پیش‌بینی برخی ویژگی‌های خاک به روش طیف‌سنجی مرئی– مادون قرمز نزدیک در منطقه بردسیر کرمان

نجمه رسولی، محمد هادی فرپور[1]، فاطمه خیامیم و حجت الله رنجبر

دانشجوی دکتری، گروه علوم و مهندسی خاک، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهید باهنر کرمان؛ Najmehrasooli@yahoo.com

استاد گروه علوم و مهندسی خاک، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهید باهنر کرمان؛ farpoor@uk.ac.ir

دانش آموخته دکتری، گروه خاکشناسی، دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی اصفهان؛ f.khayamim@ag.iut.ac.ir

استاد گروه مهندسی معدن، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهید باهنرکرمان؛ h.ranjbar@mail.uk.ac.ir

دریافت: 96/11/4 و پذیرش: 97/2/25

چکیده

تکنیک طیف‌سنجی مرئی- مادون قرمز نزدیک روشی غیرمخرب، سریع، ارزان و دارای حداقل آماده‌سازی نمونه به منظور برآورد خصوصیات خاک و بدون ضرر برای محیط زیست محسوب می‌گردد. با توجه به اینکه مطالعات اندکی در رابطه با کاربرد این روش در تعیین ویژگی‌های خاک‌های کشورمان انجام شده است، این مطالعه با هدف ارزیابی روش طیف‌سنجی انعکاسی در برآورد برخی خصوصیات خاک در منطقه بردسیر در استان کرمان انجام شد. تعداد 150 نمونه مرکب خاک سطحی، از چهار کاربری مختلف از عمق 20-0 سانتی‌متری جمع‌آوری گردید و مقادیر کربن آلی، درصدآهک، درصد شن، درصد سیلت و درصد رس و pH خاک با روش‌های استاندارد آزمایشگاهی اندازه‌گیری شد. طیف‌سنجی انعکاسی نمونه‌های هوا خشک شده تحت شرایط کنترل شده آزمایشگاهی، با استفاده از دستگاه طیف‌سنج زمینی در محدوده طول موج 2500-350 نانومتر انجام شد. پس از ثبت طیف‌ها، انواع روش‌های پیش‌پردازش مورد ارزیابی قرار گرفت. واسنجی بین داده‌های طیفی و آزمایشگاهی به روش اعتبارسنجی متقابل با استفاده از مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی انجام شد. نتایج نشان داد که مقادیر ضریب تبیین برای کربن آلی، آهک، درصد شن، درصد سیلت، درصد رس و pH به ترتیب 0/68، 0/62، 0/64، 0/66، 0/3 و 0/01 می‌باشد. با توجه به مقادیر RPD(Ratio of Prediction to Deviation)، پیش‌بینی مدل برای درصد شن و سیلت کاملاً مناسب برای کربن آلی و آهک مناسب و برای درصد رس و pH ضعیف می‌باشد. بهترین روش پیش‌پردازش برای کربن آلی متغیر نرمال استاندارد (SNV) و برای آهک، درصد شن و درصد سیلت روش مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای تعیین گردید. نتایج بر قابلیت تکنیک طیف‌سنجی مرئی- مادون قرمز در تخمین مکانی چندین ویژگی خاک به صورت همزمان، دلالت دارد. لذا این روش می‌تواند به عنوان روشی جایگزین برای روش‌های مرسوم آزمایشگاهی در تعیین برخی ویژگی‌های خاک مطرح باشد.

واژه‌های کلیدی: اعتبار سنجی، پیش‌پردازش طیفی، رگرسیون حداقل مربعات جزئی، طیف‌سنجی انعکاسی

---

[1]. نویسنده مسئول، آدرس: کرمان، دانشگاه شهید باهنر کرمان - دانشکده کشاورزی، گروه علوم و مهندسی خاک

