Utilização de análise multivariada plsr e espectroscopia vis_nir na predição de atributos físicos do solo

Franciele Romagnoli (1)
Marcos Rafael Nanni (1)
Carlos Antonio da Silva Junior (1)
Aline de Carvalho Gasparotto (1)
Anderson Antônio da Silva (1)
Mônica Sacioto (1)
Everson Cezar (1)

(1) Universidade Estadual de Maringá (UEM), Avenida Colombro, 5790 –Maringá – Brasil - CEP: 87020900, (44) 3011-1359, franciele_romagnoli@hotmail.com, carlos-junior89@gmail.com, Anderson_agrouem@hotmail.com, alinegaspa@hotmail.com, monicasacioto@gmail.com e rafaelmorenocampos@gmail.com. marcos.nanni@gmail.com, eversoncezar@yahoo.com.br.

Abstract. This study aimed to assess the method of multivariate analysis: chemometric program Parles by PLSR prediction of physical attributes (sand, silt and clay) soil by means of reflectance data from a laboratory spectroradiometer. The areas chosen for the study are located in the northwest of Paraná, in lithosequence located in the transition zone between basalt and sandstone. We collected soil samples characterizing the A and B horizons and these were subjected to physical analysis at the State University of Maringá. The spectral readings were performed on a spectroradiometer in the range 350-2500 nm, enabling the prediction of soil attributes by their spectral response. We adopted two methods for building predictive models, the first was the use of bulk samples (HA HB) for prediction of attributes. The second methodology is the separation of the HA samples (0-0.20 m) and HB (0.80 - lm) and consequently, obtaining a prediction model for the horizons separated diagnostically. Aggregate samples made it possible to obtain prediction models with better performance than the models set by the samples belonging to the horizons A and B. Models to predict the silt did not show good performance, both in the calibration and in validation.

Palavras-chaves: Spectroradiometry, prediction model, chemometrics and PLSR. Espectrorradiometria, modelos de predição, quimiometria e PLSR.

1. Introdução

O solo é uma mistura de compostos minerais e orgânicos da superfície da terra que serve de substrato para o crescimento das plantas. O pouco conhecimento dessa camada superficial e seu manejo inadequado transformaram solos produtivos em improdutivos. O conhecimento das classes de solos e sua distribuição geográfica é muito importante, tanto para sua conservação, como para a otimização dos sistemas de produção agrícola. Para isto, uma das ferramentas utilizadas para fazer o seu levantamento e reconhecimento é o Sensoriamento Remoto (Moreira, 2007).

O mapeamento detalhado dos atributos dos solos tem, em sua grande maioria, elevado custo (tempo e dinheiro), devido à sua heterogeneidade espacial. Desta forma, a busca por ferramentas de análise que sejam ágeis, de menor custo, precisas e com baixo impacto ambiental é a chave para estudos do solo em larga escala.

Dentre as técnicas de Sensoriamento Remoto utilizadas na agricultura, a espectroscopia de reflectância Vis-NIR, vem sendo muito utilizada para a predição dos atributos do solo. Esta

ferramenta vem apresentando-se como uma técnica atrativa para determinados campos donde se requer análises rápidas com baixo custo.

As técnicas PLSR (Regressão por mínimos quadrados parciais) vem sendo muito utilizada por diversos pesquisadores e vem mostrando ser uma ótima ferramenta para predição dos atributos do solo por meio dos dados espectrais, onde as variáveis preditoras são altamente colineares (Belmonte, 2006).

Uma vez obtido os modelos de calibração para predição dos atributos, pode-se analisar muitas amostras em poucos minutos sem a necessidade de recorrer aos métodos de análises convencionais. Mas, para que esses modelos de estimativa de atributos do solo, utilizando dados espectrais, possam ser utilizados para realizar predições em conjunto com os métodos convencionais, ou que venham a substituí-los, pesquisas deverão ser continuadas para melhorar a precisão e confiabilidade desses modelos de calibração.

