

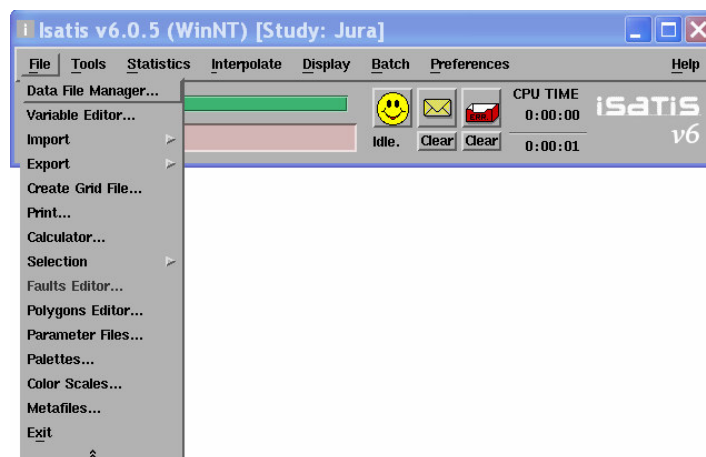
Manual de uso del software Isatis

El software *Isatis* funciona bajo el sistema operativo UNIX o LINUX y también (con ayuda del emulador *Exceed*) bajo Windows. Para tener información adicional sobre el uso de este software, se puede recurrir a la ayuda on-line que aparece al presionar la tecla *F1* o *Help*.

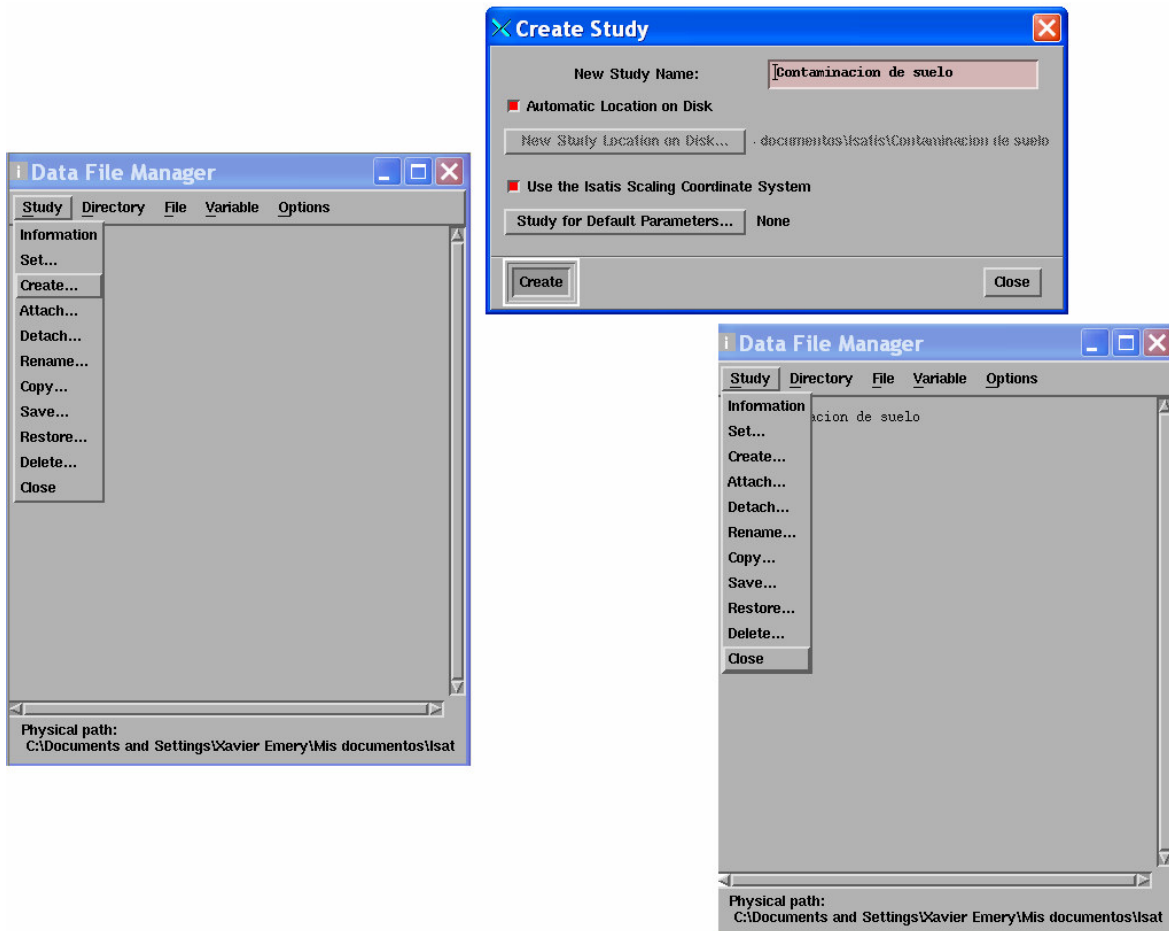


Creación de un proyecto nuevo

El punto de partida consiste en crear un estudio: **File > Data File Manager**



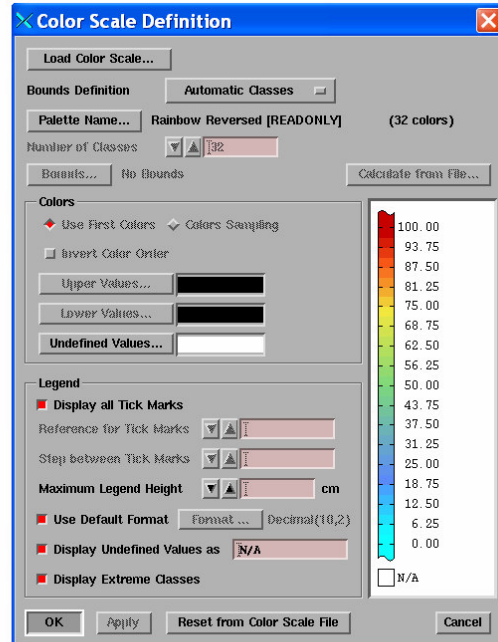
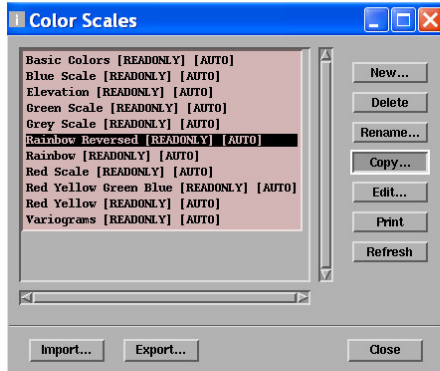
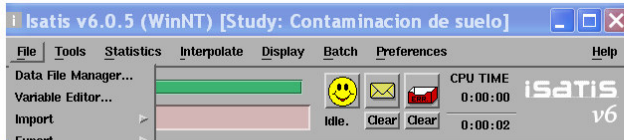
La creación de un proyecto se realiza gracias al sub-menú *Study > Create*. Se especifica el nombre del nuevo proyecto en la zona de texto, luego se puede cerrar el *Data File Manager* (*Study > Close*).



Es conveniente fijar ahora los parámetros del nuevo estudio (en especial, la escala de color utilizada por defecto y las unidades para medir las distancias).

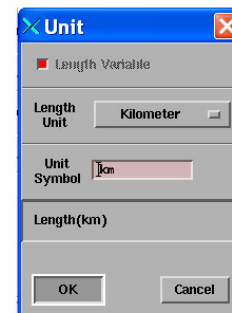
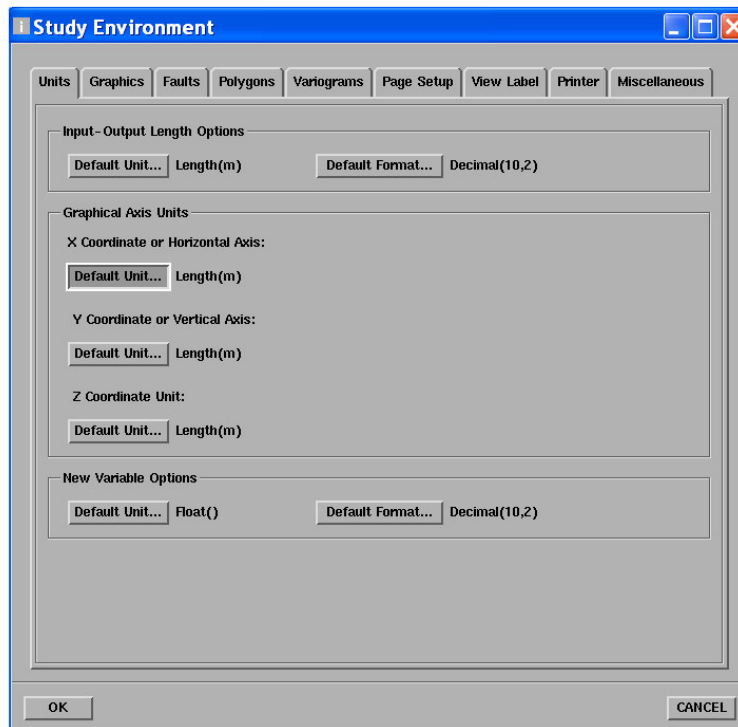
File > Color Scales

Se copia la escala de color “Rainbow Reverse” (en lectura sola) a una escala nueva llamada “arcoiris”.

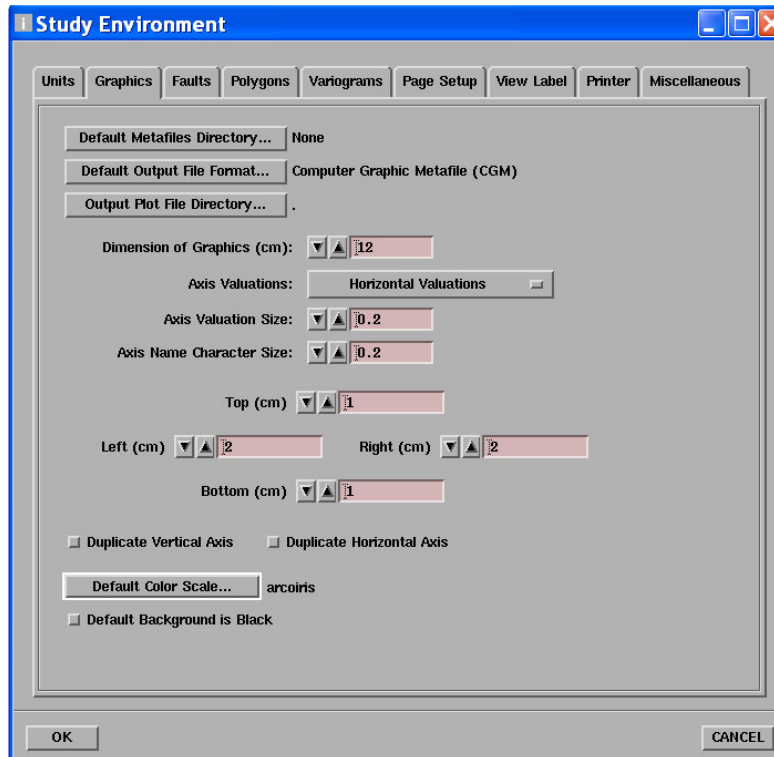


Preferences > Study Environment.

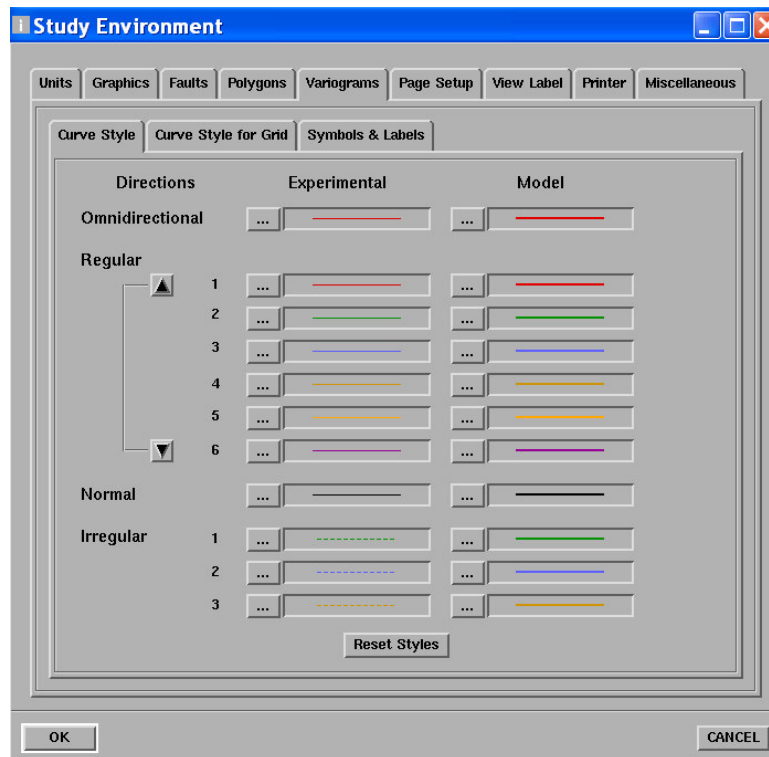
En la pestaña “Units”, se coloca el kilómetro como unidad por defecto.



En la pestaña “Graphics”, se elige la escala de colores “arcoiris” como escala por defecto.



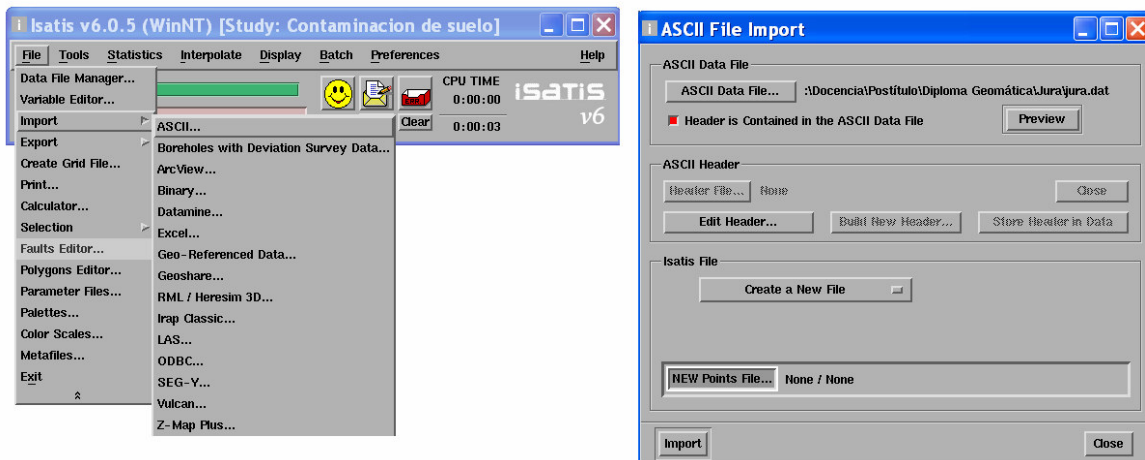
En la pestaña “Variograms”, se puede cambiar el estilo y colores de los variogramas.



Importación de los datos

Ahora, se puede importar la base de datos que se desea estudiar: **File > Import > ASCII**. El archivo con datos (*jura.dat*) ya contiene el encabezado (*header*) requerido por Isatis (el encabezado describe el contenido del archivo: nombre de las variables, unidades en las cuales se miden, etc.). Se puede considerar tres tipos de bases de datos:

- estructura *free*: corresponde a datos esparcidos en el espacio (caso que nos interesa)
- estructura *grid*: corresponde a datos ubicados en una malla regular
- estructura *line*: corresponde a datos ubicados a lo largo de sondajes.

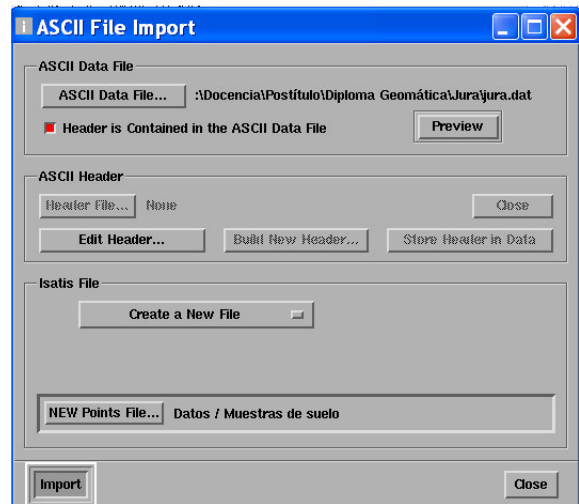
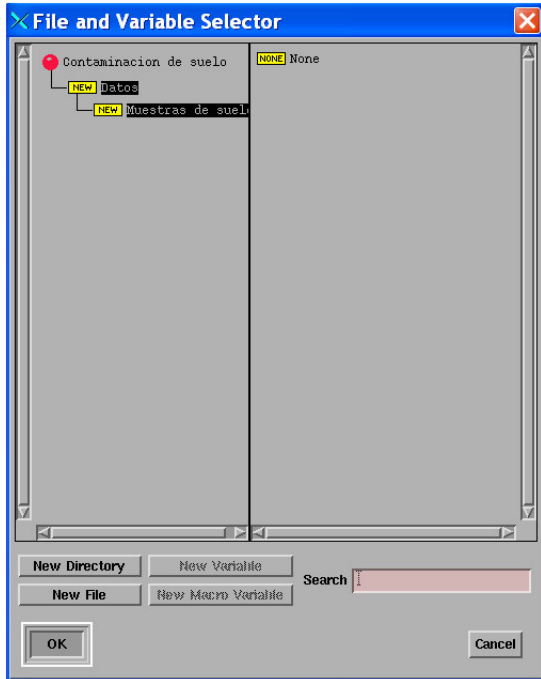
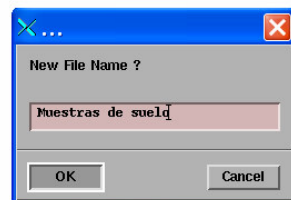
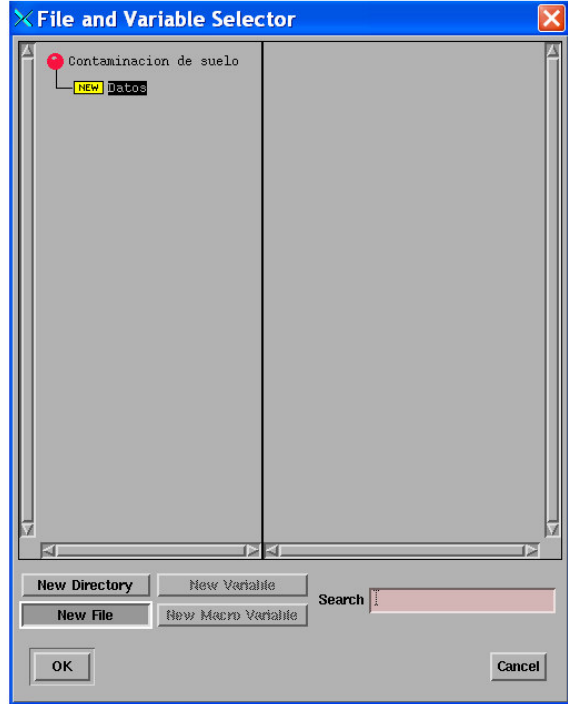
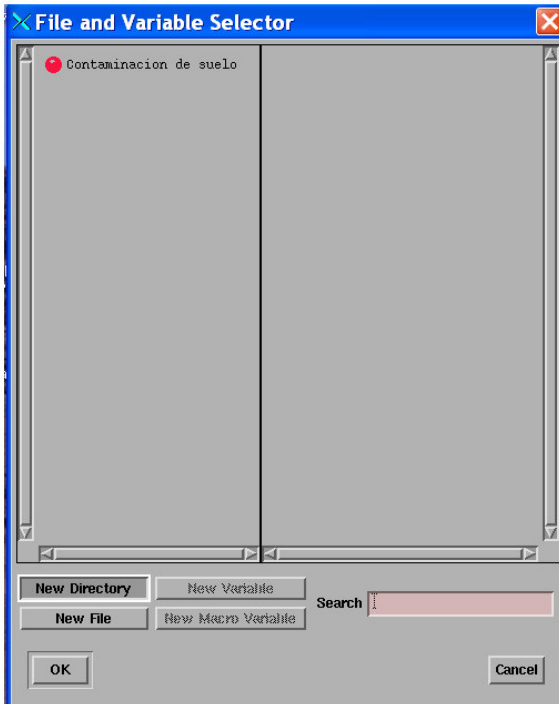


Hay que especificar el lugar donde colocar los datos en el estudio. Al presionar en *New Points File* aparece el **File and Variable Selector**, el cual es común a numerosos menús de Isatis. El lado izquierdo muestra lo que existe en el estudio actual (todavía nada, aparte del nombre del estudio), el lado derecho contiene las variables disponibles (todavía ninguna). Se crea nuevas carpetas, archivos y variables gracias a la parte inferior de la ventana.

