Universidade de São Paulo
Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"

Sensoriamento remoto hiperespectral nos níveis laboratório, campo e aéreo como ferramentas auxiliares no manejo do solo

Marston Héracles Domingues Franceschini

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

Piracicaba
2013

Marston Héracles Domingues Franceschini
Engenheiro Agrônomo

Sensoriamento remoto hiperespectral nos níveis laboratório, campo e aéreo como ferramentas auxiliares no manejo do solo

Orientador:
PROF. DR. **JOSÉ ALEXANDRE MELO DEMATTÊ**

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

Piracicaba
2013

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

Franceschini, Marston Héracles Domingues
Sensoriamento remoto hiperespectral nos níveis laboratório, campo e aéreo como ferramentas auxiliares no manejo do solo / Marston Héracles Domingues Franceschini.- - Piracicaba, 2013.
172 p: il.

Dissertação (Mestrado) - - Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz", 2013.

1. Distribuição espacial 2. Espectroscopia 3. Krigagem 4. Manejo do solo 5. Mínimos quadrados 6. Sensoriamento remoto I. Título

CDD 631.4
F815s

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

Dedico,

Aos meus pais, Marcos e Martina, os quais me deram força e apoio incondicionais para a realização deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus pelas oportunidades de crescimento pessoal e profissional que pude vivenciar durante o período de mestrado, por me guiar e fortalecer nos momentos difíceis.

Aos meus pais Marcos e Martina, e aos meus irmãos Marcos e Marcello, exemplos de honestidade, caráter, força de vontade e humildade pelo apoio, dedicação, confiança e incentivo durante toda a minha vida, em qualquer circunstância, e principalmente pelo amor e carinho dedicados.

A Raquel, pela paciência, dedicação, incentivo e afeto, os quais me deram disposição para prosseguir.

Ao Prof. José Alexandre Melo Demattê pela oportunidade e orientação.

Ao Prof. Carlos Roberto de Souza Filho (Inst. de Geociências – UNICAMP), coorientador na área de sensoriamento remoto, por partilhar de sua experiência e pela atenção.

Ao Programa de Pós-Graduação (PPG) em Solos e Nutrição de Plantas e ao Departamento de Ciência do Solo, da Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz" (ESALQ - USP), através dos professores: Dr. Pablo Vidal-Torrado (Coordenador do PPG), Dr. Álvaro Pires da Silva e Dr. Luis Reynaldo Ferracciú Alleoni (Chefe do Departamento).

A Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela concessão da bolsa de mestrado.

Ao Grupo Raízen, Unidades Bom Retiro e São Francisco, pela concessão das áreas de estudo, e ao resp. de campo Sr. Césio pela atenção dispensada.

A FotoTerra, Atividades de Aerolevantamentos Ltda., pelas imagens cedidas.

A todos os professores, funcionários e colegas de pós-graduação do departamento de Solos e Nutrição de Plantas, pela amizade, convivência, apoio técnico, científico e material necessário para a conclusão do mestrado.

Ao Prof. José Paulo Molin (Dep. de Eng. de Biossistemas – ESALQ), ao Dr. Luiz Eduardo Vicente (Embrapa - Monitoramento por Satélite), ao Prof. Peterson Ricardo Fiorio (Dep. de Eng. de Biossistemas – ESALQ) e ao Prof. Antonio Carlos Azevedo (Dep. de Ciência do Solo – ESALQ) pela imprescindível ajuda dada nas diferentes etapas deste trabalho.

Aos funcionários do departamento de Engenharia de Biossistemas, Juarez, Áureo, Francisco e José Geraldo, pelo auxilio e sugestões sempre pertinentes.

Aos amigos Fabrício Terra, Rodnei Rizzo, Osmar Bazaglia, Gustavo Arruda, Anderson Braz, Caio Fongaro, Marcus Sato e Mateus Rodrigues pelo auxílio dado em atividades de campo, ideias e momentos de descontração.

Aos amigos do grupo de pesquisas, atuais e ex-participantes: Simone Vicente, Suzana Romeiro, Júlio Gaspar, Marco Bortolleto, Gustavo Vasques, Akenya Alkimim, Mathilde Bertoldo e Evandro Alves pela paciência e amizade dedicados.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para a conclusão deste trabalho.

A todos o meu sincero muito obrigado!

SUMÁRIO

RESUMO....9
ABSTRACT....11
1 INTRODUÇÃO....13
Referências....14
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA....17
2.1 Fundamentos da espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR....17
2.2 Comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR....19
2.3 Aplicação da espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR na determinação qualitativa e quantitativa de atributos do solo: motivação e estado da arte....24
Referências....29
3 QUANTIFICAÇÃO E MAPEAMENTO DE ATRIBUTOS DO SOLO UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA DE REFLECTÂNCIA EM LABORATÓRIO E SENSOR AÉREO HIPERESPECTRAL PROSPECTIR-VS....35
Resumo....35
Abstract....36
3.1 Introdução....37
3.2 Material e Métodos....38
3.2.1 Descrição da área de estudo....38
3.2.2 Obtenção de dados espectrais nível aéreo....39
3.2.3 Coleta e análises de solo....41
3.2.4 Obtenção de dados espectrais em laboratório....43
3.2.5 Identificação de pixels com predomínio de solo exposto e extração de dados radiométricos das imagens hiperespectrais nos pontos de coleta....44
3.2.6 Análise exploratória dos atributos físicos, químicos e espectrais do solo....48
3.2.7 Métodos de processamento dos dados coletados....51
3.2.7.1 Quantificação de atributos físicos e químicos do solo através de seu comportamento espectral....53
3.2.7.1.1 Obtenção de modelos de quantificação de atributos do solo....53
3.2.7.1.2 Pré-tratamento das leituras espectrais....57
3.2.7.2 Mapeamento de atributos físicos e químicos do solo....61
3.3 Resultados e Discussão....63
3.3.1 Análises químicas, físicas e do comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR....63

3.3.2 Quantificação de atributos físicos e químicos através do comportamento espectral do solo 74
3.3.3 Mapeamento de atributos do solo determinados pelo método convencional e preditos através do comportamento espectral do solo 84
3.4 Conclusões 93
Referências 94
4 DETERMINAÇÃO DA NECESSIDADE DE CALAGEM DO SOLO POR SENSORIAMENTO PRÓXIMO NO VIS-NIR-SWIR, EM MOVIMENTO: ISTO É VIÁVEL? 101
Resumo 101
Abstract 102
4.1 Introdução 103
4.2 Material e Métodos 104
4.2.1 Descrição das áreas de estudo 104
4.2.2 Alocação do experimento no campo 105
4.2.3 Coleta de dados espectrais no campo e amostragem de solo 108
4.2.4 Leituras espectrais no laboratório 110
4.2.5 Obtenção de modelos de quantificação de atributos do solo 113
4.2.6 Obtenção de mapas de necessidade de calagem a partir de valores das análises convencionais e das predições de CTC e V% 115
4.2.7 Etapas realizadas durante o trabalho 116
4.3 Resultados e Discussão 118
4.3.1 Descrição da variabilidade dos atributos químicos, físicos e do comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR 118
4.3.2 Quantificação de atributos através do comportamento espectral do solo 124
4.3.3 Mapeamento da necessidade de calagem calculada de forma convencional e a partir das predições feitas através do espectro no Vis-NIR-SWIR 132
4.4 Conclusões 138
Referências 139
ANEXOS 143

RESUMO

Sensoriamento remoto hiperespectral nos níveis laboratório, campo e aéreo como ferramentas auxiliares no manejo do solo

A produção agrícola tem crescido nos últimos anos impulsionada pelo aumento populacional e por avanços tecnológicos. Esse crescimento pode ocasionar impactos ambientais importantes, inclusive a degradação do solo, se não forem realizados o correto planejamento agrícola e manejo do solo, a fim de assegurar uma produção competitiva e sustentável. Para isto, a descrição da variabilidade espacial do solo é necessária, sendo realizada convencionalmente através de coleta e análise de amostras. Entretanto, estes métodos convencionais de levantamento da variabilidade do solo possuem custos elevados e demandam bastante tempo e mão-de-obra para serem realizados. Com o aumento da quantidade de informação necessária os custos para descrição da variabilidade espacial do solo podem tornar-se um obstáculo, se somente metodologias convencionais são aplicadas. Portanto, métodos alternativos tornam-se necessários para auxiliar no levantamento de atributos do solo em escala adequada ao manejo agrícola. Para isto, são propostas metodologias de espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR, as quais empregam o comportamento espectral do solo de 400 nm a 2500 nm para realizar a quantificação de seus atributos. Isto é possível, pois a informação espectral possui relação direta com os constituintes do solo. Assim, no presente estudo é avaliado o uso de imagens aéreas hiperespectrais na quantificação de atributos do solo, através do método PLSR, e mapeamento destes atributos, empregando krigagem. O desempenho das predições feitas com dados do sensor aéreo é comparado ao obtido com espectros coletados em laboratório. Foi também avaliado, através de experimentos de campo, com diferentes doses de calcário em duas áreas diferentes (textura arenosa e média), o uso de informações espectrais coletadas no campo, em movimento, e em laboratório, com amostras úmidas, para a quantificação de atributos e da necessidade de calagem, pelo método PLSR. Foram obtidos resultados satisfatórios através dos dados do sensor aéreo, principalmente, para a quantificação dos teores de argila, areia e CTC (R^2 de 0,73, 0,73 e 0,80, respectivamente). Com relação aos dados obtidos por sensoriamento próximo no campo, os melhores resultados foram obtidos para a área de textura média, com R^2 de 0,33, 0,38 e 0,61 para a predição da CTC, V% e da necessidade de calagem, respectivamente.

Palavras-chave: Espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR; Regressão por mínimos quadrados parciais; Comportamento espectral; Variabilidade espacial

ABSTRACT

Hyperspectral remote sensing in laboratory, field and airborne levels as auxiliary tools in soil management

Agricultural production has increased in the last years stimulated by the population growth and technological advances. This can cause significant environmental impacts including soil degradation if suitable agricultural planning and soil management are not applied in order to ensure a competitive and sustainable production. For this purpose, the soil variability assessment is needed and it is conventionally performed through soil sampling and analysis. However, conventional methods have high costs and require considerable time and labor. When the amount of information needed increases, costs to describe soil spatial variability may become an obstacle if only conventional methodologies are applied. Therefore, alternative methods can help to depict soil properties variability on a scale suitable to soil management. So, Vis-NIR-SWIR reflectance spectroscopy (from 400 nm to 2500 nm) is proposed as a mean to predict soil properties. This is possible because spectral information has a direct relationship with soil constituents and characteristics. Therefore, in this study hyperspectral airborne imagery is evaluated as an information source to be used in soil properties quantification, via the PLSR method, and mapping, using kriging. The performance of the models derived from airborne imagery data was compared with the results obtained by models calculated from laboratory sensor data. The use of spectral information collected in the field (on-the-go) was evaluated too using a field experiment in witch different rates of lime were applied. The experiment was allocated in two fields with different soil textures (one with about 100 g kg^{-1} of clay and other with about 320 g kg^{-1} of clay). The soil properties prediction based on the on-the-go spectral measurements were compared to predictions made using spectra collect in the laboratory and the PLSR method was used to calculate models. Satisfactory results were obtained with airborne sensor data, especially for clay, sand and CTC quantification (R^2 of 0.73, 0.73 and 0.80, respectively). Regarding the on-the-go proximal sensing, better predictions were obtained for the clayey area, with R^2 of 0.33, 0.38 and 0.61 for predictions of CEC, base saturation of the soil CEC (V%) and lime requirement, respectively.

Key words: Vis-NIR-SWIR reflectance spectroscopy; Partial least squares regression; Spectral behavior; Spatial variability

1 INTRODUÇÃO

O aumento populacional e por consequência da demanda por alimentos, acompanhada pelos avanços científicos e tecnológicos, têm impulsionado o aumento da produção agrícola, tanto pela maior quantidade produzida nas áreas já cultivadas como pela abertura e exploração de novas áreas. Sendo o solo um recurso natural não renovável, em ambos os casos de expansão produtiva o conhecimento das características edáficas é essencial para determinar e orientar as atividades agrícolas a serem desenvolvidas.

Tomando-se como exemplo a cultura da cana-de-açúcar no país, do ano de 2008 a 2011 a área plantada aumentou cerca de 18% (UNICA, 2012). Pode-se questionar se esse crescimento foi planejado previamente com base em levantamentos pedológicos e do potencial de uso da terra, acompanhado de adubação e correção adequadas à cultura, a fim de evitar-se impactos ambientais importantes agora e no futuro.

No planejamento agrícola e na determinação do manejo a ser adotado, em determinada área, a amostragem e a análise de solo são etapas essenciais, pois permitem a caracterização do solo e de seus atributos. Um dos aspectos mais críticos do levantamento de atributos do solo é a obtenção de informação representativa, ou seja, em densidade, profundidade e momentos adequados para a descrição da variabilidade espacial da área a ser mapeada (ADAMCHUK et al., 2004). É importante ressaltar que muitas metodologias de coleta foram propostas, sendo o número de pontos amostrais e sua localização variável de acordo com a finalidade do levantamento, entretanto, não há um consenso sobre qual é a prática mais adequada em cada caso (WOLLENHAUPT; MULLA e CRAWFORD, 1997).

Ainda, os custos do processo de descrição da variabilidade do solo, independente do objetivo do levantamento, estão ligados principalmente à quantidade de observações ou amostras feitas no campo quando são aplicadas somente as metodologias convencionais de amostragem e análise. Desta forma, novas metodologias que possibilitem a obtenção de informação sobre a variabilidade do solo em maior densidade e a um menor custo são necessárias, a fim viabilizar um monitoramento mais acurado e menos oneroso do solo.

Diversos autores vêm estudando o uso da espectroscopia de reflectância difusa ou bidirecional como forma de obtenção de informações sobre o solo,

considerando o baixo custo, pouca mão-de-obra, rapidez e baixo impacto ambiental do método (MASSERSCHMIDT et al., 1999; MCCARTY et al., 2002; PIRIE et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006; SUMMERS et al., 2011). O comportamento espectral do solo apresenta relação direta com seus constituintes orgânicos e minerais e pode ser utilizado como ferramenta na caracterização e quantificação de atributos do solo (BAUMGARDNER et al., 1985; STENBERG et al., 2010).

Além da obtenção das informações espectrais em laboratório e no campo é possível utilizar sensores hiperespectrais, ou seja, com centenas de bandas, aéreos ou a bordo de satélites para a obtenção de dados radiométricos em grandes áreas, com resolução espectral até certo ponto comparável à de sensores empregados em laboratório. Isto pode diminuir o custo de obtenção da informação, mas geralmente diminui a qualidade da informação obtida. Apesar disto, diversos autores reportaram resultados promissores na quantificação e caracterização do solo através de sensoriamento remoto hiperespectral (BEN-DOR et al. 2002; SELIGE; BÖHNER e SCHMIDHALTER, 2006; GOMEZ; VISCARRA ROSSEL e MCBRATNEY., 2008; STEVENS et al.,2010; HIVELY et al., 2011; HBIRKOU et al. 2012).

Assim, o objetivo do presente trabalho é de avaliar a aplicação do comportamento espectral do solo, no Vis-NIR-SWIR, obtido em diferentes níveis de aquisição, ou seja, em laboratório, no campo e por sensor aéreo hiperespectral, na quantificação de atributos para levantamento da fertilidade do solo, tendo em vista a relação entre os dados radiométricos e a constituição e características do solo. Desta forma, pretende-se observar em quais casos as diferentes fontes de informação radiométrica podem ser empregadas com relativa acurácia.

Referências

ADAMCHUK, V.I.; HUMMEL, J.W.; MORGAN, M.T.; UPADHYAYA, S.K. On-the-go soil sensors for precision agriculture. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 44, p. 71–91, 2004.

BAUMGARDNER, M. F.; SILVA, L. F; BIEHL, L. L.; STONER, R. Reflectance properties of soils**. Advances in Agronomy**, San Diego, v.38, p. 1-44, 1985.

BEN-DOR, E.; PATKIN, K.; BANIN, A.; KARNIELI, A. Mapping of several soil properties using DAIS-7915 hyperspectral scanner data – a case study over clayey soils in Israel, **International Journal of Remote Sensing**, Basingstoke, v.23, p.1043-1062, 2002.

GOMEZ, C.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCBRATNEY, A.B. Soil carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field Vis-NIR spectroscopy: An Australian case study. **Geoderma**, Amsterdam, v. 146, p. 403-411, 2008.

HBIRKOU, C.; PÄTZOLD, S.; MAHLEIN, A.K.; WELP, G. Airborne hyperspectral imaging of spatial soil organic carbon heterogeneity at the field scale. **Geoderma**, Amsterdam, v. 175-176, p. 21-28, 2012.

HIVELY, W. D; MCCARTY, G.W.; REEVES III, J.B.; LANG, M.W.; OESTERLING, R.A.; DELWICHE, S.R. Use of airborne hyperspectral imagery to map soil properties in tilled agricultural fields. **Applied and Environmental Soil Science**, New York, v. 2011, p. 1-13, 2011.

MASSERSCHMIDT, I.; CUELBAS, C.J.; POPPI, R.J.; DE ANDRADE, J.C.; DE ABREU, C.A.; DAVANZO, C.U. Determination of organic matter in soils by FTIR/ diffuse reflectance and multivariate calibration. **Journal of Chemometrics**, Chichester, v. 13, p. 265-273, 1999.

MCCARTY, G.W.; REEVES III, J.B.; REEVES, V.B.; FOLLETT, R.F.; KIMBLE, J.M. Mid-infrared and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for soil carbon measurement. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 66, 2002.

PIRIE, A.; SINGH, B.; ISLAM, K. Ultra-violet, near-infrared and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopic techniques to predict several soil properties. **Australian Journal of Soil Research**, Melbourne, v. 43, p. 713-721, 2005.

SELIGE, T.; BÖHNER, J.; SCHMIDHALTER, U. High resolution topsoil mapping using hyperspectral image and field data in multivariate regression modeling procedures. **Geoderma**, Amsterdam, v. 136, p. 235-244, 2006

STENBERG, B.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MOUAZEN, A.M.; WETTERLIND, J. Visible and near-infrared spectroscopy in soil science. In: SPARKS, D. L. (Ed.) **Advances in Agronomy**, v. 107. Burlington: Academic Press. p. 163-215. 2010.

STEVENS, A.; UDELHOVEN, T.; DENIS, A.; TYCHON, B.; LIOY, R.; HOFFMANN, L.; WESEMAEL, B.V. Measuring soil organic carbon in croplands at regional scale using airborne spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam, v. 158, p. 32-45, 2010.

SUMMERS, D.; LEWISA, M.; OSTENDORF, B.; CHITTLEBOROUGH, D. Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. **Ecological Indicators**, Amsterdam, 11:1, p. 123-131, 2011.

UNIÃO DA INDÚSTRIA DE CANA-DE-AÇÚCAR. Produção de cana-de-açúcar do Brasil. Disponível em: <http://www.unica.com.br/dadosCotacao/estatistica/>. Acesso em: 15 ago 2012.

VISCARRA-ROSSEL, R.A.; WALWORT, D.J.J.; MCBRATNEY, A.B.; JANIK, L.J.; SKJESMSTAD, J. O. Visible near infrared or combined diffuse reflectance

spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. **Geoderma**, Amsterdam, v. 131, p.59-75, 2006.

WOLLENHAUPT, N.C.; MULLA, D.J.; CRAWFORD, C.A.G. Soil sampling and interpolation techniques for mapping spatial variability of soil properties. In: PIERCE, F. J.; SADLER, E. J. (Ed.). **The state of site specific management for agriculture**. Madison:ASS-CSSA-SCSA. p. 19-53. 1997.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Fundamentos da espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR

O termo radiação ótica se refere à radiação nos comprimentos de onda das regiões do visível ao infravermelho de ondas curtas (400 nm a 2500 nm, Vis-NIR-SWIR) no espectro eletromagnético. Quando a energia eletromagnética, nestes comprimentos de onda, interage com uma superfície uma porção desta radiação é absorvida pelo material, ou transmitida através da massa deste material até outra superfície em outro meio, sendo o restante da radiação refletido (BAUMGARDNER et al., 1985). Em termos gerais, a razão entre a radiação que é refletida e a radiação total que atinge uma superfície é denominada reflectância.

O procedimento adotado com mais frequência para a mensuração da reflectância em laboratório emprega a leitura da radiação refletida não só pela amostra, mas também por uma referência, sendo esta composta de material mais próximo possível de um reflector ideal perfeitamente difuso, ou seja, material que reflete a energia incidente de forma homogênea em todas as direções. Considerando que as medidas de reflectância para a amostra e para a referência sejam obtidas em condições idênticas (posição do alvo e iluminação), a razão entre estas leituras permite o cálculo do chamado fator de reflectância para a amostra (NICODEMUS et al., 1977).

A reflectância do solo, em qualquer comprimento de onda, pode ser considerada como a soma de dois componentes: a reflectância regular (especular, espelhada ou Fresnel), sendo esta a reflexão de uma superfície plana que age como um espelho, de maneira que quando as partículas encontram-se bastante espaçadas entre elas o componente disperso domina, minimizando a penetração da luz no volume da amostra; e a reflectância difusa, na qual a reflecção ocorre em uma superfície rugosa, que reflete de maneira uniforme em todas as direções (BAUMGARDNER et al., 1985; SELLITTO et al., 2009).

As medidas de reflectância podem ser definidas de diferentes formas, dependendo da maneira em que os dados são adquiridos e das condições de iluminação, podendo ser direcional, ou seja, restrita a uma angulação pequena, ou hemisférica (não direcional), quando a radiação considerada é dispersa em todas as direções (NICODEMUS et al., 1977).

As medidas de reflectância referentes a uma amostra de solo apresentam informações sobre a natureza e composição do mesmo (BAUMGARDNER et al., 1985). Isto ocorre, pois dependendo dos constituintes presentes no solo a radiação direcionada a amostra causará vibrações, fundamentais, em ligações moleculares dos materiais presentes (orgânicos e inorgânicos). Estas vibrações fundamentais ocorrem devido ao deslocamento periódico dos átomos, em relação a outros átomos, e podem ser de estiramento (*stretching*) ou deformações (*bending*), absorvendo a energia eletromagnética incidente em diferentes graus, desta forma, diferentes constituintes do solo absorvem a energia de forma variável (STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010; STENBERG et al., 2010) .

Um dado quantum de energia corresponde à diferença entre dois níveis energéticos, sendo o comprimento de onda inversamente proporcional ao quantum de energia contido na radiação eletromagnética incidente (STENBERG et al., 2010). Considerando este fato, o espectro de reflectância, ou seja, a leitura da reflectância em diversos comprimentos de onda pode ser utilizada para fins analíticos, haja vista que esta representa o comportamento de uma determinada amostra submetida a diferentes intensidades energéticas, com relação à reflecção da energia incidente, e de acordo com os constituintes da amostra poderá ocorrer absorção de energia nos diferentes comprimentos de onda medidos (MILLER, 2001; STENBERG et al., 2010).

Considerando apenas as interações da radiação eletromagnética com o solo nos comprimentos de onda do NIR-SWIR (700 nm a 2500 nm), através das leituras de reflectância são geralmente detectados os *overtones* (harmônicas) e *combinations* (combinações) das vibrações fundamentais. Os *overtones* ocorrem quando uma fundamental recebe dois ou mais quanta, podendo assim a feição aparecer duas ou mais vezes a da frequência fundamental; já as *combinations* podem ocorrer quando duas ou mais fundamentais ou *overtones* diferentes combinam-se (HUNT, 1977; MADEIRA NETTO e BAPTISTA, 2000).

Desta forma, a região do NIR-SWIR é caracterizada, de forma geral, por modos vibracionais, sobrepostos, fracos e que se estendem por vários comprimentos de ondas adjacentes, dando origem a poucas feições de absorção. No visível (400 nm a 700 nm), as feições de absorção são causadas principalmente por transições eletrônicas, as quais demandam mais energia do que os processos vibracionais citados até aqui (HILL et al. 2010; STENBERG et al., 2010).

2.2 Comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR

Embora as leituras espectrais na região do Vis-NIR-SWIR apresentem feições de absorção sobrepostas e extensas, existe nestes comprimentos de onda uma quantidade considerável de informação útil em relação aos componentes orgânicos e inorgânicos do solo (BAUMGARDNER et al., 1985; STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010).

Componentes orgânicos apresentam *overtones* e *combinations* na região do Vis-NIR-SWIR, sendo estes resultados das vibrações fundamentais (*stretching* e *bending*) ocorridas nos grupos N-H, C-H e O-H (MURRAY et al., 1993). Diversas bandas de absorção foram caracterizadas como importantes na quantificação de carbono e nitrogênio orgânico do solo, como as próximas de 1100 nm, 1600 nm, 1700nm a 1800nm, e 2000 nm a 2400 nm (STEMBERG et al., 2010).

Entretanto, a identificação específica dos diferentes compostos pertencentes à matéria orgânica que afetam o comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR não é simples, pois diversas moléculas orgânicas e inorgânicas absorvem nas mesmas regiões, além das feições características destes compostos serem fracas, principalmente em solos contendo pouca matéria orgânica em relação a componentes minerais variáveis (UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003). Viscarra Rossel e Behrens (2010) apresentam um resumo das principais vibrações fundamentais, incluindo as ocasionadas por compostos orgânicos, na região do infravermelho médio (2500 a 25000 nm), e as ocorrências dos *overtones* e *combination*s derivados destas no Vis-NIR-SWIR.

Cozzolino e Morón (2006), estudando a quantificação de carbono orgânico, através do comportamento espectral no Vis-NIR-SWIR, para diferentes frações granulométricas do solo, observaram contribuições variáveis de regiões do espectro na quantificação, comparando-se os resultados para as diferentes frações obtidas. Desta forma, os componentes da matéria orgânica em cada fração afetaram de forma diferente o comportamento espectral do solo.

Através do fracionamento químico da matéria orgânica presente em diferentes tipos de solos, Henderson et al. (1992) encontraram uma forte associação do conteúdo total de matéria orgânica com o comportamento espectral do solo, mas, embora as frações ácido húmico e ácido fúlvido apresentem feições de absorção

bastante características, quando analisados separadamente, os autores não conseguiram determinar a composição da matéria orgânica presente no solo apenas através das leituras espectrais. Segundo os autores, o ácido húmico, o qual apresenta baixa reflectância no Vis-NIR-SWIR, parece representar a maior parte da influência da matéria orgânica no comportamento espectral do solo, sendo que os ácidos fúlvicos, presentes em pequena quantidade em relação a outros componentes, afetam pouco a resposta espectral do solo.

A matéria orgânica pode influenciar, na região do visível, o albedo das curvas espectrais obtidas, como um todo, sendo este efeito inespecífico e dependente de outros constituintes do solo, como, por exemplo, dos teores de óxidos de ferro (MENESES e MADEIRA NETO, 2001). Apesar disto, muitos estudos apontam que melhores predições do conteúdo de matéria orgânica são obtidas utilizando-se a região do Vis-NIR-SWIR no lugar de somente a do NIR-SWIR (UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; COZZOLINO e MORÓN, 2006).

O nitrogênio orgânico presente no solo tem sido predito com relativo sucesso, provavelmente pelos *overtones* e *combinations* presentes na região do Vis-NIR-SWIR (STENBERG et al., 2010). Fystro (2002) obteve bons resultados de predição para valores de C e N orgânicos de forma independente. Entretanto, predições de N orgânico raramente apresentam resultados melhores que as de carbono orgânico ou matéria orgânica, sendo a predição do conteúdo de N, que geralmente é inferior a 1%, diretamente relacionada aos conteúdos de carbono ou matéria orgânica do solo (VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010).

Os componentes minerais presentes no solo também apresentam feições de absorção e comportamentos espectrais característicos na região do Vis-NIR-SWIR. Os minerais mais abundantes em solos tropicais são os óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro e alumínio, principalmente goethita, hematita e gibsita, e minerais opacos como magnetita e ilmenita, como filossilicatos são encontrados principalmente a caulinita, e em menor escala vermiculita, clorita, montmorilonita e ilita (MENESES e MADEIRA NETO, 2001; KÄMPF, CURI e MARQUES, 2009).

O ferro em seu estado trivalente produz três feições diagnósticas principais nos comprimentos de onda do Vis-NIR-SWIR, seja na forma de óxidos, hidróxido e oxi-hidróxido de ferro ou associados a outros minerais, como esmectitas (RICHTER et al. 2009). Estas feições localizam-se para goethita (α-FeOOH) em 480 nm, 650

nm e 920 nm e para hematita (α-Fe_2O_3) em 550 nm, 630 nm e 860 nm (HUNT, 1977; MADEIRA NETTO e BAPTISTA, 2000). Ocorre ainda, para goethita, uma feição de absorção em 420 nm, sendo esta, juntamente com a de 480 nm, atribuídas as margens de uma feição de absorção intensa na região do UV (250 nm a 400nm), assim como a de 550 nm para hematita (SHERMAN e WAITE, 1985; STENBERG et al., 2010).

As feições de absorção características tanto da goethita como da hematita, citadas até aqui, são ocasionadas por transições eletrônicas, sendo as feições relativas a 480 nm, para goethita, e 550 nm, para hematita, resultados de transição eletrônica de pares de elétrons, sendo estas feições mais intensas e relacionadas às diferenças nos matizes (amarela para goetita e vermelha para hematita) apresentados por estes dois minerais (SHERMAN e WAITE, 1985; SCHEINOST et al., 1998).

Além disto, em solos desenvolvidos de material de origem rico em ferro (rochas máficas) podem-se encontrar minerais primários como a magnetita e ilmetita, ditos opacos por não apresentarem feições de absorção definidas, mas sim um comportamento espectral caracterizado por albedos bastante baixos na região do Vis-NIR-SWIR (MADEIRA NETTO e BAPTISTA, 2000)

Para a gibsita, $Al(OH)_3$, a feição diagnóstica característica ocorre em 2268 nm, ocasionada pelas *combinations* das vibrações fundamentais (*streching* e *bending*) referentes aos grupos O-H e Al-OH (VISCARRA ROSSEL et al 2006a).

Com relação à caulinita esta apresenta feições de absorção características em 1400 nm, ocasionada por *overtones* das vibrações fundamentais (*streching*) do grupo O-H na região do infravermelho médio, e em 2200 nm, onde são observadas feições duplas causadas pelas *combinations* das vibrações fundamentais do grupo Al-OH (*bending*) e do grupo O-H (*streching*) (STENBERG et al., 2010).

Nas esmectitas (como a montmorilonita) as feições de absorção características são encontradas, 1400 nm, 1900 nm e 2200 nm, sendo a forte absorção em 1900 nm característica destes minerais 2:1, tendo em vista que em sua estrutura existem moléculas de água, nas entre camadas. A feição em 1900 nm resulta das *combinations* referentes às vibrações nos grupos H-O-H (*bending*) e nos grupos O-H (*streching*) (STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010). A ilita apresenta comportamento espectral semelhante ao da caulinita e esmectitas, entretanto as feições de absorção presentes são menos definidas.

Quanto à vermicultita esta apresenta picos de absorção em 1400 nm, causado por overtones relativos às vibrações fundamentais do grupo O-H (*streching*), e em 1900 nm, sendo esta feição característica de minerais 2:1 contendo água estrutural nas entre camadas (Figura 1).

A clorita, também filossilicato 2:1, apresenta feições de absorção ocasionadas por transições eletrônicas, haja vista que possui ferro em sua estrutura, sendo estas feições observadas em aproximadamente 400 nm, 700 nm, 900 nm e 1000 nm. Além disto, a clorita apresenta, assim como a vermiculita, uma feição em 2300 nm derivada de *combinations* de vibrações fundamentais dos grupos Mg-OH (*bending*) e O-H (*streching*), isto porque os dois minerais contém magnésio em sua composição (VISCARRA ROSSEL et al 2006a).

Na Figura 1 pode-se observar o comportamento espectral de alguns dos principais minerais presentes no solo, incluindo suas feições de absorção características no Vis-NIR-SWIR.

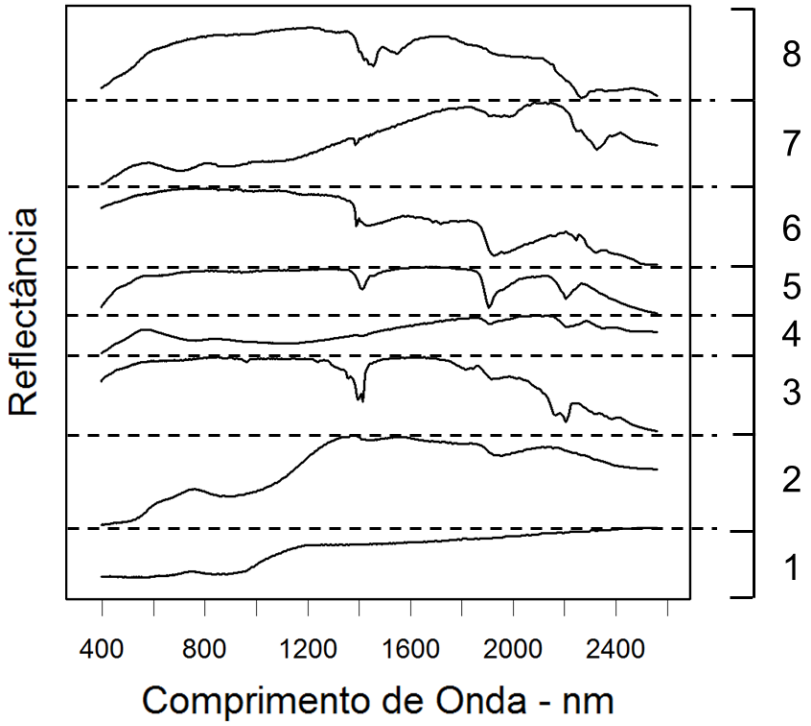


Figura 1 - Comportamento espectral de alguns dos principais minerais encontrados nos solos: hematita (1), goethita (2), caulinita (3), ilita (4), montmorilonita (5), vermiculita (6), clorita (7), gibsita (8) (fonte: CLARK et al., 2012).

Outro aspecto importante a ser considerado na caracterização espectral do solo é a presença de água na amostra analisada. A humidade presente pode influenciar fortemente o comportamento espectral do solo, isto principalmente devido

à *overtones* e *combinations* de três vibrações fundamentais das moléculas de água, estiramentos simétricos e assimétricos do grupo O-H (*streching*) e dobramentos também do grupo O-H (*bending*) (HUNT, 1977). Podem ser observadas feições de absorção relativas à água presente no solo em 1400 nm e 1900 nm, sendo estas as feições mais pronunciadas, e também em 970 nm, 1200 nm, 1770 nm, estas por sua vez mais fracas (BAUMGARDNER et al., 1985). Além das feições de absorção características, a água adsorvida na forma de camadas finas nas superfícies expostas do solo e preenchendo seus poros causa uma diminuição do albedo, como um todo, isto porque o índice de refração do meio aumenta do ar para a água, o que causa uma maior dispersão no sentido da incidência do feixe de luz e ao mesmo tempo aumenta a trajetória antes da reemersão do mesmo, o que aumenta as chances de absorção da energia eletromagnética incidente (BAUMGARDNER et al., 1985; STENBERG et al., 2010).

Além dos constituintes orgânicos, inorgânicos e do teor de água, a distribuição do tamanho das partículas (granulometria) influencia bastante o comportamento espectral apresentado pelo solo. Partículas mais grosseiras aumentam a dispersão, assim, o caminho percorrido pela energia eletromagnética aumenta o que causa acréscimo na absorção aparente e, da mesma forma, redução na reflecção (STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010). Embora este comportamento seja observado em laboratório, quando analisados constituintes do solo em separado como realizado por Bowers e Hanks (1965) com caulinita, o mesmo não se concretiza em campo ou em amostras que conservem até certo ponto a estrutura do solo, uma vez que solos argilosos, de textura mais fina, apresentam nesses casos albedo menor que solos arenosos, de textura mais grosseira (ORLOV, 1966). Isto se deve ao fato dos solos argilosos apresentarem normalmente agregados de maior tamanho, em relação a solos mais arenosos, e desta forma o albedo para estes solos diminui (MENESES e MADEIRA NETO, 2001).

2.3 Aplicação da espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR na determinação qualitativa e quantitativa de atributos do solo: motivação e estado da arte

A caracterização do solo e o levantamento da sua fertilidade são imprescindíveis no planejamento agrícola, a fim de possibilitar o correto manejo do solo e permitir uma produção competitiva e sustentável. A determinação dos atributos do solo é atualmente realizada através da coleta e análise de amostras empregando métodos em laboratório, como os propostos por Raij. et al. (2001) adotados para fins de levantamento da fertilidade do solo no estado de São Paulo, e os propostos por Embrapa (1997) empregados na classificação de solos no Brasil.

As metodologias empregadas na amostragem e análise do solo, para fins de fertilidade, estiveram até recentemente focados na definição de valores médios dos atributos para as áreas cultivadas (FRANZEN e PECK, 1993). Isto porque, no modelo de manejo adotado convencionalmente, a média é assumida como representativa da maior parte do campo, gerando assim o padrão de aplicação de fertilizantes a taxa fixa. Esta estratégia era aceitável quando, mesmo em áreas de produção agrícola intensiva, muitos dos solos cultivados apresentavam baixos teores de nutrientes disponíveis para a planta, e os fertilizantes tinham preços mais baixos (WOLLENHAUPT; MULLA e CRAWFORD, 1997). Os aumentos crescentes dos custos de produção e dos níveis de nutrição observados em amostras de solo fizeram crescer a preocupação sobre o correto manejo da fertilidade, com relação também à conservação do ambiente.

A necessidade da adoção de tratamentos diferenciados, de acordo com a variabilidade espacial do solo, foi proposta há bastante tempo (LISLEY e BAUER, 1929). Entretanto a adoção de tal ideia dependia da localização acurada dos valores de atributos do solo no campo, a fim de possibilitar a correta avaliação da variabilidade do solo.

Com a disponibilidade dos sistemas de navegação global (*Global Navigation Satellite Systems* - GNSS), dentre os quais o GPS (*Global Position System*), nos meados da década de 80, a adubação e a correção do solo de forma localizada começaram a se viabilizar, para aplicação em grande escala, através do uso de dados georreferenciados na agricu ltura.

Entretanto, a identificação da variabilidade do solo baseada somente na coleta e análise de amostras em laboratório se torna onerosa à medida que aumenta a quantidade de informação exigida, como ocorre atualmente quando adotadas técnicas de Agricultura de Precisão (MOUAZEN et al., 2007).

Com relação à classificação e ao mapeamento de solos, no Brasil e no mundo, há necessidade de diminuir o custo e o tempo gastos na produção de mapas com resolução adequada ao planejamento agrícola e ao manejo de solos (MCBRATNEY; MENDONÇA SANTOS e MINASNY, 2003), haja vista que com os métodos empregados tradicionalmente, a área já mapeada em escala adequada (1:20.000, nível detalhado) no Brasil, por exemplo, é muito pequena, considerando a área agrícola do país (MENDONÇA SANTOS e DOS SANTOS, 2007). Além disto, parte das áreas mapeadas nessa escala é fruto de esforços governamentais, mas boa parcela é resultado de investimentos privados, e neste caso os resultados geralmente não são disponibilizados para possíveis usuários em geral.

Portanto, tanto o levantamento da fertilidade quanto o mapeamento do solo, realizados da forma convencional, necessitam de alternativas que possam auxiliar na descrição da variabilidade do solo, aumentando a densidade das informações obtidas. Desta forma, técnicas de espectroscopia de reflectância difusa ou bidirecional podem ser alternativas viáveis para obtenção de informações sobre o solo, haja vista que o comportamento espectral do solo, em diversas regiões do espectro eletromagnético, como UV-Vis-NIR-SWIR-MID (de 200 nm a 25000 nm), é resultado direto de seus constituintes e características (VISCARRA ROSSEL et al., 2006b).

A adoção de técnicas de quantificação e caracterização do solo através de espectroscopia de refectância difusa apresenta diversas vantagens em relação à adoção somente das técnicas convencionais, como: diminuição dos custos; torna necessário menos mão-de-obra; minimiza a geração de resíduos gerados pelas análises convencionais em laboratório; e diminui o tempo gasto para o levantamento da variabilidade espacial solo (VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; MOUAZEN et al., 2007; STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010).

A aquisição de dados radiométricos nos comprimentos de onda do Vis-NIR-SWIR (400 nm a 2500 nm) pode ser realizada em diversos níveis. Em terra esta aquisição pode ser feita no campo ou no laboratório, sendo a segunda opção mais indicada, pois permite o uso de amostras preparadas, geralmente secas e

peneiradas ou moídas, diminuindo a interferência da umidade, da rugosidade e de possíveis crostas formadas no comportamento espectral do solo (HILL et al. 2010).

Com o avanço da tecnologia dos sensores disponíveis é possível também obter o comportamento espectral do solo, no Vis-NIR-SWIR, através de imagens hiperespectrais coletadas por avião ou satélites, sendo possível obter dados espectrais com nível de detalhe, até certo ponto, comparável ao das leituras feitas em laboratório, e em escala compatível a descrição dos campos cultivados (HIVELY et al. 2011).

As maiores limitações dos dados obtidos por sensoriamento remoto hiperespectral, em relação às informações radiométricas coletadas em laboratório, são: a absorção atmosférica interferindo nas leituras; a variação espacial em propriedades da superfície do solo, como umidade e rugosidade; distorções geométricas, ou seja, de posicionamento; e menores valores da relação sinal:ruído, o que pode gerar incompatibilidade entre as medidas espectroscópicas tomadas no campo ou laboratório com as do sensor remoto (HILL et al. 2010; MULDER et al., 2011).

Além disto, embora a resolução espacial das imagens obtidas por sensores remotos possa ser alta, com pixels de dimensões pequenas, 1 m por 1 m ou até menores, ocorre ainda mistura de materiais nos pixels imageados, já os dados coletados no campo ou em laboratório são obtidos na escala de centímetros, o que gera informação mais representativa das amostras analisadas (BEN-DOR et al., 2008).

Os atributos do solo para os quais vem sendo reportados bons resultados em relação à suas descrições qualitativas ou quantitativas através de informações espectrais são, principalmente, os teores de carbono orgânico, o teor de argila, e o conteúdo de nitrogênio (NANNI e DEMATTÊ, 2006; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b). Isto pode ser explicado, pois tanto a fração argila, e desta forma os minerais presentes nesta fração, quanto o conteúdo de matéria orgânica são constituintes fundamentais do solo e possuem comportamento espectral característico na região do Vis-NIR-SWIR.

Estudos realizados para a quantificação de carbono orgânico ou matéria orgânica do solo têm apresentado de forma geral, coeficientes de determinação (R^2) da ordem de 0,9 a 0,5, indicando que, em parte dos casos, é viável predizer os valores destes atributos através das informações espectrais obtidas em laboratório

ou campo no Vis-NIR-SWIR (MASSERSCHMIDT et al. 1999; CHANG et al., 2001; MCCARTY et al., 2002; PIRIE et al., 2005; COZZOLINO e MORÓN, 2006; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; MOUAZEN et al., 2007; ZIMMERMANN; LEIFELD e FUHRER, 2007; SANKEY et al., 2008; VASQUES; GRUNWALD e SICKMAN, 2008; LADONI et al., 2010; SUMMERS et al., 2011). A quantificação do carbono orgânico ou da matéria orgânica do solo tem sido estuda, por diversos autores, também para dados radiométricos obtidos por sensores remotos (BEN-DOR et al. 2002; SELIGE; BÖHNER e SCHMIDHALTER, 2006; DETAR et al., 2007; CHEN et al., 2008; GOMEZ; VISCARRA ROSSEL e MCBRATNEY., 2008; STEVENS et al.,2010; HIVELY et al., 2011; HBIRKOU et al. 2012). Nestes estudos o desempenho dos modelos de predição para carbono orgânico ou matéria orgânica é comparável ao dos obtidos para dados em laboratório ou campo, mostrando assim que existe potencial para quantificação destes atributos através das informações coletadas por sensores remotos.

Quanto aos teores de argila, os trabalhos realizados nos últimos anos, com dados obtidos em laboratório ou no campo, na região do Vis-NIR-SWIR, têm apresentado R^2 variando de 0,9 a 0,4, e RMSE da ordem de cerca de 30 a 70 g kg^{-1}, mostrando assim bom desempenho nas predições realizadas (CHANG et al., 2001; SHEPERD e WALSH, 2002; PIRIE et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; SANKEY et al., 2008; VISCARRA ROSSEL et al., 2009; BRICKLEMYER e BROWN, 2010; SUMMERS et al., 2011). Como observado para matéria orgânica, os resultados de quantificação dos teores de argila utilizando espectros obtidos por sensores remotos têm se apresentado dentro dos limites de desempenho observados em laboratório (ODEH e MCBRATNEY, 2000; SELIGE; BÖHNER e SCHMIDHALTER, 2006; DETAR et al., 2007; GOMEZ; LAGACHERIE e COULOUMA, 2008; HIVELY et al., 2011).

A composição mineralógica dos solos também tem sido estudada através de seu comportamento espectral em laboratório ou no campo, como nos trabalhos de Viscarra Rossel et al. (2006a) e Viscarra Rossel et al. (2009), nos quais a composição mineralógica de amostras de solo foi predita com base em leituras espectrais no Vis-NIR-SWIR obtidas em laboratório e campo, respectivamente. Considerando dados obtidos por sensores remotos o trabalho de Galvão et al. (2008) pode ser tomado como exemplo de caracterização mineralógica do solo

através deste tipo de dado, sendo preditos valores do índice Ki, avaliando-se os níveis de intemperismo para as camadas superficiais dos solos no local do estudo.

Além dos teores de matéria orgânica, textura e mineralogia do solo, existem ainda diversos estudos sobre a quantificação de atributos químicos do solo, como os teores de P, K, Ca, Mg, Al, capacidade de troca de cátions (CTC), pH e necessidade de calagem (NC). Resultados variáveis são obtidos, sendo os R^2 observados encontram-se, em geral, nos intervalos de: 0,9 a 0,2 para P; 0,6 a 0,1 para o K; 0,9 a 0,7 para Ca; 0,8 a 0,5 para Mg; 0,8 a 0,5 para pH; 0,9 a 0,6 para CTC (CHANG et al., 2001; SHEPERD e WALSH, 2002; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; PIRIE et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; MOUAZEN et al., 2007; CHRISTY, 2008). Esta variação observada nos resultados se deve principalmente ao fato destes atributos não possuírem influência direta no comportamento espectral do solo (HILL et al., 2010). Os bons resultados observados são causados principalmente pela correlação dos atributos modelados e outros atributos do solo que tenham influência direta no comportamento espectral do solo, como teor de matéria orgânica, composição mineralógica e textura (CHANG et al., 2001; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; STENBERG et al., 2010; STENBERG e VISCARRA ROSSEL et al., 2010). Resultados semelhantes aos obtidos em laboratório também são observados na quantificação de atributos químicos do solo utilizando dados de sensores aerotransportados, como reportado por DeTar et al. (2007) e Hively et al. (2011).

O teor de umidade do solo também tem sido estudado, principalmente no que diz respeito a dados coletados no campo ou por sensores remotos, e têm sido observados bons resultados na predição deste atributo seja em nível terrestre ou remoto, geralmente com R^2 na faixa de 0,9 a 0,4 (CHANG et al., 2005; MOUAZEN; BAERDEMAEKER e RAMON, 2005; MOUAZEN et al., 2007; CHRISTY, 2008; HAUBROCK et al., 2008).

As variações observadas no desempenho de modelos de predição obtidos para matéria orgânica e teores de argila podem ser ocasionadas por diversos fatores, dentre eles, a variação na composição mineralógica das amostras devido a mudanças no material de origem do solo por exemplo, sendo geralmente obtidos melhores resultados quando usadas amostras de uma mesma região (UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; STENBERG et al., 2010). Para a quantificação de atributos químicos do solo, como P, K, Ca, Mg, Al, CTC e pH o

desempenho pode ser ainda mais instável, devido a relação indireta dos valores dos atributos a serem modelados com o comportamento espectral do solo, desta forma, os modelos de predição ficam restritos a áreas geográficas ainda menores ou menos tipos de solos, podendo muitas vezes serem aplicáveis somente a uma determinada área de cultivo (STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010).

Referências

BAUMGARDNER, M.F.; SILVA, L.F; BIEHL, L.L.; STONER, R. Reflectance properties of soils**. Advances in Agronomy**, San Diego, v.38, p. 1-44, 1985.

BEN-DOR, E.; PATKIN, K.; BANIN, A.; KARNIELI, A. Mapping of several soil properties using DAIS-7915 hyperspectral scanner data – a case study over clayey soils in Israel, **International Journal of Remote Sensing**, Basingstoke, v.23, p.1043-1062, 2002.

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

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

BRICKLEMYER, R.S.; BROWN, D.J. On-the-go: VisNIR: Potential and limitations for mapping soil clay and organic carbon. **Computers and Eletronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 70, p. 209-206. 2010.

CHANG, C.W.; LAIRD, D.A.; HURBURGH JR., C.R. Influence of soil moisture on near-infrared reflectance spectroscopic measurement of soil properties. **Soil Science**, Philadelphia, v. 170, p. 244-255, 2005.

CHANG, C.W.; LAIRD, D.A.; MAUSBACH, M.J.; HURBURGH JR., C.R. Near-infrared reflectance spectroscopy – principal components regression analysis of soil properties. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 65, p. 480-490, 2001.

CHEN, F.; KISSEL, D.E.; WEST, L.T.; ADKINS, W.; RICKMAN, D.; LUVALL, J.C. Mapping soil organic carbon concentrations for multiple fields with image similarity analysis. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 72, p. 186-193. 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.

CLARK, R.N.; SWAYZE, G.A.; WISE, R.; LIVO, E.; HOEFEN, T.; KOKALY, R.; SUTLEY, S. J. 2007. USGS digital spectral library splib06a: U.S. Geological Survey, Digital Data Series 231. Disponível em: <http:// speclab.cr.usgs.gov/spectral.lib06/>. Acesso em: 10 out. 2012.

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, 2006.

DETAR, W.R.; CHESSON, J.H.; PENNER, J.V.; OJALA, J.C. Detection of soil properties with airborne hyperspectral measurements of bare fields. **Transactions of the ASABE**, Saint Joseph, v. 51, p. 463-470, 2008.

EMPRESA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA BRASILEIRA (Embrapa). **Manual de métodos de análise de solo**. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisa de Solos. 212p. 1997.

FRANZEN, D.W.; PECK, T.R. Soil sampling for variable rate fertilization. In: HOEFT, R.G. (Ed.) ILLINOIS FERT. CONF., SPRINGFIELD, IL.1993. Urbana-Champaing; Univ. of Illinois, 25-27. Jan. 1993. p. 81-91.

FYSTRO, G. The prediction of C and N content and their potential mineralization in heterogeneous soil samples using Vis-NIR spectroscopy and comparative methods. **Plant and Soil**, Dordrecht, v. 246, p. 139-149, 2002.

GALVÃO, L.S.; FORMAGGIO, A.R.; COUTO, E.G.; ROBERTS, D.A. Relantionships between the mineralogical and chemical composition of tropical soils and topography from hyperspectal remote sensing data. **Journal of Photogrammetry and Remote Sensing**, Amsterdam, v. 63, p. 259-271, 2008.

GOMEZ, C.; LAGACHERIE, P.; COULOUMA, G. Continuum removal versus PLSR method for clay and calcium carbonate content estimation from laboratory and airborne hyperspectral measurements. **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p. 141-148, 2008.

GOMEZ, C.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCBRATNEY, A,B. Soil carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field Vis-NIR spectroscopy: An Australian case study. **Geoderma**, Amsterdam, v. 146, p. 403-411, 2008.

HAUBROCK, S. N.; CHABRILLAT, S.; KUHNERT, M.; HOSTERT, P.; KAUFMANN, H. Surface soil moisture quantification and validation based on hyperspectral data and field measurements. **Journal of Applied Remote Sensing**, v. 2, p. 1-26, 2008.

HBIRKOU, C.; PÄTZOLD, S.; MAHLEIN, A.K.; WELP, G. Airborne hyperspectral imaging of spatial soil organic carbon heterogeneity at the field scale. **Geoderma**, Amsterdam, v. 175-176, p. 21-28, 2012.

HENDERSON, T.L.; BAUMGARDNER, M.F.; FRANZMEIER, D.P.; STOTT, D.E.; COSTER, D.C. High dimensional reflectance analysis of soil organic matter. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 56, p. 865-872, 1992.

HILL, J.; UDELHOVEN, T.; VOHLAND, M.; STEVENS, A. The use of laboratory spectroscopy and optical remote sensing for estimating soil properties. In: OERKE, E. C.; GERHARDS, R.; MENZ, G.; SIKORA, R. A**. Precision crop protection** – the challenge and use of heterogeneity. Dordrecht:Springer. 2010. 441 p.

HIVELY, W.D; MCCARTY, G.W.; REEVES III, J.B.; LANG, M.W.; OESTERLING, R.A.; DELWICHE, S.R. Use of airborne hyperspectral imagery to map soil properties in tilled agricultural fields. **Applied and Environmental Soil Science**, New York, p. 1-13, 2011.

HUNT, G.H. Spectral signatures of particulate minerals in the visible and near-infrared. **Geophysics**, Tulsa, v. 42, p. 501-513, 1977.

KÄMPF, N.; CURI, N.; MARQUES, J.J. Intemperismo e ocorrência de minerais no ambiente solo. In: MELO, V.F.; ALLEONI, L.R.F. (Ed). Química e mineralogia do solo: parte I – Conceitos básicos. Viçosa: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo. cap. 5. p. 2009. p. 333-379.

LADONI, M.; BAHRAMI, H.A.; ALAVIPANAH, S.K.; NOROUZI, A.A. Estimating soil organic carbono from soil reflectance: a review. **Precision Agriculture**, Dordrecht, v. 11, p. 82-99, 2010.

LISLEY, C.M.; BAUER, F.M. Test your soil for acidity. Un. of Illinois, Agricultural Experimentation Station. 1929.

MADEIRA NETTO, J. da S.; BAPTISTA, G.M. de M. **Reflectância espectral de solos**. Planaltina. 2000. 55 p.

MASSERSCHMIDT, I.; CUELBAS, C. J.; POPPI, R.J.; DE ANDRADE, J.C.; DE ABREU, C.A.; DAVANZO, C.U. Determination of organic matter in soils by FTIR/ diffuse reflectance and multivariate calibration. **Journal of Chemometrics**, Chichester, v. 13, p. 265-273, 1999.

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

MCCARTY, G.W.; REEVES III, J B.; REEVES, V.B.; FOLLETT, R.F.; KIMBLE, J.M. Mid-infrared and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for soil carbon measurement. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 66, p.245-259, 2002.

MENDONÇA SANTOS, M.L.; SANTOS, H.G. dos. 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, v. 31, p. 39-54, 2007.

MENESES, P.R.; MADEIRA NETO, J. da S. **Sensoriamento remoto**: reflectância dos alvos naturais. Brasília:UnB. 2001. 262 p.

MILLER, C.E. Chemical principles of near-infrared technology. In: WILLIANS, P.; NORRIS, K. Near-infrared technology in the agricultural and food industries. St. Paul :The American Association of Cereal Chemists. 2001. p. 19-37.

MOUAZEN, A.M; BAERDEMAEKER, J.D.; RAMON, H. Towards development of on-line soil moisture content sensor using a fiber-type NIR spectrophotometer. **Soil and Tillage Research**, Amsterdam, v. 80, p. 171-183, 2005.

MOUAZEN, A.M.; MALEKI, M.R.; BAERDEMAEKER, J.D.; RAMON, H. On-line measurement of some selected soil properties using a VIS-NIR sensor**. Soil and Tillage Research**, Amsterdam, v. 93, p. 13-27, 2007.

MULDER, V.L.; BRUIN, S. de; SCHAEPMAN, M.E.; MAYR, T.R. The use of remote sensing in soil and terrain mapping – A review. **Geoderma**, Amsterdam, v. 162, p. 1-19, 2011.

MURRAY, I.; Forage analysis by near-infrared spectroscopy. In: DAVIES, A; BAKER, R.D.; GRANT, S.A.; LAIDLAW, A.S. (Ed.) Sward herbage measurement handbook. Reading:British Grassland Society. p. 285-312. 1993.

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

NICODEMUS, F.E; RICHMONT, J.C.; HSIA, J.J.; GINSBERG, I.W.; LIMPERIS, T. Geometrical considerations and nomenclature for reflectance. Washington:U.S. Govt. Printing Office. 1977. 52 p. (NBS monograph 160.)

ODEH, I. O.A.; MCBRATNEY, A.B. Using AVHRR images for spatial prediction of clay content in the lower Namoi Valley of eastern Australia. **Geoderma**, Amsterdam, v. 97, p. 237-254, 2000.

ORLOV, D.S. Quantitative patterns of light reflection by soils. I. Influnce of particle (aggregate) size on reflectivity. **Science Papers of High School Biology**, v. 4, p. 206-210, 1966.

PIRIE, A.; SINGH, B.; ISLAM, K. Ultra-violet, near-infrared and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopic techniques to predict several soil properties. **Australian Journal of Soil Research**, Melbourne, v. 43, p. 713-721, 2005.

RAIJ, B. van.; ANDRADE, J.C.; CANTARELA, 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. 72-80, 2009.

SANKEY, J.B.; BROWN, D.J.; BERNARD, M.L.; LAWRENCE, R.L. Comparing local vs. global visible and near-infrared (VisNIR) diffuse reflectance spectroscopy (DRS)

calibrations for the prediction of soil clay, organic C and inorganic C. **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p. 149-158, 2008.

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

SELIGE, T.; BÖHNER, J.; SCHMIDHALTER, U. High resolution topsoil mapping using hyperspectral image and field data in multivariate regression modeling procedures. **Geoderma**, Amsterdam, v. 136, p. 235-244, 2006.

SELLITTO, V.M.; FERNANDES. R.B.A.; BARRÓN, V.; COLOMBO, C. Comparing two different spectroscopic techniques for the characterization of soil iron oxides: diffuse versus bi-directional reflectance. **Geoderma**, Amsterdam, v. 149, p. 2-9, 2009.

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 (3), p. 988- 998, 2002.

SHERMAN, D.M.; WAITE, T.D. Electronic spectra of Fe3p oxides and oxyhydroxides in the near infrared to ultraviolet. **Am. Mineral**, v. 70, p. 1262-1269. 1985.

STENBERG, B; VISCARRA ROSSEL, R.A.; Diffuse reflectance spectroscopy for high-resolution soil sensing. In: VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCBRATNEY, A.B.; MINASNY, B. (Ed.) **Proximal soil sensing**. Progress in Soil Science. Dordrecht:Springer. 2010. 446 p.

STENBERG, B.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MOUAZEN, A.M.; WETTERLIND, J. Visible and near-infrared spectroscopy in soil science. In: SPARKS, D. L. (Ed.) **Advances in Agronomy**, Burlington, v. 107, p. 163-215. 2010.

