

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA - UNESP
CÂMPUS DE JABOTICABAL**

**ESTIMATIVA DE ATRIBUTOS QUÍMICOS E NECESSIDADE
DE CALAGEM POR ESPECTROMETRIA DE
FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X EM SOLOS DO PLANALTO
OCIDENTAL PAULISTA**

**João de Deus Ferreira e Silva
Mestre em Ciência do Solo**

2024

**UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA – UNESP
CÂMPUS DE JABOTICABAL**

**ESTIMATIVA DE ATRIBUTOS QUÍMICOS E NECESSIDADE
DE CALAGEM POR ESPECTROMETRIA DE
FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X EM SOLOS DO PLANALTO
OCIDENTAL PAULISTA**

João de Deus Ferreira e Silva

Orientador: Prof. Dr. José Marques Júnior

Coorientadora: Dr^a. Kathleen Fernandes Braz

Tese apresentada à Faculdade de
Ciências Agrárias e Veterinárias – Unesp,
Câmpus de Jaboticabal, como parte das
exigências para a obtenção de título de
Doutor em Agronomia (Produção Vegetal).

2024

S586e Silva, João de Deus Ferreira
Estimativa de atributos químicos e necessidade de calagem por espectrometria de fluorescência de raios-X em solos do Planalto Ocidental Paulista / João de Deus Ferreira Silva. -- Jaboticabal, 2024
130 p. : il., tabs., mapas

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Jaboticabal
Orientador: José Marques Júnior
Coorientadora: Kathleen Fernandes Braz

1. Atributos do solo. 2. Sensores proximais. 3. Aprendizado de máquina. 4. Variabilidade espacial. 5. Pedometria. I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca da Universidade Estadual Paulista (UNESP), Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias, Jaboticabal. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

Impacto potencial desta pesquisa

Esta pesquisa buscou encontrar soluções inovadoras para o reconhecimento do padrão espacial dos atributos químicos do solo por meio de aplicações pedométricas, aliando sensores proximais e inteligência artificial. Os resultados obtidos possibilitam a geração de modelos para estimativa e mapeamento destes atributos, possibilitando economia nas análises laboratoriais, gerando avanços para o aumento da produção mundial de alimentos, levando em consideração a preservação ambiental.

Potential impact of this research

This research sought to find innovative solutions for recognizing the spatial pattern of soil chemical attributes through pedometric applications, combining proximal sensors and artificial intelligence. The results obtained enable the generation of regional models for estimating and mapping attributes, enabling savings in laboratory analyses, generating advances in increasing global food production, and considering environmental preservation.



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Câmpus de Jaboticabal



CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: ESTIMATIVA DE ATRIBUTOS QUÍMICOS E NECESSIDADE DE CALAGEM POR ESPECTROMETRIA DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X EM SOLOS DO PLANALTO OCIDENTAL PAULISTA

AUTOR: JOÃO DE DEUS FERREIRA E SILVA

ORIENTADOR: JOSE MARQUES JUNIOR

COORDINADORA: KATHLEEN FERNANDES BRAZ

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Doutor em Agronomia (Produção Vegetal), pela Comissão Examinadora:

Prof. Dr. JOSE MARQUES JUNIOR (Participação Presencial)
Departamento de Ciências da Produção Agrícola / FCAV UNESP Jaboticabal



Documento assinado digitalmente
JOSE MARQUES JUNIOR
Data: 21/08/2024 08:14:18-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof. Dr. LUÍS REYNALDO FERRACCIÚ ALLEONI (Participação Virtual)
Ciência do Solo / Escola Superior de Agricultura Luiz de Queiroz



Documento assinado digitalmente
ZIGOMAR MENEZES DE SOUZA
Data: 21/08/2024 08:37:35-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof. Dr. ZIGOMAR MENEZES DE SOUZA (Participação Virtual)
Departamento de Água e Solo / Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) - Campinas/SP



Documento assinado digitalmente
LUIS REYNALDO FERRACCIU ALLEONI
Data: 21/08/2024 10:47:52-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof. Dr. GLAUCO DE SOUZA ROLIM (Participação Presencial)
Departamento de Engenharia e Ciências Exatas / FCAV UNESP Jaboticabal



Documento assinado digitalmente
GLAUCO DE SOUZA ROLIM
Data: 21/08/2024 17:09:33-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Prof. Dr. THIAGO ASSIS RODRIGUES NOGUEIRA (Participação Presencial)
Departamento de Ciência do Solo / Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias - UNESP



Documento assinado digitalmente
THIAGO ASSIS RODRIGUES NOGUEIRA
Data: 22/08/2024 15:35:45-0300
Verifique em <https://validar.it.gov.br>

Jaboticabal, 13 de março de 2024

DADOS CURRICULARES DO AUTOR

João de Deus Ferreira e Silva - Nascido em Colônia do Piauí – PI em 18 de novembro de 1994. Coursou o ensino médio integrado ao Técnico em Agropecuária no Colégio Agrícola de Floriano – CAF (2011-2013). Gradou-se em Engenharia Agrônômica pela Universidade Federal do Piauí, Câmpus de Bom Jesus – PI (2014–2018). Durante a graduação foi bolsista de iniciação científica em três projetos de pesquisa (Iniciação Científica Voluntária e Bolsista CNPq). Em março de 2019 ingressou no mestrado pelo Programa de Pós-graduação em Agronomia (Ciência do solo) pela Universidade Estadual Paulista - Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias (FCAV) - Câmpus de Jaboticabal – SP, tendo bolsa de estudos da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) (01/03/2019 – 01/08/2020 – 18 meses). Para obtenção do título de mestrado desenvolveu a dissertação intitulada: *“Suscetibilidade magnética na predição espacial de metais potencialmente tóxicos em solos originados de basalto e arenito no estado de São Paulo”*. Em agosto de 2020, ingressou no doutorado pelo Programa de Pós-graduação em Agronomia (Produção Vegetal) pela UNESP/FCAV - Câmpus de Jaboticabal – SP, tendo bolsa de estudos da CAPES. Para obtenção do título de doutorado desenvolveu a tese intitulada: *“Estimativa de atributos químicos e necessidade de calagem por espectrometria de fluorescência de raios-X” em solos do Planalto Ocidental Paulista*. É membro do grupo de pesquisa Caracterização do solo para fins de manejo específico – CSME da Unesp - Câmpus de Jaboticabal, atuando como pós-graduando e em atividades de pesquisa e ensino na graduação.

Epígrafe

“Tenha coragem, Vá em frente!

Determinação, coragem e autoconfiança são fatores decisivos para o sucesso. Não importa quais sejam os obstáculos e as dificuldades. Se estamos possuídos de uma inabalável determinação, conseguiremos superá-los independentemente das circunstâncias, devemos ser sempre **humildes, recatados e despidos de orgulho.**

DALAI LAMA

DEDICATÓRIA

A Deus, por estar sempre presente em minha vida, por todo cuidado mesmo quando eu não percebi e por me permitir está vencendo tantos desafios. A minha mãe Isabel Galdino Ferreira por tanto esforço dado para sua família e por acreditar que seríamos capazes de estudar e sermos bons cidadãos. Te amo Mãe! A meu Pai, Manoel Francisco Avelino da Silva (*in memoriam*) por ter me dado a vida. A meus irmãos, Franciel Ferreira e Silva, Isael Ferreira e Silva, Izaelma Ferreira e Silva, Israel Ferreira e Silva, por sempre me apoiarem com incentivos e conversas sinceras ao longo do caminho. Amo vocês!!!

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a Deus, pela minha saúde, pela sua proteção, sempre ouvindo minhas orações e me fazendo alcançar lugares distantes na minha realidade.

À minha mãe Izabel Galdino Ferreira e Silva, por me apoiar incansavelmente em todas as fases da minha vida e por sempre me dar força, apesar da distância física.

Aos meus irmãos, Franciel Ferreira e Silva, Isael Ferreira e Silva, Izaelma Ferreira e Silva e Israel Ferreira e Silva, e minhas cunhadas Flávia e Leomaria e cunhado Tiago, por permanecerem sempre ao meu lado e estarem sempre dispostos a me ajudar durante essa longa caminhada.

À Ellen Cristina Nabiça Rodrigues por ajudar nessa etapa tão importante da minha vida, pelo companheirismo, compreensão e entendimento nos momentos que precisei de você.

Ao orientador Prof. Dr. José Marques Júnior e à minha coorientadora Dra. Kathleen Fernandes, pelos ensinamentos que contribuíram para o meu crescimento profissional pessoal e profissional.

Aos professores da banca de qualificação: Prof. Dr. Alan Rodrigo Panosso e Prof. Dr. Thiago Assis Rodrigues Nogueira, por suas sugestões e questionamentos contribuíram muito para a evolução desse trabalho.

Aos professores da banca de defesa de tese: Prof. Dr. Luis Reynaldo Ferracciú Alleoni, Prof. Dr. Zigomar Menezes de Souza, Prof. Dr. Glauco de Souza Rolim, Prof. Dr. Thiago Assis Rodrigues Nogueira, pelas correções e sugestões para a melhoria do trabalho.

À Universidade Estadual Paulista - UNESP - Faculdade de Ciências Agrárias e Veterinárias de Jaboticabal – FCAV.

Todos os integrantes do grupo de pesquisa “Caracterização do solo para fins de manejo específico”.

Ao Hagabo Paulo pela recepção no apartamento e pela paciência e compreensão nos momentos difíceis durante o mestrado e ao Romário por compartilhar o convívio durante o período do doutorado e pela paciência e empatia em me ouvir. Grato a vida de vocês.

Aos integrantes do grupo de pesquisa SOLOCER-UFPI representados pelo Professor Dr. Ronny Sobreira Barbosa, por terem me dado o apoio de base fundamental para que eu chegasse até aqui.

Aos integrantes da minha turma de mestrado e doutorado por todas as conversas de apoio e momentos de descontração durante esse período. Muito Obrigado.

A todos os meus amigos, de fora e dentro da Universidade que fazem parte de minhas pequenas conquistas, de minhas dificuldades, de minhas superações, eu agradeço.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

SUMÁRIO

	Página
RESUMO	iv
ABSTRACT	v
LISTA DE TABELAS	vi
LISTA DE FIGURAS	viii
CAPÍTULO 1 – CONSIDERAÇÕES GERAIS	1
1.1 Introdução geral	1
1.2. Revisão de literatura	4
1.2.1. Pedometria.....	4
1.2.2 Espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx) na Ciência do solo..	6
1.2.3 Mapeamento de atributos químicos do solo	9
1.2.4 Calagem nos solos tropicais úmidos	11
1.2.5 Aprendizado de máquina na Ciência do solo	13
1.2.6 Referências	15
CAPÍTULO 2 – ESTIMATIVA DE ATRIBUTOS QUÍMICOS DO SOLO DO PLANALTO OCIDENTAL PAULISTA POR FUSÃO DE ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X.....	30
RESUMO.....	30
1.INTRODUÇÃO	32
2.Material e métodos.....	33
2.1 Localização e caracterização da área de estudo.....	33
2.2 Planejamento amostral.....	35
2.3 Análises laboratoriais	36
2.3.1 Granulometria	36
2.3.2 Análises químicas.....	36
2.3.3 Espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx).....	36
2.4 Processamento e análise de dados.....	37
2.4.1 Estatística descritiva	37
2.4.2 Pré-processamento das curvas espectrais	37
2.4.3 Aprendizado de máquina	40
2.4.4 Análise geoestatística	42

3.Resultados e Discussão.....	43
3.1 Estatística descritiva dos atributos do solo	43
3.2 Correlação entre os atributos do solo	45
3.3 Estimativa dos atributos químicos do solo	46
3.4 Mapeamento dos atributos químicos obtidos e estimados pelo aprendizado de máquina com os algoritmos Cubista e XGBoost	50
4. Conclusões	54
5. Referências Bibliográficas	55
CAPÍTULO 3: DETERMINAÇÃO DE ZONAS ESPECÍFICAS DE MANEJO PARA CALAGEM EM SOLOS TROPICAIS ÚMIDOS UTILIZANDO A ESPECTROMETRIA DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X.....	65
RESUMO.....	65
1 - Introdução.....	67
2. Material e métodos	69
2.1 Localização e caracterização da área de estudo.....	69
2.2 Planejamento amostral.....	71
2.3 Análises laboratoriais	71
2.3.1 Granulometria	71
2.3.2 Análises químicas.....	72
2.3.3 Espectrometria de fluorescência de raio-X	72
2.3.4 Análises mineralógicas	73
2.4 Cálculo da necessidade de calagem	74
2.5 Análise de dados.....	74
2.5.1 Estatística descritiva	74
2.5.2 Aprendizagem de máquina	75
2.5.3 Análise geoestatística	76
3. Resultados e discussão	77
3.1 Estatística descritiva dos atributos do solo	77
3.2 Correlação entre os atributos do solo	80
3.3 Estimativa da soma de base, capacidade de troca catiônica e saturação por bases	83

3.4 Mapeamento para soma de base, capacidade de troca catiónica, saturação por bases e necessidade de calagem	87
4. Conclusões	90
5. Referências	91
CAPÍTULO 4. CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	107

ESTIMATIVA DE ATRIBUTOS QUÍMICOS E NECESSIDADE DE CALAGEM POR ESPECTROMETRIA DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X EM SOLOS DO PLANALTO OCIDENTAL PAULISTA

RESUMO - O monitoramento dos atributos químicos do solo é importante para otimização das práticas de manejo agrícola que visam manter o solo em boas condições para alcançar altas produtividades. No entanto, os métodos tradicionais são onerosos, demandam tempo e possuem entraves quanto ao grande uso de produtos laboratoriais e seu descarte, favorecendo o emprego de métodos alternativos com o uso de técnicas pedométricas e aplicando-se sensores para estimativa dos atributos do solo. Diante desse panorama, tem-se a hipótese que a espectrometria de fluorescência de raios-x (EFRx) permitirá estimar e mapear atributos químicos do solo e a necessidade da calagem em áreas de dimensão regional com ampla variação pedológica e geomorfológica. Nesse contexto, objetivou-se com a presente pesquisa estabelecer as relações existentes entre os dados obtidos a partir da EFRx e os atributos químicos do solo do Planalto Ocidental Paulista (POP) que possui ampla variação pedológica e geomorfológica, para fins de delimitar zonas específicas de manejo para tomada de decisão mais assertiva. A área de estudo possui aproximadamente 13 milhões de hectares com solos originados em sua maioria de rochas sedimentares (arenito) e magmáticas (basalto). Foram utilizadas 226 amostras de solo georreferenciadas no POP para o estudo da variabilidade espacial dos atributos mineralógicos, físicos e químicos. Foram realizadas análises: físicas, químicas, mineralógicas e de EFRx. Foi calculada a necessidade de calagem para as amostras da área de estudo. Os dados foram analisados por meio de estatística descritiva e correlação entre os atributos do solo. Foi realizada a estimativa dos atributos químicos do solo utilizando dados espectrais e elementos totais obtidos pelo sensor de EFRx com auxílio de técnicas de aprendizado de máquina. Após a estimativa dos atributos químicos foi realizado o mapeamento dos dados observados e preditos utilizando a geoestatística. Os atributos granulométricos (areia, silte e argila), químicos (MO, Ca, Mg, SB, V%, CTC) e os elementos obtidos pelo sensor de EFRx (Al, Ca, Mg, K, Si, Ti, Mn, Fe, Cu, Zn) apresentaram maiores teores para os solos originados a partir do material de origem basalto. Os espectros e os elementos obtidos pelo sensor de EFRx associados a técnicas de aprendizado de máquina foram eficientes para estimativa e mapeamento dos atributos químicos do POP. A elaboração de mapas detalhados usando sensores proximais são capazes de auxiliar no entendimento da variabilidade dos atributos do solo em áreas de dimensão regional, reduzindo o uso de insumos, a degradação dos solos e proporcionando o manejo mais sustentável.

Palavras-chave: Atributos do solo, Sensores proximais, Inteligência artificial, Variabilidade espacial, Pedometria.

ESTIMATION OF CHEMICAL ATTRIBUTES AND NEED FOR LIMING BY X-RAY FLUORESCENCE SPECTROMETRY IN SOILS OF THE WESTERN PLANALTO OF PAULISTA

ABSTRACT - Monitoring soil chemical attributes is important for optimizing agricultural management practices that aim to maintain soil in good condition to achieve high productivity. However, traditional methods are costly, time-consuming, and have obstacles regarding the large use of laboratory products and their disposal; favoring the use of alternative methods with the use of pedometric techniques and the application of sensors to estimate soil attributes. Given this scenario, it is hypothesized that X-ray fluorescence spectrometry xRFS will allow estimating and mapping soil chemical attributes and the need for liming in regional areas with wide pedological and geomorphological variation. The objective of this research was to establish the relationships between data obtained from xRFS and the chemical attributes of the soil of the Planalto Oeste Paulista (POP), which has wide pedological and geomorphological variation, to purposes of delimiting specific management zones for more assertive decision-making. The study area has approximately 13 million hectares with soils mostly originating from sedimentary rocks (sandstone) and magmatic rocks (basalt). 226 soil samples georeferenced in the POP were used to study the spatial variability of mineralogical, physical and chemical attributes. Analyzes were carried out: physical, chemical, mineralogical and x-RFS. The need for liming was calculated for samples from the study area. The data were analyzed using descriptive statistics and correlation between soil attributes. The chemical attributes of the soil were estimated using spectral data and total elements obtained by the x-RFS sensor with the aid of machine learning techniques. After estimating the chemical attributes, the observed and predicted data were mapped using geostatistics. The granulometric attributes (sand, silt and clay), chemicals (MO, Ca, Mg, SB, V%, CTC) and the elements obtained by the x-RFS sensor (Al, Ca, Mg, K, Si, Ti, Mn, Fe, Cu, Zn) presented higher levels for soils originating from basalt source material. The spectra and elements obtained by the x-RFS sensor associated with machine learning techniques were efficient for estimating and mapping the chemical attributes of POP. The creation of detailed maps using proximal sensors can help understand the variability of soil attributes in regional areas, reducing the use of inputs, soil degradation and more sustainable management.

Keywords: Soil attributes, Proximal sensors, Artificial intelligence, Spatial variability, Pedometrics.

LISTA DE TABELAS

CAPÍTULO 2: Fusão de espectros de fluorescência de raios-X para a estimativa de atributos da fertilidade dos solos do Planalto Ocidental Paulista

Tabela 1. Parâmetros e valores testados para calibração dos algoritmos.....	40
Tabela 2. Estatística descritiva dos atributos estudados do planalto ocidental paulista na profundidade de 0-20 cm.....	44
Tabela 3. Métricas de avaliação dos modelos cubista e extreme gradient boosting (XGBoost) e para os atributos químicos do solo.	47
Tabela 4. Métricas geoestatísticas para os atributos químicos obtidos e estimados profundidade de 0,00 - 0,20 m, para os solos do Planalto Ocidental Paulista.	51

CAPÍTULO 3: Espectrometria de fluorescência de raios-x na delimitação de zonas específicas de manejo para calagem em solos tropicais.

Tabela 1. Parâmetros e valores testados para calibração dos algoritmos.....	72
Tabela 2. Estatística descritiva para atributos granulométricos, mineralógicos e químicos os obtidos por metodologias convencionais para os solos do Planalto Ocidental Paulista (POP).	74
Tabela 3. Estatística descritiva para os atributos obtidos pela espectrometria de fluorescência de raio-X para solos do Planalto Ocidental Paulista (POP).....	76
Tabela 4. Métricas de avaliação dos modelos de Random Forest para estimativa da soma de bases (SB), capacidade de troca catiônica (CTC) e saturação por bases (V) na profundidade de 0,00–0,20 m, para solos do Planalto Ocidental Paulista.	840
Tabela 5. Métricas geoestatísticas para soma de base (SB), capacidade de troca	

catiônica (CTC), saturação por bases (V) e necessidade da calagem (NC) na profundidade de 0,00–0,20 m, para os solos do Planalto Ocidental Paulista.....87

LISTA DE FIGURAS

CAPÍTULO 1 – Considerações gerais

Figura 1. O mecanismo de espectrometria fluorescência de raios-X de um átomo ...7

CAPÍTULO 2: Fusão de espectros de fluorescência de raios-X para a estimativa de atributos da fertilidade dos solos do Planalto Ocidental Paulista

Figura 1. a) Mapa pedológico do Planalto Ocidental Paulista. (Fonte: Instituto Agrônomo de Campinas (equivalência ao soil taxonomy). b) Mapa geológico do Planalto Ocidental Paulista c) Mapa de dissecação do Planalto Ocidental Paulista..34

Figura 2: Espectros da Fluorescência de raios-X concatenados.....36

Figura 3: Espectros da Fluorescência de raios-X concatenados após remoção das colunas de baixo sinal espectral.....37

Figura 4: Espectros da Fluorescência transformados em absorbância.....37

Figura 5: Espectros da Fluorescência após aplicação da técnica de reamostragem.38

Figura 6: Espectros após centralização.38

Figura 7: Espectros após remoção de ruído.....39

Figura 8: Correlação entre os atributos granulométricos e químicos do solo. MO: Matéria Orgânica; Ca: Cálcio; Mg: Magnésio; K: Potássio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de cátions; V%: Saturação por bases.44

Figura 9. Regressão do desempenho do modelo cubista para os atributos químicos: (A) Soma de Bases; (B) Capacidade de Troca Catiônica; (C) Saturação por bases; (D)

Matéria Orgânica; (E) Cálcio; (F) Magnésio.47

Figura 10. Regressão do desempenho Extreme Gradient Boosting (XGBoost) para os atributos químicos: (A) Soma de Bases; (B) Capacidade de Troca Catiônica; (C) Saturação por bases; (D) Matéria Orgânica; (E) Cálcio; (F) Magnésio.48

Figura 11. Mapas de variabilidade espacial (A) Cálcio, (B) Magnésio, (C) Soma de Bases, (D) Saturação por bases, (E) Capacidade de Troca Catiônica, (F) Matéria Orgânica observados e estimados pelos modelos cubista e XGboost para os solos do Planalto Ocidental Paulista.....51

CAPÍTULO 3: Espectrometria de fluorescência de raios-x na delimitação de zonas específicas de manejo para calagem em solos tropicais.

Figura 1: Mapa pedológico do Planalto Ocidental Paulista (A). (Fonte: Instituto Agrônomo de Campinas: Entre parênteses equivalência ao soil taxonomy). Mapa geológico do Planalto Ocidental Paulista (B) (Fernandes et al., 2007, Fernandes, 2004). Mapa de dissecação do Planalto Ocidental Paulista (C).....67

Figura 2: Matriz de correlação de Spearman para os atributos dos solos do Planalto Ocidental Paulista. Hm: Hematita; Gt: Goethita; CtGb: relação caulinita sobre gibbsita; pH: potencial hidrogeniônico; H+Al: Acidez potencial; MO: Matéria Orgânica; Caq: Cálcio; Mgq: Magnésio; Kq: potássio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de cátions; V: Saturação por bases; NC: Necessidade de calagem; Al: Alumínio, Si: Silício; K: Potássio; Ca: Cálcio; Ti: Titânio; Mn: Mangânes; Fe: Ferro; Cu: Cobre; Zn: Zinco; Mg: Magnésio obtidos pelo sensor de fluorescência de raio x - ** e * - Significativo a 1 e 5%.....78

Figura 3: Regressão do desempenho dos modelos e importância das variáveis para estimativa: (A) Soma de Bases (SB), (B) Capacidade de Troca Catiônica (CTC), (C) Saturação por bases (V) para os solos do Planalto Ocidental Paulista.....82

Figura 4. Mapas de variabilidade espacial para soma de base (SB - A), capacidade de troca catiónica (CTC - B), saturação por bases (V% - C) e necessidade de calagem (NC - D) observados e estimados por random forest e seus respectivos mapas de erro, para os solos do Planalto Ocidental Paulista.85

CAPÍTULO 1 – CONSIDERAÇÕES GERAIS

1.1 INTRODUÇÃO GERAL

O avanço no estudo do solo e suas interfaces atualmente estão no centro do paradigma da sustentabilidade ambiental para a manutenção da vida na Terra (FAO, 2015). É reconhecido o importante papel do solo para a redução das mudanças climáticas e da escassez de água, conservação da biodiversidade global e a produção de alimentos para a população mundial que alcançará em torno de 10 bilhões de pessoas até 2050 (FAO; ITPS, 2015; EASAC, 2018).

A Ciência do solo é fundamental para alcançar os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) das Nações Unidas (ONU, 2015; 2020). Bouma et al. (2019) discutem que pelo menos nove dos objetivos estão associados diretamente ao sistema biofísico terrestre, no qual o solo está no centro por meio das funções ecossistêmicas. O solo é o responsável por regular processos que ocorrem constantemente e são base para alcançar de forma satisfatória os serviços ecossistêmicos, tais como o potencial primário de produtividade, ciclos biogeoquímicos, conservação dos recursos hídricos e conservação da biodiversidade e a ciclagem dos nutrientes (Schulte et al., 2014; EC, 2019).

Com o intuito de alcançar o patamar de sustentabilidade desejado, é necessário a cooperação de todas as subáreas da Ciência do solo visando alavancar os conhecimentos científicos de forma transdisciplinar e fornecer soluções adequadas para a produção sustentável (Bouma, 2015). Somado ao que foi dito, deve-se considerar para o manejo adequado o conhecimento dos fatores limites para o uso dos solos, tendo como base as características locais do recurso natural para aplicação de práticas conservacionistas mais direcionadas (Keesstra et al., 2016).

Com a crescente demanda por informações sobre o solo, os mapas convencionais não atendem por completo o conhecimento exigido da Ciência do solo Global, que busca entender as relações de causa e efeito que ocorrem para aprimorar seu manejo (Minasny e Mcbratney, 2016; Mestanza-Ramón et al., 2022). Porém, com o avanço da tecnologia da informação e o surgimento da pedometria,

sendo essa última definida como a aplicação de métodos matemáticos e estatísticos no estudo da distribuição, caracterização e gênese dos solos, possibilitaram a aquisição de uma grande quantidade de informações sobre o solo e o aumento do conhecimento espacial dos seus atributos (Roudier et al., 2016; Rossiter, 2018).

Os métodos pedométricos utilizados para a aquisição das informações de solos trazem muitos avanços em relação aos métodos tradicionais, pois fornecem estimativas quantitativas dos atributos do solo ligado a suas incertezas, são dados reproduzíveis e de possível atualização, são considerados métodos econômicos e rápidos e permitem quantificar a importância das informações que controlam a distribuição dos atributos do solo (Malone et al., 2017; Arrouays et al., 2020).

Um dos grandes aliados para a geração de dados dos atributos do solo tem sido a aplicação de sensores proximais. Estes sensores geram informações em uma ampla faixa do espectro eletromagnético (Viscarra Rossel et al., 2016). Os sensores têm sido aplicados com sucesso na Ciência do solo por que suas medidas retornam informações simultâneas de suas características físicas, químicas e mineralógicas (Adamchuk et al., 2018). Em adição, a grande quantidade de dados gerados pelos sensores tem sido base fundamental para o mapeamento pedométrico das características do solo resultando no seu monitoramento e uso mais assertivo (Teng et al., 2018, Leue et al., 2019).

Tendo em vista o número elevado de informações geradas pelos sensores pedométricos, as técnicas atuais de aprendizado de máquina se tornaram uma grande ferramenta nesse campo de estudo, por transformar as medidas inespecíficas obtidas pelos sensores em valores numéricos para estimar os atributos do solo (Wadoux et al., 2019). Os algoritmos de aprendizado de máquina têm sido utilizados com sucesso na Ciência do solo pela capacidade do reconhecimento dos padrões não lineares que são encontrados nos corpos naturais, como o solo (Lagacherie et al., 2020; Wadoux e McBratney, 2021). Tais técnicas não são dependentes de suposições estatísticas tradicionais e possuem o potencial de processar e encontrar relações de uma quantidade elevada de preditores com uma única variável alvo, fato que eleva sua aplicação nos últimos anos nos estudos do mapeamento digital do solo (Hengl et al., 2018).

Entre os sensores atuais aplicados a estudos pedométricos, a espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx) tem sido aplicada com sucesso por permitir a obtenção de informações qualitativas e quantitativas de diversos elementos da tabela periódica, situados com números atômicos maiores que o magnésio e menores que o urânio (Weindorf et al., 2014; Ribeiro et al., 2017). Tal sensor permite a obtenção dos comprimentos de onda dos elementos no material irradiado, como cada elemento possui linhas espectrais características e sua intensidade está relacionada a concentração do elemento é possível caracterizar com sucesso as amostras de solo (Horta et al., 2015; Lemièrre, 2018). Visto o potencial, esse sensor tem sido utilizado em estudos de predição de classes de solos (Hartemink et al., 2020), atributos físicos (Chakraborty et al., 2019), biológicos (Teixeira et al., 2021) e fertilidade do solo (Santos et al., 2022).

Vários estudos têm evidenciado o potencial da EFRx para estimativa de atributos químicos em regiões do mundo. Entre os atributos estimados temos: concentração de gesso em solos de regiões áridas, pH do solo e a capacidade de troca de catiônica em solos na América do Norte (Weindorf et al., 2013; Sharma et al., 2014, 2015). Solos tropicais úmidos, como o Brasil, já se tem investigações acerca da estimativa da granulometria do solo, carbono orgânico, macronutrientes e micronutrientes (Lima et al., 2018; Benedet et al., 2021).

Com base no exposto, tem-se como hipótese que a EFRx permitirá estimar e mapear atributos químicos do solo e a necessidade da calagem em áreas de dimensão regional com ampla variação pedológica e geomorfológica. Logo, objetivou-se neste estudo, estabelecer as relações existentes entre os dados obtidos por meio de EFRx e os atributos químicos do solo para fins de delimitar zonas específicas de manejo para aplicações mais eficientes de corretivos agrícolas.

1.2. REVISÃO DE LITERATURA

1.2.1. Pedometria

O termo pedometria foi citado pela primeira vez pelo cientista do solo Alex McBratney no final dos anos 1980, que faz referência ao neologismo derivado das raízes gregas “pedon” que significa solo e “metron” medição. De forma geral, a pedometria é conceituada como a área do conhecimento da Ciência do solo que utiliza métodos quantitativos para o estudo da gênese e distribuição do solo por meio de métodos matemáticos determinísticos ou estocásticos para obtenção do conhecimento sobre os processos e propriedades do solo (Webster, 2015; Wadoux et al., 2021).

Apesar do termo pedometria ser estabelecido apenas na década dos anos 1980, as ideias iniciais dessa ciência datam de meados do século XIX (McBratney et al., 2019). Dentre os trabalhos pioneiros fundamentais para criar a pedometria, pode-se citar exemplos como: Forbes (1946) medindo a temperatura do solo em diferentes profundidades; Haines e Keen (1925) quando estudaram a uniformidade do solo com auxílio de um penetrômetro e um arado, no qual construíram o primeiro mapa de solo de alta resolução, demonstrando a importância da variação espacial do solo; Youden e Mehlich, (1937) estudando métodos de amostragem eficientes para estudo de solos e Kristof et al. (1973) que utilizaram valores obtidos da matéria orgânica do solo para calibrar dados multiespectrais analisados em computador e coletados por um scanner aerotransportado; entre outros.

Muitos textos associam o sucesso do avanço e evolução da pedometria a chegada e popularização dos computadores pessoais que se tornaram acessíveis na década de 1970, tornando o gerenciamento e análise de dados de solos mais rápidos. Aliado a isso, as informações e mapas de solos passaram a ser disponibilizados de forma automatizada, possibilitando análises mais complexas como técnicas multivariadas, modelagem via regressão e avaliação de tendência dos atributos na superfície do solo (Webster, 2015; McBratney et al., 2019).

Com o advento da exploração da tecnologia, as ferramentas de computação e processamento de dados associados a pedometria ficaram cada vez mais evidentes e de fácil acesso. Fato facilitado com os computadores velozes e as

técnicas estatísticas de mineração de dados e algoritmos de aprendizado de máquina associados aos sistemas de posicionamento global (Behrens et al., 2014; Odgers et al., 2014). Somado ao fato da crescente demanda dos dados de solos buscado por governos e empresas privadas que reconheceram seu papel no controle da degradação ambiental e das mudanças climáticas (Hartemink e Minasny, 2014; Stockmann et al., 2015).

Com a crescente demanda de informações espaciais sobre o solo, a fim de reconhecer as explicações sobre a causa e o efeito da distribuição espacial dos solos, das suas propriedades e das funções ecossistêmicas a eles associados, Mcbratney et al. (2003) propuseram a modificação da função criada por Jenny (1941) sobre os fatores de formação dos solos, passando a ser chamado de SCORPAN e usada para a previsão dos fatores de formação do solo, aos invés de buscar explicar apenas a formação dos tipos de solo (McBratney et al., 2003), na qual: $S = f(s, c, o, r, p, a, n)$. Sendo que: S = tipo de solo ou atributo; s = solo; c = clima; o = organismos; r = topografia ou atributos da paisagem; p = material de origem; a = idade e/ou fator tempo; n = espaço, posição espacial.

A pedometria surgiu sustentada na incorporação de novos campos de estudo que foram inseridos dentro da Ciência do solo, visando buscar suas inter-relações para a obtenção de informações acuradas sobre seus atributos no espaço e no tempo. A Geoestatística é considerada o primeiro campo da ciência aliada a pedometria, e é considerada parte essencial para seu surgimento, pois como as propriedades do solo geralmente variam continuamente, o solo é um meio ideal para desenvolver novas técnicas Geoestatística (Minasny e McBratney, 2016).

O estabelecimento da importância do mapeamento digital de solos popularizou a pedometria. Há grande demanda dos dados de solos para o manejo assertivo das práticas agrícolas reconhecida dentro e fora do âmbito acadêmico. Isso desperta a atenção dos governos e empresas para a conexão entre a Ciência do solo e a redução dos efeitos das mudanças climáticas, aumentando o interesse global por alternativas sustentáveis para a produção de alimentos e combustíveis limpos (Finke, 2012; Minasny e McBratney, 2014).

Assim, a pedometria tem sido utilizada como ramo da Ciência do solo aliada para monitorar a capacidade dos solos no auxílio do entendimento das demandas

ambientais globais. Somado a isso, tem sido fundamental no mapeamento de aspectos relacionados a segurança do solo e a identificação de áreas com maior necessidade de proteção (McBratney et al., 2019).

1.2.2 Espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx) na Ciência do solo

A análise de EFRx tem sido utilizada em diversas áreas do conhecimento, como em ciências ambientais, geologia, química, arqueologia e nos diferentes ramos da agronomia (Elango et al., 2021; Li et al., 2022; Ng et al., 2023; Manhas et al., 2024). A grande expansão do uso dos equipamentos que usam como técnica fundamental a fluorescência de raios-X diz respeito a capacidade de análise de amostras sólidas de forma não destrutiva, avaliação de vários elementos de forma simultânea, facilidade no uso, velocidade na preparação, precisão e custo baixo, quando se leva em consideração a quantidade simultânea de dados fornecidos (Johnson et al., 2021; Bai et al., 2024).

