



AgEcon SEARCH
RESEARCH IN AGRICULTURAL & APPLIED ECONOMICS

The World's Largest Open Access Agricultural & Applied Economics Digital Library

This document is discoverable and free to researchers across the globe due to the work of AgEcon Search.

Help ensure our sustainability.

Give to AgEcon Search

AgEcon Search

<http://ageconsearch.umn.edu>

aesearch@umn.edu

*Papers downloaded from **AgEcon Search** may be used for non-commercial purposes and personal study only. No other use, including posting to another Internet site, is permitted without permission from the copyright owner (not AgEcon Search), or as allowed under the provisions of Fair Use, U.S. Copyright Act, Title 17 U.S.C.*

**A REFLEKTANCIA SPEKTROSKÓPIA ALKALMAZÁSA TALAJOK
KÉMHAJTÁSÁNAK BECSLÉSÉBEN**

The Use of Reflectance Spectroscopy in the Estimation of Soil pH

KURMAI-TAKÁCS Zsófia – CSORBA Ádám

Összefoglalás

Jelen kutatást a Gödöllői-dombság területén vett talajminták pH-értékeinek és reflektancia spektroszkópiai vizsgálatára alapoztuk. A terület 160 mintavételi pontjáról származó, 1 méter mélységig, 20 cm-ként vett összesen 800 db talajmintából 220 került be a vizsgálatba. A vizsgálat célja olyan módszer kidolgozása, mely reflektancia spektroszkópiai mérések és többváltozós matematikai-statisztikai (kemometriai) eljárások együttes alkalmazásán alapszik, és lehetővé teszi talajminták pH-jának meghatározását hagyományos laboratóriumi elemzések nélkül.

A megfelelően előkészített talajminták pH értékeit a SZIE Talajtani és Agrokémiai Tanszék laboratóriumában elektrometriás módszerrel mértük meg, minden mintát két desztillált vizes és két KCl-os oldatban. Ezután ezeknek a mintáknak a spektrális reflektanciáját vizsgáltuk. A spektrális méréseket a VM Mezőgazdasági Gépesítési Intézetének Hiperspektrális Laboratóriumában az ott dolgozó munkatársak segítségével, Analytical Spectral Devices (ASD) FieldSpec 3 MAX hordozható spektrométerrel végeztük el.

A spektrális adatokban rejlő változékonyság legnagyobb hányadért (~86%) a talaj szerves anyagának

mennyiségében (vagy akár minőségében) bekövetkezett változások felelnek. Az adatokban rejlő változékonyság 8%-át kifejező 2. komponens faktorsúlydiagramján a legpozitívabb csúcsok az 1900 és a 2200 nm-nél hosszabb hullámhosszakon mutatkoznak, és valószínűsíthetően az ebben a tartományban spektrális ujjlenyomattal rendelkező ásványok (agyagok, sók), vagy szerves összetevők befolyása jelentős. A variancia 4%-át kifejező 3. komponensen a vas különböző oxidjainak, hidroxidjainak jelentős befolyását valószínűsíthető.

A talajminta analízis során a spektroszkópiai transzformációkon átesett spektrumok PLSR kemometriai elemzésével, a kalibrációs modell független validációs adathalmazzal történt tesztelése után a PLSR algoritmus alkalmazásával a desztillált vizes szuszpenzióban mért pH értékek becslhetősége megbízhatóbbnak bizonyult, mint a KCl-os értékeké.

Areflektancia spektroszkópiai mérésekkel és többváltozós matematikai-statisztikai módszerekkel talajok kémhatása nagyfokú megbízhatósággal becslhető. Ez fontos eredménynek számít, figyelembe véve azt, hogy a talajok spektrális reflektanciáját vizsgáló kutatások elsősorban a spektrumokból az anyagi tulajdonságok (pl. szerves anyag, karbonátok

mennyisége) kimutatására helyezik a hangsúlyt. A kutatás azonban bizonyította, hogy olyan, számos tényező által együttesen szabályozott kémiai paraméter, mint a pH is becsülhető megfelelő módszerek alkalmazásával.

Kulcsszavak: spektrális felvétel, kemometriai elemzés, becslés

Jel kód: Q16; Q59

Abstract

The present research is based on the reflectance spectroscopy study of the pH of soil samples taken from the Gödöllő Hills. 220 of the 800 pieces of soil samples taken from 160 sampling points by 20 cm intervals to the depth of 1 meter were included in the study. The aim of the study was to develop a method which is based on the combined application of reflectance spectroscopy and multivariate mathematical-statistical (chemometric) procedures and allows the determination of the pH of soil samples without conventional laboratory analysis.

The pH of the properly prepared soil samples was measured at the laboratory of the Department of Soil Science and Agrochemistry of Szent István University by electrometric method. Every sample was measured in two distilled water and in two KCl solutions. Then, these samples were examined by spectral reflectance. The spectral measurements were carried out at the Hyperspectral Laboratory of the Institute of Agricultural Engineering of the Ministry of Rural Development with the help of its employees using the Analytical Spectral Devices (ASD) FieldSpec 3 MAX portable spectro radiometer.

The changes in the organic matter quantity (or even in the quality) of the soil account for the largest proportion (~ 86%) of the variability of the spectral data. The most positive peaks on the factor weight diagram of the second component, which accounts for 8% of the variability, are perceived at the wavelength of 1900 and 2200 nm. It is probable that the minerals (clays, salts) and organic compounds which have spectral fingerprints in this range are of high influence. The third component, which accounts for 4% of the variance presumes the significant influence of different iron oxides and hydroxides.

During the analysis of the soil samples with the PLSR chemometric analysis of the spectra that have undergone spectroscopic transformations, after the calibration model was tested with an independent validation data set, the estimability of the pH values measured in the distilled water suspension by applying the PLSR algorithm proved to be more reliable than the KCl values.

Soil pH can be estimated with high reliability using reflectance spectroscopy measures and multivariate mathematical-statistical methods. It is an important achievement, considering that researches into the spectral reflectance of the soil focus on the detection of material properties (e.g. organic material, the amount of carbonates) from the spectra. The research has proven that chemical parameters controlled by several factors collectively, like pH, can also be estimated by using appropriate methods.

Keywords: reflectance spectroscopy, chemometric procedures, estimation

Bevezetés

A talajok vizsgálatára számos eljárás létezik. Terjedelmi korlátok miatt jelen tanulmányban ezeket nem ismertetjük, részletesen az általunk alkalmazott talajvizsgálati módszer kerül bemutatásra. Így a szakirodalom feldolgozását nem önálló fejezetben, hanem az alkalmazott módszerek mentén dolgoztuk fel, természetesen alapozva a munka során korábban áttekintett, széles körű forrásokra.

A vizsgálat során a Gödöllői-dombság területén vett mintákat felhasználva azokra a kérdésekre kerestük a választ, hogy laboratóriumi spektrális reflektancia mérések és többváltozós matematikai-statisztikai (kemometriai) módszerek együttes alkalmazása milyen hatékonysággal alkalmazható a talajok pH-jának megbecslésében. Célunk egy reflektancia spektroszkópia mérések alapján és kemometriai eljárásokon alapuló módszer kidolgozása, mely lehetővé teszi talajminták pH-jának meghatározását hagyományos laboratóriumi elemzések nélkül. Ennek előnye a hagyományos laboratóriumi vizsgálatokhoz képest az, hogy az eljárás gyors, költségghatékony, nem igényli környezetre káros kémiai anyagok alkalmazását. Munkánk célja a talajok spektrális reflektanciája és pH-ja közötti kvantitatív kapcsolatot megállapítása, lehetővé téve a létrehozott modellek kiterjesztését, így azok kémhatásának becslését csak a reflektancia mérések alapján.