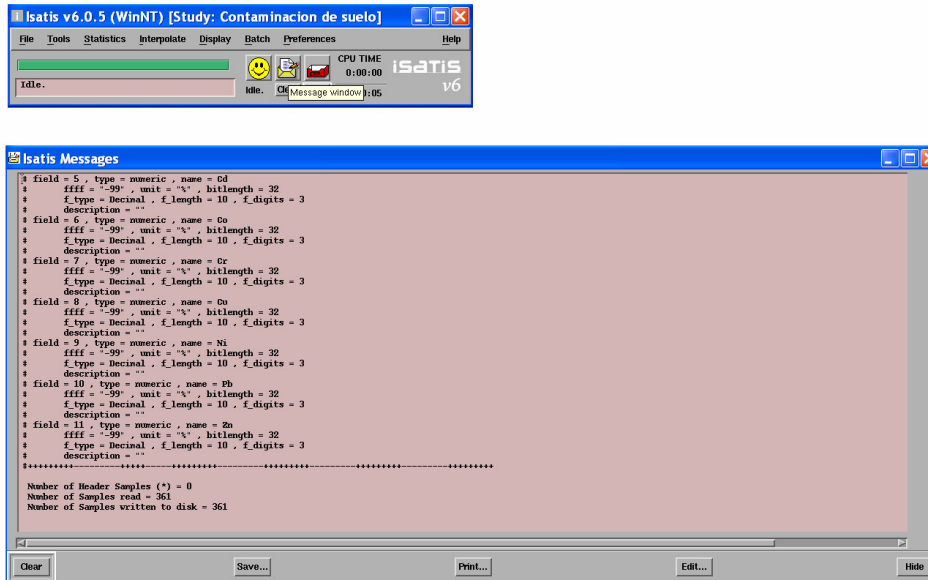
La estructura de un estudio considera la siguiente jerarquía:

Estudio > Carpetas (*Directories*) > Archivos (*Files*) > Variables

Primero, se presiona el botón *New Directory* y se entra el nombre de una nueva carpeta (por ejemplo, "Datos"). De vuelta en el *File and Variable Selector*, se presiona el botón *New File* y se da un nombre, por ejemplo, "Muestras de suelo". El programa ahora está listo para importar la base de datos. La parte derecha indica la lista de variables disponibles; en este caso, no hay ninguna variable ("None") hasta que se presione el botón *OK* para validar esta ventana y el botón *Import*.



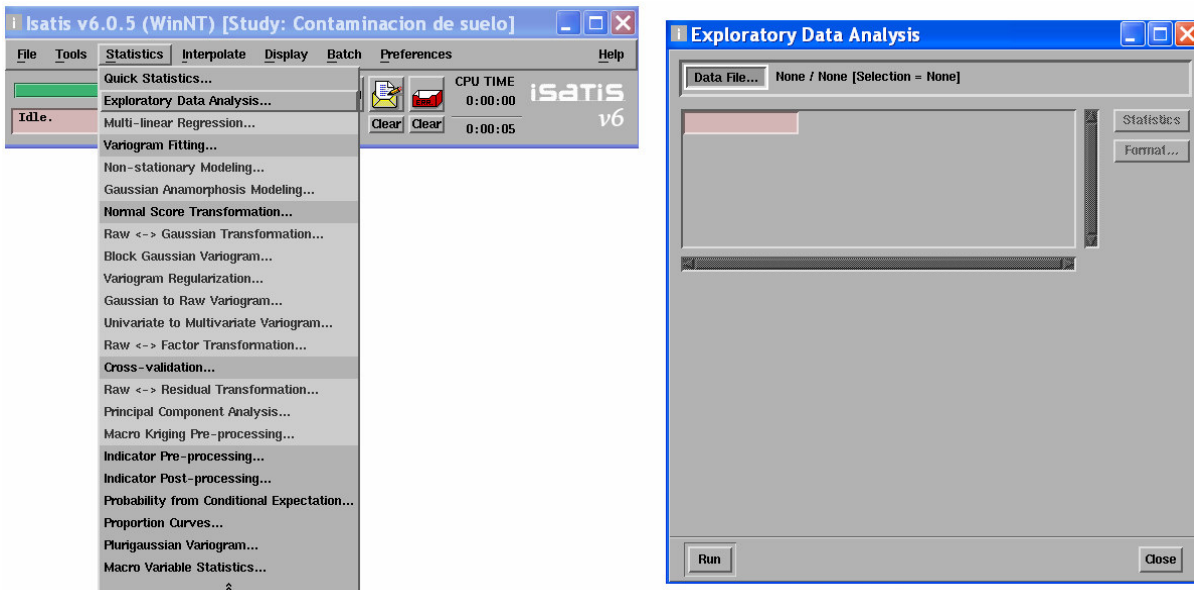
De ser exitosa la importación de los datos, el buzón de mensajes indica los parámetros del archivo y el número de datos.



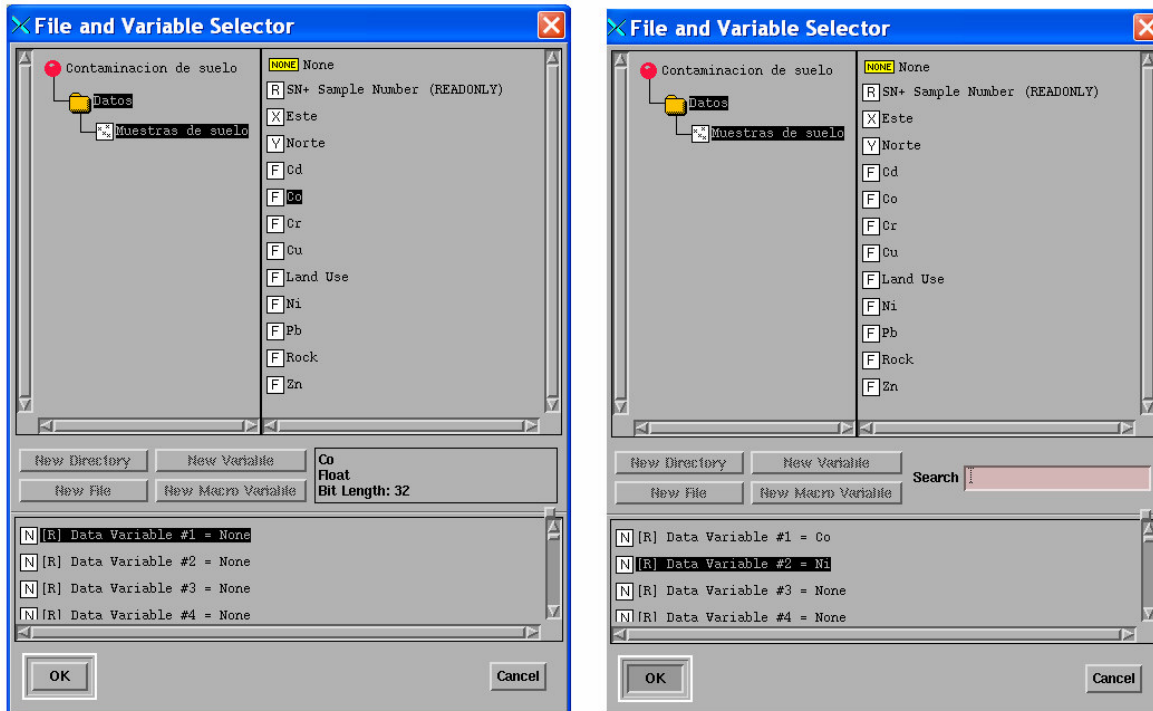
Se puede borrar el mensaje (*Clear*) y esconder la ventana de mensajes (*Hide*).

Estudio exploratorio de los datos

El principal menú de estudio exploratorio corresponde a *Statistics > Exploratory Data Analysis*. Se entra la base de datos a analizar al presionar el botón *Data File*.



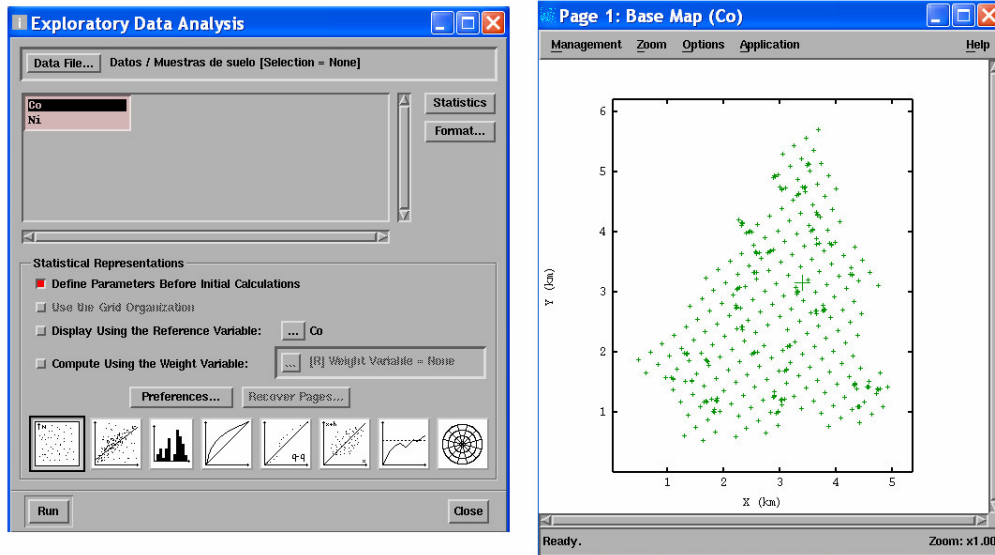
Se accede al *File and Variable Selector*. Se elige un archivo con datos, al desplazarse en el lado izquierdo de la ventana (aquí, el único archivo disponible es “Datos > Muestras de suelo”). Luego, se selecciona las variables que se desea analizar: presionar *Data Variable#1* en la parte inferior y escoger las variables deseadas en el lado derecho de la ventana (en este caso, Co y Ni, que representan las concentraciones de cobalto y níquel). Finalmente, se sale del *File and Variable Selector* (botón *OK*).



El menú de estudio exploratorio aparece ahora por completo. Su contenido es:

- lista de las variables disponibles, entre las cuales se debe seleccionar aquella(s) que se desea analizar (Co, Ni o ambas variables);
- un botón *Statistics* para calcular estadísticas básicas de las variables;
- un botón que permite personalizar los parámetros de cálculo antes de dibujar un gráfico (se aconseja activar esta opción para no usar los parámetros por defecto);
- 8 iconos que representan respectivamente: mapa de ubicación, nube de correlación, histograma, curvas tonelaje-ley, gráfico cuantil contra cuantil, nube de correlación diferida, variograma experimental y mapa variográfico;
- un botón *Run* cuyo uso no es útil a esta altura;
- un botón *Close* para cerrar la ventana del estudio exploratorio.

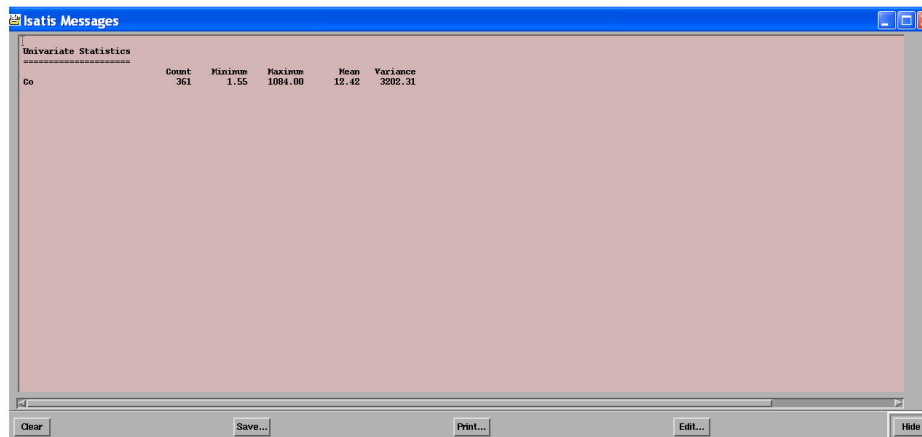
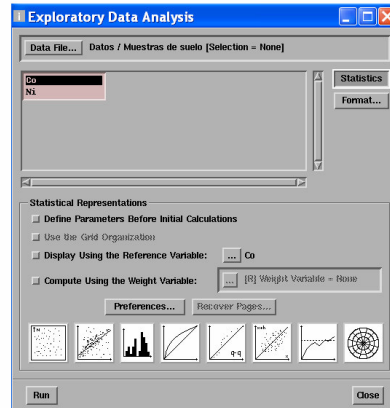
Se obtiene un mapa de ubicación de los datos al presionar el primer icono. Por defecto, el mapa se representa como una proyección en el plano horizontal, con las muestras señaladas por una cruz verde cuyo tamaño es proporcional al valor del dato (así, datos con valores altos aparecen con cruces grandes).



Todos los gráficos en Isatis poseen cuatro menús:

- **Management:** entrega opciones como guardar el gráfico en Isatis o copiarlo
- **Zoom:** permite acercar o alejar el punto de vista
- **Options:** permite desplegar una regla (*Ruler*) para ver las coordenadas de un punto
- **Applications:** este submenú contiene las opciones propias al tipo de gráfico que se está considerando. Por ejemplo, cambiar el estilo de la representación de un mapa (pintar los datos con colores) o modificar el número de clases de un histograma, etc. En cambio, los tres primeros submenús (*Management*, *Zoom*, *Options*) son comunes a todos los gráficos y no contienen aplicaciones específicas.

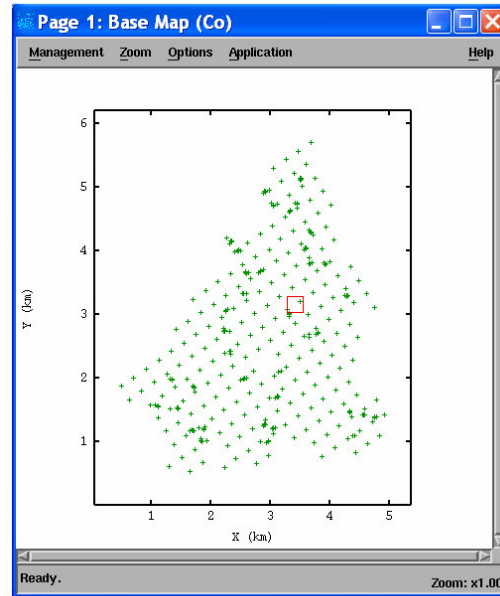
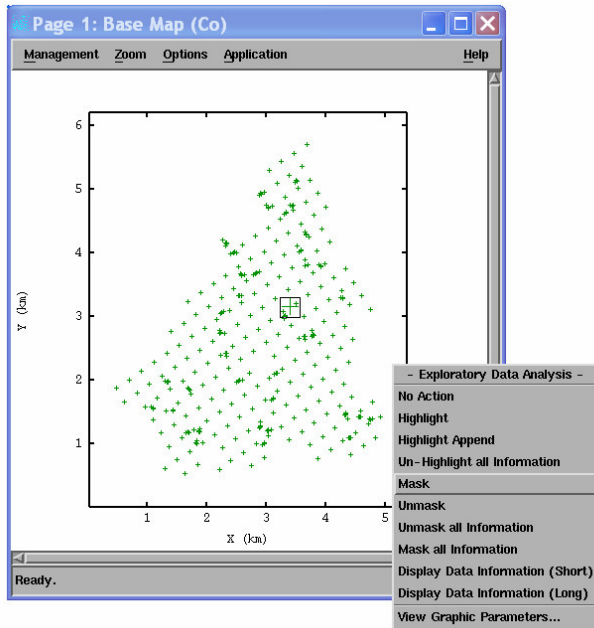
Se calcula algunas estadísticas elementales (botón *Statistics*); los resultados indican un valor máximo de 1084 ppm para la concentración de cobalto, el cual se considera como un valor aberrante que deberá ser eliminado de la base de datos.



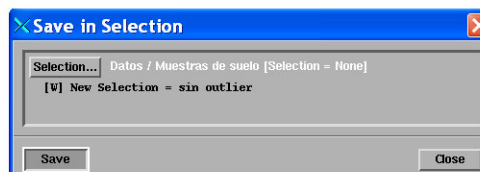
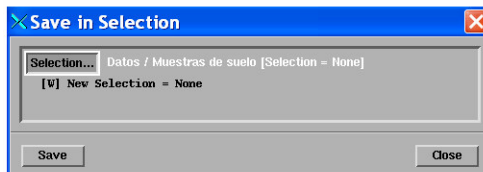
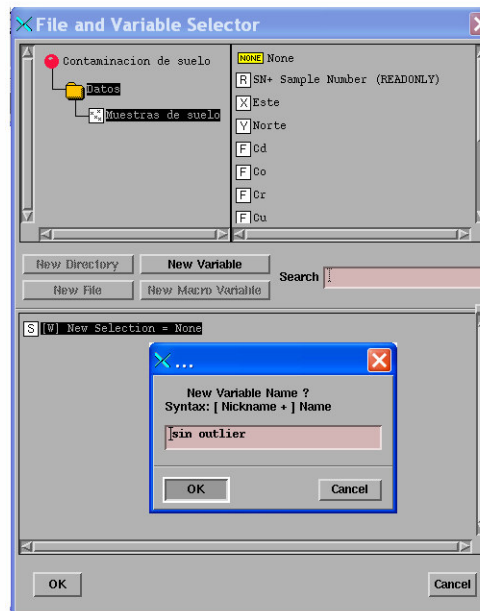
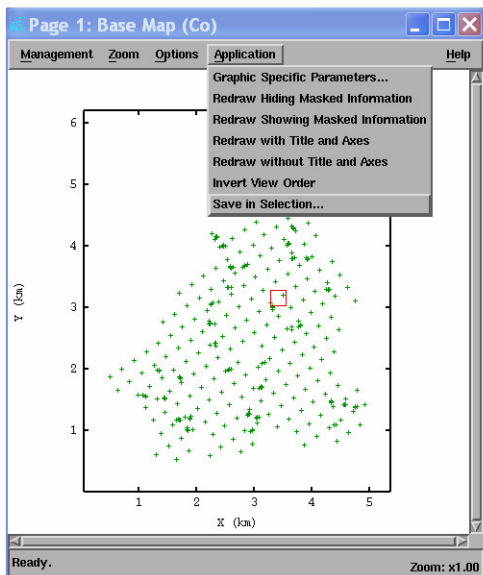
Para ello, podemos seleccionar este dato aberrante en el mismo mapa (corresponde a la cruz de mayor tamaño). El botón derecho del mouse trae varias opciones:

- *No Action*: desactiva la selección
- *Highlight* y *Highlight Append*: pone en relieve los datos seleccionados
- *Un-Highlight all information*: desactiva la opción anterior
- *Mask*: oculta los datos seleccionados y no los considera en los cálculos
- *Unmask*: todos los datos se vuelven activos
- *Display Data Information*: proporciona información sobre los datos seleccionados en el buzón de mensaje
- *View Graphic Parameters*: permite cambiar los parámetros de la representación gráfica.

