

**Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”**

**Pedologia quantitativa: espectrometria VIS-NIR-SWIR e mapeamento digital
de solos**

Leonardo Ramírez López

**Dissertação apresentada para obtenção do título de
Mestre em Agronomia. Área de concentração: Solos e
Nutrição de Plantas**

**Piracicaba
2009**

Leonardo Ramírez López
Engenheiro Agrônomo

Pedologia quantitativa: espectrometria VIS-NIR-SWIR e mapeamento digital de solos

Orientador:
Prof. Dr. **JOSÉ ALEXANDRE MELO DEMATTÊ**

**Dissertação apresentada para obtenção do título de
Mestre em Agronomia. Área de concentração: Solos e
Nutrição de Plantas**

**Piracicaba
2009**

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
DIVISÃO DE BIBLIOTECA E DOCUMENTAÇÃO - ESALQ/USP**

Ramírez-López, Leonardo

Pedologia quantitativa: espectrometria VIS-NIR-SWIR e mapeamento digital de solos /
Leonardo Ramírez-López. - - Piracicaba, 2009.
171 p. : il.

Dissertação (Mestrado) - - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", 2009.
Bibliografia.

1. Agricultura de precisão 2. Espectroscopia infravermelha 3. Mapeamento do solo
4. Pedologia - Métodos estatísticos - Métodos matemáticos 5. Quimiometria 6. Sensoriamento
remoto I. Título

CDD 631.47
R173p

"Permitida a cópia total ou parcial deste documento, desde que citada a fonte – O autor"

DEDICATÓRIA

Dedico o meu trabalho e esforço a minha mãe Elvia, meu pai Celiano, as minhas irmãs (Dianita, MarthaLu e Mafe) as minhas tias e avó e aos filhos que chegaram na minha vida. E à Gilma.

AGRADECIMENTOS

A Deus, pelo dom da vida e por ser abençoado com a minha família.

Ao professor **Dr. José Alexandre Melo Demattê**, pela amizade, orientação, motivação, confiança, paciência e fundamental ajuda, sem a qual não seria possível terminar este trabalho.

Ao professor **Dr. Álvaro Pires da Silva** e à **Comissão do Programa de Pós-graduação em Solos e Nutrição de Plantas** da Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, da Universidade de São Paulo, pela oportunidade concedida.

À Fundação de Amparo à pesquisa do Estado de São Paulo (**FAPESP**) por conceder a bolsa de estudos (proc. n. 07/58656-8) e apoio financeiro essenciais à condução deste trabalho.

Ao professor **Dr. Arnaldo Rodella** pela grande contribuição a este trabalho e a atenção dispensada.

À **Gilma Amparo** pela companhia e seu imenso apoio durante a escrita do trabalho.

Ao **Fabício Terra, Rodnei Rizzo, Suzana Romeiro, Henrique Bellinaso, Marco Bortoletto**, e aos estagiários do **Laboratório de Sensoriamento Remoto**, pela boa amizade e orientação.

Ao professor Dr. **Peterson R. Fiorio** pela informação fornecida.

A todos os **funcionários** do Departamento de Ciência do Solo.

Aos meus pais **Elvia** e **Celiano** às minhas irmãs **Diana Maria, Martha Lucia e Maria Fernanda**, às minhas tias **Lucia, Patricia** e **Eunice** e a minha avó **Rebeca** pelos grandes ensinamentos incentivos e apoio.

Ao **Rodrigo Ruiz** pela sua amizade e apoio no Brasil.

Ao **Jesús H. Camacho** pelo incentivo acadêmico.

A todos aqueles que, de alguma forma, contribuíram pela realização deste trabalho.

SUMÁRIO

RESUMO	11
ABSTRACT	13
1 INTRODUÇÃO.....	15
1.1 Mapeamento de solos, disponibilidade de alimentos e estratégias de ação.....	15
1.2 A visão internacional sobre o tema sensoriamento espectral de solos e sua importância	16
1.3 As vantagens do sensoriamento espectral para fins de estudo de solos	17
Referências	18
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	21
2.1 Pedometria, funções de pedotransferência e sistemas de inferência de solos	21
2.1.1 Mapeamento digital ou preditivo de solos.....	24
2.2 Sensoriamento espectral de solos	29
2.2.1 Características espectrais do solo no VIS-NIR-SWIR-MIR	33
2.2.2 Pedometria baseada na absorção de energia do solo: do enfoque descritivo à quimiometria	34
Referências	35
3 ANÁLISE QUIMIOMÉTRICA DAS RESPOSTAS ESPECTRAIS DO POTÁSSIO E MAGNÉSIO TROCAVEIS NO SOLO	47
Resumo	47
Abstract.....	48
3.1 Introdução.....	48
3.1.1 O uso de fertilizantes no Brasil.....	49
3.1.2 Sensoriamento próximo como ferramenta para a racionalização da adubação	51
3.1.3 Análise de rotina <i>v.s.</i> análise espectral - melhoramento das predições de modelos espectrais de estimativa de atributos do solo	52
3.2 Material e Métodos.....	53
3.2.1 Solos selecionados para o experimento e análise preliminar	53
3.2.2 Sistema de saturação com K e Mg nos solos.....	54
3.2.3 Extração do KCl e MgCl ₂ residuais.....	56

3.2.4 Misturas para a obtenção de níveis diferenciados de saturações de K e Mg no solo	56
3.2.5 Leituras espectrais e químicas dos solos com diferentes níveis de saturações de K e Mg no solo	57
3.2.6 Análise exploratória qualitativa.....	58
3.2.7 Análise quimiométrica.....	59
3.2.7.1 Identificação de <i>outliers</i> nas leituras espectrais e análise química.....	59
3.2.7.2 Identificação e análise dos efeitos do K e do Mg trocáveis sobre a resposta espectral do solo	59
3.2.7.3 Seleção de bandas em amostras de solo obtidas em condições reais de campo e calibração de modelos espectrais de quantificação de K e Mg.....	62
3.3 Resultados e Discussão.....	64
3.3.1 Análise química preliminar	64
3.3.2 Saturação dos solos, com K e Mg	65
3.3.3 Teores de K e Mg atingidos com as misturas de solos.....	67
3.4 Análise espectral exploratória qualitativa.....	70
3.3.4.1 Remoção do contínuo (CR) nos espectros de reflectância das amostras dos tratamentos	72
3.3.5 Análise quimiométrica.....	76
3.3.5.1 Análise por componentes principais (PCA) dos dados espectrais.....	76
3.3.5.2 Análise por projeção sobre estruturas latentes (PLS) ou mínimos quadrados parciais	80
3.3.5.3 Calibração de modelos de quantificação de Mg e K usando as principais bandas importantes encontradas no experimento em amostras obtidas de uma biblioteca espectral.....	82
3.4 Conclusões.....	85
Referências	86
4 EFEITO DO NÚMERO DE AMOSTRAS DE CALIBRAÇÃO NO DESEMPENHO DE MODELOS VIS-NIR-SWIR USADOS NO MAPEAMENTO ESPECTRO-DIGITAL DE ATRIBUTOS DO SOLO	93
Resumo	93
Abstract.....	94
4.1 Introdução.....	95
4.2 Material e Métodos.....	97
4.2.1 Solos e área de estudo.....	97

4.2.2 Amostragem e análise do solo.....	97
4.2.3 Análise espectral.....	98
4.2.4 Identificação de <i>outliers</i> nas leituras espectrais	98
4.2.5 Determinação do número ótimo de amostras para a calibração de modelos de estimativa de atributos	99
4.2.5.1 Seleção de grupos de amostras	99
4.2.5.2 Calibração e validação dos modelos de estimativa	100
4.2.5.3 Determinação do número ótimo de amostras para calibração de modelos.....	102
4.2.6 Modelagem espacial de atributos do solo na camada A usando dados obtidos por sensoriamento próximo	103
4.3 Resultados e Discussão.....	105
4.3.1 Filtragem dos dados.....	105
4.3.2 Descrição dos dados obtidos na análise convencional do solo.....	106
4.3.3 Análise espectral e determinação do número ótimo de amostras para a calibração dos modelos de estimativa	108
4.3.3.1 Espectros de regressão e validação das calibrações dos grupos de amostras de tamanho determinado como ótimo	115
4.3.4 Análise espacial, mapeamento digital e espectro-digital dos atributos da camada A	119
4.3.4.1 O que acontece quando não é utilizada a espectroscopia no mapeamento e a densidade amostral é baixa?	128
4.3.5 Análise aproximada de custos	131
4.4 Conclusões.....	133
Referencias	135
5 TÉCNICAS INTEGRADAS DE SENSORIAMENTO PRÓXIMO, REMOTO E ANÁLISE DE TERRENO NO MAPEAMENTO PREDITIVO DE CLASSES DE SOLOS	141
Resumo	141
Abstract.....	142
5.1 Introdução.....	143
5.2. Material e Métodos.....	146
5.2.1 Caracterização da área de estudo e amostragem de solos	146
5.2.2 Mapeamento tradicional de solos - obtenção dos mapas reais de solos	147

5.2.3 Estratégia de mapeamento digital.....	147
5.2.3.1 Base de dados utilizada.....	147
5.2.3.2 Etapas da predição digital das classes de solo.....	147
5.2.3.3 Avaliação da qualidade dos mapas digitais gerados.....	151
5.3. Resultados e Discussão.....	152
5.3.1 Mapas reais de solos.....	152
5.3.2 Estratégia de mapeamento digital do solo.....	155
5.4 Conclusões e considerações finais.....	165
Referências	166

RESUMO

Pedologia quantitativa: espectrometria VIS-NIR-SWIR e mapeamento digital de solos

Para a avaliação das características do solo relacionadas com o potencial uso dos solos, assim como para a avaliação da fertilidade, as análises químicas e físicas de rotina são os métodos convencionalmente usados. Estes são bastante custosos e demorados o que tem representado no Brasil uma dificuldade no seu uso por parte de pequenos agricultores, além da aplicabilidade da agricultura de precisão no manejo de solos. Atualmente a pedometria está fornecendo a possibilidade de incorporar em ciência do solo técnicas bastante sofisticadas que podem ajudar a diminuir o custo na obtenção da informação e compreender melhor o funcionamento dos processos do solo. Entre os tópicos mais recentes que estão incluídos na pesquisa relacionada com pedometria está a espectroscopia de reflectância. Embora se tenha demonstrado que uma grande quantidade de atributos podem ser estimados a partir da resposta espectral do solo via sensoriamento, ainda não se têm atingido níveis de acurácia ótimos em relação às metodologias convencionais, sobretudo no referente a atributos químicos. Para tanto, o presente trabalho foi desenvolvido com a finalidade de responder basicamente os seguintes questionamentos: a. Existem faixas espectrais específicas das bases trocáveis ou se estas podem mudar em função do argilomineral fornecedor da capacidade de troca de cátions?; b. A calibração de modelos usando unicamente algumas faixas espectrais específicas pode melhorar o desempenho destes?; c. Qual é a influência dos níveis de acurácia dos modelos espectrais sobre mapas construídos com atributos estimados a partir destes?; d. Como os tamanhos dos grupos de amostras de calibração influenciam a acurácia dos modelos?; e. Como a calibração de atributos relacionados com o intemperismo podem auxiliar no mapeamento de classes de solo?.

Palavras-chave: Sensoriamento próximo; Quimiometria; Pedometria; Variabilidade espacial

ABSTRACT

Quantitative pedology: VIS-NIR-SWIR spectrometry and digital soil mapping

The routine soil analysis is traditionally used on the evaluation of soil attributes related to land use potential, and the assessment of fertility. It is costly and time consuming, making it inaccessible for small farmers, and hampering the applicability of precision agriculture on soil management in Brazil. Currently, pedometrics is providing the possibility of incorporating in soil science sophisticated techniques that can help to reduce the cost of obtaining information and improve the understanding about how several soil processes works. One of the more recent topics on pedometrics is the soil reflectance spectroscopy. Through the soil reflected energy is possible to infer several soil properties, although optimum accuracy levels in the spectral estimation of soil attributes have not yet reached. In this sense, the aim of this study was basically answer the following questions: a. The exchangeable bases have specific spectral bands or the spectral responses of theses depends on the clay mineral?; b. the calibration of models by using only some specific spectral bands may improve the prediction performance?; c. What is the influence of the accuracy of prediction models on maps constructed with predicted soil attributes?; D. How calibration set size affect the accuracy of the models?; e. How the calibration of models for prediction of soil attributes related to soil weathering may assist the digital soil mapping?.

Keywords: Proximal sensing; Chemometrics; Pedometrics; Spatial variability

1 INTRODUÇÃO

1.1 Mapeamento de solos, disponibilidade de alimentos e estratégias de ação

Segundo dados da FAO, no ano 2050, estima-se que a população mundial vai aumentar de seis para nove bilhões de pessoas. É necessário que a disponibilidade mundial de alimentos e a sua adequada distribuição seja garantida em todos os países do mundo. A recente crise mundial dos preços dos alimentos reflete como a estabilidade econômica e política, sobretudo de países em desenvolvimento, é significativamente dependente do abastecimento agrícola. É preciso que os países como o Brasil adotem políticas que visem garantir a adoção de tecnologias que promovam o desenvolvimento agrícola em todos os níveis de produção.

O Brasil possui grandes áreas com potencial para o crescimento agrícola, mas onde suas características são pouco conhecidas. É claro que sem um adequado estudo dos solos destas áreas não é possível identificar qual é o seu potencial uso, além disso, não é possível garantir o crescimento de forma sustentável se as práticas de manejo adequadas são desconhecidas. Como exemplo, sabe-se que grande parte da expansão agrícola está acontecendo sobre extensas superfícies de terra ignorando-se as suas características edafológicas e por tanto nenhum tipo de planejamento. Qual será o impacto da intensificação agrícola sem este planejamento?

Para a avaliação das características do solo relacionadas com o seu potencial, assim como para a avaliação da fertilidade, as análises químicas e físicas de rotina são os métodos convencionalmente usados. Através destas análises são determinadas as necessidades de aplicação de fertilizantes e calagem. Além disso, estas são utilizadas como suporte para a implementação de irrigação, levantamento de solos, definição de zonas de manejo específico, entre outros. Sabendo-se que grande parte do produto interno bruto dos países sul-americanos depende do setor agrícola, é possível deduzir que a importância destas análises é bastante significativa, embora o custo destas é um dos principais entraves nas áreas de manejo químico e de levantamento de solos. Levando em conta que o setor agrícola produtivo é consciente da importância destas análises, o seu uso poderia aumentar consideravelmente se o custo fosse reduzido de forma significativa. Por exemplo, a agricultura de precisão para o manejo específico do solo tem sido pouco implementada na América do Sul, o que é atribuído principalmente aos altos custos das análises de solo (DEMATTE et al., 2004; DEMATTE et al., 2007). As necessidades tecnológicas mais urgentes referentes ao manejo localizado do solo e ao mapeamento de solos estão relacionadas com desenvolvimento de métodos mais rápidos e menos

custosos de obtenção da informação (VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 1998; BROWN et al., 2006; RIVERO et al., 2007; CHRISTY, 2008). Sendo que um dos custos mais altos na obtenção destes mapas é a análise de solos, uma das formas mais práticas de reduzir estes custos é sua redução.

1.2 A visão internacional sobre o tema sensoriamento espectral de solos e sua importância

Tendo-se como referência alguns casos a nível mundial, observa-se que os custos das análises de solo são muito elevados, o que dificulta a aplicabilidade da agricultura de precisão relacionada com o manejo de solos (VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 1998) a semelhança do que tem sido verificado no Brasil. Um dos objetivos básicos da agricultura de precisão é o manejo localizado do solo. Para tanto, é necessário que a variabilidade espacial dos atributos do solo seja descrita de maneira adequada, o que implica que inevitavelmente o número de observações em campo necessárias seja bastante alto, o que deriva em altos custos.

De forma geral, o desenvolvimento agrícola nos trópicos requer de grandes quantidades de análises de solos e observações de campo antes de gerar recomendações adequadas de manejo (SHEPHERD; WALSH, 2007). Sendo assim, o maior entrave na realização do mapeamento de solos, agricultura de precisão e implementação de planos adequados de manejo e uso do solo, tanto em grande quanto pequena escala, é o elevado custo das análises de rotina. Recentemente se tem reconhecido a nível mundial que o sensoriamento espectral de solos é uma poderosa ferramenta que pode diminuir de forma significativa o impacto dos destes custos.

Por outro lado, o sensoriamento próximo tem despertado bastante o interesse dos científicos de solos já que possui uma serie de vantagens sobre as análises convencionais, devido a sua alta eficiência de obtenção de informações do solo. Segundo Shepherd e Walsh (2007), esta é uma das técnicas analíticas mais eficientes, econômicas, reproduzíveis e disponíveis no século 21. Por exemplo, usando só com uma leitura da resposta espectral do solo podem ser obtidos uma grande quantidade de atributos físicos, químicos e biológicos (McBRATNEY et al., 2006), sempre que se tenham modelos estatísticos calibrados para extrair estas informações.

Segundo Cohen et al. (2007), existem sólidas evidências de que por meio de processos analíticos da reflectância espectral do solo, podem ser estimados com grande acurácia vários atributos do solo, incluso atributos que por técnicas convencionais (como as de ataque sulfúrico) são de difícil determinação. Neste sentido, os resultados de várias pesquisas têm sido satisfatórios

(JANIK et al., 1998; COZZOLINO; MORÓN, 2003; ISLAM et al., 2004; VÅGEN et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006; MADARI et al., 2006; DEMATTÊ et al., 2006; RIVERO et al., 2007; BEN-DOR et al., 2008) e apresentam à espectroscopia de reflectância como uma técnica inovadora na análise de solos e com o potencial de substituir as análises convencionais.

Na Austrália, o CSRIO fornece o serviço de análise de solo por espectroscopia de reflectância a um custo aproximadamente 83% menor do que o custo nos laboratórios de análise convencional de solos. Por outro lado o ICRAF (WORLD AGROFOESTRY CENTER, 2005) afirma que usando esta tecnologia o custo da análise de solos por amostra pode ser reduzido de USD 50 para USD 0,5, o que implica uma redução de 99%. Os dois maiores custos associados com a implementação de análise de atributos do solo através de espectroscopia tem a ver com o investimento inicial no espectrômetro e o desenvolvimento de uma base de dados espectrais e químicos que forneça as amostras e a informação para a calibração de atributos (biblioteca espectral) (VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 2008).

1.3 As vantagens do sensoriamento espectral para fins de estudo de solos

As características de economia, e redução de tempo indicam que a espectroscopia de reflectância é uma ferramenta que permitirá grandes avanços tanto na implementação como nas atividades de pesquisa relacionadas com a agricultura de precisão (VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 1998; JANIK et al., 1998; THOMASSON et al., 2001; ODLARE et al., 2005; BEN-DOR et al., 2008). Por outro lado, esta técnica de sensoriamento, facilitará o mapeamento digital de solos em grande escala, a predição e o monitoramento da erosão (SULLIVAN et al., 2005).

Outra das vantagens da implementação da espectroscopia de reflectância para a análise de solos é que os dados podem ser armazenados em tempo real em um computador, o que facilita a construção de uma base de dados espectral de solos conhecida também como biblioteca espectral. Desta forma a construção de uma biblioteca espectral dos diferentes solos a América do Sul pode servir como base para tudo tipo de estudos pedológicos já que os dados armazenados na biblioteca servem como padrão para a aplicação de técnicas de Sensoriamento remoto, além de servir como suporte para a avaliação de modelos estatísticos construídos para a quantificação de atributos do solo.

Embora se tenha demonstrado que uma grande quantidade de atributos podem ser estimados a partir da resposta espectral do solo via sensoriamento, ainda não se têm atingido níveis de acurácia ótimos em relação às metodologias convencionais, sobretudo no referente a atributos químicos do solo. A diversidade da composição mineral do solo e o baixo teor de matéria orgânica fazem da quantificação de atributos do solo através do NIR um verdadeiro repto (FERNANDEZ PIERNA; DARDENEE, 2008). Neste sentido o grupo Francês de quimiometria instituiu no ano de 2006 como desafio a quantificação de atributos do solo. É importante que sejam desenvolvidas pesquisas focadas à melhora da acurácia das estimativas incorporando também outras metodologias ou desenvolvendo novas metodologias pedométricas. Por outro, lado o potencial do sensoriamento próximo no mapeamento de solos ainda não tem sido bem explorado. Para tanto, o presente trabalho foi desenvolvido com a finalidade de responder basicamente os seguintes questionamentos: a. Existem faixas espectrais específicas das bases trocáveis ou se estas podem mudar em função do argilomineral fornecedor da capacidade de troca de cátions?; b. A calibração de modelos usando unicamente algumas faixas espectrais específicas pode melhorar o desempenho destes?; c. Qual é influencia dos níveis de acurácia dos modelos espectrais sobre mapas construídos com atributos estimados a partir destes?; d. como os tamanhos dos grupos de amostras de calibração influenciam a acurácia dos modelos?; e. Como a calibração de atributos relacionados com o intemperismo podem auxiliar no mapeamento de classes de solo?.

Referências

BEN-DOR, E., TAYLOR, G.R., HILL, J., DEMATTE, J.A.M., WHITING, M.L., CHABRILLAT, S. AND SOMMER, S., Imaging spectrometry for soil applications. **Advances in Agronomy**, Amsterdam, v. 97. p. 321-392, 2008.

BROWN, D.J. Using a global VNIR soil-spectral library for local soil characterization and landsccapemodeling in a 2nd-order Uganda watershed. **Geoderma**, Amsterdam, v. 140, p. 444–453, 2007.

CHRISTY, C.D. Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 61, p. 10-19, 2008.

COHEN, M.; MYLAVARAPU, R.S.; BOGREKCI, I.; LEE, W.S.; CLARK, M.W. Reflectance spectroscopy for routine agronomic soil analyses. **Soil Science**, New Jersey, v. 172, p. 469-485, 2007.

COZZOLINO, D., MORON, A. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy to analyse soil chemical and physical characteristics. **Journal of Agricultural Sciences**, Cambridge, v. 140, p. 65-71, 2007.

DEMATTÊ, J.A.M.; SOUZA A.; ALVES, M.C.; NANNI, M.R.; FIORIO, P; CAMPOS, R.C. Determining soil water status and other soil characteristics by spectral proximal sensing.. **Geoderma**, Amsterdam, v. 135, p. 179-195, 2006.

ISLAM, K.; McBRATNEY, A.B.; SINGH, B. Rapid estimation of soil variability from the convex hull biplot area of topsoil ultra-violet, visible and near-infrared diffuse reflectance spectra. **Geoderma**, Amsterdam, v. 128, p. 249-257. 2005.

JANIK, L.J.; MERRY, R.H.; SKJEMSTAD, J.O. Can mid infrared diffuse reflectance analysis replace soil extractions? **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood, v. 38, p. 681–696, 1998.

McBRATNEY, A.B.; MINASNY, B.; VISCARRA ROSSEL, R.A. Spectral soil analysis and inference systems: A powerful combination for solving the soil data crisis. **Geoderma**, Amsterdam. v.136, p. 272-278. 2006.

RIVERO, R.G; GRUNWALD, S; BRULAND, G.L. Incorporation of spectral data into multivariate geostatistical models to map soil phosphorus variability in a Florida wetland. **Geoderma**, Amsterdam, v.140. p.428–443, 2007.

SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Infrared spectroscopy - enabling an evidence based diagnostic surveillance approach to agricultural and environmental management in developing countries: **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Charlton, v.15, p.1-19. 2007SHEPHERD; WALSH, 2007.

VÅGEN, T.G.; SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Sensing landscape level change in soil fertility following deforestation and conversion in the highlands of Madagascar using VIS-NIR spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.133, p. 281-294. 2006.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; McBRATNEY, A.B. Soil chemical analytical accuracy and costs: implications from precision agriculture. **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood, v.38, p. 765-775. 1998.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCGLYNN, R.N.; McBRATNEY, A.B. Determining the composition of mineral-organic mixes using UV-VIS-NIR diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.137, p.70-82. 2006.

VISCARRA ROSSEL R.A.; MCBRATNEY A.B. Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for digital soil mapping. In: HARTEMINK A.E, MCBRATNEY A.B and MENDONÇA-SANTOS L. Eds. Amsterdam, Springer, 2008, **Digital soil mapping with limited data**. p. 381-396. p. 165-172.

WORLD AGROFORESTRY CENTRE – ICRAF. Shining light on soil deficiencies.
Transformations Quarterly. Nairobi, v.2, p.1, 2005.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Pedometria, funções de pedotransferência e sistemas de inferência de solos

A pedometria é uma área em ciência do solo que tem as suas origens na agronomia (WEBSTER, 1994) e que atualmente começa a ser conhecida no Brasil e a tomar popularidade no mundo. Inicialmente, e de forma provisória em 1988, foi aprovado pela sociedade internacional de ciência do solo, o grupo de trabalho em pedometria e atualmente é uma comissão da união internacional de ciência do solo. O significado formal da pedometria é “a aplicação de métodos matemáticos e estatísticos para o estudo da distribuição dos solos e sua gênese” (HEUVELINK, 2003). Sendo assim, com o desenvolvimento de trabalhos relacionados com funções para a predição de atributos do solo (hoje funções de pedotransferência) começou o progressivo incremento da inclusão de métodos estatísticos e matemáticos na descrição do solo (WEBSTER, 1994; MENDONÇA-SANTOS, 2007). Atualmente, na maioria dos trabalhos, o uso de técnicas pedométricas está relacionado com metodologias de predição de variáveis do solo. Talvez a ferramenta mais conhecida em pedometria está relacionada com o uso da geoestatísticas para a descrição da variabilidade espacial do solo. Entre os tópicos mais recentes que estão incluídos na pesquisa relacionada com pedometria existem diferentes técnicas com múltiplas aplicações. Atualmente a pedometria está fornecendo a possibilidade de incorporar em ciência do solo técnicas bastante sofisticadas que podem ajudar a compreender melhor o funcionamento dos processos do solo. Isto deriva em aplicabilidade de conhecimento interdisciplinar. O domínio da pedometria mudou um pouco desde a sua fundação, hoje em dia esta também pode ser definida como um campo interdisciplinar entre a ciência do solo, aplicada a estatística e matemática aplicada a ciência da geoinformação (Figura 1) (HENGL, 2003).



Figura 1 – A pedometria pode ser considerada uma ciência interdisciplinar onde conflui a ciência do solo, a estatística e matemática aplicada e as ciências geoinformáticas (Fonte: HENGL, 2003)

Recentemente as técnicas pedométricas têm se diversificado, desta forma as pesquisas cobrem um amplo e interessante grupo de aplicações tais como a modelagem da variação espacial e temporal dos atributos do solo (ZIMMERMANN et al., 2008; LESCH et al., 2008; BEHRENS et al., 2009), predição de classes e atributos do solo (MINASNY; MCBRATNEY, 2007; LINKER, 2008; DEBELLA-GILO; ETZELMULLER, 2009), quantificação e propagação do erro (CASTRIGNANÒ et al., 2008; SINDAYIHEBURA et al., 2009; TEMME et al., 2009), integração de dados em múltiplas escalas (CORBANE et al., 2008; DE ROSNAY et al., 2009), uso de transformações *wavelets* para a análise de complexas variações (PRINGLE et al., 2008; FURON et al., 2008), modelagem solo-paisagem usando análises digitais de terreno (THOMPSON et al., 2007; SOMMER et al., 2008; BROWN, HENGL et al., 2008), algoritmos de classificação quantitativa do solo (CARRÉ et al., 2009), simulação da gênese do solo (SOMMER, et al., 2008; FINKE; HUTSON, 2008; MINASNY et al., 2008), análise de padrões do solo (FÓTI et al., 2008; MATHIEU et al., 2009; ZHANG et al., 2008), desenho e avaliação de esquemas de amostragem (GEBREMICHAEL VIVONI, 2008; HEIM et al., 2009; KERRY; OLIVER, 2007), incorporação de informação com alta densidade de amostragem (sensoriamento remoto) na interpolação espacial (ELDEIRY et al., 2008), aplicações em agricultura de precisão (CHRISTY, 2008; TELLAECHÉ et al., 2008), sistemas de inferência de solos.

O desenvolvimento de modelos que simulam os processos do solo têm se incrementado rapidamente nos últimos anos com a finalidade de melhorar o conhecimento de importantes processos do solo e também para servir como ferramentas de avaliação de problemas agrícolas e ambientais (McBRATNEY et al., 2002). As funções resultantes dos processos de modelagem para predição de atributos do solo a partir de variáveis auxiliares são chamadas de Funções de Pedotransferência (PTFs) (BOUMA; LANEN, 1987) o objetivo destas pode ser definido de forma simples como “transformação dados que possuímos em dados que precisamos” (BOUMA, 1989). A partir das PTFs podem ser obtidos, de forma preditiva, dados importantes os quais convencionalmente apresentam dificuldade de obtenção, seja por altos custos de obtenção ou por laboriosidade. Estas predições podem usar dados auxiliares, sejam estes pré-existentes (disponíveis em relatórios de levantamentos de solos ou em Sistemas de Informação Geográfica) ou que representem uma maior facilidade de obtenção (MINASNY et al., 2003). Sendo assim, umas das finalidades da pedometria e das PTFs são a diminuição de custos e o aumento da velocidade de levantamento da informação.

Embora as PTFs tenham a possibilidade de ser utilizadas em muitas áreas da ciência do solo, o desenvolvimento destas tem sido maior na área de hidrofísica de solos, onde foram aplicados os primeiros métodos computacionais (SHEIN; ARKHANGEL'SKAYA, 2006).

Em relação ao esforço e à incerteza na obtenção da informação através de metodologias de predição, McBratney et al. (2002) deduziram os dois princípios do uso de PTFs. O primeiro princípio (esforço) indica que não devem ser construídas PTFs para algo que seja mais fácil de medir do que predizer. Por exemplo, Donatelli et al. (2004) indicam que não é prático estimar o coeficiente de infiltração do solo a partir de parâmetros quantitativos da estrutura do solo derivados de imagens aéreas, devido a que a análise destas imagens é mais laborioso do que a medição direta da infiltração. A eficiência consiste também em extrair a maior quantidade de informação das variáveis preditoras com o objetivo de minimizar os custos, tempo e incertezas. Por outro lado Minasny e McBratney (2002) definiram a eficiência como:

$$\text{Eficiência 1} = \text{qualidade da informação/esforço}$$

$$\text{Eficiência 2} = \text{qualidade da informação/custo da informação}$$

O segundo princípio apresentado por estes autores e o da incerteza o qual indica que não devem ser utilizadas FPTs se a incerteza não pode ser avaliada e se para um determinado problema existe mais do que uma FPT então, o critério de escolha da FTP a usar deve ser a que apresente a menor variância.

Com o objetivo de estruturar o conhecimento do solo fornecido pelas PTFs, estas podem ser integradas através de sistemas ou redes que possuam regras lógicas relacionadas com a aplicabilidade em condições ambientais específicas. McBratney et al. (2002) propuseram o conceito de sistemas de inferência de solos (SINFERS) os quais estão constituídos por PTFs.

Recentes trabalhos (VISCARRA ROSSEL et al., 2006; BROWN, 2007; BEN-DOR et al., 2008; TRANTER et al., 2008; HANSEN et al., 2009; CASTRIGNANÒ et al., 2009) têm demonstrado que a espectroscopia de solos têm o potencial de constituir um sistema SINFER muito eficiente devido a que com um único espectro podem ser inferidos vários atributos do solo. Desta forma, através de um único atributo (reflectância ou absorbância de energia) podem ser construídas várias FPTs.

Embora os métodos pedométricos tenham uma forte base estatística e matemática é importante levar em conta que esta nova área precisa indispensavelmente conhecimento pedológico experto para realizar inferências qualitativas, sendo que a pedometria não poderia

funcionar sem o conhecimento qualitativo do solo o qual deve ser incorporado nos processos de construção de modelos (MENDONÇA-SANTOS, 2007).

2.1.1 Mapeamento digital ou preditivo de solos

O mapeamento digital de solos (DSM) ou mapeamento preditivo de solos pode ser definido de forma simples como o mapeamento de atributos e/ou classes do solo baseado no uso de técnicas pedométricas e ferramentas computacionais. Por tanto, os princípios de esforço e incerteza podem ser também aplicados ao DSM. A criação de mapas digitais geralmente utiliza métodos perceptivos de observação em campo e laboratório coligados a sistemas de inferência de solos.

O mapeamento digital de classes de solo está ligado às funções de predição de solos. O primeiro modelo descrito foi o fatorial postulado por Jenny (1941), nesta função clássica em pedologia, os fatores que determinam a formação do solo (S) são clima (cl), organismos (o), relevo (r), material parental (p) e tempo (t), $S = f(cl, o, r, p, t)$ ou *Sclorpt*. Desde a aparição deste modelo, varios estudos têm sido desenvolvidos com o objetivo de estabelecer de forma quantitativa as relações entre estes fatores e o solo, mas só com o desenvolvimento dos sistemas de informação geográfica (SIG), as relações espaciais destes fatores começaram a ser exploradas. Antes da aparição dos SIG poucos trabalhos estudaram o componente espacial. Não obstante, Legros e Bonneric (1979), com a finalidade de predizer o grau de podzolização, eles descreveram a relação solo-ambiente usando vários fatores do relevo e do material parental (McBRATNEY et al., 2003). Desta forma, o componente espacial teve um grande impacto na compreensão dos fatores de formação, sobretudo no relacionado ao relevo. A inserção de modelos digitais de elevação em SIG potencializou as pesquisas das relações entre o solo e parâmetros do terreno (curvatura média, inclinação, radiação solar, índice de umidade, entre outros.). A compreensão das relações espaciais entre atributos pertencentes aos fatores de formação foi favorecida pela incorporação de metodologias geoestatísticas.

Em relação à predição espacial do solo McBratney et al. (2003) indicam que:

1. De forma geral, têm sido facilmente encontradas relações quantitativas entre o solo e a topografia, não obstante existe evidência de relações quantitativas com os outros quatro fatores de formação do solo.

2. Em geral, as relações entre os fatores de formação e o solo não podem ser assumidas como lineares.
3. Poucos trabalhos têm sido desenvolvidos em relação à interação entre fatores.
4. Os solos podem ser preditos espacialmente a partir da sua posição geográfica usando uma variedade de técnicas.
5. Os solos podem ser preditos a partir de outros atributos em um mesmo ponto geográfico.
6. O solo pode ser predito a partir dele mesmo, outros atributos do solo e atributos ambientais de locações vizinhas.

Em relação ao anterior, estes autores propuseram uma modificação ao modelo *clorpt* de Jenny. Esta modificação inclui dois fatores dos quais o solo pode ser inferido, assim o primeiro novo fator é o espacial (devido a que o solo pode ser predito a partir de informações vizinhas) é o segundo é o solo (devido a que o solo pode ser predito a partir de seus próprios atributos, ou os atributos podem ser preditos a partir das classes ou outras propriedades (McBRATNEY et al., 2003). Desta forma o solo (S) é uma função do solo (s), clima (c), organismos (o), relevo (r), material parental, idade ou tempo (a) e da sua posição no espaço (n). Este novo enfoque do modelo diretamente derivado do *clorpt* de Jenny recebe o nome de modelo *scorpan*, o qual pode ser escrito como:

$$S_c = f(s, c, o, r, p, a, n) \text{ ou } S_a = f(s, c, o, r, p, a, n)$$

onde S_c são as classes de solos e S_a são os atributos do solo.

Métodos pedométricos ou sistemas de inferência espacial de solos podem ser aplicados à predição de variáveis contínuas (pH, K, Ca, Mg, argila, entre outros) assim como também à predição de variáveis categóricas ou discretas (classes texturais, classes de solo, estrutura, entre outros). O mapeamento digital de variáveis contínuas tem sido aplicado a grande escala porém em pequenas áreas. A geoestatística tem sido a ferramenta básica neste tipo de mapeamento, não obstante, a densidade amostral requerida para a descrição adequada da variabilidade espacial destes atributos normalmente é bastante alta. Na prática, o solo apresenta uma variação espacial significativa em distâncias curtas, as quais são menores que as resoluções de mapeamento convencional e digital (LAGACHERIE; McBRATNEY, 2006). Por exemplo, McBratney e Pringle (1999) estimaram através da média do alcance de variogramas apresentados em trabalhos desenvolvidos por diferentes autores, que a variação destas propriedades só pode ser descrita adequadamente com resoluções espaciais de 20 – 200 m o que faz com que sua aplicabilidade em

grandes áreas seja complexa. É por isto que atualmente existe um crescente interesse no mapeamento digital a grande escala de atributos do solo devido a que a geoestatística por si só não oferece vantagens em enquanto a economia de tempo e custo. Para isto é necessário a construção de sistemas de inferência espacial de solos que incorporém diferentes funções de pedotransferência baseadas em múltiplas variáveis auxiliares de fácil obtenção com a possibilidade de fornecer alta resolução espacial (modelos digitais de terreno, fotografias aéreas, imagens de satélite, atributos do solo preditos a partir de sensores próximos e remotos, entre outros).

O mapeamento digital de variáveis categóricas do solo têm sido relativamente menos implementado que o de variáveis contínuas, porém geralmente em grandes áreas. Em este aspecto, os esforços têm sido focados ao mapeamento preditivo de classes taxonômicas de solo (BEHRENS et al., 2005; HENGL et al., 2007; MENDONÇA-SANTOS et al., 2008; DEBELLAGILO; ETZELMÜLLER, 2009). Comumente a classificação digital de solos é computada a partir de um algoritmo o qual é aplicado de forma geral para uma área inteira. Por outro lado em grandes áreas de mapeamento, vários autores (MacMILLAN et al., 2000; BURROUGH et al., 2001; MARTIN; TIMMER, 2006; MacMILLAN; SHARY, 2006; HUGHES et al., 2009) têm sugerido realizar n -particiones da área de estudo usando como critério a forma do terreno. Este é um enfoque menos linear, onde cada partição possui uma menor variabilidade espacial. Desta forma são computadas n -funções locais de classificação (uma para cada partição), diminuindo assim a incerteza.

A incerteza de mapas digitais pode ser reduzida se novas informações são obtidas. Desta forma, os mapas digitais de solos não são produtos estáticos, eles podem ser modificados de forma contínua na medida em que estas novas informações (referentes às áreas de mapeamento) vão sendo disponibilizadas e incorporadas nas bases de dados. Assim, a acurácia destes mapas pode ser melhorada com menor custo e de forma rápida (CARRÉ et al., 2007; MORA-VALLEJO et al., 2008; SCHMIDT et al., 2009; HANSEN et al., 2009). Embora se tenha também a possibilidade de melhorar mapas convencionais de solos preexistentes, existe maior dificuldade e mais entraves em comparação com os mapas digitais devido à ausência de modelos ou funções de pedotransfêrencia que reajustar de forma rápida as variáveis que se aspira melhorar.

Em relação à diminuição dos custos de mapeamento através das ferramentas pedométricas, Bui (2006) indica que em 1996, foi estimado um valor maior que 10 para a relação

benefício/custo ao digitalizar em 1990 o atlas dos solos australianos, isto em termos de dólares americanos de 1993, com um desconto do 7% sobre 30 anos, levou em consideração que o uso deste atlas continua sendo usado. Estima-se que esta relação tenha aumentado. Este autor faz um levantamento de informação de um mapeamento feito no sul da Austrália, onde indica que o mapeamento digital em uma área de 54.000 ha pode reduzir o número de pessoas requeridas por ano de 21 para 16, e os custos de US\$ 28 km⁻² para US\$ 9,35 km⁻².

A significativa diminuição de custos do mapeamento digital em relação ao convencional faz com que áreas de maior tamanho possam ser mapeadas com o mesmo investimento usado em áreas menores e que o monitoramento do solo possa ser mais freqüente. O anterior tem possibilitado a recente criação do projeto para o mapeamento digital de solos do mundo inteiro (com resolução espacial de 90 m) usando as tecnologias pedométricas disponíveis. O objetivo final deste projeto (e em geral do mapeamento digital de solos) é fornecer importantes informações que ajudem a erradicar a fome no mundo e a degradação ambiental.

Carré et al. (2007) indicam que o mapeamento digital de solos possui dois níveis de aplicabilidade básica. A primeira refere-se à avaliação digital de solos (DSA) a partir do mapeamento digital de solos, e tem a ver com a elaboração de modelos quantitativos de atributos de difícil medição necessários para a avaliação de riscos do solo (erosão, diminuição do estoque de carbono orgânico, compactação, salinização, desabamento de terras, impermeabilização, inundação, declínio da biodiversidade e da fertilidade) e as funções do solo (produção de biomassa, interações ambientais, suporte físico, produção de matérias-primas, patrimônio cultural, sumidouro de carbono, fonte de diversidade biológica (COMISSÃO EUROPÉIA, 2006; CARRÉ et al., 2007). A segunda tem a ver com a avaliação digital de riscos do solo (DSRA), os quais devem fornecer uma orientação para as políticas necessárias, isto a partir das informações geradas pelo DSA e da incorporação de dados sócio-econômicos e informações referentes ao meio ambiente. Desta forma, os mapas digitais de solos são precursores das DSA, as quais por sua vez são precursoras do DSRA, sendo assim, isto gera algumas restrições nos níveis de acurácia que devem ter estes. Estes autores sugerem um fluxo de processos básicos para às aplicações do DSM (Figura 2).

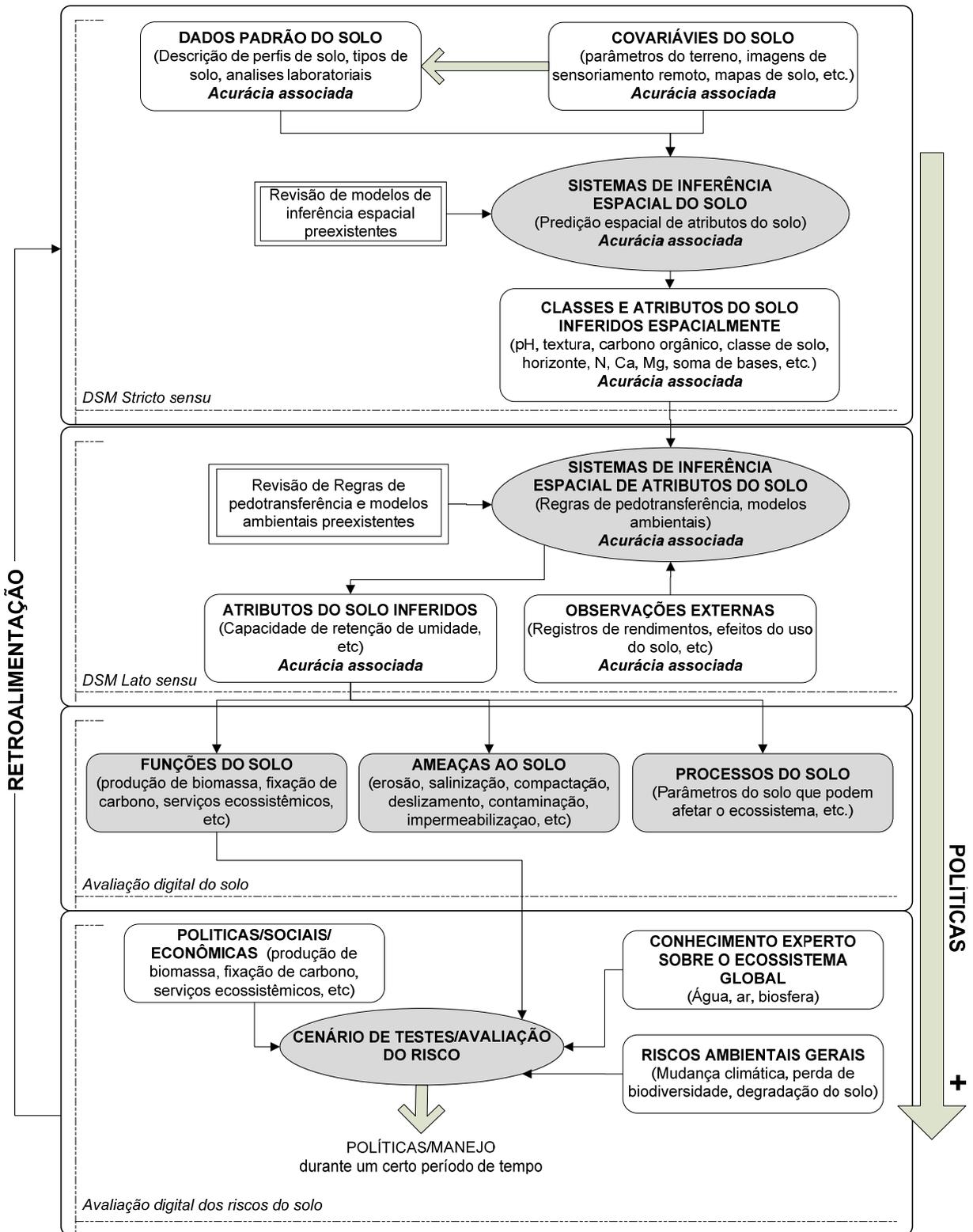


Figura 2 – Estrutura do mapeamento digital de solos e sua aplicabilidade para a avaliação digital de solos e avaliação digital dos riscos do solo (Fonte: CARRÉ et al., 2007)

A ciência do solo tem um papel fundamental a desempenhar, através do fornecimento de informações e conhecimento para a tomada de decisões estratégicas e para o estabelecimento do debate público sobre ordenamento do território e do uso sustentável do solo como um recurso natural (MENDONÇA-SANTOS, 2007). De forma específica, o mapeamento digital de solos tem como propósito básico otimizar as técnicas convencionais para diminuir o consumo de recursos e possibilitar a descrição do solo e dos riscos destes fornecendo uma base sólida para a implementação de políticas que possam reduzir atuais problemas sociais a nível mundial.

2.2 Sensoriamento espectral de solos

O sensoriamento remoto e próximo baseia-se na aquisição de informações de um objeto sem ter contato direto (LILLSEO; KIEFER, 1992) por meio de sensores instalados em laboratório, campo ou órbita. No caso do sensoriamento espectral, a energia eletromagnética funciona como um agente que interatua com os componentes do solo, de forma que cada um está intimamente relacionado a um ou mais comprimentos de onda (Figura 1). Trata-se, portanto de um processo físico onde basicamente o solo pode absorver energia (ex. proveniente de uma fonte de luz) e refletir parte dessa energia total incidente. A absorção da energia pelo solo é dada em função dos materiais que o compõem, os quais refletem energia de forma diferente e em diferentes comprimentos de onda. Este é o princípio usado pela maioria de sensores de satélites de observação para captar imagens em diferentes comprimentos de onda. Assim, a energia refletida pelo solo nos distintos comprimentos de onda é dada em função dos atributos químicos, físicos e biológicos deste. Desta forma é possível que um sensor possa captadar esta energia refletida pelo solo em diferentes comprimentos de onda do espectro eletromagnético e que a partir dessas leituras espectrais seja possível inferir sobre vários atributos do solo. A faixa espectral que se estende de 400- 2500 nm (visível ou VIS, infravermelho próximo ou NIR, infravermelho médio ou MIR) é atualmente a mais utilizada em sensoriamento espectral de solos (Figura 3). Comumente os sensores espectrais aerotransportados ou os orbitais cobrem a faixa do VIS e do NIR. Embora estas faixas sejam as mais utilizadas, alguns trabalhos na faixa do ultravioleta (UV) (ISLAM et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006a; BOGREKCI; LEE, 2007) e usando raios gamma (ELIAS et al., 2004; PIRES et al., 2005; WILFORD; MINTY, 2006) têm sido desenvolvidos.

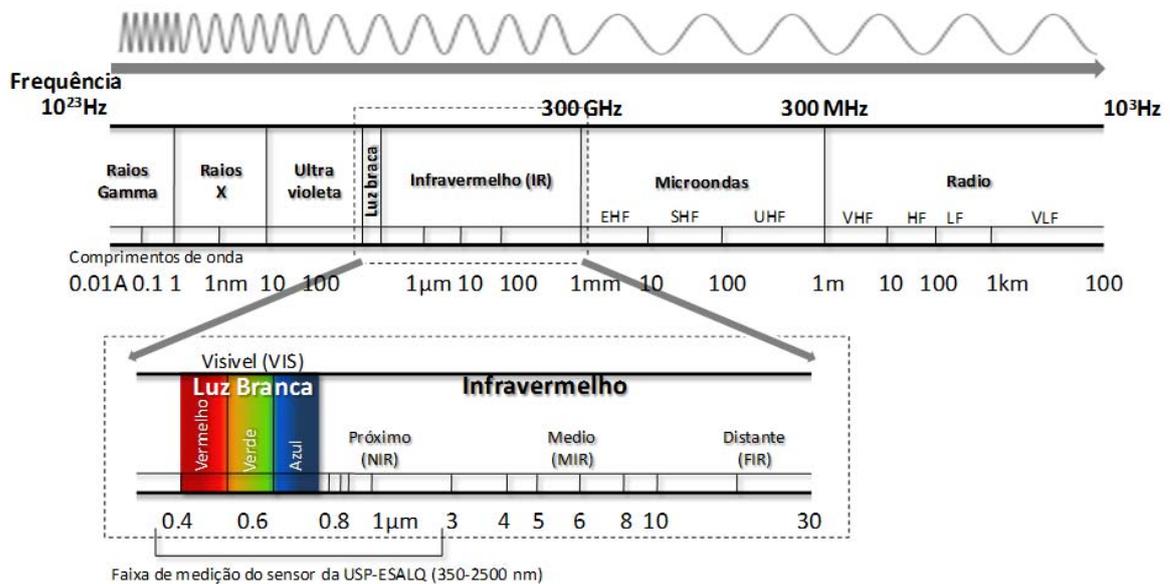


Figura 3 – Espectro eletromagnético ressaltando as faixas espectrais nas quais atualmente se encontra focada a pesquisa

Os estudos radiométricos iniciaram na porção não visível, o infravermelho próximo (NIR), descoberta em 1800, por Herschel, citado por Stark et al. (1986). Agstrom (1925) avaliou o albedo de vários corpos, entre eles o solo. Os primeiros trabalhos onde foram relacionados atributos do solo com a sua energia refletida foram desenvolvidos por Kojima (1958a, 1958b) onde através de um fotocolorímetro mediu as mudanças de cor do solo e estabeleceu que estas apresentam uma alta relação com a variação do tamanho das partículas e a umidade. Logo depois, Obukhov e Orlov (1964) estudaram a reflectância espectral de vários grupos de solos e a possibilidade de usar técnicas de espectroscopia nas pesquisas em solos. Bowers e Hanks (1965) apresentaram um importante trabalho relacionado com as características espectrais do solo na faixa do VIS e o NIR em “energia radiante refletida por solos” onde concluíram que a matéria orgânica, o teor de umidade, o tamanho de partículas e a composição mineralógica do solo possuem uma forte influencia sobre as propriedades espectrais deste. Posteriormente, vários autores têm documentado farto embasamento científico sobre a íntima relação entre atributos dos solos e a energia eletromagnética refletida (PLANET, 1970; CONDIT, 1970; HUNT et al., 1971; STONER; BAUMGARDNER, 1981; COLEMAN; MONTGOMERY, 1987; IRONS et al., 1989; NARAYANAN et al., 1992; GOETZ, 1992; PALMBORG; NORDGREN, 1995; JANIK; KEELING, 1996). Rapidamente, depois que foram obtidas as primeiras evidências de que a reflectância espectral do solo possui bastante relação com os atributos deste, o desenvolvimento

de modelos de estimativa de atributos com base em informações espectrais começou a tomar bastante popularidade (MORRA et al., 1991; BEN-DOR et al., 1997). Coleman et al. (1991) baseados nos anteriores conceitos, obtiveram uns dos primeiros "bons" resultados na modelagem e estimativa de argila a partir de leituras da reflectância do solo. Apesar dos resultados terem sido pouco consistentes, os autores sugeriram a continuidade do processo, o que foi ratificado por Ben-Dor e Bannin (1997). Janik et al. (1998) sugeriram que é possível substituir as demoradas e custosas análises convencionais de solos por quantificações feitas a partir da reflectância espectral do solo. Seguindo esta linha de trabalho, Nanni e Demattê (2001) verificaram haver alta correlação entre vários atributos físicos e químicos com a energia refletida e indicaram que o número de análises de solo feitas por métodos convencionais poderia diminuir em detrimento das análises por sensores.

O grande salto no desenvolvimento de pesquisas relacionadas com a resposta espectral do solo, só aconteceu após do ano 2000, quando a agricultura de precisão já tinha ganhado bastante popularidade e era evidente o grande investimento econômico necessário para a implementação de esta. Viscarra Rossel et al. (1998) indicaram que o custo das análises de solo era (e continua sendo) muito altos como para serem usados de forma econômica na implementação de práticas de agricultura de precisão relacionadas com o manejo do solo.

Assim, vários pesquisadores começaram a usar diferentes metodologias através de leituras de reflectância, para que os atributos do solo pudessem ser estimados com maior acurácia (GALVÃO et al., 1997; DEMATTÊ; GARCIA, 1999; VISCARRA ROSSEL et al., 2006). Atualmente, o uso de algoritmos estadísticos sofisticados tem permitido uma estimativa mais precisa dos atributos do solo (MCBRATNEY et al., 2006; MINASNY; MCBRATNEY, 2008; FERNANDEZ PIERNA; DARDENNE, 2008).

Nanni e Demattê (2006) indicaram que é possível substituir análises tradicionais de alguns elementos do solo como argila, ferro e CTC por meio de dados espectrais e modelos estadísticos de estimativa. Genú e Demattê (2006) fizeram uma comparação entre os valores de atributos determinados de forma convencional e os estimados através da reflectância (validação cruzada) e observaram que os erros nas estimações foram baixos e os valores dos coeficientes de regressão foram altos (areia, $R^2 = 0,86$; silte, $R^2 = 0,71$; argila, $R^2 = 0,86$; matéria orgânica, $R^2 = 0,78$). Por outro lado, Viscarra Rossel et al. (2006), realizaram uma recopilação dos principais resultados das validações obtidas por vários autores para a estimativa de vários atributos do solo a

partir de dados espectrais utilizando diferentes algoritmos estadísticos para a calibração dos modelos, de forma general os atributos de mais fácil estimativa são: C total, matéria orgânica, CTC, Ca, CaCO₃, Fe, Mg, Mn, N, C orgânico, pH, Al, areia, silte, argila, potencial hídrico. Estes atributos tem sido estimados com $R^2 > 0,80$ a baixos erros. É importante levar em conta que tendo os modelos calibrados, a estimativa de todos estes atributos pode ser feita utilizando uma única leitura espectral por amostra.

Bogrekci e Lee (2007) avaliaram as regiões espectrais do ultravioleta, infravermelho próximo e do visível na predição de fósforo em amostras de terra chegou à conclusão que a melhor região a ser utilizada na estimativa de teores de fósforo é a região do infravermelho próximo. Cohen et al. (2007) demonstraram que a estimativa de atributos de solo através de técnicas de sensoriamento remoto é possível e que o erro na estimativa é tão igual ou menor que o erro cometido por um laboratório de análise de solos tradicional, sobretudo na estimativa de concentrações pequenas de elementos onde o erro destas análises de rotina é geralmente alto (MINASNY; MCBRATNEY, 2008). Wetterlind et al. (2008), utilizaram dados espectrais para diminuir o número de amostras de solos a serem analisadas em laboratórios convencionais para confecção de mapas de atributos de solo de uma propriedade agrícola.

