

Análise de IA Explicável na Detecção de Gases nos Solos

**Felipe Valencia de Almeida¹, Rosa Virginia Encinas Quille¹, Danielle Monteiro¹,
Leandro Gomes de Freitas², Pedro Luiz Pizzigatti Corrêa¹**

¹Escola Politécnica - Universidade de São Paulo

²Instituto de Pesquisas Tecnológicas

{fvalencia, encinas, pedro.correa}@usp.br

{danimonteirodba}@gmail.com

{lfreitas}@ipt.br

Abstract. The study and monitoring of contaminated areas are essential for environmental risk assessment and decision-making. Among the pollutants of interest, subsurface contaminant gases, such as methane, are a concern due to their significant environmental impact. In this context, predictive analyses have been increasingly used to estimate the presence and concentration of these gases based on other variables. Machine learning models have shown good performance in such predictions; however, they often operate as "black boxes," making it difficult to understand how the results were obtained. Explainable AI aims to use techniques that enable the interpretation of model behavior, providing support for understanding how the presented results were generated. In this work, we employed SHAP and LIME techniques to analyze the explainability of Random Forest and XGBoost models in predicting contaminant gases in soil. A case study was conducted using data collected from gas monitoring wells at the USP-Leste campus, where the use of these techniques was found to improve model explainability.

Resumo. O estudo e monitoramento de áreas contaminadas é essencial para a avaliação de riscos ambientais e para a tomada de decisões. Entre os poluentes de interesse, os gases contaminantes presentes no subsolo, como o metano, representam uma preocupação devido ao impacto ambiental. Nesse contexto, análises preditivas têm sido cada vez mais utilizadas para estimar a presença e a concentração desses gases com base em outras variáveis. Modelos de aprendizado de máquina têm demonstrado bom desempenho nessas previsões, porém, muitas vezes funcionam como "caixas-pretas", dificultando a compreensão de como os resultados foram obtidos. A IA explicável tem como propósito utilizar técnicas que permitam interpretar o funcionamento dos modelos, trazendo subsídios para entender como os resultados apresentados foram obtidos. Neste trabalho, foram utilizadas as técnicas SHAP e LIME para analisar a explicabilidade dos modelos Random Forest e XGBoost aplicados à previsão de gases contaminantes em solos. Um estudo de caso foi feito utilizando dados coletados de poços de monitoramento de gases do campus USP-Leste, onde foi observado que o uso das técnicas melhorou a explicabilidade dos modelos.

1. Introdução

Embora as pesquisas na área ambiental tenham demonstrado avanços na análise da poluição ambiental, a contaminação do solo ainda representa um desafio para a governança urbana [BRZICA 2022, Mulenga 2022, Tarazona 2024]. Além dos riscos à saúde pública, áreas contaminadas podem gerar passivos ambientais que comprometem a gestão do território, levando à desvalorização imobiliária e, em alguns casos, ao abandono dessas áreas [Hou et al. 2023, Li et al. 2022]. Adicionalmente, há o risco de que contaminantes atinjam águas subterrâneas e superficiais, poluindo aquíferos e nascentes que abastecem a população. Caso tais poluentes atinjam ecossistemas sensíveis, os impactos ecológicos podem ser severos [Hartmann et al. 2021, CETESB 2022].

Ao longo das etapas de diagnóstico, remediação e monitoramento de áreas contaminadas, são gerados grandes volumes de dados ambientais. Durante o diagnóstico, o modelo conceitual da contaminação é elaborado a partir de informações pré-existentes (como dados históricos e bibliográficos), entrevistas, levantamentos em campo, amostragem e análises laboratoriais. Na fase de remediação, são coletados dados para o monitoramento dos sistemas e equipamentos, bem como para modelar o transporte de contaminantes no solo. Mesmo após a remediação, é necessário manter o monitoramento por períodos variáveis, de acordo com as estratégias de gestão adotadas [Moraes et al. 2014].

Avaliar de forma precisa e eficiente os níveis de contaminação é fundamental para mitigar riscos ambientais e sanitários. No entanto, as abordagens convencionais de análise de solos contaminados apresentam limitações, como altos custos, procedimentos demorados e dependência de técnicas laboratoriais complexas. Diante desse cenário, métodos baseados em técnicas de aprendizado de máquina têm ganhado destaque, por oferecerem ferramentas avançadas de análise preditiva e modelagem de dados ambientais.

