

**Jacek Niedźwiecki, Guillaume Debaene, Bożena Smreczak,
Magdalena Łysiak, Aleksandra Ukalska-Jaruga**

*Instytut Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa – Państwowy Instytut Badawczy
w Puławach*

WSTĘPNE BADANIA NAD WYKORZYSTANIEM METOD SPEKTRALNYCH
DO KLASYFIKACJI UTWORÓW ORGANICZNYCH
NA POTRZEBY SPEKTRALNEJ BIBLIOTEKI GLEB POLSKI*

Słowa kluczowe: gleby organiczne, spektralna biblioteka gleb, chemometria, spektroskopia VIS-NIR.

Wstęp

Gleby organiczne wytworzone z torfów, mulów, gytii czy murszy, z uwagi na zgromadzone w nich zasoby węgla, a także zdolności do magazynowania wody, są ważnym elementem środowiska przyrodniczego. W ostatnich kilkudziesięciu latach wiele z tych gleb uległo znacznym przekształceniom w wyniku melioracji odwadniających oraz zmian rolniczego użytkowania z pastwisk i łąk trwałych na grunty orne. Obniżenie poziomu wód gruntowych powoduje nieodwracalne przeobrażenia utworów organicznych (3). Zanik warunków beztlenowych (anaerobowych) i wprowadzenie powietrza w głąb profilu glebowego sprzyja mineralizacji materii organicznej i jej szybkiemu ubytkowi, co prowadzi do powstawania nowych spolimeryzowanych kompleksów próchnicznych (3). W wyniku tego procesu zanika typowa dla torfów struktura włóknista lub włóknisto-gąbczasta, a powstaje struktura agregatowa charakterystyczna dla murszy (23). Mursze przy nadmiernym odwodnieniu ulegają kolejnym przekształceniom między innymi: zmniejsza się ich pojemność wodna i wzrasta hydrofobowość (3). Przeobrażenia wywołane odwodnieniem powodują zmiany w utworach organicznych tym większe im bardziej są one zasobne w materię organiczną. Procesowi murszenia podlegają również wierzchnie warstwy utworów organiczno-mineralnych oraz próchnicznych, które przekształcają się w utwory murszowate i murszaste (20).

* Opracowanie wykonano w ramach zadania 1.3 w programie wieloletnim IUNG-PIB.

Problemy związane z procesami degradacji gleb organicznych zostały dostrzeżone przez Bieńka i Łachacza (5), którzy stwierdzili między innymi, że proces ewolucji gleb brzeżnej strefy torfowisk pod wpływem trwałego odwodnienia prowadzi do mieszania warstw organicznych z utworami podglebia oraz stopniowego ubytku materii organicznej. W wyniku tych zmian zawartość materii organicznej zmniejsza się do ilości typowej dla gleb piaszczystych (ok. 1%), a jej zapas spada poniżej 100 t·ha⁻¹. Autorzy (5) szacują, że przy obecnym tempie ubytku materii organicznej, powierzchnia gleb torfowych w Polsce może się zmniejszyć w ciągu 100 lat o połowę.

Tempo mineralizacji materii organicznej w glebach organicznych jest zróżnicowane w zależności od warunków klimatycznych i głębokości odwodnienia (17). Torfowiska niskie użytkowane jako ekstensywne łąki obniżają się średnio o 1 cm·rok⁻¹. W przypadku łąk użytkowanych intensywnie wartość ta dochodzi nawet do 1,5 cm·rok⁻¹ (17). Wielu autorów (17, 21, 22) podkreśla, że degradacja gleb organicznych powoduje zagrożenia dla ich funkcji, a w skrajnych przypadkach może prowadzić do całkowitej eliminacji tych gleb ze środowiska przyrodniczego. Zatem odwodnione i rolniczo użytkowane gleby torfowe będą ulegać niekorzystnym przekształceniom według schematu: gleby torfowe → gleby murszowo-torfowe → gleby mineralno-murszowe → gleby murszowate → gleby murszaste → gleby mineralne (21).

Spadek zawartości materii organicznej jest jednym z głównych zagrożeń dla funkcji gleb zdefiniowanych w Strategii tematycznej w dziedzinie ochrony gleby (25). Szczególna troska o gleby organiczne znajduje również odzwierciedlenie w Wspólnej Polityce Rolnej oraz polityce ochrony realizowanej na poziomie krajowym np. w Ustawie o ochronie gruntów rolnych i leśnych (Dz.U.1995 nr 16 poz. 78 z późniejszymi zmianami). W związku z koniecznością wyznaczenia w UE obszarów, na których zachodzą procesy degradacji gleb i monitorowania ich stanu rosną potrzeby w zakresie szczegółowości danych przestrzennych. Metody spektralne w połączeniu z metodami chemometrycznymi oferują możliwość znacznego uszczegółowienia danych i stanowią tańszą alternatywę dla tradycyjnych pomiarów laboratoryjnych. Ponieważ analiza spektralna ogranicza ilość wykonywanych analiz laboratoryjnych do niezbędnego minimum oraz dostarcza dodatkowych informacji o budowie materii organicznej wskazując na kierunki jej przemian. Techniki analityczne oparte o bezpośrednie pomiary spektralne mogą w znacznym stopniu ograniczać koszty związane z zakupem odczynników chemicznych oraz zmniejszają problem ich utylizacji, dlatego metody spektroskopowe spełniają wymagania stawiane metodom analitycznym przyjaznym środowisku tzw. „zielona chemia” (18).

Dane o właściwościach gleb gromadzone są przez naukowców oraz administrację poszczególnych krajów. Wykorzystanie tych danych do szerokiej, szczegółowej oceny, w znacznym stopniu ogranicza różnorodność definicji typów gleb, stosowanych w poszczególnych krajach metod analitycznych czy metod wykonywania map glebowych. Jednym z pomysłów na gromadzenie danych o właściwościach gleb w skali całego świata, z wykorzystaniem jednolitej metody

oznaczeń tych właściwości, tj. spektrometrii w bliskiej podczerwieni oraz światła widzialnego, było utworzenie Globalnej Bazy Danych Spektralnych (ang. *Global Soil Spectral Library*, GSSL); (6, 8, 29). Baza ta zawiera informacje spektralne o glebach z ponad 90 krajów świata obejmujące cechy takie jak: zawartość materii organicznej, pojemność sorpcyjna, pH, uziarnienie i zawartość żelaza. Wykorzystanie spektralnej bazy danych w zakresie bliskiej podczerwieni oraz światła widzialnego (VIS-NIR) niewątpliwie przyczyniło się do rozwoju spektroskopii gleb i tworzeniu nowoczesnych narzędzi badawczych oraz algorytmów, wyznaczanych w oparciu o korelacje z wynikami oznaczeń chemicznych, służących modelowaniu, monitorowaniu i mapowaniu różnych właściwości gleb (11-13, 2, 28, 30).

