

**Guillaume Debaene, Dorota Pikula, Jacek Niedźwiecki, Monika Kowalik**

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

SPEKTROSKOPIA BLISKIEJ PODCZERWIENI  
JAKO NARZĘDZIE PRZYDATNE W OKREŚLANIU ŻYZNOŚCI GLEB\*

**Słowa kluczowe:** żyzność gleby, nawożenie organiczne, składniki fizyczne i chemiczne, chemometria, VIS-NIR

### Wstęp

Żyzność gleb można określić jako jej zdolność do zapewnienia roślinom w odpowiednim czasie, ilości i proporcjach składników odżywczych, które umożliwią wzrost i prawidłowy rozwój roślin. Aspekt chemiczny wydajności gruntu jest zazwyczaj określany poprzez właściwości, które odnoszą się do dostępności substancji odżywczych. Decyzje dotyczące nawożenia, powinny opierać się na badaniu właściwości fizycznych i chemicznych gleb. Ocena żyzności gleby jest skomplikowana i wymaga wielu analiz, które są kosztowne i czasochłonne. Spektroskopia w paśmie widzialnym i w bliskiej podczerwieni (VIS-NIR) jest narzędziem, które umożliwia analizę wielu składników chemicznych i fizycznych gleby w tym samym czasie (15, 16). Jest ona tania, nieskomplikowana i nie wymaga stosowania dużych ilości odczynników chemicznych, z wyjątkiem próbek kalibracyjnych (15). Co więcej, VIS-NIR jest praktycznym narzędziem rolnictwa precyzyjnego, które może wspomagać decyzje nawozowe prowadzące do zwiększenia dostępności składników odżywczych dla roślin. W literaturze pojawiły się doniesienia o próbach bezpośredniego pomiaru jakości i żyzności gleby przy użyciu spektroskopii VIS-NIR (3, 33, 42, 43), ponieważ metoda ta umożliwia jednoczesne przewidywanie kilku ważnych parametrów glebowych. W artykule omówiono możliwości wykorzystania metody spektroskopii VIS-NIR na podstawie badań własnych i dostępnego piśmiennictwa do szybkiej i bezinwazyjnej oceny szeregu parametrów charakteryzujących żyzność gleb.

\* Opracowanie wykonano w ramach zadań 1.2 i 1.5 w programie wieloletnim IUNG-PIB.

## Właściwości fizyczne i chemiczne warunkujące żyzność gleb

Żyzna gleba charakteryzuje się następującymi właściwościami:

- posiada odpowiednią ilość składników pokarmowych niezbędnych do prawidłowego rozwoju roślin, tzn. azotu, fosforu i potasu;
- posiada wystarczającą ilość mikroelementów zapewniających właściwe odżywienie roślin w tym bor, chlor, kobalt, miedź, żelazo, mangan, magnez, molibden, siarkę oraz cynk;
- zawiera glebową substancję organiczną, która poprawia strukturę gleby oraz retencję wody w glebie;
- pH gleby jest odpowiednie dla większości roślin i zawiera się w przedziale od 6,0 do 6,8, jednak niektóre gatunki preferują odczyn kwaśny lub alkaliczny;
- właściwą strukturą, która umożliwia jej drenaż, aczkolwiek występują gleby o wyższej wilgotności (np. siedliska do produkcji ryżu) lub suche (np. w przypadku produkcji roślin podatnych na choroby grzybowe lub gnicie takie jak agawa);
- mnogością mikroorganizmów, które wspomagają rozwój roślin;
- często wykazuje wysoką miąższość warstwy próchnicznej.

Wiele z tych właściwości może być potencjalnie przewidywanych przy użyciu metody VIS-NIR. Zostaną one opisane w dalszej części artykułu (Wyniki i dyskusja).

### Metodyka badań

#### Schemat doświadczenia – pobieranie próbek glebowych

Zastosowanie techniki VIS-NIR do charakterystyki zmienności właściwości gleb przedstawiono na przykładzie badań odnoszących się do 30-letniego doświadczenia polowego, którego efektem było wysokie zróżnicowanie właściwości gleb w Stacji Doświadczalnej w Grabowie (16, 19, 34). Szczegółowy opis doświadczenia oraz procedury pobierania próbek zostały umieszczone we wcześniejszych publikacjach (36). Skrótowo projekt doświadczenia można opisać następująco:

Doświadczenie polowe trójczynnikowe:

**Czynnik I:** zmianowanie A – z roślinami prowadzącymi do zubożenia gleby w węgiel organiczny (ziemniak, od 2008 r. kukurydza na ziarno, pszenica ozima, jęczmień jary, kukurydza na kiszonkę) oraz zmianowanie B - z roślinami prowadzącymi do zwiększenia zawartości węgla organicznego w glebie (ziemniak, od 2008 roku – kukurydza na ziarno, pszenica ozima + poplon gorczyca, jęczmień jary + wsiewka, mieszanka koniczyny z trawami).

**Czynnik II:** (aplikacja jesienna): 5 wzrastających dawek obornika bydlęcego: 0, 20, 40, 60 i 80 t·ha<sup>-1</sup>, odpowiadające średnim dawkom azotu: 0, 98, 188, 282 i 372 kg N·ha<sup>-1</sup> w uprawie 4 gatunków roślin.

**Czynnik III:** (aplikacja jesienna): zastosowanie 4 poziomów nawożenia mineralnym azotem w dawkach odpowiednich dla poszczególnych gatunków uprawianych roślin: **N0** – brak azotu, **N1** – 170kg N·ha<sup>-1</sup> w zmianowaniu A i 275kg N·ha<sup>-1</sup> w zmianowaniu B, **N2** – 340kg N·ha<sup>-1</sup> w zmianowaniu A i 550kg N·ha<sup>-1</sup> w zmianowaniu B oraz **N3** 510kg N·ha<sup>-1</sup> w zmianowaniu A i 825 kg N·ha<sup>-1</sup> w zmianowaniu B na każde zmianowanie.

Prezentowane wyniki badań dotyczą dwóch gatunków roślin uprawnych, przy zastosowanym zmianowaniu A (z kukurydzą) i zmianowaniu B (z mieszanką koniczyna-trawy) w latach 2011-2012 (we wrześniu 2011 r. – 40 próbek i w 2012 r. 40 próbek).

Osiemdziesiąt próbek gleby zostało pobranych z warstwy ornej gleby (0-30cm) z wieloletniego doświadczenia polowego trwającego od 1980 r. w Stacji Doświadczalnej Grabów (IUNG-PIB) w Puławach na glebie o składzie granulometrycznym piasku gliniastego (klasyfikacja gleb wg PTG). Nawiązując do klasyfikacji Światowej Bazy Referencyjnej (WRB, 1998) badana gleba to *Albic Luvisol*. Próbkę gleby zostały doprowadzone do stanu powietrznie suchego i przesiane na sicie 2 mm.

W badanych próbkach przeanalizowano zawartość węgla organicznego – SOC (średnio w czterech powtórzeniach) metodą Tiurina, całkowitą zawartość azotu (N) według metody Kjeldahla oraz zawartość P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> i K<sub>2</sub>O (kationy wymienne) według metody Egnera-Riehma.

