





Capítulo 8.

Uso de espectroscopía de infrarrojo cercano NIRS para predecir algunas propiedades químicas de los suelos en Antioquia

Manuela Ortega-Monsalve

Zoot., Estudiante de MSc, Universidad de Antioquia. Grupo de Investigación en Agrociencias, biodiversidad y territorio (GAMMA)

Mario Fernando Cerón-Muñoz

Zoot. MSc, DrSc, Grupo de Investigación en Agrociencias, biodiversidad y territorio (GAMMA), Universidad de Antioquia

Marisol Medina-Sierra

Ing. Agron, MSc, DrSc, Grupo de Investigación en Agrociencias, biodiversidad y territorio (GAMMA) Universidad de Antioquia

Resumen

Los análisis químicos en suelos son una herramienta que proporciona información importante sobre los nutrientes presentes y permite corregir los excesos o deficiencias mediante planes de fertilización; sin embargo, son métodos costosos y demorados ya que requieren la utilización de reactivos químicos y de diferentes procesos. En la actualidad se busca utilizar técnicas no destructivas, rápidas y precisas que permi-

tan obtener resultados fácilmente; tal es el caso de la espectroscopía de infrarrojo cercano NIRS. En este capítulo se realiza una descripción del uso del NIRS para predecir las propiedades del suelo. Se relata la forma de procesar la muestra para la lectura, la extracción de los espectros y se describen las metodologías estadísticas para la calibración. También se desarrolla un ejemplo de calibración del equipo para materia orgánica utilizando muestras de una amplia gama de suelos de diferentes municipios del departamento de Antioquia. Estas muestras se analizan por el método de regresiones por mínimos cuadrados parciales. El uso del NIRS en conjunto con diferentes modelos estadísticos son una alternativa tecnológica que permite obtener resultados de una forma más rápida y sin la utilización de reactivos químicos que contaminen el ambiente.

Palabras clave: *absorbancia, machine learning, métodos ópticos, reflectancia, regresiones parciales, pedología, componentes principales*

I. Introducción

Los análisis de suelo por química húmeda (qh) son comúnmente utilizados para determinar las propiedades químicas. Su fin es conocer las deficiencias o excesos de minerales, corregirlas y mejorar la productividad de los cultivos. La qh sigue siendo un método costoso y de difícil acceso para muchos productores, pero la implementación de nuevas tecnologías y métodos de análisis en suelos han permitido mejorar dichos procesos. Así, se obtienen resultados más rápidos y a menor precio debido a que no son destructivos ni requieren uso de reactivos químicos. Una de las técnicas no invasivas es la espectroscopía de infrarrojo cercano (NIRS, por sus siglas en inglés), la cual funciona por medio de ondas en la región del infrarrojo entre la longitud de onda de los 780 a 2.500 nm, que

en su mayoría no son percibidas por el ojo humano (Givens et al., 1997). Estas longitudes pueden reconocer los enlaces químicos como los N-H, S-H, C=O y O-H de los compuestos principalmente orgánicos presentes en el suelo (Guerrero et al., 2008). Este método ha sido utilizado para determinar la composición y calidad de algunos productos y para monitorear algunos procesos químicos y biológicos (D’Mello, 2000).

El NIRS ha sido descrita por He et al. (2007), Macias et al. (2015), Gandariasbeitia et al. (2017) y Mohamed et al. (2018) como una buena alternativa en la agricultura de precisión para analizar las propiedades del suelo en tanto es un método fácil, útil y de bajo costo. Una de las mayores ventajas del método NIRS es que por medio del espectro obtenido de una sola muestra se pueden analizar simultáneamente propiedades químicas, físicas y biológicas del suelo (Nduwamungu et al., 2009). Algunas de sus ventajas más importantes son la rapidez con la que se realizan los análisis, no genera residuos químicos, requiere menos mano de obra ya que realiza varios análisis al mismo tiempo, luego de su calibración es muy fácil de manejar y sus análisis tienen un bajo costo (Rivera et al., 2018; Nie et al., 2018).

Los parámetros del suelo más estudiados por medio del NIRS corresponden principalmente a la materia orgánica (MO), el nitrógeno (N), el fósforo (P) el potasio (K), el calcio (Ca), el magnesio (Mg), el pH y el contenido de arcilla. En estos se han obtenido buenos resultados, excepto en minerales como el fósforo y el potasio (He et al., 2007; Gandariasbeitia et al., 2017) ya que muchas veces no se encuentran ligados a otros enlaces y no son detectables ante las ondas del NIRS. Los rangos espectrales en los cuales se puede analizar el contenido de MO se encuentran entre los 379 y 2.500 nm (Rodríguez et al., 2015) —el cual puede ser un dato de gran interés ya que está ligado a la fertilidad de los suelos—. El uso del NIRS para la predicción de algunas propiedades del suelo tiene

varias implicaciones positivas en el proceso de análisis y en los resultados finales debido a que la calibración, validación y uso de ecuaciones o modelos permitirán analizar dichas propiedades en gran número de muestras. Para ello se requiere crear ecuaciones de predicción para cada una de las características o propiedades que se desea analizar (Rivera et al., 2018).