O crescente interesse em metodologias de quantificação de atributos através de sensoriamento espectral deve-se às potenciais vantagens que estas possuem sobre as análises convencionais. Entre as principais vantagens estão: *a.* estas constituem um procedimento rápido e econômico de estimativa de atributos do solo; *b.* a partir de um espectro podem ser inferidos vários atributos de uma amostra de solo; *c.* na obtenção de dados não é necessário ter contato direto com a amostra de solo e não é necessário o uso de reagentes químicos constituindo um método não destrutivo (PALACIOS-ORUETA; USTIN, 1996; JANIK et al., 1998; REEVES et al., 1999; DUNN et al., 2002; BROWN et al., 2006; VISCARRA ROSSEL et al., 2006) e *d.* o fato de que no processo de quantificação espectral de atributos do solo, as amostras não sejam destruídas, implica que estas metodologias podem fornecer dados mais precisos em relação às técnicas convencionais já que estas normalmente alteram o equilíbrio entre as fases do solo (VISCARRA ROSSEL et al., 2006).

Desde o final da década do 90, inúmeros trabalhos têm demonstrado a eficiência da espectroscopia de reflectância de solos (CHANG et al., 2001; DUNN et al., 2002; SHEPHERD; WALSH, 2002; LEE et al., 2003; VISCARRA-ROSSEL et al., 2006; BROWN et al., 2007;

COZZOLINO; MORÓN, 2007; VISCARRA ROSSEL et al., 2008), deixando de ser apenas uma possível metodologia com potencial, e passando a ser realidade.

2.2.1 Características espectrais do solo no VIS-NIR-SWIR-MIR

As curvas espectrais do solo podem ser avaliadas de forma descritiva pelas suas características (STONER; BAUMGARDNER, 1981; DEMATTÊ, 2002). Na região VIS-NIR-SWIR (Figura 4A) e MIR (Figura 4B) é possível distinguir facilmente feições de absorção e reflectância características do solo atribuídas a óxidos de ferro, caulinita, gibbsita, esmectita, quartzo, matéria orgânica, umidade, carbonatos, cálcio, entre outros.

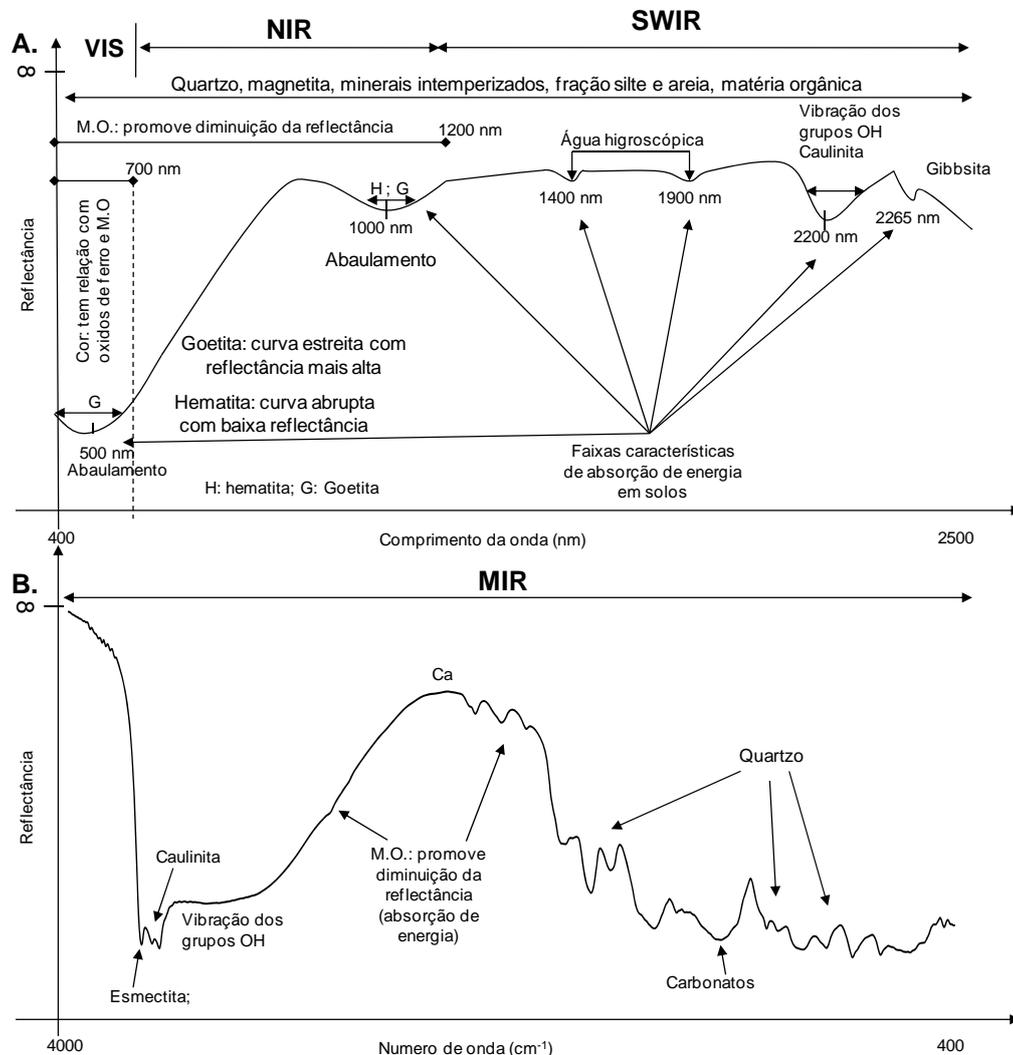


Figura 4 – Curva espectral de uma amostra de solo hipotética nas regiões do visível-infravermelho próximo e de ondas curtas (VIS-NIR-SWIR, 350-2500 nm) (A) e infravermelho médio (MIR, 4000-400 cm⁻¹) (B)

A informação espectral pode ser interpretada para fins de avaliação do solo e do uso da terra. Geralmente quanto maior o teor de matéria orgânica no solo, a intensidade de reflectância é menor. O mesmo ocorre com os óxidos de ferro, argila e a umidade do solo, os quais por promover a absorção de energia, possuem uma relação inversa com a reflectância. Não obstante estas são regras gerais, e a sua interpretação definitiva vai depender de todas as características do solo analisado. Uma importante fonte de variação espectral está relacionada com o material parental do solo, devido a que os produtos do intemperismo dessas rochas possuem diferentes características de absorção. Por exemplo, a hematita apresenta feições de absorção por volta de 877, 682, 531 e 423 nm, a goetita por volta de 953, 665, 488 e 413 nm, a maghemita por volta de 948, 675, 489, e 418 nm, a lepidocrosita por volta de 973, 687, 488, e 413 nm (SCHEINOST et al., 1998), a caulinita por volta de 2200 nm, e a gibbsita em 2265 nm.

2.2.2 Pedometria baseada na absorção de energia do solo: do enfoque descritivo à quimiometria

A influência dos componentes do solo sobre a absorção e reflexão de energia medida permite associar as variações espectrais com as variações dos teores dos elementos no solo. Desta forma é possível realizar quantificações de atributos do solo a partir de dados espectrais.

Recentemente as metodologias pedométricas de avaliação espectral do solo tem se baseado numa relativamente nova área da química chamada quimiometria (*chemometrics*). A quimiometria é uma disciplina da química que utiliza métodos matemáticos e estatísticos para delinear ou seleccionar procedimentos de medida e experimentos ótimos, e para fornecer a máxima informação química através da análise de dados (MASSART et al., 1988).

O termo quimiometria foi cunhado na década de 1970 e o seu desenvolvimento esteve ligado ao desenvolvimento da ciência da computação. Na década de 1980 foi reconhecida como disciplina da química e a partir daí começa um importante crescimento conduzido por os trabalhos relacionados com cromatografia a líquido de alto desempenho (HPLC) e a espectroscopia NIR em parte devido a que a suas implicações na redução de tempo e custos nas análises (BRERETON, 2007).

A quimiometria constitui uma importante fonte de metodologias para a quantificação espectral de atributos do solo. Não obstante, ainda não se têm atingido níveis de acurácia ótimos em relação às metodologias convencionais, sobretudo no referente a atributos químicos do solo.

A diversidade da composição mineral e orgânica do solo fazem da quantificação de seus atributos através do NIR um verdadeiro desafio (FERNANDEZ PIERNA; DARDENEE, 2008). Neste sentido o grupo Frances de quimiometria instituiu no 2006 como desafio da quimiometria a quantificação de atributos do solo.

Atualmente os métodos de regressão mais empregados nos processos de predição espectral de atributos do solo são: linear múltipla (MLR), componentes principais (PCR), mínimos quadrados parciais ou projeção sobre estruturas latentes (PLSR), splines adaptativos multivariados (MARS) e redes neurais (NNR). A PLSR tem se consagrado como um método eficiente de calibração de modelos de estimativa e tem sido empregado com relativo êxito em vários trabalhos relacionados com a predição de atributos do solo (JANIK; SKJEMSTAD, 1995; PALMBORG; NORDGREN, 1996; JANICK et al., 1998; KOOISTRA et al., 2001; SHEPHERD; WALSH, 2002; COZZOLINO; MORON, 2003; BOGREKCI; LEE, 2005; MADARI et al., 2006; AWITI et al., 2008; VISCARRA ROSSEL et al., 2009).

Referências

- AGSTROM, A. The albedo of various surfaces of ground. **Geografiska Annaler**, Berlin, v. 7, p. 323-342, 1925.
- AWITI, A.O; WALSH, M.G.; SHEPHERD, K.D; KINYAMARIO, J. Soil condition classification using infrared spectroscopy: A proposition for assessment of soil condition along a tropical forest-cropland chronosequence, **Geoderma**, Amsterdam, v. 143, p. 73-84, 2008.
- BEHRENS, T., FÖRSTER, H., SCHOLTEN, T., STEINRÜCKEN, U., SPIES, E.-D., GOLDSCHMITT, M. Digital soil mapping using artificial neural networks. **Journal of Plant Nutrition and Soil Science**, Weinheim, v. 168, p. 1-13, 2005.
- BEHRENS, T.; SCHNEIDER, O.; LÖSEL, G.; SCHOLTEN, T.; HENNINGS, V.; FELIX-HENNINGSSEN, P.; HARTWICH, R. Analysis on pedodiversity and spatial subset representativity - the German soil map 1:1,000,000. **Journal of Plant Nutrition and Soil Science**, Weinheim, v. 172, p. 91-100, 2009.
- BEN-DOR, E., BANIN, A. Near-Infrared analysis as a simultaneously method to evaluate spectral featureless constituents in soils. **Soil Science**, New Jersey, v. 159, p. 259-269, 1995
- BEN-DOR, E.; HELLER, D.; CHUDNOVSKY, A. A novel method of classifying soil profiles in the field using optical means. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 72, p. 1113-1123, 2008.

BOGREKCI, I.; LEE, W.S. Spectral soil signatures and sensing phosphorus. **Biosystems Engineering**, Belford. v. 92, p. 527-533. 2005.

_____. Comparison of ultraviolet, visible, and near infrared sensing for soil phosphorus. **Biosystems Engineering**, Belford. v. 96, p. 293-299. 2007.

BOUMA, J. Using soil survey data for quantitative le evaluation. *Advances in Soil Science*. **New York**, v. 9, p. 177-213, 1989.

BOUMA, J.; VAN LANEN, H. A.J. Transfer functions e threshold values: from soil characteristics to le qualities. In: INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTIFIED LE EVALUATION PROCEDURES, 1987, Washington. **Proceedings...** Washington. ITC Publ., 1987. p. 106–110.

BOWERS S. A.; HANKS, R.J. Reflection of radiant energy from soils. **Soil Science**, New Jersey. v. 100, p. 130-138, 1965.

BRERETON, G.R. Development of chemometrics. In: _____. **Applied chemometrics for scientists**. New York: John Wiley, 2007. p. 1-7.

BROWN, D.J. Using a global VNIR soil-spectral library for local soil characterization and landscapemodelling in a 2nd-order Uganda watershed. **Geoderma**, Amsterdam, v. 140, p. 444–453, 2007.

BUI, E. A review of digital soil mapping in Australia. In: LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B.; VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**. Amsterdam: Elsevier, 2006. v. 31, p. 25-37. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective)

BURROUGH, P.A.; WILSON, J.P.; VAN GAANS, P.F.M.; HANSEN, A.J. Fuzzy k-means classification of topo-climatic data as an aid to forest mapping in the Greater Yellowstone Area, USA. **Landscape Ecology**, Dordrecht, v. 16, p. 523-546, 2001.

CARRÉ, F.; JACOBSON, M. Numerical classification of soil profile data using distance metrics. **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p. 336–345, 2009.

CARRE, F.; McBRATNEY, A.B.; MAYR, T.; MONTANARELLA, L. Digital soil assessments: Beyond DSM. **Geoderma**, Amsterdam, v. 142, p. 69-79, 2007.

CASTRIGNANÒ, A.; COSTANTINI, E.A.C.; BARBETTI, R.; SOLLITTO, D. Accounting for extensive topographic and pedologic secondary information to improve soil mapping. **CATENA**, Amsterdam, v. 77, p. 28-38, 2009.

CASTRIGNANÒ, A.; BUTTAFUOCO, G.; CANU, A.; ZUCCA, C.; MADRAU, S. Modelling spatial uncertainty of soil erodibility factor using joint stochastic simulation. **Land Degradation & Development**, Chichester, v. 19, p. 198–213, 2008.

- CHRISTY, C.D. Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 61, p. 10-19, 2008.
- COHEN, M.; MYLAVARAPU, R.S.; BOGREKCI, I.; LEE, W.S.; CLARK, M.W. Reflectance spectroscopy for routine agronomic soil analyses. **Soil Science**, New Jersey, v. 172, p. 469-485, 2007.
- COLEMAN, T.L.; MONTGOMERY, L. Soil moisture, organic matter, and iron content effect on the spectral characteristics of selected vertisols and alfisols in Alabama. **Photogrammetric Engineering and Remote Sensing**, Bethesda, v. 53, p. 1659-1663, 1987.
- COMISSÃO EUROPEIA. **Proposal for a Directive of the European Parliament and of the Council Establishing a Framework for the Protection of Soil and Amending Directive 2004/35/EC**. Brussels: European Commission COM, 2006. p. 2-29.
- CONDIT, H.R. The spectral reflectance of American soils. **Photogrammetric Engineering and Remote Sensing**, Bethesda, v. 36, p. 955-966, 1970.
- CORBANE, C.; RACLOT, D.; JACOB, F.; ALBERGEL, J.; ERIEUX, P. Remote sensing of soil surface characteristics from a multiscale classification approach. **CATENA**, Amsterdam, v. 75, issue 3, p. 308-318, 2008.
- COZZOLINO, D., MORON, A. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy to analyse soil chemical and physical characteristics. **Journal of Agricultural Sciences**, Cambridge, v. 140, p. 65-71, 2007.
- DE ROSNAY, P.; GRUHIER, C.; TIMOUK, F.; BAUP, F.; MOUGIN, E.; HIERNAUX, P.; KERGOAT, L.; LEDANTEC, V. Multi-scale soil moisture measurements at the Gourma meso-scale site in Mali, **Journal of Hydrology**, Amsterdam,, 2009. In Press.
- DEBELLA-GILO, M.; ETZELMÜLLER, B. Spatial prediction of soil classes using digital terrain analysis and multinomial logistic regression modeling integrated in GIS: Examples from Vestfold County, Norway. **CATENA**, Amsterdam, v. 77, p. 8-18, 2009.
- DEMATTÊ, J.A.M.; GARCIA, G.J. Alteration of soil properties through a weathering sequence as evaluated by spectral reflectance. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 63, n. 2, p. 327-342, 1999.
- DEMATTÊ, J.A.M. Characterization and discrimination of soils by their reflected electromagnetic energy. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 37, p. 1445-1458, 2002.
- DEMATTÊ, J.A.M.; TOLEDO, A.M.A.; SIMÕES, M.S.. Metodologia para reconhecimento de três solos por sensores: laboratorial e orbital. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 28, p. 877-889, 2004.

DEMATTÊ, J.A.M.; GALDOS, M.V.; GUIMARÃES, R.; Genú, A.M.; Nanni, M.R.; Zullo Jr, J. Quantification of tropical soil attributes from ETM+/Landsat-7 data. **International Journal of Remote Sensing**, London, v. 28, p. 3813 – 3829, 2007.

DEMATTÊ, J.A.M.; SOUZA A.; ALVES, M.C.; NANNI, M.R.; FIORIO, P; CAMPOS, R.C. Determining soil water status and other soil characteristics by spectral proximal sensing. **Geoderma**, Amsterdam, v. 135, p. 179-195, 2006.

DONATELLI, M.; WÖSTEN, H.; BELOCCHI, G. Evaluation of pedotransfer functions. In: PACHEPSKY, Ya; RAWLS, W.J. (Ed.) **Development of pedotransfer functions in soil hydrology**. Amsterdam. Elsevier, 2004. p. 357–363.

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**, Collingwood, v. 42, p. 607–614, 2002.

ELDEIRY, A.A.; GARCIA, L.A.; REICH, R.M. Soil salinity sampling strategy using spatial modeling techniques, remote sensing, and field data. **Journal of Irrigation and Drainage Engineering**, Delaware, v. 134, issue 6, p. 768-777, 2008.

ELIAS, A.E. A simplified analytical procedure for soil particle-size analysis by gamma-ray attenuation. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 42, p. 181-184, 2004.

FERNANDEZ-PIERNA, J.A.; DARDENNE, P. Soil parameter quantification by NIRS as a Chemometric challenge at 'Chimiometrie 2006', **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v. 91, p. 94-98, 2008.

FINKE, P.A.; HUTSON, J.L. Modelling soil genesis in calcareous loess. **Geoderma**, Amsterdam. v. 145, p. 462–479, 2008.

FÓTI, S.Z.; BALOGH, J.; NAGY, Z.; ÜRMÖS, ZS.; BARTHA, S.; TUBA, Z. Temporal and spatial variability and pattern of soil respiration in loess grassland. **Community Ecology, Budapest**, v. 9, p. 57-64, 2008.

FURON, A.C.; WAGNER-RIDDLE, C.; SMITH, R.; WARLE, J.S. Wavelet analysis of wintertime and spring thaw CO₂ and N₂O fluxes from agricultural fields. **Agricultural and Forest Meteorology**, Amsterdam, v. 148, p. 1305–1317, 2008.

GALVÃO, L.S.; VITORELLO, I.; FORMAGGIO, A.R. Relationships of spectral reflectance and color among surface and subsurface horizons of tropical soil profiles. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam, v. 61, p. 24-33, 1997.

GEBREMICHAEL, M.; VIVONI, E.R. Spatial sampling uncertainty in SMEX04 soil moisture fields: A data-based resampling experiment. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam, v. 112, p. 326–336, 2008.

- GENÚ, A.M.; DEMATTÊ, J.A.M. Determination of soil attribute contents by means of reflected electromagnetic energy. **International Journal of Remote Sensing**, London, v. 27, p. 4807–4818, 2006
- HANSEN, M.K.; BROWN, D.J.; DENNISON, P.E.; GRAVES, S.A.; BRICKLEMYER, R.S. Inductively mapping expert-derived soil-landscape units within dambo wetlands. **CATENA**, AMSTERDAM, using multispectral and topographic data. **Geoderma**, Amsterdam. v. 150, p. 72-84, 2009.
- HEIM, A., WEHRLI, L.; EUGSTER, W.; SCHMIDT, M.W.I. Effects of sampling design on the probability to detect soil carbon stock changes at the Swiss CarboEurope site Lägeren. **Geoderma**, Amsterdam. v. 149, p. 347–354, 2009.
- HENGL, T. **Pedometric mapping: bridging the gaps between conventional and pedometric approaches**. Enschede: International Institute for Geo-Information Science and Earth Observation (ITC), 2003. 214 p. (ITC Series 101)
- HENGL, T.; BAJAT, B.; BLAGOJEVIC, D.; REUTER, H.I. Geostatistical modeling of topography using auxiliary maps. **Computers and Geosciences**, Amsterdam, v. 34, p. 1886-1899, 2008.
- HEUVELINK, G. The definition of pedometrics. **Pedometron**, Gainesville, n. 15, p. 10, 2003.
- HUGHES, M.W.; SCHMIDT, J.; ALMOND, P.C. Automatic landform stratification and environmental correlation for modelling loess landscapes in North Otago, South Island, New Zealand. **Geoderma**, Amsterdam, v. 149, p. 92-100, 2009.
- IRONS, J.R.; WEISMILLER, R.A.; PETERSEN, G.W. Soil reflectance. In: ASRAR, G. (Ed.). **Theory and application of optical remote sensing**. New York: Wiley, 1989. chap. 3, p. 429-473.
- ISLAM, K.; McBRATNEY, A.B.; SINGH, B. Rapid estimation of soil variability from the convex hull biplot area of topsoil ultra-violet, visible and near-infrared diffuse reflectance spectra. **Geoderma**, Amsterdam, v. 128, p. 249-257. 2005.
- JANIK, L.J.; KEELING, J.L. **Quantitative determination of halloysite using FT-IR PLS analysis and its application to the characterisation of kaolins from northwestern Eyre Peninsula, South Australia**. Canberra: Division of Soils, 1996. 59 p. (Divisional Report , 129).
- JANIK, L.J., SKJEMSTAD, J.O. Characterisation and analysis of soils using mid-infrared partial least squares: II. Correlations with some laboratory data. **Australian Journal of Soil Research**, Collingwood, v. 33, p.637–650. 1995.
- JANIK, L.J.; MERRY, R.H.; SKJEMSTAD, J.O. Can mid infrared diffuse reflectance analysis replace soil extractions? **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood, v. 38, p. 681–696, 1998.

JENNY, H. **Factors of soil formation**: a system of quantitative pedology. New York: McGraw-Hill, 1941.

KERRY, R.; OLIVER, M.A. Comparing sampling needs for variograms of soil properties computed by the method of moments and residual maximum likelihood. **Geoderma**, Amsterdam, v. 140, p. 383–396, 2007.

KOJIMA, M. Relationship between size of soil particles and soil colors. **Soil and Plant Food**, Tokyo, v. 3, p. 204, 1958a.

_____. On the relation between soil color and its moisture content. **Soil and Plant Food**. Tokyo, v. 3, p. 206, 1958b.

KOOISTRA, L.; WEHRENS, R.; LEUVEN, S.E.W.; BUYDENS, L.M.C. Possibilities of visible-near-infrared spectroscopy for the assessment of soil contamination in river floodplains, **Analytica Chimica Acta**, Amsterdam, v. 446, p. 97-105. 2001.

LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B. Spatial soil information systems and spatial soil inference systems: perspectives for digital soil mapping. In: LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B.; VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**, Amsterdam: Elsevier, 2006. v. 31, p. 1-15. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective, 31)

LEGROS, J.P.; BONNERIC, P. Modelisation informatique de la repartition des sols dans le Parc Naturel Régional du Pilat. **Annales de l'Université de Savoie: Sciences Naturelles**, Chambéry, t. 4, p.63– 68, 1979.

LESCH, S.M.; CORWIN, D.L. Prediction of spatial soil property information from ancillary sensor data using ordinary linear regression: Model derivations, residual assumptions and model validation tests, **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p. 130-140, 2008.

LINKER, R. Soil classification via mid-infrared spectroscopy. **Computing Technologies in Agriculture**, Boston, v. 2, p. 1137–1146, 2008.

MACMILLAN, R.A., PETTAPIECE, W.W., AND BRIERLEY, J. A. Capturing and applying soil survey tacit knowledge: linking soils to landform position in soil landform models. In: INTERNATIONAL CONFERENCE ON INTEGRATING GIS AND ENVIRONMENTAL MODELING. GIS/EM4: PROBLEMS, PROSPECTS AND RESEARCH NEEDS, 4., 2000, Ontario. **Proceedings ...**. Banff, 2000. p. 3-10. 1CD-ROM.

MACMILLAN, R.A.; SHARY, P.A. Landforms and landform elements in geomorphometry. In: HENGL, T.; REUTER, R.I (Ed.) **Developments in soil science**, Amsterdam: Elsevier, 2009. p. 227-254. (Geomorphometry: Concepts, Software, Applications, 33)

MADARI, B.E.; REEVES, J.B.; MACHADO, P.L.O.; GUIMARAES, C.M.; TORRES, E.; MCCARTY, G.W. Mid- and near-infrared spectroscopic assessment of soil compositional parameters and structural indices in two Ferralsols. **Geoderma**, Amsterdam. v.136, p.245-259. 2006.

- MARTIN, W.K.E.; TIMMER, V.R. Capturing spatial variability of soil and litter properties in a forest stand by landform segmentation procedures. **Geoderma**, Amsterdam, v. 132, p. 169-188, 2006.
- MASSART, D.L.; VANDEGINSTE, B.G.M.; DEMING, S.N.; MICHOTTE, Y.; KAUFMAN, L. Chemometrics and the analytical process. In: _____. **Chemometrics: a textbook**. Amsterdam: Elsevier, 1988. p. 5-10
- MATHIEU, J.; GRIMALDI, M.; JOUQUET, P.; ROULE, C.; LAVELLE, P.; DESJARDINS, T.; ROSSI, J.P. Spatial patterns of grasses influence soil macrofauna biodiversity in Amazonian pastures. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam, v.41, p.586–593. 2009.
- McBRATNEY, A.; MYNASNY, B.; STEPHEN R. CATTLE, R. WILLEM VERVOORT. From pedotransfer functions to soil inference systems. **Geoderma**, Amsterdam. v. 109, p. 41-73. 2002.
- McBRATNEY, A. B.; MENDONÇA-SANTOS, M. L.; MINASNY, B. On digital soil mapping. **Geoderma**, Amsterdam. v.117, p. 3-52. 2003.
- McBRATNEY, A.B.; MINASNY, B.; VISCARRA ROSSEL, R.A. Spectral soil analysis and inference systems: A powerful combination for solving the soil data crisis. **Geoderma**, Amsterdam. v.136, p. 272-278. 2006.
- MENDONÇA-SANTOS, M.L. Traditional or Digital Soil Mapping?. **Pedometron**. Gainesville,. v. 23, p. 11-15. 2007.
- MENDONÇA-SANTOS, M.L.; SANTOS, H.G.; DART, R.O.; PARES J.G. In: HARTEMINK A.E, MCBRATNEY A.B AND MENDONÇA-SANTOS L (Ed.). **Digital soil mapping with limited data**. Dordrecht: Springer, 2008. p. 381-396.
- MINASNY, B.; McBRATNEY, A.; MENDONÇA-SANTOS, M.L.; SANTOS, H.G. **Revisão sobre funções de pedotransferência (PTFs) e novos métodos de predição de classes e atributos do solo**. Rio de Janeiro: Embrapa solos, 2003. 50.p. (Série Documentos, 45)
- MINASNY, B.; McBRATNEY, A. Incorporating taxonomic distance into spatial prediction and digital mapping of soil classes. **Geoderma**, Amsterdam. v.142, p. 285-293, 2007.
- MINASNY, B.; McBRATNEY, A.; SALVADOR-BLANES, S. Quantitative models for pedogenesis – A review. **Geoderma**, Amsterdam. v.144, p.140–157, 2008.
- MORA-VALLEJO, A.; CLAESSENS, L.; STOORVOGEL, J.; HEUVELINK, G.V.M. Small scale digital soil mapping in Southeastern Kenya. **CATENA**, Amsterdam, v.76. p. 44-53, 2008.
- MORRA, M.J.; HALL, M.H.; FREEBORN, L.L. Carbon and nitrogen analysis of soil fractions using near-infrared reflectance spectroscopy. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.55, p. 288-291, 1991.

NARAYANAN, R.M.; GREEN, S.E.; ALEXEER, D.R. Soil classification using mid-infrared off-normal active differential reflectance characteristics. **Photogrammetric Engineering and Remote Sensing**, Bethesda. v. 58, p. 193-199, 1992.

NANNI, M.R.; DEMATTÊ, J.A.M. Spectral reflectance methodology in comparison to traditional soil analysis. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.70, p. 393–407, 2006.

OBUKHOV, E.D.A.I.; ORLOV, S. Spectral reflectivity of the major soil groups and possibility of using diffuse reflection in soil investigations. **Soviet Soil Science**, Silver Spring. v. 2, p. 174-184, 1964.

ODLARE, M.; SVENSSON, K.; PELL, M. Near infrared reflectance spectroscopy for assessment of spatial soil variation in an agricultural field. **Geoderma**, Amsterdam. v.126, p. 193-202, 2005.

PALACIOS-ORUETA, A.; USTIN, S. Multivariate statistical classification of soil spectra. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam, v. 57, p. 108-118, 1996.

PALMBORG, C.; NORDGREN, A. Partitioning the variation of microbial measurements in forest soils into heavy metal and substrate quality dependent parts by use of near infrared spectroscopy and multivariate statistics. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam, v.28, p.711-720, 1996.

PALMBORG, P.; NORDGREN, A. Modeling microbial activity and biomass in forest soil with substrate quality measured using near infrared reflectance spectroscopy. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam. v. 25: p. 1713-1718, 1995.

PIRES, L.F.; BACCHI, O.O.S.; REICHARDT, K. Soil water retention curve determined by gamma-ray beam attenuation. **Soil and Tillage Research**, Amsterdam. v.82, p.89-97, 2005.

PLANET, W. G. Some comments on reflectance measurements of wet soils. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam. v. 1, p. 127-129, 1970.

PRINGLE, M.J.; MARCHANT, B.P.; LARK, R.M. Analysis of two variants of a spatially distributed crop model, using wavelet transforms and geostatistics. **Agricultural Systems**, Amsterdam. v. 98, p.135–146, 2008.

PRINGLE, M.J.; ROMANO, N; MINASNY, B.; CHIRICO, G.B.; LARK, R.M. Spatial evaluation of pedotransfer functions using wavelet analysis. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 333, p.182–198, 2007.

REEVES, J.B., III, G.W. MCCARTY, AND J.J. MEISENGER. Near infrared reflectance spectroscopy for the analysis of agricultural soils. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Charlton. v.7, p.179–193, 1999.

RIVERO, R.G; GRUNWALD, S; BRULAND, G.L. Incorporation of spectral data into multivariate geostatistical models to map soil phosphorus variability in a Florida wetland. **Geoderma**, Amsterdam, v.140. p.428–443, 2007.

SCHEINOST, A.C.; CHAVERNAS, A.; BARRÓN, V. TORRENT, J. Use and limitations of second-derivative diffuse reflectance spectroscopy in the visible to nearinfrared range to identify and quantify Fe oxides in soils. **Clays and Clay Minerals**, Chantilly, v.46, p.528-536, 1998.

SCHMIDHALTER, U.; MAIDL, F.; HEUWINKEL, H.; DEMMEL, M.; AUERNHAMMER, H.; NOACK, P.O.; ROTHMUND, M. Precision farming - adaptation of land use management to small scale heterogeneity, In: SCHRODER, P.; PFADENHAUER J.; MUNCH, J.C. (Ed.) **Perspectives for agroecosystem management**. San Diego: Elsevier, 2008. p. 121-425.

SCHMIDT, K.; BEHRENS, T.; SCHOLTEN, T. Instance selection and classification tree analysis for large spatial datasets in digital soil mapping. **Geoderma**, Amsterdam. v.146, p.138-146, 2008.

SHEIN, E.V.; ARKHANGEL'SKAYA, T.A. Pedotransfer functions: state of the art, problems, and outlooks. **Eurasian Soil Science**, New York. v. 39, p. 1089-1099, 2006.

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

SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Infrared spectroscopy - enabling an evidence based diagnostic surveillance approach to agricultural and environmental management in developing countries: **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Charlton, v.15, p.1-19. 2007.

SINDAYIHEBURA, A.; VAN MEIRVENNE, M.; VERSTRAETE, S.; NSABIMANA, S. Accounting for shape reliability in modeling contour-derived topographic properties for use in soil–terrain correlation. **CATENA**, Amsterdam, v.74, p.165–174, 2008.

SOMMER, M.; GERKE, H.H.; DEUMLICH, D. Modelling soil landscapegenesis – a “time split” approach for hummocky agricultural landscapes. **Geoderma**, Amsterdam, v.145, p.480–493. 2008.

STARK, E., LUCHTER, K., & MARGOSHES, M. Nearinfrared analysis (NIRA): a technology for quantitative and qualitative analysis. **Applied Spectroscopy Reviews**, London, v. 22, p. 335-399, 1986

SULLIVAN, D.G.; SHAW, J.N; RICKMAN, D.; MASK, P.L.; LUVALL, J.C. Using remote sensing data to evaluate surface soil properties in Alabama ultisols. **Soil Science**, New Jersey, v. 170, p. 954-958, 2005.

TELLAECHE, A.; BURGOS ARTIZZU, X.P; PAJARES, G.; RIBEIRO, A.; FERNANDEZ-QUINTANILLA, C. A new vision-based approach to differential spraying in precision agriculture. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam. v.60, p.144-155, 2008.

TEMME, J.A.M.; HEUVELINK, G.B.M.; SCHOORL, J.M.; CLAESSENS, L. Geostatistical simulation and error propagation in geomorphometry. In: HENGL, T.; REUTER, H.I. (Ed.) **Developments in soil science**. Amsterdam: Elsevier, 2009. p.121-140. (Geomorphometry: Concepts, Software, Applications, 33)

THOMASSON, J.A.; SUI, R.; COX, M.S.; AL-RAJEHY, A. Soil reflectance sensing for determining soil properties in precision agriculture. **Transactions of the ASAE**, St. Joseph, v. 44 p.1445-1453, 2001.

THOMPSON, J.A.; PENA-YEWTUKHIW, E.M.; GROVE, J.H. Soil-landscape modeling across a physiographic region: topographic patterns and model transportability. **Geoderma**, Amsterdam, v.140. p.444-453. 2007.

TRANTER, G.; MINASNY, B.; McBRATNEY, A.B.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MURPHY, B.W. Comparing spectral soil inference systems and mid-infrared spectroscopic predictions of soil moisture retention. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.72. p.1394-1400. 2008.

VÅGEN, T.G.; SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Sensing landscape level change in soil fertility following deforestation and conversion in the highlands of Madagascar using VIS-NIR spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.133, p. 281-294. 2006.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; McBRATNEY, A.B. Soil chemical analytical accuracy and costs: implications from precision agriculture. **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood, v.38, p. 765-775. 1998.

VISCARRA ROSSEL, R.A., WALVOORT, D.J.J.; McBRATNEY, A.B.; JANIK, 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.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCGLYNN, R.N.; McBRATNEY, A.B. Determining the composition of mineral-organic mixes using UV-VIS-NIR diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.137, p.70-82. 2006b.

VISCARRA ROSSEL R.A.; MCBRATNEY A.B. Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for digital soil mapping. In: HARTEMINK A.E, MCBRATNEY A.B and MENDONÇA-SANTOS L. Eds. Amsterdam, Springer, 2008, **Digital soil mapping with limited data**. p. 381-396. p. 165-172.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; CATTLE, S.R. ORTEGA, A.; FOUAD, Y. In situ measurements of soil colour, mineral composition and clay content by VIS-NIR spectroscopy, **Geoderma**, Amsterdam. v. 150, p. 253-259. 2009.

WEBSTER, R. The development of pedometrics. **Geoderma**, Amsterdam, v.62, p. 1-15. 1994.

WILFORD, J.; MINTY, B. The use of airborne gamma-ray imagery for mapping soils and understanding landscape processes. In: LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B.; VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**, Amsterdam: Elsevier, 2006, p. 207-218. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective, 31)

WETTERLIND, J.; STENBERG, B.; SODERSTROM, M. The use of near infrared (NIR) spectroscopy to improve soil mapping at the farm scale. **Precision Agriculture**, Dordrecht. v.9, p.57–69, 2008.

WORLD AGROFORESTRY CENTRE – ICRAF. Shining light on soil deficiencies. **Transformations Quarterly**. Nairobi, v.2, p.1, 2005.

ZHANG, Z.; WEI, C.; XIE, D.; GAO, M.; ZENG, X. Effects of land use patterns on soil aggregate stability in Sichuan Basin, China. **Particology**, Amsterdam, v.6, p. 157–166, 2008.

ZIMMERMANN, B.; ELSENBEER, H. Spatial and temporal variability of soil saturated hydraulic conductivity in gradients of disturbance. **Journal of Hydrology**, Amsterdam, v. 361, p. 78-95, 2008.

3 ANÁLISE QUIMIOMÉTRICA DAS RESPOSTAS ESPECTRAIS DO POTÁSSIO E MAGNÉSIO TROCAVEIS NO SOLO

Resumo

Para a avaliação das características do solo relacionadas com o seu potencial, assim como para a avaliação da fertilidade, as análises químicas e físicas de rotina são os métodos convencionalmente usados. Estes são custosos e demorados o que dificulta o uso por parte de pequenos agricultores, além da aplicabilidade da agricultura de precisão no manejo de solos. Recentemente a espectroscopia de reflectância tem surgido como uma ferramenta com o potencial de diminuição de custos e tempo na obtenção desta informação. Os atuais esforços estão sendo focados na calibração de modelos de quantificação de múltiplos atributos do solo em especial aqueles relacionados com a fertilidade e ainda não se tem atingido um nível adequado de acurácia. As necessidades tecnológicas na sua implementação comercial bem como o incremento na demanda do uso da análise de solos (para racionalização dos fertilizantes no Brasil) constitui a base do presente estudo. O principal objetivo do trabalho foi identificar as respostas espectrais do potássio e do magnésio trocáveis no solo e deste modo melhorar o desempenho preditivo de modelos de quantificação. O experimento foi desenvolvido com três classes de solos (NEOSSOLO QUARTZARÊNICO - RQ; CAMBISSOLO HÁPLICO - CX; LATOSSOLO VERMELHO - LV). A fim de verificar os atributos químicos e físicos dos solos selecionados, estes foram submetidos a análise química e granulométrica. Com o objetivo de atingir uma saturação de 100 % de K em uma das amostras de cada solo e de 100 % de Mg no restante, os solos passaram por um processo de irrigação com soluções concentradas de KCl e MgCl₂ dentro de colunas verticais de PVC. Após foram submetidos a lavagem com água destilada e deionizada com o objetivo de extrair o KCl e o MgCl₂ residuais. Foram realizadas misturas entre solos da mesma classe saturados com Mg e K com a finalidade de atingir diferentes saturações (0%K-100%Mg, 20%K-80%Mg, 40%K-60%Mg, 60%K-40%Mg, 80%K-20%Mg e 100%K-0%Mg) de cada um destes elementos. De cada amostra de solo obtida nas misturas foram coletadas leituras espectrais nas regiões VIS-NIR-SWIR (350 – 2500 nm) com espectrorradiômetro de laboratório. Para a identificação de mudanças espectrais causadas pela variação do K e Mg trocáveis no solo foram usados três métodos: a. remoção do contínuo (CR), b. análise de componentes principais (PCA), c. regressão por mínimos quadrados parciais (PLS). A PCA indicou que o grau de associação entre as variações espectrais e as variações químicas foi alto ($r > 0,78$). As bandas específicas alteradas pelas variações de K e Mg ocorreram principalmente em 2186, 2189, 2200 nm. De forma geral, as bandas que apresentaram uma resposta espectral foram aquelas relacionadas com a mineralogia do solo e matéria orgânica, fornecedoras da CTC do solo. Com base nos resultados obtidos, as bandas onde foram identificadas mudanças relacionadas aos teores de K e Mg foram separadas em leituras espectrais de amostras extraídas de uma biblioteca espectral de solos e foram feitas calibrações de modelos espectrais de K e Mg usando unicamente estas bandas. Os resultados foram comparados com obtidos de calibrações que usaram o espectro inteiro.

Palavras-chave: Quimiometria; Remoção do contínuo; Mínimos quadrados parciais; Espectroradiometria; Análise de solos

3 CHEMOMETRIC ANALYSIS OF SPECTRAL RESPONSES OF SOIL EXCHANGEABLE POTASSIUM AND MAGNESIUM

Abstract

The routine soil analysis is traditionally used on the evaluation of soil attributes related to land use potential, and the assessment of fertility. It is costly and time consuming, making it inaccessible for small farmers, and hampering the applicability of precision agriculture on soil management. Reflectance spectroscopy recently has emerged as a potential tool to reduce the cost and time of obtain soil chemical, fiscal and mineralogical information. Current efforts are focused on the model calibration for quantification of several soil attributes especially those related to soil fertility. The current requirements to achieve adequate levels of accuracy required for the commercial implementation of this technology in order to increase the demand of soil analysis and therefore the rationalization of fertilizers in Brazil is the basis of this study. The main objective of the study was to identify the spectral responses of soil exchangeable potassium and magnesium and thus improve the performance of predictive models of K and Mg. The experiment was conducted with samples of three soil classes (NEOSSOLO QUARTZARÊNICO - RQ; CAMBISSOLO HÁPLICO - CX; LATOSSOLO VERMEHLO - LV). In order to determine the chemical and physical attributes of these soils, a soil chemical and particle size analysis was carried out. With the objective of reaching a soil K saturation of 100% in one sample of each soil and Mg saturation of 100% in the remainder soil, these soils were irrigated with concentrated solutions of KCl and MgCl₂ in vertical columns and then were washing with distilled and deionized water in order to extract the residual KCl and MgCl₂. Mixtures of the same soil class were made between Mg saturated and K saturated soils to obtain different saturations (0% 100% K-Mg, 20% K-80% Mg, 40% K-60% Mg, 60% K-40 % Mg, 80% K-20% Mg and 100% K-0% Mg). For each soil sample mixture a spectral lecture was collected in the VIS-NIR-SWIR regions (350 - 2500 nm) using a laboratory spectroradiometer. For the identification of spectral changes induced by the variation of soil exchangeable K and Mg three methods were used: a. continuum removal (CR), b. principal components analysis (PCA), and c. partial least squares regression (PLS). The PCA indicated that the degree of association between the spectral and chemical variations was high ($r > 0,78$). Specific bands altered by these variations occurred mainly in 2186, 2189 and 2200 nm. The spectral responses to K and Mg occurred in spectral bands related to soil mineralogy and organic phase. Based on the results, the identified bands (related to changes of soil K and Mg contents) were extracted from the spectral data of soil samples obtained from the Brazil soil spectral library and calibrations of K and Mg models were carried out using only these bands. The results were compared with calibrations obtained using the whole spectrum.

Keywords: Chemometrics; Continuum removal; Partial least squares; Espectroradiometry; Soil Analysis

3.1 Introdução

Para a avaliação das características do solo relacionadas com o seu potencial, assim como para a avaliação da fertilidade, as análises químicas e físicas de rotina são os métodos convencionalmente usados. Através deste tipo de análise são determinadas as necessidades de

aplicação de fertilizantes e calagem, além disso estas são utilizadas como suporte para a implementação de irrigação, levantamento de solos, definição de zonas de manejo específico, entre outros. Sabendo-se que grande parte do produto interno bruto do Brasil depende do setor agrícola, é possível deduzir que a importância deste tipo de análise é bastante significativa, embora o custo destas seja um dos principais entraves nas áreas de manejo químico e de levantamento de solos. No país o uso destas análises poderia aumentar consideravelmente se o custo fosse reduzido de forma significativa, levando em conta que o setor produtor é consciente da sua importância.

Por outro lado a agricultura de precisão direcionada ao manejo de solos tem sido pouco implementada no Brasil, devido justamente a seu alto custo relativo a análises de solo. O manejo localizado de solos demanda métodos rápidos e econômicos de obtenção da informação. É consenso da comunidade científica que é necessário que sejam desenvolvidas metodologias mais rápidas e econômicas para a obtenção de mapas de solos (VISCARRA ROSSEL et al., 1998; BROWN et al., 2005; RIVERO et al., 2007; CHRISTY, 2008). Sendo que um dos custos mais altos na obtenção destes mapas é a análise de solos, uma das formas mais práticas de reduzir estes custos é precisamente reduzindo o custo destas análises.

3.1.1 O uso de fertilizantes no Brasil

Nos últimos anos se originaram sistemas de fertilização bastante intensivos, muitas vezes, desordenados, com aplicações insuficientes e desequilibradas, caracterizando sistemas de manejo sob situações de deficiência nutricional. Tal fato gera prejuízos econômicos e agrava possíveis impactos ambientais provenientes da atividade agrícola. Ademais, o uso de insumos não renováveis de grande valor, de forma excessiva e sem o devido retorno, contraria os princípios da ciência agrônoma. Nesse contexto, o potássio foi, dentre os macronutrientes, o que apresentou o maior incremento de utilização. As razões disso estão em sua baixa disponibilidade nos solos dos cerrados e na função fisiológica crucial que o potássio desempenha no crescimento e desenvolvimento vegetal. O potássio participa no metabolismo de carboidratos, influenciando diretamente a produtividade (FREITAS et al., 2007). Segundo Jones e Wild, (1975), Kowal e Kassam (1978) e Agbenin e Yakubu (2006), na agricultura intensiva em solos de cerrado se assume desde há muito tempo que o potássio é o único cátion que limita severamente a produção vegetal. Segundo Sousa Junior et al. (2006) a formulação média NPK que era de 9,42:15,76:13,29 em 1985, passou a ser de 10,47:13,79:15,49 em 1995 e de 9,86:15,18:17,18 em

2004. Dada a escassez de minérios de potássio tradicionais no Brasil, com a agravante de tal fato se verificar em todo o hemisfério sul, e a forte dependência do País em importações de matérias primas para fertilizantes (cerca de 2,5 Mt anuais a um custo de US\$ 625 milhões em 2003) com reflexo negativo na balança comercial, há necessidade de se buscarem caminhos e se encontrarem soluções que resolvam o problema, não só por razões econômicas, mas também estratégicas. O Brasil é o país latino-americano que mais que mais potássio consome na agricultura, e Sul - América e Centro - América ocupam só uma pequena percentagem na produção mundial de adubos potássicos (USGS, 2005).

Segundo a investigação feita por Nascimento e Loureiro (2004), o problema é grave em relação ao fornecimento de adubos potássicos. Com uma única mina em produção, no Estado de Sergipe (a única em todo o hemisfério sul que, em 2002, produziu 337,3 mil toneladas de K_2O equivalente), o País depende em 83,5% de importações. Em 2002 estas importações totalizaram 4,4 Mt de KCl, a um custo superior a US\$ 540 milhões. Isto evidencia a grande dependência externa. De acordo com a ANDA (2009), nos primeiros seis meses de 2007 as entregas de adubo foram 62% maiores que no mesmo período de 2006. No 2006 a quantidade de fertilizantes entregados aos produtores brasileiros foi de 20,9 milhões de toneladas, no 2007 foi de 24,6 milhões e no 2008 foi de 22,4 milhões de toneladas. Nos dois primeiros meses de 2009 tem se entregue 26% menos fertilizantes que os entregados no mesmo período do 2008. A tendência indica que o consumo de fertilizantes tem diminuído e o custo de aquisição tem aumentado. Por exemplo na cultura da cana, , atualmente para adquirir uma tonelada de fertilizante em meia é necessário produzir 36,7 toneladas, isto é 131% mais do que custava em 2006. Se os produtores estão fertilizando menos, isto pode ter sérias conseqüências nos níveis de produção, e por tanto, no impacto da atual crise econômica mundial sobre o Brasil.

É preciso que o uso dos adubos potássicos e também dos adubos magnésicos seja racionalizado. Isso só pode ser realizado mediante o ajuste de técnicas de aplicação e de análise de requerimentos de aplicação no solo que atualmente se fundamentam na análise química de rotina, as quais são custosas. Isto implica que se o custo da análise de solos é reduzido, o seu uso pode-se incrementar, o que pode facilitar de forma efetiva a racionalização.

Por outro lado, segundo Raij et al. (2001) estima-se que no Brasil o número de análises químicas de solo tenha atingido 1 milhão de amostras no ano 2001, resultando em uma grande

quantidade de reagentes gastos e resíduos produzidos além da destinação inadequada deste material, alto custo e tempo.

3.1.2 Sensoriamento próximo como ferramenta para a racionalização da adubação

Durante o transcurso desta década muitas pesquisas têm demonstrado resultados satisfatórios e apresentam o estudo da reflectância espectral como uma técnica promissora para a avaliação da fertilidade do solo (COZZOLINO; MORÓN, 2003, DEMATTÊ et al., 2004; VÅGEN et al., 2005; SØRENSEN; DALSGAARD, 2005, MADARI et al., 2006; RIVERO et al., 2007; BEN-DOR et al., 2008, DU et al., 2009). Não obstante, para que a maturidade desta técnica atinja seus objetivos devem ser feitas pesquisas para entender a natureza da relação entre a reflectância do solo e seus nutrientes (ISLAM et al., 2004). Variações induzidas do Ca em solo foram realizadas por Demattê et al., (1998) indicam que este íon pode promover um aumento na magnitude da reflectância.

Segundo Cohen et al. (2005), existe uma sólida evidência que por meio de processos analíticos, através da reflectância espectral do solo, podem ser estimada para uma grande quantidade de atributos do solo, incluso atributos que por técnicas convencionais (como as de ataque sulfúrico) são de difícil determinação.

As características de economia, e redução de tempo indicam que a espectroscopia de reflectância é uma ferramenta que permitirá grandes avanços na racionalização de recursos, o mapeamento de solos e agricultura de precisão (VISCARRA ROSSEL ; MCBRATNEY, 1998, JANIK et al., 1998; THOMASSON et al., 2001, ODLARE et al., 2005; BEN-DOR et al., 2008b).

Na Austrália, o CSRIO (*commonwealth scientific and industrial research organization*) fornece o serviço de análise de solo por espectroscopia de reflectância a um custo aproximadamente 83% menor do que o custo nos laboratórios de análise convencional de solos. Por outro lado o ICRAF (World Agroforestry Center, 2005) afirma que usando esta tecnologia o custo da análise de solos por amostra pode ser reduzido de USD 50 para USD 0,5, o que implica uma redução de 99%.

É importante então que tanto o potássio e também outros elemento nutricionais no solo possam ser avaliados com o maior detalhe possível, através de estudos de sua variabilidade espacial. Não obstante, os estudos de variabilidade espacial demandam um grande número de amostras, que são economicamente custosas e dispendiosas de analisar através dos atuais

métodos. Devido a que o sensoriamento espectral de solos possui um grande potencial na redução de custo e tempo de análise de solos, a implementação desta técnica no manejo localizado, permite um aumento da densidade amostral o que conduz a um maior detalhamento da variabilidade espacial tanto da fertilidade como dos requerimentos químicos do solo para o sustento de culturas e finalmente a um uso mais razoável da adubação.

3.1.3 Análise de rotina v.s. análise espectral - melhoramento das predições de modelos espectrais de estimativa de atributos do solo

Para tornar realidade a implementação a escala comercial do sensoriamento próximo como técnica de quantificação de atributos, é necessário que os níveis de precisão e acurácia sejam melhorados.

Em relação aos modelos espectrais de estimativa de atributos, ainda não se têm atingido níveis de acurácia ótimos em relação às metodologias convencionais, sobretudo no referente a atributos químicos. A diversidade da composição mineral do solo e o baixo teor de matéria orgânica fazem da quantificação de atributos do solo através do NIR um verdadeiro desafio (FERNANDEZ PIERNA ; DARDENEE, 2008). É importante que sejam desenvolvidas pesquisas focadas à melhora da acurácia de estimativa.

Embora as regiões espectrais inteiras do VIS-NIR-SWIR possam ser utilizadas na calibração de modelos de quantificação, a maioria das vezes, regiões não desejadas que não contêm informação relevante relacionada com o atributo de interesse podem inserir ruído nos modelos gerados assim como incrementar o tempo de processamento computacional (De LEÓN-RODRÍGUEZ). Considerações teóricas (XU; SCHECHTER, 1996, SPIEGELMAN, et al., 1998) indicam que uma cuidadosa seleção de regiões espectrais para a calibração de modelos através do método PLS pode resultar em um maior desempenho de predição destes modelos (VAIDYANATHAN et al., 2001).

Vários trabalhos usando diferentes metodologias estatísticas, têm demonstrado que com uma cuidadosa seleção de bandas ou regiões espectrais o desempenho de predição de modelos de quantificação pode aumentar (VAIDYANATHAN et al., 2001; JIANG et al., 2002; De LEÓN-RODRÍGUEZ, HEMMATEENEJAD et al., 2006; XIAOBO et al., 2007). Para estas seleções, entre as metodologias utilizadas se encontram a transformação *wavelet*, mínimos quadrados parciais por intervalos, redes neurais artificiais, projeções sucessivas, entre outros. Não obstante,

a maior parte destes trabalhos têm sido desenvolvida em áreas diferentes à de ciência do solo e poucos a partir de experimentos químicos focados à identificação de bandas eficientes.

É provável que os atuais algoritmos disponíveis não resolvam todo o problema de identificação de bandas adequadas para o melhoramento das estimativas. Sendo assim, é necessário recorrer ao desenho de experimentos (o que é ideal em solos) que permitam eliminar fontes de interferência de identificação de bandas naquela mistura complexa.

Para o planejamento do presente projeto foi levado em conta que: *a.* o solo é um mistura bastante complexa; *b.* os modelos espectrais comumente calibrados para o K e o Mg trocáveis no solo não apresentam um alto desempenho de predição (VISCARRA ROSSEL ; MCBRATNEY, 2008); *c.* a literatura indica que a identificação de bandas espectrais pode melhorar o desempenho de modelos espectrais; *d.* poucas pesquisas avaliaram individualmente a reflectância dos nutrientes; *e.* os atributos do solo que mais pesquisados por intermédio de técnicas de espectroscopia de reflectância são matéria orgânica, carbono orgânico, teor de nitrogênio e teor de ferro (VISCARRA ROSSEL et al., 2006). Desta forma este trabalho foi desenvolvido com o objetivo de identificar as respostas espectrais do potássio e do magnésio trocáveis no solo e deste modo melhorar o desempenho preditivo de modelos de quantificação.

3.2 Material e Métodos

3.2.1 Solos selecionados para o experimento e análise preliminar

Foram coletadas amostras de solo com diferentes texturas, arenosa, argilosa e muito argilosa. Os solos foram coletados em três diferentes regiões do estado de São Paulo baseados em mapas de solos existentes. Para a obtenção do solo arenoso foi selecionado um NEOSSOLO QUARTZARÊNICO (RQ), para o solo argiloso um CAMBISSOLO HÁPLICO (CX) e para o solo muito argiloso um LATOSSOLO VERMELHO (LV). O RQ e LV foram coletados a uma profundidade de 0,6 m, e o CX a uma profundidade de 0,4 m. A massa coletada de cada uma das amostras foi de 24 kg.

As amostras foram submetidas a análise química e granulométrica conforme RAIJ et al. (1987), compreendendo: determinação do pH em água, em KCl 1N e em CaCl₂; determinação de bases trocáveis (Ca⁺⁺, Mg⁺⁺, K⁺); soma de bases (SB); capacidade de troca de cátions (CTC). Na análise granulométrica o método do densímetro (CAMARGO et al., 1987) foi utilizado na

separação das frações areia ($>0,02$ mm), silte ($0,002-0,02$ mm) e argila ($<0,002$ mm), utilizando hexametáfosfato de cálcio 0,1N e hidróxido de sódio 0,1N como agentes dispersantes.

De forma paralela à análise, todos os solos coletados foram secos destorroados, moídos e peneirados em malha de 2 mm. Posteriormente cada solo foi dividido em duas partes iguais. Desta forma, de cada solo foram obtidas duas amostras de 12 kg cada uma.

