

QUANTIFICAÇÃO DE MINERAIS PESADOS A PARTIR DE TÉCNICAS DE APRENDIZADO DE MÁQUINA DE QUÍMICA MINERAL OBTIDO POR EDS EM MICROSCÓPIO ELETRÔNICO DE VARREDURA: UM EXEMPLO NA FORMAÇÃO TWYFELFOUTEIN, NAMÍBIA

João Miguel Maraschin Santos¹, Gabriel Bertolini², Juliana Charão Marques¹

¹ Universidade Federal do Rio Grande do Sul, maraschinsantos@ufrgs.br gaberto@gmail.com;
juliana.marques@ufrgs.br

No estudo de proveniência sedimentar, os minerais pesados são aplicados para a identificação das possíveis rotas de sedimentação, compreensão do clima, relevo e para estimar a distância e tempo de transporte a fim de gerar dados essenciais para reconstrução paleogeográfica da área de estudo. Dados de química mineral são cruciais para a identificação e classificação dos minerais presentes - tradicionalmente obtidos através da microsonda eletrônica: uma técnica que, embora mais acurada, requer mais tempo e recursos para obtenção de um grande volume de dados. De forma alternativa, análises por espectrômetro de dispersão de energia acoplados a microscópio eletrônico de varredura (MEV-EDS), juntamente com uso de métodos de aprendizado de máquina podem proporcionar resultados confiáveis. A técnica permite a obtenção de um volume de dados maior, ainda que com resolução mais baixa, para a detecção e quantificação dos elementos. Buscando validar a utilização de técnicas de aquisição de dados rápidas, aproximadamente 8.000 análises individuais foram realizadas em minerais pesados utilizando MEV-EDS em amostras de arenitos da Formação Twyfelfoutein – Bacia Huab, Namíbia. Foi desenvolvido script utilizando a linguagem R para análise desse banco de dados extensivo e classificação do número de minerais encontrados, utilizando técnicas de agrupamento multivariado, simulação de número de minerais e validação de modelo. A primeira etapa do processamento consistiu na utilização de análise de componentes principais (PCA), o que permitiu um agrupamento dos minerais, baseado nos dados composicionais de química e transformação em valores planos multidimensionais. O algoritmo *k-means clustering*, é utilizado para quantificar o número de agrupamentos de minerais (clusters). Porém, por se tratar de um algoritmo de classificação supervisionado, necessita de um número de clusters (*k*) predefinido para se tornar efetivo. Para evitar esta limitação, foi simulado a classificação de *k-means* com valores de *k* entre 1 e 50. Por fim, a validação se deu por meio do *elbow method*, que indicou um número ótimo de 22 minerais (clusters). Assim, o uso de técnicas de aprendizado de máquina, com aplicação de um *script* em R para a exportação e manipulação de dados obtidos no MEV-EDS, permite gerar gráficos estatísticos de dispersão e semelhança de *clusters* que pode ser aplicado na identificação dos minerais. Este método traz vantagens como economia de tempo e de recursos, constituindo uma forma alternativa às clássicas análises por microsonda eletrônica.

Apoio: PRH 14.1 – Programa de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo

Palavras-chave: análise multivariada, proveniência, minerais pesados.