Los modelos más utilizados para predecir las propiedades del suelo por medio de NIRS son: la regresión lineal múltiple escalonada (SMLR, por sus siglas en inglés), la regresión de mínimos cuadrados parciales (PLSR, por sus siglas en inglés), la regresión adaptativa multivariante splines (MARS, por sus siglas en inglés), la regresión sobre componentes principales (PCA, por sus siglas en inglés) y las redes neuronales artificiales (ANN, por sus siglas en inglés). Sin embargo, Geladi (2003) y Tinti et al. (2015) concluyeron que los análisis PCA y PLSR son mucho más adecuados para examinar espectros debido a que o convierten un conjunto de variables altamente correlacionadas en un conjunto de variables independientes o reducen la dimensionalidad de los datos extrayendo las variables más importantes. En la Tabla 1 se observa un resumen de artículos científicos que evaluaron diversas metodologías estadísticas para relacionar los parámetros del suelo con los resultados del NIRS.

El objetivo de este capítulo es realizar una descripción del uso del NIRS para predecir las propiedades del suelo. Se relata la forma de procesar la muestra para la lectura, la extracción de los espectros y se describen las metodologías estadísticas para la calibración. También se desarrolla un ejemplo de calibración del equipo para materia orgánica utilizando muestras de una amplia gama de suelos de diferentes municipios del departamento de Antioquia, las cuales fueron analizadas por el método de regresiones por mínimos cuadrados parciales.

Tabla 1. Comparación de metodologías estadísticas para relacionar los parámetros del suelo obtenidos por química húmeda y por infrarrojo cercano NIRS

Parámetro	R2	Rango espectral (nm)	Modelo estadístico	Número de muestras	Referencia
Materia orgánica	0,96	993, 1.080, 1.951 y 2.277	PCA y PLSR	165	He et al., 2007
	0,99	450 y 600	RPD	-	Yarce & Castillo, 2014
	0,90	379 - 780 y 780 - 1.800	PLSR	72	González et al., 2020
	0,62	-	MPLS	281	Macías et al., 2015
	0,96	750 y 2.400	PLSR	147	Gandariasbeitia et al., 2017
	0,91 y 0,86	497, 503, 504, 1.888, 1.393, 1.392, 479, 482 y 487	AdaBoost	69	Wei et al., 2020
	0,90	-	PCA y PLSR	130	Lin et al., 2018
Nitrógeno	0,93	902, 2.364, 1.826 y 2.098	PCA y PLSR	165	He et al., 2007
	0,96	928, 960 y 1.638, 1 680	PLSR	-	Nie et al., 2018
Nitrógeno total	0,91	750 y 2.400	PLSR	147	Gandariasbeitia et al., 2017
	0,88	-	PCA	156	Gates, 2018
pH	0,91	-	PCA y PLSR	165	He et al., 2007
	0,96	1.850 y 2.350	PLSR	147	Gandariasbeitia et al., 2017
	0,92 y 0,93	1.000 y 2.500	PCA y PLSR	40	Munawar et al., 2020
Carbono orgánico	0,97	830 y 2.630	PCA	>500	Guerrero et al., 2008
Arcilla	0,66	2.200	PLSR	237	Summers et al., 2011
	0,91	2.200, 2.400, 2.500, 1.443, 2.231, 2.323, 6.53, 895, 1.133	MLR	184	Nanni & Dematte, 2006
Limo	0,68	840	PLSR y MLR	-	Selige et al., 2006
	0,57	520 - 600, 630 - 690	-	144	Sousa et al., 2011
Arena	0,87	2.202, 2.238, 2.322, 2.371	PLSR y MLR	-	Selige et al., 2006
	0,84	760 - 860, 2.145 - 2.525, 2.235 - 2.285	-	144	Sousa et al., 2011
Carbonatos	0,69	2.300	PLSR	228	Summers et al., 2011

Fósforo	0,93 y 0,99	1.000 y 2.500	PCA y PLSR	40	Munawar et al., 2020
Potasio	0,48	-	PLSR	165	Cobo et al., 2010
	0,71	1.906, 2.217 y 2.279	PCA y PLRS	165	He et al., 2007
Calcio	0,85	-	PLSR	130	Awiti et al., 2008
Magnesio	0,76	-	PLSR	130	Awiti et al., 2008
	0,91	-	PCA y PLSR	40	Munawar et al., 2020

R2: Coeficiente de determinación, **PCA:** regresión sobre componentes principales, **PLSR:** regresión de mínimos cuadrados parciales, **RPD:** diferencia de predicción residual, **MPLS:** método de regresión de mínimos cuadrados modificados, **MLR:** regresión lineal múltiple y **AdaBoost:** algoritmo boosting

Fuente: adaptado de Schapire (1990)

2. Metodología

2.1. Análisis por química húmeda

Cada muestra de suelo se divide en dos, una parte para ser analizada por el NIRS y la restante por qh. En este caso, cada una de las muestras fue enviada al laboratorio de química analítica de Agrosavia, donde se realizó un análisis físico-químico completo y se determinó además el contenido de Nitrógeno total y el porcentaje de Cadmio (% Cd) (Tabla 2). También se realizó un análisis para determinar la densidad aparente del suelo y se recibieron recomendaciones de fertilización, las cuales se entregaron a los productores de los predios.