3.2.2 Sistema de saturação com K e Mg nos solos

Com o objetivo atingir uma saturação de 100 % de K em uma das amostras de cada solo e de 100 % de Mg no restante, estes solos passaram por um processo de irrigação com soluções concentradas de KCl e MgCl₂ (ambas as duas ao 99% de pureza) dentro de colunas verticais (Figura 1, Figura 2). Estas colunas foram construídas com anéis de tubos de PVC rígido de 0,15 m de diâmetro, os quais foram fechados na parte inferior com uma luva redutora de esgoto com diâmetro de 0,10 m. Na base da luva foi feito um orifício no qual foi acoplada uma mangueira. Foi depositada sílica até uma altura de 0,07 m da base das colunas, e sobre está foi colocado um filtro de tela. Foram montadas duas colunas por solo, totalizando seis (Figura 2). Posteriormente, as colunas foram ajustadas a uma base metálica e em cada duas colunas foi depositado 12 kg um único solo. Desta forma duas colunas ficaram preenchidas com o LV, duas com o CX e duas com o RQ.

Foram preparadas inicialmente uma solução de KCl em água destilada e deionizada a uma concentração de 4 mol/L, com o objetivo de saturar uma coluna de cada solo com K⁺. Para a saturação com Mg⁺⁺ nas colunas restantes foi usada uma concentração inicial MgCl₂ de 3,5 mol/L. Foram usadas concentrações diferentes de KCl e MgCl₂ devido a que o KCl é menos eficiente que o MgCl₂ na extração do Al devido a que íons divalentes geralmente têm maior força de deslocamento que os monovalentes. Sendo assim, cada solução foi armazenada uniformemente em três recipientes que possuíam quatro mangueiras gotejadoras de equipo de soro na base, as quais distribuíram as soluções às colunas. Os gotejadores foram distribuídos uniformemente na parte superior da coluna e segurados por meio de uma tampa. O fluxo das soluções foi controlado por meio de reguladores nas mangueiras (Figura 1). Das duas colunas de cada solo, uma foi irrigada com KCl e a outra com MgCl₂. O produto lixiviado do solo resultante da irrigação com as soluções de KCl e MgCl₂ foi coletado em beakers de 1 L.

A série liotrópica sugerida por RAIJ (1983) indica que segundo o tamanho do íon e sua carga elétrica a ordem na que a força de ligação é maior é a seguinte: $Al^{+3} > Ca^{+2} > Mg^{+2} > K^{+} > Na^{+}$. Sendo assim, o Al é um dos elementos que mais dificilmente pode ser lixiviado. Levando em consideração que os solos apresentaram uma alta saturação de alumínio (>80%), este o monitoramento deste elemento no lixiviado serviu como indicador do progresso no nível de saturação do solo com K e com Mg. Desta forma, a cada litro de produto lixiviado, o mesmo foi submetido a análise química de alumínio feita por titulação com NaOH (0,025 mol/L). As aplicações das soluções foram suspensas no momento em que a quantidade de alumínio (determinada para o volume total do lixiviado) atingiu uma quantidade igual à encontrada em cada coluna de solo (calculada com base na análise química de rotina) e as titulações indicaram ausência (ou teor muito baixo) de alumínio no lixiviado.

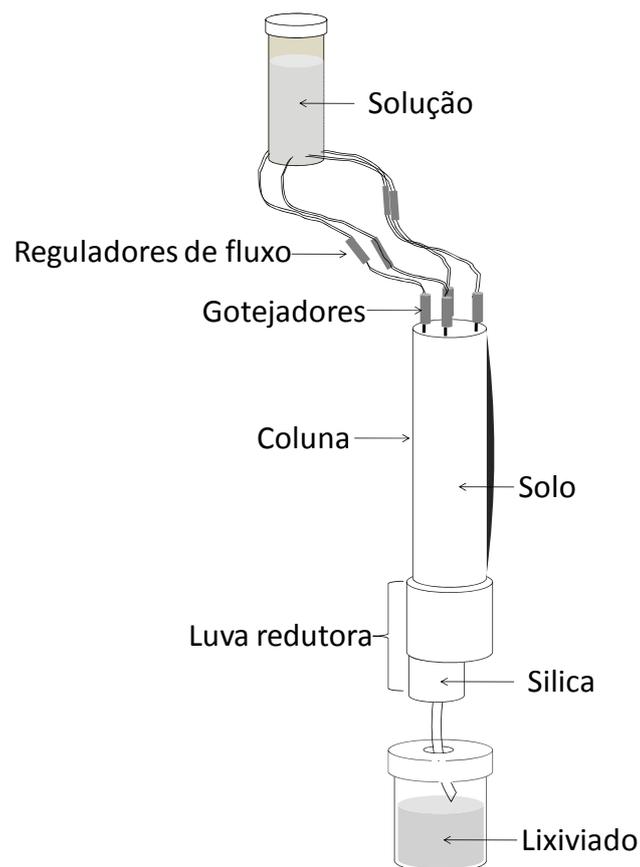


Figura 1 – Sistema de colunas montadas para saturar o solos com K e Mg



Figura 2 – Colunas verticais utilizadas para a saturação dos solos

3.2.3 Extração do KCl e MgCl₂ residuais

Após a verificação da remoção do Al nas colunas de solo, este foi submetido a lavagem com água destilada e deionizada com o objetivo de extrair o KCl e o MgCl₂ residuais. Neste processo também foi coletado o lixiviado das lavagens com a finalidade de verificar os níveis dos sais residuais no solo. Desta forma a condutividade elétrica dos lixiviados de cada coluna foi medida. Foi medida também a condutividade elétrica de quatro soluções de KCl e MgCl₂ (0,001, 0,006, 0,002 e 0,001 mol/L) com o objetivo de realizar comparações com os valores de condutividade elétrica dos lixiviados.

Após de atingir baixos níveis de condutividade elétrica nos lixiviados, os solos foram extraídos das colunas, e foram secos, destorrados e peneirados em malha de 2 mm.

3.2.4 Misturas para a obtenção de níveis diferenciados de saturações de K e Mg no solo

Foram realizadas misturas entre solos da mesma classe saturados com Mg e K com a finalidade de atingir diferentes saturações (0, 20, 40, 60, 80 e 100 %) de cada um destes elementos. A Tabela 1 apresenta as proporções de mistura utilizadas em cada solo. Desta forma

foi realizado o seguinte procedimento com o LV para se atingir os seguintes níveis de saturação: 100 % de K e 0% de Mg no solo, não foi realizada mistura, unicamente foram preparadas amostras de 800 g do solo saturado com K; 80 % de K e 20 %, foi realizada uma mistura de 640 g de solo saturado com K e 160 g de solo saturado com Mg; 60 % de K e 40 % de Mg foi realizada uma mistura de 480 g de solo saturado com K e 320 g de solo saturado com Mg; 40 % de K e 60 % de Mg foi realizada uma mistura de 320 g de solo saturado com K e 480 g de solo saturado com Mg; 20 % de K e 80 % de Mg foi realizada uma mistura de 160 g de solo saturado com K e 640 g de solo saturado com Mg; 0 % de K e 100 % de Mg não foi realizada mistura, as amostras foram coletadas diretamente do solo saturado na coluna com Mg. De cada uma das misturas foram feitas 5 repetições. Para o CX e o RQ, estes procedimentos de mistura foram repetidos, para um total de 90 misturas.

Com a finalidade de obter uma melhor distribuição do K e do Mg no solo, todas estas misturas foram depositadas em vasos para a sua incubação com água destilada e deionizada durante quatro dias. Após a incubação as amostras foram secas em estufa à 45°C durante 24 horas moídas e peneiradas com malha de 2 mm.

Tabela 1 – Proporções das misturas base feitas cada um dos solos com a finalidade de atingir as saturações desejadas

Tratamento	Saturado com K (%)	Saturado com Mg (%)	Repetições
T1	0	100	5
T2	20	80	5
T3	40	60	5
T4	60	40	5
T5	80	20	5
T6	100	0	5

3.2.5 Leituras espectrais e químicas dos solos com diferentes níveis de saturações de K e Mg no solo

De cada uma das 90 amostras resultantes das misturas foram extraídos 100 g de solo para as leituras espectrais. Estas foram colocadas nas placas de petri e através do espectroradiômetro FieldSpec (Analytical Spectral Devices, Inc., Boulder, Co) foi feito o escaneamento espectral (programado o sensor para que a leitura espectral fornecida seja uma média de 300 leituras

espectrais por amostra). Este sensor possui uma resolução espectral de 1 nm na faixa de 350 a 2500 nm (obtendo-se assim 2150 bandas espectrais por leitura). Esta faixa de medição corresponde às regiões do visível (VIS), infravermelho próximo (NIR) e ao infravermelho de ondas curtas (SWIR). Foi utilizada a geometria do sistema sensor para a aquisição dos dados conforme o indicado por DEMATTÊ et al. (1999). Os dados obtidos foram transformados para fator de reflectância de 100 %.

As 90 amostras escaneadas pelo sensor foram também submetidas a análise química de rotina determinando K, Mg, Ca, Al, H+Al, e pH. Posteriormente, foi elaborada uma base de dados na qual as informações espectrais foram inseridas junto com os respectivos resultados da análise química.

3.2.6 Análise exploratória qualitativa

Para a identificação de mudanças espectrais causadas pela variação do K e Mg trocáveis no solo foram usados métodos de remoção do contínuo (CR) (CLARK; ROUSH, 1984) a qual se baseia em uma função matemática usada para remover as feições contínuas dos espectros para isolar bandas particulares de absorção para a análise de características espectrais. Neste caso, o espectro do contínuo das amostras foi estimado usando a primeira derivada dos espectros para identificar os pontos das curvas onde se apresentaram feições de concavidade típicas. Posteriormente a reflectância das leituras obtidas foi dividida pela reflectância calculada do contínuo. A Figura 3 apresenta a reflectância espectral de um solo e o seu contínuo e a sua remoção.

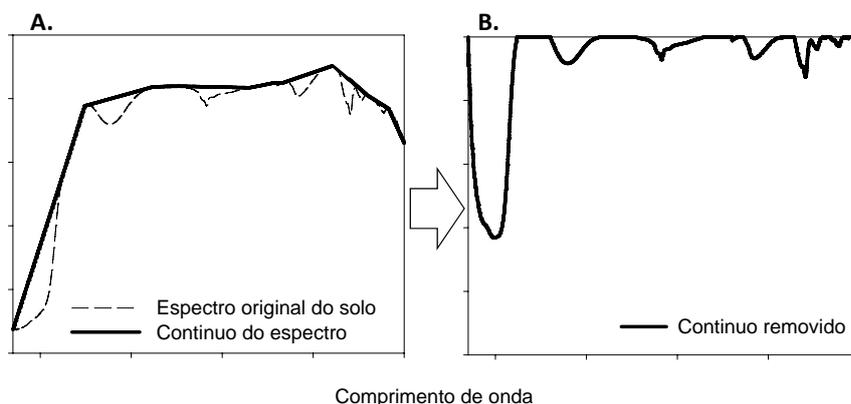


Figura 3 – Espectro de um solo e o seu espectro do contínuo (A) e espectro com o contínuo removido destacando características de absorção (B.)

3.2.7 Análise quimiométrica

Para melhorar a qualidade dos dados espectrais estes foram submetidos a correção multiplicativa de sinal (MSC) (MARTENS et al., 2003). A MSC foi aplicada por separado para os conjuntos de dados de cada solo. Os espectros foram transformados para a primeiras e segundas derivadas e suavizados usando a função Savitzky e Golay (SAVITZKY; GOLAY, 1964). A primeira derivada do espectro ressalta os efeitos aditivos de fundo a serem eliminados enquanto tanto que a segunda derivada remove as variações de inclinação produzidas pelo ruído e os efeitos aditivos (ZEAITER et al., 2005).

3.2.7.1 Identificação de *outliers* nas leituras espectrais e análise química

Para facilitar a identificação de *outliers*, os dados espectrais (correspondentes às bandas na faixa 350 - 2500 nm) foram comprimidos por meio de uma análise de componentes principais (PCA). Por meio da PCA foram obtidas novas variáveis que representaram grande parte da variabilidade das variáveis ou bandas originais. Com estas novas variáveis as amostras espectrais atípicas foram identificados usando a distancia de mahalanobis (Eq 1) e tomando como *outliers* as amostras com distancias maiores a 3. Este procedimento é amplamente usado na identificação de *outliers* em dados multivariados (De MAESSCHALCK et al., 2000) e é descrita a seguir,

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^T C^{-1} (x_i - x_j)} \quad (\text{Eq. 1})$$

onde x_i é um vetor que representa os *scores* dos primeiros componentes principais dos dados espectrais, x_j é o centróide destes scores, C^{-1} é a matriz de covariância destes *scores* para o conjunto de amostras. Este mesmo procedimento foi adotado para o conjunto de atributos físico-químicos. As amostras identificadas como *outliers* foram escaneadas novamente no caso dos dados espectrais, e no caso dos dados químicos de rotina, estas foram submetidas a uma nova análise. As amostras persistiram como *outliers*, foram eliminadas.

3.2.7.2 Identificação e análise dos efeitos do K e do Mg trocáveis sobre a resposta espectral do solo

Foi realizada uma análise de componentes principais (PCA) e mínimos quadrados parciais ou projeção sobre estruturas latentes (*projection to latent structures*) (PLS) (WOLD, 1982). Estas duas técnicas baseiam-se na compressão de dados. A PCA foi desenvolvida com o objetivo de identificar as variações espectrais sem incluir os dados dos dados químicos do Ke Mg do

laboratório de análise de rotina. Não obstante, os dados dos teores de K e Mg foram relacionados com os dados obtidos na PCA.

A análise PLS consiste na utilização de um novo sistema de coordenadas para descrever a localização das variáveis diminuindo a dimensionalidade destas, as quais podem estar correlacionadas. A PLS é desenvolvida basicamente nas seguintes etapas:

São calculados os *loadings* dos vetores de ponderação

$$W_1 = c \cdot X_0 \cdot y_0 \quad \text{Eq.2}$$

onde w_l são os pesos de cada uma das regiões do espectro, X_0 é a matriz dos dados espectrais e y_0 é a matriz do atributo que se deseja modelar, c é o fator escalar que é calculado por

$$c = (y_0^T \cdot X_0 \cdot X_0^T \cdot y_0)^{-0.5} \quad \text{Eq.3}$$

os *scores* e os *loadings* são calculados por

$$\hat{t}_1 = X_0 \cdot \hat{w}_1 \quad \text{Eq.4}$$

onde \hat{t}_1 é uma matriz de uma coluna (*Scores* da reflectância)

$$p_1 = \frac{(X_0^T \cdot \hat{t}_1)}{\hat{t}_1^T \cdot \hat{t}_1} \quad \text{Eq. 5}$$

onde p_1 é uma matriz de uma coluna (*Loadings* da reflectância)

$$q_1 = \frac{(y_0^T \cdot \hat{t}_1)}{\hat{t}_1^T \cdot \hat{t}_1} \quad \text{Eq. 6}$$

e onde q_1 é uma matriz de uma coluna e uma fila (um único valor) (*Loadings* do atributo). Desta forma os coeficientes de regressão (" b ") podem ser calculados por

$$b = W(p^T \cdot W)^{-1} \cdot q \quad \text{Eq. 7}$$

e é calculado também o fator de correção

$$b_0 = y - X^T b \quad \text{Eq. 8}$$

assim a estimativa do atributo pode ser feita por

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^n (R_i \cdot b_i) \quad \text{Eq. 9}$$

onde Y é o valor do atributo modelado, b_0 é o fator de correção, b_i são os coeficientes de regressão para cada região do espectro e R_i é a reflectância em cada região do espectro. Uma das características deste método de regressão é que esta pode ser melhorada através das matrizes de

resíduos da regressão inicial. Assim, se realiza uma nova regressão minimizando estes resíduos e obtendo novos coeficientes b . Estas matrizes são calculadas por:

$$X_1 = X_0 - t_1 \cdot p_1^T. \quad \text{Eq. 10}$$

$$y_1 = y_0 - t_1 \cdot q_1^T. \quad \text{Eq. 11}$$

onde X_l e y_l são as novas matrizes a partir das quais é realizada a nova regressão. Este procedimento pode ser repetido varias vezes minimizando cada vez mais os resíduos ou o erro e melhorando assim ate certo ponto as regressões, se o procedimento é realizado n vezes se diz que se tem usado um número n de fatores PLS.

Na análise feita através do método de regressão PLS, os dados dos atributos químicos de rotina foram incorporados. Nesta etapa foi usada uma variação do método PLS chamada PLS-2, a principal diferença entre os dois algoritmos é que com o PLS-2 podem ser realizadas calibrações de múltiplos atributos correlacionados, de forma simultânea (MARTENS ; NAES, 1991). Assim, a análise da variação espectral em resposta às variações químicas foi realizado em forma simultânea para o K e o Mg.

Como a regressão PLS incorpora nos seus algoritmos os dados dos atributos químicos, foi necessário aplicar um teste da incerteza da informação obtida, para isto foi implementado o teste de incerteza de Materns (MARTENS ; MARTENS, 2000) que fornece de forma informação sobre a estabilidade da modelagem de dados feita no PLS, este teste baseia-se no método de reamostragem é desenvolvido usando validação cruzada. Neste caso o método de validação escolhido para os testes de incerteza foi o *leave-one-out* o qual faz uma série de regressões onde em cada uma destas é deixado de fora a informação de uma das amostras. Desta forma levando em conta que cada solo possuía um total de 30 amostras, foram gerados 30 modelos espectrais por solo, os quais foram recomputados para gerar um modelo definitivo e sobre os quais foi feita a avaliação da estabilidade. Assim, foram obtidas bandas espectrais sem variação significativa nos 30 modelos gerados chamadas de bandas estáveis e são as que possuem maior importância nas projeções.

As regressões PLS têm sido amplamente utilizadas apresentado bom desempenho na estimativa de atributos baseada no comportamento espectral do solo (McBRATNEY et al., 2006; VISCARRA ROSSEL et al., 2008; VASQUES et al., 2008; ZORNOZA et al., 2008; FERNANDEZ PIERNA ; DARDENNE, 2008).

Do conjunto de amostras de cada solo foi extraída uma repetição de cada uma das misturas. Com as amostras restantes, foi desenvolvida análise PLS para os conjuntos de amostras de cada solo. As amostras extraídas inicialmente foram utilizadas em uma validação cruzada (teste de validação externa) e com a finalidade de verificar o número adequado de fatores PLS foram avaliados os seguintes parâmetros: o coeficiente de determinação (R^2), (Eq. 12) raiz quadrada do erro meio quadrático (RMSE) (Eq. 13), o erro meio (ME) (Eq. 14), e o desvio padrão do erro (SDE) (Eq. 15). Os *PCA-scores* e *PLS-scores* foram usados para verificar as correlações com a variação do K e Mg no solo, enquanto que os *PLS-loadings* foram usados para a identificação das regiões espectrais com variação significativa.

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2} \quad \text{Eq. 12}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad \text{Eq. 13}$$

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i) \quad \text{Eq. 14}$$

$$SDE = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i - ME)^2}{1 - N} \quad \text{Eq. 15}$$

As bandas com mudanças significativas foram extraídas do espectro inteiro e posteriormente foi feita uma nova PLS com a finalidade de verificar a influencia de seleção de bandas no desempenho de modelos espectrais de predição destes atributos.

3.2.7.3 Seleção de bandas em amostras de solo obtidas em condições reais de campo e calibração de modelos espectrais de quantificação de K e Mg

Da biblioteca espectral de solos do laboratório de sensoriamento remoto do Departamento de Ciência do Solo da USP/ESALQ, foram obtidos 216 espectros de reflectância os quais possuíam os seus correspondentes dados laboratoriais de análise química. Tanto a geometria do sistema sensor, como o espectroradiômetro usado para a aquisição dos dados extraídos da biblioteca foi a mesma utilizada no presente trabalho. Os dados selecionados correspondem à região de Piracicaba no estado de São Paulo. O conjunto de dados selecionado foi dividido um

subgrupo de calibração (180 amostras) e um de validação (36 amostras). As amostras de validação foram selecionadas usando uma amostragem estratificada através do método de amostragem por hipercubo latino condicionado (cLHS) (MINASNY ; MCBRATNEY, 2006) usando as tres primeiras componentes principais dos espectros.

Nesta etapa do trabalho, o método de regressão usado foi o PLS-1. Através deste método foram realizadas calibrações de modelos espectrais para a quantificação de K e Mg usando a região VIS-NIR-SWIR inteira (350 – 2500 nm).

Com a finalidade de verificar a eficiência das faixas espectrais identificadas no experimento no melhoramento do desempenho preditivo de modelos de K e Mg, foram realizadas novas calibrações usando o mesmo método de regressão, porém, usando unicamente as regiões espectrais significativamente influenciadas pela variação destes elementos. Finalmente o desempenho preditivo e as características de ambos os dois métodos de calibração usados (calibração com região VIS-NIR-SWIR inteira e calibração com bandas selecionadas) foi comparada. A Figura 4 apresenta o fluxograma de processos seguidos no presente trabalho.

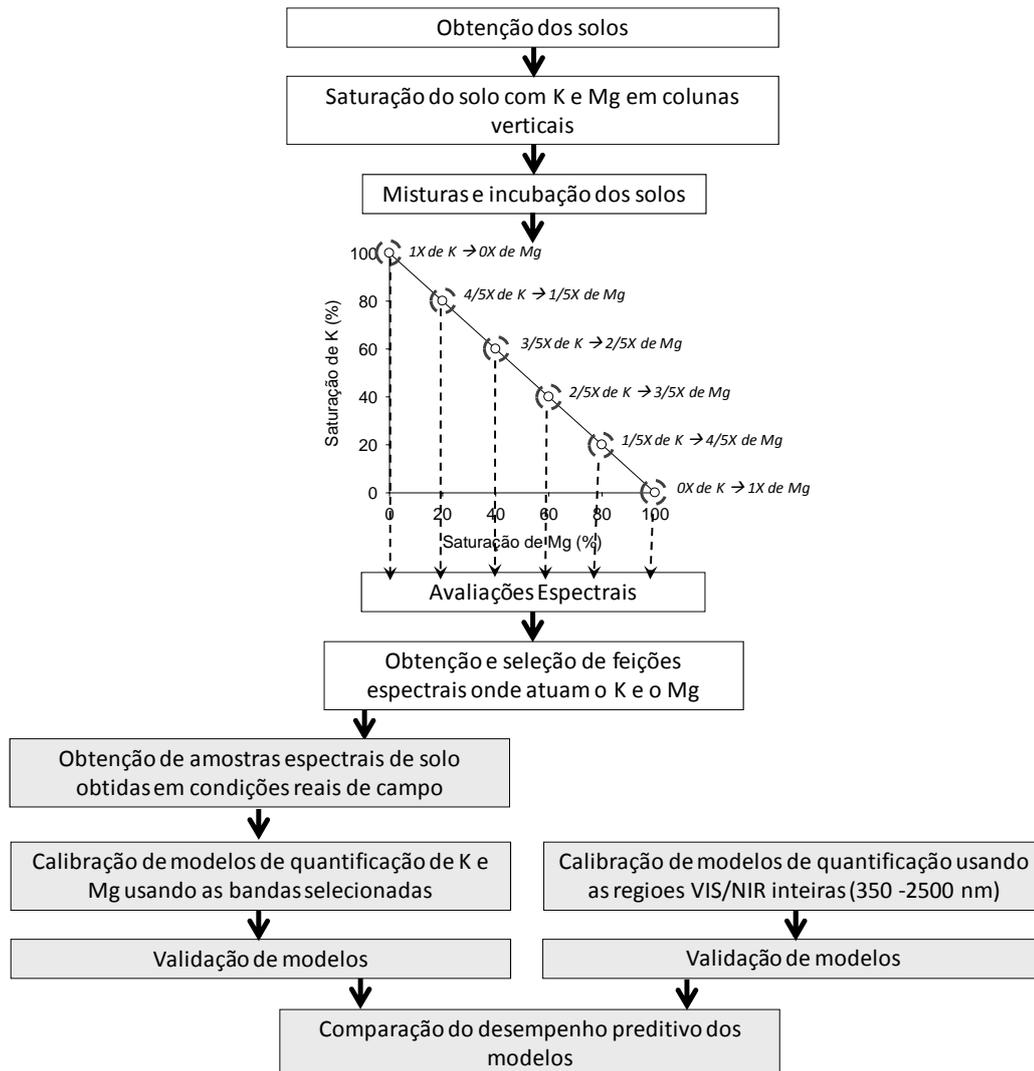


Figura 4 – Fluxograma de processos desenvolvidos para a avaliação das respostas espectrais do K e do Mg no solo

3.3 Resultados e Discussão

3.3.1 Análise química preliminar

Os solos coletados apresentaram altas saturações de alumínio (>65%) e diferenças contrastantes em quanto a sua distribuição textural (Tabela 2). O Cambissolo (CX) apresentou uma baixa porcentagem de areia e teores de silte e argila elevados. O Neossolo (RQ) apresentou uma porcentagem alta de areia e baixa porcentagem de silte e argila. O Latossolo (LV) apresentou elevado teor de argila com baixas de areia e silte. Desta forma os solos foram classificados texturalmente como argiloso, arenoso e muito argiloso respectivamente (EMBRAPA, 2006). Por outra parte, os teores de K e Mg nos solos foram baixos com saturações

menores que 3,4%, e 10% respectivamente. A CTC do CX foi significativamente maior que no RQ e LV, justamente devido à mineralogia 2:1.

Tabela 2 – Resultados da análise dos solos coletados para o experimento

	Unidades	Cambissolo CX	Neossolo RQ	Latossolo LV
Areia grossa	%	0	43	3
Areia fina	%	2	45	13
Areia total	%	2	88	16
Silte	%	43	4	9
Argila	%	55	8	75
pH _{CaCl2}		3,9	4	4,1
M.O	g kg ⁻¹	16	16	19
P	mg dm ⁻³	2	4	1
K	mmol _c kg ⁻¹	2,9	0,3	0,5
Ca	mmol _c kg ⁻¹	16	4	2
Mg	mmol _c kg ⁻¹	13	1	1
Al	mmol _c kg ⁻¹	99	10	11
H+Al	mmol _c kg ⁻¹	347	47	64
SB	mmol _c kg ⁻¹	31,9	5,3	3,5
T	mmol _c kg ⁻¹	378,9	52,3	67,5
V	%	8	10	5
m	%	76	65	76
Sat Ca	%	12,2	26,1	13,8
Sat. K	%	2,2	2,0	3,4
Sat. Mg	%	9,9	6,5	6,9

SB: soma de bases; T: capacidade de troca de cátions; V: saturação por bases; m: saturação por alumínio; Sat.: saturação.

3.3.2 Saturação dos solos, com K e Mg

A maior parte do Al trocável do solo foi removido dos solos após de 12 aplicações com concentrações de soluções que variaram gradualmente de 4 mol/L até 0,5 mol/L no caso das colunas de solo tratadas com KCl, e de 3,5 mol/L até 0,5 mol/L no caso das tratadas com MgCl₂ (a primeira aplicação agrupa a serie de aplicações feitas até a coleta do primeiro lixiviado). As titulações do lixiviado para a determinação do Al deslocado na coluna do CX com aplicações de KCl indicaram que o seu teor pode ter sido maior que o estimado na análise de solo inicial. O Al deslocado acumulado nesta coluna foi estável a partir da segunda aplicação devido a que a maior parte deste elemento foi removido com a primeira aplicação de KCl (Figura 5). A maior remoção de Al foi feita de forma geral com aplicações de KCl devido às maiores concentrações utilizadas.

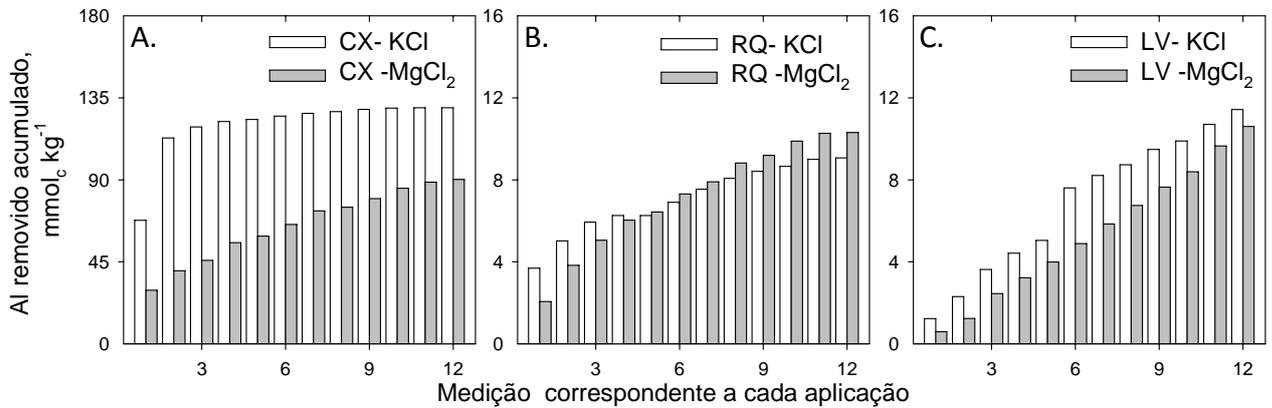


Figura 5 – Alumínio removido acumulado em cada uma das medições correspondentes às aplicações de KCl e $MgCl_2$ feitas para as colunas de solo. A. Cambissolo, B. Neossolo, C. Latossolo

Os valores de condutividade elétrica (CE) dos lixiviados obtidos na primeira lavagem foram em todos os casos maiores que $700 \mu S cm^{-1}$ indicando que a presença de sais nas colunas de solo ainda era alta. Os valores finais da CE obtidos nos lixiviados da última lavagem foram de 5 e $10 \mu S cm^{-1}$ para o CX tratado com $MgCl_2$ e KCl respectivamente, de 16 e $17 \mu S cm^{-1}$ para o RQ tratado com $MgCl_2$ e KCl respectivamente e de 157 e $210 \mu S cm^{-1}$ para o LV tratado com $MgCl_2$ e KCl respectivamente. Estes valores associados aos valores de condutividade elétrica das diferentes soluções de $MgCl_2$ e KCl (0,001, 0,006, 0,002 e 0,001 mol/L) (Figura 6) indicaram que os resíduos de $MgCl_2$ e KCl foram retirados dos solos.

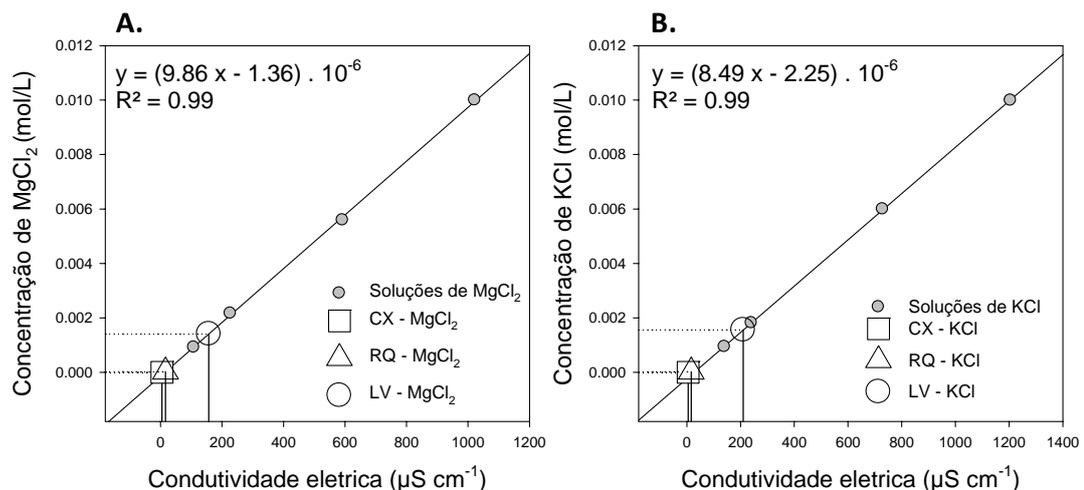


Figura 6 – Valores de condutividade elétrica de soluções de $MgCl_2$ (A) e KCl (B) em diferentes concentrações. Valores finais de condutividade elétrica dos lixiviados de cada solo em cada coluna associados a valores de concentração de $MgCl_2$ (A) e KCl (B)

3.3.3 Teores de K e Mg atingidos com as misturas de solos

As análise química das amostras de solos obtidas com as misturas (Tabela 3) indica que de forma geral os níveis de saturação de K e Mg variou amplamente. Os tratamentos T1 (tratado com KCl e sem mistura com solo tratado com $MgCl_2$) e T6 (tratado com $MgCl_2$ e sem mistura com solo tratado com KCl) indicam as condições finais dos solos tratados nas colunas.

Para o CX, a comparação entre o T1 e o T6 confirmou que o alumínio foi removido em maior quantidade no tratamento com KCl. Por outra parte, no CX tratado com KCl, se estimou que houve um deslocamento do 95% do Al sendo que o valor inicial deste elemento foi de $99 \text{ mmol}_c \text{ kg}^{-1}$ (Tabela 2) e o valor final de $5,4 \text{ mmol}_c \text{ kg}^{-1}$ (Tabela 3). O Al+H neste solo diminuiu de 347 para $73 \text{ mmol}_c \text{ kg}^{-1}$ (Tabela 2, Tabela 3) com as aplicações das soluções de KCl, e o pH aumentou de forma significativa de 3,9 para 4,6. O anterior indica que ocorreu um deslocamento de íons H. Isto pode ser explicado por uma condição de baixa drenagem seguida por alagamento que se apresentou especificamente na coluna do CX tratado com KCl durante um período do desenvolvimento do experimento. Souza et al. (2006) indicam que quando solos ácidos passam a condições de alagamento, o pH do solo aumenta, sendo que inicialmente acontece uma diminuição deste devido ao acúmulo de CO_2 e o posterior aumento do pH ocorre a causa das reações de oxirredução que se processam com consumo de hidrogênio. Levando em consideração que o íon K não possui a força suficiente para deslocar o hidrogênio do solo e que o CX utilizado no experimento possuía caráter alítico (EMBRAPA, 2006) a saída do hidrogênio do solo é atribuída ao alagamento. A coluna do CX tratado com $MgCl_2$ apresentou um período mais curto de alagamento. O alagamento no CX atribui-se a dois fatores: a presença de argilas 2:1 que com a aplicação das soluções expandiram e diminuíram o espaço poroso do solo e baixa microagregação, dificultando a drenagem.

Por outra parte, no RQ e LV a drenagem foi normal, não ocorrendo variações significativas do pH. O H+Al permaneceu constante e a saturação de alumínio diminuiu em média até 28% no RQ e 39% no LV. Nos três solos as saturações de Mg e K (Tabela 2, Figura 7) variaram amplamente e de forma consistente, sendo que a saturação de Mg diminuiu gradualmente do T1 para o T6, e a saturação de K aumentou gradualmente do T1 para o T6. No CX a saturação de Mg no T1 e T6 foi de 85,3 e 0,5% respectivamente, no entanto, a saturação de K no T1 foi de 0,4% e no T6 foi de 97,6%. No caso do RQ a saturação de Mg no T1 e no T6 foi de 56 e 1,7% e a saturação de K no T1 e T6 foi de 0,48 e 43,1 respectivamente. No LV a saturação de Mg no T1 e

no T6 foi de 51,3 e 3% respectivamente e a saturação de K no T1 e T6 foi de 4,7 e 52,5 respectivamente

Tabela 3 – Atributos químicos dos solos dos tratamentos

	Unidades	T1	T2	T3	T4	T5	T6
Cambissolo Háplico – CX							
pH _{CaCl2}		4,3	4,3	4,4	4,4	4,5	4,6
K	mmol _c kg ⁻¹	0,4	51,4	102,4	190,8	256,4	356,1
Mg	mmol _c kg ⁻¹	84,7	77,1	69,4	53,7	27,3	1,7
Ca	mmol _c kg ⁻¹	1,8	1,5	1,1	0,8	0,5	1,8
Al	mmol _c kg ⁻¹	12,5	11,9	11,3	9,9	8,3	5,4
H+Al	mmol _c kg ⁻¹	115,9	108,1	100,4	93,7	84,0	73,8
Sat. Mg	%	85,3	54,4	37,7	21,0	9,3	0,5
Sat. K	%	0,4	36,2	55,6	74,8	87,7	97,6
Neossolo Quartzarênico – RQ							
pH _{CaCl2}		4,2	4,3	4,3	4,3	4,3	4,3
K	mmol _c kg ⁻¹	0,1	1,2	2,4	2,5	3,9	6,3
Mg	mmol _c kg ⁻¹	7,3	8,8	5,3	3,4	1,2	0,2
Ca	mmol _c kg ⁻¹	2,4	3,9	3,2	1,2	1,2	1,2
Al	mmol _c kg ⁻¹	3,2	2,8	3,0	2,7	2,7	6,8
H+Al	mmol _c kg ⁻¹	31,2	32,7	32,4	31,4	30,3	32,9
Sat. Mg	%	56,5	52,5	38,0	34,6	13,8	1,7
Sat. K	%	0,48	7,4	17,4	25,6	43,1	43,1
Latossolo Vermelho – LV							
pH _{CaCl2}		4,1	4,2	4,1	4,1	4,1	4,2
K	mmol _c kg ⁻¹	0,5	2,6	3,7	5,7	7,2	8,4
Mg	mmol _c kg ⁻¹	4,9	3,3	3,0	2,1	0,9	0,5
Ca	mmol _c kg ⁻¹	1,1	1,1	1,0	1,4	1,5	1,3
Al	mmol _c kg ⁻¹	3,1	6,2	6,6	5,7	6,2	5,8
H+Al	mmol _c kg ⁻¹	64,4	64,9	62,7	63,1	64,5	65,8
Sat. Mg	%	51,3	25,0	21,2	14,3	5,7	3,0
Sat. K	%	4,7	19,6	25,5	38,1	45,9	52,5

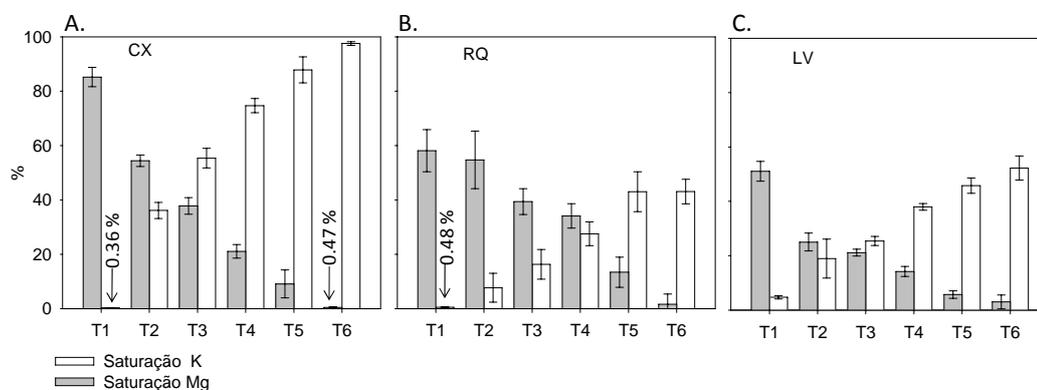


Figura 7– Variação das saturações de K e Mg nos tratamentos. A. Cambissolo, B. Neossolo, C. Latossolo

Uma análise de correlação entre os atributos dos tratamentos (Tabela 4) indicou que no CX as variações de K e Mg estiveram relacionadas as variações do pH, Al, e H+Al. Estas variações foram provocadas principalmente pelas misturas de um solo com maior teor (CX tratado com MgCl₂, T1) e um com menor teor de Al (CX tratado com KCl, T6). Na medida em que a proporção de solo tratado com MgCl₂ nas amostras de mistura aumentou, o Al também se incrementou (Tabela 4).

No RQ o Al também apresentou uma relação direta com o K, não entanto no LV não se apresentou correlação entre atributos, além da correlação entre o K e Mg. Embora os atributos correlacionados com o Mg e o K possam interferir no processo de identificação de respostas espectrais (devido a colinearidade), as variações dos atributos correlacionados foram pequenas em relação às variações do K e do Mg, desta forma o impacto sobre dito processo pode ser também baixo.

Tabela 4 – Matrizes de correlação entre atributos para as 30 amostras obtidas de cada solo correspondentes aos 6 tratamentos e às 5 repetições

	pH	K	Mg	Ca	Al	H+Al
Cambissolo - CX						
pH	1					
K	0,97	1				
Mg	-0,94	-0,95	1			
Ca	-0,09	-0,11	0,11	1		
Al	-0,76	-0,76	0,73	-0,09	1	
H+Al	-0,97	-0,97	0,93	0,18	0,72	1
Neossolo - RQ						
pH	1					
K	0,49	1				
Mg	-0,41	-0,80	1			
Ca	-0,23	-0,26	0,48	1		
Al	0,13	0,70	-0,49	-0,21	1	
H+Al	-0,15	0,10	0,01	0,13	0,27	1
Latossolo - RQ						
pH	1					
K	0,08	1				
Mg	-0,03	-0,94	1			
Ca	0,14	0,45	-0,35	1		
Al	0,05	0,49	-0,55	0,12	1	
H+Al	0,03	0,10	-0,20	-0,22	-0,12	1

3.4 Análise espectral exploratória qualitativa

A análise das curvas de reflectância dos solos (Figura 8) mostrou características típicas da mineralogia destes solos. As curvas espectrais dos três solos e especificamente as faixas de absorção de argilominerais apresentou formatos diferentes, o que indicou diferenças na composição mineralógica destes solos. A curva do CX apresentou fortes feições de absorção nos 1400, 1900 e 2200 nm (Figura 8A). Este solo apresentou uma maior reflectância que o CX e o RQ atribuída principalmente ao elevado teor de silte e à cor, concordando com Demattê e Garcia (1999). A curva do RQ (Figura 8B) indica que a reflectância neste solo é também alta, o que é causado principalmente por o teor de areia, sendo que o quartzo desta fração reflete grande quantidade de energia (WHITE et al., 1997). O LV apresentou baixa reflectância (Figura 8C), fenômeno atribuído à alta quantidade de energia absorvida pelos óxidos de ferro (DEMATTÊ et al., 2003; FERNANDES et al., 2004). O contínuo removido (CR) dos dados espectrais dos solos utilizados (Figura 9) indicam presença abundante de óxidos de ferro no LV devido a que este apresentou forte faixas com picos entre os 410 – 530 nm e 830 – 950 nm, os quais se encontram reportados amplamente na literatura como faixas espectrais de absorção de energia pelos óxidos de Fe (STONER et al., 1980; EPIPHANIO et al., 1992; SCHEINOST et al., 1998; DEMATTÊ; GARCIA, 1999; FERNANDES et al., 2004; RICHTER et al., 2009). O LV e o RQ apresentaram feições de absorção típicas da caulinita nos 2180 nm (Figura 9) caracterizada por um degrau na parte esquerda da faixa de absorção entre 2100 – 2300 nm (CLARK et al., 1999; VISCARRA ROSSEL et al., 2009). O LV também apresentou um pico nos 2265 nm atribuído à presença de gibbsita (MADEIRA-NETTO et al., 1996; DEMATTÊ et al., 2004; VISCARRA ROSSEL et al., 2009) não entanto o RQ não apresenta pico nenhum nessa faixa indicando a ausência deste mineral. O CX apresentou feições típicas de solos constituídos por argilas 2:1 tais como micas, esmectitas e vermiculitas nas faixas dos 1400, 1900 e 2200 nm devido à quantidade de moléculas de OH presentes nestes minerais (DEMATTÊ; GARCIA, 1999; CLARK, 1999, DEMATTÊ et al., 2004; GOETZ et al., 2009).

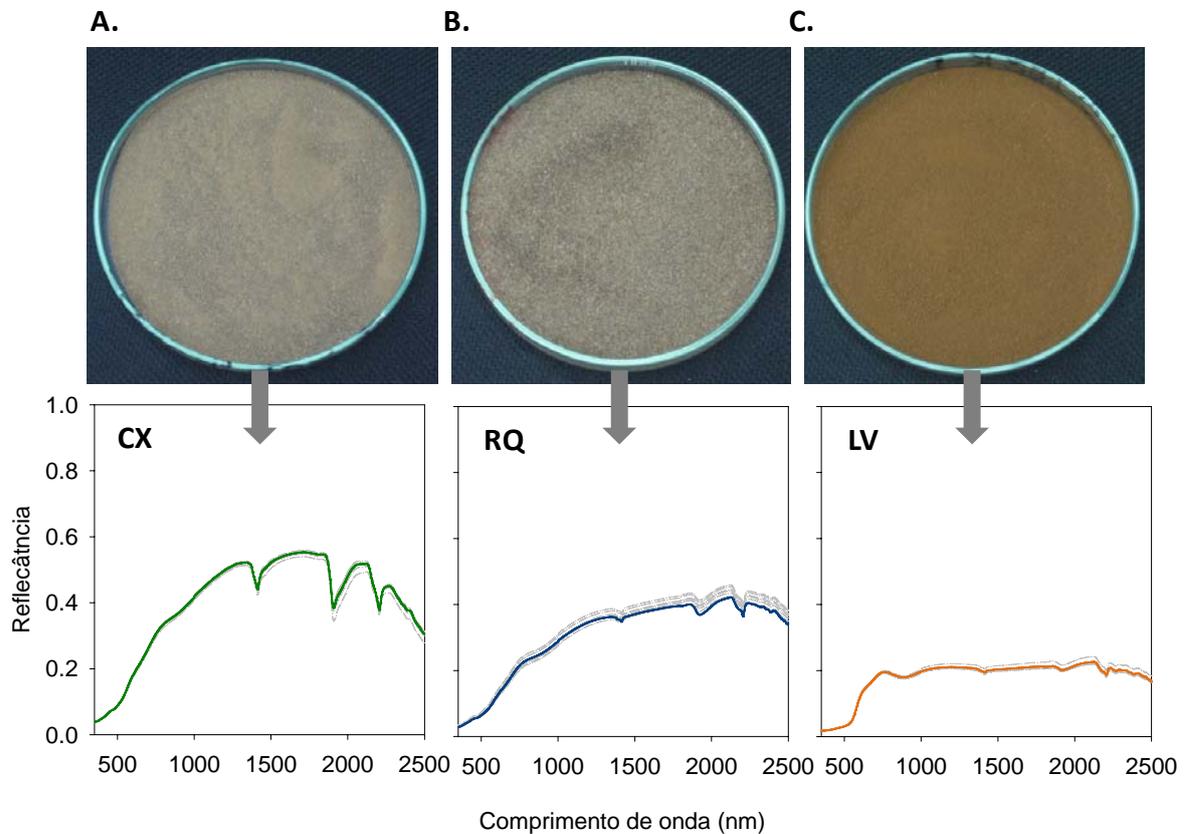


Figura 8 – Espectros de reflectância e amostras dos solos utilizados no experimento. A. Camissolo, B. Neossolo, C. Latossolo. Variações. As curvas cinza representam a reflectância espectral média dos tratamentos em cada solo

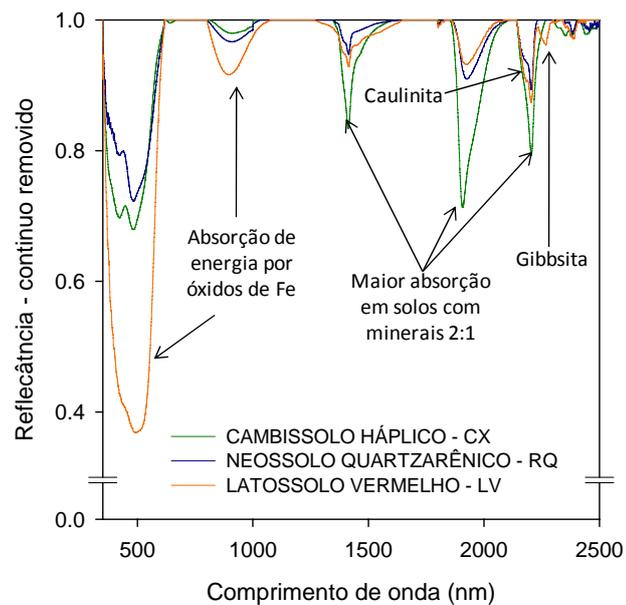


Figura 9 – Espectros de reflectância do contínuo removido (CR) dos solos utilizados no experimento

3.3.4.1 Remoção do contínuo (CR) nos espectros de reflectância das amostras dos tratamentos

Na região SWIR (1100 – 2500 nm) ocorreram mudanças de bandas de absorção consistentes com os tratamentos aplicados e a provável mineralogia destes solos, o que é atribuído a que nesta região apresentam-se importantes respostas espectrais da maioria dos argilominerais (BEN-DOR et al., 2008b). O CR das amostras dos tratamentos variou principalmente dentro das faixas 1350 – 1650, 1800 – 2150 e 2110 – 2150 nm nas quais os argilominerais possuem respostas espectrais. A faixa de absorção entre os 1350 – 1650 nm no CX (Figura 10A) apresentou uma ampla variação consistente com os tratamentos utilizados no experimento, sendo que a absorbância aumentou do tratamento com maior teor de Mg e menor teor de K (T1) para o tratamento com menor Mg e maior teor de K (T6). Neste solo na faixa entre 1800 – 2150 nm a variação da reflectância também foi ampla, sendo que as amostras absorveram maior quantidade de energia na seqüência do T6 para o T1 (Figura 10D). Levando em consideração que a absorção de energia nestas faixas estão relacionadas diretamente com a presença e quantidade de argilominerais 2:1 as mudanças na absorção também podem estar relacionadas com a presença e quantidade do Mg e do K nestes minerais. No RQ não foram observadas mudanças nestas faixas relacionadas com os tratamentos (Figura 10B, E). No LV não houve mudanças na faixa 1350 – 1650 nm relacionadas aos tratamentos (Figura 10C), não obstante na faixa de 1800 – 2150 nm estes aparentemente influenciaram a absorção de energia. No caso, os tratamentos T1, T2 e T3 apresentaram maior absorbância que T4, T5 e T6 (Figura 10F).

Em solos com argila de baixa atividade como os RQ e LV, na faixa dos 2100 – 2400 nm se apresentam múltiplas feições de absorção de argilominerais tais como a caulinita, gibbsita e esmectita (DEMATTE et al., 2004; DEMATTE et al., 2007) foram encontradas respostas espectrais relacionadas à variação dos tratamentos (Figura 11). Todos os solos apresentaram um decréscimo gradual da absorbância do T1 para o T6 nos 2200 nm e nos 2180 nm, nesta última banda não foi observada a feição da caulinita (2180 nm) no CX (Figura 10A) devido a que este solo carece deste tipo de mineral o que é atribuído ao baixo desenvolvimento pedogenético que caracteriza estes solos. O formato e a variação da feição da caulinita foram diferentes no RQ e LV (Figura 11B, C) indicando possíveis diferenças nos teores e tipos de caulinita entre estes dois solos. A variação da absorbância do LV na faixa da caulinita apresentaram-se dois picos bastante

suaves nas bandas correspondente a 2186 e 2189 nm. Não obstante os dois picos tenham aumentado a sua absorvância na seqüência de T6 para T1, foi observado um aumento gradual da inclinação entre o pico 2186 nm em relação ao pico 2189 na seqüência de T6 para T1 (Figura 11C). Por outra parte o LV mostrou claramente a feição da gibbsita (2265 nm) por ser um solo mais intemperizado. O CX e o RQ, solos mais jovens não apresentaram a banda da gibbsita, mas foi observado um incremento gradual do absorvância de T6 para T1 (Figura 11). As alterações espectrais, causadas por elementos trocáveis aqui reportados concordaram com observações feitas por Demattê et al. (2004b).

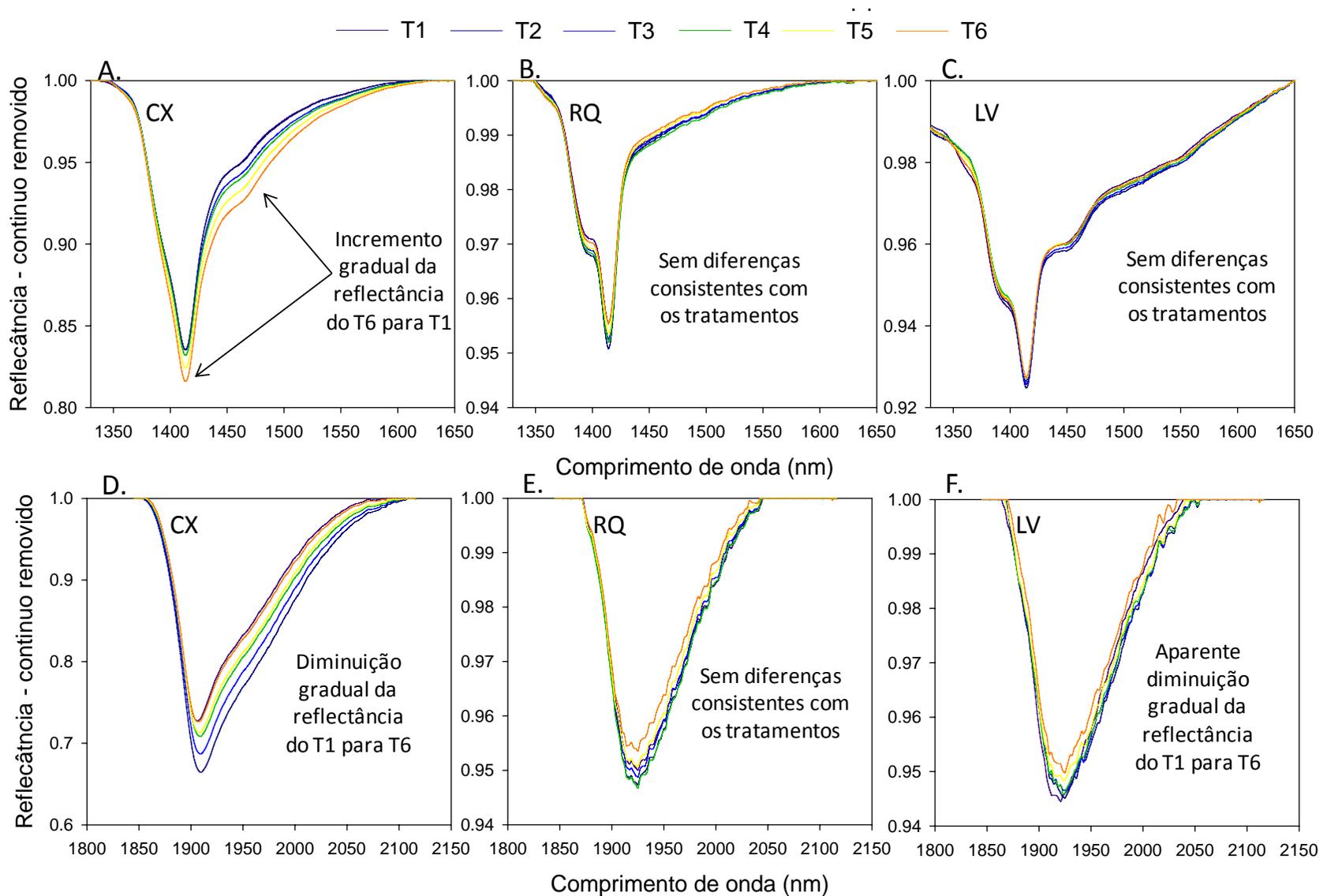


Figura 10 – Espectros dos solos com remoção do contínuo na faixa entre 1350 – 1650 nm para o CX (A), RQ (B) e LV (C) e nas faixa entre 1800 – 2150 nm para o CX (D), RQ (E) e LV (F)

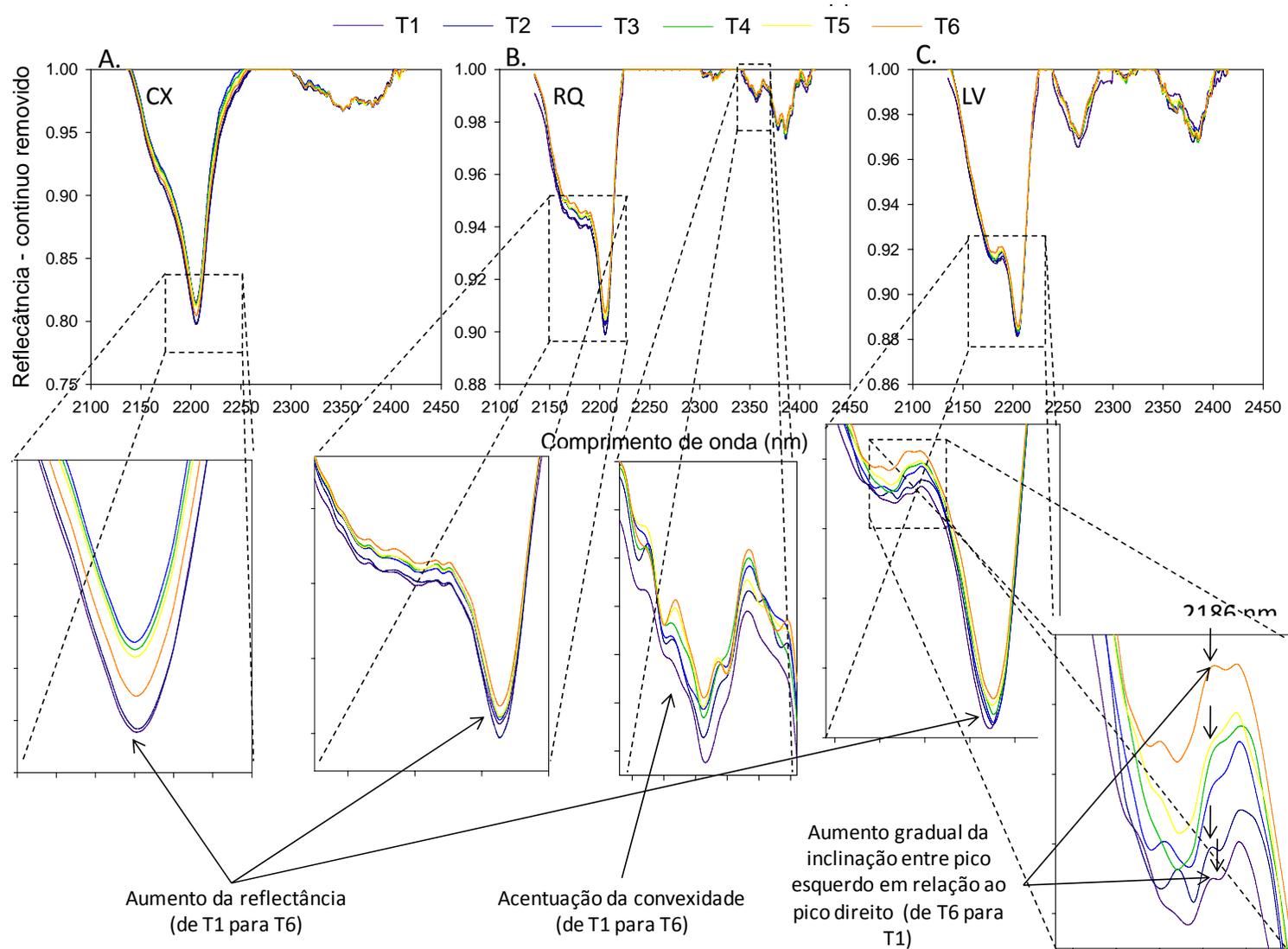


Figura 11 – Refletância com o contínuo removido na faixa de 2100 – 2400 nm. A. Cambissolo, B. Neossolo. C. Latossolo

3.3.5 Análise quimiométrica

3.3.5.1 Análise por componentes principais (PCA) dos dados espectrais

A análise por componentes principais (PCA) mostrou-se eficiente na discriminação espectral dos tratamentos indicando que as variações químicas nos teores de Mg e K causaram uma variação nas características espectrais do solo. Os três primeiros componentes principais (PC1, PC2 e PC3) resumiram um 99,87% da variação espectral do conjunto de amostras do CX, 99,13% dos dados espectrais do RQ e 99,38% no LV. O PC4 não aportou informação significativa para a discriminação de tratamentos. Através da informação dos *scores* dos PCs é possível identificar grupos de amostras por tratamento (Figura 12).

