

DONIZETI APARECIDO PASTORI NICOLETE

**SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA DAS FRAÇÕES GRANULOMÉTRICAS DO SOLO
DA FAZENDA EXPERIMENTAL EDGÁRDIA - BOTUCATU-SP**

Botucatu

2019

DONIZETI APARECIDO PASTORI NICOLETE

**SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA DAS FRAÇÕES GRANULOMÉTRICAS DO SOLO
DA FAZENDA EXPERIMENTAL EDGÁRDIA - BOTUCATU-SP**

Tese apresentada à Faculdade de Ciências Agronômicas da Unesp Campus de Botucatu, para obtenção do título de Doutor em Agronomia (Irrigação e Drenagem)

Orientador: Prof. Dr. Diego Augusto de Campos Moraes

Coorientador: Prof. Dr. Luís Gustavo Frediani Lessa

Botucatu

2019

N643s

Nicolete, Donizeti Aparecido Pastori

Simulação estocástica das frações granulométricas do solo da
Fazenda Experimental Edgárdia – Botucatu-SP / Donizeti Aparecido
Pastori Nicolete. -- Botucatu, 2019

91 p. : il., tabs., mapas

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (Unesp),
Faculdade de Ciências Agrônomicas, Botucatu

Orientador: Diego Augusto de Campos Moraes

Coorientador: Luís Gustavo Frediani Lessa

1. Simulação sequencial gaussiana. 2. Krigagem ordinária. 3.
Geoestatística. 4. Textura do solo. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca da Faculdade de
Ciências Agrônomicas, Botucatu. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

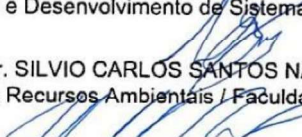
CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: SIMULAÇÃO ESTOCÁSTICA DAS FRAÇÕES GRANULOMÉTRICAS DO SOLO DA FAZENDA EXPERIMENTAL EDGÁRDIA - BOTUCATU-SP

AUTOR: DONIZETI APARECIDO PASTORI NICOLETE
ORIENTADOR: DIEGO AUGUSTO DE CAMPOS MORAES
COORDENADOR: LUIS GUSTAVO FREDIANI LESSA

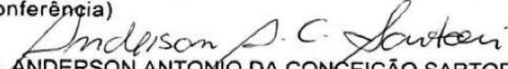
Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Doutor em AGRONOMIA (IRRIGAÇÃO E DRENAGEM), pela Comissão Examinadora:


Prof. Dr. DIEGO AUGUSTO DE CAMPOS MORAES
Análise e Desenvolvimento de Sistemas / Faculdade Eduvale de Avaré


Prof. Dr. SILVIO CARLOS SANTOS NAGY
Solos e Recursos Ambientais / Faculdade de Ciências Agrônomicas de Botucatu


Prof. Dr. FÁBIO ÁVILA NOSSACK
Engenharia Civil / Universidade Paulista - Campus Assis


Prof.ª Dr.ª TÂNIA MARIA DE CARVALHO
Instituto de Ciências Agrárias e Ambientais / Universidade Federal de Mato Grosso (participação por videoconferência)


Prof. Dr. ANDERSON ANTONIO DA CONCEIÇÃO SARTORI
Engenharia Florestal / Faculdade Origenes Lessa

Botucatu, 07 de agosto de 2019

AGRADECIMENTOS

À minha família pelo apoio em todos os momentos.

À Prof.^a Dr.^a Célia Regina Lopes Zimback, pela orientação, apoio e oportunidades oferecidas desde a iniciação científica, mestrado e grande parte do doutorado.

Ao Prof. Dr. Diego Augusto de Campos Moraes, por ter assumido a orientação e contribuído de forma significativa com o trabalho.

Ao Prof. Dr. Luís Gustavo Frediani Lessa, pela coorientação e apoio no desenvolvimento deste e outros trabalhos.

Aos membros do Grupo de Estudos e Pesquisas Agrárias Georreferenciadas (GEPAG), pela amizade e aprendizado durante todos esses anos de convívio.

Ao programa de Pós-Graduação em Agronomia (Irrigação e Drenagem) pela oportunidade em realizar o doutorado.

Ao CNPq (processo 140605/2016-9) pela concessão da bolsa de estudos, sem a qual, a realização do doutorado não seria possível.

Muito obrigado

RESUMO

O mapeamento de atributos do solo é essencial para o planejamento conservacionista das terras. A textura, composta pelas frações granulométricas areia, silte e argila, destaca-se dada sua participação em diversos processos físicos, químicos e biológicos, como movimentação e armazenamento de água, decomposição de matéria orgânica, estoque de carbono e disponibilidade de nutrientes. Nesse contexto, a pedometria e a geoestatística, utilizando métodos quantitativos de análise dos solos, possibilita a obtenção de mapeamentos numéricos, onde são estimados valores em locais não amostrados, a partir de um conjunto de dados previamente mensurados. Assim, o presente estudo teve como objetivo o uso de técnicas de geoestatística na espacialização das frações granulométricas do solo para a Fazenda Experimental Edgárdia, Botucatu-SP, buscando uma avaliação dos métodos de predição por krigagem ordinária e por simulação estocástica, no caso, a simulação sequencial gaussiana. O conjunto de dados foi composto por 95 amostras, em superfície e subsuperfície, para as quais foram obtidos os teores de areia, silte e argila, esses consistem em dados composicionais, assim para o seu tratamento foi aplicado, inicialmente, a transformação razão log-aditiva. Aos dados transformados procedeu-se o ajuste dos variogramas e posterior interpolação e simulação. Os produtos gerados foram avaliados quanto sua acurácia global, pela performance dos diferentes métodos em reproduzir a estatísticas do conjunto de dados de entrada. Os resultados mostraram que a transformação razão log-aditiva condicionou uma distribuição normal aos dados originais e a análise variográfica dos mesmos indicou a existência de dependência espacial variando de um grau moderado a forte, sendo ajustados os modelos esférico e exponencial, para as transformações em superfície e em subsuperfície, respectivamente. Cada realização individual obtida por simulação sequencial gaussiana apresentou um desempenho superior na reprodução dos dados de entrada em comparação à krigagem ordinária, sendo indicado o uso do mapa médio das realizações na caracterização espacial das frações granulométricas do solo e o conjunto de realizações nas análises das incertezas das predições.

Palavras-chave: Simulação sequencial gaussiana. Krigagem ordinária. Geoestatística. Textura do solo.

ABSTRACT

Mapping soil properties is essential for land conservation planning. Soil texture (sand, silt, and clay fractions) stands out for its participation in several physical, chemical, and biological processes such as water movement and storage, organic matter decomposition, carbon stock and nutrient availability. In this context, by quantitative soil analyses, pedometrical and geostatistical methods enable obtaining of numerical maps, in which unsampled sites can be estimated based on the previously measured dataset. The present study aims to spatialize soil particle-size fractions using two prediction models, ordinary kriging and stochastic simulation (gaussian sequential simulation). The evaluated area was the Edgárdia Experimental Farm, in Botucatu-SP (Brazil). Dataset consisted of 95 surface and subsurface samples, which were analyzed for sand, silt, and clay contents. These are compositional data; therefore, they were initially transformed by additive log-ratio. Then, transformed data were used for variogram fit, and further interpolation and simulation. Generated products were evaluated for global accuracy by different methods for input data statistics. The results showed that additive log-ratio transformation conditioned a normal distribution to the original data. Spatial dependence was detected, and it ranged from moderate to strong. Semivariograms were fitted to spherical and exponential models for surface and subsurface transformed data, respectively. Each individual realization obtained by gaussian sequential simulation presented a superior performance in input data reproduction if compared to ordinary kriging. The average realization map should be used for spatial characterization of soil grain-size fractions and realizations in prediction uncertainty analyses.

Keywords: Sequential gaussian simulation. Ordinary kriging. Geostatistics. Soil texture.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1- Guia para agrupamento de classes de textura.	20
Figura 2 - Variograma experimental (pontos) e variograma teórico (linha tracejada).	26
Figura 3 - Localização da Fazenda Experimental Edgardia e malha amostral no interior da fazenda.	37
Figura 4 - Mapa de Solos da Fazenda Experimental Edgárdia	39
Figura 5 - Fluxograma dos procedimentos da simulação sequencial gaussiana	46
Figura 6 - Triângulo textural, superfície (esquerda), subsuperfície (direita)	48
Figura 7 - Gráficos quantil-quantil para as frações granulométricas e transformações RLA em superfície	52
Figura 8 - Gráficos quantil-quantil para as frações granulométricas e transformações RLA em subsuperfície.....	53
Figura 9 - Matriz de correlação para as frações granulométricas e transformações RLA em superfície	54
Figura 10 - Matriz de correlação para as frações granulométricas e transformações RLA em subsuperfície.....	55
Figura 11 - Variograma para a transformação RLA G1	57
Figura 12 - Variograma para a transformação RLA G2.....	57
Figura 13 - Variograma para a transformação RLA G3.....	58
Figura 14 - Variograma para a transformação RLA G4.....	58
Figura 15 - Validação cruzada para a transformação RLA G1	60
Figura 16 - Validação cruzada para a transformação RLA G2	60
Figura 17 - Validação cruzada para a transformação RLA G3.....	61
Figura 18 - Validação cruzada para a transformação RLA G4	61
Figura 19 - Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G1 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas ..	64
Figura 20 - Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G2 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas ..	65
Figura 21 - Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G3 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas ..	66
Figura 22 - Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G4 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas ..	67

Figura 23 - Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G1	68
Figura 24 - Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G2.....	69
Figura 25 - Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G3.....	69
Figura 26 - Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G4	70
Figura 27 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G1	71
Figura 28 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G2	72
Figura 29 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G3	73
Figura 30 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G4	74
Figura 31 - Distribuição espacial da areia, silte e argila em superfície por KO	75
Figura 32 - Distribuição espacial tipo-E da areia, silte e argila em superfície, média das 300 realizações	76
Figura 33 - Realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG para a areia, silte e argila e superfície	77
Figura 34 - Distribuição espacial da areia, silte e argila em subsuperfície por KO ...	78
Figura 35 - Distribuição espacial tipo-E da areia, silte e argila em subsuperfície, média das 300 realizações	79
Figura 36 - Realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG para a areia, silte e argila em subsuperfície.....	80

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Estatística descritiva das frações granulométricas do solo em superfície.	49
Tabela 2 - Estatística descritiva das frações granulométricas do solo em subsuperfície	49
Tabela 3 - Parâmetros dos variogramas ajustados para os valores das transformações RLA.....	56
Tabela 4 - Estatísticas da validação cruzada para as transformações RLA.....	59
Tabela 5 - Estatística $\epsilon\gamma$ para as transformações RLA.....	68

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	17
2	REVISÃO DE LITERATURA.....	19
2.1	Frações granulométricas do solo.....	19
2.2	Mapeamento de atributos do solo.....	22
2.3	Geoestatística.....	24
2.3.1	Análise variográfica.....	25
2.3.2	Interpolação por Krigagem.....	29
2.3.3	Simulação estocástica.....	32
2.3.3.1	Simulação sequencial gaussiana (SSG).....	33
2.3.4	Aplicações da estimação e simulação geoestatística na especialização de atributos do solo.....	34
3	MATERIAL E MÉTODOS.....	37
3.1	Descrição da área.....	37
3.1.1	Localização.....	37
3.1.2	Clima.....	38
3.1.3	Geologia.....	38
3.1.4	Relevo.....	38
3.1.5	Uso e cobertura das terras.....	39
3.1.6	Classes de solos.....	39
3.2	Obtenção dos dados de solos.....	41
3.3	Programas computacionais.....	42
3.4	Transformação dos dados.....	42
3.4.1	Exemplo numérico de transformação RLA.....	43
3.5	Análise descritiva e de dependência espacial.....	44
3.6	Estimativa por Krigagem Ordinária.....	45
3.7	Estimativas por simulação estocástica.....	45
3.8	Validação e avaliação das estimativas e simulações.....	47
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	48
4.1	Descrição geral dos dados.....	48
4.2	Análise descritiva dos dados.....	49
4.3	Análise Variográfica e de dependência espacial.....	56

4.4	Comparação entre as estimativas por KO e SSG.....	62
4.4.1	Reprodução dos dados de entrada.....	62
4.5	Distribuição espacial das frações granulométricas.....	70
5	CONCLUSÕES.....	83
	REFERÊNCIAS	84

1 INTRODUÇÃO

O solo apresenta-se como um recurso natural imprescindível para a produção de alimentos, fibras e energia, além de ser a base para a implantação de obras de infraestrutura. O conhecimento da distribuição espacial das suas características e atributos, a exemplo de sua textura, é indispensável para que seu manejo seja planejado e executado de forma adequada, uma vez que essa variável tem influência em processos físicos, químicos e biológicos no interior do solo, sendo importante em projetos de irrigação e drenagem, conservação do solo e mecanização agrícola/florestal.

O solo é o habitat para inúmeros seres vivos, desde macro a micro-organismos, sendo o meio de crescimento e fixação do sistema radicular das plantas. No entanto, as atividades antrópicas podem levar esse recurso à degradação, o que vem ocorrendo em diversas partes do mundo, a exemplo dos processos erosivos acelerados, da desertificação, contaminação e esgotamento de nutrientes. Visando destacar a importância do recurso solo na manutenção da qualidade ambiental e bem-estar da sociedade humana, a *Food and Agriculture Organization of the United Nations* (FAO) declarou 2015 como o ano internacional dos solos, com a divulgação de um relatório contendo o status dos solos em diversos países, além de realizar conferências e encontros no intuito de discutir e propor ferramentas de conservação dos solos.

O planejamento conservacionista do uso das terras, geralmente, leva em consideração mapeamentos de solos cujas classes são identificadas em levantamentos pedológicos e representadas espacialmente por polígonos, os quais caracterizam as unidades de mapeamento. Dentro dessas unidades, a composição granulométrica, ou seja, os teores de areia, silte e argila estão associados a uma determinada classe textural assumida como constante para a área mapeada, não possibilitando analisar as possíveis variações no interior dessa unidade.

Nesse contexto, surgem os métodos numéricos de mapeamento, que permitem uma descrição contínua da variável de solo em análise. O método geoestatístico tem destaque no campo da ciência do solo, possibilitando a obtenção via interpolação (estimação ou simulação) de valores em locais não amostrados, tendo como entrada os valores de locais amostrados, comuns em levantamentos de solos.

A geoestatística consiste em uma metodologia consolidada em muitos campos das ciências agrárias e ambientais, como a pedologia, onde a interpolação via diferentes métodos vem sendo utilizada para espacializar inúmeros atributos do solo, porém poucos são os estudos que tratam das incertezas associadas à distribuição espacial das frações granulométricas do solo. Dessa forma, a simulação geoestatística pode reproduzir de forma mais acurada a variabilidade espacial de atributos do solo.

Nesse contexto, apresenta-se como objetivo:

Avaliar o desempenho das estimativas por krigagem ordinária e simulação estocástica, especificamente a simulação sequencial gaussiana, na reprodução das estatísticas dos dados amostrais, na predição e espacialização das frações granulométricas do solo.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Frações granulométricas do solo

O solo pode ser classificado como uma coleção de corpos naturais, onde se observam materiais minerais e orgânicos, sendo o corpo tridimensional representativo do solo denominado *pedon* (SANTOS et al., 2018).

O solo apresenta-se como um sistema trifásico, onde se observam as fases sólida, líquida e gasosa. As duas últimas podem estar presentes em maior ou menor proporção, ocupando os espaços (poros) entre as partículas sólidas, estando as dimensões desses poros condicionadas às formas e tamanho das partículas. Essas, por sua vez, compõem as frações granulométricas ou texturais do solo, sendo dividida em três componentes: areia, silte e argila (PREVEDELLO, 1996).

No contexto da pedologia, para a classificação das partículas de solo quanto ao seu tamanho, adota-se a escala de Atterberg, na qual a fração granulométrica denominada areia grossa compreende as partículas com dimensões entre 2,0 e 0,2 mm, a fração areia fina corresponde às partículas cujo tamanho varia de 0,2 a 0,05 mm, a fração silte, 0,05 a 0,002 mm e a fração argila, dentro da classificação granulométrica, abrange as dimensões inferiores a 0,002 mm (PRADO, 2016).

Além da classificação apresentada acima, outras escalas podem ser utilizadas, com ligeiras diferenças entre si, como as elaboradas pela ABNT, pelo MIT e a USBS, estas adotadas no contexto da geotecnia e geologia de engenharia (PASTORE; FORTES, 1998).

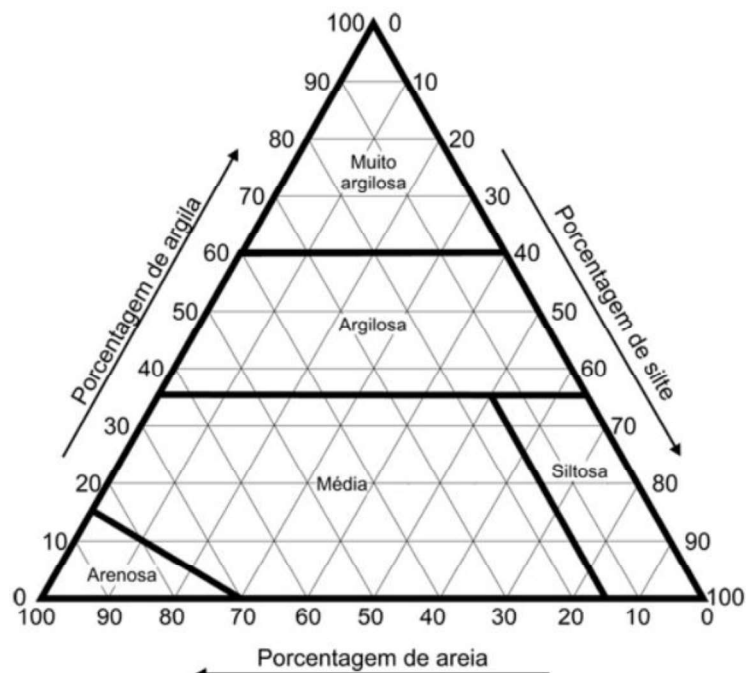
A granulometria é tida como um atributo estável no solo, uma vez que quantidades referentes a cada fração granulométrica não estão sujeitas a mudanças rápidas, sendo inerente ao próprio solo e originada essencialmente do material parental, porém, relacionada também ao relevo, uma vez que as partículas estão sujeitas ao transporte por agentes do intemperismo como a água, o vento e a gravidade. Além disso, é pouco alterada devido ao manejo praticado, portanto, trata-se de um importante atributo na descrição e classificação dos solos (CAMPOS et al., 2007; CORÁ et al., 2009).

O Sistema Brasileiro de Classificação de Solos (SiBCS) traz um agrupamento textural utilizado como um atributo na classificação de solos. Esse agrupamento pode ser expresso em notação binária ou ternária. No SiBCS são utilizados os seguintes agrupamentos (SANTOS et al., 2018):

- Textura Arenosa, para os teores de areia subtraídos os teores de argila superiores a 700 g.kg^{-1} ;
- Textura média, para o teor de argila inferior a 350 g.kg^{-1} e o teor de areia superior a 150 g.kg^{-1} ;
- Textura argilosa, é característica de solos com conteúdo de argila variando de 350 g.kg^{-1} a 600 g.kg^{-1} ;
- Textura muito argilosa, é típica de solos cujas quantidades de argila superam os 600 g.kg^{-1} ;
- Textura siltosa, é o agrupamento para solos com quantidades de areia inferiores a 150 g.kg^{-1} e argila menores a 350 g.kg^{-1} .

Os agrupamentos mencionados, podem ser obtidos por meio do guia apresentado no SiBCS (Figura 1). Esse guia consiste em um diagrama ternário, ou seja, um triângulo em que cada vértice contempla um dos componentes texturais do solo, o que caracteriza a granulometria como uma variável composicional, composta por proporções das frações areia, silte e argila (ODEH et al., 2003; TWARAKAVI et al., 2010), as quais quando somadas devem resultar em 100% quando expressas em porcentagem ou 1 se apresentado de forma proporcional.

Figura 1- Guia para agrupamento de classes de textura



Fonte: Adaptado de Santos et al. (2018).

Ainda no campo da classificação de solos, no intuito de identificar o grau de intemperismo em solos de regiões tropicais, bem como a identificação de solos originados de rochas cristalinas, ou ainda na distinção dos horizontes B latossólico e B incipiente, pode-se utilizar a relação silte/argila obtida por meio da análise granulométrica dos solos (SANTOS et al., 2018)

A textura é um importante característica física do solo que influencia em inúmeros processos naturais. As taxas de armazenamento de carbono nos solos mostram-se dependentes de suas características e propriedades, como a textura e a estrutura (LAL, 2004). Em um estudo anterior, Lepsch et al. (1982) observaram a existência de uma relação positiva entre a presença de matéria orgânica no solo e sua textura, sendo maior a manutenção de matéria orgânica em solos com textura argilosa e muito argilosa.

A infiltração e o armazenamento de água no solo são determinados, de acordo com Pan et al. (2018), pelo tamanho das partículas minerais presentes no solo, onde a presença de altos teores de areia condiciona a existência de um maior volume de macroporos possibilitando maiores taxas de infiltração e percolação da água. Contudo, solos com elevadas quantidades de argila permitem um maior armazenamento de água e a infiltração torna-se dependente do tipo e grau de estruturação das partículas (PAN et al., 2018).

As frações granulométricas correspondem a um componente essencial em muitos modelos ambientais e funções de pedotransferência. A textura do solo é largamente utilizada na estimativa de variáveis de solo de difícil mensuração, como as propriedades hidráulicas, a exemplo da condutividade hidráulica e retenção de água no solo em diferentes potenciais mátricos (PATIL; SING, 2016).

Silver et al. (2000) destacam a influência das quantidades de argila e areia na disponibilidade e retenção de nutrientes em solos altamente intemperizados de regiões tropicais, principalmente em relação à disponibilidade de fósforo lábil e dos fluxos de nitrogênio, indicando a necessidade em conhecer as características texturais do solo para uma correta interpretação da sua fertilidade.

Merece destaque também a relação entre o tamanho das partículas minerais do solo e sua suscetibilidade aos processos erosivos (SHI et al., 2012). A erodibilidade do solo determina o seu grau de suscetibilidade ao desprendimento e arraste de partículas e permite a estimativa da quantidade de material erodido por meio da aplicação da equação universal de perdas do solo. O fator erodibilidade é fortemente

afetado pelos teores de areia, silte e argila no solo, sendo estas, as variáveis de entrada para o cálculo desse fator, conforme a equação desenvolvida por Wischmeier e Smith (1978).

A granulometria do solo pode ser facilmente quantificada a partir de pontos amostrais, no entanto, tais pontos, geralmente, mostram-se esparsos, o que exige a adoção de métodos para análise do seu comportamento espacial e posterior interpolação dos dados, obtendo mapas representativos das frações granulométricas do solo (DELBARI et al., 2011).

2.2 Mapeamento de atributos do solo

Ao longo do tempo, os mapas de solos foram necessários para as mais diversas finalidades, como planejamento agrícola e de infraestrutura, resolução de problemas ambientais, segurança alimentar, produção de energia, avaliação, planejamento e uso de recursos hídricos e saúde pública (BREVIK et al., 2016). O sistema solo e sua distribuição foram incluídos por Adhikari e Hartemink (2016) como importantes fatores na identificação e quantificação de serviços ambientais ou ecossistêmicos, sendo o solo essencial para a qualidade de vida humana.

Recentemente, como o advento das ciências da informação geográficas, houve uma revolução em termos de mapeamento e espacialização de variáveis ambientais, sociais e econômicas, e as ciências do solo estão inseridas nesse processo. O chamado mapeamento digital de solos (MDS) tornou-se uma subdisciplina da pedologia, utilizando tecnologias como os sistemas de informação geográfica (SIG), o sensoriamento remoto (SR) os sistemas globais de posicionamento por satélite (GNSS) e sofisticados métodos de interpolação para predição e espacialização dos mais diversos atributos do solo (LÓPEZ-GRANADOS et al., 2005; McBRATNEY et al., 2003; MINASNY; McBRATNEY, 2016; MULDER et al., 2011; POGGIO; GIRONA, 2017).

Tradicionalmente, os mapas de atributos do solo são apresentados em classes, com limites bem definidos entre si. A textura do solo, contendo os diferentes tamanhos de partículas, tende a ser mapeada de acordo com sua classe textural, no entanto tais discontinuidades abruptas dificilmente são observadas em uma paisagem. Nesse contexto, as técnicas de pedometria, utilizando métodos geoestatísticos de análise espacial e interpolação possibilitam a caracterização contínua dos atributos, como as

frações granulométricas, assim os mapas gerados podem ser reclassificados e os valores agrupados conforme o manejo a ser adotado na área mapeada (VAN MEIRVENNE; VAN CLEEMPUT, 2005).

A pedometria pode ser definida como uma área da ciência do solo, na qual as características do solo são analisadas por meio da estatística e da probabilidade, sendo a classificação, formação e distribuição dos solos tratadas de forma quantitativa. Tal proposta visa também a descrição da variabilidade espacial dos atributos do solo, lidando com as incertezas associadas com sua distribuição (WEBSTER, 1994).

Lamsal e Mishra (2010) destacaram a necessidade dos mapeamentos numéricos referentes à textura, uma vez que esses possibilitam tomadas de decisão a respeito do manejo a ser adotado, enquanto os tradicionais mapeamentos em polígonos aplicam-se a usos gerais. Os autores utilizaram um conjunto de dados amostrais e a estes aplicaram diferentes métodos de interpolação, visando uma representação contínua dos dados para uma extensa área na região da Florida.

Diversos autores demonstraram a crescente demanda por informações quantitativas e espacialmente distribuídas a respeito dos atributos físicos do solo, desde escalas locais à escalas regionais. Ballabio et al. (2016) mapearam as frações granulométricas do solo em escala continental com base em um conjunto de dados legados, para isso foram utilizadas variáveis preditoras associadas a modelos híbridos de estimativa. Tal metodologia é amplamente utilizada no mapeamento digital de solos, tendo, como premissa básica os fatores de formação do solo expressos pelo modelo SCORPAN, $A_s = f(s, c, o, r, p, a, n)$, em que A_s é o atributo do solo determinado em função do dado de solo medido (s), clima, organismos, relevo, material de origem e tempo (c, o, r, p, a , respectivamente) e sua localização no espaço (n) (McBRATNEY et al., 2003). Também partindo da existência de dados legados e baseado nessa metodologia, Akpa et al. (2014) obtiveram a representação espacial contínua da textura do solo em nível regional, com mapas contento o tamanho das partículas do solo em diferentes profundidades para a Nigéria.

Novas tecnologias ligadas à agricultura e silvicultura de precisão demandam a existência de mapeamentos numéricos de atributos do solo, uma vez que o conceito de manejo variável de acordo com as condições específicas do solo é relativamente recente, evoluindo de forma conjunta com tecnologias como o GNSS e o SR. O manejo convencional de áreas agrícolas ou florestais adota grandes extensões de

área como sendo homogêneas onde um determinado polígono ou gleba recebe um tratamento único, resultando muitas vezes em subestimativas ou superestimativas das necessidades dentro desse polígono (VAN MEIRVENNE; VAN CLEEMPUT, 2005).

A representação quantitativa dos atributos do solo exige a existência de pontos coletados, onde os atributos desejados são mensurados, no entanto, dependendo do número de amostras, tal metodologia pode se tornar inviável para a sua representação, principalmente em áreas extensas. Assim a metodologia geoestatística destaca-se, possibilitando a realização de estimativas de valores em locais não amostrados a partir dos valores conhecidos em locais amostrados, permitindo a representação e o mapeamento de atributos do solo anteriormente analisados pontualmente (BOCCHI et al., 2000); BUTTAFUOCO et al., 2011; LARCK; BISHOP, 2007; ODEH et al., 2003; REZA et al., 2017; VAN MEIRVENNE; VAN CLEEMPUT, 2005). Essa interpolação pode, eventualmente, recorrer a variáveis secundárias visando melhorias nas estimativas (BALLABIO et al., 2016).

