

Aplicação da krigagem ordinária na modelagem do pH e da dureza da água subterrânea na área central de Passo Fundo – RS

Application of ordinary kriging for groundwater pH and hardness modeling in the downtown area of Passo Fundo – RS

Daniela Bagnara

*Universidade de Passo Fundo – UPF, Passo Fundo, RS
e-mail:danielabagnara@hotmail.com*

Pedro Domingos Marques Prietto

*Universidade de Passo Fundo – UPF, Passo Fundo, RS
e-mail:pdmp@upf.br*

Rafael de Souza Timbola

*Universidade de Passo Fundo – UPF, Passo Fundo, RS
e-mail:rafaeltimbola@hotmail.com*

RESUMO: O estudo da qualidade da água subterrânea através da modelagem espacial de poços subterrâneos é de notável importância para o gerenciamento de recursos hídricos. Neste contexto, o objetivo do presente trabalho foi avaliar a utilização da técnica de modelagem geoestatística conhecida como krigagem ordinária na caracterização espacial de dois parâmetros – pH e dureza, os quais refletem parcialmente a qualidade da água subterrânea, em termos da sua potabilidade e uso doméstico, na área central do município de Passo Fundo/RS. O estudo resumiu-se a um conjunto discreto e limitado de 123 poços profundos e seus respectivos dados referentes às análises físico-químicas da água subterrânea. Os resultados obtidos possibilitaram mapear a distribuição dos parâmetros de qualidade avaliados na região de interesse, bem como comprovar o potencial dos métodos geoestatísticos como ferramentas analíticas para o monitoramento da qualidade da água subterrânea.

ABSTRACT: The study of groundwater quality through spatial modeling is of considerable importance for the management of water resources. In this context, the objective of the present study was to evaluate the potential use of the geostatistical technique known as ordinary kriging to characterize the spatial behavior of two parameters – pH and hardness, that partially define groundwater quality, in terms of its drinkability and domestic utilization, in the downtown area of Passo Fundo/RS. The present work was restricted to a discrete and limited set of 123 deep wells and the respective available data on physical-chemical parameters of groundwater. The results enabled the mapping of the evaluated quality parameters in the area of interest, as well as to prove the potential use of geostatistical methods as analytical tools for groundwater quality monitoring.

1. INTRODUÇÃO

A crescente escassez da água tem sido definida pela Organização das Nações Unidas para a Educação, a Ciência e a Cultura (UNESCO) como o problema ambiental mais grave deste século, sendo que, neste caso, a utilização dos mananciais subterrâneos emerge como uma forte alternativa estratégica para a sobrevivência do planeta. No enfrentamento deste desafio, o Brasil desempenha

papel relevante e estratégico, pois é detentor dos maiores reservatórios de águas subterrâneas do mundo, embora ainda sejam escassos e insuficientes os dados relativos aos aquíferos brasileiros.

No município de Passo Fundo, pólo econômico da região norte do Rio Grande do Sul, um percentual significativo da água utilizada para consumo humano é oriundo da exploração de poços profundos. Contudo, a expansão das

atividades econômicas de produção e consumo, em especial na área urbana, pode potencialmente comprometer a quantidade e a qualidade dos mananciais subterrâneos, especialmente em termos da sua potabilidade e uso doméstico.

O mapeamento espacial da qualidade da água subterrânea e a identificação de áreas com alto potencial de contaminação servem como parâmetro para ações gerenciais que visem à preservação dos mananciais subterrâneos, bem como para a gestão dos órgãos públicos com relação à implementação de políticas de controle e conservação.

É neste contexto, portanto, que o presente trabalho propõe o emprego de ferramentas de modelagem geoestatística, especificamente a krigagem ordinária, na avaliação da qualidade da água subterrânea na área urbana do município de Passo Fundo/RS, com o intuito de contribuir com os processos de gestão ambiental pública e a sustentabilidade da utilização dos recursos naturais.

2. MODELAGEM GEOESTATÍSTICA

A geoestatística pode ser definida como sendo uma família de técnicas de modelagem espacial, de abordagem probabilística, as quais permitem mapear superfícies e estimar dados em locais não amostrados levando em conta o comportamento espacial e/ou temporal de um fenômeno, minimizando o erro desta estimativa [4].

