



**INSTITUTO
TECNOLÓGICO
VALE**

**Programa de Pós-Graduação em Instrumentação, Controle e
Automação de Processos de Mineração (PROFICAM)
Escola de Minas, Universidade Federal de Ouro Preto (UFOP)
Associação Instituto Tecnológico Vale (ITV)**

Dissertação

**ESPECTROSCOPIA DE REFLETÂNCIA APLICADA NA IDENTIFICAÇÃO DE
CONTAMINANTES DO MINÉRIO DE FERRO ASSOCIADOS A CÁLCIO E
MAGNÉSIO**

Rafael Pedrosa Oliveira

**Ouro Preto
Minas Gerais, Brasil
2022**

Rafael Pedrosa Oliveira

**ESPECTROSCOPIA DE REFLETÂNCIA APLICADA NA IDENTIFICAÇÃO DE
CONTAMINANTES DO MINÉRIO DE FERRO ASSOCIADOS A CÁLCIO E
MAGNÉSIO**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Instrumentação, Controle e Automação de Processos de Mineração da Universidade Federal de Ouro Preto e do Instituto Tecnológico Vale, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Controle e Automação.

Orientador: Profa. Rosa Elvira Correa Pabón,
D.Sc.

Ouro Preto
2022

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

O48e Oliveira, Rafael Pedrosa de.
Espectroscopia de refletância aplicada na identificação de contaminantes do Minério de Ferro associados a Cálcio e Magnésio. [manuscrito] / Rafael Pedrosa de Oliveira. - 2022.
94 f.: il.: color., gráf., tab..

Orientadora: Profa. Dra. Rosa Elvira Correa Pabón.
Dissertação (Mestrado Profissional). Universidade Federal de Ouro Preto. Programa de Mestrado Profissional em Instrumentação, Controle e Automação de Processos de Mineração. Programa de Pós-Graduação em Instrumentação, Controle e Automação de Processos de Mineração.
Área de Concentração: Engenharia de Controle e Automação de Processos Mineraiis.

1. Espectroscopia - Espectroscopia de Refletância. 2. Minérios de ferro - Contaminantes. 3. Minérios de ferro. I. Pabón, Rosa Elvira Correa. II. Universidade Federal de Ouro Preto. III. Título.

CDU 681.5:622.2

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
ESCOLA DE MINAS
PROGR. POS GRAD. PROF. INST. CONT. E AUT.
PROCESSOS DE MIN.



FOLHA DE APROVAÇÃO

Rafael Pedrosa de Oliveira

Espectroscopia de refletância aplicada na identificação de contaminantes do minério de ferro associados a cálcio e magnésio

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Instrumentação, Controle e Automação de Processos de Mineração (PROFICAM), Convênio Universidade Federal de Ouro Preto/Associação Instituto Tecnológico Vale - UFOP/ITV, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Engenharia de Controle e Automação na área de concentração em Instrumentação, Controle e Automação de Processos de Mineração.

Aprovada em 30 de junho de 2022

Membros da banca

Doutora - Rosa Elvira Correa Pabón - Orientadora - Instituto Tecnológico Vale
Doutor - Luciano Perdigão Cota - Instituto Tecnológico Vale
Doutora - Thais Andressa Carrino - Universidade Federal de Pernambuco

Rosa Elvira Correa Pabón, orientadora do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito no Repositório Institucional da UFOP em 08/09/2022



Documento assinado eletronicamente por **Bruno Nazário Coelho, COORDENADOR(A) DE CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM INST. CONTROLE AUTOMAÇÃO DE PROCESSOS DE MINERAÇÃO**, em 15/09/2022, às 16:34, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0398805** e o código CRC **A45FA820**.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus por ter iluminado meu caminho e ter me dado a persistência necessária para concluir essa jornada.

Em seguida, gostaria de agradecer aos meus pais Hélio (*In Memoriam*) e Esmeralda e aos meus irmãos, por todo o suporte e subsídios que puderam me proporcionar a oportunidade de estudar em uma das melhores instituições do Brasil, da qual sinto um extremo orgulho.

Quero agradecer à Lorena, por seu carinho, apoio e paciência para entender o sacrifício em prol do mestrado e me levar um "cafezinho" durante as noites e finais de semanas dedicados a dissertação.

Gostaria de agradecer à Rosa Pabón pela orientação e por ter acreditado no meu potencial mesmo com alguns altos e baixos durante o percurso. E por fim, ao Ademar por fornecer às amostras e por todo apoio prestado durante a execução do trabalho.

Obrigado!

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, Brasil (CAPES), Código de Financiamento 001; do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq); da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG); e da Vale S.A.

”O que importa não é o homem que critica ou aquele que aponta como o bravo tropeçou, ou quando o empreendedor poderia ter atingido maior êxito. Importante, em verdade, é o homem que está na arena, com a face coberta de poeira, suor e sangue; que luta com bravura, erra e, seguidamente, tenta atingir o alvo.”

Theodore Roosevelt.

RESUMO

Resumo da Dissertação apresentada ao Programa de Pós Graduação em Instrumentação, Controle e Automação de Processos de Mineração como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ESPECTROSCOPIA DE REFLETÂNCIA APLICADA NA IDENTIFICAÇÃO DE CONTAMINANTES DO MINÉRIO DE FERRO ASSOCIADOS A CÁLCIO E MAGNÉSIO

Rafael Pedrosa Oliveira

Junho/2022

Orientador: Rosa Elvira Correa Pabón

Esse trabalho tem como objetivo o estudo aprofundado acerca do uso da espectroscopia de refletância na identificação de contaminantes do minério de ferro. Tal estudo destina-se à exploração de amostras de trincheira da Mina de Conceição, localizada no Complexo de Itabira - MG. A técnica de espectroscopia de refletância, foi usada para composição de uma biblioteca espectral compreendida no intervalo do Visível ao Infravermelho de Ondas Curtas (*Visible to Short Wave InfraRed* - VSWIR - 350 - 2500 nm). A fim de destacar as feições características dos minerais em estudo, os dados foram normalizados através da remoção do contínuo e também foi calculada a segunda derivada de Savitzky Golay. Os dados processados foram analisados através da análise de componentes principais para avaliar a discriminação dos contaminantes. Os resultados obtidos foram satisfatórios para ambos os métodos de processamento, contínuo removido e segunda derivada, pois permitiram classificar amostras em dois grupos, uma que não apresenta teor dos contaminantes e outra que contém óxido de cálcio e/ou óxido de magnésio a partir do teor mínimo detectável na análise química, 0,7% e 0,4% respectivamente. Além da classificação das amostras, alguns métodos de aprendizado de máquina foram implementados na tentativa de realizar a estimativa do teor de contaminantes. Porém, o resultado alcançado foi insatisfatório devido à baixa disponibilidade de amostras para alimentar os modelos.

Palavras-chave: Espectroscopia de Refletância, Contaminantes, Minério de Ferro.

Macrotema: Usina; **Linha de Pesquisa:** Instrumentação no Processamento de Minérios; **Tema:** Sensoriamento Remoto.

ABSTRACT

Abstract of Dissertation presented to the Graduate Program on Instrumentation, Control and Automation of Mining Process as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

Rafael Pedrosa Oliveira

June/2022

Advisor: Rosa Elvira Correa Pabón

This work aims to study the use of reflectance spectroscopy in identifying contaminants in iron ore. This study is intended to explore trench samples from the Conceição Mine, located in the Itabira Complex - MG. The reflectance spectroscopy technique was used to compose a spectral library in the range of Visible to Short Wave Infrared - VSWIR (350 – 2500 nm). To highlight the absorption features of the minerals studied here, the data were normalized by continuum removal and besides, and the second derivative of Savitzky Golay was calculated. The processed data were analyzed using Principal Component Analysis to assess contaminant discrimination. The results obtained were satisfactory for both processing methods -continuum removal and second derivative. The samples were classified into two groups regarding the presence or not of calcium and/or magnesium oxide contaminants. Besides the sample classification, some machine learning methods were run to estimate the level of the contaminants. However, the results obtained were unsatisfactory due to the low number of samples available to perform the models.

Keywords: Reflectance Spectroscopy, Contaminants, Iron Ore.

Macrotheme: Plant; **Research Line:** Instrumentation in Ore Processing; **Theme:** Remote Sensing.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	A: Localização do Quadrilátero Ferrífero no Estado de Minas Gerais. B: Modelo digital de elevação, mostrando a geomorfologia da região, em que pode ser observada a predominância do relevo de serra, importantes pontos de extração mineral. C: Posição Geográfica do Complexo de Itabira.	19
Figura 2.2	Usinas de beneficiamento mineral do Complexo de Itabira	20
Figura 2.3	Coluna Estratigráfica do Quadrilátero Ferrífero com enfoque para o Grupo de Itabira	22
Figura 2.4	Fluxograma simplificado do processo de beneficiamento mineral de Conceição II	24
Figura 2.5	Corte longitudinal de um tubo de raios X.	26
Figura 2.6	Principais comprimentos de onda.	27
Figura 2.7	a-c) Um fóton de energia eletromagnética é emitido quando um elétron em um átomo retoma a camada inicial após ter sido excitado	28
Figura 2.8	a) Amostra de hematita pura, Hematite GDS27, com granulometria média de $200\mu\text{m}$, espectro de pureza A. b) Amostra de hematita com alto teor de quartzo, Hematite WS161, granulometria média de $6\mu\text{m}$, espectro pureza B. Os dois espectros foram obtidos com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$).	31
Figura 2.9	a) Amostra de goethita pura, Goethite WS222, com granulometria média de $125\mu\text{m}$, espectro obtido com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$). b) Amostra de goethita pura, Goethite GDS134, obtida através de espectrômetros ASD ($0.35\mu\text{m}$ a $2.5\mu\text{m}$).	33
Figura 2.10	a) Amostra de dolomita com traços de calcita, Dolomite HS102, com granulometria média menor que $5\mu\text{m}$, possui fraca absorção em $1\mu\text{m}$, devido à presença de óxidos de ferro, espectro obtido com espectrômetros ASD. b) Amostra de dolomita com traços de calcita, Dolomite COD2005, granulometria média de $75\mu\text{m}$, espectro foram obtidos com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$). Ambos os espectros possuem pureza B.	35
Figura 2.11	Amostras de magnesita + hidromagnesita, a) HS47.1B espectro obtido com espectrômetros ASD. b) HS47.3B espectro obtido com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$). Ambos os espectros possuem pureza A.	37

Figura 2.12	Normalização do espectro de refletância da amostra 6464+0.15mm através do contínuo removido. Nota-se que as feições de absorção localizadas próximas aos comprimentos de onda de 980 nm e 2300 nm são realçadas facilitando a caracterização das bandas de absorção sob uma base comum.	38
Figura 2.13	Representação do modelo de análise de componentes principais (PCA) . . .	40
Figura 2.14	Esquema representativo do modelo de Random Forest com conjunto de N árvores de decisão.	42
Figura 3.1	As 12 amostras separadas considerando-se quatro faixas granulométricas: (i) +8.00 mm; (ii) +1.00 mm; (iii) +0.15 mm; e (iv) -0.15 mm	44
Figura 3.2	a)FiledSpec 4 <i>Hi-Res NG 4</i> b)Sonda de Contato	46
Figura 3.3	Amostras na placa de Petri para medições espectrais	47
Figura 3.4	Assinatura espectral bruto e corrigido através do splice correction da amostra 6464 – +0,15mm.	47
Figura 3.5	Assinatura espectral média e leituras espectrais realizadas da amostra 6464 - +0.15mm. Notam-se algumas feições de absorção bem sutis próximas do comprimento de onda de 2300 nm que auxiliam na identificação de contaminantes associados aos carbonatos no minério de ferro.	48
Figura 3.6	Representação dos espectros das amostras em estudo.	49
Figura 4.1	Foto da amostra designada de 6445.	52
Figura 4.2	Foto da amostra designada de 6443.	53
Figura 4.3	Foto da amostra designada de 6469.	54
Figura 4.4	Efeito da presença de contaminantes na cor das amostras	54
Figura 4.5	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo das amostras pulverizadas de trincheira. Foi realizado um zoom na região entre 2130 – 2500 nm para resaltar possíveis bandas de absorção relacionadas com contaminantes no minério. Para comparação, todos os gráficos estão com a mesma escala vertical.	56
Figura 4.6	Feição de absorção na banda FeOH (2230 – 2295 nm). Nota-se a mistura com feições de minerais de composição alumina (A) e magnésiana (B).	59
Figura 4.7	Feição de absorção na banda Al-OH (2160 – 2230 nm): (A)Comprimentos de onda de valores intermédios (2200 – 2210 nm); (B) Comprimento de onda mais longos (>2210 - <2219 nm) e (C) Comprimentos de onda longos, > 2220 nm, e especialmente, >2220 nm) refletem micas ricas em Si	61
Figura 4.8	Feição de absorção na banda óxidos de magnésio e carbonatos são caracterizados pelas feições de absorção no intervalo entre 2300 – 2360 nm e 2300 – 2350 nm	64

Figura 5.1	Curvas espectrais das amostras de trincheira no comprimento de onda de 350nm a 2500nm. a) Espectro Original; b) Contínuo Removido; c) Segunda Derivada Savitzky-Golay	66
Figura 5.2	Exemplo do espectro do contínuo removido da amostra 6463.8mm (A) e sua respectiva segunda derivada (B). Nota-se que as bandas de absorção características observadas em A representam pontos de inflexão	67
Figura 5.3	Curvas espectrais das amostras de trincheira no comprimento de onda de 2000nm a 2450nm. a) Contínuo removido; b) Filtro Savitzky-Golay	68
Figura 5.4	Comparativo entre espectros do CR das amostras que possuem os maiores e menores valores para PC1	69
Figura 5.5	Comparativo entre espectros do CR das amostras que possuem valores extremos para PC3	70
Figura 5.6	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,7% óxido de cálcio a partir do espectro com contínuo removido	71
Figura 5.7	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,7% óxido de cálcio a partir do espectro com contínuo removido	72
Figura 5.8	Comparativo entre espectros do SGF das amostras que possuem valores extremos para PC1	72
Figura 5.9	Comparativo entre espectros do SGF das amostras que possuem valores extremos para PC3	73
Figura 5.10	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,7% óxido de cálcio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay	74
Figura 5.11	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,8% óxido de cálcio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay, onde é visualizado um erro de classificação	75
Figura 5.12	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,5% óxido de magnésio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay	76
Figura 5.13	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,4% óxido de magnésio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay	77
Figura 5.14	Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,4% óxido de magnésio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay	77
Figura 1	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6443.	86
Figura 2	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6445.	87
Figura 3	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6446.	88

Figura 4	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6451.	89
Figura 5	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6452.	90
Figura 6	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6458.	91
Figura 7	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6460.	92
Figura 8	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6463.	93
Figura 9	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6464.	94
Figura 10	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6465.	95
Figura 11	Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6469.	96

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1	Composição química das amostras pelo método de Fluorescência de Raios X	45
Tabela 4.1	Comprimentos de onda das feições de absorção de contaminantes nas amostras de trincheira analisadas neste estudo. As feições destacadas em cor laranja estão relacionadas com o comprimento de onda da feição mais profunda detectada. Observação: (i) se a absorção mais profunda estiver na banda Al-OH, feições secundárias de Al-OH poderão ser observadas no intervalo espectral de 2230 – 2500 nm – feições em cor azul; (ii) neste mesmo intervalo podem ser observada a mistura entre as feições de MgO/CO ₃ e secundárias de Al-OH – feições em vermelho.	58
Tabela 5.1	Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC1-CR	70
Tabela 5.2	Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC3-CR	70
Tabela 5.3	Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC1-SGF	72
Tabela 5.4	Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC3-SGF	73
Tabela 5.5	Análise química dos elementos dispostos na Figura 5.14	78
Tabela 5.6	RMSE para as técnicas de aprendizado de máquina	78

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ACP	Análise de Componentes Principais
ANM	Agência Nacional de Mineração
DRX	Difratometria de Raios X
FRX	Fluorescência de Raios X
LABMAT	<i>Laboratório de Materiais</i>
LDRX	<i>Laboratório de Difração de Raios X</i>
MG	Minas Gerais
SWIR	<i>Short Wave InfraRed</i>
UFAM	<i>Universidade Federal do Amazonas</i>
UFSC	<i>Universidade Federal de Santa Catarina</i>
USGS	<i>United States Geological Survey</i>
VSWIR	<i>Visible to Short Wave InfraRed</i>

SUMÁRIO

1	Introdução	15
1.1	Contextualização	15
1.2	Justificativa	16
1.3	Objetivo	17
1.3.1	Objetivo Geral	17
1.3.2	Objetivos Específicos	17
1.4	Estrutura do Trabalho	17
2	Revisão Bibliográfica	18
2.1	Exploração Mineral	18
2.2	Caracterização de Mineral	25
2.2.1	Difração de Raio X	25
2.2.2	Espectroscopia de Reflectância	26
2.2.2.1	Hematita	30
2.2.2.2	Goethita	32
2.2.2.3	Dolomita	34
2.2.2.4	Magnesita	36
2.3	Processamento dos dados	38
2.3.1	Contínuo Removido	38
2.3.2	Análise de Componentes Principais	39
2.3.3	Filtro de Savitzky-Golay	40
2.4	Métodos de Aprendizado de Máquina	40
2.4.1	Randon Forest	41
2.4.2	KNN - K-Nearest Neighbor	42
2.4.3	<i>Adaboosting</i>	42
3	Materiais e Métodos	43
3.1	Amostras	43
3.2	Instrumentação	46
3.3	MEDIÇÕES ESPECTRAIS	46

3.3.1	Leituras Espectrais	46
3.3.2	Pré-processamento dos dados	46
3.3.2.1	Média	47
3.3.2.2	Remoção do Contínuo	49
3.3.2.3	FILTRO DE SAVITZKY- GOLAY	49
3.3.2.4	Aprendizado de máquina	50
3.3.2.5	Análise por Componentes Principais	50
4	Resultados - Caracterização Física das Amostras	52
4.1	Análise Visual das Amostras	52
4.1.1	Minério de Ferro Sem Contaminantes	52
4.1.2	Contaminantes relacionados com CaO e MgO	53
4.2	Construção das Bibliotecas Espectrais	55
5	Resultados - Técnicas de Processamento e Aprendizado de Máquina	65
5.1	Caracterização das curvas espectrais	65
5.2	Análise de Componentes Principais	68
5.2.1	PCA para Contínuo Removido	69
5.2.2	PCA PARA SEGUNDA DERIVADA SAVITZKY-GOLAY	71
5.3	Aprendizado de Máquina	78
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS	79
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	80
	APÊNDICES	84

1. Introdução

1.1. Contextualização

O Brasil é um dos maiores produtores mundiais de minério de ferro, o que faz desse mineral um importante ativo para a economia, devido ao grande volume de exportações, sendo que o país é um dos principais fornecedores mundiais dessa commodities. Nesse cenário, a qualidade do minério é essencial para fins de destinação na indústria siderúrgica e metalúrgica.

No mercado mundial esse minério é comercializado com teores acima de 60% de ferro. Apesar dessa demanda, grande parte das reservas atuais não possuem essa concentração. Segundo a Agência Nacional de Mineração (ANM), no Sumário Mineral de 2017, as reservas brasileiras possuíam o teor médio de 45,7%. Para tornar esse material com baixo teor comercializável é necessário realizar processos de beneficiamento. Estes processos podem ser significativamente impactados devidos aos contaminantes presentes no material que alimenta às unidades operacionais. Os principais impactos estão relacionados com eventos que colocam em risco a produtividade e segurança da operação. Nesse contexto, identificar os contaminantes que acompanham ao minério de ferro, de forma rápida, é de fundamental importância para uma melhor definição dos parâmetros no processo de beneficiamento.

A concentração do minério de ferro pode ser realizada através de diversas técnicas, por exemplo, flotação, separação magnética, separação gravítica e lixiviação (DE MORAES, 2002). Muitas destas técnicas separam as partículas usando algumas das suas propriedades como tamanho, forma, densidade, e suscetibilidade magnética. Por outro lado, a separação dos minerais de interesse dos minerais de ganga através do processo de flotação é independente das características das partículas. Essa técnica usa reagentes que manipulam a superfície da partícula, tornando-a hidrofóbica ou hidrofílica. Assim, as partículas que não possuem afinidade com a água são carregadas através da passagem de bolhas de ar, enquanto as outras afundam. A seletividade nesse processo é de extrema importância, pois está diretamente ligada à eficiência final do processo de flotação. A presença de alguns contaminantes no material, como o magnésio e o cálcio, reduz a seletividade no processo de flotação (DE ORQUIZA MILHOMEM *et al.*, 2018)

Os contaminantes associados ao minério de ferro têm um papel crucial nos processos de beneficiamento. Assim, é importante identificá-los com prontidão para otimizar a produtividade, mas também para reduzir riscos operacionais ao manusear o material. A forma atual utilizada para obter a informação dos contaminantes é a realização de análises de fluorescência de raios X pelos laboratórios nas unidades operacionais. O retorno da informação para uso na tomada de decisão pode demorar de três horas até sete dias, dependendo do tipo de amostra – mina, usina, produto. Nesse contexto, a exploração de tecnologias e métodos que possam trazer estas informações de maneira mais rápida traz ganho para tomada de decisão em relação às estratégias operacionais.

A espectroscopia de refletância é uma técnica que apresenta uma série de atrativos, tais

como: a possibilidade de análise sem preparação da amostra, rapidez na obtenção dos espectros, cálculos e apresentação dos resultados. Esta é uma técnica que estuda a luz como função do comprimento de onda que foi emitido, refletido ou disperso de um líquido, sólido ou gás (CLARK *et al.*, 1999). Diversos estudos têm apresentado o potencial desta tecnologia na caracterização mineral (CARIOCA *et al.*, 2011; FERNANDES *et al.*, 2017; GONÇALVES, 2014; LANFRANCHI, 2019; SILVA, 2021; SILVA *et al.*, 2020). Contudo, a sua possível aplicação operacional nas atividades de mineração ainda é um desafio.

O presente trabalho estudou a aplicação de técnicas de análise de dados para obter informações dos dados de espectroscopia de reflectância de amostras de trincheira da Mina de Conceição, Itabira-MG. O tratamento das informações através de modelos matemáticos é fundamental para remover informações indesejadas e realçar características que possuam relação com as propriedades em estudo. A combinação de métodos de pré-processamento com modelos de Aprendizado de Máquina, apresentam um bom desempenho na classificação das amostras quanto à presença dos contaminantes relacionados à alumina, magnésio e cálcio.

1.2. Justificativa

A identificação dos contaminantes associados ao minério que está alimentando o beneficiamento é importante para auxiliar/orientar a tomada de decisões para se determinar ações acerca da estratégia do processo produtivo. Os métodos tradicionais de análise laboratorial são lentos e na maioria dos casos são utilizados apenas como controle de qualidade do produto expedido, não chegando a tempo de influenciar na fase de beneficiamento mineral.

A utilização e o desenvolvimento de novas tecnologias em tempo real, ou que forneçam um resultado mais ágil, poderão trazer ganhos significativos para o processo produtivo, permitindo uma tomada decisão mais assertiva e um aumento de produtividade visto que somente o material de interesse será beneficiado.

As tecnologias espectrais, com foco especial na espectroscopia de reflectância, têm sido utilizadas por décadas para identificar e qualificar materiais. É uma técnica que produz resultados rápidos, quase em tempo real, sempre que associada a modelos de referência. Contudo, torna-se necessário a construção de modelos de referência específicos para cada demanda, visando uma melhor acurácia nos resultados obtidos. Ademais, a operacionalização desta tecnologia nas atividades de mineração ainda é um desafio a ser contornado.

Nesse contexto, este estudo contribuiu com uma análise da efetividade de algumas técnicas de pré-processamento de dados combinados com modelos de aprendizagem supervisionada para classificação dos dados espectrais das amostras. Analisou-se a performance dos modelos para diferentes tipos e percentuais de contaminantes.

1.3. Objetivo

1.3.1. Objetivo Geral

Avaliar a aplicação de espectroscopia de refletância na caracterização de minério de ferro para identificação de contaminantes associados ao cálcio (*Ca*) e magnésio (*Mg*) – Estudo de caso na Mina de Conceição em Itabira - Minas Gerais (MG).

1.3.2. Objetivos Específicos

- Compor uma biblioteca espectral que compreenda as assinaturas espectrais no intervalo VSWIR do máximo de amostras de minério;
- Caracterização do minério de ferro da Mina de Conceição – Itabira, MG;
- Avaliar a viabilidade da utilização de técnicas de aprendizado supervisionado para classificação das amostras;
- Avaliar o uso da técnica de Análise de Componentes Principais – PCA para classificação dos dados.

1.4. Estrutura do Trabalho

A dissertação está estruturada em 6 capítulos que permeiam nos objetivos do trabalho, bem como os métodos adotados, resultados obtidos e recomendações de trabalho futuro. O presente capítulo (Capítulo 1) compreende em uma breve introdução sobre espectroscopia de refletância, justificativa e objetivos deste trabalho. O capítulo 2 apresenta a fundamentação teórica para embasamento da pesquisa no quesito de espectroscopia na caracterização de amostras de trincheira de minério de ferro e seus contaminantes. O capítulo 3 apresenta os materiais, métodos e instrumentos aplicados. Os capítulos 4 e 5 são referentes aos resultados alçados no trabalho, sendo que no quarto os resultados da caracterização espectral e no quinto os resultados da aplicação de métodos multivariados para processamento e classificação das amostras. O último capítulo traz a conclusão do trabalho em conjunto com as sugestões de trabalho futuro.

2. Revisão Bibliográfica

O capítulo a seguir, apresenta uma breve introdução sobre a exploração mineral no Quadrilátero Ferrífero, passando desde o início da exploração do minério de ferro até os processos nos dias atuais. Além disso, são explorados alguns métodos de caracterização mineral, tendo o maior foco na técnica de espectroscopia de reflectância em conjunto com metodologias de processamento dos dados e aprendizado de máquina.

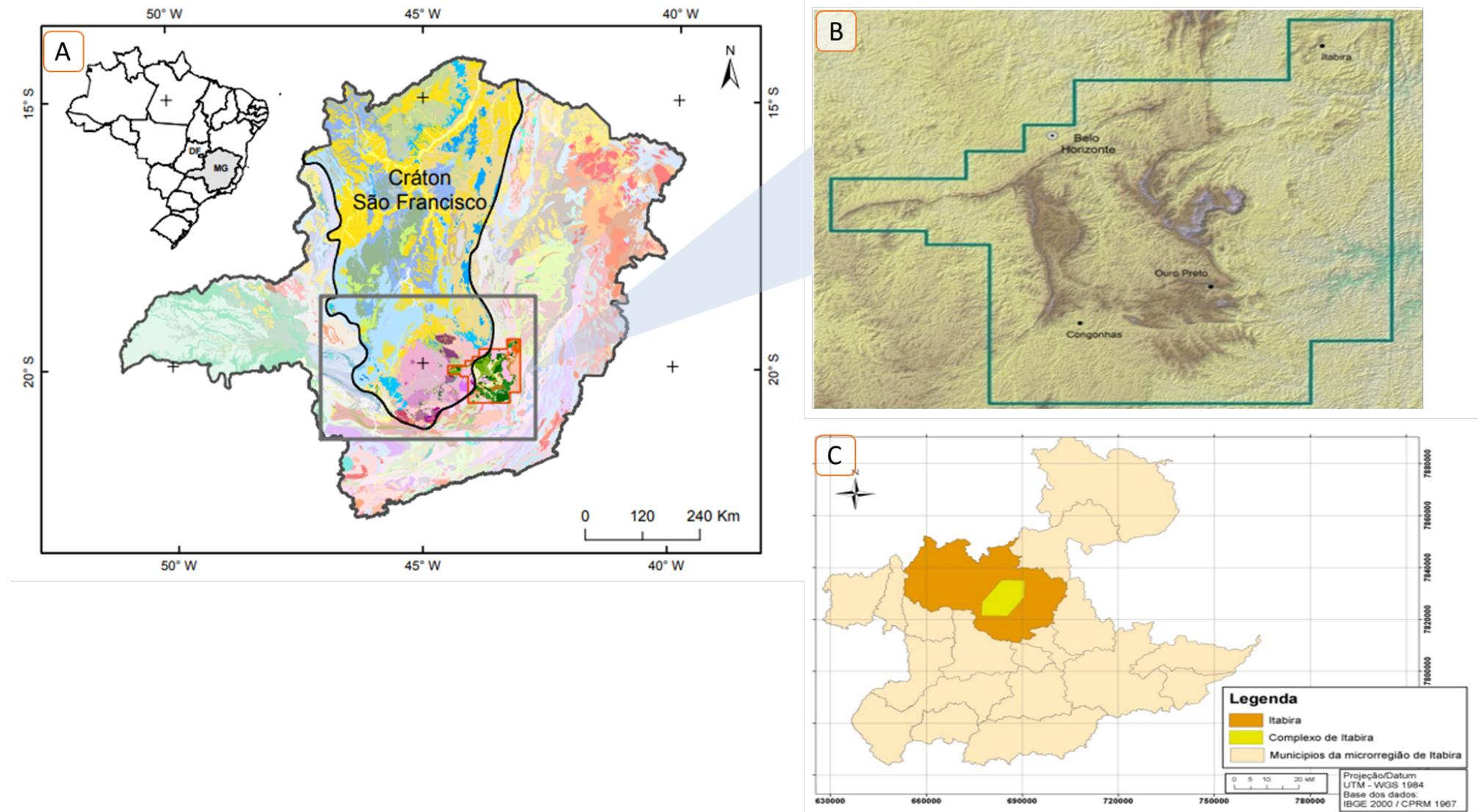
2.1. Exploração Mineral

A exploração de minério de ferro em Minas Gerais teve início no século 18, na região denominada geologicamente de Quadrilátero Ferrífero - QF, localizado no sudeste do estado de Minas Gerais, cujo os vértices são Belo Horizonte, Santa Bárbara, Congonhas do Campo e Mariana (Figura 2.1), é caracterizado como uma importante província metamagnética, devido à extensa atividade de minerais como ferro, ouro, manganés e alumínio (BEZERRA, 2014; BICALHO *et al.*, 2019).

O QF está dividido em três supergrupos com diferentes domínios geológicos: Supergrupo do Espinhaço, Supergrupo Minas e Supergrupo Rio das Velhas que se ocupam uma área de cerca de 7000km². Devido a vasta riqueza mineral, além de uma localização privilegiada, a região desempenha um papel de importância econômica para o Brasil. Essas características favoreceram a instalação da primeira fábrica para produzir barras de ferro do país, localizada em Congonhas do Campo, por Von Eschwege, em 1811 (ANDRADE, 2012; MARSHAK e ALK-MIM, 1989).

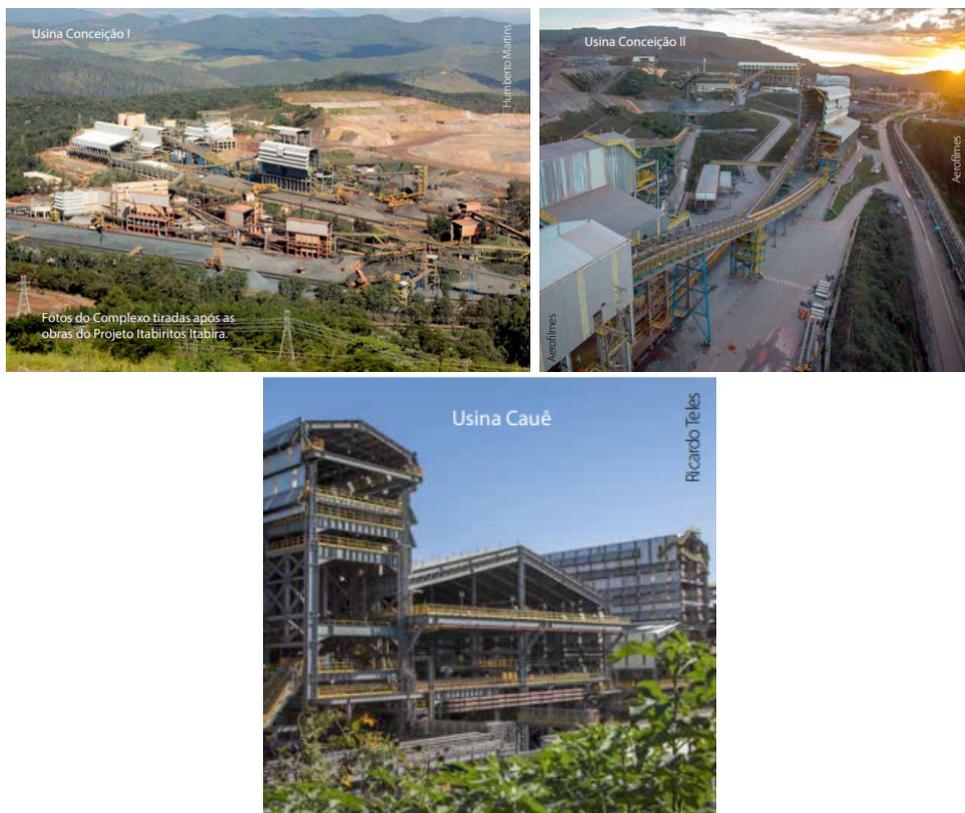
Ainda no século XVIII, dava-se início à exploração mineral em Itabira. Naquela época diversas pessoas se mudaram para essa região em busca do ouro, abundante nas terras. Nos séculos XIV e XX, devido à escassez do mineral dourado, os olhos começaram a se voltar para um mineral com depósitos ainda maiores na região, o Minério de Ferro. Ampliavam-se os estudos sobre a região, graças aos primeiros engenheiros formados pela Escola de Minas de Ouro Preto e em 1909 foi fundada por um grupo Inglês a *Brazilian Hematite Syndica*, que posteriormente foi chamada de *Itabira Iron Ore Company Limited*. (ANDRADE, 2012; VALE, 2016).