As medidas fornecidas pelos equipamentos de EFRx são caracterizadas pela energia e a intensidade da radiação fluorescente. Cada elemento presente no material analisado possui energia e intensidades específicas. A análise é, portanto, qualitativa, para identificação dos elementos presentes, e de forma quantitativa para mensurar as suas concentrações (Kobylarz et al., 2023). González et al. (2024) reportam que as energias da maioria dos raios-X são semelhantes às energias da ligação dos elétrons do núcleo dos átomos, assim, eles são fortemente influenciados pelo seu número atômico. Dessa forma, pode-se fazer a identificação e quantificação dos elementos específicos presentes em um material analisado (Figura 1).

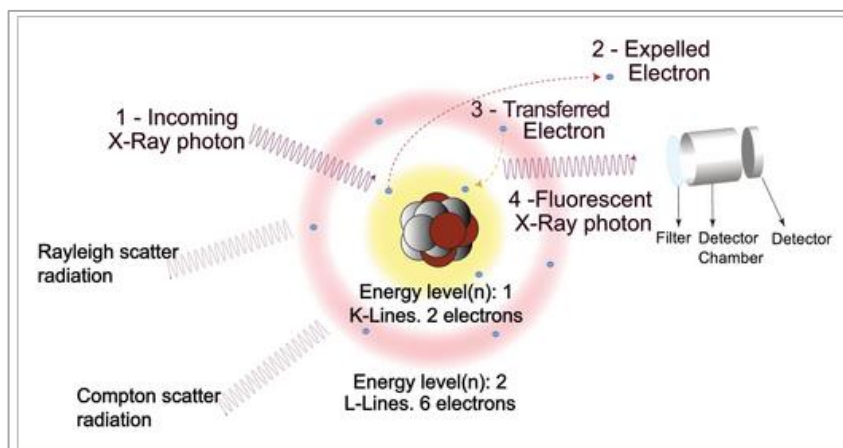


Figura 1. O mecanismo de fluorescência de raios-X de um átomo (Fonte: González et al., 2024).

Após seu surgimento, ao longo de muitas décadas as análises de EFRx foram limitadas a equipamentos presentes em laboratório. Porém, com os avanços da indústria, a EFRx está presente em equipamentos portáteis, passíveis de serem utilizados à campo, se tornando úteis para as diversas aplicações em pesquisas agrônômicas e ambientais (Melquiades et al., 2024; Chen et al., 2024), tornando mais acessível análises que anteriormente eram realizadas tradicionalmente por técnicas analíticas de laboratório como espectrometria de absorção atômica (EAA) ou espectrometria de emissão atômica com plasma acoplado indutivamente (ICP OES). Técnicas consideradas mais demoradas e perigosas por usar uma gama de reagentes fortes para a digestão das amostras de solos ou material vegetal.

Visto a grande facilidade da obtenção das medidas realizadas pelo EFRx, vários estudos vêm sendo realizados com esse sensor. Os estudos surgem como objetivo de entender as relações entre as medidas obtidas pelo EFRx e as análises tradicionais feitas nas amostras do solo. As investigações cercam temas sobre gênese do solo e classificação, caracterização de propriedades físico-químicas modelagem e previsão de classes de solo, propriedades e materiais de origem, análises espaciais, avaliação da qualidade ambiental para fins agrônômicos e geoquímica do solo (Lima et al., 2018; Hartemink et al., 2020; Santos et al., 2022).

Para as regiões tropicais úmidas os estudos estão focados principalmente na estimativa dos atributos físicos e químicos do solo por meio dos da EFRx utilizando desde métodos matemáticos tradicionais como a regressão linear até algoritmos robustos de aprendizado de máquina (Benedet et al., 2020; Teixeira et al., 2020). A

vantagem dos modelos gerados a partir dos dados de EFRx é a possibilidade de serem utilizados em amostras de solos em que as análises convencionais não foram realizadas por limitações financeiras ou laboratoriais. No entanto, os dados obtidos pelo sensor de EFRx podem ser inseridos em modelos desenvolvidos e os atributos do solo podem ser estimados de forma rápida e com precisão aceitável (Silva et al., 2018; Sun et al., 2020).

Um dos campos de estudo que a EFRx vem sendo empregada é para a comparação dos elementos totais obtidos em suas medidas com os resultados fornecidos por análises convencionais da química úmida para determinação dos teores totais ou semi-totais, buscando estabelecer correlações matemáticas entre os métodos de análise (Weindorf et al., 2014). Goff et al. (2020) em estudo desenvolvido em solos dos Estados Unidos utilizaram métodos de preparo de amostras lidas pela EFRx para a quantificação geoquímica de perfis de solos. Os autores alcançaram resultados promissores para os óxidos estudados (Si, Ti, Al, Mn, K, Fe e Ca), nos quais obtiveram equações com R^2 acima de 0,60 para os elementos analisados. No Brasil, Silva et al. (2019) compararam dados geoquímicos obtidos de amostras de solos após digestão semitotal, no qual relataram resultados acurados para a maioria dos elementos químicos analisados (Ca, Cu, Fe, Mn, Cr, Ni e V) com altos coeficientes de determinação.

Outra área de aplicação da EFRx é para o reconhecimento do comportamento espacial das classes de solos e seus atributos. Tal fato surge da possibilidade da avaliação de uma maior quantidade de amostras dentro da mesma área de interesse a ser mapeada (Meneses et al., 2020; Mukhopadhyay et al., 2020). Kebonye et al. (2021) utilizaram os dados de EFRx para estimar e realizar o mapeamento dos teores de As em solos da República Tcheca, obtendo um comportamento espacial semelhante entre as duas técnicas analisadas. Em solos agrícolas brasileiros, utilizando informações geológicas, do relevo e de EFRx, foi realizado o mapeamento dos teores de Fe, Cu, Zn e Mn (Pelegriño et al., 2018)

A EFRx aplicada a gênese e classificação dos solos está ajudado a elucidar o grau de intemperismo de perfis de solos e a distribuição interna dos elementos químicos importantes para caracterização das classes de solos (Chakraborty et al., 2019, Hartemink et al., 2020). Em solos turcos, foi caracterizada uma catena com

quatro perfis de solos com o auxílio da EFRx para identificar as variações físicas, químicas e geoquímicas (Gozukara et al., 2021). Para solos com horizontes podzólicos, pode-se concluir que Al e o Fe obtidos pela EFRx são úteis no delineamento dos horizontes de forma quantitativa (Huang et al., 2023).

1.2.3 Mapeamento de atributos químicos do solo

O conhecimento sobre a qualidade do solo tem sido constantemente investigado com objetivo de mantê-lo preservado, com potencial para produção adequadas das culturas. Visto isso, a qualidade do solo é conceituada como a capacidade de uma classe de solo exercer suas funções, dentro dos limites naturais ou manejados do ecossistema, limites estes que visam sustentar a produtividade vegetal e animal, manter e melhorar a qualidade da água e do ar, visando manter condições básicas para a saúde e habitação humana (Lal, 2016; Brevik et al., 2017).

A qualidade do solo é representada pelo conjunto de indicadores, sejam eles físicos, químicos ou biológicos que atuam de forma integrada e equilibrada para a manutenção dos serviços ecossistêmicos do solo (Wood et al., 2018). Portanto, como os demais indicadores, os químicos são importantes e estão correlacionados à capacidade do fornecimento de nutrientes para as plantas e à retenção de elementos ou compostos químicos prejudiciais ao ambiente e ao crescimento vegetal (Abdul Khalil et al., 2015).

Sabendo da importância dos atributos do solo, somado ao conhecimento de que estes apresentam distribuição espacial em escala de campo (Liu et al., 2017) é levantada a importância do conhecimento da variabilidade detalhada, que muitas vezes não são consideradas nos mapeamentos tradicionais por limitações inerentes a recursos financeiros e de amostragem para o levantamento correto das informações do solo (McBratney et al., 2006). Porém, apesar das dificuldades de aquisição das informações quantitativas, sabe-se de sua importância para o uso sustentável do solo, manejo de zonas específicas para aplicação de nutrientes e planejamento de uso da terra baseados nas potencialidades do solo (McBratney et al., 2014; Moshia et al., 2014).

A aquisição dos valores quantitativos dos atributos químicos do solo é realizada tradicionalmente por meio de sua determinação usando a química úmida em

laboratório (Mishra e Riley, 2015). Tais análises, fazem aumentar a dificuldade de levarmos em consideração a variabilidade espacial, que resultam em manejos ineficientes com excesso ou falta de insumos em locais específicos de uma área agrícola (Hyytiäinen et al., 2011). O manejo ineficiente realizado pela aquisição de poucas amostras analisadas pode levar ao manejo localizado inadequado levando a utilização de insumos acima ou abaixo dos valores ideais para a manutenção dos teores dos atributos químicos. Níveis elevados podem levar a contaminação do solo e da água ou ainda níveis baixos podem causar redução de produtividade nas culturas agrícolas (Nawar et al., 2017).

Visto a grande demanda por informações detalhadas para o manejo eficiente dos atributos químicos, a busca por alternativas para aumentar o detalhamento das informações do solo sem necessariamente realizar análises tradicionais tem aumentado (Viscarra Rossel e Bouma, 2016). Uma das alternativas que vem sendo utilizada de forma massiva é o uso de sensores para estimativa dos atributos. O surgimento desses equipamentos impulsiona novas tecnologias aplicadas para caracterizar a variabilidade dos atributos químicos (Brevik et al., 2016; Nawar et al., 2019).

Estudos que buscam alternativas para mapear os atributos químicos estimados por meio de medidas obtidas por sensores, tem aumentado, pois possui como pontos positivos, a rapidez e a facilidade na obtenção de uma ampla quantidade de dados que podem ser usados para estimativa dos atributos químicos com boa acurácia (Zhu et al., 2011; Sharma et al., 2014). Dentre os sensores utilizados para estimar e mapear os atributos químicos dos solos está a EFRx (Rawal et al., 2019; Andrade et al., 2020).

Em solos da região Sudeste do Brasil, foi utilizado a EFRx no mapeamento da matéria orgânica e dos atributos SB, CTC e V%, sendo encontrado resultados satisfatórios para a variabilidade da matéria orgânica e da capacidade de troca de cátions em uma área de aproximadamente 100 ha (Fontenelli et al., 2021). A EFRx também apresentou resultados promissores para o mapeamento dos teores de C e N em uma catena de solos desenvolvidos sobre clima temperado (Duda et al., 2017). Tais resultados reforçam a aplicação desse sensor em mapeamentos dos atributos químicos, que pode favorecer estudos que são direcionados a áreas em escalas com dimensões estaduais ou nacionais.

1.2.4 Calagem nos solos tropicais úmidos

A conservação do solo de maneira que ele consiga manter todas as suas funções ecossistêmicas (sequestro de carbono, armazenamento de nutrientes e água, produção de alimentos e biomassa) é essencial para a humanidade em rumo a segurança alimentar mundial e alcançar níveis desejáveis de sustentabilidade agrícola (Holland et al., 2018). Com o avanço da agricultura mundial e a grande exigência pelos recursos advindos do solo, as preocupações com sua degradação têm sido constantes, aliados a redução da qualidade do solo por processos de salinização, erosão, contaminação e acidificação natural ou antropogênica (FAO, 2015).

A prática da calagem e os pontos positivos da sua utilização são conhecidos há séculos, desde o início do seu estabelecimento como prática agrícola (Dodgshon, 1978). Como as demais práticas adotadas, a calagem primariamente foi adotada focada no aumento da produção das culturas. No entanto, o objetivo atual tem sido compreender seu impacto na melhoria da saúde do solo e conservação do meio ambiente (Gibbons et al., 2014).

A aplicação de materiais corretivos da acidez do solo tem como objetivo primário a elevação do pH do solo, e consequentemente, a redução da sua acidificação. A acidez dos solos é causada por processos naturais ou antrópicos, sendo os naturais causados pela ciclagem biogeoquímica do C, N ou S, material de origem e decomposição da matéria orgânica (Clair e Hindar, 2005; Kirk et al., 2010). Já as fontes antropogênicas podem ser representadas pelas aplicações de produtos fertilizantes acidificantes utilizados nas práticas agrícolas ou pela extração dos cátions devido a agricultura intensiva (Guo et al., 2010; Kunhikrishnan et al., 2016).

A propriedade do solo que é indicadora direta da necessidade da aplicação de calcário é o nível atual da saturação por bases do solo. Outra propriedade que influencia na aplicação de corretivos agrícolas é a textura do solo, pois solos argilosos exigem maiores doses de calcário para sua correção. No entanto, solos arenosos reduzem a necessidade de doses elevadas para sua correção. Em adição, além da textura, os teores de matéria orgânica também alteram a exigências de correção do

solo, quanto maior o teor de matéria orgânica, menor será a necessidade da calagem (Lemire et al., 2006; Sinclair et al., 2014).

O uso dos corretivos da acidez por meio da prática da calagem tem como função alterar positivamente os atributos do solo, por meio de materiais que contêm cátions benéficos com o Ca^{2+} e Mg^{2+} . A reação entre o material aplicado na neutralização da acidez forma gás carbônico e água, resultando no aumento do pH do solo. Ao modificar sua acidez, o solo atua de maneira significativa nos ciclos biogeoquímicos do C, N e do S, que são ciclos fundamentais para as atividades agrícolas e a manutenção da vida humana na Terra (Helyar, 1976).

A correção do solo também é uma prática agrícola que altera os processos biológicos do solo, por tanto, influencia na quantidade e tipos de organismos presentes no mesmo, podendo aumentar a proporção de bactérias e fungos nos solos (Bothe, 2015). O aumento do pH do solo influencia positivamente na colonização das raízes das plantas pelos microrganismos, que se estabelecem melhor em condições de acidez intermediária com pH do solo entre 5 e 6 (Castillo et al., 2014). Os níveis de fixação de N_2 também aumentam devido à maior presença de espécies associativas de leguminosas, aumento da população dos microrganismos e redução de fatores inibidores na rizosfera das ações entre os microrganismos e as plantas (Zhalnina et al., 2013; Gomes et al., 2015).

As práticas de correções dos solos tropicais úmidos são responsáveis pelo comportamento e disponibilidade dos elementos essenciais, benéficos e tóxicos, por ditarem as reações de adsorção, precipitação e absorção dos elementos pelas plantas (Fageria e Baligar, 2008). Com níveis mais elevados do pH do solo, macronutrientes como N, P, K e S aumentam seus teores devido ao favorecimento da mineralização do material orgânico (Higgins et al., 2012). Para os nutrientes Ca e Mg, a maior influência da correção da acidez para esses elementos está no fato destes fazerem parte da composição dos materiais corretivos da acidez do solo.

A calagem também impacta positivamente nos atributos físicos. No manejo dos solos, produtos corretivos de acidez trazem benefícios físicos, pois favorecem a agregação do solo e a formação de micro agregados, facilitando o fluxo da água ao longo do perfil (Valzano et al., 2001). Por meio do aumento da atividade biológica, a calagem aumenta a estabilidade dos agregados e da porosidade total dos solos,

sendo que a frequência do manejo dos solos com a aplicação de corretivos é um ponto fundamental no manejo estrutural dos solos (Aye et al., 2016).

Conforme discutido anteriormente, a calagem aplicada nos solos que possuem acidez elevada é fundamental para a expansão de novas áreas nas regiões tropicais e resultados satisfatórios de produtividade. Portanto, as pesquisas que investigam o papel da calagem na variabilidade do comportamento físico e químico dos solos ainda são consideradas um desafio (Edwards et al., 2016; Alkan et al., 2022; Joshi et al., 2023). Considerar estudos da calagem e sua influência nos serviços ecossistêmicos regionais e nacionais nos trópicos é fundamental para aplicação de ações de melhoria da qualidade dos solos (Emmett et al., 2016).

1.2.5 Aprendizado de máquina na Ciência do solo

O aumento do uso dos algoritmos de aprendizado de máquina nas últimas duas décadas é notável em diversos campos da pesquisa mundial. Não diferente, o aprendizado de máquina tem sido utilizado constantemente nas diferentes áreas de estudo da agronomia. Na Ciência do solo, ou mais precisamente nas pesquisas dentro da pedometria e mapeamento digital de solos, o aprendizado de máquina é usado para desenvolver modelos estatísticos usados para buscar e encontrar padrões de dados do solo por meio das variáveis ambientais que são intrínsecas a sua formação (McBratney et al., 2019; Padarian et al., 2019).

Diversos motivos podem ser atribuídos ao avanço da aplicação do aprendizado de máquina para pesquisas em Ciência do solo, no qual, alguns estão relacionados a questões globais como a crescente demanda por informações para mitigar a degradação, ou ainda motivos diretamente relacionados ao aumento da disponibilidade de dados obtidos de forma tradicional ou pedométrica (sensores), somado a evolução e disponibilidade das técnicas de inteligência artificial disponíveis de forma gratuita para utilização nos mais diversos campos de pesquisa.

O aprendizado de máquina pode ser caracterizado como a obtenção de informações úteis a partir de dados que são modelados por meio de algoritmos que buscam atingir resultados acurados e replicáveis dos padrões dentro dos dados fornecidos (Russell e Norving, 2016). Por isso, o aprendizado de máquina possui

como um dos aliados principais a estatística para análise de dados (Mohri e Rostamizadeh, 2012; Misilmani et al., 2019).

O incremento do uso do aprendizado de máquina para estudo dos atributos do solo está relacionado ao aumento do poder da computação e sua acessibilidade pelos pesquisadores para a manipulação de dados agronômicos, somado as diferentes técnicas de sensoriamento remoto para obtenção de dados, com o crescente números de cientistas do solo com conhecimento sobre processamento e ciência de dados (Ware e Mabe, 2015; Jordan e Mitchell, 2015).

Diversas áreas têm utilizado o aprendizado de máquina para aplicações em estudos sobre atributos do solo e aplicações pedométricas (Padarian et al., 2019). No campo do sensoriamento remoto a utilização de dados de satélite e aprendizado de máquina tem sido aplicado, Xu et al. (2017) utilizaram bandas espectrais obtidas remotamente para estimar o N total e K trocável usando o algoritmo de floresta aleatória. Para o mapeamento e monitoramento da salinidade do solo, Khadim et al. (2019) usaram o algoritmo de árvores de decisão em seu estudo.

O estudo das dinâmicas do estoque do C do solo também tem sido amplamente investigado, Liu et al. (2018) estudando o estoque de C em solos da China buscaram compreender a variação espaço-temporal desse atributo e sua estimativa por meio de índices de vegetação e climáticos utilizando redes neurais e floresta aleatória. Para o mapeamento do estoque de C, Wang et al. (2018) utilizaram dados topográficos e radiométricos em solos australianos comparando os algoritmos de floresta aleatória e árvores de regressão aprimoradas.

No campo do estudo ambiental, os algoritmos têm sido usados para a predição de elementos potencialmente tóxicos do solo por meio de medidas de sensores proximais. Costa et al. (2017) utilizaram modelos lineares (regressão linear múltipla) e não lineares para a predição dos metais Cd, Cr, Cu, Ni, Pb e Zn. Reeves et al. (2018) estimaram teores de elementos potencialmente tóxicos por meio de sensores remotos em solos da América do Norte com sucesso.

Os algoritmos ainda têm sido aplicados para estudar a erosão do solo, material de origem, modelagem de dados espectroscópicos, atributos físicos do solo e mapeamento de variáveis contínuas, como classes de solos. Tais pesquisas reforçam a ampla gama dos algoritmos de aprendizado de máquina para estudos de

mapeamento digital de solos (Geisen et al., 2007; Poggio et al., 2016; Martinez et al., 2017; Heggemann et al., 2017; Gao et al., 2018).

1.2.6 Referências

Adamchuk V, Ji W, Rossel RV, Gebbers R, Tremblay N (2018) Proximal soil and plant sensing. **Precision agriculture basics** 119-140.

Andrade R, Faria WM, Silva SHG, Chakraborty S, Weindorf DC, Mesquita LF, Curi N (2020) Prediction of soil fertility via portable X-ray fluorescence (pXRF) spectrometry and soil texture in the Brazilian Coastal Plains. **Geoderma** 357, 113960.

Arrouays D, Poggio L, Guerrero OAS, Mulder VL (2020) Digital soil mapping and GlobalSoilMap: Main advances and ways forward. **Geoderma Regional** 21, e00265.

Aye NS, Sale PW, Tang C (2016) The impact of long-term liming on soil organic carbon and aggregate stability in low-input acid soils. **Biology and Fertility of Soils** 52, 697-709.

Barrow NJ (2017) The effects of pH on phosphate uptake from the soil. **Plant Soil** 410, 401–410.

Behrens T, Schmidt K, Ramirez-Lopez L, Gallant J, Zhu AX, Scholten T (2014) Hyper-scale digital soil mapping and soil formation analysis. **Geoderma** 213, 578–588.

Benedet L, Acuña-Guzman SF, Faria WM, Silva SHG, Mancini M, Santos TAF, Curi N (2021) Rapid soil fertility prediction using X-ray fluorescence data and machine learning algorithms. **Catena** 197, 105003.

Benedet L, Faria WM, Silva SHG, Mancini M, Demattê JAM, Guilherme LRG, Curi N (2020) Soil texture prediction using portable X-ray fluorescence spectrometry and visible near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. **Geoderma** 376, 114553.

Bolan NS, Adriano DC, Curtin D (2003) Soil acidification and liming interactions with nutrient and heavy metal transformation and bioavailability. **Advances in agronomy** 215-272.

Bothe H (2015) The lime–silicate question. **Soil Biology and Biochemistry** 89, 172-183.

Bouma J, Kwakernaak C, Bonfante A, Stoorvogel JJ, Dekker LW (2015) Soil science input in transdisciplinary projects in the Netherlands and Italy. **Geoderma Regional**, 5, 96–105.

Bouma J, Montanarella L, Evanylo G (2019). The challenge for the soil science community to contribute to the implementation of the UN Sustainable Development Goals. **Soil Use and Management**, 35(4), 538-546.

Brevik EC, Calzolari C, Miller BA, Pereira P, Kabala C, Baumgarten A, Jordán A (2016) Soil mapping, classification, and pedologic modeling: History and future directions. **Geoderma** 264: 256-274.

Brevik EC, Steffan JJ, Burgess LC, Cerdà A (2017) Links between soil security and the influence of soil on human health. **Global soil security** 261-274.

Castillo C, Fredericksen C, Koch R, Sieverding E (2014) Effect of seed treatment with natural products on early arbuscular mycorrhizal colonization of wheat by *Claroideoglomus claroideum*. **Journal of Applied Botany and Food Quality** 87.

Chakraborty S, Li B, Weindorf DC, Deb S, Acree A, De P, Panda P (2019) Use of portable X-ray fluorescence spectrometry for classifying soils from different land use land cover systems in India. **Geoderma** 338, 5-13.

Chakraborty S, Li B, Weindorf DC, Deb S, Acree A, De P, Panda P (2019) Use of portable X-ray fluorescence spectrometry for classifying soils from different land use land cover systems in India. **Geoderma** 338, 5-13.

Clair TA, Hindar A (2005) Liming for the mitigation of acid rain effects in freshwaters: a review of recent results. **Environmental Reviews** 13(3), 91-128.

Dodgshon RA (1978) Land improvement in Scottish farming: marl and lime in Roxburghshire and Berwickshire in the eighteenth century. **The Agricultural History Review** 26(1), 1-14.

Duda BM, Weindorf DC, Chakraborty S, Li B, Man T, Paulette L, Deb S (2017) Soil characterization across catenas via advanced proximal sensors. **Geoderma** 298, 78-91.

EASAC (2018) **Opportunities for soil sustainability in Europe**. EASAC Policy report 36 German National Academy of Sciences Leopoldina. Halle, Germany: EASAC.

EC (2019) **Reflection paper: Towards a sustainable Europe by 2030**. EC.COM (2019) 22. Brussels.

Edwards AC, Sinclair AH, Coull M, Crooks W, Rees RM, Lumsdon DG (2016) Regional trends in Scottish advisory soil acidity and phosphorus results: significance of management history, land use and soil attributes. **Soil Use and Management** 32, 44-53.

El Misilmani, HM, Naous T (2019) **Machine learning in antenna design: An overview on machine learning concept and algorithms**. In 2019 International Conference on High Performance Computing & Simulation (HPCS) pp. 600-607.

Elango, D, Kanatti, A, Wang, W, Devi, AR, Ramachandran, M, Jabeen, A (2021) Analytical methods for iron and zinc quantification in plant samples. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, 52(10), 1069-1075.

Emmett BA, Cooper D, Smart S, Jackson B, Thomas A, Cosby B, Evans C, Glanville H, McDonald JE, Malham SK (2016). Spatial patterns and environmental constraints on ecosystem services at a catchment scale. **Science of the Total Environment** 572, 1586-1600.

Fageria NK (2009) **The Use of Nutrients in Crop Plants**. CRC press, Boca Raton, Florida, USA.

FAO (2015) **Agriculture Organization: Status of the World's Soil Resources (SWSR)–Main Report**. Food and Agriculture Organization of the United Nations and Intergovernmental Technical Panel on Soils, Rome, Italy.

FAO (2015) Status of the World's Soil Resources (SWSR)–Main Report. **Food and Agriculture Organization of the United Nations and Intergovernmental Technical Panel on Soils**, Rome, Italy. 650.

Finke PA (2012) On digital soil assessment with models and the Pedometrics agenda. **Geoderma** 171, 3-15.

Fontenelli JV, Adamchuk VI, Ferreira MM, Amaral LR, Guimarães CC, Demattê JA, Magalhães PS (2021) Evaluating the synergy of three soil spectrometers for improving the prediction and mapping of soil properties in a high anthropic management area: A case of study from Southeast Brazil. **Geoderma** 402, 115347.

Forbes JD (1846) XVIII—Account of some Experiments on the Temperature of the Earth at different Depths, and in different Soils, near Edinburgh. **Earth and Environmental Science Transactions of The Royal Society of Edinburgh** 16(2), 189-236.

Gao M, Li HY, Liu D, Tang J, Chen X, Chen X, Leung LR (2018) Identifying the dominant controls on macropore flow velocity in soils: A meta-analysis. **Journal of Hydrology** 567, 590-604.

Gates WP (2006) X-ray absorption spectroscopy. **Developments in clay science** 1, 789-864.

Geissen V, Kampichler C, López L.J.J.J, Galindo-Acántara A (2007) Superficial and subterranean soil erosion in Tabasco, tropical Mexico: development of a decision tree modeling approach. **Geoderma** 139(3-4), 277-287.

Gibbons JM, Williamson JC, Williams AP, Withers PJ, Hockley N, Harris IM, Hughes JW, Taylor RL, Jones DL, Healey JR (2014) Sustainable nutrient management at field, farm and regional level: Soil testing, nutrient budgets and the trade-off between lime application and greenhouse gas emissions. **Agriculture, ecosystems & environment** 188, 48-56.

Goff K, Schaetzl RJ, Chakraborty S, Weindorf DC, Kasmerchak C, Bettis III E. A. (2020) Impact of sample preparation methods for characterizing the geochemistry of soils and sediments by portable X-ray fluorescence. **Soil Science Society of America Journal** 84(1), 131-143.

Gomes EA, Oliveira CA, Lana UG, Noda RW, Marriel IE, Souza FA (2015) Arbuscular Mycorrhizal Fungal Communities in the Roots of Maize Lines Contrasting for Al Tolerance Grown in Limed and Non-Limed Brazilian Oxisoil. **Journal of microbiology and biotechnology** 25(7), 978-987.

Goulding KWT (2016) Soil acidification and the importance of liming agricultural soils with particular reference to the United Kingdom. **Soil use and management** 32(3), 390-399.

Gozukara G, Zhang Y, Hartemink AE, Altunbas S, Mustafa SARI (2021) Soil chronosequence and biosequence on old lake sediments of the Burdur Lake in Turkey. **Pedosphere** 31(6), 882-891.

Guo JH, Liu XJ, Zhang Y, Shen JL, Han WX, Zhang WF, Christie P, Goulding KWT, Vitousek PM, Zhang FS (2010) Significant acidification in major Chinese croplands. **Science** 327, 1008–1010

Haines WB, Keen BA (1925) Studies in soil cultivation. II. A test of soil uniformity by means of dynamometer and plough. **The Journal of Agricultural Science** 15(3), 387-394.

Hartemink AE, Minasny B (2014) Towards digital soil morphometrics. **Geoderma** 230, 305-317.

Hartemink AE, Zhang Y, Bockheim JG, Curi N, Silva SHG, Grauer-Gray J, Krasilnikov P (2020) Soil horizon variation: A review. **Advances in Agronomy** 160(1), 125-185.

Heggemann T, Welp G, Amelung W, Angst G, Franz SO, Koszinski S, Pätzold S (2017) Proximal gamma-ray spectrometry for site-independent in situ prediction of soil texture on ten heterogeneous fields in Germany using support vector machines. **Soil and Tillage Research** 168, 99-109.

Helyar K (1976) Nitrogen cycling and soil acidification. **The Journal of the Australian Institute of Agricultural Science**, 217-221.

Hengl T, Nussbaum M, Wright MN, Heuvelink GB, Gräler B (2018) Random forest as a generic framework for predictive modeling of spatial and spatio-temporal variables. **PeerJ** 6, e5518.

Higgins S, Morrison S, Watson CJ (2012) Effect of annual applications of pelletized dolomitic lime on soil chemical properties and grass productivity. **Soil use and Management** 28(1), 62-69.

Holland JE, Bennett AE, Newton AC, White PJ, McKenzie BM, George TS, Hayes R C (2018) Liming impacts on soils, crops and biodiversity in the UK: A review. **Science of the Total Environment** 610, 316-332.

Horta A, Malone B, Stockmann U, Minasny B, Bishop TFA, McBratney AB, Pozza L (2015) Potential of integrated field spectroscopy and spatial analysis for enhanced assessment of soil contamination: A prospective review. **Geoderma** 241, 180-209.

Huang YC, Huang CY, Minasny B, Chen ZS, Hseu ZY (2023) Using pXRF and Vis-NIR for characterizing diagnostic horizons of fine-textured podzolic soils in subtropical forests. **Geoderma** 437, 116582.

Hyytiäinen K, Niemi JK, Koikkalainen K, Palosuo T, Salo T (2011) Adaptive optimization of crop production and nitrogen leaching abatement under yield uncertainty. **Agricultural Systems** 104(8): 634-644.

IPCC - Intergovernmental Panel on Climate Change: Guidelines for National Green House Gas Inventories. Prepared by the National Greenhouse Gas Inventories Programme. Japan: IGES, 2006. chapter 11.

Jenny H (1994) **Factors of soil formation: a system of quantitative pedology**. Courier Corporation.

Johnson, LRM, Ferguson, JR, Freund, KP, Drake, L, Duke, D (2021) Evaluating obsidian calibration sets with portable X-Ray fluorescence (ED-XRF)

instruments. **Journal of Archaeological Science: Reports**, 39, 103126.

Jordan MI, Mitchell TM (2015). Machine learning: Trends, perspectives, and prospects. **Science** 349(6245), 255-260.

Kalnicky DJ, Singhvi R (2001) Field portable XRF analysis of environmental samples. **Journal of hazardous materials** 83(1-2), 93-122.

Kaniu MI, Angeyo KH, Mwala AK, Mangala MJ (2012) Direct rapid analysis of trace bioavailable soil macronutrients by chemometrics-assisted energy dispersive X-ray fluorescence and scattering spectrometry. **Analytica Chimica Acta** 729, 21-25.

Kebonye NM, John K, Chakraborty S, Agyeman PC, Ahado SK, Eze PN, Borůvka L (2021) Comparison of multivariate methods for arsenic estimation and mapping in floodplain soil via portable X-ray fluorescence spectroscopy. **Geoderma** 384, 114792.

Keesstra SD, Bouma J, Wallinga J, Tiftonell P, Smith P, Cerdà A, Fresco LO (2016) The significance of soils and soil science towards realization of the United Nations sustainable development goals, **soil**, 2, 111–128.

Khadim FK, Su H, Xu L, Tian J (2019). Soil salinity mapping in Everglades National Park using remote sensing techniques and vegetation salt tolerance. **Physics and Chemistry of the Earth Parts A/B/C**, 110, 31-50.

Khalil HA, Hossain MS, Rosamah E, Azli NA, Saddon N, Davoudpoura Y, Dungani R (2015) The role of soil properties and it's interaction towards quality plant fiber: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews** 43, 1006-1015.

Kirk GJ, Bellamy PH, Lark RM (2010) Changes in soil pH across England and Wales in response to decreased acid deposition. **Global Change Biology** 16(11), 3111-3119.

Kristof S, Baumgardner M, Johannsen C (1973) Spectral Mapping of Soil Organic Matter. **LARS Technical Reports** pp. 26.

Kunhikrishnan A, Thangarajan R, Bolan N, Xu Y, Mandal S, Gleeson D, Seshadri B, Zaman M, Barton L, Tang C (2016) Functional relationships of soil acidification, liming, and greenhouse gas flux. **Advances in agronomy** 139, 1-71.

Lagacherie P, Arrouays D, Bourennane H, Gomez C, Nkuba-Kasanda L (2020) Analysing the impact of soil spatial sampling on the performances of Digital Soil Mapping models and their evaluation: A numerical experiment on Quantile Random Forest using clay contents obtained from Vis-NIR-SWIR hyperspectral imagery. **Geoderma** 375, 114503.

Lal R (2016) Soil health and carbon management. **Food Energy Security** 5: 212–222.

Lemiere B (2018) A review of pXRF (field portable X-ray fluorescence) applications for applied geochemistry. **Journal of Geochemical Exploration** 188, 350-363.

Lemire E, Taillon KM, Hendershot WH (2006) Using pH-dependent CEC to determine lime requirement. *Canadian journal of soil science*, 86(1), 133-139.

Leue M, Hoffmann C, Hierold W, Sommer M (2019) In-situ multi-sensor characterization of soil cores along an erosion-deposition gradient. **Catena** 182, 104140.

Li, F, Zhang, X, Lu, A, Xu, L, Ren, D, You, T (2022) Estimation of metal elements content in soil using x-ray fluorescence based on multilayer perceptron. **Environmental monitoring and assessment**, 194(2), 95.

Lima TM, Weindorf DC, Curi N, Guilherme LR, Lana RM, Ribeiro BT (2019) Elemental analysis of Cerrado agricultural soils via portable X-ray fluorescence spectrometry: Inferences for soil fertility assessment. **Geoderma** 353, 264-272.

Liu M, Xu X, Sun AY, Wang K (2017) Decreasing spatial variability of drought in southwest China during 1959–2013. **International journal of climatology** 37(13), 4610-4619.

Liu S, Yang Y, Shen H, Hu H, Zhao X, Li H, Fang J (2018) No significant changes in topsoil carbon in the grasslands of northern China between the 1980s and 2000s. **Science of the total environment** 624, 1478-1487.