Os métodos geoestatísticos foram desenvolvidos graças aos estudos do engenheiro de minas Georges Matheron, na França, no final da década de 1950 e no início dos anos 1960. Estes métodos estão fundamentados na Teoria das Variáveis Regionalizadas, formalizada por Matheron a partir de estudos desenvolvidos por Daniel G. Krige, concluindo que a variância espacial dos dados possuía uma estruturação que dependia da distância entre amostragens [6].

Modernamente, esses métodos são aplicados aos mais diversos domínios das ciências da terra e do ambiente, os quais são caracterizados por um acentuado grau de incerteza. Sua aplicação tem tido grande êxito em razão da solução de diferentes problemas práticos, bem como da valorização e planejamento de recursos naturais, tais como florestas, recursos geológicos, minerais, ecológicos, e, em particular, recursos hídricos.

De modo geral, a modelagem geoestatística envolve três etapas principais:

- A análise variográfica, que tem como objetivo descrever a estrutura de dependência espacial do fenômeno em estudo;
- A análise inferencial ou krigagem, que tem como objetivo interpolar os valores de uma variável espacial em locais não amostrados;
- A simulação estocástica, que tem como objetivo construir cenários equiprováveis do fenômeno espacial em estudo.

2.1 – Análise variográfica

A análise variográfica compreende a construção do variograma experimental, a partir dos dados amostrais, e o ajuste a este de um modelo matemático apropriado, denominado variograma teórico. A Fig. 1 apresenta um variograma típico e suas propriedades.

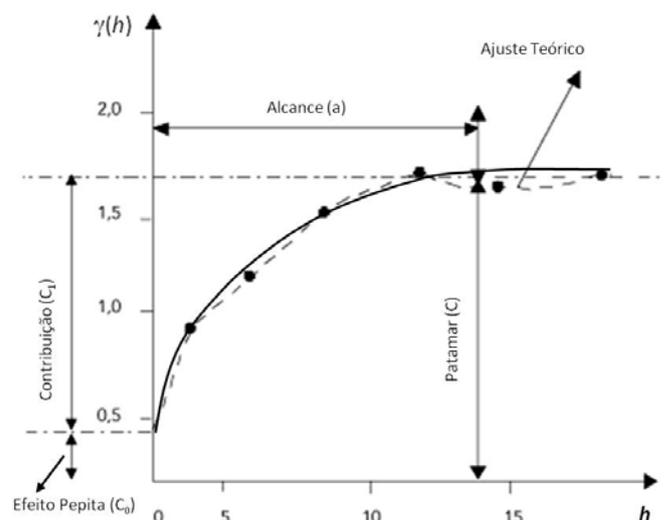


Fig 1 – Variograma típico (adaptado de [7])

A semivariância $\gamma(h)$ mede o grau de semelhança entre pares de dados amostrais separados por uma distância h em uma dada direção (quanto menor h , maior a semelhança e maior a dependência espacial) e pode ser calculada a partir da expressão:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n (v_i - v_{i+h})^2 \quad (1)$$

onde (v_i, v_{i+h}) são os n pares de dados separados pela distância h .

Na Fig. 1, a semivariância atinge um patamar C para uma dada distância $(h = a)$, denominada

alcance, a partir da qual não se verifica mais a dependência espacial dos dados, isto é, os dados apresentam comportamento aleatório. A descontinuidade junto à origem do variograma, denominada efeito pepita (C_0), está associada à dependência espacial em pequena escala, isto é, para distâncias menores do que a menor distância entre as amostras. Quando a relação C_0/C é igual à unidade tem-se o chamado efeito pepita puro, o que significa a completa ausência de dependência espacial.

2.2 – Krigagem ordinária

No processo básico de interpolação geoestatística, denominado krigagem ordinária, a estimativa de uma variável em local não amostrado (v^*) é obtida a partir da combinação linear dos n dados amostrados (v_i) disponíveis na vizinhança do ponto analisado, de acordo com a expressão geral:

$$v^* = \sum_{i=1}^n \lambda_i \cdot v_i \quad (2)$$

onde λ_i ($i = 1, 2, \dots, n$) são os pesos atribuídos a cada valor amostral.