Figura 2.1: A: Localização do Quadrilátero Ferrífero no Estado de Minas Gerais. B: Modelo digital de elevação, mostrando a geomorfologia da região, em que pode ser observada a predominância do relevo de serra, importantes pontos de extração mineral. C: Posição Geográfica do Complexo de Itabira.



Motivado pelo contexto geopolítico da época, o governo federal, liderado por Getúlio Vargas, revogou a licença dos ingleses, o que motivou a união com grupos nacionais para continuar a exploração, criando a Companhia Brasileira de Mineração e a Itabira Mineração S.A. Em 1942, o governo promoveu a união dessas empresas e assim surgiu a Companhia Vale do Rio Doce, hoje denominada Vale, que é detentora do Complexo de Itabira, formado pelas minas Cauê, Chacrinha, Onça, Dois Córregos, Periquito e Conceição. Localizado no extremo noroeste do QF, o complexo alcança uma superfície aproximada de 180km^2 e conta com três usinas de beneficiamento mineral: Conceição I e II e Cauê (Figura 2.2). (ANDRADE, 2012; VALE, 2016).

Figura 2.2: Usinas de beneficiamento mineral do Complexo de Itabira



Fonte: (VALE, 2016)

Do ponto de vista geológico, ocorre no Complexo Itabira, as formações Gandarela e Cauê. Essas unidades geológicas são pertencentes ao Supergrupo Minas, que além do Grupo Itabira, em que estão localizadas as formações citadas, é constituído pelos grupos: Caraça, Piracicaba e Sabará. A coluna estratigráfica da região é disposta na Figura 2.3 e a partir do enfoque no Grupo Itabira, pode-se observar a predominância de carbonatos na Formação do Gandarela, sendo constituído por itabiritos dolomíticos, filito dolomítico e argiloso, dolomita e calcário magnesiano. Na Formação do Cauê, predomina uma formação ferrífera bandada, constituída por itabiritos e corpos de minério de hematita, sendo o mais importante economicamente (ALKMIM e MARSHAK, 1998; ANDRADE, 2012; BICALHO *et al.*, 2019; ROSIÈRE

e CHEMALE JR, 2000; SANTIAGO, 2008).

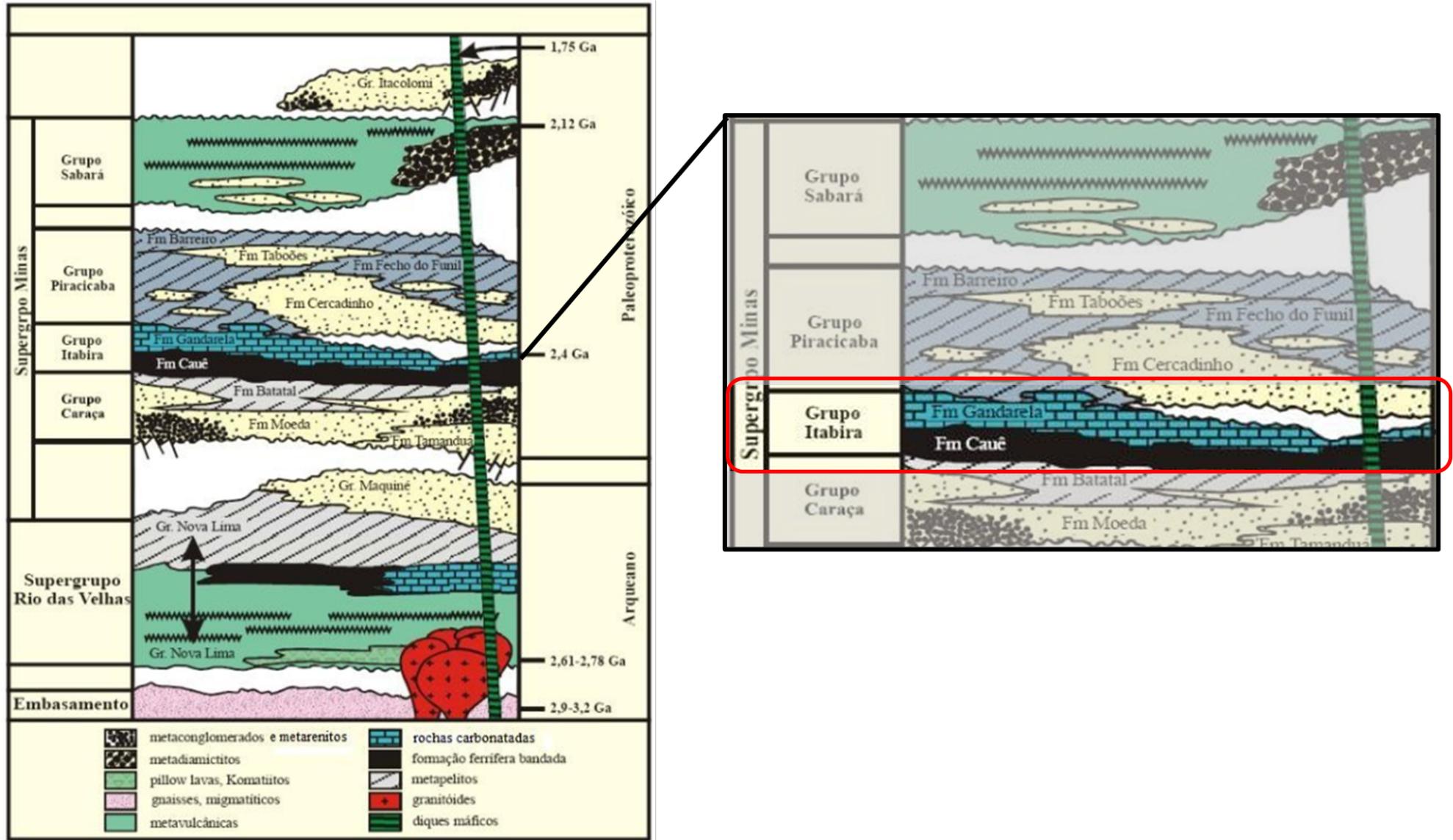
Os itabiritos são caracterizados como uma formação férrica bandada metamórfica, sendo a hematita o óxido de ferro predominante, podendo conter também goethita. Na composição da ganga, o quartzo aparece como mineral predominante, além de dolomita e anfibólios. Quando o itabirito apresenta quantidades maiores de dolomita, o termo itabirito é acrescido pelo nome do qualificador apropriado, no caso, itabirito dolomítico (BICALHO *et al.*, 2019; ROSIÈRE e CHEMALE JR, 2000).

A exploração da região pela Vale, iniciou-se com a recuperação de hematita de alto teor para alimentar as siderúrgicas e o itabirito friável era descartado e estocado sem nenhuma utilidade. Motivada pela crescente demanda no mercado, a companhia construiu a primeira usina de beneficiamento mineral para recuperar o itabirito que fora estocado, dando início da operação da usina do Cauê em 1972. Anos mais tarde foi inaugurada a usina de Conceição, mais moderna. O processo atual de Conceição II, representado na Figura 2.4, é o resultado de diversas modificações para atender o aumento da demanda do mercado em conjunto com a queda de qualidade do minério retirado do solo (VALE, 2016).

As etapas de britagem e moagem são responsáveis por adequar a granulometria do material que vem da frente de lavra chamado de *ROM - Run of Mine*. Esse procedimento é realizado para fragmentar as rochas e permitir a separação das partículas de óxido de ferro do estéril. As etapas seguintes de classificação, flotação e desaguamento, são realizadas para se obter o produto final com concentração elevada, acima de 62% de óxido de ferro para que seja comercializada.

O material resultante dessas etapas passa pelo procedimento de flotação, em que o objetivo principal é separar as partículas ricas em óxido de ferro, do material sem valor econômico no processo. Existem diversos tipos de flotação, porém o mais comum é a flotação por espumas. Neste processo, os minerais hidrofobizados dispersos, no meio aquoso, são coletados por bolhas de ar e arrastados à superfície, sendo removidos na camada de espumas por transbordo ou mecanicamente. Os minerais hidrofílicos permanecem na fase aquosa acompanhando o fluxo de água (BERTOLINO *et al.*, 2018).

Figura 2.3: Coluna Estratigráfica do Quadrilátero Ferrífero com enfoque para o Grupo de Itabira



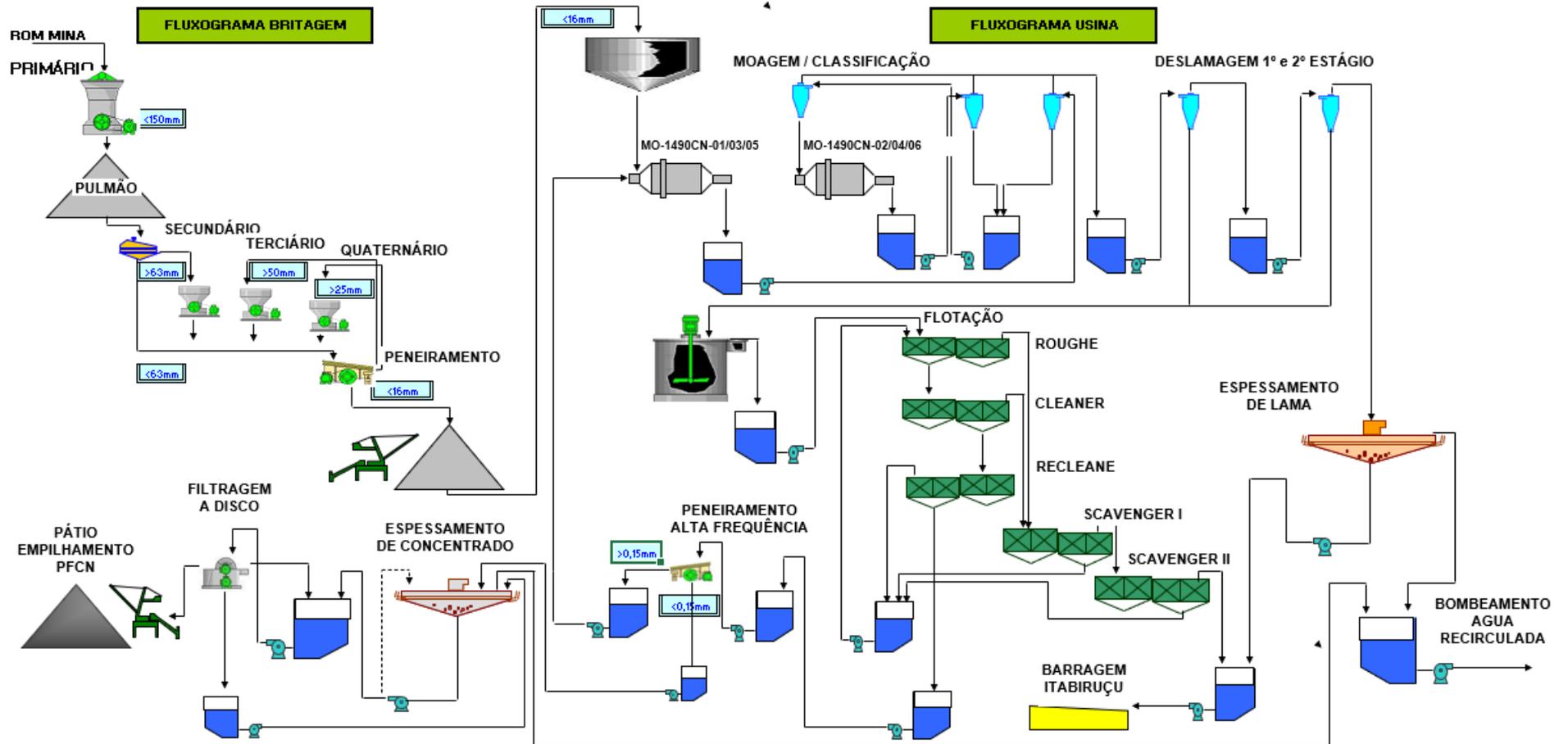
Fonte: Adaptado de Alkmim e Marshak (1998)

A hidrofobicidade no processo de flotação pode ser definida como a propriedade de determinadas espécies minerais que tem maior afinidade pela fase gasosa do que pela fase líquida, com isso, são carregadas pelas bolhas de ar pelo processo. Já os minerais hidrofílicos têm comportamento oposto, têm maior afinidade pela fase líquida. Essa é uma propriedade intrínseca dos minerais, porém, a adição de reagentes químicos permite alterar a maneira como uma partícula vai se comportar, pois o reagente é depositado na superfície do mineral, recobrando, de modo que fique um filme da substância sobre a superfície(BERTOLINO *et al.*, 2018).

É na etapa de flotação que é de extrema importância a composição química dos minério de ferro que está entrando no processo, em caso de um teor elevado de óxido de cálcio e óxido de magnésio, o processo de flotação pode ter um prejuízo imenso. No trabalho de Costa (2013), foi estudada a presença de formações férricas dolomíticas presentes na mina de Conceição da mineradora Vale, que fica dentro da Formação do Cauê, verificando que são tratadas como estéreis e depositadas em pilhas permanentes, devido à incapacidade do processamento para comercialização. O teor global da amostra utilizada em seu trabalho foi de 3,45% de MgO e 5,45% de CaO.

O impacto da presença dos óxidos de magnésio e cálcio, mesmo que em pequena quantidade, no processo de flotação foi o motivador para esse trabalho que visa estudar uma alternativa para identificar esses elementos em amostras de minério de ferro de uma forma mais rápida do que as alternativas atuais, em que muitas vezes o minério já passou pelo processo de beneficiamento antes de ter um resultado da análise química.

Figura 2.4: Fluxograma simplificado do processo de beneficiamento mineral de Conceição II



Fonte: O Autor (2022)

2.2. Caracterização de Mineral

A complexidade dos minérios, tanto sob aspectos físicos, quanto aspectos químicos, vem exigindo estudos de caracterização das propriedades dos seus materiais precedendo as etapas de beneficiamento (CARIOCA *et al.*, 2011). Devido a essa complexidade, junto com a necessidade de melhorar cada vez mais o processo de recuperação de minerais valiosos, novas técnicas de identificação mineral são testadas, na tentativa de aprimorar algumas já tradicionais, como a Difratomia de Raios X - DRX e Fluorescência de Raios X - FRX.

As técnicas Difratomia de Raios X - DRX, para identificação mineral e da Fluorescência de Raios X-FRX para quantificação mineral, são amplamente utilizadas e bem difundidas para este fim para diversos tipos de minerais (Xavier *et al.* 2012, Bertolino *et al.* 2018, da Silva *et al.* 2013, Bertolino *et al.* 2010). Já a espectroscopia de reflectância, é uma técnica ainda pouco utilizada, mas com um grande potencial na identificação e quantificação dos componentes químicos das amostras (Pabón *et al.* 2019, Carioca *et al.* 2011, Gonçalves 2014, Lanfranchi 2019, Fernandes *et al.* 2017).

2.2.1. Difração de Raio X

A difração, é um fenômeno de utilidade diversa na pesquisa científica, uma de suas implicações, é na cristalografia de raios x. A difração é identificada quando um feixe de fótons incide sobre um obstáculo contendo um ou mais orifícios, com dimensões da ordem de seu comprimento de onda (NAPOLITANO *et al.*, 2007).

Quando um feixe de radiação tem comprimento de onda das distâncias interatômicas ($\lambda \approx 1\text{Å} = 10^{-10}m$), incide sobre um arranjo ordenado periodicamente (cristalino), a interferência obedece as regularidades sendo construtiva ou destrutiva para todas as direções, esse é o fenômeno da difração. A condição da interferência construtiva, foi analisada por W.L.Bragg, que propôs uma equação que informa a direção dos feixes difratados (Napolitano *et al.* 2007, Scapin 2003).

Os raios X, são radiações eletromagnéticas que se estendem de 10^3 a 10^5 Å, podendo ser polarizados, refletidos e difratados (BERTOLINO *et al.*, 2018). O feixe de raios X, incide sobre as amostras e é difratado em cada plano cristalino. Como cada substância possui um padrão de difração único, o difratograma possibilita identificar componentes da amostra.

O espalhamento dos raios X, decorre de maneira coerente, ou seja, mesma energia da radiação incidente por um conjunto de planos cristalinos(hkl), ocorre de em um ângulo definido, denominado ângulo de Bragg (SCAPIN, 2003). A condição estabelecida pela Lei de Bragg é dada pela equação 2.1:

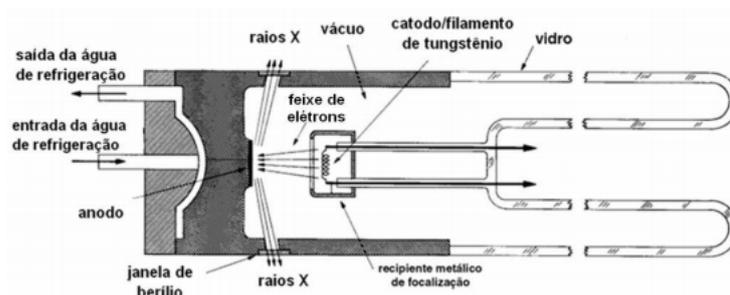
$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad (2.1)$$

onde n é a ordem da difração; λ é o comprimento de onda da radiação incidente; d_{hkl} é a

distância interplanar e θ é o semi ângulo de difração medido em relação aos raios incidentes. Os valores de d_{hkl} para compostos padrões, são tabelados e disponíveis no sistema da *International Union of Crystallography* (SCAPIN, 2003).

Os raios x, são provenientes da camada eletrônica dos átomos e são obtidos por meio de tubos que promovem a produção de raios X. Os tubos, consistem basicamente de um cilindro contendo um anodo, um catodo e janelas de berílio para saída da radiação produzida (DA SILVA *et al.*, 2013)). A Figura 2.5, apresenta o esquema geral de um tubo de raio X.

Figura 2.5: Corte longitudinal de um tubo de raios X.



Fonte: (DA SILVA *et al.*, 2013)

A Difractometria de Raio X é uma técnica amplamente utilizada na identificação mineral devido às vantagens que esse método possui, dentre elas, pode-se citar o baixo custo e a necessidade de pequenas quantidades de material. A técnica é empregada para identificação de 95% das substâncias inorgânicas e da mesma forma para o estudo de estruturas cristalinas (BERTOLINO *et al.*, 2018).

Apesar de alguns trabalhos citarem a rapidez para execução da análise por difratometria de raios x, como Albers *et al.* (2002); Scapin (2003), é necessário a preparação das amostras. Uma das etapas do preparo, consiste em realizar a cominuição do material em uma granulometria mínima $\leq 150\mu\text{m}$, conforme procedimento indicado pelo *Laboratório de Materiais* - UFAM e *Laboratório de Difração de Raios X* - UFSC. Com isso, o tempo entre a coleta do material até a análise é longo.

2.2.2. Espectroscopia de Reflectância

A espectroscopia representa uma técnica de medida científica para o estudo da matéria com sua interação com os componentes diferentes do espectro eletromagnético (MEŠTROVIĆ, 2019). Com isso, é necessário entender os princípios físicos do eletromagnetismo, para um bom entendimento dessa técnica.

A radiação eletromagnética é emitida por qualquer corpo que possua temperatura acima do zero grau absoluto (0 Kelvin). Com isso, too corpo com temperatura acima do zero grau absoluto pode ser considerado como uma fonte de energia eletromagnética. Sendo o Sol e a Terra, a principais fontes naturais utilizadas no sensoriamento remoto (DE MORAES, 2002).

O comprimento de uma onda eletromagnética, dado por λ , é definido como a distância média entre máximos ou mínimos consecutivos em um padrão periódico. Já a frequência dada por *frequência* (f), é o número de ondas por um período de tempo (DE MORAES, 2002; JENSEN, 2009). A relação entre o comprimento de onda e a frequência é baseado na equação 2.2.

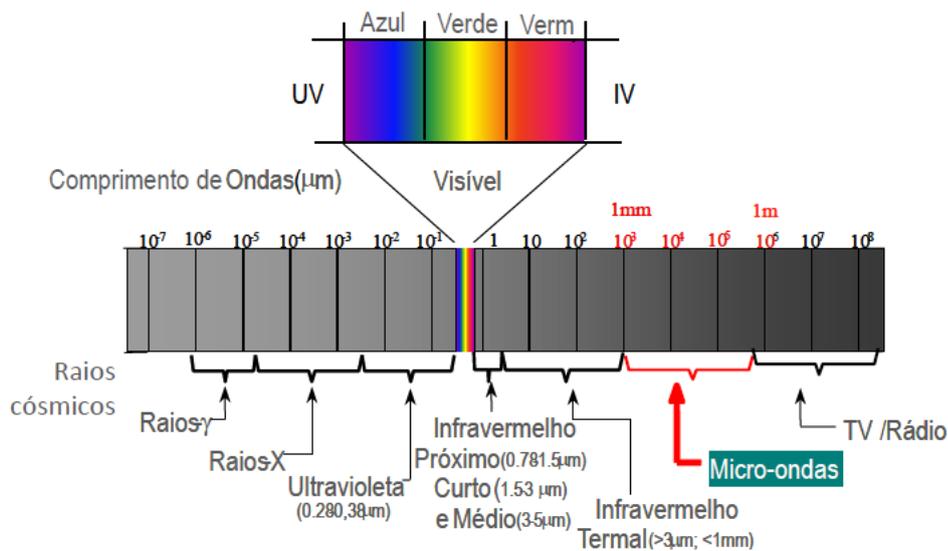
$$c = \lambda \cdot f \quad (2.2)$$

ou,

$$\lambda = \frac{c}{f} \quad (2.3)$$

A partir da equação 2.3, é possível notar que a frequência é inversamente proporcional ao comprimento de onda. Nos estudos de sensoriamento remoto, é especificada uma região do espectro eletromagnético, identificando o comprimento de onda inicial e final. As divisões mais comuns, estão sumarizadas na Figura 2.6.

Figura 2.6: Principais comprimentos de onda.



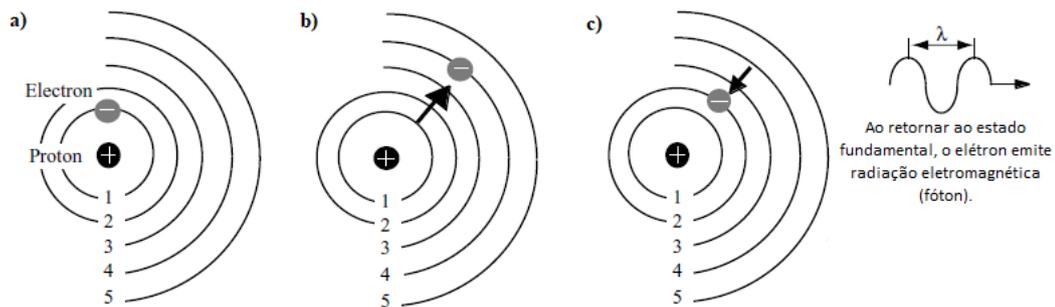
Fonte: Notas de Aula, (Pabón, R.E.C,2020)

A energia eletromagnética, é frequentemente descrita em termos do comprimento de onda, mas quando a energia interage com a matéria, é útil descrevê-la como pacote de energia, ou *quantum*. Essa relação é possível devido aos estudos de Albert Einstein (1879-1955) sobre o comportamento da luz quando ela interage com corpos. Em seus estudos, Einstein, concluiu que em contato com a matéria, a luz age como muitos corpos individuais, chamado de *fótons*, que carregam propriedades semelhantes a partículas como momento e energia (JENSEN, 2009).

Os átomos em seu estado fundamental, possuem um núcleo de carga positiva, que interagem com as cargas negativas, que orbitam ao redor do núcleo. Essas cargas negativas, os elétrons, são distribuídas em orbitais, ou camadas, que possuem diferentes distâncias do núcleo (Figura 2.7 A.) . Para que o elétron passe para uma camada superior, é necessário uma quan-

tidade de energia. Caso a energia seja suficientemente grande para que o elétron possa dar esse “salto”, o átomo é considerado excitado (Figura 2.7 B.). O elétron, permanece por curto período de tempo (10^{-8} segundos) na camada mais elevada, ao retornar para sua camada de origem, ele descarrega toda energia emitindo um pacote de radiação, chamado de *fóton* (Figura 2.7 C.) (JENSEN, 2009).

Figura 2.7: a-c) Um fóton de energia eletromagnética é emitido quando um elétron em um átomo retorna a camada inicial após ter sido excitado



Fonte: Jensen 2009(modificado)

A teoria quântica da radiação eletromagnética, proposta por Max Planck e Niels Bohr, estabelece a relação entre o quantum e a frequência da radiação expressa pela teoria das ondas, conforme a equação 2.4, mas também pode ser escrito em função do comprimento de onda (equação 2.5) (de Moraes 2002, Jensen 2009).

$$Q = h \cdot f \quad (2.4)$$

ou,

$$Q = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (2.5)$$

Em que, Q é a energia do *quantum* medida em *Joules*, h é a constante de Planck ($6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$) e f é a frequência da radiação. A partir da equação 2.5, é possível verificar que a energia de um *quantum*, é inversamente proporcional ao comprimento de onda.

A relação proposta pela equação 2.5 é de extrema importância para entender a utilização da espectroscopia de reflectância para obter informações químicas do alvo. Pois, para obter informações microscópicas, é necessária grande quantidade de energia, disponível em comprimentos de onda mais curtos.

Quando uma amostra é iluminada pela fonte de luz de um espectrômetro, certos comprimentos de onda dessa fonte são absorvidos pela amostra mineral, resultando em vibrações sub-moleculares. Essa radiação que é absorvida não é quantizada no espectro, gerando mínimos locais. Cada elemento produz um espectro único, com exceção de quartzo, feldspatos, opacos, permitindo seu uso para distinção de minerais (JENSEN, 2009; PONTUAL *et al.*, 2008).

A espectroscopia demonstra potencial na identificação componentes do minério de ferro, tais como hematita e goethita. Os estudo de Carioca (2010); Lanfranchi (2019); Silva (2021);

Viscarra Rossel *et al.* (2010), são alguns exemplos da utilização dessa técnica para estimar teores de minerais. Em todos os trabalhos, foram utilizados comprimentos de onda no VSWIR - *Visible to Short Wave InfraRed*, que varia de 350nm-2500nm.

A principal vantagem dessa tecnologia é a rapidez das análises, pois não é necessário preparar as amostras, porém, ainda não há uma precisão suficiente que permita que essa técnica substitua as tradicionais como FRX e DRX, permitindo ser uma técnica auxiliar, para consultas rápidas.

A interpretação de dados de espectroscopia de reflectância carece de espectros de referência, conforme Kokaly *et al.* 2017 "*Interpretações espectrais de dados de laboratórios, campo, aerotransportado e sensores orbitais, requerem um espectro de referência de materiais puros e bem caracterizados*".

O *United States Geological Survey* (USGS) é uma agência de pesquisa norte americana que, através da colaboração de diversos parceiros, construiu uma biblioteca sólida de dados terrestres e biológicos. O USGS Spectral Library Version 7 é uma biblioteca produzida por diversos autores, os dados espectrais e caracterização das amostras estão sendo analisados e incorporados a mais de 30 anos, fornecendo uma amplo acevo para estudos.

O objetivo dessa dissertação é estudar o comportamento dos espectros de 350 nm a 2500 nm do minério de ferro. Para essa faixa estão disponíveis na biblioteca da USGS dados puros para hematita, goethita, dolomita e magnesita, que foram analisadas para auxiliar na identificação das bandas características de cada um dos elementos citados nas amostras em estudo (KOKALY *et al.*, 2017).

2.2.2.1. Hematita

A hematita é um óxido de ferro III que tem cerca de 69,9% de ferro em sua estrutura e é o principal mineral de minério de ferro. Apresenta empacotamento hexagonal compacto de ânions de oxigênio e com os íons de Fe^{3+} , o sistema cristalino é romboédrico e densidade teórica de $5,3 \text{ g/cm}^3$ (CARIOCA, 2010).

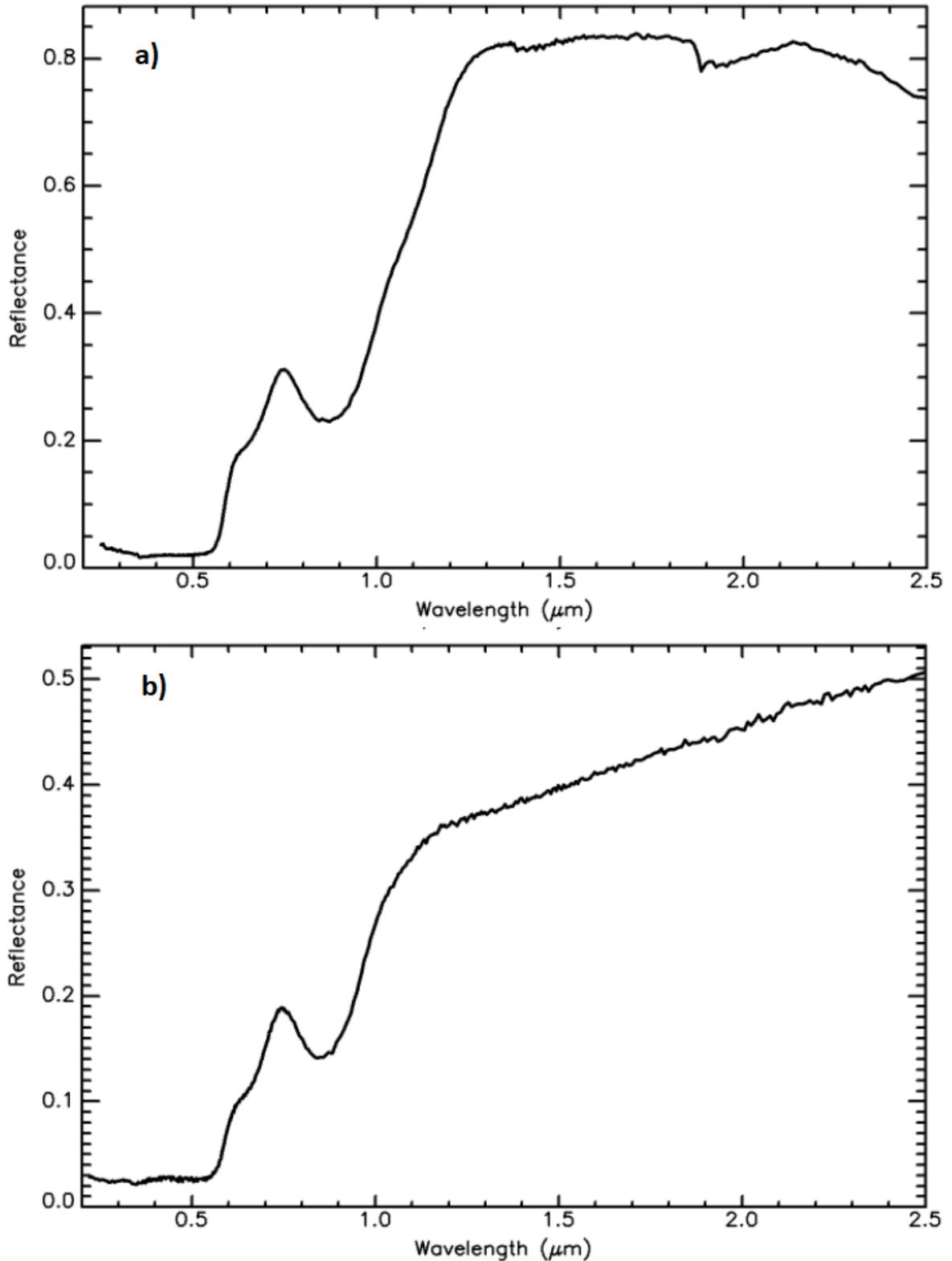
É um material frequentemente encontrado na forma isolada, ou agregado com minerais distintos, sendo mais comum a associação com o quartzo ou com a goethita, nesse último caso, o material é conhecido como limonita. A hematita possui uma variedade de cores, que está diretamente ligado a granulometria e cristalinidade, podendo ser preto, cinza, marrom, avermelhado. A coloração avermelhada de alguns solos pode ser explicada devido à porcentagem de hematita, que mesmo em pequena quantidade (cerca de 1%) já é suficiente para colorir solos (CARIOCA, 2010).