### Spektroskopia w bliskiej podczerwieni

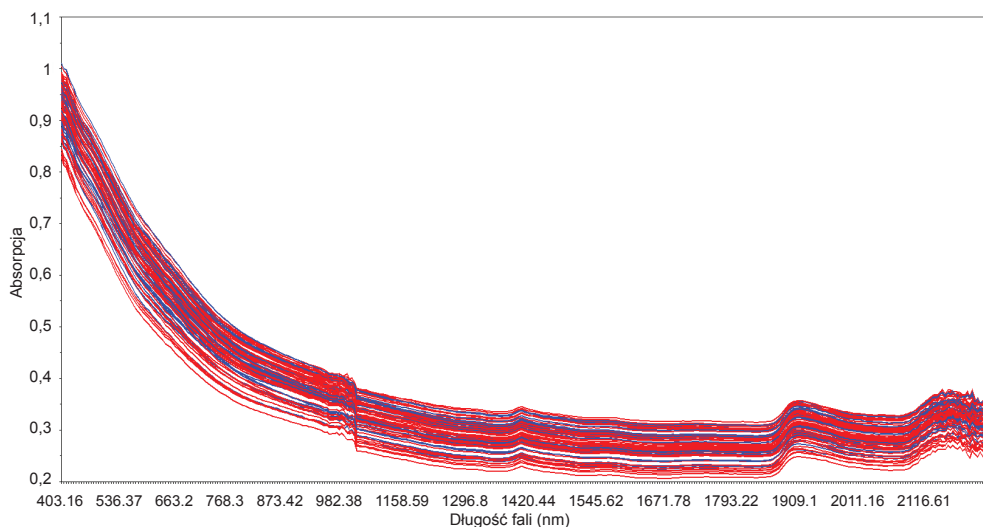
Absorbancja widma w zakresie bliskiej podczerwieni (780-2500 nm) jest zdominowana przez cząsteczki, które zawierają silne wiązania pomiędzy lekkimi atomami. W szczególności są to cząsteczki zawierające wiązania C/H, N/H lub O/H. To sprawia, iż bliska podczerwień jest szczególnie przydatna do pomiarów form węgla, azotu i stanu uwilgotnienia gleby oraz wszystkich powiązanych z tym własności. Wielkość spektrometru VIS-NIR, możliwości analizy uwilgotnionych próbek oraz zainstalowane w urządzeniu światłowody umożliwiają wykorzystanie go w terenie (11), co daje przewagę w stosunku do spektrometru średniej podczerwieni (MIR). Spektroskopia VIS-NIR wykorzystywana do analiz właściwości gleb została opisana szczegółowo w innym artykule (31). Jest to tania, szybka i wygodna metoda analizy właściwości gleb.

Analizy spektralne przeprowadzono za pomocą spektrofotometru Veris® VIS-NIR w trybie laboratoryjnym – *bench top mode* (Veris Technologie, Salina Veris, KS, USA) w zakresie widmowym 350-2220 nm z wykorzystywaniu oprogramowania spektrofotometru VERIS w wersji V1.83. Uchwyt na próbkę umieszczono na szafirowym oknie w module trzpienia, który zawierał wolframową lampę halogenową

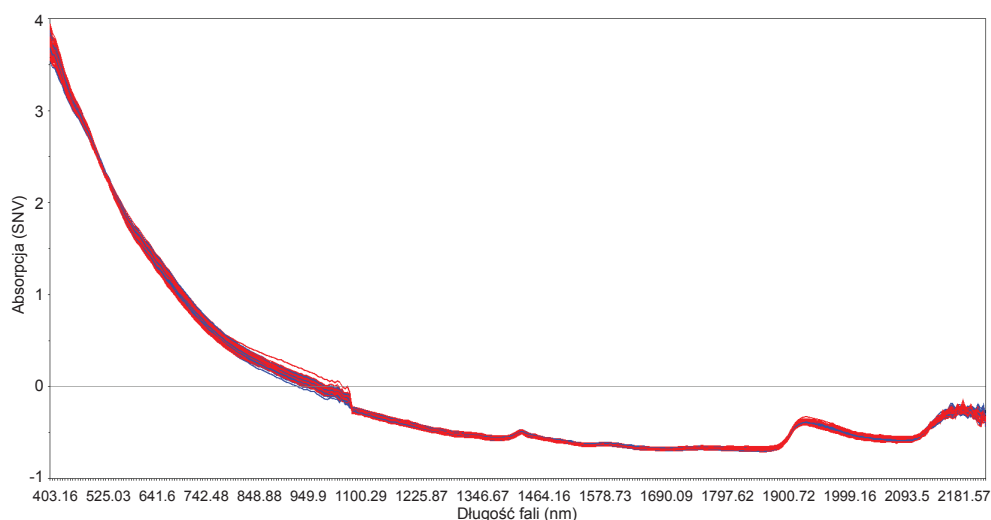
i oraz optykę światłowodową umożliwiającą transmisję danych do spektrometru. Próbki były skanowane (20 razy) i wyniki uśredniane przy użyciu oprogramowania. Dane zbierane były z rozdzielczością widmową 5 nm. Absorbancja skanowanych próbek wyrażona jest zależnością  $\log(1/R)$ , gdzie R jest współczynnikiem odbicia.

Niespecyficzność widm światła odbitego i rozproszonego spowodowana jest w dużej mierze zakłóceniami i szumami wynikającymi z nakładania się widm zróżnicowanych składników glebowych, które są ze sobą powiązane, a także tła wytwarzanego przez pracujące urządzenie. Wszystkie czynniki zakłócające muszą być odseparowane metodami matematycznymi od widma tak, aby mogły być skorelowane z konkretną właściwością gleby. Zatem, analiza spektralna gleby w zakresie VIS-NIR wymaga stosowania technik chemometrycznych i kalibracji wielowymiarowych (21).

Chemometryczną analizę danych spektralnych oraz kalibrację i walidację opracowanych modeli predykcyjnych wykonano za pomocą oprogramowania Unscrambler X<sup>®</sup> 10.3. Do określenia najlepszych związków pomiędzy właściwościami fizycznymi i chemicznymi (np. zawartość materii organicznej, skład granulometryczny) i posiadanymi danymi zastosowano metodę regresji cząstkowych najmniejszych kwadratów (PLS – *partial least square regression*). Dokładność kalibracji oceniono na podstawie współczynników determinacji  $R^2$ , ilości zmiennych ukrytych, RMSEP błędów predykcji i współczynnika RPD (*ratio of performance deviation*). Więcej informacji na temat metod chemometrycznych można znaleźć we wcześniejszych pracach (15, 21, 31).



Rys. 1. Widmo glebowe dla 80 próbek pochodzących z doświadczenia w Grabowie (kolor czerwony – próbki kalibracyjne, kolor niebieski – próbki walidacyjne)



Rys. 2. Widmo glebowe dla 80 próbek z doświadczenia w Grabowie (kolor czerwony próbki kalibracyjne, kolor niebieski próbki walidacyjne) po zastosowaniu korekty rozproszenia metodą SNV (*Standard Normal Variate*)

W przedstawionych badaniach 2/3 próbek wykorzystano do kalibracji, natomiast 1/3 do walidacji modelu predykcyjnego. Najlepsze modele wielowymiarowe zostały uzyskane przy użyciu metody SNV (*standard normal variate*) do korekcji widm. Stąd wszystkie poniższe wyniki zawierają predykcje wykorzystujące widma z zastosowaniem korekcji SNV (patrz rys. 1 i 2).

Na rysunku 1. można zauważyć, że w bliskiej podczerwieni widma nakładają się a poszczególne struktury chemiczne nie są dobrze widoczne. Wszystkie widma mają podobne kształty z najsilniejszą absorpcją w zakresie widzialnym i małymi pikami np. 1400 i 1900 nm dla wibracji cząsteczek  $H_2O$  i grup  $OH$ . Szczegółowe badania cech widm VIS-NIR gleby przeprowadzili Demattê (17) i Stenberg (40) ze współpracownikami.