مقدمه

امروزه نیاز جهانی به جمع‌آوری اطلاعات مکانی خاک به منظور پایش محیط زیست، مدلسازی و مدیریت مکانی خاک بسیار حائز اهمیت است (سامرز و همکاران، 2011). این امر توجه محققان را به کاربرد تکنیک‌هایی جدید جهت افزایش کارایی تجزیه و تحلیل رفتار خاک و یا جایگزین نمودن روش‌های دشوار و پرهزینه آزمایشگاهی، معطوف داشته است. بدین‌جهت بکارگیری روش‌های سنجش از نزدیک نظیر فن‌آوری طیف‌سنجی جهت تخمین ویژگی‌های خاک مورد توجه محققان علوم خاک واقع گردیده است (استنبرگ و همکاران، 2010). از دلایل عمده رشد چشمگیر این تکنیک مراحل اندک آماده‌سازی نمونه (هوا خشک کردن و نرم کردن نمونه خاک)، عدم استفاده از مواد شیمیایی و اندازه‌گیری بیش از 20 ویژگی خاک بطور همزمان در چند ثانیه می‌باشد (راسل و همکاران، 2009؛ کیم و همکاران، 2014). در طیف سنجی به عنوان یکی از روش‌های سنجش از نزدیک (Proximal Soil Sensing) انرژی الکترومغناطیسی گسیل شده از یک منبع نور به پدیده برخورد نموده بخشی از آن منعکس، قسمتی جذب و بخش دیگر عبور داده می‌شود.

بنابراین این تکنیک یک نوع اندازه‌گیری کمی انعکاس، جذب یا عبور می‌باشد که به این منظور از اسپکتروراديومترها استفاده می‌گردد (کلارک، 1999). با استفاده از این روش اطلاعات مربوط به خاک بدون هیچ تماسی ارزیابی می‌گردد (فریفت و همکاران، 2006). در این روش علایم طیفی بدست آمده از سطح خاک، اطلاعات اولیه‌ای را در اختیار ما قرار می‌دهند که می‌توان با استفاده از آنها بسیاری از ویژگی‌های خاک را مورد ارزیابی قرار داد و سپس با استفاده از تلفیق داده‌های طیف سنجی و اطلاعات کمکی (نظیر اطلاعات سنجش از دور) می توان به تهیه نقشه خصوصیات خاک پرداخت (مازلی و همکاران، 2006 و کانفورتی و همکاران، 2015). مزایای این تکنیک همگام با توسعه آمار چند متغیره و تکنیک‌های داده‌کاوی باعث افزایش کاربرد این روش در علوم خاک گردیده است.

تکنیک طیف‌سنجی با توجه به منحنی‌های بازتاب پدیده‌ها، به بررسی اطلاعات ترکیبی و ساختاری مولکول‌ها در محدوده طول‌موج‌های مرئی (350-700 نانومتر) و مادون قرمز نزدیک (700-2500 نانومتر) می‌پردازد، زیرا فرکانس‌های پایه‌ای مولکولی مرتبط با اجزای خاک بیشتر در این دو محدوده واقع گردیده است (استنبرگ و همکاران، 2010). توانایی تحلیل این تکنیک به تعداد دفعات جذب و گستردگی جذب امواج مرئی و مادون قرمز نزدیک به وسیله باندهای C-C، C-H، O-H و N-H وابسته است (ژومی و ژیانشه، 2013). تقریباً تمام ترکیباتی که پیوند کووالانسی دارند اعم از آلی یا معدنی طول‌موج‌های متفاوتی از امواج الکترومغناطیس در محدوده مادون قرمز را جذب می‌کنند. بنابراین به دلیل ترکیب مولکولی، ساختار و ویژگی‌های خاص، هر پدیده رفتار طیفی منحصری را ایجاد می‌کند (کلارک، 1999). تخمین کربن آلی خاک با استفاده از طیف‌سنجی با توجه به نقشی که در ارزیابی کیفیت خاک و تعدیل گرمایش جهانی دارد در دهه اخیر مورد توجه واقع گردیده است (ژی و لی، 2016). کربن آلی، در طول موج 1730 نانومتر (به دلیل وجود گروه‌هایC-H) و2330 نانومتر (به دلیل وجود گروه‌های OH) مشخصه‌های جذب قوی را نشان می‌دهد (بن دور و همکاران، 1997). همچنین مرحله تجزیه کربن آلی نیز بر کیفیت طیف تأثیر گذار است (استنبرگ و همکاران، 2010).