A hematita pura possui uma banda de absorção na faixa de $\approx 860\text{-}890\text{nm}$, conforme destacado por Viscarra Rossel *et al.* (2010), Kokaly *et al.* (2017), Lanfranchi (2019) e Pontual *et al.* (2008). Essa absorção é característica do íon Fe^{3+} , sendo esse que esse comprimento de onda que permite distinguir a hematita da goethita.

A Figura 2.8 mostra que é possível identificar a absorção característica da hematita, além disso, Pontual *et al.* (2008) apresenta observações importantes acerca desse espectro: na região de $\approx 750\text{nm}$, é possível identificar um pico que está associado a cor avermelhada característica da hematita. Na região de $\approx 660\text{nm}$, existe uma absorção fraca devido a presença do íon Fe^{3+} . Já na região demarcada na figura 2.8, é possível ver uma região em que existe uma queda acentuada da reflectância, que é característica da troca de carga de todos os óxidos de ferro.

A existência desse referencial é ainda mais importante em amostras que possuam algum contaminante, como da figura 2.8b. Pois, apesar do comportamento da curva de absorção ser diferente, as bandas características do mineral em estudo não vão se alterar, permitindo que mesmo em contaminações possa fazer uma análise espectral.

Figura 2.8: **a)** Amostra de hematita pura, Hematite GDS27, com granulometria média de $200\mu\text{m}$, espectro de pureza A. **b)** Amostra de hematita com alto teor de quartzo, Hematite WS161, granulometria média de $6\mu\text{m}$, espectro pureza B. Os dois espectros foram obtidos com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$).



Fonte: Kokaly *et al.* (2017)

2.2.2.2. Goethita

A goethita é um hidróxido de ferro [FeO(OH)] que contém 62,9% de ferro e é um óxido muito comum e abundante em vários tipos de rochas como em solos. A estrutura cristalina é de empacotamento hexagonal compacto, semelhante à hematita no que diz respeito ao arranjo de íons de oxigênio, onde os interstícios octaédricos existentes são preenchidos pelos íons de Fe³⁺, sendo a densidade relativa de 4,37 g/cm³ (CARIOCA, 2010).

Esse mineral participa da composição de muitos minérios de ferro e manganês. Nos agregados, pode estar intensamente contaminada, podendo conter Al₂O₃, CaO, BaO, SiO₂ e outros (FRANK, 2021). Segundo Carioca (2010), a goethita possui um poder de pigmentação bem menor que a hematita, mas sua coloração depende da região de origem, podendo variar, além do amarelo característico, de marrom a preto.

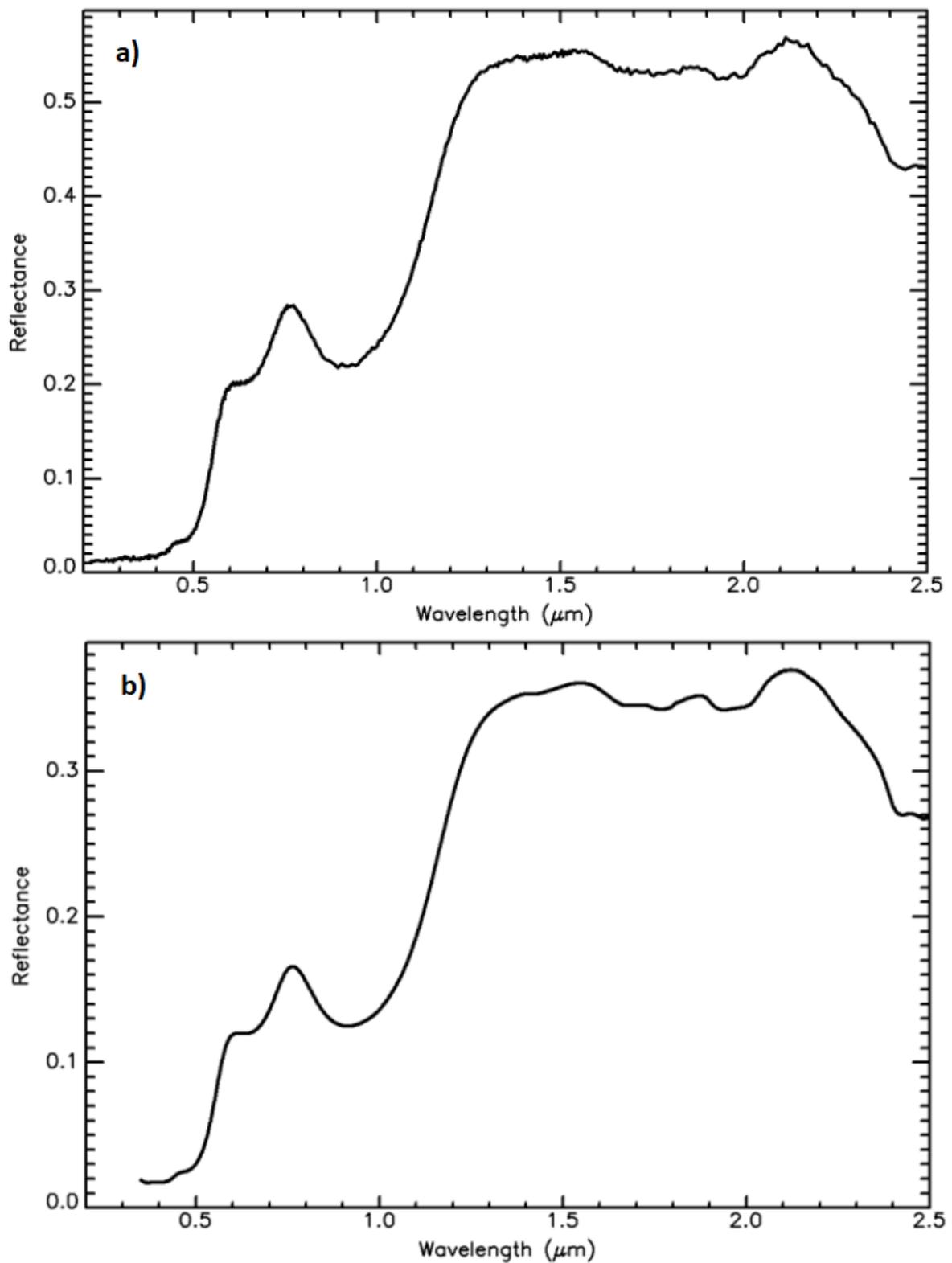
A goethita pura, possui uma banda de absorção em $\approx 920\text{nm}$, conforme destacado por Viscarra Rossel *et al.* (2010), Kokaly *et al.* (2017), Lanfranchi (2019) e Pontual *et al.* (2008). Essa absorção, assim como na hematita, é característica do íon Fe³⁺, sendo que a faixa de comprimento de onda da absorção desse mineral na goethita, permite a diferenciação da hematita.

A Figura 2.9, é possível verificar a absorção característica desse mineral em $\approx 920\text{nm}$. Além desse comprimento de onda, Pontual *et al.* (2008), apresenta outros detalhes sobre o espectro característico. No comprimento de onda de $\approx 660\text{nm}$, a goethita também possui uma absorção secundária devido a presença do íon Fe³⁺, mas é mais desenvolvida e visível do que a presente na hematita.

Ainda de acordo com Pontual *et al.* (2008), o pico característico, que está relacionado a sua cor, se dá na faixa de $\approx 760\text{nm}$. E por se tratar de um óxido de ferro, no espectro é possível observar a região em que existe uma queda acentuada da reflectância, que é característica da troca de carga de todos os óxidos de ferro, sendo semelhante a da hematita.

A apresentação dos espectros da Figura 2.9 permite visualizar que mesmo em equipamentos distintos e amostras distintas, as bandas características abordadas por Pontual *et al.* (2008) sempre vão estar presentes, o que possibilita a identificação do mineral.

Figura 2.9: **a)** Amostra de goethita pura, Goethite WS222, com granulometria média de $125\mu\text{m}$, espectro obtido com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$). **b)** Amostra de goethita pura, Goethite GDS134, obtida através de espectrômetros ASD ($0.35\mu\text{m}$ a $2.5\mu\text{m}$).



Fonte: Kokaly *et al.* (2017)

2.2.2.3. Dolomita

A dolomita [$CaMg(CO_3)_2$] é o carbonato mais comum depois da calcita com densidade relativa de $2,85 \text{ g/cm}^3$, importante formador de rochas e com uma série de aplicações industriais. Cristaliza no sistema trigonal, geralmente em romboedros, em que camadas de cátions de Ca^{2+} e Mg^{2+} são intercaladas com ânions de $(CO_3)^{2-}$. O mineral geralmente é constituído de cristais brancos na forma pura, podendo apresentar variações na cor, tons marrons (teores de Fe) ou tons rosados (teores de Mn).

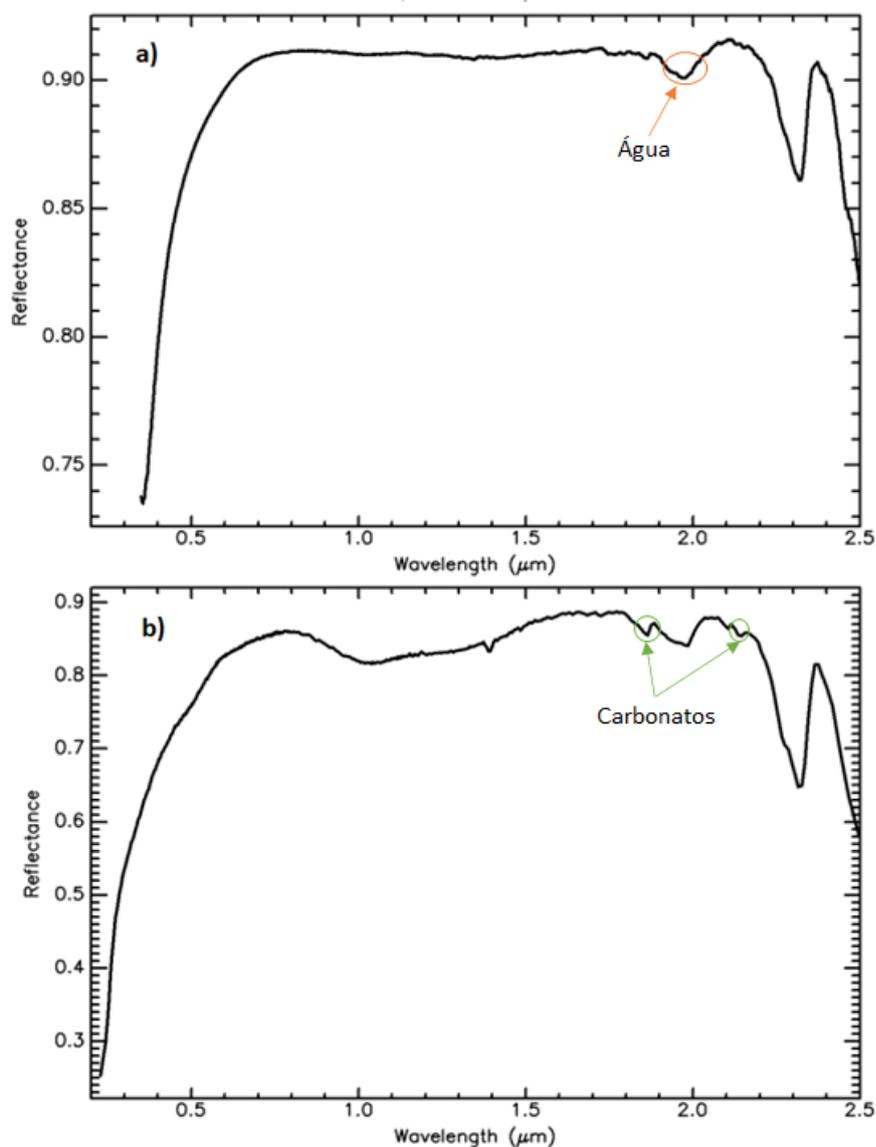
O Itabirito Dolomítico é frequentemente encontrado na formação férrica do Grupo Itabira, fonte das amostras desse estudo, em que a hematita é o óxido de ferro predominante e a dolomita que substitui parte do quartzo como ganga. Sendo que a presença da dolomita, pode dificultar o processo de beneficiamento do minério de ferro (BICALHO *et al.*, 2019; COSTA, 2009).

As amostras padrão foram extraídas do trabalho de Kokaly *et al.* (2017), designadas de Dolomite COD2005 e Dolomite HS102, a primeira contendo traços de calcita e a segunda traços de ferro na composição, porém, não o suficiente para deformar o espectro desses minerais, podendo tomar como padrão para identificação posterior em misturas.

O espectro padrão da dolomita, Figura 2.10, permite identificar a banda de absorção característica desse mineral, em $\approx 2320\text{-}2328$. Essa absorção é a única que persiste em misturas (PONTUAL *et al.*, 2008). As absorções de carbonatos ocorrem nas bandas de $\approx 1865\text{nm}$ e $\approx 2140\text{nm}$ e ficam mais evidentes na Figura 2.10 b).

A banda de absorção relacionada a água, mais evidente na Figura 2.10, ocorre no comprimento de $\approx 1940\text{nm}$, porém nem sempre está presente. Quanto maior a profundidade da absorção, maior o percentual de água no mineral.

Figura 2.10: **a)** Amostra de dolomita com traços de calcita, Dolomite HS102, com granulometria média menor que $5\mu\text{m}$, possui fraca absorção em $1\mu\text{m}$, devido à presença de óxidos de ferro, espectro obtido com espectrômetros ASD. **b)** Amostra de dolomita com traços de calcita, Dolomite COD2005, granulometria média de $75\mu\text{m}$, espectro foram obtidos com o instrumento Beckman 5270 ($0.2\mu\text{m}$ a $3.0\mu\text{m}$). Ambos os espectros possuem pureza B.



Fonte: Kokaly *et al.* (2017)(Modificado)

2.2.2.4. Magnesita

A magnesita é um carbonato anidro relativamente frequente, que constitui um importante mineral industrial, usado principalmente na fabricação de refratários. É um mineral de carbonato de magnésio ($MgCO_3$), que ocorre normalmente de forma terrosa a compacta, branca semelhante a giz, nesse caso, possui uma granulometria extremamente fina, formada por cristais submicroscópicos. A formação de cristais de magnesita é bem raro, mas quando ocorrem, são tubulares, prismas romboédricos ou hexagonais. É extremamente difícil diferenciar a magnesita de outros carbonatos comuns, como calcita e dolomita, tanto macroscopicamente quanto ao microscópio, sendo necessário utilizar outras técnicas analíticas (FRANK, 2021).

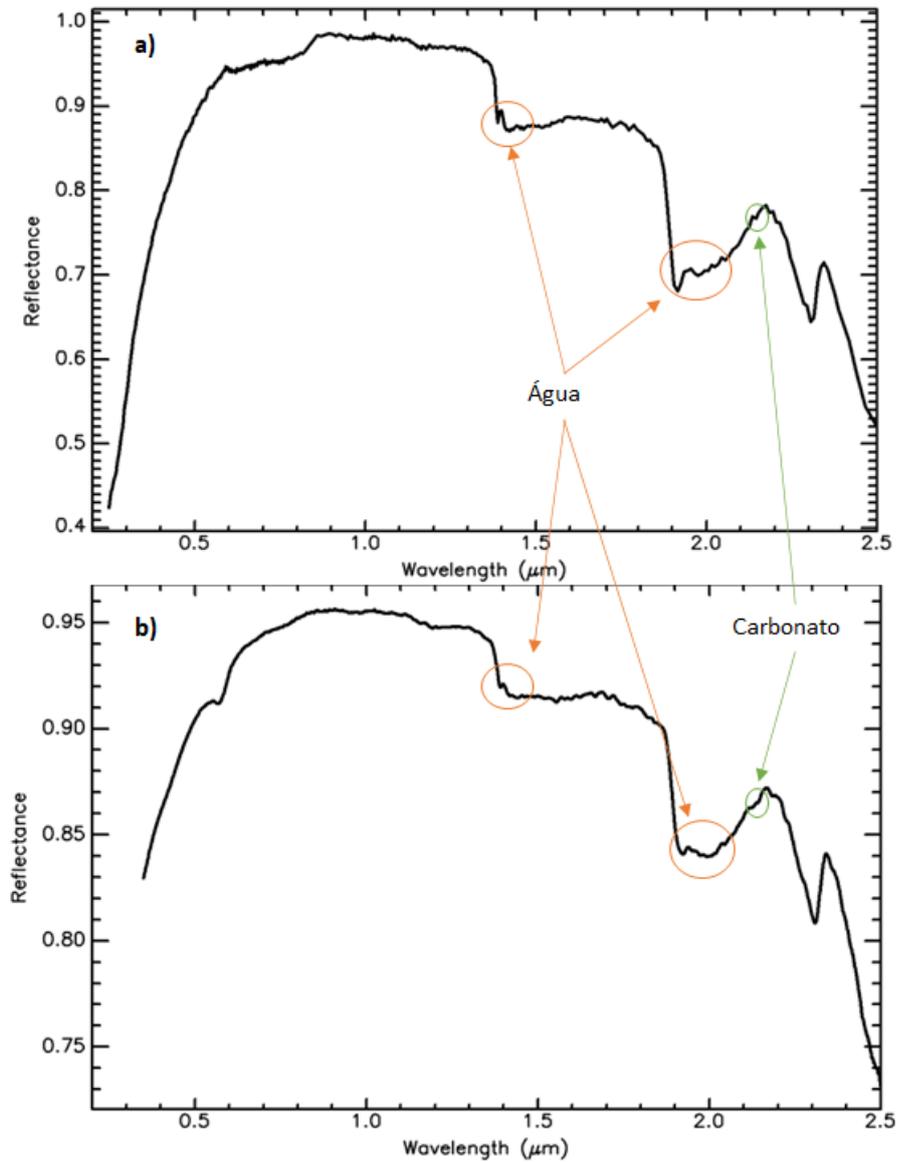
É encontrada associada com quartzo, hematita, fluorita e em rochas metamórficas, associa-se a calcita e dolomita. Possui uma densidade relativa de $3,1g/cm^3$ e dissolve facilmente, com efervescência, em ácido clorídrico quente (FRANK, 2021).

As amostras presentes no trabalho de Kokaly *et al.* (2017) tem formação compacta e não cristalina. De acordo com os autores, as amostras aparentam ser mineralogicamente puras, mas o espectro apresenta uma banda de absorção que não é compatível com a padrão dos carbonatos. Na Figura 2.11, as bandas próximas a $\approx 1400nm$ e $\approx 1900nm$ são devido a hidratação por água, com isso, as amostras possuem em sua composição hidromagnesita.

Segundo Pontual *et al.* (2008), no espectro da magnesita pura, é possível identificar duas bandas de absorção devido aos carbonatos, sendo $\approx 1850nm$ e $\approx 2130nm$, porém, no espectro padrão retirado da coletânea de Kokaly *et al.* (2017), não é possível identificar a absorção na faixa de $1850nm$ devido à presença de água na amostra o que impede essa visualização.

Ainda segundo Pontual *et al.* (2008), a banda de absorção característica da magnesita ocorre em $\approx 2302nm$, sendo bem próxima da identificada para a dolomita.

Figura 2.11: Amostras de magnesita + hidromagnesita, **a)** HS47.1B espectro obtido com espectrômetros ASD. **b)** HS47.3B espectro obtido com o instrumento Beckman 5270 (0.2 μm a 3.0 μm). Ambos os espectros possuem pureza A.



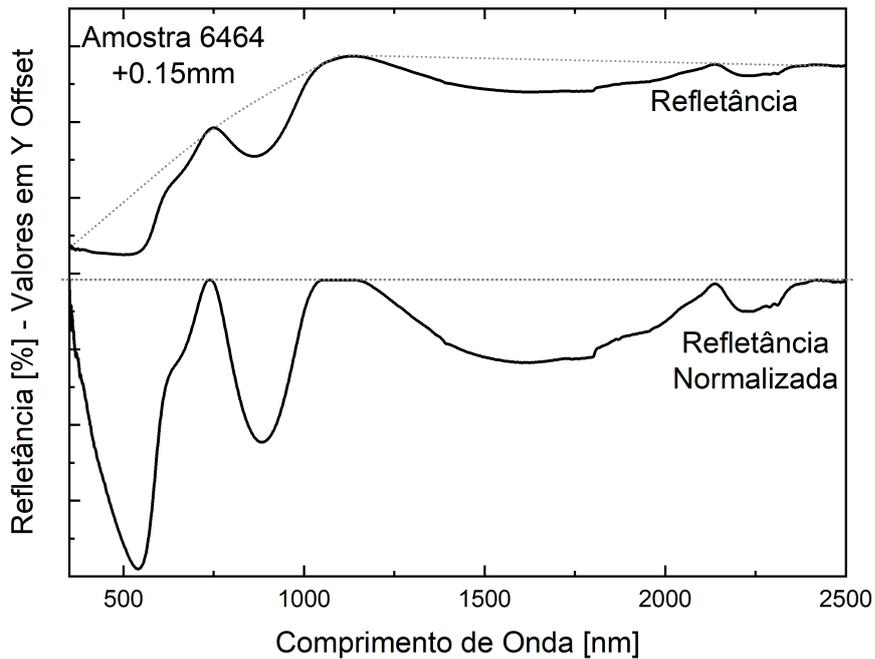
Fonte: Kokaly *et al.* (2017)(Modificado)

2.3. Processamento dos dados

2.3.1. Contínuo Removido

É uma metodologia utilizada com o intuito de avaliação de espectros de refletância onde ocorre a remoção das feições contínuas destes (Figura 2.12). O contínuo é representado por uma função matemática que isola bandas de absorção inerentes aos espectros de refletância, o que torna possível a qualificação da análise dos mesmos. Com essa técnica, é possível normalizar espectros de refletância considerando um valor de base comum e comparando-os com feições de absorção individuais (BREUNIG *et al.*, 2007). Logo, é feito com que os valores de refletância sejam normalizados em 1.0 para ajuste dos espectros resultantes onde acontecem feições de absorção (entre os menores que 1.0 e o contínuo).

Figura 2.12: Normalização do espectro de refletância da amostra 6464+0.15mm através do contínuo removido. Nota-se que as feições de absorção localizadas próximas aos comprimentos de onda de 980 nm e 2300 nm são realçadas facilitando a caracterização das bandas de absorção sob uma base comum.



Fonte: O Autor (2022)

Para tal, a Equação 2.6 representa a formulação matemática para a remoção do contínuo dos espectros de refletância, onde λ representa o comprimento de onda; $\rho_{original\lambda}$ é o fator de refletância direcional cônico original; $\rho_{contínuo\lambda}$ é o espectro do contínuo e $\rho_{CR\lambda}$ é o fator de refletância direcional cônico com o contínuo removido.

$$\rho_{CR\lambda} = \frac{\rho_{original\lambda}}{\rho_{contínuo\lambda}} \quad (2.6)$$

Para se obter a profundidade da banda, B_d , utiliza-se a Equação 2.7. A profundidade de banda de absorção, está associada a quantidade de energia absorvida (CLARK e ROUSH, 1984).

$$Pd = (1 - \rho_{CR\lambda}) \quad (2.7)$$

2.3.2. Análise de Componentes Principais

A Análise de Componentes Principais (ACP) é uma técnica de estatística multivariada, que transforma linearmente um conjunto original de variáveis, inicialmente correlacionadas entre si, num conjunto substancialmente menor de variáveis não correlacionadas que contém a maior parte da informação do conjunto original (HONGYU *et al.*, 2016; HOTELLING, 1933; PEARSON, 1901).

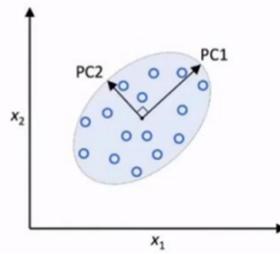
Os componentes principais apresentam propriedades importantes: cada componente principal é uma combinação linear de todas as variáveis originais, são independentes entre si e estimados com o propósito de reter, em ordem de estimação, o máximo de informação, em termos da variação total contida nos dados. A análise de componentes principais é associada à ideia de redução de massa de dados, com menor perda possível da informação (VARELLA, 2008).

A análise agrupa os indivíduos de acordo com sua variação, o número de componentes principais se torna o número de variáveis consideradas na análise, geralmente as primeiras componentes são as mais importantes já que explicam a maior parte da variação total. A escolha das componentes de interesse é feita a partir da análise da matriz de auto vetores a qual apresenta a contribuição de cada banda original na composição da componente principal gerada (LANDIM, 2011).

A primeira (PC1) explica a maior variância do conjunto, a segunda componente (PC2), explica a segunda maior e esse comportamento continua para as demais componentes. Em grande parte dos casos PC1 e PC2 conseguem dar um panorama dos dados e dividir as entradas em grupos, mas em algumas análises é preciso avaliar outras componentes mais distantes, que possam ter características de elementos que tenham valores poucos significativos em um sinal, mas que sejam de interesse, como contaminantes em uma amostra. A Figura 5, exemplifica o conceito de PCA, onde os novos eixos representam os dados com maior variância e vão representar melhor o conjunto original.

A análise de componentes principais, portanto, analisa vários dados juntos, pois eles podem estar correlacionados, além de ser a maneira mais simples de fazer a ordenação das informações. A PCA reduz a dimensionalidade de dados multivariados, ou seja, são criadas poucas variáveis chaves, onde cada uma é composta dos dados originais, de forma a caracterizar o máximo possível da variação da base de dados estudada (SILVA, 2021).

Figura 2.13: Representação do modelo de análise de componentes principais (PCA)



Fonte: (SILVA, 2021)

2.3.3. Filtro de Savitzky-Golay

O filtro de Savitzky-Golay – SGF foi criado em 1964 e procura reduzir os ruídos aleatórios e evita a introdução de distorções dos dados espectrais. O algoritmo realiza o ajuste do polinômio de ordem p em uma janela local w dos dados experimentais, sendo que a janela deve ter pontos suficientes para o ajuste do polinômio. Os coeficientes desse filtro são provenientes da realização de um ajuste linear não ponderado de mínimos quadrados, utilizando um polinômio de uma ordem determinada p , no ponto central de uma janela N (NISHIDA, 2017; RIBEIRO, 2021). Pode ser descrito pela equação:

$$y_j^* = \frac{1}{N} \cdot \sum_{i=-k}^k C_i \cdot y_{i+j} \quad (2.8)$$

Em que y_j^* é o novo valor suavizado; C_i representa os coeficientes do filtro de suavização; N é o tamanho da janela de suavização; k é o número de vizinhos em cada lado de j . Além da sua característica de filtragem de ruídos aleatórios, o ajuste dos seus coeficientes permite a rejeição de certas frequências e se difere do método de média móvel pois, tende a preservar as características dos dados, tais como altura e largura dos picos e depressões (NISHIDA, 2017). A abordagem utilizada pelo filtro pode ser considerada de solução local, pois o filtro é utilizado em apenas pequenas regiões de cada vez, através das janelas w . O método se destaca pelo fato de evitar a ocorrência de atrasos, pois não ocorre o deslocamento de picos e a facilidade de lidar com dados faltantes. Por outro lado, o filtro apresenta dificuldade em trabalhar com valores limítrofes (inicial e final), onde ocorre um declínio da qualidade (BORGES *et al.*, 2019).

2.4. Métodos de Aprendizado de Máquina

Algoritmos de aprendizado de máquina são ferramentas que cada vez mais são utilizadas na prospecção mineral, tendo em vista a velocidade das informações e a precisão dos resultados em comparação com os métodos tradicionais. Em alguns exemplos de aplicação, temos Silva (2021) que utilizou técnicas de aprendizado de máquina para monitorar a qualidade de Sinter Feed a partir de dados espectrais e VIANA (2020), que utilizou a associação de aprendizado de

máquina com imageamento hiperespectral para determinação de teor de ferro em minérios.

Conforme Monard e Baranauskas (2003), aprendizado de máquina é uma área de Inteligência Artificial cujo objetivo é o desenvolvimento de técnicas computacionais sobre o aprendizado bem como a construção de sistemas capazes de adquirir conhecimento de forma automática. Os algoritmos de aprendizado de máquina normalmente são usados em problemas onde não se tenha uma equação de solução, o que geralmente é feito, é ter uma base histórica dos dados que representem bem o problema a ser solucionado, onde parte é separada para realizar um treinamento e outra parte para validar uma possível solução. Os dados devem ser de qualidade e serem representativos do problema a ser tratado, caso contrário, não resultará em resultados expressivos (ARIA *et al.*, 2021).

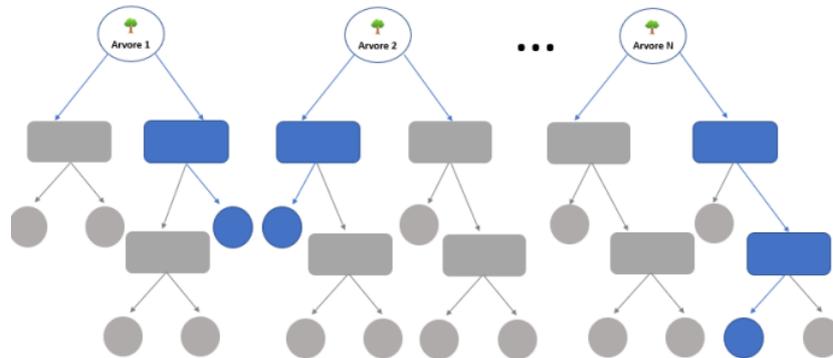
Os principais algoritmos de aprendizado de máquina, devido a sua grande presença na literatura aplicados a problemas de classificação e regressão são o Random Forest (RF), o Ada-boosting, o KNN e o SVM (ARIA *et al.*, 2021; CARIOCA, 2010; KÜMMEL, 2021; SILVA, 2021; VIANA, 2020).

2.4.1. Randon Forest

O *Random Forest* é um método que utiliza conjunto de árvores de decisão para realizar regressão ou classificação, de acordo com o problema a ser tratado. Cada árvore é construída de maneira randômica e seleciona um subconjunto de recursos aleatoriamente de um subconjunto de pontos de dados. A árvore é treinada nesses pontos de dados (somente nas características selecionadas), conjunto de treino, e o restante, conjunto de testes é usado para avaliar a árvore. As RF são conhecidas por serem efetivas na prevenção do *overfitting*, que ocorre quando o modelo "decora" os dados e performa de maneira excelente para a situação proposta, mas se torna ineficaz para prever a partir de informações novas (KÜMMEL, 2021; SILVA, 2021).

Segundo Aria *et al.* (2021), ter confiança em um modelo equivale a avaliar o modelo como um todo e testar sua capacidade de generalização com métricas de avaliação apropriadas. A Figura 2.14 representa um arranjo típico de Random Forest, vale ressaltar que esse algoritmo trabalha bem com grandes bases de dados, pois trabalha com conjunto de treino e teste, desta forma o algoritmo busca as melhores condições, e onde inserir cada uma dentro do fluxo (SILVA, 2021).

Figura 2.14: Esquema representativo do modelo de Random Forest com conjunto de N árvores de decisão.



Fonte: (SILVA, 2021).

2.4.2. KNN - K-Nearest Neighbor

O algoritmo KNN (K-Nearest Neighbor) é uma técnica heurística de busca de soluções, que pode ser usada tanto em regressões quanto problemas de classificação. Nesse método, a variável “K” irá direcionar a quantidade de vizinhos, dessa forma, o algoritmo busca os valores desejados mais próximos àquele ponto, tendo por base as distâncias dos seus “K” vizinhos mais próximos. Esse algoritmo é um dos mais simples se tratando de aprendizado supervisionado, pois explora todo o conjunto de treino para determinar quais são os vizinhos da nova variável, tendo um custo elevado e não sendo recomendado para grandes datasets (SILVA, 2021).

