

**REGRESSÕES LINEARES EM GEOCRONOLOGIA:
ISÓCRONAS, ERRÓCRONAS E PSEUDOISÓCRONAS**

K. Kawashita¹
I. K. Sonoki¹
K. Sato¹
H. M. Sonoki¹

RESUMO

Diversos métodos de regressão linear propostos na literatura, para fins geocronológicos, são discutidos de modo a orientar os geocronólogos na escolha de modelos adequados e também distinguir entre isócronas, errócronas ou pseudoisócronas. No caso do método isocrônico Rb/Sr, são disponíveis pelo menos 6 modelos ou abordagens estatísticas, cada qual com peculiaridades específicas. Exemplifica-se o caso em que os pontos se alinham dentro dos erros experimentais e utilizando modelos, adequados ou não, que empregam a técnica de ponderação dos pontos, os parâmetros resultantes são praticamente concordantes, porém os erros podem variar até por um fator tão alto quanto 7, conforme a formulação estatística proposta. Em vista deste fato, propõem-se, com base também em exemplos, os modelos mais adequados e também critérios gerais que devem ser observados até na seleção de amostras para a obtenção de isócronas. Nos casos em que os pontos não se alinham dentro dos erros experimentais, por causas geológicas (sistema aberto), são abordados 4 dos modelos sugeridos e é feita também uma discussão em que casos seriam aplicáveis. No método da concordância Pb/U, em que as regressões usuais também são aplicáveis para determinar a melhor reta, algumas particularidades adicionais são discutidas.

ABSTRACT

Several methods of linear regression reported in the literature for use in geochronology are discussed in order to guide geochronologists in the selection of an adequate model and also to distinguish among isochrons, errorochrons and pseudoisochrons. For Rb/Sr isochron methods, at least 6 models or statistical treatments are available, each one with its peculiarities. Based in two examples, we show that for cases when the experimental data points scatter within limits determined by the experimental errors, and using or not the weighted regression treatment, the resultant parameters are essentially concordant. The estimates of associated error, however especially for initial ratios, show variations by up to a factor of 7, depending upon the statistical procedure. In view of this fact and on the basis of simulated test data, we propose not only more adequate models, but also general criteria that must be observed in the selection of samples in order to obtain an isochron. If the data to be regressed show a scatter in excess of experimental error for geological reasons

¹Centro de Pesquisas Geocronológicas, CPGeo, Instituto de Geociências/USP, São Paulo.

(open system), four regression models are available to treat the parameters defined in these cases as errorchrons. These models are briefly discussed in terms of their applications. In the Pb/U methods, in which the usual regression treatment is applied to obtain the best-fit line, some additional peculiarities are pointed out.

INTRODUÇÃO

Os dados experimentais da maioria dos métodos geocronológicos são interpretados mediante a utilização dos diagramas conhecidos como isocronicos. Nesta metodologia, usualmente razões isotópicas (Y_1) e razões (X_1) entre o radionuclídeo e um isótopo estável, que é comum às mesmas, de amostras cogenéticas ou supostamente cogenéticas, consanguíneas ou coevas, são lançadas em coordenadas (X , Y). Um dos mais conhecidos e utilizados é o método isocronico Rb/Sr, preconizado por NICKOLAYSEN (1961) em que as razões respectivas são Sr^{87}/Sr^{86} e Rb^{87}/Sr^{86} . Entre outros menos utilizados, podemos citar os diagramas Nd^{143}/Nd^{144} vs Sm^{147}/Nd^{144} , Ar^{40}/Ar^{36} vs K^{40}/Ar^{36} e os sistemas U, Th/Pb. Estes diagramas, quando há cogeneticidade e o sistema permaneceu fechado, ou seja, as razões variaram apenas devido a decaimento radioativo, devem resultar em uma relação linear do tipo $Y = a + b * X$ e os parâmetros desta melhor reta fornecerão a idade, dada pela inclinação b , e a razão dita inicial, dada pela intersecção a . Nos outros dois diagramas, também bastante utilizados, conhecidos como concordia e diagrama isocronico Pb/Pb (Pb^{207}/Pb^{204} vs Pb^{206}/Pb^{204}), interessa-nos apenas o parâmetro b , ou seja, a inclinação. Embora conceitualmente simples, os geocronólogos ficam um tanto aturvidos quando não há um perfeito alinhamento dos pontos (como acontece na maior parte das vezes) e têm dificuldades em escolher, em tais casos, a melhor técnica de regressão linear para a obtenção dos parâmetros e respectivos erros associados. Na prática, muitos geocronólogos usam critérios não muito objetivos, desprezando um ponto ou conjunto de pontos que não se ajustam à reta de tendência geral e os parâmetros são calculados, quase que universalmente, pelo método proposto por YORK (1969). Existem, no entanto, pelos menos mais 4 modelos que, para certas particularidades, podem ser mais adequados. São para casos em que, por exemplo, os dados possuem erros induzidos por processos geológicos (sistema aberto), isto é, erros maiores do que os experimentais de medida, ou então para sistemas muito especiais onde ocorreram rehomogeneizações locais como no caso dos gnaisses bandados de Hebron (CAMERON et al., 1981).

Um outro aspecto bastante importante é o relativo aos erros experimentais dos diversos pontos e também quanto à forma de ponderação desses pontos. Durante um certo tempo, não houve uniformidade de critérios e o assunto é bastante discutido por BROOKS et al. (1972) e também por SNELLING (1976).

ERROS EXPERIMENTAIS E ASSOCIADOS À REGRESSÃO EM GEOCROLOGIA

Em geocronologia, geralmente nanogramas de núclídeos radiogênicos como Sr^{87} , Nd^{143} , Pb^{206} , Pb^{207} e Ar^{40} , acumulados a partir da desintegração de radionuclídeos de meia vida tão longa quanto 106 bilhões de anos, são medidas, após uma cuidadosa separação química, em termos de razões isotópicas com a máxima precisão, em espectrômetros de massa. Até o final da década de 60, estas razões (Y_1) eram obtidas com erros da ordem de 0,25%, passando após, para ordem de até 0,01% para razões como Sr^{87}/Sr^{86} e Nd^{143}/Nd^{144} , que são passíveis de normalização para efeitos de fracionamento isotópico durante a análise e quando obtidas com espectrômetros acoplados "on line" a microcomputadores. Razões isotópicas não normalizáveis como as do Pb ou de elementos bi-isotópicos como Rb e U já apresentam erros maiores, mesmo com tais

espectrômetros. Geralmente é atribuído um erro da ordem de 0,1% para efeitos de ponderação. Assim, análises precisas de relações (X_i) como Rb^{87}/Sr^{86} , U^{235}/Pb^{204} e U^{238}/Pb^{204} obtidas pelo método de diluição isotópica em que se utiliza espectrometria de massas, apresentam erros de pelo menos 0,1%. Na literatura constam erros entre 0,15% e 1%.

Especificamente, no método Rb/Sr, os erros nas razões Rb^{87}/Sr^{86} obtidas por diluição isotópica mostram ainda serem proporcionais à $(Rb^{87}/Sr^{86})^2$, ou seja, a variância de Rb^{87}/Sr^{86} é da forma: $Var (Rb^{87}/Sr^{86}) = C * (Rb^{87}/Sr^{86})^2$, onde $C = \sum ((\text{Variância}_i / (Rb^{87}/Sr^{86})_i) / N)$ e N = número de pontos, sugerindo, conforme MCINTYRE et al. (1966), um tratamento estatístico mais apropriado. Os erros ou as precisões admitidas podem, assim, serem fictícias e não condizentes com a realidade, principalmente devido às contaminações que podem ocorrer nas diversas etapas analíticas, que vão desde a coleta até a análise isotópica. A manipulação de amostras deve ser procedida em ambiente especial e, em geral, reagentes químicos, especialmente os ácidos rotulados como p.a., não são adequados para a maioria das metodologias. Mesmo com estas precauções, é recomendado, ainda, que as determinações sejam em duplicata, utilizando a clássica fórmula de estimativa para desvio padrão que é dada por: $((dup1-dup2)^2/2)^{1/2}$. Tal recomendação, no entanto, não é observada na maioria dos laboratórios, que optam por maior número de amostras participantes nas isócronas. Outros, como no CPGeo-IG/USP, devido à grande demanda de análises Rb/Sr, as determinações quantitativas destes elementos, quando as amostras apresentam teores maiores que 50 ppm, são efetuadas por fluorescência de raios X (FRX). São análises rápidas e não destrutivas, requerendo não mais que 30 minutos por amostra em duplicata, em comparação com a diluição isotópica que requer alguns dias para um grupo de 5 a 6 amostras. A desvantagem reside apenas na precisão das medidas. Para as amostras cuja concentração é superior a 50 ppm e inferior a 2000 ppm, tanto em Rb como em Sr, os erros estimados para cada um desses elementos, após a correção matricial preconizada por REYNOLDS (1963), utilizando tubo com anodo de molibbdênio, são menores que 2%. O erro composto na relação Rb^{87}/Sr^{86} seria, assim, menor que 2,8%. No entanto, por envolver uma razão, e com isso cancelar uma série de fatores que são comuns ou quase iguais, o erro final é, praticamente, circunscrito a erros estatísticos individuais e aos erros do padrão utilizado. Dependendo das concentrações relativas, os erros na razão Rb/Sr podem chegar a 1% ou menos, o que torna esta técnica quase comparável à da diluição isotópica.