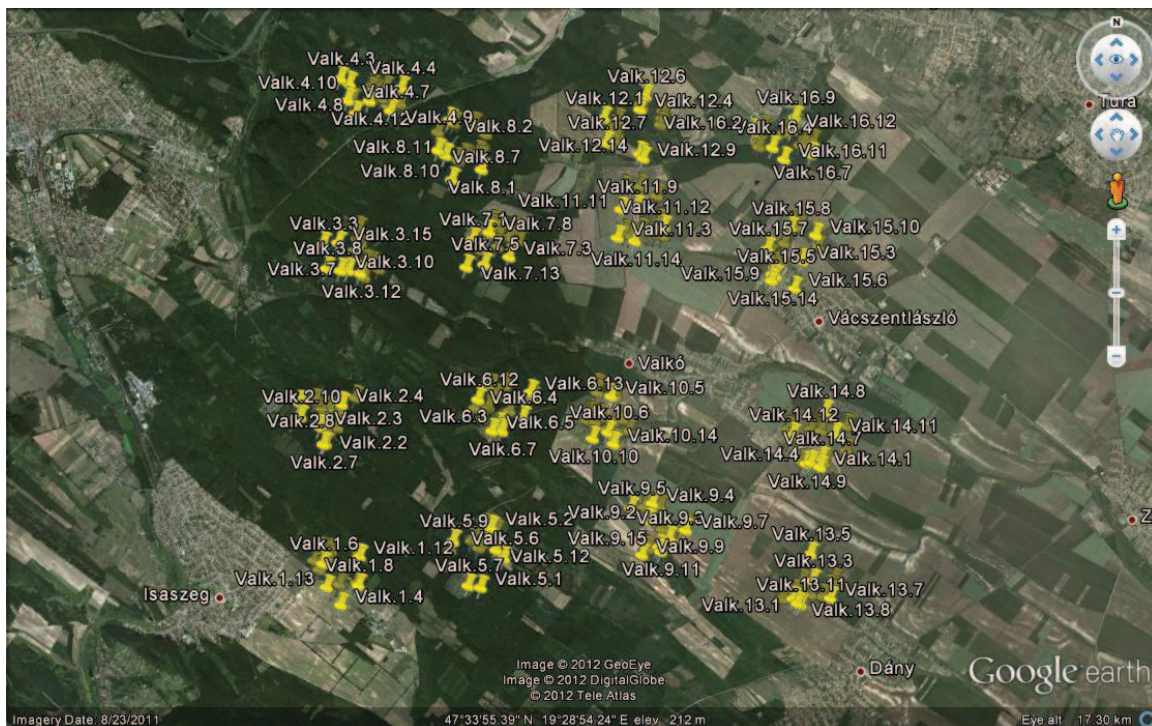
A talaj spektrális jellemzői és összetételbeli tulajdonságai közötti összefüggést elsők között CONDIT (1970), STONER és BAUMGARDNER (1981), BAUMGARDNER et al. (1985), illetve MICHÉLI et al. (1989) vizsgálta. A későbbi évek kutatásai rámutattak, hogy a tudományos és civil társadalom egyre növekvő talajinformáció-igényét a kizárólag kvalitatív vizsgálati módszerek nyújtotta lehetőségek nem elégítik ki. Felismerve, hogy a talaj reflektancia spektrumának gazdag információ-tartalma lehetővé teszi egyetlen görbéből számos ásványtani, kémiai és fizikai információ egyidejű leszűrését, a spektroszkópiai vizsgálatokba BEN-DOR és BANIN (1990; 1994) már kvantitatív módszerek bevezetését szorgalmazta. Jelenlegi kutatások bizonyítják, hogy laboratóriumi körülmények között a talajok számos szervetlen és szerves alkotója, kémiai és fizikai tulajdonságai is megbízhatóan meghatározhatók a reflektancia spektroszkópia eszközei és matematikai-statisztikai módszerek együttes alkalmazásával (VISCARRA ROSSEL et al., 2006). Ezeknek a talajparamétereknek az együttes vizsgálata lehetővé teszi a talajnak dinamikus és többkomponensű rendszerként való kezelését és értékelését is (CSORBA et al., 2012).

Anyag és módszer

Terepi adatgyűjtés

A mintaterület bemutatása

A vizsgálat során a Gödöllői-dombságban egy 10 km oldalhosszúságú négyzet került kijelölésre, figyelembe véve azt, hogy minél kevesebb lakott terület essen bele. A kiválasztott vizsgálati terület az Isaszeg-Dány vonaltól északra, a 3. főút nyomvonalától délre, Gödöllőtől keletre fekszik, különböző tájhasználatú területeket tartalmaz. A mintapontok nagyjából fele a valkói erdőszet területére esik, a másik fele mezőgazdasági művelés alá vont területeken található, mivel szempont volt, hogy a vizsgálatba különböző fajtájú talajok kerüljenek bele.



1. ábra: Talajminta-vételi pontok elhelyezkedése

A mintavételezés folyamata, gyűjtött anyagok

A talajmintavételezés 2010 nyarán indult el, a mintavételezési stratégia kidolgozása Láng Vince, a Talajtani és Agrokémiai Tanszék doktoranduszának nevéhez kapcsolódik. A mintavételezés célja egy alapvetően Afrika talajainak térképezésére alkalmazott módszer magyarországi körülmények közötti tesztelése.

A mintavételezés során alkalmazott módszer a GlobalSoilMap.net-hez kapcsolódó African Soil Information Service (AfSIS) projektben alkalmazott Land Degradation Surveillance Framework (LDSF) módszer volt, kiegészítve egyéb vizsgálatokkal (WALSCH és VAGEN, 2006).

Laboratóriumi mérések

A minták előkészítése

A 160 mintavételi pont közül random kiválasztott 44 mintavételi helyről származó 220 minta pH értékeit mértük meg a Szent István Egyetem Talajtani és Agrokémiai Tanszékének laboratóriumában, elektrometriás pH mérési módszerrel.

Laboratóriumi pH mérések

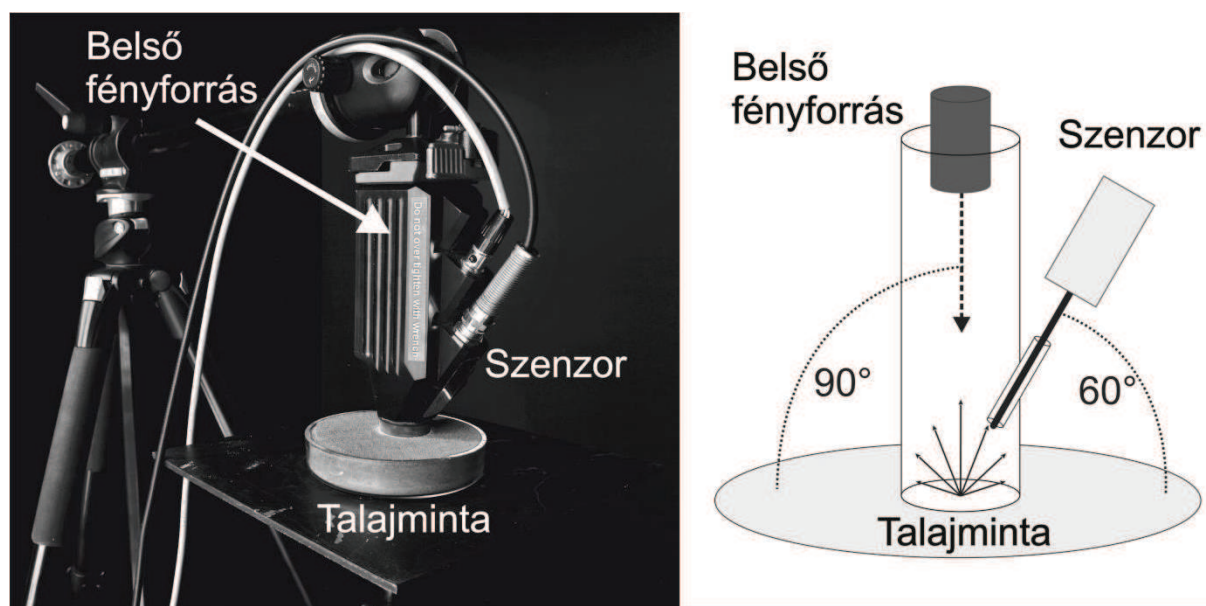
A mérés során az elektrometriás elven működő Consort P501 műszert alkalmaztuk 220 db talajminta kémhatásának meghatározásához. A mérőműszer az ismeretlen hidrónium-koncentrációjú talajsuszpenzióból és az ismert (pH 4,0) hidróniumion-töménységű normál elektródból alkotott elem feszültségét méri meg (STEFANOVITS, 1981).

A mintákból a 2-2 desztillált vizes és KCl-os mérést Consort P501 elektrometriás pH-mérő műszerrel végeztük el. A mérési eredmények duplikátum értékeit átlagolva használtuk fel.

Spektrális mérések

A gyűjtött 800 db talajmintából 220 db szolgált a reflektancia mérések alapjául. A VIS-NIR reflektancia spektroszkópiai méréseket a Vidékfejlesztési Minisztérium Mezőgazdasági

Gépesítési Intézetének Hiperspektrális Laboratóriumában az Analytical Spectral Devices (ASD) FieldSpec 3 MAX hordozható spektroradiométerrel végeztük el. A műszera 350 és 2500 nm közötti spektrális tartományban készít méréseket. A mérések során a talajminták kétirányú reflektancia spektrumát rögzítettük az ASD High Intensity Contact Probe, a mintával közvetlen érintkezést lehetővé tévő szondával, így a méréseket negatívan befolyásoló környezeti tényezők hatása (pl. légköri pára, por) minimálisra csökkent. Ezt a szenzort használva egy mérés alkalmával 10 mm átmérőjű területről kaptunk spektrális információt. Minden talajmintáról 4 ponton mért, egyenként 25 mérés átlagából számított reflektancia spektrum került rögzítésre. Az ASD High Intensity Contact Probe alkalmazása esetén a mérési elrendezés a **2. ábrán** bemutatottak szerint valósult meg.



2. ábra: Analytical Spectral Devices (ASD) FieldSpec 3 MAX hordozható spektroradiométer

Többváltozós elemzések

Főkomponens analízis

A kemometriai elemzések előtt szükségesnek tartottuk, hogy a spektrális adatokban rejlő információról átfogó képet kapjunk. Ennek érdekében főkomponens analízist (principal component analysis – PCA) végeztünk el az adatsoron.