Sendo $r = v^* - v$ o resíduo teórico da estimativa, isto é, a diferença entre o valor estimado e o valor verdadeiro (não conhecido), a melhor estimativa é obtida quando as condições de não tendenciosidade e de variância mínima são satisfeitas, conforme as expressões (3) e (4), respectivamente:

$$E(v^* - v) = 0 \quad (3)$$

$$Var(v^* - v) = \text{mínimo} \quad (4)$$

A primeira condição é garantida se a soma dos pesos é igual à unidade:

$$\sum \lambda_i = 1 \quad (5)$$

Já a minimização da variância do resíduo, sob a condição de não tendenciosidade, conduz à dedução de um sistema de equações lineares, denominado equações da krigagem ordinária:

$$\sum_{j=1}^n \lambda_j \gamma_{ij} - \mu = \gamma_{i0} \quad \forall i = 1, 2, \dots, n \quad (6)$$

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

onde γ_{ij} e γ_{i0} são obtidos no variograma teórico e correspondem, respectivamente, às semivariâncias calculadas entre pares de pontos amostrais e entre pontos amostrais e o ponto estimado.

A solução do sistema de equações da krigagem ordinária resulta na obtenção de n pesos λ , além da incógnita adicional μ (multiplicador de Lagrange).

Adicionalmente, a variância da estimativa pode ser calculada pela expressão:

$$\sigma_R^2 = \sum_{i=1}^n \lambda_i \gamma_{i0} + \mu \quad (7)$$

É importante salientar que os pesos calculados pela krigagem ordinária são fortemente influenciados pelo modelo de continuidade espacial utilizado, o qual é representado pelo variograma teórico, bem como resultam de um esquema de ponderação que considera tanto o efeito da distância entre os pontos amostrais e o ponto estimado, de forma que aos pontos mais próximos são atribuídos pesos maiores, como minimiza os efeitos do agrupamento ou redundância dos dados.

A dedução das equações (6) e (7) pressupõe que os valores dos atributos nos pontos amostrados e nos pontos estimados são resultado de um processo aleatório subjacente e, portanto, podem ser representados por variáveis aleatórias. Formalmente, para qualquer ponto onde se deseja estimar um valor não amostrado, o modelo conceitual é uma função aleatória estacionária, composta por $n+1$ variáveis aleatórias, uma para cada um dos n pontos amostrados e uma para o valor no ponto a ser estimado. Cada uma dessas variáveis aleatórias possui a mesma distribuição de probabilidades e, portanto, o mesmo valor esperado $E(V)$ (hipótese de constância da média). Adicionalmente, todo par de variáveis aleatórias possui uma distribuição conjunta de probabilidades que depende somente da distância de separação entre os pontos h e não da sua localização (hipótese da estacionariedade). É importante ressaltar que a qualidade do processo de estimação está intimamente ligada à validação

das hipóteses subjacentes ao modelo conceitual adotado.

Maiores detalhes sobre a dedução das equações da krigagem ordinária, bem como sobre outras formas de krigagem, podem ser encontrados em textos clássicos sobre geoestatística como, por exemplo, Isaaks e Srivastava [4] e Goovaerts [2,3]. Exemplos do emprego da krigagem indicativa em diferentes áreas do conhecimento podem ser encontrados, por exemplo, em Ma et al. [8] e Lado et al. [5].

3. QUALIDADE DA ÁGUA SUBTERRÂNEA

A avaliação da qualidade da água subterrânea depende do seu uso previsto e deve estar apoiada na análise espacial e temporal de parâmetros físico-químicos e microbiológicos, ou através do cálculo de indicadores de qualidade específicos.

O padrão de potabilidade das águas subterrâneas deve ser avaliado e classificado a partir da comparação de dados disponíveis de análises físico-químicas e microbiológicas de poços tubulares com valores de referência recomendados pela legislação vigente (Portaria 518/2004, do Ministério da Saúde), os quais estão resumidos na Tabela 1.