Obszerna baza danych archiwalnych próbek glebowych wraz z ich współrzędnymi geograficznymi, która jest w posiadaniu IUNG-PIB, została wykorzystana przy tworzeniu Spektralnej Biblioteki Gleb Polski (SBGP); (19). Biblioteka ta jest stale zasilana nowymi danymi pochodzącymi z różnych prac badawczych realizowanych w IUNG-PIB. Dotychczasowe prace nad tworzeniem SBGP koncentrowały się głównie na glebach mineralnych i tylko w niewielkim stopniu obejmowały gleby organiczne i organiczno-mineralne. Od 2016 r. w ramach zadania 1.3 „Monitorowanie różnych parametrów środowiska glebowego dla właściwej oceny WPR” w Programie Wieloletnim IUNG-PIB realizowane są prace dotyczące oceny aktualnego stanu gleb bogatych w węgiel organiczny pod trwałymi użytkami zielonymi z uwzględnieniem różnych czynników wpływających na te zmiany. Próbkę pobrane w trakcie tych prac zostały poddane analizom spektrofotometrycznym w zakresie bliskiej podczerwieni oraz światła widzialnego. Z uwagi na fakt, że w Polsce dotychczas nie prowadzono badań nad wykorzystaniem analiz spektralnych w ocenie gleb pochodzenia organicznego, badania te wydają się być szczególnie interesujące. Celem pracy jest charakterystyka techniki VIS-NIR oraz przedstawienie wstępnych wyników analiz spektralnych gleb pochodzenia organicznego z wykorzystaniem tej metody.

Spektroskopia bliskiej podczerwieni

Spektroskopia bliskiej podczerwieni oraz światła widzialnego jest niedestrukcyjną analityczną techniką badania interakcji pomiędzy światłem odbitym bądź pochłoniętym przez materiał a powierzchnią materiału (19). Technika ta jest szeroko wykorzystywana w przemyśle dzięki łatwości zastosowania, szybkości i braku konieczności skomplikowanego przygotowania próbek. Spektrometria VIS-NIR została po raz pierwszy użyta ponad trzy dekady temu i wykorzystana do szybkiej analizy wilgotności zboża (1, 2). Chociaż badania gleb przy zastosowaniu techniki spektrometrii w zakresie bliskiej podczerwieni i światła widzialnego są stosowane od niedawna, to analizie zostały już poddane niektóre właściwości gleb takie jak: skład granulometryczny, wilgotność, zawartość węgla organicznego, przewodność elektryczna, pojemność wymienna kationowa, pH, zawartość mikro- i makroskładników np. N, P, S, Ca, Mg, Na, K, Fe, Mn (7, 9, 11, 12, 14, 24, 26,

29). Również z dużym powodzeniem udało się wykorzystać technikę VIS-NIR do klasyfikowania poziomów diagnostycznych trzech różnych typologicznie gleb: Albic Luvisol, Gleyic Phaeozem, Brunic Arenosol (10). Podobne prace dla gleb australijskich wykonali Viscarra Rossel i in. (30). Szerokie możliwości zastosowań VIS-NIR w analizach gleby przedstawione zostały w pracach Viscarra Rossel i in (28) oraz w Cécillon i in (8). Kilkadziesiąt tysięcy próbek, szczególnie gleb piaszczystych o niskiej zawartości materii organicznej, wykorzystano do tworzenia Duńskiej Bazy Danych Spektralnych (13). Istniejące biblioteki spektralne mogą być również podstawą do rozwoju technologii – doskonalenia sensorów w nowych modelach urządzeń wykorzystujących technologię spektrometrii VIS-NIR np. do bardziej precyzyjnego określenia korekty wilgotnościowej w analizie spektralnej gleb (31).

Analiza widm glebowych i analiza głównych składowych (PCA)

Ilość promieniowania w bliskiej podczerwieni absorbowana przez próbki glebowe, określona jest przez właściwości i ilość wiązań obecnych w badanym materiale. Dlatego widma w zakresie bliskiej podczerwieni zawierają szczegółowe informacje na temat składu chemicznego badanych substancji (1). Oprócz składu chemicznego materiału, na właściwości spektralne ma również wpływ jego fizyczna struktura (np. stopień rozkładu materiału organicznego), rozmiar i kształt cząstek czy puste przestrzenie pomiędzy cząstkami. Widma NIR-VIS są typowym przykładem danych wymagających podejścia chemometrycznego dla pełnego wykorzystania zawartej w nich informacji (15). W tym celu najczęściej wykorzystywane są specjalistyczne oprogramowania posługujące się zaawansowanymi metodami kompensacji danych (np. PCA), umożliwiające wydobycie szczegółowych informacji ze zbioru danych.

Niespecyficzność widm światła odbitego i rozproszonego spowodowana jest w dużej mierze zakłóceniami i szumami wynikającymi z nakładania się widm składników glebowych oraz tła wytwarzanego przez pracujące urządzenie. Wszystkie czynniki zakłócające, przy zastosowaniu metod matematycznych, muszą być oddzielone od widma, a po korekcie są korelowane z konkretną cechą gleby. Dlatego też analiza spektralna gleby w zakresie VIS-NIR wymaga dodatkowo stosowania technik chemometrycznych i kalibracji wielowymiarowych. Chemometria dotyczy stosowania technik matematycznych lub statystycznych w analizowaniu danych chemicznych. Podczas kalibracji wielowymiarowej, wykorzystuje się dane empiryczne do przewidywania nieznannej właściwości glebowej – y na podstawie wielu pomiarowych danych spektralnych x_1, x_2, \dots, x_K . Procedury te zostały szczegółowo opisane przez Debaene i in., (11) i obejmują: 1) losowy wybór próbek kalibracyjnych, 2) wybór próbek według stężeń chemicznych, 3) wybór próbek według grupowania metodą k -średnich, 4) wybór próbek według analizy głównych składowych – PCA. Zdaniem autorów (11) najlepszą procedurą kalibracji okazał się wybór próbek metodą k -średnich. Dzięki tej procedurze, można uzyskać lepsze wyniki predykcji z zestawu danych walidacji. Takie postępowanie pozwala zmniejszyć ilość próbek kalibracyjnych do budowy modelu, a tym samym zmniejszyć koszty analiz laboratoryjnych.