Nas outras metodologias isotópicas aqui referidas, contudo, a fluorescência não é utilizada por dois fatores principais: baixa sensibilidade e/ou baixa concentração dos elementos envolvidos. Particularmente, nos métodos de concórdia Pb/U, os dois elementos são unicamente determinados por diluição isotópica. Destes dois, o chumbo é o que envolve mais variáveis que contribuem para o erro final: a variabilidade na discriminação de massa e as incertezas decorrentes da quantidade e composição isotópica dos chumbos inicial e contaminante (branco). Para casos em que a quantidade de chumbo na amostra é comparável ao nível de branco, as imprecisões nas razões isotópicas Pb^{206}/Pb^{204} e Pb^{207}/Pb^{206} podem ser dezenas de vezes maiores do que as aparentes, que saem impressas pelo computador do espectrômetro. Devido a isso, muitos laboratórios tomam, como norma, um erro maior do que o obtido experimentalmente, mesmo para amostras ricas em Pb. O grupo de Oxford por exemplo, admite um erro de pelo menos 0,1% nas razões Pb/Pb. Nas razões mistas, tipo Pb^{206}/U^{238} , como as utilizadas no diagrama concórdia, que empregam razões Pb^{206}/Pb^{204} e Pb^{207}/Pb^{206} , os erros são, portanto, sempre maiores do que 0,1%. Na sistemática analítica adotada para U/Pb, os pontos analíticos estão afetados, pois, por erros mais ou menos equivalentes tanto em Y como em X (normal bivariado) e além disso, a correlação entre os dois erros é geralmente muito alta (>0,9). Como resultado, a estimativa do erro em torno de cada ponto apresenta-se como elíptica ("error ellipse") e alongada na direção da origem.

A utilização ou não do fator t de Student, como multiplicador para estimativas dos

erros dos parâmetros quando considerado um pequeno número de pontos, é um pouco controversa. Embora alguns autores utilizem estes fatores, que podem ser facilmente encontrados em tabelas, e que são variáveis conforme o número de amostras analisadas em duplicata, tal uso é incorreto, pois a isócrona envolve uma pressuposição de que os pontos se alinham dentro dos limites dos erros experimentais obtidos, conforme observam BROOKS et al. (1972). Tal procedimento talvez fosse justificável nos casos em que a dispersão dos pontos fosse excessiva, resultando em errôneas, porém seria mais racional, a nosso ver, admitir que a tal dispersão é devida a erro de natureza geológica e utilizar um tratamento estatístico ou um modelo mais adequado conforme veremos mais adiante.

Ainda tratando sobre erros, cabe aqui tecer algumas considerações concernentes à distribuição dos erros e à correlação (r) entre os erros de Y e X . Em geocronologia, assim como em vários outros campos de pesquisa, não é muito usual manipular um número muito grande de dados experimentais e, assim aplicar corretamente o formalismo estatístico usual para uma população com frequência de distribuição normal. No que se refere a erros nas determinações de razões Sr^{87}/Sr^{86} e Rb^{87}/Sr^{86} , BROOKS et al. (1972), valendo-se de uma série de dados obtidos em duplicata pelo grupo de Departamento de Geofísica e Geoquímica da Universidade Nacional da Austrália, mostraram que os mesmos, em sua maioria, apresentavam uma distribuição normal e como tal, as regressões por mínimos quadrados são aplicáveis sem muitas restrições.

Quanto à correlação r entre os erros de X e de Y , há testes muitos conclusivos. Pelo menos 5 trabalhos: YORK (1969), CUMMING (1969), CUMMING et al. (1972), BROOKS et al. (1972) e LUDWIG (1980) fazem menção a este fator. Na metodologia Rb/Sr , o fator r deve ser positivo e somente nos casos em que a razão Sr^{87}/Sr^{86} e Sr^{86} , que é denominador comum de Y e X , forem determinados pelo método da diluição isotópica. A correlação é perceptível nos casos em que o teor de Sr é bastante baixo e portanto mais afetada por variações amostrais e contaminação, aumentando, conseqüentemente, de forma direta, as imprecisões nas relações Sr^{87}/Sr^{86} e Rb^{87}/Sr^{86} . BROOKS et al. (1972) mostram, por exemplo, que r é estatisticamente significativa (a nível de confiança de 95% pelo menos) para rochas totais, K-feldspatos e micas que apresentam razões Sr^{87}/Sr^{86} maiores do que 1,0.

Nas metodologias isocronicas Sm/Nd , K/Ar e dos sistemas U , Th/Pb em que todos estes elementos, com exceção do potássio, devem ser analisados por diluição isotópica, as correlações entre os erros de Y e X respectivos são geralmente próximos de 1,0. Na metodologia isotópica Pb/Pb , por exemplo, LUDWIG (1980) relata, um valor de 0,94 para correlação entre Pb^{206}/Pb^{204} e Pb^{207}/Pb^{204} , porém, neste caso particular, é enfatizado que é proveniente mais da incerteza no fator de discriminação d (discriminação por u.m.a.) e não a erro na medição do Pb^{204} . Isto é facilmente explicável, pois nas medidas de razões isotópicas do chumbo não é aplicável a técnica de normalização interna, como acontece para estrôncio e neodímio, casos em que os d são facilmente determinados.

CONSIDERAÇÕES SOBRE OS PRINCIPAIS TRATAMENTOS ESTATÍSTICOS

Para facilitar a discussão, relacionamos a seguir os principais tratamentos estatísticos abordados na literatura geocronológica:

- 1- Regressão simples (Y em X ou X em Y ou média das duas técnicas): SHIELDS (1963).
- 2- Modelos York 1 e Williamson (YORK, 1966 e WILLIAMSON, 1968).
- 3- Modelos 1, 2, 3 e 4 de McINTYRE et al. (1966).
- 4- Modelo York 2 (YORK, 1969).
- 5- Modelos Wendt 1 (in BROOKS et al., 1968) e Wendt 2 (in BROOKS et al., 1972).
- 6- Modelos de Cameron e outros (CAMERON et al., 1981).
- 7- Modelo de Vugrinovich (VUGRINOVICH, 1981).

8- Modelos de Cumming e Ludwig para dados Pb/U (CUMMING, 1969 e LUDWIG, 1980).

9- Modelo de Davis para dados Pb/U (DAVIS, 1982).

A regressão simples é, certamente, a mais utilizada nos diversos ramos da Ciência para se estimar os parâmetros da melhor reta que se ajusta aos dados experimentais obtidos. Na regressão de Y em X, as abscissas são assumidas como sem erros, enquanto que, na regressão de X em Y, as ordenadas é que são sem erros. Os parâmetros da melhor reta são obtidos a partir de equações derivadas assumindo, conforme um caso ou outro, que a somatória do quadrado das diferenças ou somatória dos resíduos ($\sum(\text{res } X_i)^2$ ou $\sum(\text{res } Y_i)^2$), entre a reta e os pontos experimentais, é mínima. E daí é conhecido como método dos mínimos quadrados. Calculadoras portáteis permitem obter geralmente parâmetros calculados segundo regressão de Y em X, apesar de que é também possível efetuar regressões de X em Y revertendo os eixos e reconvertendo adequadamente os parâmetros assim calculados (ver, por exemplo, SHIELDS, 1973). No método isocrônico tal prática, no entanto, é inadequada pois ambas as coordenadas são afetadas por erros que são variáveis de amostra para amostra e de laboratório para laboratório, conforme o tipo de análise e/ou instrumentos utilizados.