Dimenziócsökkentő módszerek alkalmazása vált szükségessé az adatok jellege miatt. Egy adatsor annyi dimenzióval bír, ahány változót tartalmaz. A reflektancia spektrumok esetén ez a szám 2151, így a rögzített adathalmaz kifejezetten nagy dimenzionalitásúnak tekinthető. A PCA eljárás az adatsor dimenzionalitását csökkenti úgynevezett főkomponensek létrehozásával, melyek közül az első néhány kifejezi az adatokban rejlő változékonyság legnagyobb hányadát.

Az analízis egyik legfontosabb eredménye a faktorsúly diagramok létrehozása. Ezek a diagramok megmutatják, hogy az adott főkomponenseken mely hullámhosszak játszanak jelentős szerepet. Amennyiben a diagramokon mutatkozó információhoz anyagi tulajdonságokat, vagy akár folyamatokat tudunk társítani, képet kaphatunk a spektrális mérések alapján legfontosabbnak bizonyuló talajfolyamatokról.

A spektrális adatok elő-feldolgozása, transzformációja

A kétirányú reflektancia mérések során, eltérően a diffúz reflektancia mérésektől, a minták által spekulárisan és diffúz módon visszavert sugárzás is részt vesz a spektrumok kialakításában. Ez a két fajta módon visszavert – a teljes reflektanciát kialakító – sugárzás mértéke, és hatása nagyban függ a szemcsemérettől, a minta szerkezetétől, a felszín mikrodomborzatától, illetve egyéb más, a felszín állapotát leíró jellemzőktől is. Példának okáért a szemcseméret különbözőségekből adódó szóródási jelenségek, továbbá nem lineáris folyamatok, műszeres zaj és további nagyszámú ismert, vagy akár ismeretlen forrásból származó, a létrehozandó modellek megbízhatóságát negatívan befolyásoló tényezőt kell figyelembe vennünk. Mindebből következik, hogy a kétirányú reflektancia mérések során számos olyan folyamattal és jelenséggel kell számolni, melyeket az adatok kiértékelésénél figyelembe kell venni, és hatásukat spektrum-transzformációs technikákkal kiszűrni, vagy a lehetőségekhez képest csökkenteni kell (SELITTO et al., 2009).

Az említett tényezőket figyelembe véve, annak érdekében, hogy a modellek robusztusságát növeljük – a VIS-NIR reflektancia spektroszkópia és kemometriai módszerek együttes alkalmazását előtérbe helyező korábbi kutatások tapasztalatait alapul véve (VISCARRAROSSEL et al., 2006)– különböző spektrum-transzformációkat hajtottunk végre a spektrumokon.

Első lépésként a reflektancia spektrumok abszorbanciává számítását végeztük el a spektrumokban jelenlévő nem-lineáris jelenségek hatásának csökkentése végett a következő egyenlet szerint:

$$\text{Abszorbancia} = \log(1/\text{Reflektancia})$$

A transzformáció elvégzését a Beer-Lambert törvény indokolja, mely kimondja, hogy egyrészt a minta által reflektált és az abszorbeált sugárzás között logaritmikus összefüggés van, másrészt, hogy a vizsgált minta által abszorbeált energia mennyisége közvetlen és lineáris kapcsolatban van az összetevőinek koncentrációja között. Matematikailag kifejezve:

$$A_{\lambda} = \varepsilon_{\lambda} b C$$

ahol A_{λ} a minta abszorbancia értéke meghatározott hullámhosszon (λ);

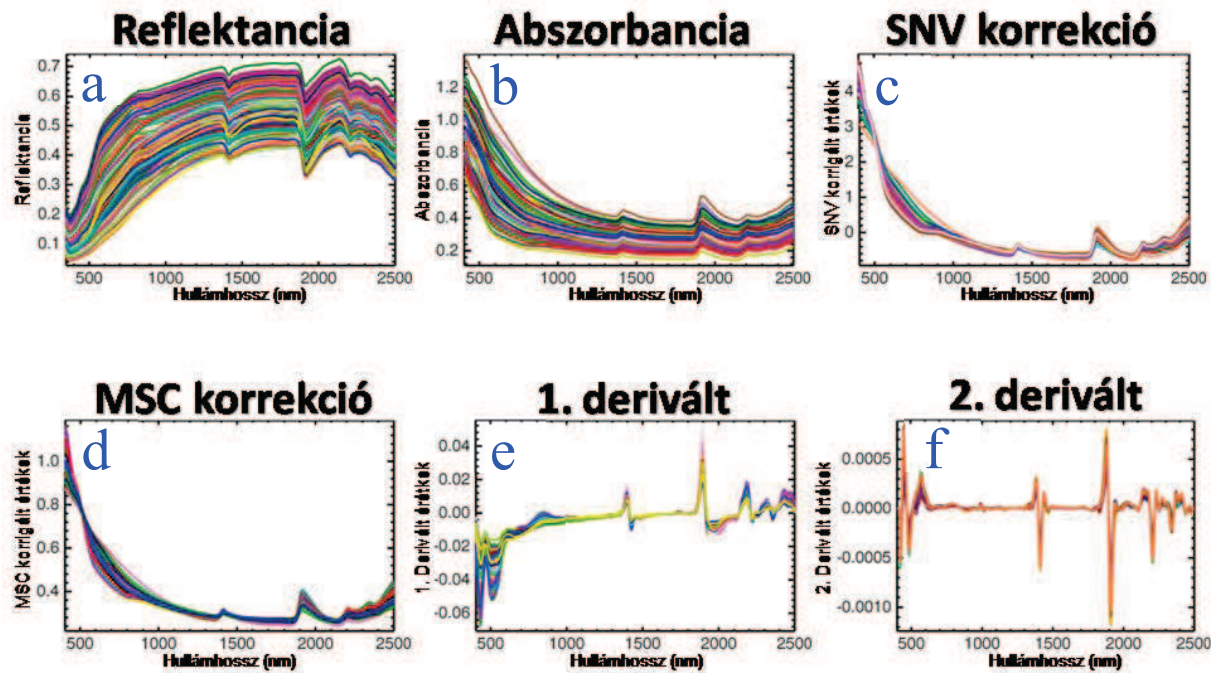
ε_{λ} az anyag abszorpciós együtthatója az adott hullámhosszon (λ);

b a sugárzás által a mintában megtett út hossza;

C az összetevő koncentrációja.

Következő lépésként az abszorbancia spektrumokon Multiplicative Scatter Correction (MSC) és Standard Normal Variate (SNV) transzformációt végeztük el. Mindkét eljárásnak az interferenciák, illetve a hullámhossztól függő szóródási jelenségek hatásának csökkentésében van nagy jelentősége. Az SNV módszerrel korrigált spektrumokon elvégeztük az első, illetve másodrendű deriváltak kiszámítását. E lépésnek elsősorban a zajcsökkentésben, illetve az átfedő abszorpciós sávok felbontásában van jelentős szerepe (VISCARRA ROSSEL, 2008).

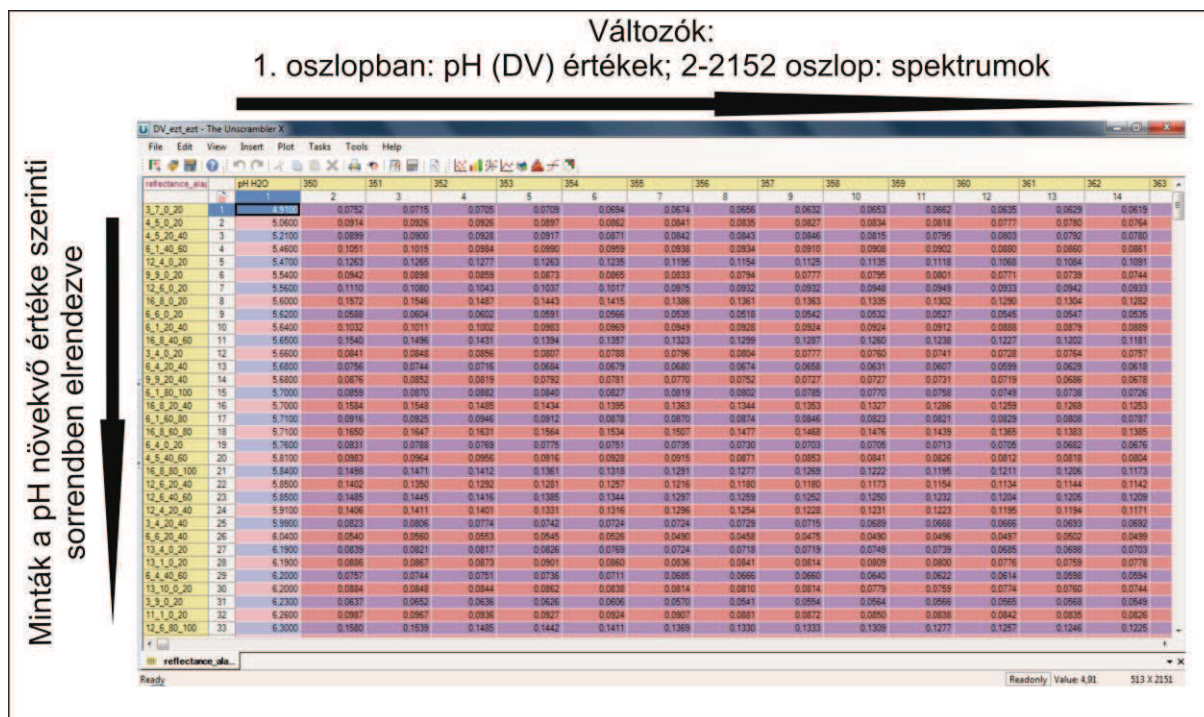
Ezeket a **3. ábrán** látható spektrumokat használtuk a kemometriai elemzésekhez, és teszteltük az egyes transzformációs eljárások – a prediktív modellek robusztusságát befolyásoló – hatásait, melyek eredményét a **1. táblázatban** tüntettük fel.