Diante disto, o objetivo deste trabalho, foi de estimar atributos físicos do solo por meio de seus dados espectrais e modelagens PLSR *e* verificar seu desempenho no ajuste e validação dos modelos de predição. Outro objetivo foi avaliar se a separação das amostras dos horizontes A e B, para obtenção dos modelos de predição para cada horizonte, diferem quando utilizado as amostras globais (HA+HB).

2. Material e Métodos

As áreas de estudo localizam-se na região noroeste do Estado do Paraná, nos municípios de Iguaraçu, Lobato, Piquirivaí e Santa Mônica. Esses locais foram escolhidos por estarem em uma faixa transicional entre o Basalto e o Arenito apresentando certa porção de material arenítico inconsolidado, cobrindo o leito basáltico. Esta associação de materiais geológicos com variáveis características e diferentes produtos advindos do processo intempérico possibilitou a formação de diversas classes de solos, devido a variação de composição dos minerais presentes no solo.

As coletas de solo com trado tipo holandês foram realizadas nas profundidades de 0-0.2 m, para caracterização de horizontes superficiais, e de 0.8-1.0 m para horizontes subsuperficiais em um total de 156 amostras. As amostras coletadas a campo foram encaminhadas ao laboratório de solos da Universidade Estadual de Maringá para a determinação de areia, silte e argila (Embrapa, 1997).

As leituras espectrais foram realizadas no laboratório de Geoprocessamento e Sensoriamento Remoto Aplicado ao Meio Ambiente, do Departamento de Agronomia da Universidade Estadual de Maringá. O equipamento utilizado foi um espectrorradiômetro FieldSpec 3, com intervalo espestral de 350 – 2500 nm (Vis-NIR) e resolução espectral de 3nm até 700 e de 30 nm de 700 a 2500 nm, presente em ambiente controlado de umidade, luminosidade e temperatura.

Para ajustar um modelo de calibração e posterior validação para predição dos atributos do solo foi utilizado o Software ParLes 3.1, proposto por Viscarra Rossel (2008). Para tanto, foi utilizada a técnica PLSR, por meio da validação cruzada. Durante a etapa de calibração, a modelagem PLS utiliza as informações da matriz de dados X e matriz de concentração Y, obtendo-se novas variáveis denominadas, variáveis latentes (fatores PLS).

Para a fase de calibração dos modelos de predição por meio do PLSR foram selecionadas aleatoriamente 2/3 das curvas espectrais junto com seus respectivos valores de atributos determinados em laboratório para ajuste do modelo restando 1/3 das amostras.para.posterior.validação. Proporções semelhantes de divisão entre amostras de calibração e validação foram utilizadas por Reeves et al. (1999), McCarty et al (2002), Shepherd e Walsh (2002) e Islam et al. (2003). A validação cruzada foi realizada a fim de se obter menores números de fatores PLS que gerassem modelos com maiores R2 e RPD e menores valores de RMSE, parâmetros estes que são indicadores da qualidade dos modelos.

De acordo com Sayes et al. (2005), valores de R² entre 0,50 e 0,65 indicam a possibilidade de discriminação de altas e baixas concentrações no modelo, enquanto que valores de R² de 0,66 a 0,80 indicam modelos aceitáveis, de 0,81 a 0,90 indicam modelos bons, e por fim, valores maiores que 0,9 indicam excelentes modelos de predição.

De acordo com Dunn et al. (2002) e Chang et al. (2001), valores de RPD acima de 2,0 já pode ser considerado como modelos excelentes, de 1,4 à 2,0 modelos aceitáveis e menor que 1,4 modelos não confiáveis. O uso do R² juntamente com o RPD, como relatado por Williams (2001), são os indicadores mais importantes para avaliação da qualidade das análises por meio da Vis-NIR.

As predições dos atributos do solo foram realizadas de duas maneiras. A primeira, 104 amostras (horizontes A e B misturados) foram utilizadas na calibração dos modelos e 52 amostras utilizadas na validação. A segunda metodologia utilizada para predição, foi a separação das amostras do horizonte A e do horizonte B, de forma a predizer os atributos em suas respectivas camadas, utilizando-se 52 amostras para a calibração dos atributos para o horizonte A e B e 26 amostras para validação dos modelos.

