

Espectroscopia no infravermelho próximo associada à máquina de vetor de suporte para quantificação de carbono e nitrogênio em solo.

Sandra M. O. Sá^{*1} (PQ), Marco F. Ferrão² (PQ), Cesar Mello³ (PQ), Carlos C. Cerri¹ (PQ) e Ronei J. Poppi⁴ (PQ). smolivei@cena.usp.br.

¹Universidade de São Paulo, Centro de Energia Nuclear na Agricultura, Biogeoquímica Ambiental, 13400-970 Piracicaba SP; ²Departamento de Química e Física, Universidade de Santa Cruz do Sul, 96815-900, Santa Cruz do Sul, RS; ³Instituto de Química, Universidade de Franca, 14404-600, Franca, SP; ⁴Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, 13083-970, Campinas, SP.

Palavras Chave: SVM, NIR, solo.

Introdução

Redes neurais, como perceptrons de múltiplas camadas e redes neurais de função de base radial, vem sendo utilizadas em várias áreas científicas para processamento de sinais e modelagem linear e não linear. Mais recentemente, uma nova categoria de redes neurais, conhecida como máquinas de vetor de suporte¹ (SVM, support vector machines), esta sendo aplicada principalmente devido a sua elevada capacidade de generalização, robustez no tratamento de matriz de dados de grande dimensão e teoria bem definida dentro da matemática e da estatística. Neste trabalho propõe-se de forma pioneira a utilização de máquina de vetor de suporte associado ao método dos mínimos quadrados (LS-SVM) para desenvolver uma metodologia a partir de espectros na região do infravermelho próximo (NIR) para a quantificação de carbono total (C-total) e nitrogênio total (N-total) em amostras de Latossolo Vermelho cultivados com cana-de-açúcar.

A área de estudo pertence à usina São Martinho, localizada no município de Pradópolis, SP. Foram coletadas amostras de solo em talhões nos quais a cana foi plantada há 8, 6, 4 e 2 anos, sem ter havido reforma do canavial, e em uma área de vegetação nativa, para comparação.

Os espectros NIR foram obtidos em equipamento NIRSystems 5000 entre 1100 e 2498 nm. As análises de referência foram efetuadas em auto-analisador LECO CN-2000. No tratamento de 250 espectros utilizou-se rotinas PCA, PLS e LS-SVM em ambiente Matlab.

Resultados e Discussão

Os resultados da PCA (Figura 1) demonstram que as três primeiras componentes principais contêm 99,02% das informações originais e as amostras se subdividem em três classes distintas de acordo com a cronologia dos plantios da cana. Todos os espectros foram pré-processados com correção MSC. A Tabela 1 mostra uma comparação de resultados entre modelos PLS e LS-SVM para prever C-total e N-total em solos cultivados com

cana-de-açúcar. Pode-se observar que o LS-SVM forneceu menor erro de predição (RMSEP) para ambos os parâmetros quantificados.

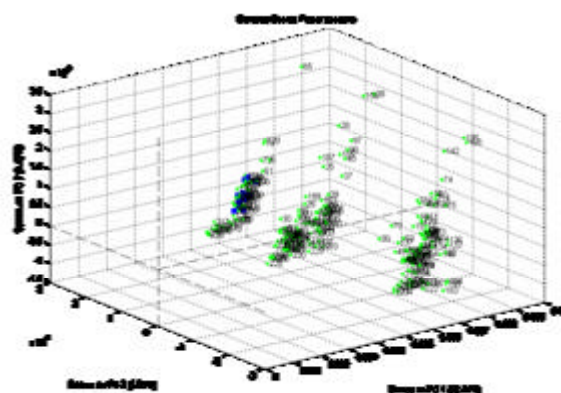


Figura 1. Gráfico 3D dos escores do PCA.

Tabela 1. Comparação do desempenho entre os modelos PLS e LS-SVM para C-total e N-total

	C-total		N-total	
	PLS	LS-SVM	PLS	LS-SVM
R ² _{cal}	0,920	0,995	0,918	0,985
RMSECV (%)	0,1762	0,1318	0,0133	0,0151
RMSEP (%)	0,1410	0,1101	0,00947	0,00837

Conclusões

O uso de LS-SVM resultou em um método robusto de calibração de espectros NIR para a quantificação rápida e precisa de C-total e N-total em Latossolos Vermelhos cultivados com cana-de-açúcar sob colheita sem queima previa do canavial.

Agradecimentos

À Carla M.B Nússio, pelo apoio instrumental. FAPESP e CNPq.

¹ Cogdill, R. P. e Dardenne, P. J. *Near Infrared Spectrosc.* 2004, 12, 93.