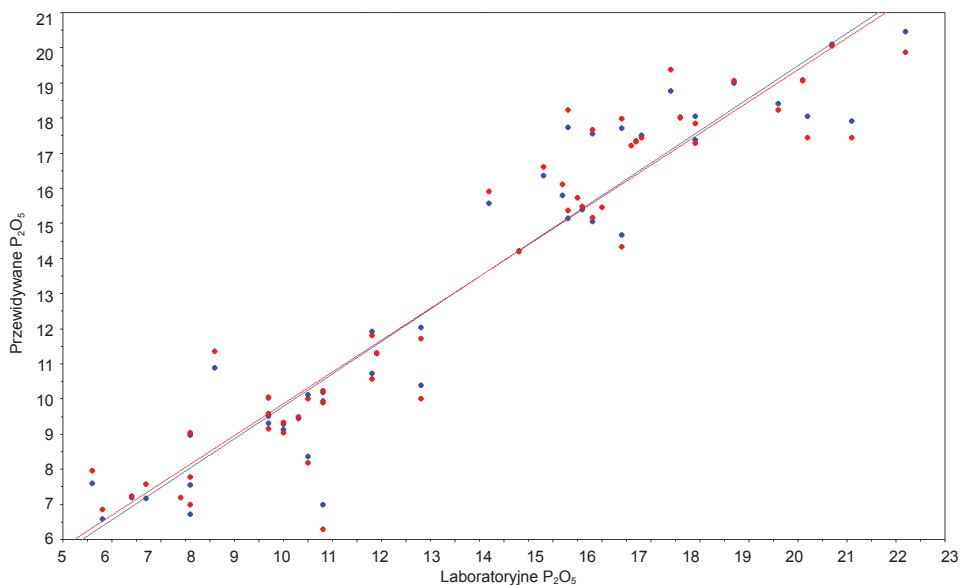
## Wyniki i dyskusja

Przeprowadzone badania wskazują na to, że na wszystkie prezentowane wyniki miał wpływ sposób uprawy roli (schemat doświadczenia), a nie tekstura gleby, ponieważ wszystkie próbki były jednorodnie (16). Naszym zdaniem, wszystkie przedstawione modele sprawdzają się w długoterminowym eksperymencie, ponieważ właściwości gleby zmieniają się w czasie, w zależności od sposobu uprawy na doświadczeniu.

### Azot, fosfor, potas (NPK)

Z badanych 3 makroelementów, jedynie N ma bezpośredni wpływ na charakterystykę spektralną w paśmie bliskiej podczerwieni. Oszacowania w przypadku N są zatem oparte na absorpcji padającego promieniowania, niezależnej od reakcji zawierającej go gleby (9). Przewidywania z udziałem VIS-NIR dotyczące zawartości P i K dokonywane są natomiast na podstawie zależności zawartości tych pierwiastków od innych właściwości gleby.

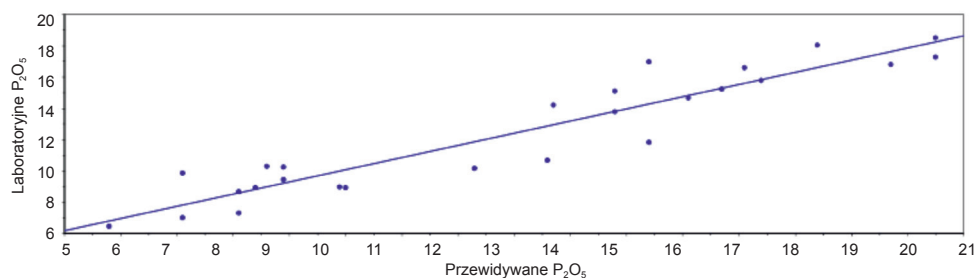
Istnieje kilka artykułów dotyczących przewidywania zawartości makroskładników z użyciem VIS-NIR (3, 15, 16, 22, 27, 30, 32). Najlepsze modele dotyczą zazwyczaj zawartości N, ale makroskładniki są dobrze przewidywane z np.  $0,6 < R^2 < 0,9$  ( $R^2$  dla zależności: wartości prognozowane vs. mierzone) i RMSE od 1 do 3% dla P i zwykle mniej niż 0,1% dla N.



Rys. 3. Zależność pomiędzy zawartościami  $P_2O_5$  (mg/100 g) mierzonymi klasyczną metodą laboratoryjną a oszacowaną na podstawie modelu PLS – linia niebieska, linia czerwona – model predykcyjny na podstawie walidacji krzyżowej, gdzie 5 próbek kalibracyjnych zostało użytych do szacowania

Prognozowanie zawartości N, P, K z użyciem VIS-NIR zostało pomyślnie przeprowadzone dla kilku typów gleby w doświadczeniach wazonowych, w doświadczeniu długoterminowym na glebie o składzie granulometrycznym piasku gliniastego (16) dla trzech rodzajów gleb z różnym sposobem użytkowania gruntów w Izraelu (zalesienie, wypas tradycyjny, wypas rolno-pasterski) (33), analizy laboratoryjne oraz

*in situ* (44) na glebach pod uprawą ryżu w Chinach. Późniejsze badania obejmują gleby o dużej wilgotności, co znacznie wpływa na kształt i cechy widma (31). Mimo to, wyniki przewidywane zostały potwierdzone w doświadczeniach laboratoryjnych na próbkach suchych dowodząc, że widma z analiz *in situ* są wiarygodne. Rysunki 3. i 4. przedstawiają wyniki regresji PLS dla przewidywanych zawartości przyswajalnego P, ekstrahowanego metodą Egnera Riehma. Statystyki modeli dla przewidywanej zawartości P w Stacji Doświadczalnej IUNG-PIB w Grabowie są bardzo dobre z  $R^2=0,88$  i  $RMSEP=1,71$ .



Rys. 4. Mierzona vs. przewidywana na podstawie PLS ze zbioru niezależnych danych zawartość P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> (mg/100 g)

Wyniki te są zgodne z literaturą cytowaną powyżej i pokazują, że zawartość N, K, P można oznaczać za pomocą spektroskopii VIS-NIR. Przedstawione modele wykazują większą odporności na niewielkie odejście od założeń modelu niż zaprezentowane w poprzedniej pracy, w której uwzględniono 40 próbek z 2008 r. (16). Jest to prawdopodobnie spowodowane zwiększeniem liczby próbek kalibracyjnych (52 vs. 30 i 35 próbek). Autorzy badali to zagadnienie poprzez zmniejszenie liczby próbek kalibracyjnych, przewidując zawartość N, P i K z użyciem 30, 35 i 40 próbek do kalibracji. Zmniejszenie to skutkowało wzrostem błędu predykcji (RMSEP) nawet w przypadku, gdy wyniki krosvalidacji (dla próbek kalibracyjnych) były bardzo dobre.

### Pierwiastki śladowe (*Trace Elements* – TE) – mikroelementy

Podobnie jak w przypadku K i P, pierwiastki śladowe (TE) nie absorbują bezpośrednio promieniowania NIR, jednakże można oszacować ich zawartości, dzięki ich współzależności z aktywnymi spektralnie składnikami gleby (np. C, N lub iłem koloidalnym). Istnieją artykuły kwestionujące możliwość oznaczania TE metodą VIS-NIR, ze względu na (1) brak ich bezpośredniej reakcji na światło i (2) ich stężenie mniejsze niż 0,1%. Według niektórych autorów 0,1% wydaje się wartością graniczną zawartości danego składnika gleby, poniżej której metoda VIS-NIR nie jest przydatna. Jednakże, jeśli mikroelementy są skorelowane w jakiś sposób z innymi

właściami gleby, metoda ta może umożliwić ich oznaczenie. Ogólna zasada jest taka, że TE można metodą VIS-NIR jedynie na poziomie 0,1% lub 1%. Z drugiej strony, nie istnieje górna granica wykrywalności TE, możliwe jest wykrywanie wysokich koncentracji TE. Wyniki niektórych badań wskazują na udane zastosowanie ww. metody do oznaczania/przewidywania zawartości pierwiastków śladowych w glebach zanieczyszczonych (37).