A segunda opção é importante para fins de classificação do solo, devido à necessidade de obter os teores dos atributos em seus horizontes diagnósticos.

3. Resultados e Discussão

3.1 Obtenção dos modelos a partir das amostras globais

Nesta fase utilizou-se o conjunto de amostras coletadas dos horizontes A e B (amostras globais) para construção dos modelos de predição dos atributos do solo.

Melhores modelos foram obtidos para os atributos areia ($R^2 = 0.88$ e RPD = 2.86) e argila ($R^2 = 0.87$ e RPD = 2.75) como mostrado na Tabela 1. De acordo com Dunn et al. (2002); Chang et al. (2001) e Saeys et al. (2005) os modelos podem ser classificados como bons e excelentes. Estes resultados foram superiores aos encontrados por Islam et. al. (2003), que utilizaram, como análise multivariada, a PCR para horizontes superficiais e subsuperficiais na Austrália obtendo, para o modelo de calibração, R^2 de 0.72 e 0.82 para areia e argila respectivamente.

Tabela 1. Fatores PLS, R², RMSE e RPD dos modelos para os atributos avaliados

Atributos	Fatores PLS	R^2	RMSE	RPD
Areia (%)	10	0,88	5,64	2,86
Silte (%)	8	0,68	1,05	1,77
Argila (%)	6	0,87	5,39	2,75

O silte apresentou para o modelo de predição, R² e RPD 0,68 e 1,77 respectivamente (Tabela 1), sendo os modelos considerados como aceitáveis (Dunn et al., 2002; Chang et al., 2001 e Sayes et al., 2005).

3.2 Obtenção dos modelos para predição dos atributos dos horizontes A e B separadamente

Nesta fase utilizou-se o conjunto de amostras coletadas dos horizontes A e B (amostras globais) para construção dos modelos de predição dos atributos do solo.

A capacidade da espectrorradiometria predizer as propriedades físicas dos solos avaliados está resumida na Tabela 2.

Tabela 2. Fatores PLS, R², RMSE e RPD dos modelos para os atributos avaliados dos horizontes A e B

Atributos	Fatores PLS	R^2	RMSE	RPD
		HA		
Areia (%)	6	0,81	5,50	2,27
Silte (%)	9	0,51	1,36	1,40
Argila (%)	5	0,80	4,93	2,22
		HB		
Areia (%)	6	0,84	6,53	2,54
Silte (%)	2	0,54	1,07	1,49
Argila (%)	5	0,86	5,77	2,66

.

Os atributos areia e argila apresentaram os melhores modelos de predição para os dois horizontes analisados, sendo considerados como bons $(0.80 < R^2 < 0.86)$ e excelentes (2.22 < RPD < 2.66) (Dunn et al. 2002, Chang et al. 2001 e Sayes et al. 2005).

Bilgili et al. (2010) trabalhando com amostras de 0-0.30 m em uma fazenda experimental na província de Torak, no norte da Turquia obtiveram, para os modelos de predição da areia e argila, R^2 de 0.81 e 0.82 respectivamente.

Para as propriedades físicas avaliadas, os melhores desempenhos foram encontrados para os modelos do HB, que obtiveram maiores R² e RPD (Tabela 2).

Os modelos de predição obtidos pelas amostras globais foram superiores para todos os atributos do solo quando comparado com os modelos ajustado para os horizontes A e B, pois obtiveram maiores valores de R² (variando de 0,68 a 0,88) e RPD (variando de 1,77 a 2,86).

As Tabela 3 e 4 apresentam o teste F e o test t para análise das variâncias dos conjuntos de amostras dos horizontes A, B e AB (amostras globais). O test t foi realizado a um nível de 5% de significância.