Modelos ou tratamento mais adequados para isócronas, especialmente Rb/Sr, foram sendo propostos com o decorrer do tempo. O princípio dos mínimos quadrados proposto por DEMING (1943) e ACTON (1959) foi inteiramente desenvolvido e adaptado para isócronas Rb/Sr por YORK (1966) que, ao contrário da sistemática simples, determina uma única reta, dada por uma das raízes de uma equação cúbica, incorporando ponderações (W) dos pontos conforme estimativas dos erros individuais assinalados. WILLIAMSON (1968) demonstra, no entanto, que a equação cúbica é redundante e que a equação linear, proposta por ele, é mais simples e realística pois, ao se intercambiar os eixos, os parâmetros da melhor reta não se alteram, ao contrário de York 1. Adicionalmente, isto permitiria obter expressões mais exatas para as estimativas das variâncias de a e b.

A equação cúbica dos mínimos quadrados ("least squares cubic equation" ou abreviadamente LSC) foi derivada independentemente por MCINTYRE et al. (1966), que propuseram não só novas formas de ponderação como também 3 outros modelos alternativos (2, 3 e 4) para os casos em que não é verificado o perfeito alinhamento dos pontos (isócronas), ou seja, quando o parâmetro, proposto como: $MSWD = \sum(W_i * (Y_i - a - b * X_i)^2) / (N-2)$ ("mean square of weighted deviates"), revelasse maior do que 1,0. A expressão minimizada no caso é $S = \sum(W_i * (Y_i - a - b * X_i)^2)$, onde Y_i e X_i são, respectivamente, médias das razões Sr^{87}/Sr^{86} e Rb^{87}/Sr^{86} analisadas em duplicatas (pele menos). $W_i = 1 / (\text{Var}Y_i + b^2 * \text{Var}X_i)$, sendo $\text{Var}Y_i$ a variância de Y_i , $\text{Var}X_i = C * X_i^2 / ND$, onde C é uma constante calculada a partir de valores experimentais e ND o número de análises em duplicata.

No modelo 2, a dispersão dos pontos em relação à melhor reta é admitida como sendo consequência de uma "variância geológica" ou um erro de natureza geológica superior à experimental. Na prática, a variância do resíduo é aumentada para $P * X_i^2 + \text{Var}Y_i / ND + b^2 * C * X_i^2 / ND$, onde P é determinado iterativamente até tornar $MSWD = 1,0$. Parece-nos que este modelo é o mais frequentemente verificado, sobretudo após o refinamento verificado nas medidas de Y. Amostras cogenéticas que tenham sofrido, ainda que uma ligeira redistribuição de Sr^{87} radiogênico, podem agora não se alinhar dentro dos pequenos erros experimentais de medida. Esse aumento na variância do resíduo tem um importante efeito de aumentar os erros associados aos parâmetros a e b (razões iniciais e idades). Na nossa opinião, parece-nos mais realístico esse procedimento, do que aumentar os erros usando nível 2 σ , aplicando ou não fatores t de Student, para adequar à dispersão observada.

No 3, a variância do resíduo é estimada como $Q + \text{Var}Y_i / ND + b^2 * C * X_i^2 / ND$, onde Q é determinado iterativamente até tornar $MSWD = 1,0$. Este modelo, em que se assume que a variação em Y é independente de X, seria aplicável para sistemas que não se homogeneizaram isotopicamente e/ou são portadores variáveis de nuclídeos radiogênicos herdados. Tais sistemas

seriam rochas sedimentares, rochas que sofreram metamorfismo brando e até rochas ígneas de uma mesma suíte amplamente distribuída.

No modelo 4, a variância é estimada como sendo $P * X_1^2 + Q + \text{Var}Y_1/ND + b^2 * C * X_1^2/ND$, ou seja é um modelo misto e portanto aplicável para casos em que os 2 últimos modelos não se enquadram.

No modelo de York 2 é introduzido o fator de correlação entre os erros de Y e X e é proposta a utilização de uma equação quadrática obtida por redução algébrica de equação cúbica utilizada anteriormente (YORK, 1966).

O modelo de Wendt 1 é comparável ao de York 2, se tomarmos o fator de correlação r como igual a -1, o que seria formalmente inválido. Wendt 2 é essencialmente idêntico a McIntyre 1. A única diferença reside na existência de um fator de ponderação misto que não aparece no de McIntyre.

Quando são verificadas isócronas secundárias por trocas isotópicas locais de estrôncio por uma ação metamórfica, a rocha, porém, permanecendo quimicamente fechada, em termos de escala regional, CAMERON et al. (1981) propõem 3 modelos tendo como suporte determinações de Rb/Sr utilizando a técnica de fatiamento (MONTGOMERY & HURLEY, 1978) em 3 camadas adjacentes e composicionalmente diferentes de gnaisses bandados Uivak (das áreas de Saglesk e Hebron do norte de Labrador).

No modelo "Free-Line" ("equilíbrio isotópico local"), as amostras resultam em isócronas secundárias paralelas e com erros individuais dos pontos, que são assumidos como desprezíveis quando comparados com a dispersão induzida por metamorfismo, sendo assim sugerida uma técnica especial de regressão. Primeiramente, é testado o paralelismo das isócronas secundárias, excluindo pontos espúrios ("outliers") se necessário e, a seguir, determinado o parâmetro b' comum (o melhor parâmetro das isócronas secundárias), bem como, o fator de correlação ρ . Cada isócrona secundária, correspondendo à idade de cerca de 1800 Ma no exemplo estudado pelos mesmos, estaria circunscrita à elipse ("error ellipse"), sendo o tamanho de cada uma destas elipses de erro proporcional ao valor teórico médio ξ_1 para X do sistema particular de troca isotópica local. Assume-se também que a estrutura de erro para amostras grandes em rocha total é a mesma daquelas das amostras fatiadas, exceto por um fator de escala. Estas elipses teriam então a mesma forma daquelas que representariam a dispersão apresentada nas análises "locais" e pode ser definida em função de b' e ρ . Com este modelamento dos erros (CREASY, 1956), é estimado o coeficiente b da reta que permitirá enfim a determinação da idade dos protólitos dos gnaisses bandados. Para o cálculo de b' , ou seja, o melhor parâmetro das isócronas secundárias paralelas, sugerimos também consultar o trabalho de TITTINGTON & HALLIDAY (1979).

O método 2 ou "Bulk Earth" 1 é sugerido para casos em que b' e ρ não seriam conhecidos e a reta, por considerações de ordem geológica, passaria por um ponto fixo de coordenadas $X_0 = 0,0856$ e $Y_0 = 0,7047$, que é tomado como o valor aproximado para a Terra Global ("Bulk Earth"). Nesse conceito, todas as isócronas atuais para rochas derivadas diretamente de uma fonte de estrôncio não fracionado, tomada aqui como Terra Global ("Bulk Earth"), deverão passar por este ponto. Conforme CAMERON et al. (1981), este modelo mais simples seria razoável para rochas muito antigas e para uma suíte de rochas que, coletivamente, representam a sua fonte mantélica em escala regional. Ainda, quando fundamentado por considerações geológicas, parece-nos razoável impor este ponto fixo em todas as situações de rochas ortoderivadas antigas em que a razão inicial calculada for irreal, menor do que 0,70 por exemplo. Neste modelo não é preciso conhecer a estrutura do erro para se calcular a inclinação b, porém não é possível calcular os limites de confiança.

O método 3 ou "Bulk Earth" 2 é praticamente igual ao modelo 1 ou "Free Line", exceto pela introdução do ponto fixo (X_0, Y_0) . As somatórias dos quadrados e produtos ponderados são agora calculados como desvios em relação a este fixo (X_0, Y_0) e não em relação às médias

ponderadas.

