

# Nova metodologia para a construção de Índices Composicionais de Poluição em solos - um estudo de caso em Langreo, Espanha



**Teresa Albuquerque**  
Msc  
Professora Adjunta  
Escola Superior de Tecnologia do IPCB.  
Membro do CERNAS | QRural, Instituto Politécnico de Castelo Branco and ICT, Universidade de Évora  
teresal@ipcb.pt

**C. Boente**  
Department of Mining, Mechanic, Energetic and Construction Engineering, ETSI, University of Huelva.  
CIQSO-Center for Research in Sustainable Chemistry, Associate Unit CSIC-University of Huelva  
"Atmospheric Pollution"

**J.R. Gallego**  
Environmental Biogeochemistry & Raw Materials Group and INDUROT.  
Campus de Mieres, University of Oviedo

**V. Pawlowsky-Glahn**  
Dpt. Computer Science, Applied Mathematics and Statistics, University of Girona, Spain

**J.J. Egozcue**  
Dpt. Civil and Environmental Engineering, Technical University of Catalonia, Barcelona, Spain

## Sumário

O complexo comportamento geoquímico de Elementos Potencialmente Tóxicos (EPT) em solos pode afetar severamente os ecossistemas e a saúde humana. No entanto, é necessário compreender primeiro o que se entende por um solo "limpo" para depois poder avaliar um solo "poluído" e correspondente grau de severidade associado. Tendo em conta que a composição química de um solo é composicional, os atributos variam juntos, é, neste trabalho, introduzida uma nova metodologia para a construção de Indicadores Composicionais com base no formalismo da Análise de Dados Composicionais (CoDa). Na identificação de um equilíbrio composicional é necessário definir os elementos poluentes e os não poluentes para depois construir um Indicador de Poluição Composicional (IPC). Apresenta-se como estudo de caso a região contaminada de Langreo, noroeste de Espanha, onde num conjunto de 150 amostras de solo georreferenciadas foram analisados, em cada amostra, 37 elementos químicos. Calcularam-se depois, três IPCs, com base no formalismo CoDa e no conhecimento pericial. Num último passo, foram construídos mapas de distribuição espacial e de probabilidade, de exceder um dado limite, para os três novos indicadores de poluição, através de um processo estocástico de simulação sequencial - Simulação Sequencial Gaussiana (SSG). Os padrões espaciais obtidos e correspondente variabilidade associada, permitiu uma melhor compreensão dos processos associados à distribuição e ao enriquecimento relativo em EPTs.

## Palavras-Chave

Elemento Potencialmente Tóxico (EPT); Indicador Composicional de Poluição (ICP); Simulação Sequencial Gaussiana (SSG).

## 1. Introdução

A acumulação contínua de Elementos Potencialmente Tóxicos (EPTs) em diferentes matrizes ambientais ao longo do tempo tem comprometido a saúde dos organismos vivos e a qualidade dos ecossistemas, ao ponto de essas substâncias representarem hoje uma grande preocupação ambiental em todo o mundo (Clemens, 2006). A acumulação de EPTs pode ser explicada pelo crescimento populacional, acompanhado pelo desenvolvimento de atividades industriais e de habitação, que trazem consigo inúmeras fontes de poluição (Boente et al, 2022, Kelepertzis et al., 2020; Sanchez de la Campa et al., 2018). Neste contexto, nos últimos anos, têm-se verificado o desenvolvimento de metodologias capazes de oferecer uma caracterização precisa da distribuição espacial de EPTs no solo, bem como de identificar as suas possíveis fontes de enriquecimento (Wang et al., 2021). Os mapas são uma forma poderosa de representar visualmente a distribuição espacial de poluentes e são uma ferramenta útil para apoiar a tomada de decisão e as vulnerabilidades em relação a cenários ambientalmente complexos (Boente et al, 2022). Em geoquímica, uma estratégia comum para representar a distribuição de EPTs consiste em calcular uma série de índices ou indicadores de contaminação. Neste trabalho, uma nova e promissora metodologia é apresentada para construir Indicadores Composicionais de Poluição (ICPs) em solos. Na região de Langreo (Espanha), foram colhidas 150 amostras de solo e três ICP foram construídos e validados.