STEVENS, A.; UDELHOVEN, T.; DENIS, A.; TYCHON, B.; LIOY, R.; HOFFMANN, L.; WESEMAEL, B.V. Measuring soil organic carbon in croplands at regional scale using airborne spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam, v. 158, p. 32-45, 2010.

SUMMERS, D.; LEWISA, M.; OSTENDORF, B.; CHITTLEBOROUGH, D. Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. **Ecological Indicators**, Amsterdam, 11:1, p. 123-131, 2011.

UDELHOVEN, T.; EMMERLING, C.; JARMER, T. Quantitative analysis of soil chemical properties with diffuse reflectance spectrometry and partial least-square regression: A feasibility study. **Plant and Soil**, Dordrecht, v. 251, p. 319-329, 2003.

VASQUES, G.M.; GRUNWALD, S.; SICKMAN, J. O. Comparison of multivariate methods for inferential modeling of soil carbon using visible/near-infrared spectra. **Geoderma**, Amsterdam, v. 146, p.14-25, 2008.

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, 2006a.

VISCARRA-ROSSEL, R.A.; WALWORT, D.J.J.; MCBRATNEY, A. B.; JANIK, L. J.; SKJESMSTAD, J. O. Visible near infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. **Geoderma**, Amsterdam, v. 131, p.59-75, 2006b.

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.; BEHRENS, T. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. **Geoderma**, Amsterdam, v. 158, p. 46-54, 2010.

WOLLENHAUPT, N.C.; MULLA, D. J.; CRAWFORD, C.A.G. Soil sampling and interpolation techniques for mapping spatial variability of soil properties. In: PIERCE, F. J.; SADLER, E. J. (Ed.). **The state of site specific management for agriculture**. Madison:ASS-CSSA-SCSA. 1997. p. 19-53.

ZIMMERMANN, M.; LEIFELD, J.; FUHRER, J. Qualifying soil organic carbon fractions by infrared-spectroscopy. **Soil Biology and Biochemistry**, Amsterdam, v. 39, p. 224-231, 2007.

3 QUANTIFICAÇÃO E MAPEAMENTO DE ATRIBUTOS DO SOLO UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA DE REFLECTÂNCIA EM LABORATÓRIO E SENSOR AÉREO HIPERESPECTRAL PROSPECTIR-VS

Resumo

A quantificação de atributos do solo através de seu comportamento espectral tem sido proposta como forma alternativa para descrever a variabilidade espacial do solo, em relação aos métodos convencionais de determinação de atributos. As técnicas de espectroscopia despertam interesse, pois são rápidas, baratas, exigem pouca mão-de-obra e podem diminuir a geração de resíduos, em relação aos métodos convencionais empregados. Embora a aplicação da espectroscopia de reflectância com dados espectrais medidos em laboratório esteja relativamente bem estabelecida, a aplicação da espectroscopia de imageamento ainda é pouco empregada no estudo quantitativo do solo. Isto porque são encontrados mais obstáculos na obtenção de dados e extração de informação útil utilizando esta fonte de informação. A maior limitação ocorre quanto à influência da atmosfera na resposta espectral captada para os alvos imageados. Entretanto, boa acurácia nas predições obtidas foi observada em diversos estudos, para diferentes atributos do solo, como teor de argila, areia, matéria orgânica, CTC e umidade do solo. Neste trabalho avaliou-se o uso de dados radiométricos obtidos por sensor hiperespectral aéreo na quantificação, através de PLSR, e mapeamento, utilizando krigagem, de atributos físicos e químicos do solo, a fim de determinar quais poderiam ser preditos de forma acurada com base nesta informação em um Latossolo. Os resultados obtidos foram comparados a valores determinados pelo método convencional e predições feitas com base em curvas espectrais coletadas em laboratório para que fosse confrontada a acurácia dos diferentes dados espectrais na quantificação dos atributos do solo. Com os dados do sensor aéreo foram obtidos desempenhos satisfatórios principalmente para as quantificações dos teores de argila, areia e CTC (R^2 de 0,73, 0,73 e 0,80, respectivamente), mas os resultados obtidos para os dados coletados em laboratório foram mais acurados (R^2 de 0,89, 0,88 e 0,89, respectivamente). Para os demais atributos os resultados foram variáveis, observando-se resultados intermediários para cálcio e acidez potencial, preditos através dos dados aéreos (R^2 de 0,60 para ambos), e novamente melhores resultados foram obtidos com espectros coletados em laboratório (R^2 de 0,78 e 0,71, respectivamente). Com relação aos mapas de atributos obtidos por krigagem os melhores resultados, considerando os dados do sensor aéreo, foram obtidos para as predições do teor de argila, areia e CTC, com as quais foram derivados mapas com boa concordância em relação às interpolações dos atributos determinados pelo método convencional (R^2 de 0,79, 0,73 e 0,77, respectivamente), para os dados obtidos em laboratório esta concordância foi superior (R^2 de 0,98, 0,95 e 0,97, respectivamente).

Palavras-chave: Sensoriamento remoto hiperespectral; Regressão por mínimos quadrados parciais; Variabilidade espacial; Krigagem.

Abstract

The soil properties quantification through its spectral behavior has been suggested as an alternative to the conventional methods used to depict soil spatial variability. The spectroscopic techniques has attracted interest because they are fast, cheap, require little labor and can reduce the amount of waste produced, compared to conventional methods. While reflectance spectroscopy, with spectral data measured in the laboratory, is relatively well established application of imaging spectroscopy is rarely used for quantitative prediction of soil properties. This happens because there are more obstacles in data collection and it is more difficult to extract useful information from this source of radiometric measurements. The more important limitation of the imaging spectroscopy is probably the atmosphere influence in the spectral response for a given target. However predictions with good accuracy were obtained in several studies for different soil properties, such as clay content, sand content, organic matter, CEC, and soil moisture. In this study it was evaluated the use of radiometric data obtained by a hyperspectral airborne sensor in the soil chemical and physical properties quantification and mapping, using PLSR and kriging. The aim was to evaluate which soil property could be accurately predicted based on this kind of information in an Oxisol. The results obtained were compared with values determined by the conventional method and predictions made based on spectral curves collected in the laboratory in order to evaluate the accuracy of the different spectral data in the soil properties quantification. Satisfactory performances were obtained specially for quantification of clay, sand and CEC using the airborne sensor data (R^2 of 0.73, 0.73 and 0.80, respectively), but results obtained for laboratory data were more accurate (R^2 of 0.89, 0.88 and 0.89, respectively). Regarding the other soil properties results were variable, intermediate results were observed for calcium and potential acidity predictions using airborne spectral data (R^2 of 0.60 for both), but better predictions were made with laboratory data (R^2 of 0.78 and 0.71, respectively). The best results for the soil properties maps interpolated by kriging were obtained for clay, sand and CEC predictions, when used airborne sensor data. The maps of these properties predictions agreed well with interpolations derived from the conventional method (R^2 of 0.79, 0.73 and 0.77, respectively). Properties maps interpolated from laboratory data were better than maps from airborne data, in general, including for clay, sand and CEC predictions (R^2 of 0.98, 0.95 and 0.97, respectively).

Key words: Hyperespectral remote sensing; Partial least squares regression; Spatial variability; Kriging.

3.1 Introdução

O comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR obtido por sensores próximos, em laboratório ou no campo, ou por sensores remotos, aéreos ou orbitais, vem sendo bastante estudado nos últimos anos (BAUMGARDNER et al., 1985; BEN-DOR et al., 2002; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; CHRISTY, 2008; GALVÃO et al., 2008; GOMEZ; LAGACHERIE e COULOUMA, 2008; VISCARRA ROSSEL et al., 2009; STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010; HIVELY et al., 2011). Nestes trabalhos o espectro de reflectância do solo é destacado como sendo rico em informação a respeito dos constituintes orgânicos e mineralógicos, assim como dos atributos físicos do solo. Embora a espectroscopia de reflectância esteja bem estabelecida para dados espectrais coletados em laboratório, com amostras secas e peneiradas, o comportamento espectral do solo obtido por espectroscopia de imageamento, aérea ou orbital, ainda não foi totalmente integrado a caracterização e quantificação de atributos do solo (BEN-DOR et al., 2008).

A obtenção de informação quantitativa, ou seja, descrição do teor de determinado atributo, a partir do comportamento espectral do solo, não pode ser feita de forma direta. Para que isto seja possível é necessário estabelecer amostras de referência, para as quais o teor do atributo é conhecido, sendo estes teores relacionados ao comportamento espectral da amostra através da calibração de um modelo, considerando que as referências devem ser representativas da gama de solos para os quais o modelo será utilizado (STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010).

Além disto, no caso da espectroscopia de imageamento existem ainda mais obstáculos para a obtenção de informação quantitativa sobre o solo, como a dificuldade do processamento dos dados, a existência de poucos sensores que obtenham este tipo de informação ao redor do mundo e a falta de reconhecimento por muitos usuários finais (BEN-DOR et al., 2008).

Ainda, outras desvantagens da espectroscopia de imageamento podem ser destacadas como a interferência atmosférica no comportamento espectral registrado para um determinado alvo. Como vantagem, em comparação ao sensoriamento próximo, no qual as leituras espectrais são realizadas em laboratório ou campo, a espectroscopia de imageamento apresenta a possibilidade de um mapeamento com

base no pixel, dependendo da resolução espacial do sensor, ou seja, permite a obtenção de informações em grande densidade e teoricamente minimiza os erros ocasionados pela interpolação dos dados (GALVÃO et al., 2008; HIVELY et al., 2011; MULDER et al., 2011).

Observa-se, portanto, a necessidade de mais estudos sobre a aplicação de sensores hiperespectrais aerotransportados em estudos quantitativos do solo a fim de avaliar o seu potencial de uso em diferentes ambientes e para diferentes finalidades, principalmente para sensores que vem surgindo, com maior resolução espectral e que teoricamente possuem melhor capacidade de caracterização dos alvos imageados.

Desta forma, o objetivo do presente trabalho foi comparar a acurácia das predições de atributos do solo realizadas através de leituras espectrais coletadas em laboratório, e empregando dados coletados por sensor aerotransportado. As comparações dos modelos de predição foram feitas de forma pontual, para os locais de coleta de solo, e através de mapas de atributos derivados dos teores determinados, pelo método convencional, e preditos, através do espectro.

Como hipótese, espera-se que através dos dados do sensor aéreo hiperespectral seja possível realizar predições de acurácia aceitável, mesmo que os resultados obtidos com espectros coletados em laboratório devam ser melhores.

3.2 Material e Métodos

3.2.1 Descrição da área de estudo

O trabalho foi realizado em área localizada (Figura 1) entre as cidades de Paulínia, SP, e Campinas, SP, Brasil (coordenadas geográficas 22°48’13” latitude sul e 47°06’44” longitude oeste de Greenwhich, considerando o *Datum* SAD-69), caracterizada por relevo predominantemente plano à suave ondulado (até 8% de declividade) e sendo os solos presentes na área classificados como Latossolo Vermelho (BERTOLDO DE OLIVEIRA; MENK e ROTTA, 1977), sendo desta forma bastante intemperizados, prevalecendo possivelmente na composição mineralógica da fração argila óxidos, hidróxidos e óxi-hidróxidos de ferro e alumínio, além de caulinita como o provável principal filossilicato presente (KER,1997; KÄMPF, CURI e MARQUES, 2009) .

No campo foi realizado teste de magnetização para avaliar a presença de minerais ferrimagnéticos, sendo detectada elevada magnetização em parte da área, indicando a influência de material de origem rico em ferro (rochas máficas, como diabásio).

Pela classificação de Köppen, o clima da região é subtropical quente, sem estação seca (Cfa), sendo a temperatura média do mês mais frio menor que 18°C, a do mês mais quente maior ou igual a 22°C e o total de chuva do mês mais seco superior a 30 mm (ROLIM et al., 2007).

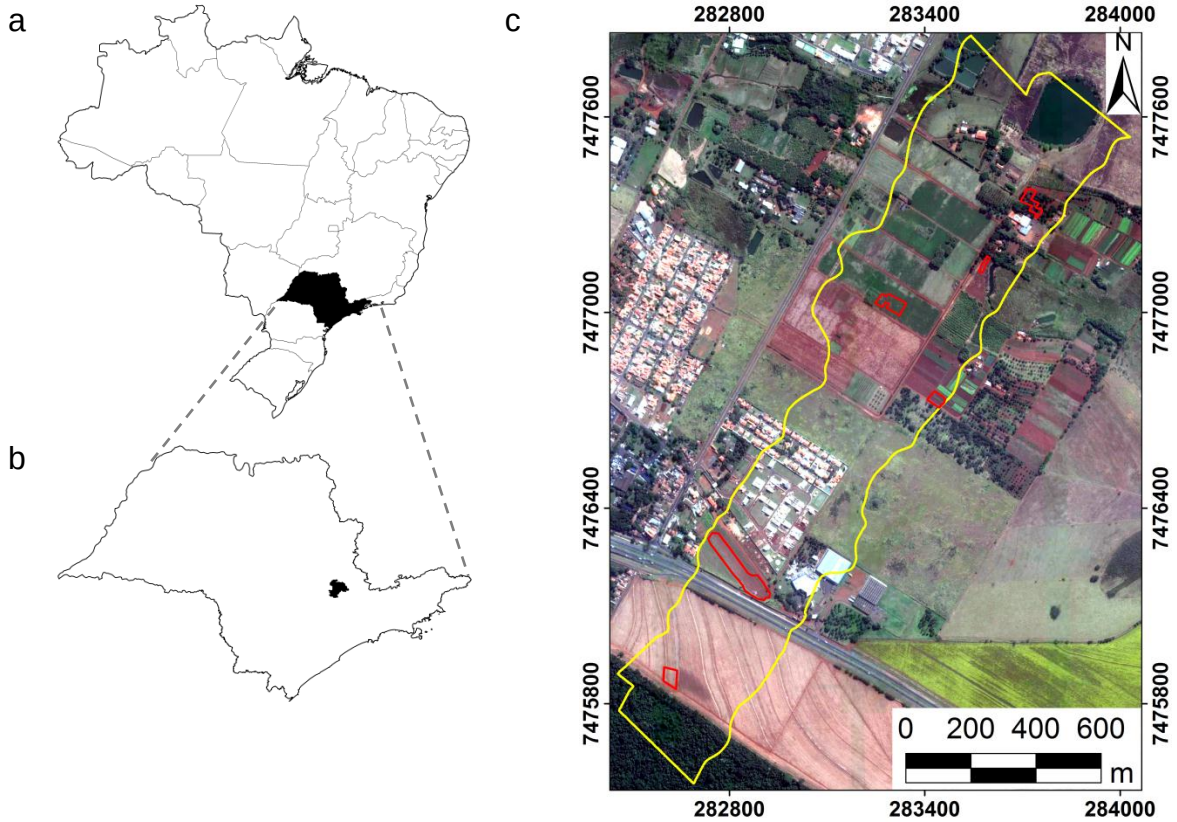


Figura 1 - Localização da área de estudo no Estado de São Paulo (entre os municípios de Paulínia e Campinas) (a, b). Linha amarela representando limites do mosaico formado com cenas do sensor aéreo e linhas vermelhas as áreas de coleta de solo dentro da área estudada (c).

3.2.2 Obtenção de dados espectrais nível aéreo

Foram obtidas informações espectrais do local de estudo utilizando o sensor hiperespectral aerotransportado *ProSpecTIR V-S* (*SpecTIR LLC, Sparks, Nevada,* EUA), sendo este composto por dois sistemas sensores imageadores, um captando os comprimentos de onda do visível ao infravermelho próximo (*Visible-Near Infrared*,

VNIR, de 400 a 970 nm) e outro os comprimentos de onda do infravermelho de ondas curtas (*Short Wave Infrared*, SWIR, de 970 a 2500 nm). O sensor utilizado possui resolução espacial de 1 m e resolução espectral de 4,6 nm na faixa espectral do VNIR e de 5,3 nm na faixa espectral do SWIR, sendo as imagens geradas compostas por 357 bandas espectrais (SPECTIR, 2012a).

Os dados brutos registrados durante a aquisição das imagens foram convertidos para valores de radiância por software específico, pelo provedor da imagem, no qual são utilizados arquivos gerados durante a calibração radiométrica e dos comprimentos de onda, feitas antes e após a mobilização do sensor, para realizar as correções e calibrações necessárias neste processo (SPECTIR, 2012a).

Os dados calibrados para radiância foram então convertidos para valores de reflectância através do modelo de transferência radiativa MODTRAN4, incorporados no programa computacional ATCOR-4 (BERK et al., 1999; RICHTER; SCHLÄPFER, 2012). O objetivo desta conversão é basicamente obter dados de reflectância para os alvos imageados promovendo a remoção da contribuição de componentes da atmosfera para a assinatura espectral destes alvos.

Foram adotados também metodologias de interpolação para estimar dados em regiões do espectro onde ocorre máxima absorção por componentes da atmosfera como vapor d'água e gás carbônico (SPECTIR, 2012b), sendo também empregados técnicas de "polimento" específicas baseadas no método descrito por Savitzky e Golay (1964) para minimizar a influência das feições de absorção destes gases atmosféricos nos dados espectrais a serem analisados.

Após a obtenção dos dados em valores de reflectância foram removidas as bandas espectrais referentes às faixas de comprimento de onda nas quais ocorre acentuada absorção da energia eletromagnética pelo vapor d'água presente na atmosfera (aproximadamente de 1300 a 1500 nm e de 1800 a 1950 nm), visando evitar a influência negativa destas faixas espectrais em processamentos posteriores. Desta forma, cada cena utilizada possuía 282 bandas espectrais, sendo necessárias duas cenas para fornecer a cobertura necessária da área estudada (cerca de 100 ha). Para facilitar o processamento das imagens, estas foram unidas em um mosaico (Figura 2) utilizando-se o programa computacional ENVI 4.5 (*ITT Vis*, *Boulder*, *Colorado*, EUA).

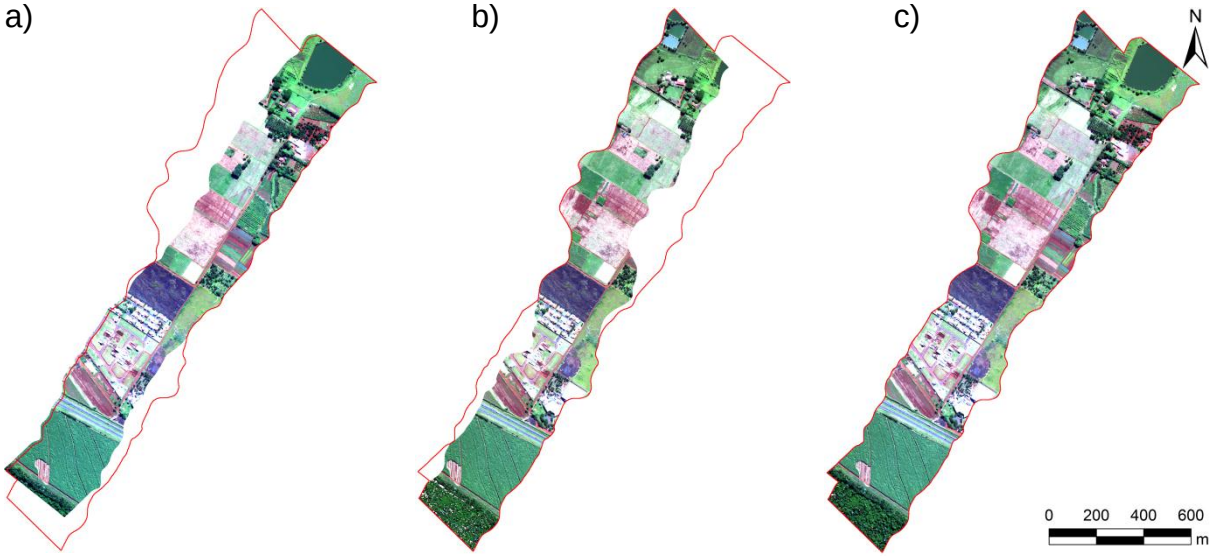


Figura 2 - Imagens utilizadas no estudo (a, b), e o mosaico obtido com estas cenas (c). Em vermelho destacados os limites do mosaico (composição das imagens: R = 653nm, G = 553nm, B = 451,8nm).

3.2.3 Coleta e análises de solo

Logo após a obtenção dos dados radiométricos, nível aéreo, foi realizada amostragem de solo em locais nos quais havia visualmente solo exposto. Estes locais foram identificados no campo, sabendo-se apenas os limites da área coberta pelo sensor. Desta forma, 89 amostras de solo foram coletadas, de 0 cm a 20 cm de profundidade, com distâncias variáveis entre os pontos de amostragem (de 5m a 30m entre amostras adjacentes), a fim de representar de forma adequada as áreas com solo exposto presentes no local. Os pontos de coleta foram georreferenciados utilizando aparelho receptor de navegação GPS Trimble, realizando-se o pós-processamento dos dados coletados para aumento da acurácia no posicionamento registrado através do programa computacional Trimble *GPS Pathfinder Office* 4.0 e utilizando dados de referência da Rede Brasileira de Monitoramento Contínuo dos Sistemas GNSS (RBMC) (IBGE, 2010). Na Figura 3 pode-se observar a localização das áreas (parcelas) nas quais foi coletado solo e dos pontos de amostragem. As áreas de coleta somaram, no total, aproximadamente de 2 ha.

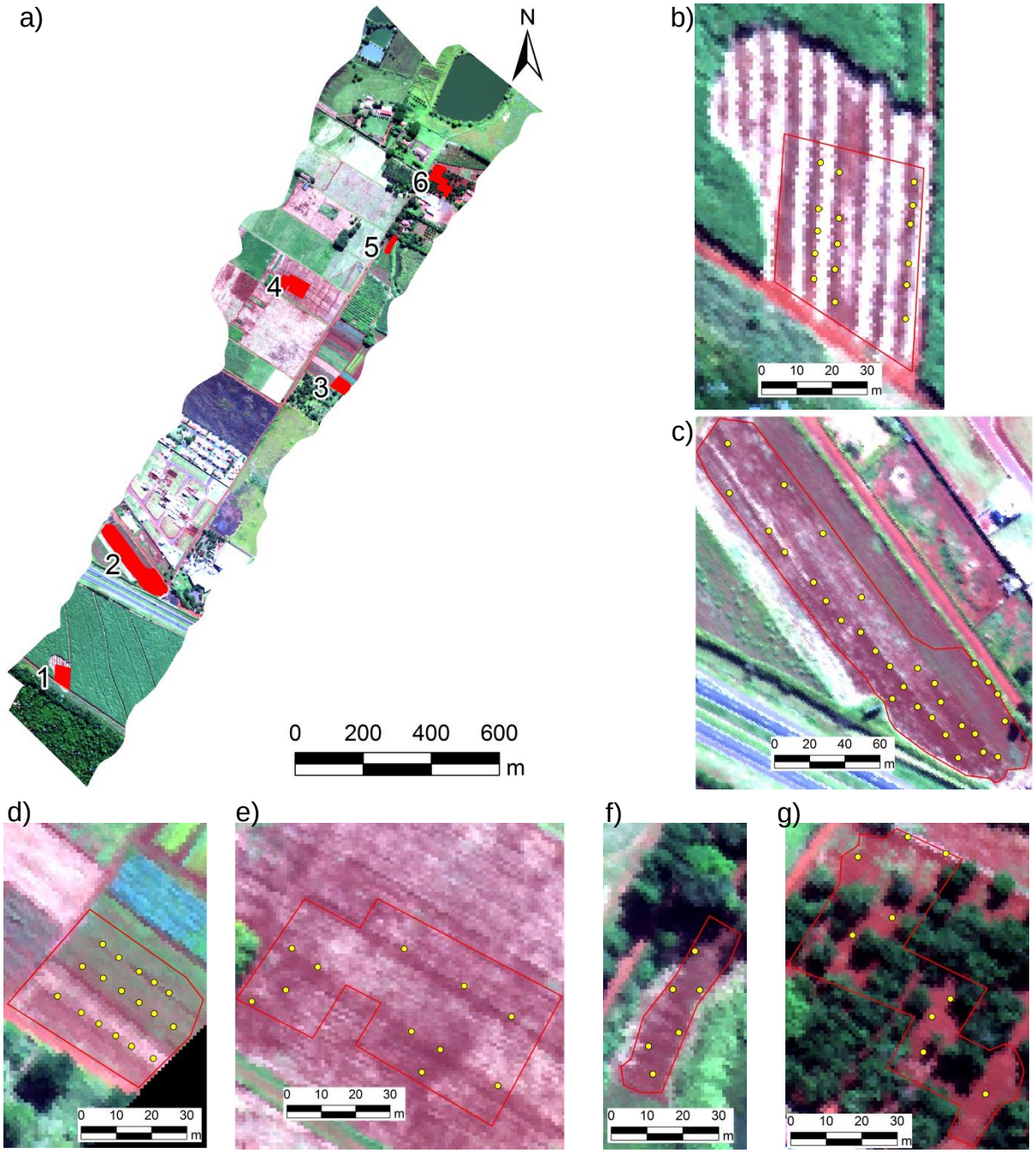


Figura 3 - Localização das parcelas de coleta de solo (em vermelho) (a), e dos pontos amostrais (em amarelo) nas parcelas 1 (b), 2 (c), 3 (d), 4 (e), 5 (f) e 6 (g) (composição das imagens: R = 653nm; G = 553nm; B = 451,8nm).

Após a coleta de solo, as amostras foram secas em estufa a 45°C por 24 horas, moídas e peneiradas com malha de 2mm. Em seguida foram encaminhadas para a realização de análises físicas e químicas em laboratório. A análise de granulometria das amostras empregou a metodologia descrita por Embrapa (1997), onde o teor da fração argila do solo é mensurado pelo método do densímetro, o teor

da fração areia do solo por peneiramento e o teor da fração silte por diferença entre o peso original da amostra analisada e a soma dos teores das frações argila e areia.

Com relação às análises químicas, estas seguiram metodologias descritas por Raij et al. (2001) para avaliação da fertilidade e incluíram: a determinação do pH em água; dos teores de fósforo (P), cálcio (Ca) e magnésio (Mg) extraídos com resina trocadora de íons, sendo o P quantificado por colorimetria e o Ca e Mg por espectrofometria de absorção atômica; a quantificação dos teores de alumínio (Al) trocável, extraído com solução de cloreto de potássio (1 mol l^{-1}) e sua concentração determinada por titulação acidimétrica com solução de hidróxido de sódio (0,025 mol l^{-1} de NaOH); a quantificação da acidez potencial (H+Al), extraída através de solução de acetato de cálcio (1 mol l^{-1}) em pH 7 e determinada por titulação com solução de NaOH (0,025 mol l^{-1}); a quantificação de matéria orgânica (via úmida) através da sua oxidação com solução de dicromato de potássio (0,1667mol l^{-1}) sendo estimada de forma indireta por titulação dos íons cromo (Cr^{3+}) restantes após a oxidação, com solução de sulfato ferroso amoniacal (0,1 mol l^{-1}). Foram ainda determinados os teores de potássio (K) extraído com solução (Melich-1) contendo ácido clorídrico (0,05 mol l^{-1}) e ácido sulfúrico (0,0124 mol l^{-1}), neste caso efetuando-se a quantificação por fotometria de emissão atômica (EMBRAPA, 1997).

A partir dos resultados das análises químicas foram calculados os valores de soma de bases (SB), capacidade de troca catiônica (CTC), saturação por bases (V%) e saturação por alumínio (m%), de acordo com Raij et al. (2001).

3.2.4 Obtenção de dados espectrais em laboratório

As amostras de solo, secas em estufa a 45°C por 24 horas e peneiradas com malha de 2mm, foram submetidas a leituras espectrais de reflectância bidirecional utilizando o espectrorradiômetro FieldSpec Pro (*Analytical Spectral Devices*, *Boulder*, *Colorado*, EUA), de acordo com metodologia descrita por Stemberg (2010) e Terra (2011). Este sensor realiza medições nos comprimentos de onda do visível, do infravermelho próximo e do infravermelho de ondas curtas (VNIR-SWIR, de 350 a 2500 nm), fornecendo dados em intervalos de 1,4 nm entre 350 a 1000 nm e de 2 nm entre 1000 e 2500 nm, sendo a resolução espectral de 3 a 10 nm e os resultados finais interpolados para cada 1 nm. As amostras de solo foram colocadas em placas de *petri* com 9 cm de diâmetro por 1,5 cm de altura, acondicionando assim cerca de

95 cm^3 de solo, sendo a superfície da amostra nivelada a fim de padronizar as condições de leitura diminuindo a influência da rugosidade. O sensor foi posicionado a 8 cm da amostra e como fontes de iluminação foram utilizadas duas lâmpadas halógenas de 50 W, distantes de 35 cm da plataforma de suporte da amostra em ângulo zenital de 30°. Como padrão de referência, para a obtenção dos dados radiométricos em valores de reflectância, foi utilizada placa de material *Spectralon*, considerando-se que esta proporciona aproximadamente 100% de reflectância. Leituras de calibração utilizando a placa padrão foram efetuadas a cada 20 minutos durante a aquisição das informações espectrais.

Cada curva espectral apresentada pelo sensor era composta pela média de 100 leituras, para cada amostra foram coletadas 3 curvas espectrais, girando-se a placa de *petri* em 90° antes de cada coleta, a fim de melhor representar a amostra analisada. A média das 3 curvas espectrais obtidas foi adotada como sendo o comportamento espectral da amostra na região do espectro estudada (de 350 a 2500 nm).

3.2.5 Identificação de pixels com predomínio de solo exposto e extração de dados radiométricos das imagens hiperespectrais nos pontos de coleta

Para a identificação de pixels com predomínio de solo exposto nas imagens adquiridas pelo sensor aéreo foi adotada metodologia descrita por Guerschman et al. (2009). Este método foi adotado pela fácil aplicação e robustez dos resultados apresentados, podendo ser empregado mesmo em imagens hiperespectrais com baixa relação sinal-ruído. O objetivo desta identificação foi de selecionar os espectros relativos a pixels contendo predominantemente solo exposto, a fim de representarem o comportamento espectral do solo nos locais de coleta de solo e serem utilizados na PLSR para obtenção de modelos de predição de atributos do solo.

Assim, o mosaico produzido com as cenas da área estudada foi submetido ao processamento "*Minimum Noise Fraction*" (MNF) de acordo com Green et al. (1988) e Boardman e Kruse (1994), implementado no software ENVI 4.5. Este processamento consiste em duas Análises em Componentes Principais (ACP) separadas e consecutivas onde na primeira os componentes principais da matriz de covariância do ruído são utilizados para descorrelacionar e reescalonar o ruído

presente nos dados, resultando em valores transformados nos quais o ruído tem variância unitária e não apresenta correlação entre bandas. A segunda parte deste método consiste na ACP dos dados derivados da imagem original já com o ruído descorrelacionado e reescalonado após a primeira ACP. Este processamento permite determinar a dimensionalidade inerente dos dados, segregar o ruído presente e reduzir a demanda computacional nos processamentos subsequentes. Nesta etapa foram utilizadas somente as bandas nos comprimentos de ondas de 705 a 1100 nm e de 2033 a 2346 nm para a realização do MNF, haja vista que estas são as regiões mais representativas para os alvos de interesse (vegetação fotosssinteticamente ativa, vegetação não fotossinteticamente ativa – “palhada” e solo exposto), sendo estas faixas escolhidas também por incluírem as bandas utilizadas no cálculo dos índices CAI e NDVI, os quais foram utilizados posteriormente na análise de desmistura da cobertura dos pixels imageados.

As 20 primeiras bandas originadas pelo MNF foram escolhidas como as mais coerentes e relativamente livres de ruído para o cálculo do “*Pixel Purity Index*” (PPI), a fim de encontrar os pixels mais puros espectralmente, os quais geralmente correspondem aos *endmembers* dos alvos presentes em uma cena (BOARDMAN; KRUSE; GREEN, 1995). O PPI é calculado projetando-se repetidamente digramas de dispersão de dimensão *n* em um vetor unitário aleatório, os pixels extremos em cada projeção são registrados contabilizando-se o total de vezes que cada pixel foi registrado como extremo.

Foram calculados também os índices “*Normalized Difference Vegetation Index*” (NDVI) e “*Cellulose Absorption Index*” (CAI) de acordo com as equações (1) e (2), respectivamente.

$$\mathrm{NDVI} = \frac{(B_{802\ nm} - B_{682\ nm})}{(B_{802\ nm} + B_{682\ nm})} \tag{1}$$

$$\mathrm{CAI} = \left[0{,}5 \times (B_{2031\ nm} + B_{2211\ nm}) - B_{2101\ nm}\right] \times 10 \tag{2}$$

O NDVI utiliza a absorção da energia eletromagnética pela clorofila, na região dos comprimentos de onda do vermelho, e o espalhamento desta energia pela celulose, na região do infravermelho próximo, para distinguir vegetação fotossinteticamente ativa de outros alvos (TUCKER, 1979; GUERSHMAN et al.,

2009). Já o CAI baseia-se na feição de absorção de 2000 a 2200 nm, relacionada à celulose e lignina presente na biomassa das plantas, para identificar vegetação não fotossinteticamente ativa (NAGLER et al., 2003; DAUGHTRY et al., 2005).

Em um gráfico de dispersão relacionando os valores de NDVI e CAI, como o ilustrado pela Figura 4, para uma área coberta essencialmente por vegetação fotossinteticamente ativa (*Photosynthetic Vegetation* – PV), vegetação não fotossinteticamente ativa (*Non-Photosynthetic Vegetation* – NPV) e por solo exposto (*Bare Soil* – BS), os valores destes índices para os pixels da área formarão um triângulo, sendo que os pixels localizados próximos às extremidades do triângulo poderão ser considerados como *endmembers* para as classes de cobertura citadas acima.

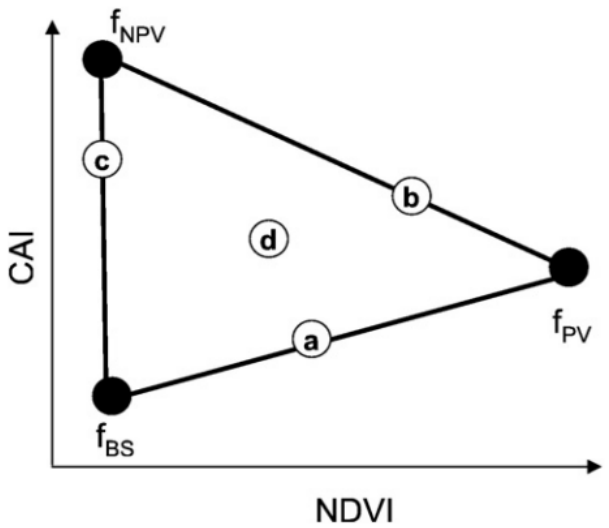


Figura 4 - O conceito do método utilizado para identificação de endmembers e quantificação da fração de cobertura nos pixels da imagem hiperespectral. Pixels contendo somente vegetação (f_{PV}=100%), palhada (f_{NPV}=100%) ou solo exposto (f_{BS}=100%) encontram-se nas extremidades do triângulo, formado pelos valores dos índices, e pixels cobertos pela mistura destes materiais encontram-se dentro do triângulo, como os pontos a, b, c, d (adaptado de GUERSHMAN et al., 2009).

A localização dos pixels classificados como puros pelo PPI e localizados próximos aos vértices do triângulo foram examinados na imagem a fim de confirmar que os *endmembers* selecionados, baseados nos índices NDVI e CAI, são compatíveis com os identificados pela técnica mais amplamente utilizada do PPI (GUERSHMAN et al., 2009).

Foram assim selecionados os *endmembers* e realizada a análise de desmistura descrita pelas equações (3), (4) e (5) a seguir:

$$V_H = (f_{PV} \times V_{PV}) + (f_{NPV} \times V_{NPV}) + (f_{BS} \times V_{BS}) \quad (3)$$

$$C_H = (f_{PV} \times C_{PV}) + (f_{NPV} \times C_{NPV}) + (f_{BS} \times C_{BS}) \quad (4)$$

$$f_{PV} + f_{NPV} + f_{BS} = 1 \quad (5)$$

Onde V_H E C_H são os valores de NDVI e CAI em um determinado pixel da imagem, f_{PV}, f_{NPV} e f_{BS} são as frações de PV, NPV e BS cobrindo este pixel e V_{PV} – C_{PV}, V_{NPV} – C_{NPV} e V_{BS} – C_{BS} são os valores dos índices para os *endmembers*. Considerando que os valores das 3 frações em um dado pixel foram restringidos a apresentar soma unitária, pixels encontrando-se fora dos limites do “triângulo” apresentaram valores negativos ou maiores que 1. Para amenizar este problema foram separadas manualmente áreas construídas, rodovias e corpos d’água, que não interessavam ao estudo, diminuindo a ocorrência de pixels fora dos limites do “triângulo” formado pelos valores de NDVI e CAI na análise de desmistura realizada. Feito isto poucos valores negativos ou superiores a 1 foram observados, sendo o desvio com relação a estes limites pequeno, assim sendo valores negativos foram arredondados para 0 e valores excedendo a unidade arredondados para 1.

Obtendo-se a fração de solo exposto em cada pixel da imagem, os pixels em que se localizavam os pontos de coleta de solo e os 8 pixels ao redor de cada um destes foram distribuídos em 3 classes: (A) pixels contendo mais de 70% de solo exposto; (B) pixels contendo entre 50 e 70% de solo exposto; e (C) com menos de 50% de solo exposto.

Para cada um dos 89 pontos amostrais o comportamento espectral do solo foi representado pela média dos valores de reflectância dos pixels classificados como pertencentes à classe A. No caso de não haverem pixels nesta classe, dentro dos 9 classificados para cada ponto, a média para os 3 pixels com maior fração de solo exposto (classes B ou C) foi considerada como sendo o comportamento espectral do solo naquele ponto. Foram desconsiderados os pixels pertencentes à classe C caso houvesse 1 ou mais pixels da classe B próximos ao pontos amostral (entre os 9

pixels representando cada ponto). Desta forma, foi obtida 1 curva espectral para representar o comportamento do solo em cada ponto amostrado.

3.2.6 Análise exploratória dos atributos físicos, químicos e espectrais do solo

Tendo sido obtidos os resultados das análises físicas e químicas das amostras de solo, assim como as leituras espectrais (em laboratório e por sensor aéreo) procedeu-se uma análise exploratória dos dados.

O objetivo destas análises foi descrever a variabilidade encontrada na área de estudo, com relação aos atributos físicos e químicos do solo. Para isto foram utilizadas medidas estatísticas básicas: valores extremos (máximo e mínimo), média aritmética, desvio padrão, coeficiente de variação, assimetria e curtose. Estes parâmetros serviram para descrever o valor médio observado para cada atributo, os extremos presentes no conjunto de dados e a distribuição dos valores observados. Detalhes dos cálculos destas medidas podem ser encontrados em Varmuza e Filzmoser (2009).

Além disto, foi empregada a Análise em Componentes Principais (ACP) para avaliar o quanto da variabilidade presente nos dados poderia ser representada pelas leituras espectrais. A ACP foi utilizada com o intuito de reduzir a dimensionalidade dos dados espectrais, para que fosse possível reter apenas as dimensões mais informativas, descartando-se, por exemplo, ruídos presentes nos dados radiométricos. Desta forma tornou-se mais fácil o estudo das relações entre a variação observada nos atributos do solo e aquela observada em seu comportamento espectral.

De acordo com Wherens (2011), o princípio da ACP pode ser resumido pela representação de dados altamente dimensionais, com muitas variáreis, através de um espaço com poucas variáveis, as quais contém a maior parte da informação apresentada pelos dados originais. As coordenadas dos indivíduos no espaço criado são os autovalores (*scores*) e as novas dimensões os autovetores (*loadings*). Estas novas dimensões, utilizadas para representar os dados, são combinações lineares das variáveis originais. A multiplicação dos *scores* e *loadings* leva a uma aproximação dos dados originais ($\tilde{\mathbf{X}}$), da forma representada pela equação (6).

$$\tilde{X} = T_a \times P_a^T \quad (6)$$

Sendo $\mathbf{T_a}$ os *scores* das amostras no espaço gerado pelo número ***a*** de componentes e $\mathbf{P_a^T}$ a matriz transposta dos *loadings*, também referentes ao número ***a*** de componentes. Se a quantidade de componentes utilizada na aproximação é o total de componentes gerado na análise, a aproximação é perfeita sendo idêntica aos dados originais.

O cálculo dos componentes principais leva a obtenção de combinações ortogonais das variáveis de forma que a variância dos scores obtidos seja máxima, que a soma das distâncias (euclidiana) entre os scores também seja máxima e a reconstrução de ***X*** a partir dos scores seja a mais próxima da original.

Do ponto de vista matemático, na maioria dos casos, o algoritmo utilizado no cálculo das componentes principais é o SVD (*Singular Value Decomposition*), este realiza a decomposição de uma matriz de dados ***X*** centrados pela média, em três partes, representadas pela equação (7).

$$X = U \times D \times V^T \quad (7)$$

Nesta, ***U*** é uma matriz ortogonal contendo os vetores singulares esquerdos, ***D*** é uma matriz diagonal contendo os valores singulares e ***V*** uma matriz ortogonal contendo os vetores singulares direitos, sendo esta composta pelos *loadings* e o produto das duas primeiras correspondente aos *scores*, da maneira descrita pela equação (8).

$$X = (U \times D) \times V^T = T \times P^T \quad (8)$$

Assim, a interpretação do conteúdo das matrizes fica mais simples. As colunas da matriz ***P*** (ou de forma equivalente, as colunas da matriz ***V***, vetores singulares direitos) são os pesos das variáveis originais nos componentes principais gerados, e assim determinam o quanto uma variável contribui na formação de certo componente. Os *scores*, colunas da matriz ***T***, são as coordenadas dos indivíduos no espaço das variáveis latentes geradas; já as colunas da matriz ***U*** fornecem as mesmas coordenadas, mas normalizadas (com variância unitária). As colunas da

matriz ***T*** tem variância correspondente à observada em dado componente principal, sendo esta variância proporcional ao quadrado dos elementos diagonais na matriz ***D***, da maneira expressa na equação (9).

$$\lambda_i = {d_i^2}/{(n - 1)} \tag{9}$$

Onde, $\boldsymbol{\lambda_i}$ é a variância do componente ***i***, $\mathbf{d_i}$ é o elemento diagonal da matriz ***D*** referente ao componente ***i*** e ***n*** o número de elementos nos dados originais. Então a variância explicada por um determinado componente principal ***i*** pode ser expressa de acordo com a equação (10).

$$FV_i = {\lambda_i}/{\sum_{j=1}^{a} \lambda_j} \tag{10}$$

Sendo $\mathbf{FV_i}$ a fração da variância dos dados originais explicada pela componente ***i***, e ***j*** o número de determinada componente, com ***a*** representando o total de componentes principais. Em geral, os três primeiros componentes principais representam variabilidade suficiente para representar de forma satisfatória os dados analisados. Os cálculos da ACP foram realizados através do pacote ***stats*** (função *prcomp*), no programa R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008).

Para o cálculo das ACPs foram empregadas as leituras radiométricas obtidas em laboratório e por sensor aerotransportado, não somente em valores de reflectância, mas também após serem submetidas à remoção do contínuo. A técnica de remoção do contínuo é empregada para normalizar os dados espectrais, desta forma permite a visualização e processamento de feições de absorção individuais a partir de uma linha de base comum (Figura 5). O contínuo se trata de um envoltório convexo ajustado sobre a curva espectral através de segmentos que ligam as máximas locais do espectro (KRUZE; LEFKOFF e DIETZ, 1993). Este processamento foi realizado no programa ENVI 4.5, tanto para os dados espectrais obtidos em laboratório quanto para aqueles obtidos por sensor remoto.

O objetivo da remoção do contínuo foi o de avaliar melhor a variabilidade presente nos dados quanto às feições de absorção e a relação desta variação e as variações nas características físicas e químicas do solo.

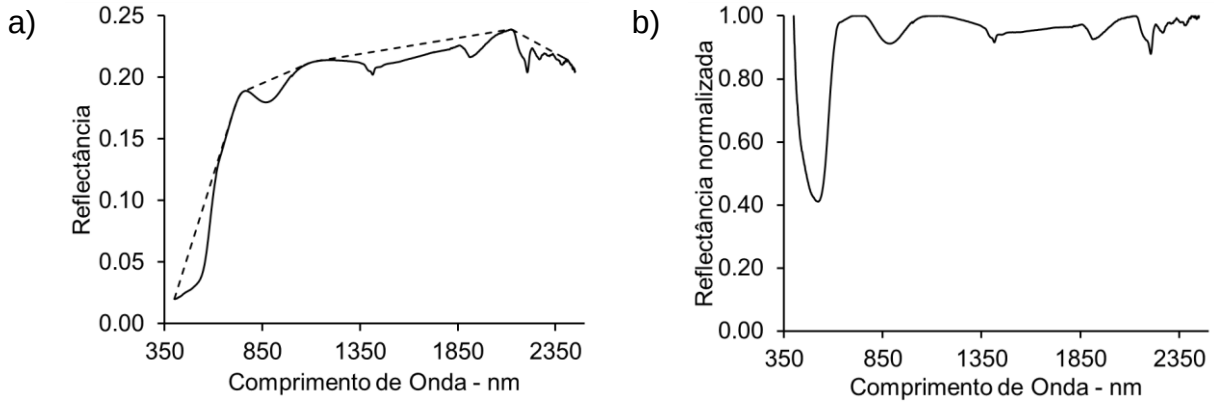


Figura 5 - Exemplo do contínuo considerando a curva espectral de uma amostra de solo (a); e o espectro normalizado após a remoção do contínuo (b).

Para avaliar a relação entre as componentes principais geradas e os atributos físicos e químicos do solo calculou-se o coeficiente de correlação de *Pearson*, como descrito em Varmuza e Filzmoser (2009), assim como a probabilidade relacionada aos coeficientes calculados, podendo-se desta forma verificar a significância estatística dos valores obtidos. Para o calculo dos coeficientes de correlação de *Pearson* foi utilizado o pacote ***psych***, no programa R (REVELLE, 2012).

3.2.7 Métodos de processamento dos dados coletados

As atividades desenvolvidas no trabalho tiveram como objetivo principal a quantificação de atributos físicos e químicos do solo através do comportamento espectral medido em laboratório e por sensor aerotransportado, comparando os resultados obtidos aos valores determinados pelo método convencional.

Na Figura 6 é possível visualizar a sequência adotada no desenvolvimento do trabalho e a dependência entre as diferentes etapas. As atividades realizadas podem ser divididas, de forma geral, em duas fases: (a) a etapa de obtenção e caracterização dos dados químicos, físicos e espectrais (em laboratório e por sensor aerotransportado); e (b) a etapa de quantificação de atributos do solo através dos dados espectrais e o mapeamento destes atributos (destacada em vermelho na Figura 6), sendo esta a etapa de processamento dos dados obtidos.

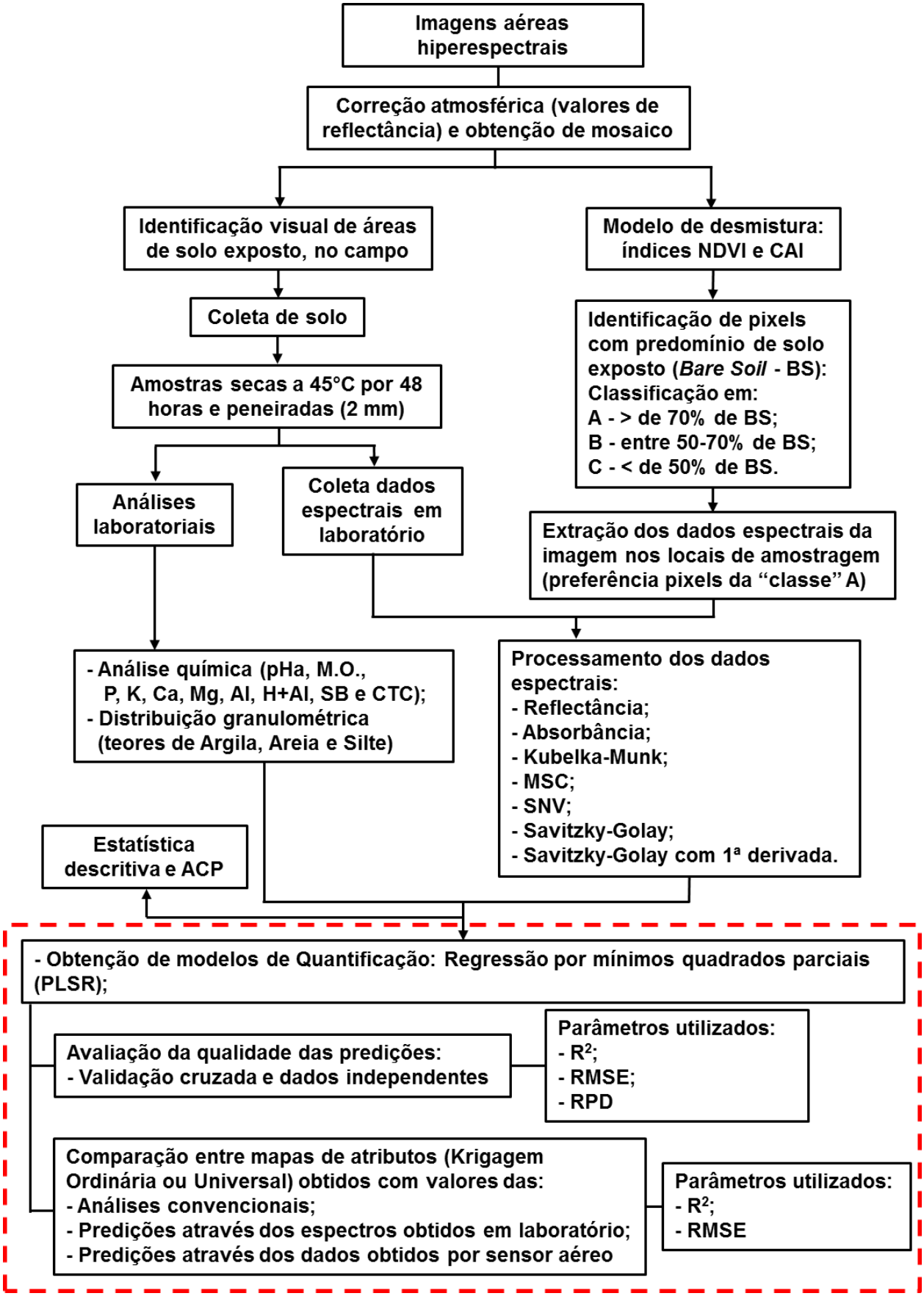


Figura 6 - Descrição das etapas e procedimentos adotados durante o trabalho, em vermelho destacada a fase de processamento dos dados.

3.2.7.1 Quantificação de atributos físicos e químicos do solo através de seu comportamento espectral

3.2.7.1.1 Obtenção de modelos de quantificação de atributos do solo

A quantificação de atributos físicos e químicos do solo através dos dados radiométricos obtidos em laboratório e por imagem aérea hiperespectral foi realizada construindo-se modelos de predição, empregando-se para isto o método de regressão por mínimos quadrados parciais (*Partial least Squares Regression* – PLSR), através de metodologia descrita por Wold; Martens e Wold (1983).

O PLSR é um dos métodos mais amplamente utilizado em quimiometria para calibração multivariada e o interesse por esta técnica é crescente em outras áreas de estudo como a ciência do solo, na qual sua aplicação na predição de atributos do solo vem sendo bastante estudada nos últimos anos (MCCARTY et al., 2002; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; NANNI e DEMATTÊ, 2006; VISCARRA-ROSSEL et al., 2006b; SUMMERS ET AL. 2011), inclusive com o desenvolvimento de softwares e pacotes especialmente desenvolvidos para quantificação de atributos do solo (VISCARRA-ROSSEL, 2008; TERHOEVEN-URSELMANS et al., 2010).

Os processos envolvidos na PLSR podem ser resumidos da seguinte forma, segundo Varmuza e Filzmoser (2009): os dados espectrais (variáveis ***x***) são primeiramente transformados em variáveis latentes intermediárias (combinações lineares das variáveis originais – chamados componentes ou *scores*), as quais são utilizadas na regressão com um determinado atributo do solo (variável ***y***). Alguns aspectos importantes desta análise são que o método aceita um grande número de variáveis de predição (podendo-se utilizar um número de variáveis superior à quantidade de observações) sendo insensível a colinearidade entre estas. Além disto, o modelo linear resultante contém coeficientes de regressão correspondente ao número de fatores adotados, mais um coeficiente de intersecção, e o número de fatores utilizados no modelo determina a complexidade deste e pode ser otimizado para melhores performances de predição.

Como aspectos matemáticos principais a regressão PLS pode ser explicada como um algoritmo numérico que maximiza uma função objetivo, sobre certas condições, sendo esta função objetivo a covariância entre os *scores* das variáveis ***x*** e a variável ***y***. O objetivo do método PLSR é encontrar uma relação linear como a descrita pela equação (11), entre as variáveis ***x*** e ***y***:

$$y = Xb + e \tag{11}$$

Onde ***b*** são os coeficientes de regressão, ***e*** o termo relativo ao erro de predição e ***X*** a matriz composta pelas variáveis de predição ***x***. Entretanto, ao invés desta relação ser estabelecida de forma direta esta é obtida através de variáveis lineares latentes, as quais podem ser representadas de acordo com o modelo de regressão expresso pela equação (12):

$$X = TP^T + E_x \tag{12}$$

Onde ***T*** é a matriz contendo os autovalores (*scores*) das variáveis ***x***, ou seja, combinações lineares destas e podem assim ser considerados como uma boa síntese dos valores apresentados; ***P*** é a matriz de autovetores (*loadings*) relativos às variáveis latentes empregadas; e $\boldsymbol{E_x}$ a matriz de erro relativo à representação dos valores de ***x*** por autovalores.

Considerando que usualmente mais de um fator (componente) são utilizados para modelar a variável ***y*** a partir das variáveis ***x***, e que o número ótimo de fatores a ser empregado pode ser estimado por validação cruzada, a relação entre os *scores* da variável ***x*** e a variável ***y*** pode ser representada como na equação (13):

$$y = Td + h \tag{13}$$

Onde ***d*** representa os parâmetros de regressão para cada componente e ***h*** os resíduos relativos à regressão.

Desta forma, fica claro que o diferencial do método é o uso de variáveis latentes na regressão com determinado atributo, e a forma de obtenção destas variáveis é caracterizada pela otimização da covariância entre os scores das

variáveis ***x*** e a variável ***y***. Utilizou-se o algoritmo *Kernel* para a obtenção dos modelos de quantificação por PLSR, sendo este implementado através do pacote ***pls*** no programa R (MEVIK e WEHRENS, 2007; R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2008). Neste algoritmo são obtidos *scores* não correlacionados, e desta forma cada novo vetor de *scores* (fator) calculado representa variabilidade dos dados que ainda não foi representada pelos vetores de *scores* já obtidos. Isto é realizado através da deflação da informação (variância) contida nos vetores de *scores* calculados da variância total apresentada pelas variáveis ***x***, antes do cálculo de um novo vetor de *scores*.

Uma melhor descrição das etapas matemáticas envolvidas no método, principalmente em relação ao problema de otimização da covariância entre as variáveis ***x*** e ***y*** e as condições deste problema, podem ser encontradas em Mevik e Wehrens (2007) e Varmuza e Filzmoser (2009).

Para a obtenção dos modelos de quantificação o total de amostras analisadas (89 pontos) foi dividido em duas partes: a primeira, contendo aproximadamente dois terços das amostras (60 pontos), foi utilizada como conjunto de treinamento; e a segunda, contendo cerca de um terço das amostras (29 pontos) como conjunto de validação.

Com o conjunto de treinamento foram criados modelos com complexidade crescente (modelos com número crescente de fatores), e para cada nível de complexidade (número de fatores) a validação cruzada do tipo *leave-one-out* foi empregada. Neste procedimento de validação uma amostra é retirada por vez antes da geração do modelo de predição e o modelo gerado é utilizado para predizer o valor do atributo modelado na amostra que foi retirada. Este procedimento é repetido para todas as amostras em cada nível de complexidade, desta forma obtém-se uma predição para cada amostra utilizando os diferentes modelos gerados, com a variação no número de fatores adotados.

As predições feitas tornam possível calcular os resíduos (erros de predição) associados a determinado número de fatores empregados, e assim pode-se avaliar qual o número de fatores mais adequado para a predição de determinado atributo.

Assim sendo, foram calculadas medidas a fim de servirem como critérios na escolha do número de fatores a serem utilizados nas predições. O primeiro critério considerado foi o ajuste dos valores observados em laboratório em relação aos valores preditos (coeficiente de determinação - R^2), dado pela equação (14).

$$R^2 = 1 - \left({}^{RSS}/_{TSS} \right) \tag{14}$$

Onde RSS é a soma do quadrado dos resíduos (*Residual Sum of Squares*) e TSS é soma dos quadrados total (*Total Sum of Squares*), descritos pelas equações (15) e (16), respectivamente.

$$RSS = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2 \tag{15}$$

$$TSS = \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \bar{y} \right)^2 \tag{16}$$

Nas quais, $\mathbf{y_i}$ representa os valor observado do atributo para a amostra ***i***, $\mathbf{\hat{y}_i}$ o valor estimado do atributo para a amostra ***i***, $\bar{\mathbf{y}}$ a média para o atributo e ***n*** o número de observações. Foi considerada também como critério a raiz do erro quadrático médio de predição (*Root Mean Squared Error* – RMSE), representado pela equação (17).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \times \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - \hat{y}_i \right)^2} \tag{17}$$

No RMSE os valores são dados na mesma unidade do atributo, o que facilita a interpretação dos resultados. Ainda, foi empregado como critério a o fator RPD (*Relative Percent Deviation*), sendo este calculado pela razão entre o desvio padrão do atributo (*Standard Deviation* – SD) e o RMSE referente à predição deste atributo, de acordo com a equação (18).

$$RPD = {}^{SD}/_{RMSE} \tag{18}$$

Os valores obtidos de RPD foram avaliados segundo os parâmetros descritos por Chang et al. (2001), nos qual valores de RPD acima de 2 indicam modelos com desempenho ótimo na predição de determinado atributo, já valores de RPD entre 2 e

1,4 indicam desempenho intermediário de predição, e RPD menor que 1,4 caracteriza um modelo com desempenho ruim, realizando predições pouco acuradas.

O último critério considerado foi o parâmetro AIC (*Akaike's Information Criterion*), sendo este uma boa medida para comparar o desempenho de modelos, considerando sua complexidade. O cálculo do AIC é demonstrado na equação (19).

$$AIC = n \times \log\left({}^{RSS}/_{n}\right) + 2m \qquad (19)$$

Nesta equação o termo ***m*** representa o número de variáveis de regressão empregadas pelo modelo, assim modelos com mais fatores são penalizados se comparados a modelos com menos fatores, haja vista que valores menores de AIC indicam melhores modelos. Este parâmetro permite a escolha de modelos mais parcimoniosos que tenham bom desempenho preditivo e não possuam fatores em excesso, minimizando o problema de "superajuste" (*overfitting*), onde os modelos são ajustados demais ao conjunto de dados empregado na sua obtenção, mas podem apresentam resultados ruins quando aplicados a conjuntos de dados independentes.