O cálculo da distância entre dois vizinhos pode ser realizada utilizando diversos métodos matemáticos, os mais comuns são (LINDEN, 2009):

- Distância Euclidiana: $d(p,q) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (p_i - q_i)^2}$
- Distância de Manhattan: $d(p,q) = \sum_{i=1}^n |p_i - q_i|$
- Distância de Mahalanobis: $d(p,q) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(p_i - q_i)^2}{\pi_i^2}}$

2.4.3. Adaboosting

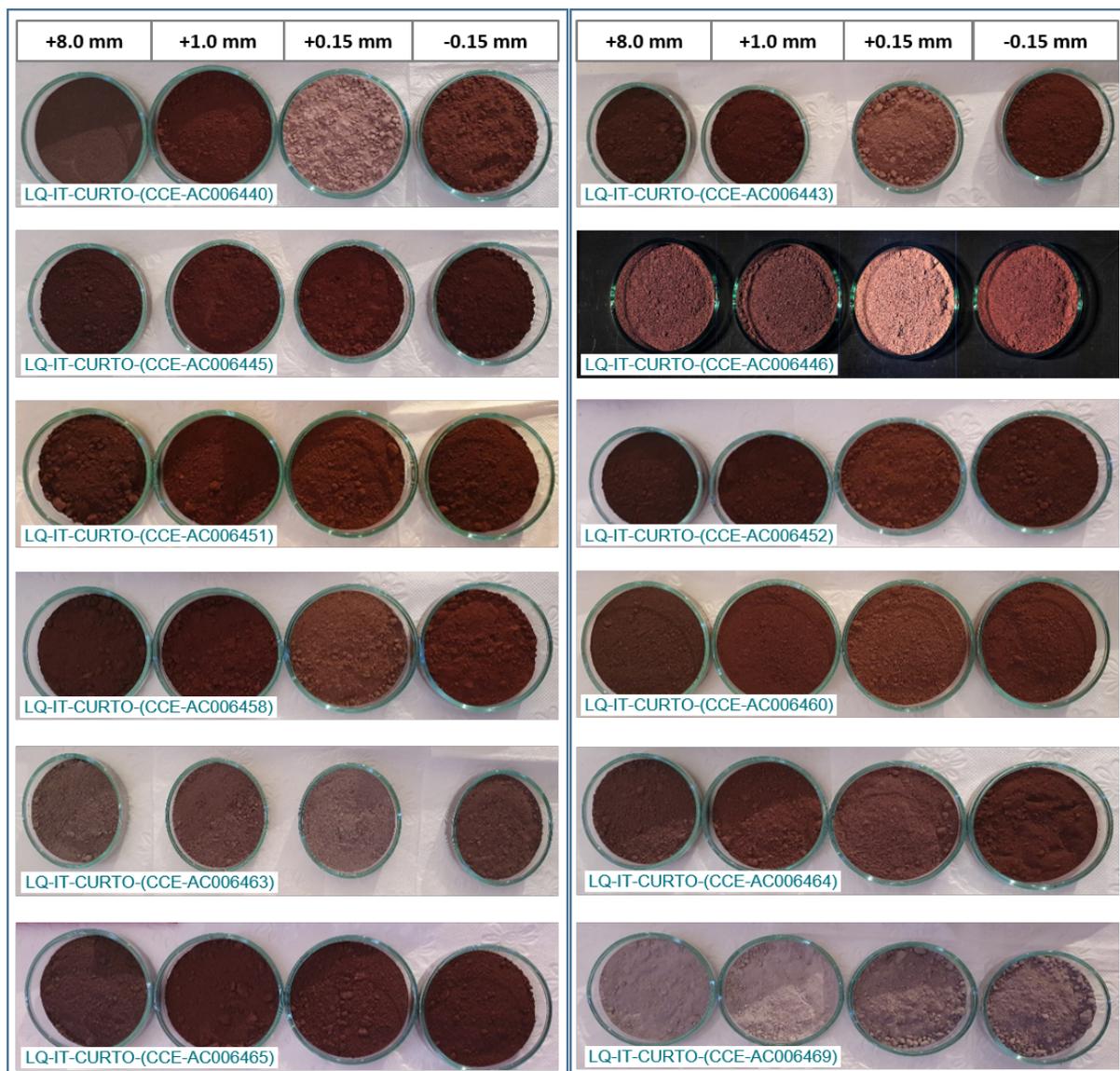
O AdaBoost é um algoritmo de aprendizado de máquina, inventado por Yoav Freund e Robert Schapire, que utiliza a combinação múltiplos classificadores com acurácias mais baixas para originar um modelo com acurácia mais elevada. É um algoritmo meta-heurístico, e pode ser utilizado para aumentar a performance de outros algoritmos de aprendizagem. O nome “AdaBoost” deriva de Adaptive Boosting. O algoritmo, que geralmente é composto por árvores de decisão, é utilizado para o treino de cada modelo classificador e conhecido como algoritmo base (FREUND *et al.*, 1996; SILVA, 2021).

3. Materiais e Métodos

3.1. Amostras

Neste estudo foram analisadas amostras de trincheiras as quais são coletadas na rotina da mina para aferir a qualidade do material. As informações dessas amostras são incorporadas ao banco de dados geológicos para atualização dos contatos do mapa geológicos e dos modelos geológicos de curto prazo. No total foram disponibilizadas pela Mina de Conceição, Complexo Itabira, 12 amostras e suas respectivas análises químicas. Estas amostras viram pulverizadas e separadas em quatro faixas granulométricas: (i) +8.00 mm; (ii) +1.00 mm; (iii) +0.15 mm; e (iv) -0.15 mm (Figura 3.1 3.1).

Figura 3.1: As 12 amostras separadas considerando-se quatro faixas granulométricas: (i) +8.00 mm; (ii) +1.00 mm; (iii) +0.15 mm; e (iv) -0.15 mm



Fonte: O Autor (2022).

Tabela 3.1: Composição química das amostras pelo método de Fluorescência de Raios X

Seq	Amostra	Gran	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Mn	Seq	Amostra	Gran	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	Mn
1	6440	+8,0mm	45,06%	36,79%	0,23%	0,05%	0,02%	0,01%	25	6458	+8,0mm	51,62%	25,41%	0,44%	0,05%	0,04%	0,07%
2	6440	+1,0mm	54,12%	22,40%	0,35%	0,05%	0,02%	0,01%	26	6458	+1,0mm	60,63%	11,73%	0,63%	0,05%	0,02%	0,15%
3	6440	+0,15mm	11,57%	83,59%	0,18%	0,05%	0,02%	0,01%	27	6458	+0,15mm	25,16%	63,32%	0,38%	0,05%	0,16%	0,24%
4	6440	0,15mm	36,09%	47,92%	0,65%	0,05%	0,02%	0,01%	28	6458	0,15mm	40,96%	39,99%	0,62%	0,05%	0,11%	0,23%
5	6443	+8,0mm	56,32%	19,52%	0,31%	0,05%	0,02%	0,04%	29	6460	+8,0mm	48,87%	29,38%	0,49%	0,05%	0,02%	0,11%
6	6443	+1,0mm	61,72%	11,42%	0,32%	0,05%	0,02%	0,02%	30	6460	+1,0mm	56,84%	17,08%	0,63%	0,05%	0,02%	0,06%
7	6443	+0,15mm	19,10%	71,90%	0,21%	0,05%	0,02%	0,02%	31	6460	+0,15mm	31,44%	54,10%	0,62%	0,05%	0,07%	0,19%
8	6443	0,15mm	46,61%	33,09%	0,50%	0,05%	0,02%	0,03%	32	6460	0,15mm	44,01%	36,10%	0,72%	0,05%	0,03%	0,15%
9	6445	+8,0mm	69,54%	0,59%	0,21%	0,05%	0,02%	0,01%	33	6463	+8,0mm	29,15%	31,56%	1,90%	6,64%	6,80%	0,17%
10	6445	+1,0mm	69,00%	0,87%	0,56%	0,05%	0,02%	0,01%	34	6463	+1,0mm	39,96%	21,09%	2,55%	4,04%	6,65%	0,12%
11	6445	+0,15mm	59,38%	13,82%	1,09%	0,05%	0,02%	0,01%	35	6463	+0,15mm	28,75%	31,75%	4,56%	2,73%	11,32%	0,12%
12	6445	0,15mm	67,57%	2,81%	0,65%	0,05%	0,02%	0,01%	36	6463	0,15mm	43,40%	17,76%	2,21%	4,09%	5,80%	0,14%
13	6446	+8,0mm	46,63%	33,86%	0,26%	0,05%	0,02%	0,01%	37	6464	+8,0mm	35,37%	45,88%	0,76%	0,77%	1,35%	0,08%
14	6446	+1,0mm	56,11%	19,66%	0,34%	0,05%	0,02%	0,01%	38	6464	+1,0mm	39,54%	36,13%	1,14%	1,02%	2,27%	0,08%
15	6446	+0,15mm	16,20%	77,12%	0,19%	0,05%	0,02%	0,01%	39	6464	+0,15mm	40,12%	31,98%	1,98%	0,98%	4,93%	0,09%
16	6446	0,15mm	41,61%	39,56%	0,55%	0,05%	0,02%	0,01%	40	6464	0,15mm	50,74%	19,52%	1,24%	1,23%	2,27%	0,11%
17	6451	+8,0mm	67,98%	2,61%	0,38%	0,05%	0,03%	0,05%	41	6465	+8,0mm	60,99%	4,35%	1,18%	1,41%	2,42%	0,14%
18	6451	+1,0mm	63,52%	7,63%	0,97%	0,05%	0,08%	0,36%	42	6465	+1,0mm	61,70%	3,46%	1,38%	1,12%	2,80%	0,10%
19	6451	+0,15mm	45,23%	29,93%	2,56%	0,05%	0,44%	0,68%	43	6465	+0,15mm	59,14%	6,11%	1,75%	0,92%	3,65%	0,16%
20	6451	0,15mm	53,93%	18,44%	2,33%	0,05%	0,29%	0,71%	44	6465	0,15mm	61,51%	4,16%	1,36%	0,94%	2,66%	0,23%
21	6452	+8,0mm	66,65%	3,62%	0,75%	0,05%	0,05%	0,27%	45	6469	+8,0mm	13,83%	46,78%	1,32%	10,32%	6,50%	0,20%
22	6452	+1,0mm	61,00%	9,99%	1,17%	0,05%	0,06%	0,77%	46	6469	+1,0mm	15,95%	24,53%	1,84%	15,87%	10,38%	0,33%
23	6452	+0,15mm	36,89%	44,34%	1,21%	0,05%	0,21%	0,70%	47	6469	+0,15mm	20,25%	36,15%	4,28%	7,85%	8,26%	0,19%
24	6452	0,15mm	47,24%	29,20%	1,87%	0,05%	0,19%	0,63%	48	6469	0,15mm	29,26%	14,82%	2,10%	12,33%	8,45%	0,28%

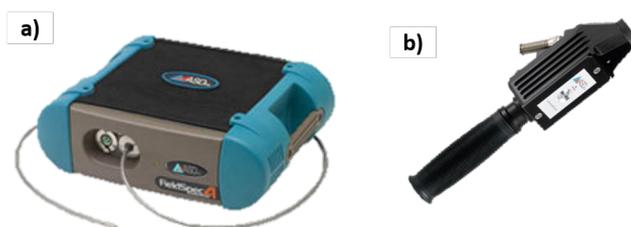
Fonte: O Autor (2022).

3.2. Instrumentação

O equipamento utilizado para aquisição dos dados de refletância das amostras foi o FieldSpec 4 High Resolution Next Generation (PANALYTICAL, 2020) (Figura 3.2). O equipamento permite leituras de radiação eletromagnética na faixa de 350-2500 nm, com resolução espectral de 3nm(@700nm) e de 6nm(@1400/2100nm). O intervalo de amostragem para comprimentos de onda entre 350 – 1000nm é de 1.4nm, e para comprimentos de onda maiores, entre 1001-2500nm, a resolução espectral é aprimorada, sendo de 1.1nm. O equipamento possui 2151 canais de amostragem.

O acessório utilizado para a coleta dos dados foi o Contact Probe (PANALYTICAL, 2020). Os dados de refletância foram gerados a partir da energia refletida pelo alvo em relação a um material de referência – Spectralon, em toda a faixa de interesse (350 – 2500 nm).

Figura 3.2: a) FiledSpec 4 *Hi-Res NG* 4 b) Sonda de Contato



Fonte: Panalytical (2020)

Os dados de refletância foram gerados a partir de medidas de energia refletida pelo alvo em relação a um material de referência (Spectralon) em toda a faixa VSWIR.

3.3. MEDIÇÕES ESPECTRAIS

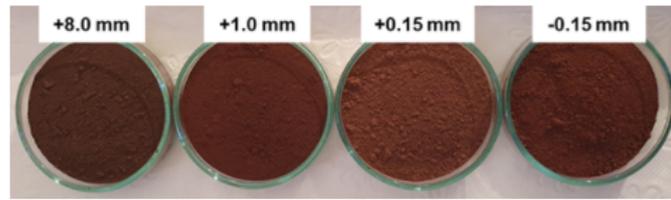
3.3.1. Leituras Espectrais

As amostras foram colocadas em placas de Petri de dimensões 60 * 15 mm para realização das medições espectrais (Figura 3.3). Estas medições foram realizadas através do software RS3, onde a amostra for lida 3 vezes, considerando-se 100 escaneamentos por leitura individual. Desta forma, cada espectro analisado neste estudo corresponde à média de 300 leituras.

3.3.2. Pré-processamento dos dados

Os estudos que envolvem medidas de espectroscopia de reflectância, fazem o uso de um grande volume de dados. Nesse caso, é necessário o uso de técnicas para o tratamento dos

Figura 3.3: Amostras na placa de Petri para medições espectrais

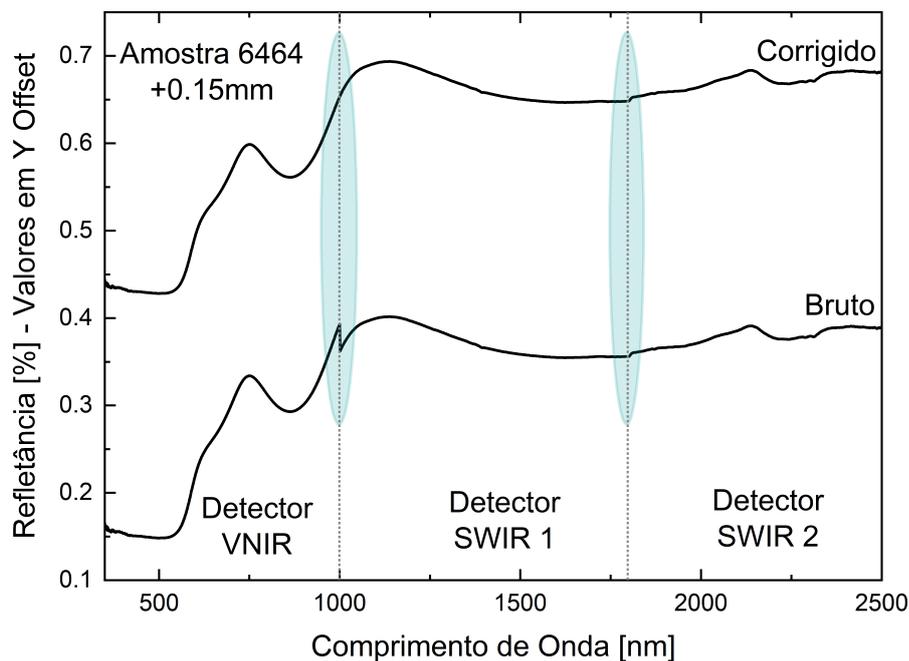


Fonte: O Autor (2022)

dados, seja para reduzir a quantidade de dados analisados, sem perder a qualidade, ou realçar feições características do material em análise.

O FieldSpec 4 Hi-Res NG possui três detectores independentes: (i) detector VNIR (350 – 1000 nm); (ii) detector SWIR 1 (1001 – 1800 nm) e; (iii) detector SWIR 2 (1801 – 2500 nm) e devido a isso, é necessário fazer a correção dos gaps para melhorar a visualização das assinaturas espectrais. Essa correção foi realizada no software ViewSpec Pro (Figura 3.4) utilizando o valor default – 5.

Figura 3.4: Assinatura espectral bruto e corrigido através do splice correction da amostra 6464 – +0,15mm.



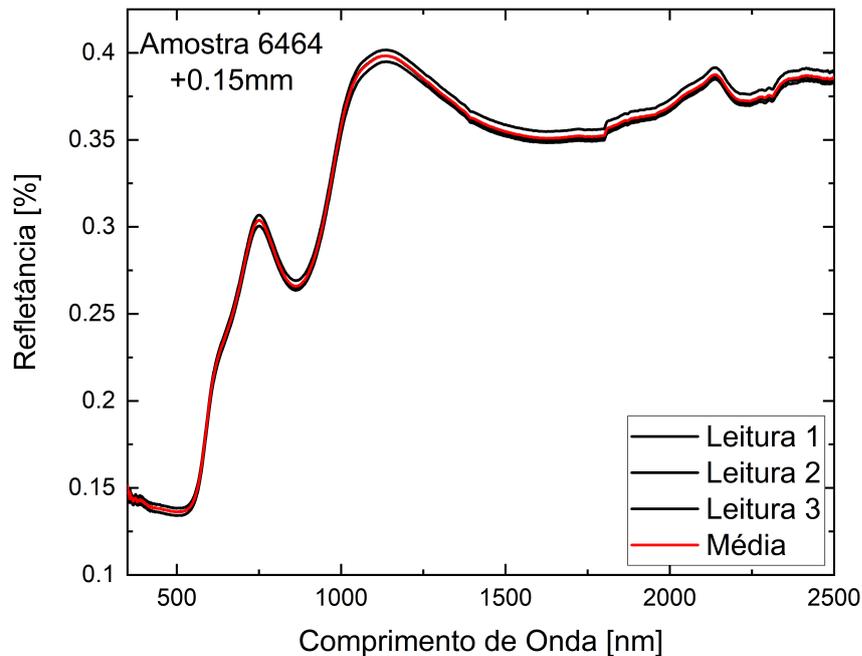
Fonte: O Autor (2022)

3.3.2.1. Média

Após realizadas as correções dos gaps em todos os espectros, foi calculada a média das três leituras espectrais coletadas (Figura 3.5). A média auxilia na redução de ruídos no espectro, em especial nos intervalos iniciais e finais. Assim, artefatos podem ser evitados ou reduzidos

aprimorando a interpretação de feições de absorção sutis, mas chaves, na identificação dos minerais.

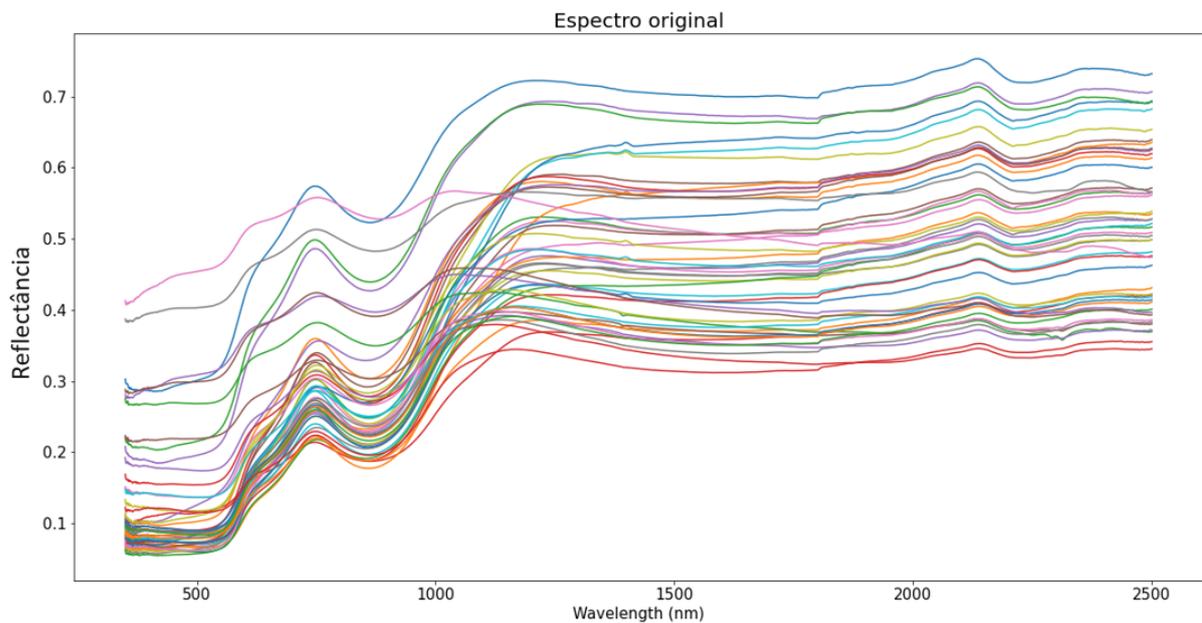
Figura 3.5: Assinatura espectral média e leituras espectrais realizadas da amostra 6464 - +0.15mm. Notam-se algumas feições de absorção bem sutis próximas do comprimento de onda de 2300 nm que auxiliam na identificação de contaminantes associados aos carbonatos no minério de ferro.



Fonte: O Autor (2022)

O espectro obtido a partir desse instrumento está representado na Figura 3.6. Os dados brutos precisam ser tratados a fim de fornecerem informações de maior qualidade para o processo de classificação das amostras. A técnica da remoção do contínuo tem sido utilizada, principalmente para análises de feições de absorção localizadas nas regiões do VSWIR (p.ex Amaral; Breunig *et al.* (2007); Kokaly *et al.* (2017); Silva (2021)). O filtro de Savitzky-Golay, mesmo que em menor proporção, é outro método também utilizado para a banda em espectral em estudo. Essa técnica evidencia vales e picos, sendo muito útil quando se busca discrepâncias nos espectros, como os ocasionados por elementos minerais de menor constituição nas amostras, tais como, contaminantes. (p.ex: Ribeiro (2021); Silva *et al.* (2020)).

Figura 3.6: Representação dos espectros das amostras em estudo.



Fonte: O Autor (2022)

3.3.2.2. Remoção do Contínuo

A remoção do contínuo foi aplicada a fim de ressaltar as características do espectro original. Os valores de refletância sejam normalizados em 1.0 para ajuste dos espectros resultantes onde acontecem feições de absorção (entre os menores que 1.0 e o contínuo). Para uma melhor visualização dos contaminantes associados ao MFe, foram realizadas duas análises:

- **Espectro completo** - Nessa situação, foram removidos os extremos do espectro antes de realizar a análise do contínuo, afim de evitar ruídos intramentais. Portanto, o espectro resultante apresenta o contínuo removido de todo espectro na faixa de 400nm a 2450nm.
- **Espectro parcial** - A região de 2000nm a 2450nm teve um enfoque, pois, as feições características dos contaminantes associados ao MFe são predominantes nessa região. Com isso, os dados foram segregados e posteriormente tiveram o contínuo removido.

3.3.2.3. FILTRO DE SAVITZKY- GOLAY

O filtro de Savitzky-Golay tem como característica a filtragem de ruídos aleatórios, além disso, o ajuste dos seus coeficientes permite a rejeição de certas frequências e tende a preservar as características dos dados, tais como altura e largura dos picos e depressões.

A determinação dos parâmetros do filtro de SGF ocorreu de forma empírica, a partir da variação dos valores de abertura N e grau do polinômio p . Os valores $p = 5$ e $N = 75$ foram escolhidos por permitirem que as características dos minerais fossem preservadas e acentuadas,

enquanto o comportamento ruidoso atenuado. Utilizou-se a segunda derivada, a fim de evidenciar ainda mais os comprimentos de onda mais discrepantes, que podem ocorrer devido a presença de contaminantes na amostra (RIBEIRO, 2021).

3.3.2.4. Aprendizado de máquina

Os métodos de aprendizado de máquina foram utilizados para realizar uma estimativa dos teores de óxido de cálcio e óxido de magnésio presentes na amostras. Os dados foram divididos em grupo de treino e validação, na proporção de 70% e 30%, respectivamente. Para a verificação da efetividade dos modelos, foi empregado o erro quadrático médio - RMSE.

O resultado final se deu a partir da média de 10 resultados para cada modelo de aprendizado supervisionado. Essa metodologia foi empregada para evitar que se obtenha uma solução ótima local, pois, há uma quantia pequena de dados para gerar um modelo robusto e o resultado é fortemente dependente de como é dividido o conjunto de treino, caso poucos valores com a presença de contaminantes estejam nessa entrada o modelo esse sofre uma piora significativa.

3.3.2.5. Análise por Componentes Principais

A Análise de Componentes Principais foi explorada com o objetivo de melhorar a extração de informações relacionadas ao conteúdo de ferro nas amostras. A ACP é uma técnica de estatística multivariada, que transforma linearmente um conjunto original de variáveis, inicialmente correlacionadas entre si, num conjunto substancialmente menor de variáveis não correlacionadas que contém a maior parte da informação do conjunto original (HONGYU *et al.*, 2016).

Os componentes principais apresentam propriedades importantes: cada componente principal é uma combinação linear de todas as variáveis originais, são independentes entre si e estimados com o propósito de reter, em ordem de estimação, o máximo de informação, em termos da variação total contida nos dados. A análise de componentes principais é associada à ideia de redução de massa de dados, com menor perda possível da informação (VARELLA, 2008).

A análise agrupa os indivíduos de acordo com sua variação, o número de componentes principais se torna o número de variáveis consideradas na análise, geralmente as primeiras componentes são as mais importantes já que explicam a maior parte da variação total. A escolha das componentes de interesse é feita a partir da análise da matriz de auto vetores a qual apresenta a contribuição de cada banda original na composição da componente principal gerada (LANDIM, 2011).

No presente trabalho, a ACP foi explorada com o objetivo de melhorar a extração das informações relacionadas aos contaminantes presentes nas amostras de trincheira. A PCA foi aplicada tanto para o espectro com os dados processados a partir da remoção do contínuo quanto para o filtro de Savitzky.

A partir das componentes principais, foi realizada uma comparação com os dados da análise química, a fim de obter uma segregação das amostras a partir do teor de óxido de cálcio e óxido de magnésio. Além disso, as componentes foram analisadas, para determinar quais as bandas espectrais que mais influenciam no peso atribuído a cada um dos elementos.

4. Resultados - Caracterização Física das Amostras

4.1. Análise Visual das Amostras

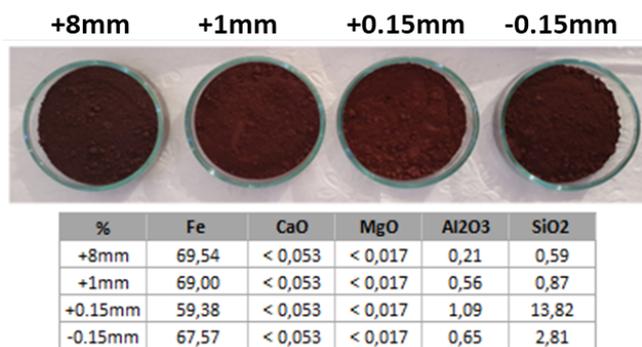
A coloração é uma das formas mais simples de distinguir os solos. Segundo Viscarra Rossel *et al.* 2010 "O forte efeito de pigmentação dos óxidos de ferro dá à maioria dos solos sua cor, o que é em grande parte um reflexo de a mineralogia do Fe do solo." Partindo desse princípio, foi realizada uma análise visual das amostras em comparação com a composição química.

4.1.1. Minério de Ferro Sem Contaminantes

A formação férrica da Mina de Conceição é formada em sua maioria por itabiritos ricos em hematita (ROSIÈRE e CHEMALE JR, 2000). Segundo Viscarra Rossel *et al.* (2010) "O forte efeito de pigmentação dos óxidos de Fe é a razão pela qual a maioria dos perfis de solo são marrons, vermelhos, laranja ou amarelo, sendo a hematita associada a cor vermelha".

O efeito da pigmentação da hematita é observado na amostra designada de 6445 (Figura 4.1). Essa amostra possui alto teor de ferro em todas as granulometrias (>58%), o que produz a cor avermelhada no solo. Vale ressaltar, que a amostra não possui teor significativo de contaminantes que possam interferir na coloração.

Figura 4.1: Foto da amostra designada de 6445.

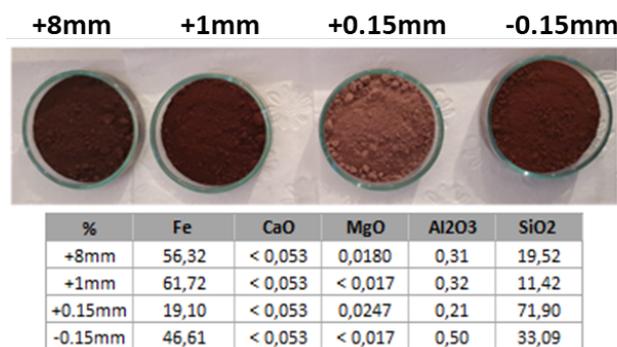


Fonte: O Autor (2022).

A amostra designada de 6443 (Figura 4.2) não apresenta níveis detectáveis dos contaminantes. E também é possível observar a cor avermelhada nas granulometrias de +8mm, +1mm e -0.15mm, em que o percentual de ferro está acima de 45%. Já na amostra com granulometria de +0.15mm, nota-se uma cor diferente, similar ao de um arenito. Para essa granulometria, o teor de ferro é de $\approx 16\%$, quantidade bem inferior das outras.

Se compararmos as amostras 6445 e 6443, respectivamente, Figura 4.1 e Figura 4.2, na granulometria de +0.15mm de ambas as amostras, o único ponto que as diferencia quimicamente é a redução do teor de ferro e o aumento da sílica (SiO_2). Com isso, é possível identificar

Figura 4.2: Foto da amostra designada de 6443.



Fonte: O Autor (2022).

influência desses minerais na pigmentação das amostras, o óxido de ferro(hematita) produz o tom avermelhado e a sílica, em sua grande maioria branca, tira a vermelhidão.

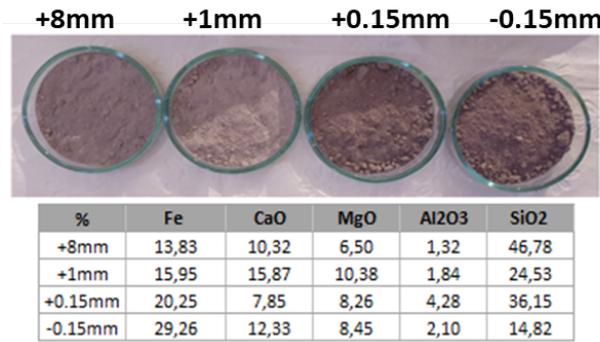
O óxido de ferro, mesmo em uma pequena quantidade altera a coloração, fornecendo a cor avermelhada da amostra 6443, e conforme o percentual desse mineral diminui, como na 6443+0.15mm e com o aumento da sílica o tom fica mais fraco.

4.1.2. Contaminantes relacionados com CaO e MgO

Nas formações do Quadrilátero Ferrífero, existe a ocorrência de Itabiritos Dolomíticos, conforme apresentado por Bicalho *et al.* (2019); Costa (2009, 2013). Nessa formação existem bandas ricas em dolomita, daí a denominação característica desse tipo de itabirito. A amostra 6469, Figura 4.3, possui um alto teor de CaO e MgO, principais constituintes da dolomita e que são o foco desse trabalho.

Na Figura 4.3, é possível identificar uma coloração acinzentada, característica da dolomita na presença de óxidos de ferro. Nesse caso, é possível observar que com o aumento do percentual de Fe não obtemos mais um tom avermelhado como o observado nas Figuras 4.2 e 4.1, em que não havia presença desses contaminantes no minério de ferro. Devido ao alto teor de CaO e MgO, com o aumento da concentração de Fe, nota-se que a coloração tende a se aproximar do preto.

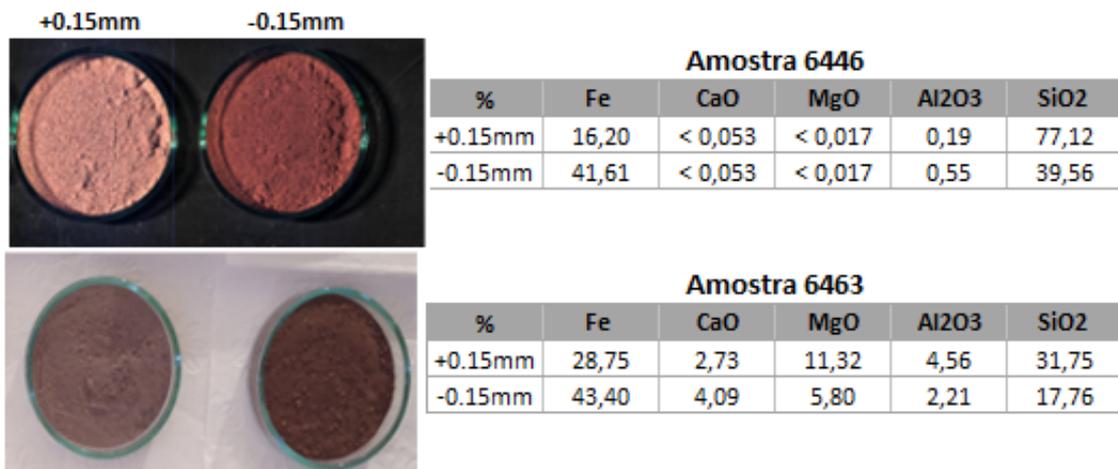
Figura 4.3: Foto da amostra designada de 6469.