DISCUSSÃO

Todos os tratamentos estatísticos abordados até aqui requerem ou postulam, uma distribuição normal para os erros. São todos baseados no princípio dos mínimos quadrados, admitindo que os erros experimentais em torno de um par fixo (X, Y) formam uma distribuição normal bivariada. Embora existam também evidências para a validade da aceitação desta suposição, conforme já tratado anteriormente, VUGRINOVICH (1981) sugere-nos a utilização da técnica da distribuição livre ("distribution-free"), em que as suposições ou postulados assumidos sobre formas ou parâmetros sejam bastante irrelevantes. Para a estimativa da inclinação é tomada a mediana (S_m) do conjunto de $N * (N-1) / 2$ inclinações S_i , obtidas a partir de combinações 2 a 2 dos N pontos, após descartados os valores espúrios ("outliers"). Estes valores são definidos como pontos em que $|R_i - R_m| > k$, com $R_i = Y_i - S_m * X_i$, onde $1 < i < N$ e R_m é a mediana dos R_i . Em não havendo valores espúrios, a razão inicial ou intersecção com Y é próprio R_m . Nos testes efetuados por VUGRINOVICH (1981), o melhor valor de k foi 3. Os limites de confiança, tanto de R_m como de S_m , podem ser facilmente avaliados, a partir dos conjuntos de valores de R_i e S_i , respectivamente. Nos 5 exemplos testados, em apenas um deles os parâmetros foram bastante discrepantes por envolver um ponto resultando um valor espúrio e provavelmente ainda, segundo aquele autor, por ter havido uma rehomogeneização em escala local tal qual, talvez, verificada com os gnaisses Uivak, abordada anteriormente. Das 4 pequenas restrições ou observações que são apontadas pelo autor, algumas são atinentes, também, às outras técnicas. A restrição principal e comum a todas as técnicas é decorrente do tamanho da população, que é, em geral, inferior a 30. Particularmente, a estimativa por distribuição livre resulta, por exemplo, distribuições assimétricas para os parâmetros, limites de confiança não simétricos em relação à mediana e usualmente maiores do que aqueles calculados por métodos usuais de regressão. Como proposta para tais casos, poderia se sugerir uma simulação do tipo Monte Carlo (AMARAL, 1990), em que o número de pontos é gerado ou aumentado dentro dos intervalos de incerteza. Por exemplo, a cada ponto experimental (X_i, Y_i) , com respectivas estimativas de erros (S_{X_i}, S_{Y_i}) , atribuir-se-ia um certo número adicional de pontos, limitados ao retângulo de erros de dimensões $2 * S_{X_i}$ e $2 * S_{Y_i}$. Os parâmetros, bem como os erros, neste caso seriam estudados a partir de regressão simples, para cada conjunto de pontos, estes selecionados aleatoriamente em cada retângulo de incerteza. Com este artificialismo, até isócronas de apenas 2 pontos, que são inviáveis nas regressões usuais, poderiam encontrar suporte na clássica teoria do intervalo de confiança. Os recursos através da computação superam facilmente as dificuldades desse trabalho, que deve ter sido bastante laborioso no passado.

O estudo da dependência dos erros experimentais sobre os erros dos parâmetros segundo os principais modelos, acha-se muito bem abordado no trabalho de BROOKS et al. (1972). Segundo estes autores, os erros em a e b são insensíveis ou invariáveis com erros experimentais em York 1 e McIntyre 2 e 4, ou são superestimados como no caso de York 1 para erro em b e nos casos de McIntyre 3 e 4 para erro em a (razão inicial), em que chega a ser cerca de 7 vezes maior quando comparado com York 2, por exemplo. Embora os modelos de McIntyre 1, Wendt 2, York 2 e também Williamson por extensão, forneçam erros algo subestimados nos parâmetros citados, eles são bastante sensíveis aos erros experimentais, sendo, portanto a nosso ver, os preferíveis.

No sistema U/Pb, as duas metodologias mais utilizadas são os diagramas de concórdia do tipo $Pb_{206}^{rad} / U^{238} / Pb_{207}^{rad} / U^{235}$, $Pb_{206}^{rad} / Pb_{207}^{rad}$ vs U^{238} / Pb_{207}^{rad} e $Pb_{207}^{rad} / Pb_{206}^{rad}$ vs U^{235} / Pb_{206}^{rad} e o diagrama isocrônico $Pb_{206}^{rad} / Pb_{204}^{rad}$ vs $Pb_{207}^{rad} / Pb_{204}^{rad}$. Em todos eles,

apenas nos interessa o coeficiente b , ou seja, a inclinação que é diretamente proporcional à idade. CUMMING (1969) foi o primeiro a abordar e propor equações para cálculos de erros e correlações dos erros na geocronologia U-Pb. Mais recentemente, LUDWIG (1980) retoma o assunto e apresenta as equações gerais, levando em conta todas as variáveis que contribuem para o erro final no parâmetro b . No cálculo de b , o método York 2 (1969) é o mais utilizado por ser o mais apropriado, enquanto que, para as intersecções erros com a curva concórdia sugerimos o algoritmo proposto por CUMMING et al. (1972) ou por LUDWIG (1980). Em ambos os casos, os erros são estimados por técnicas baseadas na clássica teoria do intervalo de confiança.

Ainda para erros nas idades Pb/U em zircões, DAVIS (1982) sugere um método baseado em intervalos de confiança de Bayes. A inclinação e a intercepção são primeiramente resolvidas utilizando-se o formalismo usual de máxima probabilidade, enquanto que a correlação entre os erros é removida, aplicando-se um operador rotacional e outro de translação, separados para cada ponto. Os erros nas idades são estimados a partir de uma função que é expressa em termos da largura de uma função de probabilidades versus t . Para casos em que os dados analíticos não alinham dentro dos erros analíticos admitidos, é sugerido um modelo onde as elipses de erros são expandidas por um fator proporcional à discordância, até se conseguir um bom ajuste. O fator t de Student, como é habitual, não é aplicado aos erros nas idades obtidas, mas somente aos resíduos dos erros das idades resultantes. Um aspecto importante deste modelo é o de fornecer erros nas idades Pb/U provavelmente mais realísticos, pois é função dessa dispersão dos pontos em relação à reta de melhor ajuste e, também, ser proporcional às discordâncias em idades. Devido a esta sistemática, conforme o próprio autor (op. cit.) observou, as estimativas dos erros podem não ser realísticas nos casos em que não esteja incluído ao menos um ponto que seja discordante da ordem de vários por cento, ou seja, razoavelmente afastado da curva concórdia.

TESTE PARA O CASO DE ISÓCRONA

Uma isócrona pode ser visualizada facilmente quando o número de pontos é pequeno e os erros analíticos são relativamente altos, como ocorria no passado, em que as razões isotópicas eram obtidas a partir de gráficos ou papéis registradores. Com o aumento do número de dados e também aliada à precisão na medida dos mesmos, torna-se difícil fazer esta avaliação, sem recorrer a um índice estatístico apropriado.

O primeiro índice proposto e bastante utilizado entre os geocronólogos é o de McINTYRE et al. (1966), conhecido abreviadamente por MSWD, conforme abordado anteriormente. Nos modelos de Wendt 1 e 2 é utilizada a expressão $(\sum X^2 / (N-2))^{1/2}$, que é o desvio médio dos pontos experimentais relativo à melhor reta e no de York 2, é utilizada a expressão $MSMS = (\text{SUMS}/(N-2))^{1/2}$ com SUMS correspondendo à somatória ponderada dos resíduos. Todos estes índices serão, no máximo, igual a 1 se a dispersão dos pontos em relação à melhor reta é atribuível somente aos erros experimentais. Teoricamente, para um número muito grande de pontos, e se os erros assinalados forem baseados em um número também muito grande de análises em duplicatas ou repetidas, o valor esperado é 1.