کانی‌های کربناته خاک به دلیل وجود گروه کربنات دارای مشخصه‌های جذب قوی در 2345 نانومتر و مشخصه‌های جذب ضعیف‌تر در مجاورت 1860، 1990 و 2140 نانومتر می‌باشند (هانت، 1980). کلارک و همکاران (1990) نیز ویژگی‌های جذبی ویژه در محدوده 2300-2350 و 2500-2550 نانومتر را به حضور کربنات‌ها در خاک مربوط می‌دانند. از دیگر ویژگی‌های مؤثر بر رفتار طیفی خاک توزیع اندازه ذرات خاک می‌باشد. چانگ و همکاران (2001) مشخصه‌های جذبی 1300-1450 نانومتر، 1850-1950 نانومتر و 2200-2400 نانومتر را مرتبط با رس خاک گزارش نمودند. پست و نوبل (1993) ویژگی‌های جذبی کم در 2280 نانومتر را به دلیل تغییر پیوندهای Fe-OH در صفحه اکتاهدرال کانی مونت‌موریلونیت بیان کردند. همچنین شیب جزئی در طول موج 2340 نانومتر را مبین حضور کانی‌های مخلوط ایلیت و موسکویت می‌دانند (پست و نوبل، 1993).

روش‌های پیش‌پردازش مرحله مهمی جهت استخراج اطلاعات مفید از طیف‌ها، افزایش دقت روش‌های پیش‌بینی، و بهبود کالیبراسیون است (بودنبام و همکاران، 2012). انواع روش‌های میانگین‌گیری، نرمال‌سازی، مشتق‌گیری، اصلاح پخشیدگی، حذف پیوستار مورد ارزیابی قرار گرفته اما تاکنون روش پیش‌پردازش منحصر به فرد، که بهترین عملکرد را در تخمین خصوصیات خاک داشته باشد معرفی نگردیده است (کارنلیتو و همکاران،

2017b). ناوار و همکاران (2016) انواع روش‌های مشتق‌گیری به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای را جهت افزایش اطلاعات طیفی و بهبود عملکرد مدل بکار بردند. رینان و همکاران (2009) کاربرد بهینه روش‌های پیش‌پردازش را در افزایش دقت و بهبود عملکرد مدل‌های رگرسیونی مؤثر می‌دانند.

در طیف‌سنجی بکارگیری روش‌های آماری و رویکردهای کارآمد مدل‌سازی به دلیل شباهت و همپوشانی طول‌موج‌ها جهت استخراج اطلاعات طیفی ضروری است (مؤذن و همکاران، 2010). تاکنون مدل‌های کالیبراسیونی متعدد جهت تخمین خصوصیات خاک استفاده گردیده که از میان آنها مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی روشی مناسب و کارآمد برای استنتاج روابط خطی بین مقادیر اندازه‌گیری شده برای ویژگی‌های مبنایی خاک و مقادیر برآورد شده است (بیلگیلی و همکاران، 2011؛ نوکیتا و همکاران، 2014؛ کانفورتی و همکاران، 2015). لذا با توجه به پژوهش‌های اندکی که در استفاده از داده‌های طیفی در برآورد ویژگی-های خاک‌های ایران انجام شده است؛ این پژوهش با اهداف 1- ارزیابی قابلیت تکنیک طیف سنجی مرئی-مادون قرمز نزدیک جهت تخمین برخی از ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک 2- بررسی تأثیر چندین روش پیش‌پردازش داده‌های طیفی بر دقت مدلسازی به روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی انجام شد.