Fonte: O Autor (2022).

O efeito do conteúdo de CaO e MgO ficam ainda mais evidentes se compararmos com uma amostra que não possui contaminantes em sua constituição, conforme apresentado na Figura 4.4. Nessa imagem, é possível observar que nas granulometrias apresentadas, a amostra 6463, mesmo com um teor mais elevado de Fe possui a cor mais acinzentada, não sendo possível observar o vermelho vivo da outra amostra que possui teores inferiores de Fe.

Figura 4.4: Efeito da presença de contaminantes na cor das amostras



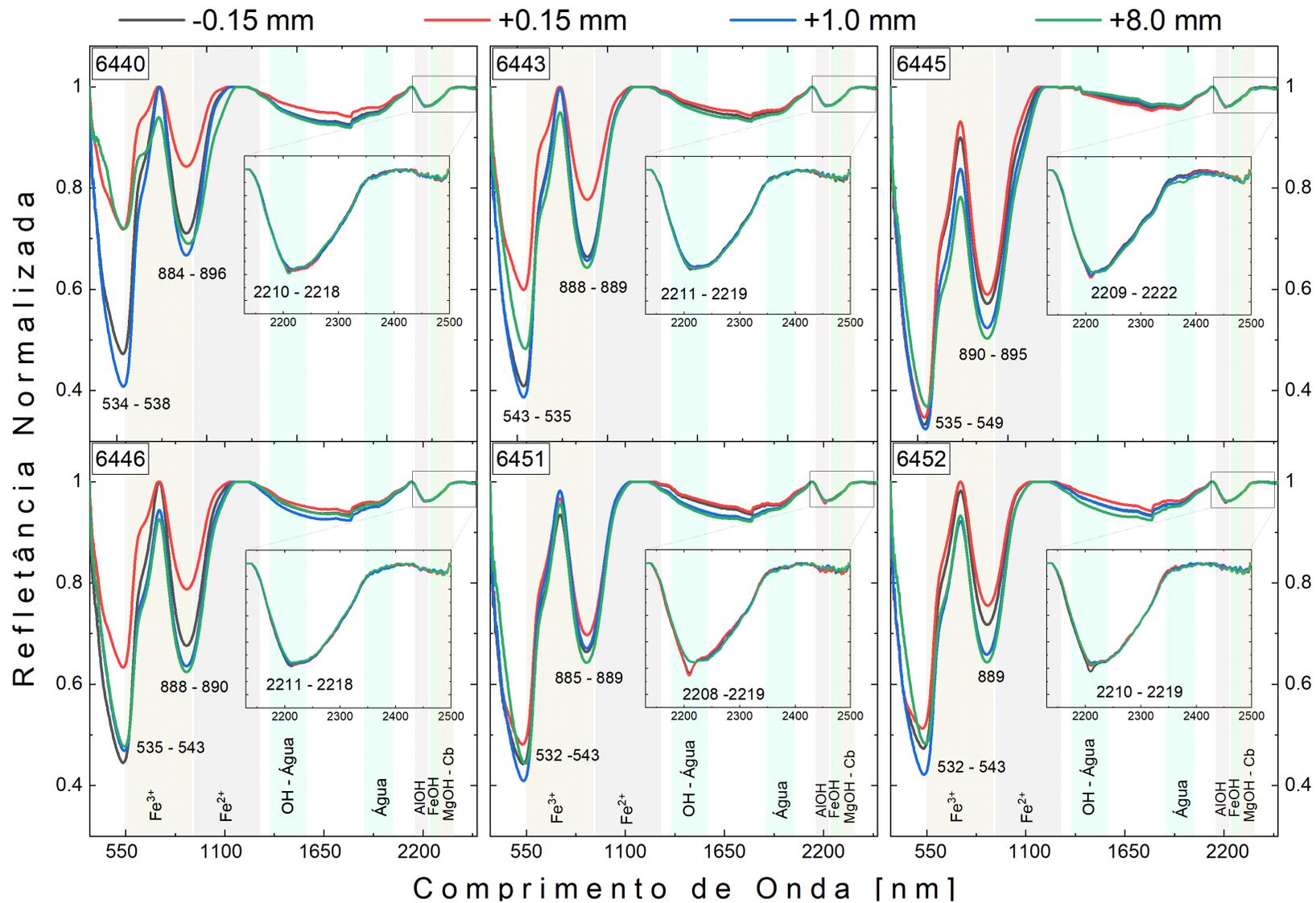
Fonte: O Autor (2022)

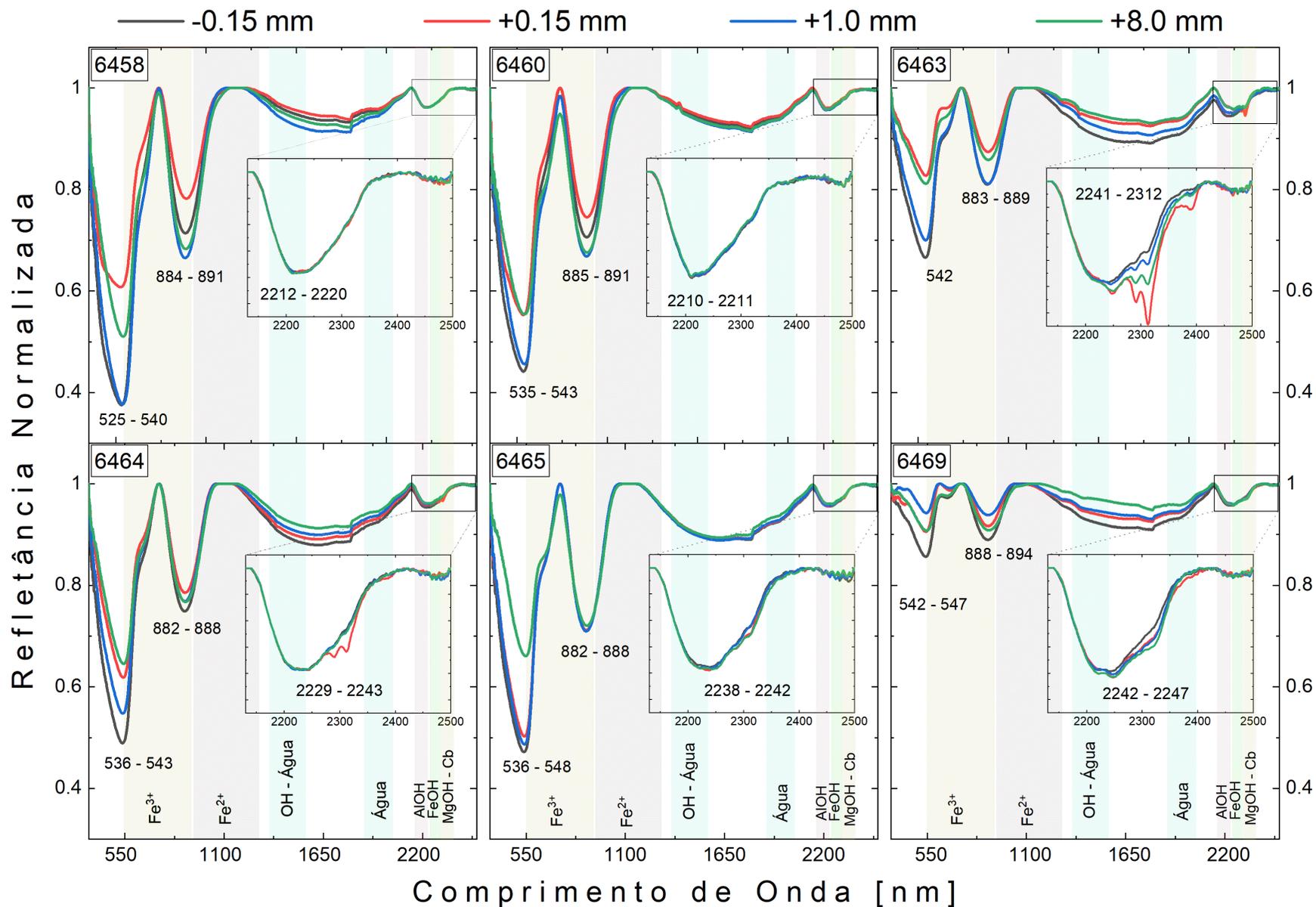
4.2. Construção das Bibliotecas Espectrais

O instrumento utilizado para aquisição dos dados de reflectância no intervalo do VSWIR, foi o espectrorradiômetro de alta resolução FieldSpec 4 *High Resolution Next Generation*. O equipamento permite leituras de radiação eletromagnética na faixa de 350-2500 nm. Apesar do instrumento trazer informações da faixa descrita, para cada mineral de interesse pode-se trabalhar em uma faixa específica. Notam-se feições de absorção bem definidas na faixa de 350 nm - 1300 nm, as quais estão relacionadas com óxidos de ferro (FeO). Adicionalmente, são observadas feições de absorção, embora não bem desenvolvidas, na região do *Short Wave InfraRed* (SWIR), entre 1300 nm - 2500 nm. Estas feições estão relacionadas com a presença dos contaminantes de interesse.

A análise dos espectros das amostras pulverizadas de trincheira indica que os mesmos apresentam feições diagnósticas de óxidos de ferro, alumínio e magnésio, e carbonato (Figura 4.5 e Tabela 4.1) (PONTUAL *et al.*, 2008).

Figura 4.5: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo das amostras pulverizadas de trincheira. Foi realizado um zoom na região entre 2130 – 2500 nm para resaltar possíveis bandas de absorção relacionadas com contaminantes no minério. Para comparação, todos os gráficos estão com a mesma escala vertical.





Fonte: O Autor (2022)

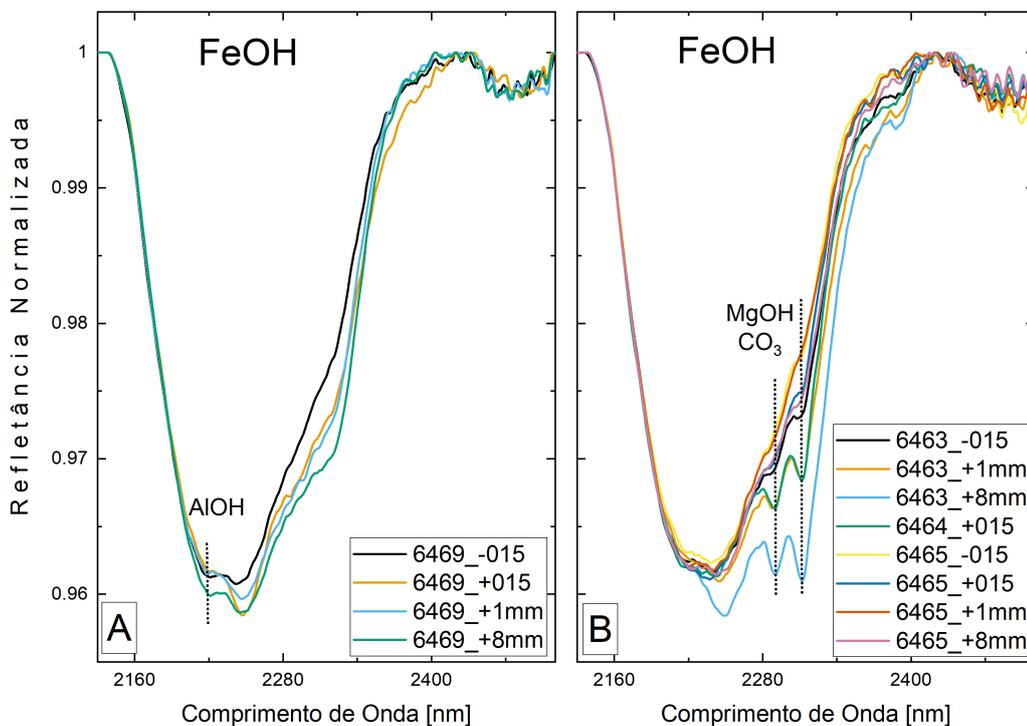
Tabela 4.1: Comprimentos de onda das feições de absorção de contaminantes nas amostras de trincheira analisadas neste estudo. As feições destacadas em cor laranja estão relacionadas com o comprimento de onda da feição mais profunda detectada. Observação: (i) se a absorção mais profunda estiver na banda Al-OH, feições secundárias de Al-OH poderão ser observadas no intervalo espectral de 2230 – 2500 nm – feições em cor azul; (ii) neste mesmo intervalo podem ser observada a mistura entre as feições de MgO/CO3 e secundárias de Al-OH – feições em vermelho.

Seq	Amostra	Granulometria	Banda Al-OH	Banda Fe-OH	Banda Mg-OH / CO3			Seq	Amostra	Granulometria	Banda Al-OH	Banda Fe-OH	Banda Mg-OH / CO3		
1	6440	+8,0 mm	2210		2240			25	6458	+8,0 mm	2212				
2	6440	+1,0 mm	2218					26	6458	+1,0 mm	2218				
3	6440	+0,15 mm	2218					27	6458	+0,15 mm	2212	2240	2277	2312	
4	6440	-0,15 mm	2211					28	6458	-0,15 mm	2220	2277	2286	2310	
5	6443	+8,0 mm	2219					29	6460	+8,0 mm	2210	2224	2234	2285	2317
6	6443	+1,0 mm	2219					30	6460	+1,0 mm	2210	2224	2234	2285	2317
7	6443	+0,15 mm	2219					31	6460	+0,15 mm	2211	2225	2234	2289	2314
8	6443	-0,15 mm	2211	2240	2277	2312		32	6460	-0,15 mm	2211	2225	2234	2289	2314
9	6445	+8,0 mm	2210	2222	2233	2285	2315	33	6463	+8,0 mm	2212	2249	2290	2312	2390
10	6445	+1,0 mm	2210	2223	2234	2287	2316	34	6463	+1,0 mm	2212	2245	2289	2312	2390
11	6445	+0,15 mm	2209	2224	2234	2285	2314	35	6463	+0,15 mm	2213	2249	2290	2312	2391
12	6445	-0,15 mm	2210	2224	2240	2285	2314	36	6463	-0,15 mm	2218	2241	2288	2312	2391
13	6446	+8,0 mm	2213		2240			37	6464	+8,0 mm		2229	2289	2310	
14	6446	+1,0 mm	2212		2234			38	6464	+1,0 mm		2229	2290	2310	
15	6446	+0,15 mm	2218		2238			39	6464	+0,15 mm	2216	2243	2290	2312	2386
16	6446	-0,15 mm	2211		2244			40	6464	-0,15 mm	2229	2243	2287	2311	
17	6451	+8,0 mm	2219		2240	2286	2312	41	6465	+8,0 mm	2222	2242	2286	2310	
18	6451	+1,0 mm	2219		2239	2286	2312	42	6465	+1,0 mm	2220	2240	2285	2312	
19	6451	+0,15 mm	2209		2240	2285	2312	43	6465	+0,15 mm	2220	2237	2287	2312	
20	6451	-0,15 mm	2209		2240	2285	2312	44	6465	-0,15 mm	2218	2238	2285	2311	
21	6452	+8,0 mm	2212		2240			45	6469	+8,0 mm	2221	2245	2288	2314	
22	6452	+1,0 mm	2211					46	6469	+1,0 mm	2219	2247	2288	2314	
23	6452	+0,15 mm	2210	2238	2286	2312		47	6469	+0,15 mm	2220	2247	2286	2316	
24	6452	-0,15 mm	2209	2237				48	6469	-0,15 mm	2220	2242	2286	2316	

Fonte: O Autor (2022)

As feições de absorção relacionadas com os óxidos de ferro são caracterizadas por duas feições de absorção na banda Fe_2O_3 que ocorrem no intervalo de 530 - 540 nm e 880 - 890 nm. Adicionalmente, é observada uma feição de absorção ampla na banda Fe-OH que ocorre no intervalo de 2230 – 2295 nm, com ponto de máxima inflexão na faixa entre 2238 – 2249 nm (Figura 4.6). Notou-se a mistura de feições de absorção com minerais de composição alumina (Figura 4.6A) e magnésiana (Figura 4.6B). A mistura com minerais de alumínio desenvolveram uma feição sutil no comprimento de onda próximo a 2220 nm. Comprimentos de onda menores – < 2250nm, estão relacionados com amostras de composição magnésiana, nas quais foi também possível observar o desenvolvimento das feições de absorção nos comprimentos de onda característicos da banda MgOH/ CO_3 (Figura 4.6B).

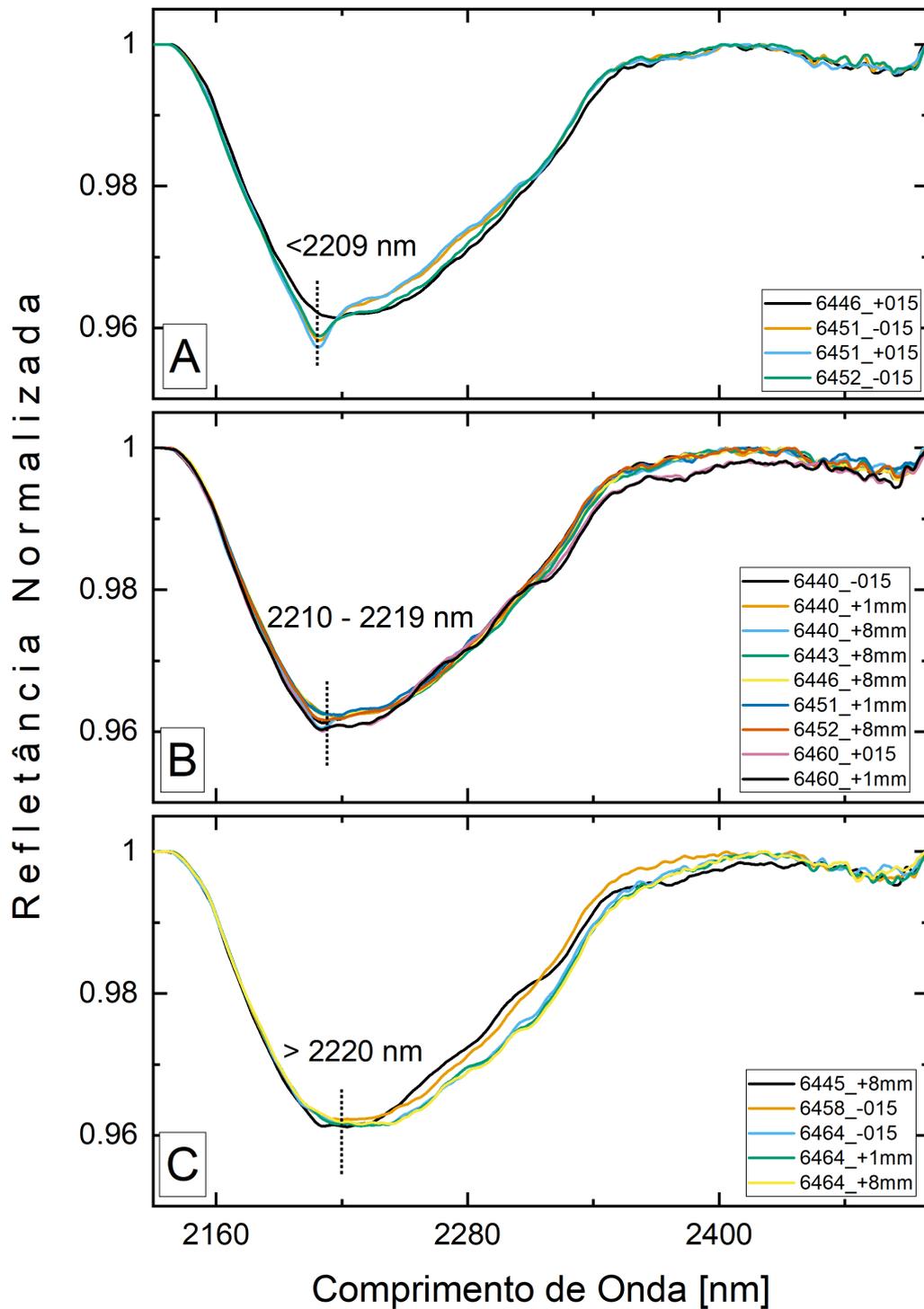
Figura 4.6: Feição de absorção na banda FeOH (2230 – 2295 nm). Nota-se a mistura com feições de minerais de composição alumina (A) e magnésiana (B).



Fonte: O Autor (2022)

A presença dos óxidos de alumínio é caracterizada pelas feições de absorção na banda Al-OH que ocorrem na faixa entre 2160 – 2230 nm. Feições de absorção nesta faixa são sensíveis à química das micas brancas (e.g., illita, muscovita). Comprimentos de onda menores (<2200 nm) refletem espécies ricas em Al; valores intermédios (2200 – 2210 nm) (Figura 4.7A) são composições potássicas (e.g., muscovita), enquanto comprimento de onda mais longos (>2210 nm, e especialmente, >2220 nm) (Figura 4.7 B e C) refletem micas ricas em Si frequentemente com conteúdo alto de Mg e Fe (PONTUAL *et al.*, 2008). A maioria das amostras analisadas neste estudo apresentaram uma feição de absorção sutil neste intervalo espectral, com predominância nos comprimentos de onda mais longos, >2210 nm.

Figura 4.7: Feição de absorção na banda Al-OH (2160 – 2230 nm): (A) Comprimentos de onda de valores intermédios (2200 – 2210 nm); (B) Comprimento de onda mais longos (>2210 - <2219 nm) e (C) Comprimentos de onda longos, > 2220 nm. nm, e especialmente, >2220 nm) refletem micas ricas em Si



Fonte: O Autor (2022)

Os óxidos de magnésio e carbonatos são caracterizados pelas feições de absorção no intervalo entre 2300 – 2360 nm e 2300 – 2350 nm, respectivamente. Além disso, os carbonatos

também exibem feições próximas a 1870 nm, 1990 nm e 2155 nm (PONTUAL *et al.*, 2008). Este intervalo de absorção de MgOH e CO₃ fornece uma alternativa para discriminação entre minerais ferromagnesianos. Comprimentos de onda baixos (<2320 nm) estão presentes em minerais altamente magnesianos, e.g. talco, tremolita, saponita; valores intermédios (2320 – 2340 nm) em minerais ricos em magnésio como flogopita, Mg-clorita, actinolita, hornblenda; e valores mais altos (>2340nm) refletindo maiores teores de Fe típicos de minerais como annita, cloritas e epidotos. Cabe mencionar que, mudanças nestes comprimentos de onda, também são aplicáveis aos minerais carbonáticos, desde magnesitas ricas em Mg próxima a 2300 nm, passando pela dolomita (2320 – 2330 nm) até a calcita (> 2335 nm) (PONTUAL *et al.*, 2008).

As amostras analisadas neste estudo, 6463 +0.15mm e 6463 +8.0mm, exibiram feições bem definidas em 2249 nm, 2290 nm, 2312nm e 2392 nm (Figura 4.8A). Estas duas amostras apresentaram teor de Fe baixo ($\approx 29\%$), teor de SiO₂ médio ($\approx 30\%$) e teores altos de MgO (>6%). A feição em 2392 nm, que é secundária do Mg-OH, só é observada na presença de minerais fortemente magnesianos (e.g. talco e tremolita). As amostras 6463 na faixa -0.15mm e +1.0mm; 6464 e 6465 em toda a faixa granulométrica; também exibiram essas quatro feições de absorção. Contudo, as feições próximas a 2290 nm e 2312 nm vão se tornando sutis, embora observáveis, a feição próxima a 2392 nm não foi observada e, a feição próxima a 2249 nm perdeu definição e se deslocou para comprimentos de onda menores devido à mistura com as feições dos óxidos de ferro e/ou alumínio (Figura 4.8B).

As amostras 6440 e 6446 (em toda a faixa granulométrica); 6443 na faixa +8.0mm, +1.0mm e +0.15mm; 6452 na faixa +8.0mm, +1.0mm e -0.15mm; e 6458 na faixa +8.0mm e +1.0mm não apresentaram feições de absorção nas bandas Mg-OH / CO₃ (Figura 4.8C, Tabela 4.1). Nestas amostras os teores de MgO e CaO ficaram abaixo do limite de detecção do equipamento utilizado para realização das análises de FRX (Tabela 3.1). Assim, pode se dizer que para teores de MgO e CaO menores a 0.017% e 0.053%, respectivamente, não foi possível identificar espectralmente feições de absorção que indiquem a presença de contaminantes de magnésio e/ou carbonato nas amostras. As amostras 6443 -0.15mm; 6445 em toda a faixa granulométrica também exibiram feições nesta região do espectro (2230 – 2500 nm) (Figura 4.8D). Porém, estas feições correspondem às feições secundárias Al-OH pois a feição mais profunda detectada foi observada na banda Al-OH (2160 – 2220 nm) (Tabela 4.1). Além disso, estas amostras exibiram teores de MgO e/ou CaO menor a 0.036%. As amostras 6451; 6460 em toda a faixa granulométrica; 6452 +0.15mm; 6458 na faixa +0.15mm e -0.15mm; apresentaram feições de absorção neste intervalo que correspondem à mistura das feições da banda Mg-OH/CO₃ e as secundárias da banda Al-OH (Figura 4.8E – Tabela 4.1). O comportamento espectral é similar àquele observado na Figura 4.8B. Contudo, o conteúdo de MgO e CaO destas amostras é menor.

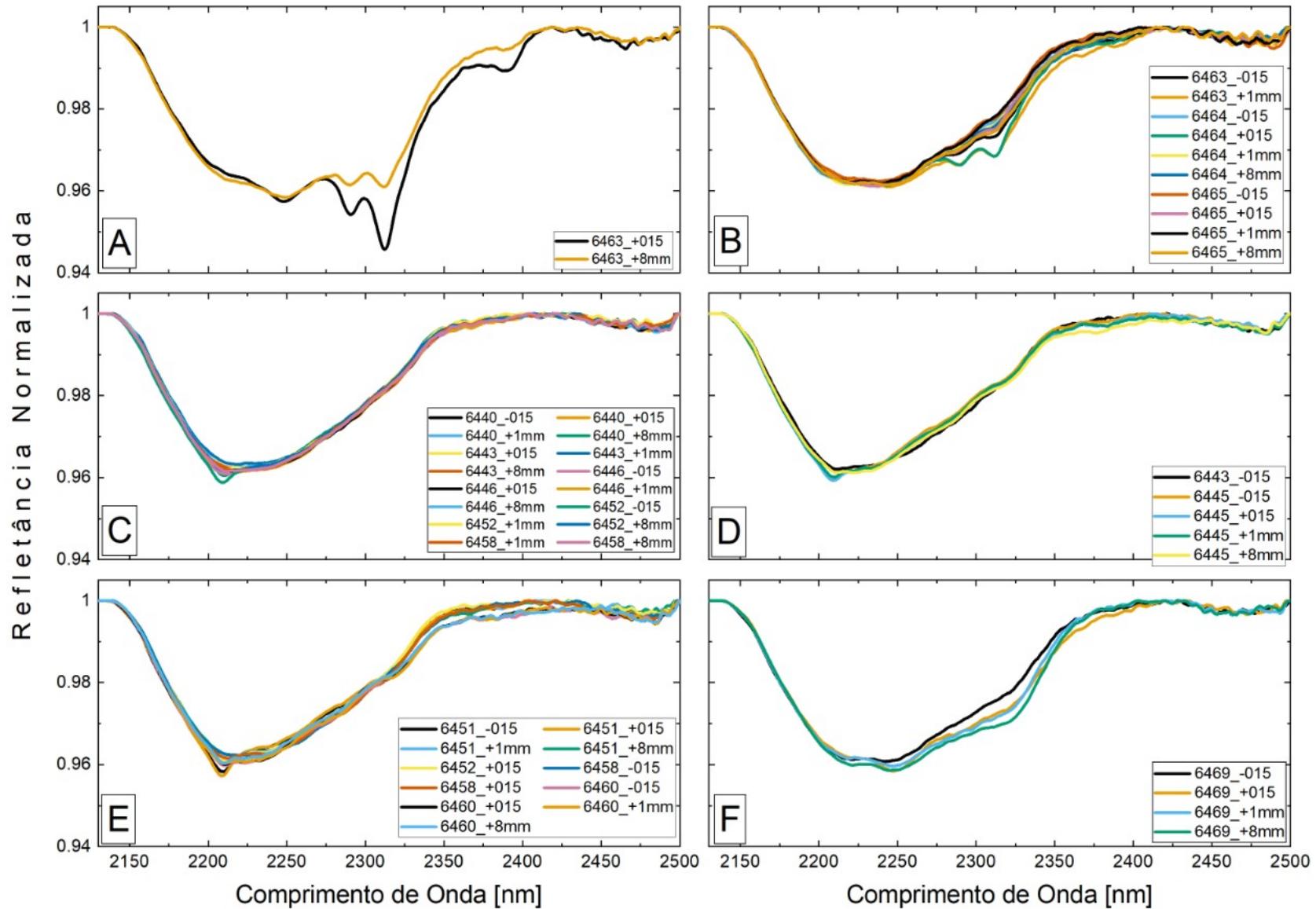
A amostra 6469, em toda a faixa granulométrica, apresentou os teores mais altos de contaminantes: MgO, CaO e SiO₂. As feições destas amostras, no intervalo entre 2300 – 2500 nm, ocorreram em 2288 nm e 2314 e deveram-se à mistura das feições Mg-OH/CaO e as feições secundárias Al-OH. (Figura 4.8F).

Assim, para teores acima de 0.3% de CaO foi possível identificar, em ambiente de laboratório, a presença do contaminante nas amostras. Para teores de MgO e CaO menores a 0.017% e 0.053%, respectivamente, não foi possível identificar espectralmente feições de absorção que indiquem a presença de contaminantes de magnésio e/ou carbonato nas amostras analisadas neste estudo.

Vc pode dizer que através da espectroscopia de refletância fo possível caracterizar o minério de ferro e identificar contaminatnes relacionados com carbonatos e aluminas. Pode mencionar algumas feições chaves observadas etc. Algo geral que encerre o capítulo

Assim, pode se dizer que através da espectroscopia de reflectância foi possível caracterizar o minério de ferro e identificar contaminantes relacionados com carbonatos e aluminas. As feições observadas no intervalo de 2300 - 2360 nm, característica dos óxidos de magnésio, permitiram a distinção dos minerais ferromagnesianos e em complemento a essa banda a feição secundária de Mg-OH em 2392nm, visível na Figura 4.8A, só está presente em minerais fortemente magnesianos, como o talco e tremolita. Ademais, para a banda Al-OH que ocorre na faixa entre 2160 – 2230 nm, a maioria das amostras apresentou uma feição característica de onda observada em >2210, que refletem micas ricas em Si frequentemente com conteúdo alto de Mg e Fe. Já para teores de MgO e CaO menores a 0.017% e 0.053%, respectivamente, não foi possível identificar espectralmente feições de absorção que indiquem a presença de contaminantes de magnésio e/ou carbonato nas amostras.

