

Agronomia - Ciência do Solo

PREDIÇÃO LIMPA E ACURADA DE ANÁLISES LITOQUÍMICAS: ALIANDO DADOS DE PXRF E INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL NUMA METODOLOGIA ECO-AMIGÁVEL

JÚLIA GONÇALVES AGUIAR - 3º módulo de Agronomia, UFLA, bolsista do Convênio nº 241/2021 CPRM/UFLA

Renata Andrade - Professora do Departamento de Ciência do Solo, UFLA.
renata_andrade@ufla.br

Magda Bergmann - Pesquisadora em Geociências, SGB/CPRM. magda.bergmann@sgb.gov.br

Liliane Lavoura Bueno Sachs - Pesquisadora em Geociências, SGB/CPRM.
liliane.sachs@sgb.gov.br

Sérgio Henrique Godinho Silva - Professor do Departamento de Ciência do Solo, UFLA.
sergio.silva@ufla.br

Nilton Curi - Orientador – Professor Emérito da UFLA. ntcuri@gmail.com - Orientador(a)

Resumo

Análises litoquímicas são importantes para o mapeamento geológico e pedológico, pois determinam a concentração de elementos químicos em rochas e solos. Contudo, essas análises são caras, demoradas, utilizam reagentes, requerem mão de obra especializada e geram resíduos químicos. Como alternativa, nas últimas décadas tem crescido o uso de dados produzidos por sensores próximos, aliados a técnicas de inteligência artificial (IA), para prever atributos importantes de forma rápida, econômica e ambientalmente correta. Nesse sentido, o objetivo deste trabalho foi utilizar dados gerados por fluorescência de raios-X portátil (pXRF), aliados a seis algoritmos de aprendizado de máquina [Projection Pursuit Regression (PPR), Partial Least Squares (PLS), Random Forest (RF), Support Vector Machine (SVM), Extreme Gradient Boosting (XGB) e Cubist Regression (CR)], para prever o conteúdo de 49 elementos em diferentes amostras de rochas. A UFLA contou com a parceria do Serviço Geológico do Brasil-CPRM para acessar resultados analíticos de 53 amostras de rochas, saprólitos e pastas de mineração, representando os litotipos basalto, gnaiss, gabro, calcário, xisto etc. Os materiais foram submetidos a análises litoquímicas pelo método ICM40B, com leitura por ICP-OES/ICP. As amostras de rocha também foram escaneadas em triplicata por pXRF, no Laboratório da UFLA. Após análise exploratória dos dados, os modelos de predição foram treinados a partir da técnica "leave one out cross-validation". Visando melhor acurácia dos modelos, foi feita uma eliminação recursiva das variáveis explanatórias através do pacote "boruta" na linguagem de programação R. A validação dos modelos foi feita através do RMSE, RPD e R². A validação dos modelos indicou alta acurácia para a predição de 41 elementos (Li, Ge, S, Ga, Cs, Zn, Bi, U, Mn, Lu, Mo, Th, Yb, Pb, V, Rb, Tl, In, Be, Nb, Al, Tb, Sc, Y, Ti, Hf, P, Ba, Ce, Mg, Co, Na, La, Fe, Cr, Ca, Zr, K, Cu, Sr e Ni) (R² > 0,80); os valores de RPD variaram de 1,31 a 23,0 e CR foi o algoritmo com a melhor performance. Os resultados demonstram o grande potencial dos dados gerados por pXRF aliados a algoritmos de aprendizado de máquina para prever as análises litoquímicas. A utilização dessa inovação metodológica tem potencial estratégico em prospecção, exploração mineral e mapeamento geológico, agilizando a caracterização de diferentes rochas e suas variações químicas de forma barata, rápida e ambientalmente correta.

Palavras-Chave: sensores próximos, sustentabilidade, metodologia verde .

Instituição de Fomento: FUNDEC

Link do pitch: https://youtu.be/QKz5AN3Vp_k