

Engenharia Ambiental

Predição de tipos de quartzos com algoritmo Random Forest e equipamento portátil de fluorescência de raios-X (pXRF)

Diego Ribeiro - 8º módulo Engenharia Ambiental e Sanitária, UFLA, Iniciação científica bolsista PIBIC/CNPQ.

Thaís S. B. Dijair - 6º módulo Agronomia UFLA

Fernanda M. Silva - Doutoranda Ciência do solos - UFLA

Sérgio H. G. Silva - Professor Titular departamento ciência do solo, UFLA, Doutor em Ciência do Solo . - Orientador(a)

Luiz R. G. Guilherme - Professor titular departamento ciência do solo, UFLA, Doutorado em Crop & Soil Sci./Environ. Toxicology - Dual Major.

Nilton Curi - Professor titular departamento ciencia do solo, UFLA, Doutorado em Soil Science. Purdue University, PURDUE, Estados Unidos.

Resumo

Minerais são definidos como materiais naturais, sólidos, inorgânicos, com estrutura cristalina e de composição química definida. Dentre os minerais, destaca-se o quartzo, presente tanto na rocha quanto no solo. O quartzo pode ter diversas cores e apesar de apresentar uma composição química definida, é comum a ocorrência em pequenas quantidades de elementos diferentes denominados impurezas. Tais impurezas podem causar variações em suas características. O equipamento portátil de fluorescência de raios-X (pXRF) tem sido utilizado cada vez mais para determinar teores de elementos químicos em diversos materiais, de maneira rápida, com baixo custo e sustentável. Este trabalho teve como objetivo prever os diferentes tipos de quartzos (com base em suas cores) através de dados gerados por leituras do pXRF com auxílio do algoritmo Random Forest (RF) no software R, além de caracterizar os diferentes tipos de quartzos. Foram utilizadas 22 amostras de quartzos do Departamento de Ciência do Solo da Universidade Federal de Lavras, de 8 tipos sendo elas: hialino (QH), leitoso (QL), fumê (QE), amarelo (QA), roxo (QRX), rosa (QRS), verde (QV), e ferruginoso (QF). As análises com pXRF foram feitas com modelo Bruker S1 Titan LE no modo trace (dual soil) durante 60s em triplicata em cada amostra indicando 13 elementos químicos: Fe, Al₂O₃, MgO, CaO, P₂O₅, SiO₂, K₂O, S, Cl, Mn, Ti, V e Cr. Através da correlação de Pearson, se pode observar em cinco análises correlação forte: Na e Cl (0,72), Ca e K₂ (0,74), K e Cl (0,78), Ca e S (0,84) e Ca e Cl (0,72). O Coeficiente Kappa, utilizado para avaliar a confiabilidade do modelo para diferenciar os tipos de quartzo, foi de 0,50 e a acurácia global foi de 0,57 o que indica concordância moderada entre resultados. A importância de cada elemento químico para separação das variações de quartzo foi obtida pelo algoritmo RF através do software R (pacote caret 6.0-086) e indicou maior relevância dos elementos SiO₂, Cl, Fe, P₂O₅ e K₂O, para diferenciação dos tipos de quartzos. Através do RF, pode-se observar que K₂O apresentou diferenciação no QRS, QV; QL, QF, QE; P₂O só não apresentou diferenciação no QH e QA; para Fe, QF, QV, QE, QA; SiO₂ no QRS, QL, QE, QA e para Cl QRS, QF, QE. Com esses resultados pode-se concluir que, com auxílio do algoritmo RF, o pXRF é uma ferramenta de grande importância para facilitar a caracterização rápida da composição química para diferentes tipos de quartzo, e também pode ser aplicado a outros minerais.

Palavras-Chave: : Fluorescência de raios-X, variabilidade química, sensores próximos..

Instituição de Fomento: CNPQ

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=qngdJ5AAyW8>

Sessão: 3

Número pôster: 42

Identificador deste resumo: 1530-16-898

novembro de 2022