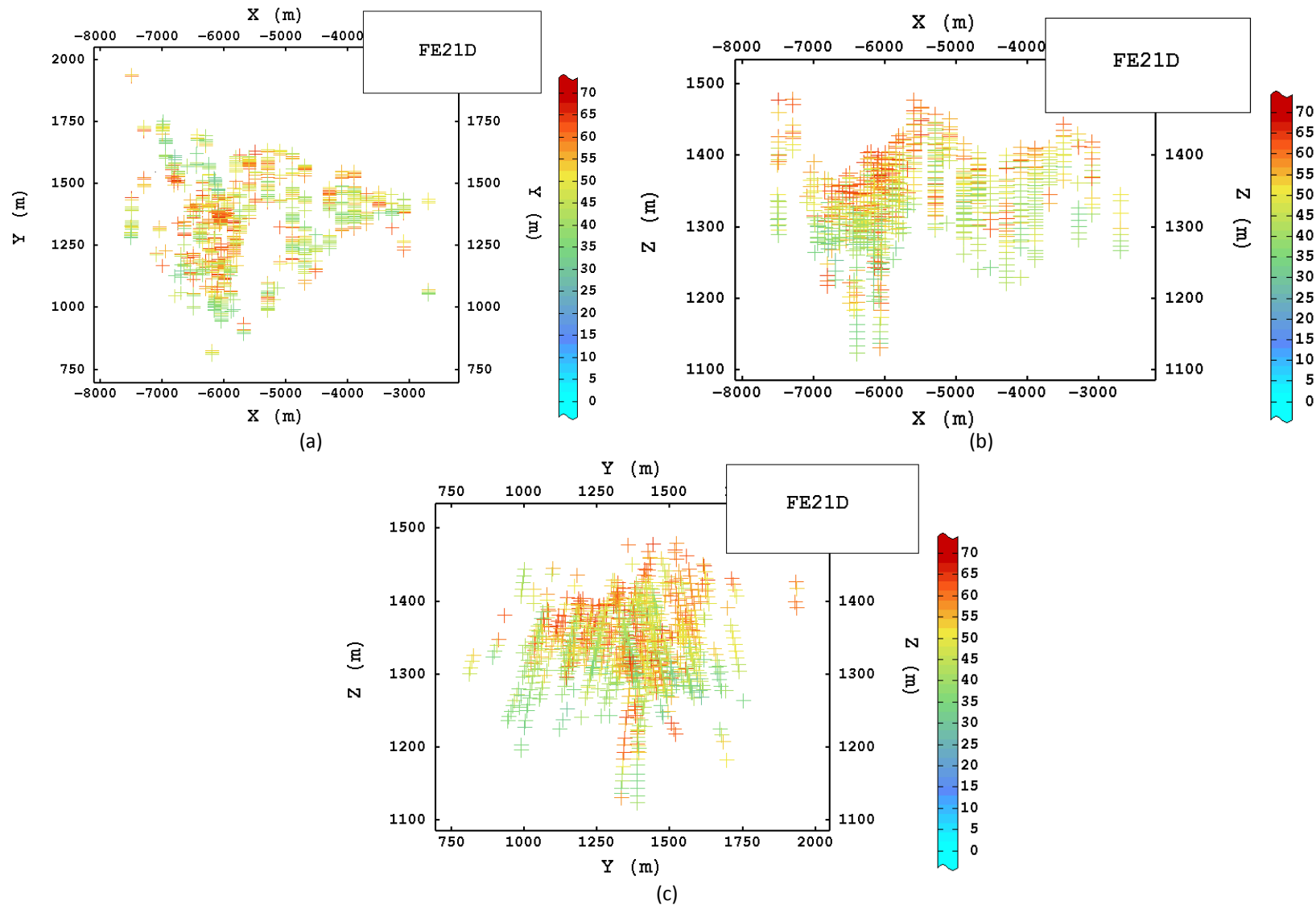


Figura 3.5 - Mapas de localização das amostras no domínio geoestatístico IB, na faixa 21, projetados nos planos (a) XY, (b) XZ e (c) YZ do sistema de coordenadas rotado na direção principal do corpo de minério, mostrando o teor correspondente ao ferro sem acumular, (FE21D) em porcentagem (letra D, teor desacumulado).



Para atenuar o efeito do agrupamento preferencial das amostras, utiliza-se a técnica de desagrupamento por células móveis (Isaaks e Srivastava, 1989). Utilizam-se células de 200 x 100 x 10 m respectivamente em X, Y e Z correspondendo a malha de sondagem mais espaçada e com a regularização das amostras em intervalos de 10 metros. No caso da sílica, utiliza-se o programa DECLUS da biblioteca GSLib (Deutsch e Journel, 1998), como é explicado na análise de resultados no Capítulo 6.

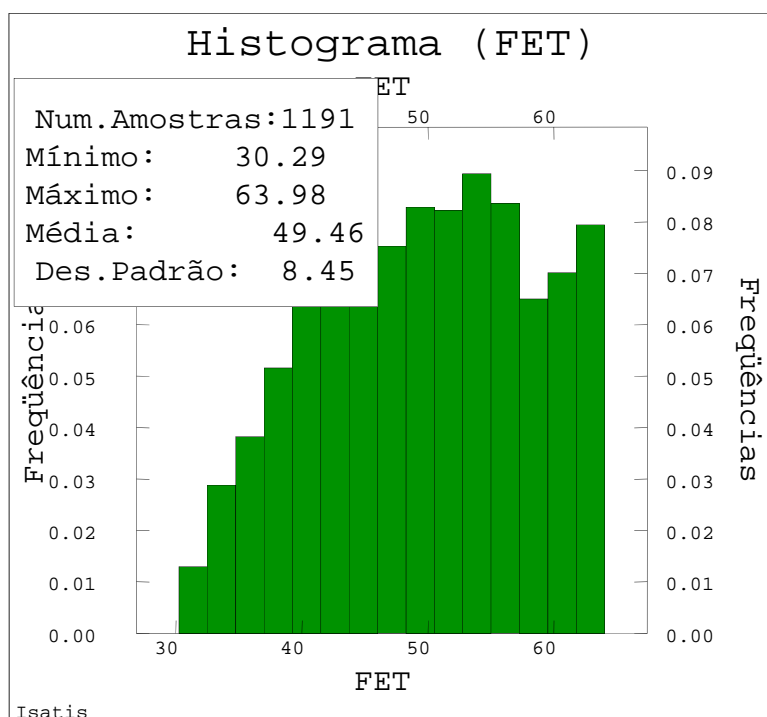


Figura 3.6 – Histograma dos dados desagrupados correspondentes ao teor global de ferro (FET).

Na Tabela 3.4, apresentam-se as estatísticas básicas dos dados originais, resumindo os valores apresentados pelos histogramas.

De forma análoga, a Tabela 3.5 apresenta as estatísticas básicas dos dados acumulados pela massa das frações granulométricas.

Os teores na faixa 22 foram calculados a partir dos teores na faixa 2 e 21, o que é indicado com a letra C.

Tabela 3.4 – Estatísticas básicas dos dados originais e dos dados desagrupados, sem acumular (letra D), nas faixas granulométricas 1, 2, 21, 22 (calculado, letra C), 3 e total T (teor global).

|         | Num. Amostras | Mínimo | Máximo | Média | Variância | Média desagrupada | Variância desagrupada |
|---------|---------------|--------|--------|-------|-----------|-------------------|-----------------------|
| AL1D    | 1191          | 0,00   | 9,44   | 0,85  | 0,757     | 0,86              | 0,793                 |
| AL2D    | 1191          | 0,10   | 2,39   | 0,70  | 0,156     | 0,71              | 0,162                 |
| AL21D   | 917           | 0,10   | 3,12   | 0,79  | 0,226     | 0,81              | 0,237                 |
| AL22CD  | 917           | 0,10   | 2,50   | 0,67  | 0,149     | 0,66              | 0,145                 |
| AL3D    | 1191          | 0,11   | 6,40   | 1,33  | 0,449     | 1,34              | 0,426                 |
| ALT     | 1191          | 0,11   | 1,99   | 1,03  | 0,218     | 1,05              | 0,213                 |
| FE1D    | 1191          | 0,00   | 69,36  | 59,47 | 73,108    | 58,63             | 83,562                |
| FE2D    | 1191          | 22,27  | 68,18  | 54,74 | 83,532    | 53,44             | 88,934                |
| FE21D   | 917           | 21,58  | 68,94  | 60,96 | 39,177    | 60,28             | 43,053                |
| FE22CD  | 917           | 15,11  | 67,07  | 47,42 | 142,782   | 46,01             | 147,202               |
| FE3D    | 1191          | 22,73  | 64,74  | 44,67 | 82,040    | 43,99             | 81,135                |
| FET     | 1191          | 30,29  | 63,98  | 50,51 | 69,994    | 49,46             | 71,366                |
| MN1D    | 1191          | 0,00   | 13,45  | 0,23  | 0,768     | 0,19              | 0,462                 |
| MN2D    | 1191          | 0,01   | 6,34   | 0,23  | 0,357     | 0,22              | 0,319                 |
| MN21D   | 917           | 0,01   | 10,19  | 0,30  | 0,592     | 0,28              | 0,489                 |
| MN22CD  | 917           | 0,01   | 5,40   | 0,24  | 0,329     | 0,22              | 0,292                 |
| MN3D    | 1191          | 0,01   | 2,24   | 0,14  | 0,067     | 0,13              | 0,061                 |
| MNT     | 1191          | 0,01   | 2,98   | 0,18  | 0,166     | 0,17              | 0,137                 |
| P1D     | 1191          | 0,00   | 0,40   | 0,06  | 0,002     | 0,06              | 0,002                 |
| P2D     | 1191          | 0,01   | 0,23   | 0,05  | 0,001     | 0,05              | 0,001                 |
| P21D    | 917           | 0,01   | 0,27   | 0,06  | 0,002     | 0,07              | 0,002                 |
| P22CD   | 917           | 0,01   | 0,23   | 0,05  | 0,001     | 0,05              | 0,001                 |
| P3D     | 1191          | 0,01   | 0,20   | 0,05  | 0,001     | 0,05              | 0,001                 |
| PT      | 1191          | 0,01   | 0,20   | 0,05  | 0,001     | 0,05              | 0,001                 |
| PPC1D   | 1180          | 0,02   | 8,00   | 2,52  | 3,582     | 2,69              | 3,819                 |
| PPC2D   | 1181          | 0,08   | 8,32   | 1,88  | 1,943     | 2,00              | 2,132                 |
| PPC21D  | 909           | 0,04   | 9,93   | 2,54  | 3,200     | 2,75              | 3,402                 |
| PPC22CD | 909           | -0,01  | 7,60   | 1,77  | 1,375     | 1,84              | 1,465                 |
| PPC3D   | 1181          | 0,16   | 6,21   | 1,85  | 1,133     | 1,95              | 1,191                 |
| PPCT    | 1180          | 0,14   | 7,09   | 1,93  | 1,423     | 2,04              | 1,502                 |
| SI1D    | 1191          | 0,00   | 85,50  | 11,00 | 150,231   | 10,96             | 173,830               |
| SI2D    | 1191          | 1,12   | 66,30  | 18,59 | 169,544   | 18,43             | 183,082               |
| SI21D   | 917           | 0,64   | 68,55  | 8,89  | 78,107    | 8,85              | 89,070                |
| SI22CD  | 917           | 1,45   | 78,11  | 29,09 | 302,655   | 31,05             | 314,354               |
| SI3D    | 1191          | 1,74   | 66,46  | 32,47 | 182,491   | 32,18             | 182,346               |
| SIT     | 1191          | 1,44   | 54,45  | 24,31 | 149,516   | 24,02             | 154,258               |
| W1      | 1191          | 0,01   | 94,53  | 18,24 | 168,718   | 17,71             | 162,414               |
| W2      | 1191          | 4,46   | 54,16  | 28,47 | 61,285    | 28,08             | 58,957                |
| W21     | 917           | 0,90   | 41,89  | 14,50 | 31,559    | 13,88             | 28,685                |
| W22C    | 917           | 3,61   | 31,75  | 13,72 | 21,788    | 14,03             | 22,683                |
| W3      | 1191          | 1,00   | 94,48  | 53,29 | 213,411   | 54,21             | 199,768               |

Tabela 3.5 - Estatísticas básicas dos dados originais e dos dados desagrupados, acumulados, nas faixas granulométricas 1, 2, 21, 22 (calculado, letra C) e 3.

|        | Num.<br>Amostras | Mínimo | Máximo  | Média   | Variância  | Média<br>desagrupada | Variância<br>desagrupada |
|--------|------------------|--------|---------|---------|------------|----------------------|--------------------------|
| AL1    | 1191             | 0,00   | 108,66  | 13,99   | 211,631    | 13,75                | 211,359                  |
| AL2    | 1191             | 1,32   | 79,35   | 19,55   | 139,902    | 19,56                | 134,409                  |
| AL21   | 917              | 0,44   | 47,13   | 10,88   | 54,297     | 10,77                | 52,140                   |
| AL22C  | 917              | 0,59   | 37,19   | 8,86    | 27,360     | 8,96                 | 26,713                   |
| AL3    | 1191             | 1,50   | 179,98  | 69,79   | 1382,036   | 71,82                | 1375,707                 |
| FE1    | 1191             | 0,70   | 1306,42 | 169,71  | 24865,482  | 180,89               | 28619,809                |
| FE2    | 1191             | 41,30  | 1498,39 | 416,22  | 65865,722  | 450,59               | 73984,046                |
| FE21   | 917              | 3,55   | 642,97  | 117,43  | 5603,889   | 122,61               | 6297,227                 |
| FE22C  | 917              | 29,58  | 1442,60 | 326,24  | 62753,98   | 355,12               | 69042,52                 |
| FE3    | 1191             | 23,89  | 3437,35 | 1363,11 | 423810,452 | 1422,76              | 417948,004               |
| MN1    | 1191             | 0,00   | 203,53  | 3,71    | 198,180    | 3,21                 | 139,735                  |
| MN2    | 1191             | 0,05   | 186,44  | 7,08    | 391,028    | 6,60                 | 337,965                  |
| MN21   | 917              | 0,03   | 124,34  | 5,13    | 189,728    | 4,57                 | 158,902                  |
| MN22C  | 917              | 0,04   | 72,53   | 3,12    | 58,345     | 2,88                 | 49,413                   |
| MN3    | 1191             | 0,05   | 112,13  | 7,14    | 192,204    | 7,11                 | 176,305                  |
| P1     | 1191             | 0,00   | 10,77   | 1,08    | 1,405      | 1,08                 | 1,317                    |
| P2     | 1191             | 0,10   | 8,64    | 1,42    | 1,023      | 1,44                 | 1,054                    |
| P21    | 917              | 0,02   | 4,36    | 0,86    | 0,386      | 0,88                 | 0,393                    |
| P22C   | 917              | 0,04   | 4,66    | 0,63    | 0,179      | 0,65                 | 0,192                    |
| P3     | 1191             | 0,04   | 9,62    | 2,50    | 2,019      | 2,61                 | 2,058                    |
| PPC1   | 1180             | 0,29   | 307,53  | 42,19   | 1847,261   | 44,16                | 1944,489                 |
| PPC2   | 1181             | 1,04   | 285,76  | 52,56   | 1621,926   | 55,37                | 1754,710                 |
| PPC21  | 909              | 0,29   | 179,31  | 33,92   | 642,220    | 35,54                | 684,160                  |
| PPC22C | 909              | -0,09  | 129,90  | 24,06   | 283,517    | 25,45                | 301,770                  |
| PPC3   | 1181             | 1,02   | 395,85  | 97,93   | 3683,416   | 104,54               | 3879,911                 |
| SI1    | 1191             | 0,00   | 1867,24 | 176,17  | 46450,902  | 190,92               | 54313,577                |
| SI2    | 1191             | 47,72  | 2006,96 | 503,88  | 132159,152 | 550,52               | 150325,927               |
| SI21   | 917              | 4,14   | 914,49  | 112,13  | 11048,163  | 118,75               | 12977,797                |
| SI22C  | 917              | 22,24  | 1964,32 | 423,54  | 125757,424 | 463,31               | 138987,643               |
| SI3    | 1191             | 30,96  | 4725,40 | 1751,23 | 851323,237 | 1826,53              | 847149,557               |

No Apêndice A, também são apresentados os diagramas de dispersão e coeficientes de correlação entre os variáveis presentes em cada faixa granulométrica e no global. Na Figura 3.7 é apresentado o diagrama correspondente a correlação existente entre os teores globais, e na Tabela 3.6 apresentam-se os coeficientes de correlação respectivos.

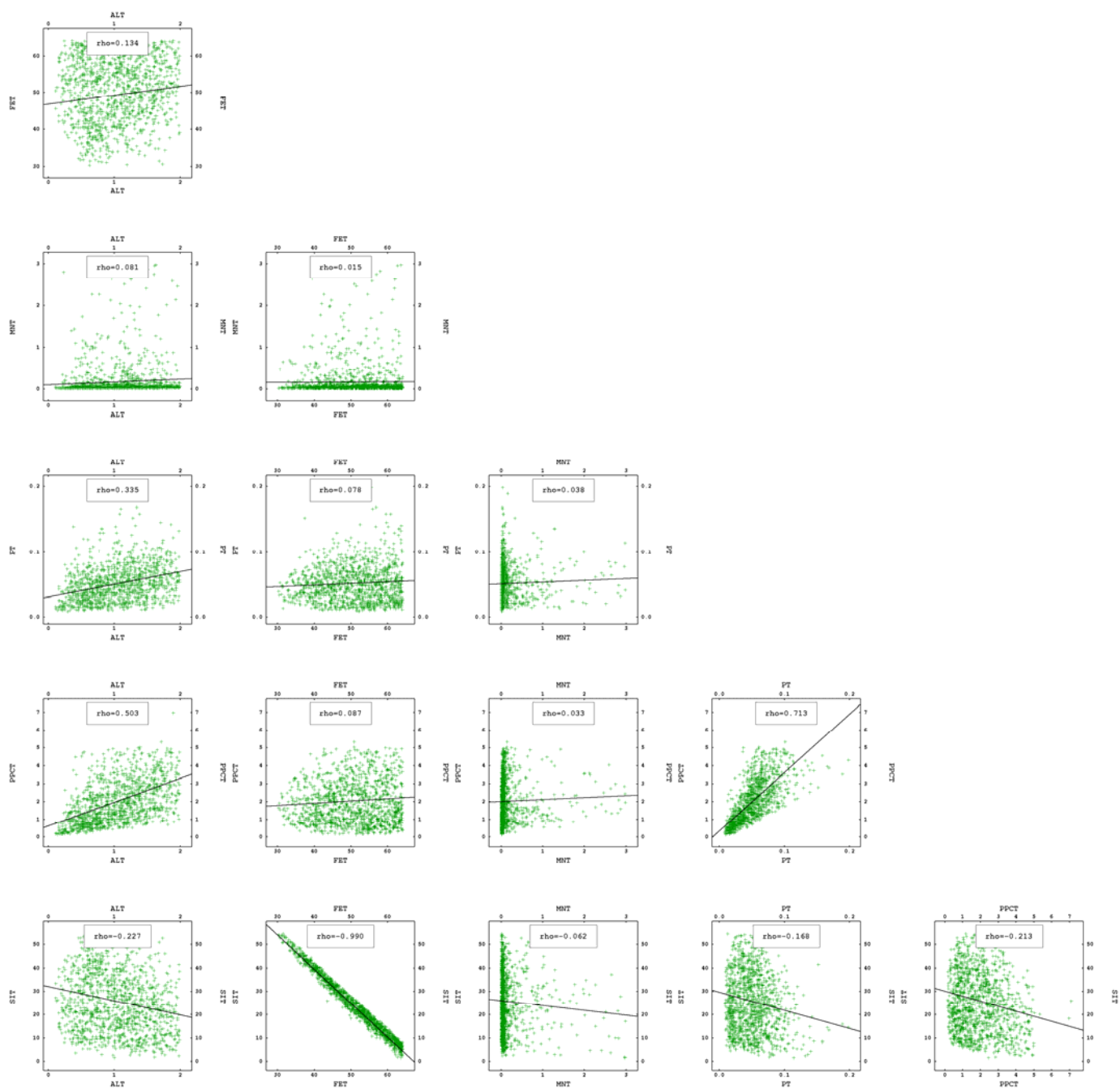


Figura 3.7 - Diagramas de dispersão das variáveis originais no global (ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT).

Tabela 3.6 - Coeficientes de correlação das variáveis originais no global (ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT).

|      | ALT    | FET    | MNT    | PT     | PPCT   |
|------|--------|--------|--------|--------|--------|
| FET  | 0,134  |        |        |        |        |
| MNT  | 0,081  | 0,015  |        |        |        |
| PT   | 0,335  | 0,078  | 0,038  |        |        |
| PPCT | 0,503  | 0,087  | 0,033  | 0,713  |        |
| SIT  | -0,227 | -0,990 | -0,062 | -0,168 | -0,213 |

No Apêndice A também são apresentados os diagramas de dispersão entre as proporções de um mesmo elemento retidas nas diferentes frações granulométricas, acumuladas. Na Figura 3.8 apresentam-se os diagramas de dispersão da alumina nas diferentes faixas e no global e na Tabela 3.7 os coeficientes de correlação respectivos.

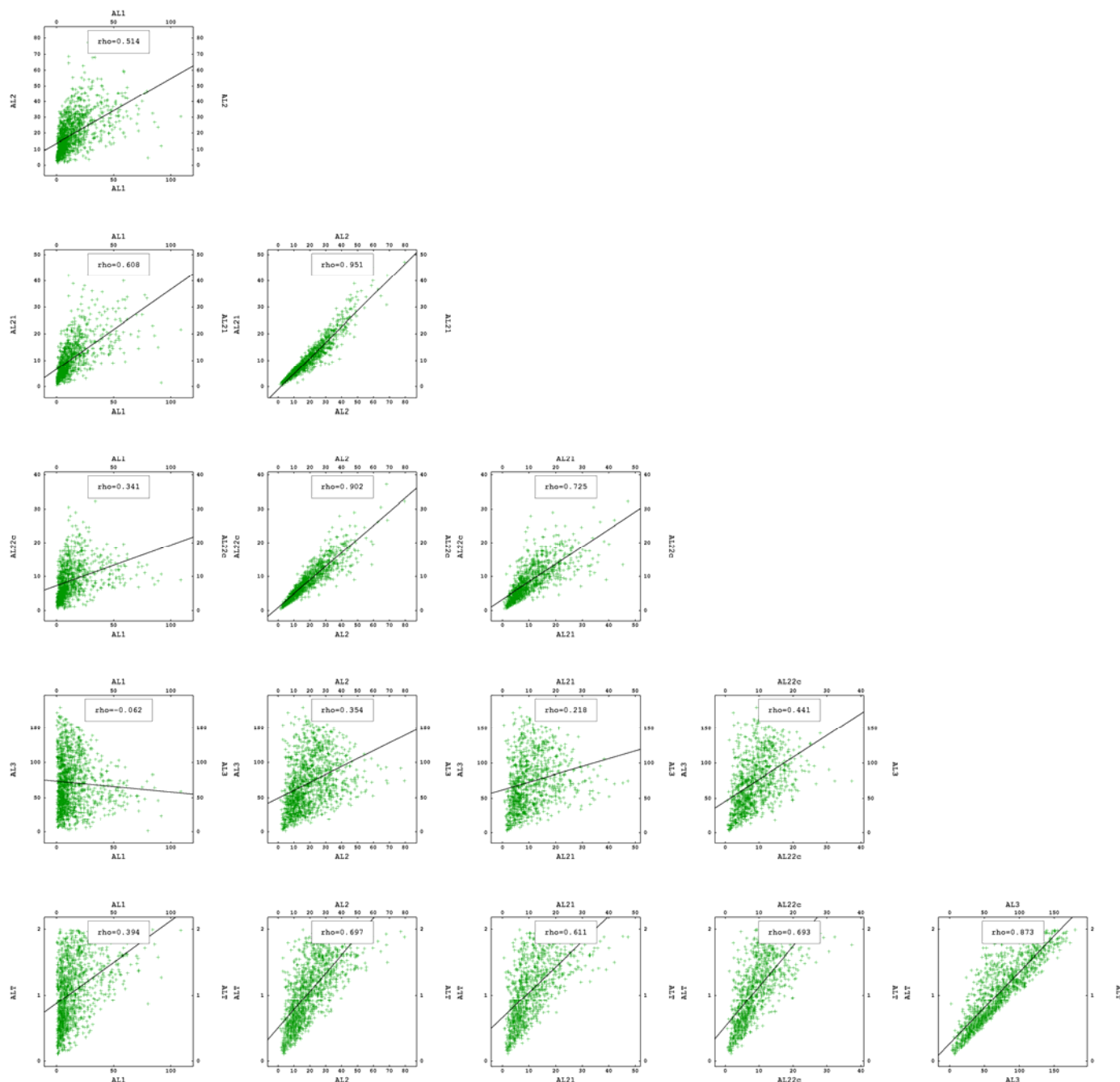


Figura 3.8 - Diagramas de dispersão da alumina acumulada nas diferentes faixas granulométricas e no global (AL1, AL2, AL21, AL22C, AL3 e ALT).

Tabela 3.7 - Coeficientes de correlação da alumina acumulada nas diferentes faixas granulométricas e no global (AL1, AL2, AL21, AL22C, AL3 e ALT).

|       | AL1    | AL2   | AL21  | AL22C | AL3   |
|-------|--------|-------|-------|-------|-------|
| AL2   | 0,514  |       |       |       |       |
| AL21  | 0,608  | 0,951 |       |       |       |
| AL22C | 0,341  | 0,902 | 0,725 |       |       |
| AL3   | -0,062 | 0,354 | 0,218 | 0,441 |       |
| ALT   | 0,364  | 0,697 | 0,611 | 0,693 | 0,873 |

### 3.4 Análise da variabilidade espacial conjunta e cokrigagem ordinária

As 41 variáveis a serem determinadas apresentam relações matemáticas que as vinculam. A partir do balanço de massas, o somatório das massas das frações granulométricas  $W_i$  é igual à massa total WT:

$$W_T(u) = W_1(u) + W_2(u) + W_3(u) = 100\% \quad (3.1)$$

O teor total de cada variável pode ser expresso em função do teor em cada faixa granulométrica:

$$AL_T(u) = \frac{((AL_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (AL_{2D}(u) \cdot W_2(u)) + (AL_{3D}(u) \cdot W_3(u)))}{100} \quad (3.2)$$

$$MN_T(u) = \frac{((MN_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (MN_{2D}(u) \cdot W_2(u)) + (MN_{3D}(u) \cdot W_3(u)))}{100} \quad (3.3)$$

$$P_T(u) = \frac{((P_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (P_{2D}(u) \cdot W_2(u)) + (P_{3D}(u) \cdot W_3(u)))}{100} \quad (3.4)$$

$$PPC_T(u) = \frac{((PPC_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (PPC_{2D}(u) \cdot W_2(u)) + (PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u)))}{100} \quad (3.5)$$

$$Sl_T(u) = \frac{((Sl_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (Sl_{2D}(u) \cdot W_2(u)) + (Sl_{3D}(u) \cdot W_3(u)))}{100} \quad (3.6)$$

No caso do ferro, a acumulação é feita com o valor complementar ao teor máximo na hematita (70%). Portanto, o teor de ferro total é expresso como:

$$FE_T(u) = 70 - \frac{((FE_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (FE_{2D}(u) \cdot W_2(u)) + (FE_{3D}(u) \cdot W_3(u)))}{100} \quad (3.7)$$

A massa da fração granulométrica 2, está constituída pelo somatório das massas das frações 21 e 22, nas quais é subdividida.

$$W_2(u) = W_{21}(u) + W_{22}(u) \quad (3.8)$$

Também, os teores nas faixas 21 e 22 devem satisfazer o balanço correspondente com os teores na faixa 2:

$$AL_{2D}(u) \cdot W_2(u) = AL_{21D}(u) \cdot W_{21}(u) + AL_{22D}(u) \cdot W_{22}(u) \quad (3.9)$$

$$FE_{2D}(u) \cdot W_2(u) = FE_{21D}(u) \cdot W_{21}(u) + FE_{22D}(u) \cdot W_{22}(u) \quad (3.10)$$

$$MN_{2D}(u) \cdot W_2(u) = MN_{21D}(u) \cdot W_{21}(u) + MN_{22D}(u) \cdot W_{22}(u) \quad (3.11)$$

$$P_{2D}(u) \cdot W_2(u) = P_{21D}(u) \cdot W_{21}(u) + P_{22D}(u) \cdot W_{22}(u) \quad (3.12)$$

$$PPC_{2D}(u) \cdot W_2(u) = PPC_{21D}(u) \cdot W_{21}(u) + PPC_{22D}(u) \cdot W_{22}(u) \quad (3.13)$$

$$Sl_{2D}(u) \cdot W_2(u) = Sl_{21D}(u) \cdot W_{21}(u) + Sl_{22D}(u) \cdot W_{22}(u) \quad (3.14)$$

Cada uma das espécies analisadas deve satisfazer, simultaneamente, o balanço estequiométrico ( $i=1, 2, 21, 22, 3$  e T):

$$\frac{FE_i(u)}{0,69825} + \frac{P_i(u)}{0,43638} + \frac{MN_i(u)}{0,63193} + AL_i(u) + Sl_i(u) + PPC_i(u) = 100 \quad (3.15)$$

Dadas as relações acima apresentadas, pode ser realizado um sistema de cokrigagem que inclua todas as variáveis e aproveite suas correlações. Isso levaria a um Modelo Linear de Corregionalização muito grande, que só poderia ser modelado dedicando um número muito elevado de horas de trabalho (horas/homem) ou com algoritmos que levassem a uma solução automática.

Decidiu-se, portanto, construir um sistema de cokrigagem envolvendo um número menor de variáveis. A partir dos diagramas de dispersão e coeficientes de correlação, escolheram-se sistemas de cokrigagem com as proporções de um mesmo elemento nas diferentes faixas granulométricas e no global, já que apresentam uma correlação mais elevada para o vetor de separação nulo, mesmo que essa correlação possa ser espúria (sem significado físico ou geológico), dada pela condição de soma fechada (Pawlowsky, 1984). Portanto, escolhem-se os subgrupos e aproveitam-se as relações dadas pelas Equações (3.1) a (3.7). Numa etapa posterior à cokrigagem, deve-se conferir se as estimativas satisfazem todas as relações matemáticas.

Não considerando a abordagem dada pela análise geoestatística de dados composicionais apresentada no Capítulo 2 (item 2.3), pode-se aplicar a metodologia proposta por Goovaerts para dados linearmente dependentes (1997, p. 214). Nela, propõem-se estimar as variáveis por cokrigagem ordinária deixando

arbitrariamente uma variável fora do sistema, a qual é determinada posteriormente por diferença. Porém, a variável escolhida carregará o somatório dos erros das estimativas das variáveis a partir das quais é determinada.

Assim, os dados provenientes das faixas 1 e 22 são deixados fora dos sistemas de cokrigagem ordinária e determinados posteriormente por diferença.

Os sistemas de cokrigagem ordinária considerados estão conformados pelos subgrupos de variáveis apresentados na Tabela 3.8. A cokrigagem do ferro realiza-se em conjunto com a da sílica para aproveitar a forte correlação inversa existente entre essas duas espécies. Portanto, os sistemas de cokrigagem envolvem três, quatro e oito variáveis.

A análise da variabilidade espacial conjunta mostra o elipsóide de anisotropia com o seu eixo maior (direção de maior continuidade) no azimute N100°, o eixo intermediário em N190°, ambos no plano XY, sem mergulho. O eixo menor do elipsóide (direção de menor continuidade) é perpendicular ao plano XY, denominada D-90°.

Tabela 3.8 – Subgrupos de variáveis utilizadas nos sistemas de cokrigagem ordinária.

| Subgrupo | Variáveis                                |
|----------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT                      |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET, SI2, SI21, SI3, SIT |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT                      |
| 4        | P2, P21, P3, PT                          |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT                  |
| 6        | W2, W21, W3                              |

A modelagem da correlação espacial conjunta é realizada por meio do Modelo Linear de Corregionalização (MLC), os quais são apresentados no Apêndice B para os seis sistemas de cokrigagem ordinária considerados. Assume-se o mesmo elipsóide de anisotropia em cada sistema. No entanto, os alcances que representam a distância até a qual existe correlação espacial, são determinados de modo Independente para cada MLC. A Figura 3.9 apresenta os variogramas experimentais diretos e cruzados, modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia e o modelo variográfico para o caso da alumina



e a Tabela 3.9 as respectivas matrizes de correionalização (contribuições à variância global),  $\mathbf{C}_0$ ,  $\mathbf{C}_1$  e  $\mathbf{C}_2$ .

Os Modelos Lineares de Correionalização, a vizinhança e estratégias de busca foram calibrados com auxílio da validação cruzada (Isaaks e Srivastava, 1989) para os teores globais ALT, FET, SIT, MNT, PT e PPCT, e para as massas das frações granulométricas 2, 21 e 3, W2, W21 e W3, respectivamente.

A vizinhança e estratégias de busca são mantidas para todos os sistemas de cokrigagem ordinária da Tabela 3.8, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 3.10.

Depois da cokrigagem ordinária das variáveis dos sistemas da Tabela 3.8, os teores da faixa 1 são determinados a partir das relações (3.1) à (3.7). Os teores da faixa 22 não são determinados já que a sua determinação é trivial a partir das relações (3.8) à (3.14).

Tendo determinado os valores da massa das frações granulométricas  $W_i$ , as estimativas são desacumuladas pelas relações (3.16) a (3.21).

$$AL_{iD}(u) = \frac{AL_i(u)}{W_i(u)} \quad (3.16)$$

$$FE_{iD}(u) = 70 - \frac{FE_i(u)}{W_i(u)} \quad (3.17)$$

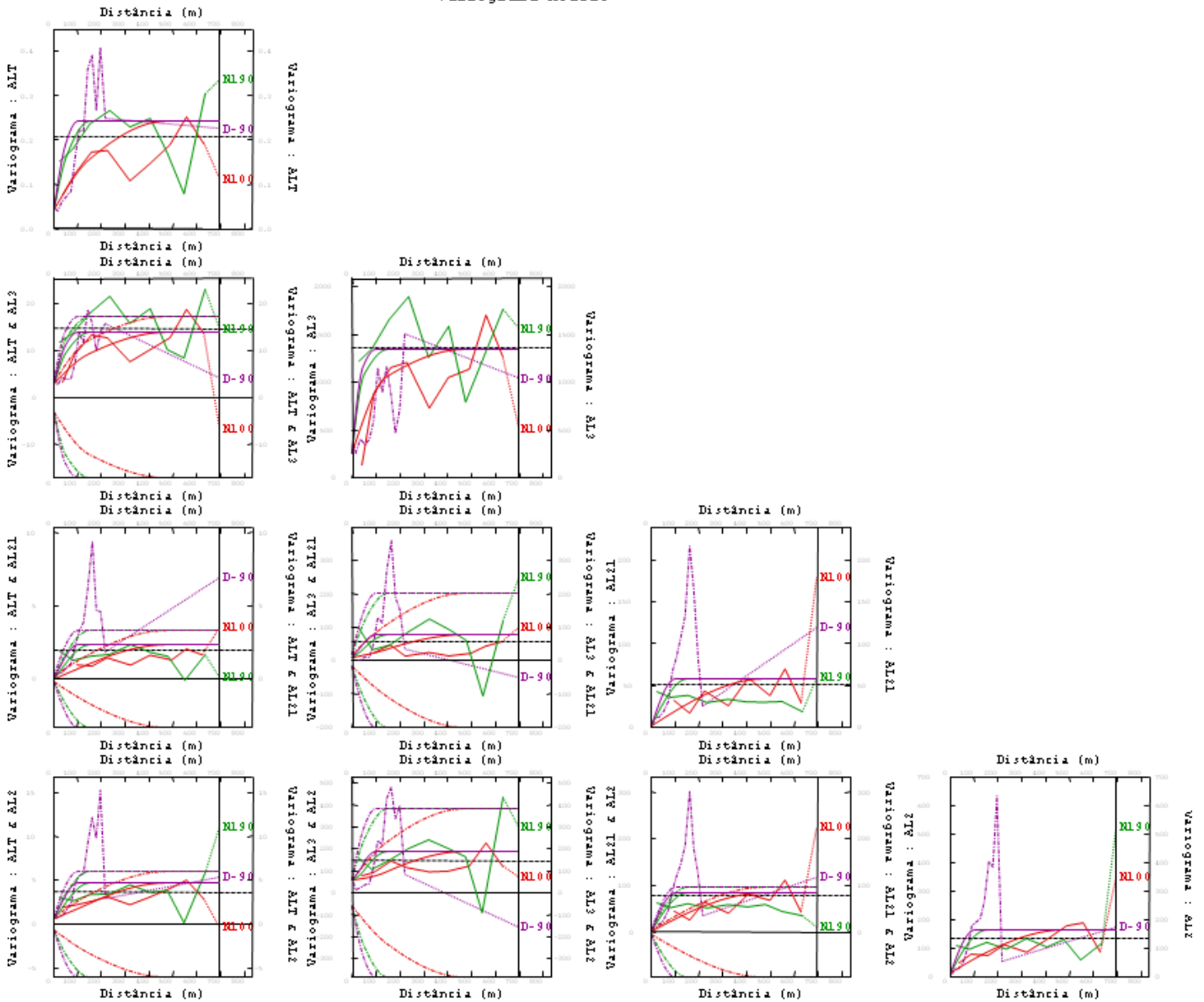
$$MN_{iD}(u) = \frac{MN_i(u)}{W_i(u)} \quad (3.18)$$

$$P_{iD}(u) = \frac{P_i(u)}{W_i(u)} \quad (3.19)$$

$$PPC_{iD}(u) = \frac{PPC_i(u)}{W_i(u)} \quad (3.20)$$

$$Sl_{iD}(u) = \frac{Sl_i(u)}{W_i(u)} \quad (3.21)$$

## Variograma Modelo



$$Y_{AL} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{145m}{N100^\circ} \frac{50m}{N190^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{470m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{100m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura 3.9 - Modelo de correção ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para a alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global (AL2, AL21, AL3 e ALT, respectivamente) e a equação do modelo correspondente, indicando os alcances de cada estrutura esférica (*Sph*) nas principais direções de anisotropia.

Tabela 3.9 - Matrizes de correionalização para o modelo linear de correionalização ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) da alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global (AL2, AL21, AL3 e ALT, respectivamente).

| <b>Matriz de Correionalização <math>C_0</math></b> |            |             |            |            |
|--|------------|-------------|------------|------------|
|  | <b>AL2</b> | <b>AL21</b> | <b>AL3</b> | <b>ALT</b> |
| <b>AL2</b>   | 12,89      | 1,65        | 57,12      | 0,70       |
| <b>AL21</b>  | 1,65       | 0,96        | 8,97       | 0,04       |
| <b>AL3</b>   | 57,12      | 8,97        | 256,80     | 2,98       |
| <b>ALT</b>   | 0,70       | 0,04        | 2,98       | 0,04       |
| <b>Matriz de Correionalização <math>C_1</math></b> |            |             |            |            |
|  | <b>AL2</b> | <b>AL21</b> | <b>AL3</b> | <b>ALT</b> |
| <b>AL2</b>   | 3,82       | 1,15        | -38,47     | -0,25      |
| <b>AL21</b>  | 1,15       | 0,35        | -11,6      | -0,07      |
| <b>AL3</b>   | -38,47     | -11,6       | 574,00     | 2,50       |
| <b>ALT</b>   | -0,25      | -0,07       | 2,50       | 0,04       |
| <b>Matriz de Correionalização <math>C_2</math></b> |            |             |            |            |
|  | <b>AL2</b> | <b>AL21</b> | <b>AL3</b> | <b>ALT</b> |
| <b>AL2</b>   | 147,70     | 80,79       | 171,70     | 4,24       |
| <b>AL21</b>  | 80,79      | 55,89       | 80,81      | 2,36       |
| <b>AL3</b>   | 171,70     | 80,81       | 520,20     | 8,28       |
| <b>ALT</b>   | 4,24       | 2,36        | 8,277      | 0,16       |

Tabela 3.10 – Parâmetros das vizinhança e estratégia de busca para os sistemas de cokrigagem ordinária.

|   |                     |
|---|---------------------|
| Tipo de vizinhança:                               | Móvel               |
| Elipsóide de busca alinhado com o da anisotropia: | N100°, N190°, D-90° |
| Raio de busca N100°:                              | 750m                |
| Raio de busca N190°:                              | 220m                |
| Raio de busca D-90°:                              | 60m                 |
| Número de setores angulares:                      | 8                   |
| Mínimo número de amostras:                        | 3                   |
| Número ótimo de amostras por setor angular:       | 2                   |
| Busca heterotópica (*):                           | Sim                 |
| Mínima distância entre pontos:                    | 10m                 |
| Discretização de blocos em X:                     | 5                   |
| Discretização de blocos em Y:                     | 5                   |
| Discretização de blocos em Z:                     | 1                   |

(\*) Na busca heterotópica são procuradas as amostras mais próximas, mas tentando ter uma amostra de cada variável do sistema de cokrigagem, seja qual for o número de amostras necessárias para satisfazer esse requerimento adicional (Bourassi et. al, 2009).

### **3.5 Pós-processamento das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária**

Posteriormente à cokrigagem ordinária, confere-se se as estimativas estão nos intervalos das variáveis no banco de dados original (Tabela 3.4).

Na Tabela 3.11, apresentam-se as estatísticas das estimativas originais, sem pós-processar (s/pp), com a quantidade de blocos fora dos intervalos originais para cada variável (incorretos), muitas vezes com valores negativos.

Essa observação faz com que os argumentos dados pela análise de dados composicionais contrários à metodologia da cokrigagem direta dos dados originais sejam verificados na prática, obtendo-se estimativas que estão fora do intervalo original das amostras.

Observa-se também que, com exceção das estimativas do manganês, o maior número de blocos incorretos corresponde aos teores calculados (letra C) na faixa 1, confirmando que a determinação por diferença, para essa faixa, faz com que essas estimativas carreguem o somatório dos erros.

No caso do manganês, os variogramas experimentais são muito erráticos e difíceis de modelar, como pode ser apreciado no modelo linear de correogionalização apresentado no Apêndice B.

Os blocos que estão fora dos intervalos válidos são substituídos por valores obtidos por outra metodologia de interpolação que, nesse caso, não fornece estimativas não tendenciosas e utiliza um modelo variográfico arbitrário (média local ou inverso ao quadrado da distância). Escolheu-se a substituição por médias locais, mas poderia se substituir pelo inverso do quadrado da distância ou krigagem.

O modelo de blocos fornecido pela empresa consta de 20855 blocos, os quais não foram estimados na sua totalidade, tendo um número de blocos estimados de 20832.

Assim, as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária pós-processadas têm as estatísticas apresentadas na Tabela 3.12 e o processo para a obtenção das estimativas pode resumir-se na Figura 3.10.

O seguinte passo depois do pós-processamento é validar as estimativas, conferindo se o balanço estequiométrico foi mantido em cada faixa. A análise de dados composicionais também alega que mesmo que os dados estejam dentro

dos limites apropriados nada garante que a condição da soma constante seja satisfeita.

Tabela 3.11 – Estatísticas das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), desacomuladas (letra D), sem pós-processar (sub-índice s/pp), indicando o número de blocos que estão fora do intervalo original das amostras, incluso com valores negativos (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados.

|                | <b>Blocos<br/>estimados</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> | <b>Blocos<br/>incorretos</b> | <b>%Blocos<br/>incorretos</b> |
|----------------|-----------------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|------------------------------|-------------------------------|
| AL1CD_CK_s/pp  | 20832                       | -0,24         | 4,72          | 0,87         | 0,241            | 30                           | 0,144                         |
| AL21D_CK_s/pp  | 20832                       | 0,05          | 2,73          | 0,87         | 0,143            | 10                           | 0,048                         |
| AL2D_CK_s/pp   | 20832                       | 0,05          | 1,93          | 0,77         | 0,080            | 3                            | 0,014                         |
| AL3D_CK_s/pp   | 20832                       | 0,31          | 3,10          | 1,38         | 0,110            | 0                            | 0,000                         |
| ALT_CK_s/pp    | 20832                       | 0,26          | 1,95          | 1,11         | 0,080            | 0                            | 0,000                         |
| FE1CD_CK_s/pp  | 20832                       | 8,10          | 72,68         | 60,19        | 28,127           | 20                           | 0,096                         |
| FE21D_CK_s/pp  | 20832                       | 31,11         | 68,69         | 61,94        | 11,131           | 0                            | 0,000                         |
| FE2D_CK_s/pp   | 20832                       | 20,39         | 67,43         | 54,28        | 44,689           | 4                            | 0,019                         |
| FE3D_CK_s/pp   | 20832                       | 26,28         | 58,88         | 44,88        | 22,267           | 0                            | 0,000                         |
| FET_CK_s/pp    | 20832                       | 33,38         | 61,39         | 50,33        | 22,240           | 0                            | 0,000                         |
| MN1CD_CK_s/pp  | 20832                       | -1,18         | 6,67          | 0,23         | 0,230            | 603                          | 2,895                         |
| MN21D_CK_s/pp  | 20832                       | -0,80         | 4,66          | 0,30         | 0,247            | 775                          | 3,720                         |
| MN2D_CK_s/pp   | 20832                       | -0,84         | 3,75          | 0,26         | 0,206            | 825                          | 3,960                         |
| MN3D_CK_s/pp   | 20832                       | -0,11         | 2,27          | 0,14         | 0,034            | 332                          | 1,594                         |
| MNT_CK_s/pp    | 20832                       | -0,26         | 2,39          | 0,19         | 0,082            | 448                          | 2,151                         |
| P1CD_CK_s/pp   | 20832                       | -0,07         | 0,39          | 0,06         | 0,001            | 19                           | 0,091                         |
| P21D_CK_s/pp   | 20832                       | -0,02         | 0,22          | 0,06         | 0,001            | 207                          | 0,994                         |
| P2D_CK_s/pp    | 20832                       | 0,01          | 0,20          | 0,05         | 0,001            | 0                            | 0,000                         |
| P3D_CK_s/pp    | 20832                       | 0,00          | 0,11          | 0,05         | 0,000            | 11                           | 0,053                         |
| PT_CK_s/pp     | 20832                       | 0,01          | 0,16          | 0,05         | 0,0003           | 0                            | 0,000                         |
| PPC1CD_CK_s/pp | 20832                       | -0,27         | 9,62          | 2,89         | 3,234            | 89                           | 0,427                         |
| PPC21D_CK_s/pp | 20832                       | -0,34         | 9,52          | 2,76         | 2,882            | 31                           | 0,149                         |
| PPC2D_CK_s/pp  | 20832                       | 0,10          | 7,54          | 2,23         | 1,496            | 0                            | 0,000                         |
| PPC3D_CK_s/pp  | 20832                       | 0,02          | 7,14          | 2,14         | 0,818            | 8                            | 0,038                         |
| PPCT_CK_s/pp   | 20832                       | 0,29          | 6,25          | 2,28         | 1,131            | 0                            | 0,000                         |
| SI1CD_CK_s/pp  | 20832                       | -8,01         | 82,05         | 9,70         | 52,518           | 48                           | 0,230                         |
| SI21D_CK_s/pp  | 20832                       | 0,55          | 54,94         | 7,17         | 17,564           | 1                            | 0,005                         |
| SI2D_CK_s/pp   | 20832                       | 2,33          | 67,92         | 18,76        | 85,949           | 5                            | 0,024                         |
| SI3D_CK_s/pp   | 20832                       | 11,00         | 61,61         | 31,74        | 50,311           | 0                            | 0,000                         |
| SIT_CK_s/pp    | 20832                       | 7,06          | 50,92         | 24,06        | 46,339           | 0                            | 0,000                         |
| W1C_CK_s/pp    | 20832                       | 2,70          | 49,85         | 17,85        | 31,897           | 0                            | 0,000                         |
| W21_CK_s/pp    | 20832                       | 4,36          | 32,78         | 14,24        | 14,116           | 0                            | 0,000                         |
| W2_CK_s/pp     | 20832                       | 12,59         | 49,89         | 28,28        | 19,044           | 0                            | 0,000                         |
| W3_CK_s/pp     | 20832                       | 24,11         | 81,54         | 53,87        | 53,975           | 0                            | 0,000                         |

Tabela 3.12 – Estatísticas das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), desacomuladas (letra D), pós-processadas substituindo os valores incorretos (fora dos intervalos originais) por médias locais.

|           | <b>Blocos modelo</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> |
|-----------|----------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|
| AL1CD_CK  | 20832                | 0,00          | 4,72          | 0,88         | 0,237            |
| AL21D_CK  | 20832                | 0,05          | 2,73          | 0,87         | 0,141            |
| AL2D_CK   | 20832                | 0,05          | 1,93          | 0,77         | 0,079            |
| AL3D_CK   | 20832                | 0,31          | 3,10          | 1,38         | 0,108            |
| ALT_CK    | 20832                | 0,26          | 1,95          | 1,11         | 0,079            |
| FE1CD_CK  | 20832                | 8,10          | 69,24         | 60,16        | 27,642           |
| FE21D_CK  | 20832                | 31,11         | 68,50         | 61,94        | 11,039           |
| FE2D_CK   | 20832                | 22,44         | 67,43         | 54,27        | 44,232           |
| FE3D_CK   | 20832                | 26,28         | 58,88         | 44,88        | 22,153           |
| FET_CK    | 20832                | 33,70         | 61,39         | 50,33        | 22,064           |
| MN1CD_CK  | 20832                | 0,00          | 6,67          | 0,24         | 0,226            |
| MN21D_CK  | 20832                | 0,01          | 4,66          | 0,31         | 0,243            |
| MN2D_CK   | 20832                | 0,01          | 3,75          | 0,27         | 0,202            |
| MN3D_CK   | 20832                | 0,01          | 2,00          | 0,14         | 0,031            |
| MNT_CK    | 20832                | 0,01          | 2,39          | 0,20         | 0,081            |
| P1CD_CK   | 20832                | 0,00          | 0,39          | 0,06         | 0,001            |
| P21D_CK   | 20832                | 0,01          | 0,22          | 0,06         | 0,001            |
| P2D_CK    | 20832                | 0,01          | 0,20          | 0,05         | 0,001            |
| P3D_CK    | 20832                | 0,01          | 0,11          | 0,05         | 0,0003           |
| PT_CK     | 20832                | 0,01          | 0,16          | 0,05         | 0,0003           |
| PPC1CD_CK | 20832                | 0,02          | 7,99          | 2,89         | 3,126            |
| PPC21D_CK | 20832                | 0,04          | 9,44          | 2,76         | 2,828            |
| PPC2D_CK  | 20832                | 0,14          | 7,54          | 2,23         | 1,472            |
| PPC3D_CK  | 20832                | 0,32          | 6,19          | 2,14         | 0,808            |
| PPCT_CK   | 20832                | 0,29          | 6,00          | 2,28         | 1,113            |
| SI1CD_CK  | 20832                | 0,03          | 82,05         | 9,74         | 51,914           |
| SI21D_CK  | 20832                | 0,80          | 54,94         | 7,18         | 17,466           |
| SI2D_CK   | 20832                | 2,33          | 65,07         | 18,77        | 84,990           |
| SI3D_CK   | 20832                | 11,00         | 61,61         | 31,74        | 50,113           |
| SIT_CK    | 20832                | 7,06          | 49,37         | 24,06        | 45,974           |
| W1C_CK    | 20832                | 2,70          | 49,85         | 17,85        | 31,568           |
| W21_CK    | 20832                | 4,36          | 32,78         | 14,24        | 13,925           |
| W2_CK     | 20832                | 12,65         | 49,89         | 28,28        | 18,753           |
| W3_CK     | 20832                | 24,11         | 81,12         | 53,87        | 53,144           |

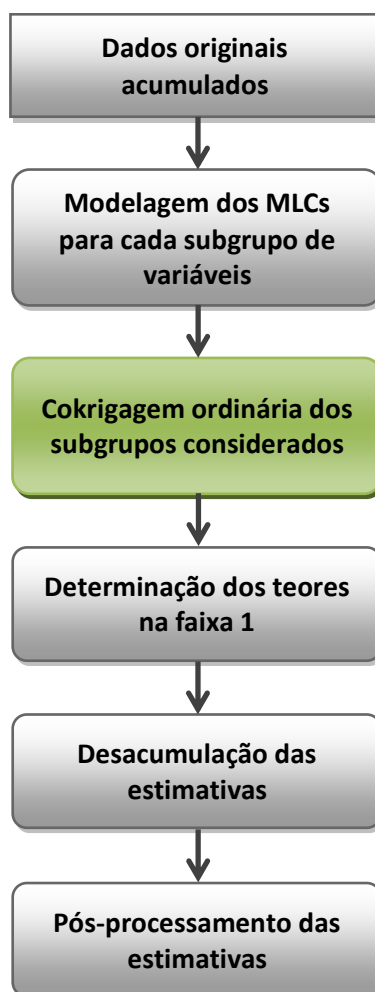


Figura 3.10 – Esquema de obtenção das estimativas por cokrigagem ordinária das variáveis nos subgrupos considerados, posterior determinação dos teores da faixa 1 e pós-processamento das estimativas nos blocos incorretos (fora do intervalo original das amostras).

Também, é importante observar para cada variável, se a média das estimativas ao longo dos eixos X, Y e Z acompanha a tendência da média dos dados originais nas mesmas direções (análise de deriva).

Outra ferramenta de validação é dada pela observação da concordância entre as estimativas e os dados originais para determinadas seções.

Esse processo de validação será apresentado para todas as metodologias utilizadas, no Capítulo 6, onde se apresenta uma discussão comparativa dos métodos utilizados e dos resultados obtidos.

## Capítulo 4

### **Krigagem ordinária de fatores independentes: Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF) e Componentes Principais (PCA)**

Esse capítulo apresenta duas metodologias alternativas à metodologia clássica da cokrigagem. Em ambas, as variáveis originais acumuladas são descorrelacionadas por métodos de fatorização, o que permite a sua krigagem de forma independente e posterior reconstituição das variáveis originais por retro-transformação.

#### **4.1 Metodologias de fatorização MAF e PCA**

A descorrelação por decomposição em componentes principais (PCA) é uma metodologia clássica da estatística multivariada, que quando utilizada com dados regionalizados, garante uma descorrelação para um vetor de separação nulo ( $h=0$ ), exceto nos casos nos quais as variáveis estão intrinsecamente correlacionadas, em que a descorrelação é válida para todos os vetores de separação  $h$  (Goovaerts, 1993).

A decomposição em fatores de autocorrelação mínimos/máximos (MAF) é uma técnica de fatorização, semelhante à PCA. Diferencia-se dessa técnica em que descorrelaciona as variáveis além do vetor de separação nulo, até um vetor de separação pequeno ( $h=\Delta$ ), geralmente coincidente com o espaçamento amostral ou com o alcance da primeira estrutura do modelo linear de corregionalização.



Apesar da decomposição em componentes principais (PCA) ter sido amplamente utilizada e de que a sua apresentação nessa tese não é inovadora, é apresentada em conjunto com a decomposição MAF por serem muito semelhantes constitutivamente e com o objetivo de observar, comparativamente, a diferença existente na utilização de uma metodologia que descorrelaciona as variáveis além do vetor de separação nulo.

Os fatores MAF e as componentes principais PCA, são determinados em condições de isotopia, não podendo ser computados se o vetor de variáveis não estiver completo. Esse problema pode ser resolvido, em caso de bancos de dados multivariados heterotópicos, estimando ou simulando as variáveis faltantes nos locais amostrais, estimando em pontos em vez de em uma malha ou modelo de blocos. Porém, isso não foi realizado no presente trabalho, utilizando-se somente o subconjunto isotópico do banco de dados.

A descorrelação e estimativas são realizadas nos mesmos subgrupos de variáveis apresentados na Tabela 3.7, excetuando o caso do ferro e da sílica, onde são considerados os subgrupos de cada espécie em separado, já que a descorrelação do subgrupo original (ferro-sílica) não era adequada. O teor na faixa 1 é determinado posteriormente, utilizando as relações (3.1) a (3.7).

#### **4.1.1 Krigagem Ordinária de Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF)**

A transformação dos dados originais acumulados, previamente normalizados utilizando os pesos de desagrupamento (Goovaerts, 1997; Chilés e Delfiner, 1999), em fatores MAF, pode ser realizada utilizando softwares que realizem operações matriciais ou softwares para determinações matemáticas e estatísticas (R (free-source) <http://www.r-project.org/>, Statistica<sup>®</sup>, MatLab<sup>®</sup>, SPSS<sup>®</sup>, entre outros). Nesses ambientes, os fatores são obtidos pelas transformações sucessivas apresentadas no Capítulo 2, item 2.2.3. Essas etapas resumem-se a seguir:

- Seja  $\mathbf{Z}(u)=[Z_1(u), Z_2(u), \dots, Z_{N_V}(u)]^T$  o vetor de variáveis regionalizadas correlacionadas (por exemplo, as variáveis do primeiro subconjunto da Tabela 3.7, AL2, AL21, AL3 e ALT).

- Seja  $\mathbf{B}$  é a matriz de variâncias-covariâncias de  $\mathbf{Z}(u)$  (ou seja, a matriz de correlações para  $h=0$ ).

Assim, a decomposição MAF é realizada segundo as seguintes etapas:

- i. Realizar a decomposição espectral (Capítulo 2, item 2.2.1.2) da matriz simétrica  $\mathbf{B}$  em uma matriz de autovetores ortonormais  $\mathbf{H}$  e uma matriz diagonal de autovalores  $\mathbf{D}$ , de modo que  $\mathbf{B}=\mathbf{H}\mathbf{D}\mathbf{H}^T$ .
- ii. Calcular as variáveis transformadas  $\mathbf{V}(u)=\mathbf{W}\mathbf{Z}(u)$  onde  $\mathbf{W}=\mathbf{H}\mathbf{D}^{-1/2}$  é tal que  $\mathbf{W}\mathbf{T}\mathbf{B}\mathbf{W}=\mathbf{I}$ . Isso equivale à determinação das componentes principais do vetor  $\mathbf{Z}(u)$  (Capítulo 2, item 2.2.2).
- iii. Calcular a matriz de variogramas para o vetor de separação  $\Delta$ ,  $\Gamma_V(\Delta)$  de  $\mathbf{V}(u)$  (a matriz de variogramas para o  $h=\Delta$ , das componentes principais de  $\mathbf{Z}(u)$ ).
- iv. Realizar a decomposição espectral (Capítulo 2, item 2.2.1.2) de  $\Gamma_V(\Delta)$  numa matriz de autovetores ortonormais  $\mathbf{C}$  e uma matriz diagonal de autovalores  $\mathbf{\Lambda}$ , tal que  $\Gamma_V(\Delta)=\mathbf{C}(\mathbf{\Lambda}/2)\mathbf{C}^T$ .
- v. Transformar  $\mathbf{Z}(u)$  com o vetor  $\mathbf{A}^T$ , tal que  $\mathbf{A}=\mathbf{W}\mathbf{C}$ , segundo a Equação (2.75):  $\mathbf{Y}(u)=\mathbf{A}^T\mathbf{Z}(u)$ , onde  $\mathbf{Y}(u)$  é o vetor de fatores MAF. Portanto, o vetor de transformação é o produto de duas matrizes provenientes de diferentes decomposições espectrais de matrizes simétricas.

Na presente tese, as transformações são realizadas utilizando o software ISATIS®.

Escolhe-se um vetor de separação  $h=\Delta=150\text{m}$ , conferindo que os variogramas cruzados experimentais não apresentem correlação até o valor de  $\Delta$  estipulado. É necessário outorgar uma tolerância na distância para a sua determinação, do mesmo modo que na determinação de qualquer variograma experimental, só que nesse caso, os valores são determinados para um só valor de  $h$ .

Cada subgrupo de variáveis é transformado num conjunto de fatores MAF correspondentes, não correlacionados entre si até  $h= \Delta$  (Tabela 4.1). O valor de  $h=150\text{m}$  é mantido para todos os sistemas considerados para não afetar o fechamento dos balanços estequiométricos.

Tabela 4.1 – Subgrupos de variáveis consideradas para descorrelacionar até  $h=\Delta$ , utilizando a decomposição em fatores MAF.

| Subgrupo | Variáveis               | Fatores MAF  |
|----------|-------------------------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT     | MAF1_AL_IB<br>MAF2_AL_IB<br>MAF3_AL_IB<br>MAF4_AL_IB     |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET     | MAF1_FE_IB<br>MAF2_FE_IB<br>MAF3_FE_IB<br>MAF4_FE_IB     |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT     | MAF1_MN_IB<br>MAF2_MN_IB<br>MAF3_MN_IB<br>MAF4_MN_IB     |
| 4        | P2, P21, P3, PT         | MAF1_P_IB<br>MAF2_P_IB<br>MAF3_P_IB<br>MAF4_P_IB         |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT | MAF1_PPC_IB<br>MAF2_PPC_IB<br>MAF3_PPC_IB<br>MAF4_PPC_IB |
| 6        | SI2, SI21, SI3, SIT     | MAF1_SI_IB<br>MAF2_SI_IB<br>MAF3_SI_IB<br>MAF4_SI_IB     |
| 7        | W2, W21, W3             | MAF1_W_IB<br>MAF2_W_IB<br>MAF3_W_IB                      |

Na Tabela 4.2, apresentam-se as estatísticas básicas dos fatores MAF obtidos a partir dos dados originais. Não são colocados os pesos de desagrupamento na determinação das estatísticas e dos histogramas já que os mesmos foram inclusos no processo prévio de normalização.

No Apêndice C, são apresentados os histogramas correspondentes a cada fator. Os fatores apresentam media zero e variância unitária. Porém, alguns dos histogramas não são simétricos, como é apreciado no histograma do fator MAF1\_AL\_IB, obtido a partir dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global (Figura 4.1).

Tabela 4.2 – Estatísticas básicas dos fatores MAF obtidos a partir dos dados originais, nos diferentes subgrupos.

|             | Num. Amostras | Mínimo | Máximo | Média | Variância |
|-------------|---------------|--------|--------|-------|-----------|
| MAF1_AL_IB  | 917           | -3,16  | 6,43   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_AL_IB  | 917           | -3,29  | 4,86   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_AL_IB  | 917           | -3,45  | 6,27   | 0,00  | 1,00      |
| MAF4_AL_IB  | 917           | -2,77  | 7,98   | 0,00  | 1,00      |
| MAF1_FE_IB  | 917           | -4,23  | 3,56   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_FE_IB  | 917           | -4,09  | 3,68   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_FE_IB  | 917           | -5,15  | 5,12   | 0,00  | 1,00      |
| MAF4_FE_IB  | 917           | -3,29  | 5,18   | 0,00  | 1,00      |
| MAF1_MN_IB  | 917           | -6,55  | 2,84   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_MN_IB  | 917           | -4,29  | 2,92   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_MN_IB  | 917           | -3,24  | 4,69   | 0,00  | 1,00      |
| MAF4_MN_IB  | 917           | -5,77  | 4,87   | 0,00  | 1,00      |
| MAF1_P_IB   | 917           | -2,35  | 6,94   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_P_IB   | 917           | -4,00  | 4,64   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_P_IB   | 917           | -4,49  | 3,07   | 0,00  | 1,00      |
| MAF4_P_IB   | 917           | -1,66  | 6,27   | 0,00  | 1,00      |
| MAF1_PPC_IB | 908           | -3,60  | 4,81   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_PPC_IB | 908           | -8,81  | 2,82   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_PPC_IB | 908           | -3,61  | 10,10  | 0,00  | 1,00      |
| MAF4_PPC_IB | 908           | -6,36  | 3,16   | 0,00  | 1,00      |
| MAF1_SI_IB  | 917           | -2,31  | 3,86   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_SI_IB  | 917           | -4,78  | 5,16   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_SI_IB  | 917           | -4,26  | 4,89   | 0,00  | 1,00      |
| MAF4_SI_IB  | 917           | -4,83  | 2,85   | 0,00  | 1,00      |
| MAF1_W_IB   | 917           | -3,70  | 1,95   | 0,00  | 1,00      |
| MAF2_W_IB   | 917           | -3,24  | 2,56   | 0,00  | 1,00      |
| MAF3_W_IB   | 917           | -5,04  | 1,66   | 0,00  | 1,00      |

A análise e modelagem da continuidade espacial de cada fator MAF, envolvem uma etapa prévia de determinação do elipsóide de anisotropia dos mesmos.

O elipsóide de anisotropia determinado tem a mesma orientação que o correspondente às variáveis originais acumuladas, apresentado no Capítulo 3, com os eixos maior, intermediário e menor nas direções N100°, N190° do plano XY e perpendicular a esse plano, D-90°, respectivamente. Essa coincidência também é achada nos trabalhos revisados durante a análise do estado da arte (Dimitrakopoulos e Fonseca, 2003; Dimitrakopoulos e Boucher, 2005; Vargas-Guzman e Dimitrakopoulos, 2003).

Nos variogramas experimentais cruzados, observa-se que não há correlação espacial importante até h=150m. Na Figura 4.2, são apresentados os

variogramas experimentais diretos e cruzados dos fatores obtidos para a descortelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global. Observa-se estruturação somente nos variogramas diretos, na diagonal principal.

A totalidade dos variogramas experimentais diretos e cruzados para cada subgrupo de fatores considerado, mostrando a correlação espacial cruzada, é apresentada no Apêndice C.

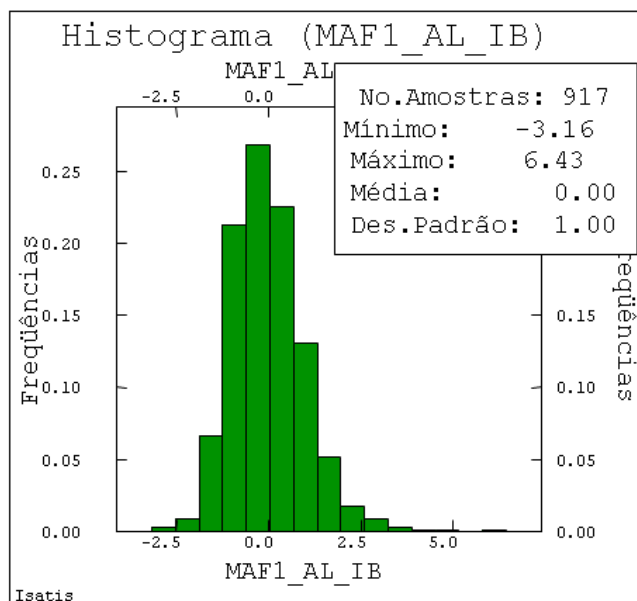


Figura 4.1 – Histograma do fator MAF1\_AL\_IB, obtido a partir dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global.

Na Figura 4.3, apresentam-se os diagramas de dispersão para  $h=0$  dos fatores MAF, obtidos a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, apreciando-se os coeficientes de correlação nulos. Os diagramas de dispersão para os restantes conjuntos de fatores são apresentados no Apêndice C, mostrando idêntico resultado.

Os variogramas direcionais, experimentais e modelados, para cada fator são apresentados no Apêndice C, mostrando uma correlação espacial crescente do fator MAF4 (fator de autocorrelação mínimo) ao MAF1 (fator de autocorrelação máximo).

## Modelo Variograma

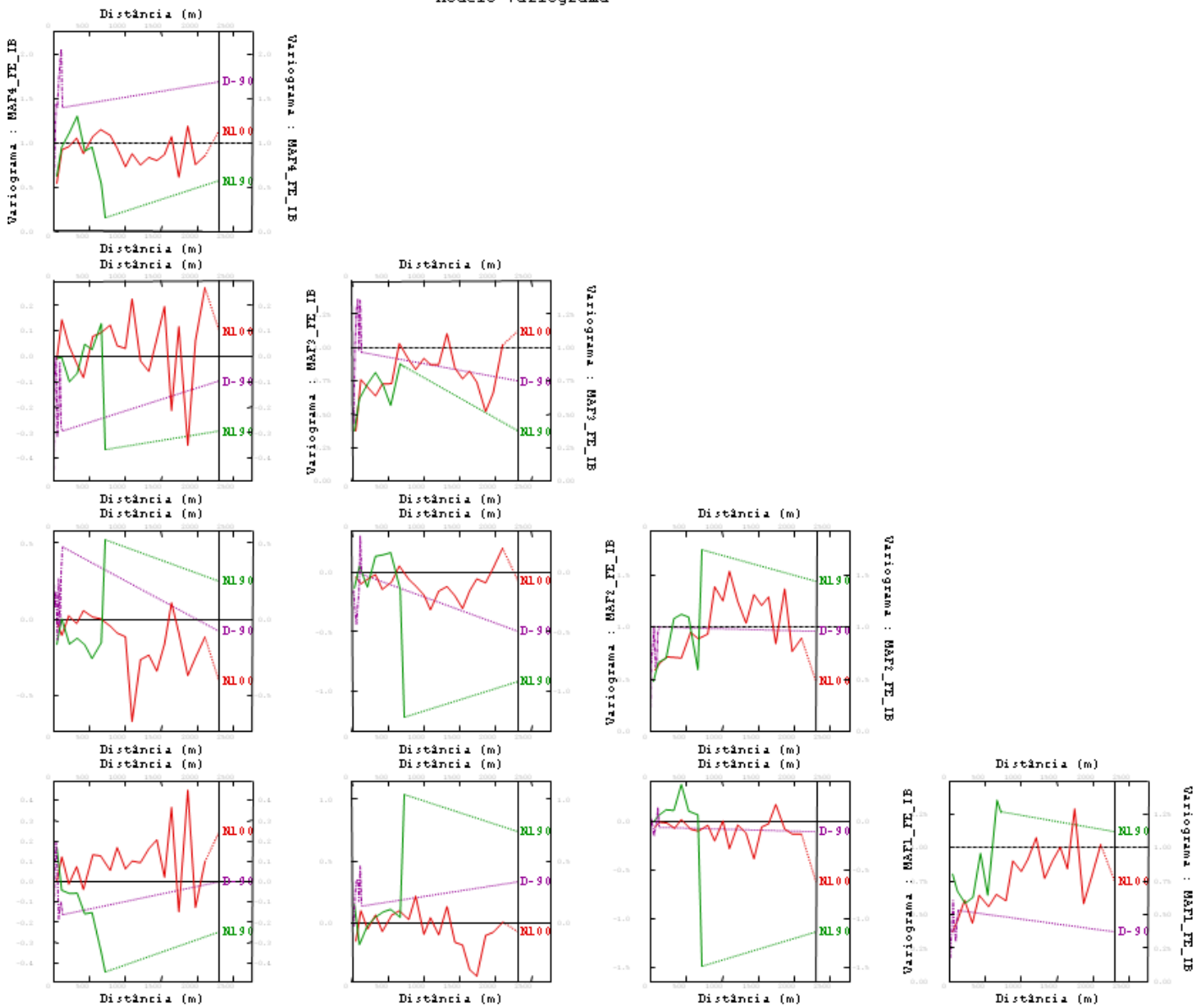


Figura 4.2 – Variogramas diretos (na diagonal principal) e cruzados dos fatores MAF obtidos a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

Na Figura 4.4, apresentam-se os variogramas correspondentes aos fatores MAF, obtidos a partir da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, onde se aprecia que a escala de autocorrelação para o fator MAF1\_FE\_IB é de 1300, 620 e 150m nas direções N100°, N190° e D-90°, respectivamente. No entanto, para o fator MAF4\_FE\_IB a escala é de 270, 185 e 30m nas mesmas direções.

Porém, nos variogramas dos fatores MAF correspondentes à alumina e ao fósforo (Apêndice C, Figuras C.22 e C.25), observa-se, no fator MAF3 um alcance no variograma experimental, maior ao do fator MAF2, o que não concorda com o esperado. Apesar disso, os modelos são ajustados, tentando compensar essa alteração na ordem decrescente dos alcances dos variogramas.

Os fatores MAF são estimados independentemente utilizando krigagem ordinária e as mesmas estratégias e vizinhança de busca apresentadas no Capítulo 3, Tabela 3.10, exceto no que se refere à busca heterotópica que não é pertinente no caso de uma única variável.

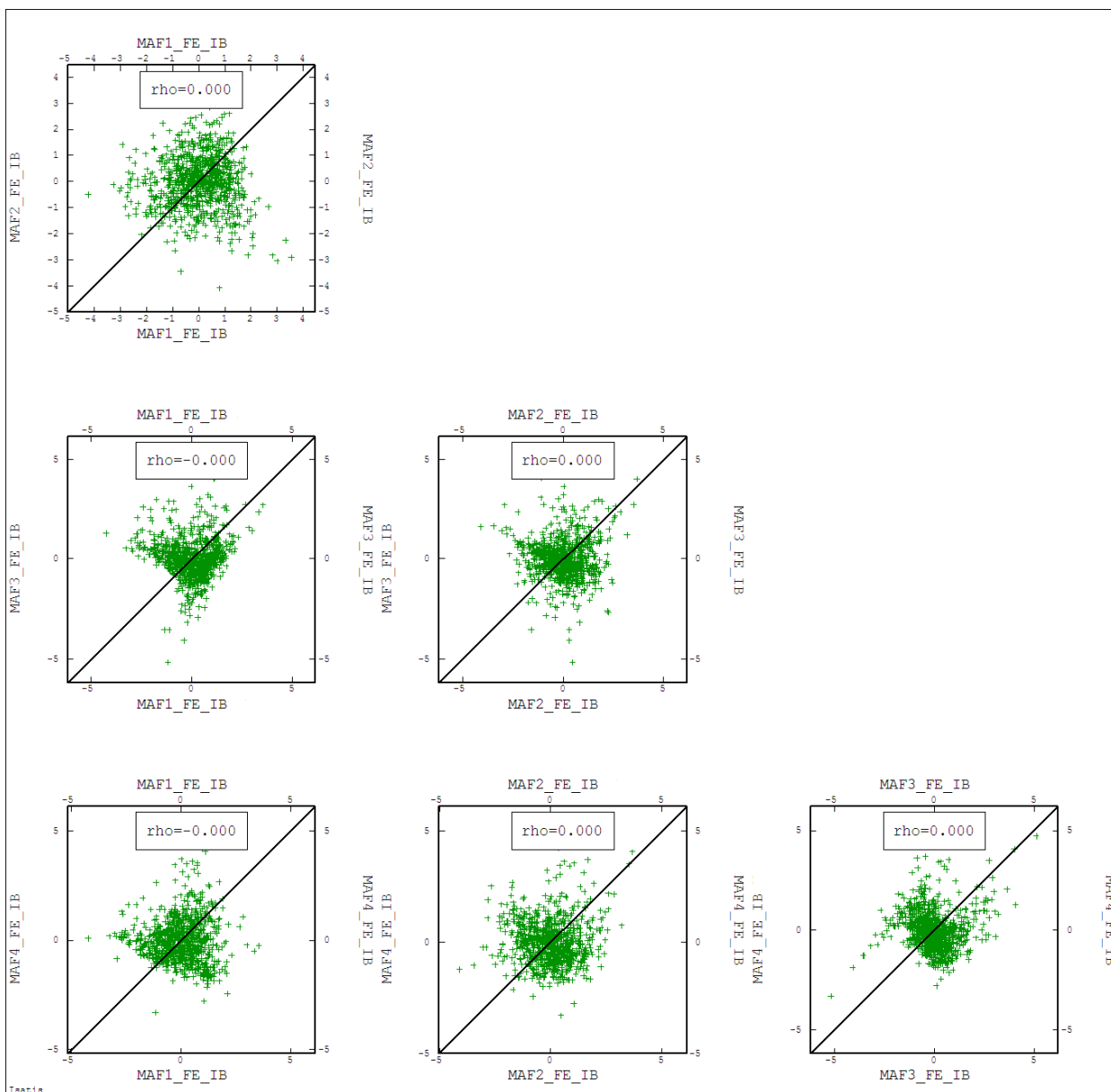
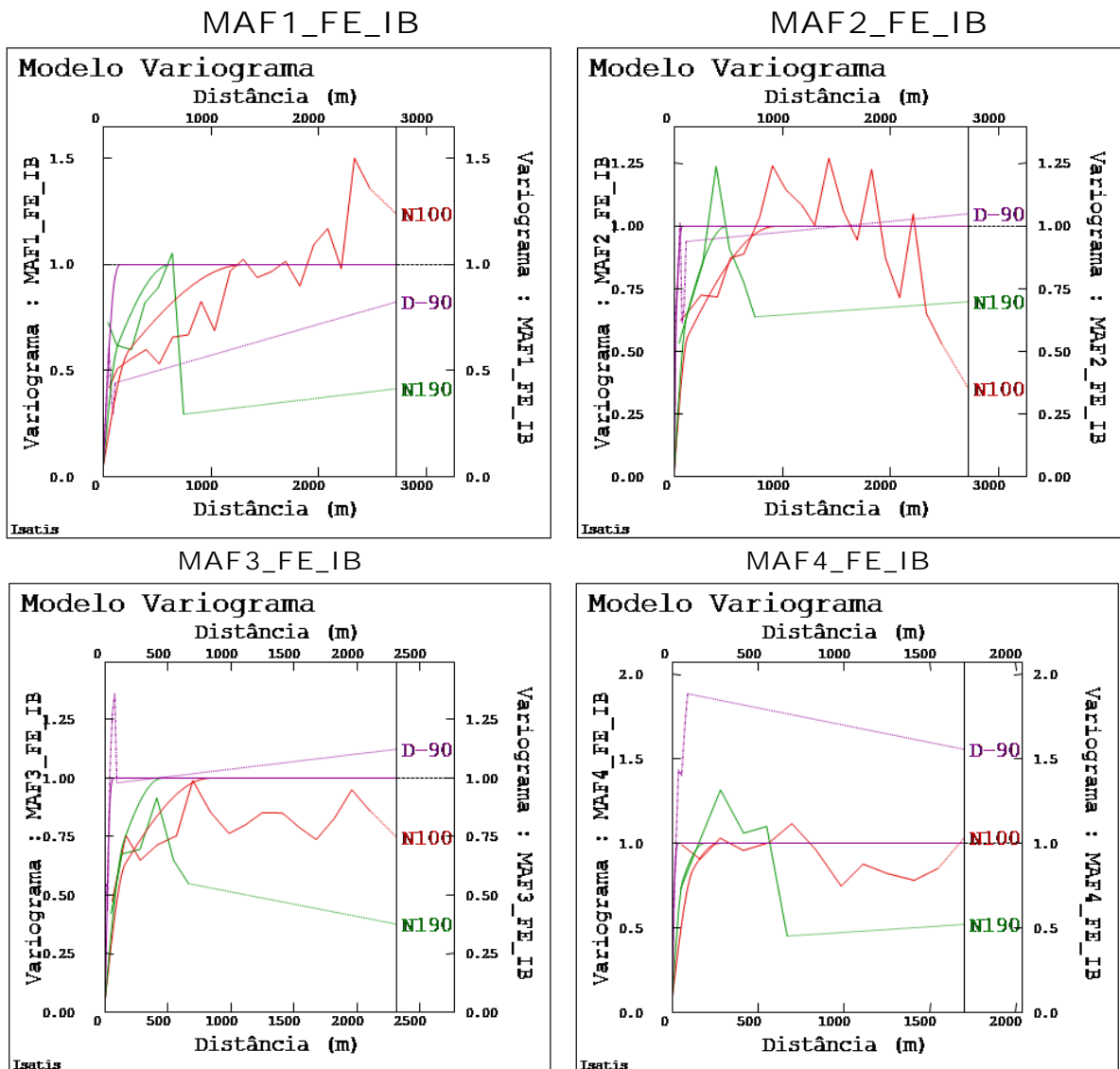


Figura 4.3 – Diagramas de dispersão para os fatores MAF obtidos a partir da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando a correlação nula ( $\rho=0,000$ ) para o vetor de separação nulo ( $h=0$ ).



$$\gamma_{MAF1\_FE\_IB} = 0,05 + 0,40 \cdot Sph\left(\frac{240m}{N100^\circ} \frac{135m}{N190^\circ} \frac{105m}{D-90^\circ}\right) + 0,55 \cdot Sph\left(\frac{1300m}{N100^\circ} \frac{620m}{N190^\circ} \frac{150m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF2\_FE\_IB} = 0,02 + 0,43 \cdot Sph\left(\frac{125m}{N100^\circ} \frac{115m}{N190^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,55 \cdot Sph\left(\frac{930m}{N100^\circ} \frac{480m}{N190^\circ} \frac{70m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_FE\_IB} = 0,06 + 0,43 \cdot Sph\left(\frac{160m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) + 0,51 \cdot Sph\left(\frac{830m}{N100^\circ} \frac{450m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF4\_FE\_IB} = 0,1 + 0,49 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{60m}{N190^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,41 \cdot Sph\left(\frac{270m}{N100^\circ} \frac{185m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura 4.4 – Variogramas direcionais, experimentais e modelados, correspondentes aos fatores MAF, obtidos a partir da decorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, junto com as Equações dos variogramas, constituídos por um efeito pepita e duas estruturas esféricas *Sph*.



Finalmente, as estimativas são retro-transformadas ao espaço original pelas transformações matemáticas inversas às especificadas no item 2.2.3 e determinam-se, numa segunda etapa, os teores correspondentes à faixa 1, utilizando as Equações (3.1) a (3.7).

A Tabela 4.3, apresenta as estatísticas básicas das estimativas obtidas por krigagem individual dos fatores MAF e os valores calculados na faixa 1. O processo de retro-transformação inclui uma etapa de transformação das variáveis normalizadas ao espaço original, fazendo com que as estimativas estejam dentro do intervalo original das amostras (Deustch e Journal, 1998).

Porém, as estimativas da faixa 1, são determinadas por diferença e não a partir da retro-transformação gaussiana que as restrinja ao intervalo original das amostras. Também, carregam o somatório dos erros das estimativas a partir das quais são determinadas, fazendo com que os valores estejam fora do intervalo original das amostras, muitas vezes com estimativas negativas, devendo ser pós-processadas do mesmo modo que as estimativas provenientes da cokrigagem, substituindo os valores incorretos pela média local.

As estatísticas básicas das estimativas correspondentes ao modelo, após o pós-processamento, são apresentadas na Tabela 4.4.

O processo para a obtenção das estimativas a partir da descorrelação em fatores MAF é apresentado esquematicamente na Figura 4.5, comparativamente com o processo utilizado no caso das estimativas obtidas a partir da decomposição em componentes principais (PCA), o qual é muito semelhante na sua aplicação prática.

Tabela 4.3 – Estatísticas das estimativas desacumuladas (letra D), sem pós-processar (sub-índice s/pp), obtidas por krigagem independente dos fatores MAF, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C), indicando o número de blocos fora do intervalo original das amostras, incluso com valores negativos (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados.

|                 | <b>Blocos estimados</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> | <b>Blocos incorretos</b> | <b>%Blocos incorretos</b> |
|-----------------|-------------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|--------------------------|---------------------------|
| AL1CD_MAF_s/pp  | 20813                   | -0,06         | 3,64          | 1,16         | 0,289            | 6                        | 0,029                     |
| AL21D_MAF_s/pp  | 20813                   | 0,13          | 2,01          | 0,81         | 0,096            | 0                        | 0,000                     |
| AL2D_MAF_s/pp   | 20813                   | 0,12          | 1,66          | 0,73         | 0,054            | 0                        | 0,000                     |
| AL3D_MAF_s/pp   | 20813                   | 0,35          | 2,54          | 1,31         | 0,087            | 0                        | 0,000                     |
| ALT_MAF_s/pp    | 20813                   | 0,24          | 1,87          | 1,12         | 0,073            | 0                        | 0,000                     |
| FE1CD_MAF_s/pp  | 20813                   | -17,69        | 90,59         | 57,80        | 50,389           | 455                      | 2,186                     |
| FE21D_MAF_s/pp  | 20813                   | 42,54         | 67,41         | 62,48        | 7,198            | 0                        | 0,000                     |
| FE2D_MAF_s/pp   | 20813                   | 31,34         | 65,09         | 55,69        | 31,060           | 0                        | 0,000                     |
| FE3D_MAF_s/pp   | 20813                   | 24,53         | 59,63         | 45,94        | 28,269           | 0                        | 0,000                     |
| FET_MAF_s/pp    | 20813                   | 33,22         | 62,96         | 50,65        | 26,687           | 0                        | 0,000                     |
| MN1CD_MAF_s/pp  | 20813                   | -1,50         | 3,82          | 0,15         | 0,080            | 1039                     | 4,992                     |
| MN21D_MAF_s/pp  | 20813                   | 0,01          | 2,24          | 0,10         | 0,023            | 0                        | 0,000                     |
| MN2D_MAF_s/pp   | 20813                   | 0,01          | 2,19          | 0,09         | 0,019            | 0                        | 0,000                     |
| MN3D_MAF_s/pp   | 20813                   | 0,01          | 1,56          | 0,08         | 0,007            | 0                        | 0,000                     |
| MNT_MAF_s/pp    | 20813                   | 0,01          | 1,87          | 0,09         | 0,015            | 0                        | 0,000                     |
| P1CD_MAF_s/pp   | 20813                   | -0,01         | 0,17          | 0,07         | 0,001            | 22                       | 0,106                     |
| P21D_MAF_s/pp   | 20813                   | 0,01          | 0,14          | 0,06         | 0,001            | 0                        | 0,000                     |
| P2D_MAF_s/pp    | 20813                   | 0,01          | 0,12          | 0,05         | 0,0003           | 0                        | 0,000                     |
| P3_MAF_IB_WD    | 20813                   | 0,01          | 0,10          | 0,05         | 0,0002           | 0                        | 0,000                     |
| PT_MAF_IB_W     | 20813                   | 0,01          | 0,10          | 0,05         | 0,0002           | 0                        | 0,000                     |
| PPC1CD_MAF_s/pp | 20813                   | -0,92         | 9,56          | 3,34         | 3,247            | 99                       | 0,476                     |
| PPC21D_MAF_s/pp | 20813                   | 0,14          | 7,57          | 2,65         | 2,097            | 0                        | 0,000                     |
| PPC2D_MAF_s/pp  | 20813                   | 0,13          | 5,85          | 2,17         | 1,119            | 0                        | 0,000                     |
| PPC3D_MAF_s/pp  | 20813                   | 0,32          | 4,81          | 2,07         | 0,682            | 0                        | 0,000                     |
| PPCT_MAF_s/pp   | 20813                   | 0,19          | 4,68          | 2,30         | 0,998            | 0                        | 0,000                     |
| SI1CD_MAF_s/pp  | 20813                   | -25,93        | 101,25        | 12,86        | 89,232           | 373                      | 1,792                     |
| SI21D_MAF_s/pp  | 20813                   | 1,56          | 34,75         | 6,01         | 11,422           | 0                        | 0,000                     |
| SI2D_MAF_s/pp   | 20813                   | 3,02          | 56,75         | 16,26        | 57,074           | 0                        | 0,000                     |
| SI3D_MAF_s/pp   | 20813                   | 9,73          | 63,44         | 29,99        | 63,738           | 0                        | 0,000                     |
| SIT_MAF_s/pp    | 20813                   | 6,55          | 48,32         | 23,23        | 55,225           | 0                        | 0,000                     |
| W1C_MAF_s/pp    | 20813                   | 3,03          | 52,67         | 17,35        | 25,735           | 0                        | 0,000                     |
| W21_MAF_s/pp    | 20813                   | 6,33          | 25,34         | 13,67        | 7,943            | 0                        | 0,000                     |
| W2_MAF_s/pp     | 20813                   | 11,27         | 40,16         | 27,93        | 14,096           | 0                        | 0,000                     |
| W3_MAF_s/pp     | 20813                   | 24,23         | 79,25         | 54,72        | 35,740           | 0                        | 0,000                     |

Tabela 4.4 – Estatísticas das estimativas desacumuladas (letra D), pós-processadas, obtidas por krigagem independente dos fatores MAF, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C).

|            | <b>Blocos modelo</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> |
|------------|----------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|
| AL1CD_MAF  | 20813                | 0,00          | 3,64          | 1,15         | 0,284            |
| AL21D_MAF  | 20813                | 0,13          | 1,95          | 0,81         | 0,093            |
| AL2D_MAF   | 20813                | 0,12          | 1,66          | 0,73         | 0,052            |
| AL3D_MAF   | 20813                | 0,35          | 2,54          | 1,31         | 0,085            |
| ALT_MAF    | 20813                | 0,24          | 1,87          | 1,12         | 0,071            |
| FE1CD_MAF  | 20813                | 6,72          | 69,35         | 57,57        | 42,799           |
| FE21D_MAF  | 20813                | 42,54         | 67,41         | 62,42        | 7,166            |
| FE2D_MAF   | 20813                | 31,34         | 65,09         | 55,59        | 30,199           |
| FE3D_MAF   | 20813                | 24,53         | 59,63         | 45,89        | 27,906           |
| FET_MAF    | 20813                | 33,22         | 62,96         | 50,59        | 26,062           |
| MN1CD_MAF  | 20813                | 0,00          | 3,82          | 0,16         | 0,072            |
| MN21D_MAF  | 20813                | 0,01          | 2,24          | 0,11         | 0,029            |
| MN2D_MAF   | 20813                | 0,01          | 2,18          | 0,10         | 0,023            |
| MN3D_MAF   | 20813                | 0,01          | 1,56          | 0,08         | 0,008            |
| MNT_MAF    | 20813                | 0,01          | 1,87          | 0,10         | 0,016            |
| P1CD_MAF   | 20813                | 0,00          | 0,17          | 0,07         | 0,001            |
| P21D_MAF   | 20813                | 0,01          | 0,14          | 0,06         | 0,001            |
| P2D_MAF    | 20813                | 0,01          | 0,12          | 0,05         | 0,0003           |
| P3D_MAF    | 20813                | 0,01          | 0,10          | 0,05         | 0,0002           |
| PT_MAF     | 20813                | 0,01          | 0,10          | 0,05         | 0,0002           |
| PPC1CD_MAF | 20813                | 0,02          | 7,99          | 3,33         | 3,213            |
| PPC21D_MAF | 20813                | 0,14          | 7,57          | 2,67         | 2,045            |
| PPC2D_MAF  | 20813                | 0,13          | 5,85          | 2,18         | 1,095            |
| PPC3D_MAF  | 20813                | 0,32          | 4,81          | 2,08         | 0,674            |
| PPCT_MAF   | 20813                | 0,19          | 4,68          | 2,30         | 0,986            |
| SI1CD_MAF  | 20813                | 0,00          | 83,30         | 13,15        | 79,149           |
| SI21D_MAF  | 20813                | 1,56          | 34,75         | 6,10         | 11,643           |
| SI2D_MAF   | 20813                | 3,02          | 56,75         | 16,41        | 55,606           |
| SI3D_MAF   | 20813                | 9,73          | 63,44         | 30,08        | 63,043           |
| SIT_MAF    | 20813                | 6,55          | 48,32         | 23,33        | 54,150           |
| W1C_MAF    | 20813                | 3,86          | 52,67         | 17,41        | 24,978           |
| W21_MAF    | 20813                | 6,33          | 25,34         | 13,69        | 7,845            |
| W2_MAF     | 20813                | 11,27         | 40,16         | 27,96        | 13,774           |
| W3_MAF     | 20813                | 24,23         | 79,25         | 54,62        | 34,424           |

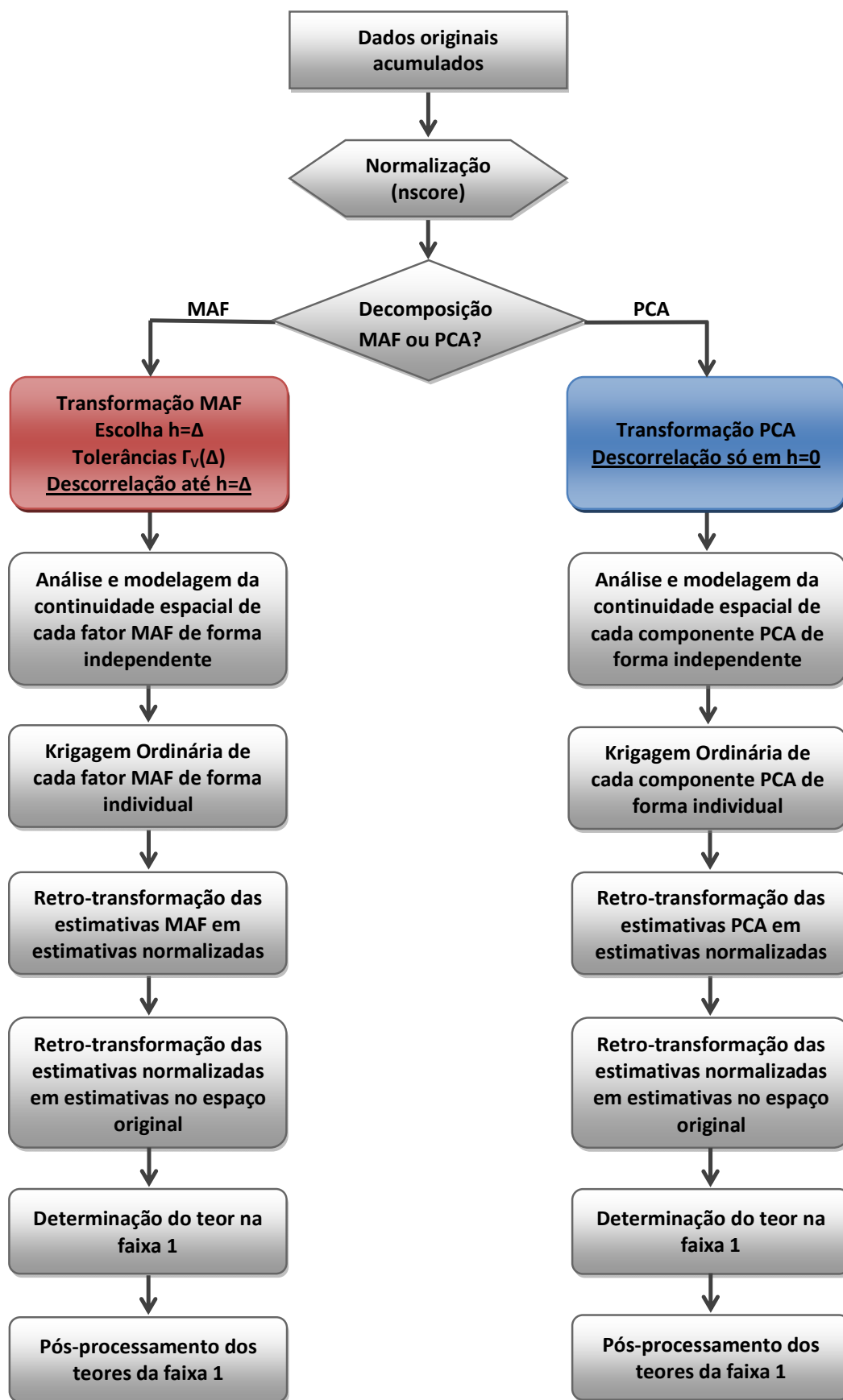


Figura 4.5 – Esquema das etapas para a obtenção das estimativas a partir da krigagem individual de fatores MAF ou de componentes principais PCA.

#### 4.1.2 Krigagem Ordinária de Componentes Principais (PCA)

No caso da decomposição em componentes principais (PCA), os dados não precisam ser previamente normalizados como na decomposição em fatores MAF, mas podendo ser estandardizados subtraindo a média e dividendo pelo desvio padrão. Realiza-se, no entanto, a normalização com fins comparativos dos resultados obtidos com a decomposição MAF.

Existem muitos softwares que realizam a decomposição em componentes principais, especialmente os que realizam determinações estatísticas como o Statistica<sup>®</sup> e o SPSS<sup>®</sup>. Também, o R, que é de livre acesso (<http://www.r-project.org/>).

Nesse caso, a descorrelação ocorre somente para o vetor de separação nulo ( $h=0$ ), excetuando o caso no qual as variáveis estão intrinsecamente correlacionadas, onde a descorrelação é válida para todo valor de  $h$  (Goovaerts, 1993).

Os subgrupos de variáveis a descorrelacionar são os mesmos que no caso da decomposição MAF. Portanto, analogamente à Tabela 4.1, são apresentados, na Tabela 4.5, os subgrupos de variáveis transformadas num conjunto de componentes principais PCA correspondentes.

Na Tabela 4.6, são apresentadas as estatísticas básicas das componentes obtidas a partir dos subgrupos da Tabela 4.5.

No Apêndice D, são apresentados os histogramas de todas as componentes. Na Figura 4.6, apresenta-se o histograma correspondente à componente principal PCA1\_FE\_IB, obtida a partir da decomposição dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global. As médias são iguais a zero em todos os casos. Porém, a variância não é unitária, porque cada componente carrega só uma parte da variância total das variáveis originais. Na maioria dos casos, os histogramas são aproximadamente simétricos.

O elipsóide de anisotropia das componentes coincide com o das variáveis originais acumuladas, como no caso dos fatores MAF (N100°, N190°, D-90°).

Para observar se existe descorrelação espacial das componentes, apesar da metodologia não garanti-la, apresentam-se os variogramas direcionais experimentais, diretos e cruzados, para os conjuntos de variáveis considerados (Apêndice D). Na Figura 4.7, são apresentados os variogramas correspondentes

aos fatores PCA, obtidos da decomposição dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

Não é observada uma correlação espacial marcada nos variogramas cruzados, diferentemente do que acontece com os variogramas na diagonal que apresentam autocorrelação, apesar da decomposição em componentes principais não garantir a descorrelação para todos os vetores de separação.

Tabela 4.5 – Subgrupos de variáveis consideradas para descorrelacionar para  $h=0$ , utilizando a decomposição em componente principais, PCA.

| Subgrupo | Variáveis               | Fatores PCA  |
|----------|-------------------------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT     | PCA1_AL_IB<br>PCA2_AL_IB<br>PCA3_AL_IB<br>PCA4_AL_IB     |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET     | PCA1_FE_IB<br>PCA2_FE_IB<br>PCA3_FE_IB<br>PCA4_FE_IB     |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT     | PCA1_MN_IB<br>PCA2_MN_IB<br>PCA3_MN_IB<br>PCA4_MN_IB     |
| 4        | P2, P21, P3, PT         | PCA1_P_IB<br>PCA2_P_IB<br>PCA3_P_IB<br>PCA4_P_IB         |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT | PCA1_PPC_IB<br>PCA2_PPC_IB<br>PCA3_PPC_IB<br>PCA4_PPC_IB |
| 6        | SI2, SI21, SI3, SIT     | PCA1_SI_IB<br>PCA2_SI_IB<br>PCA3_SI_IB<br>PCA4_SI_IB     |
| 7        | W2, W21, W3             | PCA1_W_IB<br>PCA2_W_IB<br>PCA3_W_IB                      |

Na Figura 4.8, apresentam-se os diagramas de dispersão para as componentes PCA, obtidas a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, apreciando-se os coeficientes de correlação nulos para o vetor de separação nulo ( $h=0$ ). Os diagramas de dispersão para os restantes conjuntos de componentes são apresentados no Apêndice D.

Tabela 4.6 – Estatísticas básicas das componentes PCA obtidas a partir dos dados originais, nos diferentes subgrupos.

|             | <b>Num.<br/>Amostras</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> |
|-------------|--------------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|
| PCA1_AL_IB  | 917                      | -5,15         | 4,62          | 0,00         | 3,01             |
| PCA1_FE_IB  | 917                      | -4,30         | 4,02          | 0,00         | 2,66             |
| PCA1_MN_IB  | 917                      | -4,45         | 5,46          | 0,00         | 3,69             |
| PCA1_PPC_IB | 908                      | -5,84         | 5,90          | 0,00         | 3,43             |
| PCA1_P_IB   | 917                      | -4,67         | 5,59          | 0,00         | 3,16             |
| PCA1_SI_IB  | 917                      | -5,51         | 4,11          | 0,00         | 2,96             |
| PCA1_W_IB   | 917                      | -5,11         | 4,57          | 0,00         | 2,31             |
| PCA2_AL_IB  | 917                      | -4,20         | 2,48          | 0,00         | 0,91             |
| PCA2_FE_IB  | 917                      | -4,07         | 2,91          | 0,00         | 0,79             |
| PCA2_MN_IB  | 917                      | -1,98         | 1,67          | 0,00         | 0,25             |
| PCA2_PPC_IB | 908                      | -3,10         | 1,98          | 0,00         | 0,50             |
| PCA2_P_IB   | 917                      | -3,61         | 2,50          | 0,00         | 0,73             |
| PCA2_SI_IB  | 917                      | -1,92         | 2,63          | 0,00         | 0,54             |
| PCA2_W_IB   | 917                      | -3,51         | 1,30          | 0,00         | 0,48             |
| PCA3_AL_IB  | 917                      | -0,56         | 1,80          | 0,00         | 0,05             |
| PCA3_FE_IB  | 917                      | -2,08         | 3,10          | 0,00         | 0,51             |
| PCA3_MN_IB  | 917                      | -1,11         | 1,13          | 0,00         | 0,04             |
| PCA3_PPC_IB | 908                      | -0,48         | 1,85          | 0,00         | 0,05             |
| PCA3_P_IB   | 917                      | -0,61         | 2,40          | 0,00         | 0,09             |
| PCA3_SI_IB  | 917                      | -3,27         | 2,54          | 0,00         | 0,47             |
| PCA3_W_IB   | 917                      | -0,99         | 1,83          | 0,00         | 0,21             |
| PCA4_AL_IB  | 917                      | -1,55         | 0,58          | 0,00         | 0,03             |
| PCA4_FE_IB  | 917                      | -0,97         | 1,25          | 0,00         | 0,03             |
| PCA4_MN_IB  | 917                      | -0,98         | 0,61          | 0,00         | 0,02             |
| PCA4_PPC_IB | 908                      | -1,60         | 0,61          | 0,00         | 0,02             |
| PCA4_P_IB   | 917                      | -1,12         | 0,47          | 0,00         | 0,02             |
| PCA4_SI_IB  | 917                      | -1,07         | 0,48          | 0,00         | 0,02             |

Os variogramas direcionais, experimentais e modelados, para todos os componentes são apresentados no Apêndice D.

Na Figura 4.9, apresentam-se os variogramas correspondentes às componentes PCA, obtidas a partir da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

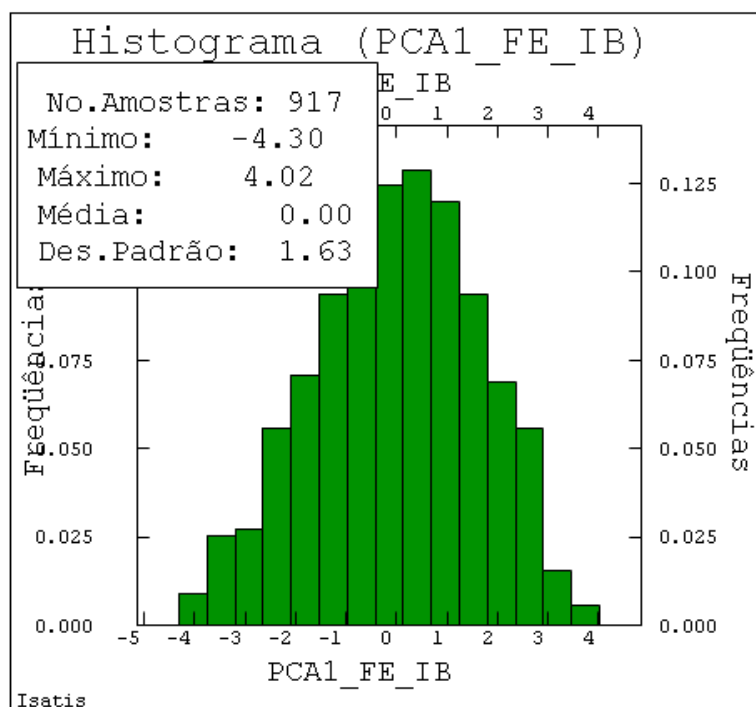


Figura 4.6 – Histograma do fator PCA1\_FE\_IB, obtido a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

As componentes PCA são estimadas independentemente utilizando krigagem ordinária e as mesmas estratégias e vizinhança de busca apresentadas no Capítulo 3, Tabela 3.10, exceto no que se refere à busca heterotópica que não é pertinente no caso de uma única variável.

Finalmente, as estimativas são retro-transformadas ao espaço original e calculam-se os teores correspondentes à faixa 1, utilizando as Equações (3.1) a (3.7).

A Tabela 4.7 apresenta as estatísticas básicas das estimativas obtidas por krigagem individual das componentes principais PCA e os valores calculados na faixa 1. Do mesmo modo que na decomposição MAF, o processo de retro-transformação inclui uma etapa de transformação das variáveis normalizadas ao espaço original, fazendo com que as estimativas estejam dentro do intervalo original das amostras (Deutsch e Journel, 1998).



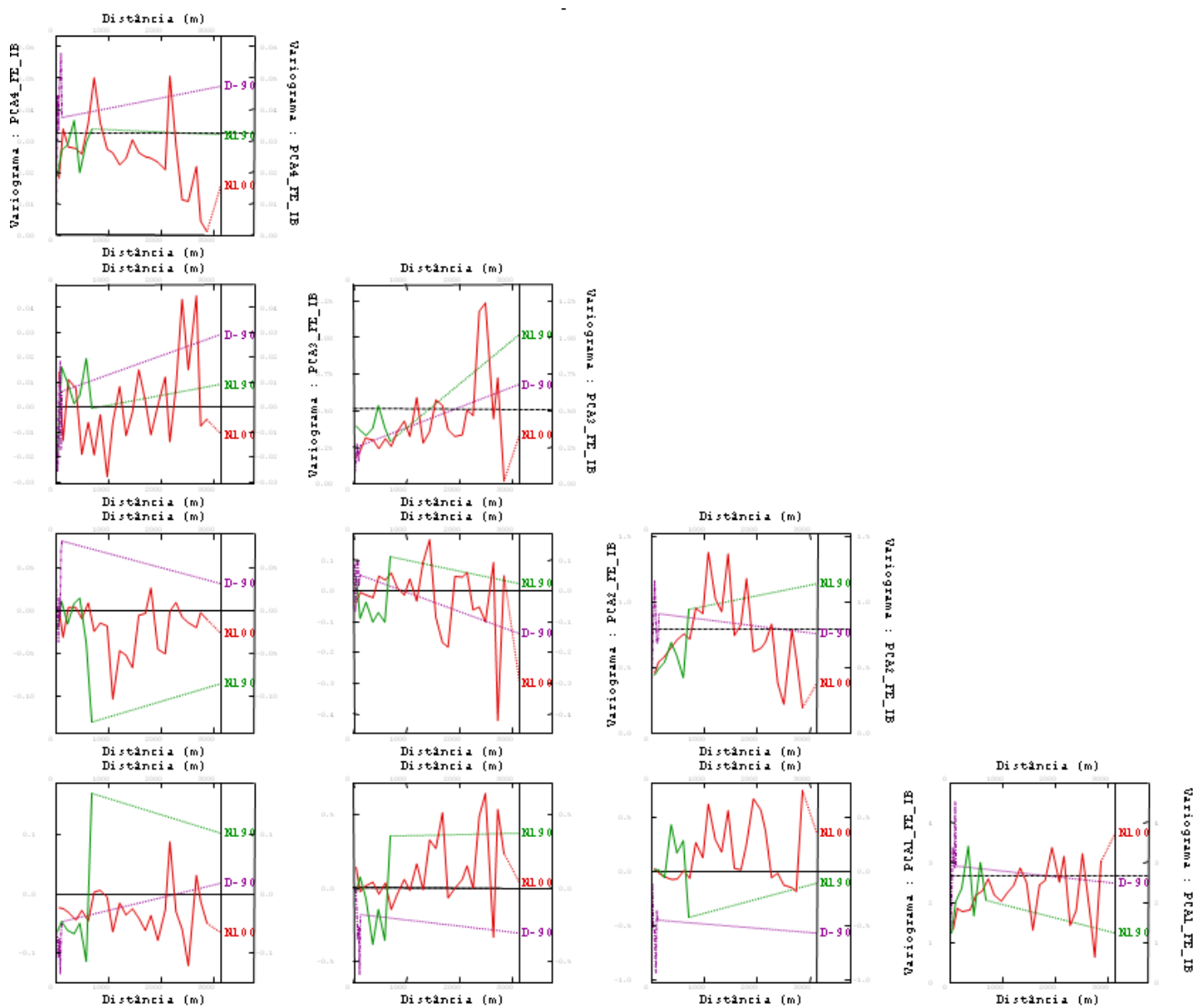


Figura 4.7 – Variogramas diretos (na diagonal principal) e cruzados das componentes PCA obtidas a partir dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

Porém, as estimativas da faixa 1, são determinados por diferença e não pela retro-transformação a partir dos valores estimados carregando o somatório dos erros das estimativas a partir das quais são determinadas, fazendo com que os valores estejam fora do intervalo original das amostras, às vezes com estimativas negativas, devendo ser pós-processadas do mesmo modo que as estimativas provenientes da cokrigagem e da krigagem de fatores MAF, substituindo os valores incorretos pela média local.

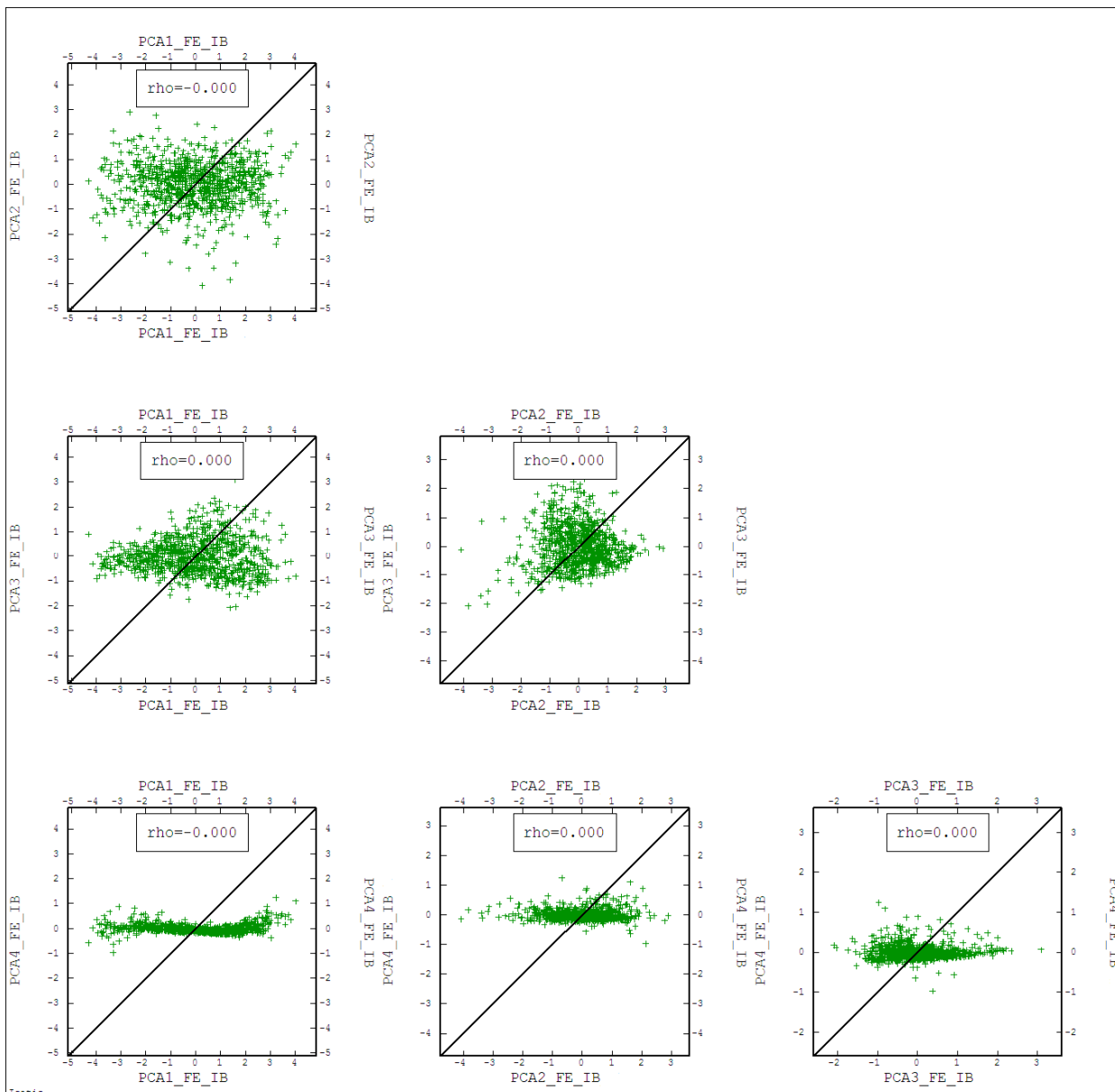
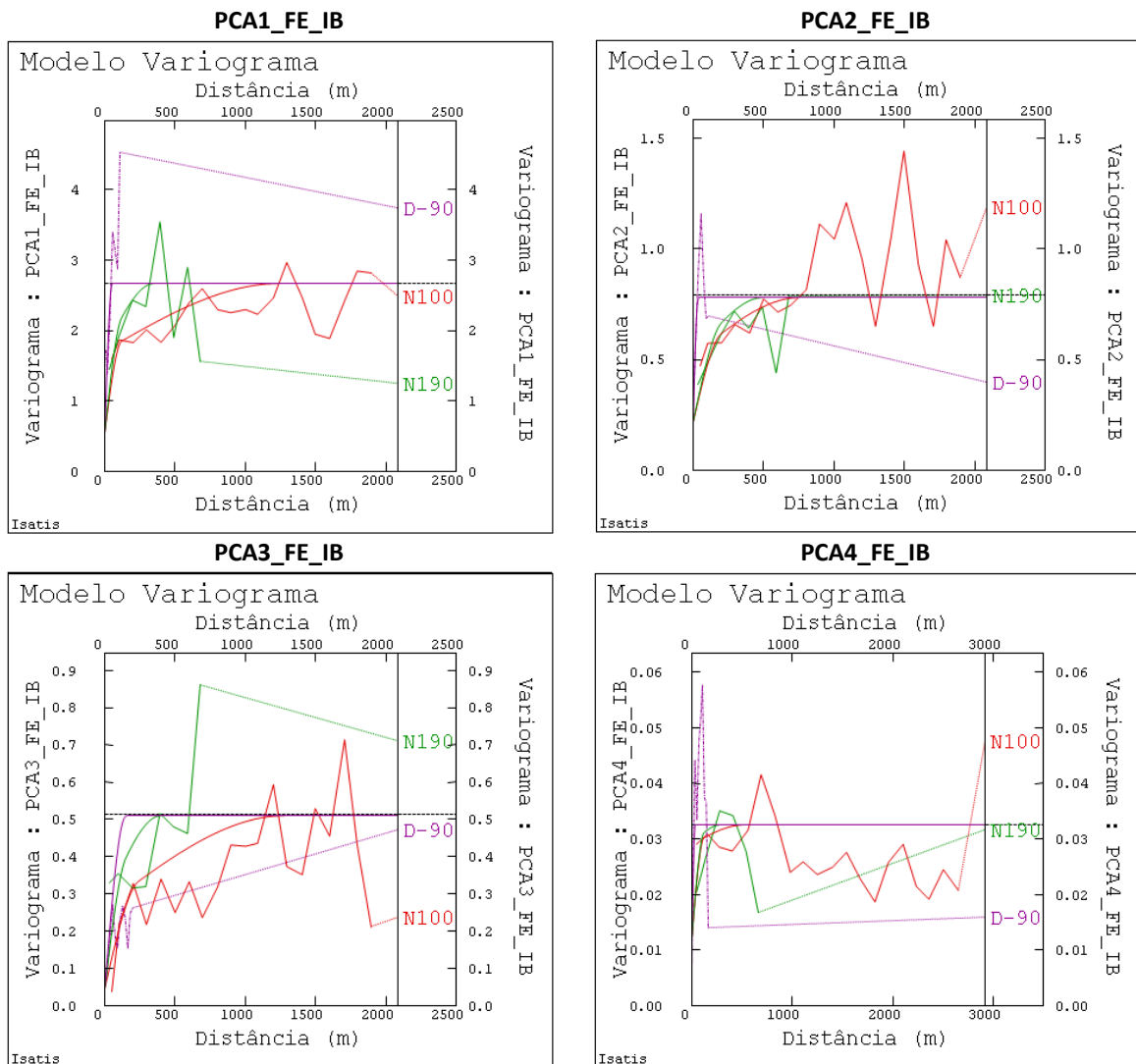


Figura 4.8 – Diagramas de dispersão para as componentes principais PCA obtidas a partir da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando a correlação nula ( $\rho=0,000$ ) para o vetor de separação nulo ( $h=0$ ).

As estatísticas básicas das estimativas correspondentes ao modelo, após o pós-processamento, são apresentadas na Tabela 4.8.



$$\gamma_{PCA1\_FE\_IB} = 0,56 + 1,15 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) + 0,96 \cdot Sph\left(\frac{1240m}{N100^\circ} \frac{350m}{N190^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA2\_FE\_IB} = 0,22 + 0,30 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \frac{200m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right) + 0,27 \cdot Sph\left(\frac{760m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_FE\_IB} = 0,05 + 0,22 \cdot Sph\left(\frac{240m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{140m}{D-90^\circ}\right) + 0,24 \cdot Sph\left(\frac{1280m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{160m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA4\_FE\_IB} = 0,01 + 0,02 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right) + 0,004 \cdot Sph\left(\frac{515m}{N100^\circ} \frac{280m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura 4.9 – Variogramas direcionais, experimentais e modelados, correspondentes às componentes PCA, obtidas a partir da descortelagem dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, junto com as Equações dos variogramas, constituídos por um efeito pepita e duas estruturas esféricas *Sph*.

Tabela 4.7 – Estatísticas das estimativas desacomuladas (letra D), sem pós-processar (sub-índice s/pp), obtidas por krigagem independente das componentes principais PCA, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C), indicando o número de blocos fora do intervalo original das amostras, incluso com valores negativos (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados.

|                 | <b>Blocos estimados</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> | <b>Blocos incorretos</b> | <b>%Blocos incorretos</b> |
|-----------------|-------------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|--------------------------|---------------------------|
| AL1CD_PCA_s/pp  | 20813                   | -0,07         | 3,71          | 1,16         | 0,293            | 1                        | 0,005                     |
| AL21D_PCA_s/pp  | 20813                   | 0,13          | 2,02          | 0,81         | 0,098            | 0                        | 0,000                     |
| AL2D_PCA_s/pp   | 20813                   | 0,12          | 1,65          | 0,73         | 0,055            | 0                        | 0,000                     |
| AL3D_PCA_s/pp   | 20813                   | 0,36          | 2,56          | 1,31         | 0,089            | 0                        | 0,000                     |
| ALT_PCA_s/pp    | 20813                   | 0,24          | 1,87          | 1,12         | 0,074            | 0                        | 0,000                     |
| FE1CD_PCA_s/pp  | 20813                   | 1,33          | 84,68         | 58,24        | 56,318           | 550                      | 2,643                     |
| FE21D_PCA_s/pp  | 20813                   | 41,45         | 68,06         | 62,70        | 8,178            | 0                        | 0,000                     |
| FE2D_PCA_s/pp   | 20813                   | 22,54         | 66,36         | 55,50        | 44,509           | 0                        | 0,000                     |
| FE3D_PCA_s/pp   | 20813                   | 22,79         | 63,29         | 45,63        | 50,452           | 0                        | 0,000                     |
| FET_PCA_s/pp    | 20813                   | 32,24         | 63,65         | 50,62        | 34,339           | 0                        | 0,000                     |
| MN1CD_PCA_s/pp  | 20813                   | -1,01         | 4,03          | 0,15         | 0,081            | 1329                     | 6,385                     |
| MN21D_PCA_s/pp  | 20813                   | 0,01          | 2,22          | 0,10         | 0,024            | 0                        | 0,000                     |
| MN2D_PCA_s/pp   | 20813                   | 0,01          | 2,28          | 0,09         | 0,019            | 0                        | 0,000                     |
| MN3D_PCA_s/pp   | 20813                   | 0,01          | 1,57          | 0,08         | 0,007            | 0                        | 0,000                     |
| MNT_PCA_s/pp    | 20813                   | 0,01          | 1,85          | 0,09         | 0,015            | 0                        | 0,000                     |
| P1CD_PCA_s/pp   | 20813                   | -0,01         | 0,17          | 0,07         | 0,001            | 25                       | 0,120                     |
| P21D_PCA_s/pp   | 20813                   | 0,01          | 0,14          | 0,06         | 0,001            | 0                        | 0,000                     |
| P2D_PCA_s/pp    | 20813                   | 0,01          | 0,12          | 0,05         | 0,0003           | 0                        | 0,000                     |
| P3D_PCA_s/pp    | 20813                   | 0,01          | 0,10          | 0,05         | 0,0002           | 0                        | 0,000                     |
| PT_PCA_s/pp     | 20813                   | 0,01          | 0,10          | 0,05         | 0,0002           | 0                        | 0,000                     |
| PPC1CD_PCA_s/pp | 20813                   | -0,68         | 9,43          | 3,35         | 3,369            | 130                      | 0,625                     |
| PPC21D_PCA_s/pp | 20813                   | 0,09          | 7,61          | 2,66         | 2,093            | 0                        | 0,000                     |
| PPC2D_PCA_s/pp  | 20813                   | 0,13          | 5,88          | 2,17         | 1,110            | 0                        | 0,000                     |
| PPC3D_PCA_s/pp  | 20813                   | 0,33          | 4,62          | 2,05         | 0,653            | 0                        | 0,000                     |
| PPCT_PCA_s/pp   | 20813                   | 0,19          | 4,66          | 2,29         | 0,990            | 0                        | 0,000                     |
| SI1CD_PCA_s/pp  | 20813                   | -27,24        | 110,39        | 12,73        | 83,746           | 352                      | 1,691                     |
| SI21D_PCA_s/pp  | 20813                   | 1,62          | 35,05         | 5,96         | 10,840           | 0                        | 0,000                     |
| SI2D_PCA_s/pp   | 20813                   | 3,23          | 53,67         | 16,24        | 56,350           | 0                        | 0,000                     |
| SI3D_PCA_s/pp   | 20813                   | 9,31          | 63,60         | 29,78        | 62,691           | 0                        | 0,000                     |
| SIT_PCA_s/pp    | 20813                   | 6,49          | 48,66         | 23,08        | 53,298           | 0                        | 0,000                     |
| W1C_PCA_IB_s/pp | 20813                   | 3,01          | 52,57         | 17,35        | 25,739           | 0                        | 0,000                     |
| W21_PCA_IB_s/pp | 20813                   | 6,43          | 24,71         | 13,65        | 7,957            | 0                        | 0,000                     |
| W2_PCA_IB_s/pp  | 20813                   | 11,51         | 40,46         | 27,89        | 14,269           | 0                        | 0,000                     |
| W3_PCA_IB_s/pp  | 20813                   | 24,77         | 79,40         | 54,76        | 36,129           | 0                        | 0,000                     |

Tabela 4.8 – Estatísticas das estimativas desacomuladas (letra D), pós-processadas, obtidas por krigagem independente das componentes PCA, exceto no caso da faixa 1 que é calculado (letra C).

|            | <b>Blocos modelo</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> |
|------------|----------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|
| AL1CD_PCA  | 20813                | 0,26          | 2,74          | 0,95         | 0,149            |
| AL21D_PCA  | 20813                | 0,28          | 1,72          | 0,87         | 0,060            |
| AL2D_PCA   | 20813                | 0,28          | 1,31          | 0,76         | 0,031            |
| AL3D_PCA   | 20813                | 0,64          | 2,10          | 1,40         | 0,049            |
| ALT_PCA    | 20813                | 0,49          | 1,61          | 1,11         | 0,035            |
| FE1CD_PCA  | 20813                | 1,33          | 69,36         | 57,96        | 51,899           |
| FE21D_PCA  | 20813                | 41,45         | 68,06         | 62,70        | 8,178            |
| FE2D_PCA   | 20813                | 22,54         | 66,36         | 55,50        | 44,509           |
| FE3D_PCA   | 20813                | 22,79         | 63,29         | 45,63        | 50,452           |
| FET_PCA    | 20813                | 32,24         | 63,65         | 50,62        | 34,339           |
| MN1CD_PCA  | 20813                | 0,00          | 4,03          | 0,16         | 0,078            |
| MN21D_PCA  | 20813                | 0,01          | 2,22          | 0,11         | 0,027            |
| MN2D_PCA   | 20813                | 0,01          | 2,28          | 0,10         | 0,021            |
| MN3D_PCA   | 20813                | 0,01          | 1,57          | 0,09         | 0,008            |
| MNT_PCA    | 20813                | 0,01          | 1,85          | 0,10         | 0,015            |
| P1CD_PCA   | 20813                | 0,01          | 0,13          | 0,06         | 0,001            |
| P21D_PCA   | 20813                | 0,02          | 0,13          | 0,06         | 0,0004           |
| P2D_PCA    | 20813                | 0,01          | 0,11          | 0,05         | 0,0002           |
| P3D_PCA    | 20813                | 0,02          | 0,08          | 0,05         | 0,0002           |
| PT_PCA     | 20813                | 0,02          | 0,09          | 0,05         | 0,0002           |
| PPC1CD_PCA | 20813                | 0,30          | 5,85          | 2,86         | 1,609            |
| PPC21D_PCA | 20813                | 0,40          | 5,66          | 2,74         | 1,281            |
| PPC2D_PCA  | 20813                | 0,34          | 4,76          | 2,17         | 0,819            |
| PPC3D_PCA  | 20813                | 0,60          | 4,20          | 2,13         | 0,591            |
| PPCT_PCA   | 20813                | 0,52          | 4,36          | 2,22         | 0,740            |
| SI1CD_PCA  | 20813                | 2,11          | 42,47         | 10,55        | 26,688           |
| SI21D_PCA  | 20813                | 2,20          | 28,64         | 7,99         | 14,160           |
| SI2D_PCA   | 20813                | 5,68          | 46,24         | 19,21        | 42,342           |
| SI3D_PCA   | 20813                | 11,75         | 52,38         | 31,73        | 34,420           |
| SIT_PCA    | 20813                | 8,92          | 42,31         | 24,34        | 29,222           |
| W1C_PCA    | 20813                | 6,96          | 33,19         | 17,46        | 11,693           |
| W21_PCA    | 20813                | 7,28          | 22,67         | 14,04        | 5,985            |
| W2_PCA     | 20813                | 17,52         | 37,57         | 28,27        | 8,118            |
| W3_PCA     | 20813                | 39,81         | 71,38         | 54,26        | 18,782           |

Na Figura 4.5, foi esquematizado o processo para a obtenção das estimativas a partir da decomposição em componentes principais (PCA), que fundamentalmente difere do processo de obtenção de estimativas a partir de fatores MAF na etapa correspondente ao cálculo da matriz de variogramas  $\Gamma_V(\Delta)$ .

## **4.2 Análise parcial dos resultados provenientes das decomposições em fatores MAF e PCA**

No Capítulo 3, mostrou-se que as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária apresentam valores que estão fora do intervalo dos dados originais e, portanto, precisam de um pós-processamento substituindo os valores inválidos por estimativas obtidas por metodologias de interpolação que assumem um modelo variográfico arbitrário e não garantem a não tendenciosidade, como é o caso das médias locais.

Os processos de obtenção das estimativas por krigagem dos fatores MAF ou PCA incluem uma etapa de normalização (nscore). Ao voltar ao espaço original, a anamorfose gaussiana (Chilés e Delfiner, 1999) faz com que os valores retro-transformados fiquem no intervalo original das amostras (Deutsch e Journel, 1998). Portanto, nas variáveis estimadas não é necessário o pós-processamento realizado no caso das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (Capítulo 3, item 3.5).

Porém, os teores na faixa 1 são determinados por diferença a partir das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF ou das componentes principais PCA. Portanto, não estão forçadas a ficar no intervalo original das amostras pela retro-transformação da normalização e também carregam o somatório dos erros dessas estimativas, obtendo-se dados fora do intervalo original das amostras ou inclusive negativos. As estimativas da faixa 1 devem ser pós-processados substituindo os teores dos blocos inválidos pela média local.

Ao comparar o número de blocos incorretos obtidos pelas duas metodologias (Tabela 4.3 e Tabela 4.7) observa-se que o número de blocos inválidos na faixa 1 é semelhante, da mesma ordem de magnitude. Portanto, nesse aspecto e nesse estudo de caso, a utilização da descorrelação até  $h=150m$  por meio de fatores MAF não fornece resultados muito diferentes do que os obtidos pela decomposição em componentes principais.

No que se refere aos valores estimados pelas duas metodologias, apresentam-se, no Apêndice E, os diagramas de dispersão das estimativas para comparar os valores em cada bloco. Na Figura 4.10. apresenta-se o diagrama de dispersão correspondente ao teor global de ferro obtido por krigagem ordinária dos fatores MAF e por krigagem ordinária das componentes principais PCA.

Nesse diagrama, não é apreciado um viés de uma metodologia sobre a outra, dando uma distribuição de pontos relativamente simétrica em torno da bissetriz, com um elevado coeficiente de correlação.

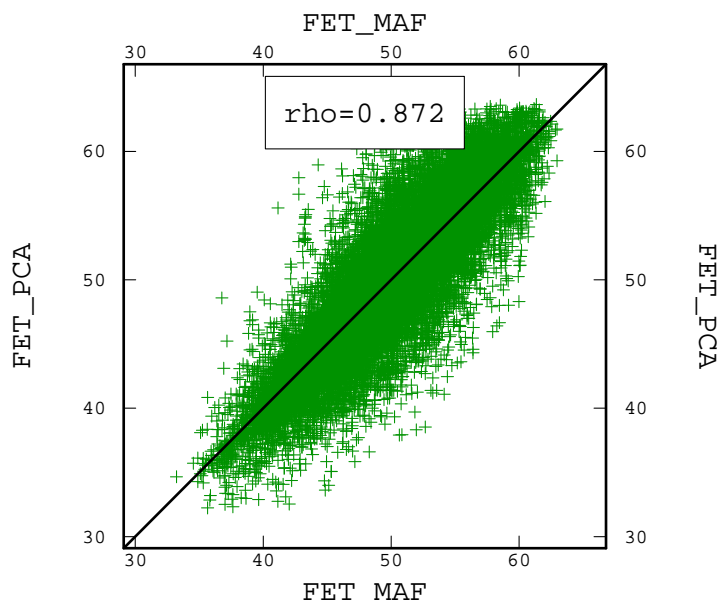


Figura 4.10 - Diagrama de dispersão do teor de ferro global (FET) obtido por krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF) vs. o teor obtido por krigagem ordinária das componentes principais PCA (FET\_PCA).

No caso dos teores calculados para a faixa 1, observa-se uma distribuição menos restrita dos valores no caso em que são utilizadas as estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF na determinação, abrangendo um intervalo maior de valores.

No Apêndice H, realiza-se uma análise comparativa das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e os valores médios provenientes das realizações obtidas por simulação estocástica, em cada bloco, denominados E-Type (Goovaerts, 1997), para observar se a metodologia aplicada introduz um viés nas estimativas. A análise é realizada para os teores globais, já que ao simular os teores acumulados e as massas das frações granulométricas por separado, e posteriormente desacumular os mesmos, são obtidos muitos valores que não pertencem ao intervalo original das amostras. Poderia-se, no entanto, simular os valores acumulados e os valores das massas das frações granulométricas e determinar os seus E-Types respectivos e posteriormente

desacumular. Essa análise não é realizada nessa tese por ser redundante no objetivo de analisar a presença de um viés.

Do mesmo modo que foi apresentado no Capítulo 3, também deve-se conferir se as estimativas obtidas pelas duas metodologias satisfazem os balanços estequiométricos em cada faixa, observar que as médias ao longo dos eixos X, Y e Z acompanhem a tendência da média dos dados originais nas mesmas direções (análise de deriva) e observar a concordância entre as estimativas e dados originais para determinadas seções.

No Capítulo 6, serão apresentadas as validações correspondentes, conjuntamente com as das outras metodologias utilizadas e uma análise mais detalhada dos resultados.



## Capítulo 5

### Geoestatística de Dados Composicionais: Cokrigagem de Razões-Logarítmicas Aditivas (alr)

Os dados provenientes dos depósitos de minério de ferro são dados composicionais – vetores com componentes que carregam informação relativa, sendo proporções de um total, com uma soma constante. As razões-logarítmicas aditivas obtidas a partir dos dados originais provem informação relativa e adequação matemática para o tratamento de dados composicionais. Nesse capítulo, apresenta-se a cokrigagem de razões-logarítmicas aditivas como uma metodologia que capitaliza as vantagens teóricas da cokrigagem dando solução ao problema do fechamento dos balanços.

#### 5.1 Condições de soma constante

No caso de dados composicionais, as relações entre as variáveis devem estar expressas numa equação matemática de soma constante.

No Capítulo 3, item 3.4, apresentaram-se, nas Equações (3.1) a (3.7), as relações de balanço de massa e de balanços estequiométricos para as variáveis de interesse.

A seguir são apresentadas essas relações segundo os requerimentos da soma constante:

O somatório das massas é igual a 100% (Equação (3.1)):

$$W_T(u) = W_1(u) + W_2(u) + W_3(u) = 100\% \quad (3.1)$$

As Equações (3.2) a (3.6) são re-escritas como:

$$100 = \frac{(AL_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{AL_T(u)} + \frac{(AL_{2D}(u) \cdot W_2(u))}{AL_T(u)} + \frac{(AL_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{AL_T(u)} \quad (5.1)$$

$$100 = \frac{(MN_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{MN_T(u)} + \frac{(MN_{2D}(u) \cdot W_2(u))}{MN_T(u)} + \frac{(MN_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{MN_T(u)} \quad (5.2)$$

$$100 = \frac{(P_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{P_T(u)} + \frac{(P_{2D}(u) \cdot W_2(u))}{P_T(u)} + \frac{(P_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{P_T(u)} \quad (5.3)$$

$$100 = \frac{(PPC_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{PPC_T(u)} + \frac{(PPC_{2D}(u) \cdot W_2(u))}{PPC_T(u)} + \frac{(PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{PPC_T(u)} \quad (5.4)$$

$$100 = \frac{(Sl_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{Sl_T(u)} + \frac{(Sl_{2D}(u) \cdot W_2(u))}{Sl_T(u)} + \frac{(Sl_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{Sl_T(u)} \quad (5.5)$$

Nesse estudo de caso, a equação correspondente ao ferro é diferente do tipo apresentado nas Equações (5.1) à (5.5) por causa da expressão do teor como complementar ao teor máximo. Portanto, a Equação (3.7) é expressa como:

$$7000 = (100 \cdot FE_T(u)) + (FE_1(u)) + (FE_2(u)) + (FE_3(u)) \quad (5.6)$$

O banco de dados do estudo de caso tem a particularidade da subdivisão da fração 2 nas frações 21 e 22. A massa da fração granulométrica 2, pode ser expressa como o somatório das massas das frações 21 e 22, como foi expresso na Equação (3.8). Assim:

$$W_1(u) + W_{21}(u) + W_{22}(u) + W_3(u) = 100\% \quad (5.7)$$

Também, os teores nas faixas 21 e 22 devem satisfazer o balanço de massa relativo aos teores da faixa 2 (Equações (3.93.14)).

$$100 = \frac{(AL_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{AL_T(u)} + \frac{(AL_{21D}(u) \cdot W_{21}(u))}{AL_T(u)} + \frac{(AL_{22D}(u) \cdot W_{22}(u))}{AL_T(u)} + \frac{(AL_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{AL_T(u)} \quad (5.8)$$

$$100 = \frac{(MN_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{MN_T(u)} + \frac{(MN_{21D}(u) \cdot W_{21}(u))}{MN_T(u)} + \frac{(MN_{22D}(u) \cdot W_{22}(u))}{MN_T(u)} + \frac{(MN_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{MN_T(u)} \quad (5.9)$$

$$100 = \frac{(P_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{P_T(u)} + \frac{(P_{21D}(u) \cdot W_{21}(u))}{P_T(u)} + \frac{(P_{22D}(u) \cdot W_{22}(u))}{P_T(u)} + \frac{(P_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{P_T(u)} \quad (5.10)$$

$$100 = \frac{(PPC_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{PPC_T(u)} + \frac{(PPC_{21D}(u) \cdot W_{21}(u))}{PPC_T(u)} + \frac{(PPC_{22D}(u) \cdot W_{22}(u))}{PPC_T(u)} + \frac{(PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{PPC_T(u)} \quad (5.11)$$

$$100 = \frac{(Sl_{1D}(u) \cdot W_1(u))}{Sl_T(u)} + \frac{(Sl_{21D}(u) \cdot W_{21}(u))}{Sl_T(u)} + \frac{(Sl_{22D}(u) \cdot W_{22}(u))}{Sl_T(u)} + \frac{(Sl_{3D}(u) \cdot W_3(u))}{Sl_T(u)} \quad (5.12)$$

$$7000 = (100 \cdot FE_T(u)) + (FE_{1D}(u) \cdot W_1(u)) + (FE_{21D}(u) \cdot W_{21}(u)) + (FE_{22D}(u) \cdot W_{22}(u)) + (FE_{3D}(u) \cdot W_3(u)) \quad (5.13)$$

Ao mesmo tempo, em cada faixa granulométrica, é satisfeito o balanço estequiométrico (Equação (3.15)), que pode ser expressa nos seguintes termos, deixando o teor de ferro ( $FE_i(u)$ ) como um termo independente:

$$\frac{0.69825 \cdot P_i(u)}{0,43638} + \frac{0.69825 \cdot MN_i(u)}{0,63193} + 0,69825 \cdot AL_i(u) + 0,69825 \cdot PPC_i(u) + 0,69825 \cdot SI_i(u) + FE_i(u) = 69,825 \quad (5.14)$$

onde  $i=1, 2, 21, 22, 3$  e  $T$ .

## 5.2 Definição da rota de cálculo

Antes de realizar a transformação em razões-logarítmicas aditivas (alr) é necessário decidir quais serão as transformações sucessivas a serem realizadas, de modo a estimar as variáveis de interesse, satisfazendo os balanços de massa ou estequiométricos.

É importante destacar, que as estimativas obtidas não podem satisfazer simultaneamente os balanços de massa e estequiométricos. Escolheram-se os balanços de massa como prioritários e posteriormente confere-se o fechamento da estequiometria, como foi realizado ao utilizar outras metodologias.

### 5.2.1 Transformação em razões-logarítmicas aditivas (alr)

Os fundamentos teóricos da transformação em razões-logarítmicas aditivas (alr) foram apresentados no Capítulo 2, item 2.3.2.

Na prática, o passo inicial é a escolha de uma variável, das que compõem a composição-r, para ser colocada no denominador. Na teoria, a escolha da variável no denominador é indistinta, não influenciando nos resultados obtidos.

Numa seguinte fase, realizam-se as transformações logarítmicas dos quocientes, obtendo as razões-logarítmicas aditivas.

O seguinte passo é dado pela análise e modelagem da continuidade espacial, utilizando modelos lineares de correlogramização, já que a transformação em razões-logarítmicas elimina o problema da correlação espacial espúria, mas não descorrelaciona as variáveis. Porém, um aspecto positivo da transformação

em razões-logarítmicas aditivas é dado pela redução dimensional dos sistemas ao colocar umas das variáveis da composição-r no denominador. Dessa forma, os modelos lineares de correção regionalização a serem modelados têm uma variável a menos que a composição original, facilitando, em certa medida, o processo de modelagem.

As razões-logarítmicas são estimadas pelas técnicas convencionais de geoestatística multivariada, i.e. cokrigagem ordinária, e posteriormente retro-transformadas ao espaço original pela transformação inversa, a transformação logística aditiva generalizada (agl) apresentada no Capítulo 2, item 2.3.2.

A transformação alr não pode ser implementada em presença de zeros (valores faltantes ou com valor igual a zero, situação de heterotopia). Portanto, para preencher-se os pontos faltantes pode-se utilizar de técnicas de estimativa ou simulação colocando as variáveis nos locais amostrais onde o vetor não está completo ou substituir os zeros seguindo os critérios apresentados no Capítulo 2, item 2.3.6.

Outra alternativa, é subdividir o banco de dados de forma tal de ter sub-composições (sub-domínios) que satisfaçam a condição de soma constante.

Na presente tese, estimam-se todas as variáveis nas faixas 1, 2, 3 e global, que estão numa situação de isotopia. Numa segunda etapa, determinam-se os teores nas faixas 21 e 22, a partir do subconjunto de dados nos quais as informações nessas faixas estão disponíveis.

### **5.2.2 Alternativas de rotas de cálculo**

A estimativa das variáveis de interesse faz necessário um seqüenciamento nas determinações sucessivas.

As Equações (5.1) a (5.5) provêm a soma constante para a estimativa dos teores de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica nas faixas 1, 2 e 3. Porém, ao calcular-se os quocientes, os teores globais não podem ser determinados. Portanto, os teores globais são determinados a partir da equação do balanço estequiométrico (5.13) com  $i=T$ .

Ao mesmo tempo, a Equação (5.6) fornece a soma constante para a estimativa dos teores de ferro nas faixas 1, 2, 3 e global. O teor de ferro global obtido a partir do balanço de massa (Equação (5.6)) é diferente do obtido a partir

do balanço estequiométrico (Equação (5.14)). Isso acontece pela particularidade do banco de dados utilizado, no qual o teor de ferro é expresso como complementar ao teor máximo. O teor global de ferro escolhido é o proveniente do balanço de massa. Posteriormente, confere-se a satisfação do balanço estequiométrico com a utilização do mesmo.

Na Figura 5.1, esquematiza-se a rota de cálculo para a determinação dos teores nas faixas 1, 2, 3 e global.

Numa segunda etapa, como foi mencionado anteriormente, são determinados os teores e massas no domínio composto pelas faixas 21 e 22, que constituem uma particularidade do banco de dados do estudo de caso.

Para essas determinações, são utilizadas as Equações (3.8) e a Equação (5.14) com  $i=21$  e  $i=22$ . Se fossem utilizados os balanços de massa das Equações (5.8) a (5.13), seriam determinados novos teores nas faixas 1, 2, 3 e globais. Esses teores não poderiam ser utilizados por terem sido determinados anteriormente a partir das Equações (5.1) a (5.6). Portanto, decide-se satisfazer o balanço estequiométrico para essas faixas e posteriormente conferir os balanços de massa. O processo é esquematizado na Figura 5.2. As estimativas das massas nas faixas 1 e 3 ( $W12(u)$  e  $W32(u)$ , respectivamente) obtidas por esse processo são diferentes das obtidas segundo a rota de cálculo da Figura 5.1 ( $W1(u)$  e  $W3(u)$ ).

Se o banco de dados fosse isotópico e ao mesmo tempo o teor de ferro não fosse expresso como complementar ao teor máximo, a rota de cálculo poderia ser a apresentada na Figura 5.3, onde nenhuma variável é determinada duas vezes e são satisfeitos os balanços de massa (expressos nas Equações dos quadros verdes) e o balanço estequiométrico global (expresso no quadro azul) para a totalidade das estimativas. Posteriormente, deveriam ser conferidos os balanços estequiométricos nas faixas 1, 2, 21, 22 e 3.

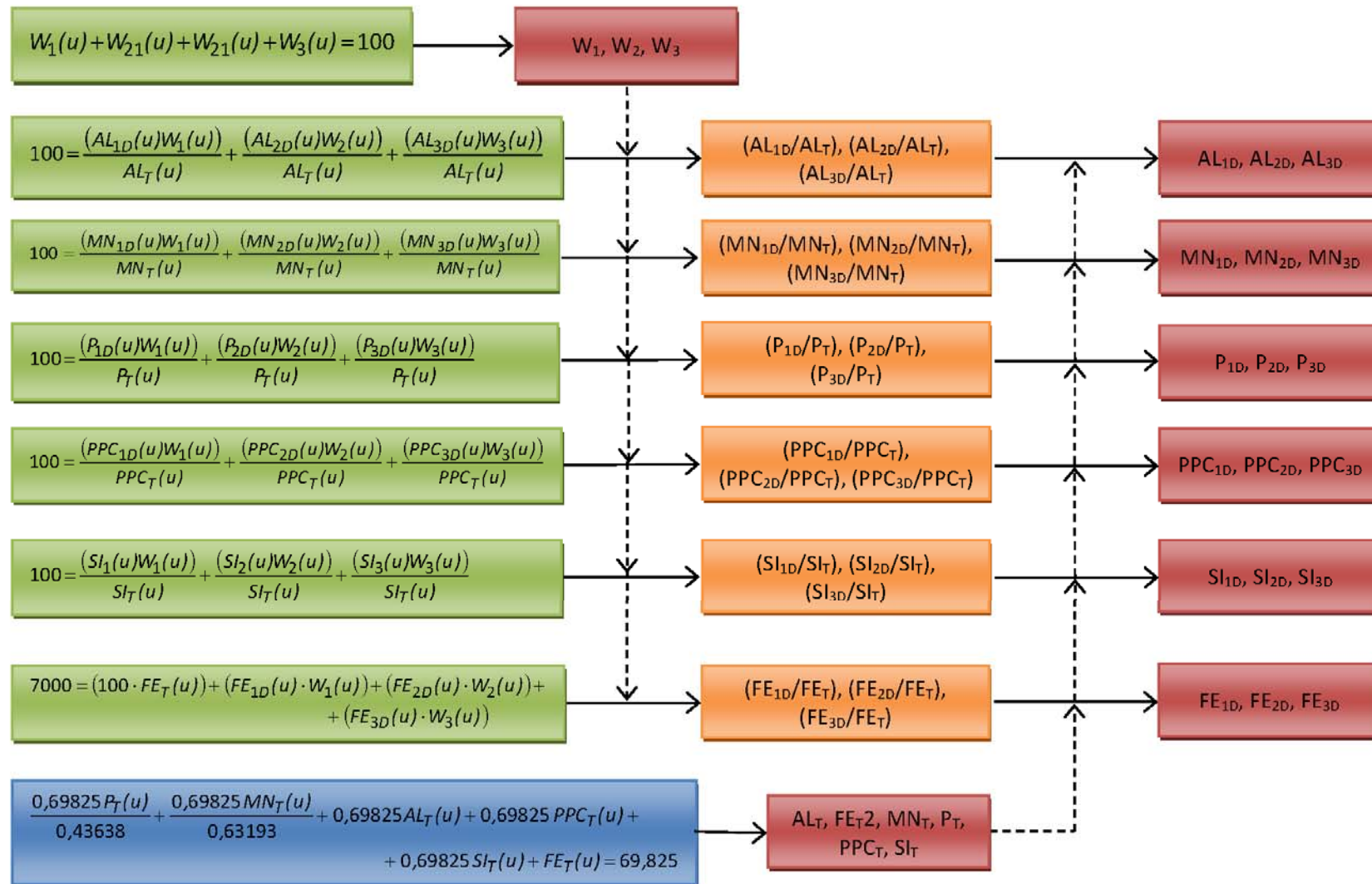


Figura 5.1 – Rota de cálculo para a determinação dos teores de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação, sílica e massa das partições granulométricas nas faixas 1, 2, 3 e global, utilizando a análise de dados composicionais. Os teores de ferro globais  $FET(u)$  e  $FET2(u)$  são diferentes, escolhendo-se o teor  $FET(u)$  como válido, satisfazendo o balanço de massa.

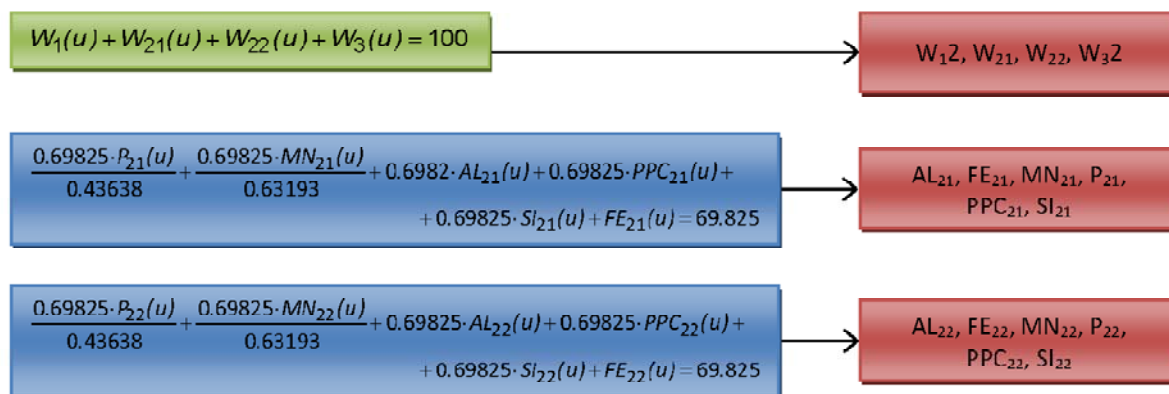


Figura 5.2 – Rota de cálculo para determinar os teores de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação, sílica e as massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 21 e 22.

### 5.3 Estimativa das variáveis de interesse nas faixas 1, 2, 3 e global: Cokrigagem Ordinária das razões-logarítmicas aditivas (alr)

Segundo a rota de cálculo da Figura 5.1, as estimativas são realizadas nas seguintes etapas: transformação em razões-logarítmicas aditivas (alr), análise e modelagem da continuidade espacial das razões-logarítmicas, cokrigagem ordinária das mesmas e retro-transformação ao espaço original pela transformação inversa agl.

A seguir, são apresentados os passos sucessivos para a determinação de todas as variáveis de interesse.

#### 5.3.1 Estimativa das massas das partições granulométricas

A partir da Equação (3.1) é escolhida a massa na faixa 3,  $W_3(u)$ , para ser colocada no denominador das razões alr. Assim, a transformação alr é expressa na seguinte equação:

$$Y_{1BW}(u) = \ln\left(\frac{W_1(u)}{W_3(u)}\right)$$

$$Y_{2BW}(u) = \ln\left(\frac{W_2(u)}{W_3(u)}\right)$$
(5.15)

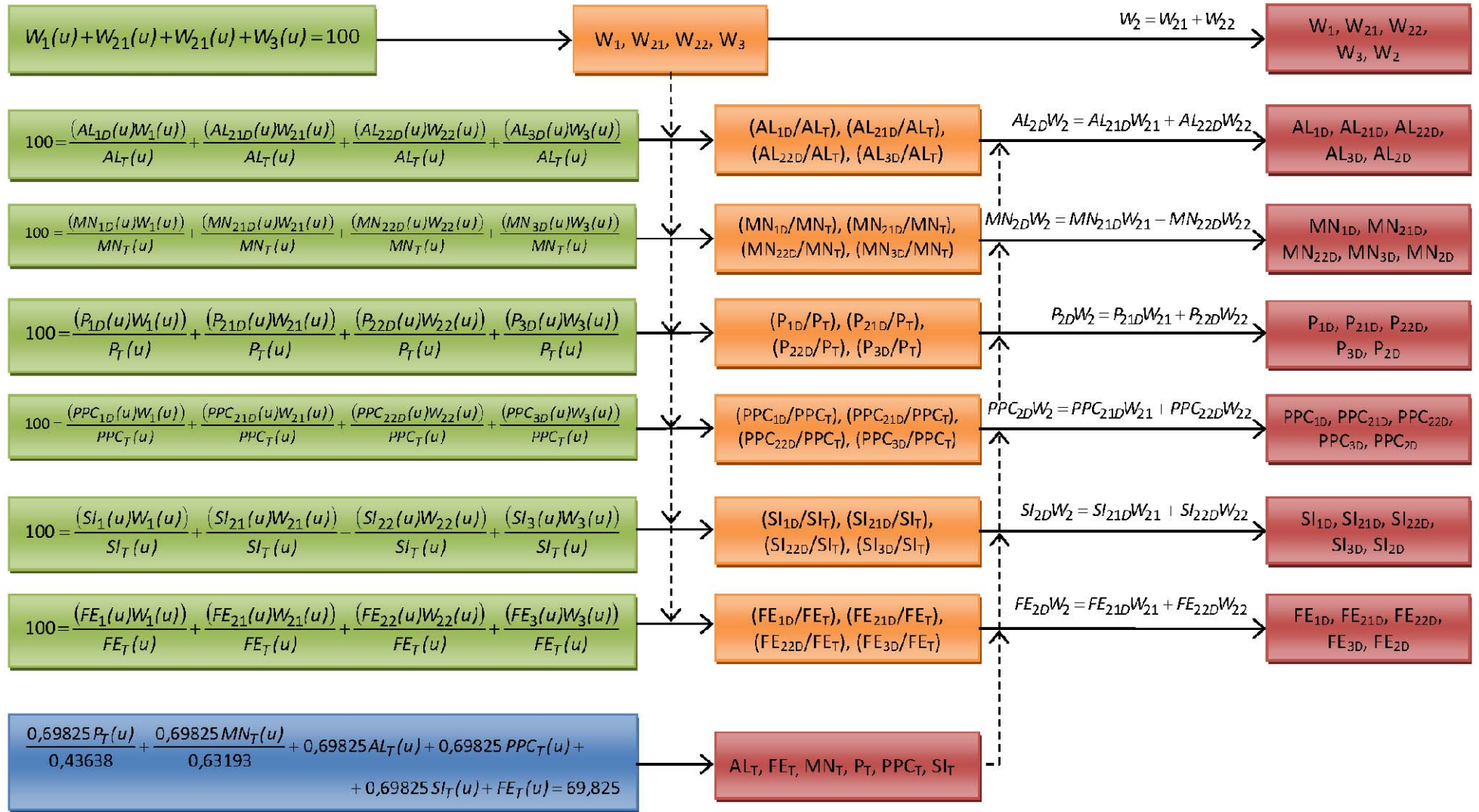


Figura 5.3 - Rota de cálculo hipotética para a determinação dos teores de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação, sílica e massa das partições granulométricas nas faixas 1, 2, 21, 22, 3 e global, utilizando a análise de dados composicionais, se o banco de dados fosse isotópico e o ferro não estivesse expresso como complementar ao teor máximo.



onde  $Y1BW(u)$  e  $Y2BW(u)$  são as transformações alr utilizando as massas na faixa 1 e 2 ( $W1(u)$  e  $W2(u)$ ) no numerador, respectivamente.

Os histogramas das razões-logarítmicas  $Y1BW(u)$  e  $Y2BW(u)$  são apresentados na Figura 5.4.

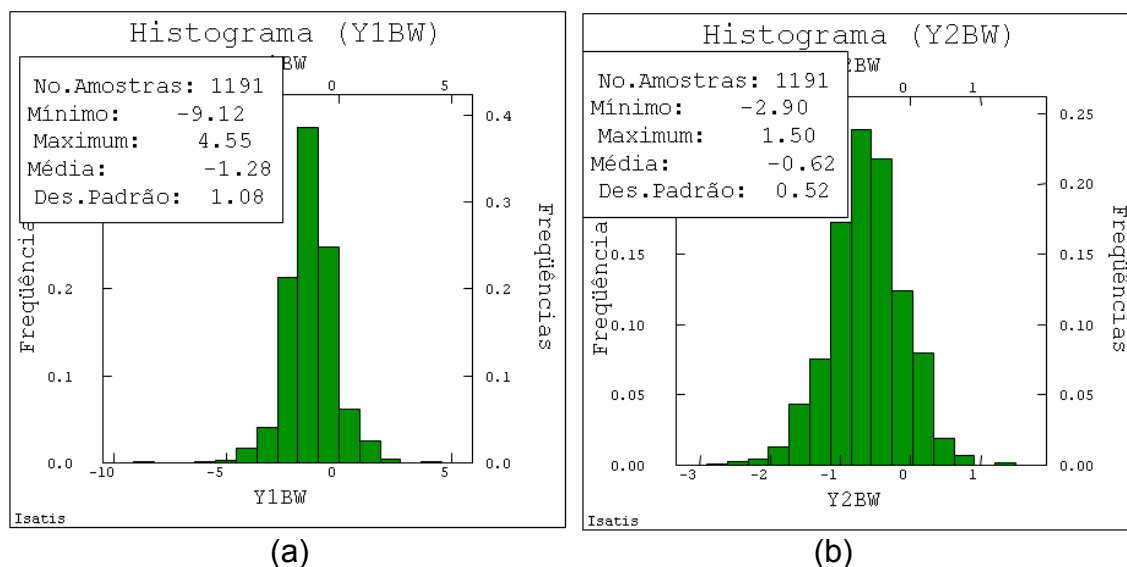


Figura 5.4 – Histogramas das razões-logarítmicas (a)  $Y1BW(u)$  e (b)  $Y2BW(u)$ .

As variáveis  $Y1BW(u)$  e  $Y2BW(u)$  são duas novas variáveis cuja variabilidade espacial deve ser analisada de modo independente à variabilidade das variáveis no espaço original.

Conseqüentemente, o elipsóide de anisotropia das razões-logarítmicas aditivas tem o seu eixo maior (direção de maior continuidade espacial) na direção  $N68^\circ$ , o eixo intermediário na direção  $N158^\circ$ , ambos no plano XY, e o eixo menor (direção de menor continuidade espacial) na direção perpendicular ao plano XY,  $D-90^\circ$ . Essas direções de anisotropia estão rotacionadas 32 graus com respeito às das variáveis originais.

Partindo de três variáveis ( $W1(u)$ ,  $W2(u)$  e  $W3(u)$ ), deve-se modelar um modelo linear de correção (MLC) de duas variáveis ( $Y1BW(u)$  e  $Y2BW(u)$ ).

