

Predição do Carbono Orgânico do solo por meio do Sensoriamento Remoto e duas técnicas de Análise multivariada

Franciele Romagnoli¹
Marcos Rafael Nanni¹
Everton da Silva Neiro¹
Roney Berti de Oliveira¹
Marcelo Luiz Chicati¹
Everson Cezar¹
José Alexandre Melo Demattê²

¹ Universidade Estadual de Maringá - UEM
Avenida Colombo, 1790 – Jardim Universitário – Maringá – PR – CEP: 87020-900
Franciele_romagnoli@hotmail.com
mrnanni@uem.br
esneiro@gmail.com
roneyberti@yahoo.com.br
mlchicati@yahoo.com.br
eversoncezar@yahoo.com.br

² Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz - ESALQ
Rua Dias, 11 – Piracicaba – SP – CEP: 13418-900
jamdemat@esalq.usp.br

Abstract. This study aimed to evaluate two methods of multivariate analysis: PLSR by chemometric program Parles and Multiple linear regression with stepwise variable selection by SAS to predict the soil organic carbon by means of reflectance data from a laboratory spectroradiometer. 156 samples were collected in northwestern Paraná and those undergoing chemical analysis in soil laboratory at the State University of Maringá. The spectral readings were performed on a spectroradiometer in the range 350-2500 nm (Vis-NIR spectroscopy), allowing construction of a prediction model for soil organic carbon through its spectral response. The Parles and SAS showed similar results for the calibration phase of the model prediction. For the validation phase, the PLSR technique overcame Stepwise regression.

Palavras-chave: Vis_NIR Spectroscopy, Multivariate Analysis, Stepwise Regression, PLSR and Organic Carbon. Espectroscopia Vis_NIR, Análise multivariada, Regressão Stepwise, PLSR e Carbono Orgânico.

1. Introdução

A agricultura é um dos setores que mais influenciam no desenvolvimento do Brasil, sendo uma das principais bases da sua economia. O Brasil se apresenta como um dos principais produtores de alimentos do mundo, exportando em 2011, cerca de US\$ 88 bilhões em alimentos in natura e industrializados. Com a nova demanda mundial por alimentos, ligado com o crescimento populacional (atingindo 7 bilhões de habitantes em 2011 e previsão de 9,1 bilhões para 2050 - ONU), a otimização dos sistemas de produção agrícola deve ser tratado de forma pormenorizada.

O teor de Carbono Orgânico (C.O.) está diretamente relacionado com a qualidade do solo, tornando-se um condicionante do mesmo, atuando em mecanismos que permitem a manutenção da sua capacidade produtiva e sua conservação. Porém, a análise laboratorial

C.O. no solo é custosa e demorada, além de gerar resíduos químicos que podem causar sérios problemas para o meio ambiente. Por isso novas tecnologias devem ser estudadas e desenvolvidas afim de auxiliar ou até mesmo substituir a análise convencional de laboratório.

Dentre as técnicas de Sensoriamento Remoto utilizadas na agricultura, a espectroscopia de reflectância do Visível e do Infravermelho Próximo (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. Além disso, outra característica interessante desta técnica é a sua multiplicidade, já que, uma vez que se obtém o espectro é possível, a partir deste, estimar vários parâmetros de uma só vez (BEN DOR e BANIN, 1995; SHEPHERD e WALSH, 2002).

A utilização dos dados espectrais na quantificação dos atributos dos solos necessita de técnicas estatísticas para discriminar a resposta dos atributos do solo a partir das características espectrais (VISCARRA ROSSEL et al., 2006). Para isto, tem se utilizado análises multivariadas como PLSR, PCR, MARS, Regressão linear múltipla, dentre outras.

As técnicas PLSR e a regressão linear múltipla com seleção de variáveis *Stepwise* vem sendo muito utilizadas por diversos pesquisadores. A regressão PLSR foi introduzida por Word et al., (1975) 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). A técnica de seleção de variáveis *Stepwise*, realizada por meio da regressão linear múltipla, seleciona as variáveis preditoras em detrimento do coeficiente de determinação entre as variáveis dependentes e independentes. Por serem duas das técnicas de análise multivariadas mais utilizadas para predição dos atributos do solo, torna-se importante a análise comparativa entre elas, já que não se encontra, na literatura, trabalhos comparando-as.

Diante disto, o objetivo deste trabalho, foi de estimar o C.O. do solo por meio de seus dados espectrais e modelagens PLSR e regressão linear múltipla juntamente com o método de seleção de variáveis *Stepwise* e verificar seus desempenhos no ajuste e validação dos modelos de predição, bem como saber qual método multivariado oferece melhores resultados, quando comparado com as análises convencionais conduzidas em laboratório.

