SEMINÁRIO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA DO IFG

MODELAGEM COMPARATIVA DA BIOATIVIDADE DE HERBICIDAS UTILIZANDO INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL

OLIVEIRA, Victor Inácio de[1]
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Inhumas .

CALIXTO, Wesley Pacheco Calixto[2]
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Inhumas.

GOMES PACHECO, Viviane Margarida[3]
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás, Câmpus Inhumas.

O presente trabalho apresenta a expansão de um framework de inteligência artificial para a otimização de doses dos seguintes herbicidas pré-emergência: diclosulam, flumioxazin, imazethapyr, metribuzin e sulfentrazone. Recomendações estáticas presentes nas bulas ignoram a diversidade edáfica, que por sua vez pode gerar super ou hipodosagem, levando à contaminação do solo ou ineficiência dos presentes herbicidas. O objetivo deste estudo foi modelar a resposta à diversidade edáfica, utilizando aprendizado de máquina e otimização paramétrica e validando a arquitetura em sete solos fracamente intemperizados (1.225 unidades experimentais). O *pipeline* computacional foi desenvolvido em Python, utilizando regressão via XGBoost com hiperparâmetros otimizados por busca Bayesiana através do framework Optuna e validação cruzada estratificada do tipo *Leave-One-Soil-Out*. A explicabilidade do modelo foi garantida pelo método SHAP, que identificou os atributos mais sensíveis do solo. Posteriormente, os resultados foram condensados em Funções Dose-Resposta (DRFs) paramétricas utilizando otimização híbrida (Evolução Diferencial e Nelder-Mead). Alcançou-se alto poder preditivo através dos modelos XGBoost (R^2 entre 0,835 e

0,926). A análise SHAP confirmou a dose como preditor dominante e identificou moduladores edáficos específicos por molécula. As DRFs reproduziram as superfícies da IA com erro percentual absoluto médio (MAPE) entre 1,55% e 6,45%. O desenvolvimento do pipeline demonstra como técnicas de *Machine Learning* interpretável podem apoiar o manejo agronômico localizado e decisões multicritério que equilibram eficácia preditiva e risco ambiental. Com o modelo de aprendizado de máquina garantindo robustez de generalização de ponta-a-ponta, a adoção de um modelo substituto paramétrico (*surrogate*) de baixa dimensão construído sobre essa superfície provou ser a estratégia arquitetural oportuna para evitar a explosão de variância dos resíduos, limitando as formulações paramétricas complexas e, simultaneamente, oferecendo estabilidade para sumarização operacional. Conclui-se que a arquitetura computacional proposta é robusta e transferível entre diferentes famílias químicas, permitindo recomendações de dose específicas por sítio, reduzindo o uso de agroquímicos e mitigando riscos ambientais.

Palavras-chave

Inteligência Artificial; XGBoost; SHAP; Otimização; Bioatividade de Herbicidas.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Goiás. Agradecemos ao CNPq pela bolsa concedida.