

ESPECTROSCOPIA DE REFLECTÂNCIA NA PREDIÇÃO DE SÓDIO EM SOLOS DO NORDESTE BRASILEIRO

Francisca Evelice Cardoso de Souza¹, Ana Maria Vieira da Silva², Raul Shiso Toma³, Nicole Ferreira dos Santos⁴

RESUMO: A sodicidade no solo é um problema crítico que causa a degradação dos solos globalmente. Nesse sentido, este estudo explora o potencial da espectroscopia de reflectância da faixa do visível ao infravermelho de ondas curtas, com o objetivo de prever o teor de sódio em solos de seis estados do Nordeste do Brasil, por meio da correlação entre dados espectrais e análises convencionais de laboratório na criação de uma modelagem preditiva. Foram analisadas 164 amostras de solo originárias do Ceará, Pernambuco, Alagoas, Sergipe, Bahia e Maranhão. Os solos foram analisados pelo método tradicional de química úmida e pelo método espectral na faixa do visível ao infravermelho de ondas curtas (350 – 2500 nm). Os resultados do sódio trocável (Na^+) no solo foram analisados com estatística descritiva. Para predição do Na^+ , os espectros foram submetidos a técnicas de pré-processamentos, tendo sido usado na modelagem os dados espectrais brutos e processados e o algoritmo de regressão por mínimos quadrados parciais. A análise estatística evidenciou que a concentração média de sódio dos solos é baixa. A predição com os dados processados pela variável normal padrão alcançou o maior desempenho ($R^2 = 0,55$), sendo o modelo classificado como razoável.

PALAVRAS-CHAVE: sodicidade; predição espectral; regressão multivariada.

REFLECTANCE SPECTROSCOPY IN THE PREDICTION OF SODIUM IN SOILS IN NORTHEASTERN BRAZIL

ABSTRACT: Soil sodicity is a critical problem that causes soil degradation globally. In this sense, this study explores the potential of visible to shortwave infrared reflectance spectroscopy

¹ Doutoranda em Ciência do Solo, Departamento de Ciências do Solo, UFC, Rua Campus do Pici s/n Bloco 807, CEP 60440-554, Fortaleza, CE. Fone (85) 987563791. e-mail: evelicesouza@gmail.com.

² Doutoranda em Ciência do Solo, Departamento de Ciências do Solo, UFC, Fortaleza, CE.

³ Prof. Doutor, Departamento de Ciências do Solo, UFC, Fortaleza, CE.

⁴ Engenheira Agrônoma, UFC, Fortaleza, CE.

to predict sodium content in soils from six states in northeastern Brazil, using spectral data and conventional laboratory analyses to create a predictive model. A total of 164 soil samples from Ceará, Pernambuco, Alagoas, Sergipe, Bahia, and Maranhão were analyzed. The soils were analyzed using the traditional wet chemistry method and the spectral method in the visible to shortwave infrared range (350–2500 nm). The results for exchangeable sodium (Na^+) in the soil were analyzed using descriptive statistics. To predict Na^+ , the spectra were subjected to pre-processing techniques, and the raw and processed spectral data and the partial least squares regression algorithm were used in the modeling. Statistical analysis showed that the average sodium concentration in the soils is low. Prediction with the processed data by the standard normal variable achieved the highest performance ($R^2 = 0.55$), with the model being classified as reasonable.

KEYWORDS: sodicity; spectral prediction; multivariate regression.

INTRODUÇÃO

A sodicidade é um problema crítico que historicamente afeta a produtividade agrícola e causa degradação em terras do mundo todo (Van de Craats et al., 2020). No solo, a alta concentração de sódio trocável possui efeito prejudicial, ocasionando a degradação da estrutura do solo e a dispersão da argila (Vasconcelos et al., 2013). Condições climáticas semiáridas e o aumento da utilização de águas subterrâneas para irrigação, como ocorrem na região Nordeste do Brasil (Freire et al., 2020), agravam gradualmente a questão do acúmulo de sais e de sódio nos agrossistemas (Minhas et al., 2019).

