

Durante este período, la Disciplina de Biometría, en cumplimiento de su responsabilidad de brindar apoyo técnico a los investigadores en la formulación de proyectos con aplicación del método científico, ha contribuido además en el análisis de datos de investigaciones, mediante el uso de diversas herramientas estadísticas, entre ellas análisis de varianza para diseños experimentales, análisis multivariado y modelos de funciones de probabilidad, entre otros. En total, se llevó a cabo la discusión de al menos 38 propuestas de investigación, de las cuales 19 fueron formalizadas y registradas en el Sistema de Información y Gestión de Proyectos de Investigación (SIGA), con la debida aprobación del Comité de Investigación.

Determinación de propiedades químicas de suelos de la zona cafetera colombiana por espectroscopia de infrarrojo cercano – NIRS. BIO103007

Esta propuesta de investigación, se fundamenta en la ventaja que ofrece esta tecnología para la determinación de propiedades del suelo a bajo costo y con una menor contaminación. La evaluación de las características físicas y químicas del suelo resulta indispensable para tomar mejores decisiones respecto al manejo de la fertilización, buscando altos niveles de productividad en el cultivo de café. Para esto, se requiere realizar análisis de suelo, sin embargo, los procedimientos convencionales implican una serie de etapas desde la recolección de muestras, la aplicación de reactivos, hasta los análisis de laboratorio que demandan tiempo considerable.



En respuesta a estas limitaciones, la espectroscopia de infrarrojo cercano (NIRS) se ha posicionado como una alternativa innovadora. Este método, basado en la capacidad de las moléculas del suelo de absorber radiación en la región del infrarrojo cercano, hace posible identificar su composición química de manera rápida, no invasiva y sin generar residuos contaminantes. Por la anterior, para el desarrollo de esta investigación, se recolectaron muestras anuales de suelos de estaciones experimentales de Cenicafé y, de cada una, se extrajo una contramuestra de 400 g para realizar la determinación de las propiedades químicas tanto por el método convencional como por NIRS. Inicialmente, las muestras se analizaron con técnicas tradicionales para obtener valores de Materia Orgánica (MO), Magnesio (Mg) y Aluminio (Al), y posteriormente se registró la huella espectral mediante la espectroscopia NIRS.

Con los espectros de cada muestra de suelo, se procedió a detectar y entender los datos atípicos, los cuales pueden originarse por diferentes causas como ruido del equipo o variaciones en el acondicionamiento físico de las muestras, que alteran la forma global del espectro, comprometiendo la solidez de los modelos de análisis. Para resolver este inconveniente, se aplicó un Análisis de Componentes Principales (PCA), a partir del cual se extrajeron los *scores* que representan la descomposición espectral de cada muestra. Con dichos componentes principales se calculó la distancia de Mahalanobis, una medida robusta para identificar valores anómalos. Este filtrado espectral resulta clave, pues al reducir la influencia de datos atípicos se incrementa la precisión y la estabilidad de los análisis subsiguientes, evitando sesgos en la interpretación y en la construcción de los modelos.

Una vez conformada la librería espectral, el paso siguiente fue mejorar la relación señal/ruido de los espectros, para ello, se aplicaron distintos pretratamientos espectrales, tales como la primera (1D) y segunda derivada (2D), así como el método de variación normal estándar (SNV). Los espectros pretratados se emplearon como insumo para la construcción de modelos de Regresión con Máquinas de Soporte Vectorial (SVR), Modelo de Regresión Cubist (RC), Regresión por Componentes Principales (PCR) y Regresión por Mínimos Cuadrados Parciales (PLS), los cuales fueron evaluados mediante el coeficiente de determinación (R^2), la raíz del error cuadrático medio (RMSE) y la razón de desempeño (RPD).

En la tabla 8, se ilustran los estadísticos de ajuste para uno de los cuatro modelos utilizados haciendo uso de tres pretratamientos espectrales. Se evidencia el efecto que tiene el método de pretratamiento espectral en el resultado de la capacidad predictiva de las diferentes propiedades químicas utilizando el modelo de regresión Cubist. En particular, el método SNV mostró el mejor desempeño, alcanzando altos niveles de ajuste tanto para MO ($R^2 = 87,15\%$, $RPD = 2,82$) como para Al ($R^2 = 92,87\%$, $RPD = 3,77$), lo que respalda su capacidad para predicciones cuantitativas confiables. Por su parte, el pretratamiento 1D produjo resultados aceptables para MO ($R^2 = 81,43\%$, $RPD = 2,32$) y Al ($R^2 = 78,62\%$, $RPD = 2,18$), aunque con menor robustez en comparación con SNV; sin embargo, en el caso de Mg el ajuste fue prácticamente nulo ($R^2 = 6,69\%$, $RPD = 1,01$), lo que refleja limitaciones claras del modelo bajo este escenario. Finalmente, el pretratamiento 2D presentó desempeños más bajos en todas las variables, destacándose únicamente un ajuste moderado para MO ($R^2 = 77,8\%$, $RPD = 1,89$), pero con valores reducidos en Al ($R^2 = 62,63\%$, $RPD = 1,54$) y Mg ($R^2 = 53,28\%$, $RPD = 1,14$), lo cual lo posiciona como el

enfoque menos adecuado dentro de los evaluados. En conjunto, los resultados resaltan que el pretratamiento SNV constituye la estrategia más efectiva para mejorar la calidad de las predicciones espectrales en suelo, particularmente en la estimación de Al y MO, mientras que la predicción de Mg sigue representando un reto para identificar una combinación de pretratamiento y modelo que permita mejorar su estimación.

Los resultados de esta investigación confirman que los análisis NIRS, en combinación con modelos y preprocesamientos espectrales específicos, constituye una herramienta para la predicción de diversas propiedades químicas del suelo en sistemas de producción cafetera. El pretratamiento SNV demostró una capacidad significativa para eliminar el ruido espectral no relacionado con las propiedades químicas de interés, lo que mejoró notablemente el desempeño predictivo de los modelos, independientemente de su estructura. En referencia, el aluminio fue la propiedad mejor predicha, alcanzando un coeficiente de determinación (R^2) del 92,87% y un valor de RPD de 3,77.

Tabla 8. Desempeño estadístico de validación para cada compuesto químico por modelo de regresión Cubist, según pretratamiento espectral.

Pretratamiento	Propiedad química	Regresión Cubist		
		RMSE	R2	RPD
1D	MO	1,47	81,43	2,32
	Al	0,52	78,62	2,18
	Mg	0,89	6,69	1,01
SNV	MO	1,21	87,15	2,82
	Al	0,4	92,87	3,77
	Mg	0,41	78,59	1,59
2D	MO	1,8	77,80	1,89
	Al	1,01	62,63	1,54
	Mg	0,57	53,28	1,14