Zawartość mikroelementów (roślinnych składników odżywczych: Mn, Zn, Fe, B, Cu, Cl) była pomyślnie przewidywana w kontekście poprawy żyzności gleb typu Vertisol (23) z wykorzystaniem metody spektroskopii VIS-NIR z dwóch 100 m transektów Liverpool Plaine (Australia). Autorzy doszli do wniosku, że modele były istotne ze względu na wzajemne korelacje składników odżywczych z materią organiczną i/lub minerałami ilastymi, co można uznać za pomiar pośredni.

Inne badania (37) z zastosowaniem średniej i bliskiej podczerwieni w pomiarach zawartości metali w glebie, w kontekście zanieczyszczeń w skali lokalnej, wykonano w rejonie Tarnowskich Gór w Polsce. Autorzy uzyskali dobrą przewidywalność dla Fe, Zn, Cd, Pb, Cu, Ni i nieco lepsze wyniki z użyciem zakresu średniej podczerwieni. Doszli do wniosku, że wyniki te są wiarygodne tylko dlatego, że zanieczyszczenie nastąpiło kilkadziesiąt lat temu i był czas, aby pierwiastki śladowe (TE) utworzyły kompleksy z SOC i minerałami ilastymi. Elementy te mogą nie być bezpośrednio związane z żyznością gleby, jednak w pracy tej podkreślono fakt, że jeśli TE w pewien sposób tworzą kompleks (sorpcja, okluzja, wytrącanie) z materią organiczną, tlenkami żelaza lub minerałami ilastymi, metoda ta umożliwi prawidłowe oznaczenie ich zawartości. W innej pracy (35) badano przydatność spektroskopii w paśmie średniej i bliskiej podczerwieni do przewidywania zawartości mikro- i makroelementów w glebach pozyskanych w wyniku badań geochemicznych Ameryki Północnej w skali kontynentalnej. Uzyskane wyniki były lepsze w paśmie średniej niż bliskiej podczerwieni. Otrzymano stosunkowo dobre prognozy dla niektórych mikroelementów, z wyjątkiem cynku. Bor i chlor nie były badane. Autorzy zauważają, że przewidywania czasami nie były zadowalające ze względu na skrajną zmienność próbek gleby w skali kontynentalnej - próbki zostały pobrane łącznie z transektu o długości tysiąca kilometrów i niektóre właściwości gleby nie były reprezentowane dostatecznie w bazie danych spektralnych. Przyczyny takiego stanu można dopatrywać się w specyfice niektórych próbek i ich przewidywanych właściwościach wykraczających poza zakres, jaki był określany na podstawie próbek kalibracyjnych, nie mają one odpowiednika w próbkach z kalibracji. Prawdopodobnie, gdyby można było zwiększyć liczbę próbek (w bazie danych glebowych), rezultaty przewidywań byłyby lepsze.

W niedawno opublikowanym artykule (41) przedstawiono wyniki badań w innej skali (skala regionalna – Brazylia, w Europie byłaby to skala krajowa), z wykorzystaniem bogatej bazy danych różnych typów gleb. Mikroelementy: Cu, B, Fe, Zn, Mn badano z użyciem spektroskopii średniej i bliskiej podczerwieni. Wyniki przewidywań dla zawartości miedzi były zadowalające ze względu na jej dodatnią korelację z zawartością minerałów ilastych (minerały ilaste są dobrze przewidywane przez

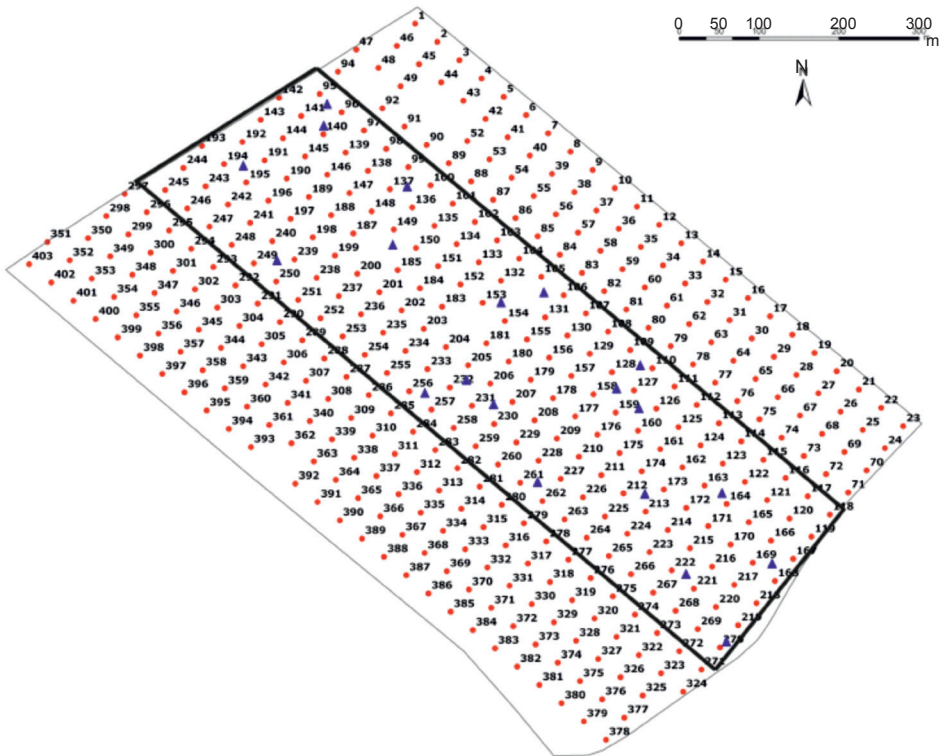
modele). Modele dla manganu zostały prawidłowo dobrane ( $0,52 < R^2 < 0,56$  i  $0,36 < RMSEP < 0,40$ ). Było to prawdopodobnie spowodowane jego istotną korelacją z miedzią, która korelowała z zawartością minerałów ilastych. Nie zawsze tak jest. Bor, który jest również istotnie skorelowany z innymi właściwościami gleby nie jest dobrze przewidywany w podczerwieni. Przewidywania dla innych mikroelementów nie były zadowalające. Warto zauważyć, że przewidywania byłyby znacznie lepsze, gdyby Fe i Mn były w postaci tlenkowej.

Na podstawie przedstawionych wyników badań można wnioskować, że spektroskopia w średniej podczerwieni jest lepszym rozwiązaniem niż spektroskopia w bliskiej podczerwieni w przypadku badania zawartości mikroelementów. Jeśli jednak mikroelementy są skorelowane z odpowiednimi własnościami gleby, zawartość niektórych z nich można skutecznie przewidywać również z użyciem proponowanej metody VIS-NIR.