Convencionalmente, o sódio trocável do solo é determinado com técnicas de química úmida, contudo, os procedimentos tradicionais de quantificação têm se mostrado onerosos. Associado a isso, esses métodos limitam o monitoramento do solo em larga escala (Zeng et al., 2018), considerando a variabilidade espacial dos atributos do solo (Akramkhanov et al., 2011) e o baixo nível de tecnicidade dos produtores da região semiárida (Aquino et al., 2020).

Alternativamente, a espectroscopia de reflectância emerge como uma ferramenta promissora, que permite estimar de forma rápida e não destrutiva as propriedades do solo, através da interação da luz com seus constituintes, baseando-se nas suas assinaturas espectrais, que por sua vez, são influenciadas pelos minerais, matéria orgânica e sais solúveis, entre outros constituintes presentes nos solos (Mohamed et al., 2018). Essa técnica avalia o solo na faixa do visível (Vis: 350-750 nm), infravermelho próximo (NIR: 750-1100 nm), infravermelho de

ondas curtas (SWIR: 1100-2500 nm) e infravermelho médio (MIR: 2500-25000 nm ou 4000-400 cm^{-1}) (Mendes et al., 2022).

Diferentemente dos métodos tradicionais, a análise espectral não produz resultados diretos, sendo necessário associar os dados espectrais com métodos estatísticos para construir modelos de predição dos atributos do solo. Avanços recentes na modelagem quimiométrica, como a regressão por mínimos quadrados parciais (PLSR) e algoritmos de aprendizado de máquina, melhoraram a precisão das predições espectrais permitindo o desenvolvimento de modelos de calibração robustos, que podem subsidiar o mapeamento dos cátions nos solos e contribuir para o manejo sustentável (Zhao et al., 2021) em regiões mais vulneráveis como a região Nordeste do Brasil.

Diante dos aspectos abordados, este estudo explora o potencial da espectroscopia de reflectância da faixa do visível ao infravermelho de ondas curtas, com o objetivo de prever o teor de sódio em solos de seis estados do Nordeste do Brasil, por meio da correlação entre dados espectrais e análises convencionais de laboratório para a criação de uma modelagem preditiva.

MATERIAL E MÉTODOS

As amostras de solo analisadas no presente estudo são provenientes dos estados do Ceará (Quixadá, Pentecoste, Fortaleza), Pernambuco (Goiana), Alagoas (Rio Largo), Sergipe (Neópolis), Bahia (Cruz das Almas) e Maranhão (Brejo). Essas amostras são oriundas de estudos pedológicos realizados anteriormente nesses estados, e encontravam-se armazenadas no acervo do Laboratório de Pedologia da Universidade Federal do Ceará (UFC).

Uma das vantagens da espectroscopia de reflectância é a possibilidade de digitalizar amostras de solo previamente analisadas e depositadas em acervos antigos. Esse recurso permite realizar a predição dos atributos do solo com dados espectrais obtidos a partir de amostras cuja caracterização química já foi realizada anteriormente por metodologias convencionais (FAO, 2022).

Nessa perspectiva, foram analisadas 164 amostras de solo com a metodologia convencional (química úmida) e espectral. Para tanto, as amostras de solo foram dispostas na sombra e ao ar para secagem, em seguida foram moídas e tamisadas em peneira com malha de abertura de 2 mm para obtenção da terra fina seca ao ar (TFSA).

Para determinar o sódio trocável do solo com a metodologia convencional, as amostras de TFSA foram avaliadas seguindo o procedimento do manual de métodos de análise de solo

da Embrapa (Teixeira et al., 2017). Para realizar as análises espectrais, as amostras de TFSA foram submetidas ao processo de secagem em estufa com circulação de ar forçado em temperatura de 45° durante 24 horas, visando reduzir os efeitos da umidade do solo (Epiphany et al. 1992). Posteriormente, as amostras foram acondicionadas em recipientes de polipropileno preto, com 5 cm de diâmetro e 1,5 cm de altura.