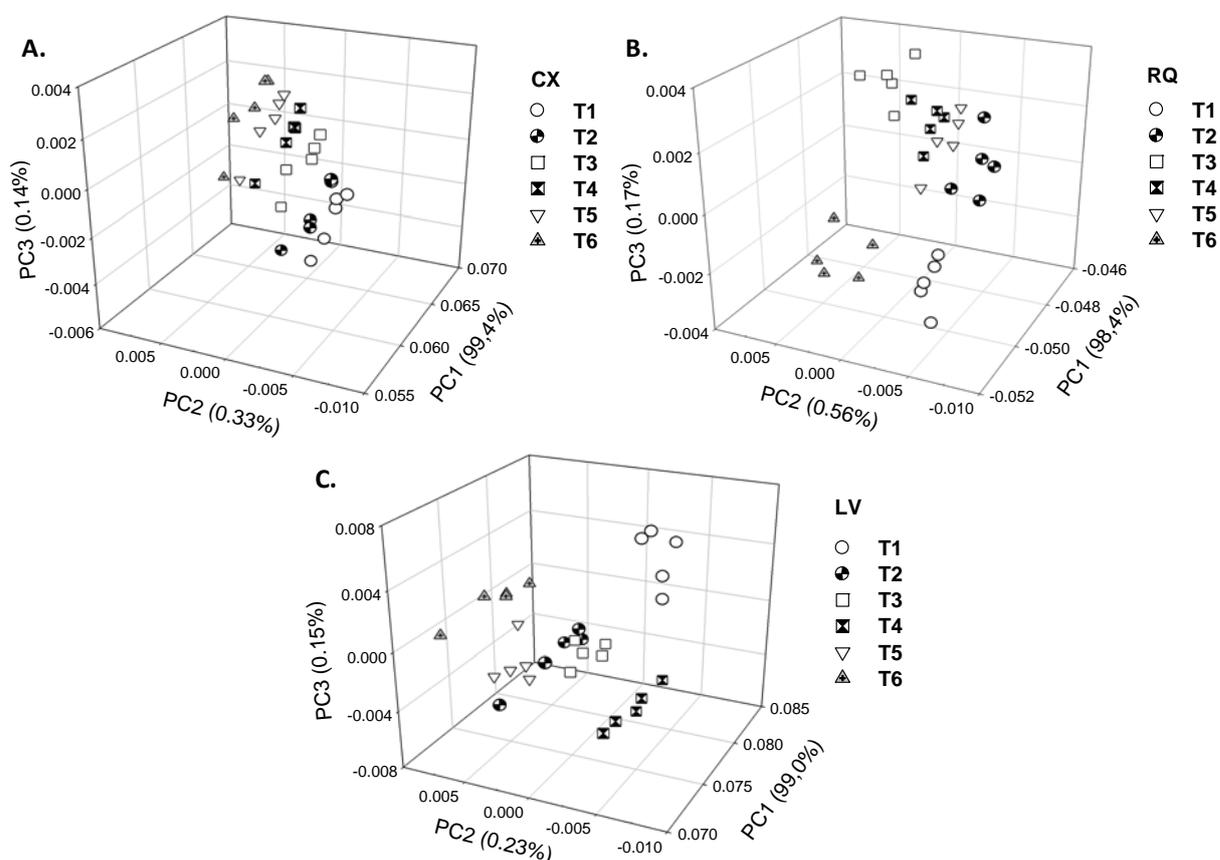


Figura 12 – *Scores* do PC1, PC2 e PC3 derivados da análise de componentes principais (PCA) feita para os dados espectrais. A estrutura dos dados espectrais de cada solo variou em função dos tratamentos aplicados. A. Cambissolo, B. Neossolo, C. Latossolo

O PC1 representa a maior parte da variabilidade espectral (>98%) em cada um dos casos (CX, RQ e LV) não obstante o PC2 e PC3 resumem a uma menor variabilidade (<0,60%). No caso do CX o agrupamento dos tratamentos nos planos dos PCs (Figura 12A) possui uma

estrutura de agrupamento bastante clara onde os valores dos *scores* do PC1, PC2 e PC3 aumentam na seqüência de T1 para T6. No RQ e no LV a observou-se também uma relação entre os valores dos *scores* e os tratamentos, sendo esta confirmada com uma análise que correlação entre os valores dos teores do Mg e K e os *scores* (Tabela 5).

A análise de correlação entre os *scores* e os teores de Mg e K (Tabela 5) indicou que no CX, o PC1, PC2 e PC3 possuem uma alta correlação inversa com os teores de Mg assim como uma alta correlação direta com os teores de K. No RQ o PC1 e o PC3 possuem uma alta correlação direta com o Mg e inversa com o K. No caso do LV a correlação do Mg e K se apresentou unicamente com o PC3, sendo esta também bastante alta.

Tabela 5 – Matrizes de correlação entre os *scores* da PCA e os valores dos teores de Mg e K atingidos nas diferentes amostras de cada solo

	K	Mg	PC1	PC2	PC3	PC4
Cambissolo - CX						
K	1					
Mg	-0,95	1				
PC1	0,74	-0,76	1			
PC2	0,86	-0,86	0,96	1		
PC3	0,52	-0,47	-0,11	0,09	1	
PC4	-0,15	0,16	-0,20	-0,11	-0,03	1
Neossolo - RQ						
K	1					
Mg	-0,80	1				
PC1	-0,81	0,83	1			
PC2	-0,18	0,07	0,22	1		
PC3	-0,69	0,71	0,87	0,00	1	
PC4	-0,38	0,03	0,09	0,00	0,00	1
Latossolo - LV						
K	1					
Mg	-0,94	1				
PC1	0,27	-0,29	1			
PC2	-0,13	0,14	-0,45	1		
PC3	0,82	-0,78	0,36	0,00	1	
PC4	0,21	-0,32	-0,05	0,00	0,00	1

Na PCA as variações dos *scores* sintetizam as variações entre as amostras espectrais e por outra parte nesta análise também são gerados *loadings* os quais representam resumidamente as regiões do espectro que provocaram estas variações entre amostras. As variações representadas

pelos *scores* de um PC_k correspondem ao *loading* PC_k . Desta forma, devido a que as variações do Mg e do K no CX possuem uma alta correlação com o PC1, PC2 e PC3, os *loadings* que indicam as variações espectrais causadas relacionadas ao Mg e K são os três primeiros (Figura 13A, D e G). O primeiro e terceiro *loading* são os que representam a variação espectral no RQ. No caso do LV, o *loading* correspondente ao PC3 é o que representa esta variação. No CX as bandas com picos *loadings* maiores que 0 representam uma maior variação (Figura 13A, D e G) desta forma as principais bandas influenciadas pelo Mg e K são as bandas relacionadas com a presença de argilominerais 2:1 (1400, 1900 e 2200 nm) (DEMATTE; GARCIA, 1999; CLARK, 1999; DEMATTÊ et al., 2008; BEN-DOR et al., 2008; GOETZ et al., 2009) o que indica que sugere que as respostas espectrais do Mg e K ocorrem em função do argilomineral. De fato, a única alteração das amostras de terra foi nos elementos que compõem a CTC. Por outra parte o *loading* do PC2 (Figura 13D) indica que houve uma variação na faixa dos 350 – 750 nm, o que pode ser explicado pelo fato de esta ser uma faixa onde a matéria orgânica (M.O) influencia as características espectrais do solo (DALMOLIM, 2002; NANNI et al., 2004) e desde o ponto de vista químico fornece cargas negativas as quais podem ser compensadas por cátions como o Mg e o K, desta forma as respostas espectrais destes elementos trocáveis no solo têm relação com a matéria orgânica. No caso do RQ, os *loadings* que relacionados à variação de Mg e K são os correspondentes ao PC1 e PC3. O *loading* do PC1 (Figura 13B) indicou que a região espectral que maior variação apresentou em relação ao Mg e K foi a compreendida entre 350 – 1100 nm o que é explicado pelo grande aporte da M.O à CTC neste solo, levando em consideração que o aporte da fase mineral à CTC no RQ é geralmente baixa. Assim, a maior parte do Mg e do K está compensando cargas negativas na M.O e gerando respostas espectrais na faixa 350 – 1100 nm. No RQ foi também observada uma variação significativa na faixa de absorção de energia da caulinita nos *loadings* do PC1 e do PC3 (Figura 13B, H). No caso do LV, no *loading* correspondente ao PC3 (Figura 13I) (o único que apresento correlação com as variações de Mg e K) observou-se que existe uma feição na faixa de absorção de energia da M.O. não obstante a diferença do observado no CX e no RQ este pico localiza-se nos 560 – 750 nm. Nos 2200 nm observou-se também o pico correspondente à caulinita no qual foi afetado pelas variações de Mg e K.

Os picos onde a M.O possuem respostas espectrais foram maiores no RQ e no LV, do que no CX, o que é atribuído a que o CX possuem uma alta quantidade de CTC aportada pela fase

mineral o que diminui a proporção da CTC aportada pela M.O e desta forma sendo mais ampla a variação de elementos na CTC da fase mineral do que da fase orgânica.

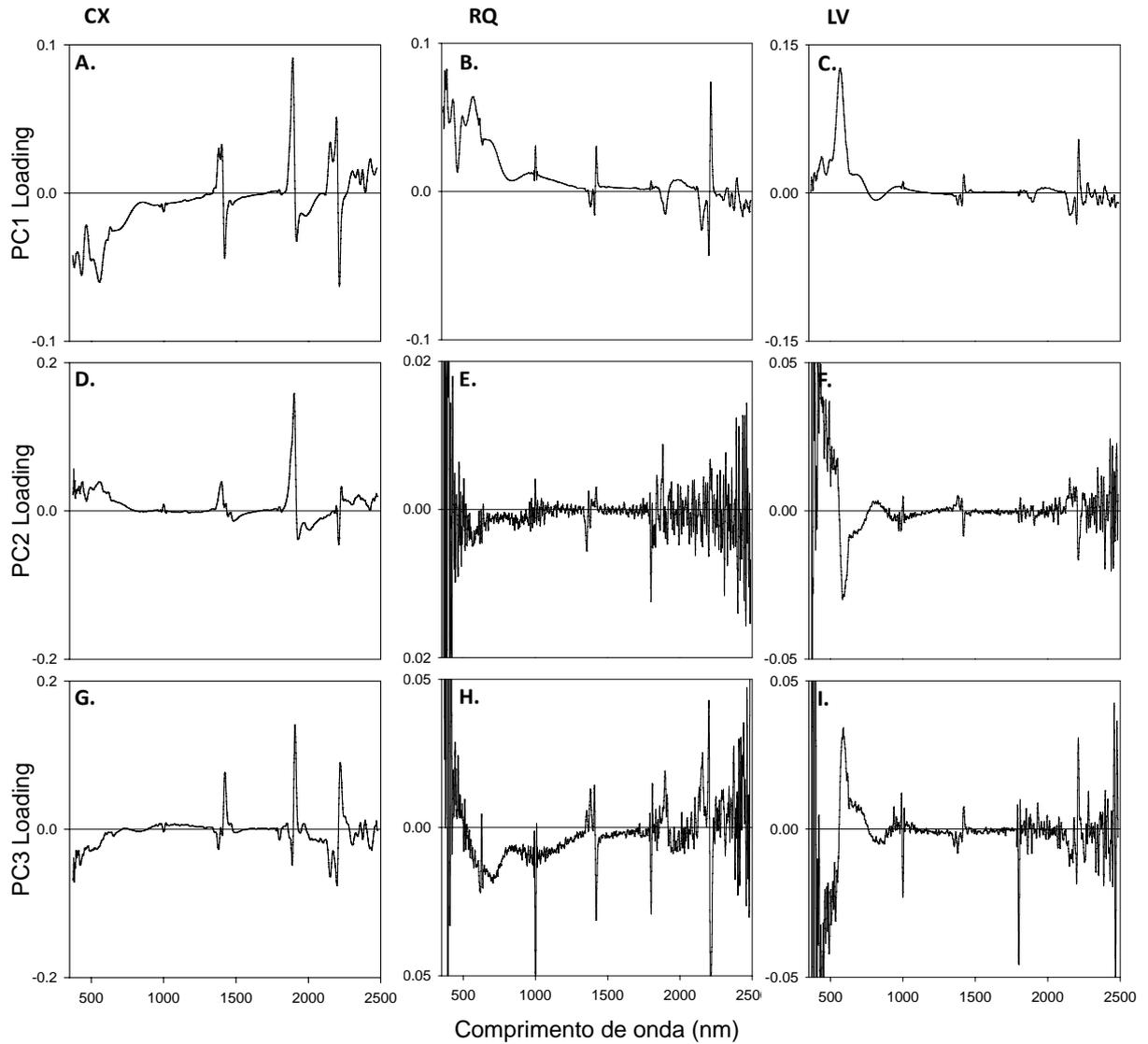


Figura 13 – *Loadings* derivados da PCA os quais representam as principais variações espectrais causadas pelas variações de Mg e K nas diferentes bandas VIS-NIR-SWIR. A, D e G correspondem ao CX, todos relacionados com a variação do Mg e K. B, E e H são os correspondentes ao RQ, sendo que o PC1 e o PC3 são os relacionados com a variação de Mg e K. C, F e I são os correspondentes ao LV e unicamente o PC3 tem relação com as variações de Mg e K

3.3.5.2 Análise por projeção sobre estruturas latentes (PLS) ou mínimos quadrados parciais

A análise de resultados na PLS é semelhante à feita na PCA. Também são gerados PCs chamados de PLS, os quais possuem *scores* e *loadings*. Neste caso os picos dos *loadings* tanto com valor positivo como negativo indicam variação. Esta metodologia também mostrou-se eficiente na discriminação e identificação de respostas espectrais causadas pela variação de Mg e K no solo. Os *scores* das amostras agruparam-se em função dos tratamentos (Figura 14). As correlações entre os PLS e o Mg e K no CX e no LV e foi mais baixa no LV, não obstante todas as correlações foram significativamente altas (Tabela 6). Neste caso os PLS 2 estiveram associados às variações de Mg e K no solo.

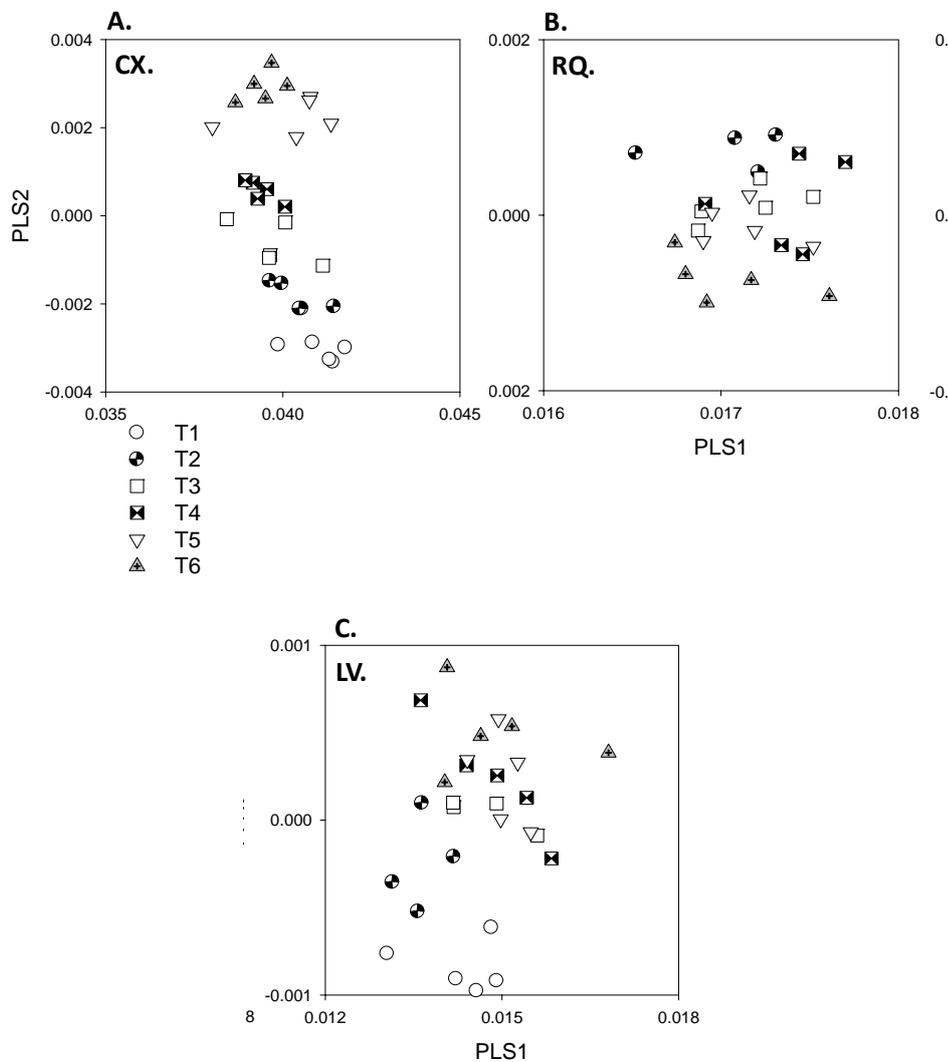


Figura 14 – *Scores* da análise PLS apresentando uma estrutura de agrupamento em função dos tratamentos. A. Cambissolo, B. Neossolo, C. Latossolo

Tabela 6 – Matrizes de correlação entre os *scores* da análise PLS e os valores dos teores de Mg e K atingidos nas diferentes amostras de cada solo

	K	Mg	PLS1	PLS2
Cambissolo - CX				
K	1			
Mg	-0,95	1		
PLS1	-0,41	0,42	1	
PLS2	0,96	-0,92	-0,44	1
Neossolo – RQ				
K	1			
Mg	-0,80	1		
PLS1	0,01	0,03	1	
PLS2	0,73	-0,69	0,05	1
Latossolo - LV				
K	1			
Mg	-0,94	1		
PLS1	-0,44	0,50	1	
PLS2	-0,82	0,80	0,18	1

Os *loadings* dos PLS 2 de cada solo (Figura 15) indicaram que existem variações importantes nas bandas de absorção relacionadas com os argilominerais fornecedores da CTC. No caso do RQ e o LV também foi novamente verificada uma variação nas bandas de resposta espectral da matéria orgânica.

Em relação à estabilidade das e à importância das bandas para as projeções, verificou-se que nos três solos as bandas de absorção de minerais (1400, 1900 e 2200 nm) possuem uma alta significância (Figura 15). No RQ (Figura 15B) e no LV (Figura 15C) as bandas de absorção da M.O são estáveis possuindo também uma alta significância nas projeções. Embora nos *loadings* do LV existam faixas espectrais sem picos mas com estabilidade, estas não representam variação nenhuma. No CX a faixa espectral da M.O. não apresentou variações significativas e não tendo importância nas projeções. Isto ocorre por que a contribuição na CTC nestes solos é mais significativa devido à mineralogia que aos colóides orgânicos, ao contrario dos LV e RQ. Sabendo que os três solos têm M.O semelhantes, é esperado que maior atuação da CTC da M.O nos LV e RQ.

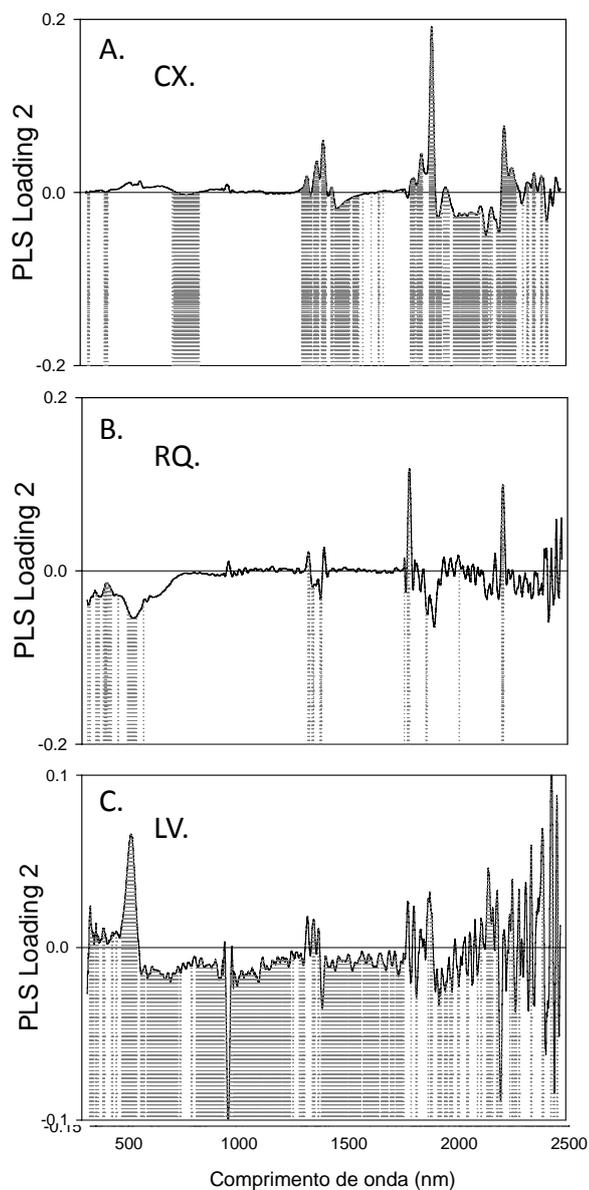


Figura 15 – Loadings do PLS 2 relacionados com as variações de Mg e K. A. Cambissolo, B. Neossolo, C. Latossolo. As linhas descontínuas indicam as bandas com estabilidade nas projeções

3.3.5.3 Calibração de modelos de quantificação de Mg e K usando as principais bandas importantes encontradas no experimento em amostras obtidas de uma biblioteca espectral

Com base nos resultados encontrados no experimento, foram selecionados os picos significativamente estáveis nas projeções. Assim, foram selecionadas 408 bandas das 2150 iniciais as quais se derivaram de uma combinação entre todas as bandas encontradas nos três

solos. Isto levando em consideração que a mineralogia das amostras selecionadas da biblioteca é desconhecida. A análise química destas amostras provêm de um laboratório comercial de análise química de rotina. A amplitude da faixa de valores de atributos físicos foi alta, mas o seu desvio padrão foi baixo (Tabela 7). A variação do K foi alta, e a do Mg, Ca e CTC foi baixa. A escala de medição do e Mg e K mostrou-se pouco sensitiva, sendo que os valores de Mg se apresentam em múltiplos de 1 e os de K em múltiplos de 0,5.

Tabela 7 – Estatística descritiva dos atributos das amostras escolhidas da biblioteca espectral

	Unidades	Mínimo	Máximo	Média	Desvio padrão	Assimetria
Areia	%	7,4	89,0	79,3	6,8	-5,9
Silte	%	0,5	16,3	5,9	3,0	0,4
Argila	%	8,6	26,5	14,5	3,1	1,2
M.O	g kg ⁻¹	4,0	33,0	11,8	4,1	1,6
Mg	mmol _c dm ⁻³	1,0	14,0	5,2	2,5	0,7
K	mmol _c dm ⁻³	0,1	6,9	1,6	1,2	1,6
Ca	mmol _c dm ⁻³	4,0	30,0	13,4	5,3	0,6
CTC	mmol _c dm ⁻³	22,0	68,0	39,7	9,1	0,3

Em relação às calibrações feitas para o Mg, o R² do modelo que utiliza o espectro com as bandas selecionadas apresentou um valor de 0,6. O R² da calibração usando o espectro inteiro foi de 0,59. Para o K os valores de R² nas calibrações foi de 0,45 usando as bandas selecionadas e 0,45 com o espectro inteiro. Os espectros de regressão obtidos para o Mg (Figura 16) indicam que as bandas mais importantes na calibração do modelo foram aquelas relacionadas com as feições de absorção de argilominerais e M.O. O R² das de validações destes modelos resultaram em uma melhor predição do Mg com as bandas selecionadas (Figura 17A, B). Não obstante os modelos do K apresentaram melhor desempenho preditivo usando o espectro inteiro, atingindo um R²= 0,66 (Figura 17C, D).

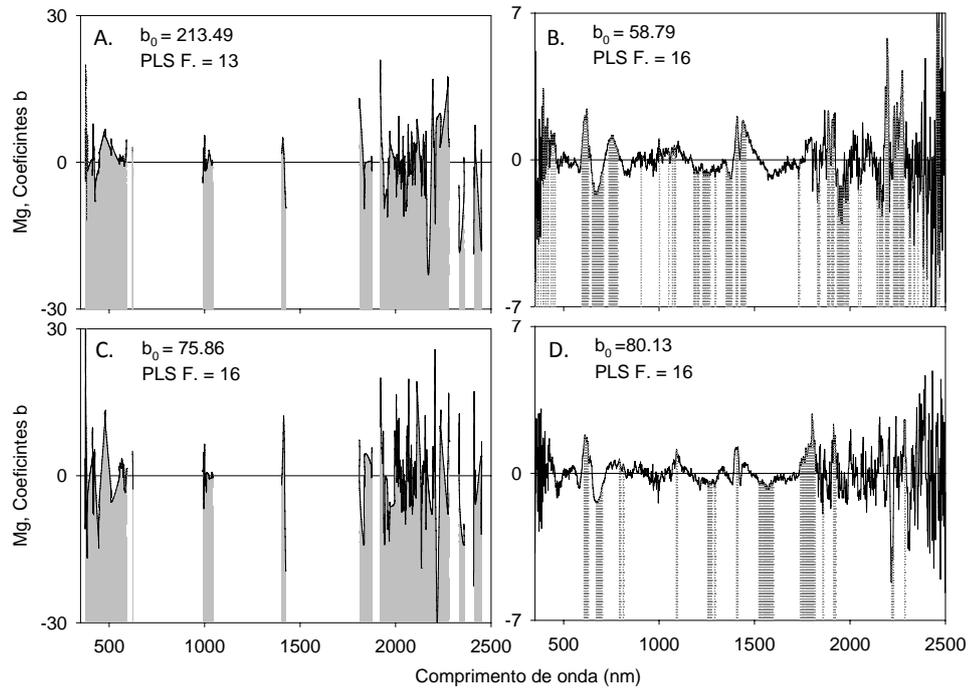


Figura 16 – Espectros de regressão do Mg usando o as bandas selecionadas (A.) e o espectro inteiro (B) e espectros de regressão do K usando as bandas selecionadas (C) e o espectro inteiro (D). As áreas sombreadas no espectro de regressão (A e B) ressaltam as bandas selecionadas utilizadas para a calibração. As linhas descontínuas indicadas para os coeficientes do espectro inteiro indicam as bandas estáveis e importantes da modelagem

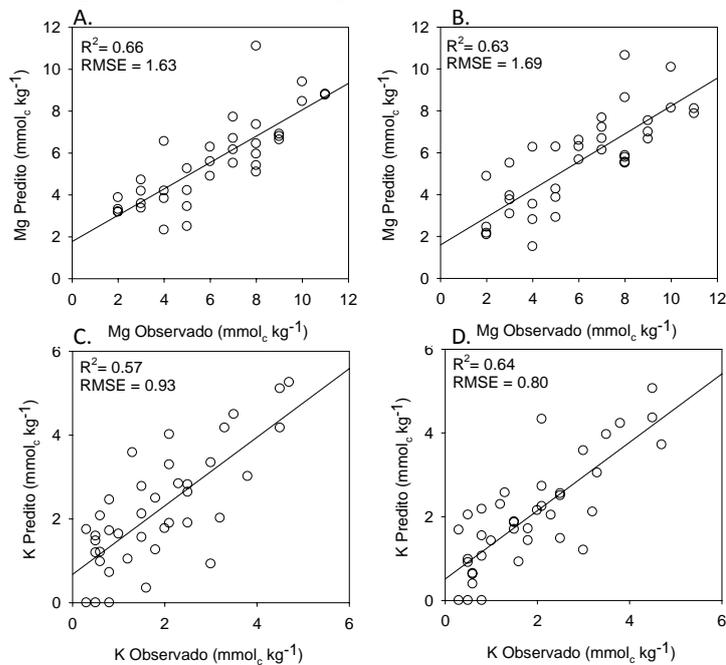


Figura 17 – Validações dos modelos de Mg com as bandas selecionadas (A), com o espectro inteiro (B). Validações dos modelos de K as bandas selecionadas (D), com o espectro inteiro (E)

Estes resultados indicam que em uma mistura tão complexa como o solo não é conveniente calibrar modelos únicos de estimativa de K e Mg para solos com diferentes composições mineralógicas e orgânicas. É necessário abordar as calibrações desde um ponto de vista não linear. Se sugere assim um sistema onde os solos sejam inicialmente classificados de acordo com a sua mineralogia e composição orgânica usando o espectro do visível e infravermelho, após desta classificação estudar as possibilidades de uso de modelos lineares na predição de atributos.

3.4 Conclusões

A análise qualitativa das curvas espectrais com o contínuo removido mostrou características típicas da mineralogia dos solos avaliados marcando diferenças na composição mineralógica destes.

As respostas espectrais dos solos em relação aos tratamentos situaram-se nos lugares da curva espectral onde os argilominerais e a matéria orgânica fornecedores da CTC do solo possuem também uma resposta espectral característica. Desta forma na faixa de 1350 – 1650 nm observou-se uma resposta espectral consistente com os tratamentos unicamente no CX devido a que nesta faixa os argilominerais 2:1 deste solo possuem também uma faixa de absorção características. Na faixa dos 2100 – 2400 nm onde se apresentam múltiplas feições de absorção de argilominerais tais como a caulinita, gibbsita e esmectita foram encontradas respostas espectrais relacionadas à variação dos tratamentos em todos os solos.

A resposta espectral na região VIS-NIR-SWIR do K e do Mg trocáveis pode depender dos argilominerais que estejam retendo estes elementos. Isto fundamenta-se no fato que o formato de bandas específicas de argilominerais (como o caso da banda da caulinita do LV nos 2180 nm) variou em relação aos tratamentos aplicados. Por outra parte, lugares da curva espectral do mesmo solo onde não se apresentam respostas espectrais características de argilominerais não apresentaram variações consistentes com os tratamentos aplicados.

Observaram-se duas feições específicas na faixa espectral pertencente à caulinita, 2186 e 2189 nm as quais são atheradas claramente pelas variações de K e Mg.

Os resultados indicam que a resposta espectral das bases trocáveis Mg e K, é controlada pela matéria orgânica e mineralogia do solo relacionadas com a CTC. Assim, os esforços na calibração de modelos globais de quantificação devem ser repensados criando a necessidade de desenvolver um sistema de inferência espectral onde a identificação da fase mineralógica e orgânica possa fornecer uma melhor capacidade de predição de atributos químicos.

Referências

- AGBENIN, J.O.; YAKUBU, S. Potassium–calcium and potassium–magnesium exchange equilibria in an acid savanna soil from northern Nigeria. **Geoderma**, Amsterdam, v. 136, p. 542-554. 2006.
- ANDA - Associação Nacional para a Difusão de Adubos. Principais indicadores do setor de fertilizantes. Disponível em: <http://www.anda.org.br>. Acesso em: 20 Feb. 2009.
- BEN-DOR, E.; HELLER, D.; CHUDNOVSKY, A. A novel method of classifying soil profiles in the field using optical means. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.72, p.1113-1123, 2008.
- BEN-DOR, E.; TAYLOR, G.R.; HILL, J.; DEMATTÊ, J.A.M.; WHITING, M.L.; CHABRILLAT, S.; SOMMER, S. Imaging spectrometry for soil applications. **Advances in Agronomy**, Amsterdam, v.97, p.321-392, 2008b
- BROWN, D.J.; SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G.; MAYS, M.D.; REINSCH, T.G. Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.132, p. 273-290, 2006.
- CAMARGO, M. N.; KLANT, E.; KAUFFMAN, J. H. Classificação de solos utilizada em levantamentos pedológicos no Brasil. Campinas. **Boletim Informativo da Sociedade Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v.12. n.1, p.11-13, jan./abr. 1987.
- CHRISTY, C.D. Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 61.p. 10-19, 2008.
- CLARK, R. N.; ROUSH, T. L. Reflectance spectroscopy: quantitative analysis techniques for remote sensing applications. **Journal of Geophysical Research**, Washington, v. 89, p. 6329-6340, 1984.
- CLARK, R.N. Spectroscopy of rocks and minerals, and principles of spectroscopy. In: RENCZ, A.N. (Ed.). **Manual of remote sensing**. New York: John Wiley, 1999. v. 3. p. 3–58.
- COHEN, M.; MYLAVARAPU, R.S.; BOGREKCI, I.; LEE, W.S.; CLARK, M.W. Reflectance spectroscopy for routine agronomic soil analyses. **Soil Science**, New Jersey, v. 172, p. 469-485, 2007.
- COZZOLINO, D.; MORÓN, A. Potential of near-infrared reflectance spectroscopy and chemometrics to predict soil organic carbon fractions. **Soil and Tillage Research**, Amsterdam. v.85, p. 78-85. 2003.
- DALMOLIM, R.S.D. **Matéria orgânica e características físicas, químicas, mineralógicas e espectrais de Latossolos de diferentes ambientes**. 2002. 151p. Tese (Doutorado em Ciência do

Solo) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Faculdade de Agronomia, Porto Alegre, 2002.

De LEÓN-RODRÍGUEZ, L.M.; BASUIL-TOBIAS, D.A. Testing the possibility of using UV–vis spectrophotometric techniques to determine non-absorbing analytes by inclusion complex competition in cyclodextrins. **Analytica Chimica Acta**, Amsterdam, v.543, p.282–290, 2005.

DEMATTÊ, J.A.M.; GARCIA, G.J.; PROCHNOW, L.I. Variações induzidas de atributos químicos e sua influência na reflectância espectral de três solos do estado do Paraná. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v.22, p. 479-490, 1998.

DEMATTÊ, J.A.M.; GARCIA, G.J. Alteration of soil properties through a weathering sequence as evaluated by spectral reflectance. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 63, p. 327-342, 1999.

DEMATTÊ, J.A.M.; EPIPHANIO, J.C.N.; FORMAGGIO, A.R. Influência da matéria orgânica e formas de ferro na reflectância de solos tropicais com argila com baixa atividade. **Bragantia**, Campinas, v.62, p. 451-464, 2003.

DEMATTE, J.A.M.;CAMPOS, R.C.; ALVES, M.C.; FIORIO P.R.; NANNI, M.R. Visible–NIR reflectance for soil evaluation. **Geoderma**, Amsterdam, v.121, p. 95–112, 2004.

DEMATTÊ, J.A.M., M.A.P. GAMA, M.COOPER, J.C. ARAÚJO, M.R. NANNI, P.R. FIORIO. Effect of fermentation residue on the spectral reflectance properties of soils. **Geoderma**, Amsterdam, v. 120, p. 187-200, 2004b.

DEMATTÊ, J.A.M.; M.R. NANNI; A.R. FORMAGGIO, J.C.N. EPIPHANIO, I. Spectral Reflectance for the mineralogical evaluation of Brazilian low clay activities soils. **International Journal of Remote Sensing**, London, v. 28, p. 4537-4559. 2007.

DU, C.; ZHOU, J.; WANG, H.; CHEN, X.; ZHU, A.; ZHANG, J. Determination of soil properties using Fourier transform mid-infrared photoacoustic spectroscopy. **Vibrational Spectroscopy**, Amsterdam. v.49. p.32-37, 2009.

EMBRAPA. Sistema brasileiro de classificação de solos. Centro nacional de pesquisa de solos. 2.ed. Rio de Janeiro, 2006. 306 p.

EPIPHANIO, J.C.N.; FORMAGGIO, A.R.; VALERIANO, M.; OLIVEIRA, J.B. **Comportamento espectral de solos do Estado de São Paulo**. Relatório técnico 5424/PRP-172, São José dos Campos: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 1992. 131 p.

FERNANDES, R.B.A.; BARRÓN, V.; TORRENT, J.; FONTES, M.P.F. Quantificação de óxidos de ferro de latossolos brasileiros por espectroscopia de reflectância difusa. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 28, p. 245-257, 2004.

FERNANDEZ-PIERNA, J.A.; DARDENNE, P. Soil parameter quantification by NIRS as a chemometric challenge at 'Chimiometrie 2006'. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v.91. p.94-98, 2008.

FREITAS, R.J.; LEANDRO, W.M.; CARVALHO, M.S. Efeito da adubação potássica via solo e foliar sobre a produção e a qualidade da fibra em algodoeiro (*gossypium hirsutum L.*). **Pesquisa Agropecuária Tropical**, Goiânia, v. 37, p. 106-112, 2007.

GOETZ, A.F.H.; CURTISS, B.; SHILEY, D.A. Rapid gangue mineral concentration measurement over conveyors by NIR reflectance spectroscopy. **Minerals Engineering**, Oxford, v.22, p.490-499, 2009.

HEMMATEENEJAD, B.; GHAVAMI, R.; MIRI, R.; SHAMSIPUR, M. Net analyte signal-based simultaneous determination of antazoline and naphazoline using wavelength region selection by experimental design-neural networks. **Talanta**, Amsterdam. v. 68. p. 1222-1229, 2006.

ISLAM, K.; SINGH, B.; SCHWENKE, G.; McBRATNEY, A. Evaluation of Vertosol soil fertility using ultra-violet, visible and near-infrared reflectance spectroscopy. In: Australian and New Zealand Soils Conference, 3, 2004, Sydney, **Proceedings...** Disponível em: http://www.regional.org.au/au/asssi/supersoil2004/s4/oral/1514_islamk.htm, Acesso em: 20 Jan. 2009.

JANIK, L. J.; MERRY, R. H.; SKJEMSTAD, J. O. Can mid infrared diffuse reflectance analysis replace soil extractions? **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood v38, p. 681-696, 1998.

JIANG, H.; BERRY, R.J.; SIESLER H.W.; OZAKI. Y. wavelength interval selection in multicomponent spectral analysis by moving window partial least-squares regression with applications to mid-infrared and near-infrared spectroscopic data. **Analytical Chemistry**, Washington, v.74, p. 3555-3565, 2002.

JONES, M.J.; WILD, A. **Soil of the west african savanna**. Commonwealth Agricultural Bureaux, Harpenden, 1975. (Technical Communication of the Commonwealth Bureau of Soils, 55)

KOWAL, J.M.; KASSAM, A.H. **Agricultural ecology of the savanna**. *A study of West Africa*. Oxford: Clarendon press. 1978.

MADARI, B.E.; REEVES, J.B.; MACHADO, P.L.O.; GUIMARAES, C.M.; TORRES, E.; MCCARTY, G.W. Mid- and near-infrared spectroscopic assessment of soil compositional parameters and structural indices in two Ferralsols. **Geoderma**, Amsterdam. v.136, p.245-259, 2006.

MADEIRA NETTO, J.S. Spectral reflectance properties of soils. **Photo Interpretation**, Paris, v. 34, p. 59-70, 1996.

- MAESSCHALCK, R. De; JOUAN-RIMBAUD, D.; MASSART D, L. The Mahalanobis distance, **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v.50. p.1–18, 2000.
- MARTENS H, MARTENS M. Modified Jack-knife estimation of parameter uncertainty in bilinear modelling by partial least squares regression (PLSR). **Food Quality and Preference**, Amsterdam, v.11. p. 5–16, 2000.
- MARTENS H, T NAES. **Multivariate calibration**. New York: Wiley, 1991. 419 p.
- MARTENS H.; NIELSEN J.P.; ENGELSEN S.B. Light scattering and light absorbance separated by extended multiplicative signal correction. Application to nearinfrared transmission analysis of powder mixtures. **Analytical Chemistry**, Washington, v.75. p. 394–404. 2003.
- McBRATNEY, A.B.; MINASNY, B.; VISCARRA ROSSEL, R. Spectral soil analysis and inference systems: a powerful combination for solving the soil data crisis, **Geoderma**, Amsterdam, v. 136. p.272–278, 2006.
- MINASNY. B.; McBRATNEY. A.B. A conditioned latin hypercube method for sampling in the presence of ancillary information. **Computers and Geosciences**, Amsterdam,. v.32. p. 1378–1388, 2006.
- NANNI, M. R.; DEMATTÊ, J.A.M.; FIORIO, P. R. Análise discriminante dos solos por meio da resposta espectral do nível terrestre. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 37, p. 995-1006, 2004.
- NASCIMENTO, M; LOUREIRO, F.E.L. Panorama do potássio. Comunicação técnica elaborada para o XIII congresso brasileiro de geologia, 2004. Rio de Janeiro: CETEM, 3p. Disponível em: <http://www.cetem.gov.br/publicacao/CTs/CT2004-101-00.pdf>. Acesso em: 20 Jan. 2008.
- ODLARE, M.; SVENSSON, K.; PELL, M. Near infrared reflectance spectroscopy for assessment of spatial soil variation in an agricultural field. **Geoderma**, Amsterdam. v.126, p. 193-202, 2005.
- RAIJ, B. van; QUAGGIO, J.A. Métodos de análise de solo para fins de fertilidade. **Boletim Técnico do IAC**, Campinas, v.81, p.1-31, 1983.
- RAIJ, B. van.; QUAGGIO, J.A.; CANTARELLA, H.; FERREIRA, M. E.; LOPES A. S.; BATAGLIA. C.O. **Análise química do solo para fins de fertilidade**. Campinas: Fundação Cargill, 1987. 170 p.
- RAIJ, B.V.; ANDRADE, J.C.; CANTARELLA, H.; QUAGGIO, J.A. Análise química para avaliação de solos tropicais. Campinas: IAC, 2001. 285p.
- RICHTER, N.; JARMER, T.; CHABRILLAT, S.; OYONARTE, C.; HOSTERT, P.; KAUFMANN, H. free iron oxide determination in mediterranean soils using diffuse reflectance spectroscopy. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.73. p.72 – 81, 2009.

RIVERO, R.G; GRUNWALD, S; BRULAND, G.L. Incorporation of spectral data into multivariate geostatistical models to map soil phosphorus variability in a Florida wetland. **Geoderma**, Amsterdam, v.140. p. 428–443, 2007.

SAVITZKY A.; GOLAY, M.J.E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures, **Analytical Chemistry**, Washington. v. 36, p. 1627–1639, 1964

SCHEINOST, A.C.; CHAVERNAS, A.; BARRÓN, V. TORRENT, J. Use and limitations of second-derivative diffuse reflectance spectroscopy in the visible to nearinfrared range to identify and quantify Fe oxides in soils. **Clays and Clay Minerals**, Chantilly, v. 46, p.528-536, 1998.

SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Infrared spectroscopy - enabling an evidence based diagnostic surveillance approach to agricultural and environmental management in developing countries: **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Charlton. v.15, p.1-19, 2007.

SØRENSEN, L.K; DALSGAARD, S. Determination of clay and other soil properties by near infrared spectroscopy. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 69; p. 159-167, 2005.

SOUZA, R.O.; CAMARGO, F.A.O.; VAHL, L.C. Solos alagados. In: MEURER, E.J. **Fundamentos de química do solo**. Porto Alegre: Genesis, 2006. p.126-149.

SPIEGELMAN, C.H.; MCSHANE, M.J.; GOETZ, M.J.; MOTAMEDI, M.; YUE, Q.L.; COTE, G.L. Theoretical Justification of Wavelength Selection in PLS Calibration: Development of a New Algorithm. **Analytical Chemistry**, Washington, v.70,p. 35-44, 1998.

STONER, E.R., BAUMGARDNER, M.F. ; BIEHL, L.L. ; ROBINSON, B.F. **Atlas of soil reflectance properties**. West Lafayette: Purdue University, 1980. 75p.

SULLIVAN, D.G.; SHAW, J.N; RICKMAN, D.; MASK, P.L.; LUVALL, J.C. Using remote sensing data to evaluate surface soil properties in alabama ultisols. **Soil Science**, New Jersey, v.170. p 954-968, 2005.

THOMASSON, J.A.; SUI, R.; COX, M.S.; AL-RAJEHY, A. Soil reflectance sensing for determining soil properties in precision agriculture. **Transactions of the ASAE**, St. Joseph. v. 44, p.1445-1453, 2001.

USGS - UNITED STATES GEOLOGICAL SURVEY. Potash statistics and information. Disponível em: <http://minerals.usgs.gov/minerals/pubs/commodity/potash/potasmcs05.pdf>. 2005. Acesso em: 20 Nov. 2007.

VÅGEN, T.G.; SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Sensing landscape level change in soil fertility following deforestation and conversion in the highlands of Madagascar using VIS-NIR spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.133, p. 281-294, 2006.

VAIDYANATHAN, S., HARVEY, L.M E MCNEIL, B. Deconvolution of near-infrared spectral information for monitoring mycelial biomass and other key analytes in a submerged fungal bioprocess. **Analytica Chimica Acta**, Amsterdam. v.428, p.41–59, 2001.

VISCARRA ROSSEL R.A.; MCBRATNEY A.B. Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for digital soil mapping. In: HARTEMINK A.E, MCBRATNEY A.B AND MENDONÇA-SANTOS L (Ed.). **Digital soil mapping with limited data**. Dordrecht: Springer, 2008. p. 165-172.

VISCARRA ROSSEL, R.A., WALVOORT, D.J.J.; MCBRATNEY, A.B.; JANIK, 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.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; CATTLE, S.R.; ORTEGA, A.; FOUAD, Y. In situ measurements of soil colour, mineral composition and clay content by VIS-NIR spectroscopy, **Geoderma**, Amsterdam. v. 150, p. 253-266, 2009.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCBRATNEY, A.B. Soil chemical analytical accuracy and costs: implications from precision agriculture,. **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood, v. 38, p. 765-775, 1998.

VISCARRA ROSSEL, R.A; FOUAD, Y; WALTER, C. Using a digital camera to measure soil organic carbon and iron contents. **Biosystems Engineering**, Bedford. v. 100, p. 149 – 159, 2008.

WEBSTER, R. The development of pedometrics. **Geoderma**, Amsterdam, v.62, p. 1-15, 1994.

WHITE, K; WALDEN, J.; DRAKE, N.; ECKARDT, F.; SETTLE, J. Mapping the iron oxide content of dune sands, Namib Sand Sea, Namibia, using Landsat Thematic Mapper Data. **Remote Sensing Environment**, New York, v. 62, p.30-39, 1997.

WOLD, H. **Systems under indirect observation**. Amsterdam: Elsevier. 1982. 2v.

WORLD AGROFORESTRY CENTRE - ICRAF, Shining light on soil deficiencies. **Transformations Quarterly**, Nairobi, v.2. p.1, 2005.

XIAOBO, Z., JIEWEN, Z., YANXIAO, L. Selection of the efficient wavelength regions in FT-NIR spectroscopy for determination of SSC of 'Fuji' apple based on BiPLS and FiPLS models. **Vibrational Spectroscopy**, Amsterdam, v.44. p. 220-227, 2007.

XU, K.; SCHECHTER, I. Wavelength selection for simultaneous spectroscopic analysis. experimental and theoretical study. **Analytical Chemistry**, Washington, v. 68 ,p. 2392–2400, 1996.

ZEATER. M.; ROGER, J.M.; BELLON-MAUREL, V. Robustness of models developed by multivariate calibration. Part II: The influence of pre-processing methods. **Trends in Analytical Chemistry**, Amsterdam, v.24, p. 437-445, 2005

ZORNOZA, R.; GUERRERO, C.; MATAIX-SOLERA, J.; SCOW, K.M.; ARCENEGUI, V.; MATAIX-BENEYTO, J. Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam, v.40, p.1923-1930, 2008.

4 EFEITO DO NÚMERO DE AMOSTRAS DE CALIBRAÇÃO NO DESEMPENHO DE MODELOS VIS-NIR-SWIR USADOS NO MAPEAMENTO ESPECTRO-DIGITAL DE ATRIBUTOS DO SOLO

Resumo

Tendo-se como referência alguns casos a nível mundial, observa-se que os custos das análises de solo são muito elevados, o que dificulta os estudos relacionados com a descrição da variabilidade espacial. Atualmente existe um crescente interesse nas avaliações das características do solo através de sensoriamento remoto e próximo, já que estas apresentam um grande potencial por serem mais econômicas e rápidas que as técnicas convencionais, tendo grande potencial no mapeamento digital de solos bem como agricultura de precisão. Sendo assim, os principais objetivos deste trabalho foram: *a.* avaliar o efeito de diferentes tamanhos de grupos de calibração de modelos de estimativa de atributos do solo sobre o desempenho preditivo destes, *b.* verificar o efeito do erro dos modelos calibrados sobre a estrutura espacial de atributos preditos e *c.* identificar vantagens econômicas do uso de dados estimados por modelos espectrais na diminuição de custos de mapeamento. A área de estudo compreende 500 ha e localiza-se no sudoeste do Estado de São Paulo, na região de Barra Bonita. Foi feita uma amostragem sistemática em grade regular de 100 x 100 m nas profundidades de 0 - 0,20 m (camada A) e 0,80 - 1,00 m (camada B). As amostras foram submetidas a análise de solo através da qual foram obtidos os atributos químicos e físicos avaliados no presente trabalho (Ca^{++} , Mg^{++} , K^{+} , soma de bases, areia, argila). Para a análise espectral, foram feitas leituras na região do visível e do infravermelho próximo (350-2500 nm) para cada uma das amostras. Para a calibração de modelos de cada um dos atributos avaliados foi usado o método de mínimos quadrados parciais (PLS). Foram criados 33 grupos de amostras para gerar assim 33 modelos de quantificação por atributo. A seleção das amostras foi feita através de amostragem estratificada. O menor grupo foi constituído por 6 amostras e o maior por 326. Um grupo de 333 amostras não utilizadas nas calibrações foi utilizada para a validação externa (validação cruzada) dos modelos. O desempenho de predição dos modelos em função do tamanho do grupo de amostras de calibração foi avaliado usando parâmetros do erro (raiz quadrada do erro médio quadrático das predições, RMSEP; erro médio, ME; RMSEP relativo; desvio padrão do erro, SDE) e de ajuste (R^2) das validações externas. Posteriormente, foi determinado um número ótimo de amostras em termos práticos para a calibração de modelos. Finalmente foi verificado o efeito do erro sobre estruturas espaciais e na descrição da variabilidade espacial dos atributos preditos na camada A com os modelos calibrados. Foi determinado que para os atributos químicos avaliados o número ótimo de amostras de calibração é de 136 com as que a validação dos modelos atinge valores de $R^2 > 0,73$ enquanto que para granulometria é de 166, atingindo $R^2 > 0,83$ na validação. Uma comparação pixel a pixel dos mapas gerados usando informações espectrais (mapas espectro-digitais) e os que não usaram estas informações, resultou em $R^2 > 0,83$ para atributos químicos e apresentaram graus de semelhança (indicados por uma) com $R^2 > 0,96$ para granulometria o que indica baixo impacto do erro dos modelos sobre a construção de mapas de variabilidade espacial. Finalmente uma análise econômica indica que o uso de informações espectrais pode representar uma economia de custos da ordem de 64%.

Palavras-Chave: Sensoriamento próximo; Espectrorradiometria; Mínimos quadrados parciais (PLS), Variabilidade espacial.