Regresja metodą częściowych najmniejszych kwadratów (PLS)

W analizie widm spektralnych gleb wykorzystuje się regresję metodą cząstkowych (częściowych) najmniejszych kwadratów (PLS). Metoda ta dotyczy dwóch macierzy danych X i Y analizowanych poprzez model liniowy wielowymiarowy i jest powszechnie stosowana w analizie odbicia danych spektralnych PLSR, ponieważ obrazuje rozkład obu zmiennych X i Y i znajduje nowe komponenty (punkty), zwane zmiennymi ukrytymi. W metodzie tej obliczana jest regresja pomiędzy otrzymanymi nowymi składnikami zmiennych X i Y, gdzie X jest odbiciem gleby, a Y mierzona właściwością gleby. Oceny statystyk dokonuje się poprzez obliczenie współczynnika determinacji r^2 pomiędzy przewidywanymi, a mierzonymi wartościami oraz na podstawie obliczonego średniego błędu kwadratowego (RMSE) i RPD (ang. *ratio of performance to deviation*) według wzorów podanych poniżej:

$$R^2 = \frac{\left[\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})(y_i - \bar{y}_i) \right]^2}{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y}_i)^2}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2}$$

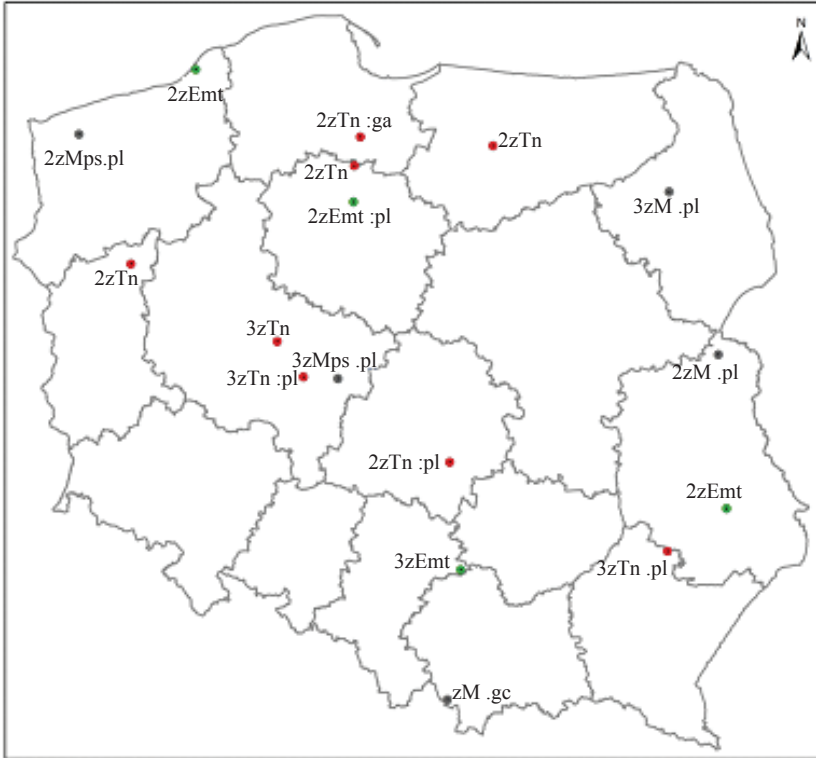
$$RPD = SD/RMSE$$

Gdzie \hat{y}_i jest wartością przewidywaną i y_i wartością zmierzoną; \bar{y}_i średnia z wartości zmierzonej; $\bar{\hat{y}}$ średnia z wartości przewidywanej i n ilością próbek.

Badania aktualnego stanu gleb pochodzenia organicznego pod trwałymi użytkami zielonymi

Głównym celem badań realizowanych w latach 2016-2017, w ramach zadania 1.3 w Programie Wieloletnim IUNG-PIB, była ocena aktualnego stanu gleb pochodzenia organicznego z uwzględnieniem czynników wpływających na te zmiany. Do gleb pochodzenia organicznego pod trwałymi użytkami zielonymi (TUZ) zaliczono gleby opisane na mapie glebowo-rolniczej w skali 1: 25 000 (MGR 25 000) symbolami: T – gleby torfowe, gleby torfowe na podłożu mineralnym, gleby murszowo-torfowe, M – gleby murszowe na podłożu mineralnym, murszowate, murszaste i torfiaste oraz E – gleby mułowo-torfowe i torfowo-mułowe. Dla potrzeb badań wytypowano 17 konturów glebowych (obszarów) reprezentujących kombinację kompleksu rolniczej przydatności gleb użytków zielonych (1z, 2z, 3z) i typu gleby, które w trakcie tworzenia mapy glebowo-rolniczej w skali 1: 25 000 były najliczniej reprezentowane. Przykładowe kombinacje obejmują: 2z Etm, 3z Etm, 2z M · pl, 3z M · pl, 2z Tn, 3z

Tn i 2z Tn : pl. Obszary te były zlokalizowane w różnych regionach Polski (Rys. 1). Przy wyznaczaniu każdego z tych obszarów dodatkową informację stanowiły tzw. profile wzorcowe, zawierające szczegółowy opis budowy profilu glebowego i wyniki analiz właściwości fizyko-chemicznych (16).



Rys. 1. Lokalizacja obszarów testowych wytypowanych do badania gleb pochodzenia organicznego.

Źródło: opracowanie własne

Na każdym z wyznaczonych obszarów wykonano odkrywki glebowe w miejscu lokalizacji profilu wzorcowego oraz dodatkowo w ponad 10 punktach kontrolnych (Rys. 2).