3. ábra: A kutatás keretében felvett (a.) reflektancia spektrumok, és azok spektroszkópiai transzformációi: (b.) abszorbancia, (c.) abszorbancia + MSC korrekció, (d.) abszorbancia + SNV korrekció, (e.) abszorbancia + SNV + 1. deriváltak, (f.) abszorbancia + SNV korrekció + 2. deriváltak

Többváltozós elemzések

A kemometriai elemzések megkezdése előtt a talajminták adatait tartalmazó adatsort egy kalibrációs és egy teszt csoportra bontottuk. Az értékeket pH szerint növekvő sorrendbe rendeztük, a páros számú minták a kalibrációs, míg a páratlanok a teszt csoportba kerültek. Így biztosítottuk, hogy mindkét adatsorban a talajparaméter-értékek teljes tartománya reprezentálva legyen. A többváltozós modellezéshez és a paraméterek becsléséhez a – kifejezetten a részleges legkisebb négyzetek módszerére (partial least squares regression – továbbiakban PLSR algoritmusra) kihegyezett – The Unscrambler (CAMO software) programot alkalmaztuk (4. ábra).



4. ábra: Az adatsor elrendezése az Unscrambler szoftverben

A Partial Least Squares Regression módszer

A kemometriai gyakorlatban a PLSR az egyik legnépszerűbb modellezési eljárás, és a spektrális adatok kvantitatív kiértékelésében leggyakrabban alkalmazott módszerek közé tartozik (DUCKWORTH, 1998). A PLSR olyan esetekben alkalmazható a leghatékonyabban prediktív modellek létrehozására, amikor a független (X) változók (a hullámhosszokon mutató spektrális értékek) száma nagy, és a közöttük jelentős multikolinearitás mutatkozik. Az eljárás szoros rokonságban áll a főkomponens regresszióval (principal component regression – PCR) módszerrel. Ám, míg a PCR a spektrális adatokon elvégzett főkomponens analízis eredményeképpen kapott faktorértékeket korrelálja a talajparaméter értékekhez, a PLSR algoritmus két adatsort egyszerre a felhasználva a spektrális adatok (X változók) és a talajparaméterek (Y változók) közötti kovariancia maximalizálására törekszik. Egy PLSR modell megalkotásánál annak a néhány PLSR faktornak a definiálása a cél, mely mind a független X, és mind a függő Y változóknak jelen lévő változékonyság legnagyobb hányadát kifejezi. A PLSR eljárás az X és Y változókat faktor értékekké (T) és faktorsúlyokká (P és q) bontja szét a következők szerint:

$$X=TP+E$$

$$Y=Tq+f$$

A két mátrix szétbontása egyidejűleg történik úgy, hogy az első néhány faktor kifejezze a X és Y változóknak jelen lévő változékonyság legnagyobb hányadát. A visszamaradó faktorok figyelmen kívül hagyhatóak, ugyanis főként a képletben szereplő E és f által jelzett zajt fejezik ki. A PLSR szétbontás eredményeképpen kapott mátrixok és vektorok jelentősen alacsonyabb dimenzionalitással bírnak, mint az eredeti X és Y. Amennyiben olyan talajminta összetételének a meghatározása a cél, melyről csak spektrális adat áll rendelkezésre, a vizsgált talajparaméter becslése az új spektrum PLSR modellbe integrálásával, a mintára kiszámított faktorsúly és faktorérték bilineáris kombinációjával végezhető el.

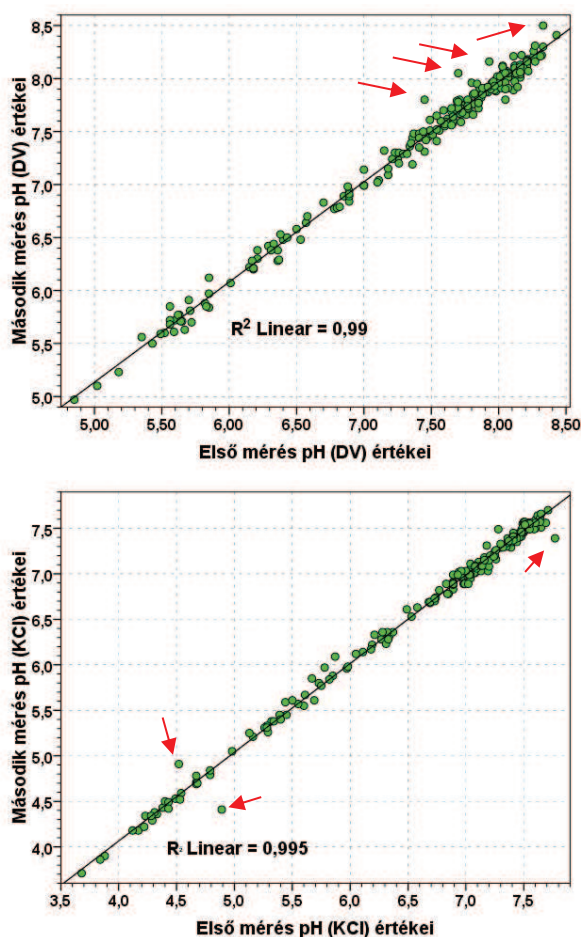
Kemometriai elemzés: Az optimális PLSR kalibrációs modell kiválasztása és tesztelése

Annak érdekében, hogy a modellezés során meghatározzuk azoknak a faktoroknak a számát, melyek a vizsgálat szempontjából fontos információt hordoznak, a „leave-one-out” keresztvalidáció módszerét alkalmaztuk. Az elemzést 20faktor vizsgálatában maximalizáltuk, és azt a modellt választottuk ki, mely legalacsonyabb közepes négyzetes eltérés (root mean squared error – továbbiakban RMSE), valamint legmagasabb R^2 értékét biztosította. A megalkotott modell tesztelése a validációs csoport adataival történt.

Eredmények

A laboratóriumi pH mérések statisztikai elemzése

A desztillált vizes és KCl-os pH méréseket is két ismétlésben végeztük. Azoknak a mintáknak az esetében, ahol nagy eltérés mutatkozott a két mérési eredmény között (piros nyíllal jelölve) a mérési hibák kiküszöbölésére megismételtük a mérést és az átlaguk került feltüntetésre. (5. ábra).



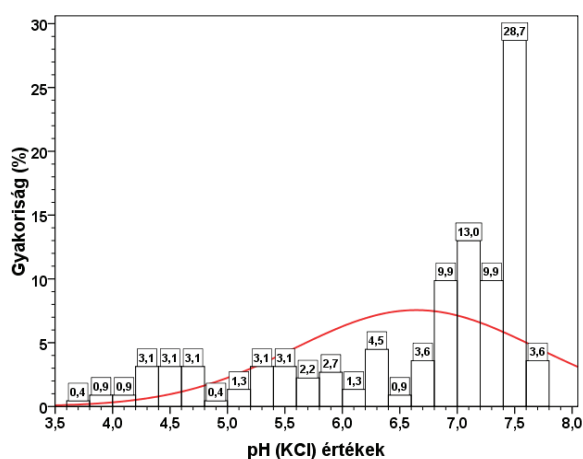
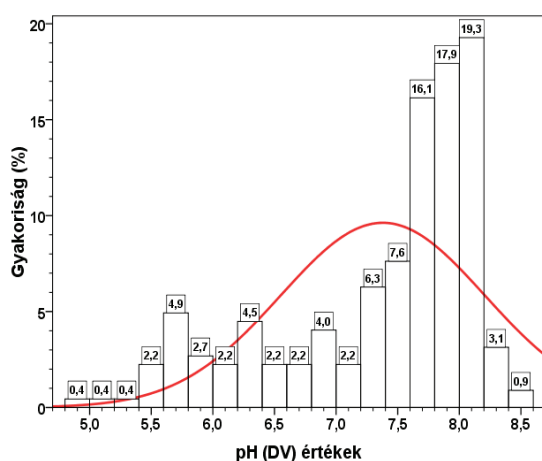
5. ábra: A desztillált vizes és KCl-os pH mérések eredményei

A 220 minta desztillált vizes pH értékei 4,91 és 8,42 között, míg a KCl-os értékek 3,7 és 7,71 közötti tartományt ölelnek fel. (1. táblázat)

1. táblázat: A minták pH értékeinek statisztikai vizsgálati eredményei

	Mintaszám	Terjedelem	Minimum	Maximum	Átlag
pH (DV)	220	3,51	4,91	8,42	7,37
pH (KCl)	220	4,01	3,70	7,71	6,64