Figura 4.8: Feição de absorção na banda óxidos de magnésio e carbonatos são caracterizados pelas feições de absorção no intervalo entre 2300 – 2360 nm e 2300 – 2350 nm

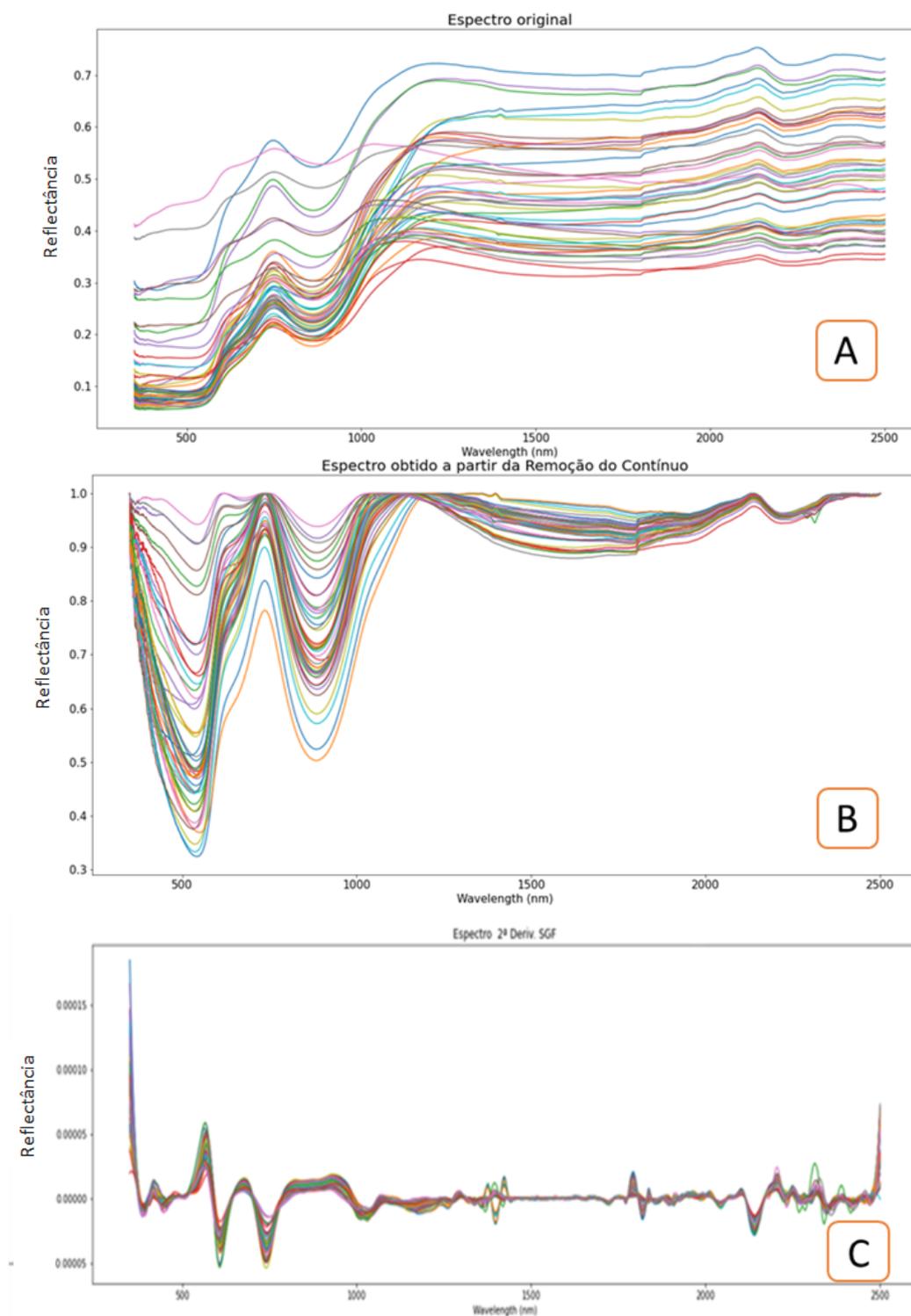


5. Resultados - Técnicas de Processamento e Aprendizado de Máquina

5.1. Caracterização das curvas espectrais

As assinaturas espectrais dos métodos de processamento e do conjunto original de dados são apresentados na Figura 5.1. As amostras apresentam uma variação na refletância, que é um indicativo da variação de composição, principalmente pela presença ou não dos contaminantes associados ao cálcio, alumina e magnésio (PONTUAL *et al.*, 2008). Portanto, a avaliação qualitativa do espectro fornece informações relevantes, indicando as bandas de absorção correlacionadas com os contaminantes em estudo.

Figura 5.1: Curvas espectrais das amostras de trincheira no comprimento de onda de 350nm a 2500nm. a) Espectro Original; b) Contínuo Removido; c) Segunda Derivada Savitzky-Golay

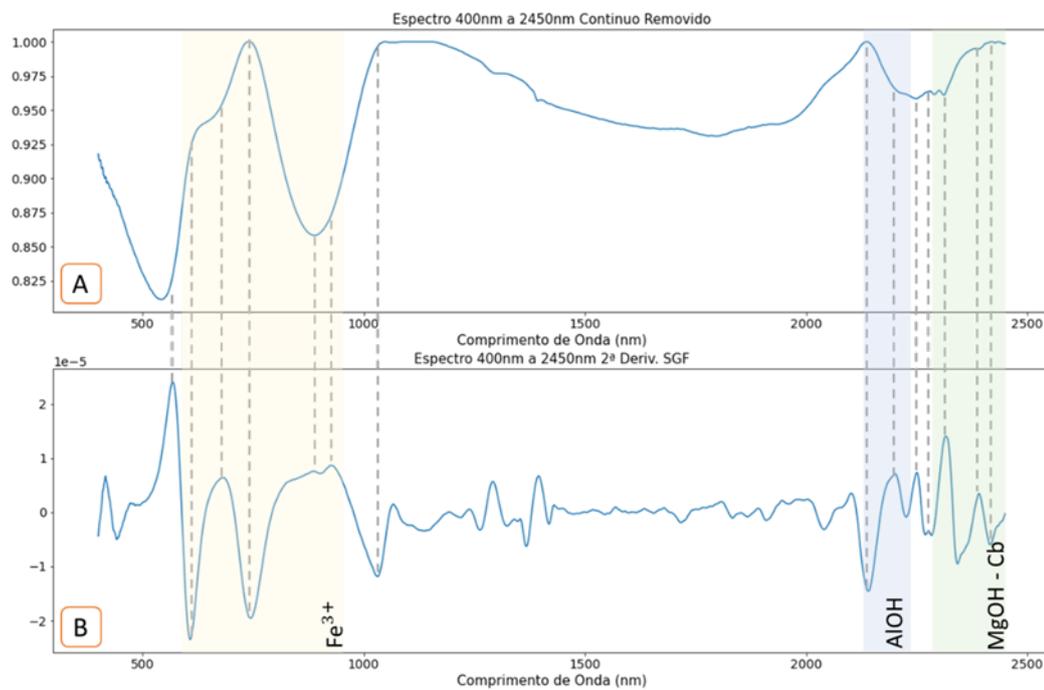


Fonte: O Autor (2022)

As feições de absorção relacionadas com os óxidos de ferro são caracterizadas por duas feições de absorção na banda Fe_2O_3 que ocorrem no intervalo de 530 - 540 nm e 880 - 890 nm. A presença dos óxidos de alumínio é caracterizada pelas feições de absorção na banda

Al-OH que ocorrem na faixa 2160 – 2220 nm. A maioria das amostras analisadas neste estudo apresentaram uma feição de absorção sutil neste intervalo espectral. Os óxidos de magnésio e carbonatos são caracterizados pelas feições de absorção na banda MgOH-Cb que ocorrem na faixa de 2300 – 2360nm (PONTUAL *et al.*, 2008). As bandas características dos minerais citados, podem ser observadas na Figura 5.2.A, no espectro com o contínuo removido para a amostra 6463.8mm, ao refletir esses pontos para a segunda derivada de Savitzky Golay, verifica-se que os pontos característicos se tornam pontos de inflexão, conforme Figura 5.2.B

Figura 5.2: Exemplo do espectro do contínuo removido da amostra 6463.8mm (A) e sua respectiva segunda derivada (B). Nota-se que as bandas de absorção características observadas em A representam pontos de inflexão



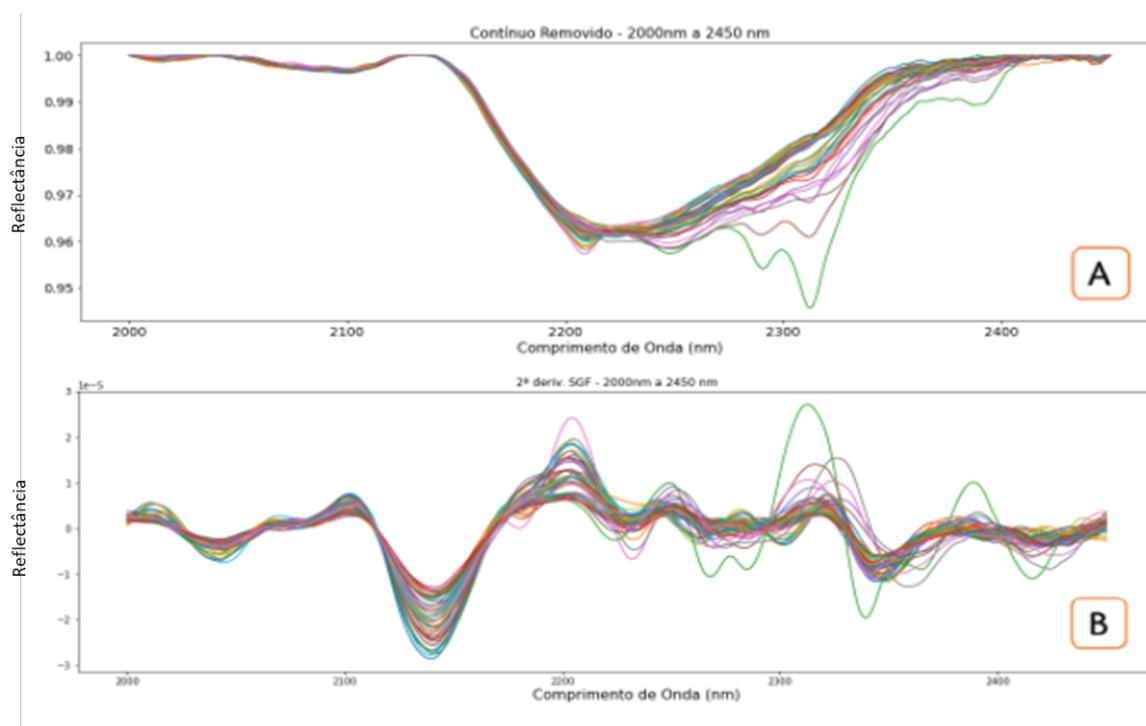
Fonte: O Autor (2022)

5.2. Análise de Componentes Principais

A análise de componentes principais para os contaminantes relacionados ao cálcio e magnésio foi realizada na banda espectral de 2000 a 2450 nm, faixa em que se encontram as principais características desses elementos, representado na Figura 5.3.A. Apesar de o instrumento realizar medições até 2500 nm, os últimos 50nm foram descartados, pois apresentam ruídos eletrônicos do instrumento de medição.

A partir dos dados processados pela técnica de remoção do contínuo, as componentes PC1 e PC2 foram escolhidas, pois representam um grande percentual do conjunto inicial, cerca de 95% dos dados. Já para a segunda derivada de Savitzky- Golay , Figura 5.3.B, as componentes que melhor representaram os dados e permitiram uma boa classificação utilizando o PCA foram as PC1 e PC3, que representam 60% do conjunto inicial. Apesar de representar um percentual menor do total do grupo inicial, a componente mais distante foi selecionada pois apresenta uma variação mais sensível aos contaminantes alvo do trabalho.

Figura 5.3: Curvas espectrais das amostras de trincheira no comprimento de onda de 2000nm a 2450nm. a) Contínuo removido; b) Filtro Savitzky-Golay



Fonte: O Autor (2022)

5.2.1. PCA para Contínuo Removido

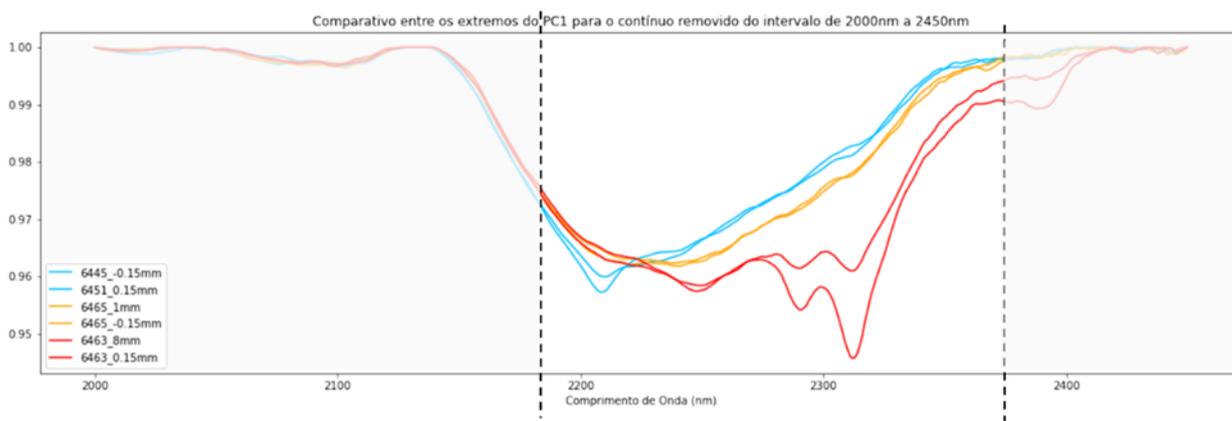
As componentes obtidas a partir dos dados processados pelo contínuo removido foram analisadas para observar qual banda do espectro tem comportamento predominante. Os espectros das amostras que possuem os valores extremos para a PC1 são representados na Figura 5.4. Na área em destaque, observa-se a diferença do vale alcançado pelas amostras, verifica-se que quanto maior o valor da PC1, mais profundo é o vale na faixa de 2220 – 2410nm.

A alteração dos valores de reflectância e o surgimento de vales na faixa em destaque está associada à presença de minerais com Ca e Mg, que exibem feições características na banda dos carbonatos que ocorrem na faixa 2300– 2360 nm (PONTUAL *et al.*, 2008).

Ao comparar com os dados da análise química, representados na Tabela 5.1, é notado que as amostras 6463_8mm e 6463_0.15mm, que possuem os maiores valores para a PC1, apresentam minerais com Ca e Mg em sua composição em comparação aos elementos 6445_0.15mm e 6451_-0.15mm e que estão no extremo oposto.

A alteração do pico de absorção atingido pelas amostras na faixa em destaque pode estar associada à presença dos óxidos de alumínio, uma vez que é caracterizada pelas feições de absorção na banda Al-OH que ocorrem na faixa 2160 – 2220 nm (PONTUAL *et al.*, 2008). Além disso, essa banda sofre efeito da presença de outros contaminantes, nesse caso associados ao óxido de cálcio e óxido de magnésio, que suavizam a feição característica da alumina. Assim, até mesmo algumas amostras com valores superiores de alumina possuem valor de reflectância menor, pois estão em conjunto com um percentual superior de CaO e MgO.

Figura 5.4: Comparativo entre espectros do CR das amostras que possuem os maiores e menores valores para PC1



Fonte: O Autor (2022)

A segunda componente não apresentou características marcantes, o que pode estar ligado ao percentual dos dados, cerca de 3,5%. Como pode ser visualizado na Tabela 5.2, a composição química para os extremos dessa PCA tem boa semelhança e em sua maioria apresentam óxido de cálcio e óxido de magnésio em níveis elevados em sua composição. A partir da Figura 5.5, é possível observar que o único ponto em que os elementos com os valores positivos

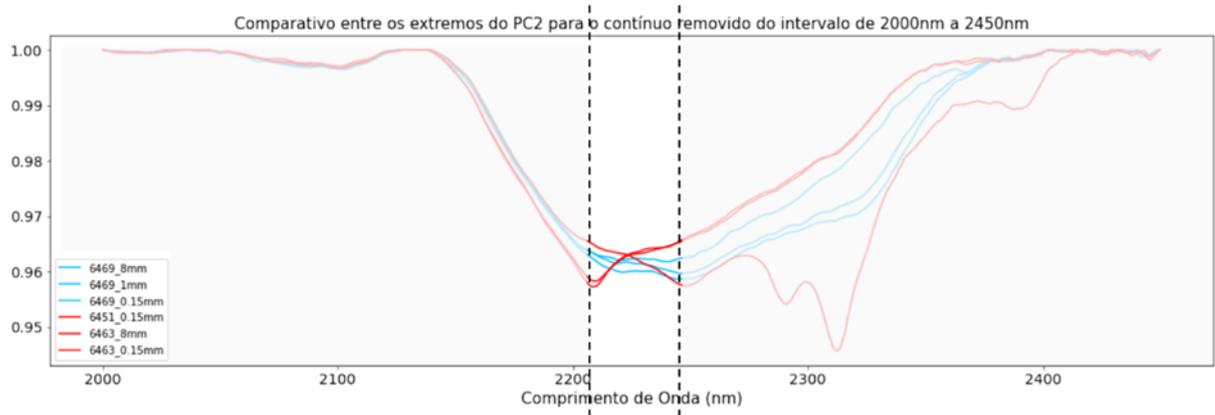
Tabela 5.1: Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC1-CR

ID	Amostra	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	PC1
1	6445_-0.15mm	67,57%	2,81%	0,65%	0,05%	0,02%	-0,0347
2	6451_0.15mm	45,23%	29,93%	2,56%	0,05%	0,44%	-0,0339
3	6463_8mm	29,15%	31,56%	1,90%	6,64%	6,80%	0,1098
4	6463_0.15mm	28,75%	31,75%	4,56%	2,73%	11,32%	0,1719

Fonte: O Autor (2022).

para PC3 se encontram está na faixa de 2200nm a 2250nm. Essa região está próxima de onde as feições características de Al-OH se manifestam entre 2160 – 2220 nm (PONTUAL *et al.*, 2008).

Figura 5.5: Comparativo entre espectros do CR das amostras que possuem valores extremos para PC3



Fonte: O Autor (2022)

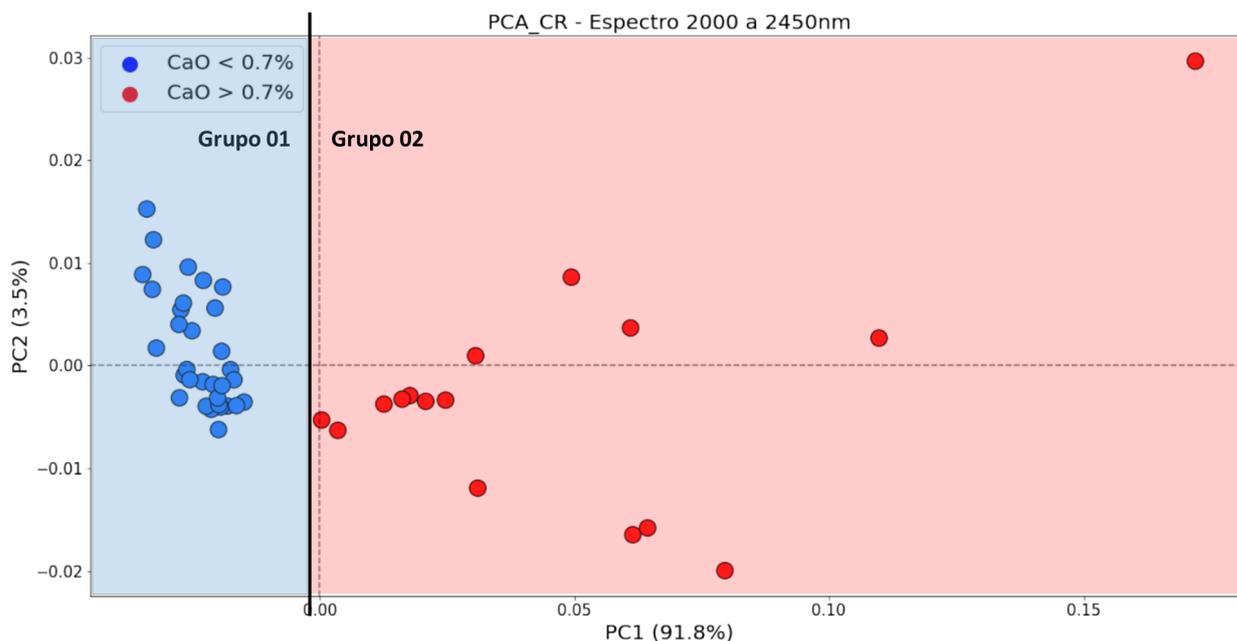
Tabela 5.2: Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC3-CR

ID	Amostra	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	PC1
1	6469_8mm	13,83%	46,78%	1,32%	10,32%	6,50%	-0,0199
2	6469_1mm	15,95%	24,53%	1,84%	15,87%	10,38%	-0,0164
3	6469_0.15mm	20,25%	36,15%	4,28%	7,85%	8,26%	0,0158
4	6451_0.15mm	45,23%	29,93%	2,56%	0,05%	0,44%	0,0152
5	6463_0.15mm	28,75%	31,75%	4,56%	2,73%	11,32%	0,0296
6	6463_8mm	29,15%	31,56%	1,90%	6,64%	6,80%	0,0026

Fonte: O Autor (2022).

Dentre as amostras utilizadas nesse estudo que possuem o óxido de cálcio em sua composição, o percentual mínimo apresentado foi de 0,7%. Ao utilizar esse teor como ponto de segregação dos dados gerados pela PCA, é possível estabelecer dois grupos bem definidos. A partir dos PC1 e PC2 as amostras se agruparam em dois setores, representados na Figura 5.6. No grupo 01, estão todos os elementos que não possuem óxido de cálcio em sua composição, ou seja, menos de 0,7%. Já no segundo, estão contidos os elementos que apresentam um teor superior a 0,7%.

Figura 5.6: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,7% óxido de cálcio a partir do espectro com contínuo removido



Fonte: O Autor (2022)

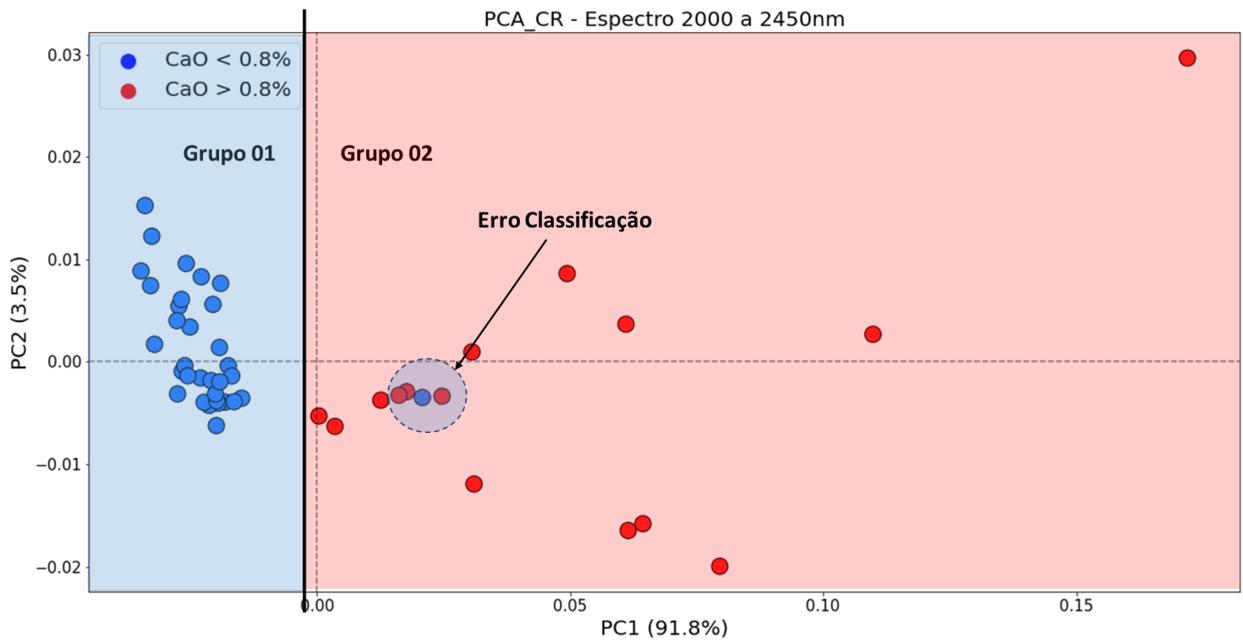
A partir de 0,8% não é mais possível estabelecer grupos bem definidos, conforme representado na Figura 5.7. Com isso, a técnica possibilitou apenas segregar as amostras que contém óxido de cálcio (>0,7%) daquelas que não contém (<0,7%) óxido de cálcio em sua composição.

5.2.2. PCA PARA SEGUNDA DERIVADA SAVITZKY-GOLAY

A partir dos dados processados pela segunda derivada Savitsky-Golay, foi realizada a análise de componentes principais, tendo como, melhor representação dos dados as PC1 e PC3, que combinadas representam cerca de 60% do conjunto inicial. A PC3 foi escolhida pois traz informações das partes consideradas mais ruidosas do espectro, que são úteis nesse estudo, pois podem estar associadas aos contaminantes do MFe.

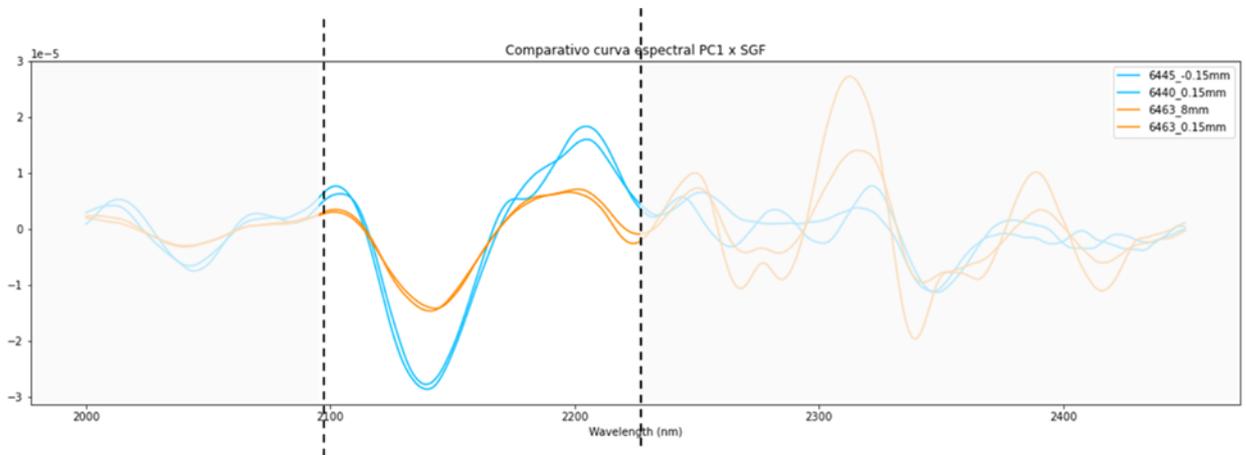
Os espectros das amostras que possuem os valores extremos para a PC1 são representados na Figura 5.8. Na área em destaque, observa-se a diferença do vale em 2160nm e do pico em 2210nm. Ao comparar com os dados da análise química, representados na Tabela 5.3, é notado que as amostras 6463_8mm e 6463_0.15mm, que possuem os maiores valores para a PC1, apresentam de óxido de magnésio, óxido de cálcio e valores superiores de alumina em sua composição. Esses elementos têm seu vale suavizado em 2160nm e praticamente não apresenta um pico em 2210nm se comparados aos espectros de 6445_-0.15mm e 6440_0.15mm. Porém, não é possível estabelecer uma relação entre a variação percentual das amostras e variação do valor para PC1, somente se possuem ou não os contaminantes.

Figura 5.7: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,7% óxido de cálcio a partir do espectro com contínuo removido



Fonte: O Autor (2022)

Figura 5.8: Comparativo entre espectros do SGF das amostras que possuem valores extremos para PC1



Fonte: O Autor (2022)

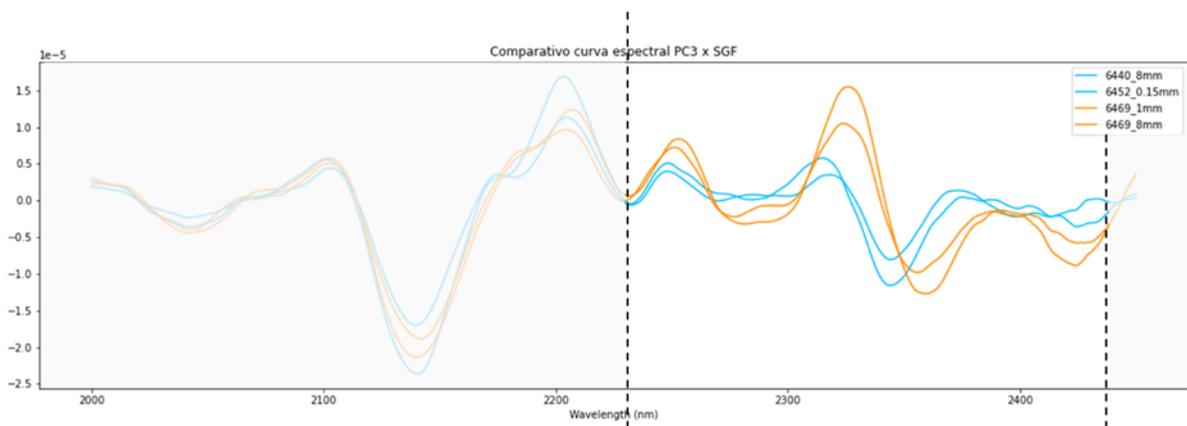
Tabela 5.3: Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC1-SGF

ID	Amostra	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	PC3(x10 ⁻⁵)
1	6445_-0.15mm	67,57%	2,81%	0,65%	0,05%	0,02%	-5,09
2	6440_0.15mm	11,57%	83,59%	0,18%	0,05%	0,02%	-5,05
3	6463_8mm	28,75%	31,75%	4,56%	2,73%	11,32%	5,38
4	6463_0.15mm	29,15%	31,56%	1,90%	6,64%	6,80%	8,53

Fonte: O Autor (2022).

A terceira componente apresenta um comportamento bem relevante para o estudo dos contaminantes associados ao MFe. Os espectros representados na Figura 5.9, demonstram que os elementos com os maiores valores para a PC3, em laranja, têm um comportamento diferente dos elementos do extremo oposto de valores da PC3 na faixa em destaque de 2230 – 2430nm. Os picos em 2260nm são mais acentuados e em 2360nm além disso, os valores de máxima mínima estão suavemente deslocados para a direita, ou seja, para comprimentos de onda mais distantes. Os dados da análise química e da PCA, representados na Tabela 5.4, expõem a relevância que essa componente tem para a classificação dos dados. A amostra 4, que possui o maior valor para PC3, também é aquela que tem o maior percentual de óxido de cálcio e óxido de magnésio de todo o conjunto de dados. A amostra 3 também está entre um dos que tem o percentual mais elevado desses minerais. Com isso, a variação dessa componente está fortemente associada a variação percentual dos óxidos nos dados de entrada.

Figura 5.9: Comparativo entre espectros do SGF das amostras que possuem valores extremos para PC3



Fonte: O Autor (2022)

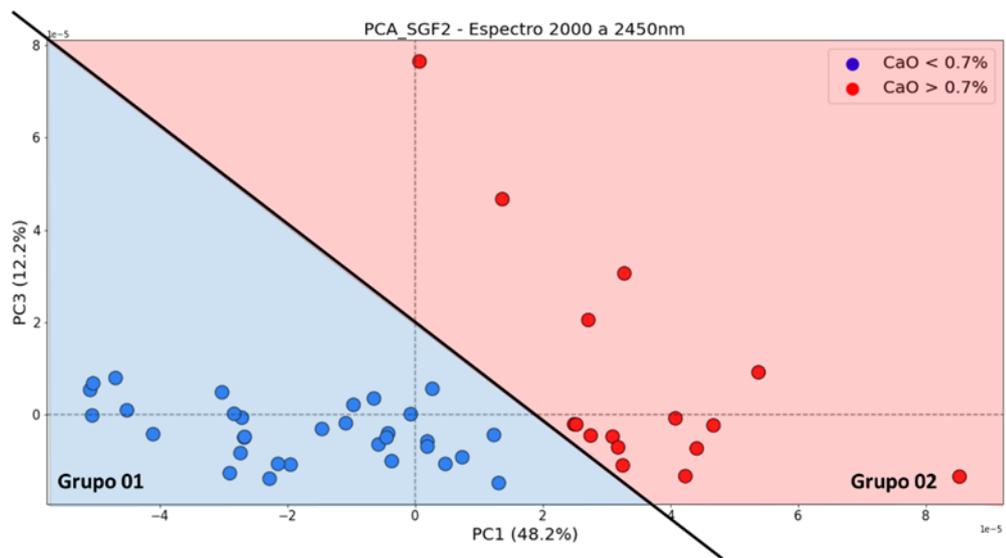
Tabela 5.4: Análise química das amostras que possuem valores extremos para PC3-SGF

ID	Amostra	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO	PC3(x10 ⁻⁵)
1	6440_8mm	45,06%	36,79%	0,23%	0,05%	0,02%	-1,47
2	6452_0.15mm	36,89%	44,34%	1,21%	0,05%	0,21%	-1,38
3	6469_8mm	13,83%	46,78%	1,32%	10,32%	6,50%	4,66
4	6469_1mm	15,95%	24,53%	1,84%	15,87%	10,38%	7,64

Fonte: O Autor (2022).

A Figura 5.10 representa a análise de componentes principais, utilizando a PC1 e PC3, a partir dos dados tratados pela segunda derivada de Savitzky-Golay, com foco na divisão em grupos a partir do percentual de óxido de cálcio. Assim como na análise com o contínuo removido, é possível realizar a segregação das amostras a partir do percentual mínimo de 0,7% de CaO, ou seja, os grupos podem ser caracterizados como elementos que contém o óxido em sua formulação, grupo 02, ou que não contenham o mineral, grupo 1.