Tabela 3. Análise de variância dos atributos do solo para amostras do horizonte A, B e AB

	FV	GL	SQ	QM	FC	<i>PrFc</i>
Areia	Tratamentos	2	3350,82	1675,41	7,31	0,000
	erro	309	70733,21	228,91		
	Total	311	74084,03			
	FV	GL	SQ	QM	FC	<i>Pr>Fc</i>
Silte	Tratamentos	2	8,30	4,15	1,25	0,28
	erro	309	1023,53	3,31		
	Total	311	1031,84			
	FV	GL	SQ	QM	FC	<i>Pr>Fc</i>
Argila	Tratamentos	2	3692,82	1846,41	9,58	0,0001
	erro	309	56530,28	192,65		
	Total	311	63223,11			

Analisando a Tabela 3, verificou-se que o único atributo do solo que não apresentou diferença significativa em suas variâncias (à um nível de 5% de probabilidade) entre as amostras dos horizontes A, B e AB foi o silte. O restante dos atributos mostrou-se estatisticamente diferentes em pelo menos um arranjo de amostras ($A \neq B$, $A \neq AB$ ou $B \neq AB$). Por meio da Tabela 4, é possível saber quais arranjos de amostras diferiram entre si.

Tabela 4. Test t dos atributos do solo para comparar médias dos horizontes A, B e AB

	Tratamentos	Médias	Resultados do teste t ¹
	В	64,07	a
Areia	AB	68,71	b
	A	73,34	c
	Tratamentos	Médias	Resultados do teste t
	В	2,65	a
Silte	AB	2,88	a
	A	3,11	a
	Tratamentos	Médias	Resultados do teste t
	A	23,53	a
Argila	AB	28,40	b
	В	33,26	c

Para os atributos areia e argila houve diferença estatística (a um nível de 5% de significância) para todos os arranjos de amostras, ou seja (A≠B, A≠AB e B≠AB). O melhor desempenho dos modelos de predição ajustados por meio das amostras globais para os atributos areia e argila, possivelmente ocorreu devido à diferença entre a variância e a quantidade de dados utilizados para obtenção dos modelos, já que os arranjos de amostras utilizadas para analisar os dados (amostras HA, HB e HA+HB) diferiram entre si, e o número de amostras utilizadas para ajustar os modelos foram o dobro quando comparada com os modelos obtidos para os horizontes A e B.

3.3 Validação dos modelos de predição com as amostras globais

Depois de obtido os modelos para predições dos atributos do solo, foram realizadas suas validações, a fim de testar a sua capacidade de previsão. Essa validação foi realizada utilizando as amostras que não entraram na fase de construção do modelo. Para isto, foram utilizadas 52 amostras correspondendo, portanto, a um terço das amostras totais.

A validação dos modelos para predição dos atributos realizados pelo método PLSR, estão apresentados na Tabela $5\,$

Tabela 5. R², RMSE e RPD resultantes da validação dos modelos de predição

Atributos	R^2	RMSE	RPD
Areia (%)	0,80	5,56	2,13
Silte (%)	0,26	1,55	1,11
Argila (%)	0,79	6,01	2,18

O modelo validado para a estimativa do silte não apresentou bom desempenho na fase de validação ($R^2=0.26$ e RPD de 1,11) (Tabela 5), valores estes, discrepantes dos obtidos na fase de calibração ($R^2=0.68$ e RPD = 1,77 – Tabela 1). Ainda assim, se mostrou superior ao encontrado por Islam et. al. (2003) que, utilizando a técnica multivariada PCR, obtiveram R^2 de 0,05 e RPD de 0,9.

Melhores desempenhos na fase de validação foram obtidos para os atributos areia $(R^2 = 0.80 \text{ e RPD} = 2.13)$, argila $(R^2 = 0.79 \text{ e RPD} = 2.18)$. Na fase de obtenção dos modelos (calibração), esses atributos também tiveram melhores desempenhos (Tabela 1).

Waiser et al. (2007), trabalhando com solos do Texas obtiveram, para a argila, R² superior ao encontrado neste trabalho (0,84). Ao contrário, Islam et al. (2003) obtiveram para a areia, R² de 0,53 e RPD de 1,5 e para a argila, R² de 0,72 e RPD de 1,9. Valores semelhantes foram obtidos por Brown et al. (2006) que encontraram, para a argila, R² de 0,73. Summers et al.

(2006) trabalhando na Austrália obtiveram, para os modelos da argila, R² de 0,66 e RPD de 2,0 respectivamente.