O modelo variográfico apresenta-se na equação (5.16). Na Tabela 5.1, são colocadas respectivas matrizes de correção (contribuições à variância

global). Na Figura 5.5, são apresentados os variogramas experimentais diretos e cruzados, modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia.

$$Y_{BW} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{70m}{N68^\circ} \frac{50m}{N158^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{140m}{N68^\circ} \frac{130m}{N158^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right) \quad (5.16)$$

As estimativas são realizadas por cokrigagem ordinária, utilizando as estratégias e vizinhança de busca apresentada na Tabela 3.10. Os parâmetros de busca e dimensão do elipsóide de busca são mantidos respeito às metodologias anteriores, porém rotando-o nas atuais direções de anisotropia (Tabela 5.2).

Tabela 5.1 – Matrizes de correionalização para o modelo linear de correionalização das razões-logartítmicas alr  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$ , correspondentes à massa das partições granulométricas nas faixas 1, 2 e 3, utilizando a massa na fração 3 ( $W_3(u)$ ) no denominador e as massas nas faixas 1 e 2 ( $W_1(u)$  e  $W_2(u)$ ) no numerador, respectivamente.

| Matriz de Correionalização $C_0$ |      |      |
|----------------------------------|------|------|
|                                  | Y1BW | Y2BW |
| Y1BW                             | 0,14 | 0,03 |
| Y2BW                             | 0,03 | 0,01 |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |      |      |
|                                  | Y1BW | Y2BW |
| Y1BW                             | 0,13 | 0,04 |
| Y2BW                             | 0,04 | 0,01 |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |      |      |
|                                  | Y1BW | Y2BW |
| Y1BW                             | 0,91 | 0,32 |
| Y2BW                             | 0,32 | 0,25 |

Uma vez obtidas as estimativas das razões-logarítmicas aditivas,  $Y^*_{1BW}(u)$  e  $Y^*_{2BW}(u)$ , as mesmas são retro-transformadas ao espaço original utilizando a transformação inversa agl (Capítulo 2, item 2.3.2), obtendo-se os valores estimados  $W_{1Y}(u)$ ,  $W_{2Y}(u)$  e  $W_{3Y}(u)$ .

A retro-transformação é expressa nas seguintes Equações:

$$W_{1Y}(u) = 100 \cdot \frac{\exp(Y^*_{1BW}(u))}{K_W} \quad (5.17)$$

$$W_{2Y}(u) = 100 \cdot \frac{\exp(Y^*_{2BW}(u))}{K_W} \quad (5.18)$$

$$W_{3Y}(u) = \frac{100}{K_W} \quad (5.19)$$

$$K_W = 1 + \exp(Y_{1BW}^*(u)) + \exp(Y_{2BW}^*(u)) \quad (5.20)$$

onde K é colocado para simplificar a expressão da função agl dada pela Equação (2.95) (Tolosana-Delgado, 2006, p. 121) é o subíndice W indica o conjunto de variáveis consideradas, W1(u), W2(u) e W3(u)

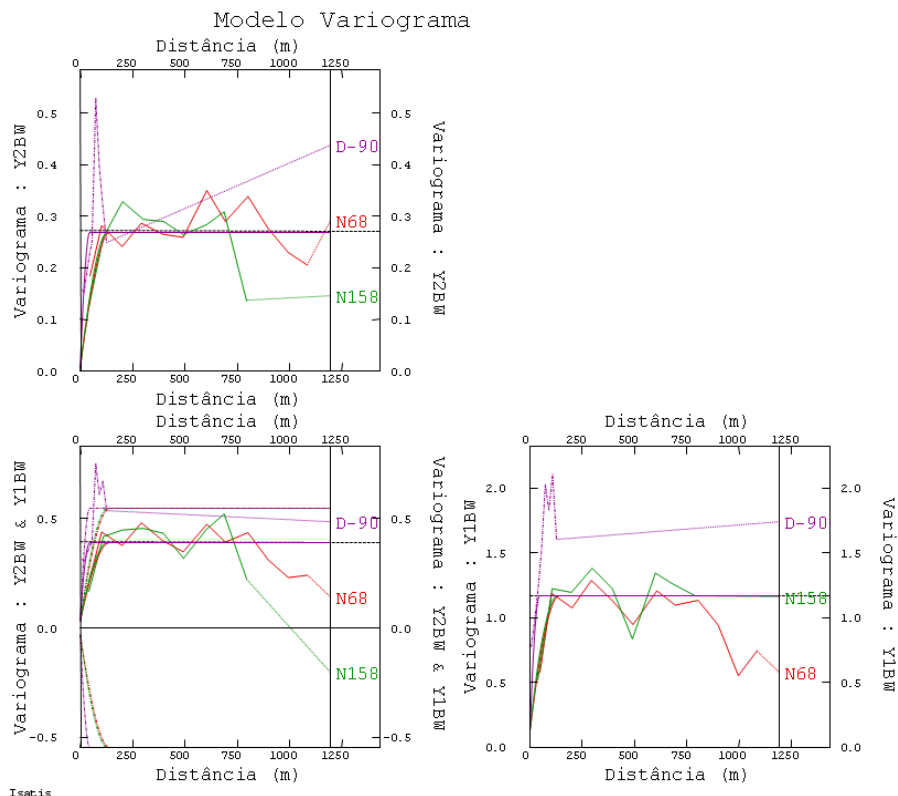


Figura 5.5 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logartítmicas alr  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$ , correspondentes à massa das partições granulométricas das faixas 1, 2 e 3, utilizando a massa na fração 3 ( $W_3(u)$ ) no denominador e as massas nas faixas 1 e 2 ( $W_1(u)$  e  $W_2(u)$ ) no numerador, respectivamente.

Tabela 5.2 – Parâmetros das vizinhança e estratégia de busca para os sistemas de cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$ , alinhado com o elipsóide de anisotropia nas direções  $N68^\circ$ ,  $N158^\circ$  e  $D-90^\circ$ .

|   |   |
|---|---|
| Tipo de vizinhança:                               | Móvel                                     |
| Elipsóide de busca alinhado com o da anisotropia: | $N68^\circ$ , $N158^\circ$ , $D-90^\circ$ |
| Raio de busca $N68^\circ$ :                       | 750m                                      |
| Raio de busca $N158^\circ$ :                      | 220m                                      |
| Raio de busca $D-90^\circ$ :                      | 60m                                       |
| Número de setores angulares:                      | 8   |
| Mínimo número de amostras:                        | 3   |
| Número ótimo de amostras por setor angular:       | 2   |
| Busca heterotópica                                | Sim                                       |
| Mínima distância entre pontos:                    | 10m                                       |
| Discretização de blocos em X:                     | 5   |
| Discretização de blocos em Y:                     | 5   |
| Discretização de blocos em Z:                     | 1   |

### 5.3.2 Estimativa dos teores de ferro

A estimativa dos teores de ferro, no estudo de caso considerado, tem a particularidade de que o mesmo é expresso como complementar ao teor máximo de ferro (70%).

A partir da equação (5.6), escolhe-se o teor acumulado de ferro na faixa 3 ( $FE_3(u)$ ) para ser utilizado no denominador das transformações alr:

$$\begin{aligned}
 Y_{1BFE}(u) &= \ln\left(\frac{(100 \cdot FE_T(u))}{(FE_3(u))}\right) \\
 Y_{2BFE}(u) &= \ln\left(\frac{(FE_1(u))}{(FE_3(u))}\right) \\
 Y_{3BFE}(u) &= \ln\left(\frac{(FE_2(u))}{(FE_3(u))}\right)
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

onde  $Y_{1BFE}(u)$ ,  $Y_{2BFE}(u)$  e  $Y_{3BFE}(u)$  são transformações alr utilizando o teor global multiplicado por cem ( $100 \cdot FE_T(u)$ ) e os teores de ferro acumulados nas faixas 1 e 2,  $FE_1(u)$  e  $FE_2(u)$ , no numerador, respectivamente.

De forma análoga ao procedimento realizado com as razões-logarítmicas alr correspondentes à massa das partições granulométricas (item 5.3.1), são apresentados os histogramas das razões-logarítmicas  $Y_{1BFE}(u)$ ,  $Y_{2BFE}(u)$  é

Y3BFE(u) no Apêndice F, junto com a totalidade dos histogramas das razões-logarítmicas obtidas nas rotas de cálculo da Figura 5.1 e da Figura 5.2.

A variabilidade espacial das razões-logarítmicas alr Y1BFE(u), Y2BFE(u) é Y3BFE(u) é semelhante à variabilidade espacial das razões Y1BW(u) e Y2BW(u) já que a variabilidade da massa das frações granulométricas incide diretamente na variabilidade do produto. Analisando a variabilidade espacial, se obtém um elipsóide de anisotropia orientado nas mesmas direções que no caso das razões logarítmicas alr Y1BW(u) e Y2BW(u), em N68°, N158° e D-90°.

O modelo linear de correção (MLC) a ser modelado envolve três variáveis, Y1BFE(u), Y2BFE(u) e Y3BFE(u), reduzindo dimensionalmente o sistema inicial de quatro variáveis (FE1(u), FE2(u), FE3(u) e FET(u)).

A equação que descreve o modelo variográfico, a tabela correspondente às matrizes de correção e os variogramas direcionais, experimentais e modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia, são apresentados, no Apêndice F, sendo análoga às apresentadas para a determinação das massas W1Y(u), W2Y(u) e W3Y(u) na equação (5.16), na Tabela 5.1 e na Figura 5.5, respectivamente.

As estimativas, Y\*1BFE(u), Y\*2BFE(u) e Y\*3BFE(u), são obtidas por meio de cokrigagem ordinária, com as mesmas estratégias é vizinhança de busca, apresentadas na

Tabela 3.10, e posteriormente são retro-transformadas ao espaço original, utilizando a transformação inversa agl:

$$(100 \cdot FE_{TY}(u)) = 7000 \cdot \frac{\exp(Y_{1BFE}^*(u))}{K_{FE}} \quad (5.22)$$

$$((70 - FE_{1YD}(u)) \cdot W_{1Y}(u)) = 7000 \cdot \frac{\exp(Y_{2BFE}^*(u))}{K_{FE}} \quad (5.23)$$

$$((70 - FE_{2YD}(u)) \cdot W_{2Y}(u)) = 7000 \cdot \frac{\exp(Y_{3BFE}^*(u))}{K_{FE}} \quad (5.24)$$

$$((70 - FE_{3YD}(u)) \cdot W_{3Y}(u)) = \frac{7000}{K_{FE}} \quad (5.25)$$

$$K_{FE} = 1 + \exp(Y_{1BFE}^*(u)) + \exp(Y_{2BFE}^*(u)) + \exp(Y_{3BFE}^*(u)) \quad (5.26)$$

Utilizando os valores estimados de  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ , são determinados os valores estimados de  $FE1YD(u)$ ,  $FE2YD(u)$ ,  $FE3YD(u)$  e  $FETY(u)$ .

### 5.3.3 Estimativa dos teores de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica

A estimativa dos teores de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica, envolvem as mesmas transformações, já que as Equações (5.7) a (5.11) estão expressas nos mesmos termos.

Assim, as Equações de transformação em razões alr são as seguintes:

Transformação alr para a alumina:

$$Y_{1BAL}(u) = \ln \left( \frac{(AL_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / AL_T(u)}{(AL_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / AL_T(u)} \right) \quad (5.27)$$

$$Y_{2BAL}(u) = \ln \left( \frac{(AL_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / AL_T(u)}{(AL_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / AL_T(u)} \right)$$

Transformação alr para o manganês:

$$Y_{1BMN}(u) = \ln \left( \frac{(MN_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / MN_T(u)}{(MN_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / MN_T(u)} \right) \quad (5.28)$$

$$Y_{2BMN}(u) = \ln \left( \frac{(MN_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / MN_T(u)}{(MN_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / MN_T(u)} \right)$$

Transformação alr para o fósforo:

$$Y_{1BP}(u) = \ln \left( \frac{(P_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / P_T(u)}{(P_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / P_T(u)} \right) \quad (5.29)$$

$$Y_{2BP}(u) = \ln \left( \frac{(P_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / P_T(u)}{(P_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / P_T(u)} \right)$$

Transformação alr para as perdas por calcinação:

$$Y_{1BPPC}(u) = \ln \left( \frac{(PPC_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / PPC_T(u)}{(PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / PPC_T(u)} \right)$$

$$Y_{2BPPC}(u) = \ln \left( \frac{(PPC_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / PPC_T(u)}{(PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / PPC_T(u)} \right)$$
(5.30)

Transformação alr para a sílica:

$$Y_{1BSI}(u) = \ln \left( \frac{(SI_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / SI_T(u)}{(SI_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / SI_T(u)} \right)$$

$$Y_{2BSI}(u) = \ln \left( \frac{(SI_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / SI_T(u)}{(SI_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / SI_T(u)} \right)$$
(5.31)

Os histogramas correspondentes às razões logarítmicas acima definidas são apresentados no Apêndice F.

Essas transformações também são influenciadas pela variabilidade espacial das massas das frações granulométricas, pelo que a sua variabilidade espacial é semelhante à variabilidade espacial das razões  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$ , com o elipsóide de anisotropia tendo seus eixos maior, intermediário e menor, orientados nas direções em  $N68^\circ$ ,  $N158^\circ$  e  $D-90^\circ$ , respectivamente.

Os modelos lineares de correção (MLCs) a serem modelados envolvem duas variáveis em cada caso. As Equações que descrevem os modelos variográficos, as tabelas correspondentes às matrizes de correção e os variogramas direcionais, experimentais e modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia, são apresentados, no Apêndice F.

As estimativas, para cada sistema, são obtidas utilizando cokrigagem ordinária com as mesmas estratégias de vizinhança de busca, apresentadas na Tabela 5.2 e posteriormente são retro-transformadas ao espaço original, utilizando a transformação inversa agl segundo as seguintes Equações:

Retro-transformação agl da alumina:

$$\frac{AL_{1YD}(u) \cdot W_{1Y}(u)}{AL_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{1BAL}^*(u))}{K_{AL}} \quad (5.32)$$

$$\frac{AL_{2YD}(u) \cdot W_{2Y}(u)}{AL_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{2BAL}^*(u))}{K_{AL}} \quad (5.33)$$

$$\frac{AL_{3YD}(u) \cdot W_{3Y}(u)}{AL_{TY}(u)} = \frac{100}{K_{AL}} \quad (5.34)$$

$$K_{AL} = 1 + \exp(Y_{1BAL}^*(u)) + \exp(Y_{2BAL}^*(u)) \quad (5.35)$$

Retro-transformação agl do manganês:

$$\frac{MN_{1YD}(u) \cdot W_{1Y}(u)}{MN_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{1BMN}^*(u))}{K_{MN}} \quad (5.36)$$

$$\frac{MN_{2YD}(u) \cdot W_{2Y}(u)}{MN_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{2BMN}^*(u))}{K_{MN}} \quad (5.37)$$

$$\frac{MN_{3YD}(u) \cdot W_{3Y}(u)}{MN_{TY}(u)} = \frac{100}{K_{MN}} \quad (5.38)$$

$$K_{MN} = 1 + \exp(Y_{1BMN}^*(u)) + \exp(Y_{2BMN}^*(u)) \quad (5.39)$$

Retro-transformação agl do fósforo:

$$\frac{P_{1YD}(u) \cdot W_{1Y}(u)}{P_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{1BP}^*(u))}{K_P} \quad (5.40)$$

$$\frac{P_{2YD}(u) \cdot W_{2Y}(u)}{P_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{2BP}^*(u))}{K_P} \quad (5.41)$$

$$\frac{P_{3YD}(u) \cdot W_{3Y}(u)}{P_{TY}(u)} = \frac{100}{K_P} \quad (5.42)$$

$$K_P = 1 + \exp(Y_{1BP}^*(u)) + \exp(Y_{2BP}^*(u)) \quad (5.43)$$

Retro-transformação agl das perdas por calcinação:

$$\frac{PPC_{1YD}(u) \cdot W_{1Y}(u)}{PPC_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{1BPPC}^*(u))}{K_{PPC}} \quad (5.44)$$

$$\frac{PPC_{2YD}(u) \cdot W_{2Y}(u)}{PPC_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{2BPPC}^*(u))}{K_{PPC}} \quad (5.45)$$

$$\frac{PPC_{3YD}(u) \cdot W_{3Y}(u)}{PPC_{TY}(u)} = \frac{100}{K_{PPC}} \quad (5.46)$$

$$K_{PPC} = 1 + \exp(Y_{1BPPC}^*(u)) + \exp(Y_{2BPPC}^*(u)) \quad (5.47)$$



Retro-transformação agl da sílica:

$$\frac{Sl_{1YD}(u) \cdot W_{1Y}(u)}{Sl_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{1BSI}^*(u))}{K_{SI}} \quad (5.48)$$

$$\frac{Sl_{2YD}(u) \cdot W_{2Y}(u)}{Sl_{TY}(u)} = 100 \cdot \frac{\exp(Y_{2BSI}^*(u))}{K_{SI}} \quad (5.49)$$

$$\frac{Sl_{3YD}(u) \cdot W_{3Y}(u)}{Sl_{TY}(u)} = \frac{100}{K_{SI}} \quad (5.50)$$

$$K_{SI} = 1 + \exp(Y_{1BSI}^*(u)) + \exp(Y_{2BSI}^*(u)) \quad (5.51)$$

Para a obtenção dos teores desacumulados nas faixas 1, 2 e 3, não são necessários somente os valores estimados das massas nas frações granulométricas,  $W_{1Y}(u)$ ,  $W_{2Y}(u)$  e  $W_{3Y}(u)$ , mas também são necessários os teores globais,  $AlTY(u)$ ,  $MNTY(u)$ ,  $PTY(u)$ ,  $PPCTY(u)$  e  $SITY(u)$ .

#### 5.3.4 Estimativa dos teores globais

Os teores globais,  $AlTY(u)$ ,  $MNTY(u)$ ,  $PTY(u)$ ,  $PPCTY(u)$  e  $SITY(u)$ , são obtidos a partir do balanço estequiométrico global (Equação (3.15) com  $i=T$ ). O balanço estequiométrico global escreve-se de modo tal a utilizar o teor global de ferro no denominador (equação (5.14)).

O teor global de ferro já está determinado, como foi apresentado no item 5.3.2. Porém, ele não pode ser substituído na equação (5.14), já que, a soma deixaria de ser constante em cada local  $u$ . Portanto, o teor global de ferro é determinado novamente, denominando-o  $FETY_2(u)$ . Isso constitui um caso particular para esse banco de dados dado pelo fato do teor de ferro estar expresso como complementar ao teor máximo (70%). Finalmente, o teor determinado nessa etapa, é descartado, preservando o teor que satisfaz o balanço de massa,  $FETY(u)$  e conferindo, posteriormente, que o mesmo satisfaça o balanço estequiométrico.

A transformação alr, envolve, nesse caso, seis variáveis, gerando cinco razões-logartímicadas aditivas alr:

$$\begin{aligned}
Y_{1EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot P_T(u) / 0,43638}{FE_T(u)} \right) \\
Y_{2EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot MN_T(u) / 0,63193}{FE_T(u)} \right) \\
Y_{3EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot AL_T(u)}{FE_T(u)} \right) \\
Y_{4EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot PPC_T(u)}{FE_T(u)} \right) \\
Y_{5EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot SI_T(u)}{FE_T(u)} \right)
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Os histogramas correspondentes às razões-logarítmicas acima definidas, são apresentadas no Apêndice F.

Nesse caso, as razões-logarítmicas alr não incluem a massa das partições granulométricas como acontece nas outras razões-logarítmicas antes determinadas. Portanto, analisa-se novamente a variabilidade espacial, achando-se o elipsóide de anisotropia com os seus eixos maior, intermediário e menor nas direções respectivas de N100°, N190° (no plano XY) e D-90° (ortogonal ao plano XY), coincidentes com o elipsóide de anisotropia das variáveis no espaço original.

O modelo linear de correionalização (MLC) envolve cinco variáveis, sendo difícil de modelar sem o auxílio de softwares que implementem o ajuste automático das contribuições à variância satisfazendo as condições de definição positiva.

A equação que descreve o modelo variográfico, a tabela correspondente às matrizes de correionalização e os variogramas direcionais, experimentais e modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia, são apresentados, no Apêndice F.

As estimativas,  $Y^*1EQT(u)$ ,  $Y^*2EQT(u)$ ,  $Y^*3EQT(u)$ ,  $Y^*4EQT(u)$  e  $Y^*5EQT(u)$  são obtidas utilizando cokrigagem ordinária com as estratégias e vizinhança de busca, apresentadas na Tabela 3.10.

Posteriormente, as estimativas das razões-logarítmicas são retro-transformadas ao espaço original, utilizando a transformação inversa agl:

$$0,69825 \cdot P_{TY}(u) / 0,43638 = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{1EQT}^*(u))}{K_{EQT}} \quad (5.53)$$

$$0,69825 \cdot MN_{TY}(u) / 0,63193 = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{2EQT}^*(u))}{K_{EQT}} \quad (5.54)$$

$$0,69825 \cdot AL_{TY}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{3EQT}^*(u))}{K_{EQT}} \quad (5.55)$$

$$0,69825 \cdot PPC_{TY}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{4EQT}^*(u))}{K_{EQT}} \quad (5.56)$$

$$0,69825 \cdot SI_{TY}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{5EQT}^*(u))}{K_{EQT}} \quad (5.57)$$

$$FE_{TY2}(u) = \frac{69,825}{K_{EQT}} \quad (5.58)$$

$$K_{EQT} = 1 + \exp(Y_{1EQT}^*(u)) + \exp(Y_{2EQT}^*(u)) + \exp(Y_{3EQT}^*(u)) + \exp(Y_{4EQT}^*(u)) + \exp(Y_{5EQT}^*(u)) \quad (5.59)$$

Dessa forma, são obtidos os teores globais, ALTY(u), MNTY(u), PTY(u), PPCTY(u) e SITY(u), que permitem a determinação dos teores de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica, utilizando as estimativas da massa das partições granulométricas, W1Y(u), W2Y(u) e W3Y(u), operando nas Equações (5.32) a (5.51).

## 5.4 Estimativa das variáveis de interesse nas faixas 21 e 22: caso particular do banco de dados do estudo de caso

A estimativa das variáveis de interesse, nas faixas 21 e 22, é realizada segundo a rota de cálculo colocada na Figura 5.2, envolvendo as seguintes etapas sucessivas: transformação em razões logarítmicas aditivas (alr), análise e modelagem da continuidade espacial das razões-logarítmicas, cokrigagem ordinária das mesmas e retro-transformação ao espaço original pela transformação inversa agl. Os teores na faixa 22, são calculados utilizando as informações das amostras do banco de dados original, nas faixas 2 e 21, segundo as Equações (3.9) a (3.14).

### 5.4.1 Estimativa das massas das partições granulométricas

A Equação (5.7) é semelhante à Equação (3.1), com a diferença de expressar a massa da faixa 2, em função das massas das faixas 21 e 22 (Equação (3.8)).

Ao determinar-se as massas das faixas 21 e 22 ( $W_{21}(u)$  e  $W_{22}(u)$ ), são determinados novamente as massas nas faixas 1 e 3, que são diferentes das estimadas no item 5.3.1 já que provêm de sistemas de cokrigagem diferentes. Essas estimativas ( $W_{1Y2}(u)$  e  $W_{3Y2}(u)$ ) não são utilizadas, preservando as estimativas determinadas anteriormente ( $W_{1Y}(u)$  e  $W_{3Y}(u)$ ), que satisfazem o balanço dado pela Equação (3.1).

$$\begin{aligned}
 Y_{BW21\_1}(u) &= \ln\left(\frac{W_1(u)}{W_3(u)}\right) \\
 Y_{BW21\_2}(u) &= \ln\left(\frac{W_{21}(u)}{W_3(u)}\right) \\
 Y_{BW21\_3}(u) &= \ln\left(\frac{W_{22}(u)}{W_3(u)}\right)
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

onde  $Y_{BW21\_1}(u)$ ,  $Y_{BW21\_2}(u)$  e  $Y_{BW21\_3}(u)$  são as transformações alr utilizando as massas das faixas 1, 21 e 22 ( $W_1(u)$ ,  $W_{21}(u)$  e  $W_{22}(u)$ ) no numerador e a massa da faixa 3 ( $W_3(u)$ ) no denominador, respectivamente.

No Apêndice F, são apresentados os histogramas das razões-logarítmicas  $Y_{BW21\_1}(u)$ ,  $Y_{BW21\_2}(u)$  e  $Y_{BW21\_3}(u)$  junto com a totalidade dos histogramas das razões-logarítmicas obtidas nas rotas de cálculo da Figura 5.1 e da Figura 5.2.

A variabilidade espacial é semelhante à variabilidade espacial das razões  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$  com o elipsóide de anisotropia orientado nas direções  $N68^\circ$ ,  $N158^\circ$  e  $D-90^\circ$ .

O modelo linear de correção (MLC) a ser modelado envolve três variáveis,  $Y_{BW21\_1}(u)$ ,  $Y_{BW21\_2}(u)$  e  $Y_{BW21\_3}(u)$ . A equação que descreve o modelo variográfico, a tabela correspondente às matrizes de correção e os variogramas direcionais, experimentais e modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia, são apresentados, no Apêndice F.

As estimativas,  $Y^*_{BW21\_1}(u)$ ,  $Y^*_{BW21\_2}(u)$  e  $Y^*_{BW21\_3}(u)$ , são obtidas por cokrigagem ordinária utilizando as estratégias de vizinhança de busca, apresentadas na Tabela 5.2 e posteriormente são retro-transformadas ao espaço original, utilizando a transformação inversa agl, obtendo-se os valores estimados  $W_{1Y2}(u)$ ,  $W_{21Y}(u)$ ,  $W_{22Y}(u)$  e  $W_{3Y2}(u)$ .

$$W_{1Y2}(u) = 100 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BW21\_1}(u))}{K_{W21}} \quad (5.61)$$

$$W_{21Y}(u) = 100 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BW21\_2}(u))}{K_{W21}} \quad (5.62)$$

$$W_{22Y}(u) = 100 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BW21\_3}(u))}{K_{W21}} \quad (5.63)$$

$$W_{3Y2}(u) = \frac{100}{K_{W21}} \quad (5.64)$$

$$K_{W21} = 1 + \exp(Y^*_{BW21\_1}(u)) + \exp(Y^*_{BW21\_2}(u)) + \exp(Y^*_{BW21\_3}(u)) \quad (5.65)$$

#### 5.4.2 Estimativa dos teores nas faixas 21 e 22

Os teores nas faixas 21 e 22,  $AL_{21Y}(u)$ ,  $MN_{21Y}(u)$ ,  $P_{21Y}(u)$ ,  $PPC_{21Y}(u)$  e  $SI_{21Y}(u)$ , e  $AL_{22Y}(u)$ ,  $MN_{22Y}(u)$ ,  $P_{22Y}(u)$ ,  $PPC_{22Y}(u)$  e  $SI_{22Y}(u)$ , respectivamente, são determinados a partir do balanço estequiométrico (Equação

(3.15),  $i=21$  e  $22$ ). O balanço escreve-se segundo a equação (5.14) que permite utilizar o teor de ferro de forma independente no denominador.

Cada um dos balanços estequiométricos envolvem seis variáveis, gerando cinco razões-logarítmicas aditivas alr, respectivamente:

$$\begin{aligned}
 Y_{BEQ21\_1}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot P_{21D}(u) / 0,43638}{FE_{21D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ21\_2}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot MN_{21D}(u) / 0,63193}{FE_{21D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ21\_3}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot AL_{21D}(u)}{FE_{21D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ21\_4}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot PPC_{21D}(u)}{FE_{21D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ21\_5}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot Sl_{21D}(u)}{FE_{21D}(u)} \right)
 \end{aligned} \tag{5.66}$$

e

$$\begin{aligned}
 Y_{BEQ22\_1}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot P_{22D}(u) / 0,43638}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_2}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot MN_{22D}(u) / 0,63193}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_3}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot AL_{22D}(u)}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_4}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot PPC_{22D}(u)}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_5}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot Sl_{22D}(u)}{FE_{22D}(u)} \right)
 \end{aligned} \tag{5.67}$$

No Apêndice F, são apresentados os histogramas correspondentes às razões-logarítmicas acima definidas.

O elipsóide de anisotropia está orientado nas mesmas direções que o elipsóide determinado ao analisar a variabilidade espacial das razões-logarítmicas aditivas no caso do balanço estequiométrico global (item 5.3.4),  $N100^\circ$ ,  $N190^\circ$  e  $D-90^\circ$ , coincidente com o elipsóide de anisotropia das variáveis no espaço original.

Os modelos lineares de correção regionalização (MLC) envolvem cinco variáveis em cada caso (faixa 21 e 22), sendo modelados com o auxílio de softwares que implementam o ajuste automático das contribuições à variância máxima, satisfazendo as condições de definição positiva.

As Equações que descrevem os modelos variográficos, as Tabelas correspondentes às matrizes de correção regionalização e os variogramas direcionais, experimentais e modelados utilizando o MLC, nas principais direções de anisotropia em cada caso, são apresentados, no Apêndice F.

As estimativas,  $Y^*_{BEQ21\_1}(u)$ ,  $Y^*_{BEQ21\_2}(u)$ ,  $Y^*_{BEQ21\_3}(u)$ ,  $Y^*_{BEQ21\_4}(u)$ , e  $Y^*_{BEQ21\_5}(u)$  e,  $Y^*_{BEQ22\_1}(u)$ ,  $Y^*_{BEQ22\_2}(u)$ ,  $Y^*_{BEQ22\_3}(u)$ ,  $Y^*_{BEQ22\_4}(u)$ , e  $Y^*_{BEQ22\_5}(u)$  são obtidas utilizando cokrigagem ordinária com as mesmas estratégias e vizinhança de busca que os teores globais (item 5.3.4), apresentadas na Tabela 3.10. Posteriormente, são retro-transformadas ao espaço original, utilizando a transformação inversa agl, em cada caso:

$$0,69825 \cdot P_{21YD}(u) / 0,43638 = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BEQ21\_1}(u))}{K_{BEQ21}} \quad (5.68)$$

$$0,69825 \cdot MN_{21YD}(u) / 0,63193 = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BEQ21\_2}(u))}{K_{BEQ21}} \quad (5.69)$$

$$0,69825 \cdot AL_{21YD}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BEQ21\_3}(u))}{K_{BEQ21}} \quad (5.70)$$

$$0,69825 \cdot PPC_{21YD}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BEQ21\_4}(u))}{K_{BEQ21}} \quad (5.71)$$

$$0,69825 \cdot S_{21YD}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BEQ21\_5}(u))}{K_{BEQ21}} \quad (5.72)$$

$$FE_{21YD}(u) = \frac{69,825}{K_{BEQ21}} \quad (5.73)$$

$$K_{BEQ21} = 1 + \exp(Y^*_{BEQ21\_1}(u)) + \exp(Y^*_{BEQ21\_2}(u)) + \exp(Y^*_{BEQ21\_3}(u)) + \exp(Y^*_{BEQ21\_4}(u)) + \exp(Y^*_{BEQ21\_5}(u)) \quad (5.74)$$

e

$$0,69825 \cdot P_{22YD}(u) / 0,43638 = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y^*_{BEQ22\_1}(u))}{K_{BEQ22}} \quad (5.75)$$

$$0,69825 \cdot MN_{22YD}(u) / 0,63193 = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{BEQ22\_2}^*(u))}{K_{BEQ22}} \quad (5.76)$$

$$0,69825 \cdot AL_{22YD}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{BEQ22\_3}^*(u))}{K_{BEQ22}} \quad (5.77)$$

$$0,69825 \cdot PPC_{22YD}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{BEQ22\_4}^*(u))}{K_{BEQ22}} \quad (5.78)$$

$$0,69825 \cdot SI_{22YD}(u) = 69,825 \cdot \frac{\exp(Y_{BEQ22\_5}^*(u))}{K_{BEQ22}} \quad (5.79)$$

$$FE_{22YD}(u) = \frac{69,825}{K_{BEQ22}} \quad (5.80)$$

$$K_{BEQ22} = 1 + \exp(Y_{BEQ22\_1}^*(u)) + \exp(Y_{BEQ22\_2}^*(u)) + \exp(Y_{BEQ22\_3}^*(u)) + \exp(Y_{BEQ22\_4}^*(u)) + \exp(Y_{BEQ22\_5}^*(u)) \quad (5.81)$$

Dessa forma, são obtidos os teores nas faixas 21 e 22, AL21YD(u), FE21YD(u), MN21YD(u), P21YD(u), PPC21YD(u) e SI21YD(u) e AL22YD(u), FE22YD(u), MN22YD(u), P22YD(u), PPC22YD(u) e SI22YD(u), respectivamente.

## 5.5 Análise parcial dos resultados

As estatísticas das estimativas obtidas são apresentadas na Tabela 5.3. Quando comparadas com os dados originais (Tabela 3.3), observa-se que as mesmas estão dentro do intervalo original das amostras, excetuando o caso das perdas por calcinação na faixa 1 (PPC1YD) e a sílica na faixa 3 (SI3YD). Porém, essas diferenças são de pequena ordem e devidas à utilização de funções logarítmicas e exponenciais, sensíveis ao número de casas decimais utilizadas. No Capítulo 6, serão analisadas as médias globais fornecidas por cada metodologia, quando comparadas com as médias desagrupadas dos dados originais.

Um aspecto importante a destacar na utilização da abordagem da análise de dados composicionais e posterior aplicação de metodologias da geoestatística multivariada, é a obtenção de estimativas que estão dentro do intervalo original das amostras, não sendo necessário um pós-processamento.



A metodologia não permite o fechamento simultâneo dos balanços de massa e dos balanços estequiométricos. Mas, as estimativas obtidas a partir da transformação em razões-logarítmicas (alr) e retro-transformação agl provêm a satisfação da soma fechada considerada o que é mostrado nessa análise parcial dos resultados.

### **5.5.1 Fechamentos dos balanços utilizados para a estimativa dos teores nas faixas 1, 2, 3 e global**

A seguir, são apresentados os resultados correspondentes ao fechamento dos balanços (soma constante) utilizados, por parte das estimativas obtidas a partir da rota de cálculo da Figura 5.1.

A partir da Equação (3.1) foram determinados, no item 5.3.1, as massas nas frações granulométricas 1, 2 e 3,  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ , respectivamente. O histograma da soma obtida a partir das estimativas (BW) é apresentado na Figura 5.6, observando que o fechamento é de 100%, para a totalidade dos valores estimados.

Tabela 5.3 – Estatísticas das estimativas obtidas por cokrigeção ordinária das razões-logarítmicas aditivas, desacomuladas (letra D), indicando o número de blocos que estão fora do intervalo original das amostras, (blocos incorretos) e a porcentagem de blocos incorretos sobre o total de blocos estimados.

|         | <b>Blocos<br/>estimados</b> | <b>Mínimo</b> | <b>Máximo</b> | <b>Média</b> | <b>Variância</b> | <b>Blocos<br/>incorretos</b> | <b>%Blocos<br/>incorretos</b> |
|---------|-----------------------------|---------------|---------------|--------------|------------------|------------------------------|-------------------------------|
| AL1YD   | 20790                       | 0,13          | 5,34          | 0,84         | 0,198            | 0                            | 0,000                         |
| AL21YD  | 20813                       | 0,13          | 2,17          | 0,82         | 0,115            | 0                            | 0,000                         |
| AL22YD  | 20813                       | 0,12          | 1,93          | 0,70         | 0,056            | 0                            | 0,000                         |
| AL2YD   | 20790                       | 0,14          | 1,86          | 0,74         | 0,067            | 0                            | 0,000                         |
| AL3YD   | 20790                       | 0,25          | 4,07          | 1,33         | 0,127            | 0                            | 0,000                         |
| ALTY    | 20832                       | 0,25          | 1,90          | 1,07         | 0,083            | 0                            | 0,000                         |
| FE1YD   | 20811                       | 28,26         | 68,95         | 60,97        | 16,941           | 0                            | 0,000                         |
| FE21YD  | 20813                       | 33,47         | 67,93         | 62,58        | 10,874           | 0                            | 0,000                         |
| FE22YD  | 20813                       | 19,27         | 65,56         | 49,14        | 75,161           | 0                            | 0,000                         |
| FE2YD   | 20811                       | 27,21         | 66,33         | 55,61        | 33,743           | 0                            | 0,000                         |
| FE3YD   | 20811                       | 25,79         | 61,65         | 46,63        | 29,613           | 0                            | 0,000                         |
| FETY    | 20811                       | 33,50         | 62,99         | 51,64        | 24,484           | 0                            | 0,000                         |
| MN1YD   | 20790                       | 0,01          | 4,09          | 0,10         | 0,031            | 0                            | 0,000                         |
| MN21YD  | 20813                       | 0,01          | 2,33          | 0,12         | 0,033            | 0                            | 0,000                         |
| MN22YD  | 20813                       | 0,01          | 2,78          | 0,12         | 0,044            | 0                            | 0,000                         |
| MN2YD   | 20790                       | 0,01          | 2,73          | 0,13         | 0,047            | 0                            | 0,000                         |
| MN3YD   | 20790                       | 0,01          | 1,45          | 0,10         | 0,015            | 0                            | 0,000                         |
| MNTY    | 20832                       | 0,01          | 2,16          | 0,11         | 0,024            | 0                            | 0,000                         |
| P1YD    | 20790                       | 0,01          | 0,19          | 0,06         | 0,001            | 0                            | 0,000                         |
| P21YD   | 20813                       | 0,01          | 0,19          | 0,06         | 0,001            | 0                            | 0,000                         |
| P22YD   | 20813                       | 0,01          | 0,16          | 0,04         | 0,0003           | 0                            | 0,000                         |
| P2YD    | 20790                       | 0,01          | 0,14          | 0,05         | 0,0004           | 0                            | 0,000                         |
| P3YD    | 20790                       | 0,01          | 0,11          | 0,05         | 0,0003           | 0                            | 0,000                         |
| PTY     | 20832                       | 0,01          | 0,11          | 0,05         | 0,0003           | 0                            | 0,000                         |
| PPC1YD  | 20790                       | 0,07          | 9,21          | 2,79         | 2,855            | 5                            | 0,020                         |
| PPC21YD | 20813                       | 0,06          | 7,92          | 2,63         | 2,485            | 0                            | 0,000                         |
| PPC22YD | 20813                       | 0,05          | 5,66          | 1,84         | 0,851            | 0                            | 0,000                         |
| PPC2YD  | 20790                       | 0,13          | 6,14          | 2,13         | 1,450            | 0                            | 0,000                         |
| PPC3YD  | 20790                       | 0,27          | 5,67          | 2,15         | 0,905            | 0                            | 0,000                         |
| PPCTY   | 20832                       | 0,24          | 5,53          | 2,22         | 1,160            | 0                            | 0,000                         |
| SI1YD   | 20790                       | 0,99          | 50,28         | 8,06         | 28,353           | 0                            | 0,000                         |
| SI21YD  | 20813                       | 1,44          | 51,28         | 6,60         | 17,548           | 0                            | 0,000                         |
| SI22YD  | 20813                       | 2,78          | 71,27         | 26,78        | 153,329          | 0                            | 0,000                         |
| SI2YD   | 20790                       | 2,37          | 55,68         | 17,05        | 71,266           | 0                            | 0,000                         |
| SI3YD   | 20790                       | 5,14          | 67,79         | 30,14        | 86,492           | 1                            | 0,005                         |
| SITY    | 20832                       | 4,67          | 49,20         | 22,69        | 62,695           | 0                            | 0,000                         |
| W1Y     | 20811                       | 1,19          | 58,19         | 16,02        | 39,356           | 0                            | 0,000                         |
| W21Y    | 20759                       | 3,93          | 34,53         | 14,37        | 12,801           | 0                            | 0,000                         |
| W22Y    | 20759                       | 4,31          | 28,05         | 14,28        | 10,590           | 0                            | 0,000                         |
| W2Y     | 20811                       | 9,09          | 51,39         | 29,16        | 23,185           | 0                            | 0,000                         |
| W3Y     | 20811                       | 19,19         | 89,18         | 54,82        | 66,010           | 0                            | 0,000                         |

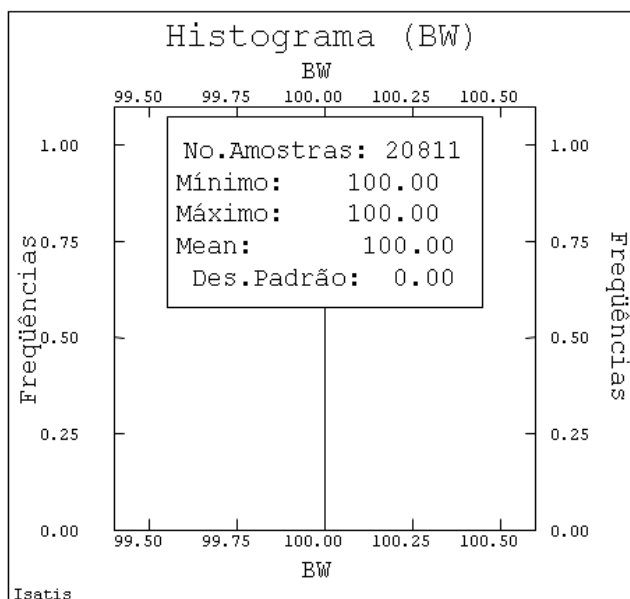


Figura 5.6 – Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, das massas das partições granulométricas nas faixas 1, 2 e 3,  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (3.1).

No caso do ferro, os teores estimados ( $FE1YD(u)$ ,  $FE2YD(u)$ ,  $FE3YD(u)$  e  $FETY(u)$ ) devem satisfazer a Equação (5.6), acumulando-os utilizando as massas estimadas,  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ . Na Figura 5.7, é apresentada a soma das estimativas do ferro (BFE), segundo a Equação (5.6). O valor esperado é de 7000 dada a particularidade de o teor estar expresso como complementar ao teor máximo. Observa-se, que a condição de soma constante é satisfeita para todas as estimativas.

No caso das estimativas da alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica, é necessária a determinação dos teores globais para poder determinar os teores nas faixas, como foi apresentado no item 5.3.4, utilizando a Equação (5.14) com  $i=T$ .

O teor de ferro global é determinado novamente,  $FETY2(u)$ , sendo diferente do determinado a partir da Equação (5.6) ( $FETY(u)$ ). O fechamento estequiométrico da Equação (3.15) ( $EQTY2$ ), determinado utilizando o teor  $FETY2(u)$ , é de 100% em todos os locais estimados, como mostra a Figura 5.8.

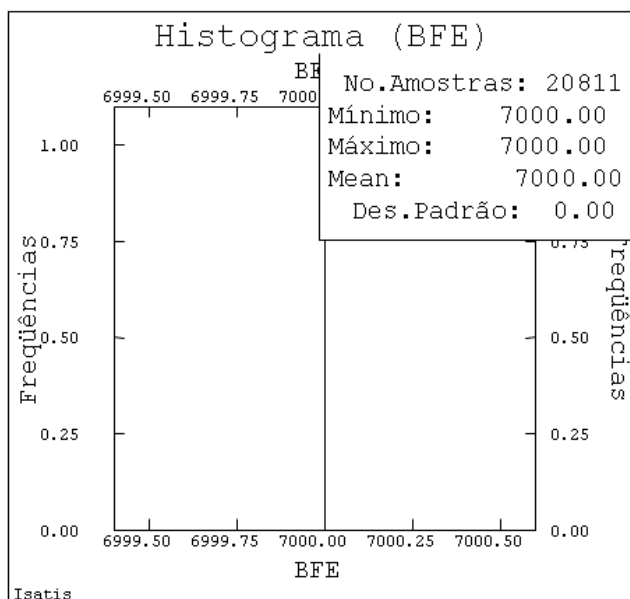


Figura 5.7 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de ferro nas faixas 1, 2, 3 e global FE1YD(u), FE2YD(u), FE3YD(u) e FETY(u), respectivamente, segundo a Equação (5.6).

Porém, escolhe-se o teor antes determinado (FETY(u)), dando prioridade ao fechamento do balanço de massa (Equação (5.6)).

O fechamento do balanço estequiométrico (EQTY) utilizando o teor de ferro obtido a partir da Equação (5.6) é apresentado na Figura 5.9, observando que o valor da soma está distribuído de forma simétrica em torno de 100%, aproximadamente.

Na Figura 5.10, apresenta-se o diagrama de dispersão de ambos os teores globais, FETY(u) vs. FETY2(u), com uma nuvem de pontos simétrica em torno da bissetriz com um coeficiente de correlação de 0,893.

Posteriormente, confere-se que os fechamentos dos balanços de massa da alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica (BAL, BMN, BP, BPPC e BSI, respectivamente), dados pelas Equações (5.8) a (5.12), obtidos a partir das estimativas provenientes das razões-logarítmicas aditivas apresentadas no item 5.3.3, são satisfeitos, como é observado nas Figuras 5.11 à 5.15.

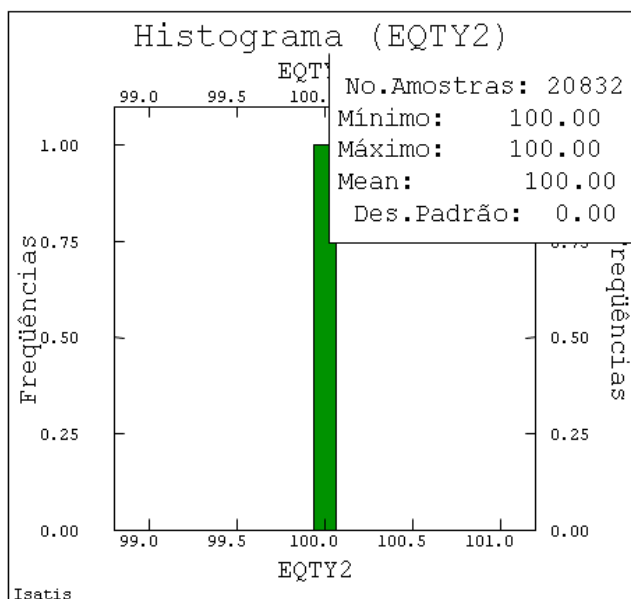


Figura 5.8 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores globais de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica ALTY(u), FETY2(u), MNTY(u), PTY(u), PPCTY(u) e SITY(u), respectivamente, segundo a Equação (3.15).

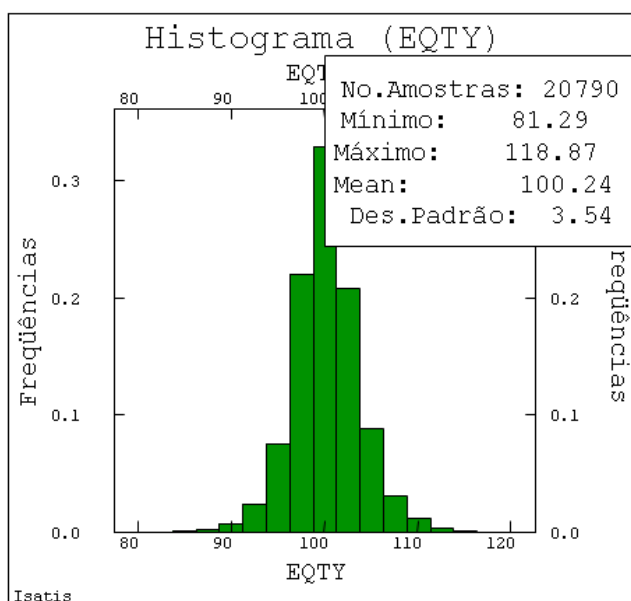
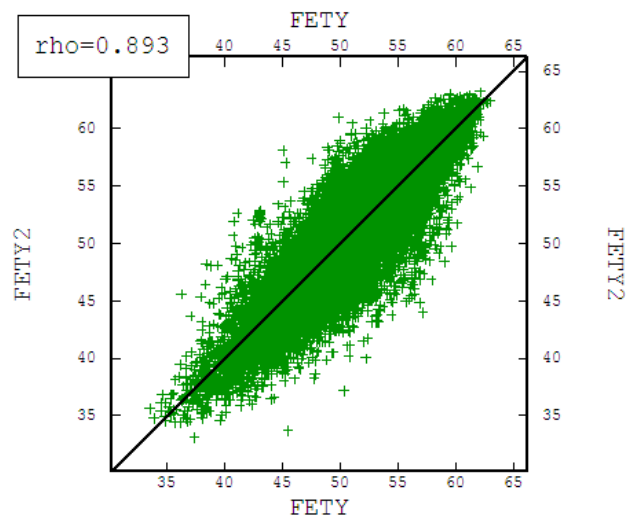
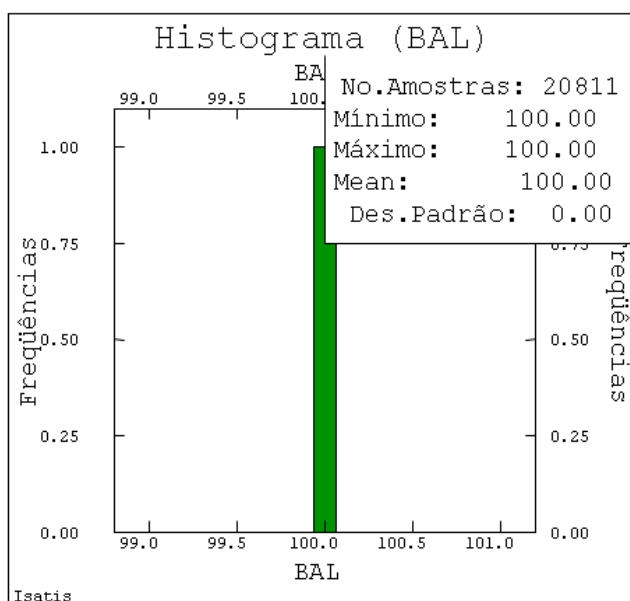


Figura 5.9 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores globais de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica ALTY(u), MNTY(u), PTY(u), PPCTY(u) e SITY(u), respectivamente, e o teor de ferro FETY (u), segundo a Equação (3.15).



Isatis  
 Figura 5.10 – Diagrama de dispersão dos teores globais de ferro FETY(u) vs. FETY2(u) determinados a partir dos balanços das Equações (5.6) e (5.13), respectivamente.



Isatis  
 Figura 5.11 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de alumina nas faixas 1, 2 e 3, AL1YD(u), AL2YD(u) e AL3YD(u) respectivamente, segundo a Equação (5.8) que incorpora o teor global ALTY(u), e as estimativas das massas das frações granulométricas W1Y(u), W2Y(u) e W3Y(u).

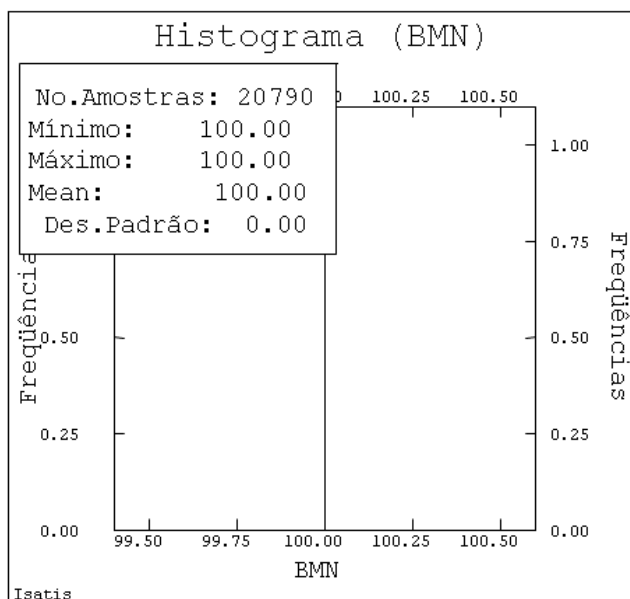


Figura 5.12 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de manganês nas faixas 1, 2 e 3,  $MN1YD(u)$ ,  $MN2YD(u)$  e  $MN3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.9) que incorpora o teor global  $MNTY(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ .

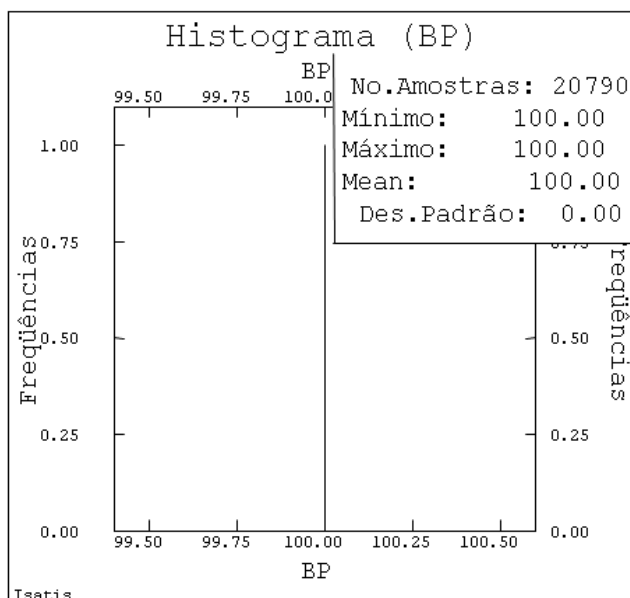


Figura 5.13 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de fósforo nas faixas 1, 2 e 3,  $P1YD(u)$ ,  $P2YD(u)$  e  $P3YD(u)$  respectivamente, segundo a Equação (5.10) que incorpora o teor global  $PTY(u)$ , e as estimativas das massas das frações granulométricas  $W1Y(u)$ ,  $W2Y(u)$  e  $W3Y(u)$ .

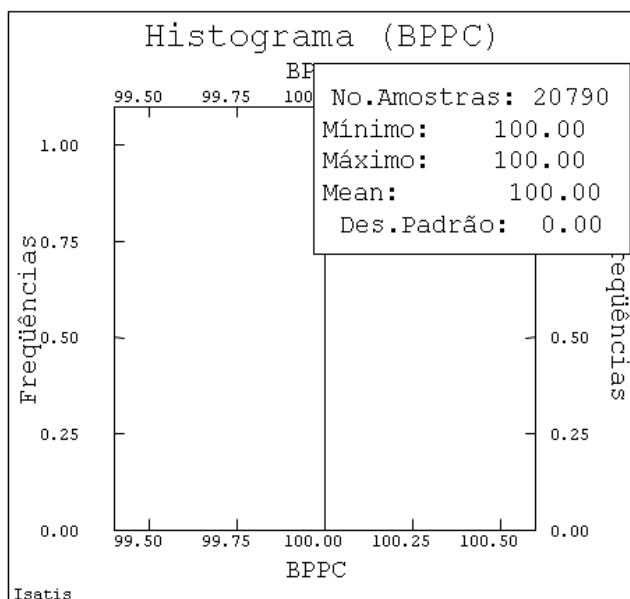


Figura 5.14 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores das perdas por calcinação nas faixas 1, 2 e 3, PPC1YD(u), PPC2YD(u) e PPC3YD(u) respectivamente, segundo a Equação (5.11), que incorpora o teor global PPC<sub>TY</sub>(u), e as estimativas das massas das frações granulométricas W1Y(u), W2Y(u) e W3Y(u).

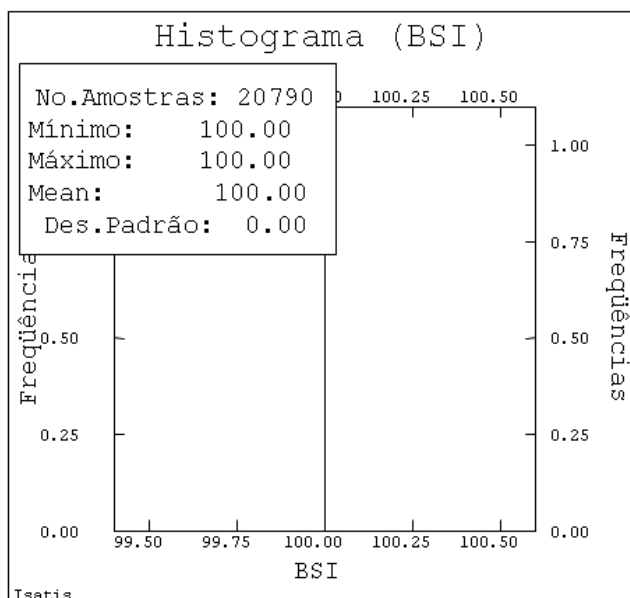


Figura 5.15 - Histograma da soma das estimativas, obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, dos teores de sílica nas faixas 1, 2 e 3, SI1YD(u), SI2YD(u) e SI3YD(u) respectivamente, segundo a Equação (5.12), que incorpora o teor global SI<sub>TY</sub>(u), e as estimativas das massas das frações granulométricas W1Y(u), W2Y(u) e W3Y(u).



### 5.5.2 Fechamentos dos balanços utilizados para a estimativa dos teores nas faixas 21 e 22

A seguir, são apresentados os resultados correspondentes ao fechamento dos balanços utilizados pelas estimativas obtidas a partir da rota de cálculo da Figura 5.2.

Confere-se o fechamento do balanço de massa dado pelo somatório das estimativas das massas nas faixas 1, 21, 22 e 3 (BW21\_2) segundo a Equação (5.7), obtidos segundo a metodologia descrita no item 5.4.1. (Figura 5.16). A soma de 100% é satisfeita pela totalidade das estimativas. Porém, os valores estimados nas faixas 1 e 3 são diferentes dos obtidos no item 5.3.1, denominados  $W1Y2(u)$  e  $W3Y2(u)$

As estimativas  $W1Y2(u)$  e  $W3Y2(u)$  são descartadas já que são obtidas em função de uma equação que é um caso particular do banco de dados do estudo de caso. Ao conferir o mesmo balanço de massa utilizando os valores das massas nas faixas 1 e 3 estimados segundo a Equação (3.1) no item 5.3.1,  $W1Y(u)$  e  $W3Y(u)$  (BW21), obtém-se a Figura 5.17, onde aprecia-se que a distribuição é simétrica, também com uma média em torno de 100%.

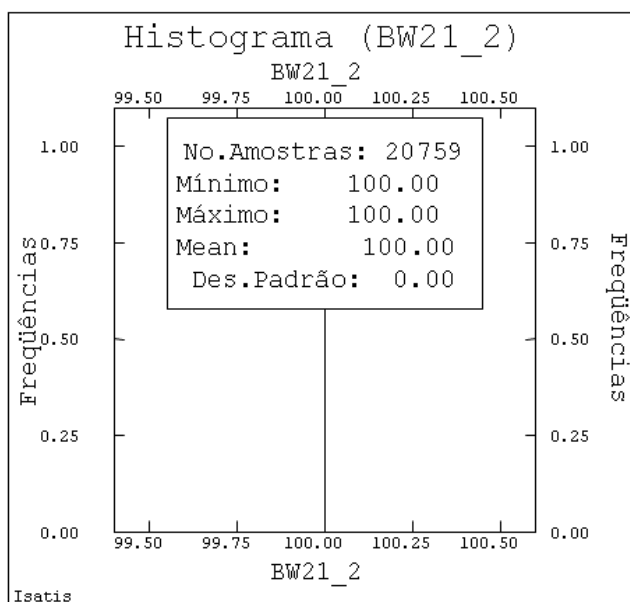


Figura 5.16 - Histograma da soma das estimativas (BW21\_2), obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, das massas das partições granulométricas nas faixas 1, 21, 22 e 3,  $W1Y2(u)$ ,  $W21Y(u)$ ,  $W22Y(u)$  e  $W3Y2(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (3.8).

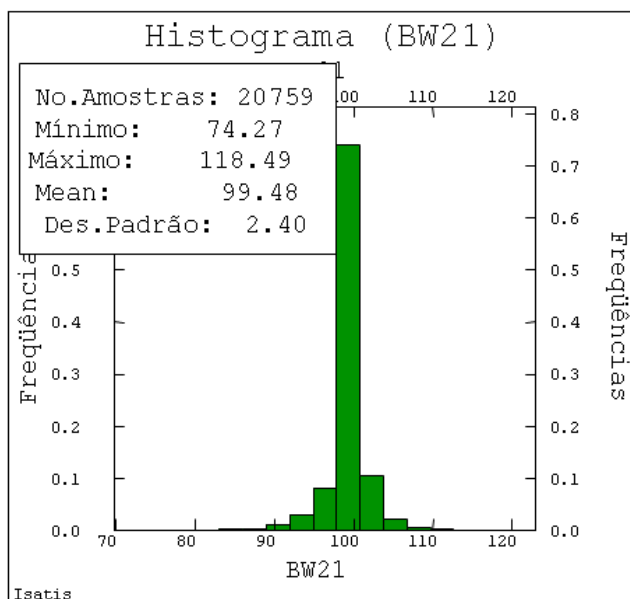


Figura 5.17 - Histograma da soma das estimativas (BW21), obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, das massas das partições granulométricas nas faixas 1, 21, 22 e 3,  $W1Y(u)$ ,  $W21Y(u)$ ,  $W22Y(u)$  e  $W3Y(u)$ , respectivamente, segundo a Equação (5.7).

Nos diagramas de dispersão da Figura 5.18, são observados os valores estimados  $W1Y(u)$  vs.  $W1Y2(u)$  e  $W3Y(u)$  vs.  $W3Y2(u)$ . Nesse último caso, observa-se que os valores obtidos a partir da Equação (5.7),  $W3Y2(u)$ , são um pouco maiores que os obtidos a partir da Equação (3.1),  $W3Y(u)$ .

As Equações (3.8) a (3.14) apresentam as massas e teores da faixa 2 determinados a partir dos teores e massas nas faixas 21 e 22 que a constituem.

Na rota de cálculo apresentada na Figura 5.1, são determinados os teores e massas na faixa 2 ( $AL2YD(u)$ ,  $FE2YD(u)$ ,  $MN2YD(u)$ ,  $P2YD(u)$ ,  $PPC2YD(u)$ ,  $SI2YD(u)$  e  $W2Y(u)$ ) e na rota de cálculo apresentada na Figura 5.2 estimam-se os teores e massas das faixas 21 e 22.

Portanto, a partir dos teores e massas nas faixas 21 e 22, utilizando as Equações (3.8) a (3.14), podem ser determinados os valores da faixa 2 ( $AL2YD2(u)$ ,  $FE2YD2(u)$ ,  $MN2YD2(u)$ ,  $P2YD2(u)$ ,  $PPC2YD2(u)$ ,  $SI2YD2(u)$  e  $W2cY(u)$ ) e compará-los com os obtidos pela rota de cálculo da Figura 5.1. Nas Figuras 5.19 a 5.25, são apresentados os diagramas de dispersão comparando ambas estimativas na faixa 2. Em todos os casos os pontos estão distribuídos simetricamente em torno da bissetriz e os coeficientes de correlação são

elevados, no entorno de 0,85 a 0,96. Escolhem-se as estimativas determinadas segundo a rota de cálculo da Figura 5.1.

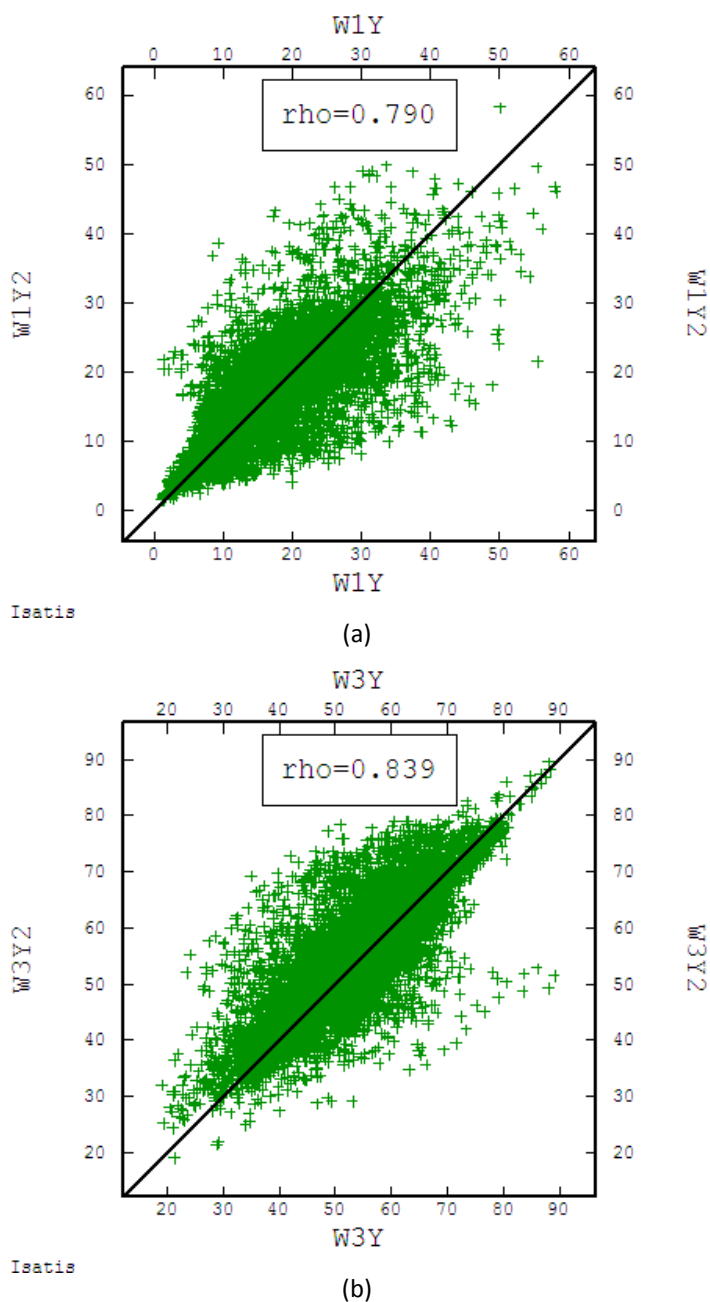
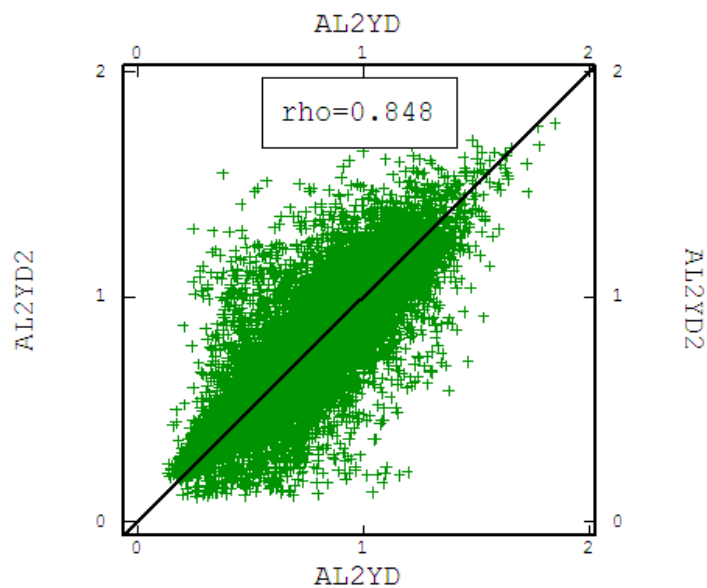
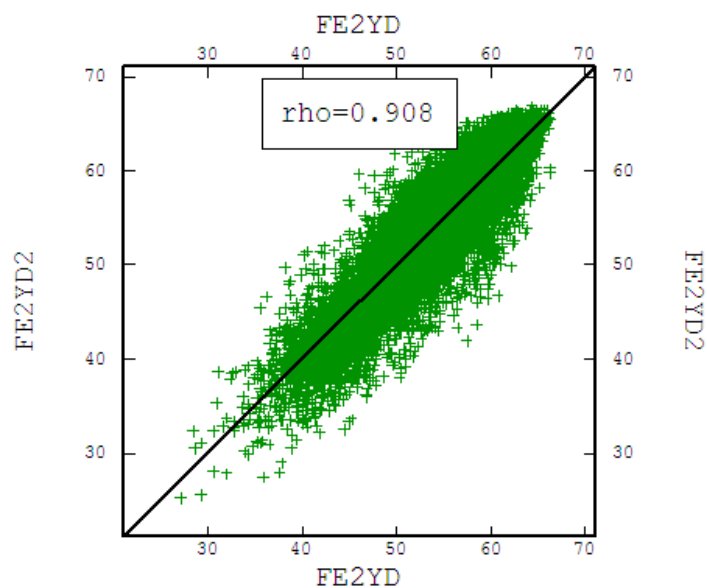


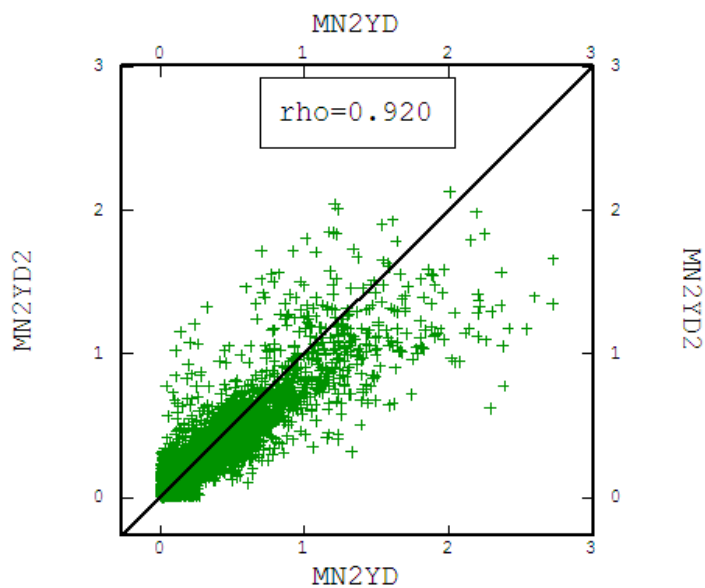
Figura 5.18 – Diagramas de dispersão das massas estimadas a partir dos balanços das Equações (3.1) e (5.7): (a)  $W1Y(u)$  vs.  $W1Y2(u)$ , (b)  $W3Y(u)$  vs.  $W3Y2(u)$ .



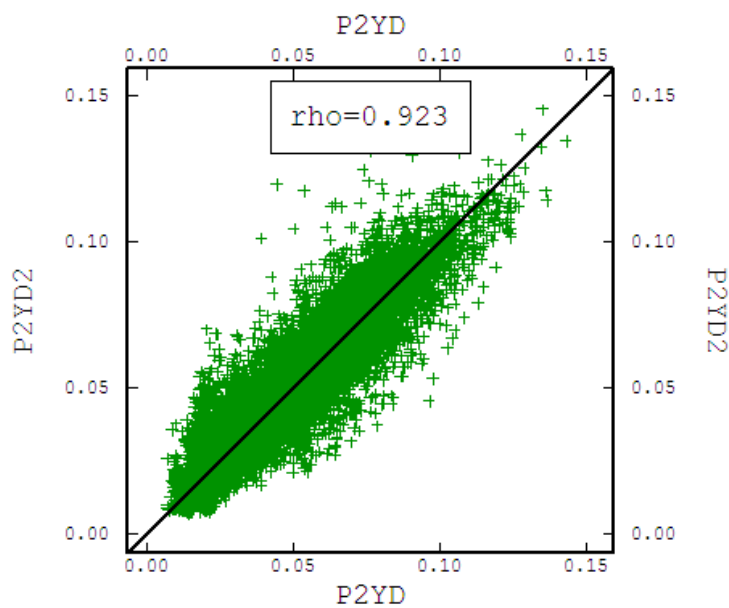
Isatis  
 Figura 5.19 - Diagramas de dispersão dos teores de alumina na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.1) (AL2YD) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.9) (AL2YD2).



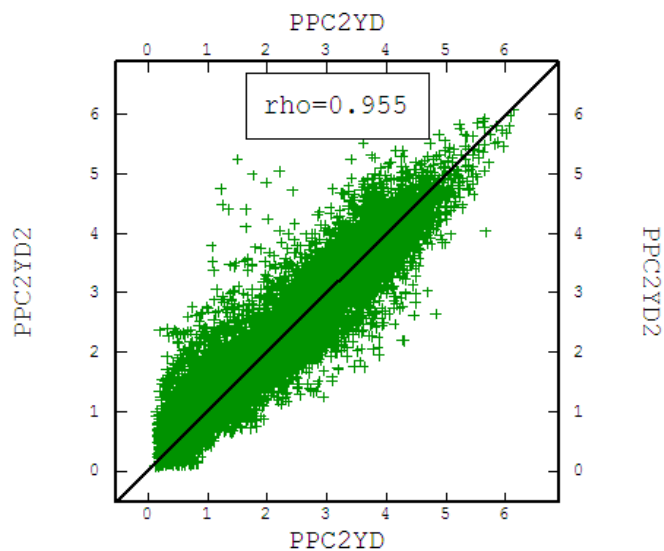
Isatis  
 Figura 5.20 - Diagramas de dispersão dos teores de ferro na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.6) (FE2YD) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.10) (FE2YD2).



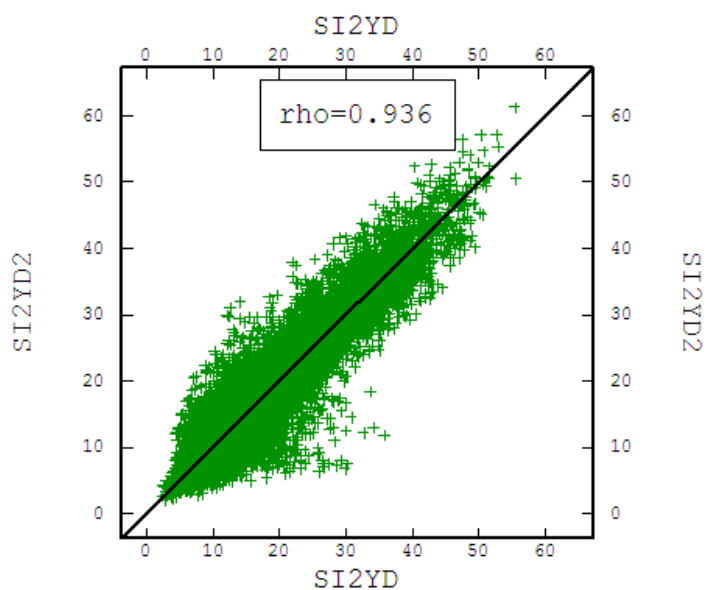
Isatis  
 Figura 5.21 - Diagramas de dispersão dos teores de manganês na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.2) (MN2YD) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.11) (MN2YD2).



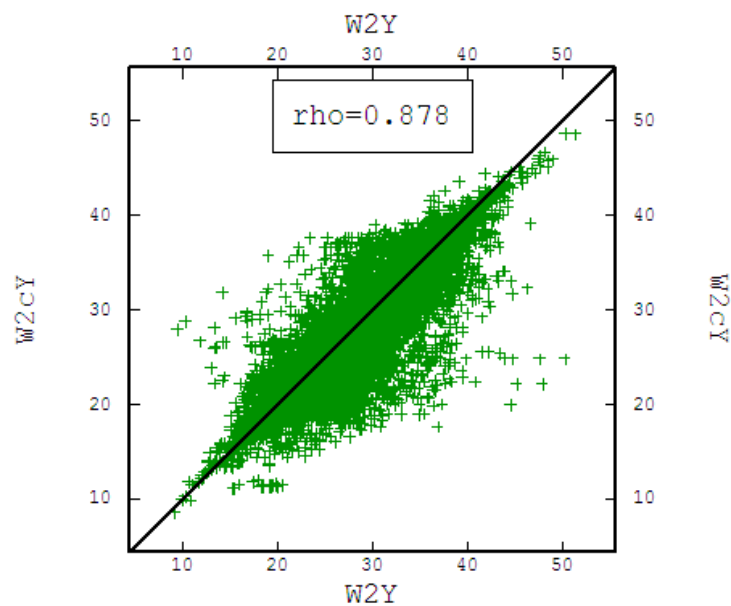
Isatis  
 Figura 5.22 - Diagramas de dispersão dos teores de fósforo na faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.3) (P2YD) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.12) (P2YD2).



Isatis  
 Figura 5.23 - Diagramas de dispersão das perdas por calcinação na faixa 2, estimadas a partir do balanço da Equação (5.4) (PPC2YD) e calculadas a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.13) (PPC2YD2).



Isatis  
 Figura 5.24 - Diagramas de dispersão dos teores de na sílica faixa 2, estimados a partir do balanço da Equação (5.5) (SI2YD) e calculados a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.14) (SI2YD2).



Isatis  
 Figura 5.25 - Diagramas de dispersão das massas da faixa 2, estimadas a partir do balanço da Equação (3.1) (W2Y) e calculadas a partir das estimativas obtidas no item 5.4.2 utilizando a Equação (3.8) (W2cY).

O processo de avaliação dos resultados, e validação das estimativas é apresentado em conjunto para todas as metodologias utilizadas no Capítulo 6, a seguir.

## Capítulo 6

### Análise e Discussão de Resultados

Nesse capítulo, são analisadas as metodologias utilizadas de forma comparativa.

Apresentam-se as estimativas obtidas por cokrigagem e sua comparação com as obtidas por krigagem dos fatores MAF, PCA e cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas, comparadas bloco a bloco em diagramas de dispersão.

Também, confere-se a reprodução da média global, comparando a média dos dados originais desagrupados com as médias das estimativas obtidas por cada metodologia. Num nível mais local, analisam-se, para cada metodologia, as médias ao longo de faixas nas direções coincidentes com os eixos X, Y e Z, comparando-as com as dos dados originais desagrupados nas mesmas faixas (análise de deriva).

Observa-se e compara-se a quantidade de blocos pós-processados em cada metodologia e observa-se o fechamento dos balanços no global e por faixa granulométrica.

Também, colocam-se mapas das estimativas obtidas por cada metodologia em algumas seções seções horizontais e verticais do modelo de blocos.

Finalmente, é apresentado um resumo das vantagens e desvantagens de cada metodologia, em base aos resultados obtidos e à complexidade na implementação operacional.

Para apresentar a discussão, são escolhidos os teores no global e na faixa 1 determinada por diferença (calculada, exceto no caso da cokrigagem ordinária das razões logarítmicas aditivas  $alr$ ), dado que os resultados nas restantes faixas é semelhante ao do global (apresentados no Apêndice G). Também, apresentam-



se, nesse capítulo, os resultados correspondentes às massas das frações granulométricas nas frações 1, 2, 21 e 3, por afetarem diretamente as estimativas das variáveis acumuladas.

## 6.1 Blocos pós-processados

Como foi mencionado no Capítulo 3, as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária dos teores acumulados, muitas vezes estão fora do intervalo original das amostras, inclusive assumindo as vezes valores negativos, precisando ser substituídas por valores válidos, que no caso, são fornecidos por médias locais.

No caso das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes PCA, a retro-transformação gaussiana dos dados normalizados ao espaço original, faz com que as estimativas estejam dentro dos limites originais das amostras, e não seja necessário um pós-processamento dos mesmos.

Na Tabela 6.1, apresenta-se o número e porcentagem de blocos estimados que devem ser pós-processados para cada variável, em cada metodologia, resumindo as informações fornecidas nas Tabelas 3.10.

Nos casos acima, as estimativas correspondentes à faixa 1 são determinadas por diferença a partir das Equações (3.1) a (3.7), o que faz com que carreguem o somatório dos erros provenientes das outras determinações. Isso leva a que as estimativas na faixa 1, apresentem um número maior de valores inválidos (fora dos intervalos originais ou negativos). Portanto, a determinação de uma faixa por diferença não aparece como uma boa prática.

Uma alternativa poderia ser determinar todas as faixas e o global. Porém, as estimativas não têm por que satisfazer a soma fechada, devendo-se distribuir o erro. Por exemplo, as estimativas da massa das frações granulométricas 1, 2 e 3 ( $W^*1(u)$ ,  $W^*2(u)$  e  $W^*3(u)$ , respectivamente), devem somar 100%, segundo a Equação (3.1). Se elas forem determinadas de forma conjunta, a soma delas pode ser menor, maior ou igual que 100%. Para obterem-se estimativas que somem 100% ( $W^{**1}(u)$ ,  $W^{**2}(u)$  e  $W^{**3}(u)$ ) é necessário distribuir o erro da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 W_1^{**}(u) &= \frac{W_1^*(u)}{W_1^*(u) + W_2^*(u) + W_3^*(u)} \cdot 100 \\
 W_2^{**}(u) &= \frac{W_2^*(u)}{W_1^*(u) + W_2^*(u) + W_3^*(u)} \cdot 100 \\
 W_3^{**}(u) &= \frac{W_3^*(u)}{W_1^*(u) + W_2^*(u) + W_3^*(u)} \cdot 100
 \end{aligned}
 \tag{6.1}$$

É importante salientar, que no caso da cokrigagem de razões-logarítmicas aditivas, os dados não precisam ser pós-processados, já que ficam dentro do intervalo original das amostras, sendo esta uma propriedade intrínseca da metodologia: preservar a soma constante, com estimativas que estejam dentro do Simplex  $S^D$ .

Os teores do manganês são muito erráticos, sendo difícil achar variogramas experimentais (Apêndice B, item B.1.3) e modelos apropriados. O MLC consta de um efeito pepita e só uma estrutura esférica. Isso se reflete nas estimativas obtidas por cokrigagem que apresentam um número mais elevado de blocos incorretos.

Essa erraticidade dos dados do manganês faz com que o número de blocos incorretos também seja mais elevado, se comparado as outras variáveis, no caso das estimativas na faixa 1 por krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes PCA.

No caso do fósforo, os teores são muito baixos e com uma variância muito pequena. Para obterem-se as estimativas por cokrigagem os teores são acumulados pelas massas das frações granulométricas, com uma variabilidade muito maior. Ao desacumular os valores estimados, obtêm-se valores muito suscetíveis às estimativas das massas das frações granulométricas. Uma prática alternativa poderia ser expressar o teor de fósforo em ppm (partes por milhão) e não em porcentagens.

As estimativas mais representativas para a avaliação dos resultados provêm do ferro, a sílica, alumina e massas das partições granulométricas. Portanto, mesmo que a análise dos resultados deva envolver todas as variáveis, destaca-se que as estimativas de manganês e fósforo apresentam algumas particularidades dadas pelos aspectos acima mencionados.

## 6.2 Reprodução da média global

Apesar das estimativas não reproduzirem o histograma original das amostras, elas devem reproduzir a média global.

Na Tabela 3.4, apresentaram-se as estimativas dos dados originais, das quais a média desagrupada é a utilizada para ser comparada com as médias das estimativas obtidas pelas diferentes metodologias, as quais foram apresentadas nas Tabelas 3.11, 4.4, 4.8 e 5.4. Na Tabela 6.1, resumem-se os valores das médias originais desagrupadas e das médias das estimativas pós-processadas (substituindo os valores inválidos pela média local), obtidas a partir das diferentes metodologias.

Na Tabela 6.2, apresentam-se as porcentagens de afastamento em relação a média original em cada caso, determinadas como:

$$\% \text{afastamento} = \frac{(\text{média estimativas} - \text{média original desagrupada})}{\text{média original desagrupada}} \cdot 100 \quad (6.2)$$

Analisando a diferença relativa, em termos de porcentagens (Equação (6.2)), pode-se dizer que as estimativas do manganês apresentam o maior afastamento da média original, dado pela erraticidade mencionada anteriormente.

Apesar dos valores do fósforo ser de pequena magnitude, esperando uma grande influência das estimativas das massas ao desacumular, as médias das estimativas do fósforo estão no entorno do valor original.

No entanto, as estimativas da sílica apresentam um maior afastamento do que o esperado. O desagrupamento dos dados originais é realizado com um tamanho de célula de 200 x 100 x 10m, como foi apresentado no Capítulo 3 item 3.3. Porém, este tamanho de célula não resulta apropriado para o caso da sílica.

Os teores de ferro apresentam uma correlação inversa com a sílica, como é observado nos diagramas de dispersão por faixa granulométrica no item A.2.1. do Apêndice A. No processo desagrupamento, procura-se uma média do ferro que seja menor que a original e portanto, uma média de sílica maior que a original (agrupada).

Numa primeira instância, pode-se afirmar que as médias das estimativas estão dentro da mesma ordem de magnitude que as médias originais desagrupadas, exceto para o caso do manganês.

Porém, ao realizar o desagrupamento utilizando o programa DECLUS da biblioteca GSLIB (Deutsch e Journel, 1998), observa-se que os teores de sílica, no entorno dos tamanhos de célula compatíveis com o tamanho dos blocos (50 x 25 x 10m) apresentam uma média menor que a não desagrupada (Figura 6.1). Portanto, o valor da média desagrupada da sílica pode não ser o ótimo.

Tabela 6.1 – Número e porcentagens de blocos incorretos (fora do intervalo original das amostras ou negativos) para as metodologias cokrigagem (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF e krigagem ordinária das componentes PCA. O subíndice s/pp indica que as variáveis estimadas estão sem pós-processar.

| Variável estimada | No. Blocos incorretos CK | %Blocos incorretos CK | No. Blocos incorretos MAF | %Blocos incorretos MAF | No. Blocos incorretos PCA | %Blocos incorretos PCA |
|-------------------|--------------------------|-----------------------|---------------------------|------------------------|---------------------------|------------------------|
| AL1CD_s/pp        | 30                       | 0,144                 | 6                         | 0,029                  | 1                         | 0,005                  |
| AL21D_s/pp        | 10                       | 0,048                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| AL2D_s/pp         | 3                        | 0,014                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| AL3D_s/pp         | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| ALT_s/pp          | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| FE1CD_s/pp        | 20                       | 0,096                 | 455                       | 2,186                  | 550                       | 2,643                  |
| FE21D_s/pp        | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| FE2D_s/pp         | 4                        | 0,019                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| FE3D_s/pp         | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| FET_s/pp          | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| MN1CD_s/pp        | 603                      | 2,895                 | 1039                      | 4,992                  | 1329                      | 6,385                  |
| MN21D_s/pp        | 775                      | 3,720                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| MN2D_s/pp         | 825                      | 3,960                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| MN3D_s/pp         | 332                      | 1,594                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| MNT_s/pp          | 448                      | 2,151                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| P1CD_s/pp         | 19                       | 0,091                 | 22                        | 0,106                  | 25                        | 0,120                  |
| P21D_s/pp         | 207                      | 0,994                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| P2D_s/pp          | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| P3D_s/pp          | 11                       | 0,053                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| PT_s/pp           | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| PPC1CD_s/pp       | 89                       | 0,427                 | 99                        | 0,476                  | 130                       | 0,625                  |
| PPC21D_s/pp       | 31                       | 0,149                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| PPC2D_s/pp        | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| PPC3D_s/pp        | 8                        | 0,038                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| PPCT_s/pp         | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| SI1CD_s/pp        | 48                       | 0,230                 | 373                       | 1,792                  | 352                       | 1,691                  |
| SI21D_s/pp        | 1                        | 0,005                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| SI2D_s/pp         | 5                        | 0,024                 | -                         | -                      | -                         | -                      |
| SI3D_s/pp         | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| SIT_s/pp          | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| W1C_s/pp          | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| W21_s/pp          | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| W2_s/pp           | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |
| W3_s/pp           | -                        | -                     | -                         | -                      | -                         | -                      |

Tabela 6.2 – Porcentagens de afastamento das médias das estimativas da média original desagrupada (CK – cokrigagem ordinária, MAF – krigagem ordinária dos fatores MAF, PCA – krigagem ordinária das componentes principais, Y – cokrigagem ordinária das razões logarítmicas aditivas alr.

|        | CK     | MAF    | PCA    | Y      |
|--------|--------|--------|--------|--------|
| AL1D   | 1,93   | 34,25  | 10,19  | -2,46  |
| AL21D  | 7,24   | 0,26   | 7,60   | 1,40   |
| AL22D  |        |        |        | 5,93   |
| AL2D   | 8,52   | 2,89   | 7,52   | 4,36   |
| AL3D   | 3,15   | -1,96  | 4,55   | -0,49  |
| ALT    | 5,97   | 6,50   | 5,76   | 2,13   |
| FE1D   | 2,62   | -1,81  | -1,14  | 4,00   |
| FE21D  | 2,75   | 3,56   | 4,02   | 3,82   |
| FE22D  |        |        |        | 6,81   |
| FE2D   | 1,56   | 4,03   | 3,85   | 4,06   |
| FE3D   | 2,03   | 4,32   | 3,74   | 6,02   |
| FET    | 1,77   | 2,28   | 2,35   | 4,41   |
| MN1D   | 25,03  | -19,38 | -17,37 | -47,07 |
| MN21D  | 10,80  | -62,30 | -61,13 | -56,34 |
| MN22D  |        |        |        | -44,99 |
| MN2D   | 24,93  | -55,44 | -55,01 | -41,12 |
| MN3D   | 6,24   | -39,58 | -36,21 | -22,84 |
| MNT    | 17,74  | -42,73 | -40,12 | -34,03 |
| P1D    | -1,73  | 12,61  | -1,06  | -6,29  |
| P21D   | -4,83  | -11,31 | -3,81  | -11,08 |
| P22D   |        |        |        | -5,42  |
| P2D    | 2,87   | -3,12  | 1,36   | -2,05  |
| P3D    | 1,82   | -3,84  | 2,51   | 2,33   |
| PT     | 2,34   | 0,87   | 1,52   | -0,47  |
| PPC1D  | 7,27   | 23,72  | 6,28   | 3,60   |
| PPC21D | 0,37   | -3,00  | -0,35  | -4,46  |
| PPC22D |        |        |        | 0,25   |
| PPC2D  | 11,62  | 8,78   | 8,35   | 6,44   |
| PPC3D  | 9,82   | 6,62   | 9,15   | 10,20  |
| PPCT   | 11,69  | 12,74  | 8,59   | 8,58   |
| SI1D   | -11,17 | 20,00  | -3,74  | -26,47 |
| SI21D  | -18,86 | -31,05 | -9,72  | -25,41 |
| SI22D  |        |        |        | -13,73 |
| SI2D   | 1,82   | -10,98 | 4,22   | -7,51  |
| SI3D   | -1,37  | -6,53  | -1,41  | -6,35  |
| SIT    | 0,17   | -2,87  | 1,33   | -5,53  |
| W1     | 0,76   | -1,69  | -1,40  | -9,54  |
| W21    | 2,62   | -1,35  | 1,15   | 3,50   |
| W22    |        |        |        | 1,72   |
| W2     | 0,73   | -0,40  | 0,71   | 3,86   |
| W3     | -0,62  | 0,76   | 0,09   | 1,12   |

### 6.3 Análise de deriva

Depois de comparar as médias globais, é pertinente comparar a variação das estimativas ao longo dos eixos X, Y e Z, com respeito aos dados amostrais nas mesmas regiões, observando se é mantida a tendência, num processo comumente conhecido como análise de deriva.

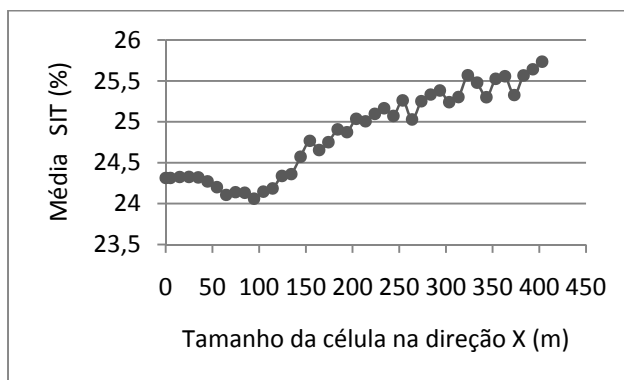


Figura 6.1 – Média desagrupada do teor de sílica global (SIT), dependendo do tamanho da célula escolhida no arquivo de parâmetros do programa DECLUS da biblioteca GSLIB (Deutsch e Journel, 1998) (anisotropia da célula:  $X=1$ ,  $Y=0,4$  e  $Z=0,2$ ).

Os gráficos apresentados a seguir, apresentam nas abscissas o valor da coordenada nas diferentes direções, e nas ordenadas os valores das médias nos locais. A média é determinada ao longo de faixas. Nesse caso, são consideradas faixas de 150m (constituídas por três blocos de 50m), de 40m (dois blocos de 20m) e 20m (2 blocos de 10m), ao longo das direções X, Y e Z, respectivamente.

Apresentam-se as análises de deriva para os teores globais, para as massas das frações granulométricas e para os teores e massa da fração 1. Os gráficos correspondentes às faixas 21, 2 e 3 são apresentadas no Apêndice G.

#### 6.3.1 Teores globais

As análises de deriva para os teores globais da alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica são apresentados nas Figuras 6.2 à 6.7.

Observa-se que ao longo da direção X as tendências das quatro metodologias (CK – cokrigagem ordinária, MAF – krigagem ordinária dos fatores

MAF, PCA – krigagem ordinária das componentes principais e Dados Comp. – cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas alr) são muito semelhantes, exceto no caso do manganês.

Para a alumina, fósforo e perdas por calcinação, observa-se que em valores elevados ao longo da direção Y, as tendências afastam-se umas das outras, ficando às correspondentes a krigagem ordinária de fatores MAF e das componentes principais PCA por cima e por baixo das restantes, respectivamente, o que pode estar dado pela menor densidade amostral nesse setor, já que as duas metodologias fornecem estimativas determinadas a partir do banco de dados isotópico (Figura 3.5).

Ao longo da direção do eixo Z, as tendências das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária, krigagem ordinária dos fatores MAF e cokrigagem das razões-logarítmicas, são semelhantes. No entanto, observa-se que a tendência das estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes PCA aparece mais suavizada.

O caso das estimativas correspondentes ao manganês novamente apresentam um comportamento diferenciado, no qual as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária apresentam uma tendência muito mais elevada que a correspondente às outras metodologias, acompanhando melhor a elevada variabilidade da tendência original. Na Tabela 6.1, observa-se que a quantidade de blocos pós-processados no caso da cokrigagem é mais elevada que no caso das outras metodologias, substituindo o seu valor calculado por CK pela média local, o que explica essa maior semelhança com a tendência dos dados originais.

### **6.3.2 Massa das frações granulométricas**

As estimativas das massas das frações granulométricas influenciam na modelagem da variabilidade espacial das variáveis acumuladas e no processo da desacumulação.

Os diagramas de análise de deriva para as massas nas frações 2, 21 e 3 são apresentados nas Figuras 6.8 a 6.10.

Observa-se que, ao longo da direção X, as tendências das quatro metodologias são semelhantes, acompanhando a tendência dos dados originais.



Nas direções Y e Z, as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária e por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas, acompanham de forma mais marcada as variações da tendência dos dados originais. No entanto, as tendências provenientes das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes principais PCA, apresentam uma variação mais suavizada.

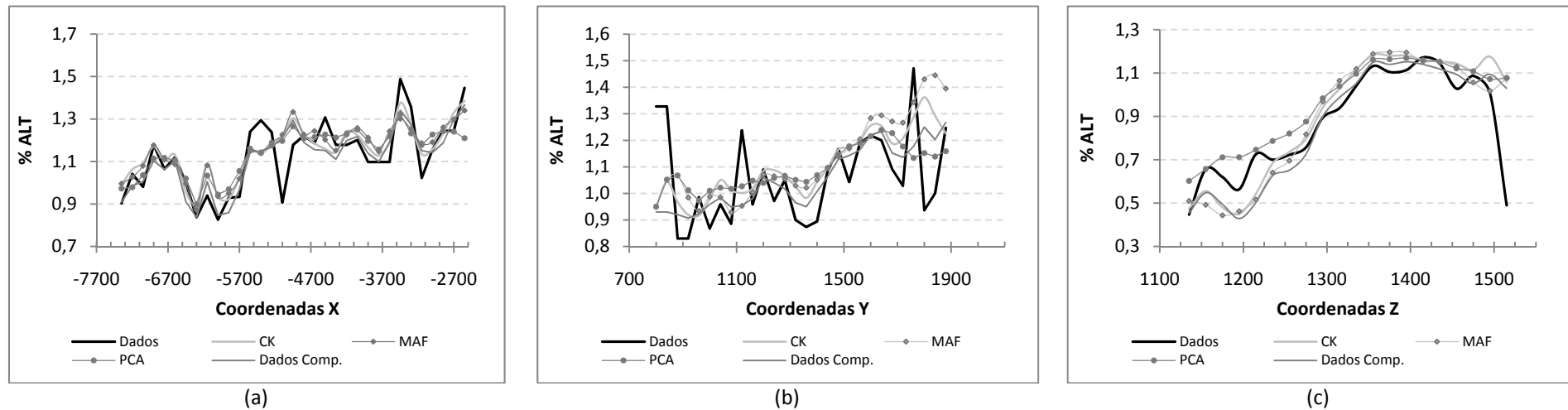


Figura 6.2 – Diagramas de análise de deriva para o teor global de alumina (ALT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

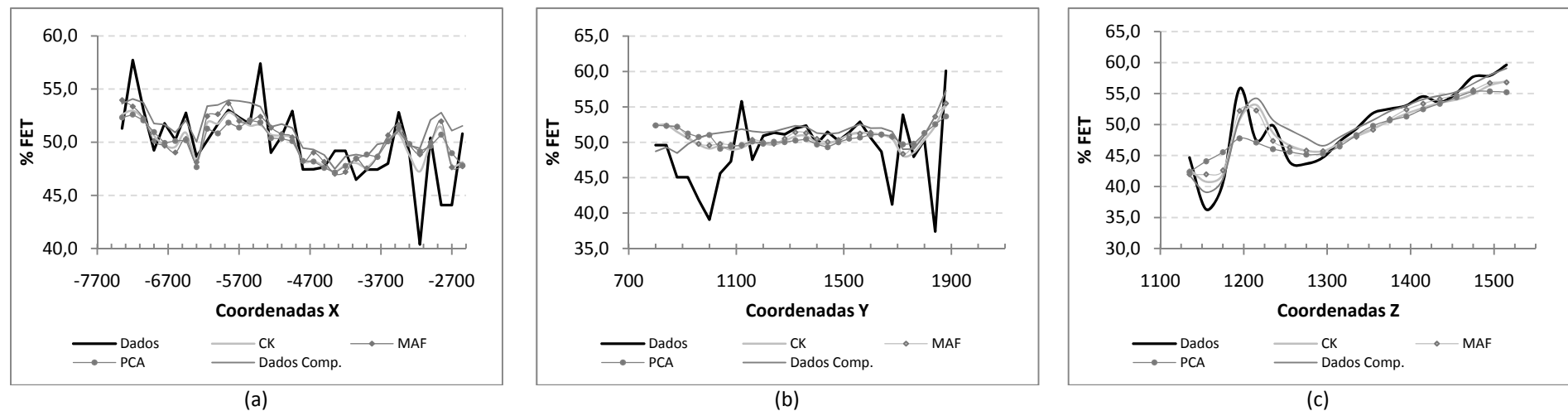


Figura 6.3 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de ferro (FET) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

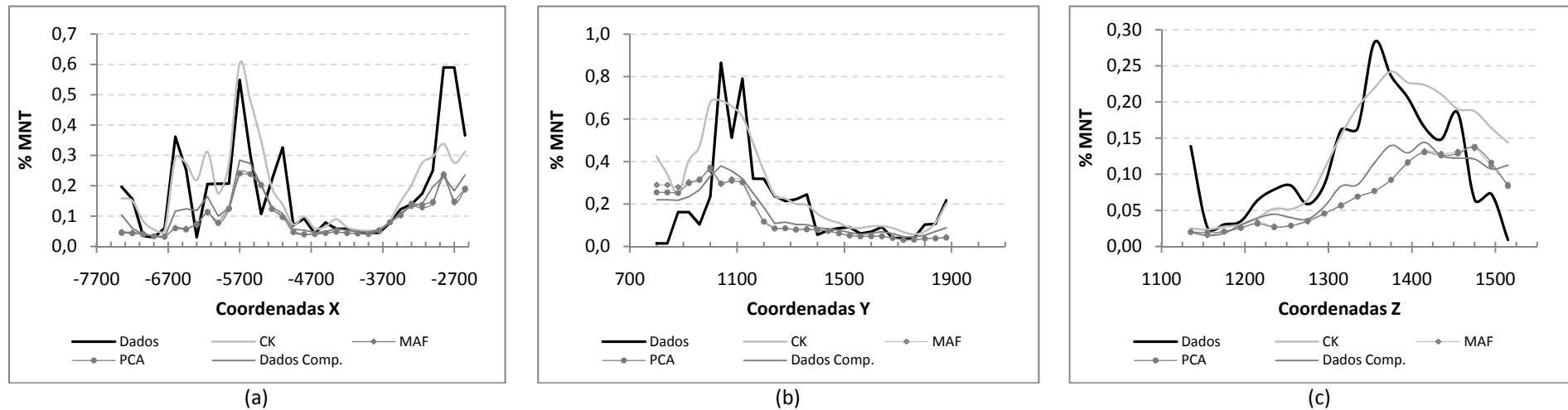


Figura 6.4 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de manganês (MNT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

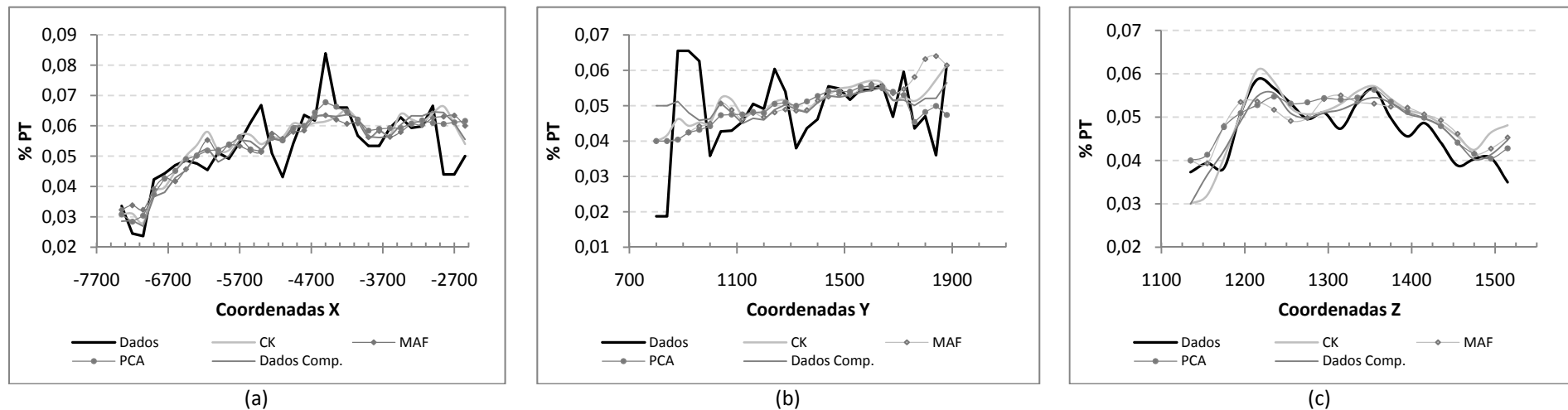


Figura 6.5 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de fósforo (PT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

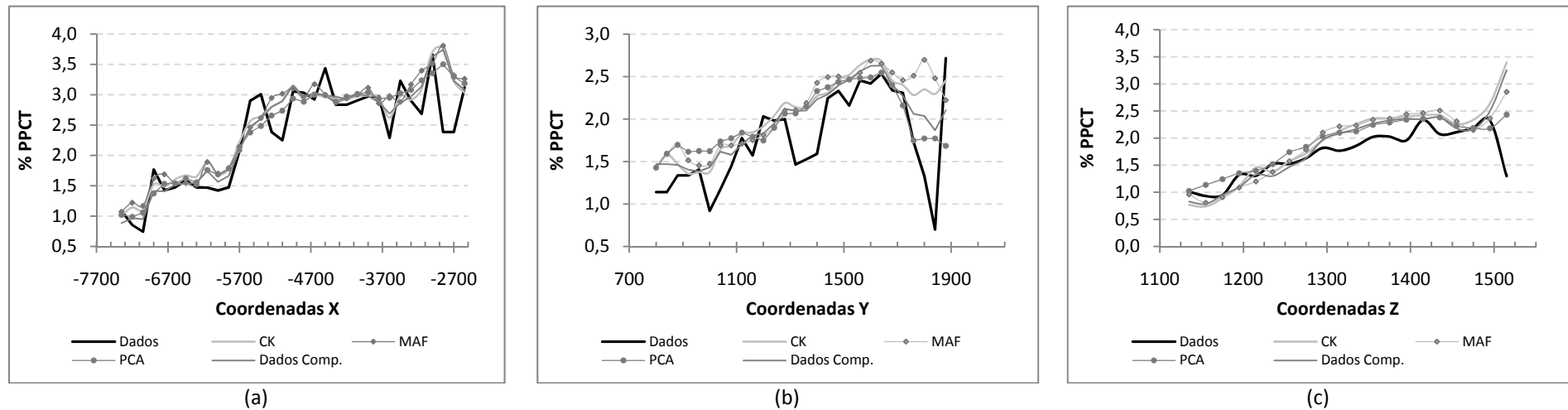


Figura 6.6 - Diagramas de análise de deriva para o teor global das perdas por calcinação (PPCT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

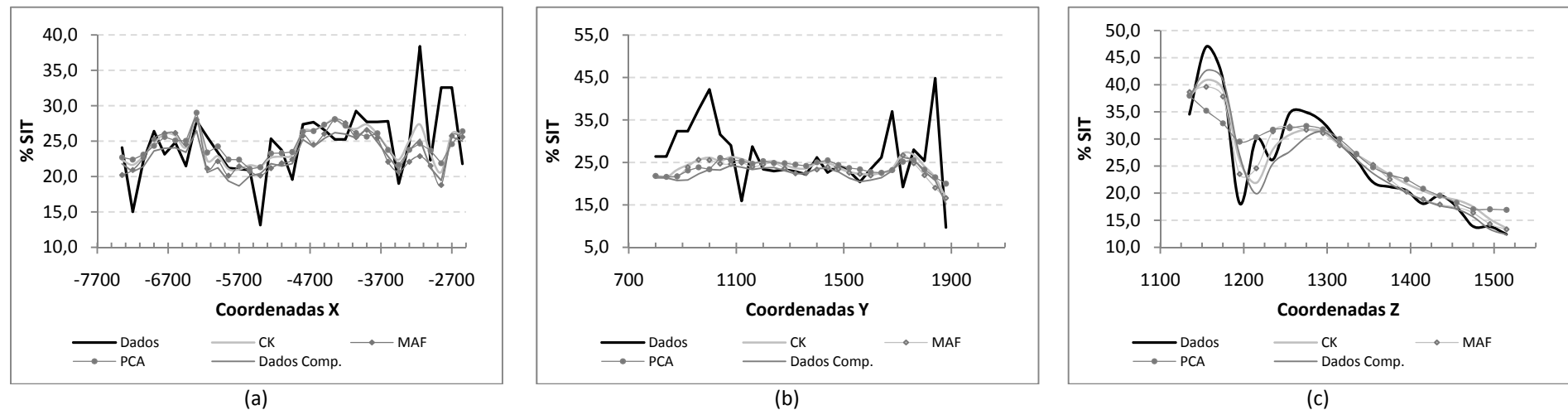


Figura 6.7 - Diagramas de análise de deriva para o teor global de sílica (SIT) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

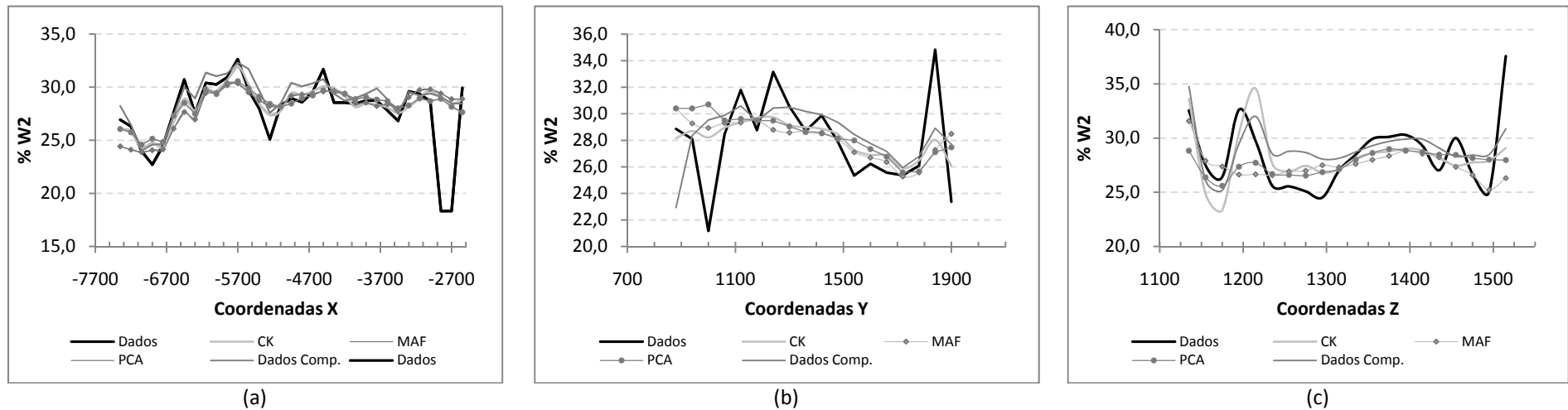


Figura 6.8 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 2 (W2) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

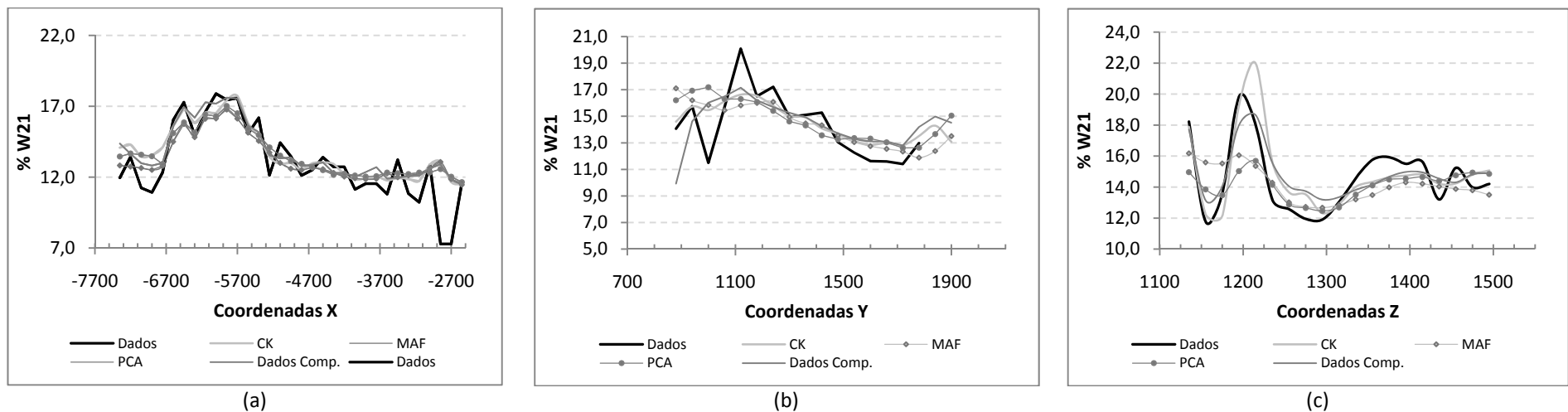


Figura 6.9 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 21 (W21) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

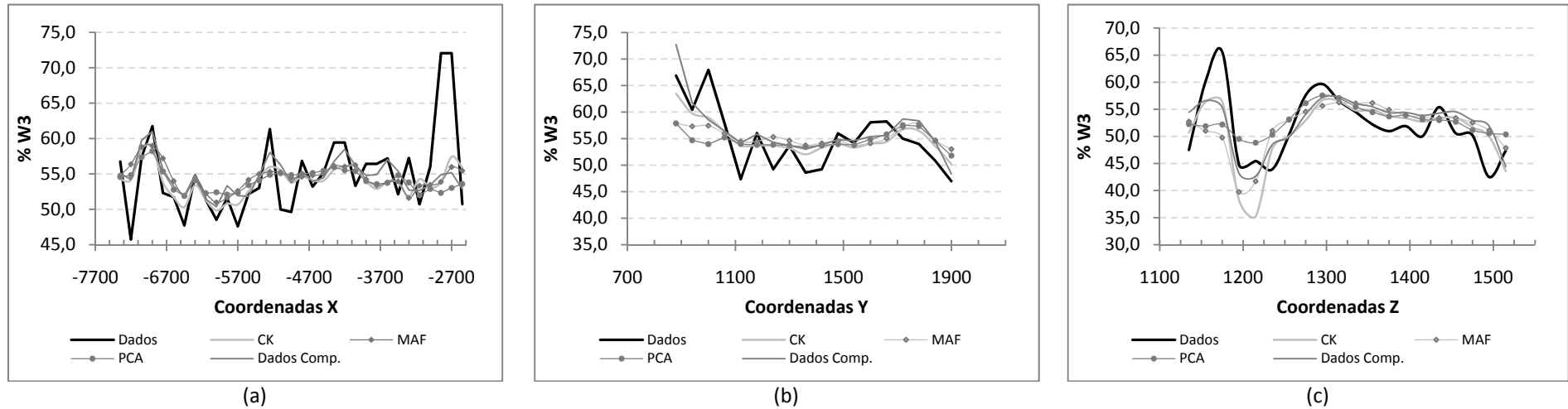


Figura 6.10 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 3 (W3) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

### 6.3.3 Teores e massa na faixa 1

Os teores desacomulados e massa na faixa 1 são determinados a partir das estimativas global e nas outras faixas, utilizando as relações dadas pelas Equações (3.1) a (3.7), exceto na cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas, na qual a estimativa é realizada de forma conjunta com a estimativa no global e nas restantes faixas.

Nos casos nos quais os teores e a massa são determinados numa etapa posterior, as análises de deriva mostram a influência do somatório dos erros das estimativas (Figuras 6.11 a 6.17). Porém, também deve ser levado em conta que nesses casos, o número de blocos substituídos pela média local é mais elevado que no caso das outras faixas granulométricas e o global.

Observa-se que as tendências na faixa 1, provenientes das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF, apresentam-se mais apartadas das restantes, estando por cima destas, exceto no caso do ferro em que está por baixo, mostrando que a acumulação de erros é maior para essa metodologia.

Por outra parte, as tendências provenientes das estimativas obtidas por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas, não são afetadas pelo somatório dos erros das determinações nas outras faixas. Porém, os valores das tendências no caso da sílica estão por debaixo da tendência dos dados originais e das tendências obtidas a partir das outras metodologias. No entanto, acompanham as flutuações dos dados originais ao longo das três direções.

De forma geral, pode-se afirmar que as estimativas obtidas pelas quatro metodologias provêm tendências que estão no entorno das obtidas a partir dos dados originais, não mostrando grandes diferenças.

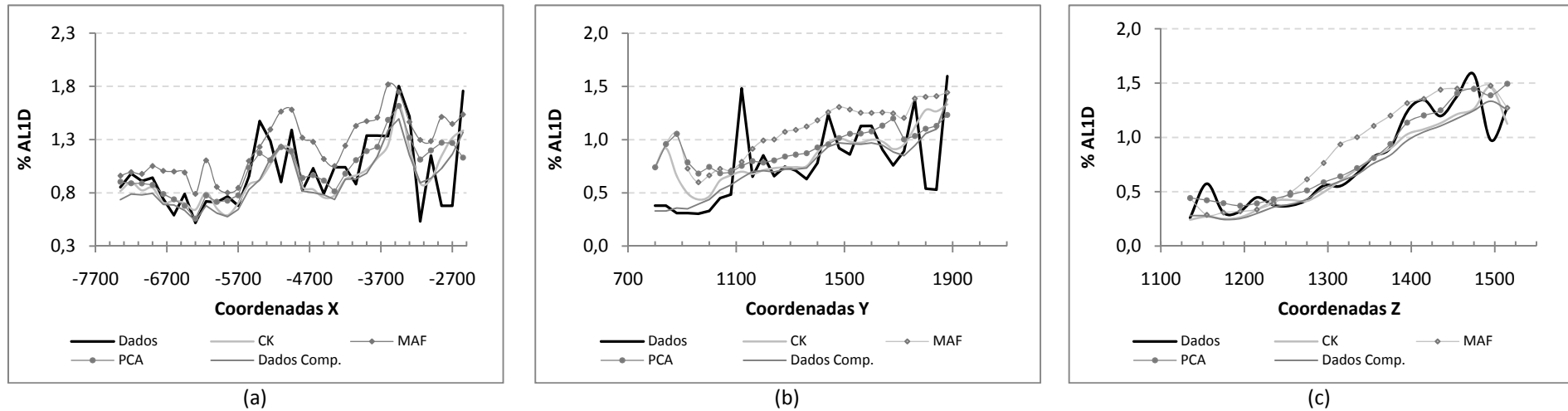


Figura 6.11 - Diagramas de análise de deriva para o teor de alumina na faixa 1 (AL1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

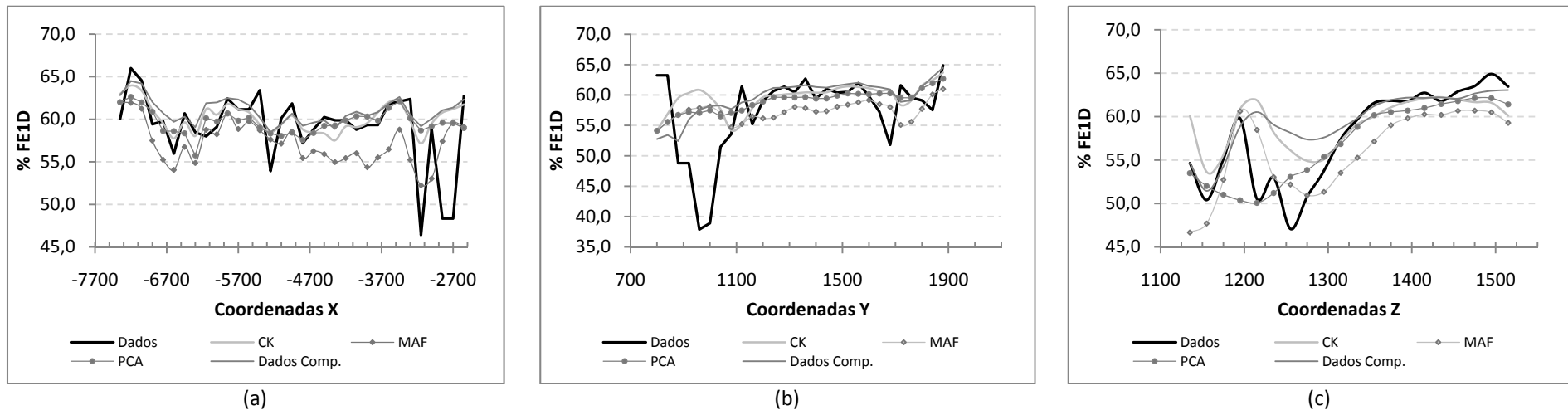


Figura 6.12 - Diagramas de análise de deriva para o teor de ferro na faixa 1 (FE1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).



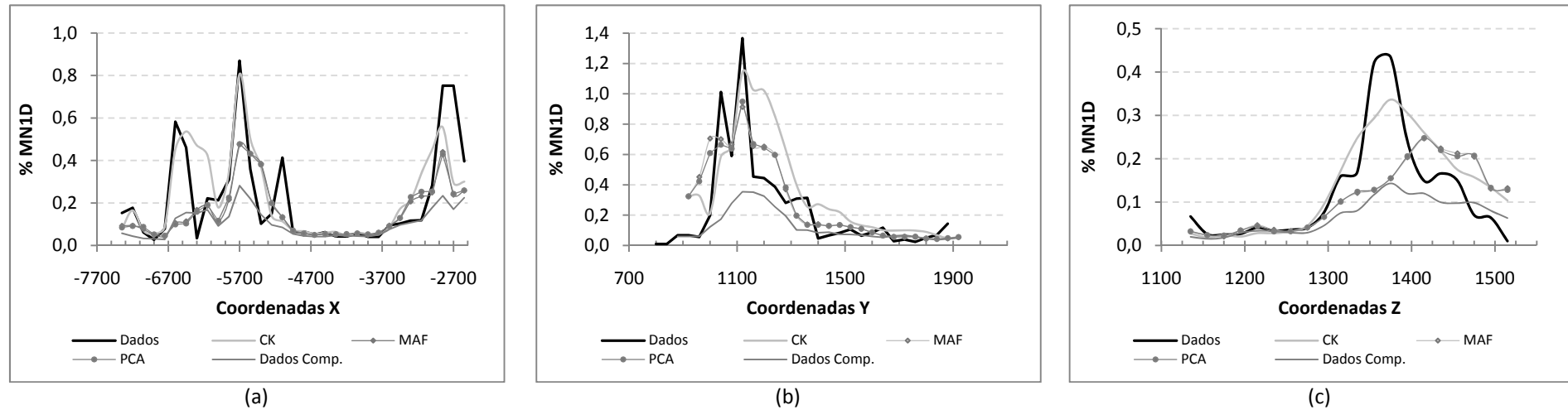


Figura 6.13 - Diagramas de análise de deriva para o teor de manganês na faixa 1 (MN1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

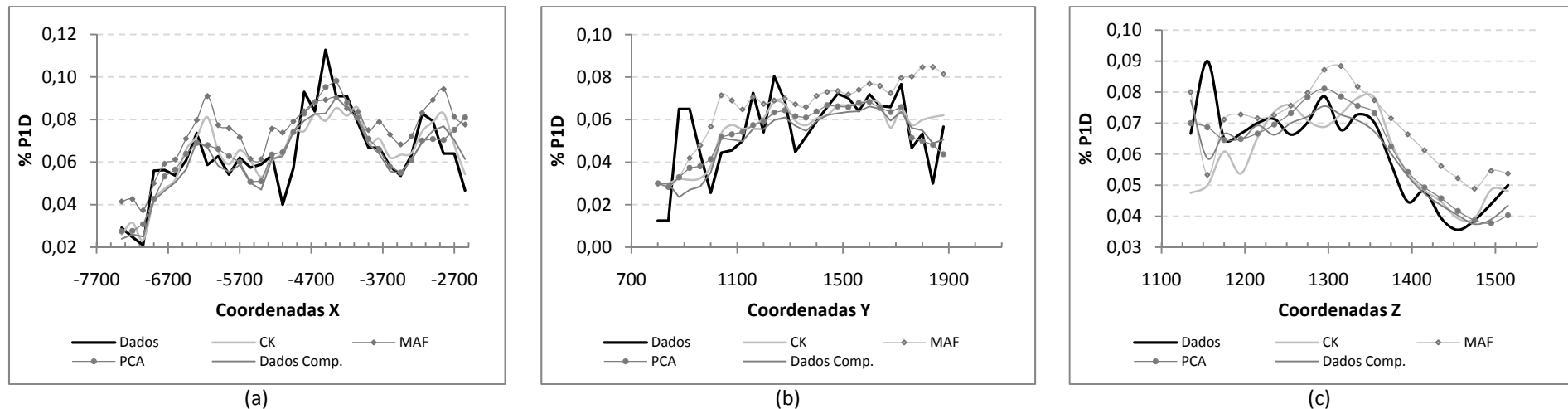


Figura 6.14 - Diagramas de análise de deriva para o teor de fósforo na faixa 1 (P1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

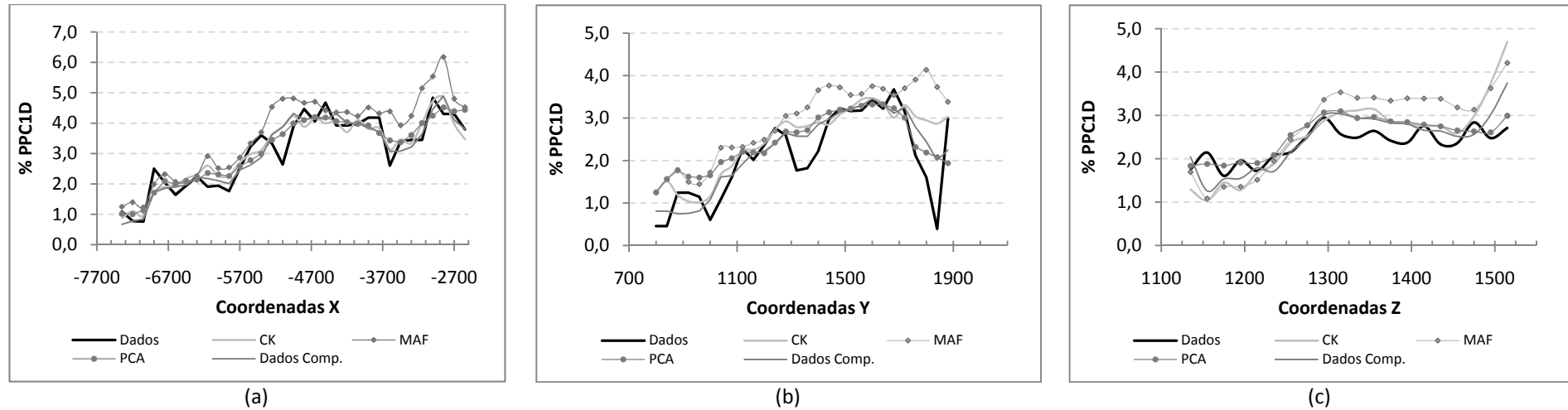


Figura 6.15 - Diagramas de análise de deriva para o teor das perdas por calcinação na faixa 1 (PPC1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

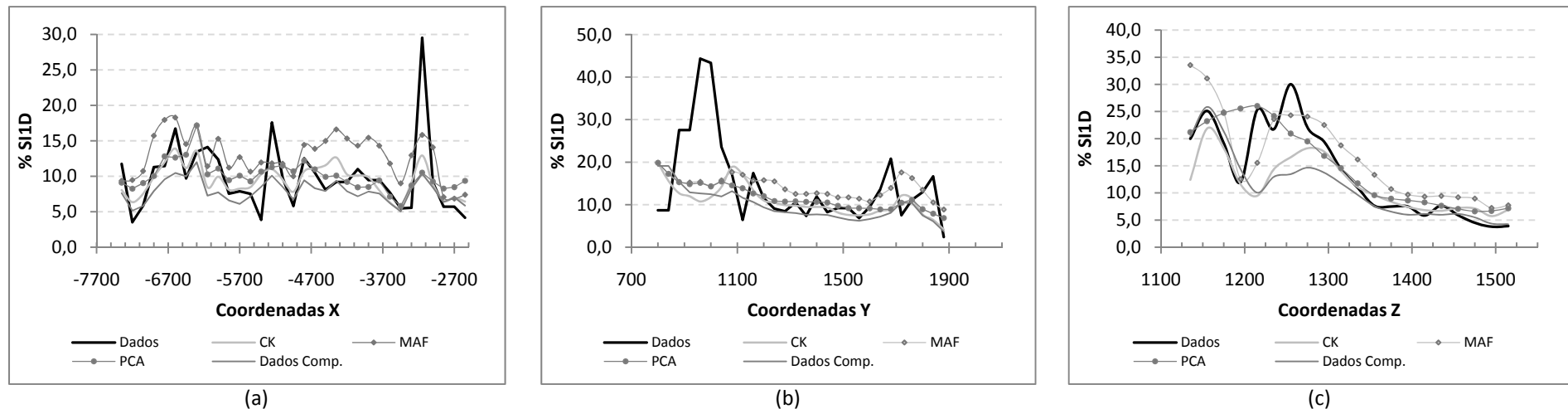


Figura 6.16 - Diagramas de análise de deriva para o teor de sílica na faixa 1 (SI1D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

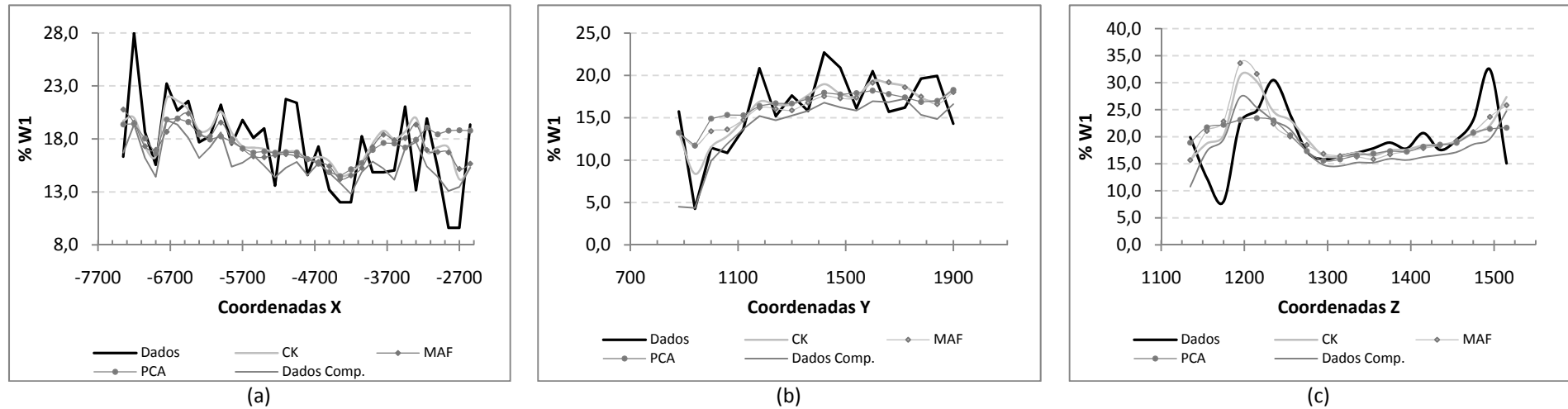


Figura 6.17 - Diagramas de análise de deriva para o a massa da fração granulométrica 1 (W1) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

## **6.4 Estimativas bloco a bloco: diagramas de dispersão**

Outra forma de avaliar as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária, krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes PCA e por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas é realizar diagramas de dispersão entre elas. Apresentam-se os diagramas de dispersão dos teores globais, das massas das frações granulométricas e dos teores e massa na fração 1. Os diagramas correspondentes às frações 2, 21 e 3 são apresentados no Apêndice G.

### **6.4.1 Teores globais**

Os diagramas de dispersão das estimativas obtidas para os teores globais de alumina, ferro, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica são apresentados nas Figuras 6.18 a 6.23.

No caso da alumina e do fósforo, as estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes PCA, apresentam uma correlação elevada, o que já tinha sido apresentado no Capítulo 4, item 4.2 e no Apêndice E.

As estimativas do fósforo apresentam uma correlação elevada entre todas as metodologias utilizadas.

No caso da sílica e das perdas por calcinação, existe uma boa correlação entre as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária e tanto por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas como por krigagem ordinária dos fatores MAF.

Para o manganês, todas as metodologias consideradas tendem a fornecer valores estimados menores que as obtidas por cokrigagem.

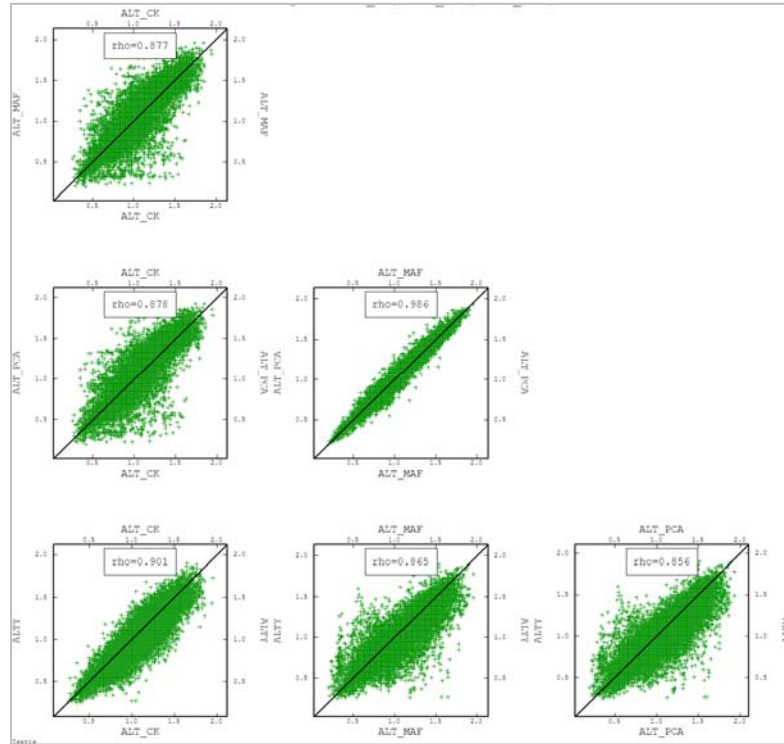


Figura 6.18 – Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de alumina obtidas por cokrigagem ordinária (ALT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (ALT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY).

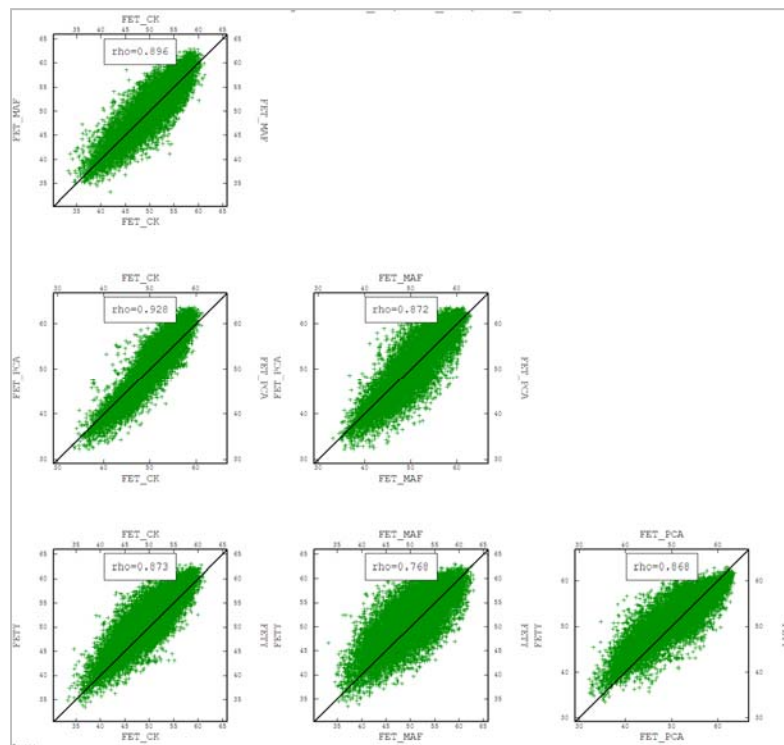


Figura 6.19 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de ferro obtidas por cokrigagem ordinária (FET\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FET\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY).

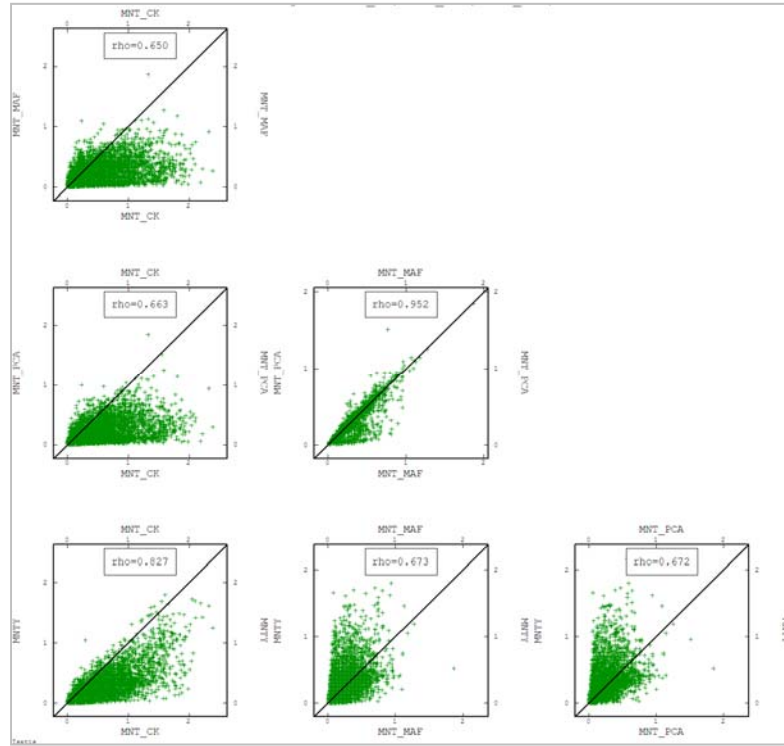


Figura 6.20 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de manganês obtidas por cokrigagem ordinária (MNT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MNT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY).

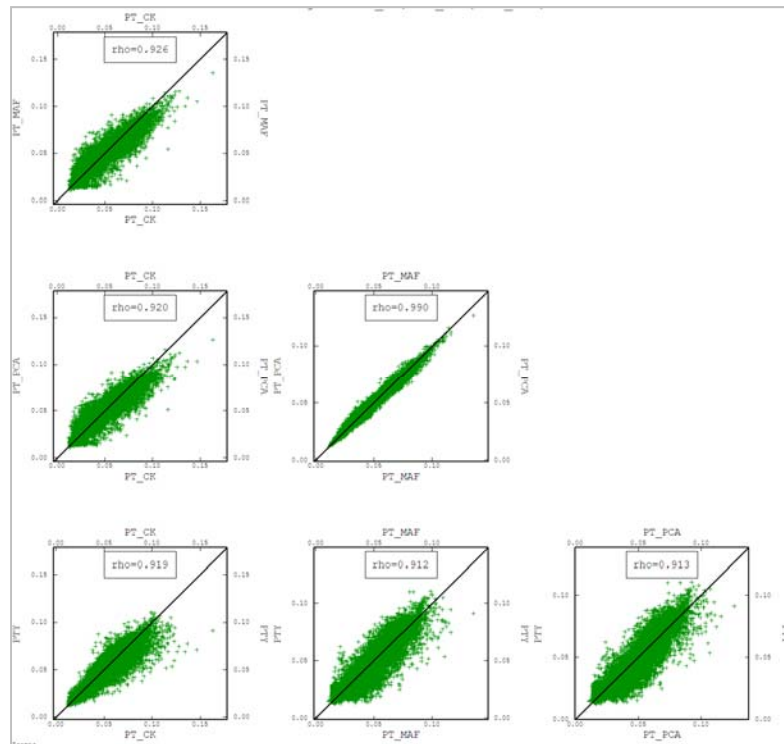


Figura 6.21 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de fósforo obtidas por cokrigagem ordinária (PT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY).

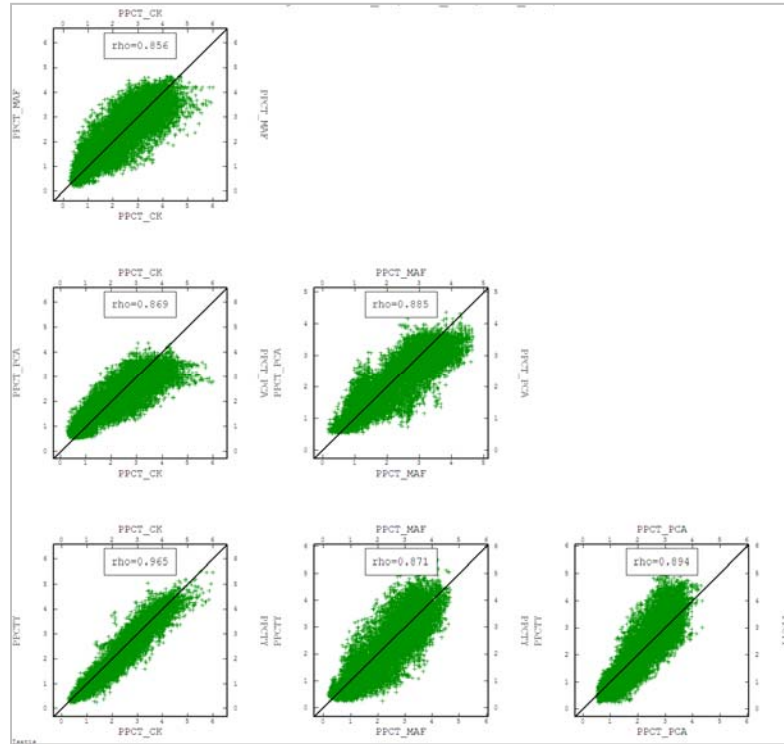


Figura 6.22 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global das perdas por calcinação obtidas por cokrigagem ordinária (ALT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (ALT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY).

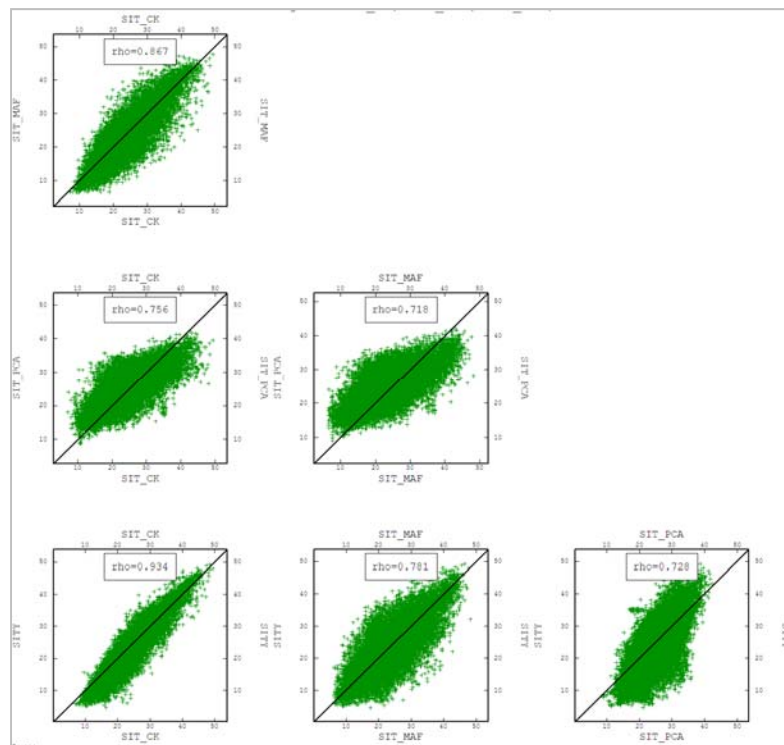


Figura 6.23 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor global de sílica obtidas por cokrigagem ordinária (SIT\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SIT\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY).

### 6.4.2 Massa das frações granulométricas

Do mesmo modo que foi apresentado para os diagramas das análises de deriva, apresentam-se os diagramas de dispersão das estimativas das massas nas frações 2, 21 e 3, nas Figuras 6.24 a 6.26.

Em todas as faixas (2, 21 e 3), as estimativas da massa, obtidas por cokrigagem, apresentam uma correlação adequada com as obtidas por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas e por krigagem ordinária dos fatores MAF. A dispersão com as estimativas obtidas por krigagem das componentes PCA não apresenta simetria em torno da bissetriz.

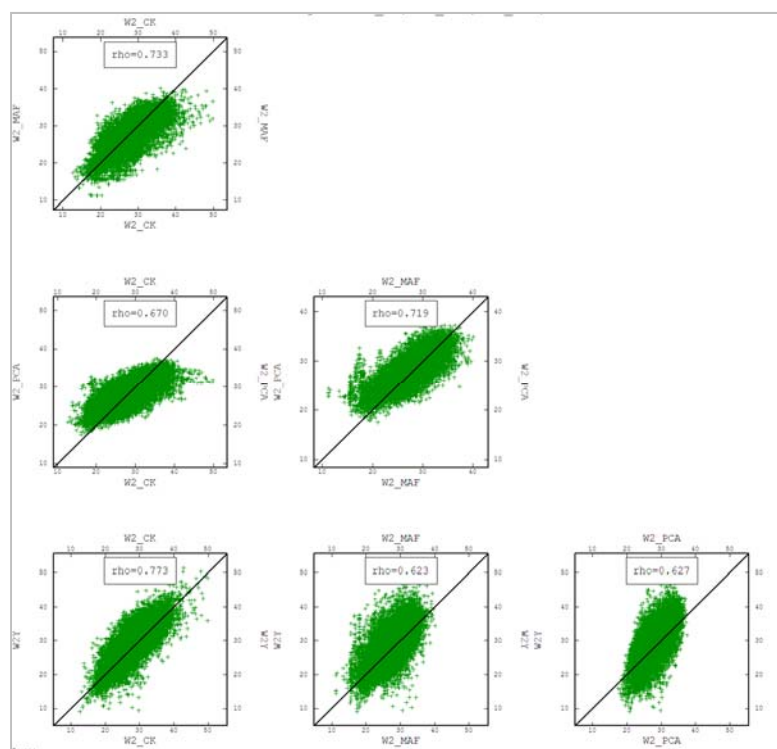


Figura 6.24 - Diagramas de dispersão das estimativas da massa da fração 2, obtidas por cokrigagem ordinária (W2\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W2\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2TY).



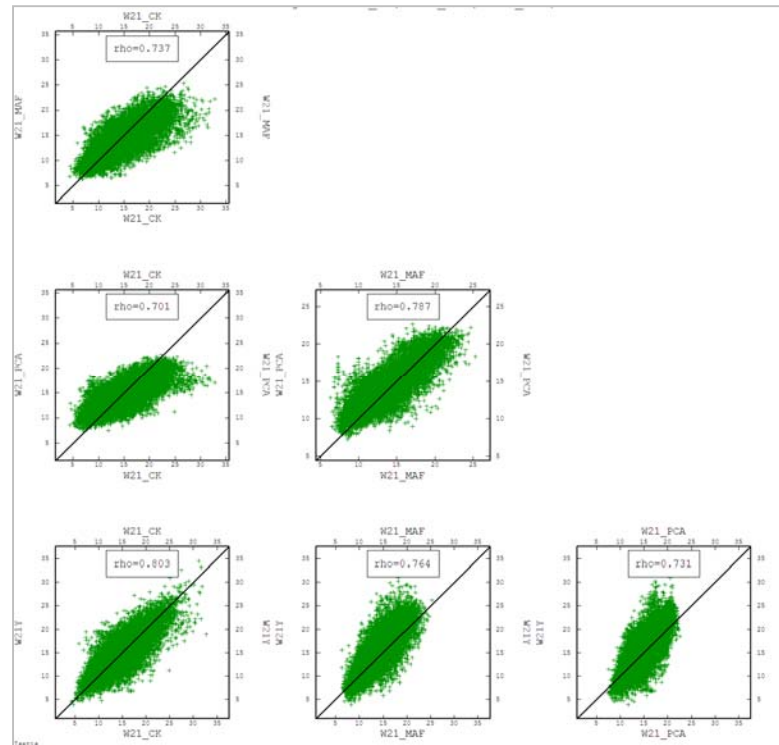


Figura 6.25 - Diagramas de dispersão das estimativas da massa da fração 21, obtidas por cokrigagem ordinária (W21\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W21\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21TY).

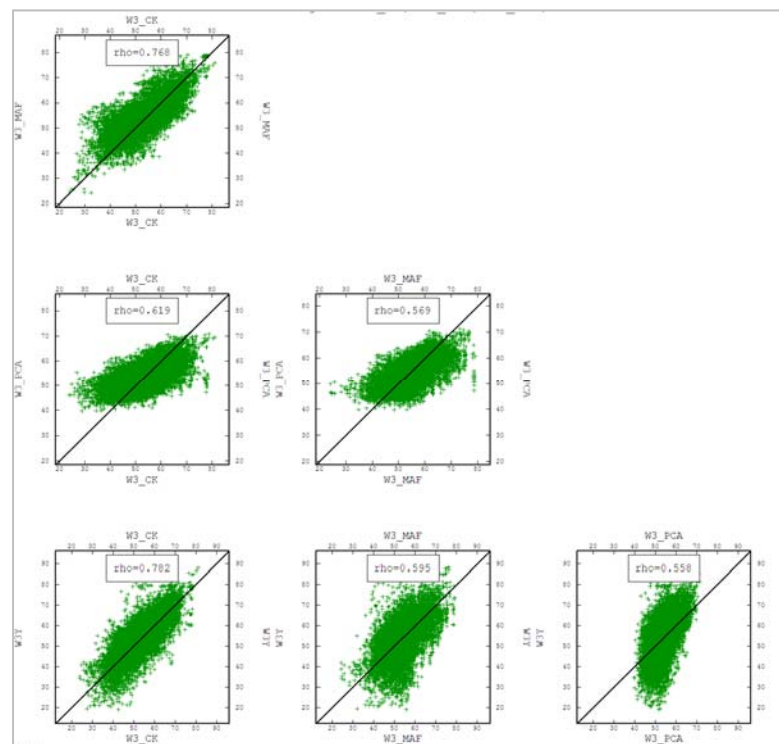


Figura 6.26 - Diagramas de dispersão das estimativas da massa da fração 3, obtidas por cokrigagem ordinária (W3\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W3\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3TY).

### 6.4.3 Teores e massa na faixa 1

Como foi mencionado anteriormente, as estimativas da faixa 1 são calculadas a partir das estimativas no global e restantes faixas, exceto no caso da cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas.

Os diagramas de dispersão são apresentados nas Figuras 6.27 a 6.33.

No caso da alumina, ferro, manganês, perdas por calcinação e sílica, as estimativas obtidas por cokrigagem apresentam a correlação mais elevada com as obtidas por cokrigagem das razões alr. Para o fósforo e a massa, a maior correlação aparece com as estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF.

No caso da sílica, a massa e as perdas por calcinação, a nuvem de pontos das estimativas de cokrigagem vs. as estimativas obtidas por krigagem das componentes PCA não é simétrica em torno da bissetriz.

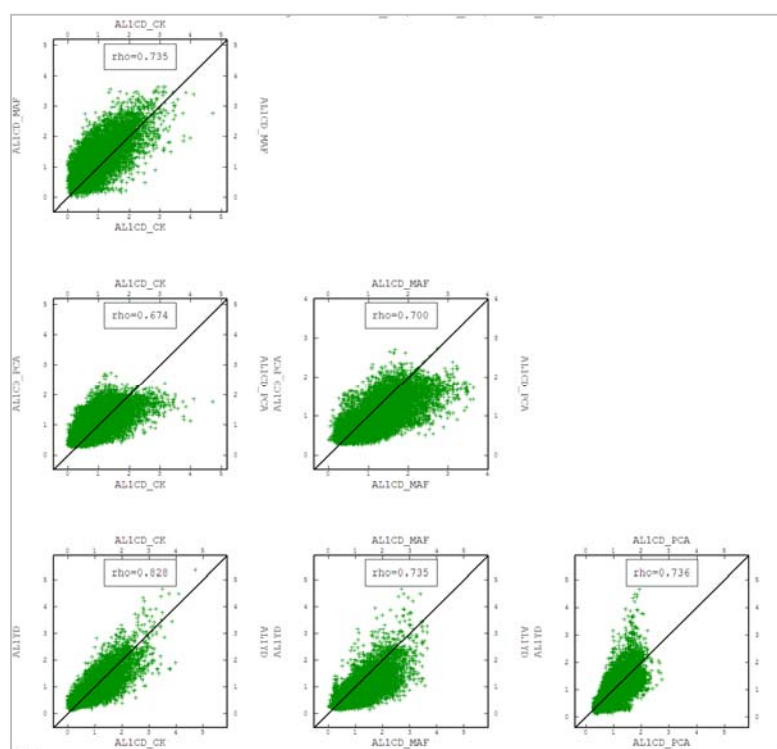


Figura 6.27 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de alumina na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (AL1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (AL1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (AL1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL1YD).

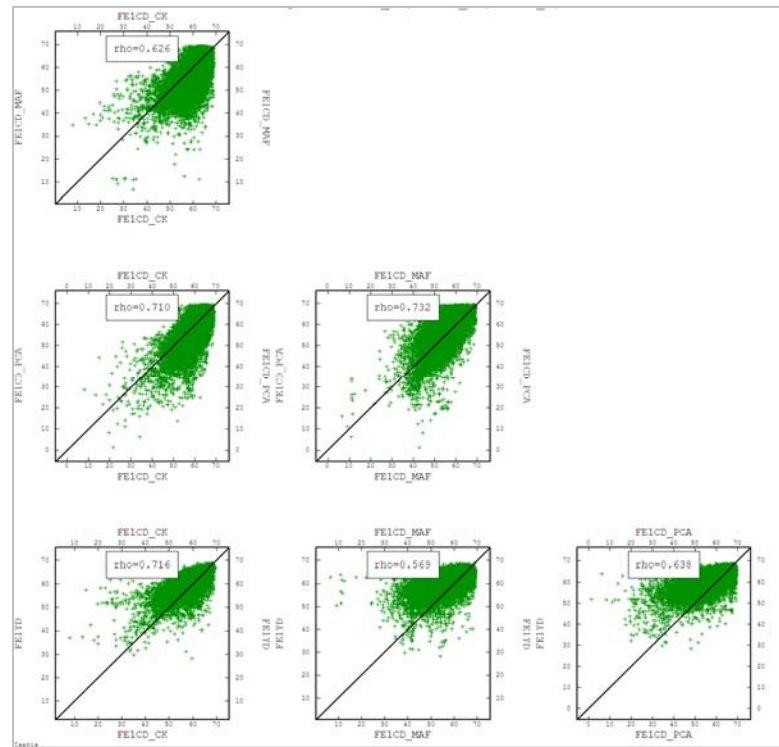


Figura 6.28 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de ferro na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (FE1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FE1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FE1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE1YD).

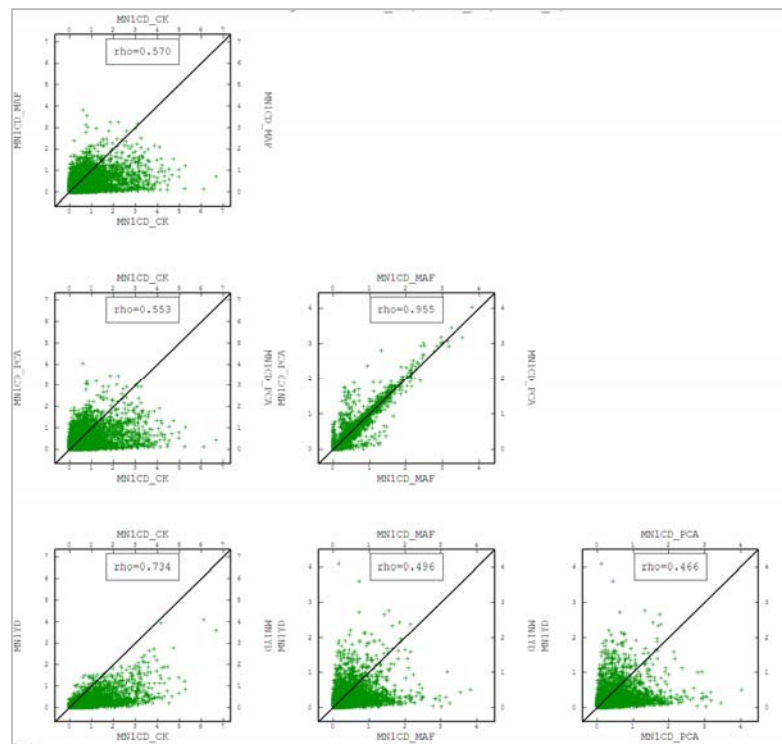


Figura 6.29 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de manganês na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (MN1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MN1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MN1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN1YD).

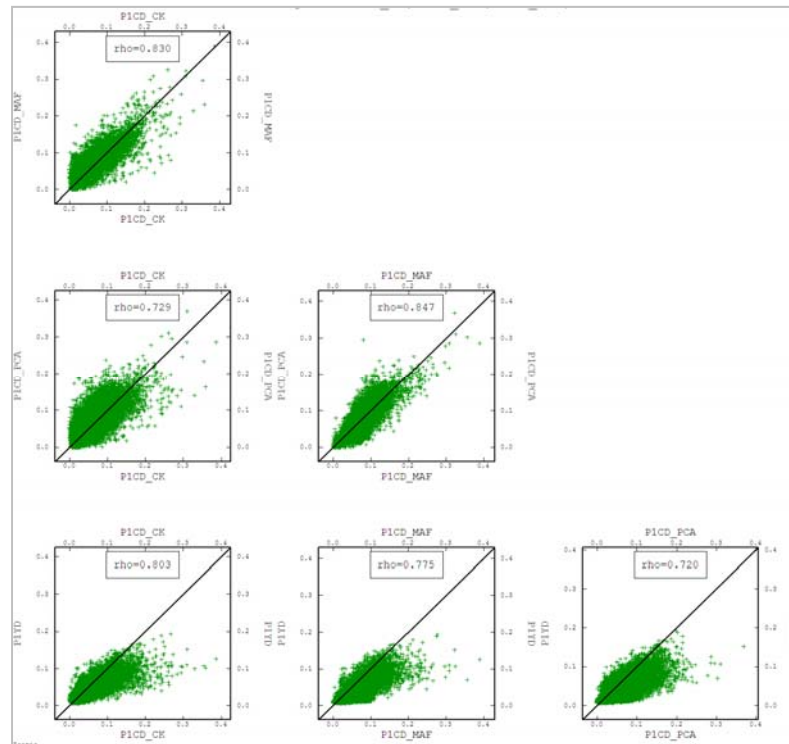


Figura 6.30 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor de fósforo na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (P1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (P1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (P1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P1YD).