2.3 Geoestatística

Diversos elementos da paisagem, recursos ambientais e fenômenos espaciais, a exemplo do solo, florestas, pluviometria, temperatura, formações geológicas, qualidade da água em aquíferos, aspectos sociais e econômicos são, muitas vezes, entidades cuja distribuição no espaço não ocorre de forma aleatória, apresentando uma certa estruturação, indicando, a existência de uma dependência espacial nas observações desses fenômenos (SOARES, 2006).

A análise geoestatística visa a interpretação de variáveis ambientais que possuem dependência espacial, aplicando, para isso, métodos matemáticos para o entendimento das leis que determinam o comportamento de variáveis regionais, partindo de um conjunto de observações ou amostras acessadas de forma discreta e geralmente numericamente escassas (LANDIM, 2003; SOARES, 2006).

Os primórdios da geoestatística datam das décadas de 50 e 60 do século XX, quando novas metodologias foram desenvolvidas de forma empírica para a análise de valores amostrais envolvendo reservas minerais. Essas metodologias receberam posteriormente um tratamento matemático formal por Matheron (1963), cunhando o termo variáveis regionalizadas para as observações espacialmente estruturadas (LANDIM, 2006; OLIVER; WEBSTER, 2014).

Segundo a teoria das variáveis regionalizadas, a continuidade espacial tem sua manifestação no fato de que valores medidos em posições próximas no espaço tendem a ser mais semelhantes entre si em relação àqueles medidos em posições distantes, indicando que cada observação sofre influência dos valores vizinhos (SRIVASTAVA, 2013).

Desde sua origem a geoestatística vem sendo aplicada em diversos estudos ligados às ciências da Terra, como a geologia e a mineração (ARMSTRONG, 1998; SRIVASTAVA; 2013), a hidrologia e climatologia (BENAVIDES et al., 2007). Trangmar et al. (1985) apresentam uma descrição dos métodos geoestatísticos visando sua aplicação nas ciências do solo. Os mesmos autores destacam a necessidade de caracterizar adequadamente as diferenças existentes nos solos para um diagnóstico preciso de seus atributos.

A metodologia geoestatística vem sendo adotada para analisar a estrutura espacial de atributos do solo, buscando-se o entendimento da continuidade espacial dos atributos analisados e sua posterior estimativa em locais não amostrados (FUKS; VOLTS, 2001; GOOVAERTS, 1999; WANG; SHI, 2017). A análise espacial e seu nível de estruturação é comumente realizada por meio de uma ferramenta básica na geoestatística, denominada variograma ou semi-variograma, o qual determina o grau de dependência espacial existente em variáveis regionalizadas e possibilita sua posterior interpolação (ARMSTRONG, 1998).

2.3.1 Análise variográfica

Na geoestatística é chamado variograma, um gráfico síntese, que possibilita a análise e entendimento da variabilidade espacial presente em uma variável regionalizada. Nesse gráfico é plotada a variância calculada em função das distâncias de pares de amostras. Em síntese, o variograma é um gráfico que contém as diferenças médias quadráticas entre pares de dados separados por uma distância pré-determinada (SRIVASTAVA, 2013).

O variograma experimental pode ser obtido utilizando a Equação 1 (ARMSTRONG, 1998).

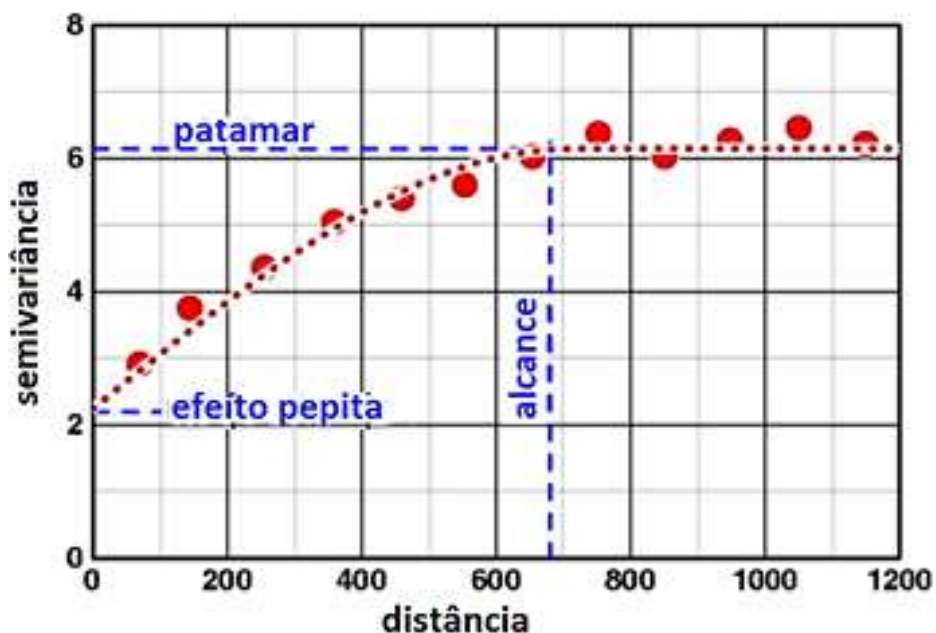
$$\gamma(h) = \left(\frac{1}{2N(h)} \right) \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_i + h)]^2 \quad (1)$$

Sendo: $N(h)$ é o número de pares experimentais de observações e $Z(x_i)$ e $Z(x_i + h)$ são os pares de pontos separados por uma distância h .

O variograma possibilita a obtenção de informações necessárias para o planejamento de malhas amostrais, para modelos de interpolação, como a krigagem, e para modelos de simulação, a exemplo da simulação sequencial gaussiana. Para tanto, faz-se necessário ajustar sobre os pontos do variograma experimental, um modelo variográfico teórico (ARMSTRONG, 1998).

Na Figura 2, estão ilustrados ambos os variogramas, experimental (pontos) e teórico (linha tracejada), bem como os componentes ou partes desses.

Figura 2 - Variograma experimental (pontos) e variograma teórico (linha tracejada)



Fonte: Adaptado de Srivastava (2013)

A dependência espacial é observada no variograma (Figura 2) pois os valores da semivariância são crescentes em função da distância até um determinado momento quando esses se estabilizam, assumindo um valor próximo à variância dos dados. A essa distância dá-se o nome de alcance, representando a distância máxima na qual os dados estão correlacionados espacialmente. À região horizontal do variograma,

onde observa-se a estabilização, dá-se o nome de patamar, indicando a não existência de dependência espacial entre os pontos amostrados para as maiores distâncias (ARMSTRONG, 1998).

O efeito pepita, por sua vez, é o valor da semivariância quando a distância entre os pares de pontos amostrados é igual a zero, nesse caso o valor esperado também seria zero, ou seja $[Z(x_i) - Z(x_i + 0)] = 0$. No entanto, o que se observa é que o modelo ajustado, ou variograma teórico, corta o eixo das semivariância na condição em que a distância (h) é nula, indicando uma perturbação residual corresponde à soma de todos os erros de mensuração associados à variável analisada $Z(x)$, bem como a variabilidade espacial existente e não captada pelos pontos amostrais (YAMAMOTO; LANDIM, 2013).

Após a obtenção do variograma experimental, utilizando a Equação 1, procede-se o ajuste de uma curva ao conjunto de pontos. Essa curva deve possuir uma expressão matemática que descreve as mudanças na variância em função da distância, onde os valores para a variância não sejam negativos (OLIVER; WEBSTER, 2014).

De acordo com Yamamoto e Landim (2013) e Oliver e Webster (2014), existem inúmeros modelos matemáticos utilizados para o ajuste do variograma teórico, porém, alguns são tidos como mais comuns para a explicação da variabilidade espacial de muitos fenômenos nas ciências da Terra.

Os principais modelos são (YAMAMOTO; LANDIM, 2013, p.42):

(a) Modelo esférico (Equação 2):

$$\gamma(h) = C_0 + C \left[1,5 \frac{h}{a} - 0,5 \left(\frac{h}{a} \right)^3 \right] \quad \text{para } h < a \quad (2)$$

$$\gamma(h) = C_0 + C \quad \text{para } h \geq a$$

O modelo esférico destaca-se por ser um dos mais utilizados no contexto das ciências do solo (PEREIRA, 2009). Sendo função de apenas dois parâmetros, o patamar (C_0+C), representando o limite superior do variograma e o alcance (a), onde os valores de $\gamma(h)$ param de crescer, caracterizando o término da dependência espacial entre os pontos (SOARES, 2006).

(b) Modelo Exponencial (Equação 3):

$$\gamma(h) = C_0 + C \left[1 - \exp\left(-\frac{h}{a}\right) \right] \quad (3)$$

Assim como o modelo esférico, o modelo exponencial é dependente do alcance (a) e do patamar (C_0+C), com C representando o componente estrutural do modelo, que varia do efeito pepita ao patamar. O patamar nesse caso tem um caráter assintótico, com isso, adota-se como o valor do alcance, a distância em que o modelo atinge 95% do patamar, ou seja, $\gamma(h) = 0,95(C_0+C)$ (SOARES, 2006).

(c) Modelo gaussiano (Equação 4):

$$\gamma(h) = C_0 + C \left\{ 1 - \left[-\left(\frac{h}{a}\right)^2 \right] \right\} \quad (4)$$

Conforme Soares (2006), os modelos esférico e exponencial têm como característica representar fenômenos espaciais relativamente irregulares, uma vez que a função cresce rapidamente após a origem. Já o modelo gaussiano, com uma forma parabólica junto a origem representa fenômenos com valores mais regulares. A exemplo do modelo exponencial, adota-se um valor de alcance referente à distância correspondente a 95% do patamar.

Oliver e Webster (2014) comentam que o ajuste de variograma é um tema controverso na geoestatística, onde muitos dos usuários realizam ajustes à “sentimento”, de acordo com sua experiência prática. Porém, diversos programas computacionais possibilitam um ajuste automático, onde o “melhor” modelo é escolhido de acordo como parâmetros estatísticos, adotando, por exemplo, o método dos mínimos quadrados para o ajuste.

Os mesmos autores sugerem uma sequência de passos para a obtenção do ajuste de um variograma teórico:

- 1º determina-se o variograma experimental;
- 2º testa-se vários modelos, de acordo com seu ajuste ao variograma experimental, utilizando um programa computacional confiável;
- 3º o variograma teórico é plotado juntamente ao variograma experimental, a fim de verificar se o ajuste parece razoável;

4º se vários modelos apresentarem um bom ajuste, escolhe-se aquele com menor soma dos resíduos ao quadrado;

5º caso ainda exista alguma insegurança na escolha do modelo, procede-se o teste da validação cruzada.

2.3.2 Interpolação por Krigagem

Uma vez obtidos os parâmetros do variograma e verificada a dependência espacial para o conjunto de dados utilizados, procede-se a estimativa dos valores em locais não amostrados, tendo como base aqueles previamente mensurados. Um dos métodos mais utilizados nessa etapa de interpolação é a krigagem. Esta, parte dos seguintes princípios: ser um estimador não enviesado e gerar estimativas com variância mínima (YAMAMOTO; LANDIM, 2013).

A krigagem, consiste em um termo genérico para um conjunto de métodos de interpolação linear, como a krigagem simples e a krigagem ordinária, esta largamente utilizada no contexto da análise espacial (OLIVER; WEBSTER, 2014). Ambos os métodos podem ser aplicados diretamente sobre o conjunto de dados observados por meio de modelagens lineares, ou ainda, sobre os dados transformados por funções logarítmicas, gaussianas ou binárias, caracterizando a krigagem lognormal, krigagem multigaussiana e krigagem indicativa, respectivamente (YAMAMOTO; LANDIM, 2013).

No estudo de fenômenos ligados à geologia, mineração e pedologia, alguns métodos determinísticos de inferência espacial foram largamente utilizados no processo de interpolação, ou seja, para obtenção de valores em locais não amostrados, partindo dos valores conhecidos. Esses métodos, a exemplo dos polígonos de Voronoi, inverso da distância ponderada e superfícies de tendência, têm como vantagem uma fácil implementação, porém, não são capazes de fornecer qualquer medida de incerteza associadas às estimativas e não consideram a dependência ou estrutura espacial existente na variável ou fenômeno analisado (LANDIM, 2003; SOARES, 2006). Em contraponto, os métodos geoestatísticos de estimativa possibilitam contornar as limitações dos métodos determinísticos.

Diversos estudos foram realizados visando comparar os diferentes métodos de interpolação (PHACHOMPHON et al., 2010; ROBINSON; METTERNICHT, 2006; SCHLOEDER et al., 2001), sendo necessário analisar a escolha dos métodos caso a

caso, uma vez que esses são suscetíveis às características espaciais da variável em análise, como número de amostras e a configuração da malha amostral. Além disso, quando várias variáveis são analisadas, por exemplo, atributos do solo, um método pode apresentar estimativas de melhor qualidade para uma variável e para outra variável um segundo método pode ter um desempenho superior, conforme observado por esses autores.

A krigagem, como um método geoestatístico, utiliza informações fornecidas pelo variograma para a determinação do conjunto de pesos ótimos associados aos pontos amostrados e assim possibilitar a estimativa de um ponto com variância mínima (LANDIM, 2003).

A krigagem ordinária, devido à sua simplicidade, apresenta-se como o método de interpolação mais utilizado nas ciências do solo. Consiste em uma média ponderada dos valores das amostras vizinhas, dentro dos limites do alcance. Os parâmetros do variograma são utilizados para a obtenção de cada um dos pesos λ_i utilizados na interpolação (PEREIRA, 2009; OLIVER; WEBSTER, 2014; YAMAMOTO; LANDIM, 2013).

A estimativa por krigagem ordinária é dada pela Equação 5.

$$Z_{KO}^*(x_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_i Z(x_i) \quad (5)$$

Sendo, Z_{KO}^* é o valor estimado por krigagem ordinária para um local não amostrado x_0 , λ_i é o peso que será o ponderador do valor da amostra no ponto x_i .

Essa é uma estimativa não enviesada, com isso, faz-se necessário obedecer a condição apresentada na Equação 6.

$$\sum_{i=1}^n \lambda_i = 1 \quad (6)$$

Para a obtenção dos pesos (λ_i) faz-se necessário a resolução do sistema de equações da krigagem, o qual geralmente é denotado de forma matricial, sendo expresso pela Equação 7 (SOARES, 2006; YAMAMOTO; LANDIM, 2013).

$$[\lambda] = [K]^{-1} \cdot [M] \quad (7)$$

Sendo $[K]$ a matriz de variâncias entre as amostras e $[K]^{-1}$ a inversa da matriz $[K]$, $[M]$ é a matriz de variâncias entre as amostras e o ponto a ser estimado, tais variâncias são obtidas utilizando-se o modelo variográfico, previamente ajustado, e $[\lambda]$, por sua vez é a matriz de pesos.

Conforme colocado por Soares (2006), são dois os fatores que interferem na obtenção de pesos no processo de interpolação por krigagem. O primeiro é denominado pelo autor de fator distância estrutural, dado pela matriz $[M]$, de onde é feita a seguinte dedução: amostras próximas do ponto a ser estimado terão maiores pesos na estimativa. E o segundo, é chamado fator desagregação, dado pela matriz $[K]^{-1}$, na qual se observa que amostras altamente correlacionadas possuem elevado efeito de agrupamento, com isso seu peso individual será menor no processo de estimativa.

Além da krigagem ordinária, em alguns casos utiliza-se a krigagem simples, a qual se diferencia da primeira ao impor que a média global da variável regionalizada seja conhecida, o que pode ocorrer em casos onde os valores originais foram transformados para uma distribuição gaussiana, com média zero ou em situações onde a deriva é bem conhecida e modelada, sendo essa utilizada como a média (SOARES, 2006).

O estimador da krigagem simples é dado pela Equação 8 (YAMAMOTO, LANDIM; 2013).

$$Z_{KS}^*(x_0) = m + \sum_{i=1}^n \lambda_i [Z(x_i) - m] \quad (8)$$

Sendo, Z_{KS}^* é o valor estimado por krigagem simples para um local não amostrado x_0 , λ_i é o peso que será o ponderador do valor da amostra no ponto x_i e m é a média, onde para a krigagem multigaussiana é assumido o valor zero.

A krigagem tem como desvantagem a apresentação de resultados suavizados, onde as estatísticas do conjunto de valores estimados não necessariamente reproduzem as estatísticas do conjunto de entrada. Essa suavização, caracterizada pela superestimativa de valores baixos e subestimativa de valores altos, é um reflexo

da minimização da variância do erro durante o processo de estimativa (YAMAMOTO; LANDIM, 2013).

Segundo os mesmos autores, nesse caso, as inferências a respeito da variabilidade espacial, bem como, da distribuição da variável regionalizada tornam-se restritas. Com isso, uma solução encontrada na geoestatística foi a simulação estocástica, possibilitando interpretar a variação das incertezas espaciais associadas às estimativas. Os métodos de simulação permitem a obtenção de n realizações equiprováveis, as quais visam honrar as características dos dados de entrada.

2.3.3 Simulação estocástica

Conforme mencionado, os métodos de simulação estocástica surgem no contexto da geoestatística visando contornar os efeitos de suavização observados na interpolação por krigagem, além de possibilitar a análise das incertezas ao combinar diversas realizações.

De acordo com Srivastava (2013), os resultados obtidos por simulação diferem das estimativas por krigagem pelo fato da krigagem resultar em valores médios, sendo que os valores estimados variam gradualmente entre os valores amostrados, já a simulação tenta imitar a variabilidade existente na variável regionalizada, condicionando, muitas vezes, mudanças bruscas nos valores estimados entre pontos conhecidos. Tais diferenças fazem com que existam distinções entre os valores estimados por krigagem e aqueles obtidos em cada realização da simulação.

A simulação estocástica produz inúmeras realizações, gerando diferentes, porém equiprováveis representações da realidade, e mesmo diferentes, cada realização deve honrar os dados de entrada, como a distribuição de frequência e o variograma das amostras. Assim, as realizações equiprováveis trabalhadas em conjunto, permitem analisar as incertezas na distribuição espacial dos valores do atributo de interesse, bem como avaliar diferentes cenários, além de cenários críticos, úteis em situações de contaminação do solo ou da água, por exemplo (GOOVAERTS, 2000).

Castrignanò et al. (2002) coloca um importante questionamento ao realizar a espacialização dos teores de argila no solo: “Interpolação ou Simulação?”. De acordo com os autores, a krigagem foi capaz de produzir as melhores estimativas na predição do atributo do solo, porém, a mesma falhou na identificação de estruturas menores e ao gerar um mapa com aparência suavizada. Em contrapartida, a simulação tem

menor desempenho em termos de acurácia local, sendo o método preferível quando o objetivo é a reprodução das feições espaciais com vista a uma maior acurácia global.

Os métodos sequenciais de simulação estocástica destacam-se por sua simplicidade e no caso de a simulação ser condicional, os valores simulados serão iguais àqueles observados no ponto amostral, onde têm-se k dados condicionantes $Z(y_k)$ e m nós nos quais deseja-se simular a variável regionalizada $Z_{S_n}(x_m)$.

Diferentes métodos de simulação condicional são descritos e utilizados no contexto das ciências da Terra, sendo os mais comuns: a simulação sequencial gaussiana (SSG), simulação sequencial direta (SSD), simulação sequencial indicadora (SSI), simulação por *simulated annealing* (SSA), bem como as cossimulações associadas a esses métodos (DEUTSCH; JOURNAL, 1998; SOARES, 2006). No caso específico da ciência do solo, para a avaliação e caracterização dos seus atributos o método com registros mais frequente na literatura é a simulação sequencial gaussiana (HE et al., 2010; OLIVEIRA et al., 2014; POGGIO et al., 2010; SILVA JR et al., 2012).

2.3.3.1 Simulação sequencial gaussiana (SSG)

A simulação sequencial gaussiana (SSG) é um método condicional e consiste na aplicação de métodos sequenciais de simulação a um conjunto de dados previamente transformados considerando uma distribuição multigaussiana. Conforme descrito por Yamamoto e Landim (2013), os seguintes passos devem ser adotados para a obtenção de uma realização da SSG:

- i. Uma das exigências da SSG é o conjunto de dados apresentar uma distribuição normal, assim, caso esse critério não seja atendido, inicialmente é feita a transformação da distribuição de frequência da variável $Z(x)$ para uma distribuição $Y(x)$ normal, $Y(x) = \varphi[Z(x)]$, onde φ corresponde à função de transformação para a distribuição normal. Nesta a média deve ser igual a zero e variância igual a unidade, ou seja, $E[Y(x)] = 0$ e $Var[Y(x)] = 1$;
- ii. Obtém-se o variograma experimental e a esse ajusta-se o modelo variográfico teórico;
- iii. Realiza-se a simulação sequencial para a variável transformada com:
 - (a) escolha de um caminho aleatório dentro da malha a ser simulada;

(b) para o primeiro ponto da malha (x_i) faz-se a estimativa por krigagem simples ou krigagem ordinária, esse valor será a média condicional de (x_i) e a variância da krigagem simples ou variância da krigagem ordinária representará a variância condicional. Ambas, média condicional e variância condicional irão definir a função de distribuição condicional acumulada (FDAC);

(c) Um valor aleatório é extraído da FDAC sendo adicionado ao ponto x_i e ao conjunto de dados;

(d) o algoritmo passa para o próximo ponto da malha, seguindo o caminho pré-estabelecido;

(e) a operação se repete até que todos os pontos (x_i) sejam visitados.

- iv. Ao final da simulação obtém-se para cada ponto da malha um valor simulado, e esses deverão, caso inicialmente transformados, receber uma transformação de volta, ou seja, para a escala de valores iniciais.

Ao final do procedimento descrito acima, é obtida uma realização, ou uma imagem contendo as estimativas para os locais não amostrados, para a obtenção das n realizações repete-se os passos definindo novos caminhos dentro da malha (DEUTSCH; JOURNAL, 1998).

2.3.4 Aplicações da estimação e simulação geoestatística na espacialização de atributos do solo

Trabalhos prévios tiveram como objetivo avaliar a distribuição espacial e analisar a incerteza na predição de atributos do solo utilizando como métodos de estimativa a krigagem e diferentes métodos para simulação.

Pereira et al. (2015) avaliaram a distribuição espacial dos teores de cálcio no solo e verificaram que a krigagem ordinária não reproduziu adequadamente as estatísticas globais da variável em análise, onde as técnicas de simulação, no caso a SSG e a SSA mostraram-se superiores à krigagem, permitindo identificar variações nos teores de cálcio em pequenas distâncias, característica não detectada com o uso da krigagem.

Oliveira et al. (2013), visando o manejo adequado da fertilidade do solo em áreas agrícolas, destacam que alguns nutrientes, como o fósforo, são críticos para o desenvolvimento das culturas, além de apresentar significativa variabilidade espacial.

Nesse contexto, os autores avaliaram as técnicas de KO e SSG na determinação das incertezas associadas às estimativas de fósforo no solo. Os resultados indicaram um desempenho superior da SSG, com destaque para a reprodução das estatísticas dos dados de entrada, e permitindo indicar tais resultados da SSG para o planejamento de zonas específicas de manejo.

Ainda no contexto da fertilidade do solo, Oliveira et al. (2014) compararam o desempenho de dois métodos de simulação estocástica, sendo a SSG e a SSI, frente à KO na determinação da distribuição espacial dos teores de potássio no solo. Os autores verificaram que ambos os métodos de simulação se mostraram superiores à KO, principalmente pelo fato dessa suavizar os valores no processo de estimativa, além disso a SSI mostrou-se sensivelmente superior à SSG na reprodução dos dados originais.

Estudos voltados à contaminação do solo também recorreram às técnicas geoestatísticas de estimação e simulação visando seu monitoramento e remediação, Lin et al. (2001) verificaram um desempenho superior da SSA em relação à SSG, sendo ambos superiores à KO na espacialização da contaminação do solo por chumbo. Juang et al. (2004) compararam as técnicas de krigagem indicativa e SSI para a interpolação e determinação da distribuição espacial de cobre no solo, com indicação final para o uso da SSI, uma vez que esta, a partir das múltiplas realizações, possibilitou a determinação das incertezas associadas às estimativas, bem como identificar locais cujos teores superaram limites críticos, o que caracterizou tais áreas como contaminadas. De forma semelhante, Ersoy e Yunsel (2018) aplicaram a SSG na espacialização e determinação de incertezas para os teores de diferentes metais pesados no solo e concluíram que esse método pode ser utilizado para a separação de áreas contaminadas e não contaminadas, bem como auxiliar no processo de tomada de decisão quanto a possíveis estudos de remediação, com a avaliação a partir de diferentes cenários.

Diversos atributos físicos do solo foram analisados por meio das técnicas de krigagem e simulação estocástica. Silva Jr et al. (2012) verificaram que a simulação sequencial, no caso a SSG, refletiu de forma mais adequada a distribuição espacial de minerais da fração argila do solo, quando comparada à krigagem. Os autores recomendam o uso do mapa médio das simulações na definição de zonas para o manejo localizado, devido ao fato deste apresentar um grau de detalhamento superior ao resultado obtido pela KO.

Os teores de água no solo, como um importante fator em processos hidrológicos, bem como sua disponibilidade para o desenvolvimento de plantas, foram avaliados em vários estudos (BOURENNANE et al., 2007; CASTRIGNANÒ; BUTTAFUOCO, 2004; DELBARI et al., 2009; POGGIO et al., 2010) por meio da SSG, indicando a robustez do método na determinação de áreas críticas em relação à disponibilidade de água tanto no espaço quanto no tempo.

He et al. (2010) utilizaram variogramas indicativos bem como a SSI na definição de classes de textura em solos aluviais obtendo representações tridimensionais para essa variável. No trabalho de Silva et al. (2014) e Silva et al. (2015) a SSI foi aplicada diretamente sobre os valores de areia e argila no solo, com o intuito de utilizar esses atributos na delimitação de classes de solos para manejos específicos, os autores verificaram uma adequada reprodutibilidade dos dados de entrada, com destaque para os variogramas, com a utilização desse método.

Fuks e Voltz (2001) aplicaram a SSG e a SSI diretamente sobre os valores de silte e argila no solo para a obtenção da distribuição espacial dos mesmos, concluindo que a SSG se apresentou como mais adequada principalmente na situação em que os dados amostrais são limitados. Castrignano et al. (2008) aplicaram a SSG também diretamente sobre os valores de silte e argila, obtendo com isso a distribuição espacial e desvios-padrões das n realizações dessas variáveis, tais resultados foram utilizando como entrada em modelos de determinação da erodibilidade do solo.

Buttafuoco et al. (2011), com o objetivo de espacializar as frações granulométricas do solo, como variáveis de entrada para a determinação da erodibilidade, utilizaram a SSG sobre transformações razão log-aditiva aplicadas à areia, silte e argila com posterior volta para os valores originais após obtenção das n realizações, os resultados possibilitam espacializar a fragilidade dos solos frente aos processos erosivos, bem como as incertezas associadas às estimativas. Outros estudos aplicaram transformações nas frações granulométricas antes da interpolação, porém com o intuito de testar a eficiência das diferentes metodologias de transformação sobre as estimativas, sendo a metodologia anteriormente citada (razão log-aditiva) amplamente utilizada, além de estimadores como a KO e a krigagem composicional (ODEH et al., 2003; WANG; SHI, 2017; WANG; SHI, 2018), bem como modelos híbridos de estimativa, como a regressão krigagem (AKPA et al., 2014; POGGIO; GIMONA, 2017).