2.2. Proceso de obtención de muestras y preparación de muestras para lectura del NIRS

La toma de muestras de suelo en campo se realizó por medio de un equipo de personas capacitadas, quienes hicieron el muestreo dependiendo de la topografía del terreno. Se obtuvo una muestra compuesta,

Tabla 2. Métodos utilizados para análisis de suelos dedicados a cultivos

Determinación analítica	Unidad	Método
Porcentaje de arena (% A)	g/100 g	Método de Bouyoucos
Porcentaje de arcilla (% Ar)	g/100 g	Método de Bouyoucos
Porcentaje de limo (% L)	g/100 g	Método de Bouyoucos
Clase textural	No aplica	Método de Bouyoucos
Cadmio (Cd) pseudo total	mg/kg	Digestión ácido nítrico-clorhídrico/ ICP
pH (1:2, 5)	Unidades de pH	GA-R-046, versión 05 de 2019-10-02
Conductividad eléctrica (CE) (1:5)	dS/m	NTC 5596.2008 Método b. Medición en suspensión suelo
Materia orgánica (MO)	g/100g	Cálculo según NTC 5403 Walkley Black
Carbono orgánico (CO)	g/100g	GA-R-119 V2 2019-09-20
Fósforo (P) disponible (Bray II)	mg/kg	GA-R-048. Versión 05 de 2019-10-02
Nitrógeno total (NT)	g/100g	Kjeldahl
Azufre (S) disponible	mg/kg	Fosfato monobásico de calcio
Cap Interc Cation Effect (CICE)	cmol(+)/kg	Cálculo
Boro (B) disponible	mg/mk	Fosfato monobásico de calcio
Acidez (Al+H)	cmol(+)/kg	KCl
Aluminio (Al) intercambiable	cmol(+)/kg	KCl
Calcio (Ca) disponible	cmol(+)/kg	GA-R-050 versión 7 de 2019-10-02
Magnesio (Mg) disponible	cmol(+)/kg	GA-R-050 versión 7 de 2019-10-02
Potasio (K) disponible	cmol(+)/kg	GA-R-050 versión 7 de 2019-10-02
Sodio (Na) disponible	cmol(+)/kg	GA-R-050 versión 7 de 2019-10-02
Hierro (Fe) olsen disponible	mg/kg	NTC 5526:2007
Cobre (Cu) olsen disponible	mg/kg	NTC 5526:2007
Manganeso (Mn) olsen disponible	mg/kg	NTC 5526:2007
Zinc (Zn) olsen disponible	mg/kg	NTC 5526:2007

Fuente: elaboración propia

resultado de la mezcla de ocho submuestras, lo cual permite obtener información promedio de la fertilidad del lugar (Gómez, 2013). La profundidad del muestreo fue de 20 cm y se realizó con la ayuda de un barreno. La muestra fue empacada en bolsas *ziploc* y marcada con los datos más relevantes para el análisis (nombre del municipio, nombre del predio y cultivos establecidos).

Para el desarrollo de esta investigación se tomaron muestras de suelo en diferentes municipios del departamento de Antioquia, en predios dedicados principalmente a la producción de leche, carne, cacao y flores. Las muestras pertenecen al proyecto Cedait (Centro de Desarrollo Agrobiotecnológico de Innovación e Integración Territorial, El Carmen de Viboral, Antioquia) y fueron recolectadas dentro del componente Sistema Experto.

2.2.1. Secado de las muestras de suelo

Las muestras de suelo se secan al aire libre y en un horno de ventilación forzada, según los parámetros descritos en la norma NTC-ISO 11464 de 1995. Estas se secan completamente, hasta que la masa perdida sea máxima de 5% de masa (m/m) en 24 horas.

Para acelerar el proceso de secado se disgregan los terrones mayores a 15 mm. Cuando las muestras se secan al aire se trituran un poco con la mano, con un mazo de madera o un mortero. El mismo procedimiento se debe seguir cuando las muestras se secan en el horno.

- *Secado al aire libre:* se esparce todo el material en una capa de espesor menor a 15 mm sobre papel kraft o bandejas de plástico (Figura 1). Se debe evitar la luz solar directa, ya que puede crear diferencias de temperatura en la muestra.



Figura 1. Muestras de suelo secados al aire libre
(Fuente: archivo del Proyecto)

- *Secado en estufa:* se esparce todo el material en una capa de espesor menor a 15 mm sobre una bandeja metálica que no absorba humedad y que no cause contaminación. Se pone la bandeja en la estufa (Memmert UF 750) y se seca a una temperatura máxima de 40°C (Figura 2); se recomienda esta temperatura para que el suelo no pierda propiedades. El secado se realiza hasta que el color del suelo sea uniforme y no se observen zonas húmedas (Zapata, 2021).



Figura 2. Muestras de suelo secando en horno de ventilación forzada
(Fuente: archivo del Proyecto)

2.2.2. Tamizado de las muestras de suelo

Antes de realizar este procedimiento se retiran las piedras, raíces y elementos extraños. Si las muestras de suelo se secan en terrones es necesario triturarlos con ayuda de un mazo. Se tamiza la muestra por medio de un tamiz de 2 mm, se tritura el material mayor a 2 mm y se vuelve a tamizar hasta obtener la cantidad necesaria (Figura 3). La fracción de 2 mm se homogeniza y se almacena en un frasco plástico. Se debe guardar otra muestra de igual tamaño como contramuestra.