## 2. Material e Métodos

### 2.1. Natureza e requisitos de Indicador Composicional de poluição (ICP)

A definição de uma linha de base composicional para avaliação da poluição do solo e suas variações requer a consideração de um conjunto de pontos-chave (Boente et al., 2022):

1. Caráter composicional: A análise da amostra

do solo, concentrações de elementos químicos e/ou outras substâncias químicas presentes devem ser consideradas como composicionais, ou seja, como uma única composição. Os indicadores devem ser coerentes com essa suposição preliminar.

2. Definição de poluição: A poluição é definida como uma anomalia (diferença composicional) da composição de uma amostra em comparação com o que é considerado um solo natural e não poluído, designado background. O background deve incluir elementos poluentes, bem como componentes não poluentes.
3. Um indicador para cada tipo de poluição: Existem diferentes tipos de poluição e distingui-los pode ser importante. Por exemplo, a poluição pode derivar da agricultura, água de cidades, indústria, entre outros. O estudo desses diferentes tipos de contaminação requer a disponibilidade de amostras que cubram todos esses tipos de poluição permitindo assim uma análise discriminante.

Foram construídos três Indicadores Composicionais de Poluição:  $CIP_1$ ,  $CIP_2$  e  $CIP_3$ , de acordo com a equações 1, 2 e 3:

$$CIP_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \left( \ln \frac{Sb}{(K \cdot Al)^{\frac{1}{2}}} \right) \quad \text{Equação (1)}$$

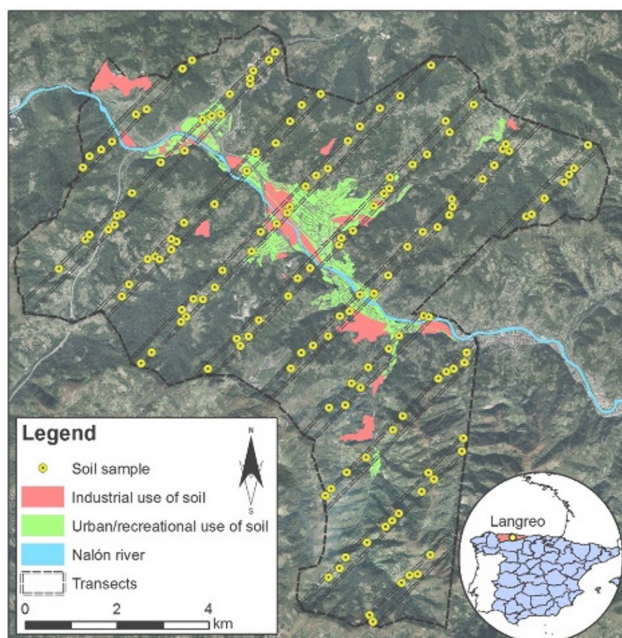
$$CIP_2 = \sqrt{\frac{9}{6}} \ln \left( \frac{(Sb \cdot Pb \cdot Hg)^{\frac{1}{3}}}{(K \cdot Al \cdot Zn)^{\frac{1}{3}}} \right) \quad \text{Equação (2)}$$

$$CIP_3 = \sqrt{\frac{30}{11}} \ln \left( \frac{(As \cdot Cu \cdot Hg \cdot Pb \cdot Zn)^{\frac{1}{5}}}{(Al \cdot Ca \cdot Fe \cdot K \cdot Mg \cdot Na)^{\frac{1}{5}}} \right) \quad \text{Equação (3)}$$

### 2.2. Características do conjunto de dados e da área de estudo

Foram colhidas 150 amostras de solo e 37 elementos químicos, incluindo PTEs de toxicidade variável. Os elementos químicos considerados (mg/kg) foram: Ag, Al, As, Au, B, Ba, Bi, Ca, Cd, Co, Cu, Cr, Fe, Ga, Hg, K, La, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, P, Pb, S, Sb, Sc, Se, Sr, Te, Th, Ti, Tl, U, V, W e Zn. Conjuntamente, foi recolhida informação as diferentes atividades desenvolvidas. Nomeadamente, industriais,

como mineração de carvão, metalurgia e fábricas químicas urbanas (Fig.1).