4 EFFECT OF CALIBRATION SET SIZE ON THE PERFORMANCE OF VIS-NIR-SWIR MODELS USED FOR SPECTRO-DIGITAL MAPPING OF SOIL ATTRIBUTES

Abstract

Taking into account several cases around the world, has been observed that soil analysis are too expensive, which represents a disadvantage on the works related to the assessment of soil spatial variability. There is a growing interest on the estimation of soil characteristics by remote and proximal sensing. The infrared spectroscopy have show great potential as information source for the quantification of soil attributes using multivariate statistics. These techniques are rapid, accurate and more economical than conventional methods of soil analysis. In this way, the main objectives of this work were: *a.* evaluate the effect of the calibration set size on the predictive performance of soil attributes by VIS-NIR-SWIR models, *b.* evaluate the effect of the models uncertainty on the spatial structure of soil VIS-NIR-SWIR-predicted attributes, *c.* identify economic advantages on the use of spectral data for soil attribute mapping. The study area is located in the southeast region of São Paulo State, and comprised an area of 500 ha. The area was covered by a regular grid sampling sites with spacing of 100 x 100 m. In each point was collected soil samples at two depths (layer A, 0-0,20 m and layer B, 0,80-1,00 m), and performed a 946 soil samples. Soil samples were submitted to soil analysis in order to obtain the chemical and physical attributes evaluated in this work (Ca^{++} , Mg^{++} , K^+ , sum of exchangeable bases, sand and clay). The spectral measures was performed in the VIS-NIR-SWIR region (350-2500 nm) for each soil sample. Calibration of attribute quantification models was carried out by partial least squares regression (PLS). 33 calibration data subsets with different sizes were formed (the minimum data subset size was composed by 6 samples and the maximum by 326 samples). Thus 33 models were calibrated for each attribute. A group of 333 samples that were not used in the models calibration were used as external validation set. To evaluate the performance of the prediction models as function of calibration set size were used error parameters (root mean square error of prediction, RMSEP; mean error, ME; relative RMSEP; standard deviation of the error, SDE) and the determination coefficient (R^2) of external validations. Then it was determined an optimal number of samples (in practical terms) for the models calibration process. Finally, was evaluate the effect of error on spatial structures of soil attributes. Was determined that the optimal number of soil samples for the calibration of chemical attributes is 136, with $R^2 > 0.73$ in the validation, while for particle size is 166, with $R^2 > 0.83$ in the validation. A pixel to pixel comparison between the map that use spectral information (spectro-digital map) and those who do not use this information resulted in $R^2 > 0.83$ for chemical attributes and $R^2 > 0,96$ to grain zise. These results indicates low impact of the models error on the construction of spatial variability maps of soil attributes. Finally, an economic analysis indicates that with the use of spectral the costs can be reduzed in order of 64%.

Keywords: Proximal sensing; Spectroradiometry; Partial least squares (PLS), Spatial variability.

4.1 Introdução

A variabilidade espacial dos atributos é uma característica própria dos solos e o seu mapeamento é de grande utilidade no planejamento das atividades agrícolas e na otimização de recursos destinados à melhoria dessas características. Um dos inconvenientes que se tem na adequada descrição da variabilidade espacial de atributos do solo está relacionado com o número de amostras ótimo que devem ser obtidas para conseguir representar apropriadamente essa variabilidade. A densidade de amostragem para essas descrições é geralmente alta e portanto o custo é consideravelmente alto em relação aos custos totais destas descrições (ADAMCHUK et al., 2005)

Atualmente existe um crescente interesse nas avaliações das características do solo com técnicas de sensoriamento remoto e próximo, já que estas apresentam um grande potencial por serem de menor custo e muito mais rápidas que as técnicas convencionais. Os métodos analíticos normalmente utilizados são lentos e podem apresentar relações mal compreendidas entre os dados obtidos e os processos do solo (JANIK et al., 1998).

As técnicas de espectroscopia de reflectância apresentam grande sensibilidade para medir fases orgânicas e inorgânicas do solo, fazendo com que seu uso nas ciências agrícolas e ambientais seja particularmente relevante. Por ser um método não destrutivo, a avaliação dos atributos do solo por meio da sua resposta espectral pode apresentar resultados mais precisos que as técnicas convencionais as quais alteram o equilíbrio entre as fases do solo e, de fato, podem dificultar a interpretação dos resultados (VISCARRA ROSSEL et al., 2006).

Tendo como referência alguns casos a nível mundial, observa-se que os custos das análises de solo são muito elevados dificultando a aplicabilidade em agricultura de precisão (AP) relacionada com o manejo de solos (VISCARRA ROSSEL et al., 1998), semelhante ao que tem se verificado no Brasil. De fato as grades de amostragem utilizadas em AP iniciaram na Europa com 1 amostra ha^{-1} , não obstante se tem reconhecido que a densidade amostral para fins de manejo de nutrientes deve ser maior (GODTOWIN et al., 2003), o que representa um custo muito elevado. A densidade de 1 amostra ha^{-1} indicada inicialmente na década de 90 para cana-de-açúcar, mostrou-se economicamente inviável, o que impossibilitou vários trabalhos no Brasil. Devido a isto, pesquisas conduzidas por Demattê et al., (2006) indicaram que a máxima densidade com que a amostragem resulta economicamente adequada é de 1 amostra a cada 4 ha o que vem sendo refletido até o momento.

Entre os objetivos básicos da agricultura de precisão está o manejo localizado do solo. Para tanto, é necessário que a variabilidade espacial dos seus atributos seja descrita de maneira adequada, o que implica inevitavelmente em um número relativamente alto amostras de solo necessárias, acarretando maiores custos. Neste sentido Tweeten (1996) indica que a agricultura de precisão só poderá ser viabilizada se os custos forem mais baixos do que o sistema convencional de manejo. McBratney e Pringle (1999) concluíram que para obter informação de solos com uma resolução adequada para a implementação de agricultura de precisão, as grades de amostragem usadas devem possuir espaçamento de 20 – 30 m. É por isto que a agricultura de precisão hoje, demanda métodos mais eficientes de análise e amostragem de solos (BRAMLEY; JANIK, 2005).

De forma geral, o desenvolvimento agrícola nos trópicos requer de grandes quantidades de análises de solos e observações de campo antes de gerar recomendações adequadas de manejo de solos (SHEPHERD ; WALSH, 2007). Assim, na América do Sul o maior entrave, tanto na implementação em grande escala da agricultura de precisão quanto na implementação de planos adequados de manejo e uso do solo, é o elevado custo da análise. Conforme o observado na maioria dos casos, o serviço de análise de solos é inacessível aos pequenos produtores devido aos altos custos (BARRIOS et al., 2006).

Recentes pesquisas têm demonstrado resultados satisfatórios e apresentam o estudo da reflectância espectral como uma técnica promissora (COZZOLINO; MORÓN, 2003, DEMATTÊ et al., 2004; SØRENSEN ; DALSGAARD, 2005, VÅGEN et al., 2006; MADARI et al., 2006; RIVERO et al., 2007; BEN-DOR et al, 2008). Para que a maturidade desta técnica atinja seus objetivos devem ser feitas pesquisas para entender a natureza da relação entre a reflectância do solo e seus nutrientes (ISLAM et al., 2004).

Com técnicas mais rápidas e que possam cobrir extensas áreas, o mapeamento da variabilidade espacial de atributos poderá ser mais eficaz, permitindo melhorar a precisão no manejo. A natureza das análises de reflectância espectral sugere sua utilização como suporte de decisões em agricultura de precisão na avaliação de grandes áreas utilizando uma maior densidade de amostras (VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 1998; JANIK et al., 1998; THOMASSON et al., 2001, ODLARE et al., 2005). O estudo de atributos do solo por meio do SR pode facilitar os trabalhos de levantamentos, a predição de áreas sujeitas a processos erosivos e as práticas de adubação de culturas para um manejo mais preciso (SULLIVAN et al., 2005).

O objetivo do trabalho foi determinar um número mínimo de amostras necessárias para calibrar modelos de estimativa de atributos físicos e químicos baseados no comportamento espectral do solo, e cuja precisão seja suficientemente adequada para utilização em agricultura de precisão. Para tanto, espera-se que através das técnicas de sensoriamento de solos seja possível aumentar a densidade amostral diminuindo o número de amostras analisadas no laboratório sem alterar significativamente a qualidade dos dados de atributos do solo.

4.2 Material e Métodos

4.2.1 Solos e área de estudo

A área onde as amostras foram coletadas localiza-se no sudoeste do Estado de São Paulo, na região de Barra Bonita, sendo delimitada pelas coordenadas geográficas 22°26'2,37" - 22°23'16,53" latitude sul e 48°31'24,22" - 48°27'51,77" longitude oeste. A área possui 500 ha cultivados com cana-de-açúcar em altitudes variando entre 550 e 710 metros. O clima da região, segundo a classificação de Köppen, é do tipo Cwa, clima mesotérmico (SENTELHAS et al., 1998). A litologia é representada pela ocorrência da Formação Serra Geral, a qual se caracteriza por compreender um conjunto de derrames basálticos entre os quais se intercalam arenitos com as mesmas características da Formação Botucatu, aparece ainda a Formação Itaqueri do grupo Bauru predominando arenitos com cimento argiloso na maior parte da área (IPT, 1981).

Os solos da região estudada classificam-se em: NEOSSOLO QUARTZARÊNICO Órtico típico, LATOSSOLO VERMELHO Distrófico típico, LATOSSOLO VERMELHO Distrófico típico, LATOSSOLO VERMELHO-AMARELO Distrófico, ARGISSOLO VERMELHO Distrófico abrupto, ARGISSOLO VERMELHO Eutrófico abrupto, CAMBISSOLO HÁPLICO Eutrófico típico, NITOSSOLO VERMELHO Eutroférico (EMBRAPA, 2006).

4.2.2 Amostragem e análise do solo

Foi utilizada uma grade regular de 100 x 100 m demarcada no campo com distanciômetros (feixe de infravermelho), onde cada interseção da grade gerou um ponto de amostragem que foi marcado em campo com uma estaca, perfazendo um total de 473 pontos. Esses foram numerados, georreferenciados e amostrados com trado nas profundidades 0-0,20 m (profundidade A) e 0,80-1,00 m (profundidade B), totalizando 956 amostras. Maiores detalhes no banco de dados de Fiorio (2002).

Para as análises químicas utilizou-se metodologia conforme RAIJ et al. (1987), compreendendo: determinação do pH em água, em KCl 1N e em CaCl₂; determinação de bases trocáveis (Ca⁺⁺, Mg⁺⁺, K⁺); soma de bases (SB); capacidade de troca de cátions (CTC). Na análise granulométrica o método do densímetro (CAMARGO et al., 1986) foi utilizado na separação das frações areia (>0,02 mm), silte (0,002-0,02 mm) e argila (<0,002 mm), utilizando hexametáfosfato de cálcio 0,1N e hidróxido de sódio 0,1N como agentes dispersantes.

4.2.3 Análise espectral

Para a obtenção dos dados espectrais, foi utilizado o sensor Infra-Red Intelligent spectroradiometer, IRIS (Geophysical and Environmental Research Corporation) com resolução de 2 nm na faixa de 350 a 1000 nm e 4 nm entre 1000 e 2500 nm. Esta faixa de medição corresponde às regiões do visível (VIS) e infravermelho próximo (NIR) e do infravermelho de ondas curtas (SWIR). As amostras foram secas em estufa a 45°C por 24 horas, moídas e peneiradas (malha 2 mm), para a homogeneização dos efeitos de umidade e rugosidade. Essas foram acondicionadas em placas de petri e iluminadas por uma lâmpada halógena de 650 W, alimentada por uma fonte de energia estabilizada. A geometria para aquisição dos dados seguiu os procedimentos adotados por Demattê e Garcia (1999) e Nanni e Demattê (2006). Utilizou-se como padrão de referência absoluta uma placa branca com 100% de referência. Foram realizadas três leituras em cada amostra, sendo utilizada a curva espectral média.

4.2.4 Identificação de *outliers* nas leituras espectrais

Para facilitar a identificação de *outliers*, as 830 bandas espectrais (correspondentes às bandas da faixa 350 - 2500 nm) foram comprimidos por meio de uma análise de componentes principais (PCA). Por meio da PCA foram obtidas novas variáveis que representaram grande parte da variabilidade das bandas originais. Com estas novas variáveis as amostras espectrais atípicas foram identificados usando a distância de mahalanobis (Eq 1) e tomando como *outliers* as amostras com distâncias maiores a 3. Este procedimento é amplamente usado na identificação de *outliers* em dados multivariados (De MAESSCHALCK et al., 2000) e descrita a seguir,

$$d_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^T C^{-1} (x_i - x_j)} \quad (\text{Eq. 1})$$

onde x_i é um vetor que representa os *scores* dos primeiros componentes principais dos dados espectrais, x_j é o centroide destes *scores*, C^{-1} é a matriz de covariância destes *scores* para o

conjunto de amostras. Este mesmo procedimento foi adotado para o conjunto de atributos físico-químicos. As amostras identificadas como *outliers* foram eliminadas da base de dados.

4.2.5 Determinação do número ótimo de amostras para a calibração de modelos de estimativa de atributos

4.2.5.1 Seleção de grupos de amostras

Os grupos foram selecionados unicamente a partir dos dados espectrais. Para isto, primeiramente foi realizada uma nova PCA dos dados espectrais. Assim, os valores ou *scores* destas novas variáveis obtidas com esta análise foram a base do processo de seleção de amostras. A determinação do número ótimo de amostras necessárias para calibrar modelos de estimativa de atributos do solo a partir de dados espectrais foram seguidos os seguintes passos:

- Das amostras correspondentes às profundidades A e B, foram selecionadas 333 amostras que formaram o grupo de amostras para a validação de modelos de estimativa (amostras para teste externo) que foram desenvolvidos em uma etapa posterior. Estas amostras foram escolhidas por meio de uma amostragem estratificada usando o método de Hipercubo Latino condicionado (cLHS) (MINASNY; McBRATNEY, 2006) o qual fornece uma forma eficiente de amostragem de dados multivariados a partir de sua distribuição de probabilidade. O grupo restante das amostras (banco de amostras para calibração) foi usado exclusivamente na fase de calibração dos modelos de estimativa.
- Usando novamente a amostragem por cLHS no banco de amostras para calibração obtido no passo anterior, foram criados 33 grupos de amostras. O objetivo desta amostragem foi desenvolver grupos de calibração de distintos tamanhos. Desta forma, foram escolhidas 326 amostras (o grupo com maior número de amostras) do banco de amostras. Posteriormente foi escolhido um segundo grupo com 316 amostras e desta forma foram selecionando-se amostras do banco diminuindo um número de 10 amostras em cada seleção, até chegar a um último grupo constituído de 6 amostras de solo.

4.2.5.2 Calibração e validação dos modelos de estimativa

Técnicas de transformação, como a aplicação de $\log(1/R)$ (absorbância), e de pré-processamento, como a normalização dos dados espectrais, foram utilizadas quando necessárias para melhorar a qualidade dos dados espectrais.

Para cada conjunto de amostras selecionado, os modelos de predição foram calibrados por meio do método de regressão por mínimos quadrados parciais ou projeção sobre estruturas latentes (*projection to latent structures*) (PLSR) (WOLD, 1982). Este método de regressão é desenvolvido de forma básica nas seguintes etapas:

São calculados os *loadings* dos vetores de ponderação

$$W_1 = c \cdot X_0 \cdot y_0 \quad \text{Eq.2}$$

onde w_1 são os pesos de cada uma das regiões do espectro, X_0 é a matriz dos dados espectrais e y_0 é a matriz do atributo que se deseja modelar, c é o fator escalar que é calculado por

$$c = (y_0^T \cdot X_0 \cdot X_0^T \cdot y_0)^{-0.5} \quad \text{Eq.3}$$

os *scores* e os *loadings* são calculados por

$$\hat{t}_1 = X_0 \cdot \hat{w}_1 \quad \text{Eq.4}$$

onde \hat{t}_1 é uma matriz de uma coluna (*Scores* da reflectância)

$$p_1 = \frac{(X_0^T \cdot \hat{t}_1)}{\hat{t}_1^T \cdot \hat{t}_1} \quad \text{Eq. 5}$$

onde p_1 é uma matriz de uma coluna (*Loadings* da reflectância)

$$q_1 = \frac{(y_0^T \cdot \hat{t}_1)}{\hat{t}_1^T \cdot \hat{t}_1} \quad \text{Eq. 6}$$

e onde q_1 é uma matriz de uma coluna e uma fila (um único valor) (*Loadings* do atributo). Desta forma os coeficientes de regressão (" b ") podem ser calculados por

$$b = W(p^T \cdot W)^{-1} \cdot q \quad \text{Eq. 7}$$

e é calculado também o fator de correção

$$b_0 = y - X^T b \quad \text{Eq. 8}$$

assim a estimativa do atributo pode ser feita por

$$Y = b_0 + \sum_{i=1}^n (R_i \cdot b_i) \quad \text{Eq. 9}$$

onde Y é o valor do atributo modelado, b_0 é o fator de correção, b_i são os coeficientes de regressão para cada região do espectro e R_i é a reflectância em cada região do espectro. Uma das características deste método de regressão é que esta pode ser melhorada através das matrizes de resíduos da regressão inicial. Assim, se realiza uma nova regressão minimizando estes resíduos e obtendo novos coeficientes b . Estas matrizes são calculadas por:

$$X_1 = X_0 - t_1 \cdot p_1^T \quad \text{Eq. 10}$$

$$y_1 = y_0 - t_1 \cdot q_1^T \quad \text{Eq. 11}$$

onde X_l e y_l são as novas matrizes a partir das quais é realizada a nova regressão⁵. Este procedimento pode ser repetido varias vezes minimizando cada vez mais os resíduos ou o erro e melhorando assim ate certo ponto as regressões, se o procedimento é realizado n vezes se diz que se tem usado um número n de fatores PLS. As regressões PLS têm sido amplamente utilizadas apresentado bom desempenho na estimativa de atributos baseada no comportamento espectral do solo (McBRATNEY et al., 2006; VISCARRA ROSSEL et al., 2008; VASQUES et al., 2008; ZORNOZA et al., 2008; FERNANDEZ PIERNA; DARDENNE, 2008).

Nas calibrações feitas foi usado o método *leave-one-out* que fornece informação sobre a estabilidade da modelagem de dados feita no PLS, este teste baseia-se no método de reamostragem é desenvolvido usando validação cruzada. Por outra parte, o número de fatores PLS foram escolhidos usando como critério os resultados da validação dos modelos (teste externo), onde foram avaliados: o coeficiente de determinação (R^2) (Eq. 12), raiz do erro médio quadrático da predição (RMSEP) (Eq. 13), erro médio quadrático relativo ($RMSE_{\text{Relativo}}$) (Eq. 14) erro médio (ME) (Eq.15) e desvio padrão do erro (SDE) (Eq. 16).

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{y}_i)^2} \quad \text{Eq. 12}$$

$$RMSEP = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{Y}_i - y_i)^2} \quad \text{Eq. 13}$$

$$RMSE_{\text{relativo}} = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{Y}_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^N y_i^2} \quad \text{Eq. 14}$$

$$ME = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i) \quad \text{Eq. 15}$$

$$SDE = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i - ME)^2}{1 - N} \quad \text{Eq. 16}$$

\hat{y}_i indica os valores estimados pelo modelo, y_i indica os valores observados e N é o número observações da variável a modelar. O R^2 e o RMSE foi também avaliado dentro de uma validação realizada com as amostras de calibração (validação ou teste interno).

4.2.5.3 Determinação do número ótimo de amostras para calibração de modelos

Com cada um dos 33 grupos criados para a calibração de modelos, foi desenvolvida uma equação para a estimativa de cada um dos atributos avaliados (areia, argila, Ca, Mg e K). Sendo assim, foram calibrados distintos modelos de estimativa em função do número de amostras.

Por meio de validação cruzada (dos dados preditos em relação aos dados obtidos na análise convencional de laboratório) foram avaliados parâmetros do desempenho de cada um dos modelos de predição de atributos, tais como o RMSE, ME, SDE e o R^2 . Para cada um dos atributos, foi modelada a variação destes parâmetros em função do número de amostras usado para calibrar os modelos de estimativa. Desta forma, foi determinado o máximo valor de R^2 alcançado pelos modelos de cada atributo, assim como os mínimos valores alcançados de RMSE, ME e SDE e os valores do tamanho do grupo de amostras a partir do qual estes parâmetros alcançam sua estabilidade. Paralelamente, foram construídos gráficos destes parâmetros em função do tamanho do grupo de amostras de calibração. Obtiveram-se equações sobre as quais foi determinado o número ótimo de amostras. A Figura 1 exemplifica as curvas teóricas que são obtidas a partir das equações resultantes da modelagem dos parâmetros de validação dos modelos em função do número de amostras usadas na calibração. O 99% do máximo R^2 , e o 99% do mínimo RMSE, ME, SDE, foram usados como o valor onde o número de amostras usadas para na calibração não influencia significativamente no aumento do R^2 ou na diminuição do erro de validação.

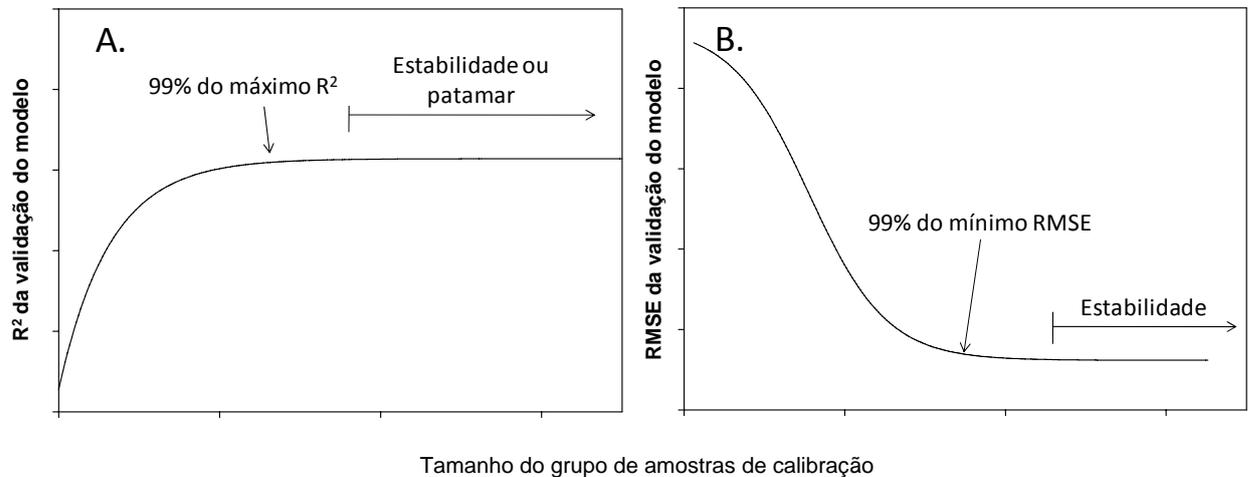


Figura 1 – Exemplo de curvas teóricas do R^2 (A) e do RMSE (B) da validação de modelos de estimativa de atributos em função do número de amostras usadas na calibração

4.2.6 Modelagem espacial de atributos do solo na camada A usando dados obtidos por sensoriamento próximo

Nesta etapa os modelos de quantificação calibrados com os grupos de amostras de tamanho considerados como ótimos foram usados para prever os atributos da profundidade A. A predição de atributos unicamente foi realizada para as amostras que não fizeram parte da calibração dos modelos escolhidos (modelos com número ótimo de amostras). Após este processo, os dados preditos foram agrupados com os dados dos atributos obtidos por análise física e química convencional das amostras usadas na calibração. Desta forma foi criado um banco de dados da profundidade A, com uma combinação de dados obtidos de forma convencional e obtidos por sensoriamento próximo. O objetivo desta etapa do trabalho foi simular o processo metodológico que seria seguido na aplicação prática da técnica de predição de atributos por sensoriamento próximo para fins de mapeamento da fertilidade do solo.

Os atributos foram relacionados à suas coordenadas geográficas correspondentes. Verificaram-se os coeficientes de assimetria e curtose dos dados estimados. Todos os atributos do solo (preditos pelos modelos espectrais e os determinados na análise de rotina) foram analisados através de métodos geoestatística os usando o pacote GeoR (RIBEIRO ; DEIGGLE, 2001) do software estatístico R (versão 2.7.2). Foi usada a função do semi-variograma (MATHERON, 1965) (Eq. 17) para a construção dos semi-variogramas experimentais e identificação das estruturas espaciais.

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_i + h)]^2 \quad \text{Eq. 17}$$

onde $\gamma(h)$ e a variância média entre pares de pontos separados por uma distancia h . $N(h)$ é o número de pares de pontos de amostrados separados por uma distancia h , $Z(x_i)$, $Z(x_i + h)$ representam os valores do atributo em dois pontos separados por uma distancia h .

Estes semi-variogramas foram ajustados a modelos teóricos de semivariância espacial através da função de máxima verossimilhança (DEIGGLE ; RIBEIRO, 2007). Para isto, foram testadas diferentes funções geoestatísticas entre elas a exponencial, matern, circular, cúbica, cauchy, gaussiano e esférico. Estes modelos foram escolhidos usando o *critério de informação* do Akaike (AIC) e as características destes semi-variogramas foram usadas para determinar e classificar o grau de dependência espacial dada pela relação entre o valor do sill (C) e a variância total (Co+C) no semi-variograma. Valores menores que 0,25 indicam dependência espacial fraca, valores entre 0,25 e 0,75 indicam dependência espacial moderada, e valores acima de 0,75 dependência espacial forte (adaptado de CAMBARDELLA et al., 1994). Foram realizadas comparações entre os correspondentes semi-variogramas dos atributos do solo obtidos com a análise de rotina e com os estimados pelos modelos espectrais.

As características dos semi-variogramas foram usadas também na construção de mapas de variabilidade espacial dos atributos através do método de interpolação de krigagem ordinária, gerando um mapa de variabilidade espacial de cada atributo. Foram desenvolvidos mapas utilizando unicamente os dados de atributos obtidos de análises convencionais, com o objetivo de fazer comparações com os mapas obtidos por atributos derivados de análises espectrais. Além destes mapas, outros foram elaborados utilizando-se dados da análise de solo. Estes detinham o mesmo número de amostras (na camada A) dos modelos calibrados com a quantidade de amostras determinada como ótima. Sendo assim, foram selecionadas amostras de forma sistemática na grade de amostragem original usando um espaçamento constante. Os objetivos da elaboração destes mapas foram: a) determinar se com este número de amostras poder-se-ia identificar a estrutura espacial dos atributos avaliados; b) se possível, elaborar mapas de atributos; c) comparar o grau de precisão destes em relação aos mapas construídos por dados espectrais.

Desta forma foi realizada a avaliação do impacto da acurácia das estimativas sobre o processo de mapeamento de atributos do solo.

Finalmente, levando em consideração que esta etapa do trabalho aponta à aplicabilidade do sensoriamento próximo no mapeamento digital da variabilidade espacial do solo para manejo localizado, foi feita uma análise aproximado de custos da metodologia que incorpora dados espectrais para a estimativa de atributos. Estes custos foram comparados com os custos de um mapeamento de atributos do solo usando dados de análise convencional de laboratório.

4.3 Resultados e Discussão

4.3.1 Filtragem dos dados

Médiante a aplicação do método da distância de mahalanobis para PC1 x PC2 e para PC1 x PC3 foram identificados 30 *outliers* dos dados espectrais. Com o mesmo procedimento foram identificados 29 *outliers* para os dados das análises físico-químicas. Estes *outliers* foram subtraídos do conjunto total de amostras. Os três primeiros componentes principais resultantes dos dados espectrais filtrados descreveram 99.4% da variabilidade espectral total (Figura 2A). Para este mesmo número de componentes, no caso dos dados físico-químicos, os três primeiros PCs descreveram 78.3% da variabilidade (Figura 2B). Em ambas as situações, observou-se uma tendência de agrupamento em função da profundidade a qual é atribuída principalmente por diferenças na textura e teor de matéria orgânica.

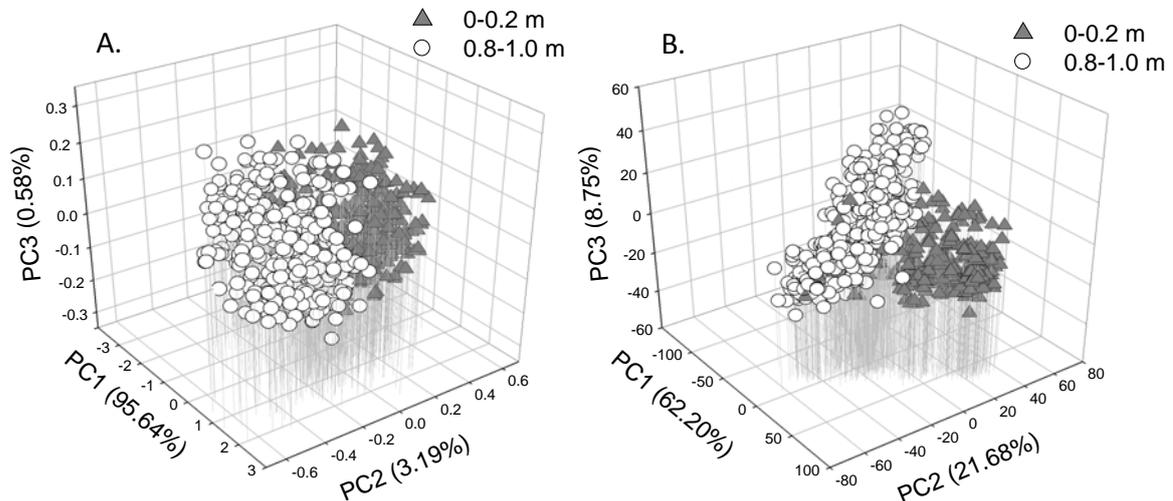


Figura 2 – A. Scores dos três primeiros componentes principais onde se apresenta a estrutura dos dados espectrais. O agrupamento na esquerda dos dados da profundidade A (0 - 0,2 m) e a direita dos dados da profundidade B (0 - 0,2 m). B. Scores dos três primeiros componentes principais onde se apresenta a estrutura de variabilidade do conjunto de dados físico-químicos. Profundidade A (0 - 0,2 m,) profundidade B (0 - 0,2 m)

4.3.2 Descrição dos dados obtidos na análise convencional do solo

Os dados de areia apresentaram um coeficiente de assimetria negativo (Tabela 1), o qual indica uma tendência de distribuição à direita (Figura 3B), enquanto que os demais atributos apresentaram tendência à esquerda (coeficiente positivo) (Figura 3 A, C-F). Todos os atributos avaliados apresentaram altos coeficientes de assimetria e curtose. Em geral altos valores de curtose estão diretamente relacionados com elevados valores de desvio padrão, condicionado pela variabilidade natural dos atributos no solo estudado, os quais são influenciados por condições geomorfológicas (SOUZA et al., 2003).

O histograma da areia (Figura 3B) indica que na área de estudo a maioria dos seus valores encontra-se entre 70 - 90 %. O valor médio encontrado para este atributo foi de 71,6 %. A maioria das amostras de solo classificadas no triângulo textural USDA (Soil Survey Staff, 1975) correspondem às classes franco argilo-arenosa e franco-arenoso (Figura 4). Os altos teores de areia encontrados na maioria de amostras analisadas indicam que os solos da área possuem, de forma geral, uma baixa capacidade de troca de cátions. Não obstante, os teores de bases (Tabela 1) indicam que a matéria orgânica contribui de forma significativa na CTC dos solos estudados. Os valores dos atributos avaliados encontram-se numa faixa ampla de distribuição (Tabela 1; Figura 2), o que é explicado pela variabilidade de solos dentro da área. Além disso, a quantidade de amostras usadas para o presente trabalho representa uma vantagem na construção de modelos robustos de estimativa destes atributos.

Tabela 1 - Estatística descritiva dos atributos das amostras de solo nas profundidades A e B

Atributo	Mínimo	Máximo	Média	D.P*	Assimetria	Curtose
Argila, %	2,0	76,0	23,6	15,2	1,76	2,17
Areia, %	9,0	96,0	71,6	18,6	-1,81	2,19
K, mmol _c dm ⁻³	0,1	8,1	1,6	1,26	1,80	4,76
Ca, mmol _c dm ⁻³	0	73,0	13,0	11,6	1,71	3,55
Mg, mmol _c dm ⁻³	0	21,0	4,7	3,6	1,70	3,52
SB ^{**} , mmol _c dm ⁻³	2,1	96,9	19,3	15,4	1,56	2,70

*Desvio padrão; **Soma de bases

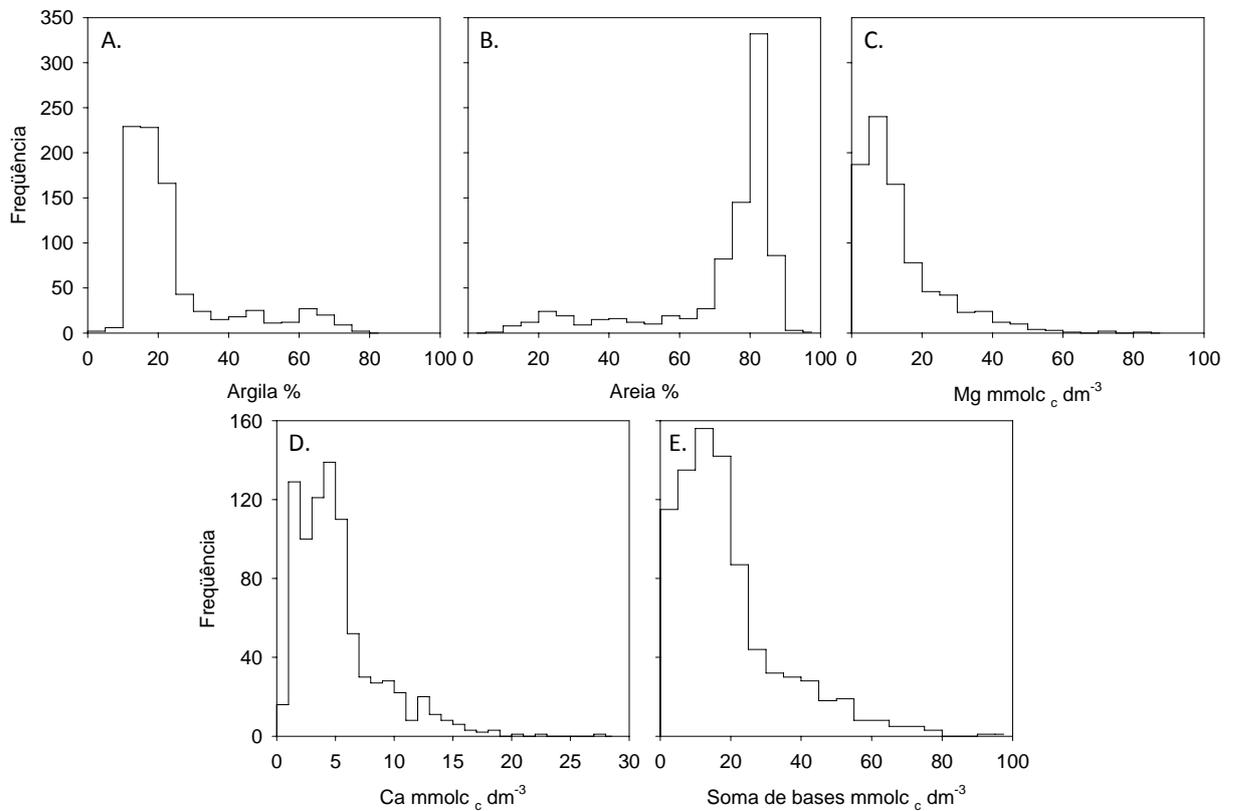


Figura 3 – Histogramas da frequência de valores dos atributos avaliados obtidos na convencional de solos avaliados. A. Argila; B. Areia; C. Cálcio; D. Magnésio; E. Soma de bases

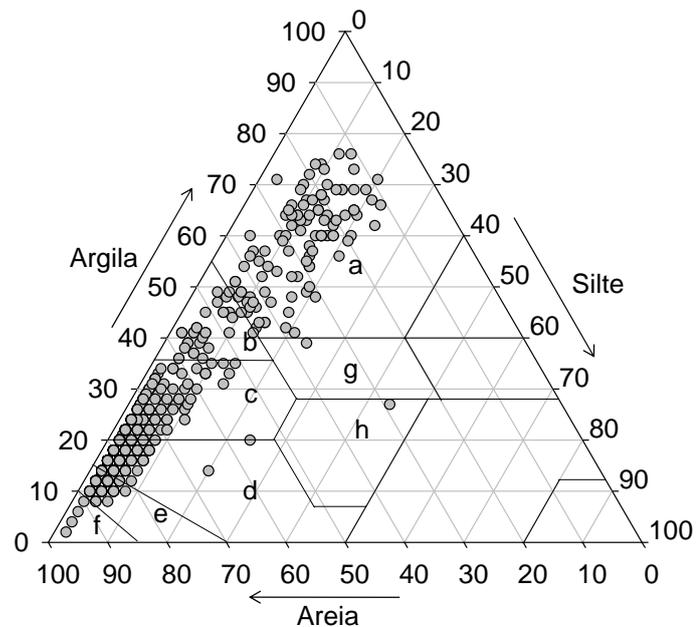


Figura 4 – Distribuição textural no triângulo textural USDA (Soil Survey Staff, 1975). a: argiloso; b: argilo arenoso; c: franco argilo arenoso; d: franco arenoso; e: arenoso franco; f: arenoso; g: franco argiloso; h: franco

4.3.3 Análise espectral e determinação do número ótimo de amostras para a calibração dos modelos de estimativa

De forma geral as curvas espectrais apresentaram feições de absorção bem definidas em torno de 1400 e 1900 nm, atribuídas ao OH⁻ da água higroscópica do solo e a presença de minerais do tipo 2:1 (DEMATTE et al., 1998), e em 2200 nm oriunda dos grupos OH⁻ dos argilominerais (Figura 5). Exceto para as amostras provenientes dos NEOSSOLOS QUARTZARÊNICOS, os espectros dos solos apresentaram influência de óxido de ferro com bandas de absorção centradas em 435 nm e 550 nm, características da presença de goetita e hematita (FERNANDES et al., 2004), respectivamente, além da feição em 850 nm e da conseqüente redução de albedo e suavização das demais feições de absorção (DEMATTE; GARCIA, 1999; VITORELLO ; GALVÃO, 1996). Como a reflectância do quartzo é elevada (WHITE et al., 1997) há um aumento na intensidade do albedo das amostras de RQo, quando comparada às demais, visto que este tipo de solo apresenta uma elevada porcentagem de areia total.

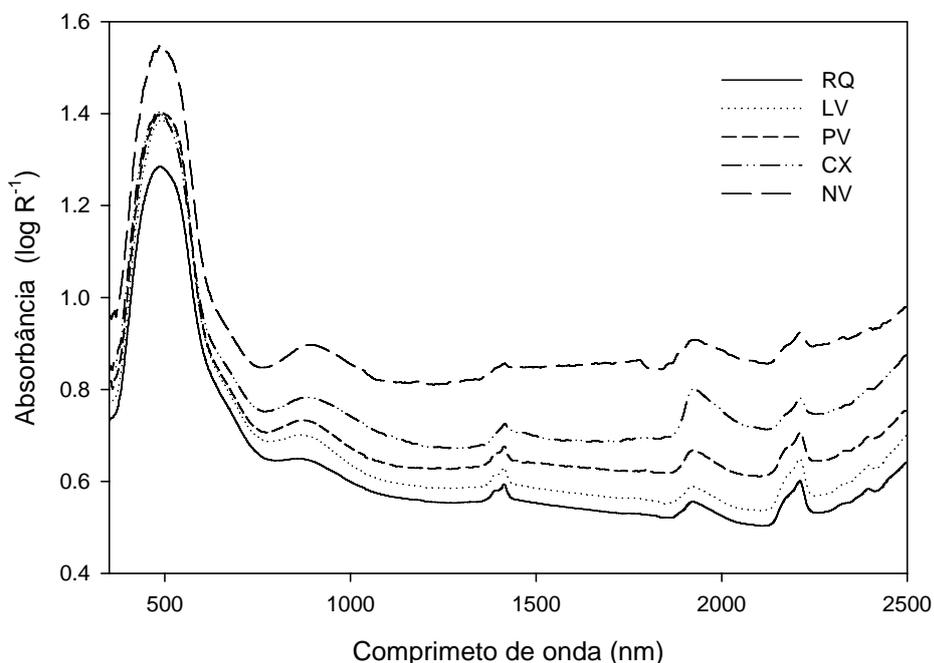


Figura 5 - Espectros representativos das amostras de diferentes classes de solo. RQ: Neossolo Quartzarênico; LV: Latossolo Vermelho; PV: Argissolo Vermelho; CX: Cambissolo Háplico; NV: Nitossolo Vermelho

Verificou-se que o melhor pré-processamento para os dados espectrais foi a centralização em torno da média (MC). Para as calibrações, todos os dados espectrais obtidos como reflectância foram transformados para absorbância ($\text{Log}(1/R)$). Nas 33 calibrações de modelos de estimativa feitas para cada atributo, conforme o número de amostras usadas para calibração aumentou, na validação destes modelos os coeficientes de determinação (R^2) aumentaram e os valores de RMSEP, $\text{RMSEP}_{\text{relativo}}$, SDE, e ME diminuíram. Em outras palavras, os modelos ficaram mais robustos. Na validação dos modelos, os valores de RMSEP variaram de 7,2 a 5,8 % para argila; de 9,6 a 7,2 % para areia; de 8,9 a 1,8 $\text{mmol}_c \text{dm}^{-3}$ para Mg; de 12,2 a 5,9 $\text{mmol}_c \text{dm}^{-3}$ para Ca e de 18,4 a 7,6 $\text{mmol}_c \text{dm}^{-3}$ para a soma de bases.

A variação dos parâmetros de validação em função do número de amostras usadas para a calibração ajustou-se a três tipos de funções: sigmóides de quatro parâmetros (Eq. 18), sigmoidais Chapman (Eq. 19) e exponenciais simples com aproximação ao valor máximo (Eq. 20). Em todos os casos as curvas construídas com estas funções atingiram um nível de estabilidade onde o parâmetro avaliado permaneceu relativamente constante sendo então independente do número de amostras usadas para a calibração (Figura 6, 7 e 8). Como já citado acima, em todos os casos o número de amostras ótimo para a calibração de modelos de estimativa de atributos na área de estudo, foi menor do que 326 amostras (maior grupo).

$$f = y_0 + \frac{a}{1 + e^{-(x-x_0)/b}} \quad \text{Eq. 18}$$

$$f = y_0 + a (1 - e^{-b \cdot x})^c \quad \text{Eq. 19}$$

$$f = y_0 + a (1 - b^x) \quad \text{Eq. 20}$$

Os modelos ajustados para descrever a variação dos parâmetros da validação em função do número de amostras de calibração ajustaram-se com coeficientes de determinação (R^2) acima de 0,62 para os modelos de descrição do R^2 da validação (Figura 6), 0,65 para os modelos de descrição do $\text{RMSE}_{\text{relativo}}$ (Figura 7), e 0,81 para os modelos de descrição do SDE (Figura 8).

Através das equações de regressão geradas, foi obtido o valor de cada parâmetro onde ele torna-se constante e independente do número de amostras usadas na calibração. O R^2 da

validação dos modelos de estimativa construídos atingiu, em todos os casos, o patamar acima de 0,70.

No caso das validações dos 33 modelos de estimativa de argila, uma equação de tipo sigmóide foi a que melhor descreveu a variação do R^2 em função tamanho do grupo de amostras de calibração (Figura 6A, Tabela 2). Esta função indica que o máximo R^2 que um modelo de estimativa deste atributo pode atingir é de 0,87 (Tabela 2). Assim, 99% da estabilidade é alcançada de forma significativa quando o valor do R^2 é de 0,86 (Tabela 2). Substituindo o valor de 0,86 na equação de regressão que foi calculada com 100 amostras de solo usadas na calibração, este valor de R^2 pode ser atingido (Tabela 2).

O incremento do R^2 da validação causado pelo aumento no número de amostras usadas na calibração de modelos de estimativa de areia foi descrito por uma função de tipo sigmóide, enquanto que para os modelos de estimativa dos atributos químicos este incremento foi descrito por funções de tipo exponencial (Figura 6, Tabela 2).

Para argila, a variação do $RMSE_{relativo}$ e do SDE em função do tamanho do grupo de calibração ajustaram-se a modelos de tipo sigmóide. Através dos modelos que descrevem estas variações (Figura 7A e 8A) calculou-se o menor número de amostras com que o $RMSE_{relativo}$ e o SDE é minimizado em 99% é de 103 e 99 respectivamente. Com o anterior foram obtidos 3 números que indicam os tamanhos de grupos de amostras adequados para a calibração de modelos de estimativa da argila. Assim, o número ótimo de amostras é o maior valor encontrado, correspondente a 103. Isto porque este número de amostras permite atingir um nível onde o R^2 é o 99% ou mais do R^2 máximo possível e o $RMSE_{relativo}$ e o SDE possuem um valor de 99% ou mais do mínimo possível. Desta forma, para cada atributo foi calculado um número de amostras ótimo para a calibração de modelos de estimativa, onde para areia foi de 166, para Mg de 136, para Ca de 118 e para soma de bases de 129.

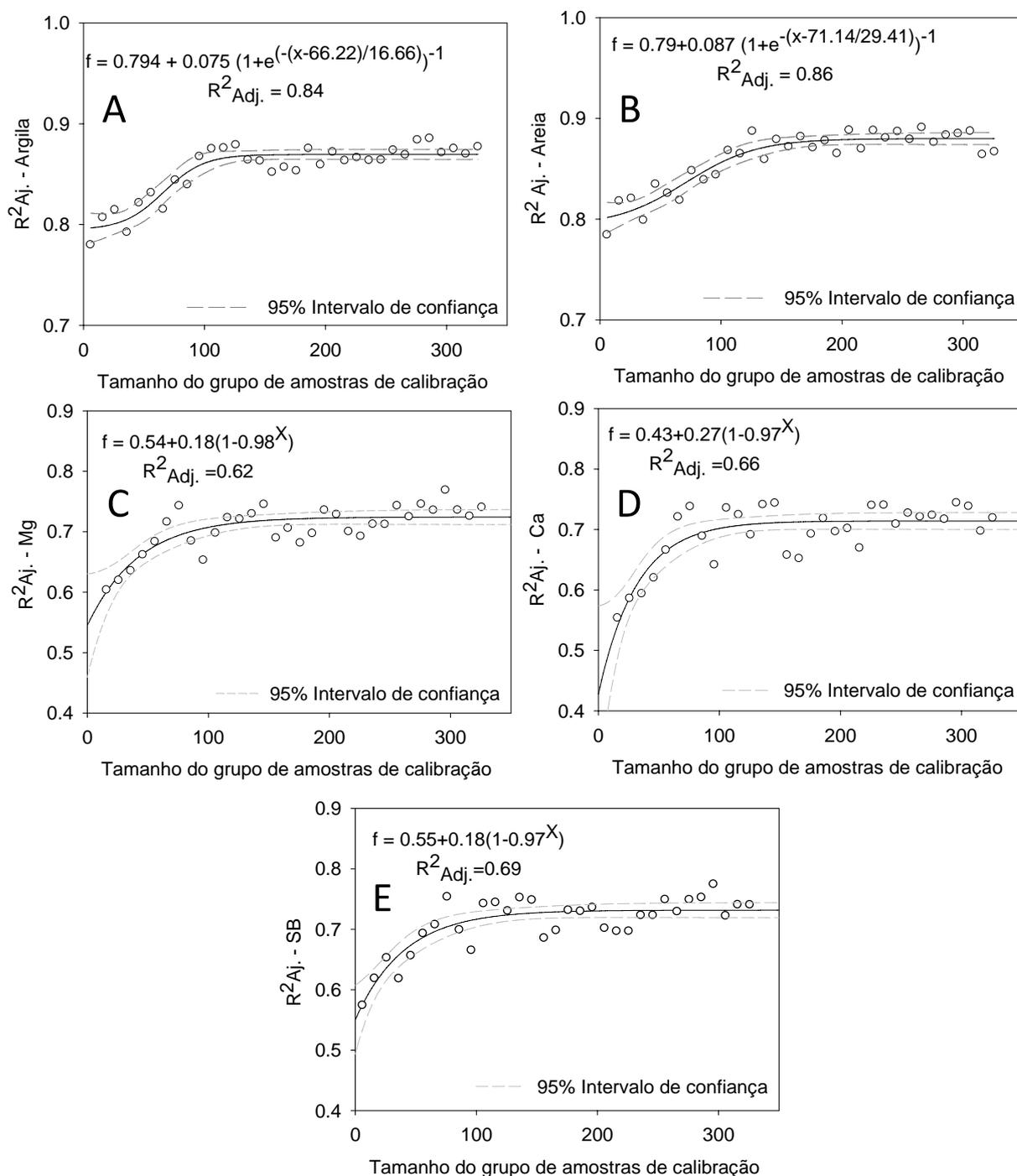


Figura 6 – Variação do R^2 em função do tamanho do grupo de amostras usadas na calibração de: A. argila, B. Areia, C. Mg, D. Ca, E. soma de bases

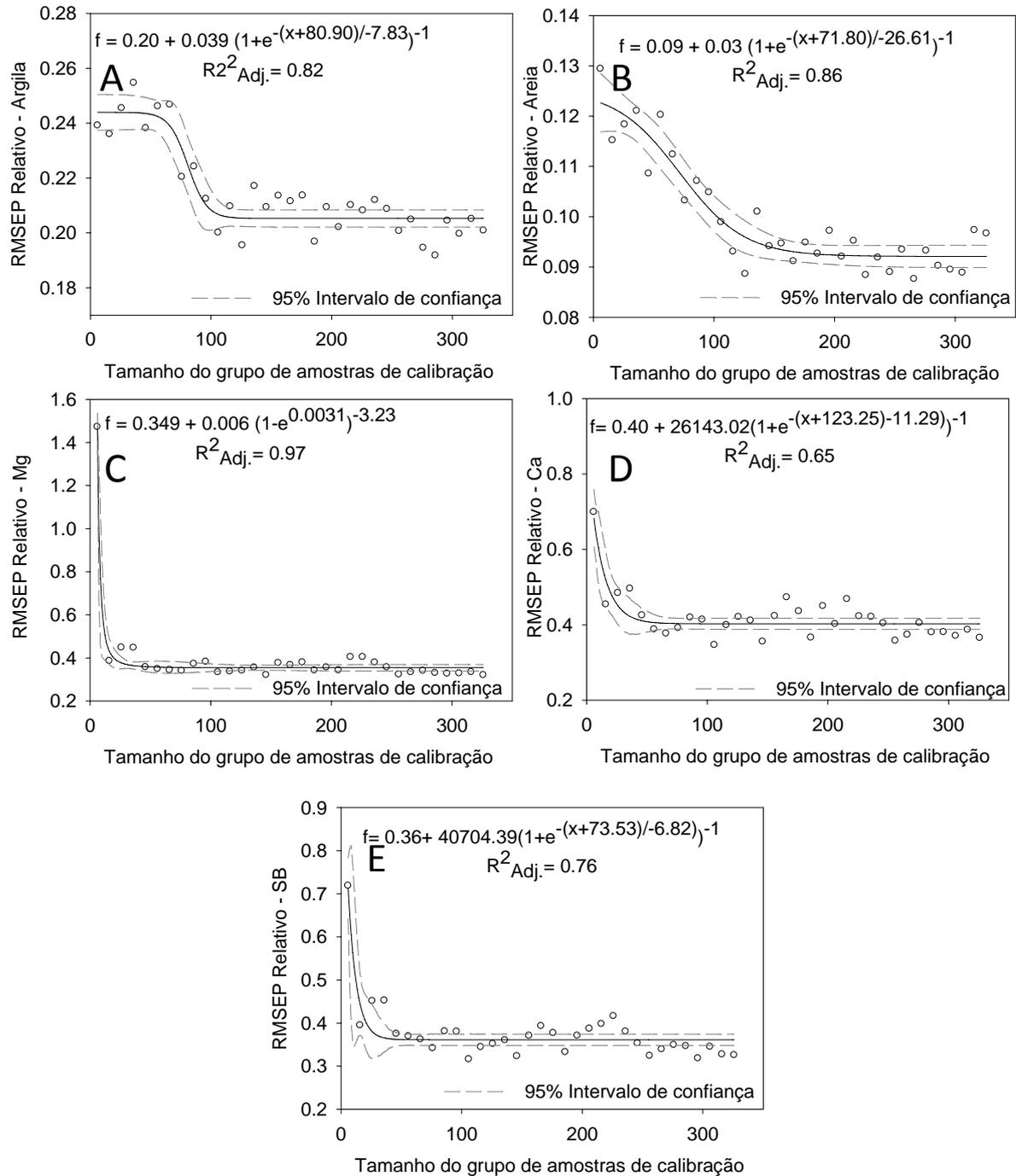


Figura 7 – Variação do RMSE relativo em função do tamanho do grupo de amostras usadas na calibração de: A. argila, B. Areia, C. Mg, D. Ca, E. soma de bases

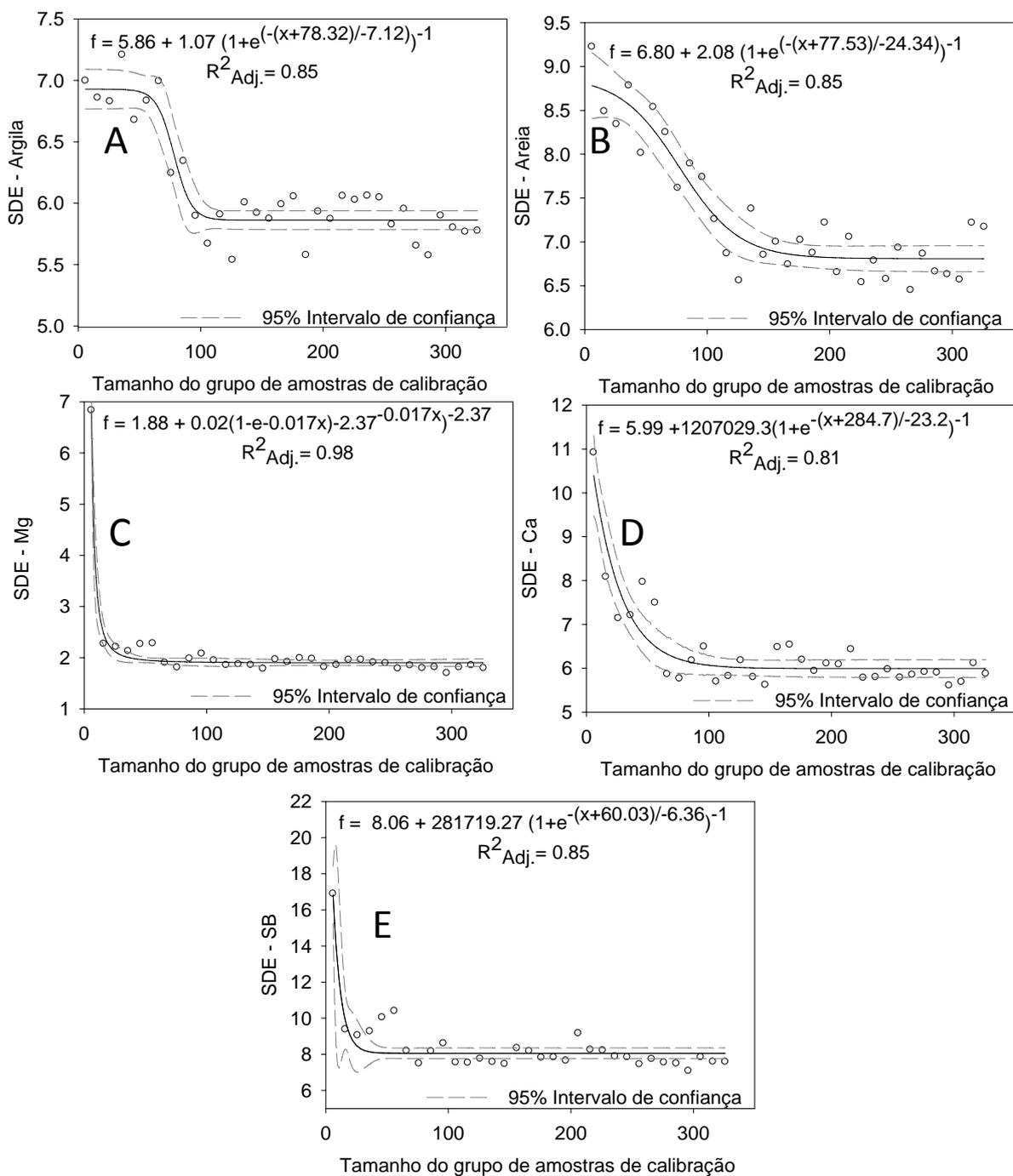


Figura 8 – Variação do RMSE relativo em função do tamanho do grupo de amostras usadas na calibração de: A. argila, B. Areia, C. Mg, D. Ca, E. soma de bases

Na que na análise convencional a areia e a argila são atributos que são determinados de forma simultânea, então na prática, o número de amostras ótimo para a calibração de modelos espectrais de quantificação destes atributos, será o maior valor de amostras necessário determinado (Tabela 2). Assim, para estes dois atributos o número ótimo encontrado foi de 166 amostras. Isso indica que só é necessária a análise convencional de textura em 166 amostras do total de amostras das duas profundidades estudadas (A e B). Por outro lado, devido a que convencionalmente a determinação do Ca e do Mg é feita de forma simultânea, e a soma de bases é calculada usando estes atributos, então o número de amostras ótimo para calibrar modelos de estimativa destes atributos é de 136, correspondente ao maior valor de número de amostras ótimo para a calibração do conjunto destes atributos (Tabela 2). Embora seja preciso um menor número de amostras para calibrar os modelos de atributos químicos, os modelos de areia e argila possuem um maior poder de predição.