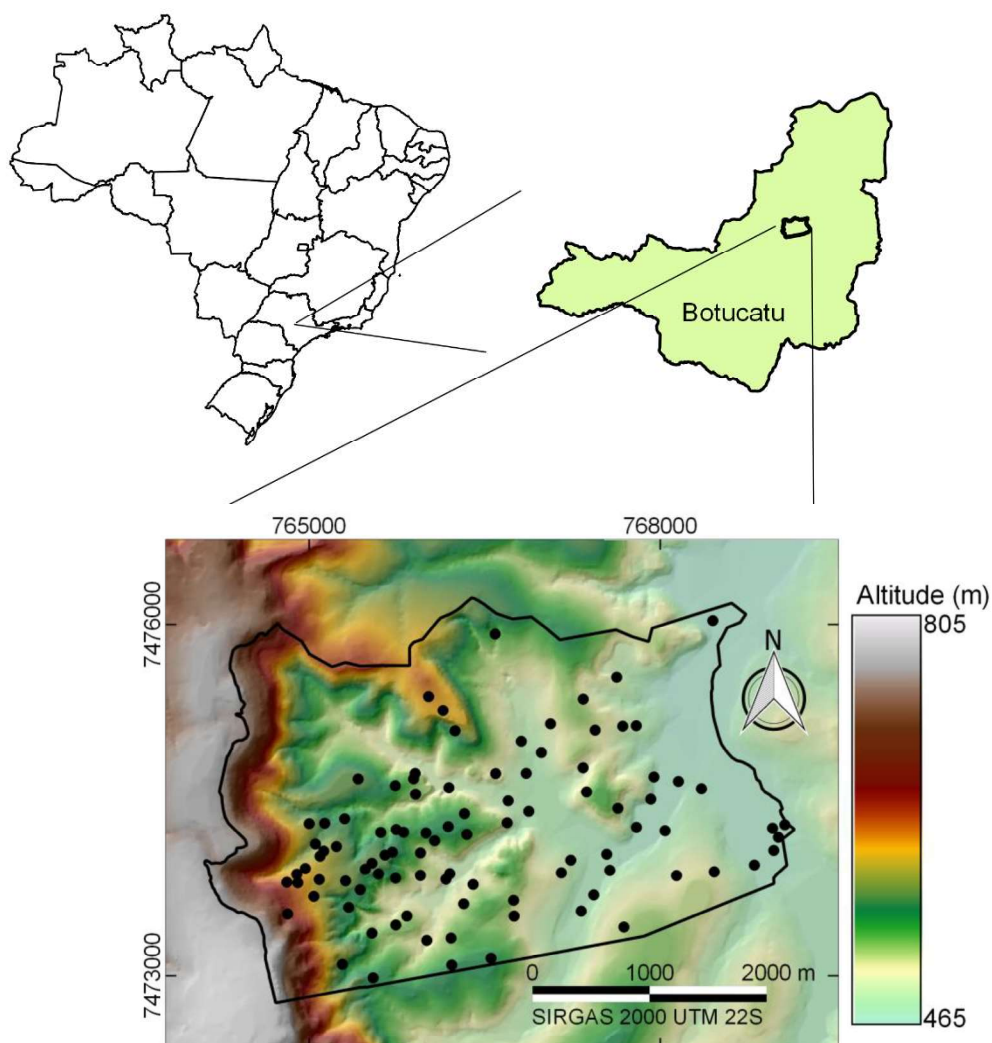
3 MATERIAL E MÉTODOS

3.1 Descrição da área

3.1.1 Localização

A área de estudo está localizada no interior da Fazenda Experimental Edgárdia, pertencente à Faculdade de Ciências Agrônômicas da Universidade Estadual Paulista (Unesp), no município de Botucatu – SP. A fazenda possui uma área de 1200,32 ha, tendo sua localização estabelecida pelas coordenadas geodésicas $22^{\circ}47'50''$ a $22^{\circ}50'15''$ S e $48^{\circ}22'20''$ a $48^{\circ}25'50''$ WGr. Datum SIRGAS 2000 (Figura 3).

Figura 3 - Localização da Fazenda Experimental Edgárdia e malha amostral no interior da fazenda



3.1.2 Clima

O clima da região, seguindo a classificação climática de Köppen é do tipo Cfa, temperado quente (mesotérmico) úmido, onde as temperaturas variam de 17,1°C a valores que ultrapassam os 22°C para os meses mais frios e quentes do ano respectivamente, com temperatura média anual da ordem de 20,3°C. A precipitação pluviométrica média anual é de 1.428,4 mm tendo no mês de janeiro os maiores valores de precipitação (média de 246,2 mm) e o mês de agosto apresentado em média 36,1 mm, caracterizando-o como o mês mais seco (CUNHA; MARTINS, 2009).

3.1.3 Geologia

Ocorrem na área da Fazenda Edgárdia as Formações Geológicas denominadas Pirambóia, Botucatu e Serra Geral, pertencentes ao grupo São Bento, além de sedimentos aluviais do período Holoceno. Os arenitos eólicos-fluviais e eólicos, cuja granulação varia de fina a média e coloração avermelhada, são os principais constituintes das Formações Piramboia e Botucatu. Já a Formação Serra Geral é constituída por rochas eruptivas básicas, como o basalto, o qual apresenta coloração cinza escura e estrutura amigdaloidal (CARVALHO, et al. 1991).

Os depósitos de sedimentos inconsolidados recentes, datados do período Holoceno ocorrem principalmente nas regiões da várzea do Rio Capivara, a leste da Fazenda Edgárdia. Observam-se, ainda, depósitos coluvionares junto às bordas inferiores do Front da Cuesta (CARVALHO, et al. 1991).

3.1.4 Relevo

Com relação ao relevo, destacam-se duas regiões geomorfológicas distintas, sendo elas: as Cuestas Basálticas e a Depressão Periférica, na primeira encontram-se as rochas eruptivas básicas e na segunda os arenitos e depósitos aluvionares.

As áreas de relevo plano, com declividade variando de 0 a 3%, ocorrem nas áreas de menor altitude, cerca de 450 m, o relevo denominado suave ondulado e ondulado, cujas declividades variam de 3 a 20%, estão presentes no Front da Cuesta, onde as altitudes atingem 750m, já nas maiores declividades, acima de 20%, são observados

afloramentos das rochas basálticas, presentes no Front da Cuesta (CARVALHO, et al. 1991).

3.1.5 Uso e cobertura das terras

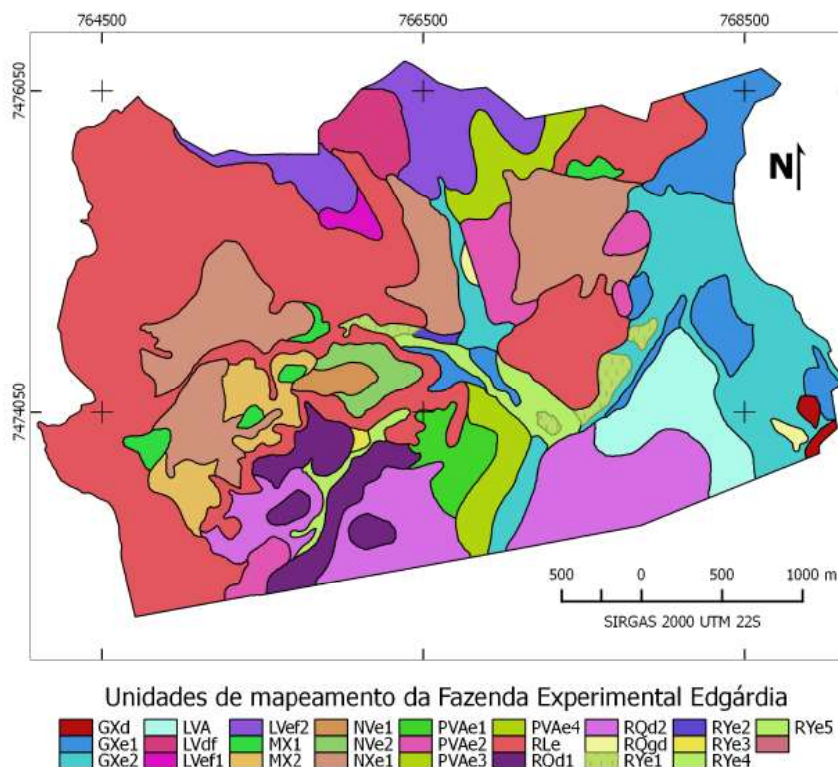
Dentre as formações vegetais, a Floresta Estacional Semidecidual e a Savana Florestada, são as predominantes, além de formações pioneiras aluviais, típicas de áreas úmidas, ocorrendo em áreas da várzea do Rio Capivara.

Com relação ao uso do solo, destacam-se pastagens, as quais podem ser divididas em três classes: pastagem, pastagem e regeneração da vegetação natural e pastagem com árvores esparsas, de acordo com o componente arbóreo presente nas mesmas. As áreas agrícolas são menos frequentes, com destaque para o cultivo de arroz irrigado (JORGE; SARTORI, 2002).

3.1.6 Classes de solos

As classes de solos estão apresentadas na Figura 4 e descritas no Quadro 1.

Figura 4. Mapa de Solos da Fazenda Experimental Edgárdia



Fonte: Carvalho (2016).

As classes de solos apresentadas na Figura 4, bem como as descrições de cada classe (Quadro 1) foram obtidas por Carvalho et al. (1991) e atualizadas por Silva (2014) e Carvalho (2016) para as nomenclaturas do SiBCS de 2013.

Quadro 1 - Unidades de mapeamento de solos da Fazenda Experimental Edgárdia.

Classe	Descrição
LVA	LATOSSOLO VERMELHO AMARELO Distrófico A moderado textura média fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado
LVdf	Associação de LATOSSOLO VERMELHO Distrófico textura média fase floresta tropical subperenifólia/cerrado + LATOSSOLO VERMELHO Eutrófico + NITOSSOLO HÁPLICO Eutrófico Ta abrupto ambos textura arenosa/média fase floresta tropical subperenifólia/cerrado todos A moderado relevo ondulado
LVEf1	LATOSSOLO VERMELHO Eutrófico A moderado textura argilosa fase floresta tropical subperenifólia/cerrado relevo suave ondulado
LVEf2	LATOSSOLO VERMELHO Eutrófico A moderado textura média fase floresta tropical subperenifólia/cerrado relevo ondulado
NVe1	NITOSSOLO VERMELHO Eutrófico Tb A moderado textura média/argilosa fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado
NVe2	NITOSSOLO VERMELHO Eutrófico Ta A moderado textura argilosa fase floresta tropical subperenifólia relevo ondulado
NXe1	NITOSSOLO HÁPLICO Eutrófico Tb A chernozêmico textura média/argilosa fase floresta tropical subperenifólia relevo ondulado
PVAe1	ARGISSOLO VERMELHO-AMARELO Eutrófico Tb abrupto textura arenosa/argilosa fase floresta tropical subperenifólia relevo ondulado
PVAe2	ARGISSOLO VERMELHO-AMARELO Eutrófico abrupto textura arenosa/média fase floresta tropical subperenifólia relevo ondulado
PVAe3	Associação de ARGISSOLO VERMELHO-AMARELO Eutrófico textura arenosa/argilosa + ARGISSOLO VERMELHO-AMARELO Eutrófico textura arenosa/média ambos Tb abrupto fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado + LATOSSOLO VERMELHO Distrófico textura média fase floresta tropical subperenifólia/cerrado relevo ondulado + NITOSSOLO HÁPLICO Eutrófico Tb abrupto textura arenosa/média fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado todos A moderado
PVAe4	Associação de ARGISSOLO VERMELHO-AMARELO Eutrófico Tb abrupto textura arenosa/argilosa A moderado relevo ondulado + NEOSSOLOS LITÓLICOS Eutróficos Ta a chernozêmico textura média fase relevo forte ondulado substrato basalto e arenito ambos fase floresta tropical subperenifólia + NEOSSOLOS QUARTZARÊNICOS Distróficos A moderado fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado + NEOSSOLOS QUARTZARÊNICOS Eutróficos Ta textura arenosa/média ambos A moderado fase campo tropical higrófilo de várzea relevo plano.
MX1	CHERNOSSOLO HÁPLICO textura média/argilosa fase floresta tropical subperenifólia relevo ondulado
MX2	Associação de CHERNOSSOLO HÁPLICO textura média/argilosa fase pedregosa relevo ondulado + NEOSSOLO LITÓLICO Eutrófico Ta A chernozêmico textura média relevo forte ondulado substrato basalto e arenito + NITOSSOLO VERMELHO Tb A relevo ondulado fase floresta tropical subperenifólia + NITOSSOLO HÁPLICO Eutrófico Tb A chernozêmico textura média/argilosa fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado

GXd	GLEISSOLO HÁPLICO Distrófico Ta textura argilosa/média/arenosa fase campo tropical hidrófilo de várzea relevo plano
GXe1	GLEISSOLO HÁPLICO Ta Eutrófico textura argilosa/média fase campo tropical hidrófilo de várzea relevo plano
GXe2	Associação de GLEISSOLO HÁPLICO Eutrófico + GLEISSOLO Distrófico ambos Ta textura média + GLEISSOLO HÁPLICO Distrófico Tb textura argilosa + GLEISSOLO HÁPLICO Eutrófico Ta textura argilosa todos fase campo tropical hidrófilo de várzea relevo plano
RQd1	NEOSSOLO QUARTZARÊNICO Distrófico A moderado fase floresta tropical subperenifólia relevo suave ondulado
RQd2	Associação de NEOSSOLOS QUARTZARÊNICOS Distróficos A moderado fase floresta tropical subperenifólia relevo ondulado + NEOSSOLOS LITÓLICOS Eutróficos Ta A moderado textura arenosa fase floresta tropical subperenifólia relevo forte ondulado substrato basalto e arenito
RQgd	NEOSSOLO QUARTZARÊNICO HIDROMÓRFICO Distrófico A moderado fase campo tropical hidrófilo de várzea relevo plano
RYe1	NEOSSOLO FLÚVICO Eutrófico Ta A chernozêmico textura média fase campo tropical higrófilo de várzea relevo plano
RYe2	NEOSSOLO FLÚVICO Eutrófico Ta A moderado textura média/arenosa/média fase campo tropical higrófilo de várzea relevo plano
RYe3	NEOSSOLO FLÚVICO Eutrófico Ta típico textura arenosa/média fase campo tropical higrófilo de várzea relevo plano
RYe4	Associação de NEOSSOLO FLÚVICO A chernozêmico textura média + NEOSSOLO FLÚVICO A moderado textura média/arenosa/média ambos fase campo tropical higrófilo de várzea + GLEISSOLO HÁPLICO A moderado textura argilosa/média fase campo tropical hidrófilo de várzea + GLEISSOLO HÁPLICO textura argilosa/ média fase campo tropical hidrófilo de várzea todos Eutróficos Ta relevo plano
RYe5	Associação de NEOSSOLO FLÚVICO textura média + NEOSSOLOS FLÚVICOS textura média/arenosa/média ambos Eutróficos Ta fase campo tropical hidrófilo de várzea + NEOSSOLOS QUARTZARÊNICOS HIDROMÓRFICOS Distrófico fase campo tropical tropical hidrófilo de várzea todos A moderado relevo plano
RLe	NEOSSOLO LITÓLICO Eutrófico Ta chernozêmico textura média fase floresta tropical subperenifólia relevo forte ondulado substrato basalto e arenito

Fonte: Silva (2014) e Carvalho (2016).

3.2 Obtenção dos dados de solos

A obtenção dos valores de textura dos solos deu-se a partir do relatório do Levantamento Semidetalhado de Solos da Fazenda Edgardia, elaborado por Carvalho et al. (1991), consistindo em 95 pontos com distribuição espacial irregular, onde a granulometria do solo foi obtida segundo a metodologia da Embrapa (1979). Possíveis

conversões de unidades deverão obedecer o que preconiza a norma de Santos et al. (2018).

O banco de dados foi organizado considerando duas profundidades do solo, sendo uma superficial (horizonte A), recebendo as seguintes notações (areia_1, silte_1 e argila_1) e outra subsuperficial (topo do horizonte B ou horizonte C) (areia_2, silte_2 e argila_2).

3.3 Programas computacionais

O processamento dos dados foi realizado por meio do uso dos seguintes programas computacionais:

- *System for Automated Geoscientific Analysis* – SAGA GIS (CONRAD et al., 2015): processamento das informações geográficas e álgebra de mapas;
- QGIS (QGIS DEVELOPMENT TEAM, 2016): processamento das informações geográficas e elaboração de mapas temáticos;
- *R Language and Environment for Statistical Computing* (R DEVELOPMENT TEAM, 2016): estatística descritiva e análise geral dos dados.
- GS+ (ROBERTSON, 2008): obtenção dos variogramas experimentais, ajuste dos variogramas teóricos e análise do grau de dependência espacial;
- *Geostatistics Software Library* – GSLIB (DEUTSCH; JOURNAL, 1998): estimativas por krigagem ordinária (programa kb2d), obtenção das n realizações por simulação sequencial gaussiana (programa sgsim) e pós processamento das n realizações (programa postsim).

3.4 Transformação dos dados

As frações granulométricas do solo, representadas pela areia, silte e argila, quando analisadas em um dado local devem somar 1 ou 100%, o que caracteriza um conjunto de dados composicional. Com isso, os mesmos foram transformados de acordo com a metodologia denominada razão log-aditiva (RLA) proposta por Aitchison (1982).

A transformação RLA teve a finalidade de preservar a correlação espacial e manter o caráter composicional das variáveis após a obtenção das estimativas via interpolação ou simulação (BUTTAUFUOCO et al., 2011; ODEH et al., 2003). Essa

transformação foi obtida de acordo com Lark et al. (2012), onde a composição possui n elementos sendo $z = [z_1, \dots, z_n]$, com $\sum_{i=1}^n z_i = 1$.

A transformação RLA (Equação 9) de z fornece o vetor y (LARK et al., 2012). Esse método, transforma os dados originais para um espaço denominado real, onde os valores podem variar de $-\infty$ a $+\infty$ (AITCHISON, 1982).

$$RLA(z) = y = [y_1, \dots, y_{n-1}] = \left[\ln \frac{z_1}{z_n}, \dots, \ln \frac{z_{n-1}}{z_n} \right] \quad (9)$$

A transformação inversa foi obtida com a equação 10 (LARK et al., 2012).

$$z = [z_1, \dots, z_{n-1}, z_n] = \left[\frac{\exp y_1}{\sum_{i=1}^{n-1} \exp y_i + 1}, \dots, \frac{\exp y_{n-1}}{\sum_{i=1}^{n-1} \exp y_i + 1}, \frac{1}{\sum_{i=1}^{n-1} \exp y_i + 1} \right] \quad (10)$$

No caso da textura do solo, n é igual a 3 e o vetor z passa a ser igual a [areia, silte e argila]. A argila foi utilizada como denominador na Equação 9, assim, as componentes RLA ficam definidas de acordo com as Equações 11 e 12:

$$RLA_{areia} = \ln \frac{areia}{argila} \quad (11)$$

$$RLA_{silte} = \ln \frac{silte}{argila} \quad (12)$$

Foram utilizadas as denominações G1 e G2 para as transformações para o horizonte superficial do solo e G3 e G4 ao horizonte subsuperficial (Ex. G1 = $\ln(areia_1/argila_1)$).

A argila foi adotada como denominador da RLA, pois os graus dependências espaciais foram superiores (apresentados no item 4.3) quando comparados à utilização da areia ou silte como denominadores.

3.4.1 Exemplo numérico de transformação RLA

Considerando um dos pontos amostrais, no caso, a amostra cujas coordenadas são N = 7474064 m e E = 765124 m e os valores de areia, silte e argila são 71%, 17% e 12% respectivamente, ou seja, as três partes da composição textural:

$$z = [71, 17, 12] \in S^3$$

A transformação RLA aplicada ao vetor z pode ser expressa conforme a sequência:

$$RLA(z) = RLA[71, 17, 12]$$

$$RLA[71, 17, 12] = \left[\ln\left(\frac{71}{12}\right), \ln\left(\frac{17}{12}\right) \right] = [1,777773, 0,348307]$$

O teor de argila foi utilizado como denominador, resultando em um novo vetor com dois componentes, o primeiro resultante da aplicação do log natural à divisão do teor de areia pelo teor de argila e o segundo da aplicação do log natural à divisão do teor de silte pelo teor de argila.

Com a transformação inversa, retorna-se aos valores originais em S^3 conforme a sequência apresentada abaixo:

$$z = \left[\frac{\exp(1,777773)}{\exp(1,777773) + \exp(0,348307) + 1}, \frac{\exp(0,348307)}{\exp(1,777773) + \exp(0,348307) + 1}, \frac{1}{\exp(1,777773) + \exp(0,348307) + 1} \right] = [71, 17, 12]$$

Outros exemplos numéricos de transformação RLA, além de outras metodologias para se trabalhar com variáveis composicionais, como *centred-log-ratio* (CLR) e *isometric-log-ratio* (IRL) podem ser encontrados em Pawlowsky-Glahn e Egozcue (2006).

3.5 Análise descritiva e de dependência espacial

A análise descritiva contou com as medidas de posição e dispersão dos dados como: média, variância, desvio padrão, valores máximos e mínimos, coeficientes de assimetria e de curtose, bem como a aplicação de testes de normalidade como o de Kolmogorov-Smirnov. Essas avaliações objetivam um entendimento geral do conjunto de dados, possibilitando conhecer suas variações e formas de distribuição de frequências.

Após a análise descritiva, as variáveis foram submetidas à verificação do grau de dependência espacial por meio da obtenção de variogramas experimentais (Equação 1) e posterior ajuste dos variogramas teóricos pelo método dos mínimos quadrados. A partir dos modelos teóricos permissíveis (OLIVER; WEBSTER, 2014) foram adotados aqueles com menor soma dos quadrados dos resíduos (SQR), maior coeficiente de determinação, bem como os que apresentam melhor desempenho nos testes de validação cruzada.

A medida de dependência espacial foi obtida pelo índice de dependência espacial (IDE) que relaciona o componente estrutural (C) e o patamar do variograma (C+C₀), Equação 13 (ZIMBACK, 2001). Para valores de IDE menores a 25% considera-se uma fraca dependência espacial, sendo classificada como moderada para o intervalo de 25 a 75% e forte dependência espacial para valores acima de 75%.

$$IDE = \frac{c}{c+c_0} \times 100 \quad (13)$$

3.6 Estimativa por Krigagem Ordinária

Uma vez verificada a dependência espacial dos dados e obtidos os parâmetros do variograma, os quais foram utilizados na definição dos ponderadores ótimos para as amostras utilizadas, os valores das variáveis granulométricas do solo em locais não amostrados foram estimados por meio do processo de interpolação por krigagem ordinária (Equação 5).

Nesse processo, os locais a serem estimados levaram em consideração as amostras da vizinhança, adotando para a interpolação pontos com valores conhecidos. O processo de interpolação por krigagem ordinária está descrito no item 2.3.2.

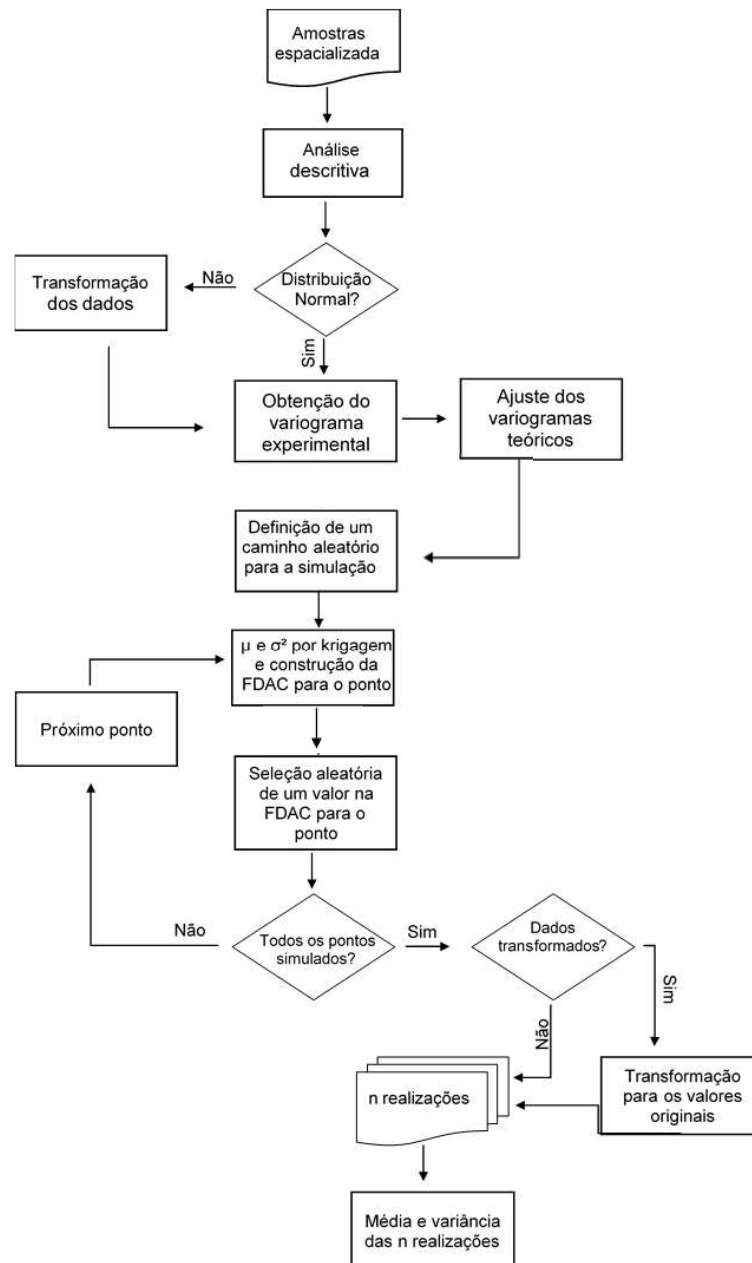
3.7 Estimativas por simulação estocástica

De posse dos variogramas ajustados para cada composição das frações granulométrica do solo, os valores para os locais não amostrados foram estimados por meio da simulação estocástica, mais especificamente pela simulação sequencial gaussiana.

A SSG exige que os dados apresentem uma distribuição normal, a qual foi verificada pela aplicação de testes de normalidade, a exemplo do teste de Kolmogorov-Smirnov. Caso verificado o não cumprimento dessa exigência, os dados devem passar por uma transformação, convertendo-os para uma distribuição normal padronizada, onde a média deverá ser igual a 0 e a variância igual a 1, e após a realização das estimativas, a transformação inversa deve ser realizada.

O Fluxograma de trabalho contendo a sequência de passos para implementação da SSG está apresentado na Figura 5, sendo essa sequência descrita no item 2.3.3.1.

Figura 5 – Fluxograma dos procedimentos da simulação sequencial gaussiana



Fonte: Adaptado de Teixeira (2015) e Moraes (2015).

3.8 Validação e avaliação das estimativas e simulações

Após a obtenção dos mapas contendo a distribuição espacial das composições RLA, via estimação por KO e das n realizações via simulação estocástica por SSG, os mesmos foram avaliados quanto reprodução dos histogramas e variogramas originais.

Os métodos de simulação estocástica geram n realizações em cada ponto ou pixel, com isso, foi calculado o mapa tipo-E que consiste em uma média calculada pixel a pixel considerando todas as realizações (DEUTSCH; JOURNAL, 1998). Adicionalmente foi obtido, também, pixel a pixel, a variância para o conjunto de realizações, o qual possibilita a análise das incertezas locais associadas às estimativas (BOURENNANE et al., 2007).

Procedeu-se a avaliação de acordo com Boluwade e Madramootoo (2015):

- i. Reprodução das distribuições de frequência ou das funções de densidade acumuladas para as estimativas, realizações e mapas do Tipo-E;
- ii. Reprodução dos variogramas para as estimativas, realizações e mapas do Tipo-E;

A acurácia na reprodução dos variogramas pelos métodos de estimação e simulação, foi dada pelo parâmetro ε_γ (GOOVAERTS, 2000) (Equação 14):

$$\varepsilon_\gamma = \sum_{s=1}^s \frac{[\gamma(h_s) - \gamma^*(h_s)]^2}{[\gamma(h_s)]^2} \quad (14)$$

Sendo que s corresponde ao número de intervalos de distâncias (h) do variograma, $\gamma(h_s)$ é a variância presente no variograma do conjunto de dados em uma distância h e $\gamma^*(h_s)$ é o valor da variância estimada ou simulada para a mesma distância h .