Malone BP, Styc Q, Minasny B, McBratney AB (2017) Digital soil mapping of soil carbon at the farm scale: A spatial downscaling approach in consideration of measured and uncertain data. **Geoderma** 290, 91-99.

Manhas, M, Tomar, A, Tiwari, M, Sharma, S (2024) **Application of X-ray fluorescence in forensic archeology: A review**. X-Ray Spectrometry.

Martinez G, Weltz M, Pierson FB, Spaeth KE, Pachepsky Y (2017) Scale effects on runoff and soil erosion in rangelands: Observations and estimations with predictors of different availability. **Catena** 151, 161-173.

McBratney A, Gruijter J, Bryce A (2019) Pedometrics timeline. **Geoderma** 338, 568-575.

McBratney AB, Minasny B, Rossel RV (2006) Spectral soil analysis and inference systems: A powerful combination for solving the soil data crisis. **Geoderma** 136(1-2), 272-278.

McBratney AB, Santos MM, Minasny B (2003) On digital soil mapping. **Geoderma** 117(1-2), 3-52.

McBratney AB, Stockmann U, Angers DA., Minasny B, Field DJ (2014) Challenges for soil organic carbon research. **Soil carbon** 3-16.

Menezes MD, Bispo FHA, Faria WM, Gonçalves MGM, Curi N, Guilherme LRG (2020) Modeling arsenic content in Brazilian soils: What is relevant ?. **Science of the Total Environment** 712, 136511.

Mestanza-Ramón C, Cuenca-Cumbicus J, D'Orio G, Flores-Toala J, Segovia-Cáceres S, Bonilla-Bonilla A, Straface S (2022) Gold mining in the Amazon Region of Ecuador: History and a review of its socio-environmental impacts. **Land**, 11(2), 221.

- Minasny B, McBratney AB (2016) Digital soil mapping: A brief history and some lessons. **Geoderma** 264, 301-311.
- Mishra U, Riley WJ, (2015) Scaling impacts on environmental controls and spatial heterogeneity of soil organic carbon stocks. **Biogeosciences** 12, 3993–4004
- Mohri M, Rostamizadeh A, Talwalkar A (2012) **Foundations of Machine Learning**. Adaptive Computation and Machine Learning.
- Moshia ME, Khosla R, Longchamps L, Reich R, Davis JG, Westfall DG (2014) Precision manure management across site-specific management zones: Grain yield and economic analysis. **Agronomy Journal** 106(6), 2146-2156.
- Mukhopadhyay S, Chakraborty S, Bhadoria PBS, Li B, Weindorf DC (2020) Assessment of heavy metal and soil organic carbon by portable X-ray fluorescence spectrometry and NixPro™ sensor in landfill soils of India. **Geoderma Regional** 20, e00249.
- Nawar S, Corstanje R, Halcro G, Mulla D, Mouazen AM (2017) Delineation of soil management zones for variable-rate fertilization: A review. **Advances in agronomy** 143: 175-245.
- Nawar S, Delbecq N, Declercq Y, Smedt P, Finke P, Verdoodt A, Meirvenne MV, Mouazen AM (2019) Can spectral analyses improve measurement of key soil fertility parameters with X-ray fluorescence spectrometry?. **Geoderma** 350: 29-39.
- Odgers N, McBratney A, Minasny B, Sun W, Clifford D (2014) DSMART: an algorithm to spatially disaggregate soil map units. In: GlobalSoilMap: Basis of the Global Spatial Soil Information System - **Proceedings of the 1st GlobalSoilMap** Conference pp. 261–266.
- Padarian J, Minasny B, McBratney AB (2020) Machine learning and soil sciences: a review aided by machine learning tools. **Soil** 6(1), 35-35.
- Pelegriño MHP, Silva SHG, Faria ÁJG, Mancini M, Teixeira AFDS, Chakraborty S, Curi N (2022) Prediction of soil nutrient content via pXRF spectrometry and its spatial

variation in a highly variable tropical area. **Precision Agriculture** 23(1), 18-34.

Poggio L, Gimona A, Spezia L, Brewer MJ (2016) Bayesian spatial modelling of soil properties and their uncertainty: The example of soil organic matter in Scotland using R-INLA. **Geoderma** 277, 69-82.

Rawal A, Chakraborty S, Li B, Lewis K, Godoy M, Paulette L, Weindorf DC (2019) Determination of base saturation percentage in agricultural soils via portable X-ray fluorescence spectrometer. **Geoderma** 338, 375-382.

Reeves MK, Perdue M, Munk LA, Hagedorn B (2018) Predicting risk of trace element pollution from municipal roads using site-specific soil samples and remotely sensed data. **Science of the Total Environment** 630, 578-586.

Ribeiro BT, Silva SHG, Silva EA, Guilherme LRG (2017) Portable X-ray fluorescence (pXRF) applications in tropical Soil Science. **Ciência e Agrotecnologia** 41, 245-254.

Rossel RV, Behrens T, Ben-Dor E, Brown DJ, Demattê, JAM, Shepherd KD, Ji W (2016) A global spectral library to characterize the world's soil. **Earth-Science Reviews** 155, 198-230.

Rossiter DG, Bouma J (2018) A new look at soil phenoforms—Definition, identification, mapping. **Geoderma** 314, 113-121.

Roudier P, Manderson A, Hedley C (2016) Advances towards quantitative assessments of soil profile properties. **Digital soil morphometrics** 113-132.

Russell SJ, Norvig P (2016) **Artificial intelligence: a modern approach**. Malaysia; Pearson Education Limited.

Santos TAF, Andrade R, Mancini M, Silva SHG, Weindorf DC, Chakraborty S, Curi N (2022) Proximal sensor data fusion for tropical soil property prediction: Soil fertility properties. **Journal of South American Earth Sciences** 116, 103873.

Santos TAF, Pelegrino MHP, Faria WM, Silva SHG, Gonçalves MGM, Júnior FWA, Curi N (2020) Tropical soil pH and sorption complex prediction via portable X-ray fluorescence spectrometry. **Geoderma** 361, 114132.

Schulte RPO, Creamer RE, Donnellan T, Farrelly N, Fealy R, O'Donoghue C, O'HUallachain D (2014). Functional land management: A framework for managing soil-based ecosystem services for the sustainable intensification of agriculture. **Environmental Science and Policy**, 38, 45–58.

Sharma A, Weindorf DC, Man T, Aldabaa AAA, Chakraborty S (2014) Characterizing soils via portable X-ray fluorescence spectrometer: 3. Soil reaction (pH). **Geoderma** 232, 141-147.

Sharma A, Weindorf DC, Man T, Aldabaa AAA, Chakraborty S (2014) Characterizing soils via portable X-ray fluorescence spectrometer: 3. Soil reaction (pH). **Geoderma** 232, 141-147.

Sharma A, Weindorf DC, Wang D, Chakraborty S (2015) Characterizing soils via portable X-ray fluorescence spectrometer: 4. Cation exchange capacity (CEC). **Geoderma** 239, 130-134.

Silva JGD (2015) **Revised World Soil Charter**. Rome, FAO.

Silva SHG, Silva EA, Poggere GC, Guilherme LRG, Curi N (2018) Tropical soils characterization at low cost and time using portable X-ray fluorescence spectrometer (pXRF): Effects of different sample preparation methods. **Ciência e Agrotecnologia** 42, 80-92.

Sinclair A, Crooks B, Coull M (2014) **Soils Information, Texture and Liming Recommendations**, Technical Note TN656. SRUC, Aberdeen.

Stockmann U, Malone B, McBratney A, Minasny B (2015) Landscape-scale exploratory radiometric mapping using proximal soil sensing. **Geoderma** 239, 115–129.

Sun F, Bakr N, Dang T, Pham V, Weindorf DC, Jiang Z, Wang QB (2020) Enhanced soil profile visualization using portable X-ray fluorescence (PXRF) spectrometry. **Geoderma** 358, 113997.

Teixeira AFDS, Weindorf, DC, Silva SHG, Guilherme LRG, Curi N (2018) Portable X-ray fluorescence (pXRF) spectrometry applied to the prediction of chemical attributes in Inceptisols under different land uses. **Ciência e Agrotecnologia** 42, 501-512.

Teng H, Rossel RAV, Shi Z, Behrens T (2018) Updating a national soil classification with spectroscopic predictions and digital soil mapping. **Catena** 164, 125-134.

UN (2015) **Transforming our world: the 2030 Agenda for Sustainable Development**. Resolution adopted by the General Assembly on 25 September 2015. United Nations.

Valzano FP, Murphy BW, Greene RSB (2001) The long-term effects of lime (CaCO_3), gypsum ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$), and tillage on the physical and chemical properties of a sodic red-brown earth. **Soil Research** 39(6), 1307-1331.

Viscarra Rossel RA, Bouma J (2016) Soil sensing: A new paradigm for agriculture. **Agricultural Systems** 148: 71-74.

Wadoux AMC, Heuvelink GB, Lark RM, Lagacherie P, Bouma J, Mulder VL, McBratney AB (2021) Ten challenges for the future of pedometrics. **Geoderma** 401, 115155.

Wadoux AMC, McBratney AB (2021) Digital soil science and beyond. **Soil Science Society of America Journal** 85(5), 1313-1331.

Wadoux AMC, Padarian J, Minasny B (2019) Multi-source data integration for soil mapping using deep learning. **Soil** 5(1), 107-119.

Wang B, Waters C, Orgill S, Gray J, Cowie A, Clark A, Li Liu D (2018) High resolution mapping of soil organic carbon stocks using remote sensing variables in the semi-arid rangelands of eastern Australia. **Science of the Total Environment** 630, 367-378.

Ware M, Mabe M (2015) **The STM report: An overview of scientific and scholarly journal publishing.**

Webster R (2015) Technological developments for spatial prediction of soil properties, and Danie Krige's influence on it. **Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy** 115(2), 165-172.

Weindorf DC, Bakr N, Zhu Y (2014) Advances in portable X-ray fluorescence (PXRF) for environmental, pedological, and agronomic applications. **Advances in agronomy** 128, 1-45.

Weindorf DC, Bakr N, Zhu Y (2014) Advances in portable X-ray fluorescence (PXRF) for environmental, pedological, and agronomic applications. **Advances in agronomy** 128, 1-45.

Weindorf DC, Herrero J, Castañeda C, Bakr N, Swanhart S (2013) Direct soil gypsum quantification via portable x-ray fluorescence spectrometry. **Soil Science Society of America Journal** 77(6), 2071–2077

Weindorf DC, Herrero J, Castañeda C, Bakr N, Swanhart S (2013) Direct soil gypsum quantification via portable x-ray fluorescence spectrometry. **Soil Science Society of America Journal** 77(6), 2071-2077.

Weindorf DC, Zhu Y, Haggard B, Lofton J, Chakraborty S, Bakr N, Legoria M (2012) Enhanced pedon horizonation using portable X-ray fluorescence spectrometry. **Soil Science Society of America Journal** 76(2), 522-531.

Wood SA, Gilbert JA, Leff JW, Fierer N, D'Angelo H, Bateman C, McGuire KL (2017) Consequences of tropical forest conversion to oil palm on soil bacterial community and network structure. **Soil Biology and Biochemistry** 112, 258-268.

Xu Y, Smith SE, Grunwald S, Abd-Elrahman A, Wani SP (2017) Incorporation of satellite remote sensing pan-sharpened imagery into digital soil prediction and mapping models to characterize soil property variability in small agricultural fields. **ISPRS journal of photogrammetry and remote sensing** 123, 1-19.

Youden WJ, Mehlich A (1937) **Selection of efficient methods for soil sampling.** In: Contributions of the Boyce Thompson Institute for Plant Research. vol. 9. pp. 59–70.

Zhalnina K, Quadros PD, Gano KA, Davis-Richardson A, Fagen JR, Brown CT, Triplett EW (2013) Ca. Nitrososphaera and Bradyrhizobium are inversely correlated and related to agricultural practices in long-term field experiments. **Frontiers in microbiology** 4, 104.

Zhu Y, Weindorf DC, Zhang W (2011) Characterizing soils using a portable X-ray fluorescence spectrometer: 1. Soil texture. **Geoderma** 167: 167-177.

CAPÍTULO 2 – ESTIMATIVA DE ATRIBUTOS QUÍMICOS DO SOLO DO PLANALTO OCIDENTAL PAULISTA POR FUSÃO DE ESPECTROS DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X

RESUMO – Manter níveis ideais dos atributos químicos do solo são essenciais para incrementos na produtividade das culturas, visando a segurança alimentar e a sustentabilidade agrícola. Inserido nesse contexto, com o presente estudo objetivou-se estimar os teores de cálcio (Ca), magnésio (Mg) soma de bases (SB), capacidade de troca de cátions (CTC), saturação por bases (V%) e matéria orgânica (MO) por meio de algoritmos de aprendizado de máquina a fim de delimitar zonas específicas de manejo. A área de estudo foi o Planalto Ocidental Paulista (POP) com total em torno de 13 milhões de hectares. Foi utilizado um total de 226 amostras de solo para estudo da variabilidade espacial. Foram realizadas análises físicas (areia, silte e argila) e químicas (Ca, Mg, SB, CTC, V% e MO) e obtidos os espectros das amostras de solo em dois níveis de energia (15 kV e 50 kV). Realizou-se a estatística descritiva e a estimativa dos atributos foi determinada por meio de algoritmos de aprendizado de máquina (Cubista e XGBoost). A variabilidade espacial foi realizada por interpolação usando krigagem ordinária. Foi observado que o material de origem basalto e arenito influenciaram significativamente nos atributos físicos e químicos do solo. Entre os dois algoritmos de aprendizado de máquina utilizado, o modelo cubista apresentou melhores estimativas para o período de teste do modelo. Os mapas de variabilidade espacial obtidos para os atributos observados e preditos para os algoritmos de aprendizado de máquina foram similares, indicando que o sensor de espectroscopia de fluorescência de raios-X (EFRx) pode ser utilizado para caracterização espacial dos atributos do solo estudados. Assim, pode-se concluir que os espectros obtidos pelo sensor de EFRx associado as técnicas de aprendizado de máquina (cubista e XGBoost) foram eficientes para a estimativa e delimitação de zonas específicas de manejo para Ca, Mg, SB, CTC, V% e MO.

Palavras-chave: Atributos do solo, Sensores proximais, Inteligência artificial, Variabilidade espacial, Pedometria.

CHAPTER 2 – ESTIMATION OF CHEMICAL ATTRIBUTES OF THE SOIL OF THE WESTERN PLANALTO OF PAULISTA BY FUSION OF X-RAY FLUORESCENCE SPECTRA

ABSTRACT – Maintaining ideal levels of soil chemical attributes is essential for increasing crop productivity, aiming for food security and agricultural sustainability. Inserted in this context, the present study aimed to estimate the levels of calcium (Ca), magnesium (Mg), sum of bases (SB), cation exchange capacity (CEC), base saturation (BS%) and organic matter (OM) using machine learning algorithms in order to delimit specific management zones. The study area was the Planalto Oeste Paulista (POP) with a total of around 13 million hectares. A total of 226 soil samples were used to study spatial variability. Physical (sand, silt and clay) and chemical analyzes (Ca, Mg, SB, CEC, BS and OM) were carried out and spectra of soil samples were obtained at two energy levels (15 kV and 50 kV). Descriptive statistics were performed and the attribute estimation was determined using machine learning algorithms (Cubista and XGBoost). Spatial variability was performed by interpolation using ordinary kriging. It was observed that the basalt and sandstone source material significantly influenced the physical and chemical attributes of the soil. Between the two machine learning algorithms used, the cubist model presented better estimates for the model testing period. The spatial variability maps obtained for the observed and predicted attributes for the machine learning algorithms were similar, indicating that the X-ray fluorescence spectroscopy (EFRx) sensor can be used for spatial characterization of the studied soil attributes. Thus, it can be concluded that the spectra obtained by the EFRx sensor associated with machine learning techniques (cubist and XGBoost) were efficient for estimating and delimiting specific management zones for Ca, Mg, SB, CEC, BS% and MO.

Keywords: Chemical attributes, Proximal sensors, Machine learning, Spatial variability, Pedometrics.

1. INTRODUÇÃO

O monitoramento da concentração das propriedades do solo é uma prática comum e importante para otimização das práticas de manejo agrícola que visam manter o solo em boas condições para alcançar altas produtividades, visando a segurança alimentar e a sustentabilidade agrícola (Brownlie et al., 2024). Os métodos tradicionais de análises químicas do solo são essenciais para sua caracterização. No entanto, as metodologias preconizadas para a caracterização dos indicadores químicos são metodologias onerosas, que demandam tempo e podem gerar subprodutos analíticos que necessitem de descarte adequado (Weindorf et al., 2014; Hu et al., 2014).

Visto a grande demanda por informações sobre o solo, dependendo da necessidade da resolução das informações a serem geradas e o tamanho da área de estudo, metodologias alternativas são propostas para uma coleta mais rápida a fim de atingir esses objetivos (Ribeiro et al., 2017; Pearson et al., 2018; Faria et al., 2020). A crescente utilização dos sensores proximais em todo o mundo, surge como uma solução prática para superar esses problemas (Schmidinger et al., 2024) complementando ou mesmo substituindo os métodos tradicionais (Then et al., 2024).

Com o advento da pedometria e a utilização de sensores que geram uma grande quantidade de dados, a técnica de aprendizado de máquina tem sido cada vez mais aplicada para estabelecer relações entre os atributos do solo e as medidas fornecidas pelos sensores (Bhatia et al., 2018; Zhang et al., 2020). A aplicação dos algoritmos de aprendizado de máquina tem sido utilizados com grande frequência nos últimos anos com foco na captura das relações que ocorrem entre as propriedades do solo e os dados obtidos pelos sensores, realçando as relações não lineares encontradas na natureza (Yang et al., 2018, Xu et al., 2019).

O sensor de espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx) têm se mostrado uma técnica espectrométrica promissora para a caracterização dos atributos da fertilidade do solo, sendo utilizada atualmente para estabelecer relações com os atributos com mínima preparação de amostras (Nocita et al., 2015; Silva et al., 2021; Santos et al., 2023). Apesar da EFRx fornecer nas suas medidas espectrais dados que representam os conteúdos totais dos elementos presentes nas amostras

analisadas, a mesma tem sido usada como dados de entrada para a predição de atributos do solo em várias subáreas, a exemplo na física do solo, com a predição da textura (Zhu et al., 2011), pedologia na classificação de solos (Weindorf et al., 2012; Stockmann et al., 2016), contaminação do solo (Horta et al., 2015; Paulette et al., 2015; Chakraborty et al., 2017) e fertilidade do solo (Sharma et al., 2015).

Com foco na estimativa dos atributos do solo por meio da Fluorescência de raios-X, estudos pioneiros foram desenvolvidos em condições de clima temperado, a citar exemplos como Zhu et al. (2009) na estimativa dos teores de Ca, Weindorf et al. (2009) estimando o CaCO_3 ; Sharma et al. (2015) na estimativa do pH e CTC do solo e Wang et al. (2015) estimando o C orgânico do solo. Nos solos tropicais, pesquisas vêm sendo desenvolvidas no intuito de entender as relações da EFRx e os atributos químicos do solo. Lima et al. (2019) utilizou a regressão linear múltipla para estimar os atributos da fertilidade de solos do Cerrado brasileiro. Pelegrino et al. (2019) realizaram a estimativa de micronutrientes (Fe, Cu, Mn e Zn) obtendo bons resultados usando o algoritmo Random Forest. Benedet et al. (2021) estimaram os elementos disponíveis Ca, Mg, P, K e Al por meio de aprendizado de máquina de amostras de solo oriundas de vários estados brasileiros.

Os estudos anteriormente citados balizam a aplicabilidade desse sensor para estimativas dos atributos da fertilidade nos solos tropicais úmidos. No entanto, até onde se sabe, a EFRx não foi aplicada em áreas com ampla variação geológica e pedológica como o Planalto Ocidental Paulista para fins de mapeamento. Temos como hipótese, que os dados espectrais obtidos pelo sensor de fluorescência de raios-X podem auxiliar de forma alternativa a delimitação de zonas específicas de manejo dos atributos químicos do solo. Assim, objetivou-se com o presente estudo, estimar e delimitar zonas específicas de manejo dos atributos químicos Ca, Mg, SB, CTC, V% e MO por meio de algoritmos de aprendizado de máquina.

2. Material e métodos

2.1 Localização e caracterização da área de estudo

O estudo foi desenvolvido no Planalto Ocidental Paulista (POP), que

corresponde há aproximadamente 13 milhões de hectares (~ 48% do Estado de São Paulo) (Figura 1). Na região Norte e Noroeste do POP prevalece o clima tropical com estação seca de inverno, enquanto na região Sul prevalece o clima temperado úmido com verão quente. Na parte Leste e Sudeste o clima é temperado úmido com inverno seco e verão quente. A vegetação natural da área é a Mata Atlântica na região Oeste e Cerrado na região Leste e Sudoeste. Sendo o uso atual mais representativo o cultivo de cana-de-açúcar e áreas de pastagem.

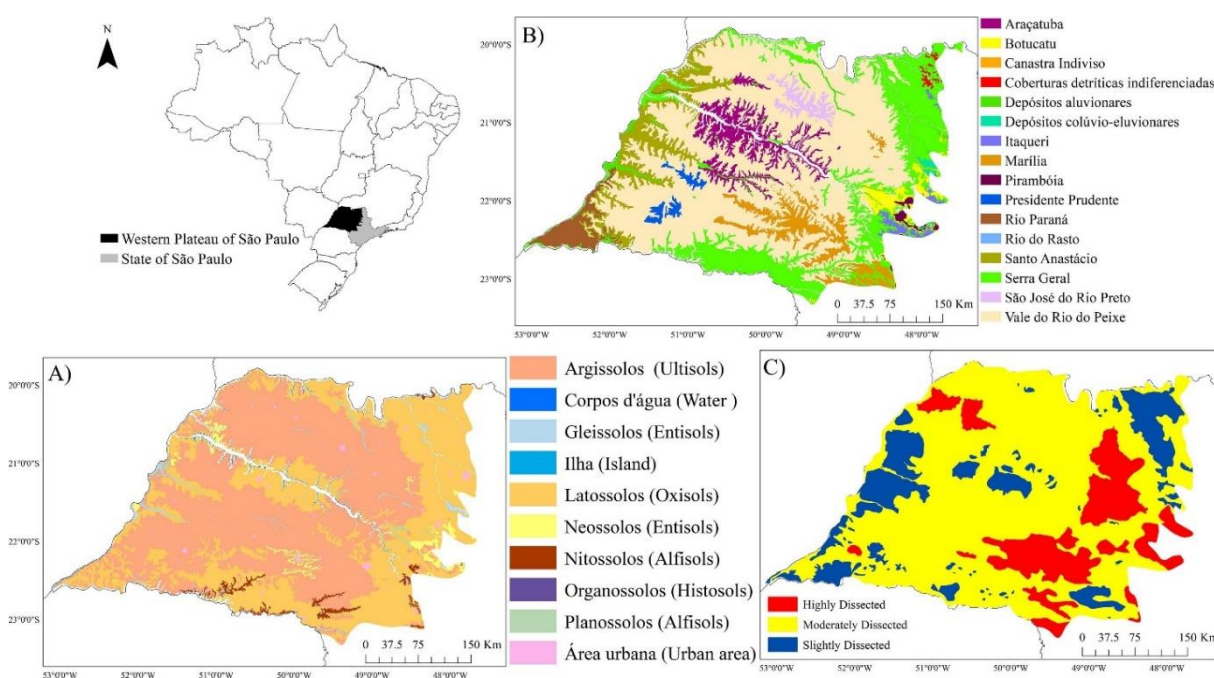


Figura 1. a) Mapa pedológico do Planalto Ocidental Paulista. (Fonte: Instituto Agrônômico de Campinas). Entre parênteses está a equivalência do soil taxonomy (USDA 2014). b) Mapa geológico do Planalto Ocidental Paulista (Fernandes, 2004, Fernandes et al., 2007). c) Mapa de dissecação do Planalto Ocidental Paulista.

O esboço geológico é caracterizado principalmente por sedimentos arenosos, argilosos e cascalho, rochas vulcânicas de composição básica e sequências sedimentares, principalmente psamíticas, podendo incluir piroclásticas (Figura 1b). Dos 13 milhões de hectares de solos do POP, aproximadamente 2 milhões hectares são ocupados por basalto da formação Serra Geral (15,5%), 7,4 de milhões hectares pela Formação Vale do Rio do Peixe (57,1%) e 3,6 milhões de hectares pelas outras formações sedimentares (27,5%).

As formações geológicas do POP são divididas em dois Grupos: (I) Grupo Caiuá composto pelas formações Santo Anastácio e Rio Paraná no Estado de São Paulo, correspondentes a depósitos de lençóis de areia, de clima seco, acumulados em extensas e planícies desérticas, marginais com grandes complexos de dunas do deserto Caiuá, que se estende para região Norte do Estado do Paraná e, (II) Grupo Bauru composto pelas formações Uberaba, Vale do Rio do Peixe, Araçatuba, São José do Rio Preto, Presidente Prudente e Marília e com analcimitos Taiúva, rochas vulcânicas localmente intercaladas na sequência (Fernandes, 2004; Fernandes et al., 2007).

Os solos de maior ocorrência são classificados como Argissolo Vermelho-Amarelo, Latossolo Férrico, Neossolo Litólico, Nitossolo Vermelho e Gleissolo Háplico (Figura 1A) (Rossi et al., 2017). A Figura 1c mostra a geomorfologia da área estudada. Os predomínios da região são de áreas moderadamente dissecadas. O nível de dissecação expressa a evolução solo-paisagem (Figura 1c), que é associada a pedogênese (taxa de formação do solo) e geomorfogênese (taxa de evolução da paisagem). As áreas geologicamente relacionadas ao basalto estão associadas ao compartimento pouco dissecado. Enquanto áreas de arenito mais associadas ao compartimento moderadamente dissecado. Para o delineamento dos compartimentos de dissecação foi utilizado o mapa de relevo do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE) (Fernandes e Coimbra, 2000) e com auxílio da metodologia proposta por Vasconcelos et al. (2012).

2.2 Planejamento amostral

Foram utilizadas 226 amostras de solo georreferenciadas no POP para o estudo da variabilidade espacial dos atributos mineralógicos, físicos e químicos na profundidade de 0,0-0,2 m. Com base no arquivo de rodovias do Estado fornecidas pelo Departamento de Estradas e Rodagem, foi elaborado o plano de amostragem utilizando a ferramenta ET GeoWizards no ArcView 9.3. O espaçamento mínimo e máximo variou de 10 a 60 km, respectivamente. As amostras foram coletadas ao longo das rodovias do Estado, em locais representativos dos solos e da geologia. As informações das coordenadas de cada ponto foram definidas previamente e

inseridos em um GPS de navegação com precisão de três a cinco metros.

2.3 Análises laboratoriais

2.3.1 Granulometria

A granulometria do solo foi determinada pelo método da pipeta utilizando solução de NaOH 0,1 mol L⁻¹ como dispersante químico e agitação mecânica em aparelho de baixa velocidade por 16 h (Teixeira et al., 2017).

2.3.2 Análises químicas

As amostras de solo foram secas ao ar e passadas em peneira de 2 mm de abertura de malha para a determinação dos atributos químicos do solo (MO, pH, H+Al, Ca, Mg e K), seguindo os protocolos analíticos descritos por Raij et al. (2001). A matéria orgânica foi determinada após oxidação com K₂Cr₂O₇ em presença de H₂SO₄ e titulação do excesso de dicromato com a solução de Fe (NH₄)₂(SO₄)₂·6H₂O 0,4 mol L⁻¹. O pH foi medido potenciométricamente em 1:2,5 de solo: 0,01 mol L⁻¹ de CaCl₂ e os cátions trocáveis foram extraídos por resina de troca iônica. Os teores de Ca e Mg foram quantificados por espectrofotometria de absorção atômica (EAA). O potássio (K⁺) foi determinado por fotometria de chama. A acidez potencial (H⁺+Al³⁺) foi estimada pelo método do pH SMP. Diante desses resultados, foram calculadas a soma de bases (SB), a capacidade de troca catiônica total (CTC) a pH 7,0 e a saturação por bases (V).

2.3.3 Espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx)

As amostras de solo foram secas ao ar, trituradas e passadas em peneira de malha de 2,0 mm, obtendo-se a terra fina seca ao ar (TFSA). A TFSA foi posteriormente macerada e homogeneizada e escaneados no equipamento, modelo NexQc da marca Rigaku. As amostras foram irradiadas na atmosfera do ar, utilizando um tubo de raios X Rh operado a 15 kV (Na - Sc) por 200 segundos e 50 kV (Ti - U)

por 250 segundos, com detector de desvio de silício (SDD) com uma resolução < 145 , obtendo-se assim uma excitação adequada para uma ampla gama de elementos.

A voltagem de 15 kV favorece a fluorescência de elementos na faixa de Na-Sc e 50 kV é mais apropriada para elementos mais pesados na faixa Ti-Fe. Para fins de avaliação da detecção do conteúdo elementar da amostra pela EFRx, materiais do solo certificados pelo Serviço Geológico dos Estados Unidos (USGS): BCR-2, DNC-1, QLO-1a, SDC-1 e W-2A (Flanagan, 1969; Jochum et al., 2016) foram utilizados para calibrar o equipamento.

2.4 Processamento e análise de dados

2.4.1 Estatística descritiva

Os atributos granulométricos e químicos do solo foram analisados previamente, calculando-se os valores de medianas, desvio-padrão, assimetria, curtose, coeficiente de variação, mínimo e máximo para os solos desenvolvidos de basalto e arenito. As comparações das medianas para os dois materiais de origem foram realizadas pelo teste de Mann-Whitney a 5%. Por meio da correlação de Spearman verificou-se o nível de correlação entre os atributos do solo. Todos os dados foram processados no software estatístico R Core Team (2022) com auxílio dos pacotes: rstatix (Kassambara, 2020) e corrplot (Wei e Simko, 2017).

2.4.2 Pré-processamento das curvas espectrais

Etapas 1: Os dados das duas curvas espectrais obtidas na voltagem de 15 KeV e 50 KeV espectrais foram concatenados (Figura 2). A voltagem de 15 kV favorece a fluorescência de elementos na faixa de Na-Sc e 50 kV, sendo a mais apropriada para elementos mais pesados na faixa Ti-Fe (Silva et al., 2021).

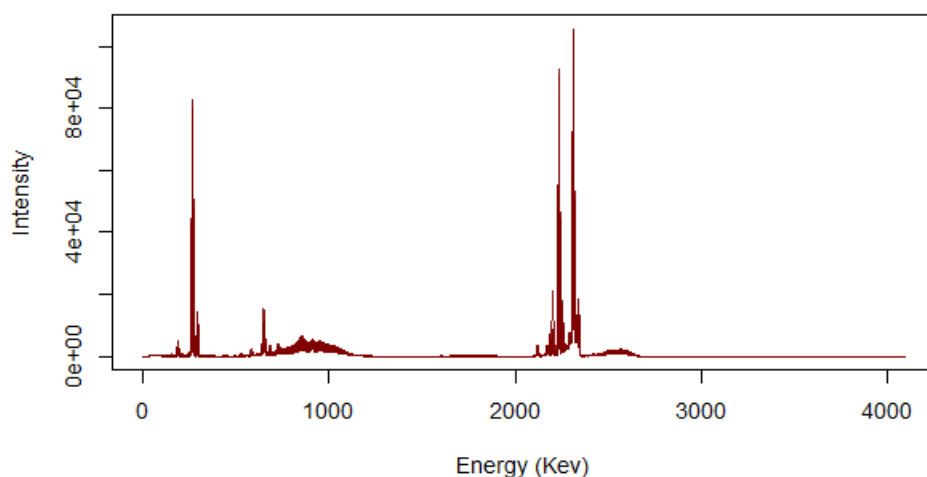


Figura 2: Espectros da espectrometria de fluorescência de raios-X concatenados.

Etapa 2: Realizou-se uma análise contínua em todo o espectro obtido para a retirada de todas as colunas que apresentam somatório igual a zero e ruídos providos durante o período da análise (Figura 3) (Weindorf et al., 2020).

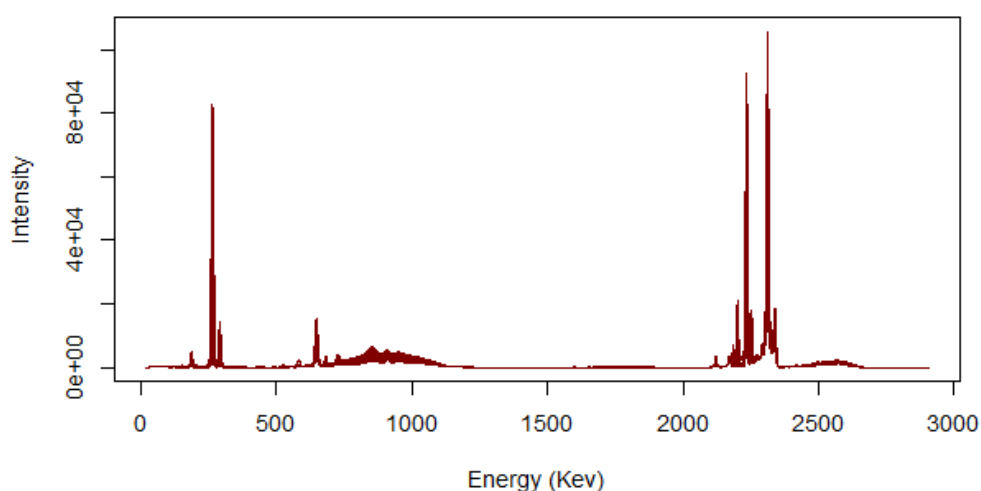


Figura 3: Espectros da espectrometria fluorescência de raios-X concatenados após remoção das colunas de baixo sinal espectral.

Etapa 3: Os espectros de reflectância foram transformados em absorvância usando a fórmula $\log_{10}(1/R)$, onde R é a reflectância obtida, tornando evidente os picos dos elementos presentes. Quando os espectros são usados para extrair informações do solo por meio de modelagem, os mesmos são melhor expressos em termos de absorvância em vez de unidades de reflectância (Gobrecht et al., 2015) (Figura 4).

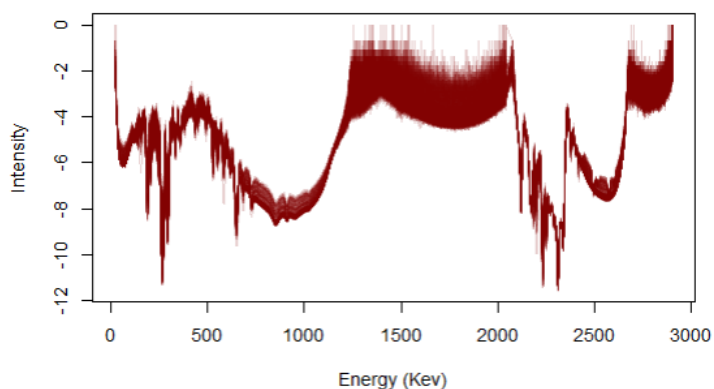


Figura 4: Espectros da espectrometria de fluorescência transformados em absorvância.