Tabela 2 - Tipos de funções da variabilidade dos parâmetros da validação em relação ao número de amostras de calibração, e número de amostras ótimo para a construção de modelos de estimativa de cada atributo

Parâmetro	Atributo	Tipo de função	Valor do parâmetro no ponto de estabilidade	99 % do valor da estabilidade	Número ótimo de amostras
R^2_{Ajustado}	Argila	Sigmóide	0,87	0,86	100
	Areia	Sigmóide	0,88	0,87	135
	Mg	Exponencial	0,72	0,72	136
	Ca	Exponencial	0,71	0,71	118
	SB	Exponencial	0,73	0,72	129
RMSEP Relativo	Argila	Sigmóide	0,21	0,21	103
	Areia	Sigmóide	0,09	0,09	166
	Mg	Sigmoidal Chapman	0,35	0,36	55
	Ca	Sigmóide	0,40	0,41	54
	SB	Sigmóide	0,36	0,36	37
SDE	Argila	Sigmóide	5,86	5,92	99
	Areia	Sigmóide	6,81	6,88	160
	Mg	Sigmoidal Chapman	1,90	1,92	82
	Ca	Sigmóide	5,99	6,05	106
	SB	Sigmóide	8,06	8,14	36

4.3.3.1 Espectros de regressão e validação das calibrações dos grupos de amostras de tamanho determinado como ótimo

Os modelos calibrados para cada atributo do solo são apresentados na Figura 9 na forma de espectros de regressão. Cada banda espectral possui o seu correspondente coeficiente de regressão (coeficiente b). Os coeficientes b contêm informação interpretável a qual pode ser usada para indicar quais regiões espectrais contribuem nas predições (HAALAND AND THOMAS, 1988). Neste caso as faixas espectrais que possuem valores positivos indicam absorção de energia por parte do atributo analisado, e as faixas com valores negativos indicam reflexão de energia.

Os espectros de argila e areia possuem uma correlação inversa e proporcional (CHANG et al., 2001). Estas características inversas foram observadas principalmente nas bandas 593, 683, 1078, 1366, 1802, 1831, 2211, 2263 e 2393 nm (Figura 9A e B). Assim, nas faixas espectrais em que a argila absorve energia (valores positivos) e a areia reflete (valores negativos). A banda dos 2200 nm que está relacionada com argilominerais (HUNT, 1982, BEN-DOR et al., 2008b), apresentou uma faixa de reflexão nos espectros da argila (Figura 9A), Mg (Figura 9C), Ca (Figura 9D) e soma de bases (Figura 9E). Isto indica que existe uma correlação direta entre os argilominerais e as bases. Esta faixa, portanto, está também relacionada com a CTC.

O Ca e Mg indicam um comportamento espectral semelhante. Ambos possuem um pico em 745 nm mas este apresenta uma intensidade de absorbância maior no Mg. Nos dois espectros, se apresenta uma faixa de absorção entre 1800 e 2150 nm, mas o pico desta faixa encontra-se nos 2057 nm para o Mg e 1923 nm para o Ca. Neste último elemento o pico indica uma absorbância mais intensa que a do Mg.

No espectro do Mg foi observado um pico diagnóstico em 403 nm o qual é ausente no espectro de regressão do Ca. Este pico apresentou a maior intensidade de absorção dentro do espectro de regressão do Mg, indicando que das bandas de absorção de energia do Mg esta é a que mais contribui na predição dos teores deste elemento. As bandas 1388 e 1411 nm indicam que o Ca e o Mg refletem energia nestes comprimentos de onda e são as que maior contribuição têm na estimativa destes elementos.

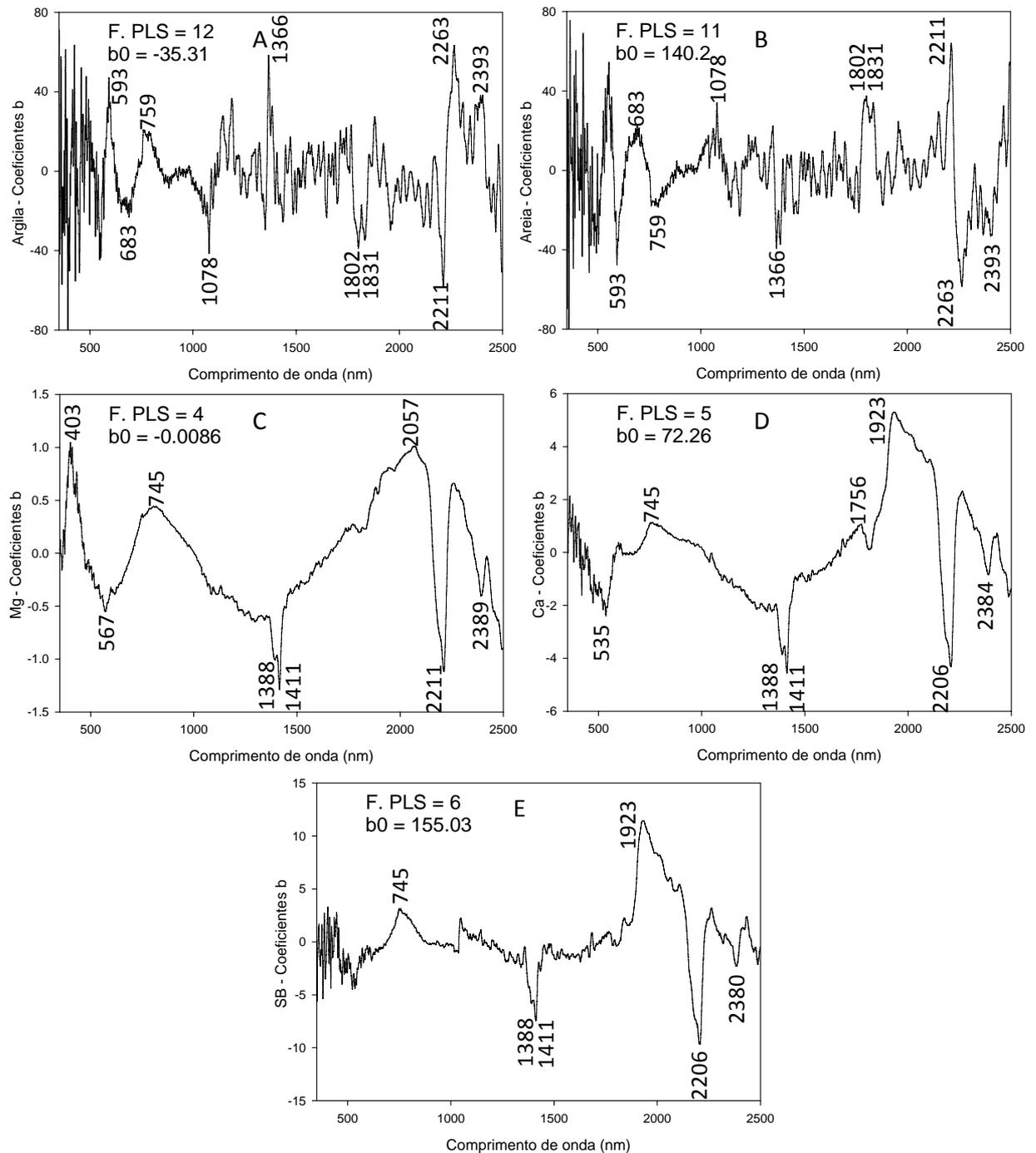


Figura 9 – Espectros de regressão gerados para: argila (A); areia (B); Mg (C); Ca (D); e soma de bases (E)

O desempenho de modelos espectrais de estimativa de atributos pode ser classificado por meio do R^2 em: muito bom (> 0.81), bom ($0.61 - 0.8$), regular ($0.41 - 0.6$) e fraco (< 0.4)

(VISCARRA ROSSEL ; MCBRATNEY, 2008). Assim, o desempenho dos modelos calibrados para argila e areia foi muito bom e para o Ca, Mg e soma de bases foi bom (Tabela 3).

Tabela 3 – Avaliação estatística dos modelos de estimativa de atributos aplicados às amostras de calibração (teste interno) e às amostras de validação do modelo (teste externo). O número de amostras usadas na calibração é o número determinado como adequado para a construção de modelos de textura e de bases

Atributo	Tamanho do grupo de calibração	Validação cruzada com amostras de calibração teste interno			Validação dos modelos teste externo (n=333)			
		Fatores PLS	R ² _{ajust.}	RMSE	R ² _{ajust.}	RMSE _P	ME _P	SDE _P
Argila %	166	12	0,90	4,1	0,85	5,9	-0,24	5,99
Areia %	166	11	0,95	3,5	0,88	6,7	0,03	6,73
Mg mmol _c kg ⁻¹	136	4	0,77	1,6	0,73	1,9	-0,34	1,86
Ca mmol _c kg ⁻¹	136	5	0,76	4,6	0,74	5,6	-0,49	5,62
SB mmol _c kg ⁻¹	136	6	0,78	6,2	0,75	7,5	-0,52	7,47

O R² das validações cruzadas dos modelos espectrais de argila e areia apresentaram valores altos em comparação aos citados em outras pesquisas envolvendo a mesma faixa espectral (VIS-NIR-SWIR) e a MIR. Por exemplo, Viscarra Rossel e Mcbratney (2008) indicam que o valor médio de R² (computado a partir de informações de várias pesquisas entre 1986 e 2006) da validação cruzada para este atributo é de 0,76 usando nas regiões VIS-NIR, e usando a região MIR este valor é de 0,78. Para as validações de Ca, Mg, os R² foram um pouco mais baixos que os reportados por estes autores que indicam uma média de 0,80 para Ca e 0,76 para Mg usando dados VIS-NIR e 0,89 e 0,76 correspondentemente usando dados MIR.

Os modelos calibrados apresentaram um bom desempenho na predição dos atributos do solo avaliados (Tabela 3; Figura 10), embora a falta de sensibilidade das análises de rotina para os dados observados pode ter prejudicado o desempenho dos modelos, já que os intervalos de medição para argila, Ca e Mg tiveram uma amplitude de medição alta, sobretudo quando os valores foram baixos (Figura 10). Isto também pode ser explicado pelo fato de que baixos teores de atributos podem conter maior erro analítico laboratorial (MINASNY ; MCBRATNEY, 2008). De fato, erros em laboratórios são comuns conforme relatado por CANTARELLA et al. (2006).

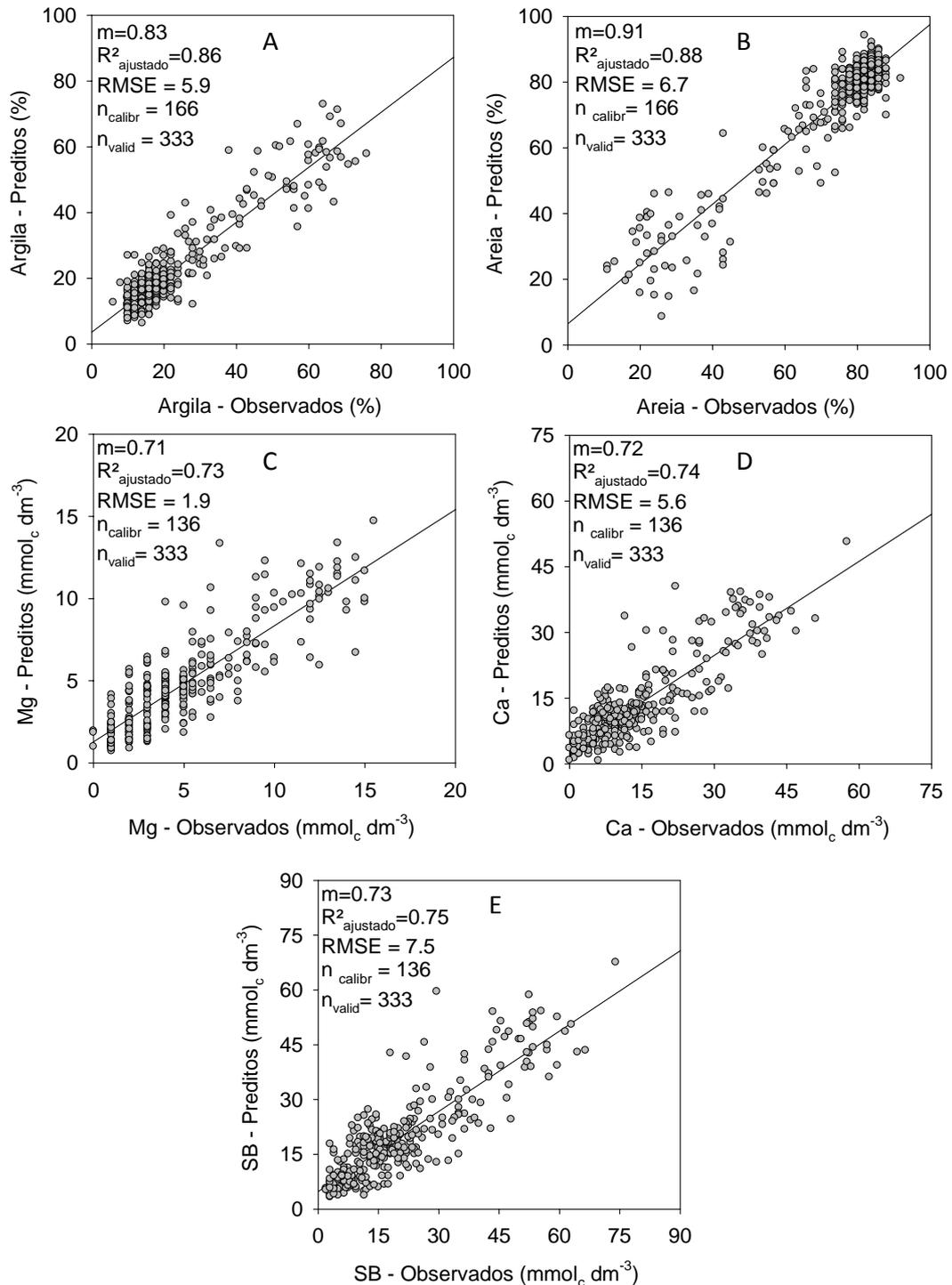


Figura 10 – Validações dos modelos construídos com o número de amostras calculado como ótimo. argila (A); areia (B); Mg (C); Ca (D); e soma de bases (E). Os intervalos de medição das análises convencionais (observados) possuem uma amplitude alta, o que pode indicar uma baixa sensibilidade de medição sobretudo em quando os teores são baixos. m : inclinação; n_{calibr} : número de amostras usadas na calibração; n_{valid} : número de amostras usadas na validação

No Brasil a variabilidade das análises de solo entre diferentes laboratórios comerciais indica que só entre 74 - 97% das análises químicas de rotina e 68 - 85% das análises de textura são consideradas como aceitáveis (CANTARELLA et al., 2006). Baseados nestas faixas de valores, o nível de acurácia das análises químicas obtido no presente trabalho são considerados como ótimos para a granulometria. É possível que estes níveis de acurácia possam ser aumentados significativamente usando técnicas de regressão ainda mais sofisticadas e incorporando faixas espectrais como a MIR (VISCARRA ROSSEL et al., 2006). Como já citado anteriormente, a acurácia laboratorial nunca atinge 100% de precisão. Isto implica que nas calibrações de modelos espectrais usando como padrão os dados de laboratórios de rotina sempre vai estar incorporado o erro destes últimos. Isto concorda com Nanni e Demattê (2006) em relação à utilização de dados obtidos por modelos espectrais em substituição dos obtidos na análise convencional. Por outro lado, os referidos autores obtiveram níveis de acurácia (a partir de modelos de regressões lineares múltiplas) menores que os aqui obtidos usando regressões PLS.

4.3.4 Análise espacial, mapeamento digital e espectro-digital dos atributos da camada A

Embora a avaliação pontual tenha indicado que os atributos apresentaram desempenhos classificados como muito bons (areia e argila) e bons (Mg, Ca e soma de bases), estes níveis de acurácia não podem ser usados como indicadores globais da acurácia de mapas digitais construídos usando dados estimados com modelos espectrais, devido a que o erro das predições dos modelos espectrais, assim como também o erro próprios dos dados da análise de rotina, podem-se propagar de formas diferentes ao estes serem introduzidos nos cálculos requeridos para a descrição espacial dos atributos. Sendo assim, foi necessário então fazer uma avaliação do impacto da acurácia das estimativas sobre o processo de mapeamento de atributos do solo.

Das 166 amostras usadas na calibração dos modelos de argila e areia (quantidade ótima) 85 (20,5%) pertenciam à camada A, e das 136 usadas para a calibração de Ca, Mg e soma de bases, 71 (17,1%) correspondiam a esta mesma profundidade.

A estrutura espacial dos dados dos atributos da análise de rotina, assim como dos dados estimados pelo comportamento espectral são bastante semelhantes (Tabela 3). Não foram observadas diferenças contrastantes entre os dados derivados da análise convencional e os derivados dos modelos espectrais (Tabela 3; Figura 11). O uso de dados preditos por modelos

espectrais não alterou a tendência de variação espacial dos atributos indicada pelos de semi-variogramas aos que estes foram ajustados. Todos os semi-variogramas ajustaram-se satisfatoriamente a modelos teóricos, apresentando $R^2 > 0,94$ com baixos erros (Figura 11).

Tabela 3 – Características dos semi-variogramas dos atributos na camada A determinados por análise convencional (valores observados) e dos atributos estimados pelos modelos (sensoriamento remoto)

Atributo	Características do semi-variograma				Validação da krigagem		
	Modelo	Pepita (C ₀)	Patamar (C)	Alcance (m)	$\frac{C}{C_0 + C}$	R ² _{ajust.}	RMSE
<i>Análise convencional - Valores observados</i>							
Argila	Circular	12,32	78,2	715	0,86	0,89	4,69
Areia	Circular	14,64	137,9	685	0,90	0,91	5,46
Mg	Esférico	1,87	6,2	843	0,77	0,75	1,64
Ca	Esférico	23,28	63,51	909	0,73	0,70	5,55
SB	Esférico	39,98	116,0	880	0,74	0,72	7,39
<i>Sensoriamento próximo - Valores preditos pelos modelos</i>							
Argila	Circular	16,45	50,7	647	0,76	0,87	4,73
Areia	Circular	29,39	91,2	686	0,76	0,87	5,93
Mg	Esférico	0,81	4,2	1114	0,84	0,80	1,13
Ca	Esférico	10,43	45,1	1242	0,81	0,76	3,87
SB	Esférico	20,67	79,8	1297	0,79	0,76	5,38

Os semi-variogramas (circulares e esféricos) possuem um formato semelhante (Figura 11) com valores de alcances também semelhantes. Este fato sugere que a estrutura espacial dos atributos pode estar sendo controlada por um fator como o relevo, já que em solos derivados de basalto, a variabilidade espacial dos atributos do solo é em grande parte controlada pela topografia, especialmente em solos tropicais (THANACHIT et al., 2006; SOUZA Jr; DEMATTÊ, 2008).

Embora a proporção $C/(C_0+C)$ tenha sido maior nos semi-variogramas dos atributos físicos obtidos de forma convencional que nos semi-variogramas dos obtidos por espectroscopia, esta relação indica que nos dois casos a dependência espacial foi forte (Tabela 3). Os alcances, os quais indicam a distância a que o atributo perde a sua auto-correlação espacial foram semelhantes (entre 647 e 715 m). O pepita (C₀) apresentou valores maiores nos semi-variogramas construídos derivados dos atributos preditos por modelos espectrais. No caso da argila, o C₀ foi duas vezes maior quando usados dados estimados do que quando foram usados unicamente os dados convencionais (Tabela 3). Levando em consideração que o valor do C₀ está diretamente

relacionado com o erro próprio da amostragem e das medições dos atributos, o erro das estimativas de argila com os modelos espectrais possuem um maior impacto no reconhecimento da estrutura espacial sendo que este manifestou-se no semi-variograma com um maior valor de C_0 .

A variabilidade espacial dos atributos químicos e físicos do solo e os problemas associado à representatividade da amostragem pode induzir a variações nos resultados das análises de solo. Por outro lado, erros na amostragem de solos são geralmente maiores que os erros derivados da análise de solo em particular (CANTARELLA et al., 2006). Isto marca uma grande vantagem no uso de espectroscopia de reflectância, já que através dela podem ser identificadas amostras atípicas (*outliers*) de forma eficiente. Informação contendo este tipo de dados atípicos pode gerar erros setorizados nos mapas de variabilidade espacial construídos. Além disto, a identificação de informações atípicas diminui a possibilidade de investir dinheiro na análise química de amostras que não aportaram informação relevante.

A dependência espacial dos atributos determinados de forma convencional, foi forte para o Mg e moderada para o Ca e a soma de bases, sendo que a relação $C/(C_0+C)$ destes dois últimos foi de 0,73 e 0,74 respectivamente. Esta dependência nos semi-variogramas construídos com os dados preditos espectralmente foi forte nos três atributos químicos avaliados. O C_0 destes semi-variogramas foi aproximadamente a metade do valor do C_0 dos semi-variogramas dos atributos da análise convencional (Tabela 3), o que indica que usando os dados preditos o erro de medição pode ter sido menor. Os alcances foram maiores nos semi-variogramas dos dados de atributos químicos preditos do que nos dos dados químicos convencionais (Tabela 3). Os dados preditos apresentaram uma estrutura espacial mais definida e uma autocorrelação espacial maior.

O desempenho da krigagem, avaliado pela validação cruzada, foi relacionado com o grau de dependência espacial. Quanto maior foi a proporção $C/(C_0+C)$ maior o R^2 e menor o erro da validação da krigagem. O anterior indica que no caso da areia e a argila, as interpolações tiveram um melhor desempenho com os dados determinados de forma convencional e no caso dos atributos químicos o desempenho foi melhor com os dados estimados com os modelos espectrais.

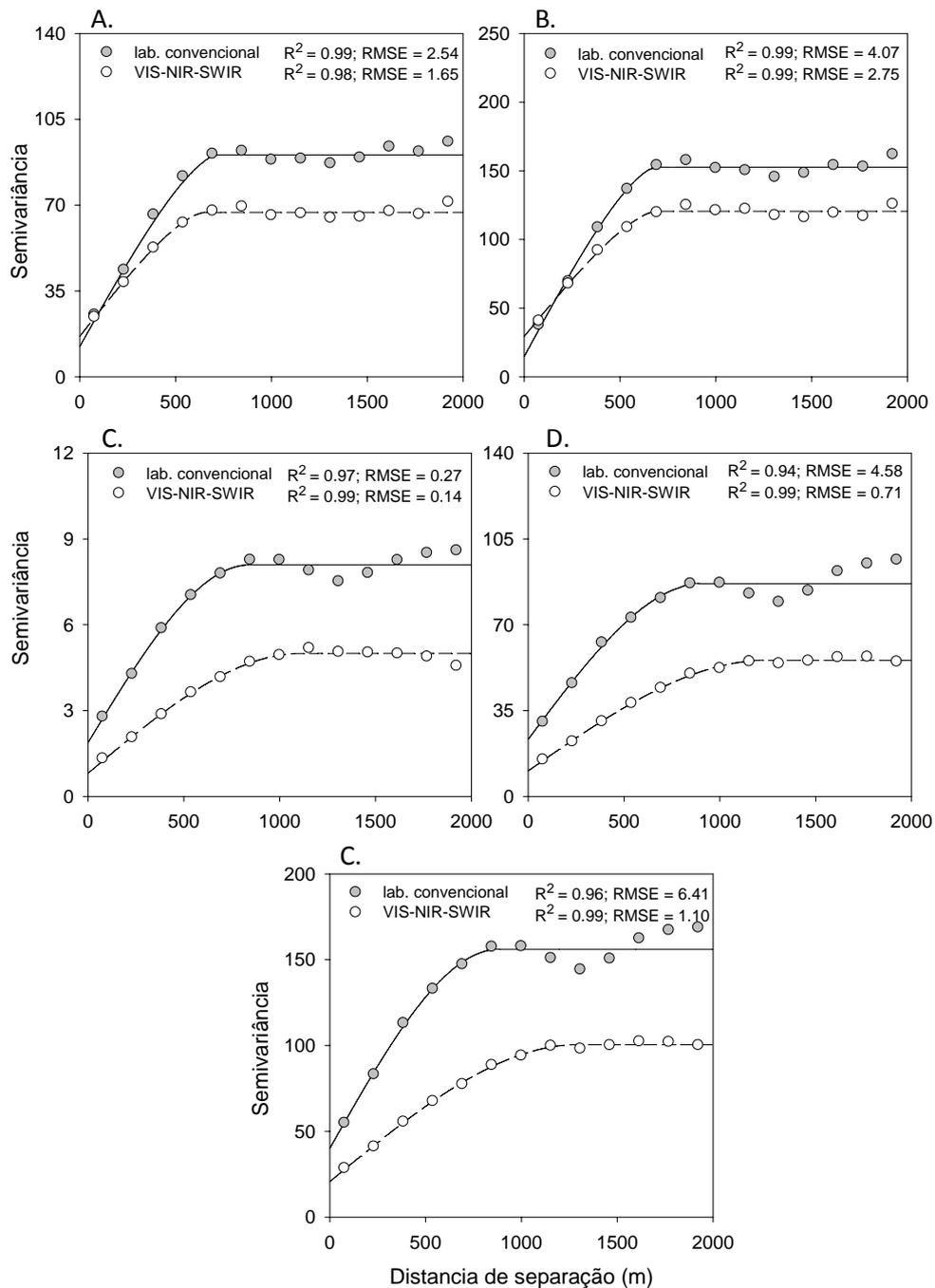


Figura 11 – Semi-variogramas de atributos da camada A de: A. argila, B. areia, C. Mg, D. Ca, E. soma de bases. Atributos do solo obtidos de forma convencional são representados por linhas contínuas e pontos cinza, e os atributos estimados pelos modelos espectrais são representados por linhas descontinuas e pontos brancos

Os mapas interpolados usando os dados preditos (mapas espectro-digitais) apresentaram alta semelhança com os correspondentes mapas construídos unicamente com os dados da análise de rotina (mapas digitais) sendo que foi observada uma alta correspondência espacial entre os

mapas espectro-digitais (Figura 12 B e D) e os digitais de argila e areia (Figura 12 A e C). Sendo assim, existem várias áreas com teores relativamente constantes as quais podem ser observadas nos mapas produzidos com ambas as técnicas (espectro-digital e digital). Isto é atribuído ao excelente desempenho dos modelos de estimativa e à alta semelhança entre as estruturas espaciais do conjunto de dados da análise de rotina e dos estimados espectralmente.

O cruzamento do mapa espectro-digital e o digital de argila (Figura 13A) resultou em $R^2 = 0,96$, com $RMSE = 3,26 \%$, e a inclinação da linha de comparação foi de $0,87$. Esta mesma comparação entre os mapas de areia (Figura 13B) apresentou $R^2 = 0,97$, com $RMSE = 4,38 \%$ e a inclinação da linha de comparação foi de $0,86$. A Figura 14 apresenta os mapas de variabilidade dos resíduos de areia com valor absoluto maior do que o RMSE da comparação entre mapas. Embora os erros encontrados tenham sido relativamente baixos, no caso dos resíduos da comparação feita para argila (Figura 14A) os maiores erros apresentaram-se em uma área onde os teores de argila foram altos. O caso contrário foi observado no mapa dos resíduos da comparação feita para areia (Figura 14 B).

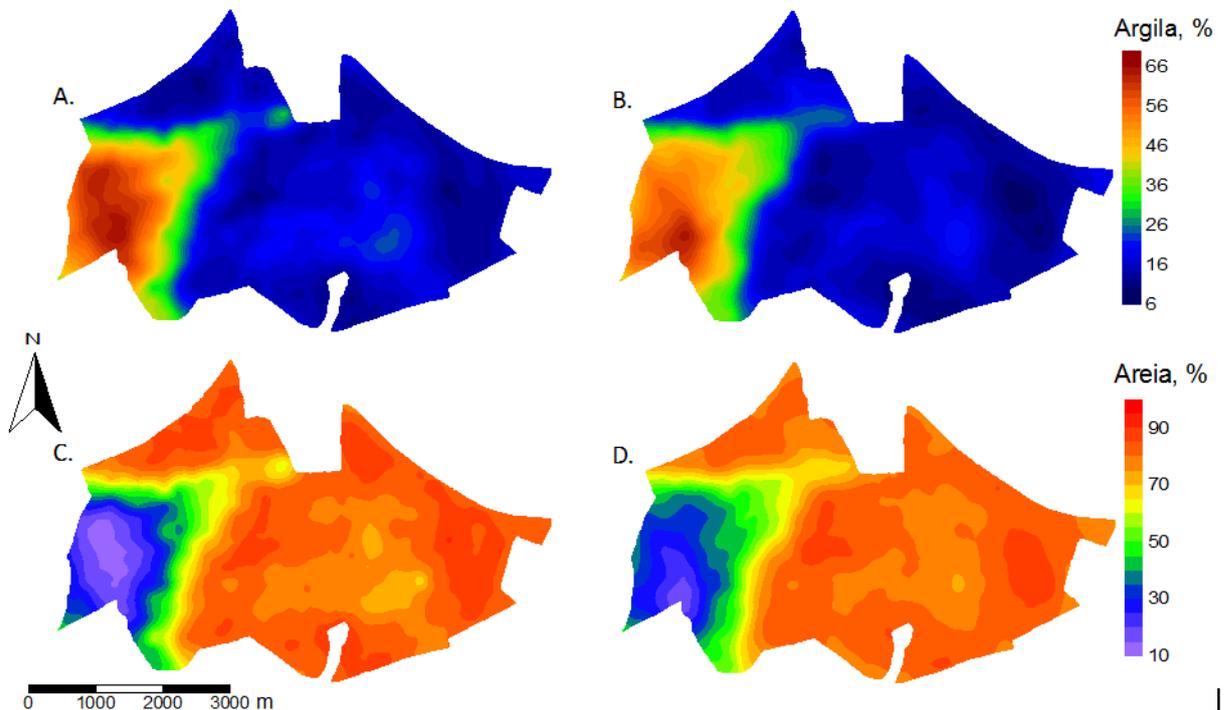


Figura 12 – Mapas de argila (A e B) e areia (C e D) da camada A interpolados com os valores dos atributos obtidos de forma convencional (A e C, mapas digitais) e usando os valores preditos pelos modelos espectrais de estimativa (B e D, mapas espectro-digitais)

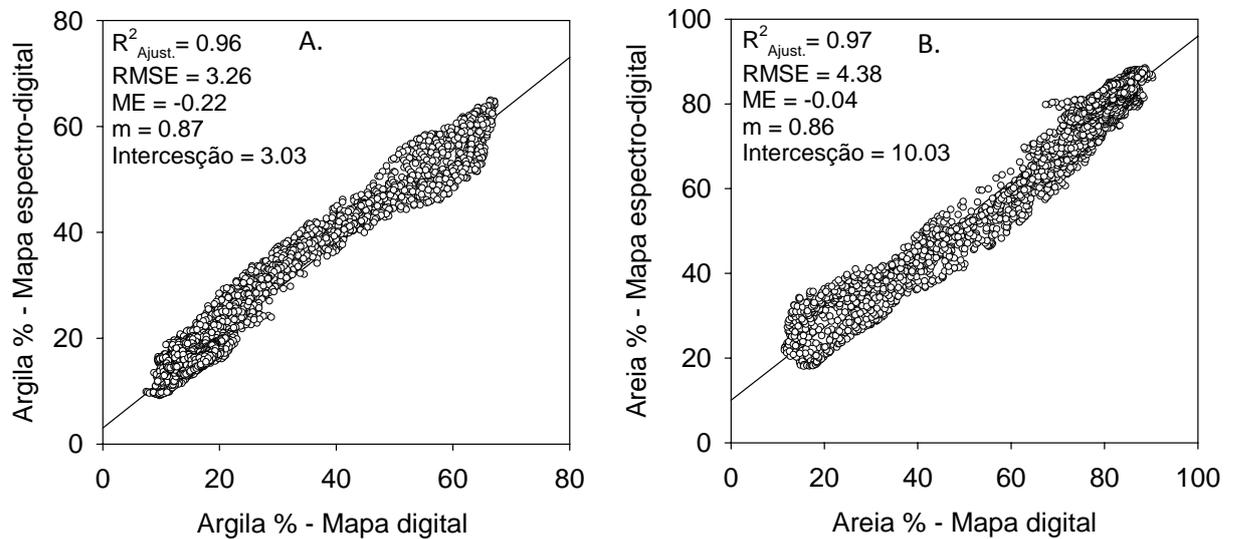


Figura 13 – Comparação entre os dados interpolados de argila (A) e areia (B) quando os mapas foram construídos usando unicamente os dados da análise convencional (mapas digitais) e quando foram usados valores estimados pelos modelos espectrais (mapas espectro-digitais)

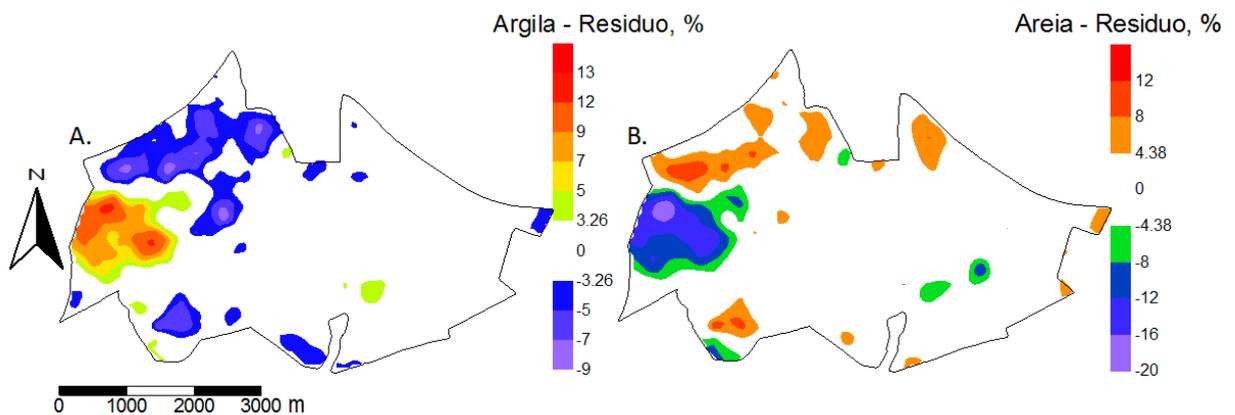


Figura 14 – Mapas dos resíduos das comparações entre os mapas digitais e espectro-digitais indicando as áreas onde o valor absoluto do resíduo foi maior ao RMSE da comparação. Os resíduos negativos indicam um valor maior no mapa espectro-digital, os positivos indicam maior valor no digital. A. Mapa de resíduos da comparação entre mapas de argila. B. Mapa de resíduos da comparação entre mapas de areia

Observou-se que existe uma semelhança entre todos os mapas construídos. Nos mapas correspondentes aos atributos químicos assim como nos mapas de argila, os maiores teores ocorreram na mesma área. Esta zona é atravessada por uma rede de drenagem. O anterior reforça a idéia de que o basalto é o material de origem predominante na área, a variabilidade espacial dos atributos é fortemente controlada pelo relevo e que existe uma alta correlação entre todos os atributos do solo. Os mapas espectro-digitais e os digitais possuem um padrão espacial semelhante, em relação à distribuição dos valores dos atributos químicos e físicos. O coeficiente de correlação (r) entre os atributos permaneceu relativamente constante (Tabela 4). Sendo assim, o r entre os valores interpolados do mapa digital de Mg e o mapa digital de Ca foi igual ao r entre os correspondentes mapas espectro-digitais, apresentando um valor de 0,98.

Tabela 4 – Correlação entre os valores interpolados nos mapas digitais e espectro-digitais

	Argila	Areia	Mg	Ca	SB
<i>Mapas digitais</i>					
Argila	1,00				
Areia	-0,99	1,00			
Mg	0,92	-0,93	1,00		
Ca	0,90	-0,91	0,98	1,00	
SB	0,92	-0,92	0,99	0,99	1,00
<i>Mapas espectro-digitais</i>					
Argila	1,00				
Areia	-0,99	1,00			
Mg	0,95	-0,96	1,00		
Ca	0,96	-0,97	0,98	1,00	
Sb	0,96	-0,97	0,98	0,99	1,00

A comparação pixel-a-pixel entre os mapas digitais e espectro-digitais de Ca, Mg e soma de bases (Figura 15), resultou em uma semelhança menor do que a observada nos mapas de argila e areia. O R^2 da comparação entre mapas (Figura 16) apresentou valores de 0,84, 0,85 e 0,84 para Ca, Mg e soma de bases respectivamente. O RMSE foi baixo nestes atributos. O ME indicou que os mapas espectro-digitais possuem uma tendência de superestimativa em relação aos mapas digitais.

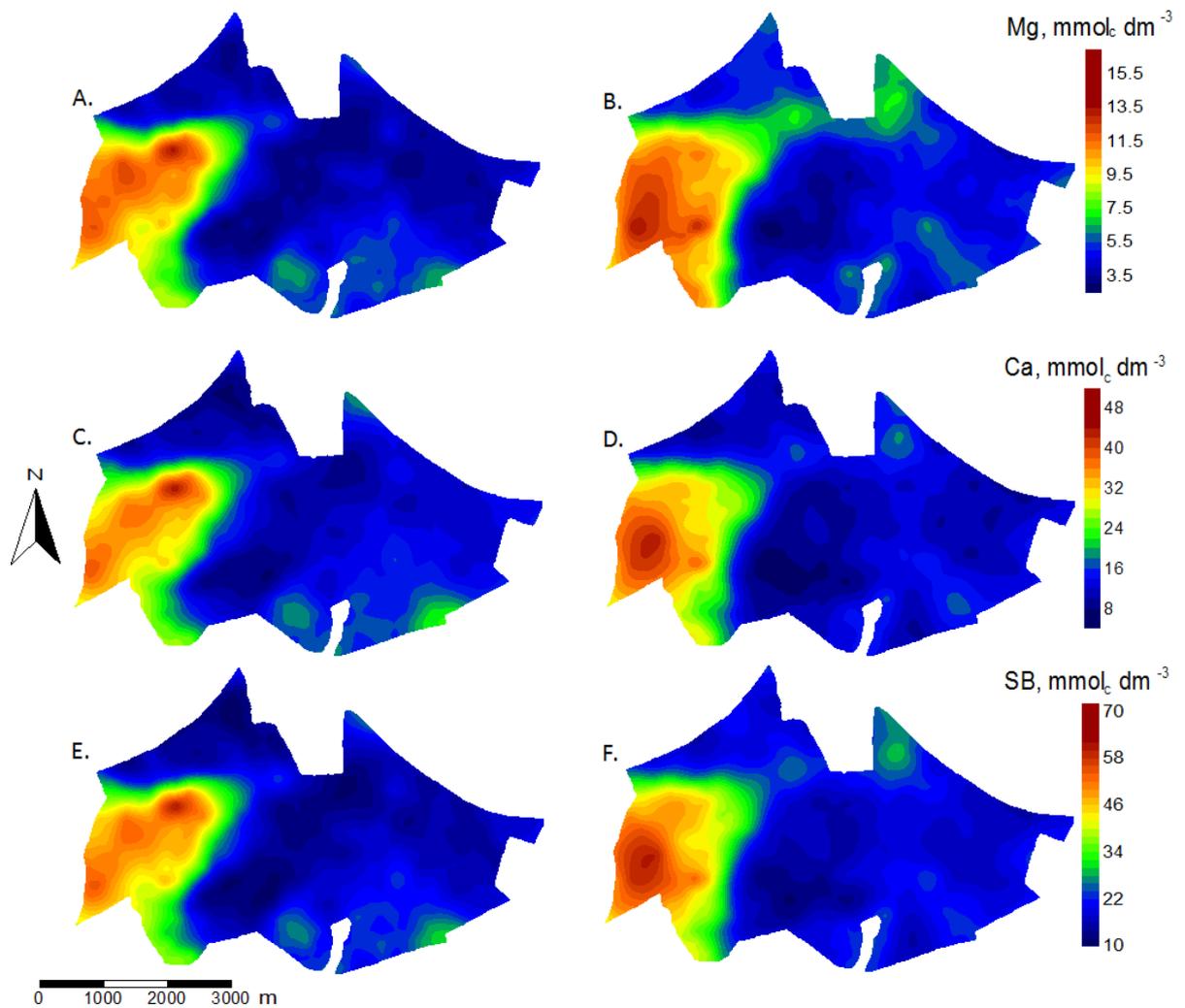


Figura 15 – Mapas de Mg (A e B), Ca (C e D) e soma de bases (E e F) da camada A interpolados com os valores dos atributos obtidos de forma convencional (A, C e E, mapas digitais) e usando os valores preditos pelos modelos espectrais de estimativa (B, D e E, mapas espectro-digitais)

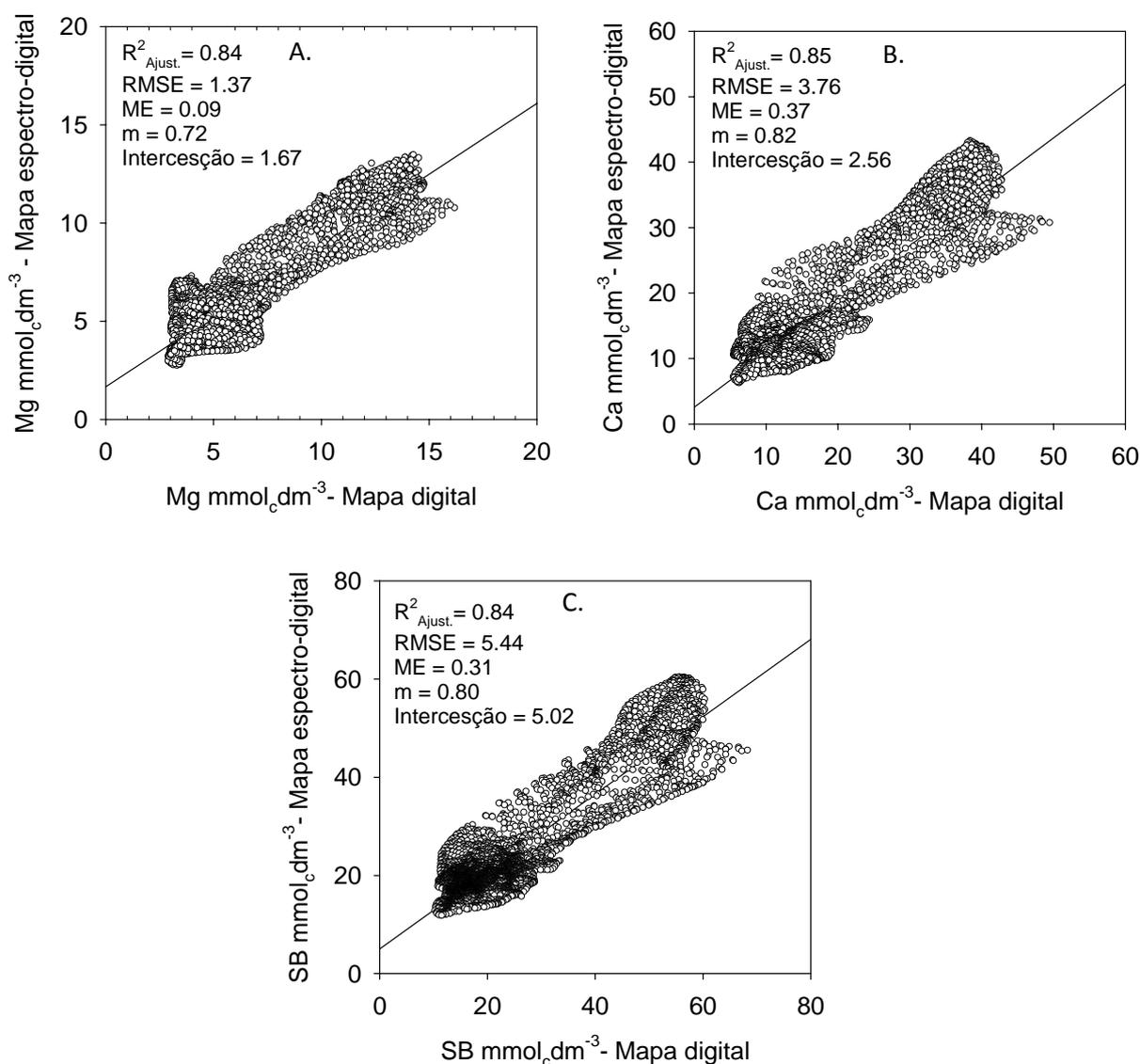


Figura 16 – Comparação entre os dados interpolados de Mg (A), Ca (B) e soma de bases (C) quando os mapas foram construídos usando unicamente os dados da análise convencional (mapas digitais) e quando foram usados valores estimados pelos modelos espectrais (mapas espectro-digitais)

Os resíduos da comparação dos mapas digitais e espectro-digitais de Ca, Mg e soma de bases, apresentaram resíduos (com valor absoluto) maiores que o correspondente RMSE em lugares semelhantes (Figura 17). Os resíduos foram mais baixos no mapa do Mg. Existe um ponto em comum que apresentou o mais alto valor residual nos três mapas o qual corresponde a uma amostra de solo para a que os atributos químicos foram estimados com um erro alto.

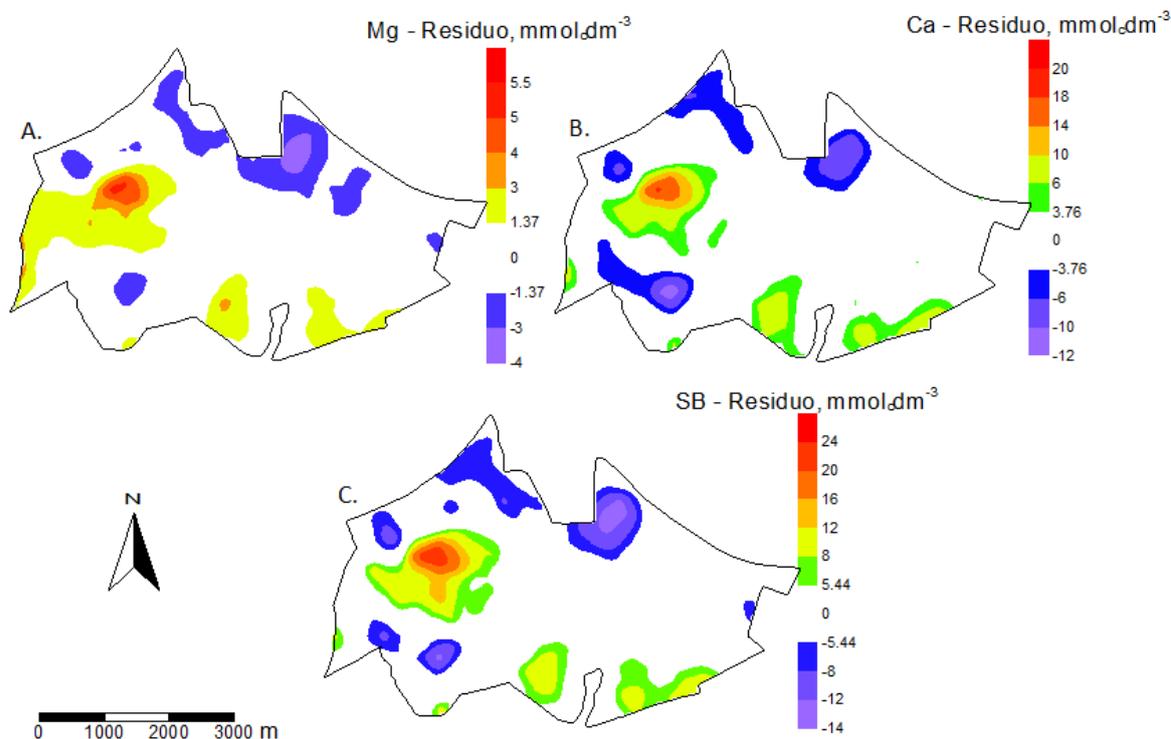


Figura 17 – Mapas dos resíduos das comparações entre os mapas digitais e espectro-digitais indicando as áreas onde o valor absoluto do resíduo foi maior ao RMSE da comparação. Os resíduos negativos indicam um valor maior no mapa espectro-digital, os positivos indicam maior valor no digital. Mapa de resíduos da comparação entre mapas de: A. Mg, B. Ca e C. soma de bases

4.3.4.1 O que acontece quando não é utilizada a espectroscopia no mapeamento e a densidade amostral é baixa?

Foi necessário verificar, se é possível construir mapas digitais acurados (usando unicamente dados da análise de rotina) com a mesma quantidade de amostras determinadas como ótimas para a calibração de modelos espectrais. Para isto foram utilizadas as amostras de uma grade de 300 x 300 extraída da grade original. Para a análise espacial de argila e areia foram adicionadas amostras da grade original até completar um total de 85 amostras. Este número foi escolhido devido a que das 166 amostras usadas na calibração dos modelos, 85 pertenciam à camada A. Para a análise espacial dos atributos químicos, a grade de 300 x 300 foi completada com amostras até chegar a 71 amostras (mesma quantidade de amostras da camada A usadas na calibração dos modelos com 136 amostras).

A análise dos semi-variogramas construídos com a grade base de 300 x 300 (Tabela 5) indicou que a estrutura espacial de todos os atributos avaliados mudou em relação às estruturas

determinadas com a grade original. Os semi-variogramas de areia e argila apresentaram um bom ajuste ao modelo escolhido (cauchy). Não obstante, os parâmetros dos semi-variogramas mudaram de forma contrastante. Os semi-variogramas dos atributos químicos apresentaram um ajuste baixo. Os alcances foram subestimados em média 62%. O C_0 foi também subestimado, resultando em valores de 0,00 para argila, Mg, Ca e soma de bases e de 6,99 para areia (Tabela 5). O C_0 poderia ser mal interpretado já que quando este valor é baixo, pode-se assumir que os erros de medição e amostragem dos atributos são pouco relevantes. O baixo C_0 também acarretou um incremento da relação $C/(C_0+C)$, o que indica que o grau de dependência espacial foi superestimado, especialmente para o Ca e a soma de bases. Todos estes semi-variogramas indicam de forma errada uma maior variabilidade espacial dos atributos dentro da área. Desta forma, estruturas espaciais inadequadas podem incrementar o erro das interpolações. Além disto, o menor número de amostras implica uma diminuição proporcional da resolução espacial dos mapas. Sendo assim, os mapas correspondentes a estes semi-variogramas não foram computados.

Tabela 5 – Características dos semi-variogramas dos atributos determinados por análise convencional (valores observados) usando a mesma quantidade de amostras da camada A usadas na calibração dos modelos

Atributo	n	Modelo	$R^2_{ajust.}$	Pepita (C_0)	Patamar (C)	Alcance (m)	Kappa (κ)	$\frac{C}{C_0 + C}$
<i>Análise convencional - grade base de 300 x 300</i>								
Argila	85	Cauchy	0,93	0,00	78,18	139	0,096	1,00
Areia	85	Cauchy	0,93	6,99	173,30	256	0,500	0,96
Mg	71	Circular	0,67	0,00	7,48	385	-	1,00
Ca	71	Circular	0,58	0,00	91,09	385	-	1,00
SB	71	Circular	0,60	0,00	154,65	385	-	1,00

Neste caso o baixo número de amostras usadas prejudicou a análise espacial. Webster e Oliver (1992) e Webster e Oliver (1993), indicaram que o número mínimo adequado de amostras para o computo do semi-variograma encontra-se entre 100 e 150 e uma quantidade maior é requerida para a análise de atributos anisotrópicos. Segundo Fraisse e Faoro (1998), o espaçamento da grade amostral em áreas experimentais é de 20 a 30 m, enquanto que em áreas comerciais o espaçamento diminui, sendo de entre 100 - 160 m, devido ao custo envolvido de amostragem e análise de solo (WERNER, 2007). Demattê et al. (2006) verificaram que na prática a densidade amostral mínima requerida é de 1 amostra por ha, mas para que seja economicamente

veavel esta deve ser de 1 amostra para cada 4 há, o que implica que o detalhamento necessario para uma adequada descrição é ate o momento economicamente inviável devido aos custos da análise de solos. Os resultados sugerem que a implementação de metodologias de quantificação de atributos do solo através da sua reflectância espectral pode ajudar a minimizar os problemas encontrados no mapeamento com adequadas densidades amostrais.