Foi realizado o test t, entre os dados observados e determinados em laboratório para avaliar se existe ou não diferença entre as médias de variâncias dos dados, conforme apresenta a Tabela 6. O test t foi realizado no SAS (SAS, 2001) utilizando o procedimento t test.

Tabela 6. Teste t¹ aplicado às médias dos atributos estimados e observados

	Areia	Silte	Argila
Observado	68,20 a	3,14 a	28,85 a
Estimado	68,30 a	2,78 b	28,38 a

¹ Letras iguais significa que os dados não diferem entre si e letras diferentes significa a diferença entre as médias de variâncias (p<0,05).

Analisando a Tabela 6, podemos concluir que a utilização das equações para predição dos atributos do solo, possibilitou a estimativa de valores estatisticamente semelhantes aos determinados em laboratório para a areia e argila. Para o silte, as médias entre observados e estimados foram estatisticamente diferentes (a um nível de 5% de significância).

3.4 Validação dos modelos de predição separando os horizontes A e B

A estimativa dos atributos do solo por meio da sua resposta espectral, também foi realizada para os horizontes A e B utilizando, para validação, 26 amostras de solo. Os R², RMSE e RPD, que são utilizados para avaliar a performance dos modelos de predição, estão apresentados na Tabela 7.

Tabela 7. R², RMSE RPD, resultante da validação dos modelos de predição realizado pelo ParLes quando as amostras dos horizontes A e B foram analisadas separadamente

1			
Atributos	R^2	RMSE	RPD
		HA	
Areia (%)	0,77	6,78	2,10
Silte (%)	0,58	1,30	1,47
Argila (%)	0,82	5,30	2,38
_		HB	
Areia (%)	0,75	8,12	2,0
Silte (%)	0,27	1,64	1,10
Argila (%)	0,63	9,0	1,68

Analisando a Tabela 7, pôde-se observar que a validações dos modelos de predição do horizonte A foram superiores às validações realizadas paras os atributos do horizonte B. Para o horizonte A, a areia e a argila obtiveram RPD acima de dois e R² variando de 0,77 a 0,82, contra o horizonte B, que obteve RPD = 2,0 e R² 0,75, somente para a validação da areia, sendo esses índices, os maiores obtidos dentre as validações realizadas para o horizonte.

De acordo com Morgano (2005) discrepâncias entre as correlações obtidas para a calibração e validação sugerem que a calibração pode ter sido ajustada com ruídos nos dados espectrais.

Menores R², foram obtidos por Viscarra Rossel et al. (2006) que, trabalhando com solos do HA na Austrália e utilizando a faixa espectral NIR (700 -2500 nm), encontraram para areia, silte e argila R² de 0,59, 0,41 e 0,60 respectivamente. Quando utilizaram somente a faixa Vis (400-700 nm), esses valores reduziram substancialmente.

Já, Chang et al. (2001), usando PCR, encontraram maiores R^2 e RPD para a areia ($R^2 = 0.82$ e RPD = 2,32) e silte ($R^2 = 0.84$ e RPD = 2,52), mas não para a argila ($R^2 = 0.67$ e RPD = 1,71).

O mesmo ocorreu com um trabalho realizado por Wetterlind et al. (2010), no qual obtiveram, para a areia e o silte, maiores R² (0,93 e 0,73) e RPD (3,4 e 1,8), mas não para a argila, encontrando R² de 0,75 e RPD de 2,3, contra 0,82 e 2,38 respectivamente, encontrados neste trabalho.

Depois de realizada a validação dos modelos de predição, foi aplicado o teste t, para analisar a igualdade entre as médias dos dados estimados pelo método PLSR e determinado em laboratório, como apresenta a Tabela 8.

Tabela 8. Teste t¹ aplicado às médias dos atributos observados (método convencional) e estimados pelo Parles, quando as amostras dos horizontes são analisadas separadamente.

	Areia	Silte	Argila
		HA	_
Observado	72,96 a	3,19 a	23,84 a
Estimado	73,69 a	3,14 a	24,38 a
		HB	
Observado	64,76 a	2,84 a	32,38 a
Estimado	65,49 a	2,21 b	31,16 b

¹ Colunas com letras iguais representam médias estatisticamente semelhantes a um nível de 5% de significância.