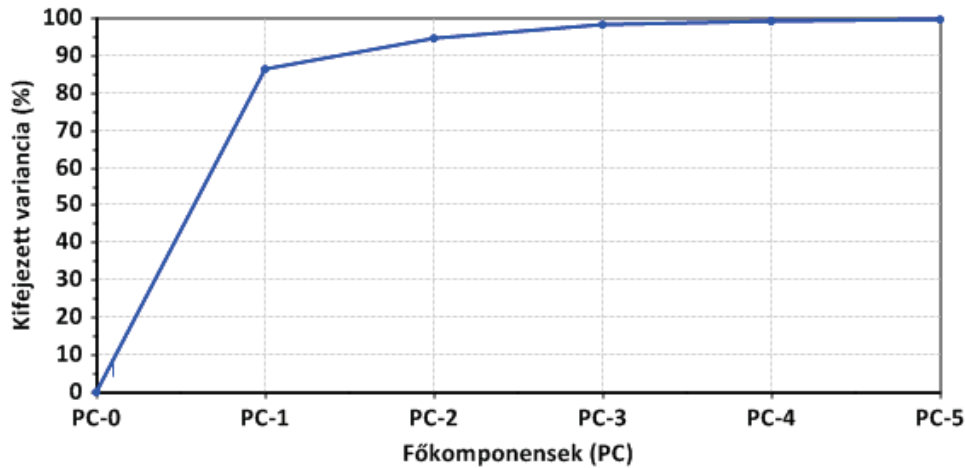
A pH hisztogramjaiból leolvasható, hogy alacsony pH értéket ($\text{pH(DV)} < 5,5$; $\text{pH(KCl)} < 4,3$) a minták elenyésző hányada mutat. Közepes pH értékeket ($5,5 < \text{pH(DV)} < 7,3$; $4,3 < \text{pH(KCl)} < 6,5$) lényegesen több minta képvisel. A diagramról egyértelműen kitűnik, hogy a legtöbb minta a magasabb pH tartományba ($7,3 < \text{pH(DV)}$; $6,5 < \text{pH(KCl)}$) tartozik, mely mérési eredmény kiváló összhangban van a Gödöllői-dombság területére jellemző, alapvetően karbonátos alapkőzetten (elsősorban löszön) végbemenő talajképződéssel. A pH értékek eloszlása desztillált vizes mérések esetében a normál eloszláshoz közelinek mondható, míg a KCl-os oldatban mért értékek esetében az átlag eltolódik a magasabb értékek felé.

**6. ábra:** pH értékek százalékos megoszlása és a normál eloszlási referencia görbe

A főkomponens analízis eredménye

A spektrális adatokon elvégzett PCA által létrehozott főkomponensek közül az első az adatokban lévő változékonyságnak 86,2, a második 7,8, míg a harmadik 4%-át fejezi ki (**7. ábra**). A többi komponens által leírt 2% zajnak tekinthető. Ez azt jelenti, hogy ha meghatározzuk azokat a hullámhosszakat vagy hullámhossz tartományokat, melyek

jelentősnek bizonyulnak a komponenseken, és ezekhez a spektrális tulajdonságokhoz talajalkotókat, vagy akár talajfolyamatokat tudunk társítani, lehetővé válik előzetes információkat leszűrni azokról a folyamatokról, melyek a spektrális adatok alapján dominánsnak bizonyulnak. Ezeknek az információknak a leszűrésére a PCA algoritmus által létrehozott főkomponens faktordiagramok használhatók fel.

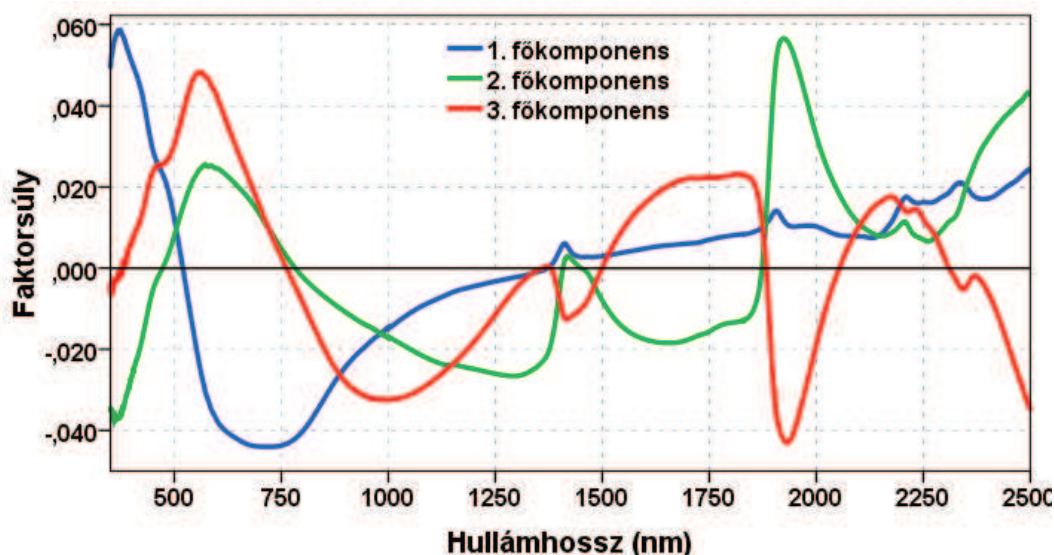


7. ábra: A spektrális adatokon elvégzett PCA során létrehozott főkomponensek által kifejezett variancia (%)

A teljes variancia 86%-át magyarázó első főkomponensen magas értékek mutatkoznak a 350 - ~500 nm közötti, illetve nagyon alacsonyak ~500~1100-es régióban. Ezt a jelenséget a talaj szerves anyaga okozza (STEVENS et al., 2010), így elmondható, hogy a spektrális adatokban jelen lévő változékonyság túlnyomó hányadéért ennek a talajparaméternek a mennyiségében (vagy akár minőségében) bekövetkező változások felelnek. Kevésbé domináns pozitív csúcsok jelentkeznek a kémiailag, és fizikailag kötött víz elnyelése által létrehozott 1400 és 1900, agyagásványokhoz kapcsolható 2200, és a karbonátoknak tulajdonítható 2340 nm körüli tartományban.

Az adatokban rejlő változékonyság 8%-át kifejező 2. komponens faktorsúly-diagramján a legpozitívabb csúcsok az 1900 és a 2200 nm-nél hosszabb hullámhosszakon mutatkoznak. Ezek a tartományok a molekuláris rezgések régiói, és valószínűsíthetően az ebben a tartományban spektrális ujjenyomattal rendelkező ásványok (agyagok, sók), vagy szerves összetevők befolyása jelentős. A látható tartományban megfigyelhető, 500 és 720 nm közötti pozitív csúcs interpretációja bizonytalan, indikálhatja bizonyos vas-oxidok, de a szerves anyag jelentőségét is.

A variancia 4%-át kifejező 3. komponensen a látható és a közeli infravörös tartomány rövidebb hullámhosszain mutatkoznak a legpozitívabb és a legnegatívabb értékek is. A faktorsúly diagramot összevetve ásványok reflektancia spektrumait tartalmazó ábrával, és megfigyelve a ~490 és ~620 nm-nél mutatkozó keskeny pozitív, illetve az 1000 nm környékén megfigyelhető széles jelenségeket, megállapítható a vas különböző oxidjainak, hidroxidjainak jelentős befolyása ezen a komponensen.



8. ábra: Az első főkomponens faktorsúly értékei

A PCA-t az előzetes tájékozódás érdekében végeztük el. A levont következtetések a szubjektív megítélés bizonytalanságát is magában foglalhatják. Mindemellett az eredmények lehetséges kiindulópontjai lehetnek egy (vagy több), a spektrális adatokra kihegyezett vizsgálatnak is.

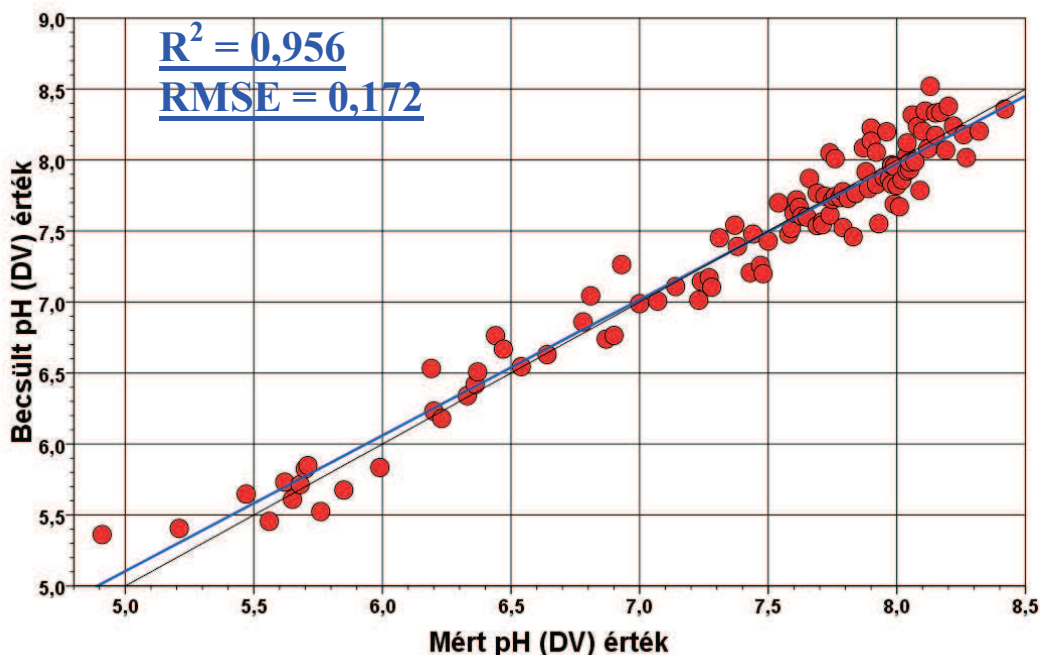
A PLSR modellezés eredménye

A kemometriai elemzést minden egyes, a 3. ábrán bemutatott spektroszkópai transzformációkon átesett spektrumokon is elvégeztük. Az egyes transzformációk modellre gyakorolt hatása (a vizsgálatba bevont faktorok száma, R^2 és RMSE értékek) a 2. táblázatban látható. A táblázatban a kalibrációs eljárás eredményeképpen kapott statisztikai értékeket tüntettük fel, és ezek alapján választottuk ki további elemzésre az abszorbancia számítás (log(1/Reflektancia)), SNV korrekción átesett spektrumokat, melyeken az elsőrendű deriváltak kiszámítása került elvégzésre (spektrumok a 3/e ábrán).