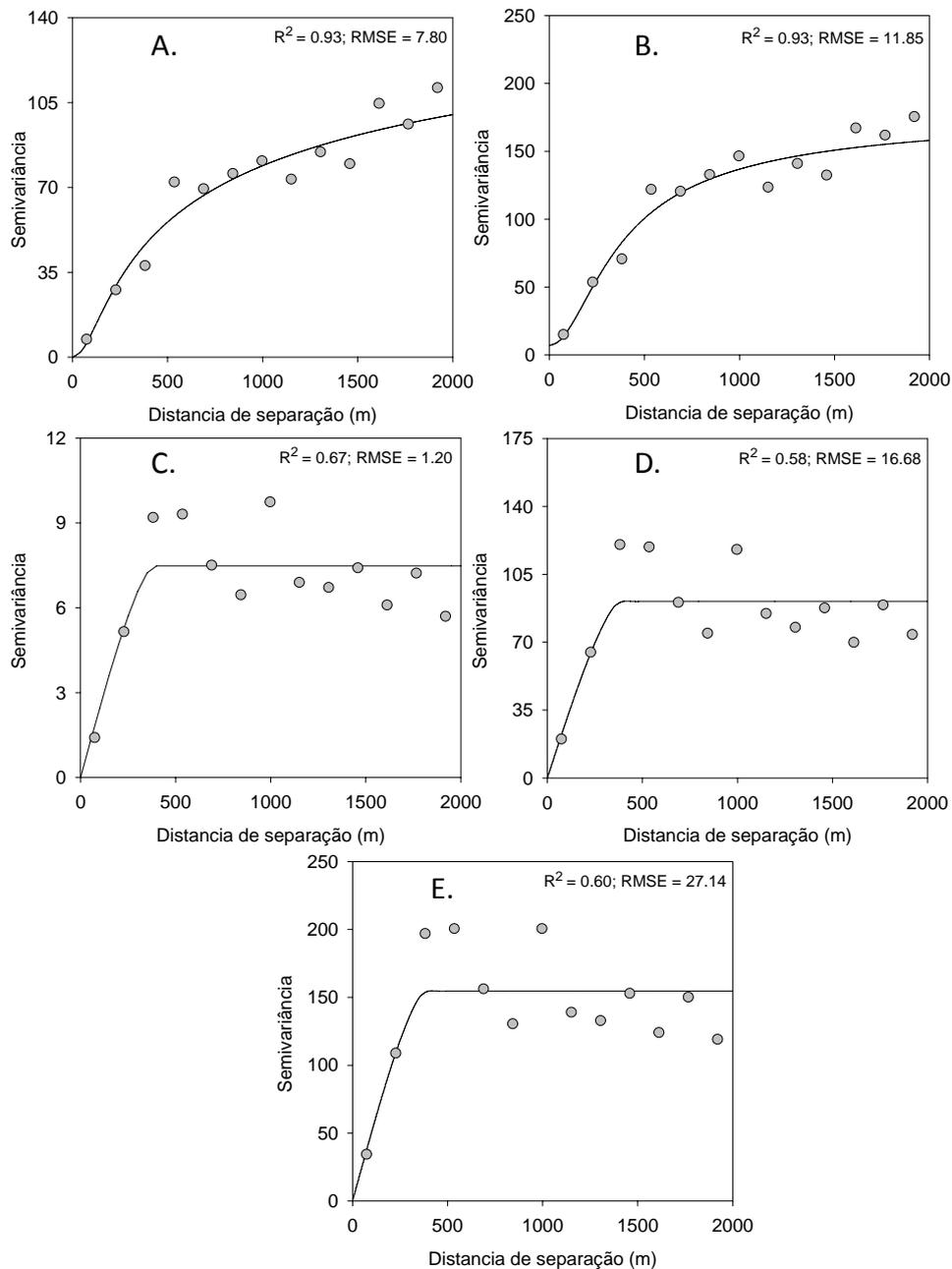


Figura 18 – Semi-variogramas dos atributos determinados por análise convencional (valores observados) usando a mesma quantidade de amostras da camada A usadas na calibração dos modelos. A. Argila; B. Areia; C. Mg; D. Ca; E. Soma de bases

Neste caso, este trabalho verificou que o uso da espectroscopia de reflectância para a análise de solos favorece o incremento da densidade amostral conseguindo assim uma clara identificação das estruturas espaciais. Isto concorda com o observado por Wetterlind et al. (2008), os quais encontraram grandes diferenças entre os alcances dos semi-variogramas elaborados com base em uma densidade amostral convencionalmente usada no mapeamento de solos e uma densidade amostral maior auxiliada por espectroscopia de solos.

É importante destacar que embora existam diferenças entre os mapas digitais e os espectro-digitais, estas são mais acentuadas quando é usada uma grade amostral de baixa densidade.

4.3.5 Análise aproximada de custos

Levando em consideração que a quantificação de atributos por meio da resposta espectral do solo é mais barata e rápida (JANIK et al., 1998; VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 1998, SHEPHERD; WALSH, 2007, TRANTER et al., 2008) que as quantificações das análises de rotina convencionais, na prática, o uso de espectroscopia de solos pode gerar mapas de atributos mais acurados e de maior resolução espectral que os convencionais através do aumento da densidade amostral.

Em relação à densidade amostral requerida de análise de rotina para elaboração dos mapas espectro-digitais da camada A, pode-se dizer que foi de 1 amostra para cada 3 ha para a avaliação da argila e areia, e para avaliação dos atributos químicos foi de 1 amostra a cada 3,5 ha. O fato de ter diminuído em 80 e 83 % a quantidade de análises físico-químicas convencionais (necessários na camada A) para o mapeamento de argila e areia, e dos atributos químicos correspondentemente, indica que a redução dos custos do mapeamento pode ser alta. Verifica-se que na prática, a demanda ideal custo/benefício é de 1 ponto a cada 4 ha (DEMATTÊ et al., 2006). Atualmente preço médio da análise química básica (pra fins de avaliação da fertilidade) é de R\$ 16,3 e o da análise granulométrica é de R\$ 17 (cálculos baseados nos preços de três reconhecidos laboratórios no Brasil: EMBRAPA, IAC e ESALQ).

Em relação aos custos de análises de solos via espectroscopia de reflectância existem poucos reportes a nível mundial, embora este tipo de análise seja reconhecida como uma técnica econômica. O uso da espectroscopia pode ter custo zero de reagentes contra pelo menos R\$ 15,00 comumente consumidos nas análises tradicionais. Os gastos de um laboratório com produção

anual de 46.000 amostras equivalem ao custo de um sensor a cada mês, desconsiderado custos posteriores com reagentes e tratamentos de resíduos. Considerando o tempo gasto nas análises, a tradicional leva 48 horas na determinação da argila contra 10 min. do sensor (tendo um modelo calibrado). Na Austrália, por exemplo, o CSRIO fornece o serviço de análise de solos através de espectroscopia de reflectância a um custo por amostra aproximadamente 83% mais baixo em relação ao custo das análises de solos convencionais fornecidos por laboratórios comerciais. Por outro lado, o ICRAF (WORLD AGROFOESTRY CENTRE, 2005) afirma que usando esta tecnologia o custo da análise de uma amostra de solo é diminuído de USD 50 para USD 0.5, o que significa a redução de 99%.

Tomando como referência o preço médio calculado anteriormente da análise química básica e da análise granulométrica, calculou-se que o custo das análises químicas para a construção de mapas digitais na camada A é de R\$ 13820, e em ambas as camadas (A e B) é de R\$ 27872. Devido a que a técnica de sensoriamento remoto não demanda o uso de reagentes químicos pra a determinação estima-se que o preço comercial de uma análise de solos (granulométrica e atributos químicos) via espectroscopia de reflectância pode ser de aproximadamente R\$ 5 reais por amostra para fins de mapeamento da variabilidade espacial (este preço não inclui os custos das análises convencionais para calibração). Isto significa neste caso, que para a obtenção de mapas espectro-digitais nas camadas A e B, seria preciso investir R\$ 2822 em análises de granulométrica convencional e R\$ 2216 em análise química de rotina. Por outro lado, para a validação dos modelos estima-se que são necessárias 50 amostras de solo. O que implica que os custos aumentariam em R\$ 850 para análise granulométrica e R\$ 815 para análise química de rotina. É importante destacar que com os modelos calibrados podem ser estimados tanto os atributos químicos como os granulométricos, de forma rápida e consecutiva com a mesma leitura espectral. Sendo assim, o custo das estimações de granulometria é o mesmo custo das estimações de simultâneas de granulometria - atributos químicos. Desta forma o custo das análises espectrais seria de R\$ 3355. Portanto, o custo total das análises e estimativas de atributos do solo para a obtenção de mapas espectro-digitais da camada A e B, é de R\$ 10058, o que implica uma redução dos custos de 64%.

Por outro lado, o uso do sensoriamento espectral de solos possui duas vantagens importantes no mapeamento: a. Através da reflectância espectral do solo podem ser avaliados uma grande quantidade de atributos (Ca, Mg, K, CTC, areia, silte, argila, N, C, matéria orgânica,

Na, pH, P, Al trocável, Al_2O_3 , Fe_2O , TiO_2 , SiO_2 , umidade gravimétrica, entre outros.). b. Em posteriores estudos na área os custos podem ser reduzidos ainda mais devido a que os modelos calibrados no primeiro estudo podem ser aplicados novamente. Em outras palavras, inicialmente seria construída uma biblioteca espectral da área que posteriormente seria usada para a quantificação de atributos. Desta forma a biblioteca espectral teria o potencial de diminuir ainda mais os custos de posteriores mapeamentos. O anterior reflete o grande avanço que pode ter a agricultura de precisão no Brasil e no mundo inteiro, se estas metodologias de sensoriamento e análise espectral forem incorporadas no manejo de solos. Além disso, o constante incremento do custo dos fertilizantes no mundo inteiro aumenta a importância da análise de solos e da descrição detalhada da variabilidade espacial pra fins de manejo localizado.

É necessário aprofundar mais nos estudos de mapeamento espectro-digital dos atributos do solo, com a finalidade de aumentar a precisão dos mapas. Por exemplo, metodologias como a regressão-krigagem, junto com a incorporação de variáveis auxiliares para o mapeamento, podem melhorar significativamente a predição espacial do erro das estimativas dos modelos espectrais e assim na melhora da qualidade dos mapas.

4.4 Conclusões

O uso de atributos do solo preditos a partir de modelos espectrais não interfere na adequada identificação das estruturas espaciais dos atributos. Verificou-se que esta metodologia pode ser implementada de forma exitosa no mapeamento da variabilidade espacial de atributos do solo.

O número ótimo de amostras encontrado foi de 166 para granulometria e 136 para atributos químicos o que indica uma densidade de entre 3-4 amostras por ha.

A espectroscopia representa uma grande vantagem na identificação de amostras atípicas o facilita a seleção de amostras destinadas à análise convencional. Isto, junto com técnicas de amostragem baseadas em variáveis auxiliares, incrementa a eficiência do uso das análises, diminuindo a possibilidade de investir dinheiro em amostras que não aportaram informação relevante.

Os R^2 de validação dos modelos de argila e areia apresentaram valores de 0,86 e 0,88 respectivamente, junto com erros baixos, o que indica que as análises de laboratório podem ser

substituídas em grande parte por modelos espectrais de estimativa. Os R^2 de Ca, Mg e soma de bases, foram de 0,73, 0,74 e 0,75 respectivamente, apresentando erros relativamente baixos, não obstante, estes valores precisam ser melhorados para a que a substituição da análise convencional possa ser possível.

Na geração de mapas de variabilidade espacial de atributos do solo, a combinação de espectroscopia de reflectância e análises convencionais pode diminuir os custos de mapeamento até um 64% obtendo mapas com uma precisão acima de 96% para granulometria e 84% para atributos químicos.

A modelagem da variação dos parâmetros do erro das validações dos modelos espectrais de quantificação de atributos indicou que na medida em que o número de amostras usadas na calibração aumenta, o erro diminui até certo valor limite. O R^2 das validações dos modelos possui uma relação direta com o tamanho do grupo de amostras usadas na calibração, até certo ponto onde o R^2 é o máximo possível conseguido pela modelagem. Desta forma a maior minimização do erro e maximização do R^2 se conseguiu usando 166 amostras (19,8 % das amostras totais) para a calibração do conjunto de dados físicos avaliados e usando 136 (16,2 % das amostras totais) amostras para a calibração do conjunto de dados químicos avaliados.

Quando a densidade amostral da grade foi diminuída até um número igual ao número de amostras ótimo usado na calibração de atributos, e a análise geoestatística foi realizada, não foi possível identificar de forma clara as estruturas espaciais dos atributos.

Através das técnicas de sensoriamento espectral do solo é possível aumentar a densidade de amostragem diminuindo o número de amostras analisadas convencionalmente sem diminuir significativamente a qualidade dos mapas de variabilidade espacial. É claro que os níveis de acurácia obtidos no presente trabalho podem ser aumentados significativamente usando técnicas de regressão e de seleção de amostras para calibração ainda mais sofisticadas e incorporando outras faixas espectrais como a do infravermelho médio. Mesmo, trabalhos como o desenvolvido no capítulo anterior podem contribuir na melhora das estimativas e também na diminuição do número necessário de amostras para calibrar modelos de estimativa, resultando em uma maior diminuição de custos.

Levando em conta que um grande problema na adoção de práticas de agricultura de precisão é a alta quantidade de dinheiro requerida para análise de solos, demonstrou-se que o sensoriamento espectral de solos fornece uma alternativa com grande potencial para a

implementação destas praticas de manejo do solo. Além disso, a significativa redução de custos fornece uma grande oportunidade para que os pequenos agricultores possam começar a implementar este tipo de praticas.

Referencias

BEN-DOR, E.; TAYLOR, G.R.; HILL, J.; DEMATTÊ, J.A.M.; WHITING, M.L.; CHABRILLAT, S.; SOMMER, S. Imaging spectrometry for soil applications, **Advances in Agronomy**, Amsterdam, v.97, p.321-392, 2008.

BRAMLEY, R. G. V. E JANIK L.J. Precision Agriculture, Dordrechtulture Demands a New Approach to Soil and Plant Sampling and Analysis - Examples from Australia. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, London, v. 36, p.9–22, 2005.

CAMARGO, M. N.; KLANT, E.; KAUFFMAN, J. H. Classificação de solos utilizada em levantamentos pedológicos no Brasil. Campinas. **Boletim Informativo da Sociedade Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v.12. n.1, p.11-13, jan./abr. 1987.

CAMBARDELLA C.A.; MOORMAN T.B.; NOVAK J.M., PARKIN T.B.; KARLEN D.L.; TURCO R.F.; KONOPKA A.E. Field-scale variability of soil properties in central Iowa soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 58, p. 1501 – 1511, 1994.

CANTARELLA, H.; QUAGGIO, J. A.; RAIJ, B. Van.; ABREU, M.F . Variability of soil analysis in commercial laboratories: implications for lime and fertilizer recommendations. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, London, v. 37, p. 2213-2225, 2006.

COZZOLINO, D., MORON, A. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy to analyse soil chemical and physical characteristics. **Journal of Agricultural Sciences**, Cambridge, v.140, p. 65-71, 2003.

MAESSCHALCK, R. De; JOUAN-RIMBAUD, D.; MASSART D, L. The Mahalanobis distance, **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v.50. p.1–18, 2000.

DEMATTÊ, J.A.M.; GARCIA, G.J. Alteration of soil properties through a weathering sequence as evaluated by spectral reflectance. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.63, p.327–342, 1999.

DEMATTÊ, J.A.M.; SOUSA, A.A.; NANNI, M.R. Avaliação espectral de amostras de solo e argilo-minerais em função de diferentes níveis de hidratação. Simpósio brasileiro de sensoriamento remoto, 9., Santos, 1998. In: **Anais** Santos, INPE/SELPER, 1998. 1CD-ROM

DEMATTÊ, J.A.M.;CAMPOS, R.C.; ALVES, M.C.; FIORIO P.R.; NANNI, M.R. Visible–NIR reflectance for soil evaluation, **Geoderma**, Amsterdam. v.121, p.95–112. 2004.

DEMATTÊ, J. A. M.; MORELLI, J.; DEMATTÊ, J.L.I. Nem tanta precisão. **Idea News**, Ribeirão Preto, v. 70, p. 52 - 60. 2006.

DIGGLE, P.J.; RIBEIRO JR. P.J. **Model-based geostatistics**. New York : Springer. 2007.

EMBRAPA. Centro Nacional de Pesquisa De Solos. **Sistema brasileiro de classificação de solos**. 2.ed. Rio de Janeiro, 2006. 306 p.

FERNANDES, R. B. A. ; BARRÓN, V. ; TORRENT, J. ; FONTES, M. P. F. Quantificação de óxidos de ferro de latossolos brasileiros por espectroscopia de reflectância difusa. **Revista Brasileira de Ciencia do Solo**, Viçosa, v. 28, p. 245-257. 2004.

FERNANDEZ-PIERNA, J.A.; DARDENNE, P. Soil parameter quantification by NIRS as a Chemometric challenge at 'Chimiometrie 2006', **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v.91. p.94-98, 2008.

FIORIO, P.R. **Dados radiométricos obtidos nos níveis terrestre e orbital na avaliação de solo**. 2002. 198p. Tese (Doutorado Solos e Nutrição de Plantas) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2002.

FRAISSE, C., FAORO, L. Agricultura de precisão: a tecnologia de GIS/GPS chega às fazendas. **Fator GIS On Line**. Curitiba, v. 21, p. 28-33, 1998.

GALVÃO, L. S.; VITORELLO, I.; FORMAGGIO, A.R. Relationships of spectral reflectance and color among surface and subsurface horizons of tropical soil profiles. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam, v.61, p. 24-33, 1997.

HUNT, G.R. Spectroscopic properties of rocks and minerals. In: CARMICHAEL, R.S.(Ed) **Handbook of physical properties of rocks**, Boca Raton: CRC Press, 1982, p. 295–385.

INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS - IPT. Divisão de Minas e Geologia Aplicada. **Mapa geológico do Estado de São Paulo**. Escala 1:1000.000. São Paulo, 1981.

ISLAM, K.; McBRATNEY, A.B.; SINGH, B. Rapid estimation of soil variability from the convex hull biplot area of topsoil ultra-violet, visible and near-infrared diffuse reflectance spectra. **Geoderma**, Amsterdam. v.128. p.249-257, 2005.

JANIK, L.J.; MERRY, R.H.; SKJEMSTAD, J.O. Can mid infrared diffuse reflectance analysis replace soil extractions? **Australian Journal of Experimental Agriculture**, Collingwood, v. 38, p. 681–696, 1998.

MADARI, B.E.; REEVES, J.B.; MACHADO, P.L.O.; GUIMARAES, C.M.; TORRES, E.; MCCARTY, G.W. Mid- and near-infrared spectroscopic assessment of soil compositional parameters and structural indices in two Ferralsols. **Geoderma**, Amsterdam. v.136, p.245-259, 2006.

MATHERON, G. **Les variables régionalisées et leur estimation: une application de la théorie des fonctions aléatoires aux sciences de la nature.** Paris: Masson, 1965. 305p.

McBRATNEY, A.B. AND PRINGLE, M.J. Estimating average and proportional variograms of soil properties and their potential use in precision agriculture, **Precision Agriculture**, Dordrecht, v.1, p. 125–152, 1999.

McBRATNEY, A.B.; MINASNY, B.; VISCARRA ROSSEL, R. Spectral soil analysis and inference systems: a powerful combination for solving the soil data crisis, **Geoderma**, Amsterdam, v.136. p.272–278, 2006.

MINASNY, B.; McBRATNEY, A.B. Regression rules as a tool for predicting soil properties from infrared reflectance spectroscopy, **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v.94, p.72-79, 2008.

MINASNY, B.; McBRATNEY, A. B. A conditioned latin hypercube method for sampling in the presence of ancillary information. **Computers and Geosciences**, Amsterdam, v.32, p. 1378–1388, 2006.

NANNI, M.R.; DEMATTÊ, J.A.M. Spectral reflectance methodology in comparison to traditional soil analysis. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 70, p. 393-407, 2006.

ODLARE, M.; SVENSSON, K.; PELL, M. Near infrared reflectance spectroscopy for assessment of spatial soil variation in an agricultural field. **Geoderma**, Amsterdam, v.126, p. 193-202, 2005.

RAIJ, B. van.; QUAGGIO, J.A.; CANTARELLA, H.; FERREIRA, M. E.; LOPES A. S.; BATAGLIA, C.O. **Análise química do solo para fins de fertilidade.** Campinas: Fundação Cargill, 1987. 170 p.

RIBEIRO Jr.P.J.; DIGGLE, P.J. geoR: A package for geostatistical analysis. **R-NEWS**. Melbourne. v.1, n. 2. p. 15-18, 2001.

RIVERO, R.G; GRUNWALD, S; BRULAND, G.L. Incorporation of spectral data into multivariate geostatistical models to map soil phosphorus variability in a Florida wetland. **Geoderma**, Amsterdam. v.140. p.428–443, 2007.

SENTELHAS, P.C.; MARIN, F.R.; PEREIRA, R.; ANGELOCCI, L.R.; VILA NOVA, N.A.; BARBIERI, V. **Análise de dados climáticos e do balanço hídrico climatológico de Piracicaba (1917-1997).** Piracicaba: DFM, ESALQ, 1998. 81p.

SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Infrared spectroscopy - enabling an evidence based diagnostic surveillance approach to agricultural and environmental management in developing countries. **Journal of Near Infrared Spectroscopy**, Charlton, v.15, 2007 p.1-19, 2007.

SOIL SURVEY STAFF. **Soil taxonomy:** a basic system of soil classification for making and interpreting soil surveys. Washington: Government Printing Office, 1975, 154p.

SØRENSEN, L.K.; DALSGAARD, S. Determination of clay and other soil properties by near infrared spectroscopy. **Soil Science Society of America Journal**, Madison. v.69, p. 159–167, 2005.

SOUZA, C.K.; MARQUES JÚNIOR, J.; MARTINS FILHO, M.V.; PEREIRA, G.T. Influência do relevo e erosão na variabilidade espacial de um latossolo em Jaboticabal (SP). **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa. v.27, p.1067-1074, 2003.

SOUSA JUNIOR, J.G. de A; DEMATTE, J.A.M. Modelo digital de elevação na caracterização de solos desenvolvidos de basalto e material arenítico. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 31, p. 449-456, 2008.

SULLIVAN, D.G.; SHAW, J.N; RICKMAN, D.; MASK, P.L.; LUVALL, J.C. Using remote sensing data to evaluate surface soil properties in alabama ultisols. **Soil Science**, New Jersey, v.170, p 954-968, 2005.

THANACHIT, S.; SUDDHIPRAKARN, A.; KHEORUENROMNE, I.; GILKES, R.J. The geochemistry of soils on a catena, on basalt at Khon Buri, northeast Thailand. **Geoderma**, Amsterdam, v. 135 pp 81–96, 2006.

THOMASSON, J.A.; SUI, R.; COX, M.S.; AL-RAJEHY, A. Soil reflectance sensing for determining soil properties in precision agriculture. **Transactions of the ASAE**. St. Joseph. v. 44, p.1445-1453, 2001.

TRANTER G, MINASNY B, McBRATNEY AB, VISCARRA ROSSEL RA AND MURPHY B. Comparing spectral soil inference systems and mid-infrared spectroscopy predictions of soil volumetric moisture retention. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.72, p.1394-1400, 2008.

TWEETEN, L. Is precision farming good for society? **Better crops**, Norcross, v.8, p.3-5, 1996.

VÅGEN, T.G.; SHEPHERD, K.D.; WALSH, M.G. Sensing landscape level change in soil fertility following deforestation and conversion in the highlands of Madagascar using VIS-NIR spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.133, p. 281-294, 2006.

VAN WAES, C.; MESTDAGH, I.; LOOTENS, P.; CARLIER, L. Possibilities of near infrared reflectance spectroscopy for the prediction of organic carbon concentrations in grassland soils, **Journal of Agricultural Sciences**, Cambridge, v.143, p. 487–492, 2005.

VASQUES G.M.; GRUNWALD, S.; SICKMAN, J.O. Comparison of multi-variate methods to predict soil carbon using visible/near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam. v.146. p.14-25, 2008.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; WALVOORT, D.J.J.; McBRATNEY, A.B.; JANIK, 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.

VISCARRA ROSSEL, R.A.; WALVOORT, D.J.J.; McBRATNEY, A.B.; JANIK, 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.

VISCARRA ROSSEL R.A.; JEON Y.S.; ODEH I.O.A.; McBRATNEY A.B. Using a legacy soil sample to develop a mid-IR spectral library. **Australian Journal of Soil Research**, Collingwood, v.46. p.1-16, 2008.

VISCARRA ROSSEL R.A.; McBRATNEY A.B. Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for digital soil mapping. In: HARTEMINK A.E, MCBRATNEY A.B AND MENDONÇA-SANTOS L (Ed.). **Digital soil mapping with limited data**. Dordrecht: Springer, 2008. p.165-172.

WEBSTER, R.; OLIVER, M. A. Sample adequately to estimate variograms of soil properties. **Journal of Soil Science**, New York, v.43, p. 177–192, 1992.

WEBSTER, R.; OLIVER, M.A. How large a sample is needed to estimate the regional variogram adequately? In: Soares, A. Ed., **Geostatistics Tróia'92**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1993. p.155–166.

WERNER, V. **Análise econômica e experiência comparativa entre agricultura de precisão e tradicional**. 2007. 133p. Tese (Doutorado em engenharia agrícola) – Universidade Federal de Santa Maria. Santa Maria, 2007.

WETTERLIND, J., STENBERG, B., SÖDERSTRÖM, M. The use of near infrared (NIR) spectroscopy to improve soil mapping at the farm scale. **Precision Agriculture**, Dordrecht. v.9. p.57–69, 2008.

WHITE, K., J. WALDEN, N. DRAKE, F. ECKARDT, AND J. SETTLE. mapping the iron oxide content of dune sands, namib sand sea, namibia, using landsat thematic mapper data. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam. v.62, p.30–39, 1997.

WOLD, H. **Systems under indirect observation**. Amsterdam: Elsevier, 1982.

WORLD AGROFORESTRY CENTRE - ICRAF, Shining light on soil deficiencies. **Transformations Quarterly**, Kenya, v.2. p.1, 2005.

ZORNOZA, R.; GUERRERO, C.; MATAIX-SOLERA, J.; SCOW, K.M.; ARCENEGUI, V.; MATAIX-BENEYTO. Near infrared determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam, v. 40, p. 1923-1930, 2008.

5 TÉCNICAS INTEGRADAS DE SENSORIAMENTO PRÓXIMO, REMOTO E ANÁLISE DE TERRENO NO MAPEAMENTO PREDITIVO DE CLASSES DE SOLOS

Resumo

Atualmente existe uma grande necessidade a nível mundial de informações espaciais de solos. Os mapas de solos reúnem uma grande quantidade de informação do solo sendo úteis no planejamento agrícola e ambiental. Os métodos convencionais de mapeamento são demorados e custosos, assim como a atualização ou correção destes. O mapeamento digital de solos propõe a otimização do mapeamento através da aplicação de metodologias pedométricas as quais possuem uma forte base matemática e estatística, assim como requerem da aplicação do conhecimento experiente em pedologia. O objetivo do trabalho foi desenvolver uma metodologia com a qual possam ser preditas espacialmente classes de solos usando técnicas pedométricas incorporando dados do terreno e de sensoriamento orbital e próximo. Para isto foi selecionada uma área de 500 ha localizada no município de Barra Bonita-SP, a qual foi coberta por uma grade amostral regular (100 x 100 m). Em cada ponto foram coletadas amostras de solo em duas profundidades. Destas, 206 pertencentes a transectos foram submetidas a análise de solos. Foram obtidos os teores de argila, Al_2O_3 , Fe_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 e índices de intemperismo. Foram desenvolvidos dois mapas de solos (detalhado e semidetalhado, ambos os dois de alta intensidade) usando a metodologia convencional (mapas reais). Para a elaboração dos mapas digitais de solos foram utilizadas as informações derivadas dos dados multiespectrais da imagem Landsat, dados hiperespectrais de laboratório (sensoriamento próximo) pertencentes a cada uma das amostras coletadas, e os parâmetros do terreno extraídos do modelo digital de elevação. Os dados foram divididos em três grupos: *i*) Atributos do solo preditos para a camada B (relacionados com o intemperismo do solo) a partir das informações dos dados hiperespectrais de laboratório usando uma biblioteca espectral de solos local. *ii*) Parâmetros do terreno; *iii*) dados multiespectrais da imagem Landsat. As informações destes grupos foram sintetizadas através de uma análise de componentes principais (PCA). Os mapas digitais foram gerados a partir de uma classificação supervisionada. A informação de treinamento para esta classificação foi extraída de cinco toposequências nos mapas reais de solos e da informação das PCA. Os modelos de predição de atributos do intemperismo mostraram um alto desempenho preditivo com R^2 de validação entre 0,71 – 0,90, apresentando baixos erros. A predição espacial destes atributos também apresentou um alto desempenho, apresentando R^2 de validação $> 0,78$. Estes modelos permitiram incrementar a resolução espacial da informação dos atributos representando uma economia de 92,8 % na obtenção desta informação. Finalmente a comparação entre os mapas de solo “reais” e os digitais apresentou uma acurácia global de 62% para o mapa detalhado de alta intensidade e 69% para o mapa semidetalhado, com índices kappa de 0,45 e 0,52 respectivamente.

Palavras-chave: Mapeamento digital de solos; Pedometria; Toposequência; Máxima verossimilhança; Sensoriamento próximo e remoto

5 INTEGRATED TECHNIQUES OF REMOTE AND PROXIMAL SENSING AND TERRAIN ANALYSIS ON THE PREDICTIVE MAPPING OF SOIL CLASSES

Abstract

There is consensus in the scientific community about the great need of spatial soil information. Soil maps have a lot of soil information which can be used for land use and agricultural planning, environmental risk identification and implementation of policies for environmental protection. Conventional mapping methods are time consuming and involve high costs. The digital soil mapping has emerged as an area in which the soil mapping is optimized by the application of pedometric methodologies which have a strong mathematical and statistical basis, as well as the application of expert knowledge in pedology. In this sense, the objective of the study was to develop a methodology for the spatial prediction of soil classes by pedometric techniques using terrain information and proximal and remote soil sensing. The study area is located in the São Paulo State, and comprised an area of 500 ha, which was covered by a regular grid (100 x 100 m). In each grid node was collected soil samples at two depths (layers A and B). Only 206 samples extracted from transect sections were submitted to soil analysis (clay, Al_2O_3 , Fe_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 , and weathering indexes was obtained). First of all it was developed two maps as ground truth information (detailed and semidetailed, in high intensity level). For the elaboration of the digital soil maps were used a multispectral data of Landsat image, laboratory hyperspectral data (proximal sensing) lectures of all soil samples, and a digital elevation model. The data was divided into three groups: *i*) Predicted soil attributes of the layer B (related to the soil weathering) from hyperspectral information using a local soil spectral library; *ii*) Terrain parameters; *iii*) Multispectral data extracted from the landsat image. This information was siteitized by a principal component analysis (PCA) in each group. Digital soil maps were generated by supervised classification using a maximum likelihood method. The training information for this classification was extracted from five toposequences on the ground truth maps and the PCA information obtained. The spectral models of weathering soil attributes shown a high predictive performance with R^2 of the validation between 0.71 to 0.90, showing low residual errors. The spatial prediction of these attributes also showed a high performance (validations with $R^2 > 0.78$). These models allowed to increase spatial resolution of soil weathering information representing a cost saving of 92.8% in the obtention of this information. On the other hand, the comparison between the ground truth and digital soil maps shows a global accuracy of 62% for the detailed high density map and 69% in the semidetailed high density map, with kappa indices of 0.45 and 0.52 respectively.

Keywords: Digital soil mapping; Pedometrics; Toposequence; Maximum likelihood; Remote and proximal sensing

5.1 Introdução

A recente crise mundial econômica e de alimentos tem evidenciado a necessidade de incrementar a produção agrícola e ao mesmo tempo diminuir os custos de produção. A comunidade internacional vem formulando varias propostas para a adoção de políticas agrícolas e ambientais para reduzir o impacto deste problema o qual é muito importante sobretudo para países em desenvolvimento.

Por outro lado, é reconhecido que o entendimento dos solos é essencial na compreensão de problemas relacionados a mudanças climáticas, regulação ambiental e serviços ecossistêmicos, além disto, o solo é chave no planejamento do uso da terra o que atende a generalizada preocupação sobre a área agrícola necessária para a produção de energia (biocombustíveis), alimentos (eliminação da fome, incremento da demanda) e alimentação animal (aumento da produção animal), desta forma atualmente os solos ocupam um lugar importante na agenda global (HARTEMINK; McBRATNEY, 2008; BOUMA, 2009).

Os mapas de solos reúnem uma importante quantidade de informação sobre o solo a qual possui um grande peso (e grande utilidade) no planejamento do uso da terra. Não obstante, o conhecimento e a informação dos recursos mundiais de solos encontra-se fragmentado e desatualizado. Atualmente existe uma grande necessidade a nível mundial de informação e de organização da informação existente sobre solos. Por exemplo, os mapas com melhor detalhamento de solos no Brasil são muito poucos e a demanda de informação referente a levantamentos é alta em muitas regiões do país (MENDONÇA-SANTOS; DOS SANTOS, 2006; FIGUEIREDO et al., 2008).

Por outro lado, os métodos convencionais de mapeamento de solos (assim como a atualização ou correção de mapas existentes) são demorados e custosos. A pesquisa convencional de solos tanto em campo como laboratório começa a se tornar cada vez menos atrativa em termos de custos e tempo requerido para gerar resultados (DEBELLA-GILO; ETZELMÜLLER, 2009). O mapeamento digital de solos tem surgido como uma área na que o mapeamento de solos é otimizado através da aplicação de metodologias pedométricas as quais possuem uma forte base matemática e estatística, assim como com a aplicação do conhecimento experto em pedologia. Estas metodologias incorporam informações do ambiente as quais podem influir em determinadas condições do solo. Os mapas digitais de solos não são produtos estáticos, eles podem ser modificados de forma contínua na medida em que estas novas

informações (referentes às áreas de mapeamento) vão sendo disponibilizadas e incorporadas nas bases de dados. Assim, a acurácia destes mapas pode ser melhorada com menor custo e de forma rápida.

Em relação à vantagem que em termos econômicos o mapeamento digital de solos representa, Bui (2006) indica que em 1996, foi estimado um valor maior que 10 para a relação benefício/custo de digitalizar em 1990 o atlas dos solos australianos, isto em termos de dólares americanos de 1993, com um desconto do 7% sobre 30 anos, levando em consideração que o uso deste atlas continua sendo usado, estima-se que esta relação tenha aumentado. Os custos de produção de um mapa digital de solos são muito mais baixos que no mapeamento convencional, por exemplo, na Austrália, o mapeamento digital em uma área de 54.000 ha pode reduzir o número de pessoas requeridas por ano de 21 para 16, e os custos diminuem de U\$ 28 km⁻² para U\$ 9,35 km⁻² (BUI, 2006).

A ciência do solo tem um papel fundamental a desempenhar, através do fornecimento de informações e conhecimento para a tomada de decisões estratégicas e para o estabelecimento do debate público sobre ordenamento do território e do uso sustentável do solo como um recurso natural (MENDONÇA-SANTOS, 2007). De forma específica, o mapeamento digital de solos tem como propósito básico otimizar as técnicas convencionais para diminuir o consumo de recursos e possibilitar a descrição do solo e dos riscos destes fornecendo uma base sólida para a implementação de políticas que possam reduzir atuais problemas sociais a nível mundial.

Recentemente foi estabelecido um consórcio mundial com a finalidade de desenvolver um mapa digital de solos do mundo com resolução de 90 x 90 m. Espera-se que este projeto ajude a erradicar a fome no mundo e a degradação ambiental. Tem-se reconhecido que ainda existe uma grande carência de informação relacionada com a distribuição espacial dos solos e os seus atributos no mundo. É necessário também continuar desenvolvendo técnicas pedométricas que possam auxiliar de forma eficiente o mapeamento de solos. Hoje, no Brasil poucos são os trabalhos desenvolvidos. Aqueles que ocorrem são esporádicos e em regiões restritas, quando não em caráter de empresas particulares, diminuindo consideravelmente o poder que apresentam no desenvolvimento de um país (MENDONÇA-SANTOS; DOS SANTOS, 2006). Por outro lado, os métodos convencionais de mapeamento de solos possuem um baixo grau de eficácia, encontrando-se comumente dificuldades práticas tais como estabelecimento de limites de solos, bastante trabalho de campo e tempo empregado e sobretudo altos custos. Atualmente, as

ferramentas de sensoriamento de solos possuem um grande potencial no mapeamento digital de solos, fazendo com que os estudos sobre grandes áreas sejam mais rápidos e econômicos. Com o incremento da disponibilidade de novas fontes de predição baseadas em sensoriamento de solos e em modelos digitais de elevação, tem surgido um grande interesse em incluir estas informações (com alta resolução espacial e possibilidade de extrair informação de forma exaustiva) na interpolação de classes de solo (HENGL et al., 2007).

Recentemente, com o surgimento da pedometria e o mapeamento digital uma serie de avançadas técnicas estatísticas têm sido aplicadas à predição espacial e não espacial de classes de solos. Minasny et al. (2008), indicam que entre as ferramentas de predição espacial desenvolvidas durante os últimos estão o uso da máxima verossimilhança residual, máxima entropia bayesiana e filtro de Kalman, e entre as de predição não espacial estão as máquinas de suporte vetorial, arvores de classificação e regressão, redes neurais, processos gaussianos, e classificação por lógica difusa. Neste mesmo sentido Hengl et al. (2007), indicam, que as técnicas de produção de mapas de solos podem ser agrupadas como: *i*) Técnicas de classificação puras (equivalentes às classificações feitas para imagens de sensores remotos), *ii*) Técnicas de regressão puras (tal como a regressão logística multinomial), *iii*) técnicas geoestatísticas puras (tal como a krigagem multi-indicativa), *iv*) Aproximações de técnicas híbridas estatísticas/geoestatísticas e *v*) Sistemas expertos (baseados em regras empíricas criadas e ajustadas pelo mapeador, estas geralmente demandam grande quantidade de tempo na preparação dos dados).

Comumente as variáveis auxiliares no mapeamento digital de classes de solos são as derivadas de modelos digitais de elevação, imagens de satélite, mapas geológicos e mapas de uso da terra. Embora tenha sido reconhecida a importância do sensoriamento próximo no mapeamento digital de solos (VISCARRA ROSSEL; McBRATNEY, 2008) existe uma grande carência de trabalhos sobre aplicabilidade da espectroscopia de solos na predição espacial de classes de solos, e só alguns trabalhos tem sido focados à classificação pontual de solos (LINKER, 2008). Neste sentido, é importante o desenvolvimento de bibliotecas espectrais de solos. Recentemente foi criado um grupo chamado de "*The soil spectroscopy group*" (VISCARRA ROSSEL, 2008) formado por pesquisadores de 43 países com o objetivo de construir uma biblioteca espectral de solos do mundo o qual sem duvida será de grande ajuda no fornecimento de variáveis auxiliares no projeto de mapeamento digital dos solos do mundo.

Baseados no contexto atual das necessidades de produção de mapas digitais e no fato de que as classes de solo podem ser preditas a partir de variáveis auxiliares relacionadas com o modelo *scorpan* (onde o solo é determinado em função do solo, clima, organismos, relevo, material parental, idade ou tempo, posição no espaço) (McBRATNEY et al., 2003) o objetivo deste trabalho foi desenvolver uma metodologia de baixo custo com a que possam ser preditas e mapeadas as diferentes classes de solos dentro de uma área específica usando análise de terreno, produtos de sensoriamento remoto e próximo, e técnicas de geoprocessamento.

5.2. Material e Métodos

5.2.1 Caracterização da área de estudo e amostragem de solos

A área de estudo, encontra-se localizada no estado de São Paulo e ocupa 500 ha. É delimitada pelas coordenadas geográficas 22°26'2,37" - 22°23'16,53" latitude sul e 48°31'24,22" - 48°27'51,77" longitude oeste e altitudes variando entre 550 e 710 metros. O clima da região, segundo a classificação de Köppen, é do tipo Cwa, clima mesotérmico (SENTELHAS et al., 1998). A litologia é representada pela ocorrência da Formação Serra Geral, a qual se caracteriza por compreender um conjunto de derrames basálticos entre os quais se intercalam arenitos com as mesmas características da Formação Botucatu, aparece ainda a Formação Itaqueri do grupo Bauru predominando arenitos com cimento argiloso na maior parte da área (IPT, 1981).

A área foi coberta por uma grade de amostragem com espaçamento de 100 x 100 m. Em cada ponto foi coletada uma amostra na camada de 0 - 0.20 m (camada A) e outra na camada de 0.8 - 1.0 m de profundidade (camada B). Um total de 946 amostras foram obtidas e somente 206 amostras extraídas de toposequências demarcadas em campo (Figura 1) e submetidas a análise de solo completa para fins de levantamento. Maiores detalhamentos no banco de dados de Fiorio (2002). As amostras de solo foram analisadas através de métodos convencionais de análise química (RAIJ et al., 2001), distribuição do tamanho de partículas e de ataque sulfúrico (CAMARGO et al., 1987). Os seguintes atributos do solo foram obtidos: soma de bases (SB), argila, silte, areia, Al_2O_3 , Fe_2O_3 , sílica SiO_2 , TiO_2 e índices de intemperismo ($Ki = SiO_2/Al_2O_3$, $Kr = SiO_2/Fe_2O_3+Al_2O_3$).

5.2.2 Mapeamento tradicional de solos - obtenção dos mapas reais de solos

Foram elaborados dois mapas seguindo os métodos tradicionais de levantamento de solos. Estes mapas foram designados como mapa detalhado de solos nível de alta intensidade (CSM1a), mapa semidetalhado de solos de alta intensidade (CSM1b), ambos os dois mapas na escala de 1:25000 deferindo no número de amostras e grau de detalhamento categórico (o mapa semidetalhado só atinge o primeiro nível categórico). Estes mapas foram assumidos como a informação das verdadeiras unidades de mapeamento de solos.

5.2.3 Estratégia de mapeamento digital

5.2.3.1 Base de dados utilizada

Para a elaboração dos mapas digitais de solos foram utilizadas informações espectrais e de atributos do terreno. Foi utilizada uma imagem da área de estudo obtida do sensor TM do Landsat sobre a qual realizaram-se processos de georeferenciação, além disso foi feita a correção atmosférica. Finalmente as informações de reflectância espectral foram extraídas. Além das informações espectrais obtidas da imagem de satélite (que fornece uma resolução espectral muito limitada) foram obtidas leituras hiperespectrais para cada uma das amostras de solo através de um sensor de laboratório. Para isto, as amostras de solo foram secas a 45 °C por 24 horas, e posteriormente foram passadas por uma peneira com malha de 2 mm. Para a obtenção das leituras espectrais foi usado o sensor infrared intelligent spectroradiometer (IRIS) que cobre a região entre 350 - 2500 nm com uma resolução de 2 nm entre os 350 - 1000 nm e de 4 nm para a faixa dos 1000 - 2500 nm.

A informação altimétrica da área foi obtida na forma de mapa de segmentos. O intervalo das isolinhas de contorno deste mapa foi de cada 5 metros sobre o nível do mar. O modelo digital de terreno (MDT) foi obtido por a interpolação dos contornos com um tamanho de pixel de 5 m.

5.2.3.2 Etapas da predição digital das classes de solo

Esta estratégia de mapeamento propõe uma nova metodologia para o mapeamento digital das classes de solo. Para isto, os dados foram inicialmente analisados em três grupos separados dos quais foram extraídos os componentes mais importantes da informação, sendo estes: a) Atributos

do solo na camada B relacionados com o intemperismo, preditos a partir de dados hiperespectrais utilizando uma biblioteca espectral (informação sub-superficial); *b*) Parâmetros do terreno (curvatura média, inclinação e altitude) extraídos do MDT (informação da paisagem); *c*) dados de reflectância espectral extraídos da imagem Landsat (informação superficial). Desta forma a estratégia é descrita a seguir:

Passo a. Este passo compreende o desenvolvimento de uma biblioteca espectral local baseada na informação hiperespectral de laboratório usando metodologias de quimiometria analítica para a predição de atributos.

Foi realizada uma análise de componentes principais (PCA) de todos os dados espectrais obtidos no laboratório. Foram identificados *outliers* através da distancia de mahalanobis nos *scores* dos dois primeiros componentes principais, amostras com distâncias maiores que 3 foram eliminadas da base de dados. O mesmo procedimento foi realizado com os dados das análises de solos. Depois da identificação e eliminação dos *outliers* a PCA dos dados espectrais foi novamente executada usando unicamente as 206 amostras extraídas das topossequências (Figura 1). Para a calibração de modelos de quantificação, assim como para a sua validação, as amostras foram separadas em dois grupos usando uma amostragem estratificada através do método de amostragem por hipercubo latino condicionado (cLHS) (MINASNY; MCBRATNEY, 2006) usando as duas primeiras componentes principais. Desta forma o grupo de calibração foi constituído por 156 amostras e o grupo de validação dos modelos foi constituído por 50 amostras (Figura 1). As curvas espectrais foram analisadas com o objetivo de identificar o tipo de pré-processamento requerido para estes dados. Posteriormente, foram construídos modelos de quantificação de argila, soma de bases (SB), SiO₂, Al₂O₃, TiO₂ e Fe₂O₃ através do método de regressão por mínimos quadrados parciais ou projeção sobre estruturas latentes (*projection to latent structures*) (PLSR) (WOLD, 1982), amplamente utilizado e apresentando bom desempenho na estimativa de atributos baseada no comportamento espectral do solo (McBRATNEY et al., 2006; VISCARRA ROSSEL et al., 2008; VASQUES et al., 2008; ZORNOZA et al., 2008). Estes modelos foram selecionados com base em parâmetros do erro e do ajuste de validações cruzadas. Desta forma foi avaliada a raiz quadrada do erro meio quadrático (RMSE), o erro meio (ME), o coeficiente de determinação (R²) e o desvio padrão do erro (SDE). Foi feita uma validação cruzada (sempre com as 50 amostras de validação) para testar o desempenho do modelo. Estes modelos foram inseridos na biblioteca espectral a qual foi

utilizada para a predição de atributos em todas as amostras da camada B (incluindo as amostras de calibração). Desta forma a quantificação de atributos do solo da camada B (horizonte diagnóstico mais importante) foi feita empregando unicamente informação espectral.

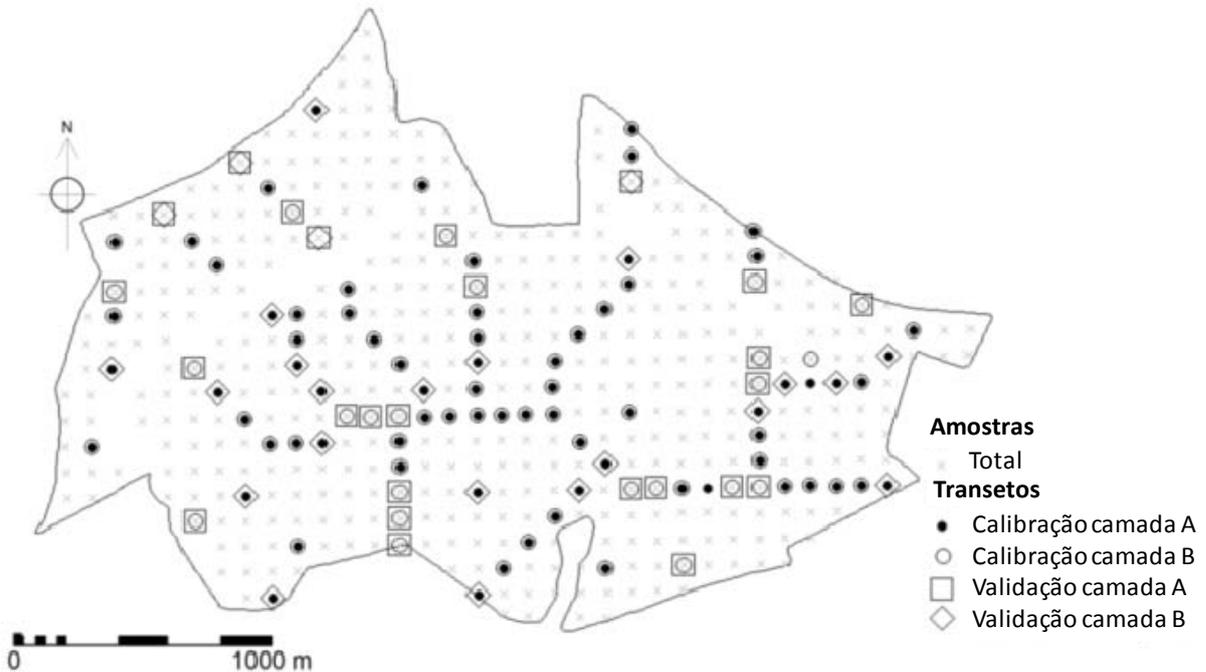


Figura 1 – Distribuição da grade de amostragem, indicando as amostras de solos selecionadas para análise de rotina pra fins de levantamento e as amostras selecionadas para a calibração e validação de modelos de estimativa de atributos relacionados com o intemperismo

Passo b. Todos os atributos do solo foram analisados através de métodos geostatísticos usando o pacote GeoR (RIBEIRO; DEIGGLE, 2001) do software estatístico R (versão 2.7.2). Nesta análise foram usados os procedimentos sugeridos por Kerry e Oliver (2007) em relação ao tratamento de variáveis assimétricas. Foi utilizada a função do semi-variograma para a construção dos semi-variogramas experimentais e identificação das estruturas espaciais. Estes semi-variogramas foram ajustados a modelos teóricos através da função de máxima verossimilhança (RIBEIRO; DEIGGLE, 2001). Estes modelos foram escolhidos usando o critério de informação do Akaike (AIC) e as características destes semi-variogramas foram utilizadas para a construção de mapas de variabilidade espacial de cada atributo a través do método de interpolação de krigagem ordinária. Desta forma foram obtidos mapas raster para SB, SiO₂, Al₂O₃, TiO₂ e Fe₂O₃. Mapas de Ki e Kr foram determinados a partir das informações dos mapas anteriores. Finalmente para resumir e diminuir a informação redundante produto da correlação entre atributos contida na

no conjunto de mapas gerados, o número de mapas raster foi reduzido através do método de PCA. Desta forma foram gerados novos mapas de componentes principais do solo (SPCs).

Passo c. A partir do MDT, foram extraídas as informações de inclinação e curvatura média usando o software ILWIS 3.5 open (52°North). A informação foi resumida usando o método de PCA com o objetivo de gerar mapas raster de componentes principais do terreno (TPCs) com a informação mais representativa da variabilidade destes parâmetros e diminuir a redundância.

Passo d. Levando em consideração que o tamanho do pixel dos mapas de atributos do solo e de parâmetros de terreno foi de 5 m, o tamanho do pixel das imagens de satélite foi reduzido para 5 m com a finalidade de que os três grupos de informação (mapas raster de atributos do solo, dos parâmetros do terreno e as bandas das imagens de satélite), tivessem o mesmo tamanho de pixel e desta forma não perder detalhamento nos mapas de terreno e de atributos do solo.

Para as bandas 1, 2, 3, 4, 5 e 7 da imagem TM foi realizada uma PCA, gerando assim uma menor quantidade de novas bandas com representativas da variabilidade do conjunto original de 6 bandas. Neste caso só a nova primeira banda (TMPC1) gerada com a PCA foi levada em conta já que ela representa em grande parte o albedo do espectro (GALVÃO et al., 1995; SALDANHA et al., 2004) o qual está relacionado com a textura do solo (DEMATTE, 2002). Comumente o primeiro PC (neste caso TMPC1) explica mais que 80% da variância total original do conjunto de imagens.

Passo e. Neste passo foram usados os conjuntos de mapas de componentes principais gerados nas etapas (SPCs, TPCs e TMPC1) para coletar informação de treinamento para uma classificação supervisionada do solo através do método de máxima verossimilhança. Este interpolador tem demonstrado um bom desempenho na classificação digital de atributos do solo (NICOLETTI et al., 2003; HENGL et al., 2007; LIU et al., 2008).

Foram demarcadas 5 toposseqüências na área de estudo ao longo das quais foram coletados 260 pixels ou amostras em cada mapa de componentes principais. Para cada um destes pixels foi extraída a informação de componentes principais dos atributos do solo, da imagem Landsat e dos parâmetros do terreno. Para cada pixel foi atribuído a sua correspondente classe de solo do mapa detalhado de alta intensidade. Finalmente, com o algoritmo de classificação treinado nas toposseqüências foi feita a predição das classes de solo na área inteira gerando assim, o mapa ML1. O mesmo procedimento foi feito para a obtenção do mapa digital semidetalhado ML2. A Figura 2 apresenta o esquema dos passos seguidos para a predição do mapa de solos.

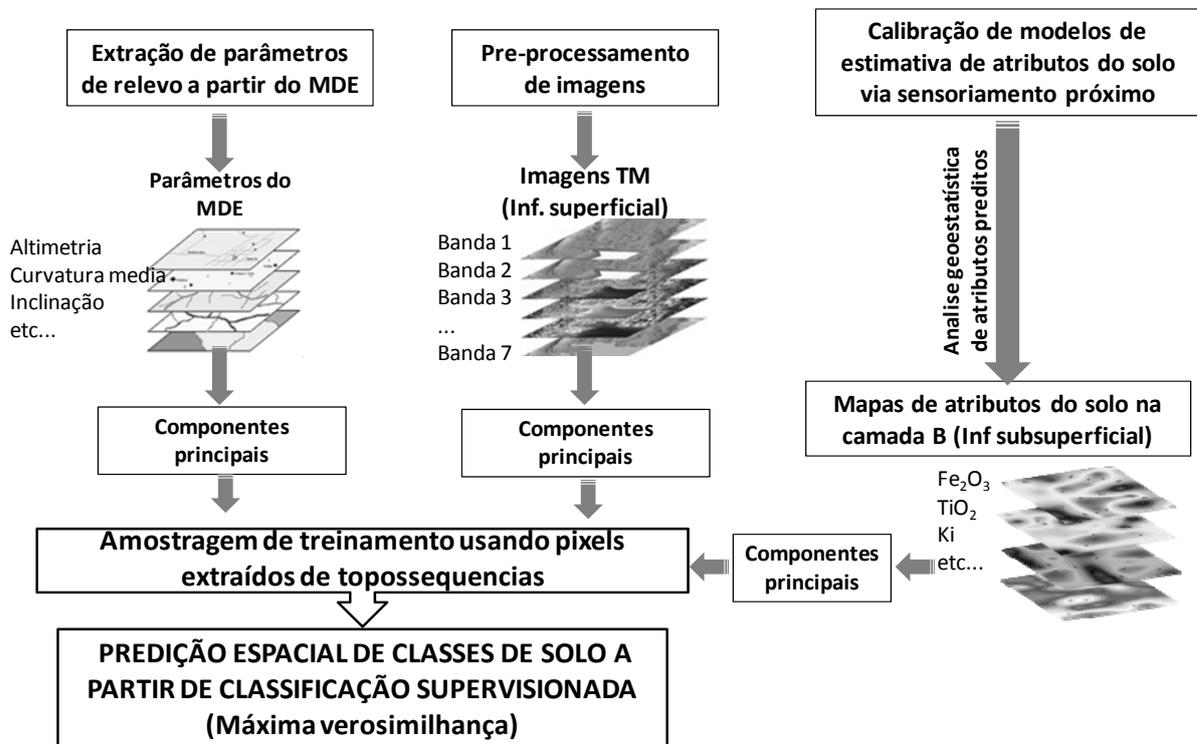


Figura 2 – Esquema dos passos propostos para a predição digital das classes de solo

5.2.3.3 Avaliação da qualidade dos mapas digitais gerados

Para a avaliação da qualidade dos mapas digitais detalhados de classes de solos foi realizada uma comparação entre estes e os mapas reais. Foi avaliada a correspondência espacial (S_c) que indica a percentagem coberta de cada área de classe de solo por cada classe predita a partir da seguinte equação,

$$S_c = \frac{\sum_{i=1}^k \hat{p}_i \cap p_i}{n} \cdot 100$$

onde $\hat{p}_i \cap p_i$ são os pixels de cada classe no mapa predito que estão dentro da área ocupada por os pixels de cada classe de solo no mapa real (p_i). Também foi avaliado o grau de correspondência espacial (DSC),

$$DSC = 2 \frac{\sum_{i=1}^k \hat{p}_i \cap p_i}{n + m} \cdot 100$$

onde m é o número total de pixels da classe de solo predita. A DSC é um indicador de correspondência espacial que leva em consideração o tamanho de ambos os dois, a área ou número de pixels da classe de solo predita e a área ou número de pixels da classe de solo real. Em outras palavras elimina a superestimação da correspondência espacial causada por classes preditas de solo com grandes áreas cobrindo por sua vez grandes áreas nas classes de solo real. Adicionalmente nesta estratégia foi calculada a acurácia global e o índice kappa (κ). O κ mede o grau de concordância entre dois grupos de variáveis (nesta caso mapas) e baseia-se na comparação entre as classes preditas e reais para cada caso no grupo de avaliação (FOODY, 2004). O κ pode ser calculado por,

$$\kappa = \frac{p_0 - p_c}{1 - p_c}$$

$$\theta_c = \sum_i p_{1i} p_{2i}$$

onde p_0 é a acurácia global; p_c é a concordância por acaso entre as classes observadas e as preditas; p_1 e p_{2i} são proporções de pixels que são observados e classificados como categoria i , respectivamente. O κ é calculado a partir de uma matriz de confusão e é um bom indicador que leva em conta a probabilidade de que um pixel seja classificado por acaso (GIRARD; GIRARD, 1999). O κ obtido foi classificado em cinco níveis segundo o proposto por Fonseca (2000). De acordo com o desempenho da classificação estes níveis são os seguintes: 0-0,2 baixo desempenho; 0,2-0,4: desempenho moderado; 0,4-0,6: bom desempenho; 0,6-0,8: desempenho muito bom; e 0,8-1,0 desempenho excelente.