Figura 3. Tamizado de las muestras de suelo con tamiz de malla de 2 mm
(Fuente: archivo del Proyecto)

2.2.3. Almacenamiento de las muestras de suelo

Luego de que el suelo quede tamizado se almacena en dos frascos de plástico previamente rotulados (su peso debe estar entre los 150 y 250 gramos) (Figura 4). De estos dos recipientes se sacan muestras más pequeñas para realizar la lectura en el equipo NIRS.

Las muestras de suelo se procesan en un equipo NIRS. Estos pueden adquirirse con diferentes marcas comerciales, por ejemplo: Analytical Spectral Devices Inc, Foss NIR system Denmark, Bruker Optik GmbH, ASD LabSpec, Veris Technology Incorporation, Isuzu Optics Corp y Ther-



Figura 4. Almacenamiento de las muestras de suelo en recipientes plásticos
(Fuente: archivo del Proyecto)

mo Nicolet Antaris II. Generalmente estos equipos contienen un rango espectral o longitud de onda que va desde los 350 a los 2.500 y desde los 850 a los 2.630 nanómetros aproximadamente y su tiempo de análisis es menor a 40 segundos, por lo cual son equipos altamente eficientes para determinar parámetros de interés.

En este caso se utilizó un equipo NIRS modelo FOSS DS 2500 F del Laboratorio Integrado de Nutrición Animal y de Pastos y Forrajes de la Facultad de Ciencias Agrarias de la Universidad de Antioquia. Se analizaron 47 muestras para la toma del espectro; se utilizaron 20 gramos de cada una, contenido que se presionó con el dispositivo que trae el equipo con el objetivo de que quedara uniforme para su lectura (Figura 5). Luego de cada lectura se limpió la cubeta con un paño limpio y seco para eliminar los residuos de la muestra anterior.

3. Resultados: obtención de espectros y análisis estadístico

El NIRS genera los espectros para cada muestra analizada, en este caso el rango espectral se encuentra entre los 850 y 2.500 nanómetros (nm). La



Figura 5. Muestra de suelo preparada para su lectura en el equipo NIRS
(Fuente: archivo del Proyecto)

base de datos se exporta de 2 en 2 nanómetros en el software MOSAIC y se generan 825 columnas correspondientes a dicho rango de espectros. Los valores de absorbancia (au) y reflectancia (ref) se encuentran en un rango de 0,0 a 1,0

La base de datos puede ser analizada por ISIScan o por otro software estadístico, en este caso se utilizó R-project (R Core Team, 2021). Generalmente se realiza un análisis visual de los espectros para verificar inconsistencias en la forma de las curvas de cada muestra en el rango espectral; en la Figura 6, por ejemplo, se muestran dos gráficos de relación de los niveles de absorbancia y reflectancia con las longitudes de onda, los cuales se obtuvieron con la librería graphics de R Core Team (2021). Los espectros de absorbancia se convirtieron a reflectancia por medio de la ecuación $\log_{10}(1/\text{absorbancia})$.

.Después de verificar la calidad de los espectros se acoplan las bases de datos de los espectros con la base de datos de química húmeda y se

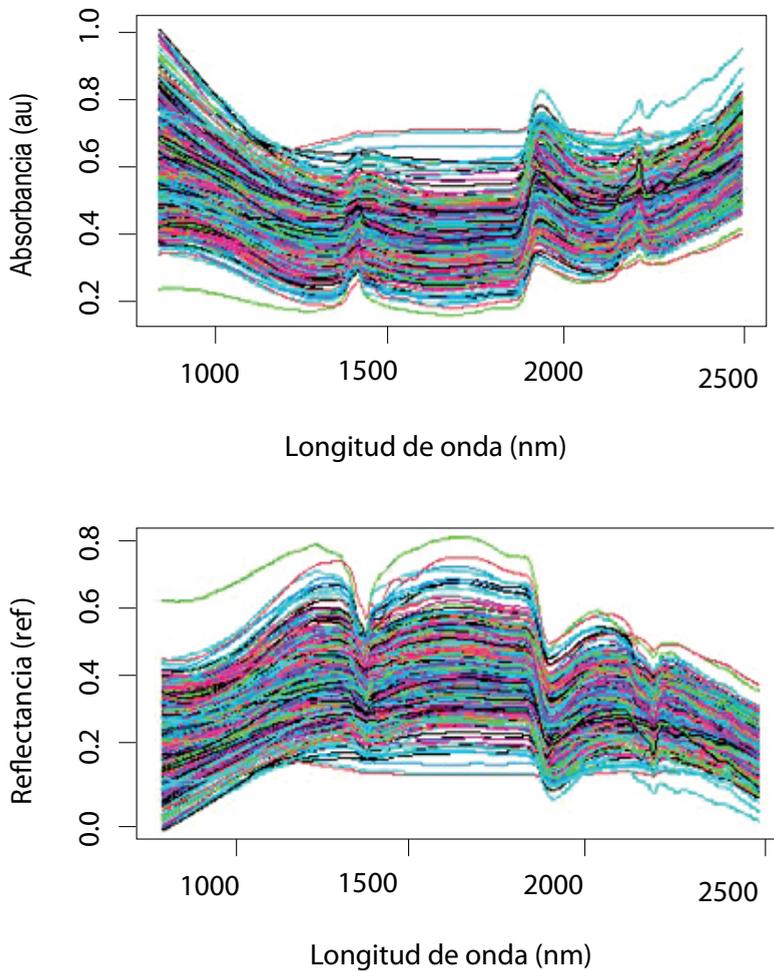


Figura 6. Relación de la absorbancia y la reflectancia con la longitud de onda para las muestras de suelos de Antioquia (Fuente: elaboración propia)