2. Metodologia de trabalho

As coletas de solo foram realizadas na região noroeste do Estado do Paraná. Essas amostras foram coletadas com um trado tipo holandês e depois foram condicionadas em sacos plásticos e encaminhadas ao laboratório de solos da Universidade Estadual de Maringá. Foram realizadas análises químicas de rotina, na determinação do pH, acidez ativa e de reserva, bases trocáveis (cálcio e magnésio e potássio), capacidade de troca catiônica (CTC), fósforo (P), carbono orgânico (C.O.), saturação por bases (V%) e saturação por alumínio (m%), conforme 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 espectral de 350 – 2500 nm (Vis-NIR) e resolução espectral de 3nm até 700 e de 30 nm de 700 a 2500nm, presente em ambiente controlado de umidade, luminosidade e temperatura.

O sensor ótico presente na ponta da fibra foi colocado em posição vertical a 8 cm de distância da amostra, sendo medida a luz refletida numa área aproximada de 2 cm² no centro da amostra. A fonte de iluminação utilizada foi uma lâmpada halógena de 650 W, com feixe não colimado para o plano visado, sendo posicionada a 35 cm da amostra e com um ângulo zenital de 30°.

Foram realizadas, para cada amostra, três leituras com o sensor girando-se a placa de petri a 120° entre as leituras, obtendo melhor varredura da amostra, como realizado por (Nanni, 2000). Para cada uma das três leituras, o equipamento fez 50 leituras, gerando a curva espectral média de cada amostra.

Para ajustar um modelo de calibração e posterior validação para predição do C.O., foram utilizados os Softwares, ParLes 3.1, proposto por Viscarra Rossel, (2008) e o Statistical Analysis System (SAS) (SAS, 2001).

A primeira técnica multivariada utilizada para construção dos modelos de predição foi o programa ParLeS versão 3.1 (VISCARRA ROSSEL, 2008). Para tanto, foi utilizada a técnica PLSR, introduzida por Word (1975), por meio da validação cruzada. A PLSR é uma técnica de análise multivariada, muito utilizada em análises de predição por meio dos dados espectrais, no qual as variáveis preditoras são altamente colineares (BELMONTE, 2006). 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).

O segundo método utilizado para estimativa dos atributos do solo por meio dos dados espectrais, foi a regressão linear múltipla juntamente com o método de seleção de variáveis *Stepwise*, realizado pelo programa estatístico SAS. Todos os comprimentos de onda do espectro Vis-NIR (350-2500 nm) foram inseridos na rotina para uma possível seleção *Stepwise*.

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 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).

De acordo com Viscarra Rossel et al., (2006), ao ajustar um modelo utilizando-se PLSR, pretende-se encontrar o menor número possível de fatores PLS necessários para explicar a maior parte da variação entre as variáveis. Durante a validação cruzada (*cross validation*), $n-1$ amostras foram utilizadas para a calibração do modelo de predição. A validação cruzada foi realizada a fim de se obter menores números de fatores PLS que gerassem modelos com maiores R^2 e RPD e menores valores de RMSE, parâmetros estes que são indicadores da qualidade dos modelos.

A calibração obtida por meio da regressão *Stepwise* realizada pelo SAS (SAS, 2001), estabelece, passo a passo, o modelo cujas variáveis dependentes tenham maior coeficiente de determinação com as variáveis independentes. O sistema apresenta equações para cada atributo do solo selecionado na análise, determinando a correlação deste em cada comprimento de onda. Assim, cada comprimento terá um fator na equação, de acordo com a contribuição do elemento nessa faixa. As faixas onde o elemento não obtiver correlação, não aparecerão na equação. A avaliação qualitativa dos modelos de predição obtidos pela regressão *Stepwise* serão realizados por meio do R^2 e RMSE dos modelos.

Estes parâmetros estatísticos são comumente utilizadas para avaliar técnicas de espectroscopia, portanto, serão utilizados na avaliação da qualidade dos modelos para predição C.O.

De acordo com Sayes et al. (2005), valores de R^2 entre 0,50 e 0,65 indicam a possibilidade de discriminação de altas e baixas concentrações no modelo, enquanto que valores de R^2 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 R^2 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.

3. Resultados e Discussão

3.1. Fase de Calibração dos modelos de predição

3.1.1. Parles – Regressão por mínimos quadrados parciais

Por meio da Tabela 1, pôde-se analisar que o modelo de calibração do C.O. indicou apenas a possibilidade de discriminação de altas e baixas concentrações e modelagem não confiável para predição ($R^2 = 0,44$ e $RPD = 1,34$) (SAYES et al., 2005).