Rys. 2. Przykład konturu opisanego symbolami 2z Tn występowania gleb organicznych. Żółtym oznaczono lokalizacje punktów, z których pobrano próbki do analiz spektralnych; czerwony punkt oznacza lokalizację profilu wzorcowego

Źródło: opracowanie własne

Dla każdego profilu glebowego został sporządzony opis budowy morfologicznej. Z warstw organicznych i mineralnych pobrano próbki do badań laboratoryjnych i analiz spektrometrycznych.

Dotychczas w wyniku przeprowadzonych prac pobrano ponad 500 próbek glebowych, które skanowano przy użyciu spektrofotometru działającego w zakresie widma elektromagnetycznego w bliskiej podczerwieni (NIR) oraz w paśmie widzialnym (VIS). W analizach spektralnych uwzględniono nie tylko próbki pobrane z warstwy powierzchniowej, ale też pochodzące z głębszych warstw, w tym również z podłoża mineralnego. Dotyczy to głównie gleb torfowych, torfowomurszowych oraz murszastych. Takie działanie pozwoliło na przeprowadzenie analiz wpływu charakterystyki poziomów zróżnicowania profilu na właściwości spektralne gleb. Docelowo w ramach badań gleb pochodzenia organicznego zaplanowano zeskanowanie około 2000 próbek glebowych, których widma zasilą Spektralną Bibliotekę Gleb Polski (SBGP) tworzoną w IUNG-PIB.

Analizy spektralne gleb pochodzenia organicznego z zastosowaniem techniki NIR-VIS

Analizę spektralną próbek pobranych z profili gleb pochodzenia organicznego przeprowadzono przy użyciu spektrometru PSR-3500® (Spectral Evolution, Lawrence, MA, USA) w zakresie długości fali od 350 do 2500 nm oraz oprogramowania

Unscrambler® X (CAMO Software); (Rys. 3). Rozdzielczość spektralna dla tych pomiarów wynosiła 2 nm. Skanowanie próbek było ułatwione dzięki zastosowaniu sond z wbudowanym źródłem światła 5 W. Każdą próbkę skanowano czterokrotnie obracając każdorazowo sondę o 90° pomiędzy poszczególnymi pomiarami w celu uzyskania średniej krzywej widmowej. Po zeskanowaniu każdej próbki spektrofotometr był kalibrowany przy pomocy dedykowanej do urządzenia białej płytki kalibracyjnej o wymiarach 5 cm x 5 cm.



Rys. 3. Skanowanie próbek gleb organicznych przy pomocy spektroradiometru PSR-3500® (Spectral Evolution, Lawrence, MA, USA)

Źródło: opracowanie własne

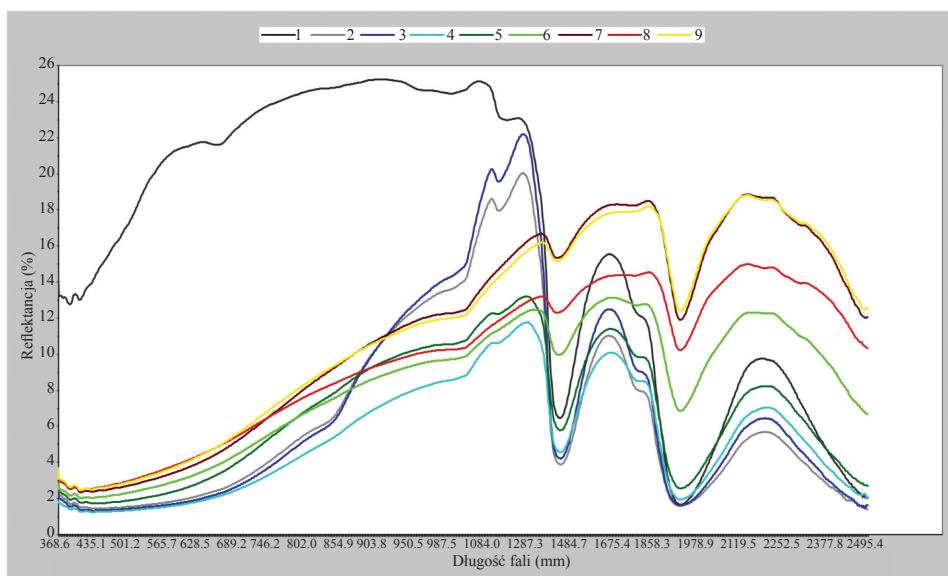
Ze względu na istotny wzrost refraktancji w suszonych próbkach oraz pochłanianie pary wodnej z powietrza przez próbki suche, do analiz spektralnych wykorzystano tylko próbki gleb w stanie wilgotności aktualnej. We wstępnej fazie badań spektralnych gleb pochodzenia organicznego przeprowadzono następujące oceny:

- wpływu rodzaju materiału organicznego i stopnia jego przeobrażenia na kształt widm,
- wpływu stopnia rozkładu torfów na kształt widm spektralnych,
- analizę składowych głównych (PCA),
- analizę regresyjną pomiędzy zawartością węgla całkowitego (C_{tot}) i azotu całkowitego (N_{tot}).

Wpływ rodzaju materiału organicznego i stopnia jego przeobrażenia na kształt widm

Zastosowanie techniki VIS-NIR potwierdziło występujące różnice w kształcie widm utworów organicznych charakteryzujących się różnym pochodzeniem (torf, gytia). Wykazano także zróżnicowanie widm spektralnych torfów o różnym stopniu rozkładu – przykładowe widma spektralne badanych utworów glebowych przedstawiono na rysunku 4.