procede a realizar el análisis con las metodologías descritas en la Tabla 1 o con otro tipo de metodologías, modelos y transformaciones que el investigador estime conveniente. Esta investigación desarrolló el análisis de relaciones para la variable MO a través de un análisis PLSR con cinco componentes, utilizando el comando `plsr` de la librería `pls` (Bjorn-Helge et al., 2020). Este método de regresión es altamente utilizado en la es-

pectroscopía de infrarrojo cercano, ya que facilita la lectura de las líneas superpuestas del espectro (Bjorn-Helge & Wehrens, 2020). Adicionalmente, se trabajó la librería `mc2d` (Pouillot & Delignette-Muller, 2010) con el comando `rbern` (ensayos de bernoulli de una distribución bivariada) para dividir aleatoriamente la base en dos partes, una que contenga los datos para entrenamiento del modelo y otra con datos para probar el ajuste. También se puede utilizar directamente el argumento `validation = c("CV", "LOO")` del comando `pls` para la validación cruzada. En este caso se optó por dividir la base en dos. El principal objetivo de la validación de las muestras de suelo es obtener una ecuación adecuada que pueda predecir las propiedades de otras muestras a futuro (Givens et al., 1997; Cao, 2013).

Es muy común utilizar como indicadores de un buen ajuste del modelo en la base de datos para entrenamiento y prueba los valores del error cuadrático medio de predicción (MSEP), la raíz del error cuadrático medio de predicción (RMSEP) y el coeficiente de determinación múltiple de A.K.A. (R^2). Para este trabajo se obtuvieron respectivamente con los argumentos `MSEP`, `RMSEP` y `R2` de la librería `pls`. Se busca que el R^2 sea cercano a 1, que el `RPD` sea >2 y que el `RMSEP` sea bajo para que el análisis o modelo sea ajustable (Wei et al., 2020). En este caso se obtuvieron unos R^2 de 0,86 y 0,78, un `RMSEP` de 1,9 y 2,3 para el entrenamiento y la prueba y un `RPD` general de 2,39.

Los gráficos del análisis se pueden obtener por varios comandos y librerías, acá se utilizó el comando `validationplot` de la librería `lps` para visualizar la validación del `RMSEP` y R^2 , en función del número de componentes (Figura 7), y obtener el mayor ajuste del modelo utilizado. Se espera que cuando el R^2 es alto, el `RMSEP` sea bajo, esto significa que es el resultado esperado y que la diferencia entre los valores observados y predichos es baja. Con el comando `ggplot` de la librería `ggplot2` (Hadley,

2016) se puede graficar la relación de la información de química húmeda y las predicciones del NIRS con el método estadístico (Figura 8). Ambos se encuentran en el rango normal esperado para los valores de MO.

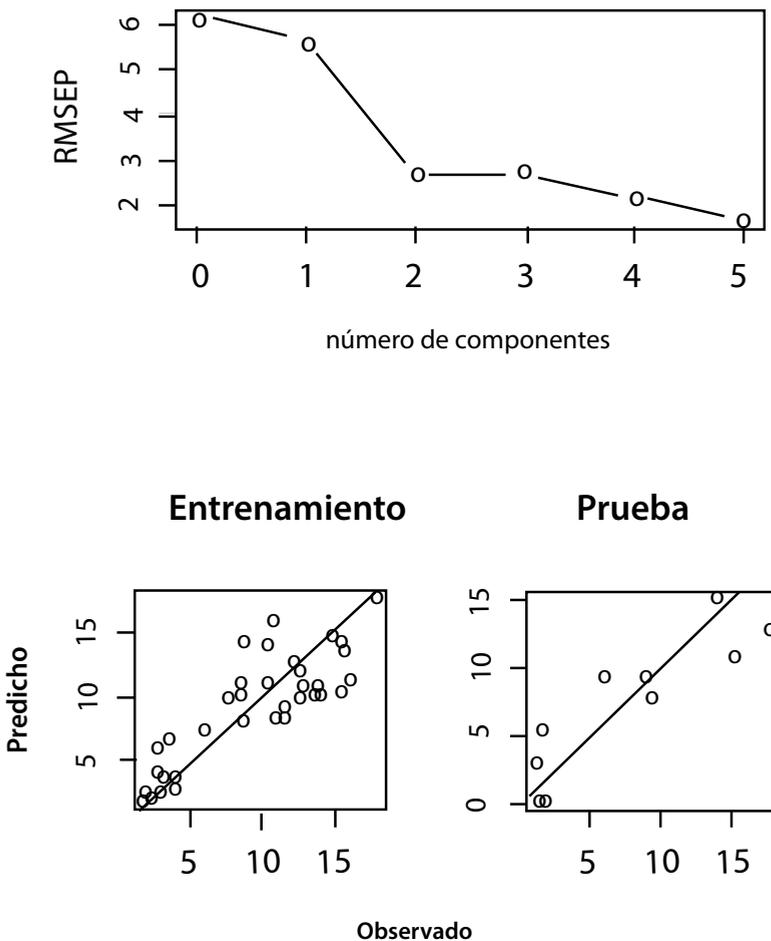


Figura 7. Gráficas de RMSEP vs número de componentes para la materia orgánica (%) y relaciones de los valores observados con los valores predichos por el modelo
(Fuente: elaboración propia)