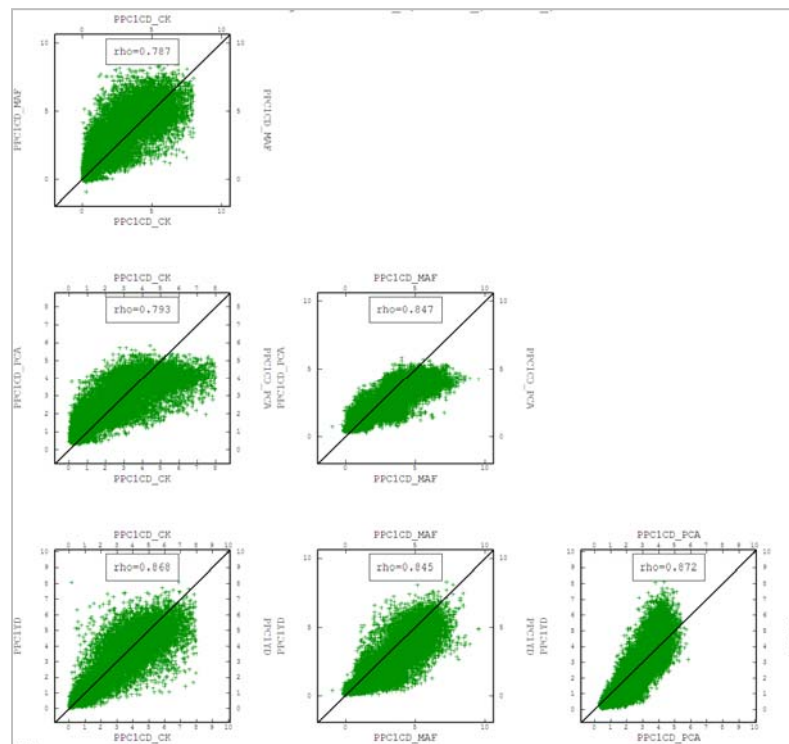


Figura 6.31 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor das perdas por calcinação na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (PPC1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PPC1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PPC1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC1YD).

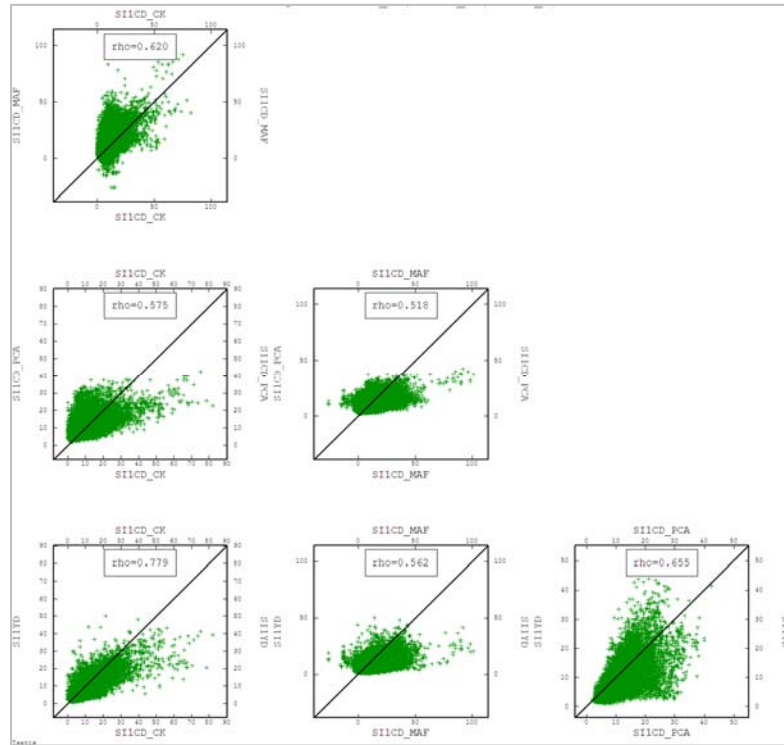


Figura 6.32 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) do teor da sílica na faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (SI1CD\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SI1CD\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (SI1CD\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI1YD).

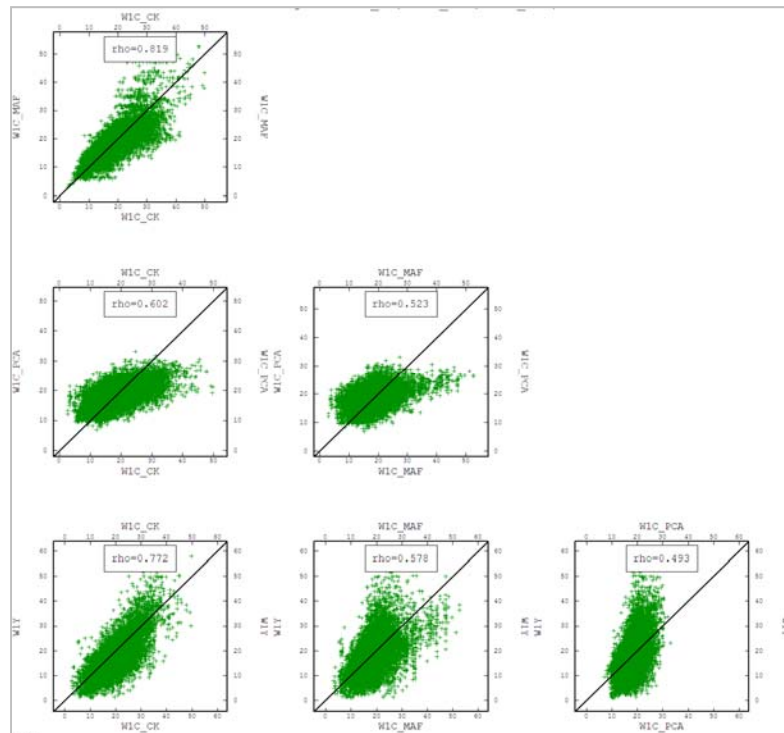


Figura 6.33 - Diagramas de dispersão das estimativas calculadas (C) da massa da faixa 1, obtidas por cokrigagem ordinária (W1C\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (W1C\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (W1C\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y).

## 6.5 Mapas das estimativas

A seguir são apresentados mapas das estimativas para os teores globais, massas das diferentes frações granulométricas e teores e massa na faixa 1.

No caso das estimativas globais e das massas nas diferentes faixas, são apresentados mapas no plano XY, XZ e YZ. Para as estimativas nas faixas 1, 2, 21 e 3, apresentam-se somente os mapas no plano XY.

Escolheram-se seções verticais e horizontais do modelo de blocos que sejam representativas, com um número de blocos suficiente para avaliar visualmente os resultados.

Assim, no plano XY, é escolhido o nível 36, que equivale a um valor de coordenada  $Z=1345\text{m}$ , no plano XZ escolhe-se o plano vertical 30, que equivale a um valor de coordenada  $Y=1360\text{m}$  e no plano YZ escolhe-se o plano vertical 25, que equivale a um valor de  $X=-6350\text{m}$  (Figura 6.34

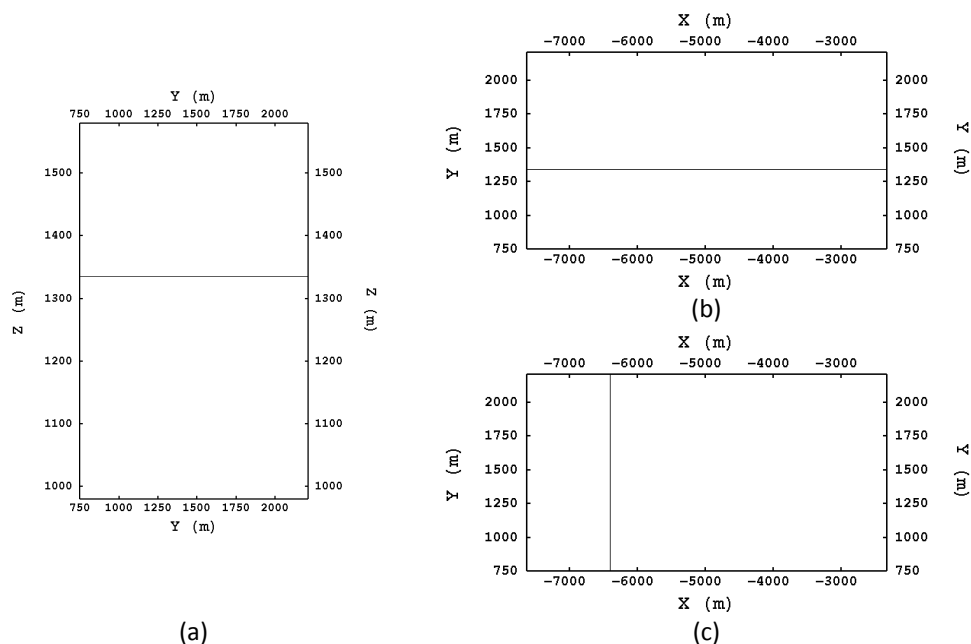


Figura 6.34 – Planos escolhidos para apresentar os mapas das estimativas: (a) plano XY em  $Z=1345\text{m}$ , (b) plano XZ em  $Y=1360\text{m}$ , (c) plano YZ em  $X=-6350\text{m}$ .

Em todos os casos, coloca-se, com fins comparativos, um mapa onde estão as amostras mais próximas à seção do modelo de blocos considerada migrando o valor das amostras aos blocos (Bourassi et al ,2009).

### 6.5.1 Teores globais

Nas Figuras 6.35 à 6.52, são apresentados os mapas dos teores globais nas seções XY, XZ e YZ escolhidas em  $Z=1345\text{m}$ ,  $Y=1360\text{m}$  e  $X=-6350\text{m}$ , respectivamente. Os comentários comparativos, quando os mapas apresentarem diferenças a destacar, colocam-se a continuação de cada figura.

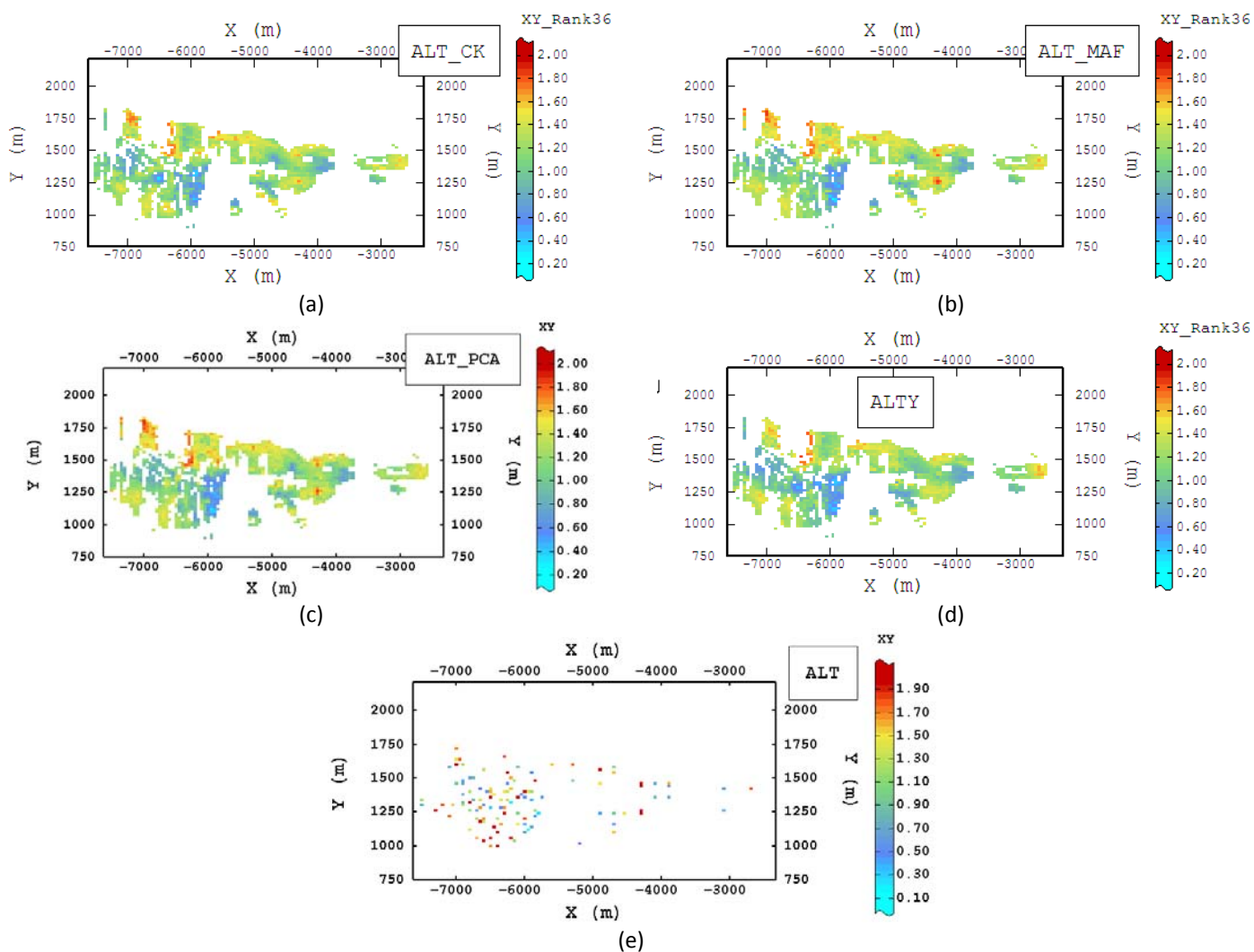


Figura 6.35 – Mapas das estimativas do teor de alumina global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (ALT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (ALT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY), e (e) o mapa das amostras (ALT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

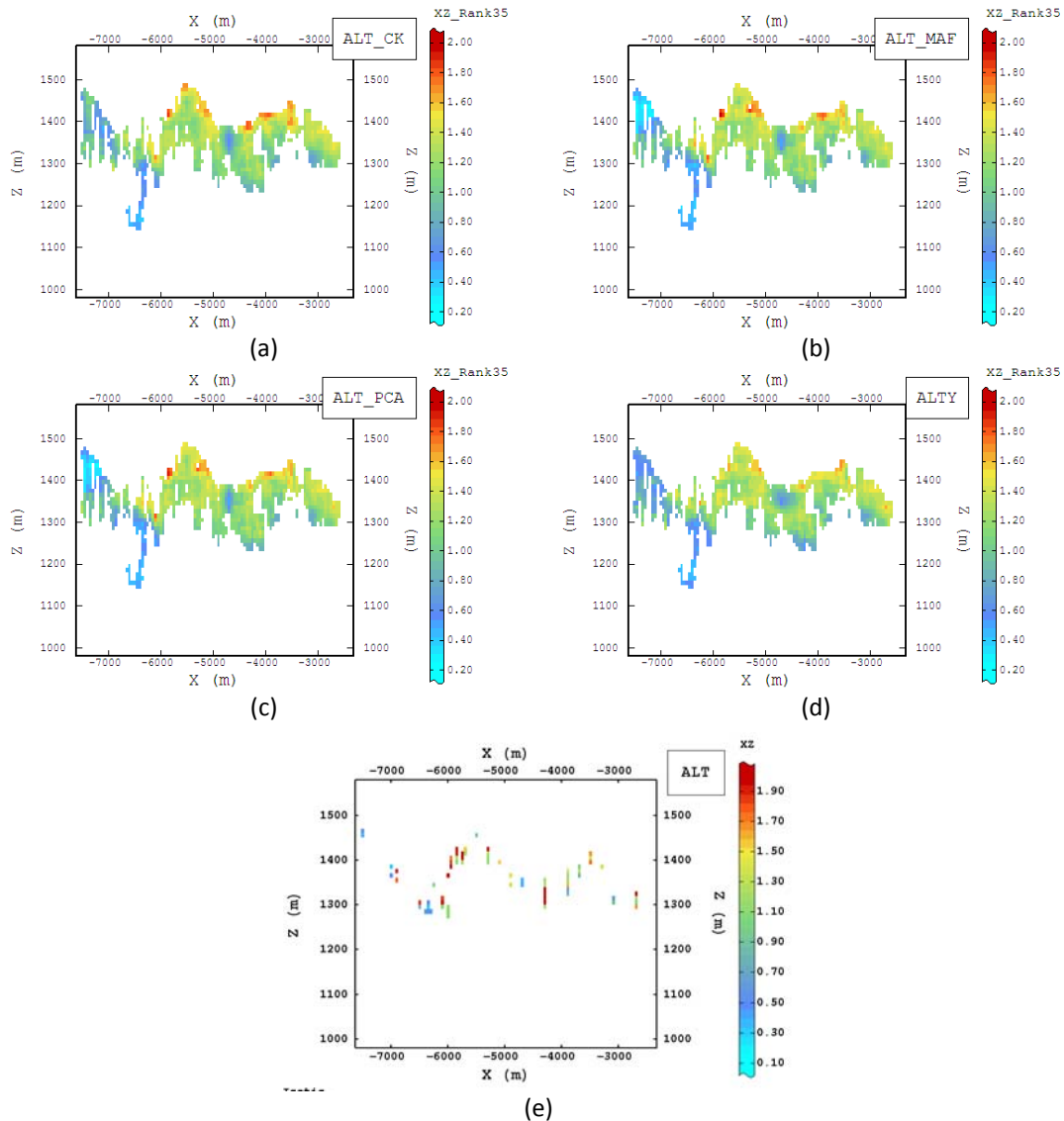


Figura 6.36 - Mapas das estimativas do teor de alumina global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (ALT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (ALT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY), e (e) o mapa das amostras (ALT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m).



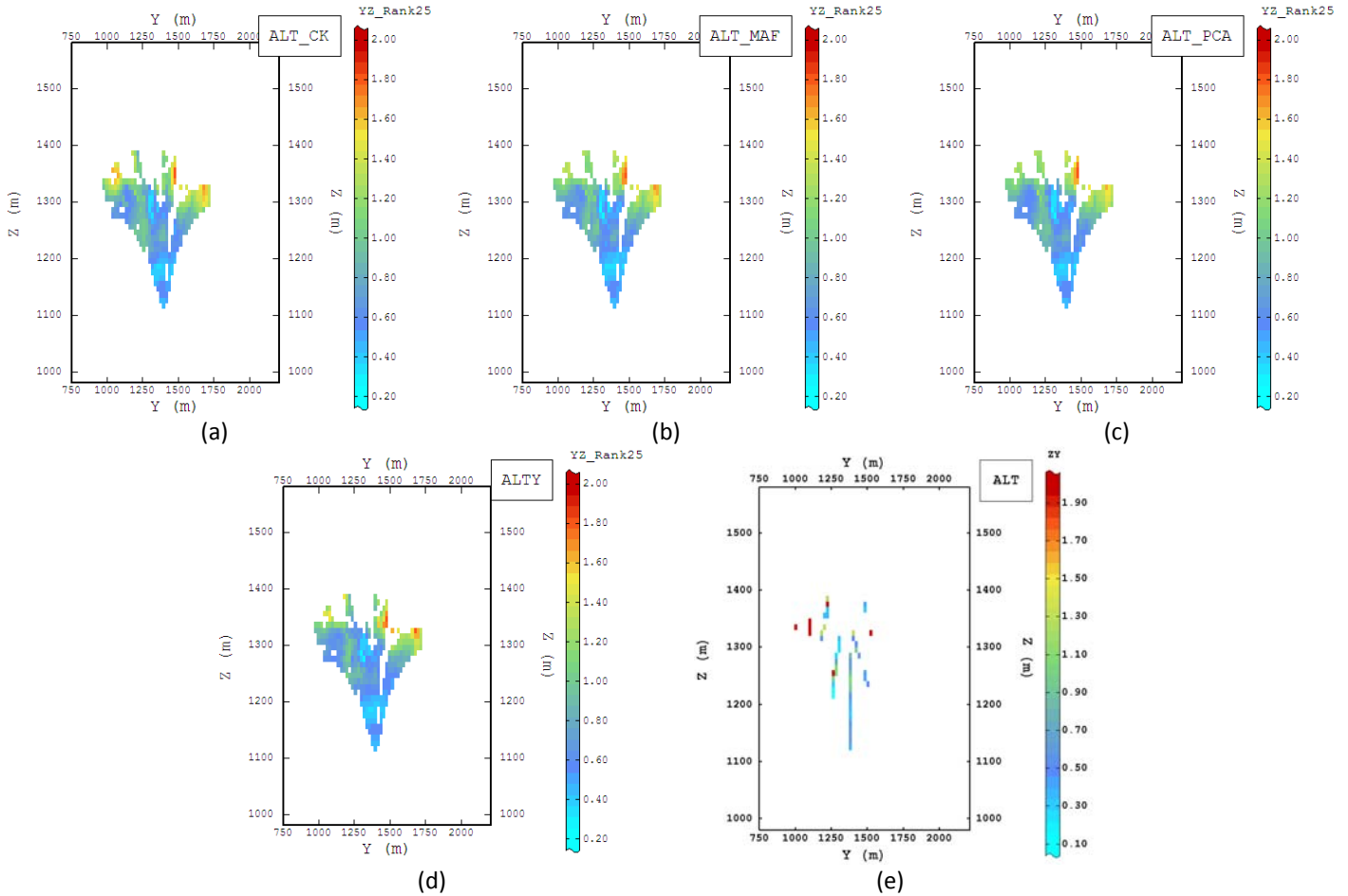


Figura 6.37 - Mapas das estimativas do teor de alumina global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (ALT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (ALT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (ALT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (ALTY), e (e) o mapa das amostras (ALT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

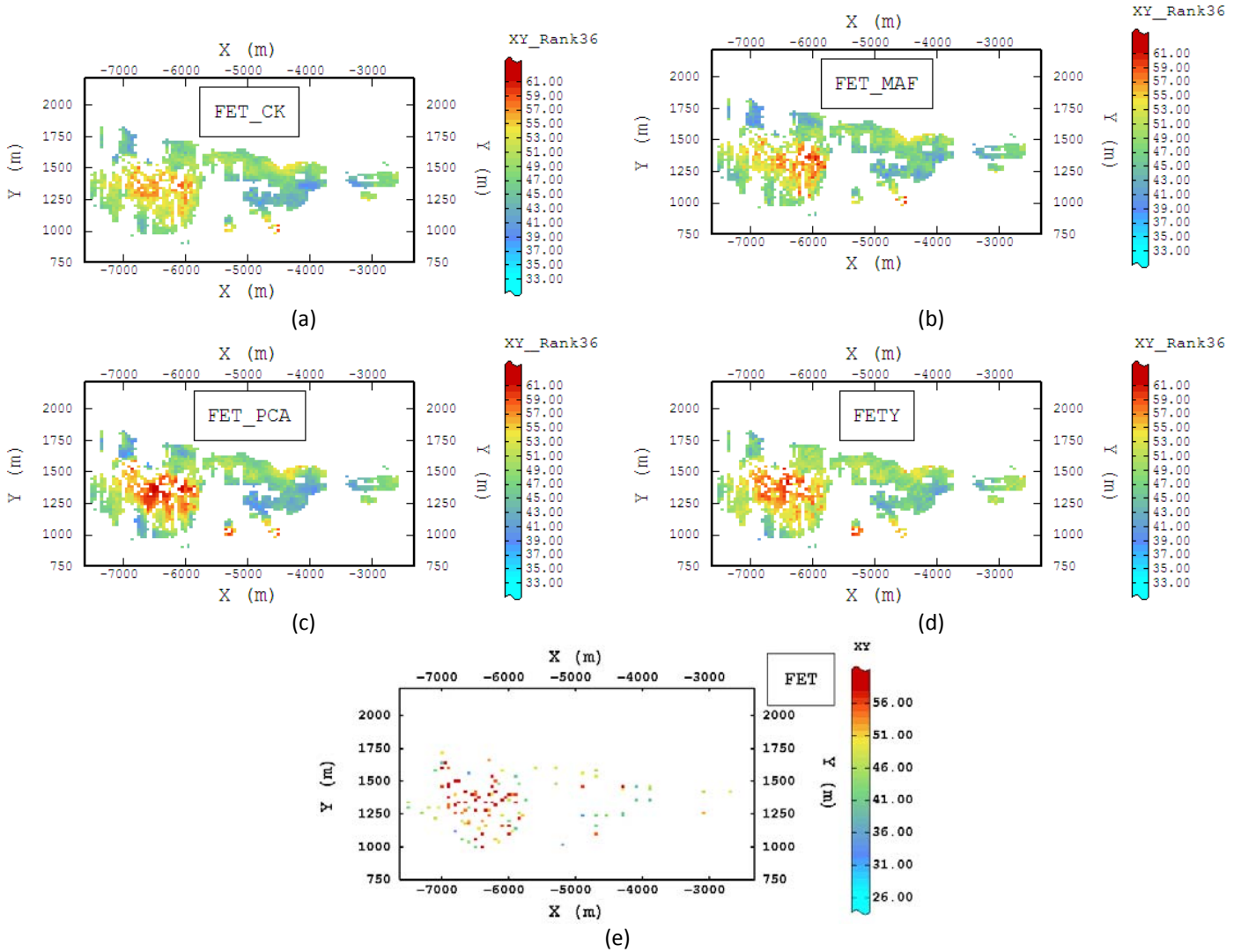


Figura 6.38 - Mapas das estimativas do teor de ferro global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FET\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY), e (e) o mapa das amostras (FET) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

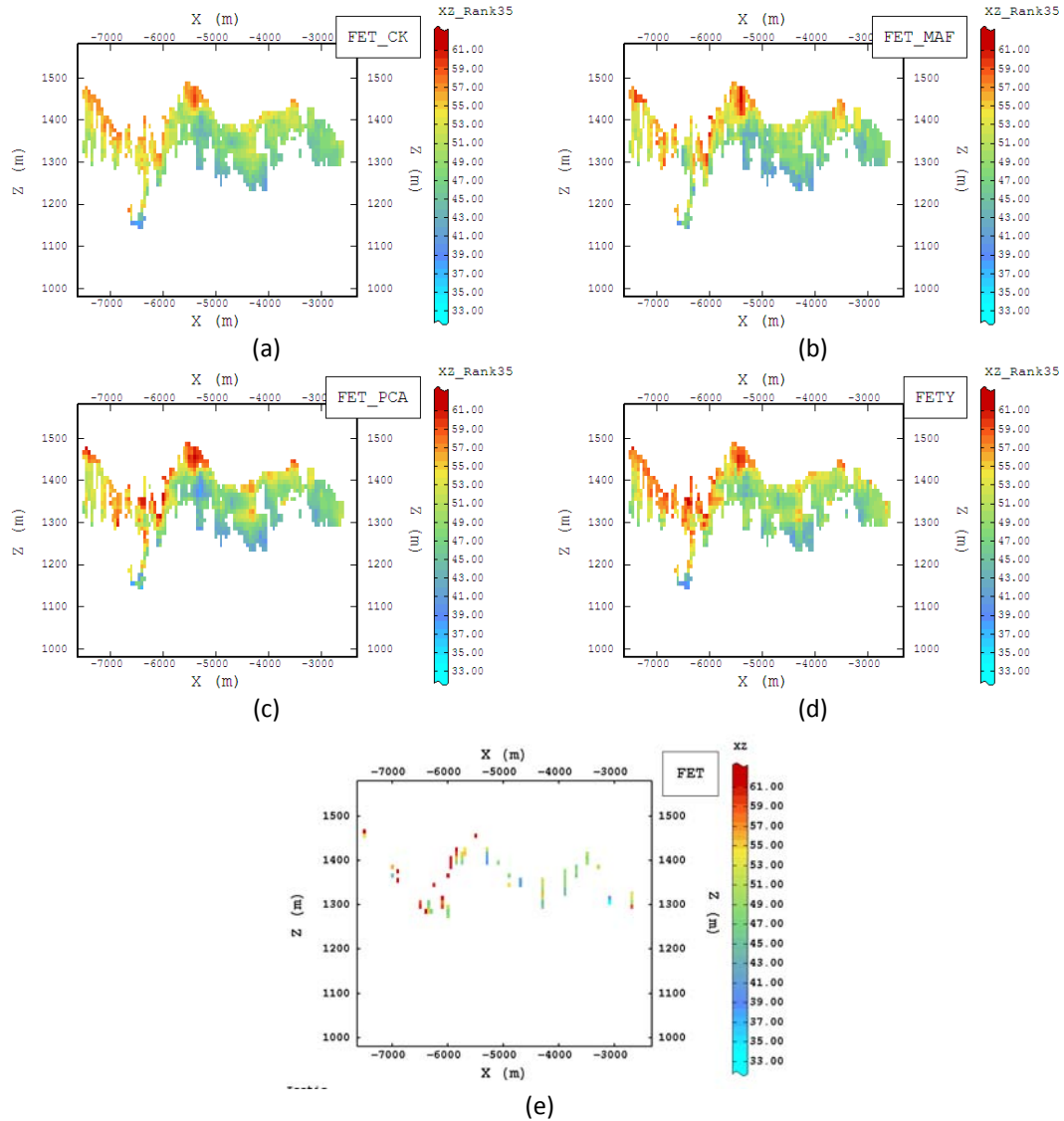


Figura 6.39 - Mapas das estimativas do teor de ferro global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FET\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FET\_Y), e (e) o mapa das amostras (FET) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m).

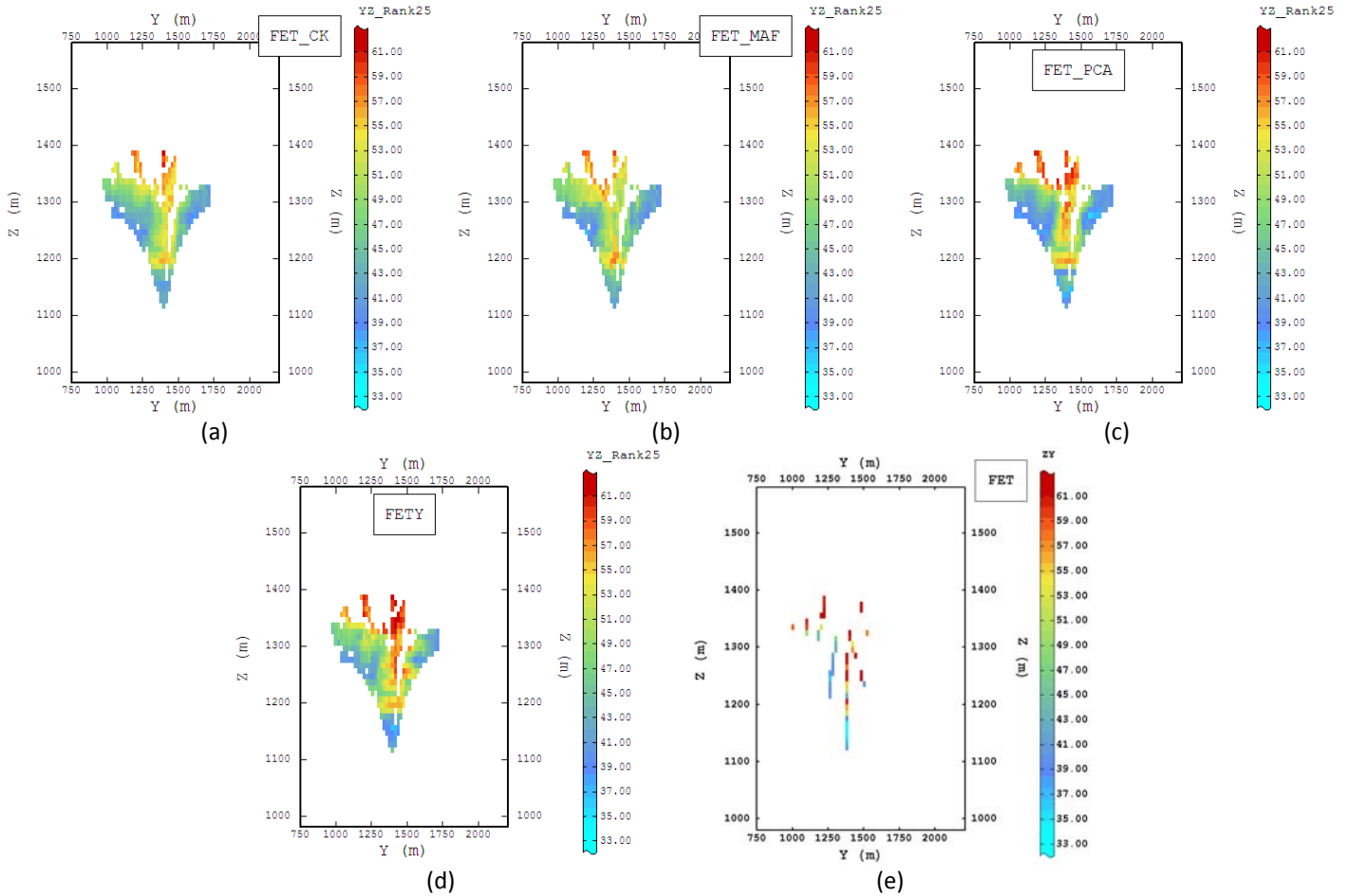


Figura 6.40 - Mapas das estimativas do teor de ferro global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FET\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FET\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FET\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FETY), e (e) o mapa das amostras (FET) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

Nos mapas obtidos para o manganês (Figuras 6.41, 6.42 e 6.43), observa-se uma maior suavização nas metodologias da krigagem ordinária dos fatores MAF, das componentes principais PCA e na cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas.

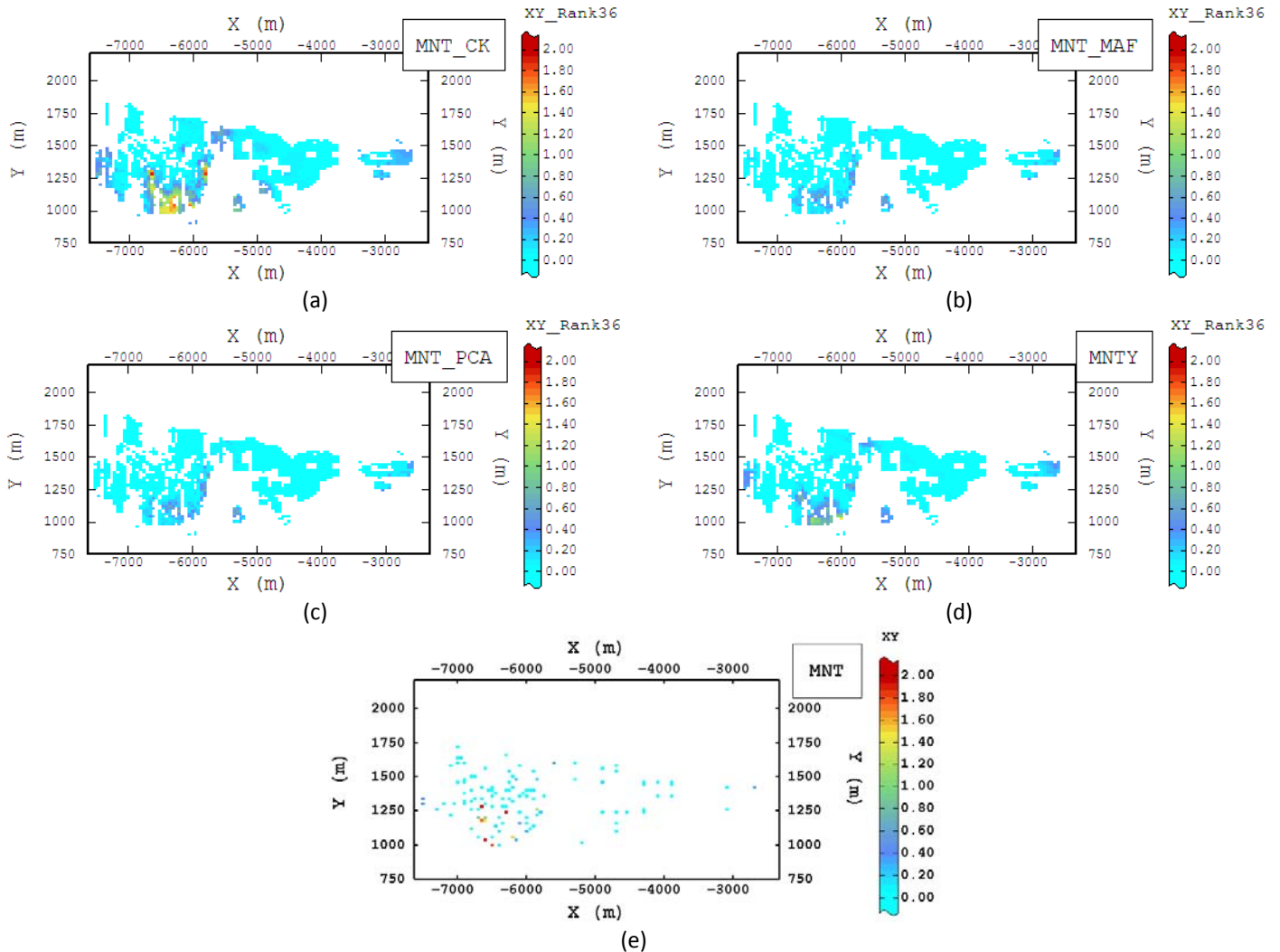


Figura 6.41 - Mapas das estimativas do teor de manganês global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MNT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MNT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY), e (e) o mapa das amostras (MNT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

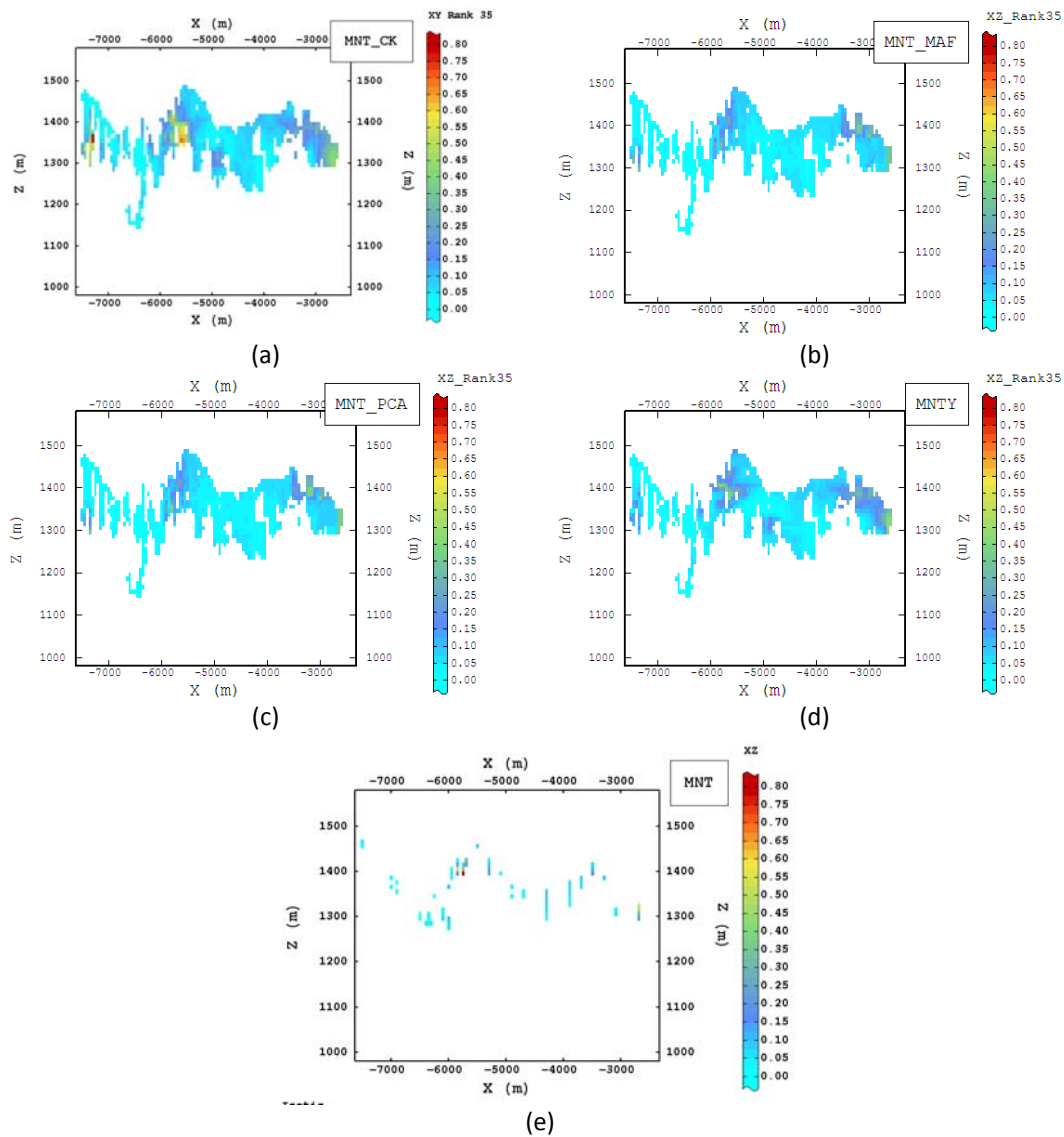


Figura 6.42 - Mapas das estimativas do teor de manganês global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MNT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MNT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY), e (e) o mapa das amostras (MNT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ ).

Nessa seção (Figura 6.43), observa-se a maior adequação aos dados originais mais próximos, dada pela cokrigagem ordinária e a cokrigagem ordinária das razões alr.

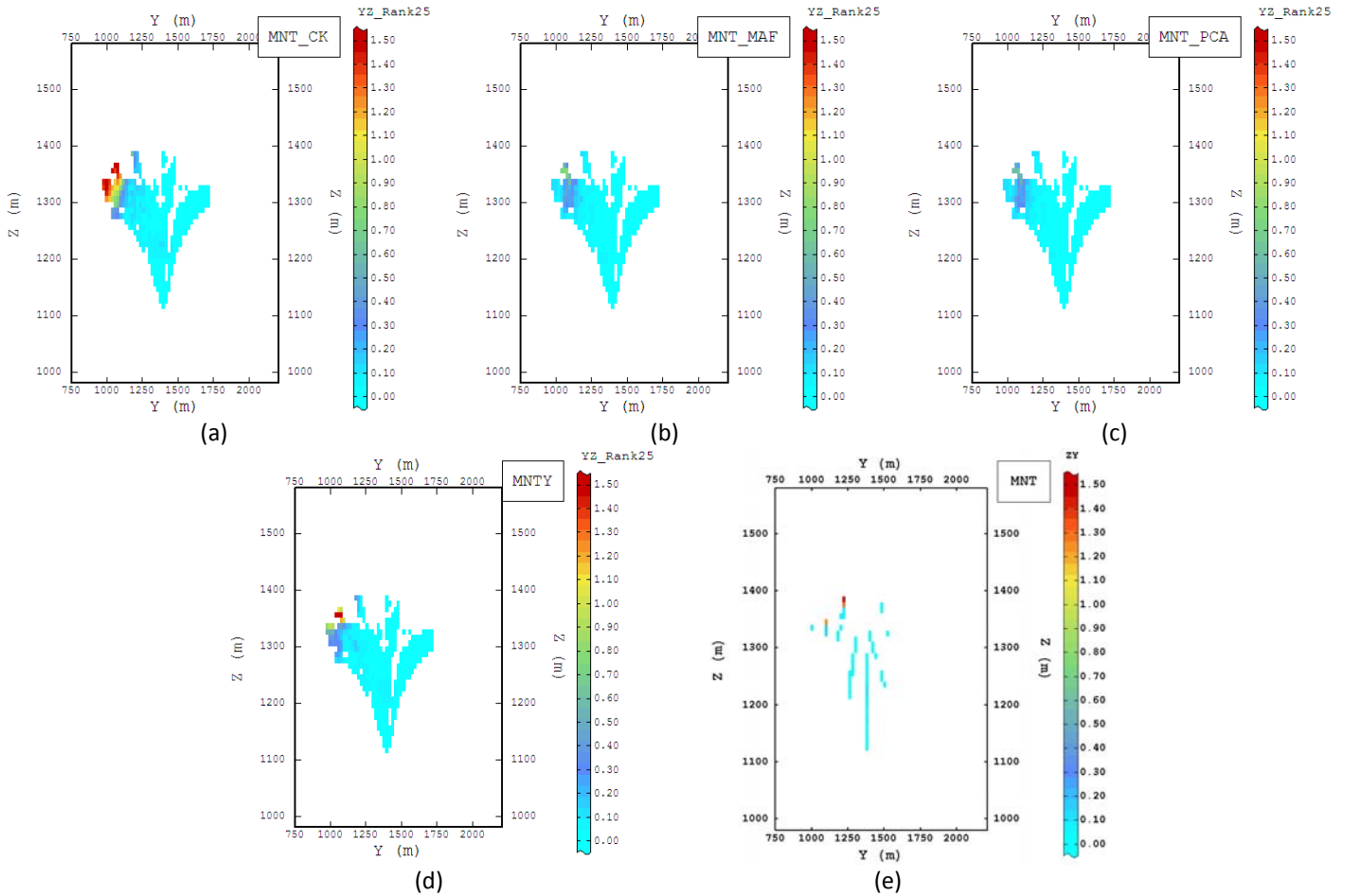


Figura 6.43 - Mapas das estimativas do teor de manganês global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MNT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MNT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MNT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MNTY), e (e) o mapa das amostras (MNT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

No caso do fósforo, não são observadas diferenças substanciais nos mapas obtidos pelas quatro metodologias

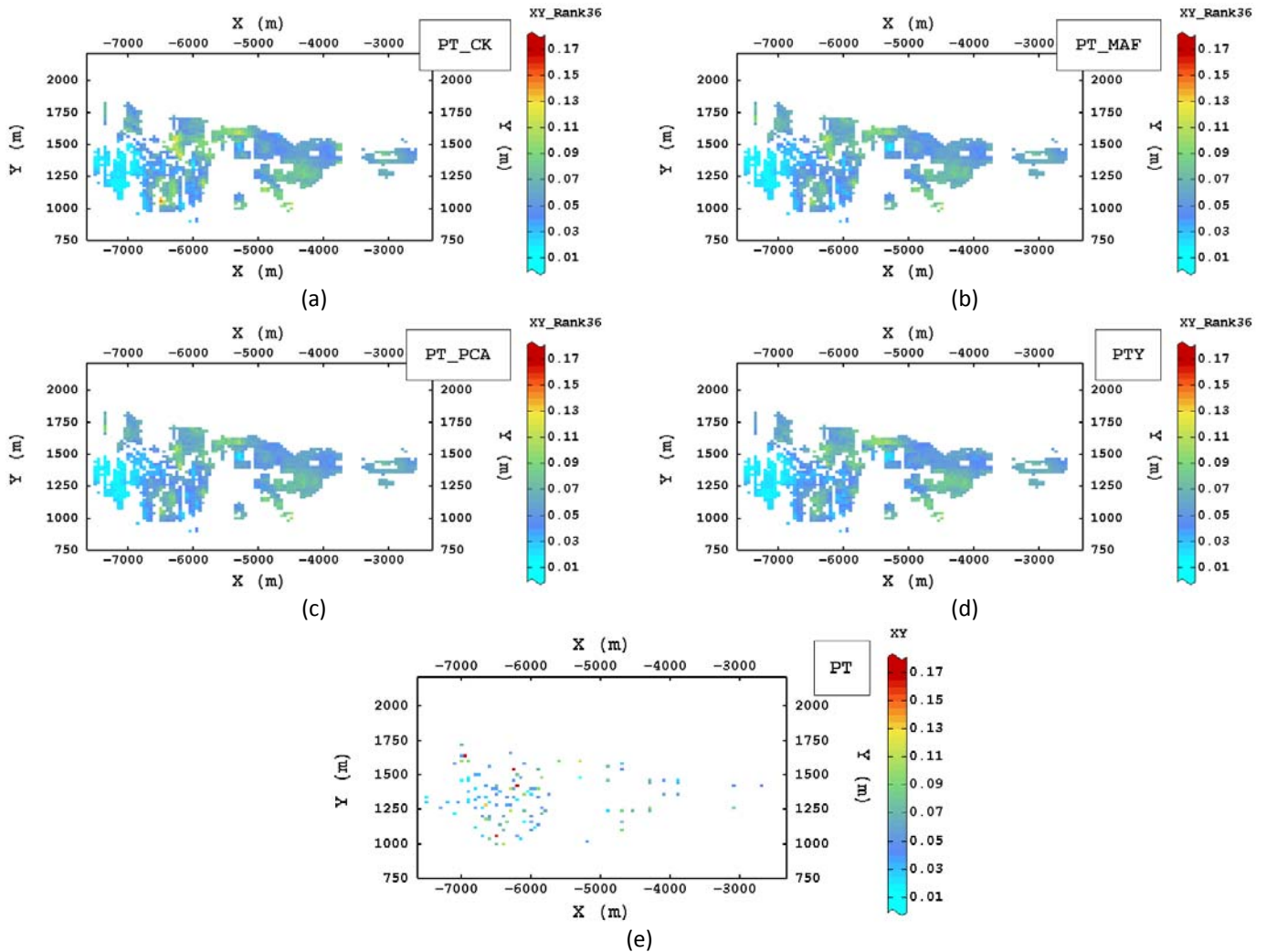


Figura 6.44 - Mapas das estimativas do teor de fósforo global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY), e (e) o mapa das amostras (PT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).



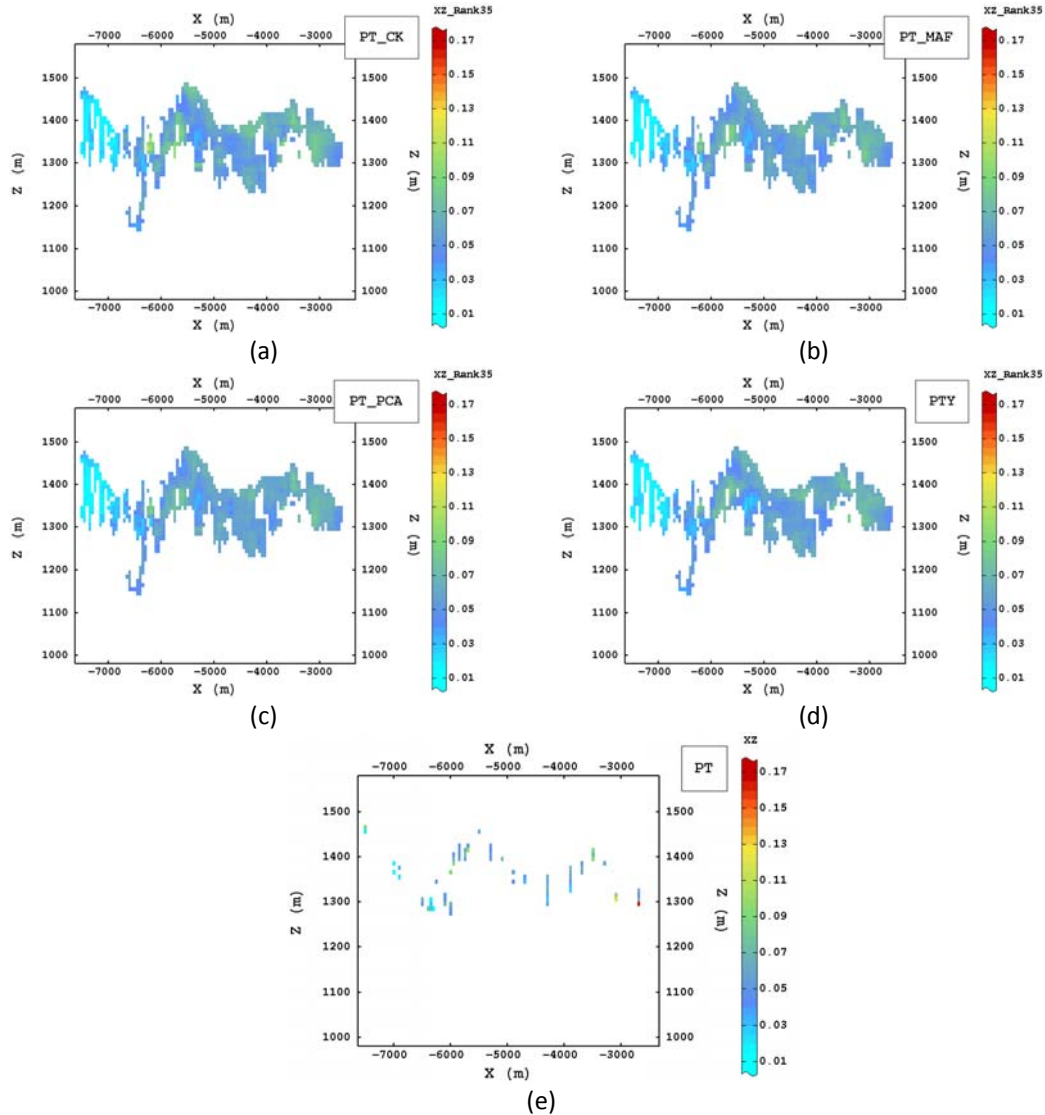


Figura 6.45 - Mapas das estimativas do teor de fósforo global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY), e (e) o mapa das amostras (PT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ ).

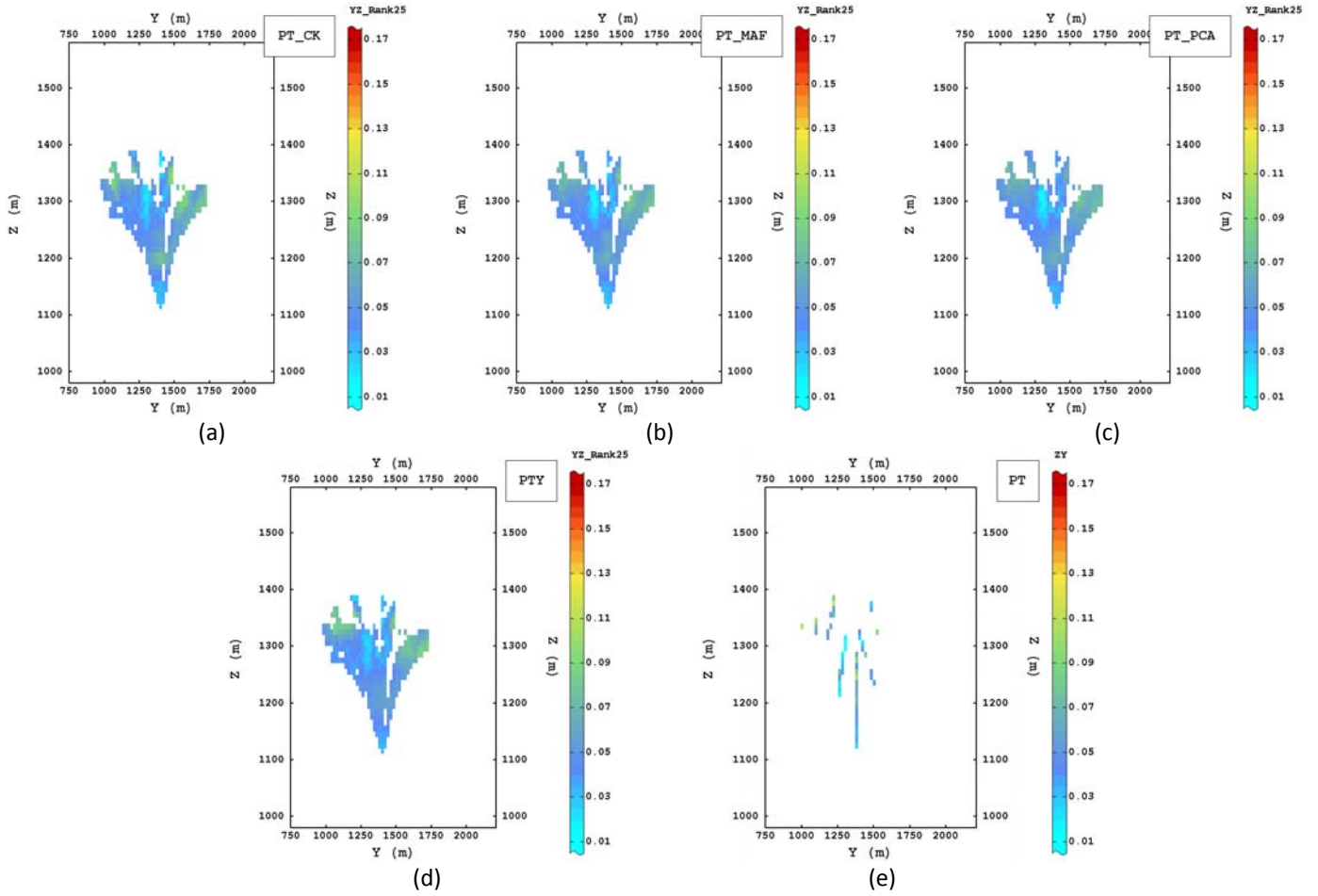


Figura 6.46 - Mapas das estimativas do teor de fósforo global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PTY), e (e) o mapa das amostras (PT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

Para as perdas por calcinação, observa-se uma maior reprodução dos dados nas estimativas obtidas por cokrigagem e cokrigagem das razões alr, e no caso das krigagens dos fatores MAF e das componentes PCA, os mapas aparecem mais suavizados (Figuras 6.47, 6.48 e 6.49).

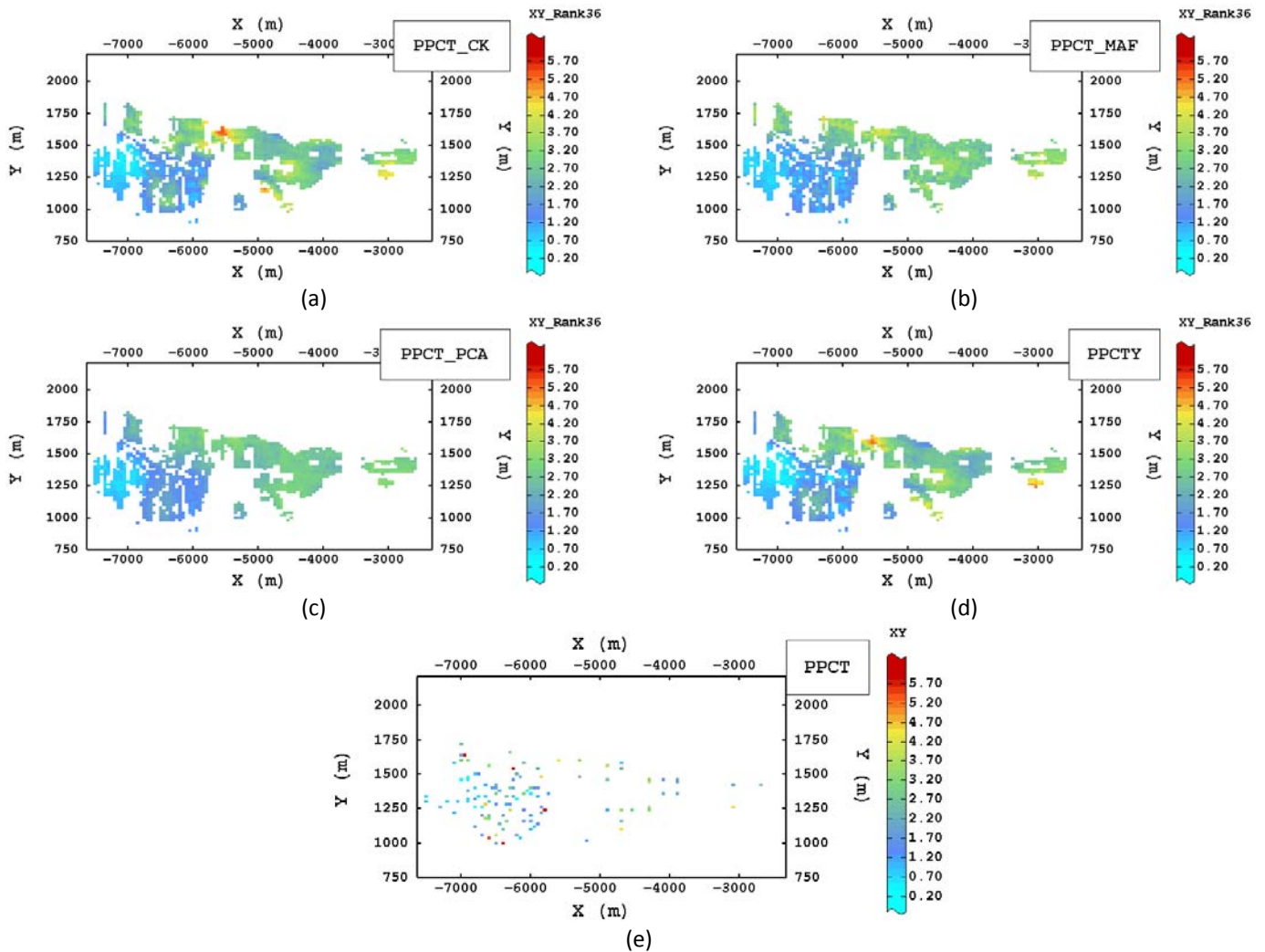


Figura 6.47 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação globais, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPCT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPCT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPCT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPCTY), e (e) o mapa das amostras (PPCT) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

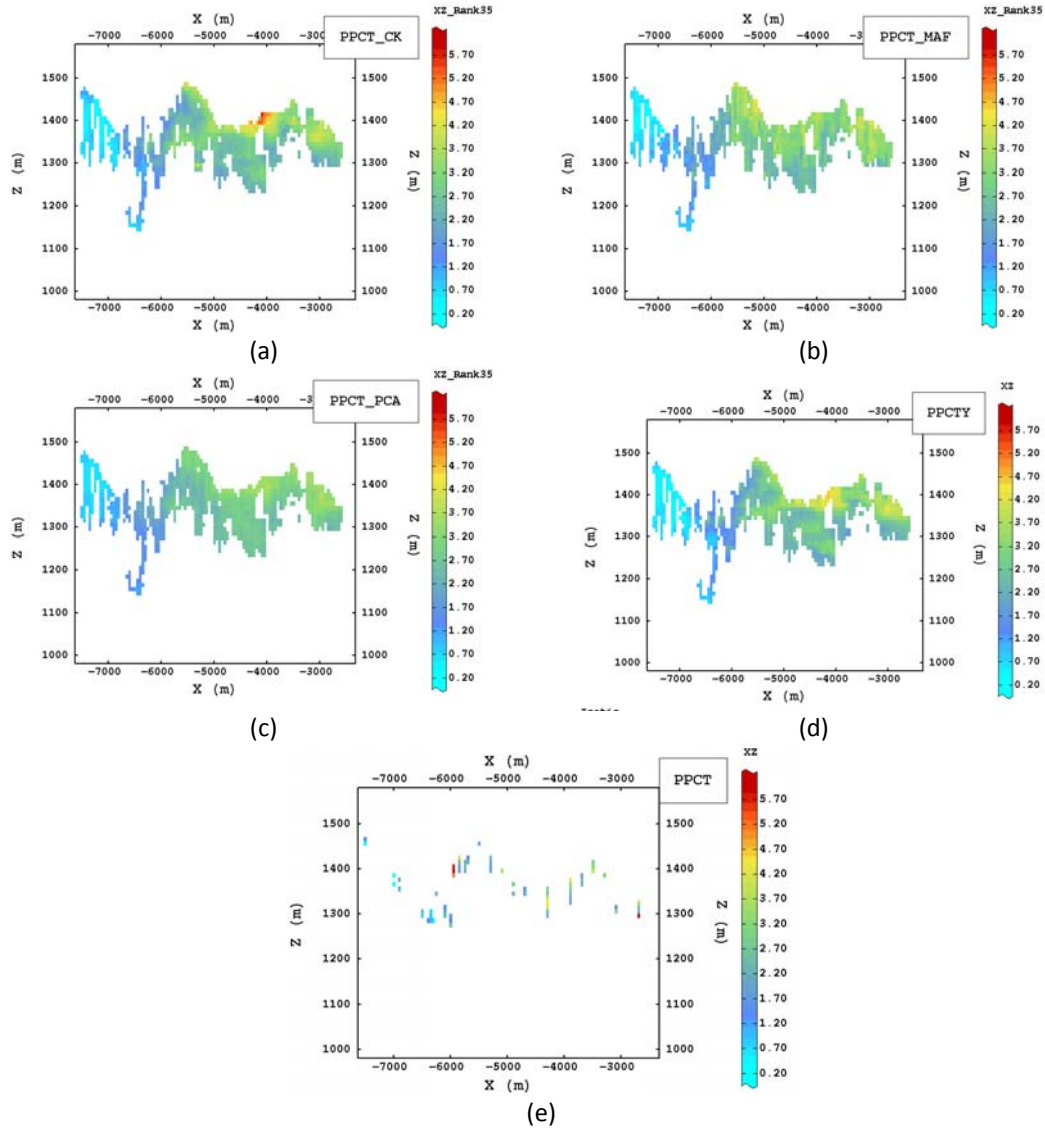


Figura 6.48 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação globais, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPCT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPCT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPCT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPCTY), e (e) o mapa das amostras (PPCT) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ ).

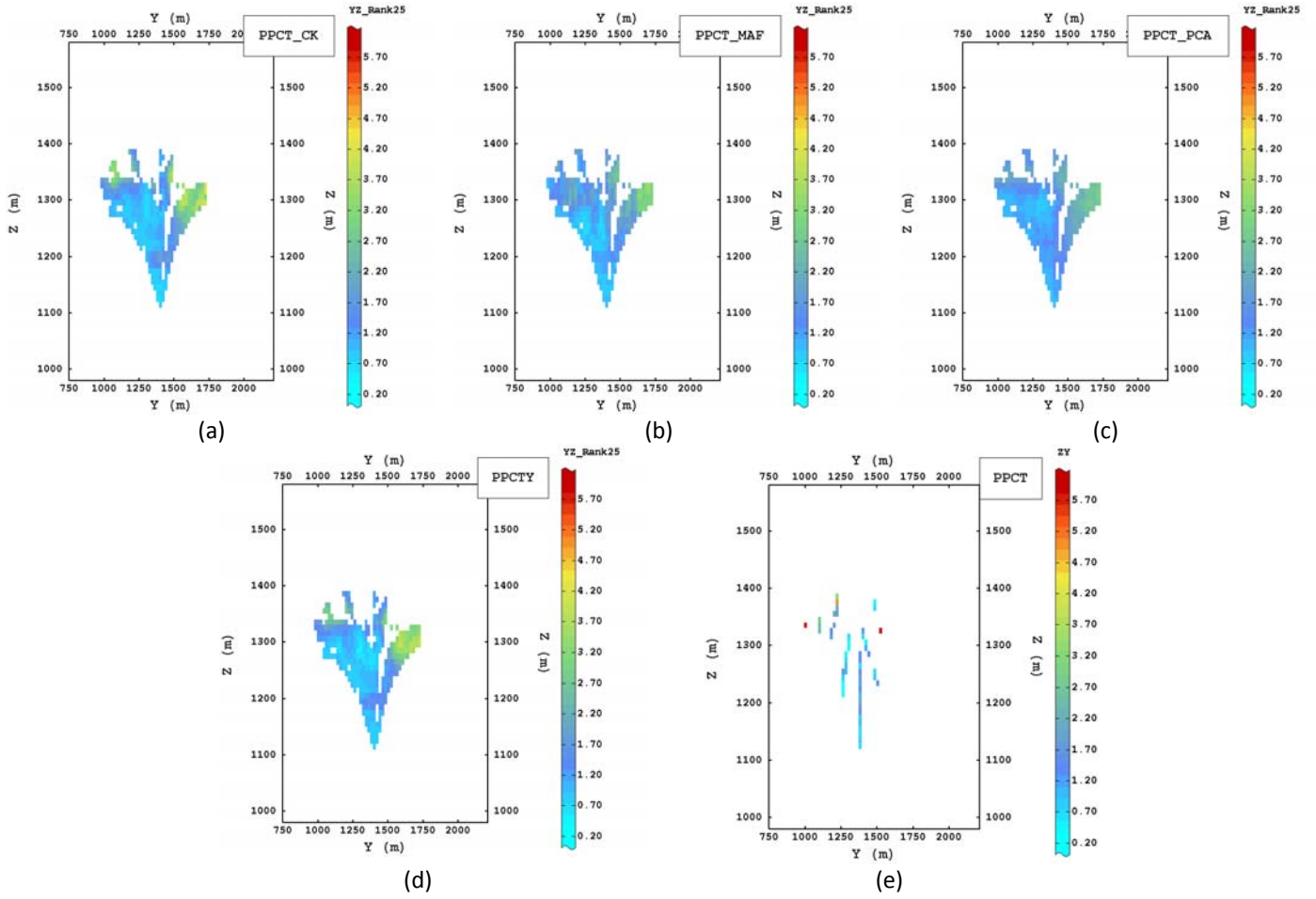


Figura 6.49 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação globais, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPCT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPCT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPCT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPCTY), e (e) o mapa das amostras (PPCT) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

Para a sílica, observa-se uma maior reprodução dos dados mais próximos por parte das estimativas obtidas por cokrigagem, cokrigagem das razões alr e krigagem dos fatores MAF que no caso das obtidas por krigagem das componentes PCA, onde os mapas aparecem mais suavizados (Figuras 6.50, 6.51 e 6.52).

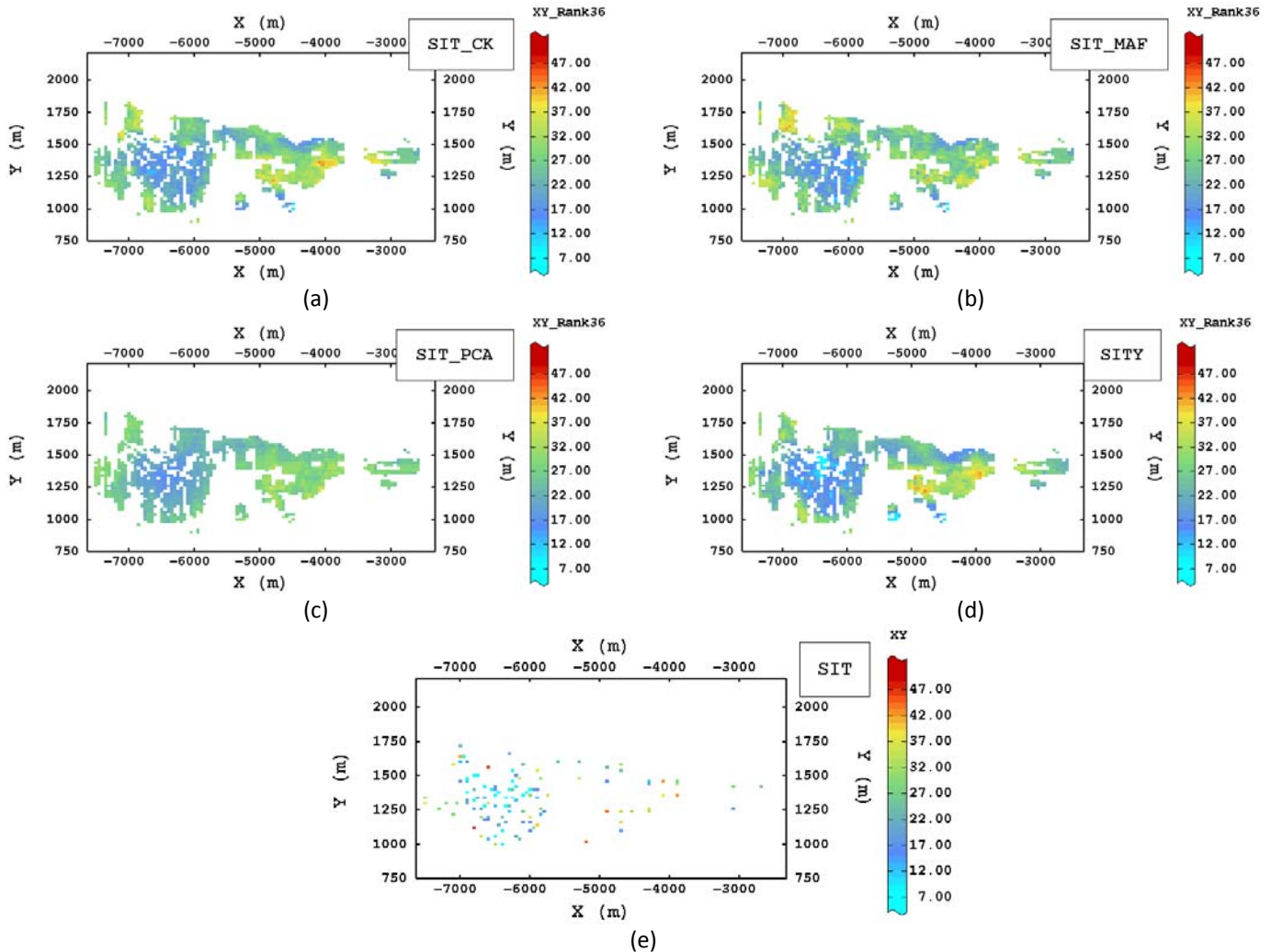


Figura 6.50 - Mapas das estimativas do teor de sílica global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SIT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SIT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY), e (e) o mapa das amostras mais próximas (SIT) à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

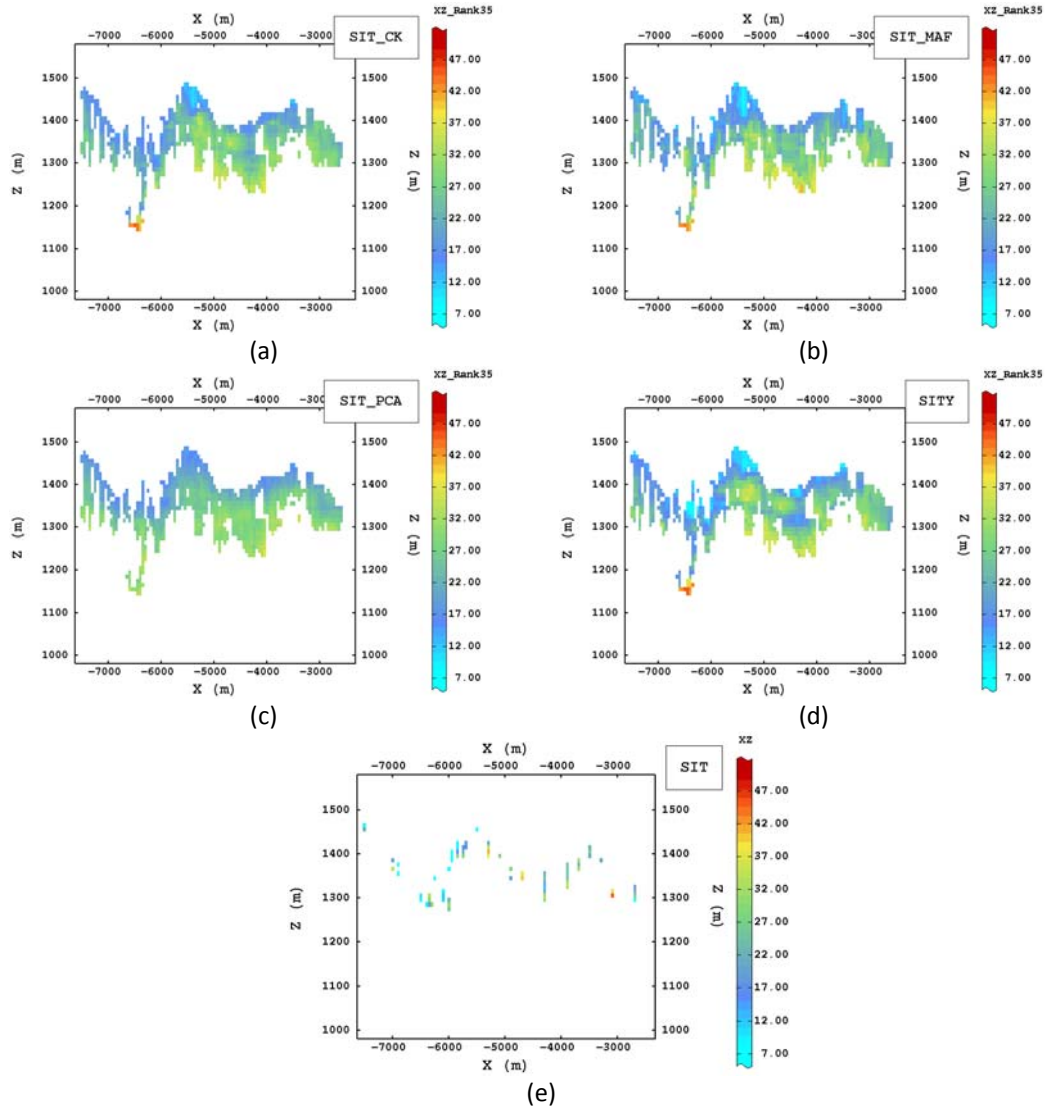


Figura 6.51 - Mapas das estimativas do teor de sílica global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SIT\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SIT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SIT\_Y), e (e) o mapa das amostras mais próximas (SIT) à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m).

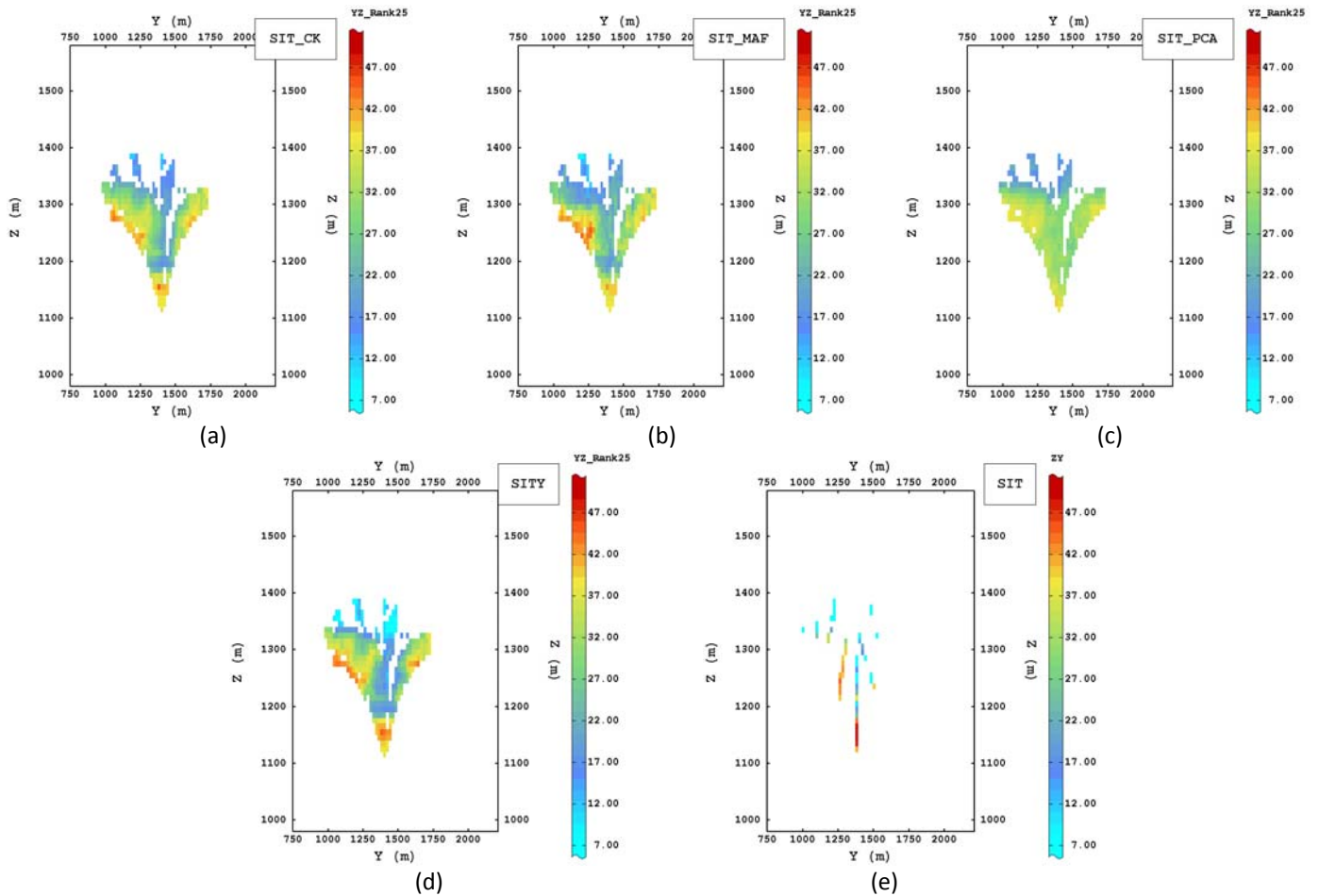


Figura 6.52 - Mapas das estimativas do teor de sílica global, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SIT CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SIT\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SIT\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SITY), e (e) o mapa das amostras mais próximas (SIT) à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

### 6.5.2 Massas das frações granulométricas

Nas Figuras 6.53 a 6.61, são apresentados os mapas correspondentes as massas nas faixas 2, 21 e 3, nos planos XY, XZ e YZ escolhidos em  $Z=1345\text{m}$   $Y=1360\text{m}$  e  $X=-6350\text{m}$ , respectivamente.



A cokrigagem ordinária e a cokrigagem das razões alr reproduzem melhor os valores extremos que no caso das krigagens de fatores MAF e componentes PCA, que provêm mapas mais suavizados (Figuras 6.53, 6.54 e 6.55)

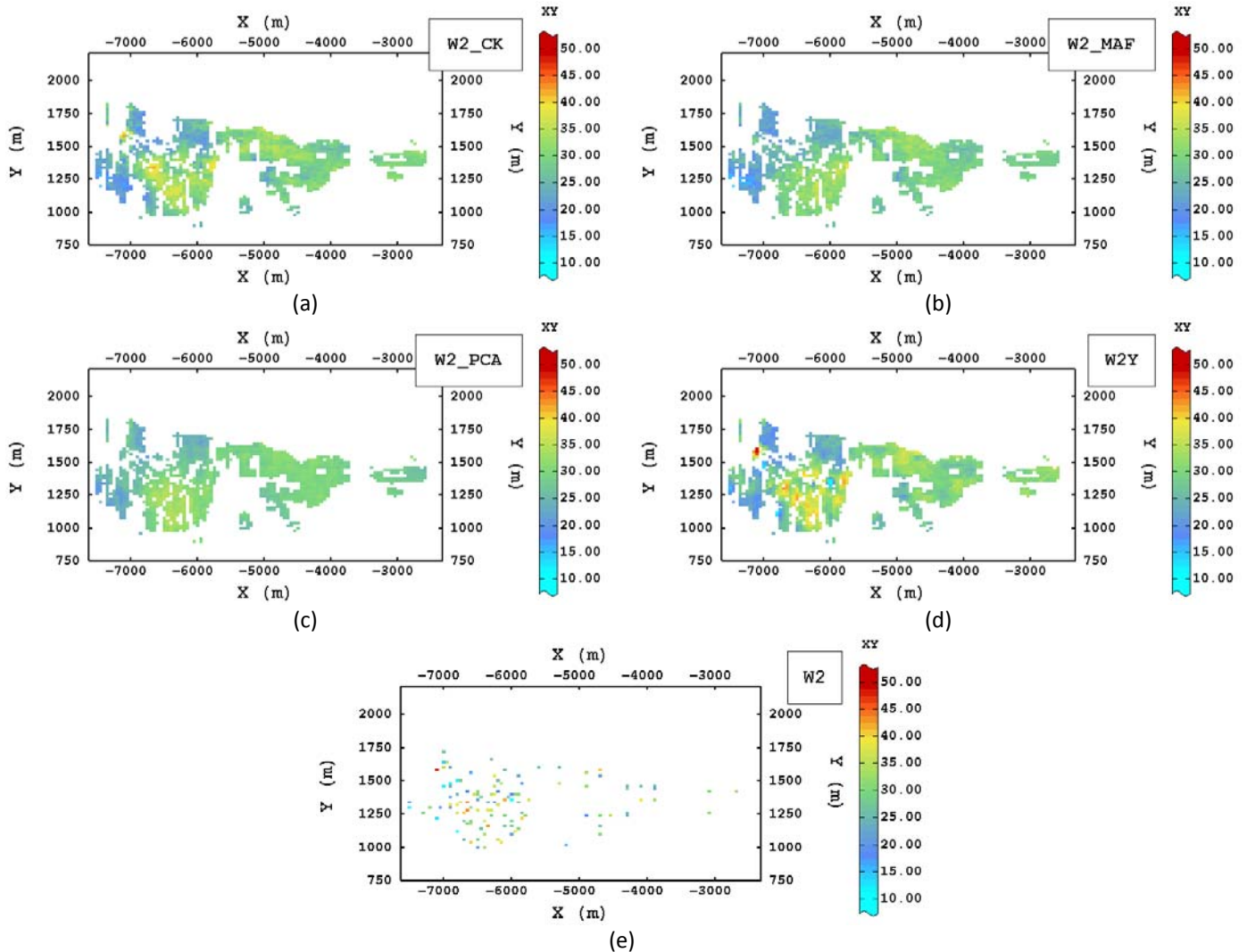


Figura 6.53 - Mapas das estimativas da massa da fração 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W2\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W2\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2Y), e (e) o mapa das amostras (W2) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

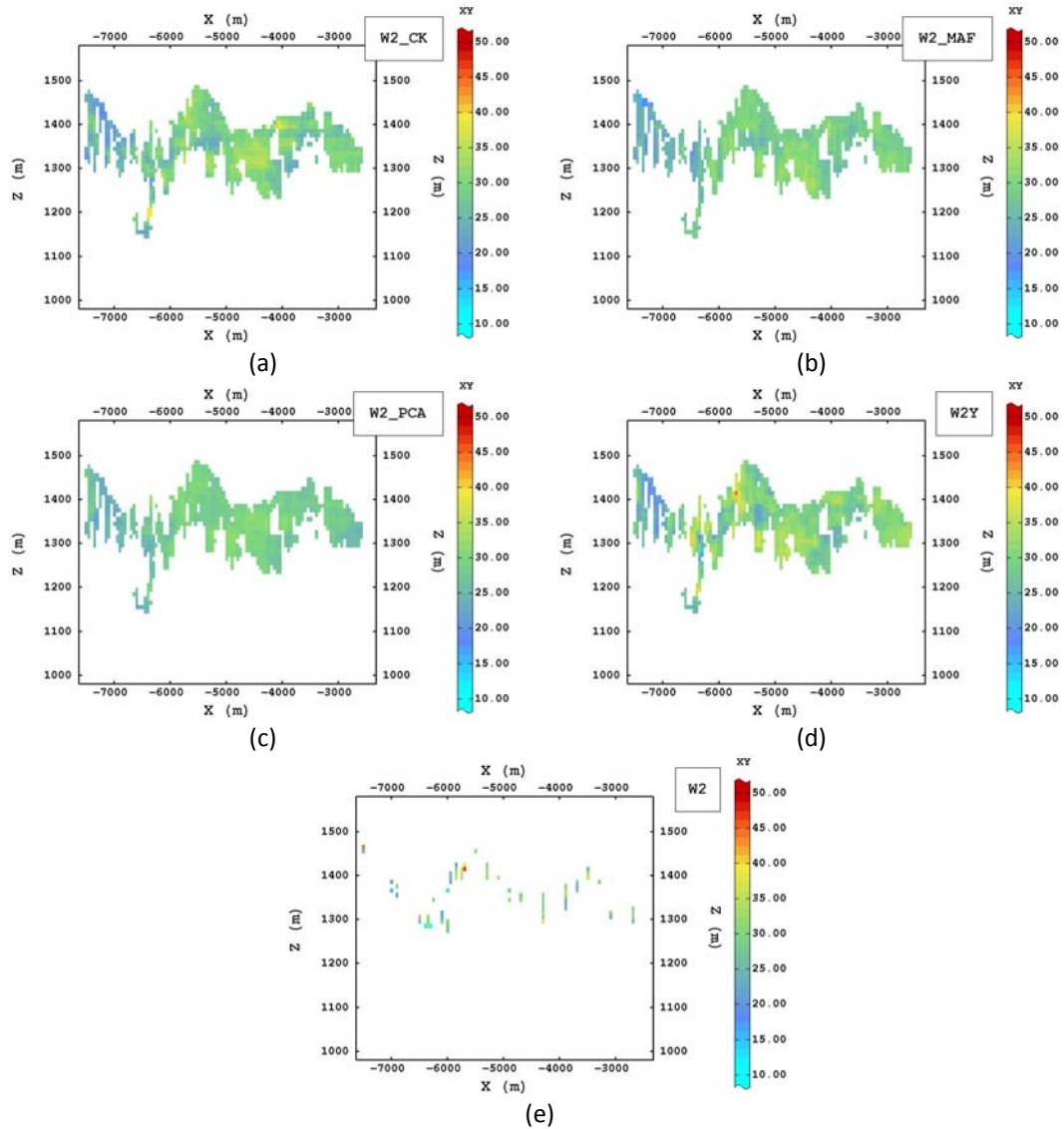


Figura 6.54 - Mapas das estimativas da massa da fração 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W2\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W2\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2Y), e (e) o mapa das amostras (W2) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ ).

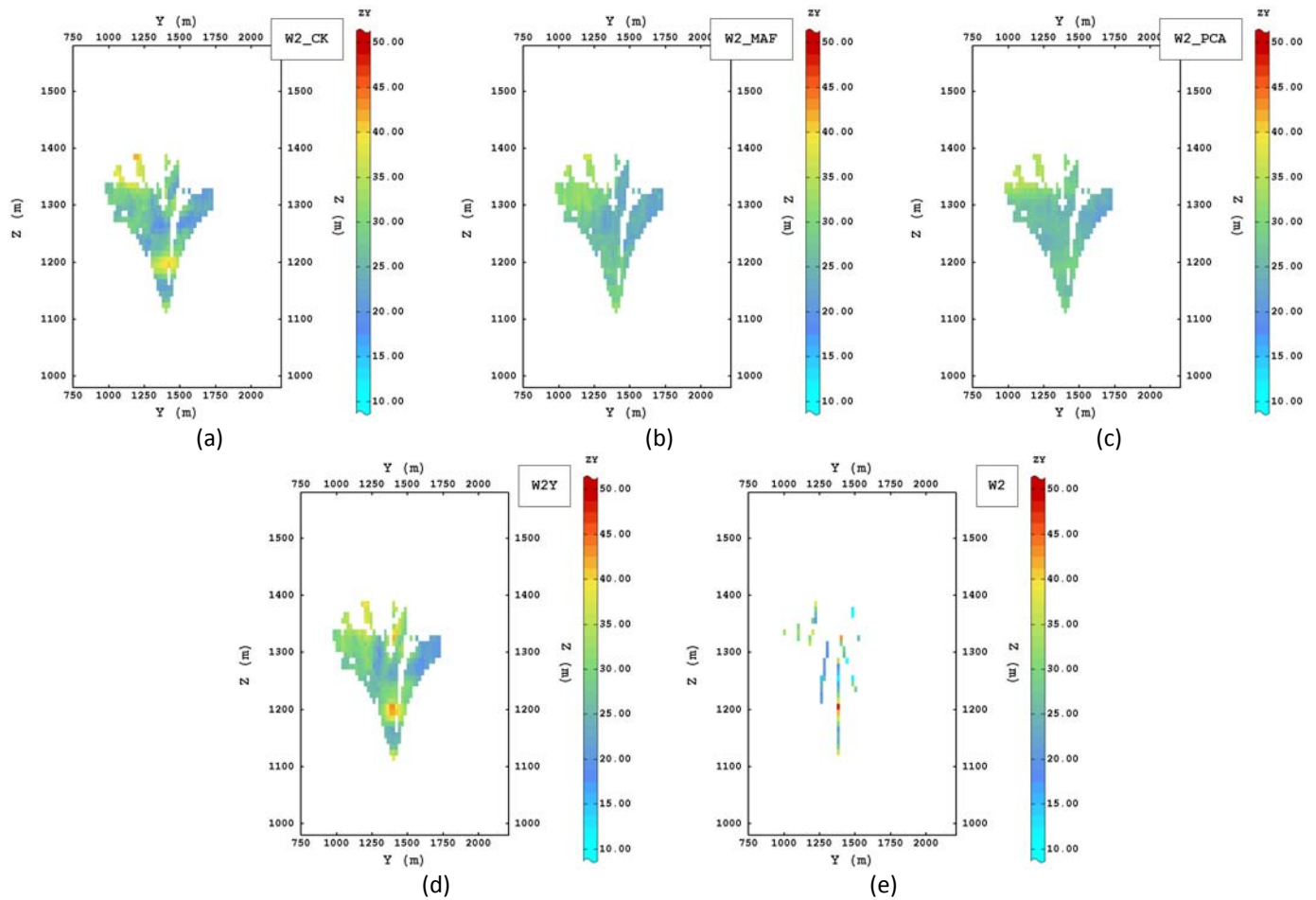


Figura 6.55 - Mapas das estimativas da massa da fração 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W2\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W2\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W2\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W2Y), e (e) o mapa das amostras (W2) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

No caso da massa na fração 21, as estimativas por cokrigagem ordinária são obtidas a partir do banco de dados heterotópico. As estimativas obtidas por krigagem dos fatores MAF, das componentes PCA e por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas são obtidas a partir do subconjunto isotópico. Porém, novamente a cokrigagem ordinária e a cokrigagem das razões alr reproduzem melhor os valores extremos que no caso das krigagens de fatores MAF e componentes PCA, que provêm mapas mais suavizados, independentemente de que o número de dados seja menor para essas últimas metodologias(Figuras 6.56, 6.57 e 6.58).

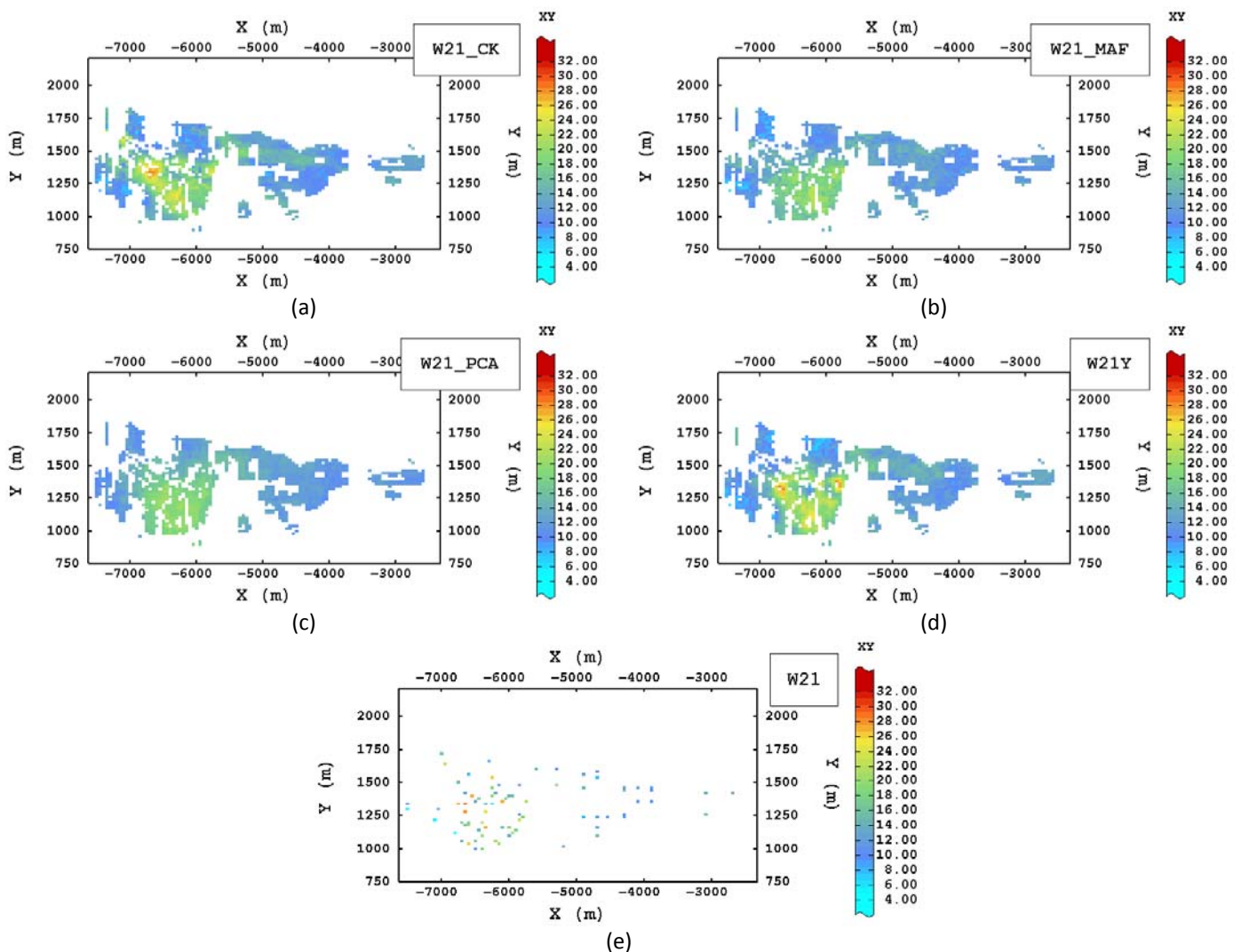


Figura 6.56 - Mapas das estimativas da massa da fração 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W21\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W21\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21Y), e (e) o mapa das amostras (W21) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

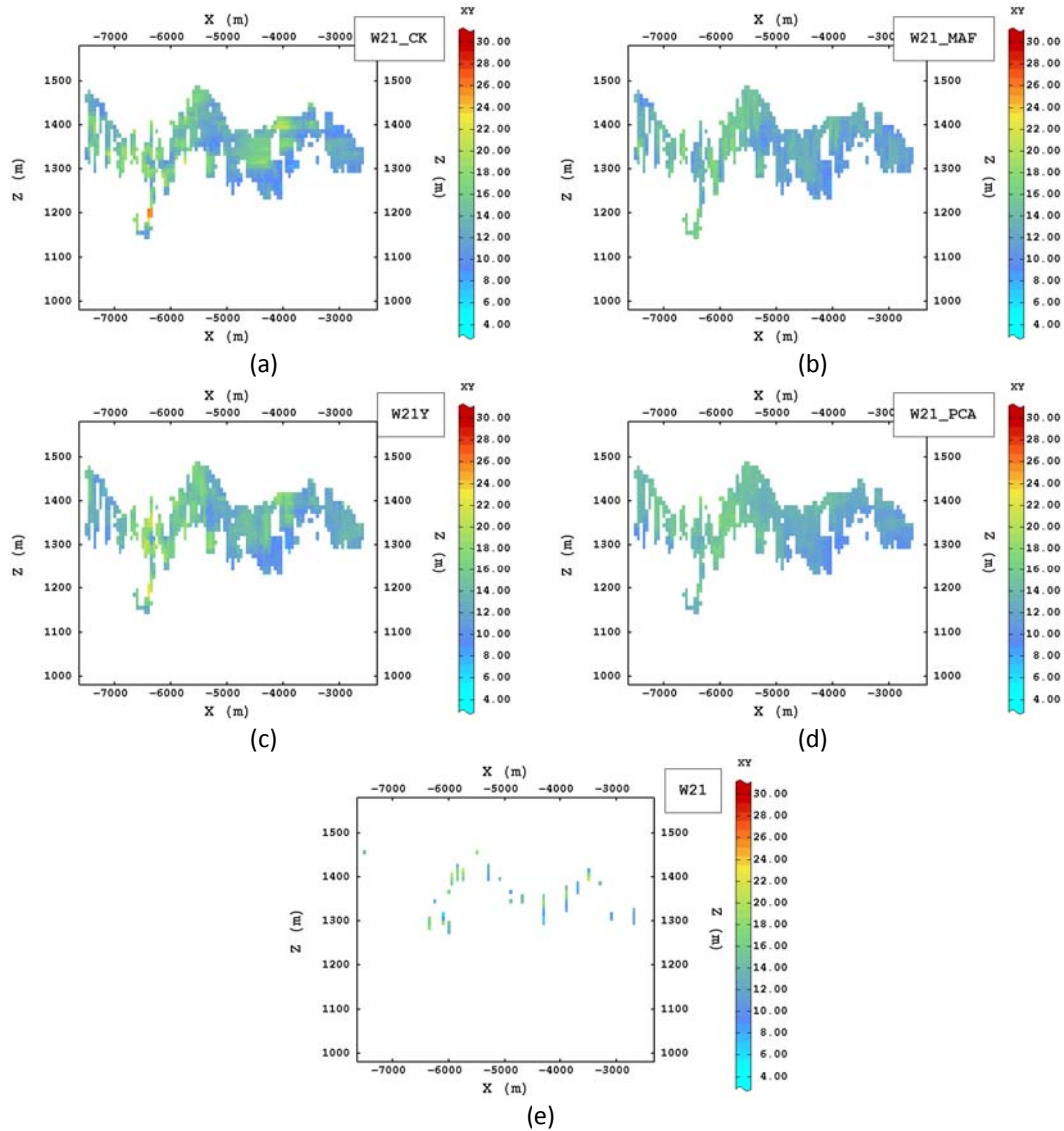


Figura 6.57 - Mapas das estimativas da massa da fração 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W21\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W21\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21Y), e (e) o mapa das amostras (W21) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ ).

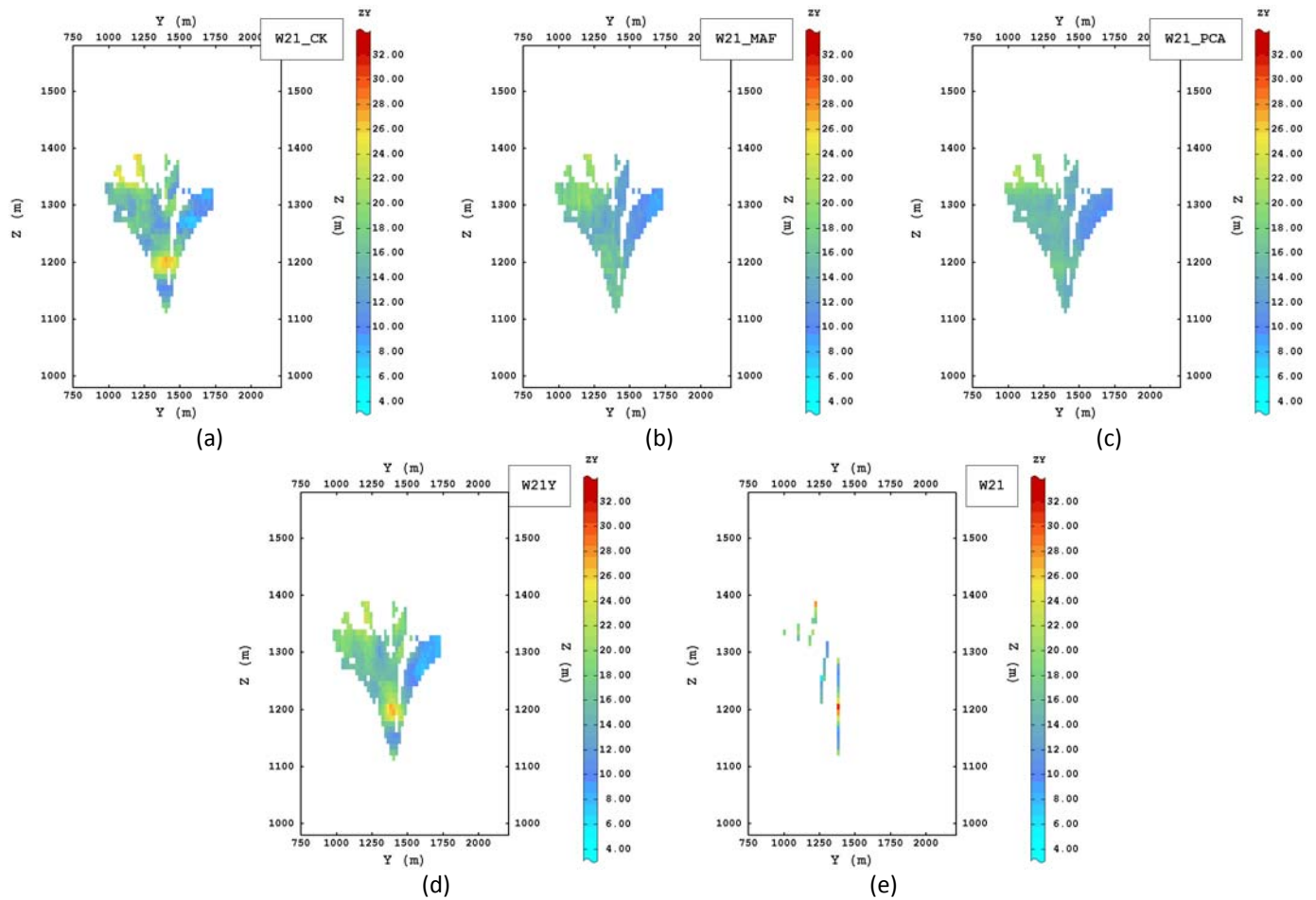


Figura 6.58 - Mapas das estimativas da massa da fração 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W21\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W21\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W21\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W21Y), e (e) o mapa das amostras (W21) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

No caso da massa na faixa 3, a reprodução das feições dos dados originais mais próximos é menos apropriada para o caso das estimativas obtidas por krigagem das componentes PCA (Figura 6.59).

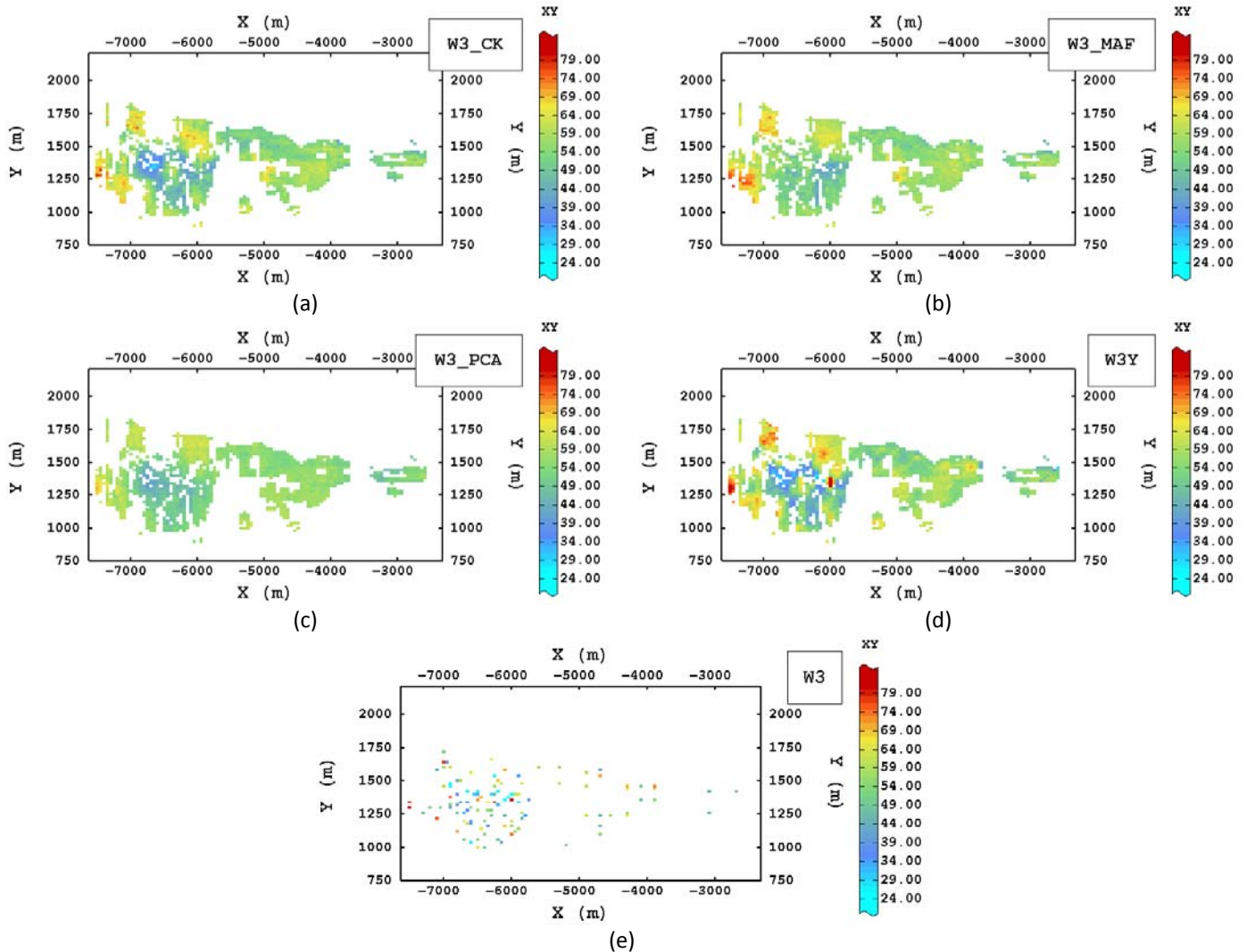


Figura 6.59 - Mapas das estimativas da massa da fração 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W3\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W3\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3Y), e (e) o mapa das amostras (W3) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

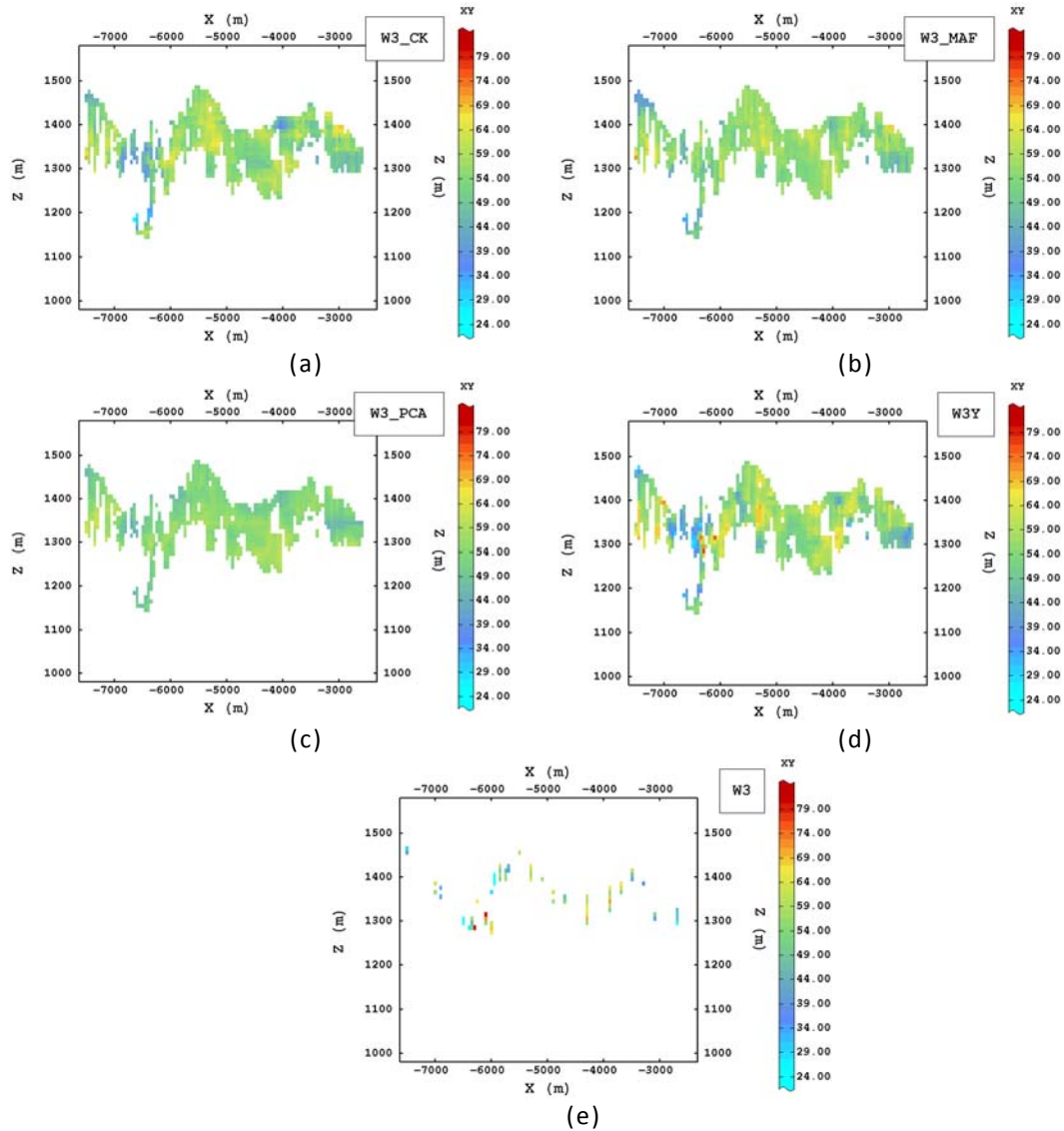


Figura 6.60 - Mapas das estimativas da massa da fração 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W3\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W3\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3Y), e (e) o mapa das amostras (W3) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada (Y=1360m).



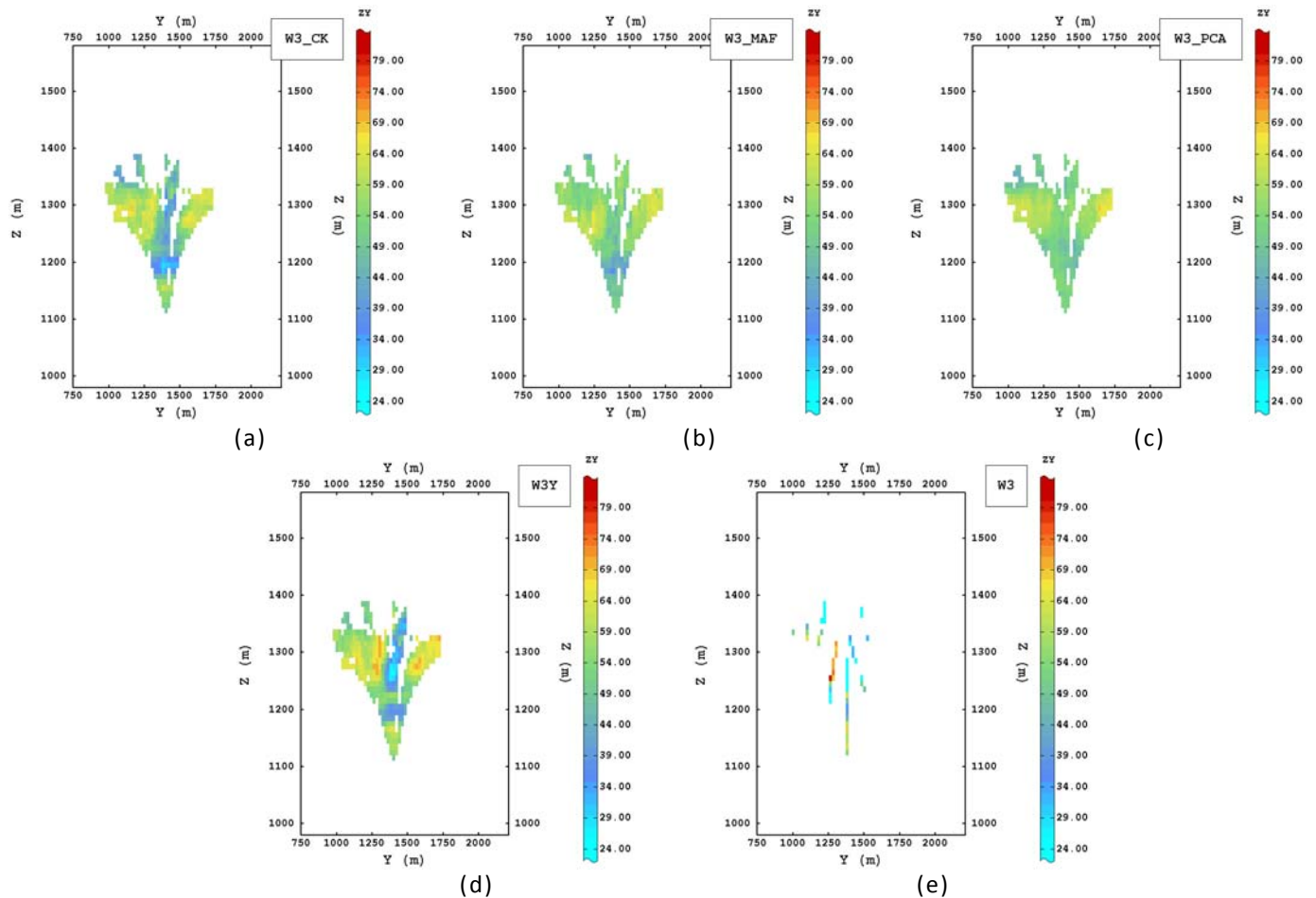


Figura 6.61 - Mapas das estimativas da massa da fração 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W3\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W3\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W3\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W3Y), e (e) o mapa das amostras (W3) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

### 6.5.3 Teores e massa na fração 1

Os mapas correspondentes à fração 1, são apresentados somente no plano XY, para o valor de  $Z=1345\text{m}$ , excetuando o caso da massa, para a qual são apresentados os mapas nos planos XY, XZ e YZ do mesmo modo que no caso dos mapas das massas nas frações 2, 21 e 3 (Figuras 6.62 a 6.70).

No caso a seguir (Figura 6.62), os mapas mais suavizados estão dados pelas estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes PCA e por cokrigagem das razões alr. Porém, no caso da krigagem dos fatores MAF, obtém-se um mapa que apresenta alguns valores extremos que não são coincidentes com o mapa das amostras mais próximas. Porém, é mais semelhante ao mapa obtido por cokrigagem ordinária.

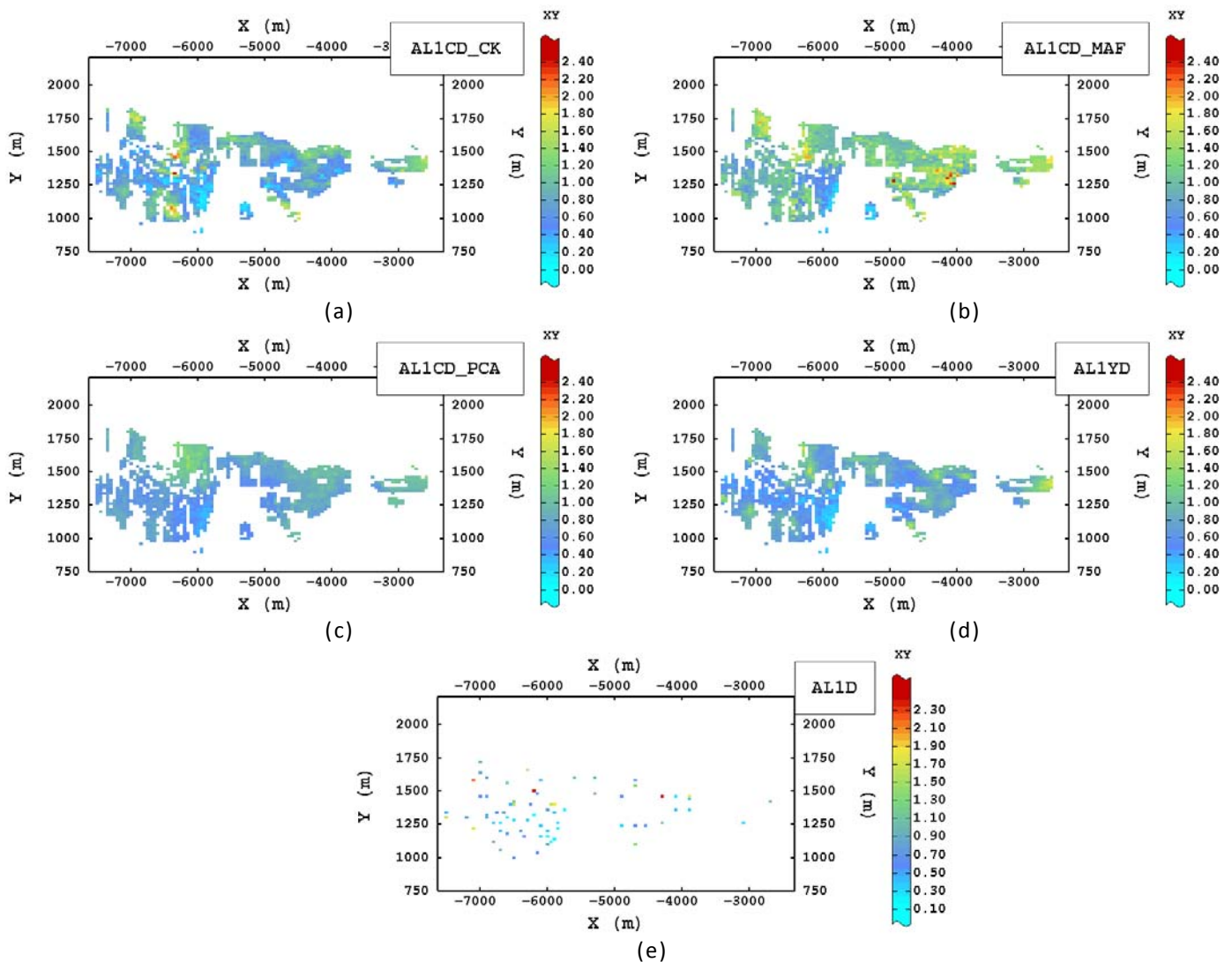


Figura 6.62 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (AL1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (AL1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (AL1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL1YD), e (e) o mapa das amostras (AL1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

Os mapas obtidos a partir da krigagem dos fatores MAF e das componentes principais PCA, apresentam umas regiões com teores mais baixos, contrastando com valores adjacentes muito elevados, o que não é justificado pelo mapa das amostras mais próximas e não acontece no caso dos mapas obtidos a partir da cokrigagem e da cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas que apresentam variações de teores mais gradativas (Figura 6.63).

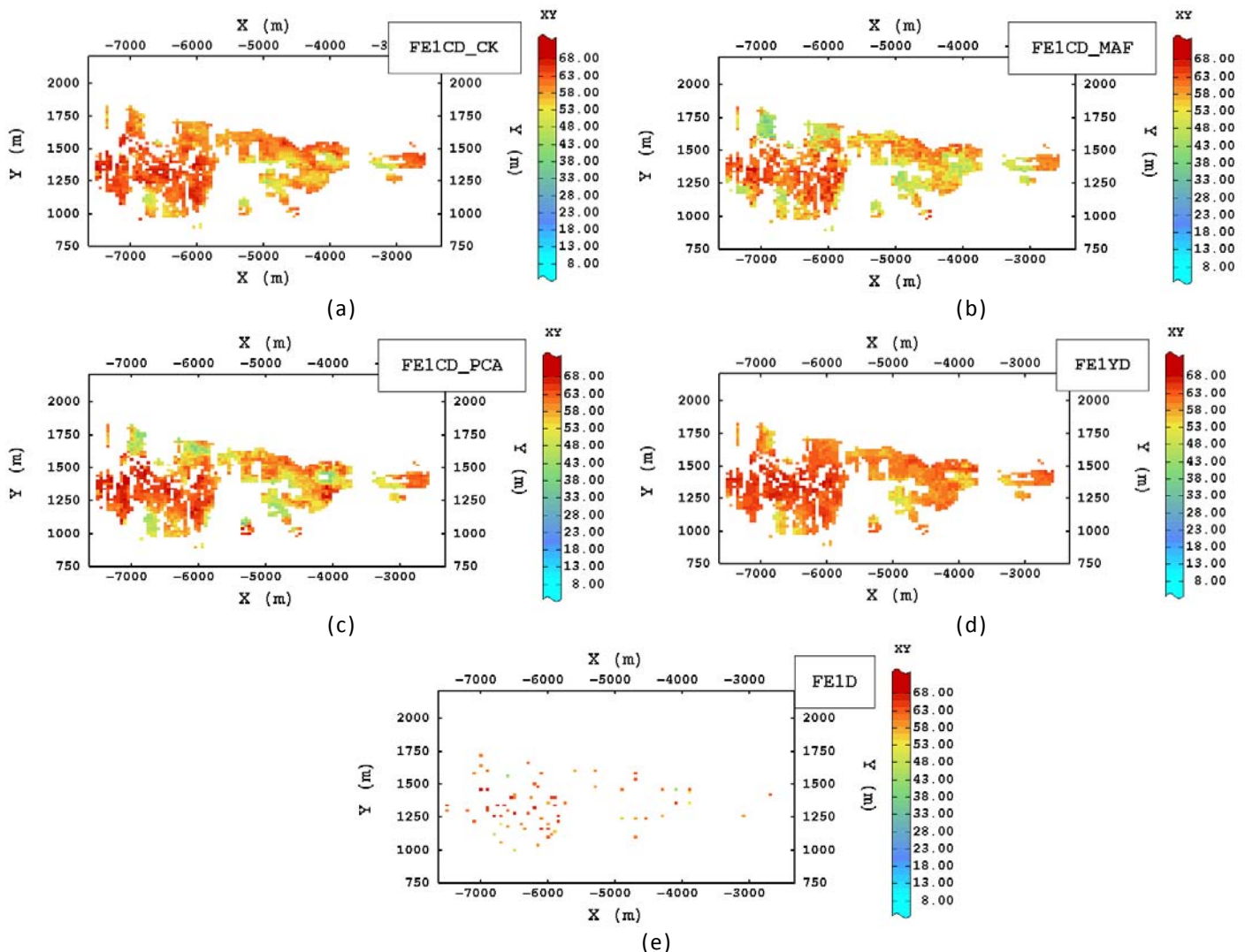


Figura 6.63 - Mapas das estimativas do teor de ferro na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FE1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FE1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FE1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE1YD), e (e) o mapa das amostras (FE1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

No caso do mapa obtido por cokrigagem, aparece a influência de uma amostra elevada numa região de teores mais elevados no mapa do modelo, o que não acontece para as outras metodologias (Figura 6.64).

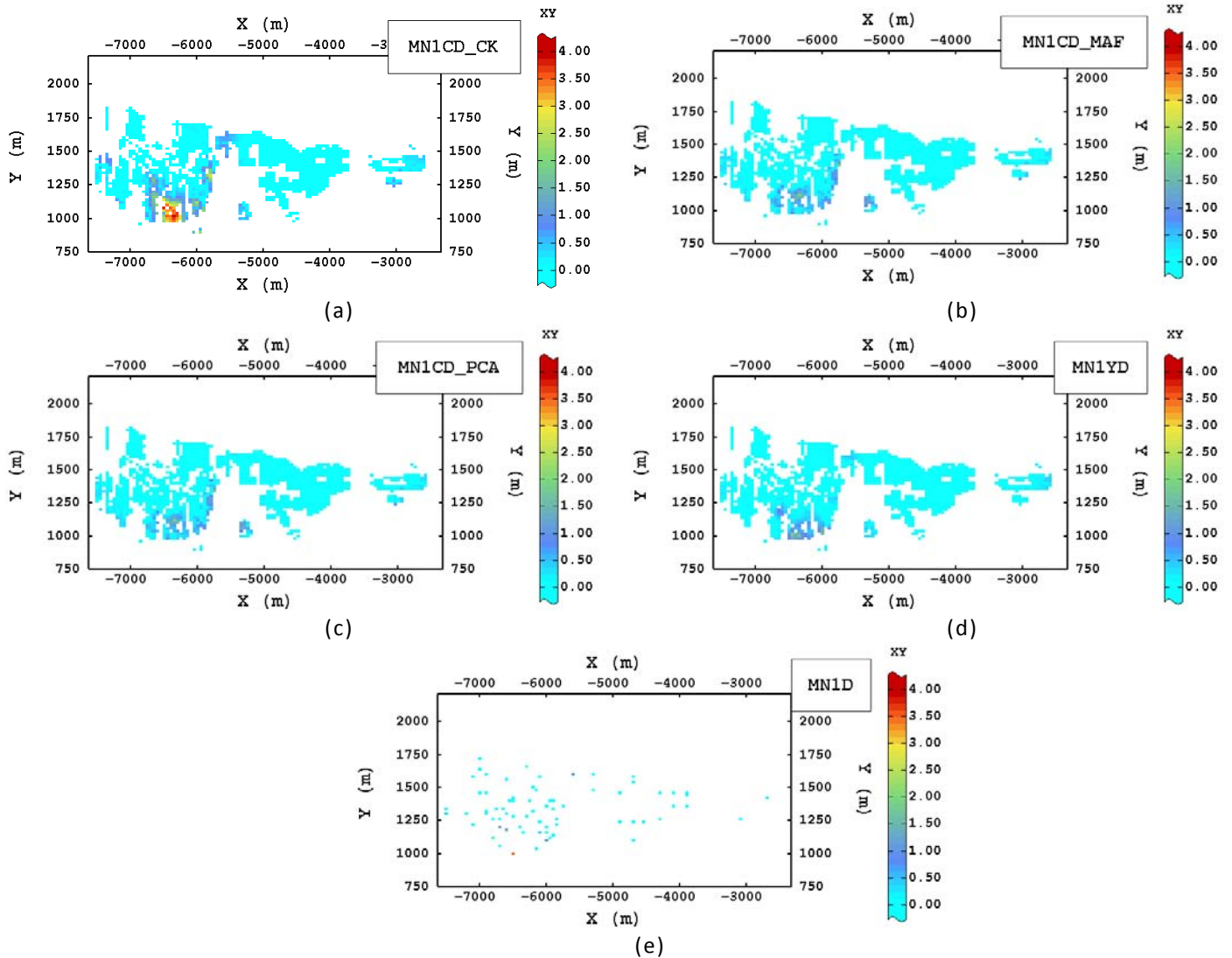


Figura 6.64 - Mapas das estimativas do teor de manganês na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MN1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MN1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MN1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN1YD), e (e) o mapa das amostras (MN1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

No caso do fósforo (Figura 6.65), aparecem alguns valores extremos nos mapas (exceto no caso dos obtidos por cokrigagem das razões alr) que não estão no mapa das amostras mais próximas e podem estar mais distantes, mostrando a sua influência, dados os baixos valores do teor de fósforo. Também, o valor da massa na fração 1 para a cokrigagem das razões alr é um pouco mais elevada que nas outras metodologias, o que pode afetar ao desacumular, gerando valores do teor de fósforo menores.

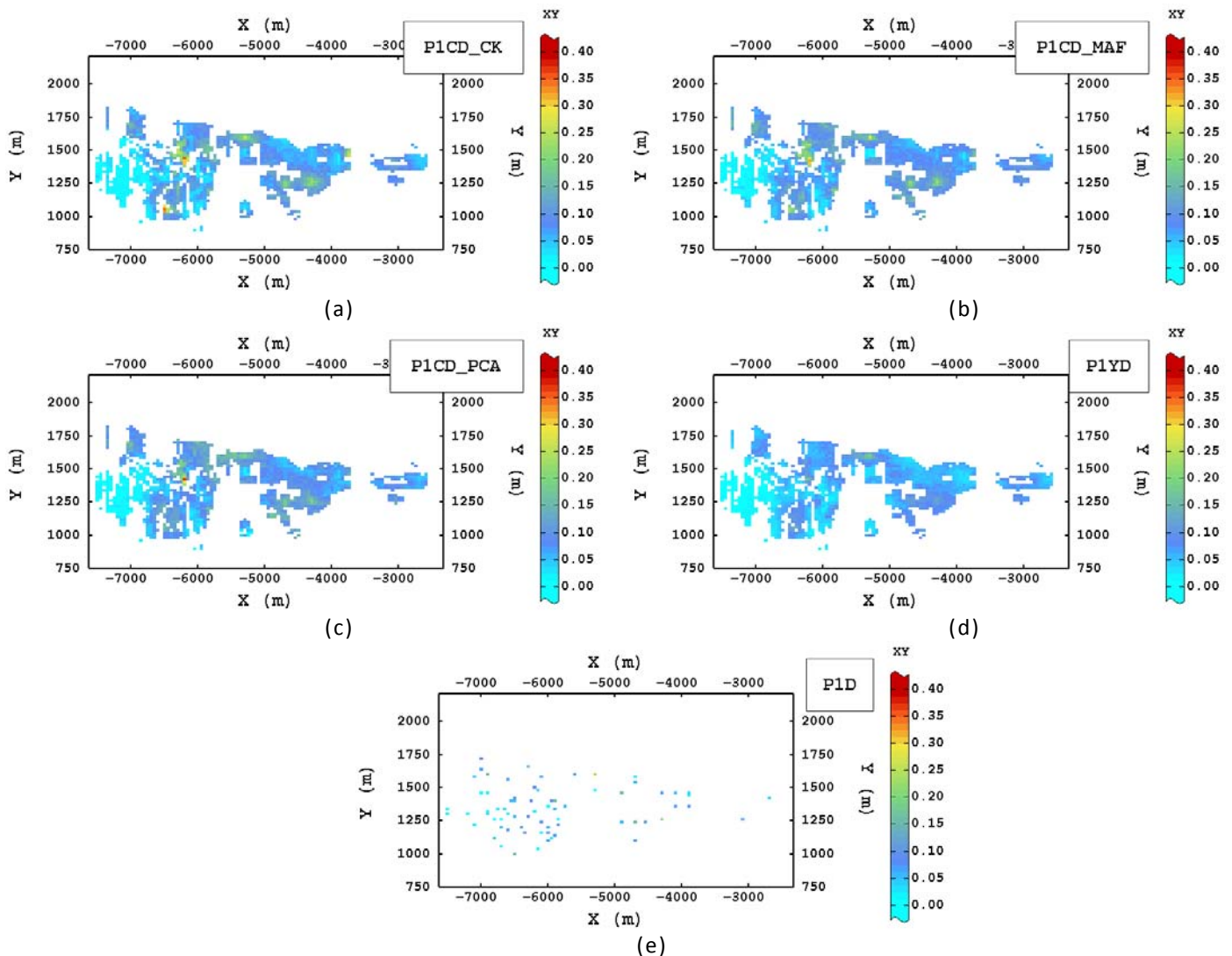


Figura 6.65 - Mapas das estimativas do teor de fósforo na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (P1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (P1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (P1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P1YD), e (e) o mapa das amostras (P1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

O mapa das perdas por calcinação obtido a partir das estimativas realizadas por cokrigagem das razões  $\ln r$ , é mais apropriado que os restantes onde se tem uma suavização excessiva (krigagem PCA) ou valores muito contrastantes (cokrigagem, krigagem dos fatores MAF) (Figura 6.66).

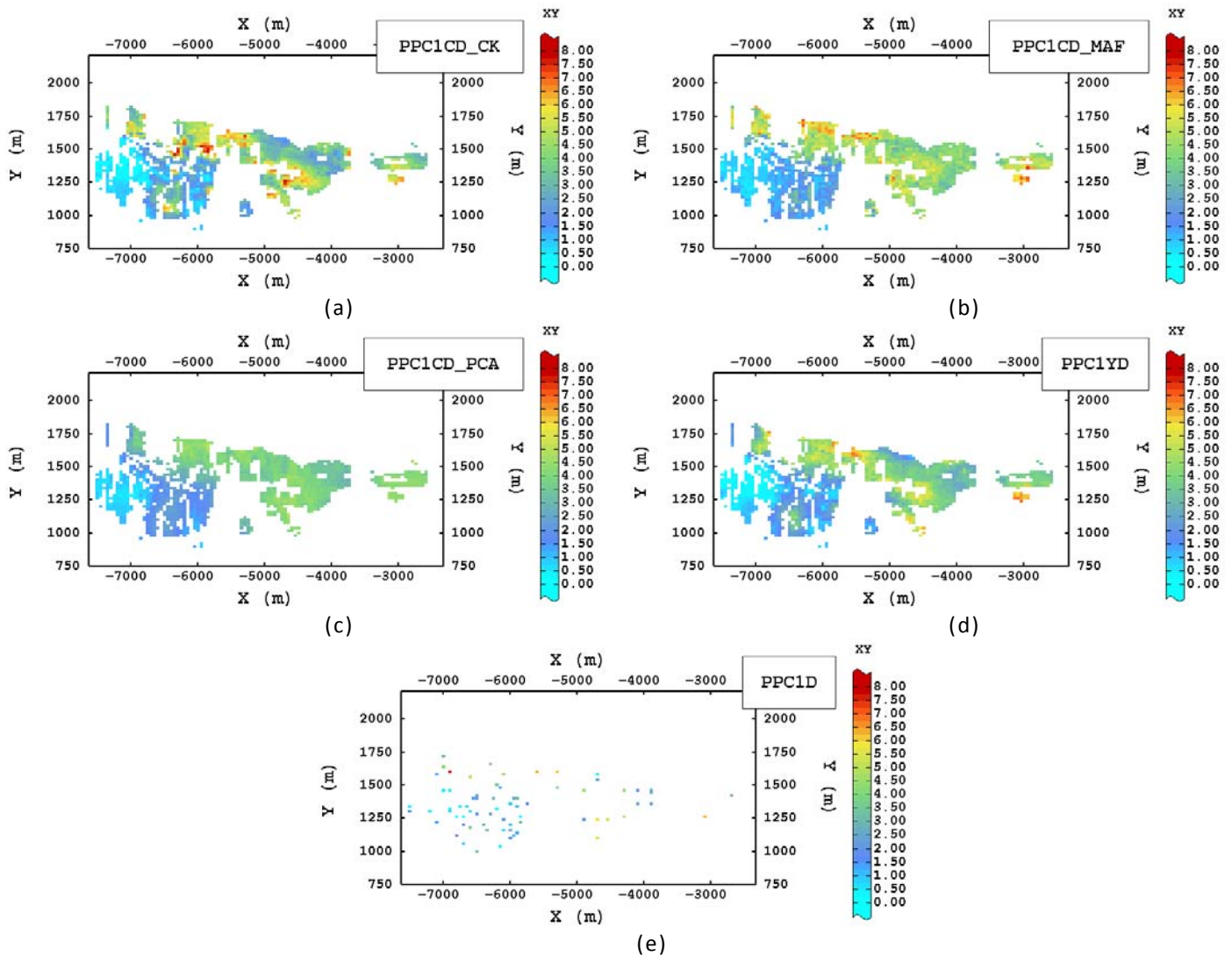


Figura 6.66 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPC1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPC1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPC1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC1YD), e (e) o mapa das amostras (PPC1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

O mapa das estimativas da sílica a partir da krigagem dos fatores MAF aparece com valores extremos elevados, quando comparado com os valores dos restantes mapas e do mapa das amostras mais próximas (Figura 6.67).

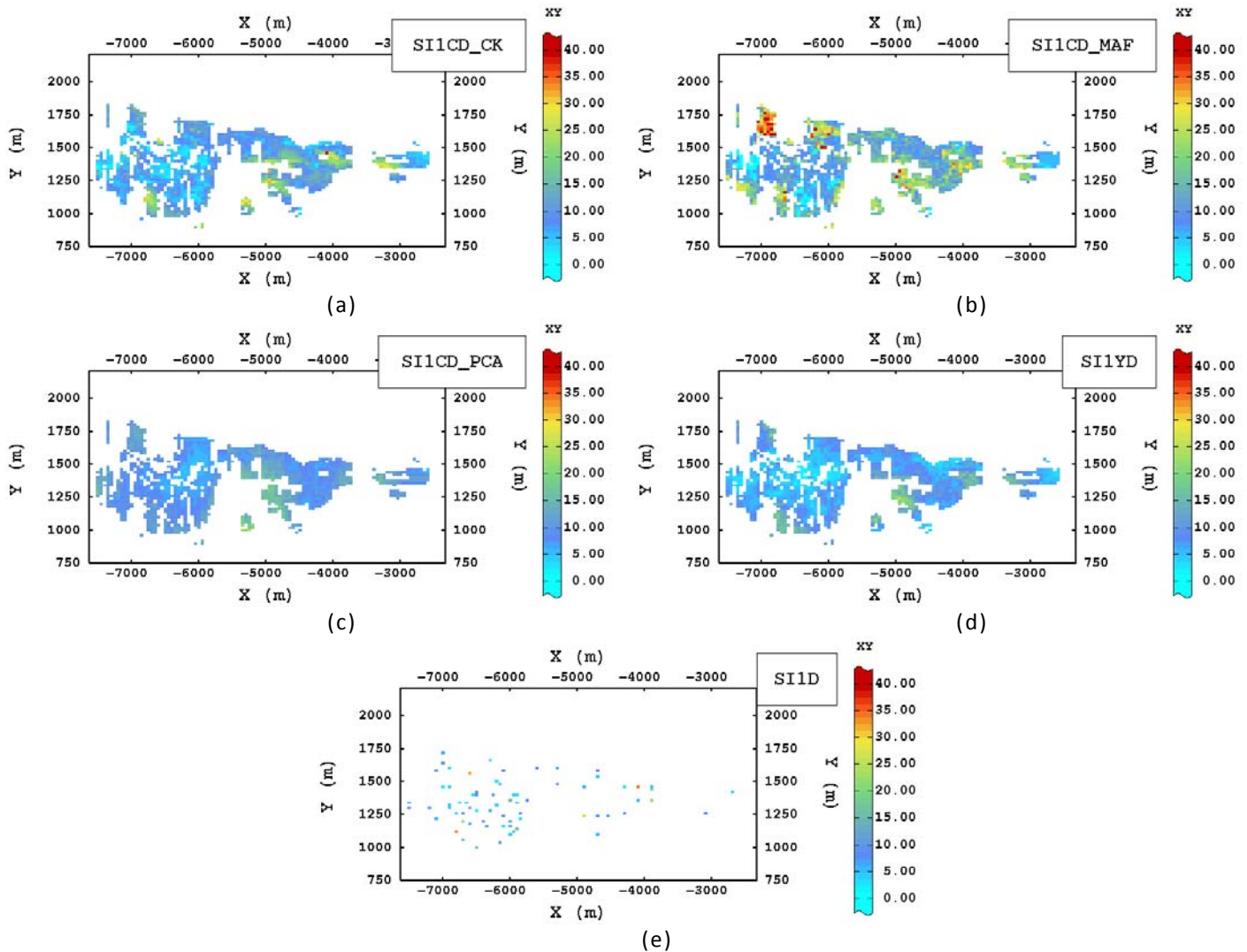


Figura 6.67 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SI1CD\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SI1CD\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SI1CD\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI1YD), e (e) o mapa das amostras (SI1D) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).

Tanto a cokrigagem ordinária quanto a cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas refletem melhor os valores extremos da massa da fração granulométrica na faixa 1, mostrados no mapa das amostras mais próximas, sem o suavizado dado nos mapas obtidos a partir das estimativas determinadas por krigagem dos fatores MAF e das componentes PCA (Figuras 6.68, 6.69 e 6.70).

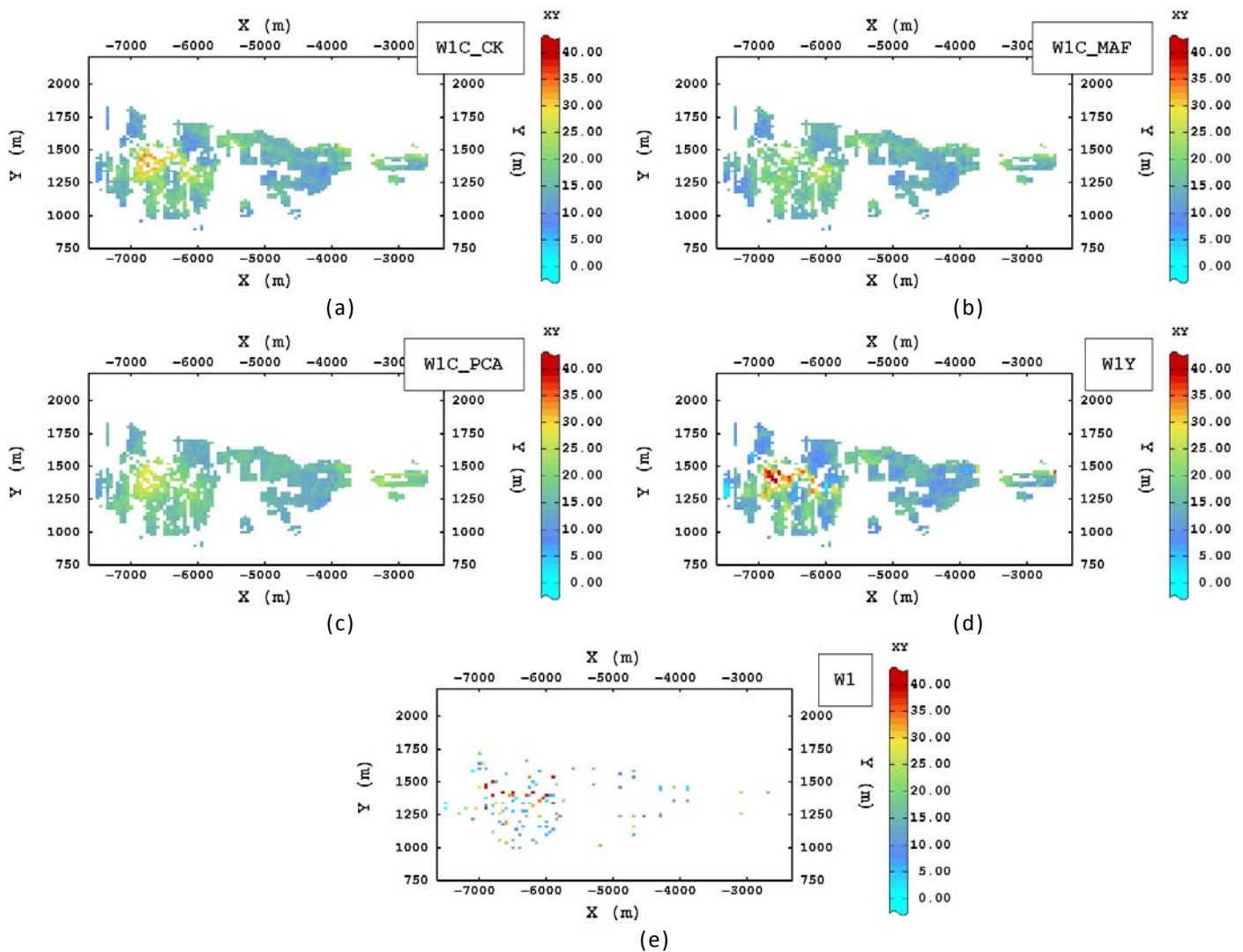


Figura 6.68 - Mapas das estimativas da massa da fração 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W1\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W1\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W1\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y), e (e) o mapa das amostras (W1) mais próximas à seção horizontal XY do modelo de blocos considerada (Z=1345m).



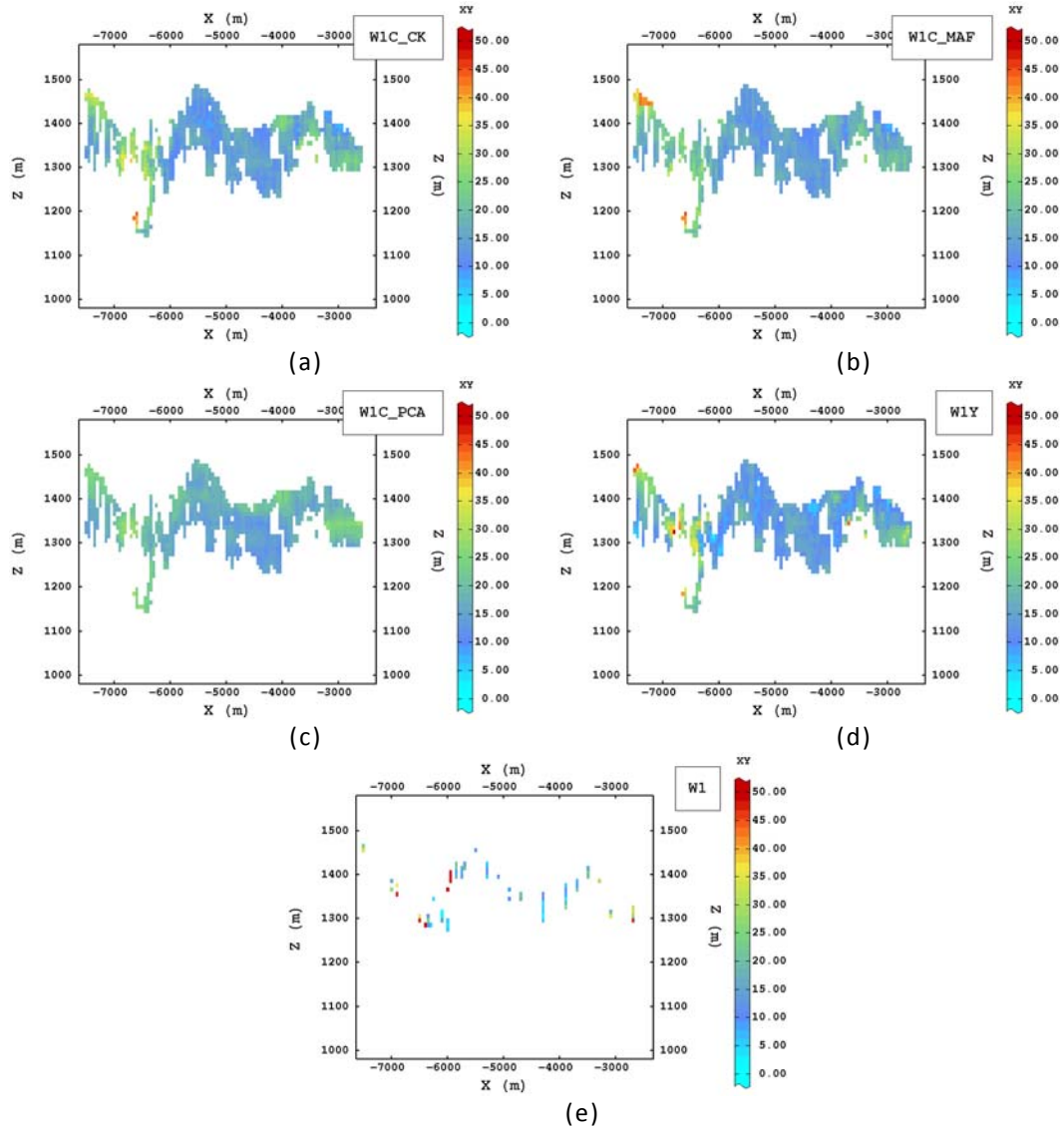


Figura 6.69 - Mapas das estimativas da massa da fração 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W1\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W1\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W1\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y), e (e) o mapa das amostras (W1) mais próximas à seção vertical XZ do modelo de blocos considerada ( $Y=1360\text{m}$ ).

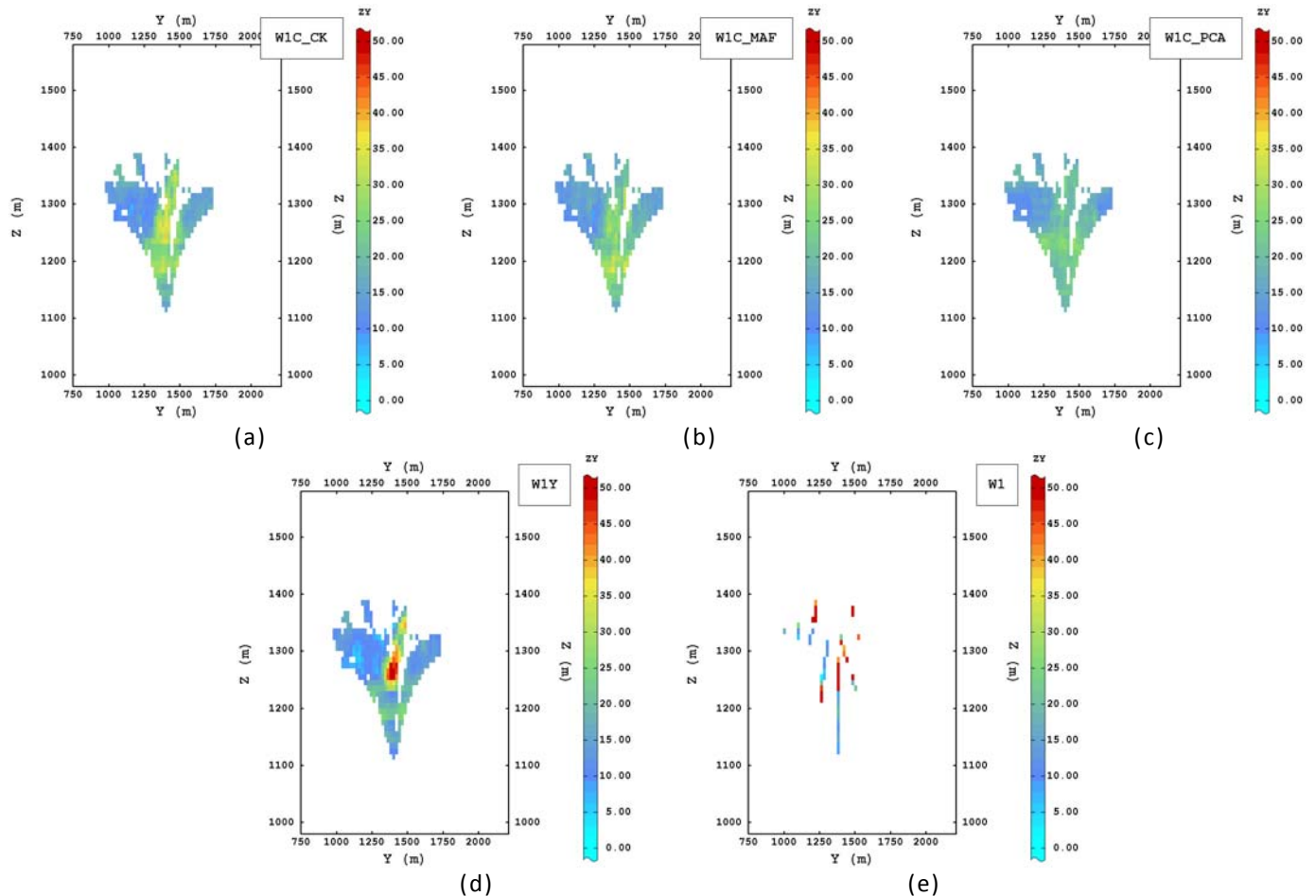


Figura 6.70 - Mapas das estimativas da massa da fração 1, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (W1\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (W1\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (W1\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (W1Y), e (e) o mapa das amostras (W1) mais próximas à seção vertical YZ do modelo de blocos considerada ( $X=-6350\text{m}$ ).

## 6.6 Fechamento dos balanços estequiométricos

Em cada metodologia abordada, foi ressaltado o fato de que não podem ser satisfeitos simultaneamente os balanços de massa e estequiométricos, apresentados de forma esquemática já no Capítulo 1, na Figura 1.3.

Para a cokrigagem ordinária, krigagem ordinária dos fatores MAF e krigagem ordinária das componentes principais PCA, o balanço de massa é garantido ao deixar fora as variáveis correspondentes à faixa 1 e determinando-as posteriormente pelas relações das Equações (3.1) a (3.7).

Precisa-se, portanto, conferir se o balanço estequiométrico, dado pela Equação (3.15) é satisfeito.

As estimativas obtidas por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas alr satisfazem os balanços de massa nas Figuras 5.1 e 5.2. No que se refere aos balanços estequiométricos, os mesmos são satisfeitos só para as faixas 21 e 22. Como foi mencionado no Capítulo 5, o balanço estequiométrico dos teores globais, apresentado na Figura 5.1, não é satisfeito já que se substitui o teor global de ferro (FETY2) pelo fornecido pela relação do balanço de massa (FETY).

Nas Figuras 6.71 a 6.75, são apresentados os histogramas da soma estequiométrica da Equação (3.15), com valor teórico de 100%.

É importante ressaltar, que as estimativas obtidas por cokrigagem tem que ser pós-processadas, assim como também as estimativas na faixa 1 calculadas a partir das estimativas obtidas por krigagem dos fatores MAF e das componentes PCA. As estimativas obtidas por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas não precisam ser pós-processadas.

Os histogramas que apresentam a dispersão mais elevada dos valores de fechamento estequiométrico são os correspondentes as estimativas obtidas por krigagem das componentes PCA.

As somas correspondentes as estimativas obtidas por cokrigagem apresentam histogramas pouco espalhados, com valores da média no entorno do 100%. Porém, os valores mínimos são mais distantes do valor esperado de 100% do que no caso das somas obtidas a partir das estimativas determinadas por krigagem dos fatores MAF e por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas, exceto no caso da soma para a faixa 3.

A soma estequiométrica na faixa 21, obtida por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas apresenta um fechamento de 100% para a totalidade das estimativas.

No caso da faixa 1, a soma estequiométrica obtida a partir das estimativas determinadas por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas é a única que apresenta valores extremos razoáveis.

De forma geral, as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária, krigagem dos fatores MAF e cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas, apresentam somas estequiométricas distribuídas simetricamente em torno de 100%.

A faixa 1, novamente apresenta a acumulação dos erros das estimativas das restantes faixas e do global, exceto no caso da cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas.

Comparando os fechamentos estequiométricos das estimativas obtidas por krigagem dos fatores MAF e das componentes PCA, pode-se dizer que os primeiros são mais satisfatórios.