A leitura dos dados espectrais de reflectância foi realizada com o auxílio de uma sonda de contato (*Hi-Brite Contact Probe*) acoplada a um espectrorradiômetro FieldSpec Pro FR 3 (Analytical Spectral Devices, Boulder, Colorado, USA). Esse equipamento realiza leituras na faixa do visível ao infravermelho de ondas curtas (350 – 2500 nm), possui resolução espectral de 3 nm e 10 nm reamostrados para 1 nm e um campo de visão de 25°.

Para a obtenção dos dados espectrais na faixa Vis-NIR-SWIR foi realizada a calibração do sensor do equipamento com uma placa branca (Spectralon), que é considerada como padrão de referência de 100% de reflectância, tendo sido a calibração feita a cada 20 minutos por meio da leitura dessa placa. Na superfície de cada amostra foram feitas três leituras espectrais, visando efetuar a total varredura do solo e obter uma boa representatividade.

Os dados espectrais de reflectância foram submetidos a técnicas de pré-processamento antes de realizar a modelagem preditiva. Foram aplicadas as técnicas de suavização com o filtro Savitzky-Golay (SG) e de normalização com variável normal padrão (SNV), a fim de eliminar ruídos e informações irrelevantes e de melhorar a qualidade do sinal espectral para os procedimentos de modelagem subsequentes.

Antes da modelagem preditiva, o resultado da concentração de Na^+ no solo foi analisado com estatística descritiva, tendo sido avaliada, ainda, a normalidade dos dados com o teste de hipótese - Shapiro-Wilk a 5%. Tendo em vista a não normalidade dos dados, foi aplicada a transformação logaritmo de base 10 para obter valores normalmente distribuídos e melhorar a predição. As análises estatísticas, o pré-processamento dos dados espectrais e a modelagem foram executadas no software R (R Core Team, 2024).

A modelagem do sódio trocável foi realizada com o algoritmo de regressão por mínimos quadrados parciais (PLSR), sendo empregado nessa etapa os espectros brutos de reflectância e os espectros pré-processados. Para a produção dos modelos, os dados foram separados de modo aleatório em 75% das amostras para calibração e 25% para teste do modelo com dados inéditos. Na etapa de calibração foi realizada a validação cruzada *k-fold* 10 vezes.

O desempenho dos modelos preditivos foi avaliado com as seguintes métricas: coeficiente de determinação (Equação 1), raiz do erro quadrático médio (Equação 2) e razão da

performance do desvio (Equação 3). Antes de calcular essas métricas, os valores de Na^+ foram transformados de volta para suas unidades originais.

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n 1 (\hat{y} - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n 1 (y - \bar{y})^2} \quad (1)$$

Em que, R^2 = coeficiente de determinação; $\hat{Y}$ = valor predito; $\bar{Y}$ = média dos valores observados; Y = valor observado; n = número de amostras.

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^{n-m} \frac{(y_i' - y_i)^2}{n - m}} \quad (2)$$

Em que, RMSE = raiz do erro quadrático médio; n = número de amostras; m = número de amostras usadas para predição; $y_i' - y_i$ = valores preditos e observados, respectivamente.

$$RPD = \frac{\sigma_{Y_0}}{RMSE} \quad (3)$$

Em que, RPD = razão da performance do desvio; σ_{Y_0} = desvio padrão para os valores observados.

Em função dos resultados obtidos para o coeficiente de determinação, o desempenho dos modelos foi classificado conforme sugere Terra et al. (2015), sendo as classes compreendidas por: $R^2 > 0,75$ - modelos bem ajustados para prever com precisão os atributos do solo; $0,50 \leq R^2 \leq 0,75$ - modelos justos, mas que podem ser melhorados; e $R^2 < 0,50$ - modelos não confiáveis e sem capacidade de predição.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A análise da estatística descritiva (Tabela 1) evidenciou que a concentração média ($0,33 \text{ cmolc/dm}^3$) de sódio trocável dos solos é baixa, com valores variando entre 0,02 e $3,17 \text{ cmolc/dm}^3$. Baixos valores de Na^+ no solo não representam problemas para a produção vegetal e a qualidade edáfica, todavia, tais valores devem ser constantemente monitorados para evitar a degradação por sodicidade.