Tabela 1 – Parâmetros de Potabilidade da Água

Parâmetro de qualidade	Limite máximo ou faixa recomendável
Cor	5 Pt/L
Turbidez	5 UTN
pH	6,0 a 9,5
Fluoretos	1,5 mg/l
Nitratos (NO ₃ /N)	10,0 mg/l
Cloretos	250,0 mg/l
Dureza	500,0 mg/l CaCO ₃
Ferro Total	0,3 mg/l
Manganês	0,1 mg/l
Sulfatos	250,0 mg/l
Sólidos Totais Dissolvidos	1000,0 mg/l
Coliformes Fecais	0/100 ml
Coliformes Totais	0/100 ml

A dureza é um parâmetro característico da qualidade de águas de abastecimento, porém, em termos da sua potabilidade, são admitidos valores relativamente altos, conforme indica a Tabela 1, típicos de águas duras ou muito duras. A dureza

excessiva não é causa de problemas fisiológicos, contudo pode conferir sabor desagradável à água de consumo. Por outro lado, águas muito duras, assim como muito moles, não são adequadas a outros usos domésticos, pois podem produzir incrustações ou provocar corrosão em tubulações, tanques e caldeiras. Quanto ao pH, valores muito baixos (ácidos) ou altos (alcalinos) podem resultar em efeitos semelhantes ao da dureza, isto é, provocar corrosão ou incrustações, respectivamente.

4. METODOLOGIA

4.1 – Área de estudo

O trabalho foi desenvolvido na área urbana central do município de Passo Fundo, situado na região norte do Estado do Rio Grande do Sul, com aproximadamente 760 km² de extensão territorial total e cerca de 180 mil habitantes. No município de Passo Fundo as atividades econômicas de produção e consumo têm gerado externalidades negativas que comprometem a qualidade de sua água superficial e subterrânea. Diversas ações têm contribuído para a degradação dos mananciais hídricos, desde atividades rurais, como drenagem das várzeas para uso agrícola, implantação de lavouras, contaminação por agrotóxicos, desmatamento de matas ciliares, até atividades urbanas, como esgotos clandestinos, eliminação de efluentes industriais e depósito inadequado de resíduos sólidos urbano, entre outros.

A hidrogeologia do município de Passo Fundo é formada pelos sistemas aquíferos Guarani, Serra Geral I e Serra Geral II [9].

4.2 – Base de dados e parâmetros analisados

Os dados de 123 poços tubulares localizados na área urbana de Passo Fundo, referentes a um período de cinco anos, foram coletados junto a Secretaria Municipal da Saúde e a uma empresa construtora de poços artesianos localizada no município. Foram disponibilizados dados referentes à qualidade da água subterrânea, incluindo parâmetros físico-químicos e microbiológicos. A profundidade média dos poços analisados é de aproximadamente 140 metros.

Tendo em vista que nem todos estes parâmetros apresentavam dados suficientes, tanto em termos de quantidade como qualidade, foram analisados

somente os parâmetros pH e Dureza, a partir dos quais é possível avaliar preliminarmente a qualidade da água subterrânea na região de estudo, bem como demonstrar o potencial da modelagem geoestatística para este fim.

A partir da compilação dos dados, foi construído um banco de dados georeferenciado contendo todas as informações necessárias às análises propostas com o auxílio do software de manipulação de informações geográficas ArcGIS Desktop[®], versão 9.3.1.

A Fig. 2 mostra a localização espacial de todos os poços compilados na área urbana de Passo Fundo. O contorno pontilhado identifica a área central, onde está concentrada a maioria dos poços.

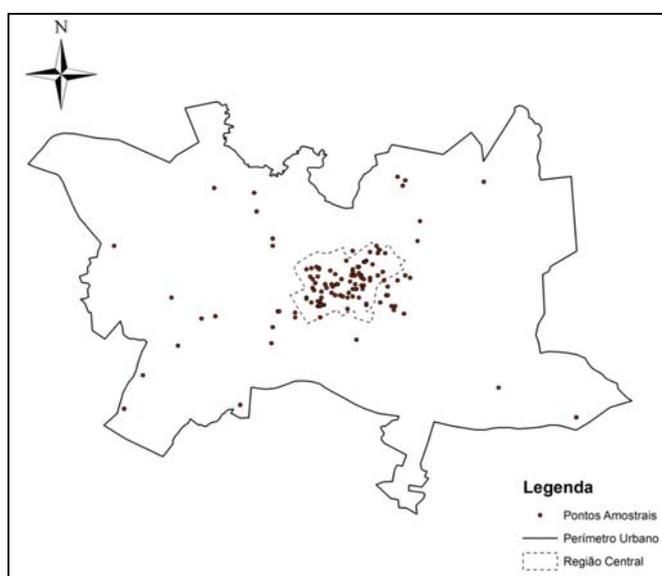


Fig. 2 - Localização dos poços na área urbana e central do município de Passo Fundo – RS.