Embora modelos de aprendizado de máquina apresentem bom desempenho na detecção de gases em solos, a baixa interpretabilidade desses modelos pode dificultar a análise dos resultados por especialistas da área. Esse desafio torna-se ainda mais evidente no uso de modelos de regressão, uma vez que, diferentemente dos classificadores, que utilizam métricas mais intuitivas, como a acurácia, os regressores empregam métricas de mais difícil interpretação, como o *Root Mean Square Error* (RSME).

Este trabalho tem como objetivo avaliar o uso de técnicas de Inteligência Artificial Explicável (xAI) para aumentar a transparência e a interpretabilidade de modelos de aprendizado de máquina aplicados à previsão da concentração de gases poluentes em solos. O estudo de caso desenvolvido baseou-se em dados coletados de poços de monitoramento de gases localizados no campus USP-Leste.

2. Método

A Figura 1 apresenta o método utilizado na condução deste trabalho. Ele é composto por cinco etapas, sendo elas: (i) coleta de dados, (ii) análise exploratória, (iii) treinamento dos modelos, (iv) uso das técnicas de xAI e (v) análise dos resultados. Em sequência é apresentada uma descrição de cada etapa do método.

2.1. Coleta dos Dados

Os dados analisados neste estudo foram obtidos por meio do Programa de Monitoramento Ambiental realizado na Escola de Artes, Ciências e Humanidades da Universidade de São

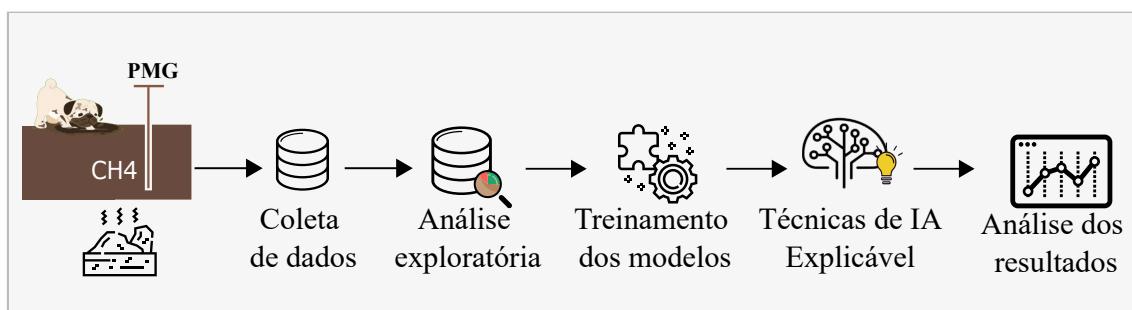


Figura 1. Passos do método utilizado

Paulo (EACH-USP, campus USP Leste). O conjunto de dados consiste em medições *in situ* de gases atmosféricos realizadas ao longo de um período de oito anos, compreendido entre 8 de abril de 2014 e 30 de junho de 2022, totalizando 100.570 registros individuais provenientes dos Poços de Monitoramento de Gases (PMG).

Foram monitorados 128 conjuntos de PMG. Dentre esses, 104 apresentavam dois níveis de profundidade (A e B), enquanto 9 possuíam três níveis (A, B e C), possibilitando a caracterização vertical das concentrações de gases no subsolo. As campanhas de amostragem foram realizadas em frequência semanal ou quinzenal, a depender das condições operacionais e da acessibilidade aos locais monitorados. Em cada amostra foram coletadas as concentrações de *CH₄*, *CO₂*, *O₂*, *H₂S*, *CO* e a pressão do poço.

O conjunto de dados utilizado neste estudo está disponível pelo DOI: <https://doi.org/10.60748/uspgasmon1weach.00>. O acesso requer registro no ORCID e autorização prévia por meio do sistema Datamap. Como alternativa, uma versão pública do dataset pode ser acessada em: <https://wds.pol.i.usp.br/sga/discovery/>. Uma descrição completa do sistema utilizado para coletar os dados é apresentada no artigo de Quille et al. (2025).

2.2. Análise Exploratória

Durante a análise exploratória, observou-se que a distribuição dos dados entre os 131 poços de monitoramento de gases não é uniforme. Além disso, cada poço possui uma frequência distinta de valores nulos para a variável *ch4_concentration*, que indica a concentração de metano (*CH₄*) medida naquele poço. A Tabela 1 apresenta a disponibilidade de dados nos poços juntamente com a presença de valores nulos, destacando os cinco poços com maior número de medições e os cinco com menor número de medições.