Etapa 4: Após a transformação para absorvância, foi realizada a redução da dimensão dos espectros, mantendo a absorção das características mais importantes. Para redução da dimensão foi usada a técnica da reamostragem e cálculo da média, para a reamostragem aqui realizada foi utilizada uma janela de tamanho 5, reduzindo as curvas espectrais para 578 informações (Figura 5).

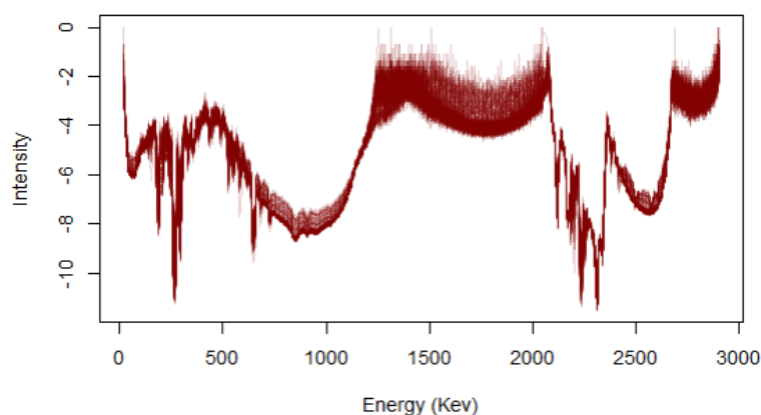


Figura 5: Espectros da espectrometria de fluorescência de raios-X após aplicação da técnica de reamostragem.

Etapa 5: Foi realizada a transformação da variável normal padrão (VNP) que corrige o espalhamento de luz (Barnes et al., 1989). Os espectros são normalizados ou dimensionados para média zero e variância unitária (Figura 6).

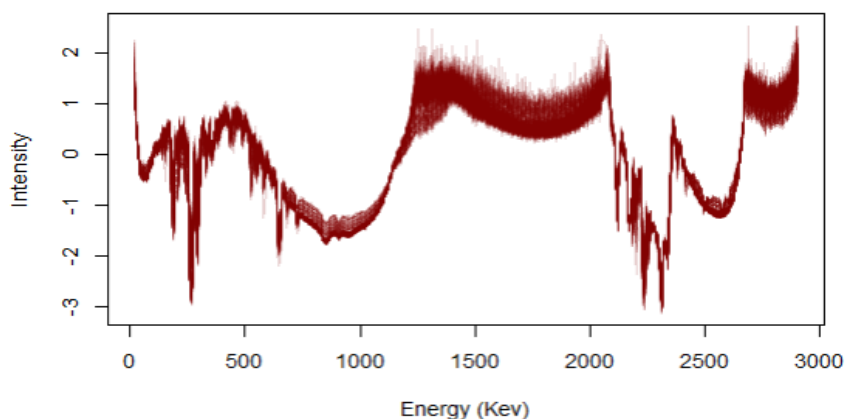


Figura 6: Espectros da espectrometria de fluorescência de raios-X após centralização.

Etapa 6: Para finalização do pré-processamento, foi realizado a operação de janela móvel, na qual cada valor de comprimento de onda é considerado como as médias dos comprimentos de onda vizinhos. Os espectros originais são suavizados, reduzindo o ruído que contém no espectro. O espectro passa a ter um total de 569 informações (Figura 7).

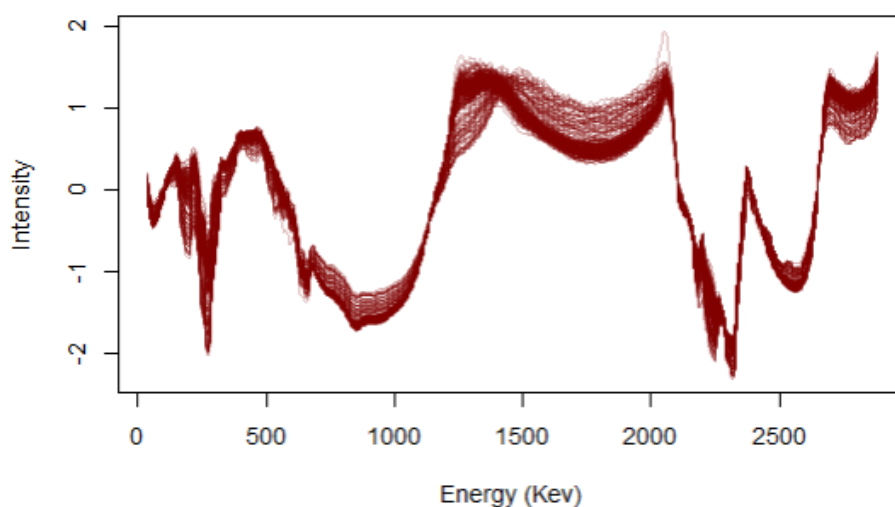


Figura 7: Espectros de espectrometria de fluorescência de raios-X após remoção de ruído.

2.4.3 Aprendizado de máquina

A predição dos atributos MO, Ca, Mg, SB, CTC, V% foram obtidas por meio dos espectros do sensor de fluorescência de raios-X utilizando os algoritmos de

aprendizado de máquina: cubista e extreme gradient boosting (XGBoost), utilizando as amostras de solos coletadas e representativas da área de estudo.

Os preditores utilizados compreendem os sinais espectrais (representados com energia em keV restantes ao fim do pré-processamento ($X = 569$ preditores) para cada amostra analisada. Já as variáveis alvo foram os valores obtidos na análise dos atributos do solo para as 226 amostras.

Os dois modelos utilizados (Cubista e Boosting) são baseados em árvores de decisão. O modelo cubista (modelo 1) é baseado em regras que permitem explorar relações não lineares em dados observados. É um algoritmo de modelo de árvore baseado na teoria M5 (Quinlan, 1992) e particiona as variações do preditor em diferentes subconjuntos de acordo com uma série de regras e cada regra representando um modelo linear multivariado do preditor (Kuhn et al., 2016).

Extreme Gradient Boosting (XGBoost) (modelo 2) é um algoritmo híbrido do modelo de árvore, aplicado a previsões de regressão e classificação. É um modelo *ensemble* que funciona com base na previsão de várias árvores, que é altamente eficaz e amplamente utilizado (Chen e Guestrin, 2016). Seu mecanismo de trabalho escalável é baseado em estágios com aumentos no número de árvores. Um aspecto diferencial do modelo é sua capacidade de lidar com banco de dados com grande quantidade de variáveis e observações.

O banco de dados foi padronizado para apresentarem média nula e variância unitária, transformando todas as variáveis para mesma ordem de grandeza. Para realizar a predição, o banco de dados foi dividido em treino e teste. Assim, 70% dos dados ficaram para treinamento do modelo e 30% para o teste do mesmo utilizando parâmetros distintos para cada algoritmo (Tabela 1). Para evitar ajuste excessivo dos modelos (overfitting) foi aplicado uma validação cruzada com k-fold = 5, que divide o banco de dados de treino em cinco para avaliação interna do modelo.

Tabela 1. Parâmetros e valores testados para calibração dos algoritmos.

Cubista	
Parâmetros	Valores testados
committees	10,20,21,22,23,24,25,26,27,28,29,30
neighbors	0, 1,2,3, 5, 9
XGBoosting	
Parâmetros	Valores testados
nrounds	50,100,150
eta	0.025, 0.05,0.3
max_depth	2,4
gamma	0
colsample_bytree	1
subsample	1
min_child_weight	1

Os modelos gerados foram avaliados por meio do coeficiente de determinação ajustado (R^2) e raiz do erro quadrático médio (RMSE). Os modelos preditivos foram desenvolvidos usando o pacote Caret (Kuhn, 2008) por meio dos algoritmos: “Cubist” (Quinlan e Ross, 1993) e Xgbtree (Chen e Guestrin, 2016) utilizando linguagem de programação R (R Development Core Team, 2020).

2.4.4 Análise geoestatística

A análise da dependência espacial dos dados foi realizada por meio da geoestatística (Vieira et al., 1983). O semivariograma experimental foi calculado de acordo com Oliver e Webster (2014) por meio da seguinte equação:

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [z(x_i) - z(x_i + h)]^2 \quad (1)$$

em que: $\hat{\gamma}(h)$ é a semivariância na distância h ; $N(h)$ é o número de pares envolvidos para calcular h ; $Z(x_i)$ é o valor atributo Z na posição x_i , e $Z(x_i + h)$ é o valor do atributo Z separado por uma distância h da posição x_i .

Os resultados dos variogramas experimentais foram submetidos ao ajuste de modelos teóricos: modelo esférico, exponencial e gaussiano. O grau de dependência espacial (GDE) foi estimado a partir da razão entre o efeito pepita (C_0) e o patamar ($C_0 + C_1$). O GDE foi considerado forte, moderado ou fraco quando a razão $[C_0/(C_0+C_1) \times 100]$ foi de menor que 25%, 25-75% ou superior a 75%, respectivamente

(Cambardella et al., 1994). Após a modelagem e escolha do melhor modelo teórico ajustado aos dados, os valores correspondentes aos pontos não amostrados foram estimados pela técnica de interpolação da krigagem ordinária usando pacote gstat (Pebesma, 2001). Os mapas de variabilidade espacial dos atributos foram processados utilizando os seguintes pacotes: pacote sp (Pebesma e Bivand, 2005); pacote maptools (Bivand et al., 2023) e pacote raster (Hijmans et al., 2013). Os processamentos dos dados geoestatísticos foram realizados utilizando linguagem de programação R (R Development Core Team, 2020).

3. Resultados e Discussão

3.1 Estatística descritiva dos atributos do solo

Os solos originados de basalto apresentaram os maiores teores de argila (426 g kg^{-1}) e silte (154 g kg^{-1}). Já os solos de arenito apresentaram os maiores teores de areia em sua composição (780 g kg^{-1}) (Tabela 2). O comportamento observado para a granulometria do solo ocorre devido aos solos originados de rochas ígneas (basalto), que possuírem baixo teor de sílica e alto teor de minerais ferromagnesianos, que após a sua transformação por meio do intemperismo, resultam na formação de minerais secundários presentes na fração argila, como a caulinita, gibbsita e os óxidos de ferro (Schwertmann, 1988; Waroszewski et al., 2019; Fruett et al., 2022).

Os maiores teores da matéria orgânica estão presentes nos solos originados de basalto ($\text{MO} = 29,0 \text{ g kg}^{-1}$). Esses resultados acompanham o comportamento da quantidade de argila do solo (Tabela 2). A argila auxilia na conservação e proteção da matéria orgânica do solo por meio das cargas de superfície (Barré et al., 2017; Singh et al., 2018). Em adição, os argilominerais presentes na fração argila em diferentes proporções também fazem associação com a matéria orgânica formando microagregados, que contribuem para a estabilização e conservação da matéria orgânica (Churchman, 2018; Gartzia-Bengoetxea et al., 2020).

Tabela 2. Estatística descritiva dos atributos químicos estudados do Planalto Ocidental Paulista na profundidade de 0-20 cm.

	Mediana	Desvio Padrão	Assimetria	Curtose	CV	Min-Max
SOLOS ORIGINADOS DE BASALTO						
Areia (g kg ⁻¹)	393,00 B	197,7	0,27	-0,80	47,2	95,89 - 832,00
Silte (g kg ⁻¹)	154,00 A	104,7	1,2	1,13	33,5	32,00 - 472,48
Argila (g kg ⁻¹)	426,00 A	133,5	-0,44	-0,77	57,13	125,00 - 610,00
MO (g dm ⁻³)	29,00 A	11,44	0,30	-0,33	40,7	10,00 - 58,00
Ca (mmol _c dm ⁻³)	35,00 A	16,5	0,55	0,20	45,7	6,00 - 80,00
Mg (mmol _c dm ⁻³)	20,00 A	11,6	2,28	9,38	55,5	4,00 - 74,00
SB (mmol _c dm ⁻³)	99,40 A	26,49	0,66	1,00	43,2	10,80 - 140,40
CTC (mmol _c dm ⁻³)	65,10 A	27,07	0,10	0,46	28,10	38,80 - 164,40
V (%)	62,00 B	15,41	-0,88	0,81	24,79	21,91 - 90,35
SOLOS ORIGINADOS DE ARENITO						
Areia (g kg ⁻¹)	780,00 A	104,4	-2,11	7,29	13,65	182,11 - 926,98
Silte (g kg ⁻¹)	94,20 B	74,14	2,68	10,00	69,10	13,00 - 500,24
Argila (g kg ⁻¹)	110,00 A	73,76	2,82	12,90	57,49	24,00 - 628,00
MO (g dm ⁻³)	14,00 B	6,3	1,39	2,78	41,47	9,00 - 44
Ca (mmol _c dm ⁻³)	22,00 B	13,82	1,38	2,32	64,44	2,00 - 75,00
Mg (mmol _c dm ⁻³)	18,00 B	62,25	2,02	7,41	62,25	2,00 - 49,00
SB mmol _c dm ⁻³)	30,50 B	20,57	1,36	2,68	58,23	5,60 - 122,70
CTC (mmol _c dm ⁻³)	55,40 B	20,98	1,07	1,60	35,6	23,40 - 140,70
V (%)	57,70 B	16,88	-0,36	-0,59	29,68	11,77 - 88,25

²Mediana seguida pela mesma letra maiúscula na coluna não diferem pelo teste de Mann-Whitney a 5% entre as geologias. MO: Matéria orgânica; Ca: Cálcio; Mg: Magnésio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de catiônica; V%: Saturação por bases; CV: Coeficiente de variação. Min-Max: Valores mínimo e máximo.

Os maiores teores de Ca e Mg, soma de bases (SB) e saturação por bases (V%) foram encontrados nos solos originados de basalto (Tabela 2). Tal fato, ocorre devido à maior quantidade de argila que são responsáveis pela conservação da matéria orgânica e retenção de cátions em sua superfície (Zinn et al., 2020; Lima et al., 2022). A capacidade de troca catiônica também é maior para os solos de basalto (Tabela 2). Barré et al. (2017) associa que o aumento das cargas dos solos de basalto tem relação com a abundância de argila e a conservação do material orgânico que auxiliam no incremento de cargas para os solos de basalto (Feng et al., 2013; Wiesmeier et al. 2019).

Ao analisar os valores de assimetria e curtose para os atributos do solo separados pela geologia estudada, observa-se que os solos do material de origem arenito possuem valores maiores para ambas as medidas analisadas (Tabela 2). O comportamento aqui encontrado é resultado da maior representatividade de formações geológicas originadas de rochas areníticas, em torno de 15 formações

diferentes, frente a apenas uma formação geológica representando os solos originados de rochas basálticas (Fernandes, 2004; Fernandes et al., 2007).

A amplitude dos atributos inferida pelo coeficiente de variação (CV) também demonstrou ampla variação (Tabela 2), confirmando que a geologia influencia de forma expressiva os pedogênicos (granulométricos) ou químicos do solo. Tal influência também já foi reportada em estudos anteriores sobre mineralogia e classes de solo (Silva et al., 2020; Fernandes et al., 2020).

3.2 Correlação entre os atributos do solo

O atributo areia apresentou correlações significativas e negativas com silte ($r = -0.74, p < 0,01$), argila ($r = -0,77, p < 0,01$), MO ($r = -0,53, p < 0,01$), Ca ($r = -0,43, p < 0,05$), Mg ($r = -0,44, p < 0,05$), SB ($r = -0,45, p < 0,05$), CTC ($r = -0,53, p < 0,01$). No silte observou-se correlações positivas com MO ($r = -0,38, p < 0,05$), Ca ($r = -0,43, p < 0,05$), Mg ($r = -0,39, p < 0,05$), K ($r = -0,38, p < 0,05$), SB ($r = -0,44, p < 0,05$), e CTC ($r = -0,44, p < 0,05$). A argila apresentou correlações significativas para a MO ($r = -0,45, p < 0,01$) e a CTC ($r = -0,40, p < 0,05$) (Figura 8). As correlações obtidas para a granulometria *versus* atributos químicos demonstram que a medida que ocorre a redução do tamanho das partículas do solo (silte e argila) ocorre maior conservação do material orgânico e das bases que estão ligadas em suas cargas de superfície (Meliyo et al., 2016; Désiré Tsozué et al., 2019).

A MO apresentou correlação positiva significativa com o Mg ($r = -0,48, p < 0,05$), SB ($r = -0,48, p < 0,05$) e a CTC ($r = -0,58, p < 0,01$) (Figura 8). A relação obtida entre as bases e as cargas do solo com a matéria orgânica ocorre principalmente devido a fração argila dos solos tropicais úmidos possuírem em sua grande maioria minerais de baixa atividade química, com baixa CTC natural, nessas condições a maioria das cargas negativas são originárias da superfície dos colóides da MO, o que explica a correlação entre a CTC e MO nos solos das regiões tropicais (Xu et al., 2014; Domingues et al., 2020).

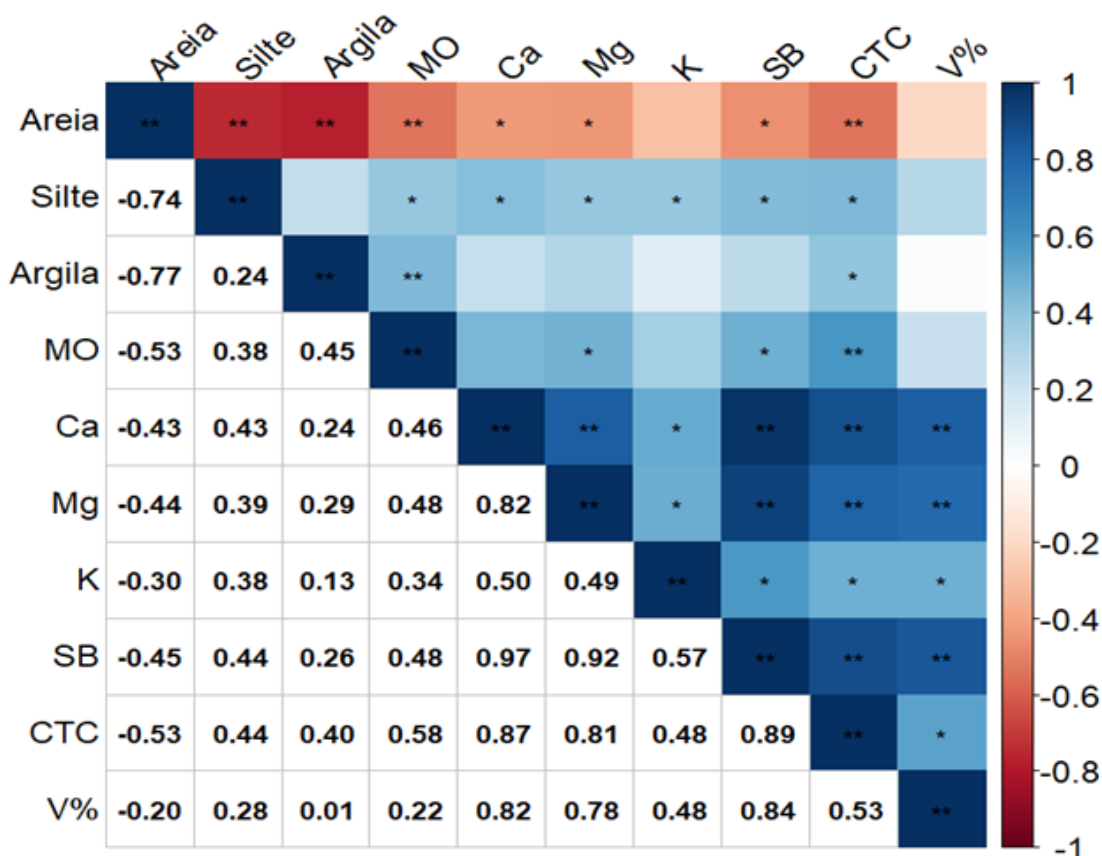


Figura 8: Correlação entre os atributos granulométricos e químicos do solo. MO: Matéria Orgânica; Ca: Cálcio; Mg: Magnésio; K: Potássio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de cátions; V%: Saturação por bases. ** e * - Significativo a 1 e 5%.

Os nutrientes Ca, Mg e K apresentaram correlações positivas entre si, como esperado: (Ca e Mg; $r = -0,82$, $p < 0,01$); (Ca e K; $r = -0,50$, $p < 0,05$); (Mg e K; $r = -0,49$, $p < 0,05$). A correlação entre a SB e CTC foi de $r = -0,80$ ($p < 0,05$). Já a correlação entre SB e V% foi de $r = -0,84$ ($p < 0,05$) (Figura 8). A correlação conhecida entre esses elementos está ligada principalmente aos sítios de ligação em comum onde esses elementos estão presentes no solo, seja eles na superfície dos minerais ou dos colóides orgânicos (Hailegnaw et al., 2019).

3.3 Estimativa dos atributos químicos do solo

As métricas e gráficos de desempenho da estimativa dos atributos químicos do solo por meio de espectros de EFRx usando os algoritmos cubista e XGBoost são apresentados na Tabela 3 e Figuras 9 e 10, respectivamente. Os dados para o período

de teste dos modelos das estimativas apresentaram os maiores valores de coeficientes de determinação (R^2) para as estimativas obtidas pelo algoritmo cubista. Para o algoritmo cubista os resultados obtidos foram: MO ($R^2 = 0,45$ e RMSE = 6,25); Ca ($R^2 = 0,54$ e RMSE = 9,9); Mg ($R^2 = 0,55$ e RMSE = 5,36); (SB) ($R^2 = 0,55$ e RMSE = 15,13); CTC ($R^2 = 0,45$ e RMSE = 19,56) e V% ($R^2 = 0,38$ e RMSE = 15,24)

Para as estimativas obtidas pelo algoritmo XGBoost os resultados foram: MO ($R^2 = 0,35$ e RMSE = 5,53); Ca ($R^2 = 0,41$ e RMSE = 11,17); Mg ($R^2 = 0,40$ e RMSE = 5,67); SB ($R^2 = 0,44$ e RMSE = 16,84); CTC ($R^2 = 0,48$ e RMSE = 18,95) e V% ($R^2 = 0,30$ e RMSE = 16,87). Comparando os valores de acurácia dos modelos (RMSE), os menores valores foram representados pelo modelo cubista para a maioria dos atributos, com exceção para os atributos CTC e MO, nos quais os menores valores foram obtidos para o modelo XGBoost.

Tabela 3. Métricas de avaliação dos modelos cubista e extreme gradient boosting (XGBoost) e para os atributos químicos do solo.

Atributo	CUBISTA				XGBOOST			
	Treino		Teste		Treino		Teste	
	R^2	RMSE*	R^2	RMSE*	R^2	RMSE*	R^2	RMSE*
MO	0,66	5,24	0,45	6,75	0,76	3,21	0,35	5,53
Ca	0,70	7,76	0,54	9,9	0,68	7,89	0,41	11,17
Mg	0,61	4,06	0,55	5,36	0,66	3,64	0,40	5,67
SB	0,70	12,04	0,55	15,13	0,73	11,45	0,44	16,84
CTC	0,67	14,22	0,45	19,56	0,86	9,24	0,48	18,95
V%	0,54	11,08	0,38	15,24	0,79	7,52	0,30	16,87

*RMSE - raiz do erro quadrático médio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de cátions; V%: Saturação por bases; MO: Matéria Orgânica; Ca: Cálcio; Mg: Magnésio.

Em solos subtropicais do Sul do Brasil, Fontenelli et al. (2021) estimando os atributos químicos por meio dos espectros de EFRx usando regressão parcial dos mínimos quadrados (PLSR) encontraram valores de precisão semelhantes aos encontrados no presente estudo, com valores de R^2 em torno de 0,50 para a MO e CTC, e valores de RMSE = 5,51 para a MO e RMSE = 9,0 para a CTC. Tais resultados, demonstram que apesar da dimensão territorial do Planalto Ocidental Paulista (13 milhões de ha), os modelos desenvolvidos apresentam desempenho satisfatório as áreas agrícolas de menor dimensão. Porém, quando se observa os valores obtidos no presente estudo para os teores de cálcio e magnésio com R^2 superiores (Ca = $R^2 > 0,41$ e Mg = $R^2 > 0,40$) aos encontrados por Fontenelli et al.

(2021), podemos afirmar que modelos mais robustos (cubista e XGboost) apresentam melhores estimativas

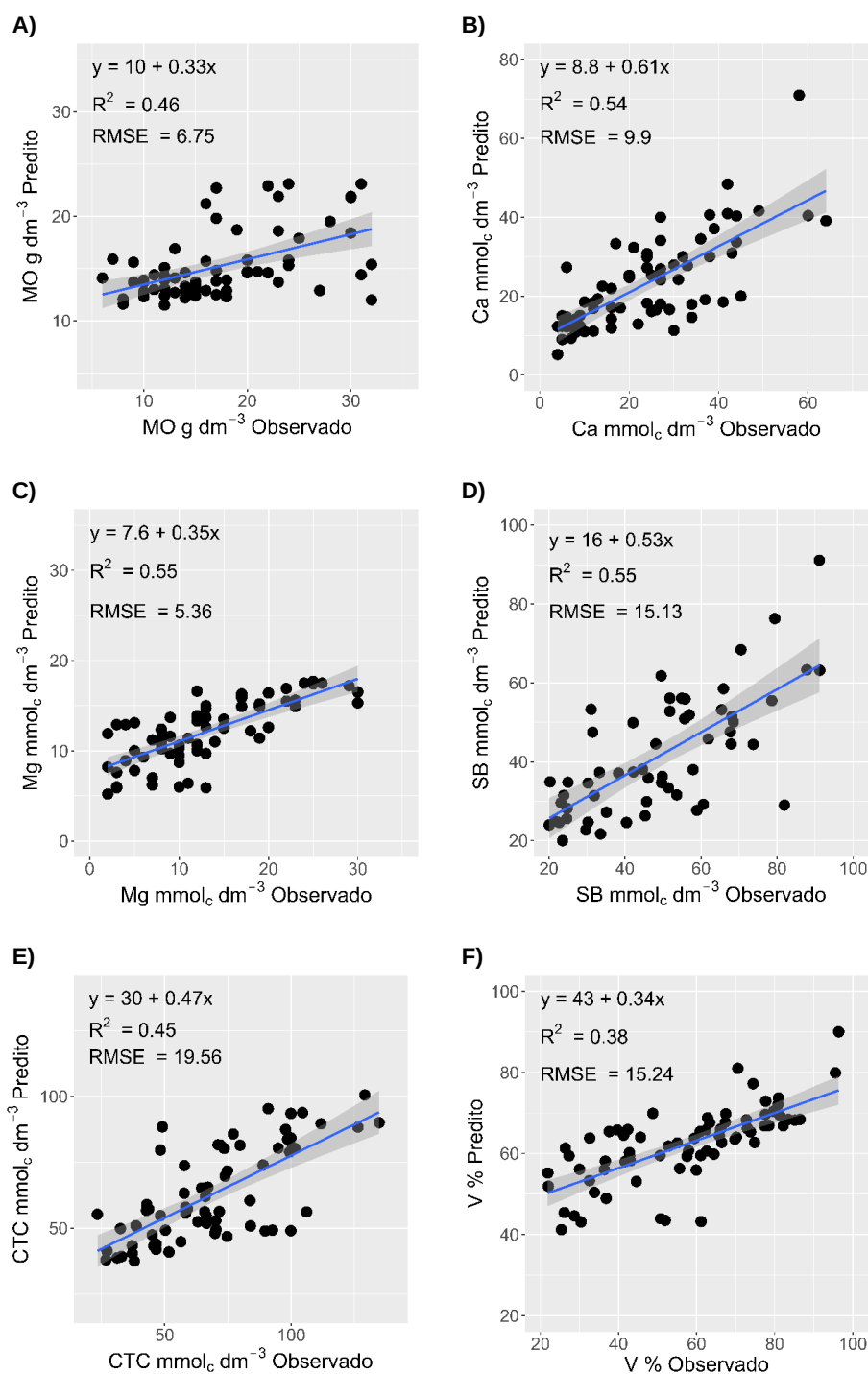


Figura 9. Desempenho do modelo cubista para estimativa da: (A) Matéria Orgânica; (B) Cálcio (C) Magnésio (D) Soma de Bases; (E) Capacidade de Troca Catiônica e (F) Saturação por bases.

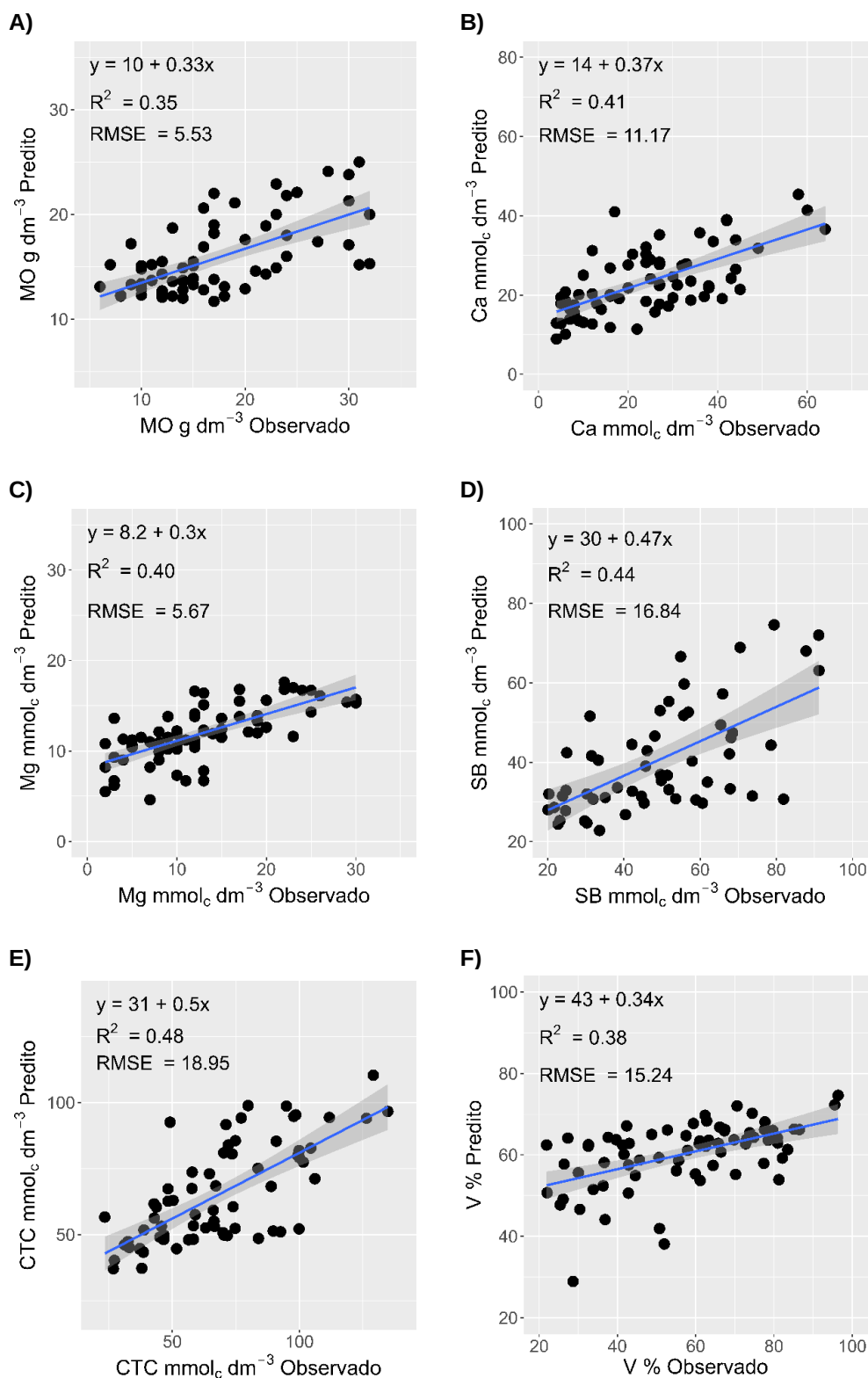


Figura 10. Desempenho do modelo cubista para estimativa da: (A) Matéria Orgânica; (B) Cálcio (C) Magnésio (D) Soma de Bases; (E) Capacidade de Troca Catiônica e (F) Saturação por bases.

O modelo cubista foi utilizado por O'Rourke et al. (2016) para a predição dos atributos químicos nos solos da Austrália, os autores obtiveram os seguintes resultados para a CTC ($R^2 = 0,78$ e $RMSE = 21,5$); Ca ($R^2 = 0,51$ e $RMSE = 19,5$) e Mg ($R^2 = 0,53$ e $RMSE = 24,1$). Os resultados encontrados pelos autores para a CTC do solo apresentaram maior valor de precisão (R^2), porém, os valores de acurácia encontrados no presente estudo foram menores (cubista $RMSE = 19,56$; XGBoost $RMSE = 18,95$), demonstrando que os modelos obtidos são robustos comparados aos desenvolvidos em outras pesquisas. Para a estimativa de Ca e Mg, o estudo desenvolvido por O'Rourke et al. (2016) obteve melhores valores de acurácia ($RMSE$). Os autores reforçaram que a variação das estimativas obtida para cátions trocáveis está relacionada a variação dos princípios de medição da EFRx, que estão relacionados ao teor total do elemento determinado, com isso, dependem da variação da matriz do solo de cada região de estudo.

Testando a EFRx para a estimativa da CTC em solos da China usando o modelo PLSR, Wan et al. (2022) obtiveram resultados de $R^2 = 0,50$ e $RMSE = 53,0$, que foram semelhantes aos encontrados para esta pesquisa. Os autores reforçaram que os valores de precisão (R^2) e acurácia ($RMSE$) foram maiores quando usaram espectros de EFRx e VIS-NIR juntos, com aumento das métricas para $R^2 = 0,72$ e $RMSE = 40,0$.

Estudando a matéria orgânica, Zhao et al. (2018) encontraram valores de $R^2 = 0,52$ e $RMSE = 2,5$ por meio de modelagem com a regressão dos mínimos quadrados parciais, demonstrando que as estimativas obtidas pelo modelo cubista no presente estudo são semelhantes aos valores reportados em outros estudos.

3.4 Mapeamento dos atributos químicos obtidos e estimados pelo aprendizado de máquina com os algoritmos Cubista e XGBoost

O modelo esférico foi o que melhor se ajustou aos variogramas experimentais (Tabela 4). Tal comportamento indica que a variabilidade espacial das propriedades do solo é menos errática em pequenas escalas (Khan et al., 2021). O modelo esférico é caracterizado por se ajustar as variáveis que possuem mudanças abruptas no espaço (Isaaks e Srivastava, 1989). As mudanças abruptas podem estar relacionadas

ao material de origem (Teixeira et al., 2018), tipos de solo (Silveiro et al., 2019) ou a mineralogia do solo (Fernandes et al., 2020, Silva et al., 2020).

