

## **APLICAÇÃO DA ANÁLISE DE AGRUPAMENTO (CLUSTER ANALYSIS) DE DADOS DE DIFRATOMETRIA DE RAIOS-X NO SETOR MINERAL**

Rômulo Simões Angélica<sup>1</sup>

<sup>1</sup> UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ

**RESUMO:** A técnica estatística multivariada de Análise de Agrupamento (Cluster Analysis) é bastante conhecida no tratamento estatístico de dados geológicos, especialmente de resultados de análises geoquímicas, no agrupamento de amostras (Modo Q) ou de variáveis (Modo R), neste último caso, para o estudo de associações geoquímicas. A utilização deste tipo de análise para o agrupamento de difratogramas de raios-x, ou de qualquer outro tipo de espectro, é relativamente recente, e foi desenvolvida pela empresa Panalytical (antiga Philips), no software High Score Plus. Na indústria mineral, no controle de qualidade de matérias primas ou outras aplicações, cada vez mais a difratometria de raios-x vem sendo usada como ferramenta complementar a caracterização química de diferentes materiais, em função da necessidade de determinação e quantificação das fases minerais presentes. E com o desenvolvimento de detectores de estado sólido que permitem coleta de dados em tempo bastante reduzido, o volume de difratogramas gerados tem aumentado substancialmente. Com isso, surge a necessidade de técnicas de tratamento dos dados que agrupem amostras semelhantes (de composição mineralógica similar) e que permitam maior rapidez na interpretação dos dados. Neste trabalho, diferentes exemplos serão utilizados da aplicação desta técnica no setor mineral, de um modo geral. Esta análise permite o agrupamento padrões difratométricos em classes de semelhança, de acordo com a posição dos picos (fases presentes) ou posição + intensidade dos picos (fases + conteúdos). Adicionalmente, variações no “grau de cristalinidade” de um mineral (por exemplo, caulinitas), podem ser facilmente discriminadas. Exemplos em depósitos de caulim e bauxita da região Amazônica serão apresentados. O software permite a utilização/tratamento de um grande número de difratogramas (por ex., maior que 100 amostras), identificando a amostra mais representativa de cada classe além da possibilidade de visualização dos grupos através de dendrogramas e análise dos componentes principais (ACP).

**PALAVRAS-CHAVE:** DIFRAÇÃO DE RAIOS-X; ANÁLISE DE AGRUPAMENTOS; ESTATÍSTICA.