Tabela 1. Estatística descritiva para os valores de sódio trocável (cmolc/dm³) do solo.

Média	Mediana	Mínimo	Máximo	Assimetria	Curtose	SD ⁽¹⁾	p-valor ⁽²⁾
0,33	0,13	0,02	3,17	3,11	9,74	0,57	7,94E-21

(1) Desvio padrão (SD); (2) p-valor do teste de normalidade de Shapiro-Wilk.

O teste de normalidade de Shapiro-Wilk revelou que os dados de concentração de Na⁺ possuem distribuição não normal. A falta de normalidade dos atributos pedológicos é uma característica comum (Bellon-Maurel et al., 2010), especialmente quando se refere a solos com características contrastantes como é o caso dos solos avaliados neste estudo, cuja origem é seis estado da região Nordeste do Brasil.

Com relação à modelagem preditiva dos dados espectrais (Tabela 2), observou-se que o melhor desempenho foi obtido quando a regressão PLSR foi realizada em associação com os dados espectrais processados pela variável normal padrão (SNV), ao passo que o desempenho dos demais modelos foi classificado como não confiável.

Tabela 2. Resultado da modelagem PLSR, calibração e teste, para estimativa do sódio trocável (cmolc/dm³) do solo na faixa espectral 350 – 2500 nm.

Tratamento - dados espectrais	Nº C ⁽³⁾	R ² calib. ⁽⁴⁾	RMSE ⁽⁵⁾	DP ⁽⁶⁾	R ² valid. ⁽⁷⁾	RMSE	RPD ⁽⁸⁾
Bruto	7	0,46	0,44	0,46	0,37	0,36	1,28
SG ⁽¹⁾	8	0,43	0,46	0,46	0,46	0,34	1,38
SNV ⁽²⁾	9	0,75	0,30	0,46	0,55	0,31	1,52

(1) Suavização Savitzky-Golay (SG); (2) Variável normal padrão (SNV); (3) Número de componentes do modelo (Nº C); (4) Coeficiente de determinação de calibração (R² calib.); (5) Raiz do erro quadrático médio (RMSE); (6) Desvio padrão (DP); (7) Coeficiente de determinação de validação (R² valid.); (8) Razão da performance do desvio (RPD).

Mediante análise das métricas, observou-se que nenhum dos modelos obtidos alcançou uma acurácia classificável como excelente. A modelagem com os espectros brutos e suavizados com o filtro SG foi considerada sem capacidade de predição devido aos baixos valores do coeficiente de determinação e da razão da performance do desvio, visto que para ser considerado um modelo com desempenho excelente é necessário obter valores de RPD > 2 (Sun et al., 2024).

Na etapa de validação com dados inéditos, a predição com espectros processados por SNV apresentou os maiores valores de R² e RPD e o menor RMSE, de modo que o modelo desenvolvido foi classificado como de desempenho moderado, sendo necessário realizar ajustes para melhorar a predição. O resultado da modelagem foi superior ao obtido por Zhao et al. (2021), em termos de RPD, porém está em consonância com os achados de O'Rourke et al. (2016), apresentando R² na faixa de razoável.

O resultado obtido corrobora os achados da literatura, em que a predição de Na^+ não alcança desempenho excelente. O desempenho moderado da modelagem de sódio trocável justifica-se pela característica desse elemento mineral, o qual não é diretamente detectável no espectro eletromagnético, apresentando assim relações espectrais de segunda ordem. Destaca-se que a precisão da predição das concentrações elementares está especialmente relacionada à concentração do elemento no solo ou a sua elevada correlação com elementos espectralmente ativos (Ng et al., 2022).