Tabela 4. Métricas geoestatísticas para os atributos químicos obtidos e estimados na profundidade de 0,0 - 0,2 m, para os solos do Planalto Ocidental Paulista.

	Atributo	Modelo	C ₀	C	A ₀ (km)	SQR	GDE (%)
Observado	Ca	Esférico	122,95	41,47	110,39	2,25e-05	74,70
	Mg	Esférico	28,56	10,17	174,60	1,63e-06	74,06
	SB	Esférico	245,90	80,96	143,00	6,13e-03	75,23
	V%	Esférico	214,83	80,75	102,27	2,35e-03	72,68
	CTC	Esférico	308,90	112,19	161,86	6,64e-03	73,35
	MO	Esférico	25,75	9,03	139,77	4,14e-07	74,02
Cubista	Ca	Esférico	67,18	29,32	172,12	4,92e-05	69,61
	Mg	Esférico	8,50	5,20	113,54	4,14e-07	62,04
	SB	Esférico	143,88	68,74	209,04	1,42e-03	67,66
	V%	Esférico	51,43	28,28	139,95	3,12e-05	64,52
	CTC	Esférico	117,23	116,34	170,96	2,26e-03	50,19
	MO	Esférico	3,86	5,80	106,28	1,13e-06	39,95
XGboost	Ca	Esférico	42,37	17,41	160,55	1,24e-05	70,86
	Mg	Esférico	8,19	4,47	300,50	4,40e-07	70,30
	SB	Esférico	124,60	51,64	256,77	1,10e-03	70,69
	V%	Esférico	71,36	24,02	139,72	4,79e-05	74,83
	CTC	Esférico	165,68	113,24	160,05	2,99e-03	59,40
	MO	Esférico	6,38	5,24	96,69	7,14e-07	54,91

*C₀ — Efeito pepita; C — Patamar; A₀ - Alcance; SQR — Soma dos quadrados dos resíduos; GDE — análise de dependência espacial.

Os valores de alcance (A) obtidos em estudos geoestatísticos representam o intervalo máximo em que os valores do atributo apresentam dependência espacial (Isaaks e Srivastava, 1989), e podem ser usados para futuros estudos geoestatísticos em regiões com características semelhantes, indicando o intervalo espacial para coletas de amostras (Siqueira et al., 2014; Marques Jr. et al., 2015). Os valores de alcance encontrados para os atributos do solo apresentaram ordem crescente: V% (102,27 km); Ca (110,39 km); MO (139,77 km); SB (143,00 km); CTC (161,86 km) e Mg (174,60 km). Os valores de alcance semelhantes demonstram as relações intrínsecas entre os atributos do solo avaliados.

Os atributos do solo presentes nesse estudo apresentaram um grau de dependência espacial (GDE) classificado como moderado (0,50 - 0,75). Segundo Isaaks e Srivastava (1989) a moderada dependência espacial encontrada para atributos do solo são atribuídas a fatores intrínsecos ao solo, como o material de origem do solo e aos seus processos de formação somado as ações de manejo

antrópico do solo. Duan et al. (2020) ao estudar a variabilidade espacial de atributos químicos (matéria orgânica, pH e capacidade de troca catiônica) do solo na província de Hunan na China (área = 211.800 km²) atribuíram em fraca ou moderada dependência encontrada para as variações climáticas, fertilização do solo e as mudanças de uso da terra. Li et al. (2020) estudando a influência da paisagem, granulometria e tipos de manejo na variabilidade espacial dos atributos químicos, verificaram GDE variando entre 35% a 50%, e associaram ao fato de que os atributos foram afetados tanto pela topografia, quando pelas atividades agrícolas (tipos de manejo).

Os mapas de variabilidade espacial dos atributos químicos observados e estimados por meio das medidas da EFRx aliadas aos algoritmos cubista e XGboost são apresentados na Figura 11. Observa-se que os atributos observados e estimados apresentam comportamento espacial semelhantes entre si, reforçando que a EFRx aliada as técnicas de aprendizado de máquina são ferramentas robustas para estudo desses atributos em áreas de grande dimensão. Pelegrino et al. (2021) reforçam os resultados aqui obtidos, já que os autores obtiveram resultados promissores nos estudos de variabilidade espacial dos atributos químicos do solo (Ca, K e P) em solos altamente intemperados do Brasil.

O comportamento apresentado para as isolinhas dos atributos químicos observados e estimados pelos algoritmos cubista e XGboost (Figura 11) acompanham a distribuição espacial do contraste litológico arenito-basalto e pedológico de Argissolos e Latossolos. Pode-se destacar intervalos nítidos de valores nos mapas para todos os atributos, originando uma zona arenítica (Z1) e basáltica (Z2). Deste modo, os intervalos podem ser classificados pelos seguintes valores: MO (Z1 < 70 e Z2 > 70), Ca (Z1 < 20 e Z2 > 20); Mg (Z1 < 25 e Z2 > 25), SB (Z1 < 12 e Z2 > 12), CTC (Z1 < 60 e Z2 > 60), V % (Z1 < 40 e Z2 > 40).

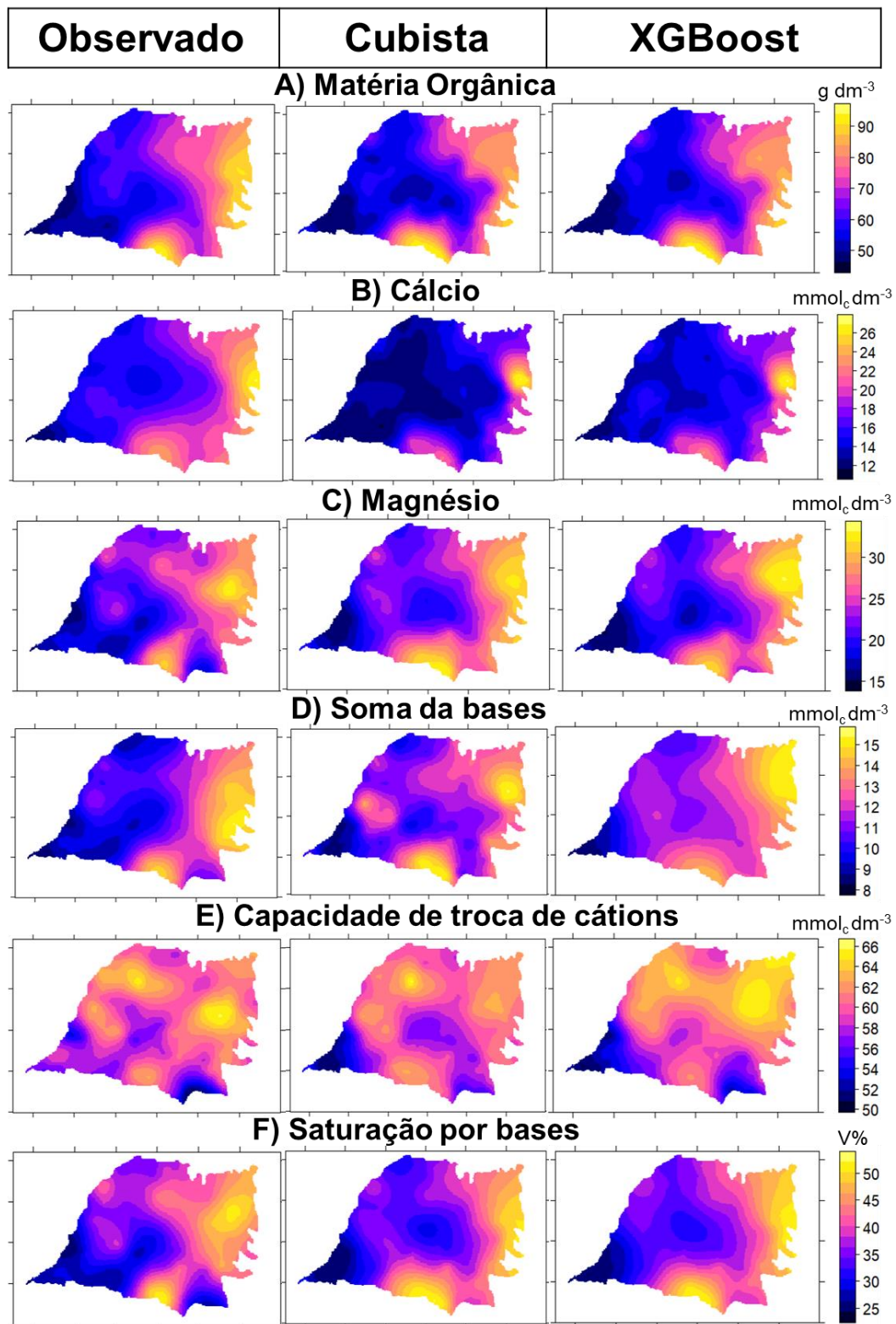


Figura 11. Mapas de variabilidade espacial observados e estimados pelos modelos cubista e XGboost para os atributos matéria orgânica (A), Cálcio (B), Magnésio (C), soma de bases (D), capacidade de troca de cátions (E) e saturação por bases (F) dos solos do Planalto Ocidental Paulista.

As isolinhas situadas sobre a zona basáltica possuem maior potencial de acúmulo de MO e das bases do solo. Esse fato ocorre devido os solos dessa região apresentem textura argilosa, com maior concentração de óxidos de ferro e de alumínio, o que possibilita a formação de agregados do solo, que atuam na proteção da MO e possibilita a ligação das bases presentes em solução (Mao et al., 2020; Grant et al., 2022). Kögel-Knabner et al. (2021) afirmam que solos basálticos possuem capacidade diferenciada para preservação da MO e das bases por apresentarem maior área de superfície específica, tendo até 3 vezes maior poder de interação com a MO e bases do solo.

Os resultados mostrados confirmam o potencial da EFRx para reconhecimento de zonas específicas de manejo em áreas de grande dimensão. Somado a isso, estes estudos auxiliam na consolidação da EFRx como uma técnica pedométrica robusta para o manejo de atributos químicos e reconhecimento de áreas com maior conservação de material orgânico, auxiliando na elaboração de mapas temáticos a nível de detalhe. As informações obtidas com essa pesquisa podem auxiliar no planejamento estratégico sustentável de uso e ocupação regional do solo e na aplicação adequada de fertilizantes por meio do estabelecimento de zonas de manejo homogêneas.

4. Conclusões

Os espectros da EFRx aliado aos algoritmos de aprendizado de máquina (Cubista e XGBoost) foram eficientes para estimar com acurácia os atributos químicos do solo.

Comparando os resultados obtidos para os dois algoritmos, o modelo cubista apresentou as melhores estimativas para a maioria dos atributos estudados, com exceção para a CTC e MO, no qual foram melhor estimados pelo XGBoost.

Os mapas obtidos a partir dos valores estimados pelo sensor de EFRx apresentou comportamento espacial semelhante ao mapa observado dos atributos avaliados em laboratório, no qual, acompanham a distribuição espacial do contraste litológico arenito-basalto e pedológico de Argissolos e Latossolos.

5. Referências Bibliográficas

Adler, K, Piikki, K, Söderström, M, Eriksson, J, Alshihabi, O (2020) Predictions of Cu, Zn, and Cd concentrations in soil using portable X-ray fluorescence measurements. **Sensors**, 20(2), 474.

Andrade JC, Cantarrella H, Quaggio JA (2001). **"Análise química para avaliação da fertilidade de solos tropicais."** p. 285.

Barré P, Fernandez-Ugalde O, Virto I, Velde B, Chenu C (2014) Impact of phyllosilicate mineralogy on organic carbon stabilization in soils: incomplete knowledge and exciting prospects. **Geoderma** 235, 382-395.

Barré P, Fernandez-Ugalde O, Virto I, Velde B, Chenu C (2014) Impact of phyllosilicate mineralogy on organic carbon stabilization in soils: incomplete knowledge and exciting prospects. **Geoderma** 235, 382-395.

Benedet L, Acuña-Guzman SF, Faria WM, Silva SHG, Mancini M, Santos T.A.F, Curi N (2021) Rapid soil fertility prediction using X-ray fluorescence data and machine learning algorithms. **Catena** 197, 105003.

Bhatia M, Specht AJ, Ramya V, Sulaiman D, Konda M, Balcom P, Qureshi A (2021) Portable X-ray fluorescence as a rapid determination tool to detect parts per million levels of Ni, Zn, As, Se, and Pb in human toenails: a South India case study. **Environmental Science & Technology** 55(19), 13113-13121.

Bivand, R, Lewin-Koh, N, Pebesma, E, Archer, E, Baddeley, A, Bearman, N, Golicher, D (2023) **Package ‘maptools’**. Package ‘maptools’.

Brownlie, W. J., Alexander, P., Maslin, M., Cañedo-Argüelles, M., Sutton, M. A., & Spears, B. M. (2024). Global food security threatened by potassium neglect. *Nature Food*, 1-5.

Chakraborty S, Man T, Paulette L, Deb S, Li B, Weindorf DC, Frazier M (2017) Rapid assessment of smelter/mining soil contamination via portable X-ray fluorescence spectrometry and indicator kriging. **Geoderma** 306, 108-119.

Chen T, Guestrin C (2016). **Xgboost: A scalable tree boosting system**. In Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining pp. 785-794.

Chen, T, Guestrin, C (2016). **Xgboost: A scalable tree boosting system**. In Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining (pp. 785-794).

Churchman GJ (2018) Game Changer in Soil Science. Functional role of clay minerals in soil. **Journal of Plant Nutrition and Soil Science** 181(1), 99-103.

Domingues RR, Sánchez-Monedero MA, Spokas KA, Melo LC, Trugilho PF, Valenciano MN, Silva CA (2020) Enhancing cation exchange capacity of weathered soils using biochar: feedstock, pyrolysis conditions and addition rate. **Agronomy** 10(6), 824.

Duan, XC, Yu, HH, Ye, TR, Huang, Y, Li, J, Yuan, GL, Albanese, S (2020) Geostatistical mapping and quantitative source apportionment of potentially toxic elements in top-and sub-soils: A case of suburban area in Beijing, China. **Ecological Indicators**, 112, 106085.

Faria ÁJG, Silva SHG, Melo LCA, Andrade R, Mancini M, Mesquita LF, Curi N. (2020) Soils of the Brazilian Coastal Plains biome: prediction of chemical attributes via portable X-ray fluorescence (pXRF) spectrometry and robust prediction models. **Soil Research** 58(7), 683-695.

Feng W, Plante AF, Six J (2013) Improving estimates of maximal organic carbon stabilization by fine soil particles. **Biogeochemistry** 112, 81-93.

Fernandes K, Júnior JM, Souza BASR, Demattê JA, Ribon AA (2020) Landscape-scale spatial variability of kaolinite-gibbsite ratio in tropical soils detected by diffuse reflectance spectroscopy. **Catena** 195, 104795.

Fernandes K, Júnior JM, Souza BASR, Demattê JÁ, Ribon AA (2020) Landscape-scale spatial variability of kaolinite-gibbsite ratio in tropical soils detected by diffuse reflectance spectroscopy. **Catena** 195, 104795.

<https://doi.org/10.1016/j.catena.2020.104795>

Fernandes LA (2004) Mapa litoestratigráfico da parte oriental da Bacia Bauru (PR, SP, MG), escala 1: 1.000. 000. **Boletim Paranaense de Geociências**, 55.

Fernandes LA, Castro AB, Basilici G (2007) Seismites in continental sand sea deposits of the late Cretaceous Caiua Desert, Bauru Basin, Brazil. **Sedimentary Geology** 199 (1-2), 51-64.

Fernandes LA, Coimbra AM (2000) Revisão estratigráfica da parte oriental da bacia Bauru (Neocretáceo). **Revista Brasileira de Geociências** 30:717–728.

Fruett T, Inda AV, Barrón V, Zinn YL, Taha K, Fernandes AFD (2022) Impact of crop production and eucalyptus forestry on a Ferralsol under native grassland in southern Brazil. **Geoderma Regional** 31, e00575.

Gartzia-Bengoetxea N, Virto I, Arias-González A, Enrique A, Fernández-Ugalde O, Barré P (2020) Mineral control of organic carbon storage in acid temperate forest soils in the Basque Country. **Geoderma** 358, 113998.

Grant KE, Galy VV, Haghipour N, Eglinton TI, Derry LA (2022) Persistence of old soil carbon under changing climate: The role of mineral-organic matter interactions. **Chemical Geology** 587, 120629.

Hailegnaw NS, Mercl F, Pračke K, Száková J, Tlustoš P (2019) Mutual relationships of biochar and soil pH, CEC, and exchangeable base cations in a model laboratory experiment. **Journal of Soils and Sediments** 19, 2405-2416.

Hengl T, Leenaars JGB, Shepherd KD, Walsh MG, Heuvelink GBM, Mamo T, Tilahun H, Berkhout E, Cooper M, Fegraus E, Wheeler I, Kwabena NA. Soil nutrient stocks in sub-saharan Africa: modeling soil nutrients using machine learning. In **AGU Fall Meeting Abstracts** Vol. 2017, pp. B53F-2001.

Hijmans, RJ, Van Etten, J, Mattiuzzi, M, Sumner, M, Greenberg, JA, Lamigueiro, OP, Shortridge, A (2013) **Raster package in R**. Version. <https://mirrors.sjtug.sjtu.edu.cn/cran/web/packages/raster/raster.pdf>.

Horta A, Malone B, Stockmann U, Minasny B, Bishop TFA, McBratney AB, Pozza L (2015) Potential of integrated field spectroscopy and spatial analysis for enhanced assessment of soil contamination: A prospective review. **Geoderma** 241, 180-209.

Hu W, Huang B, Weindorf DC, Chen Y (2014) Metals analysis of agricultural soils via portable X-ray fluorescence spectrometry. **Bulletin of environmental contamination and toxicology** 92, 420-426.

Isaaks, EH, Srivastava, MR, (1989) **Applied Geostatistics**. Oxford University Press.

Jackson ML (1985) **Soil chemical analysis** second. Madison, 930p.

Kassambara A (2020) **Package ‘rstatix’**. R topics documented. **Joint Conference on Artificial Intelligence World Scientific**, pp. 343–348.

Khan, MZ, Islam, MR, Salam, ABA, Ray, T, (2021) Spatial variability and geostatistical analysis of soil properties in the diversified cropping regions of Bangladesh using geographic information system techniques. **Applied and Environmental Soil Science** 2021, 1-19.

Kögel-Knabner I, Amelung W (2021) Soil organic matter in major pedogenic soil groups. **Geoderma** 384, 114785.

Kuang B, Mahmood HS, Quraishi MZ, Hoogmoed WB, Mouazen AM, van Henten EJ (2012) Sensing soil properties in the laboratory, in situ, and on-line. A review. **Advances in Agronomy** 114, 155–223.

Kuhn M, Weston S, Keefer C, Coulter N (2018) **Cubist: Rule-and Instance-Based Regression Modeling (Version 0.2. 2)**.

Kuhn, M (2008) Building predictive models in R using the caret package. **Journal of statistical software** 28, 1-26.

Li, Z, Zhang, R, Liu, C, Zhang, R, Chen, F, Liu, Y (2020) Phosphorus spatial distribution and pollution risk assessment in agricultural soil around the Danjiangkou reservoir, China. **Science of the Total Environment**, 699, 134417.

Lima RP, Rolim MM, Toledo MP, Tormena CA, Silva AR, Silva IAC, Pedrosa EM (2022) Texture and degree of compactness effect on the pore size distribution in weathered tropical soils. **Soil and Tillage Research** 215, 105215.

Lima TM, Weindorf DC, Curi N, Guilherme LR, Lana RM, Ribeiro BT (2019) Elemental analysis of Cerrado agricultural soils via portable X-ray fluorescence spectrometry: Inferences for soil fertility assessment. **Geoderma** 353, 264-272.

Lima TM, Weindorf DC, Curi N, Guilherme LR, Lana RM, Ribeiro BT (2019) Elemental analysis of Cerrado agricultural soils via portable X-ray fluorescence spectrometry: Inferences for soil fertility assessment. **Geoderma** 353, 264-272.

Mao X, Van Zwieten L, Zhang M (2020) O material parental do solo controla os estoques de matéria orgânica e os padrões de retenção na China subtropical. *Journal Soils Sediments* 20, 2426–2438.

Mao, X, Van Zwieten, L, Zhang, M, Qiu, Z, Yao, Y, Wang, H (2020) Soil parent material controls organic matter stocks and retention patterns in subtropical China. **Journal of Soils and Sediments**, 20, 2426-2438.

Marques Jr, J, Alleoni, LRF, Teixeira, DDB, Siqueira, DS, Pereira, GT (2015) Sampling planning of micronutrients and aluminium of the soils of São Paulo, Brazil. **Geoderma Regional** 4, 91-99.

Meliyo JL, Msanya BM, Kimaro DN, Massawe BHJ, Hieronimo P, Mulungu L, Gulinck H (2016) Variability of soil organic carbon with landforms and land use in the Usambara Mountains of Tanzania. **Journal of Soil Science and Environmental Management** 7(9), 123-132.

Nocita M, Stevens A, Van Wesemael B, Aitkenhead M, Bachmann M, Barthès B, ... & Wetterlind, J. (2015). Soil spectroscopy: an alternative to wet chemistry for soil monitoring. **Advances in agronomy** 132, 139-159.

Paulette L, Man T, Weindorf DC, Person T (2015) Rapid assessment of soil and contaminant variability via portable x-ray fluorescence spectroscopy: Copșa Mică, Romania. **Geoderma** 243, 130-140.

Pearson D, Weindorf DC, Chakraborty S, Li B, Koch J, Van Deventer P, Kusi NY (2018) Analysis of metal-laden water via portable X-ray fluorescence spectrometry. **Journal of Hydrology** 561, 267-276.

Pebesma, E, Bivand, RS (2005) **S classes and methods for spatial data: the sp package**. R news, 5(2), 9-13.

Pebesma, EJ (2001) **Gstat user's manual**. Dept. of Physical Geography, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands.

Pelegrino MHP, Silva SHG, Faria ÁJG, Mancini M, Teixeira AFDS, Chakraborty S, Curi N (2022) Prediction of soil nutrient content via pXRF spectrometry and its spatial variation in a highly variable tropical area. **Precision Agriculture** 23(1), 18-34.

Pelegrino, MHP, Silva, SHG, Faria, ÁJG, Mancini, M, Teixeira, AFDS, Chakraborty, S, Curi, N (2022) Prediction of soil nutrient content via pXRF spectrometry and its spatial variation in a highly variable tropical area. **Precision Agriculture**, 23(1), 18-34.

Quinlan JR (1992) Learning with continuous classes., Proc. **In: of the Fifth Australian**

Quinlan, JR (2014) **C4. 5: programs for machine learning**. Elsevier.

R Development Core Team, R, (2020) **R: A Language and Environment for Statistical Computing**

Raij BV, Quaggio JA, Cantarella H, Ferreira ME, Lopes AS, Bataglia OC (1987). **Análise química do solo para fins de fertilidade** p.170.

Ramcharan A, Hengl T, Nauman T, Brungard C, Waltman S, Wills S, Thompson J (2018) Soil property and class maps of the conterminous United States at 100-meter spatial resolution. **Soil Science Society of America Journal** 82(1), 186-201.

Ribeiro BT, Silva SHG, Silva EA, Guilherme LRG (2017) Portable X-ray fluorescence (pXRF) applications in tropical Soil Science. **Ciência e Agrotecnologia** 41, 245-254.

ROSSI M (2017) **Mapa pedológico do estado de São Paulo: revisado e ampliado**. São Paulo: Instituto Florestal.

Santos FR, Oliveira JF, Bona E, Barbosa GM, Melquiades FL (2021) Evaluation of pre-processing and variable selection on energy dispersive X-ray fluorescence spectral data with partial least square regression: A case of study for soil organic carbon prediction. **Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy** 175, 106016.

Schmidinger, J., Schröter, I., Bönecke, E., Gebbers, R., Ruehlmann, J., Kramer, E., ... & Vogel, S. (2024). Effect of training sample size, sampling design and prediction model on soil mapping with proximal sensing data for precision liming. **Precision Agriculture**, 1-27.

Schwertmann U (1988) Occurrence and formation of iron oxides in various pedoenvironments. In **Iron in soils and clay minerals** (pp. 267-308). Dordrecht: Springer Netherlands.

Sharma A, Weindorf DC, Wang D, Chakraborty S (2015) Characterizing soils via portable X-ray fluorescence spectrometer: 4. Cation exchange capacity (CEC). **Geoderma** 239, 130-134.

Sharma A, Weindorf DC, Wang D, Chakraborty S (2015) Characterizing soils via portable X-ray fluorescence spectrometer: 4. Cation exchange capacity (CEC). **Geoderma** 239, 130-134.

Silva FM, Silva SHG, Acuña-Guzman SF, Silva EA, Ribeiro BT, Fruett T, Curi N (2021) Chemical and mineralogical changes in the textural fractions of quartzite-derived tropical soils, along weathering, assessed by portable X-ray fluorescence spectrometry and X-ray diffraction. **Journal of South American Earth Sciences** 112, 103634.

Silva LS, Júnior JM, Barrón V, Gomes RP, Teixeira DDB, Siqueira DS, Vasconcelos V (2020) Spatial variability of iron oxides in soils from Brazilian sandstone and basalt. **Catena** 185, 104258.

Silva LS, Júnior JM, Barrón V, Gomes RP, Teixeira DDB, Siqueira DS, Vasconcelos V (2020). Spatial variability of iron oxides in soils from Brazilian sandstone and basalt. **Catena** 185, 104258.

Singh JS, Gupta VK (2018) Soil microbial biomass: A key soil driver in management of

ecosystem functioning. **Science of the Total Environment** 634, 497-500.

Siqueira, DS, Marques Jr, J, Pereira, GT, Barbosa, RS, Teixeira, DB, Peluco, RG (2014) Sampling density and proportion for the characterization of the variability of Oxisol attributes on different materials. **Geoderma** 232, 172-182.

Stockmann U, Cattle SR, Minasny B, McBratney AB (2016) Utilizing portable X-ray fluorescence spectrometry for in-field investigation of pedogenesis. **Catena** 139, 220-231.

Teixeira, DD, Marques Jr, J, Siqueira, DS, Vasconcelos, V, Carvalho Jr, OA, Martins, É.S, Pereira, GT (2018) Mapping units based on spatial uncertainty of magnetic susceptibility and clay content. **Catena**, 164, 79-87.

Then, M., Lobsey, C., Henry, D., Sochacki, S., & Harper, R. (2024). Proximal Sensing in Soil Water Repellency Management: A Review. *Sandy Soils*, 75-88.

Tsozué D, Nghonda JP, Tematio P, Basga SD (2019) Changes in soil properties and soil organic carbon stocks along an elevation gradient at Mount Bambouto, Central Africa. **Catena** 175, 251-262.

Vasconcelos V, Junior OAC, Martins ÉDS, Junior AFC, Guimarães RF, Gomes RA, Trancoso (2012) Sistema de classificação geomorfométrica baseado em uma arquitetura sequencial em duas etapas: árvore de decisão e classificador espectral, no Parque Nacional Serra da Canastra. **Revista Brasileira de Geomorfologia** 13:171–186.

Viscarra Rossel RA, Adamchuk VI, Sudduth KA, McKenzie NJ, Lobsey C (2011) Proximal soil sensing. An effective approach for soil measurements in space and time. **Advances in Agronomy** 113, 243–291.

Waroszewski J, Sprafke T, Kabała C, Kobierski M, Kierczak J, Muszytyfaga E, Łabaz B (2019) Tracking textural, mineralogical and geochemical signatures in soils developed from basalt-derived materials covered with loess sediments (SW Poland). **Geoderma** 337, 983-997.

Wei T, Simko V, (2017) In: **R Package "corrplot": Visualization of a Correlation Matrix (Version 0.84)**. Available from: <https://github.com/taiyun/corrplot>

Weindorf DC, Bakr N, Zhu Y (2014) Advances in portable X-ray fluorescence (PXRF) for environmental, pedological, and agronomic applications. **Advances in agronomy** 128, 1-45.

Weindorf DC, Zhu Y, McDaniel P, Valerio M, Lynn L, Michaelson G, Ping CL (2012) Characterizing soils via portable x-ray fluorescence spectrometer: 2. Spodic and Albic horizons. **Geoderma** 189, 268-277.

Weindorf, D. C., & Chakraborty, S. (2020). Portable X-ray fluorescence spectrometry analysis of soils. *Soil Science Society of America Journal*, 84(5), 1384-1392.

Wiesmeier M, Urbanski L, Hobley E, Lang B, von Lützow M, Marin-Spiotta E, Kögel-Knabner I (2019) Soil organic carbon storage as a key function of soils-A review of drivers and indicators at various scales. **Geoderma** 333, 149-162.

Xu D, Chen S, Rossel RV, Biswas A, Li S, Zhou Y, Shi Z (2019) X-ray fluorescence and visible near infrared sensor fusion for predicting soil chromium content. **Geoderma** 352, 61-69.

Xu X, Schimel JP, Thornton PE, Song X, Yuan F, Goswami S (2014) Substrate and environmental controls on microbial assimilation of soil organic carbon: a framework for Earth system models. **Ecology letters** 17(5), 547-555.

Yang M, Wang C, Yang ZP, Yan N, Li FY, Diao YW, Qian X (2018) Use of portable X-ray fluorescence spectroscopy and geostatistics for health risk assessment. **Ecotoxicology and environmental safety** 153, 68-77.

Zhang DP, Xue DS, Liu YH, Wan B, Guo Q, Guo JJ (2020) Comparative study of three mixing methods in fusion technique for determining major and minor elements using wavelength dispersive X-ray fluorescence spectroscopy. **Sensors** 20(18), 5325.

Zhu Y, Weindorf DC (2009) Determination of soil calcium using field portable X-ray fluorescence. **Soil Science** 174(3), 151-155.

Zhu Y, Weindorf DC, Zhang W (2011) Characterizing soils using a portable X-ray fluorescence spectrometer: 1. Soil texture. **Geoderma** 167, 167-177.

Zinn YL, Faria JA, Araujo MA, Skorupa ALA (2020) Soil parent material is the main control on heavy metal concentrations in tropical highlands of Brazil. **Catena** 185, 104319.

CAPÍTULO 3: DETERMINAÇÃO DE ZONAS ESPECÍFICAS DE MANEJO PARA CALAGEM EM SOLOS TROPICAIS ÚMIDOS UTILIZANDO A ESPECTROMETRIA DE FLUORESCÊNCIA DE RAIOS-X

RESUMO – A qualidade dos solos tropicais úmidos é altamente afetada pela acidez, reduzindo a produtividade das culturas e podendo causar a insegurança alimentar. Diante disso, a calagem é uma prática essencial para diminuir a acidez do solo e fornecer nutrientes e estímulo ao crescimento das culturas. Nesse contexto, objetivou-se com o presente estudo avaliar a eficiência da espectrometria de fluorescência de raios-x (EFRx) na caracterização de alguns indicadores químicos de qualidade do solo e mapear zonas de manejo para a necessidade de calagem em solos tropicais. Para os solos coletados no Planalto Ocidental Paulista, foram analisados os atributos físicos (areia, silte, argila), químicos (MO, pH, Ca, Mg, K, SB, CTC, V%), do sensor de EFRx (Al, Ca, Cu, Fe, K, Mn, Mg, Si, Ti e Zn) e mineralógicos (Hm, Gt, Ct e Gb). Os dados foram avaliados por meio de estatística descritiva e os atributos SB, CTC e V% estimados por meio dos elementos determinados pela EFRx. Os valores obtidos foram utilizados para o mapeamento dos atributos utilizando a krigagem ordinária. Observou-se que as dissecações da paisagem influenciaram a quantidade da hematita, goethita, matéria orgânica e CTC. Os demais atributos avaliados foram influenciados pelo material de origem arenito-basalto, apresentando maiores teores nos solos originados de rocha basáltica. As medidas do sensor de EFRx associado ao algoritmo Random Forest foram eficientes na avaliação da SB, CTC e V% e no mapeamento da necessidade de calagem. A maior capacidade de armazenar os nutrientes foi apontado para a região dos solos desenvolvidos sobre basalto. A elaboração de mapas detalhados em áreas de dimensão regional, usando sensores proximais pode auxiliar na estimativa de indicadores químicos de qualidade do solo relacionados ao manejo da acidez, aumentando a eficiência no uso corretivos, auxiliando para maior conservação do solo, proporcionando uma agricultura mais sustentável.

Palavras-chave: Mineralogia do solo, acidez do solo, basalto, arenito, pedometria.

CHAPTER 3: DETERMINATION OF SPECIFIC MANAGEMENT ZONES FOR LIMED IN HUMID TROPICAL SOILS USING X-RAY FLUORESCENCE SPECTROMETRY

ABSTRACT – The quality of humid tropical soils is highly affected by acidity, reducing crop productivity and potentially causing food insecurity. Therefore, liming is an essential practice to reduce soil acidity and provide nutrients and stimulate crop growth. In this context, the objective of this study was to evaluate the efficiency of x-ray fluorescence spectrometry (xRFS) in characterizing some chemical indicators of soil quality and mapping management zones for the need for liming in tropical soils. For the soils collected in the Planalto Oeste Paulista, the physical attributes (sand, silt, clay), chemical attributes (OM, pH, Ca, Mg, K, SB, CEC, BS%) of the EFRx sensor (Al, Ca, Cu, Fe, K, Mn, Mg, Si, Ti and Zn) and mineralogical (Hm, Gt, Ct and Gb). The data were evaluated using descriptive statistics and the attributes SB, CEC and BS% were estimated using the elements determined by EFRx. The values obtained were used to map the attributes using ordinary kriging. It was observed that landscape dissections influenced the amount of hematite, goethite, organic matter and CEC. The other attributes evaluated were influenced by the sandstone-basalt source material, presenting higher levels in soils originating from basalt rock. The measurements from the EFRx sensor associated with the Random Forest algorithm were efficient in evaluating SB, CEC and BS% and in mapping the need for liming. The greatest capacity to store nutrients was found in the region of soils developed on basalt. The creation of detailed maps in areas of regional dimension, using proximal sensors, can help in estimating chemical indicators of soil quality related to acidity management, increasing efficiency in the use of correctives, helping to achieve greater soil conservation, providing more sustainable agriculture.

Keywords: Soil mineralogy, soil acidity, basalt, sandstone, pedometrics.

1 - Introdução

A qualidade do solo é caracterizada como a capacidade intrínseca de um solo contribuir para os serviços ecossistêmicos, considerando o uso da terra para a conservação das características biológicas, manutenção da qualidade ambiental e promoção da saúde vegetal e animal (Bünemann et al., 2018). Os indicadores de qualidade química do solo possibilitam avaliar o potencial do solo para uma produção mais eficiente e sustentável, com o intuito de manter a segurança alimentar mundial (Lehmann et al., 2020).