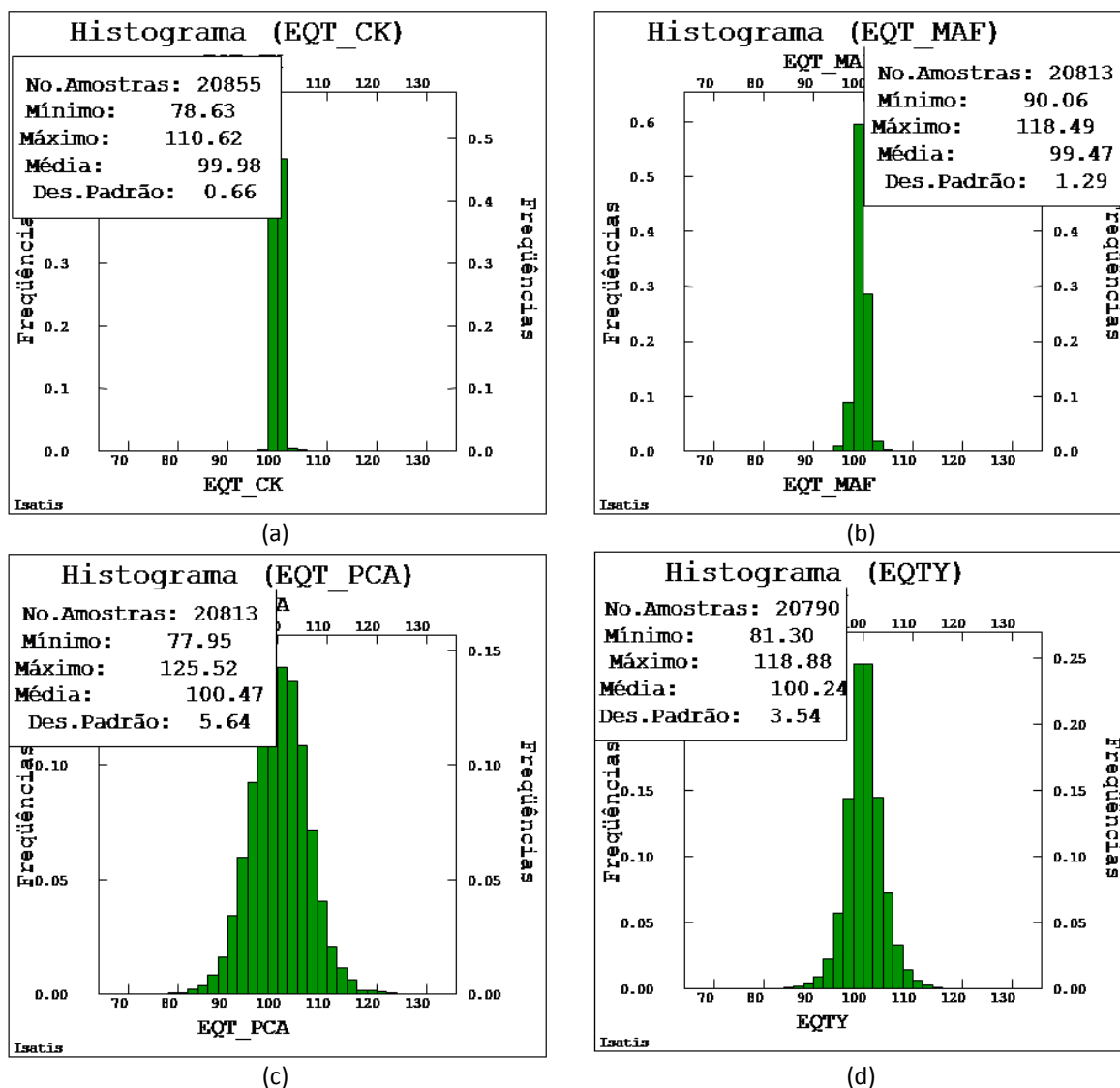
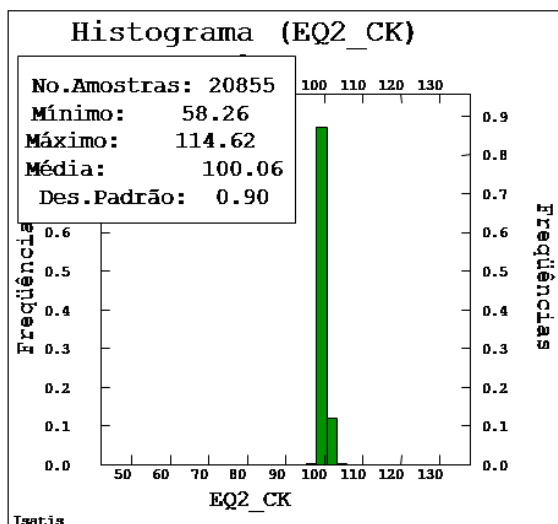
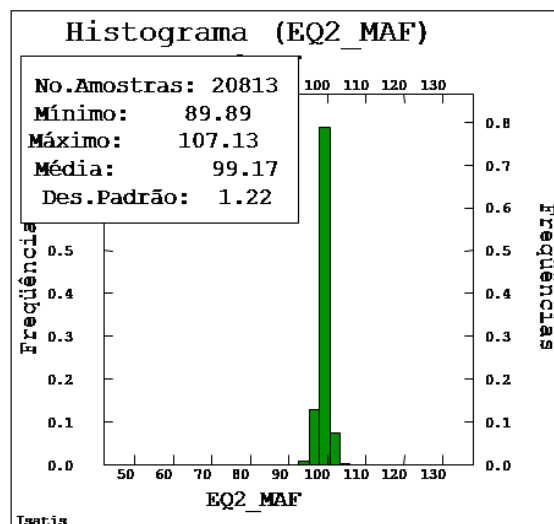


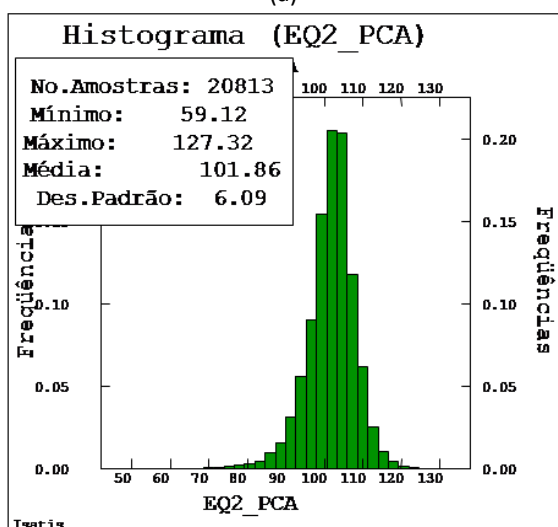
Figura 6.71 – Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores globais obtidos por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr.



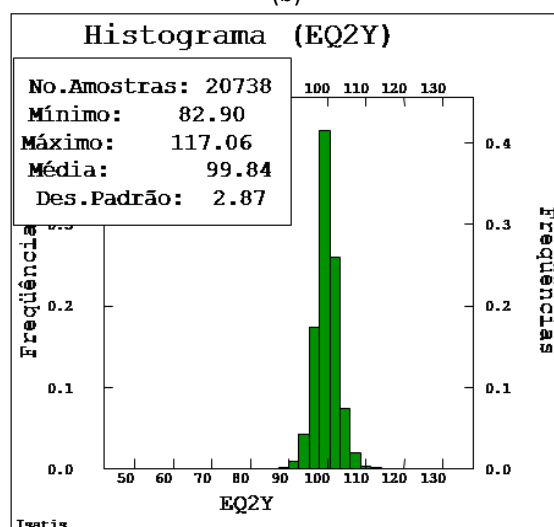
(a)



(b)

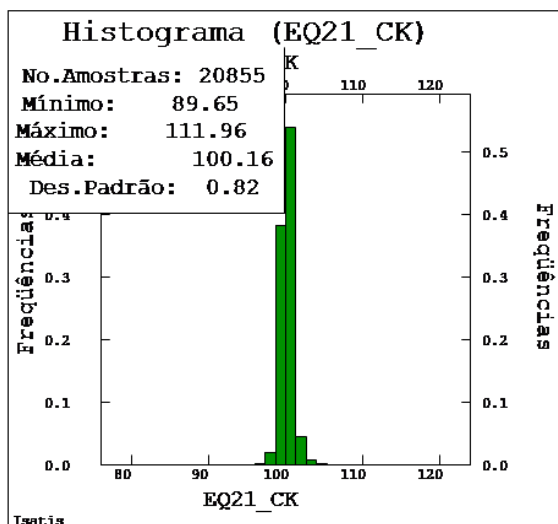


(c)

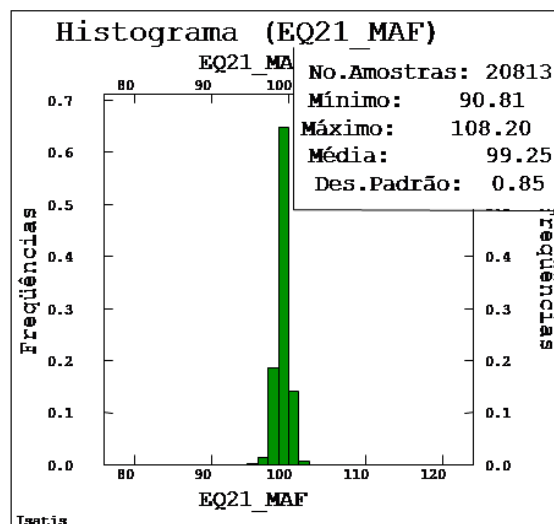


(d)

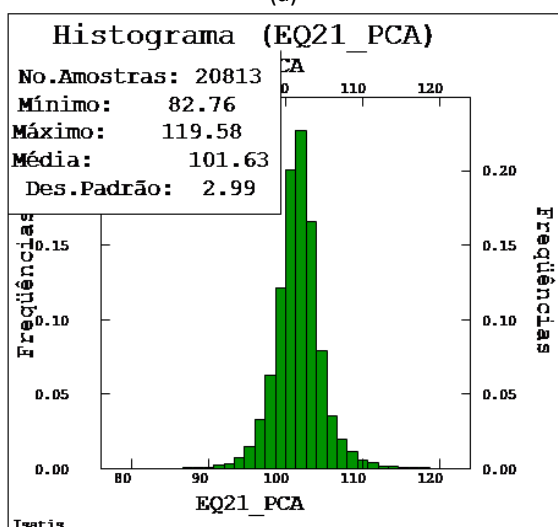
Figura 6.72 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores estimados na faixa 2 por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr.



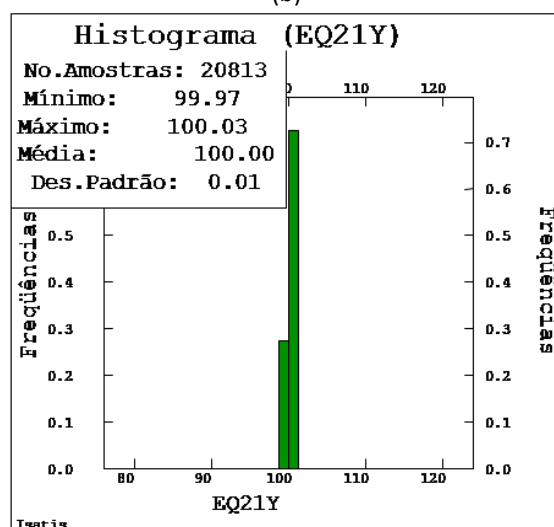
(a)



(b)

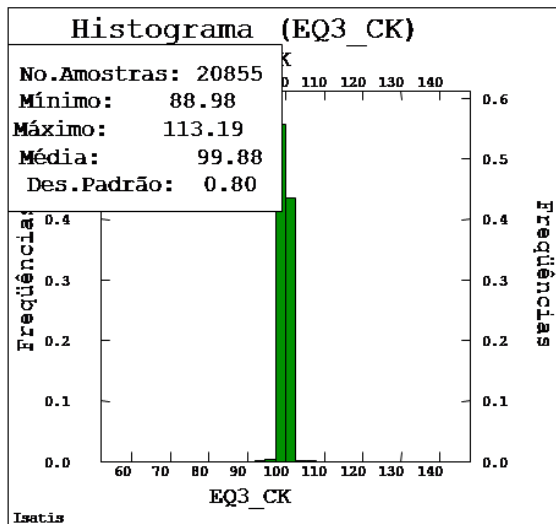


(c)

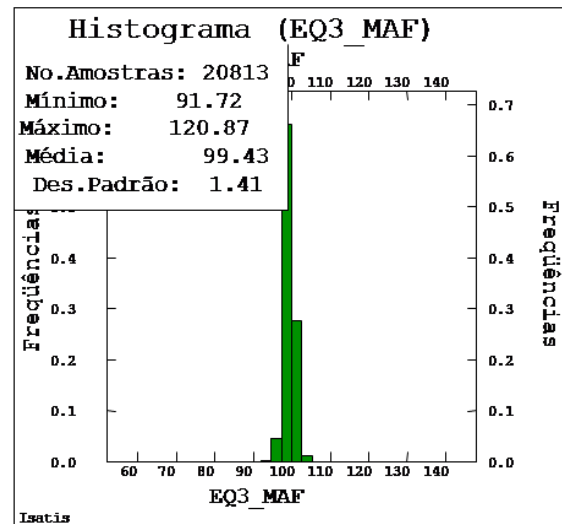


(d)

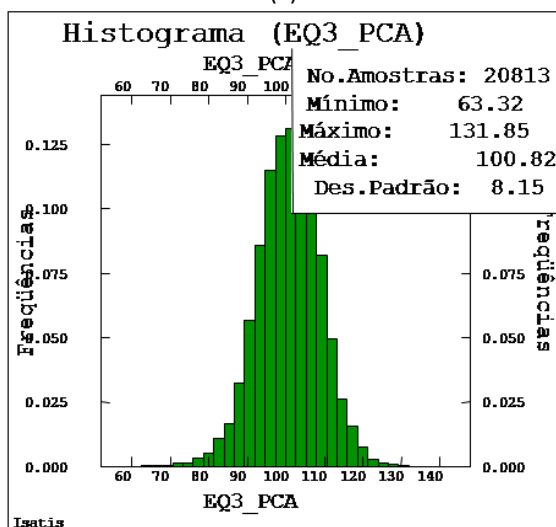
Figura 6.73 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores estimados na faixa 21 por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr.



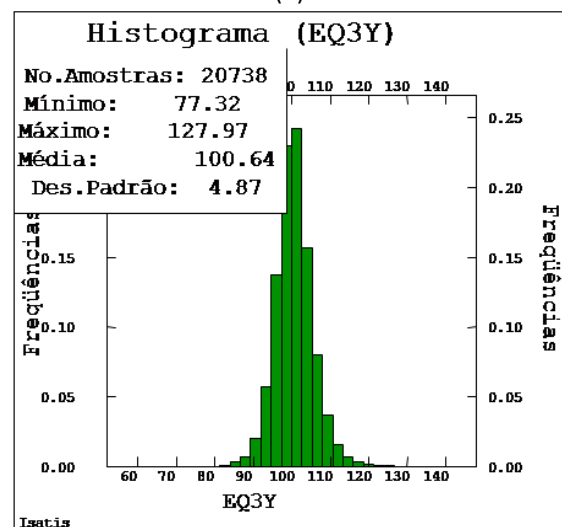
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura 6.74 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado a partir dos teores estimados na faixa 3 por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr.

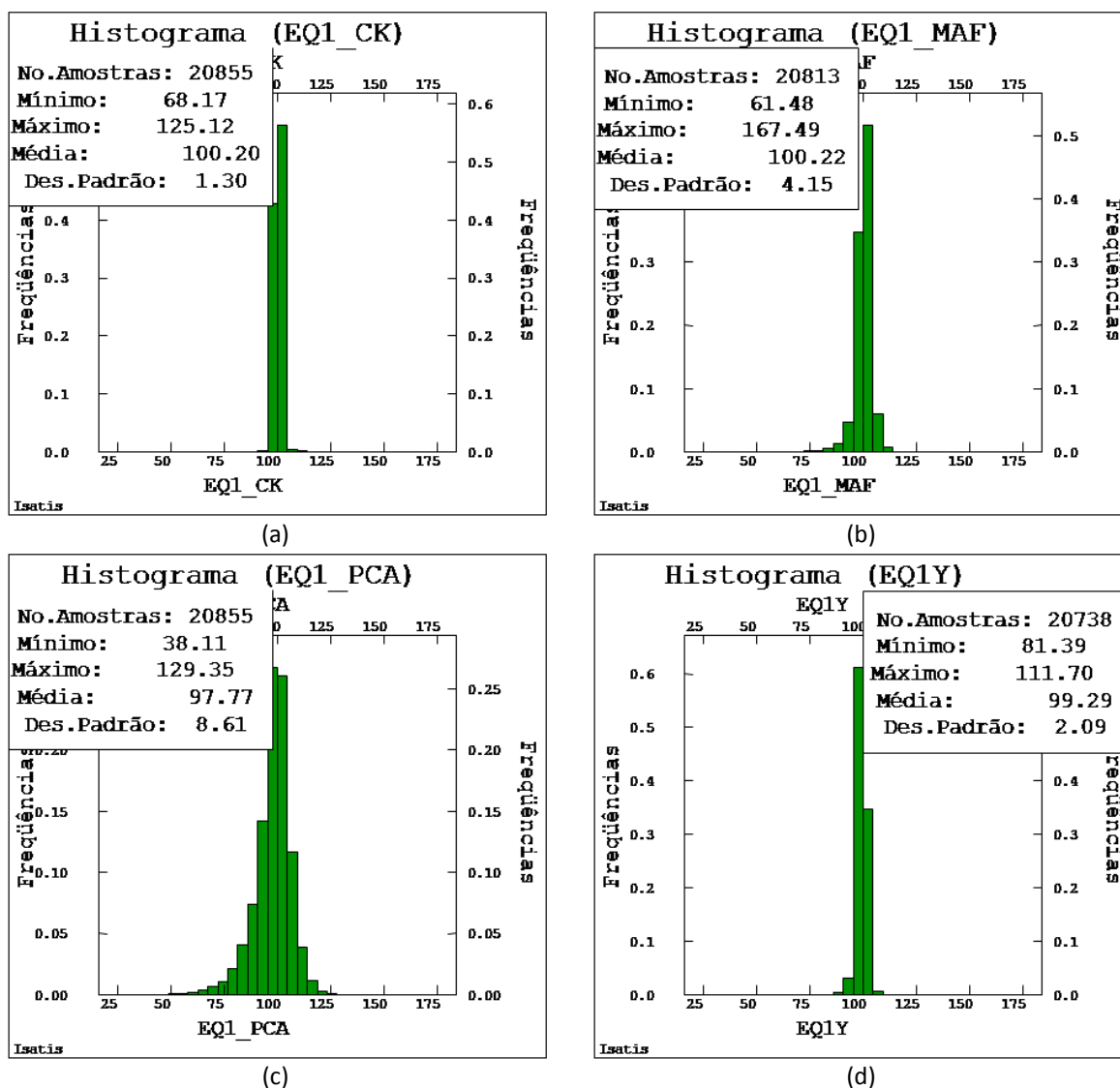


Figura 6.75 - Histograma da soma do balanço estequiométrico, com valor teórico de 100%, determinado com os teores da faixa 1 calculados a partir das estimativas obtidas por (a) cokrigagem ordinária, (b) krigagem dos fatores MAF, (c) krigagem dos fatores PCA e (d) cokrigagem das razões logarítmicas alr.

## 6.7 Discussão comparativa das metodologias utilizadas

A seguir, são consideradas cada uma das metodologias utilizadas, colocando considerações referentes aos aspectos da sua implementação e resultados obtidos.



### 6.7.1 Cokrigagem ordinária

A cokrigagem ordinária é uma metodologia que provêm estimativas não tendenciosas minimizando a variância do erro e melhora as estimativas de uma variável chamada de primária, ao incorporar informações secundárias provenientes de outras variáveis fortemente correlacionadas com a primária ou que estejam mais densamente amostradas, conseguindo lidar adequadamente com bancos de dados heterotópicos. A maior dificuldade na sua implementação vem dada pela modelagem do Modelo Linear de Corregionalização.

No caso de variáveis cujas estimativas devam apresentar uma soma constante (100% por exemplo), as estimativas obtidas por cokrigagem não garantem o fechamento e ao mesmo tempo são obtidas estimativas que estão fora do intervalo original das amostras, ou até apresentam valores negativos.

Numa primeira instância, o fechamento não é garantido, já que no caso das somas fechadas, as estimativas devem pertencer ao simplex, que é o espaço amostral das variáveis regionalizadas com soma fechada, como foi apresentado na Equação (2.87).

O simplex é uma configuração espacial de  $n$  dimensões determinadas a partir de  $(n+1)$  pontos (Aitchison, 1986). Por exemplo, um simplex triangular tem três vértices e duas dimensões – o triângulo, num plano. Portanto, os sistemas conformados por três variáveis, podem ser representados num diagrama ternário (Aitchison, 1986; Tolosana-Delgado, 2006).

Para as massas das frações 1, 2 e 3, cuja soma fechada é de 100%, a composição  $[W_1(u), W_2(u) \text{ e } W_3(u)]$  é representada por um ponto  $P$  num triângulo onde  $W_1$ ,  $W_2$  e  $W_3$  são as distâncias perpendiculares aos lados opostos aos vértices respectivos 1, 2 e 3. (Figura 6.76). A soma das perpendiculares, em qualquer ponto no interior do triângulo é de 100%.

No caso da cokrigagem, as estimativas não estão restringidas ao simplex, pelo que para satisfazer a soma fechada existem duas alternativas: deixar uma variável fora do sistema de cokrigagem e determiná-la a posteriori por diferença, ou determinar todas as variáveis e depois distribuir o erro segundo o exemplo dado pela Equação (6.1).

Respeito aos valores negativos, como foi explicado no Capítulo 2, item 2.3.4.1, existe uma condição de viés negativo que leva a valores de covariância direta (variância) negativa, o que não é possível.

Mesmo assim, substituindo os valores inválidos (pós-processamento) e determinando uma faixa por diferença ou distribuindo o erro, obtêm-se valores que provém uma reprodução adequada da média, diagramas de análise de deriva consistentes com os dos dados originais e fechamentos estequiométricos adequados.

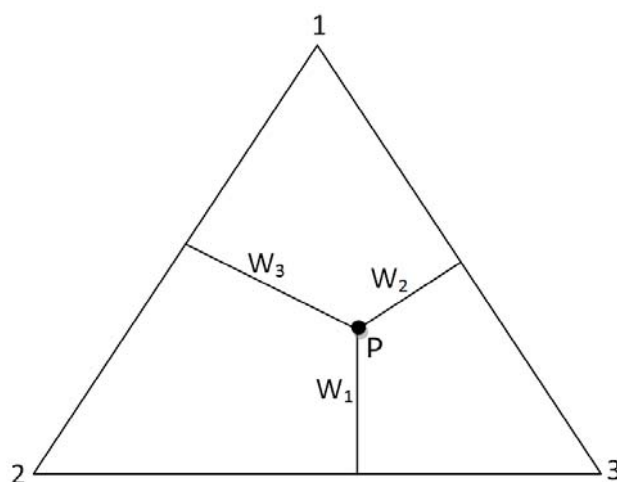


Figura 6.76 – Diagrama ternário para a composição de três partes  $[W_1(u), W_2(u), W_3(u)]$ , representada pelo ponto  $P$ .

### 6.7.2 Decomposição em Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos

As estimativas obtidas a partir da krigagem ordinária de fatores MAF, apresentam a vantagem de estarem dentro do intervalo original das amostras, exceto no caso das variáveis na faixa 1, determinadas por diferença, o que é dado pela etapa de normalização e retro-transformação ao espaço original inerente à metodologia.

A descorrelação até um vetor de separação de 150m fornece resultados diferentes dos obtidos por metodologias que descorrelacionam as variáveis somente no vetor de separação nulo, como é o caso da decomposição em componentes principais (PCA).

Assim, na análise dos resultados, os mesmos resultam sistematicamente mais apropriados para o caso da decomposição por meio de fatores MAF que no caso da decomposição por PCA.

Uma desvantagem da metodologia vem dada pela transformação em fatores que são difíceis de interpretar no espaço transformado.

Também, é necessário que o banco de dados seja isotópico. Essa desvantagem pode ser superada estimando ou simulando as variáveis faltantes nos locais amostrais onde não se dispõe da informação.

A pesar dos dados estarem dentro dos intervalos originais das amostras, nada garante que os fechamentos estequiométricos sejam satisfeitos. Como na cokrigagem ordinária, deve-se deixar fora uma variável que carregue o somatório dos erros ou estimar todas as variáveis e, numa etapa posterior, distribuir o erro como é exemplificado na Equação (6.1).

A maior vantagem dessa metodologia vem dada pelo fato de ela não precisar da modelagem da correionalização. Cada fator MAF é estimado de forma independente, sem a necessidade de modelar o Modelo Linear de Correionalização.

A metodologia também tem a vantagem de poder ser implementada por meio de operações matemáticas matriciais e não precisar de um software específico para a sua implementação.

Hoje existem novas metodologias, derivadas da decomposição em fatores MAF, que permitem a descorrelação para todos os vetores de separação, as quais também podem ser implementadas por operações matriciais (Bandarian e Mueller, 2008; Bandarian et. al, 2008).

A metodologia não apresenta um viés apreciável quando comparada com as estimativas obtidas por cokrigagem ordinária, já que os diagramas de dispersão das estimativas obtidas por ambas as metodologias (Figuras 6.19 a 6.33 e G19 a g.36 do Apêndice G) mostram-se simétricos em torno da bissetriz na maioria dos casos, com exceções nas estimativas do manganês e na faixa 1.

No Apêndice H, são apresentadas as estimativas dos teores globais determinados por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio do E-Type (Deutsch e Journel, 1998) correspondente às realizações das simulações estocásticas dos fatores uma vez retro-transformados ao espaço original para observar a influência da aproximação realizada (krigagem ordinária de uma transformação não linear) na observação de um viés nas estimativas.

### 6.7.3 Cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas

Como no caso da transformação em fatores MAF, a transformação em razões-logarítmicas aditivas faz difícil a interpretação dos dados e estimativas transformados.

Porém, na abordagem de *permanecer-no-simplex*, não considerada nessa tese, os dados e estimativas são interpretados no simplex. Nesse caso, abandona-se o espaço Euclidiano de duas ou três dimensões e trabalha-se num espaço de Hilbert, no qual se pode trabalhar com finitas ou infinitas dimensões (Pawlowsky-Glahn e Egozcue, 2001; Tolosana-Delgado, 2006), podendo demonstrar nele, a não tendenciosidade dos estimadores (Pawlowsky-Glahn e Egozcue, 2002; Tolosana-Delgado, 2008).

Os resultados não precisam de pós-processamento, com um fechamento de 100% para todas as estimativas, as quais provêm uma reprodução adequada da média, diagramas de análise de deriva consistentes com os dos dados originais e fechamentos estequiométricos adequados.

No entanto, a metodologia não dá solução ao problema da decorrelação das variáveis, fazendo com que seja necessária a modelagem da correionalização para um aproveitamento das correlações espaciais entre as razões-logarítmicas.

Porém, a transformação em razões-logarítmicas aditivas provoca uma redução dimensional nos sistemas, fazendo com que os modelos lineares de correionalização fiquem mais simples de modelar. De fato, as composições de D componentes são D-1 dimensionais, por causa da soma constante que retira um grau de liberdade (por exemplo, uma composição de três partes pode ser desenhada num plano de duas dimensões, num diagrama ternário, como foi apresentado na Figura 6.76).

### 6.7.4 Considerações gerais

De forma geral, é importante destacar que nenhuma das metodologias abordadas na presente tese, permite o fechamento simultâneo dos balanços de massa e estequiométricos.

Cada metodologia alternativa à metodologia clássica da cokrigagem ordinária apresenta vantagens e desvantagens. Qual escolher depende das necessidades do usuário dependendo do estudo de caso.

A não disponibilidade de um software que permita a modelagem do modelo linear de correção regionalização faz com que as metodologias que descorrelacionam as variáveis e permitem estimá-las de forma independente sejam de mais apropriadas.

No entanto, a abordagem dada pela análise de dados composicionais é uma metodologia que fornece melhores resultados quando é necessário garantir o fechamento de balanços estequiométricos ou de massa, sem distribuir o erro ou carregá-lo acima de uma única variável.

## Capítulo 7

### Conclusões

A seguir, são apresentadas as conclusões dessa tese, fazendo uma análise retrospectiva para observar se a meta e objetivos expostos no Capítulo 1 foram atingidos.

Também, são colocadas recomendações para trabalhos futuros, baseados em novos desenvolvimentos científico-matemáticos ocorridos ao longo do período no qual esse trabalho foi desenvolvido, junto com aspectos e considerações metodológicas que podem ser pesquisados e validados em novos trabalhos.

#### 7.1 Conclusões

A seguir são apresentadas as conclusões referentes ao problema inicial, à meta proposta e aos objetivos individuais apresentados no Capítulo 1, assim como conclusões de ordem geral.

##### 7.1.1 Problema

No Capítulo 1, colocaram-se os problemas existentes na aplicação de uma metodologia da geoestatística multivariada clássica, como a cokrigagem ordinária, ao aplicá-la na estimativa de teores para a caracterização de depósitos complexos como os de minério de ferro.

Os mais importantes correspondem à dificuldade da modelagem da correionalização utilizando o Modelo Linear de Correionalização (MLC) ou suas variantes, como o Modelo de Correionalização Intrínseco (MCI), por

apresentarem uma discrepância entre os variogramas experimentais e os variogramas modelados. Para tal, faz-se necessária, a utilização de softwares que permitam um ajuste automático das contribuições à variância global, já que é muito difícil satisfazer as condições de definição positiva impostas por esses modelos. Esses modelos, também impõem uma distância de autocorrelação (alcance do variograma) idêntica para todas as variáveis envolvidas e para a correção conjunta entre elas (variogramas cruzados), o que na prática pode ser uma imposição muito distante da realidade.

Outro aspecto negativo provém das estimativas obtidas estarem fora do intervalo original das amostras, muitas vezes sendo negativas, o que carece de sentido físico. Geralmente, essas estimativas são substituídas por valores arbitrários (igual a 0), ou estimados por metodologias como inverso da distância ao quadrado ou médias locais.

E finalmente, a consideração de que os balanços de massa e estequiométricos não são satisfeitos pelas estimativas obtidas. Portanto, são aplicadas metodologias paliativas, como por exemplo, deixar uma variável fora do sistema de cokrigagem e que seja determinada numa etapa posterior, por diferença de fechamento, o que carrega nela o somatório dos erros. Ou, de forma alternativa, podem-se determinar todas as variáveis envolvidas nesses balanços e, posteriormente, distribuir o erro de modo de garantir o fechamento das somas constantes.

### **7.1.2 Conclusão Inicial**

A meta colocada inicialmente, de obter uma metodologia ideal como foi planteado no item 1.4 era muito ambiciosa. Como conclusão inicial, pode-se afirmar que a meta proposta, da obtenção de uma metodologia que conseguisse dar solução simultânea aos problemas mencionados, não foi atingida.

Cada metodologia utilizada prove solução a alguns dos problemas citados, mas não à totalidade.

### 7.1.3 Conclusões referentes aos objetivos propostos

Assim, no caso de depósitos polimetálicos complexos como os de ferro, conclui-se que:

#### I. Cokrigagem Ordinária:

- i. a cokrigagem ordinária prove estimativas que precisam de um pós-processamento para a maioria das variáveis estimadas, substituindo os valores inválidos por valores que estejam no intervalo original das amostras;
- ii. a modelagem do MLC não é fácil de implementar no caso de um número de variáveis superior a 2 ou 3 no máximo, sem a utilização de softwares que realizem ajustes automáticos das contribuições à variância de modo de satisfazer as condições de definição positiva impostas pelo modelo;
- iii. o fechamento dos balanços não é garantido, e para tal uma variável deve ser deixada fora do sistema, carregando o somatório dos erros, ou serem determinadas todas as variáveis simultaneamente e, posteriormente, distribuir o erro;
- iv. não é possível satisfazer simultaneamente os balanços de massa e estequiométricos. Escolhe-se satisfazer um dos dois pelas metodologias acima mencionadas, e posteriormente é necessário conferir se o balanço deixado de fora do sistema foi obtido. Nesse estudo de caso, a verificação forneceu resultados satisfatórios, exceto para o caso da variável deixada fora do sistema de cokrigagem e determinada por diferença, que carrega o somatório dos erros;
- v. um aspecto positivo da metodologia é que consegue lidar com bancos de dados heterotópicos, não necessitando que todas as variáveis estejam definidas em todos os locais amostrais.

#### II. Krigagem Ordinária de Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF):

- i. descorrelaciona adequadamente as variáveis até um vetor de separação pequeno, no caso 150m, permitindo a consideração individual de cada variável, sem necessidade de modelar o Modelo Linear de Corregionalização (MLC);



- ii. ao realizar uma transformação gaussiana e voltar ao espaço original, são obtidos valores que estão no intervalo original das amostras, sem valores negativos, não sendo necessário o pós-processamento das estimativas;
- iii. do mesmo modo que na cokrigagem, a krigagem individual de fatores MAF não garante o fechamento dos balanços pelo que uma variável deve ser deixada fora do sistema, carregando os erros, ou serem determinadas todas as variáveis simultaneamente e, posteriormente, distribuir o erro. No caso da variável determinada por diferença, a mesma precisa de um pós-processamento, já que acumula os erros provenientes das outras determinações;
- iv. também, não é possível satisfazer simultaneamente os balanços de massa e estequiométricos. Escolhe-se satisfazer um deles pelas metodologias acima mencionadas, e posteriormente é necessário conferir a satisfação do não considerado. Nesse estudo de caso, a verificação forneceu resultados satisfatórios, exceto para a variável deixada fora do sistema e determinada por diferença, que carrega o somatório dos erros;
- v. não é apreciado um viés nas estimativas apesar da utilização de uma transformação não linear como é a normalização e posterior krigagem, como foi observado ao comparar as mesmas com a média das realizações obtidas por simulação estocástica realizada pela metodologia de bandas rotativas;
- vi. os mapas e análises de deriva mostram estimativas mais suavizadas que as obtidas por cokrigagem (pós-processadas) e por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas;
- vii. é necessário que o banco de dados seja isotópico, pelo que o mesmo deve ser completado por regressão multivariada, estimativa ou simulação estocástica, ou utiliza-se um subconjunto isotópico;

### III. Krigagem Ordinária das Componentes Principais (PCA):

- i. a decomposição PCA não impõe a transformação não linear da normalização como no caso da decomposição em fatores MAF, podendo ser aplicada nas variáveis originais e em variáveis estandardizadas. Nessa

- tese, foi utilizada em variáveis normalizadas para a sua comparação com a metodologia de descorrelação em fatores MAF;
- ii. ao realizar uma transformação gaussiana e voltar ao espaço original, são obtidos valores que estão no intervalo original das amostras, sem valores negativos, não sendo necessário o pós-processamento das estimativas;
  - iii. descorrelaciona adequadamente as variáveis só até o vetor de separação nulo,  $h=0$ ;
  - iv. sob a hipótese de que a descorrelação é válida para vetores de separação maiores que zero, permite a determinação individual de cada variável, sem necessidade de modelar o Modelo Linear de Corregionalização;
  - v. os resultados obtidos por essa metodologia de descorrelação são menos adequados que os obtidos por krigagem ordinária dos fatores MAF, fundamentalmente no que se refere a estimativas mais suavizadas e fechamento dos balanços estequiométricos, com uma maior dispersão em torno do valor esperado de 100%, comparativamente com as outras metodologias utilizadas;
  - vi. do mesmo modo que na cokrigagem dos dados originais acumulados e na krigagem ordinária de fatores MAF, não garante o fechamento dos balanços, pelo que uma variável deve ser deixada fora do sistema, carregando os erros, ou serem determinadas todas as variáveis e, posteriormente, distribuir o erro. Também, no caso da variável determinada por diferença, a mesma precisa de um pós-processamento, por serem obtidos sem utilizar a anamorfose Gaussiana na retro-transformação;
  - vii. também, é necessário que o banco de dados seja isotópico, pelo que o mesmo deve ser completado por regressão multivariada, estimativa ou simulação estocástica, ou alternativamente, retém-se um subconjunto isotópico.

#### IV. Cokrigagem das Razões-Logarítmicas Aditivas alr:

- i. um dos problemas mais importantes, apresentados no início, é o referente à obtenção de estimativas negativas ao realizar a cokrigagem ordinária dos dados originais acumulados. A análise de dados composicionais, fornece uma resposta, desde o ponto de vista teórico, para esse problema,

- indicando que o mesmo ocorre por causa da presença de um viés negativo, o qual não aparece com a abordagem das razões-logarítmicas aditivas. Isso é verificado na prática, já que na cokrigagem das razões alr são obtidas estimativas positivas, adequadas, dentro do intervalo original das amostras, não sendo necessária uma etapa posterior de pós-processamento;
- ii. ao considerar as variáveis que satisfazem um balanço de massa ou estequiométrico nos depósitos de ferro, está-se considerando uma composição-r de dimensão D igual ao número de variáveis consideradas. O espaço amostral original dessas variáveis é o simplex de dimensão D, onde a soma está restringida a uma constante. Ao transformá-las em razões-logarítmicas aditivas, o espaço amostral deixa de ser o simplex de dimensão D, para ser o espaço real R de dimensão D-1. Nele, é possível utilizar as metodologias clássicas da geoestatística multivariada, como a cokrigagem ordinária. Posteriormente, é necessário voltar ao espaço amostral original, pela transformação agl, estando as estimativas novamente no simplex. Portanto, a metodologia de cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas garante o fechamento dos balanços a partir dos quais são determinadas, já que as estimativas obtidas estão restringidas ao simplex, que é o espaço amostral das variáveis por definição da própria metodologia e as suas transformações, não sendo necessário deixar uma variável fora do sistema e determiná-la posteriormente por diferença ou determinar todas as variáveis simultaneamente e, posteriormente, distribuir o erro, como acontece no caso da cokrigagem ordinária das variáveis originais acumuladas ou na krigagem ordinária de fatores MAF ou componentes principais PCA;
  - iii. não permite a satisfação simultânea dos balanços de massa e estequiométricos, pelo que se deve conferir a adequação para o balanço não considerado. Nesse estudo de caso, a verificação forneceu resultados satisfatórios para todas as variáveis determinadas;
  - iv. a metodologia oferece soluções ao problema do fechamento dos balanços, porém, não descorrelaciona as variáveis, pelo que a metodologia mais apropriada para a estimativa das razões alr é a cokrigagem ordinária, colocando de novo o problema da modelagem da correção regionalização. No entanto, a metodologia diminui a ordem dos sistemas de cokrigagem em

- uma unidade em relação ao sistema de variáveis original. Sistemas de cokrigagem, dimensionalmente menores, são mais simples de modelar;
- v. a metodologia não permite trabalhar com valores iguais a zero, pelo que é necessário realizar uma substituição prévia desses valores pelo limite de detecção, ou separar o banco de dados original em subdomínios nos quais não haja valores nulos;
  - vi. se o banco de dados for heterotópico, é recomendável transformá-lo em isotópico por regressão multivariada, estimativa ou simulação estocástica;
  - vii. os resultados obtidos são satisfatórios, reproduzindo melhor que no caso da krigagem ordinária dos fatores MAF, as características dos dados originais, o fechamento dos balanços e não sendo necessário o pós-processamento das estimativas. Porém, como foi mencionado anteriormente, não prove uma solução ao problema da modelagem da correionalização, que ainda é necessária;

#### V. Considerações gerais:

- i. todas as metodologias apresentadas requerem uma transformação dos dados originais. No novo espaço transformado, as estatísticas e aspectos relativos à variabilidade espacial são difíceis de interpretar;
- ii. observa-se de forma marcada o fato ressaltado na bibliografia revisada, referente ao somatório dos erros ficarem carregados sobre a variável determinada por diferença no caso das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária e krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes principais PCA;
- iii. os teores originais de manganês tem uma variabilidade espacial muito elevada, fazendo difícil a interpretação dos resultados correspondentes para todas as metodologias utilizadas.

## 7.2 Recomendações para trabalhos futuros

A partir da implementação das metodologias utilizadas nessa tese e dos resultados obtidos, surgem vários aspectos que podem ser analisados em trabalhos futuros:

- i. implementação da metodologia MAF utilizando um software de cálculo matemático (Matlab<sup>®</sup>, Statistica<sup>®</sup> ou R, entre outros), fazendo uso das relações matriciais apresentadas no Capítulo 2;
- ii. implementação da metodologia MAF modificada (DMAF), desenvolvida por Bandarian e Mueller (2008), na qual a descorrelação é válida para todos os vetores de separação;
- iii. avaliação da desacumulação de variáveis acumuladas, obtidas a partir de realizações por simulação estocástica, já que na operação matemática que utiliza as realizações da variável acumulada e do fator acumulador, para voltar ao espaço original, são obtidas estimativas incoerentes, muitas vezes carentes de sentido físico;
- iv. aplicação de métodos de descorrelação para razões-logarítmicas aditivas, como por exemplo decomposição MAF ou DMAF, para evitar a modelagem da correionalização dos fatores, baseados na utilização realizada por Aitchison (1983) da decomposição em componentes principais (PCA) de dados composicionais, no caso de variáveis não regionalizadas;
- v. aplicações utilizando simulações estocásticas para o mapeamento do espaço de incerteza, utilizando as transformações em razões logarítmicas aditivas em depósitos constituídos por dados composicionais;
- vi. implementação de metodologias geoestatísticas de dados composicionais sob a abordagem de *permanecer-no-simplex*, para um maior entendimento e interpretação de resultados num espaço não Euclidiano (para ser mais específicos, num espaço de Hilbert que é a generalização do espaço Euclidiano a um espaço de finitas ou infinitas dimensões);
- vii. análise de alternativas para a geração de bancos de dados isotópicos a partir de bancos de dados heterotópicos, utilizando regressão multivariada, krigagem, cokrigagem ou simulação estocástica nos locais amostrais originais;
- viii. na presente tese, foram utilizadas sempre as mesmas vizinhanças e estratégias de busca para não gerar uma alteração adicional na satisfação dos balanços de massa e estequiométricos, e que as vezes não eram os mais apropriados para as metodologias aplicadas. É recomendável a validação dessas metodologias no mesmo estudo de caso ou em outros,

utilizando os critérios mais apropriados, sem ter em consideração os aspectos comparativos que geraram essas restrições.

### 7.3 Considerações finais

Na presente tese, foi abordada a problemática associada à determinação de múltiplas variáveis provenientes de um depósito poli-metálico, mais especificamente de um depósito de ferro, presentes em diferentes frações granulométricas, as quais apresentam relações matemáticas entre si, dadas pelas relações estequiométricas e pelos balanços de massa entre as diferentes frações e no global.

Algumas dessas variáveis apresentam correlações espaciais dadas pelos processos da gênese do depósito, características morfológicas dos corpos de minério, processos de intemperismo, etc.

Ao mesmo tempo, as relações matemáticas observadas entre as variáveis (balanços de massa e estequiométricos), levaram a utilizar as mesmas de forma análoga à correlação espacial, sem ter em consideração que o espaço amostral dessas variáveis está restringido ao simplex, que as correlações observadas são produto das restrições dadas pela soma constante e que as matrizes de covariância cruzada das variáveis original são singulares, não permitindo a utilização de metodologias multivariadas como a cokrigagem, apresentando também, uma condição chamada de viés negativo, que explica a obtenção de estimativas negativas.

Portanto, a abordagem da geoestatística aplicada a dados composicionais, aparece como uma metodologia de interesse a ser incorporada nesse tipo de depósitos e também em outros nos quais as variáveis apresentem relações entre si (soma fechada dada pela estequiometria, por exemplo), mesmo que não estejam presentes em diversas faixas granulométricas. Ela provém estimativas que satisfazem os balanços considerados, e que estão no intervalo original das amostras, sem necessidade de pós-processamento.

Ao mesmo tempo, a aproximação dada pela decomposição em fatores MAF para descorrelacionar as variáveis e conseguir estimá-las sem a necessidade de modelar a correogionalização, é uma abordagem que permite a utilização de

softwares de modelagem variográfica simples, obtendo valores que não precisam de pós-processamento, por estarem dentro do intervalo original das amostras.

Nesse caso, é recomendável que sejam estimadas todas as variáveis envolvidas e que posteriormente o erro seja distribuído em vez de determinar uma variável por diferença que carregue o somatório dos erros.

A decisão da utilização de uma metodologia que forneça resultados adequados com respeito ao fechamento dos balanços (cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas), sem necessidade de carregar ou distribuir erros, mas tendo que modelar a correção regionalização, ou uma metodologia de fácil implementação matemática, sem a necessidade de modelagem da correção regionalização (krigagem ordinária dos fatores MAF), porém tendo que distribuir o erro para satisfazer os balanços, depende das necessidades do caso.

No entanto, se a decisão é modelar a correção regionalização no caso de somas fechadas, é recomendável a utilização da cokrigagem de razões-logarítmicas aditivas do que as variáveis originais acumuladas, já que respeita o espaço amostral original das amostras, o conceito de maior relevância introduzido nessa tese: o simplex.

## Referências Bibliográficas

- Aitchison, J., 1981, A new approach to null correlations of proportions, *Mathematical Geology*, 13(2), pp. 175-189
- Aitchison, J., 1982, The statistical analysis of compositional data (with discussion), *Journal of the Royal Statistical Society, Series B (Statistical Methodology)*, 44(2), pp. 139-177
- Aitchison, J., 1983, Principal components analysis of compositional data, *Biometrika*, 70(1), pp. 57-65
- Aitchison, J., 1984, The statistical analysis of geochemical compositions, *Mathematical Geology*, 16(6), pp. 531-564
- Aitchison, J., 1986, *The Statistical Analysis of Compositional Data*, Monographs on Statistics and Applied Probability, Chapman & Hall Ltd., 416 p.
- Aitchison, J. Egozcue, J. J., 2005, Compositional data analysis: where are we and where should we be heading? *Mathematical Geology*, 37(7), pp. 829-850
- Almeida, A. S., 1993, Joint simulation of multiple variables with a Markov-type coregionalization model, tese de doutorado, Universidade de Stanford, Stanford, 199p.
- Almeida, F. F. M., 1977, O Cráton de São Francisco, *Revista Brasileira de Geociências*, 7(4), pp. 349-364
- Bandarian, E. M., Bloom, L. M. e Mueller, U. A., 2008, Direct Minimum/Maximum Autocorrelation Factors Within the Framework of a Two Structure Linear Model of Coregionalization, *Computers&Geosciences*, 34(3), pp. 190-200



- Bandarian, E. M. e Mueller, U. A., 2008, Reformulation of Direct Minimum/Maximum Autocorrelation Factors as a Generalized Eigenvalue Problem, GEOSTATS 2008, Anais do Otavo Congresso Internacional de Geoestatística, Volume 21, Gecamin Ltd., Santiago, Chile, pp. 2991173-1178
- Billheimer, D., Guttorp, P. e Fagan, W., 1997, Statistical analysis and interpretation of discrete compositional data. Technical report, 96(456), pp. 1205-1214
- Boezio, M. N. M., Costa, J. F. C. L., Ribeiro, D. T., Pilger, G. G., Koppe, J. C., 2006, Geoestatística multivariada aplicada a depósitos de ferro – Complexo Pico – MG, Anais do IV Congresso Brasileiro de Mina a Céu Aberto/ IV Congresso Brasileiro de Mina Subterrânea, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil.
- Boucher, A., 2003, Conditional joint simulation of random fields on block support, Dissertação de mestrado, Universidade de Queensland, Brisbane, 161p.
- Bourassi, A., Foucher, B., Geffroy, F., Marin, J. Y., Martin, B., Meric, Y. M., Perseval, S., Renard, D., Robinot, L. e Touffait, Y., 2009, Isatis version 9.0, Ecole des Mines de Paris & Geovariances, Fontainebleau.
- Campbell, S. L. e Meyer, C.D., 1991, Generalized Inverses of Linear Transformations, Dover, Nova Iorque, 288p.
- Chayes, F., 1960, On correlation between variables of constant sum, Journal of Geophysical Research, 65(12), pp. 4185-4193
- Chilés, J. P. e Delfiner, P., 1999, Geostatistics: modeling spatial uncertainty, Wiley-Interscience, Nova Iorque, 695p.
- David, M., Dagbert, M., Sergerie, G. e Cupcic, F., 1984, Complete estimation of the tonnage, shape and grade of a Saskatchewan Uranium deposit, Anais do 27<sup>th</sup> International Geology Congress, VNU Science Press, pp. 154-186
- Davis, B. M. e Greenes, 1983, Estimation Using Spatially Distributed Multivariate Data: An Example with Coal Quality, Mathematical Geology, 15(2), pp. 287-300
- Desbarats, A. J. e Dimitrakopoulos, R., 2000, Geostatistical simulation of regionalized pore-size distributions using Min/Max autocorrelation factors, Mathematical Geology, 32(8), pp. 919-942

- Deutsch, C. V. e Journel, A. G., 1998, GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide. Oxford University Press, Nova Iorque, 340p.
- Dimitrakopoulos, R. e Boucher, A., 2005, A New Efficient Joint Simulation Framework and Application in a Multivariable Deposit, Orebody Modeling and Strategic Mine Planning – Uncertainty and Risk Management Models, Ed. Dimitrakopoulos, R., AUSIMM Australasian Institute of Mining and Metallurgy, Spectrum Series 14, pp. 319-328
- Dimitrakopoulos, R. e Fonseca, M. B., 2003, Assessing risk in grade-tonnage curves in a complex copper deposit, northern Brazil, based on an efficient joint simulation of multiple correlated variables, APCOM 2003, Application of Computers and Operations Research in the Minerals Industries, pp. 373-382
- Dorr, J. V. N., 1969, Physiographic, Stratigraphic and Structural Development of the Quadrilátero Ferrífero. USGS Professional Paper, Minas Gerais, Brasil, Nº 641-A, 110p.
- Egozcue, J. J., Pawlowsky-Glahn, V., Mateu-Figueiras, G. e Barceló-Vidal, C., 2003, Isometric log-ratio transformations for compositional data analysis, *Mathematical Geology*, 35(3), pp. 279-300
- Emery, X. e Lantuéjoul, C., 2006, TBSIM: A Computer Program for Conditional Simulation of Three-Dimensional Gaussian Random Fields via The Turning Bands Method, *Computers & Geosciences*, 32, pp. 1615-1628
- Golub, G. H. e Van Loan, C. F., 1989, *Matrix Computations*, The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 642 p.
- Goovaerts, P., 1993, Spatial orthogonality of the principal components computed from coregionalized variables, *Mathematical Geology*, 25(3), pp. 281-302
- Goovaerts, P., 1997, *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*, Oxford University Press, Nova Iorque, 483p.
- Hatcher, A., 2002, *Algebraic Topology*, Cambridge University Press, Cambridge, 544p.
- Isaaks, E. H. e Srivastava, R. M., 1989, *An Introduction to Applied Geostatistics*, Oxford University Press, Nova Iorque, 561p.
- Johnson, R. A. e Wichern, D. W., 1998, *Applied Multivariate Statistical Analysis*, Prentice Hall, Nova Jersey, 816p.

- Journel, A., 1974, Geostatistics for Conditional Simulation of Ore Bodies, *Economic Geology*, 69(5), pp. 673-687
- Journel, A., 1999, Markov Models for Cross-Covariances, *Mathematical Geology*, 31(8), pp. 955–964
- Journel, A. G. e Huijbregts, C. J., 1978, *Mining Geostatistics*, Academic Press, Londres, 600p.
- Koppe, V. C., 2009, Metodologia para Comparar Eficiência de Alternativas para Disposição de Amostras. Tese de Doutorado, PPGEM, UFRGS, 215p.
- Lantuéjoul, C., 2002, *Geostatistical Simulation: Models and Algorithms*. Springer, Berlin, 256p.
- Marechal, A., 1970, Cokrigage et regression em correlation intrinsique, Centre de Geostatistique de Fontainebleau, Fontainebleau, 40p.
- Matheron, G., 1973, The Intrinsic Random Functions and Their Applications. In *Adv. Appl. Prob.*, Vol 5, pp. 439–468.
- Martín-Fernández, J. A., 2001, Medidas de diferencia y clasificación no paramétrica de datos composicionales, tesis de doctorado, Universidade Politècnica de Catalunya, Barcelona.
- Martín-Fernández, J. A., Barceló-Vidal, C. e Pawlowsky-Glahn, V., 2003, Dealing With Zeros and Missing Values in Compositional Data Sets Using Nonparametric Imputation, *Mathematical Geology*, 35(3), pp. 253–278
- Mateu-Figueiras, G., 2004, Models de distribució sobre el simplex, tese de doutorado, Universidade Politècnica de Catalunya, Barcelona, Espanha.
- Matheron, G., 1965, *Les variables regionalisées et leur estimation*, Ed. Masson, Paris, 306p.
- Myers, D. E., 1982, Matrix formulation of co-kriging, *Mathematical Geology*, 14(3), pp. 249-257
- Pawlosky, V., 1984, On spurious spatial covariance between variables of constant sum, *Science de la Terre, Ser. Informatique*, vol. 21, pp. 107-113
- Pawlosky, V., 1986, *Raumliche Strukturanalyse und Stachzung ortsabahniger Kompositionen mit Anwendungsbeispielen aus der Geologie*, tese de doutorado, Universidade Freie, Berlin, 170p.

- Pawlowsky-Glahn, V. e Egozcue, J. J., 2002, BLU Estimators and Compositional Data, *Mathematical Geology*, 34(3), pp. 259-274
- Pawlowsky-Glahn, V. e Egozcue, J. J., 2001, Geometric approach to statistical analysis on the simplex, *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment (SERRA)*, 15(5), pp. 384-398
- Pawlowsky-Glahn, V., 2003, Statistical modeling on coordinates, *Anais do Compositional Data Analysis Workshop, CoDaWork'03*, Universidade de Girona, <http://ima.udg.es/Activities/CoDaWork03/>
- Pawlowsky-Glahn, V. e Olea, R. A., 2004, *Geostatistical Analysis of Compositional Data*, *Studies in Mathematical Geology*, Oxford University Press, 181p.
- Pawlowsky-Glahn, V., Egozcue, J. J. e Tolosana-Delgado, R., 2007, *Lectures Notes on Compositional Data Analysis*, Apostilhas do curso CoDaWork'07, Universidade de Girona, 95p.
- Pearson, K., 1897, Mathematical contributions to the theory of evolution on a form of spurious correlation which may arise when indices are used in the measure of organs, *Anais da Royal Society of London*, vol LX, pp. 489-502
- Rivoirard, J., 2002, Which Models for Collocated Cokriging?, *Mathematical Geology*, 33(2), pp. 117–131
- Rivoirard, J., 2004, On some simplifications of cokriging neighborhood, *Mathematical Geology*, 36(8), pp. 899-915
- Spier, C. A., Moura, M. M., Ribeiro, D. T. e Reis da Cruz, F. A., 2004, Appraisal of Geological Resources of the Pico Complex, *Quadrilátero Ferrífero – Minas Gerais, Relatório Interno MBR (Minerações Brasileiras Reunidas)*, Belo Horizonte, 168p.
- Switzer, P. e Green, A. A., 1984, Min/Max autocorrelation factors for multivariate spatial imagery, *Reporte Técnico Número 6*, Departamento de estatística, Universidade de Stanford, Stanford, 14p.
- Tecran, A. E., 1999, Importance of orthogonalization algorithm in modeling conditional distributions by orthogonal transformed indicator methods, *Mathematical Geology*, 31(2), pp. 155-173
- Tolosana-Delgado, R., 2006, *Geostatistics for constrained variables: positive data, compositions and probabilities. Application to environmental hazard monitoring*, tese de doutorado, Universidade de Girona, 198p.

- Tolosana-Delgado, R., Egozcue, J. J e Pawlosky-Glahn, V., 2008, Cokriging of Compositions: log-ratios and unbiasedness, GEOSTATS 2008, Anais do Otavo Congresso Internacional de Geoestatística, Volume 1, Gecamin Ltd., Santiago, Chile, pp. 299-308
- Tolosana-Delgado, R., van den Boogaart, K. G. e Pawlowsky-Glahn, V., 2009, Estimating and modeling variograms of compositional data with occasional missing variables in R, anais do StatGIS 2009, Geoinformatics for Environmental Surveillance, ed. G. Dubois, Ilha de Milos, Grça.
- Tolosana-Delgado, R. e von Eynatten, H., 2009, Grain-Size Control on Petrographic Composition of Sediments: Compositional Regression and Rounded Zeros, Mathematical Geosciences, DOI 10.1007/s1104-009-9216-6.
- Tozzo-Martins, A. B., Ribeiro Júnior, P. J. e Bonat, W. H., 2009, Um modelo geoestatístico bivariado para dados composicionais, Revista Brasileira de Biometria, 27(3), pp. 456-477
- Vargas-Guzman, J. A. e Dimitrakopoulos, R., 2003, Computational properties of min/Max autocorrelation factors, Computers & Geosciences, 29, pp. 715-723
- Wackernagel, H., 1994, Multivariate Geostatistics. An introduction with applications, Springer-Verlag, Berlim, 275p.
- Wackernagel, H., Petitgas, Y. e Touffait, Y., 1989, Overview of methods for coregionalization analysis, em Geostatistics ed. Armstrong, M., Kluwer Academic, pp. 409-420
- Walwoort, D. J. e Gruijter, J. J., 2001, Compositional kriging: a spatial interpolation method for compositional data. Mathematical Geology, 33(8), pp. 951-966
- Xu, W., Tran, R., Srivastava, M. e Journel, A., 1992, The collocated cokriging alternative, Anais do 67th Annual Technical Conference of the Society of Petroleum Engineers, 24742, pp. 833-842
- Yao, T. e Journel, A. G., 1998, Automatic modeling of (cross)covariances tables using Fast Fourier Transform, Mathematical Geology, 30(6), pp. 589-615

## Apêndices

Apêndice A: Análise estatística exploratória: histogramas, diagramas de dispersão e coeficientes de correlação

Apêndice B: Análise e modelagem da continuidade espacial para a abordagem clássica da Cokrigagem

Apêndice C: Histogramas, Análise da Correlação Espacial e Modelos Variográficos dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos MAF

Apêndice D: Histogramas, Análise da Correlação Espacial e Modelos Variográficos das Componentes Principais PCA

Apêndice E: Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores MAF e por Krigagem Ordinária das Componentes Principais PCA

Apêndice F: Histogramas e Modelos Lineares de Corregionalização das Razões-Logarítmicas Aditivas (alr)

Apêndice G: Gráficos Correspondentes à Análise e Discussão de Resultados

Apêndice H: Análise da Presença de Viés nas estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos

## **Apêndice A**

### **Análise estatística exploratória: histogramas, diagramas de dispersão e coeficientes de correlação.**

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes à análise exploratória dos dados. Apresentam-se os histogramas dos dados originais desagrupados e dos dados acumulados desagrupados. Analisam-se também, as correlações presentes em cada faixa granulométrica e no global, e, entre as proporções de um mesmo elemento ou óxido retidas nas diferentes frações granulométricas.

#### **A.1 Histogramas dos dados desagrupados**

A seguir, são apresentados os histogramas dos dados originais desagrupados pela técnica de células móveis (Isaaks e Srivastava, 1989). Utilizam-se células de 200 x 100 x 10 m respectivamente em X, Y e Z, correspondendo com a malha de sondagem mais espaçada e com a regularização das amostras em intervalos de 10 metros.

Os teores na faixa 22 são calculados a partir dos teores nas faixas 2 e 21 (letra C).

##### **A.1.1 Dados originais sem acumular**

Nas Figuras Figura A.1, Figura A.2, Figura A.3 e Figura A.4 são apresentados os histogramas dos dados originais, sem acumular (letra D) pela massa das frações granulométricas.

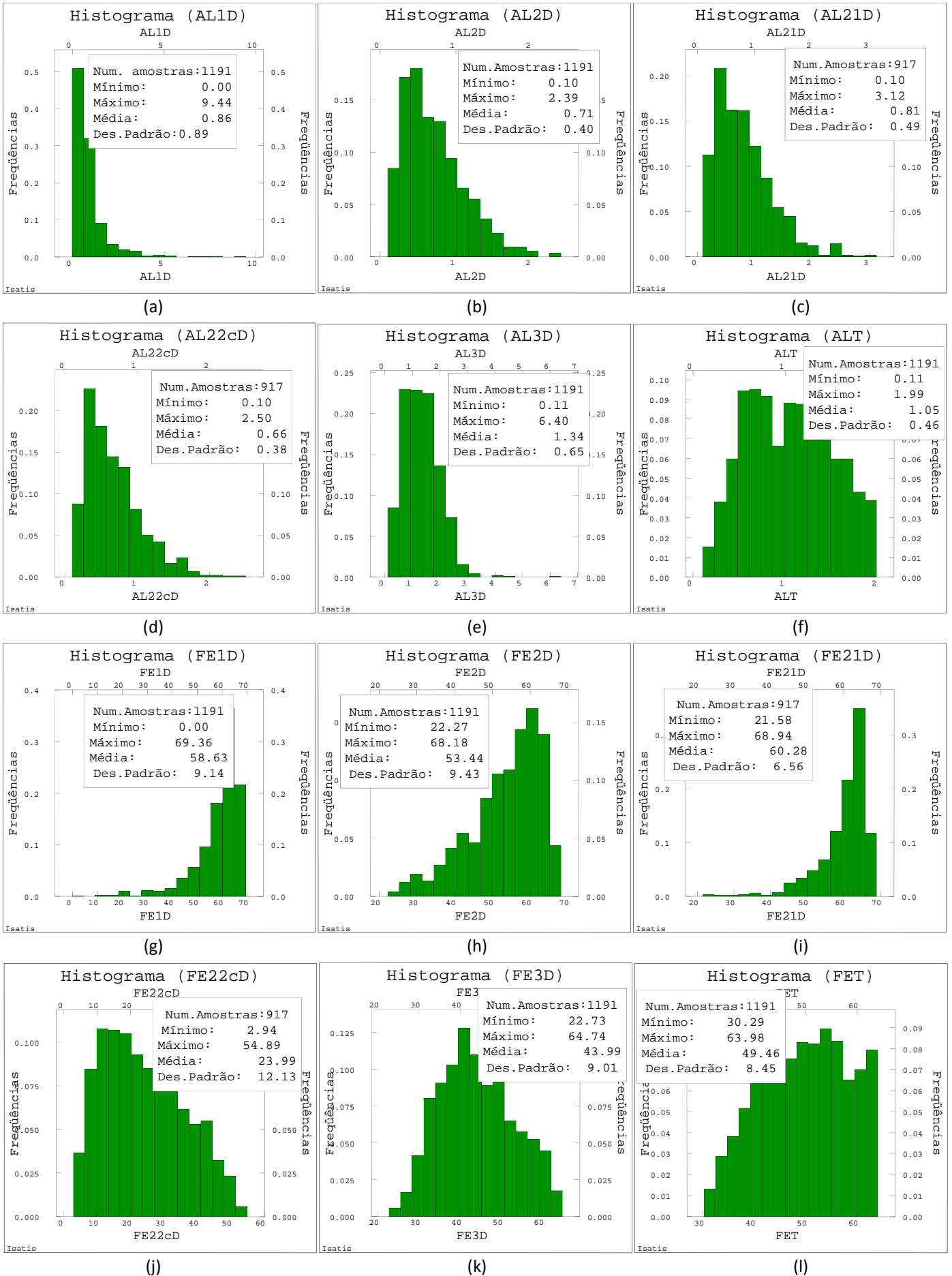


Figura A.1 – Histogramas dos dados originais sem acumular (letra D), desagrupados, para as variáveis (a)AL1, (b)AL2, (c)AL21, (d)AL22, (e)AL3, (f)ALT, (g)FE1, (h)FE2, (i)FE21, (j)FE22, (k)FE3 e (l)FET.



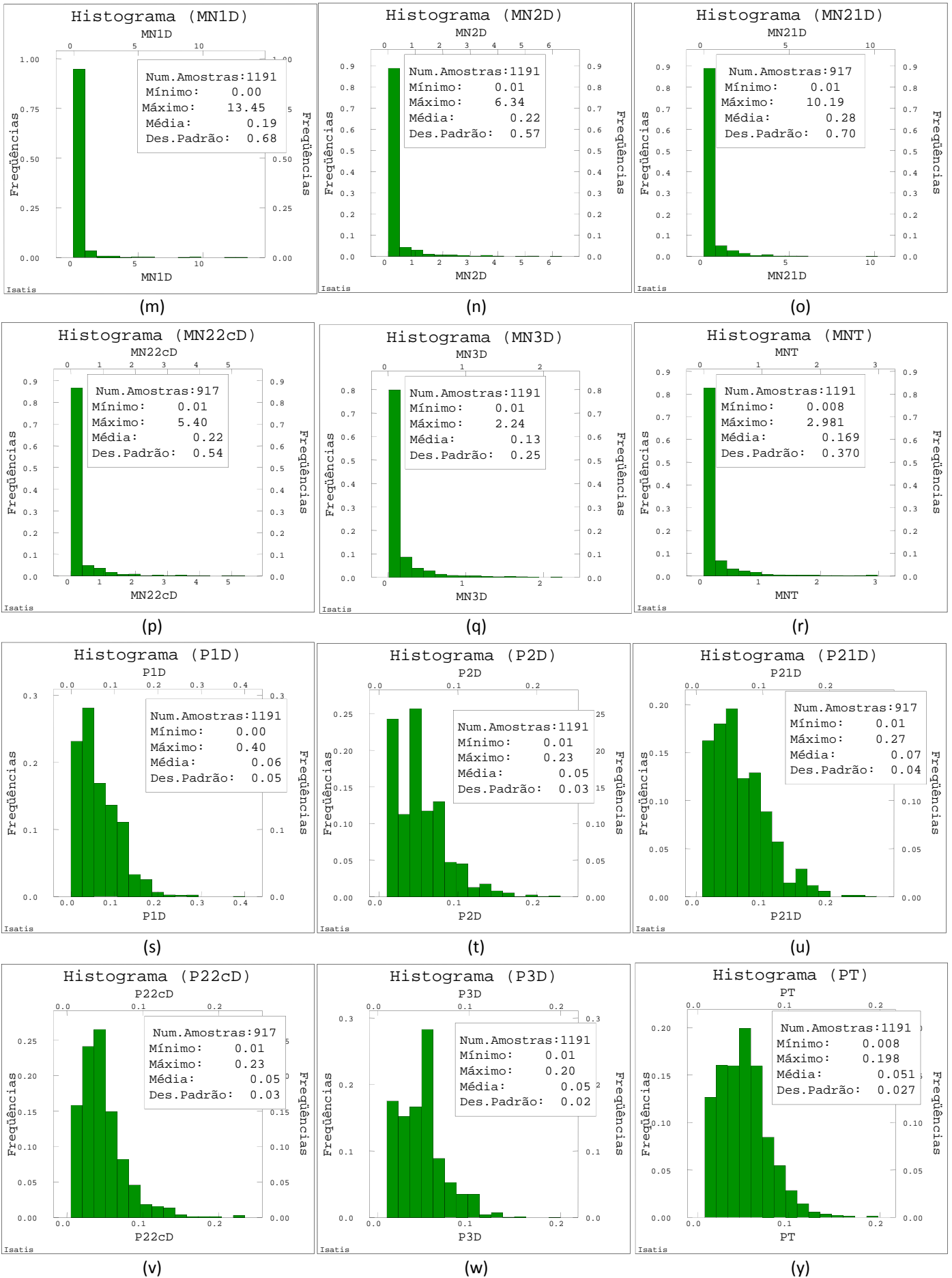


Figura A.2 – Histogramas dos dados originais sem acumular (letra D), desagrupados, para as variáveis (m)MN1, (n)MN2, (o)MN21, (p)MN22, (q)MN3, (r)MNT, (s)P1, (t)P2, (u)P21, (v)P22, (w)P3 e (y)PT.

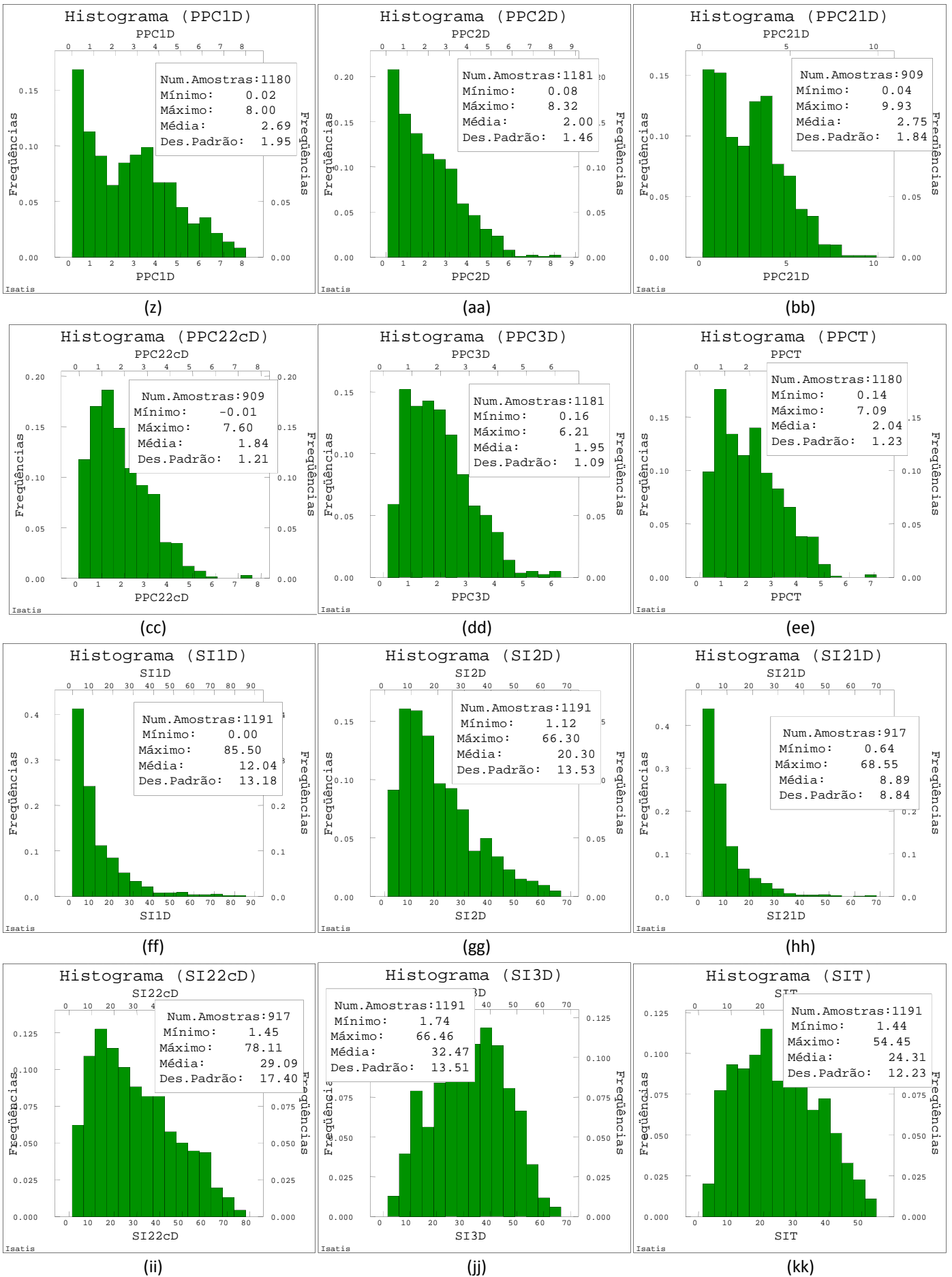


Figura A.3 – Histogramas dos dados originais sem acumular (letra D), desagrupados, para as variáveis (z)PPC1, (aa)PPC2, (bb)PPC21, (cc)PPC22, (dd)PPC3, (ee)PPCT, (ff)SI1, (gg)SI2, (hh)SI21, (ii)SI22, (jj)SI3 e (kk)SIT.

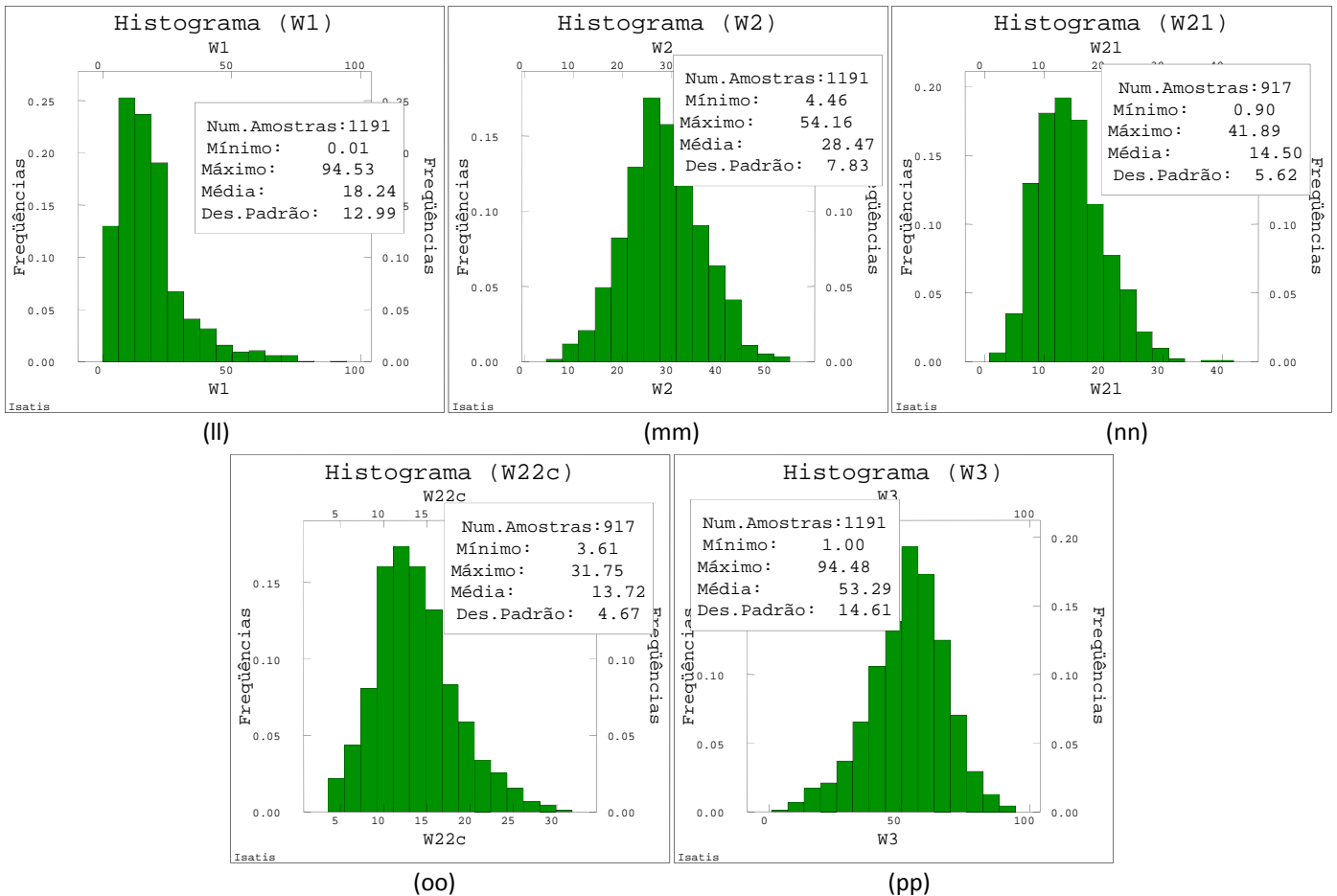


Figura A.4 – Histogramas dos dados originais sem acumular (letra D), desagrupados, para as variáveis (ll)W1, (mm)W2, (nn)W21, (oo)W22 e (pp).W3.

### A.1.2 Dados acumulados pela massa das frações granulométricas

Para corrigir o efeito do diferente suporte nos teores das amostras, por possuírem diferentes massas, acumulam-se os mesmos pela sua massa. A variável acumulada é o produto de duas variáveis e se uma delas tem um coeficiente de variação muito maior que a outra, a de menor variabilidade atuará como uma constante no produto, dando por resultado uma distribuição da variável acumulada semelhante à da variável de maior variabilidade.

Na Figura A.5, Figura A.6 e Figura A.7 são apresentados os histogramas dos dados acumulados.

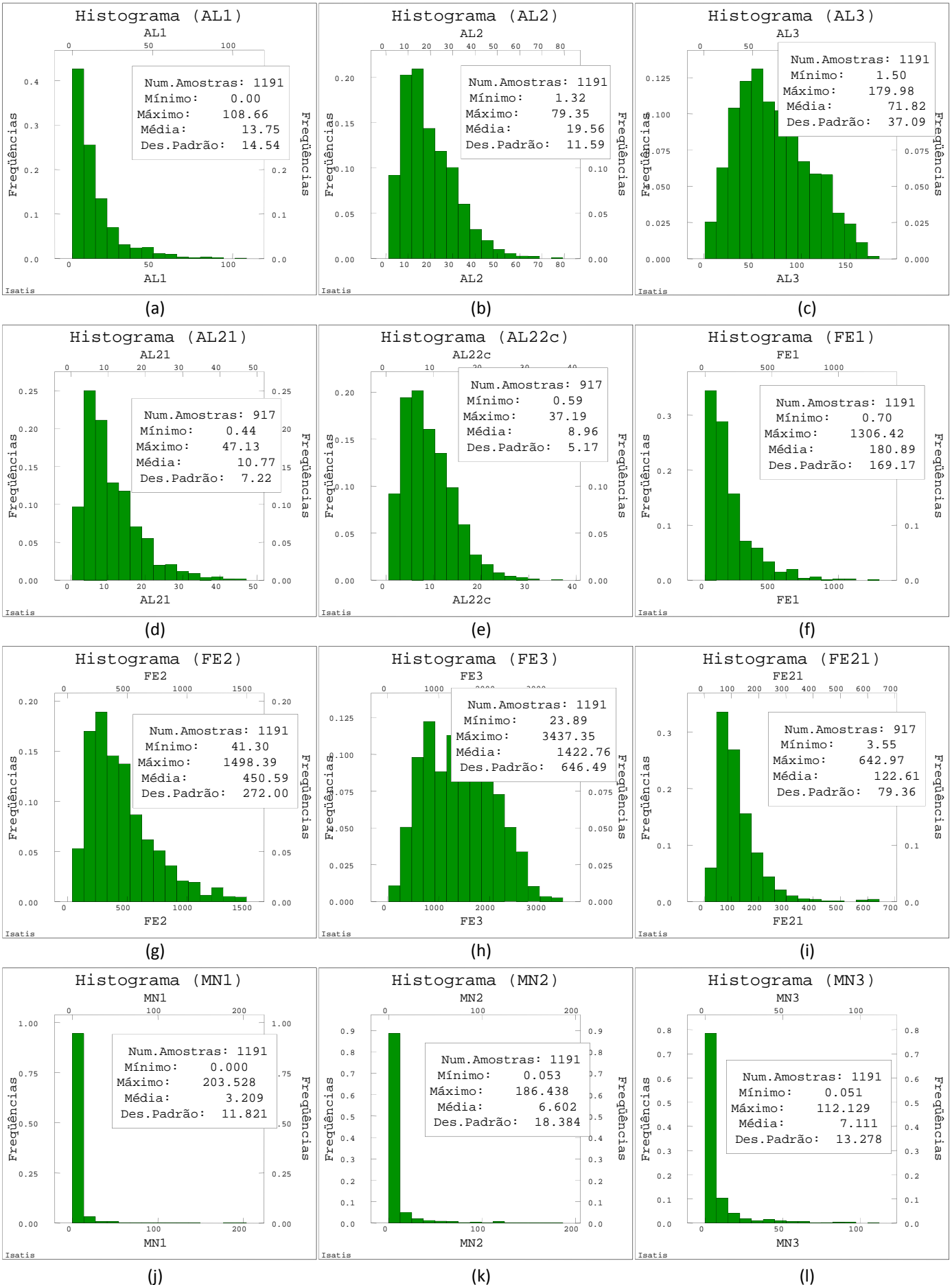


Figura A.5 - Histogramas dos dados originais acumulados, desagrupados, para as variáveis (a)AL1, (b)AL2, (c)AL3, (d)AL21, (e)AL22, (f)FE1, (g)FE2, (h)FE3, (i)FE21, (j)MN1, (k)MN2 e (l)MN3.

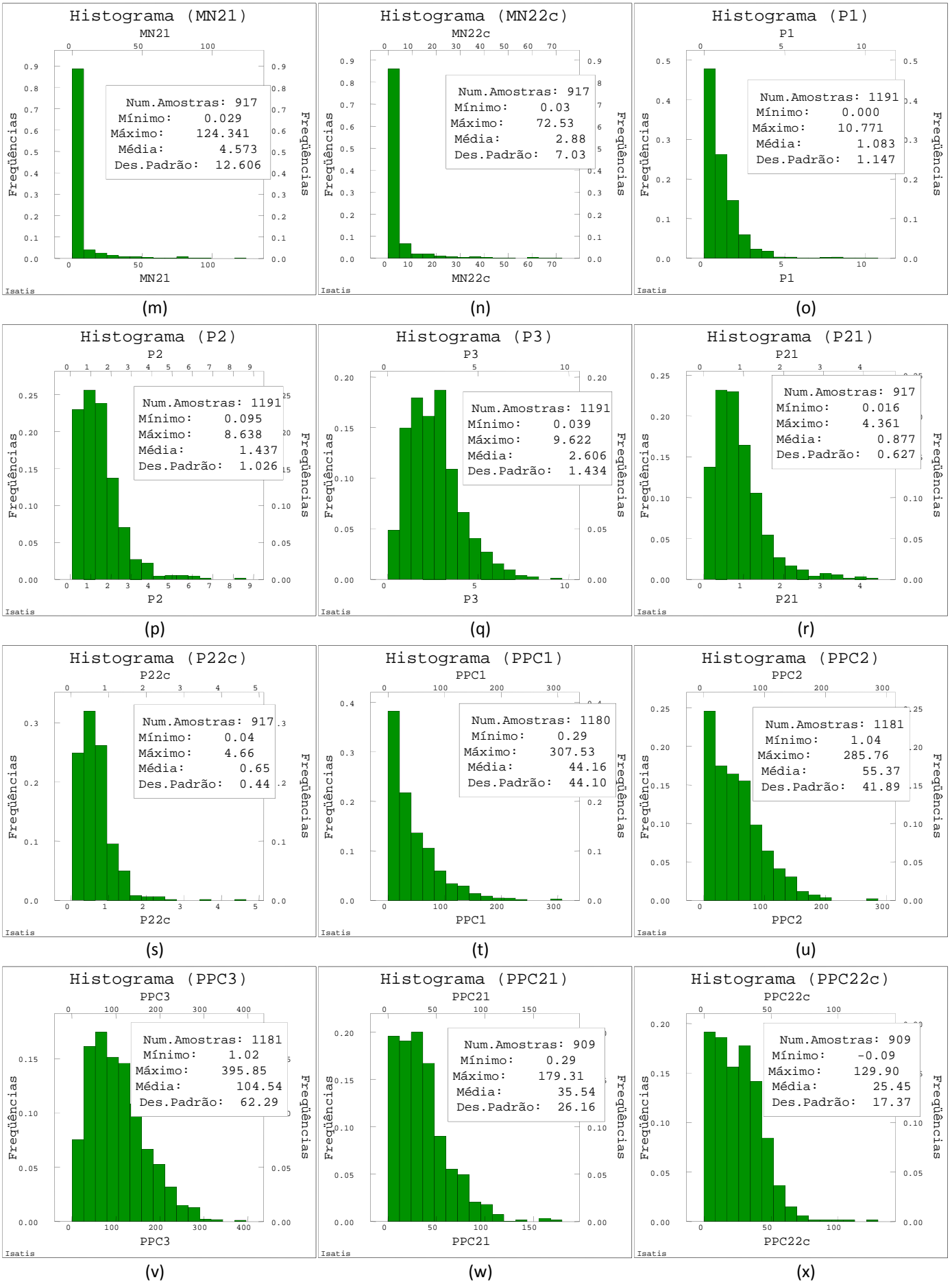


Figura A.6 - Histogramas dos dados originais acumulados, desagrupados, para as variáveis (m)MN21, (n)MN22, (o)P1, (p)P2, (q)P3, (r)P21, (s)P22, (t)PPC1, (u)PPC2, (v)PPC3, (w)PPC21 e (x)PPC22.

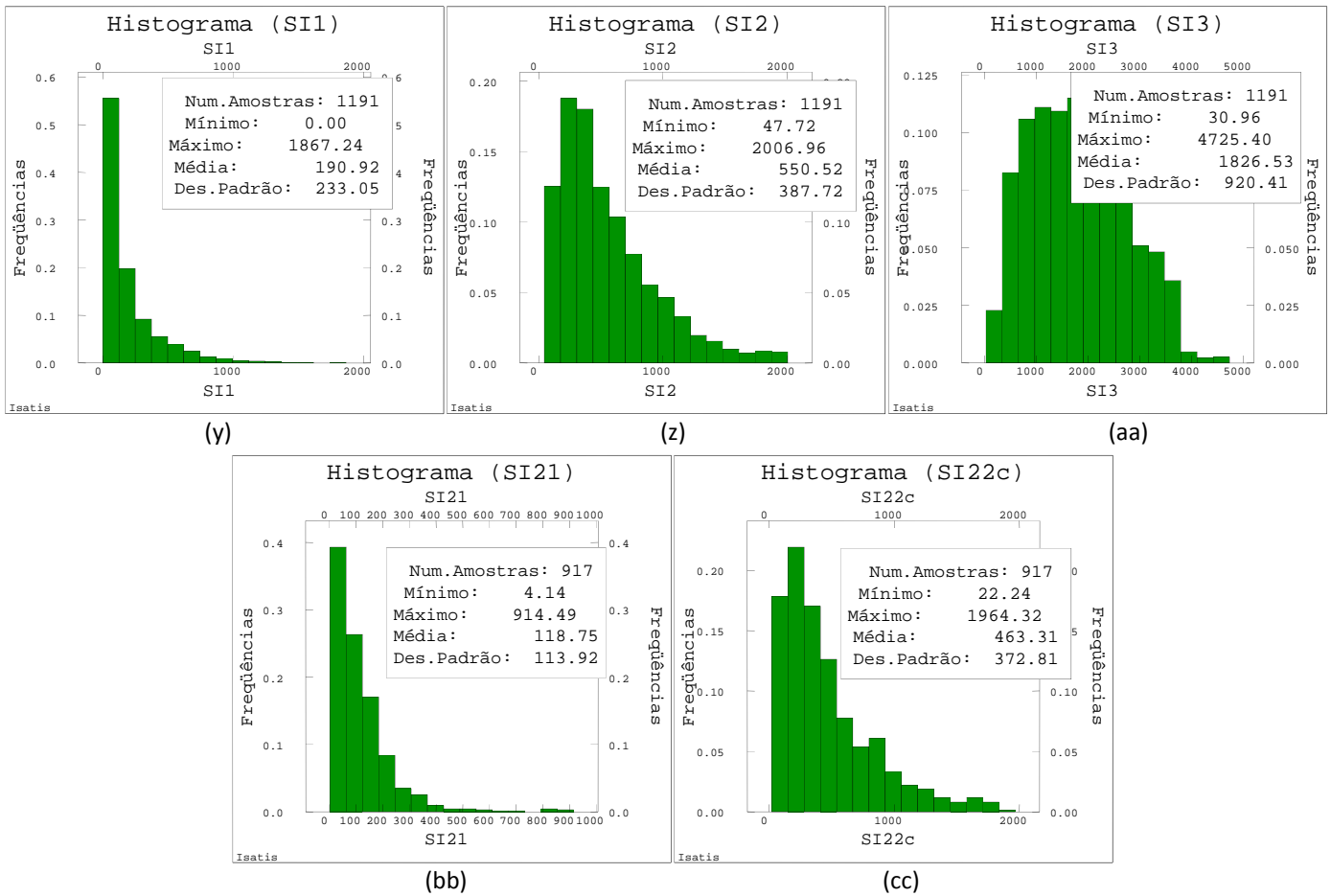


Figura A.7 - Histogramas dos dados originais acumulados, desagrupados, para as variáveis (y)SI1, (z)SI2, (aa)SI3, (bb)SI21 e (cc)SI22.

## A.2 Diagramas de dispersão e coeficientes de correlação

Nessa seção, são apresentados os diagramas de dispersão e os coeficientes de correlação para as variáveis originais em cada faixa granulométrica e no global. Também os diagramas de dispersão e coeficientes de correlação para cada espécie presente nas diferentes frações granulométricas.

### A.2.1 Diagramas de dispersão e coeficientes de correlação por faixa granulométrica

A seguir, apresentam-se os diagramas de dispersão (Figura A.8 a Figura A.13) e coeficientes de correlação (Tabela A.1 a Tabela A.6) para as variáveis originais, por faixa granulométrica.

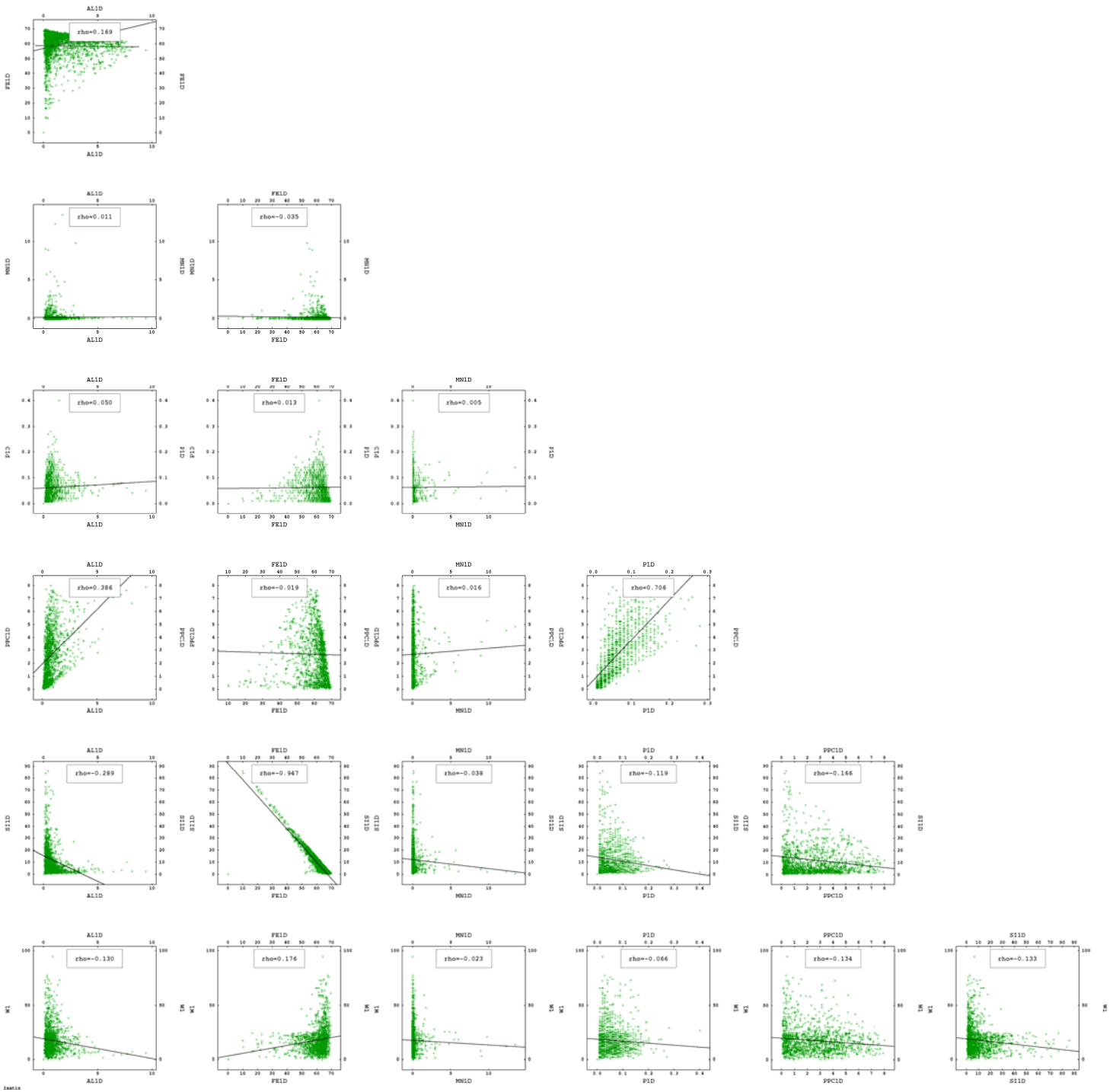


Figura A.8 – Diagramas de dispersão das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 1 (AL1D, FE1D, MN1D, P1D, PPC1D, SI1D e W1).

Tabela A.1 – Coeficientes de correlação das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 1 (AL1D, FE1D, MN1D, P1D, PPC1D, SI1D e W1).

|       | AL1D   | FE1D   | MN1D   | P1D    | PPC1D  | SI1D   |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| FE1D  | 0,169  |        |        |        |        |        |
| MN1D  | 0,011  | -0,035 |        |        |        |        |
| P1D   | 0,050  | 0,013  | 0,005  |        |        |        |
| PPC1D | 0,386  | -0,019 | 0,016  | 0,706  |        |        |
| SI1D  | -0,289 | -0,947 | -0,038 | -0,119 | -0,166 |        |
| W1    | -0,130 | 0,176  | -0,023 | -0,066 | -0,134 | -0,133 |

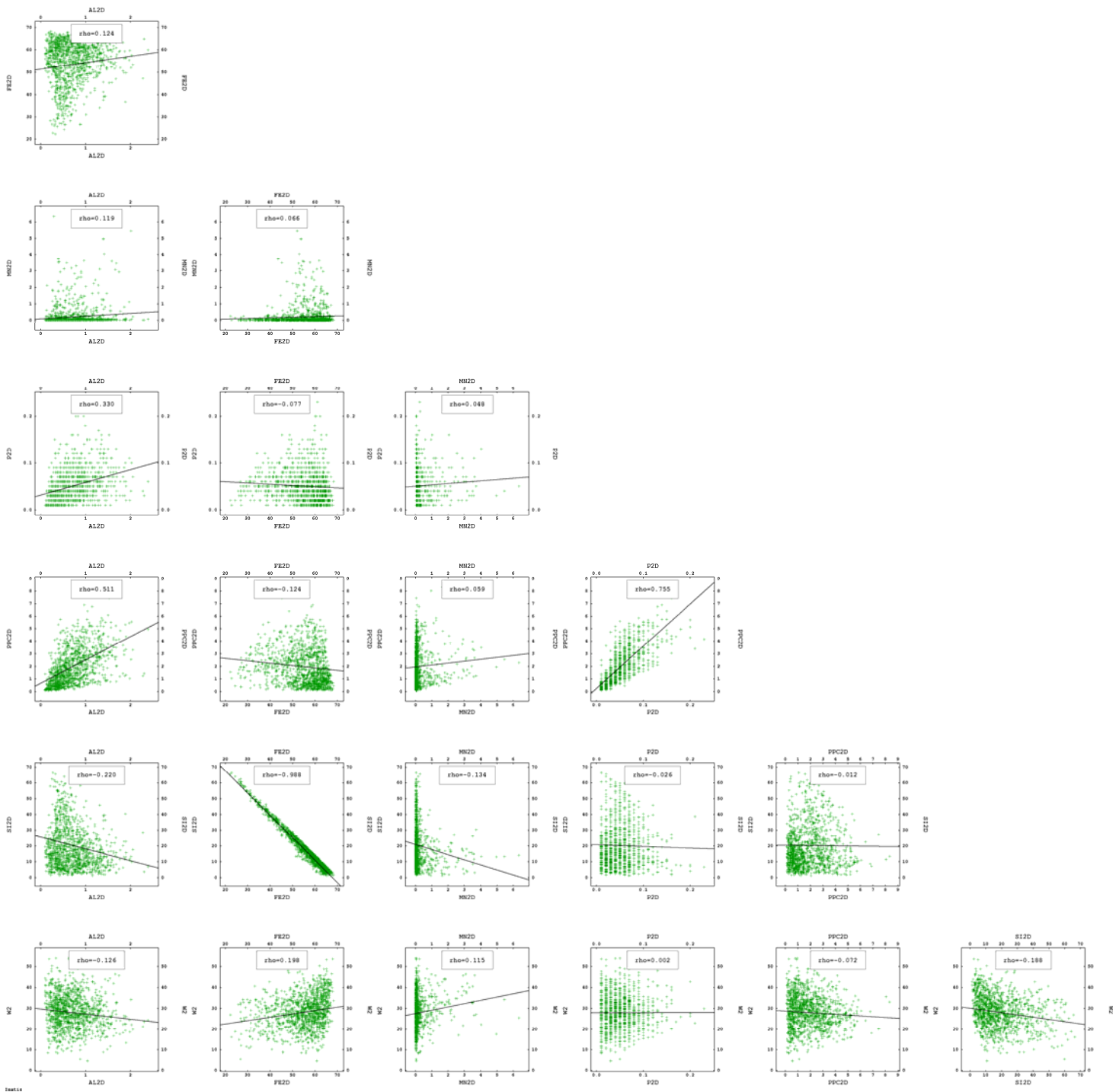


Figura A.9 – Diagramas de dispersão das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 2 (AL2D, FE2D, MN2D, P2D, PPC2D, SI2D e W2).

Tabela A.2 – Coeficientes de correlação das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 2 (AL2D, FE2D, MN2D, P2D, PPC2D, SI2D e W2).

|       | AL2D   | FE2D   | MN2D   | P2D    | PPC2D  | SI2D   |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| FE2D  | 0,124  |        |        |        |        |        |
| MN2D  | 0,119  | 0,066  |        |        |        |        |
| P2D   | 0,330  | -0,077 | 0,048  |        |        |        |
| PPC2D | 0,511  | -0,124 | 0,059  | 0,755  |        |        |
| SI2D  | -0,220 | -0,988 | -0,134 | -0,026 | -0,012 |        |
| W2    | -0,126 | 0,198  | 0,115  | 0,002  | -0,072 | -0,188 |



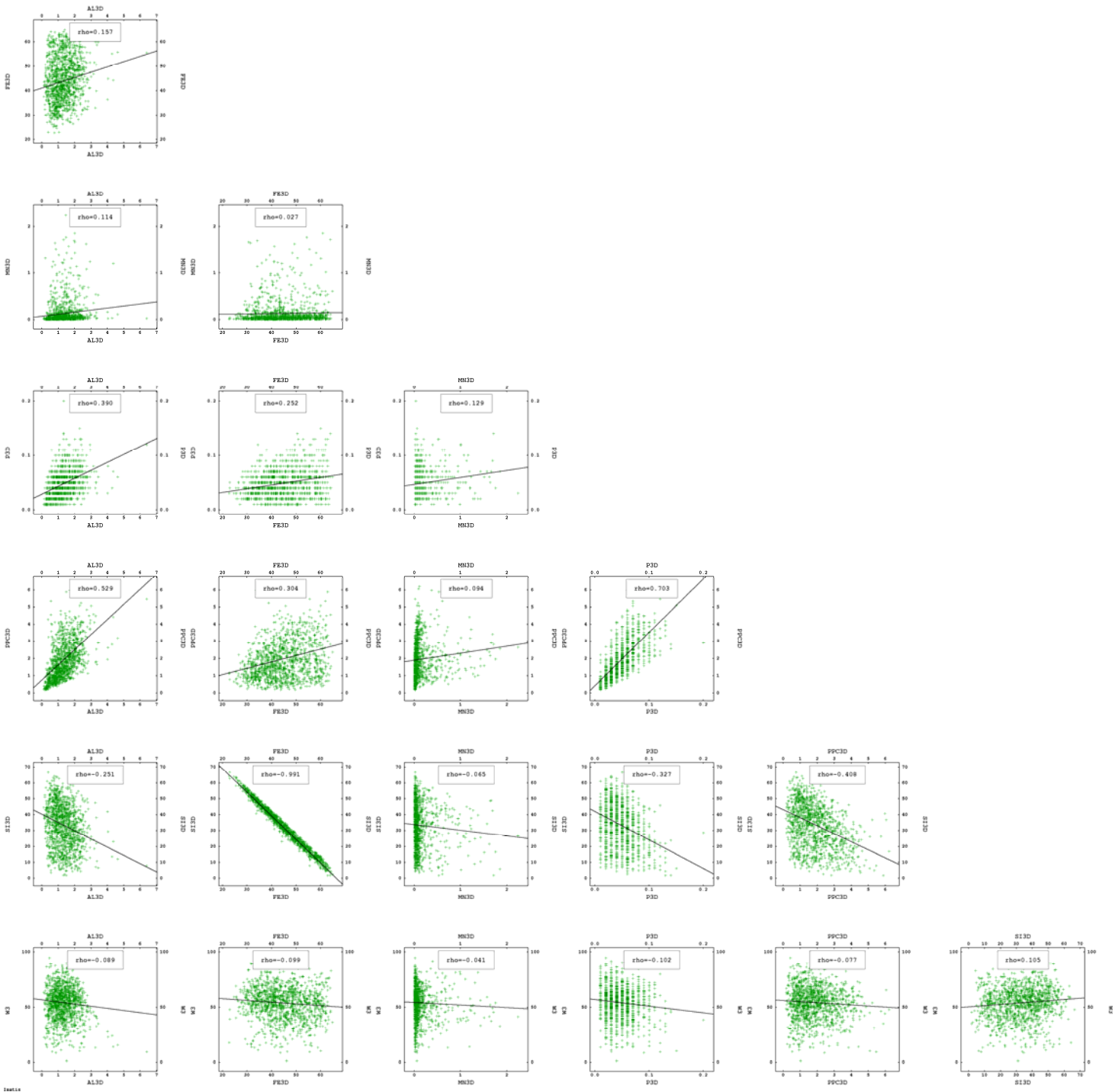


Figura A.10 – Diagramas de dispersão das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 3 (AL3D, FE3D, MN3D, P3D, PPC3D, SI3D e W3).

Tabela A.3 – Coeficientes de correlação das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 3 (AL3D, FE3D, MN3D, P3D, PPC3D, SI3D e W3).

|       | AL3D   | FE3D   | MN3D   | P3D    | PPC3D  | SI3D  |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|
| FE3D  | 0,157  |        |        |        |        |       |
| MN3D  | 0,114  | 0,027  |        |        |        |       |
| P3D   | -0,390 | 0,252  | 0,129  |        |        |       |
| PPC3D | 0,529  | 0,304  | 0,094  | 0,703  |        |       |
| SI3D  | -0,251 | -0,991 | -0,065 | -0,327 | -0,408 |       |
| W3    | -0,089 | -0,099 | -0,041 | -0,102 | -0,077 | 0,105 |

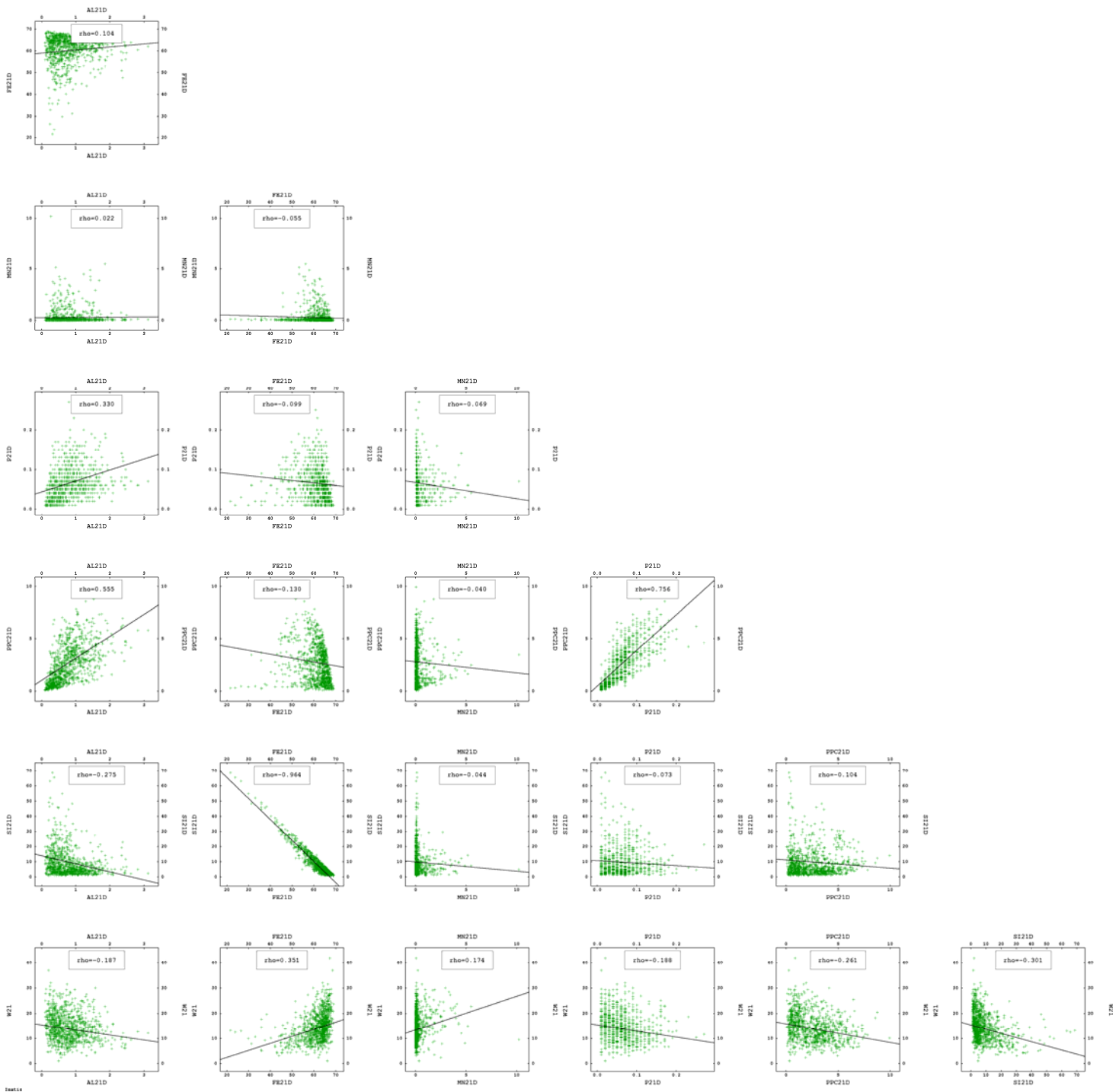


Figura A.11 – Diagramas de dispersão das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 21 (AL21D, FE21D, MN21D, P21D, PPC21D, SI21D e W21).

Tabela A.4 – Coeficientes de correlação das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 21 (AL21D, FE21D, MN21D, P21D, PPC21D, SI21D e W21).

|        | AL21D  | FE21D  | MN21D  | P21D   | PPC21D | SI21D  |
|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| FE21D  | 0,104  |        |        |        |        |        |
| MN21D  | 0,022  | -0,055 |        |        |        |        |
| P21D   | 0,330  | -0,099 | -0,069 |        |        |        |
| PPC21D | 0,555  | -0,130 | -0,040 | 0,756  |        |        |
| SI21D  | -0,275 | -0,964 | -0,044 | -0,073 | -0,104 |        |
| W21    | -0,187 | 0,351  | 0,174  | -0,188 | -0,261 | -0,301 |

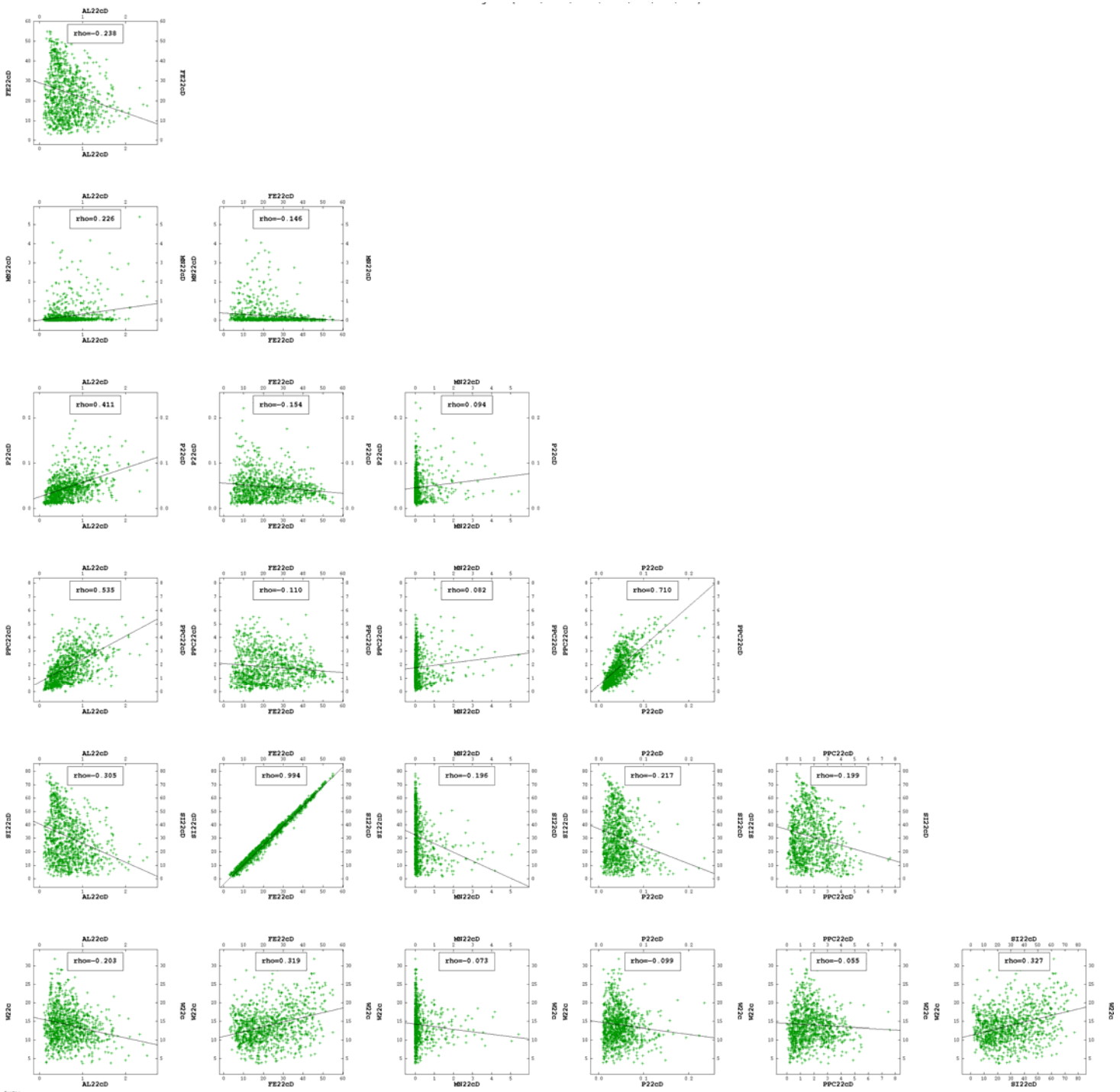


Figura A.12 – Diagramas de dispersão das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 22 (calculada, letra C) (AL22CD, FE22CD, MN22CD, P22CD, PPC22CD, SI22CD e W22C).

Tabela A.5 – Coeficientes de correlação das variáveis originais sem acumular (letra D) na faixa 22 (AL22CD, FE22CD, MN22CD, P22CD, PPC22D, SI22CD e W22C).

|         | AL22CD | FE22CD | MN22CD | P22CD  | PPC22CD | SI22CD |
|---------|--------|--------|--------|--------|---------|--------|
| FE22CD  | -0,238 |        |        |        |         |        |
| MN22CD  | 0,226  | -0,146 |        |        |         |        |
| P22CD   | 0,411  | -0,154 | 0,094  |        |         |        |
| PPC22CD | 0,535  | -0,110 | 0,082  | 0,710  |         |        |
| SI22CD  | -0,305 | 0,994  | -0,196 | -0,217 | -0,199  |        |
| W22C    | -0,203 | 0,319  | -0,073 | -0,099 | -0,055  | 0,327  |

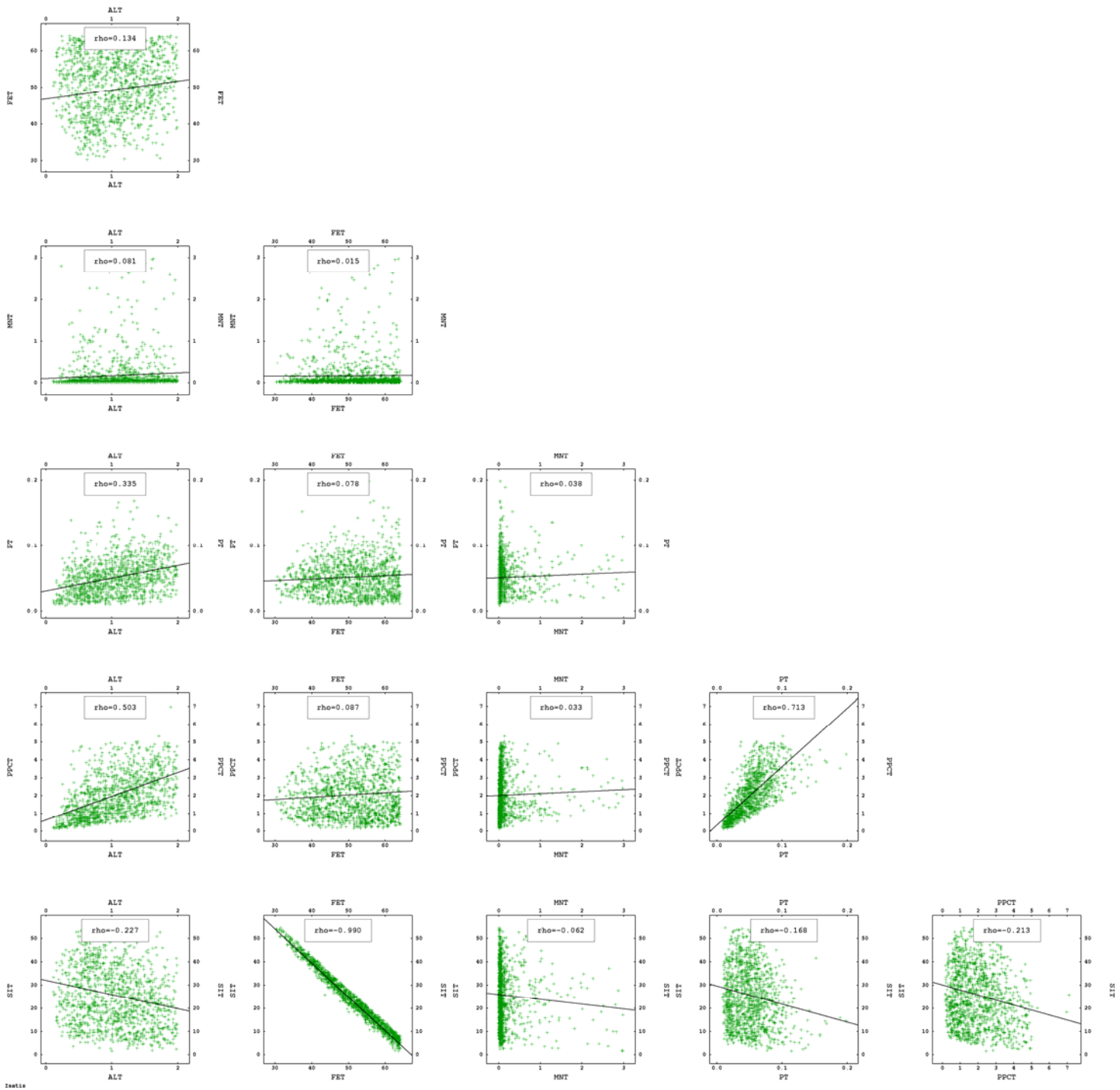


Figura A.13 – Diagramas de dispersão das variáveis originais no global (ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT).

Tabela A.6 – Coeficientes de correlação das variáveis originais no global (ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT).

|      | ALT    | FET    | MNT    | PT     | PPCT   |
|------|--------|--------|--------|--------|--------|
| FET  | 0,134  |        |        |        |        |
| MNT  | 0,081  | 0,015  |        |        |        |
| PT   | 0,335  | 0,078  | 0,038  |        |        |
| PPCT | 0,503  | 0,087  | 0,033  | 0,713  |        |
| SIT  | -0,227 | -0,990 | -0,062 | -0,168 | -0,213 |

### **A.2.2 Diagramas de dispersão e coeficientes de correlação das variáveis acumuladas nas diferentes faixas granulométricas e no global**

A seguir, apresentam-se os diagramas de dispersão (Figura A.14 a Figura A.19) e coeficientes de correlação (Tabela A.7 a Tabela A.12) para as variáveis acumuladas nas diferentes faixas granulométricas e no global.

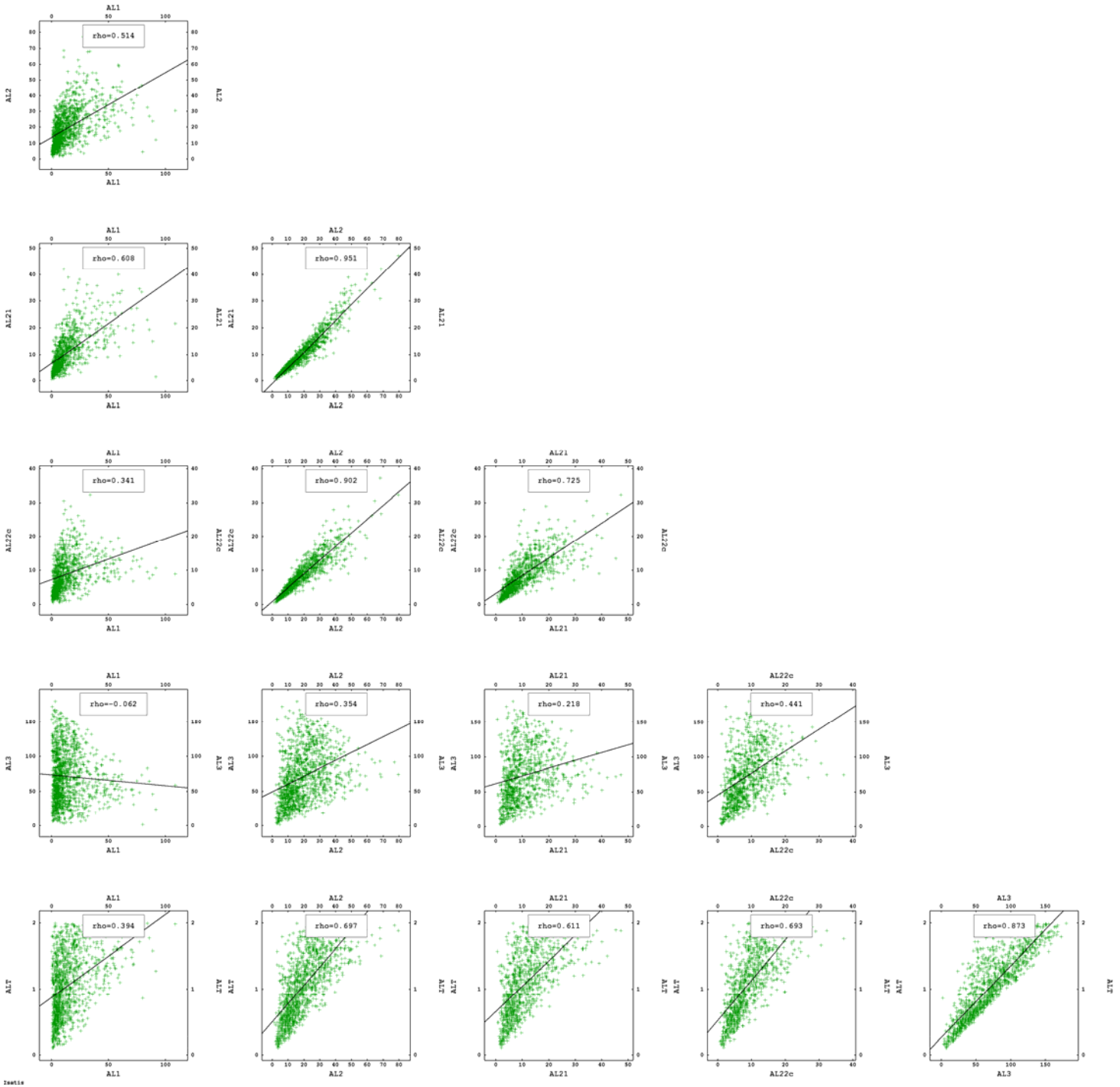


Figura A.14 – Diagramas de dispersão da alumina acumulada nas diferentes faixas granulométricas e no global (AL1, AL2, AL21, AL22C, AL3 e ALT).

Tabela A.7 – Coeficientes de correlação da alumina acumulada nas diferentes faixas granulométricas e no global (AL1, AL2, AL21, AL22C, AL3 e ALT).

|       | AL1    | AL2   | AL21  | AL22C | AL3   |
|-------|--------|-------|-------|-------|-------|
| AL2   | 0,514  |       |       |       |       |
| AL21  | 0,608  | 0,951 |       |       |       |
| AL22C | 0,341  | 0,902 | 0,725 |       |       |
| AL3   | -0,062 | 0,354 | 0,218 | 0,441 |       |
| ALT   | 0,364  | 0,697 | 0,611 | 0,693 | 0,873 |

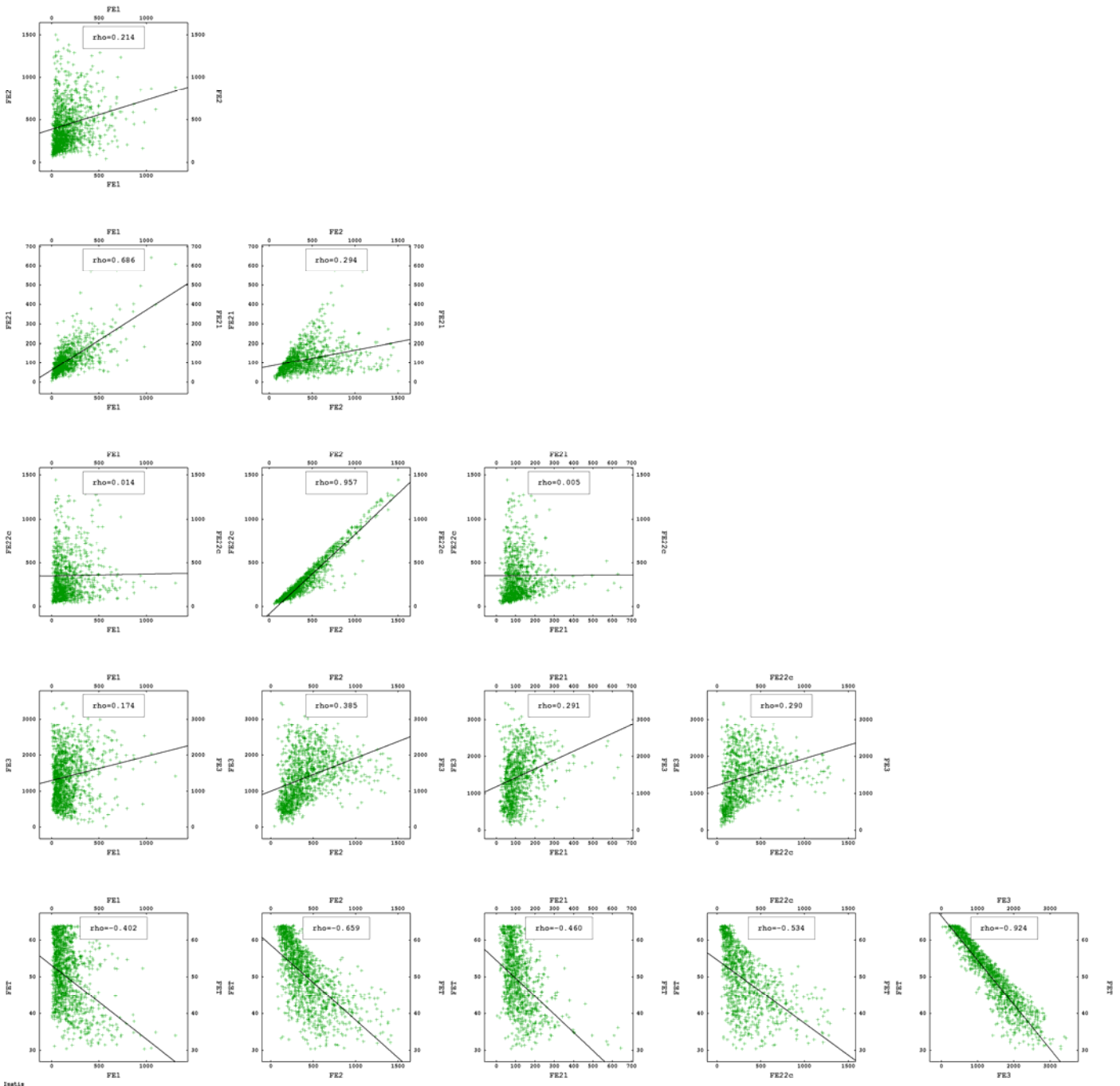


Figura A.15 – Diagramas de dispersão do ferro acumulado nas diferentes faixas granulométricas e no global (FE1, FE2, FE21, FE22C, FE3 e FET).

Tabela A.8 – Coeficientes de correlação do ferro acumulado nas diferentes faixas granulométricas e no global (FE1, FE2, FE21, FE22C, FE3 e FET).

|       | FE1    | FE2    | FE21   | FE22C  | FE3    |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|
| FE2   | 0,214  |        |        |        |        |
| FE21  | 0,686  | 0,294  |        |        |        |
| FE22C | 0,014  | 0,957  | 0,005  |        |        |
| FE3   | 0,174  | 0,385  | 0,291  | 0,290  |        |
| FET   | -0,402 | -0,659 | -0,460 | -0,534 | -0,924 |

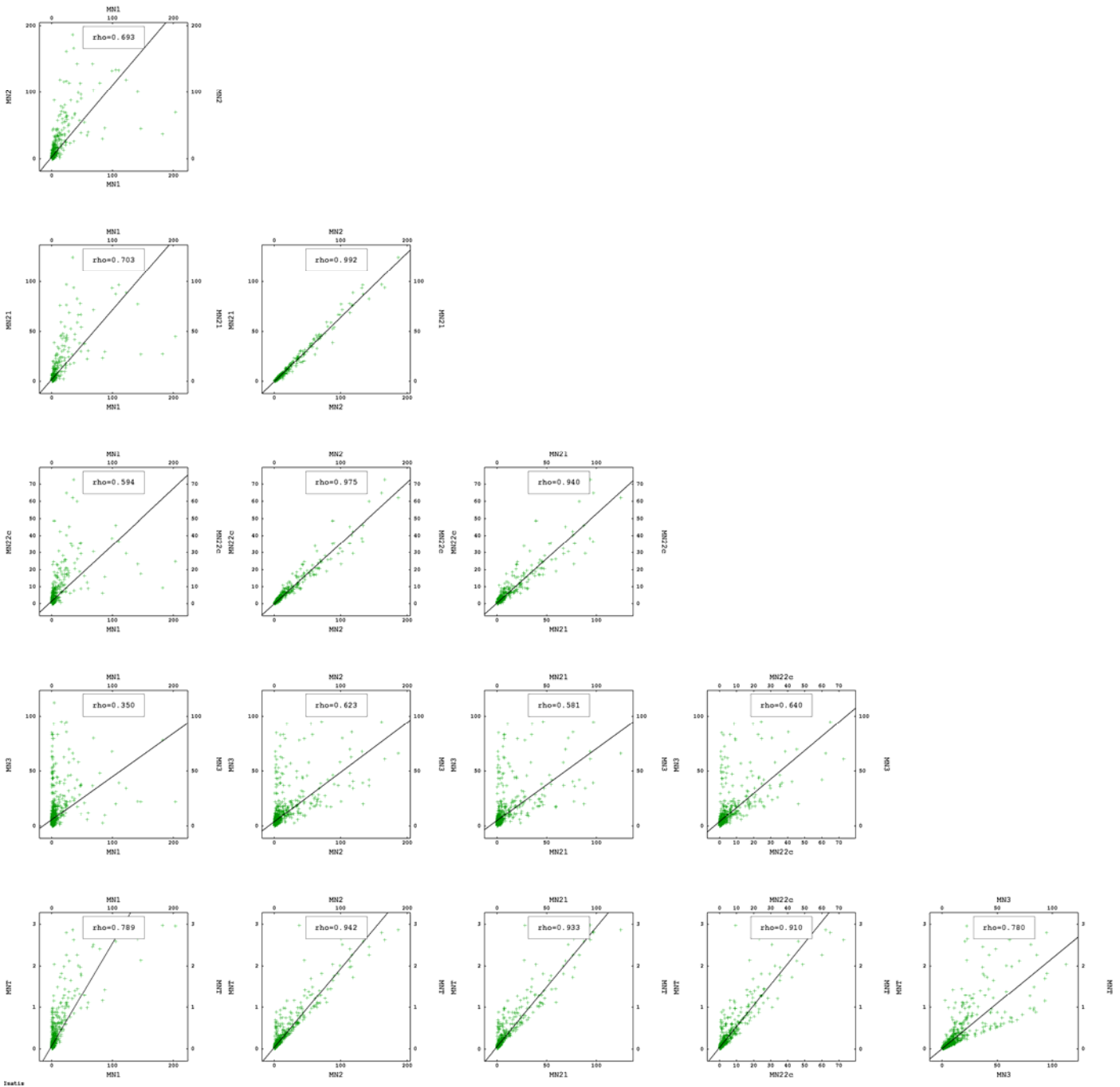


Figura A.16 – Diagramas de dispersão do manganês acumulado nas diferentes faixas granulométricas e no global (MN1, MN2, MN21, MN22C, MN3 e MNT).

Tabela A.9 – Coeficientes de correlação do manganês acumulado nas diferentes faixas granulométricas e no global (MN1, MN2, MN21, MN22C, MN3 e MNT).

|       | MN1   | MN2   | MN21  | MN22C | MN3   |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| MN2   | 0,693 |       |       |       |       |
| MN21  | 0,703 | 0,992 |       |       |       |
| MN22C | 0,594 | 0,975 | 0,940 |       |       |
| MN3   | 0,350 | 0,623 | 0,581 | 0,640 |       |
| MNT   | 0,789 | 0,942 | 0,933 | 0,910 | 0,780 |



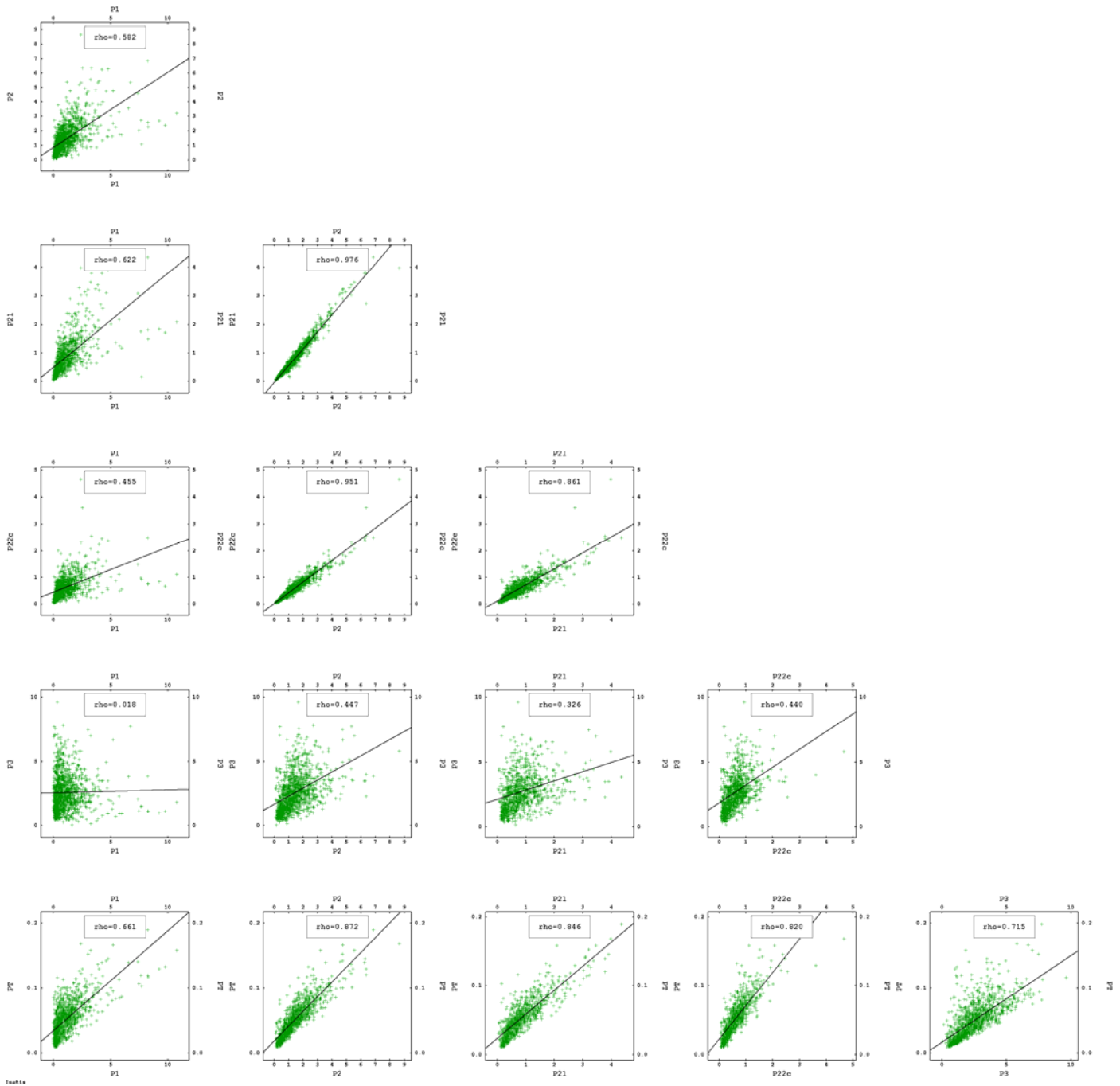


Figura A.17 – Diagramas de dispersão do fósforo acumulado nas diferentes faixas granulométricas e no global (P1, P2, P21, P22C, P3 e PT).

Tabela A.10 – Coeficientes de correlação do fósforo acumulado nas diferentes faixas granulométricas e no global (P1, P2, P21, P22C, P3 e PT).

|      | P1    | P2    | P21   | P22C  | P3    |
|------|-------|-------|-------|-------|-------|
| P2   | 0,582 |       |       |       |       |
| P21  | 0,622 | 0,976 |       |       |       |
| P22C | 0,455 | 0,951 | 0,861 |       |       |
| P3   | 0,018 | 0,447 | 0,326 | 0,440 |       |
| PT   | 0,661 | 0,872 | 0,846 | 0,820 | 0,715 |

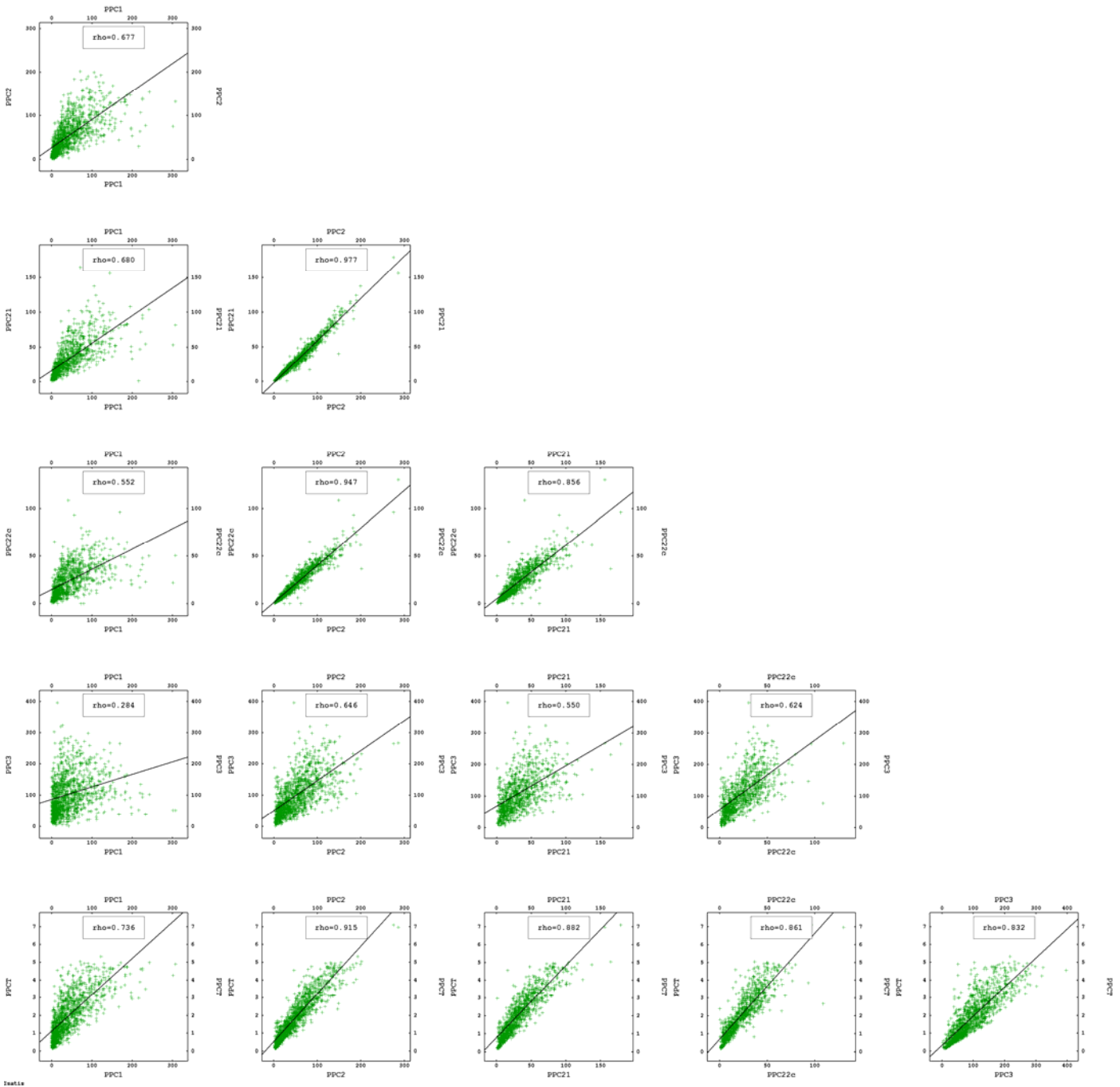


Figura A.18 – Diagramas de dispersão das perdas por calcinação acumuladas nas diferentes faixas granulométricas e no global (PPC1, PPC2, PPC21, PPC22C, PPC3 e PPCT).

Tabela A.11 – Coeficientes de correlação das perdas por calcinação acumuladas nas diferentes faixas granulométricas e no global (PPC1, PPC2, PPC21, PPC22C, PPC3 e PPCT).

|        | PPC1  | PPC2  | PPC21 | PPC22C | PPC3  |
|--------|-------|-------|-------|--------|-------|
| PPC2   | 0,677 |       |       |        |       |
| PPC21  | 0,680 | 0,977 |       |        |       |
| PPC22C | 0,552 | 0,947 | 0,856 |        |       |
| PPC3   | 0,284 | 0,646 | 0,550 | 0,624  |       |
| PPCT   | 0,736 | 0,915 | 0,882 | 0,861  | 0,832 |

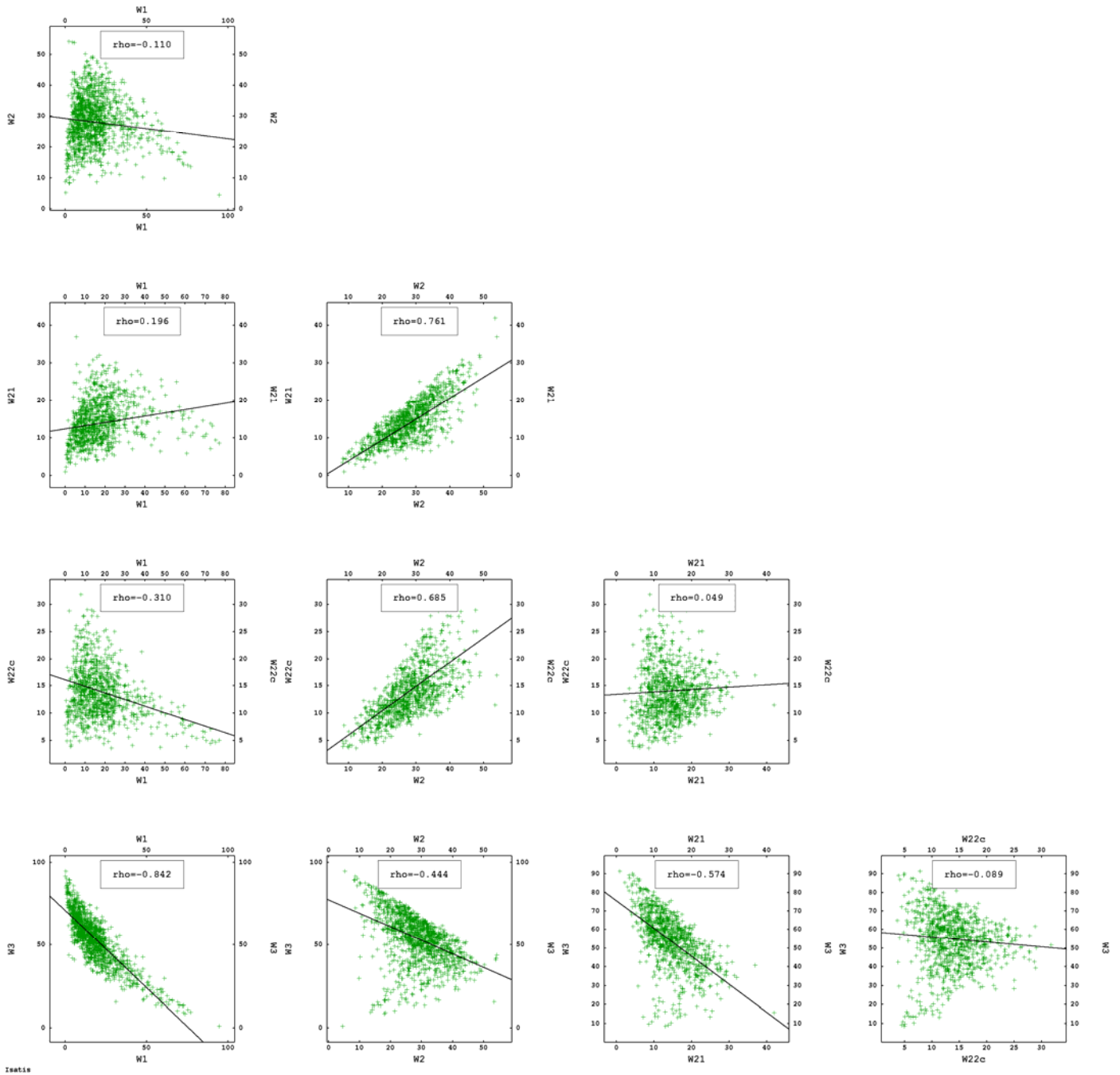


Figura A.19 – Diagramas de dispersão da massa da fração granulométrica nas diferentes faixas (W1, W2, W21, W22C e W3).

Tabela A.12 – Coeficientes de correlação da massa da fração granulométrica nas diferentes faixas (W1, W2, W21, W22C e W3).

|      | W1     | W2     | W21    | W22C   |
|------|--------|--------|--------|--------|
| W2   | -0,110 |        |        |        |
| W21  | 0,196  | 0,761  |        |        |
| W22C | -0,310 | 0,685  | 0,049  |        |
| W3   | -0,842 | -0,444 | -0,574 | -0,089 |

Os teores de ferro e sílica apresentam uma correlação elevada. Portanto, considera-se a correlação entre essas espécies nas diferentes faixas granulométricas (Tabela A.13). Os diagramas de dispersão não são apresentados.

Tabela A.13 – Coeficientes de correlação da sílica e do ferro acumulados nas diferentes faixas granulométricas e no crude (FE1, FE2, FE21, FE22C, FE3, FET, SI1, SI2, SI21, SI22C, SI3 e SIT).

|              | FE1    | FE2    | FE21   | FE22C  | FE3    | FET    | SI1   | SI2   | SI21  | SI22C | SI3   |
|--------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-------|-------|-------|-------|-------|
| <b>FE2</b>   | 0,214  |        |        |        |        |        |       |       |       |       |       |
| <b>FE21</b>  | 0,686  | 0,294  |        |        |        |        |       |       |       |       |       |
| <b>FE22C</b> | 0,014  | 0,957  | 0,005  |        |        |        |       |       |       |       |       |
| <b>FE3</b>   | 0,174  | 0,385  | 0,291  | 0,290  |        |        |       |       |       |       |       |
| <b>FET</b>   | -0,402 | -0,659 | -0,460 | -0,534 | -0,924 |        |       |       |       |       |       |
| <b>SI1</b>   | 0,965  | 0,246  | 0,698  | 0,051  | 0,290  | -0,495 |       |       |       |       |       |
| <b>SI2</b>   | 0,220  | 0,986  | 0,273  | 0,950  | 0,424  | -0,686 | 0,279 |       |       |       |       |
| <b>SI21</b>  | 0,700  | 0,301  | 0,937  | 0,032  | 0,404  | -0,552 | 0,769 | 0,336 |       |       |       |
| <b>SI22C</b> | 0,024  | 0,954  | 0,003  | 0,997  | 0,308  | -0,550 | 0,070 | 0,958 | 0,051 |       |       |
| <b>SI3</b>   | 0,204  | 0,374  | 0,307  | 0,277  | 0,993  | -0,921 | 0,325 | 0,422 | 0,433 | 0,300 |       |
| <b>SIT</b>   | 0,401  | 0,631  | 0,447  | 0,511  | 0,923  | -0,990 | 0,515 | 0,677 | 0,574 | 0,534 | 0,934 |

## **Apêndice B**

### **Análise e modelagem da continuidade espacial para a abordagem clássica da Cokrigagem.**

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes à análise e modelagem da continuidade espacial para a abordagem clássica da cokrigagem, apresentada no Capítulo 3.

Apresentam-se os modelos lineares de correionalização para os diferentes sistemas de cokrigagem considerados, com as contribuições à variância global detalhadas numa tabela em cada caso.

#### **B.1 Modelos lineares de correionalização**

Os sistemas de cokrigagem considerados estão conformados pelos subgrupos de variáveis apresentados na Tabela B.1. A cokrigagem do ferro realiza-se em conjunto com a da sílica para aproveitar a forte correlação inversa existente entre essas duas espécies.

A análise da variabilidade espacial conjunta mostra o elipsóide de anisotropia com o seu eixo em  $N100^\circ$ , o eixo intermediário em  $N190^\circ$  e o eixo menor na direção perpendicular ao plano XY, denominada  $D-90^\circ$ .

Tabela B.1– Subgrupos de variáveis utilizadas nos sistemas de cokrigagem.

| Subgrupo | Variáveis                                |
|----------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT                      |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET, SI2, SI21, SI3, SIT |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT                      |
| 4        | P2, P21, P3, PT                          |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT                  |
| 6        | W2, W21, W3                              |

A modelagem da correlação espacial conjunta é realizada por meio do Modelo Linear de correionalização (MLC), assumindo a mesma anisotropia em cada sistema e alcances determinados de modo independente para cada MLC.

O software utilizado para a modelagem dos mesmos é o ISATIS<sup>®</sup>, utilizando a função de ajuste automático das contribuições à variância global com pesos atribuídos proporcionais ao número de pares e inversamente proporcionais ao vetor de separação. Os alcances são modelados manualmente.

### B.1.1 Modelo Linear de correionalização: Alumina

O modelo linear de correionalização para a alumina presente nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, é dado pela seguinte Equação:

$$Y_{AL} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{145m}{N100^\circ} \frac{50m}{N190^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{470m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{100m}{D-90^\circ}\right) \quad B.1$$

O modelo está composto por um efeito pepita e duas estruturas *Sph* esféricas (Goovaerts, 1997). Entre parênteses são apresentados os alcances, em metros, nas direções dos eixos maior, intermediário e menor, do elipsóide de anisotropia.

Na Tabela B.2, são apresentados os valores de contribuição à variância global ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ), numa matriz de correionalização para cada estrutura.

A Figura B.1 apresenta os variogramas direcionais, experimentais e modelados, diretos e cruzados, para a alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global, nas principais direções de anisotropia.

Tabela B.2 – Matrizes de correionalização para o modelo linear de correionalização da alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global (AL2, AL21, AL3 e ALT, respectivamente).

| <b>Matriz de correionalização C<sub>0</sub></b> |            |             |            |            |
|---|------------|-------------|------------|------------|
|   | <b>AL2</b> | <b>AL21</b> | <b>AL3</b> | <b>ALT</b> |
| <b>AL2</b>                                      | 12,89      | 1,65        | 57,12      | 0,70       |
| <b>AL21</b>                                     | 1,65       | 0,96        | 8,97       | 0,04       |
| <b>AL3</b>                                      | 57,12      | 8,97        | 256,80     | 2,98       |
| <b>ALT</b>                                      | 0,70       | 0,04        | 2,98       | 0,04       |
| <b>Matriz de correionalização C<sub>1</sub></b> |            |             |            |            |
|   | <b>AL2</b> | <b>AL21</b> | <b>AL3</b> | <b>ALT</b> |
| <b>AL2</b>                                      | 3,82       | 1,15        | -38,47     | -0,25      |
| <b>AL21</b>                                     | 1,15       | 0,35        | -11,6      | -0,07      |
| <b>AL3</b>                                      | -38,47     | -11,6       | 574,00     | 2,50       |
| <b>ALT</b>                                      | -0,25      | -0,07       | 2,50       | 0,04       |
| <b>Matriz de correionalização C<sub>2</sub></b> |            |             |            |            |
|   | <b>AL2</b> | <b>AL21</b> | <b>AL3</b> | <b>ALT</b> |
| <b>AL2</b>                                      | 147,70     | 80,79       | 171,70     | 4,24       |
| <b>AL21</b>                                     | 80,79      | 55,89       | 80,81      | 2,36       |
| <b>AL3</b>                                      | 171,70     | 80,81       | 520,20     | 8,28       |
| <b>ALT</b>                                      | 4,24       | 2,36        | 8,277      | 0,16       |

Variograma Modelo

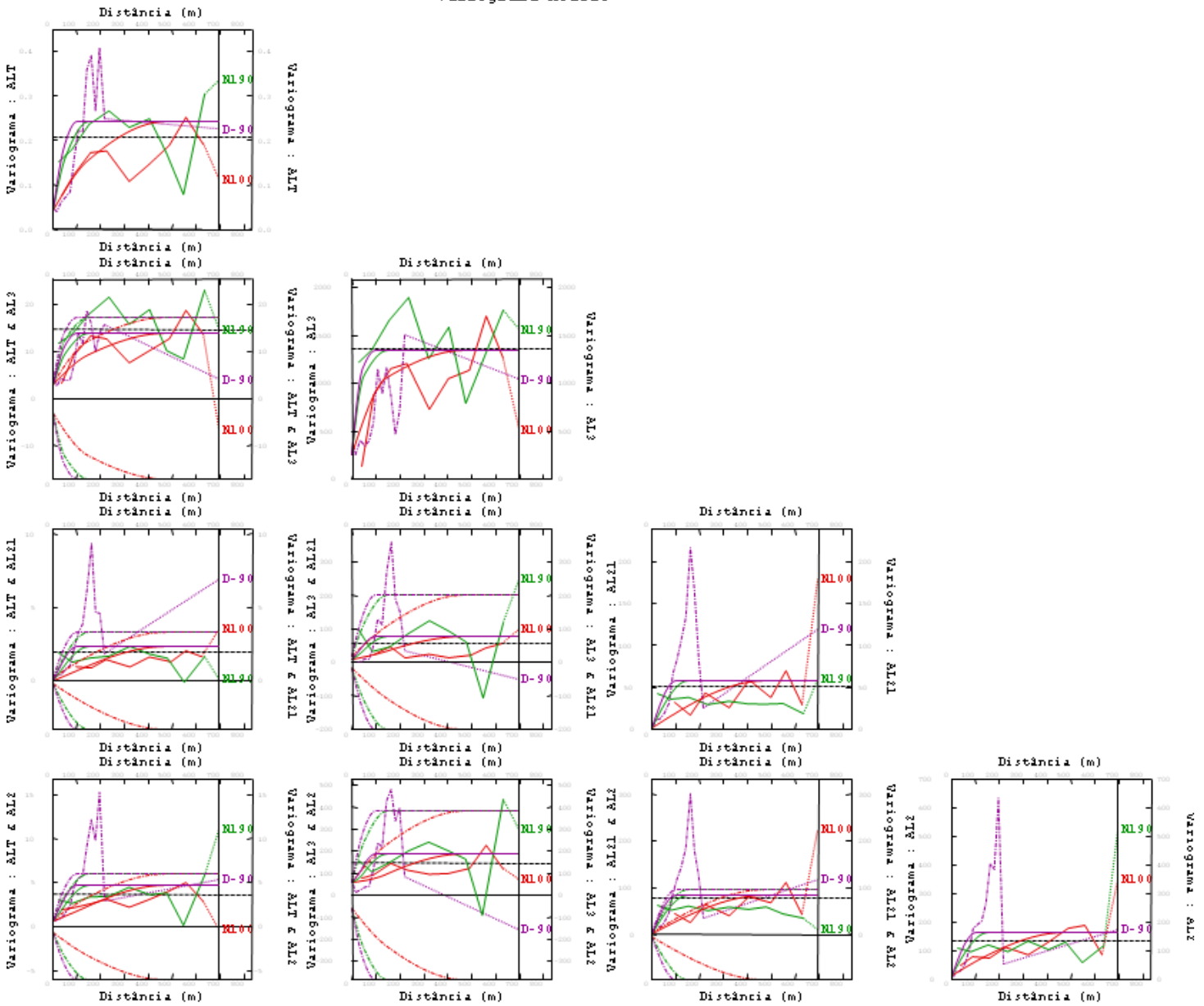


Figura B.1 - Modelo de correlogramização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para a alumina nas faixas 2, 21, 3 e no global (AL2, AL21, AL3 e ALT, respectivamente).



### B.1.2 Modelo Linear de correionalização: Ferro-Sílica

O modelo linear de correionalização para o ferro e a sílica presentes nas faixas 2, 21, 3 e no global é dado pela seguinte Equação:

$$Y_{FE-SI} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{190m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{2000m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{130m}{D-90^\circ}\right) \quad B.2$$

Na Tabela B.3, são apresentados os valores de contribuição à variância global ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ), numa matriz de correionalização para cada estrutura.