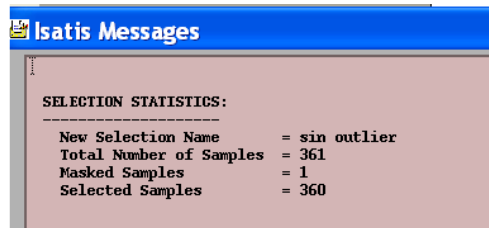
En este caso, la opción adecuada es *Mask*. El dato aberrante aparece ahora con color rojo.



Para descartar el dato aberrante en todas las manipulaciones futuras, se tiene que guardar esta selección: *Application* > *Save in selection*. Esta vez, se usa el *File and variable selector* para crear una nueva variable, a la cual se le da el nombre de “sin outlier”.

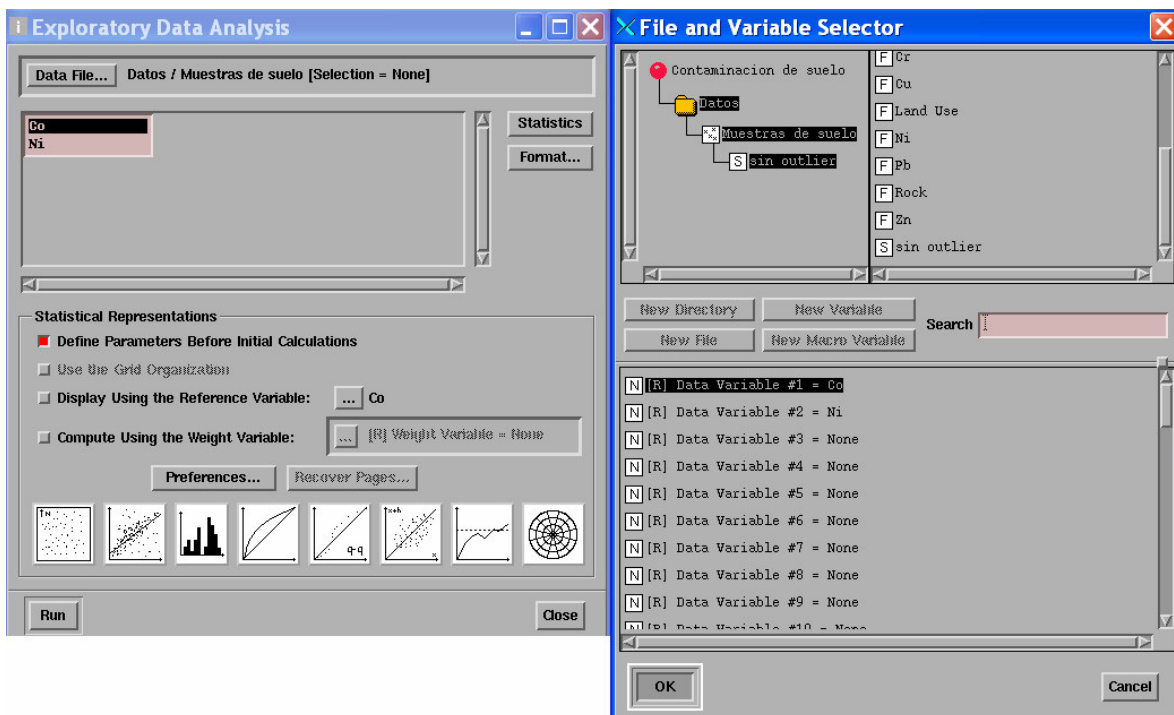


Un resumen aparece en el buzón de mensaje, indicando que los datos seleccionados son 360, mientras que inicialmente había 361 datos.

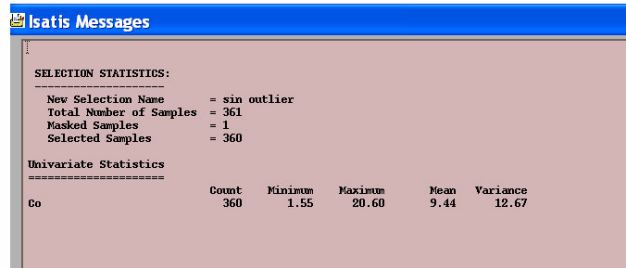
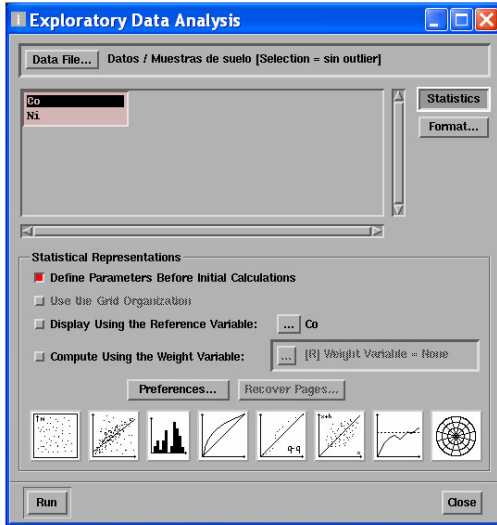


Lo que se hizo fue crear una variable binaria (que vale 0 para el dato aberrante y 1 para los otros datos) y que se puede usar como “filtro”, es decir, se puede pedir al programa analizar solamente los datos donde la variable de selección vale 1. Para ello, es preciso volver a presionar el botón *Data File* al principio del menú de estudio exploratorio.

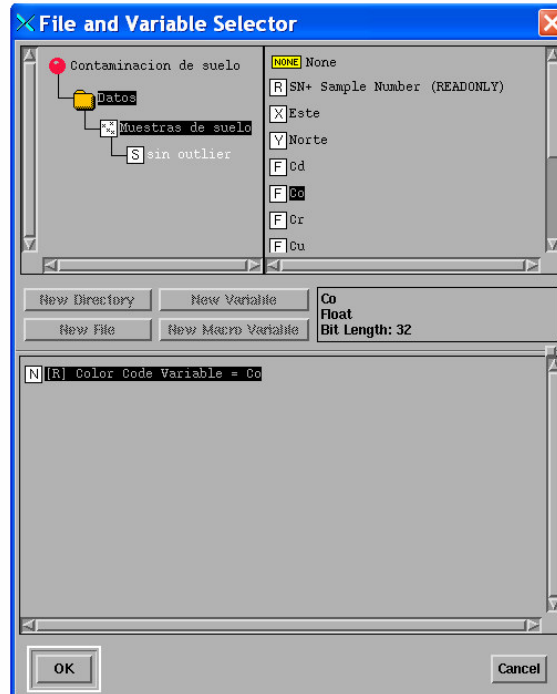
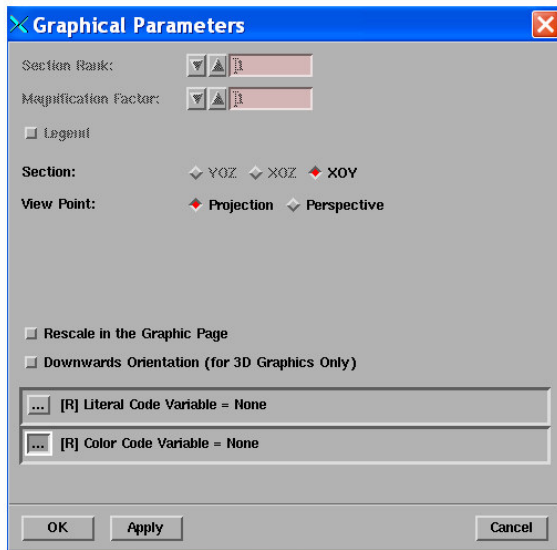
La variable creada (“sin outlier”) aparece en ambos lados del *File and variable selector*. En el lado derecho, se considera como variable binaria (0-1), mientras que en el lado izquierdo se considera como filtro. Esta última aplicación es la que buscamos, de modo que conviene entrar en la selección (lado izquierdo) y validar (OK).



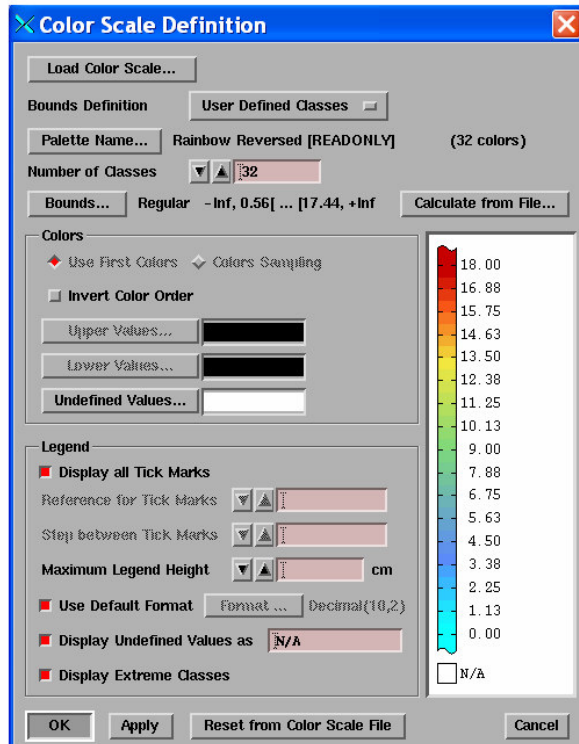
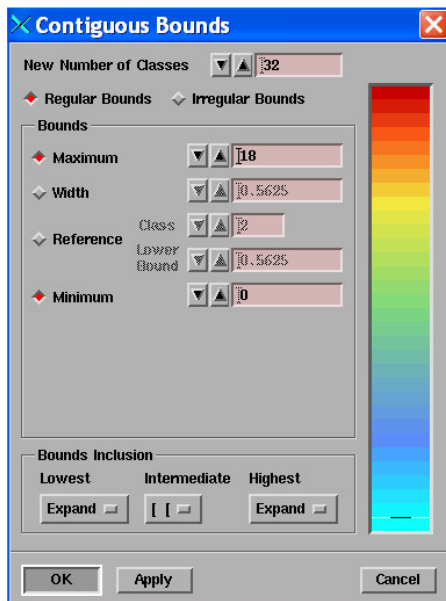
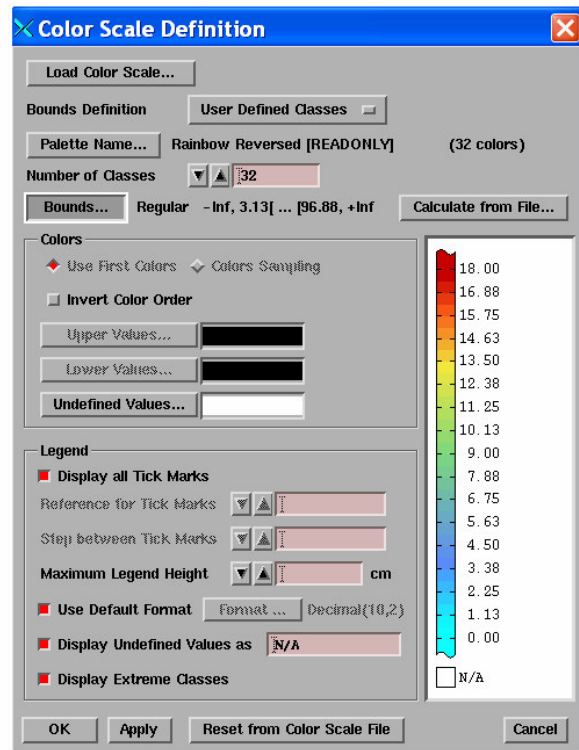
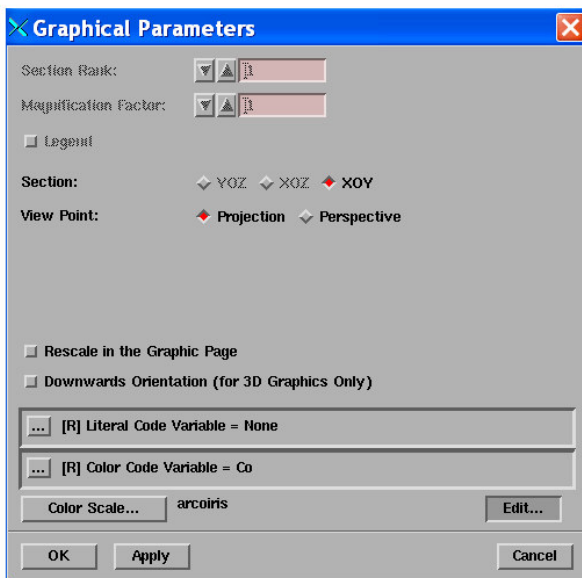
Se puede calcular de nuevo las estadísticas. Se observa que ya no hay datos aberrantes para las concentraciones de cobalto (valores entre 1.55 y 20.60 ppm).



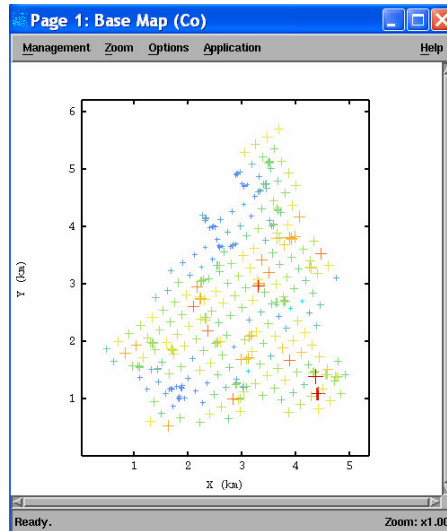
En el mapa, el menú *Application > Graphic Specific Parameters* permite personalizar el modo de representación de los datos. En este caso, se desea dibujar los datos con un código de color (*Color Code Variable*), escogiendo la concentración de cobalto (“Co”) para definir la escala del código de color.



Finalmente, se puede arreglar la escala de color al presionar *Edit* al lado de la opción *Color Scale*, eligiendo por ejemplo una escala de color entre 0 y 18 ppm.



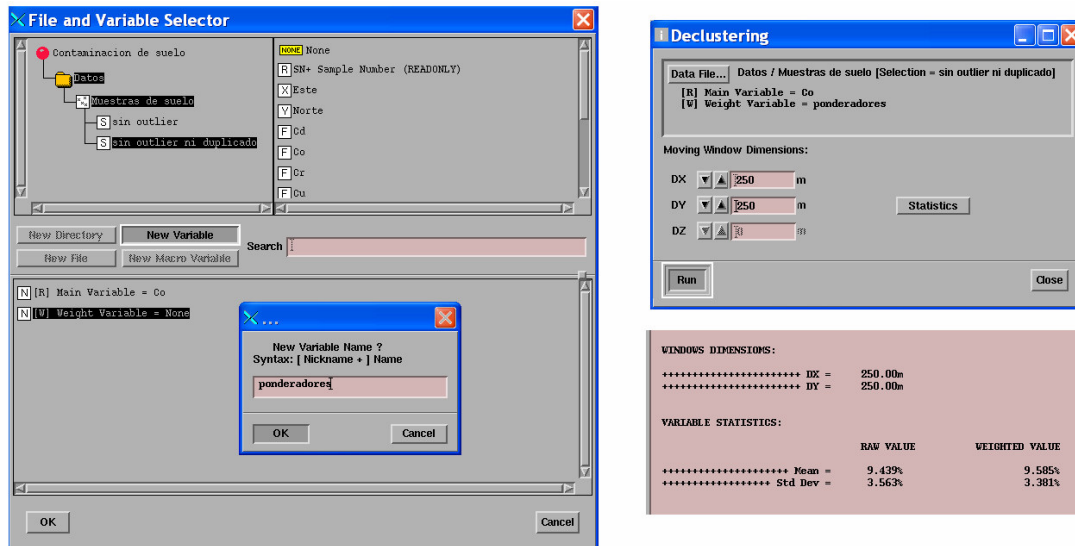
Ahora, el mapa aparece con el código de color solicitado (azul para valores bajos, verde y amarillo para valores intermedios y rojo para valores altos).



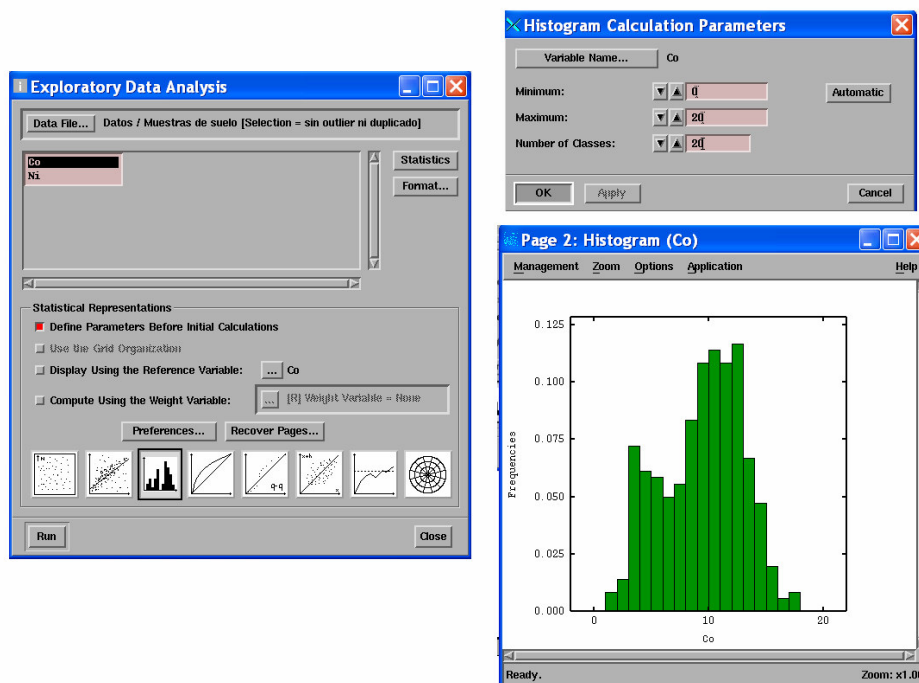
Antes de continuar con los otros íconos del estudio exploratorio, procederemos a verificar que no existen datos duplicados y a desagrupar los datos.

- Búsqueda de datos duplicados: **Tools > Look for duplicates.**
 Se define una nueva variable de selección (por ejemplo, “sin outlier ni duplicado”) y se considera como duplicados a datos distantes de menos de 1 metro. Se encuentra un par de datos duplicados, siendo descartado el segundo dato de este par.