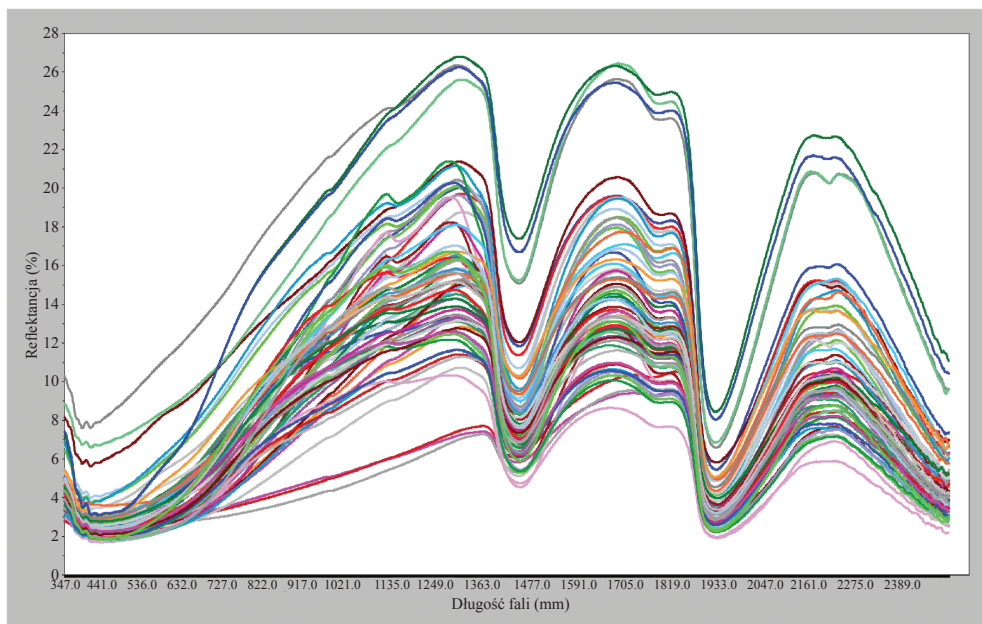
Ze wstępnych badań wynika, że w przypadku gytii wapiennej maksimum refraktancji przypadało dla zakresu długość fal pomiędzy 903 nm a 1084 nm. Również dla torfu średnio rozłożonego maksimum refraktancji było charakterystyczne dla tego zakresu długości fal. W przypadku torfu silnie rozłożonego maksima refraktancji przypadały dla zakresów 1675-1858 nm i 2119-2252 nm. Najbardziej wyraźne różnice pomiędzy gytią, a średnio i silnie rozłożonym torfem zaobserwowano w zakresie długości fal 368,6-1084 nm. Różnice w kształcie widm spektralnych badanych utworów mogą wynikać z różnej ich struktury, która ma wpływ na absorbcję fal elektromagnetycznych w różnych zakresach (1).



Rys. 4. Wpływ rodzaju utworu organicznego na kształt widm spektralnych: 1 – gytia; 2, 3 – torf średnio rozłożony; 4, 5, 6, 7, 8, 9 – torf silnie rozłożony

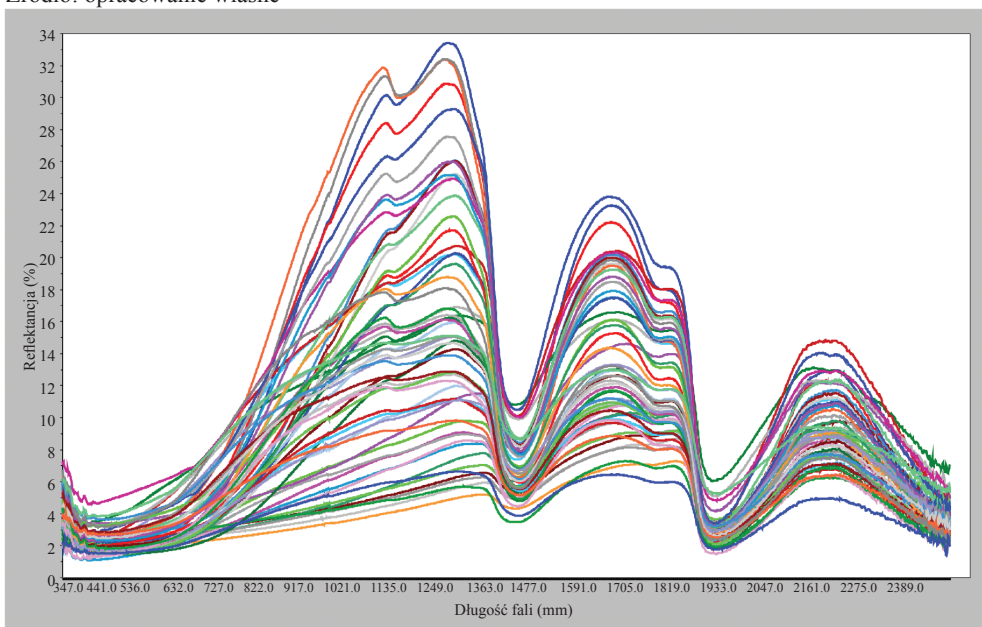
Źródło: opracowanie własne

Dodatkowo zanotowano różnice w budowie widm spektralnych w obrębie poszczególnych utworów organicznych takich jak mursze (Rys. 5) i torfy (Rys. 6). Na podstawie analiz spektralnych stwierdzono, że wartości refraktacji w glebach murszowych osiągały znacznie niższą wartość w porównaniu do gleb torfowych. Wynikać to może z różnej struktury tych utworów. Mursze, które charakteryzują się znacznie większym rozrobieniem i strukturą agregatową, mają większą zdolność do absorpcji fal elektromagnetycznych, szczególnie w zakresie bliskiej podczerwieni. Z kolei analizując wartości refraktacji torfów można stwierdzić, że utwory te w mniejszym stopniu absorbują fale elektromagnetyczne w zakresie bliskiej podczerwieni. Różnice te może powodować włóknista struktura torfów, ale potwierdzenie tego przypuszczenia wymaga dalszych badań.