Tabela B.3 – Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização do ferro e da sílica nas faixas 2, 21, 3 e no global (FE2, FE21, FE3, FET, SI2, SI21, SI3 e SIT, respectivamente).

| Matriz de correionalização C0 |          |          |           |          |          |          |           |         |
|-------------------------------|----------|----------|-----------|----------|----------|----------|-----------|---------|
|                               | FE2      | FE21     | FE3       | FET      | SI2      | SI21     | SI3       | SIT     |
| FE2                           | 8562,00  | 3812,00  | 28500,00  | -387,50  | 11270,00 | 4311,00  | 42110,00  | 560,40  |
| FE21                          | 3812,00  | 1806,00  | 8752,00   | -132,40  | 4975,00  | 1969,00  | 13590,00  | 195,80  |
| FE3                           | 28500,00 | 8752,00  | 244800,00 | -2854,00 | 40340,00 | 12800,00 | 342200,00 | 4036,00 |
| FET                           | -387,50  | -132,40  | -2854,00  | 34,01    | -544,60  | -180,50  | -4038,00  | -48,56  |
| SI2                           | 11270,00 | 4975,00  | 40340,00  | -544,60  | 15050,00 | 5694,00  | 60000,00  | 795,50  |
| SI21                          | 4311,00  | 1969,00  | 12800,00  | -180,50  | 5694,00  | 2201,00  | 19350,00  | 264,90  |
| SI3                           | 42110,00 | 13590,00 | 342200,00 | -4038,00 | 60000,00 | 19350,00 | 483200,00 | 5766,00 |
| SIT                           | 560,40   | 195,80   | 4036,00   | -48,56   | 795,50   | 264,90   | 5766,00   | 70,00   |
| Matriz de correionalização C1 |          |          |           |          |          |          |           |         |
|                               | FE2      | FE21     | FE3       | FET      | SI2      | SI21     | SI3       | SIT     |
| FE2                           | 37840,00 | 2627,00  | 17630,00  | -577,60  | 54430,00 | 4645,00  | 24780,00  | 844,00  |
| FE21                          | 2627,00  | 1843,00  | -1551,00  | -63,47   | 2531,00  | 2164,00  | -2909,00  | 60,90   |
| FE3                           | 17630,00 | -1551,00 | 18570,00  | -290,20  | 31050,00 | 1293,00  | 27780,00  | 540,90  |
| FET                           | -577,60  | -63,47   | -290,20   | 9,89     | -858,40  | -123,70  | -421,30   | -14,87  |
| SI2                           | 54430,00 | 2531,00  | 31050,00  | -858,40  | 81960,00 | 6925,00  | 45680,00  | 1331,00 |
| SI21                          | 4645,00  | 2164,00  | 1293,00   | -123,70  | 6925,00  | 3584,00  | 1794,00   | 176,40  |
| SI3                           | 24780,00 | -2909,00 | 27780,00  | -421,30  | 45680,00 | 1794,00  | 44860,00  | 831,30  |
| SIT                           | 844,00   | 60,90    | 540,90    | -14,87   | 1331,00  | 176,40   | 831,30    | 24,00   |
| Matriz de correionalização C2 |          |          |           |          |          |          |           |         |
|                               | FE2      | FE21     | FE3       | FET      | SI2      | SI21     | SI3       | SIT     |
| FE2                           | 30230,00 | -3443,00 | 5995,00   | -391,20  | 43020,00 | -2139,00 | 11520,00  | 616,10  |
| FE21                          | -3443,00 | 3007,00  | -0,81     | 36,85    | -5055,00 | 295,20   | -364,00   | -58,87  |
| FE3                           | 5995,00  | -0,81    | 147000,00 | -851,00  | 13670,00 | 4340,00  | 102500,00 | 1359,00 |
| FET                           | -391,20  | 36,85    | -851,00   | 27,29    | -642,60  | -22,22   | -1289,00  | -23,12  |
| SI2                           | 43020,00 | -5055,00 | 13670,00  | -642,60  | 64380,00 | -2871,00 | 24250,00  | 1012,00 |
| SI21                          | -2139,00 | 295,20   | 4340,00   | -22,22   | -2871,00 | 8287,00  | 6356,00   | 38,95   |
| SI3                           | 11520,00 | -364,00  | 102500,00 | -1289,00 | 24250,00 | 6356,00  | 309600,00 | 2086,00 |
| SIT                           | 616,10   | -58,87   | 1359,00   | -23,12   | 1012,00  | 38,95    | 2086,00   | 61,39   |

Na Figura B.2, são apresentados os variogramas direcionais, experimentais e modelados, diretos e cruzados, para o ferro e a sílica nas faixas 2, 21, 3 e no global, nas principais direções de anisotropia. O modelo nesse caso envolve oito variáveis e a sua visualização não é adequada pelo elevado número de variogramas diretos e cruzados

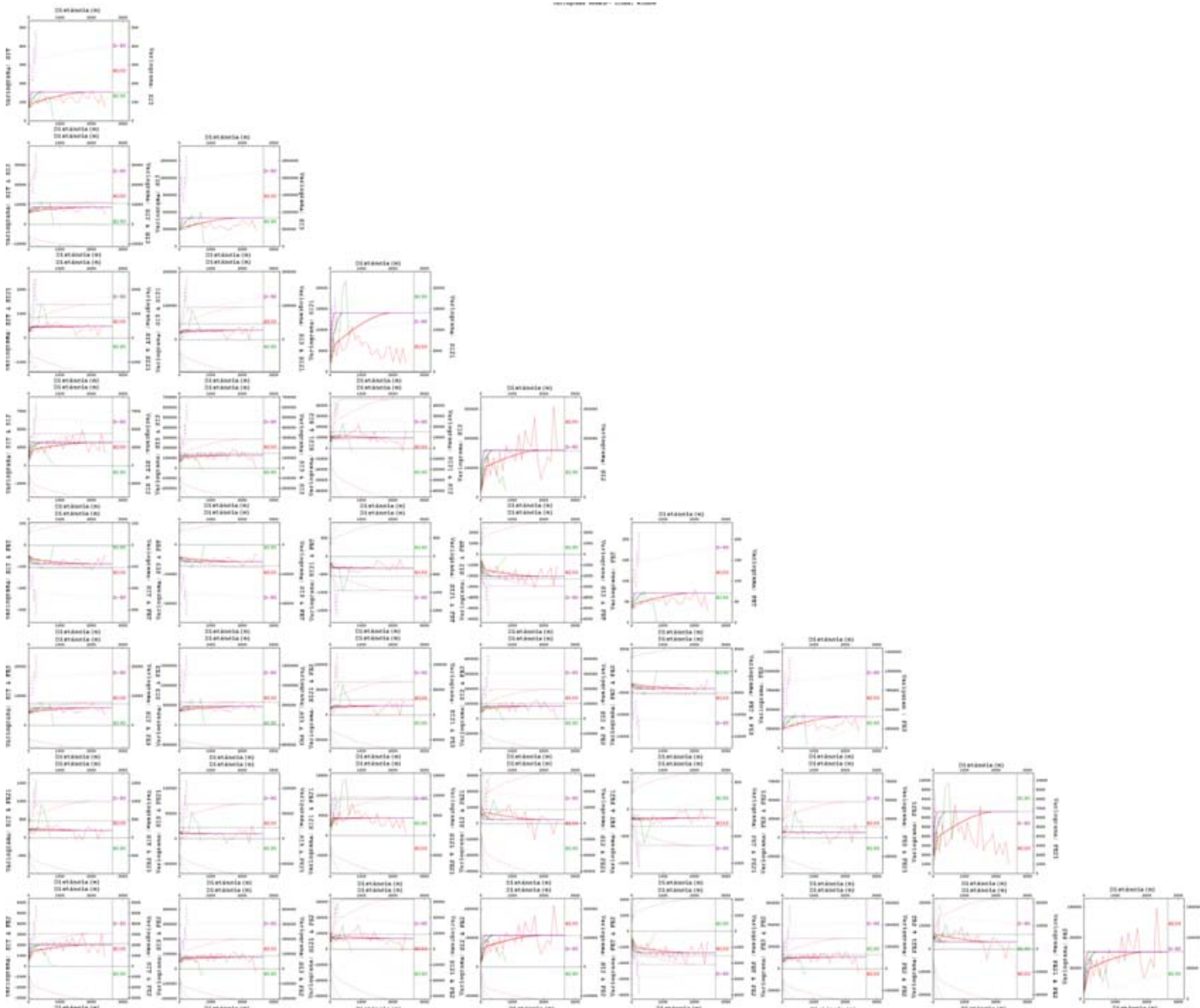


Figura B.2 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para o ferro e a sílica nas faixas 2, 21, 3 e no global (FE2, FE21, FE3, FET, SI2, SI21, SI3 e SIT, respectivamente).

### B.1.3 Modelo Linear de correionalização: Manganês

No caso do manganês, presente nas faixas 2, 21, 3 e no global, o modelo linear de correionalização é dado pela seguinte Equação:

$$Y_{MN} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{300m}{N100^\circ} \frac{220m}{N190^\circ} \frac{145m}{D-90^\circ}\right) \quad B.3$$

Os variogramas experimentais do manganês são muito erráticos e a modelagem mostrou-se mais apropriada utilizando uma estrutura esférica *Sph* em vez de duas. Na Tabela B.4, são apresentados os valores de contribuição à variância global ( $C_0$  e  $C_1$ ), numa matriz de correionalização para cada estrutura. A matriz  $C_2$  não é apresentada já que todos seus elementos são nulos.

Tabela B.4 – Matrizes de correionalização  $C_0$  e  $C_1$  para o modelo linear de correionalização do manganês nas faixas 2, 21, 3 e no global (MN2, MN21, MN3, e MNT, respectivamente).

| Matriz de correionalização C0 |        |        |        |      |
|-------------------------------|--------|--------|--------|------|
|                               | MN2    | MN21   | MN3    | MNT  |
| MN2                           | 13,40  | 16,93  | 1,19   | 0,23 |
| MN21                          | 16,93  | 21,74  | 1,37   | 0,31 |
| MN3                           | 1,19   | 1,37   | 0,16   | 0,01 |
| MNT                           | 0,23   | 0,31   | 0,01   | 0,01 |
| Matriz de correionalização C1 |        |        |        |      |
|                               | MN2    | MN21   | MN3    | MNT  |
| MN2                           | 291,30 | 166,70 | 136,70 | 5,42 |
| MN21                          | 166,70 | 118,20 | 76,66  | 3,07 |
| MN3                           | 136,70 | 76,66  | 168,70 | 3,18 |
| MNT                           | 5,42   | 3,07   | 3,18   | 0,12 |

Os variogramas direcionais, experimentais e modelados, nas principais direções de anisotropia, do manganês nas faixas 2, 21, 3 e global, são apresentados na Figura B.3.

Variograma Modelo

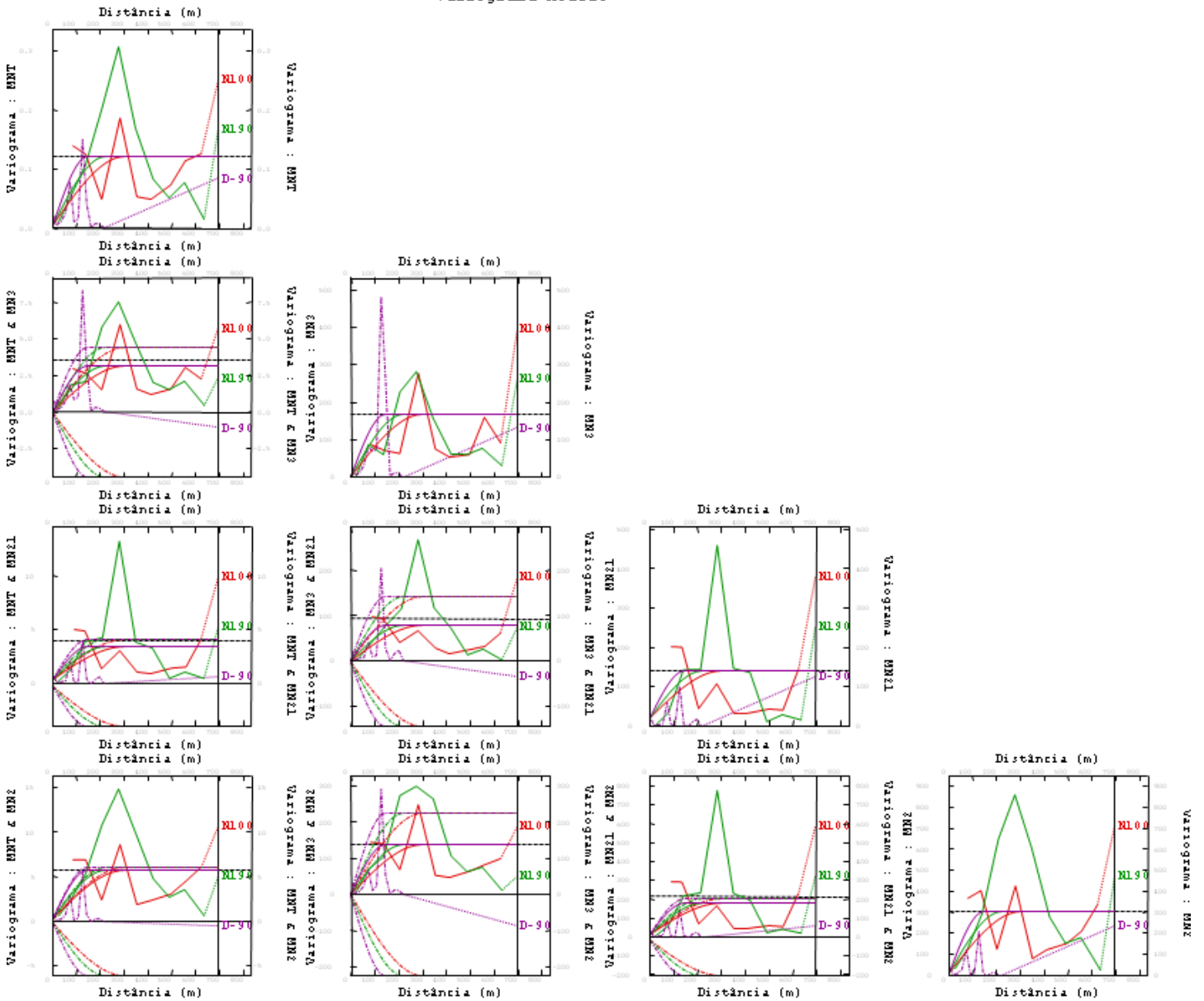


Figura B.3 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para o manganês nas faixas 2, 21, 3 e no global (MN2, MN21, MN3 e MNT, respectivamente).

### B.1.4 Modelo Linear de correionalização: Fósforo

O modelo linear de correionalização para o fósforo presente nas faixas 2, 21, 3 e no global é dado pela seguinte Equação:

$$Y_P = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{140m}{N100^\circ} \frac{140m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{600m}{N100^\circ} \frac{270m}{N190^\circ} \frac{100m}{D-90^\circ}\right) \quad B.4$$

Na Tabela B.5, são apresentados os valores de contribuição à variância global ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ), numa matriz de correionalização para cada estrutura.

Tabela B.5 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização do fósforo nas faixas 2, 21, 3 e no global (P2, P21, P3, e PT, respectivamente).

| Matriz de correionalização C0 |        |        |        |       |
|-------------------------------|--------|--------|--------|-------|
|                               | P2     | P21    | P3     | PT    |
| P2                            | 0,042  | -0,008 | 0,117  | 0,002 |
| P21                           | -0,008 | 0,001  | -0,021 | 0,000 |
| P3                            | 0,117  | -0,021 | 0,479  | 0,006 |
| PT                            | 0,002  | 0,000  | 0,006  | 0,000 |
| Matriz de correionalização C1 |        |        |        |       |
|                               | P2     | P21    | P3     | PT    |
| P2                            | 0,627  | 0,359  | 0,156  | 0,010 |
| P21                           | 0,359  | 0,206  | 0,083  | 0,006 |
| P3                            | 0,156  | 0,083  | 0,156  | 0,002 |
| PT                            | 0,010  | 0,006  | 0,002  | 0,000 |
| Matriz de correionalização C2 |        |        |        |       |
|                               | P2     | P21    | P3     | PT    |
| P2                            | 0,320  | 0,238  | 0,292  | 0,011 |
| P21                           | 0,238  | 0,178  | 0,224  | 0,008 |
| P3                            | 0,292  | 0,224  | 1,387  | 0,017 |
| PT                            | 0,011  | 0,008  | 0,017  | 0,001 |

Na Figura B.4, são apresentados os variogramas direcionais, experimentais e modelados, diretos e cruzados, para o fósforo nas faixas 2, 21, 3 e no global, nas principais direções de anisotropia.

Variograma Modelo

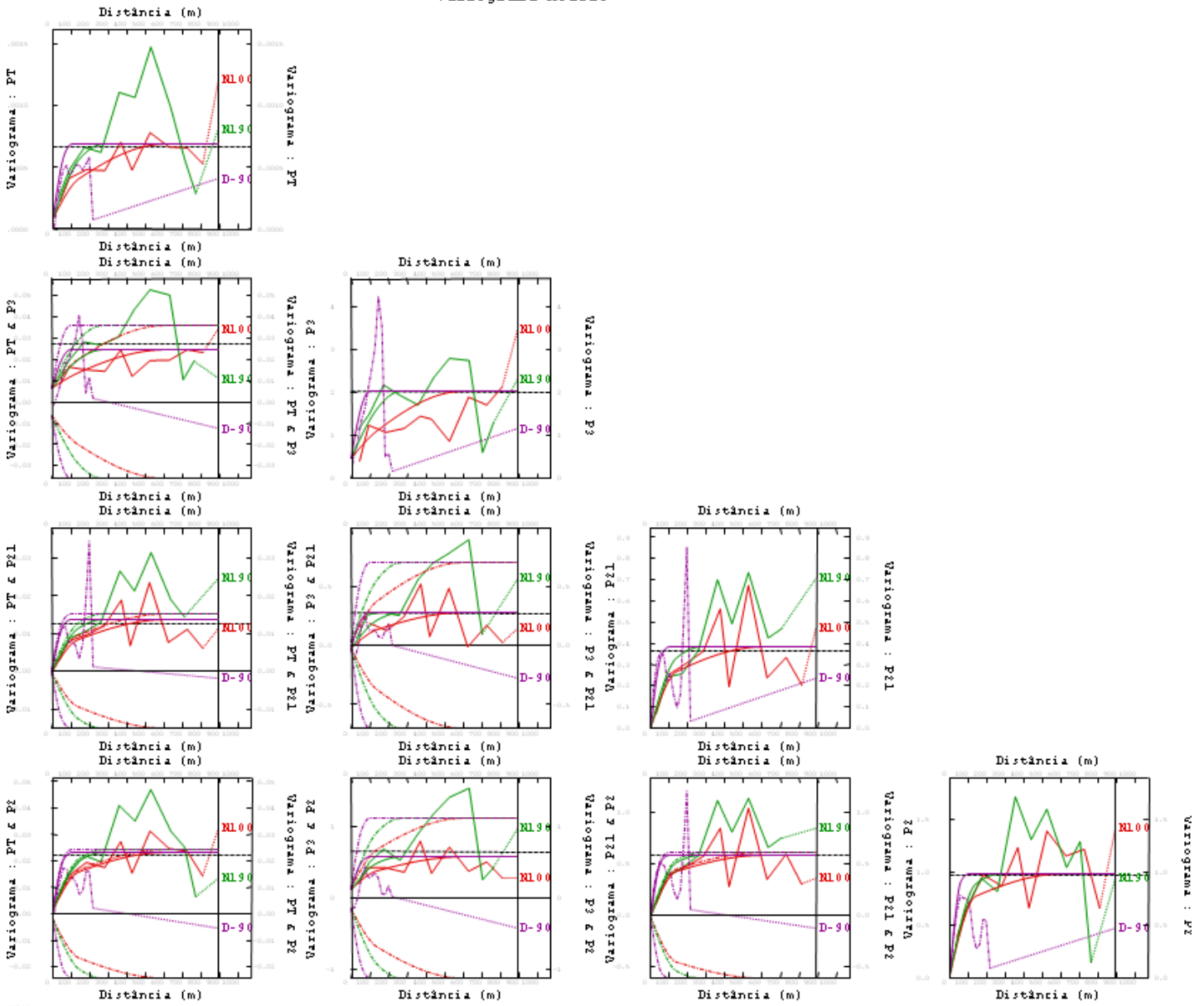


Figura B.4 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para o fósforo nas faixas 2, 21, 3 e no global (P2, P21, P3 e PT, respectivamente).

### B.1.5 Modelo Linear de correionalização: Perdas por calcinação

Para as perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global, o modelo linear de correionalização é dado pela seguinte Equação:

$$Y_{PPC} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{190m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{1300m}{N100^\circ} \frac{435m}{N190^\circ} \frac{195m}{D-90^\circ}\right) \quad B.5$$

Assim, a Tabela B.6 apresenta os valores de contribuição à variância global ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ), numa matriz de correionalização para cada estrutura.

Tabela B.6 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e no global (PPC2, PPC21, PPC3, e PPCT, respectivamente).

| Matriz de correionalização C0 |         |         |         |       |
|-------------------------------|---------|---------|---------|-------|
|                               | PPC2    | PPC21   | PPC3    | PPCT  |
| PPC2                          | 74,56   | 9,65    | 112,40  | 2,09  |
| PPC21                         | 9,65    | 1,28    | 10,00   | 0,22  |
| PPC3                          | 112,40  | 10,00   | 939,90  | 11,85 |
| PPCT                          | 2,09    | 0,22    | 11,85   | 0,16  |
| Matriz de correionalização C1 |         |         |         |       |
|                               | PPC2    | PPC21   | PPC3    | PPCT  |
| PPC2                          | 205,40  | 134,40  | -215,00 | 1,77  |
| PPC21                         | 134,40  | 88,92   | -153,70 | 1,30  |
| PPC3                          | -215,00 | -153,70 | 388,60  | -3,66 |
| PPCT                          | 1,77    | 1,30    | -3,66   | 0,04  |
| Matriz de correionalização C2 |         |         |         |       |
|                               | PPC2    | PPC21   | PPC3    | PPCT  |
| PPC2                          | 1581,00 | 1063,00 | 1440,00 | 40,69 |
| PPC21                         | 1063,00 | 716,20  | 978,00  | 27,35 |
| PPC3                          | 1440,00 | 978,00  | 2577,00 | 36,83 |
| PPCT                          | 40,69   | 27,35   | 36,83   | 1,35  |

A Figura B.5 apresenta os variogramas direcionais, experimentais e modelados, diretos e cruzados, para as perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e no global, nas principais direções de anisotropia.

Variograma Modelo

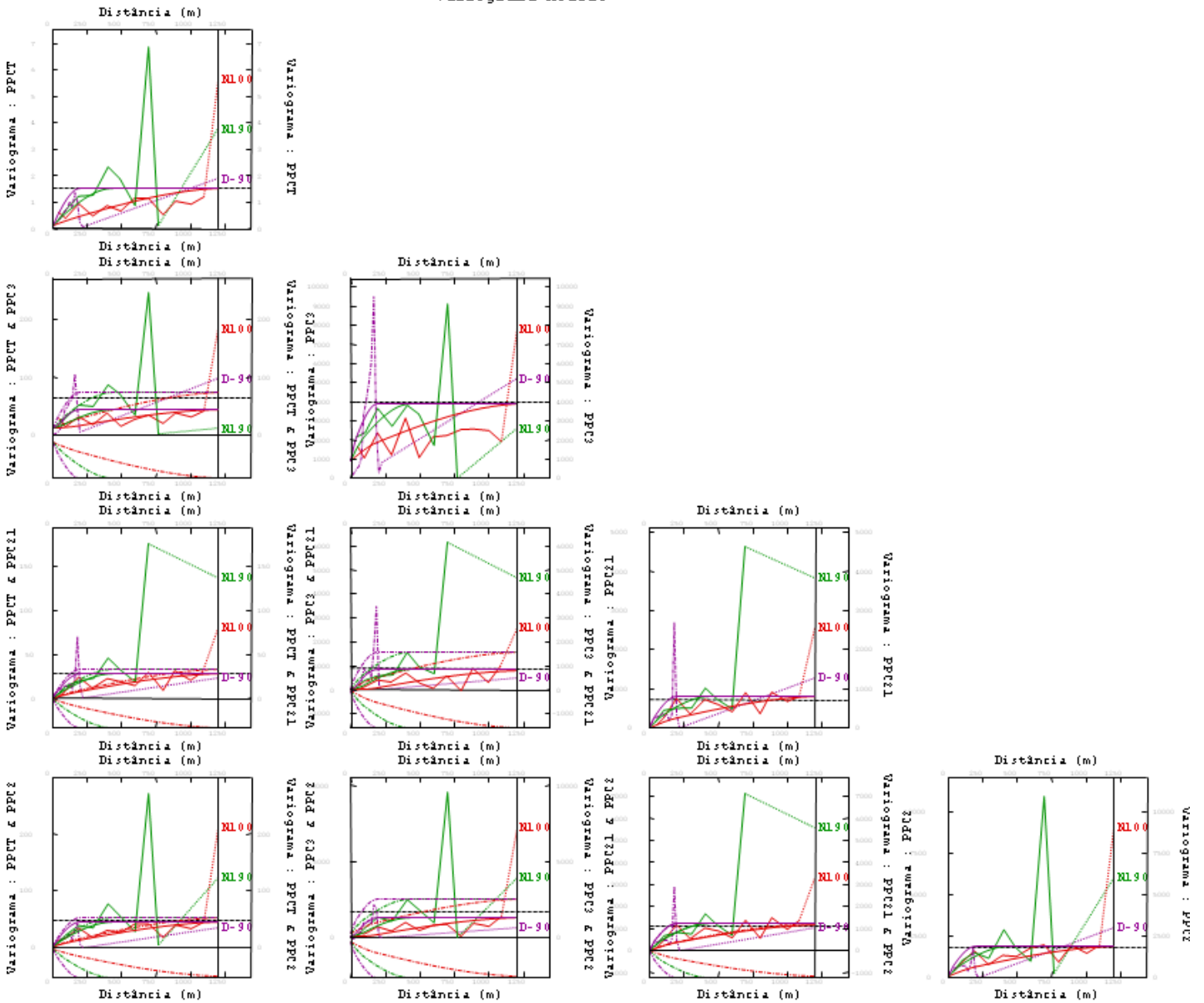


Figura B.5 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e no global (PPC2, PPC21, PPC3 e PPCT, respectivamente).



### B.1.6 Modelo Linear de correionalização: Massa da fração granulométrica

O modelo linear de correionalização para o fósforo presente nas faixas 2, 21, 3 e no global expressa-se na seguinte Equação:

$$Y_W = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{330m}{N100^\circ} \frac{155m}{N190^\circ} \frac{25m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{800m}{N100^\circ} \frac{300m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) \quad B.6$$

Os valores de contribuição à variância global ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ), são apresentados na Tabela B.7 numa matriz de correionalização para cada estrutura.

Tabela B.7 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização da massa das frações granulométricas 2, 21 e 3 ( $W_2$ ,  $W_{21}$  e  $W_3$ , respectivamente).

| Matriz de correionalização $C_0$ |        |          |        |
|----------------------------------|--------|----------|--------|
|                                  | $W_2$  | $W_{21}$ | $W_3$  |
| $W_2$                            | 30,83  | 5,44     | -21,60 |
| $W_{21}$                         | 5,44   | 4,15     | -6,70  |
| $W_3$                            | -21,60 | -6,70    | 108,40 |
| Matriz de correionalização $C_1$ |        |          |        |
|                                  | $W_2$  | $W_{21}$ | $W_3$  |
| $W_2$                            | 1,07   | -0,68    | 3,90   |
| $W_{21}$                         | -0,68  | 0,43     | -2,48  |
| $W_3$                            | 3,90   | -2,48    | 14,22  |
| Matriz de correionalização $C_2$ |        |          |        |
|                                  | $W_2$  | $W_{21}$ | $W_3$  |
| $W_2$                            | 30,41  | 27,39    | -38,95 |
| $W_{21}$                         | 27,39  | 24,67    | -35,08 |
| $W_3$                            | -38,95 | -35,08   | 62,23  |

Os variogramas direcionais, experimentais e modelados, diretos e cruzados, nas principais direções de anisotropia, são apresentados na Figura B.6.

Variograma Modelo

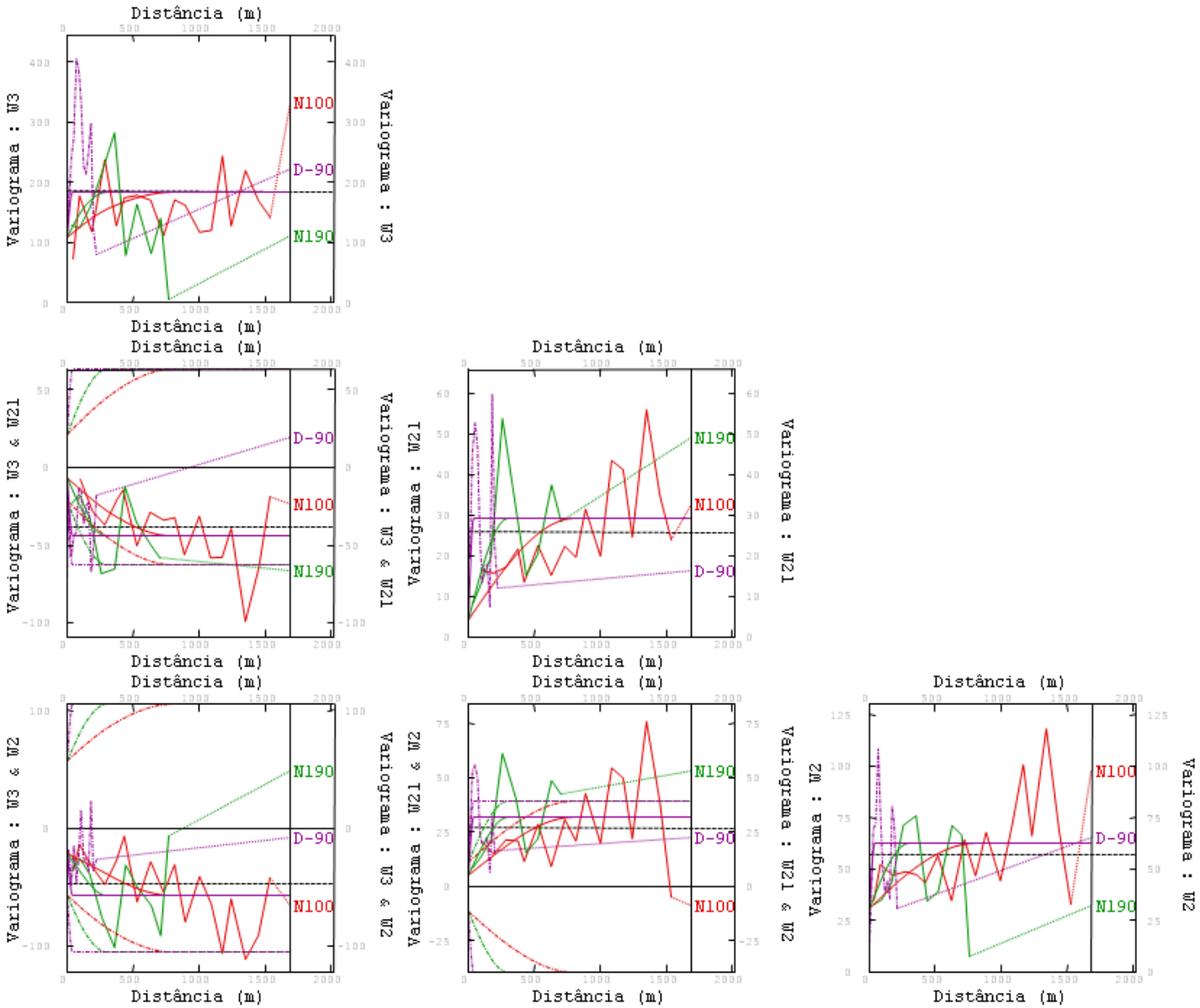


Figura B.6 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para a massa das frações granulométricas 2, 21 e 3 (W2, W21 e W3, respectivamente).

## **Apêndice C**

### **Histogramas, Análise da Correlação Espacial e Modelos Variográficos dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos MAF**

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes a estatística básica, análise da correlação espacial e modelagem da mesma para os Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF).

#### **C.1 Transformação em Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos MAF**

Os fatores MAF são obtidos a partir de subgrupos de variáveis que são apresentados na Tabela C.1, descorrelacionando as variáveis originais até um vetor de separação  $h=150m$ .

Tabela C.1 – Subgrupos de variáveis consideradas para serem decorrelacionadas até  $h=150m$ , utilizando a decomposição em fatores MAF.

| Subgrupo | Variáveis               | Fatores MAF  |
|----------|-------------------------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT     | MAF1_AL_IB<br>MAF2_AL_IB<br>MAF3_AL_IB<br>MAF4_AL_IB     |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET     | MAF1_FE_IB<br>MAF2_FE_IB<br>MAF3_FE_IB<br>MAF4_FE_IB     |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT     | MAF1_MN_IB<br>MAF2_MN_IB<br>MAF3_MN_IB<br>MAF4_MN_IB     |
| 4        | P2, P21, P3, PT         | MAF1_P_IB<br>MAF2_P_IB<br>MAF3_P_IB<br>MAF4_P_IB         |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT | MAF1_PPC_IB<br>MAF2_PPC_IB<br>MAF3_PPC_IB<br>MAF4_PPC_IB |
| 6        | SI2, SI21, SI3, SIT     | MAF1_SI_IB<br>MAF2_SI_IB<br>MAF3_SI_IB<br>MAF4_SI_IB     |
| 7        | W2, W21, W3             | MAF1_W_IB<br>MAF2_W_IB<br>MAF3_W_IB                      |

## C.2 Histogramas

A seguir, são apresentados os histogramas dos fatores MAF correspondentes a cada subgrupo de variáveis.

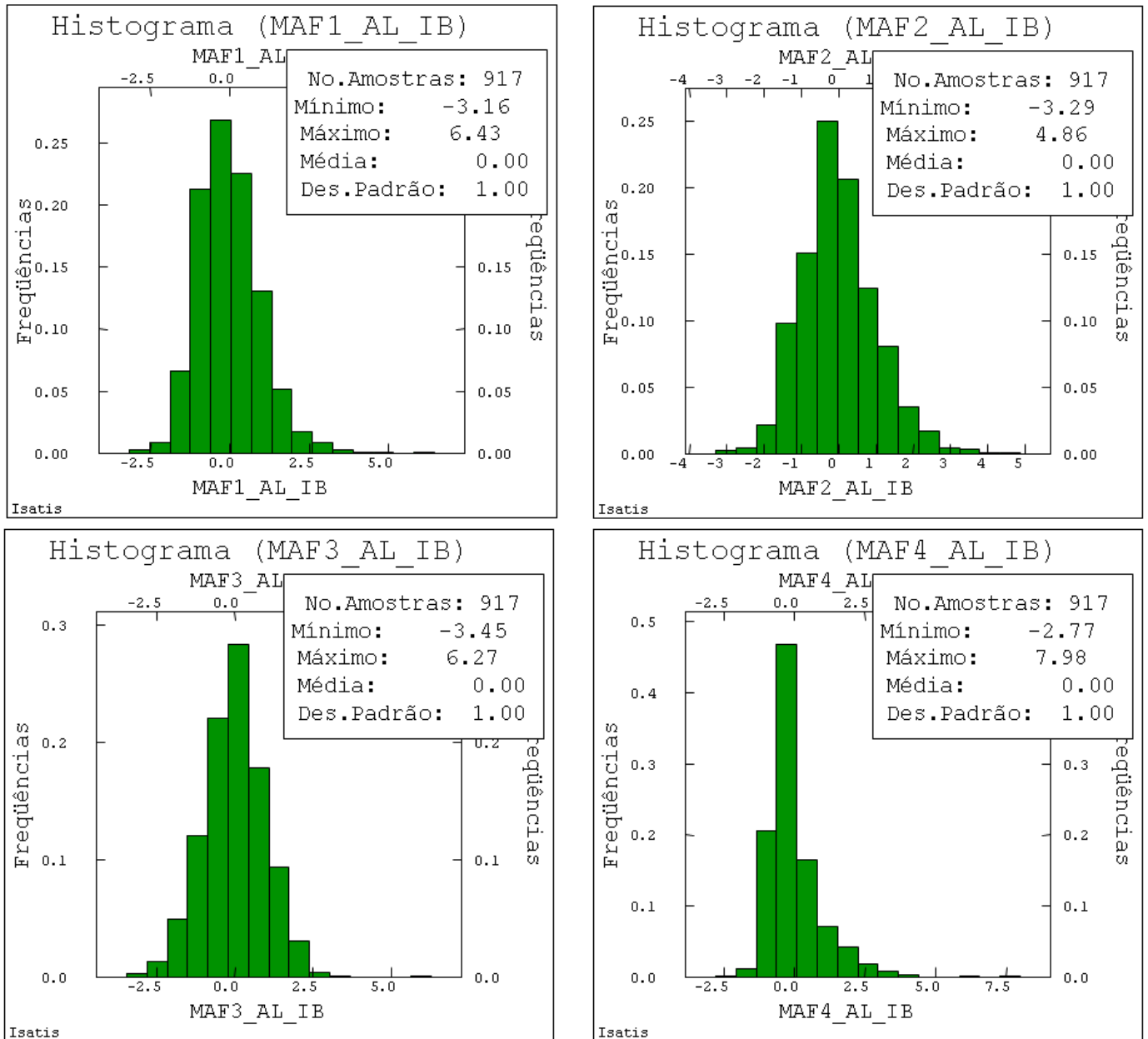


Figura C.1 – Histogramas dos fatores MAF obtidos para a decorrelação dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global.

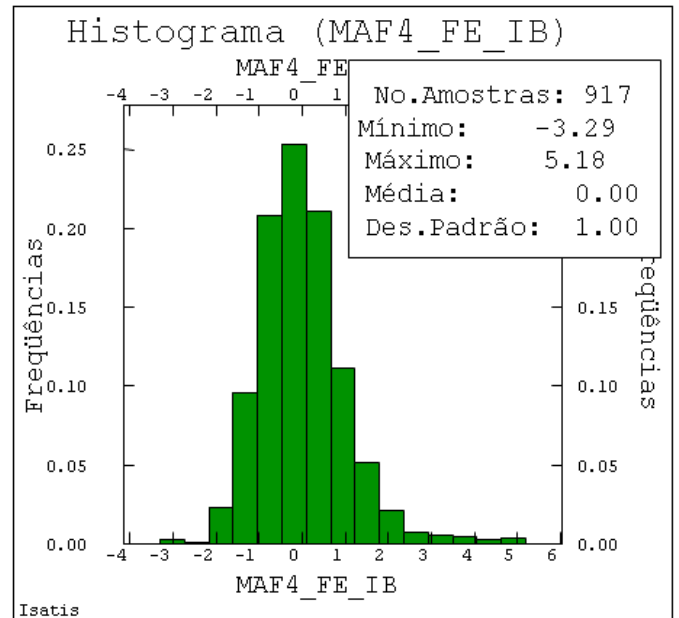
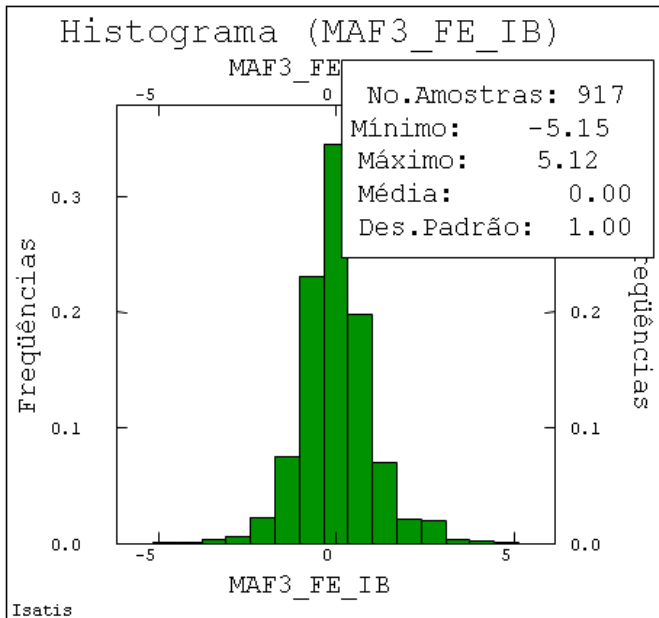
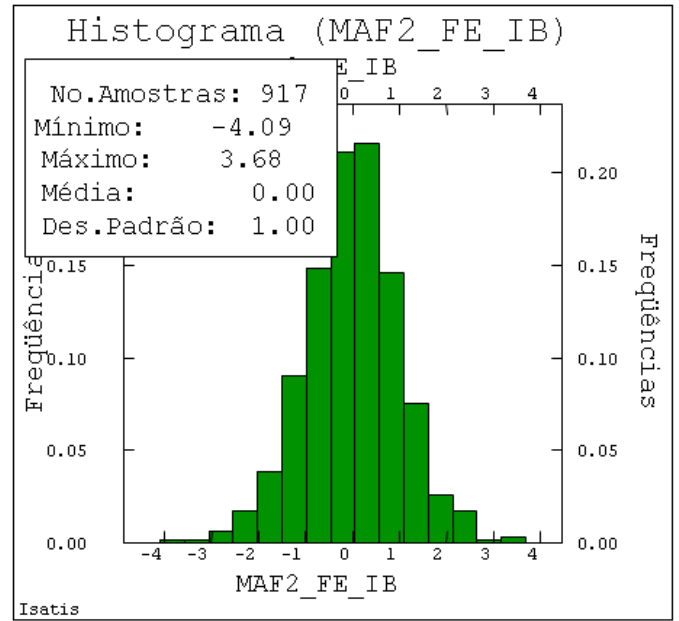
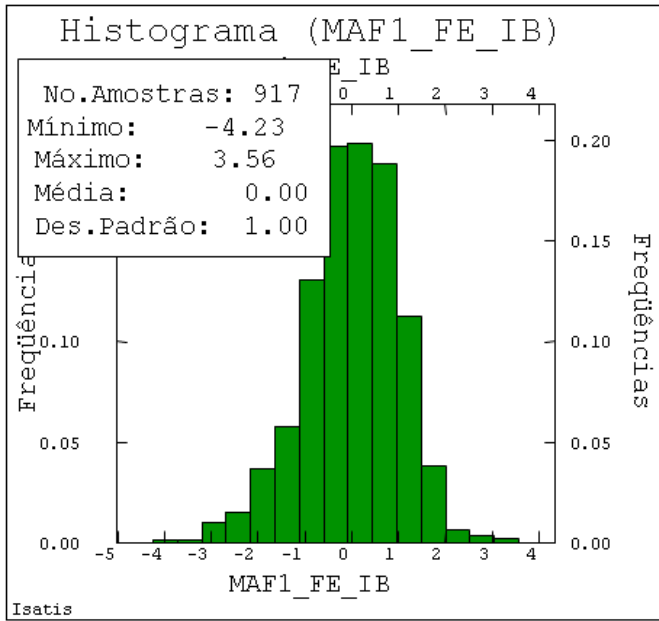


Figura C.2 - Histogramas dos fatores MAF obtidos para a decorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

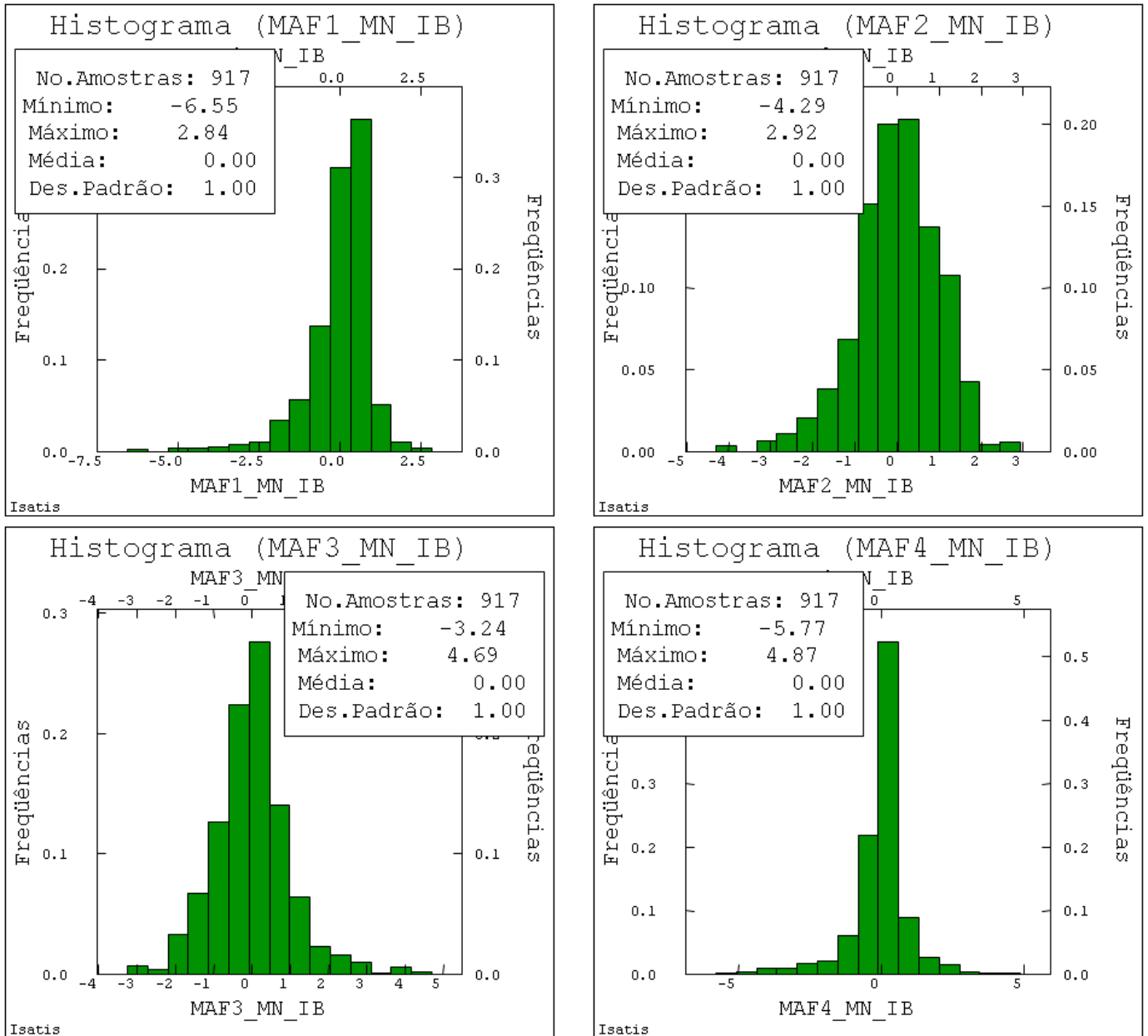


Figura C.3 - Histogramas dos fatores MAF obtidos para a decorrelação dos teores de manganês nas faixas 2, 21, 3 e global.

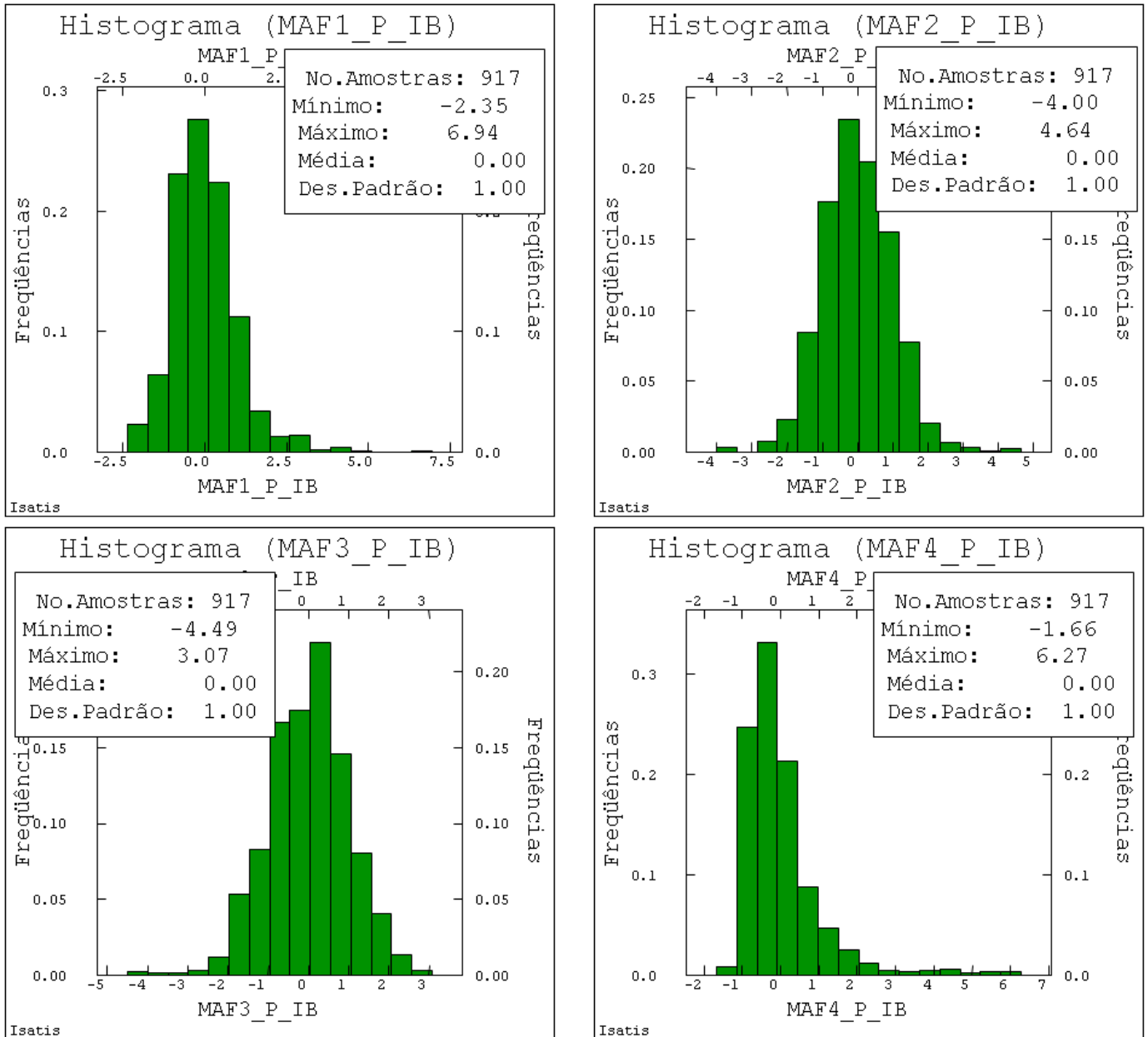


Figura C.4 - Histogramas dos fatores MAF obtidos para a decorrelação dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global.



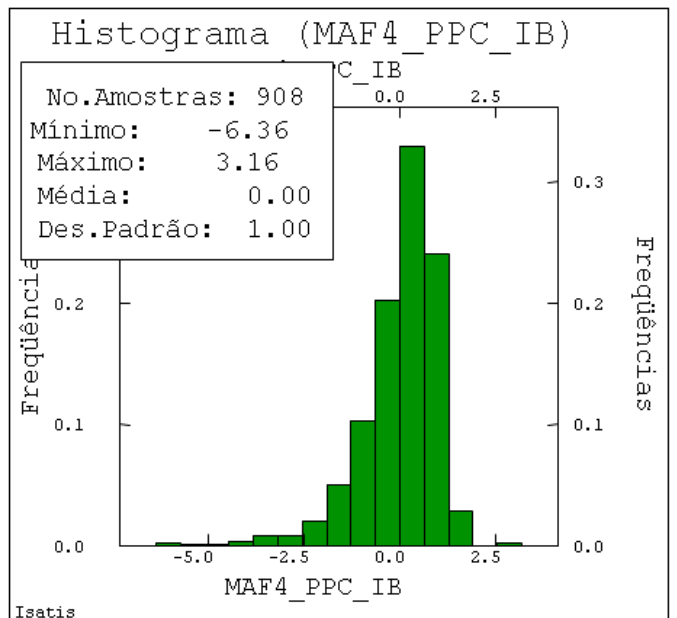
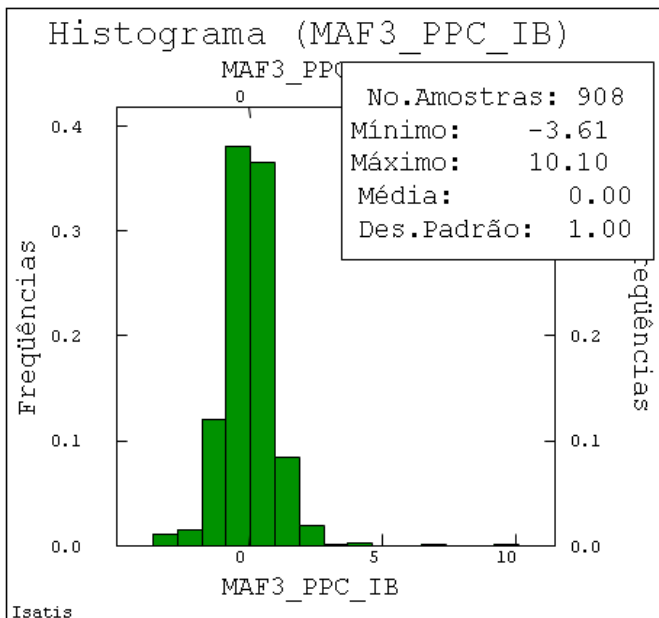
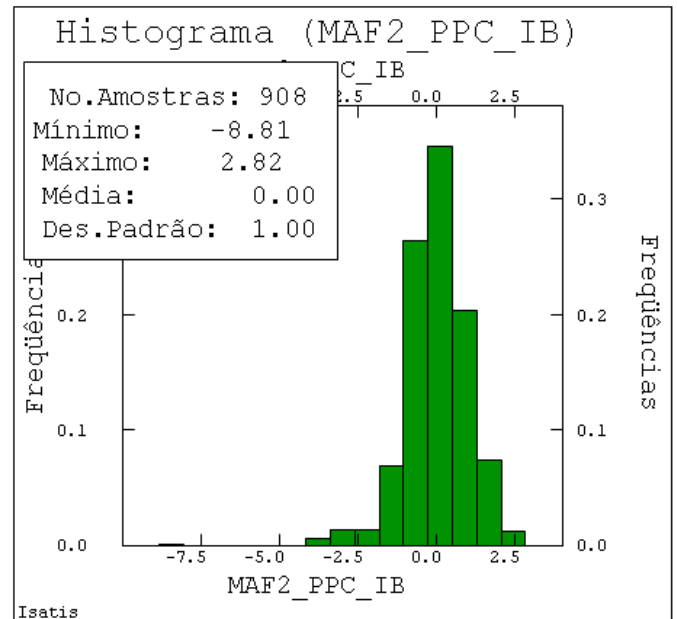
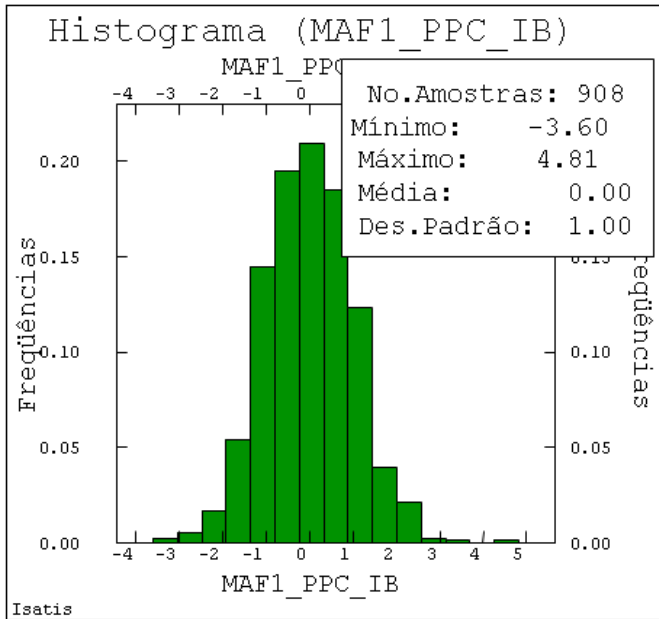


Figura C.5 - Histogramas dos fatores MAF obtidos para a decorrelação dos teores de perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global.

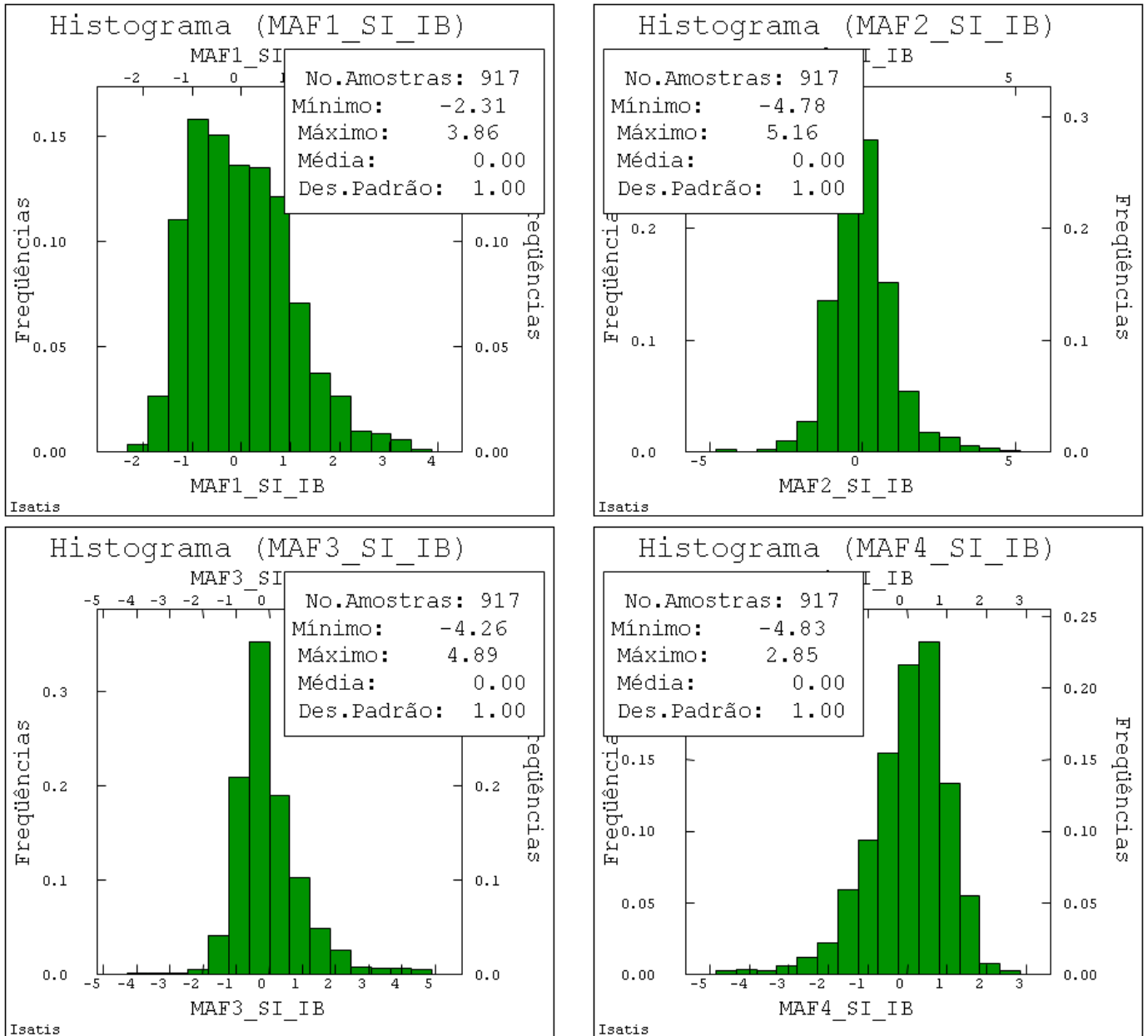


Figura C.6 - Histogramas dos fatores MAF obtidos para a descორrelação dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global.

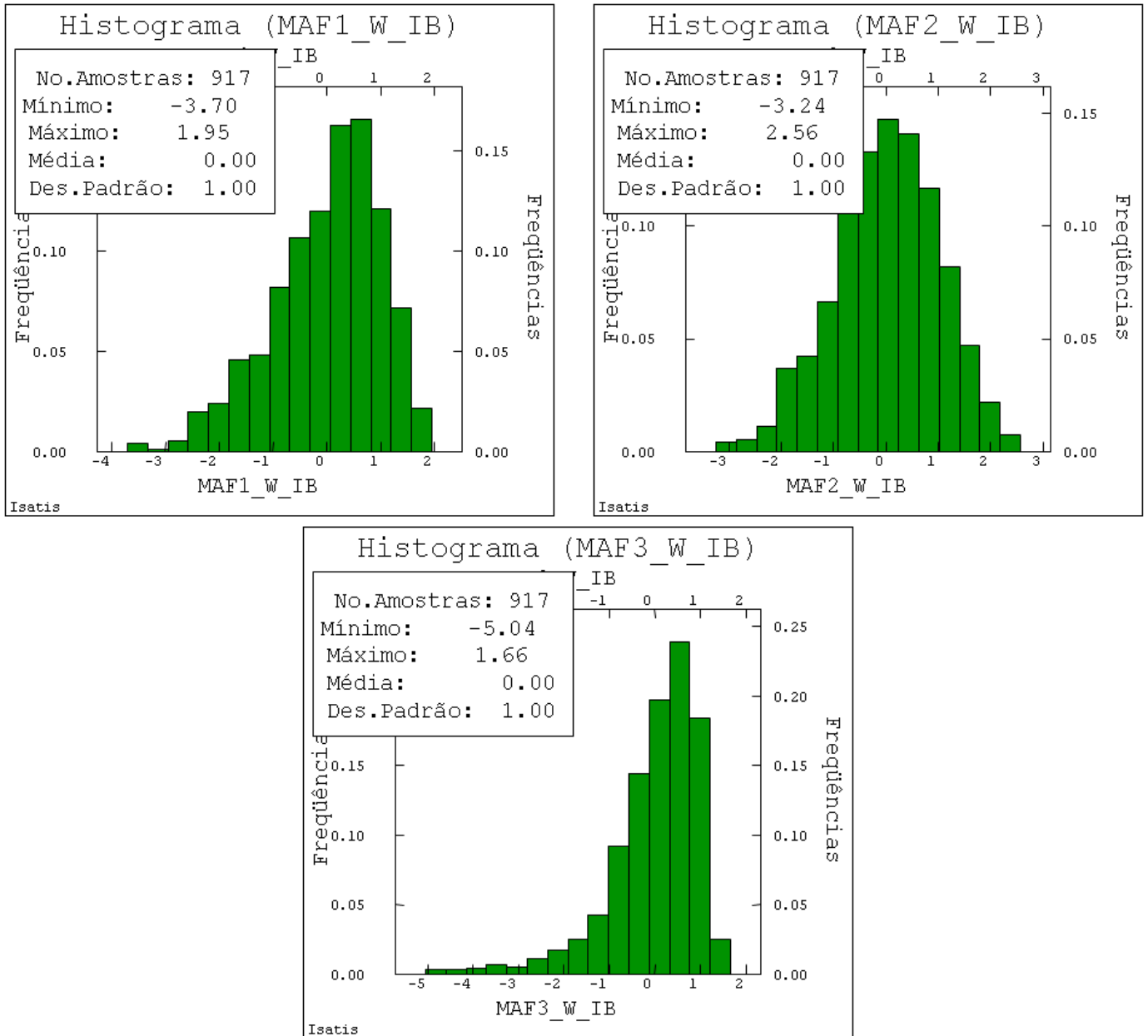


Figura C.7 - Histogramas dos fatores MAF obtidos para a decorrelação das massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 2, 21 e 3.

### C.3 Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF

Nas figuras a seguir, são apresentados os variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial até  $h=150\text{m}$ , nas principais direções de anisotropia  $N100^\circ$ ,  $N190^\circ$  e  $D-90^\circ$ . Observa-se, que os variogramas diretos, na diagonal, são os únicos a apresentarem autocorrelação.

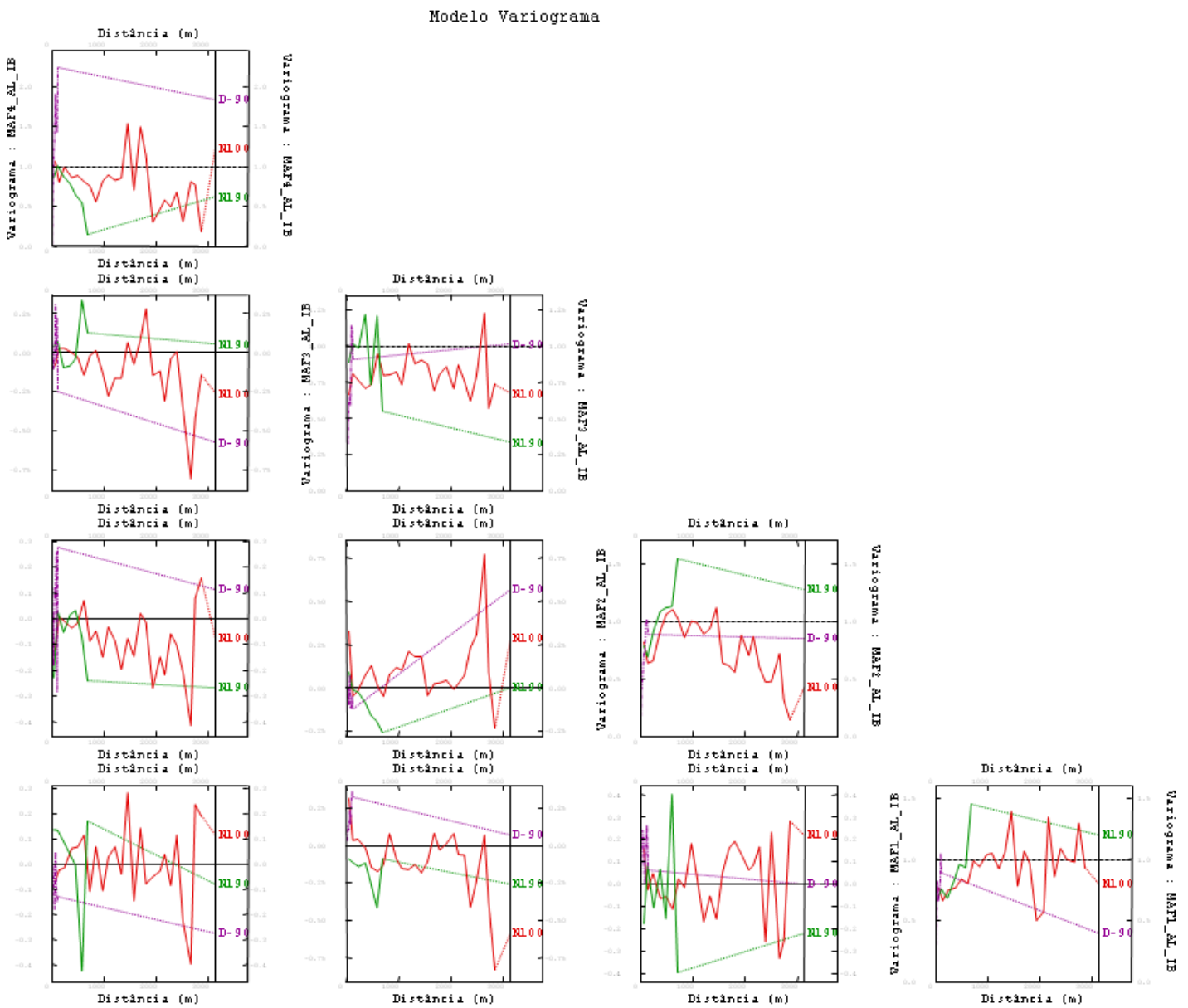


Figura C.8 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial da alumina nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, até  $h=150\text{m}$ , nas principais direções de anisotropia  $N100^\circ$ ,  $N190^\circ$  e  $D-90^\circ$ .

Modelo Variograma

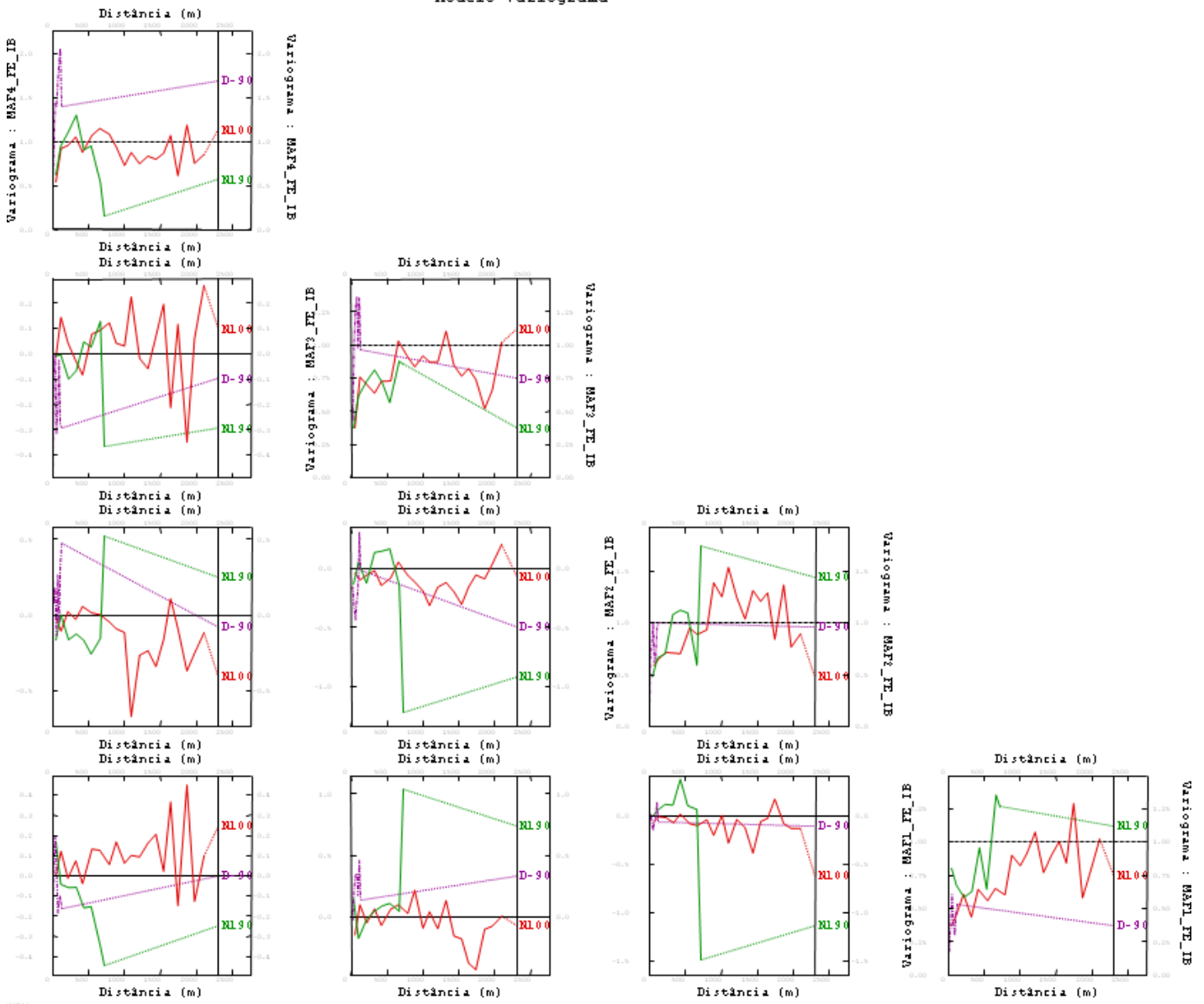


Figura C.9 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial do ferro nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, até h=150m, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

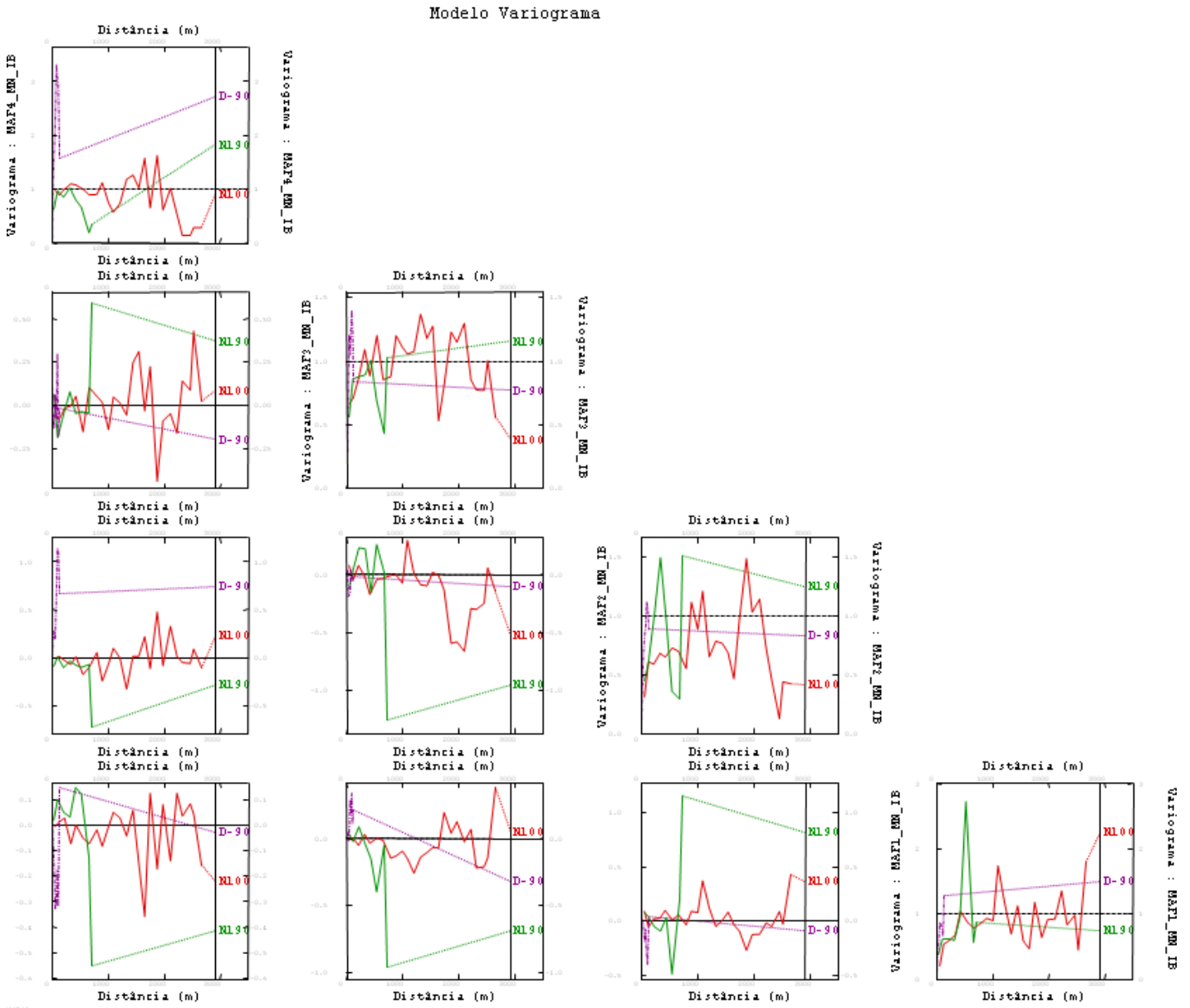


Figura C.10 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial do manganês nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, até h=150m, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

Modelo Variograma

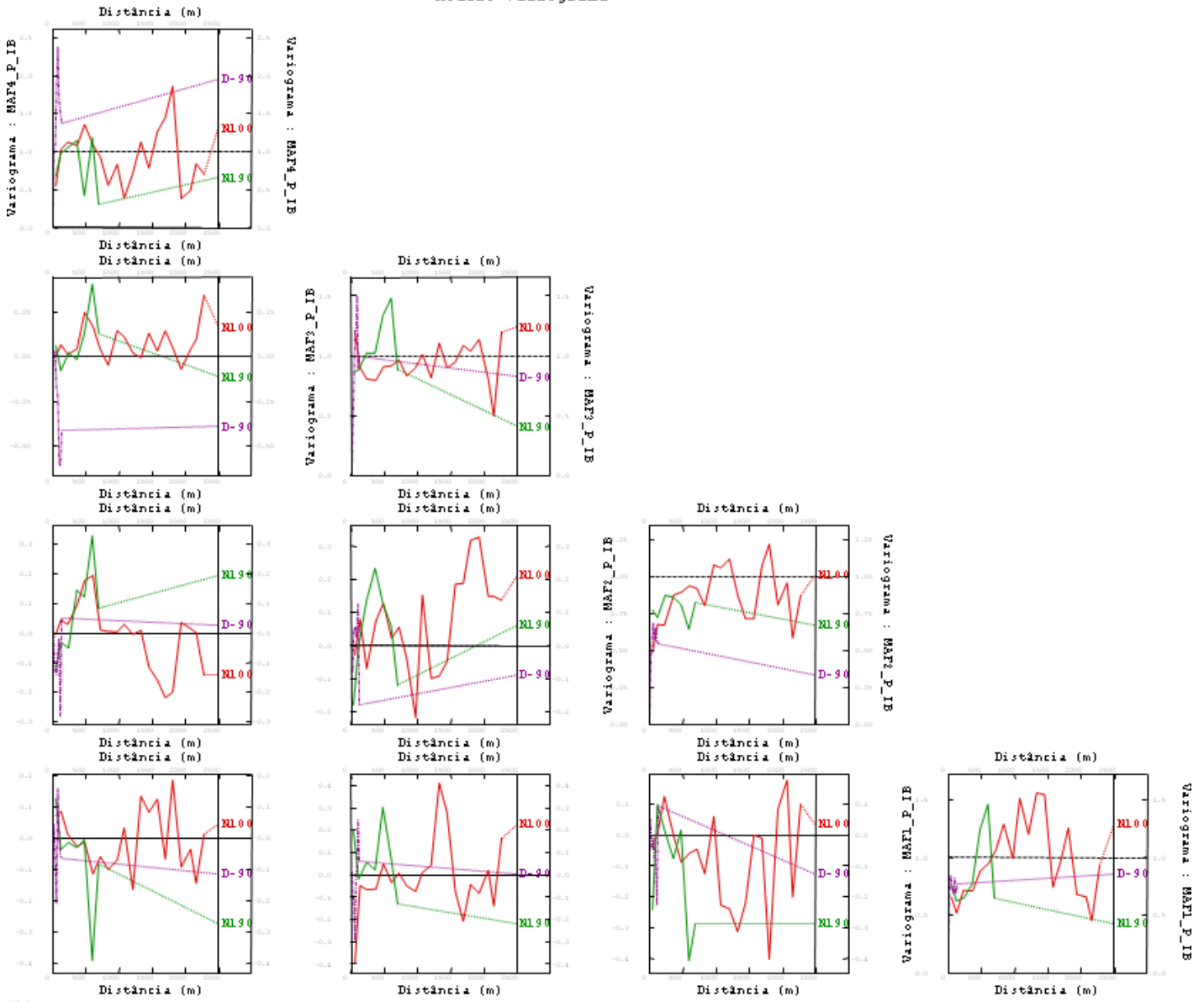


Figura C.11 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial do fósforo nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, até h=150m, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

Modelo Variograma

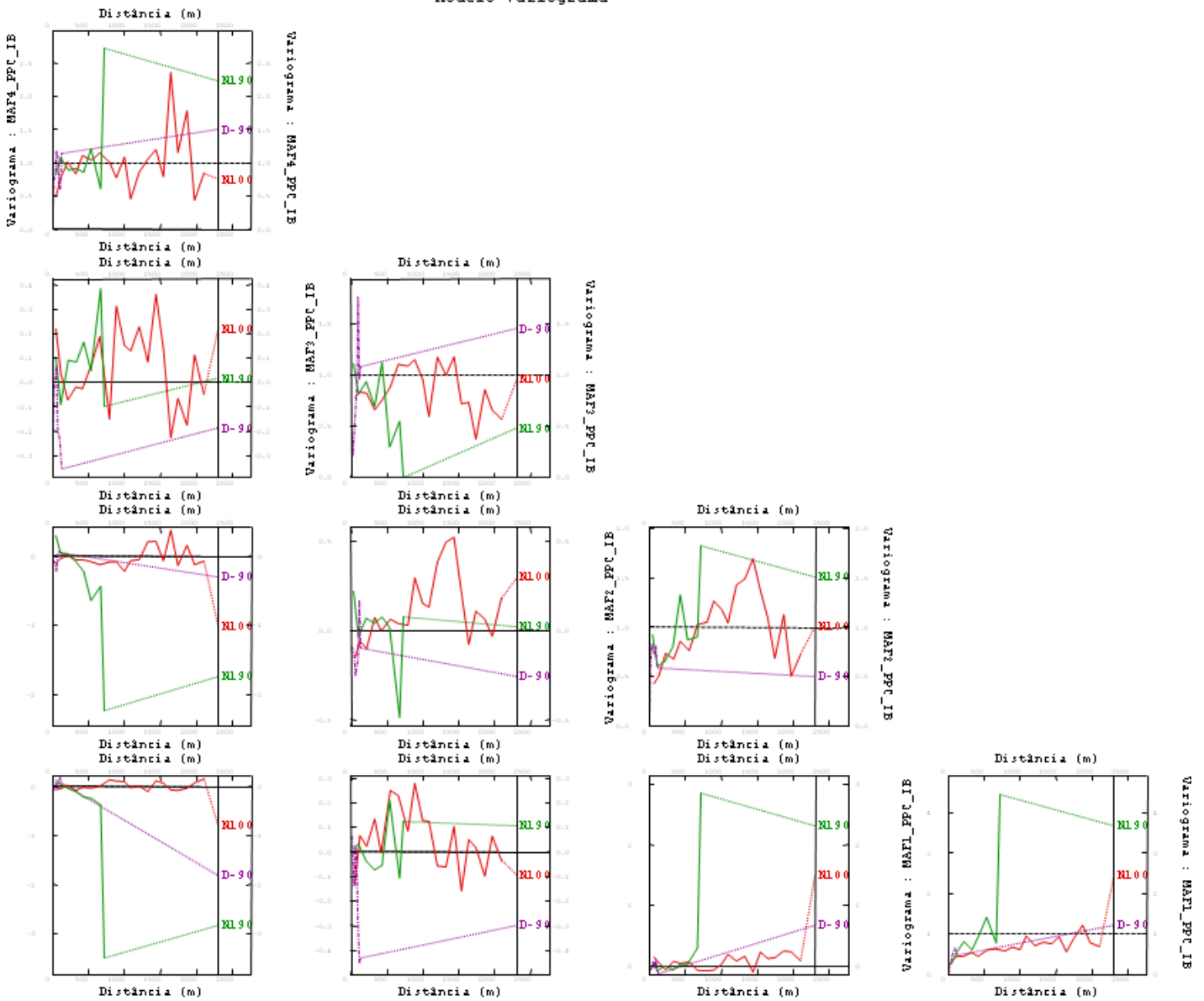


Figura C.12 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial das perdas por calcinação nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, até h=150m, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.



Modelo Variograma

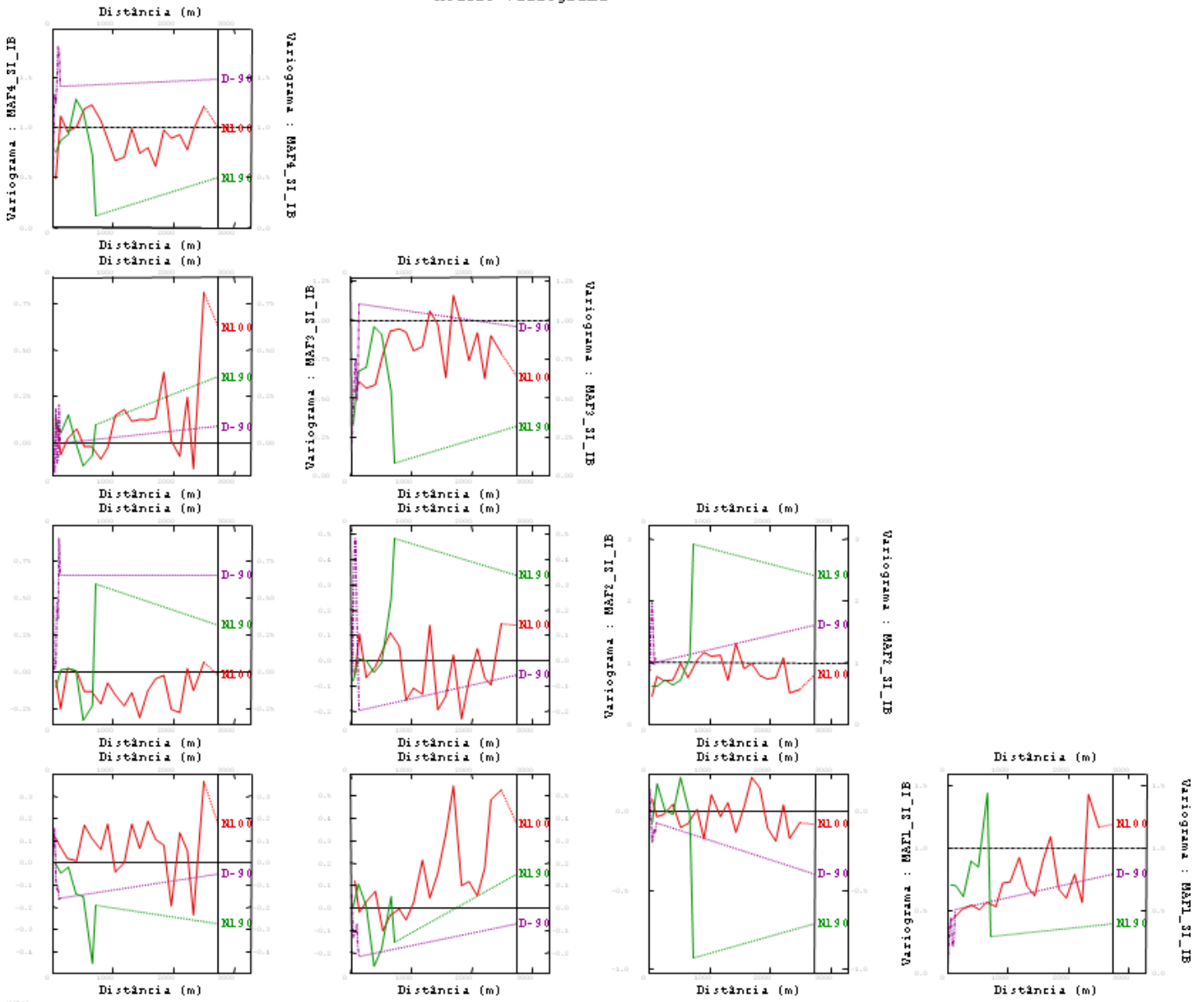


Figura C.13 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da decorrelação espacial da sílica nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, até h=150m, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

Modelo Variograma

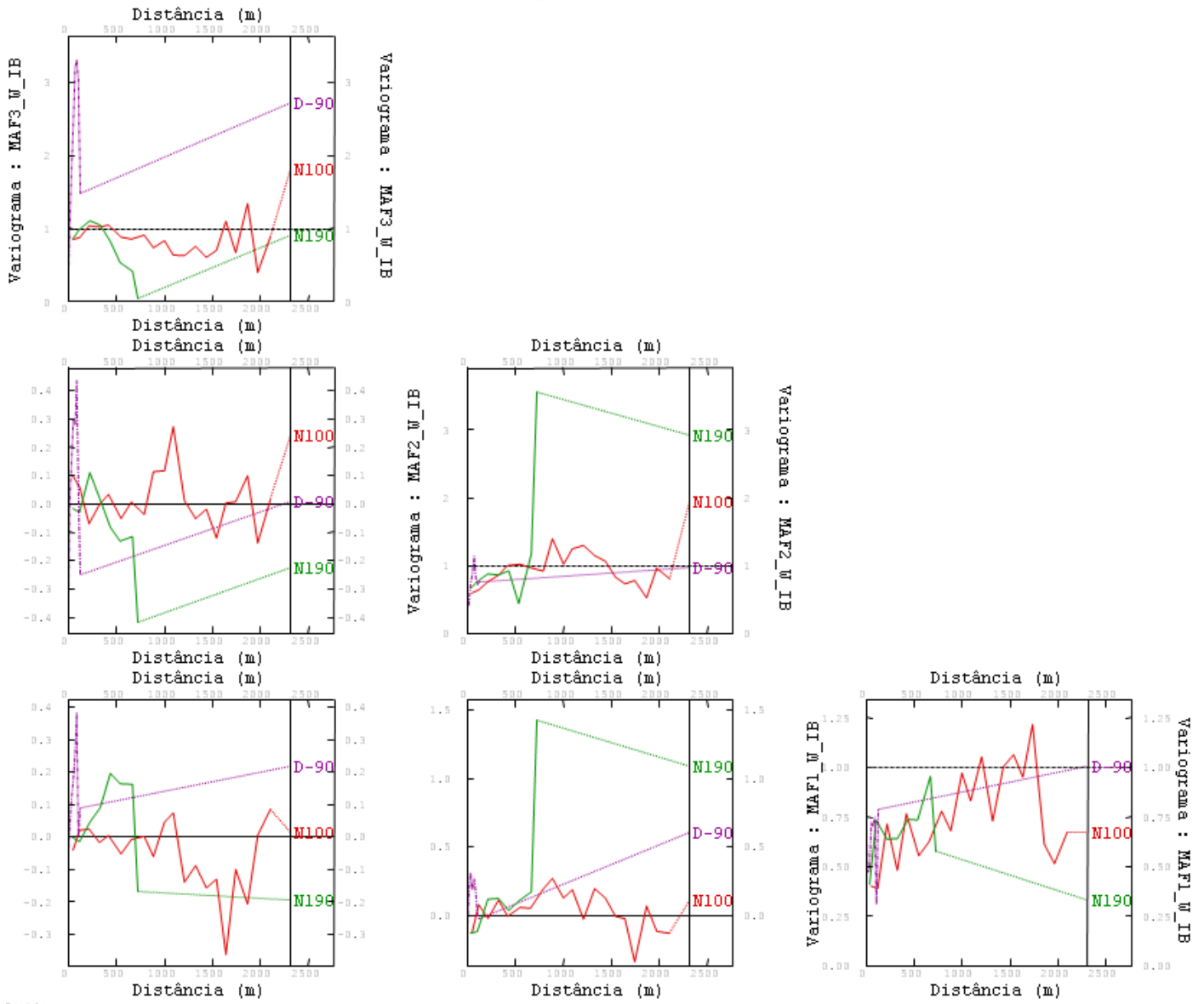


Figura C.14 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados dos fatores MAF, para a análise da descorrelação espacial da massa das partições granulométricas nas faixas 2, 21 e 3, até h=150m, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

### C.4 Diagramas de dispersão entre fatores MAF

Nos diagramas de dispersão que se apresentam a seguir, correspondentes aos fatores MAF utilizados para descorrelacionar cada grupo de variáveis, observa-se que o coeficiente de correlação é nulo para h=0.

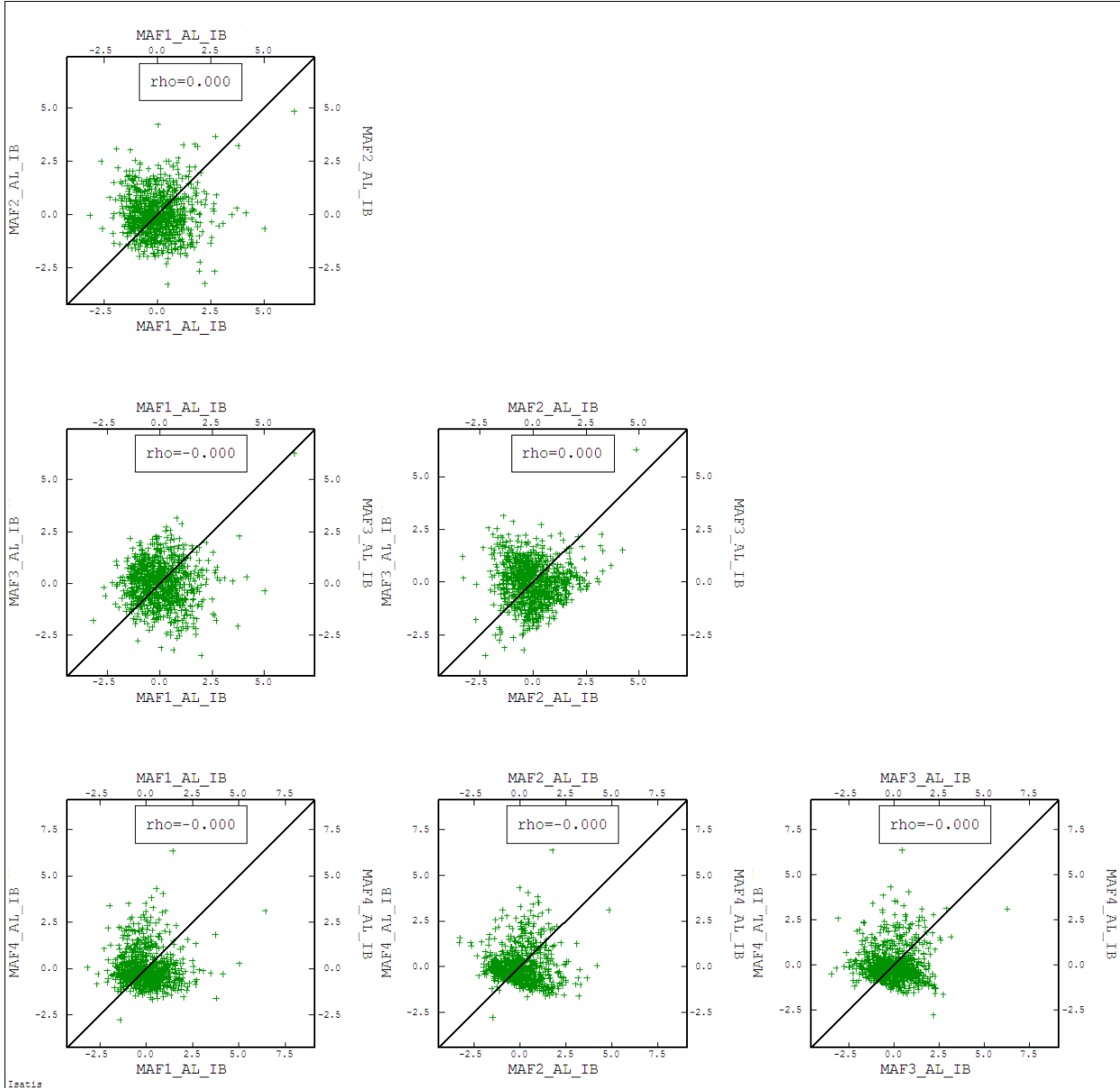


Figura C.15 – Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

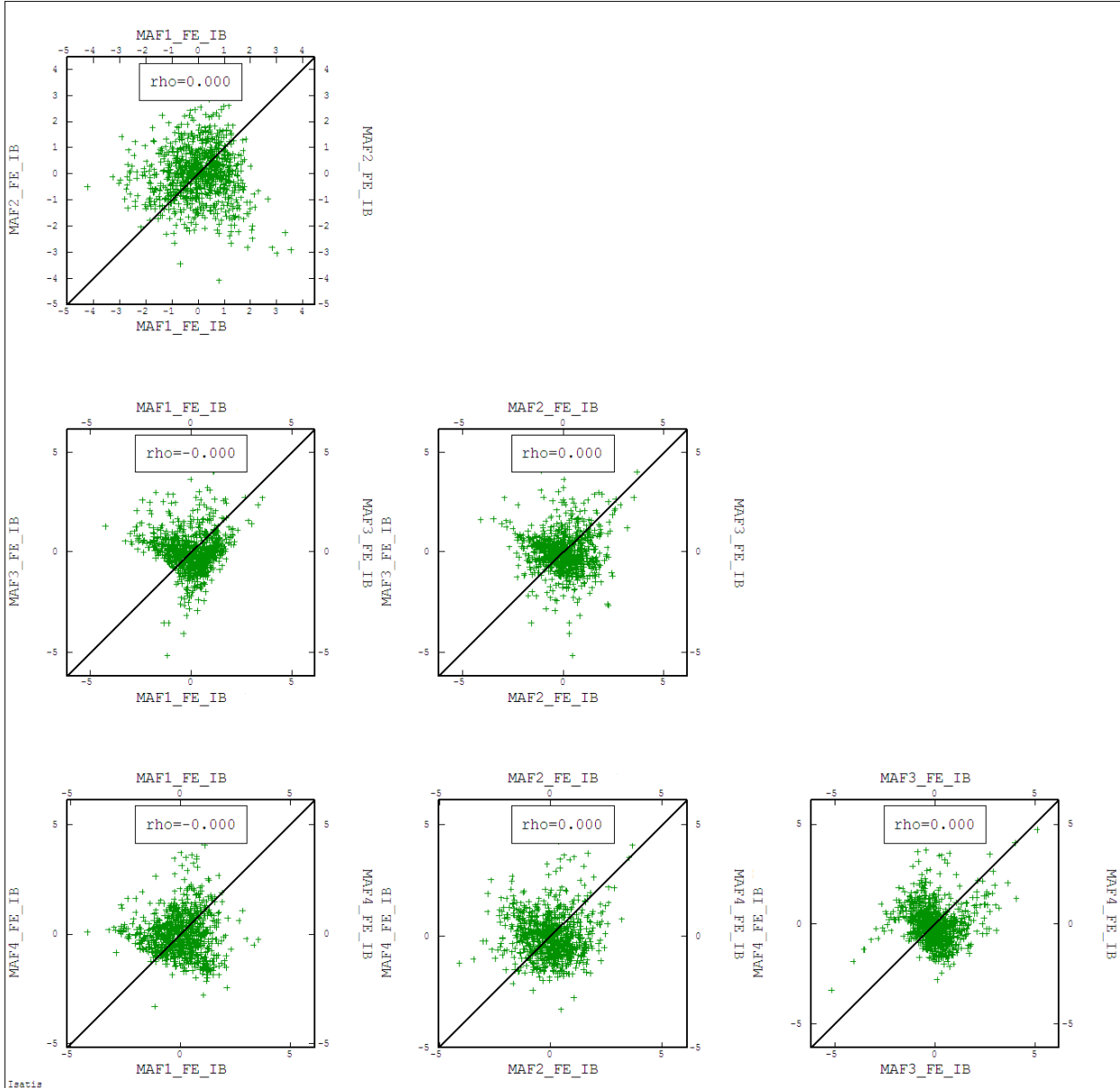


Figura C.16 - Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa dos teores de ferro nas faixas 2, 21,3 e global, mostrando correlação nula para h=0.

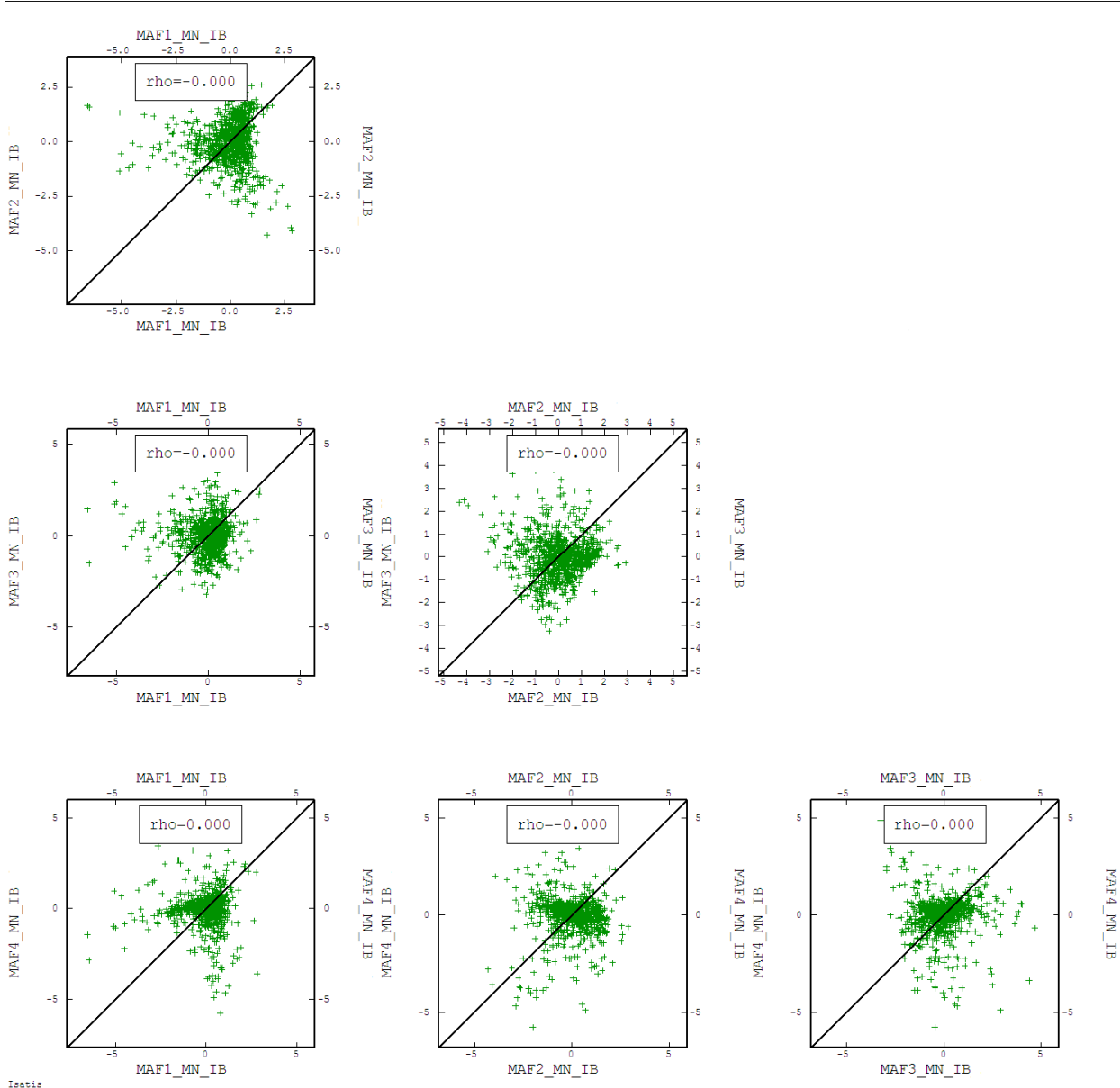


Figura C.17 - Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa dos teores de manganês nas faixas 2, 21,3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

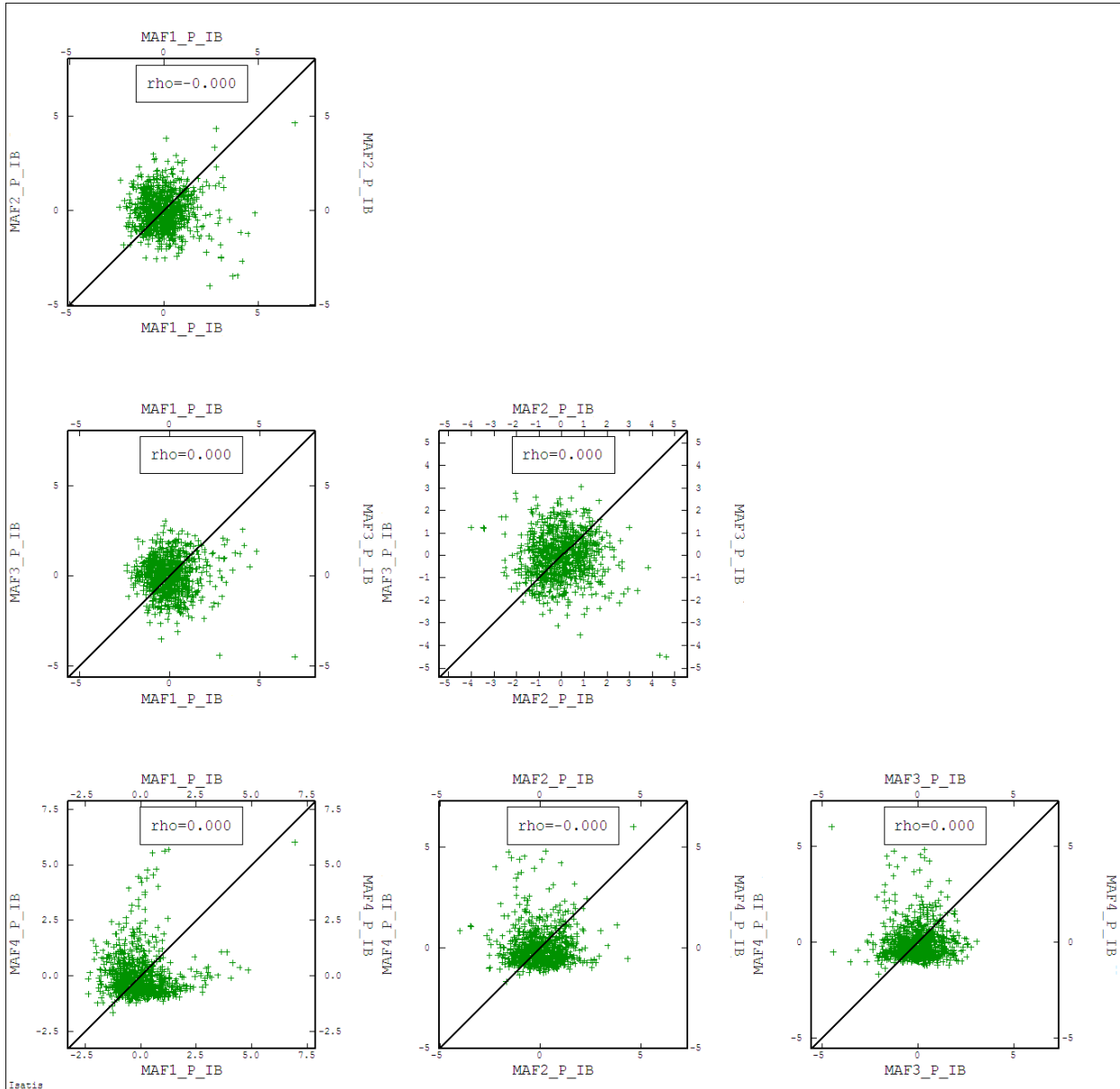


Figura C.18 - Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

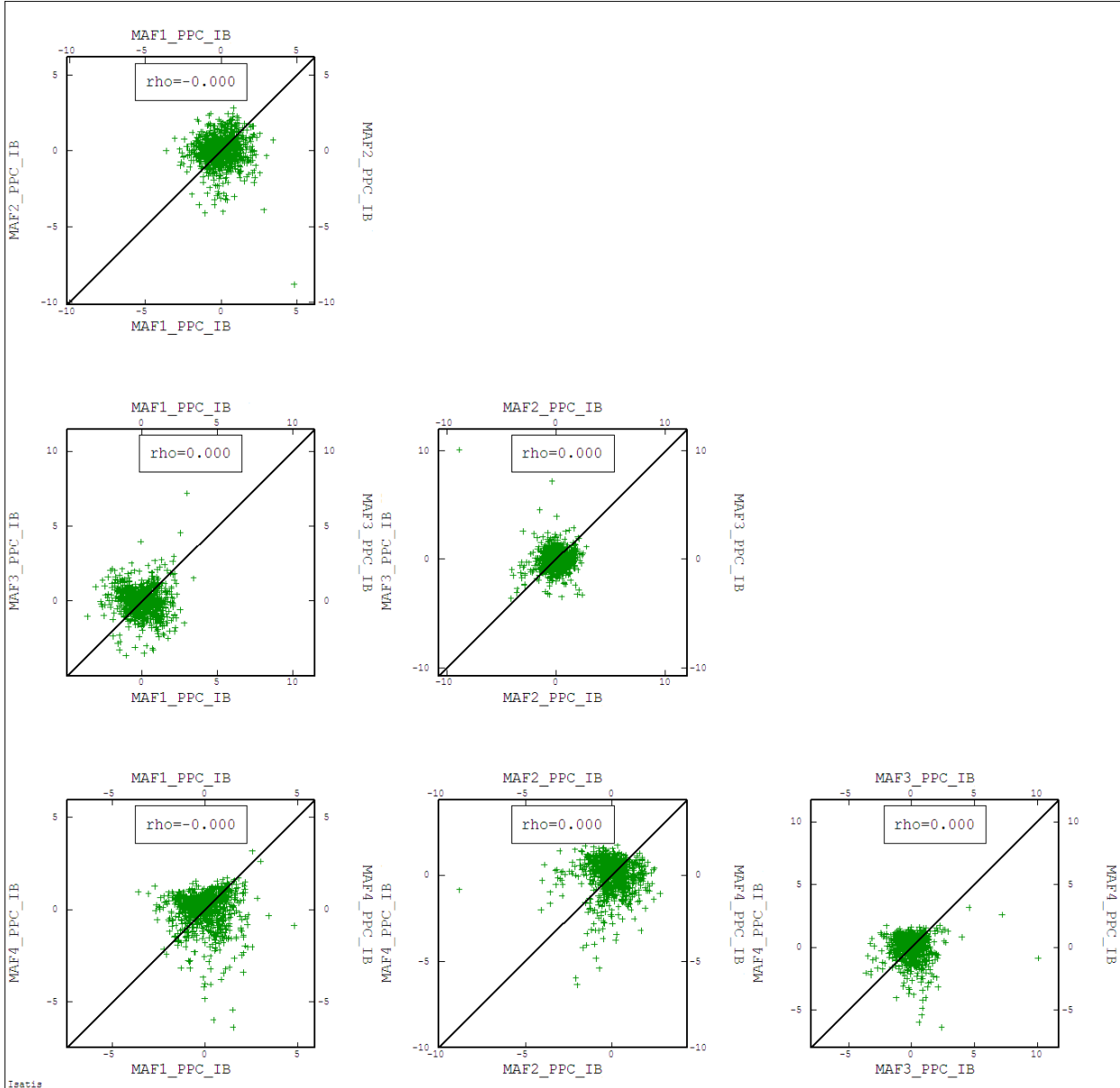


Figura C.19 - Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa dos teores das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

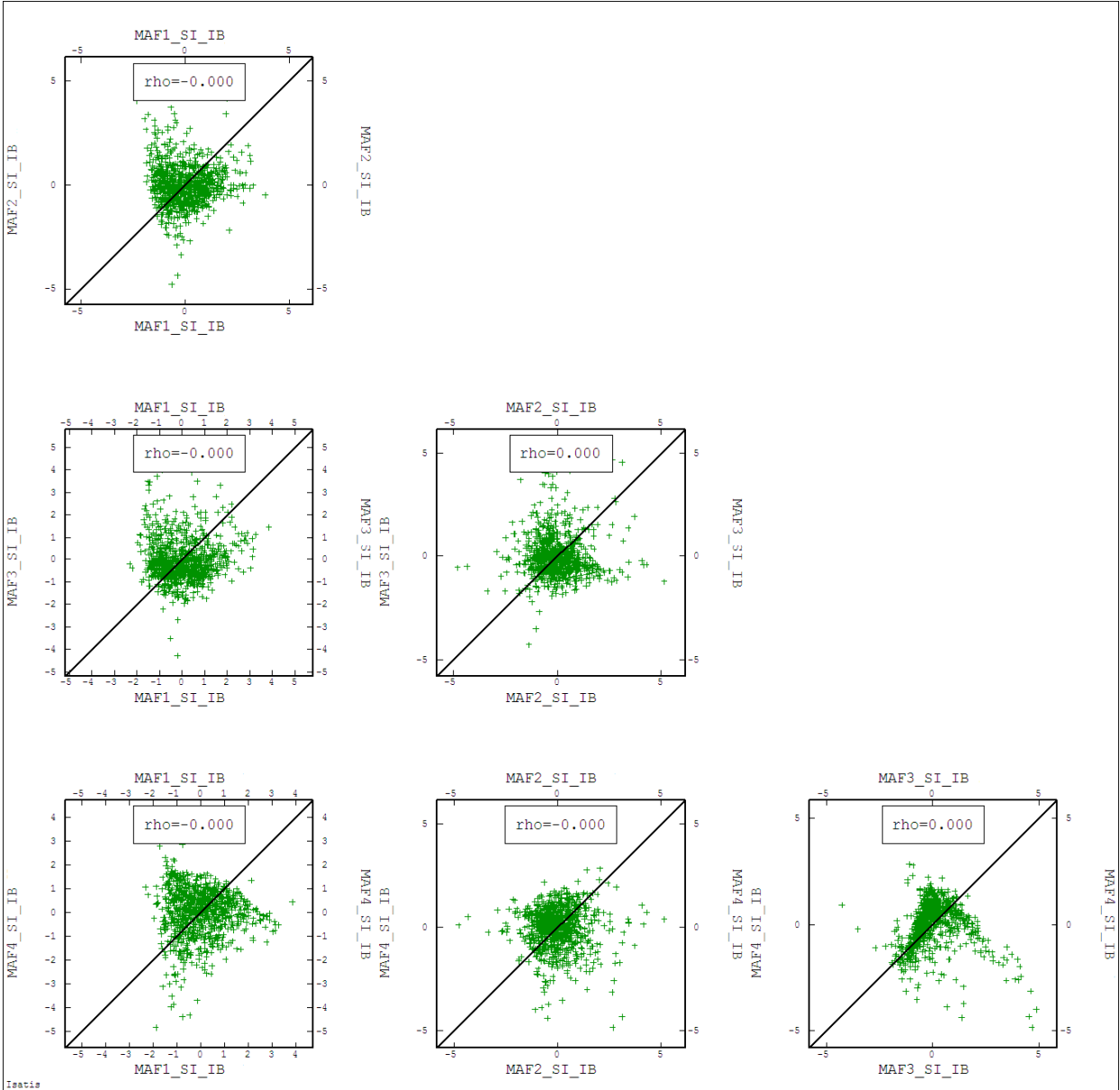


Figura C.20 - Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .



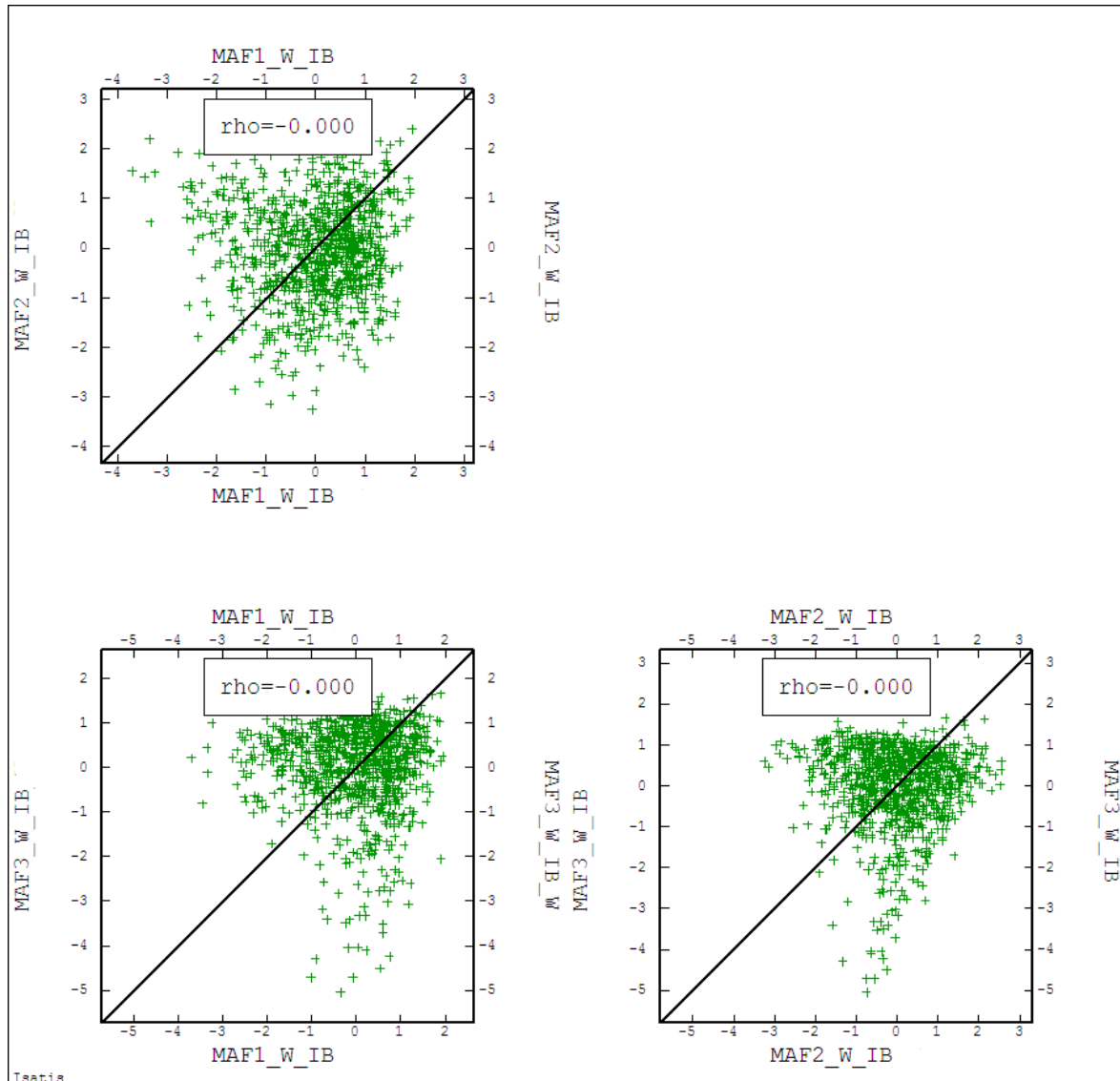
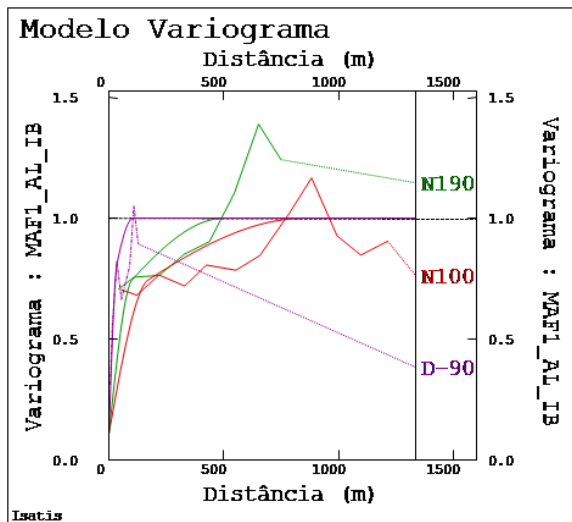


Figura C.21 - Diagramas de dispersão dos fatores MAF obtidos para a estimativa das massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 2, 21, e 3, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

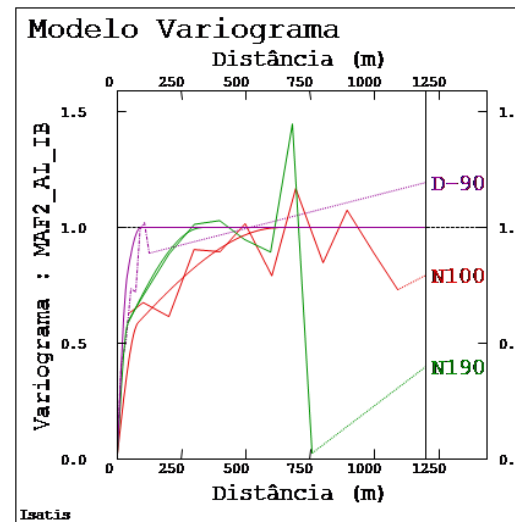
### C.5 Variogramas direcionais, experimentais e modelados dos fatores MAF

Nas seguintes figuras, são apresentados os variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia  $N100^\circ$ ,  $N190^\circ$  e  $D-90^\circ$ , experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF. Também, são apresentadas as Equações dos variogramas respectivos. Observa-se um valor decrescente do alcance ao passar do fator MAF1 (fator de autocorrelação máxima) ao fator MAF4 (fator de autocorrelação mínima).

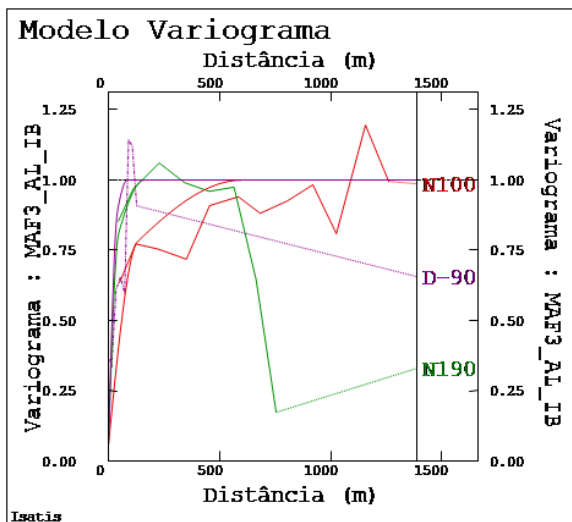
MAF1\_AL\_IB



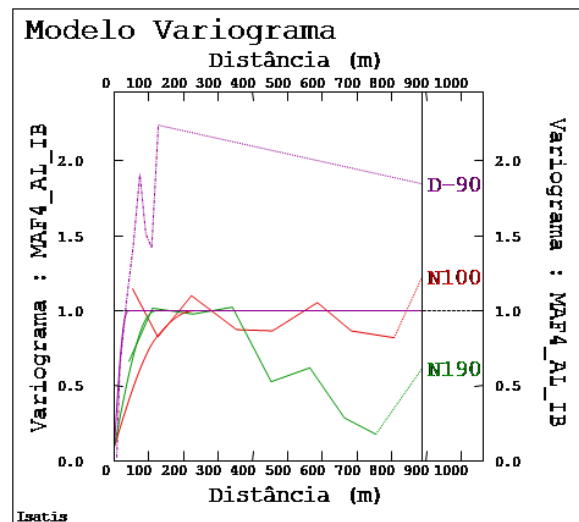
MAF2\_AL\_IB



MAF3\_AL\_IB



MAF4\_AL\_IB



$$\gamma_{MAF1\_AL\_IB} = 0,11 + 0,53 \cdot Sph\left(\frac{170m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right) + 0,36 \cdot Sph\left(\frac{850m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{105m}{D-90^\circ}\right)$$

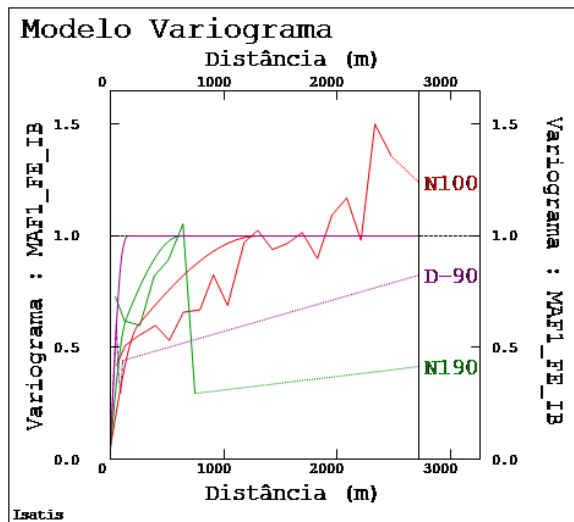
$$\gamma_{MAF2\_AL\_IB} = 0,02 + 0,47 \cdot Sph\left(\frac{80m}{N100^\circ} \frac{40m}{N190^\circ} \frac{38m}{D-90^\circ}\right) + 0,51 \cdot Sph\left(\frac{630m}{N100^\circ} \frac{330m}{N190^\circ} \frac{90m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_AL\_IB} = 0,06 + 0,62 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N100^\circ} \frac{45m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) + 0,32 \cdot Sph\left(\frac{600m}{N100^\circ} \frac{160m}{N190^\circ} \frac{85m}{D-90^\circ}\right)$$

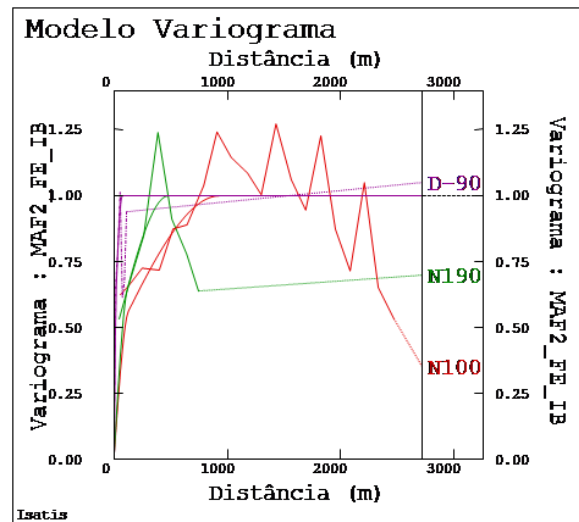
$$\gamma_{MAF4\_AL\_IB} = 0,1 + 0,27 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right) + 0,63 \cdot Sph\left(\frac{230m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.22 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da descortelagem dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

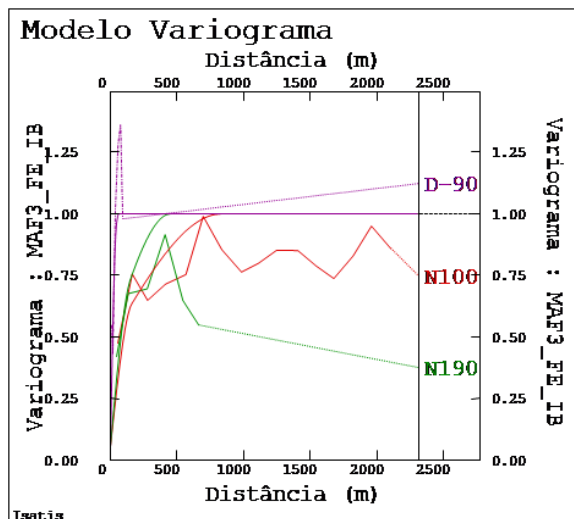
MAF1\_FE\_IB



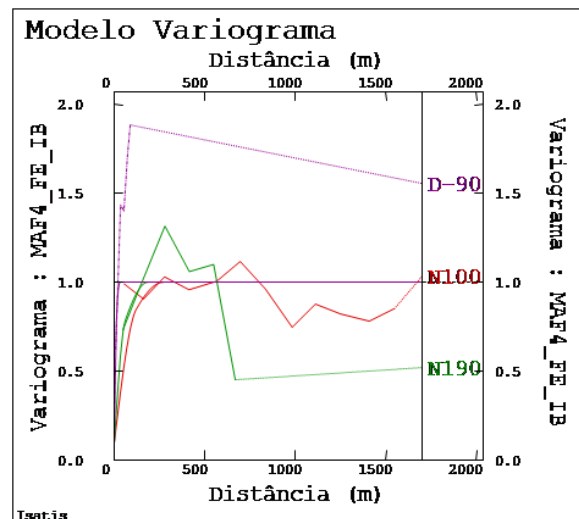
MAF2\_FE\_IB



MAF3\_FE\_IB



MAF4\_FE\_IB



$$\gamma_{MAF1\_FE\_IB} = 0,05 + 0,40 \cdot Sph\left(\frac{240m}{N100^\circ} \frac{135m}{N190^\circ} \frac{105m}{D-90^\circ}\right) + 0,55 \cdot Sph\left(\frac{1300m}{N100^\circ} \frac{620m}{N190^\circ} \frac{150m}{D-90^\circ}\right)$$

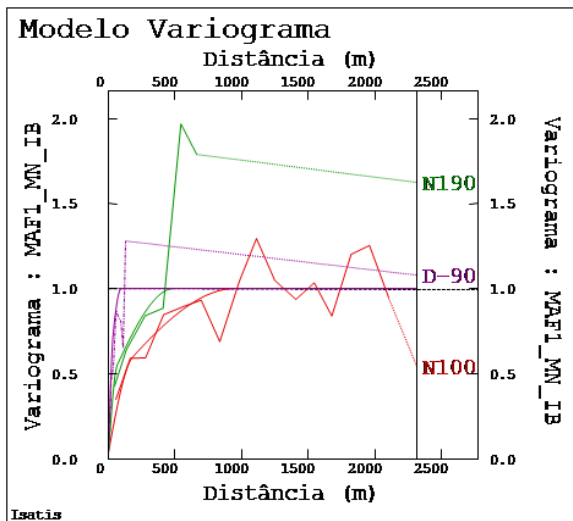
$$\gamma_{MAF2\_FE\_IB} = 0,02 + 0,43 \cdot Sph\left(\frac{125m}{N100^\circ} \frac{115m}{N190^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,55 \cdot Sph\left(\frac{930m}{N100^\circ} \frac{480m}{N190^\circ} \frac{70m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_FE\_IB} = 0,06 + 0,43 \cdot Sph\left(\frac{160m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) + 0,51 \cdot Sph\left(\frac{830m}{N100^\circ} \frac{450m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

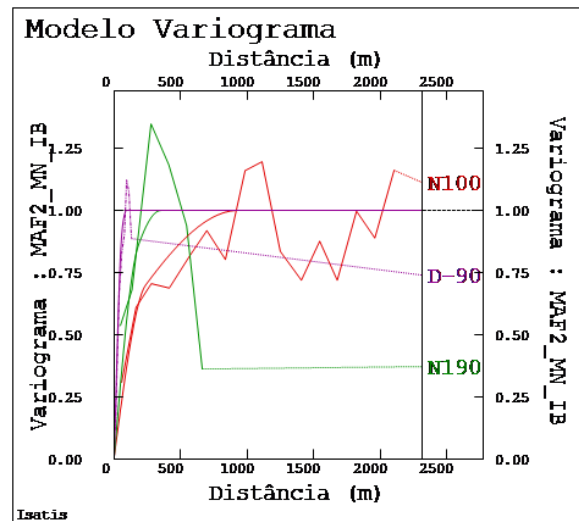
$$\gamma_{MAF4\_FE\_IB} = 0,1 + 0,49 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{60m}{N190^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,41 \cdot Sph\left(\frac{270m}{N100^\circ} \frac{185m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.23 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da descorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

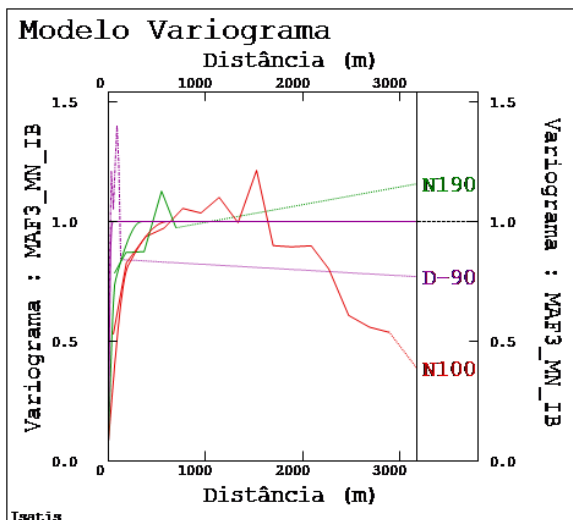
MAF1\_MN\_IB



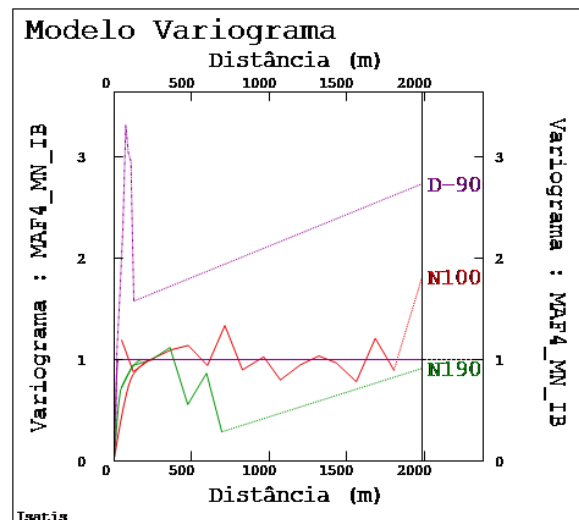
MAF2\_MN\_IB



MAF3\_MN\_IB



MAF4\_MN\_IB



$$\gamma_{MAF1\_MN\_IB} = 0,04 + 0,40 \cdot Sph\left(\frac{180m}{N100^\circ} \frac{65m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right) + 0,56 \cdot Sph\left(\frac{950m}{N100^\circ} \frac{490m}{N190^\circ} \frac{95m}{D-90^\circ}\right)$$

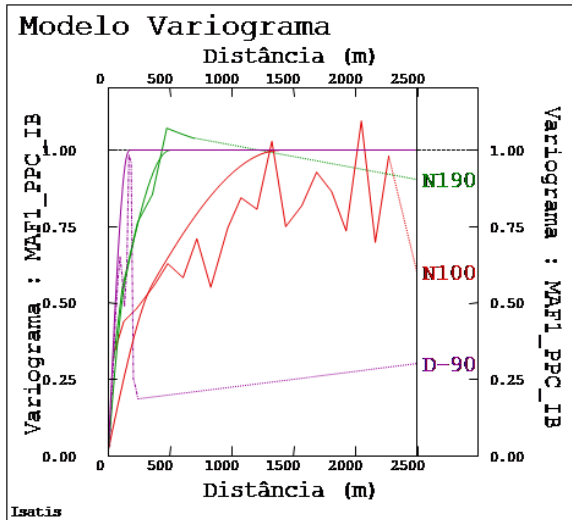
$$\gamma_{MAF2\_MN\_IB} = 0,02 + 0,50 \cdot Sph\left(\frac{235m}{N100^\circ} \frac{180m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) + 0,48 \cdot Sph\left(\frac{930m}{N100^\circ} \frac{350m}{N190^\circ} \frac{90m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_MN\_IB} = 0,08 + 0,56 \cdot Sph\left(\frac{170m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right) + 0,36 \cdot Sph\left(\frac{850m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{105m}{D-90^\circ}\right)$$

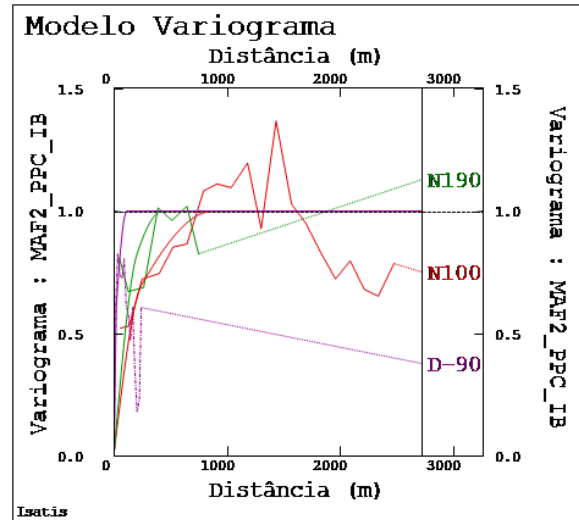
$$\gamma_{MAF4\_MN\_IB} = 0,039 + 0,52 \cdot Sph\left(\frac{125m}{N100^\circ} \frac{45m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + 0,44 \cdot Sph\left(\frac{250m}{N100^\circ} \frac{180m}{N190^\circ} \frac{25m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.24 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da descortelagem dos teores de manganês nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

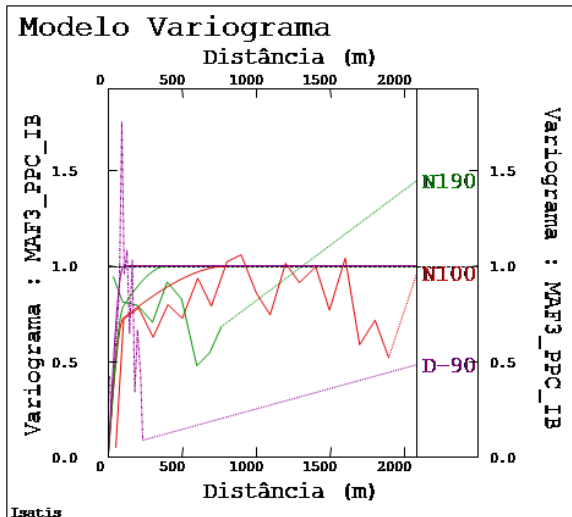
MAF1\_PPC\_IB



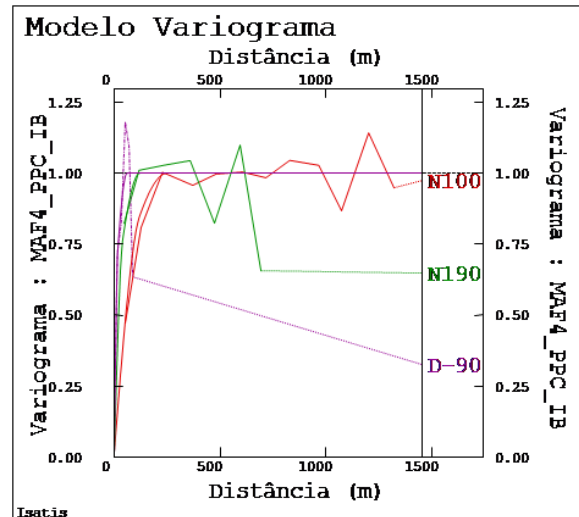
MAF2\_PPC\_IB



MAF3\_PPC\_IB



MAF4\_PPC\_IB



$$\gamma_{MAF1\_PPC\_IB} = 0,02 + 0,28 \cdot Sph\left(\frac{360m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{140m}{D-90^\circ}\right) + 0,70 \cdot Sph\left(\frac{1400m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{170m}{D-90^\circ}\right)$$

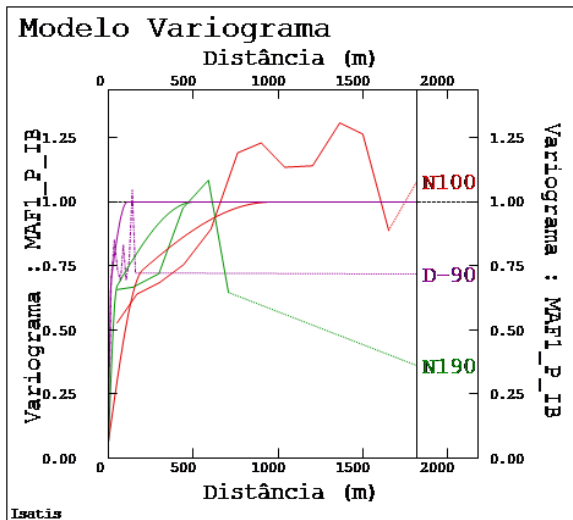
$$\gamma_{MAF2\_PPC\_IB} = 0,02 + 0,47 \cdot Sph\left(\frac{240m}{N100^\circ} \frac{200m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + 0,51 \cdot Sph\left(\frac{870m}{N100^\circ} \frac{425m}{N190^\circ} \frac{110m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_PPC\_IB} = 0,02 + 0,65 \cdot Sph\left(\frac{100m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{95m}{D-90^\circ}\right) + 0,33 \cdot Sph\left(\frac{820m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{110m}{D-90^\circ}\right)$$

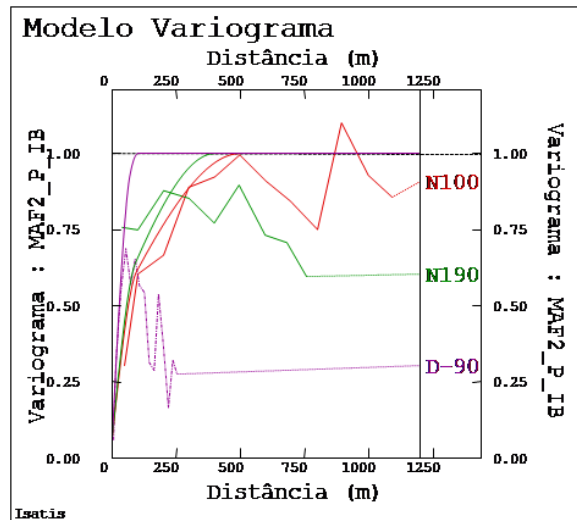
$$\gamma_{MAF4\_PPC\_IB} = 0,022 + 0,53 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{40m}{N190^\circ} \frac{16m}{D-90^\circ}\right) + 0,45 \cdot Sph\left(\frac{250m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.25 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da decorrelação dos teores das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

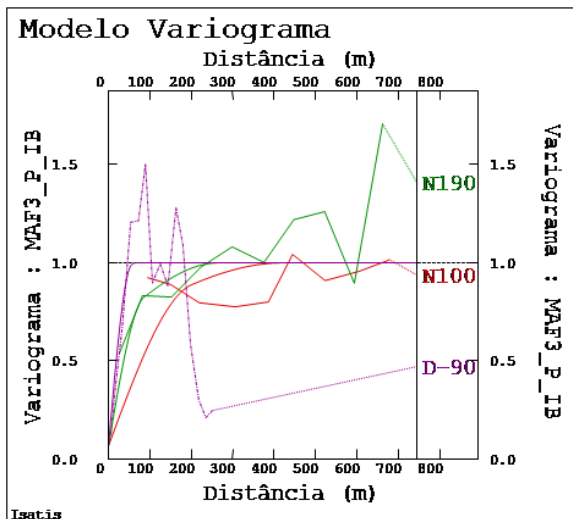
MAF1\_P\_IB



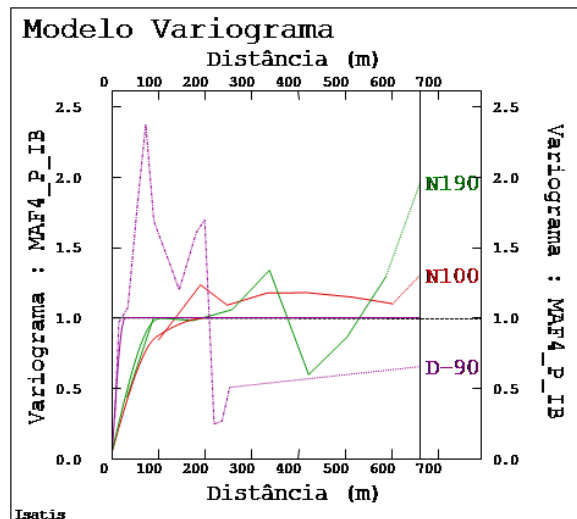
MAF2\_P\_IB



MAF3\_P\_IB



MAF4\_P\_IB



$$\gamma_{MAF1\_P\_IB} = 0,06 + 0,54 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \ 5 \ \frac{100m}{N190^\circ} \ \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,40 \cdot Sph\left(\frac{950m}{N100^\circ} \ \frac{500m}{N190^\circ} \ \frac{110m}{D-90^\circ}\right)$$

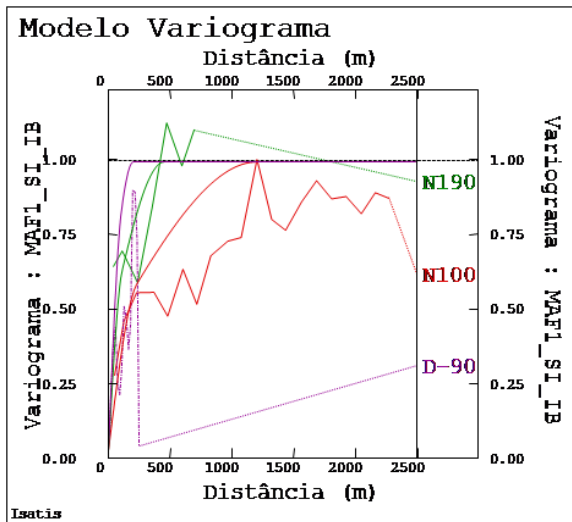
$$\gamma_{MAF2\_P\_IB} = 0,07 + 0,39 \cdot Sph\left(\frac{95m}{N100^\circ} \ \frac{90m}{N190^\circ} \ \frac{70m}{D-90^\circ}\right) + 0,54 \cdot Sph\left(\frac{500m}{N100^\circ} \ \frac{400m}{N190^\circ} \ \frac{100m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_P\_IB} = 0,11 + 0,53 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \ \frac{85m}{N190^\circ} \ \frac{55m}{D-90^\circ}\right) + 0,36 \cdot Sph\left(\frac{420m}{N100^\circ} \ \frac{265m}{N190^\circ} \ \frac{65m}{D-90^\circ}\right)$$

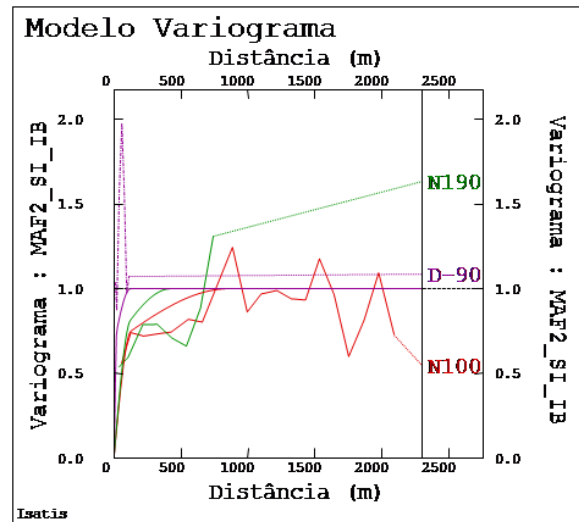
$$\gamma_{MAF4\_P\_IB} = 0,06 + 0,56 \cdot Sph\left(\frac{95m}{N100^\circ} \ \frac{95m}{N190^\circ} \ \frac{25m}{D-90^\circ}\right) + 0,38 \cdot Sph\left(\frac{205m}{N100^\circ} \ \frac{110m}{N190^\circ} \ \frac{30m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.26 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da descორrelação dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

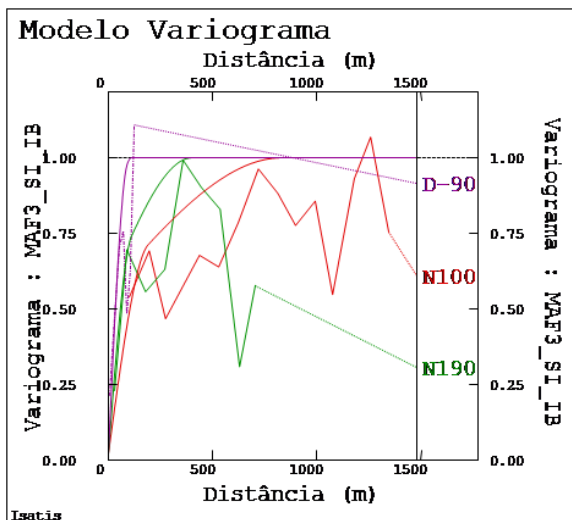
MAF1\_SI\_IB



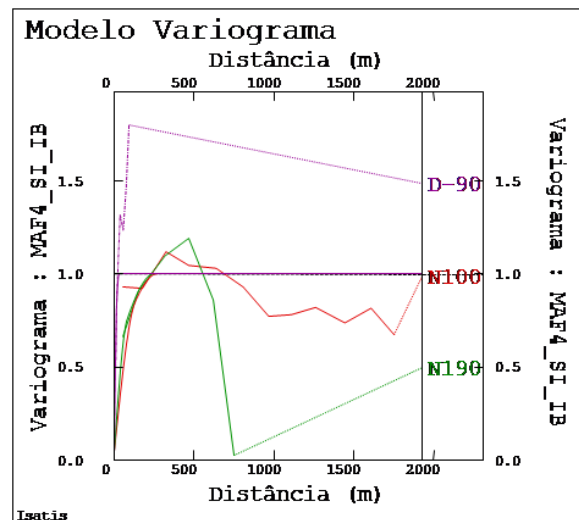
MAF2\_SI\_IB



MAF3\_SI\_IB



MAF4\_SI\_IB



$$\gamma_{MAF1\_SI\_IB} = 0,03 + 0,40 \cdot Sph\left(\frac{230m}{N100^\circ} \frac{110m}{N190^\circ} \frac{105m}{D-90^\circ}\right) + 0,57 \cdot Sph\left(\frac{1200m}{N100^\circ} \frac{450m}{N190^\circ} \frac{200m}{D-90^\circ}\right)$$

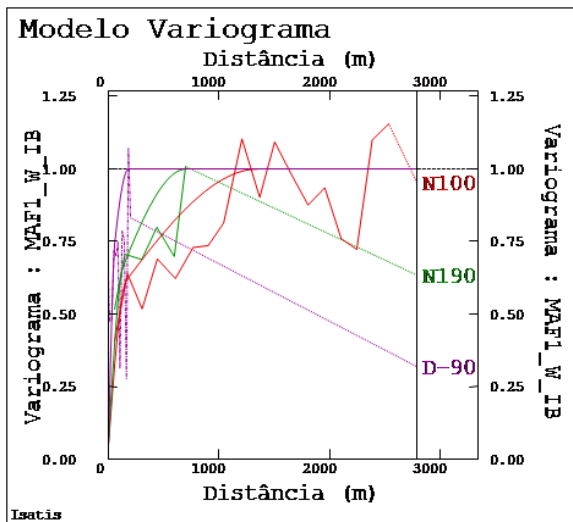
$$\gamma_{MAF2\_SI\_IB} = 0,03 + 0,66 \cdot Sph\left(\frac{125m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{18m}{D-90^\circ}\right) + 0,32 \cdot Sph\left(\frac{850m}{N100^\circ} \frac{420m}{N190^\circ} \frac{120m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_SI\_IB} = 0,02 + 0,55 \cdot Sph\left(\frac{190m}{N100^\circ} \frac{110m}{N190^\circ} \frac{90m}{D-90^\circ}\right) + 0,43 \cdot Sph\left(\frac{830m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{110m}{D-90^\circ}\right)$$

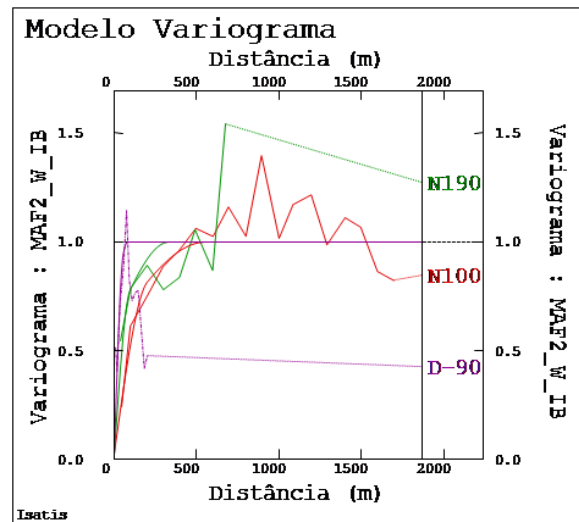
$$\gamma_{MAF4\_SI\_IB} = 0,05 + 0,49 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N100^\circ} \frac{80m}{N190^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,46 \cdot Sph\left(\frac{270m}{N100^\circ} \frac{250m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.27 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da decorrelação dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

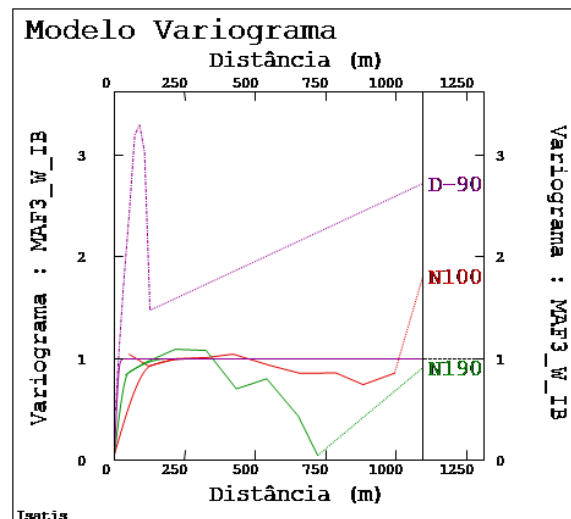
MAF1\_W\_IB



MAF2\_W\_IB



MAF3\_W\_IB



$$\gamma_{MAF1\_W\_IB} = 0,05 + 0,50 \cdot Sph\left(\frac{160m}{N100^\circ} \frac{130m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) + 0,40 \cdot Sph\left(\frac{1350m}{N100^\circ} \frac{700m}{N190^\circ} \frac{180m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF2\_W\_IB} = 0,03 + 0,59 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \frac{95m}{N190^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right) + 0,39 \cdot Sph\left(\frac{550m}{N100^\circ} \frac{330m}{N190^\circ} \frac{80m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{MAF3\_W\_IB} = 0,06 + 0,72 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N100^\circ} \frac{50m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + 0,22 \cdot Sph\left(\frac{250m}{N100^\circ} \frac{180m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura C.28 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada fator MAF obtido da decorrelação das massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 2, 21 e 3, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.



## **Apêndice D**

### **Histogramas, Análise da Correlação Espacial e Modelos Variográficos das Componentes Principais PCA**

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes a estatística básica, análise da correlação espacial e modelagem da mesma para as Componentes Principais (PCA)

#### **D.1 Transformação em Componentes Principais**

As componentes principais PCA são obtidas a partir de subgrupos de variáveis que são apresentados na Tabela C.1, descorrelacionando as variáveis originais no vetor de separação nulo  $h=0$ .

Tabela D.1 – Subgrupos de variáveis consideradas para descorrelacionar em  $h=0$ , utilizando a decomposição em componentes principais PCA.

| Subgrupo | Variáveis               | Fatores PCA  |
|----------|-------------------------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT     | PCA1_AL_IB<br>PCA2_AL_IB<br>PCA3_AL_IB<br>PCA4_AL_IB     |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET     | PCA1_FE_IB<br>PCA2_FE_IB<br>PCA3_FE_IB<br>PCA4_FE_IB     |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT     | PCA1_MN_IB<br>PCA2_MN_IB<br>PCA3_MN_IB<br>PCA4_MN_IB     |
| 4        | P2, P21, P3, PT         | PCA1_P_IB<br>PCA2_P_IB<br>PCA3_P_IB<br>PCA4_P_IB         |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT | PCA1_PPC_IB<br>PCA2_PPC_IB<br>PCA3_PPC_IB<br>PCA4_PPC_IB |
| 6        | SI2, SI21, SI3, SIT     | PCA1_SI_IB<br>PCA2_SI_IB<br>PCA3_SI_IB<br>PCA4_SI_IB     |
| 7        | W2, W21, W3             | PCA1_W_IB<br>PCA2_W_IB<br>PCA3_W_IB                      |

## D.2 Histogramas

A seguir, são apresentados os histogramas das componentes principais PCA correspondentes a cada subgrupo de variáveis.

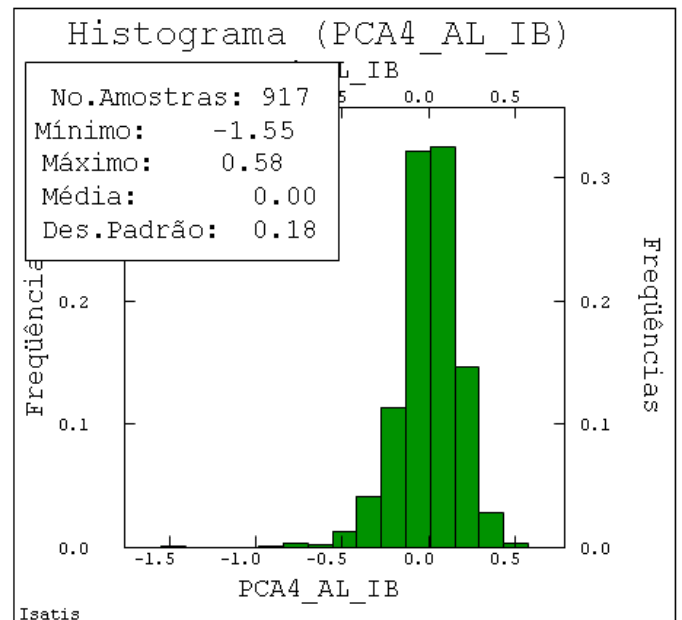
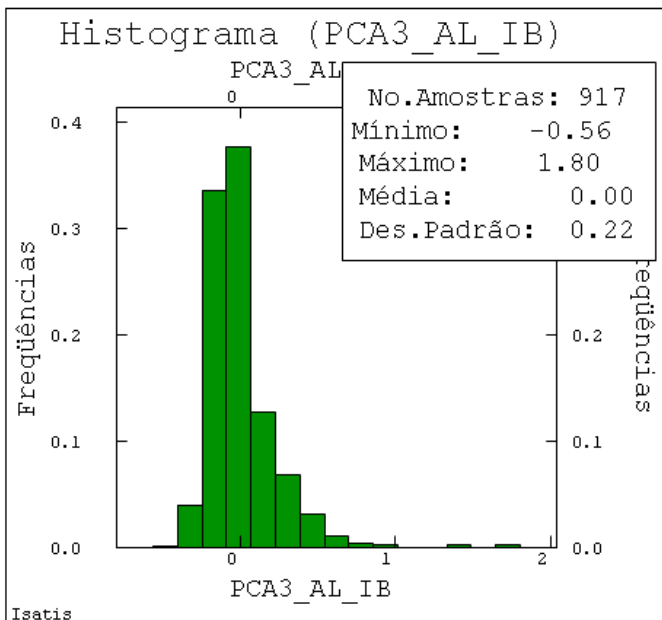
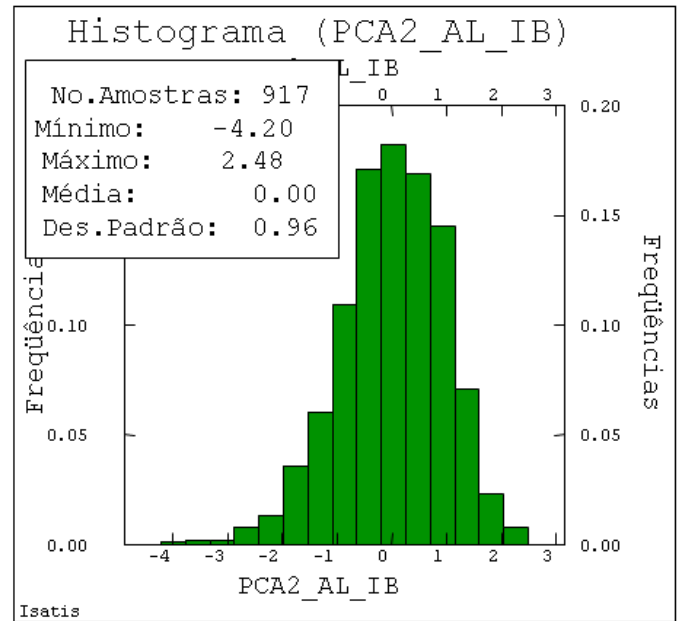
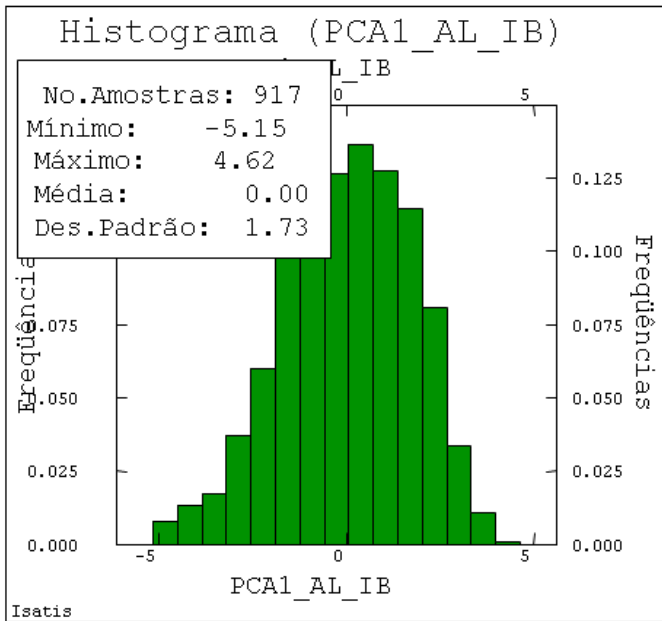


Figura D.1– Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global.