4.3 – Modelagem espacial dos dados

A modelagem geoestatística da distribuição espacial dos parâmetros de qualidade das águas subterrâneas na área urbana central do município de Passo Fundo foi realizada com o auxílio da ferramenta *Geostatistical Analyst* do software ArcGIS Desktop[®], versão 9.3.1 e do software Surfer, versão 9.

5. RESULTADOS

5.1 – Análise exploratória dos dados

A Tabela 2 apresenta, para as duas variáveis analisadas, um sumário estatístico incluindo: média, mediana, primeiro quartil, terceiro quartil, mínimo, máximo, desvio padrão, coeficiente de assimetria e coeficiente de curtose. É apresentado, ainda, o resultado do teste de Anderson-Darling [10] para verificação da normalidade das distribuições.

Tabela 2 – Sumário estatístico das variáveis.

Variável	pH	Dureza
Numero de Dados	123	123
Média	6,75	45,9
Desvio Padrão	0,54	20,9
Assimetria	0,27	0,44
Curtose	0,27	-0,57
Mínimo	5,43	8,20
1º Quartil	6,4	29,5
Mediana	6,78	43,7
3º Quartil	7,04	60,1
Máximo	8,24	94,6
Teste AD ^(*)	0,447	0,760

(*) Teste de Anderson-Darling para normalidade da distribuição

Analisando as estatísticas apresentadas na Tabela 2, constata-se que as distribuições das variáveis pH e Dureza se aproximam razoavelmente da hipótese normalidade, premissa esta importante para a utilização da krigagem ordinária [4].

5.2 – Variogramas experimentais e teóricos

Nas Figuras 3 e 4 são apresentados os variogramas experimentais omnidirecionais juntamente com os respectivos modelos teóricos ajustados, obtidos para as duas variáveis analisadas, pH e Dureza. Cabe ressaltar que na obtenção destes variogramas foram utilizados somente os poços localizados na região de interesse ou próximos aos seus limites (ver Fig. 2), totalizando 90 pontos amostrais.

Além dos variogramas omnidirecionais apresentados nas Figuras 3 e 4, foram construídos variogramas direcionais a fim de incorporar no modelo teórico uma eventual anisotropia

geométrica no comportamento estrutural das variáveis analisadas.

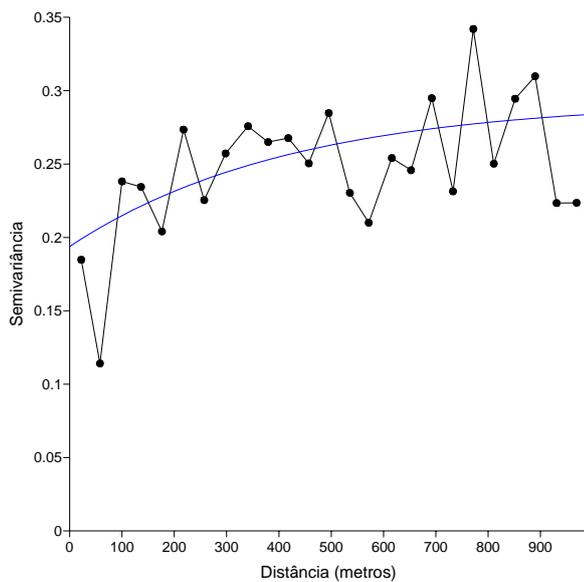


Fig. 3 – Variograma omnidirecional para o parâmetro pH (90 pontos amostrais).

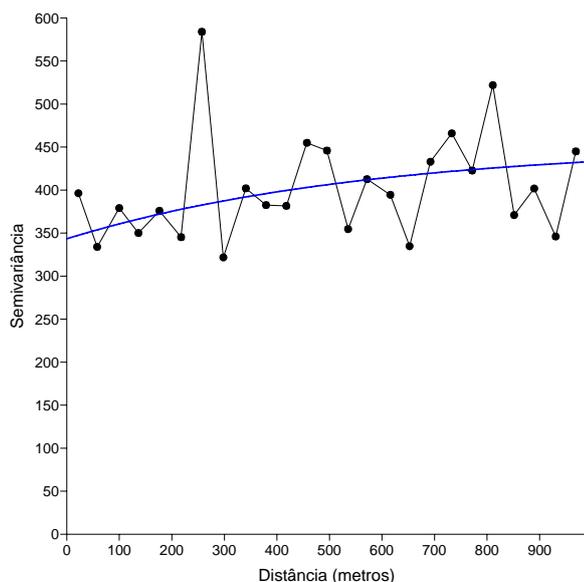


Fig. 4 – Variograma omnidirecional para o parâmetro dureza total (90 pontos amostrais).