### **Glebowa materia organiczna (SOM) / glebowy węgiel organiczny (SOC)**

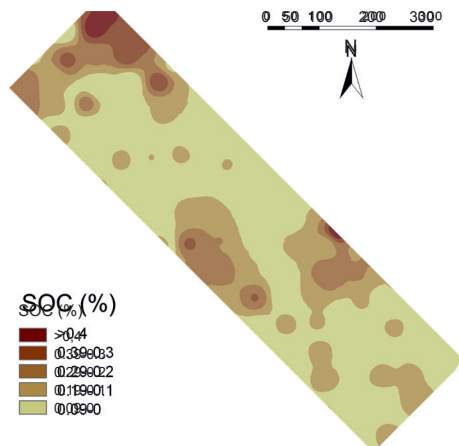
Zawartość węgla organicznego w glebie jest podstawowym czynnikiem warunkującym strukturę i utrzymanie wilgoci w glebie. Materia organiczna w glebie (SOM) i węgiel organiczny (SOC) są najczęściej przewidywanymi właściwościami gleby przy wykorzystaniu technologii VIS-NIR w skali gospodarstwa, lokalnej, regionalnej, krajowej lub skali kontynentu (2, 15, 26, 44). Możliwość przewidywania SOC dzięki spektroskopii była szeroko dyskutowana przez N i e d Ź w i e c k i e g o i zespół (31), gdzie podjęto próbę porównania metody klasycznej wyznaczenia zawartości SOC z metodą VIS-NIR (31). W literaturze podjęto kilka prób porównania metod oznaczania SOC (5, 10, 38). Metodę VIS-NIR można zwykle porównać, pod względem skuteczności, do innych metod klasycznych w skali gospodarstwa. W skali regionalnej lub większej metoda ta nie jest tak precyzyjna, jak metody laboratoryjne, jednak pod uwagę należy wziąć fakt, iż koszty badań są do 90% niższe, a czas analizy może być również zmniejszony kilkukrotnie. Zwłaszcza, gdy baza danych spektralnych już istnieje i trzeba ją tylko uzupełnić o nowe próbki do przewidywań.

Istnieje bardzo wiele artykułów dotyczących modelowania SOC/SOM w glebie dla prawie każdego z typów gleb, dla wielu różnych regionów, które ujęto m.in. w przeglądzie L a d o n i i n . (26). Rezultaty predykcji są zwykle bardzo dobre, uzyskane z dużą dokładnością. Było kilka udanych prób wykorzystania technologii *on-the-go* do celów kartograficznych (11, 14, 24). Przykład mapowania *on-the-go* przedstawiono na rys. 6. Mapa stanowi różnicę pomiędzy zawartością przewidywaną i laboratoryjną SOC dla analiz z SD Baborówko. Dwadzieścia reprezentatywnych próbek (do analiz chemicznych) wykorzystano w kalibracji (rys. 5). Walidacja została wykonana metodą *leave-one-out cross-validation*. Można przyjąć, że istnieje duża zgodność pomiędzy tradycyjnymi metodami i metodami *on-the-go* przy mapowaniu zawartości SOC. Przedstawione mapy obrazują wysoką zgodność – ponad 70% powierzchni map wykazuje różnice poniżej 0,2%.



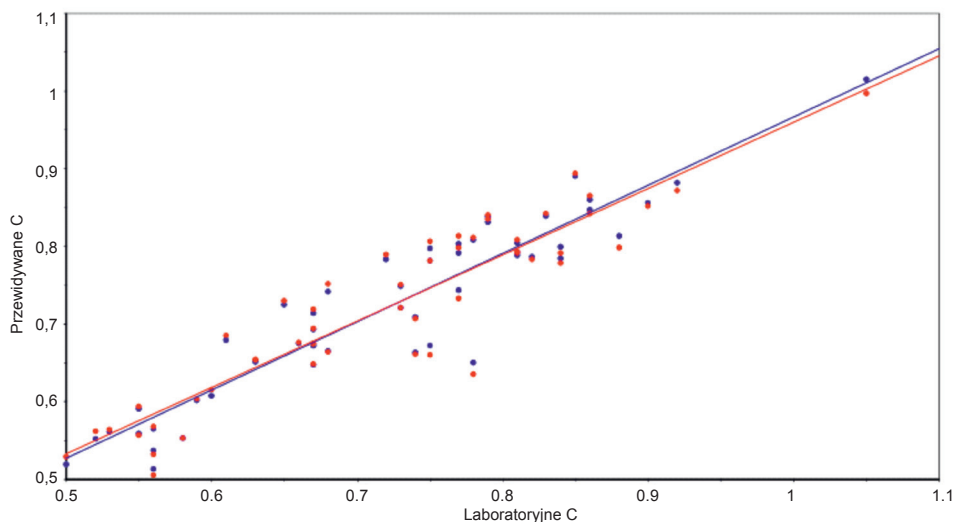
Rys. 5. Położenie 20 próbek kalibracyjnych (niebieskie trójkąty).

Siatka czerwonych punktów była niezbędna do zbudowania konwencjonalnej mapy zawartości węgla organicznego w glebie (SOC)

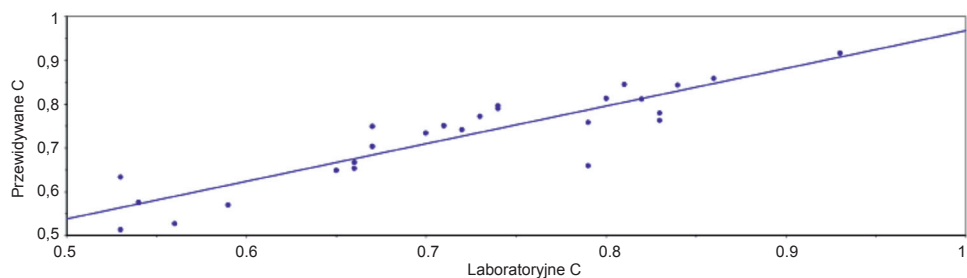


Rys. 6. Mapa różnic zawartości SOC (%) między wartościami zmierzonymi klasycznie a oszacowanymi na podstawie VIS-NIRS *on-the-go*

Technologia *on-the-go* pozwala na „z wielokrotnienie” pomiarów od momentu, gdy urządzenie przechodzi w tryb ciągły pomiarów widma glebowego. Wynikiem pomiaru są grupy tysięcy widm. Typowe widma reprezentujące każdą z grup są wybierane oraz wykorzystywane do dalszych badań i modelowania.



Rys. 7. Wartości zmierzone metodami klasycznymi vs. oszacowane – zawartość C (%) na podstawie PLS- linia niebieska, linia czerwona – model predykcyjny na podstawie walidacji krzyżowej, gdzie 5 próbek kalibracyjnych zostało użytych do szacowania



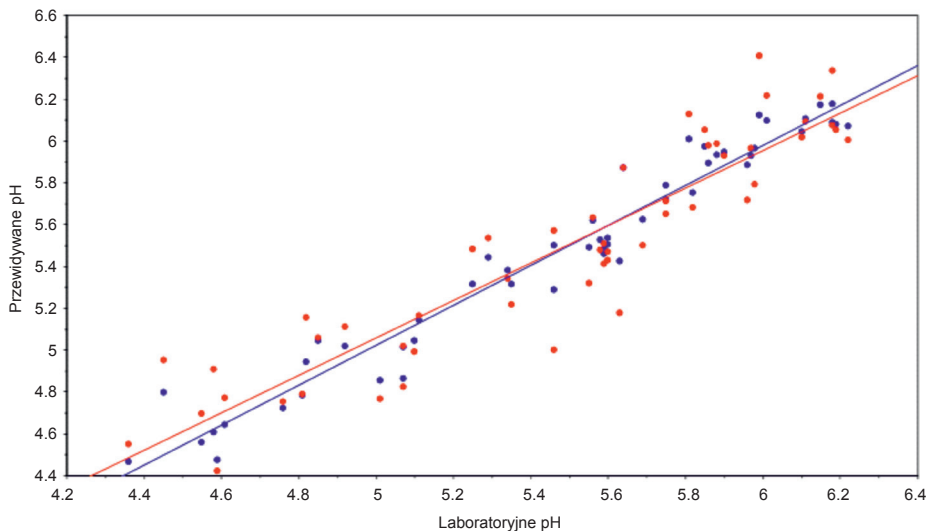
Rys. 8. Wartości zmierzone metodami klasycznymi vs. przewidywana na podstawie PLS ze zbioru niezależnych danych – zawartość C (%)