Para comparar a distribuição de frequência, ou seja, os histogramas dos dados originais e os estimados ou simulados, foi utilizado o gráfico Q-Q e as estatísticas associadas a ele.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

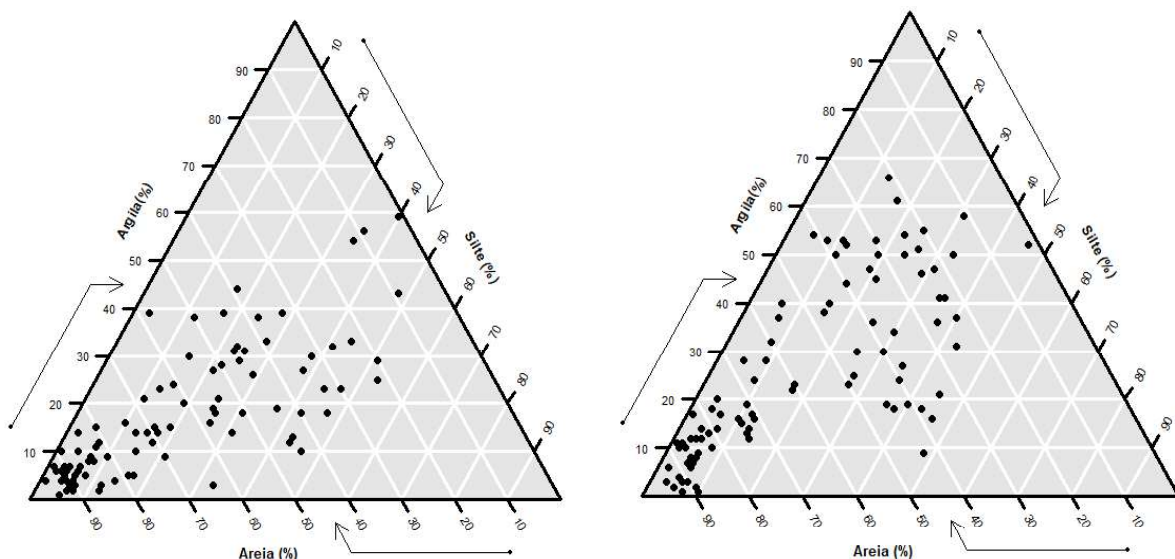
4.1 Descrição geral dos dados

As frações granulométricas do solo, como variável composicional, quando plotadas em um diagrama ternário, resultam em uma classificação textural para cada uma das amostras (SANTOS et al., 2018). Para a composição areia, silte e argila em superfície (Figura 6, esquerda), observa-se um predomínio de texturas classificadas como arenosa (fração areia subtraída da fração argila $> 70\%$) e média (argila $< 35\%$ e $70\% > \text{areia} > 15\%$), com apenas quatro amostras na classe textural denominada argilosa.

Para as amostras em subsuperfície (Figura 6, direita), ainda predominam os pontos nas classes texturais arenosa e média, porém são observados um maior número de amostras sendo classificadas como de textura argilosa ($35\% < \text{argila} < 60\%$) e muito argilosa (argila $> 60\%$), essa última classe com duas amostras.

Esse aumento nos teores de argila em profundidade se dá em função das principais classes de solos que ocorrem na Fazenda Experimental Edgárdia, uma vez que são esperados maiores valores de argila nos horizontes B latossólicos, B níticos e B texturais, quando comparados aos horizontes A, acima destes. Na área de estudo, ocorrem também extensas manchas de Neossolos Quartzarênicos (Figura 4), cujo horizonte subsuperficial (horizonte C) tende a apresentar uma textura tipicamente arenosa.

Figura 6 – Triângulo textural, superfície (esquerda), subsuperfície (direita)



4.2 Análise descritiva dos dados

A análise descritiva dos valores das frações granulométricas do solo, areia silte argila e dos valores transformados em superfície e em subsuperfície possibilitou a obtenção das estatísticas de posição e dispersão dos dados, bem como da sua distribuição de frequência e verificação de normalidade nas distribuições. Os resultados da análise descritiva estão apresentados nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1 - Estatística descritiva das frações granulométricas do solo em superfície

	areia1	silte1	argila1	G1	G2
n	95	95	95	95	95
média	64.8	18.3	16.9	1.5784	0.0413
mínimo	1	1	1	-4.0775	-2.5649
máximo	95	53	59	4.5433	2.3979
DP	24.7	14.5	13.4	1.4287	0.8563
CV	0.38	0.79	0.79	-	-
assimetria	-0.61	0.75	1.07	-0.75	-0.28
curtose	-0.70	-0.62	0.62	1.35	0.82
valor-p	7.8E-06	1.4E-05	1.3E-04	0.25	0.19

n: número de observações; DP: desvio padrão; CV: coeficiente de variação.

Tabela 2 - Estatística descritiva das frações granulométricas do solo em subsuperfície

	areia2	silte2	argila2	G3	G4
n	95	95	95	95	95
média	57.5	16.7	25.9	0.9811	-0.4878
mínimo	2	1	1	-3.2581	-2.8332
máximo	94	48	66	4.5218	2.3026
DP	25.7	13.3	17.5	1.428	0.9394
CV	0.45	0.80	0.67	-	-
assimetria	-0.14	0.81	0.45	0.14	0.31
curtose	-1.38	-0.62	-1.04	0.01	0.38
valor-p	5.5E-05	8.4E-08	2.5E-05	0.36	0.44

n: número de observações; DP: desvio padrão; CV: coeficiente de variação.

As maiores variabilidades foram observadas para o silte e argila tanto em superfície quanto em subsuperfície, de acordo com Warrick (1998) considera-se com alta variabilidade, valores de CV acima de 0,5, moderada variabilidade valores de CV

entre 0,15 e 0,5 e baixa variabilidade valores inferiores a 0,15. Com base nessa classificação, argila e silte, em ambas as profundidades, apresentaram alta variabilidade com CV iguais a 0,79, 0,79 (superfície, respectivamente) e 0,67 e 0,80 (subsuperfície, respectivamente).

A variabilidade da areia é tida como moderada, com valores de CV iguais a 0,38 e 0,45 para superfície e subsuperfície, respectivamente. Warrick (1998) destaca que frações granulométricas do solo geralmente apresentam uma variação média, em concordância com os resultados da areia para Fazenda Experimental Edgárdia.

Os valores negativos para o coeficiente de assimetria para a areia nas duas profundidades indicam que esta variável possui uma distribuição de frequência assimétrica para a esquerda, sendo esse valor mais próximo à zero em subsuperfície. Já o silte e argila, apresentaram esse mesmo coeficiente com valores positivos, indicando uma assimetria à direita, com destaque para a argila em superfície com uma assimetria acima de 1,0.

Para a verificação da hipótese de normalidade na distribuição de frequência dos dados, adotou-se o teste de Kolmogorov-Smirnov (LILLIEFORS, 1967), este mostrou que tanto a areia, silte e argila nas duas profundidades não seguem uma distribuição normal, com valores de p-valores inferiores a 0,05 (LILLIEFORS, 1967; OLEA; LUPPENS, 2015). Porém, após a aplicação da transformação RLA, de acordo com o teste, os dados passaram a apresentar uma distribuição normal, com p-valores de 0,25, 0,19, 0,36 e 0,44 para as variáveis transformadas G1, G2, G3 e G4 respectivamente.

Mesmo apresentando distribuição normal, as variáveis transformadas apresentaram-se assimétricas (Tabelas 1 e 2), com valores de coeficiente de assimetria diferentes de zero. De acordo com Lark e Bishop (2007), após a transformação RLA os dados podem ser considerados com distribuição normal, porém apresentando alguns *outliers*, o que confere a assimetria nas distribuições de frequência. Os mesmos autores destacam que não há necessidade de remoção dos valores tidos como *outliers*, uma vez que não são necessariamente errôneos e sim representativos da variabilidade existente nos solos.

Além da aplicação dos testes, a normalidade do conjunto de valores pode ser verificada por meio de gráficos tipo quantil-quantil, ou gráficos Q-Q, onde os dados amostrais são confrontados com uma distribuição normal esperada. No gráfico Q-Q, para uma distribuição normal, os valores devem se apresentar sobre uma linha

diagonal 1:1. Os histogramas, além da normalidade, permitem também a identificação de possíveis assimetrias. Os gráficos Q-Q para as variáveis originais bem como as transformadas estão apresentadas nas Figuras 7 e 8.

Nas Figuras 9 e 10 são apresentados os coeficientes de correlação entre as variáveis em escala de valores originais e as transformadas. Observou-se que areia e argila apresentam fortes correlações, porém negativas, para as duas profundidades ($r = -0,875$ e $-0,878$, respectivamente). Tal fato, é uma característica de dados composicionais, cuja soma das variáveis deve ser constante, no caso das frações granulométricas do solo essa soma deve ser igual a 1,0 ou 100%; assim com o aumento de uma variável, outra deve obrigatoriamente diminuir (ODEH et al., 2003; PAWLOWSKY-GLAHN; EGOSCUE, 2006).

Areia e silte também apresentaram correlações negativas para ambas as profundidades com valores de $r = -0,895$ e $-0,778$, respectivamente, as correlações entre argila e silte foram positivas com coeficientes de correlação da ordem de 0,567 para a camada subsuperficial e 0,383 para a camada superficial.

Para as variáveis G1 e G2, bem como G3 e G4, os coeficientes de correlação mostraram valores da ordem de 0,23 e 0,33, respectivamente, indicando uma fraca correlação entre elas, Odeh et al. (2003) observaram que a RLA diminuiu a correlação entre argila e silte e argila e areia. Leão (2016) também observou uma fraca correlação entre as transformadas RLA, tendo a argila como denominador da expressão, porém quando a areia passou a ser a variável utilizada no denominador o autor observou uma forte correlação entre as transformações.

Figura 7 – Gráficos quantil-quantil para as frações granulométricas e transformações RLA em superfície

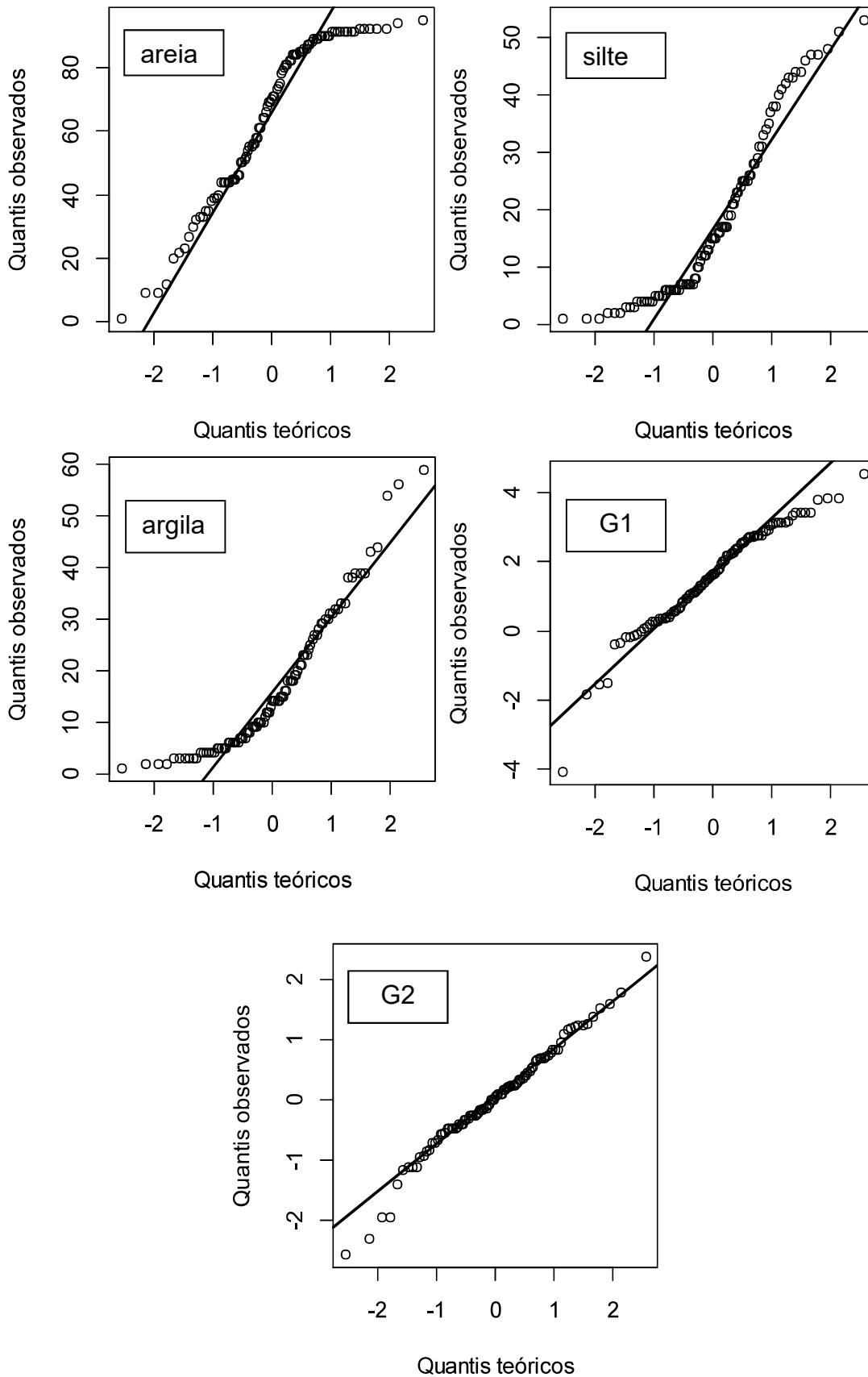


Figura 8 – Gráficos quantil-quantil para as frações granulométricas e transformações RLA em subsuperfície

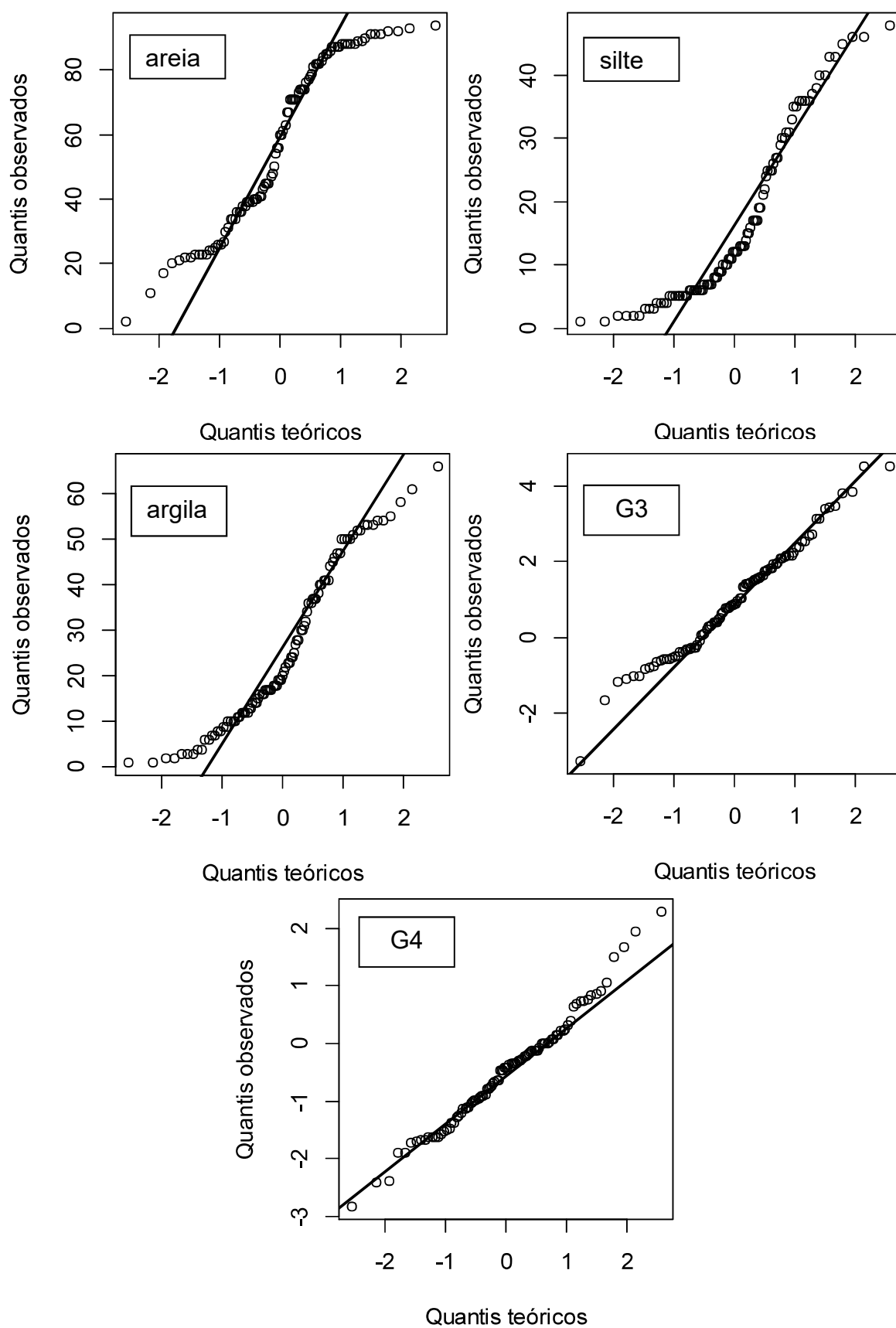


Figura 9 – Matriz de correlação para as frações granulométricas e transformações RLA em superfície

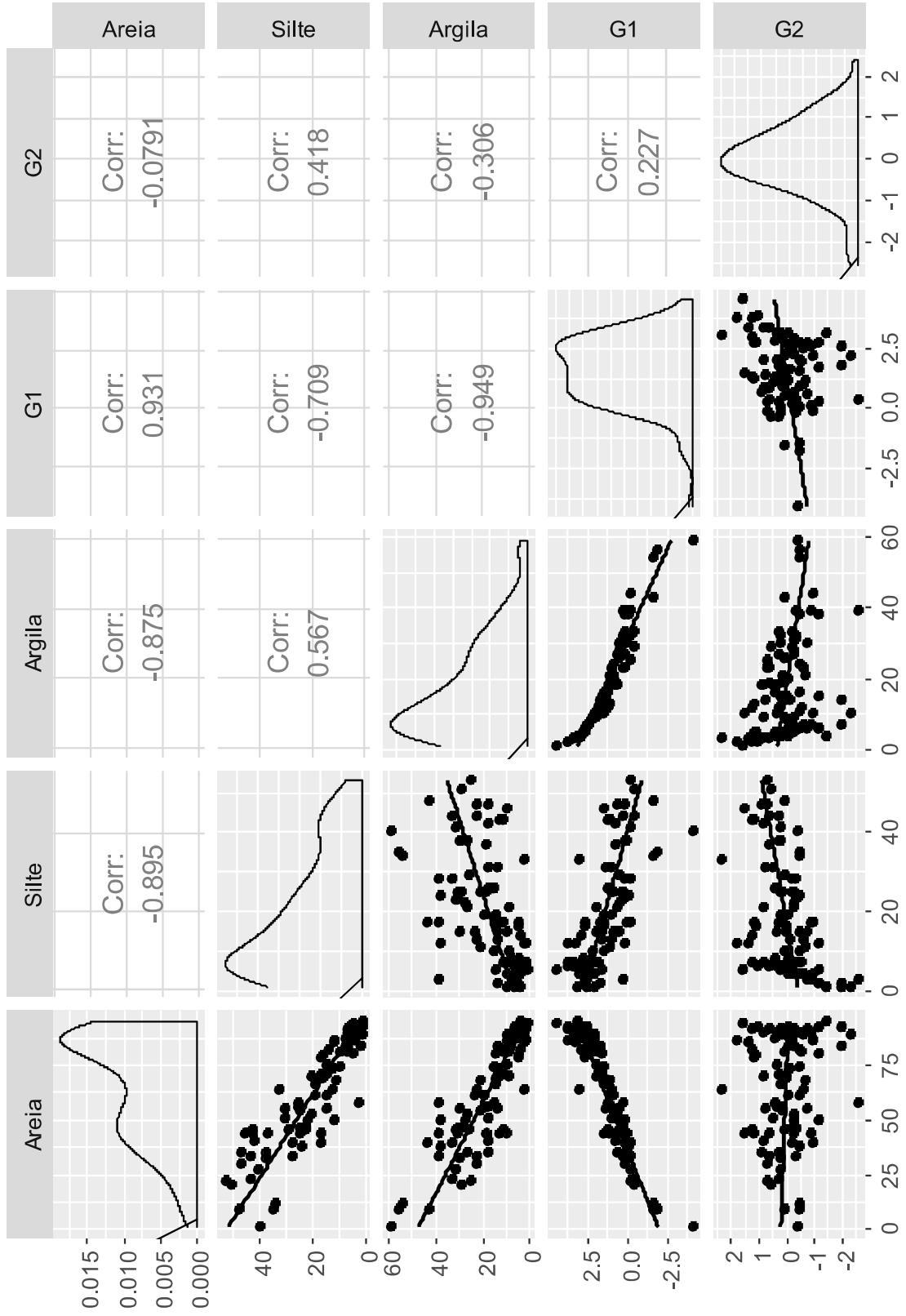
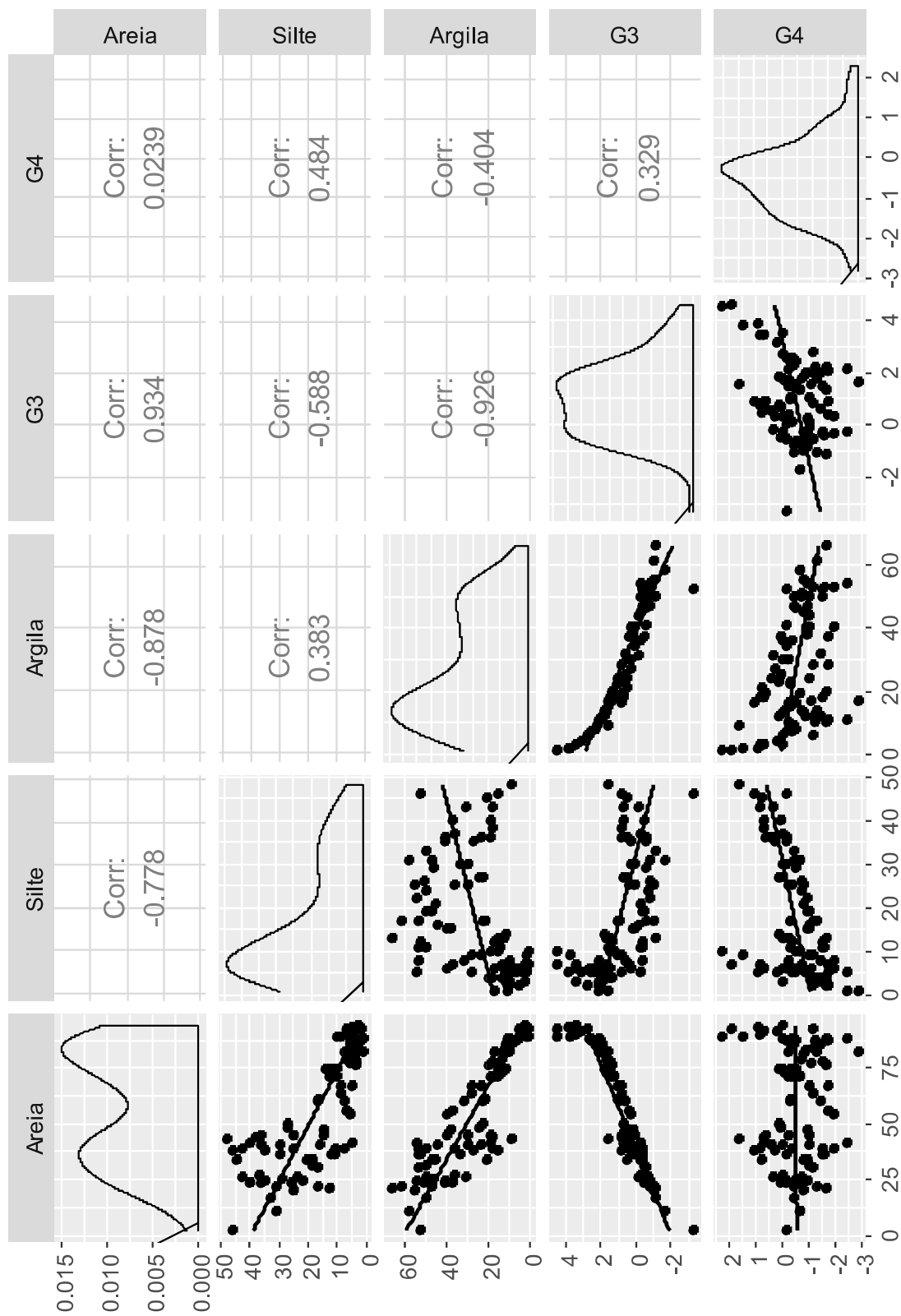


Figura 10 - Matriz de correlação para as frações granulométricas e transformações RLA em subsuperfície



4.3 Análise Variográfica e de dependência espacial

A análise variográfica é uma ferramenta amplamente utilizada na geoestatística para avaliar a variabilidade espacial de atributos físicos e químicos do solo. Os variogramas experimentais e teóricos obtidos para as variáveis transformadas via RLA estão apresentados nas Figuras 11, 12, 13 e 14 e os parâmetros extraídos dos variogramas na Tabela 3. Os modelos teóricos ajustados foram o esférico para as variáveis G1 e G2 e o exponencial para G3 e G4, a escolha de tais modelos se deu pelos menores valores de RMQ e maiores valores dos coeficientes de determinação (R^2), estes apresentaram-se superiores a 0,7, indicando que as funções matemáticas se adequam ao conjunto de pontos pertencentes ao variograma experimental.

O maior alcance foi observado para G1 (1663 m), seguido de G4 (672 m), G3 (663 m) e G2 (527 m). Tais valores indicam a máxima distância na qual se observa dependência entre os pontos amostrais (ISAAKS; SRIVASTAVA, 1989). De acordo com Yao et al (2019), menores valores de alcance indicam uma maior heterogeneidade da variável. Valores de alcance entre 502 m e 811 m foram obtidos por Wang e Shi (2018) ao analisar o comportamento espacial das transformações RLA aplicadas a areia e ao silte, os quais estão em concordância com os obtidos para G2, G3 e G4 neste trabalho.

O IDE foi utilizado para descrever o grau de dependência espacial entre os pontos amostrais para as variáveis transformadas. De acordo com a classificação proposta por Zimback (2001), denomina-se como, dependência espacial moderada ($25\% < IDE < 75\%$) e forte dependência $IDE > 75\%$. Segundo esse critério, a variável G1 apresentou moderada dependência espacial (59%) e alta dependência espacial para as variáveis G2, G3 e G4 (99,9%, 99,9%, 78,2%, respectivamente).