Como é possível observar na tabela, os cinco poços com menor número de medições apresentam uma predominância de valores nulos. Uma possível explicação para esse fenômeno é que esses poços passaram a ser monitorados mais tarde, a partir de 2020. Considerando que o monitoramento dos poços teve início em 2014, é provável que, à época em que esses cinco poços começaram a ser acompanhados, as iniciativas implementadas no campus para mitigar os efeitos da contaminação por gases no solo já estivessem em pleno funcionamento, o que teria contribuído para a redução das concentrações de metano.

Para a condução do estudo de caso, foram escolhidos os poços PMG-119 e PMG-48. A escolha levou em conta uma ponderação entre a quantidade de amostras disponíveis

e a porcentagem de valores nulos, além da intenção de considerar cenários relativamente distintos, a fim de avaliar o desempenho dos modelos de aprendizado de máquina em diferentes contextos.

Tabela 1. Disponibilidade de dados nos poços e presença de valores nulos

Poço	Amostras	Qtd nulos	Nulos (%)
PMG-119	1022	877	85.8
PMG-120	1019	885	86.8
PMG-48	837	583	69.6
PMG-49	837	580	69.3
PMG-50	837	639	76.3
PMG-126	198	193	97.5
PMG-127	198	197	99.5
PMG-129	198	198	100
PMG-131	198	197	99.5
PMG-125	196	194	99.0

2.3. Treinamento dos Modelos

Os modelos de aprendizado de máquina utilizados neste trabalho foram o Random Forest e o XGBoost. A escolha desses algoritmos baseou-se em evidências da literatura, que apontam seu bom desempenho na tarefa de detecção de gases em solos. Além disso, ambos os modelos apresentam alta complexidade intrínseca quando comparados a algoritmos mais intuitivos, como o kNN, o que reforça a necessidade de técnicas de explicabilidade para a interpretação dos resultados.

Para a otimização dos hiperparâmetros de cada modelo, foi empregada a técnica de validação cruzada utilizando o método K-Fold, com $K = 5$. O conjunto de hiperparâmetros testado para cada modelo é apresentado na Tabela 2.

Tabela 2. Modelos e hiperparâmetros utilizados

Modelo	Hiperparâmetro
<i>Random Forest</i>	<i>n_estimators</i> : [100, 200, 300]
	<i>max_depth</i> : [None, 10, 20]
	<i>min_samples_split</i> : [2, 5, 10]
	<i>min_samples_leaf</i> : [1, 2, 4]
<i>XGBoost</i>	<i>n_estimators</i> : [100, 200, 300]
	<i>max_depth</i> : [3, 5, 7]
	<i>learning_rate</i> : [0.1, 0.01, 0.001]

Para cada poço selecionado (PMG-119 e PMG-48), os modelos foram treinados considerando as concentrações de CO_2 , O_2 , H_2S , CO e a pressão do poço como *features* e a concentração de CH_4 como *target*. Informações temporais relativas ao momento da coleta das medições não foram consideradas no treinamento dos modelos.

2.4. Uso das Técnicas xAI

As técnicas de IA Explicável utilizadas neste trabalho foram a *SHapley Additive exPlanations* (SHAP) e a *Local Interpretable Model-agnostic Explanations* (LIME). A escolha

destas técnicas foi feita considerando a relevância de ambas, no contexto da melhoria da interpretabilidade dos modelos, e o caráter complementar delas.

SHAP é uma técnica baseada na teoria dos valores de Shapley da Teoria dos Jogos [Lundberg and Lee 2017]. Ela atribui a cada *feature* uma contribuição para a predição realizada, considerando todas as combinações possíveis de *features*. Assim, é possível interpretar como cada variável influenciou o resultado de uma predição. Utilizando o SHAP é possível obter tanto explicações globais do modelo, considerando seu comportamento geral, quanto explicações locais, interpretando uma predição em específico.

LIME é uma técnica de explicação local que aproxima o comportamento de um modelo complexo ao redor de uma instância específica por meio de um modelo mais simples e interpretável [Ribeiro et al. 2016]. Seu funcionamento baseia-se em gerar perturbações nas *features* e observar como a predição muda, permitindo entender quais delas foram mais importantes para aquela previsão. Sua análise é de caráter local, onde cada predição é analisada separadamente.