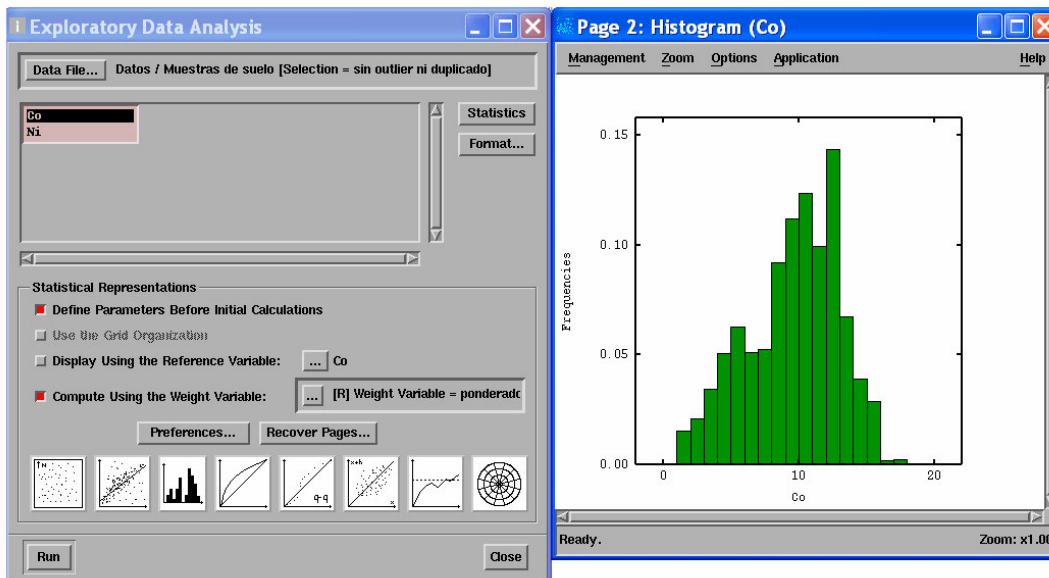
- Desagrupamiento de datos: **Tools > Declustering**.
El desagrupamiento se realiza por el método de las celdas. En input, se entran los datos de concentración de cobalto (con selección para filtrar datos aberrantes y duplicados) y se elige un tamaño de celda de 250m * 250m, correspondiente a la malla de muestreo subyacente.



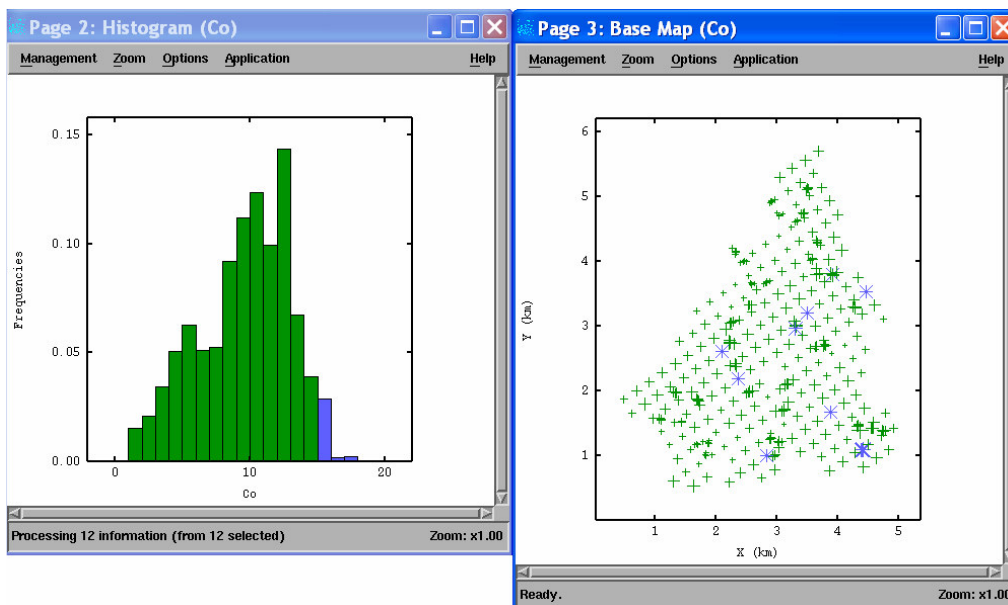
Volvemos ahora al menú **Statistics > Exploratory Data Analysis**. Procedemos a entrar los datos contenidos en la selección final (sin outlier ni duplicado) y a calcular un histograma de las concentraciones de cobalto (tercer icono). Se cambia los parámetros de cálculo por defecto, eligiendo dibujar el histograma entre los valores 0 y 20 ppm, con 20 clases.



Se puede comparar este histograma con el histograma obtenido al utilizar los ponderadores de desagrupamiento (*Compute using the weight variable > ponderadores*)



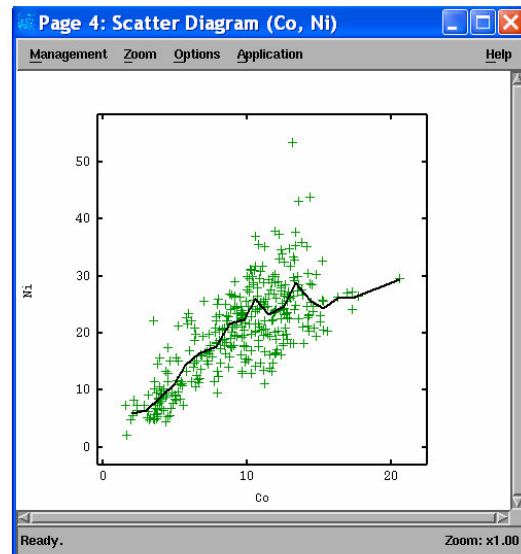
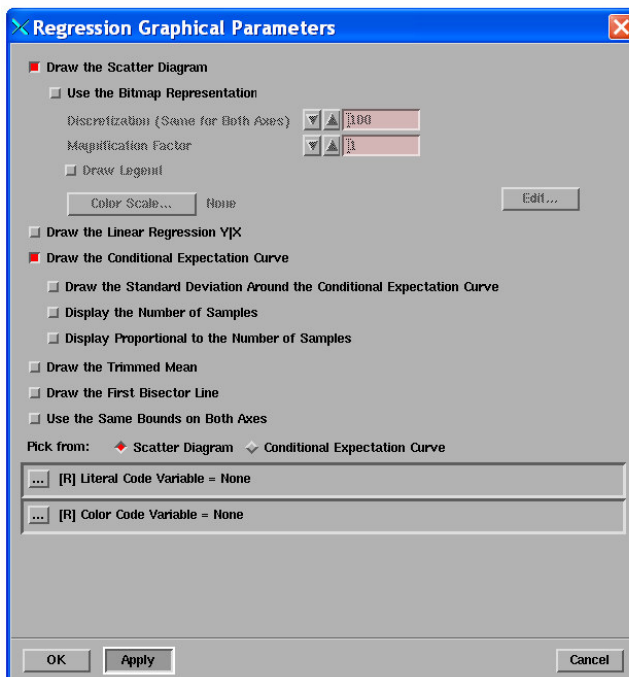
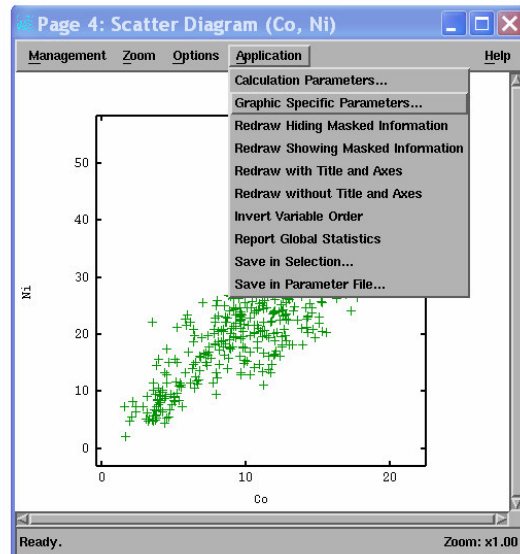
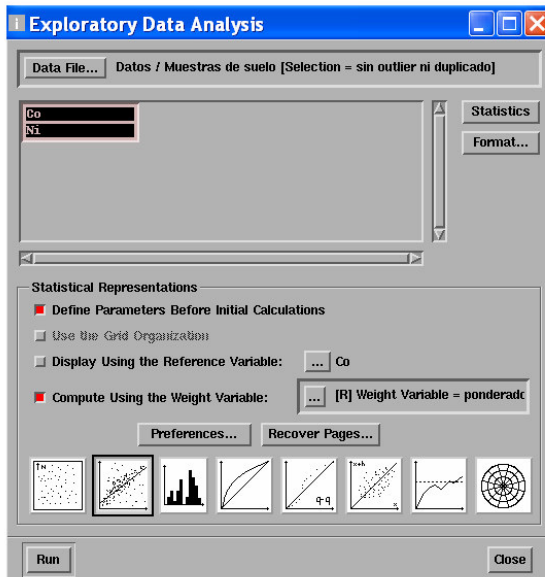
En el histograma, se puede seleccionar una parte de los datos con ayuda del mouse. En el siguiente ejemplo, se selecciona los datos mayores que 15 ppm, que se ponen en relieve gracias a la opción *Highlight* (botón derecho del mouse). Todas las ventanas del estudio exploratorio (mapa, histograma...) están vinculadas, de modo que los datos seleccionados aparecen también en el gráfico del mapa (datos señalados en azul).



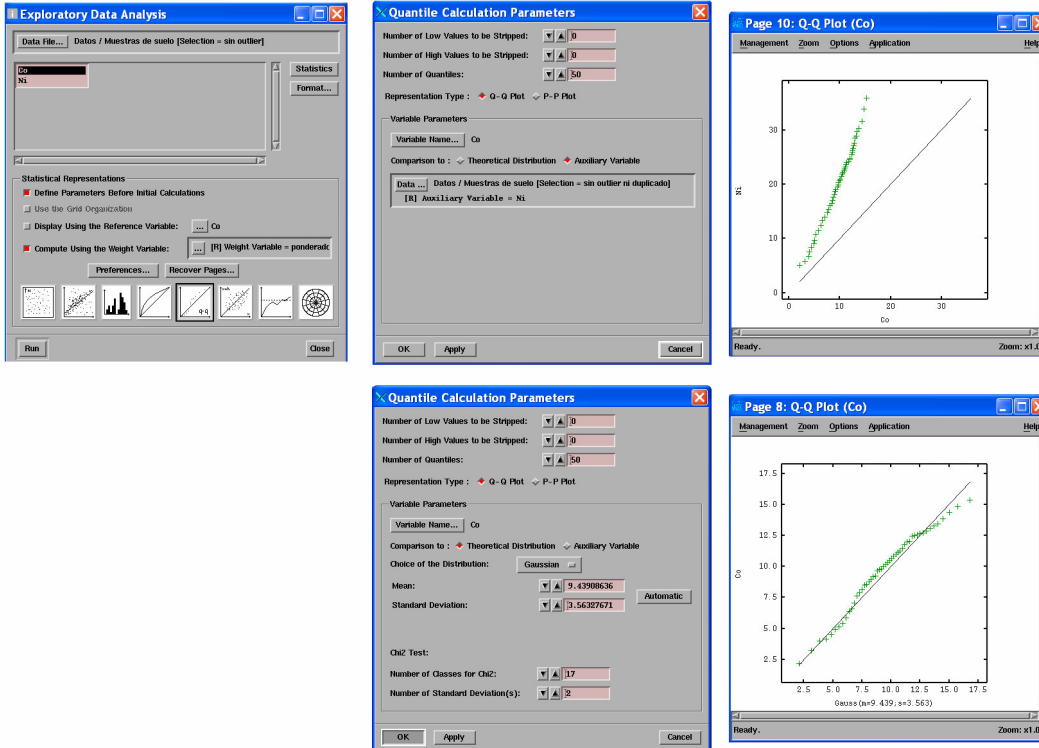
Se regresa al estado anterior con la opción *Un-Highlight all information*.

Entre las otras herramientas del estudio exploratorio, cabe destacar

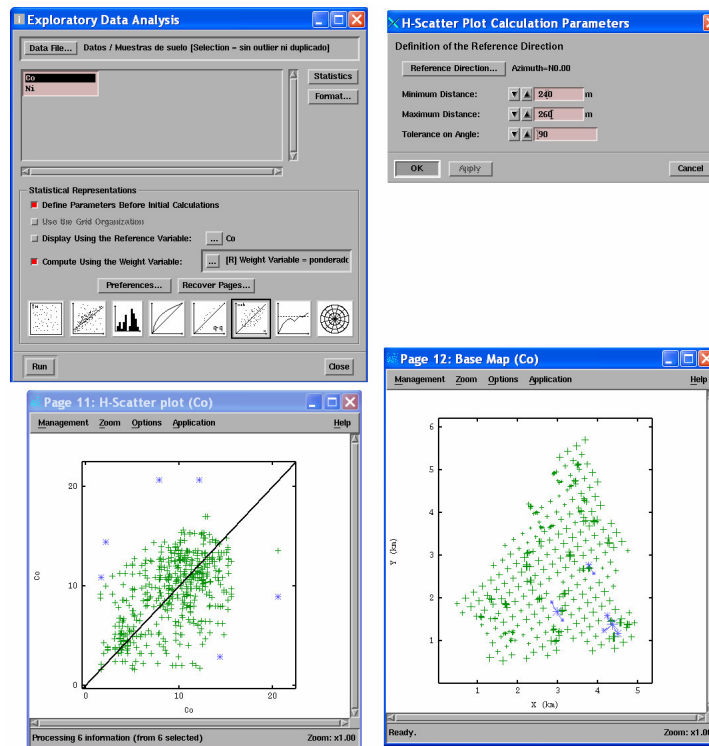
- La nube de correlación entre dos variables (por ejemplo, las concentraciones de cobalto y de níquel). En *Application > Graphic Specific Parameters*, existen opciones para dibujar las curvas de regresión (regresión lineal y media condicional) sobre la nube de puntos.



- Los gráficos cuantil contra cuantil (QQ-plots). Permiten comparar dos distribuciones empíricas (por ejemplo, las distribuciones de concentración de cobalto y níquel) o una distribución empírica contra una distribución teórica (por ejemplo, la distribución de concentración de cobalto contra una distribución Gaussiana).



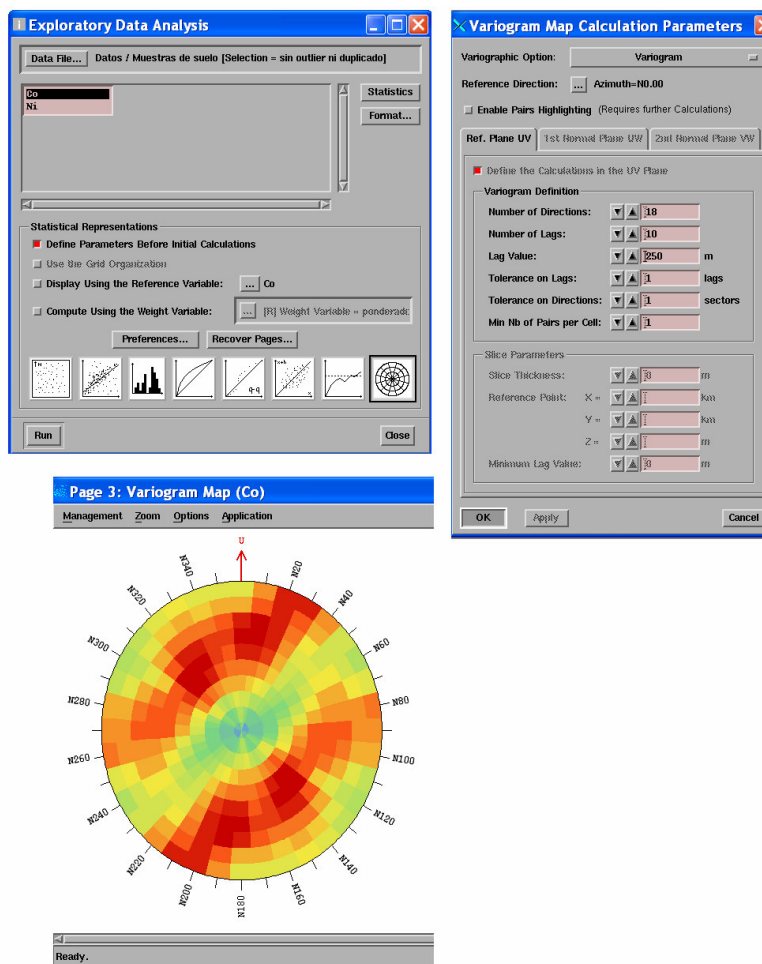
- La nube de correlación diferida, que busca comparar pares de datos con cierta distancia de separación. Se puede destacar a los puntos de la nube más alejados de la diagonal, que corresponden a los pares de datos con valores muy disímiles.



Análisis variográfico de datos

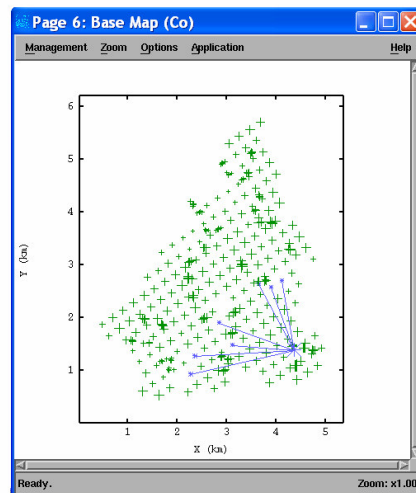
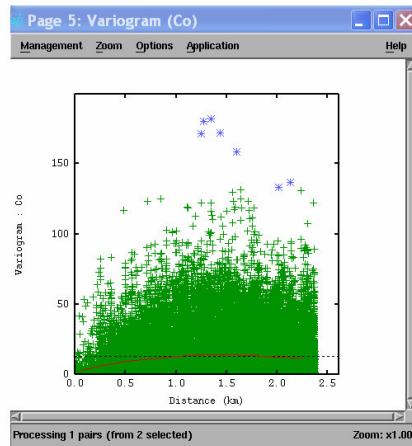
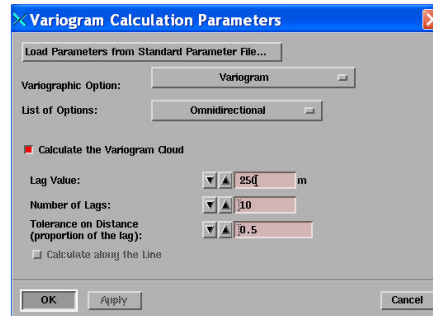
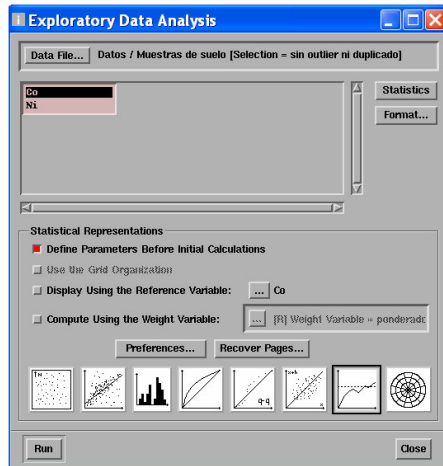
El cálculo de variogramas experimentales y mapas variográficos todavía se realiza con el menú *Statistics > Exploratory Data Analysis*.

- El mapa variográfico corresponde al último ícono y sirve para detectar anisotropías. Se elige los siguientes parámetros de cálculo:
 - Número de direcciones: 18 (1 dirección cada 10° de ángulo). En Isatis, el mapa se dibuja en forma radial, lo que facilita la interpretación de las direcciones.
 - Número de pasos: 10
 - Paso (distancia): 250 m
 - Tolerancia en la distancia: 1 paso (250 m)
 - Tolerancia en la dirección: 1 sector (10°)
 - Número mínimo de pares de datos: 1



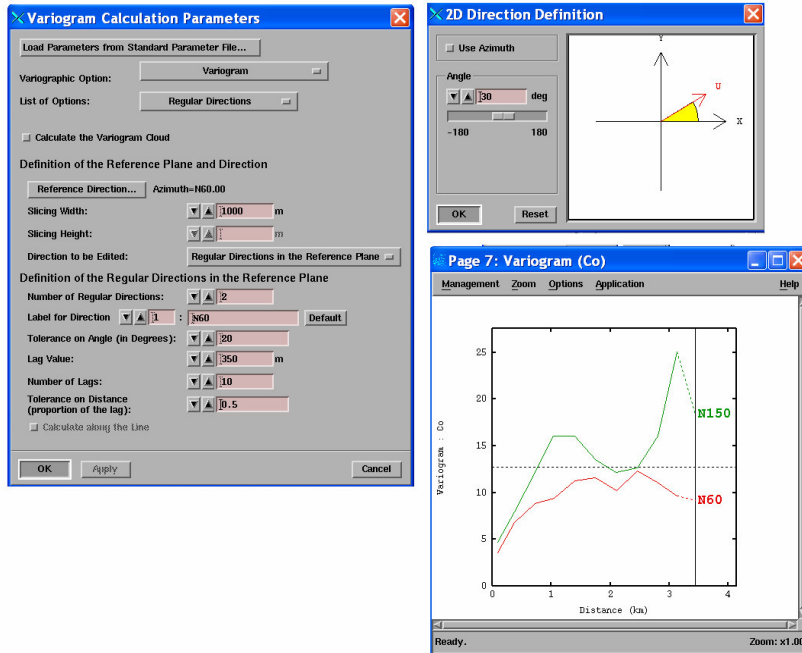
Se aprecia una anisotropía de tipo zonal, con dirección principal de continuidad N60°E (franja que se destaca en el mapa variográfico).