Os melhores modelos, com o número mais adequado de fatores, foram utilizados na predição dos atributos para os dados do conjunto de validação. Assim, pode-se avaliar o desempenho dos modelos obtidos em dados não empregados na obtenção dos modelos. Esta avaliação foi feita utilizando os critérios descritos anteriormente (R^2, RMSE, RPD e AIC).

3.2.7.1.2 Pré-tratamento das leituras espectrais

Diversos tratamentos do espectro foram avaliados na obtenção dos modelos de quantificação por PLSR. Estes tratamentos foram aplicados antes da realização do PLSR, a fim de obter dados espectrais melhor relacionados às variáveis a serem modeladas. Alguns métodos de processamento do espectro baseiam-se principalmente em conceitos matemáticos, já outros levam também em consideração

os conceitos físico-químicos envolvidos no problema. A seguir são explicados os métodos adotados e a justificativa de sua utilização.

O primeiro dos métodos de transformação utilizado foi o cálculo da absorbância aparente, através da equação (20):

$$A = \log_{10}\left({}^{1}/_{R}\right) \tag{20}$$

Sendo ***A*** a absorbância aparente no comprimento de onda considerado e ***R*** a medida de reflectância neste mesmo comprimento de onda. Desta forma, a absorbância foi considerada como o logaritmo negativo da quantidade de luz que atinge o detector do espectrorradiômetro.

Foi realizada também a conversão dos dados em reflectância para unidades obtidas pela transformação Kubelka-Munk (KUBELKA e MUNK, 1931), de acordo com a equação (21):

$$KM = {}^{\left(1- R^2\right)}/_{(2 \times R)} \tag{21}$$

Onde ***KM*** é o valor transformado de reflectância, para determinado comprimento de onda. Ambos os pré-tratamentos descritos pelas equações 9 e 10 são empregados a fim de melhorar a linearidade dos dados espectrais obtidos, ou seja minimizar efeitos de espalhamento da energia eletromagnética refletida.

Também foi adotado como pré-tratamento o método MSC (*Multiplicative Scatter Correction*), descrito por Martens; Jensen e Geladi (1983), onde cada espectro obtido é corrigido para que apresente aproximadamente o mesmo nível de espalhamento observado em um “espectro ideal”, sendo neste caso adotado a média de todos os espectros como padrão. Este método foi aplicado através do pacote ***pls*** no programa R (MEVIK e WEHRENS, 2007) e é descrito na equação (22):

$$x_{ij}\,(MSC) = {}^{\left(x_{ij} - a_i\right)}/_{b_i} \tag{22}$$

Sendo que $\mathbf{a_i}$ representa o efeito aditivo e $\mathbf{b_i}$ o efeito multiplicativo da transformação, ambos os parâmetros são estimados para cada espectro através de regressão OLS (*Ordinary Least-Squares*). Originalmente o método foi desenvolvido para mitigar o efeito do espalhamento da energia eletromagnética (partículas menores espalham mais luz que partículas maiores) em medições de reflectância (WORKMAN Jr. e SPRINGSTEEN, 1997; VARMUZA e FILZMOSER, 2009).

A transformação SNV (*Standard Normal Variate*) também foi aplicada nos dados radiométricos (BARNES et al., 1989). Nesta, cada espectro é tratado separadamente, sendo realizada a normalização dos valores de reflectância da forma descrita na equação (23):

$$x_{ij}\,(\mathrm{SNV}) = \left(x_{ij} - \bar{x}_i\right) \Big/ s_i \qquad (23)$$

Com $\bar{\boldsymbol{x}}_{\boldsymbol{i}}$ representando a média e $\mathbf{s_i}$ o desvio padrão dos valores de reflectância do espectro ***i***. Desta forma, as absorbâncias transformadas tem média zero e desvio padrão igual a 1 em cada espectro. Assim como no método MSC, a transformação SNV foi desenvolvida para diminuir os efeitos do espalhamento da luz e variações no comprimento da trajetória feita pela energia eletromagnética, devido a este espalhamento.

Além dos valores em reflectância e a aplicação dos quatro pré-tratamentos descritos até aqui (absorbância, função Kubelka-Munk, MSC e SNV), foram realizados também a suavização do espectro e o cálculo da sua primeira derivada através do método descrito por Savitzky e Golay (1964). A suavização tenta reduzir ruídos aleatórios e assim remover picos estreitos presentes no espectro, enquanto a diferenciação auxilia na extração de informação importante contida no espectro, mas aumenta o ruído presente. Com o cálculo da primeira derivada linhas base aditivas são removida e, desta forma, espectros que se encontrem deslocados, em paralelo, em relação ao outro apresentarão espectros idêntico após a transformação (WORKMAN Jr. e SPRINGSTEEN, 1997; VARMUZA e FILZMOSER, 2009). Esta diferença entre linhas de base pode ser ocasionada por variações no ambiente de coleta entre leituras (*background*) e não necessariamente por mudanças na composição ou características das amostras analisadas. O método Savitzky-Golay se trata de uma regressão polinomial local, na qual para cada ponto do espectro

(comprimento de onda) uma soma ponderada dos valores vizinhos é calculada, sendo que os pesos atribuídos aos valores vizinhos determinam se uma suavização é aplicada ou se a derivada é calculada para o espectro. O número de vizinhos e o grau da polinomial utilizados determinam a intensidade da suavização aplicada. A equação (24) descreve a transformação realizada pelo método:

$$x_j^* = {}^1/_N \times \sum_{h=-k}^{k} \left(c_h x_{j+h}\right) \qquad (24)$$

Sendo $\mathbf{x_j^*}$ um novo valor de uma curva transformada (suavizada ou sua derivada), **N** a constante de normalização, **k** o número de valores vizinhos em cada lado de **j**, $\mathbf{c_h}$ os coeficientes que dependem do grau da polinomial utilizada e da finalidade do cálculo (suavização ou derivação).

Neste trabalho foram empregadas as polinomiais de segundo grau, com janelas de 7, 13 e 21 valores (contando o valor transformado e os vizinhos nos seus dois lados) para suavização das curvas obtidas. Além da simples suavização foram calculadas também as derivadas de primeiro grau, utilizando também polinomiais de segundo grau e janelas de 7, 13 e 21 elementos. Para aplicar o método Savitzky-Golay nas leituras espectrais obtidas foi utilizado o pacote ***signal*** no programa R (SIGNAL DEVELOPERS, 2011).

Todos os dados, independente do pré-tratamento adotado, foram centrados pela média antes da realização do PLSR, assim as médias dos dados, por comprimento de onda, foram subtraídas dos valores originais obtendo-se variáveis (comprimentos de onda) de média zero, facilitando alguns métodos envolvidos na análise multivariada dos dados.

Embora os pré-tratamentos propostos sejam técnicas estabelecidas em química analítica o seu uso em espectroscopia de imageamento, ou seja, em dados derivados de imagens obtidas por sensoriamento remoto hiperespectral, é pouco frequente. Entretanto, alguns autores, como Demetriades-Shah; Steven e Clark (1990) afirmam que no sensoriamento remoto a aquisição de dados sofre com interferências análogas (embora em diferentes escalas), onde o sinal recebido é influenciado pelo ambiente de coleta (*background*) além da contribuição de outros alvos na visada do sensor remoto. Desta forma, o uso de derivadas, por exemplo, pode ser útil no pré-processamento de dados hiperespectrais coletados por

sensores remotos, a fim de melhorar a capacidade de identificação e caracterização de diferentes alvos e reduzir o impacto de ruídos provenientes do ambiente nos processamentos realizados.

3.2.7.2 Mapeamento de atributos físicos e químicos do solo

Para espacializar os atributos do solo a partir dos valores observados nas análises convencionais e nas predições, utilizou-se a função semi-variograma a fim de representar a dependência espacial existente para cada atributo. Pode-se descrever o semi-variograma como a variância do erro cometido ao estimar um teor desconhecido na posição ***x+h***, considerando um ponto dado em ***x***. O semi-variograma pode ser representado pela equação (25).

$$y(h) = \frac{1}{2N(h)} \times \sum_{i=1}^{N(h)} \left[Z(x_i) - Z(x_i+h)\right]^2 \qquad (25)$$

Na qual, $\mathbf{y(h)}$ representa a variância média entre pares de pontos separados pela distância ***h***, $\mathbf{N(h)}$ o número de pares de pontos amostrados separados por esta distância, já $\mathbf{Z(x_i)}$ e $\mathbf{Z(x_i+h)}$ representam os valores de um atributo em dois pontos separados pela distância ***h***.

Para computar os semi-variogramas para os diferentes atributos estudados e realizar o ajuste de modelos teóricos aos semi-variogramas derivados dos dados foi empregado o pacote ***GeoR***, em ambiente computacional R (RIBEIRO Jr. e DIGGLE, 2001). Foram testados como modelos teóricos principalmente funções do tipo "*exponencial*" e "*Matern*", considerando a compatibilidade do comportamento descrito por estas famílias de funções e os dados estudados. Os parâmetros dos modelos ajustados foram estimados por máxima verossimilhança, como proposto por Diggle e Ribeiro Jr. (2007).

Para avaliar o grau de dependência espacial dos atributos foi utilizada a razão entre o patamar (*sill* - C) e a variância total representada no semi-variograma (*C* + *Co*, sendo *Co* o efeito pepita observado), como descrito por López (2009) e adaptado de Cambardella et al. (1994). Para este parâmetro, valores abaixo de 0,25 caracterizam dependência espacial fraca, entre 0,25 e 0,75 dependência espacial moderada e maiores que 0,75 dependência espacial forte.

Os modelos teóricos ajustados aos dados foram empregados na obtenção de mapas de atributos do solo por Krigagem Ordinária ou Krigagem Universal, sendo ajustados modelos não somente aos valores observados nas análises convencionais de solo, mas também aos valores preditos utilizando leituras espectrais obtidas em laboratório e por sensor aéreo hiperespectral.

A escolha entre Krigagem Ordinária ou Universal, como método de interpolação, foi realizada através da comparação visual entre semi-variogramas obtidos para serem empregados nos respectivos métodos. Desta forma foi computando o semi-variograma, para determinado atributo, sem tendência espacial, o qual poderia ser utilizado na krigagem ordinária, e com tendência espacial, podendo este ser empregado na krigagem universal. Os semi-variogramas obtidos foram comparados visualmente sendo adotado o que descrevia o processo espacial da forma mais coerente, ou seja, no qual a semi-variância era crescente à medida que aumentava a distância entre pares de amostras (comportamento típico esperado de um semi-variograma). As tendências testadas foram as polinomiais de primeiro e segundo grau das coordenadas cartesianas de posicionamento das amostras (DIGGLE e RIBEIRO JR., 2007).

Também foi empregado, quando necessário, à transformação dos dados, buscando uma distribuição mais próxima da normal, através da transformação *Box-Cox*, como descrito por Varmuza e Filzmoser (2009).

Assim, para cada atributo modelado foram obtidos três mapas distintos: (a) o primeiro derivado dos resultados das análises convencionais (89 pontos amostrais); (b) o segundo interpolado a partir do conjunto de treinamento (60 amostras) mais os valores preditos, para o conjunto de validação (29 amostras), a partir dos espectros medidos em laboratório; (c) e o terceiro originado pela espacialização dos valores quantificados "*pixel a pixel*", ou seja, dos valores estimados utilizando os espectros da imagem aérea hiperespectral. Neste último caso, foram empregadas cerca de 1300 predições para cada atributo, as quais foram realizadas apenas para pixels com mais de 70% de solo exposto.

Os mapas derivados de valores preditos, através de leituras espectrais, foram comparados aos mapas obtidos a partir dos resultados das análises de solo convencionais, a fim de avaliar a capacidade de representação da variabilidade espacial dos atributos pelas predições. Para isto, utilizaram-se dois critérios: (a) o

ajuste (coeficiente de determinação – R^2) dos valores obtidos pela interpolação dos resultados das análises convencionais, em relação aos valores obtidos pela interpolação dos dados estimados através do espectro (equação 14); (b) e a raiz do erro quadrático médio (*Root Mean Squared Error* – RMSE), considerando os valores obtidos pela interpolação dos dados das análises convencionais como valores observados, e como valores preditos o resultado da interpolação das predições feitas a partir do espectro (equação 17).

3.3 Resultados e Discussão

3.3.1 Análises químicas, físicas e do comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR

Apesar das dimensões relativamente pequenas da área estudada, e das parcelas amostradas, foi constatada variabilidade considerável nos atributos do solo determinados em laboratório. Na Tabela 3.1 são descritos os parâmetros de média e dispersão para as 89 amostras coletadas.

Tabela 3.1 - Caracterização das amostras de solo coletadas na área de estudo, 89 amostras de 0 a 20 cm de profundidade.

Parâmetros	pH em água	M. O.	P	K	Ca	Mg	Al	H+Al	SB	CTC	V	m	Argila	Areia	Silte
		$g.kg^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	----------	----------	----------	$mmol_c.kg^{-1}$	----------	----------	----------	----- %	------	--------	$g.kg^{-1}$	---------
Mínimo	4.4	16.7	4.4	0.8	1.0	1.0	0.2	21.4	3.9	37.0	5.8	0.4	328.9	202.6	148.4
Máximo	6.2	38.5	289.7	7.9	53.0	15.0	10.4	71.4	72.9	109.2	75.4	72.6	618.6	512.1	301.1
Média	5.4	29.7	58.9	2.5	19.9	6.0	1.7	44.0	28.4	72.3	38.5	8.9	485.4	322.3	192.3
Mediana	5.4	29.9	15.2	1.9	18.0	6.0	0.7	41.0	25.9	68.1	40.1	2.8	486.7	314.0	187.5
Desvio Padrão	0.4	4.6	87.2	1.7	10.0	2.9	2.1	12.0	13.2	16.6	13.4	14.2	75.0	80.5	28.2
Coef. de Variação	7.0	15.5	148.1	70.4	50.5	47.5	126.8	27.4	46.4	22.9	34.7	159.1	15.5	25.0	14.6
Assimetria[1]	-0.4	-0.6	1.6	1.4	0.4	0.9	2.1	0.4	0.3	0.5	-0.3	2.4	-0.1	0.3	1.3
Curtose[2]	2.6	3.5	3.8	4.1	2.9	3.7	6.9	2.2	2.9	2.6	3.2	8.7	1.9	1.9	5.2

[1] – adimensional: 0 indica distrib. normal, > 0 distrib. leptocúrtica (desvios da média tendem a ser mais baixos que a mesma), < 0 distrib. platicúrtica (desvios da média tendem a ser mais altos que a mesma);
[2] - adimensional: valores > 0 indica distrib. alongada na média, caudas mais expressivas em relação a distrib. normal.

A análise granulométrica indicou que a maioria dos pontos amostrais pertence à classe textural argilosa, contendo entre 350 e 600 g kg^{-1} de argila, sendo algumas poucas amostras de textura média (menos de 350 g kg^{-1} de argila) ou de textura muito argilosa (mais de 600 g kg^{-1} de argila) (EMBRAPA, 1999).

Quanto aos teores de matéria orgânica observados estes puderam ser incluídos, na sua maioria, no intervalo entre 2,5 a 3,5 g kg^{-1}, sendo estes valores relativamente elevados considerando a classe de solo (Latossolo Vermelho, textura argilosa), em comparação, por exemplo, aos valores reportados por Bayer et al. (2006), para solos da mesma classe e com textura semelhante. Isto provavelmente ocorreu devido à presença de resíduos culturais (palhada) e/ou vegetação em boa parte das áreas onde foram coletadas as amostras, como pode ser observado na Figura 3 e no resultado da análise de desmistura para os pixels das imagens utilizadas (ANEXO A), sendo estas as prováveis fontes de material orgânico para o solo.

Os teores de bases como potássio, cálcio e magnésio, assim como os teores de fósforo, apresentaram variação (Tabela 3.1) principalmente entre os diferentes locais de coleta (parcelas) na área de estudo (ANEXO B). Esta variação pode ter ocorrido pela provável diferença nas culturas implantadas anteriormente, e assim na adubação e correção do solo, entre as parcelas. Valores mais elevados de nutrientes foram observados, por exemplo, na parcela 3, principalmente para cálcio e fósforo, na qual havia cultivo de hortaliças antes da coleta das amostras.

Esta variação esteve presente também nos valores de saturação por bases (V%) e de pH em água do solo (Tabela 3.1). A maioria dos valores de V% concentrou-se na faixa de 30 a 50%, estando abaixo das exigências de boa parte das plantas cultivadas (RAIJ et al., 1996). Como a maior parte das amostras apresentou valores de pH em água maiores que 5,0, valor a partir do qual a disponibilidade de alumínio começa a diminuir (MALAVOLTA, 1979), na maior parte do pontos de coleta pouco alumínio disponível foi constatado, menos que 2 $mmol_c$ kg^{-1}. O mesmo foi observado para a saturação do solo por alumínio (m%), em geral os valores de m% foram baixos, menores que 20%.

A distribuição dos valores de matéria orgânica, CTC, V% e teor de argila determinados para as amostras da área são representados na Figura 7, para os demais atributos esta destruição é ilustrada nos ANEXO C.

Uma análise de correlação foi realizada entre os atributos do solo, a fim de determinar as associações existentes entre eles (ANEXO D). Com relação à CTC devem-se ressaltar as correlações observadas com os teores de argila (0,69) e areia (-0,72). Estes atributos tem relação com a capacidade de troca de cátions do solo, pois quanto maior os teores de argila, e menores os de areia, maior a quantidade de

minerais da fração argila presentes no solo e dentre estes, provavelmente, de filossilicatos, como a caulinita, os quais possuem um número considerável de complexos de troca, contribuindo assim com a CTC.

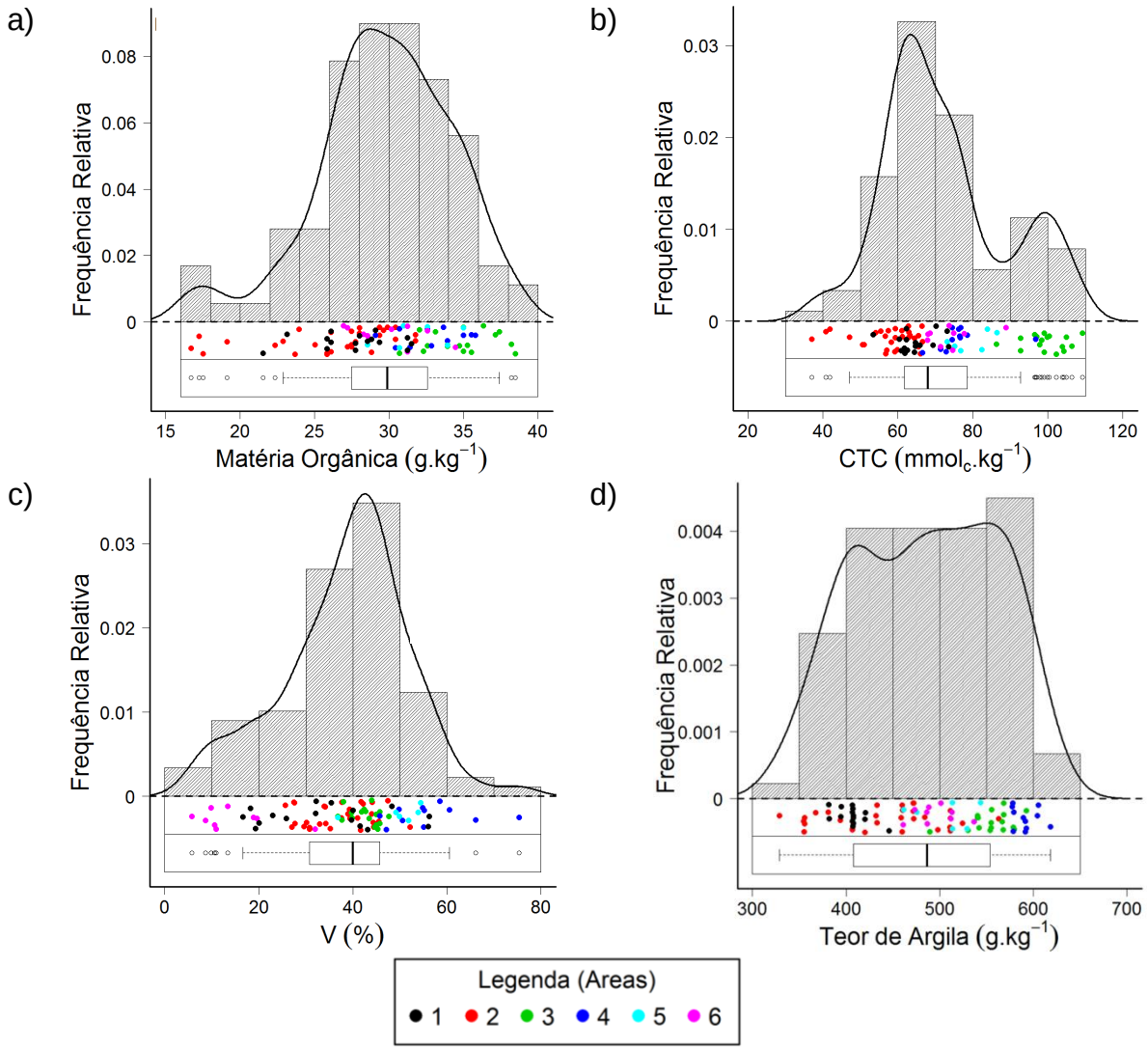


Figura 7 - Box-plot, digrama de dispersão, histograma e gráfico de densidade de probabilidade para valores observados de matéria orgânica (a), CTC (b), V% (c) e teor de argila (d) nas 89 amostras analisadas.

Entretanto, a correlação da CTC com a matéria orgânica (0,85) foi maior do que a observada para os teores de argila e areia (ANEXO D), o que é esperado para a camada superficial (0 a 20 cm) de solos bastante intemperizados, haja vista que nestes predominam minerais de carga variável na fração argila, como óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro e alumínio, os quais contribuem pouco para o complexo de troca do solo. Desta forma, como a correlação entre a CTC e a matéria orgânica é grande pode-se afirmar que boa parte da CTC nesta profundidade é

derivada de complexos de troca presentes na matéria orgânica. Ainda, a textura do solo apresentou forte correlação com os teores de matéria orgânica, o que pode também ter influenciado o aumento da CTC em amostras com maior teor de argila.

As bases (K, Ca e Mg) apresentaram correlação principalmente com o pH em água do solo (ANEXO D), o que é de se esperar, haja vista que em solos corrigidos, onde o pH é mais elevado a quantidade de cátions aumenta pois são adicionados juntamente com o corretivo (Ca e Mg) e ao mesmo tempo aumenta a capacidade de retenção destes cátions pelo solo, com a precipitação do alumínio e diminuição da saturação da CTC do solo por este elemento.

O comportamento espectral médio das amostras, em reflectância, é apresentado na Figura 8 (a, c). As curvas espectrais obtidas variaram quanto ao albedo ao longo de toda a região do Vis-NIR-SWIR, o que pode ser percebido através do desvio padrão observado para as leituras espectrais. Esta variação está presente tanto nas leituras coletadas em laboratório quanto nos dados do sensor aéreo hiperespectral. Isto pode ter sido ocasionado, principalmente, pela variação nos teores de matéria orgânica e na textura das amostras analisadas, uma vez que o aumento da quantidade de matéria orgânica causa diminuição do albedo, principalmente na região do visível, assim como o aumento dos teores de argila, por exemplo, intensifica a absorção ao longo de todo o espectro eletromagnético no Vis-NIR-SWIR (BAUMGARDNER et al., 1985; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; COZZOLINO e MORÓN, 2006; STENBERG et al., 2010).

Com relação ao comportamento espectral médio após a remoção do contínuo (Figura 8 - b, d) é possível observar uma menor variabilidade entre amostras (menor desvio padrão). Uma vez que a remoção do contínuo destaca as feições de absorção, e que as feições mais intensas no Vis-NIR-SWIR são ocasionadas principalmente por constituintes minerais do solo (HUNT, 1977; SCHEINOST et al., 1998; VISCARRA ROSSEL et al 2006a; STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010), pode-se afirmar que a composição mineralógica das amostras varia pouco.

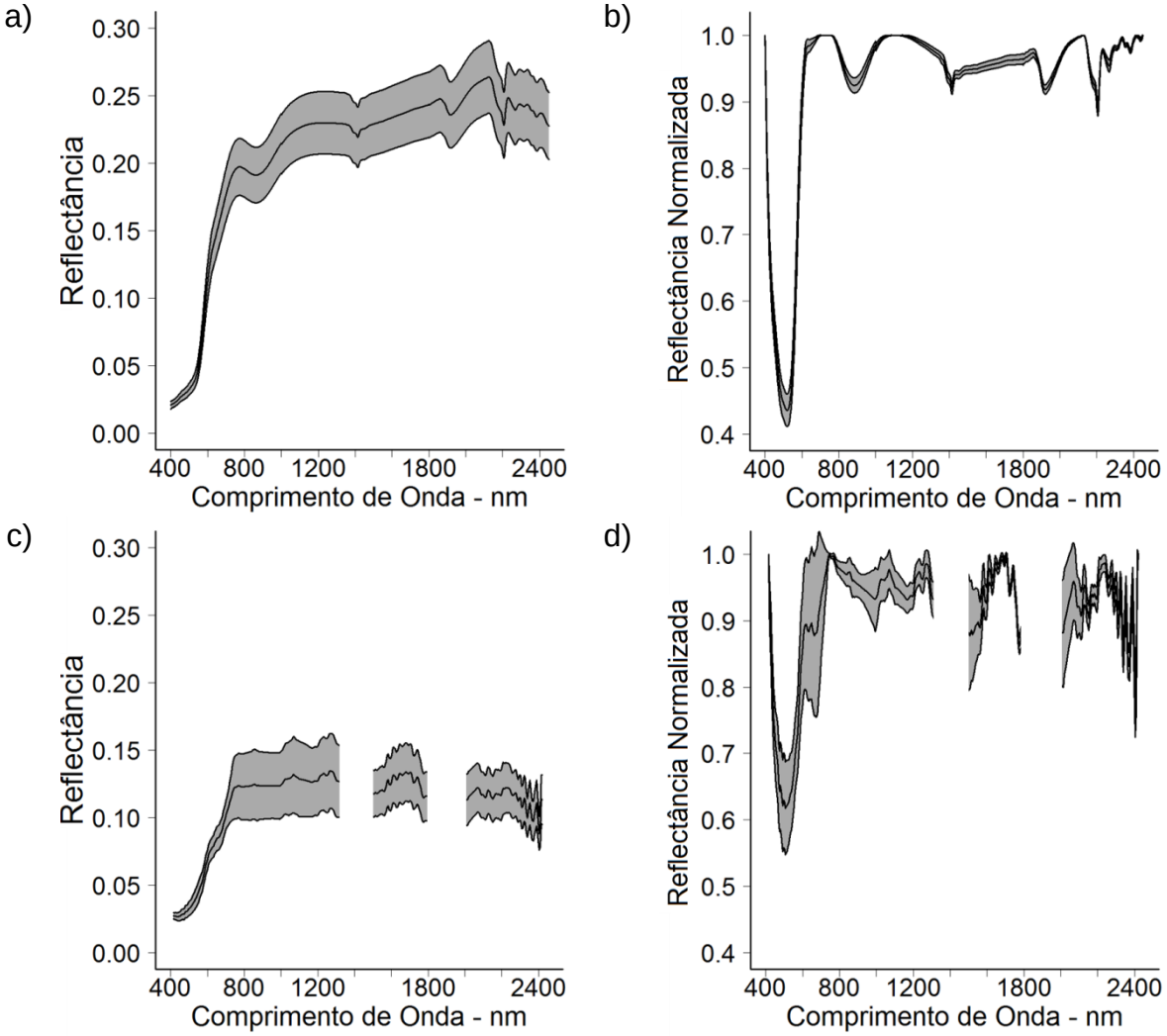


Figura 8 - Comportamento espectral médio das amostras de solo, valores em reflectância (a, c) e após remoção do contínuo (b, d), limites inferior e superior representam o desvio padrão. Dados espectrais coletados em laboratório (a, b) e por sensor aerotransportado (c, d).

A maior fonte de variabilidade das amostras, em relação à mineralogia, parece estar associada aos teores de óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro, pois as feições centradas em 550 e 860 nm são as que apresentam maior desvio padrão (Figura 8 – b, d). O posicionamento destas feições de absorção indica que a hematita é a forma mais abundante, em relação aos outros minerais contendo ferro presentes no solo como a goethita (SCHEINOST et al., 1998; RICHTER et al. 2009). Além disto, a variação observada se dá principalmente em relação aos teores e não quanto ao tipo de óxido, hidróxido ou óxi-hidróxido presente, tendo em vista que não há variação quanto ao posicionamento das feições de absorção, somente quanto à profundidade das feições centradas 550 e 860 nm.

Quanto aos filossilicatos pode-se afirmar que a constituição das amostras (Figura 8 – b, d) é predominantemente caulinítica, ocorrendo feição de absorção bastante intensa em 2200 nm. O filossilicato presente mais abundante é a caulinita devido à pequena intensidade da banda de absorção centrada em 1900 nm, a qual, em amostras secas, auxilia na distinção de amostras contendo filossilicatos 2:1 com água em sua estrutura de amostras contendo somente filossilicatos 1:1, como a caulinita, que não possuem água estrutural (VISCARRA ROSSEL et al 2006a; STENBERG et al., 2010). Ocorre também feição de absorção característica de gibsita (hidróxido de alumínio), centrada em 2260 nm, nas amostras analisadas.

A distinção de feições de absorção tornou-se mais difícil quando utilizadas informações espectrais coletadas por sensor aerotransportado, principalmente quanto às feições de absorção localizadas a partir de 2000 nm, como as referentes às vibrações fundamentais dos grupos Al-OH e O-H dos filossilicatos e óxido de alumínio. De forma geral, tanto o albedo das curvas espectrais, como um todo, quanto à intensidade das feições de absorção foram atenuados nos dados aéreos, em relação aos dados obtidos em laboratório (Figura 8).

As informações espectrais obtidas foram utilizadas em Análises de Componentes Principais (ACP), a fim de resumir a variabilidade dos dados radiométricos e, desta forma, facilitar a comparação do comportamento espectral do solo nos diferentes pontos de coleta.

Na ACP efetuada com dados espectrais de laboratório, considerando os valores em reflectância (Figura 9 – a, b, c), cerca de 96,4% da variabilidade dos dados é representada pela Componente Principal (CP1). Esta CP é influenciada principalmente pela reflectância nos comprimentos de onda maiores que 700 nm (NIR-SWIR), como pode ser constatado através dos valores do autovetor da CP1 na Figura 10 (a). Embora a CP1 represente muito bem a variabilidade dos dados espectrais, não é possível descrever, através desta CP, um agrupamento entre as amostras pertencentes às mesmas parcelas de coleta no campo na Figura 9 (a, b), mesmo quando a CP1 é associada a CP2 (2.8%). Os coeficientes da CP2, ao contrário dos da CP1, indicam grande contribuição da região do visível, entretanto esta contribuição é oposta a dos comprimentos de onda maiores que 2000 nm (Figura 10 – a).

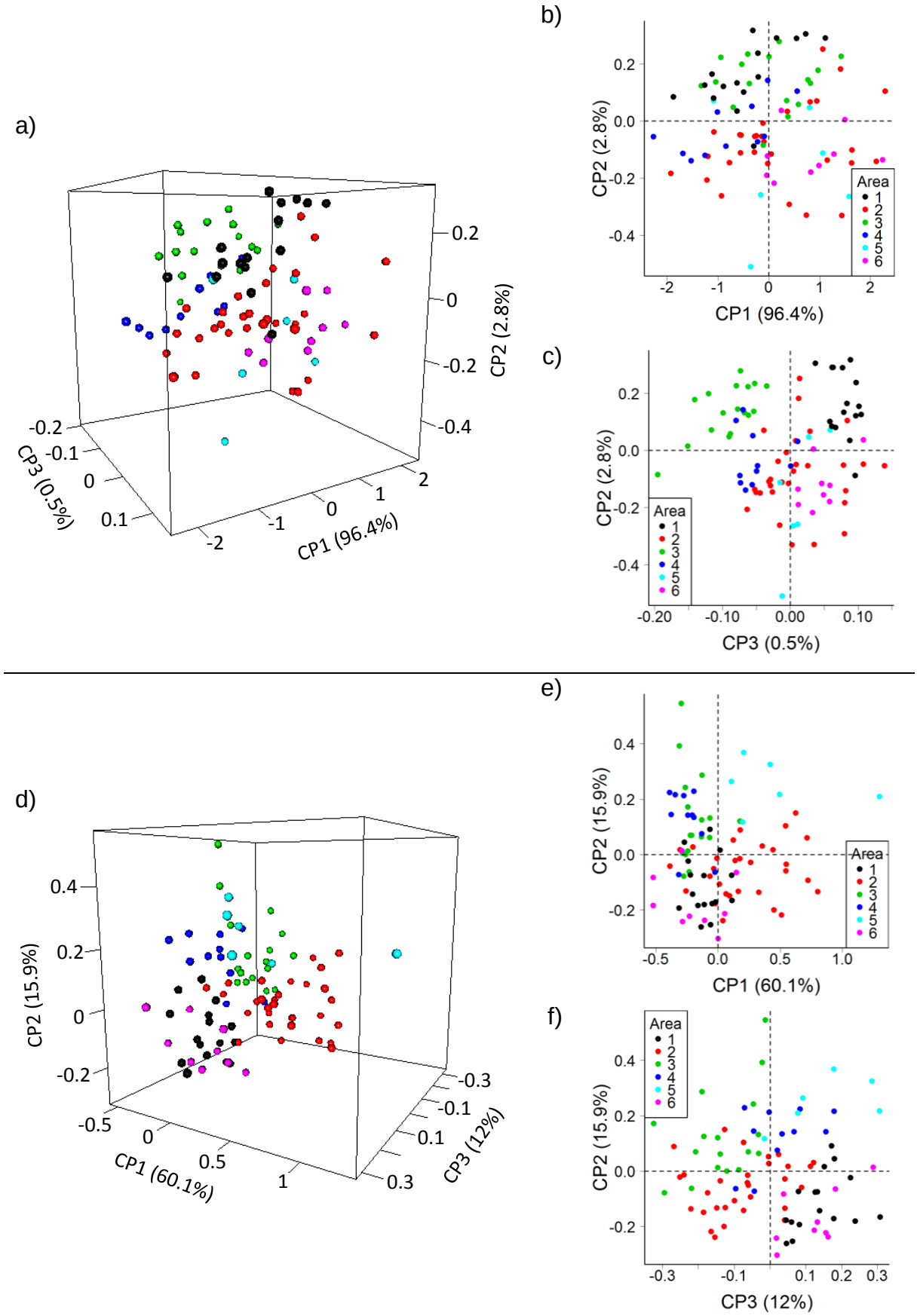


Figura 9 - Autovalores (“scores”) para ACP realizada com dados espectrais obtidos em laboratório. Dados em reflectância (a,b,c) e após remoção do contínuo (d,e,f).

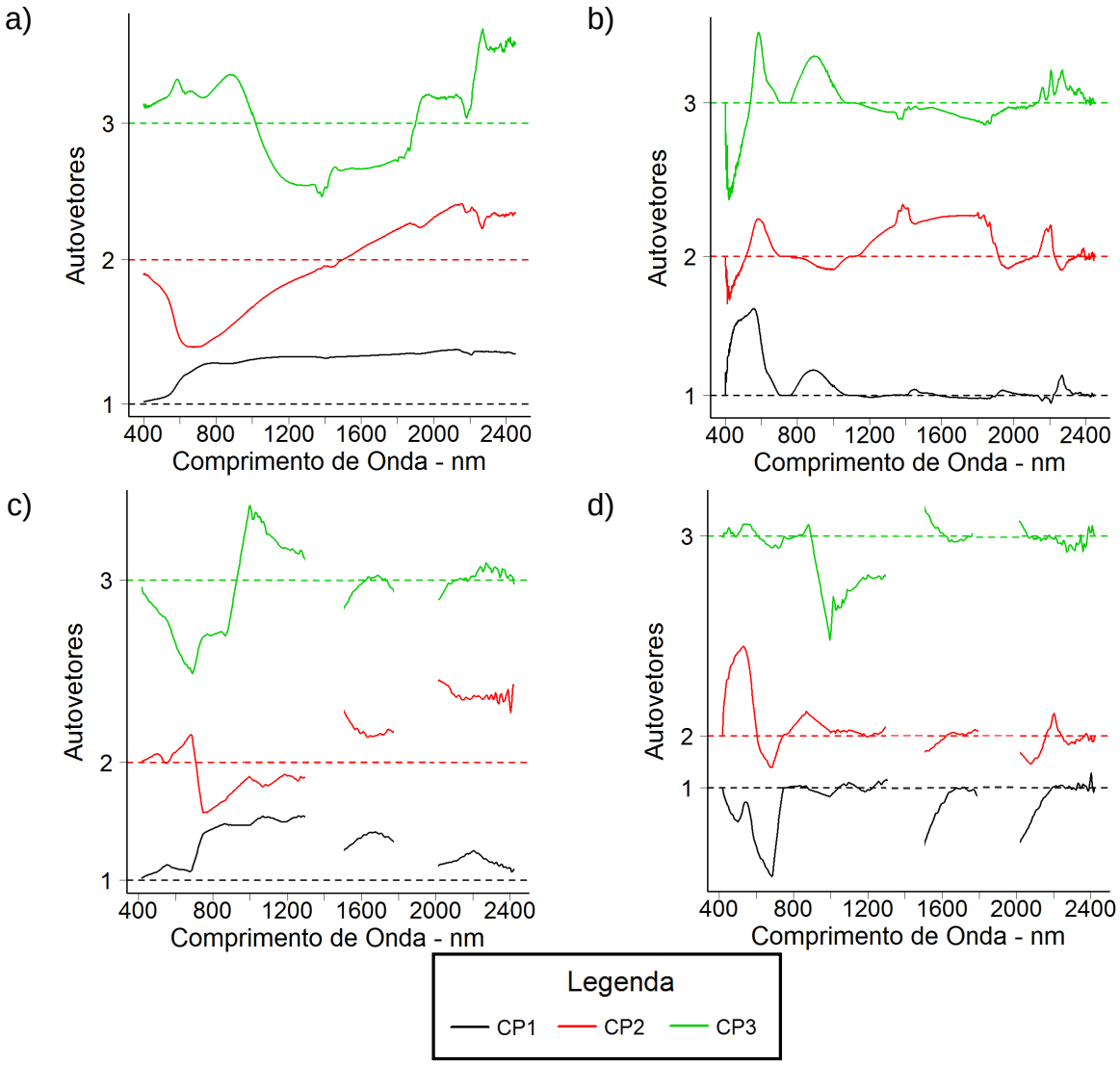


Figura 10 - Autovetores dos três primeiros componentes principais referentes aos dados radiométricos coletados em laboratório (a, b) e por sensor aéreo hiperespectral (c, d). Dados utilizados na ACP em valores de reflectância (a, c) e após remoção do contínuo (b, d).

Já na CP3 o autovetor correspondente apresenta valores semelhantes no visível e em comprimentos de onda maiores que 2000 nm, sendo estes valores opostos aos coeficientes da região entre 1000 e 2000 nm.

Desta forma, a CP3 está relacionada ao albedo do solo entre 1000 e 2000 nm, em contraste com as regiões onde ocorrem as principais feições de absorção para óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro e alumíno, assim como para filossilicatos (até cerca de 1000 nm e a partir de 2000 nm). Através da CP3 é possível associar melhor as amostras pertencentes às mesmas parcelas de coleta (Figura 9 – c), e desta forma, pode-se afirmar que mesmo representando pouco da variabilidade

espectral (0,5%) a CP3 está mais relacionada à variabilidade dos atributos do solo na área estudada.

Além disto, foram realizadas análises de correlação entre os autovalores obtidos nas ACPs e os atributos do solo, sendo os resultados apresentados na Tabela 3.2. Para a ACP feita com os dados espectrais de laboratório (valores em reflectância), a CP3 foi a que apresentou maiores coeficientes de correlação com os atributos do solo, principalmente com a textura (teores de argila e areia), conteúdo de matéria orgânica, CTC, potássio e cálcio.

Nas amostras com albedo menor (maior teor de argila e matéria orgânica), por exemplo, foi observada maior absorção na região do visível e acima de 2000 nm, em feições de absorção relativas aos óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro, alumínio e filossilicatos. Este padrão pôde ser representado através da CP3 justificando sua melhor correlação com os atributos do solo.

Tabela 3.2 - Coeficientes de correlação entre os autovalores (*scores*) obtidos pelas ACPs dos dados espectrais e atributos físico-químicos das 89 amostras solo.

Atributos	Laboratório						Imagem					
	Reflectância			Contínuo removido			Reflectância			Contínuo removido		
	CP1	CP2	CP3	CP1	CP2	CP3	CP1	CP2	CP3	CP1	CP2	CP3
pH em água	**-0.27****	0.12	**-0.48****	-0.02	**0.50****	**-0.23***	0.09	-0.16	**-0.21***	0.15	**0.34****	**0.32****
M. O.	-0.05	**0.29****	**-0.59****	**-0.38****	**0.47****	-0.09	**0.21***	**-0.47****	-0.14	**0.48****	-0.01	**0.32****
P	0.00	**0.37****	**-0.64****	**-0.26***	**0.45****	**-0.37****	**0.64****	**-0.64****	-0.06	**0.82****	**0.25***	0.04
K	-0.19	0.04	**-0.63****	-0.06	**0.47****	**-0.37****	0.17	**-0.64****	-0.04	**0.66****	0.02	**0.33****
Ca	-0.20	0.20	**-0.60****	-0.14	**0.58****	**-0.23***	0.21	**-0.36****	-0.18	**0.35****	**0.26***	**0.27****
Mg	**-0.34****	0.12	**-0.31****	-0.13	**0.46****	0.05	-0.14	0.10	-0.14	-0.14	0.20	**0.37****
Al	**0.30****	-0.13	**0.37****	-0.20	**-0.41****	**0.35****	-0.08	0.13	0.00	-0.16	**-0.39****	-0.15
H+Al	**0.22***	**0.24***	**-0.23***	**-0.38****	0.03	-0.01	**0.43****	**-0.47****	0.03	**0.60****	-0.18	-0.07
SB	**-0.25***	0.19	**-0.61****	-0.14	**0.60****	**-0.21***	0.15	**-0.34****	-0.17	**0.32****	**0.24***	**0.33****
CTC	-0.03	**0.32****	**-0.66****	**-0.39****	**0.50****	-0.18	**0.43****	**-0.61****	-0.12	**0.69****	0.07	**0.21***
V	**-0.34****	0.02	**-0.38****	0.09	**0.46****	-0.19	-0.10	-0.06	-0.14	-0.03	**0.27****	**0.29****
m	**0.29****	-0.14	**0.35****	-0.21	**-0.40****	**0.33****	-0.06	0.11	-0.03	-0.14	**-0.39****	-0.15
Argila	-0.15	0.04	**-0.72****	**-0.52****	**0.44****	**-0.21***	-0.03	**-0.50****	**-0.32****	**0.33****	**-0.24***	**0.44****
Areia	0.04	0.03	**0.72****	**0.39****	**-0.53****	0.16	0.03	**0.56****	**0.36****	**-0.36****	**0.23***	**-0.44****
Silte	**0.28****	-0.18	-0.12	**0.27****	**0.36****	0.12	-0.01	**-0.27****	-0.17	0.16	-0.02	0.09

* - significativo a um nível de significância de 5%.
** - significativo a um nível de significância de 1%.

Através da ACP dos dados espectrais obtidos em laboratório, após a remoção do contínuo (Figura 9 – d, e, f), observa-se também que para as CPs nas quais os valores do autovetor correspondente são intensificados nas regiões do visível e nos comprimentos de onda superiores a 2000 nm, que no caso foram as CP1 (60,1%) e CP2 (15,9%) (Figura 10), há melhor segregação das amostras coletadas em parcelas diferentes, e ao mesmo tempo os autovalores destas CPs tem maior correlação com os atributos do solo (Tabela 3.2)

Considerando que através da remoção do contínuo são destacadas as feições de absorção, e que após esta remoção as correlações dos dados radiométricos com os atributos do solo diminuem, pode-se afirmar que, além das feições de absorção, o albedo das curvas espectrais foi importante na descrição da variabilidade dos atributos através do espectro.

Nos dados coletados por sensor aéreo hiperespectral é possível observar o mesmo padrão constatado nos dados em laboratório, seja para os valores em reflectância ou após a remoção do contínuo.

De maneira que, os autovetores com coeficientes semelhantes na região do visível e na região após 2200 nm (Figura 10 – c, d), sendo estes ao mesmo tempo opostos aos observados para a região entre 1000 e 2000 nm (para os dados em reflectância), são os autovetores das CPs que melhor segregaram amostras das mesmas parcelas (Figura 11). Estas CPS também apresentaram melhor correlação com os atributos do solo, principalmente com os teores de argila, areia e de matéria orgânica (Tabela 3.2). Para os dados do sensor aéreo em reflectância as melhores correlações entre autovalores e atributos do solo foram observadas para a CP2 (19,5%), já para os dados submetidos à remoção do contínuo foram obtidas para a CP1(73,0%) e CP3 (5,4%).

Assim sendo, de forma geral os componentes do solo que mais influenciaram a diferenciação das amostras através da resposta espectral foram principalmente a textura e matéria orgânica, além dos teores de óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro, alumínio e de filossilicatos. Portanto, é provável que toda a correlação existente entre os demais atributos e o comportamento espectral do solo seja uma forma indireta de correlação através destes atributos.

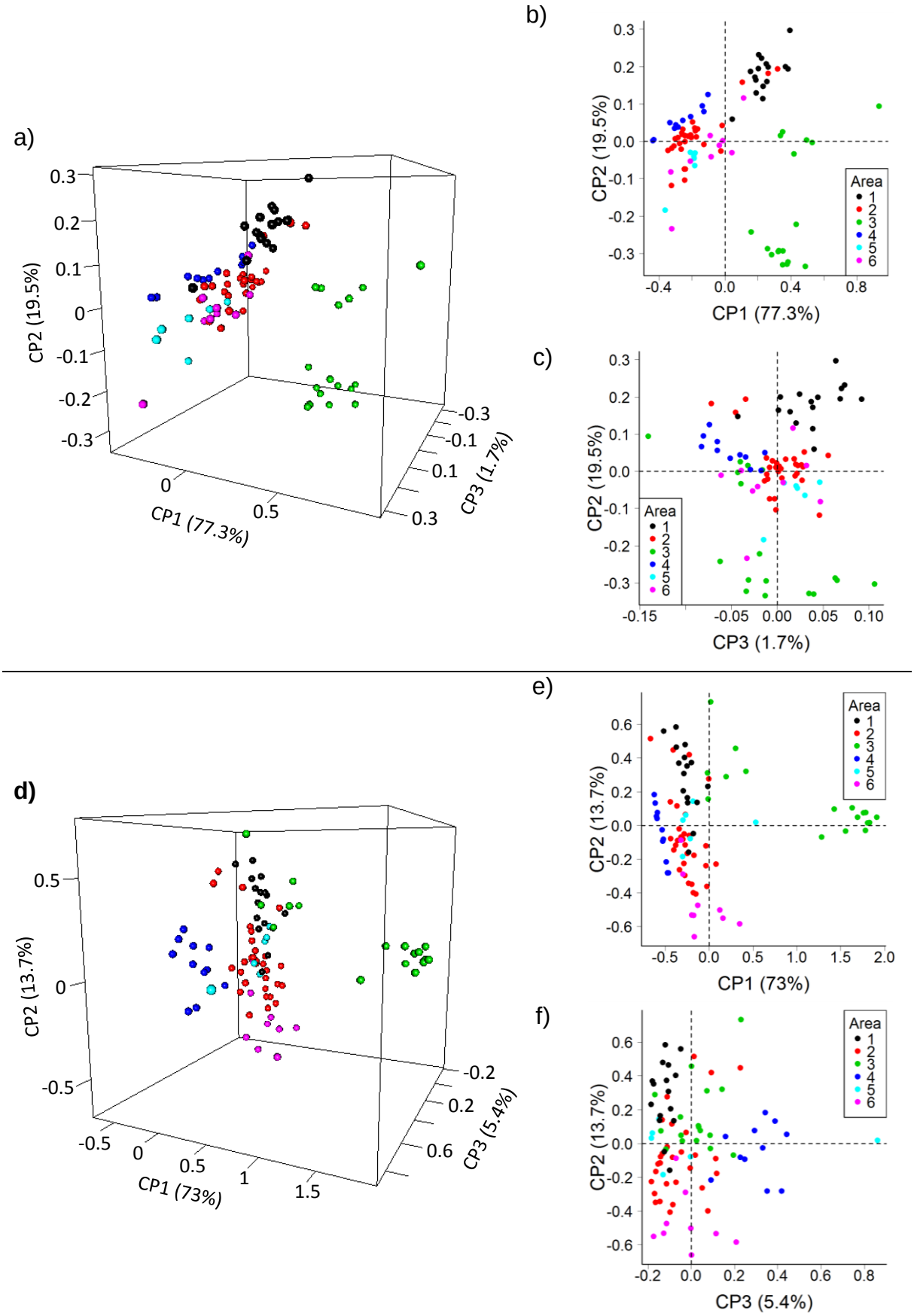


Figura 11 - Autovalores (“scores”) para ACP dos dados espectrais obtidos por sensor aéreo. Dados em reflectância (a, b, c) e após a remoção do contínuo (d, e, f).

Com relação aos dados espectrais coletados por sensor aéreo, pode-se perceber nos gráficos da Figura 11 que algumas das amostras coletadas na parcela 3 apresentaram comportamento espectral bastante distinto das demais amostras, isto foi causado provavelmente pela maior absorção na região próxima a 700 nm para estas amostras devido a quantidade elevada de vegetação nesta parcela (Figura 3, ANEXO A). O aumento do albedo do espectro pela presença de resíduos culturais (palhada), além da influencia da vegetação no comportamento espectral dos pixels imageados, são fatores que podem ter prejudicado a caracterização e a quantificação de atributos do solo por meio dos dados coletados pelo sensor aéreo, não somente nesta parcela, mas também nos demais pontos de coleta onde a quantidade de resíduos e/ou vegetação era elevada.

É importante ressaltar que a ACP visa à obtenção de novas variáveis que descrevam da melhor forma possível, e em menor número de dimensões, os dados espectrais originais (VARMUZA e FILZMOSER, 2009). Desta forma, as variáveis obtidas descrevem a variabilidade presente no conjunto de dados, mas, diferente dos componentes obtidos na PLSR, não buscam otimizar a correlação entre as informações espectrais e um ou mais atributos do solo, por exemplo. Portanto, a ACP permitiu apenas comparar o comportamento espectral das amostras coletadas, avaliando o grau de associação existente entre elas e verificando quais regiões do espectro eletromagnético foram mais importantes na distinção entre amostras e na correlação do espectro com os atributos do solo.

3.3.2 Quantificação de atributos físicos e químicos através do comportamento espectral do solo

Com os dados espectrais obtidos em laboratório e por sensor aéreo hiperespectral, em conjunto com os valores determinados pelas análises convencionais, foram obtidos modelos de predição dos atributos do solo utilizando a regressão por mínimos quadrados parciais (PLSR – *Partial Least Squares Regression*).

O desempenho dos modelos obtidos é apresentado na Tabela 3.3 e nas Figuras 1 a 5 dos Anexos E e F. Com os modelos referentes às leituras radiométricas feitas em laboratório os melhores resultados foram obtidos nas predições de matéria orgânica, CTC, argila e areia. Para estes atributos o RPD foi

de aproximadamente 2,0 na validação cruzada, chegando a cerca de 3,0 na validação com dados independentes, o que segundo a classificação descrita por Chang et al. (2001) indica que os modelos obtidos podem produzir predições com grande acurácia.

Tabela 3.3 - Desempenho dos melhores modelos de quantificação, relativos aos espectros obtidos em laboratório e por sensor aerotransportado. Validação cruzada e predição para dados independentes.

Atrib.	Laboratório								Aerotransportado							
	Pré-trat.	Nº de Fatores	Validação Cruzada			Predição			Pré-trat.	Nº de Fatores	Validação Cruzada			Predição		
			R^2	RMSE[1]	RPD	R^2	RMSE[1]	RPD			R^2	RMSE[1]	RPD	R^2	RMSE[1]	RPD
pH em água	SG-21-1ª	5	0.51	0.274	1.44	0.71	0.189	1.88	Kub.-M.	5	0.42	0.298	1.32	0.38	0.275	1.29
M.O.	MSC	7	0.73	2.153	1.95	0.78	2.479	2.17	SG-21	11	0.53	2.853	1.47	0.47	3.858	1.40
P	MSC	11	0.74	43.247	1.96	0.82	39.045	2.37	Reflec.	4	0.83	34.550	2.46	0.76	44.294	2.09
K	Kub.-M.	7	0.45	1.170	1.36	0.50	1.414	1.44	Absorb.	7	0.61	0.989	1.61	0.75	0.993	2.05
Ca	SG-21-1ª	5	0.66	5.735	1.74	0.78	4.721	2.19	SG-7-1ª	5	0.44	7.309	1.36	0.60	6.404	1.61
Mg	SG-13-1ª	5	0.49	2.129	1.41	0.58	1.670	1.58	Absorb.	7	0.51	2.065	1.45	0.52	1.791	1.47
Al	Reflec.	7	0.60	1.385	1.60	0.57	1.224	1.56	Kub.-M.	4	0.51	1.545	1.44	0.18	1.698	1.12
H+Al	SG-21-1ª	5	0.60	7.750	1.59	0.71	6.181	1.88	Kub.-M.	4	0.72	6.490	1.90	0.60	7.250	1.61
SB	SG-21-1ª	5	0.69	7.277	1.82	0.80	5.804	2.26	Absorb.	7	0.50	9.231	1.44	0.57	8.491	1.55
CTC	SG-21-1ª	4	0.76	7.716	2.05	0.89	5.890	3.09	SG-21	12	0.73	8.186	1.94	0.80	7.948	2.29
V	SG-21-1ª	5	0.58	8.796	1.56	0.61	7.787	1.63	Kub.-M.	6	0.52	9.422	1.46	0.41	9.555	1.33
m	SG-21-1ª	5	0.59	9.542	1.58	0.57	8.192	1.55	Kub.-M.	5	0.51	10.410	1.44	0.27	10.659	1.19
Argila	SG-21	6	0.83	29.251	2.48	0.89	26.331	3.06	MSC	7	0.58	46.480	1.56	0.73	41.085	1.96
Areia	MSC	6	0.78	35.330	2.14	0.88	30.108	2.97	MSC	6	0.66	43.674	1.73	0.73	45.769	1.96
Silte	Kub.-M.	5	0.15	26.781	1.10	0.28	20.965	1.20	MSC	2	0.03	28.782	1.02	0.06	24.006	1.05

[1] – Os valores de RMSE são dados nas mesmas unidades dos atributos: M.O. em g kg^{-1}; P em mg kg^{-1}; K, Ca, Mg, Al, H+Al, SB e CTC em $mmol_c$ kg^{-1}; V em %; teores de argila, areia e silte em g kg^{-1}.

A boa predição da textura, da matéria orgânica e da CTC do solo através dos espectros obtidos em laboratório era esperada, uma vez que as principais causas de variação no comportamento espectral do solo para as amostras foram alterações nos teores de argila e areia, matéria orgânica, e de óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro e outros minerais da fração argila do solo (Figura 8).

A forte influência da textura e da matéria orgânica no comportamento espectral do solo foi observada também através da análise de correlação entre os autovalores das ACPs dos espectros e os atributos do solo (Tabela 3.2), na qual boas correlações foram obtidas para os teores de argila, areia, matéria orgânica e CTC.

Estes resultados estão de acordo com os obtidos em trabalhos realizados por outros autores nos quais bons desempenhos foram observados para modelos de

predição da textura, matéria orgânica e CTC, a partir de leituras espectrais em laboratório ou campo (CHANG et al., 2001; SHEPERD e WALSH, 2002; PIRIE et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; SANKEY et al., 2008; VISCARRA ROSSEL et al., 2009; BRICKLEMYER e BROWN, 2010; SUMMERS et al., 2011). Os valores de R^2 para a validação com dados independentes (29 amostras) foram de 0,89, 0,88, 0,89 e 0,78 para teores de argila, areia, CTC e matéria orgânica, com RMSE de 26,3 g kg^{-1}, 30,1 g kg^{-1}, 5,9 $mmol_c$ kg^{-1} e 2,5 g kg^{-1}, respectivamente. Pode-se observar que os ajustes dos modelos foram bastante elevados e os erros de predição foram pequenos, demonstrando que o comportamento espectral possui um grande potencial para a predição destes atributos.

Embora os valores de R^2, 0,73 e 0,82, e RPD, 2,0 e 2,4 na validação cruzada e na validação com dados independentes, respectivamente (Tabela 3.3), tenham sido elevados para o modelo de predição de fósforo (P) os erros associados ao modelo (RMSE de 43,3 mg kg^{-1} e 39,1 mg kg^{-1}) foram bastante elevados indicando que as predições obtidas não foram confiáveis, para os dados radiométricos coletados em laboratório. Este resultado contraditório, entre os parâmetros de avaliação do ajuste do modelo e de avaliação dos erros observados, pode ter ocorrido, pois valores muito elevados de P foram observados em algumas amostras. Estes valores foram constatados principalmente em amostras da parcela 3, dentre as quais o valor mínimo de P foi de 133,1 mg kg^{-1}, sendo este maior do que o máximo teor observado em outras parcelas (87,7 mg kg^{-1}, na parcela 5).

Para os modelos de predição do pH em água e dos teores de K, Ca, Mg, Al, H+Al, SB, V% e m%, através de informação espectral coletada em laboratório, foram obtidos valores de RPD entre 1,4 e 2,0 na validação cruzada (Tabela 3.3), podendo assim ser classificados como modelos de desempenho intermediário quanto a acurácia das predições (CHANG et al., 2001).

Dentre as bases as melhores predições, através dos dados espectrais coletados em laboratório, foram feitas para o cálcio (Ca), com R^2 de 0,78, RPD de 2,2 e RMSE de 4,7 $mmol_c$ kg^{-1}, na validação com dados independentes (Tabela 3.3), o que caracteriza um bom desempenho. Resultado semelhante foi reportado por Dunn et al. (2002) que obtiveram R^2 de 0,86 e RPD de 2,7. Entretanto um desempenho de predição pior foi descrito por Viscarra Rossel et al. (2006b), sendo neste trabalho o R^2 de 0,31 e o RPD de 1,2. Esta variabilidade na qualidade dos modelos de predição ocorre, pois o cálcio não possui feições de absorção no Vis-

NIR-SWIR e a obtenção de bons modelos depende, portanto, da sua correlação com outros atributos que influenciem diretamente o comportamento espectral do solo (UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; STENBERG et al., 2010).