A Tabela 3 apresenta um resumo dos parâmetros dos modelos de variograma adotados. Nesta tabela, o fator de anisotropia se refere à relação entre os alcances determinados nas direções de maior e de menor continuidade espacial, enquanto o ângulo de anisotropia se refere ao ângulo formado pela direção de maior continuidade espacial (alcance máximo) com a direção horizontal, medido no sentido anti-horário.

Tabela 3 – Parâmetros dos modelos de variograma adotados para as variáveis analisadas.

Variável	pH	Dureza
Tipo de Modelo	Exponencial	Exponencial
Efeito Pepita	0,1938	343,3 (mg/l) ²
Patamar	0,2931	452,3 (mg/l) ²
Alcance ^(*)	808,9 m	882,0 m
Fator de Anisotropia	2	2
Ângulo de Anisotropia	107,9°	2,96°

^(*) distância para a qual 63% do patamar é atingido.

5.3 – Mapas de distribuição espacial

As Figuras 5 e 6 apresentam, respectivamente, o mapa de distribuição das estimativas do pH na região central da área urbana do município de Passo Fundo – RS, obtidos por krigagem ordinária, e o mapa de desvios padrão destas estimativas.

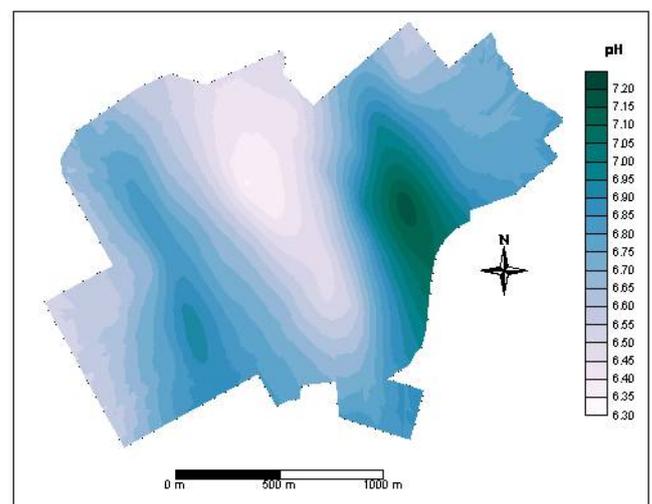


Fig. 5 – Mapa de estimativas para o pH.

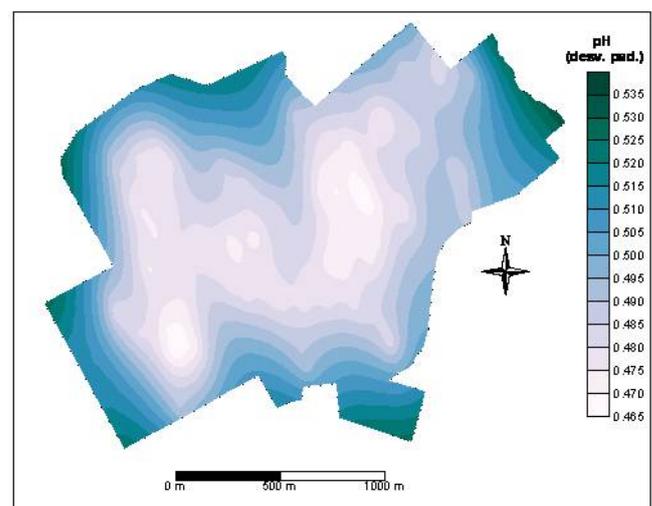


Fig. 6 – Mapa de desvios-padrão para o pH.

As Figuras 7 e 8 apresentam os mesmos mapas para a variável dureza.