Como exemplos de isócronas, tomaremos análises efetuadas em 8 gnaiesses de Jeribá (SIGA Jr., 1986), cujos dados analíticos constam na Tabela 1, e um outro, com dados teóricos, examinado por BROOKS et al. (1972). Os parâmetros a e b e respectivos erros obtidos utilizando-se os diversos tratamentos estatísticos aqui abordados, constam, respectivamente, nas Tabelas 2 e 3. No primeiro exemplo, deixamos de efetuar apenas as determinações preconizadas por McINTYRE et al. (1966), por não adotarmos a sistemática de análises em duplicata, e conseqüentemente impedindo avaliações do coeficiente C , na variância dos X_i .

Tabela 1 - Gnaisses AP-OS de Jeribá. Dados analíticos Rb/Sr.

N° LAB.	AMOSTRA	Rb ⁸⁷ /Sr ⁸⁶	Sr ⁸⁷ /Sr ⁸⁶
7369	18K	3,188±0,090	0,74482±0,00022
7365	180	4,002±0,113	0,75230±0,00005
7368	18J	5,209±0,147	0,76135±0,00014
7370	18N	5,813±0,163	0,76835±0,00017
7366	18H	6,129±0,172	0,76994±0,00004
7361	16A	6,767±0,190	0,77308±0,00002
7362	16B	7,399±0,208	0,78066±0,00005
7367	181	8,765±0,246	0,79144±0,00027

Tabela 2 - Gnaisses AP-OS de Jeribá. Parâmetros e erros.

MODELO	INCLINAÇÃO (b)	ERRO	RAZÃO INICIAL (a)	ERRO	MSWD
1 Regressão					
Y em X	0,00829	0,00021	0,71875	0,00131	
X em Y	0,00832	0,00021	0,71855	0,02705	
2 York 1	0,00836	0,00019	0,71839	0,00099	0,51
3 Williamson	0,00836	0,00027	0,71839	0,00139	0,51
4 York 2					
r = 0	0,00836	0,00027	0,71839	0,00138	0,51
r = -1	0,00833	0,00030	0,71852	0,00159	0,45
r = 1	0,00840	0,00022	0,71818	0,00108	0,59
5 Wendt 1					
Wendt 2	0,00833	0,00026	0,71852	0,00134	0,45
	0,00833	0,00026	0,71851	0,00132	0,51
6 Vugrinovich 0,00820					
			0,7195		
Média (1-5) 0,00834					
			0,71846		

Regressões (1-5):

Inclinação (idade):

Razão Inicial:

Diferença Máxima

1,33% (0,00829 a 0,00840)

0,079% (0,71818 a 0,71875)

Tabela 3 - Parâmetros e erros associados. Dados teóricos publicados em BROOKS et al. (1972) ("Test Data Set 1").

MODELO	INCLINAÇÃO (b)	ERRO	RAZÃO INICIAL (a)	ERRO	MSWD
1 Regressão					
Y em X	0,005016	0,000024	0,71907	0,00151	
X em Y	0,005017	0,000024	0,71902	0,00601	
2 York 1	0,005008	0,000019	0,71949	0,00056	0,59
3 Williamson	0,005008	0,000025	0,71949	0,00073	0,59
4 York 2					
r = 0	0,005008	0,000025	0,71949	0,00073	0,59
r = -1	0,005008	0,000030	0,71948	0,00096	0,42
r = 1	0,005002	0,000017	0,71968	0,00023	1,19
5 Wendt 1	0,005008	0,000025	0,71948	0,00073	0,42
Wendt 2	0,005007	0,000025	0,71949	0,00073	0,59
6 McIntyre 1	0,004996	0,000026	0,71947	0,00079	
7 Vugrinovich	0,005018		0,71987		
Regressões Ponderadas (2 a 6)					
Diferença Máxima					
Inclinação (idade):	1,68% (0,004996 a 0,00508)				
Razão Inicial:	0,029% (0,71947 a 0,71968)				
Erro da Inclinação:	76,47% (0,000017 a 0,000030)				
Erro da Razão Inicial:	fator 4,2 (320%) (0,00023 a 0,00096)				

Não levando em conta a inclinação estimada segundo o modelo sugerido por VUGRINOVICH (1981), que é inadequado para poucos dados como no presente caso, os valores obtidos do parâmetro b (Tabela 2), no exemplo de SIGA Jr. (1986), situam-se entre um mínimo de 0,00829 (regressão simples de Y em X) a um máximo de 0,00840 (York 2 para $r = 1$), com uma variação percentual de 1,3% em relação à média de 0,008345, inferior a qualquer uma das estimativas dos erros, cujo mínimo (que é aquele obtido por York 1) corresponde a um erro de 2,3%. No exemplo artificial de BROOKS et al. (1972), as estimativas de inclinação, que aparecem na Tabela 3, variam também numa faixa bastante limitada entre 0,005002 (York 2 para $r = 1$) a 0,005017 (regressão linear de X em Y), com variação percentual de apenas 0,30% em

relação à média. Tanto num exemplo como no outro, as regressões simples apresentam dados mais discrepantes em relação aos demais, que são regressões ponderadas para erros experimentais de medidas. Embora estas regressões sejam peremptoriamente evitadas na determinação de parâmetros de uma isócrona Rb/Sr, por apresentarem erros variáveis de ponto para ponto e nas duas coordenadas, apresentam, ainda assim, parâmetros b confiáveis e totalmente dentro dos limites de erros estimados. Isto aliás, não deve ser nada estranho, pois no caso em que os pontos se alinham perfeitamente, os parâmetros, tanto b como a, devem ser idênticos, independentes do tratamento estatístico utilizado. Em termos de estimativa dos erros do parâmetro b temos, também, valores bastante semelhantes nos 2 exemplos. A priori, não se pode afirmar que um ou outro modelo subestime ou superestime a estimativa dos erros em b, o que contrariamente é bastante evidenciável nos testes simulados por BROOKS et al. (1972) ao aplicar fatores multiplicativos variáveis nos erros de Y e X.

No que se refere ao parâmetro a, no primeiro exemplo em que o MSWD é da ordem de 0,50, temos valores de 0,71818 a 0,71875 com um valor médio de 0,71846, cuja variação percentual em relação a essa média é de apenas 0,079%. No segundo exemplo, as estimativas dos coeficientes, calculados segundo técnica de regressão ponderada, apresentam uma diferença máxima de apenas 0,029%. Neste caso, todos os valores estão compreendidos entre 0,71947 e 0,71968. As regressões lineares simples, ao contrário do exemplo anterior, apresentam resultados nitidamente inferiores, porém se considerarmos os erros, concordam plenamente com os anteriores. No tocante às estimativas dos erros de a, apenas aquelas obtidas por regressões simples de X em Y apresentam valores irrealmente justificáveis e seriam atribuídas à inadequacidade peculiar da extrapolação.

Resumindo, podemos afirmar que nos casos em que o coeficiente MSWD é próximo de 1, os parâmetros e os respectivos erros podem ser obtidos por qualquer uma das regressões aqui abordadas. A única restrição é aquela relativa ao parâmetro a e seu erro utilizando regressão simples de X em Y.

ERRÓCRONAS: RECONHECIMENTO E TRATAMENTO ESTATÍSTICO

Conforme visto, o índice MSWD é valioso indicador do grau de espalhamento dos pontos experimentais em relação à melhor reta. Em princípio, um valor maior do que 1, calculado para um número muito grande de pontos, é indicativo de que há uma dispersão dos mesmos em relação à melhor reta e que os erros experimentais não seriam a única explicação para o não alinhamento dos pontos. Mas como na prática o número de pontos é bastante limitado, este limite de 1 deve ser ampliado conforme o número de amostras participantes da isócrona e número de análises em duplicata ou repetição. BROOKS et al. (1972) apresentam uma tabela de distribuição F (como apêndice 3) para uma ampla situação experimental e que permite avaliar os limites de corte adequados. Se as estimativas dos erros analíticos são bem conhecidas e baseadas em um número muito grande de análises, conforme observa SNELLING (1976), os níveis de corte (níveis de confiança de 95%) convenientes para reconhecer isócrona de errócrona seriam aqueles correspondentes à última fila da tabela, ou seja:

nº de Pontos:	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14
MSWD:	3,92	3,07	2,68	2,45	2,29	2,18	2,09	2,02	1,91	1,83

Em tais circunstâncias, por exemplo, se o MSWD calculado para 5 amostras for superior a 2,68, estaremos defrontando com uma errócrona e pode ser que seja possível visualizar no diagrama um ponto ou pontos que estejam realmente prejudicando o alinhamento. A maioria dos pesquisadores rejeita tal(is) ponto(s), considerando-o(s) como anômalo(s), sem

tentar buscar explicação(ões) plausível(is). Tal procedimento é justificável desde que a idade ou a razão assim obtida seja compatível com a esperada ou concordante com outra(s) metodologia(s).