Através do resultado da análise de correlação entre os autovalores das ACPs e os atributos do solo (Tabela 3.2) é possível observar que as correlações tanto do cálcio quanto das outras bases (K e Mg) com o comportamento espectral do solo estão provavelmente associadas as correlações observadas para a matéria orgânica e textura, tendo em vista que estas aumentam e diminuem nas mesmas condições.

Desta forma, provavelmente a predição destes atributos foi possível através da correlação indireta de seus teores com o espectro por meio de fatores associados aos teores de matéria orgânica e textura do solo.

Considerando os modelos de predição obtidos para o potássio (K) e para o magnésio (Mg) os resultados são piores, R^2 de 0,50 e 0,58, RMSE de 1,4 e 1,7 $mmol_c$ kg^{-1} e RPD de 1,4 e 1,6, respectivamente, em relação aos resultados observados para o cálcio, utilizando leitura radiométricas em laboratório (Tabela 3.3). Entretanto, parte considerável da variabilidade destes atributos foi descrita através do comportamento espectral do solo. Desempenhos variáveis quanto à predição destes atributos foram obtidos por diversos autores, cuja causa pode estar ligada a ausência de feições de absorção específicas para estes atributos no Vis-NIR-SWIR (CHANG et al. 2001; DUNN et al. 2002; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; VISCARRA ROSSEL et al.; 2006b; STENBERG et al., 2010).

Predições relativamente boas foram obtidas para a acidez potencial (H+Al) do solo, com R^2 de 0,71, RMSE de 6,2 $mmol_c$ kg^{-1} e RPD de 1,9, considerando a validação com dados independentes para as leituras espectrais feitas em laboratório (Tabela 3.3). Porém, não há feições de absorção diretamente ocasionadas por este atributo no Vis-NIR-SWIR. Na análise de correlação entre os autovalores da ACPs e os atributos do solo (Tabela 3.2) a melhor correlação para H+Al ocorreu com a CP1 da análise feita com dados espectrais após a remoção do contínuo. As principais regiões do espectro associadas a esta CP foram o visível (400 de 700 nm) e de 800 a 1000 nm, sendo estes comprimentos de onda referentes principalmente aos óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro no solo. Desta forma, pode-se atribuir em parte a boa predição da acidez potencial do solo a uma correlação com fatores relacionados aos teores destes minerais no solo.

O desempenho de predição para a acidez do solo através de curvas espectrais obtidas em laboratório no Vis-NIR-WIR também é reportado por Chang et al. (2001), sendo os resultados semelhantes aos apresentados neste trabalho, R^2 de 0,65 e RPD de 1,7.

Com relação aos modelos de predição de pH em água, da SB e V% o melhor resultado, considerando a validação com dados independentes, foi observado para a SB (R^2 de 0,80, RMSE de 5,8 $mmol_c$ kg^{-1} e RPD de 2,3) seguido pelo pH em água (R^2 de 0,71, RMSE de 0,2 $mmol_c$ kg^{-1} e RPD de 1,9) e pela V% (R^2 de 0,61, RMSE de 7,8 $mmol_c$ kg^{-1} e RPD de 1,6), considerando os espectros obtidos em laboratório. Também para estes atributos boa parte da variabilidade foi representada pelos dados espectrais, tendo em vista que os resultados das predições foram relativamente acurados (Tabela 3.3; ANEXOS E e F).

Na análise de correlação dos autovalores das ACPs com os atributos do solo (Tabela 3.2) os valores observados para pH em água, SB e V% são semelhantes aos obtidos para a matéria orgânica e textura do solo, sendo que as correlações mais fortes para estes atributos ocorrem nos mesmos componentes principais. Assim, provavelmente a relação do pH em água, SB e V% com o comportamento espectral do solo se deu através da correlação com fatores ligados aos teores de matéria orgânica e de textura no solo. Chang et al. (2001) obtiveram desempenho semelhante para a predição da SB, R^2 de 0,75 e RPD de 2,0, assim como Pirie, Singh e Islam (2005) e Viscarra Rossel et al. (2006b) reportaram para pH em água, R^2 de 0,65 e 0,73, respectivamente.

Os modelos de predição de alumínio e saturação por alumínio a partir de informação espectral obtida em laboratório tiveram desempenhos intermediários na validação com dados independentes, RMSE de 1,2 $mmol_c$ kg^{-1} e 8,2%, respectivamente, R^2 de 0,57 e RPD de 1,6, para ambos. O teor alumínio e a saturação do solo pelo mesmo, assim como os teores de bases, o pH em água, a SB e a V%, não afetam diretamente o comportamento espectral do solo. Entretanto, através da análise de correlação entre os atributos do solo e os autovalores das ACPs pode-se observar que o alumínio e a m% estão associados inversamente ao pH em água, teores de base, matéria orgânica, textura e CTC, tanto na CP3 da análise feita com os dados em valores de reflectância quanto na CP2 após a remoção do contínuo (Tabela 3.2). Dentre os atributos aos quais as correlações do alumínio e da m% parecem estar associadas, principalmente a textura e o teor de

matéria orgânica são ativos quanto absorção da energia incidente no Vis-NIR-SWIR. Desta forma, a predição obtida para o alumínio e m% deve estar baseada em fatores ligados a estes atributos.

De forma geral, nas predições obtidas com dados radiométricos coletados em laboratório os melhores resultados foram obtidos para atributos com influência direta sobre o comportamento espectral do solo, como matéria orgânica e textura, e para outros atributos intimamente relacionados a estes como a CTC. Os demais, como pH em água, teores de bases, acidez potencial, alumínio, SB, V% e m% foram preditos com desempenho variável dependendo do grau de associação com os atributos que atuaram diretamente no absorção da energia incidente.

Estas conclusões estão de acordo com resultados reportados em diversos trabalhos que tratam sobre a quantificação de atributos do solo através de leituras espectrais no Vis-NIR-SWIR (CHANG et al., 2001; SHEPERD e WALSH, 2002; DUNN et al. 2002; UDELHOVEN; EMMERLING e JARMER, 2003; PIRIE et al., 2005; VISCARRA ROSSEL et al., 2006b; CHRISTY, 2008; BRICKLEMYER e BROWN, 2010; SUMMERS et al., 2011). Nestes trabalhos a correlação indireta de atributos do solo com seu comportamento espectral através de covariação com atributos espectralmente ativos é uma conclusão obtida frequentemente e uma explicação coerente para a obtenção de bons resultados mesmo para atributos que não atuam diretamente na absorção da energia incidente (STEMBERG et al., 2010).

Através das ACPs e da análise de correlação dos autovalores destas com os atributos do solo foi possível descrever, de modo geral, a contribuição das diferentes regiões do espectro no Vis-NIR-SWIR para a descrição da variabilidade dos atributos do solo modelados (Figuras 9, 10 e 11; Tabela 3.2). Entretanto, estas considerações são inespecíficas, sendo que resultados adaptados a cada atributo poderiam ser obtidos através da análise dos autovalores dos primeiros componentes da PLSR ou dos coeficientes de regressão da PLSR nos diferentes comprimentos de onda, para cada atributo do solo. Porém através das análises realizadas os principais objetivos foram alcançados, descrevendo-se em linhas gerais os padrões presentes nos dados radiométricos, nos teores de atributos do solo e quanto à relação entre os espectros e os atributos.

Com relação às predições feitas com dados espectrais coletados por sensor aéreo hiperespectral foram obtidos resultados comparáveis aos observados com dados coletados em laboratório, sendo as melhores predições feitas para a textura

do solo e a CTC (Tabela 3.3). Entretanto, os modelos de predição de teores de matéria orgânica apresentaram desempenho acentuadamente inferior aos resultados obtidos empregando os dados coletados em laboratório. Isto pode ter ocorrido provavelmente pela presença de resíduos culturais (palhada) e/ou vegetação, em proporção variável, nos pixels dos quais foram extraídos os dados radiométricos para representar o comportamento espectral do solo nos locais de coleta (Figura 3, ANEXO A).

A presença de resíduos de culturas pode influenciar a leitura espectral de forma variável dependendo do estado de decomposição do resíduo, haja vista que logo após a colheita estes geralmente apresentam um albedo bastante elevado para toda a curva espectral e com o passar do tempo, e avanço do estado de decomposição, o albedo deste material tende a diminuir tornando-se menor que o observado para o solo (SERBIN et al., 2009). Além disto, os resíduos de culturas apresentam feições de absorção características como a feição centrada próxima a 2100 nm causada pela celulose e lignina da biomassa das plantas (NAGLER et al., 2003). Já para os pixels que contenham vegetação a influência no espectro registrado pode ser observada de acordo com o comportamento espectral da vegetação presente, como por exemplo, na região dos comprimentos de onda próximos a 700 nm, na qual ocorre, de forma geral, intensa feição de absorção ocasionada pela clorofila (USTIN et al., 2004).

Como as predições de matéria orgânica foram mais prejudicadas do que as de textura ou CTC pela mistura de solo com outros materiais (vegetação e/ou resíduos de culturas), a influência destas coberturas no espectro registrado deve ter ocorrido em regiões importantes na relação da matéria orgânica com os dados radiométricos do solo. Pela análise de correlação entre os autovalores das ACPs e os atributos do solo (Tabela 3.2) percebe-se que a região do visível (400 a 700 nm) é uma das mais importantes na relação da matéria orgânica com os espectros, seja para os dados coletados pelo sensor aéreo ou para os medidos em laboratório, sendo esta região também afetada diretamente pela presença de vegetação ou resíduos de cultura.

Na análise de correlação entre os autovalores das ACPs, nas quais foram empregados os dados obtidos por sensor aéreo, e os atributos do solo (Tabela 3.2), as melhores correlações foram obtidas nas CPs com grande contribuição da reflectância na região do visível (400 a 700 nm) e acima de 2000 nm, em oposição aos coeficientes relativos aos comprimentos de onda entre estas regiões,

principalmente de 1000 e 1400 nm, no caso da ACP realizada com dados em reflectância. Este padrão assemelha-se até certo ponto ao observado com dados obtidos em laboratório, sendo que dentre os coeficientes de correlação mais elevados encontram-se os obtidos para os teores de argila, areia, matéria orgânica, CTC e acidez potencial. Isto indica que, de forma geral, o mesmo padrão observado nos dados obtidos em laboratório pôde, até certo ponto, ser descrito através dos dados coletados por sensor aerotransportado.

Diversos trabalhos realizaram a predição da matéria orgânica ou carbono orgânico, textura do solo e CTC a partir de dados coletados por sensoriamento remoto hiperespectral obtendo resultados semelhantes aos deste trabalho (ODEH e MCBRATNEY, 2000; BEN-DOR et al. 2002; SELIGE; BÖHNER e SCHMIDHALTER, 2006; DETAR et al., 2007; CHEN et al., 2008; GOMEZ; LAGACHERIE e COULOUMA, 2008; GOMEZ; VISCARRA ROSSEL e MCBRATNEY., 2008; STEVENS et al., 2010; HIVELY et al., 2011; HBIRKOU et al., 2012). Por exemplo, Selige; Böhner e Schmidhalter (2006) obtiveram R^2 de 0,71 e RMSE de 42,0 g kg^{-1} para as estimativas do teor de argila, enquanto Stevens et al. (2010) reportaram R^2 de 0,69 e RMSE de 5,24 g kg^{-1} relativos a predições de carbono orgânico através de dados remotos hiperespectrais.

Para os demais atributos, os modelos de predição obtidos a partir das leituras espectrais do sensor aéreo apresentaram desempenho sensivelmente pior do que os resultados alcançados com modelos derivados dos dados coletados em laboratório (Tabela 3.3). Mesmo assim, boa parte da variabilidade observada nestes atributos pode ser descrita através informações obtidas pelo sensor aéreo hiperespectral.

No caso do K, Ca, Mg, e para a SB o desempenho dos modelos foi intermediário, de acordo com Chang et al. (2001), com R^2 de 0,75, 0,60, 0,52 e 0,57 e valores de RMSE de 1,0 $mmol_c$ kg^{-1}, 6,4 $mmol_c$ kg^{-1}, 1,8 $mmol_c$ kg^{-1} e 8,5 $mmol_c$ kg^{-1}, respectivamente, na validação com dados independentes para os dados aéreos hiperespectrais. Resultados equivalentes foram obtidos por outros autores como DeTar et al. (2007) e Hively et al. (2011) com R^2 de 0,64 e 0,61 para potássio, R^2 de 0,62 e 0,71 para cálcio e R^2 de 0,58 e 0,71 para magnésio, respectivamente.

Através dos resultados obtidos na análise de correlação (Tabela 3.2) entre os autovalores da ACPs, que foram realizadas com dados espectrais coletados por sensor aéreo, e os atributos do solo percebe-se que as melhores correlações

obtidas ocorrem nas mesmas CPs onde há boa correlação para textura e matéria orgânica, principalmente no caso do potássio, cálcio e soma de bases. Desta forma, provavelmente a predição destes atributos se deu através da correlação indireta com fatores associados à textura e teores de matéria orgânica, assim como observado para os dados em laboratório.

Além disto, na análise de correlação dos autovalores com os atributos do solo (Tabela 3.2), quando realizada a remoção do contínuo, percebe-se a importância da região do visível (400 a 700nm) na descrição da variabilidade. Isto porque as melhores correlações para cálcio, potássio e inclusive para acidez potencial, CTC e matéria orgânica foram obtidas com a CP1, na qual os coeficientes na região do visível são acentuados demonstrando a grande contribuição da reflectância nestes comprimentos de onda para a CP (Figura 10).

Com relação às predições de acidez potencial, os resultados foram relativamente bons, em comparação aos obtidos com dados coletados em laboratório, com R^2 de 0,60 e RMSE de 7,3 $mmol_c$ kg^{-1}, considerando a validação com dados independentes.

Dentre os modelos de predição com pior desempenho estão os obtidos para pH em água, alumínio, V% e m% com R^2 de 0,38, 0,18, 0,41 e 0,27 e valores de RMSE de 0,28, 1,7 $mmol_c$ kg^{-1}, 9,6% e 10,7%, respectivamente, para a validação com dados independentes, sendo estes resultados piores que os obtidos com dados coletados em laboratório. Os modelos obtidos para estes atributos apresentaram na validação com dados independentes valores de RPD inferiores a 1,4, e de acordo com Chang et al. (2001), estes podem ser apontados como modelos incapazes de fazer predições acuradas para os dados modelados.

O modelo obtido para predição de fósforo a partir dos dados coletados por sensor aéreo apresentou, assim como observado no modelo obtido para os dados coletados em laboratório, valores de R^2 e RPD relativamente bons, 0,76 e 2,1, entretanto, o RMSE obtido foi muito elevado, 44,3 mg kg^{-1}, indicando que o modelo obtido não produziu resultados acurados.

Na Figura 12 é possível comparar o desempenho dos modelos obtidos para quantificação dos atributos do solo, seja com dados espectrais coletados em laboratório ou por sensor aéreo. Com base nesta comparação foram determinados quais atributos seriam interpolados através de krigagem, a fim de possibilitar a avaliação dos resultados obtidos não só de forma pontual, mas também através de

mapas de atributos. Para isto foram escolhidos os atributos que puderam ser preditos com boa acurácia através de ambos os dados espectrais coletados, sendo estes os teores de argila, areia e a CTC. A matéria orgânica, as bases (K, Ca, e Mg) e a acidez potencial foram preditas pelo menos com acurácia intermediária, considerando ambas as fontes de dados radiométricos utilizadas. Por esta razão, também foram obtidos mapas destes atributos para comparação entre os mapas derivados de valores determinados pelos métodos convencionais e os obtidos a partir dos valores preditos através das informações espectrais.

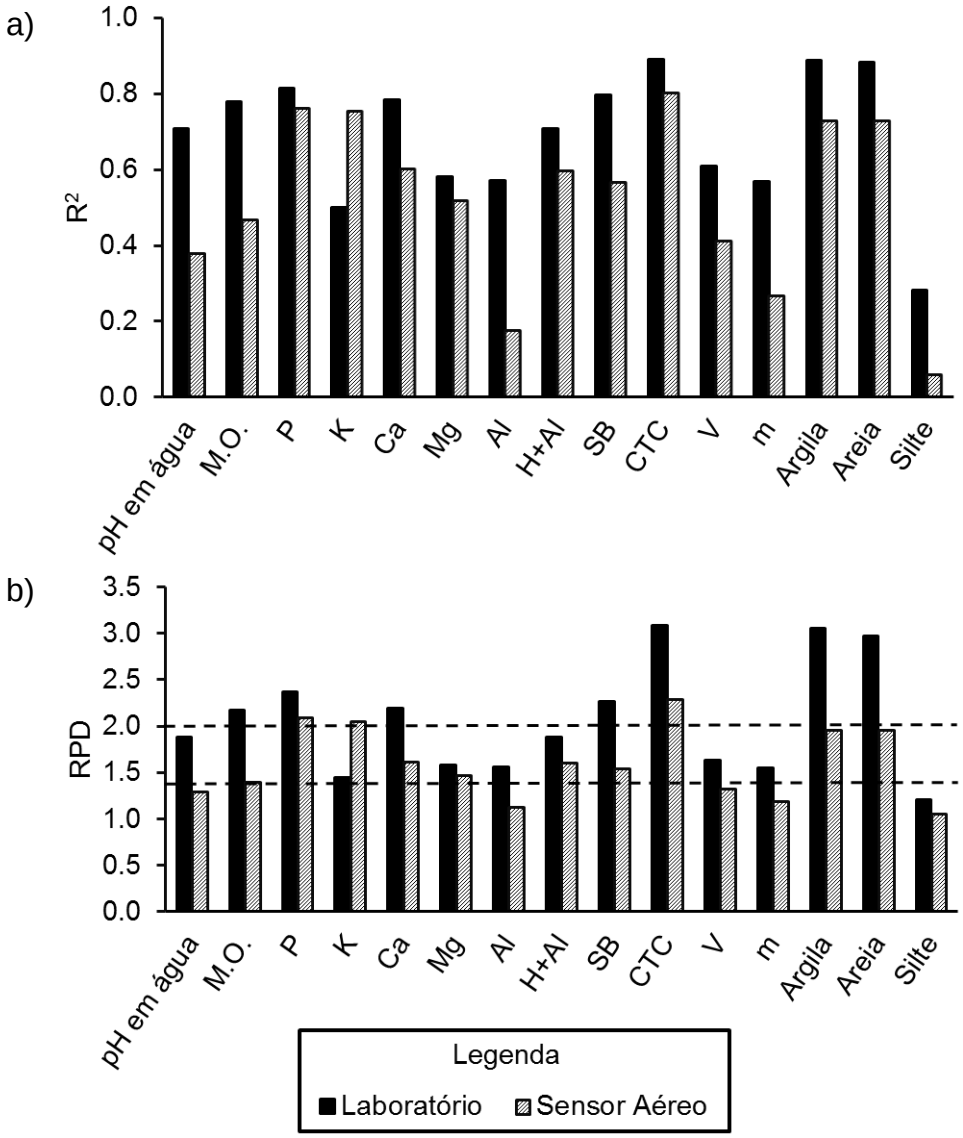


Figura 12 - Coeficiente de determinação (R^2, a) e RPD (b) para o ajuste entre os valores observados nas análises convencionais e preditos através das leituras espectrais. Resultado da validação com dados independentes. Linhas pontilhadas indicam separação entre as classes de modelos, segundo Chang et al. (2001), indicando desempenhos bom (RPD ≥ 2,0), intermediário (2,0 > RPD ≥ 1,4) e ruim (RPD < 1,4).

3.3.3 Mapeamento de atributos do solo determinados pelo método convencional e preditos através do comportamento espectral do solo

Os atributos do solo determinados pelos métodos convencionais e preditos através do comportamento espectral do solo, medido em laboratório e por sensor aerotransportado, foram empregados na interpolação por krigagem a fim de serem obtidos três mapas para cada atributo, um para cada dado. Estes mapas foram comparados, utilizando-se sempre como referência os mapas de atributos determinados pelo método convencional.

Os parâmetros dos semivariogramas para cada atributo são mostrados na Tabela 3.4, nesta são listados o modelo teórico ajustado ao semivariograma (exponencial ou matern), assim como o tipo de krigagem, ordinária (sem tendência) ou universal (com tendência, expressa pela polinomial de primeiro ou segundo grau das coordenadas cartesianas dos pontos), e por fim os demais parâmetros relativos aos semivariogramas de cada atributo, e também o resultado da validação cruzada ou validação para os resultados da interpolação.

Com relação ao alcance dos modelos teóricos ajustados, este variou entre 30 e 50 m, aproximadamente, sendo que o alcance prático oscilou entre cerca de 100 a 250 m. Estes valores de alcance observados são coerentes em relação ao conjunto de dados estudados, pois a maioria dos pontos amostrais encontravam-se relativamente próximos uns dos outros, sendo aproximadamente 240 m a maior distância entre pontos de coleta. Desta forma, o fato de existirem menos pontos para amostras mais distantes pode ter dificultado a detecção de dependência espacial em distâncias maiores. As distâncias máximas empregadas na estimativa semivariogramas foram limitadas a distâncias menores que 240 m (distância máxima observada no conjunto de dados), como proposto por Diggle e Ribeiro Jr. (2007).

Considerando o parâmetro de estimativa da dependência espacial, de acordo com Cambardella et al. (1994), tanto para os semivariogramas dos valores estimados pelo método convencional quanto para os relativos aos valores preditos através de dados espectrais coletados em laboratório, os valores observados estiveram acima de 0,75 indicando forte dependência espacial.

Tabela 3.4 - Parâmetros dos semivariogramas para atributos do solo determinados através de método convencional, com uso, em parte, de predições feitas por dados espectrais em laboratório e com uso apenas de predições por dados de sensor aéreo.

Atributo	Modelo	Transformação e Tendência[1]	Pepita (Co)	Patamar (C)	Alcance (m)	Alcance Prático (m)	$\frac{C}{(C+Co)}$	R^2	RMSE
	Método 1 - Análise tradicional (observados=89)							Validação Cruzada[2]	
M.O.	Matern	-	3.8	16.4	39	183	0.81	0.74	2.32
K	Exponencial	Box-Cox	0.04	0.12	40	120	0.77	0.73	0.89
Ca	Exponencial	Pol. de 2ª ordem	4.5	37.0	30	90	0.89	0.75	4.98
Mg	Exponencial	Pol. de 2ª ordem	0.75	4.10	50	150	0.85	0.78	1.34
H+Al	Matern	Box-Cox	0.07	0.37	30	142	0.84	0.81	5.13
CTC	Exponencial	Pol. de 2ª ordem	12.4	52.4	46	138	0.81	0.89	5.57
Argila	Matern	-	500	7100	43	204	0.93	0.89	24.42
Areia	Matern	-	400	8000	50	237	0.95	0.91	24.43
	Método 2 - Dados radiométricos em laboratório (observados=60; preditos=29)							Validação[3]	
M.O.	Matern	-	3.5	32.0	45	213	0.90	0.95	0.96
K	Exponencial	Box-Cox	0.04	0.18	48	144	0.82	0.88	0.40
Ca	Exponencial	Pol. de 2ª ordem	8.0	29.0	38	114	0.78	0.96	1.64
Mg	Exponencial	Box-Cox; Pol. de 2ª ordem	0.07	0.30	42	126	0.81	0.96	0.53
H+Al	Matern	Box-Cox	0.04	0.16	35	166	0.82	0.94	2.51
CTC	Matern	Box-Cox; Pol. de 1ª ordem	0.10	0.46	42	199	0.82	0.97	2.40
Argila	Matern	-	700	7500	50	237	0.91	0.98	11.33
Areia	Matern	-	450	5800	52	247	0.91	0.95	17.12
	Método 3 - Dados radiométricos de sensor aéreo (preditos ≅ 1300)							Validação[3]	
M.O.	Matern	Pol. de 1ª ordem	8.0	14.5	46	218	0.64	0.46	3.15
K	Matern	Box-Cox	0.06	0.16	30	142	0.73	0.52	0.81
Ca	Matern	Box-Cox; Pol. de 2ª ordem	4.0	7.5	36	171	0.65	0.39	6.10
Mg	Matern	Pol. de 1ª ordem	1.4	2.8	35	166	0.67	0.69	1.52
H+Al	Exponencial	-	6.3	12.7	33	98	0.67	0.79	4.71
CTC	Matern	Box-Cox	0.60	1.35	40	190	0.69	0.77	6.41
Argila	Matern	-	1000	3000	40	190	0.75	0.79	35.37
Areia	Matern	Pol. de 1ª ordem	900	2000	45	213	0.69	0.73	38.61

[1] - Transformação aplicada aos dados antes da obtenção do modelo de interpolação e tendência utilizada no cálculo da média pelo modelo, ausência indica a não transformação e uso de média constante; [2] - Validação cruzada realizada omitindo-se uma das observações por vez; [3] - Validação realizada comparando-se todos os valores estimados pelo Método 1 com os valores estimados pelo o respectivo Método.

Para os semivariogramas obtidos a partir das predições feitas utilizando as leituras espectrais coletadas por sensor aerotransportado, os valores do parâmetro de avaliação da dependência espacial podem ser classificados como moderados (entre 0,25 e 0,75), indicando um aumento do efeito pepita (Co) em comparação aos semivariogramas obtidos para os outros conjuntos de dados (Tabela 3.4).

O efeito pepita pode representar, segundo Diggle e Ribeiro Jr. (2007), erros nas medições (amostragem, laboratório, etc.) ou variação espacial menor do que a menor distância existente entre dois pontos do esquema amostral. Desta forma, um aumento no efeito pepita no semivariograma, como foi observado para as predições feitas através dos espectros coletados por sensor aéreo, significa provavelmente aumento dos erros presentes nas predições obtidas para o atributo mapeado.

No caso dos semivariogramas referentes às predições feitas através dos espectros coletados em laboratório, os erros inseridos pelas predições foram menores, pois os modelos de predição apresentaram melhor desempenho, além de serem utilizadas predições somente para um terço das amostras (conjunto de validação), sendo que para o restante dos pontos amostrais foram utilizados valores determinados pelo método convencional (conjunto de treinamento dos modelos).

Na validação cruzada realizada durante a obtenção dos mapas de atributos determinados pelo método convencional os melhores resultados foram obtidos para os teores de areia, argila, CTC e acidez potencial. Para estes atributos os valores interpolados através da krigagem foram mais acurados, entretanto mesmo para os demais atributos, bases (K, Ca e Mg) e matéria orgânica, os resultados foram satisfatórios com valores de R^2 superiores a 0,70 e com RMSE relativamente pequeno.

Comparando-se os mapas das predições feitas com espectros obtidos em laboratório com os mapas dos atributos determinados pelos métodos convencionais os erros observados foram pequenos. Portanto, mesmo substituindo-se um terço dos resultados obtidos pelo método convencional por valores preditos através de informações espectrais de laboratório o RMSE foi relativamente baixo e o R^2 manteve-se acima de 0,85, mostrando uma boa concordância entre os mapas comparados.

Já com relação aos mapas dos atributos preditos com base nos espectros coletados por sensor aerotransportado, as comparações destes com mapas de atributos determinados pelos métodos convencionais geraram ajustes (R^2)

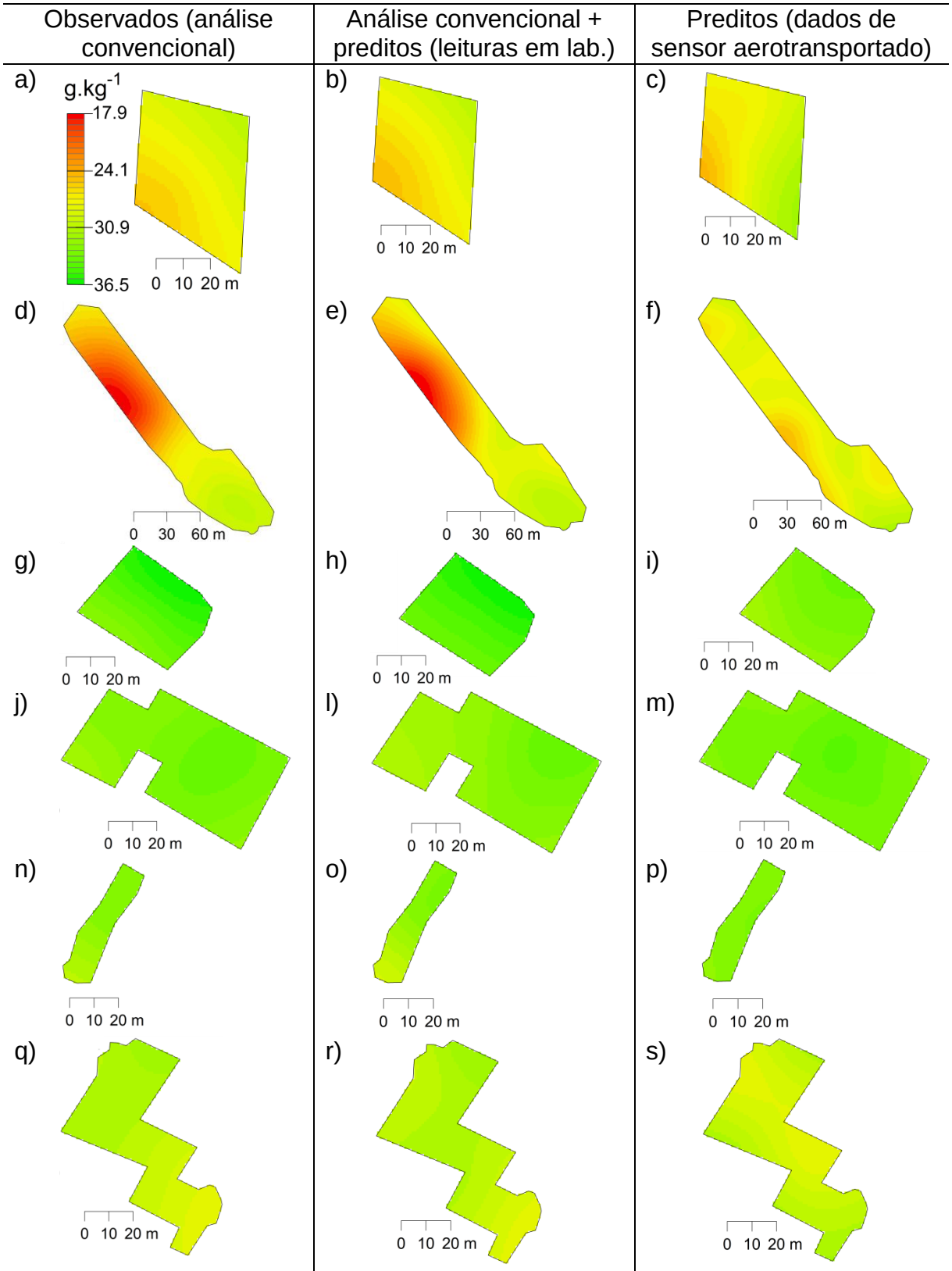
sensivelmente piores e valores de RMSE maiores, principalmente para os atributos que tiveram modelos de predição com desempenho inferior (Tabela 3.3). Este foi o caso para as bases (K, Ca, Mg), especialmente para o cálcio, e matéria orgânica que apresentaram os piores resultados dentre os atributos mapeados. Entretanto, foi observada boa acurácia para certos atributos, como teor de argila e CTC, com ajustes (R^2) superiores a 0,75 e RMSE relativamente pequenos.

Nas Figuras 13 a 17 são representados os mapas obtidos para os teores de matéria orgânica, cálcio, CTC, argila e areia, resultantes da interpolação dos valores determinados pelo método convencional e dos valores preditos através de leituras radiométricas coletadas em laboratório e por sensor aéreo.

Através destas pode-se perceber que os mapas derivados de predições com bom desempenho nas validações (Tabela 3.4) representam de forma adequada a variabilidade espacial do solo detectada pelo método convencional.

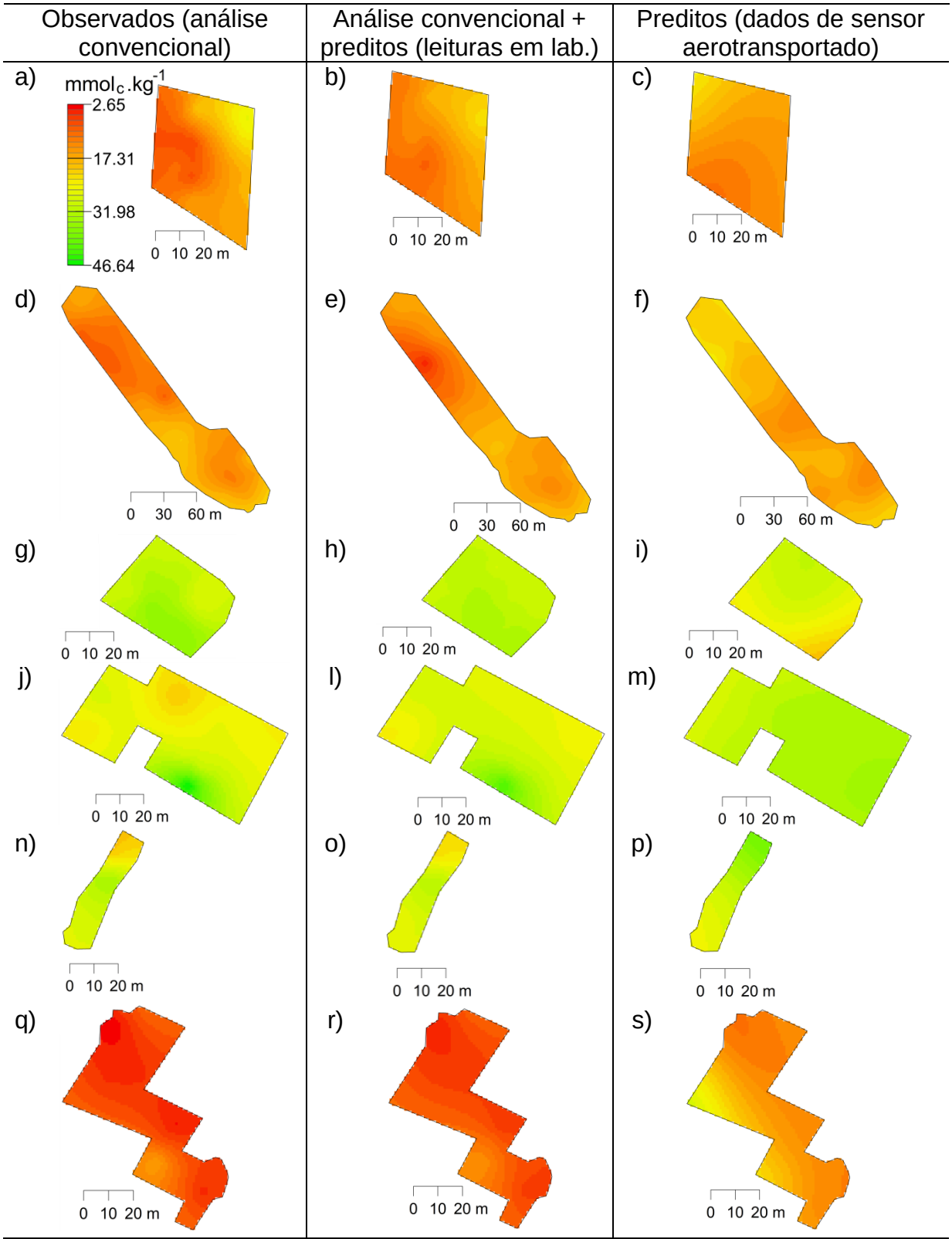
Isto se confirma pela repetição dos padrões observados nos mapas. Quando considerados os mapas dos valores preditos através dos espectros, coletados em laboratório, os mapas apresentam boa acurácia para todos os atributos, adicionando pouco erro as informações obtidas, com relação ao método convencional.

No caso dos mapas das predições feitas através de leituras radiométricas do sensor aéreo, os mapas referentes aos teores de matéria orgânica e cálcio, diferentemente dos mapas obtidos para os teores de argila, areia e CTC, demonstram que a variabilidade espacial do solo não foi bem representada (Figuras 13 a 17). Nestes mapas os padrões existentes nas interpolações dos valores obtidos pelo método convencional não foram descritos adequadamente.



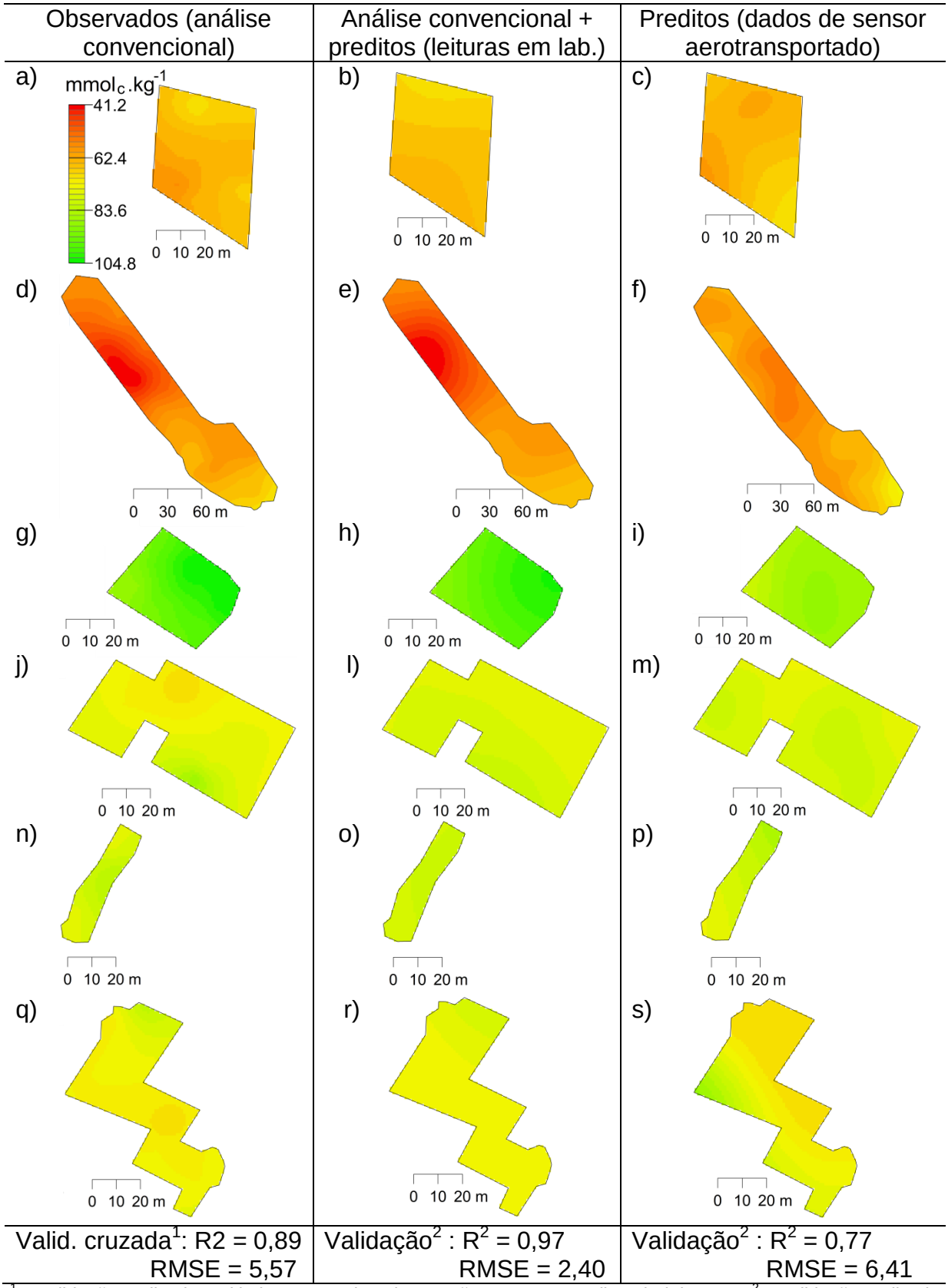
[1] - Validação realizada omitindo-se uma das observações por vez e aplicando krigagem; [2] - Validação realizada comparando valores estimados pela krigagem para o método tradicional e para valores preditos através de leituras espectrais obtidas em laboratório ou por sensor aéreo.

Figura 13 - Teores de mat. orgânica estimada por análise convencional (a, d, g, j, n, q), espectros obtidos em laboratório (b, e, h, l, o, r) e avião (c, f, i, m, p, s).



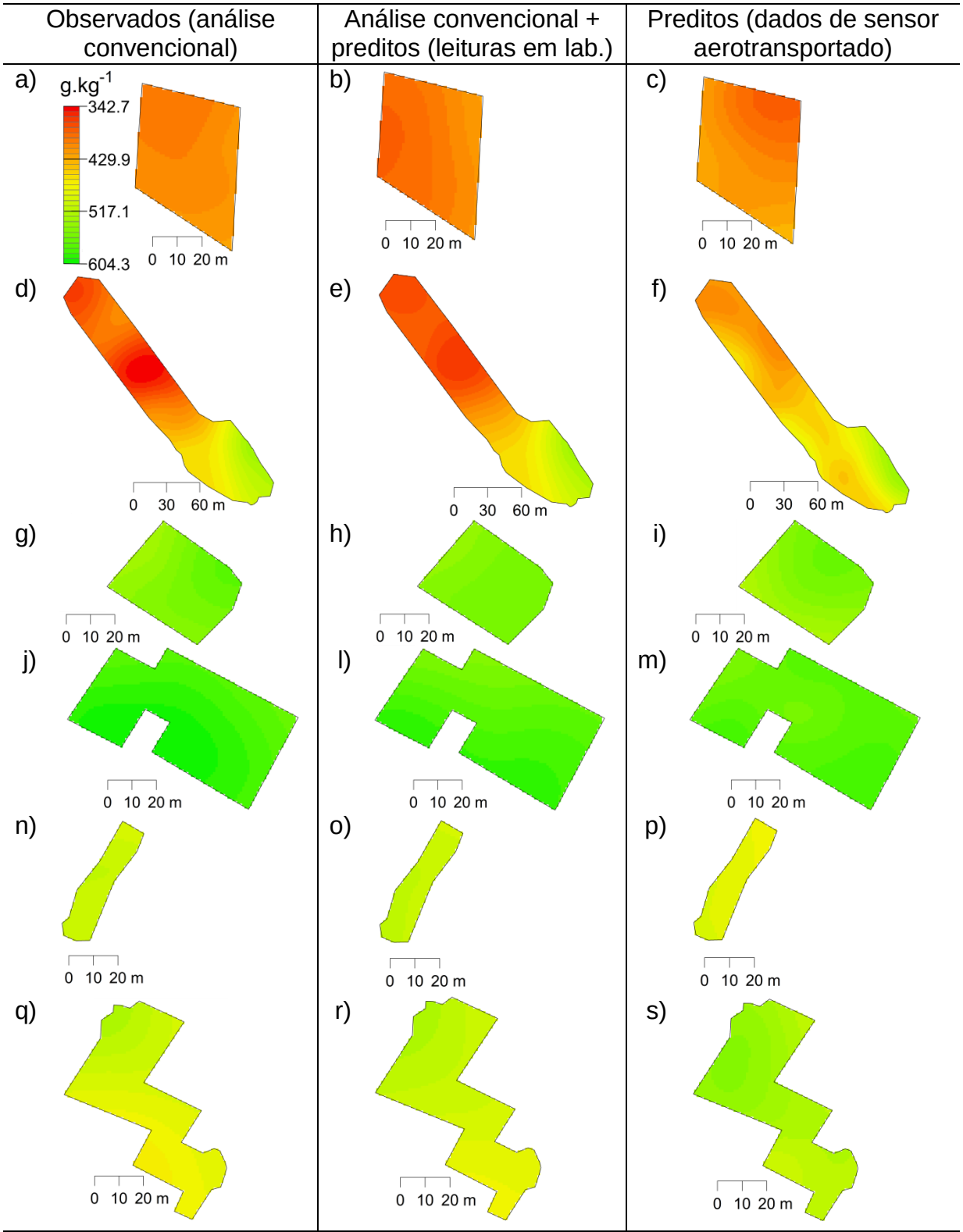
[1] - Validação realizada omitindo-se uma das observações por vez e aplicando krigagem; [2] - Validação realizada comparando valores estimados pela krigagem para o método tradicional e para valores preditos através de leituras espectrais obtidas em laboratório ou por sensor aéreo.

Figura 14 - Teores de cálcio estimados por análise convencional (a, d, g, j, n, q), espectros obtidos em laboratório (b, e, h, l, o, r) e por avião (c, f, i, m, p, s).



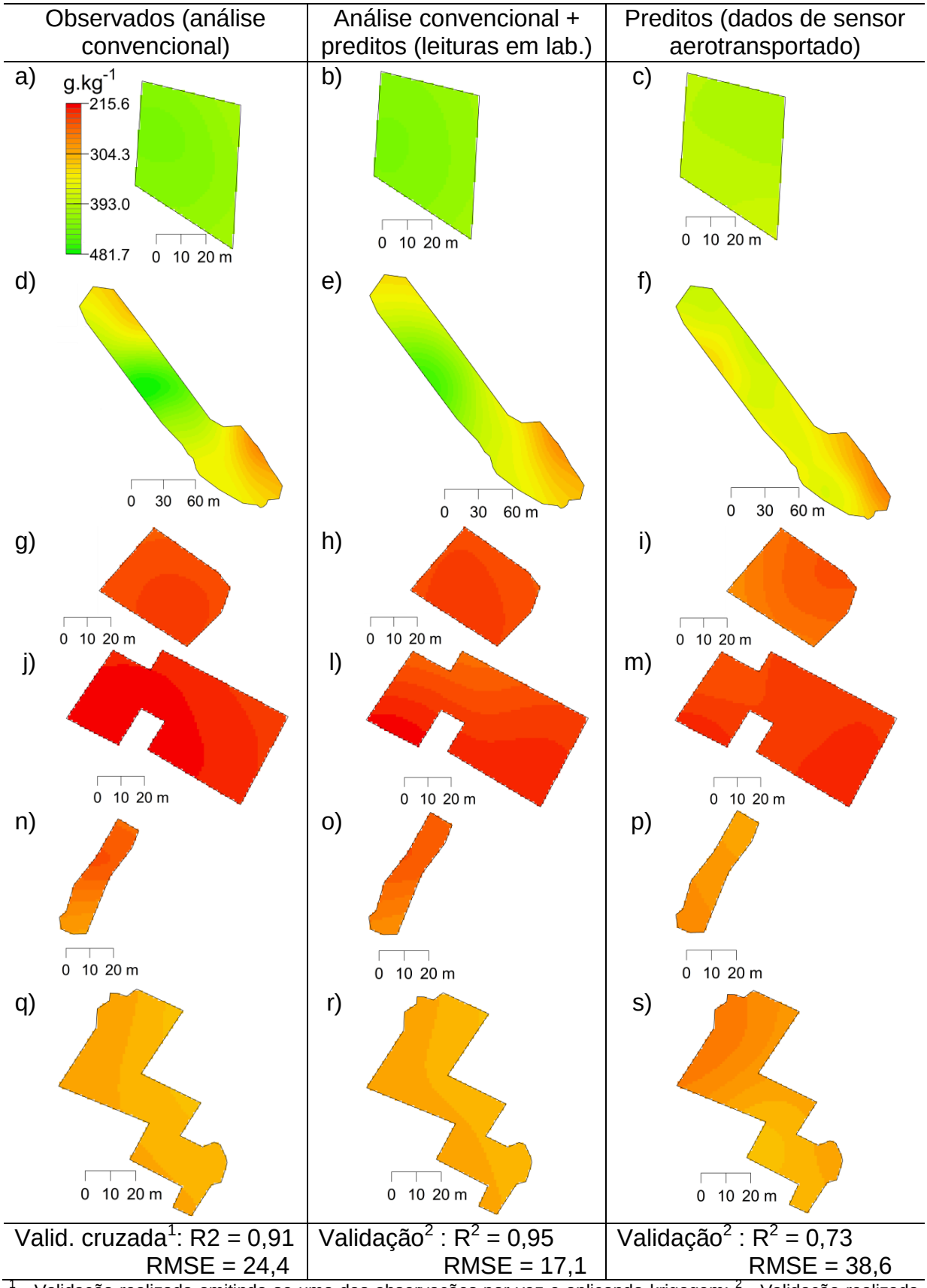
[1] - Validação realizada omitindo-se uma das observações por vez e aplicando krigagem; [2] - Validação realizada comparando valores estimados pela krigagem para o método tradicional e para valores preditos através de leituras espectrais obtidas em laboratório ou por sensor aéreo.

Figura 15 - Estimativas da CTC a partir de análise convencional (a, d, g, j, n, q), espectros obtidos em laboratório (b, e, h, l, o, r) e por avião (c, f, i, m, p, s).



[1] - Validação realizada omitindo-se uma das observações por vez e aplicando krigagem; [2] - Validação realizada comparando valores estimados pela krigagem para o método tradicional e para valores preditos através de leituras espectrais obtidas em laboratório ou por sensor aéreo.

Figura 16 - Teores de argila estimados por análise convencional (a, d, g, j, n, q), espectros obtidos em laboratório (b, e, h, l, o, r) e por avião (c, f, i, m, p, s).



[1] - Validação realizada omitindo-se uma das observações por vez e aplicando krigagem; [2] - Validação realizada comparando valores estimados pela krigagem para o método tradicional e para valores preditos através de leituras espectrais obtidas em laboratório ou por sensor aéreo.

Figura 17 - Teores de areia estimados por análise convencional (a, d, g, j, n, q), espectros obtidos em laboratório (b, e, h, l, o, r) e por avião (c, f, i, m, p, s).

3.4 Conclusões

Tanto com os dados radiométricos obtidos em laboratório quanto com as leituras espectrais feitas por sensor aéreo hiperespectral foi possível obter modelos de quantificação relativamente acurados.

Foi possível quantificar principalmente os teores de argila, areia, CTC, matéria orgânica e acidez potencial, para os quais foram obtidos R^2 de 0,89, 0,88, 0,89, 0,78 e 0,71, respectivamente, utilizando informações espectrais coletadas em laboratório, e R^2 de 0,73, 0,73, 0,80, 0,47 e 0,60, respectivamente, empregando dados radiométricos do sensor aerotransportado.

Para os demais atributos do solo estudados, pH em água, P, K, Ca, Mg, Al, SB, V% e m%, foram obtidos modelos de desempenho variável, sendo a principal causa desta variabilidade o fato destes atributos não possuírem feições de absorção ou influência direta no comportamento espectral do solo. A boa predição destes atributos dependeu aparentemente da correlação com outros atributos, os quais por sua vez possuíam relação direta com o comportamento espectral do solo como, por exemplo, textura, matéria orgânica e composição mineralógica do solo.

Com o uso do comportamento espectral do solo foi possível obter mapas de atributos que descreveram relativamente bem a variabilidade espacial do solo, seja substituindo parte das informações convencionais por estimativas feitas com base em espectros coletados em laboratório, seja realizando predições pixel a pixel com base em dados radiométricos coletados por sensor aéreo. Os melhores mapas de atributos obtidos empregando dados aéreos foram os referentes aos teores de argila, areia e CTC, com R^2 de 0,79, 0,73 e 0,77, respectivamente, mas os mapas referentes às predições feitas através de dados radiométricos coletados em laboratório foram mais acurados, com R^2 de 0,98, 0,95 e 0,97, respectivamente.

Embora a acurácia de predição seja maior para as informações espectrais coletadas em laboratório, tanto nas comparações pontuais quanto para os mapas de atributos, resultados promissores foram obtidos com dados coletados por sensor aéreo, o que ajuda a justificar o uso deste tipo de tecnologia na detecção da variabilidade espacial do solo, em escala compatível ao manejo agrícola.

Referências

BARNES, R.J.; DHANOA, M.S.; LISTER, S.J. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. **Applied Spectroscopy**, Baltimore, v. 43, p. 772-777. 1989.

BAUMGARDNER, M.F.; SILVA, L.F; BIEHL, L.L.; STONER, R. Reflectance properties of soils. **Advances in Agronomy**, San Diego, v.38, p. 1-44, 1985.

BAYER, C.; MARTIN-NETO, L.; MIELNICZUK, J.; PAVINATO, A.; DIECKOW, J. Carbon sequestration in two Brazilian cerrado soils under no-till. **Soil and Tillage Research**, Amsterdam, v. 86, p. 237-245, 2006.

BEN-DOR, E.; PATKIN, K.; BANIN, A.; KARNIELI, A. Mapping of several soil properties using DAIS-7915 hyperspectral scanner data – a case study over clayey soils in Israel, **International Journal of Remote Sensing**, Basingstoke, v.23, p.1043-1062, 2002.

BEN-DOR, E.; TAYLOR, R. G.; 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.

BERK, A.; ANDERSON, G.P.; BERNSTEIN, L.S.; ACHARYA, P.K.; DOTHE, H.; MATTHEW, M.W.; ADLER-GOLDEN, S.M.; CHETWYND Jr., J.H.; RICHTSMEIER, S.C.; PUKALL, B.; ALLRED, C.L.; JEONG, L.S.; HOKE, M.L. MODTRAN4 Radiative Transfer Modeling for Atmospheric Correction. In: LARAR, A.M. (Ed.) OPTICAL SPECTROSCOPY TECHNIQUES AND INSTRUMENTATION FOR ATMOSPHERIC AND SPACE RESEARCH, 3, 1999. Denver, CO, **Proceedings** of SPIE, v. 3756, p. 554-362. 1999.

BERTOLDO DE OLIVEIRA, J.; MENK, J.R.F.; ROTTA, C.L. Levantamento Semidetalhado dos Solos do Estado de São Paulo: Quadrícula de Campinas. Campinas:IAC. 1977. Escala: 1:100.000.

BOARDMAN, J.W.; KRUSE, F.A. Automated spectral analysis: a geological example using AVIRIS data, north Grapevine Mountains, Nevada: In: ERIM THEMATIC CONFERENCE ON GEOLOGIC REMOTE SENSING, 10, 1994. Ann Arbor. **Proceedings**… Ann Arbor, MI:Environmental Research Institute of Michigan. 1994. p. I-407 - I-418.

BOARDMAN, J.W.; KRUSE, F.A.; GREEN, A.A. Mapping target signatures via partial unmixing of AVIRIS data. In: JPL AIRBORNE EARTH SCIENCE 1995. Summaries...Workshop…JPL Publication 95-1, v. 1, 1995. p. 23-26.

BRICKLEMYER, R.S.; BROWN, D.J. On-the-go: VisNIR: Potential and limitations for mapping soil clay and organic carbon. **Computers and Eletronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 70, p. 209-206, 2010.

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.

CHANG, C.W.; LAIRD, D.A.; MAUSBACH, M.J.; HURBURGH JR., C.R. Near-infrared reflectance spectroscopy – principal components regression analysis of soil properties. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 65, p. 480-490, 2001.

CHEN, F.; KISSEL, D.E.; WEST, L.T.; ADKINS, W.; RICKMAN, D.; LUVALL, J.C. Mapping soil organic carbon concentrations for multiple fields with image similarity analysis. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 72, p. 186-193, 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.

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, 2006.

DAUGHTRY, C.S.T.; HUNT JR, E.H.; DORAISWAMY, P.C.; MCMURTREY III, J.E. Remote Sensing the Spatial Distribution of Crop Residues. **Agronomy Journal**, Madison, 97, p. 864-871, 2005.

DEMETRIADES-SHAH, T.H.; STEVEN, M.D.; CLARK, J.A. High resolution derivative spectra in remote sensing. **Remote Sensing of Environment**, New York, v. 33, p. 55-64, 1990.

DETAR, W.R.; CHESSON, J.H.; PENNER, J.V.; OJALA, J.C. Detection of soil properties with airborne hyperspectral measurements of bare fields. **Transactions of the ASABE**, Saint Joseph, v. 51, p. 463-470, 2008.

DIGGLE, P.J.; RIBEIRO JR., P.J. **Model Based Geostatistics**. Springer: New York. 2007. 230 p.

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**, Melbourne, v. 42, p. 607-614, 2002.

EMPRESA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA BRASILEIRA (Embrapa). **Manual de métodos de análise de solo**. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisa de Solos. 212p. 1997.

EMPRESA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA BRASILEIRA (Embrapa). **Sistema brasileiro de classificação de solos**. Rio de Janeiro:Embrapa. 1999. 421 p.

GALVÃO, L.S.; FORMAGGIO, A.R.; COUTO, E.G.; ROBERTS, D.A. Relantionships between the mineralogical and chemical composition of tropical soils and topography

from hyperspectal remote sensing data. **Journal of Photogrammetry and Remote Sensing**, Amsterdam, v. 63, p. 259-271, 2008.

GOMEZ, C.; LAGACHERIE, P.; COULOUMA, G. Continuum removal versus PLSR method for clay and calcium carbonate content estimation from laboratory and airborne hyperspectral measurements. **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p. 141-148, 2008.

GOMEZ, C.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MCBRATNEY, A.B. Soil carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field Vis-NIR spectroscopy: An Australian case study. **Geoderma**, Amsterdam, v. 146, p. 403-411, 2008.

GREEN, A.A.; BERMAN, M.; SWITZER, P.; CRAIG, M.D. A transformation for ordering multispectral data in terms of image quality with implications for noise removal: **IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing**, Piscataway, v. 26, no. 1, p. 65-74. 1988.

GUERSCHMAN, J.P.; HILL, M.J.; RENZULLO, L.J.; BARRETT, D.J.; MARKS, A. L.; BOTHA, E. J. Estimating fractional cover of photosynthetic vegetation, non-photosynthetic vegetation and bare soil in the Australian tropical savanna region upscalling the EO-1 Hyperion and MODIS sensors. **Remote Sensing of Environment**, New York, v. 113, p. 928-944, 2009.

HBIRKOU, C.; PÄTZOLD, S.; MAHLEIN, A.K.; WELP, G. Airborne hyperspectral imaging of spatial soil organic carbon heterogeneity at the field scale. **Geoderma**, Amsterdam, v. 175-176, p. 21-28, 2012.

HIVELY, W.D; MCCARTY, G.W.; REEVES III, J.B.; LANG, M.W.; OESTERLING, R. A.; DELWICHE, S. R. Use of airborne hyperspectral imagery to map soil properties in tilled agricultural fields. **Applied and Environmental Soil Science**, New York, p. 1-13, 2011.

HUNT, G.H. Spectral signatures of particulate minerals in the visible and near-infrared. **Geophysics**, Tulsa, v. 42, p. 501-513, 1977.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (IBGE). **Rede Brasileira de Monitoramento Contínuo dos Sistemas GNSS**. Disponível em: < http://www.ibge.gov.br/home/geociencias/geodesia/rbmc/ntrip/>. Acesso em: 10 jul. 2010.

KÄMPF, N.; CURI, N.; MARQUES, J.J. Intemperismo e ocorrência de minerais no ambiente solo. In: MELO, V.F.; ALLEONI, L.R.F. (ed**). Química e mineralogia do solo: parte 1 – Conceitos básicos**. Viçosa: Sociedade Brasileira de Ciência do Solo. cap. 5. 2009. p. 333-379.