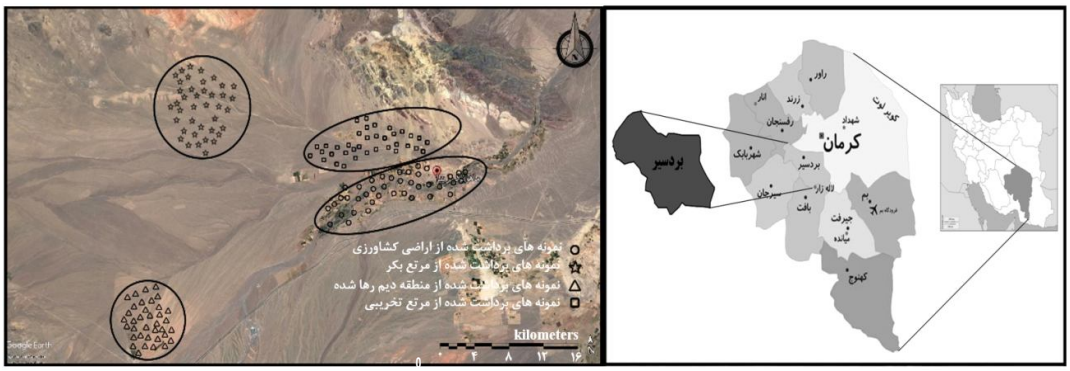
مواد و روش ها

منطقه مورد مطالعه

منطقه مطالعاتی با وسعتی حدود 3500 هکتار در جنوب شرقی استان کرمان در 13/5 کیلومتری شمال غرب شهرستان بردسیر در محدوده روستای ماهونک با مختصات ′ 00 °56 تا ′ 31 °56 طول جغرافیایی و ′ 45 °29 تا ′ 12 °30 عرض جغرافیایی و ارتفاع متوسط 2120 متر از سطح دریا قرار دارد. متوسط دمای سالانه 14/6درجه سانتی‌گراد و متوسط بارندگی 171 میلی‌متر است (پایگاه هواشناسی climate-data، 2012). لذا دارای رژیم رطوبتی اریدیک و رژیم حرارتی مزیک می‌باشد.

نمونه‌برداری و آنالیز خصوصیات خاک

جهت تعیین مناطق نمونه‌برداری پس از مشاهدات صحرایی محدوده 4 کاربری شامل اراضی کشاورزی، مرتع بکر، اراضی دیم رهاشده و مرتع تخریبی جهت جمع‌آوری نمونه‌هایی با خصوصیات متفاوت خاکی انتخاب گردید(شکل 1). سپس در هر کاربری به صورت تصادفی نمونه‌برداری به صورت مرکب حاصل از 5 نمونه (رئوس و مرکز مربعی به ابعاد 10 در 10 متر) و از عمق صفر تا 20 سانتی‌متر انجام شد. در مجموع 150 نمونه خاک برداشت گردید. نمونه‌ها پس از انتقال به آزمایشگاه به مدت 24 ساعت هوا خشک شده و از الک 2 میلی‌متری عبور داده شدند. سپس مقدار کربن آلی به روش والکی-بلک (اسمیت، 1991)، کربنات کلسیم معادل با روش تیتراسیون برگشتی (پیج و همکاران، 1992) و بافت خاک به روش هیدرومتر (بایوکس، 1962) اسیدیته گل اشباع با دستگاه پ‌هاش- سنج مدل (JENWAY) اندازه‌گیری شد.



شکل 1- شمایی از موقعیت نقاط نمونه‌برداری در منطقه مورد مطالعه

آنالیز طیفی

آنالیز طیفی خاک‌های مورد نظر با دستگاه طیف سنج زمینی (FieldSpec®3, ASD, FR, USA) در طول موج 350 تا 2500 نانومتر با روشهای استاندارد طیف‌سنجی در تاریک‌خانه انجام شد. بدین منظور 50 گرم از هر نمونه خاک هوا خشک شده با اندازه کوچکتر از 2 میلی‌متر پس

از قرارگیری در آون در دمای 40 درجه به مدت 24 ساعت، مورد آنالیز قرار گرفت. دستگاه طیف‌سنج زمینی با صفحه سفید مبنا (White panel Spectralon) به منظور افزایش دقت اندازه‌گیری مقدار بازتابش و حذف آشفتگی‌های طیفی، به ازای هر 5 نمونه واسنجی شد. برای هر نمونه 3 تکرار و در مجموع 450 طیف ثبت گردید.