2. táblázat: A spektroszkópai transzformációk modellre gyakorolt hatása

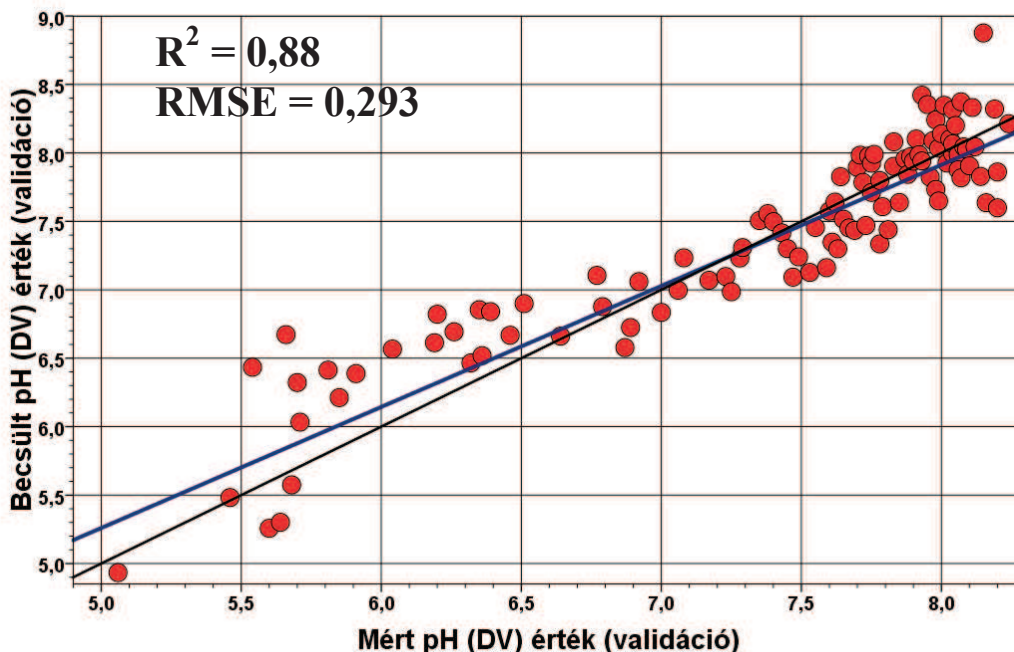
	Reflektancia		Abszorbancia		Abszorbancia + MSC		Abszorbancia + SNV		Abszorbancia + SNV + 1. derivált		Abszorbancia + SNV + 2. derivált	
	pH(DV)	pH(KCl)	pH(DV)	pH(KCl)	pH(DV)	pH(KCl)	pH(DV)	pH(KCl)	pH(DV)	pH(KCl)	pH(DV)	pH(KCl)
Faktorok száma (2)	12	13	9	14	15	9	12	9	14	15	11	9
R^2	0,81	0,821	0,815	0,702	0,85	0,68	0,855	0,72	0,956	0,87	0,717	0,81
RMS Error	0,23	0,42	0,27	0,43	0,19	0,52	0,18	0,39	0,172	0,37	0,43	0,41

A PLSR kalibráció eredménye a fent említett transzformációkon átesett spektrális adatokon a 9. ábrán látható. A diagram vízszintes tengelyén a laboratóriumban mért, míg a függőleges tengelyen a modell által becsült értékek szerepelnek. A lineáris korreláció igen magasnak ($R^2=0,956$), míg a közepes négyzetes eltérés (RMSE = 0,172) értéke alacsonynak mondható.



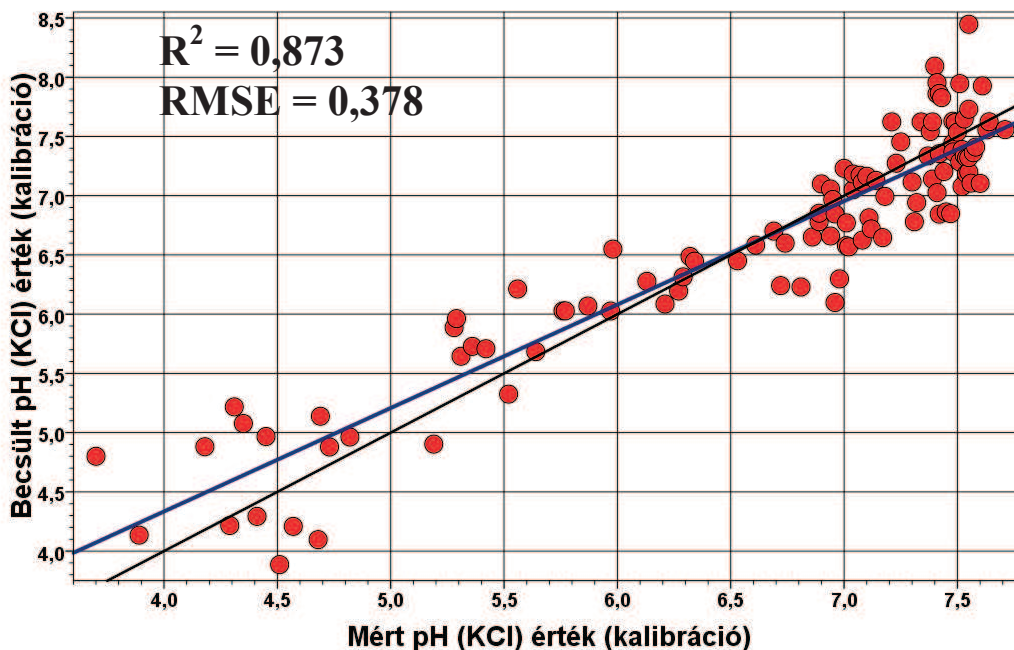
9. ábra: PLSR kalibráció eredménye desztillált vizes pH értékekkel

A modellt a független validációs adatsor spektrumaival teszteltük. (10. ábra). A modell prediktív kapacitása alacsonyabb ($R^2=0,88$), és a megbízhatóságát megadó közepes négyzetes eltérés értéke is magasabb ($RMSE=0,293$), mint a kalibrációs csoport adatai alapján származtatott eredmények. Ez nem meglepő, hiszen a kalibrációs folyamat során a modell önmagát ugyanazzal az adatokkal ellenőrzi, amivel a modellt kalibráltuk, míg a validáció során egy, a kalibrációs csoporttól független adatsorral ellenőrizzük a modell teljesítményét. Azáltal, hogy ez az eredmény egy független adatsorra vonatkozik, feltételezhető, hogy – a kutatás folytatásaként vizsgálendő – ismeretlen pH-jú minták esetében, melyeknek csak a spektrális reflektanciája ismert, a validáció során számított R^2 és $RMSE$ értékeke érvényesek, és ilyen megbízhatósággal becsülhető a minták kémhatása.