KER, J.C. Latossolos do Brasil: Uma revisão. Geonomos, Belo Horizonte, v. 5, p. 17-40, 1997.

KUBELKA, M.; MUNK, F. Ein beitrag zur optik der farbanstriche (A contribution to the optics of colour coatings). **Zeit. Tech. Physik**, 12, p. 593-601, 1931.

KRUSE, F.A.; LEFKOFF, A.B.; DIETZ, J.B. Expert system-based mineral mapping in northern Death Valley, California/Nevada using the airborne visible/infrared imaging spectrometer (AVIRIS): **Remote Sensing of Environment,** Special issue on AVIRIS, New York, v. 44, p. 309-336, 1993.

LOPEZ, L.R. 2009. Pedologia quantitativa: espectrometria VIS-NIR-SWIR e mapeamento digital de solos. Piracicaba, 2009. 171 p. Dissertação (Mestrado) – Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz". 2009 .

MALAVOLTA, E. **ABC da adubação**, 4 ed. São Paulo: Editora Agronômica Ceres. 1979. 256 p.

MARTENS, H.; JENSEN, S.; GELADI, P. Multivariate linearity transformation for near-infrared reflectance spectroscopy. In: CHRISTIE, O.H.J. (Ed.). NORDIC SYMPOSIUM ON APPLIED STATISTICS. 1983. Stavenger. **Proceedings**… Stavenger:Stokkand Forlag Publ. 1983. p. 205-234.

MCCARTY, G.W.; REEVES III, J.B.; REEVES, V.B.; FOLLET, R.F.; KIMBLE, J.M. Mid-Infrared and Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy for Soil Carbon Measurement. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 66, p. 640-646. 2002.

MEVIK, B.H.; WEHRENS, R. The pls package: Principal Component and Partial Least Squares Regression in R. **Journal of Statistical Software**, v.18, p. 1-24. 2007.

MULDER, V.L.; BRUIN, S. de; SCHAEPMAN, M.E.; MAYR, T.R. The use of remote sensing in soil and terrain mapping – A review. **Geoderma**, Amsterdam, v. 162, p. 1-19, 2011.

NAGLER, P.L.; INOUE, Y.; GLENN, E. P.; RUSS, A. L.; DAUGHTRY, C.S.T. Cellulose absorption index (CAI) to quantify mixed soil plant litter scenes. **Remote Sensing of Environment**, New York, v. 87, p. 310-325, 2003.

ODEH, I. O. A.; MCBRATNEY, A. B. Using AVHRR images for spatial prediction of clay content in the lower Namoi Valley of eastern Australia. **Geoderma**, Amsterdam, v. 97, p. 237-254, 2000.

PIRIE, A.; SINGH, B.; ISLAM, K. Ultra-violet, near-infrared and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopic techniques to predict several soil properties. **Australian Journal of Soil Research**, Melbourne, v. 43, p. 713-721, 2005.

R DEVELOPMENT CORE TEAM. R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, Disponível em: <http://www.R-project.org>. 2008.

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

RAIJ, B. van.; CANTARELA, H.; QUAGGIO, J.A; FURLANI, A.M.C. (Ed.). **Recomendação de adubação e calagem para o Estado de São Paulo**. 2 ed. Campinas: IAC, 285p. 1996. (IAC. Boletim Técnico, 100).

REVELLE, W. Psych: procedures for personality and psychological research. Illinois :Northwerstern University. Disponível em: http://personality-project.org/r/psych. manual.pdf. 2012.

RIBEIRO JR., P.J.; DIGGLE, P.J. GeoR: a package for geostatistical analysis. **R-News**, v. 1/2, p. 15-18. 2001.

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. 72-80, 2009.

RICHTER, R.; SCHLÄPFER. ATCOR-4 User Guide, version 6.2.0. Wil: ReSe applications. 2012. 110 p.

ROLIM, G. de S.; CAMARGO, M.B.P. de; LANIA, D.G.; MORAES, J.F.L. de. Classificação climática de Köppen e de Thornthwaite e sua aplicabilidade na determinação de zonas agroclimáticas para o estado de São Paulo. **Bragantia**, Campinas, v. 66, n. 4, p. 711-720, 2007.

SANKEY, J.B.; BROWN, D.J.; BERNARD, M.L.; LAWRENCE, R.L. Comparing local vs. global visible and near-infrared (VisNIR) diffuse reflectance spectroscopy (DRS) calibrations for the prediction of soil clay, organic C and inorganic C. **Geoderma**, Amsterdam, v. 148, p. 149-158, 2008.

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 near-infrared range to identify and quantify Fe oxide minerals in soils. **Clays and Clay Minerals**, New York, v. 46, p. 528-536, 1998.

SELIGE, T.; BÖHNER, J.; SCHMIDHALTER, U. High resolution topsoil mapping using hyperspectral image and field data in multivariate regression modeling procedures. **Geoderma**, Amsterdam, v. 136, p. 235-244, 2006.

SERBIN, G.; DAUGHTRY, C.S.T.; HUNT JR., E.R.; REEVES III, J.B.; BROWN, D.J. Effects of soil composition and mineralogy on remote sensing of crop residue cover. **Remote Sensing of Environment**, New York, v. 113, p. 224-238, 2009.

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 (3), p. 988- 998, 2002.

SIGNAL DEVELOPERS. Signal: Signal Processing. Disponível em: <http://r-forge.r-project.org/projects/signal/>. 2011.

SPECTRAL TECHNOLOGY AND INNOVATIVE RESEARCH CORPORATION (SPECTIR). Aisa dual hyperespectral sensor. Disponível em: <http://www.spectir.com/wp-content/uploads/ 2012/02/dual_datasheet_ver1-2011.pdf>. Acesso em: 4 out. 2012a.

SPECTRAL TECHNOLOGY AND INNOVATIVE RESEARCH CORPORATION (SPECTIR). ProSpecTIR instrument calibration and data processing overview. Disponível em: < http://www.spectir.com/wp-content/uploads/2012/02/Calibration_ and_Data_Processing_Overview.pdf>. Acesso em: 4 out. 2012b.

STEMBERG, B. Effects of soil sample pretreatments and standardized rewetting as interacted with sand classes on Vis-NIR predictions of clay and soil organic carbon. **Geoderma**, Amsterdam, v. 158, p. 15-22, 2010.

STENBERG, B; VISCARRA ROSSEL, R.A.; Diffuse reflectance spectroscopy for high-resolution soil sensing. In: VISCARRA ROSSEL, R. A.; MCBRATNEY, A. B.; MINASNY, B. (Ed.) **Proximal soil sensing**. Progress in Soil Science. Dordrecht:Springer. 2010. 446 p.

STENBERG, B.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MOUAZEN, A.M.; WETTERLIND, J. Visible and near-infrared spectroscopy in soil science. In: SPARKS, D. L. (Ed.) **Advances in Agronomy**, v. 107. Burlington: Academic Press. 2010. p. 163-215.

STEVENS, A.; UDELHOVEN, T.; DENIS, A.; TYCHON, B.; LIOY, R.; HOFFMANN, L.; WESEMAEL, B. V. Measuring soil organic carbon in croplands at regional scale using airborne spectroscopy. **Geoderma**, Amsterdam, v. 158, p. 32-45, 2010.

SUMMERS, D.; LEWISA, M.; OSTENDORF, B.; CHITTLEBOROUGH, D. Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. **Ecological Indicators**, Amsterdam, v. 11, n. 1, p. 123-131, 2011.

TERRA, F. da S. **Espectroscopia de reflectância do visível ao infravermelho médio aplicada aos estudos qualitativos e quantitativos de solos**. 2011. 374 p. Tese Doutorado em Agronomia - Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, SP, 2011.

TERHOEVEN-URSELMANS, T.; VAGEN, T.G.; SPAARGAREN, O.; SHEPHERD, K.D. Prediction of soil fertility properties from a globally distributed soil mid-infrared spectral library. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 74, p. 1792-1799. 2010.

TUCKER, C.J. Red and photographic infrared linear combinations for monitoring vegetation. **Remote Sensing of Environment**, New York, v. 8, p.127-150, 1979.

UDELHOVEN, T.; EMMERLING, C.; JARMER, T. Quantitative analysis of soil chemical properties with diffuse reflectance spectrometry and partial least-square regression: A feasibility study. **Plant and Soil**, Dordrecht, v. 251, p. 319-329, 2003.

USTIN, S.L.; ROBERTS, D.A.; GAMON, J.A.; ASNER, G.P.; GREEN, R.O. Using imaging spectroscopy to study ecosystem process and properties. **Bioscience**, Washington, v. 54, p. 523-534, 2004.

VARMUZA, K.; FILZMOSER, P. **Introduction to multivariate statistical analysis in chemometrics**. Boca Raton:CRC Press. 2009. 321 p.

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, 2006a.

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. 58-75, 2006b.

VISCARRA ROSSEL, R.A. ParLeS: Software for chemometric analysis of spectroscopic data. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, Amsterdam, v. 90, p. 72-83. 2008.

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.

WEHRENS, R. **Chemometrics with R**: Multivariate data analysis in the natural sciences and life sciences. New York:Springer. 285 p. 2011.

WORKMAN JR., J.; SPRINGSTEEN, A. **Applied Spectroscopy**: A compact Reference for Practitioners. Academic Press: Chestnut Hill. 539 p.

WOLD, S.; MARTENS, H.; WOLD, H. The multivariate calibration method in chemistry solved by the PLS method. In: RUHE, A.; KAGSTROM, B. (Ed.). CONFERENCE ON MATRIX PENCILS, 1983, Heidelberg, **Proceedings**…Lecture Notes in Mathematics. Springer-Verlag:Heidelberg. 1983. p. 286-293.

4 DETERMINAÇÃO DA NECESSIDADE DE CALAGEM DO SOLO POR SENSORIAMENTO PRÓXIMO NO VIS-NIR-SWIR, EM MOVIMENTO: ISTO É VIÁVEL?

Resumo

Os atributos do solo variam na paisagem e a espectroscopia de reflectância tem sido apontada com uma alternativa viável para auxiliar na descrição desta variabilidade, com a finalidade de diminuir os custos, o tempo gasto, a demanda por mão de obra e o impacto ambiental do levantamento da fertilidade pelos métodos convencionais. Isto é possível, pois o comportamento espectral do solo está diretamente relacionado à sua composição e características. A espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR tem sido amplamente estudada em laboratório, utilizando amostras de solo preparadas (TFSA), tendo em vista que a aquisição de dados radiométricos em campo, e mais ainda se estes são coletados em movimento, impõem algumas dificuldades. Estas dificuldades ocorrem principalmente devido a heterogeneidade do solo em sua condição natural e a dificuldades encontradas na aquisição dos dados, como espelhamento da superfície de leitura ocasionada pela atuação do sensor em movimento. Embora existam estas dificuldades autores tem reportado bons resultados de quantificação de atributos físicos e químicos do solo através de seu comportamento espectral obtido em movimento no campo. Neste trabalho foi realizada a avaliação de modelos de predição obtidos a partir de dados radiométricos coletados em movimento no campo e em laboratório. Foram montados experimentos em duas áreas, com solo de textura arenosa em uma e de textura média em outra. Nas parcelas foram aplicadas doses variáveis de calcário a fim de obter-se diferentes níveis de saturação do solo por bases (V%). O sensor foi passado no campo sendo realizada amostragem de solo (150 pontos por área) em grid disposto sobre as linhas deixadas pelo sensor. Os melhores resultados foram obtidos para as predições referentes aos espectros coletados em laboratório, com R^2 de 0,60, 0,28 e 0,20, para a área arenosa, e R^2 de 0,41, 0,64 e 0,61, para a área de textura média, com relação à CTC, V% e necessidade de calagem, respectivamente. Já para as predições feitas com dados coletados em campo os melhores resultados foram observados para as parcelas de textura média, com R^2 de 0,33, 0,38 e 0,34, para a CTC, V% e necessidade de calagem, respectivamente.

Palavras-chave: Espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR, Comportamento espectral, Regressão por mínimos quadrados parciais, Calagem.

Abstract

Soil properties vary across landscape and diffuse reflectance spectroscopy is suggested as a viable alternative to help in the soil variability assessment, in order to reduce costs, time spent, labor needed and the environmental impact of the conventional methods used to determine soil properties. This is possible because the soil spectral behavior is directly related to the soil composition and characteristics. The Vis-NIR-SWIR reflectance spectroscopy has been widely studied in the laboratory, using prepared soil samples (dried and sieved), but studied to a lesser extend using radiometric data acquired in the field (on-the-go). This happens because on-the-go spectral measurements impose some difficulties, mainly due to the natural soil heterogeneity and issues related to the data acquisition, as soil surface smearing while radiometric measurements are taken. Although there are such difficulties several authors have quantified with relative success physical and chemical properties of the soil through its spectral behavior measured on-the-go. In this work a performance evaluation was carried out with prediction models calculated using PLSR. The models were derived from radiometric data collected on-the-go and from spectra measured in the laboratory. For this, field experiments were allocated in two areas, each one with different soil texture (one with about 100 g kg^{-1} of clay, area 1, and another with about 320 g kg^{-1} of clay, area 2). In the plots of each area different rates of lime were applied to achieve different levels of soil CEC saturation by bases (V%). Laboratory measurements were conducted in 300 soil samples, 150 for each field, collected on the same lines where the sensor took the spectral measurements. The best results were obtained for predictions regarding the spectra collected in the laboratory, with R^2 of 0.60, 0.28 and 0.20 for the area 1 and R^2 of 0.41, 0.64 and 0.61, for the area 2, to CTC, V% and lime requirement, respectively. For the predictions derived from data collected in the field the best results were observed for the area 2, with R^2 of 0.33, 0.38 and 0.34 for the CTC, V% and lime requirement, respectively.

Key words: VIS-NIR-SWIR reflectance spectroscopy, Spectral behavior, Partial least squares regression, Liming.

4.1 Introdução

Os atributos do solo variam na paisagem e a espectroscopia de reflectância no Vis-NIR-SWIR tem sido apontada como uma alternativa para descrever esta variabilidade, de forma detalhada e rápida, menos onerosa e com potencial para mitigar o impacto ambiental dos métodos convencionalmente empregados (ADAMCHUK et al., 2004; BRICKLEMYER e BROWN, 2010). Isto porque, o comportamento espectral do solo reflete a sua composição, orgânica e mineralógica, e também suas características físicas permitindo a quantificação de atributos do solo (STENBERG e VISCARRA ROSSEL, 2010).

Entretanto, são poucos os trabalhos que tratam sobre a quantificação de atributos com base em dados espectrais coletados em movimento no campo, uma vez que a aquisição deste tipo de dado é mais difícil, sofrendo influência da heterogeneidade, agregação e umidade, naturais do solo (CHRISTY, 2008). Além disto, quando consideradas as leituras espectrais coletadas em movimento a informação obtida pode ter sua qualidade degradada pela inconsistência na apresentação do solo, pela ocorrência de espelhamento na superfície de leitura e pela obtenção de dados espectrais médios, os quais são derivados das informações coletadas em certa distância, dependendo da velocidade em que se trafega e do tempo de aquisição do sensor (WAISER et al., 2007; BRICKLEMYER e BROWN, 2010)

Como principal vantagem, a aquisição de dados radiométricos no campo, em movimento, permite a obtenção de informações de forma contínua, em densidade bastante superior a permitida por técnicas de sensoriamento próximo estacionárias (MOUAZEN et al., 2007).

Desta forma, o emprego de sensores de campo para aquisição do comportamento espectral do solo, em movimento, pode ser muito útil na descrição da variabilidade do solo, tendo em vista que os métodos convencionais de amostragem e análise possuem custo elevado, os quais podem tornar-se proibitivos quando necessária grande quantidade de informação, como ocorre quando adotadas técnicas de Agricultura de Precisão (MOUAZEN, 2012).

A obtenção de modelos de predição para diversos atributos do solo, a partir de dados radiométricos coletados em movimento no campo, foi reportada na literatura, sendo observados resultados variáveis, principalmente para atributos que não são

espectralmente ativos, ou seja, que não influenciam diretamente o comportamento espectral do solo (SHIBUSAWA et al., 1999; MOUAZEN et al., 2007; CHRISTY, 2008; BRICKLEMYER e BROWN, 2010; MOUAZEN, 2012). Assim, a predição de atributos químicos, como teores de nutrientes, tem se provado mais difícil não só com dados obtidos em campo, mas em laboratório também, na medida em que a relação entre o espectro de reflectância do solo com os teores destes atributos se dá de forma indireta, através de correlação com outros atributos espectralmente ativos (HILL et al., 2010).

O objetivo do presente estudo foi avaliar o potencial preditivo das informações espectrais obtidas em laboratório, com amostras ainda úmidas, e no campo, com o sensor em movimento, principalmente com relação ao teor de matéria orgânica, CTC, cálcio, magnésio, SB e V%, em escala compatível com o manejo agrícola. Espera-se, pelos resultados observados na literatura, que até certo ponto seja possível predizer os atributos que fazem parte do cálculo da necessidade de calagem (V% e CTC), entretanto, como estes atributos não possuem feições de absorção características sabe-se que o resultado pode ser variável.

4.2 Material e Métodos

4.2.1 Descrição das áreas de estudo

O trabalho foi realizado em dois locais, sendo o primeiro localizado próximo à cidade de Monte Mor, SP, Brasil (coordenadas geográficas 22°58’5,8” latitude sul e 47°16’28,4” longitude oeste de Greenwhich, *Datum* SAD-69); e o segundo próximo a cidade de Elias Fausto, SP, Brasil (coordenadas geográficas 23°2’47” latitude sul e 47°19’28,9” longitude oeste de Greenwhich, *Datum* SAD-69). Ambos os locais foram cedidos pelo Grupo Raízen (Unidade São Francisco), e pertenciam a áreas que seriam submetidas às operações de reforma do canavial, após quatro anos de cultivo consecutivo.

Estas áreas foram escolhidas, pois os solos destas podem ser enquadrados em classes texturais distintas, considerando amostras de 0 a 20 cm de profundidade, sendo a primeira área de solo de textura arenosa (teor de argila menor que 15% e teor de areia maior que 70%) e a segunda de solo de textura média (teor de argila menor que 35%, e teor de areia maior que 15%), como

verificado por análise granulométrica (Tabela 4.1), realizada segundo metodologia descrita por Embrapa (1997).

Tabela 4.1 - Distribuição granulométrica e classificação textural, segundo Embrapa (1999), dos solos nos locais de estudo (amostras de 0 a 20 cm).

Área	Argila	Areia	Silte	Classe textural
	----------	g.kg^{-1}	----------	
1	100.8	805.9	93.2	arenosa
2	320.5	545.1	134.4	média

4.2.2 Alocação do experimento no campo

Nas duas áreas escolhidas foram alocadas parcelas a fim de serem submetidas a diferentes tratamentos com relação à correção do solo com calcário. Para isto, cada área foi primeiramente dividida em 5 blocos, em cada bloco foram estabelecidas 5 parcelas, cada uma com 10 metros de largura por 15 metros de comprimento, e espaçadas entre elas de 3 metros. O espaçamento entre os diferentes blocos foi de 2 metros, e a organização das parcelas e blocos nas áreas estudadas deu-se da forma representada na Figura 1.

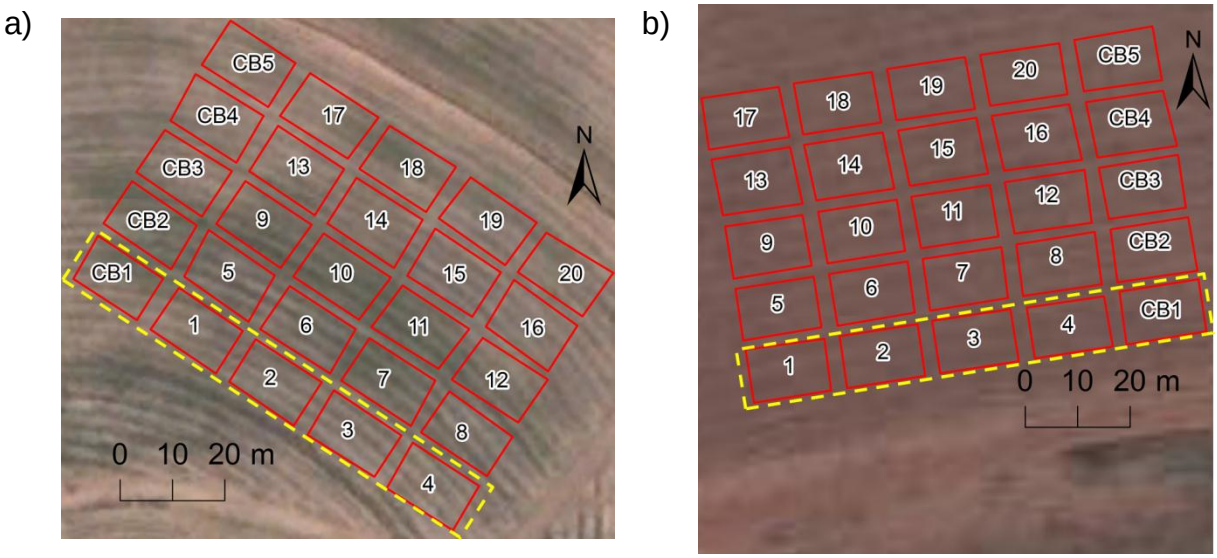


Figura 1 - Distribuição das parcelas (em vermelho) na área 1 (a), de textura arenosa, e na área 2 (b), de textura média. Em amarelo destacado o bloco 1 em cada local.

As parcelas alocadas foram numeradas de 1 a 20, sendo também adotados 1 controle para cada bloco. Desta forma, o primeiro bloco em cada local foi formado pelas parcelas 1 a 4, mais o controle do bloco 1 (CB1), como mostrado na Figura 1, os demais blocos seguiram este mesmo padrão. Em cada parcela foi coletada 1 amostra de solo, de 0 a 20 cm de profundidade, sendo esta composta de 5 sub-amostras obtidas em diferentes locais da parcela. Assim, em cada área foram obtidas 25 amostras, 1 para cada parcela.

As amostras coletadas foram secas em estufa a 45°C por 24 horas, moídas e peneiradas com malha de 2mm, para serem posteriormente analisadas em laboratório quanto aos seus atributos químicos.

As análises químicas realizadas seguiram as metodologias descritas por Raij et al. (2001), para avaliação da fertilidade e incluíram: a determinação do pH em solução de cloreto de cálcio (0,01mol l^{-1}); a determinação dos teores de fósforo (P), cálcio (Ca), magnésio (Mg) e potássio (K) extraídos com resina trocadora de íons, sendo o P quantificado por colorimetria , o Ca e Mg por espectrofometria de absorção atômica, e o K por fotometria de emissão atômica; a quantificação dos teores de alumínio (Al) trocável, extraído com solução de cloreto de potássio (1 mol l^{-1}) e sua concentração determinada por titulação acidimétrica com solução de hidróxido de sódio (0,025 mol l^{-1}); a quantificação da acidez potencial (H+Al), através do método do tampão SMP; e a quantificação de matéria orgânica (via úmida) através da sua oxidação com solução de dicromato de potássio (0,1667mol l^{-1}) e determinação dos íons cromo (Cr^{3+}) restantes, após a oxidação, por colorimetria.

A partir dos resultados das análises químicas foram calculados os valores de soma de bases (SB), capacidade de troca catiônica (CTC), saturação por bases (V%) e saturação por alumínio (m%), de acordo com Raij et al. (2001).

Para cada parcela, excluindo-se os controles, foram atribuídos, de forma aleatória, tratamentos a serem aplicados, com relação à correção do solo por calcário, adotando-se o critério da saturação por bases (V%). Portanto, foram fixados quatro tratamentos: 90%, 75% e 65% de saturação do solo por bases, além das testemunhas, nas quais não foi aplicado corretivo. Desta forma, cada bloco continha 3 parcelas tratadas com doses distintas de calcário (calculadas para 90%, 75 e 60% de saturação do solo por bases), e 2 parcelas nas quais não foi aplicado corretivo (testemunha e controle).

As doses de calcário a serem aplicadas nas parcelas foram calculadas segundo a equação (26).

$$NC\left(t\,ha^{-1}\right) = {(V_2 - V_1) \times T}\Big/{(10 \times PRNT)} \qquad (26)$$

Onde, **NC** é a dose a ser aplicada, em toneladas para a camada de 0 a 20 cm, considerando 1 ha; $\mathbf{V_1}$ a saturação por bases atual do solo; $\mathbf{V_2}$ a saturação por bases a ser atingida com a dose aplicada (V% desejado); **T** a CTC potencial do solo em $mmol_c\,dm^{-3}$; **PRNT** o poder relativo de neutralização total do calcário (em %), que para o calcário utilizado era de 78%. Após este cálculo, o resultado foi convertido em kg ha^{-1} e também multiplicado por 0,015, para que fosse obtida a dose (em kg) a ser aplicada na parcela.

As doses calculadas foram aplicadas a lanço, manualmente, e incorporadas na camada superficial do solo através da passagem de grade, após a aplicação do calcário. A distribuição das doses nas parcelas, em ambas as áreas, é mostrada na Figura 2.

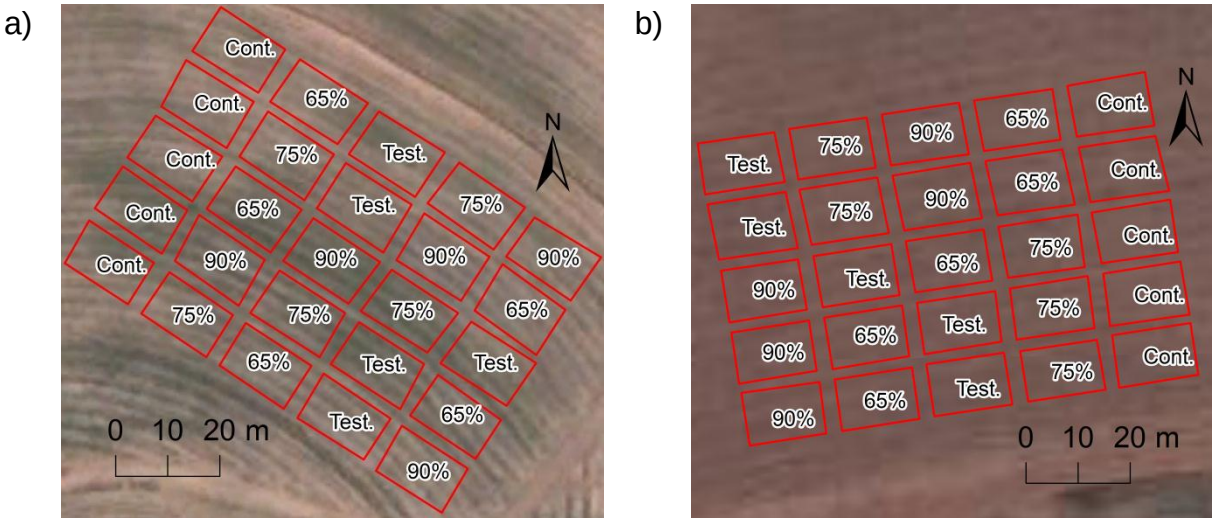


Figura 2 - Tratamentos aplicados nas parcelas da área 1 (a), de textura arenosa, e na área 2 (b), de textura média.

Após a aplicação e incorporação do calcário, as áreas foram mantidas sem qualquer vegetação de cobertura, através da pulverização de herbicidas quando necessário, a fim de evitar a ocupação da área por plantas.

4.2.3 Coleta de dados espectrais no campo e amostragem de solo

Após a aplicação dos tratamentos em ambas as áreas, foi esperado cerca de 7 meses para a completa reação do calcário aplicado, e também para que o solo estivesse relativamente seco no campo. Quando obtidas estas condições efetuaram-se leituras espectrais nas parcelas alocadas, a fim de determinar o comportamento espectral do solo após o tratamento com diferentes doses de corretivo.

Para isto utilizou-se o espectrorradiômetro Veris VIS-NIR *Spectrophotometer* (Veris Technologies Inc., Salina, Kansas, EUA), desenvolvido para uso em campo, mas podendo ser utilizado também para leituras em laboratório. O equipamento (Figura 3) possui uma haste montada numa barra de ferramentas, sendo puxado por trator, as leituras são efetuadas através de uma janela de safira presente na parte inferior da haste montada, e o aparelho possui fonte de luz própria.

A energia refletida pelo solo é transmitida por cabos de fibra ótica até um espectrorradiômetro embarcado, sendo medidos os comprimentos de onda de 350 a 2224 nm (VNIR-SWIR), e as leituras registradas em um computador portátil ligado ao aparelho (CHRISTY, 2008). O equipamento utilizado apresenta resolução espectral de 8 nm e taxa de aquisição de dados de cerca de 20 espectros por segundo, sendo registrado um espectro por segundo, derivado da média das leituras coletadas neste intervalo. O recobrimento periódico da janela de coleta permite a obtenção de leituras dos padrões (escuro e referência) a cada 10 minutos.

As leituras espectrais obtidas pelo sensor são georreferenciadas utilizando dados de um receptor GPS e registradas no computador embarcado já com as coordenadas geográficas correspondentes. Como fonte de energia foram utilizadas baterias externas tanto para o espectrorradiômetro quanto para o receptor GPS, sendo alimentado direto na bateria do trator somente o computador portátil utilizado para registrar os dados, a fim de minimizar a influência de oscilações na fonte de energia na qualidade dos dados obtidos.

O tipo de espectrorradiômetro do equipamento utilizado é, segundo Christy (2008), ideal para uso no campo, haja vista que as leituras espectrais são captadas em todos os comprimentos de onda simultaneamente.

Durante as medições, a haste do sensor foi colocada a cerca de 15 cm de profundidade no solo (Figura 3 – b), e o trator conduzido a cerca de 3,6 km/h. O equipamento foi passado duas vezes em cada parcela, sendo as passadas

contínuas e distanciada de 3 metros entre elas. Foram registrados cerca de 15 leituras espectrais por passada em cada parcela, e desta forma obtidos cerca de 30 espectros por parcela.

a) b)

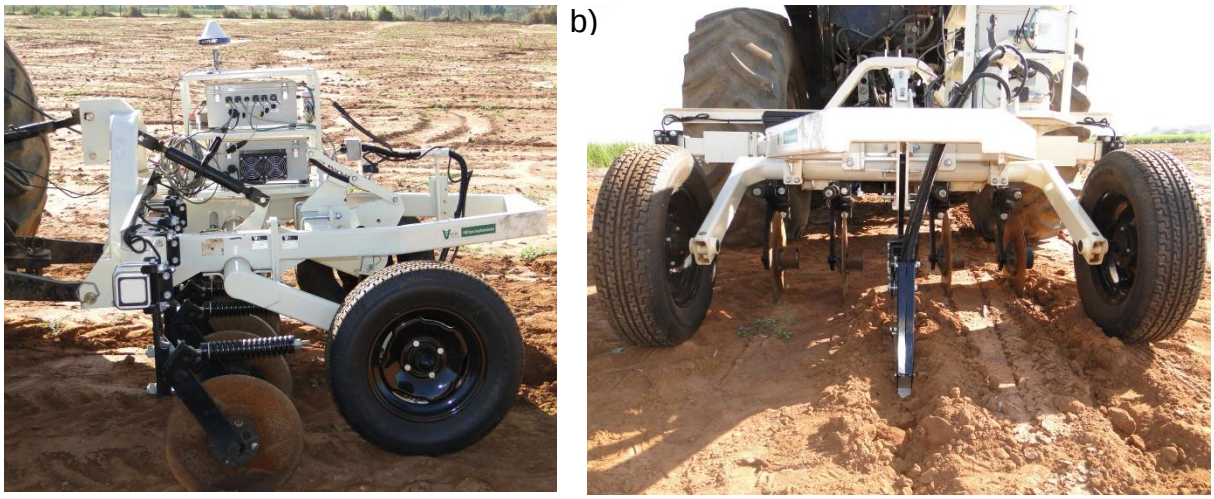


Figura 3 - Espectrorradiômetro Veris VIS-NIR *Spectrophotometer*, lateral do aparelho (a) e haste penetrando no solo para realização de leituras (b).

Após a passagem do sensor nas parcelas, foi realizada amostragem de solo, e como proposto por Christy (2008) e Bricklemyer e Brown (2010) o *grid* amostral adotado foi sobreposto aos sulcos deixados pelo sensor durante sua passagem (Figura 4). Ainda de acordo com Christy (2008), cada amostra coletada foi retirada de 1m de sulco, de 0 a 10 cm de profundidade a partir do fundo do sulco, considerando a largura do sulco de cerca de 7 cm. Desta forma, cada amostra representou 1 m da passagem do sensor no campo. Em cada parcela foram coletadas 6 amostras de solo, 3 em cada sulco deixado pelo sensor, sendo estas amostras espaçadas de 3 metros entre elas e também em relação aos bordos da parcela.

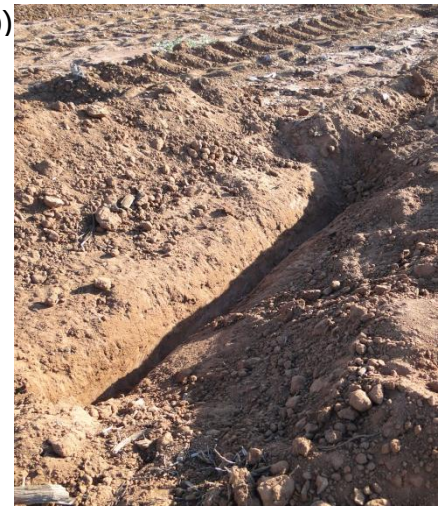
a) b) 

Figura 4 - Locais de coleta de solo em uma parcela (a), ponto amostral no sulco de leitura deixado pelo sensor (b).

Em cada área do experimento foram coletadas 150 amostras de solo, totalizando 300 amostras de solo se somadas as coletas nas parcelas de textura arenosa e de textura média. As amostras coletadas eram ensacas e fechadas com fita adesiva, evitando a perda de umidade. Após serem transportadas ao laboratório foram submetidas à determinação da umidade gravimétrica, de acordo com a metodologia descrita por Embrapa (1997), retirando-se uma alíquota de cada amostra e secando-a em estufa a 105°C durante 24 horas. As alíquotas foram pesadas antes e após a secagem, sendo a umidade gravimétrica calculada de acordo com a equação (27) e expressa em kg de água por kg de solo seco.

$$Ug = \left[{(a - b)}/{b} \right] \tag{27}$$

Onde, ***a*** é a massa da amostra úmida (em kg) e ***b*** a massa da amostra seca (em kg). A umidade foi monitorada pela sua grande influência no comportamento espectral do solo.

4.2.4 Leituras espectrais no laboratório

As amostras coletadas foram submetidas a leituras espectrais em laboratório, utilizando o mesmo espectrorradiômetro empregado nas leituras efetuadas no campo, Veris VIS-NIR *Spectrophotometer* (Veris Technologies Inc., Salina, Kansas,

EUA). O comportamento espectral das amostras em laboratório foi obtido com o solo ainda úmido, isto para que fosse possível a comparação direta dos dados obtidos em campo com os dados obtidos em laboratório.

O sensor foi montado em laboratório seguindo as recomendações do fabricante (VERIS, 2012), sendo retiradas do chassi utilizado no campo todas as partes necessárias para o funcionamento do equipamento em laboratório (Figura 5). Como fonte de energia para o equipamento foi utilizada a rede elétrica no lugar das baterias utilizadas no campo, empregando-se uma fonte de 19 amperes fornecida com o aparelho. Como fonte de luz utilizou-se a lâmpada halógena do espectrorradiômetro, a mesma utilizada no campo.

As amostras de solo foram montadas individualmente em suporte específico para a realização das leituras, conforme ilustrado na Figura 5. Para cada amostra foram efetuadas três leituras consecutivas, sendo a média destas três leituras adotada com sendo o comportamento espectral da amostra.

a) b)

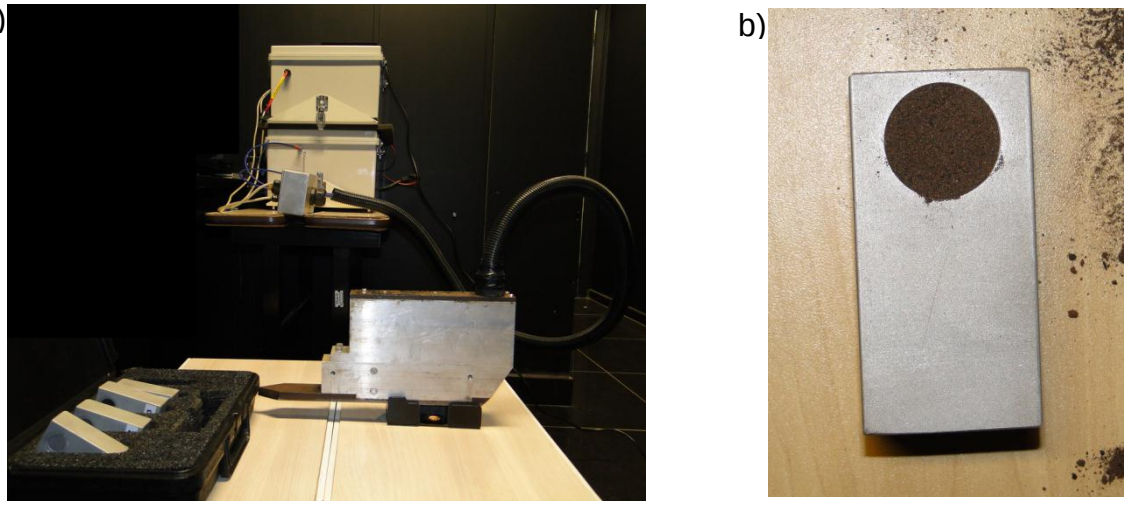


Figura 5 - Espectrorradiômetro Veris VIS-NIR *Spectrophotometer*, aparelho montado no laboratório (a); solo colocado em suporte antes das leituras no sensor (b).

Os dados radiométricos obtidos em laboratório foram utilizados para escolher as leituras que representariam o comportamento espectral do solo nos locais de amostragem no campo. Isto foi feito a fim de selecionar somente os melhores dados obtidos no campo, para serem analisados posteriormente.

Para cada amostra de solo coletada foram obtidas, em média, 5 leituras espectrais no campo. Estes espectros foram comparados à curva espectral obtida em laboratório, para a amostra em questão, através do ajuste de uma regressão

linear entre os valores observados no campo e os valores da curva obtida em laboratório. Como critério de avaliação da semelhança entre uma leitura espectral obtida no campo e outra obtida em laboratório foi adotado o coeficiente de determinação (R^2) para a regressão linear ajustada entre elas (Figura 6).

Desta forma, as 3 leituras espectrais com maior R^2, em relação a curva espectral da amostra em laboratório, foram selecionadas e sua média foi adotada como sendo o comportamento espectral da amostra no campo.

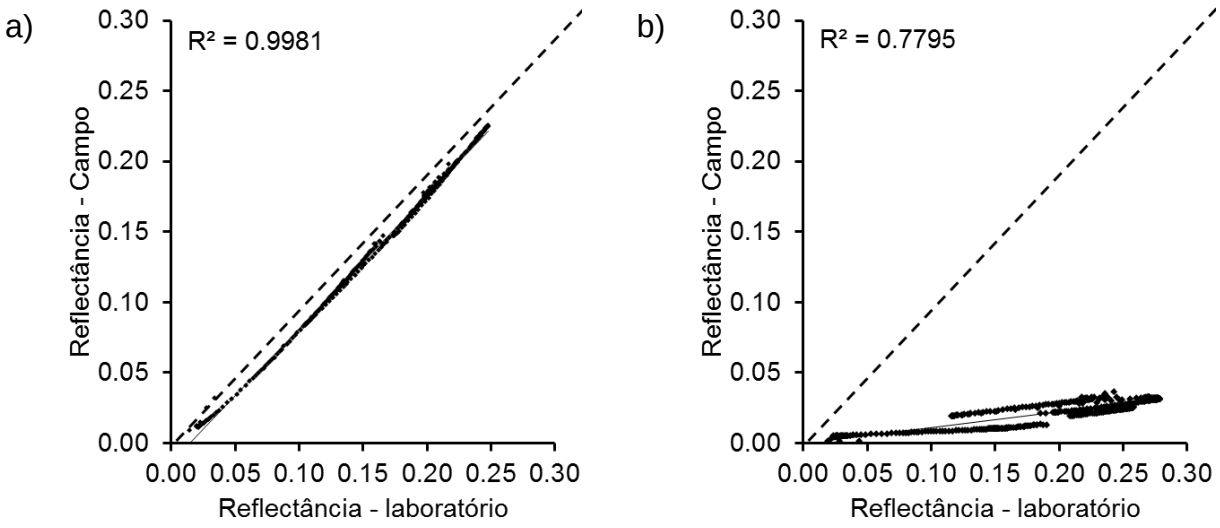


Figura 6 - Método de seleção de leituras espectrais de campo para utilização nos modelos de quantificação. Mostrado exemplo de gráfico referente à leitura espectral feita no campo selecionada (a) e não selecionada (b), para o cálculo da curva espectral média, de uma determinada amostra.

Após a obtenção dos dados radiométricos em laboratório as amostras de solo foram secas em estufa a 45°C por 24 horas, moídas e peneiradas com malha de 2mm, a fim de serem analisadas quanto seus atributos químicos.

Foram realizadas análises químicas nas amostras de acordo com as metodologias descritas por Raij et al. (2001), para avaliação da fertilidade do solo e incluíram: a determinação do pH em solução de cloreto de cálcio (0,01mol l^{-1}); a determinação dos teores de fósforo (P), cálcio (Ca), magnésio (Mg) e potássio (K) extraídos com resina trocadora de íons, sendo o P quantificado por colorimetria , o Ca e Mg por espectrofometria de absorção atômica, e o K por fotometria de emissão atômica; a quantificação dos teores de alumínio (Al) trocável, extraído com solução de cloreto de potássio (1 mol l^{-1}) e sua concentração determinada por titulação acidimétrica com solução de hidróxido de sódio (0,025 mol l^{-1}); a quantificação da acidez potencial (H+Al), através do método do tampão SMP; a quantificação de

matéria orgânica (via úmida) através da sua oxidação com solução de dicromato de potássio (0,1667mol l^{-1}) sendo estimada de forma indireta por titulação dos íons cromo (Cr^{3+}) restantes após a oxidação, com solução de sulfato ferroso amoniacal (0,1 mol l^{-1}).

A partir dos resultados das análises químicas foram calculados os valores de soma de bases (SB), capacidade de troca catiônica (CTC), saturação por bases (V%) e saturação por alumínio (m%), de acordo com Raij et al. (2001).

4.2.5 Obtenção de modelos de quantificação de atributos do solo

Tendo sido obtidos os resultados das análises químicas, juntamente com os dados radiométricos de campo e laboratório, obtiveram-se modelos de predição de atributos do solo através do método de regressão por mínimos quadrados parciais (*Partial least Squares Regression* – PLSR), descrito por Wold; Martens e Wold (1983).

O PLSR é um método amplamente utilizado em quimiometria que vem sendo bastante aplicado também para predição de atributos do solo através do comportamento espectral deste (MCCARTY et al., 2002; VISCARRA-ROSSEL et al., 2006). O método baseia-se na obtenção de variáveis latentes para os dados espectrais, a partir de combinações lineares destes, e realiza a regressão destas variáveis criadas com o atributo do solo a ser modelado (VARMUZA e FILZMOSER, 2009).

A regressão PLS visa à obtenção de variáveis latentes de modo não somente a capturar o máximo da variação presente nos dados espectrais, mas ao mesmo tempo maximizar a correlação entre as variáveis criadas e o atributo do solo a ser modelado, ou seja, o método maximiza a covariância entre os dados espectrais e o atributo do solo de interesse (WEHRENS, 2011).

A complexidade dos modelos gerados pela técnica pode ser determinada pelo número de fatores utilizados na regressão, e o número ótimo de fatores a ser utilizado pode ser obtido por validação cruzada.

Assim, as amostras coletadas em cada área (150 pontos amostrais por área) foram divididas em duas partes: a primeira com dois terços das amostras (100 pontos) foi empregada como conjunto de treinamento, e a segunda com um terço das amostras (50 pontos) serviu como conjunto de validação.

Os conjuntos de treinamentos serviram para a obtenção dos modelos de predição de atributos do solo, com número crescente de fatores, sendo para cada modelo (determinado número de fatores) aplicada a validação cruzada do tipo *leave-one-out*. Nesta validação retira-se uma amostra, gera-se um modelo e aplica-se o modelo ao elemento retirado, repetem-se estes passos sucessivamente até que todas as amostras tenham sido retiradas e preditas. Portanto, obtêm-se valores preditos referentes a todas as amostras, com diferentes modelos (quantidades diferentes de fatores utilizados).

As predições feitas são utilizadas para determinar qual o número de fatores mais adequado para a quantificação de determinado atributo solo. Para isto utilizam-se os erros de predição (resíduos), e critérios derivados destes erros. Foram utilizados quatro critérios distintos para escolher os melhores modelos a serem utilizados, sendo estes: o coeficiente de determinação (R^2) entre os valores observados nas análises de laboratório e os valores preditos utilizando as leituras espectrais (obtidas no campo ou laboratório), calculado utilizando-se a equação (14); a raiz do erro quadrático médio de predição (*Root Mean Squared Error* – RMSE), calculada segundo a equação (17);o fator RPD (*Relative Percent Deviation*), de acordo com a equação (18); e o parâmetro AIC (*Akaike's Information Criterion*), segundo a equação (19). Ainda, os valores obtidos de RPD foram avaliados segundo os parâmetros descritos por Chang et al. (2001), nos quais valores de RPD acima de 2,0 correspondem a modelos com desempenho ótimo na predição de determinado atributo, já valores de RPD entre 2,0 e 1,4 indicam desempenho de predição intermediário, e RPD menor que 1,4 caracteriza um modelo com desempenho ruim, realizando predições pouco acuradas.

Os critérios utilizados permitiram a escolha de modelos com bom desempenho de predição e relativamente simples.

Os modelos de quantificação foram obtidos não somente para os dados radiométricos em valores de absorbância, formato em que os dados são fornecidos pelo espectrorradiômetro utilizado, mas também para os dados em valores de reflectância, calculada pelo inverso da equação (20). Além disto, os dados em reflectância foram transformados pelos seguintes métodos: Kubelka-Munk (KUBELKA e MUNK, 1931), de acordo com a equação (21); MSC (MARTENS; JENSEN e GELADI, 1983), como mostrado na equação (22); SNV (BARNES et al., 1989), empregando a equação (23); Savitzky-Golay (SAVITZKY e GOLAY, 1964),

com polinomial de segundo grau e janelas de 7 e 15 valores, descrito pela equação (24); e Savitzky-Golay com primeira derivada, polinomial de segundo grau e janelas de 7 e 15 valores, obtido também pela equação (24).

Todos os dados, independente do pré-tratamento adotado, foram centrados pela média antes da realização do PLSR, a fim de facilitar alguns métodos envolvidos na análise multivariada dos dados.

Os melhores modelos obtidos, para cada pré-tratamento, foram aplicados na predição de atributos dos dados pertencentes ao conjunto de validação, isto para avaliar o despenho dos modelos obtidos na quantificação de atributos para dados não utilizados na obtenção dos próprios modelos.

4.2.6 Obtenção de mapas de necessidade de calagem a partir de valores das análises convencionais e das predições de CTC e V%

Os valores de saturação do solo por bases (V%) e CTC, dados pela análise convencional das amostras do grupo de validação (50 pontos por área), foram utilizados para calcular a necessidade de calagem (NC, t ha^{-1}), considerando um V% desejado de 85%. Para o cálculo da NC foi utilizada a equação (27), sendo calculado também a NC empregando os valores de V% e CTC preditos, a partir dos dados espectrais obtidos no campo e em laboratório.

Os valores de NC foram interpolados, a fim de serem obtidos mapas de NC, tanto para os valores observados, quanto para os valores preditos. Para obtenção dos mapas foi utilizado o interpolador inverso quadrado da distância (IDW – *Inverse Distance Weighting*), aplicado através do programa ArcGIS 9.3 (ESRI, 2006), extensão *Spatial Analyst*. Como parâmetros para a interpolação adotou-se a segunda potência e foram considerados os 15 pontos mais próximos para a obtenção do valor em cada pixel do mapa, sendo a dimensão dos pixels de 0,30 m por 0,30 m.

Portanto, foram obtidos três mapas de NC para cada área: (a) o primeiro pela interpolação dos valores derivados das análises convencionais; (b) o segundo feito empregando-se os valores preditos a partir de dados radiométricos de campo; (c) e o terceiro interpolado a partir das predições obtidas com leituras espectrais de laboratório.

Os mapas obtidos pela interpolação dos valores preditos foram comparados aos mapas dos valores obtidos pelo método convencional. Esta comparação foi feita através de dois critérios: (a) o coeficiente de determinação (R^2), ou seja, o ajuste entre os valores de NC obtidos pelo método convencional e os preditos utilizando leituras espectrais de campo ou laboratório (equação 14); (b) a raiz do erro quadrático médio (*Root Mean Squared Error* – RMSE), considerando os valores da interpolação dos dados convencionais como valores observados, e a interpolação das predições, feitas com os espectros de campo ou laboratório, como valores preditos (equação 17).

Estes parâmetros calculados permitiram avaliar não somente as predições de forma pontual, mas também dos mapas obtidos a partir destas predições, sendo que estes produtos poderiam ser diretamente utilizados no manejo do solo.

4.2.7 Etapas realizadas durante o trabalho

Durante o trabalho foram desenvolvidas diversas atividades a fim de possibilitar a quantificação dos atributos do solo através dos dados radiométricos coletados no campo e obtidos em laboratório, e comparar os resultados obtidos com os dados das análises convencionais de solo, sendo estas comparações pontuais e entre mapas de atributos.

A sequência das etapas realizadas e a dependência entre estas são ilustradas na Figura 7, na qual é possível observar as etapas envolvidas na fase de montagem do experimento no campo, assim como na fase de coleta e análise dos dados.

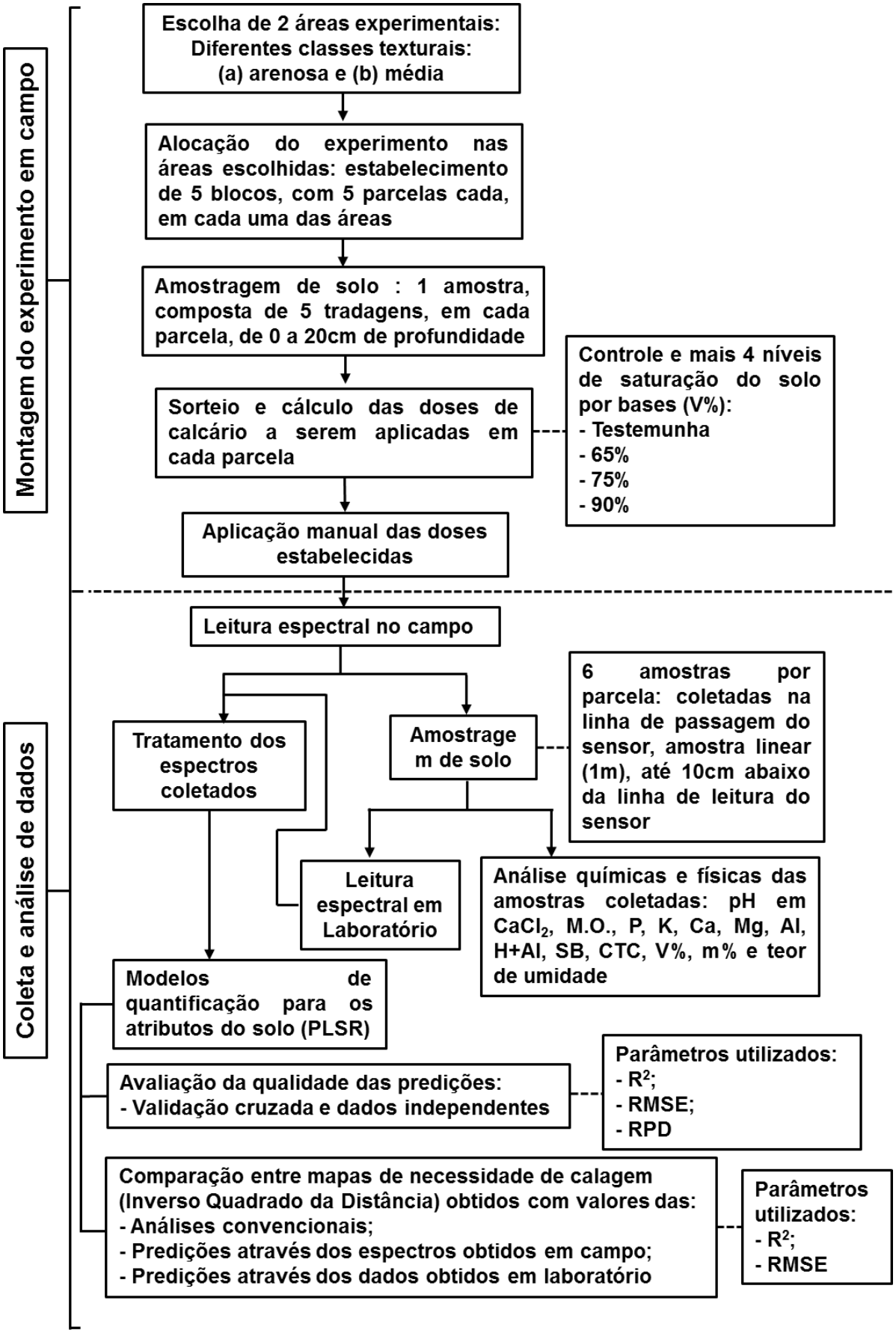


Figura 7 - Etapas realizadas durante o do trabalho, incluindo as fases de montagem do experimento no campo e a fase de coleta e análise dos dados.

4.3 Resultados e Discussão

4.3.1 Descrição da variabilidade dos atributos químicos, físicos e do comportamento espectral do solo no Vis-NIR-SWIR

A variação dos atributos do solo nas amostras coletadas, em ambas as áreas onde foram alocados os experimentos, é descrita na Tabela 4.2 na qual são apresentados parâmetros de média e dispersão para o conjunto de dados.

Considerando que os tratamentos aplicados às parcelas foram doses variáveis de calcário, a fim de promover diferentes níveis de saturação do solo por bases (90%, 75%, 60%, ou testemunhas), pode-se observar que os atributos diretamente relacionados aos tratamentos adotados, principalmente cálcio, magnésio, acidez potencial, SB e V%, apresentaram maiores variações, como pode ser percebido pelos coeficientes de variação mais elevados, principalmente no caso das parcelas de textura média. Os níveis de pH em $CaCl_2$, alumínio e m% apresentaram uma menor variação, mesmo sendo atributos que têm seus teores influenciados pela calagem.

Tabela 4.2 - Características físicas e químicas das amostras coletadas nas parcelas.

Parâmetros	pH em $CaCl_2$	MO	P	K	Ca	Mg	Al	H+Al	SB	CTC	V	m	Umidade[1]
		$g.dm^{-3}$	$mg.dm^{-3}$	----------$mmol_c.dm^{-3}$ ----------							---- % ----		$kg.kg^{-1}$
	Área 1 - Parcela de textura arenosa (n* = 150)												
Mínimo	4.0	11.0	9.0	0.5	12.0	3.0	0.0	13.0	16.5	41.4	40.0	0.0	0.027
Máximo	6.5	32.0	264.0	6.2	58.0	18.0	1.0	34.0	70.1	100.8	78.0	6.0	0.084
Média	5.1	17.5	48.3	1.0	26.1	8.0	0.2	22.0	34.9	57.1	60.5	0.51	0.049
Mediana	5.1	17.0	38.0	0.9	25.0	8.0	0.0	22.0	33.6	55.5	61.0	0.0	0.047
Desvio Padrão	0.3	3.7	40.2	0.5	7.0	2.3	0.4	4.0	8.9	8.7	8.0	0.99	0.010
Coef. de Variação	5.5	21.0	83.3	54.9	26.7	29.3	181.9	18.2	25.5	15.2	13.2	195.0	20.1
Assimetria[2]	0.3	0.9	2.7	5.8	1.3	1.0	1.3	0.8	1.1	1.8	-0.3	2.1	1.2
Curtose[3]	7.2	4.1	12.2	54.8	6.5	4.6	2.6	3.8	5.2	8.3	2.9	8.4	4.8
	Área 2 - Parcela de textura média (n* = 150)												
Mínimo	4.0	15.0	19.0	0.5	6.0	3.0	0.0	18.0	9.8	60.3	13.0	0.0	0.118
Máximo	6.6	29.0	102.0	2.3	50.0	33.0	14.0	64.0	83.8	102.0	82.0	59.0	0.187
Média	5.1	20.4	42.4	1.2	23.1	12.9	1.7	36.2	37.1	73.3	49.6	6.7	0.147
Mediana	5.1	20.0	39.0	1.2	23.0	12.0	0.0	34.0	37.1	72.6	52.5	0.0	0.146
Desvio Padrão	0.7	2.5	14.4	0.3	10.0	6.1	2.6	11.8	15.9	7.7	17.6	11.0	0.012
Coef. de Variação	13.0	12.4	34.0	27.5	43.4	47.8	154.2	32.7	43.0	10.5	35.5	163.7	8.1
Assimetria[2]	0.3	0.5	1.2	0.5	0.5	0.7	1.9	0.4	0.5	0.9	-0.1	2.0	0.6
Curtose[3]	1.9	3.4	5.1	3.3	2.6	3.3	6.9	2.2	2.7	4.1	1.8	6.8	4.1

* – n = nº de amostras;
[1] – teores de umidade dado em kg de água por kg de solo;
[2] – adimensional: 0 indica distrib. normal, > 0 distrib. leptocúrtica (desvios da média tendem a ser mais baixos que a mesma), < 0 distrib. platicúrtica (desvios da média tendem a ser mais altos que a mesma);
[3] – adimensional: valores > 0 indica distrib. alongada na média, caudas mais expressivas em relação a distrib. normal.

Os valores iniciais de pH em $CaCl_2$ do solo, antes da aplicação dos corretivos, tinham média de 5,2 para ambas as áreas, valores mínimos de 4,9 e 4,8, e máximos de 5,5 e 5,9, com desvios padrão de 0, 2 e 0,3, para as áreas 1 (textura arenosa) e 2 (textura média), respectivamente. Assim, os valores de pH nas áreas estudadas encontravam-se relativamente altos, correspondendo a valores em água acima de 5,0. Desta forma, a aplicação de corretivos teria um impacto menor nestes atributos, principalmente nos teores de alumínio e m%, haja vista que em valores de pH em água acima de 5,0 a disponibilidade de alumínio começa a diminuir, baixando também a m% (MALAVOLTA, 1978).