Uma outra situação muito comum, de rochas que sofreram metamorfismo de médio grau sem atingir a homogeneização isotópica, é a de os pontos exibirem uma tendência, mas sem indicações de possíveis anomalias em alguns deles como no caso acima. Como exemplo, tomaremos 5 amostras de gnaisses migmatíticos coletadas próximo a Fortaleza de Minas, MG, (dados inéditos CPGeo), cujos dados analíticos constam da Tabela 4.

Conforme Figura 1, é patente o espalhamento dos pontos em relação à melhor reta obtida por regressão simples e, a priori, é difícil rejeitar um ou outro ponto em que os erros das coordenadas são todos praticamente iguais, sendo de aproximadamente 0,01% para Sr^{87}/Sr^{86} e 2,8% para Rb^{87}/Sr^{86} . Aqui, estamos realmente face a uma errôcrona, onde o MWSD obtido é de 120.

Tabela 4 - Gnaisses migmatíticos WT-HA-9 (frações félsicas). Dados analíticos Rb/Sr.

N° LAB.	AMOSTRA	Rb^{87}/Sr^{86}	Sr^{87}/Sr^{86}
9902	9.4F	$1,250 \pm 0,035$	$0,79010 \pm 0,00006$
9903	9.5F	$0,743 \pm 0,021$	$0,76760 \pm 0,00006$
9904	9.8F	$3,235 \pm 0,090$	$0,82292 \pm 0,00006$
9905	9.10F	$2,264 \pm 0,063$	$0,80407 \pm 0,00006$
9904	9.1F	$1,003 \pm 0,028$	$0,79128 \pm 0,00006$

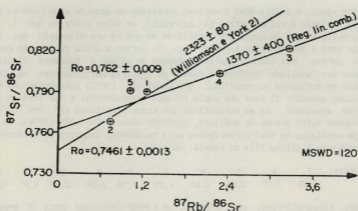


Figura 1 - Diagrama isocrônico dos gnaisses migmatizados WT-HA-9 (frações félsicas): parâmetros e seus respectivos erros estimados conforme modelos utilizados.

Examinaremos, a seguir para o presente exemplo, as estimativas dos parâmetros e erros respectivos que aparecem na Tabela 5 e que foram calculados segundo o formalismo usual adotado para isócronas.

Tabela 5 - Gnaisses migmatíticos WT-HA-9 (frações fêlsicas). Parâmetros e erros associados relativos.

MODELO	INCLINAÇÃO (b)	ERRO	RAZÃO INICIAL (a)	ERRO	MSWD
1 Regressão					
Y em X	0,0185	0,0039	0,764	0,007	
X em Y	0,0209	0,0044	0,760	0,230	
Média	0,0197		0,762		
2 Williamson					
	0,0335	0,0012	0,7461	0,0013	120
3 York 2					
r = 0	0,0335	0,0010	0,7461	0,0011	120
r = -1	0,0321	0,0010	0,7476	0,0011	110
r = 1	0,0352	0,0010	0,7445	0,0011	131
4 Wendt 2					
	0,02380	0,00025	0,7564	0,0004	167

Os parâmetros a e b apresentam valores muito discordantes entre os obtidos por regressões simples e ponderadas. A discordância maior é verificada no parâmetro b, cujo valor mínimo é 0,0185 (regressão de Y em X), correspondendo a uma idade de cerca de 1300 Ma. e um valor máximo de 0,0352 (York 2 para r = 1), correspondendo a uma idade de 2440 Ma.

Embora as regressões ponderadas, excetuando a de Wendt 2, apresentem valores de b bastante próximos entre si, em torno de 0,0340, pode-se deduzir, da Figura 1, que não é a mais esperada ou apropriada para o conjunto de pontos, Tal fato é facilmente explicável se observarmos as ponderações efetuadas. Conforme Tabela 6, os pesos em X_i são bastante

Tabela 6 - Gnaisses migmatíticos WT-HA-9 (frações fêlsicas). Estimativa dos erros nos parâmetros a e b, admitindo os erros individuais analíticos. Modelo Williamson.

AMOSTRA	X	ERRO GERAL	Y	ERRO GERAL	PESO X	RESÍDUO X	PESO Y (*10 ⁶)	RESÍDUO Y (10 ⁻³)
1 9.4F	1,250	0,035	0,79010	0,00006	816	+0,06	277,8	-0,53
2 9.5F	0,743	0,021	0,76760	0,00006	2268	-1,00	277,8	+2,50
3 9.8F	3,235	0,090	0,82292	0,00006	123	-0,94	277,8	+1,25
4 9.10F	2,264	0,063	0,80407	0,00006	252	-0,54	277,8	+1,45
5 9.1F	1,003	0,026	0,79128	0,00006	1276	+0,34	277,8	-4,67

discrepantes, pelo fato de terem sido tomados como inverso da variância, não acontecendo esta discrepância no que se refere às ponderações em Y_1 , cujos erros absolutos são, em geral, mais ou menos constantes de amostra para amostra, desde que se utilize os mesmos procedimentos analíticos e espectrométricos.

Os erros absolutos de X_1 já variam muito e conforme os valores de X_1 . No presente exemplo, varia de 0,021 a 0,090, enquanto que os pesos individuais em X_1 variam de 123 (mínimo e correspondente ao ponto 3 mais afastado) a 2268 (correspondente ao ponto 2, mais próximo da origem). Este efeito de ponderar fortemente os pontos mais próximos à origem ou os de razões mais baixas, não só distorce os parâmetros, bem como seus erros associados. Conforme Tabela 5, as regressões ponderadas, excetuando a de Wendt 2, fornecem uma inclinação ao redor de 0,0335 e razões iniciais próximas de 0,745, com erros bastante irrealis de $\pm 0,001\%$. A simples inspeção visual, nota-se que a reta obtida não é realística. Os pontos 3 e 4 praticamente foram desconsiderados. Uma reta, ou parâmetros mais adequados, no caso desta errôcrons seria aquela obtida por regressão linear simples, ou seja, uma inclinação da ordem de 0,0275, correspondendo a uma idade de 1370 Ma. com erro de cerca de 400 Ma. e razão inicial de 0,762 com erro de $\pm 0,007$. Aliás, esta idade de 1370 Ma. coaduna-se muito bem com outros dados geocronológicos preliminares conhecidos na área e que estão muito próximos desta cifra, conforme M. Teixeira (inf. verbal).

Um outro procedimento adotado para o caso de errôcrons é o de se admitir que os erros analíticos foram subestimados, ou então, que a dispersão dos pontos é devida a uma causa qualquer. No modelo de McIntyre 2, os erros em X_1 são, por exemplo, aumentados por um fator $P * X_1^2$, sendo P determinado iterativamente até que o MSWD resultante torna-se igual a 1,0. Uma outra forma mais simples e adotada em muitos laboratórios, como em Oxford e pelo CPGeo, é a de multiplicar os erros em X_1 e Y_1 por $(MSWD)^{1/2}$. Este artifício fornece erros mais realísticos para a inclinação (idade) e parâmetro a (razão inicial) em função da dispersão dos pontos e ponderando agora de acordo com o assim conhecido como "erro geológico".

Aplicando-se tal artifício ao nosso exemplo, os erros em X_1 e Y_1 tiveram de ser ampliados por um fator próximo de 11, conforme Tabela 7. Os resultados finais aparecem na Figura 2. O erro na idade que era de 3,6% passou para 38,8% (± 877 Ma.), enquanto que, para a razão inicial, passou de 0,17% para 1,88%. Estes erros, se levados em conta, fazem com que as cifras obtidas tornem-se concordantes ao nível de 1 σ com as obtidas por regressões lineares simples, mas os parâmetros são irrealísticos ou distorcidos pela ponderação. Este mesmo procedimento, já aplicando o formalismo estatístico segundo Wendt 2 e que designaremos como Wendt 3, conforme resumimos na Tabela 8, já propicia parâmetros distintos, porém mais próximos do esperado além de erros menores para os parâmetros a e b, respectivamente de 13,5% e 0,74%. A idade e o erro respectivo seriam de 1656 \pm 223 Ma., dados aparentemente menos distorcidos do que quando obtidos utilizando o método de York 2 ou Williamson.