5.3. Resultados e Discussão

5.3.1 Mapas reais de solos

Os solos encontrados na área de estudo foram classificados como: NEOSSOLO QUARTZARÊNICO (RQ), LATOSSOLO VERMELHO (LV), LATOSSOLO VERMELHO-AMARELO (LVA), ARGISSOLO VERMELHO (PV), ARGISSOLO VERMELHO (PVA),

CAMBISSOLO HÁPLICO Eutrófico (CXef), CAMBISSOLO HÁPLICO (CXb), NITOSSOLO VERMELHO (NV), NITOSSOLO VERMELHO eutrófico (NVef) (EMBRAPA, 2006). No mapa semidetalhado estes solos foram classificados somente no primeiro nível categórico. Desta forma o mapa semidetalhado reúne o LVA e o LV no grupo dos LATOSSOLOS (L), o CX e o CXef no grupo dos CAMBISSOLOS (C), o NV e o NVef no grupo dos NITOSSOLOS (N) e o PVA e o PV no grupo dos ARGISSOLOS (P).

O mapa detalhado de solos de alta intensidade (CSM1a, Figura 3A) apresentou 9 unidades de mapeamento, enquanto que o semidetalhado (CSM1b, Figura 3B) apresentou 5.

Os mapas reais de solos indicam uma variação heterogênea nas classes de solos encontradas (Figura 3). Basicamente a área é dominada pelos LATOSSOLOS os quais são solos mais profundos e intemperizados. Estes solos são altamente drenados ocorrendo em relevo plano. Por outro lado, a área apresenta solos com horizonte B textural (EMBRAPA, 2006) tal como os ARGISSOLOS. Estes solos ocorrem em áreas onduladas da paisagem. Os altos teores de argila no horizonte B conferem a este solo uma capacidade de drenagem mais lenta que os LATOSSOLOS. Na área encontram-se também solos pouco profundos como os CAMBISSOLOS que possuem um horizonte B incipiente e ocorrem em relevo ondulado.

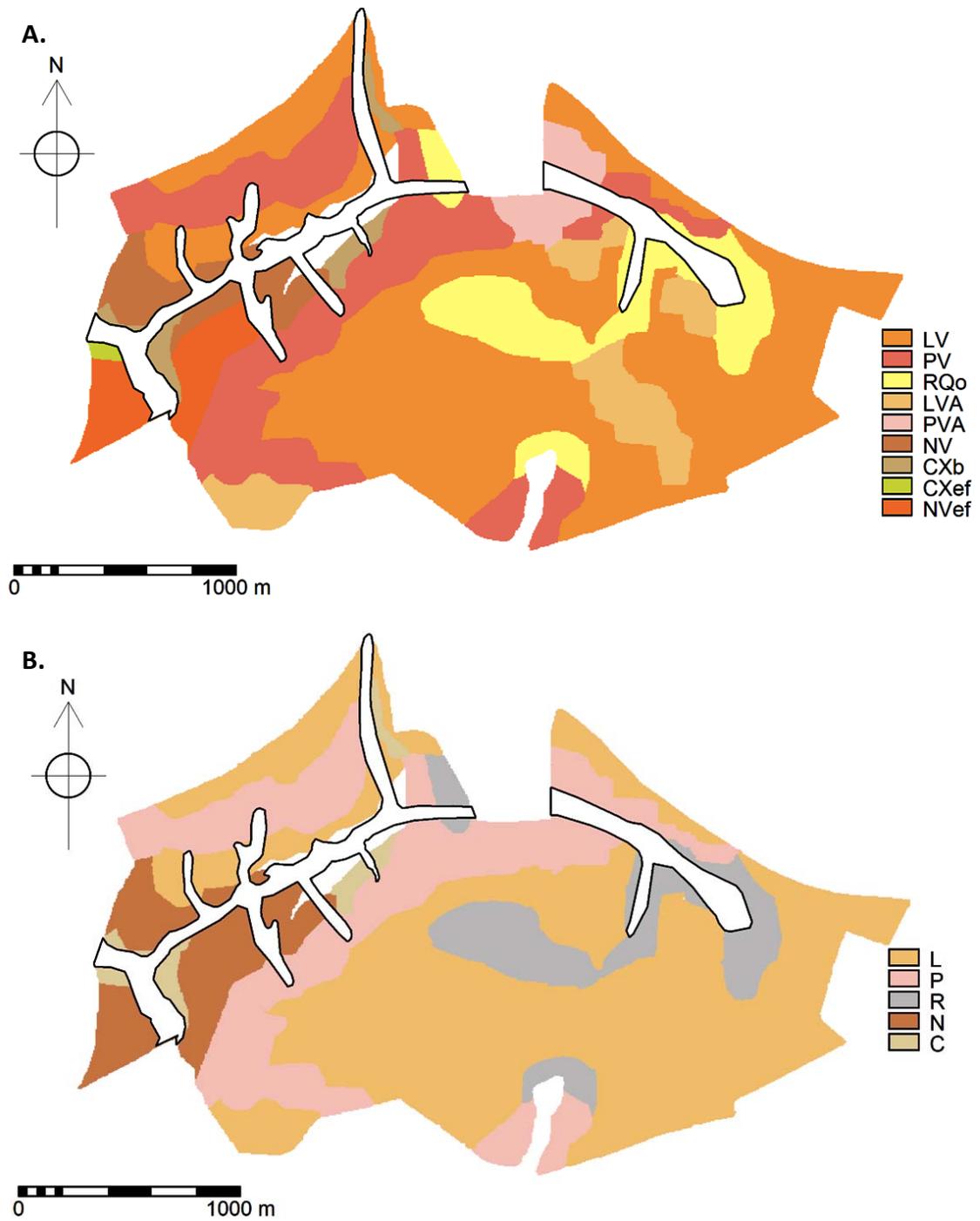


Figura 3 – Mapas de solos obtidos pelo método tradicional (mapas reais). A. Detalhado de alta intensidade. B. Semidetalhado de alta intensidade

5.3.2 Estratégia de mapeamento digital do solo

Esta estratégia integra vários produtos do sensoriamento de solos, incorporando importantes variáveis de sub-superfície que estão relacionadas como o intemperismo dos solos e a sua classificação, concordando com Demattê e Garcia (1999) e Demattê et al. (2001) que preconizaram a importância da avaliação espectral em transectos assim como a integração de informações espectrais espaciais e pontuais com informações do relevo. Neste caso grande parte da acurácia das predições está relacionada com a qualidade dos mapas de atributos químicos do solo, e por sua vez a qualidade destes mapas está relacionada com a qualidade das estimações (desempenho dos modelos da biblioteca espectral).

No *passo a*, através da análise dos PCs foram identificados 50 *outliers* do total de dados espectrais e físico-químicos. Para os dados usados para as calibrações e validações de modelos, os três primeiros PCs (PC1, PC2 e PC3) explicaram o 94,7, 4,2 e 0,5% da variância total respectivamente. Os dados espectrais extraídos dos transectos (os quais foram empregados na construção da biblioteca espectral) foram representativos dos dados espectrais da área inteira (Figura 4). Para a calibração dos modelos foi necessária a transformação para absorvância ($\log 1/R$). Este tipo de transformação é comumente usado devido a que na maioria dos casos a amplitude de concentração de um analito a ser determinado por reflectância espectral é pequena e o por efeito da não-linearidade de $\log 1/R$ as variações espectrais associam-se mais com as variações do analito (GRIFFITHS; DAHM, 2007).

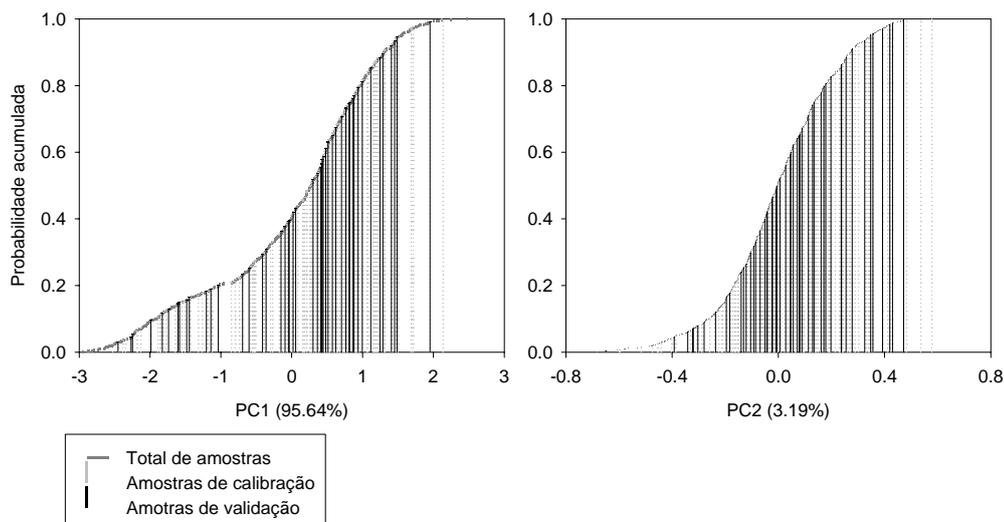


Figura 4 – Posição na probabilidade acumulada dos PCs das amostras espectrais de solo extraídas dos transectos (amostras para a calibração e validação de modelos de estimativa de atributos)

Os coeficientes de regressão (para cada banda) obtidos na calibração dos modelos para cada atributo podem ser analisados na forma de espectros de regressão (Figura 5), onde cada banda espectral possui o seu correspondente coeficiente chamado de “*b*”. Os coeficientes *b* contem informação interpretável a qual pode ser utilizada para indicar quais regiões espectrais contribuem nas predições (HAALAND; THOMAS, 1988). Estes espectros possuem picos claros e semelhantes nas bandas 530, 990, 1870 e 2200 nm, o que indica que estes atributos, para os que foram calibrados estes modelos, estão correlacionados. A banda dos 2200 está relacionada com argilominerais (BEN-DOR et al., 2008), o que explica o fato de que todos os espectros tenham picos nesta banda já que sabe-se que eles estão relacionados ao teor de argila no solo. Os picos da banda em 530 nm, pertence à faixa espectral da hematita (521 – 565 nm) (SCHEINOST et al., 1998). O anterior sugere que o conjunto destes atributos pode conter informação redundante. Esta informação que pode ser resumida em um menor número de variáveis.

Por outro lado, os modelos calibrados apresentaram um bom desempenho na predição dos atributos do solo avaliados (Tabela 1; Figura 5). Destaca-se que existem poucas pesquisas e trabalhos publicados relacionados com a quantificação de atributos como Al_2O_3 , Fe_2O_3 , SiO_2 e TiO_2 através de técnicas de sensoriamento remoto ou próximo (JANIK et al., 1995). Tendo em vista que a análise de rotina destes atributos é muito custosa e demorada, estes resultados indicam que a técnica utilizada tem um grande potencial e ainda grandes desafios não só na quantificação de atributos (SCHEINOST et al., 1998; FERNANDES et al., 2004) mas também no levantamento de solos.

Tabela 1 – Resultados da calibração e validação de modelos de estimativa de atributos do solo da biblioteca espectral

Atributo	Fatores PLS	Validação interna com amostras de calibração ($n=155$)				Validação externa dos modelos ($n=50$)			
		$R^2_{ajust.}$	RMSE	ME	SDE	$R^2_{ajust.}$	RMSE _P	ME _P	SDE _P
Fe_2O_3 g kg^{-1}	9	0,88	18,99	-1,11	1,12	0,85	23,02	3,28	0,65
Al_2O_3 g kg^{-1}	6	0,81	16,58	0,37	-0,38	0,77	19,05	5,28	-2,55
SiO_2 g kg^{-1}	4	0,77	15,07	0,87	0,12	0,71	18,72	-1,94	5,02
TiO_2 g kg^{-1}	9	0,91	4,14	-0,22	0,22	0,87	4,93	0,69	-0,32
Argila %	9	0,93	4,26	0,22	-0,22	0,90	5,07	0,53	-0,69
SB $mmol_c$ kg^{-1}	6	0,76	8,24	-0,35	0,35	0,76	6,81	-0,63	-0,03

SB: Soma de bases. *p*: indica a predição

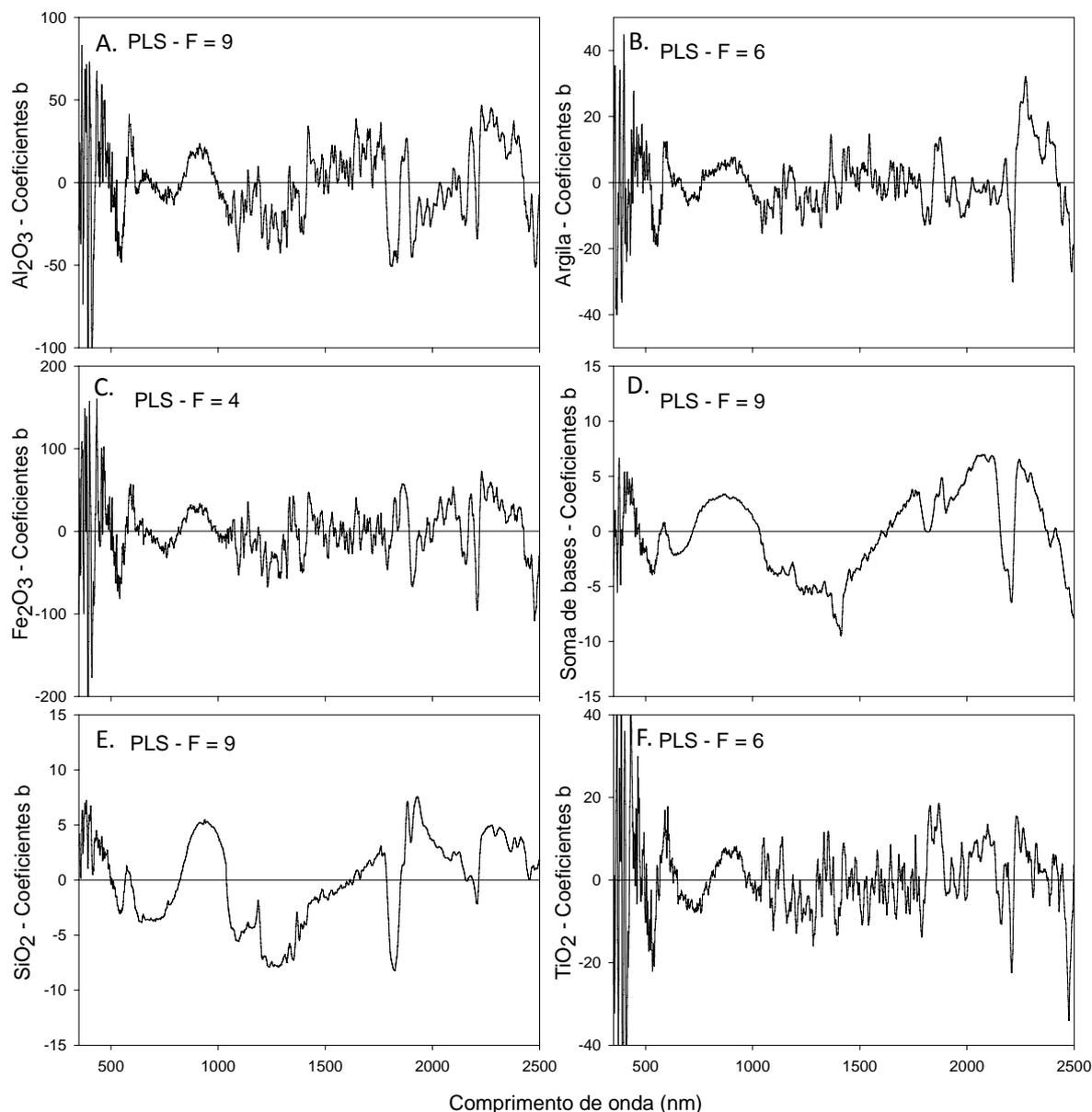


Figura 5 – Espectros de regressão gerados para: Al_2O_3 (A); argila (B); Fe_2O_3 (C); soma de bases (D); SiO_2 (E); e TiO_2 (F)

Outro parâmetro de avaliação do desempenho das previsões no grupo de validação é a inclinação da linha de tendência. Em uma validação na que os valores preditos são exatamente iguais aos observados, a relação é 1:1 e a inclinação da curva é igual a 1. Exceto na validação do SiO_2 (Figura 5E) as inclinações das linhas de tendência tiveram valores maiores que 0.75 (Figura 5), o que corrobora o bom desempenho dos modelos calibrados na estimativa destes atributos.

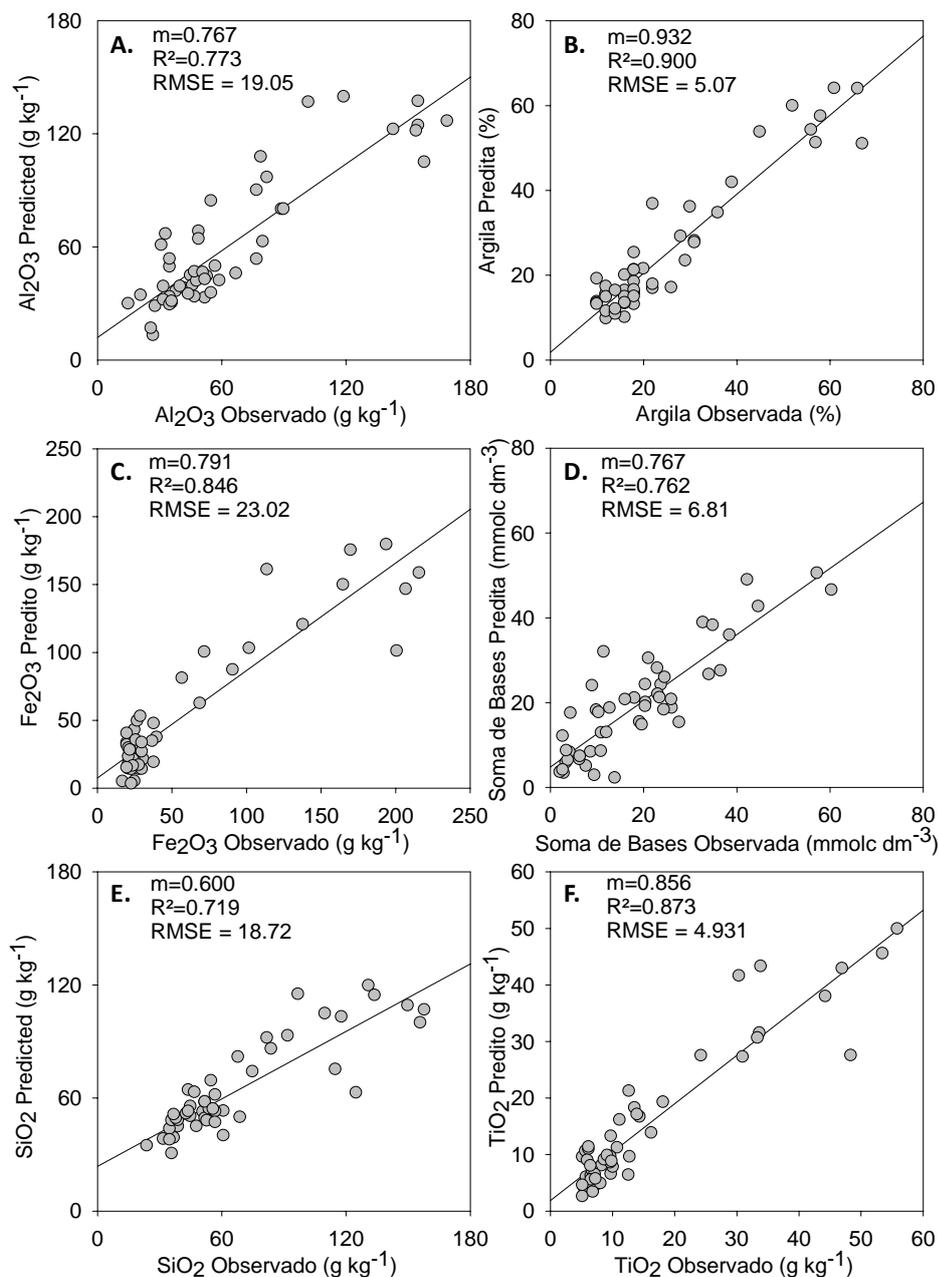


Figura 6 – Comparação entre valores observados e valores preditos pelos modelos para: Al₂O₃ (A); argila (B); Fe₂O₃ (C); soma de bases (D); SiO₂ (E); e TiO₂ (F). Os valores de m indicam a inclinação da linha de tendência

O uso de técnicas quimiométricas para a quantificação de atributos do solo com dados de sensoriamento próximo possibilita que uma grande quantidade de amostras de solos possa ser analisada sem acarretar grandes custos. No Brasil, o custo da determinação de Al₂O₃, Fe₂O₃, TiO₂ e SiO₂ em solos (extraídos comumente através do método do ataque sulfúrico), é de aproximadamente R\$68 o que limita bastante o seu uso. Neste estudo, as 255 amostras que

possuíam informação de Al_2O_3 , Fe_2O_3 , TiO_2 e SiO_2 junto com a informação espectral possibilitou a quantificação destes atributos em 172 amostras da profundidade B, o que forneceu uma alta resolução espacial desta informação. A obtenção destes atributos nas 172 amostras através do método convencional de ataque sulfúrico tivesse incrementado os custos em pelo menos R\$ 12.000, frente a aproximadamente R\$ 860 da estimativa por sensoriamento próximo (uma economia de 92,8% nos custos do incremento do detalhamento da informação espacial) . A quantidade final de amostras que continham informação do Al_2O_3 , Fe_2O_3 , TiO_2 , SiO_2 , argila e soma de bases possibilitou a clara identificação da estrutura espacial dos atributos químicos avaliados e o bom desempenho da krigagem (Tabela 2) estão associados à densidade de amostragem. Segundo a classificação do grau de dependência espacial descrito por Cambardella et al. (1994) e Cambardella e Karlen (1999) esta é fraca quando o valor da relação $C/(C_0+C)$ é menor que 0,25, moderada de 0,25 – 0,75 e forte quando maior que 0,75. Assim, o grau de dependência espacial do Al_2O_3 e do SiO_2 é moderado, para argila, Fe_2O_3 , TiO_2 e soma de bases é forte.

Por outro lado todos os semi-variogramas têm alcances entre 800 – 900 m e possuem um padrão espacial semelhante o qual é controlado pela topografia, o qual é indicado pela alta correlação dos atributos do solo com a elevação (Tabela 3) o que é consistente com varias pesquisas (BRUBAKER et al., 1993; KUZUYAKOVA, et al., 1997; DEMATTÊ et al., 2001; DEMATTÊ; NANNI, 2003; SEIBERT et al., 2007; WEI et al., 2008) que indicam que em solos derivados de basalto, a variabilidade espacial dos atributos em grande parte controlada pela topografia, especialmente em solos tropicais concordando com Demattê e Demétrio (1998) e Thanachit et al. (2006).

Tabela 2 – Resultados da análise geoestatística utilizada para o mapeamento de atributos do solo

Atributo	Parâmetros do semi-variograma					Validação da krigagem		
	Modelo	Co	Co+C	h (m)	$\frac{C}{C_0 + C}$	R^2_{ajust}	RMSE	ME
$\text{Fe}_2\text{O}_3 \text{ g kg}^{-1}$	Esférico	241,1	998,9	868,0	0,76	0,87	20,01	-0,21
$\text{Al}_2\text{O}_3 \text{ g kg}^{-1}$	Esférico	222,9	512,8	801,2	0,57	0,78	18,58	-0,40
$\text{SiO}_2 \text{ g kg}^{-1}$	Esférico	102,6	205,2	895,1	0,50	0,84	10,73	0,67
$\text{TiO}_2 \text{ g kg}^{-1}$	Esférico	8,3	73,9	832,8	0,89	0,87	5,08	-0,03
Argila %	Esférico	17,9	89,7	801,4	0,80	0,87	5,95	-0,01
SB $\text{mmol}_c \text{ kg}^{-1}$	Esférico	7,9	90,4	898,0	0,91	0,88	5,29	0,10

SB: soma de bases; Co+C: patamar; h: Alcance; $\frac{C}{C_0+C}$: grau de dependência espacial; Co: pepita

O alto grau de correlação observado entre os mapas raster dos atributos do solo preditos através da biblioteca espectral (Tabela 3) indica que existe informação redundante que pode ser resumida. Assim, o número destes mapas foi reduzido para um mapa raster (SPC1) que explica o 98% da variância total do conjunto total de mapas originais. Da mesma forma, as bandas da imagem TM foram reduzidas para uma única banda (TMPC1) que representa o 91% da variância total entre as bandas originais.

A PCA não foi aplicada nos dados do MDT por causa de que eles apresentaram baixos graus de correlação entre eles (Tabela 3) e desta forma a informação não pode ser resumida de forma eficiente por este tipo de análise. Então estes parâmetros foram usados diretamente no processo de classificação.

Tabela 3 – Matriz de correlação dos atributos do solo preditos e os parâmetros do MDT

	Al ₂ O ₃	Argila	Ki	Kr	Fe ₂ O ₃	SiO ₂	TiO ₂	SB	Elev.	CM	Incl.
Al ₂ O ₃	1	0,99	-0,59	-0,76	0,98	0,94	0,97	0,97	-0,84	-0,01	0,37
Argila		1	-0,5	-0,70	0,99	0,97	0,98	0,98	-0,86	-0,01	0,38
Ki			1	0,93	-0,53	-0,32	-0,48	-0,41	0,29	-0,01	-0,12
Kr				1	-0,74	-0,55	-0,71	-0,64	0,51	0,00	-0,23
Fe ₂ O ₃					1	0,94	0,99	0,97	-0,85	-0,01	0,38
SiO ₂						1	0,96	0,98	-0,90	-0,02	0,42
TiO ₂							1	0,98	-0,88	-0,02	0,41
SB								1	-0,89	-0,02	0,42
Elev									1	0,09	-0,55
CM										1	0
Incl.											1

SB: Soma de bases; Elev: Elevação; CM: Curvatura média; Incl: inclinação

Uma abundante quantidade de informação relacionada com a paisagem pode ser favorável no processo de classificação do solo, não obstante esta pode ser redundante devido às correlações entre variáveis. Neste sentido o pedólogo (mapeador) precisa fornecer ao algoritmo interpolador unicamente a informação mais importante de forma sintetizada. Assim o uso da PCA favorece o processo de classificação. Neste caso só 5 variáveis obtidas a partir de um grupo de 17 variáveis iniciais, foram utilizadas na classificação supervisionada. As grandes quantidades de informação redundante causam efeitos negativos no computo e tempo requerido para as predições e na acurácia destas (QI, 2004).

Por meio da classificação supervisionada do SCP1, TMPC1 e os parâmetros do terreno, foi gerado um mapa predito detalhado de alta intensidade (ML1) (Figura 7A) com uma acurácia global de 62% e um índice kappa de 0,45 correspondente a uma classificação de bom desempenho (FONSECA, 2000). De fato, a discriminação de solos por informações superficiais do solo usando imagens é válida entre solos com superfícies contrastantes, mas sabendo que a classificação final do solo depende do horizonte subsuperficial, conforme o observado por Demattê et al., (2005). A predição do mapa semidetalhado de alta intensidade (ML2) (Figura 7B) apresentou um bom desempenho ($\kappa=0,52$) com uma acurácia global de 69%. Os níveis de confusão entre classes de solos na classificação foram relativamente baixos (Tabelas 4 e 5) e os valores de DSC foram satisfatórios (Tabela 5). Por outro lado a comparação visual entre os mapas reais e os correspondentes mapas digitais mostra uma semelhança alta.

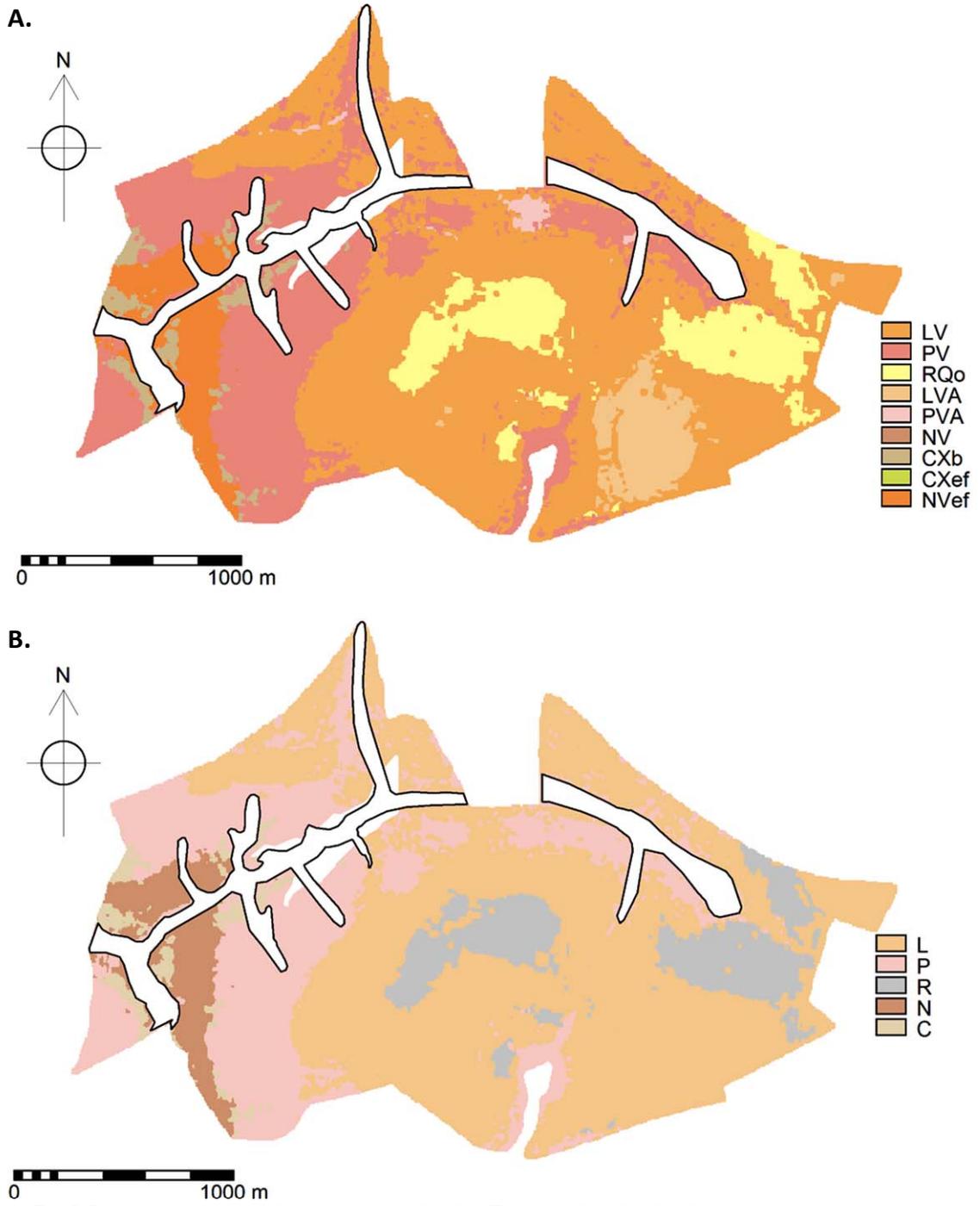


Figura 7 – Mapas digitais preditos; A. detalhado. B. semidetalhado de alta intensidade

Tabela 4 – Percentagem de cada área de classe de solo coberta por cada classe de solo predita (Sc).

Classes de solo preditas	Detalhado de alta densidade								
	LV	LVA	PV	PVA	RQo	NV	NVef	CXb	CXef
ML1-LV	73,7	35,8	21,0	20,9	42,9	0,0	0,0	17,3	0,0
ML1-LVA	4,1	31,6	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
ML1-PV	6,2	25,3	76,3	46,6	12,2	20,8	49,2	42,1	99,2
ML1-PVA	0,1	0,0	0,2	32,5	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
ML1-RQo	13,5	2,5	0,2	0,0	44,9	0,0	0,0	0,0	0,0
ML1-NV	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0
ML1-NVef	1,4	4,8	2,1	0,0	0,0	44,5	39,4	0,0	0,0
ML1-CXb	1,1	0,0	0,1	0,0	0,0	34,7	11,4	33,7	0,8
ML1-CXef	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	7,0	0,0

Tabela 5 – Percentagem de cada área de classe de solo coberta por cada classe de solo predita (Sc)

Classes de solo preditas	Semidetalhado de alta densidade				
	L	P	R	N	C
ML2-L	76,5	19,2	35,3	0,0	10,8
ML2-P	11,0	76,0	26,9	23,7	32,8
ML2-R	9,7	0,1	37,8	0,0	0,0
ML2-N	2,5	3,8	0,0	54,83	23,6
ML2-C	0,3	0,1	0,0	21,5	32,8

O LV do mapa digital cobriu algumas das áreas do RQo real, isto é possivelmente devido ao fato de que a fração argila do LV nesta área é baixa (15 - 20%) e neste caso estes solos têm valores próximos. A maioria das confusões do mapa predito de alta densidade ocorreu entre subgrupos da mesma classe de solo. A classe CX foi predita com baixa acurácia, isto é atribuído ao pequeno tamanho das unidades de mapeamento deste solo e a sua dispersão espacial dentro da área de estudo.

Tabela 5 – Grau de correspondências espaciais (DSC)

Grau de correspondência espacial - DSC (%)			
Detalhado		Semidetalhado	
LV - LV	73,9	L - L	76,5
LVA - LVA	40	P - P	76,1
PV - PV	66,4	R - R	37,8
PVA - PVA	48,2	N - N	54,9
RQo - RQo	42,5	C - C	32,8
NV - NV	0	-	-
NVef - NVef	36,3	-	-
CXb - CXb	25,1	-	-
CXef - CXef	0	-	-

Em relação à confusão entre o NV e o PV, assim como N e P, a diferenciação entre estes dois solos apenas pelas características químicas e granulométricas da camada B é praticamente impossível. Assim, o peso do SPC1 (na discriminação destes solos) é muito baixo já que ele não fornece suficiente informação que permita esta discriminação (levando em conta que não os Nitossolos possuem também gradiente textural). Não obstante com as informações da superfície do solo da imagem de satélite a sua diferenciação pode resultar menos complexa. Estes inconvenientes são observados no mapeamento convencional devido à dificuldade em estabelecer limites de solos e diferenciar solos taxonomicamente semelhantes em campo são causas comuns de erro no mapeamento. Por exemplo, as confusões observadas entre o LV e o RQ (e L e R) neste trabalho representam uma fonte de erro devido à proximidade taxonômica destas duas classes (o que inclui também proximidade na classe textural e mesmo na ocorrência no relevo). Neste caso em particular, nos mapas convencionais o limite entre estes foi estabelecido basicamente por uma mudança no teor de argila, onde 15% foi o limite taxonômico destes solos. Desta forma, erros de laboratório e amostragem, podem influir significativamente na identificação do limite do solo e na pureza do mapeamento. Neste sentido, algumas pesquisas indicam que no mapeamento convencional de solos a pureza das unidades de mapeamento de solos é frequentemente baixa (RIEZEBOS, 1989; ZIADAT et al., 2003; ZIADAT, 2007) assim como também a pureza taxonômica. Por exemplo, Dobos (1998) estimou que a pureza taxonômica da base de dados de solos e de terreno da Hungria (desenvolvida usando o convencional conhecimento experiente) é de 49,5%.

Assumindo que a pureza dos mapas reais seja de 100% (fato pouco provável) e levando em consideração a acurácia global dos mapas digitais preditos neste trabalho e que as confusões ocorreram entre solos taxonomicamente semelhantes, é possível afirmar que o valor de acurácia do mapa digital semidetalhado encontra-se dentro das faixas normais e que a acurácia global do mapa detalhado de alta intensidade encontra-se perto do limite inferior desta faixa.

Em relação à escala utilizada (1:25.000), os resultados encontram-se dentro da faixa de pureza de unidades de mapeamento de solos encontradas por Burrough et al. (1971) quem indica nesta escala é de 65 - 86%. Neste sentido, existe uma grande incerteza das predições, sobretudo nos limites estabelecidos de solos (LAGACHERIE et al., 1996; GREVE et al., 2006). Isto obedece ao fato que a única referência com a que se conta é a dos mapas reais o dos mapas derivados de conhecimento experiente nos que comumente não é quantificado o grau de precisão. É claro que “erros” nos mapas reais interferem no processo de treinamento do algoritmo de classificação derivando em um decréscimo do desempenho de predição. É importante levar em consideração que os mapas de solo convencionais derivados da experiência dos pedólogos não estão isentos de variações na interpretação sendo que este muitas vezes afronta complexos problemas que deve resolver se baseando no seu conhecimento. Neste sentido, o pedólogo pode diminuir a complexidade destes problemas guiando as ferramentas pedométricas disponíveis através do seu conhecimento.

5.4 Conclusões e considerações finais

Os modelos de quantificação de atributos do intemperismo (Fe_2O_3 , Al_2O_3 , SiO_2 , TiO_2 e Argila) através da resposta espectral do solo apresentaram alto desempenho com erros baixos e valores de R^2 da validação entre 0,76 e 0,90.

A predição espacial usando as informações dos atributos preditos apresentou também um alto desempenho, com R^2 das validações da krigagem, entre 0,78 e 0,88.

No Brasil é comum o uso de SiO_2 , Al_2O_3 , TiO_2 e Fe_2O_3 como informação importante na classificação do solo. O custo destas análises é de R\$ 68, neste caso por simples análises a redução dos custos destas análises para incrementar a resolução espacial da informação destes elementos na camada B foi de aproximadamente 92,8%.

As metodologias de predição pontual e espacial dos atributos relacionados ao intemperismo do solo os quais foram derivados da informação espectral, mostraram um grande potencial para a sua utilização na construção de mapas digitais do solo.

A integração de dados de relevo, espectral obtidos a nível orbital e de atributos preditos derivados de modelos espectrais devidamente calibrados, permitiu a determinação de mapas de solo a níveis detalhado e semidetalhado.

Os mapas preditos usando metodologias de extração e de redução de dimensionalidade da informação favoreceu a predição dos mapas de solos. Assim os mapas preditos foram semelhantes com os reais apresentado valores de acuracia global de 0,62% para o mapa detalhado e 0,69 para o semidetalhado e valores kappa de 0,45 e 0,52 respectivamente. O desempenho preditivo do método em geral foi satisfatório, especialmente na predição do mapa semidetalhado.

A qualidade e a quantidade das informações relacionadas com os fatores de formação do solo favorecem a sua classificação, embora muita desta informação pode ser redundante o que pode representar um problema de multicolinearidade (MENDONÇA-SANTOS et al., 2006), neste sentido o mapeador de solos deve extrair e prover ao algoritmo de interpolação do solo a informação mais importante. Qi (2004) indica que uma grande quantidade de informação redundante causa efeitos negativos no tempo de computo requerido e na qualidade das predições. Por outro lado, no mapeamento digital de classes de solos McBratney et al. (2003) tem proposto o modelo *scorpan* que considera que a classe de solo pode ser definida em função do clima, organismos, topografia, material parental, idade e espaço. Através do sensoriamento remoto é possível extrair informação importante sobre parâmetros destes fatores. Na estratégia utilizada neste trabalho focou-se unicamente em três destes fatores (solo, topografia e espaço), embora também tenha levado em conta indicadores de intemperismo que podem estar associados com o fator tempo. É possível que a incorporação de mais fatores do modelo *scorpan* como as sugeridas por Demattê et al., (2001) e outras metodologias pedométricas chave como as distancias taxonômicas (MINASNY; McBRATNEY., 2007) e a seleção de instancias (SCHMIDT et al., 2008), o desempenho das predições de classes de solo para o mapeamento digital de solos poda ser melhorado significativamente.

Referências

BEN-DOR, E., TAYLOR, G.R., HILL, J., DEMATTE, J.A.M., WHITING, M.L., CHABRILLAT, S. AND SOMMER, S., Imaging spectrometry for soil applications. **Advances in Agronomy**, Amsterdam, v. 97. p. 321-392, 2008

BOUMA, J. Soils are back on the global agenda: now what? **Geoderma**, Amsterdam, v.150, p.224-225, 2009

BRUBAKER, S.C.; JONES, A.J.; LEWIS, D.T.; FRANK, K. Soil properties associated with landscape position. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 57, p.235-239, 1993.

BUI, E. A review of digital soil mapping in australia. In: LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B.; VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**. Amsterdam: Elsevier, 2006. p. 269-278. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective, 31)

BURROUGH, P.A., P.H.T. BECKETT E H.G. JARVIS, The relation between cost and utility in soil survey (I-III). **Journal of Soil Science**, New York, v. 22, p. 368-381, 1971.

CAMARGO, M. N.; KLANT, E.; KAUFFMAN, J. H. Classificação de solos utilizada em levantamentos pedológicos no Brasil. Campinas. **Boletim Informativo da Sociedade Brasileira de Ciência do Solo**, v.12. n.1, p.11-13, jan./abr. 1987.

CAMBARDELLA C.A., KARLEN D.L. Spatial analysis of soil fertility parameters. **Precision Agriculture**, Dordrecht, v. 1 p.5-14, 1999.

CAMBARDELLA C.A.; MOORMAN T.B.; NOVAK J.M., PARKIN T.B.; KARLEN D.L.; TURCO R.F.; KONOPKA A.E. Field-scale variability of soil properties in central Iowa soils. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v.58, p.1501-1511, 1994.

DEBELLA-GILO, M.; ETZELMÜLLER, B. Spatial prediction of soil classes using digital terrain analysis and multinomial logistic regression modeling integrated in GIS: Examples from Vestfold County, Norway. **CATENA**, Amsterdam, v. 77, p. 8-18, 2009.

DEMATTÊ, J.A.M.; DEMÉTRIO, V.A. Caracterização de solos por padrões de drenagem e sua relação com índices de intemperismo. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v.33,p.87-95, 1998.

DEMATTÊ, J.A.M.; GARCIA, G.J. Alteration of soil properties through a weathering sequence as evaluated by spectral reflectance. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 63, p. 327-342, 1999.

DEMATTÊ, J.A.M.; DEMATTÊ, J.L.I.; CAMARGO, W.P.; FIORIO, P.R.; NANNI, M.R. Remote sensing in the recognition and mapping of tropical soils developed on topographic sequences. **Mapping Sciences and Remote Sensing**, Columbia, USA, v.38, p. 79-102, 2001.

DEMATTÊ, J.A.M. Characterization and discrimination of soils by their reflected electromagnetic energy. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 37, p. 1445-1458, 2002.

DEMATTÊ J.A.M.; NANNI, M. R. Weathering sequence of soils developed from basalt as evaluated by laboratorial (IRIS), airborne (AVIRIS) and orbital (TM) sensors. **International Journal of Remote Sensing**, v.24, n. 23, 4715-4738, 2003.

DEMATTÊ, J. A. M.; MORETI, D.; VASCONCELOS, A. C. F.; GENU, A. M. Uso de imagens de satélite na discriminação de solos desenvolvidos de basalto e arenito na região de Paraguaçu Paulista. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 40, p. 697-706, 2005.

DOBOS, E. **Quantitative analysis and evaluation of AVHRR and terrain data for small scale soil pattern recognition**. (Ph.D. thesis). Purdue University, West Lafayette, 1998.

EIBERT, J.; STENDAHL, J.; SØRENSEN, R. Topographical influences on soil properties in boreal forests. **Geoderma**, Amsterdam, v. 141, p.139-148, 2007.

EMBRAPA. Sistema brasileiro de classificação de solos. Centro nacional de pesquisa de solos. 2.ed. Rio de Janeiro, 2006. 306 p.

FERNANDES, R. B. A.; BARRÓN, V.; TORRENT, J. ; FONTES, M. P. F. Quantificação de óxidos de ferro de latossolos brasileiros por espectroscopia de reflectância difusa. **Revista Brasileira de Ciencia do Solo**, Viçosa, v. 28, p. 245-257, 2004.

FIGUEIREDO, S.R.; GIASSON, E.; TORNQUIST, C.G.; NASCIMENTO, P.C. Uso de regressões logísticas múltiplas para mapeamento digital de solos no planalto médio do RS. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, Viçosa, v. 32. p. 2779-2785, 2008.

FIORIO, P.R. **Dados radiométricos obtidos nos níveis terrestre e orbital na avaliação de solo**. 2002. 198p. Tese (Doutorado Solos e Nutrição de Plantas) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2002.

FONSECA, L.M.G. **Processamento digital de imagens**. São Jose dos Campos: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 2000. 105p. (Relatório técnico)

FOODY, G. Thematic map comparison: Evaluating the statistical significance of differences, **Photogrammetric Engineering and Remote Sensing**. Annapolis. v.70, p.627–633, 2004.

GALVÃO, L.S.; VITORELLO, I.; PARADELLA, W.R. Spectroradiometric discrimination of laterites with principal components analysis and additive modeling. **Remote Sensing of Environment**, Amsterdam, v.53, p.70–75, 1995.

GIRARD, M.C; GIRARD C.M. **Traitement des données de télédétection**. Paris: DUNOD, 1999. 529 p.

GREVE, M. H.; GREVE, M. B. Using soil covariates to evaluate and represent the fuzziness of soil map boundaries, In: LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B.; VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**, Amsterdam: Elsevier, 2006, p. 543-553, 632. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective, 31)

GRIFFITHS, P.R.; DAHM, D.J. Continuum and discontinuum theories of diffuse reflection. In: D. BURNS AND E. CIURCZAK. TAYLOR AND FRANCIS (Ed.). **Handbook of near-infrared spectroscopy**. Boca Raton: CRC, 2007. p. 21-64.

HAALAND, D.M. AND THOMAS, E.V. Partial Least-Squares methods for spectral analyses. Relation to other quantitative calibration methods and the extraction of qualitative information. **Analytical Chemistry**, Washington, v. 60, p. 1193-1202, 1988.

HARTEMINK, A.E.; McBRATNEY, A. A soil science renaissance. **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p.123-129, 2008.

HENGL, T., TOOMANIAN, N., REUTER, H.I., AND MALAKOUTI, M.J. Methods to interpolate soil categorical variables from profile observations: lessons from Iran. **Geoderma**, Amsterdam, v.140, p.417 – 427, 2007.

INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS- IPT. Divisão de Minas e Geologia Aplicada. **Mapa geológico do Estado de São Paulo**. Escala 1:1000.000. São Paulo, 1981.

JANIK, L. J.; SKJEMSTAND, J. O.; RAVEN, M. D. characterization and analysis of soils using mid-infrared partial least squares. i. correlations with XRF-determined major element composition. **Australian Journal of soil Research**, Collingwood, v. 140.p. 621-36, 1995.

KERRY, R.; OLIVER, M.A. Comparing sampling needs for variograms of soil properties computed by the method of moments and residual maximum likelihood. **Geoderma**, Amsterdam, v. 140, p. 383–396, 2007.

KUZYAKOVA, I.F.; KUZYAKOV, Y.V.; THOMAS, E. Effect of microrelief on the spatial variability of carbon content of a Podzoluvisol in a long term field trial. **Journal of Plant Nutrition and Soil Science**, Weinheim, v.160, p.555-561, 1997.

LAGACHERIE, P., ANDRIEUX, P., BOUZIGUES, R. Fuzziness and uncertainty of soil boundaries: from reality to coding in GIS. In: BURROUGH P.A. AND FRANK A.U. (Ed.) **Geographic objects with indeterminate boundaries**. London: CRC, 1996. p. 275–286.

LINKER, R. Soil classification via mid-infrared spectroscopy. In: DAOLIANG, LI (Ed). **Computing technologies in agriculture**, Boston: Springer, 2008. v.2. p. 1137–1146.

LIU, J., PATTEY, E., NOLIN, M.C., MILLER, J.R., AND KA, O. Mapping Within-Field Soil Drainage Using Remote Sensing, Dem and Apparent Soil Electrical conductivity. **Geoderma**, Amsterdam, v.143, p.261-272, 2008.

McBRATNEY A.B.; MENDONÇA-SANTOS M.L.; MINASNY, B. On digital soil mapping. **Geoderma**, Amsterdam, v. 117. p. 3-52, 2003

McBRATNEY, A.B.; MINASNY, B.; VISCARRA ROSSEL, R. Spectral soil analysis and inference systems: a powerful combination for solving the soil data crisis. **Geoderma**, Amsterdam, v. 136, p.272–278, 2006.

MENDONÇA-SANTOS, M.L.; DOS SANTOS H.G. The state of the art of brazilian soil mapping and prospects for digital soil mapping. In: LAGACHERIE, P.; McBRATNEY, A.B.;

VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**. Amsterdam: Elsevier, 2006. p. 39-54. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective, 31)

MENDONÇA-SANTOS, M.L.; MCBRATNEY, A.B.; MINASNY B. Soil prediction with spatially decomposed environmental factors. In: LAGACHERIE, P.; MCBRATNEY, A.B.; VOLTZ, M. (Ed.). **Developments in soil science**. Amsterdam: Elsevier, 2006. p. 269-278. (Digital Soil Mapping: An Introductory Perspective, 31)

MINASNY, B.; MCBRATNEY, A. Incorporating taxonomic distance into spatial prediction and digital mapping of soil classes. **Geoderma**, Amsterdam, v. 142, p. 285-293, 2007.

MINASNY, B.; MCBRATNEY, A.; SALVADOR-BLANES, S. Quantitative models for pedogenesis – A review. **Geoderma**, Amsterdam, v. 144, p.140–157, 2008.

MINASNY, B.; MCBRATNEY, A.B. A conditioned Latin hypercube method for sampling in the presence of ancillary information. **Computers and Geosciences**, Amsterdam, v. 32. p. 1378-1388, 2006.

NICOLETTI, V., S. SILVESTRI, F. RIZZETTO, L. TOSI, M. PUTTI AND P. TEATINI. Use of remote sensing for the delineation of surface peat deposits south of the Venice Lagoon (Italy), In: International Geoscience and Remote Sensing Symposium, 2003, Tolosa, **Proceedings...** p.2881-2883.

QI, F. Knowledge discovery from area-class resource maps: data preprocessing for noise reduction. **Transactions in GIS**, New York, p. 297–308, 2004

RAIJ, B. Van.; ANDRADE, J.C.; CANTARELLA, H.; QUAGGIO, J.A. **Análise química para avaliação de solos tropicais**. Campinas: IAC, 2001. 285p.

RAIJ, B. van; QUAGGIO, J.A. Métodos de análise de solo para fins de fertilidade. Campinas: IAC, 1983. p.1-31. (Boletim Técnico, 81)

RIBEIRO Jr. P.J.; DIGGLE, P.J. geoR: A package for geostatistical analysis. **R-NEWS**. Merborlne. v.1, p. 15-18, 2001.

RIEZEBOS, H Application of nested analysis of variance in mapping procedure for land evaluation, **Soil Use and Management**, New York. v.5. p. 25-30, 1989.

SALDANHA, D.L.; LIMA, M.C.; CUNHA, E.; HAERTEL, V. Spectral analysis of soils from mafic/ultramafic rocks of Cerro Mantiqueira, south-west of Rio Grande do Sul, Brazil. . **International Journal of Remote Sensing**, London, v. 25, v. 4381 – 4393, 2004.

SCHEINOST, A.C.; CHAVERNAS, A.; BARRÓN, V. TORRENT, J. Use and limitations of second-derivative diffuse reflectance spectroscopy in the visible to nearinfrared range to identify and quantify Fe oxides in soils. **Clays and Clay Minerals**, Chantilly, v.46, p.528-536, 1998

- SCHMIDT, K.; BEHRENS, T.; SCHOLTEN, T. Instance selection and classification tree analysis for large spatial datasets in digital soil mapping. **Geoderma**, Amsterdam. v. 146. p.138-146, 2008.
- SENTELHAS, P.C.; MARIN, F.R.; PEREIRA, R.; ANGELOCCI, L.R.; VILA NOVA, N.A.; BARBIERI, V. **Análise de dados climáticos e do balanço hídrico climatológico de Piracicaba (1917-1997)**. Piracicaba: DFM, ESALQ, 1998. 81p.
- THANACHIT, S.; SUDDHIPRAKARN, A.; KHEORUENROMNE, I.; GILKES, R.J. The geochemistry of soils on a CATENA, Amsterdam, on basalt at Khon Buri, northeast Thailand.. **Geoderma**, Amsterdam, v. 135, p. 81–96, 2006
- VASQUES G.M.; GRUNWALD, S.; SICKMAN, J.O. Comparison of multi-variate methods to predict soil carbon using visible/near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam, v. 146, p.14-25, 2008.
- VISCARRA ROSSEL R.A.; JEON Y.S.; ODEH I.O.A.; McBRATNEY A.B. Using a legacy soil sample to develop a mid-IR spectral library. **Australian Journal of Soil Research**, Collingwood, v.46, p.1-16, 2008.
- VISCARRA ROSSEL R.A.; MCBRATNEY A.B. Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for digital soil mapping. In: HARTEMINK A.E, MCBRATNEY A.B AND MENDONÇA-SANTOS L (Ed.). **Digital soil mapping with limited data**. Dordrecht: Springer, 2008. p. 165-172.
- VISCARRA ROSSEL, R. The Soil Spectroscopy Group and the development of a global soil spectral library. **Pedometron**, Sydney, v.25, p. 28-31, 2008.
- WEI, J.B.; XIAO, D.N.; ZENG, H.; FU, Y.K. Spatial variability of soil properties in relation to land use and topography in a typical small watershed of the black soil region, northeastern China. **Environmental Geology**, Dordrech, v.53, p, 1663–1672, 2008.
- WOLD, H. **Systems under indirect observation**. Amsterdam: Elsevier, 1982.
- ZIADAT, F.M. TAYLOR J.C. AND BREWER, T.R. Merging Landsat TM imagery with topographic data to aid soil mapping in the Badia region of Jordan. **Journal of Arid Environments**, Amsterdam, v. 54, p.527–541, 2003.
- ZIADAT, F.M. Land suitability classification using different sources of information: Soil maps and predicted soil attributes in Jordan. **Geoderma**, Amsterdam, v. 140. p.73–80. 2007.
- ZORNOZA, R.; GUERRERO, C.; MATAIX-SOLERA, J.; SCOW, K.M.; ARCENEGUI, V.; MATAIX-BENEYTO, J. Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam. v. 40, p.1923-1930. 2008.