Analisando a Tabela 8, para o HA, verifica-se que a utilização das equações de predição pelo método PLSR possibilitou a estimativa de valores estatisticamente semelhantes aos determinados em laboratório para a areia, silte e argila. Em relação a camada subsuperficial (HB), os atributos a areia apresentou médias semelhantes entre os dados determinados em laboratório com os estimados pelas equações de predição.

4. Conclusões

Foi possível determinar modelos de predição para os atributos do solo por meio de sua resposta espectral para o método de Regressão por mínimos quadrados parciais (PLSR) pelo programa ParLes.

Os modelos gerados (calibrações) e as validações para as amostras globais foram superiores que os modelos gerados para os horizontes A e B.

Dentre os atributos estudados, os modelos para silte foram os que apresentaram pior desempenho, tanto na calibração quanto na validação.

Referências Bibliográficas

Belmonte, R.Z. Evaluación de la calidad ambiental en suelos de la provincia de alicante desarrollo y aplicación de diferentes técnicas. 2006. tese (doutorado). elche. 2006.

Chang, C.; Laird, D. A.; Mausbach, M. J.; Hurburg Junior, C. R. Near infrared reflectance spectroscopy – principal components regression analyses of soil properties. **Soil Science Society of American Journal**, v.25, n.2, p. 480-490, 2001.

Dunn, B.W.; Beecher, H.G.; Batten, G.D.; Ciavarella, S. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy for soil analysis — a case study from the riverine plain of south-eastern Australia. **Australian Journal of Experimental Agriculture**, v.42, p.607-614, 2002.

Embrapa. **Manual de métodos de análises de solo**. 2.ed. rio de janeiro: ministério da agricultura e do abastecimento, 1997.

Islam, K., Singh, B., McBratney, A.B., simultaneous estimation of various soil properties by ultra-violet, visible and near-infrared reflectance spectroscopy. **Australian Journal of Soil Research**, v. 41, p. 1101–1114, 2003.

McCarty, G. W., Reeves, J. B., Reeves, V. B., Follett, R. F., Kimble, J. M., Mid-infrared and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for soil carbon measurements. **Soil Science Society of America Journal,** v. 66, p. 640–646, 2002.

Moreira, M. A. Fundamentos de sensoriamento remoto e metodologias de aplicação. Viçosa: UFV, 2007.

Morgano, M. A. **Aplicação do métodos quimiométrico em análise de alimentos**. tese (doutorado). Universidade de Campinas, Campinas, 2005.

Muller, E., Décamps, H. **Modeling** soil moisture – reflectance. **Remote Sensing of Environment.**, v.76, p. 173-180, 2001

Reeves, J. B., McCarty, G. W., Meisinger, J. J., Near infrared reflectance spectroscopy for the analysis of agricultural soils. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, p. 179–193, 1999.

Sayes, W.; Mouazen, A. M.; Ramon, H. Potencial for onsite and online analysis of pig manire using visible and near infrared reflectance spectroscopy. **Biosystems Engineering**, v. 91, p. 393-402, 2005.

Shepherd, K.D., Walsh, M. G. Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. **Soil Science Society of America Journal.** v. 66, p. 988–998. 2002.

Viscarra Rossel, R. A. Parles: software for chemometric analysis of spectroscopic data. chemometrics intelligent laboratory. **Systems**, v.90, p.72-83, 2008.

Viscarra Rossel, R.; Walvoot, D. J. J.; McBratney, A. B.; Janic, l. J.; Skjemstad, J. O. Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. **Geoderma**, v.131, p. 59-75, 2006.

Wetterlind, J.; Stenberg, B.; Soderstrom, M. Increased sample point density in farm soil mapping by local calibration of visible and near infrared prediction models. **Geoderma**. V. 156, p. 152-160, 2010.

Williams, P. C. Implementation of near infrared technology. in: near infrared technology in the agricultural and food industries. **American Association of Cereal Chemist**, p. 145-169, 2001.