Tabela 3 - Parâmetros dos variogramas ajustados para os valores das transformações RLA

	G1	G2	G3	G4
Modelo	Esférico	Esférico	Exponencial	Exponencial
A (m)	1663	527	663	672
Co	0,806	0,001	0,001	0,220
C + Co	1,966	0,793	2,141	1,004
RMQ	0,260	0,121	1,15	0,0862
R^2	0,897	0,806	0,713	0,792
IDE (%)	59,0	99,9	99,9	78,1

Figura 11 – Variograma para a transformação RLA G1

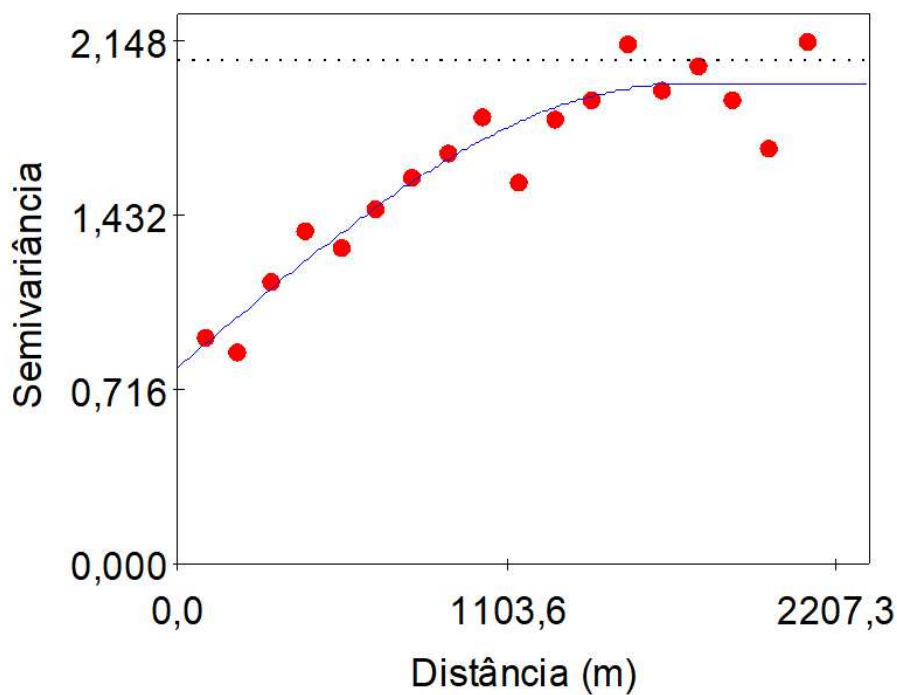


Figura 12 – Variograma para a transformação RLA G2

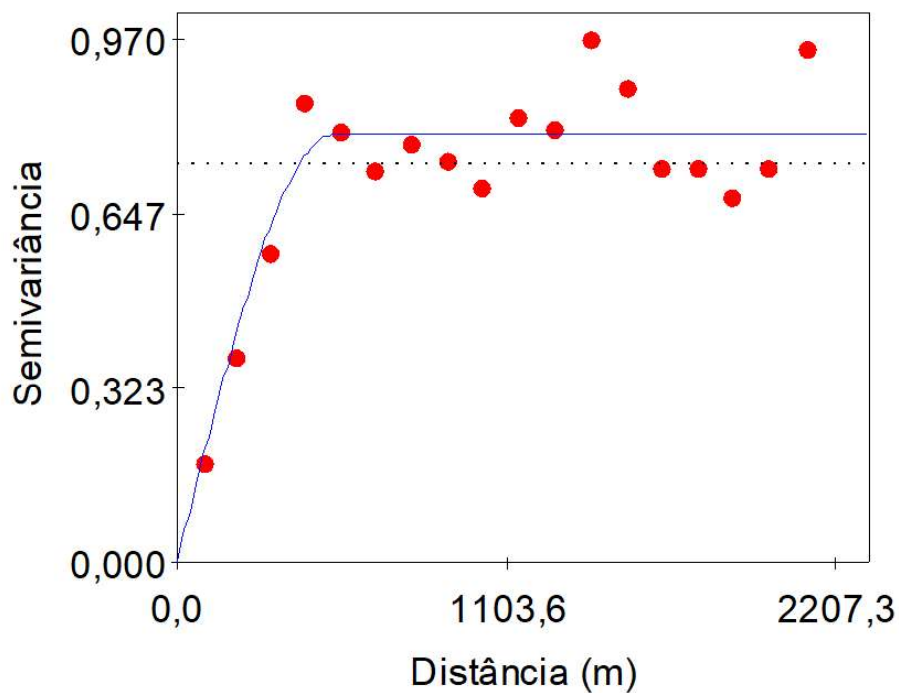
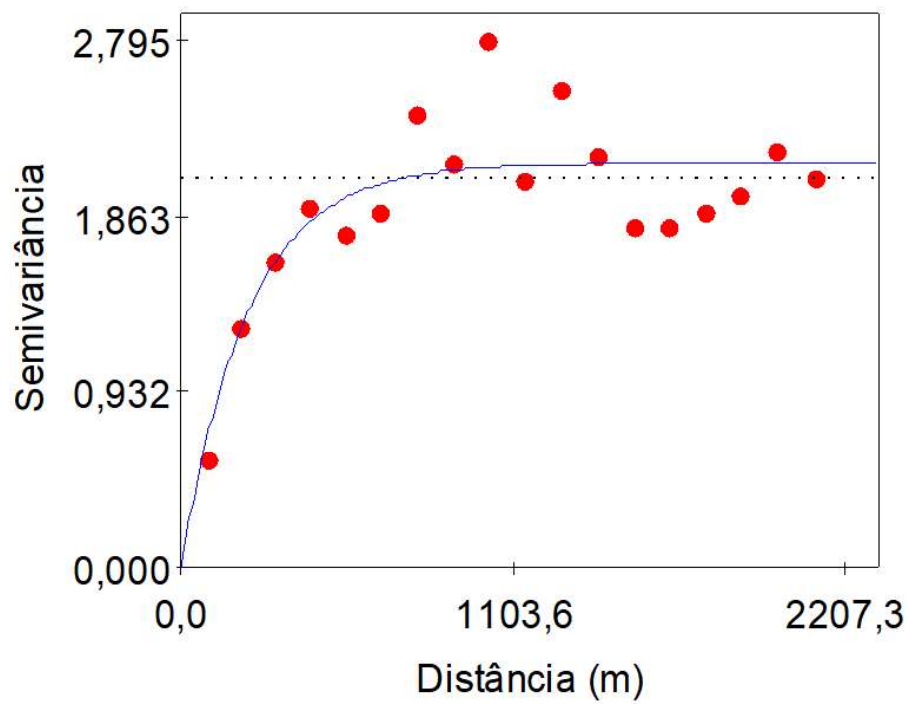
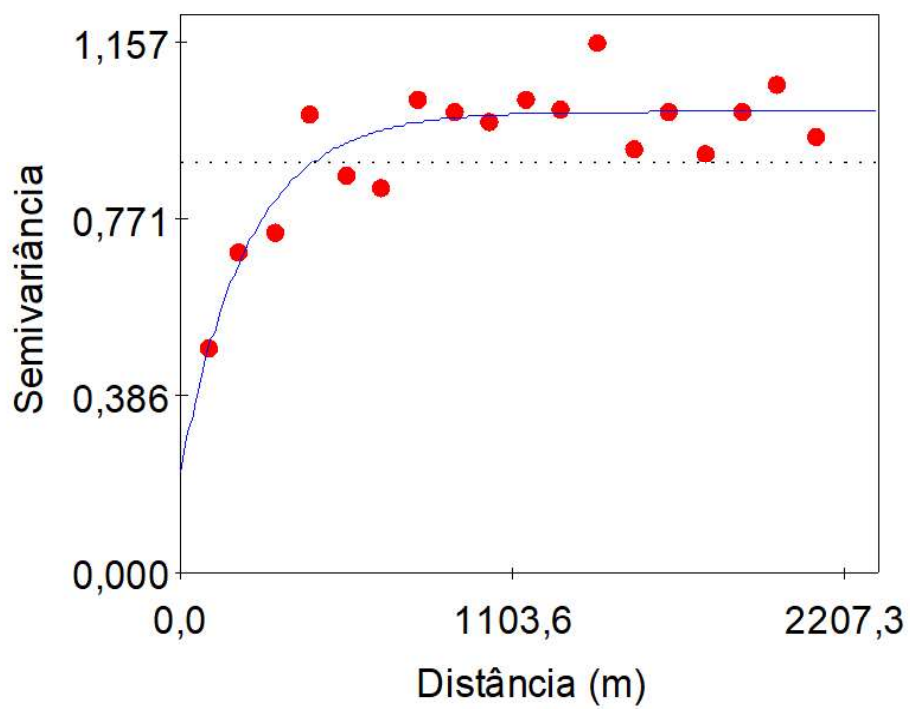


Figura 13 – Variograma para a transformação RLA G3**Figura 14 – Variograma para a transformação RLA G4**

Com o intuito de verificar a qualidade das interpolações geradas pelos modelos ajustados aos variogramas experimentais, foi utilizada a validação cruzada (BUTTAFUOCO et al., 2005). Esta, possibilita comparar valores observados e estimados usando apenas os dados do próprio conjunto amostral. Na validação cruzada, uma determinada amostra é temporariamente descartada do conjunto e posteriormente estimada a partir das demais amostras e do variograma teórico (ISAAKS; SRIVASTAVA, 1989).

Nas Figura 15, 16, 17 e 18 estão apresentadas as validações cruzadas para as variáveis G1, G2, G3 e G4, juntamente com os ajustes lineares (linha contínua) e correlação 1:1 (linha pontilhada). Na comparação entre os valores observados e os estimados, observou-se um ajuste linear relativamente baixo, com R^2 inferiores a 0,5 para as quatro variáveis (Tabela 4). Valores dessa ordem são frequentemente apresentados em trabalhos nos quais busca-se análise espacial e posterior interpolação de atributos do solo (GUAN et al., 2017; YAO et al., 2019).

Lundgren et al. (2017), ao analisarem a validação cruzada, utilizaram como parâmetros de erros da estimativa, além do R^2 , os valores do intercepto (β_0) e do coeficiente angular (β_1). Este, quando semelhante à unidade, indica um ajuste próximo à reta 1:1 (ROBERTSON, 2008) e o β_0 , por sua vez, deve estar próximo a zero. As variáveis G1, G2, G3 e G4 apresentaram os valores 1,11, 0,53, 0,87 e 0,69 para β_1 , respectivamente, e -0,18, -0,015, 0,18 e -0,18 para o β_0 , respectivamente (Tabela 4) indicando uma maior concordância entre o ajuste linear e a reta 1:1 para a variável G1.

Tabela 4 - Estatísticas da validação cruzada para as transformações RLA

	G1	G2	G3	G4
β_0	-0,18	-0,015	0,18	-0,18
β_1	1,11	0,53	0,87	0,69
R^2	0,46	0,13	0,31	0,1
Erro padrão	0,13	0,14	0,13	0,22

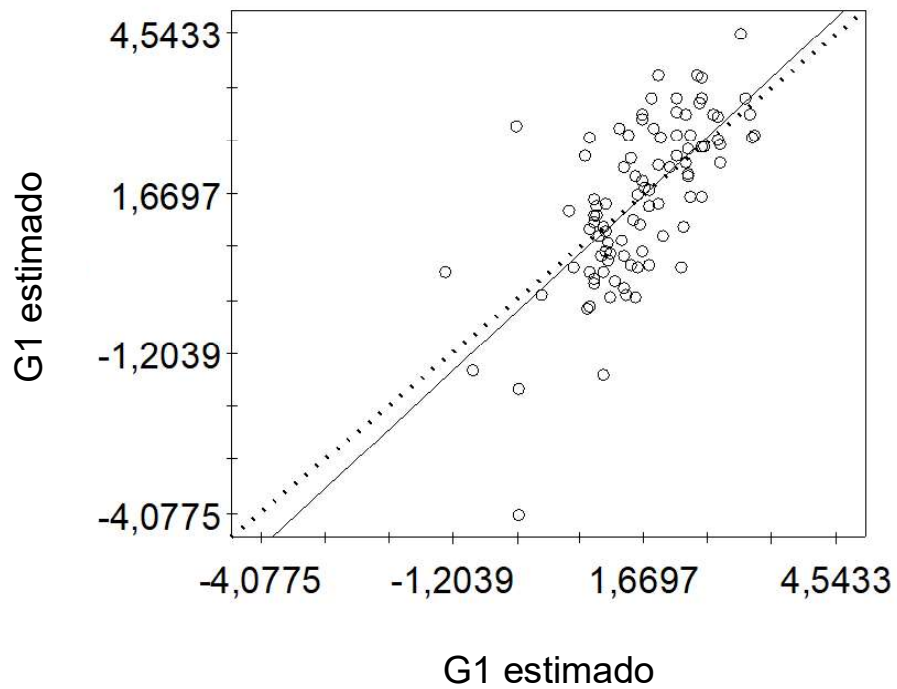
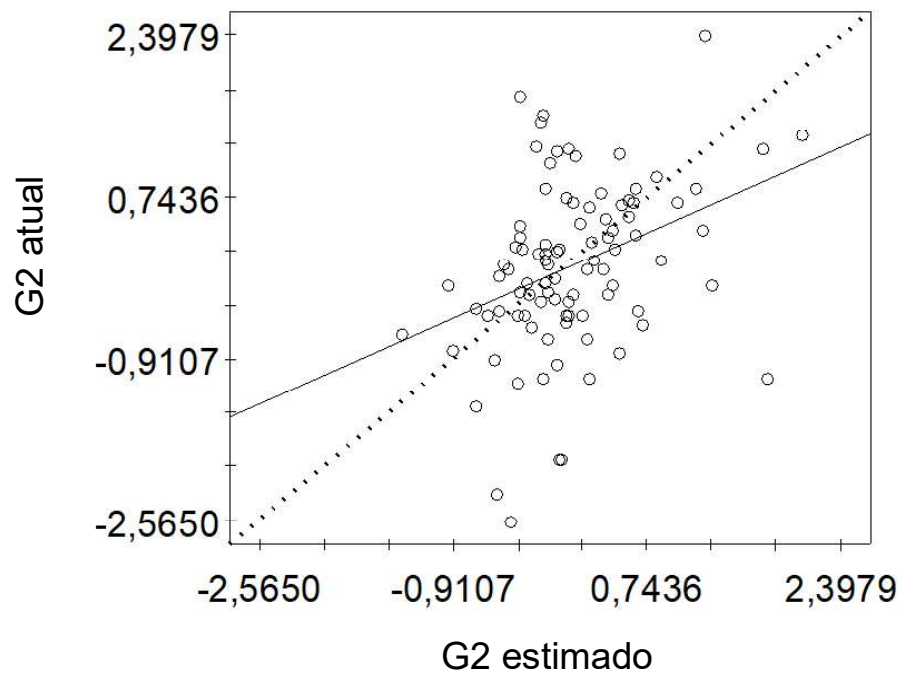
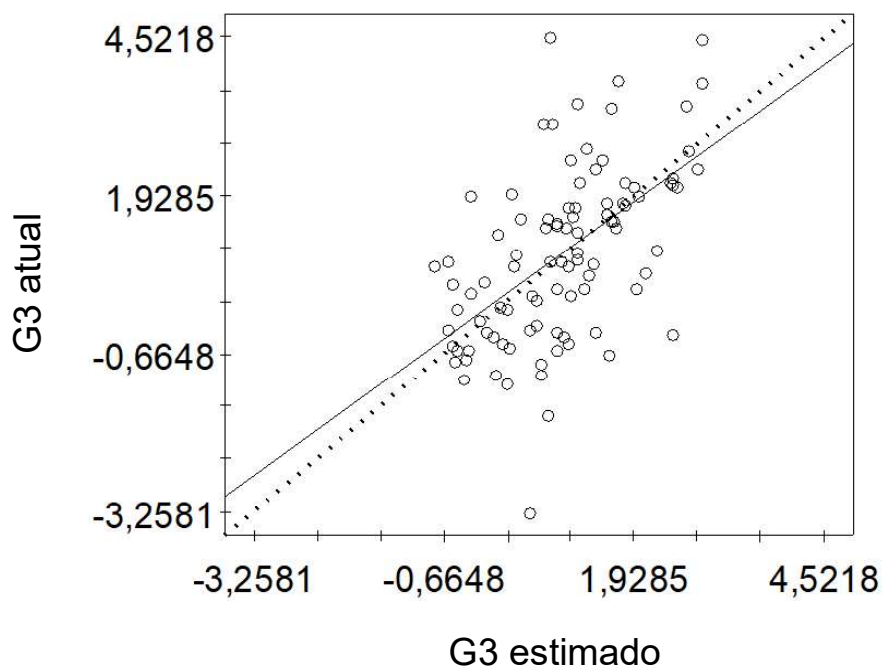
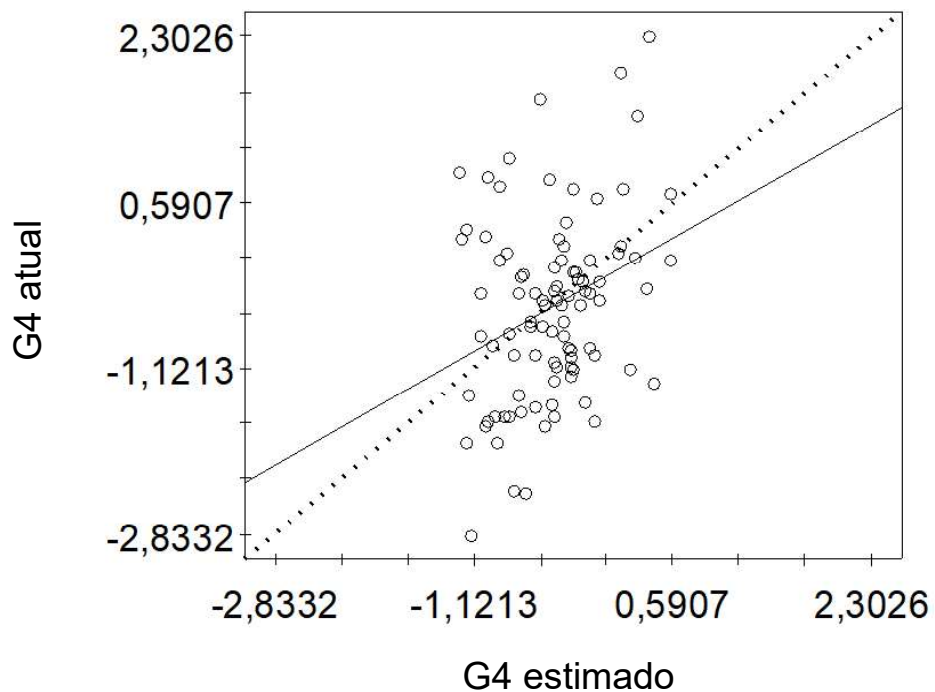
Figura 15 – Validação cruzada para a transformação RLA G1**Figura 16 – Validação cruzada para a transformação RLA G2**

Figura 17 – Validação cruzada para a transformação RLA G3**Figura 18 – Validação cruzada para a transformação RLA G4**

4.4 Comparação entre as estimativas por KO e SSG

Para cada variável transformada (G1, G2, G3 e G4) foram obtidas estimativas via KO e 300 realizações por SSG, os mapas das variâncias da krigagem das realizações, bem como o mapa médio (mapa tipo-E) pixel-a-pixel para o conjunto de realizações.

A SSG exige uma distribuição multigaussiana nos dados (DEUTSCH; JOURNAL, 1998). Com a transformação RLA, de acordo com o teste de Lilliefors (Kolmogorov-Smirnov), esses apresentaram uma distribuição normal e conforme Buttafuocco et al. (2011) e Olea e Luppens (2015) não é necessária uma segunda transformação nos dados, permitindo a aplicação da SSG diretamente sobre os valores da primeira transformação.

O número de realizações deve ser suficiente para representar espacialmente as incertezas associadas à estimativa, sendo geralmente adotados valores a partir de 100 realizações (GOOVAERTS, 2000). Bourennane et al. (2007) utilizaram 200 realizações para a avaliação da incerteza no mapeamento do conteúdo de água no solo e Teixeira et al. (2018) utilizaram 300 realizações para a obtenção de um mapa médio e das incertezas nas quantidades de argila no solo. Outros estudos mostram a possibilidade do uso de um número menor de simulações para alguns atributos do solo como argila, areia, índice de saturação por bases, alumínio e emissão de CO₂ (SILVA et al., 2014; TEIXEIRA et al., 2011).

Para fins de comparação, quatro realizações foram selecionadas aleatoriamente (4, 88, 186 e 279). Estas podem apresentar variações em termos de valores obtidos para um mesmo local, devido a simulação seguir caminhos aleatórios, com exceção dos locais com pontos amostrais, os quais são honrados, uma vez que se trata de um método condicional.

4.4.1 Reprodução dos dados de entrada

A qualidade na reprodução das distribuições de frequência ou histogramas (primeira ordem), foi avaliada por meio dos gráficos Q-Q, nos quais foram confrontadas os dados originais e suas estimativas por KO e SSG (Figuras 19, 20, 21 e 22). A reta diagonal (1:1) indica uma concordância exata entre os dois conjuntos de dados. Tanto a KO quanto a média das realizações (tipo-E) apresentaram desempenhos semelhantes na reprodução do histograma para as quatro variáveis

(G1, G2, G3 e G4). É possível notar que os quantis superiores e inferiores são pouco coincidentes com a reta 1:1 o que evidencia o efeito de suavização obtido pela KO e de forma similar pela estimativa tipo-E. Tal comportamento é menos evidente para as realizações analisadas, indicando que cada realização individualmente reproduz de forma mais satisfatória as estatísticas dos conjunto de dados de entrada.

A reprodução dos variogramas (segunda ordem) pela KO e SSG estão apresentadas nas Figuras 23, 24, 25 e 26. Para as quatro variáveis, observa-se que a KO apresenta uma estrutura variográfica que difere do modelo ajustado aos dados de entrada, onde a variabilidade dos dados (patamar) mostrou-se inferior em relação ao modelo alvo, evidenciando o efeito de suavização desse método. Cada uma das quatro realizações sorteadas, apresentaram um comportamento mais próximas ao modelo alvo, porém com flutuação em relação ao patamar e em relação ao alcance.

Os valores de ϵ_Y (Tabela 5) reforçam, numericamente, o desempenho superior das realizações obtidas via SSG em reproduzir o modelo variográfico dos dados de entrada. De acordo com Goovaerts (2000) valores de ϵ_Y próximos a zero indicam uma boa concordância entre os variogramas. O ϵ_Y variou de 0,04 a 1,09 para as quatro variáveis dentro das realizações sorteadas, enquanto para a KO a variação se deu entre 7,22 e 11,47. Valores semelhantes foram observados entre a KO e a média das simulações, porém a reprodução dos variogramas foram superiores para o tipo-E nas variáveis G1, G3 e G4 e inferior para a G2.

Teixeira et al. (2012) obtiveram resultados semelhantes ao comparar o comportamento da KO e da SSG para a espacialização de diferentes variáveis do solo, a exemplo da densidade, cujos valores de ϵ_Y foram de 8,80 e 7,95 para a KO e tipo-E, respectivamente, já as diferentes realizações tiveram variações 0,18 a 0,30 para essa variável.

Silva Jr. et al. (2013) encontraram valores de ϵ_Y ainda mais próximos de zero, com um mínimo de 0,04 e máximo de 0,09 para as realizações obtidas por SSG e um comportamento semelhante com relação aos variogramas, sendo o obtido na KO apresentando o patamar inferior aos dados de entrada.

Figura 19 – Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G1 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas

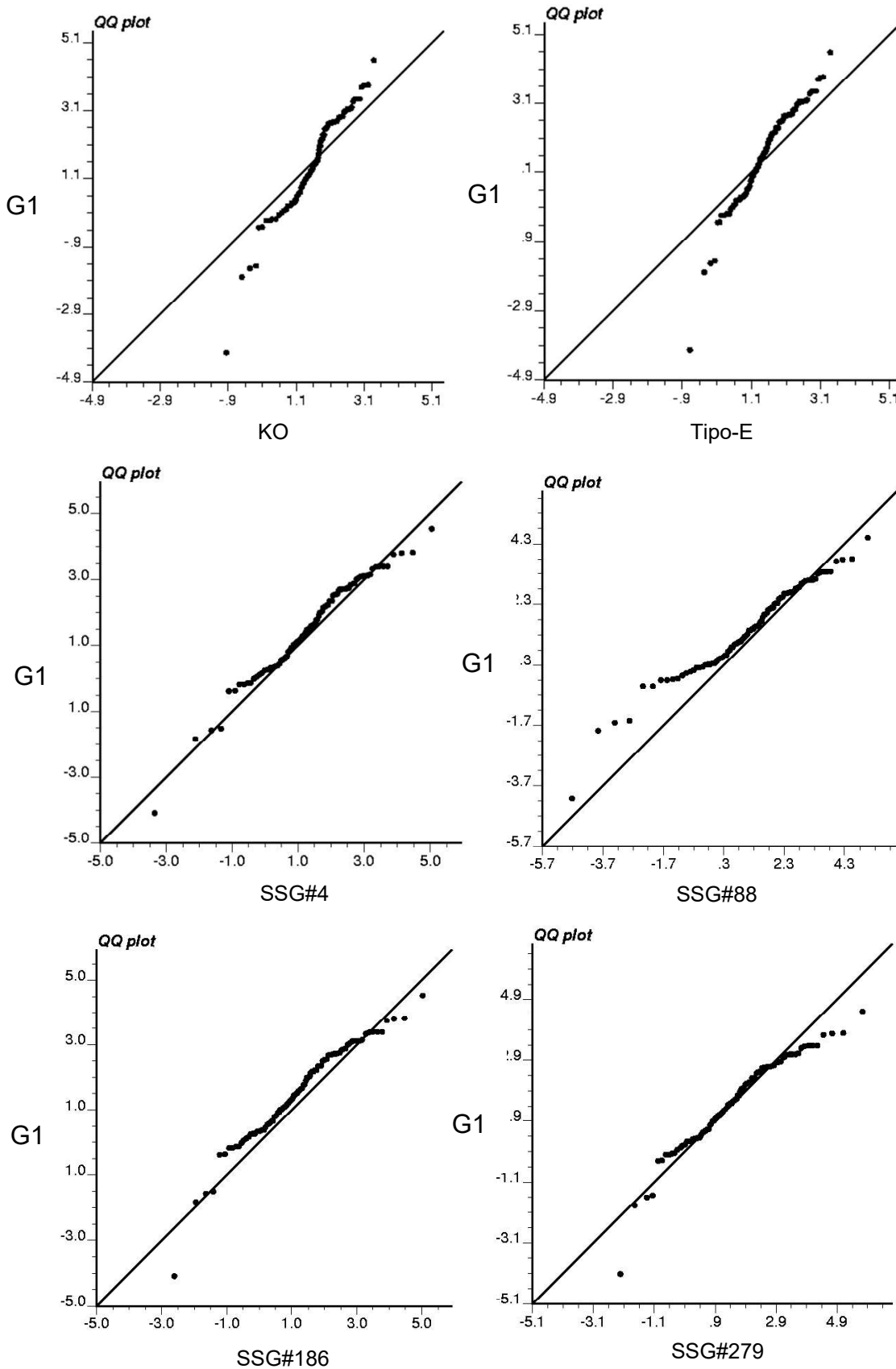


Figura 20 – Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G2 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas

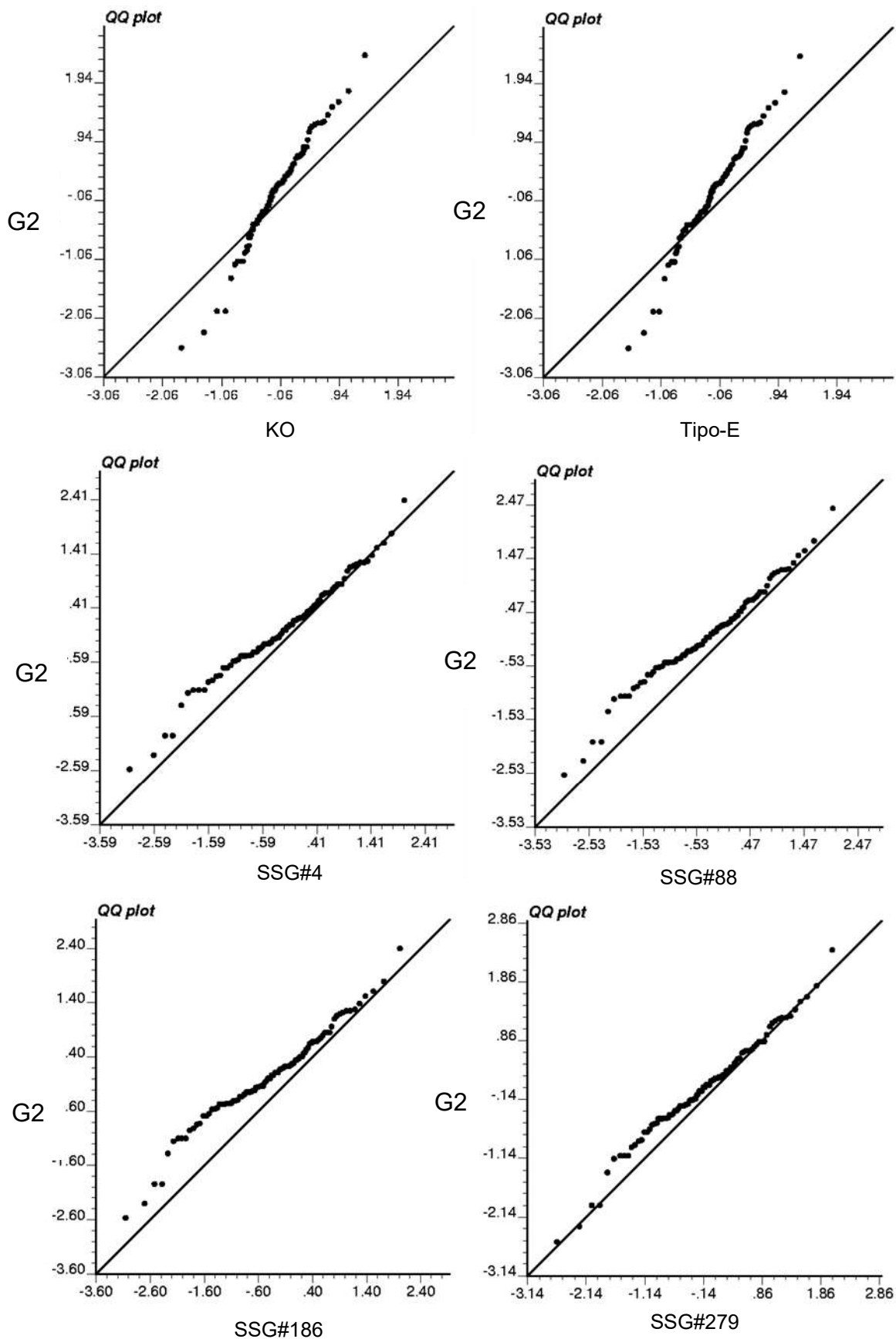


Figura 21 – Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G3 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas

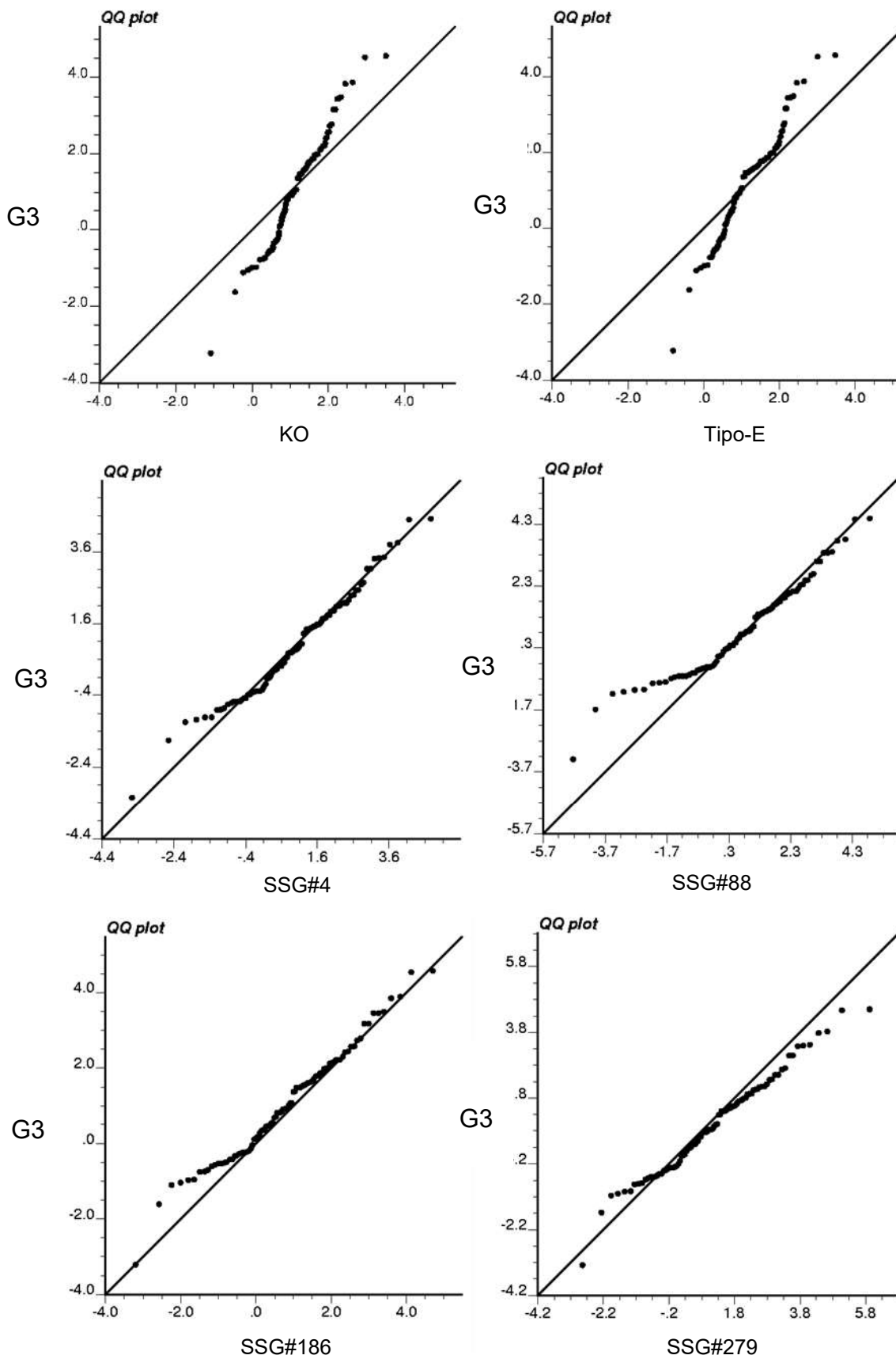


Figura 22 – Gráficos quantil-quantil dos valores da transformação RLA G4 e interpolações por KO, tipo-E e para as quatro realizações sorteadas

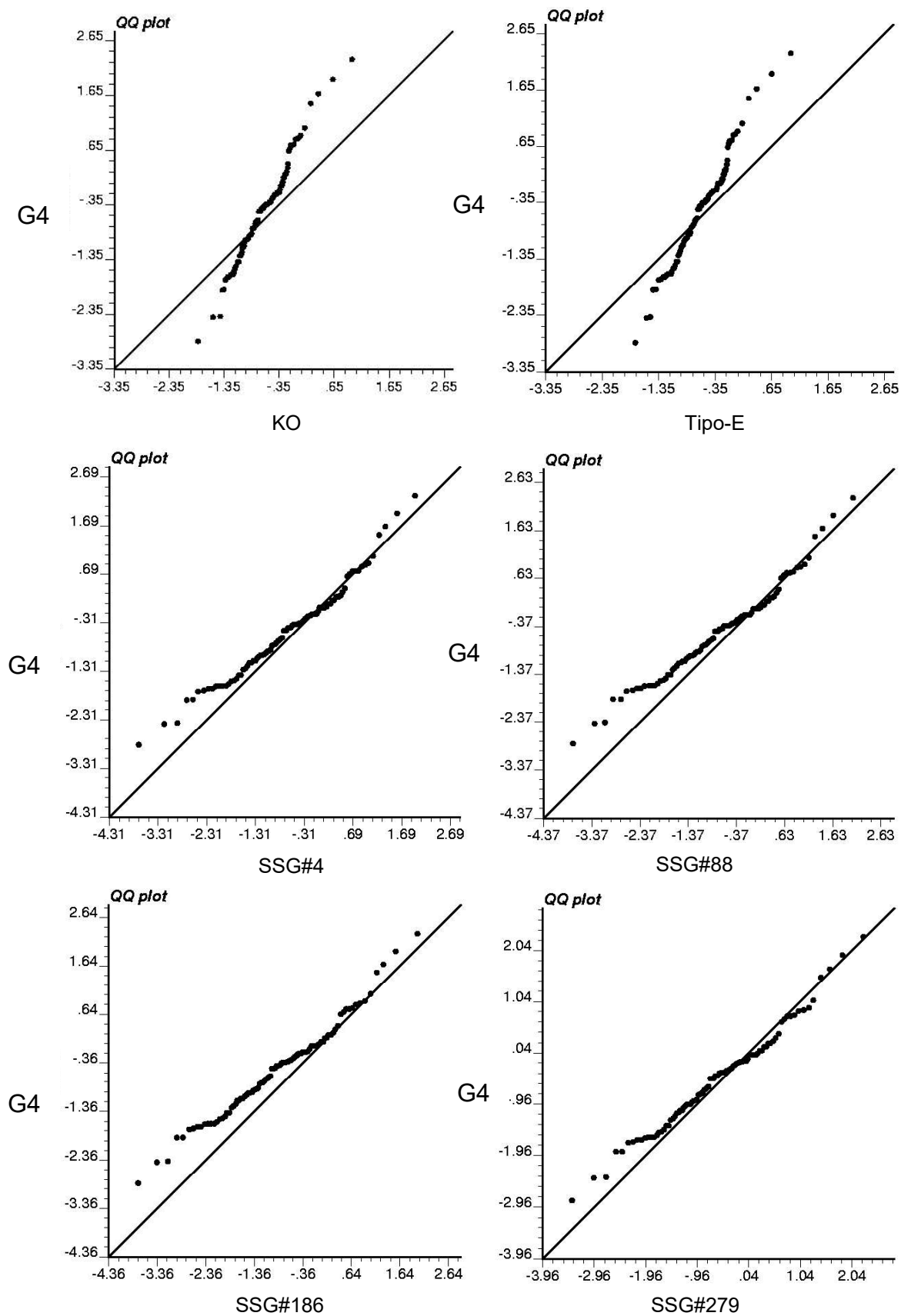


Tabela 5 - Estatística ϵ_Y para as transformações RLA

	G1	G2	G3	G4
KO	11,47	7,22	9,58	10,99
Simulação 4	0,21	0,04	0,05	0,13
Simulação 88	1,09	0,50	0,45	0,96
Simulação 186	0,61	1,08	0,21	0,57
Simulação 279	0,35	0,26	0,15	0,29
Tipo-E	10,31	7,50	9,54	10,76

De acordo com Deutsch e Journel (1998), uma reprodução exata das características de primeira e segunda ordem dificilmente são obtidas, tal fato está associado às flutuações ergódicas. Estas flutuações estão associadas, dentre outras, às características do método de simulação, do número e densidade dos pontos amostrais (condicionantes) e dos parâmetros do modelo variográfico utilizado (SILVA et al., 2015).

Figura 23 – Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G1

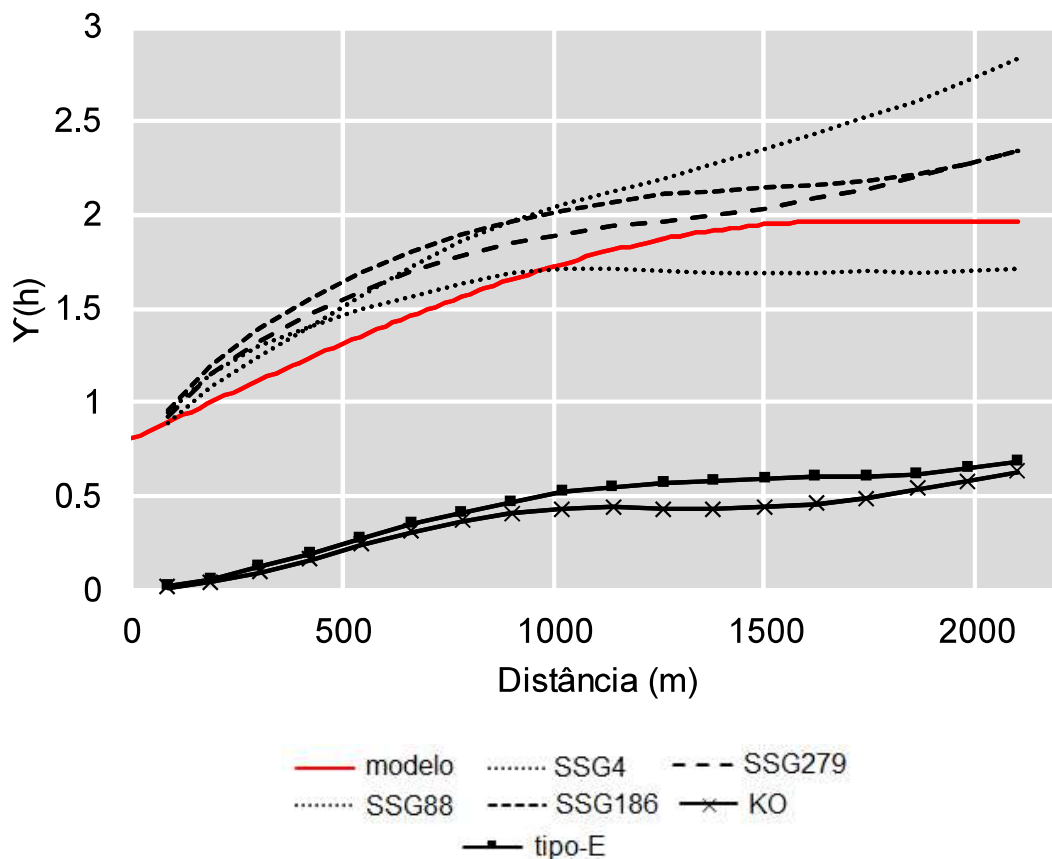


Figura 24 – Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G2

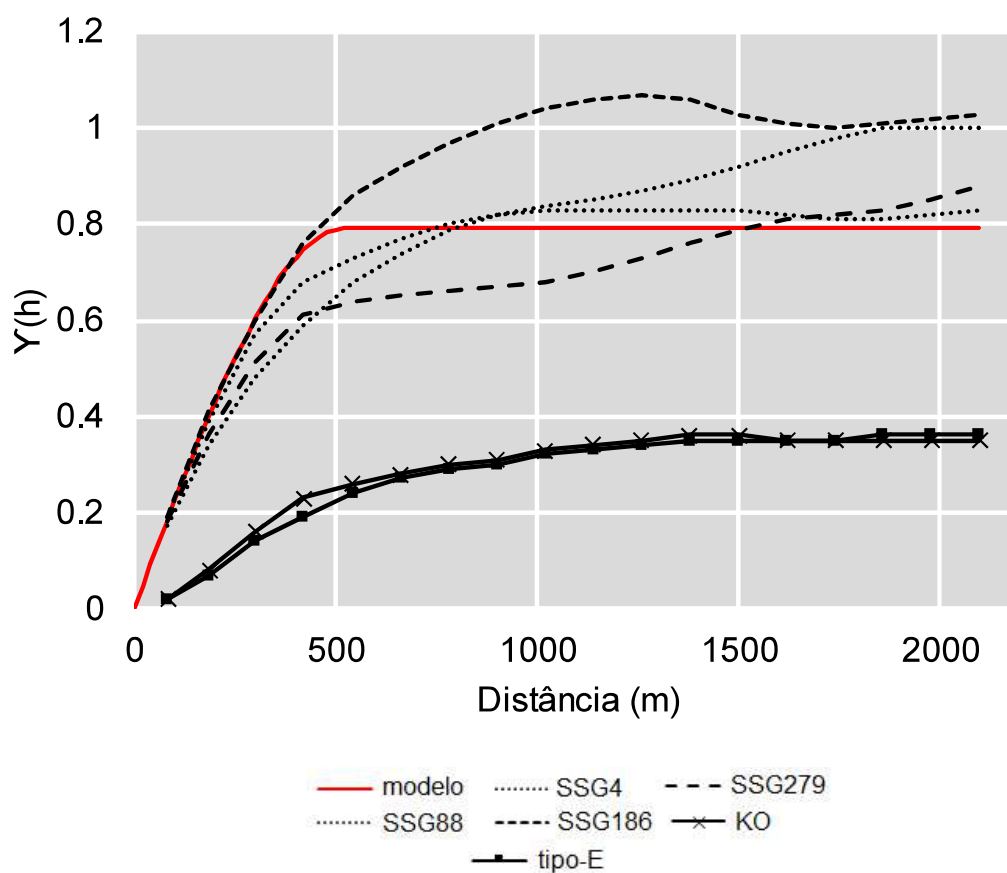


Figura 25 – Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G3

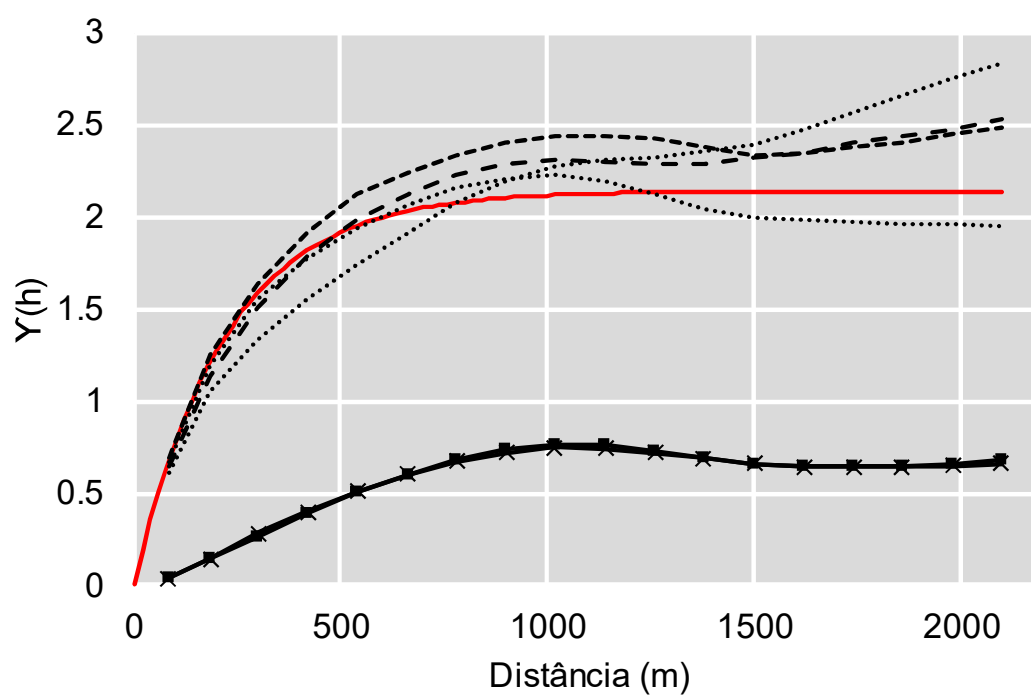
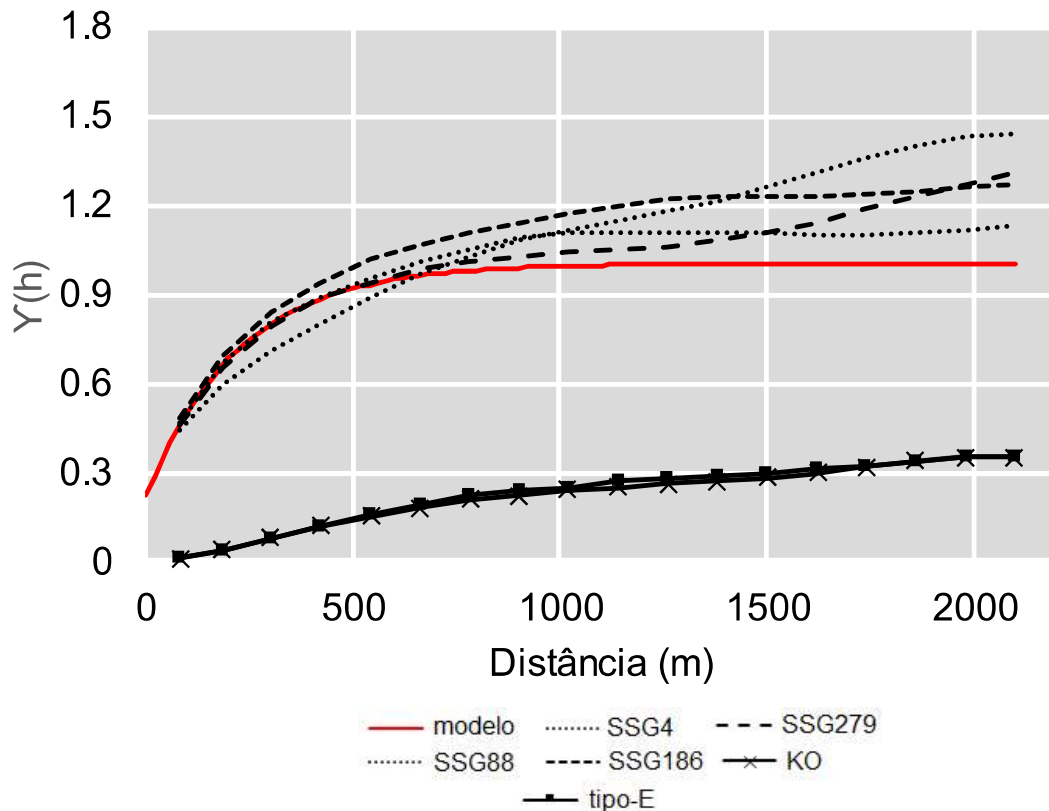


Figura 26 – Variogramas das interpolações por KO, tipo-E, realizações por SSG e modelo ajustado para a transformação RLA G4



4.5 Distribuição espacial das frações granulométricas

Os mapas representativos das realizações sorteadas, KO e tipo-E para as variáveis G1, G2, G3 e G4, estão apresentados nas Figuras 27, 28, 29 e 30 respectivamente. Nestas, observa-se uma distribuição espacial semelhante entre a KO e o mapa tipo-E, uma vez que, a média de muitas realizações tende a aproximar-se da krigagem (DEUTSCH; JOURNAL, 1998).

Observa-se também uma variação nos locais com maiores e menores valores, esse fato se deve ao caminho aleatório percorrido em cada simulação, com exceção dos pixels que possuem um ponto amostral, onde ambos são iguais, uma vez que o método de simulação está condicionado aos dados de entrada.

Os mapas de variância mostraram-se semelhantes para a KO e SSG, sendo os maiores valores ocorrendo em locais de menor densidade amostral. No caso dos desvios-padrão para a SSG os maiores valores indicam locais com maior flutuação nos valores obtidos para as diferentes realizações.