- El variograma experimental corresponde al penúltimo ícono. Para empezar, se puede calcular un variograma omnidireccional (sin importar la dirección) y desplegar la nube variográfica. Se verifica que los valores más altos de esta nube corresponden a pares de datos que se originan en un mismo dato, a saber, el dato de máxima concentración de cobalto (20.6 ppm).

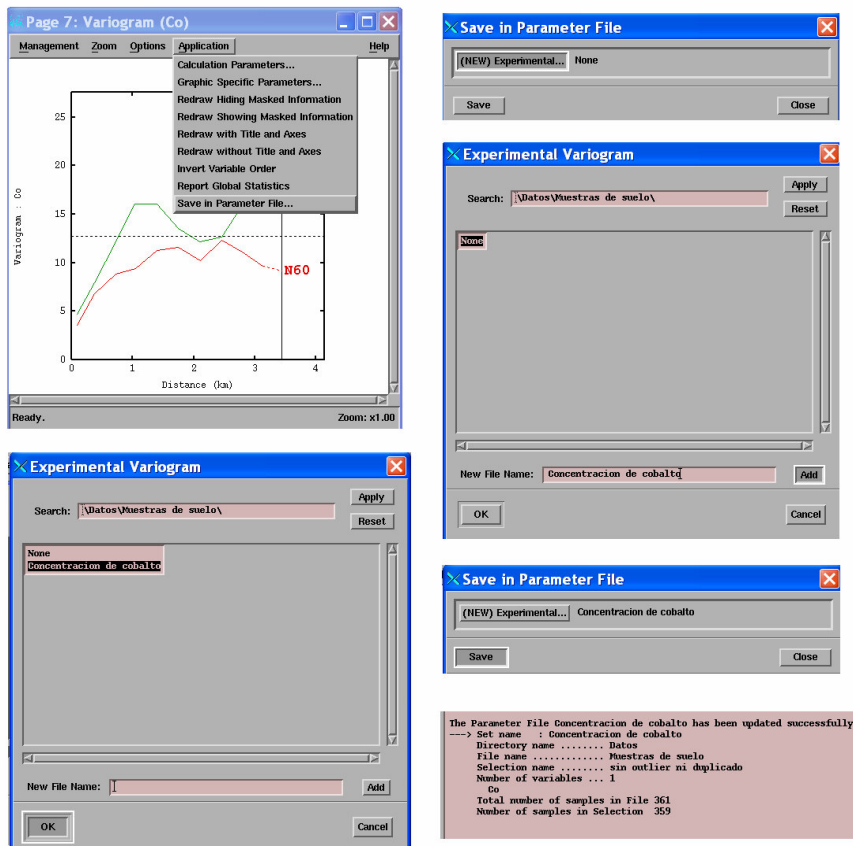


Acorde al mapa variográfico, se espera una anisotropía con direcciones principales N60°E y N30°W. Por consiguiente, se vuelve a calcular el variograma experimental, esta vez en forma direccional (sin desplegar la nube variográfica), con los siguientes parámetros:

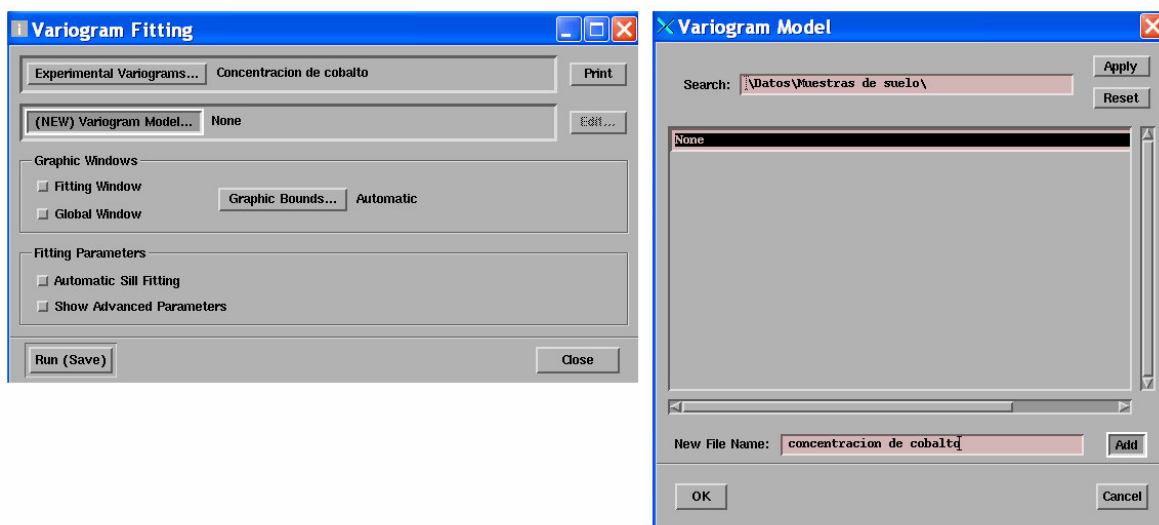
- Ancho de banda = 1000 m
- Número de direcciones: 2
- Número de pasos: 10
- Paso (distancia): 350 m
- Tolerancia en la distancia: 0.5 paso (175 m)
- Tolerancia angular: 20°
- Número mínimo de pares de datos: 1



Se guarda este variograma experimental en los parámetros del estudio: *Application* > *Save in parameter file*. Se escribe el nombre del variograma en la zona de texto, luego se presiona *Add* para agregar este nombre a la lista, *OK* para validar y finalmente *Save* para guardar.



Para ajustar un modelo de variograma, es preciso ir a otro menú: **Statistics > Variogram Fitting**. Primero, se selecciona el variograma experimental (“Concentracion de cobalto”), luego se define el nombre del modelo de variograma en *(NEW) Variogram model*. Para mayor facilidad, se puede dar al modelo el mismo nombre que el variograma experimental. El programa hace automáticamente la distinción entre un variograma experimental y un variograma modelado. El nombre del modelo se entra en la zona de texto, luego se presiona *Add* para agregar el nombre a la lista de modelos y *OK* para validar.



El menú de ajuste trae las siguientes opciones:

- *Print*: escribe las características del variograma experimental en el buzón de mensaje
- *Edit*: edita y modifica la definición del modelo
- *Fitting window*: dibuja el variograma dirección por dirección y (en caso multivariable) variable por variable
- *Global window*: dibuja el variograma en todas las direcciones y para todas las variables simultáneamente
- *Automatic sill fitting*: permite que el programa ajuste las mesetas de los modelos anidados en forma automática
- *Show advanced parameters*: reglas usadas para el ajuste automático de mesetas
- *Run (save)*: guarda el modelo ajustado
- *Close*: cierra la ventana

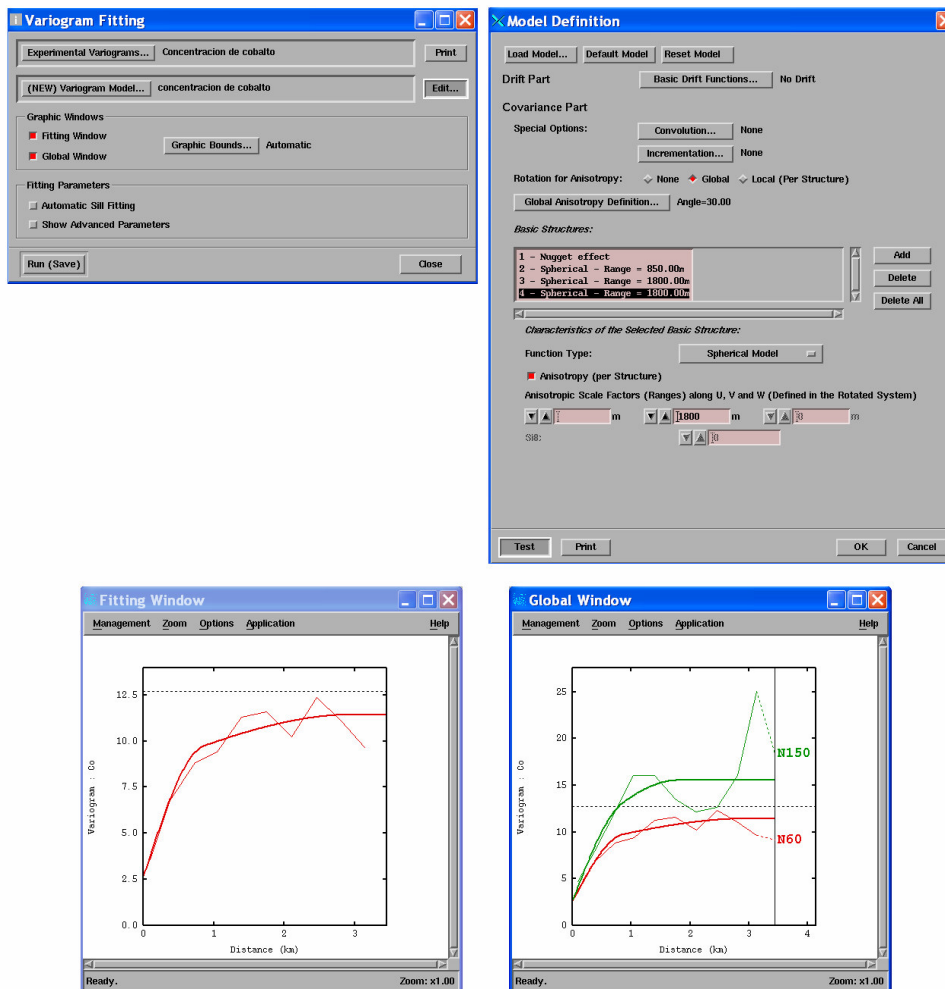
Activemos las opciones (*Fitting Window*, *Global Window* y *Automatic Sill Fitting*), luego editemos el modelo (*Edit*). Se entra en la ventana que define el modelo variográfico (por defecto, se trata de un modelo esférico isótropo). Las primeras opciones (hasta *Rotation for anisotropy*) son de uso especializado y no se detallarán aquí.

Para definir la *Rotation for anisotropy*, las opciones son: *None* (ninguna rotación, o sea, los ejes principales de anisotropía son los ejes de coordenada), *Global* (todos los modelos anidados tendrán las mismas direcciones de anisotropía) y *Local* (cada modelo anidado

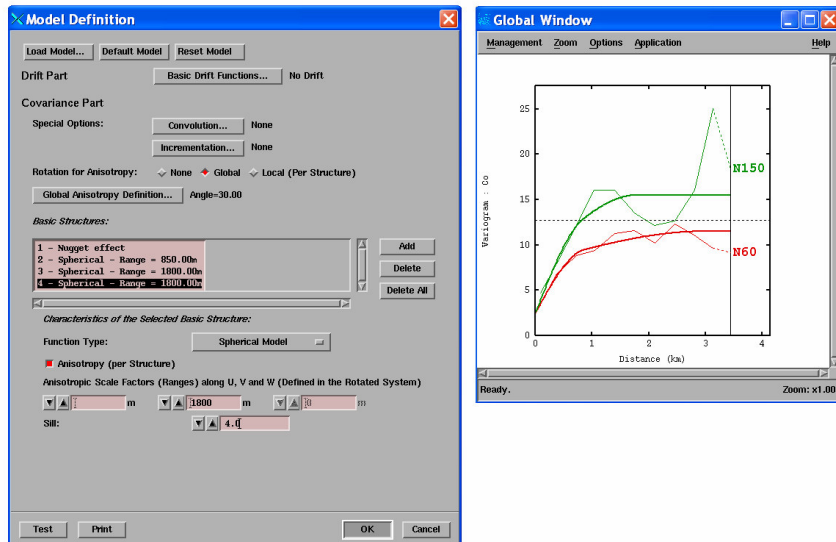
podrá tener sus direcciones propias de anisotropía). En nuestro caso, elegimos la opción *Global*. Por defecto, el ángulo es idéntico al ángulo utilizado para calcular el variograma experimental (30° con respecto al eje de abscisa, dando de esta forma la dirección principal N60°E).

En la lista de *Basic structures*, se presiona *Add* para agregar un modelo de base, *Delete* para suprimir uno, *Delete all* para suprimir todo. Cada modelo de base puede ser elegido dentro de una lista que se encuentra en *Function Type*. Su alcance (*Scale factor* o *Range*) se define a continuación; puede ser el mismo a lo largo de todas las direcciones del espacio, o bien cambiar según la dirección; en este último caso, es preciso activar la opción *Anisotropy (per structure)* y especificar los alcances en las direcciones principales de anisotropía. En cambio, las mesetas no aparecen, dado que hemos activado la opción de ajuste automático.

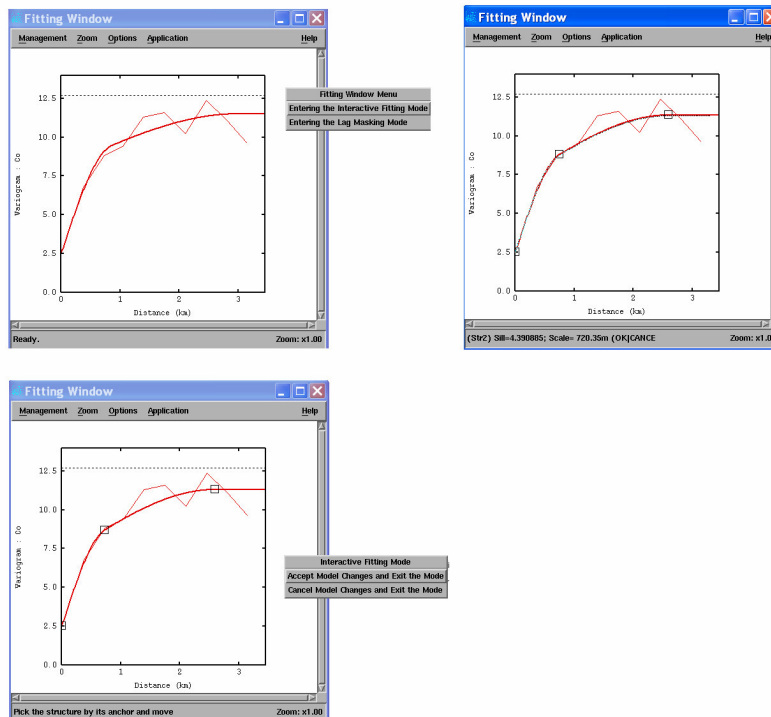
Se cambia el modelo esférico en un modelo pepítico (*Nugget*). Luego, se agrega 3 modelos esféricos, de alcances respectivos (0.85km;0.85km), (3km;1.8km) y (∞ ;1.8km) (para este último modelo, se deja el valor del primer alcance en blanco para indicar que es infinito). Al presionar el botón *Test*, el programa calcula automáticamente las mesetas que realizan el mejor ajuste del variograma experimental.



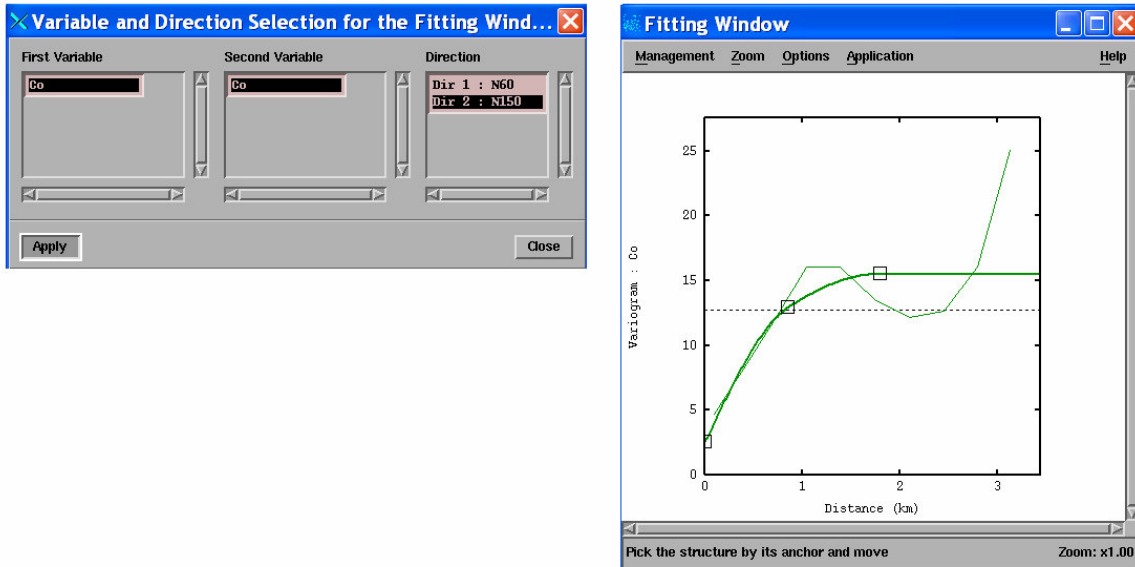
Podemos desactivar la opción de ajuste automático, en cuyo caso las mesetas aparecen en la ventana de definición del variograma. De este modo, se puede afinar el ajuste obtenido con el ajuste automático.



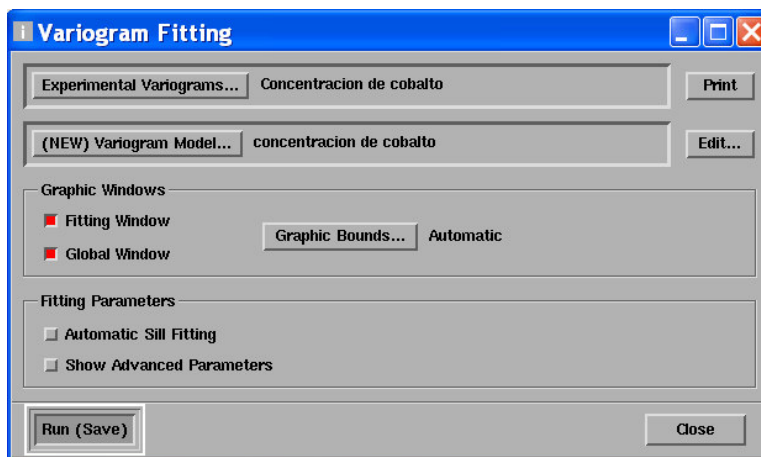
Otra manera de ajustar el variograma experimental es usar la ventana *Fitting Window*. Con el botón derecho del mouse, se selecciona el menú *Entering the interactive fitting mode*. Cada uno de los modelos anidados está representado por un cuadrado, del cual se puede modificar el alcance (moviendo de derecha a izquierda) y/o la meseta (moviendo de arriba a abajo).



Esta opción de ajuste actúa en una dirección del espacio a la vez, de modo que es preciso ver también lo que sucede en la otra dirección: *Application > variable & direction selection* (escoger la dirección 2 y validar). Por ejemplo si se cambia la meseta de un modelo anidado en una dirección, el cambio también afecta la otra dirección.



Se guarda el modelo definido al ejecutar el botón *Run (Save)* de la ventana de ajuste de variograma, luego se puede cerrar dicha ventana (*Close*).