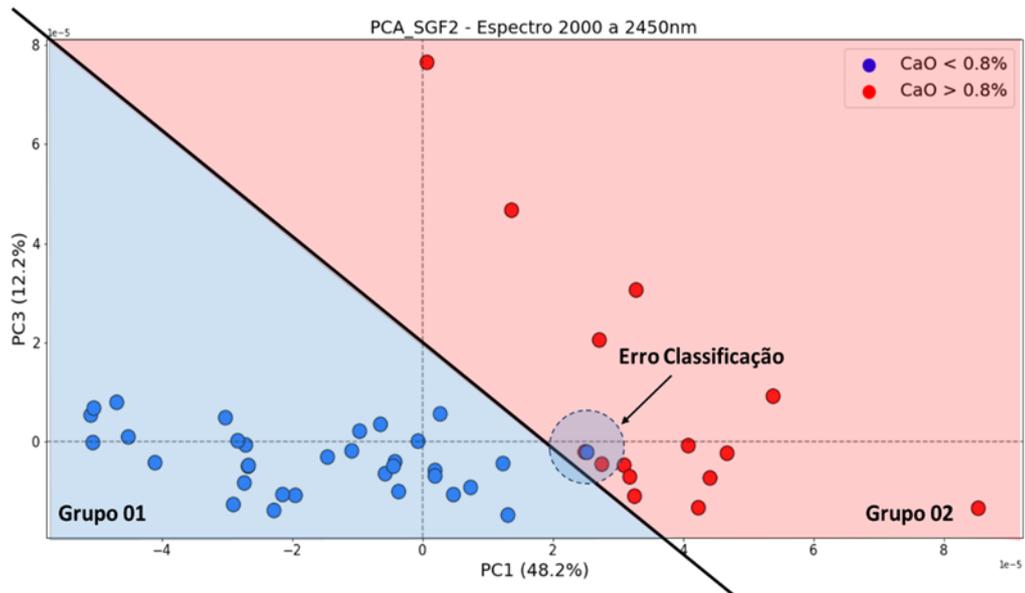
Figura 5.10: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,7% óxido de cálcio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay



Fonte: O Autor (2022)

A partir do teor de 0,8% de CaO, não é mais possível estabelecer uma divisão clara em dois grupos, pois a amostra 6464.8mm que apresenta um percentual inferior ao limite, está alocada na região 2, conforme representado na Figura 5.11.

Figura 5.11: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,8% óxido de cálcio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay, onde é visualizado um erro de classificação

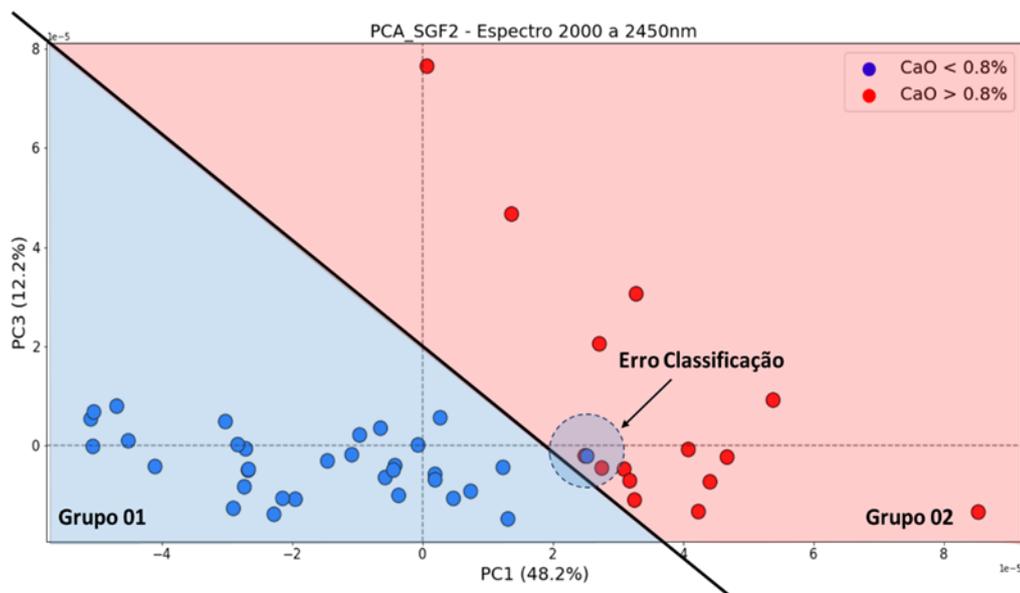


Fonte: O Autor (2022)

O espectro da amostra 6464_8mm juntamente com o da 6464_1mm, estão representados na Figura 20. O segundo elemento foi escolhido por estar praticamente sobreposto ao primeiro na Figura 19, por possuírem valores próximos para as componentes PC1 e PC3. Os espectros tem um comportamento similar e praticamente se sobrepõem, além disso, a composição química, disponível na Tabela 8, tem valores próximos indicando que para a técnica de análise de componentes principais utilizando os dados da segunda derivada de Savitzky-Golay, o limite é estabelecido em 0,7% para o óxido de cálcio, ou seja, a presença ou não desse mineral é o limiar para emprego dessa técnica nesse estudo de caso.

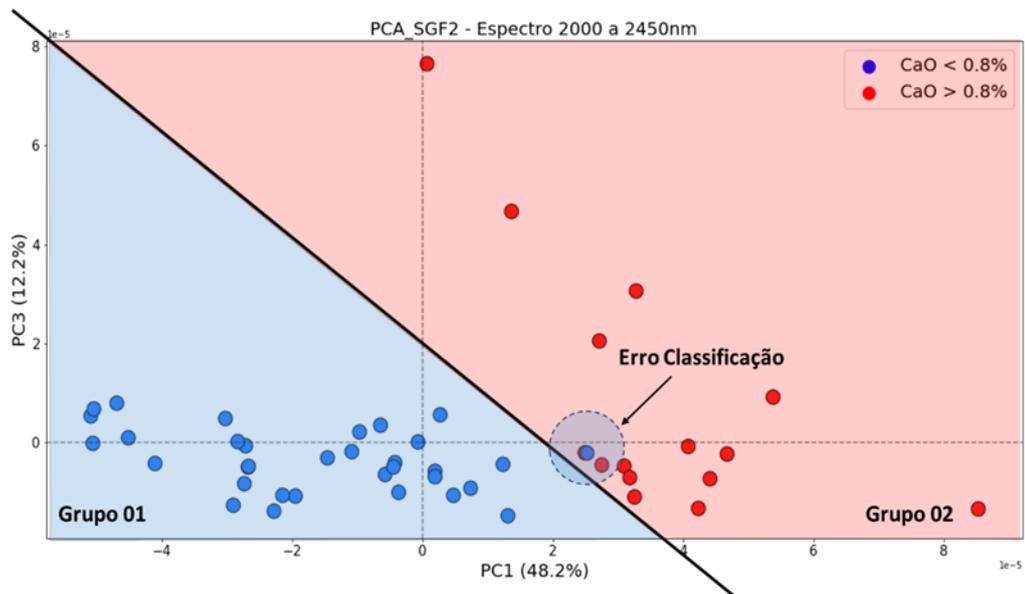
Assim como ocorrido com a análise de PCA para os dados com o contínuo removido, o PCA para os elementos tratados a partir da segunda derivada de SGF, possibilitou segregar os dados em dois grupos com o teor de corte em 0,5% para óxido de magnésio, Figura 5.12. A partir do percentual de 0,4% já não é mais possível estabelecer duas regiões, conforme Figura 5.13.

Figura 5.12: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,5% óxido de magnésio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay



Fonte: O Autor (2022)

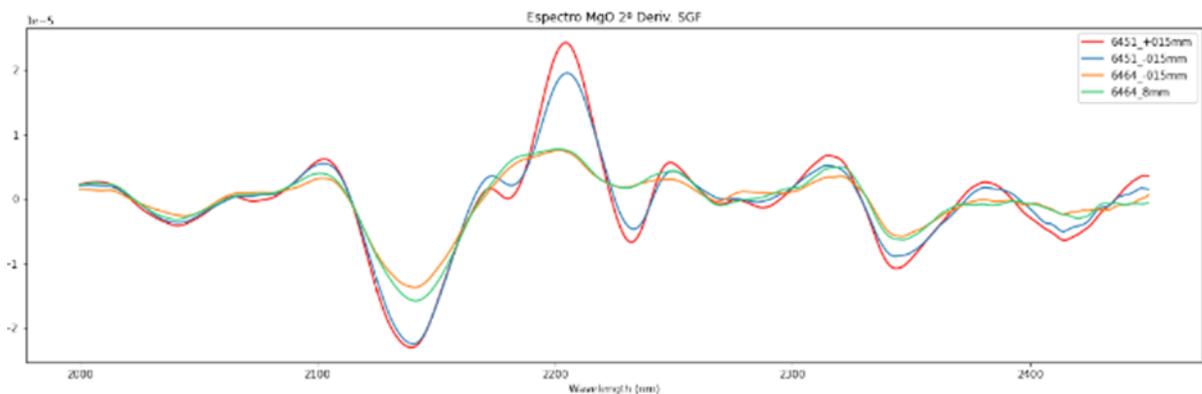
Figura 5.13: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,4% óxido de magnésio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay



Fonte: O Autor (2022)

O espectro da amostra 6451_-0.15mm, que foi classificado incorretamente é representado na Figura 5.14, juntamente com outros que possuem valores próximos para óxido de magnésio. A partir dessa comparação, é destacado que a amostra possui maior similaridade com o grupo 1, que o percentual baixo de MgO não é suficiente para afetar o espectro resultante. O valor da PC1 para o elemento 6451_-0.15mm, é distante da região de fronteira, pois além do percentual de óxido de magnésio, a alumina presente nessa amostra, conforme Tabela 5.5, faz com que essa componente tenha um valor negativo.

Figura 5.14: Análise PCA para classificação das amostras pelo teor de 0,4% óxido de magnésio a partir do espectro da segunda derivada de Savitzky-Golay



Fonte: O Autor (2022)

Tabela 5.5: Análise química dos elementos dispostos na Figura 5.14

ID	Amostra	Fe	SiO ₂	Al ₂ O ₃	CaO	MgO
1	6451_0.15mm	45,23%	29,93%	2,56%	0,05%	0,44%
2	6451_-0.15mm	53,93%	18,44%	2,33%	0,05%	0,29%
3	6464_-0.15mm	50,74%	19,52%	1,24%	1,23%	2,27%
4	6464_8mm	35,37%	45,88%	0,76%	0,77%	1,35%

Fonte: O Autor (2022).

5.3. Aprendizado de Máquina

Os dados tratados pelas técnicas de SGF, Contínuo Removido e Análise de componentes principais, serviram de entrada para os modelos de aprendizado de máquina; os resultados estão dispostos na Tabela 5.6, que apresenta as previsões para óxido de cálcio. É possível identificar que apesar do erro quadrático médio ser elevado, as combinações que apresentaram melhor performance nesse indicador foram aquelas com a análise de componentes principais. Esse fato é relacionado à característica dessa técnica de agrupar as principais informações e já realizar uma classificação dos dados em sua concepção.

Tabela 5.6: RMSE para as técnicas de aprendizado de máquina

Método	RMSE_PCA_SGF	RMSE_PCA_CR	RMSE_SGF	RMSE_CR
KNN	1,33	1,98	3,79	4,01
Adaboost	1,79	2,37	3,33	3,19
Random Forest	1,12	1,16	3,84	3,84

Fonte: O Autor (2022).

O resultado geral se mostra insatisfatório para utilizar qualquer técnica para realizar a previsão dos dados, principalmente por conta do volume de dados, são apenas 48 amostras e com pouca variabilidade, tendo em vista que apenas 16 delas apresentam teor detectável de óxido de cálcio. Conforme apontado Aria *et al.* (2021) “Os dados devem ser de qualidade e serem representativos do problema a ser tratado, caso contrário, não resultará em resultados expressivos.”

6. CONSIDERAÇÕES FINAIS

No âmbito desta pesquisa, foi possível determinar a resposta espectral de amostras de trincheira da Mina de Conceição no intervalo VSWIR. As amostras possuem uma variação de cores e granulometria que permitiu realizar uma caracterização física e espectral. A partir do espectro normalizado das amostras, foi possível visualizar variações nas bandas de absorção características do Al-OH (2160nm-2230nm), FeOH(2230nm-2295nm) e Mg-OH/CO₃(2300nm-2360nm). Além disso, os dados na faixa de 2000nm-2450nm, foram processados através da análise de componentes principais, em que foi possível classificar os dados de acordo com a presença ou não de contaminantes relacionados ao CaO e MgO.

O número pequeno de apenas 48 amostras torna difícil a aplicação de modelos de aprendizado de máquina para a quantificação de teores. Esse cenário é ainda pior quando o mineral de interesse é algum contaminante relacionado ao óxido de cálcio e/ou ao óxido de magnésio, uma vez que somente 35% de todo o conjunto possui teores detectáveis para esses elementos. Além da quantidade ser pequena, a porcentagem possui uma variação muito grande, o que dificulta na determinação de padrões pelos modelos de aprendizado de máquina.

O resultado dos modelos para quantificação dos teores relacionados aos contaminantes presentes nas amostras a partir dos dados espectrais, conforme o esperado, teve um desempenho extremamente ruim, apresentando um erro médio quadrático de 1,98 no melhor caso, para uma variável que, muitas vezes, possui valores inferiores a 1, ou seja, a predição pode apresentar um erro maior do que 100% da medida real. Apesar do resultado negativo, é possível observar que a utilização dos dados provenientes das componentes principais tem uma performance muito melhor do que quando o modelo é alimentado com todos os dados, fato que está atrelado à retirada das variáveis que poluem o conjunto de dados, deixando só informações relevantes.

O estudo também contou com a caracterização física das amostras, com foco na região de 2000-2450nm, em que se encontram feições características dos contaminantes presentes no MFe. Os resultados foram inseridos na biblioteca espectral da Vale (PABÓN *et al.*, 2021).

Para trabalhos futuros, é importante a coleta de mais amostras para integrar a biblioteca espectral criada para região do Complexo de Itabira e, a partir desse acervo, focar na estimativa de teores para os contaminantes associados ao minério de ferro, como o óxido de cálcio e magnésio.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALBERS, A.; MELCHIADES, F.; MACHADO, R.; BALDO, J.; BOSCHI, A. Um método simples de caracterização de argilominerais por difração de raios X. **Cerâmica**, v. 48, pp. 34–37, 2002.
- ALKMIM, F. F.; MARSHAK, S. Transamazonian orogeny in the Southern Sao Francisco craton region, Minas Gerais, Brazil: evidence for Paleoproterozoic collision and collapse in the Quadrilátero Ferrífero. **Precambrian Research**, v. 90, n. 1-2, pp. 29–58, 1998.
- AMARAL, C. H. D. **Sensoriamento remoto hiperespectral e definição de espécies indicadoras aplicados à geobotânica no bioma cerrado**. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo.
- ANDRADE, C. F. Relevo antropogênico associado à mineração de ferro no Quadrilátero Ferrífero: uma análise espaço-temporal do complexo Itabira (Município de Itabira-MG). 2012.
- ARIA, M.; CUCCURULLO, C.; GNASSO, A. A comparison among interpretative proposals for Random Forests. **Machine Learning with Applications**, v. 6, pp. 100094, 2021.
- BERTOLINO, L. C.; LUZ, A. B. D.; TIMÓTEO, D. M. O.; TONNESEN, D. A.; PEÇANHA, E. R. Caracterização mineralógica e estudos de beneficiamento da bentonita de Pedra Lavrada-PB. Em: **II Simpósio de Minerais Industriais do Nordeste**, CETEM/UFPE, 2010.
- BERTOLINO, L. C.; SANTOS, W. H. D.; SANTOS, A. C. D. Caracterização mineralógica de minérios. CETEM/MCTIC, 2018.
- BEZERRA, D. P. Quadrilátero ferrífero MG: fatores condicionantes do relevo. 2014.
- BICALHO, L. S.; OTHERS. Flotação de minério de ferro dolomítico. 2019.
- BORGES, F. A.; RABELO, R. D. A. L.; ARAÚJO, M. A.; FERNANDES, R. A. D. S. METODOLOGIA BASEADA NO ALGORITMO ADABOOST COMBINADO

- COM REDE NEURAL PARA LOCALIZAÇÃO DO DISTÚRBIO DE AFUNDAMENTO DE TENSÃO. Em: **Congresso Brasileiro de Automática-CBA**, v. 1, 2019.
- BREUNIG, F. M.; CAMARGO, F. F.; ADAMI, M.; MANTELLI, L. R.; COSTA, M.; PONZONI, F. J.; FREITAS, J. Aplicação da técnica de remoção do contínuo para a discriminação espectral de diferentes dosagens de Nitrogênio aplicadas ao trigo (*Triticum aestivum*, L.-IAC-370). **Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto**, v. 13, pp. 91–98, 2007.
- CARIOCA, A. C. Caracterização de minério de ferro por espectroscopia de reflectância difusa. 2010.
- CARIOCA, A. C.; COSTA, G. M. D.; BARRÓN, V.; FERREIRA, C. M.; TORRENT, J. Aplicação da espectroscopia de reflectância difusa na quantificação dos constituintes de bauxita e de minério de ferro. **Rem: Revista Escola de Minas**, v. 64, n. 2, pp. 199–204, 2011.
- CLARK, R. N.; ROUSH, T. L. Reflectance spectroscopy: Quantitative analysis techniques for remote sensing applications. **Journal of Geophysical Research: Solid Earth**, v. 89, n. B7, pp. 6329–6340, 1984.
- CLARK, R. N.; OTHERS. Spectroscopy of rocks and minerals, and principles of spectroscopy. **Manual of remote sensing**, v. 3, n. 3-58, pp. 2–2, 1999.
- COSTA, J. L. Seletividade na flotação de minérios ferríferos dolomíticos. 2009.
- COSTA, J. C. V. Caracterização do itabirito dolomítico da Mina de Conceição, visando aproveitamento como matéria-prima na siderurgia. 2013.
- DA SILVA, A. L.; OTHERS. Caracterização mineralógica por difração de raios X e determinação de terras raras por ICP-MS de rochas da região sul da Bahia. 2013.
- DE MORAES, E. C. Capítulo 1 fundamentos de sensoriamento remoto. 2002.
- DE ORQUIZA MILHOMEM, F.; DE SOUZA, T. F.; COTA, T. G.; PEREIRA, T. M.; RODRIGUES, O. M.; OTHERS. ANÁLISE DE COMPONENTES PRINCIPAIS APLICADA À FLOTAÇÃO DE MINÉRIO DE FERRO. **Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineração**, v. 15, n. 4, pp. 429–433, 2018.
- ENDO, I.; GALBIATTI, H.; DELGADO, C. .; OTHERS. Mapa geológico do Quadrilátero Ferrífero, Minas Gerais, Brasil. Escala 1:150.000. **Departamento de Geologia, Escola de Minas – UFOP -Centro de Estudos Avançados do Quadrilátero Ferrífero: www.qfe2050.ufop.br**; 2020.

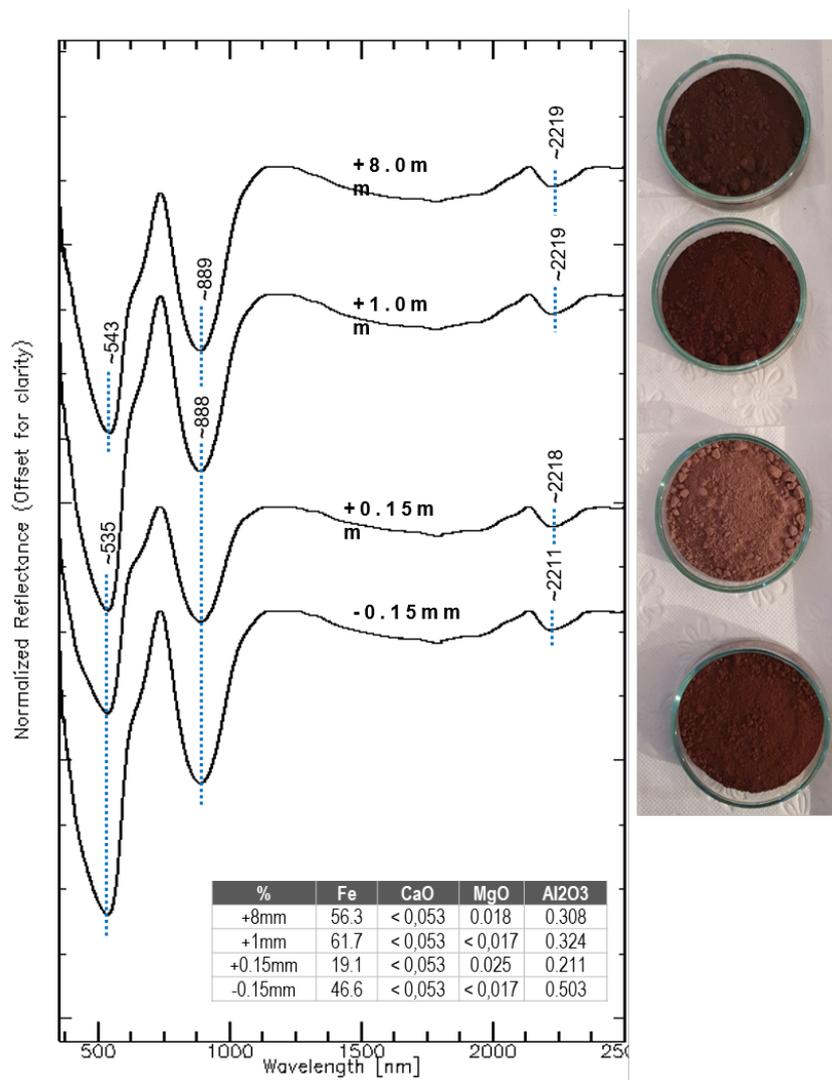
- FERNANDES, K. L.; RIBON, A. A.; MARQUES JUNIOR, J.; BAHIA, A. S. R. D. S.; TAVARES FILHO, J. Magnetic and spectral signatures of Cerrado soils in the state of Goiás, Brazil. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 52, n. 10, pp. 923–932, 2017.
- FRANK, H. T. MinMicro: Banco de Dados Minerais ao Microscópio. 2021. Disponível em: <<https://www.ufrgs.br/minmicro>>.
- FREUND, Y.; SCHAPIRE, R. E.; OTHERS. Experiments with a new boosting algorithm. Em: **icml**, v. 96, pp. 148–156. Citeseer, 1996.
- GONÇALVES, Í. G. Espectroscopia de reflectância difusa como ferramenta para o planejamento da lavra e controle de processo do caolim. 2014.
- HONGYU, K.; SANDANIELO, V. L. M.; DE OLIVEIRA JUNIOR, G. J. Análise de componentes principais: resumo teórico, aplicação e interpretação. **E&S Engineering and science**, v. 5, n. 1, pp. 83–90, 2016.
- HOTELLING, H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. **Journal of educational psychology**, v. 24, n. 6, pp. 417, 1933.
- JENSEN, J. R. **Remote sensing of the environment: An earth resource perspective 2/e** . Pearson Education India, 2009.
- KOKALY, R.; CLARK, R.; SWAYZE, G.; LIVIO, K.; HOEFEN, T.; PEARSON, N.; WISE, R.; BENZEL, W.; LOWERS, H.; DRISCOLL, R.; OTHERS. Usgs spectral library version 7 data: Us geological survey data release. **United States Geological Survey (USGS): Reston, VA, USA**, 2017.
- KÜMMEL, L. F. D. F. Aprendizado de máquina aplicado em previsão de curto prazo de valores de indicadores de nível de água. 2021.
- LANDIM, P. M. B. **Análise estatística de dados geológicos multivariados** . Oficina de Textos, 2011.
- LANFRANCHI, R. A. Sensoriamento remoto e espectroscopia de reflectância na prospecção de ferro no setor intracontinental do orógeno Araçuaí-oeste Congo. 2019.
- LINDEN, R. Técnicas de agrupamento. **Revista de Sistemas de Informação da FSMA**, v. 4, n. 4, pp. 18–36, 2009.
- MARSHAK, S.; ALKMIM, F. F. Proterozoic contraction/extension tectonics of the southern São Francisco region, Minas Gerais, Brazil. **Tectonics**, v. 8, n. 3, pp. 555–571, 1989.
- MEŠTROVIĆ, D. T. Aplicações da espectroscopia. News-Medical. 2019. Disponível em: <[https://www.news-medical.net/life-sciences/Spectroscopy-Applications-\(Portuguese\).aspx](https://www.news-medical.net/life-sciences/Spectroscopy-Applications-(Portuguese).aspx)>. Acesso em: 06 de jun. de 2021.

- MONARD, M. C.; BARANAUSKAS, J. A. Conceitos sobre aprendizado de máquina. **Sistemas inteligentes-Fundamentos e aplicações**, v. 1, n. 1, pp. 32, 2003.
- NAPOLITANO, H. B.; CAMARGO, A. J.; MASCARENHAS, Y. P.; VENCATO, I.; LARIUCCI, C. Análise da difração dos raios X. **Revista Processos Químicos**, v. 1, n. 1, pp. 35–45, 2007.
- NISHIDA, E. N. Propriedades da Filtragem de Savitzky-Golay Aplicadas na Identificação de Complexos QRS em Sinais de Eletrocardiograma. 2017.
- PABÓN, R. E. C.; DE SOUZA FILHO, C. R.; DE OLIVEIRA, W. J. Reflectance and imaging spectroscopy applied to detection of petroleum hydrocarbon pollution in bare soils. **Science of the total environment**, v. 649, pp. 1224–1236, 2019.
- PABÓN, R.; SILVA, A. C.; OLIVEIRA, R.; OTHERS. BIBLIOTECA ESPECTRAL VALE - Versão 01. **Relatório Parcial do Projeto Tecnologias Espectrais e Inteligência Artificial nas Atividades de Mineração - Instituto Tecnológico Vale**, 2021.
- PANALYTICAL, M. ASD FieldSpec 4 Hi-Res: Espectrorradiômetro de alta resolução. 2020. Disponível em: <<https://www.malvernpanalytical.com/br/products/product-range/asd-range/fieldspec-range/fieldspec4-hi-res-high-resolution-spectroradiometer>>.
- PEARSON, K. LIII. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. **The London, Edinburgh, and Dublin philosophical magazine and journal of science**, v. 2, n. 11, pp. 559–572, 1901.
- PONTUAL, S.; MERRY, N.; GAMSON, P. Spectral interpretation-field manual. GMEX. Spectral analysis guides for mineral exploration. **Victoria, AusSpec International Pty**, 2008.
- RIBEIRO, S. G. Espectroscopia de reflectância na avaliação do carbono orgânico em solos do semiárido. 2021.
- ROSIÈRE, C. A.; CHEMALE JR, F. Itabiritos e minérios de ferro de alto teor do Quadrilátero Ferrífero—uma visão geral e discussão. **Geonomos**, 2000.
- SANTIAGO, L. O. R. **Weathering and weatherability of metamorphised intrusive igneous rocks and sericitic phylites of the Iron Quadrangle and its implication on their mechanical behaviour**. Doutorado em geotecnia, Universidade Federal de Viçosa, 2008.
- SCAPIN, M. A. **Aplicação da difração e fluorescência de raios-X (WDXRF): ensaios de argilominerais**. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, 2003.

- SILVA, A. C. P. MONITORAMENTO DA QUALIDADE DE SINTER FEED ATRAVÉS DE DADOS ESPECTRAIS ASSOCIADOS A APRENDIZADO DE MÁQUINA—ESTUDO DE CASO: MINA DE CARAJÁS SERRA SUL (S11D). 2021.
- SILVA, J. C. A.; SIGNOR, D.; BRITO, A.; CERRI, C. E. P.; CAMARGO, P.; PEREIRA, C. F. Espectroscopia no Infravermelho Próximo e Análise de Componentes Principais para Investigação de Solos Submetidos a Diferentes Usos da Terra na Amazônia Oriental Brasileira. **Rev Virtual Quím**, v. 12, pp. 1–112, 2020.
- VALE. Memória da tecnologia da mineração em Itabira. 2016. Disponível em: <<http://www.vale.com/brasil/PT/initiatives/innovation/itabiritos/itabira-memory/Documents/assets/projeto-memorias.pdf>>. Acesso em: 20 de fev. de 2022.
- VARELLA, C. A. A. Análise de Componentes Principais: Análise Multivariada Aplicada as Ciências Agrárias. **Universidade Federal do Rural do Rio de Janeiro - UFRRJ**, 2008.
- VIANA, A. O. Estimando teores de ferro em minérios: uma investigação com métodos de aprendizado de máquina e imagens hiperespectrais. 2020.
- VISCARRA ROSSEL, R.; BUI, E.; DE CARITAT, P.; MCKENZIE, N. Mapping iron oxides and the color of Australian soil using visible–near-infrared reflectance spectra. **Journal of Geophysical Research: Earth Surface**, v. 115, n. F4, 2010.
- XAVIER, K. C. M.; SILVA FILHO, E. C.; SANTOS, M.; SANTOS, M.; LUZ, A. Caracterização mineralógica, morfológica e de superfície da atapulgita de Guadalupe-PI. **Holos**, v. 5, pp. 60–70, 2012.

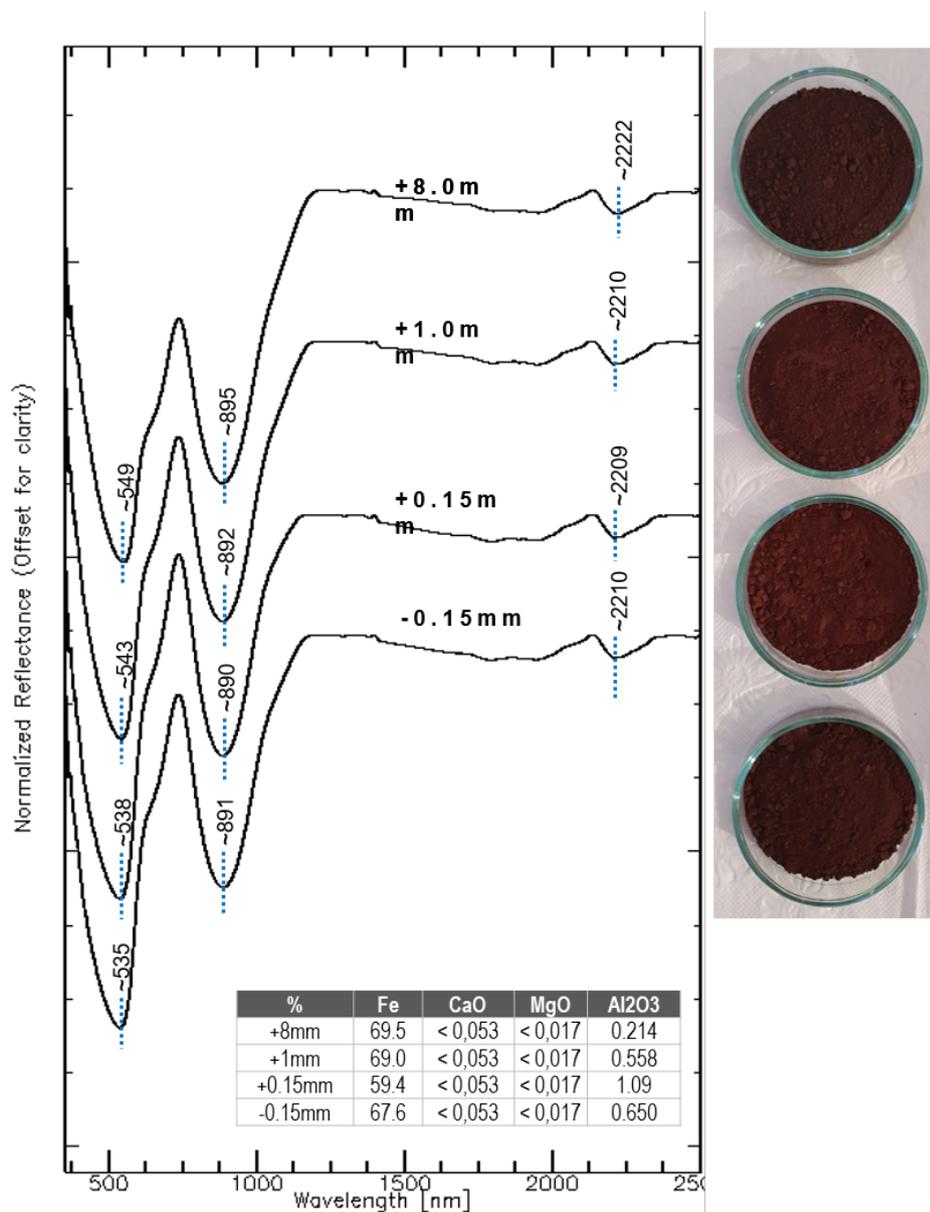
APÊNDICE A: ESPECTROS DE REFLETÂNCIA NORMALIZADOS ATRAVÉS DA REMOÇÃO DO CONTÍNUO

Figura 1: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6443.