Figura 27 – Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G1

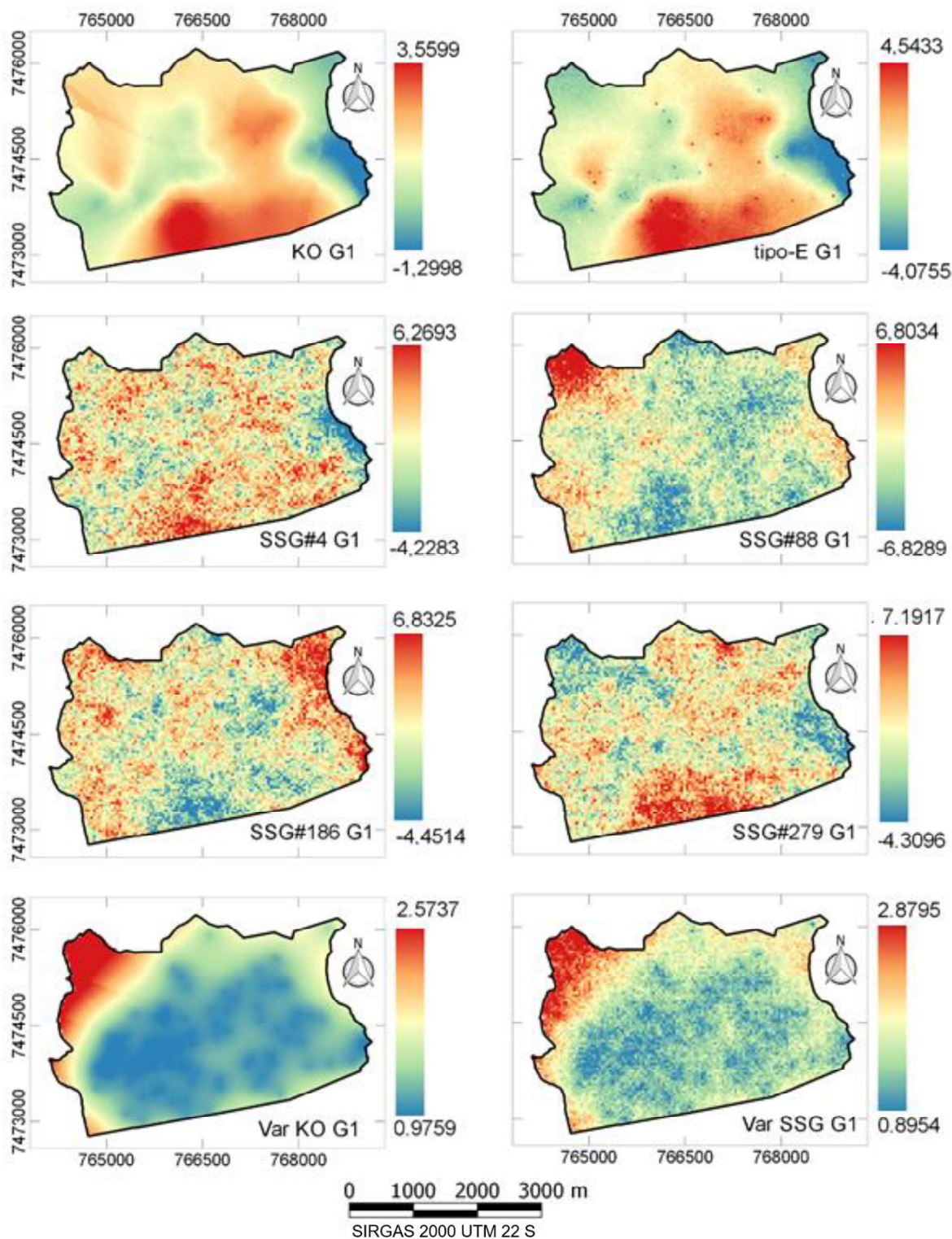


Figura 28 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G2

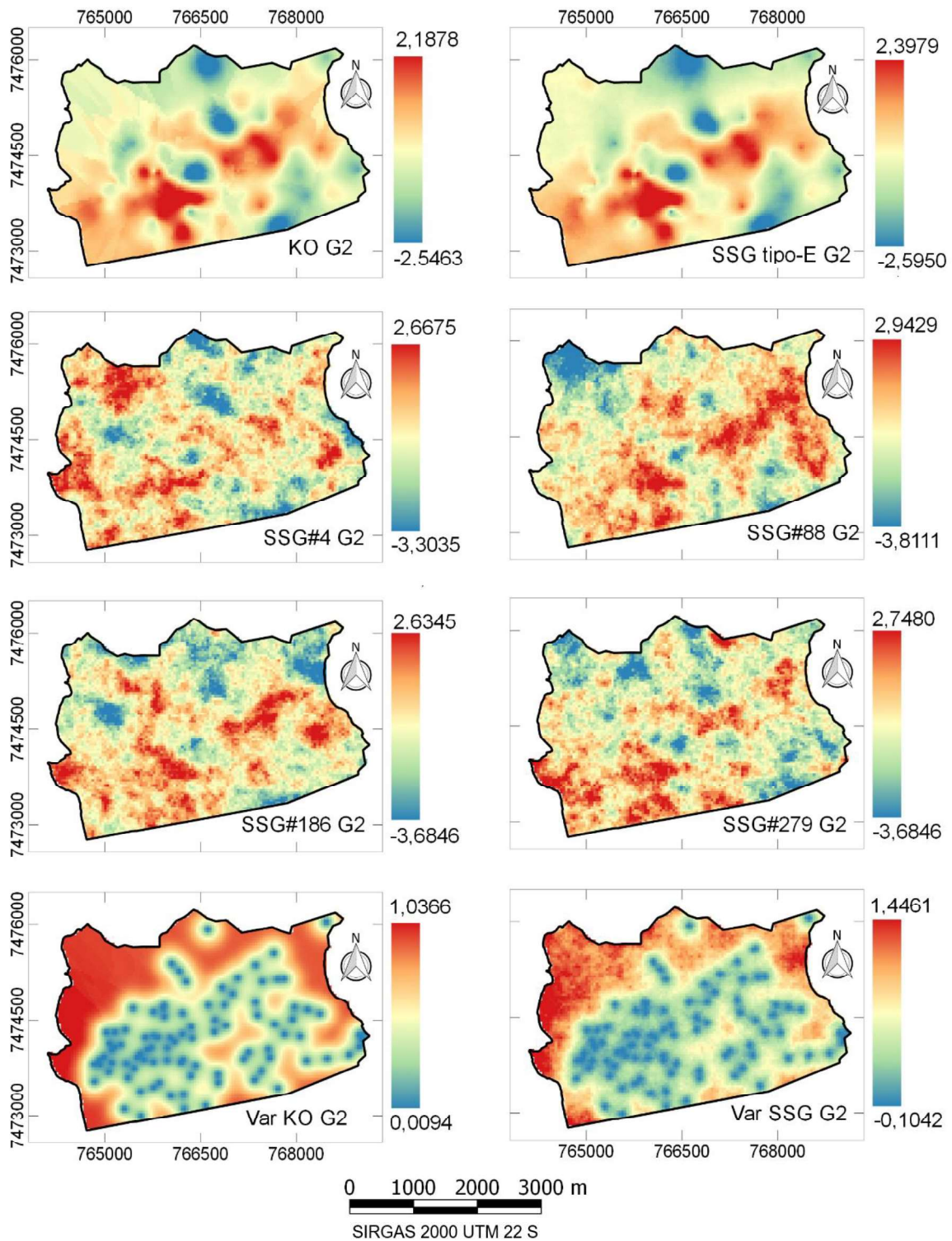


Figura 29 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G3

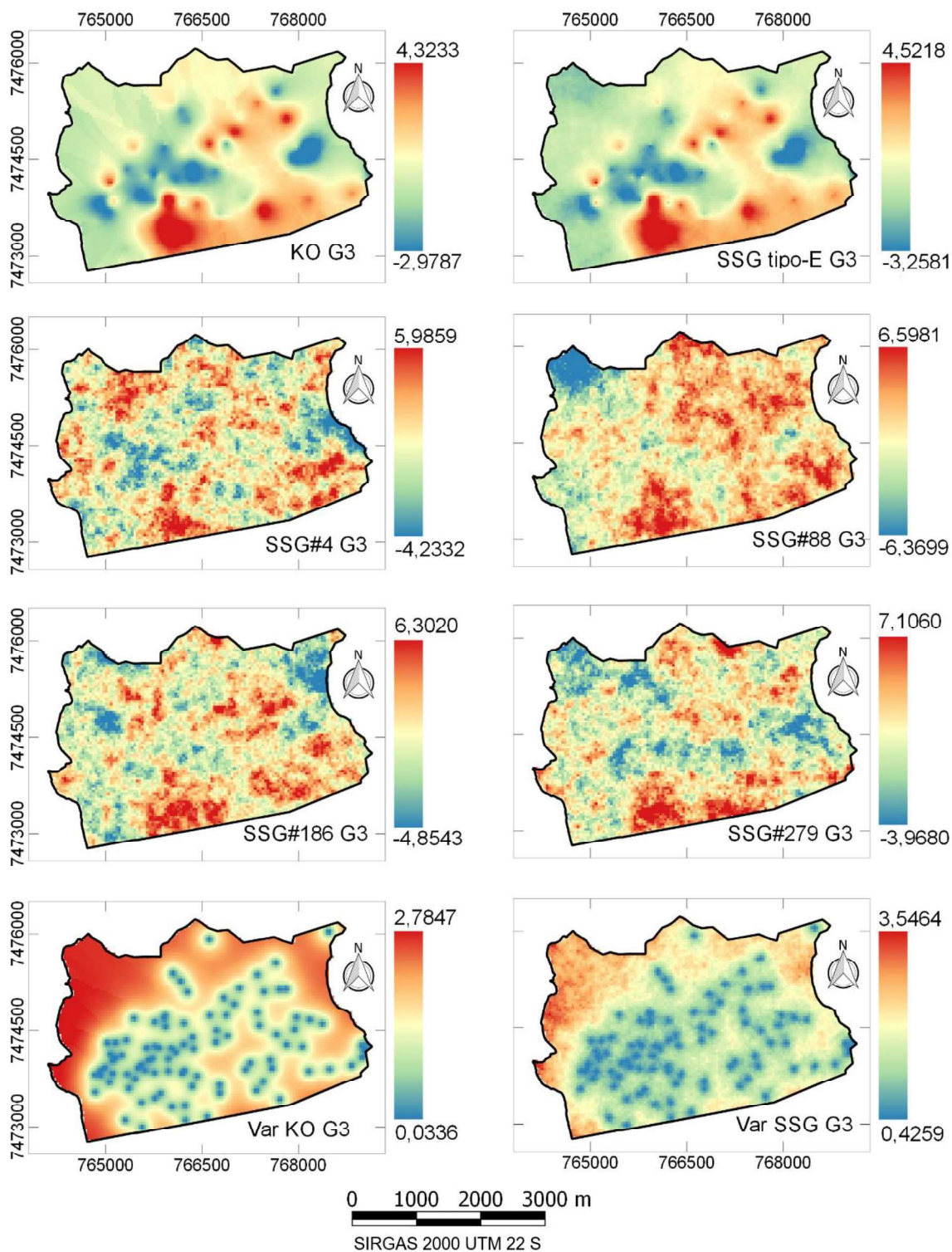
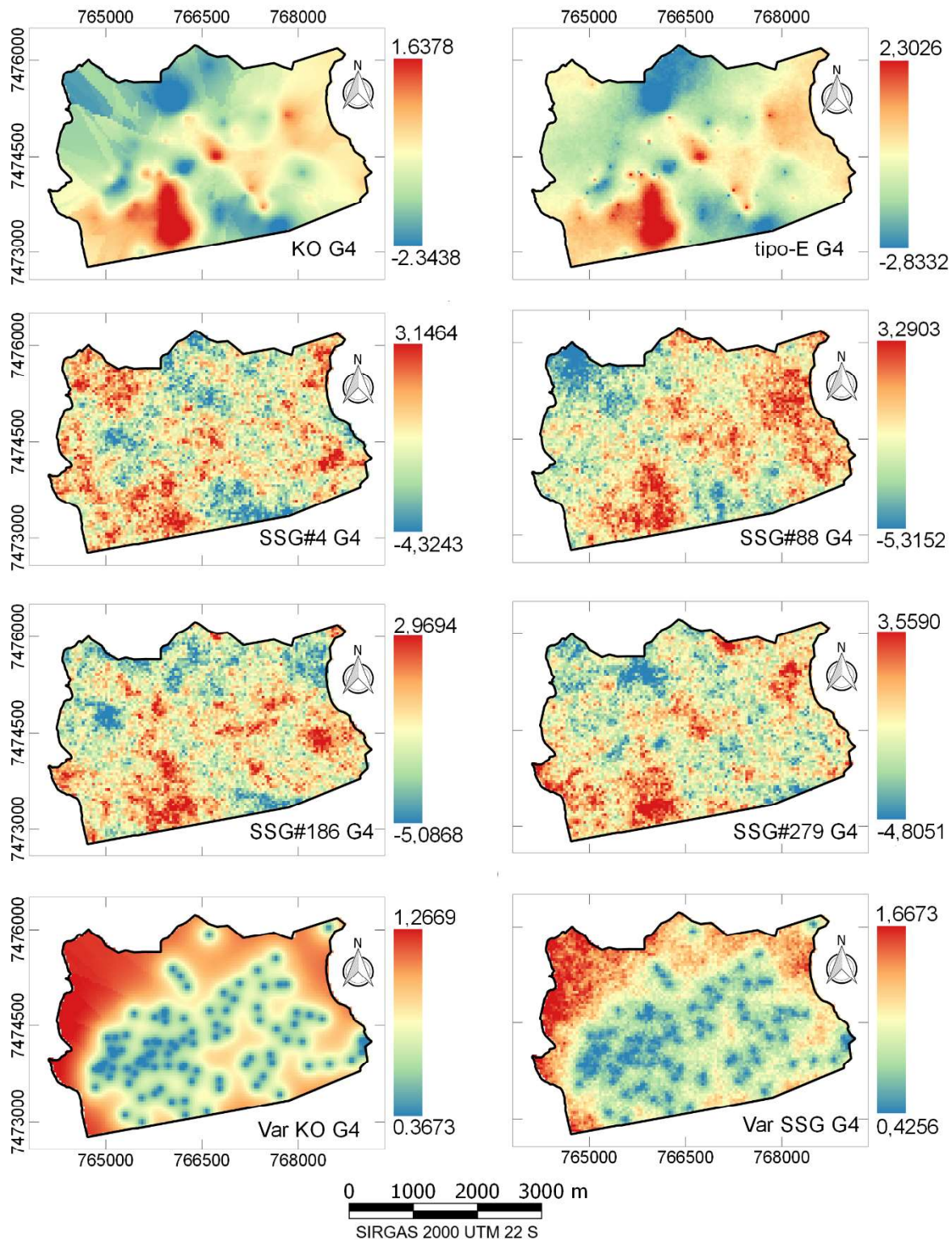


Figura 30 - Distribuição espacial por KO, tipo-E, realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG, variância da KO e variância da SSG para a transformação RLA G4



Após a transformação inversa das variáveis G1, G2, G3 e G4, obtiveram-se os mapas de areia, silte e argila para as duas profundidades analisadas. As Figuras 31,

32, 33, 34, 35 e 36 trazem as distribuições espaciais para as três variáveis, por KO, mapa tipo-E e as quatro realizações sorteadas.

Figura 31 - Distribuição espacial da areia, silte e argila em superfície por KO

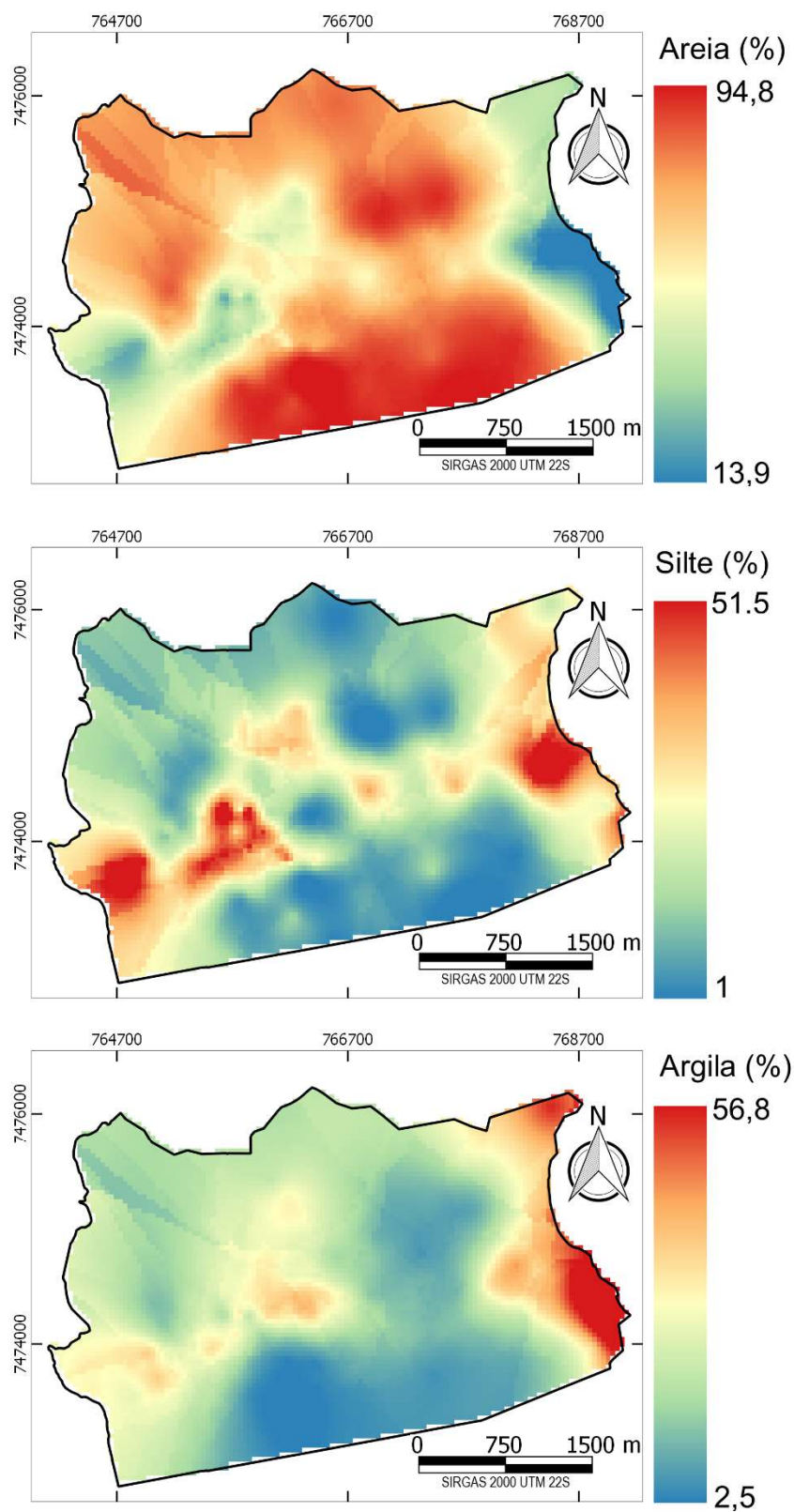


Figura 32 - Distribuição espacial tipo-E da areia, silte e argila em superfície, média das 300 realizações

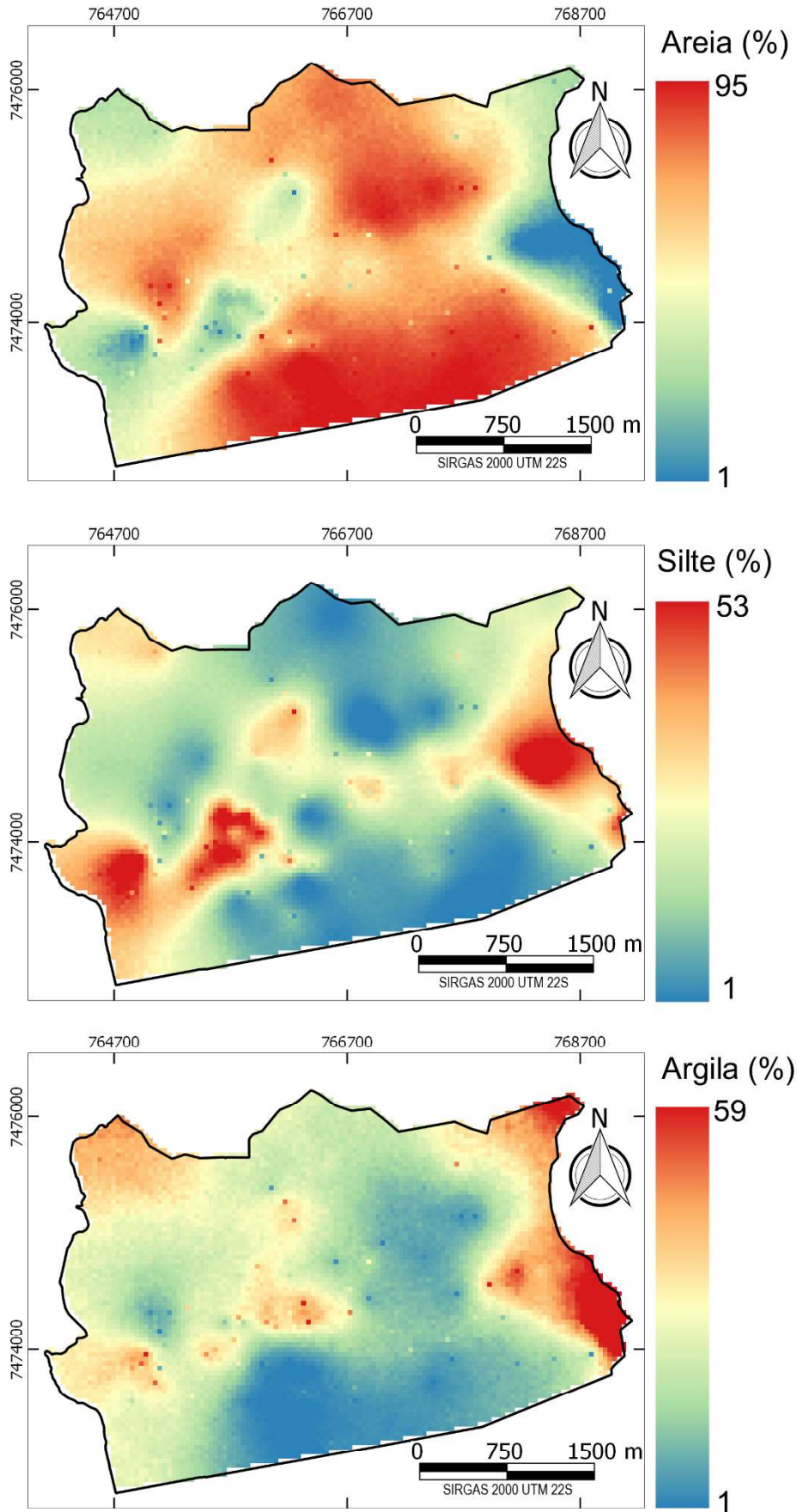


Figura 33 - Realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG para a areia, silte e argila em superfície

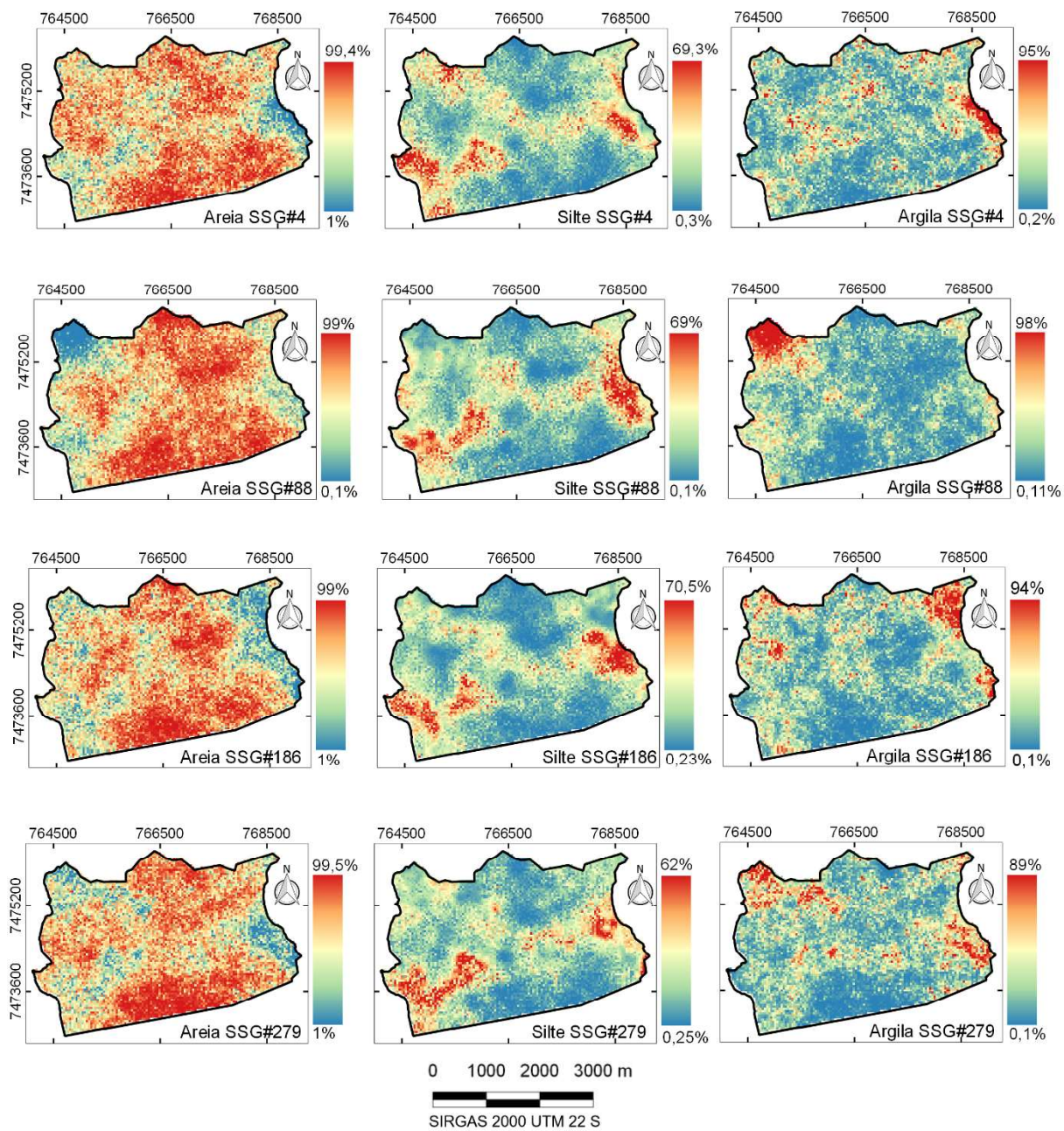


Figura 34 - Distribuição espacial da areia, silte e argila em subsuperfície por KO

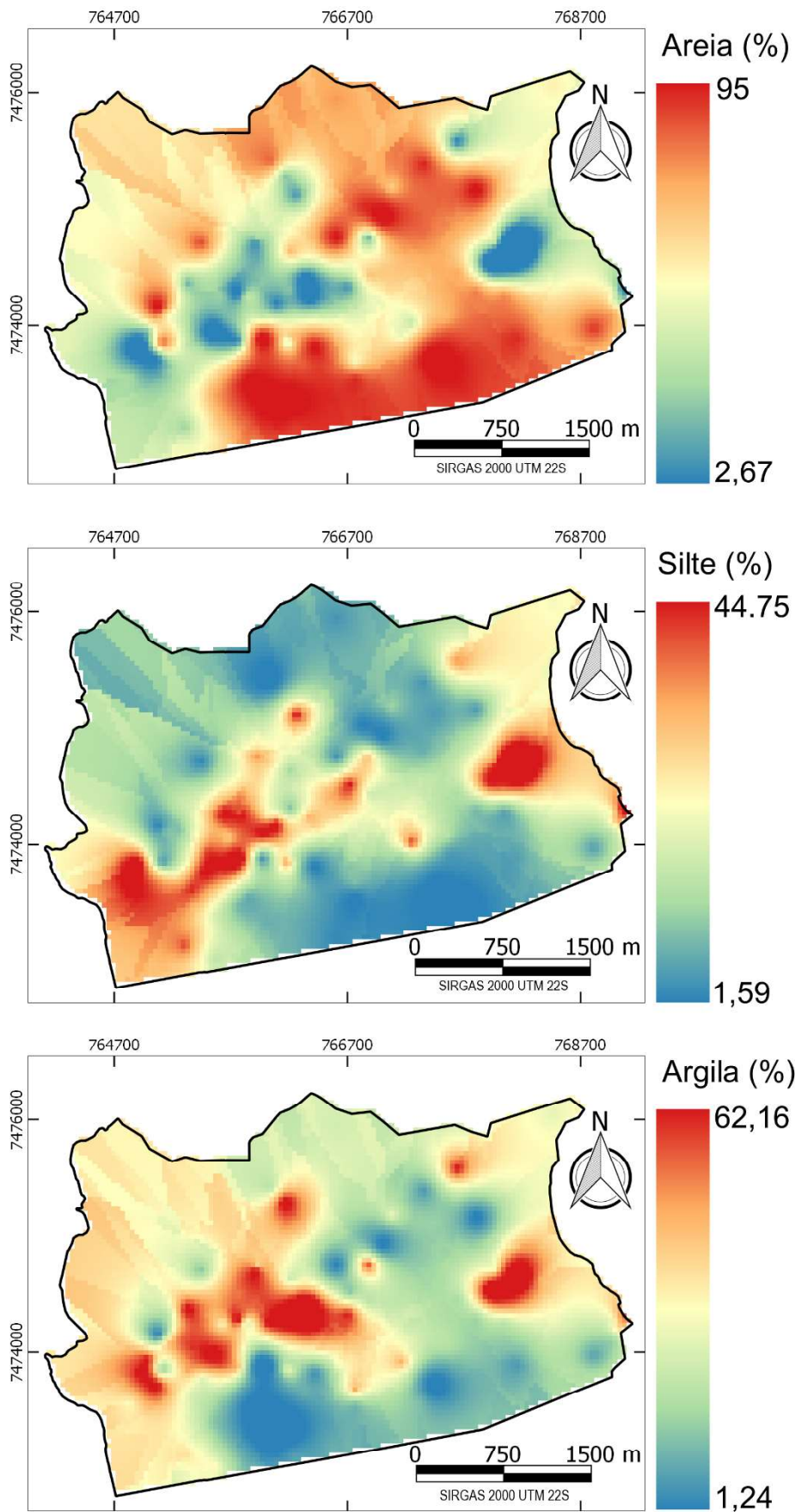


Figura 35 - Distribuição espacial tipo-E da areia, silte e argila em subsuperfície, média das 300 realizações

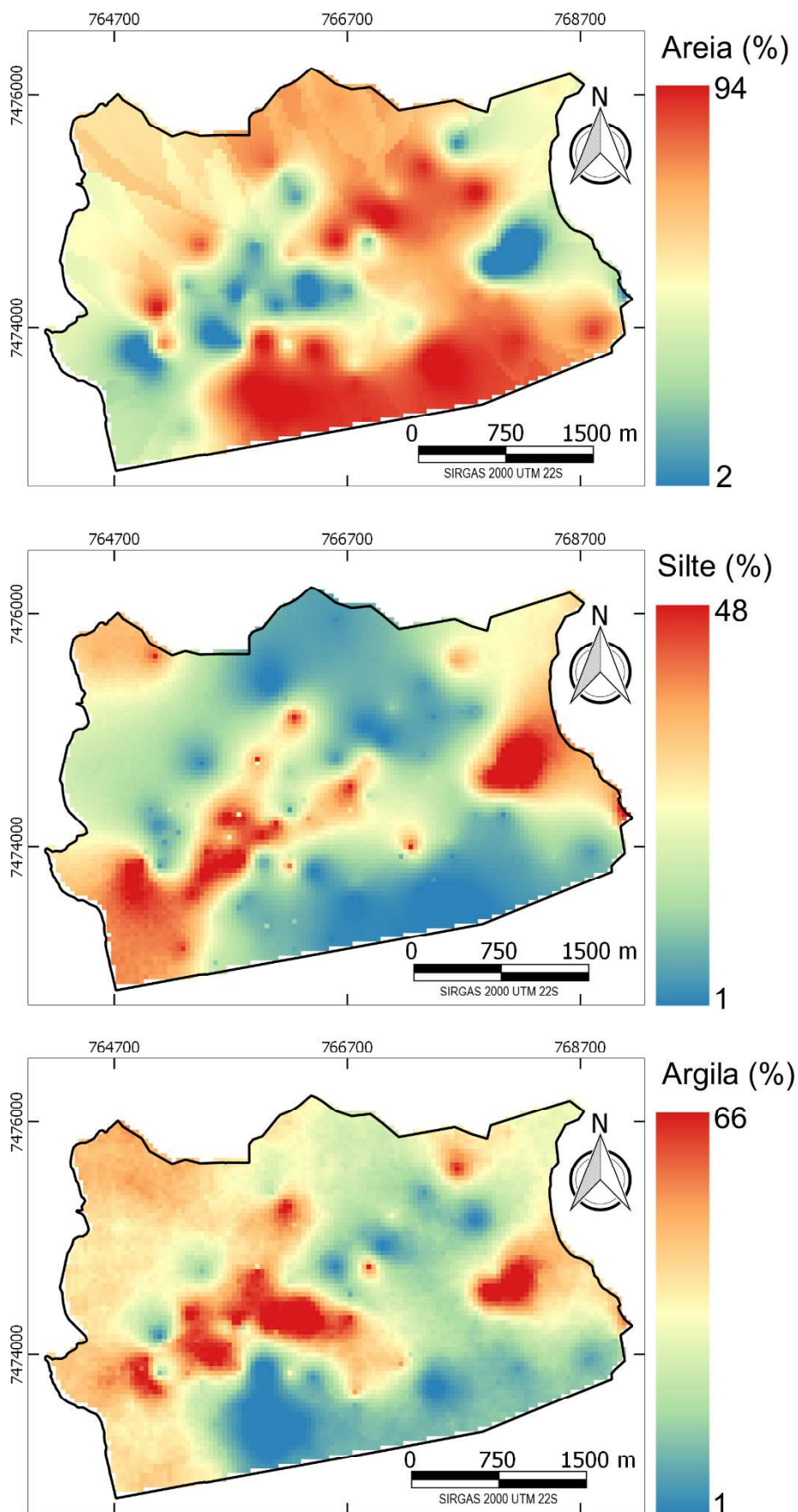
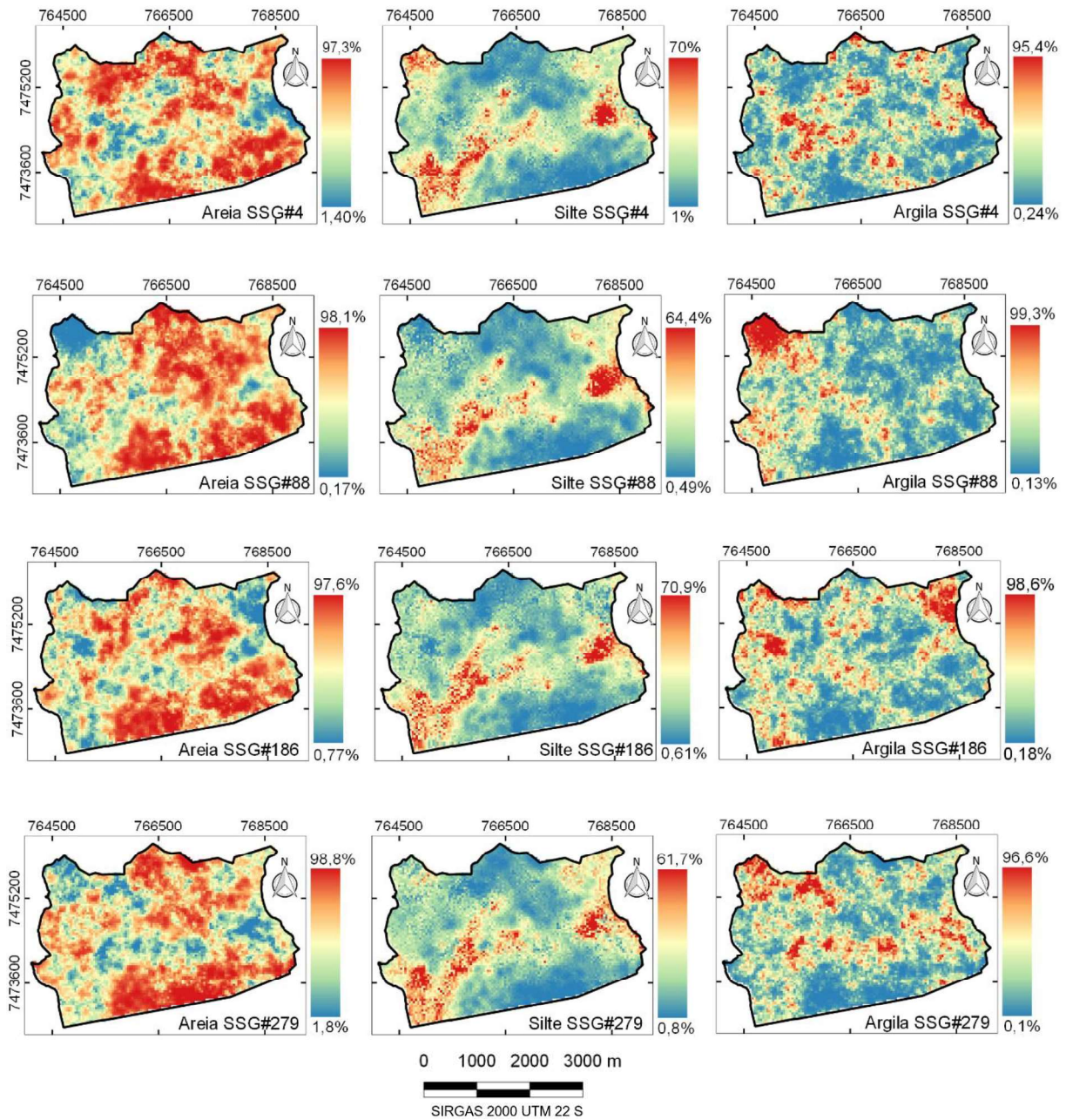


Figura 36 - Realizações 4, 88, 186 e 279 por SSG para a areia, silte e argila em subsuperfície



A partir dos mapas das frações granulométricas, observa-se que a areia apresenta um valor médio elevado tanto em superfície quanto em subsuperfície, com predomínio dos maiores teores na porção sul da área, onde ocorrem, segundo Carvalho et al. (1991) os Neossolos Quartzarênicos originados dos arenitos da Formação Piramboia, por deposição aluvial ou intemperização em situ. A fração areia mostra-se predominante, nas simulações sorteadas e no mapa tipo-E, também em uma faixa

que se estende de norte a sul, o acúmulo de areia nessas porções indicam a atuação dos fatores pedogenéticos, como material de origem e relevo, na distribuição textural, uma vez que, além da rocha matriz ser predominantemente constituída de sílica, a faixa norte-sul está associada a um relevo que favorece a concentração de fluxo de água.