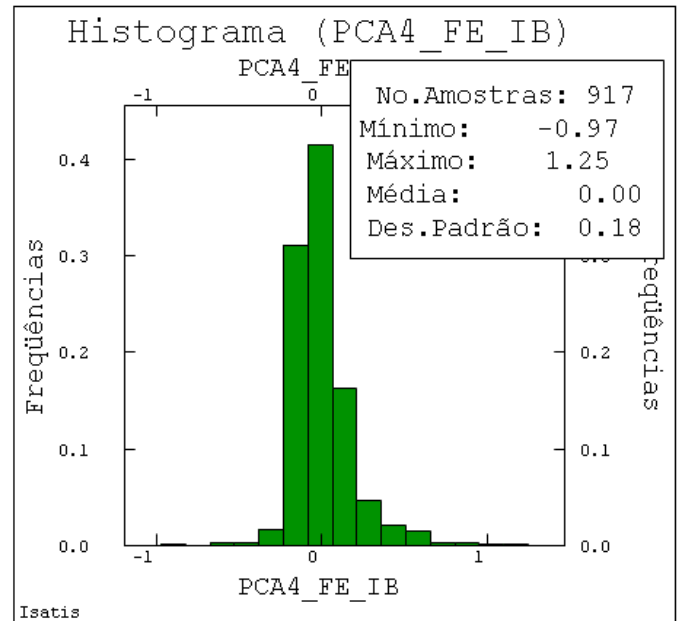
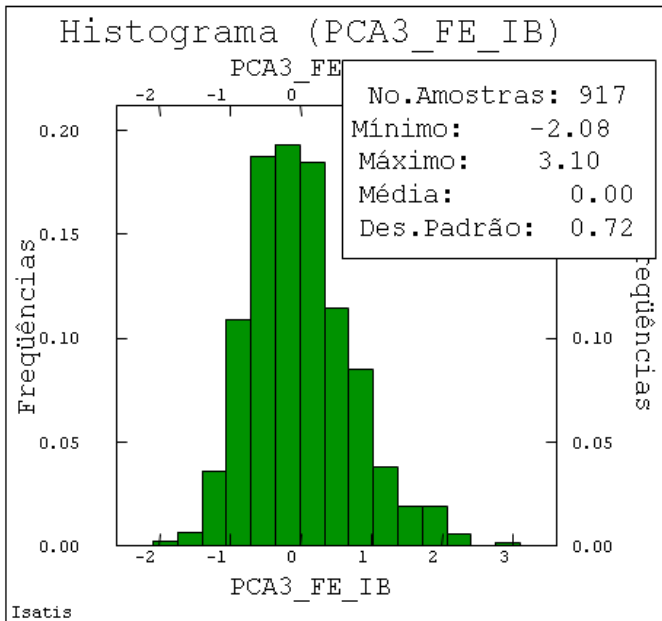
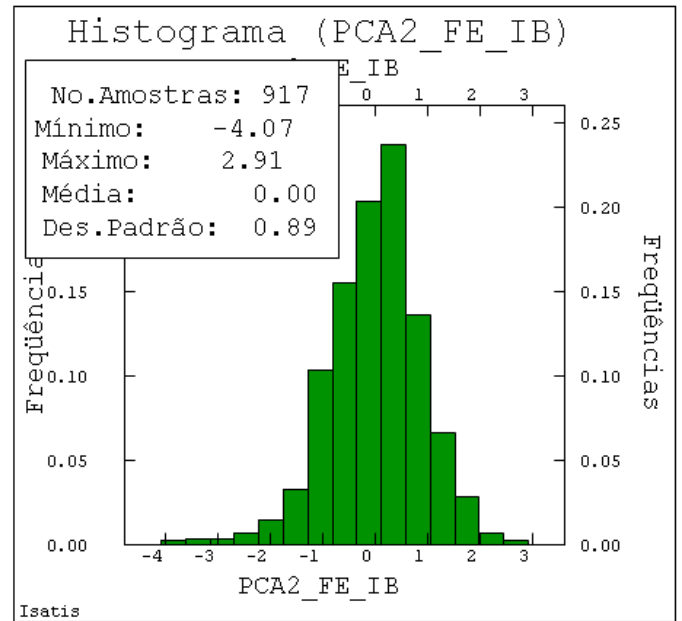
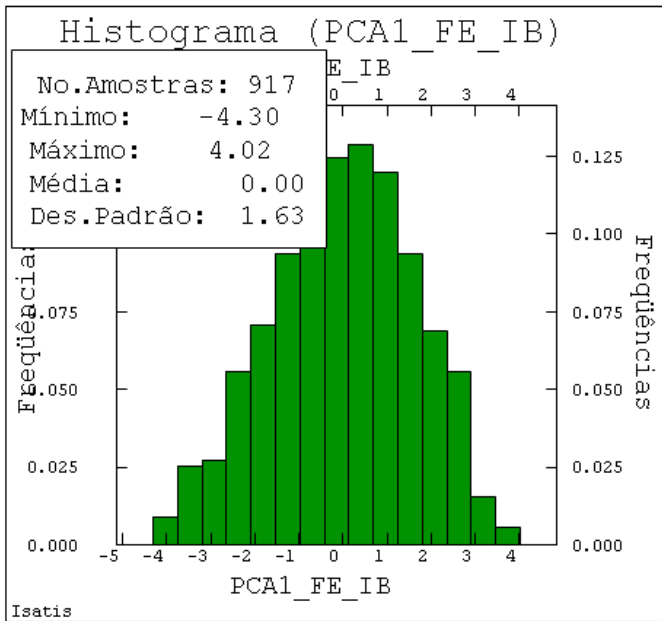


Figura D.2 - - Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global.

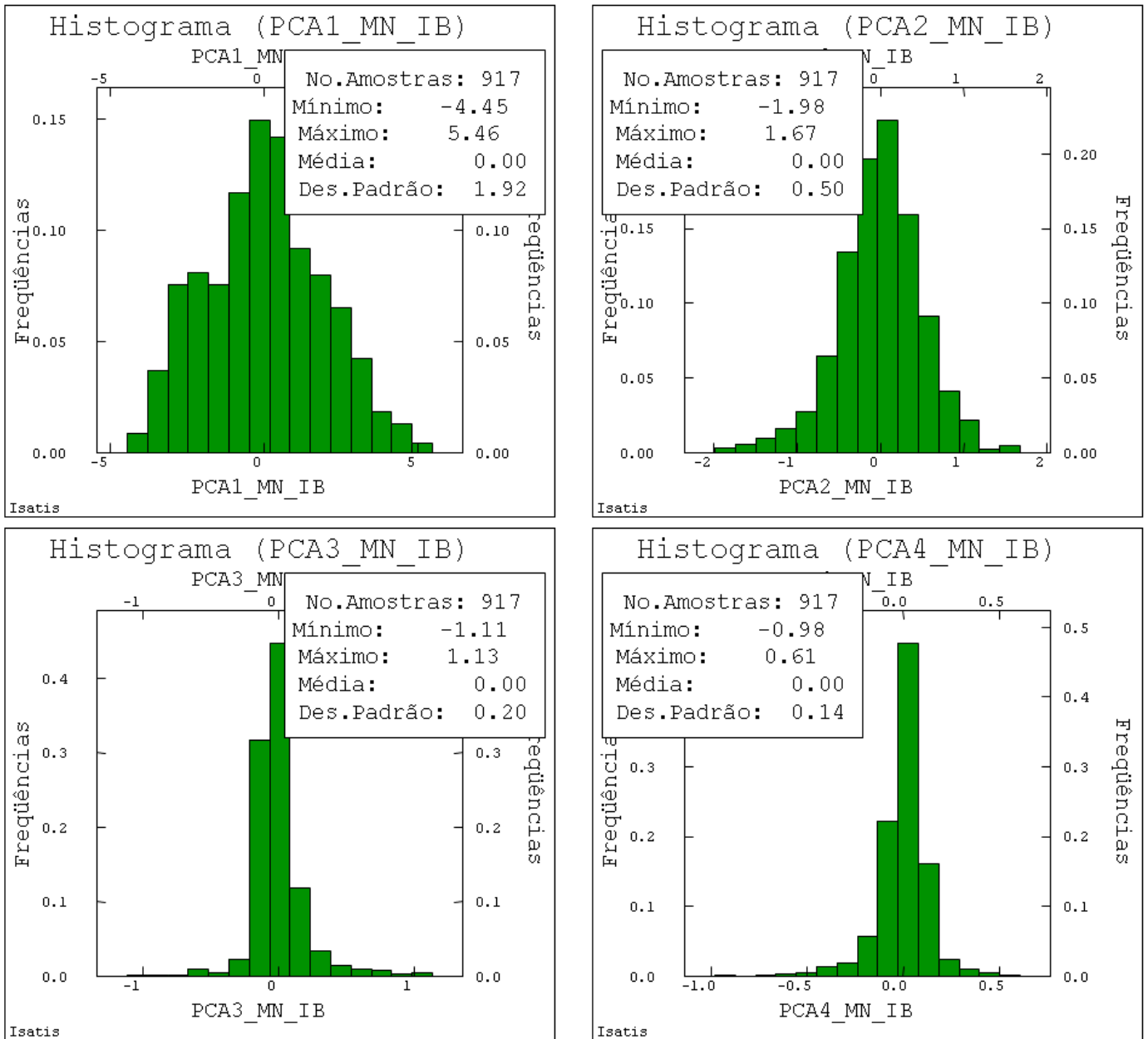


Figura D.3 - – Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação dos teores de manganês nas faixas 2, 21, 3 e global.

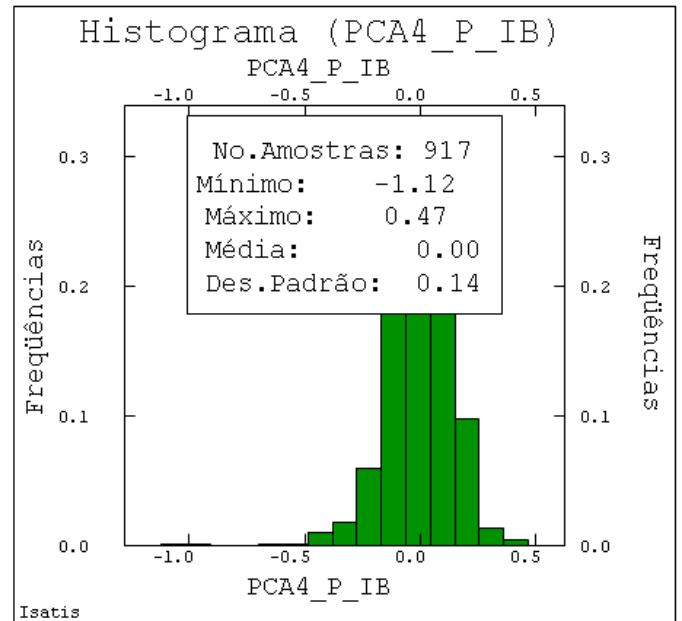
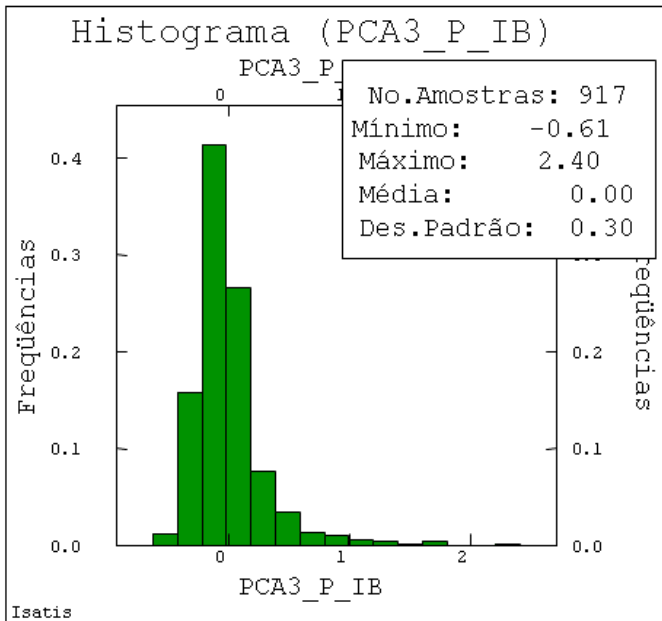
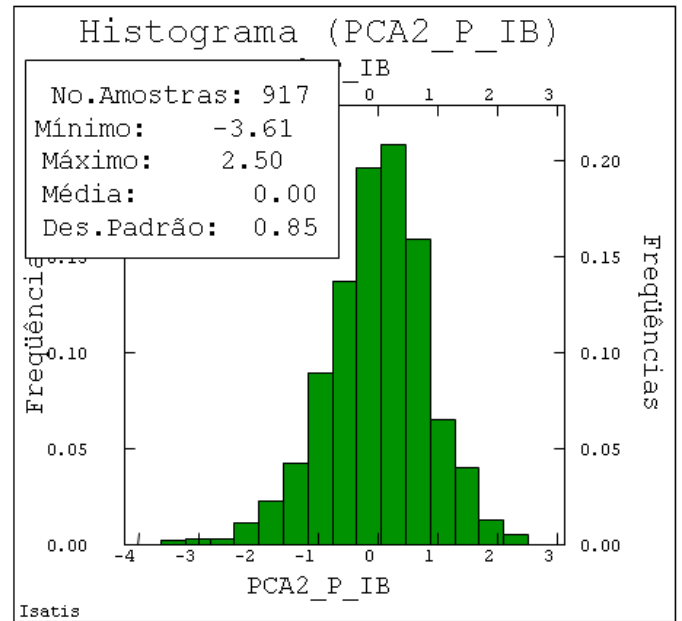
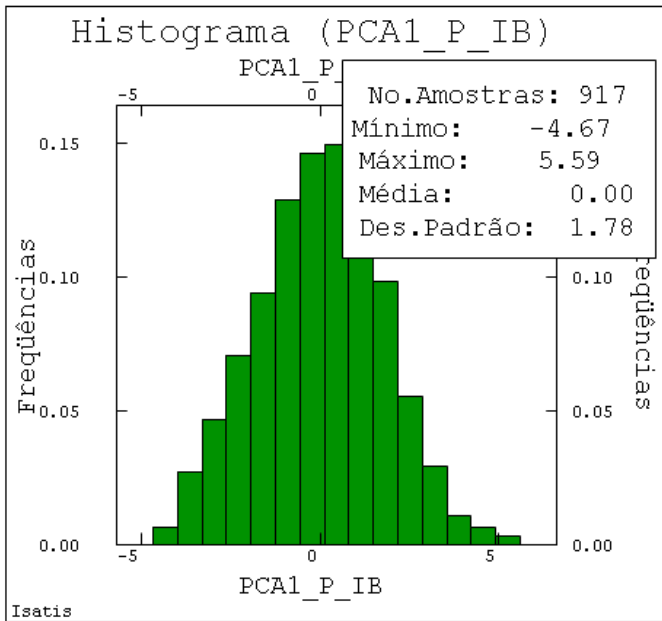


Figura D.4– Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global.

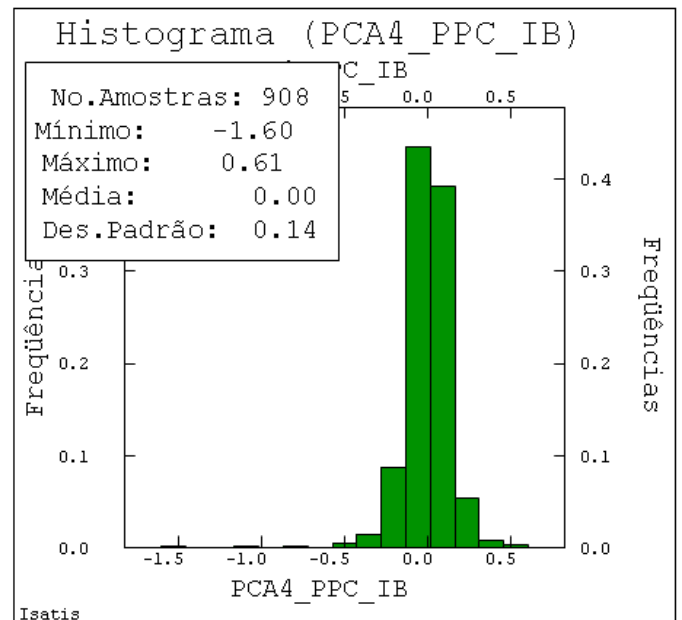
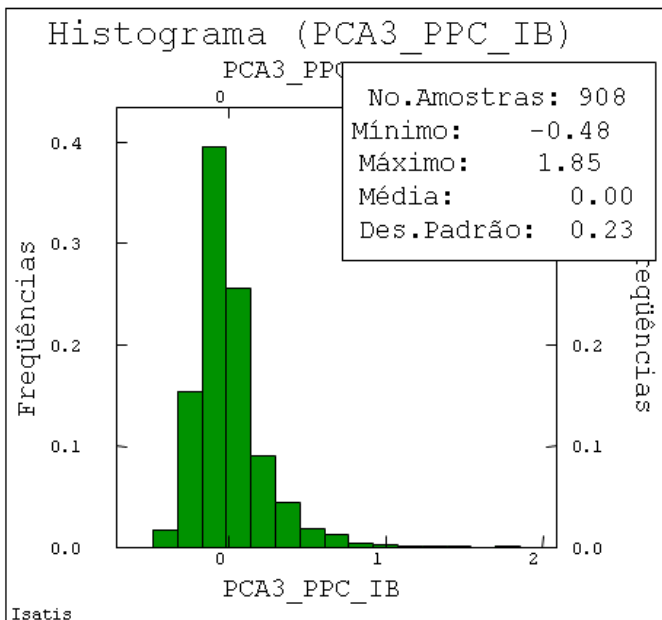
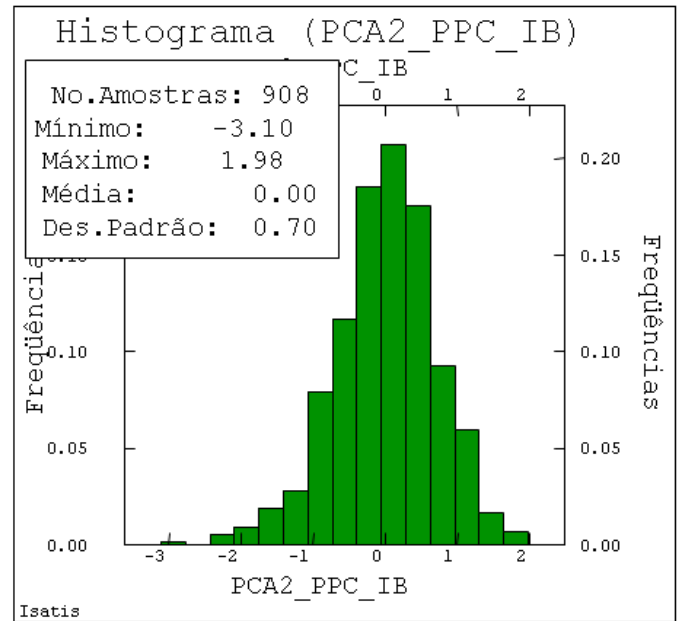
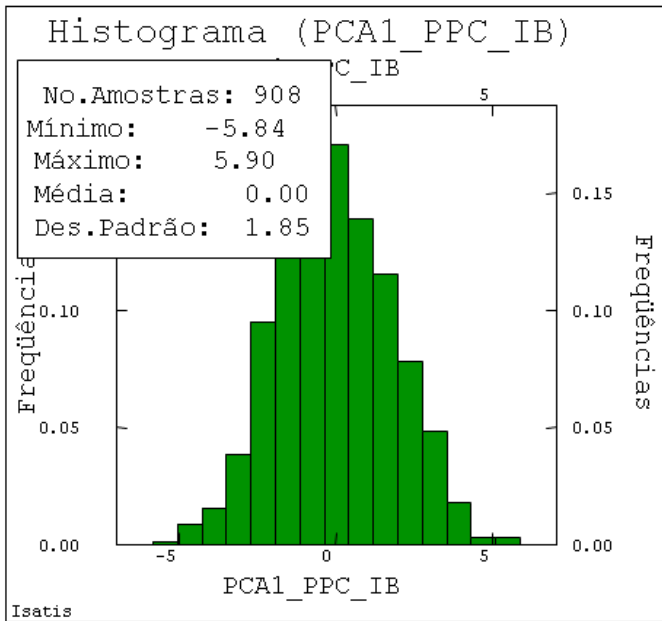


Figura D.5– Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação dos teores das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global.

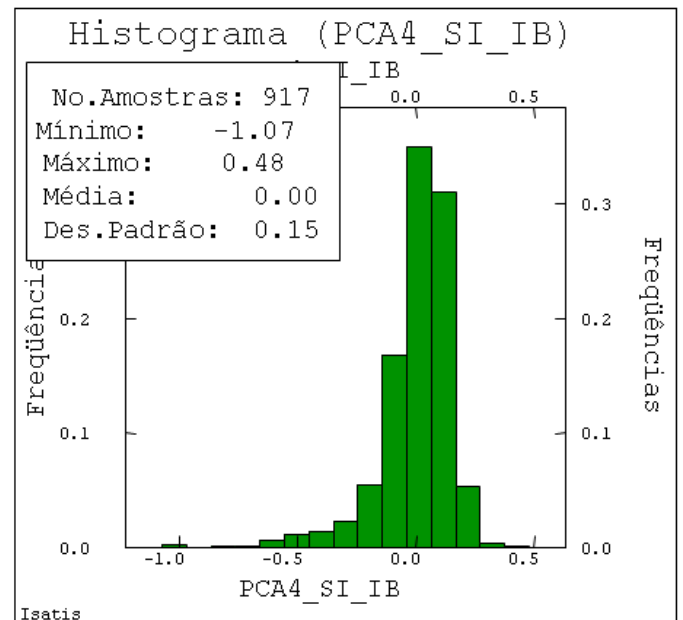
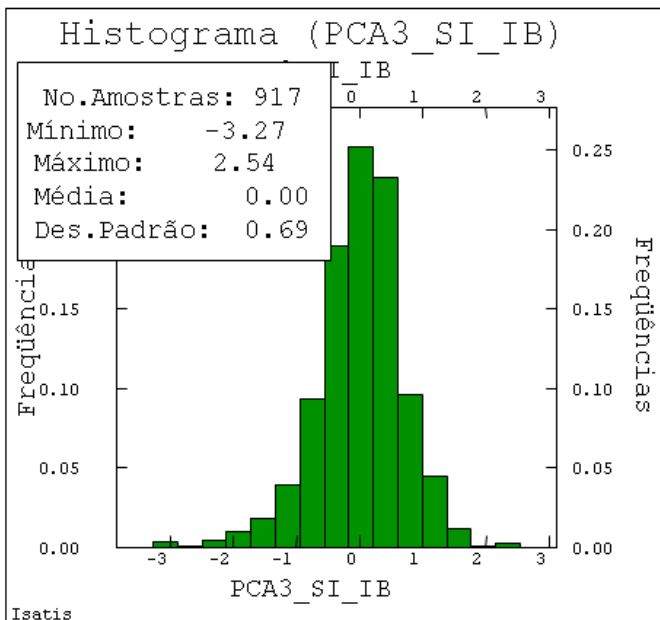
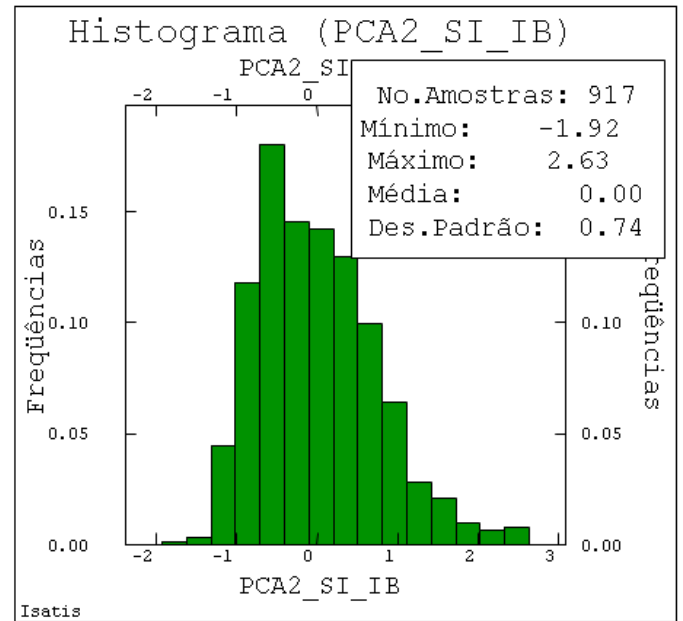
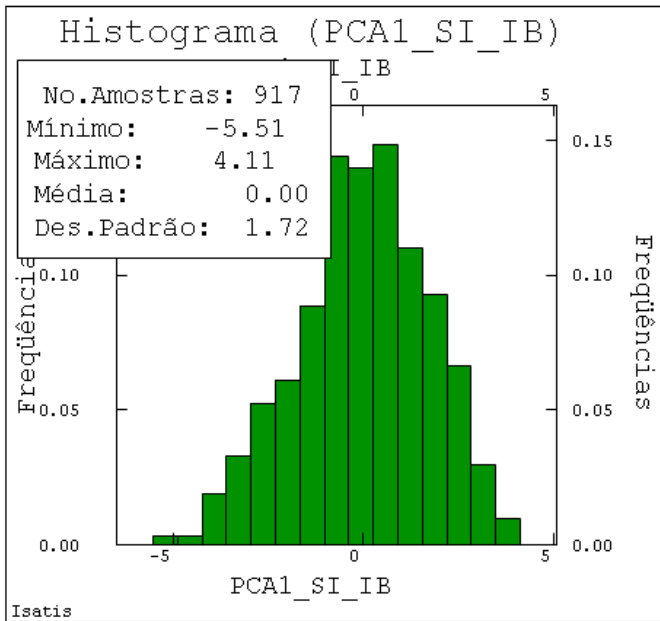


Figura D.6– Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global.



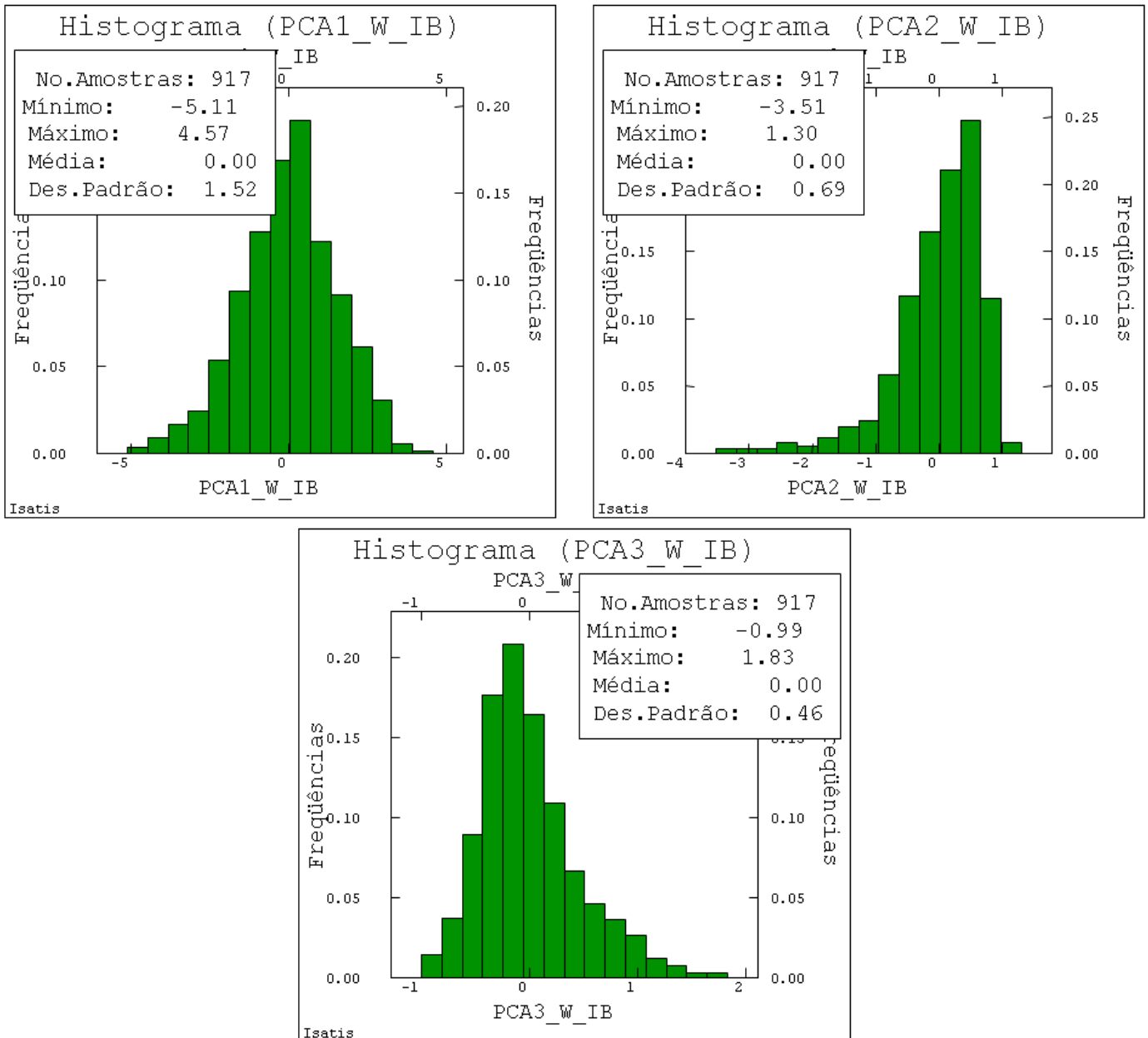


Figura D.7 - Histogramas das componentes PCA obtidas para a decorrelação das massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 2, 21 e 3.

### D.3 Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das Componentes Principais PCA

Nas figuras a seguir, são apresentados os variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da decorrelação espacial para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

Observa-se, que nos variogramas fora da diagonal principal (cruzados), não existe uma correlação espacial muito marcada.

## Modelo Variograma

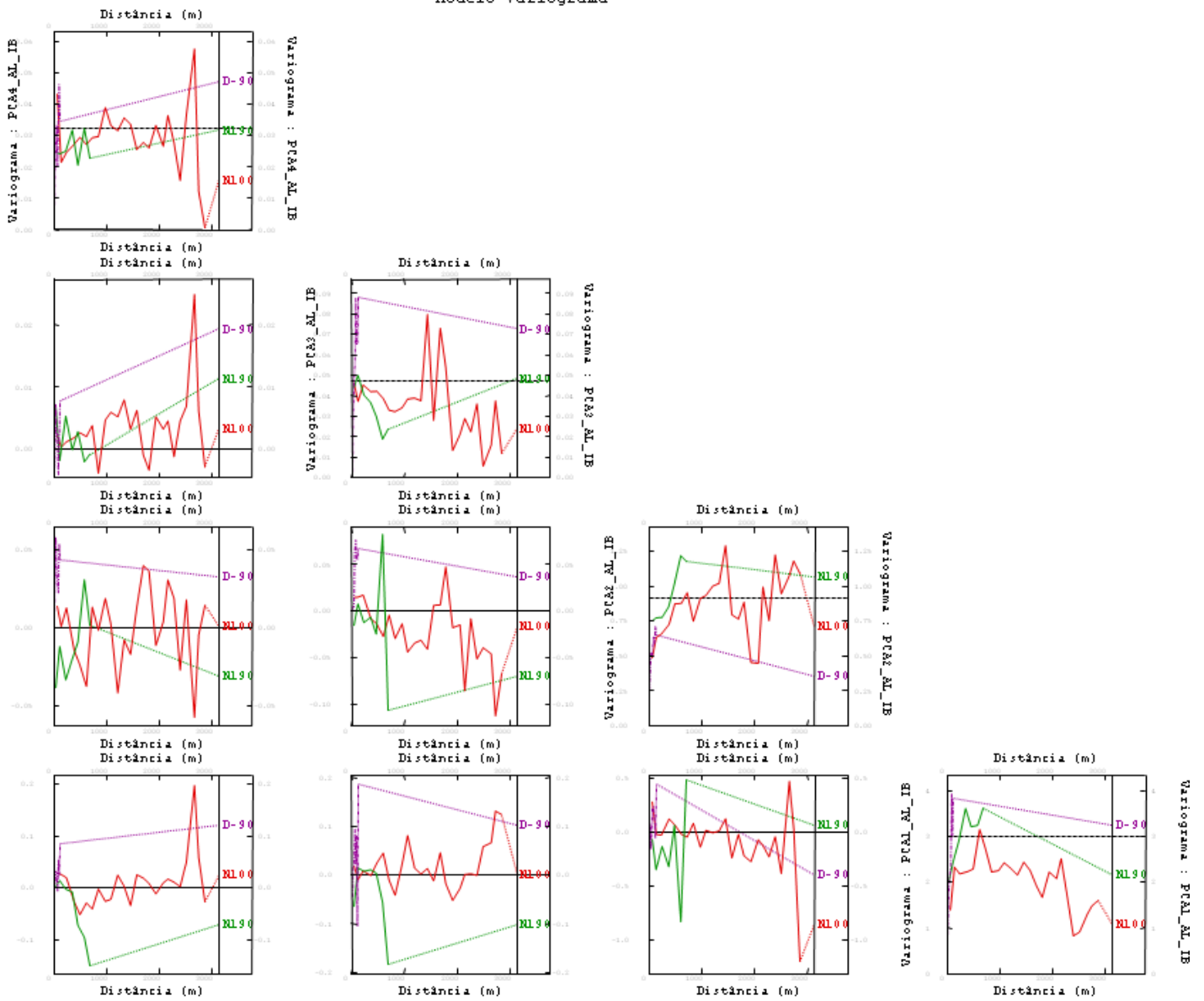


Figura D.8 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da decorrelação espacial da alumina nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

## Modelo Variograma

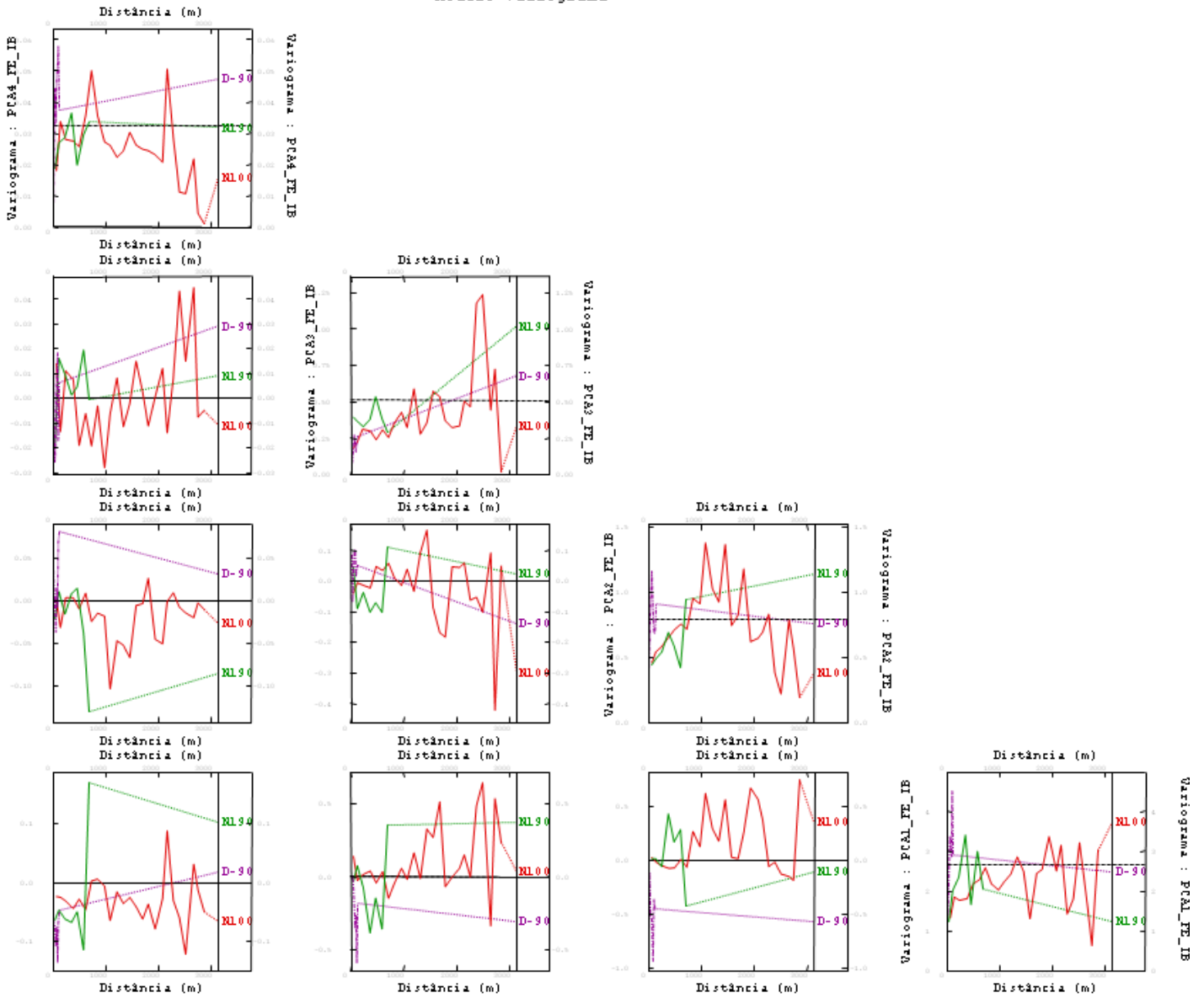


Figura D.9 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da decorrelação espacial do ferro nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

## Modelo Variograma

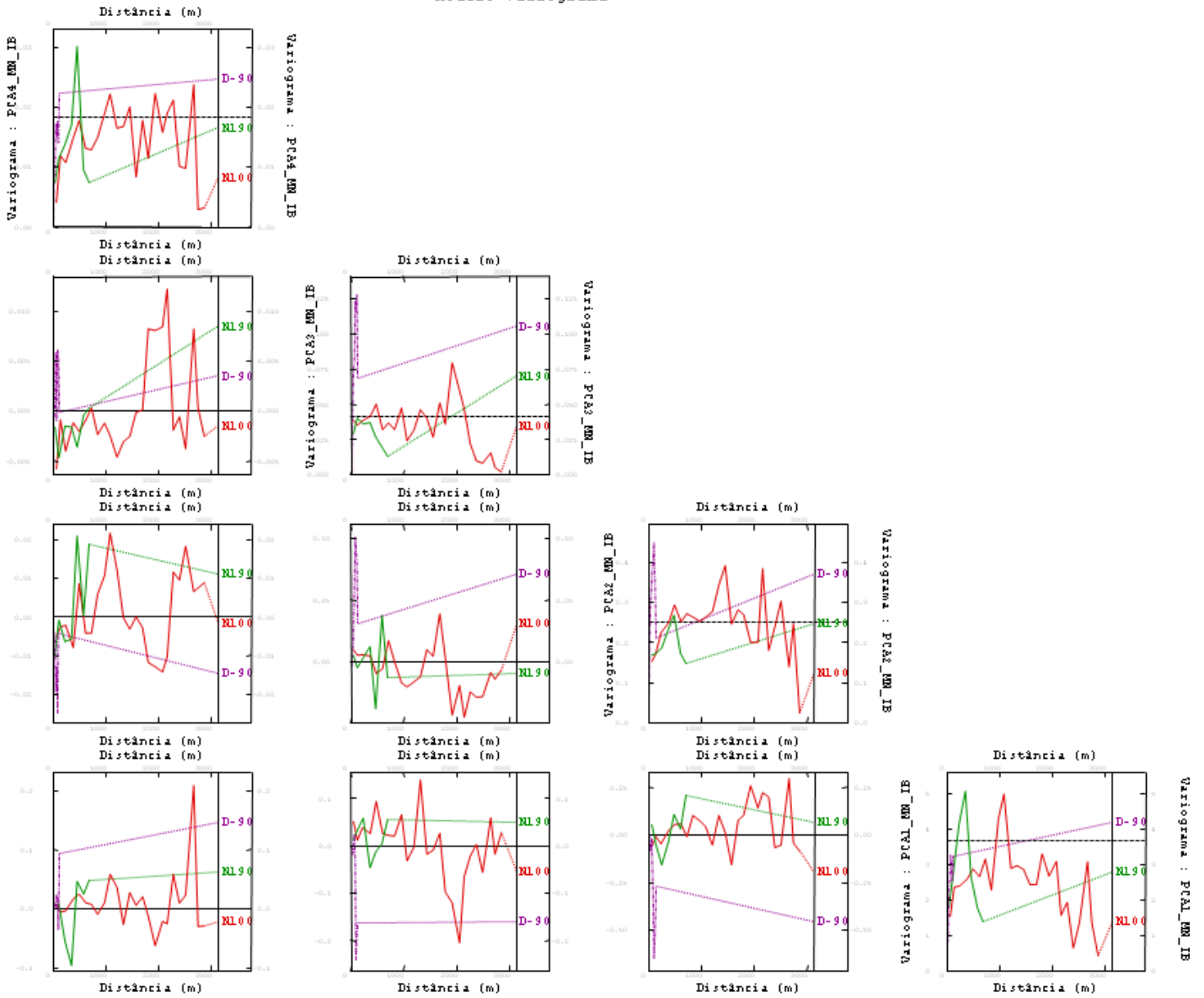


Figura D.10 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da descorrelação espacial do manganês nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

Modelo Variograma

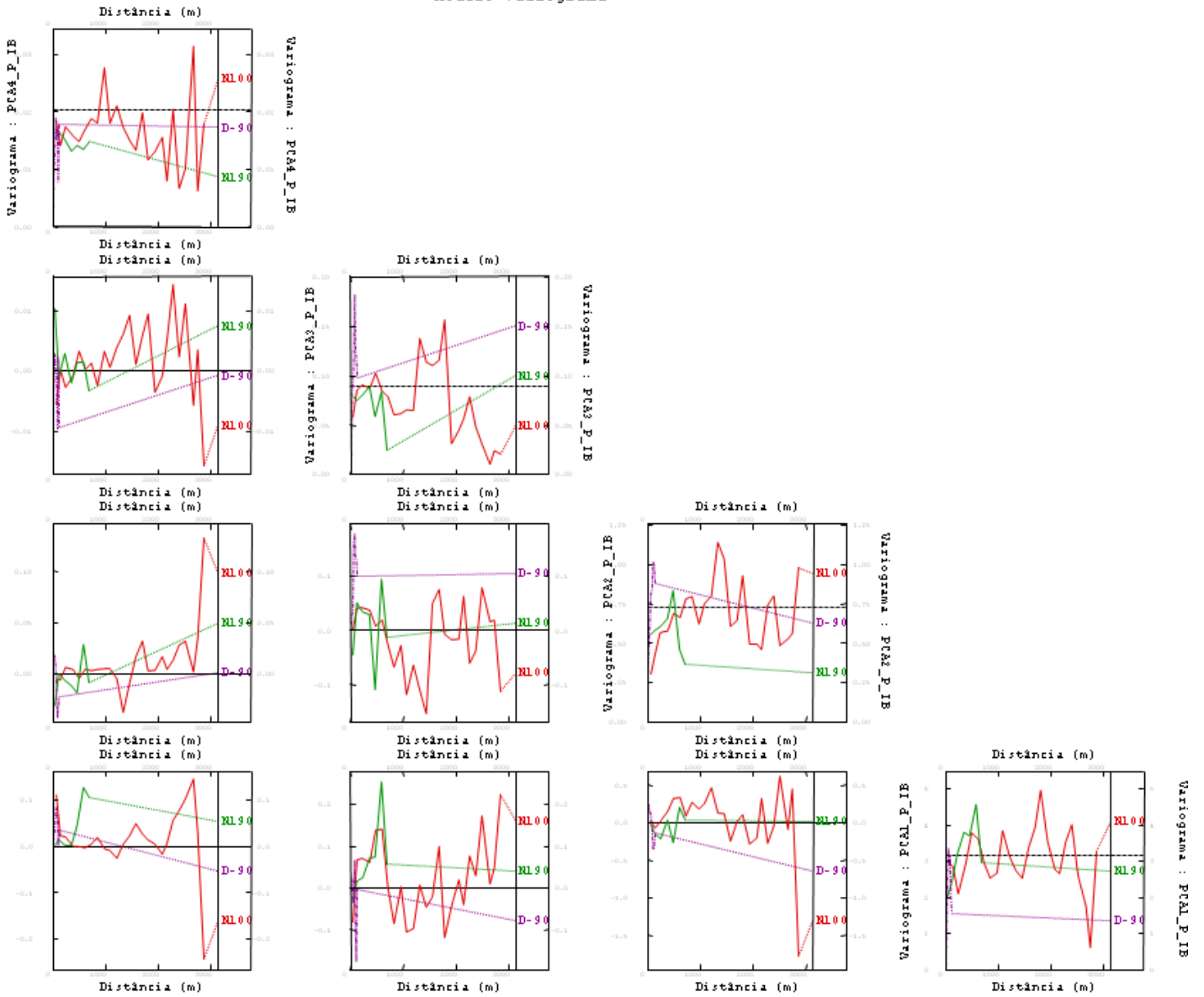


Figura D.11 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da decorrelação espacial do fósforo nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia  $N100^\circ$ ,  $N190^\circ$  e  $D-90^\circ$ .

Modelo Variograma

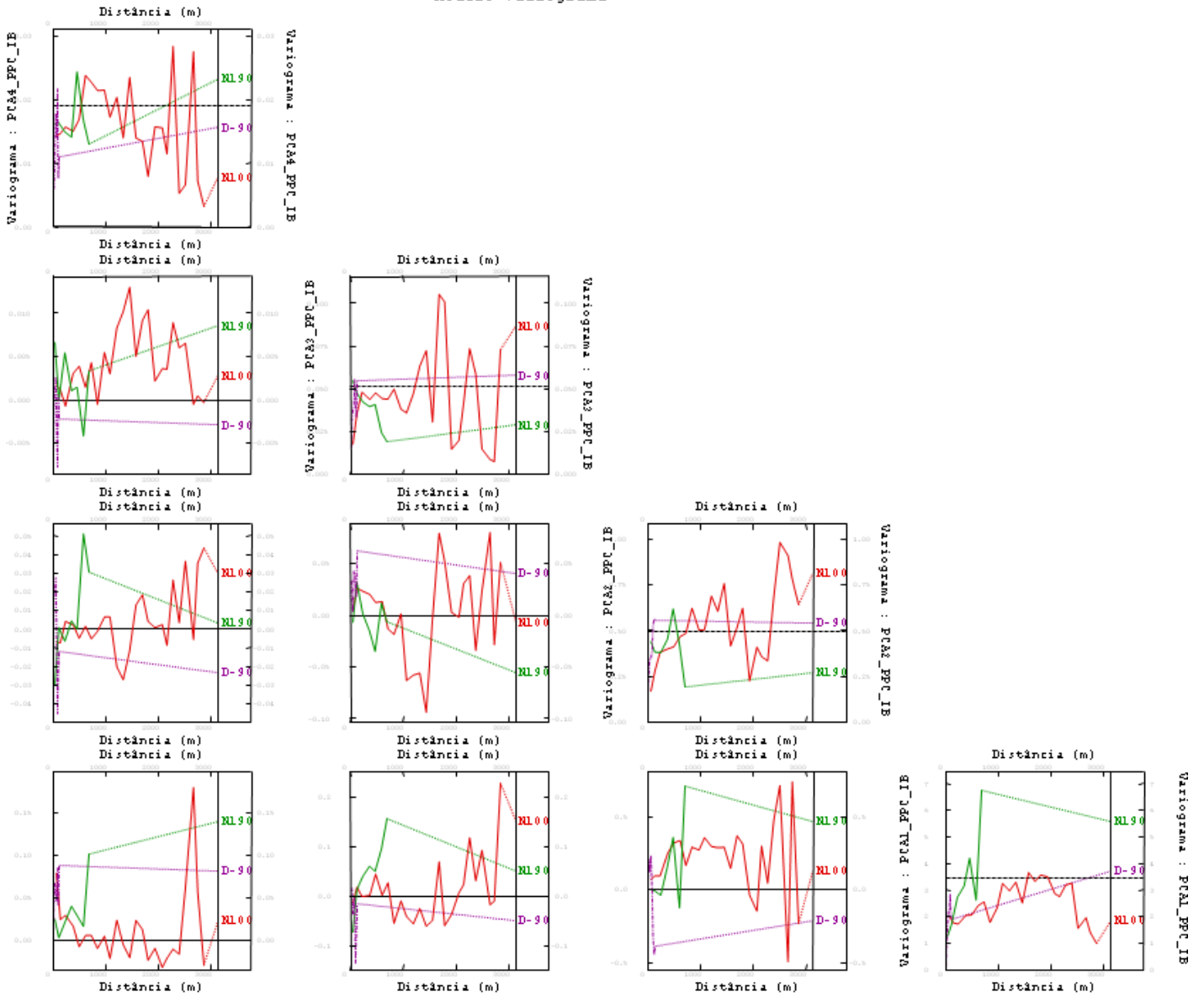


Figura D.12 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da decorrelação espacial das perdas por calcinação nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

## Modelo Variograma

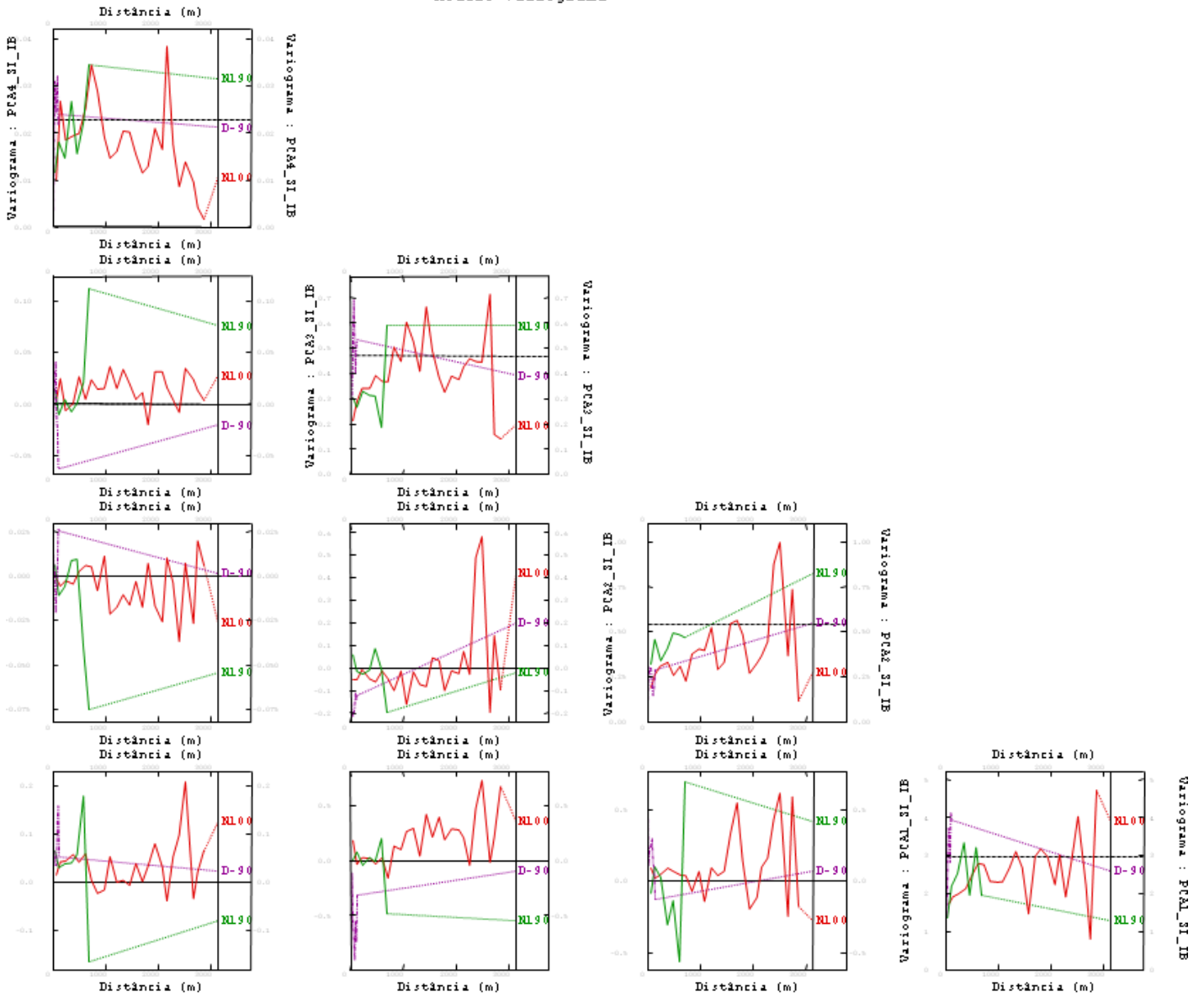


Figura D.13 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da descorrelação espacial da sílica nas faixas granulométricas 2, 21, 3 e global, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

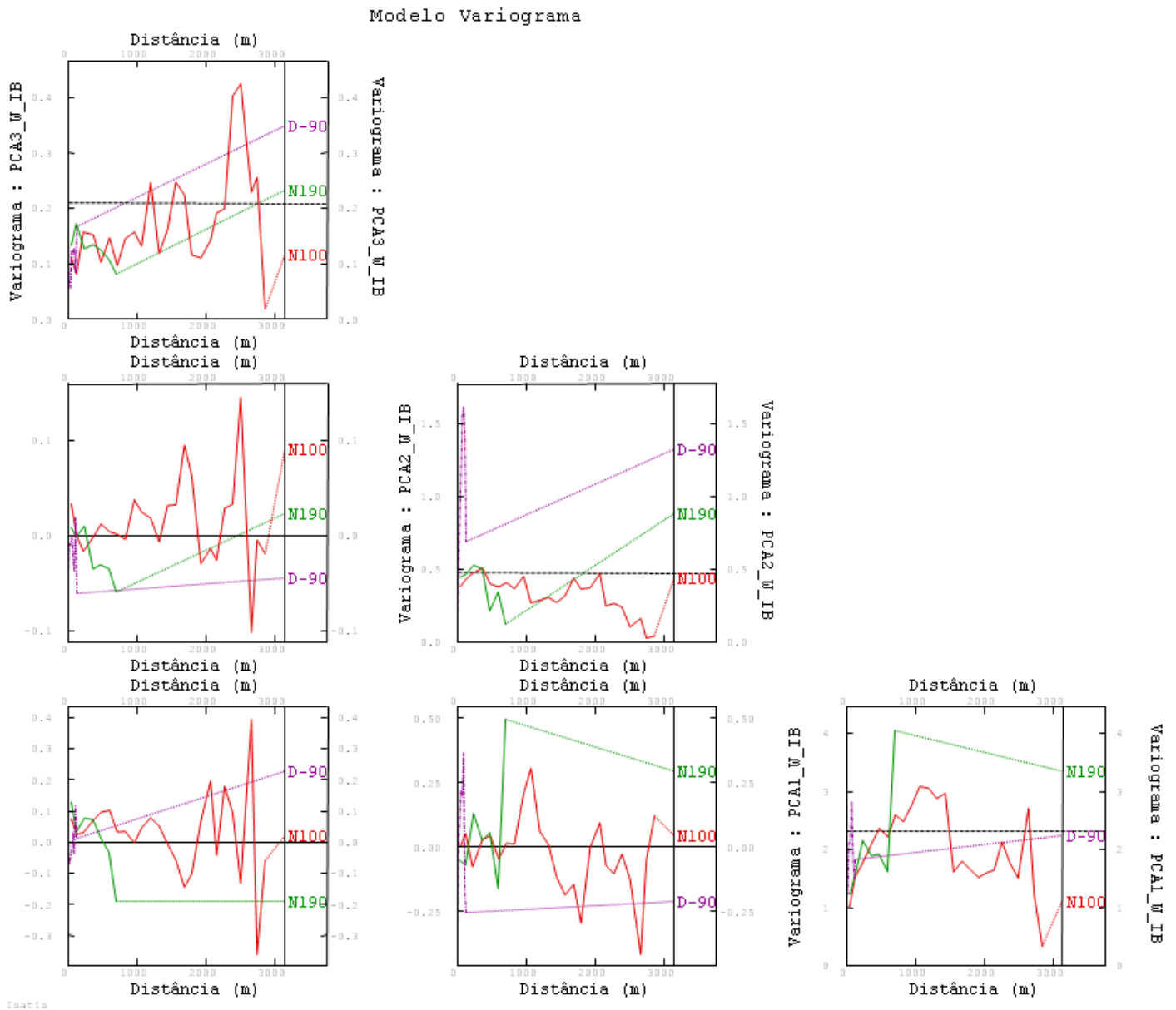


Figura D.14 - Variogramas direcionais, experimentais, diretos e cruzados das componentes PCA, para a análise da decorrelação espacial da massa das partições granulométricas nas faixas 2, 21 e 3, para vetores de separação diferentes de zero, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°.

#### D.4 Diagramas de dispersão entre as componentes PCA

Nos diagramas de dispersão que se apresentam a seguir, correspondentes às componentes PCA utilizadas para decorrelacionar cada grupo de variáveis, observa-se que o coeficiente de correlação é nulo para  $h=0$ .



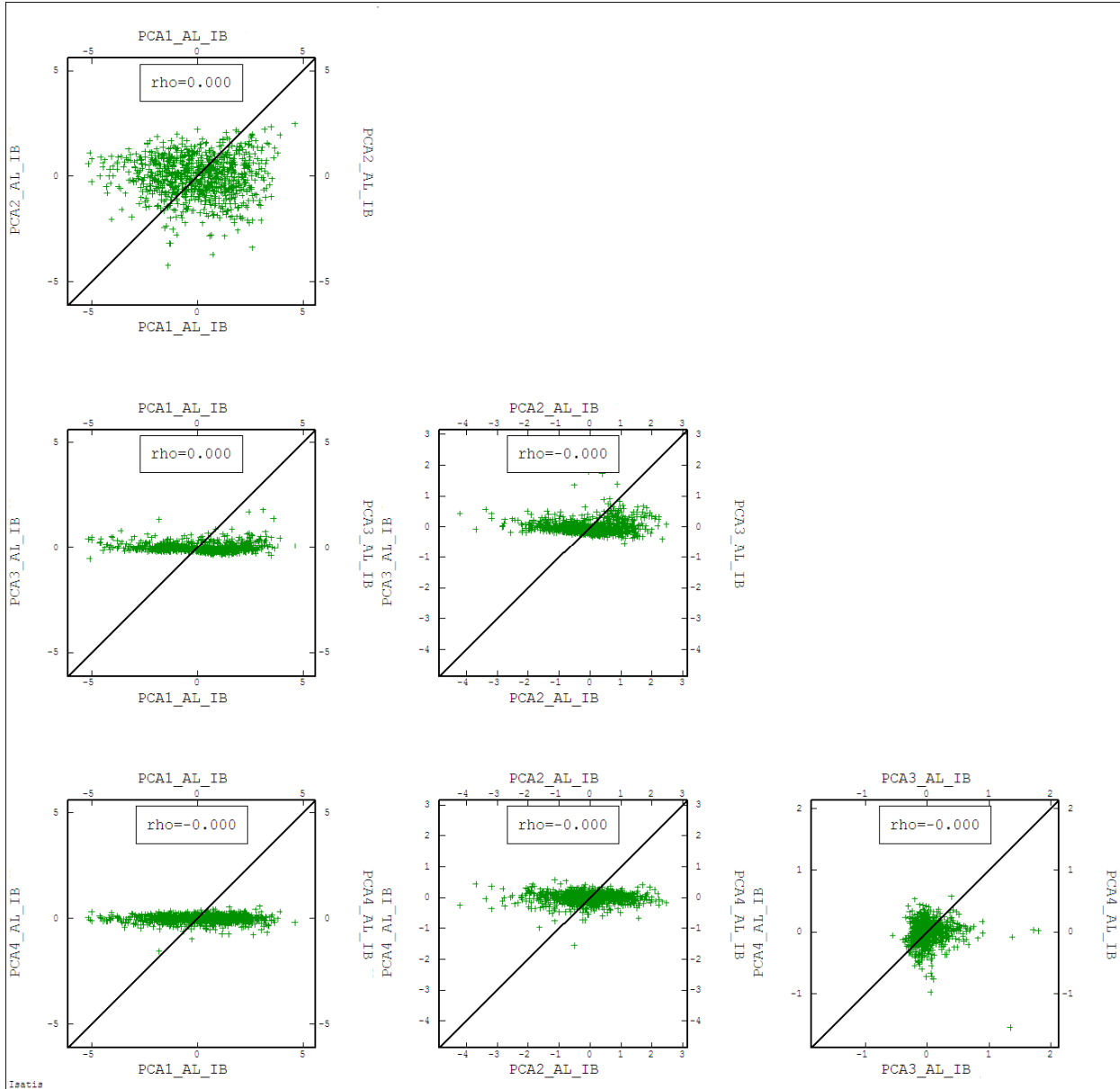


Figura D.15 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

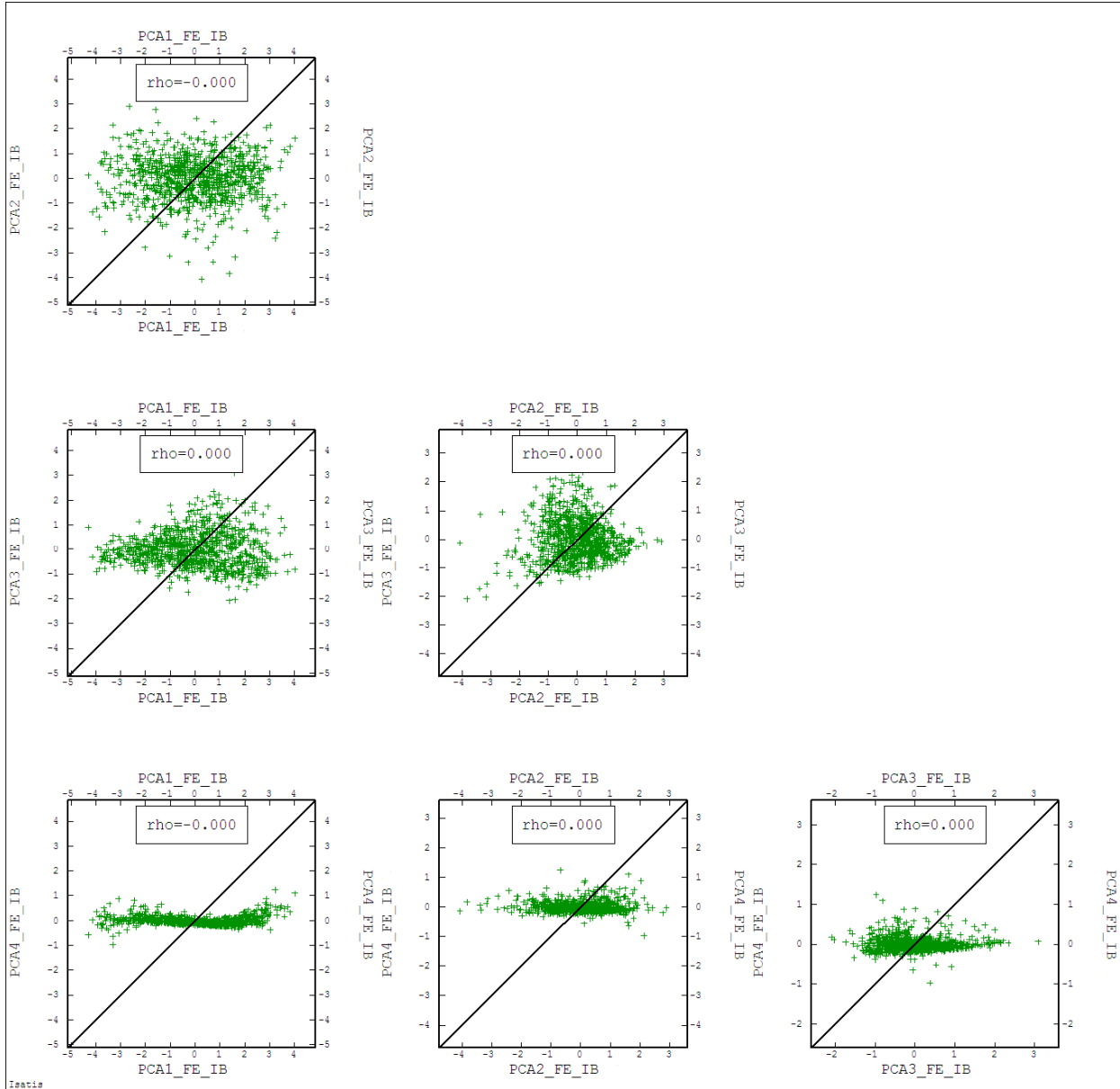


Figura D.16 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

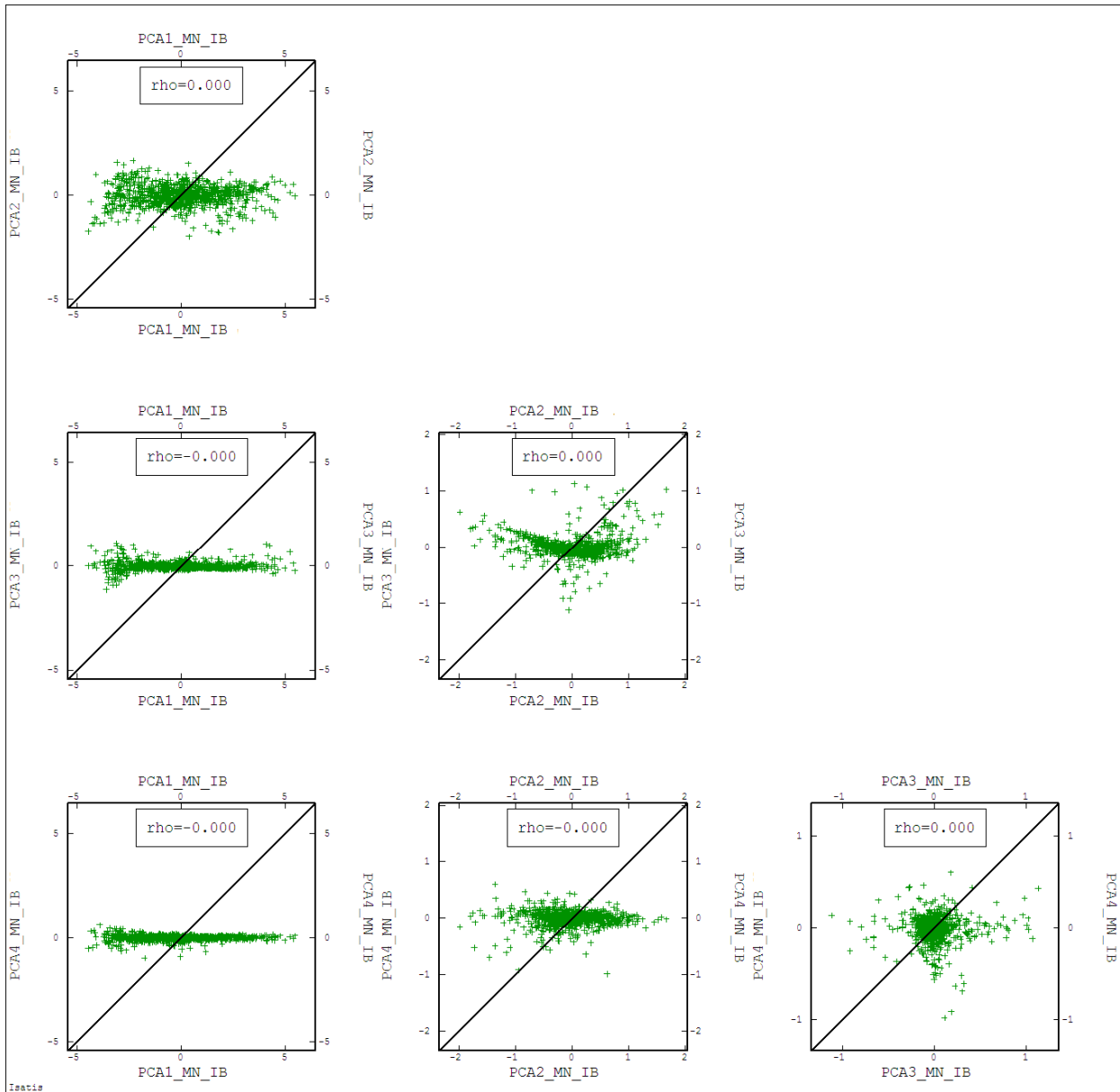


Figura D.17 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa dos teores de manganês nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para h=0.

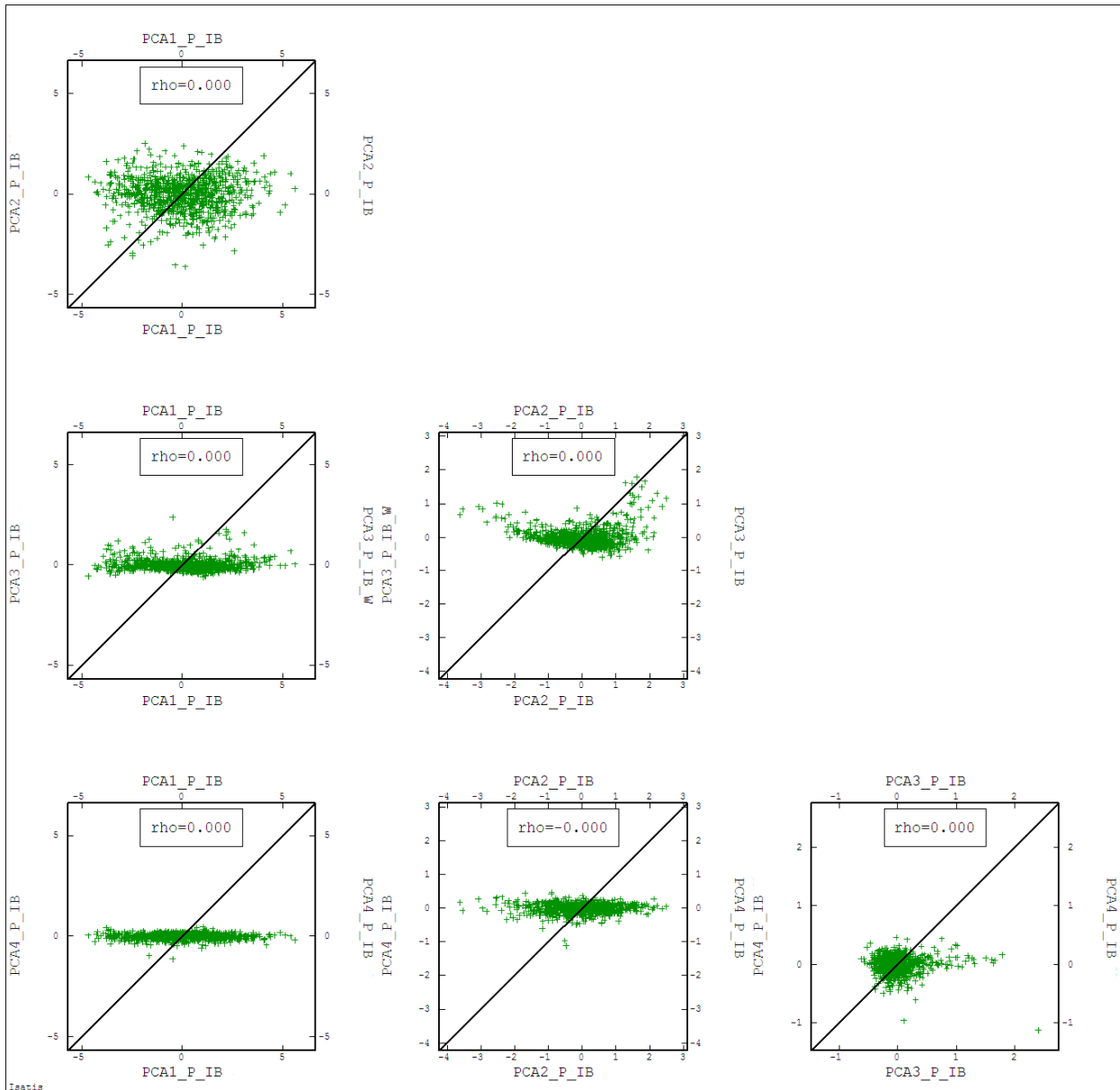


Figura D.18 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

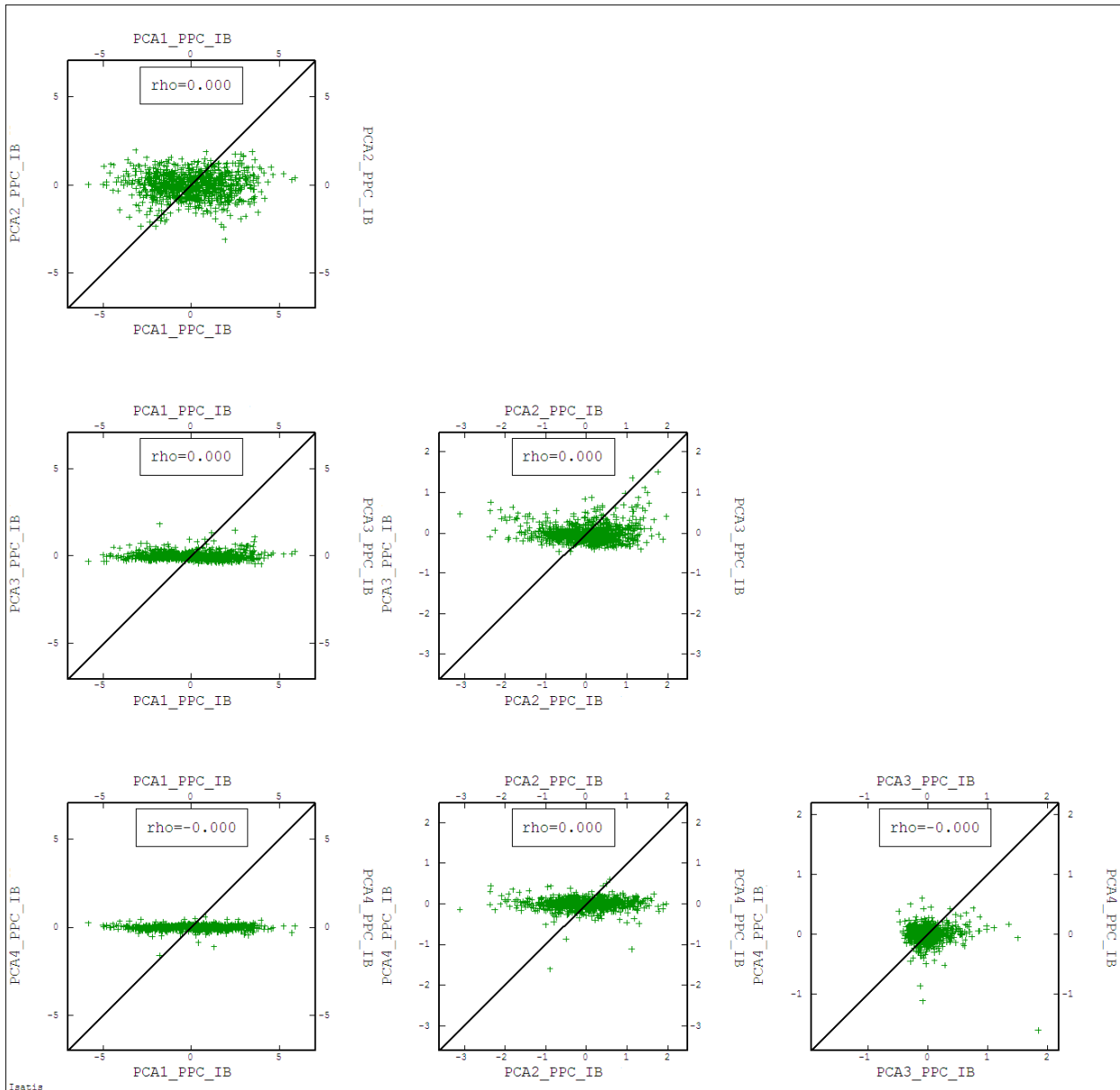


Figura D.19 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa dos teores das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

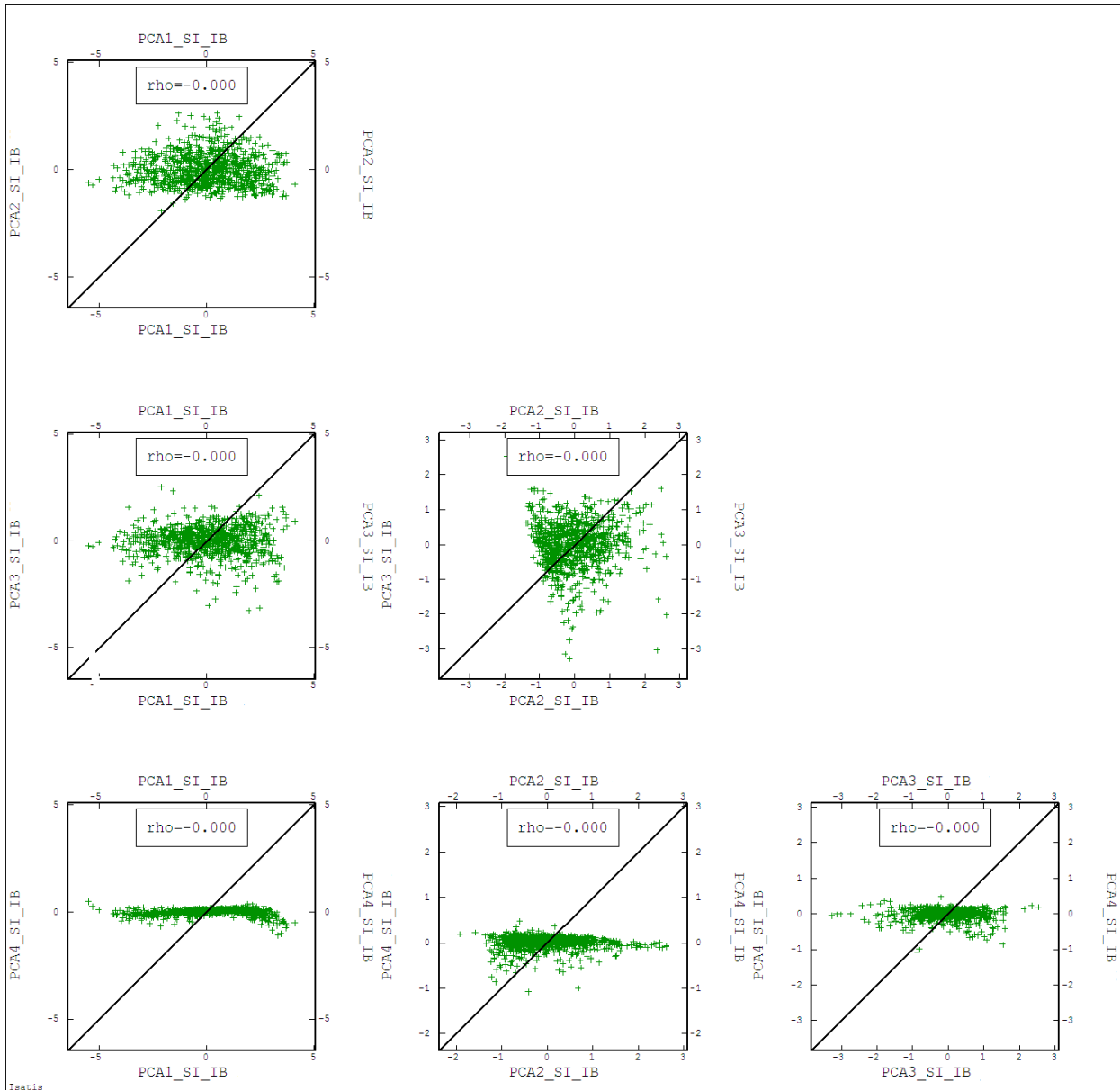


Figura D.20 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

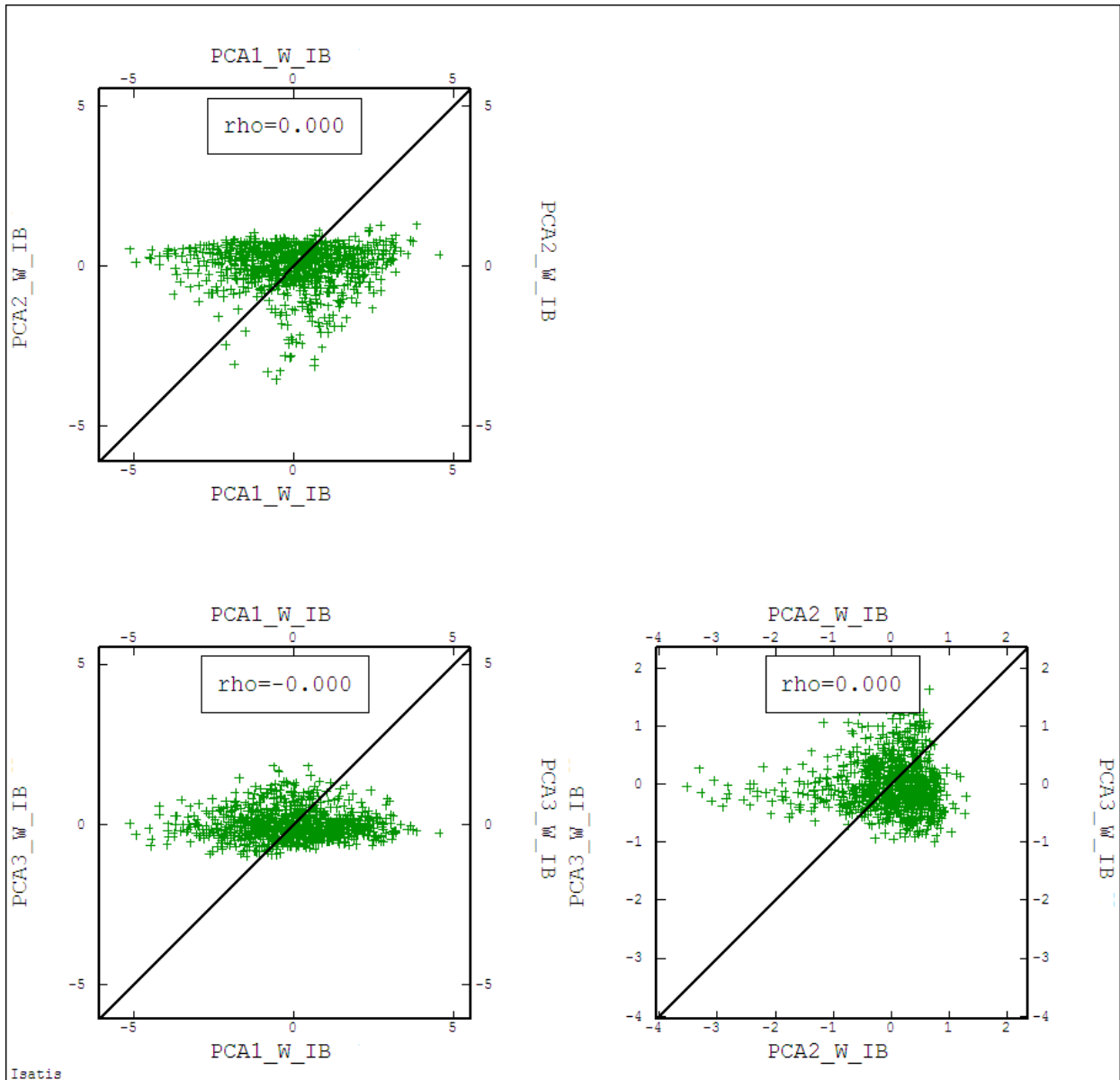
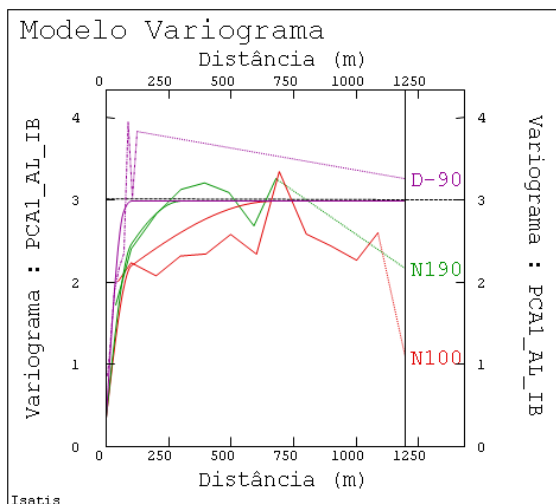


Figura D.21 - Diagramas de dispersão das componentes PCA obtidas para a estimativa das massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 2, 21 e 3, mostrando correlação nula para  $h=0$ .

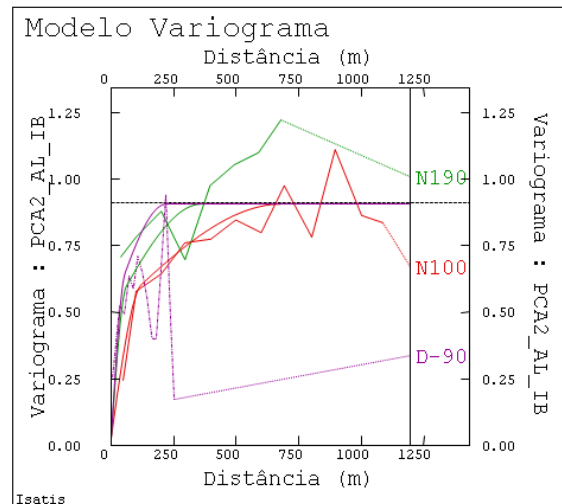
## D.5 Variogramas direcionais, experimentais e modelados das componentes PCA

Nas seguintes figuras, são apresentados os variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia  $N100^\circ$ ,  $N190^\circ$  e  $D-90^\circ$ , experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA. Também, são apresentadas as Equações dos variogramas respectivos.

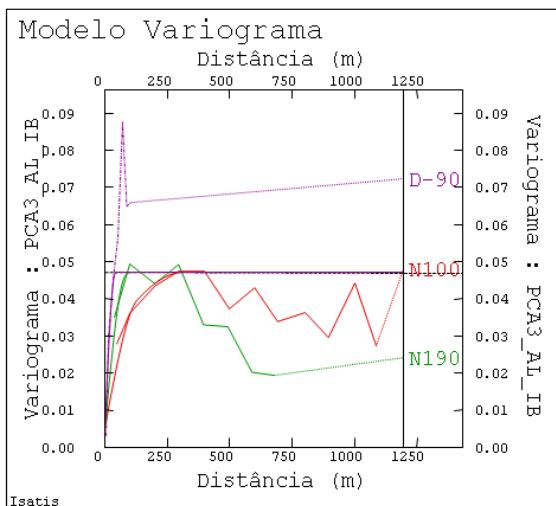
PCA1\_AL\_IB



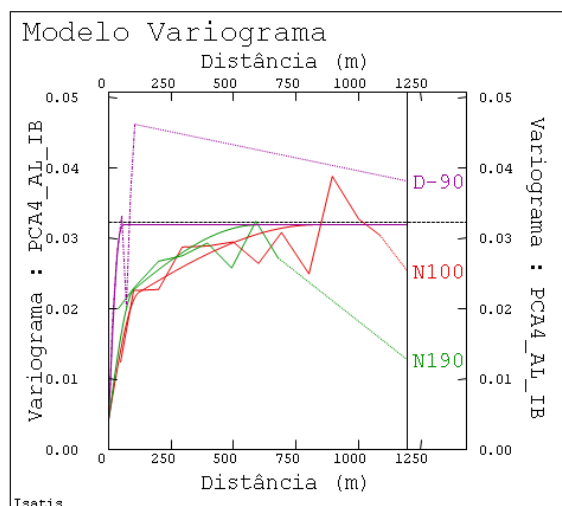
PCA2\_AL\_IB



PCA3\_AL\_IB



PCA4\_AL\_IB



$$\gamma_{PCA1\_AL\_IB} = 0,36 + 1,62 \cdot Sph\left(\frac{100m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{70m}{D-90^\circ}\right) + 1,01 \cdot Sph\left(\frac{670m}{N100^\circ} \frac{300m}{N190^\circ} \frac{100m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA2\_AL\_IB} = 0,03 + 0,47 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{60m}{N190^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right) + 0,41 \cdot Sph\left(\frac{680m}{N100^\circ} \frac{360m}{N190^\circ} \frac{220m}{D-90^\circ}\right)$$

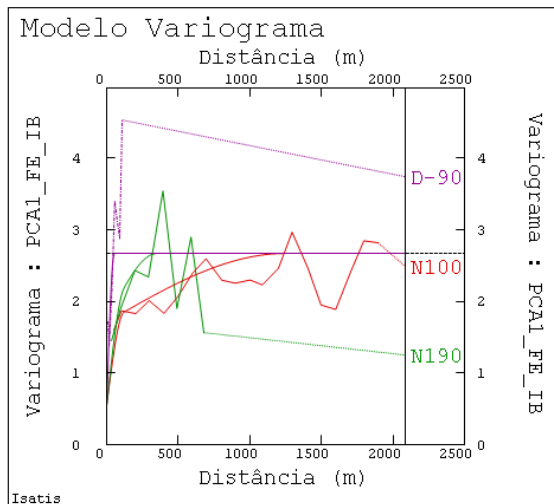
$$\gamma_{PCA3\_AL\_IB} = 0,01 + 0,02 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N100^\circ} \frac{80m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) + 0,02 \cdot Sph\left(\frac{310m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA4\_AL\_IB} = 0,004 + 0,02 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right) + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{830m}{N100^\circ} \frac{600m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

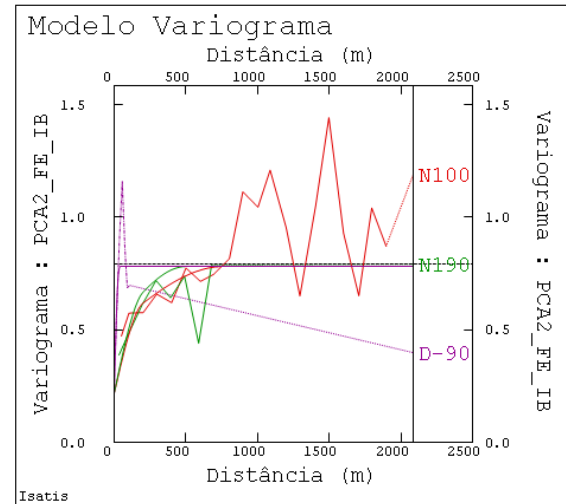
Figura D.22 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da descorrelação dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.



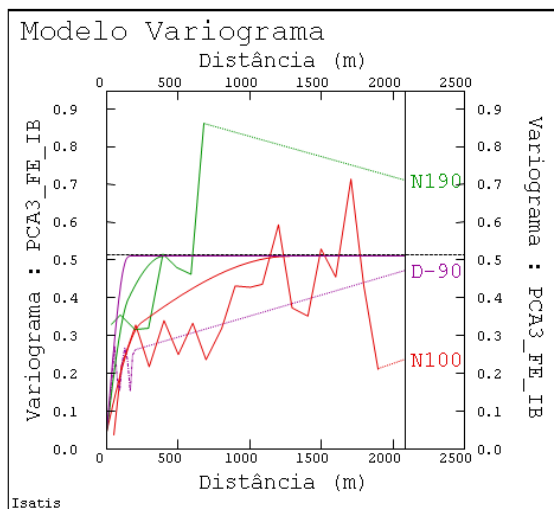
PCA1\_FE\_IB



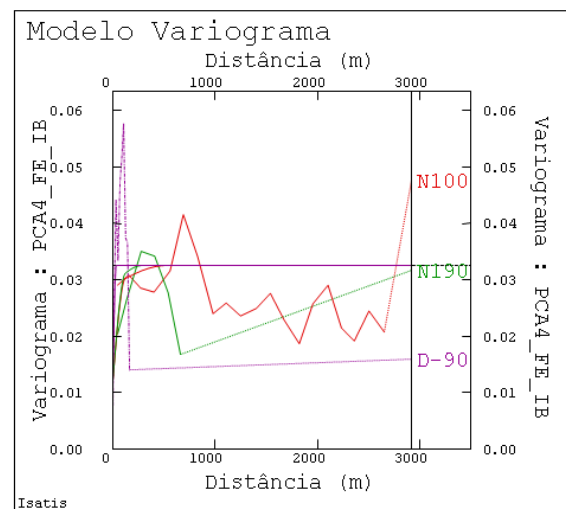
PCA2\_FE\_IB



PCA3\_FE\_IB



PCA4\_FE\_IB



$$\gamma_{PCA1\_FE\_IB} = 0,56 + 1,15 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) + 0,96 \cdot Sph\left(\frac{1240m}{N100^\circ} \frac{350m}{N190^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right)$$

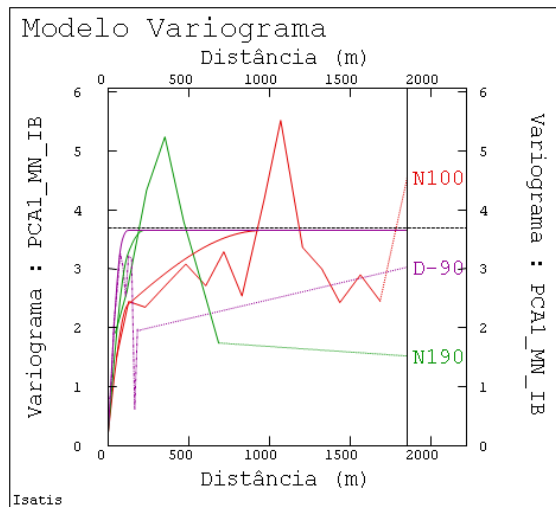
$$\gamma_{PCA2\_FE\_IB} = 0,22 + 0,30 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \frac{200m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right) + 0,27 \cdot Sph\left(\frac{760m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_FE\_IB} = 0,05 + 0,22 \cdot Sph\left(\frac{240m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{140m}{D-90^\circ}\right) + 0,24 \cdot Sph\left(\frac{1280m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{160m}{D-90^\circ}\right)$$

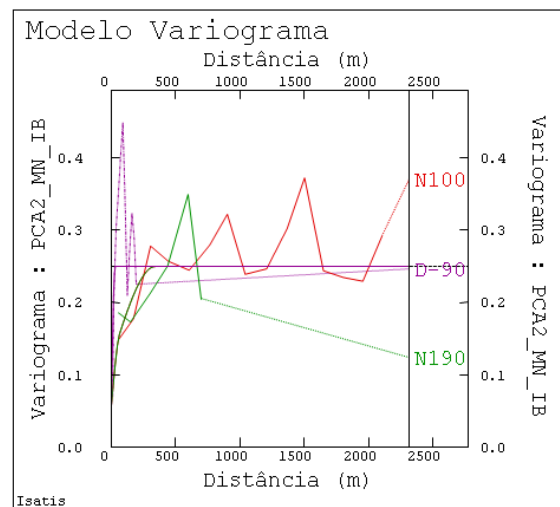
$$\gamma_{PCA4\_FE\_IB} = 0,01 + 0,02 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right) + 0,004 \cdot Sph\left(\frac{515m}{N100^\circ} \frac{280m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura D.23 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da descortelagem dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

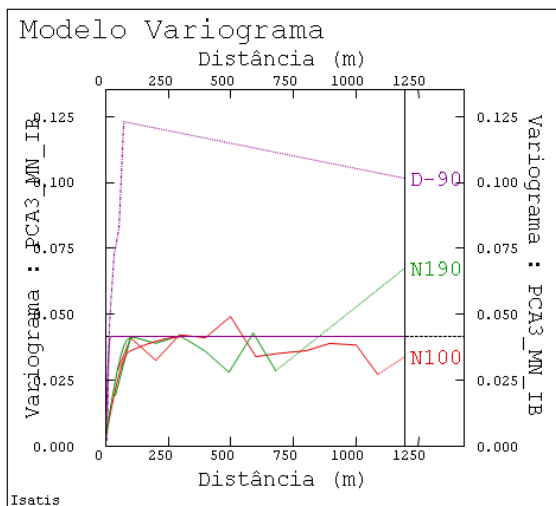
PCA1\_MN\_IB



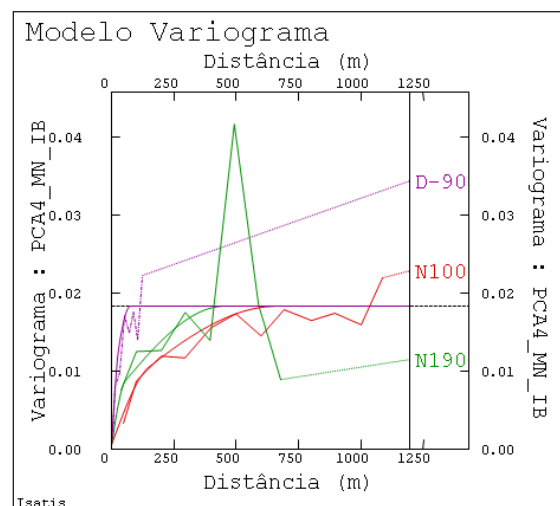
PCA2\_MN\_IB



PCA3\_MN\_IB



PCA4\_MN\_IB



$$\gamma_{PCA1\_MN\_IB} = 0,23 + 1,87 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{85m}{D-90^\circ}\right) + 1,56 \cdot Sph\left(\frac{950m}{N100^\circ} \frac{220m}{N190^\circ} \frac{120m}{D-90^\circ}\right)$$

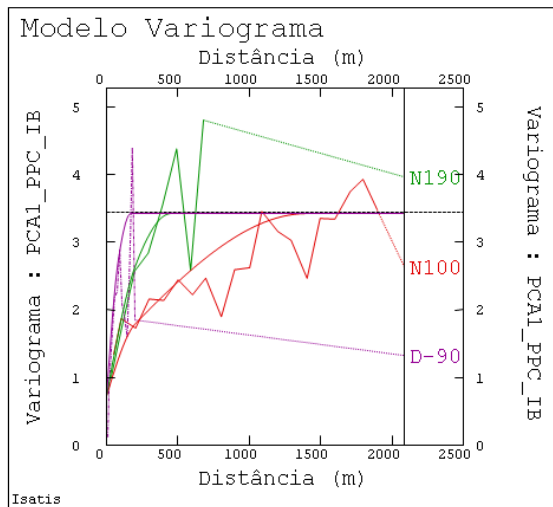
$$\gamma_{PCA2\_MN\_IB} = 0,06 + 0,06 \cdot Sph\left(\frac{65m}{N100^\circ} \frac{65m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + 0,13 \cdot Sph\left(\frac{340m}{N100^\circ} \frac{340m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_MN\_IB} = 0,004 + 0,03 \cdot Sph\left(\frac{95m}{N100^\circ} \frac{90m}{N190^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{320m}{N100^\circ} \frac{120m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right)$$

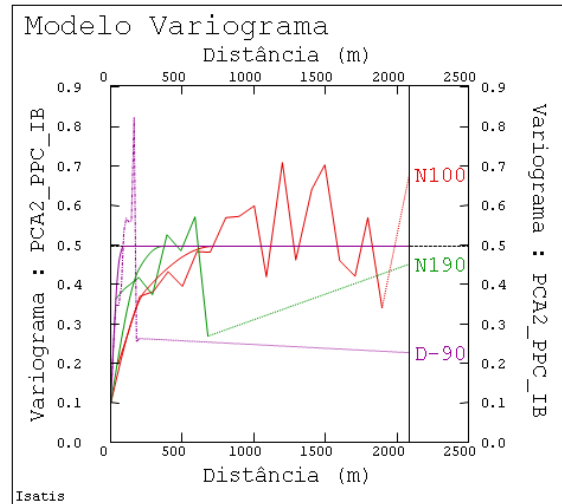
$$\gamma_{PCA4\_MN\_IB} = 0,001 + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{150m}{N100^\circ} \frac{55m}{N190^\circ} \frac{30m}{D-90^\circ}\right) + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{660m}{N100^\circ} \frac{450m}{N190^\circ} \frac{75m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura D.24 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da decorrelação dos teores de manganês nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

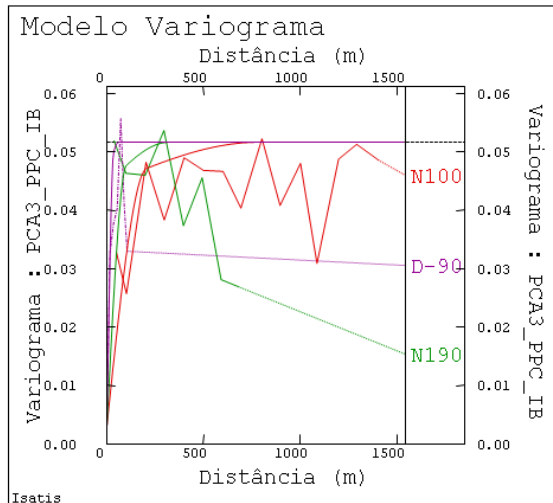
PCA1\_PPC\_IB



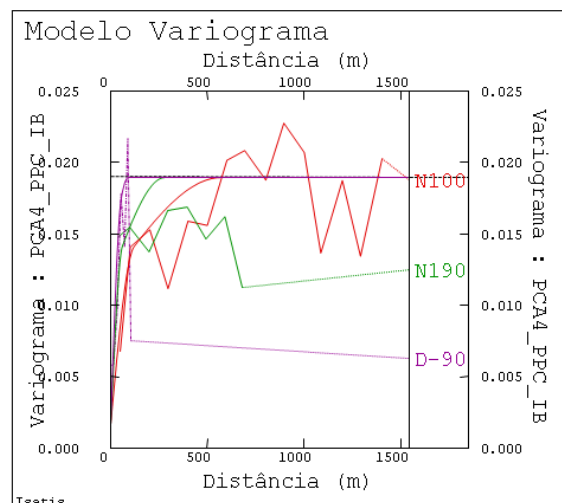
PCA2\_PPC\_IB



PCA3\_PPC\_IB



PCA4\_PPC\_IB



$$\gamma_{PCA1\_PPC\_IB} = 0,73 + 0,62 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \frac{200m}{N190^\circ} \frac{80m}{D-90^\circ}\right) + 2,07 \cdot Sph\left(\frac{140m}{N100^\circ} \frac{450m}{N190^\circ} \frac{170m}{D-90^\circ}\right)$$

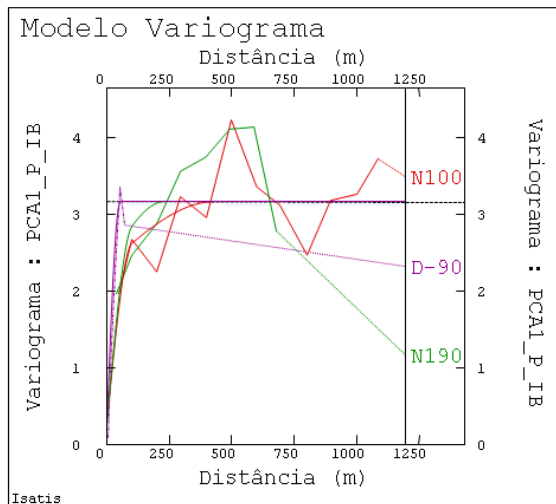
$$\gamma_{PCA2\_PPC\_IB} = 0,10 + 0,18 \cdot Sph\left(\frac{240m}{N100^\circ} \frac{200m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) + 0,22 \cdot Sph\left(\frac{715m}{N100^\circ} \frac{360m}{N190^\circ} \frac{90m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_PPC\_IB} = 0,003 + 0,04 \cdot Sph\left(\frac{205m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right) + 0,08 \cdot Sph\left(\frac{780m}{N100^\circ} \frac{320m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

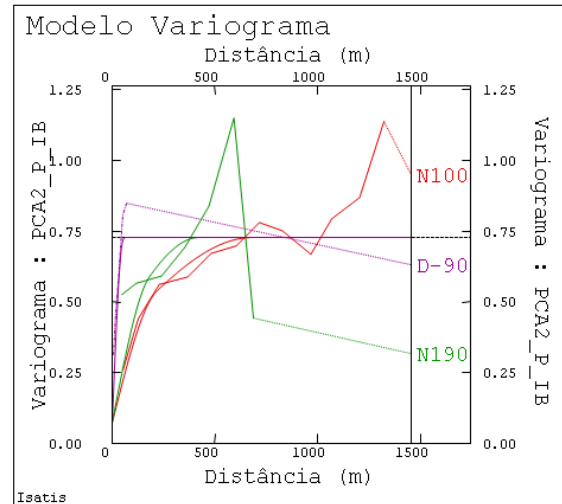
$$\gamma_{PCA4\_PPC\_IB} = 0,002 + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{120m}{N100^\circ} \frac{60m}{N190^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right) + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{570m}{N100^\circ} \frac{280m}{N190^\circ} \frac{90m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura D.25 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da descorrelação dos teores das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

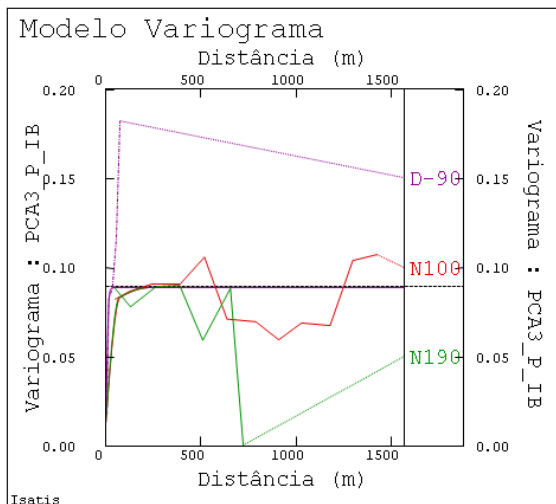
PCA1\_P\_IB



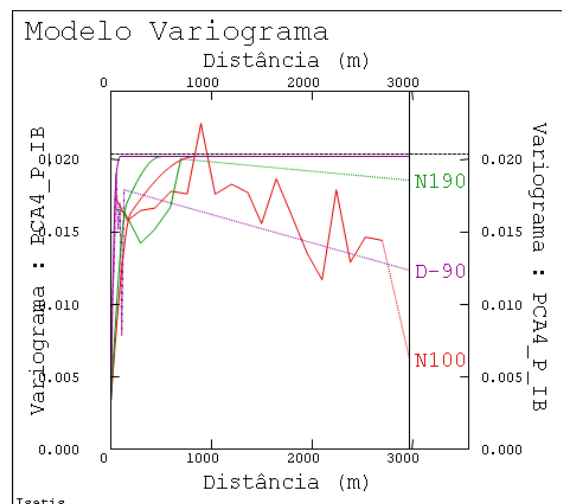
PCA2\_P\_IB



PCA3\_P\_IB



PCA4\_P\_IB



$$\gamma_{PCA1\_P\_IB} = 0,28 + 2,05 \cdot Sph\left(\frac{100m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) + 0,83 \cdot Sph\left(\frac{430m}{N100^\circ} \frac{230m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

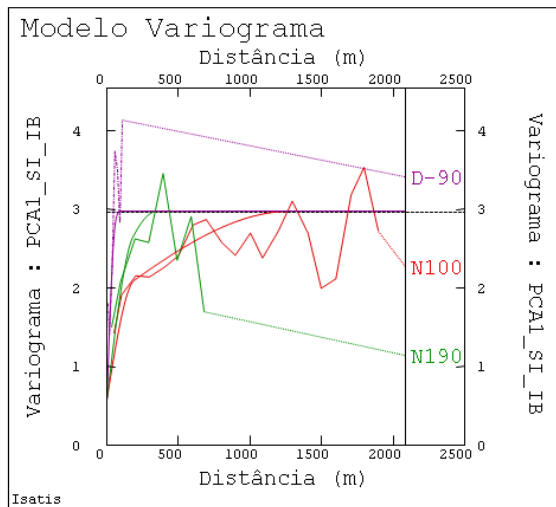
$$\gamma_{PCA2\_P\_IB} = 0,07 + 0,30 \cdot Sph\left(\frac{215m}{N100^\circ} \frac{180m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) + 0,35 \cdot Sph\left(\frac{680m}{N100^\circ} \frac{420m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_P\_IB} = 0,01 + 0,07 \cdot Sph\left(\frac{75m}{N100^\circ} \frac{70m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{230m}{N100^\circ} \frac{220m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right)$$

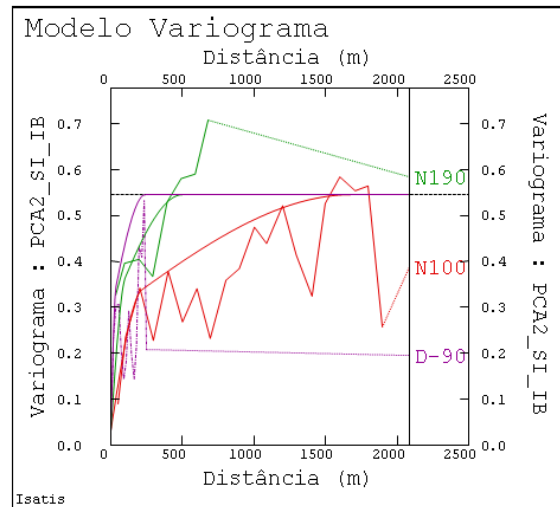
$$\gamma_{PCA4\_P\_IB} = 0,003 + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N100^\circ} \frac{160m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) + 0,01 \cdot Sph\left(\frac{840m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{90m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura D.26 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da descorrelação dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

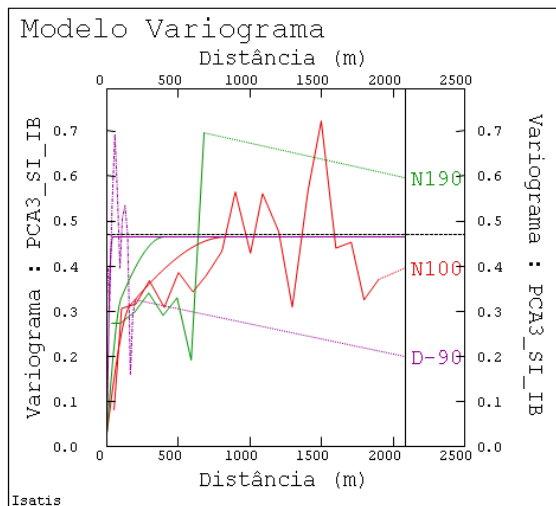
PCA1\_SI\_IB



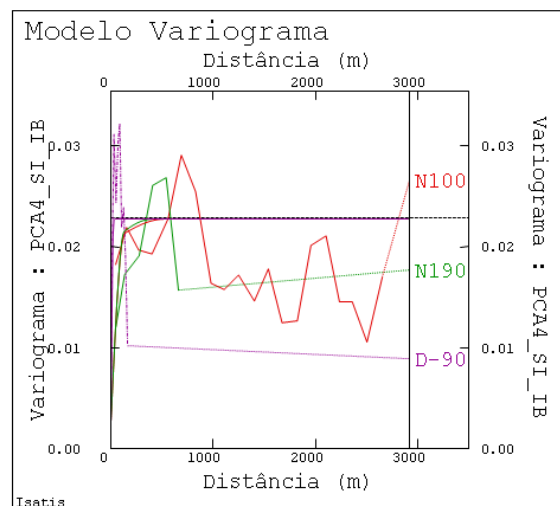
PCA2\_SI\_IB



PCA3\_SI\_IB



PCA4\_SI\_IB



$$\gamma_{PCA1\_SI\_IB} = 0,59 + 1,26 \cdot Sph\left(\frac{190m}{N100^\circ} \frac{180m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) + 1,13 \cdot Sph\left(\frac{1280m}{N100^\circ} \frac{350m}{N190^\circ} \frac{85m}{D-90^\circ}\right)$$

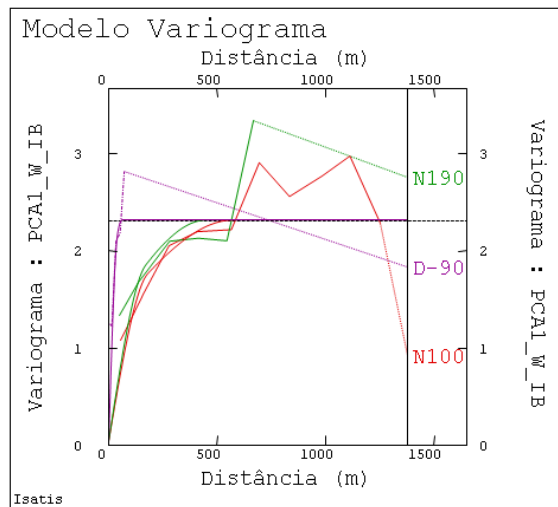
$$\gamma_{PCA2\_SI\_IB} = 0,03 + 0,26 \cdot Sph\left(\frac{215m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right) + 0,26 \cdot Sph\left(\frac{1680m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{240m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_SI\_IB} = 0,03 + 0,22 \cdot Sph\left(\frac{160m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{27m}{D-90^\circ}\right) + 0,21 \cdot Sph\left(\frac{830m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right)$$

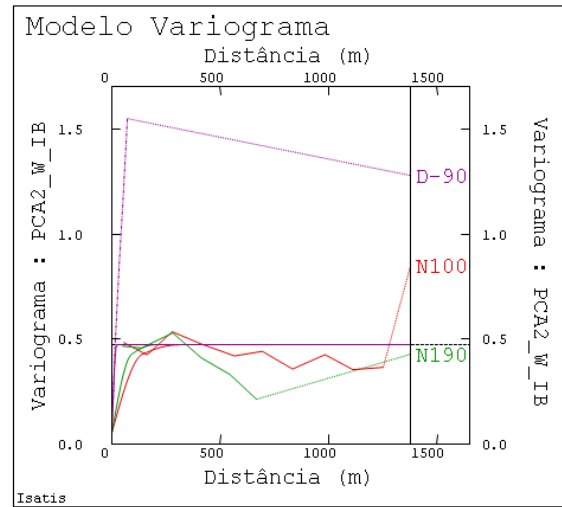
$$\gamma_{PCA4\_SI\_IB} = 0,003 + 0,02 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N100^\circ} \frac{130m}{N190^\circ} \frac{25m}{D-90^\circ}\right) + 0,002 \cdot Sph\left(\frac{520m}{N100^\circ} \frac{400m}{N190^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura D.27 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da descorrelação dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

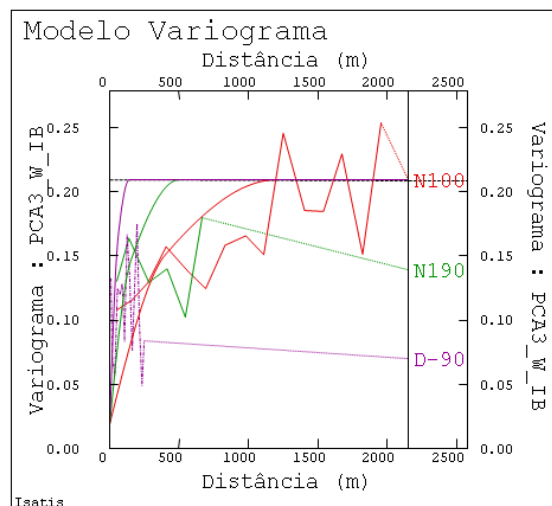
PCA1\_W\_IB



PCA2\_W\_IB



PCA3\_W\_IB



$$\gamma_{PCA1\_W\_IB} = 0,05 + 1,25 \cdot Sph\left(\frac{180m}{N100^\circ} \frac{170m}{N190^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) + 1,01 \cdot Sph\left(\frac{575m}{N100^\circ} \frac{450m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA2\_W\_IB} = 0,06 + 0,29 \cdot Sph\left(\frac{140m}{N100^\circ} \frac{90m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + 0,123 \cdot Sph\left(\frac{310m}{N100^\circ} \frac{200m}{N190^\circ} \frac{25m}{D-90^\circ}\right)$$

$$\gamma_{PCA3\_W\_IB} = 0,02 + 0,08 \cdot Sph\left(\frac{400m}{N100^\circ} \frac{150m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) + 0,11 \cdot Sph\left(\frac{1200m}{N100^\circ} \frac{500m}{N190^\circ} \frac{140m}{D-90^\circ}\right)$$

Figura D.28 - Variogramas direcionais, nas principais direções de anisotropia N100°, N190° e D-90°, experimentais e modelados de forma independente para cada componente PCA obtida da descorrelação das massas das partições granulométricas correspondentes às faixas 2, 21 e 3, conjuntamente com as Equações dos variogramas respectivos.

## **Apêndice E**

### **Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores MAF e por Krigagem Ordinária das Componentes Principais PCA**

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes aos diagramas de dispersão entre as estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos (MAF) e as obtidas por Krigagem Ordinária das Componentes Principais (PCA).

#### **E.1 Diagramas de dispersão MAF vs PCA**

No contexto da análise parcial dos resultados correspondentes ao Capítulo 4, onde são aplicadas as metodologias de decomposição em fatores MAF e em componentes principais (PCA) para um posterior tratamento geoestatístico independente dos mesmos, são apresentados os diagramas de dispersão onde são colocados os teores obtidos em cada bloco, por cada uma das metodologias.

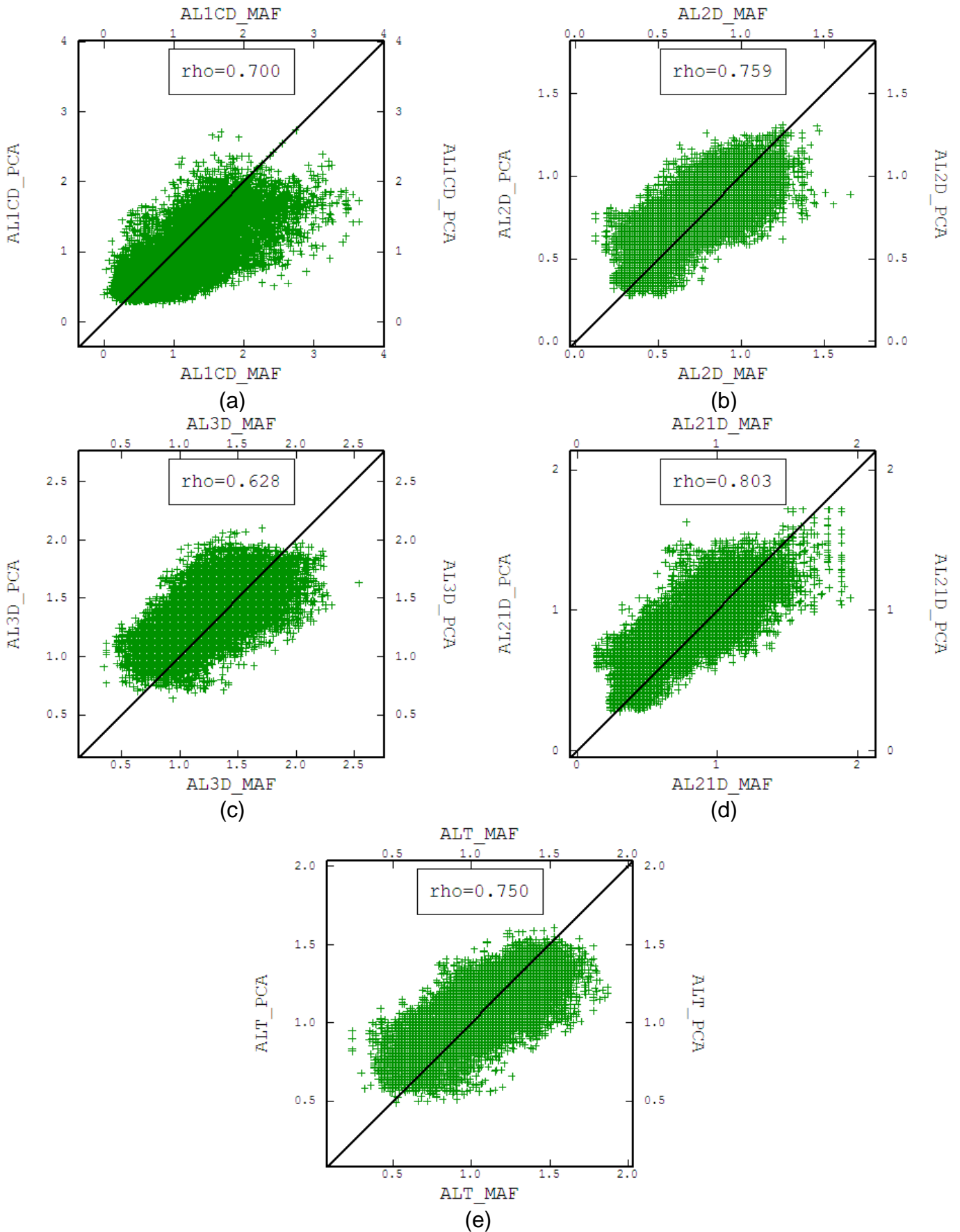


Figura E.1 – Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para os teores de alumina nas faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c), 21 (d) e global (e).



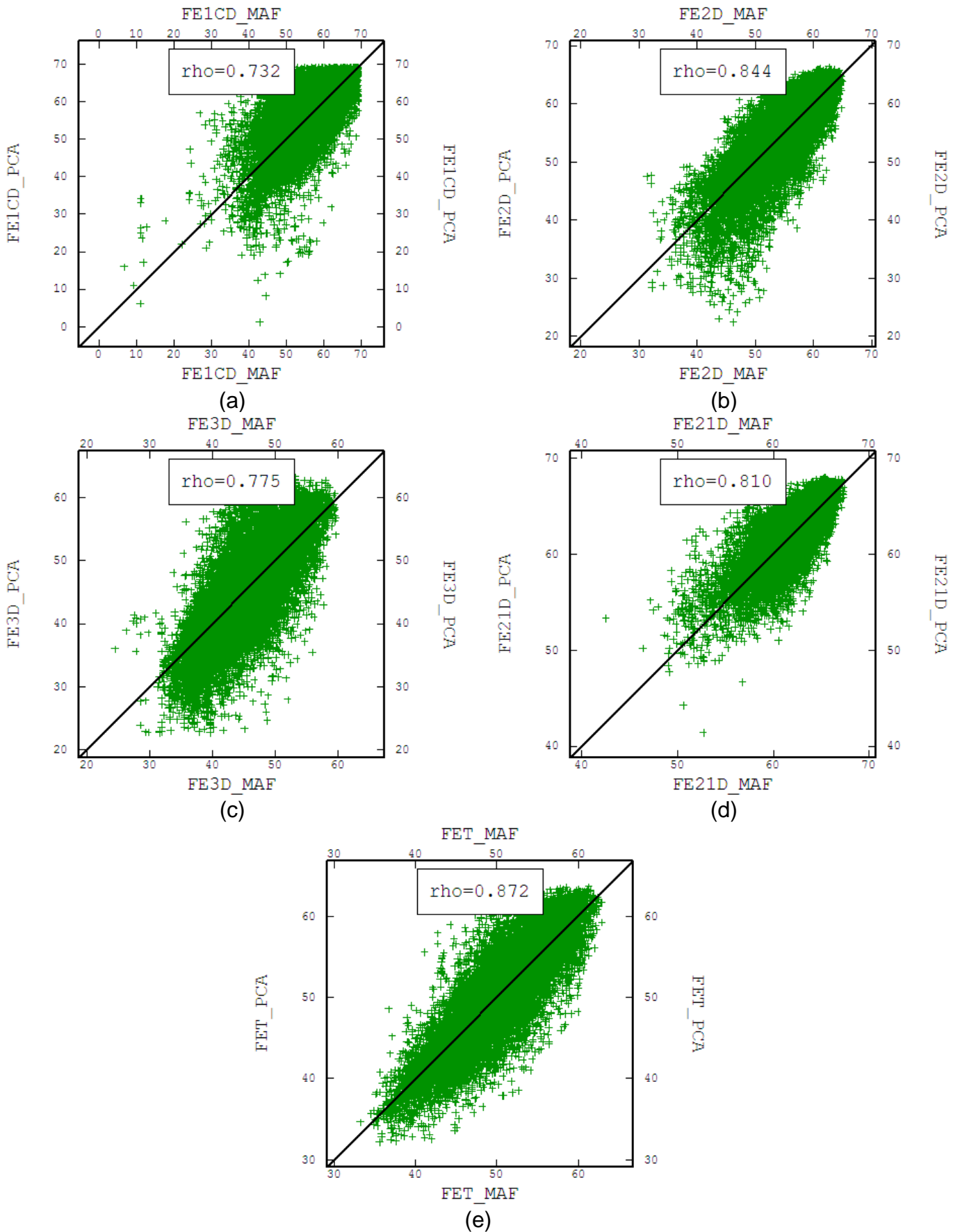


Figura E.2 - Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para os teores de ferro nas faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c), 21 (d) e global (e).

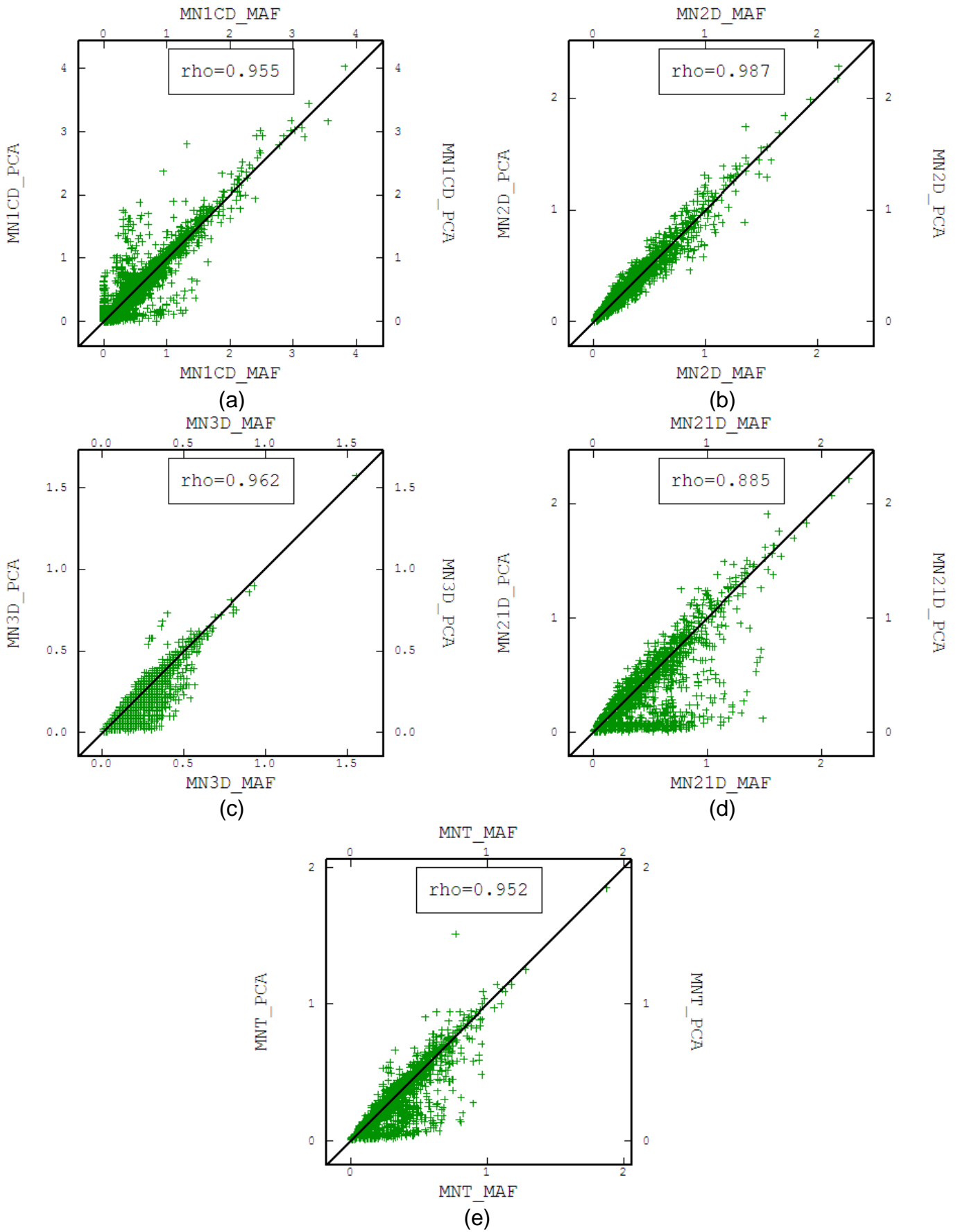


Figura E.3 - Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para os teores de manganês nas faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c), 21 (d) e global (e).

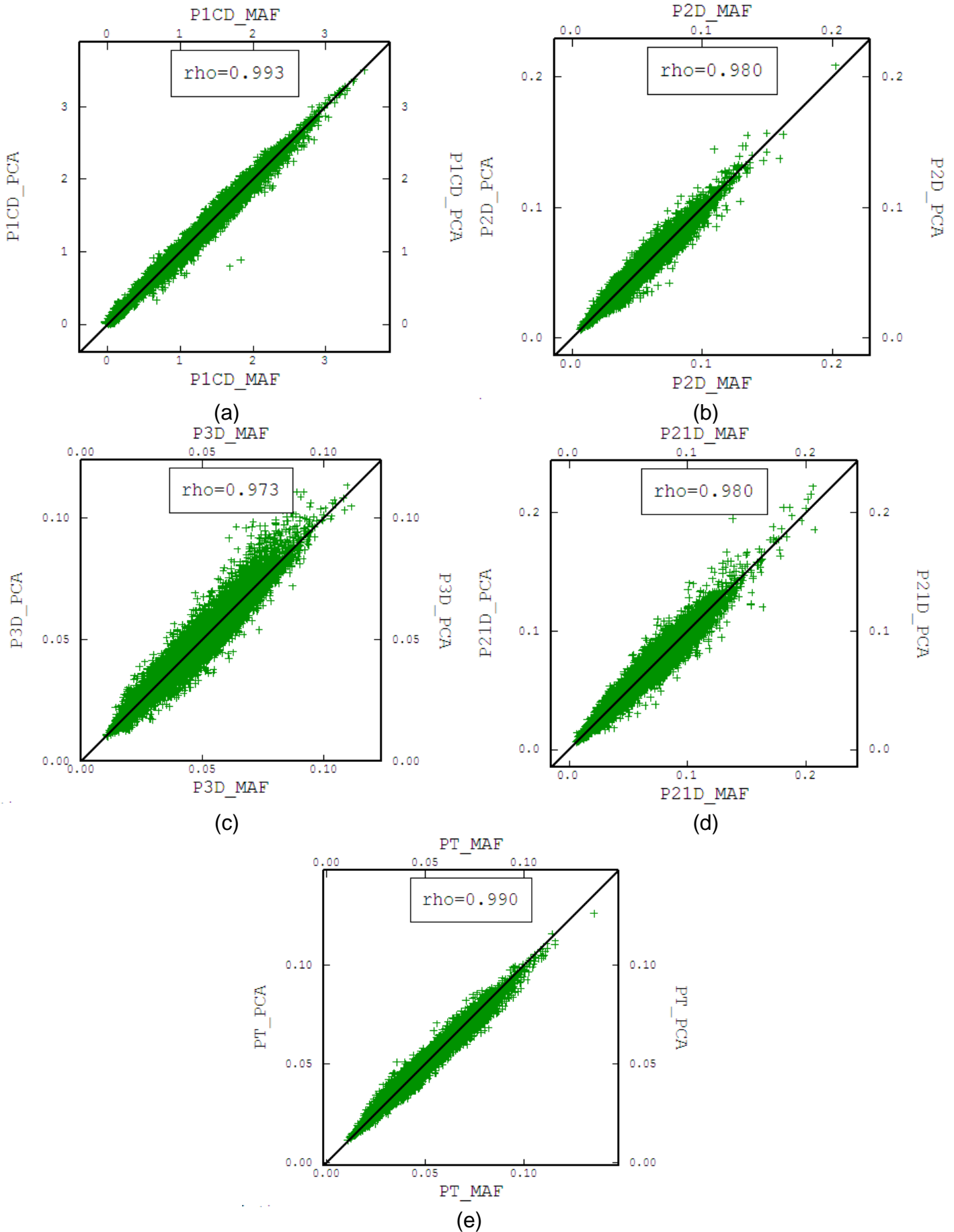


Figura E.4 - Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para os teores de fósforo nas faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c), 21 (d) e global (e).

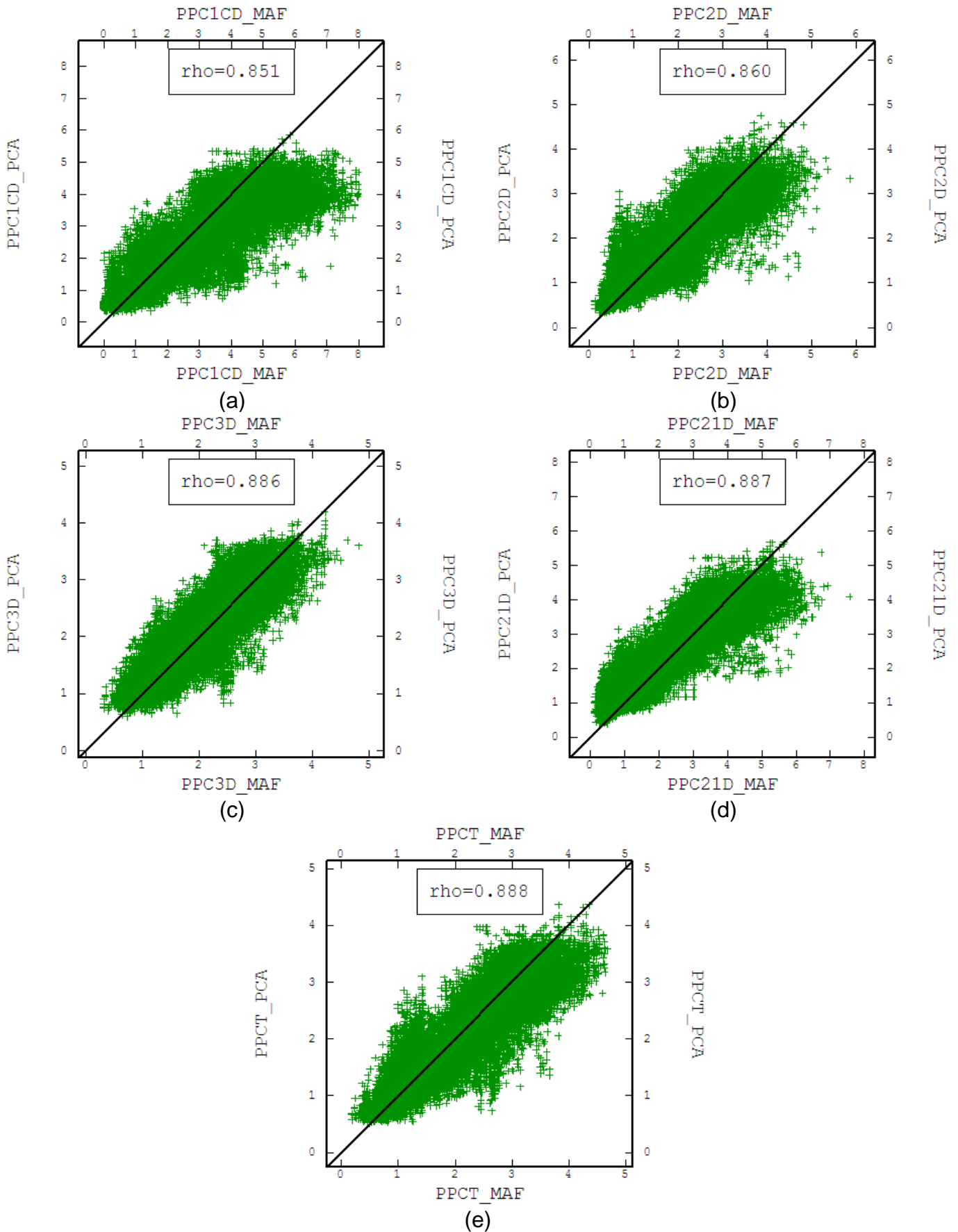


Figura E.5 - Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para os teores das perdas por calcinação nas faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c), 21 (d) e global (e).

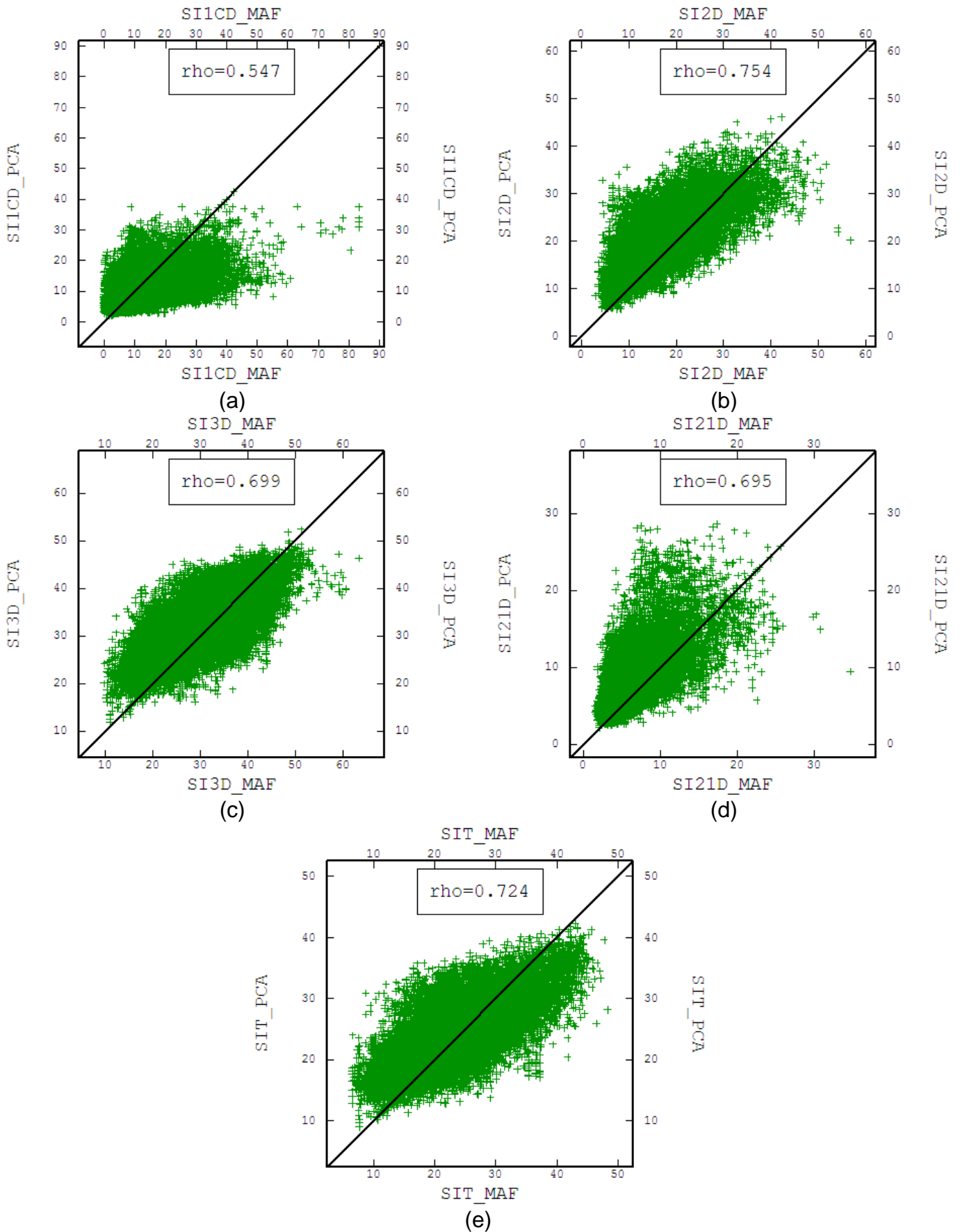


Figura E.6 - Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para os teores de sílica nas faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c), 21 (d) e global (e).

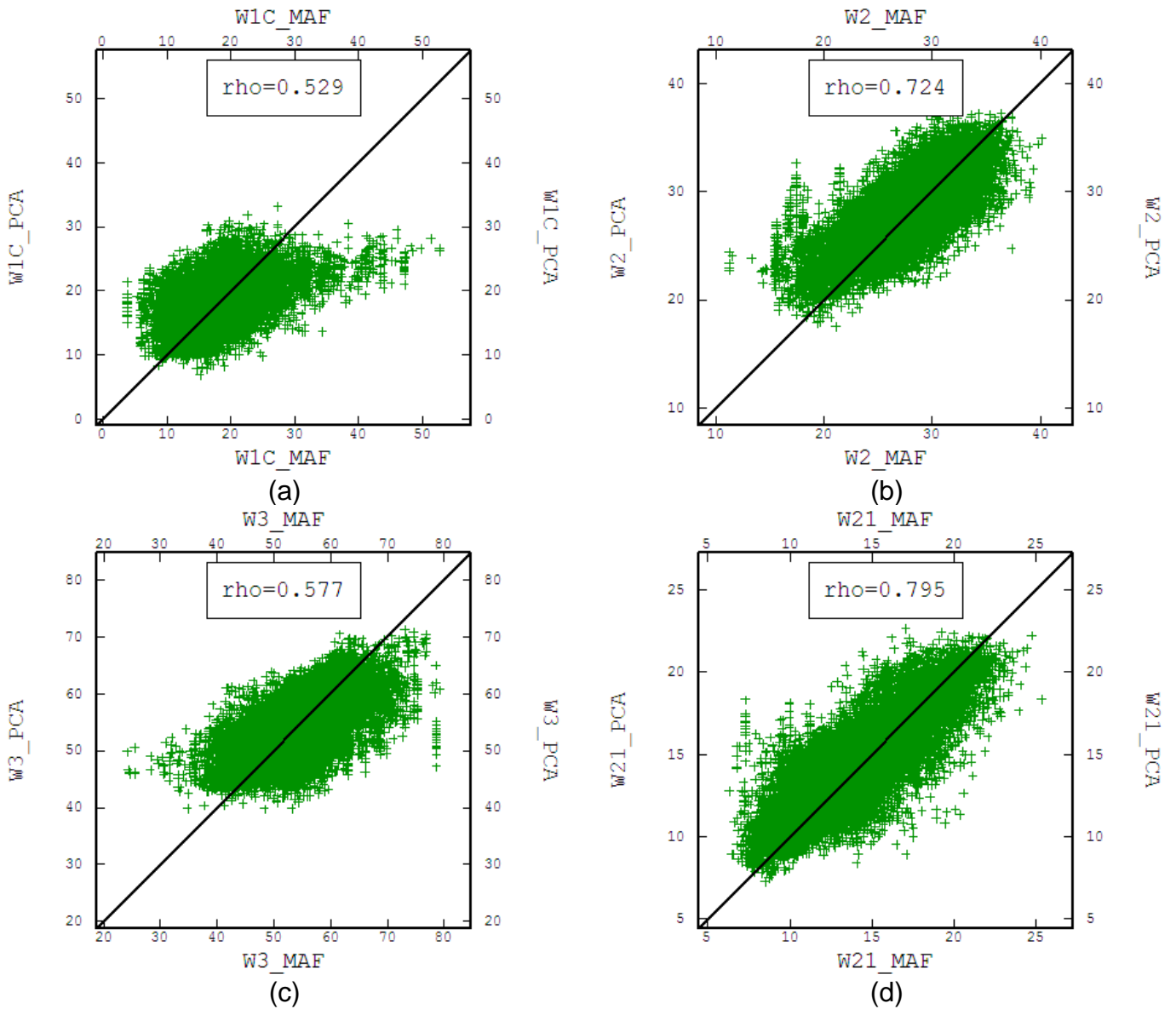


Figura E.7 - Diagramas de dispersão das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF vs as estimativas obtidas por krigagem ordinária das componentes principais PCA para massas das frações granulométricas correspondentes às faixas 1 (calculado, letra C) (a), 2 (b), 3 (c) e 21 (d).

## Apêndice F

### Histogramas e Modelos Lineares de Corregionalização das Razões-Logarítmicas Aditivas (alr)

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes aos histogramas e modelos lineares de corregionalização das razões-logarítmicas aditivas (alr) apresentadas no Capítulo 5.

#### F.1 Histogramas das Razões-Logarítmicas Aditivas (alr)

A seguir são apresentados os histogramas das razões-logarítmicas aditivas, obtidas para cada etapa das rotas de cálculo apresentadas nas Figuras 5.1 e 5.2.

##### F.1.1 Razões-logarítmicas aditivas correspondentes às massas e teores nas faixas 1, 2, 3 e global

A partir das relações apresentadas no Capítulo 5, item 5.3.1, determinam-se as transformações alr expressas na Equação (5.15),  $Y_{1BW}(u)$  é  $Y_{2BW}(u)$ , para as massas das partições 1, 2 e 3 ( $W_1(u)$ ,  $W_2(u)$  e  $W_3(u)$ ).

$$Y_{1BW}(u) = \ln\left(\frac{W_1(u)}{W_3(u)}\right)$$

$$Y_{2BW}(u) = \ln\left(\frac{W_2(u)}{W_3(u)}\right)$$
(5.15)

Os histogramas correspondentes são apresentados na Figura F.1.

No caso das estimativas dos teores de ferro, as transformações alr foram apresentadas no item 5.3.2, determinadas pelo conjunto de Equações (5.21).

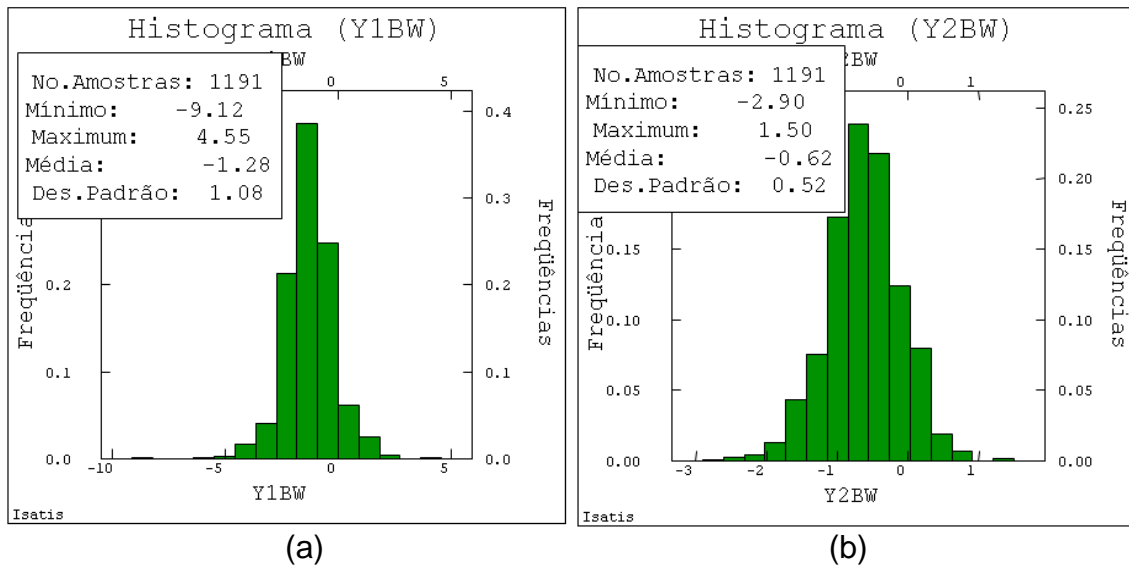


Figura F.1 – Histogramas das razões-logarítmicas (a)  $Y1BW(u)$  e (b)  $Y2BW(u)$ .

$$\begin{aligned}
 Y_{1BFE}(u) &= \ln \left( \frac{(100 \cdot FE_T(u))}{(FE_3(u))} \right) \\
 Y_{2BFE}(u) &= \ln \left( \frac{(FE_1(u))}{(FE_3(u))} \right) \\
 Y_{3BFE}(u) &= \ln \left( \frac{(FE_2(u))}{(FE_3(u))} \right)
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

Os histogramas respectivos são apresentados na Figura F.2.

Na rota de cálculo da Figura 5.1, o seguinte passo é dado pela determinação das razões-logarítmicas aditivas necessárias para determinar os teores de alumina, manganês, fósforo, perdas por calcinação e sílica nas faixas 1, 2, 3 e global. As transformações vêm dadas pelas Equações (5.27) a (5.31) que são colocadas novamente a continuação:

Transformação alr para a alumina:

$$\begin{aligned}
 Y_{1BAL}(u) &= \ln \left( \frac{(AL_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / AL_T(u)}{(AL_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / AL_T(u)} \right) \\
 Y_{2BAL}(u) &= \ln \left( \frac{(AL_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / AL_T(u)}{(AL_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / AL_T(u)} \right)
 \end{aligned} \tag{5.28}$$



Transformação alr para o manganês:

$$Y_{1BMN}(u) = \ln \left( \frac{(MN_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / MN_T(u)}{(MN_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / MN_T(u)} \right)$$

$$Y_{2BMN}(u) = \ln \left( \frac{(MN_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / MN_T(u)}{(MN_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / MN_T(u)} \right)$$
(5.28)

Transformação alr para o fósforo:

$$Y_{1BP}(u) = \ln \left( \frac{(P_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / P_T(u)}{(P_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / P_T(u)} \right)$$

$$Y_{2BP}(u) = \ln \left( \frac{(P_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / P_T(u)}{(P_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / P_T(u)} \right)$$
(5.29)

Transformação alr para as perdas por calcinação:

$$Y_{1BPPC}(u) = \ln \left( \frac{(PPC_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / PPC_T(u)}{(PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / PPC_T(u)} \right)$$

$$Y_{2BPPC}(u) = \ln \left( \frac{(PPC_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / PPC_T(u)}{(PPC_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / PPC_T(u)} \right)$$
(5.30)

Transformação alr para sílica:

$$Y_{1BSI}(u) = \ln \left( \frac{(SI_{1D}(u) \cdot W_1(u)) / SI_T(u)}{(SI_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / SI_T(u)} \right)$$

$$Y_{2BSI}(u) = \ln \left( \frac{(SI_{2D}(u) \cdot W_2(u)) / SI_T(u)}{(SI_{3D}(u) \cdot W_3(u)) / SI_T(u)} \right)$$
(5.31)

Os histogramas correspondentes são apresentados nas Figuras F.3 a F.7.

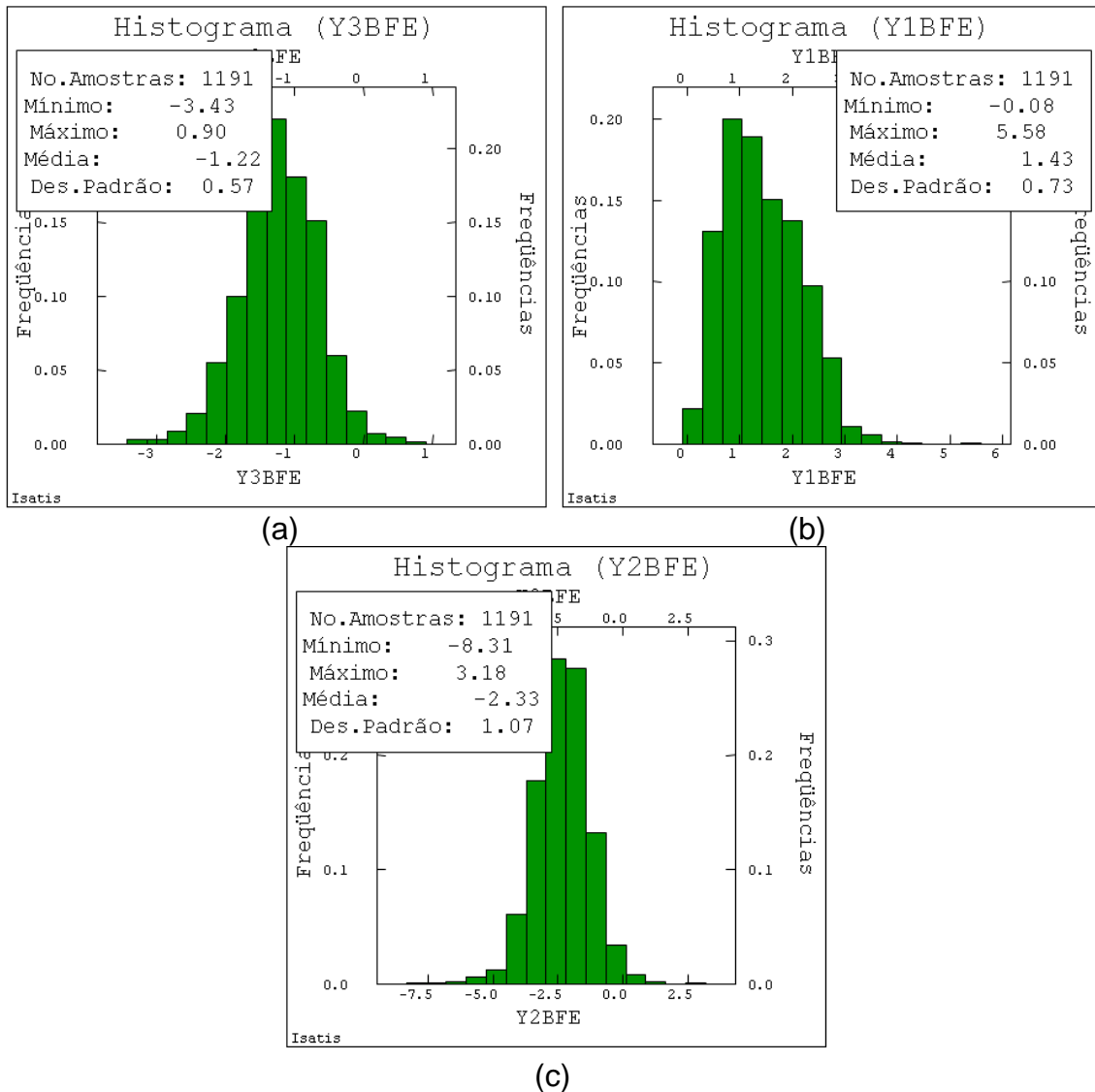


Figura F.2 – Histogramas das razões-logarítmicas (a) Y1BFE(u), (b) Y2BFE(u) e (c) Y3BFE(u).

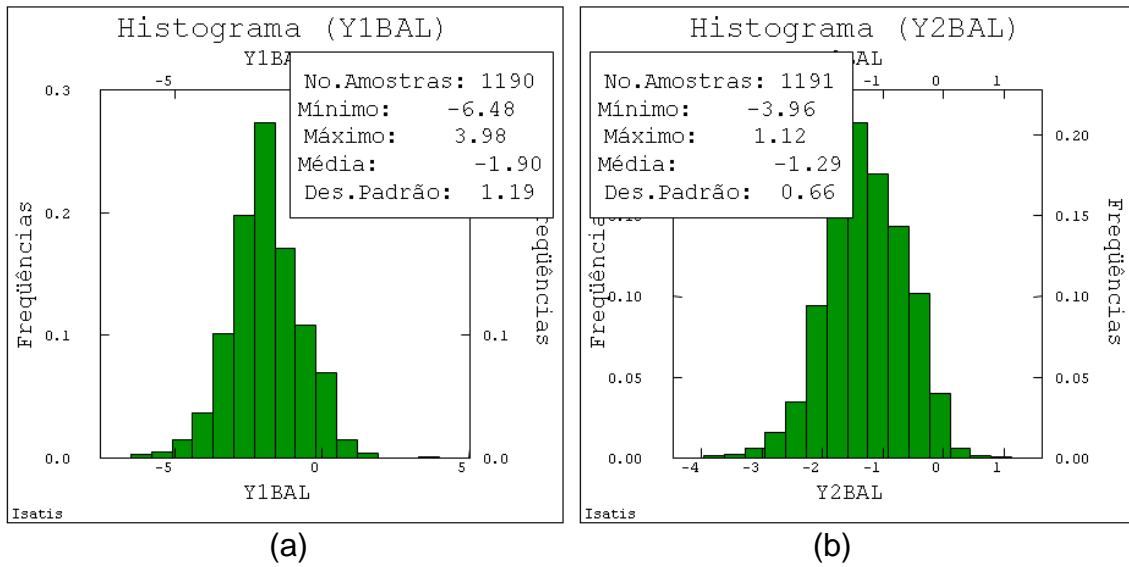


Figura F.3 - Histogramas das razões-logarítmicas (a)  $Y1BAL(u)$  e (b)  $Y2BAL(u)$ .