A prática da calagem nas regiões tropicais possibilitou a abertura de fronteiras agrícolas e tornou o Brasil um dos maiores produtores mundiais de alimentos (Moraes et al., 2023). Isto porque a calagem reduz os efeitos negativos da acidez natural dos solos (Mohammed et al., 2021; Bortoluzzi et al., 2022). Além de elevar os teores de Ca e Mg e neutralizar o alumínio trocável, promove o aumento da capacidade de troca de cátions (CTC) e auxilia na melhoria dos atributos físicos, químicos e biológicos do solo (Fageria et al., 2014; Borgmann et al., 2021). Como as demais práticas de manejo do solo, a prática da calagem está inserida diretamente em pelo menos quatro dos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS): fome zero e agricultura sustentável, consumo e produção responsáveis, ações contra a mudança do clima e vida na água (FAO, 2019).

O consumo de calcário no Brasil aumenta constantemente com o decorrer dos anos. Segundo dados fornecidos pela Associação Brasileira dos Produtores de Calcário Agrícola (ABRACAL), no ano de 2022, o Brasil teve um aumento em torno de 20% no consumo de calcário, quando comparado ao ano de 2021. Em valores absolutos, o agronegócio brasileiro demandou um total de 60 milhões de toneladas de calcário no ano de 2022, sendo estimado o consumo ideal em torno de 70 milhões de toneladas por ano (ABRACAL, 2022).

Nos solos tropicais a maior parte dos nutrientes presente nos minerais primários, facilmente intemperizados, já foram liberados (Resende et al., 2014) e as chuvas intensas também aumentam as chances de lixiviação dos nutrientes (Zhu et al., 2011; Augusto et al., 2017). Estes solos cobrem uma área em torno de 50% das terras aráveis do globo terrestre, espalhados por mais de 70 países. No Brasil,

representam um total de 571 milhões de hectares, equivalente a 67% das terras agricultáveis nacionais (Rheinheimer et al., 2018). Tais solos necessitam de práticas constantes de adubação e correção da acidez (Caires et al., 2015; Molin et al., 2019; Benedet et al., 2021).

Sabemos que, solos das regiões tropicais são caracterizados por serem pobres quimicamente e terem um elevado grau de intemperismo e acidez, baixa fertilidade natural, com predomínio de óxidos de ferro e alumínio e filossilicatos de grade 1:1 (caulinita), sendo que as principais classes de solos representantes são os Latossolos e Argissolos (Fink et al., 2016; Santos et al., 2018).

A mineralogia oxídica de solos da região tropical é a responsável por coordenar o comportamento de sorção dos íons, comandando de forma conjunta suas características químicas e físicas (Pereira-Junior et al., 2015). Foi comprovada a variabilidade dos atributos mineralógicos dos solos tropicais úmidos (Camargo et al., 2008, 2013; Silva et al., 2020, Fernandes et al., 2020; Baldo et al., 2021), assim como dos atributos físicos e químicos que são por eles coordenados (Oliver e Webster, 2014; Siqueira et al., 2015; Bahia et al., 2017; Almeida et al., 2021;). Estas pesquisas já evidenciaram que existe correlação local entre a mineralogia e os demais atributos do solo, que devem ser investigados espacialmente para uma melhor gestão no manejo e aplicação de materiais corretivos, a exemplo da aplicação do calcário agrícola (Abalos et al., 2020).

Um dos entraves para melhor compreensão do comportamento espacial dos atributos do solo por meio das técnicas de geoestatística é o grande número de amostras que devem ser utilizadas. Quanto maior a amostragem, maiores os gastos associados com coletas e análises feitas por metodologias laboratoriais tradicionais (Tóth et al., 2015). Porém, esse impedimento vem sendo contornado com as aplicações das técnicas pedométricas (McBratney et al., 2003, 2019; Ng et al., 2019). A pedometria é um ramo da ciência que se baseia na aplicação de métodos estatísticos no estudo de atributos do solo. Nesse cenário, pode-se incluir a Espectrometria de Fluorescência de Raios-x (EFRx) que surge como uma importante ferramenta para a análise do solo (Weindorf et al., 2014; Weindorf et al., 2016).

A EFRx vem sendo amplamente utilizada em diversos ramos da Ciência do solo. Essa técnica não destrutiva, não exige tratamento químico do solo, é de fácil

aplicação e tem capacidade de retornar uma leitura multielementar (Weindorf et al., 2014; Demattê et al., 2021). Estes elementos, por sua vez, refletem as características mineralógicas, químicas e físicas do solo analisado (Gates et al., 2006; Weindorf et al., 2012). A EFRx vem sendo utilizada na predição de atributos dos solos tropicais úmidos com sucesso, tais como, na predição da granulometria do solo (Silva et al., 2020); capacidade de troca de cátions (Andrade et al., 2020; Benedet et al., 2021; Tavares et al., 2021); pH do solo, saturação por bases e saturação por alumínio (Teixeira et al., 2020); e uma vez que esses atributos estão diretamente relacionados à recomendação e aplicação de corretivos da acidez. Logo, levanta-se a hipótese de que a EFRx irá auxiliar de forma eficiente e sustentável no reconhecimento de zonas específicas de manejo aprimorando as recomendações de calagem.

Desse modo, objetivou-se com o presente estudo avaliar a eficiência da EFRx como preditora de atributos relacionados ao completo de sorção do solo (soma de bases, capacidade de troca catiônica e saturação por bases) e mapear zonas de manejo para a necessidade de calagem em solos do Planalto Ocidental Paulista.

2. Material e métodos

2.1 Localização e caracterização da área de estudo

O estudo foi desenvolvido no Planalto Ocidental Paulista (POP), que corresponde a aproximadamente 13 milhões de hectares (~ 48% do Estado de São Paulo) (Figura 1). Na região norte e noroeste do POP prevalece o clima tropical com inverno seco, enquanto na região sul prevalece o clima temperado com verão quente. Na parte leste e sudeste o clima é temperado úmido com inverno seco e verão quente. A vegetação natural da área era Mata Atlântica na região Leste e Oeste e Cerrado na região Sudoeste, Centro Oeste e Centro norte Paulista. Sendo o uso do solo atualmente constituído pelos cultivos de cana-de-açúcar e pastagem.

O esboço geológico é caracterizado principalmente por sedimentos arenosos, argilosos e cascalho, rochas vulcânicas de composição básica e sequências sedimentares, principalmente psamíticas, podendo incluir piroclásticas (Figura 1B). Dos 13 milhões de hectares de solos do Planalto, aproximadamente 2 milhões

hectares são ocupados por basalto da formação Serra Geral (15,5%), 7,4 de milhões hectares pela Formação Vale do Rio do Peixe (57,1%) e 3,6 milhões de hectares pelas outras formações sedimentares (27,5%).

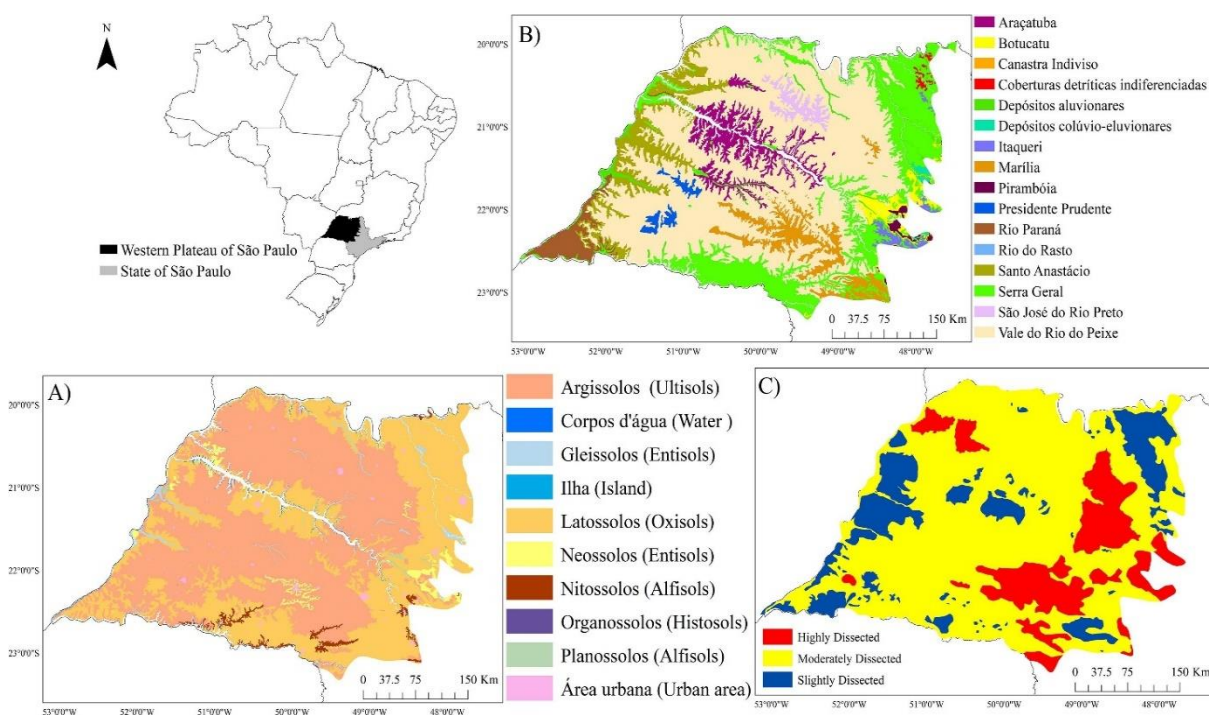


Figura 1: Mapa pedológico do Planalto Ocidental Paulista (A). (Fonte: Instituto Agrônomo de Campinas). Entre parênteses equivalência ao soil taxonomy (USDA 2014). Mapa geológico do Planalto Ocidental Paulista (B) (Fernandes et al., 2007, Fernandes, 2004). Mapa de dissecação do Planalto Ocidental Paulista (C).

As formações geológicas do POP são divididas em dois grupos: (I) grupo Caiuá composto pelas formações Santo Anastácio e Rio Paraná no estado de São Paulo, correspondentes a depósitos de lençóis de areia, de clima seco, acumulados em extensas e monótonas planícies desérticas, marginais com grandes complexos de dunas do deserto Caiuá, que se estende para região norte do estado do Paraná e (II) grupo Bauru é composto pelas formações Uberaba, Vale do Rio do Peixe, Araçatuba, São José do Rio Preto, Presidente Prudente e Marília e com analcimitos Taiúva, rochas vulcânicas localmente intercaladas na sequência (Fernandes, 2004; Fernandes et al., 2007).

Os solos de maior ocorrência são classificados como Argissolo Vermelho-Amarelo, Latossolo Férrico, Neossolo Litólico, Nitossolo Vermelho e Gleissolo Hápico

(Figura 1B) (Rossi et al., 2017). Na Figura 1C está descrita a geomorfologia da área estudada e, nota-se o predomínio de áreas moderadamente dissecadas. O nível de dissecação expressa a evolução solo-paisagem (Fig. 1C), que é associada a pedogênese (taxa de formação do solo) e geomorfogênese (taxa de evolução da paisagem). As áreas geologicamente relacionadas ao basalto estão relacionadas ao compartimento pouco dissecado. Enquanto áreas de arenito mais relacionado ao compartimento moderadamente dissecado. Para o delineamento dos compartimentos de dissecação foi utilizado o mapa de relevo do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE) (Fernandes e Coimbra, 2000) e com auxílio da metodologia proposta por Vasconcelos et al. (2012).

2.2 Planejamento amostral

Foram utilizadas 226 amostras de solo georreferenciadas no POP para o estudo da variabilidade espacial dos atributos mineralógicos, físicos e químicos na profundidade de 0,00–0,20 m. Com base no arquivo de rodovias do Estado fornecidas pelo Departamento de Estradas e Rodagem foi elaborado o plano de amostragem utilizando a ferramenta ET GeoWizards no ArcView 9.3. O espaçamento mínimo e máximo variou de 10 km a 60 km, respectivamente. As amostras foram coletadas ao longo das rodovias do Estado, em locais representativos dos solos e da geologia regional. As informações das coordenadas de cada ponto foram definidas previamente e inseridos em um GPS de navegação com precisão de 3 a 5 metros.

2.3 Análises laboratoriais

2.3.1 Granulometria

A granulometria do solo foi obtida pelo método da pipeta utilizando solução de NaOH 0,1 mol L⁻¹ como dispersante químico e agitação mecânica em aparelho de baixa velocidade por 16 h (Teixeira et al., 2017).

2.3.2 Análises químicas

As amostras de solo foram secas ao ar e passadas em peneira de 2 mm de abertura de malha para a determinação dos atributos químicos do solo (MO, pH, H+Al, Ca, Mg e K), seguindo os protocolos analíticos descritos por Raij et al. (2001). A matéria orgânica foi determinada após oxidação com $K_2Cr_2O_7$ em presença de H_2SO_4 e titulação do excesso de dicromato com a solução de $Fe (NH_4)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ 0,4 mol L^{-1} . O pH foi medido potenciometricamente em 1:2,5 de solo: 0,01 mol L^{-1} de $CaCl_2$ e os cátions trocáveis foram extraídos por resina de troca iônica. Os teores de Ca e Mg foram quantificados por espectrofotometria de absorção atômica (EAA). O potássio (K^+) foi determinado por fotometria de chama. A acidez potencial ($H^+ + Al^{+3}$) foi estimada pelo método do pH SMP. Diante desses resultados, foram calculadas a soma de bases (SB), a capacidade de troca catiônica total (CTC) a pH 7,0 e a saturação por bases (V).

2.3.3 Espectrometria de fluorescência de raio-X

As determinações de Al, Ca, Cu, Fe, K, Mn, Mg, Si, Ti e Zn representam a concentração total em porcentagem do elemento na matriz analisada. Foram analisadas um total de 226 amostras. Foram utilizados 2,0 g de Terra Fina Seca ao Ar (TFSA). As amostras foram maceradas em almofariz de ágata e peneiradas e homogeneizadas em peneira de 100 mesh. Na sequência foram escaneadas no equipamento modelo NexQc da marca Rigaku (Applied rigaku Technologies, inc., TX USA). As amostras foram irradiadas na atmosfera do ar, utilizando um tubo de raios-X operado a 15 kV (Na - Sc) e 50 kV (Ti - U) por 200 e 250 s, respectivamente. Detector de Desvio de Silício (SDD) com uma resolução < 145. Para obter uma excitação adequada para uma ampla gama de elemento o tubo de raios-x foi operado a 15 kV e 50 kV. A voltagem de 15 kV favorece a fluorescência de elementos na faixa de Na-Sc e 50 kV, sendo a mais apropriada para elementos mais pesados na faixa Ti-Fe. Para fins de avaliação da detecção do conteúdo elementar da amostra pela EFRx, materiais do solo certificados pelo Serviço Geológico dos Estados Unidos (USGS): BCR-2, DNC-1, QLO-1a, SDC-1 e W-2A (Flanagan, 1969; Jochum et al., 2016) foram

utilizados para calibrar o equipamento.

2.3.4. Análises mineralógicas

A argila para a análise de difratometria de raios-x (DRX) foi separada da amostra de solo pelo método de centrifugação (Jackson, 1985). Os minerais da fração argila hematita (Hm), goethita (Gt), caulinita (Kt) e gibbsita (Gb) foram caracterizados por DRX em lâminas confeccionadas com material sem orientação (em pó). A caracterização da Hm e da Gt ocorreu após o tratamento da fração argila com NaOH a 5 mol L⁻¹ (1 g argila 100 mL⁻¹ solução), para a concentração dos mesmos, segundo método de Norrish e Taylor (1961), modificado por Kämpf e Schwertmann (1982). A razão Gt/(Gt+Hm) foi obtida após o cálculo das áreas dos reflexos da hematita (012) e goethita (110), nos reflexos dos difratogramas, e nesse caso foi multiplicada a área do pico da Gt (110) pelo valor 0,35 devido à intensidade de 35% da hematita (012) (Kämpf e Schwertmann, 1998).

Para a obtenção das estimativas do teor de Gt, o teor de Fe cristalino foi multiplicado pela razão Gt/(Gt+Hm) e por 1,59. Para a hematita, multiplicou-se o teor de Fe cristalino por 1,43, após ser subtraído deste valor a quantidade de Fe correspondente à Gt (Dick, 1986), conforme as equações:

$$[(Gt/Gt+Hm)] \times (Fed\%-Feo\%) = \%FeGt; \quad (1)$$

$$FeGt\% \times 1,59 = FeOOH = \%Gt; \quad (2)$$

$$FeGt\%-(Fed\%-Feo\%) = FeHm\%; \quad (3)$$

$$FeHm\% \times 1,43 = Fe_2O_3 = Hm\%. \quad (4)$$

Para caracterização da Kt e da Gb, a fração argila foi submetida à eliminação dos óxidos de ferro pelo método Ditionito-Citrato-Bicarbonato (DCB), segundo Mehra e Jackson (1960), e peneirada em malha de 0,10 mm. A razão Caulinita/(Caulinita+Gibbsita) [Kt/(Kt+Gb)] foi calculada empregando-se as áreas dos reflexos da Ct (001) e da Gb (002) dos difratogramas.

O difratômetro utilizado foi o Mini-Flex II- Rigaku, empregando-se cátodo de cobre com filtro de níquel e radiação α (20mA, 30Kv). A velocidade de varredura empregada foi de 1°20'/minuto com amplitude de 23 a 49°20' para a caracterização da Hm e Gt, e de 11 a 19°20' para a caracterização da Ct e Gb.

2.4 Cálculo da necessidade de calagem

A recomendação foi calculada para a cultura da cana-de-açúcar seguindo a fórmula para o cálculo de necessidade (Quaggio e Raij, 2022), conforme descrito na equação:

$$NC: [CTC \times (V_2 - V_1)] / (10 \times PRNT) \quad (1)$$

Onde: NC = Necessidade de calagem, em t ha⁻¹ por 0,2 m de profundidade, ou o volume de 2.000 m³ de solo da camada arável; CTC = Capacidade de troca de cátions, em mmol_c dm⁻³; V₂ = Saturação por bases desejada para a cultura, em %, sendo utilizada uma saturação de 70% para o presente estudo; V₁ = Saturação por bases atual do solo, em %; PRNT = Poder Relativo de Neutralização Total, que mede a capacidade neutralizante do corretivo, em %, que foi adotado para fins de cálculo no valor de 70%. Após a estimativa dos atributos do solo pelo aprendizado de máquina realizou-se o cálculo da calagem estimada para comparação da variabilidade espacial.

2.5 Análise de dados

2.5.1 Estatística descritiva

Os atributos físicos, químicos, mineralógicos e de EFRx foram analisadas previamente, calculando-se os valores de medianas, máximos e mínimos para os níveis de dissecação da paisagem e materiais de origem. Foram realizadas comparações entre os três níveis de dissecação da paisagem pelo teste Kruskal-Wallis e quando observada diferença entre os grupos, o teste post-hoc de Dunn a 5% foi utilizado. Para a comparações entre os dois materiais de origem foi utilizado o teste de Mann-Whitney a 5%. Por meio da correlação de Spearman verificou-se o nível de correlação entre os dados obtidos pelo sensor de EFRx e atributos do solo. Após avaliação da correlação, foram utilizados os seis elementos obtidos da EFRx com maior correlação para predição dos atributos químicos do solo. Todos os dados foram processados por meio do software estatístico R Core Team (2022) com auxílio dos

pacotes: rstatix (Kassambara, 2021) e corrplot (Wei e Simko, 2017).

2.5.2 Aprendizagem de máquina

A predição dos atributos soma de bases (SB), capacidade de troca de cátions (CTC) e saturação por bases (V%) foi obtida com aprendizado de máquina usando o algoritmo *Random Forest* por meio dos elementos totais obtidos pela EFRx de amostras representativas do contraste litológico arenito-basalto e das unidades de dissecação da paisagem. O Algoritmo *Random Forest* (RF) é um algoritmo amplamente utilizado para aplicações em Ciência do solo e em um vasto leque de subáreas desse ramo de estudo. O modelo RF é um conjunto de árvores de decisão organizados como conjunto de árvores estruturadas e podem ser utilizados para a regressão e classificação (Breiman, 2001). A vantagem do RF quando comparado a outros algoritmos tradicionais é que o mesmo é baseado em várias regras, onde cada uma é construída utilizando diferentes tamanhos do conjunto de dados original (Breiman, 2001).

As variáveis foram padronizadas para a média = 0 e variância = 1, deste modo, as variáveis foram todas transformadas para a mesma ordem de grandeza. Para realizar a predição o banco de dados foi dividido em treino e teste. Assim, 70% dos dados ficaram para treinamento do modelo e 30% para o teste do mesmo. Foi utilizado parâmetros para ajuste do modelo, no qual foi aplicado busca em grade para obtenção dos melhores valores (Tabela 1). Os modelos gerados foram avaliados por meio do coeficiente de determinação ajustado (R^2) e da raiz do erro quadrático médio (RMSE).

Tabela 1. Parâmetros e valores testados para calibração dos algoritmos.

Random Forest	
Parâmetros	Valores testados
bootstrap	True, False
max_depth	20 – 100
max_features	auto, sqrt, log2
min_samples_leaf	2 – 10
min_samples_split	2 – 10
n_estimators	10 – 150
random_state	1,2

Os modelos preditivos foram desenvolvidos em Python usando o Jupyter Lab (versão 3.7.4 para Windows) da biblioteca de modelagem de dados no scikit-learn (Pedregosa et al., 2011). As otimizações dos parâmetros para os algoritmos foram ajustadas usando RandomizedSearchCV no Scikit-Learn (Pedregosa et al., 2011).

2.5.3 Análise geoestatística

A análise da dependência espacial dos dados foi realizada utilizando da geoestatística (Vieira et al., 1983). O semivariograma experimental foi calculado de acordo com Oliver e Webster (2014) baseada da seguinte equação:

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [z(x_i) - z(x_i + h)]^2 \quad (1)$$

em que: $\hat{\gamma}(h)$ é a semivariância na distância h ; $N(h)$ é o número de pares envolvidos para calcular h ; $Z(x_i)$ é o valor atributo Z na posição x_i , e $Z(x_i + h)$ é o valor do atributo Z separado por uma distância h da posição x_i .

Os resultados dos variogramas experimentais foram submetidos ao ajuste de modelos teóricos: modelo esférico, exponencial e gaussiano. Após a modelagem e escolha do melhor modelo teórico ajustado aos dados, os valores correspondentes aos pontos não amostrados foram estimados pela técnica de interpolação da krigagem ordinária usando pacote gstat (Pebesma, 2001). Os mapas de variabilidade espacial dos atributos foram processados utilizando os seguintes pacotes: pacote sp (Pebesma e Bivand, 2005); pacote maptools (Bivand et al., 2023) e pacote raster (Hijmans et al., 2013). O grau de dependência espacial (GDE) foi estimado a partir da razão entre o efeito pepita (C_0) e o patamar ($C_0 + C_1$). O GDE foi considerado forte, moderado ou fraco quando a razão $[C_0/(C_0+C_1) \times 100]$ foi menor que 25%, 25-75% ou superior a 75%, respectivamente (Cambardella et al., 1994). O processamento dos dados geoestatísticos foi realizado utilizando-se a linguagem de programação R (R Development Core Team, 2020).

3 Resultados e discussão

3.1 Estatística descritiva dos atributos do solo

A caracterização descritiva dos atributos granulométricos, mineralógicos e químicos está apresentada na Tabela 2. Os níveis de dissecação da paisagem para os solos de origem basáltica apresentaram diferenças significativas entre si ($p < 0,05$). Para a CTC os maiores valores foram observados em solos de paisagem altamente dissecada. Para os solos de origem arenítica, os níveis de dissecação da paisagem apresentaram diferenças significativas para a CTC, MO, teores de Hm e Gt. Os maiores teores da CTC, MO e Gt são encontrados em solos altamente dissecados e para Hm os maiores teores estão presentes nos solos pouco dissecados.

Os resultados encontrados para a CTC, MO e Gt ocorrem pelo fato da paisagem altamente dissecada ser caracterizada por formas de relevos em que prevalecem formas côncavas e convexas e comportamento deposicional (Sanchez et al., 2009), apresentando superfícies mais instáveis quanto a sua pedogênese e favorecendo acúmulo de material orgânico (Queiroz Neto e Pellerin, 1994, Cunha et al., 2005). Tal fato explica os teores da Hm, que possui maior tendência para concentração em ambientes com paisagens pouco dissecadas (Silveiro et al., 2019; Silva et al., 2020). Estes ambientes são aqueles mais planos favorecendo maior infiltração de água, melhor drenagem, maior lixiviação, radiação solar mais uniforme, entre outras características que favorecem maior intemperismo do solo (maiores taxas de pedogênese).

Em relação aos Fe cristalinos (Fed) e mal cristalizados (Feo), os solos sobre material de origem basáltica apresentaram os maiores teores, isso ocorre devido a presença de minerais litogênicos ricos em ferro das rochas basálticas e pela neoformação de minerais secundários, como os óxidos de ferro (Kämpf e Curi 2000; Silva et al., 2020, Fonseca et al., 2021). Apresentando comportamento semelhante, os teores de Hm e Gt então presentes em maior quantidade nos solos de basalto.

Tabela 2. Estatística descritiva para atributos granulométricos, mineralógicos e químicos, obtidos por metodologias convencionais para os solos do Planalto Ocidental Paulista (POP).

Variável	Solos originados de basalto				
	Pouco dissecado ¹	Moderadamente dissecado ¹	Altamente dissecado ¹	Mediana Geral ²	Min-Max
Areia (g kg ⁻¹)	449,31 a	399,36 a	369,80 a	393,00 B	95,89-832,00
Silte (g kg ⁻¹)	121,12 a	165,70 a	183,15 a	154,00 A	32,00-472,48
Argila (g kg ⁻¹)	442,50 a	411,50 a	428,50 a	426,00 A	125,00-610,00
Fed (g kg ⁻¹)	75,60 a	76,90 a	73,31 a	75,90 A	28,00- 86,27
Feo (g kg ⁻¹)	1,18 a	1,63 a	2,12 a	1,73 A	0,47- 4,66
Hm (g kg ⁻¹)	45,00 a	63,00 a	74,00 a	63,00 A	11,00-105,00
Gt (g kg ⁻¹)	24,00 a	39,00 a	33,00 a	37,00 A	8,00- 116,00
Kt/(Kt+Gb)	0,56 a	0,78 a	0,86 a	0,78 B	0,31-1,00
MO (g dm ⁻¹)	35,00 a	27,00 a	32,50 a	29 A	10,00 – 58,00
pH (CaCl ₂)	4,60 a	5,15 a	4,70 a	5,00 A	3,80-6,50
H+Al (mmol _c dm ⁻³)	34,00 a	31,00 a	38,00 a	31,00 A	15,00-98,00
Ca (mmol _c dm ⁻³)	27,00 a	35,50 a	45,00 a	35,00 A	6,00-80,00
Mg (mmol _c dm ⁻³)	17,00 a	22,00 a	16,50 a	20,00 A	4,00-74,00
K (mmol _c dm ⁻³)	2,50 a	3,00 a	3,20 a	2,70 A	0,80-13,40
SB (mmol _c dm ⁻³)	49,50 a	59,45 a	73,20 a	57,10 A	10,80-140,40
CTC (mmol _c dm ⁻³)	82,90 c	98,65 b	126,50 a	99,40 A	38,80-164,40
V (%)	54,16 a	65,76 a	66,40 a	65,10 A	21,91-90,35
NC (t/ha ⁻¹)	1,97 a	0,59 a	0,50 a	0,62 B	0,00-9,05
Solos originados de arenito					
Areia (g kg ⁻¹)	787,00 a	780,29 a	777,70 a	780,00 A	182,11 - 926,98
Silte (g kg ⁻¹)	92,25 a	94,89 a	90,30 a	94,20 B	13,00 - 500,24
Argila (g kg ⁻¹)	103,25 a	110,00 a	115,50 a	110,00 A	24,00 - 628,00
Fed (g kg ⁻¹)	19,94 a	20,54 a	22,10 a	20,60 B	8,41 - 79,76
Feo (g kg ⁻¹)	0,50 a	0,49 a	0,56 a	0,51 B	0,03 - 2,22
Hm (g kg ⁻¹)	21,00 a	15,00 a	8,00 b	15,50 B	2,00 - 103,00
Gt (g kg ⁻¹)	11,50 c	17,00 a	22,00 a	17,00 B	3,00 - 75,00
Kt/(Kt+Gb)	1,00 a	1,00 a	1,00 a	1,00 A	0,33 - 1,00
MO (g dm ⁻¹)	11,5 b	14,00 a	16,00 a	14,00 B	9,00 - 44
pH (CaCl ₂)	4,80 a	4,80 a	4,80 a	4,80 A	3,60 - 7,40
H+Al (mmol _c dm ⁻³)	20,00 a	22,00 a	20,00 a	22,00 B	10,00 - 64,00
Ca (mmol _c dm ⁻³)	17,00 a	18,00 a	24,00 a	18,00 B	2,00 - 75,00
Mg (mmol _c dm ⁻³)	8,50 a	10,00 a	12,00 a	10,00 B	2,00 - 49,00
K (mmol _c dm ⁻³)	2,10 a	2,00 a	2,55 a	2,00 B	0,40 – 10,70
SB (mmol _c dm ⁻³)	26,85 a	30,10 a	37,30 a	30,50 B	5,60 - 122,70
CTC (mmol _c dm ⁻³)	51,15 b	55,40 a	61,35 a	55,40 B	23,40 - 140,70
V (%)	57,12 a	57,45 a	62,75 a	57,70 B	11,77 - 88,25
NC (t/ha ⁻¹)	0,92 a	0,92 a	0,66 a	0,87 A	0,00 - 5,06

¹Medianas seguidas pela mesma letra minúscula não diferem pelo teste de Dunn a 5% para os níveis de dissecação da paisagem, dentro da mesma geologia. ² medianas seguidas pela mesma letra maiúscula conforme teste de Mann-Whitney a 5% entre as geologias. Fed: ferro extraído por ditionito-citrato-bicarbonato; Feo: Ferro extraído por oxalato de amônio; Hm: Hematita; Gt: Goethita; Kt/(Kt+Gb): relação caulinita sobre gibbsita; MO: Matéria orgânica; pH: potencial hidrogeniônico; H+Al: Acidez potencial; Caq: Cálcio; Mgq: Magnésio; Kq: Potássio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de cátions; V: Saturação por bases; NC: Necessidade de calagem.

A elevada presença de ferro, ocorre devido a boa drenagem, durante a pedogênese dos solos que favorece a formação dos óxidos de ferro secundários (Hm e Gt) (Coventry e Williams 1984; Schwertmann e Taylor 1989; Poggere et al., 2018). Solos desenvolvidos de arenito, apresentam os maiores teores da relação Kt/(Kt+Gb). Materiais de origem arenosos tem baixa quantidade de minerais férricos favorecendo a formação de minerais silicatados, como a Kt (Resende, 1976; Schaefer et al., 2008; Fernandes et al., 2020).

Os atributos químicos do solo apresentaram diferenças significativas quando caracterizados pelos materiais de origem (arenito e basalto). As maiores concentrações de Ca, Mg, K, SB, CTC, V% e MO estão presentes nos solos de origem de basalto. Os resultados encontrados para os atributos químicos corroboram estudos de Cunha et al. (2005), Campos et al. (2012) e Araújo et al. (2014), indicando que os solos desenvolvidos de basalto possuem maior capacidade para o armazenamento de bases. Os basaltos são rochas ígneas ricas em silicatos, magnésio, cálcio, potássio e minerais férricos em sua estrutura primária (Swoboda et al., 2022), justificando os maiores teores de Ca, Mg, CTC, SB e V% para solos originados desse tipo de material de origem.

Levando em consideração a classificação dos níveis de dissecação da paisagem, os elementos determinados por meio da EFRx não apresentaram diferenças significativas ($p < 0,05$) (Tabela 3). No entanto, quanto foi realizada a caracterização pelo tipo de material de origem arenito e basalto (mediana geral), na qual todos os elementos diferiram significativamente (Mann-Whitney a 5%), com exceção para o teor de Mg que foi semelhante para as duas geologias. A ampla variação entre valores mínimos e máximos para os atributos analisados expressam a variedade dos materiais de origem e processos de formação do solo (Benedict et al., 2013; Oludare, 2017) e do manejo do solo (Lopes e Guilherme, 2016; Teixeira et al., 2018).

Tabela 3. Estatística descritiva para os atributos obtidos pela espectrometria de fluorescência de raios-X para solos do Planalto Ocidental Paulista (POP).

Variáveis	Solos originados de basalto				
	Pouco dissecado ¹	Moderadamente dissecado ¹	Altamente dissecado ¹	Mediana Geral ²	Min-Max
Al (%)	10,72 a	11,14 a	9,76 a	11,00 A	4,11–17,59
Si (%)	14,00 a	18,60 a	19,20 a	18,90 B	11,45–30,86
K (%)	0,52 a	0,51 a	0,50 a	0,51 B	0,46–1,04
Ca (%)	0,46 a	0,52 a	0,53 a	0,51 A	0,41–1,11
Ti (%)	3,87 a	2,10 a	1,92 a	2,03 A	0,41–4,30
Mn (%)	0,08 a	0,11 a	0,08 a	0,09 A	0,03–0,20
Fe (%)	9,74 a	11,50 a	10,10 a	11,10 A	2,17 – 21,00
Cu (%)	0,02 a	0,02 a	0,02 a	0,02 A	0,02–0,04
Zn (%)	0,01 a	0,01 a	0,01 a	0,012 A	0,01–0,02
Mg (%)	0,61 a	0,98 a	0,71 a	0,93 A	0,50–2,33
Variáveis	Solos originados de arenito				
	Pouco dissecado ¹	Moderadamente dissecado ¹	Altamente dissecado ¹	Mediana Geral ²	Min-Max
Al (%)	4,91 a	5,28 a	5,45 a	5,30 B	1,16–13,59
Si (%)	29,40 a	29,50 a	28,80 a	29,30 A	13,09–40,24
K (%)	0,56 a	0,62 a	0,64 a	0,61 A	0,40–1,38
Ca (%)	0,42 a	0,43 a	0,43 a	0,42 B	0,35–1,10
Ti (%)	0,54 a	0,56 a	0,66 a	0,56 B	0,14–3,57
Mn (%)	0,03 a	0,03 a	0,03 a	0,03 B	0,02–0,14
Fe (%)	1,78 a	1,90 a	2,27 a	1,97 B	0,52–18,59
Cu (%)	0,01 a	0,01 a	0,01 a	0,01 B	0,02–0,03
Zn (%)	0,01 a	0,01 a	0,01 a	0,01 B	0,01–0,01
Mg (%)	0,77 a	0,96 a	0,89 a	0,87 A	0,50–2,23

¹Medianas seguidas pela mesma letra minúscula não diferem pelo teste de Dunn a 5% para os níveis de dissecação da paisagem, dentro da mesma geologia. ²Mediana, medianas seguidas pela mesma letra maiúscula na pelo teste de Mann-Whitney a 5% entre as geologias. Al: Alumínio, Ca: Cálcio; Mg: Magnésio; K: potássio; Si: Silício; Ti: Titânio; Mn: manganês; Fe: Ferro; Cu: cobre; Zn: Zinco.