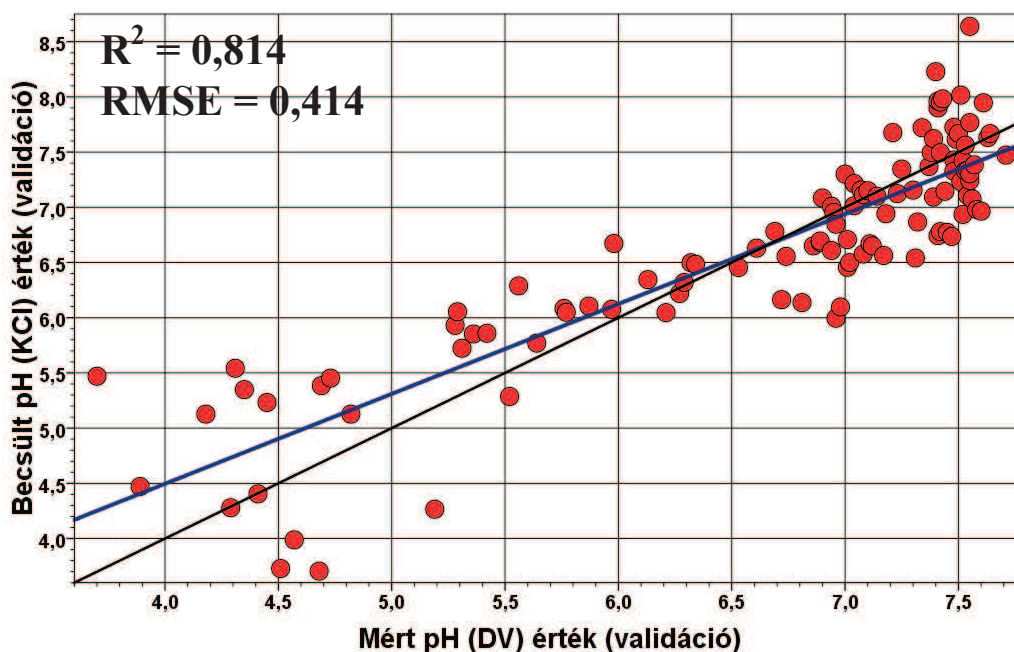
10. ábra: A modell tesztelésének eredménye desztillált vizes pH értékekkel

A KCl-os szuszpenzióban mért pH értékek alapján végzett kalibráció szembetűnően gyengébb lineáris kapcsolatot ($R^2=0,873$) és magasabb RMSE értéket (0,378) mutat, mint a desztillált vizes esetében (11. ábra).



11. ábra: PLSR kalibráció eredménye KCl-os pH értékekkel

A KCl-os szuszpenzióban mért pH értékekre épülő modell validálása is hasonló eredményre vezetett, mint a desztillált vizes oldat esetében, azaz a R^2 (0,814) alacsonyabb és az RMSE (0,414) is magasabb, mint a kalibráció által tükrözött érték. Az alacsonyabb pH tartományokban nagy eltérések mutatkoznak a laboratóriumban mért és a modell által becült pH értékek között (12. ábra).



12. ábra: A modell tesztelésének eredménye KCl-os pH értékekkel

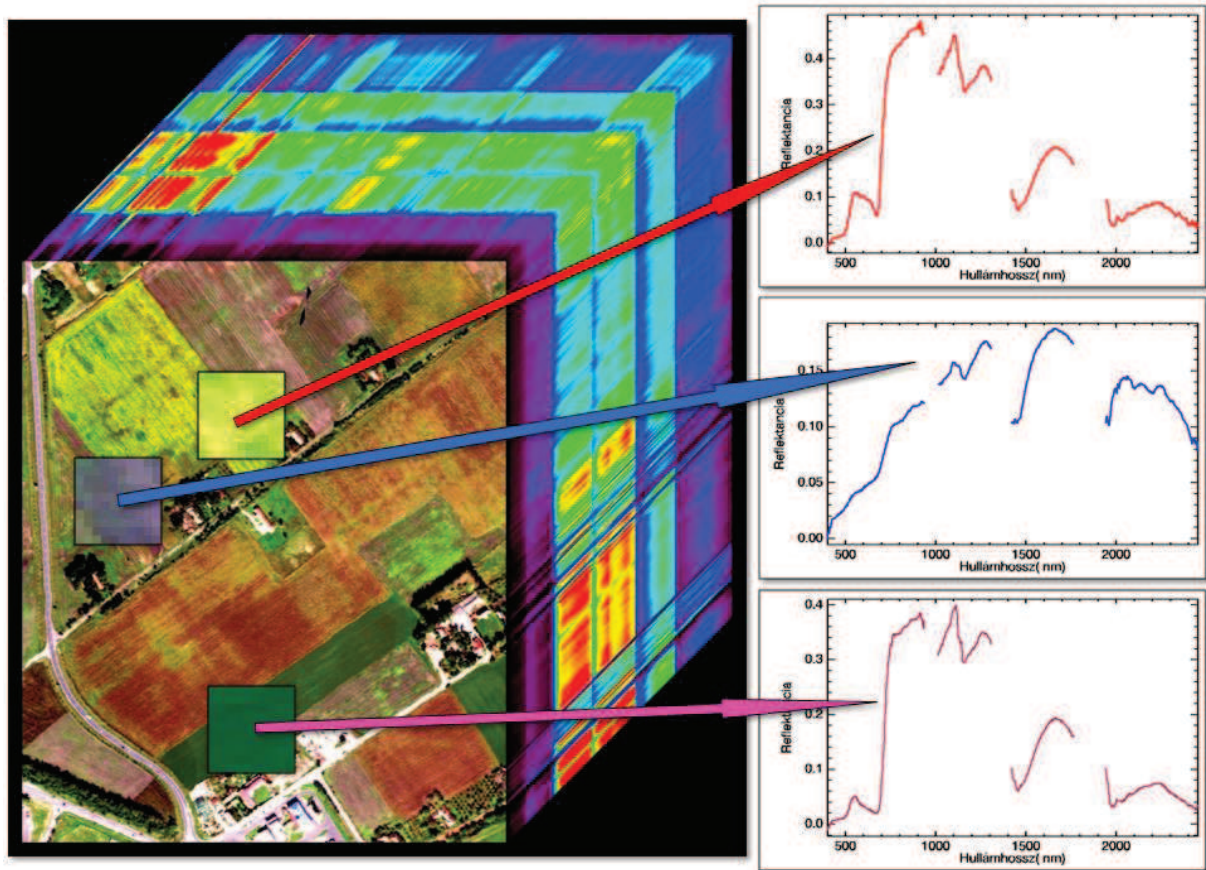
A PLSR algoritmus tehát a desztillált vizes szuszpenzióban mért pH értékek esetében jobb eredményt adott, mint a KCl-os méréseknél.

A talajokról felvett reflektancia spektrumban anyagi tulajdonságok tükröződnek. Elsősorban a szerves anyag, vas-oxidok és -hidroxidok, agyagásványok, szulfátok, karbonátok és egyéb sók, illetve számos más talajalkotó – kémiai és fizikai tulajdonságai által szabályozott – spektrális ujjlenyomata figyelhető meg a görbéken. Így jelentős eredménynek számít, hogy egy olyan paraméter becslhetősége is lehetséges a reflektancia spektrumok alapján, mely számos talajösszetevő által együttesen szabályozott kémiai tulajdonság, és nincs közvetlen lenyomata a vizsgált spektrális tartományban. Ebből következően, hogy a pH becslése nem közvetlenül történik, hanem – spektrális ujjlenyomattal rendelkező, és a pH-val szoros korrelációt mutató – anyagi összetevők mennyiségén keresztül, közvetve. Ez tükröződik a modellek eredményét bemutató szóródási-diagramokon is. Megfigyelhető, hogy a magasabb pH tartományokban ($\sim 7,5 < \text{pH(DV)}$; $\sim 6,5 < \text{pH(KCl)}$) a korreláció szorosabb, mint az alacsonyabbakban. Ennek oka valószínűsíthetően az, hogy 7,5-nél magasabb pH(DV) értékeknél megjelennek a karbonátok, melyek mennyisége szoros kapcsolatban áll a pH értékével. 7,5-nél magasabb pH esetében a – kémiai összetételénél fogva jól detektálható – karbonátok miatt a pH is megbízhatóbban becsülhető. $\sim 7,5$ -ös pH alatt a karbonátok eltűnnek, és már nincs jelen olyan talajkomponens, melyhez a pH szorosan korrelálható lenne, így a becslhetősége is jelentősen romlik.

Következtetések

A vizsgálat szervesen kapcsolódik egy, a SZIE Talajtani és Agrokémiai Tanszéke és a VM Mezőgazdasági Gépesítési Intézete által közösen folytatott kutatásnak, melynek célja a reflektancia spektroszkópiai mérések és módszerek, valamint a hiperspektrális távérzékelés integrálása a talajvizsgálati eljárások közé.

A bemutatott eredmények és módszerek nem csak a laboratóriumi (és terepi) reflektancia spektroszkópia alkalmazási területén bírnak nagy jelentőséggel. A talajok spektrális reflektanciája és fizikai-kémiai tulajdonságai közötti kvantitatív összefüggések meghatározásának jelentős szerepe van a fejlődésnek indult, és környezeti vizsgálatokban egyre nagyobb szerepet kapó hiperspektrális távérzékelés területén. A légi képalkotó spektroszkópiának is nevezett adatgyűjtési technológia alapját a laboratóriumi mérések alapját is képző reflektancia spektrumok alkotják (**13. ábra**). Amíg a labor és a terepi mérések pontszerű adatokkal szolgálnak, a légi képalkotás lehetővé teszi, hogy a felvételezés térbeli felbontásának megfelelő részletességben nyomon tudjuk követni (elsősorban felszíni) talajtulajdonságok térbeli változékonyságát. A légi hiperspektrális felvételek térbeli felbontása az esetek többségében 1 és 2 méter/pixel között mozog, így ha laboratóriumi mérések alapján lehetséges talajtulajdonságok és a spektrális reflektancia adatok között számszerű összefüggés megállapítása, ezeknek a modelleknek a kiterjesztésével lehetővé válik ezeknek a tulajdonságoknak eddig soha nem látott részletességű térképezése.