Rys. 5. Zmienność spektralna gleb murszowych

Źródło: opracowanie własne



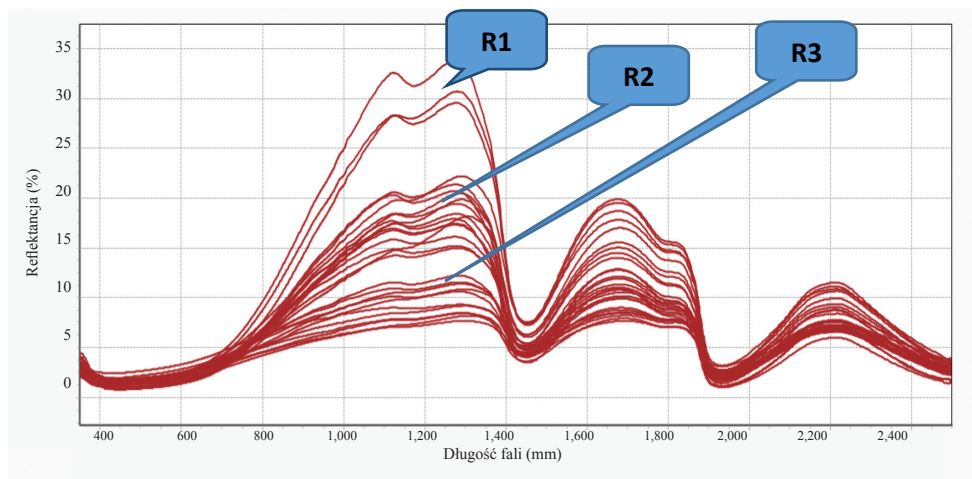
Rys. 6. Zmienność spektralna gleb torfowych

Źródło: opracowanie własne

Wpływ stopnia rozkładu torfu na kształt widm spektralnych

Przeprowadzona analiza spektralna widm wykazała, że stopień rozkładu torfu różnicuje charakterystyki spektralne tych utworów (Rys.7). Stopień rozkładu torfu z podziałem na trzy grupy przyjęto za Okruszko (20), gdzie R1 to materiał organiczny o słabym stopniu rozkładu (do 30%), R2 – materiał organiczny średnio rozłożony (30-60%), R3 – materiał organiczny silnie rozłożony (powyżej 60%). Podział ten jest uznany przez Międzynarodowe Stowarzyszenie Torfowe (ang. *International Peatland Society*).

Wstępne wyniki badań wskazują, że technika VIS-NIR może być stosowana do oceny stopnia rozkładu utworów torfowych. Stwierdzono, że torfy najsilniej rozłożone wykazywały istotnie niższą reflaktancję (Rys. 7), co może być spowodowane znacznie większym rozdrobnieniem materii organicznej i zmianami jej budowy w porównaniu do torfów o słabym stopniu rozkładu.

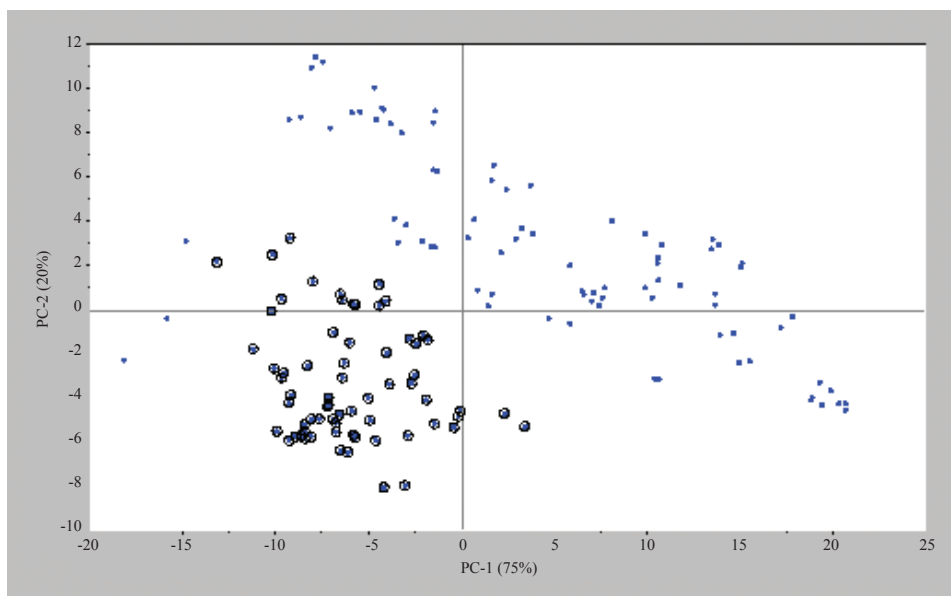


Rys. 7. Zróżnicowanie widm spektralnych w zależności od stopnia rozkładu torfu

Źródło: opracowanie własne

Analiza składowych głównych

Analiza PCA wskazuje możliwość rozróżnienia utworów glebowych na organiczne i mineralne przez dwie pierwsze główne składowe. Gleby organiczne (mursze, torfy, muły i gytie) wykazują przeważnie dodatnie wartości PC1, a gleby mineralne w większości przypadków charakteryzują się ujemnymi wartościami PC1. Wykres ładunku (Rys. 8) wskazuje, że składowa PC1 opisuje 75%, natomiast PC2 wyjaśnia 20% całkowitej zmienności. Gleby pochodzenia organicznego wykazują zarówno dodatnie jak i ujemne wartości PC1 co wskazuje na złożony charakter tych utworów i prawdopodobnie jest związane z przekształceniami materii organicznej, szczególnie w płytkich glebach murszowych i glebach murszastych. W glebach tych może następować mieszanie się części mineralnych i organicznych gleby. W celu weryfikacji tych przypuszczeń konieczne jest przeprowadzenie dodatkowych analiz chemometrycznych.



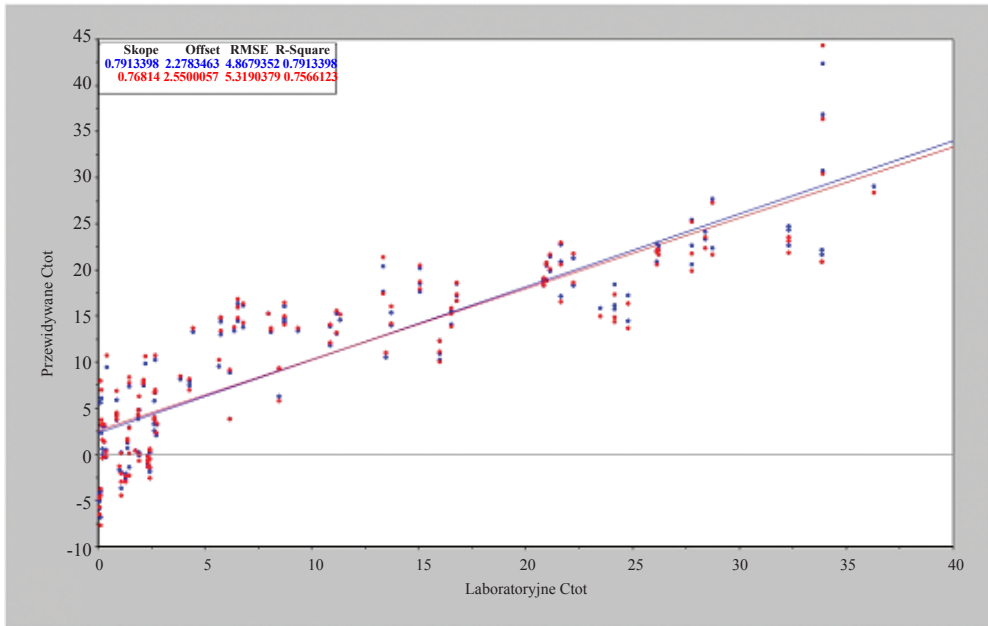
Rys. 8. Analiza PCA danych spektralnych gleb pochodzenia organicznego

