



DESENVOLVIMENTO E APLICAÇÃO DE UMA BIBLIOTECA DE REFLETÂNCIA ESPECTRAL NA ANÁLISE MULTIPARAMÉTRICA DIRETA DE SOLOS

Sherlan G. Lemos¹ (PQ)*, Paola D. Marreto¹ (PG), Giovana Delboni¹ (IC), Ernesto C. Pereira¹ (PQ), Gilberto B. Silva² (PG), Alberto C. C. Bernardi² (PQ), Ana Rita A. Nogueira² (PQ)

sherlan03@yahoo.es

1. Departamento de Química, Universidade Federal de São Carlos, C.P. 676, 13560-970, São Carlos, SP. 2. Embrapa Pecuária Sudeste, C.P. 339, 13560-970, São Carlos, SP.

Palavras Chave: análise direta, análise multivariada, refletância difusa, solos.

Introdução

A análise de solos vem sendo objeto de constante estudo, com o objetivo de substituir os métodos via úmida convencionais por técnicas analíticas mais simples, rápidas, não poluentes e que não necessitem de um preparo elaborado da amostra. A espectroscopia de refletância difusa no infravermelho próximo preenche todos esses requisitos. Sua principal desvantagem estava relacionada ao processamento e a interpretação dos dados espectroscópicos. Com a sua utilização conjuntamente aos métodos quimiométricos de análise atualmente é possível estabelecer uma relação quantitativa entre os espectros de solos e suas características físico-químicas. Neste trabalho propõe-se a utilização de um banco de dados de amostras de solos referenciados na construção de uma biblioteca espectral e utilização da mesma na determinação multiparamétrica direta de amostras de solos.

Experimental

O desenvolvimento da biblioteca foi se processando da seguinte maneira: foram utilizadas 45 amostras certificadas de solo das mais diferentes regiões do país para a construção da biblioteca e 300 amostras para a validação dos modelos criados, caracterizadas através dos seguintes parâmetros: matéria orgânica (MO), pH, macronutrientes (P e K), micronutrientes (Al, B, Ca, Cu, Fe, Mg, Mn, Zn) e acidez ativa (H + Al). A calibração resultante das 45 amostras iniciais foi utilizada para prever as propriedades nas 300 amostras restantes. As amostras que se apresentaram como anômalas ao modelo foram incorporadas ao mesmo. Foi utilizado um espectrofotômetro Cary 500 (Varian, Austrália), medindo-se de

440nm a 2500nm, com 1nm de resolução. Para a visualização e tratamento dos dados foi utilizado o software Pirouette 3.11 (Infometrix, EUA). PCR e PLS foram avaliados como métodos de regressão. Diversos tipos de transformações dos dados para construção dos modelos foram utilizados: $\log(1/R)$, Kubelka-Munk, Multiplicative Scattering Correction (MSC), variação normal padrão (SNV), além de suas derivadas primeiras. Auto-escalamento e centralização dos dados pela média também foram utilizados, bem como o método da validação cruzada para a escolha do número de fatores.

Resultados e Discussão

Entre os métodos de regressão avaliados o método PCR necessitou sempre de um maior número de fatores para um melhor ajuste do modelo. Os melhores resultados foram obtidos com a primeira derivada dos dados transformados a Kubelka-Munk e auto-escalados, necessitando de apenas 14 fatores. Dos resultados obtidos pode-se destacar o pH e o B com previsões excelentes. Esses resultados são promissores, pois é conhecido da literatura que o pH não apresenta bons resultados quando determinado por NIR e, quanto ao B, esse apresenta complicações experimentais inerentes ao procedimento padrão de determinação. Fe e Mn foram os que apresentaram relativamente maiores erros de previsão.

Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPESP, CAPES e CNPq pelo auxílio financeiro. Também agradecem à Embrapa Solos e ao Instituto Agrônomo do Paraná – IAPAR pela cessão das amostras referenciadas.