Os maiores teores de Al, Ca, Ti, Mn, Fe, Cu e Zn estão presentes nos solos basálticos (Tabela 3). Os solos desenvolvidos das rochas básicas ou ultrabásicas nas regiões tropicais, contém óxidos de alumínio (Gb) associado a proporções variáveis de óxidos de ferro (Hm, Gt, maghemita e ferrihidrita) (Medeiros et al., 2013; Almeida et al., 2018). As maiores concentrações de Si e K estão presentes nos solos de arenito. O arenito possui em sua constituição básica quartzo, feldspato potássico ou plagioclásio, condizendo aos resultados obtidos no presente estudo (Stockmann et al., 2016; Mancini et al., 2019; Andrade et al., 2020).

3.2 Correlação entre os atributos do solo

As relações entre os atributos do solo foram analisadas por meio do coeficiente de correlação de Spearman (Figura 2). O teor de areia apresentou correlação negativa com Hm (-0,53, $p < 0,01$) e Gt (-0,44, $p < 0,01$) e positiva para a razão Kt/(Kt+Gb)

(0,41, $p < 0,01$). Os teores de argila apresentaram correlações positivas com Hm (0,63, $p < 0,01$) e Gt (0,53, $p < 0,01$) e negativa para Kt/(Kt+Gb) (-0,45, $p < 0,01$). O solo originado de arenito possui maior concentração dos minerais Kt e Gb. Isso ocorre devido a menor concentração de ferro no material de origem dessas rochas, favorecendo a formação de minerais que possuem em sua estrutura alumínio e silício de forma predominante (Schaefer et al., 2008; Fernandes et al., 2020).

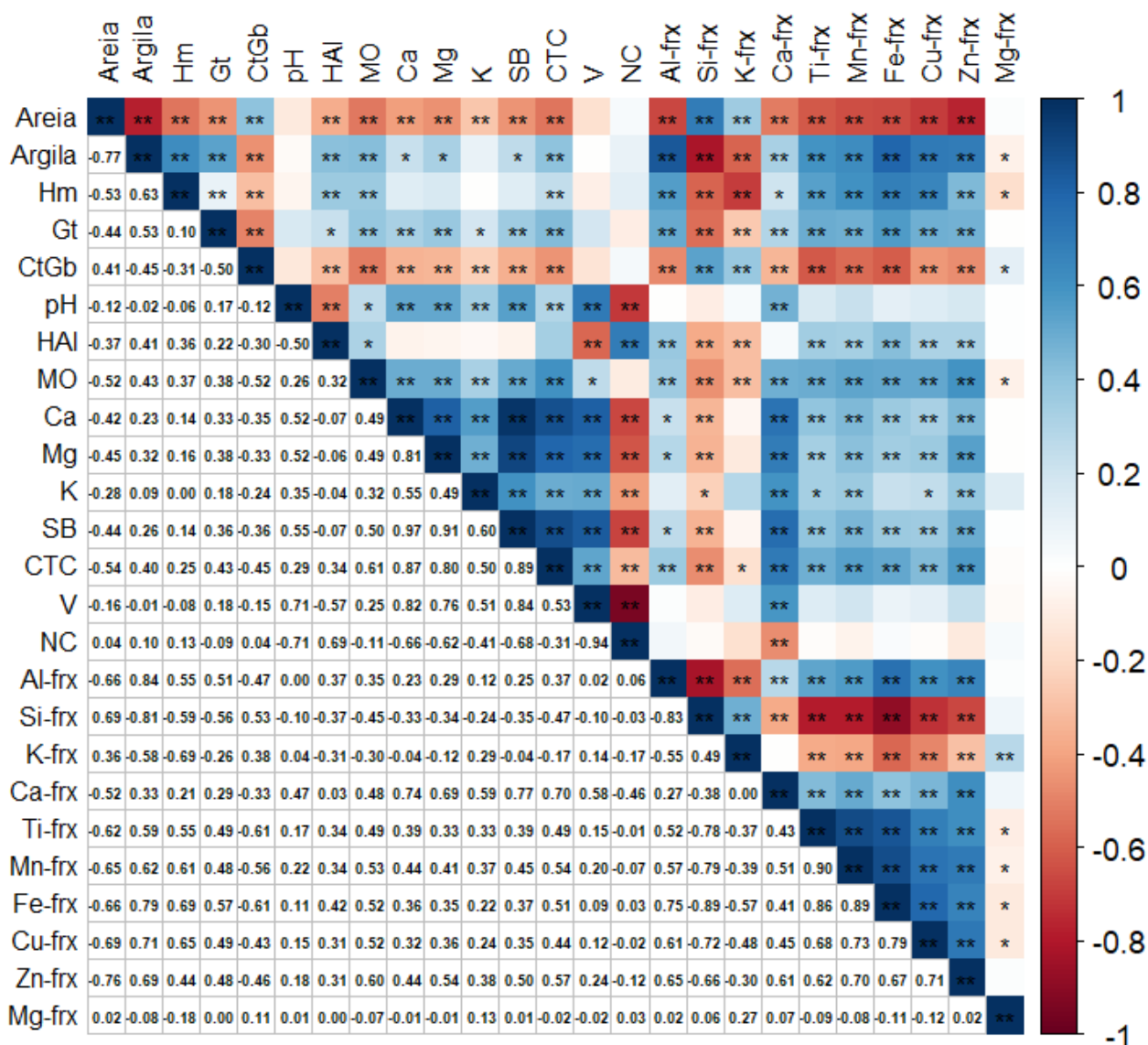


Figura 2: Matriz de correlação de Spearman para os atributos dos solos do Planalto Ocidental Paulista. Hm: Hematita; Gt: Goethita; CtGb: relação caulinita sobre gibbsita; pH: potencial hidrogeniônico; H+Al: Acidez potencial; MO: Matéria Orgânica; Ca: Cálcio; Mg: Magnésio; K: potássio; SB: Soma de bases; CTC: Capacidade de troca de cátions; V: Saturação por bases; NC: Necessidade de calagem; Al-frx: Alumínio, Si-frx: Silício; K-frx: Potássio; Ca-frx: Cálcio; Ti-frx: Titânio; Mn-frx: Mangânes; Fe-frx: Ferro; Cu-frx: Cobre; Zn-frx: Zinco; Mg-frx: Magnésio. - ** e * - Significativo a 1 e 5%.

O pH está correlacionado positivamente com os teores de Ca (0,52, $p < 0,01$), Mg (0,52, $p < 0,01$) e K (0,35, $p < 0,01$). Esses valores são semelhantes aos observados por Benedet et al. (2021) que avaliaram os atributos químicos para solos de diferentes regiões do país, incluindo o Estado de São Paulo. O pH do solo apresentou correlação positiva com SB (0,55, $p < 0,01$), CTC (0,29, $p < 0,01$) e V% (0,71, $p < 0,01$) e negativa com a necessidade de calagem (-0,71, $p < 0,01$). Isto ocorre pela íntima relação dessas propriedades com o complexo de cargas do solo que são responsáveis por reter esses elementos na superfície dos colóides do solo (Aprile et al., 2011; Hailegnaw et al., 2019; Gillespie et al., 2021).

A acidez potencial (H+Al) dos solos apresentou correlação negativa com V% (-0,57, $p < 0,01$) e positiva com a necessidade de calagem (0,69, $p < 0,01$). A correlação inversa apresentada entre a H+Al e V% ocorre devido a adsorção dos íons H+Al na superfície dos colóides do solo, ocasionando a lixiviação dos íons livres na solução do solo (Li et al., 2019; Yao et al., 2021). Tornando necessário a reposição das bases do solo por meio da prática da calagem, como indica a correlação entre a acidez e necessidade de calagem (Vazquez et al., 2019).

A matéria orgânica do solo (MO), apresentou correlação positiva com a SB (0,50, $p < 0,01$) e CTC (0,61, $p < 0,01$) e com V% (0,25, $p < 0,05$). Nos solos tropicais úmidos a matéria orgânica é um importante componente para o aumento da CTC do solo, podendo representar grande parte das cargas negativas presentes, atuando na adsorção dos cátions trocáveis ali presentes na solução (Rowley et al., 2018, Rasmussen et al., 2018; Solly et al., 2020).

A SB, CTC e V % apresentaram correlações positivas e negativas significativas para a maioria dos elementos determinados pelo sensor de EFRx. Para a SB foram: Al (0,25, $p < 0,05$), Si (-0,35, $p < 0,01$), Ca (0,77, $p < 0,01$), Ti (0,39, $p < 0,01$), Mn (0,45, $p < 0,01$), Fe (0,37, $p < 0,01$), Cu (0,35, $p < 0,01$) e Zn (0,50, $p < 0,01$). Para a CTC foram: Al (0,37, $p < 0,01$), Si (-0,47, $p < 0,01$), K (-0,17, $p < 0,05$), Ca (0,70, $p < 0,01$), Ti (0,49, $p < 0,01$), Mn (0,54, $p < 0,01$), Fe (0,51, $p < 0,01$), Cu (0,44, $p < 0,01$) e Zn (0,57, $p < 0,01$). Já para V%, apenas o Ca (0,58, $p < 0,01$) apresentou correlação significativa. As correlações positivas encontradas entre o Ca, SB, CTC e V% possui associação com a aplicação da calagem (Sharma et al., 2014; Rawal et al., 2019,

Teixeira et al., 2020). As relações entre o teor de Ca determinado pela análise química e pela EFRx apresentou correlação positiva (0,74, $p < 0,01$). Os elementos químicos com número atômico próximo de 12 (número atômico do mg = 12) são de difícil detecção na EFRx (Tavares et al., 2021; Demattê et al., 2021), justificando correlações não significativas entre esses elementos presente neste estudo (Figura 2).

O Fe presente nos solos tropicais úmidos está presente nos óxidos ferro litogênicos (magnetita) e pedogênicos (hematita, goethita e maghemita) sendo responsáveis por ditar o complexo de sorção do solo e apresentando relação com os íons presentes no solo (Chwertmann et al., 1993; Coward et al., 2017). Os óxidos de titânio e manganês também estão presentes na fração argila, mas em quantidades menores, quando comparados aos óxidos de ferro, porém, também influenciam nas cargas eletroquímicas presentes no solo (Kämpf e Azevedo, 1993; Lu et al., 2008; Colin et al., 2009).

O Cu e Zn são encontrados como metais auxiliares da formação dos óxidos em solos tropicais, ocorrendo por meio da substituição isomórfica durante a formação dos óxidos (Singh e Gilkes, 1992; Chaparro et al., 2020; Zhao et al., 2021).

3.3 Estimativa da soma de base, capacidade de troca catiônica e saturação por bases

O desempenho do algoritmo Random Forest para a estimativa da SB, CTC e V% utilizando os elementos determinados pela EFRx estão descritos na Tabela 4. Vale ressaltar que, esses são atributos relacionados diretamente com o cálculo de determinação da necessidade da calagem. Para o conjunto de dados de treino os atributos estudados apresentaram R^2 acima de 0,68. No conjunto de dados de teste dos modelos, o melhor desempenho foi obtido para a SB ($R^2 = 0,62$ e RMSE = 15,50), seguida da CTC ($R^2 = 0,54$ e RMSE = 19,43) e V% ($R^2 = 0,41$ e RMSE = 13,39). Teixeira et al. (2020) avaliando o potencial de predição da SB, CTC e V% por EFRx, obtiveram para SB os valores de R^2 variando de 0,66–0,81 e RMSE de 23,9–17,5, para CTC o R^2 variou de 0,51–0,58 e RMSE de 31,0–29,0 e V% obtiveram R^2 de 0,41–0,65 e RMSE de 15,8–20,6 que são semelhantes aos encontrados nesse estudo. Em contrapartida, Tavares et al. (2021) utilizaram

diferentes sensores para estimar atributos químicos de solos tropicais, nos quais os valores obtidos por meio da EFRx para CTC ($R^2 = 0,88$, RMSE = 10,19) e V% ($R^2 = 0,95$, RMSE = 5,60) foram superiores aos encontrados no presente estudo.

Tabela 4. Métricas de avaliação dos modelos de Random Forest para estimativa da soma de bases (SB), capacidade de troca catiônica (CTC) e saturação por bases (V) na profundidade de 0,00–0,20 m.

Atributos	Treino		Teste	
	RMSE*	R^2	RMSE	R^2
SB	13,25	0,68	15,50	0,62
CTC	14,08	0,70	19,43	0,54
V	8,12	0,75	13,39	0,41

* RMSE - raiz do erro quadrático médio

Para solos temperados dos Estados Unidos, Sharma et al. (2015) também relataram bons desempenhos da CTC ($R^2 = 0,90$ e RMSE = 24,98). Benedet et al. (2021) observaram valores semelhantes para a estimativa do Ca e Mg. Os solos estudados pelos autores foram representativos de sete estados do país, com extremos climáticos, geológicos, classes de solo e paisagem. Considerando as condições do estudo apresentado e as demais observadas na literatura, as estimativas da SB, CTC e V% apresentaram bom desempenho para o treino e teste. Quando se trata de solos tropicais, a variabilidade é extremamente alta e todos os dados gerados são importantes para explicar as relações de causa e efeito entre os solos e o manejo adequado.

As regressões desenvolvidas durante o período de teste do modelo, com dados independentes e os gráficos de importância são apresentados na Figura 3. Os gráficos de importância representam o nível de contribuição de cada variável para estimar a variável alvo, que neste caso é a SB, CTC e V%. Os elementos obtidos pelo sensor da EFRx usados na estimativa dos atributos apresentaram sequência de importância diferentes, demonstrando que cada atributo do solo possui uma relação particular com os elementos do sensor. A sequência em ordem de importância para estimar a SB foi: Ca, Fe, Mn, Zn, Cu e Ti. A CTC apresentou a seguinte sequência: Ca, Zn, Fe, Mn, Si e Ti. Para o V% foi: Ca, Fe, Mn, Cu, Zn e Ti. Faria et al. (2020) também observaram

que o Ca foi a variável mais importante para estimar a SB e V%. Teixeira et al. (2020) e Lopes e Guilherme (2016) citam que a elevada importância do Ca está associada as práticas de correção do solo como a calagem que eleva os teores desse elemento nos solos das regiões tropicais. Esse conhecimento é de extrema importância para a estimativa de atributos, pois pode auxiliar no aprimoramento de futuras metodologias (Benedet et al., 2021).

O Fe foi o segundo elemento mais importante para a estimativa dos atributos estudados. Nos solos tropicais, os óxidos de ferro altamente cristalinos e mal cristalizados desempenham papel importante na conservação da matéria orgânica pela formação de agregados e aumentando da capacidade de troca de cátions do solo (Zhang et al., 2013; Feng et al., 2016, Wang et al., 2019). O Mn se apresentou também como elemento importante para a avaliação dos atributos. Este elemento está presente nos solos tropicais úmidos na forma de óxidos residuais em associação com os óxidos de ferro e quando possuem baixa cristalinidade possuem influencia nas cargas do solo com o aumento do pH junto aos óxidos de ferro (Amstaetter et al., 2010; Hindersmann e Mansfeldt, 2014).

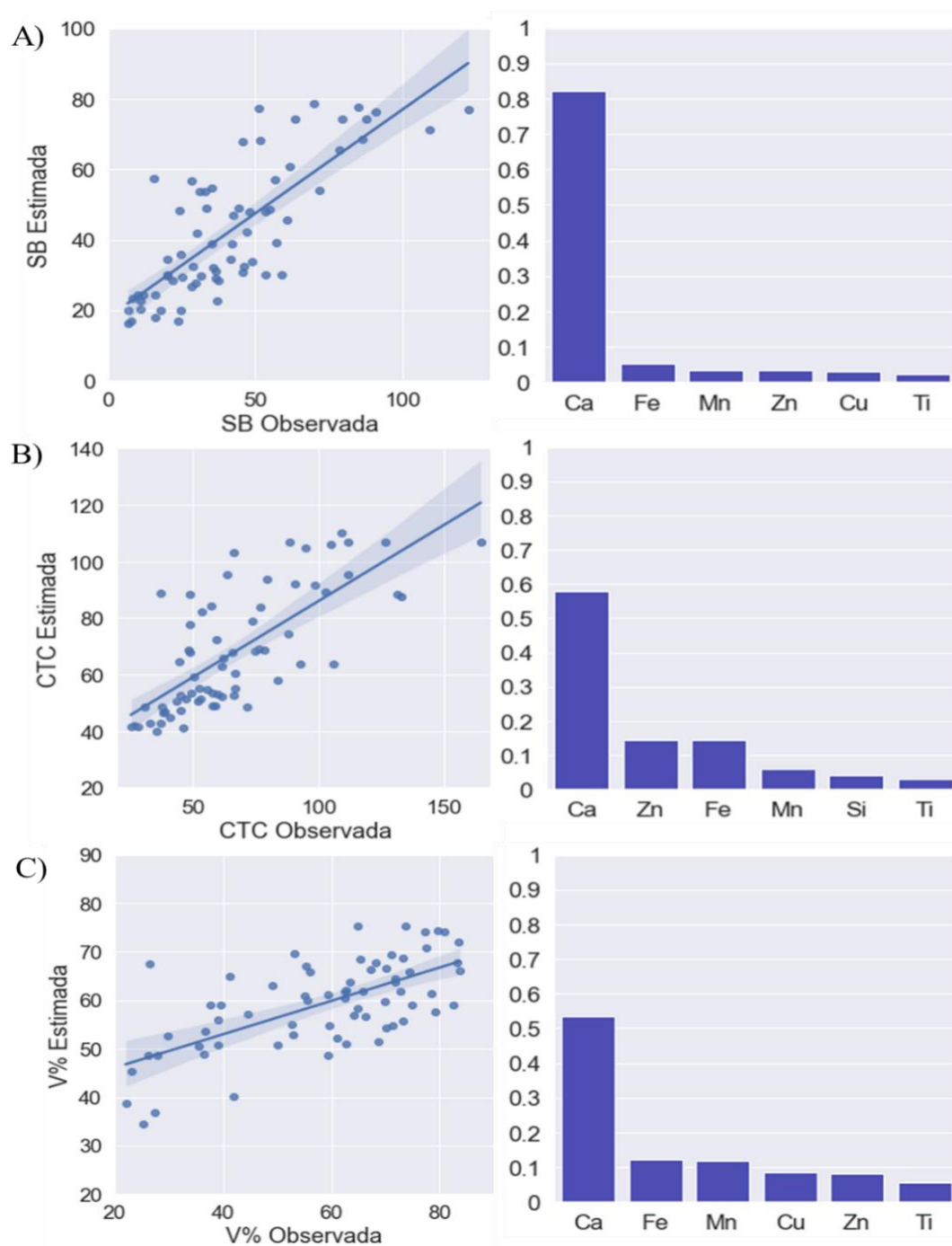


Figura 3: Desempenho do modelo e importância das variáveis para estimativa: (A) Soma de Bases – SB em $\text{mmol}_c \text{dm}^{-3}$; (B) Capacidade de Troca Catiônica – CTC em $\text{mmol}_c \text{dm}^{-3}$ e (C) Saturação por bases – V %.

3.4 Mapeamento para soma de base, capacidade de troca catiônica, saturação por bases e necessidade de calagem

Os atributos obtidos pela análise química e estimados pelo sensor de EFRx foram submetidos a análise geoestatística (Tabela 5 e Figura 4). Os atributos se ajustaram ao modelo do semivariograma esférico. O modelo esférico é caracterizado por representar a variabilidade de atributos do solo ditados pelos fatores geológicos e pedológicos da área em estudo (Cambardella et al., 1994; Webster e Oliver, 2007). O modelo esférico tem se ajustado a atributos químicos em áreas menores de produção agrícola dentro do Planalto Ocidental Paulista (Souza et al., 2014; Siqueira et al., 2016; Baldo et al., 2020; Almeida et al., 2021). Liu et al. (2014), também obtiveram ajustes de dados com o modelo esférico a atributos químicos (pH, MO e K) em áreas de caráter regional com aproximadamente 24 milhões de hectares. Usowicz et al. (2017) obtiveram bons ajustes de modelos esféricos em campos cultivados com cereais, demonstrando que os manejos dos atributos intrínsecos do solo coordenam a variabilidade dos atributos.

Tabela 5. Métricas geoestatísticas para soma de bases (SB), capacidade de troca catiônica (CTC), saturação por bases (V%) e necessidade da calagem (NC) na profundidade de 0,0–0,2 m.

	Atributo	Modelo	C ₀	C	A ₀ (km)	SQR	GDE
Observado	SB (mmol _c dm ⁻³)	Esférico	397,10	140,09	196,761	5,30e-04	73,93
	CTC (mmol _c dm ⁻³)	Esférico	424,90	150,74	208,653	1,61e-03	73,90
	V (mmol _c dm ⁻³)	Esférico	214,23	75,78	131,927	2,54e-04	73,86
	NC (t/ha)	Esférico	0,52	0,18	70,497	4.20e-10	74,05
Estimado - Random Forest	SB (mmol _c dm ⁻³)	Esférico	194,02	99,22	163,556	1,47e-04	66,16
	CTC (mmol _c dm ⁻³)	Esférico	164,87	109,31	133,106	1,47e-04	60,13
	V (mmol _c dm ⁻³)	Esférico	106,65	36,42	208,316	1,66e-04	74,54
	NC (t/ha)	Esférico	0,55	0,18	139,164	7.53e-10	74,32

*C₀ — Efeito pepita; C — Patamar; A₀ - Alcance; SQR — Soma dos quadrados dos resíduos; GDE — análise de dependência espacial.

Os parâmetros demonstram que o efeito pepita (C₀) para os atributos químicos observados são maiores do que os estimados pelo algoritmo de aprendizado de máquina. O C₀ consiste na soma da variabilidade existente em escala menor que a malha de pontos usados para a avaliação (Cambardella et al., 1994; Webster e Oliver, 2007). Os valores obtidos desse atributo estão relacionados a erros e incertezas analíticas durante os procedimentos de análise laboratoriais, que podem variar entre

15–30% (Isaaks e Srivastava, 1989; Cantarella et al., 2006). O grau de dependência espacial foi classificado como moderado para todos os atributos do solo, tal fato, indica que somado aos fatores intrínsecos (material de origem, clima e relevo), ocorrem fatores relacionados ao manejo. As práticas de correção e adubação do solo, a exemplo das adotadas na área de estudo podem estar influenciando na variabilidade dos atributos avaliados (Cambardella et al., 1994; Ghan et al., 2017).

Os valores de alcance (A_0) indicam a distância máxima em que as amostras apresentam dependência espacial (Isaaks e Srivastava, 1989) (Tabela 5). Para os alcances obtidos para os atributos observados e estimados nota-se uma redução do alcance para os atributos SB e CTC indicando aumento na variabilidade desses atributos e aumento para V% e necessidade de calagem (NC), representado suavização na variabilidade desses atributos. Foram encontrados resultados A_0 semelhantes citados por Baldo et al. (2020) que estudaram a estimativa de atributos mineralógicos em solos do POP.

Ao analisar os mapas de variabilidade obtidos pela krigagem ordinária, pode-se observar um comportamento semelhante entre os mapas dos atributos observados e estimados (Figura 4). Os mapas de erro mostram baixa variação, com valores dentro do intervalo de -20 - 20%, indicando diferença aceitável, indicando a EFRx como técnica promissora para mapeamento dos atributos do solo, mesmo em áreas de dimensão regional (Baldo et al., 2020; Fernandes et al., 2020; Silva et al., 2020).

As isolinhas delimitadas para SB, CTC e V% nos mapas observados e estimados seguem o mesmo comportamento espacial geológico da área em estudo, que é representada pelos materiais de origem arenito e basalto (Figura 1). Os atributos químicos possuem maior concentração das bases na região basáltica. Solos com textura argilosa possui maior CTC e maior capacidade de armazenar as bases do solo, apontados para a região dos solos desenvolvidos sobre basalto. A variabilidade dos atributos mineralógicos, que são os coordenadores dos processos que ocorrem no solo, apresentam comportamento espacial semelhante aos dos mapas deste estudo (Silva et al., 2020; Fernandes et al., 2020; Baldo et al., 2021).

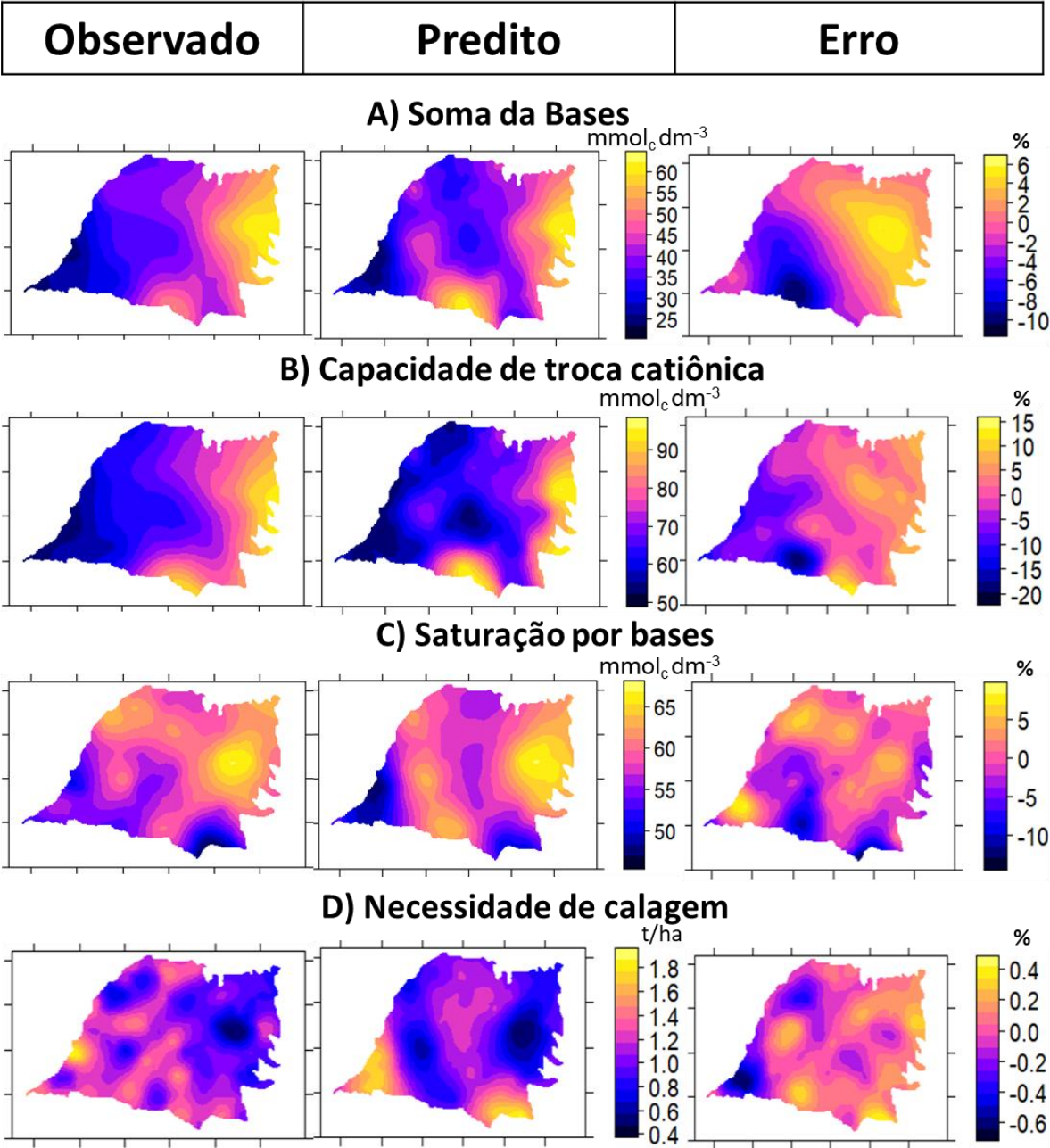


Figura 4. Mapas de variabilidade espacial observados e estimados por random forest e mapas de erro, para os solos do Planalto Ocidental Paulista.

Comportamento inverso foi obtido no mapa de isolinhas da necessidade de calagem (Figura 4), no qual, o mesmo indica maior necessidade de aplicação de calcário na porção arenítica do POP (Figura 1). Os solos da geologia arenítica possuem naturalmente menor CTC, ocasionando uma lixiviação frequente dos nutrientes e rápida decomposição da matéria orgânica, reduzindo o pH, e consequente necessitando de doses mais elevadas de calcário (Eneci et al., 2023;

Gunnarsson et al., 2022).

Com os resultados obtidos pode-se projetar o uso do sensor da EFRx como um método pedométrico eficiente no mapeamento dos atributos estudados (Figura 4). Esta técnica pode auxiliar os métodos convencionais de mapeamento do solo em áreas de caráter regional como o Planalto Ocidental Paulista, que possui uma ampla variação geológica e pedológica (Figura 1).

Contudo, cabe ressaltar que técnicas baseadas em sensores não excluem as metodologias convencionais, mas podem ser utilizadas em associação. Os métodos químicos são associados por vezes a poluição e degradação do ambiente, entretanto as técnicas alternativas, como as técnicas pedométricas trazem uma nova alternativa, se baseando na redução do uso de soluções químicas e geração de substâncias insalubres (Gredilla et al., 2016).

4 Conclusões

Os atributos mineralógicos, granulométricos, químicos e os elementos obtidos pela EFRx variam de acordo com a distribuição do material de origem basalto-arenito.

A concentração total dos elementos Ca, Fe, Mn, Zn, Cu e Ti associado ao algoritmo Random Forest foi eficiente para estimativa de SB, CTC e V% e delimitação de zonas específicas de manejo da necessidade de calagem.

A elaboração de mapas detalhados tornará o manejo da aplicação de calagem nos solos tropicais mais eficiente, gerando menor impacto negativo para a exploração dos materiais corretivos, da necessidade de reagentes químicos para as análises de rotina e maior equilíbrio entre a demanda nutricional e a disponibilidade de nutrientes para o adequado desenvolvimento das culturas.

5 Referências

- Abalos D, Liang Z, Dörsch P, Elsgaard L (2020) Trade-offs in greenhouse gas emissions across a liming-induced gradient of soil pH: Role of microbial structure and functioning. **Soil Biology and Biochemistry** 150, 108006.
- Abracal - Associação brasileira dos produtores de calcário agrícola (2022, 26 de setembro). **Consumo calcário avança e sinaliza melhor cuidado com o solo**. Disponível em: <http://www.abracal.com.br/noticia/205/consumo-de-calcario-avanca-46-e-sinaliza-melhor-cuidado-com-o-solo.html>.
- Abreu JRCH, Muraoka T, Lavorante AF (2003) Relationship between acidity and chemical properties of Brazilian soils. **Scientia Agricola** 60 (2), 337-343. <https://doi.org/10.1590/S0103-90162003000200019>
- Almeida GM, Pereira GT, Bahia ASRS, Fernandes K, Marques Júnior J (2021) Machine learning in the prediction of sugarcane production environments. **Computers and Electronics in Agriculture** 190. <https://doi.org/10.1016/j.compag.2021.106452>
- Andrade JC, Cantarella H, Quaggio JA (2001) **Análise química para avaliação da fertilidade de solos tropicais**. Instituto Agrônomo de Campinas.
- Araujo MA, Pedroso AV, Amaral DC, Zinn YL (2014) Paragênese mineral de solos desenvolvidos de diferentes litologias na região sul de Minas Gerais. **Revista Brasileira. Ciência do solo**, 38, 11–25. <https://doi.org/10.1590/S0100-06832014000100002>
- Augusto L, Achat DL, Jonard M, Vidal D, Ringeval B (2017) Soil parent material – a major driver of plant nutrient limitations in terrestrial ecosystems. **Global Change Biology** 23 (9), 3808–3824. <https://doi.org/10.1111/gcb.13691>.
- Bahia ASRS, Marques J, la Scala N, Pellegrino CCE, Camargo LA (2017) Prediction and Mapping of Soil Attributes using Diffuse Reflectance Spectroscopy and Magnetic Susceptibility. **Soil Science Society of America Journal** 81, 1450–1462. <https://doi.org/10.2136/sssaj2017.06.0206>

Baldo D, Marques J, Fernandes K, Almeida GM, Siqueira DS (2021) Soil mineralogical attributes estimated by color as accessed by proximal sensors and machine learning. **Soil Science Society of America Journal** 85, 2185–2200. <https://doi.org/10.1002/saj2.20309>

Benedet L, Acuna-Guzman SF, Faria WM, Silva SHG, Mancini M, Teixeira, AFS, Pierangeli LMP, Acerbi Júnior FW, Gomide LR, Pádua Júnior AL, Souza IA, Menezes MD, Marques JJ, Guilherme LRG, Curi N (2021) Rapid soil fertility prediction using X-ray fluorescence data and machine learning algorithms. **Catena** 197, <https://www/2073-4395/12/11/2699#>

Benke KK, Norng S, Robinson NJ, Chia K, Rees DB, Hopley J (2020) Development of pedotransfer functions by machine learning for prediction of soil electrical conductivity and organic carbon content. **Geoderma** 366, 114-210. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2020.114210>

Bivand, R, Lewin-Koh, N, Pebesma, E, Archer, E, Baddeley, A, Bearman, N, Golicher, D (2023) **Package ‘maptools’**. Package ‘maptools’.

Borgmann C, Secco D, Marins AC, Zanao Junior LA, Bassegio D, Souza SNMD; Silva TRBD (2021) Effect of Soil Compaction and Application of Lime and Gypsum on Soil Properties and Yield of Soybean. **Communications in Soil Science and Plant Analysis** 1-14. <https://doi.org/10.1080/00103624.2021.1885688>

Bortoluzzi EC, Garibotti A, Tiecher T, Santos DR, Moterle DF, Fiorin JE (2022) Revisiting Limestone Quality for Soil Liming Purpose. **Minerals** 12(12), 1522. <https://doi.org/10.3390/min12121522>

Brady NC, Weil RR, (2013) **Elementos da natureza e propriedades dos solos**. 3.ed. Porto Alegre: Bookman.704p.