Tabela 1. Fatores PLS, R^2 , RMSE e RPD dos modelos para o Carbono Orgânico

| Atributo | Fatores PLS | R^2 | RMSE | RPD |
|-----------------------------|-------------|-------|------|------|
| C.O. (g dm^{-3}) | 8 | 0,44 | 2,59 | 1,34 |

3.1.2. SAS – Regressão *Stepwise*

O modelo de predição do C.O., também foi ajustado utilizando o SAS (SAS, 2001), por meio do procedimento REG com a opção *Stepwise* (Tabela 2). O modelo apresentou quais variáveis independentes (comprimentos de onda) foram selecionadas pelo método *Stepwise* para ajuste do modelo de predição.

Tabela 2. Equação de regressão múltipla obtida pelo método *Stepwise* para predição do Carbono Orgânico do solo

| Atributo | Equação de calibração ¹ | R^2 | RMSE |
|-----------------------------|---|-------|------|
| C.O. (g dm^{-3}) | $\text{C.O} = 15,345 + 153,935 * c578 - 166,400 * c648$ | 0,28 | 2,99 |

¹ significativo à 5%, c = comprimento de onda.

Analisando a Tabela 2, para a calibração do modelo de predição do C.O., não foi possível ajustar um modelo satisfatório ($R^2 = 0,28$) (SAYES et al, 2005).

Para comparar a habilidade dos dois métodos utilizados na construção dos modelos de predição, foi realizada a análise do R^2 e RMSE dos mesmos. Para o C.O., o Parles ajustou um modelo, cujo R^2 e RMSE foi maior e menor respectivamente comparados com o SAS.

Mas, conforme a Tabela 3, o teste t possibilitou a análise entre as médias das variâncias dos valores estimados pelos dois métodos.

Tabela 3. Teste t¹ aplicado aos valores estimados pelos dois métodos estatísticos

| Método multivariado | C.O ¹ |
|---------------------|------------------|
| SAS | 6,04 a |
| Parles | 6,03 a |

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

Verifica-se, portanto, que mesmo que a regressão PLSR tenha apresentado coeficiente de determinação superior ao obtido pela regressão *Stepwise*, estes não foram suficientemente maiores para diferirem sobre as médias de variância dos valores estimados pelos dois métodos estatísticos, no processo de construção dos modelos de predição.

A faixa espectral do visível (400-700 nm) foi muito importante para a obtenção do modelo de predição do C.O, sendo esta responsável pela leitura de cor do solo. A cor do solo é um atributo facilmente determinado, e sua importância se dá pelo fato de que a matéria orgânica e os óxidos de ferro estão associados a ela (POST et al., 1993).

Krishman et al. (1980), ao estudarem a reflectância espectral de solos para identificar comprimentos de onda mais adequados para prever o conteúdo de matéria orgânica do solo, concluíram que a região do visível proporcionou as melhores informações. Isso também ocorreu neste trabalho, no qual as bandas c578 e c648 foram as mais importantes para predição do C.O..

3.2. Fase de validação dos modelos de predição

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.

3.2.1. Parles – Regressão por mínimos quadrados parciais

A validação do modelo para predição do C.O. realizado pelo método PLSR, está apresentado na Tabela 4.

Tabela 4. R², RMSE e RPD resultantes da validação do modelo de predição

| Atributos | R ² | RMSE | RPD |
|----------------------------|----------------|------|------|
| C.O. (g dm ⁻³) | 0,64 | 2,41 | 1,67 |

Para a validação do modelo de predição do C.O., o R² e RPD obtidos (0,64 e 1,67), foram superiores aos encontrados por Summers et al. (2011), que obtiveram, para o modelo, R² de 0,57 e RPD de 1,8. No entanto, eles foram inferiores, aos obtidos por Islam et al. (2003) que encontraram R² e RPD de 0,76 e 1,7 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 5. O test t foi realizado no SAS (SAS, 2001) utilizando o procedimento t test.

Tabela 5. Teste t¹ aplicado às médias dos atributos estimados e observados

| Método multivariado | C.O |
|---------------------|--------|
| Observado | 6,67 a |
| Estimado | 6,47 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 5, 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 o C.O..

3.2.2. SAS – Regressão Stepwise

A Tabela 6 apresenta a validação do modelo de predição do C.O.

Tabela 6. R^2 referente a validação do modelo de calibração realizada pelo procedimento *proc reg – stepwise* do Sas

| Atributos | R^2 da validação |
|-----------------------------|--------------------|
| C.O. (g dm^{-3}) | 0,43 |

A validação para o modelo de predição do C.O. ($R^2 = 0,43$), não apresentou bom desempenho, o que já era esperado, pois o C.O. não possibilitou o ajuste de um modelo de calibração confiável ($R^2 = 0,28$).

