

Engenharia Ambiental

Caracterização e predição de tipos de quartzos com auxílio de equipamento portátil de fluorescência de raios-X (pXRF)

Diego Ribeiro - 6º módulo de Eng. Ambiental e Sanitária, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Thaís S. B. Dijair - 2º módulo de Agronomia, UFLA, Iniciação científica voluntária.

Fernanda M. Silva - Mestranda departando ciência do solo, UFLA.

Sérgio H. G. Silva - Orientador, DCS, UFLA. - Orientador(a)

Luiz R. G. Guilherme - Coorientador, DCS, UFLA.

Nilton Curi - Coorientador, DCS, UFLA.

Resumo

O conhecimento em mineralogia é fundamental para entender processos e propriedades de formação de minerais e rochas, além do solo. A avaliação e caracterização desses processos para descrição de propriedades condicionadas a elementos químicos ainda são extremamente escassas. O espectrômetro portátil de fluorescência de raios-X (pXRF) tem sido crescentemente utilizado para determinação do teor total de elementos químicos nos materiais analisados. Este equipamento tem se mostrado uma alternativa rápida, de menor custo, sustentável, pois não gera resíduos químicos, e necessidade mínima de preparação das amostras. Este trabalho pretende avaliar determinados elementos químicos com base nas leituras feitas com auxílio do pXRF através do emprego de algoritmos estatísticos através de análise com Random Forest (RF) pelo software R e teste de médias Scott Knott 5% de significância de teores de elementos através do software Sisvar. Foram utilizadas 22 amostras de quartzos do Departamento de Ciência do Solo da Universidade Federal de Lavras, sendo elas correspondentes a quartzos de tipos variados: hialino (QH), leitoso (QL), fumê (QE), amarelo (QA), roxo (QRX), rosa (QRS), verde (QV), e ferruginoso (QF). As análises foram feitas utilizando um pXRF Bruker S1 Titan LE através de leituras em triplicata, durante 60s, no modo trace (dual soil), em cada uma das amostras determinando 13 elementos químicos: SiO₂, Al₂O₃, Fe, CaO, MgO, S, K₂O, P₂O₅, Cl, Mn, Ti, V, e Cr. Os modelos gerados por meio do algoritmo Random Forest mostraram maior relevância do Fe, Cl, K₂O, P₂O₅ e SiO₂, para diferenciar os tipos de quartzos. O coeficiente Kappa variou entre 0.50 e 0.57, dando a entender pela validação que existe força de concordância moderada entre os resultados. A correlação de Pearson demonstrou-se forte em cinco análises: Ca e Cl (0,88), Ca e S (0,84), K e Cl (0,78), Ca K₂O (0,74) Na e Cl (0,72). Através do teste de médias Scott Knott 5% de significância, obteve-se com as leituras do pXRF maiores teores elementares para caracterização em cada tipo de quartzo onde QH apresentou maior teor de SiO₂ (99,53%). Maiores teores de Fe ocorreram no QF (2232 ppm), de Cl no QF (3942 ppm), de K₂O no QF (5615ppm) e de P₂O₅ no QE (1532 ppm). Os resultados aqui encontrados mostram que o pXRF é uma ferramenta que auxiliou a caracterização rápida da composição química dos diferentes tipos de quartzos e para a predição de seus tipos, com auxílio do algoritmo Random Forest.

Palavras-Chave: pXRF, quartzo, Random Forest.

Instituição de Fomento: CNPQ

Link do pitch: https://youtu.be/o_s5743clOM