Źródło: opracowanie własne

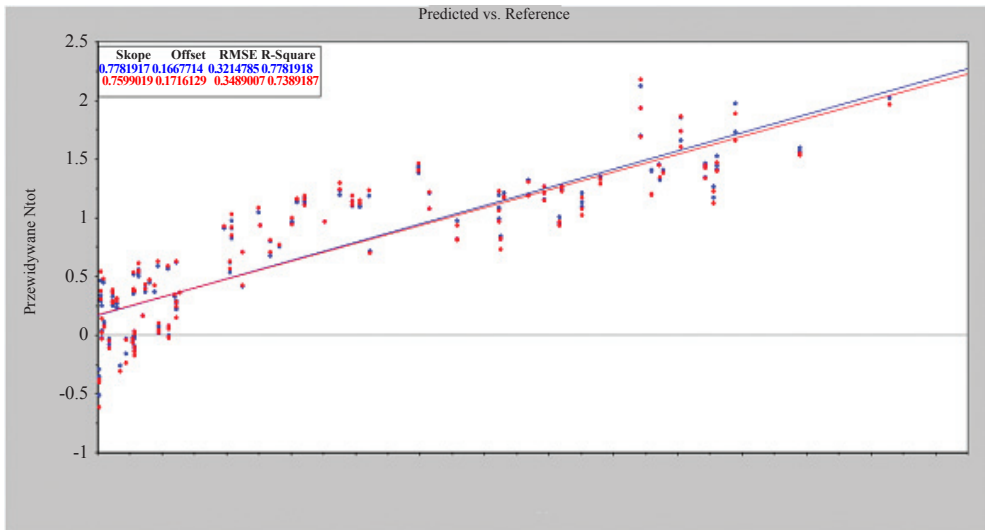
Modele regresyjne

Na rysunkach 9 i 10 przedstawiono zależność regresyjną pomiędzy przewidywaną i mierzoną wartością węgla całkowitego (C_{tot}) i azotu całkowitego (N_{tot}) w badanych próbkach glebowych.

Na podstawie analizy regresji częściowych najmniejszych kwadratów (PLS-partial least squares regression) stwierdzono, że zawartości węgla całkowitego oraz azotu całkowitego w badanych glebach szacowane na podstawie uzyskanych modeli kalibracyjnych charakteryzują się bardzo dobrą zdolnością predykcyjną. Współczynnik determinacji (R^2) dla zbioru walidacyjnego wynosił w przypadku C_{tot} 0,76, a dla N_{tot} – 0,74. Średnie kwadratowe błędy przewidywania wynosiły dla C_{tot} – 5,32, a dla N_{tot} – 0,35.



Rys. 9. Przewidywane vs. mierzone wartości Ctot (%), niebieski – kalibracja, czerwony – walidacja
 Źródło: opracowanie własne



Rys. 10. Przewidywane vs. mierzone wartości Ntot (%), niebieski – kalibracja, czerwony – walidacja
 Źródło: opracowanie własne

Podsumowanie

Wstępne badania wykazały potencjalną przydatność technik spektralnych do klasyfikowania gleb pochodzenia organicznego, wytworzonych z różnych utworów organicznych. Uzyskane dane spektralne dla gleb torfowych, murszowych oraz gytii zasilły Spektralną Bibliotekę Gleb – IUNG, dzięki czemu będą pomocne w szybkim określaniu pochodzenia organicznych utworów glebowych oraz ocenie stopnia ich przemian. Wyniki predykcji (zawartość węgla organicznego czy azotu całkowitego) są porównywalne z wynikami otrzymanymi klasycznymi metodami analizy, co oznacza, że niezależny nowy zbiór danych może być użyty do sprawdzenia zdolności predykcyjnej otrzymanych modeli.

Wykorzystanie spektralnej bazy danych w zakresie bliskiej podczerwieni oraz światła widzialnego może przyczynić się do rozwoju spektroskopii gleb i stworzenia nowoczesnych narzędzi badawczych (modeli predykcyjnych) służących modelowaniu, monitorowaniu gleb organicznych i ocenie stopnia ich degradacji, a w następnej kolejności sporządzania map dla obszarów występowania tych gleb.