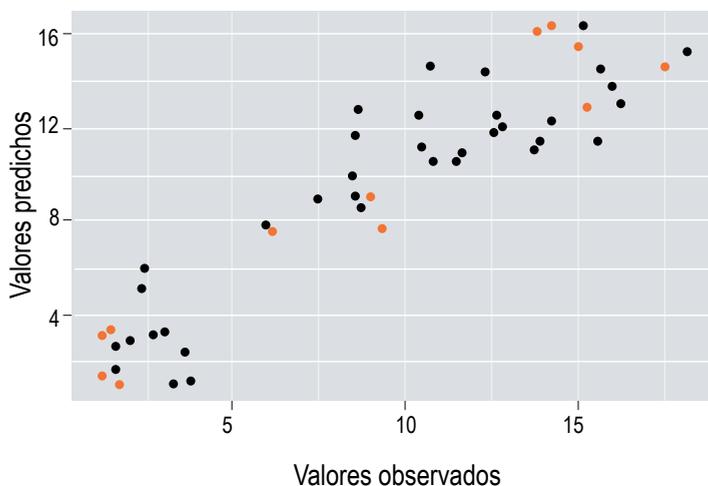


Figura 8. Relación entre los valores observados de la materia orgánica (%) obtenida por química húmeda y los valores predichos por regresión por mínimos cuadrados parciales utilizando las bases de datos para entrenamiento (negro) y la de prueba (rojo)
(Fuente: elaboración propia)

La Figura 9 presenta un flujograma en el que se resumen los procesos y procedimientos desde la toma de la muestra de suelo hasta la predicción por PLSR.

Yarce & Castillo (2014) realizaron una investigación en el centro de investigación de caña de azúcar de Colombia sobre validación no exhaustiva para la determinación de materia orgánica en suelos por medio de espectrofotometría UV- VIS, donde obtuvieron un coeficiente de determinación (R^2) de 0,99, por lo que concluyeron que el método evaluado cumplió con los criterios establecidos.

Un estudio realizado en China determinó el contenido de materia orgánica en el suelo a través de la espectrofotometría de infrarrojo cercano (NIRS). Utilizaron 165 espectros para la etapa de calibración y validación

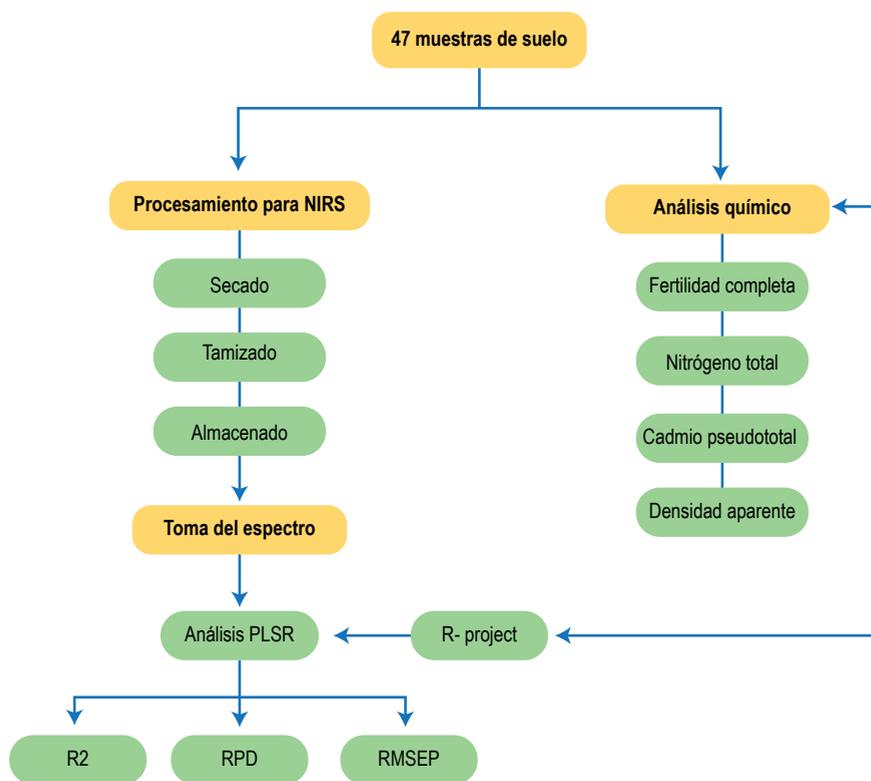


Figura 9. Esquema de la metodología empleada para el procesamiento y análisis de los suelos
(Fuente: elaboración propia)

y encontraron que el NIRS fue una buena alternativa al obtener un R^2 de 0,91 y un RMSEP de 0,12 para la materia orgánica; también se concluyó que el NIRS es una buena herramienta para avanzar en la agricultura de precisión (He et al., 2007).