2.5. Análise dos Resultados

Os resultados obtidos neste trabalho correspondem aos relatórios gerados pelas técnicas de xAI utilizadas. Assim, foram analisadas as saídas produzidas tanto pelo SHAP quanto pelo LIME.

No caso do SHAP, foram gerados gráficos do tipo "beeswarm" [SHAP 2025]. Esse tipo de gráfico é caracterizado por apresentar uma alta densidade de informações, em que cada instância explicada é representada por um ponto ao longo da linha correspondente à *feature*. A aglomeração de pontos, por sua vez, indica como as instâncias de explicação estão concentradas nas *features*.

Para o LIME foi analisado o relatório padrão gerado pela técnica. Dado que a sua explicação é local, considerado cada predição, optou-se por selecionar em cada poço a previsão que obteve o maior erro absoluto, comparando o valor real com o valor correspondente previsto pelo modelo.

3. Resultados e Discussões

A Tabela 3 apresenta as métricas de *Mean Absolute Error* (MAE) e *Root Mean Square Error* (RSME) obtidas pelos modelos nos experimentos utilizando cada poço, onde é possível observar que o desempenho do XGBoost foi superior ao do Random Forest em ambos os casos. Conforme mencionado na introdução deste trabalho, essas métricas são de difícil interpretação e não permitem identificar o impacto individual das variáveis nas predições realizadas pelos modelos, o que motivou a posterior aplicação de técnicas de xAI.

Tabela 3. Métricas obtidas pelos modelos

	PMG-119		PMG-48	
	MAE	RSME	MAE	RSME
Random Forest	0.0057	0.0205	0.0125	0.0325
XGboost	0.0030	0.0119	0.0115	0.0316

A Figura 2 apresenta a análise SHAP, por meio dos gráficos *beeswarm*, para os modelos Random Forest e XGBoost nos dois poços. Nos quatro cenários analisados, observa-se que a variável *o2_concentration* exerce a maior influência nas predições dos modelos. Em situações extremas, concentrações elevadas de oxigênio impactam negativamente na predição da concentração de metano, enquanto concentrações mais baixas de oxigênio têm um impacto positivo. As variáveis *well_pressure* e *co2_concentration* aparecem com impacto moderado e variável, podendo tanto contribuir positivamente quanto negativamente para as predições, dependendo do cenário analisado. Já as variáveis *h2s_concentration* e *co_concentration* mostraram baixo impacto nos dois modelos e em ambos os conjuntos de dados, apresentando concentração de valores próximos do ponto central (valor SHAP próximo de zero).

Considerando uma análise dos cenários, observa-se uma consistência entre os dois modelos em termos da ordem de importância das variáveis, embora o XGBoost apresente uma distribuição relativamente mais dispersa dos valores SHAP. Também é destacado que no poço PMG-48 o impacto das variáveis é maior, principalmente para *o2_concentration* e *co2_concentration*. Isso sugere que esse conjunto de dados possui padrões mais definidos, talvez pela menor porcentagem de valores nulos, quando comparado com o poço PMG-119.