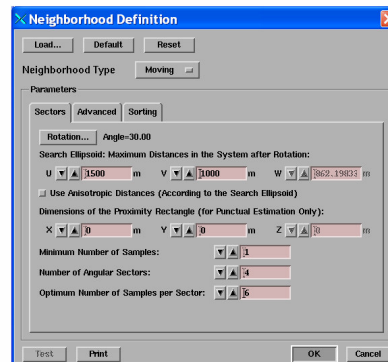
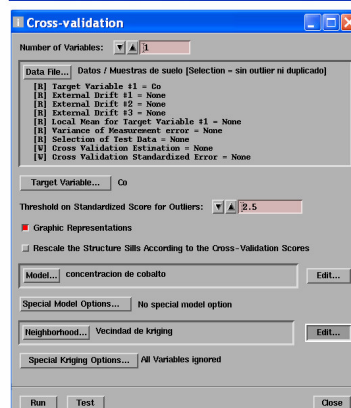
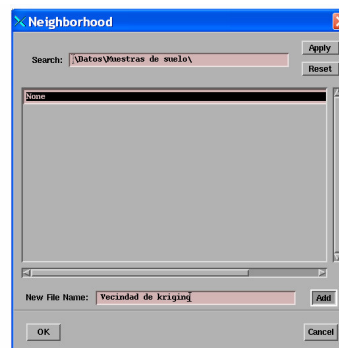
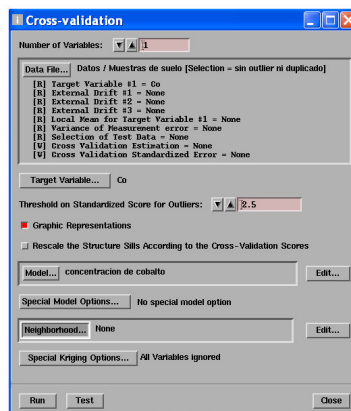
Validación cruzada

Validaremos el modelo de variograma encontrado y definiremos una vecindad de kriging mediante validación cruzada: *Statistics > Cross Validation*.

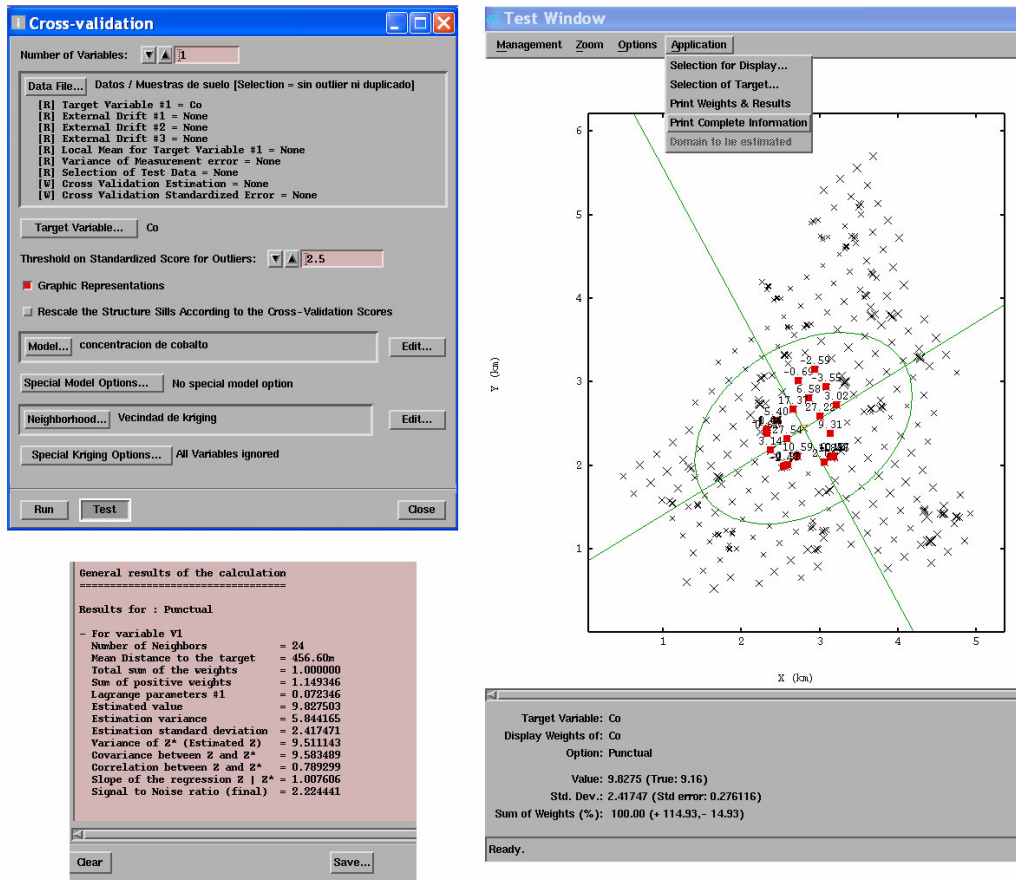
Los datos (*Data File*) corresponden a las concentraciones de cobalto, excluyendo los datos aberrantes y duplicados. El botón *Target variable* permite seleccionar la variable a analizar en caso de tener un modelo multivariable y el *Threshold* corresponde al umbral a partir del cual una estimación se considera “mala”. Por defecto, este umbral es 2.5, es decir, que una estimación es mala cuando el valor absoluto del error de estimación es mayor que 2.5 veces la desviación estándar de estimación.

Se pide realizar tests gráficos (*Graphic representations*). En cambio, no se desea modificar el modelo variográfico según los resultados obtenidos (en caso de activar la opción *Rescale the structure sills...*, se modificaría la meseta del modelo de tal forma que los resultados de validación cruzada den menos de un 5% de datos mal estimados). Se selecciona el modelo de variograma con la opción *Model*. Se puede escoger realizar un kriging simple (de media conocida) con el botón *Special model options*; por defecto, se realiza un kriging ordinario.

Falta especificar una vecindad de kriging (*Neighborhood*). Se define el nombre de la nueva vecindad en la zona de texto, luego se agrega este nombre a la lista (*Add*) y se valida (*OK*). Por defecto, la vecindad es única, o sea, contiene la totalidad de los datos. Se modifica esta elección con el botón *Edit*. Aquí, se puede definir una vecindad móvil (*Moving*), que está constituida por una elipse. Se decide dividirla en cuadrantes, con un dato como mínimo (en la vecindad entera) y 6 datos como máximo en cada cuadrante. Se oriente la elipse según las direcciones principales de anisotropía (ángulo de 30° en *Rotation*), con radios de 1500m en la dirección N60°E y 1000m en la dirección N30°W. Se dejan nulas las distancias de proximidad.



De vuelta en la ventana principal, se tiene tres opciones: cerrar la ventana (*Close*), ejecutar la validación cruzada (*Run*) o realizar una prueba (*Test*). Al escoger esta última opción, se obtiene un mapa de los datos. Al pinchar un dato con el mouse, se efectúa la validación de este dato, indicándose los datos vecinos seleccionados y sus ponderadores de kriging. En el menú *Application*, existen opciones adicionales, como imprimir la información relativa a la estimación (*Print complete information*), la cual aparece en el buzón de mensajes. En particular, uno se puede fijar en la pendiente de la regresión entre el valor real y el valor estimado (*Slope of the regression $Z | Z^*$*), la cual debe acercarse a 1 para que la nube de puntos (real/estimado) sea lo más cercana posible a la línea diagonal.



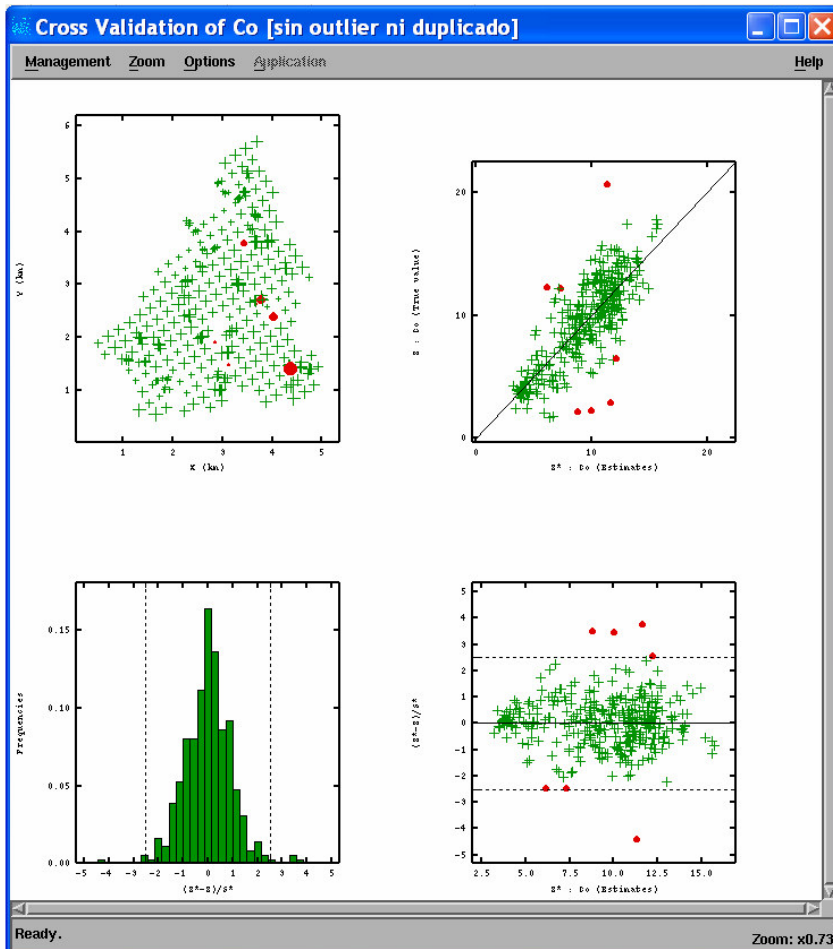
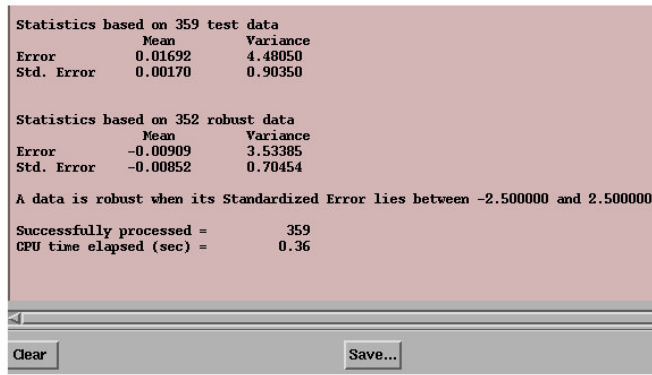
La prueba se puede repetir con varios datos; también se puede probar distintas vecindades de kriging o distintos modelos variográficos.

Luego, se cierra la ventana *Test* (*Management > Delete Window*) y se ejecuta la validación cruzada (*Run*). Esto desemboca en dos tipos de resultados. Por una parte, las estadísticas básicas (media y varianza) sobre los errores de estimación y los errores estandarizados, las cuales aparecen en el buzón de mensajes. Por otra parte, los tests gráficos que habían sido solicitados:

- un mapa de ubicación de los datos
- la nube de correlación entre los valores reales y los valores estimados

- el histograma de los errores estandarizados cometidos
- la nube de correlación entre los errores estandarizados y los valores estimados

En rojo, se señalan aquellos datos que han sido “mal” estimados (error estandarizado mayor que 2.5 o menor que -2.5).



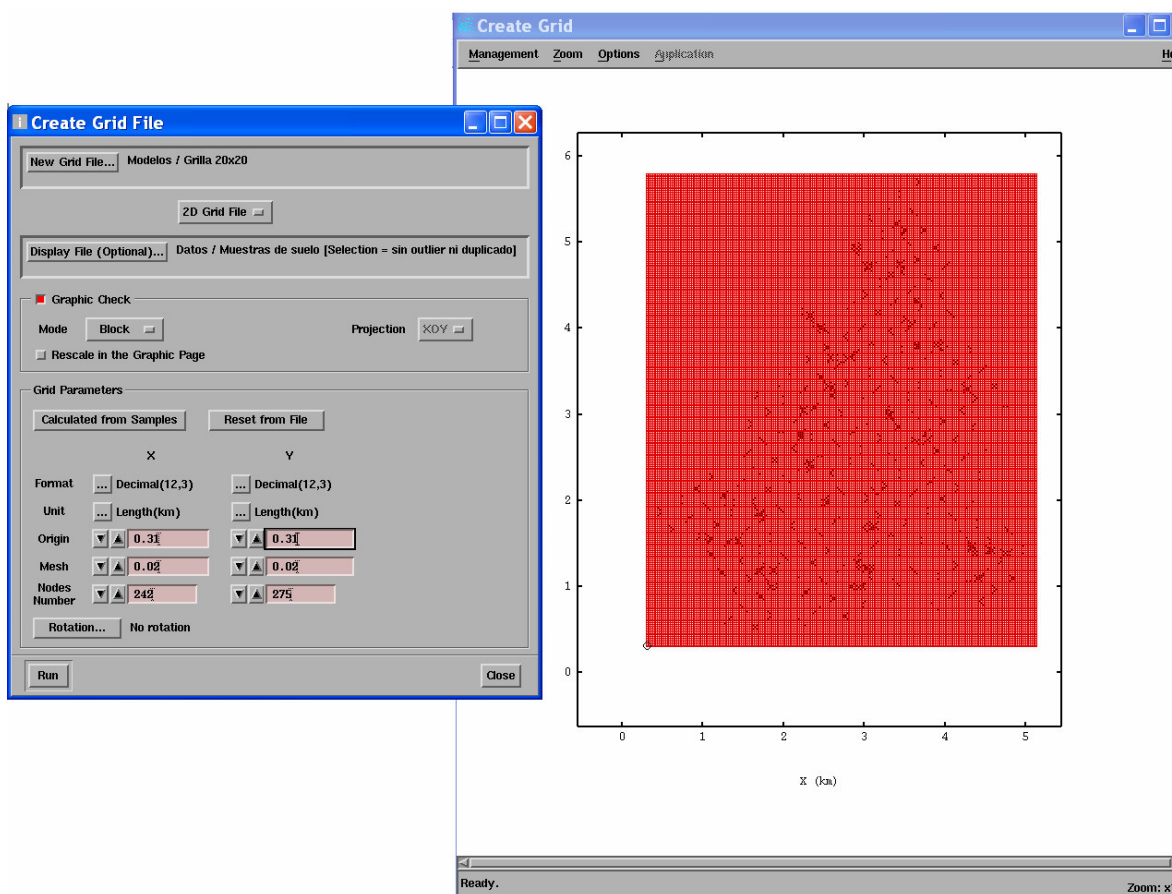
Definición de un modelo de bloques

Antes de realizar la estimación por kriging, se requiere definir una grilla que cubre la zona muestreada y cuya malla representa las unidades de remediación ambiental (20m de lado en cada eje). Se crea la grilla deseada en **File > Create Grid File**.

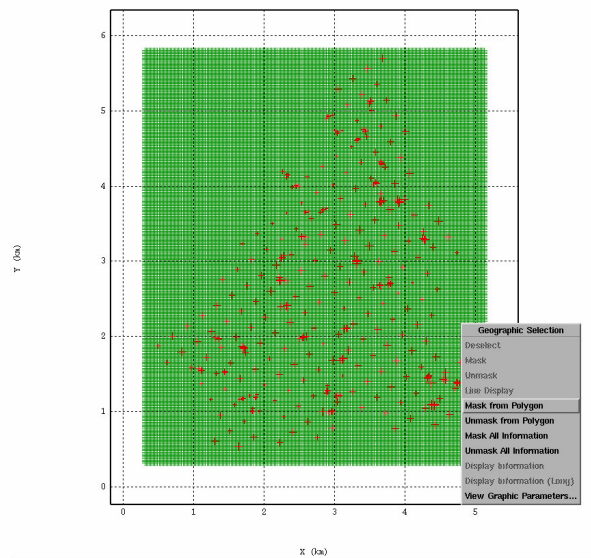
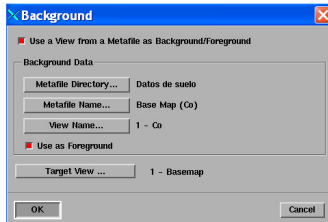
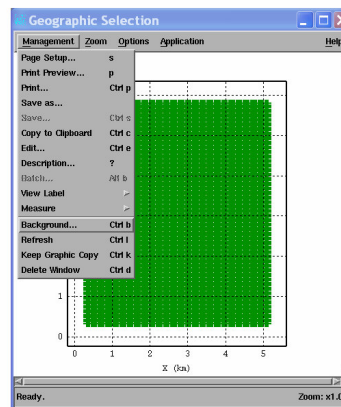
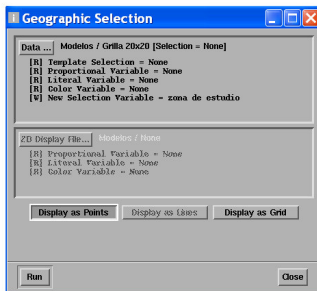
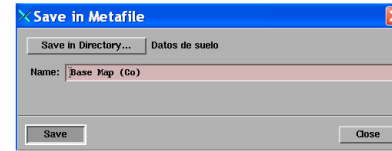
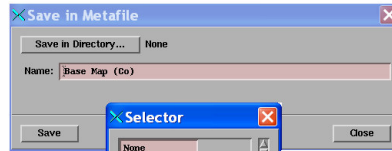
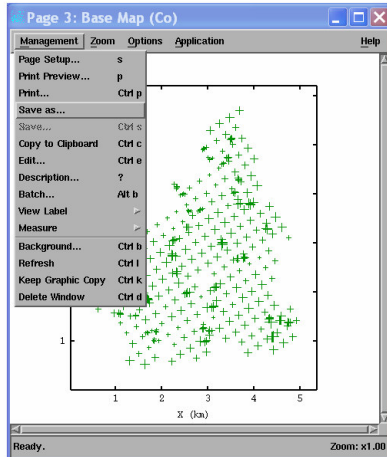
Se entra en el *File and variable selector* al presionar *New Grid File*. Luego, se define una nueva carpeta (*Modelos*) y un nuevo archivo (*Grilla 20x20*). Los parámetros de la grilla propuesta son:

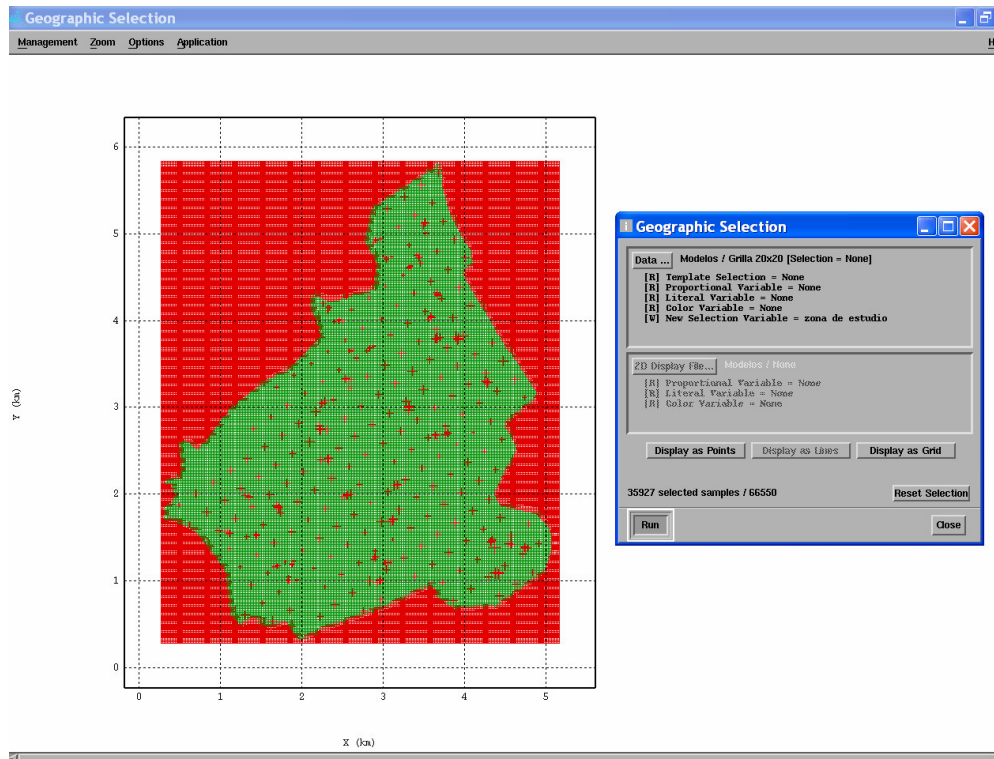
- origen: (0.31km ; 0.31km)
- malla: (0.02km ; 0.02km)
- número de nodos : (242,275)

Se puede desplegar la grilla junto con los datos disponibles al entrar el archivo con datos en *Display File (Optional)* y activar la opción “Graphic Check”.