Assim, os tratamentos aplicados nas parcelas das áreas estudadas foram eficazes na promoção da variabilidade dos atributos químicos do solo de interesse, principalmente para as bases (Ca e Mg), SB e V%, permitindo a avaliação da capacidade de predição destes atributos através de informações espectrais coletadas em campo e no laboratório, para áreas com solos semelhantes aos das áreas adotadas.

Na Figura 8 são representadas as distribuições dos valores de CTC e V%, atributos utilizados no cálculo da necessidade de calagem, e dos teores de umidade determinados para as amostras coletadas nas áreas 1 e 2, após a aplicação dos tratamentos e aquisição de leituras espectrais nas parcelas.

Os teores de umidade do solo foram baixos (Tabela 4.2; Figura 8), principalmente na área 1, e variaram pouco nas áreas de estudo, especialmente na área 2, o que indica que as condições de coleta foram relativamente boas, minimizando-se a influência da umidade na variabilidade das leituras espectrais coletadas.

Quanto aos teores de fósforo e potássio nas parcelas, apesar de não serem atributos influenciados diretamente pelos tratamentos adotados, estes apresentaram uma variabilidade relativamente grande. Os teores de potássio apresentaram as seguintes características, antes da aplicação dos tratamentos nas áreas 1 e 2, respectivamente: valores mínimos 0,4 $mmol_c\ dm^{-3}$ e 0,6 $mmol_c\ dm^{-3}$; máximos de 2,1 $mmol_c\ dm^{-3}$ e 1,7 $mmol_c\ dm^{-3}$; média de 0,9 $mmol_c\ dm^{-3}$ e 1,0 $mmol_c\ dm^{-3}$; e coeficientes de variação de 39,6 e 29,2.

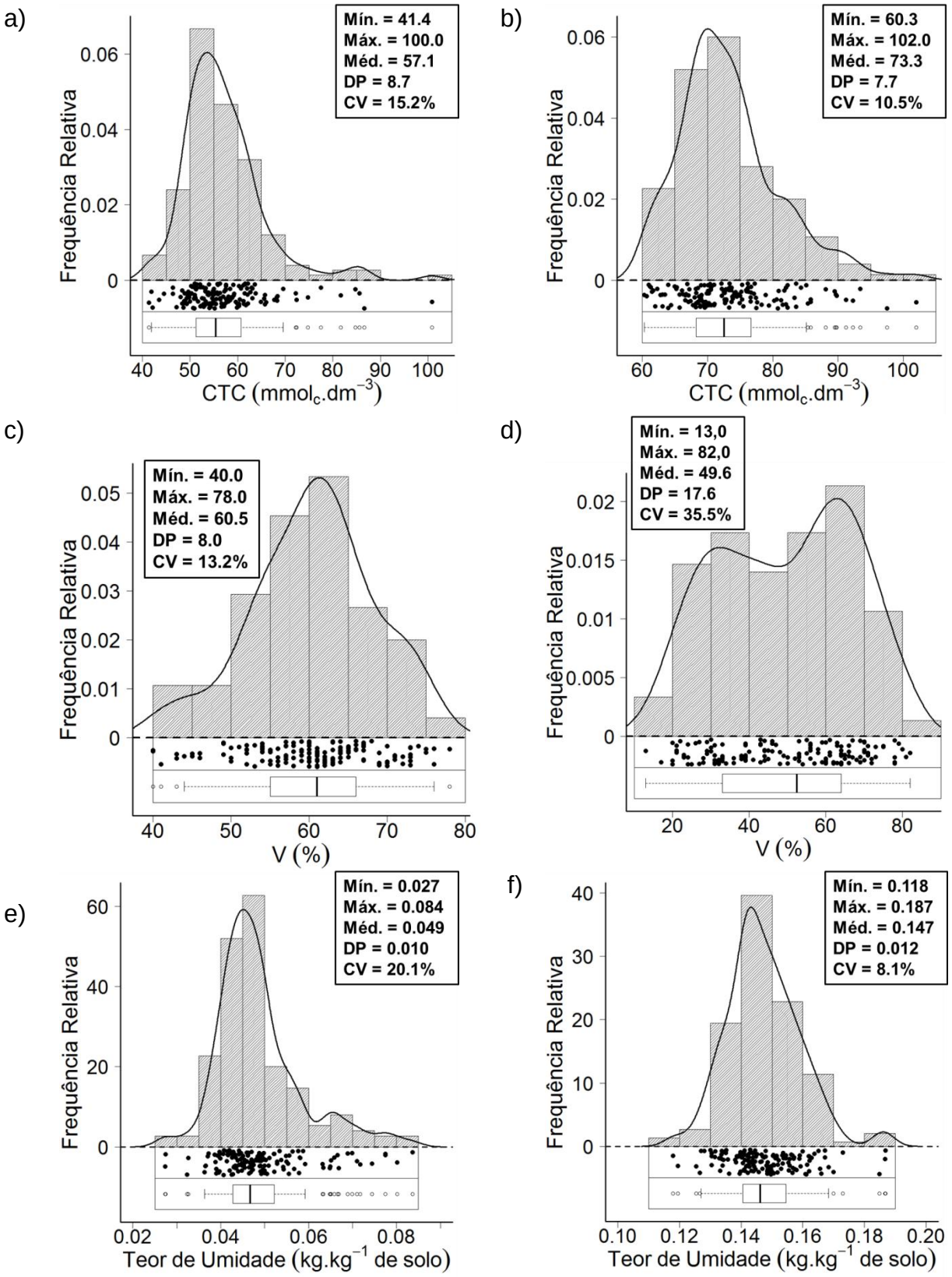


Figura 8 - Box-plot, digrama de dispersão, histograma e gráfico de densidade de probabilidade para valores observados de atributos do solo em parcela de textura arenosa (a, c, e) e de textura média (b, d, f). As siglas mín, máx, méd., DP, e CV, representam, respectivamente: mínimo, máximo, média, desvio padrão e coeficiente de variação.

Já os teores de fósforo variaram da seguinte forma, antes da aplicação dos tratamentos nas áreas 1 e 2, respectivamente: valores mínimos 10,8 mg dm^{-3} e 20,7 mg dm^{-3}, máximos de 58,0 mg dm^{-3} e 63,0 mg dm^{-3}, média de 28,6 mg dm^{-3} e 38,7 mg dm^{-3}, e coeficientes de variação de 40,9 e 24,5. Desta forma, certa variabilidade já era observada para estes atributos antes da aplicação dos diferentes tratamentos nas áreas.

O comportamento espectral médio para as leituras coletadas no campo e em amostras no laboratório referentes à área 1 (textura arenosa) e 2 (textura média) são apresentados nas Figuras 9 e 10, tanto em reflectância quanto em reflectância normalizada após a remoção do contínuo.

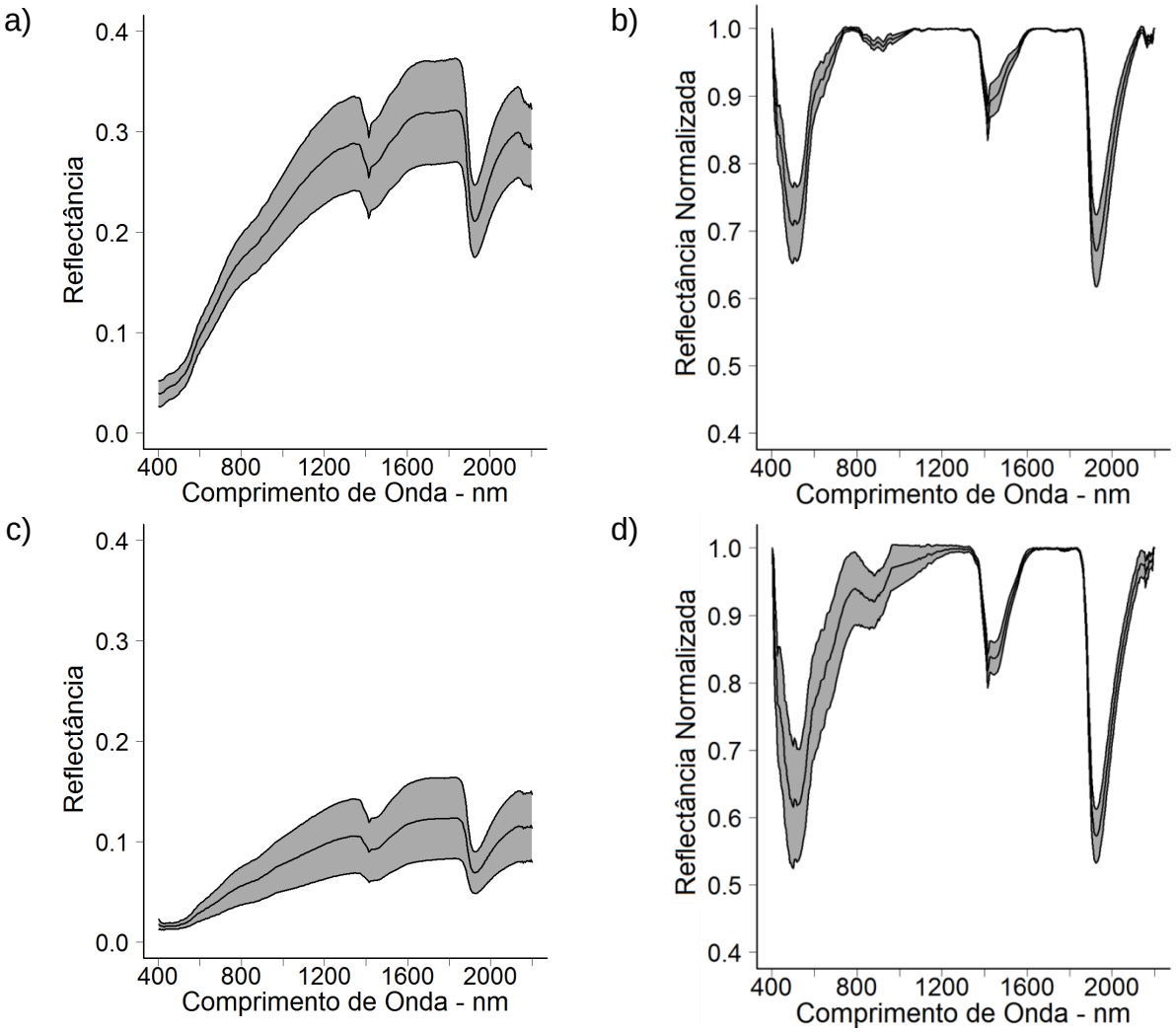


Figura 9 - Comportamento espectral médio das amostras coletadas nas parcelas de textura arenosa (área 1), valores em reflectância (a, c) e após remoção do contínuo (b, d), limites inferior e superior representam o desvio padrão. Dados espectrais coletados em laboratório (a, b) e no campo (c, d).

Com relação às leituras espectrais em valores de reflectância, pode-se observar uma considerável variação no albedo das curvas como um todo, tanto nas medições feitas em laboratório quanto nas realizadas no campo. As causas desta variação no albedo podem ser, de acordo com a literatura, principalmente ocasionadas por variações na textura, dos teores de matéria orgânica e umidade do solo (BAUMGARDNER et al., 1985; STENBERG et al., 2010).

Como as alterações na textura do solo nas áreas experimentais podem ser consideradas pequenas, uma vez que as áreas são relativamente homogêneas, a variação no albedo pode ser atribuída principalmente a variações dos teores de matéria orgânica e umidade.

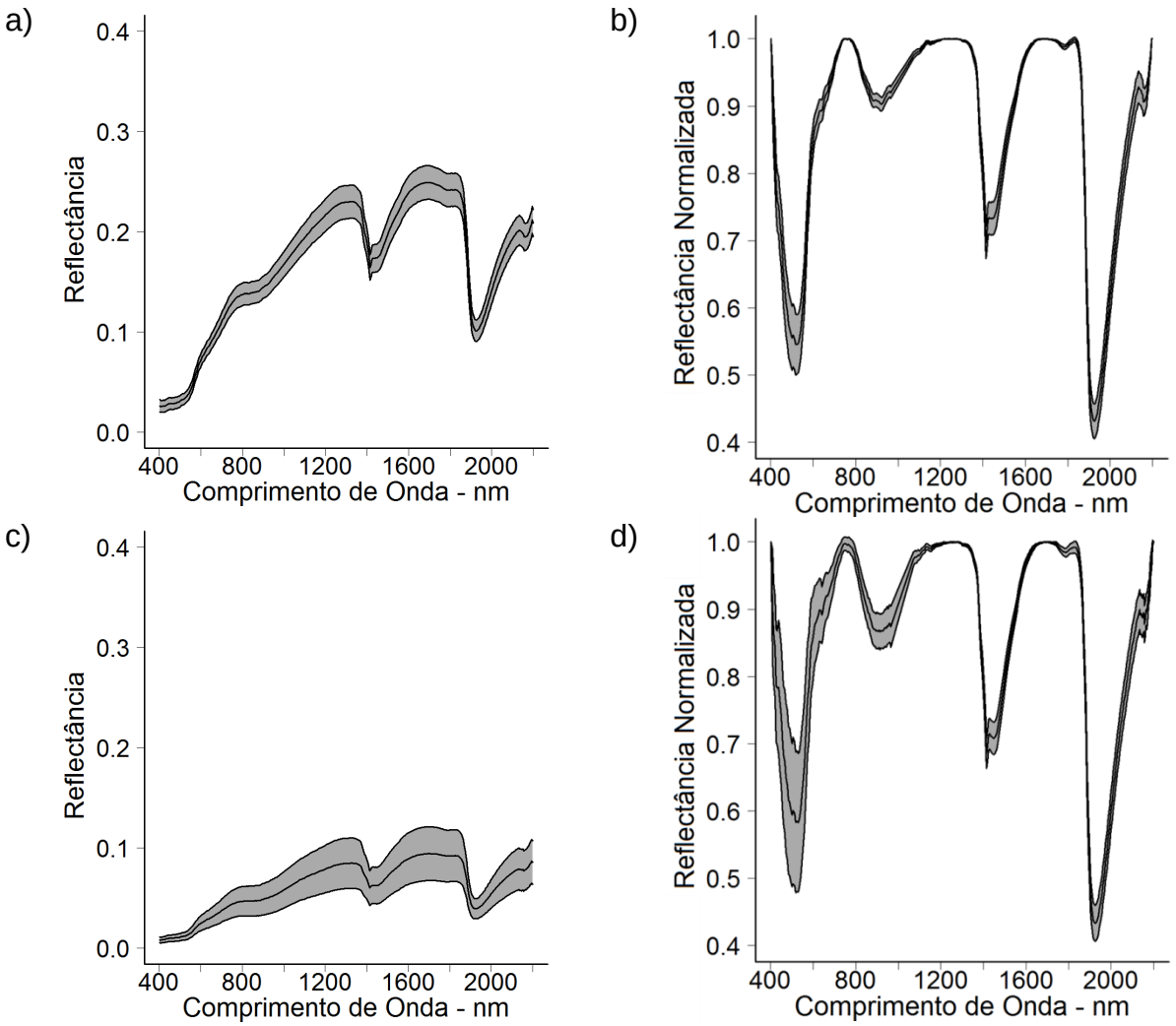


Figura 10 - Comportamento espectral médio das amostras coletadas nas parcelas de textura média (área 2), valores em reflectância (a, c) e após remoção do contínuo (b, d), limites inferior e superior representam o desvio padrão. Dados espectrais coletados em laboratório (a, b) e no campo (c, d).

Percebe-se ainda que a intensidade (albedo) das leituras realizadas no campo é consideravelmente mais baixa que nas medições feitas em laboratório.

Comparando-se as informações espectrais em reflectância e após a remoção do contínuo (Figuras 9 e 10), para ambas as áreas estudadas, conclui-se que as diferenças detectadas foram menores quanto às feições de absorção, ou seja, quanto à forma da curva espectral, em relação à variação observada no albedo.

Isto pode ser percebido, por exemplo, pela pequena variação entre a profundidade das feições de absorção centradas em 1400 e 1900 nm, ocasionadas pela água, seja nos dados obtidos em campo ou nos medidos laboratório, após a remoção do contínuo (Figuras 9 e 10). Portanto, as leituras feitas em campo foram relativamente acuradas quanto à forma das curvas espectrais, entretanto o albedo das curvas espectrais obtidas em campo foi muito menor que o albedo das curvas espectrais coletadas em laboratório.

Esta menor intensidade observada nas leituras feitas em campo pode ter sido causada principalmente por dois fatores relacionados à aquisição dos dados: (a) o primeiro é o fato de que durante as leituras no campo não foi possível assegurar o contato permanente do sensor com o solo durante toda a aquisição tendo em vista que as informações são coletadas em movimento, e como a janela de leitura é relativamente pequena o contato do sensor com o solo é essencial para permitir uma leitura de qualidade, na qual a energia refletida pelo solo chegue ao detector do sensor; (b) o segundo fator é fonte de energia utilizada para alimentar o sensor e sua fonte de luz, uma vez que oscilações podem prejudicar a obtenção de leituras representativas.

Desta forma a correta regulagem da altura haste, responsável pelo sulco onde as leituras são realizadas, e do ângulo de contato do sensor com a superfície do solo, assim como a utilização de fonte de energia externa relativamente estável, são quesitos primordiais para a aquisição de leituras espectrais de qualidade.

Além disto, com relação aos dados espectrais após a remoção do contínuo, é possível observar uma maior variação (maior amplitude do desvio padrão), quanto às feições de absorção dos dados coletados em campo, em comparação a variação presente nos dados coletados em laboratório (Figuras 9 e 10 – b, d). Isto pode ser observado principalmente na região entre cerca de 400 a 1000 nm, na qual parece haver maior instabilidade para os dados coletados em movimento no campo. Como as leituras nestes comprimentos de onda são realizadas por um espectrorradiômetro

distinto do relativo às medidas tomadas de 1000 a 2224 nm, esta maior instabilidade observada pode ser ocasionada por fatores relacionados ao sensor ou à maior sensibilidade das leituras nestes comprimentos de onda.

Observando os dados de refletância normalizada pela remoção do contínuo destacam-se, além das feições centradas em 1400 e 1900 nm referentes à água presente no solo, as feições centradas em, aproximadamente, 550 e 860 nm, as quais são características de óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro (HUNT, 1977; SHERMAN e WAITE, 1985; SCHEINOST et al., 1998; RICHTER et al. 2009). Estas feições de óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro são mais intensas nas leituras espectrais referentes à área 2 (textura média), o que era esperado principalmente pelo matiz mais avermelhado e maior teor de argila nesta área.

Pouco da região acima de 2000 nm é detectada pelo sensor empregado, somente até 2200 nm, o que torna difícil ou impossibilita a avaliação das feições de absorção presentes nestes comprimentos de onda como, por exemplo, as feições de filossilicatos (caulinita), centrada em 2200 nm, e de gibsita (hidróxido de alumínio), centrada em 2264 nm (VISCARRA ROSSEL et al., 2006a).

4.3.2 Quantificação de atributos através do comportamento espectral do solo

As curvas espectrais coletadas no campo e em laboratório foram utilizadas, juntamente com os valores determinados pelas análises convencionais, para a obtenção de modelos de predição de atributos, empregando o método PLSR. O desempenho dos modelos obtidos é mostrado na Tabela 4.3, no ANEXO G, e nas Figuras 1 a 3 dos ANEXOS H, I, J e K.

Os modelos obtidos para predição dos teores de cálcio, magnésio, acidez potencial, SB e V%, ou seja, atributos que foram diretamente afetados pelos tratamentos aplicados no experimento, apresentaram desempenho variável quando consideradas as predições derivadas das leituras espectrais coletadas em laboratório (Tabela 4.3), tanto para a área 1 (textura arenosa) quanto para a área 2 (textura média).

Apenas os modelos de predição dos teores de cálcio e SB apresentaram valores de RPD entre 1,4 e 2,0, na validação cruzada e validação com dados independentes, para as predições obtidas em ambas as áreas (de textura arenosa e

de textura média) (Tabela 4.3), tendo assim desempenho intermediário, de acordo com Chang et al. (2001).

As predições para magnésio, acidez potencial, e V% foram pouco acuradas para as amostras das parcelas de textura arenosa, sendo observados valores de RPD menores que 1,4 (Tabela 4.3), quando utilizados os espectros obtidos em laboratório. Entretanto, os modelos de predição destes atributos apresentaram melhor desempenho para amostras das parcelas de textura média, RPD entre 1,4 e 2,0.

Tabela 4.3 - Modelos de quantificação de atributos através dos espectros, referentes às parcelas de textura arenosa e de textura média. Parâmetros de validação cruzada e predição para dados independentes.

Atrib.	Laboratório								Campo							
	Pré-trat.	Nº de Fatores	Validação Cruzada			Predição			Pré-trat.	Nº de Fatores	Validação Cruzada			Predição		
			R^2	RMSE[1]	RPD	R^2	RMSE[1]	RPD			R^2	RMSE[1]	RPD	R^2	RMSE[1]	RPD
Área 1 - Parcelas de textura arenosa																
pH	Absorb.	6	0.05	0.285	1.03	0.09	0.240	1.06	Absorb.	5	-0.02	0.296	1.00	-0.09	0.262	0.97
M. O.	MSC	7	0.70	2.144	1.82	0.59	1.971	1.58	SG-15-1ª	3	0.11	3.663	1.07	-0.09	3.228	0.97
K	SG-15	11	0.48	0.248	1.40	0.21	0.719	1.14	SG-15-1ª	8	0.38	0.272	1.28	0.20	0.724	1.13
Ca	MSC	5	0.64	4.186	1.66	0.47	4.984	1.39	Absorb.	4	0.13	6.442	1.08	-0.02	6.925	1.00
Mg	Absorb.	6	0.25	1.971	1.16	0.34	1.914	1.25	SG-15-1ª	5	0.00	2.273	1.01	-0.11	2.485	0.96
H+Al	Absorb.	6	0.27	3.129	1.17	0.07	4.273	1.05	SG-7-1ª	4	0.01	3.634	1.01	-0.01	4.456	1.01
SB	SNV	5	0.62	5.468	1.62	0.49	6.258	1.41	Kub.-M.	8	0.21	7.845	1.13	-0.04	8.942	0.99
CTC	MSC	5	0.72	4.812	1.91	0.60	4.716	1.61	SG-15	2	0.02	9.030	1.02	0.05	7.298	1.04
V	Absorb.	8	0.30	6.244	1.20	0.28	7.225	1.19	Kub.-M.	8	-0.03	7.569	0.99	-0.02	8.595	1.00
Umid.	SG-15	5	0.71	0.006	1.87	0.85	0.003	2.59	SNV	6	0.30	0.009	1.21	0.20	0.008	1.13
Área 2 - Parcelas de textura média																
pH	Absorb.	15	0.63	0.401	1.65	0.76	0.330	2.08	Absorb.	12	0.26	0.564	1.17	0.43	0.513	1.34
M. O.	SG-7-1ª	4	0.13	2.274	1.08	0.12	2.452	1.08	SNV	7	0.14	2.266	1.08	0.43	1.971	1.34
K	SG-7	9	-0.01	0.344	1.00	0.01	0.332	1.02	Absorb.	1	-0.02	0.345	1.00	-0.09	0.348	0.97
Ca	SG-7-1ª	13	0.68	5.512	1.78	0.72	5.514	1.91	SG-15-1ª	10	0.22	8.581	1.14	0.29	8.781	1.20
Mg	SG-7-1ª	12	0.55	4.059	1.50	0.64	3.739	1.69	MSC	11	0.23	5.301	1.15	0.48	4.512	1.40
H+Al	SG-7	15	0.57	7.411	1.53	0.57	8.327	1.55	Absorb.	14	0.24	9.805	1.16	0.28	10.834	1.19
SB	Absorb.	15	0.63	9.510	1.65	0.70	8.993	1.85	Absorb.	12	0.17	14.168	1.11	0.43	12.418	1.34
CTC	SG-15-1ª	10	0.30	6.462	1.21	0.41	5.782	1.31	MSC	6	0.08	7.449	1.05	0.33	6.154	1.23
V	SG-15-1ª	12	0.63	10.354	1.67	0.65	10.889	1.71	Absorb.	12	0.20	15.325	1.13	0.38	14.466	1.28
Umid.	SG-7-1ª	4	0.38	0.009	1.27	0.63	0.008	1.66	SNV	6	0.02	0.011	1.02	0.30	0.011	1.21

[1] – Valores de RMSE dados nas mesmas unidades dos atributos: M.O. em g dm^{-3}; K, Ca, Mg, H+Al, SB e CTC em $mmol_c\ dm^{-3}$; V em %; Umid. em g kg^{-1}.

Com relação às predições da CTC valores relativamente acurados foram obtidos para as parcelas de textura arenosa (Tabela 4.3), RPD de 1,9, quando empregados dados radiométricos de laboratório. O contrário foi observado nas

predições feitas para as parcelas de textura média, RPD menor que 1,4 indicando desempenho ruim do modelo.

Os teores de matéria orgânica e de umidade do solo foram preditos com acurácia intermediária, RPD entre 1,4 e 2,0, para as parcelas de textura arenosa, através de modelos derivados das informações espectrais coletadas em laboratório (Tabela 4.3). Entretanto, este não foi o caso das predições feitas para as parcelas de textura média, as quais apresentaram baixa acurácia com RPD menor que 1,4.

O fato dos teores de matéria orgânica terem sido mais bem preditos para as parcelas de textura arenosa, em comparação as predições feitas para as parcelas de textura média, considerando-se os modelos derivados de espectros medidos em laboratório, pode ser uma explicação para um desempenho superior dos modelos de predição da CTC do solo para área de textura arenosa. Isto porque em solos bastante intemperizados, como nos solos de ambas as áreas utilizadas no experimento, a matéria orgânica presente pode ser responsável por boa parte das cargas do complexo de troca do solo.

Com relação ao pH em $CaCl_2$ as melhores predições, feitas com dados radiométricos coletados em laboratório, foram obtidas para a área de textura média, com RPD maior que 2,0 para a validação com dados independentes (Tabela 4.3). Já com relação às predições feitas para as parcelas de textura arenosa o desempenho do modelo foi sensivelmente inferior, RPD menor que 1,4, tanto na validação cruzada quanto na validação com dados independentes.

Com relação às predições obtidas para os teores de potássio, fósforo, alumínio e m% (Tabela 4.3, ANEXO G), atributos pouco ou nada afetados pelos tratamentos aplicados nas parcelas, estas foram pouco acuradas, RPD menor que 1,4, tanto para as amostras da área de textura arenosa quanto para as referentes à área de textura média, utilizando-se dados radiométricos obtidos em laboratório.

Os modelos de predição obtidos utilizando-se as leituras espectrais coletadas no campo apresentaram desempenho relativamente ruim para todos os atributos, em ambas as áreas onde foi realizado o estudo, observando-se valores de RPD menores que 1,4 (Tabela 4.3). Entretanto, os modelos obtidos para a área de textura média tiveram, de forma geral, um desempenho melhor, sendo obtidos, por exemplo, R^2 de 0,33 e 0,38, com RMSE de 6,15 $mmol_c\ dm^{-3}$ e 14,17% para CTC e V%, respectivamente, quando considerados a validação com conjunto de dados independentes.

Na literatura, o desempenho dos modelos de predição obtidos para quantificação de atributos do solo utilizando informação espectral coletada em movimento no campo é variável. Christy (2008) reportou um bom desempenho dos modelos obtidos para predição, principalmente, de matéria orgânica, teores de cálcio, magnésio e fósforo, os quais apresentaram R^2 de aproximadamente 0,8. Mouazen et al. (2007) também reportaram bons resultados para a predição de carbono orgânico, umidade, pH e fósforo, com valores de R^2 entre 0,7 e 0,9. Entretanto, Bricklemyer e Brown (2010) não obtiveram resultados tão promissores, principalmente para carbono orgânico, com R^2 de 0,02 e RPD de 1,0. No Brasil, Mouazen (2012) apresentou resultados variáveis com bom desempenho, principalmente para CTC, com R^2 de 0,75, pH com R^2 de 0,82, e fósforo, com R^2 de 0,73, mas desempenhos relativamente ruins para cálcio, magnésio e potássio, com valores de R^2 de 0,55, 0,46 e 0,21, respectivamente.

Esta variabilidade nos resultados encontrados, principalmente para atributos que não estão relacionados diretamente com a resposta espectral do solo, como teores de cálcio, magnésio e V%, ocorre, pois a boa predição destes atributos depende da correlação com outros atributos, que sejam espectralmente ativos como matéria orgânica, textura e constituintes minerais do solo (STENBERG et al., 2010).

Os resultados reportados neste trabalho para os espectros coletados no campo encontram-se acentuadamente piores em relação à boa parte dos resultados obtidos em outros estudos. Entretanto, mesmo os modelos derivados de leituras espectrais coletados em laboratório apresentaram resultados relativamente limitados (Tabela 4.3), com RPD entre 1,4 e 2,0, correspondendo a um desempenho intermediário, ou com RPD menor que 1,4, indicando um desempenho ruim, segundo Chang et al. (2001).

O fato das amostras analisadas encontrarem-se úmidas pode ser um dos motivos para os resultados, mesmo em laboratório, não serem tão acurados quanto o esperado. De acordo com Chang; Laird e Hurburgh (2005) a realização de leituras espectrais de amostras úmidas pode diminuir a acurácia dos modelos obtidos. Entretanto, estes autores obtiveram bons modelos de predição para, por exemplo, carbono orgânico e CTC, com valores de RPD superiores a 2,0, mesmo sendo os modelos derivados de informações espectrais medidas em amostras úmidas. É importante destacar que no estudo de Chang; Laird e Hurburgh (2005) os autores moeram e peneiraram (em malha de 2 mm) as amostras antes das leituras em

laboratório, secando parcialmente as amostras quando necessário, diferente do que foi realizado no presente trabalho no qual as amostras foram apenas homogeneizadas manualmente.

As predições inacuradas referentes aos dados radiométricos coletados no campo, em comparação a resultados encontrados em outros trabalhos (MOUAZEN et al., 2007; CHRISTY, 2008; MOUAZEN, 2012), não pode ser justificada somente com base na umidade ou falta de homogeneidade do solo analisado. Podem ter ocorrido, neste caso, dificuldades relacionadas à operação de coleta de dados no campo, haja vista que o contato ininterrupto do sensor com o solo não pôde ser garantido, assim como a estabilidade da fonte energética empregada no campo provavelmente era menor do que a da utilizada em laboratório.

Na Figura 11 são apresentados os coeficientes de regressão (coeficientes b) dos modelos obtidos na PLSR para predição da CTC, através dos espectros coletados no campo e em laboratório, para ambas as áreas estudadas.

No caso do modelo obtido para as parcelas arenosas, com dados coletados em laboratório (Figura 11 – a), a maior parte da variabilidade presente nos valores de CTC (77,13%) foi representada com o número de fatores (5) considerado no modelo, o que explica os resultados relativamente acurados, R^2 de 0,72, para a validação cruzada (Tabela 4.3). Pode ser percebida forte relação dos coeficientes de regressão com regiões do espectro centradas em 1400 e 1900 nm, as quais contêm feições de absorção ocasionadas pela água contida nas amostras, com a região do visível (até 700 nm) e também com a região centrada em aproximadamente 900 nm, sendo estas relacionadas aos teores de matéria orgânica, mas também aos óxidos, hidróxidos e óxi-hidróxidos de ferro presentes no solo. É observada também uma contribuição acentuada dos comprimentos de onda próximos a 2000 nm, relativos principalmente a filossilicatos, como caulinita. Como a fração argila é pouco representativa no solo das parcelas de textura arenosa, é provável que, os principais componentes espectralmente ativos, aos quais estão relacionados os coeficientes de regressão, sejam a matéria orgânica e também a umidade, principalmente até 1000 nm e nas regiões de 1400 e 1900 nm.

Com relação ao modelo de predição da CTC para as parcelas de textura média, obtido a partir dos dados espectrais coletados em laboratório (Figura 11 – b), a porcentagem da variabilidade presente nos valores de CTC representada com o número de fatores (10) adotados pelo modelo foi menor (59,52%), em relação à

representatividade dos fatores do modelo referente às parcelas de textura arenosa (77,13%).

Assim, é normal que as predições da CTC tenham sido menos acuradas para as parcelas de textura média, R^2 de 0,30 e 0,41 na validação cruzada e com dados independentes, respectivamente, contra R^2 de 0,72 e 0,60 referentes às parcelas de textura arenosa (Tabela 4.3).

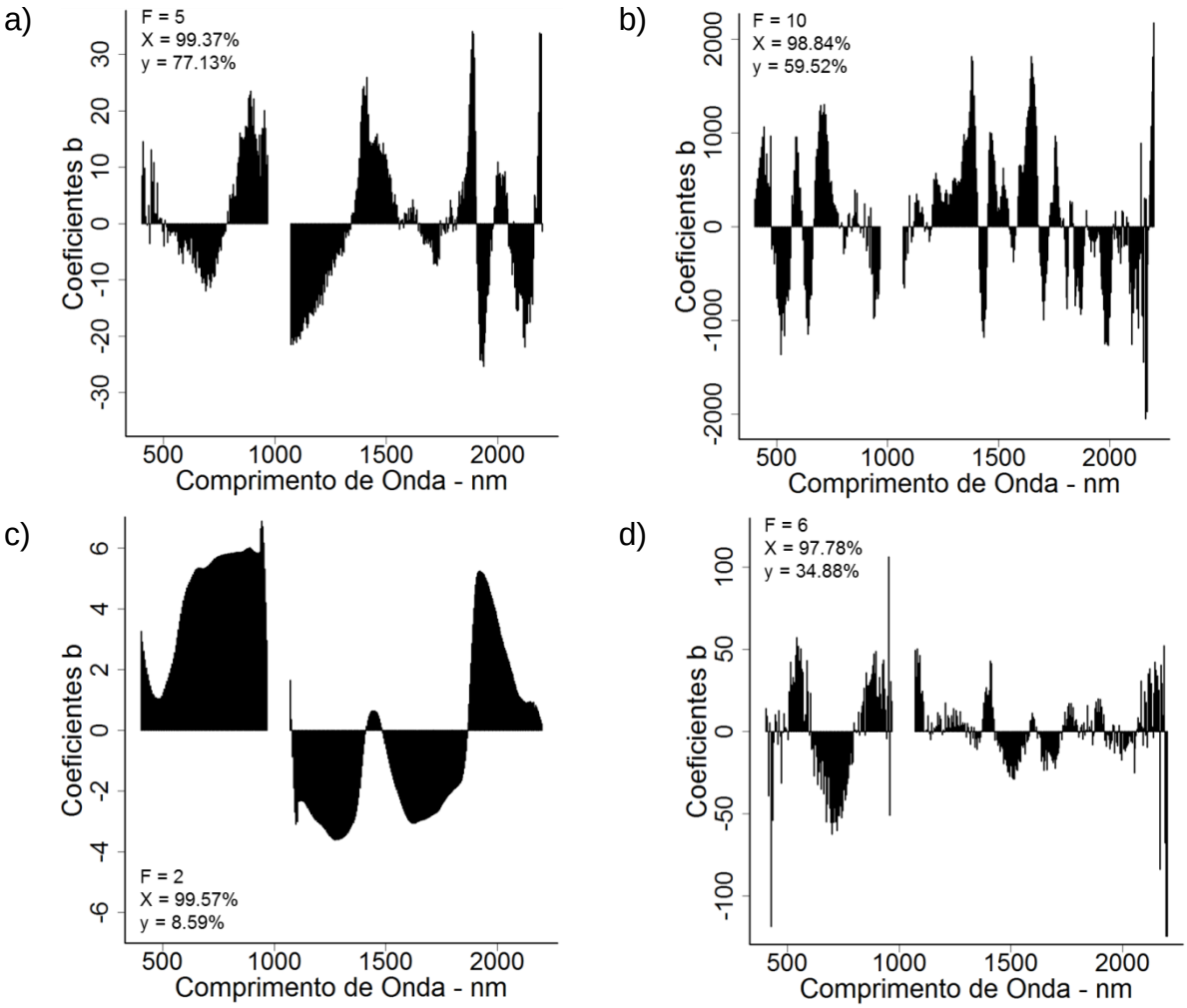


Figura 11 - Coeficientes de regressão (b) da PLSR na predição da CTC através de dados radiométricos coletados em laboratório (a, b) e no campo (c, d). Predições referentes às parcelas de textura arenosa (a, c) e de textura média (b, d), sendo expressas as porcentagens da variabilidade explicada das informações espectrais (X) e da CTC (y) para o número de fatores (F) utilizado no modelo.

Quanto aos coeficientes de regressão para os modelos de predição da CTC através de espectros obtidos em laboratório (Figura 11, b), pode-se observar uma forte ralação com os comprimentos de onda próximos a 1400 e 1900 nm, do visível (400 a 700nm) até cerca de 1000 nm, e na região próxima a 2000 nm,

correspondentes a absorção da água, da matéria orgânica, de óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro e filossilicatos (caulinita).

Para os modelos obtidos com dados radiométricos coletados no campo, em parcelas de textura arenosa, a porcentagem explicada da variabilidade dos valores de CTC (8,59%) através dos fatores empregados na PLSR (2) foi menor em comparação à variabilidade explicada (34,88%) pelos fatores adotados (5) no modelo relativo às parcelas de textura média (Figura 11 – c, d). Desta forma, as predições de CTC obtidas para as parcelas de textura arenosa foram menos acuradas que as predições para as parcelas de textura média, quando considerados os modelos relativos às leituras espectrais coletadas no campo (Tabela 4.3), R^2 de 0,05 contra 0,33, respectivamente, na validação com dados independentes.

Na Figura 12 podem ser observados os coeficientes de regressão (coeficientes b) relativos aos modelos de predição da V%, através do método PLSR, tanto para os espectros coletados no campo como para os medidos em laboratório, para ambas as áreas estudadas.

O modelo obtido para predição da V% para as parcelas de textura arenosa, através dos espectros coletados em laboratório, empregou 8 fatores, através dos quais 52,71% da variabilidade da V% foi representada (Figura 12). Esta porcentagem foi menor em relação à variabilidade explicada (81,92%) através dos fatores adotados (12) pelo modelo de predição da V% para as parcelas de textura média. Assim, é natural a ocorrência de melhores predições de V% para as parcelas de textura média (R^2 de 0,65, validação com dados independentes) em relação às predições referentes às parcelas de textura arenosa (R^2 de 0,28, validação com dados independentes), quando utilizados dados radiométricos de laboratório.

Considerando as leituras espectrais coletadas no campo, a variabilidade da V% explicada através dos fatores (8) adotados no modelo referente às parcelas de textura arenosa foi menor (29,19%) em relação à explicada (65,36%) pelos fatores empregados (12) no modelo obtido para as parcelas de textura média (Figura 12). O que justifica o pior desempenho do modelo de predição da V% para as parcelas de textura arenosa em relação ao modelo obtido para as parcelas de textura média, R^2 de -0,02 e 0,38, respectivamente, para os dados espectrais coletados no campo quanto à validação com dados independentes.

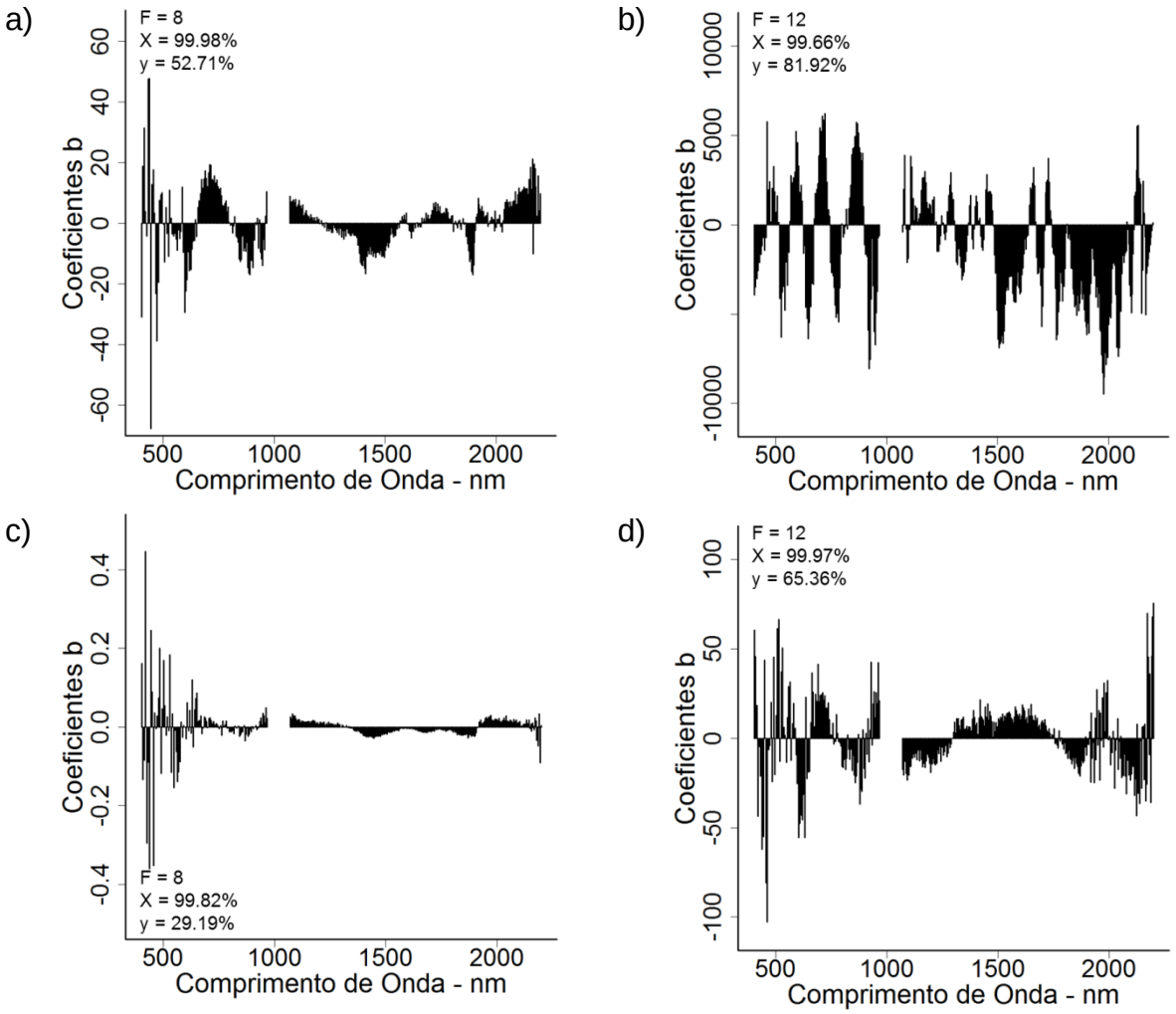


Figura 12 - Coeficientes de regressão (b) da PLSR na predição da V% através de dados radiométricos coletados em laboratório (a, b) e no campo (c, d). Predições referentes às parcelas de textura arenosa (a, c) e de textura média (b, d), sendo expressas também as porcentagens da variabilidade explicada das informações espectrais (X) e da V% (y) para o número de fatores (F) utilizado no modelo.

Com relação aos coeficientes de regressão dos modelos de predição da V%, foi observada tanto nos modelos referentes às informações espectrais medidas em laboratório quanto nos relativos aos espectros obtidos em campo (Figura 12), a influência das bandas centrada em 1400 e 1900 nm, da região do espectro próxima a 2000 nm, mas especialmente dos comprimentos de onda do visível (400 a 700 nm) até cerca de 1000 nm, relacionadas provavelmente, neste caso, a matéria orgânica e umidade, mas também a fatores ligados aos óxidos, hidróxidos e oxi-hidróxidos de ferro presentes.

Assim, quando considerados a CTC e a V%, os dois parâmetros utilizados no cálculo da necessidade de calagem para o estado de São Paulo, as leituras

espectrais obtidas em laboratório foram capazes de representar boa parte da variabilidade destes atributos, de 53 a 82% desta variabilidade, considerando as parcelas de textura arenosa e média. Já os dados radiométricos obtidos em campo foram menos eficazes em representar a variabilidade destes atributos, de 9% a 65% da variabilidade, em ambas as áreas de estudo.

4.3.3 Mapeamento da necessidade de calagem calculada de forma convencional e a partir das predições feitas através do espectro no Vis-NIR-SWIR

Os valores de CTC e V% determinados pelas análises convencionais foram utilizados para calcular a necessidade de calagem (NC em t ha^{-1}) para as amostras cujas informações não foram utilizadas na obtenção de modelos de quantificação, ou seja, para as amostras selecionadas para validação dos modelos obtidos (50 pontos de coleta). Ainda, foram calculadas a NC para os dados preditos através das informações espectrais medidas em laboratório e no campo, considerando também as amostras do conjunto de validação independente.

Em boa parte dos estudos a NC é estimada diretamente das informações espectrais, entretanto neste trabalho optou-se pela realização do cálculo da NC a partir das predições de CTC e V%, a fim de se entender melhor os fatores que limitaram ou promoveram a acurácia dos resultados obtidos.

Na Figura 13 são apresentadas as comparações entre a NC determinada pelo método convencional e a NC calculada a partir das predições feitas pelos modelos de quantificação de CTC e V%, para os dados radiométricos coletados em laboratório e no campo, em ambas as áreas empregadas neste trabalho. As estimativas de NC mais acuradas foram obtidas para as parcela de textura média, principalmente empregando-se informações espectrais coletadas em laboratório.

Os melhores resultados obtidos através dos modelos de predição da V% foram observados para as parcelas de textura média em relação aos resultados referentes às parcelas de textura arenosa, R^2 de 0,65 em comparação a R^2 de 0,28, respectivamente, na validação com dados independentes quando utilizados os espectros lidos em laboratório (Tabela 4.3). Porém, o contrário foi observado para os modelos de predição da CTC, nos quais o melhor desempenho foi observado para as parcelas de textura arenosa, R^2 de 0, 60, em relação às parcelas de textura

média, R^2 de 0,41, na validação com dados independentes. Naturalmente, a acurácia das predições de NC foi limitada pelo desempenho dos modelos de predição da CTC e V%, sendo os melhores resultados observados para as áreas com menor erro acumulado nas predições destes atributos.

Considerando as informações espectrais coletadas em campo, tanto a CTC quanto a V% foram mais bem preditas para a área de textura média (Tabela 4.3). O que explica os cálculos de NC mais acurados para esta área (Figura 13).

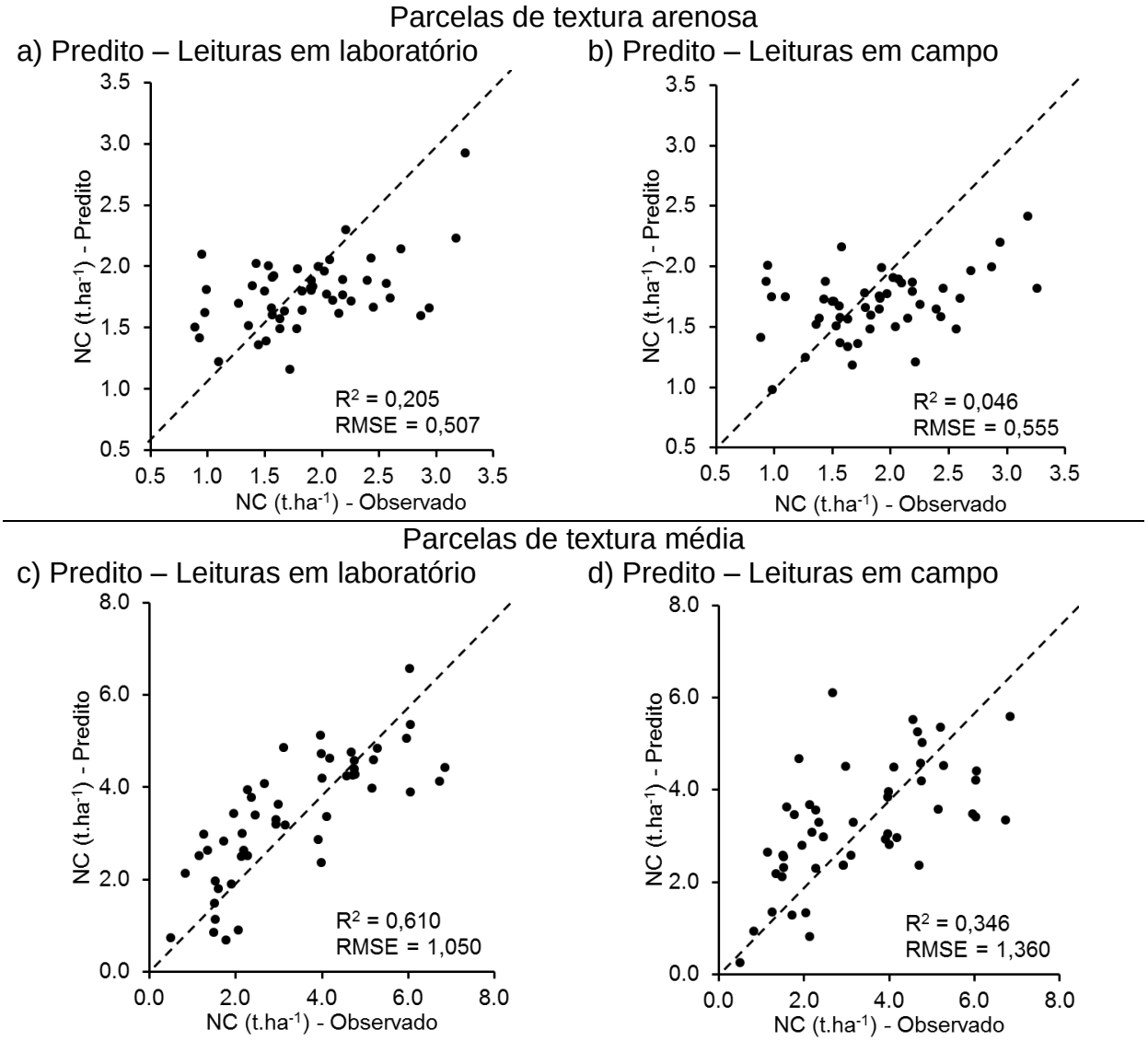


Figura 13 - Relação entre necessidade de calagem calculada pelo método convencional e através de predições feitas empregando leituras espectrais em laboratório (a, c) e em campo (b, e). Resultado para 50 pontos não utilizados na obtenção de modelos de predição da CTC e V%.

Alguns autores conseguiram melhores desempenhos nas predições para a NC, como Viscarra Rossel et al (2006b) com R^2 de 0,74 e RMSE de 0,62 t ha^{-1}, mas é importante ressaltar que no trabalho citado foram utilizadas leituras espectrais coletadas em laboratório, sendo as amostras secas e peneiradas. Christy (2008) por sua vez obteve predições menos acuradas utilizando informações espectrais coletadas no campo, reportando R^2 de 0,38 e RMSE de 1,3 t ha^{-1}. Tais resultados concordam com os valores aqui apresentados indicando a grande dificuldade em quantificar atributos do solo, principalmente atributos químicos, com dados coletados em movimento no campo.

Os mapas interpolados dos valores de NC (para V% final de 85%) são apresentados na Figura 14. Para a obtenção destes mapas foram utilizadas a CTC e a V%, determinadas pelo método convencional e preditas com base no espectro. Pode-se observar que ocorreu uma variabilidade considerável nas doses de calcário recomendadas, tanto para a área de textura arenosa quanto para a área de textura média, com NC variando de 0,890 t ha^{-1} a 3,257 t ha^{-1} e de 0,504 t ha^{-1} a 6,847 t ha^{-1}, nas respectivas áreas de estudo.

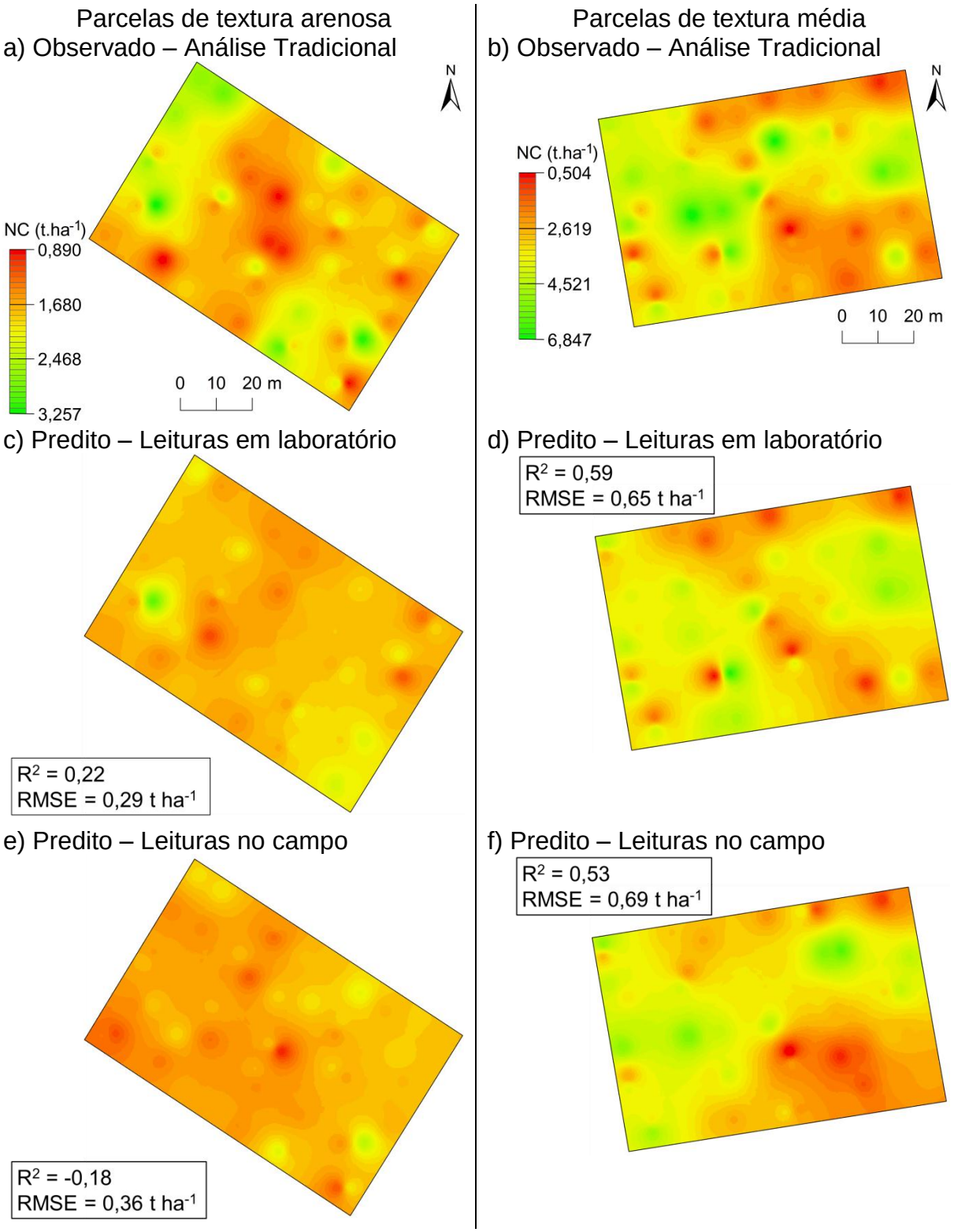


Figura 14 - Necessidade de calagem calculada, para V% de 85%, com valores das análises tradicionais de solo (a, b) e com predições feitas através de leituras espectrais obtidas em laboratório (c, d) e no campo (e, f). Cálculos para as parcelas de textura arenosa (a, c, e) e de textura média (b, d, f) em 50 pontos não utilizados na obtenção dos modelos de predição. Apresentados valores de R^2 e RMSE para comparação do mapa convencional com mapas derivados das predições.

Na área de textura arenosa, como observado também através das observações pontuais (Figura 13), a representação da variabilidade da NC, através das informações espectrais, foi bem menos acurada que a obtida para a área de textura média. Isto pode ser verificado através do ajuste (R^2) entre as interpolações da NC feitas a partir de valores determinados pelo método convencional e preditos através do espectro (Figura 14).

Para os mapas relativos aos dados radiométricos coletados em laboratório o R^2 referente às parcelas de textura arenosa foi de 0,22, contra R^2 de 0,59 para as parcelas de textura média. Da mesma forma, para as informações espectrais coletadas no campo R^2 de -0,18 foi obtido para a área de textura arenosa e R^2 de 0,53 observado para a área de textura média.

Comparando-se os mapas de NC referentes às leituras espectrais coletadas no campo e em laboratório observa-se, de forma geral, maior RMSE e pior ajuste (R^2) para os mapas derivados de leituras no campo (Figura 14). Entretanto, esta perda de informação observada, quando utilizados os dados de campo, foi menos acentuada para a área de textura média, na qual os valores de R^2 e RMSE foram bastante próximos dos obtidos para as leituras espectrais em laboratório.

Esta diminuição do erro de predição (RMSE) e o melhor ajuste (R^2) dos dados referentes às leituras espectrais coletadas no campo, principalmente para a parcela de textura média, quando avaliados os valores interpolados (Figura 14) e não as predições pontuais (Figura 13) pode ter sido ocasionada pelo método de interpolação utilizado.

Isto porque através da interpolação foram obtidos cerca de 55000 valores de NC (pixels, 0,30 m por 0,30 m) para representar a variabilidade da área, contra apenas 50 valores comparados pontualmente, desta forma com mais observações pode ter havido uma suavização dos erros observados. Além disto, para a obtenção do valor de cada pixel foram utilizadas as 15 observações mais próximas, pelo método do inverso quadrado da distância (IDW), sendo que o conjunto de dados utilizados para interpolação era de 50 pontos, em cada área.

Estes fatos podem ter colaborado para a suavização dos erros observados, embora tenha sido testada, a interpolação pelo IDW considerando apenas os 7 pontos mais próximos de cada pixel, e o resultado não variou muito do observado quando empregados os 15 pontos mais próximos. Para a área de textura média, por exemplo, foram obtidos R^2 de 0,58 e 0,52 e RMSE de 0,725 e 0,786 t ha^{-1}, com

dados coletados em laboratório e campo, respectivamente, utilizando a interpolação para os 7 valores mais próximos de cada pixel.

No entanto, a comparação visual entre os mapas derivados de valores determinados pelo método convencional e preditos utilizando espectros medidos em laboratório e campo (Figura 14), sugere que, ao menos para as parcelas de textura média, foi possível predizer parcialmente a variabilidade associada à NC.

Como forma de melhor visualizar nos mapas os erros relacionados à NC calculada a partir das predições pelo espectro, foram elaborados mapas de resíduos entre as interpolações dos valores determinados pelo método convencional e dos valores preditos com informação radiométrica (Figura 15).