Tabela 7 - Estimativa dos erros nos parâmetros a e b, admitindo existência do erro de natureza geológica e o efeito sobre os erros individuais. Modelo Williamson.

AMOSTRA	X	ERRO		PESO	RESÍDUO		PESO	RESÍDUO	
		GERAL	Y		GERAL	X		Y	Y
							(*10 ⁶)		(10 ⁻³)
1 9.4F	1,250	0,383	0,79010	0,00066	7	+0,06	2,32		-0,53
2 9.5F	0,743	0,230	0,76760	0,00066	19	-1,00	2,32		+2,50
3 9.8F	3,235	0,985	0,82292	0,00066	1	-0,94	2,32		+1,25
4 9.10F	2,264	0,689	0,80407	0,00066	2	-0,54	2,32		+1,45
5 9.1F	1,003	0,306	0,79128	0,00066	11	+0,34	2,32		-4,67

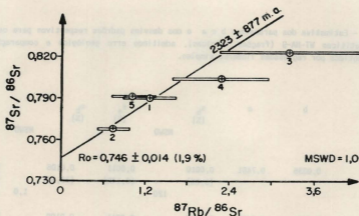


Figura 2 - Estimativa dos erros nos parâmetros a e b, admitindo a existência do erro de natureza geológica e o efeito sobre os erros individuais.

PSEUDOISÓCRONAS

Sob a denominação de pseudoisócrona preferimos englobar todas as isócronas casuísticas ou acidentais, fictícias, artificiais e outras designações similares, cujas idades são destituídas de significado geológico. Na concepção original de BROOKS et al. (1976), o diagrama pseudoisocrônico é obtido lançando as razões iniciais versus suas respectivas razões $\text{Rb}^{87}/\text{Sr}^{86}$. Em trinta ocorrências de rochas ígneas vulcânicas mesozóicas estudadas por eles, apresentando correlações positivas foi possível definir, portanto, idades aparentes entre 70 a 3340 Ma., interpretadas como idades do manto (isócrona do manto) a partir do qual as rochas ígneas se originaram. Os autores rejeitaram inclusive a possibilidade de contaminação como possível causa para tais arranjos lineares verificados.

No entanto, estudos mais recentes e associados com razões isotópicas de neodímio e composição isotópica de oxigênio favorecem mais para uma hipótese de contaminação com núclídeos radiogênicos, ou mistura de magmas com composições isotópicas distintas. A propósito, misturas binárias de composições isotópicas distintas e em proporções variadas resultam isócronas cujas idades são fictícias e que podem ser reconhecidas como tal, verificando a linearidade entre as razões $\text{Sr}^{87}/\text{Sr}^{86}$ iniciais (R_0) versus inverso dos respectivos Sr total das amostras. Tais isócronas, por esta razão, são conhecidas também como isócronas de mistura. Prováveis exemplos são sugeridos por BELL & POWELL (1969), DICKINSON et al. (1969), DUNCAN & COMPSTON (1976), além de outros. Além das isócronas fictícias, cabe também mencionar a possibilidade de ocorrerem isócronas artificiais, em que a linearidade é devida à participação de razões tendo denominador comum. No método Rb/Sr , temos, por exemplo, Sr^{86} como denominador comum. BUTLER (1982) examina através de uma série de experimentos numéricos os efeitos do denominador comum, tendo como base 2 exemplos reais tomados na literatura, porém sem demonstrar de forma convincente a importância de tal fato.

Por último, existe a possibilidade de estarmos face a uma isócrona "perfeita" em que as amostras sejam de unidades geológicas distintas e/ou são de diferentes idades geológicas,

Tabela 8 - Estimativa dos parâmetros b e a e dos desvios padrões respectivos para os gnaiss migmatíticos WT-HA-9 (frações félsicas), admitindo erro geológico e comparação com valores obtidos por regressões lineares simples.

MÉTODO	b	a	s_b (%)	s_a (%)	s_b (%)	s_a (%)
			MSWD			MSWD
York 2						
r = 0	0,0335	0,7461	0,0010 (3,0%)	0,0011 (0,14%)	0,0106 (31,6%)	0,0123 (1,65%)
			120			1,0
r = -1	0,0321	0,7476	0,0010 (3,1%)	0,0011 (0,15%)	0,0100 (31,1%)	0,0119 (1,59%)
			110			1,0
r = 1	0,0352	0,7445	0,0010 (2,8%)	0,0011 (0,15%)	0,0112 (31,8%)	0,0128 (1,72%)
			131			1,0
Williamson	0,0335	0,7461	0,0012 (3,6%)	0,0013 (0,17%)	0,013 (38,8%)	0,014 (1,88%)
			120			1,0
Wendt 2	0,0238	0,7564	0,00025 (1,0%)	0,0004 (0,06%)	0,0032 (13,5%)	0,0056 (0,74%)
			167			1,0
Linear Y em X	0,0185	0,7638	0,0039 (20,92%)	0,0075 (0,98%)		
Linear X em Y	0,0209	0,7597	0,0044 (20,9%)	0,2303 (30,0%)		
Linear Combinado	0,0197	0,7618	0,0043 (21,9%)	0,2304 (30,2%)		

não obedecendo, portanto, as premissas básicas da metodologia isocrônica, mas alirhando-se casuística ou acidentalmente. Da mesma forma, erros laboratoriais grosseiros podem levar acidentalmente à obtenção de pseudoisócronas. Neste último caso, os erros podem ser minimizados se as análises forem efetuadas em duplicata, o que infelizmente não é prática da maioria dos laboratórios, conforme já frisamos anteriormente.

SUMÁRIO E RECOMENDAÇÕES

Na utilização do método isocrônico, algumas observações importantes podem ser resumidas conforme segue:

- a - rochas comagnéticas, que se mantiveram sempre fechadas isotopicamente, têm seus pontos respectivos em um diagrama isocrônico, teoricamente alinhados segundo uma reta dentro dos limites dos erros experimentais de medida. Para se obter as estimativas mais realísticas dos parâmetros, recomenda-se contudo que ao menos 3 amostras tenham razões X mais ou menos regularmente distribuídas entre os valores extremos. A concentração de pontos, especialmente próximos da origem, ou seja, com valores de X baixos devida à ponderação ser inversamente proporcional à variância, pode reforçar ou distorcer artificialmente a precisão do parâmetro a (razão inicial) em detrimento do parâmetro b. A inclinação é proporcional à idade se bem que a mesma possa ser fictícia ou espúria.
- b - quando não se verifica alinhamento, isto pode ser atribuído à causa de natureza geológica ou experimental incluindo-se aqui eventual erro accidental verificado durante as diversas fases de preparação das amostras. Em tal caso é preciso buscar uma explicação do não alinhamento dos pontos e utilizar técnicas estatísticas adequadas.
- c - no caso de estarmos face a uma isócrona, isto é, MSWD menor que o nível de corte, os parâmetros a e b podem ser calculados por qualquer um dos modelos estatísticos para os erros experimentais. Conforme discutido, os parâmetros mais realísticos deverão ser obtidos, preferencialmente, utilizando Williamson e a seguir, Wendt 2, York 2 ou McIntyre 1. Para o cálculo de erros, deve-se adotar modelos que sejam bastante sensíveis aos erros das medidas experimentais. Neste aspecto, qualquer um dos quatro modelos acima são, a nosso ver, perfeitamente adequados, sendo as estimativas dos erros bastante próximas entre si.
- d - no caso de errôcronas, em que os erros das medidas fogem totalmente dos conceitos estatísticos baseados em distribuição normal, vimos que os parâmetros e os erros respectivos, obtidos usando os modelos estatísticos convencionais, podem ser totalmente irrealis. A exceção fica por conta dos casos em que se utilizam apenas erros internos individuais de cada amostra, que são sempre subestimados, podendo como consequência apresentar um MSWD alto, ou falsa indicação de errôcrona. Ressalvado este último caso, deve prevalecer antes um bom senso crítico na interpretação da errôcrona do que propriamente preocupação de saber o melhor formalismo estatístico. No entanto, dois aspectos salientes poderiam ser ressaltados: 1 - por razão exposta no início e fundamentada em um exemplo aqui apresentado, os parâmetros a e b podem, conforme circunstâncias, indicar resultados não realísticos quando é aplicada a metodologia usual de ponderação dos pontos em função dos erros experimentais. Os modelos 2, 3 e 4. de MCINTYRE et al. (1966) ou os de CAMERON (1981) seriam as possíveis alternativas, conforme o caso. Nos casos não enquadrados em nenhum destes modelos ou quando não se conhece adequadamente a natureza e/ou precisão dos erros individuais, parece-nos mais recomendável utilizar as regressões lineares simples. Neste caso, a inclinação b (idade) deve ser a média das 2 regressões lineares enquanto que para o parâmetro a (razão inicial) deve ser aquele estimado a partir de regressão de Y em X; 2 - as estimativas dos erros, no caso de errôcronas, não devem ser avaliadas segundo fórmulas convencionais conhecidas e os modelos 2, 3 e 4 sugeridos por McIntyre seriam os melhores aplicáveis.