Rysunki 7. i 8. przedstawiają wyniki regresji PLS dla SOC zawierające prognozy dla badanych 80 próbek. Modelowe statystyki dla przewidywania SOC na doświadczeniu w SD Grabów (rys. 7) są bardzo dobre z  $R^2 = 0,82$  i  $RMSEP = 0,05\%$ . Ten poziom precyzji i dokładności jest zbliżony, a nawet lepszy od klasycznych metod wyznaczania SOC. Warto zauważyć, że dokładność modelowania z użyciem

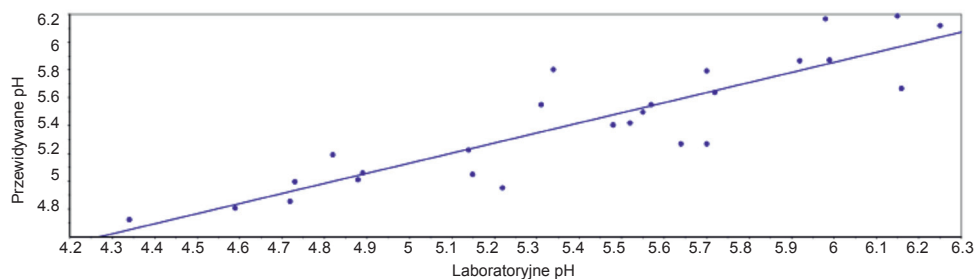
VIS-NIR zależy od zakresu wartości SOC w zbiorze danych kalibracji. Tutaj zakres zawartości SOC wynosi od 0,5% do 1,05%. To może wyjaśniać błąd modelu jedynie na poziomie 0,05% (RMSEP). Mały zakres wartości zwykle oznacza mniejszy błąd modelu (zwłaszcza, jeśli parametry modelu są dobre).

### Odczyn – pH

Na rys. 9. i 10. przedstawiono wyniki regresji PLS dla przewidywanych wartości pH. Statystyki modeli przewidywania pH w doświadczeniu w SD w Grabowie (rys. 10) są bardzo dobre z  $R^2 = 0.79$  i  $RMSEP = 0,24$ . W literaturze opisano inne badania, w których również udało się z powodzeniem przewidywać pH gleby w skali lokalnej lub regionalnej (20, 33, 44). Nie zawsze się to udaje, zwłaszcza gdy próbki pochodzą z większej powierzchni (41). Ponadto, przewidywania pH wydają się być zależne od miejsca. W swoich badaniach K u a n g i M o u a z e n (25) mogli przewidzieć wartości pH tylko w niektórych z badanych gospodarstw, ale nie udawało się to w innych gospodarstwach. Autorzy ci doszli do wniosku, że słaba zdolność przewidywania wartości pH wynika z tego, że parametr ten nie ma bezpośredniej reakcji w zakresie bliskiej podczerwieni. Również budowanie krajowej bazy danych, modelu do prognozowania pH bywa trudne z powodu różnych metod analitycznych stosowanych w oznaczaniu pH. Poprawa prognozowania pH ze spektroskopii VIS-NIR wymaga wciąż dużego nakładu pracy.

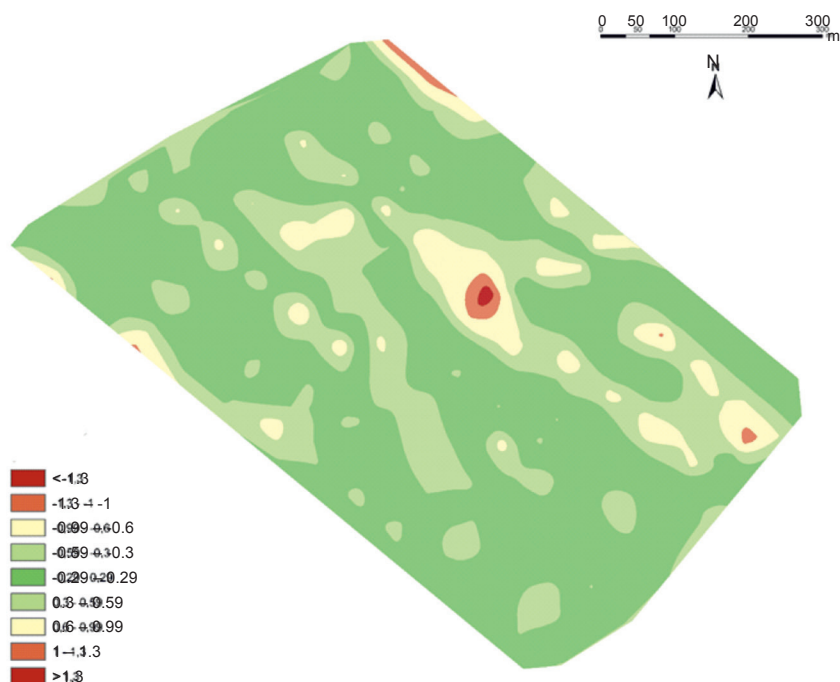


Rys. 9. Zmierzone metodami klasycznymi vs. przewidywane pH gleby na podstawie PLS- linia niebieska, linia czerwona – model predykcyjny na podstawie walidacji krzyżowej, gdzie 5 próbek kalibracyjnych zostało użytych do szacowania



Rys. 10. Wartości zmierzone metodami klasycznymi vs. przewidywane na podstawie PLS ze zbioru niezależnych danych wartości pH

Należy zauważyć, że nawet model z nie do końca optymalnie dobranymi parametrami predykcji, może dostarczyć cennych informacji, jak przedstawiono (15). Rysunek 11. obrazuje rzeczywistą wartość metody. Mapa różnic pomiędzy przewidywanymi wartościami pH a otrzymanymi w badaniach laboratoryjnych (15) wykorzystuje umiarkowanej jakości model ( $R^2 = 0,58$ ,  $RMSEP = 0,32$ ). Jak można zauważyć, sposób ten może być użyteczny w badaniach przesiewowych pH.



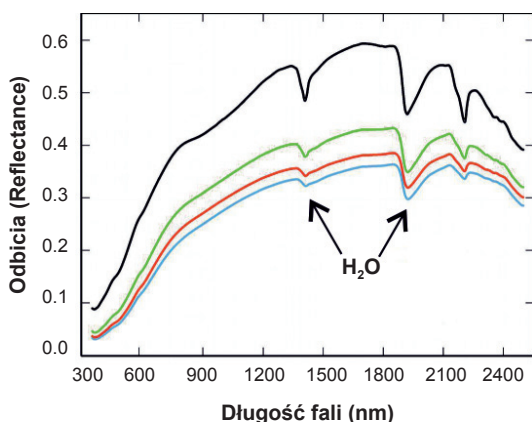
Rys. 11. Mapa różnic zawartości pH między wartościami zmierzonymi klasycznie a oszacowanymi na podstawie VIS-NIR (79 próbek). Pole (Baborówko) o powierzchni 53,6 ha

## Skład granulometryczny gleby (tekstura gleby i agregaty)

Korzystna struktura gleby jest związana z zawartością frakcji koloidalnej i agregatów glebowych. Może to tłumaczyć fakt, że frakcja koloidalna jest jedną z najczęściej przewidywanych właściwości gleby za pomocą NIR i że dołożono wszelkich starań, aby uzyskać najlepsze kalibracje. Agregaty nie są badane często, prawdopodobnie ze względu na fakt, że nie ma wielu baz danych z informacjami na temat tej właściwości gleb a analizy następują wielu trudności.