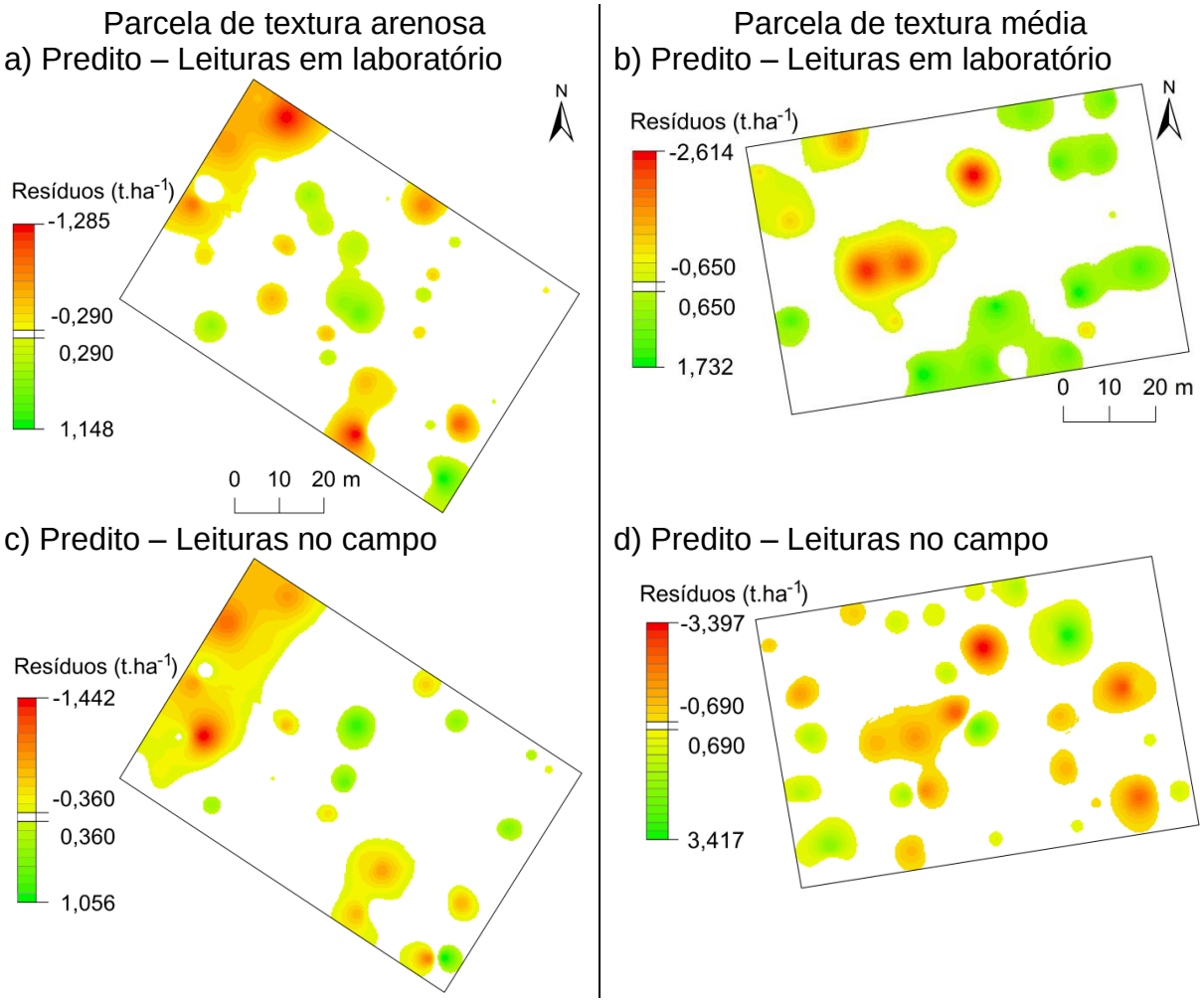


Figura 15 - Resíduos entre necessidade de calagem calculada com valores das análises convencionais e com predições feitas através de leituras espectrais obtidas em laboratório (a, b) e no campo (c, d). Mapas para as parcelas de textura arenosa (a, c) e de textura média (b, d). Mostrados apenas variações maiores que o RMSE.

Através dos mapas de resíduos pode-se observar que os erros presentes nos mapas relativos às leituras espectrais coletadas no campo são maiores, principalmente quanto aos valores extremos observados (Figura 15). Entretanto, a área com valores maiores que o RMSE aparentemente não foi tão superior para os mapas referentes aos espectros de campo, quando comparados aos mapas relativos às leituras em laboratório.

Assim, embora a acurácia seja maior para as predições obtidas em laboratório, boa parte das áreas das parcelas apresentou erro pequeno em relação aos valores determinados pelo método convencional, mesmo quando empregadas informações espectrais coletada no campo, principalmente para a área de textura média. Desta forma, pôde-se observar potencial descritivo da variabilidade do solo, relacionada a NC, em dados radiométricos coletados em laboratório e até mesmo nas leituras feitas no campo.

4.4 Conclusões

Através das informações espectrais coletadas no Vis-NIR-SWIR, considerando as medições feitas em laboratório e no campo, foram obtidos modelos com desempenho variável de predição, até mesmo para atributos mais relacionados ao comportamento espectral do solo, como matéria orgânica, CTC e umidade.

Entretanto, mesmo que as predições obtidas tenham apresentado, de forma geral, acurácia variando entre intermediária a ruim (valores de RPD menores que 2,0), a variabilidade do solo pode, até certo ponto, ser descrita através das leituras espectrais. Principalmente para a área de textura média foi possível predizer parcialmente a necessidade de calagem (NC) com base no comportamento espectral do solo medido em laboratório e no campo, como pode ser observado nos mapas de NC obtidos, com R^2 de 0,59 e 0,53, respectivamente.

Como possíveis causas para o desempenho insatisfatório dos modelos obtidos podem ser apontadas a utilização de amostras ainda úmidas em laboratório e dificuldades no momento de coleta dos espectros no campo, com relação, por exemplo, ao contato do sensor com o solo.

Considerando que os resultados obtidos no estudo foram alcançados utilizando amostras pouco processadas, ou seja, amostras que não passaram por secagem ou peneiramento, os resultados indicam que as informações obtidas, seja em

laboratório ou no campo, possuem potencial para descrever a variabilidade do solo, embora não tenha sido possível, com as metodologias empregadas no trabalho, predizer com acurácia satisfatória atributos químicos relacionados à necessidade de correção do solo.

Métodos de pré-processamento das amostras, seja em campo ou no laboratório, antes das leituras espectrais, ajustes quanto à aquisição de dados no campo e aplicação de outros métodos de calibração de modelos de quantificação podem promover uma melhora nos desempenhos de predição observados.

De forma geral, os resultados foram otimistas no sentido de que mesmo em áreas pequenas, com pouca variabilidade de atributos do solo que sejam espectralmente ativos, no Vis-NIR-SWIR, como textura ou composição mineralógia, foi possível predizer, até certo nível de acurácia, atributos que não possuem feições de absorção ou que não influem diretamente no comportamento espectral do solo.

Referências

ADAMCHUK, V.I.; HUMMEL, J.W.; MORGAN, M.T.; UPADHYAYA, S.K. On-the-go soil sensors for precision agriculture. **Computers and Electronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 44, p. 71–91, 2004.

BARNES, R.J.; DHANOA, M.S.; LISTER, S.J. Standard normal variate transformation and de-trending of near-infrared diffuse reflectance spectra. **Applied Spectroscopy**, Baltimore, v. 43, p. 772-777, 1989.

BAUMGARDNER, M.F.; SILVA, L.F; BIEHL, L.L.; STONER, R. Reflectance properties of soils. **Advances in Agronomy**, San Diego, v.38, p. 1-44, 1985.

BRICKLEMYER, R.S.; BROWN, D.J. On-the-go: VisNIR: Potential and limitations for mapping soil clay and organic carbon. **Computers and Eletronics in Agriculture**, Amsterdam, v. 70, p. 209-206, 2010.

CHANG, C.W.; LAIRD, D.A.; MAUSBACH, M.J.; HURBURGH JR., C.R. Near-infrared reflectance spectroscopy – principal components regression analysis of soil properties. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 65, p. 480-490, 2001.

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.

EMPRESA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA BRASILEIRA (EMBRAPA). **Manual de métodos de análise de solo**. Rio de Janeiro: Centro Nacional de Pesquisa de Solos. 1997. 212 p.

EMPRESA DE PESQUISA AGROPECUÁRIA BRASILEIRA (EMBRAPA). **Sistema brasileiro de classificação de solos**. Rio de Janeiro:Embrapa. 1999. 421 p.

ESRI. **ArcGIS Desktop Developer Guide ArcGIS 9**. ESRI Press, Redlands, Califórnia. 2006. 1 CD-ROM.

HUNT, G. H. Spectral signatures of particulate minerals in the visible and near-infrared. **Geophysics**, Tulsa, v. 42, p. 501-513, 1977.

KUBELKA, M.; MUNK, F. Ein beitrag zur optik der farbanstriche (A contribution to the optics of colour coatings). **Zeit. Tech. Physik**, 12, p. 593-601, 1931.

MALAVOLTA, E. **ABC da adubação**. 4 ed. São Paulo: Editora Agronômica Ceres. 1979. 256 p.

MARTENS, H.; JENSEN, S.; GELADI, P. Multivariate linearity transformation for near-infrared reflectance spectroscopy. In: CHRISTIE, O.H.J. (Ed.). NORDIC SYMPOSIUM ON APPLIED STATISTICS. 1983. Stavenger. **Proceedings**… Stavenger:Stokkand Forlag Publ. 1983. p. 205-234.

MCCARTY, G.W.; REEVES III, J.B.; REEVES, V.B.; FOLLET, R.F.; KIMBLE, J.M. Mid-Infrared and Near-Infrared Diffuse Reflectance Spectroscopy for Soil Carbon Measurement. **Soil Science Society of America Journal**, Madison, v. 66, p. 640-646, 2002.

MOUAZEN, A.M.; MALEKI, M.R.; BAERDEMAEKER, J.D.; RAMON, H. On-line measurement of some selected soil properties using a VIS-NIR sensor. **Soil and Tillage Research**, Amsterdam, v. 93, p. 13-27, 2007.

MOUAZEN, A.M. Recent advances on sensors for soil fertility diagnostic. In: CONGRESSO BRASILEIRO DE AGRICULTURA DE PRECISÃO (COMBAP). 2012. **Proceedings**...Ribeirão Preto. 2012. p. 1-8.

RAIJ, B. van.; ANDRADE, J.C.; CANTARELA, 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. 72-80, 2009.

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 near-infrared range to identify and quantify Fe oxide minerals in soils. **Clays and Clay Minerals**, New York, v. 46, p. 528-536, 1998.

SHERMAN, D. M.; WAITE, T. D. Electronic spectra of Fe3p oxides and oxyhydroxides in the near infrared to ultraviolet. **Am. Mineral.**, v. 70, p. 1262-1269, 1985.

SHIBUSAWA, S.; LI, M.Z.; SAKAI, K.; SASAO A.; SATO H.. Spectrophotometer for Real-Time Underground Soil Sensing. St. Joseph, Mich. ASAE. 1999. (ASAE Paper No. 993030).

STENBERG, B.; VISCARRA ROSSEL, R.A.; MOUAZEN, A.M.; WETTERLIND, J. Visible and near-infrared spectroscopy in soil science. In: SPARKS, D.L. (Ed.) **Advances in Agronomy**, v. 107. Burlington: Academic Press. 2010. p. 163-215.

STENBERG, B; VISCARRA ROSSEL, R.A.; Diffuse reflectance spectroscopy for high-resolution soil sensing. In: VISCARRA ROSSEL, R. A.; MCBRATNEY, A. B.; MINASNY, B. (Ed.). **Proximal soil sensing**. Progress in Soil Science. Dordrecht:Springer. 2010. 446 p.

VARMUZA, K.; FILZMOSER, P. **Introduction to multivariate statistical analysis in chemometrics**. CRC Press: Boca Raton. 2009. 321 p.

VERIS TECHNOLOGIES INCORPORATION. VIS-NIR spectrophotometer: Operating Instructions. Disponível em: <http://www.veristech.com/manuals/2011/VIS-NIR-EC_Shank_Operation_Manual_2011.pdf>. Acesso em: 20 ago. 2012.

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, 2006a.

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. 58-75, 2006b.

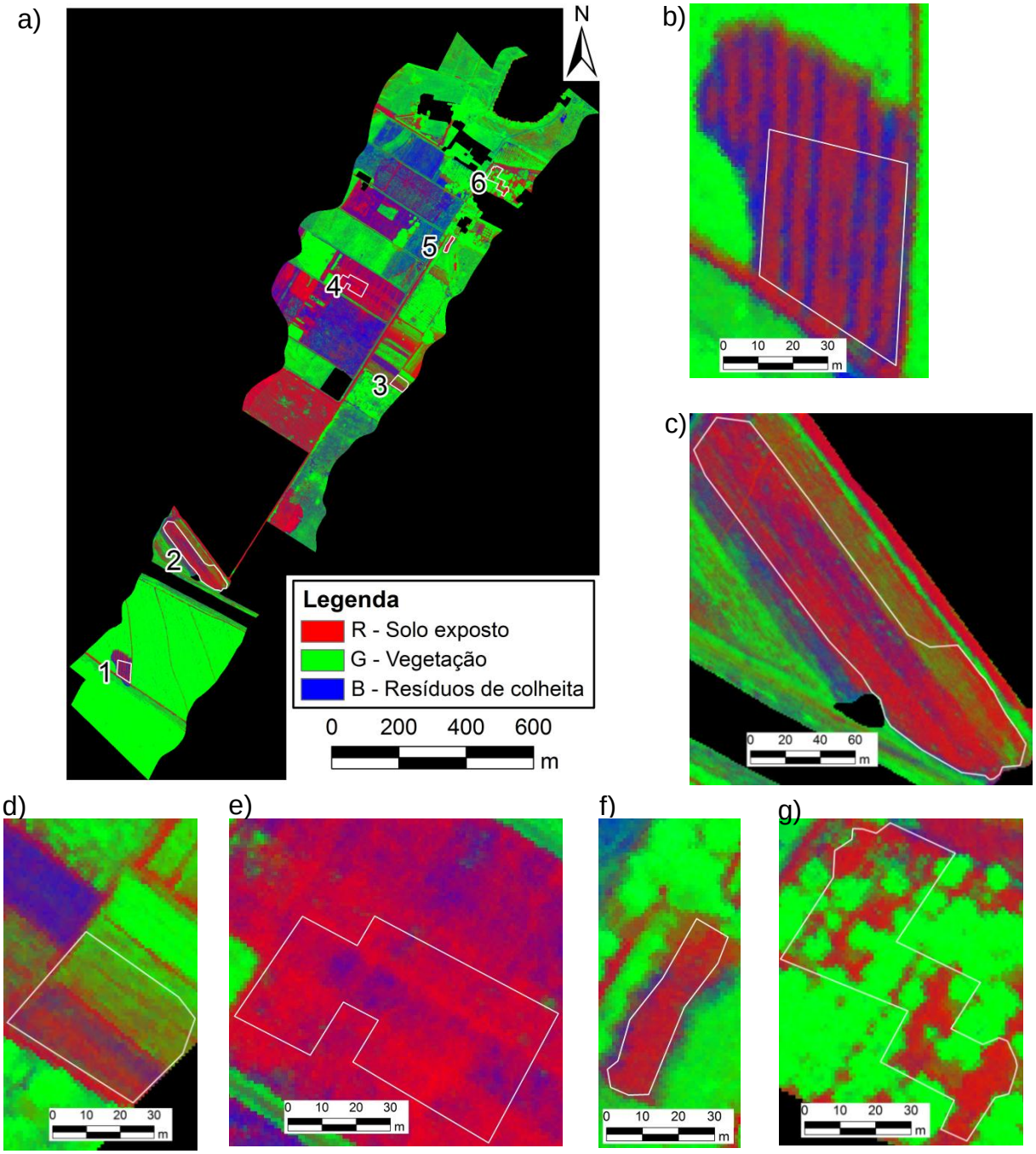
WAISER, T.H.; MORGAN, C.L.S.; BROWN, D.J.; HALLMARK, C.T. In situ characterization of soil clay content with visible near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. **Soil Science Society of American Journal**, Madison, v. 71, p. 389-396, 2007.

WEHRENS, R. **Chemometrics with R**: Multivariate data analysis in the natural sciences and life sciences. New York:Springer. 2011. 285 p.

WOLD, S.; MARTENS, H.; WOLD, H. The multivariate calibration method in chemistry solved by the PLS method. In: Ruhe, A.; Kagstrom, B. (Ed.). CONFERENCE ON MATRIX PENCILS, LECTURE NOTES IN MATHEMATICS. 1983. Heidelberg. **Proceedings**... Heidelberg:Springer-Verlag. 1983.p. 286-293.

ANEXOS

ANEXO A - Composição RGB com os resultados da análise de desmistura para a cobertura dos pixels no mosaico utilizado no estudo. Parcelas 1 (b), 2 (c), 3 (d), 4 (e), 5 (f) e 6 (g) destacadas em branco. (composição das imagens: R = abundância de solo exposto; G = abundância de vegetação; B = abundância de restos culturais). Valores de abundância variando de 0 a 1 (0 a 100%).



ANEXO B - Caracterização das 89 amostras coletadas na área de estudo, por área de coleta

Parâmetros	pH em água	M. O.	P	K	Ca	Mg	Al	H+Al	SB	CTC	V	m	Argila	Areia	Silte
		$g.kg^{-1}$	$mg.kg^{-1}$	----------$mmol_c.kg^{-1}$ ----------							---- % ---		-------- $g.kg^{-1}$--------		
							Área 1 (n*=16)								
Mínimo	4.8	21.5	11.0	0.8	6.0	3.0	0.3	28.4	10.1	53.4	16.6	0.8	381.5	399.8	148.4
Máximo	5.9	31.5	35.9	2.3	28.0	10.0	5.5	52.0	39.0	73.5	56.2	33.9	446.0	444.2	200.4
Média	5.3	27.6	19.0	1.2	14.7	6.3	2.1	42.2	22.2	64.4	34.2	11.4	406.6	421.5	171.9
Desvio Padrão	0.4	2.8	6.6	0.4	7.1	2.4	1.9	8.1	9.1	5.1	13.0	12.1	15.2	15.2	16.9
Coef. de Variação	6.7	10.1	34.7	36.1	48.1	37.4	89.6	19.3	40.9	8.0	38.1	106.2	3.7	3.6	9.8
							Área 2 (n*=30)								
Mínimo	5.0	16.7	4.4	0.9	8.0	3.0	0.3	21.4	13.0	37.0	25.6	0.9	328.9	269.7	155.9
Máximo	5.8	31.8	15.2	5.1	21.0	8.0	2.9	47.8	31.8	66.5	52.1	17.2	562.9	512.1	301.1
Média	5.3	26.2	8.9	1.8	14.8	4.6	1.5	36.5	21.3	57.7	36.9	7.1	442.2	367.0	190.7
Desvio Padrão	0.2	4.2	2.7	0.9	3.6	1.2	0.9	6.7	4.8	7.8	7.1	4.9	61.0	57.7	32.8
Coef. de Variação	3.8	15.9	30.5	51.1	24.2	26.3	59.6	18.3	22.5	13.4	19.1	69.9	13.8	15.7	17.2
							Área 3 (n*=17)								
Mínimo	5.4	30.7	133.1	1.7	27.0	5.0	0.2	50.2	36.1	86.3	36.9	0.5	489.2	228.9	167.5
Máximo	5.8	38.5	289.7	7.9	37.0	7.0	0.5	67.2	46.6	109.2	47.6	1.1	592.8	254.4	269.3
Média	5.7	34.8	231.6	4.6	31.8	5.9	0.3	57.1	42.4	99.4	42.7	0.8	554.4	242.2	203.4
Desvio Padrão	0.1	2.3	37.0	2.2	3.3	0.7	0.1	5.4	3.2	5.6	3.2	0.2	23.7	6.0	23.4
Coef. de Variação	1.8	6.5	16.0	47.1	10.4	11.1	20.9	9.5	7.5	5.7	7.6	20.6	4.3	2.5	11.5
							Área 4 (n*=11)								
Mínimo	5.5	29.1	15.2	1.9	19.0	9.0	0.3	23.8	31.4	66.6	45.7	0.4	577.5	211.1	170.0
Máximo	6.2	35.8	29.3	5.9	53.0	15.0	0.7	42.6	72.9	96.7	75.4	1.6	618.6	233.1	201.3
Média	5.9	32.8	23.3	3.6	28.3	11.5	0.4	33.1	43.4	76.5	56.3	1.0	591.6	223.5	185.0
Desvio Padrão	0.2	2.2	4.3	1.3	8.8	2.0	0.1	5.8	10.7	7.5	8.7	0.4	13.4	6.3	10.9
Coef. de Variação	3.9	6.8	18.6	34.7	31.0	17.2	27.9	17.6	24.7	9.8	15.5	36.2	2.3	2.8	5.9
							Área 5 (n*=6)								
Mínimo	5.3	28.5	9.8	0.8	18.0	5.0	0.3	37.6	26.9	73.1	36.8	0.6	461.5	202.6	196.1
Máximo	5.9	35.0	87.7	3.9	35.0	11.0	1.2	46.2	47.0	86.4	54.4	4.3	543.5	329.0	266.8
Média	5.7	31.9	61.7	2.3	29.0	8.2	0.5	40.1	39.5	79.6	49.3	1.3	506.0	266.3	227.7
Desvio Padrão	0.2	2.4	30.6	1.1	6.1	1.9	0.4	3.2	7.2	5.3	6.5	1.5	31.5	51.9	27.4
Coef. de Variação	3.7	7.4	49.6	47.3	20.9	23.8	81.6	7.9	18.3	6.7	13.1	111.1	6.2	19.5	12.0
							Área 6 (n*=9)								
Mínimo	4.4	26.9	7.2	0.9	1.0	1.0	1.1	50.8	3.9	67.9	5.8	4.4	461.1	292.4	170.8
Máximo	5.3	34.5	14.5	2.4	18.0	4.0	10.4	71.4	23.9	88.8	32.0	72.6	536.8	321.5	235.4
Média	4.8	30.1	11.6	1.4	7.0	2.4	6.4	63.1	10.9	74.0	14.4	41.0	495.3	306.5	198.2
Desvio Padrão	0.2	2.6	2.3	0.6	5.2	1.0	2.6	5.7	6.5	6.5	8.0	20.3	22.9	8.0	20.4
Coef. de Variação	4.9	8.5	20.0	38.6	74.2	41.5	40.4	9.0	59.4	8.8	55.6	49.4	4.6	2.6	10.3

* - n = número de amostras

ANEXO C - Distribuição dos valores observados para as 89 amostras nas análises convencionais de solo

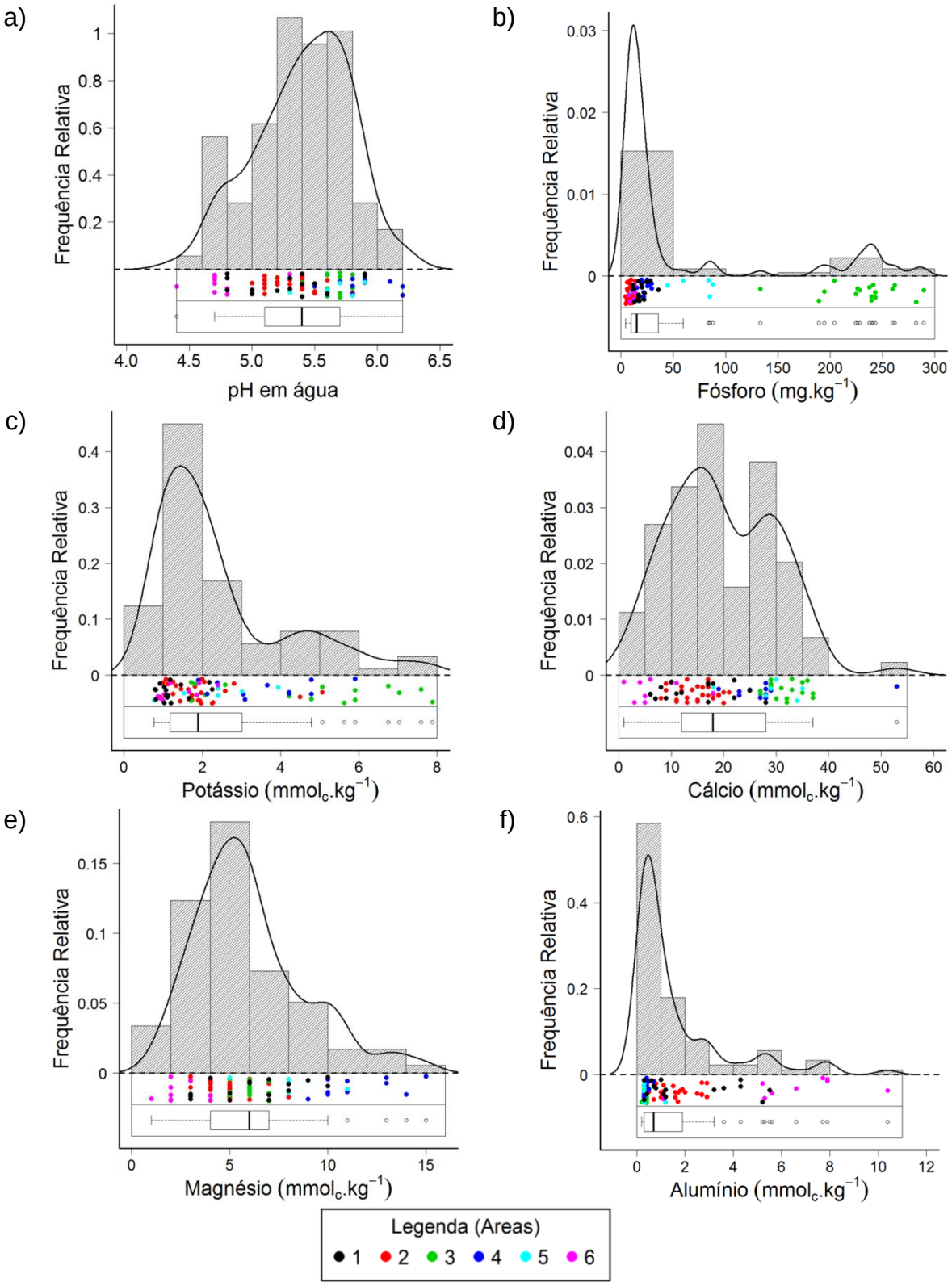


Figura 1 - Box-plot, digrama de dispersão, histograma e gráfico de densidade de probabilidade para valores observados de pH em água (a), fósforo (b), potássio (c) cálcio (d), magnésio (e) e alumínio (f) nas 89 amostras analisadas.

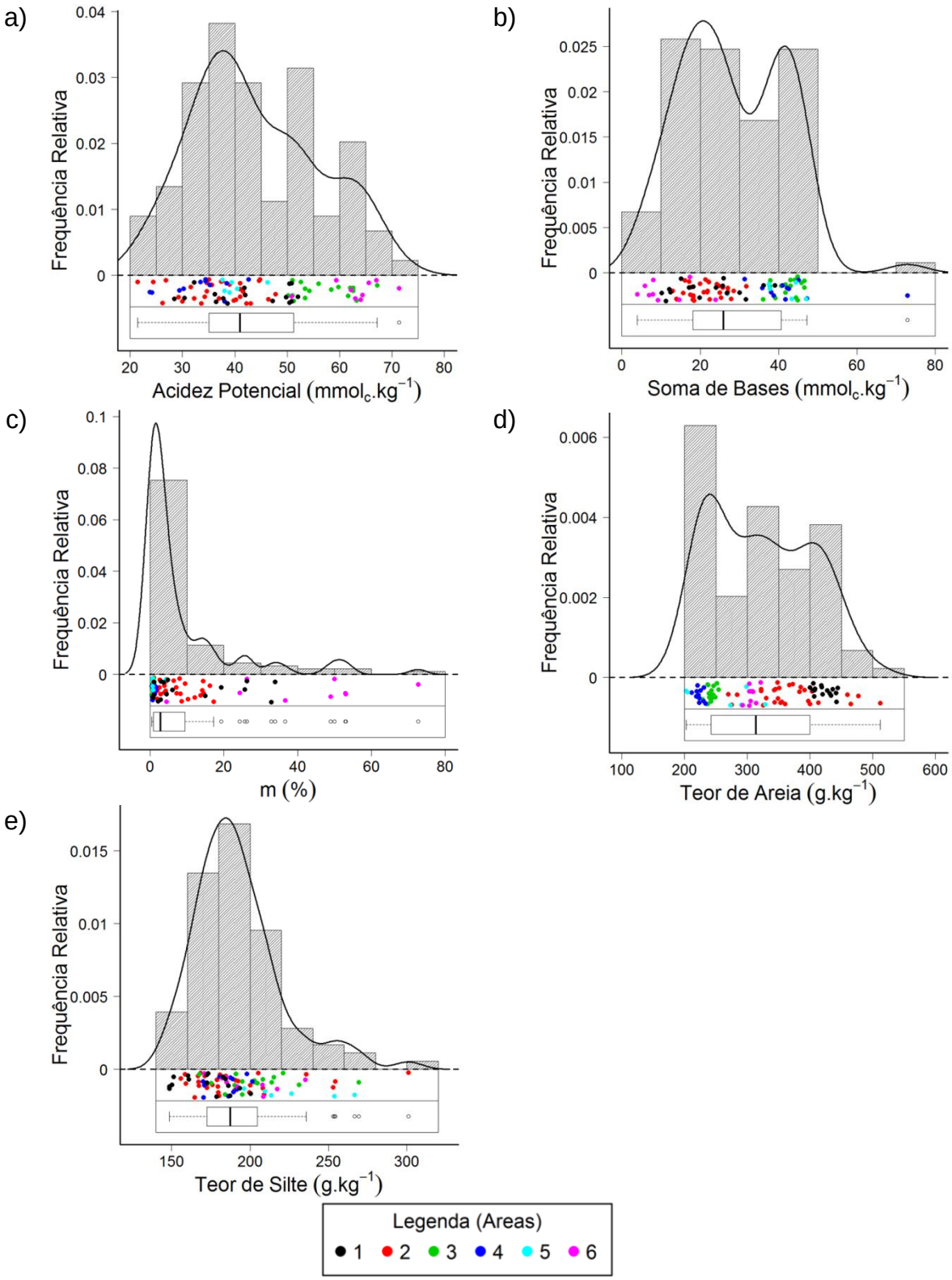


Figura 2 - Box-plot, digrama de dispersão, histograma e gráfico de densidade de probabilidade para valores observados de acidez potencial (a), soma de bases (b), teores de areia (c) e teor de silte (d) nas 89 amostras analisadas.

ANEXO D - Matriz de correlação entre os atributos físico-químicos do solo para as 89 amostras analisadas

Atributos	pH em água	M. O.	P	K	Ca	Mg	Al	H+Al	SB	CTC	V	m	Argila	Areia	Silte
pH em água	1	**0.40****	**0.39****	**0.43****	**0.83****	**0.76****	**-0.81****	**-0.40****	**0.86****	**0.38****	**0.88****	**-0.78****	**0.42****	**-0.45****	0.15
M. O.		1	**0.59****	**0.51****	**0.64****	**0.40****	-0.20	**0.46****	**0.64****	**0.85****	**0.29****	**-0.20***	**0.72****	**-0.73****	0.18
P			1	**0.62****	**0.65****	0.08	**-0.34****	**0.52****	**0.59****	**0.85****	**0.21***	**-0.31****	**0.47****	**-0.52****	**0.22***
K				1	**0.55****	**0.30****	**-0.36****	0.18	**0.62****	**0.62****	**0.40****	**-0.34****	**0.47****	**-0.50****	0.17
Ca					1	**0.67****	**-0.72****	-0.09	**0.98****	**0.71****	**0.81****	**-0.69****	**0.58****	**-0.63****	**0.25***
Mg						1	**-0.61****	**-0.44****	**0.76****	**0.28****	**0.84****	**-0.60****	**0.41****	**-0.38****	-0.01
Al							1	**0.50****	**-0.73****	**-0.21***	**-0.85****	**0.98****	-0.17	0.20	-0.12
H+Al								1	-0.14	**0.61****	**-0.60****	**0.48****	**0.29****	**-0.30****	0.08
SB									1	**0.69****	**0.86****	**-0.71****	**0.60****	**-0.63****	**0.21***
CTC										1	**0.24***	**-0.21***	**0.69****	**-0.72****	**0.22***
V											1	**-0.83****	**0.33****	**-0.35****	0.12
m												1	-0.16	0.18	-0.11
Argila													1	**-0.93****	0.01
Areia														1	**-0.36****
Silte															1

* - significativo a um nível de significância de 5%.
** - significativo a um nível de significância de 1%.

ANEXO E - Comparação dos valores obtidos pelas análises convencionais com os resultados das predições. Modelos obtidos com informações espectrais coletadas em laboratório

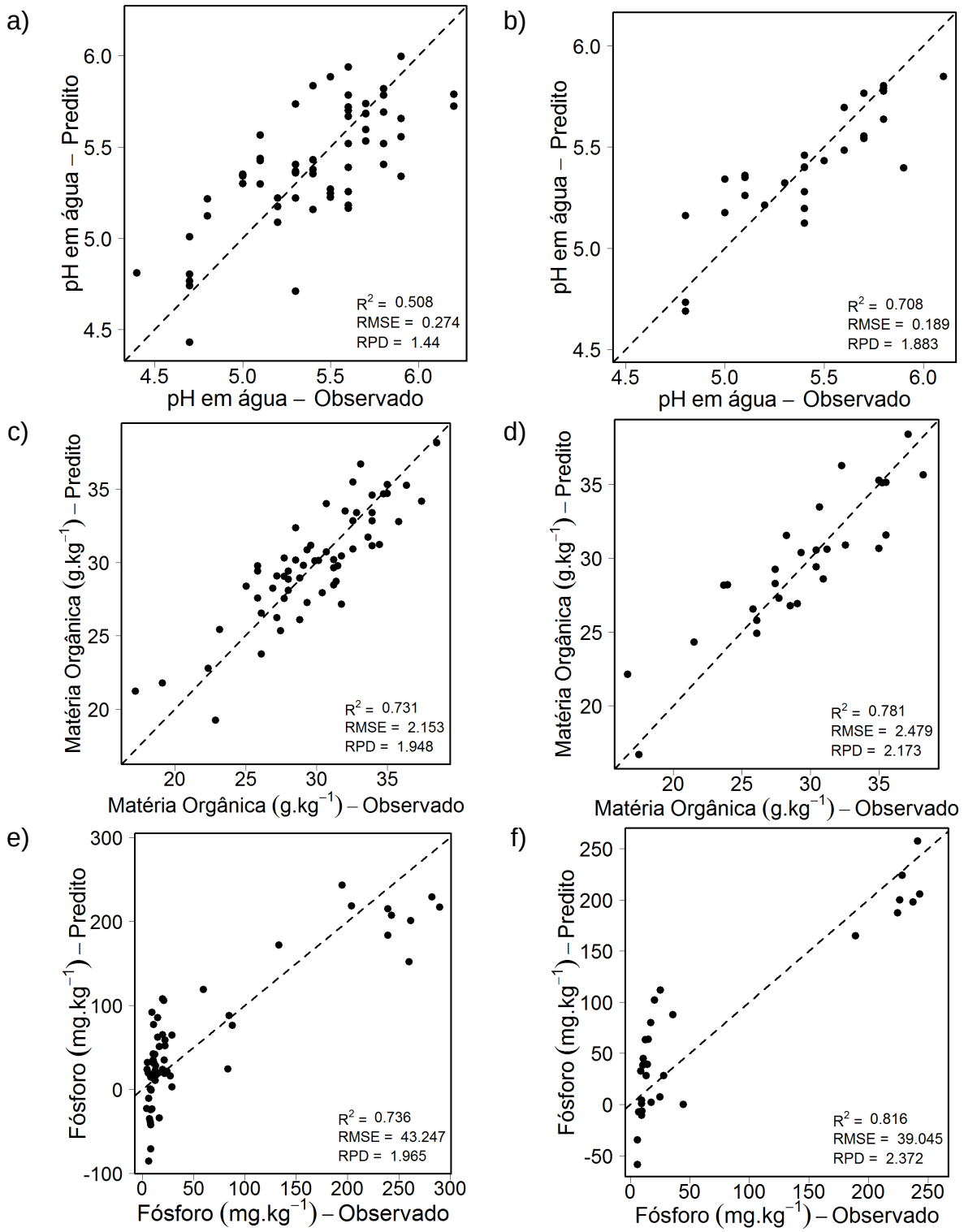


Figura 1 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados em laboratório.

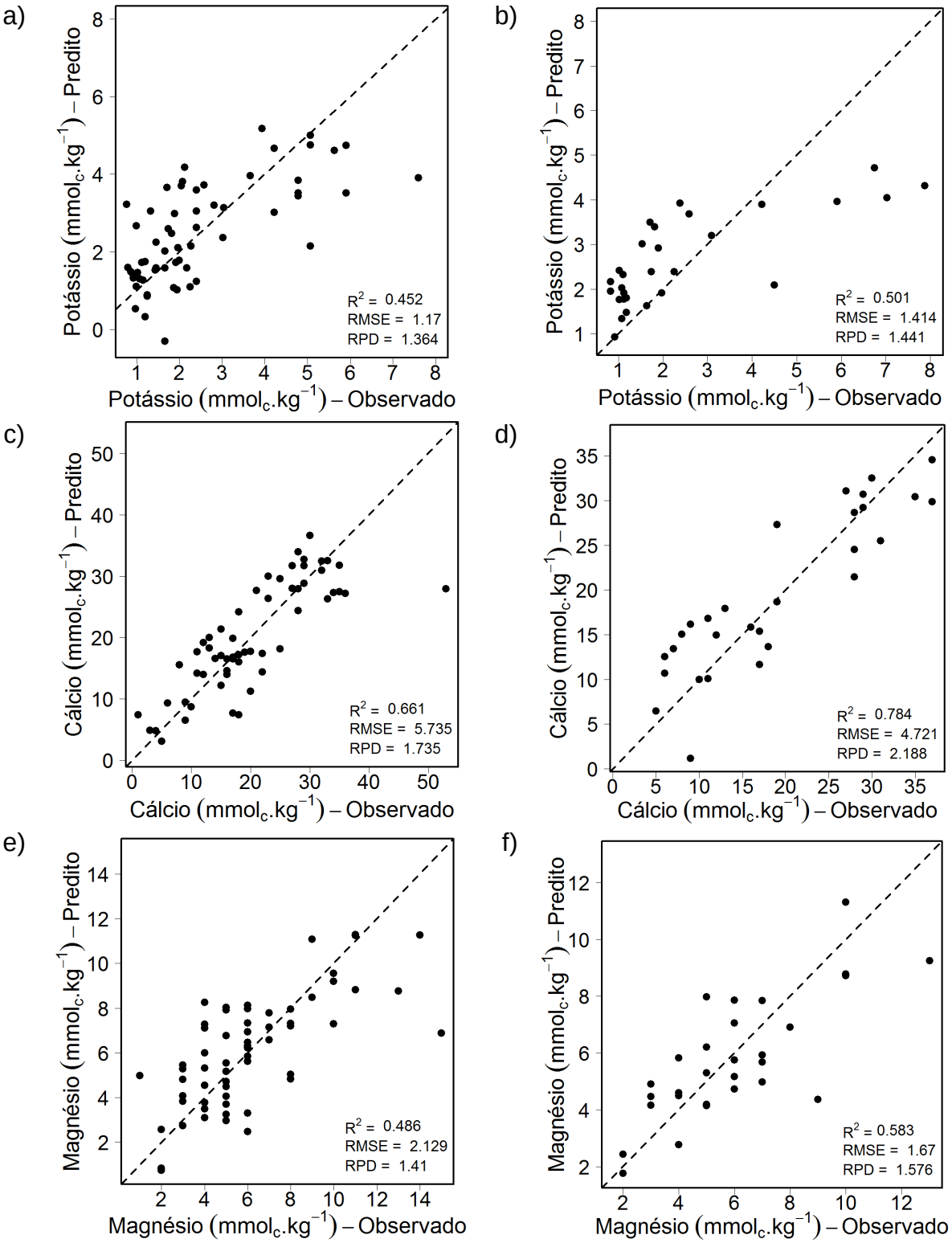


Figura 2 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados em laboratório.

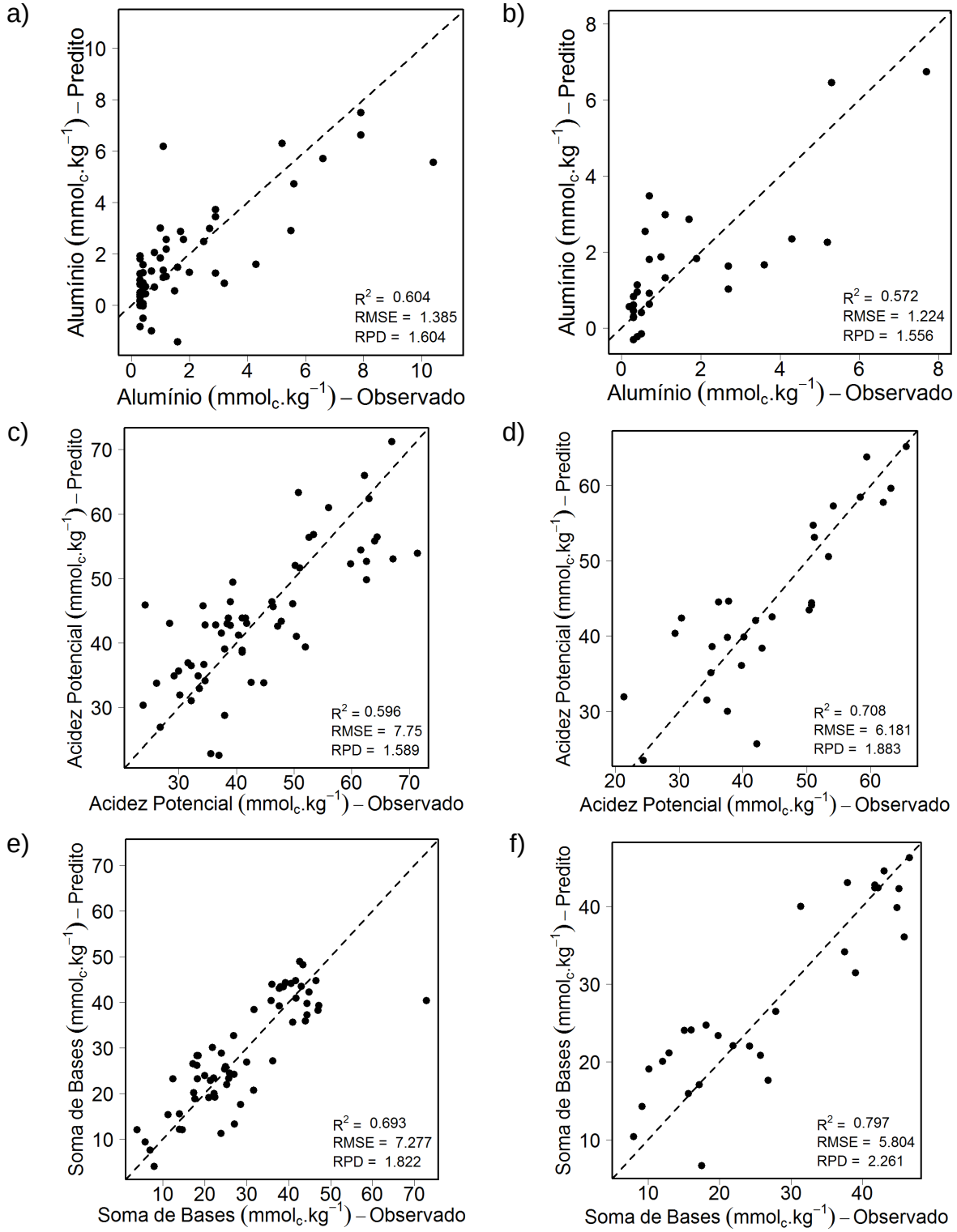


Figura 3 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados em laboratório.

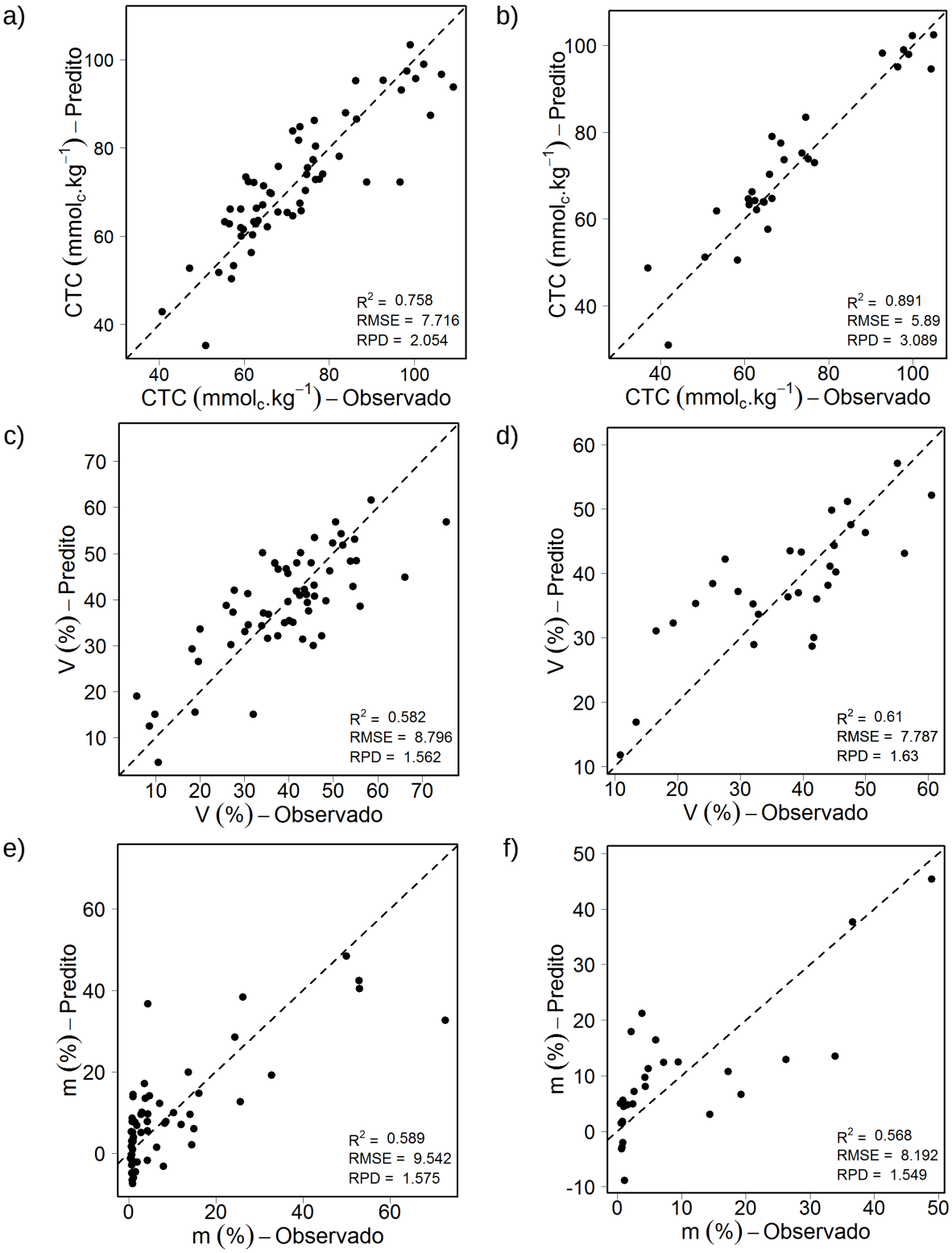


Figura 4 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados em laboratório.

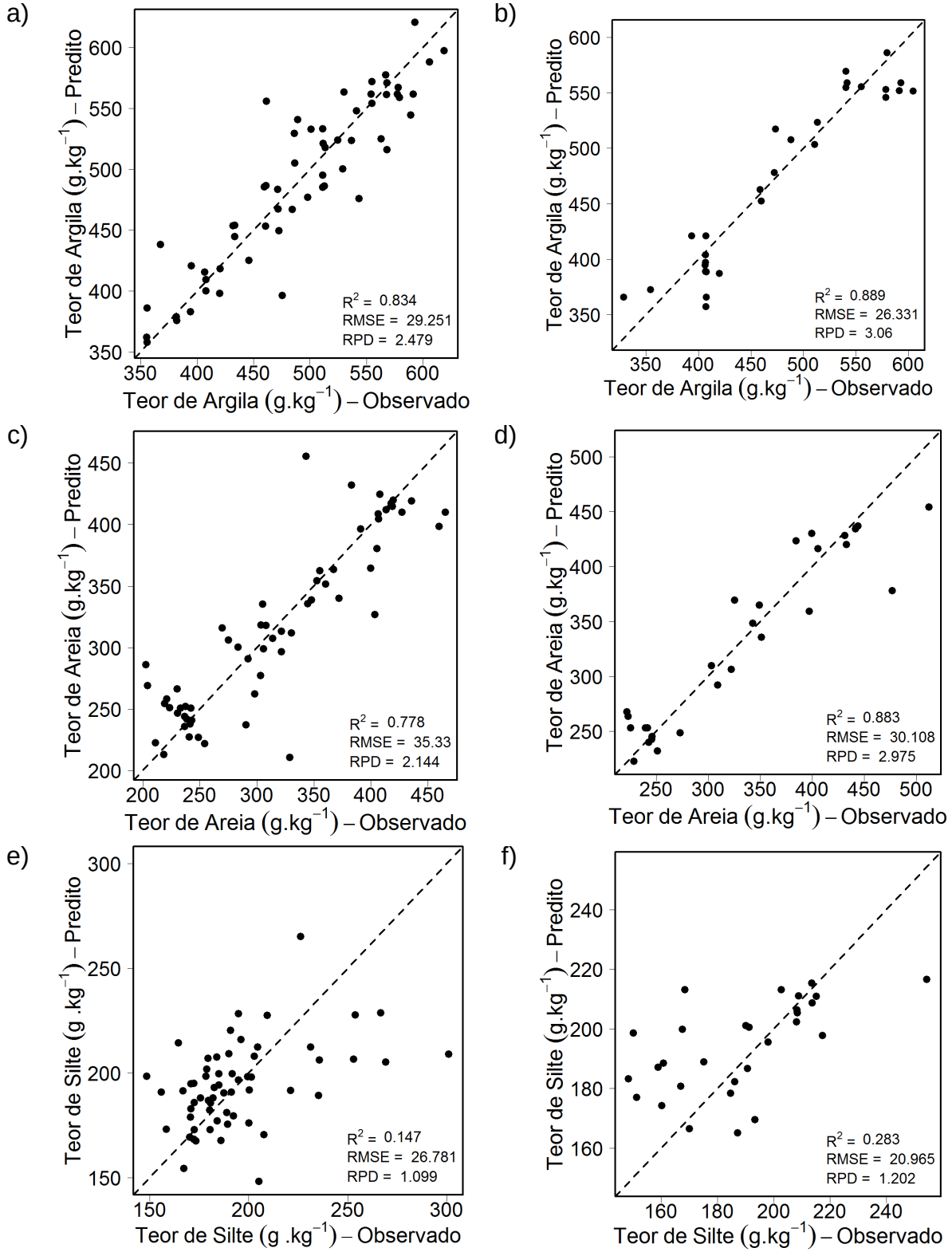


Figura 5 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados em laboratório.

ANEXO F - Comparação dos valores obtidos pelas análises convencionais com os resultados das predições. Modelos obtidos com informações espectrais coletadas por sensor aerotransportado

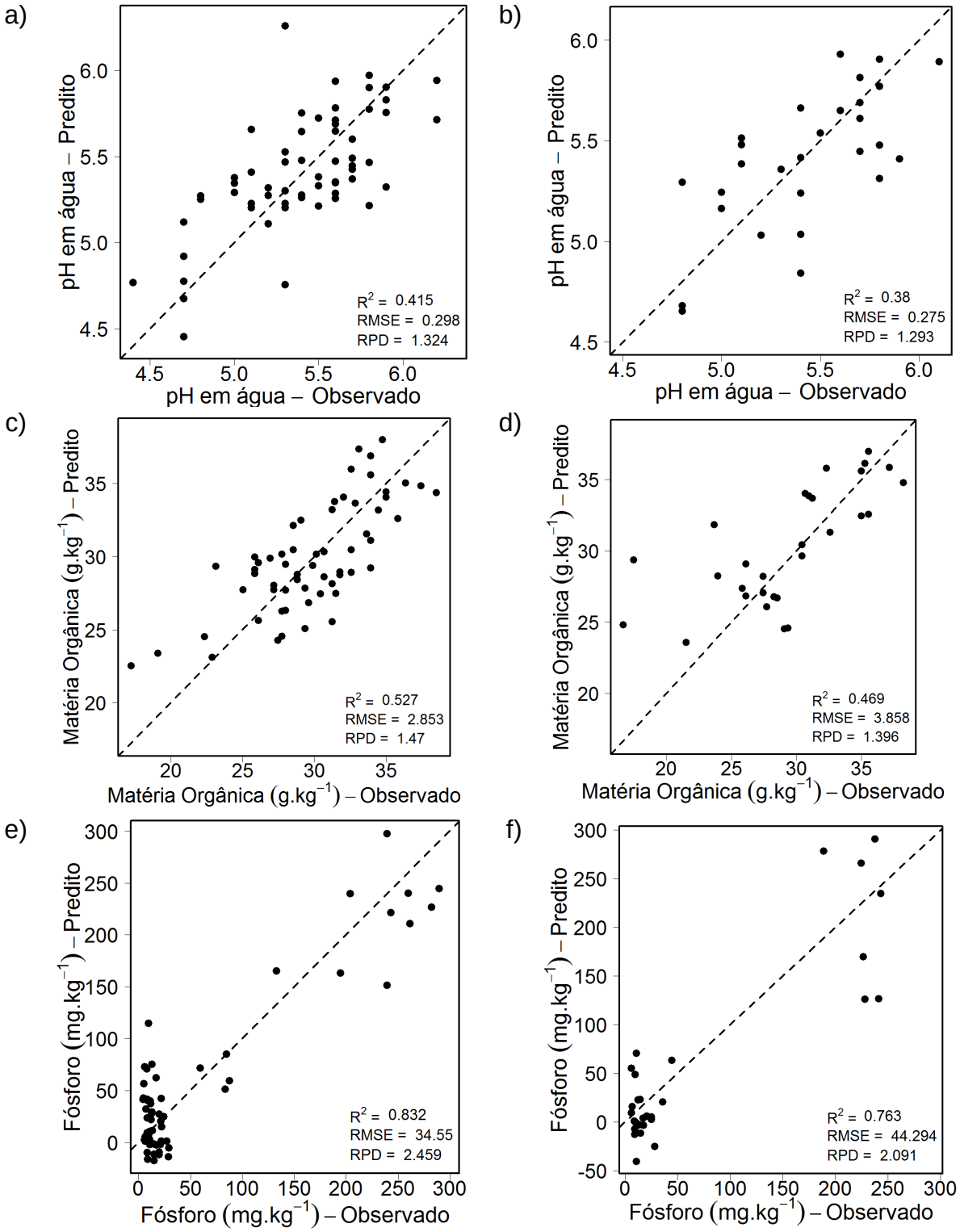


Figura 1 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados por sensor aerotransportado.

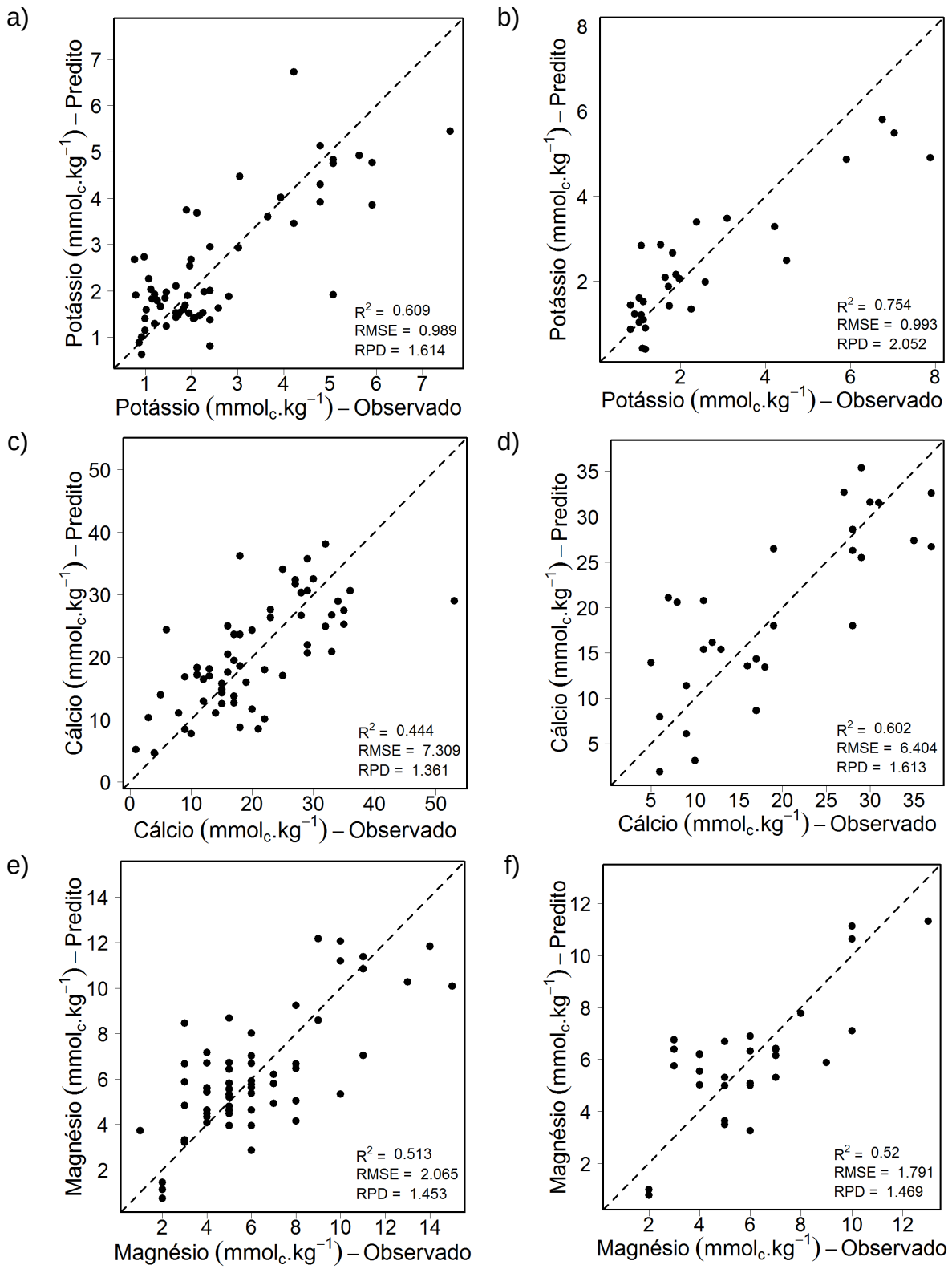


Figura 2 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados por sensor aerotransportado.