Tendo em vista todos os pontos acima abordados, o setor de computação do CPGeo está

reunindo num programa único, designado como PISOG, compatível com os micros IBM/PC, todos os modelos estatísticos mais importantes e úteis na metodologia Rb/Sr, segundo a nossa concepção. Entre esses incluem-se: Williamson, York 2 ($r = 0$), York 2 ($r = 1$), Wendt 2, Wendt 3 (para errôcronas) e regressões lineares que podem ser escolhidas de forma bastante simples. Nos três primeiros programas é oferecida a opção para testar a possibilidade da isócrona ser fictícia (isócrona de mistura), calculando não só a correlação r entre R_0 e $1/Sr$ (total), bem como exibindo no display o respectivo diagrama. Para o caso de errôcrona, o programa oferece as opções Wendt 3 ou regressões lineares. Para as outras metodologias como Pb/Pb, Sm/Nd e Pb/U, o CPGeo dispõe de todos os programas nas suas versões originais mais correntemente utilizadas e que foram cedidos pelos diversos pesquisadores estrangeiros que estão assessorando a instalação dessas técnicas analíticas, aos quais agradecemos. Entre eles, citaremos os Drs. Gunther Lugmair, Paul N. Taylor, Randal Van Schumus e Philippe Vidal. Entre os colegas do Instituto de Geociências, agradecemos ao Dr. Gilberto Amaral, que sempre se interessou pelos aspectos estatísticos e subsidiou vários pontos aqui abordados, ao Prof. Sílvio Vlach pela cessão de parte do programa ISOJOB, que serviu de suporte para a elaboração do programa PISOG, e ao Dr. Wilson Teixeira pela paciente leitura e correção crítica do texto.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ACTON, F.S. (1959) *Analysis of straight line data*. New York, John Wiley.
- AMARAL, G. (1990) Regressão com variáveis sujeitas à imprecisão: uma abordagem pelo Método de Monte Carlo. *Boletim do Instituto de Geociências, USP*, 21:47-52.
- BELL, K. & POWELL, J.L. (1969) Strontium isotopic studies of alkali rocks: the potassium-rich lavas of Birunga and Toro-Amkole regions east and central equatorial Africa. *Journal Petrology*, 10(3):536-572.
- BROOKS, C.; WENDT, I.; HARRE, W. (1968) Two-error regression treatment and its application to Rb-Sr and initial $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ ratios of younger variscan granitic rocks from the Schwarzwald massif, Southwest Germany. *Journal Geophysical Research*, 73(18):6071-6084.
- BROOKS, C.; HART, S.R.; WENDT, I. (1972) Realistic use of two-error regression treatments as applied to rubidium-strontium and data. *Reviews of Geophysics and Space Physics*, 10(2):551-577.
- BROOKS, C.; JAMES, D.E.; HART, S.R. (1976) Ancient lithosphere: its role in young continental volcanism. *Science*, 193(4258):1086-1094.
- BUTLER, Y.C. (1982) Artificial isochrons. *Lithos*, 15(3):207-214.
- CAMERON, M.; COLLERSON, K.D.; COMPSTON, W.; NORTON, R. (1981) The statistical analysis and interpretation of imperfectly fitted Rb-Sr isochrons from polymetamorphic terrains. *Geochimica, Cosmochimica Acta*, 45(7):1087-1097.
- CREASY, M.A. (1956) Confidence limits for the gradient in the linear functional relationship. *Journal Royal Statistical Society*, B18:65-69.
- CUMMING, G.L. (1969) A recalculation of the age of solar system. *Canadian Journal Earth*

Sciences, 6(4):719-735.

- CUMMING, G.L.; ROLLET, J.S.; ROSOTTI, F.J.C.; WHEWELL, R.J. (1972) Statistical methods for the computation of stability constants, I - straight-line fitting of points with correlated errors. *Journal Chemical Society. Dalton Transactions, Issue 23*, p.2652-2658.
- DAVIS, D.W. (1982) Optimum linear regression and error estimation applied to U-Pb data. *Canadian Journal Earth Sciences*, 19(11):2141-2149.
- DEMING, W.E. (1943) *Statistical adjustment of data*. New York, John Wiley.
- DICKINSON, D.R.; DODSON, M.H.; GASS, I.G.; REX, C. (1969) Correlation of initial $^{87}\text{Sr}/^{86}\text{Sr}$ with Rb/Sr in some late tertiary volcanic rocks of South Arabia. *Earth Planetary Science Letters*, 6(1):84-90.
- DUNCAN, R.A. & COMPSTON, W. (1976) Sr - isotopic evidence for an old mantle source region for French Polynesian volcanism. *Geology*, 4(12):728-732.
- LUDWIG, K.R. (1980) Calculation of uncertainties of U-Pb data. *Earth Planetary Science Letters*, 46(2):212-220.
- McINTYRE, G.A.; BROOKS, C.; COMPSTON, W.; TUREK, A. (1966) The statistical assessment of Rb-Sr isochrons. *Journal Geophysical Research*, 71(22):5459-5468.
- MONTGOMERY, C.W. & HURLEY, P.M. (1978) Total rock U-Pb and Rb-Sr systematics in the Imatoca series, Guayana shield, Venezuela. *Earth Planetary Science Letters*, 39(2):281-290.
- NICOLAYSEN, L.D. (1961) Graphic interpretation of discordant age measurement of metamorphic rocks. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 91(2):198-206.
- SHIELDS, R.M. (1963) A computer program to calculate a least squares isochron and associated errors, M.I.T. Eleventh Annual Progress Report, p.149-152.
- SIGA Jr., O. (1986) A evolução geotectônica da porção nordeste de Minas Gerais, com base em interpretações geocronológicas. São Paulo, 140 p. (Tese de Mestrado - Instituto de Geociências/USP).
- SNELLING, N.J. (1976) *Least squares fitting of straight line to analytical data geochronological applications*. London, Institute of Geological Sciences. 20p. (Report 76.18).
- REYNOLDS Jr., R.C. (1963) Matrix corrections in trace element analysis by X-ray fluorescence: estimation of the mass absorption coefficient by compton scattering. *American mineralogist*, 48(9-10):1133-1143.
- TITTERINGTON, D.M. & HALLIDAY, A.N. (1979) On the fitting of parallel isochrons and the method of maximum likelihood. *Chemical Geology*, 26(3-4):183-195.
- VUGRINOVICH, R.G. (1981) A distribution free alternative to least-squares regression and its application to Rb-Sr isochron calculation. *Mathematical Geology*, 13(5):443-454.

- WILLIAMSON, J.H. (1968) Least-squares fitting of a straight line. *Canadian Journal Physics*, **46**:1845-1847.
- YORK, D. (1966) Least-squares fitting of a straight line. *Canadian Journal Physics*, **44**:1079-1086.
- YORK, D. (1969) Least-squares fitting of a straight line with correlated errors. *Earth Planetary Science Letters*, **5**(5):320-324.