پیش‌پردازش طیف‌ها

روش‌های پیش‌پردازش جهت به حداقل رساندن تأثیرات عوامل ناخواسته مثل زبری سطح خاک، بقایای آلی درشت، آلودگی پروب، تغییر فاصله سنسور و خاک و تأثیرات پرتو افکنی جوی اعمال می‌گردند. بدین منظور، دو بخش نویزی ابتدا و انتهای طیف‌ها در محدوده 350 تا 400 و 2450 تا 2500 نانومتر و دو وقفه حاصل از تغییر دیتکتور در محدوده 900 تا 1700 نانومتر حذف گردید (گومز و همکاران، 2008، راسل و همکاران، 2009). سپس از سه طیف ثبت شده برای هر نمونه، میانگین گرفته شد و مقادیر انعکاس به جذب تبدیل شد. و روش‌های پیش‌پردازش شامل فیلتر میانه، متغیر نرمال استاندارد SNV (standard normal variate)، مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای، مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای، و تصحیح پخشیده چندگانه MSC (multiplicative scatter correction) انجام شدند. در نهایت اطلاعات طیفی به کمک آنالیز مؤلفه اصلی (PCA) خلاصه گردید، تا بتوان جهات با حداکثر واریانس داده‌های طیفی را جستجو نمود.

مدل‌سازی

جهت برآورد خصوصیات خاک از اعتبارسنجی متقابل با یک نمونه خارج شده (Leave one out cross validation) از مدل با تمام نمونه‌های مورد استفاده در واسنجی استفاده شد. سپس آزمون دقت برآوردها با استفاده از اعتبارسنجی، به طور جداگانه روی بخشی از نمونه‌ها انجام شد. بدین منظور ابتدا مجموعه داده‌ها به صورت تصادفی به دو گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی تقسیم گردید. تعداد نمونه‌های گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی به ترتیب 100 و 50 نمونه تعیین شد. سپس از روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی PLSR (Partial Least Square Regression) جهت تجزیه و تحلیل کمی داده‌های طیفی استفاده گردید. در این روش حداکثر کوواریانس بین مقادیر طیف (X) و ویژگی مبنایی خاک (Y) اندازه‌گیری و بهترین مؤلفه تعیین می‌گردد (ناوار و همکاران، 2016). جهت تعیین بهترین مؤلفه در مدل در گروه کالیبراسیون از روش اعتبارسنجی متقابل با یک نمونه خارج شده از مدل استفاده می‌شود. بدین شکل که پس از خارج کردن یک نمونه برای n-1 مشاهده دیگر مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی برازش داده می‌شود و با این کار همه نمونه‌ها در اعتبارسنجی مدل استفاده خواهند شد. درنهایت بهترین مدل برازش داده شده بر اساس حداقل ریشه میانگین مربعات خطای پیش‌بینی (RMSE) تعیین می‌گردد. جهت تعیین عملکرد مدل با استفاده از اعتبارسنجی متقابل آزمون دقت برآوردها به طور جداگانه روی گروه اعتبارسنجی انجام شد و مقادیر ریشه حداقل مربعات خطا (RMSE)، مقدار ضریب تبیین (R^2) و شاخص انحراف نسبی (RPD) که نسبت انحراف معیار مقادیر اندازه‌گیری شده (SD) به حداقل مربعات خطای مدل می‌باشد با روابط (1، 2 و3) تعیین گردید.

$$(۱)\ \mathrm{RMSE} = \sqrt{\left(\frac{\sum_{i=1}^{n}(Y-X)^2}{N}\right)} \quad (۲)\ R^2 = \frac{[\sum_{i=1}^{n}(x-\bar{x})(Y-\bar{Y})]^2}{\sum_{i=1}^{n}(x-\bar{x})^2\sum_{i=1}^{n}(Y-\bar{Y})^2} \quad (۳)\ RPD = \frac{SD}{RMSE}$$

X و $\bar{x}$ به ترتیب مقادیر اندازه‌گیری شده و میانگین مقادیر اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه، y و $\bar{y}$ مقادیر پیش‌بینی شده و میانگین آنها و N تعداد نمونه می‌باشد. مراحل توصیف آماری متغیرها، پیش‌پردازش طیف‌ها و مدلسازی با استفاده از نرم‌افزار SPSS18 و Unscrambler X 10.4 انجام شد.