Ponieważ skład granulometryczny gleby nie zmienia się w czasie (przynajmniej nie w czasie trwania doświadczenia), próbki analizowano tylko raz (dla zmianowania upraw w 2007 r.). Wyniki składu granulometrycznego gleby, podano w publikacji Debaene i in. (16). Grupa granulometryczna badanej gleby to piasek gliniasty (wg PTG 2008). Czterdzieści badanych próbek było podobnych pod względem składu granulometrycznego, więc nie było powodu, aby budować model VIS-NIR dla tego parametru. Istnieją liczne badania, które zawierają przewidywania właściwości gleby z wykorzystaniem technologii VIS-NIR. Niektóre z opublikowanych niedawno prac dotyczą badań gleb i zawartości *in situ*, w glebach leśnych lub glebach użytkowanych rolniczo (1, 12, 13). Wszystkie prace prezentują bardzo dobrze skalibrowane modele do przewidywania zawartości minerałów ilastych, a czasem piasku i pyłu.

Przedstawiona metoda pozwala również na klasyfikację próbki gleby w zależności od jej tekstury (29). Na podstawie rys. 12 łatwo jest zrozumieć, dlaczego technika ta umożliwia grupowanie podobnych próbek, kiedy są one bardzo zróżnicowane pod tym względem. Jest to jednak przykład idealny. Czasami widma pokrywają się i należy wykorzystać metody uczenia maszynowego (np. *support vector machine* zob. (16)), które są niezbędne do rozróżnienia próbek.



Rys. 12. Uśrednione widma glebowe dla różnych klas granulometrycznych gleb.

W paśmie 1400 i 1900nm woda absorbuje światło. Wyjaśnia to, dlaczego wilgotność gleby sprawia problem przy tworzeniu bazy danych spektralnych. Podobnie, metoda ta może być stosowana do modelowania i predykcji agregatów glebowych

## Warstwa orna

Znacząca efektywność przewidywania różnych właściwości gleb za pomocą VIS-NIR wskazuje, że możliwe jest wykorzystanie technik opartych na spektrometrycznej i chemometrycznej analizie widm glebowych, do szacowania cech glebowych niezbędnych do kwalifikowania diagnostycznego poziomów glebowych w profilu glebowym. Na podstawie pozyskanych danych spektralnych, możliwe jest również pośrednie wnioskowanie o cechach gleby, nie mających bezpośredniego odzwierciedlenia w charakterystyce spektralnej. Stosunkowo niedawno wydane artykuły potwierdzają możliwość wykorzystania jej do klasyfikacji profilu glebowego (4, 6, 18). Bardzo obiecującą metodą będzie połączenie spektrometru VIS-NIR z kamerą hiperspektralną pracującą w paśmie widzialnym i bliskiej podczerwieni. Autorzy byli w stanie oznaczyć w małej skali zawartość pierwiastków w profilu glebowym (Al, Fe, Mn, C, N), Ben-Dor i in. (4), udało się również prawidłowo zaklasyfikować profile. Stwierdzono, że poprzez odpowiednie połączenie informacji otrzymanej ze spektrometru polowego, optycznej głowicy zainstalowanej na spektrometrze i dzięki dobraniu odpowiednich modeli wielowymiarowych, możliwym jest opisanie ilościowe i obiektywne całego profilu glebowego *in situ*. Wniosek jest taki, że w praktyce, widmo zawiera łączną informację o poszczególnych parametrach niezbędnych do opisu profilu glebowego.

Alternatywą dla ręcznego kopania profilu, jest zastosowanie sondy profilowej Veris. Technologia ta oferuje sondę hydrauliczną, która umożliwia pomiar spektralny w zakresie VIS-NIR w sondowanym profilu do głębokości 137 cm. Wadą jest to, że system ten jest bardzo kosztowny i skomplikowany w obsłudze.

## Mikroorganizmy

Przyszłość spektroskopii bliskiej podczerwieni wydaje się być związana z badaniami możliwości wykorzystania tej metody do przewidywania różnorodnych biologicznych właściwości gleby. Dotychczas pojawiły się już publikacje na ten temat, koncentrując się głównie na biomase, aktywności biologicznej gleby, parametrach oddychania mikroorganizmów glebowych (patrz (7)). Przegląd literatury wskazuje, że istnieją właściwości mikrobiologiczne, które można skutecznie przewidywać z użyciem spektroskopii NIR (8). Najlepsze przewidywania uzyskiwano dla węgla biomasy mikroorganizmów i potencjał denitryfikacji ( $R^2 = 0,9$ ; RMSEP odpowiednio 0,2 i 0,06).

## Wnioski

1. Spektroskopia w zakresie VIS-NIR jest metodą tanią, szybką i niewymagającą użycia szkodliwych dla środowiska odczynników chemicznych. Może być wykorzystywana do przewidywania wielu właściwości związanych z żyznością gleby.

2. Zawartość SOC i ihu są jednymi z częściej badanymi właściwościami gleby za pomocą metod spektroskopii w zakresie bliskiej podczerwieni. Uzyskane na podstawie tych badań modele prognostyczne dają bardzo dobre dopasowania tych cech glebowych.
3. Metoda może być wykorzystywana klasyfikacji profili glebowych.
4. Jest ona prawdopodobnie najlepszą alternatywą dla klasycznych metod mapowania tych właściwości, bez potrzeby pobierania setek lub tysięcy próbek.
5. Należy jednak pamiętać, iż przed dokonaniem przewidywania właściwości gleb metodami spektroskopii w podczerwieni należy zbudować dobrze dobrany model zależności pomiędzy wartościami oznaczonymi klasycznie a danymi spektralnymi, co w niektórych przypadkach może wymagać wielu próbek.

### Literatura

1. Ackerson J.P., Demattê J.A., Morgan C.L.: Predicting clay content on field-moist intact tropical soils using a dried, ground VisNIR library with external parameter orthogonalization. *Geoderma*, 2015, **259-260**: 196-204.
2. Aïchi H., Fouad Y., Walter C., Viscarra Rossel, R.A., Lili Chabaane Z., Sanaa M.: Regional predictions of soil organic carbon content from spectral reflectance measurements. *Biosystems Engineering*, 2009, **104(3)**: 442-446.
3. Askari M.S., O'Rourke S.M., Holden N.M.: Evaluation of soil quality for agricultural production using visible-near-infrared spectroscopy. *Geoderma*, 2015, **243-244**: 80-91.
4. Ben-Dor E., Heller D., Chudnovsky A.: A Novel Method of Classifying Soil Profiles in the Field using Optical Means. *Soil Science Society of America Journal*, 2008, **72(4)**: 1113.
5. Bisutti I., Hilke I., Raessler M.: Determination of total organic carbon – an overview of current methods. *Trends in Analytical Chemistry*, 2004, **23(10-11)**: 716-726.
6. Buddenbaum H., Steffens M.: The Effects of Spectral Pretreatments on Chemometric Analyses of Soil Profiles Using Laboratory Imaging Spectroscopy. *Applied and Environmental Soil Science*, 2012, **2012(6)**: 1-12.
7. Cécillon L., Barthès B.G., Gomez C., Ertlen D., Genot V., Hedde M., Stevens A., Brun J.J.: Assessment and monitoring of soil quality using near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS). *European Journal of Soil Science*, 2009, **60(5)**: 770-784.
8. 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(7)**: 1975-1979.
9. Chang C.W., Laird D.A.: Near-infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N. *Soil Science*, 2002, **167(2)**: 110-116.
10. Chatterjee A., Lal R., Wielopolski L., Martin M.Z., Ebinger M.H.: Evaluation of Different Soil Carbon Determination Methods. *Critical Reviews in Plant Sciences*, 2009, **28(3)**: 164-178.