13. ábra: Légi hiperspektrális felvétel és spektrális reflektancia adatok

Irodalomjegyzék

- BAUMGARDNER, M. F., SILVA, L. F., BIEHL, L. L., STONER, E. R. (1985): Reflectance Properties of Soils. *Advances in Agronomy*. 38: 1-44.
- BEN-DOR, E., BANIN, A. (1990): Near-Infrared Reflectance Analysis of Carbonate Concentration in Soils. *Applied Spectroscopy*. 44 (6): 1064-1069.
- BEN-DOR, E., BANIN, A., (1994): Visible and near-infrared (0.4 – 1.1 μm) analysis of arid and semiarid soils. *Remote Sensing of Environment*. 48 (3): 261-274.
- CONDIT, H. R. (1970): The Spectral Reflectance of American Soils. *Photogrammetric Engineering*. 36: 955-966.
- CSORBA Á., LÁNG V., SZALAY D. K., MICHÉLI E., FENYVESI L. (2012): Prediction of Soil Organic Carbon and Calcium Carbonate Content Based on Reflectance Spectroscopy and Multivariate Modelling Methods. *International Conference of Agricultural Engineering*. 2012. július 8 – 12, Valencia, Spanyolország. Papers Book, In Press
- DUCKWORTH, J. H. (1998): Spectroscopic Quantitative Analysis. In: WORKMAN, J., SPRINGSTEEN, A. (eds.): *Applied Spectroscopy*. Academic Press, San Diego, California, 539 p., 93-163. p.
- MICHÉLI, E., STEFANOVITS, P., FENYVESI, L., (1989): Infrared reflectance of artificially prepared organo-mineral complexes. *International Agrophysics*. 5: 99-105.

- SELITTO, V. M., FERNANDES, R. B. A., BARRÓN, V., COLOMBO, C., (2009): Comparing two different spectroscopic techniques for the characterization of soil iron oxides: Diffuse versus bi-directional reflectance. *Geoderma*. 149 (1-2): 2-9.
- STEFANOVITS P. (1981): *Talajtan. Mezőgazda Kiadó, Budapest, 388 p.*
- STEVENS, A., UDELHOVEN, T., DENIS, A., TYCHON, B., LIOY, R., HOFFMANN, L., WESMAEL, B. (2010): Measuring soil organic carbon in croplands at regional scale using airborne imaging spectroscopy. *Geoderma*. 158: 32-45.
- STONER, E. R., BAUMGARDNER, M. F. (1981): Characteristic variations in reflectance on surface soils. *Soil Science Society of America Journal*. 45: 1161-1165.
- VISCARRA ROSSEL, R. A., WALVOORT, D. J. J., MCBRATNEY, A. B., JANIK, L. J., SKJEMSTAD, J. O. (2006): Visible, near-infrared, mid-infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. *Geoderma*. 131: 59-75.
- VISCARRA ROSSEL, R. A. (2008) ParLeS: Software for chemometric analysis of spectroscopic data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 90: 72-83.
- WALSCH, M. G., VAGEN, T. G. (2006): *The Land Degradation Surveillance Framework – Guide to Field Sampling and Measurement Procedures*. 12 p.

További áttanulmányozott, de nem hivatkozott forrás

- BEN-DOR, E., PATKIN, K., BANIN, A., KARNIELI, A. (2002): Mapping of several soil properties using DAIS-7915 hyperspectral scanner data. A case study over clayey soils in Israel. *International Journal of Remote Sensing*. 23: 1043-1062.
- BRADY, N. C. (1990): *The Nature and Properties of Soils*. Macmillan Publishing Company, New York. 622 p., 213-251. p.
- CHABRILLAT, S., GOETZ, A. F. H., KROSLEY, L., OLSEN, H. W. (2002): Use of hyperspectral images in identification and mapping of expansive clay soils and the role of spatial resolution. *Remote Sensing of Environment*. 82: 431-445.
- CHABRILLAT, S., KAUFMANN, H., MERZ, B., MUELLER, A., BENS, O., LEMMNITZ, C. (2003): Development of relationships between reflectance and erosion modelling: Test site preliminary field spectral analysis. *Proceedings 3rd EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy, Hersching, Germany, 2003, 165-172 p.*
- CLARK, R. N. (1999). *Spectroscopy of Rocks and Minerals, and Principles of Spectroscopy*. In: RENCZ, A. (ed.): *Manual of Remote Sensing*. John Wiley and Sons Inc., New York. 3-58. p.
- COM 2002/179 (2002): *Communication from the Commission to the Council, the European Parliament, the European Economic and Social Committee and the Committee of the Regions – Towards the Thematic Strategy for Soil Protection*. Commission of the European Communities, Bruxelles, 2002
- DEMATTÊ, J. A. M., FOCHT, D. (1999): Detection of soil erosion by spectral reflectance. *Brazilian Journal of Soil Science*. 23: 401-411.
- DOBOS E. (2006): The future of soil science: a vision from Europe. In: HARTEMINK, A. E. (ed.): *The Future of Soil Science*. IUSS, Wageningen, 165 p., 34-37. p.

- ESRI (Environmental System Resource Institute) (2009): ArcMap 9.3. ESRI, Redlands, California, USA
- GROVE, C. I., HOOK, S. J., PAYLOR, E. D. (1992): Laboratory reflectance spectra for 160 minerals 0.4-2.5 micrometers. JPL Publication. 92-2, Jet Propulsion Laboratory, Pasadena, CA.
- HAUBROCK, S.-N., CHABRILLAT, S., KUHNERT, M., HOSTERT, O., KAUFMANN, H. (2008): Surface soil moisture quantification and validation based on hyperspectral data and field measurements. *Journal of Applied Remote Sensing* 2, online publication
- HILL, J., MEHL, W., ALTHERR, M. (1994): Land degradation, soil erosion and desertification monitoring in Mediterranean ecosystem. In: HILL, J., MÉGIER, J. (1994): *Imaging Spectrometry – a tool for environmental observations*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 335 p., 237-260 p.
- HILL, J., SCHÜTT, B. (2000): Mapping complex patterns of erosion and stability in dry Mediterranean ecosystems. *Remote Sensing of Environment*. 74: 557-569.
- KEMPER, T., SOMMER, S. (2002): Estimate of heavy metal contamination in soils after a mining accident using reflectance spectroscopy. *Environmental Science and Technology*. 36: 2742-2747.
- NÉMETH T., STEFANOVITS P., VÁRALLYAY Gy. (2005): *Talajvédelem – Országos Talajvédelmi Stratégia tudományos háttére*. Környezetvédelmi és Vízügyi Minisztérium, Budapest, 265 p.
- SHERROD, P. H. (2003): DTREG manual. <http://www.dtreg.com/DTREG.pdf>
- STEFANOVITS P. (1956): *Magyarország talajai*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 252 p.
- STEFANOVITS P. (1963): *Magyarország talajai*. Akadémiai Kiadó, Budapest, 442 p.
- STEFANOVITS P., FILEP Gy., FÜLEKY Gy. (1999): *Talajtan*. Mezőgazda Kiadó, Budapest, 470 p., 321-356. p., 430-432. p.
- SZABÓ L. (2011): *Gödöllői-dombság természeti- és gazdaságföldrajzi viszonyai, kultúrtörténete*. Agroinform Kiadó és Nyomda Kft., Budapest, 268 p.
- TAYLOR, G. R., HEMPHILL, P., CURRIE, D., BROADFORD, T., DEHAAN, R. I. (2001): Mapping dry land salinity with hyperspectral imagery. *Proceedings IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium Scanning the Present and Resolving the Future*. Institute of Electrical and Electronic Engineers, 302-304. p.
- VÁRALLYAY Gy. (2005): *Talajvédelmi stratégia az EU-ban és Magyarországon*. MTA Talajtani és Agrokémiai Kutatóintézet, Budapest. 15 p.
- VÁRALLYAY Gy. (2009): *Magyarország talajainak állapota a Talajvédelmi Információs és Monitoring (TIM) rendszer adatai alapján*. Földművelésügyi és Vidékfejlesztési Minisztérium, Budapest, 91 p., 38-39. p.
- VISCARRA ROSSEL, R. A., CHEN, C. (2011): Digitally mapping the information content of visible – near-infrared spectra of surficial Australian soils. *Remote Sensing of Environment*. 115(6): 1443-1455.
- WHITING, M., LI, A., USTIN, S. L. (2004): Predicting water content using Gaussian model on soil spectra. *Remote Sensing of Environment*. 89: 535-552.

WU, Y. Z., CHEN, J., JI, J., TIAN, Q. J., WU, X. M. (2005): Feasibility of reflectance spectroscopy for the assessment of soil mercury contamination. Environmental Science and Technology. 39: 873-878.

http1: KÖRINFO Környezetvédelmi Információ. Magyarország talajainak kémiai tulajdonságai. www.enfo.hu/gis/korinfo/. Letöltve: 2012. október 7.

Szerzők:

Kurmai-Takács Zsófia

mérnök-szakértő

környezetmérnök, MSc

Generisk Kft., 1091 Budapest, Üllői út 121.

zsofia.takacs@gmail.com

Csorba Ádám

tanszéki mérnök

Szent István Egyetem,

Talajtani és Agrokémiai Tanszék,

Gödöllő, Páter K. u. 1.

csorba.adam@gmail.com