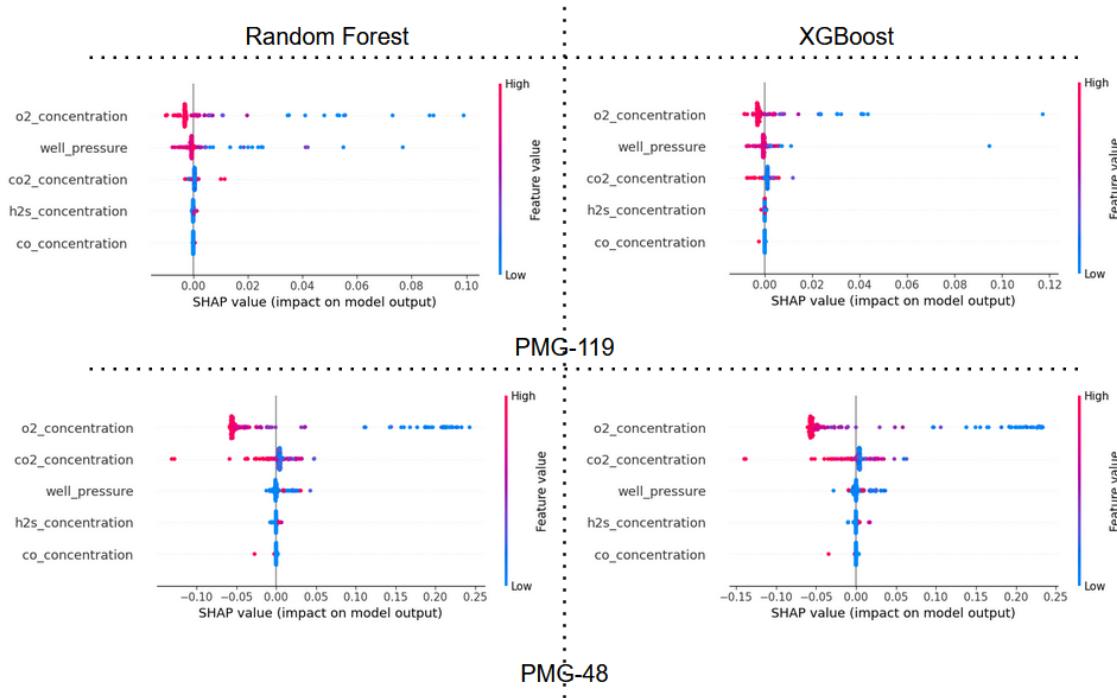


Figura 2. Análise SHAP dos modelos Random Forest e XGBoost

A Figura 3 apresenta a análise LIME para os modelos Random Forest e XGBoost em ambos os poços. Considerando as quatro medições de maior erro absoluto consideradas na análise, os resultados apresentados reforçam as conclusões anteriores gerados pelo SHAP. Em todas as medições, as variáveis *h2s_concentration* e *co_concentration* não contribuíram significativamente para a predição dos modelos, enquanto as variáveis *o2_concentration* e *well_pressure* apresentaram as maiores contribuições. Observa-se

ainda que, em três dos quatro casos, a predição dos modelos resultou em valores inferiores aos valores reais da concentração de metano, indicando subestimação.