**Figura 1.** Área de estudo (Langreo, Espanha), localização das amostras colhidas e definição de áreas correspondentes a atividades urbanas e industriais (in Boente et al, 2022).

### 2.3. Modelos espaciais - abordagem geoestatística

Para a construção de mapas de distribuição espacial e de probabilidade, de ultrapassar um determinado limite de corte, para cada um dos três ICP, foi utilizada a Simulação Gaussiana Sequencial (SGS) como algoritmo de simulação estocástica (Goovaerts, 1997). Os resultados obtidos (Fig.2) mostram que CIP1, CIP2 e CIP3 mostram distribuições espaciais similares. A cidade e os seus arredores são as principais áreas afetadas pela poluição e ao utilizar K e Al como referência de origem natural (não poluída), o Sb por si só é um indicador adequado de poluição na área.

### Conclusões

Os dados geoquímicos são dados composicionais, uma vez que as concentrações de elementos em qualquer matriz ambiental são comumente expressas como partes de um todo e variam juntas. Uma vez estabelecida

esta característica, é possível aplicar procedimentos de dados composicionais para obter indicadores que abordem a poluição, por exemplo, em solos. Uma nova metodologia é descrita para o controlo a distribuição de PTEs. O método foi testado com 150 amostras de solo e 37 elementos químicos analisados na área industrializada de Langreo (Espanha). A metodologia apresentada define um fundo não poluído onde os indicadores medem a desvio do fundo. A construção de mapas permite uma visualização de padrões probabilísticos de distribuição espacial, para os novos indicadores de poluição, constituindo uma ferramenta importante na definição de planos de monitorização e estabelecimento de estratégias adequadas de mitigação.