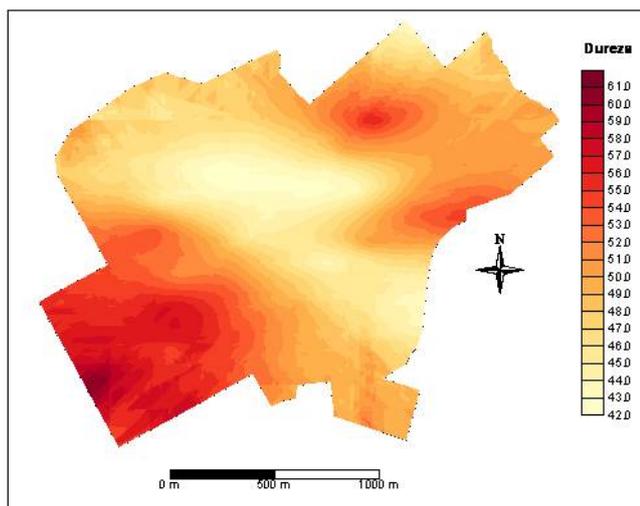


Fig. 7 – Mapa de estimativas para a dureza (mg/l CaCO₃).

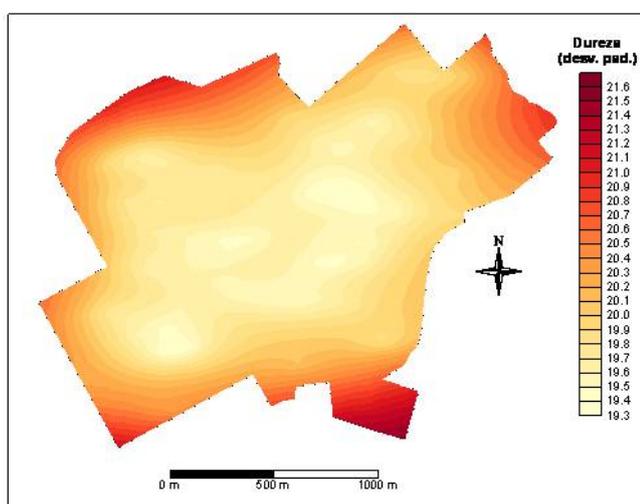


Fig. 8 – Mapa de desvios-padrão para a dureza (mg/l CaCO₃).

Na construção dos mapas apresentados nas Figuras 5 a 8 foi utilizada uma malha de interpolação de 400 x 334 pontos, com espaçamento de aproximadamente 26 metros em ambas as direções.

Para cada nó da malha de interpolação, a partir da definição de uma região de busca circular dos dados amostrais a serem utilizados na estimativa, foi montado e resolvido o sistema da krigagem ordinária (equação 6) para determinação dos pesos necessários ao cálculo da estimativa (equação 2) e, finalmente, calculado o desvio-padrão da estimativa (equação 7).

Deve-se ressaltar que a representatividade dos mapas de distribuição espacial está intimamente ligada à obtenção de variogramas representativos da verdadeira estrutura espacial subjacente às variáveis analisadas, o que, no presente caso, pode

ser sido prejudicada pelo número relativamente baixo de pontos amostrais. O erro associado às estimativas dos atributos, embora de magnitude aceitável, é menor na região onde se verifica o maior agrupamento dos dados, na parte central da região de interesse, crescendo em direção às bordas da área, quando o desejável é que a distribuição do erro fosse mais uniforme.

Quanto à avaliação dos parâmetros de qualidade da água subterrânea na área central de Passo Fundo, observa-se que o pH se encontra dentro da faixa indicada pela Portaria 518/2004, do Ministério da Saúde e que a dureza apresenta valores baixos (dureza moderada) se comparados ao limite estabelecido pela mesma portaria (ver Tabela 2). No entanto, uma avaliação mais completa da qualidade da água, tanto em termos da sua potabilidade como da adequação ao uso doméstico, requer a avaliação de outros parâmetros, como os demais listados na Tabela 2.

5.4 – Validação cruzada

A incerteza associada às estimativas obtidas pela krigagem ordinária pode ser convenientemente avaliada através de um procedimento denominado validação cruzada. Resumidamente, este procedimento envolve a estimativa de cada ponto medido "fazendo de conta" que ele não existe e utilizando todos os demais dados disponíveis na sua estimativa. Se a krigagem for mesmo representativa do processo espacial real, e se as hipóteses assumidas forem verdadeiras, então um valor estimado utilizando a validação cruzada deverá ser razoavelmente próximo do valor amostrado em uma mesma localização. A Tabela 4 apresenta um resumo da validação cruzada, incluindo estatísticas para os resíduos, isto é, as diferenças entre os valores medidos e os valores estimados pela krigagem.