CONCLUSÕES

O emprego de técnicas de pré-processamento foi uma estratégia eficiente para promover a melhoria da precisão dos modelos preditivos, todavia, nenhum dos procedimentos testados foi capaz de gerar modelos com acurácia excelente para predição do Na^+ do solo. Esses achados abrem margens para realização de novos estudos visando melhorar a precisão preditiva do Na^+ com espectroscopia.

A adoção de uma nova estratégia na etapa de divisão dos dados para calibração e teste pode representar uma alternativa eficiente para melhorar a qualidade da modelagem espectral. Associado a isso, deve-se considerar a ampliação dos dados avaliados, visto que um grande conjunto de dados pode representar com maior fidelidade uma grande diversidade pedológica, como ocorre no Nordeste brasileiro.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao INCT em Agricultura Sustentável no Semiárido Tropical-INCTAGriS (CNPq/Funcap/Capes) pelo apoio e a Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FUNCAPE) pelas bolsas de estudo. O primeiro autor também gostaria de agradecer à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de estudos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AKRAMKHANOV, A.; MARTIUS, C.; PARK, S. J.; HENDRICKX, J. M. H. Environmental factors of spatial distribution of soil salinity on flat irrigated terrain. **Geoderma**, v. 163, issues 1-2, jun., 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2011.04.001>.
- AQUINO, J. R.; ALVES, M. O.; VIDAL, M. F. Agricultura familiar no nordeste do brasil: um retrato atualizado a partir dos dados do censo agropecuário 2017. **Rev. Econ. NE**, Fortaleza, v. 51, suplemento especial, p. 31-54, ago., 2020. DOI: <https://doi.org/10.61673/ren.2020.1271>.
- BELLON-MAUREL, V.; FERNANDEZ-AHUMADA, E.; PALAGOS, B.; ROGER, J. M.; MCBRATNEY, A. Critical review of chemometric indicators commonly used for assessing the quality of the prediction of soil attributes by NIR spectroscopy. **TrAC - Trends in Analytical Chemistry**, v. 29, p. 1073–1081, 2010. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.trac.2010.05.006>.
- EPIPHANIO, J. C. N.; FORMAGGIO, A. R.; VALERIANO, M. M.; OLIVEIRA, J. B. **Comportamento espectral de solos do Estado de São Paulo**. São José dos Campos: Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais, 1992. 132 p. Disponível em: <http://mtc-m12.sid.inpe.br/col/sid.inpe.br/iris@1912/2005/07.19.23.05/doc/publicacao.pdf>. Acesso em: 08 ago. 2025.
- FAO, Food and Agriculture Organization of the United Nations. **A primer on soil analysis using visible and near-infrared (vis-NIR) and mid-infrared (MIR) spectroscopy**. Rome: FAO, 2022. 28 p. DOI: 10.4060/cb9005en.
- FREIRE, M. B. G. S.; FREIRE, F. J.; PESSOA, L. G. M.; SOUZA, E. R. de; GHEYI, H. R. Salt affected soils in the Brazilian Semiarid and phytoremediation as a reclamation alternative. In: TALEISNIK, E.; LAVADO, R. S. (orgs.) **Saline and alkaline soils in Latin America**. Online: Springer, Cham. 2020. p.119-139. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-52592-7_6.
- MENDES, W. de S.; DEMATTÊ, J. A. M.; ROSIN, N. A.; TERRA, F. da S.; POPPIEL, R. R.; URBINA-SALAZAR, D. F.; BOECHAT, C. L.; SILVA, E. B.; CURTI, N.; SILVA, S. H. G.; SANTOS, U. J. dos; VALLADARES, G. S. The Brazilian soil mid-infrared spectral library: The power of the fundamental range. **Geoderma**, v. 415, jun., 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2022.115776>.
- MINHAS, P. S.; QADIR, M.; YADAV, R. K. Groundwater irrigation induced soil sodification and response options. **Agricultural Water Management**, v. 215, p. 74-85, apr., 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.agwat.2018.12.030>.