### Agradecimentos:

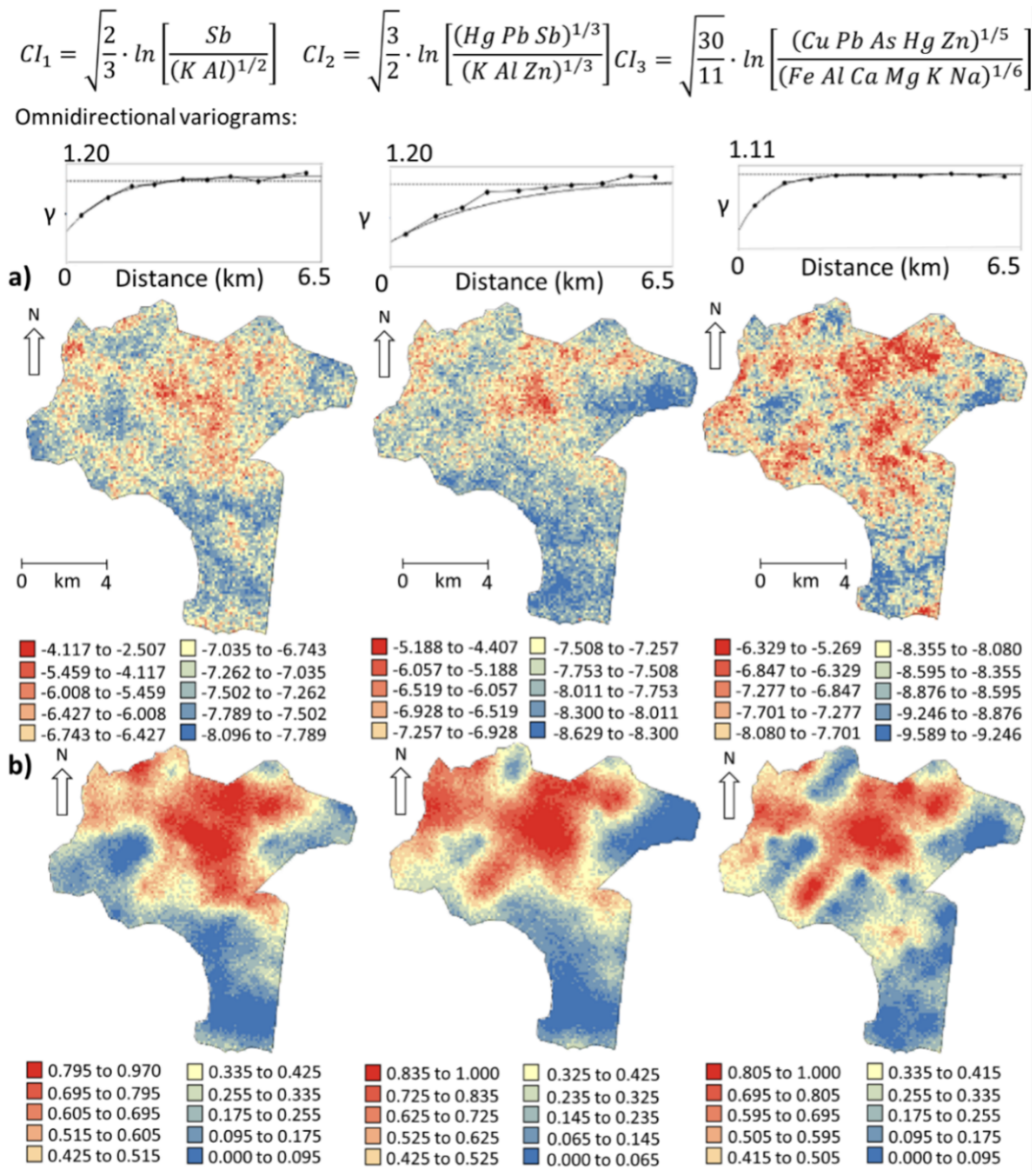
Financiamento através de PAIDI 2020 program (Ref 707 DOC 01097) and RTI2018-095518-B-C21 (C22) (MCIU/AEI/FEDER)

### Referências

- Boente, C., Albuquerque, M. T. D., Gallego, J. R., Pawlowsky-Glahn, V. and Egozcue, J. J. (2022). Compositional baseline assessments to address soil pollution: An application in Langreo, Spain. *Science of the Total Environment*, 812. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.152383>.
- Clemens, S. (2006). Toxic metal accumulation, responses to exposure and mechanisms of tolerance in plants. *Biochimie* 88, 1707-1719.
- Goovaerts, P. (1997). *Geostatistics for Natural Resources Evaluation*. Applied Geostatistics Series. Oxford University Press, New York, NY (USA). 837 483 p.
- Jenks, G. F. (1967). The data model concept in statistical mapping. *International Yearbook of Cartography* 7: 186-190.
- Kelepertzis, E., A. Argyraki, V. Chrastny, F. Botsou, K. Skordas, M. Koma\_rek, and A. Fouskas (2020). Metal(Ioid) and isotopic tracing of pb in soils, road, and house dusts from the industrial area of volos (central Greece). *Science of the Total Environment* 725, 13830.

Sanchez de la Campa, A. M., D. Sanchez-Rodas, L. Alsiou\_, A. Alastuey, X. Querol, and J. D. de la Rosa (2018). Air quality trends in an industrialized area of SW Spain. *J. Clean. Prod.* 186, 465{474.

Wang, Z., X. Chen, D. Yu, L. Zhang, J. Wang, and J. Lv (2021). Source apportionment and spatial distribution of potentially toxic elements in soils: A new exploration on receptor and geostatistical models. *Science of the Total Environment* 759 (14342). 8.



**Figura 2.** Variogramas omnidirecionais, imagens medias das 100 SSG, mapas de probabilidade de exceder um limite definido, para cada um do ICP. A escala de cores corresponde às classes obtidas pela classificação de Jenks (Jenks, 1967) (in Boente et al, 2022).