Para refinar la definición de la zona de estudio (que no corresponde a la grilla rectangular completa), se puede guardar el mapa de los datos obtenido en *Exploratory Data Analysis* como imagen. Luego, en el menú **File > Selection > Geographic**, se puede cargar la grilla y superponer la imagen del mapa de los datos (*Management > Background*). Finalmente se delinea la zona de estudio utilizando la opción “Mask from polygon”.



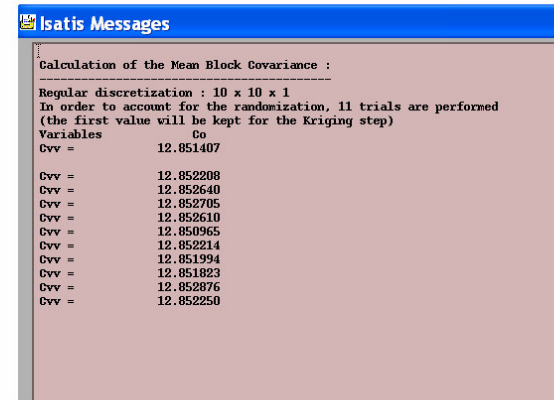
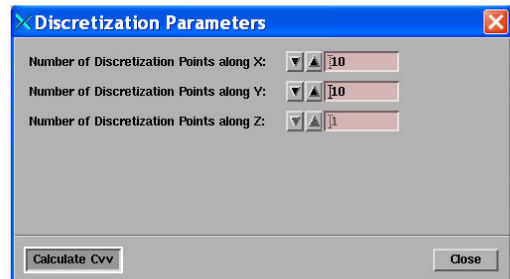
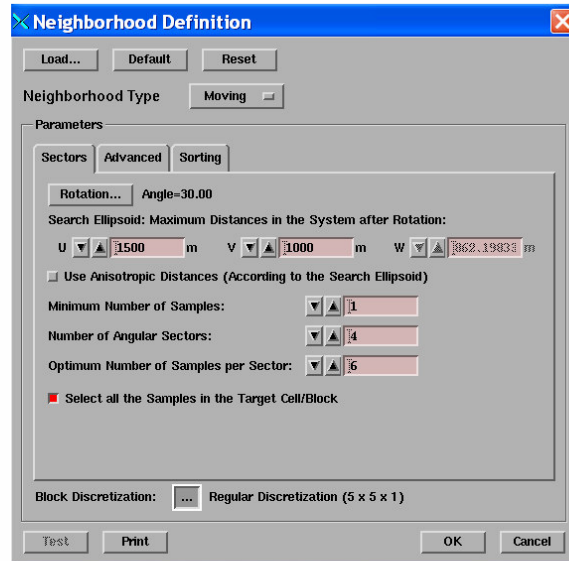
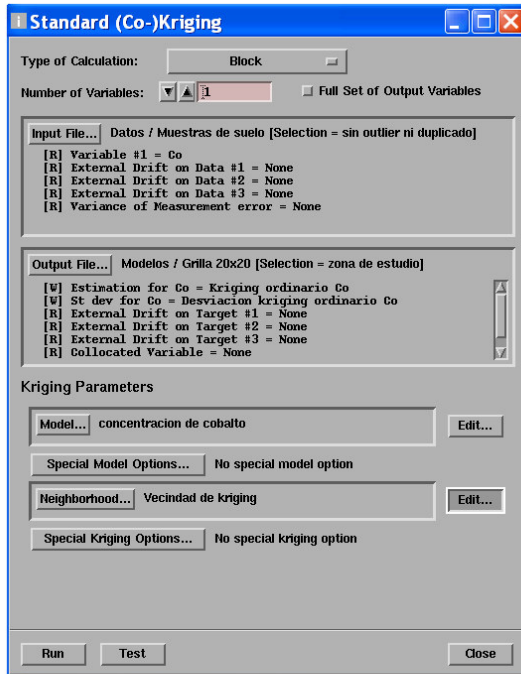


Estimación de las concentraciones de cobalto por kriging

La interpolación por kriging se encuentra en *Interpolate > Estimation > (Co-)Kriging*.

Las unidades a estimar miden 20m×20m y tienen un soporte mayor que las muestras de suelo. Por esta razón, se realiza un kriging de bloque, activando la opción correspondiente al inicio de la ventana de kriging. Los datos a utilizar (*Input File*) son las concentraciones de cobalto en las muestras de suelo. Se especifica el nombre de las variables de salida en *Output File* (a saber, el valor estimado y la desviación estándar de kriging), el modelo de variograma (*Model*) y la vecindad (*Neighborhood*). No se prueba ninguna opción especial (*Special model options* y *Special kriging options*).

Sin embargo, por tratarse de una estimación no puntual, una discretización es requerida, cuyos parámetros se especifican en la vecindad (*Edit*). Al final de la ventana que define la vecindad, aparece una opción *Discretizing* (por defecto, 5×5×1). Se decide aumentar esta discretización a 10×10×1. Al presionar el botón *Calculate C_v*, el buzón de mensajes indica los resultados de 11 intentos para calcular la varianza de las concentraciones de cobalto en las unidades de remediación (esta varianza se evalúa a partir del modelo de variograma, mediante una integración numérica). De ser suficiente la discretización de los bloques, los resultados deberían permanecer relativamente estables. En el presente caso, todos los intentos señalan una varianza de 12.85.



Se aprueba el parámetro de discretización de la vecindad (*OK*) y se ejecuta el kriging de bloques (*Run*).

Los resultados del kriging pueden verse en el menú *Statistics > Exploratory Data Analysis*:

- mapas de los valores estimados y desviaciones estándar de estimación
- histograma de los valores estimados
- selección de los bloques cuya estimación sobrepasa un umbral crítico (12 ppm).

Las estadísticas básicas indican que de las 35927 unidades de remediación, 30278 (o sea, el 84.3% del total) tienen valores estimados bajo el umbral crítico de 12 ppm. Ahora, debido a la propiedad de suavizamiento del kriging, esta proporción puede estar ser engañosa: el kriging tiende a acercar los valores estimados a la media de los datos, disminuyendo la frecuencia de valores extremos (sobre el umbral). Para remediar a esta situación se preferirá utilizar simulaciones condicionales.

Exploratory Data Analysis

Data File... Modelos / Grilla 20x20 [Selection = zona de estudio]

Kriging ordinario Co
Desviacion kriging ordinario Co

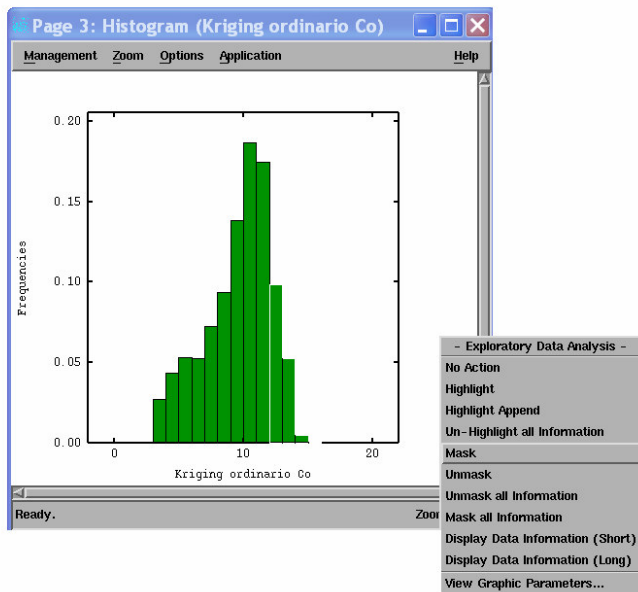
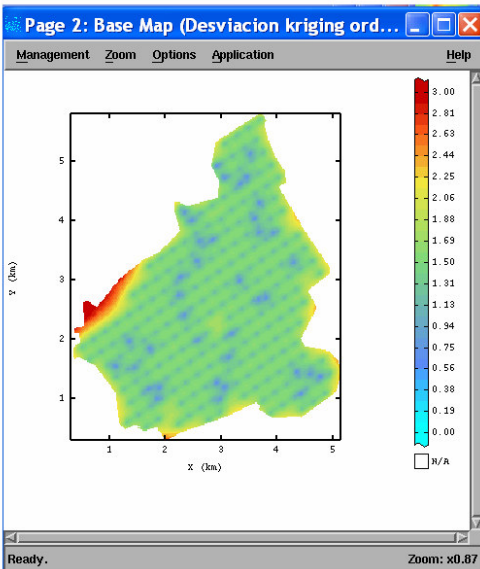
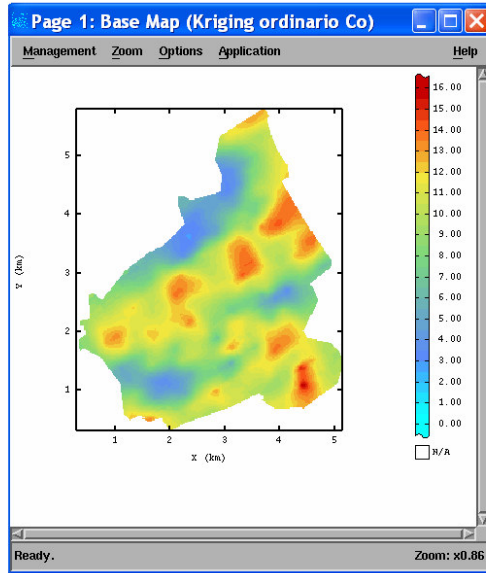
Statistics
Format...

Statistical Representations

- Define Parameters Before Initial Calculations
- Use the Grid Organization
- Display Using the Reference Variable: ... Kriging ordinario Co
- Compute Using the Weight Variable: ... [R] Weight Variable = None

Preferences... Recover Pages...

Run Close



Isatis Messages

Univariate Statistics

	Count	Minimum	Maximum	Mean	Variance
Kriging ordinario Co	35927	2.84	15.93	9.58	6.49

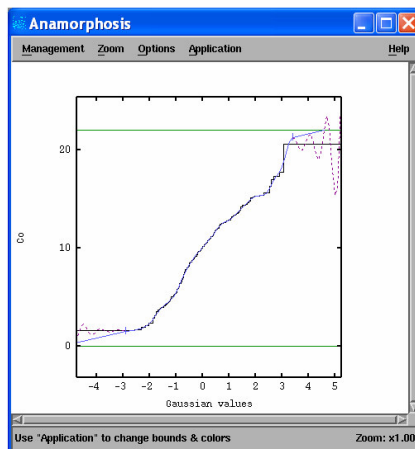
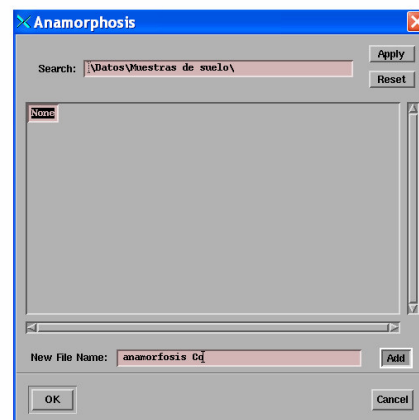
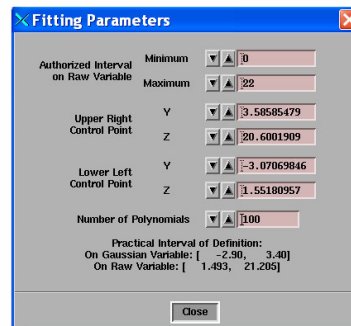
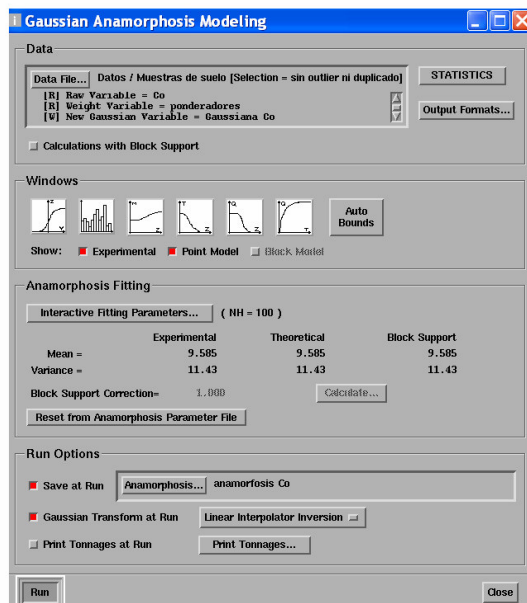
Univariate Statistics

	Count	Minimum	Maximum	Mean	Variance
Kriging ordinario Co	30278	2.84	12.00	8.97	5.26

Simulación condicional de las concentraciones de cobalto

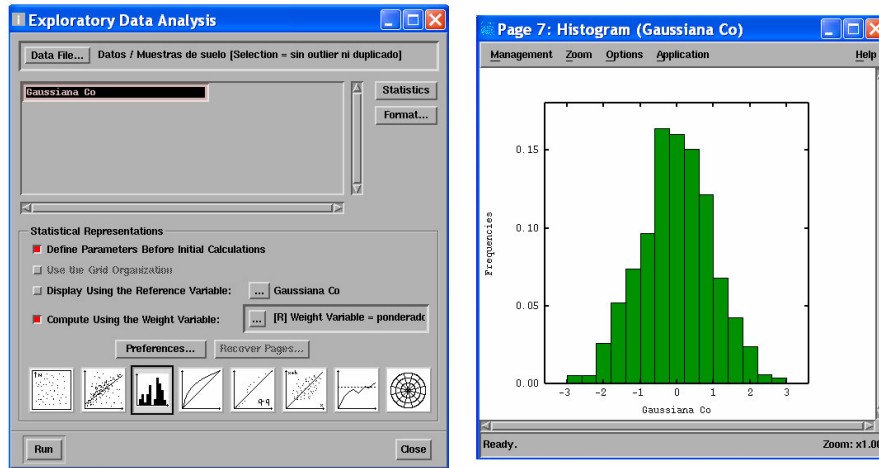
La simulación se lleva a cabo en el marco del llamado modelo multi-Gaussiano. Contempla las siguientes etapas.

- 1) Transformación de los datos originales (concentración de cobalto) a datos Gaussianos: **Statistics > Gaussian Anamorphosis Modeling**. En este menú, se debe especificar los valores extremos admisibles para la concentración de cobalto (por ejemplo, 0 ppm y 22 ppm), el grado del polinomio utilizado para modelar la función de anamorfosis (100), el nombre de la función de anamorfosis (por ejemplo, “anamorfosis Co”) y la opción de transformación. Respecto a lo último, las dos primeras opciones (*Frequency inversion* y *Empirical inversion*) realizan la transformación de los datos siguiendo la anamorfosis empírica (función escaloneada, que aparece en negra en el gráfico de la anamorfosis), mientras que la tercera opción (*Linear Interpolator Inversion*) utiliza la anamorfosis modelada (línea azul).

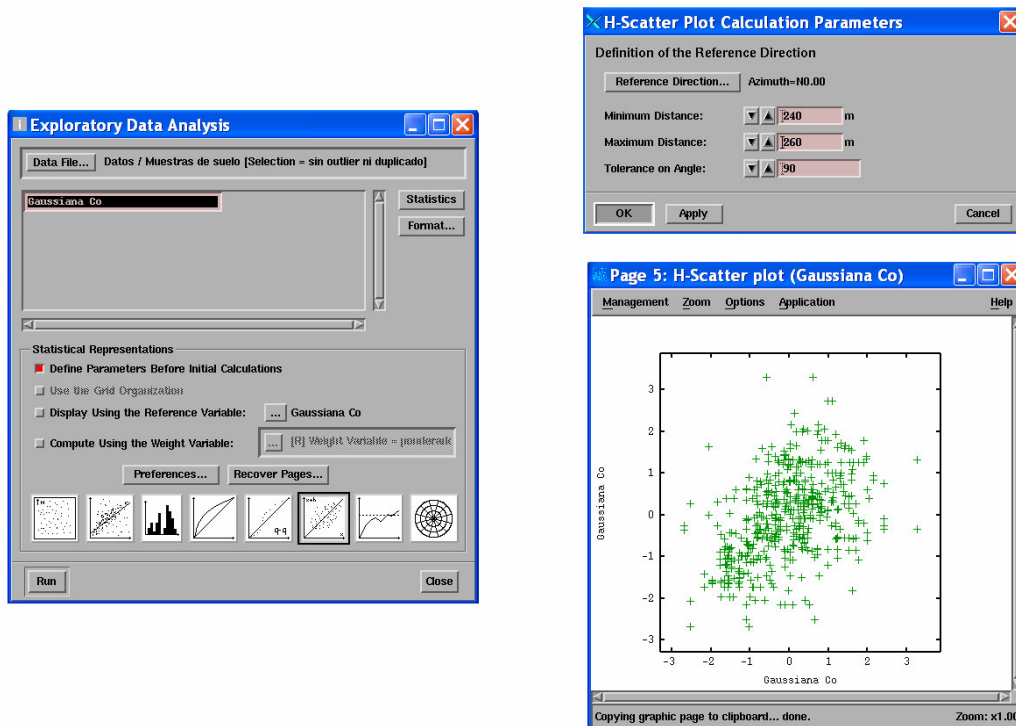


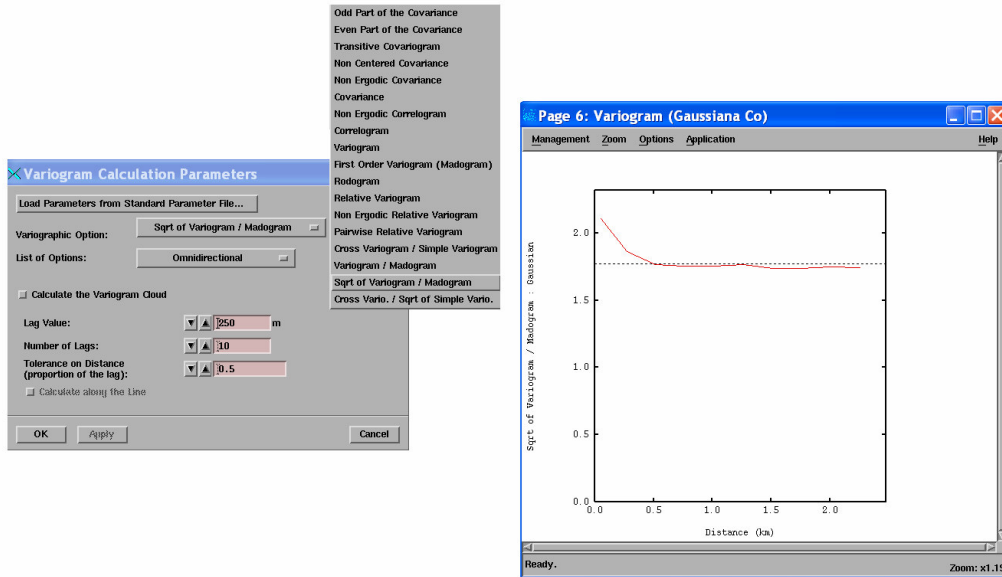
2) Estudio exploratorio y variográfico de los datos Gaussianos: *Statistics > Exploratory Data Analysis* y *Statistics > Variogram Fitting*.