Breiman L (2001). Random forests. **Machine learning** 45, 5-32. <https://doi.org/10.1023/A:1010933404324>

Caires EF, Haliski A, Bini AR, Scharr DA (2015) Surface liming and nitrogen fertilization for crop grain production under no-till management in Brazil. **European Journal of Agronomy**. <https://doi.org/10.1002/saj2.20309>

Camargo LA, Júnior JM, Pereira GT, Alleoni LRF (2013) Spatial correlation between the composition of the clay fraction and contents of available phosphorus of an Oxisol at hillslope scale. **Catena** 100, 100-106. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2012.07.016>

Camargo LA, Marques Júnior J, Pereira GT, Horvat RA (2008) Variabilidade espacial de atributos mineralógicos de um latossolo sob diferentes formas do relevo: II- correlação espacial entre mineralogia e agregados. **Revista Brasileira de Ciência do solo** 32, 2279-2288. <https://doi.org/10.1590/S0100-06832008000600007>

Cambardella CA, Moorman TB, Novak JM, Parkin TB, Karlen DL, Turco RF, Konopka AE (1994) Field-scale variability of soil properties in Central Iowa soils. **Soil Science Society of America Journal** 58:1501-1511. <https://doi.org/10.2136/sssaj1994.03615995005800050033x>

Campos MCC, Ribeiro MR, Souza Júnior VS, Ribeiro Filho MR, Souza RVCC, Almeida MC (2012) Soil-relief relationships in a grassland/forest transition in the region of Humaitá, Amazonas State, Brazil. **Acta Amazon** 42,387–398. <https://doi.org/10.1590/S0044-59672012000300011>

Cantarella H, Quaggio JA, Van Raij B, Abreu MF (2006) Variability of soil analysis in commercial laboratories: implications for lime and fertilizer recommendations. **Communications in Soil Science and Plant Analysis** 37 (15–20), 2213–2225. <https://doi.org/10.1080/00103620600817523>

CANTARELLA, H.; QUAGGIO, J. A.; Mattos Júnior, D.; Boaretto, R.M.; RAIJ, V.R (Ed.). **Recomendações de adubação e calagem para o Estado de São Paulo. Boletim Técnico Nº 100**. 2. ed. Campinas: Instituto Agrônomo e Fundação IAC, 2022.

Chaparro MA, Moralejo M, Böhnelt HN, Acebal SG (2020) Iron oxide mineralogy in Mollisols, Aridisols and Entisols from southwestern Pampean region (Argentina) by

environmental magnetism approach. **Catena** 190, 104534.
<https://doi.org/10.1016/j.catena.2020.104534>

Coventry RJ, Williams J (1984) Quantitative relationships between morphology and current soil hydrology in some Alfisols in semiarid tropical Australia. **Geoderma** 33(3), 191-218. [https://doi.org/10.1016/0016-7061\(84\)90055-7](https://doi.org/10.1016/0016-7061(84)90055-7)

Coward EK, Thompson AT, Plante AF (2017) Iron-mediated mineralogical control of organic matter accumulation in tropical soils. **Geoderma** 306, 206-216.
<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.07.026>

Cunha P, Marques Júnior J, Curi N, Pereira GT, Lepsch IF (2005) Superfícies geomórficas e atributos de Latossolos em uma seqüência arenítico-basáltica da região de Jaboticabal (SP). **Revista Brasileira de Ciência do solo** 29(1), 81-90.
<https://doi.org/10.1590/S0100-06832005000100009>

Dematte JAM, Terra FS, Bellinaso H, Poppiel RR, Marques Júnior J, Braz KF, Milori DMBP, Villas-Boas PR, Guimarães CCB, Silva SHG, Campos JRR, Tavares TR, **Fundamentos do Sensoriamento Próximo de Solos**. IN: Souza-Filho LF, Silva RC, Cesar FRCF, Souza CMM. tópicos em Ciência do solo. SBSCS: Viçosa, MG, 200. pg. 417-486

Demattê JAMAC, Dotto AFS, Paiva MV, Sato RSD Dalmolin (2019) The Brazilian Soil Spectral Library (BSSL): A general view, application and challenges. **Geoderma** 354(August): 113793.

Dick DP (1986) **Caracterização de óxidos de ferro e adsorção de fósforo na fração argila de horizontes B latossólicos**. Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

EMBRAPA – Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (2015) **Recomendações para correção da acidez do solo para cana-de-açúcar no cerrado**. Embrapa Cerrados - Comunicado Técnico 177.

Enesi RO, Dyck M, Chang S, Thilakarathna MS, Fan X, Strelkov S, Gorim LY (2023) Liming remediates soil acidity and improves crop yield and profitability-a meta-analysis. *Frontiers in Agronomy* 5, 1194896.

FAO (2019). **The state of food security and nutrition in the world: Safeguarding against economic slowdowns and downturns**. Rome.

Faria AJG, Silva SHG, Melo LCA, Andrade R, Mancini M, Mesquita LF, Teixeira AFS, Guilherme LRG, Curi N (2020) Soils of the Brazilian Coastal Plains biome: prediction of chemical attributes via portable X-ray fluorescence (pXRF) spectrometry and robust prediction models. **Soil Research in press**. <https://doi.org/10.1071/SR20136>.
<https://doi.org/10.1071/SR20136>

Fernandes K, Júnior JM, Souza BASR, Demattê JÁ, Ribon AA (2020) Landscape-scale spatial variability of kaolinite-gibbsite ratio in tropical soils detected by diffuse reflectance spectroscopy. **Catena** 195, 104795.
<https://doi.org/10.1016/j.catena.2020.104795>

Fernandes LA (2004) Mapa litoestratigráfico da parte oriental da Bacia Bauru (PR, SP, MG), escala 1: 1.000. 000. **Boletim Paranaense de Geociências** 55. DOI: 10.1590/S0103-84782014000200011

Fernandes LA, Castro AB, Basilici G (2007) Seismites in continental sand sea deposits of the late Cretaceous Caiua Desert, Bauru Basin, Brazil. **Sedimentary Geology** 199 (1-2), 51-64. <https://doi.org/10.1016/j.sedgeo.2005.12.030>

Fernandes LA, Coimbra AM (2000) Revisão estratigráfica da parte oriental da bacia Bauru (Neocretáceo). **Revista Brasileira de Geociências** 30:717–728. [https://doi.org/10.1016/0016-7061\(84\)90055-7](https://doi.org/10.1016/0016-7061(84)90055-7)

Fink JR, Inda AV, Bavaresco J, Barrón V, Torrent J, Bayer C (2016) Adsorption and desorption of phosphorus in subtropical soils as affected by management system and mineralogy. **Soil and Tillage Research** 155, 62-68. <https://doi.org/10.1016/j.still.2015.07.017>

Flanagan FJ (1970) Sources of geochemical standards—II. **Geochimica et Cosmochimica Acta** 34(1), 121-125. [https://doi.org/10.1016/0016-7037\(70\)90155-9](https://doi.org/10.1016/0016-7037(70)90155-9)

Fonseca JDS, Campos, MCC, Brito Filho EGD, Mantovanelli BC, Silva LS, Lima AF L, Santos LAC (2021) Soil–landscape relationship in a sandstone-gneiss topolitho

sequence in the State of Amazonas, Brazil. **Environmental Earth Sciences** 80, 1-15.
<https://doi.org/10.1007/s12665-021-10026-9>

Fonseca JS, Campos MCC, · Filho EGB, Mantovanelli BC, Silva LS, Lima AFLJ, Cunha M, Simões EL, Santos LAC (2021) Soil–landscape relationship in a sandstone-gneiss topolithosequence in the State of Amazonas, Brazil. **Environmental Earth Sciences** 80:714. <https://doi.org/10.5194/se-2019-131>

Frageria NK, Nascente AS (2014) Management of soil acidity of South American soils for sustainable crop production. **Advances in Agronomy** 128, 221–275.
<https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802139-2.00006-8>

Gates WP (2006) X-ray absorption spectroscopy. In: Bergaya F, Theng BKG, Lagaly G (Eds.), Handbook of Clay Science. **Developments in Clay Science** 1,789–864.
[https://doi.org/10.1016/S1572-4352\(05\)01001-9](https://doi.org/10.1016/S1572-4352(05)01001-9)

Gillespie CJ, Antonangelo JA, Zhang H (2021) The response of soil pH and exchangeable Al to alum and lime amendments. **Agriculture** 11(6), 547.
<https://doi.org/10.3390/agriculture11060547>

Gredilla A, Vallejuelo SFO, Elejoste N, Diego A, Madariaga JM (2016) Non-destructive Spectroscopy combined with chemometrics as a tool for Green Chemical Analysis of environmental samples: A review. **TRAC: Trends in Analytical Chemistry** 76, 30–39. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2015.11.011>

Grotzinger J, Jordan T (2013) **Para Entender a Terra**. Porto Alegre, Brasil: Bookman

Gunnarsson A, Blomquist, J., Persson L, Olsson Å, Hamnér K, Berglund K (2022) Liming alkaline clay soils: effects on soil structure, nutrients, barley growth and yield. **Acta Agriculturae Scandinavica, Section B—Soil & Plant Science** 72(1), 803-817.

Hailegnaw NS, Mercl F, Pračke K, Száková J, Tlustoš P (2019) Mutual relationships of biochar and soil pH, CEC, and exchangeable base cations in a model laboratory experiment. **Journal of Soils and Sediments** 19, 2405-2416.
<https://doi.org/10.1007/s11368-019-02264-z>

He S, Feng Y, Ni J, Sun Y, Xue L, Feng Y, Yang L (2016) Different responses of soil microbial metabolic activity to silver and iron oxide nanoparticles. **Chemosphere** 147, 195-202. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2015.12.055>

Hijmans, RJ, Van Etten, J, Mattiuzzi, M, Sumner, M, Greenberg, JA, Lamigueiro, OP, Shortridge, A (2013) **Raster package in R**. Version. <https://mirror.sjtug.sjtu.edu.cn/cran/web/packages/raster/raster.pdf>.

Hindersmann I, Mansfeldt T (2014) Trace element solubility in a multimetal-contaminated soil as affected by redox conditions. **Water, Air, & Soil Pollution** 225, 1-20. <https://doi.org/10.1007/s11270-014-2158-8>

IBSRAM (1985) **Acid Tropical Soils Management Network**. International Board of Soil Research and Management, Bangkok.

Isaaks EH, Srivastava RM (1989) **Applied Geostatistics**. Oxford University Press.

Jackson ML (1985) **Soil Chemical Analysis**. Madison.

Jochum KP, Weis U, Schwager B, Stoll B, Wilson SA, Haug GH,ENZWEILER J (2016) Reference values following ISO guidelines for frequently requested rock reference materials. **Geostandards and Geoanalytical Research** 40(3), 333-350. <https://doi.org/10.1111/j.1751-908X.2015.00392.x>

Kampf N, Schwertmann U (1982). The 5-M-NaOH concentration treatment for iron oxides in soils. **Clays and clay minerals** 30(6), 401-408. <https://doi.org/10.1346/CCMN.1982.0300601>

Kämpf N, Schwertmann U (1998) Avaliação da estimativa de substituição de Fe por Al em hematitas de solos. **Revista Brasileira de Ciência do solo** 22, 209-213. <https://doi.org/10.1590/S0100-06831998000200005>

Kämpf, N. Curi, N (2000) Óxidos de ferro: indicadores de ambientes pedogênicos e geoquímicos. Tópicos em Ciência do solo. Sociedade Brasileira de Ciência do solo.

Kassambara A (2020) **Package 'rstatix'**. R topics documented.

- Ker JC, Curi N, Schaefer CE, Torrado PV (2012) **Pedologia: fundamentos**. Viçosa.
- Li Q, Wu J, Zhao X, Gu X, Ji R (2019) Separation and identification of microplastics from soil and sewage sludge. **Environmental Pollution** 254, 113076. <https://doi.org/10.1016/j.envpol.2019.113076>
- Lima APB, Inda AV, Zinn YL, Nascimento PC (2021) Weathering sequence of soils along a basalt-sandstone toposequence in the Brazilian Cerrado. **Geoderma** 394(2),115009. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2021.115009>
- Lima APB, Inda AV, Zinn YL, Nascimento PC (2021) Weathering sequence of soils along a basalt-sandstone toposequence in the Brazilian Cerrado. **Geoderma** 394, 115009. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2021.115009>
- Liu Z, Zhou W, Shen J, He P, Lei Q, Liang G (2014) A simple assessment on spatial variability of rice yield and selected soil chemical properties of paddy fields in South China. **Geoderma** 235, 39-47. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2014.06.027>
- Lopes AS, Guilherme LRG (2016) A career perspective on soil management in the Cerrado region of Brazil. **Advances in Agronomy** 137, 1–72. <https://doi.org/10.1016/bs.agron.2015.12.004>
- Lu SG, Xue QF, Zhu L, Yu JY (2008) Mineral magnetic properties of a weathering sequence of soils derived from basalt in Eastern China. **Catena** 73(1), 23-33. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2007.08.004>
- Mancini M, Weindorf DC, Chakraborty S, Silva SHG, Teixeira AFS, Guimarães Guilherme LR, Curia N (2019) Tracing tropical soil parent material analysis via portable X-ray fluorescence (pXRF) spectrometry in Brazilian Cerrado. **Geoderma** 337, 718–728. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.10.026>
- Marques Júnior J, Siqueira DS, Camargo LA, Teixeira DDB, Barron V, Torrent J (2014) Magnetic susceptibility and diffuse reflectance spectroscopy to characterize the spatial variability of soil properties in a Brazilian Haplustalf. **Geoderma** 219–220, 63–71. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2013.12.007>

Matias SSR, Marques Júnior J, Siqueira DS, Pereira GT (2014) Outlining precision boundaries among areas with different variability standards using magnetic susceptibility and geomorphic surfaces. **Engenharia Agrícola** 34 (4), 695–706. <https://doi.org/10.1590/S0100-69162014000400009>

McBratney A, Gruijter J, Bryce A (2019) Pedometrics timeline. **Geoderma** 338, 568-575. <https://doi.org/10.5194/soil-6-35-2020>

McBratney AB, Santos MM, Minasny B (2003) On digital soil mapping. **Geoderma** 117(1-2), 3-52. [https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(03\)00223-4](https://doi.org/10.1016/S0016-7061(03)00223-4)

Mehra OP, Jackson ML (1960). Iron oxide removed from soils and clays by dithionitecitrate system buffered with sodium bicarbonate. **Clays and Clay Minerals** 7(1), 1317-327. <https://doi.org/10.1590/S0103-90162014000300010>

Metcalfe H, Milne AE, Coleman K, Murdoch AJ, Storkey J (2019) Modelling the effect of spatially variable soil properties on the distribution of weeds. **Ecological modelling** 396, 1-11. <https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2018.11.002>

Mohammed AT, Jaafar MNM, Othman N, Veza I, Mohammed B, Oshadumi FA, Sanda HY (2021) Soil fertility enrichment potential of *Jatropha curcas* for sustainable agricultural production: A case study of Birnin Kebbi, Nigeria. **Annals of the Romanian Society for Cell Biology** 21061-21073. <https://annalsofrscb.ro/index.php/journal/article/view/10086>

Molin JP, Tavares TR (2019) Sensor systems for mapping soil fertility attributes: Challenges, advances, and perspectives in Brazilian tropical soils. **Engenharia Agrícola** 39, 126–147. <https://doi.org/10.1590/1809-4430-Eng.Agric.v39nep126-147/2019>

Murdoch AJ, Flint C, Pilgrim RA, de la Warr PN, Camp J, Knight B, Lutman P, Magri B, Miller P, Robinson T, Sandford S, Walters N (2014) Eyeweed: automating mapping of black-grass (*Alopecurus myosuroides*) for more precise applications of pre- and post-emergence herbicides and detecting potential herbicide resistance. **Aspects of Applied Biology** 127, 151–158. [https://doi.org/10.1016/S0016-7061\(03\)00223-4](https://doi.org/10.1016/S0016-7061(03)00223-4)

Ng W, Minasny B, McBratney A (2020) Convolutional neural network for soil microplastic contamination screening using infrared spectroscopy. **Science of the Total Environment** 702, 134723. <https://doi.org/10.5194/soil-6-35-2020>

Norrish K, Taylor RM (1961) The isomorphous replacement of iron by aluminium in soil goethites. **Journal of Soil Science** 12(2), 294-306.

Oliver MA, Webster RA (2014) Tutorial guide to geostatistics: computing and modelling variograms and kriging. **Catena** 113, 56-69. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2013.09.006>

Pebesma, E, Bivand, RS (2005) **S classes and methods for spatial data: the sp package**. R news, 5(2), 9-13.

Pebesma, EJ (2001) **Gstat user's manual**. Dept. of Physical Geography, Utrecht University, Utrecht, The Netherlands.

Pedregosa F, Varoquaux G, Gramfort A, Michel V, Thirion B, Grisel O, Blondel M, Prettenhofer P, Weiss R, Dubourg V (2011) Scikit-learn: Machine learning in Python. **Journal of Machine Learning Research** 12:2825–2830.

Pereira-Junior EV, Giori FG, Nascimento AL, Tornisielo VL, Regitano JB (2015) Effects of soil attributes and straw accumulation on the sorption of hexazinone and tebuthiuron in tropical soils cultivated with sugarcane. **Journal of environmental science and health - part b pesticides, food contaminants, and agricultural wastes** 50 (4), 238–246. <https://doi.org/10.1080/03601234.2015.999588>

Poggere GC, Inda AV, Barrón V, Kämpf N, Brito ADB, Barbosa JZ, Curi N (2018) Maghemite quantification and magnetic signature of Brazilian soils with contrasting parent materials. **Applied Clay Science**. Sci 161:385–394. <https://doi.org/10.1016/j.clay.2018.05.014>

Queiroz Neto JPD, Pellerin J (1994) Solos e relevo no alto vale do rio de peixe-Oscar Bressane (São Paulo, Brasil). **Revista do Departamento de Geografia** (7), 25-34. <http://dx.doi.org/10.7154/RDG.1994.0007.0002>

R Core Team, 2020. In: **R: A Language and Environment for Statistical Computing**. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. <https://www.R-project.org/>

Raij BV, Quaggio JA, Cantarella H, Ferreira ME, Lopes AS, Bataglia OC (1987) **Análise química do solo para fins de fertilidade**. Fundação Cargill.

Raij BV; Quaggio, J.A. & Cantarella, H.(1987). Análise química do solo para fins de fertilidade.

Rasmussen C, Heckman K, Wieder WR, Keiluweit M, Lawrence CR, Berhe AA, Wagai R (2018) Beyond clay: towards an improved set of variables for predicting soil organic matter content. **Biogeochemistry** 137, 297-306. <https://doi.org/10.1007/s10533-018-0424-3>

Rawal A, Chakraborty S, Li B, Lewis K, Godoy M, Paulette L, Weindorf DC (2019) Determination of base saturation percentage in agricultural soils via portable X-ray fluorescence spectrometer. **Geoderma** 338, 375-382. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2018.12.032>

Resende M (1976) **Mineralogy, chemistry, morphology and geomorphology of some soils of the central plateau of Brazil**. Purdue University.

Resende M, Curi N, Rezende SB, Corrêa GF, Ker JCJC (2014) **Pedologia: base para distinção de ambientes**. UFLA, Lavras.

Rheinheimer DS, Tiecher T, Gonzatto R, Zafar M, Brunetto G (2018) Residual effect of surface-applied lime on soil acidity properties in a long-term experiment under no-till in a Southern Brazilian sandy Ultisol. **Geoderma** 313, 7-16. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.10.024>

Ribeiro BT, Weindorf DC, Silva BM, Tedassinari D, Amarante LC, Curi N, Guilherme LR (2018) The influence of soil moisture on oxide determination in tropical soils via portable X-ray fluorescence. **Science Society of America Journal** 82 (3), 632–644. <https://doi.org/10.2136/sssaj2017.11.0380>

Robertson GP (1998) **GS+: Geostatistics for the environmental sciences**. Versão 5.03 Beta, Plainwell, Gamma Design Software.

Rossi M (2017) **Mapa Pedológico Do Estado de São Paulo: Revisado e Ampliado**. Instituto Florestal.

Rowley MC, Grand S, Spangenberg JE, Verrecchia EP (2021) Evidence linking calcium to increased organo-mineral association in soils. **Biogeochemistry** 153(3), 223-241. <https://doi.org/10.1007/s10533-021-00779-7>

Sanchez RB, Marques Júnior J, Souza ZMD, Pereira GT, Martins Filho MV (2009) Variabilidade espacial de atributos do solo e de fatores de erosão em diferentes pedoformas. **Bragantia** 68, 1095-1103. <https://doi.org/10.1590/S0006-87052009000400030>

Santos HG, Jacomine PKT, Anjos LHC, Oliveira VA, Lumbleras JF, Coelho MR, Cunha TJF (2018) **Sistema brasileiro de classificação de solos**. Embrapa.

Schaefer CEG, Simas FN, Gilkes RJ, Mathison C, Costa LM, Albuquerque MA (2008) Micromorphology and microchemistry of selected Cryosols from maritime Antarctica. **Geoderma** 144(1-2), 104-115. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2007.10.018>

Schwertmann U, Taylor RM (1989) Iron oxides. In: Dixon JB, Weed SB (eds) Minerals in soil environments. **Soil Science Society of America** <https://doi.org/10.2136/sssabookser1.2ed.c8>

Sharma A, Weindorf DC, Wang DD, Chakraborty S (2015) Characterizing soils via portable X-ray fluorescence spectrometer: 4. Cation exchange capacity (CEC). **Geoderma** 239-240, 130–134. <https://doi.org/10.1016/J.GEODERMA.2014.10.001>

Silva LS, Júnior JM, Barrón V, Gomes RP, Teixeira DDB, Siqueira DS, Vasconcelos V (2020) Spatial variability of iron oxides in soils from Brazilian sandstone and basalt. **Catena** 185, 104258. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2019.104258>

Silva SHG, Weindorf DC, Pinto LC, Faria WM, Junior FWA, Gomide LR, Curi N (2020) Soil texture prediction in tropical soils: A portable X-ray fluorescence spectrometry approach. **Geoderma** 362, 114136. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2019.114136>

Silveira EMO, Silva SHG, Acerbi Junior FW, Carvalho MC, Carvalho LMT, Scolforo JRS, Wulder MA (2019) Object-based random forest modelling of above ground forest biomass out performs a pixel-based approach in a heterogeneous and mountain tropical environment. **International Journal of Applied Earth Observation** 78, 175–188. <https://doi.org/10.1016/j.jag.2019.02.004>

Silvero NEQ, Siqueira DS, Coelho RM, Costa FD, Marques Júnior J (2019) Protocol for the use of legacy data and magnetic signature on soil mapping of São Paulo Central West, Brazil. **Science of the Total Environment** 693,133463. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.07.269>

Singh B, Gilkes RJ (1992) Properties and distribution of iron oxides and their association with minor elements in the soils of south-western Australia. **Journal of soil Science** 43(1), 77-98. <https://doi.org/10.1111/j.1365-2389.1992.tb00121.x>

Siqueira DS, Marques Junior J, Pereira GT, Teixeira DB, Vasconcelos V, Carvalho Júnior AO, Martins ES (2015) Detailed mapping unit design based on soil–landscape relation and spatial variability of magnetic susceptibility and soil color. **Catena** 135,149-162. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2015.07.010>

Siqueira DS, Marques Júnior J, Teixeira DDB, Matias SSR, Camargo LA, Pereira GT (2016) Magnetic susceptibility for characterizing areas with different potentials for sugar cane production. **Pesquisa Agropecuária Brasileira** 51(9), 1349-1358. <https://doi.org/10.1590/S0100-204X2016000900034>

Solly EF, Weber V, Zimmermann S, Walthert L, Hagedorn F, Schmidt MW (2020) A critical evaluation of the relationship between the effective cation exchange capacity and soil organic carbon content in Swiss forest soils. **Frontiers in Forests and Global Change** 3, 98. <https://doi.org/10.3389/ffgc.2020.00098>

Souza ZM, Souza GS, Marques Jr J, Pereira GT (2014) Number of samples in geostatistical analysis and kriging maps of soil properties. **Ciência Rural** 44(2), 261–269. DOI: 10.1590/S0103-84782014000200011

Stockmann U, Cattle SR, Minasny B, McBratney AB (2016) Utilizing portable X-ray fluorescence spectrometry for in-field investigation of pedogenesis. **Catena** 139, 220–231. <https://doi.org/10.1016/j.catena.2016.01.007>

SURFER, version 11. **Golden Software, 2013. Conjunto de programas.** (versão de teste). Disponível em <http://www.goldensoftware.com> Acesso em 20 jul. de 2020.

Swoboda P, Döring TF, Hamer M (2022) Remineralizing soils? The agricultural usage of silicate rock powders: A review. **Science of The Total Environment** 807, 150976. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.150976>

Tavares TR, Molin JP, Nunes LC, Wei MCF, Krug FJ, Carvalho HWP, Mouazen AM (2021) Multi-sensor approach for tropical soil fertility analysis: comparison of individual and combined performance of VNIR, XRF, and LIBS spectroscopies. **Agronomy** 11(6), 1028. <https://www.mdpi.com/2073-4395/11/6/1028#>

Teixeira AFDS, Weindorf DC, Silva SHG, Guilherme LRG, Curi N (2018) Portable X-ray fluorescence (pXRF) spectrometry applied to the prediction of chemical attributes in Inceptisols under different land uses. **Ciência e Agrotecnologia** 42 (5), 501–512. <https://doi.org/10.1590/1413-70542018425017518>.

Teixeira AFS, Pelegrino MHP, Faria WM, Silva SHG, Gonçalves MGM, Júnior FWA, Curi N (2020) Tropical soil pH and sorption complex prediction via portable X-ray fluorescence spectrometry. **Geoderma** 361(3), 114132. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2019.114132>

Teixeira PC, Donagemma GK, Fontana A, Teixeira WG (2017) **Manual de métodos de análise de solo.** Embrapa.

Tóth B; Weynants M, Nemes A, Makó A, Bilas G, Tóth G (2015) New generation of hydraulic pedotransfer functions for Europe. **European journal of soil science** 66 (1), 226–238. <https://doi.org/10.1111/ejss.12192>

Usowicz B, Lipiec J (2017) Spatial variability of soil properties and cereal yield in a cultivated field on sandy soil. **Soil and Tillage Research** 174, 241-250. <https://doi.org/10.1016/j.still.2017.07.015>

Vasconcelos V, Júnior OAC, Martins ÉDS, Junior AFC, Guimarães RF, Gomes RA, Trancoso (2012) Sistema de classificação geomorfométrica baseado em uma arquitetura sequencial em duas etapas: árvore de decisão e classificador espectral, no Parque Nacional Serra da Canastra. **Revista Brasileira de Geomorfologia** 13:171–186. <https://doi.org/10.20502/rbg.v13i2.248>

Vazquez E, Benito M, Espejo R, Teutscherova N (2019) Effects of no-tillage and liming amendment combination on soil carbon and nitrogen mineralization. **European Journal of Soil Biology** 93, 103090. <https://doi.org/10.1016/j.ejsobi.2019.103090>

Vieira SR, Hatfield JL, Nielsen DR, Biggar JW (1983) Geostatistical theory and application to variability of some agronomical properties. **Hilgardia** 51(3), 1-75. DOI:10.3733/hilg.v51n03p075

Wang M, Zhang C, Meng T, Pu Z, Jin H, He D, Mu S (2019) Iron oxide and phosphide encapsulated within N, P-doped microporous carbon nanofibers as advanced tri-functional electrocatalyst toward oxygen reduction/evolution and hydrogen evolution reactions and zinc-air batteries. **Journal of Power Sources** 413, 367-375. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.12.056>

Wei T, Simko V (2017) In: **R Package "corrplot": Visualization of a Correlation Matrix (Version 0.84)**. Available from: <https://github.com/taiyun/corrplot>

Weindorf DC, Bakr N, Zhu Y (2014) Advances in portable X-ray fluorescence (PXRF) for environmental, pedological, and agronomic applications. **Advances in agronomy** 128, 1-45. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-802139-2.00001-9>

Weindorf DC, Chakraborty S, Herrero J, Castañeda B, Li C, Choudhury A (2016) Simultaneous assessment of key properties of arid soil by combined PXRF and Vis–NIR data. **European Journal of Soil Science** 67(2), 173-183. <https://doi.org/10.1111/ejss.12320>

Weindorf DC, Zhu Y, Ferrell R, Rolong N, Barnett T, Allen BL, Herrero J, Hudnall W (2009) Evaluation of Portable X-ray Fluorescence for Gypsum Quantification in Soils. **Soil Science** 174(10), 556-562. DOI: 10.1097/SS.0b013e3181bbbd0

Weindorf DC, Zhu Y, Haggard B, Lofton J, Chakraborty S, Bakr N, Zhang W, Weindorf WC, Legoria M (2012) Enhanced pedon Horizonation using portable x-ray fluorescence spectrometry. **Soil Science Society of America Journal** 76 (2), 522–531. <https://doi.org/10.2136/sssaj2011.0174>

Yao Y, Li J, He C, Hu X, Yin L, Zhang Y, Li S (2021) Distribution Characteristics and relevance of heavy metals in soils and colloids around a mining area in Nanjing, China. **Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology** 107(6), 996-1003. <https://doi.org/10.1007/s00128-021-03350-0>

Zhao T, Lozano YM, Rillig MC (2021) Microplastics increase soil pH and decrease microbial activities as a function of microplastic shape, polymer type, and exposure time. **Frontiers in Environmental Science** 9, 675803. <https://doi.org/10.3389/fenvs.2021.675803>

Zhu Y, Weindorf DC, Zhang W (2011) Characterizing soils using a portable X-ray fluorescence spectrometer: 1. Soil texture. **Geoderma** 167,167–177.<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2011.08.010>. <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2011.08.010>

CAPÍTULO 4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Com o crescimento da população mundial, tem-se a necessidade do aumento da produção de alimentos e as informações sobre o solo tem sido fundamentais para aumento na eficiência dessa produção. O conhecimento sobre os atributos mineralógicos, físicos e químicos são fundamentais para a otimização de produção e aquisição das melhores estratégias de conservação do solo.

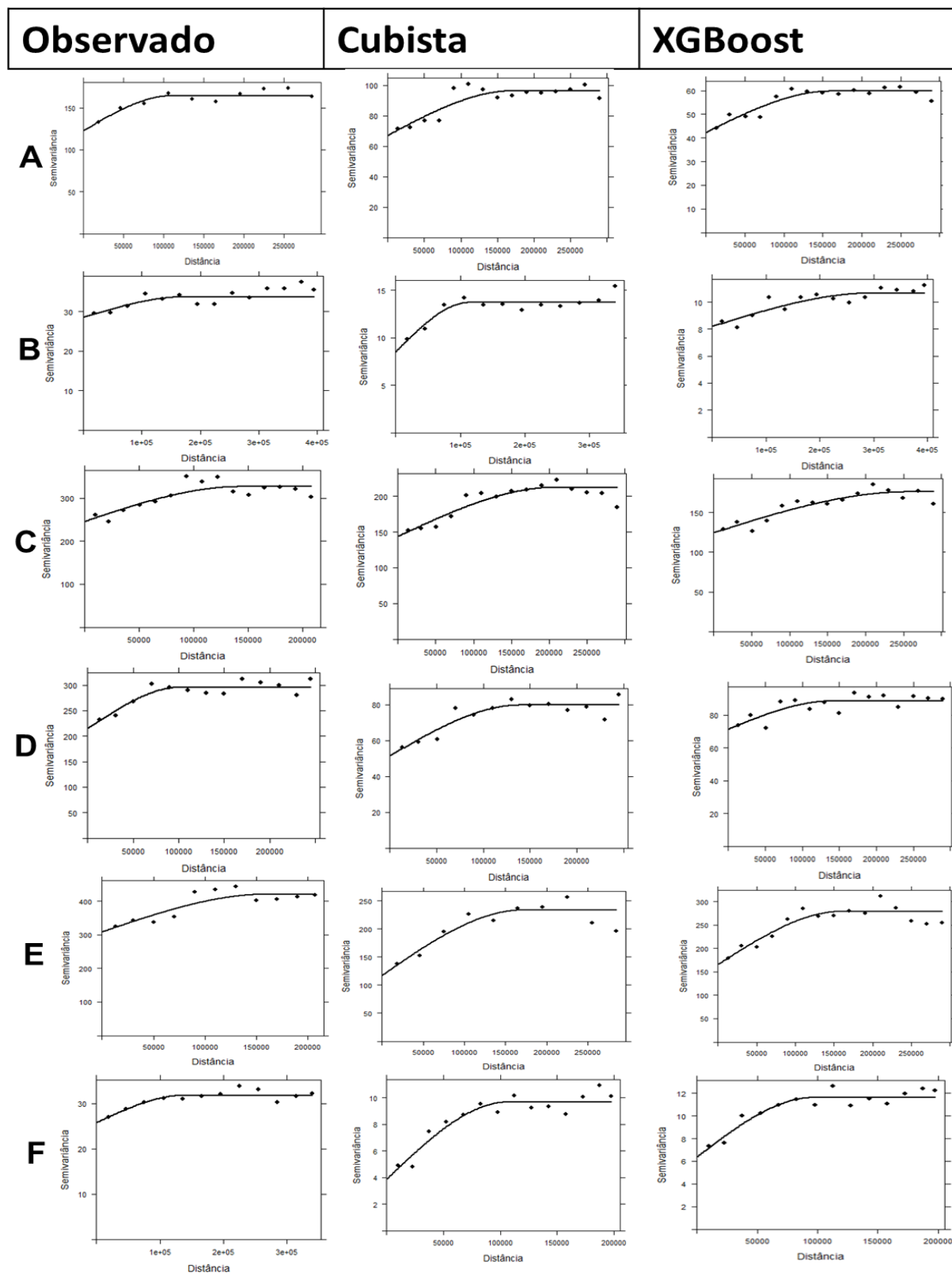
Os atributos químicos são indicadores fundamentais para a avaliação da sua qualidade do solo. Portanto, o conhecimento do teor desses atributos é importante para a produção, e deve ser monitorada a cada ciclo de produção. Surge assim, as técnicas alternativas que auxiliam na avaliação desses atributos de forma mais econômica, levando em consideração a possibilidade de dados que são gerados.

A pedometria surgiu aliada a evolução tecnológica com a implementação dos sensores e do aprendizado de máquina. Os sensores fazem parte das alternativas para a estimativa dos atributos do solo, com foco em gerar zonas específicas de manejo. Dentre os sensores utilizados para a estimativa dos atributos do solo, está a espectrometria de fluorescência de raios-X (EFRx) que é um sensor que vem sendo bastante utilizado na Ciência do solo atual pela comprovada relação e eficiência na estimativa desses atributos.

Este trabalho trouxe como desafio estudar as relações entre as medidas da EFRx e os atributos químicos do solo do planalto ocidental paulista, que apresenta 48% da área territorial agrícola do estado de São Paulo, que apresenta ampla variação pedologia e geológica. Os resultados aqui obtidos representam um avanço de informações acerca da utilização do sensor de EFRx em áreas de grande dimensão, fornecendo informações importantes para o desenvolvimento de trabalhos futuros em áreas com as mesmas características.

APÊNDICES

Apêndice A: Semivariogramas do artigo 1: (A) Cálcio, (B) Magnésio, (C) Soma de Bases, (D) Saturação por bases, (E) Capacidade de Troca Catiônica, (F) Matéria Orgânica observados e estimados pelos modelos cubista e XGboost para os solos do Planalto Ocidental Paulista.



Apêndice B: Semivariogramas do artigo 2: soma de base (SB - A), capacidade de troca catiônica (CTC - B), saturação por bases (V% - C) e necessidade de calagem (NC - D) observados e estimados por random forest e seus respectivos mapas de erro, para os solos do Planalto Ocidental Paulista.