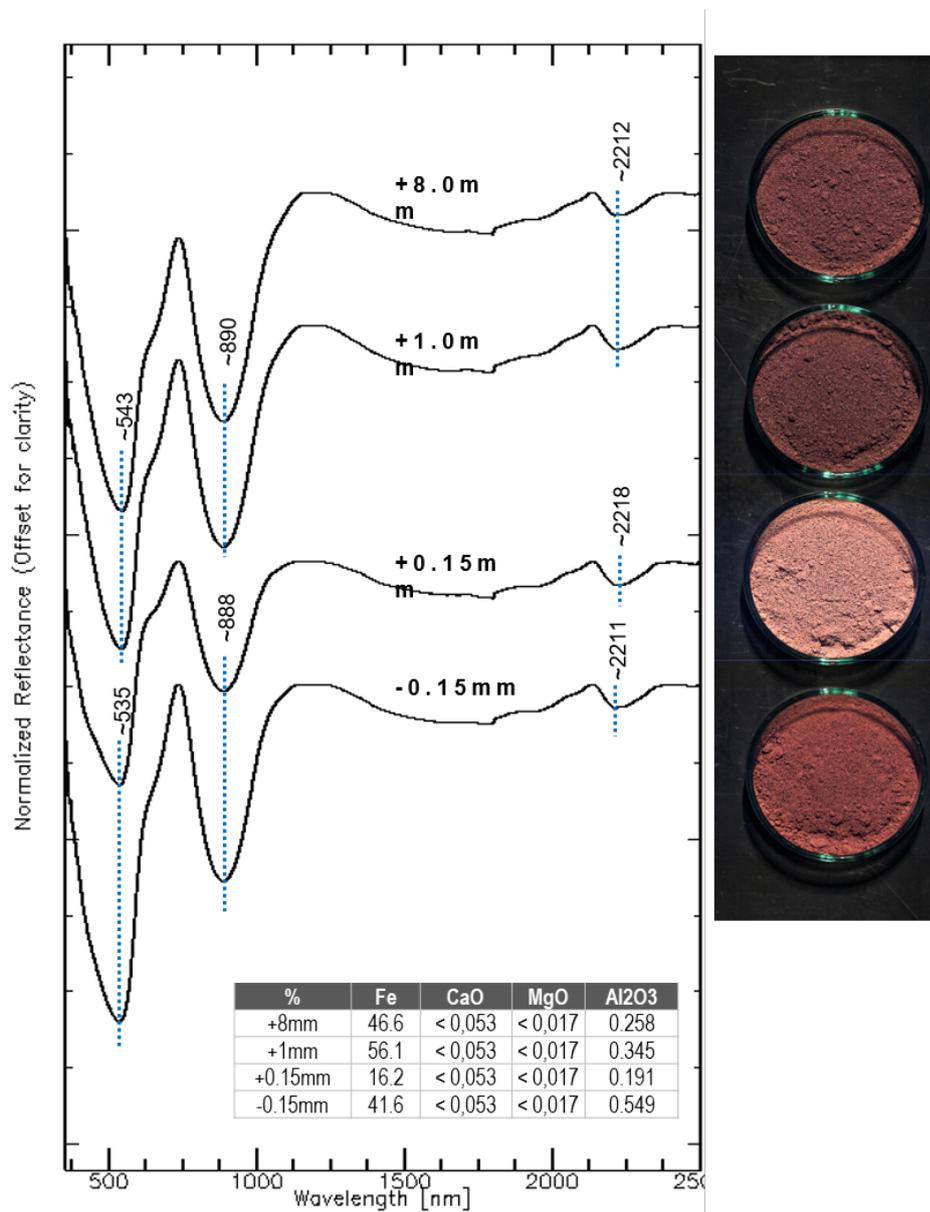
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 2: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6445.



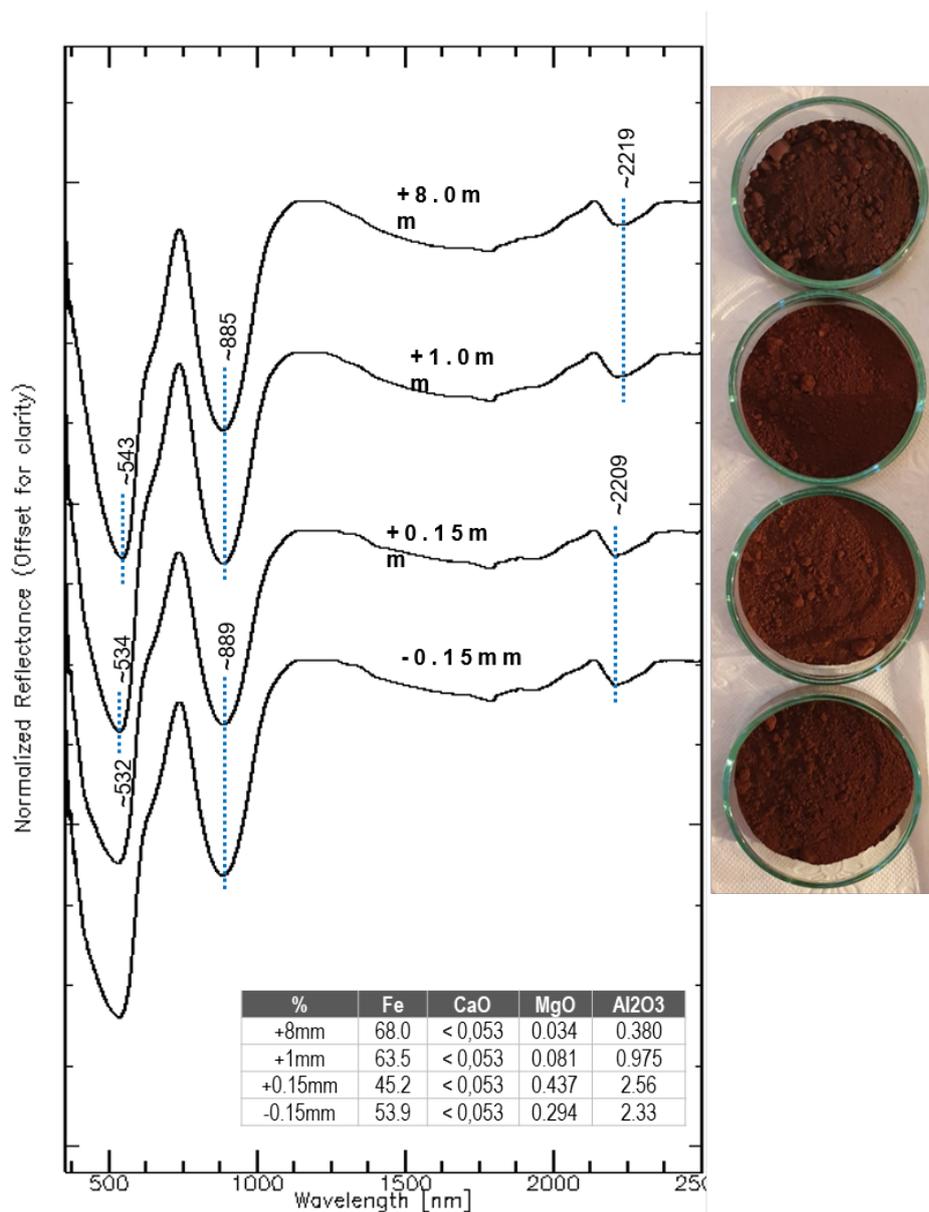
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 3: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6446.



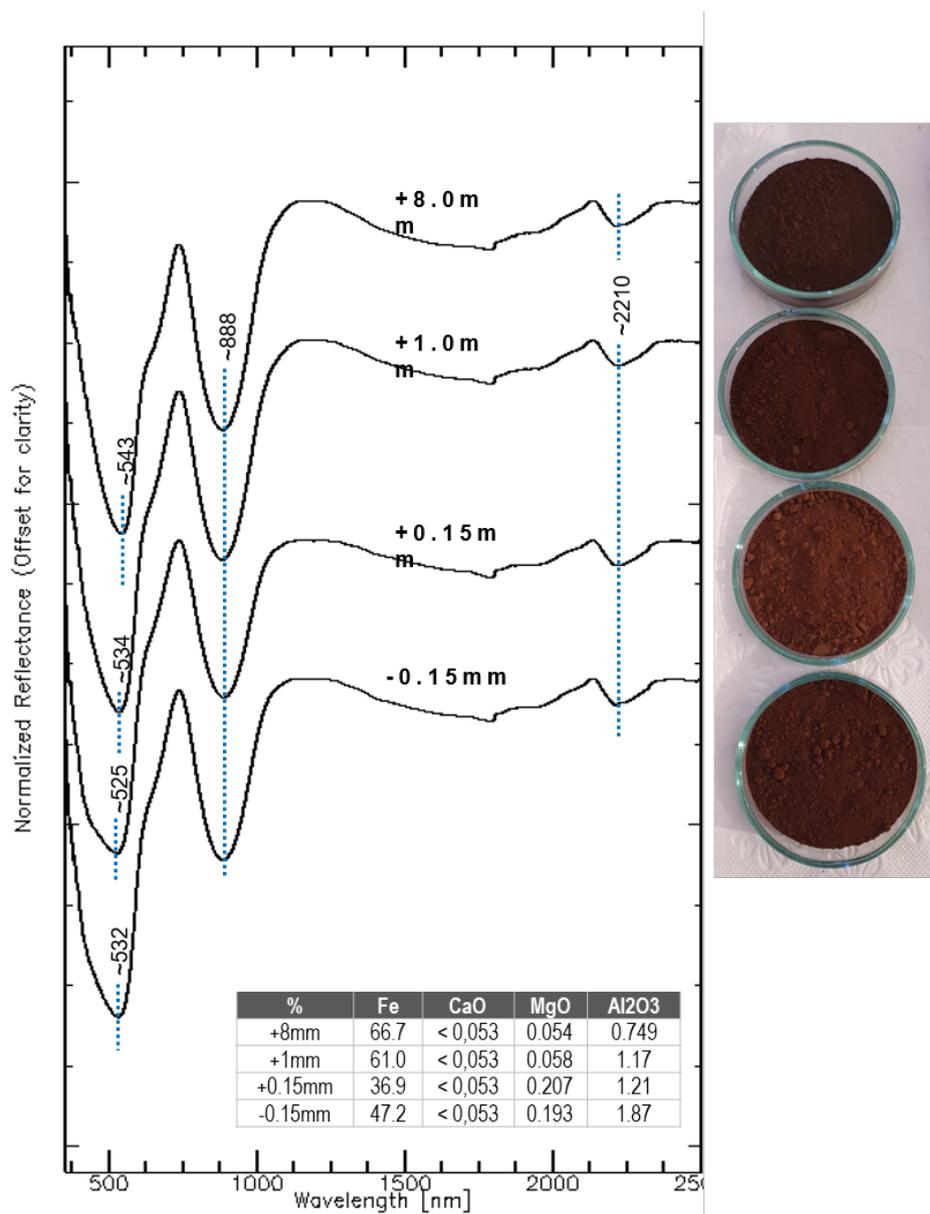
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 4: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6451.



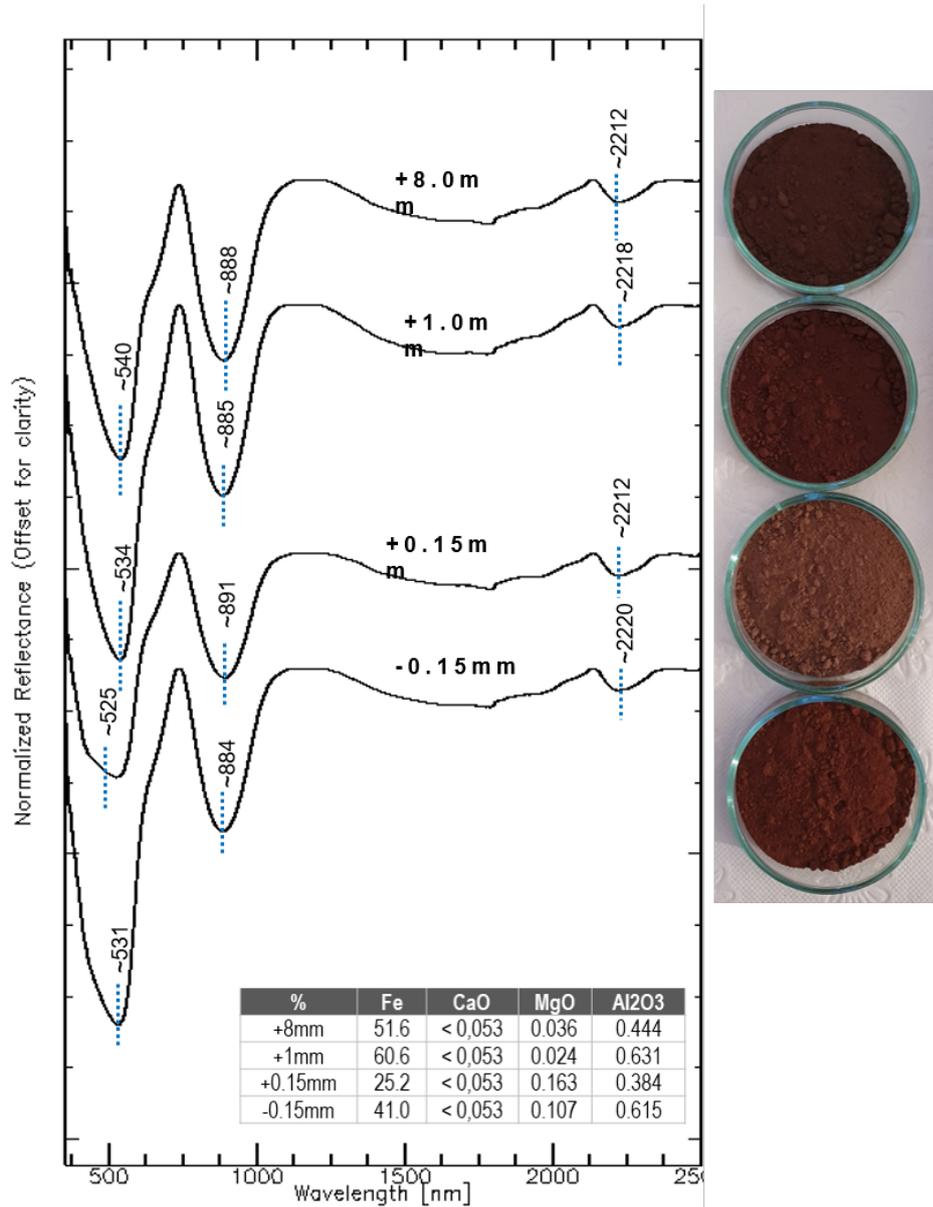
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 5: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6452.



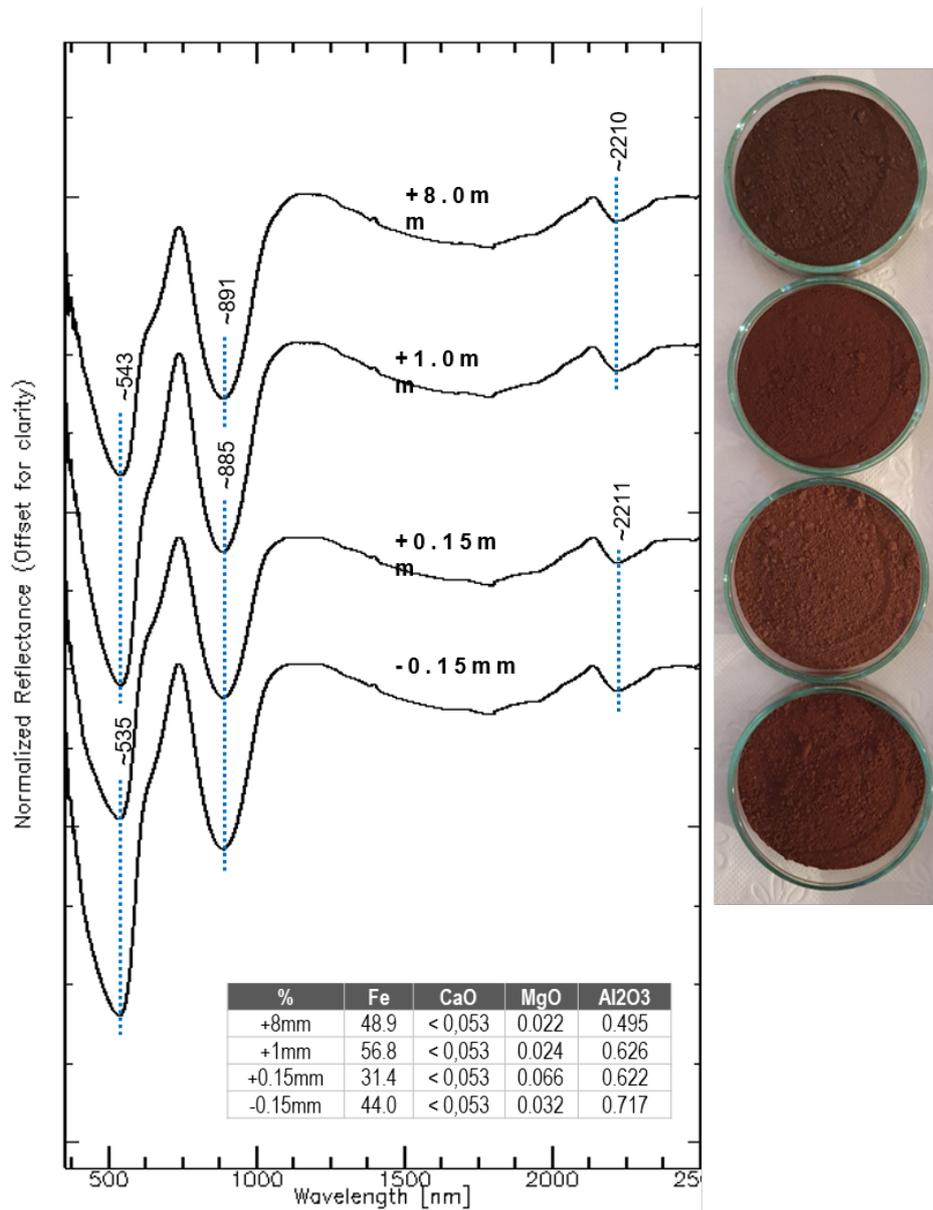
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 6: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6458.



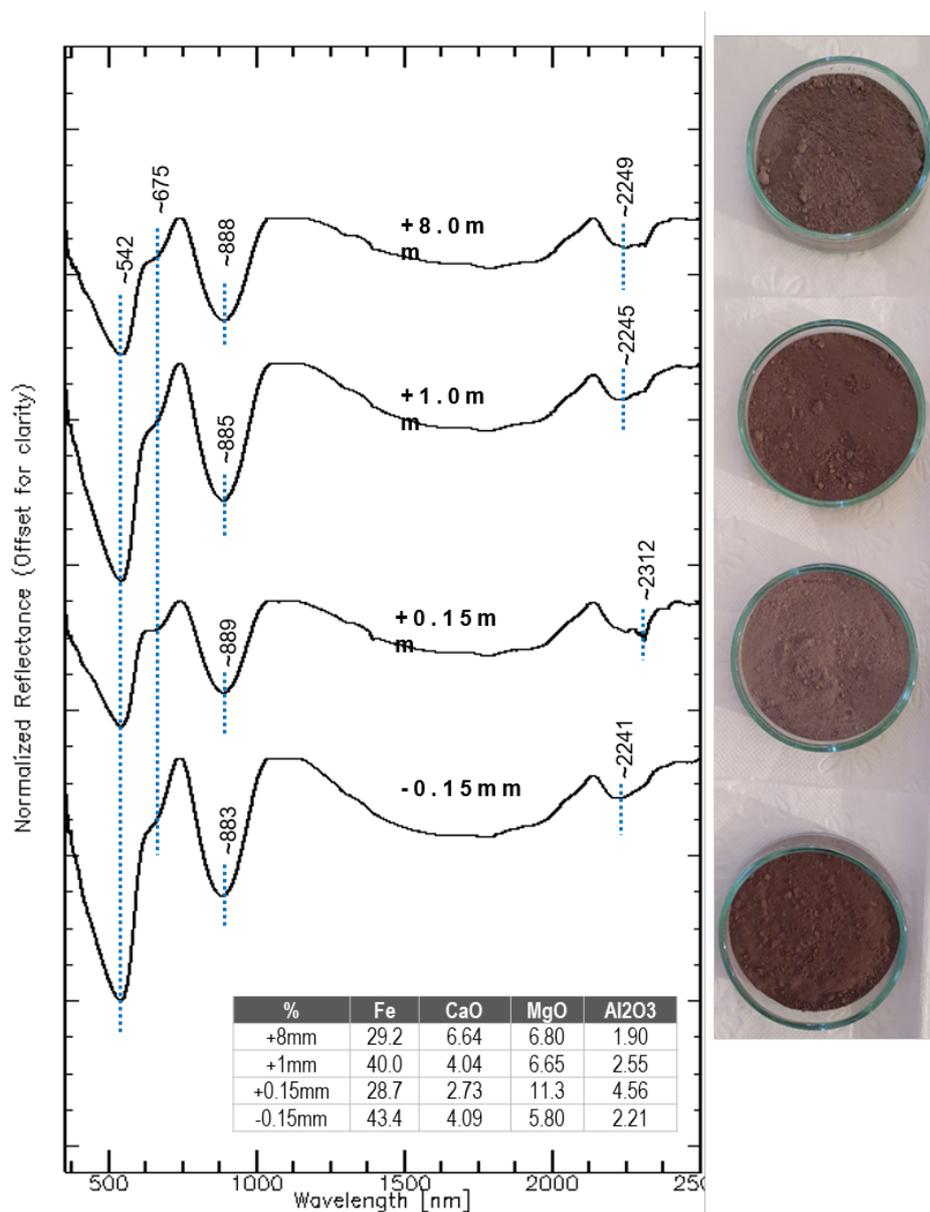
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 7: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6460.



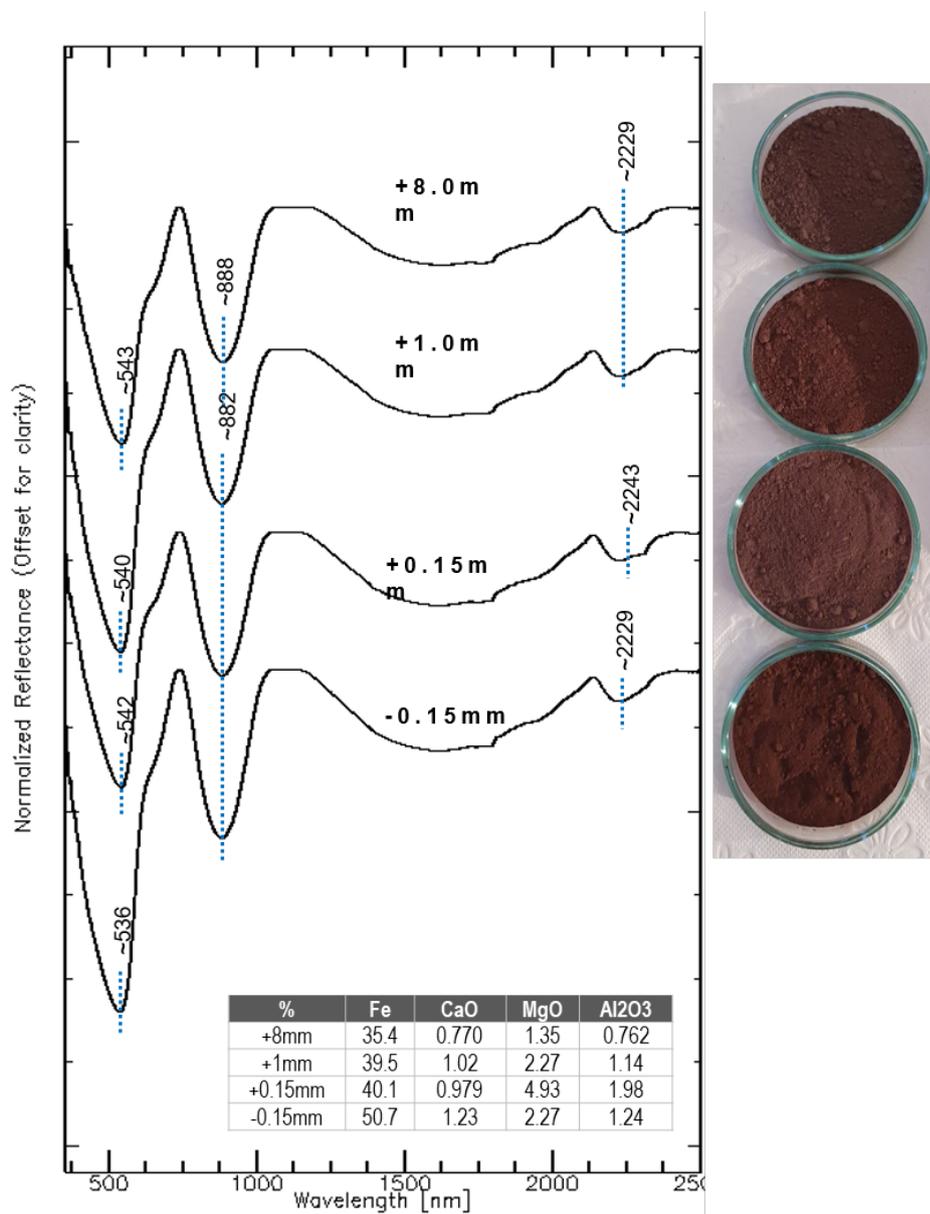
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 8: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6463.



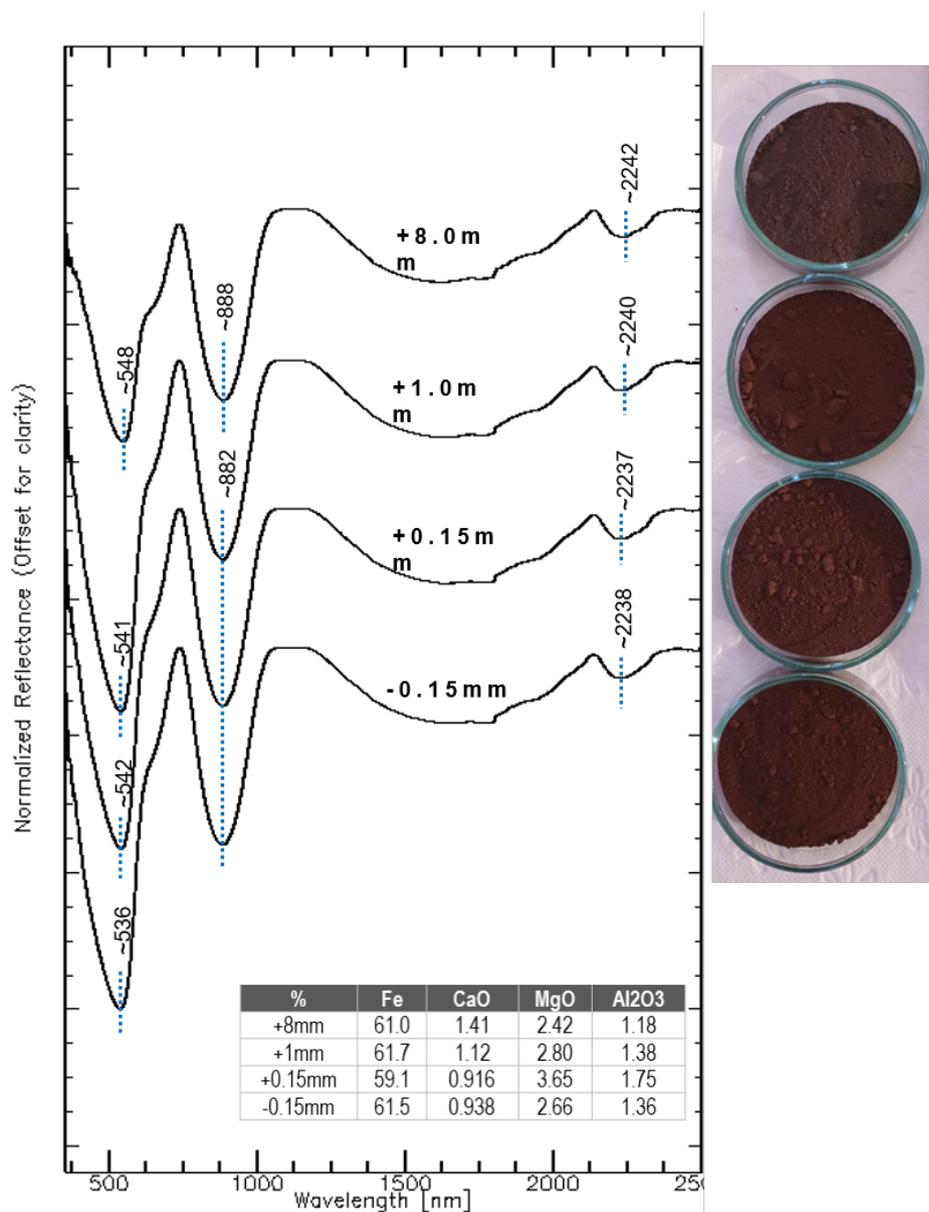
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 9: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6464.



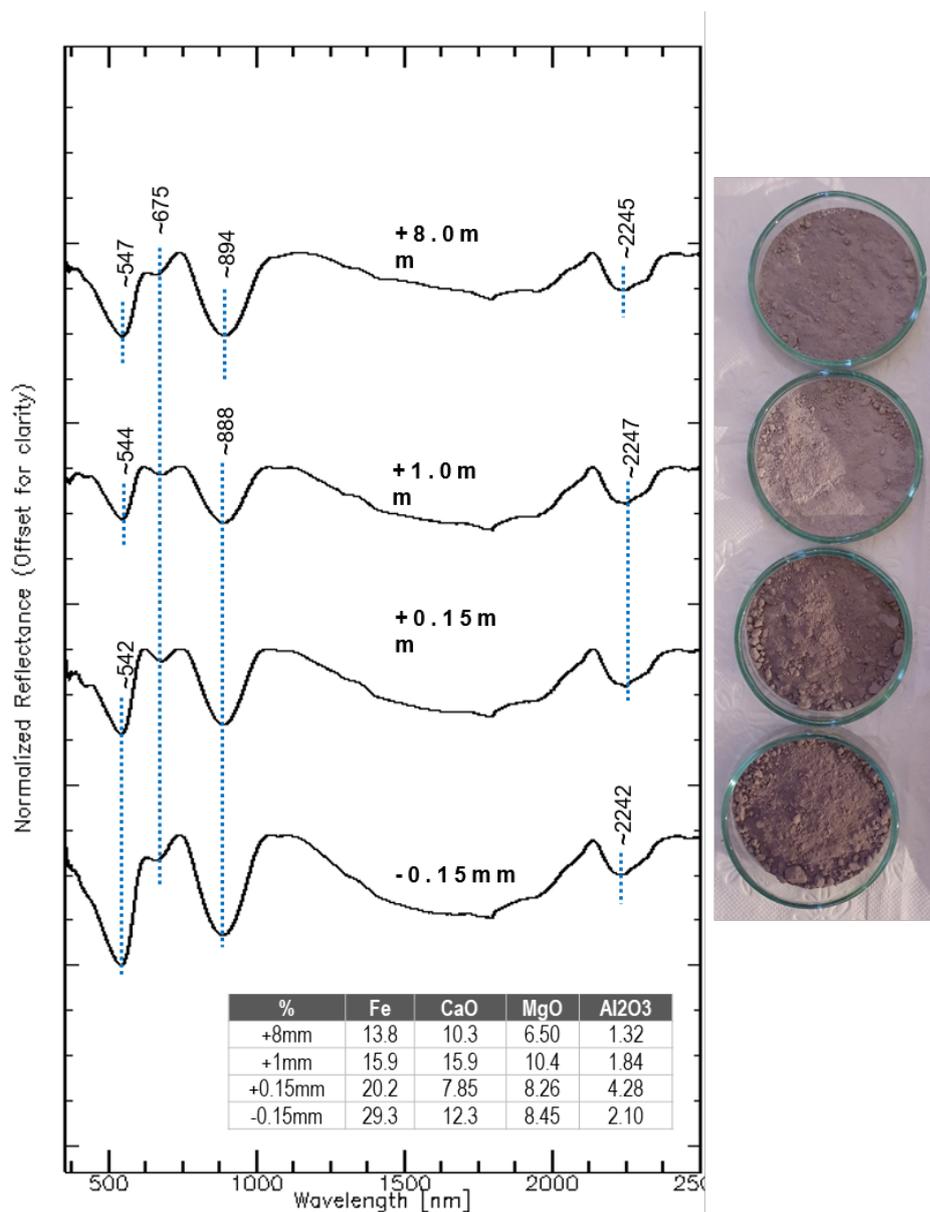
Fonte: Os Autores (2020).

Figura 10: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6465.



Fonte: Os Autores (2020).

Figura 11: Espectros de refletância normalizados através da remoção do contínuo da amostra designada de 6469.



Fonte: Os Autores (2020).