O predomínio de uma textura arenosa nessas porções da fazenda, também são indicativos da fragilidade natural desses solos, mostrando-se altamente suscetíveis aos processos erosivos (JORGE, 2009), o que evidencia a necessidade de manutenção da cobertura florestal e a adoção de práticas de conservação de solo e água quando no uso agropecuário dessas terras.

Com relação à argila em superfície, observam-se maiores valores, tanto para estimativa por KO e para as médias das 300 realizações, na porção leste da fazenda porém, as realizações sorteadas indicam certas discrepâncias na atribuição dos valores para os pixels, o que resulta em uma maior variabilidade e incerteza na estimativa, pois hora são atribuídos altos valores e posteriormente valores baixos para um mesmo ponto. Nessa área, junto à várzea do Rio Capivara, ocorrem Gleissolos sujeitos a inundações, fator que aumenta o nível de complexidade do ambiente e exige uma amostragem mais detalhada para a uma descrição dessas terras com um menor nível de incerteza.

Na porção mais ao centro da fazenda, onde são encontradas manchas de Latossolos, Argissolos e Nitossolos, observaram-se também os maiores valores de argila para a camada subsuperficial. Esse padrão pode ser observado tanto para a KO, mapa médio das realizações e para as realizações individuais (Figuras 34, 35 e 36). Essa textura, com maior presença de argila é esperada para os horizontes Bt e B Niticos os quais ocorrem em meia encosta e relevos movimentados, sendo influenciada também pela litologia local, a qual é composta pelos basaltos da Formação Serra Geral.

A porção oeste da Fazenda Experimental Edgárdia é caracterizada pelo Front da Cuesta, região essa com elevada declividade, e com predomínio de solos classificados como Neossolos Litólicos, apresentou alta variabilidade nas realizações por SSG, o que é evidenciado pelos altos valores de variância das realizações, isso se deve à baixa densidade amostral nessa região, devido principalmente às dificuldades de acesso, portanto, os valores estimados para esses locais mostram-se pouco confiáveis.

Ressalta-se que cada uma das 300 realizações é uma reprodução equiprovável da realidade, onde os dados de entrada são honrados pela reprodução aproximada dos variogramas e dos histogramas. Assim locais com altos ou baixos teores para a maioria das realizações pode ser considerado exato, permitindo a determinação de cenários críticos, especialmente quando a textura é utilizada como variável na determinação de retenção de água no solo, retenção e lixiviação de nutrientes e agrotóxicos, suscetibilidade a erosão, entre outros. Os locais onde houve uma maior variabilidade, ou seja, valores distintos na maioria das realizações devem receber uma maior atenção, pois as incertezas associadas à predição daquele valor são altas.

Comparando os mapas obtidos por KO e SSG fica evidente o efeito de suavização dos detalhes locais da variabilidade espacial, característico da KO (PEREIRA, 2009). Utilizando cada uma das realizações é possível destacar possíveis variações em distâncias curtas, o que não é evidente para a área analisada. Observa-se áreas com alta continuidade espacial para altos valores de areia ou de forma inversa baixos valores de argila (porção sul, por exemplo). Assim, a SSG, com um número suficientemente grande de realizações, mostra-se como um método preferível, se comparado à KO, pois a variabilidade e os níveis de incerteza podem ser analisados e o mapa médio, ou tipo-E, utilizado como representativo da área.

Destaca-se ainda a necessidade de uma amostragem com maior nível de detalhamento para uma melhor caracterização dos solos, uma vez que a densidade amostral utilizada, em média uma amostra a cada 12,6 ha, pode não ser adequada dada a complexidade ambiental inerente à área da Fazenda Experimental Edgárdia. Os mapas de variância das realizações, cujos maiores valores indicam os maiores níveis de incertezas devem ser utilizados para o planejamento da malha amostral.

5 CONCLUSÕES

A simulação sequencial gaussiana, de forma geral, mostrou-se superior na reprodução das estatísticas dos dados amostrais (histograma e variograma) em comparação à krigagem ordinária, quando aplicadas nas transformações razão log-aditiva das frações granulométricas do solo, tanto em superfície, quanto em subsuperfície;

Cada realização individual reproduziu de forma satisfatória as estatísticas dos dados de entrada, sem o efeito de suavização típico da krigagem ordinária;

Os mapas médios (tipo-E) das frações granulométricas apresentaram comportamento espacial semelhante ao obtido por krigagem ordinária; com isso o mapa tipo-E pode ser utilizado na caracterização dessa variável de solo e quando associado às várias realizações permitem inferir sobre as incertezas nas predições.

REFERÊNCIAS

- ADHIKARI, K.; HARTEMINK, A. E. Linking soils to ecosystem services – A global review. **Geoderma**, Amsterdam, v. 262, p. 101-111, 2016.
- AITCHISON, J. The statistical analysis of compositional data. **Journal of the Royal Statistical Society**, Series B, v.44, n.2, p.139-177, 1982.
- AKPA, S. I. C. *et al.* Digital mapping of soil particle-size fractions for Nigeria. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 78, n. 6, p.1953-1967, 2014.
- ARMSTRONG, M. **Basic Linear Geostatistics**. Berlim: Springer, 1998. 153 p.
- BALLABIO, C.; PANAGOS, P.; MONATANARELLA, L. Mapping topsoil physical properties at European scale using the LUCAS database. **Geoderma**, Amsterdam, v. 261, p.110-123, 2016.
- BENAVIDES, R. *et al.* Geostatistical modelling of air temperature in a mountainous region of Northern Spain. **Agricultural and Forest Meteorology**, Amsterdam, v. 146, n. 3-4, p.173-188, out. 2007.
- BOCCHI, S. *et al.* Application of factorial kriging for mapping soil variation at field scale. **European Journal of Agronomy**, Amsterdam, v. 13, n. 4, p.295-308, 2000.
- BOLUWADE, A.; MADRAMOOTOO, C. Geostatistical independent simulation of spatially correlated soil variables. **Computers & Geosciences**, Amsterdam, v. 85, p.3-15, 2015.
- BOURENNANE, H. *et al.* Uncertainty assessment of soil water content spatial patterns using geostatistical simulations: An empirical comparison of a simulation accounting for secondary information. **Ecological Modelling**, Amsterdam, v.205, p.323-335, 2007.
- BREVIK, E. C. *et al.* Soil mapping, classification, and pedologic modeling: History and future directions. **Geoderma**, Amsterdam, v. 264, p.256-274, 2016.
- BUTTAFUOCO, G. *et al.* Studying the spatial structure evolution of soil water content using multivariate geostatistics. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 311, n. 1-4, p.202-218, 2005.
- BUTTAFUOCO, G. *et al.* Assessing spatial uncertainty in mapping soil erodibility factor using geostatistical stochastic simulation. **Environmental Earth Sciences**, Heidelberg, v. 66, n. 4, p.1111-1125, 2011.
- CAMPOS, M. C. C. *et al.* Variabilidade espacial da textura de solos de diferentes materiais de origem em Pereira Barreto, SP. **Revista Ciência Agrônômica**, Fortaleza, v. 38, n. 02, p. 149-157, 2007.

CARVALHO, T. M. **Modelagem digital de atributos de solo da Fazenda Edgárdia - Botucatu-SP**. 2016. 143 f. Tese (Doutorado em Agronomia – Energia na Agricultura) - Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2016.

CARVALHO, W. A.; PANOSO, L. A.; MORAES, M. H. **Levantamento semidetalhado dos solos da Fazenda Experimental Edgárdia – Município de Botucatu - SP**. Botucatu: Universidade Estadual Paulista, 1991. 2 v.

CASTRIGNANÒ, A.; BUTTAFUOCO, G. Geostatistical Stochastic Simulation of Soil Water Content in a Forested Area of South Italy. **Biosystems Engineering**, London, v. 87, n. 2, p.257-266, 2004.

CASTRIGNANÒ A. *et al.* Estimation or stochastic simulation in soil science? In: 7. International meeting on Soils with Mediterranean Type of Climate. Bari: CIHEAM, p. 167-182, 2002. (**Options Méditerranéennes: Série A**, n. 50).

CASTRIGNANÒ, A. *et al.* Modelling spatial uncertainty of soil erodibility factor using joint stochastic simulation. **Land Degradation & Development**, Oxford, v. 19, n. 2, p.198-213, 2008.

CONRAD, O. *et al.* System for automated geoscientific analyses – SAGA v. 2.1.4. **Geoscientific Model Development**, Goettingen, v. 8, p. 1991-2007, 2015.

CORÁ, J. E. *et al.* Adição de areia para dispersão de solos na análise granulométrica. **Revista Brasileira de Ciência Solo**, Viçosa, v.33, n.2, p. 255-262, 2009.

CUNHA, A. R.; MARTINS, D. Classificação Climática para os municípios de Botucatu e São Manuel – SP. **Revista Irriga**, Botucatu, v. 14, n. 1, p. 1-11. 2009.

DELBARI, M.; AFRASIAB, P.; LOISKANDL, W. Geostatistical analysis of soil texture fractions on the field scale. **Soil Water Res.**, Prague, v. 6 p. 173-189, 2011.

DELBARI, M.; AFRASIAB, P.; LOISKANDL, W. Using sequential Gaussian simulation to assess the field-scale spatial uncertainty of soil water content. **Catena**, Amsterdam, v. 79, n. 2, p.163-169, 2009.

DEUTSCH, C. V.; JOURNEL, A. G. **GSLIB: Geostatistical software Library and User's Guide**. New York, Oxford University Press, 1998. 369 p.

EMBRAPA. Serviço Nacional de Levantamento e Conservação do Solo. **Manual de métodos de análise de solo**. Rio de Janeiro: Embrapa Solos, 1979

ERSOY, A.; YÜNSEL, T. Y. The assessment of soil contamination by heavy metals using geostatistical sequential Gaussian simulation method. **Human and Ecological Risk Assessment: An International Journal**, Amherst, v. 24, n. 8, p.2142-2161, 2018.

FUKS, S. D.; VOLTZ, M. Comparison of geostatistical simulation approaches for estimating the spatial uncertainty of soil texture. In **geoENV III: Geostatistics for Environmental Applications**, v. 1, p. 463 – 474, 2001.

GRASS DEVELOPMENT TEAM. **Geographic Resources Analysis Support System (GRASS) Software**, Version 7.0. Open Source Geospatial Foundation. 2015 <http://grass.osgeo.org>

GOOVAERTS, P. Geostatistics in soil science: state-of-the-art and perspectives. **Geoderma**, Amsterdam, v. 89, p. 1-45, 1999.

GOOVAERTS, P. Estimation or simulation of soil properties? An optimization problem with conflicting criteria. **Geoderma**, Amsterdam, 97:165-186, 2000.

GUAN, F. *et al.* Spatial variability of soil nitrogen, phosphorus and potassium contents in Moso bamboo forests in Yong'an City, China. **Catena**, Amsterdam, v. 150, p.161-172, 2017.

HE, Y. *et al.* Three dimensional spatial distribution modeling of soil texture under agricultural systems using a sequence indicator simulation algorithm. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 71, p. S24-S31, 2010.

ISAAKS, H. E.; SRIVASTAVA, R. M. **An introduction to applied geostatistics**. New York: Oxford University Press, 1989. 561 p.

JORGE, L. A. B. Soil erosion fragility assessment using an impact model and geographic information system. **Scientia Agrícola**, Piracicaba, v. 66, n. 5, p.658-666, 2009.

JORGE, L. A. B.; SARTORI, M. S. Uso do solo e análise temporal da ocorrência de vegetação natural na Fazenda Experimental Edgárdia, em Botucatu-SP. **Revista Árvore**, Viçosa, v. 26, n. 5, p. 585-592, 2002.

JUANG, K.; CHEN, Y.; LEE, D. Using sequential indicator simulation to assess the uncertainty of delineating heavy-metal contaminated soils. **Environmental Pollution**, Amsterdam, v. 127, n. 2, p.229-238, 2004.

LAL, R. Soil carbon sequestration impacts on global climate change and food security. **Science**, Washington, v. 304, n. 5677, p.1623-1627, 2004.

LAMSAL, S.; MISHRA, U. Mapping soil textural fractions across a large watershed in north-east Florida. **Journal of Environmental Management**, Amsterdam, v. 91, n. 8, p.1686-1694, 2010.

LANDIM, P. M. B. **Análise estatística de dados geológicos**. 2. ed. rev. ampl. São Paulo: Editora Unesp, 2003. 253 p.

LANDIM, P. M. B. Sobre Geoestatística e mapas. **Terrae Didatica**, Campinas, v. 2, n. 1, p. 19-33. 2006.

LARK, R. M.; BISHOP, T. F. A. Cokriging particle size fractions of the soil. **European Journal of Soil Science**, [s.l.], v. 58, n. 3, p.763-774, 2007.

LARK, R. M. et al. Spatial prediction of seabed sediment texture classes by cokriging from a legacy database of point observations. **Sedimentary Geology**, Amsterdam, v. 281, p.35-49, 2012.

LEÃO, T. P. Particle size distribution of Oxisols in Brazil. **Geoderma Regional**, Amsterdam, v. 7, n. 2, p.216-222, 2016.

LEPSCH, I. F.; SILVA, N. M.; ESPIRONELO, A. Relação entre matéria orgânica e textura de solos sob cultivo de algodão e cana-de-açúcar, no estado de São Paulo. **Bragantia**, Campinas, v. 41, n. 1, p.231-236, 1982.

LILLIEFORS, H. W. On the Kolmogorov-Smirnov test for normality with mean and variance unknown. **Journal of the American Statistical Association**, Washington, vol. 62, p. 399-402, 1967.

LIN, Y. P.; CHANG, T. K.; TENG, T. P. Characterization of soil lead by comparing sequential Gaussian simulation, simulated annealing simulation and kriging methods. **Environmental Geology**, Heidelberg, v.41, p.189-199, 2001.

LÓPEZ-GRANADOS, F. *et al.* Using geostatistical and remote sensing approaches for mapping soil properties. **European Journal of Agronomy**, Amsterdam, v. 23, n. 3, p.279-289, 2005.

LUNDGREN, W. J. C.; SILVA, J. A. A.; FERREIRA, R. L. C. A Precisão da Estimativa do Erro da Krigagem pela Validação Cruzada. **Floresta e Ambiente**, Soropédica, v. 24, p.1-12, 2017.

MATHERON, G. Principles of geostatistics. **Economic Geology**, Littleton, v.58, p.1246-1266, 1963.

MCBRATNEY, A. B; SANTOS, M. I. M.; MINASNY, B. On digital soil mapping. **Geoderma**, Amsterdam, v. 117, n. 1-2, p.3-52, 2003.

MINASNY, B.; MCBRATNEY, A. B. Digital soil mapping: A brief history and some lessons. **Geoderma**, Amsterdam, v. 264, p.301-311, 2016.

MORAES, D. A. C. **Simulação sequencial na interpolação dos dados de entrada ou saída do modelo de lixiviação do Software ARAquá**. 2015. 88 f. Tese (Doutorado em Agronomia – Irrigação e Drenagem) - Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2015.

MULDER, V.I. *et al.* The use of remote sensing in soil and terrain mapping — A review. **Geoderma**, Amsterdam, v. 162, n. 1-2, p.1-19, 2011.

ODEH, I. O. A.; TODD, A. J.; TRIANTAFILIS, J. Spatial prediction of soil particle-size fractions as compositional data. **Soil Science**, Philadelphia, v. 168, n. 7, p.501-515, 2003.

OLEA, R. A.; LUPPENS, J. A. Mapping of coal quality using stochastic simulation and isometric logratio transformation with an application to a Texas lignite. **International Journal of Coal Geology**, Amsterdam, v. 152, p.80-93, 2015.

OLIVEIRA, I. R. et al. Modelagem geoestatística das incertezas da distribuição espacial do fósforo disponível no solo, em área de cana-de-açúcar. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v.37, p.1481- 1491, 2013.

OLIVEIRA, I. R. et al. Modelagem e quantificação da incerteza espacial do potássio disponível no solo por simulações estocásticas. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, DF, v. 49, n. 9, p.708-718, 2014.

OLIVER, M. A.; WEBSTER, R. A tutorial guide to geostatistics: computing and modelling variograms and kriging. **Catena**, Amsterdam, v. 113, p. 56-69, 2014.

PAWLOWSKY-GLAHN, V.; EGOZCUE, J. J. Compositional data and their analysis: an introduction. In: BUCCIANTI, A.; MATEU-FIGUERAS, G.; PAWLOWSKY-GLAHN, V. (Eds.). **Compositional data analysis in the geosciences: from theory to practice**. London: Geological Society, 2006. p.1-10.

PAN, R. et al. Processes of soil infiltration and water retention and strategies to increase their capacity. **Journal of Experimental Agriculture International**, [s.l.] v. 20, n. 2, p.1-14, 2018.

PASTORE, E. L. FORTES, R. M. Caracterização e classificação dos solos. In: OLIVEIRA, A. M. S.; BRITO, S. N. A. (editores). **Geologia de engenharia**. São Paulo: ABGE, 1998. 576p.

PATIL, N. G.; SINGH, S. K. Pedotransfer functions for estimating soil hydraulic properties: a review. **Pedosphere**, Amsterdam, v. 26, n. 4, p.417-430, 2016.

PEREIRA, G. T. **Avaliação da variabilidade espacial por técnicas de simulação**. 2009. 107 f. Tese (Livre Docência) - Faculdade de Ciências Agrárias, Universidade Estadual Paulista, Jaboticabal, 2009.

PEREIRA, G. T. et al. Stochastic simulations of calcium contents in sugarcane area. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 19, n. 8, p.767-772, ago. 2015.

PHACHOMPON, K.; DLAMINI, P.; CHAPLOT, V. Estimating carbon stocks at a regional level using soil information and easily accessible auxiliary variables. **Geoderma**, Amsterdam, v. 155, n. 3-4, p.372-380, mar. 2010.

POGGIO, L. et al. Soil available water capacity interpolation and spatial uncertainty modelling at multiple geographical extents. **Geoderma**, Amsterdam, v. 160, n. 2, p.175-188, 2010.

POGGIO, L.; GIMONA, A. 3D mapping of soil texture in Scotland. **Geoderma Regional**, Amsterdam, v. 9, p.5-16, 2017.

PRADO, H. **Pedologia fácil: aplicações em solos tropicais**. 5ª ed. Piracicaba: SP. 2016. 271p.

PREVEDELLO, C. L. **Física do solo com problemas resolvidos**. Curitiba: SAEAFS, 1996. 446 p.

QGIS DEVELOPMENT TEAM. **QGIS**. Versão 3.4. 2018. <http://qgis.org/>.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. **R: A language and environment for statistical computing**. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. 2018. <http://www.R-project.org>.

REZA, S. K. *et al.* Characterizing spatial variability of soil properties in alluvial soils of India using geostatistics and geographical information system. **Archives of Agronomy and Soil Science**, Abingdon, v. 63, n. 11, p.1489-1498, 2017.

ROBERTSON, G.P. **GS+: Geostatistics for the environmental sciences – GS+ user's guide**. Plainwell, Gamma Design Software, 2008. 152p.

ROBINSON, T. P.; METTERNICHT, G. Testing the performance of spatial interpolation techniques for mapping soil properties. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 50, n. 2, p.97-108, 2006.

SANTOS, H. G. *et al.* **Sistema brasileiro de classificação de solos**. 4. ed. rev. ampl. Brasília, DF: Embrapa, 2018. 353 p.

SHI, Z. H. *et al.* Soil erosion processes and sediment sorting associated with transport mechanisms on steep slopes. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 454-455, p.123-130, 2012.

SCHLOEDER, C.A.; ZIMMERMAN, N.E.; JACOBS, M.J. Comparison of Methods for Interpolating Soil Properties Using Limited Data. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 65, n. 2, p.470-479, 2001.

SILVA, A. F. **análise multivariada de dados espaciais na classificação interpretativa de solos**. 2014. 111 f. Tese (Doutorado em Agronomia – Energia na Agricultura) - Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2014.

SILVA, A. F. *et al.* A new approach to soil classification mapping based on the spatial distribution of soil properties. **Geoderma**, Amsterdam, v. 219-220, p. 106-116, 2014.

SILVA, A. F. *et al.* Simulação sequencial de atributos diagnósticos do solo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 19, n. 5, p.418-425, 2015.

SILVA JÚNIOR, J.F. *et al.* Simulação geoestatística na caracterização espacial de óxidos de ferro em diferentes pedoformas. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v.36, p.1690 - 1703, 2012.

SILVA JÚNIOR, J. F. et al. Métodos geoestatísticos na modelagem espacial do diâmetro médio do cristal da goethita. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 17, p. 1127-1134, 2013.

SILVER, W. L. *et al.* Effects of soil texture on belowground carbon and nutrient storage in a lowland Amazonian forest ecosystem. **Ecosystems**, New York, v. 3, n. 2, p.193-209, 2000.

SOARES, A. **Geoestatística para as ciências da terra e do ambiente**. Coleção Ensino da Ciência e da Tecnologia: ed.2, IST Press, Lisboa: 2006. 206 p.

SRIVASTAVA, R. M. Geostatistics: a toolkit for data analysis, spatial prediction and risk management in the coal industry. **International Journal Coal Geology**, Amsterdam, v. 112, p. 2-13. 2013.

TEIXEIRA, D. B. **Suscetibilidade magnética e análise de incertezas em mapeamento de solos**. 2015. 105 f. Tese (Doutorado em Agronomia -Produção Vegetal. Universidade Estadual Paulista, Jaboticabal, 2015.

TEIXEIRA, D. B. *et al.* Soil CO₂ emission estimated by different interpolation techniques. **Plant and Soil**, Dordrecht, v. 345, n. 1-2, p.187-194, 2011.

TEIXEIRA, D. B. *et al.* Uncertainties in the prediction of spatial variability of soil CO₂ emissions and related properties. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 36, n. 5, p.1466-1475, 2012.

TEIXEIRA, D. B. *et al.* Mapping units based on spatial uncertainty of magnetic susceptibility and clay content. **Catena**, Amsterdam, v. 164, p.79-87, 2018.

TRANGMAR, B.B.; YOST, R.S.; UEHARA, G. Applications of geoestatistics to spatial studies of soil properties. **Advances in Agronomy**, Kent, v. 38, p.45-94, 1985.

TWARAKAVI, N. K. C.; SIMÖNEK, J.; SCHAAP, M. G. Can texture-based classification optimally classify soils with respect to soil hydraulics? **Water Resources Research**, Hoboken, v. 46, n. 1, p.1-2, 2010.

VAN MEIRVENNE, M.; VAN CLEEMPUT, I. Pedometrical techniques for soil texture mapping at different scales. In: GRUNWALD, S. (Ed.). **Environmental Soil-landscape Modeling e Geographic Information Technologies and Pedometrics**. CRC Press, Boca Raton, FL, 2005. 323 a 341 p.

WANG, Z.; SHI, W. Mapping soil particle-size fractions: A comparison of compositional kriging and log-ratio kriging. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 46, p.526-541, 2017.

WANG, Z.; SHI, W. Robust variogram estimation combined with isometric log-ratio transformation for improved accuracy of soil particle-size fraction mapping. **Geoderma**, Amsterdam, v. 324, p.56-66, 2018.

WARRICK, A. W. Spatial variability. In HILLEL D. (Ed.), **Environmental soil physics**. Cambridge, MA: Academic Press, 1998. p. 655-675.

WEBSTER, R. The development of pedometrics. **Geoderma**, Amsterdam, v. 62, n. 1-3, p.1-15, 1994.

WISCHMEIER, W. H.; SMITH, D. D. **Predicting rainfall erosion losses: a guide to conservation planning**. Washington, DC: USDA, 1978. 537p.

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

YAO, X. *et al.* Spatial distribution of soil organic carbon stocks in Masson pine (*Pinus massoniana*) forests in subtropical China. **Catena**, Amsterdam, v. 178, p.189-198, 2019

ZIMBACK, C. R. L. **Análise espacial de atributos químicos de solos para fins de mapeamento da fertilidade do solo**. 2001. 114 f. Tese (Livre Docência) - Faculdade de Ciências Agronômicas, Universidade Estadual Paulista, Botucatu, 2001.