También en China, Lin et al. (2018) utilizaron NIRS para predecir el contenido de materia orgánica por medio de transformaciones y encontraron un R^2 de 0,90, un RPD de 2,24 y un RMSEP de 0,21. Por ello, concluyeron que esta es una alternativa óptima para su determinación. Adicionalmente, se aplicaron distintos métodos para determinar el pretratamiento

to espectral, la selección de las muestras y el rango de longitud de onda para mejorar su precisión. Por otra parte, por medio de transformaciones y la utilización del análisis AdaBoost, Wei et al. (2020) encontraron una alta precisión con un R2 de 0,86 y un RMSEP de 0,72 para la materia orgánica presente en suelos agrícolas.

Macías et al. (2015) analizaron la materia orgánica por medio del NIRS y encontraron un R2 de 0,62 y un RPD de 1,8, lo que pudo deberse a la procedencia de las muestras de suelo. Estos resultados podrían mejorar aumentando el número de muestras utilizadas para la validación. Por último, Gandariasbeitia et al. (2017) encontraron un R2 de 0,96 y un RPD de 4,01 para la materia orgánica analizada por medio de NIRS y PCA, estos dos métodos podrían ser de gran utilidad para analizar grandes cantidades de muestras.

4. Conclusiones

El uso de la espectroscopía de infrarrojo cercano NIRS es una buena alternativa para predecir la composición fisicoquímica. Es una metodología fácil de usar, económica y permite analizar muchas muestras de suelo en poco tiempo. Se requiere calibrar constantemente al aumentar el número de muestras y analizar por diversos procedimientos estadísticos cada componente del suelo.

Agradecimientos

Los autores expresan su agradecimiento al proyecto financiado por el Sistema General de Regalías vigente “Desarrollo y Establecimiento del Centro de Desarrollo Agrobiotecnológico de Innovación e Integración Territorial, El Carmen de Viboral, Antioquia, Occidente” CEDAIT, Subcomponente Sistema Experto, código BPIN 2016000100060.

Referencias bibliográficas

- Awiti, A. O., Walsh, M. G., Shepherd, K. D. & Kinyamario, J. (2008). Soil condition classification using infrared spectroscopy: a proposition for assessment of soil condition along la tropical forest-cropland chronosequence. *Geoderma* 143:73-84.
- Bjørn-Helge, M. Wehrens, R. & Hovde Liland, K. (2020). pls: Partial Least Squares and Principal Component Regression. R package version 2.7-3. <https://CRAN.R-project.org/package=pls>
- Bjørn-Helge, M. & Wehrens, R. (2020). Introduction to the pls package. <https://cran.r-project.org/web/packages/pls/vignettes/pls-manual.pdf>
- Cao, N. (2013). Calibration optimization and efficiency in near infrared spectroscopy [Doctoral dissertation] Iowa State University.
- Cobo, J. G., Dercon, G., Yekeye, T., Chapungu, L., Kadzere, C., Murwira, A., Delve, R. & Cadisch, G. (2010). Integration of mid-infrared spectroscopy and geostatistics in the assessment of soil spatial variability at landscape level. *Geoderma*, 15. pp:398-411.
- D`Mello P F. (2000). Farm animal metabolism and nutrition. CABI
- Hadley, W. (2016). ggplot2: Elegant Graphics for Data Analysis. Springer-Verlag New York.
- Gandariasbeitia, M., Besga, G., Albizu, I., Larregla, S. & Mendarte, S. (2017). Prediction of chemical and biological variables of soil in grazing areas with visible- and near-infrared spectroscopy, *Geoderma* 305, pp. 228-235, ISSN 0016-7061, <https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2017.05.045>.
- Gates, J. R. (2018). A Comparison of VNIR and MIR Spectroscopy for Predicting Various Soil Properties. Dissertations & Theses in Natural Resources. 264 p.
- Geladi, P. (2003). Chemometrics in spectroscopy. Part 1. Classical chemometrics. *Spectrochim. Acta - Part B At. Spectrosc.* 58(5). pp. 767–782. doi: 10.1016/S0584-8547(03)00037-5.
- Givens, D I., De Boever, J L. & Deaville E.R. (1997). The principles, practices and some future applications of near infrared spectroscopy for predicting the nutritive value of foods for animals and humans. *Nutrition Research Reviews*, 10(1). pp. 83-114.