MOHAMED, E. S.; SALEH, A. M.; BELAL, A. B.; GAD, A. Application of near-infrared reflectance for quantitative assessment of soil properties. **The Egyptian Journal of Remote Sensing and Space Science**, v. 21, issue 1, apr., 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ejrs.2017.02.001>.

NG, W.; MINASNY, B.; JEON, S. H.; MCBRATNEY, A. Mid-infrared spectroscopy for accurate measurement of an extensive set of soil properties for assessing soil functions. **Soil Security**, vol. 6, p. 100043, mar., 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.soisec.2022.100043>.

O'ROURKE, S. M.; STOCKMANN, U.; HOLDEN, N. M.; MCBRATNEY, A. B.; MINASNY, B. An assessment of model averaging to improve predictive power of portable vis-NIR and XRF for the determination of agronomic soil properties. **Geoderma**, vol. 279, p. 31–44, out., 2016. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2016.05.005>.

TEIXEIRA, P. C.; DONAGEMMA, G. K.; FONTANA, A.; TEIXEIRA, W. G. **Manual de métodos de análise de solo**. 3 ed. Brasília: Embrapa, 2017. Disponível em: <https://www.embrapa.br/en/busca-de-publicacoes/-/publicacao/1085209/manual-de-metodos-de-analise-de-solo>. Acesso em: 08 ago. 2025.

TERRA, F. S.; DEMATTÊ, J. A. M.; ROSSEL, R. A. V. Spectral libraries for quantitative analyses of tropical Brazilian soils: Comparing vis-NIR and mid-IR reflectance data. **Geoderma**, v. 255–256, p. 81–93, out., 2015. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2015.04.017>.

R CORE TEAM. **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. Vienna, Austria, 2024. Disponível em: <https://www.r-project.org/>. Acesso em: 08 ago. 2025.

SUN, M.; LIU, H.; LI, P.; GONG, P.; YU, X.; YE, F.; GUO, Y.; WU, Z. Effects of salt content and particle size on spectral reflectance and model accuracy: Estimating soil salt content in arid, saline-alkali lands. **Microchemical Journal**, v. 207, p. 111666, dez., 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.microc.2024.111666>.

VAN DE CRAATS, D.; VAN DER ZEE, S. E. A. T. M.; SUI, C.; VAN ASTEN, P. J. A.; CORNELISSEN, P.; LEIJNSE, A. Soil sodicity originating from marginal groundwater. **Vadose Zone Journal**, v. 19, issue 1, feb., 2019. DOI: <https://doi.org/10.1002/vzj2.20010>.

VASCONCELOS, R. R. A. de; BARROS, M. de F. C.; SILVA, E. F. de F. e; GRACIANO, E. S. A.; FONTENELE, A. J. P. B.; SILVA, N. M. L. da. Características físicas de solos salino-

sódicos do semiárido pernambucano em função de diferentes níveis de gesso. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 17, p. 1318–1325, dez., 2013. DOI: <https://doi.org/10.1590/S1415-43662013001200010>.

ZENG, W.; ZHANG, D.; FANG, Y.; WU, J.; HUANG, J. Comparison of partial least square regression, support vector machine, and deep-learning techniques for estimating soil salinity from hyperspectral data. **Journal of Applied Remote Sensing**, v. 12, Issue 2, jan., 2018. DOI: <https://doi-org.ez11.periodicos.capes.gov.br/10.1117/1.JRS.12.022204>.

ZHAO, D. ARSHAD, M.; WANG, J.; TRIANTAFILIS, J. Soil exchangeable cations estimation using Vis-NIR spectroscopy in different depths: Effects of multiple calibration models and spiking. **Computers and Electronics in Agriculture**, v. 182, mar., 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compag.2021.105990>.