Literatura

1. Ben-Dor E., Banin A.: Near-infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 1995, **59**: 364-372.
2. Batten, G.D.: Plant analysis using near infrared reflectance spectroscopy: the potential and the limitations. *Aust. J. Exp. Agric.* 1998, **38**: 697-706.
3. Bednarek R., Skiba S.: Elementarne (typologiczne) procesy glebotwórcze. [W:] *Gleboznawstwo*, redakcja naukowa A. Mocek, 2016: 91-92.
4. Ben-Gera, I., Norris, K.H.: Direct Spectrophotometric Determination of Fat and Moisture in Meat Products. *J. Food Sci.*, 1968, **33**: 64-67.
5. Bieniek A., Łachacz A.: Ewolucja gleb murszowych w krajobrazie sandrowym. [W:] *Wybrane problemy ochrony mokradeł*. A. Łachacz (red.). *Współczesne Problemy Kształtowania i Ochrony Środowiska*. Wydział Kształtowania Środowiska i Rolnictwa, Katedra Gleboznawstwa i Ochrony Gleb, Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie, 2012, 111-131.
6. Brown, D.J., Shepherd, K.D., Walsh, M.G., Dewayne Mays, M., Reinsch, T.G.: Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma* 2006, **132**: 273-290.
7. Cécillon, L., Cassagne, N., Czarnes, S., Gros, R., Brun, J.-J.: Variable selection in near infrared spectra for the biological characterization of soil and earthworm casts. *Soil Biology and Biochemistry*, 2008, **40**: 1975-1979.
8. Cécillon, L.; Barthès, B. G.; Gomez, C.; Ertlen, D.; Genot, V.; Hedde, M.: Assessment and monitoring of soil quality using near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS). w: *European J. Soil Sci.*, 2009, **60(5)**: 770-784.
9. Chang, C.-W., Laird, D.A., Mausbach, M.J., Hurburgh, C.R.: Near-Infrared Reflectance Spectroscopy-Principal Components Regression Analyses of Soil Properties. *Soil Science Society of America Journal*, 2001, **65**: 480.
10. Debaene G., Bartmiński P., Niedźwiecki J., Miturski T.: Visible and Near -Infrared Spectroscopy as a Tool for Soil Classification and Soil Profile Description. *Polish Journal of Soil Science*, 2017, **50**: 1-10.
11. Debaene, G., Niedźwiecki, J., Pecio, A., Żurek, A.: Effect of the number of calibration samples on the prediction of several soil properties at the farm-scale. *Geoderma*, 2014a, **214-215**: 114-125.
12. Debaene, G., Pikula, D., Niedźwiecki, J.: Use of VIS-NIRS for land management classification with a support vector machine and prediction of Soil Organic Carbon and other soil properties. *Ciencia e investigación agraria*, 2014b, **41**: 5-6.

13. Deng F., Knadel M., Thomsen A., Greve M.H.: Development of near infrared spectral library of Danish soils. The Second Global Workshop on Proximal Soil Sensing. Montreal, 2011.
14. Dunn, B.W., Batten, G.D., Beecher, H.G., Ciavarella, S. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy for soil analysis — a case study from the Riverine Plain of south-eastern Australia. *Aust. J. Exp. Agric.* 2002, **42**: 607–614.
15. Geladi P.: Chemometrics in spectroscopy Part 1. Classical Chemometrics. *Spectrochimica Acta Part B*, 2003, **58**: 767-782.
16. Jadczyk J., Smreczak B.: Mapa glebowo-rolnicza w skali 1:25 000 i jej wykorzystanie na potrzeby współczesnego rolnictwa, *Studia i Raporty IUNG-PIB*, 2017, **51(5)**: 9-27.
17. Karczewska A.: Ochrona gleb i rekultywacja terenów zdegradowanych. Wrocław, 2008: 85-100.
18. Keith L. H., Gron L. U., Young J. L.: Green analytical methodologies. *Chemical Reviews*, 2007, **107**: 2695-2708.
19. Niedźwiecki J., Debaene G., Kowalik M.: Spektralna biblioteka gleb użytków rolnych w Polsce – podstawowe założenia. *Studia i Raporty IUNG-PIB. Krajowe bazy danych o glebach*. 2017 (50), 5: 91-110.
20. Okruszko H.: Zasady rozpoznawania i podziału gleb hydrogenicznych z punktu widzenia potrzeb melioracji, *Bibl. Wiad. IMUZ*, 1976, **52**: 7-53.
21. Piaścik H., Gotkiewicz J.: Procesy degradacji na odwodnionych torfowiskach terenów młodo glacialnych. *Zesz. Probl. Post. Nauk Roln.*, 1995, **418**: 185-190.
22. Piaścik H., Gotkiewicz J.: Przeobrażenia odwodnionych gleb torfowych jako przyczyna ich degradacji. *Roczn. Gleb.* 2004, **55**: 331-338.
23. Prusinkiewicz Z.: Środowisko i gleby w definicjach, Oficyna Wyd. Turpress, Toruń, 1999.
24. Sørensen, L.K., Dalgaard, S.: Determination of Clay and Other Soil Properties by Near Infrared Spectroscopy. *Soil Science Society of America Journal*, 2005, **69**: 159.
25. Strategia tematyczna w dziedzinie ochrony gleby. Komunikat Komisji do Rady, Parlamentu Europejskiego, Europejskiego Komitetu Ekonomiczno-społecznego oraz Komitetu Regionów, Bruksela, dnia 22.9.2006, KOM(2006)231 wersja ostateczna.
26. Velasquez, E., Lavelle, P., Barrios, E., Joffre, R., Reversat, F.: Evaluating soil quality in tropical agroecosystems of Colombia using NIRS. *Soil Biology and Biochemistry*, 2005, **37**: 889-898.
27. Viscarra Rossel, R. A., McBratney, A. B.: Diffuse Reflectance Spectroscopy as a Tool for Digital Soil Mapping, w: *Digital Soil Mapping with Limited Data*, red. Alfred E. Hartemink, Alex McBratney i Mendonça-Santos, Maria de Lourdes. Dordrecht: Springer Netherlands, 2008: 165-172
28. Viscarra Rossel, R. A.; Behrens, T.; Ben-Dor, E.; Brown, D. J.; Demattê, J.A.M.; Shepherd, K. D.: A global spectral library to characterize the world's soil. w: *Earth-Science Reviews* 2016: 198–230
29. Viscarra Rossel, R.A., Walvoort, D.J.J., McBratney, A.B., Janik, L.J., Skjemstad, J.O.: Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. *Geoderma* 2006, **131**: 59-75.
30. Viscarra Rossel, R.A., Webster, R.: Discrimination of Australian soil horizons and classes from their visible-near infrared spectra. *European Journal of Soil Science* 2011, **62**: 637-647.
31. Wijewardane, N. K.; Ge, Y.; Morgan, C. L. S.: Prediction of soil organic and inorganic carbon at different moisture contents with dry ground VNIR: a comparative study of different approaches. *European Journal of Soil Science*, 2016, **67(5)**: 605-615.

Adres do korespondencji:

dr Jacek Niedźwiecki
Zakład Gleboznawstwa Erozji i Ochrony Gruntów
IUNG-PIB
ul. Krańcowa 8, 24-100 Puławy
tel. 81 47 86 780
e-mail: jacekn@iung.pulawy.pl