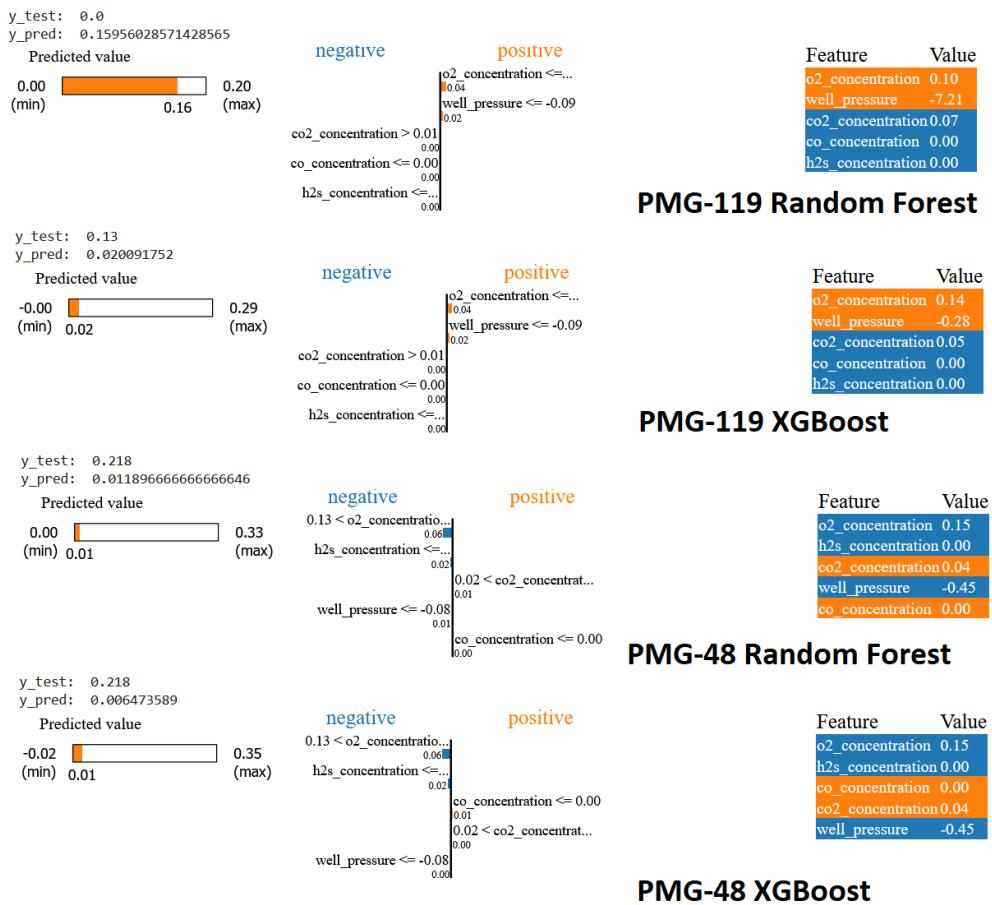


Figura 3. Análise LIME dos modelos Random Forest e XGBoost

4. Conclusão

Neste trabalho, foram aplicadas técnicas de Inteligência Artificial Explicável (xAI) na tarefa de predição da concentração de metano em solos. As técnicas SHAP e LIME foram utilizadas com o objetivo de proporcionar interpretabilidade global e local, aos modelos Random Forest e XGBoost empregados nos experimentos. A análise dos resultados revelou que, em ambos os modelos, as variáveis relacionadas à concentração de oxigênio e à pressão do poço se destacaram como as mais relevantes para a predição, dentre o conjunto de variáveis coletadas. A consistência destes resultados nos quatro cenários analisados reforça a confiabilidade das explicações geradas.

Como perspectivas para trabalhos futuros, algumas possibilidades podem ser exploradas. Novos conjuntos de dados relacionados à contaminação de gases em solos podem ser coletados, com o objetivo de verificar se a relevância das variáveis observada neste estudo se mantém em outros contextos. Além disso, as técnicas de xAI podem ser aplicadas a modelos de aprendizado profundo, que apresentam desafios ainda mais significativos em termos de interpretabilidade.

Agradecimentos

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

Referências

- BRZICA, D. (2022). Governing major cities in the context of new environmental challenges. *Economic Review/Ekonomické Rozhl'ady*, 51(3).
- CETESB (2022). Manual de gerenciamento de Áreas contaminadas. Technical report, CETESB.
- Hartmann, A., Jasechko, S., Gleeson, T., Wada, Y., Andreo, B., Barberá, J. A., Brielmann, H., Bouchaou, L., Charlier, J.-B., Darling, W. G., Filippini, M., Garvelmann, J., Goldscheider, N., Kralik, M., Kunstmann, H., Ladouce, B., Lange, J., Lucianetti, G., Martín, J. F., Mudarra, M., Sánchez, D., Stumpp, C., Zagana, E., and Wagener, T. (2021). Risk of groundwater contamination widely underestimated because of fast flow into aquifers. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 118(20):e2024492118.
- Hou, D., Al-Tabbaa, A., O'Connor, D., Hu, Q., Zhu, Y.-G., Wang, L., Kirkwood, N., Ok, Y. S., Tsang, D. C. W., Bolan, N. S., and Rinklebe, J. (2023). Sustainable remediation and redevelopment of brownfield sites. *Nature Reviews Earth & Environment*, 4(4):271–286.
- Li, X., Yi, S., Cundy, A. B., and Chen, W. (2022). Sustainability transitions of contaminated sites: A global meta-analysis on economic effects of remediation behaviour. *Land Degradation & Development*, 33(11):1775–1786.
- Lundberg, S. M. and Lee, S.-I. (2017). A unified approach to interpreting model predictions. *Advances in neural information processing systems*, 30.
- Moraes, S., Teixeira, C., and Maximiano, A. (2014). *Guia de elaboração de planos de intervenção para o gerenciamento de áreas contaminadas*. IPT - Instituto de Pesquisas Tecnológicas do Estado de São Paulo.
- Mulenga, C. (2022). Soil governance and the control of mining pollution in zambia. *Soil Security*, 6:100039.
- Quille, R., Vieira, G., Freitas, L., Corrêa, P., Souza, S., Barbosa, A., and Almeida, F. (2025). Dataset de poços de monitoramento de gases da usp leste. In *Anais do XVI Workshop de Computação Aplicada à Gestão do Meio Ambiente e Recursos Naturais*, pages 352–355, Porto Alegre, RS, Brasil. SBC.
- Ribeiro, M. T., Singh, S., and Guestrin, C. (2016). "why should i trust you?"explaining the predictions of any classifier. In *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*, pages 1135–1144.
- SHAP (2025). Beeswarm plot. Disponível em: https://shap.readthedocs.io/en/latest/example_notebooks/api_examples/plots/beeswarm.html. Acesso em 25 de junho de 2025.
- Tarazona, J. V. (2024). Pollution, soil. In Wexler, P., editor, *Encyclopedia of Toxicology (Fourth Edition)*, pages 801–807. Academic Press, Oxford, fourth edition edition.