Tabela 4 – Estatísticas para os resíduos obtidos na validação cruzada.

Variável	pH	Dureza
Média	0,0044	-0,049
Mediana	-0,103	0,052
Desvio-Padrão	0,457	20,5

A análise dos valores apresentados na Tabela 3 indica que, embora a krigagem tenha produzido estimativas não tendenciosas, o desvio padrão

relativamente elevado dos resíduos evidencia que muitos valores foram superestimados ou subestimados. Possivelmente, este fato está relacionado ao baixo grau de dependência espacial apresentado pelas variáveis (elevado efeito pepita). Contudo, um melhor plano de amostragem, ou ainda, o refinamento no ajuste dos variogramas experimentais e a incorporação de eventuais tendências subjacentes ao comportamento dos dados (krigagem universal) poderiam melhorar o desempenho do estimador geoestatístico.

6. CONCLUSÕES

O presente trabalho avaliou a utilização da técnicas de modelagem geoestatística conhecida como krigagem ordinária na caracterização da variabilidade espacial de parâmetros da qualidade da água subterrânea na área urbana do município de Passo Fundo/RS.

Os mapas de distribuição espacial para as variáveis pH e dureza na região de interesse, construídos a partir da aplicação da krigagem ordinária, constituem ferramentas valiosas de apoio a tomada de decisão para o gestor de recursos hídricos, porém a sua representatividade é extremamente dependente da malha amostral e da qualidade e quantidade das análises disponíveis, bem como dos modelos de dependência espacial adotados e seus parâmetros (análise variográfica). É também muito importante a experiência e o conhecimento do analista em relação aos processos físicos e químicos subjacentes ao fenômeno em estudo

A partir dos mapas produzidos, foi possível concluir preliminarmente que a qualidade da água subterrânea na área urbana de Passo Fundo, no que diz respeito ao pH e à dureza, está de acordo com os parâmetros de potabilidade estabelecidos pelo Ministério da Saúde, porém uma avaliação mais completa não foi possível em razão no número restrito de parâmetros analisados.

REFERÊNCIAS

1. Goovaerts, P. *Geostatistical modelling of uncertainty in soil science*. Geoderma, v. 103, p. 3-26, 2001.
2. Goovaerts, P. *Geostatistics for natural resources evaluation*. New York: Oxford University Press, 1997.
3. Isaaks, E.H.; Srivastava, R.M. *An introduction to applied geostatistics*. New York: Oxford University Press, 1989.
4. Lado, L.R.; Hengl, T.; Reute, H.I. *Heavy metals in European soils: A geostatistical analysis of the FOREGS Geochemical database*. Geoderma, v. 140, p. 189-199, 2008.
5. Landim, P.M.B.; Sturaro, J.R. *Krigagem indicativa aplicada à elaboração de mapas probabilísticos de riscos*. 2002. Disponível em <<http://www.rc.unesp.br/igce/aplicada/textodi.html>>. Acesso em 20/11/2008.
6. Lourenço, R.W.; Landim, P.M.B. *Mapeamento de áreas de risco à saúde pública por meio de métodos geoestatísticos*. Caderno de Saúde Pública, Rio de Janeiro, v. 21, n. 1, 2005.
7. Ma, T; Sophocleous, M.; Yu, Y. *Geostatistical Applications in Ground-Water Modeling in South Central Kansas*. Journal of Hydrologic Engineering, v. 4, n. 1, p. 57-64, 1999.
8. Machado, J.L.F; Freitas, M.A. *Compartimentação Espacial e Arcabouço Hidroestratigráfico do Sistema Aquífero Guarani no Rio Grande do Sul*. Tese de doutoramento. Programa de Pós Graduação em Geologia, Unisinos. São Leopoldo, 2005.
9. Shapiro, S.S.; Francia, R.S. *An Approximate Analysis of Variance Test for Normality*. Journal of the American Statistical Association, v. 67, p. 215-216, 1972.