A validação dos modelos apresentou discrepância quando comparado com a fase de calibração (que obteve menor R^2). 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. Como não foi realizado nenhum tipo de tratamento nos espectros antes da construção dos modelos de predição, como no Parles, isso pode ter ocorrido com a modelagem obtida pelo SAS.

A validação do modelo realizado pelo Parles, em comparação com a validação realizada pelo SAS, (RMSE e o R^2) apresentou melhor desempenho.

Melhor validação foi obtida quando utilizado o programa ParLes (por meio da análise do RMSE e o R^2). A técnica PLSR se mostrou melhor preditora na fase de validação quando comparada com o procedimento *proc reg* e função *stepwise* realizada pelo SAS. De acordo com Bilgili et al. (2010), a técnica multivariada PLSR, é o método mais utilizado na calibração e validação da predição de atributos do solo, utilizando sua reflectância, devido sua superioridade sobre os métodos convencionais em lidar com a multicolinearidade dos dados.

Para verificar se as médias das variáveis respostas estimadas diferem das médias determinadas em laboratório, foi realizado o teste t. A Tabela 7 apresenta o teste t da média dos dados à um nível de 5% de significância.

Tabela 7. Teste t^1 aplicado à média do C.O. estimado e observado realizado pelo SAS

| Método multivariado | C.O. |
|---------------------|--------|
| Observado | 6,89 a |
| Estimado | 6,20 b |

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 7, podemos verificar que a utilização da equação para predição do C.O do solo, não possibilitou a estimativa de valores estatisticamente semelhantes aos determinados em laboratório, mostrando-se estatisticamente diferentes (a um nível de 5% de significância).

4. Conclusões

Foi possível determinar modelos de predição para os atributos do solo por meio de sua resposta espectral para os dois métodos utilizados: Regressão por mínimos quadrados parciais (PLSR) pelo programa ParLes proposto por Viscarra Rossel, (2008) e a regressão linear múltipla com seleção de variáveis Stepwise (SAS, 2001).

Na fase de obtenção do modelo de predição (calibração), os dois métodos analisados apresentaram desempenhos semelhantes.

Na fase de validação dos modelos de predição, a técnica PLSR superou a regressão *Stepwise*.

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.
- BEN-DOR, E., BANIN, A., Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. **Soil Science Society of America Journal**. 59, 364– 372. 1995.
- 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**, Madison, v.25, n.2, p. 480-490, mar/apr. 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** 41, 1101– 1114. 2003.
- KRISHNAN, P. et al. Reflectance technique for predicting soil organic matter. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.44, p.1282-1285, 1980.
- MCCARTY, G.W., REEVES III, 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** 66, 640– 646. 2002.
- MOREIRA, M.A. (2007) **Fundamentos de Sensoriamento Remoto e Metodologias de Aplicação**. 3° ed. 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 Sens. Environ.**, v.76. p. 173-180, 2001
- REEVES III, J.B., MCCARTY, G.W., MEISINGER, J.J., Near infrared reflectance spectroscopy for the analysis of agricultural soils. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, 179– 193. 1999.
- NANNI, M. R. Dados radiométricos obtidos em laboratório e no nível orbital na caracterização e mapeamento dos solos. **Tese (Doutorado)** – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”. Piracicaba, 2000.
- POST D.F. et al. Correlations between field and laboratory measurements of soil color. **Soil Color**. Madison, p.35-49. 1993.
- SAS - INSTITUTE. **SAS, software: user's guide, version 8.2**, Cary, 2001.
- SAYES, W.; MOUAZEN, A.M.; RAMON, H. Potencial for onsite and online analysis of pig manure using visible and near infrared reflectance spectroscopy. **Biosystems Engineering**, Cambridge, v.91, p.393-402, 2005.

SUMMERS, D.; LEWIS, M.; OSTENDORF, B.; CHITTLEBOROUGH, D. Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. **Ecological Indicators**. p. 123-131. 2011.

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

VISCARRA ROSSEL, R. A. ParLeS: Software for chemometric analysis of spectroscopic data. Chemometrics Intelligent Laboratory. **Systems**, Amsterdam, 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**, Amsterdam, v.131, p. 59-75. 2006.

WETTERLIND, J.; STENBERG, BO.; SODERSTROM, M. Increased sample point density in farm soil mapping by local calibration of visible and near infrared prediction models. **Geoderma**. 156. p. 152-160. 2010.

WILLIAMS, P.C. Implementation of near infrared technology. In: Near infrared technology in the agricultural and food industries. Eds Williams, P.C. & Norris, K.H., **American Association of Cereal Chemist**, St. Paul, Minnesota, USA. pp. 145-169. 2001.