11. Christy C.D.: Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2008, **61(1)**: 10-19.
12. Conforti M., Froio R., Matteucci G., Buttafuoco G.: Visible and near infrared spectroscopy for predicting texture in forest soil: an application in southern Italy. *iForest*, 2015, **8(3)**: 339-347.
13. Curcio D., Ciraolo G., D'Asaro F., Minacapilli M.: Prediction of Soil Texture Distributions Using VNIR-SWIR Reflectance Spectroscopy. *Procedia Environmental Sciences*, 2013, **19**: 494-503.
14. Debaene G., Niedźwiecki J., Pecio A.: On-the-go mapping of soil organic carbon content in Western Poland, 2013, 248-251.
15. 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*, 2014, **214-215**: 114-125.
16. 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. *Cienc. Inv. Agr.*, 2014, **41(1)**: 5-6.
17. Demattê J.A., Campos R.C., Alves M.C., Fiorio P.R., Nanni M.R.: Visible-NIR reflectance: a new approach on soil evaluation. *Geoderma*, 2004, **121(1-2)**: 95-112.
18. Demattê J.A., da Silva Terra F.: Spectral pedology: A new perspective on evaluation of soils along pedogenetic alterations. *Geoderma*, 2014, **217-218**: 190-200.
19. Dexter A.R., Czyż E.: Effects of soil management on the dispersibility of clay in a sandy soil. *International Agrophysics*, 2000, **14**: 269-272.
20. Dunn B.W., Beecher H.G., Batten G.D., Ciavarella S.: The potential of near infrared reflectance spectroscopy for soil analysis – A case study from the riverine plain of South Eastern. *Aust. J. Exp. Agric.*, 2002, **42(5)**: 607.
21. Esbensen K., Guyot D., Westad F., Houmoller L.P.: *Multivariate data analysis: In practice: an introduction to multivariate data analysis and experimental design* (5th edition). Oslo, Norway: CAMO, 2010.
22. He Y., Huang M., García A., Hernández A., Song H.: Prediction of soil macronutrients content using near-infrared spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture*, 2007, **58(2)**: 144-153.
23. Islam K., Singh B., Schwenke G., McBratney A.: *Evaluation of Vertosol soil fertility using ultra-violet, visible and near-infrared reflectance spectroscopy*, 2006.
24. Knadel M., Thomsen A., Greve M.H.: Multisensor on-the-go mapping of soil organic carbon content. *Soil Science Society of America Journal*, 2011, **75(5)**: 1-8.
25. Kuang B., Mouazen A.M.: Calibration of visible and near infrared spectroscopy for soil analysis at the field scale on three European farms. *European Journal of Soil Science*, 2011, **62(4)**: 629-636.
26. Ladoni M., Bahrami H.A., Alavipanah S.K., Norouzi A.A.: Estimating soil organic carbon from soil reflectance: a review. *Precision Agric.*, 2010, **11(1)**: 82-99.
27. Linker R.: Application of FTIR Spectroscopy to agricultural soil analysis.

28. Lynch J.P., St. Clair S.B.: Mineral stress: the missing link in understanding how global climate change will affect plants in real world soils. *Field Crops Research*. 2004, **90(1)**: 101-115.
29. Mouazen A.M.: Classification of soil texture classes by using soil visual near infrared spectroscopy and factorial discriminant analysis techniques, 2005.
30. Niederberger J., Todt B., Boča A., Nitschke R., Kohler M., Kühn P., Bauhus J.: Use of near-infrared spectroscopy to assess phosphorus fractions of different plant availability in forest soils. *Biogeosciences*, 2015, **12(11)**: 3415-3428.
31. Niedźwiecki J., Debaene G.: Nowoczesne chemometryczne metody oznaczania substancji organicznej w glebach. *Studia i Raporty IUNG-PIB*, 2013, **35(9)**: 199-212.
32. Nocita M., Stevens A., van Wesemael B., Aitkenhead M., Bachmann M., Barthès B., Ben Dor E., Brown D.J., Clairotte M., Csorba A., Dardenne P., Demattê J.A., Genot V., Guerrero C., Knadel M., Montanarella L., Noon C., Ramirez-Lopez L., Robertson J., Sakai H., Soriano-Disla J.M., Shepherd K.D., Stenberg B., Towett E.K., Vargas R., Wetterlind J.: Soil Spectroscopy: An Alternative to Wet Chemistry for Soil Monitoring. In: *Advances in Agronomy*. Elsevier, 2015: 139-159.
33. Paz-Kagan T., Shachak M., Zaady E., Karnieli A. A spectral soil quality index (SSQI) for characterizing soil function in areas of changed land use. *Geoderma*, 2014, **230-231**: 171-184.
34. Pikula D., Rutkowska A. Effect of leguminous crop and fertilization on soil organic carbon in 30-years field experiment. *Plant Soil Environment*, 2014, **60(11)**: 507-511.
35. Reeves J.B., Smith D.B.: The potential of mid- and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for determining major- and trace-element concentrations in soils from a geochemical survey of North America. *Applied Geochemistry*, 2009, **24(8)**: 1472-1481.
36. Rutkowska A., Pikula D.: Effect of Crop Rotation and Nitrogen Fertilization on the Quality and Quantity of Soil Organic Matter. *Soil processes and current trends in quality assessment*. Intech, 2013.
37. Siebielec G., McCarty G.W., Stuczyński T., Reeves III J.B.: Near- and Mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for measuring soil metal content. *Journal of Environment Quality*, 2004, **33**: 2056-2069.
38. Sleutel S., Neve S. de, Singier B., Hofman G.: Quantification of Organic Carbon in Soils: A Comparison of Methodologies and Assessment of the Carbon Content of Organic Matter. *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 2007, **38(19-20)**: 2647-2657.
39. St. Clair S.B., Lynch J.P.: The opening of Pandora's Box: climate change impacts on soil fertility and crop nutrition in developing countries. *Plant Soil*, 2010, **335(1-2)**: 101-115.
40. Stenberg B., Viscarra Rossel R.A., Mouazen A.M., Wetterlind J.: Visible and Near Infrared Spectroscopy in Soil Science. In: *Advances in Agronomy*. Elsevier, 2010: 163-215.
41. Terra F.S., Demattê J.A., Viscarra Rossel R.A.: Spectral libraries for quantitative analyses of tropical Brazilian soils: Comparing vis-NIR and mid-IR reflectance data. *Geoderma*, 2015, **255-256**: 81-93.
42. Vågen T.G., Shepherd K.D., Walsh M.G.: Sensing landscape level change in soil fertility following deforestation and conversion in the highlands of Madagascar using Vis-NIR spectroscopy. *Geoderma*, 2006, **133(3-4)**: 281-294.

43. Viscarra Rossel R. A., Rizzo R., Demattê J., Behrens T.: Spatial Modeling of a Soil Fertility Index using Visible–Near-Infrared Spectra and Terrain Attributes. *Soil Science Society of America Journal*, 2010, **74(4)**: 1293.
  44. Wenjun J., Zhou S., Jingyi H., Shuo L., Motta A.: In Situ Measurement of Some Soil Properties in Paddy Soil Using Visible and Near-Infrared Spectroscopy. *PLoS ONE*, 2014, **9(8)**: e105708.
- 

Adres do korespondencji:

*dr Guillaume Debaene*  
*Zakład Gleboznawstwa Erozji i Ochrony Gruntów*  
*IUNG-PIB*

*ul. Czartoryskich 8*

*24-100 Puławy*

*tel.: (81) 4786 776*

*e-mail: gdebaene@iung.pulawy.pl*