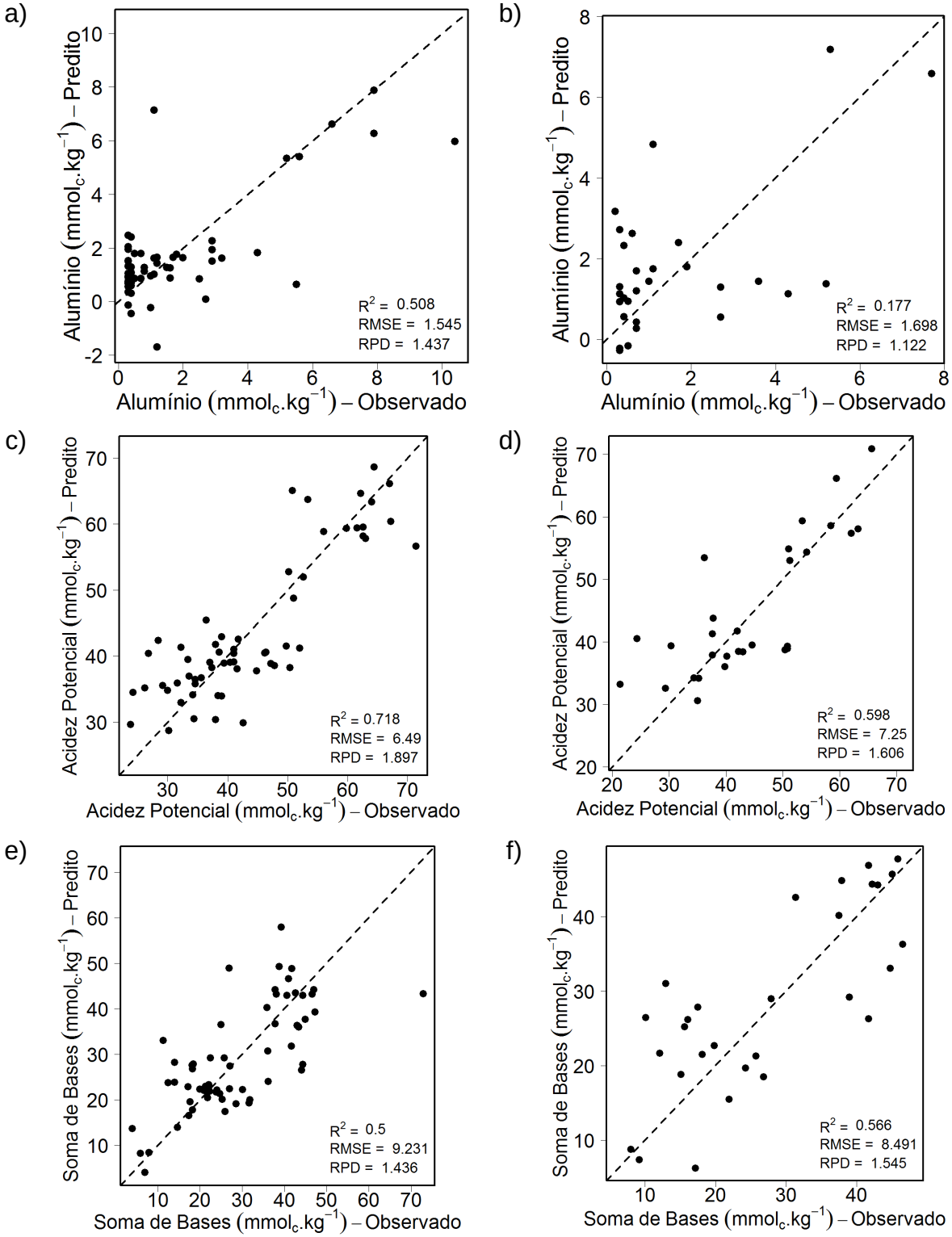


Figura 3 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados por sensor aerotransportado.

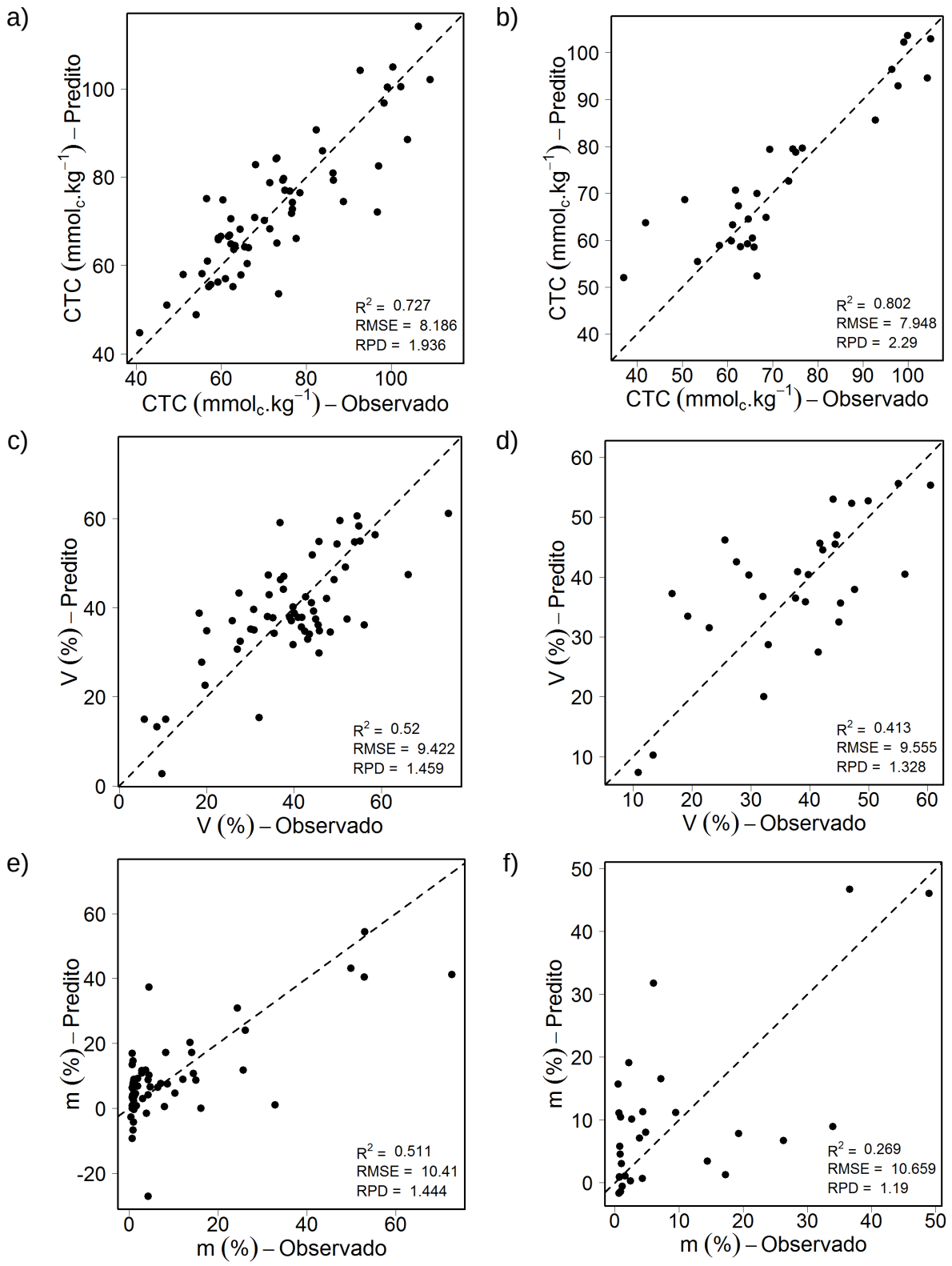


Figura 4 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados por sensor aerotransportado.

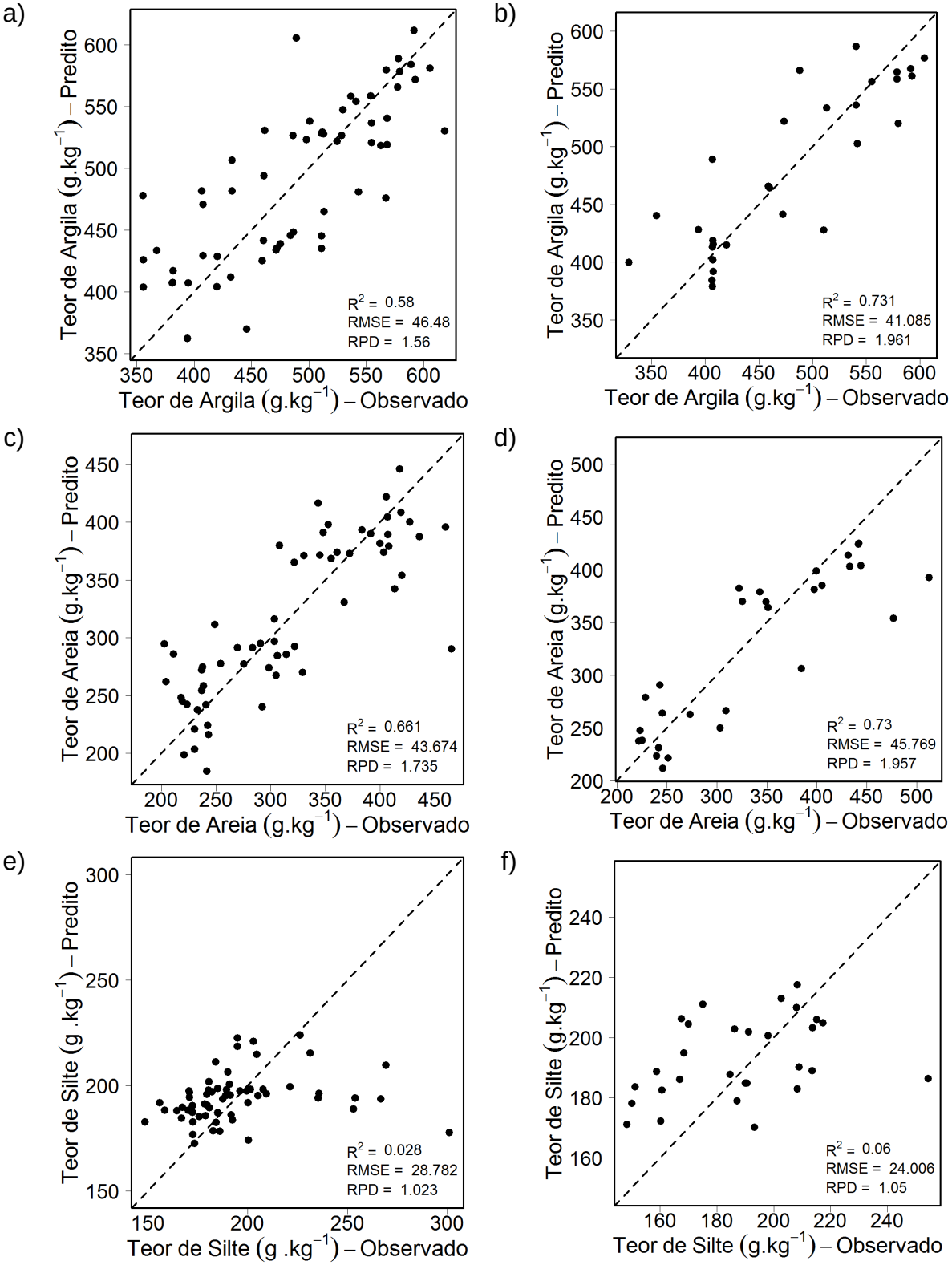


Figura 5 - Valores observados, em análise convencional, e valores preditos por modelos de quantificação. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos coletados por sensor aerotransportado.

ANEXO G - Melhores modelos de quantificação de atributos do solo para os dados espectrais referentes às parcelas de textura média e arenosa

Atrib.	Laboratório								Campo							
	Pré-trat.	Nº de Fatores	Validação Cruzada			Predição			Pré-trat.	Nº de Fatores	Validação Cruzada			Predição		
			R^2	RMSE[1]	RPD	R^2	RMSE[1]	RPD			R^2	RMSE[1]	RPD	R^2	RMSE[1]	RPD
	Área 1 - Parcelas de textura arenosa															
P	SNV	4	0.76	18.862	2.07	0.47	30.916	1.38	SNV	1	0.01	38.619	1.01	0.15	39.021	1.10
Al	SG-15-1ª	5	0.17	0.372	1.10	0.02	0.444	1.02	Reflec.	1	-0.03	0.413	0.99	-0.01	0.450	1.01
m	MSC	6	0.14	0.912	1.08	-0.02	0.988	1.00	Reflec.	1	-0.03	1.000	0.99	-0.01	0.985	1.00
	Área 2 - Parcelas de textura média															
P	Kub.-M.	8	0.08	15.315	1.05	0.15	9.309	1.10	SG-7-1ª	1	-0.02	16.190	0.99	0.01	10.019	1.02
Al	SG-15-1ª	10	0.20	2.200	1.13	0.17	2.604	1.11	Kub.-M.	3	0.09	2.354	1.05	0.09	2.722	1.06
m	SNV	3	0.17	9.353	1.11	0.11	11.593	1.07	Absorb.	12	0.15	9.466	1.09	0.12	11.491	1.08

[1] – Valores de RMSE dados nas mesmas unidades dos atributos: P em mg dm^{-3}; Al em $mmol_c$ dm^{-3}; m em %.

ANEXO H - Relação entre valores observados em análise tradicional e valores preditos empregando-se espectros obtidos em laboratório, para amostras coletadas em parcela de textura arenosa

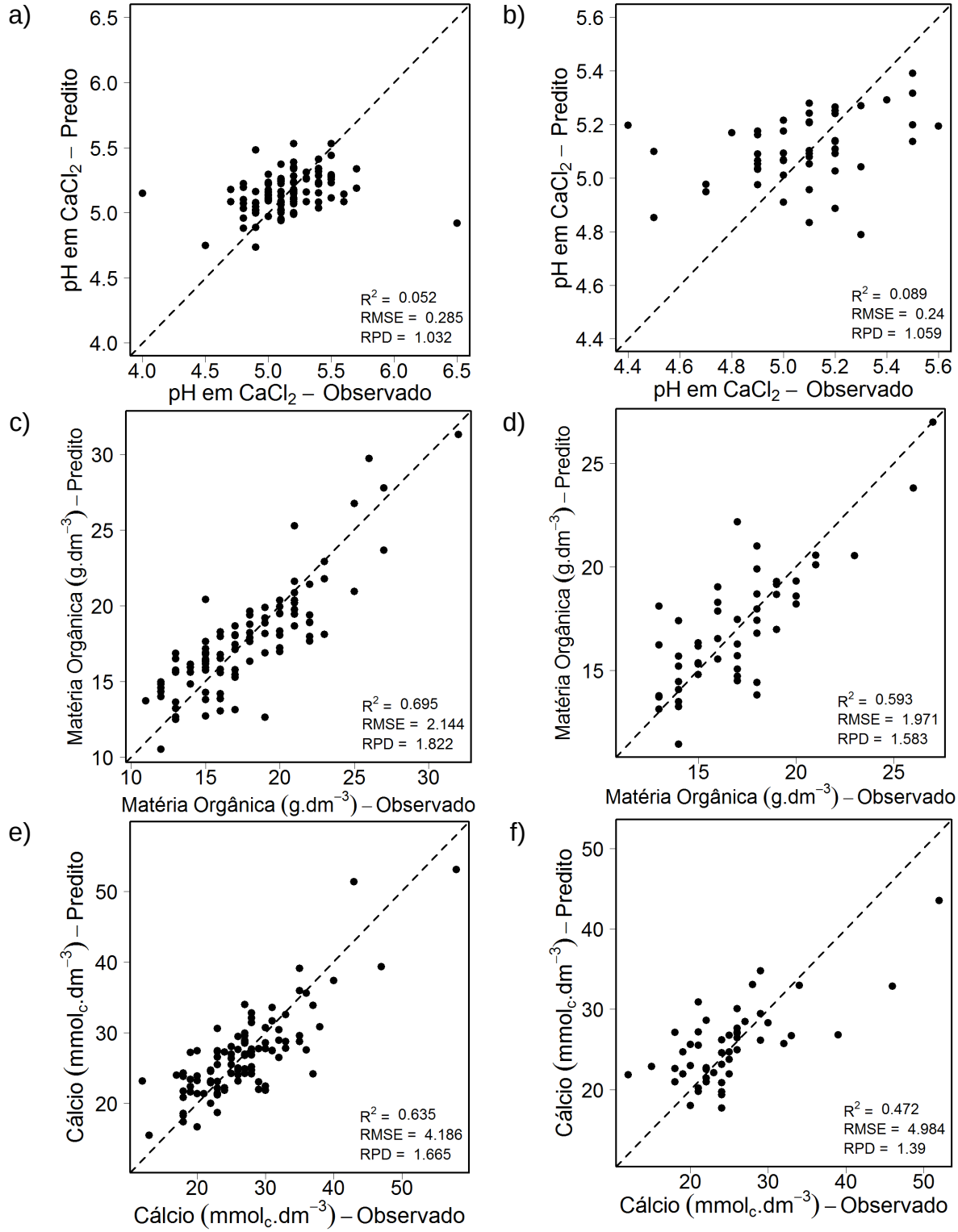


Figura 1. - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura arenosa. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em laboratório.

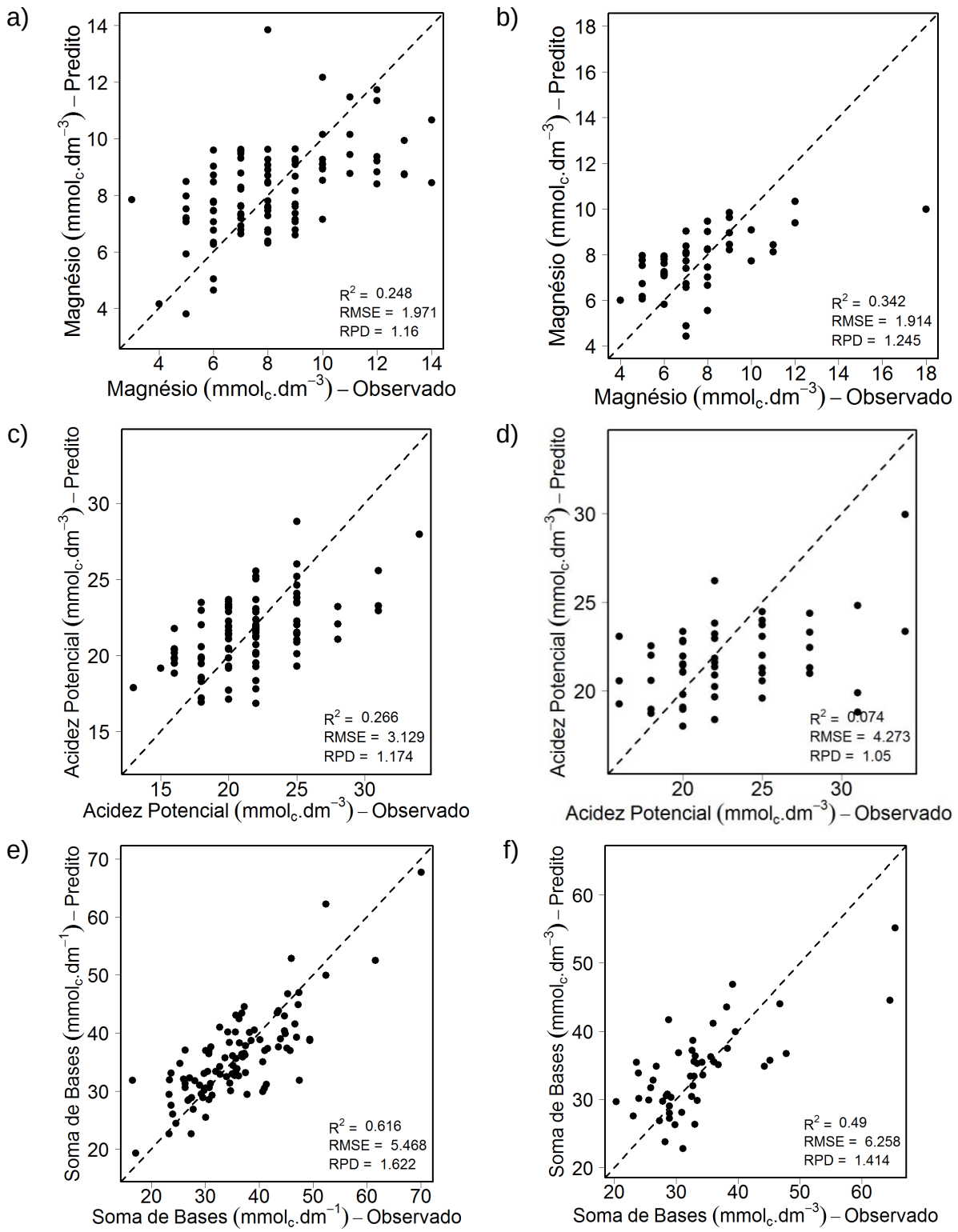


Figura 2 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura arenosa. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em laboratório.

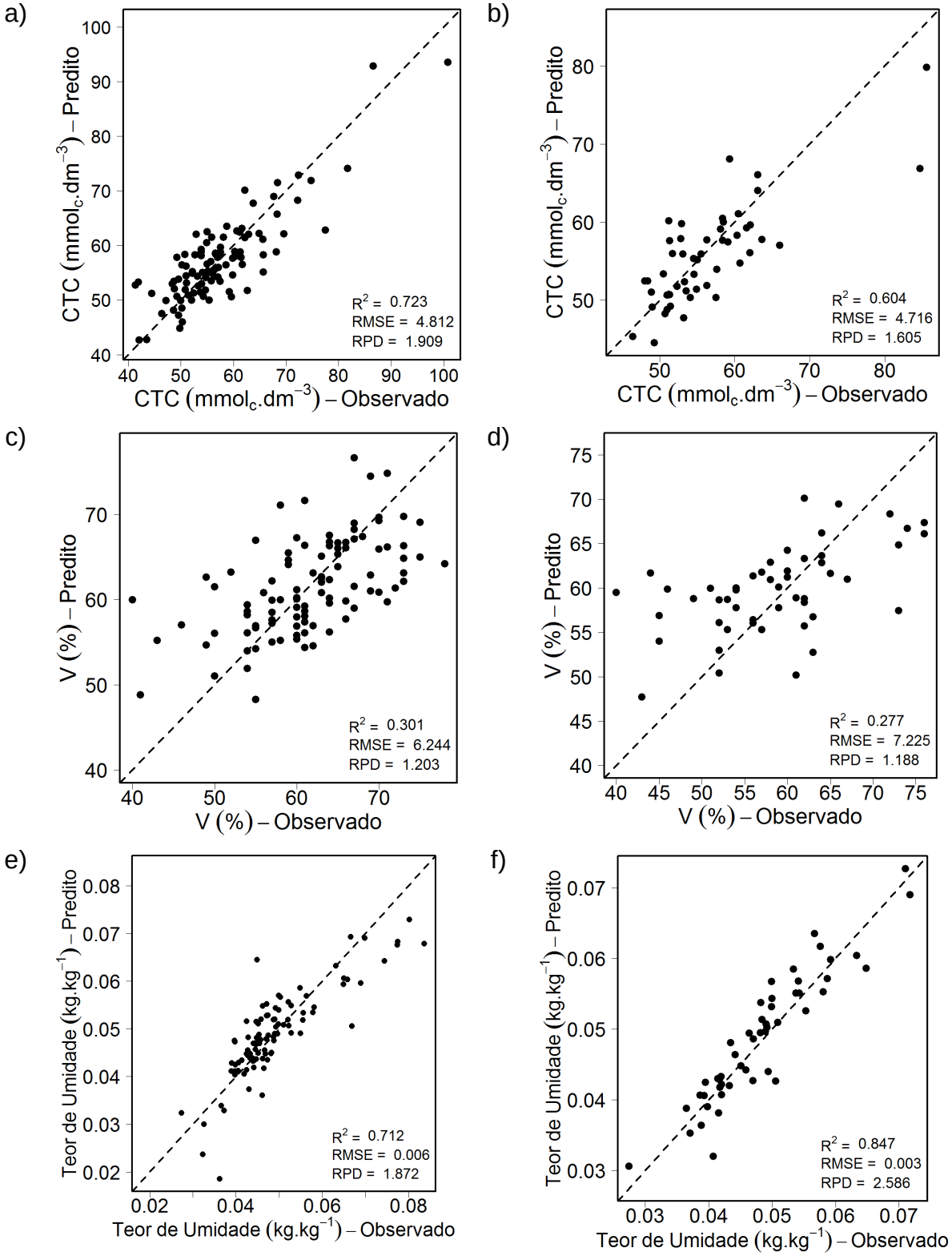


Figura 3 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura arenosa. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em laboratório.

ANEXO I - Relação entre valores observados em análise tradicional e valores preditos empregando-se espectros obtidos em laboratório, para amostras coletadas em parcela de textura média

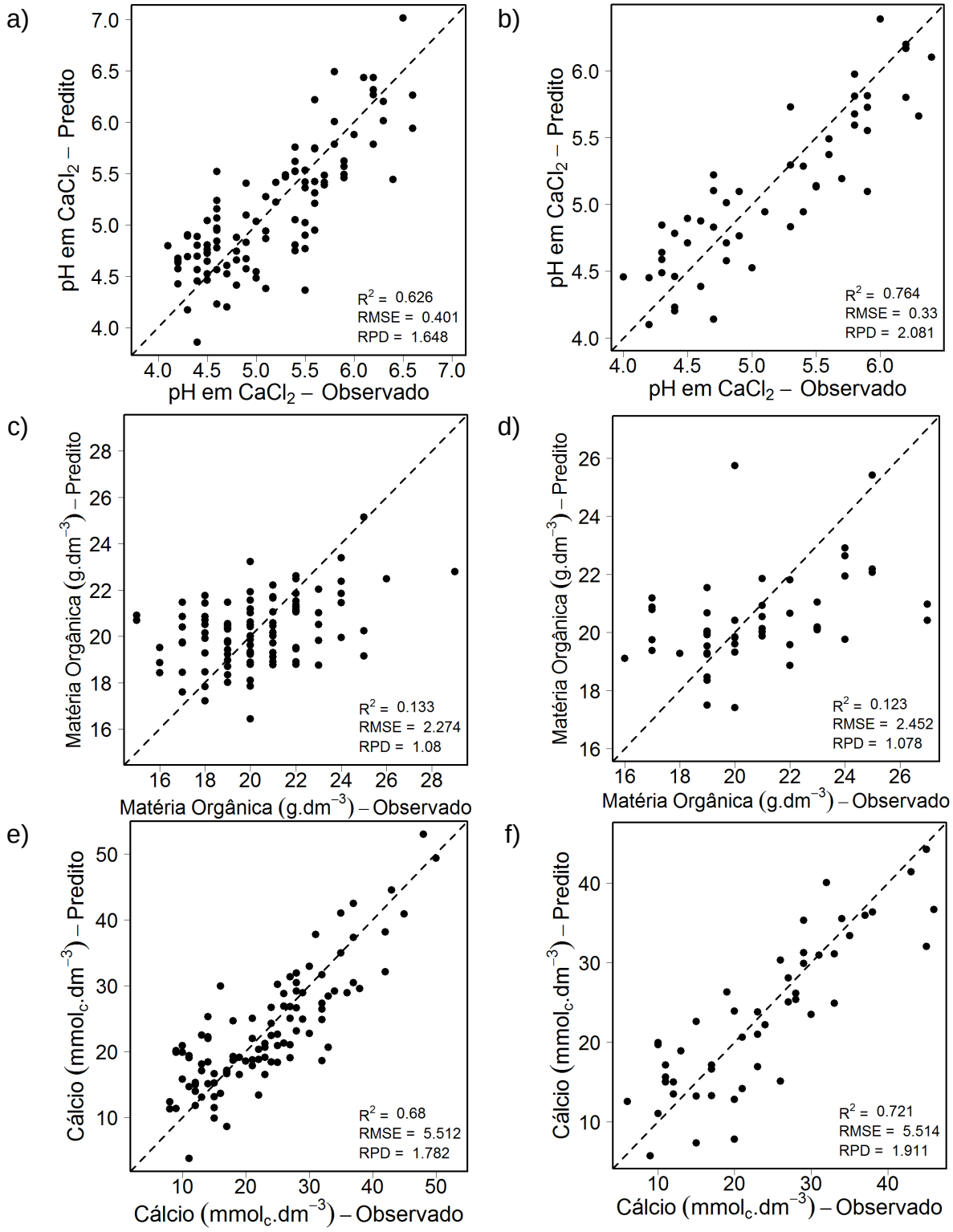


Figura 1 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura média. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em laboratório.

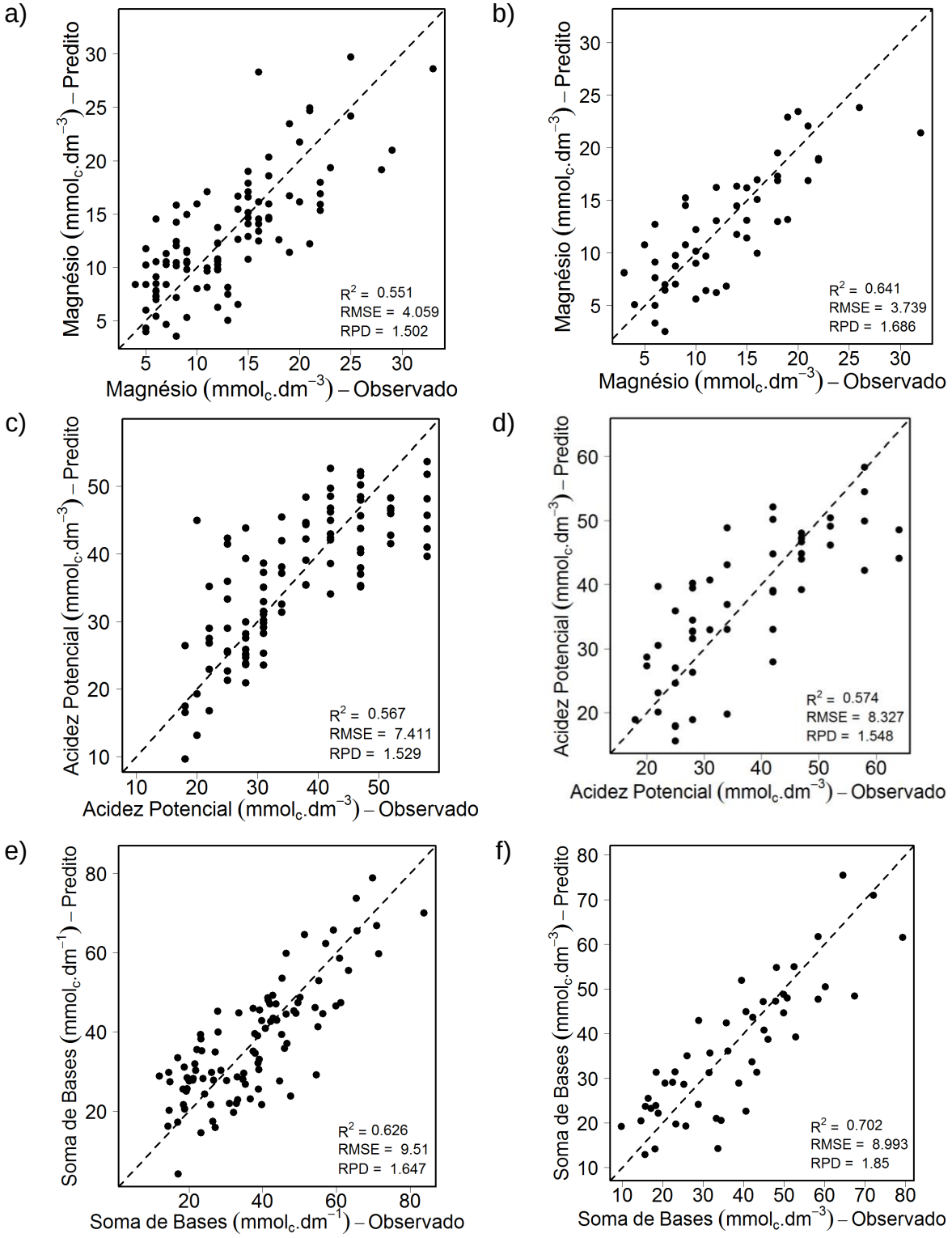


Figura 2 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura média. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em laboratório.

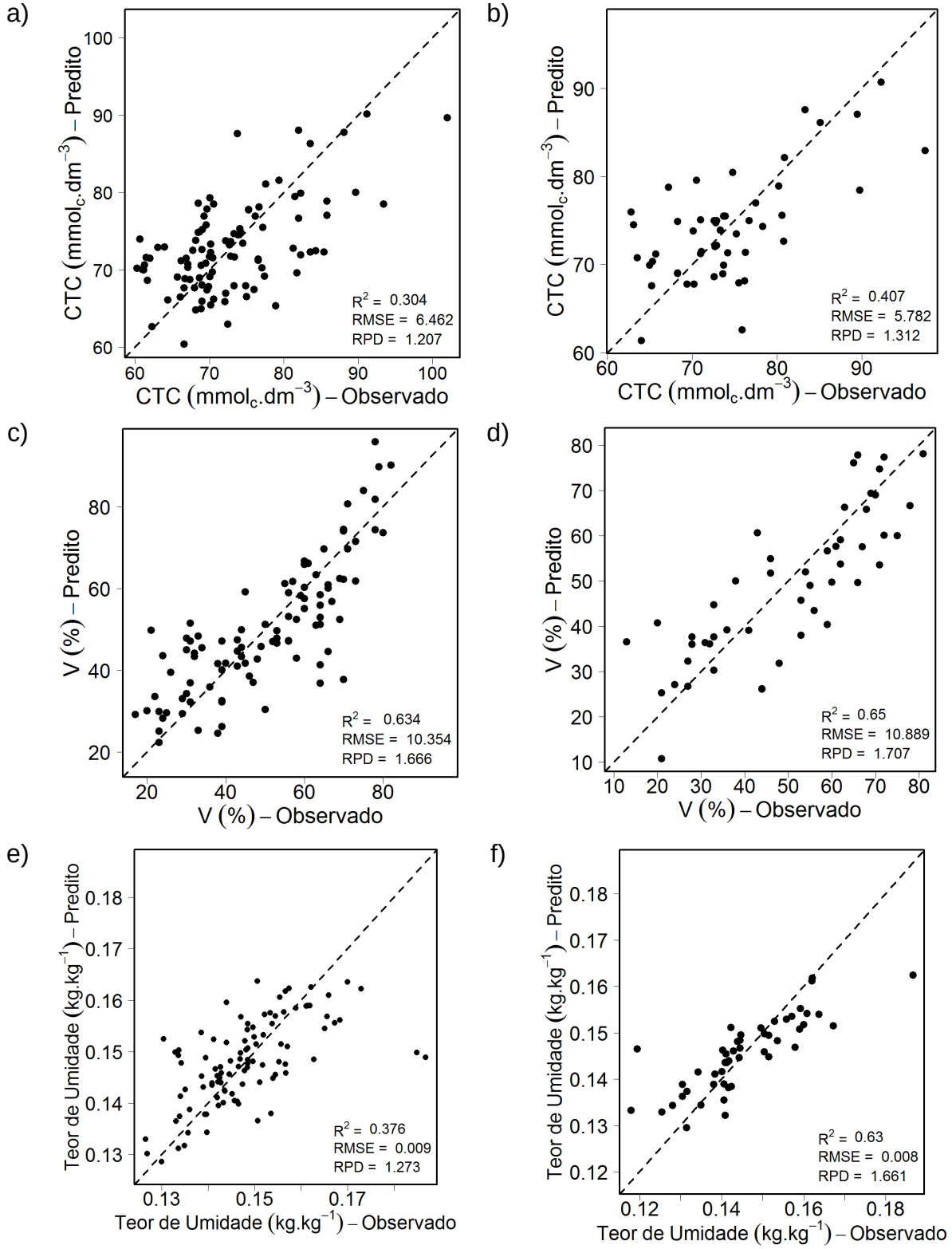


Figura 3 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura média. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em laboratório.

ANEXO J - Relação entre valores observados em análise tradicional e valores preditos empregando-se espectros obtidos em campo, para amostras coletadas em parcela de textura arenosa

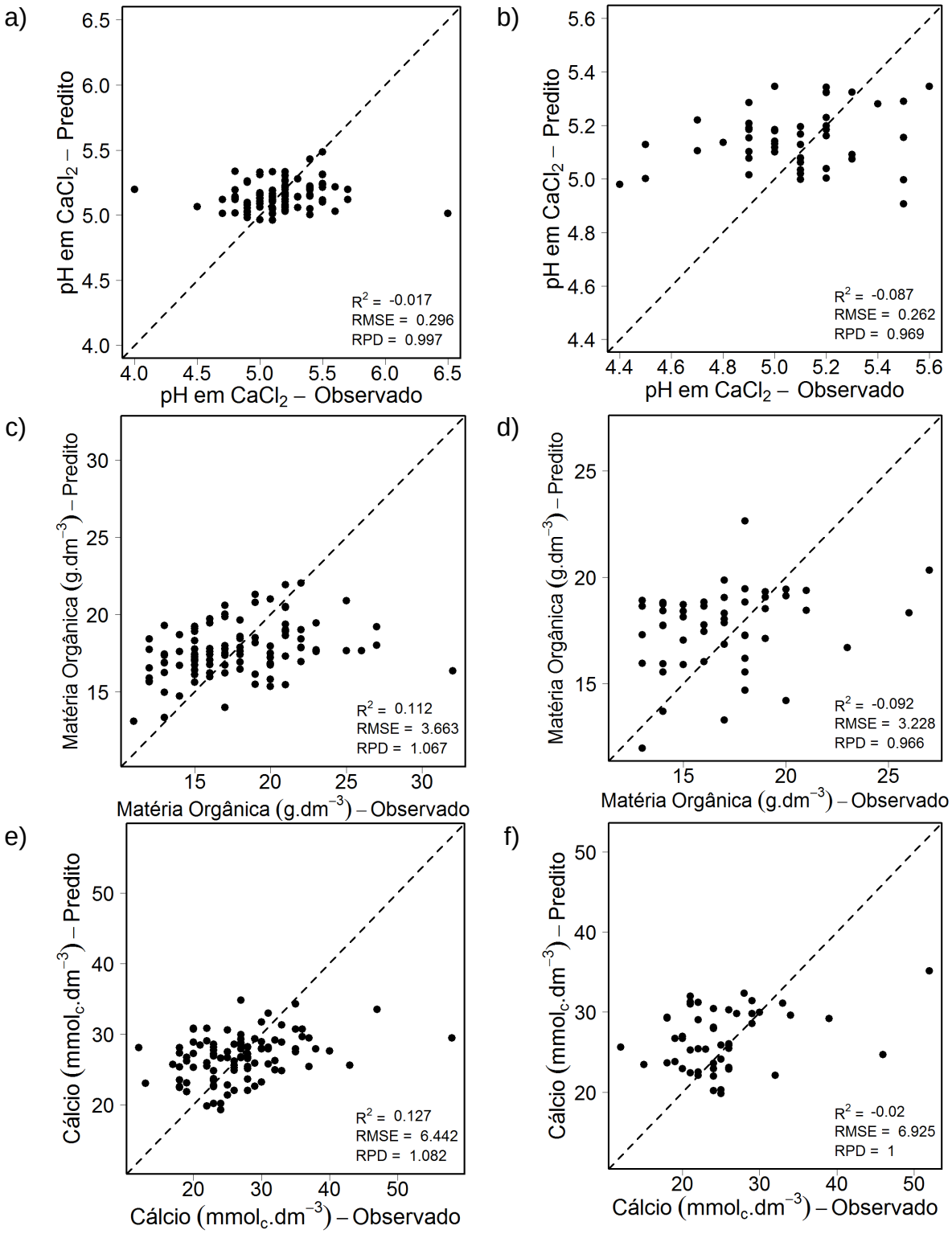


Figura 1 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura arenosa. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em campo.

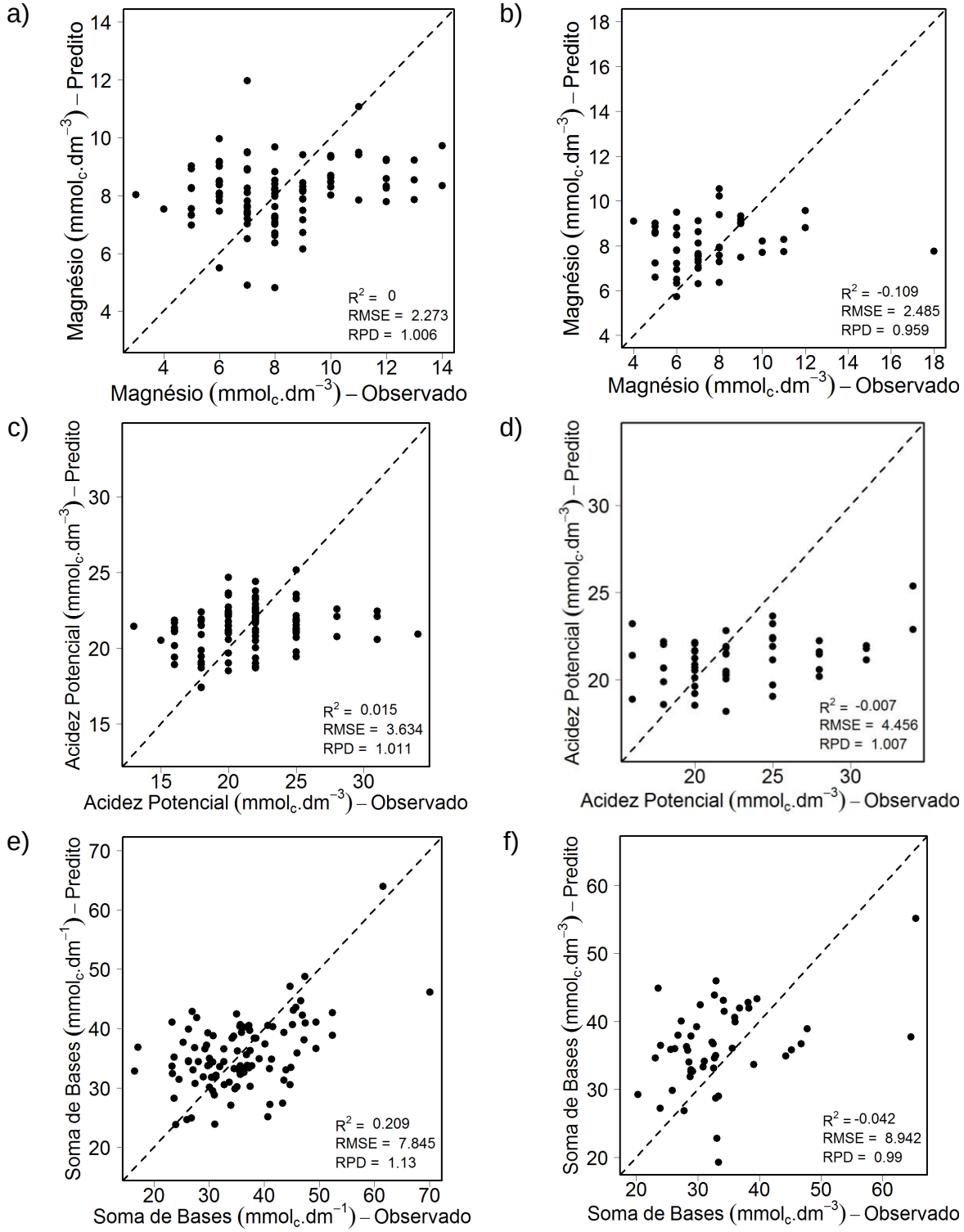


Figura 2 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura arenosa. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em campo.

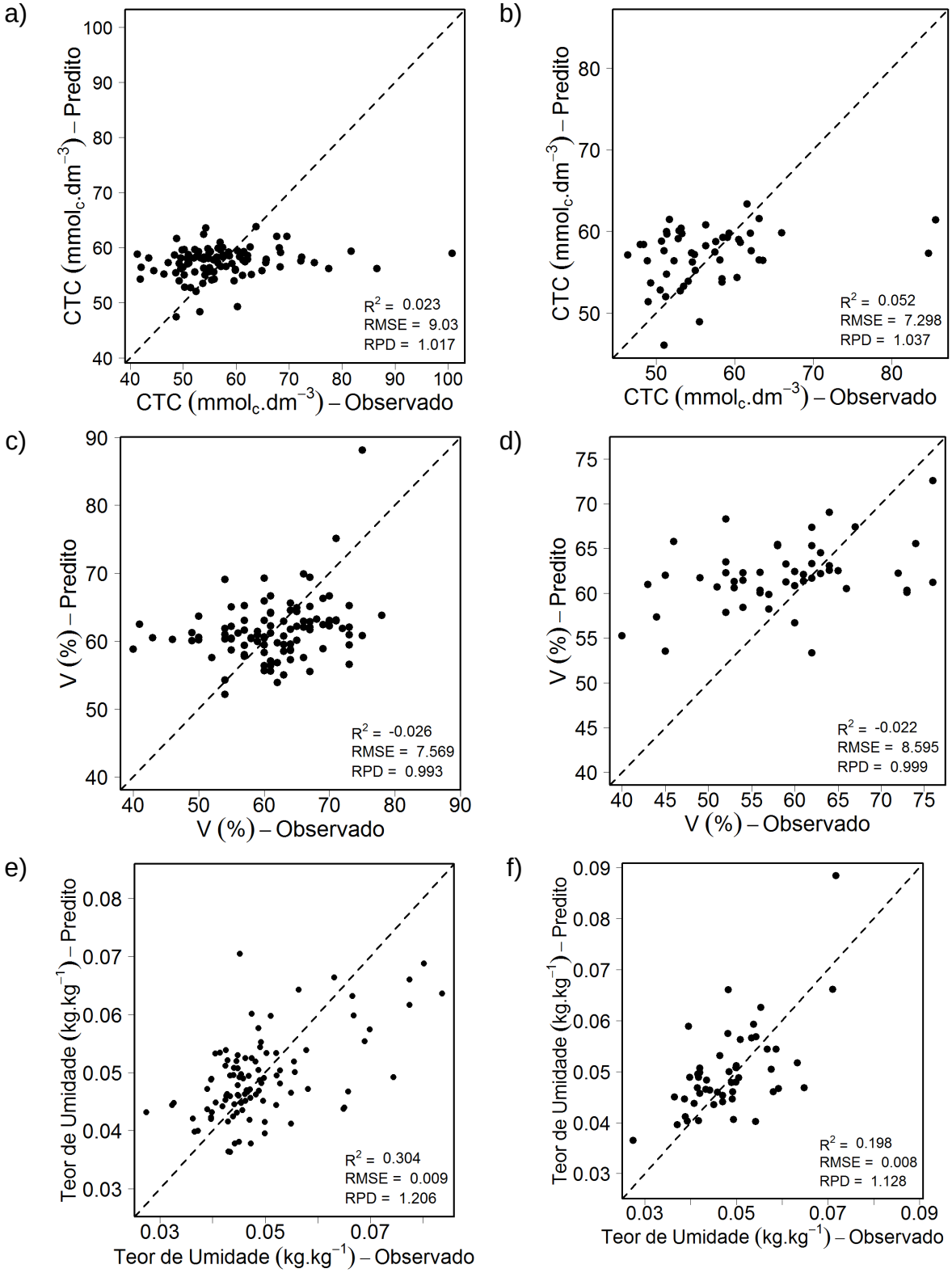


Figura 3 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura arenosa. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em campo.

ANEXO K - Relação entre valores observados em análise tradicional e valores preditos empregando-se espectros obtidos em campo, para amostras coletadas em parcela de textura média

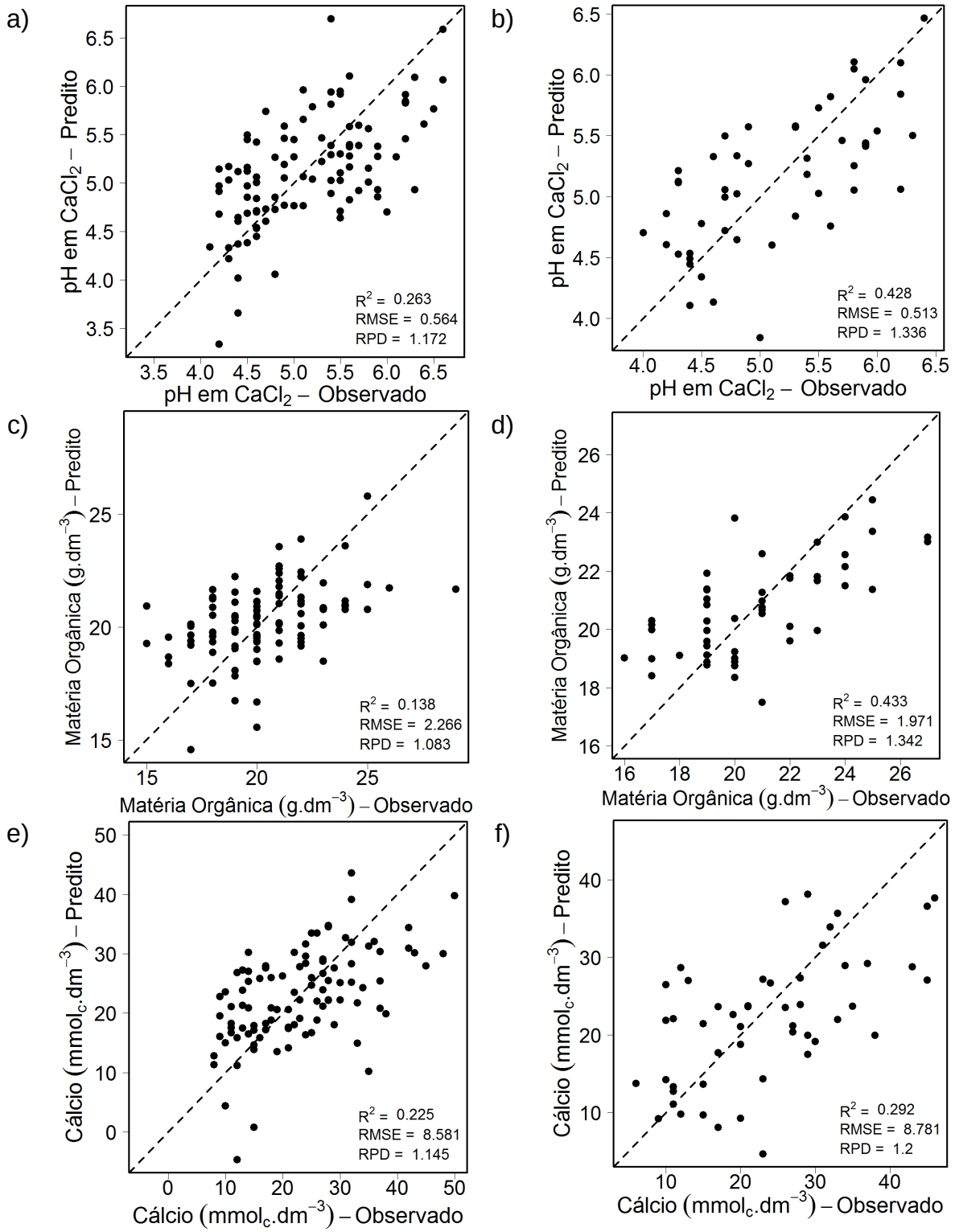


Figura 1 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura média. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em campo.

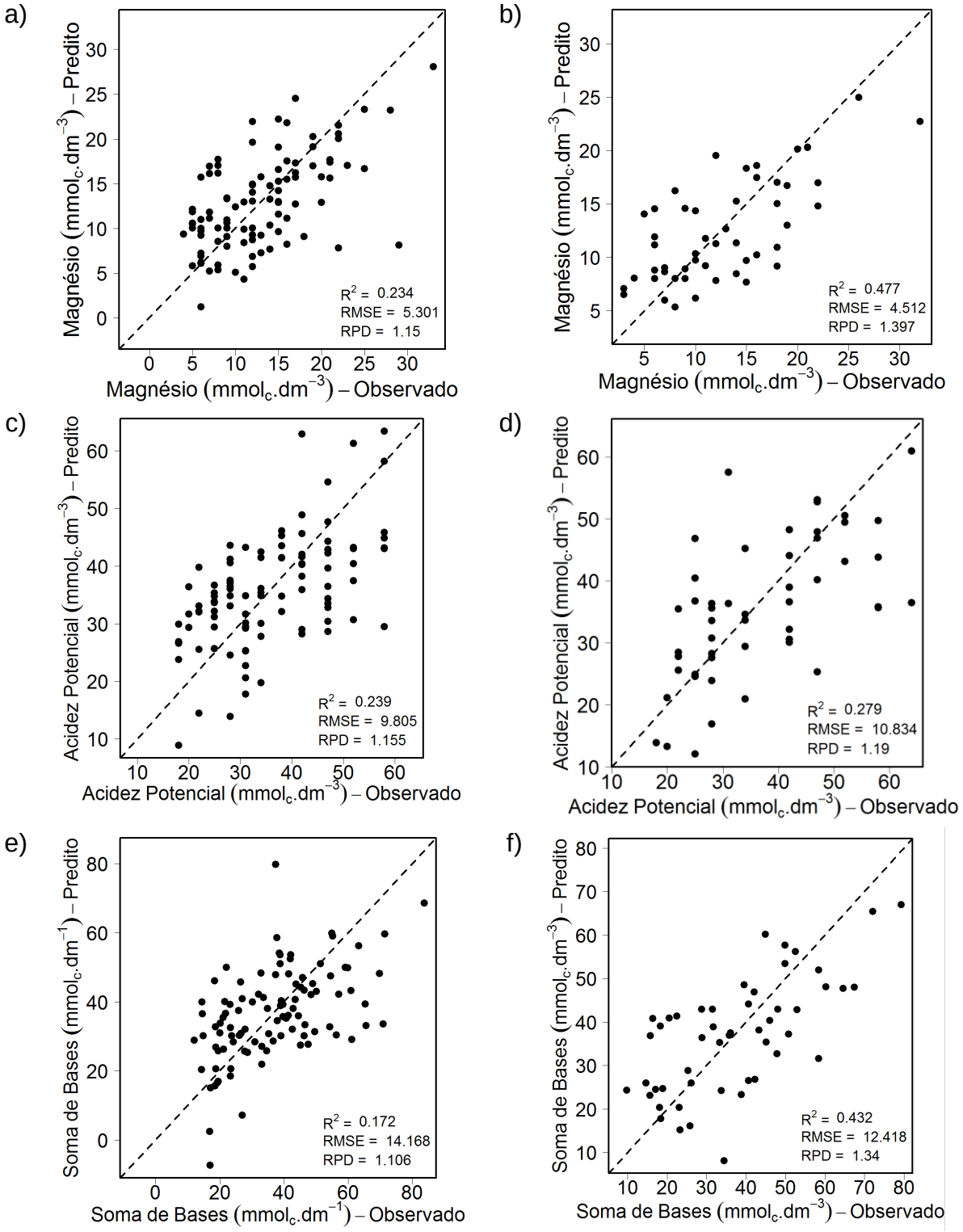


Figura 2 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura média. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em campo.

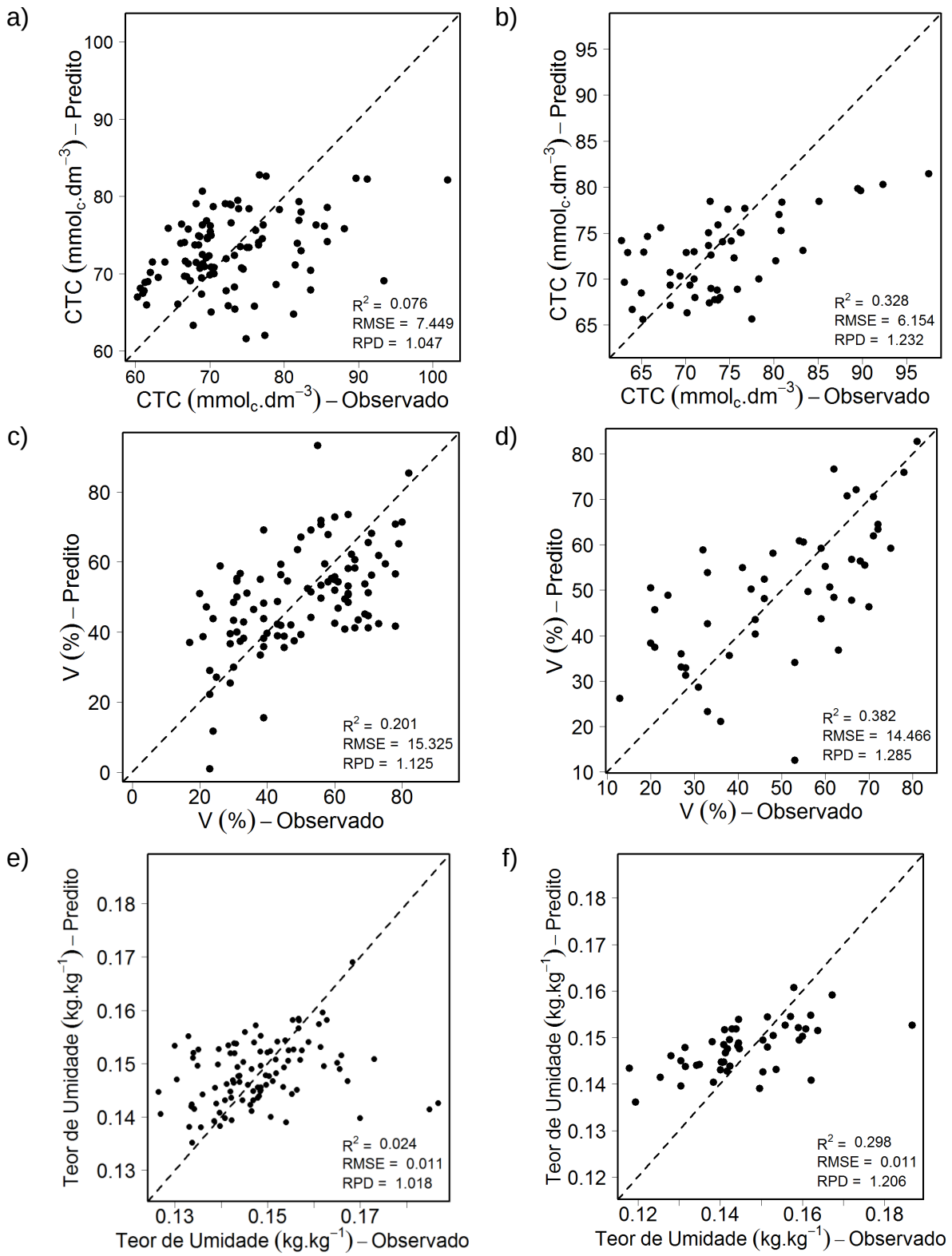


Figura 3 - Valores observados em análise tradicional e preditos para amostras coletadas em parcelas de textura média. Validação cruzada (a, c, e) e predição para amostras independentes (b, d, f). Dados radiométricos obtidos em campo.