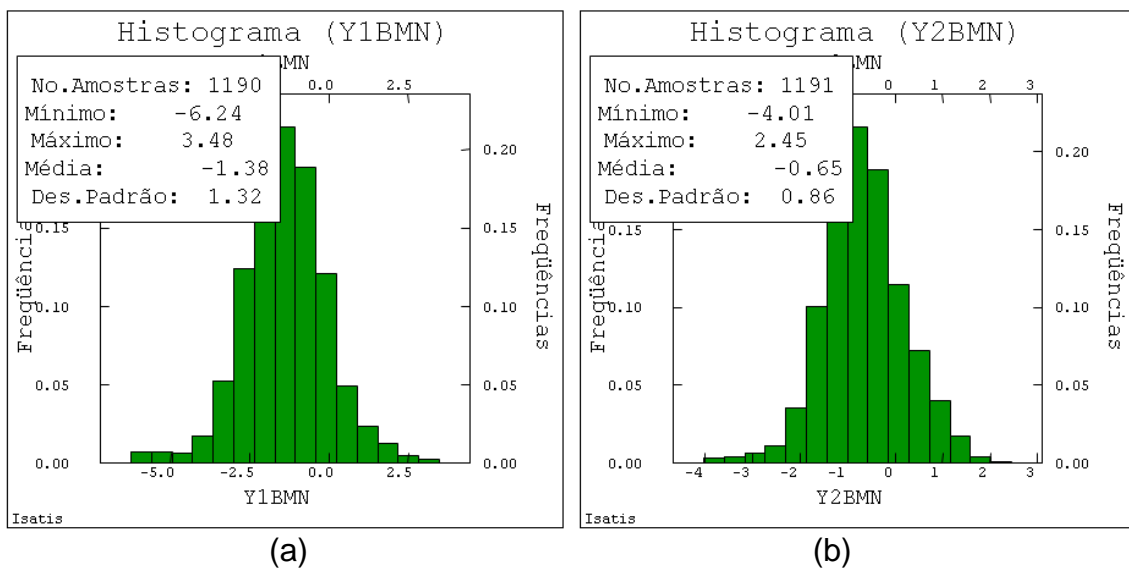


Figura F.4 - Histogramas das razões-logarítmicas (a)  $Y1BMN(u)$  e (b)  $Y2BMN(u)$ .

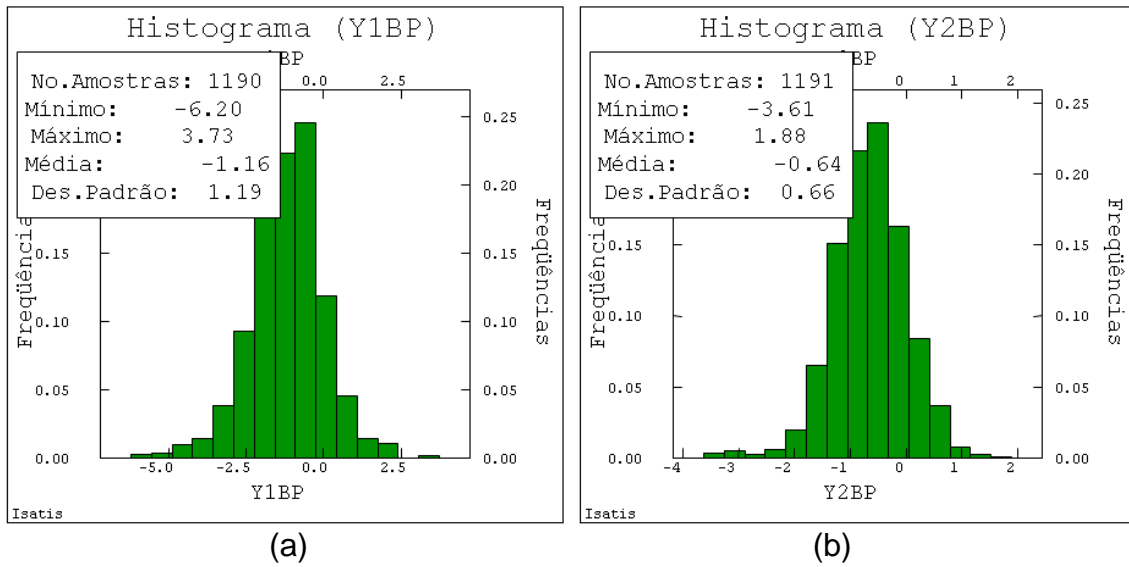


Figura F.5 - Histogramas das razões-logarítmicas (a) Y1BP(u) e (b) Y2BP(u).

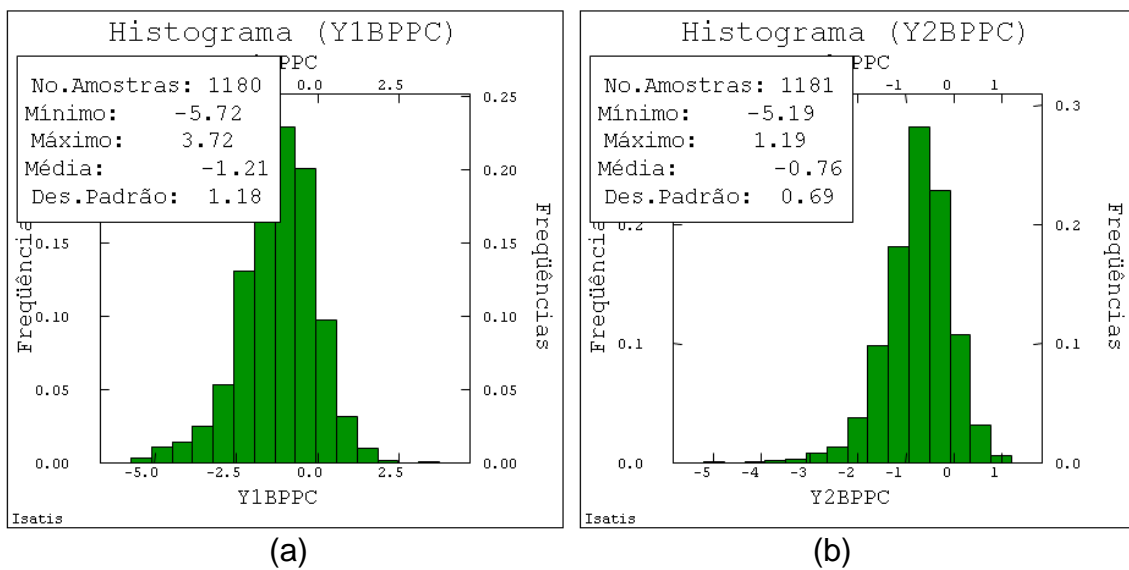


Figura F.6 - Histogramas das razões-logarítmicas (a) Y1BPPC(u) e (b) Y2BPPC(u).

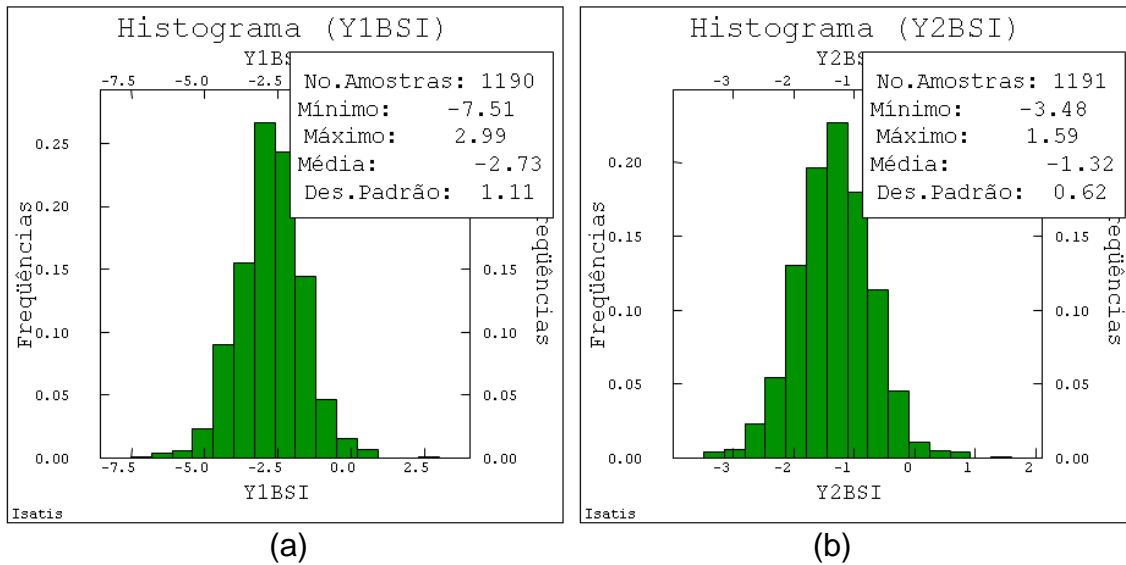


Figura F.7 - Histogramas das razões-logarítmicas (a) Y1BSI(u) e (b) Y2BSI(u).

Os histogramas correspondentes às razões-logarítmicas utilizadas para determinar os teores globais (Equação (5.52)) são apresentados na Figura F.8.

$$\begin{aligned}
 Y_{1EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot P_T(u) / 0,43638}{FE_T(u)} \right) \\
 Y_{2EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot MN_T(u) / 0,63193}{FE_T(u)} \right) \\
 Y_{3EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot AL_T(u)}{FE_T(u)} \right) \\
 Y_{4EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot PPC_T(u)}{FE_T(u)} \right) \\
 Y_{5EQT}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot SI_T(u)}{FE_T(u)} \right)
 \end{aligned} \tag{5.52}$$

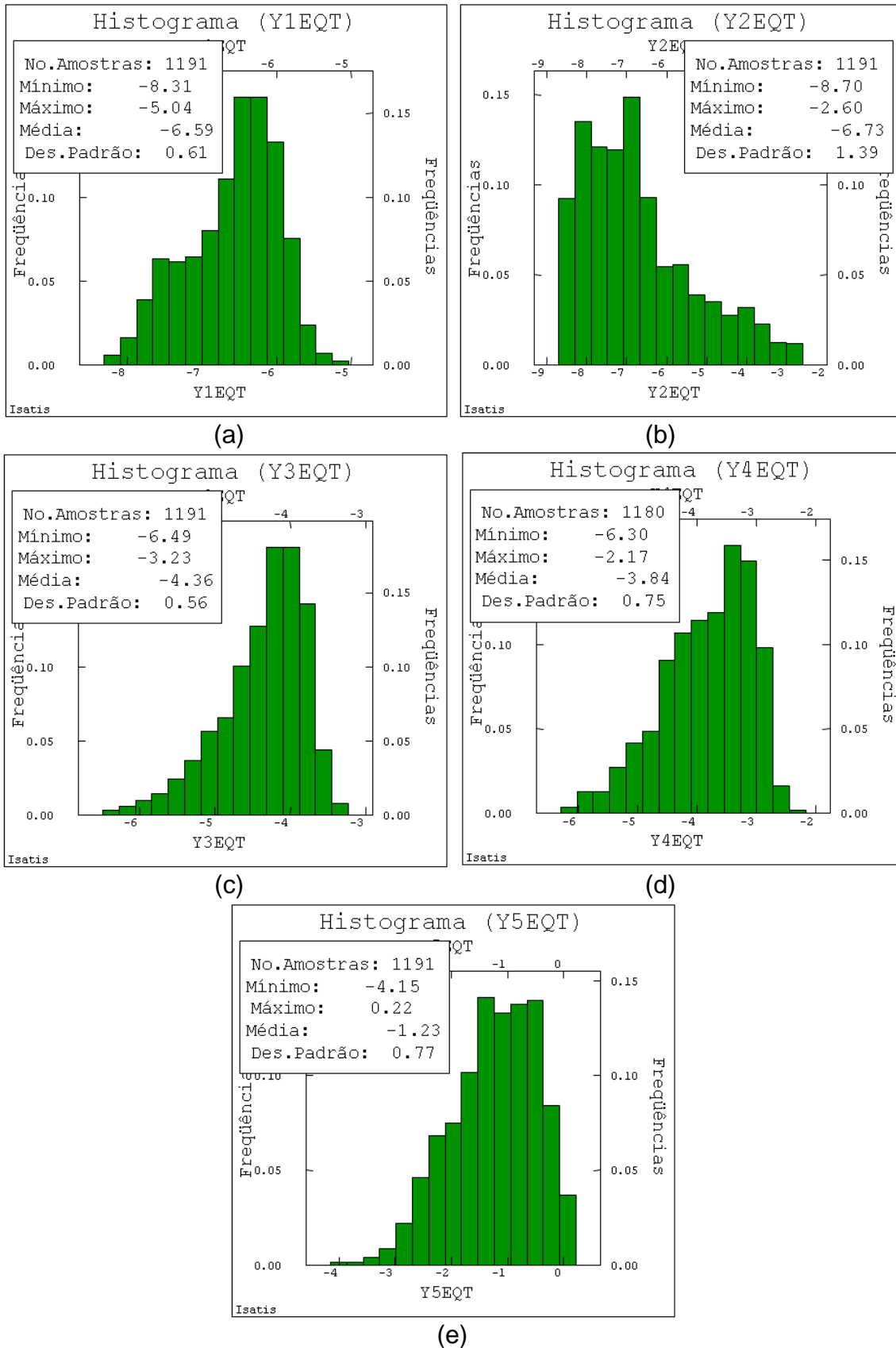


Figura F.8 - Histogramas das razões-logarítmicas (a) Y1EQT(u), (b) Y2EQT(u), (c) Y3EQT(u), (d) Y4EQT(u) e (e) Y5EQT(u).

### F.1.2 Razões-logarítmicas aditivas correspondentes à estimativa das massas e teores nas faixas 21 e 22

No Capítulo 5, item 5.4.1 são apresentadas as transformações alr para a estimativa das massas das partições granulométricas 21 e 22,  $W_{21}(u)$  e  $W_{22}(u)$  na Equação (5.60).

$$\begin{aligned}
 Y_{BW21\_1}(u) &= \ln\left(\frac{W_1(u)}{W_3(u)}\right) \\
 Y_{BW21\_2}(u) &= \ln\left(\frac{W_{21}(u)}{W_3(u)}\right) \\
 Y_{BW21\_3}(u) &= \ln\left(\frac{W_{22}(u)}{W_3(u)}\right)
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

Os histogramas respectivos são apresentados na Figura F.9.

A estimativa dos teores nas faixas 21 e 22, apresentados no item 5.4.2, envolve a utilização dos balanços estequiométricos da Equação (3.15), com  $i=21$  e 22, respectivamente, escrevendo-o segundo a Equação (5.14) para que o teor de ferro possa ser determinado de forma independente.

As transformações alr são as apresentadas nas Equações (5.66) e (5.67), em cada caso e os histogramas respectivos são apresentados nas Figuras (F.10) e (F.11).

$$\begin{aligned}
 Y_{BEQ21\_1}(u) &= \ln\left(\frac{0,69825 \cdot P_{21D}(u) / 0,43638}{FE_{21D}(u)}\right) \\
 Y_{BEQ21\_2}(u) &= \ln\left(\frac{0,69825 \cdot MN_{21D}(u) / 0,63193}{FE_{21D}(u)}\right) \\
 Y_{BEQ21\_3}(u) &= \ln\left(\frac{0,69825 \cdot AL_{21D}(u)}{FE_{21D}(u)}\right) \\
 Y_{BEQ21\_4}(u) &= \ln\left(\frac{0,69825 \cdot PPC_{21D}(u)}{FE_{21D}(u)}\right) \\
 Y_{BEQ21\_5}(u) &= \ln\left(\frac{0,69825 \cdot SI_{21D}(u)}{FE_{21D}(u)}\right)
 \end{aligned} \tag{5.66}$$

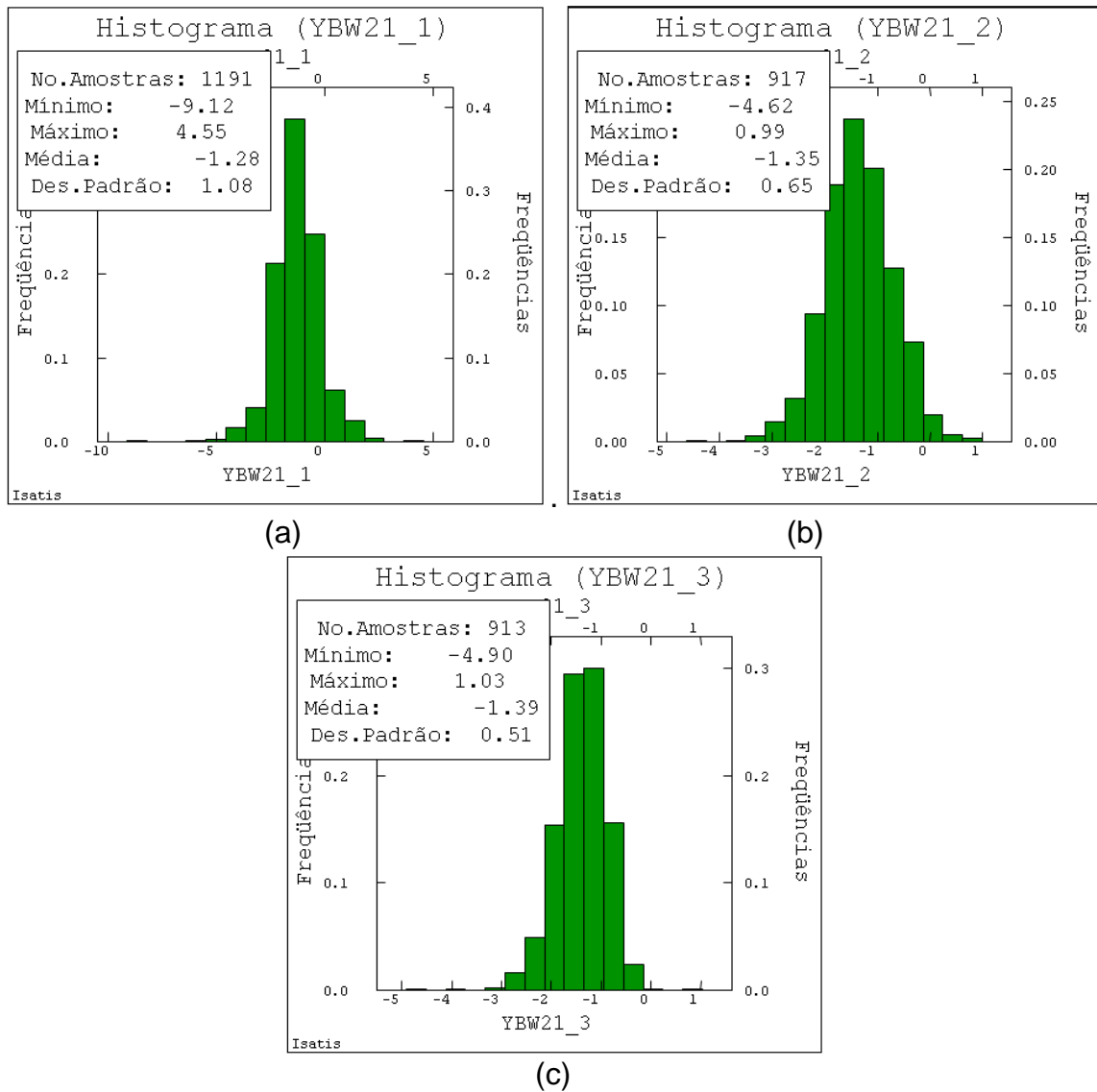


Figura F.9 - Histogramas das razões-logarítmicas (a)  $Y_{BW21_1}(u)$ , (b)  $Y_{BW21_2}(u)$  e (c)  $Y_{BW21_3}(u)$ .

$$\begin{aligned}
 Y_{BEQ22\_1}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot P_{22D}(u) / 0,43638}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_2}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot MN_{22D}(u) / 0,63193}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_3}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot AL_{22D}(u)}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_4}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot PPC_{22D}(u)}{FE_{22D}(u)} \right) \\
 Y_{BEQ22\_5}(u) &= \ln \left( \frac{0,69825 \cdot SI_{22D}(u)}{FE_{22D}(u)} \right)
 \end{aligned} \tag{5.67}$$



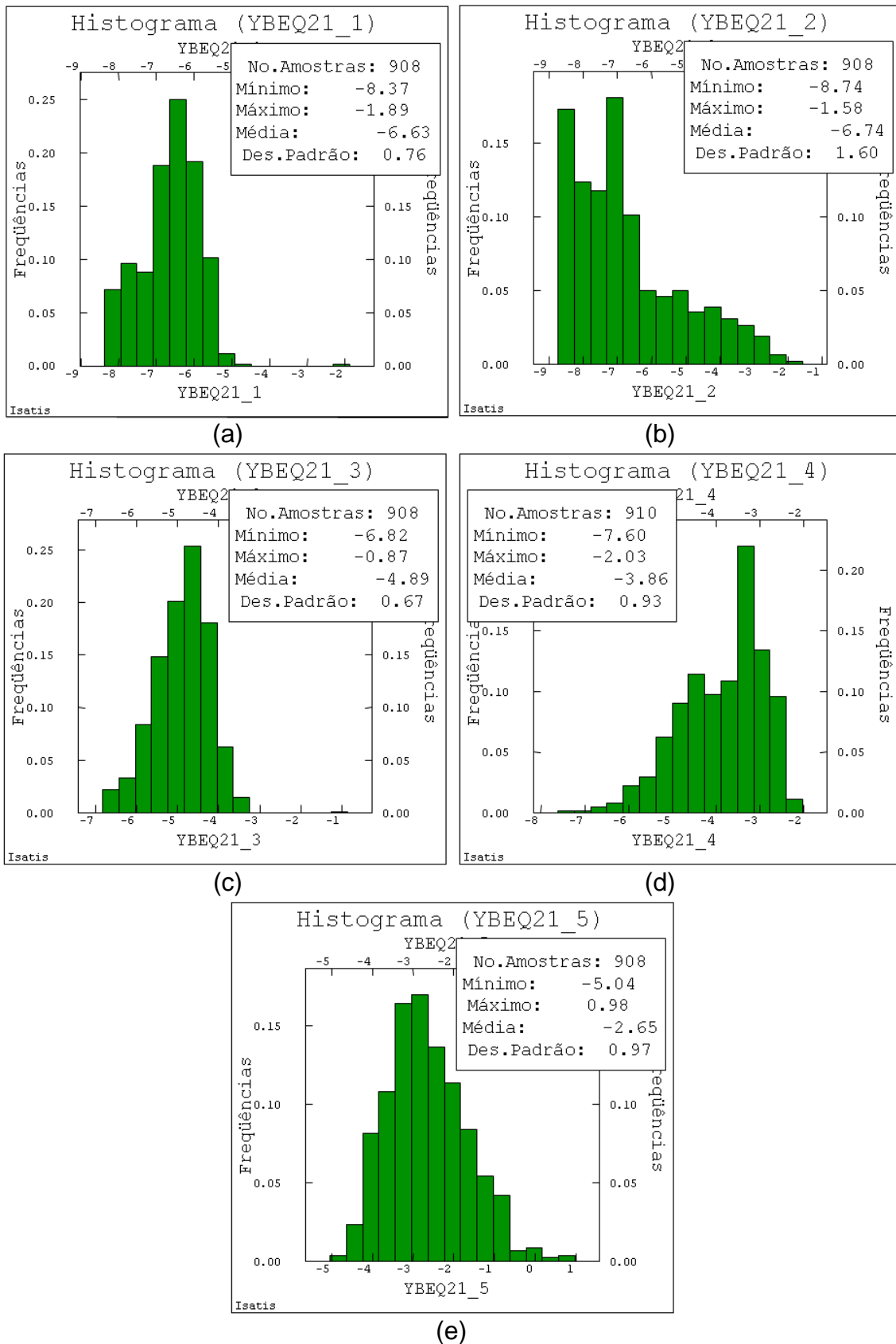


Figura F.10 - Histogramas das razões-logarítmicas (a) YBEQ21\_1(u), (b) YBEQ21\_2(u), (c) YBEQ21\_3(u), (d) YBEQ21\_4(u) e (e) YBEQ21\_5(u).

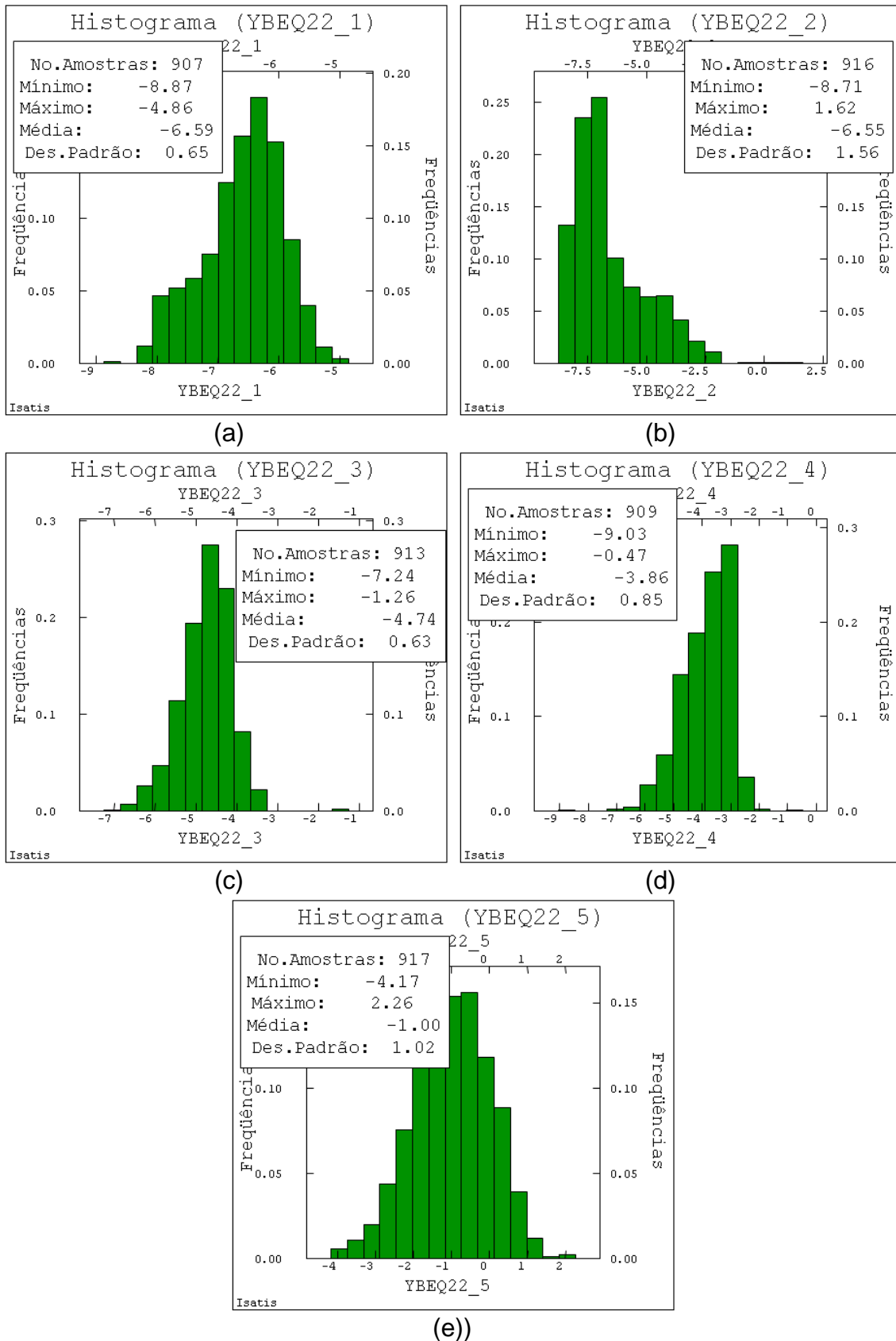


Figura F.11 - Histogramas das razões-logarítmicas (a) YBEQ22\_1(u), (b) YBEQ22\_2(u), (c) YBEQ22\_3(u), (d) YBEQ22\_4(u) e (e) YBEQ22\_5(u).

## F.2 Modelos lineares de correionalização

A seguir são apresentados os modelos variográficos, as matrizes de correionalização e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, para cada subconjunto de razões-logarítmicas aditivas.

### F.2.1 Razões-logarítmicas aditivas correspondentes às massas e teores nas faixas 1, 2, 3 e global

O modelo linear de correionalização correspondente às razões-logarítmicas aditivas  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$  apresentadas no Capítulo 5 na Equação (5.15), pode ser expresso pela seguinte Equação:

$$Y_{BW} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{70m}{N68^\circ} \frac{50m}{N158^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{140m}{N68^\circ} \frac{130m}{N158^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.1)$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) são apresentadas na Tabela B.2, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.12.

Tabela F.1 – Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr  $Y_{1BW}(u)$  e  $Y_{2BW}(u)$ .

| Matriz de Correionalização $C_0$ |      |      |
|----------------------------------|------|------|
|                                  | Y1BW | Y2BW |
| Y1BW                             | 0,14 | 0,03 |
| Y2BW                             | 0,03 | 0,01 |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |      |      |
|                                  | Y1BW | Y2BW |
| Y1BW                             | 0,13 | 0,04 |
| Y2BW                             | 0,04 | 0,01 |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |      |      |
|                                  | Y1BW | Y2BW |
| Y1BW                             | 0,91 | 0,32 |
| Y2BW                             | 0,32 | 0,25 |

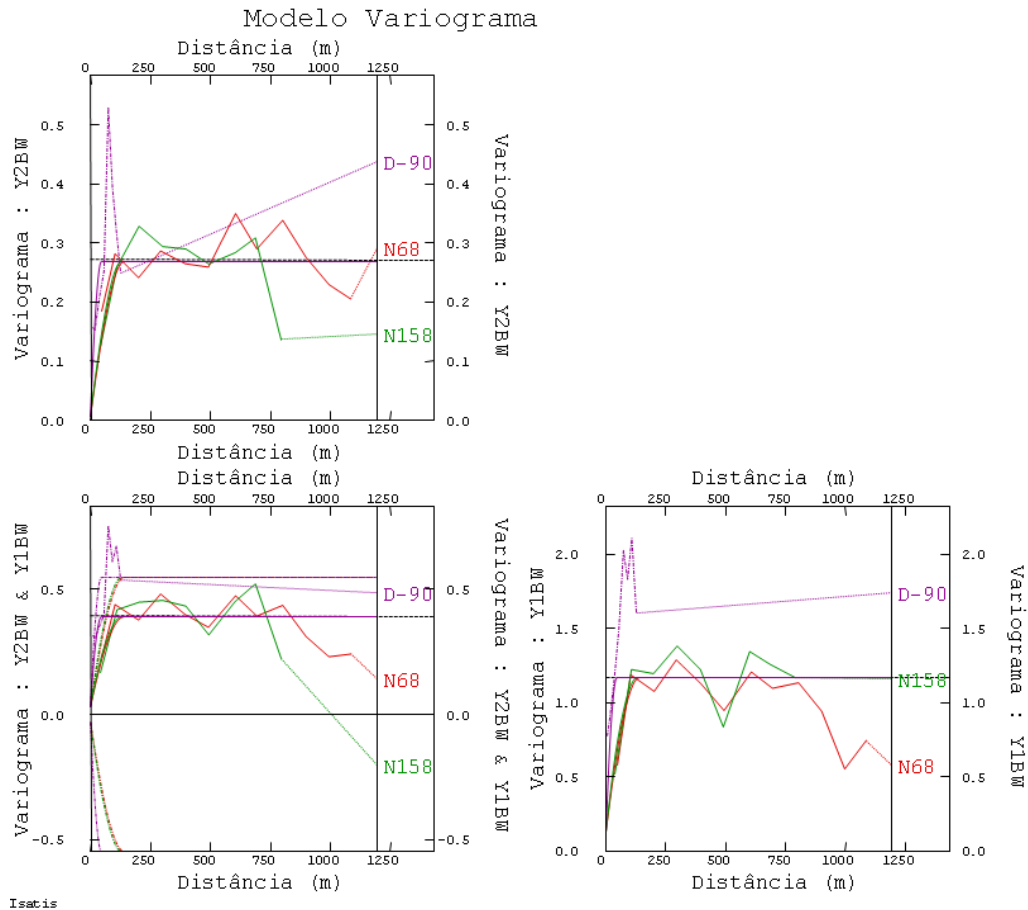


Figura F.12 - Modelo de correlogionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr Y1BW(u) e Y2BW(u).

O modelo linear de correlogionalização das razões-logarítmicas Y1BFE(u), Y2BFE(u) e Y3BFE(u), determinadas pela Equação (5.21) do Capítulo 5, para determinar os teores de ferro nas faixas 1, 2, 3 e global, é apresentado na Equação (F.2).

$$Y_{BFE} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{200m}{N68^\circ} \frac{150m}{N158^\circ} \frac{15m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{360m}{N68^\circ} \frac{340m}{N158^\circ} \frac{35m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.2)$$

As matrizes de correlogionalização correspondentes ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) são apresentadas na Tabela F.2, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.13.

Tabela F.2 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr Y1BFE(u), Y2BFE(u) e Y3BFE(u).

| <b>Matriz de Correionalização <math>C_0</math></b> |              |              |              |
|--|--------------|--------------|--------------|
|  | <b>Y1BFE</b> | <b>Y2BFE</b> | <b>Y3BFE</b> |
| <b>Y1BFE</b>                                       | 0,22         | 0,09         | 0,08         |
| <b>Y2BFE</b>                                       | 0,09         | 0,11         | 0,05         |
| <b>Y3BFE</b>                                       | 0,08         | 0,05         | 0,14         |
| <b>Matriz de Correionalização <math>C_1</math></b> |              |              |              |
|  | <b>Y1BFE</b> | <b>Y2BFE</b> | <b>Y3BFE</b> |
| <b>Y1BFE</b>                                       | 0,17         | 0,18         | -0,01        |
| <b>Y2BFE</b>                                       | 0,18         | 0,78         | 0,11         |
| <b>Y3BFE</b>                                       | -0,01        | 0,11         | 0,03         |
| <b>Matriz de Correionalização <math>C_2</math></b> |              |              |              |
|  | <b>Y1BFE</b> | <b>Y2BFE</b> | <b>Y3BFE</b> |
| <b>Y1BFE</b>                                       | 0,13         | 0,06         | 0,09         |
| <b>Y2BFE</b>                                       | 0,06         | 0,25         | 0,11         |
| <b>Y3BFE</b>                                       | 0,09         | 0,11         | 0,16         |

No caso da alumina, o modelo linear de correionalização das transformações alr Y1BAL(u) e Y2BAL(u), determinadas pela Equação (5.27), apresenta-se na seguinte Equação:

$$Y_{BAL} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N68^\circ} \frac{110m}{N158^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.3)$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $C_0$  e  $C_1$ ) são apresentadas na Tabela F.3, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.14.

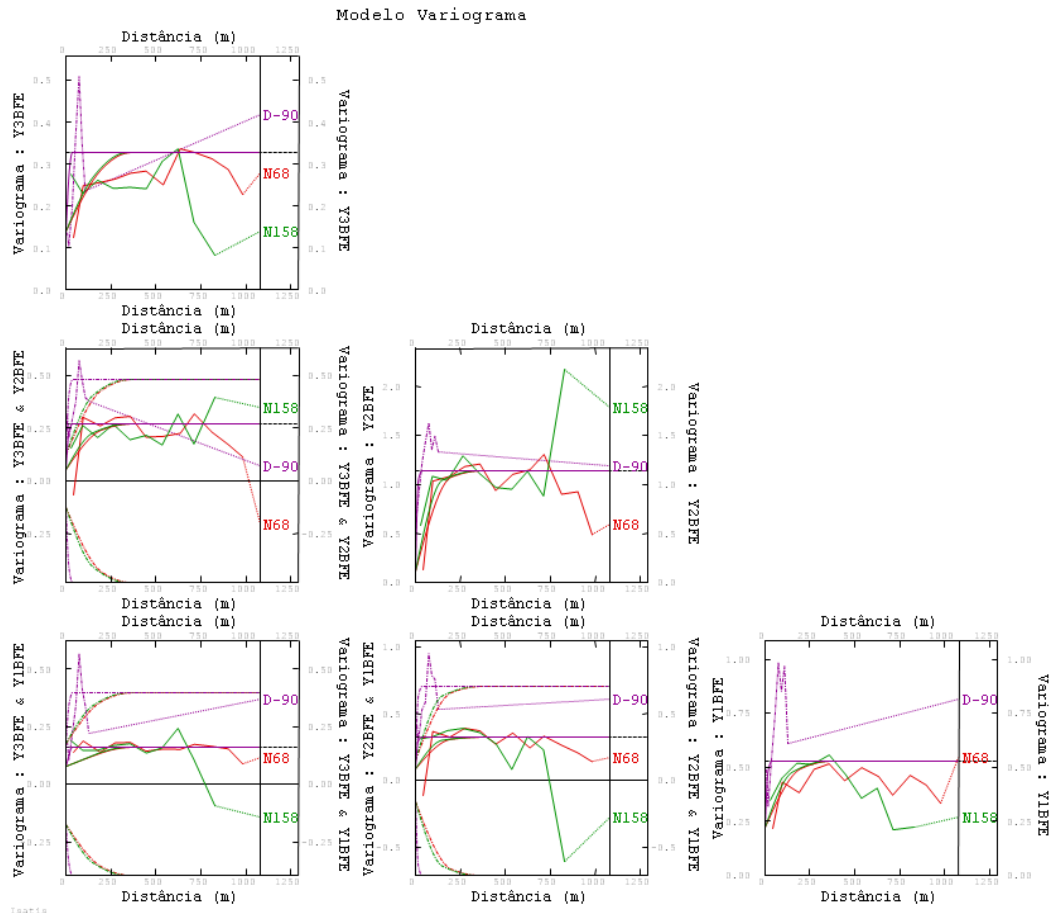


Figura F.13 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as transformações  $alr Y1BFE(u)$ ,  $alr Y2BFE(u)$  e  $alr Y3BFE(u)$ .

Tabela F.3 - Matrizes de correlogramação  $C_0$  e  $C_1$  para o modelo linear de correlogramação das razões-logarítmicas  $alr Y1BAL(u)$  e  $alr Y2BAL(u)$ .

| Matriz de Correlogramação $C_0$ |       |       |
|---------------------------------|-------|-------|
|                                 | Y1BAL | Y2BAL |
| Y1BAL                           | 0,44  | 0,18  |
| Y2BAL                           | 0,18  | 0,08  |
| Matriz de Correlogramação $C_1$ |       |       |
|                                 | Y1BAL | Y2BAL |
| Y1BAL                           | 0,99  | 0,42  |
| Y2BAL                           | 0,42  | 0,35  |

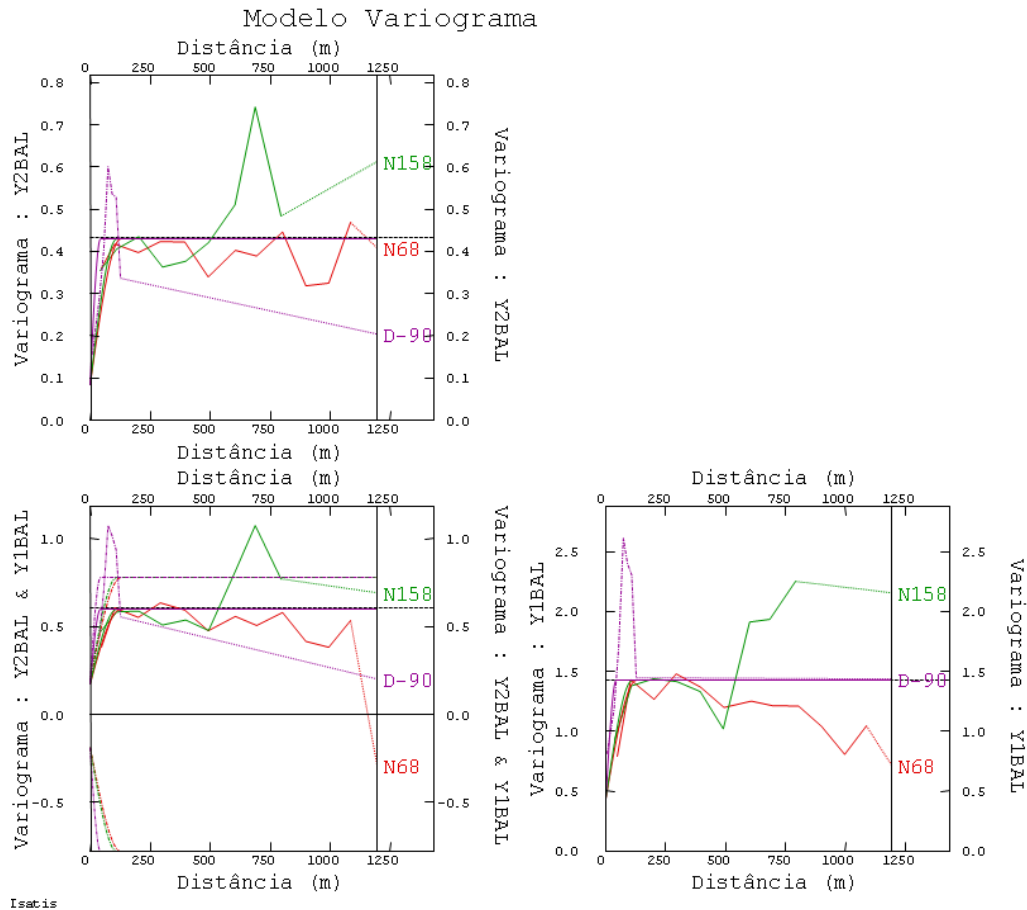


Figura F.14 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr Y1BAL(u) e Y2BAL(u).

As transformações alr obtidas para as estimativas dos teores de manganês, Y1BMN(u) e Y2BMN(u), a partir da Equação (5.28), apresentam o seguinte modelo linear de correlogramação:

$$Y_{BMN} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{70m}{N68^\circ} \frac{50m}{N158^\circ} \frac{25m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{130m}{N68^\circ} \frac{115m}{N158^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.4)$$

As matrizes de correlogramação correspondentes ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) são apresentadas na Tabela F.4, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.15.

Tabela F.4 - Matrizes de correlogramação  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correlogramação das razões-logarítmicas alr Y1BMN(u) e Y2BMN(u).

| Matriz de Correlogramação $C_0$ |       |       |
|---------------------------------|-------|-------|
|                                 | Y1BMN | Y2BMN |
| Y1BMN                           | 0,24  | 0,07  |
| Y2BMN                           | 0,07  | 0,02  |
| Matriz de Correlogramação $C_1$ |       |       |
|                                 | Y1BMN | Y2BMN |
| Y1BMN                           | 0,38  | 0,17  |
| Y2BMN                           | 0,17  | 0,08  |
| Matriz de Correlogramação $C_2$ |       |       |
|                                 | Y1BMN | Y2BMN |
| Y1BMN                           | 1,12  | 0,60  |
| Y2BMN                           | 0,60  | 0,63  |

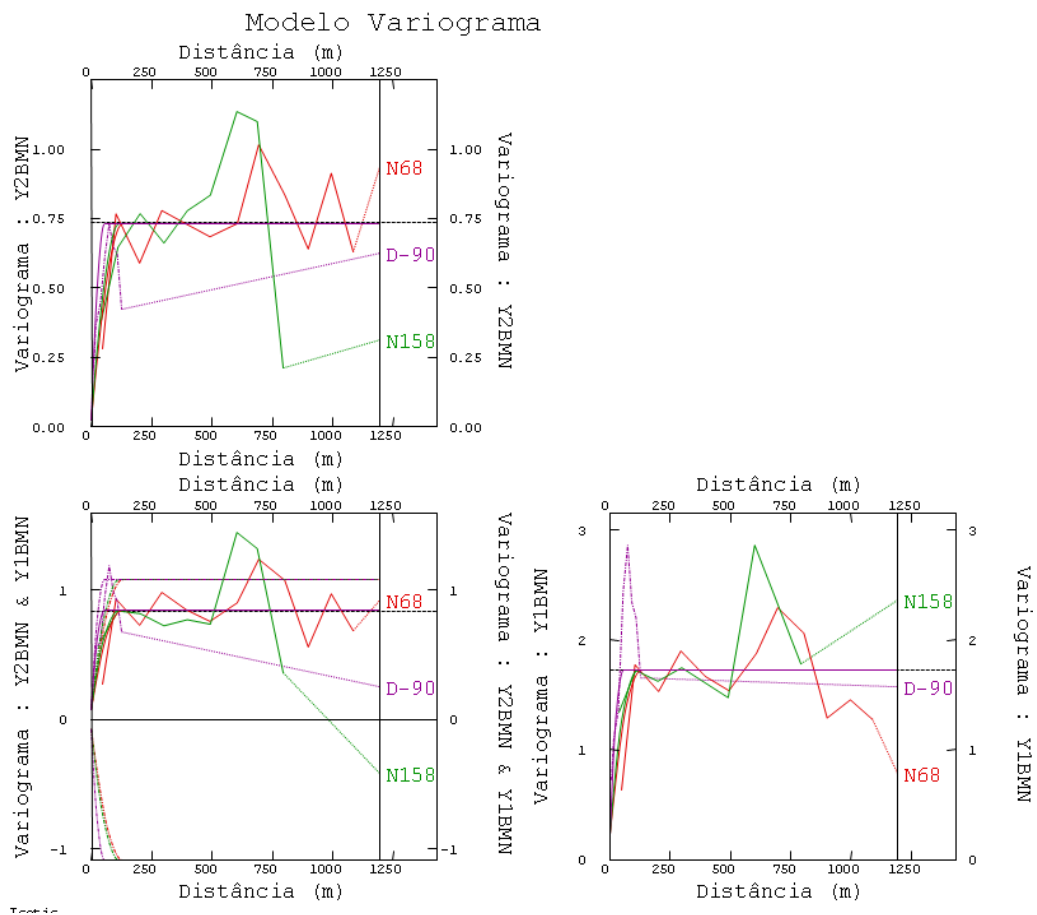


Figura F.15 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr Y1BMN(u) e Y2BMN(u).



No caso do fósforo, modela-se o modelo linear de correionalização das razões logarítmicas obtidas a partir da Equação (5.29),  $Y_{1BP}(u)$  e  $Y_{2BP}(u)$ , o qual é expresso pela seguinte Equação:

$$Y_{BP} = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_1 \cdot Sph\left(\frac{70m}{N68^\circ} \frac{50m}{N158^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + \mathbf{C}_2 \cdot Sph\left(\frac{140m}{N68^\circ} \frac{130m}{N158^\circ} \frac{45m}{D-90^\circ}\right) \quad (\text{F.5})$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $\mathbf{C}_0$ ,  $\mathbf{C}_1$  e  $\mathbf{C}_2$ ) são apresentadas na Tabela F.5, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.16.

Tabela F.5 - Matrizes de correionalização  $\mathbf{C}_0$ ,  $\mathbf{C}_1$  e  $\mathbf{C}_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr  $Y_{1BP}(u)$  e  $Y_{2BP}(u)$ .

| Matriz de Correionalização $\mathbf{C}_0$ |      |      |
|---|------|------|
|   | Y1BP | Y2BP |
| Y1BP                                      | 0,24 | 0,07 |
| Y2BP                                      | 0,07 | 0,02 |
| Matriz de Correionalização $\mathbf{C}_1$ |      |      |
|   | Y1BP | Y2BP |
| Y1BP                                      | 0,38 | 0,17 |
| Y2BP                                      | 0,17 | 0,08 |
| Matriz de Correionalização $\mathbf{C}_2$ |      |      |
|   | Y1BP | Y2BP |
| Y1BP                                      | 1,12 | 0,60 |
| Y2BP                                      | 0,60 | 0,63 |

Para as perdas por calcinação, as razões-logarítmicas aditivas,  $Y_{1BPCC}(u)$  e  $Y_{2BPCC}(u)$ , são determinadas pela Equação (5.30), e o modelo linear de correionalização é apresentado na Equação (F.6).

$$Y_{BPCC} = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_1 \cdot Sph\left(\frac{70m}{N68^\circ} \frac{50m}{N158^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + \mathbf{C}_2 \cdot Sph\left(\frac{175m}{N68^\circ} \frac{160m}{N158^\circ} \frac{55m}{D-90^\circ}\right) \quad (\text{F.6})$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $\mathbf{C}_0$ ,  $\mathbf{C}_1$  e  $\mathbf{C}_2$ ) são apresentadas na Tabela F.6, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.17.

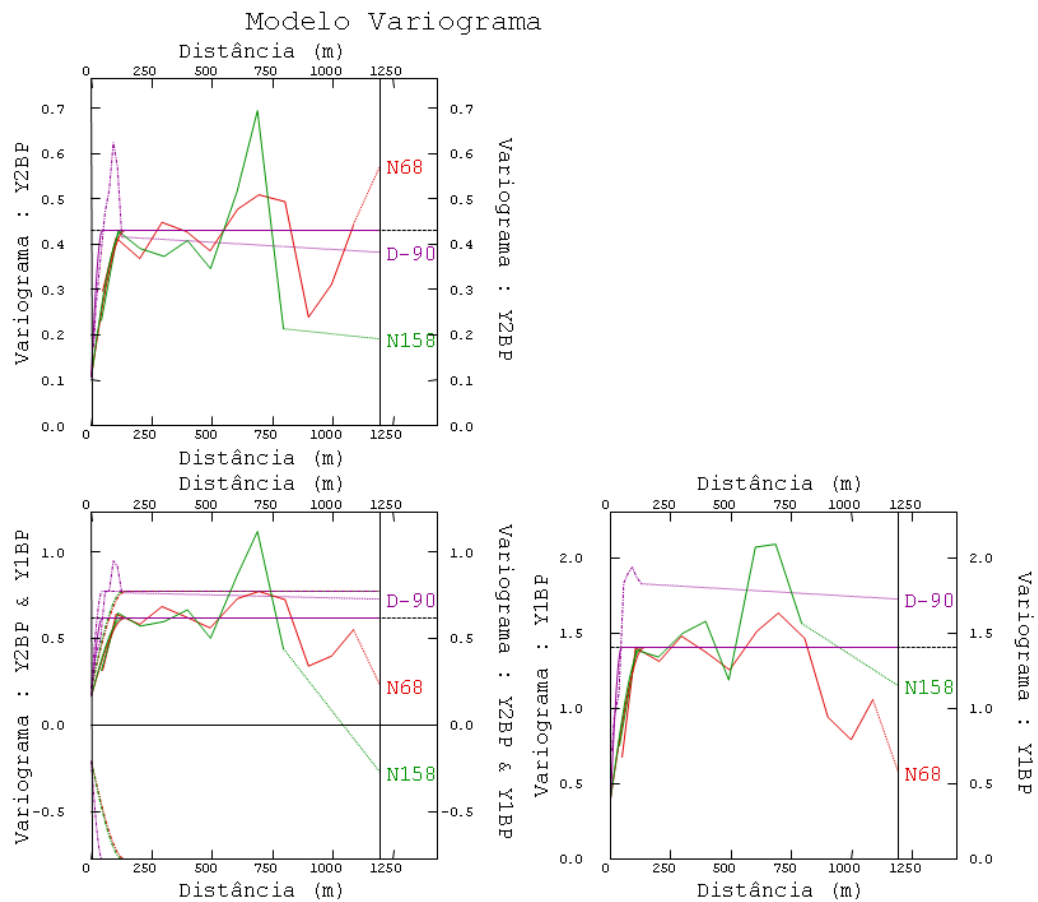


Figura F.16 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr Y1BP(u) e Y2BP(u).

Tabela F.6 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr Y1BPPC(u) e Y2BPPC(u).

| Matriz de Correionalização $C_0$ |        |        |
|----------------------------------|--------|--------|
|                                  | Y1BPPC | Y2BPPC |
| Y1BPPC                           | 0,54   | 0,21   |
| Y2BPPC                           | 0,21   | 0,10   |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |        |        |
|                                  | Y1BPPC | Y2BPPC |
| Y1BPPC                           | 0,07   | 0,06   |
| Y2BPPC                           | 0,06   | 0,05   |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |        |        |
|                                  | Y1BPPC | Y2BPPC |
| Y1BPPC                           | 0,76   | 0,37   |
| Y2BPPC                           | 0,37   | 0,33   |

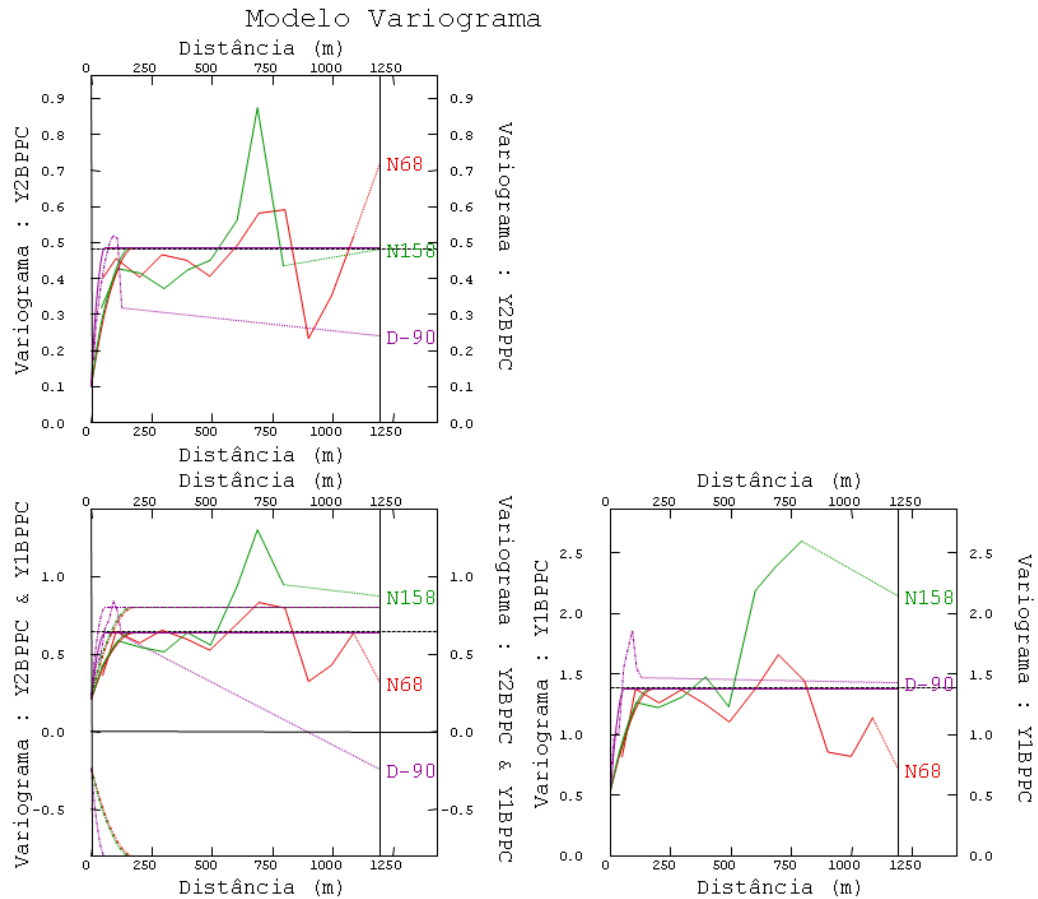


Figura F.17 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas  $Y1BPPC(u)$  e  $Y2BPPC(u)$ .

As razões-logarítmicas aditivas para a sílica  $Y1BSI(u)$  e  $Y2BSI(u)$ , determinadas a partir da Equação (5.31), apresentam uma variabilidade espacial conjunta modelada pelo seguinte modelo linear de correionalização:

$$Y_{BSI} = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_1 \cdot Sph\left(\frac{150m}{N68^\circ} \frac{120m}{N158^\circ} \frac{25m}{D-90^\circ}\right) + \mathbf{C}_2 \cdot Sph\left(\frac{570m}{N68^\circ} \frac{480m}{N158^\circ} \frac{40m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.7)$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $\mathbf{C}_0$ ,  $\mathbf{C}_1$  e  $\mathbf{C}_2$ ) são apresentadas na Tabela F.7, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.18.

Tabela F.7 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr Y1BSI(u) e Y2BSI(u).

| Matriz de Correionalização $C_0$ |       |       |
|----------------------------------|-------|-------|
|                                  | Y1BSI | Y2BSI |
| Y1BSI                            | 0,33  | 0,01  |
| Y2BSI                            | 0,01  | 0,03  |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |       |       |
|                                  | Y1BSI | Y2BSI |
| Y1BSI                            | 0,55  | 0,12  |
| Y2BSI                            | 0,12  | 0,24  |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |       |       |
|                                  | Y1BSI | Y2BSI |
| Y1BSI                            | 0,37  | 0,03  |
| Y2BSI                            | 0,03  | 0,12  |

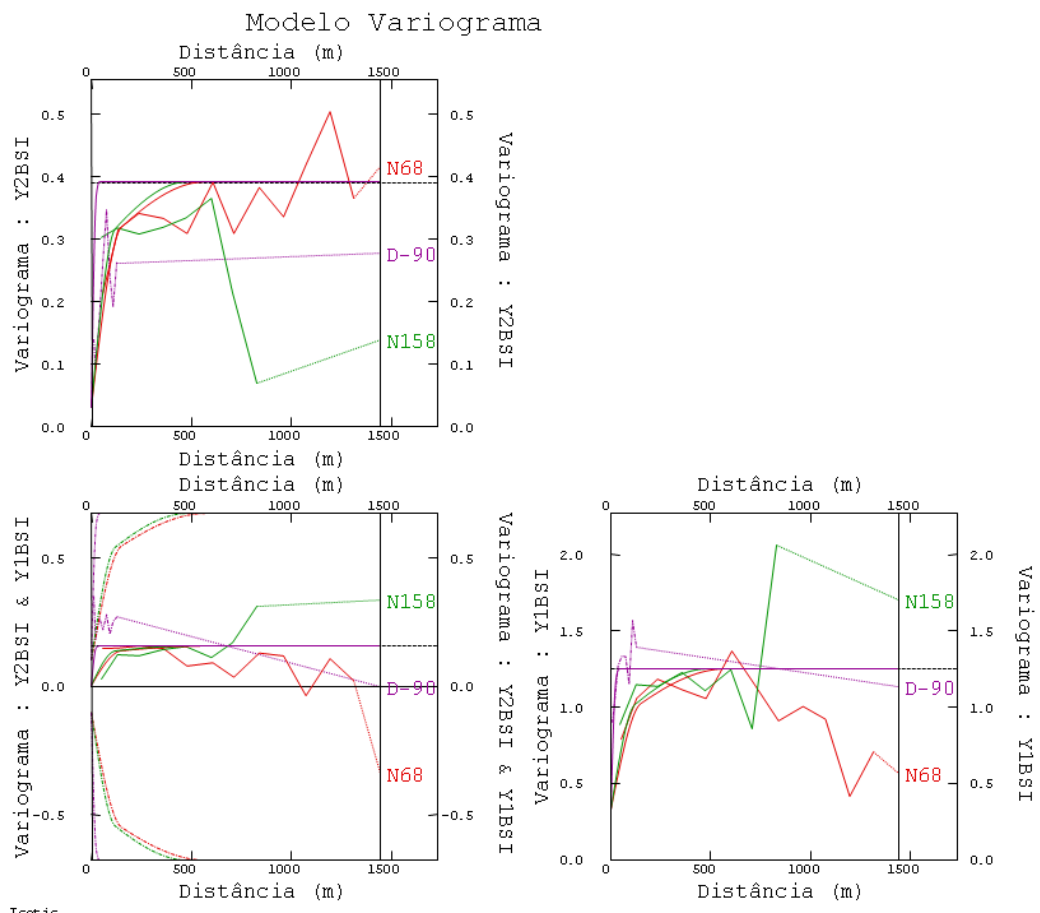


Figura F.18 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr Y1BSI(u) e Y2BSI(u).

As razões-logarítmicas aditivas dos teores globais são determinadas pela Equação (5.52) e o modelo linear de correionalização associado está dado pela seguinte Equação:

$$Y_{EQT} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{190m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{950m}{N100^\circ} \frac{270m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.8)$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) são apresentadas na Tabela F.8, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.19.

Tabela F.8 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr  $Y1EQT(u)$ ,  $Y2EQT(u)$ ,  $Y3EQT(u)$ ,  $Y4EQT(u)$  e  $Y5EQT(u)$ .

| Matriz de Correionalização $C_0$ |       |       |       |       |       |
|----------------------------------|-------|-------|-------|-------|-------|
|                                  | Y1EQT | Y2EQT | Y3EQT | Y4EQT | Y5EQT |
| Y1EQT                            | 0,13  | 0,09  | 0,06  | 0,10  | 0,00  |
| Y2EQT                            | 0,09  | 0,39  | -0,02 | 0,07  | 0,01  |
| Y3EQT                            | 0,06  | -0,02 | 0,13  | 0,07  | 0,06  |
| Y4EQT                            | 0,10  | 0,07  | 0,07  | 0,10  | -0,01 |
| Y5EQT                            | 0,00  | 0,01  | 0,06  | -0,01 | 0,25  |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |       |       |       |       |       |
|                                  | Y1EQT | Y2EQT | Y3EQT | Y4EQT | Y5EQT |
| Y1EQT                            | 0,01  | -0,03 | -0,01 | -0,01 | 0,00  |
| Y2EQT                            | -0,03 | 0,14  | 0,05  | 0,01  | -0,03 |
| Y3EQT                            | -0,01 | 0,05  | 0,02  | 0,00  | -0,02 |
| Y4EQT                            | -0,01 | 0,01  | 0,00  | 0,01  | 0,01  |
| Y5EQT                            | 0,00  | -0,03 | -0,02 | 0,01  | 0,02  |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |       |       |       |       |       |
|                                  | Y1EQT | Y2EQT | Y3EQT | Y4EQT | Y5EQT |
| Y1EQT                            | 0,22  | 0,13  | 0,05  | 0,15  | 0,03  |
| Y2EQT                            | 0,13  | 1,29  | 0,11  | 0,14  | 0,06  |
| Y3EQT                            | 0,05  | 0,11  | 0,14  | 0,10  | 0,02  |
| Y4EQT                            | 0,15  | 0,14  | 0,10  | 0,44  | 0,01  |
| Y5EQT                            | 0,03  | 0,06  | 0,02  | 0,01  | 0,32  |

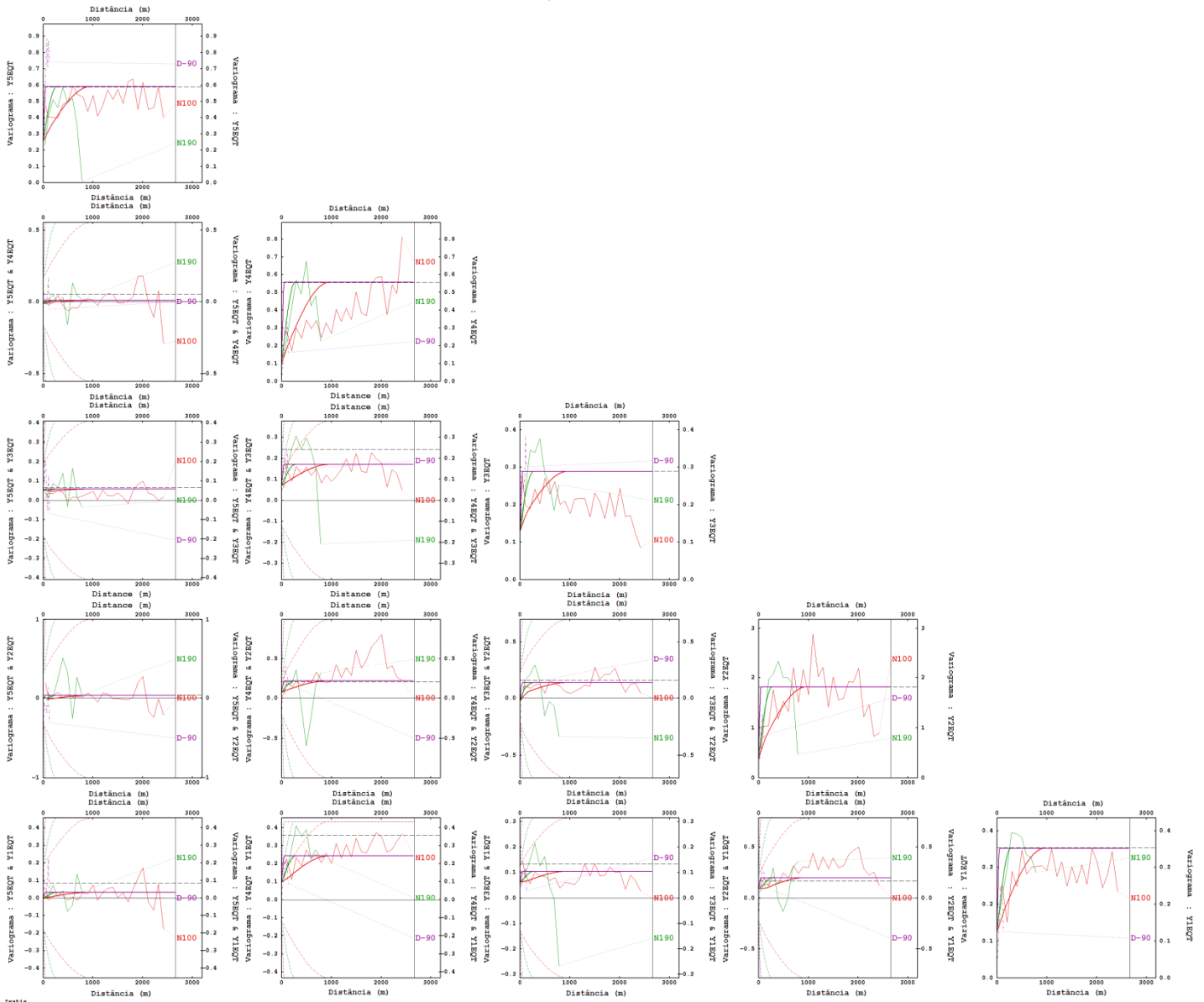


Figura F.19 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas  $alr Y1EQT(u)$ ,  $Y2EQT(u)$ ,  $Y3EQT(u)$ ,  $Y4EQT(u)$  e  $Y5EQT(u)$ .

### F.2.2 Razões-logarítmicas aditivas correspondentes às massas e teores nas faixas 1, 2, 3 e global

Para determinar as massas nas frações 21 e 22 ( $W_{21}(u)$  e  $W_{22}(u)$ ), utilizam-se as transformações alr descritas pela Equação (5.60),  $Y_{BW21\_1}(u)$ ,  $Y_{BW21\_2}(u)$  e  $Y_{BW21\_3}(u)$ . O modelo de correlogramação determinado é o seguinte:

$$Y_{BW21} = \mathbf{C}_0 + \mathbf{C}_1 \cdot Sph \left( \frac{140m}{N68^\circ} \frac{140m}{N158^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ} \right) \quad (\text{F.9})$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $\mathbf{C}_0$  e  $\mathbf{C}_1$ ) são apresentadas na Tabela F.9, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.20.

Tabela F.9 - Matrizes de correionalização  $\mathbf{C}_0$  e  $\mathbf{C}_1$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas alr YBW21\_1(u), YBW21\_2(u) e YBW21\_3(u).

| Matriz de Correionalização $\mathbf{C}_0$ |         |         |         |
|---|---------|---------|---------|
|   | YBW21_1 | YBW21_2 | YBW21_3 |
| YBW21_1                                   | 0,62    | 0,23    | 0,05    |
| YBW21_2                                   | 0,23    | 0,12    | 0,03    |
| YBW21_3                                   | 0,05    | 0,03    | 0,02    |
| Matriz de Correionalização $\mathbf{C}_1$ |         |         |         |
|   | YBW21_1 | YBW21_2 | YBW21_3 |
| YBW21_1                                   | 0,53    | 0,29    | 0,22    |
| YBW21_2                                   | 0,29    | 0,31    | 0,17    |
| YBW21_3                                   | 0,22    | 0,17    | 0,21    |

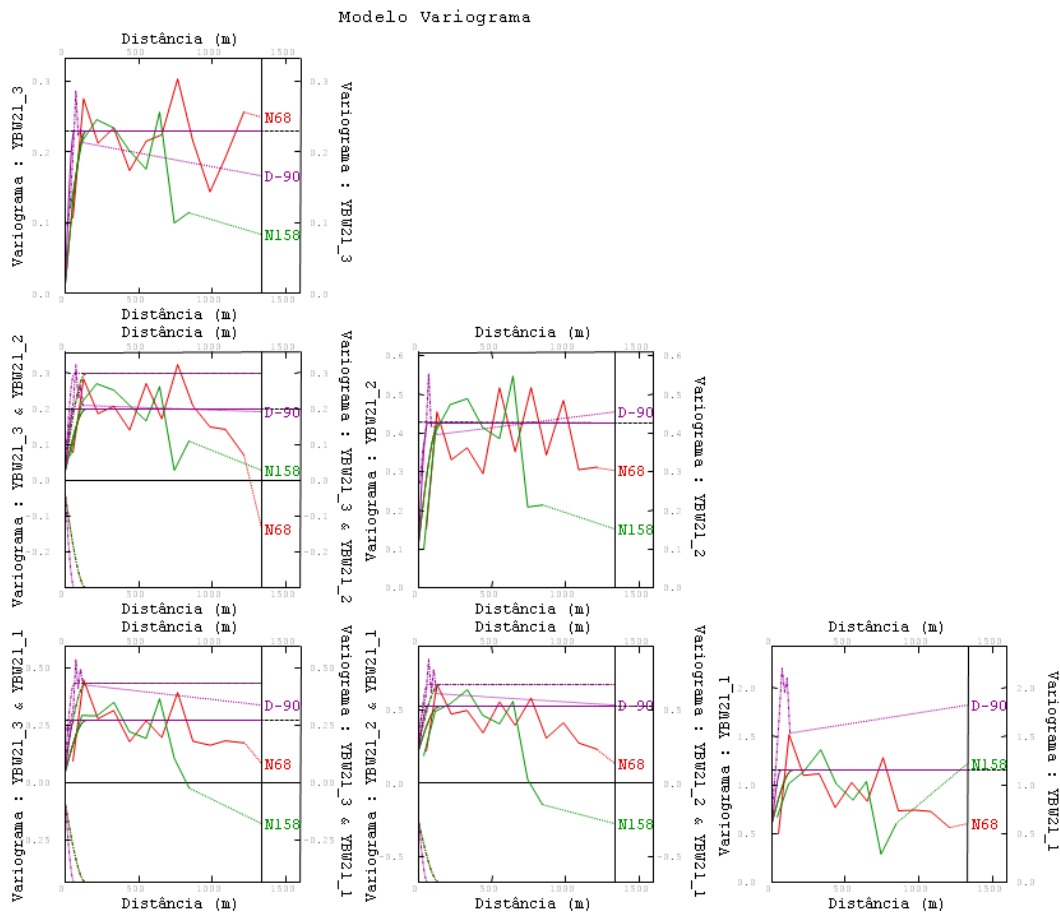


Figura F.20 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr YBW21\_1(u), YBW21\_2(u) e YBW21\_3(u).

Os teores nas faixas 21 e 22 são determinados utilizando as razões-logarítmicas expressas nas Equações (5.66) e (5.67). No caso das transformações alr para a faixa 21 (YBEQ21\_1(u), YBEQ21\_2(u), YBEQ21\_3(u), YBEQ21\_4(u) e YBEQ21\_5(u)) o modelo linear de correionalização é expresso pela Equação (F.10).

$$Y_{BEQ21} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{190m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{20m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{1100m}{N100^\circ} \frac{315m}{N190^\circ} \frac{60m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.10)$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) são apresentadas na Tabela F.10, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.21.



Tabela F.10 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas  $Y_{BEQ21_1}(u)$ ,  $Y_{BEQ21_2}(u)$ ,  $Y_{BEQ21_3}(u)$ ,  $Y_{BEQ21_4}(u)$  e  $Y_{BEQ21_5}(u)$ .

| Matriz de Correionalização $C_0$ |          |          |          |          |          |
|----------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
|                                  | YBEQ21_1 | YBEQ21_2 | YBEQ21_3 | YBEQ21_4 | YBEQ21_5 |
| YBEQ21_1                         | 0,20     | 0,19     | 0,13     | 0,20     | 0,06     |
| YBEQ21_2                         | 0,19     | 0,87     | 0,03     | 0,24     | 0,08     |
| YBEQ21_3                         | 0,13     | 0,03     | 0,16     | 0,13     | -0,01    |
| YBEQ21_4                         | 0,20     | 0,24     | 0,13     | 0,23     | -0,01    |
| YBEQ21_5                         | 0,06     | 0,08     | -0,01    | -0,01    | 0,21     |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |          |          |          |          |          |
|                                  | YBEQ21_1 | YBEQ21_2 | YBEQ21_3 | YBEQ21_4 | YBEQ21_5 |
| YBEQ21_1                         | 0,07     | -0,08    | -0,03    | 0,00     | -0,06    |
| YBEQ21_2                         | -0,08    | 0,55     | 0,08     | -0,04    | -0,11    |
| YBEQ21_3                         | -0,03    | 0,08     | 0,02     | -0,01    | -0,01    |
| YBEQ21_4                         | 0,00     | -0,04    | -0,01    | 0,01     | 0,03     |
| YBEQ21_5                         | -0,06    | -0,11    | -0,01    | 0,03     | 0,29     |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |          |          |          |          |          |
|                                  | YBEQ21_1 | YBEQ21_2 | YBEQ21_3 | YBEQ21_4 | YBEQ21_5 |
| YBEQ21_1                         | 0,27     | 0,08     | 0,14     | 0,29     | 0,07     |
| YBEQ21_2                         | 0,08     | 0,92     | 0,01     | 0,02     | 0,23     |
| YBEQ21_3                         | 0,14     | 0,01     | 0,22     | 0,22     | 0,02     |
| YBEQ21_4                         | 0,29     | 0,02     | 0,22     | 0,63     | 0,06     |
| YBEQ21_5                         | 0,07     | 0,23     | 0,02     | 0,06     | 0,44     |

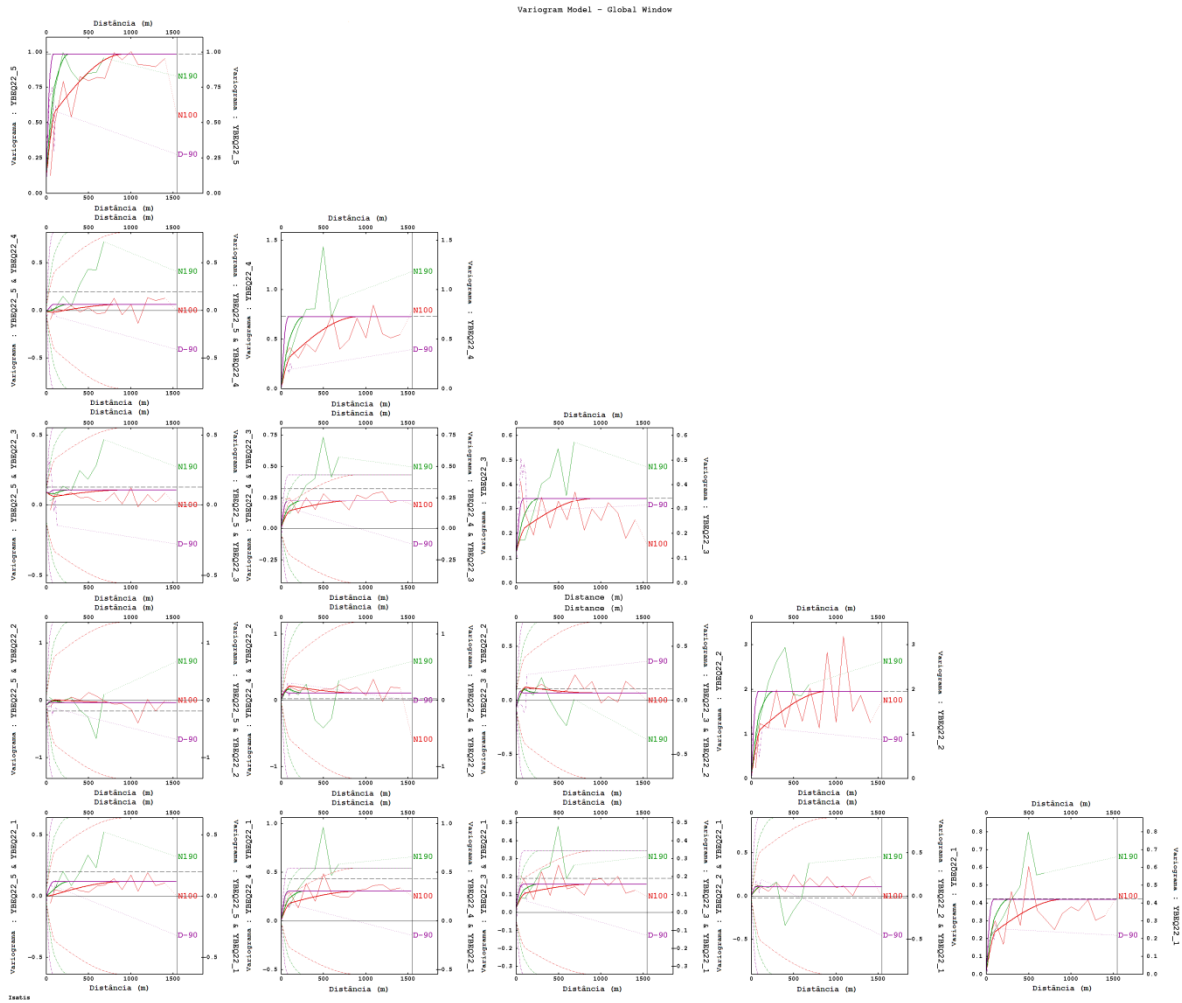


Figura F.21 - Modelo de correionalização ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas alr YBEQ21\_1(u), YBEQ21\_2(u), YBEQ21\_3(u), YBEQ21\_4(u) e YBEQ21\_5(u).

No caso das transformações alr para a faixa 22 (YBEQ22\_1(u), YBEQ22\_2(u), YBEQ22\_3(u), YBEQ22\_4(u) e YBEQ22\_5(u)) o modelo linear de correionalização é expresso pela seguinte Equação:

$$Y_{BEQ22} = C_0 + C_1 \cdot Sph\left(\frac{110m}{N100^\circ} \frac{100m}{N190^\circ} \frac{50m}{D-90^\circ}\right) + C_2 \cdot Sph\left(\frac{910m}{N100^\circ} \frac{260m}{N190^\circ} \frac{85m}{D-90^\circ}\right) \quad (F.11)$$

As matrizes de correionalização correspondentes ( $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$ ) são apresentadas na Tabela F.11, e os variogramas direcionais, experimentais e modelados, na Figura F.22.

Tabela F.11 - Matrizes de correionalização  $C_0$ ,  $C_1$  e  $C_2$  para o modelo linear de correionalização das razões-logarítmicas aditivas YBEQ22\_1(u), YBEQ22\_2(u), YBEQ22\_3(u), YBEQ22\_4(u) e YBEQ22\_5(u).

| Matriz de Correionalização $C_0$ |          |          |          |          |          |
|----------------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|
|                                  | YBEQ22_1 | YBEQ22_2 | YBEQ22_3 | YBEQ22_4 | YBEQ22_5 |
| YBEQ22_1                         | 0,02     | 0,01     | 0,03     | 0,02     | 0,00     |
| YBEQ22_2                         | 0,01     | 0,06     | -0,06    | 0,01     | -0,08    |
| YBEQ22_3                         | 0,03     | -0,06    | 0,13     | 0,01     | 0,10     |
| YBEQ22_4                         | 0,02     | 0,01     | 0,01     | 0,01     | -0,01    |
| YBEQ22_5                         | 0,00     | -0,08    | 0,10     | -0,01    | 0,12     |
| Matriz de Correionalização $C_1$ |          |          |          |          |          |
|                                  | YBEQ22_1 | YBEQ22_2 | YBEQ22_3 | YBEQ22_4 | YBEQ22_5 |
| YBEQ22_1                         | 0,18     | 0,10     | 0,07     | 0,14     | -0,01    |
| YBEQ22_2                         | 0,10     | 0,87     | 0,20     | 0,23     | 0,10     |
| YBEQ22_3                         | 0,07     | 0,20     | 0,07     | 0,11     | -0,04    |
| YBEQ22_4                         | 0,14     | 0,23     | 0,11     | 0,23     | -0,02    |
| YBEQ22_5                         | -0,01    | 0,10     | -0,04    | -0,02    | 0,38     |
| Matriz de Correionalização $C_2$ |          |          |          |          |          |
|                                  | YBEQ22_1 | YBEQ22_2 | YBEQ22_3 | YBEQ22_4 | YBEQ22_5 |
| YBEQ22_1                         | 0,22     | 0,00     | 0,06     | 0,14     | 0,13     |
| YBEQ22_2                         | 0,00     | 1,03     | -0,07    | -0,13    | -0,06    |
| YBEQ22_3                         | 0,06     | -0,07    | 0,14     | 0,10     | 0,05     |
| YBEQ22_4                         | 0,14     | -0,13    | 0,10     | 0,48     | 0,10     |
| YBEQ22_5                         | 0,13     | -0,06    | 0,05     | 0,10     | 0,49     |

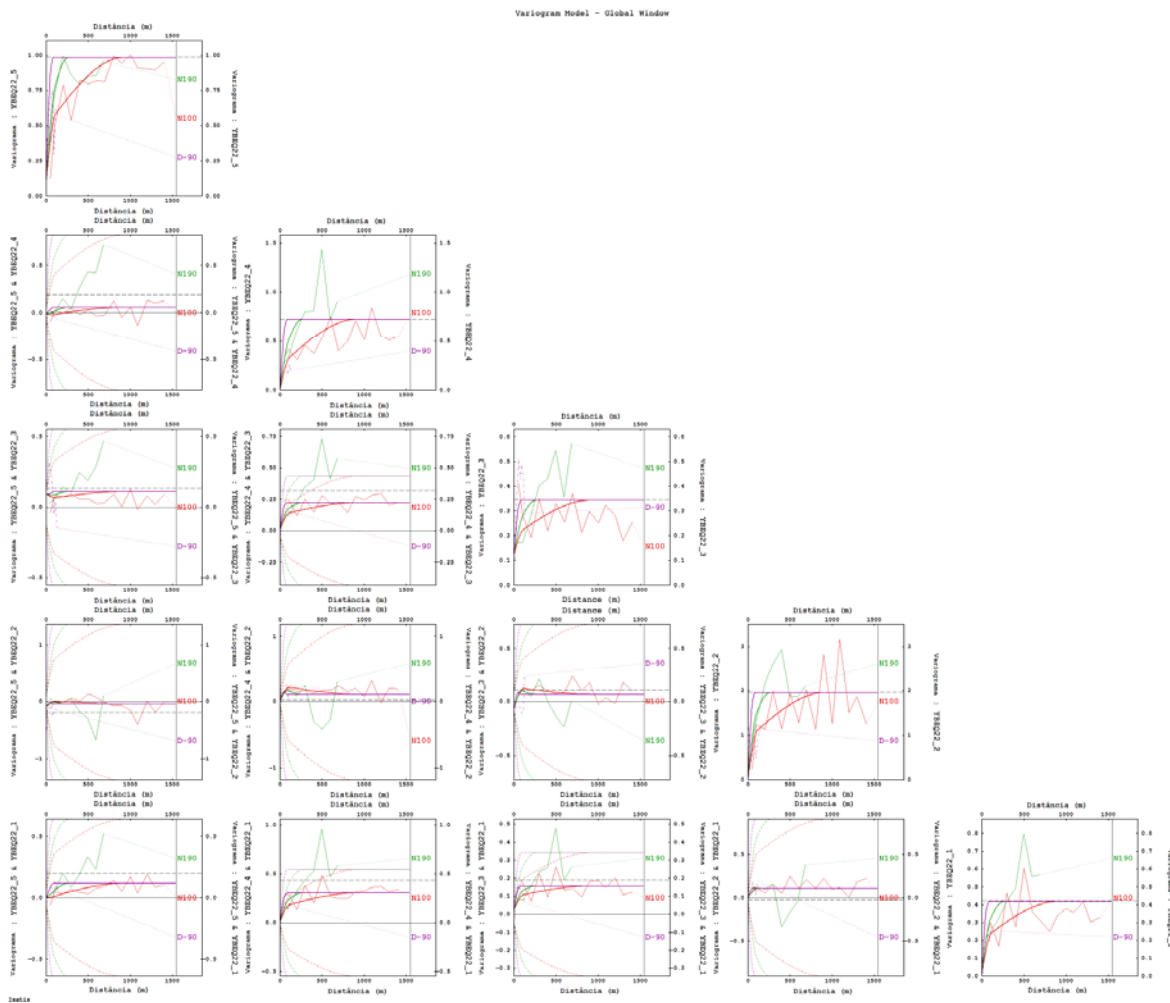


Figura F.22 - Modelo de correlogramação ajustado aos variogramas experimentais, diretos e cruzados, para as razões-logarítmicas  $\ln YBEQ22_1(u)$ ,  $\ln YBEQ22_2(u)$ ,  $\ln YBEQ22_3(u)$ ,  $\ln YBEQ22_4(u)$  e  $\ln YBEQ22_5(u)$ .

## **Apêndice G**

### **Gráficos Correspondentes à Análise e Discussão de Resultados**

Nesse apêndice, são apresentados os gráficos correspondentes à análise de deriva, diagramas de dispersão e mapas das estimativas nas faixas 2, 21 e 3, complementares aos apresentados no Capítulo 6, para analisar os resultados.

#### **G.1 Análise de deriva**

Nos diagramas das Figuras G.1 a G.18, são apresentadas as variações das tendências das estimativas ao longo dos eixos X, Y e Z, respeito aos valores originais, observando se a mesma é mantida, num processo denominado de análise de deriva.

No Capítulo 6 foram apresentadas as análises de deriva das estimativas das variáveis globais, das massas das frações granulométricas e das variáveis na faixa 1, determinadas por diferença (calculadas).

Nessa seção são apresentadas as análises de deriva correspondentes às variáveis nas faixas 2, 21 e 3.

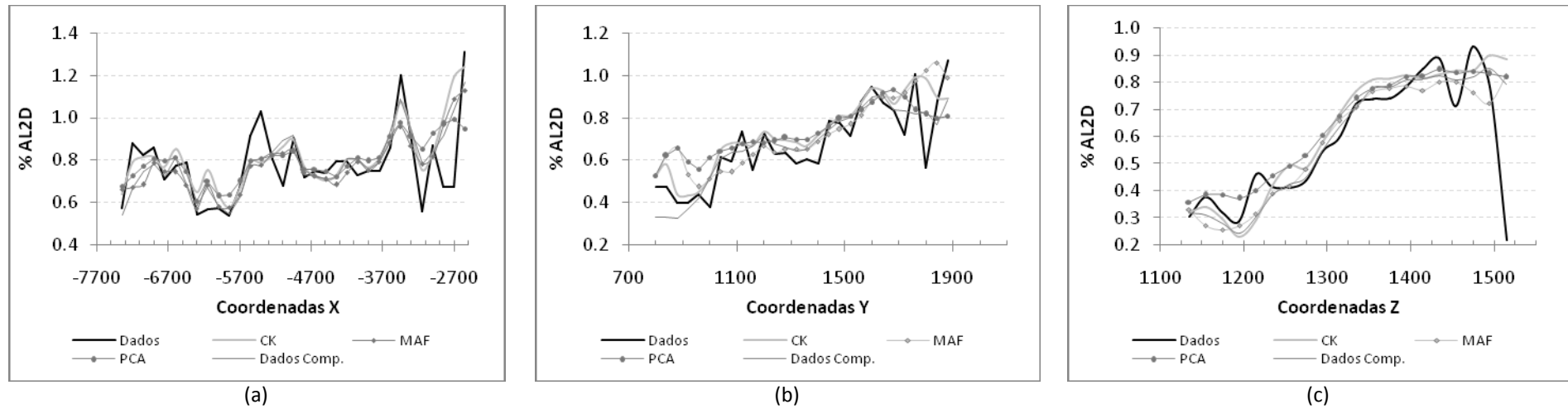


Figura G.1 - Diagramas de análise de deriva para o teor de alumina na faixa 2 (AL2D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

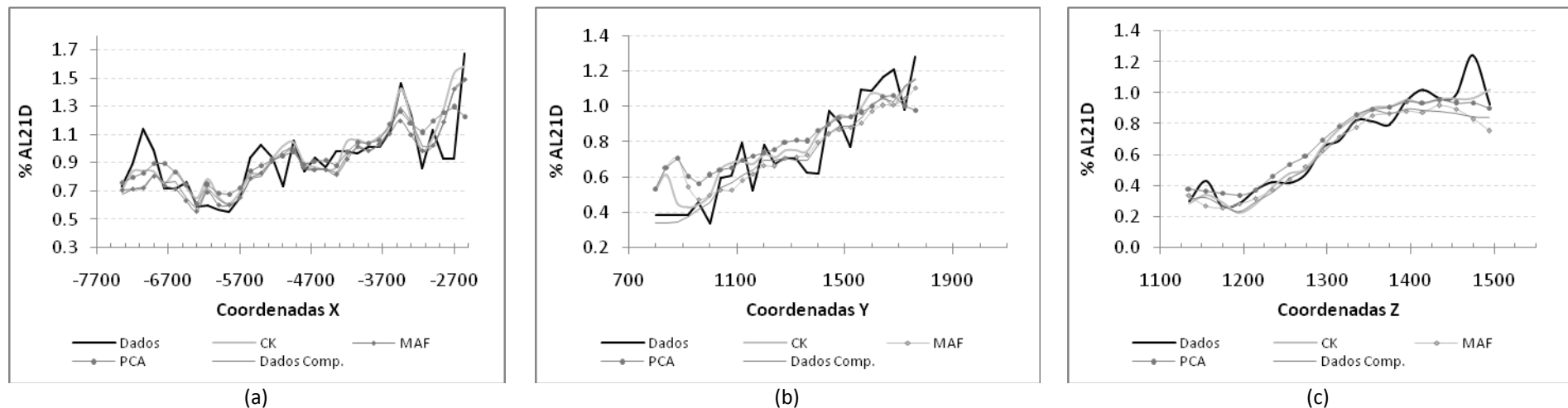


Figura G.2 - Diagramas de análise de deriva para o teor de alumina na faixa 21 (AL21D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

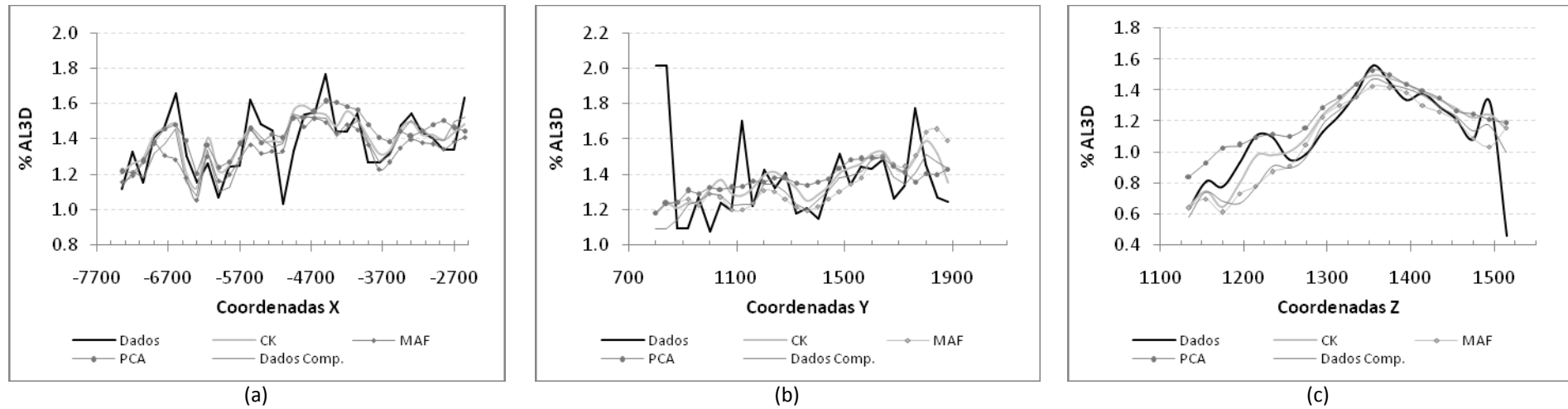


Figura G.3 - Diagramas de análise de deriva para o teor de alumina na faixa 3 (AL3D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

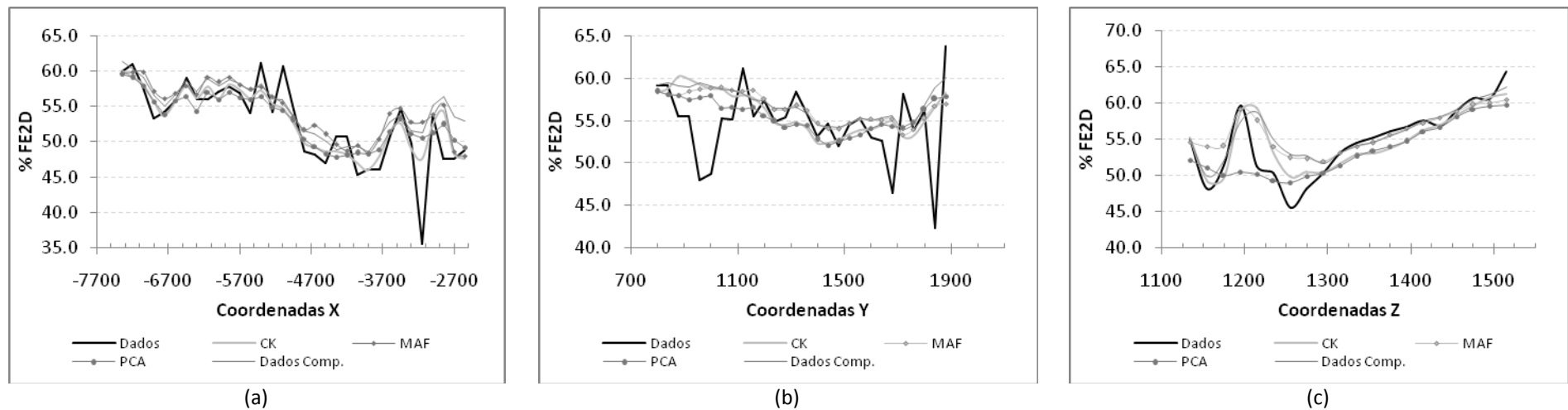


Figura G.4 - Diagramas de análise de deriva para o teor de ferro na faixa 2 (FE2D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

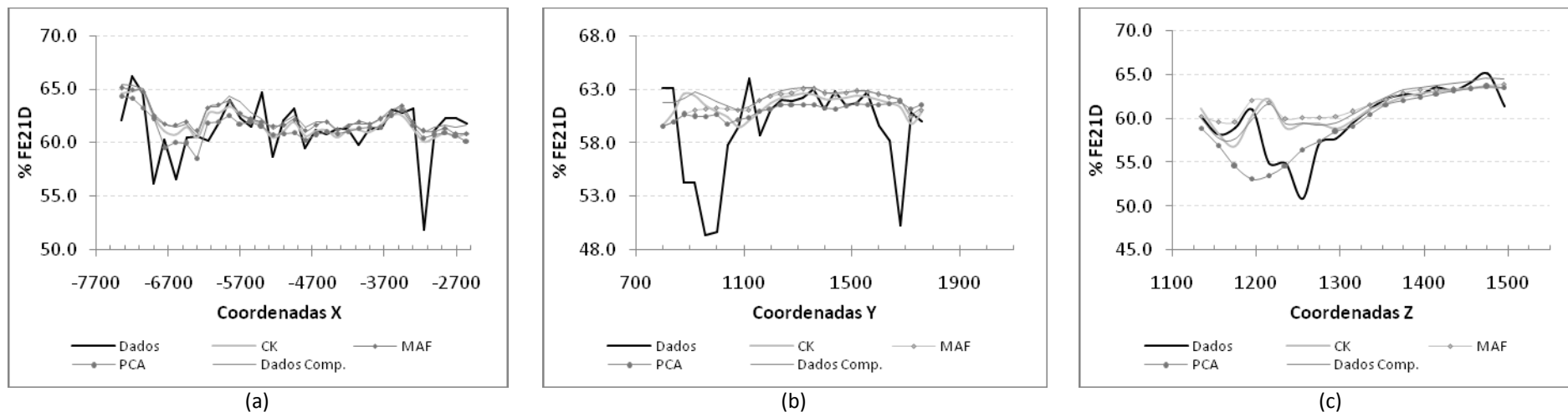


Figura G.5 - Diagramas de análise de deriva para o teor de ferro na faixa 21 (FE21D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

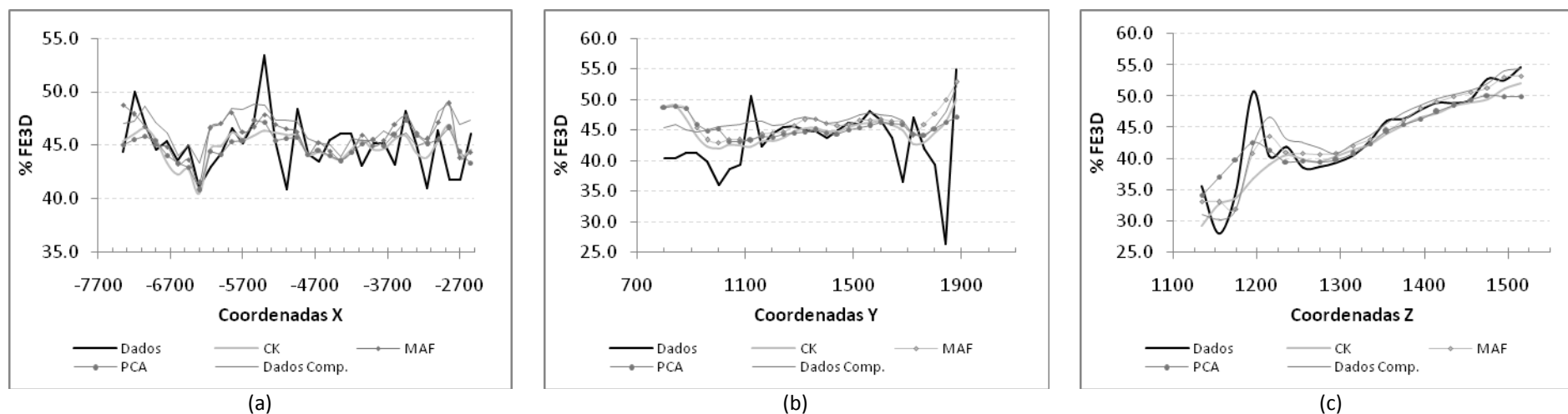


Figura G.6 - Diagramas de análise de deriva para o teor de ferro na faixa 3 (FE3D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).



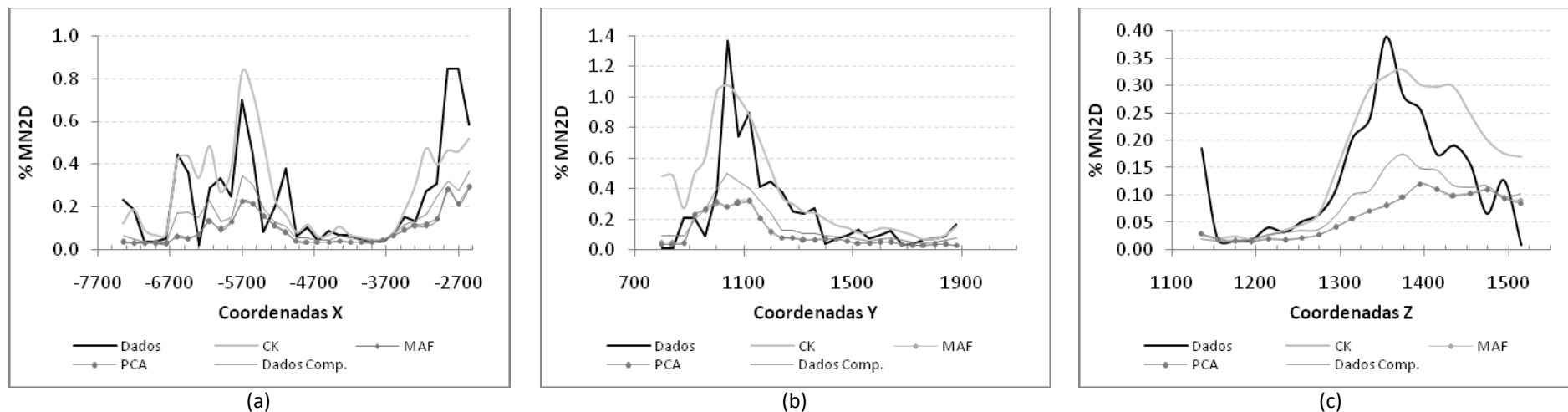


Figura G.7 - Diagramas de análise de deriva para o teor de manganês na faixa 2 (MN2D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

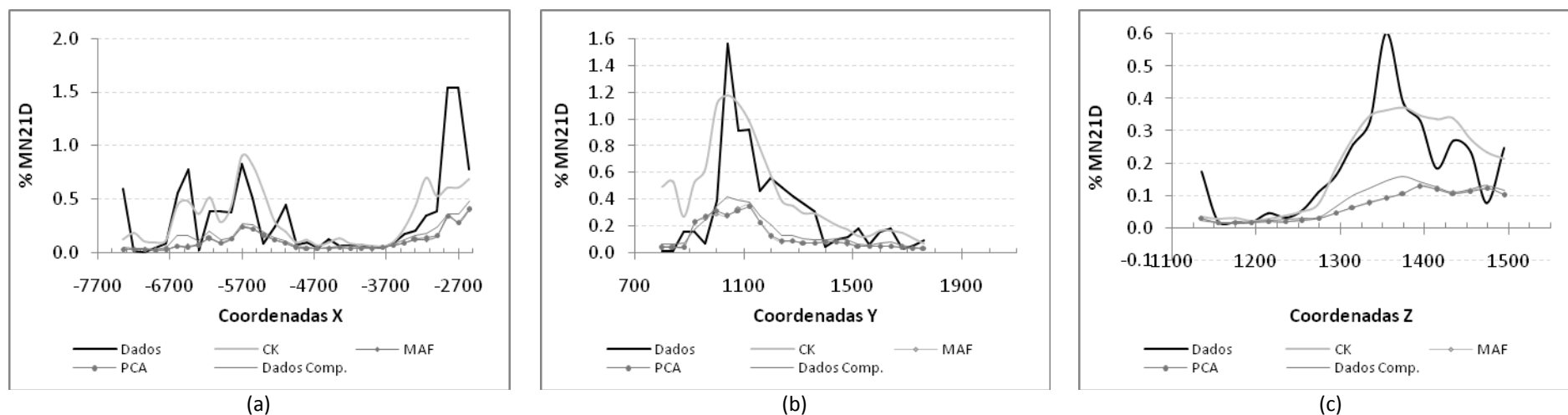


Figura G.8 - Diagramas de análise de deriva para o teor de manganês na faixa 21 (MN21D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

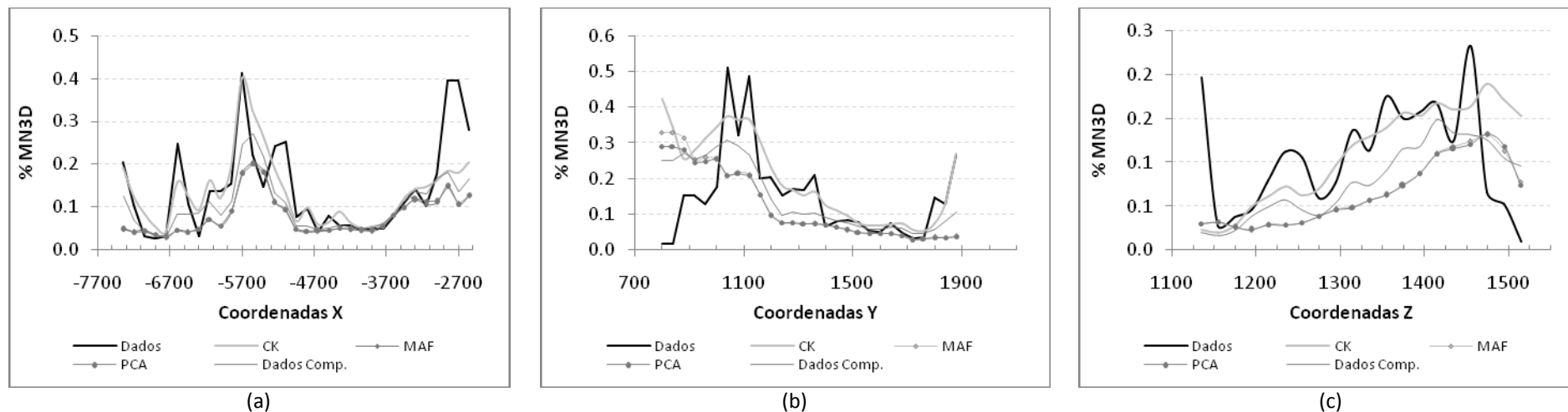


Figura G.9 - Diagramas de análise de deriva para o teor de manganês na faixa 3 (MN3D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

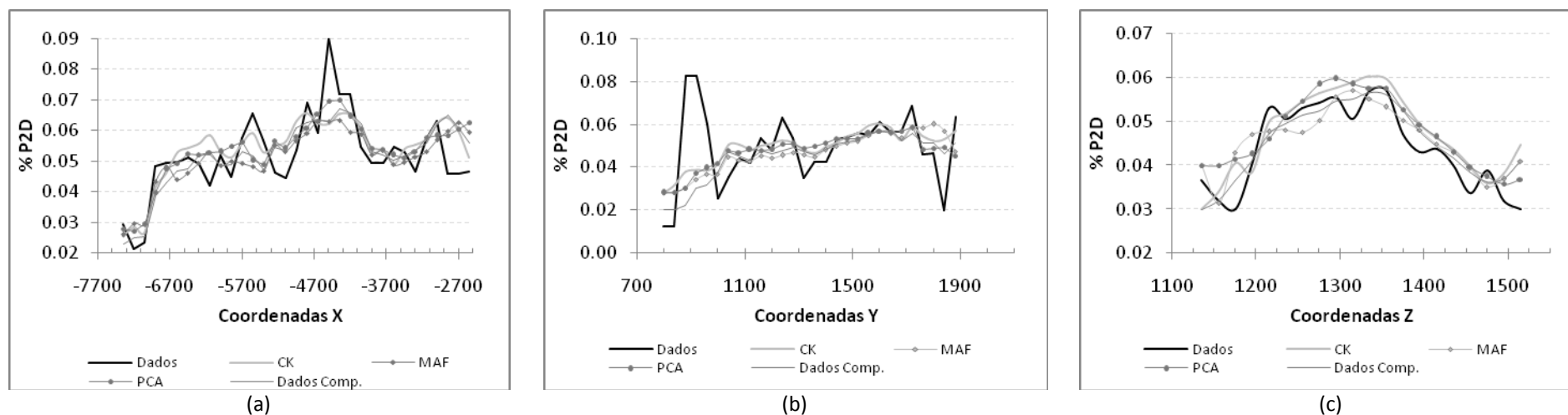


Figura G.10 - Diagramas de análise de deriva para o teor de fósforo na faixa 2 (P2D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

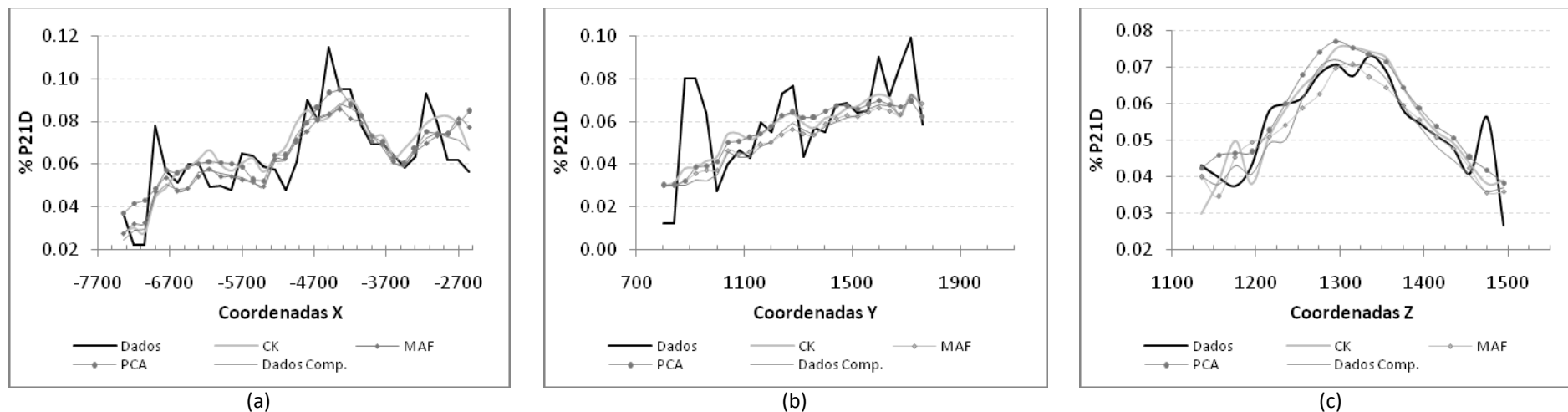


Figura G.11 - Diagramas de análise de deriva para o teor de fósforo na faixa 21(P21D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

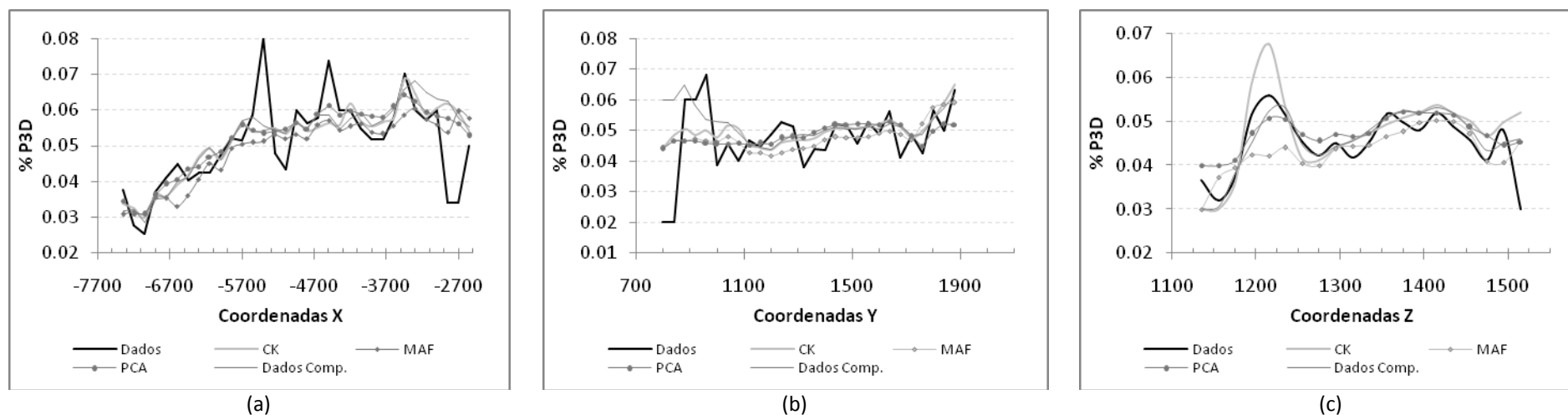


Figura G.12 - Diagramas de análise de deriva para o teor de fósforo na faixa 3 (P3D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

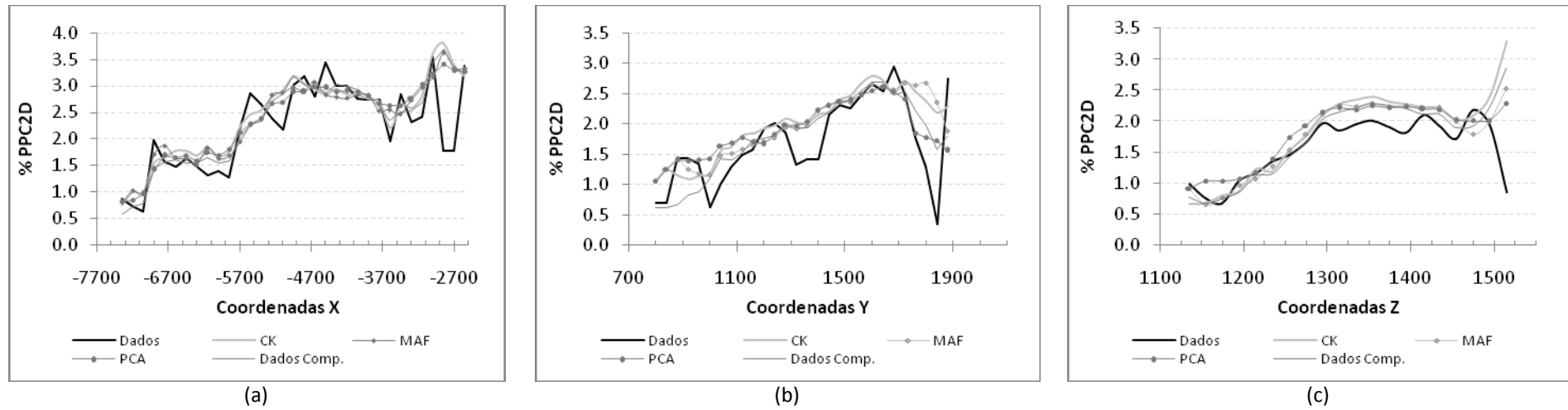


Figura G.13 - Diagramas de análise de deriva para o teor das perdas por calcinação na faixa 2 (PPC2D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

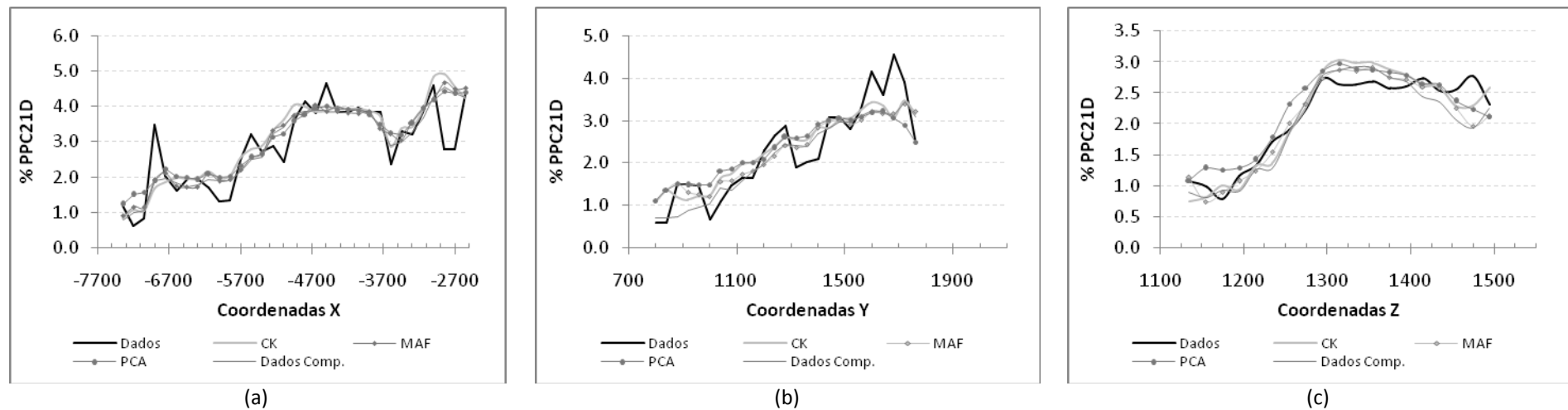


Figura G.14 - Diagramas de análise de deriva para o teor das perdas por calcinação na faixa 21 (PPC21D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

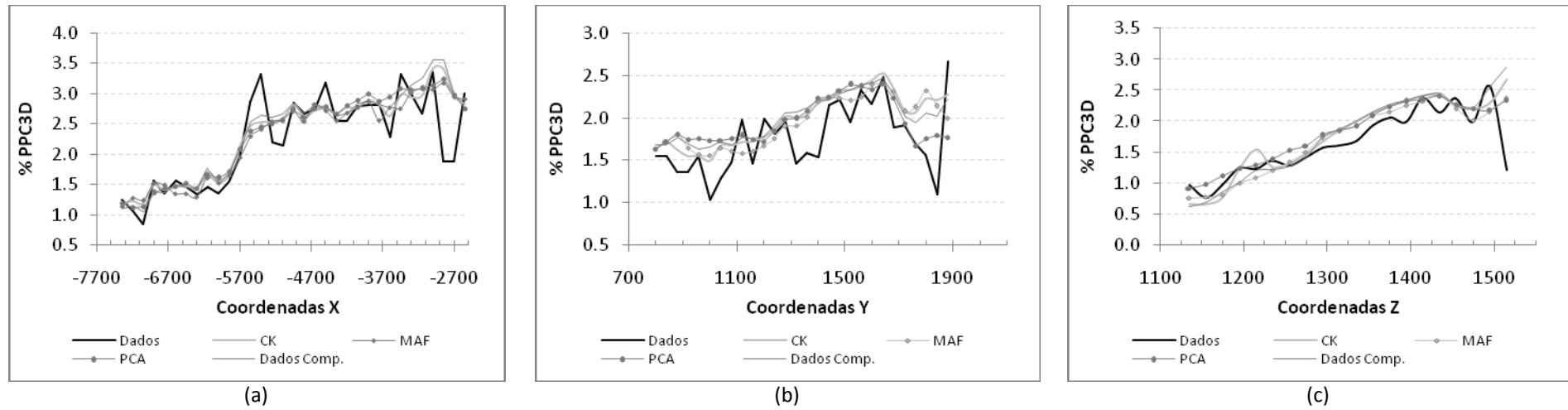


Figura G.15 - Diagramas de análise de deriva para o teor das perdas por calcinação na faixa 3 (PPC3D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

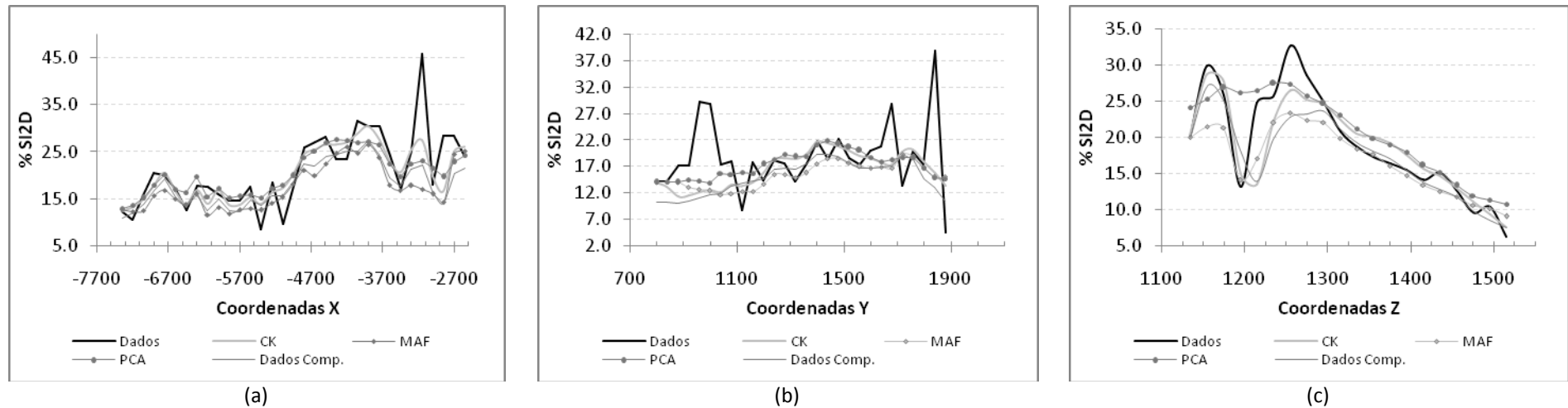


Figura G.16 - Diagramas de análise de deriva para o teor de sílica na faixa 2 (SI2D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

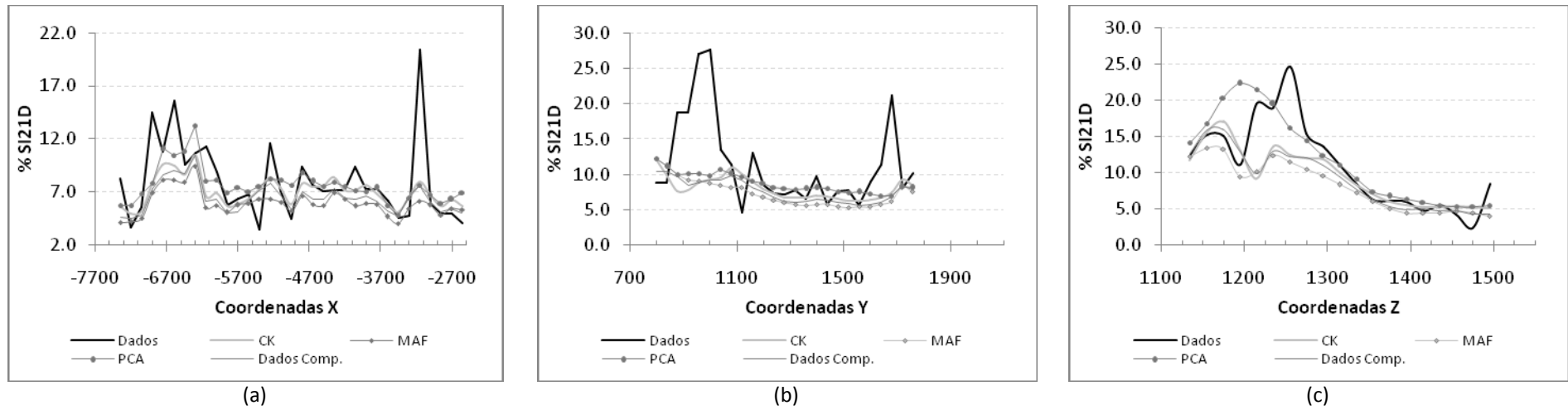


Figura G.17 - Diagramas de análise de deriva para o teor de sílica na faixa 21 (SI21D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

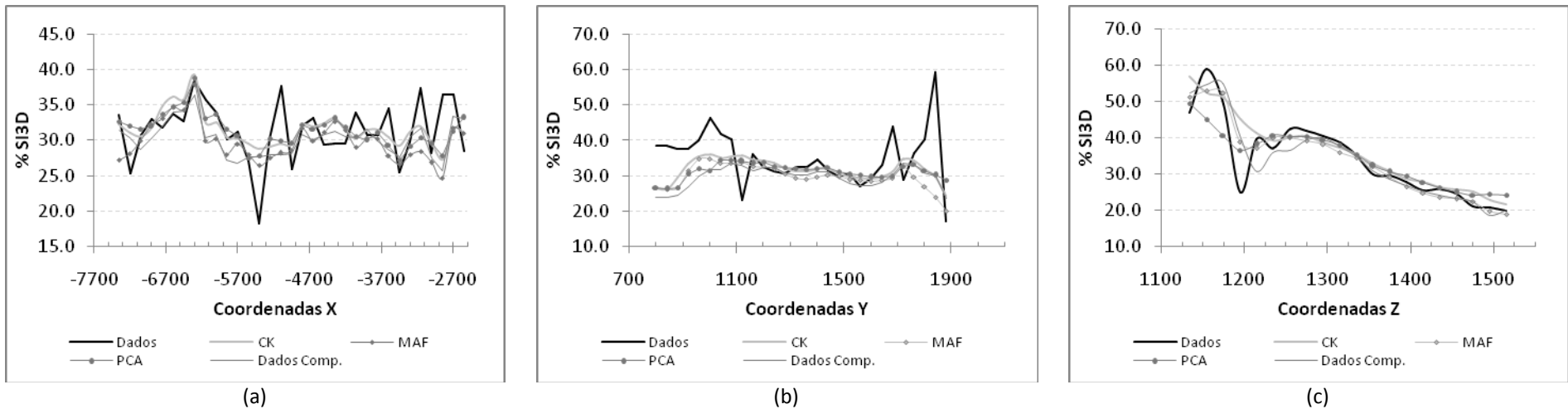


Figura G.18 - Diagramas de análise de deriva para o teor de sílica na faixa 3 (SI3D) ao longo dos eixos (a) X, (b) Y e (c) Z, com as tendências dos dados originais (Dados) e das estimativas obtidas por cokrigagem ordinária (CK), krigagem ordinária dos fatores MAF, krigagem ordinária das componentes principais (PCA) e cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (Dados Comp.).

## G.2 Diagramas de dispersão

Nas Figuras G.19 a G.36 apresentam-se os diagramas de dispersão correspondentes às estimativas obtidas por cokrigagem ordinária, krigagem ordinária dos fatores MAF e das componentes PCA e por cokrigagem das razões-logarítmicas aditivas correspondentes às faixas 2, 21 e 3.

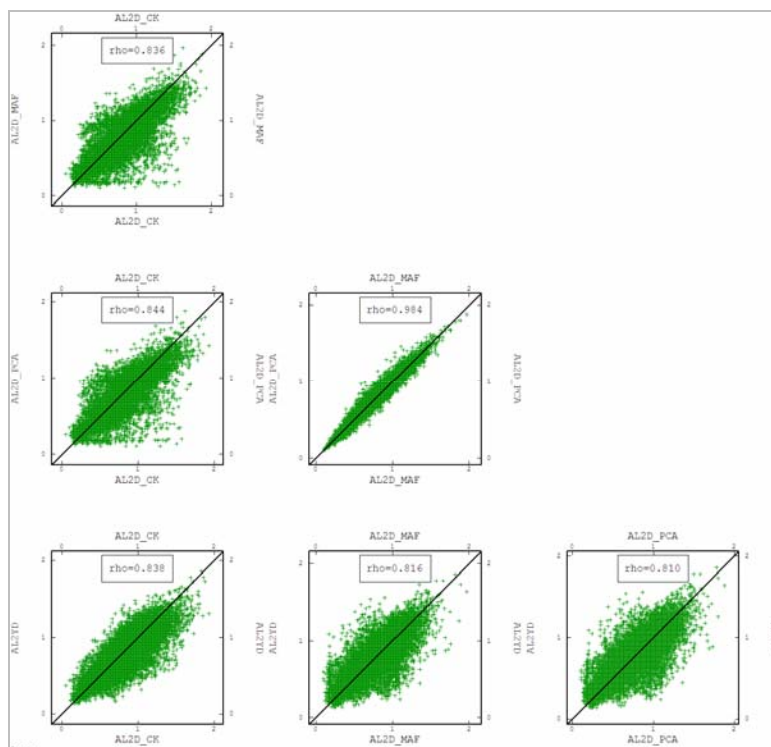


Figura G.19 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de alumina na faixa 2, obtidas por cokrigagem ordinária (AL2D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (AL2D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (AL2D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL2YD).

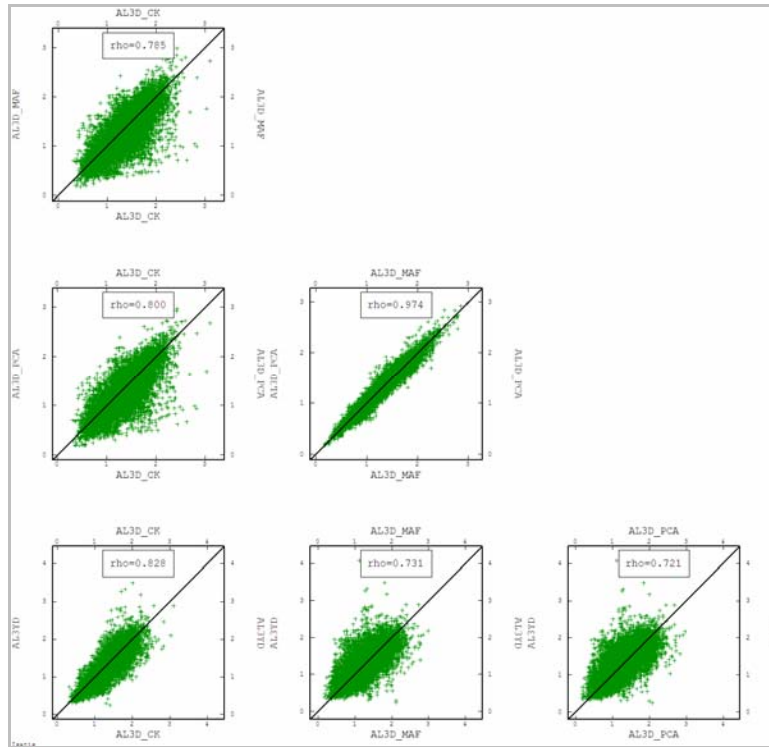


Figura G.20 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de alumina na faixa 3, obtidas por cokrigagem ordinária (AL3D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (AL3D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (AL3D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL3YD).

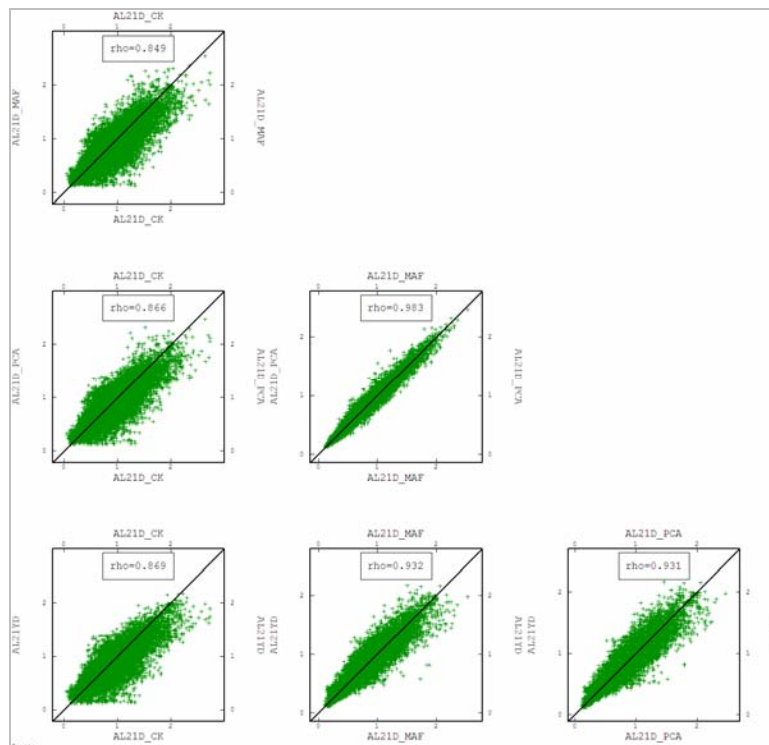


Figura G.21 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de alumina na faixa 21, obtidas por cokrigagem ordinária (AL21D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (AL21D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (AL21D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL21YD).



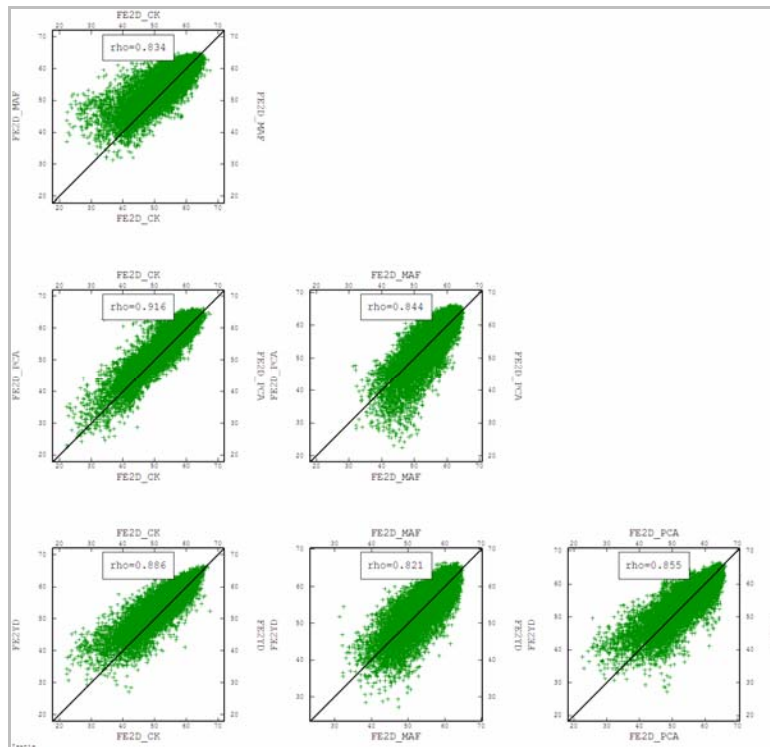


Figura G.22 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de ferro na faixa 2, obtidas por cokrigagem ordinária (FE2D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FE2D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FE2D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE2YD).

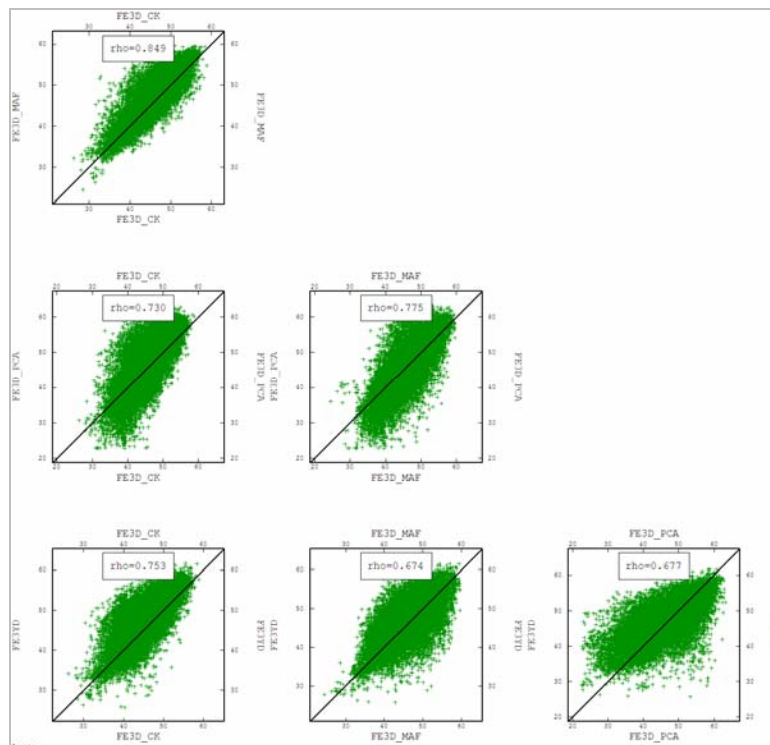


Figura G.23 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de ferro na faixa 3, obtidas por cokrigagem ordinária (FE3D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FE3D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FE3D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE3YD).

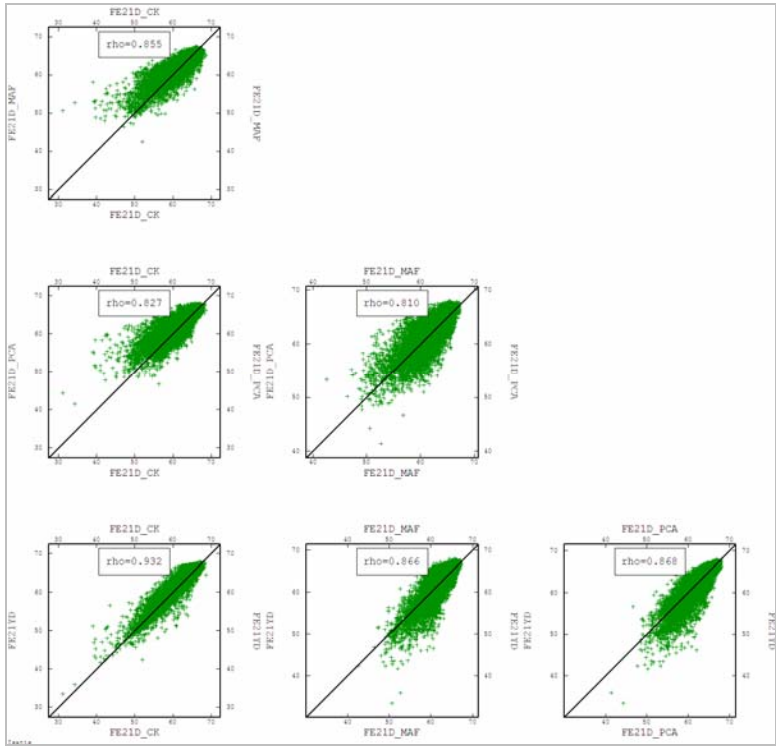


Figura G.24 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de ferro na faixa 21, obtidas por cokrigagem ordinária (FE21D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (FE21D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (FE21D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE21YD).

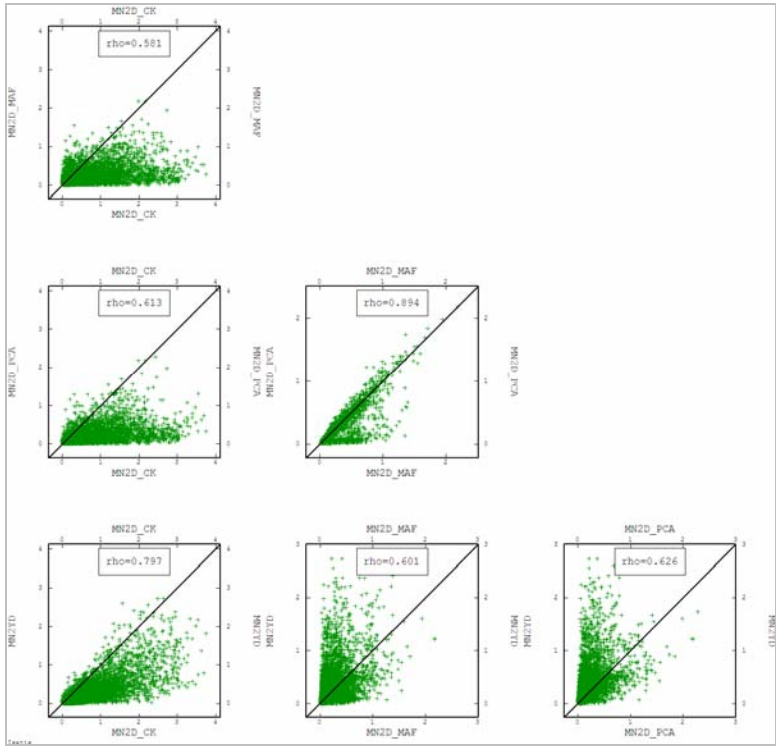


Figura G.25 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de manganês na faixa 2, obtidas por cokrigagem ordinária (MN2D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MN2D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MN2D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN2YD).

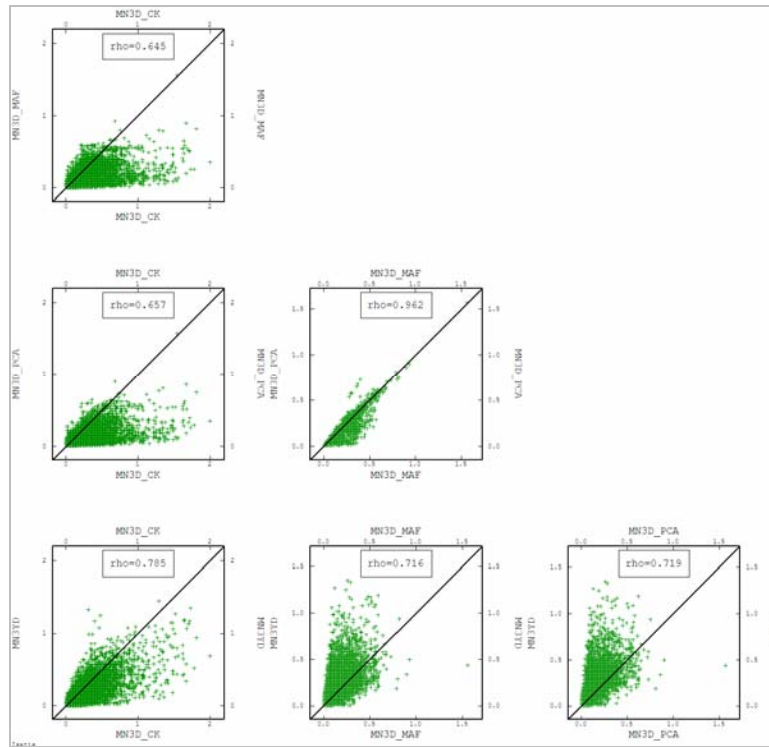


Figura G.26 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de manganês na faixa 3, obtidas por cokrigagem ordinária (MN3D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MN3D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MN3D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN3YD).

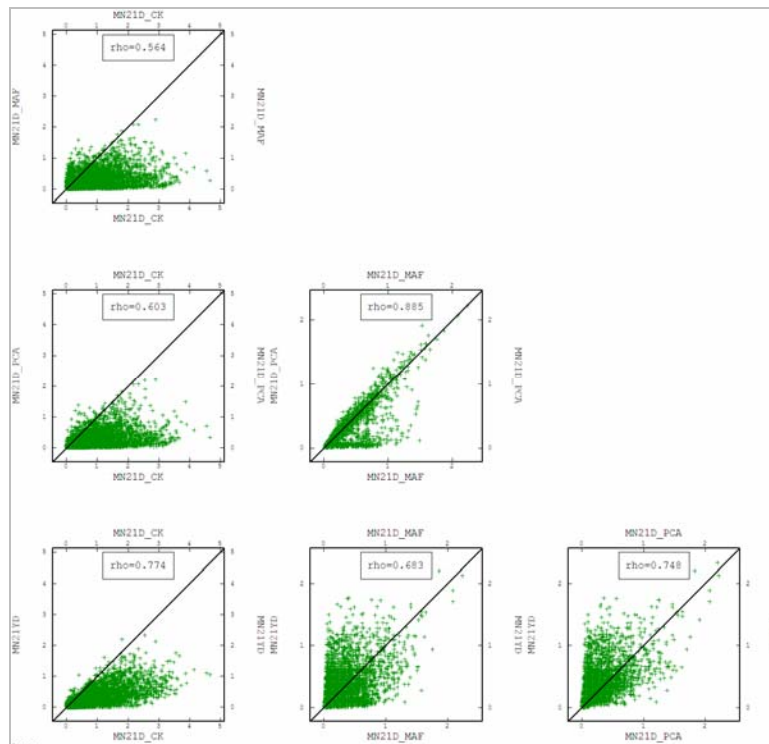


Figura G.27 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de manganês na faixa 21, obtidas por cokrigagem ordinária (MN21D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (MN21D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (MN21D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN21YD).

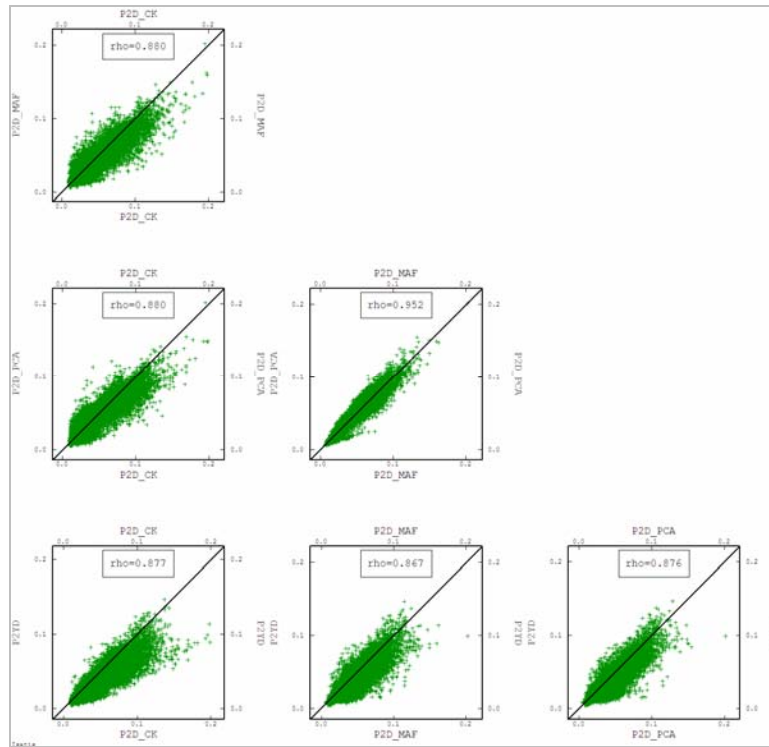


Figura G.28 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de fósforo na faixa 2, obtidas por cokrigagem ordinária (P2D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (P2D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (P2D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P2YD).

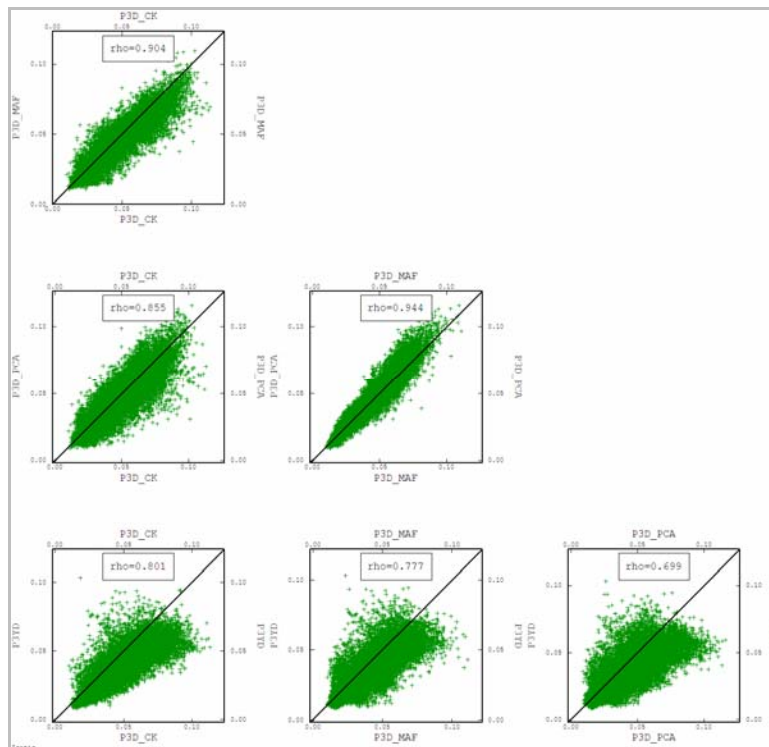


Figura G.29 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de fósforo na faixa 3, obtidas por cokrigagem ordinária (P3D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (P3D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (P3D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P3YD).

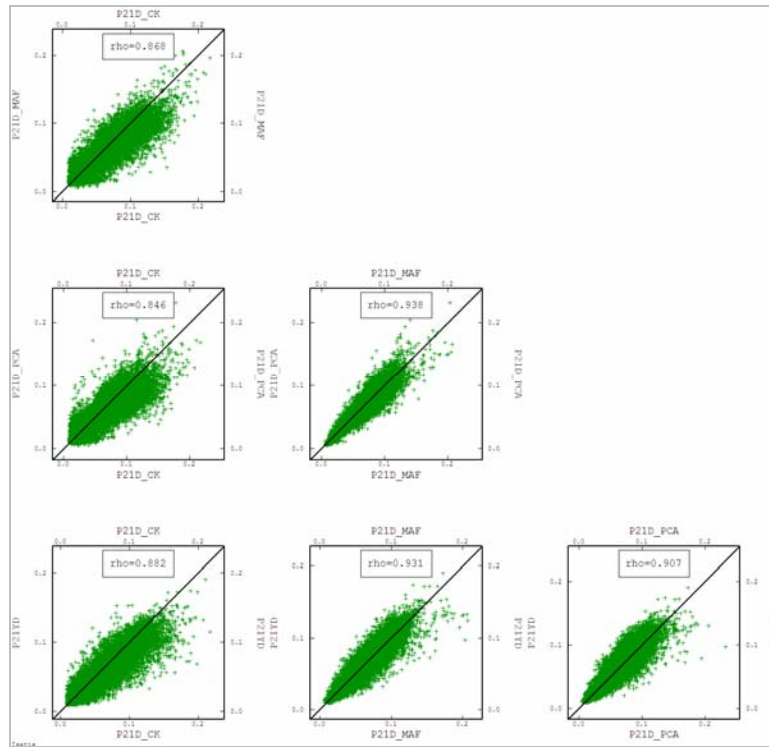


Figura G.30 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor de fósforo na faixa 21, obtidas por cokrigagem ordinária (P21D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (P21D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (P21D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P21YD).

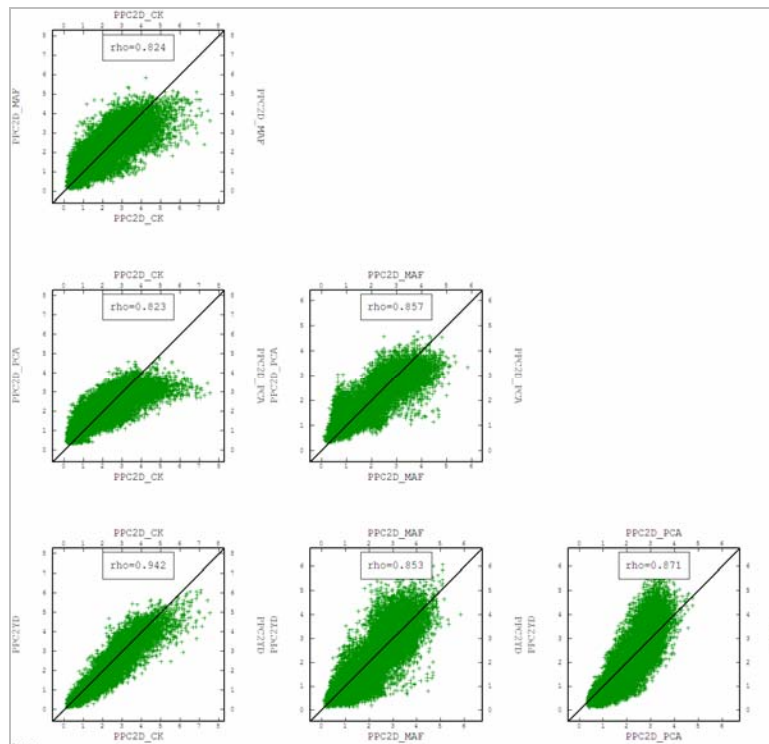


Figura G.31 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 2, obtidas por cokrigagem ordinária (PPC2D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PPC2D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PPC2D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC2YD).

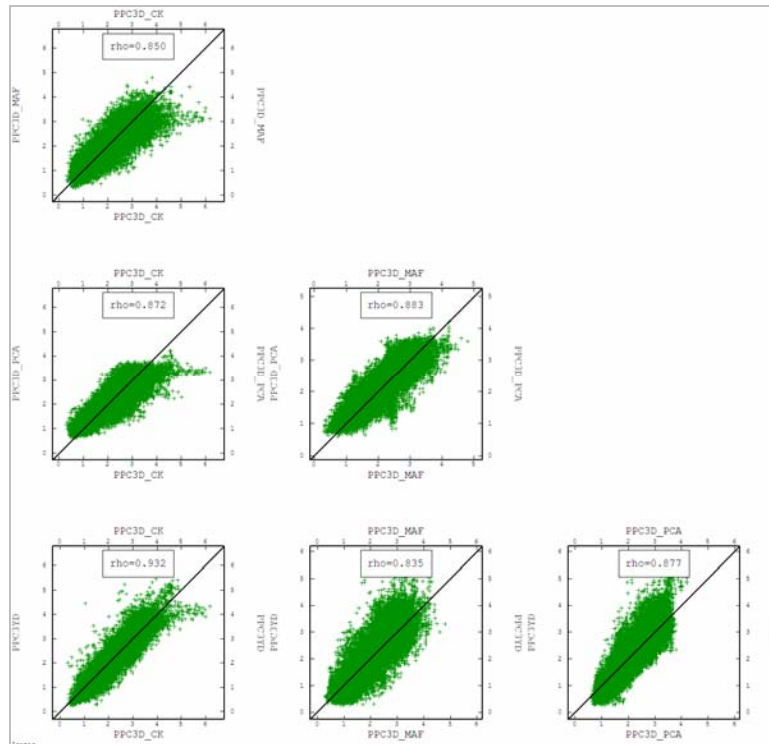


Figura G.32 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 3, obtidas por cokrigagem ordinária (PPC3D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PPC3D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PPC3D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC3YD).

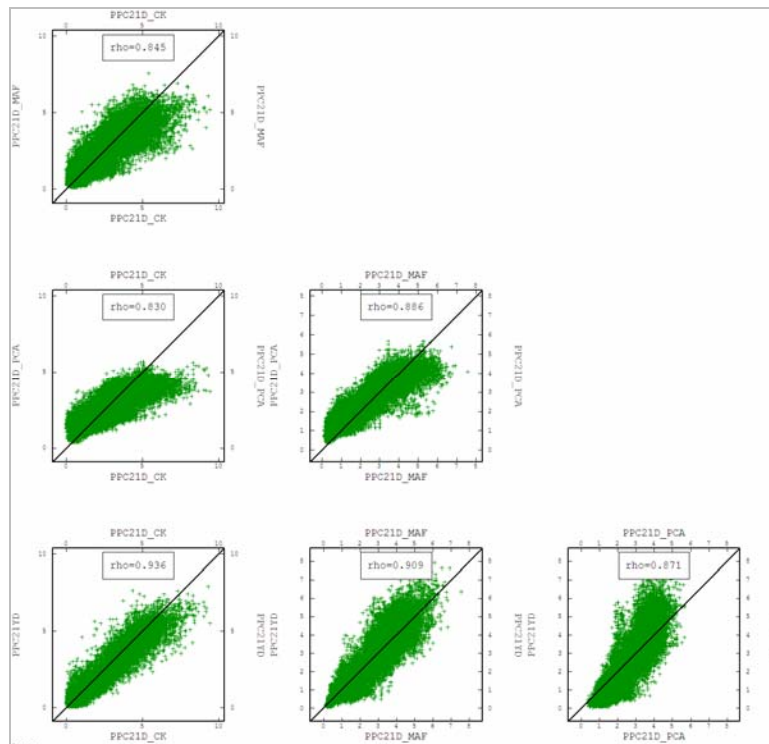


Figura G.33 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 21, obtidas por cokrigagem ordinária (PPC21D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (PPC21D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (PPC21D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC21YD).

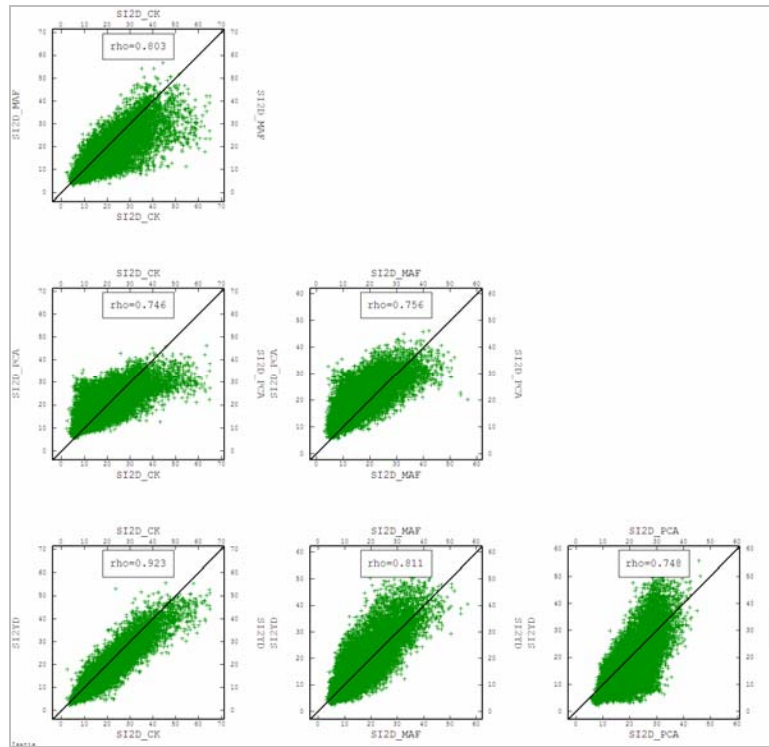


Figura G.34 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor da sílica na faixa 2, obtidas por cokrigagem ordinária (SI2D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SI2D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA

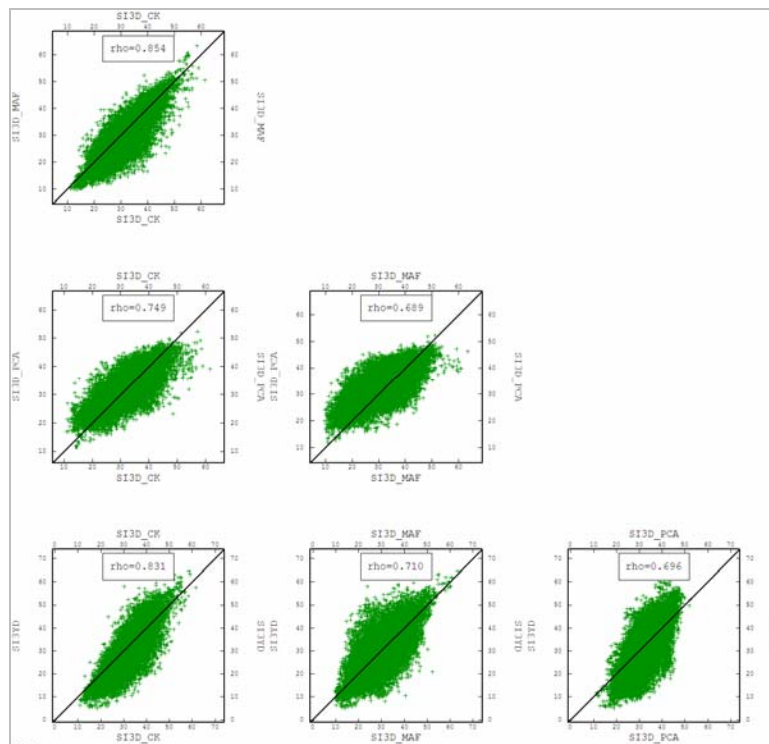


Figura G.35 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor da sílica na faixa 3, obtidas por cokrigagem ordinária (SI3D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SI3D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (SI3D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI3YD).