- Gómez, J C. (2013). Manual de prácticas de campo y del laboratorio de suelos. Tolima: Espinal. Editorial: Servicio Nacional de Aprendizaje (SENA). <https://repositorio.sena.edu.co/handle/11404/2785>.
- González, D., Colás, A., Rodríguez, O., Álvarez, O. A., Gattorno, S. & Chacón, A. (2020). Estimación de materia orgánica en suelo Pardo mullido medianamente lavado mediante espectroscopía vis-NIR. *Centro agrícola*, 47(3), pp. 23-32.
- Guerrero, C., Zornoza, R., Pérez, A., Solera, J., Gómez, I. & García-Orenes, F. (2008). Uso de la espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR) para la estimación rápida del carbono orgánico y la respiración basal en suelos forestales. *Cuad. Soc. Esp. Cienc. For.* 25. pp. 209-214
- He, Y., Huang, M., García, A., Hernández, A. & Song, H. (2007). Prediction of soil macronutrients content using near-infrared spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture*, 58(2). pp. 144-153, ISSN 0168-1699, <https://doi.org/10.1016/j.compag.2007.03.011>.
- Lin, Z., Wang, R., Wang, Y., Wang, L., Lu, C., Liu, Y., Zhang, Z., & Zhu, L. (2018). Accurate and rapid detection of soil and fertilizer properties based on visible/near-infrared spectroscopy, *Appl. Opt.* 57, D69-D73.
- Macías, M., Cueto, J., Muñoz, J., & Landeros, Ó. (2015). Predicción de propiedades del suelo de importancia agronómica por espectroscopia de reflectancia de infrarrojo cercano. *Revista Mexicana de Ciencias Agrícolas* 6(6). pp. 1317-1329.
- Mohamed, E S., Saleh, A M., Belal, A.B. & Allah Gad, A. (2018). Application of near-infrared reflectance for quantitative assessment of soil properties, *The Egyptian Journal of Remote Sensing and Space Science*, 21(1), pp. 1-14, ISSN 1110-9823, <https://doi.org/10.1016/j.ejrs.2017.02.001>.
- Munawar, A., Yunus, Y., Devianti y Satriyo P. (2020). Calibration models database of near infrared spectroscopy to predict agricultural soil fertility properties, *Data in Brief*, 30, 105469, ISSN 2352-3409, <https://doi.org/10.1016/j.dib.2020.105469>.
- Nanni, M. R. & Dematte, J. A. M. (2006). Spectral reflectance methodology in comparison to traditional soil analysis. *Soil Science Society American Journal*, 70, pp. 393-406.

- Nduwamungu, C., Ziadi, N., Parent, É., Tremblay, F. & Thuries, L. (2009). Opportunities for, and limitations of, near infrared reflectance spectroscopy applications in soil analysis: A review. *Canadian Journal of soil science*, 89(5). pp. 531-541.
- Nie, P., Dong, T., Oye Xiao, S., Qu, F. & Lin, L. (2018). The Effects of Drying Temperature on Nitrogen Concentration Detection in Calcium Soil Studied by NIR Spectroscopy. *Apl. Sci.* 8, 269. <https://doi.org/10.3390/app8020269>.
- Instituto Colombiano de Normas Técnicas y Certificación. (1995). Gestión ambiental, calidad del suelo, pretratamiento de las muestras de suelo para análisis fisicoquímicos. Norma Técnica NTC-ISO 11464. https://repository.agrosavia.co/bitstream/handle/20.500.12324/11641/81663_62299.pdf?sequence=1&isAllowed=y.
- Pouillot, R. & Delignette-Muller, M.L. (2010), Evaluating variability and uncertainty in microbial quantitative risk assessment using two R packages. *International Journal of Food Microbiology* 142(3). pp. 330-40
- R Core Team (2021). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL <https://www.R-project.org/>.
- Rivera, A., Medina, M. & Cerón-Muñoz, M. F. (2018). Predicción de la composición química de alimentos de uso animal mediante NIRS Aplicaciones e interpretación práctica. Facultad de Ciencias Agrarias Universidad de Antioquia. Fundación CIPAV.
- Rodríguez, J., Cortiza, A., Pereira, C., Chacón, A., Gattorno, S., Rodríguez, O., Rodríguez, A., Jiménez, R., Torres, P. (2015). Determinación VIS/NIR del contenido de materia orgánica en suelos agrícolas pardos mullidos medianamente lavados VIS/NIR. *Centro agrícola* 42(3). pp. 5-12
- Selige, T., Böhner, J. & Schmidhalter, U. (2006). High resolution topsoil mapping using hyperspectral image and field data in multivariate regression modeling procedures. *Geoderma*, 136. pp. 235–244. DOI:<https://doi.org/10.1016/j.geoderma.2006.03.050>
- Schapiro, R. (1990) The strength of weak learnability. *Machine Learning*, 5(2). pp. 197-227.
- Sousa, J., Dematte, J. & Romeiro, S. (2011). Modelos espectrais terrestres e orbitais na determinação de teores de atributos dos solos: potencial e custos.

Solos e Nutrição de Plantas, 70(3), 610-621. DOI:<http://dx.doi.org/10.1590/S0006-87052011000300017>.

Summers, D., Lewis, M., Ostendorf, B. & Chittleborough, D (2011). Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. *Ecological Indicators*, 11(1). pp. 123-131, ISSN 1470-160X, <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2009.05.001>.

Wei, L., Yuan, Z; Wang, Z; Zhao, L; Zhan, Y; Lu, X & Cao, L. (2020). Hyperspectral Inversion of Soil Organic Matter Content Based on a Combined Spectral Index Model. *Sensors*, 20. 2777; doi:10.3390/s20102777.

Yarce, C. & Castillo, J. (2014). Validación no exhaustiva del método analítico de Walkley-Black, para la determinación de materia orgánica en suelos por espectrofotometría de UV-VIS. *Ingenium*, 8(19), 37-45.

Zapata, R. (2021). Métodos de análisis de suelos. Universidad Nacional de Colombia. Sin publicar.