- Primero, se comprueba que el histograma de los datos transformados tiene forma de campana de Gauss.

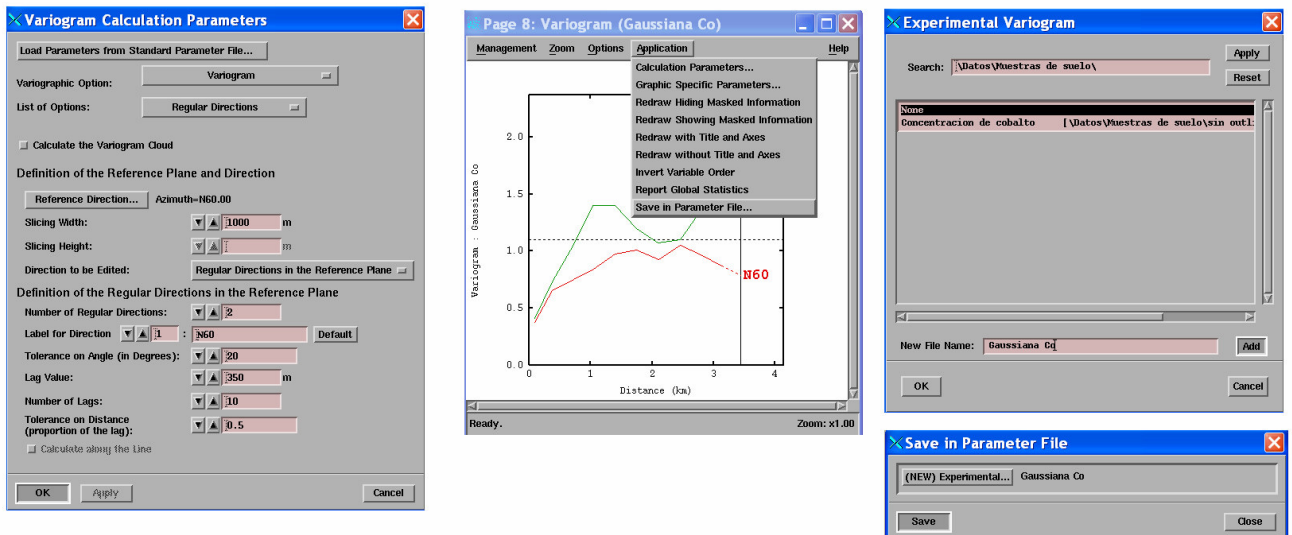


- Se verifica que los pares de datos transformados tienen distribuciones bigaussianas, mediante la visualización de nubes de correlación diferida (que deben tener forma de elipses) o del cociente entre la raíz cuadrada del variograma y el madograma (que debe ser constante e igual a 1.77).

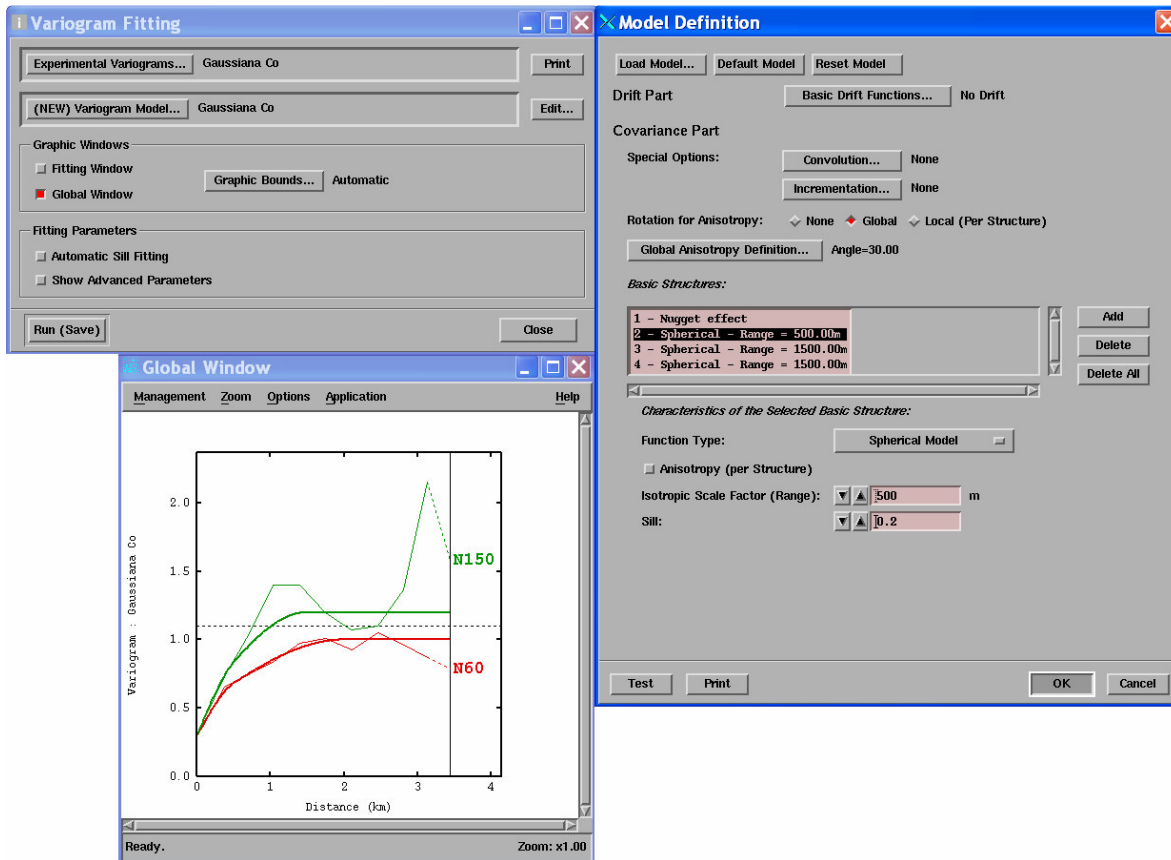




- Se calcula y se guarda el variograma experimental de los datos transformados. Para ello, se usa los mismos parámetros que para calcular el variograma experimental de los datos originales.



- Se ajusta un modelo de variograma (*Statistics > Variogram Fitting*). El modelo propuesto consta de un efecto pepita (*Nugget*) y tres modelos esféricos anidados, con alcances (0.5km;0.5km), (2km;1.5km) y (∞ ;1.5km) a lo largo de las direcciones N60°E y N30°W, respectivamente. Se guarda el modelo al presionar el botón *Run (Save)*.



3) Simulación condicional: **Interpolate > Conditional Simulation**. Isatis dispone de tres algoritmos de simulación de funciones aleatorias multi-Gaussianas:

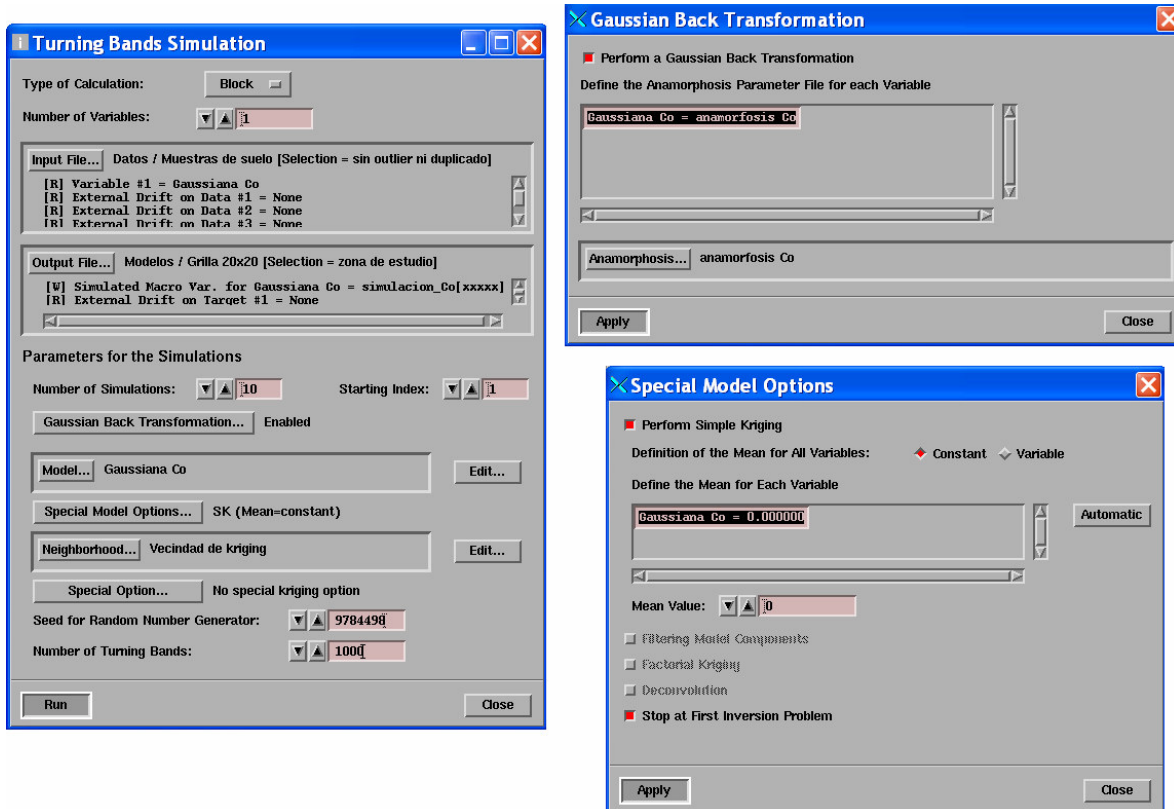
- Algoritmo de bandas rotantes (*Turning Bands*)
- Algoritmo secuencial (*Sequential Gaussian*)
- Algoritmo de descomposición matricial (*LU Decomposition*)

En el presente caso, se decide usar el primer algoritmo (bandas rotantes). La simulación se realizará sobre bloques (option *Block*), a saber, unidades de remediación de 20m de lado. En input file, uno entra los datos Gaussianos de cobalto, mientras que en output file se define una variable de salida (*simulacion_Co*). Se trata de una variable vectorial (“*macro-variable*”), que tiene tantas componentes como realizaciones construidas (en este caso, serán 50). Luego, se entra la función de anamorfosis (*anamorfosis Co*) que se usará para transformar las simulaciones desde el espacio Gaussiano al espacio de las concentraciones de cobalto, el modelo variográfico de los datos Gaussianos, el tipo de kriging utilizado para condicionar las simulaciones (kriging simple de media 0) y la vecindad de kriging. Finalmente, se debe entrar dos números:

- Un número de semilla (*Seed*), requerido para la generación de valores aleatorios. Se aconseja tomar un número grande (6 a 8 dígitos). En caso de hacer varias corridas (por ejemplo, 5 corridas de 10 realizaciones), se debe cambiar la semilla en cada

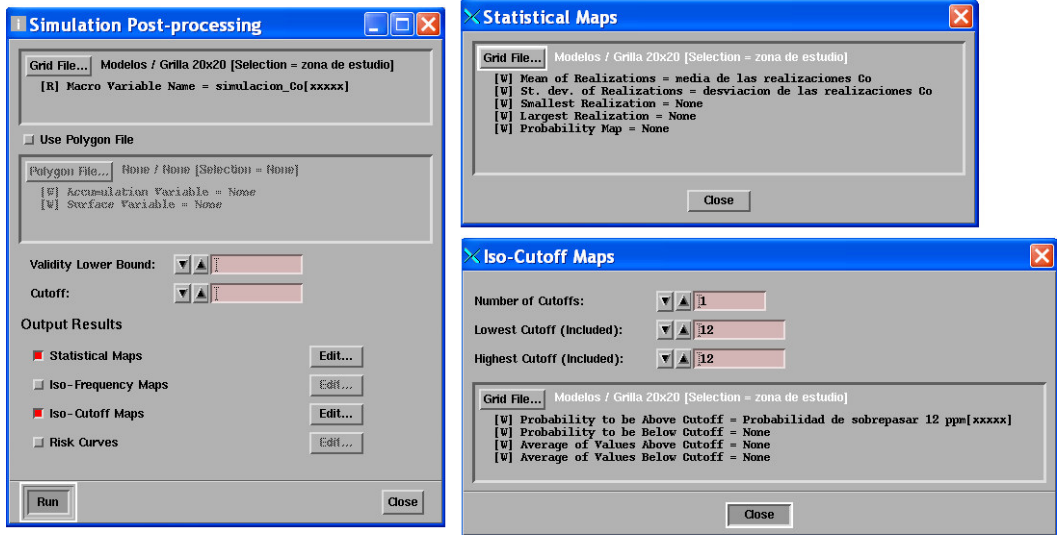
corrida, a falta de que los números aleatorios generados serían los mismos y, por lo tanto, las realizaciones también serían las mismas.

- Un número de “bandas rotantes” que es propio del algoritmo de simulación. La simulación en el espacio 2D se logra mediante simulaciones unidimensionales a lo largo de líneas distribuidas en forma regular o casi regular en el espacio 2D. Converge a una simulación multi-Gaussiana cuando se suma una gran cantidad de simulaciones unidimensionales (debido al teorema del límite central), para fijar las ideas, varios cientos o miles. En este caso se decide tomar 1000 bandas.

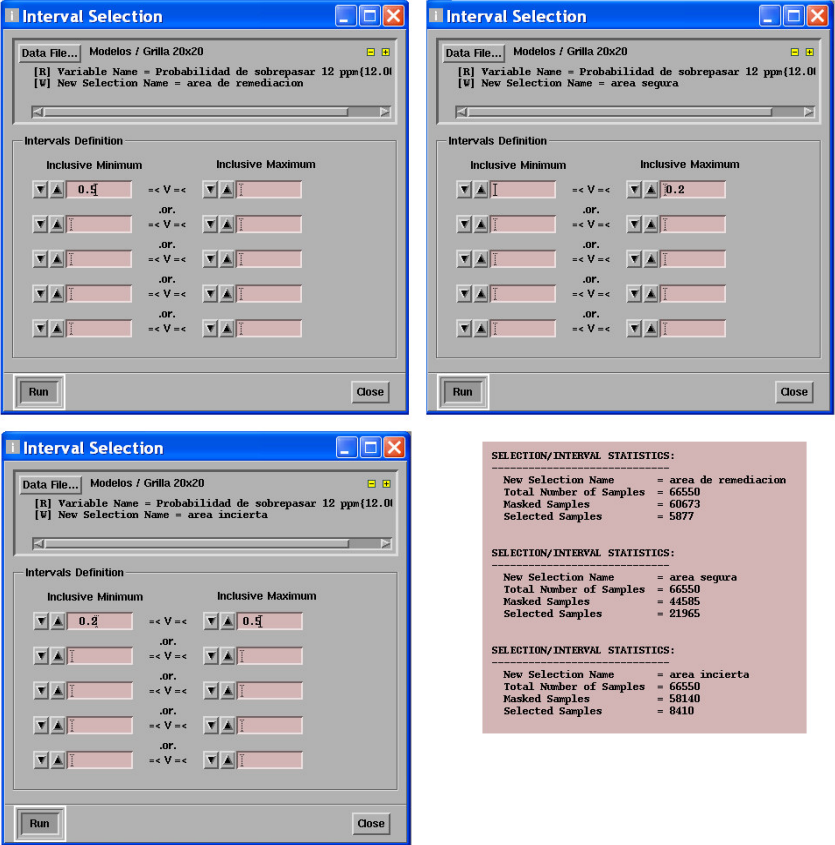


4) Procesamiento de las simulaciones. En el menú **Tools > Simulation Post-Processing**, se puede calcular varias estadísticas (bloque a bloque) sobre las concentraciones simuladas de cobalto. Por ejemplo:

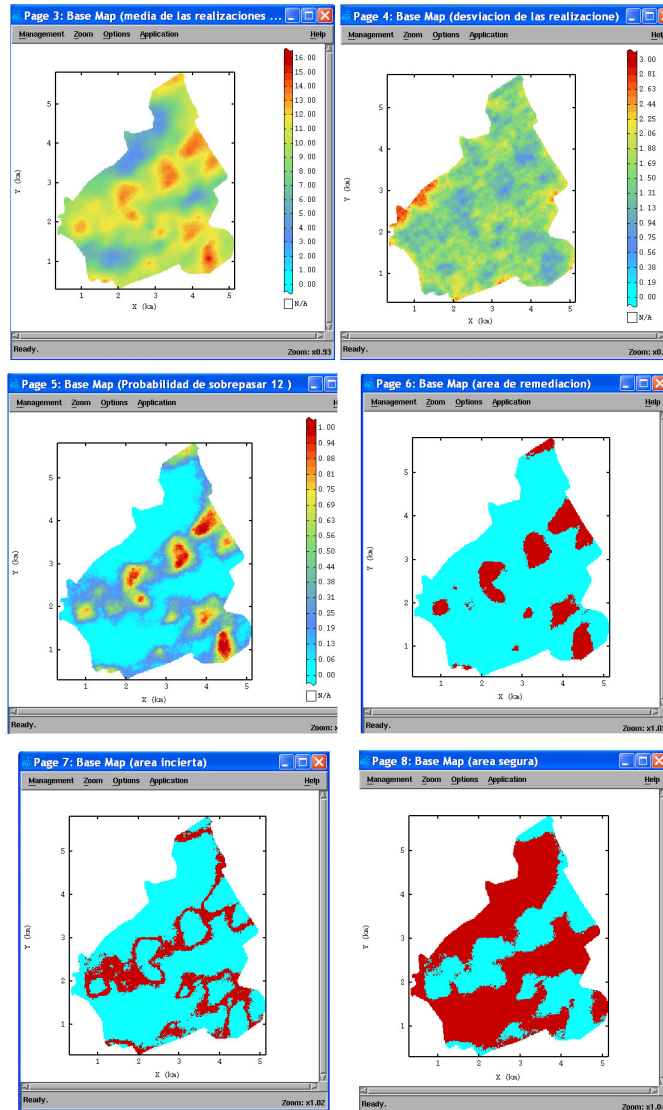
- Promedio y desviación estándar de las realizaciones (*Statistical Maps*)
- Cuantiles (por ejemplo, la mediana) de las realizaciones (*Iso-Frequency Maps*)
- Probabilidad de sobrepasar un umbral dado (*Iso-Cutoff Maps*), por ejemplo 12 ppm.



5) Definición de áreas según el nivel de peligrosidad (*File > Selection > Intervals*). Por ejemplo: un *área de remediación* donde la probabilidad de superar el umbral 12 ppm es mayor que 0.5; un *área segura* con las unidades cuya probabilidad de superar 12 ppm es menor que 0.2; un *área incierta* con las unidades cuya probabilidad de superar 12 ppm está entre 0.2 y 0.5, la cual requerirá un muestreo adicional para saber si se debe remediar o dejar in situ.



- 6) Visualización de los resultados (*Statistics > Exploratory Data Analysis*), por ejemplo mapas de la concentración esperada (media de las realizaciones), de la incertidumbre asociada (desviación estándar de las realizaciones), de la probabilidad de encontrar una concentración sobre 12 ppm y de las tres áreas previamente definidas.



Cabe notar la similitud entre el mapa de kriging y el mapa obtenido al promediar las realizaciones. En cambio, la desviación estándar de las realizaciones depende no sólo de la cantidad y posición de las muestras, sino que también de las concentraciones de cobalto medidas en estas muestras, a diferencia de la desviación estándar de kriging.