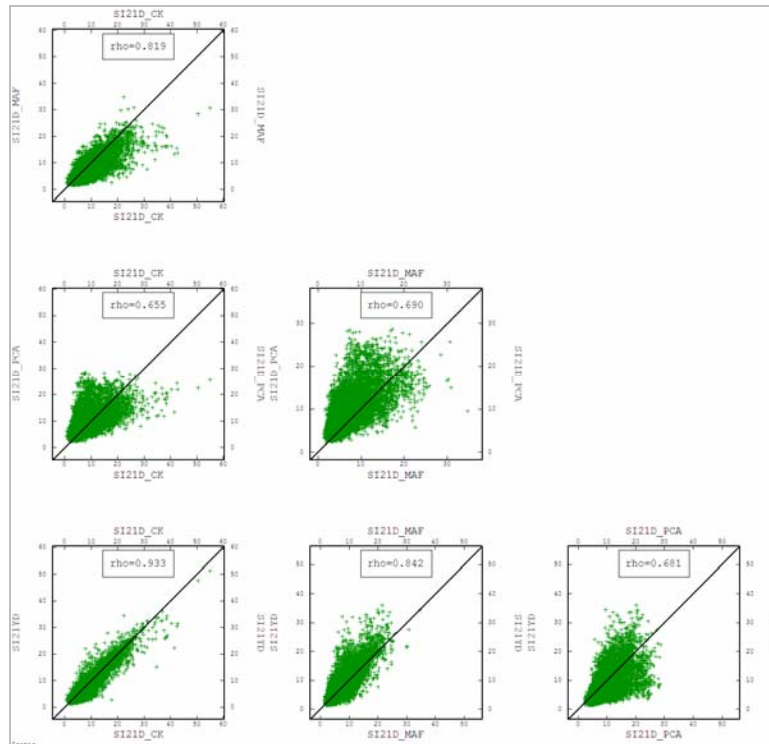


Figura G.36 - Diagramas de dispersão das estimativas do teor da sílica na faixa 21, obtidas por cokrigagem ordinária (SI21D\_CK), krigagem ordinária das componentes MAF (SI21D\_MAF), krigagem ordinária das componentes PCA (SI21D\_PCA) e por cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI21YD).

### G.3 Mapas das estimativas

A seguir são apresentados os mapas das estimativas obtidas pelas diferentes metodologias consideradas, nas frações 2, 21 e 3, escolhendo uma seção horizontal (plano XY) do modelo de blocos, com um número de blocos suficiente para avaliar visualmente os resultados, em  $Z=1345\text{m}$  (Figuras G.37 a G.54).



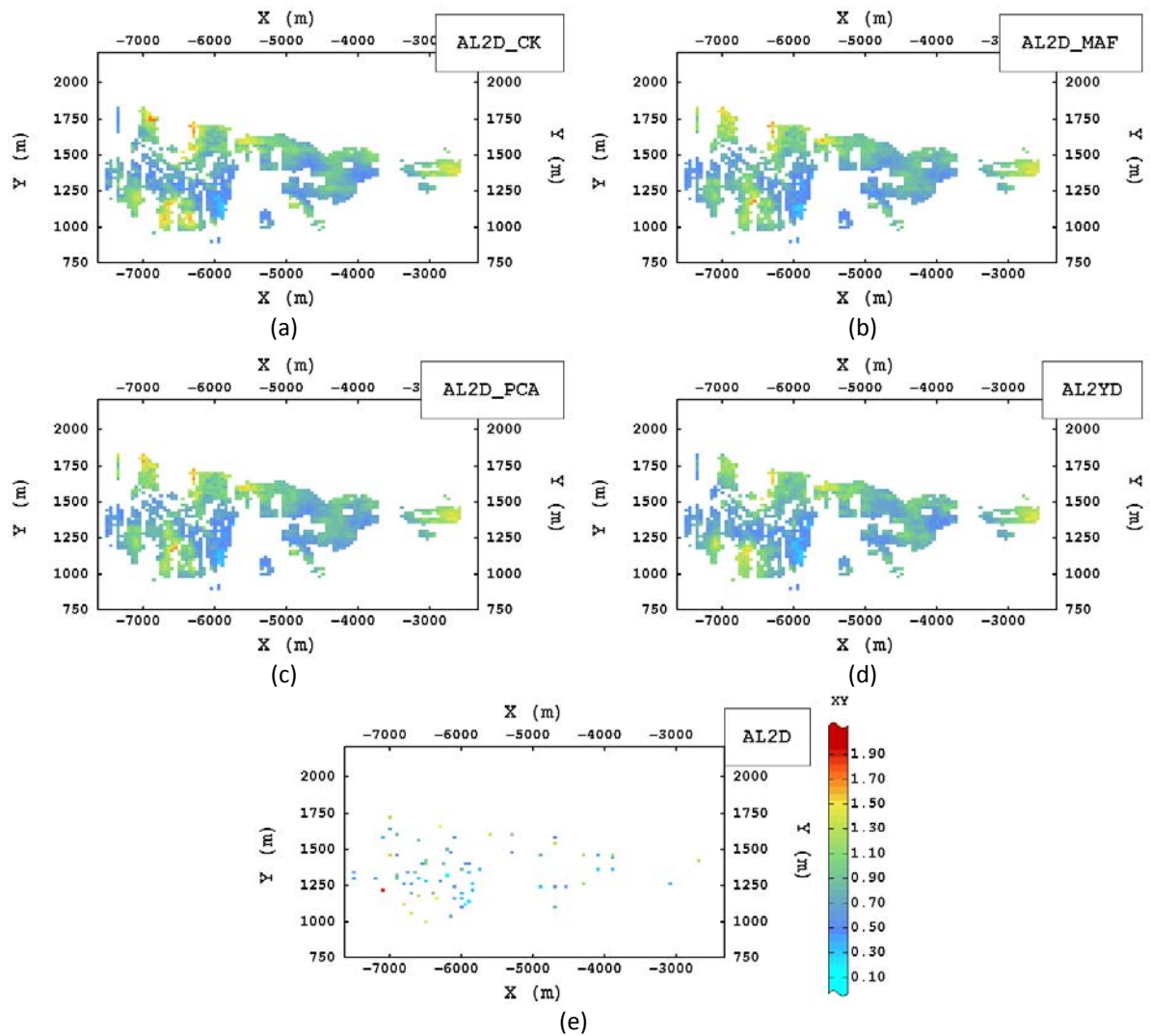


Figura G.37 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (AL2D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (AL2D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (AL2D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL2YD), e (e) o mapa das amostras (AL2D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

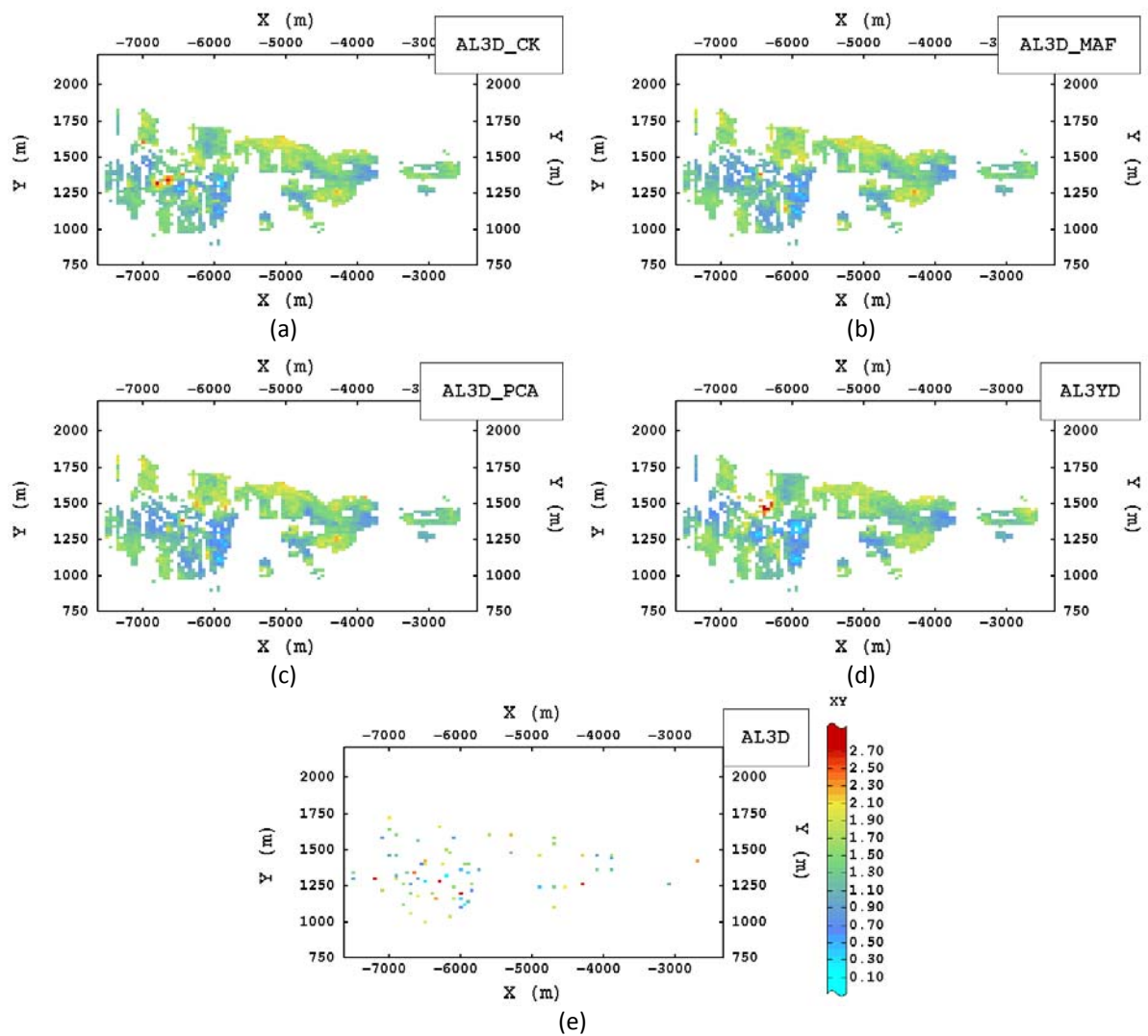


Figura G.38 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (AL3D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (AL3D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (AL3D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL3YD), e (e) o mapa das amostras (AL3D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

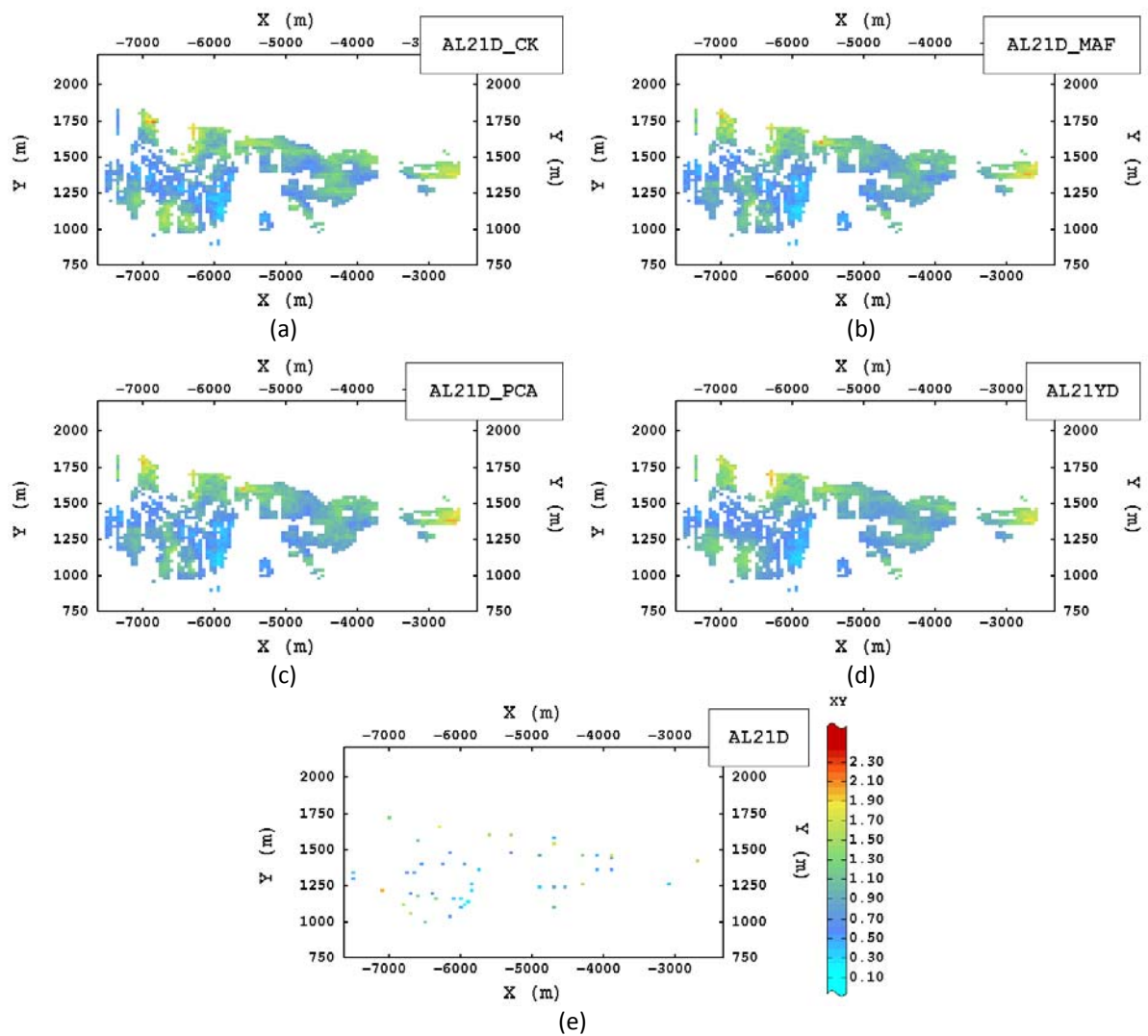


Figura G.39 - Mapas das estimativas do teor de sílica na faixa 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (AL21D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (AL21D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (AL21D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (AL21YD), e (e) o mapa das amostras (AL21D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

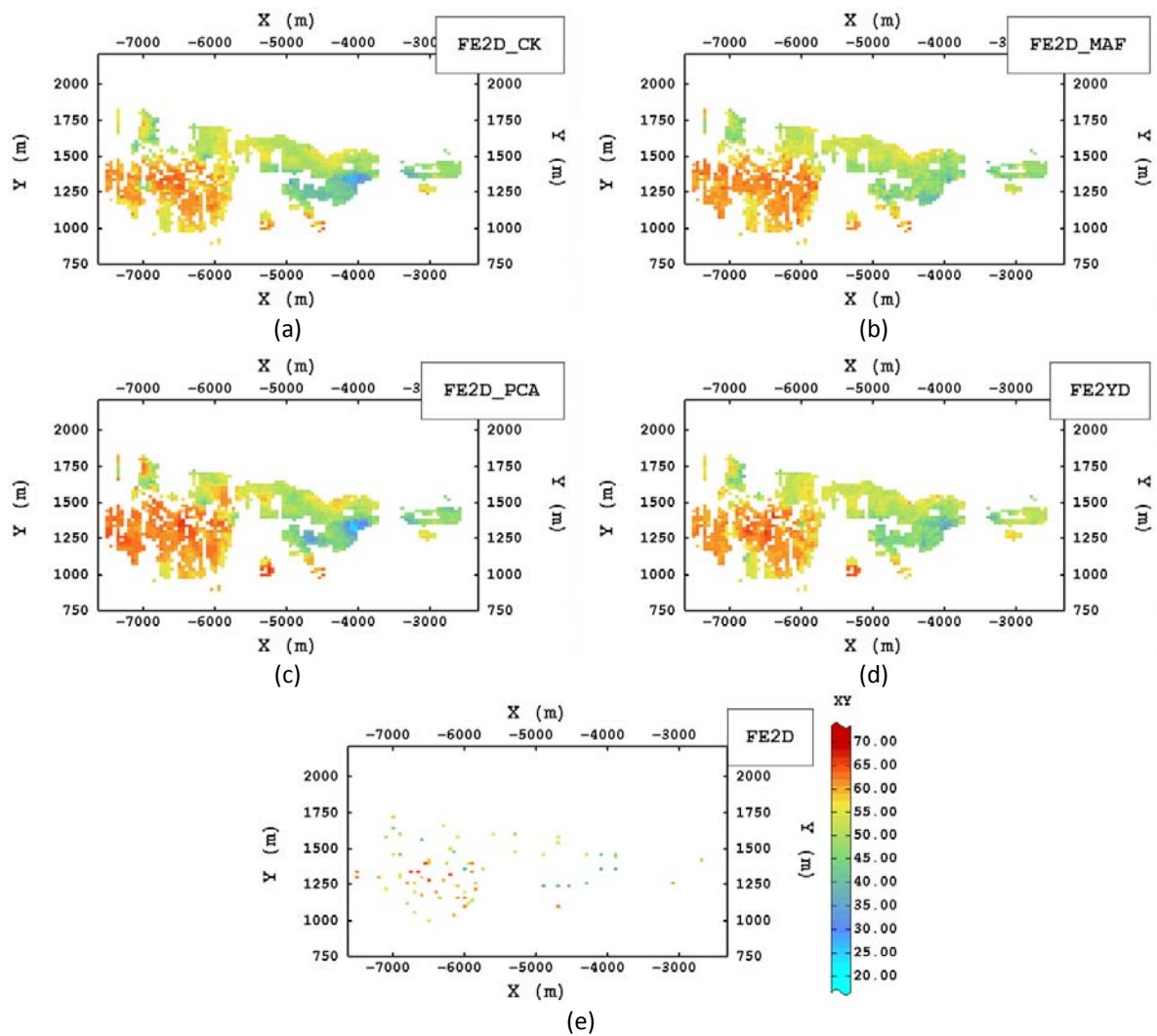


Figura G.40 - Mapas das estimativas do teor de ferro na faixa 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FE2D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FE2D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FE2D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE2D\_YD), e (e) o mapa das amostras (FE2D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

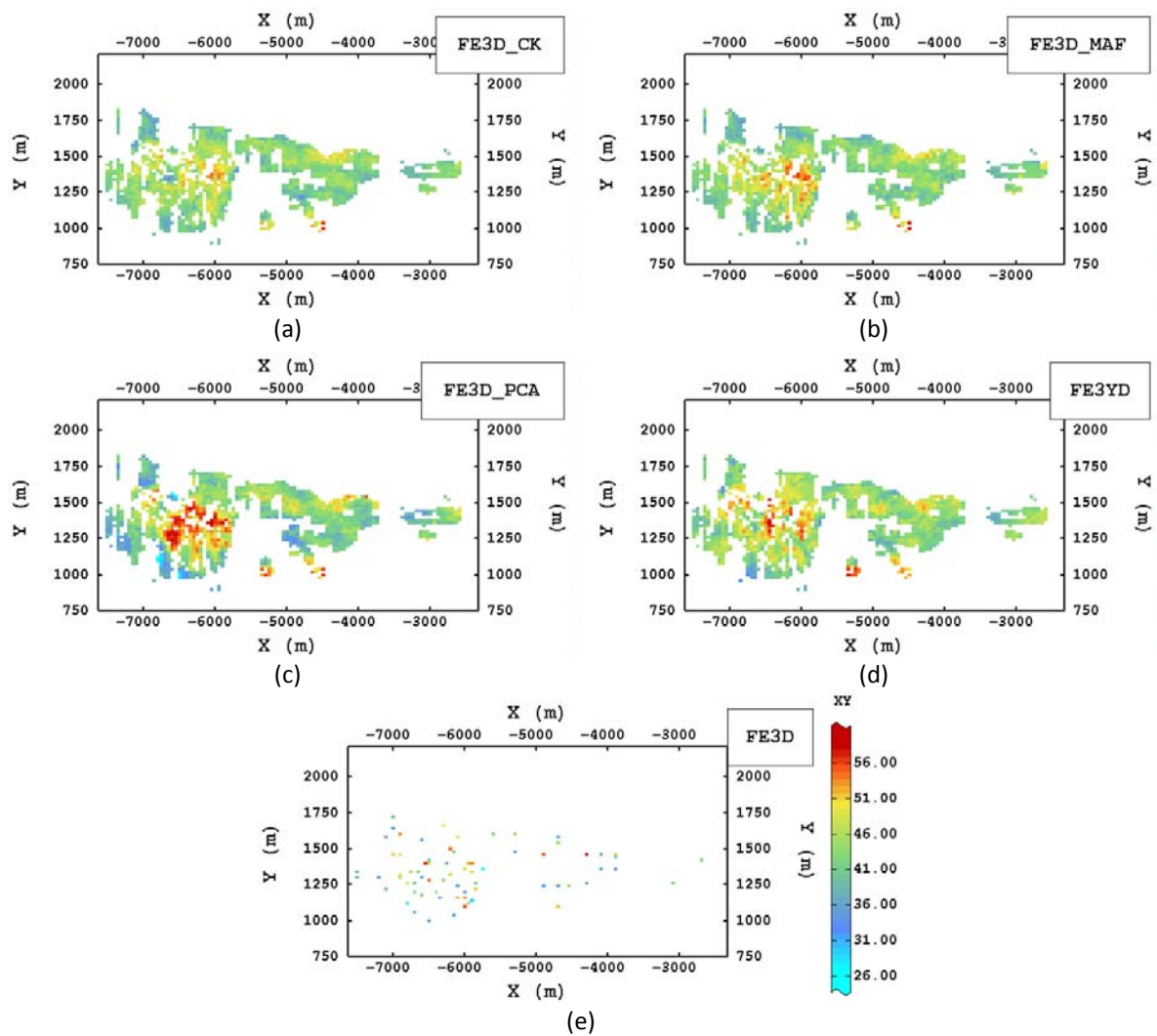


Figura G.41 - Mapas das estimativas do teor de ferro na faixa 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FE3D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FE3D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FE3D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE3YD), e (e) o mapa das amostras (FE3D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

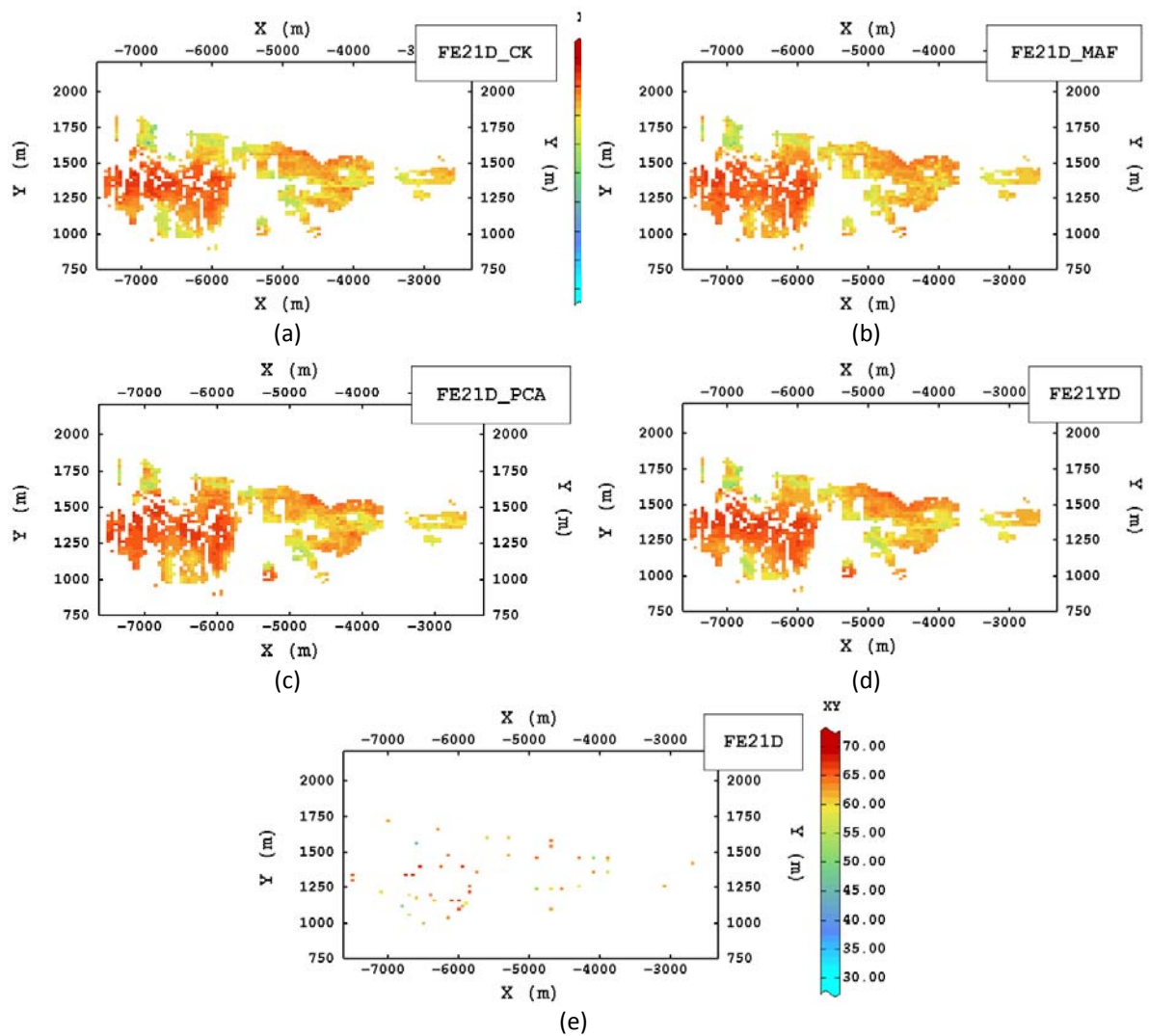


Figura G.42 - Mapas das estimativas do teor de ferro na faixa 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (FE21D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (FE21D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (FE21D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (FE21YD), e (e) o mapa das amostras (FE21D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada (Z=1345m).

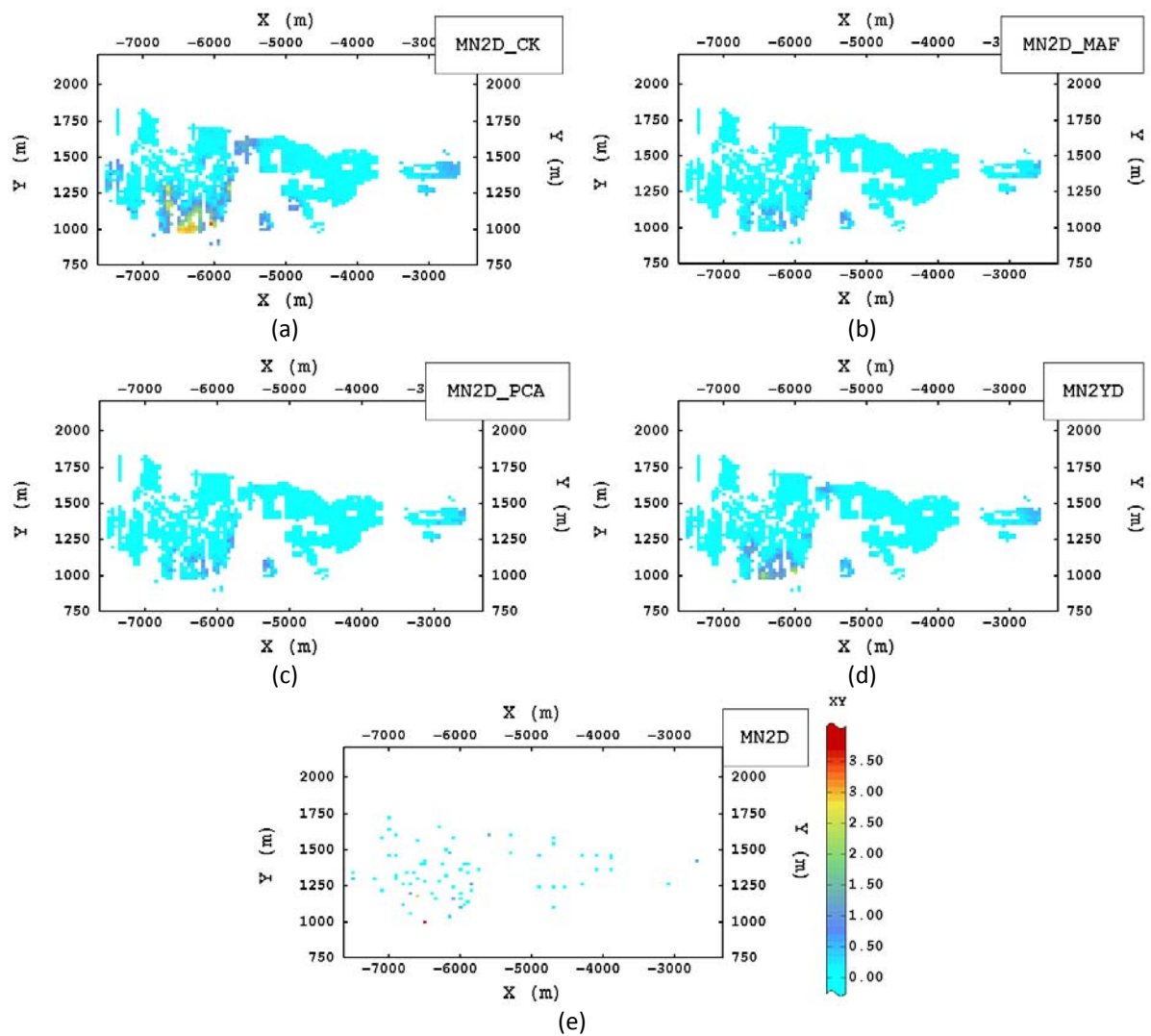


Figura G.43 - Mapas das estimativas do teor de manganês na faixa 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MN2D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MN2D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MN2D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN2YD), e (e) o mapa das amostras (MN2D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

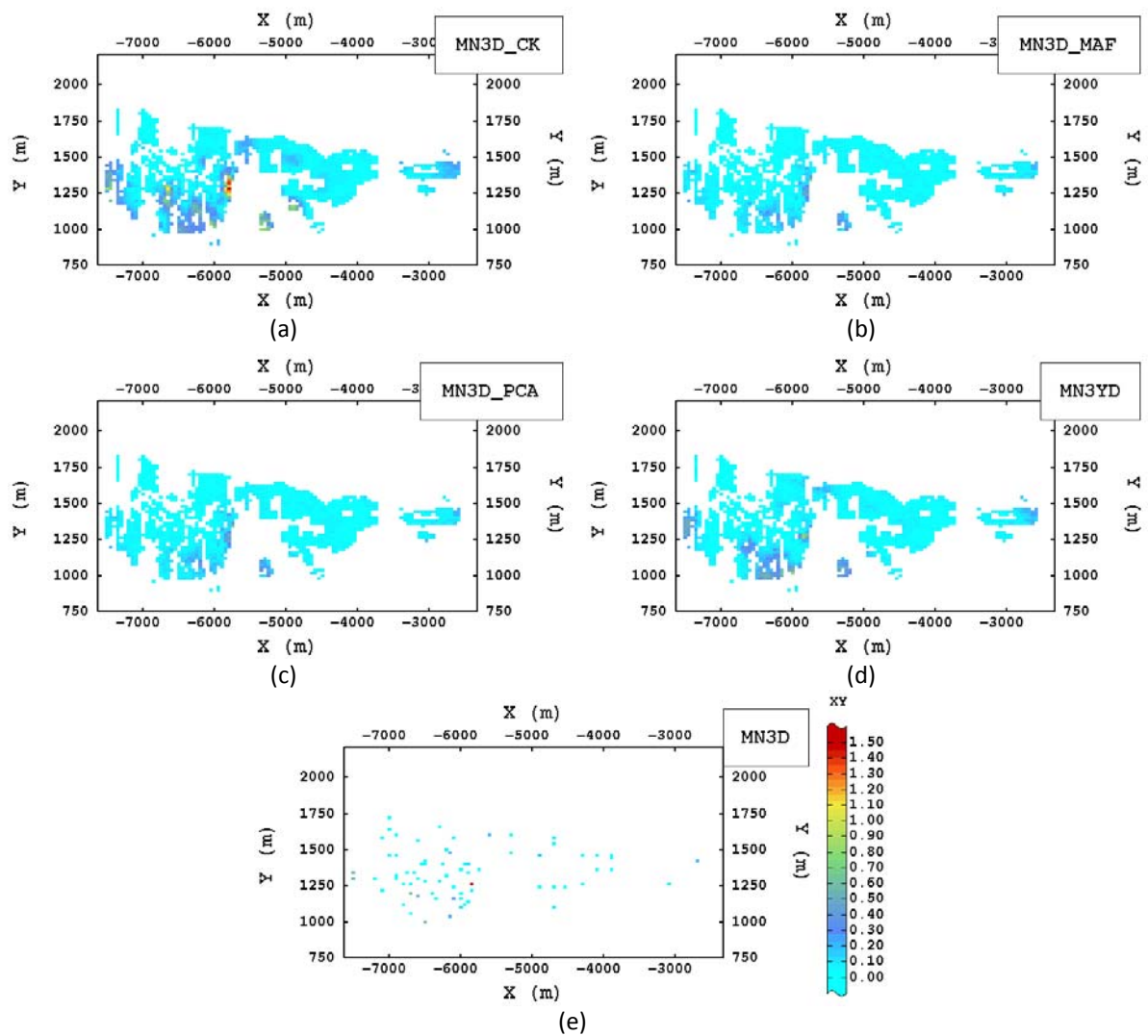


Figura G.44 - Mapas das estimativas do teor de manganês na faixa 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MN3D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MN3D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MN3D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN3YD), e (e) o mapa das amostras (MN3D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).



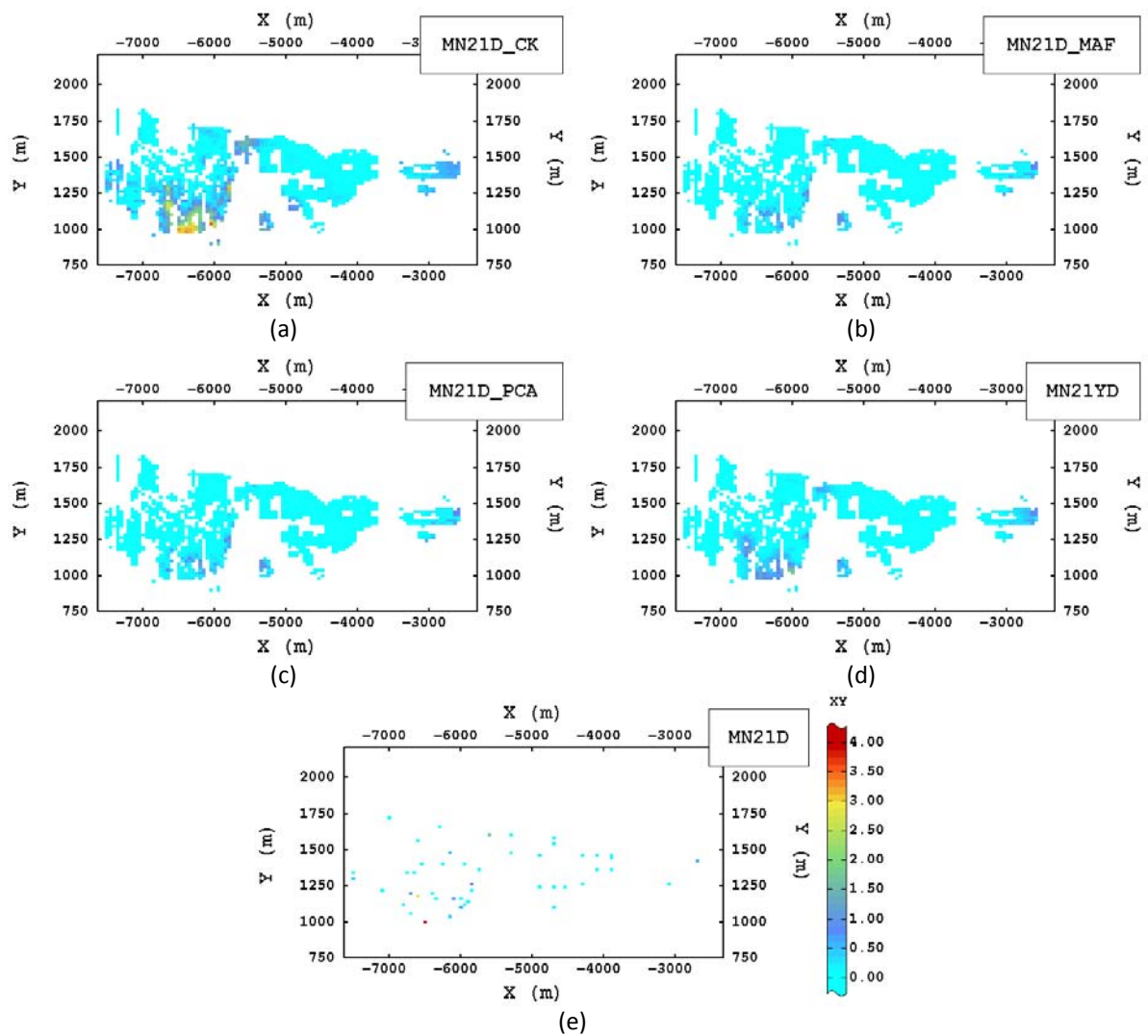


Figura G.45 - Mapas das estimativas do teor de manganês na faixa 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (MN21D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (MN21D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (MN21D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (MN21YD), e (e) o mapa das amostras (MN21D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

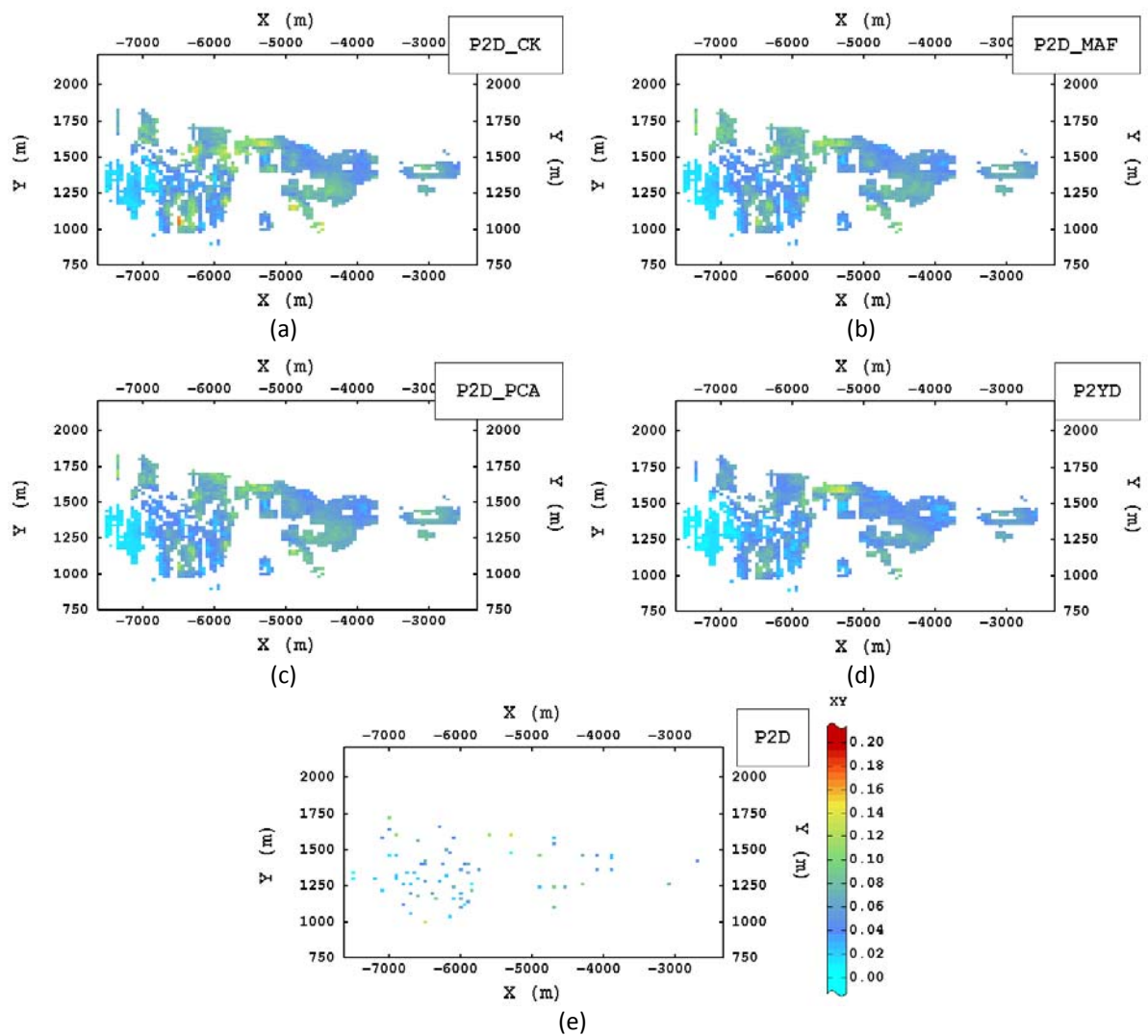


Figura G.46 - Mapas das estimativas do teor de fósforo na faixa 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (P2D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (P2D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (P2D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P2YD), e (e) o mapa das amostras (P2D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

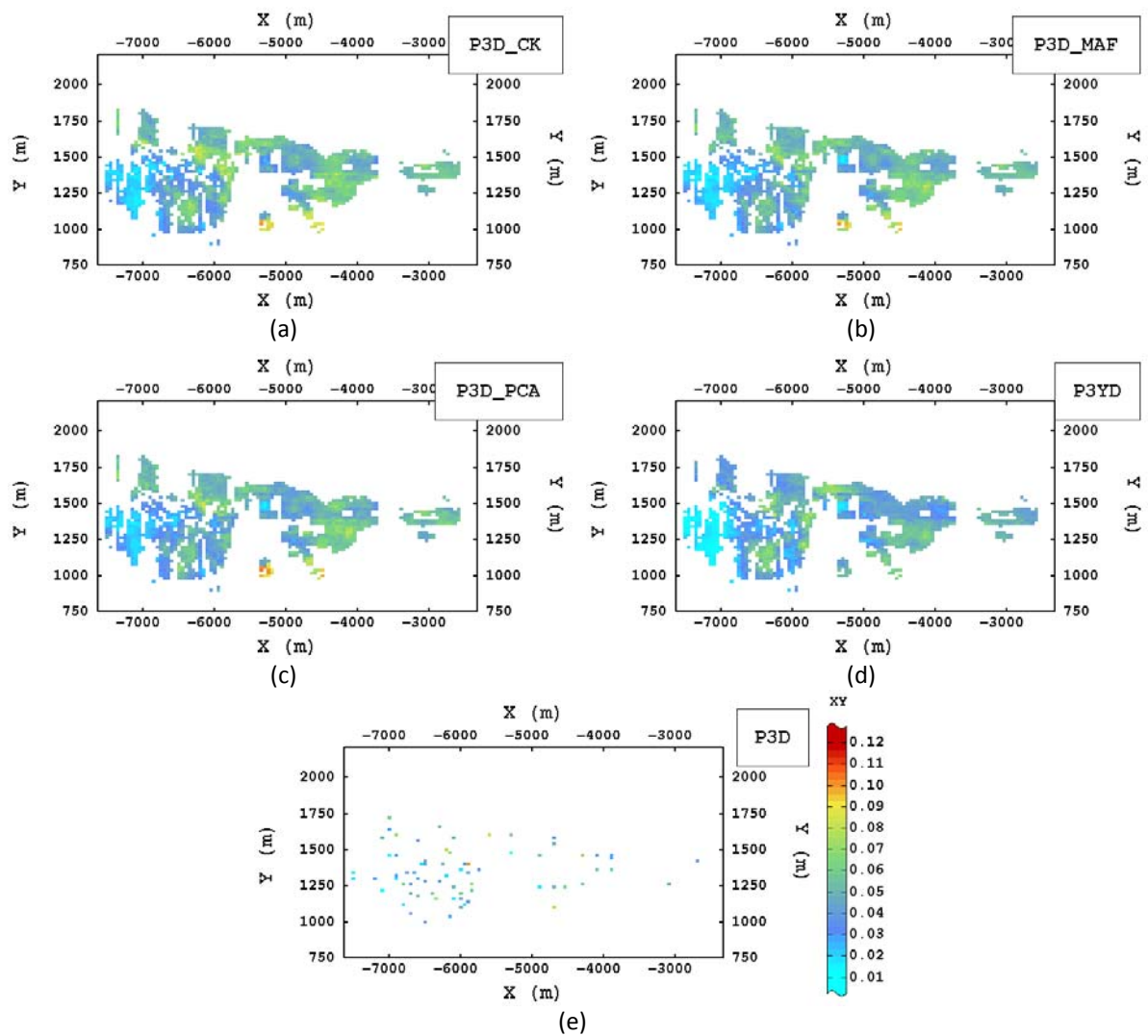


Figura G.47 - Mapas das estimativas do teor de fósforo na faixa 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (P3D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (P3D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (P3D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P3YD), e (e) o mapa das amostras (P3D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

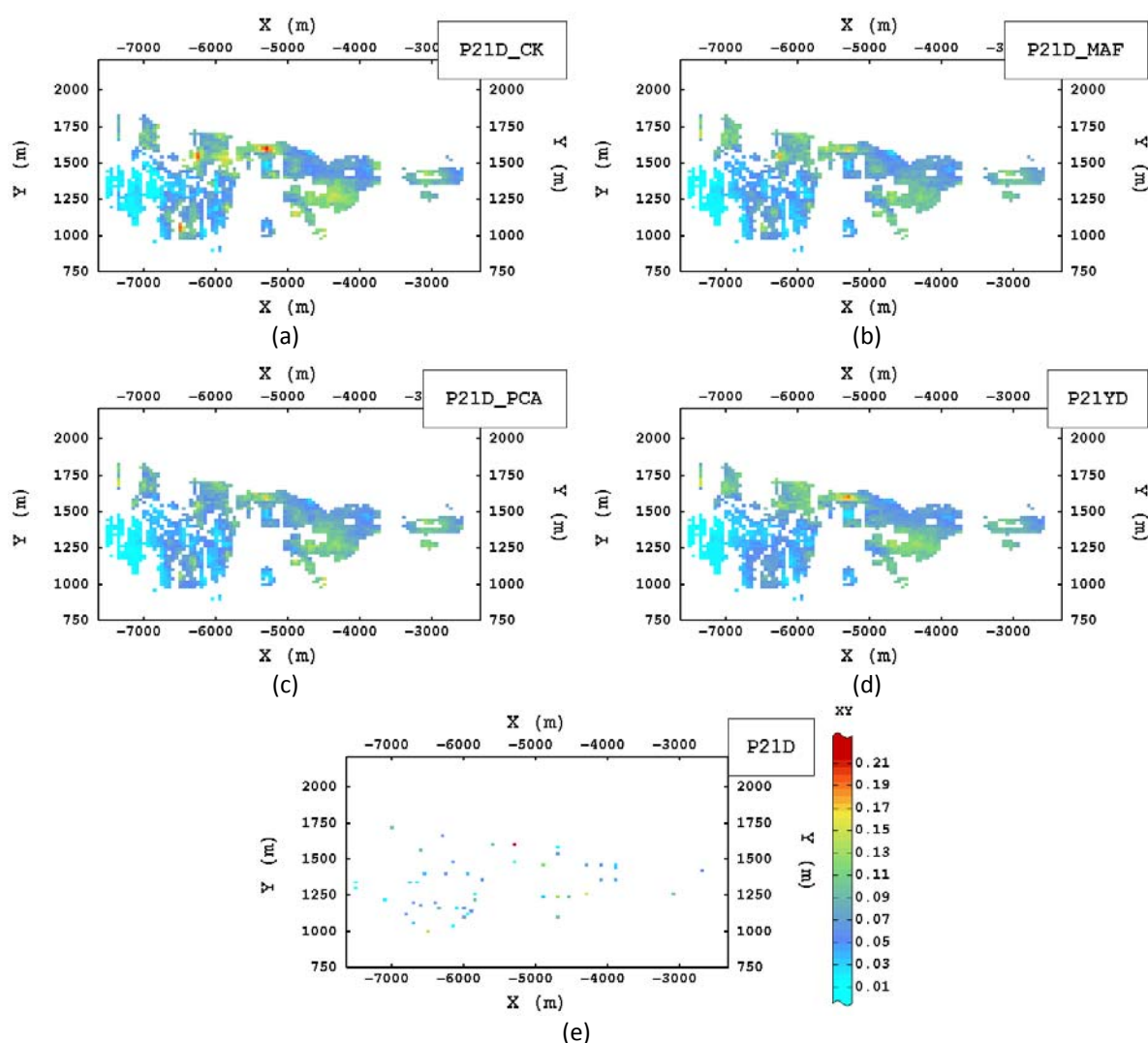


Figura G.48 - Mapas das estimativas do teor de fósforo na faixa 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (P21D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (P21D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (P21D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (P21YD), e (e) o mapa das amostras (P21D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

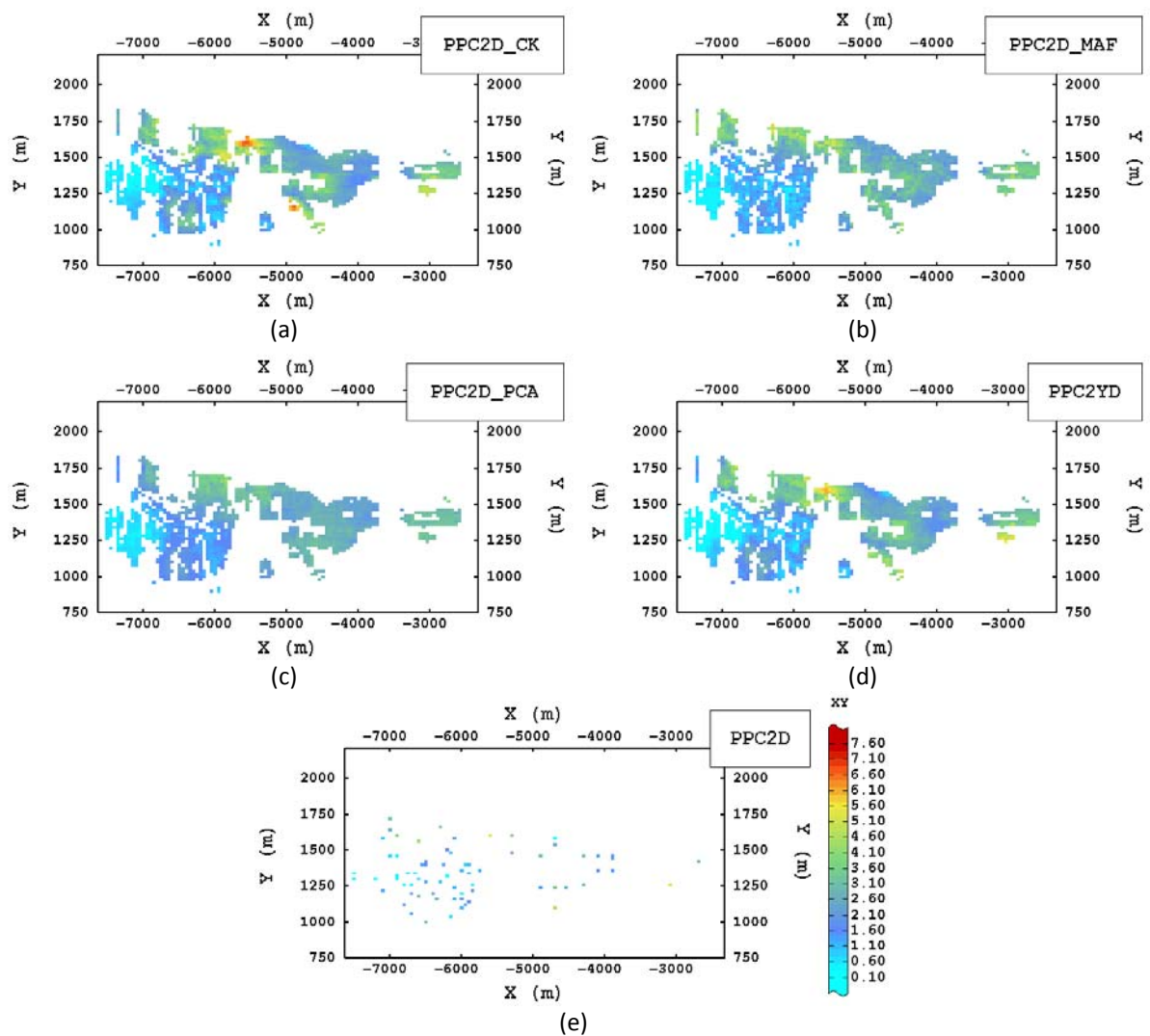


Figura G.49 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPC2D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPC2D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPC2D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC2YD), e (e) o mapa das amostras (PPC2D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

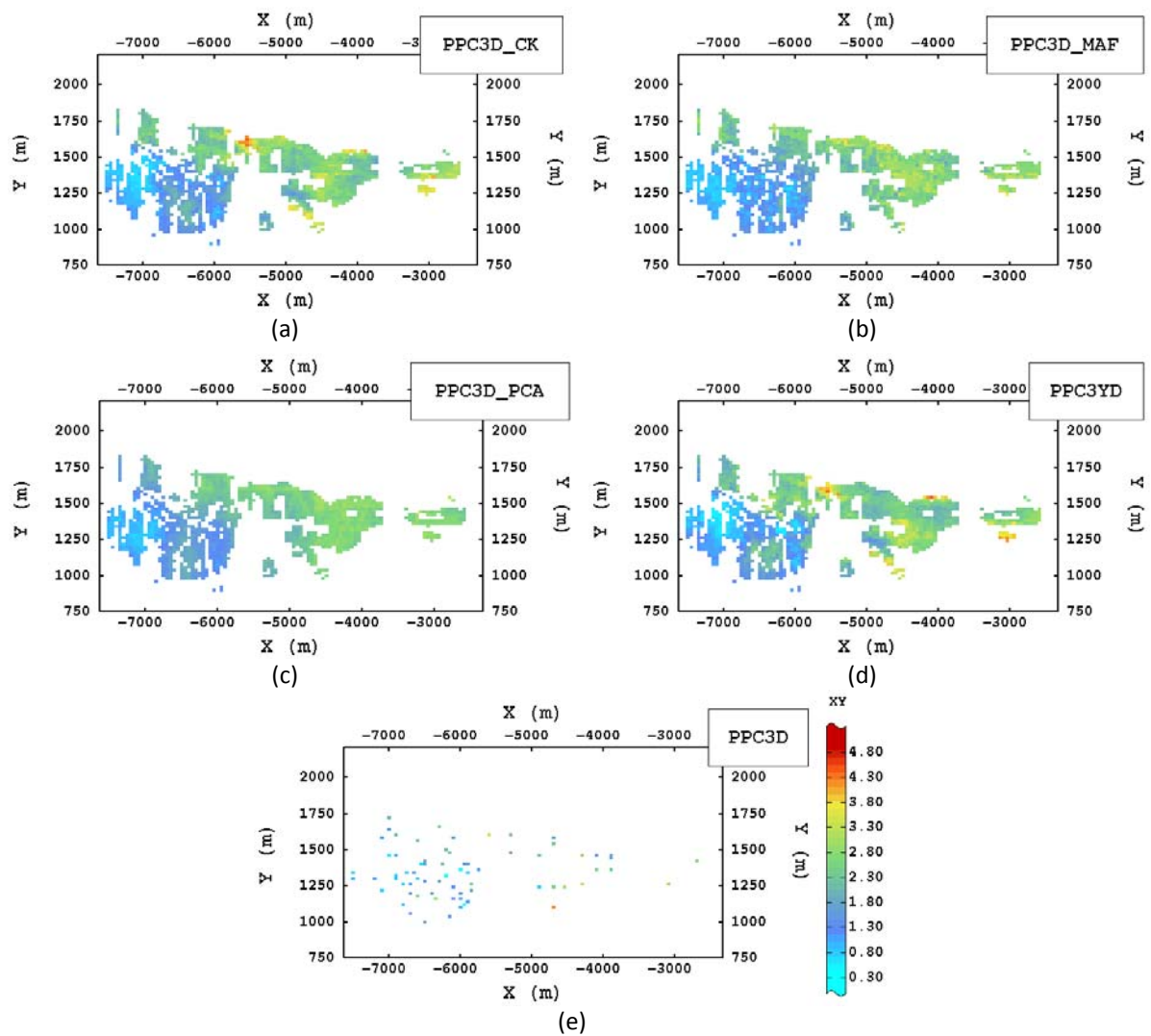


Figura G.50 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPC3D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPC3D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPC3D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC3YD), e (e) o mapa das amostras (PPC3D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

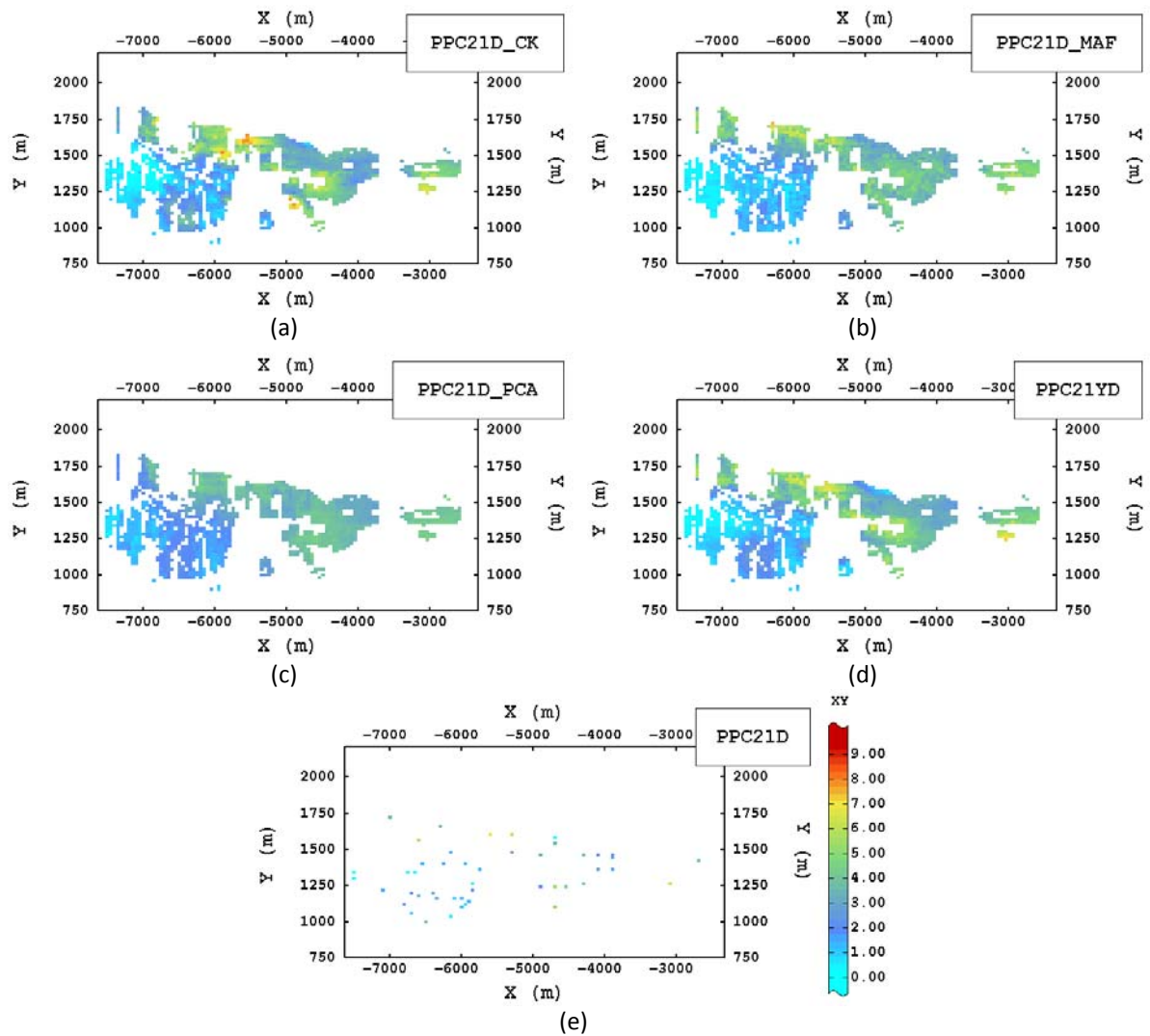


Figura G.51 - Mapas das estimativas do teor das perdas por calcinação na faixa 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (PPC21D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (PPC21D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (PPC21D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (PPC21YD), e (e) o mapa das amostras (PPC21D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

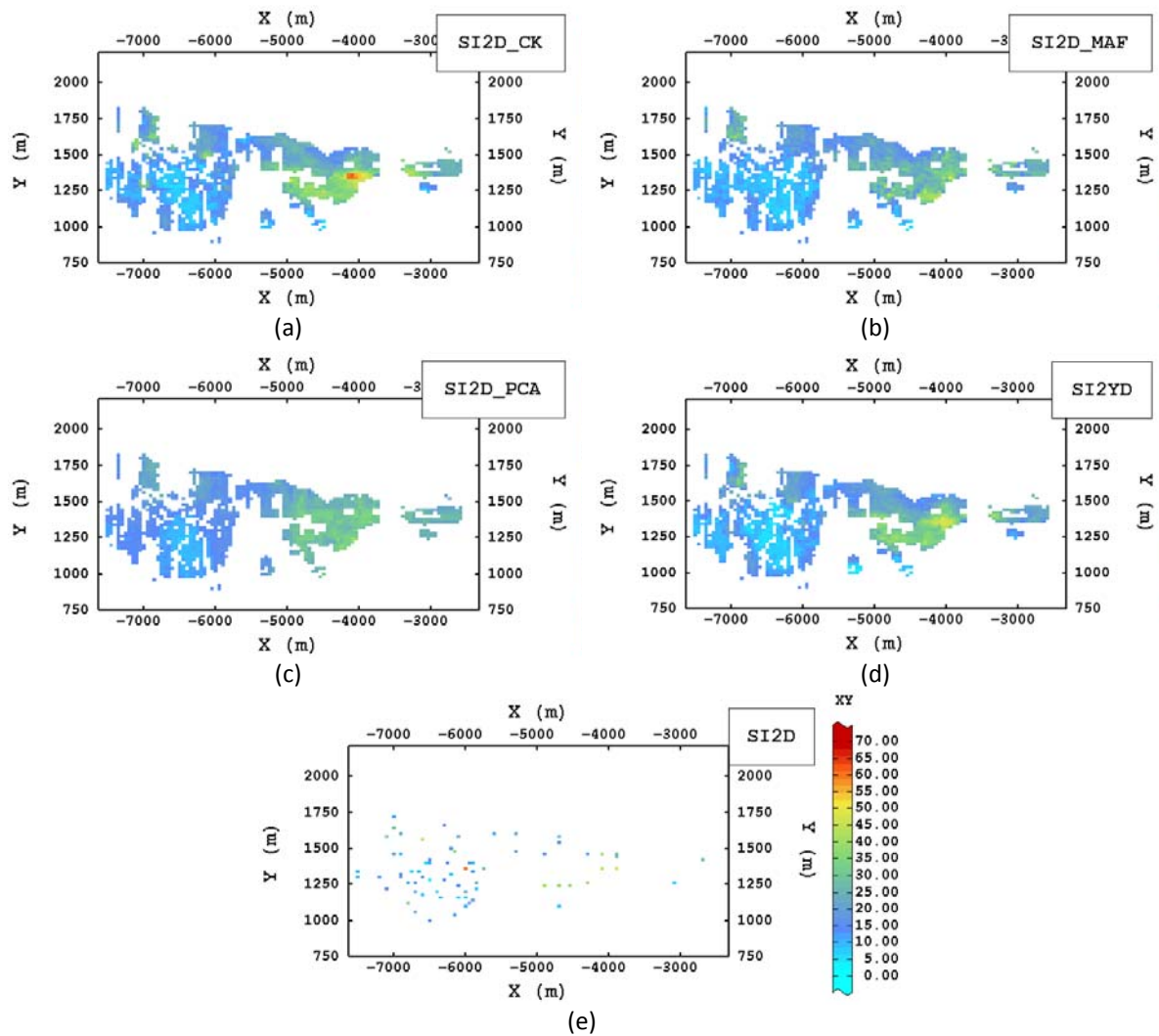


Figura G.52 - Mapas das estimativas do teor da sílica na faixa 2, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SI2D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SI2D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SI2D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI2YD), e (e) o mapa das amostras (SI2D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).



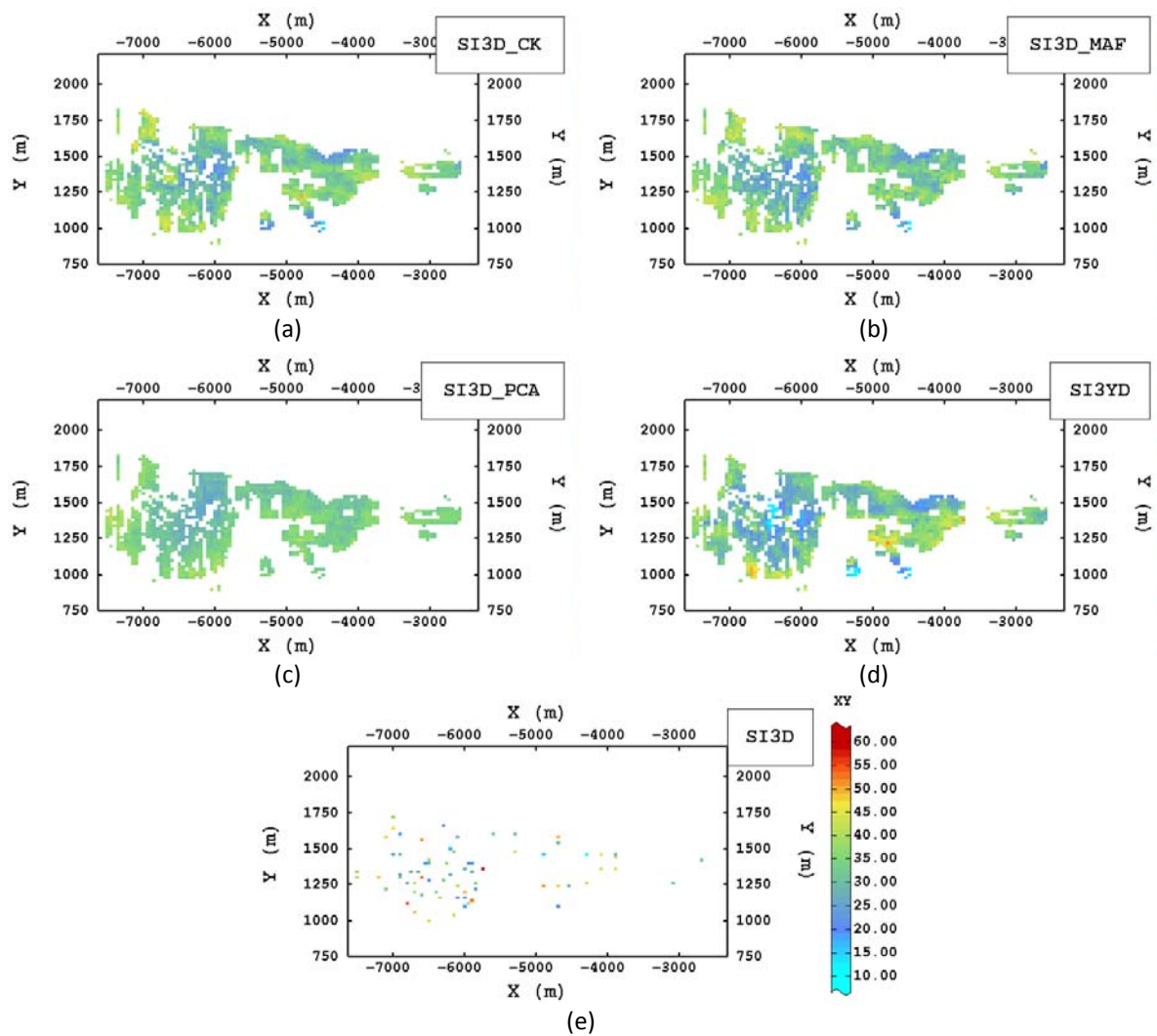


Figura G.53 - Mapas das estimativas do teor da sílica na faixa 3, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SI3D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SI3D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SI3D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI3YD), e (e) o mapa das amostras (SI3D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

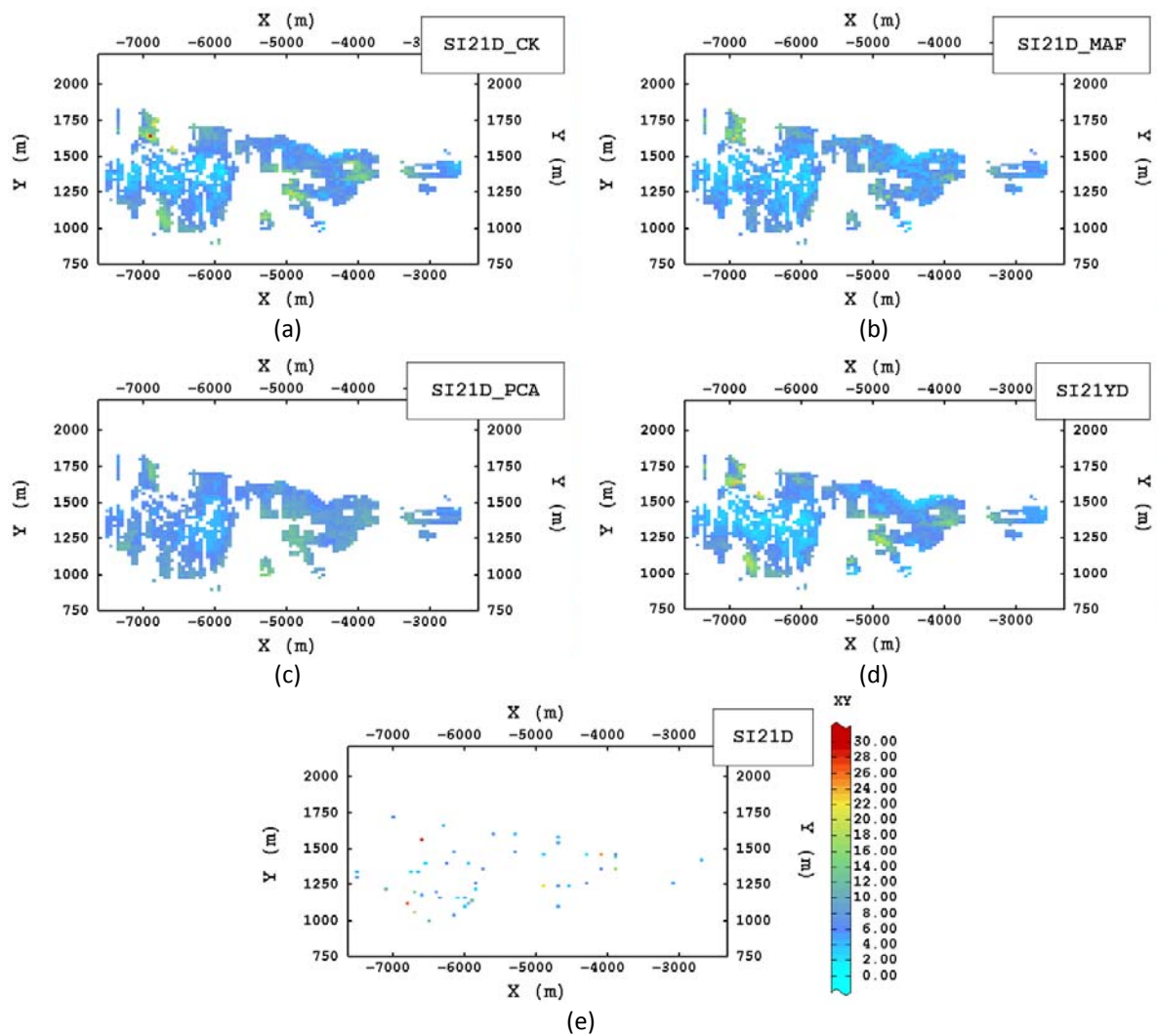


Figura G.54 - Mapas das estimativas do teor da sílica na faixa 21, obtidas por (a) cokrigagem ordinária (SI21D\_CK), (b) krigagem ordinária dos fatores MAF (SI21D\_MAF), (c) krigagem ordinária das componentes PCA (SI21D\_PCA) e (d) cokrigagem ordinária das razões-logarítmicas aditivas (SI21YD), e (e) o mapa das amostras (SI21D) mais próximas à seção horizontal XY do modelos de blocos considerada ( $Z=1345\text{m}$ ).

## Apêndice H

### **Análise da Presença de Viés nas estimativas obtidas por Krigagem Ordinária dos Fatores de Autocorrelação Mínimos/Máximos**

Nessa seção, são apresentadas as estimativas dos teores globais determinados por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio do E-Type correspondente às realizações das simulações estocásticas dos fatores uma vez retro-transformados ao espaço original, para observar se a influência da aproximação realizada (krigagem ordinária de uma transformação não linear) causa algum viés nas estimativas.

#### **H.1 Decomposição MAF: transformação não linear**

A transformação em fatores MAF, inclui uma etapa de normalização, a que constitui uma transformação não linear. Apesar de que o modelo Gaussiano tem muitas propriedades positivas, não é comum achar variáveis com essa distribuição e, portanto, as mesmas são muitas vezes transformadas em Gaussianas.

A krigagem ordinária pode ser substituída por krigagem simples, se a variável original é estacionária localmente, com uma média que varia suavemente na zona de interesse. A mesma situação é esperada para a variável transformada em Gaussiana. Porém, nesse caso, a estimativa por krigagem não coincide com a expectativa condicional (Chilès e Delfiner, 1999), introduzindo um viés.

Em Deutsch e Journel (1998), é mencionada a krigagem dos valores normalizados como uma generalização da krigagem lognormal (Journel e Huijbregts, 1978), a qual, na retro-transformação, que envolve uma transformação exponencial, introduz um viés nas estimativas.

Uma alternativa à estimativa por krigagem ordinária dos fatores MAF, é determinar o E-Type (média dos valores simulados em cada bloco) proveniente das simulações estocásticas realizadas nos fatores, já que os mesmos apresentam distribuição normal.

Assim, a determinação do E-Type, pode ser considerada uma metodologia alternativa à krigagem ordinária dos fatores MAF, com a possibilidade de não introduzir um viés.

A análise comparativa entre as duas metodologias é realizada para os teores globais, já que ao simular os teores acumulados e as massas das frações granulométricas separadamente, e posteriormente desacumular os mesmos, são obtidos muitos valores que não pertencem ao intervalo original das amostras.

Uma alternativa poderia ser simular os valores acumulados e os valores das massas das frações granulométricas e determinar os seus E-Types respectivos e numa etapa posterior realizar a desacumulação. Essa análise não será realizada por ser redundante no objetivo de analisar a presença de um viés.

## **H.2 Simulação estocástica dos teores globais**

Para a obtenção dos E-Types correspondentes aos teores globais é necessário simular os fatores MAF que descorrelacionam os subgrupos de variáveis da Tabela H.1, apresentada anteriormente no Capítulo 4 e no Apêndice C.

A metodologia utilizada é a simulação condicional estocástica em bandas rotativas, cujo fundamento teórico não será apresentado. Revisões completas ao respeito podem ser achadas em Matheron (1973), Journel, (1974), Lantuéjoul, (2002), Emery e Lantuéjoul (2006) e Koppe (2009).

O objetivo é a obtenção de realizações equiprováveis, geradas de forma estocástica, nas quais se reproduz a variabilidade espacial (variograma) e o

histograma dos dados originais desagrupados. Em suma, cada modelo simulado (realização) terá o mesmo histograma e variograma dos dados originais.

Tabela H.1 – Subgrupos de variáveis consideradas para descorrelacionar até  $h=150m$ , utilizando a decomposição em fatores MAF.

| Subgrupo | Variáveis               | Fatores MAF  |
|----------|-------------------------|--|
| 1        | AL2, AL21, AL3, ALT     | MAF1_AL_IB<br>MAF2_AL_IB<br>MAF3_AL_IB<br>MAF4_AL_IB     |
| 2        | FE2, FE21, FE3, FET     | MAF1_FE_IB<br>MAF2_FE_IB<br>MAF3_FE_IB<br>MAF4_FE_IB     |
| 3        | MN2, MN21, MN3, MNT     | MAF1_MN_IB<br>MAF2_MN_IB<br>MAF3_MN_IB<br>MAF4_MN_IB     |
| 4        | P2, P21, P3, PT         | MAF1_P_IB<br>MAF2_P_IB<br>MAF3_P_IB<br>MAF4_P_IB         |
| 5        | PPC2, PPC21, PPC3, PPCT | MAF1_PPC_IB<br>MAF2_PPC_IB<br>MAF3_PPC_IB<br>MAF4_PPC_IB |
| 6        | SI2, SI21, SI3, SIT     | MAF1_SI_IB<br>MAF2_SI_IB<br>MAF3_SI_IB<br>MAF4_SI_IB     |
| 7        | W2, W21, W3             | MAF1_W_IB<br>MAF2_W_IB<br>MAF3_W_IB                      |

Os dados originais estão em suporte de pontos. Os variogramas e histogramas correspondentes estão no mesmo suporte (Isaaks e Srivastava, 1989). Portanto, para reproduzir os histogramas e variogramas originais, as simulações são realizadas em malhas de pontos, e posteriormente, re-blocadas ao tamanho de bloco com o qual se deseja trabalhar.

Assim, nesse caso, realizam-se simulações numa malha de  $10 \times 10 \times 10m$  e posteriormente se re-blocam no tamanho de bloco de  $50 \times 20 \times 10 m$ , que é o correspondente ao modelo de blocos utilizado para a krigagem ordinária dos fatores MAF.

São simulados 50 cenários, já que a partir desse número de realizações não são observadas flutuações significativas em torno da média original.

Os modelos simulados são transformados ao espaço original por duas etapas sucessivas e a re-blocagem é realizada numa etapa posterior. No espaço original, são considerados somente os teores globais ALT, FET, MNT, PT, PPCT e SIT.

Depois de obtidos os valores re-blocados, são determinados os E-Type, como as médias das realizações em cada bloco.

Desse modo, em vez de determinar as variáveis por estimativa, é determinada a função de probabilidade de teores em cada bloco, das quais é extraída a esperança matemática, o E-Type.

A seguir são apresentados os gráficos de dispersão dos teores globais determinados por krigagem ordinária dos fatores MAF, vs. os E-Types obtidos a partir das realizações estocásticas (Figuras H.1 a H.6).

Observam-se nuvens de pontos que não acusam um viés apreciável, exceto no caso da alumina e do fósforo. Nesses casos, a krigagem ordinária dos fatores MAF, fornece valores que são menores e maiores que os provenientes do E-Type no caso de baixos e altos teores, respectivamente.

Todos os sistemas da Tabela H.1 foram descorrelacionados com o mesmo vetor de separação  $h=150$  metros, levando a fatores que apresentam correlação espacial decrescente, do fator MAF1 ao MAF4. Porém, no caso da alumina e do fósforo, isso não acontece, como foi apresentado no Capítulo 4, item 4.1.1 e como pode ser observado nos variogramas dos fatores MAF correspondentes a essas duas variáveis, apresentados no Apêndice C, Figuras C.22 e C.25. Nestas, os variogramas experimentais dos fatores MAF3 têm um alcance maior ao do MAF2, contrariamente ao esperado. Apesar disso, os modelos variográficos dos fatores, foram ajustados para compensar essa alteração na ordem da autocorrelação.

Portanto, uma explicação para a falta de simetria existente nos diagramas de dispersão das Figuras H.1 e H.5 pode estar dada pela discordância existente entre o modelo variográfico inserido nos processos de simulação, que não está de acordo completamente com a variabilidade espacial dos dados condicionantes. Posteriormente, essa discordância pode ver-se transladada ao espaço original pelas duas retro-transformações sucessivas.

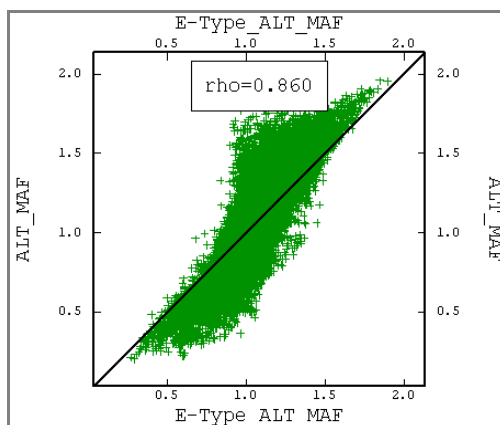


Figura H.1 – Diagrama de dispersão das estimativas do teor global de alumina obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio da média das realizações em cada bloco (E-Type), retro-transformadas a partir dos fatores MAF simulados condicionalmente por Bandas Rotativas, ALT\_MAF e E-Type\_ALT\_MAF, respectivamente.

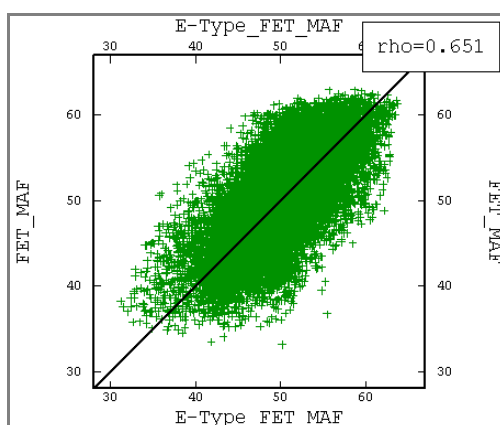


Figura H.2 - Diagrama de dispersão das estimativas do teor global de ferro obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio da média das realizações em cada bloco (E-Type), retro-transformadas a partir dos fatores MAF simulados condicionalmente por Bandas Rotativas, FET\_MAF e E-Type\_FET\_MAF, respectivamente.

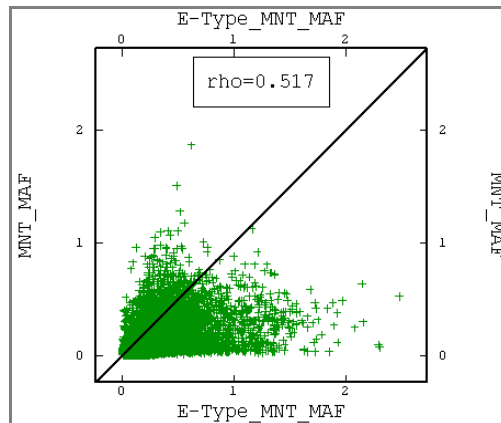


Figura H.3 - Diagrama de dispersão das estimativas do teor global de manganês obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio da média das realizações em cada bloco (E-Type), retro-transformadas a partir dos fatores MAF simulados condicionalmente por Bandas Rotativas, MNT\_MAF e E-Type\_MNT\_MAF, respectivamente.

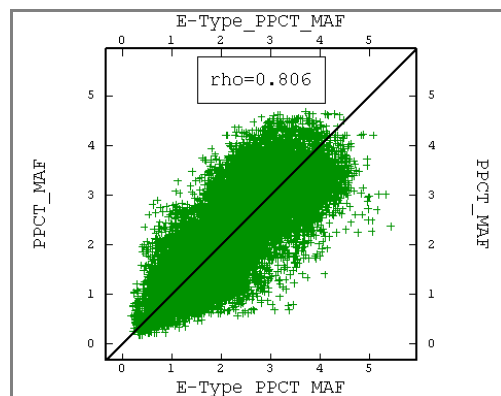


Figura H.4 - Diagrama de dispersão das estimativas do teor global das perdas por calcinação obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio da média das realizações em cada bloco (E-Type), retro-transformadas a partir dos fatores MAF simulados condicionalmente por Bandas Rotativas, PPCT\_MAF e E-Type\_PPCT\_MAF, respectivamente.



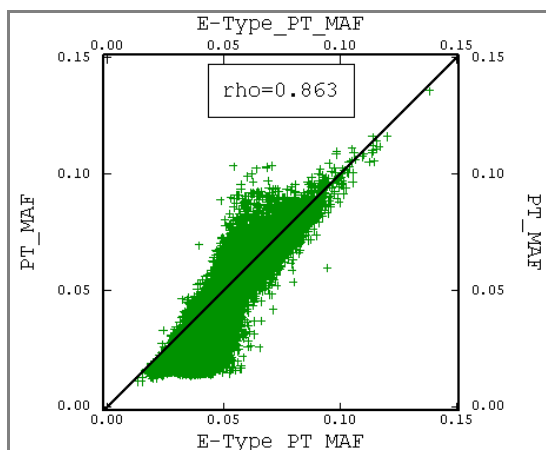


Figura H.5 - Diagrama de dispersão das estimativas do teor global de fósforo, obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio da média das realizações em cada bloco (E-Type), retro-transformadas a partir dos fatores MAF simulados condicionalmente por Bandas Rotativas, PT\_MAF e E-Type\_PT\_MAF, respectivamente.

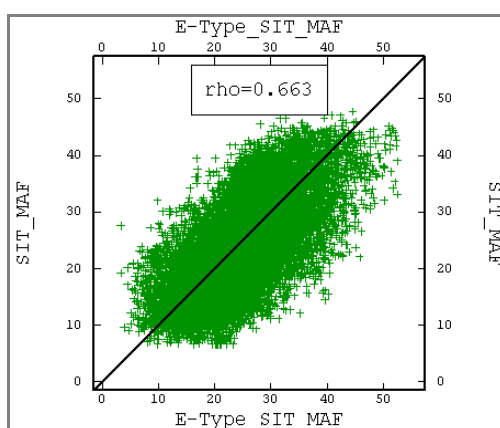


Figura H.6 - Diagrama de dispersão das estimativas do teor global de sílica, obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e por meio da média das realizações em cada bloco (E-Type), retro-transformadas a partir dos fatores MAF simulados condicionalmente por Bandas Rotativas, SIT\_MAF e E-Type\_SIT\_MAF, respectivamente.

Apesar dos diagramas de dispersão da alumina e do fósforo não serem simétricos em torno da bissetriz, observa-se que a média global das estimativas obtidas por krigagem ordinária dos fatores MAF e a correspondente dos E-Type obtidos por simulação condicional estocástica, são muito semelhantes para todos os teores globais (Figuras H.7 a H.12).

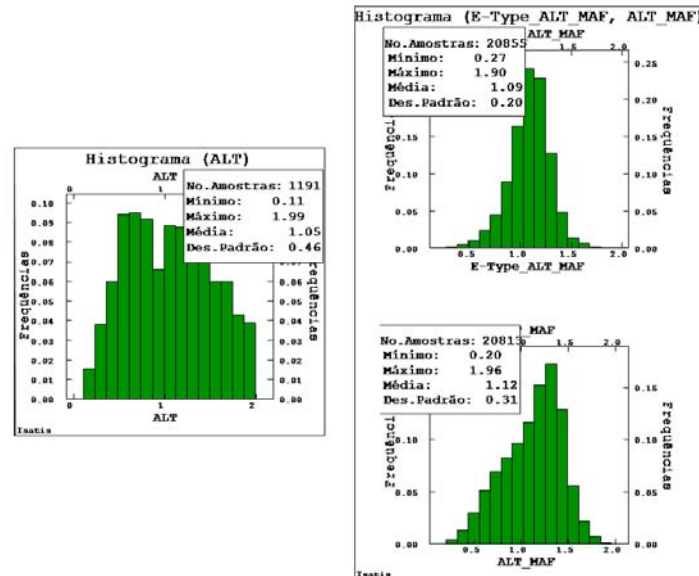


Figura H.7 – Histogramas dos dados originais de alumina desagrupados (esquerda) e das estimativas (direita), obtidas por krigagem dos fatores MAF (abaixo) e por meio da média dos valores simulados em cada bloco (E-Types) (acima).

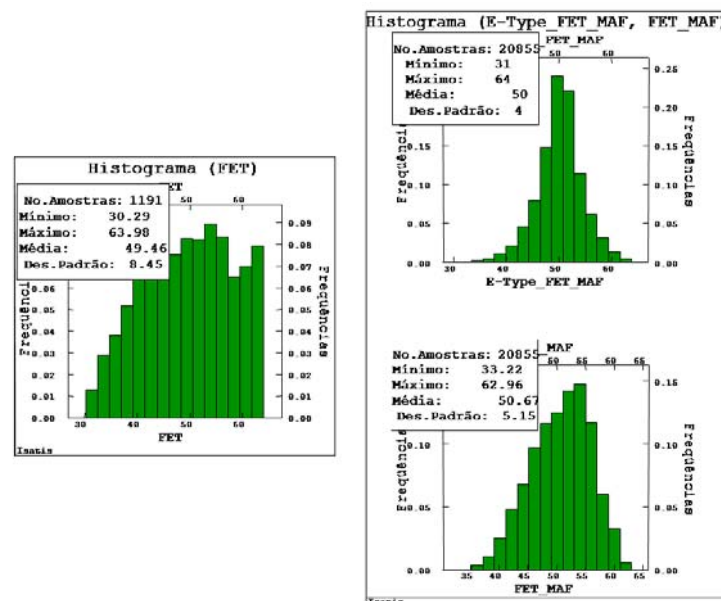


Figura H.8 - Histogramas dos dados originais de ferro desagrupados (esquerda) e das estimativas (direita), obtidas por krigagem dos fatores MAF (abaixo) e por meio da média dos valores simulados em cada bloco (E-Types) (acima).

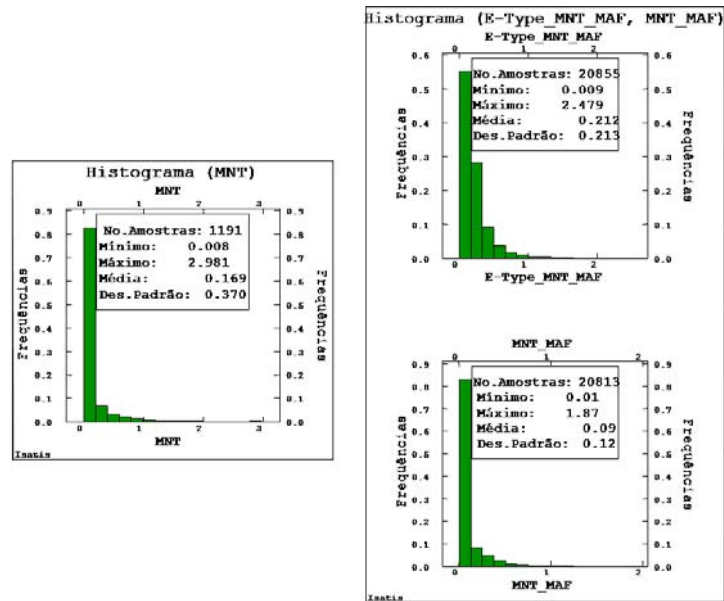


Figura H.9 - Histogramas dos dados originais de manganês desagrupados (esquerda) e das estimativas (direita), obtidas por krigagem dos fatores MAF (abaixo) e por meio da média dos valores simulados em cada bloco (E-Types) (acima).

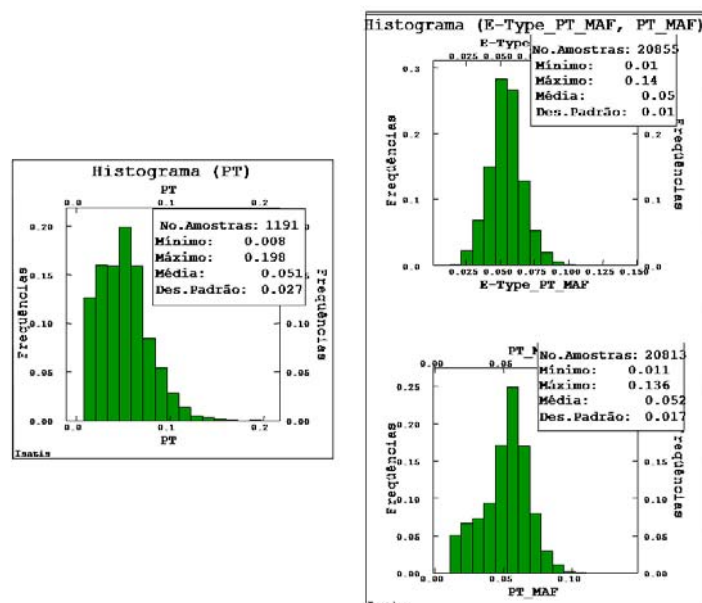


Figura H.10 - Histogramas dos dados originais de fósforo desagrupados (esquerda) e das estimativas (direita), obtidas por krigagem dos fatores MAF (abaixo) e por meio da média dos valores simulados em cada bloco (E-Types) (acima).

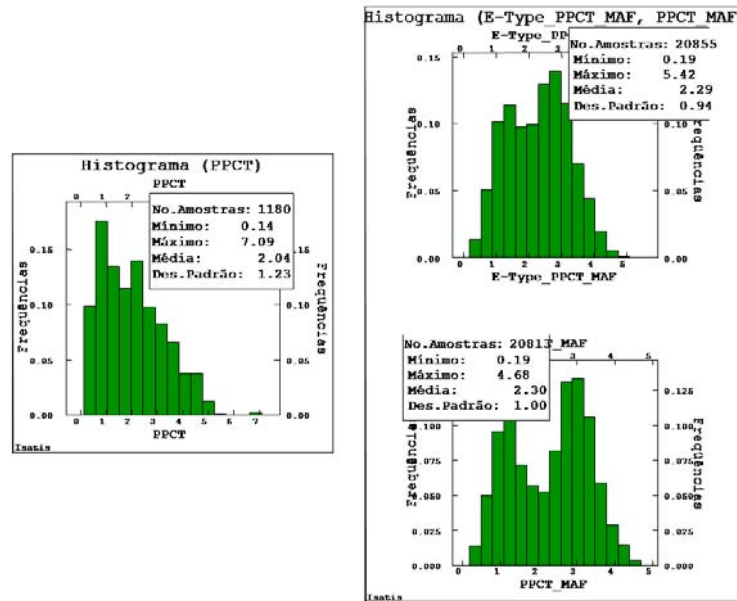


Figura H.11 - Histogramas dos dados originais das perdas por calcinação desagrupados (esquerda) e das estimativas (direita), obtidas por krigagem dos fatores MAF (abaixo) e por meio da média dos valores simulados em cada bloco (E-Types) (acima).

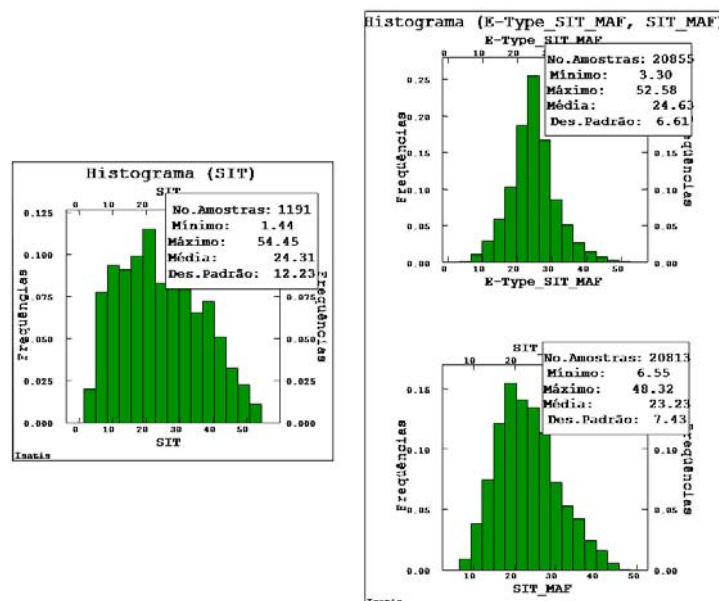


Figura H.12 - Histogramas dos dados originais de sílica desagrupados (esquerda) e das estimativas (direita), obtidas por krigagem dos fatores MAF (abaixo) e por meio da média dos valores simulados em cada bloco (E-Types) (acima).

Também, o balanço estequiométrico da Equação (3.15), para os teores globais ( $i=T$ ), é satisfeito de forma adequada, tanto com os valores obtidos por krigagem como pelos E-Types (Figura H.13).

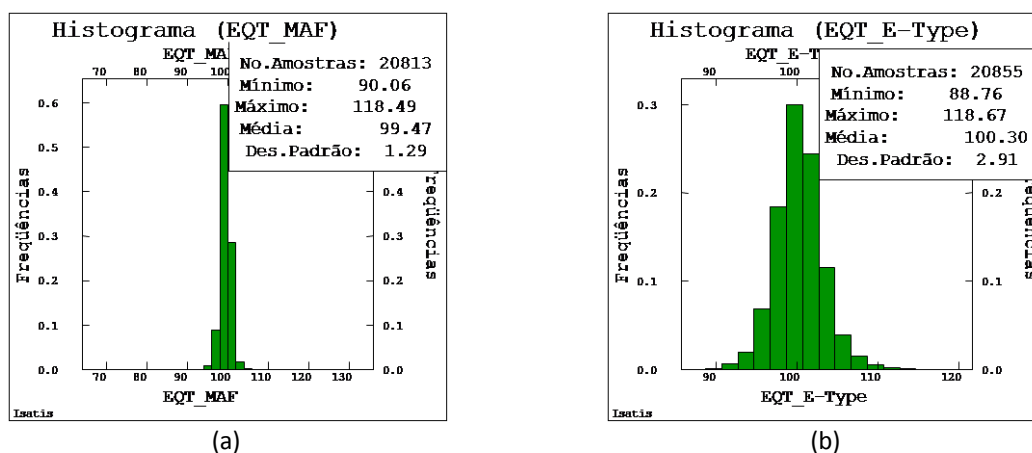


Figura H.13 – Histogramas do balanço estequiométrico obtido a partir das estimativas globais determinadas por krigagem ordinária dos fatores MAF (a) e pelas médias das realizações (E-Type) (b).

Nas Figuras H.14 a H.25, são apresentados os gráficos correspondentes às flutuações ergódicas das 50 realizações obtidas por simulação condicional estocástica de bandas rotativas.

É esperável que essas flutuações aconteçam em torno da média original e do variograma modelado, obtidos a partir dos dados amostrais transformados em fatores MAF. Porém, isso não acontece em todos os casos, tendo flutuações que ficam sistematicamente por cima ou por baixo da média original (zero) e a mesma situação pode ser observada nas flutuações em torno do variograma.

As causas dessas discrepâncias podem ser de diversa índole e difícil interpretação a partir dos fatores MAF já que os mesmos são obtidos a partir de duas transformações sucessivas dos dados originais, com um vetor de separação  $h=150m$  que pode ser adequado para uns subgrupos de variáveis, mas não para outros.

Ao mesmo tempo, pode-se afirmar que a krigagem ordinária dos fatores MAF é uma metodologia aproximada adequada para a estimativa de teores em depósitos polimetálicos, a qual não introduz um viés apreciável.

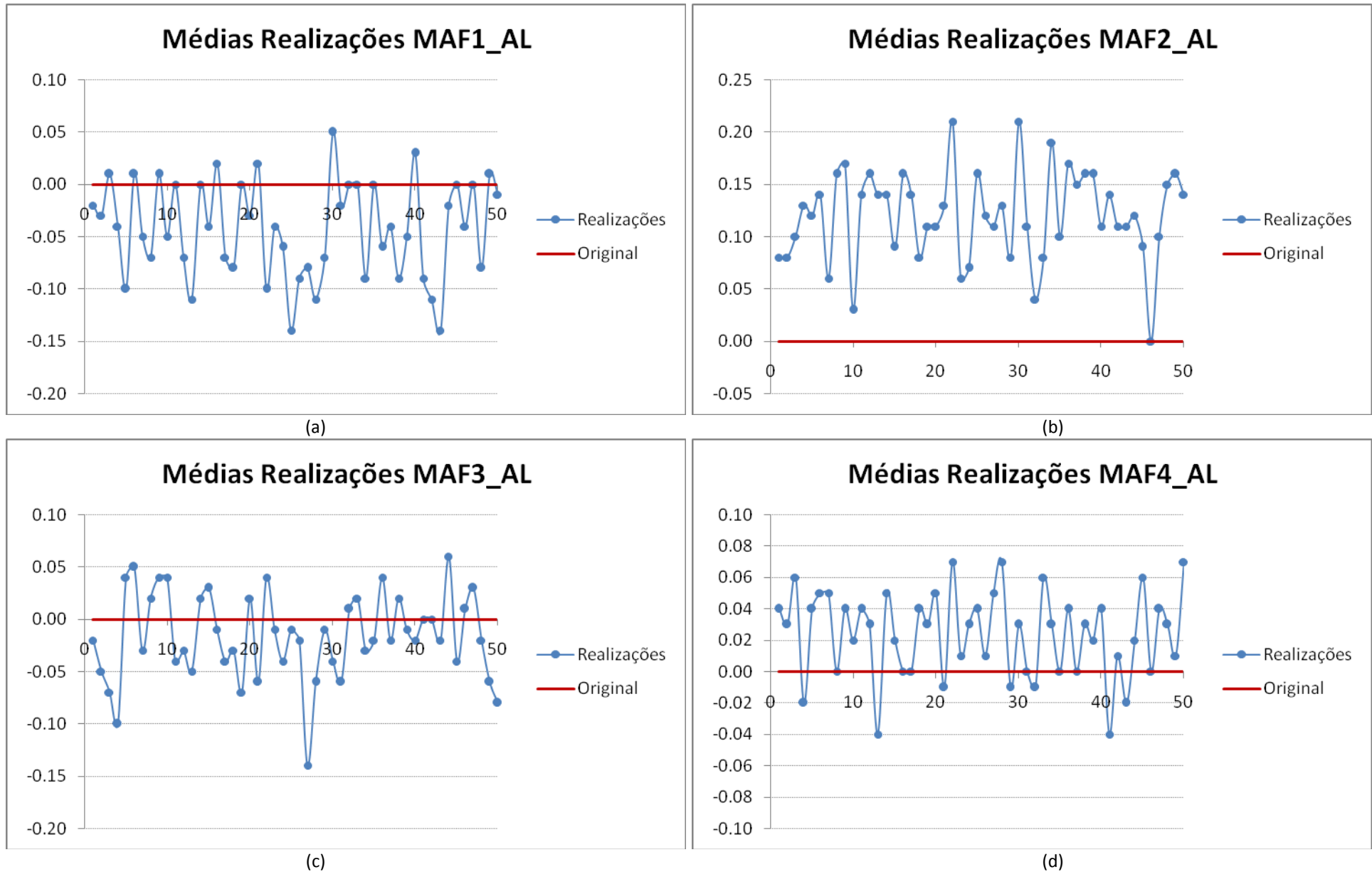
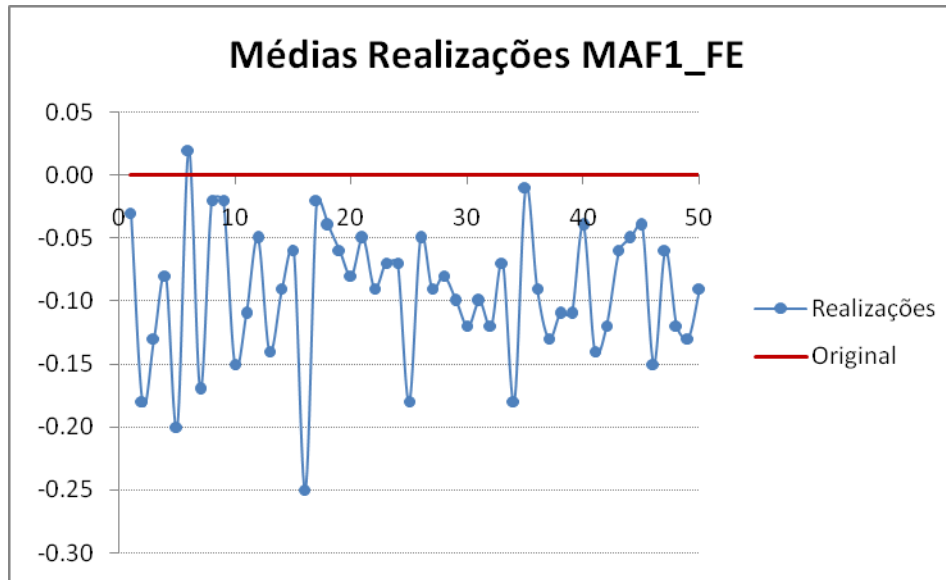
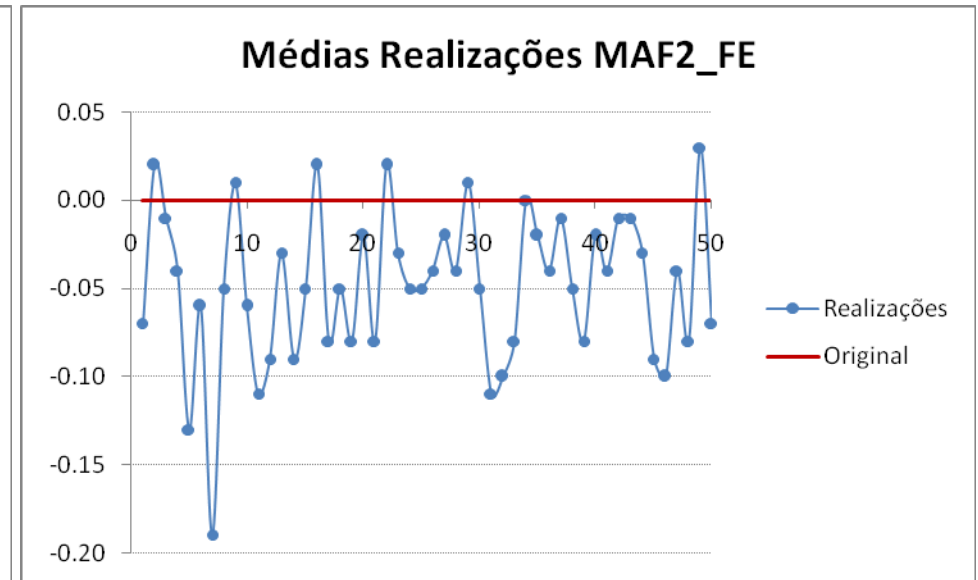


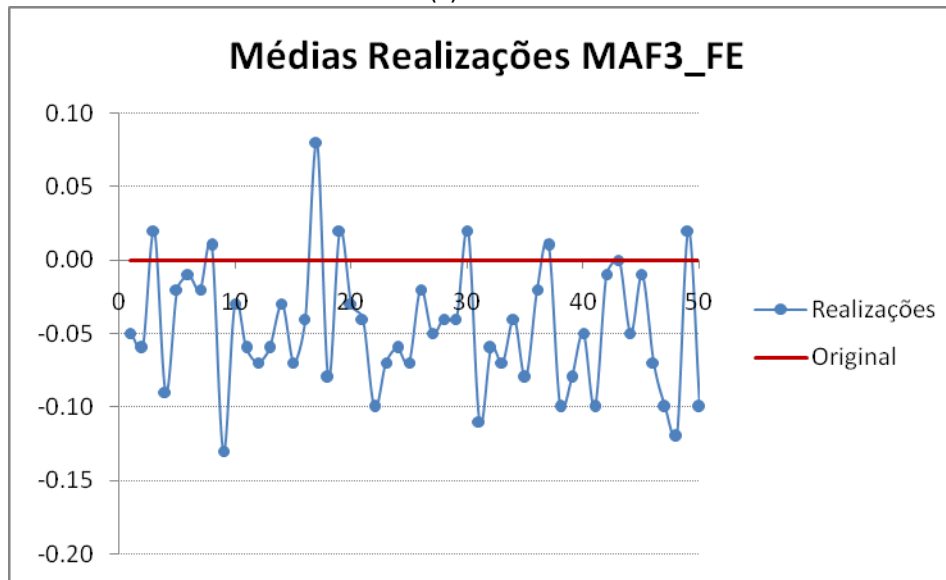
Figura H.14 – Flutuações da média das realizações obtidas por simulação estocástica, em torno da média original, para os fatores MAF correspondentes à decorrelação dos teores de alumina nas faixas 2, 21, 3 e global (T), (a) MAF1\_AL, (b) MAF2\_AL, (c) MAF3\_AL e (d) MAF4\_AL, respectivamente.



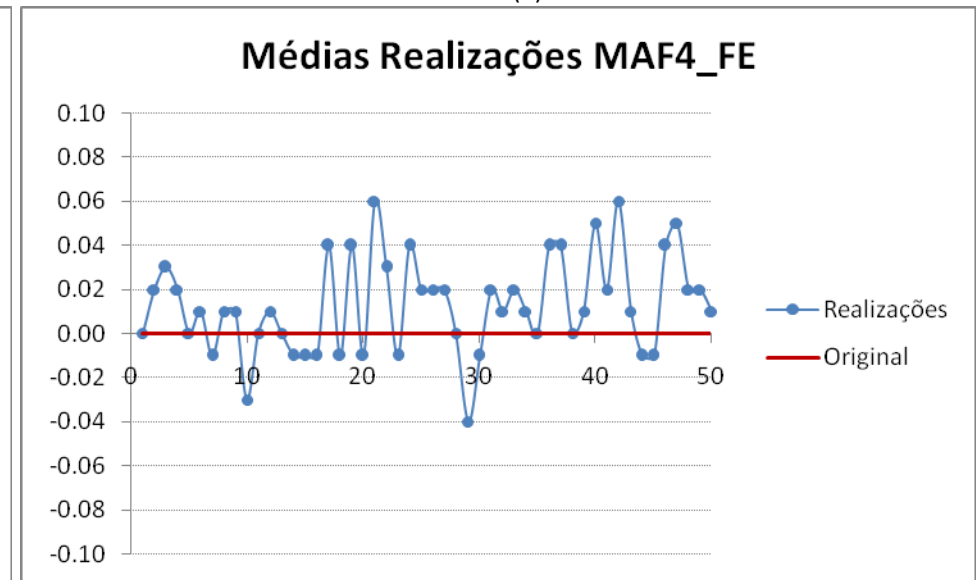
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura H.15 - Flutuações da média das realizações obtidas por simulação estocástica, em torno da média original, para os fatores MAF correspondentes à decorrelação dos teores de ferro nas faixas 2, 21, 3 e global (T), (a) MAF1\_FE, (b) MAF2\_FE, (c) MAF3\_FE e (d) MAF4\_FE, respectivamente.

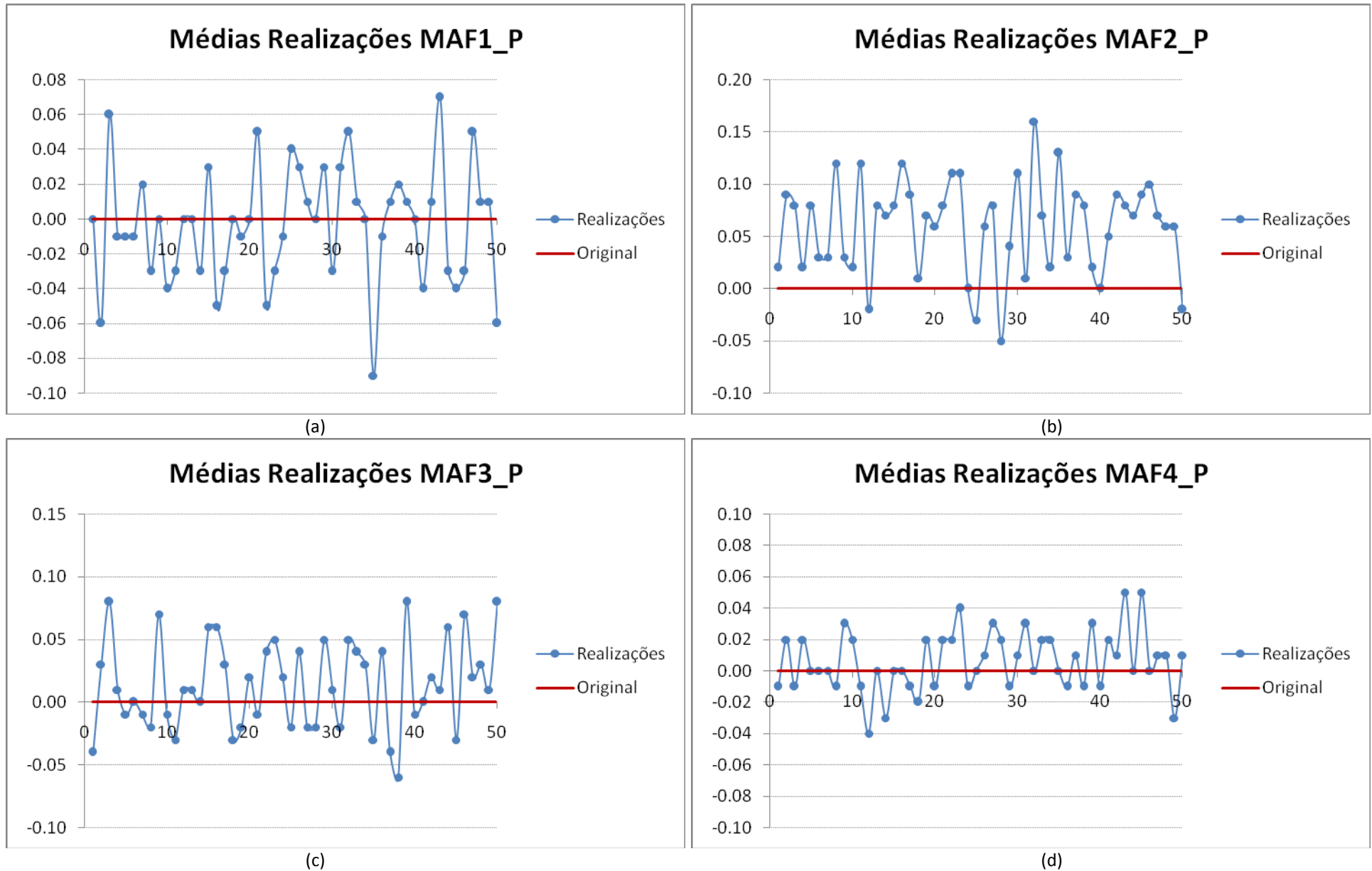
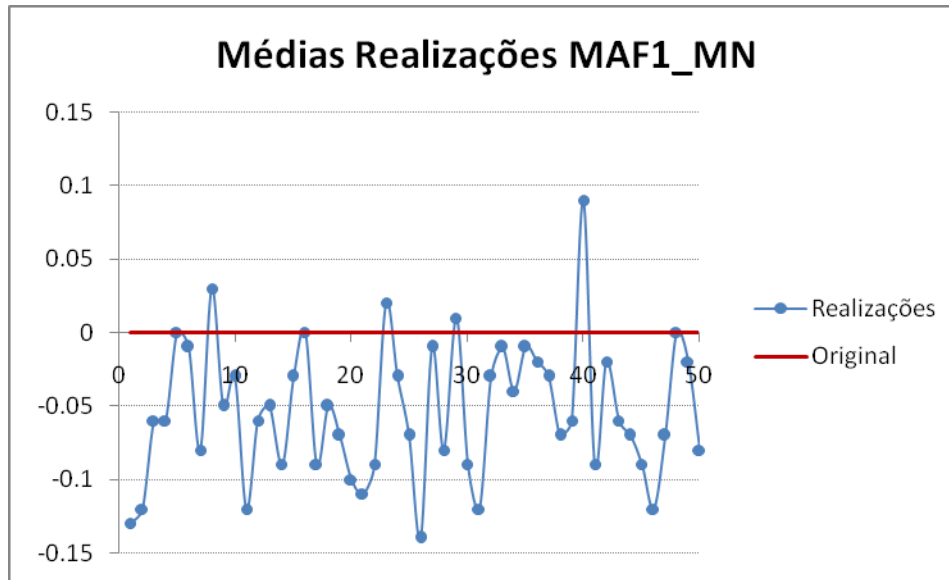
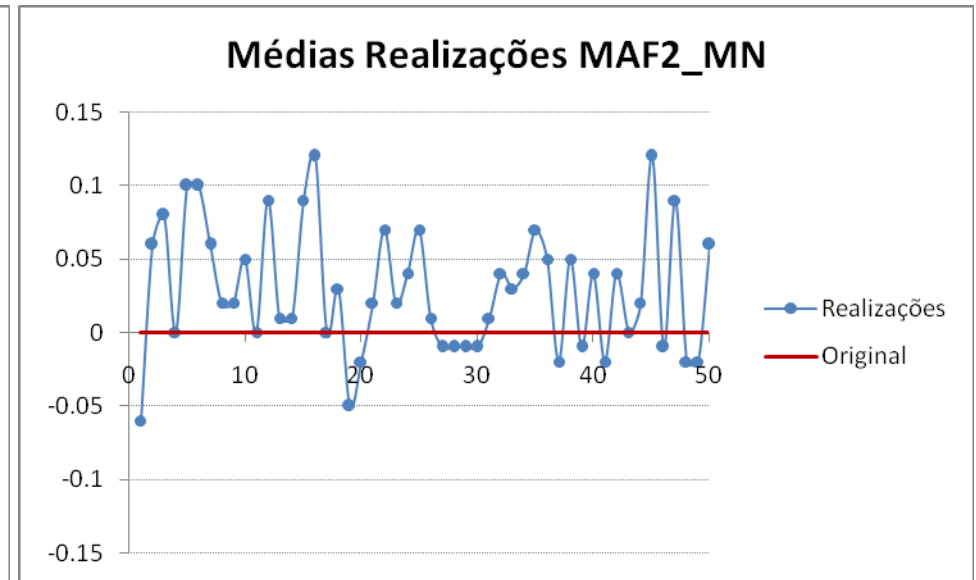


Figura H.16 - Flutuações da média das realizações obtidas por simulação estocástica, em torno da média original, para os fatores MAF correspondentes à descorrelação dos teores de fósforo nas faixas 2, 21, 3 e global (T), (a) MAF1\_P, (b) MAF2\_P, (c) MAF3\_P e (d) MAF4\_P, respectivamente.

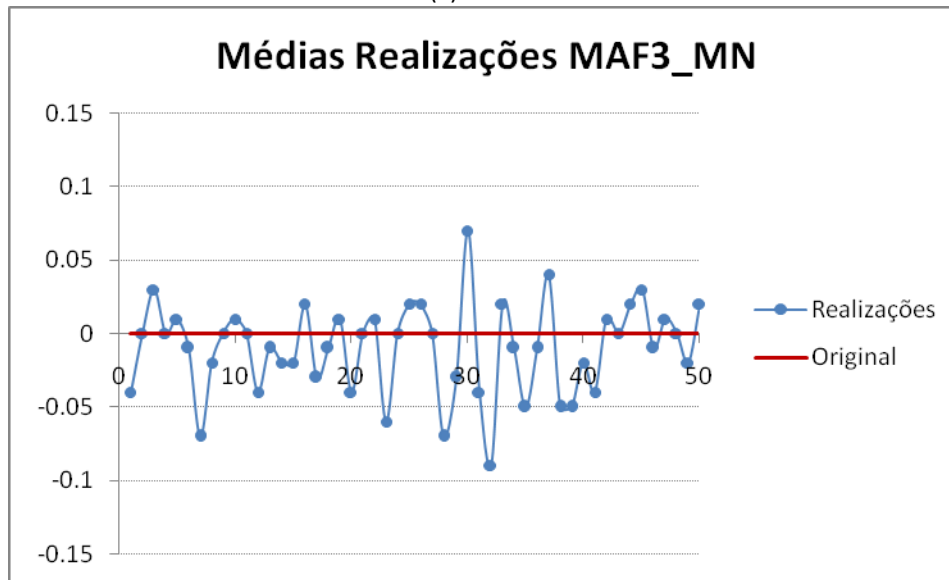




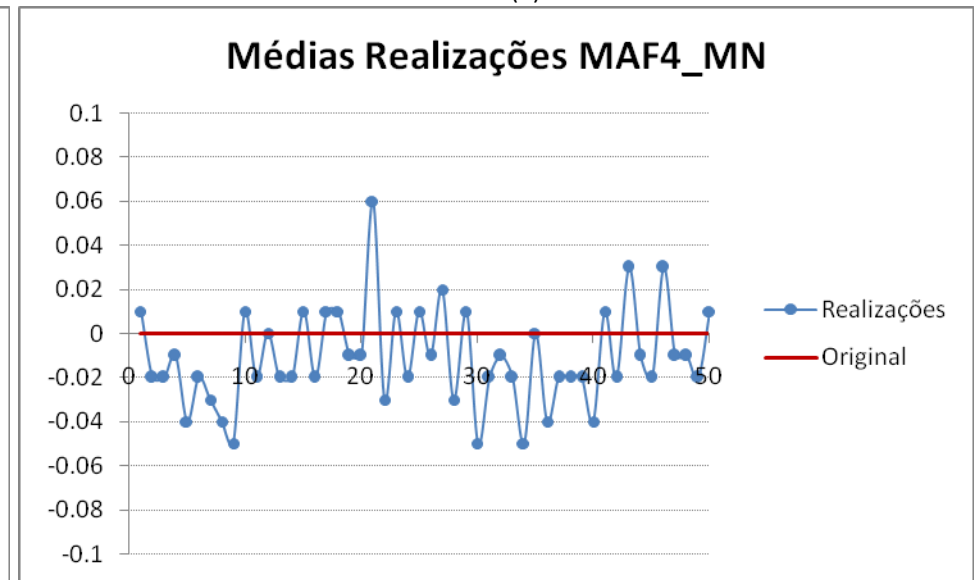
(a)



(b)

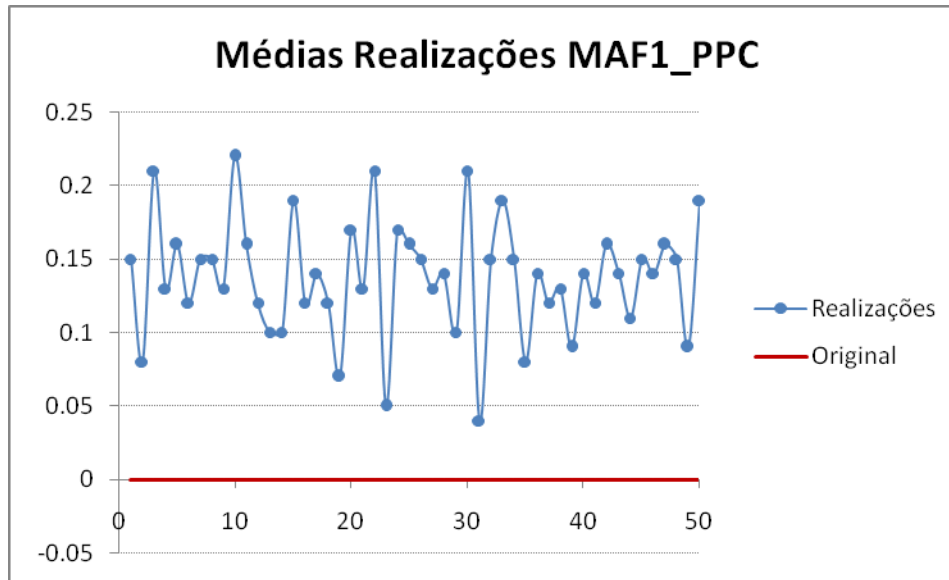


(c)

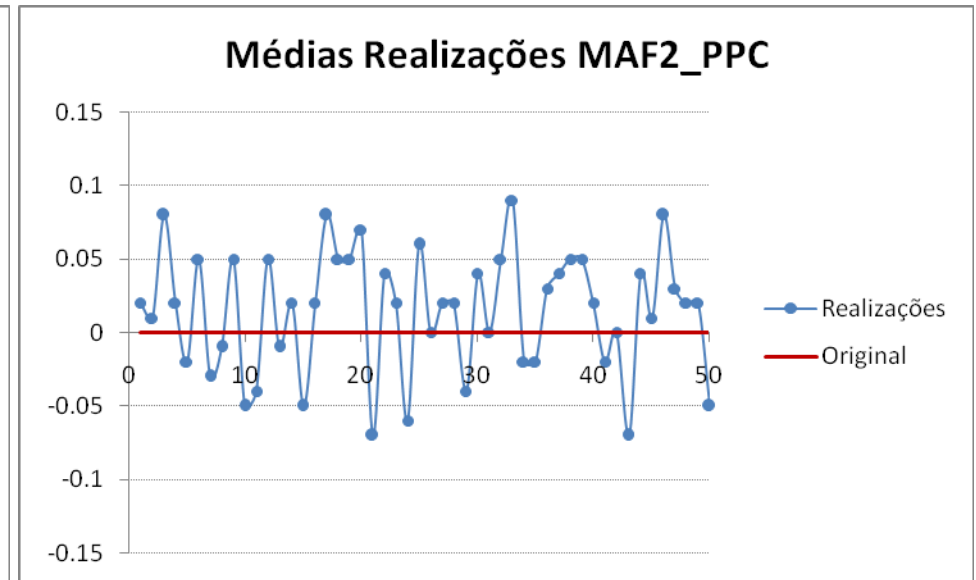


(d)

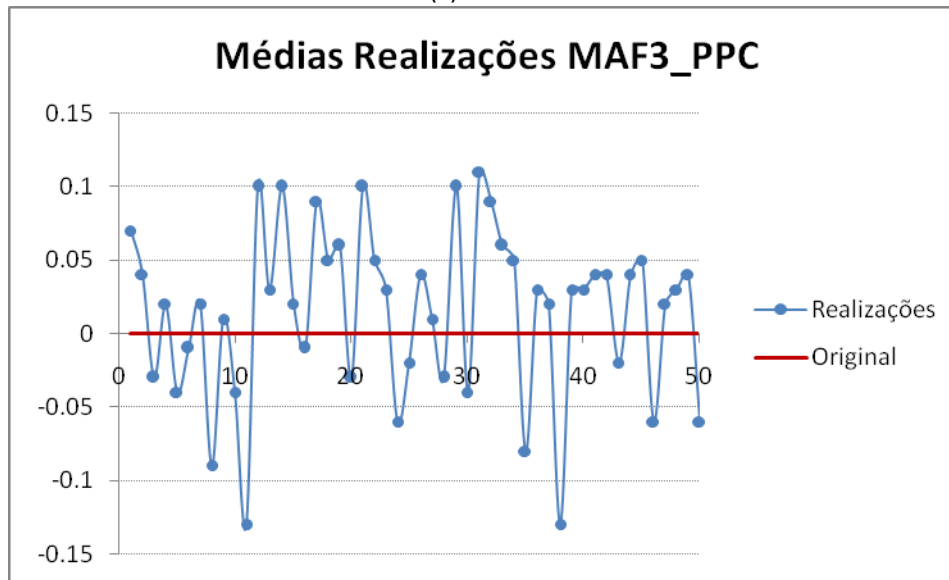
Figura H.17 - Flutuações da média das realizações obtidas por simulação estocástica, em torno da média original, para os fatores MAF correspondentes à descorrelação dos teores de manganês nas faixas 2, 21, 3 e global (T), (a) MAF1\_MN, (b) MAF2\_MN, (c) MAF3\_MN e (d) MAF4\_MN, respectivamente.



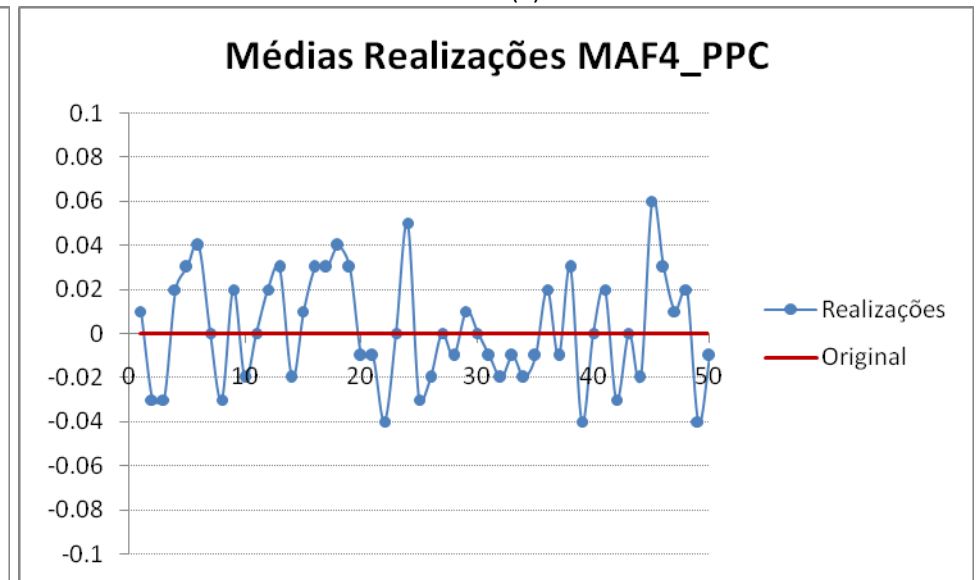
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura H.18 - Flutuações da média das realizações obtidas por simulação estocástica, em torno da média original, para os fatores MAF correspondentes à decorrelação dos teores das perdas por calcinação nas faixas 2, 21, 3 e global (T), (a) MAF1\_PPC, (b) MAF2\_PPC, (c) MAF3\_PPC e (d) MAF4\_PPC, respectivamente.

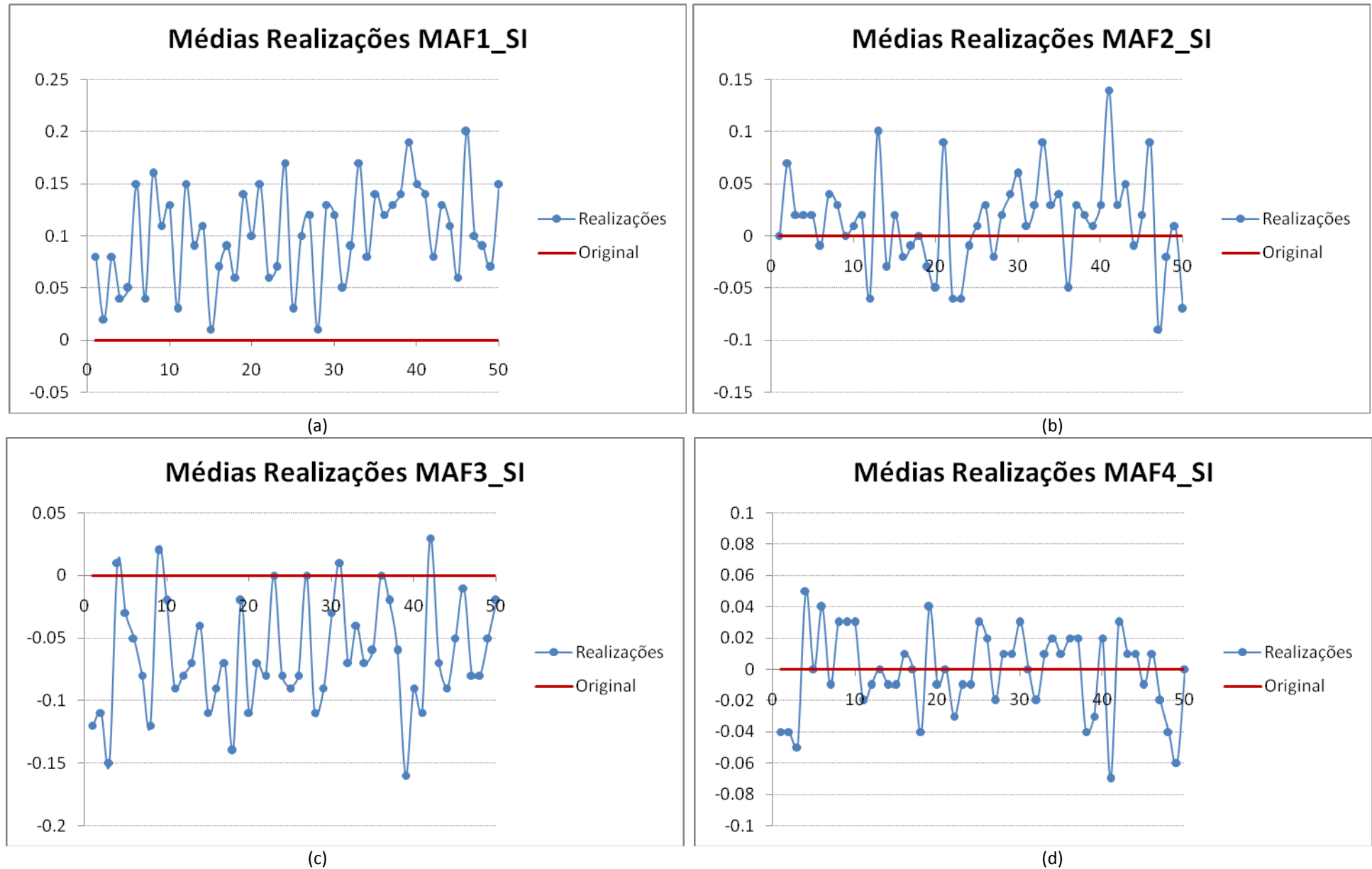


Figura H.19 - Flutuações da média das realizações obtidas por simulação estocástica, em torno da média original, para os fatores MAF correspondentes à decorrelação dos teores de sílica nas faixas 2, 21, 3 e global (T), (a) MAF1\_SI, (b) MAF2\_SI, (c) MAF3\_SI e (d) MAF4\_SI, respectivamente.

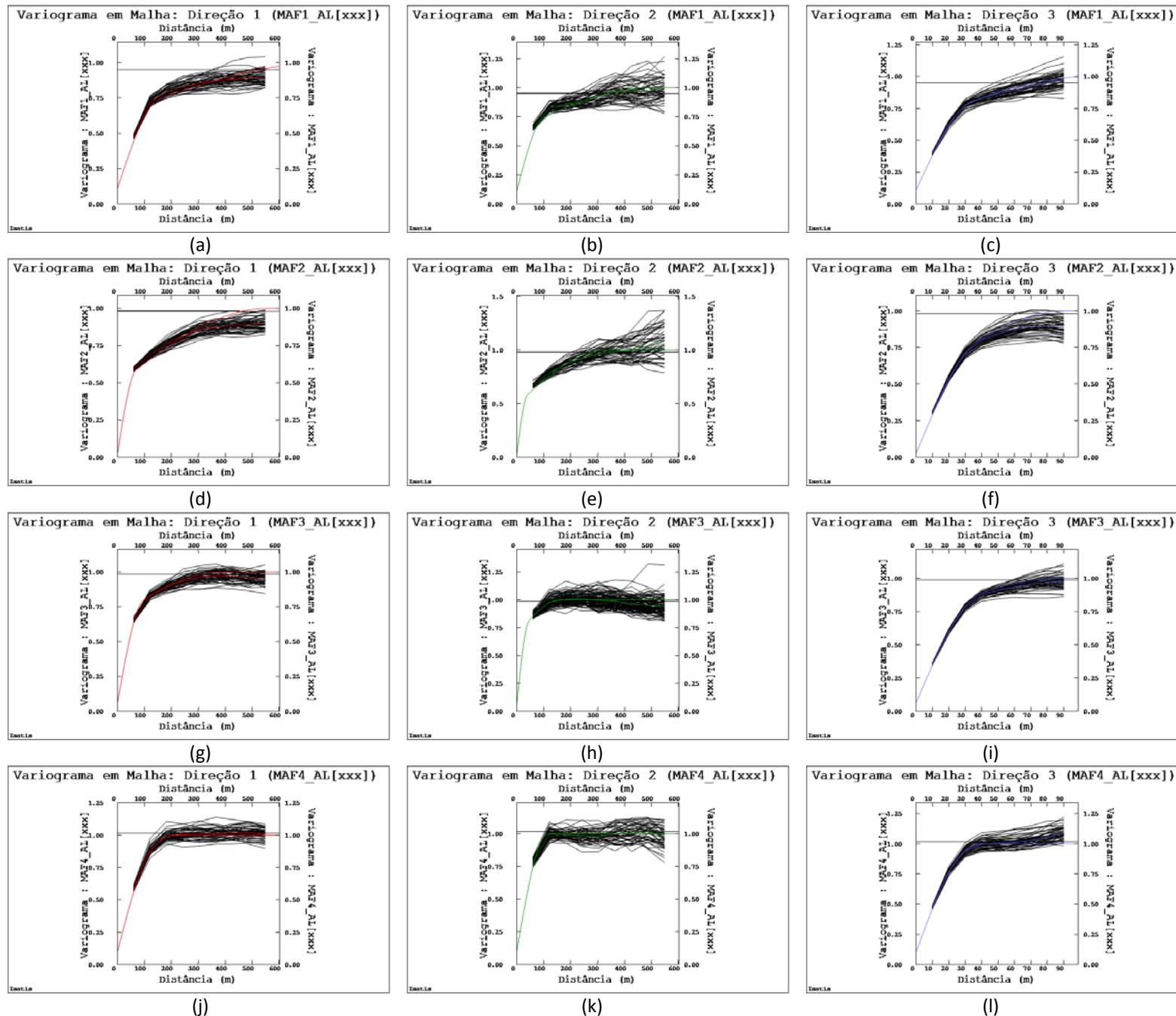


Figura H.20 – Flutuações ergódicas dos variogramas experimentais das realizações para os fatores MAF1, MAF2, MAF3 e MAF4, correspondentes à alumina, nas direções principais de anisotropia (N100°, N190° e D-90°, Direções 1, 2 e 3, respectivamente).

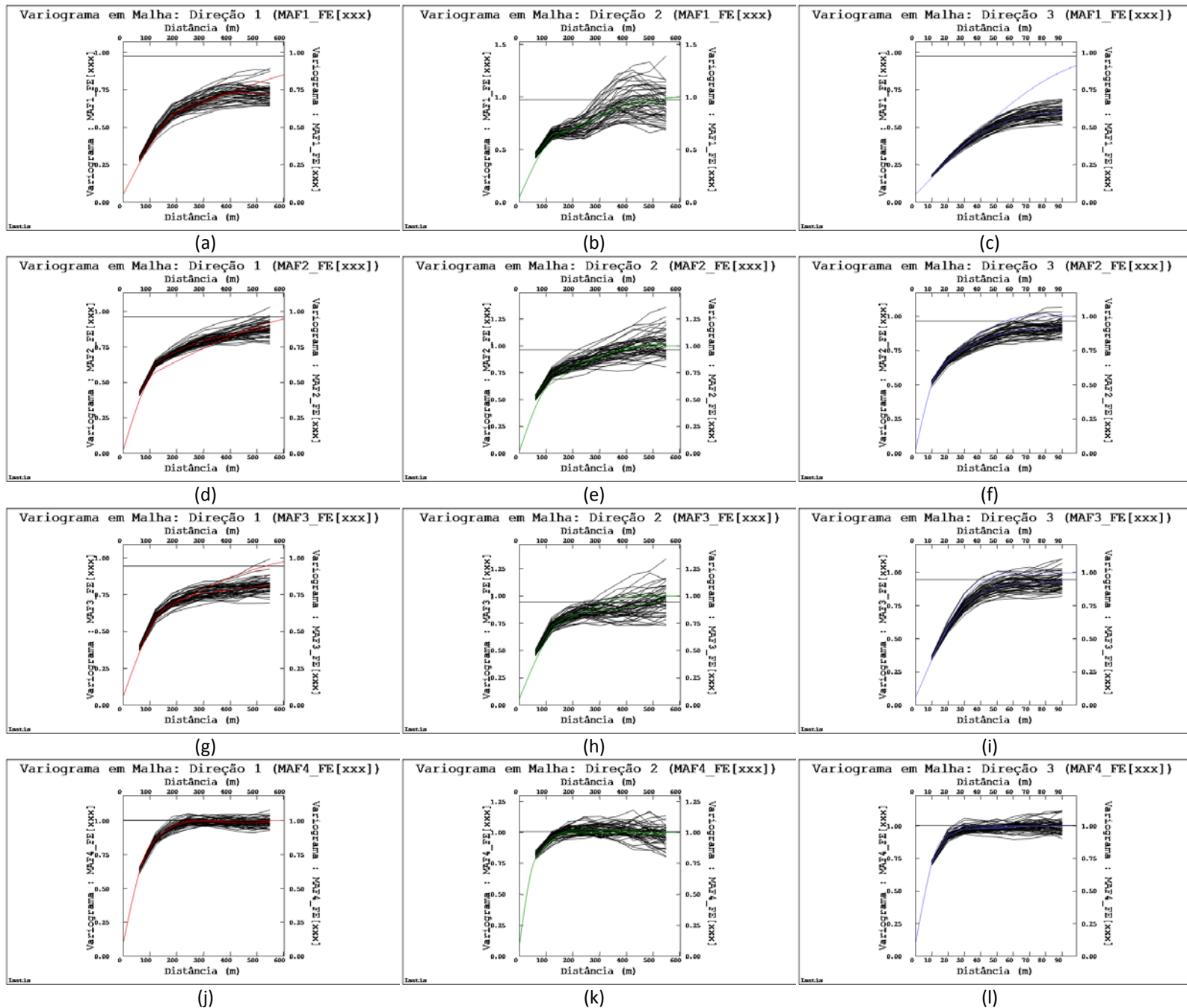


Figura H.21 - Flutuações ergódicas dos variogramas experimentais das realizações para os fatores MAF1, MAF2, MAF3 e MAF4, correspondentes ao ferro, nas direções principais de anisotropia (N100°, N190° e D-90°, Direções 1, 2 e 3, respectivamente).

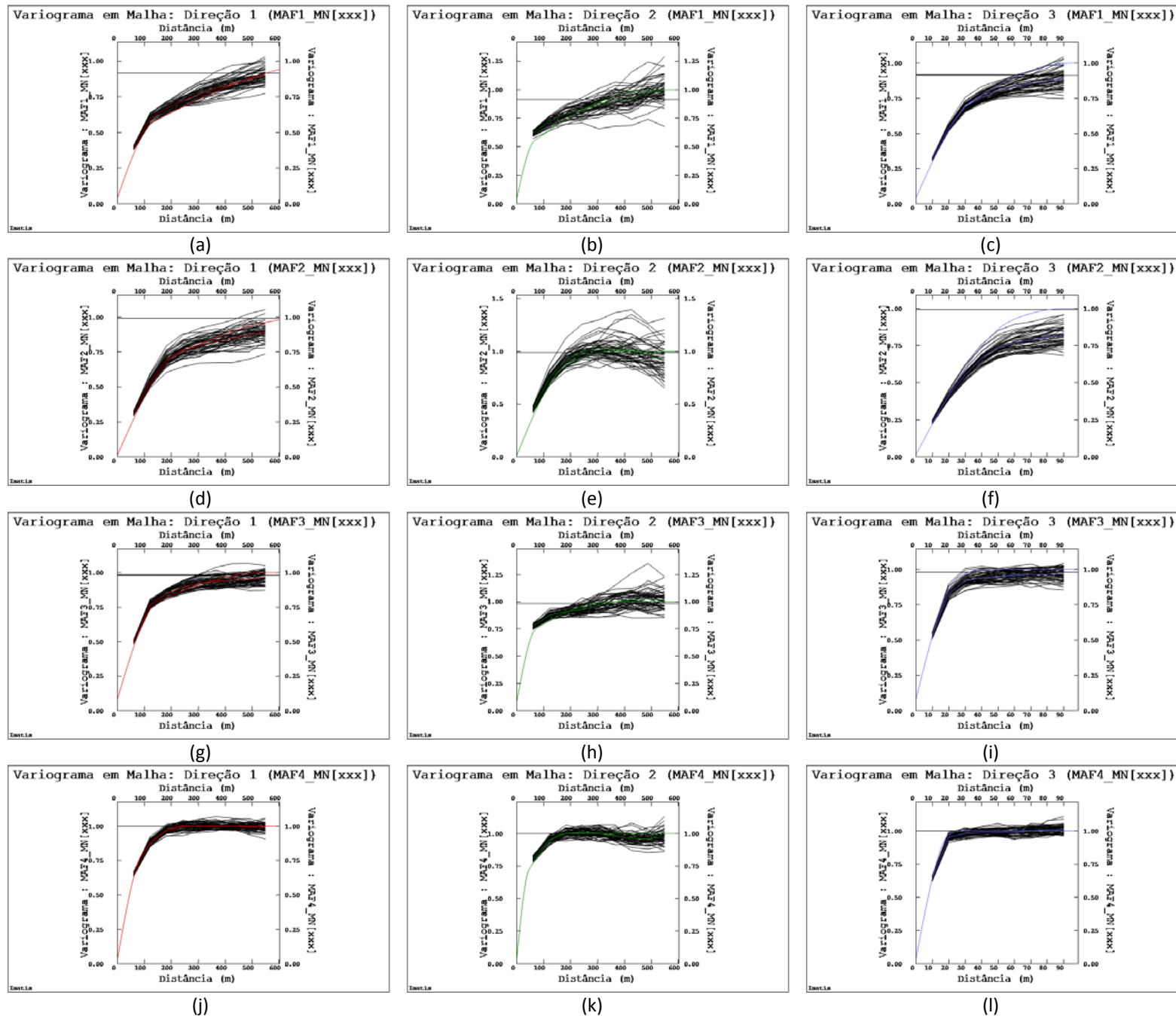


Figura H.22 - Flutuações ergódicas dos variogramas experimentais das realizações para os fatores MAF1, MAF2, MAF3 e MAF4, correspondentes ao manganês, nas direções principais de anisotropia (N100°, N190° e D-90°, Direções 1, 2 e 3, respectivamente).

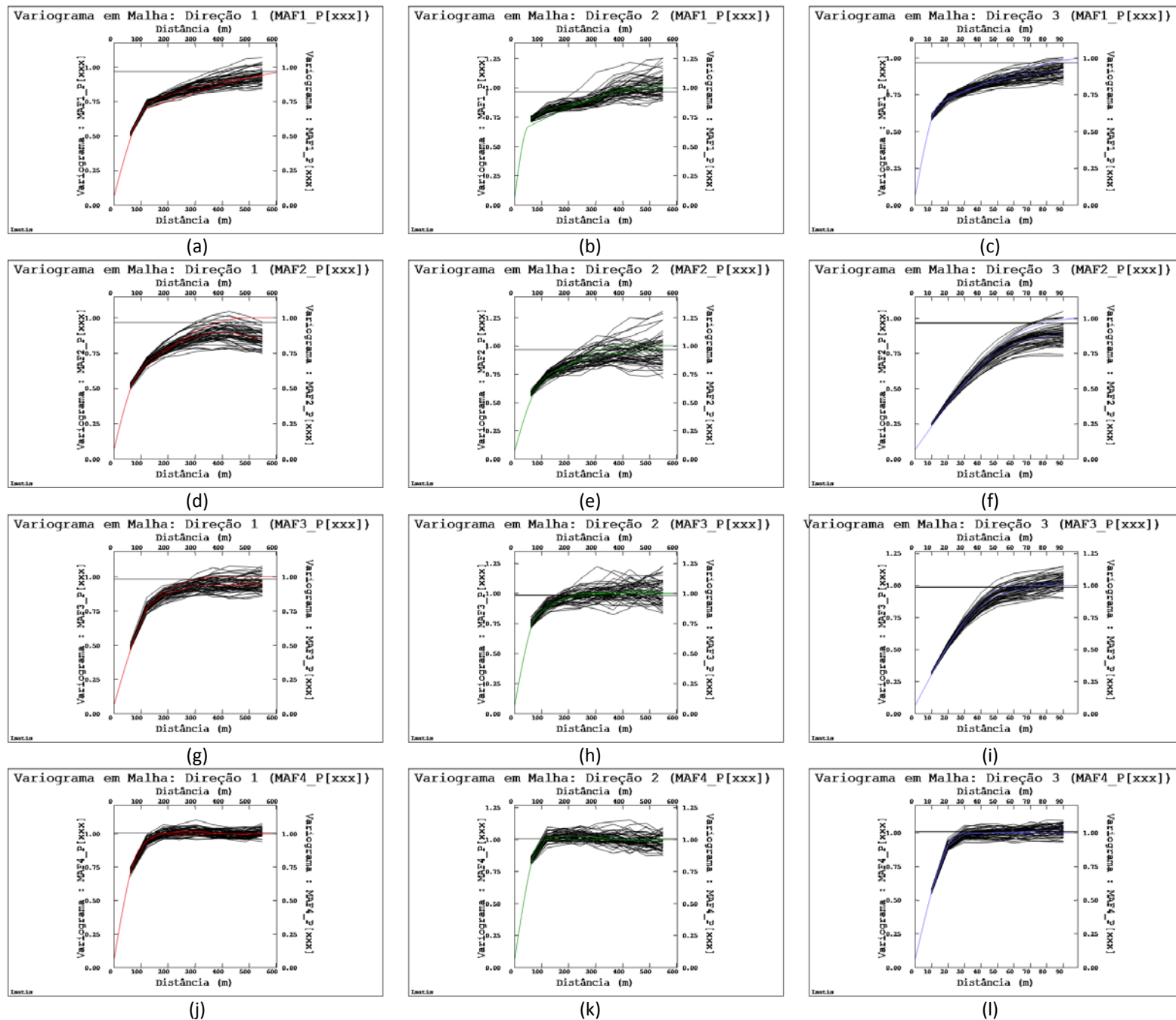


Figura H.23 - Flutuações ergódicas dos variogramas experimentais das realizações para os fatores MAF1, MAF2, MAF3 e MAF4, correspondentes ao fósforo, nas direções principais de anisotropia (N100°, N190° e D-90°, Direções 1, 2 e 3, respectivamente).

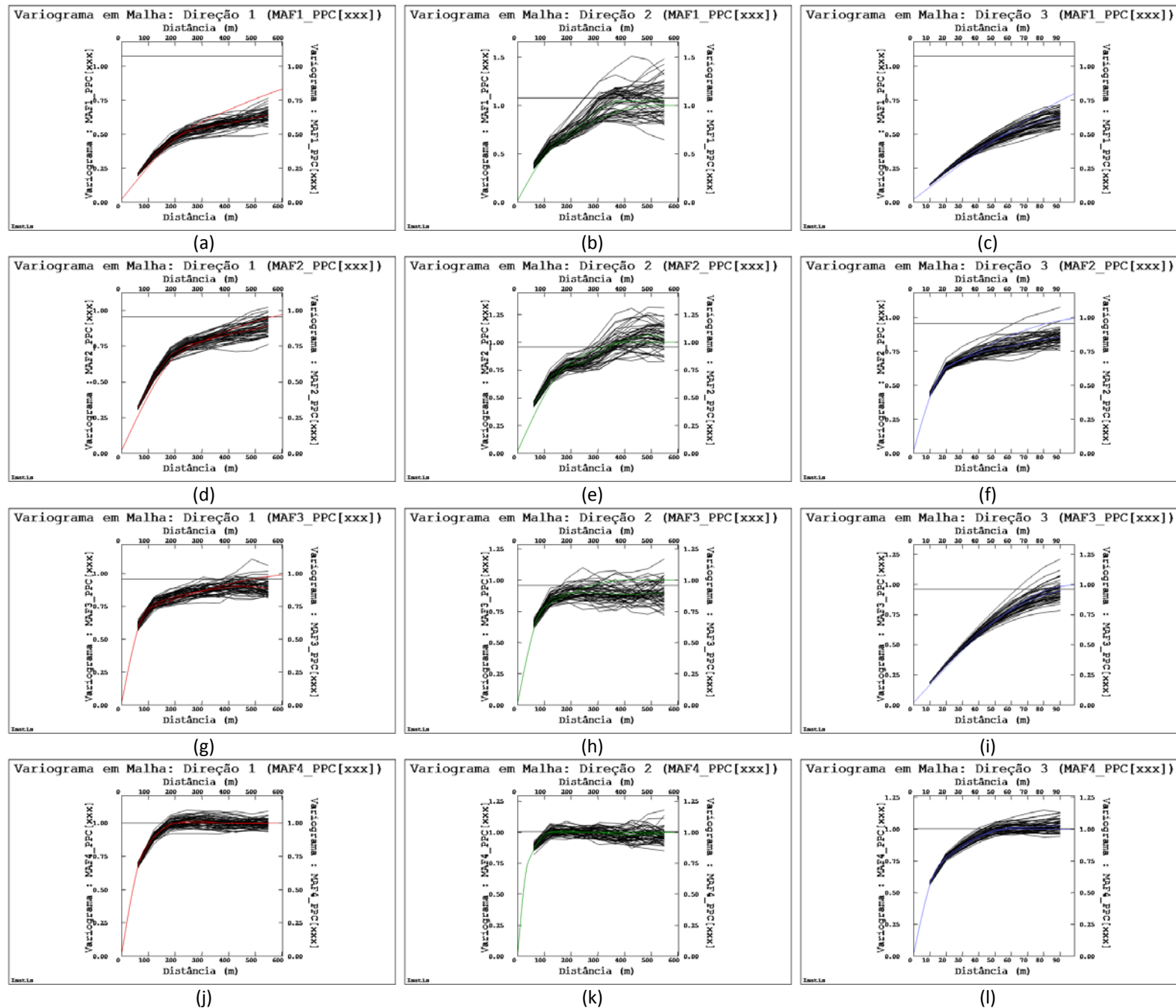


Figura H.24 - Flutuações ergódicas dos variogramas experimentais das realizações para os fatores MAF1, MAF2, MAF3 e MAF4, correspondentes às perdas por calcinação, nas direções principais de anisotropia (N100°, N190° e D-90°, Direções 1, 2 e 3, respectivamente).



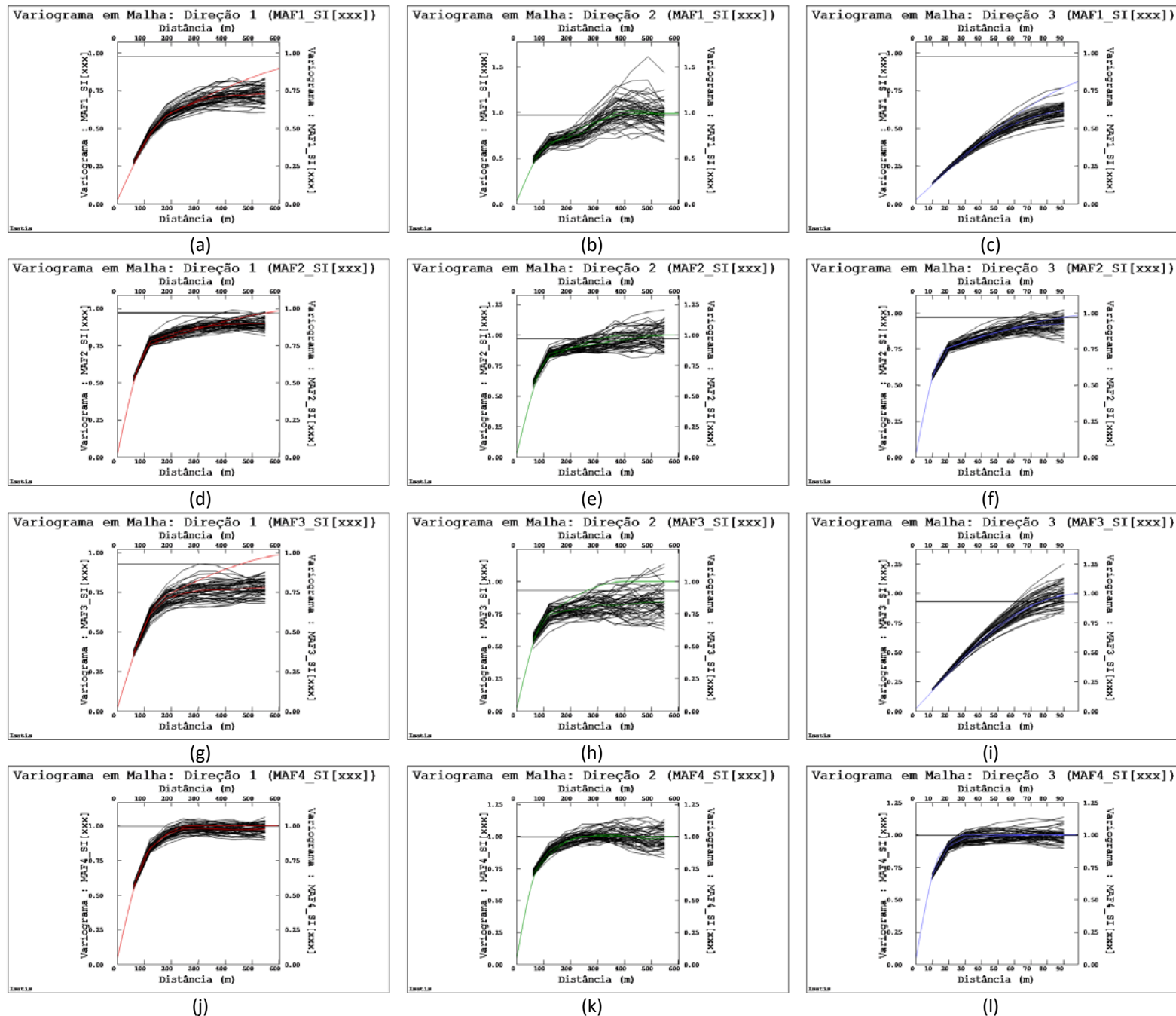


Figura H.25 - Flutuações ergódicas dos variogramas experimentais das realizações para os fatores MAF1, MAF2, MAF3 e MAF4, correspondentes à sílica, nas direções principais de anisotropia (N100°, N190° e D-90°, Direções 1, 2 e 3, respectivamente).