نتایج و بحث

توصیف آماری ویژگی‌های خاک

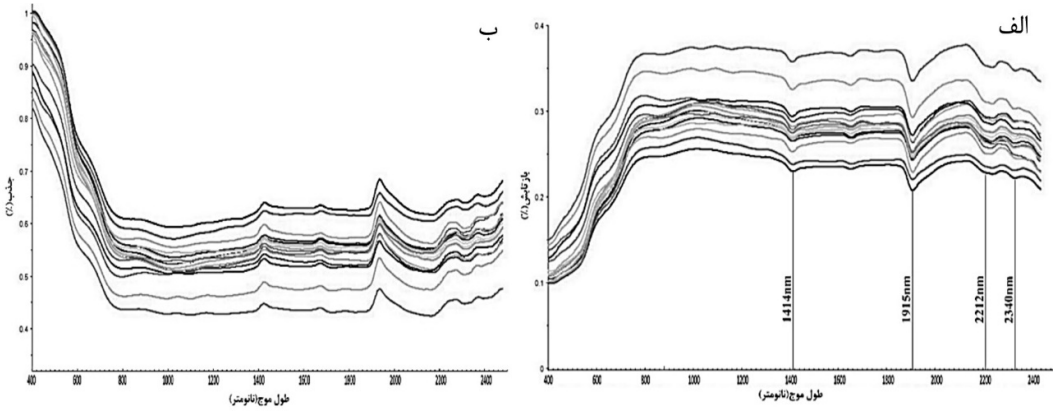
جدول 1 توصیف آماری ویژگی‌های خاک را در دو گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی نشان می‌دهد. میانگین مقادیر کربن آلی، کربنات، شن، سیلت، رس و pH در گروه کالیبراسیون 0/54، 14/03، 79 ،14/8، 4/94 و 7/8 می‌باشد این مقادیر برای گروه اعتبارسنجی تقریباً مشابه است. انحراف معیار مقادیر کربن آلی، کربنات، شن، سیلت، رس و pH در گروه کالیبراسیون 0/32، 3/56، 7/64، 6/41، 2/41 و 0/25 و برای گروه اعتبارسنجی0/34، 3/67، 8/81، 7/65، 2 و 0/24درصد می‌باشد. این مسئله نشان می‌دهد که گروه اعتبارسنجی نماینده مناسبی از مجموعه داده‌های مورد مطالعه می‌باشد. در پیش‌بینی خصوصیات خاک به روش طیف‌سنجی طراحی مدل کالیبراسیونی و تعداد نمونه‌های کالیبراسیون در تخمین بسیار مؤثر است.

جدول 1- توصیف آماری ویژگی‌های خاک در دو گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی

	کالیبراسیون (n=100)						اعتبارسنجی (n=50)					
	کربن آلی	کربنات	شن	سیلت	رس	pH	کربن آلی	کربنات	شن	سیلت	رس	pH
میانگین	0/54	14/03	79	14/8	4/94	7/8	0/56	14/06	79/3	15/6	5	7/8
حداکثر	1/27	24	91/6	35/2	11	8/4	1/27	23	88/5	39/2	9/6	8/7
حداقل	0/07	7	58	5/20	0/5	7/2	0/07	7/5	52	5	1	7/3
انحراف معیار	0/32	3/56	7/64	6/41	2/41	0/25	0/34	3/67	8/81	7/65	2	0/24
واریانس	0/10	12/6	5/4	41/1	5/8	0/06	0/11	13/4	77/7	58/5	4/2	0/05
چولگی	0/36	0/54	-0/9	1/2	0/58	0/4	0/58	0/77	-1/27	1/35	0/5	0/8

ویژگی‌های طیف‌های خاک

به طور کلی رطوبت، بافت، ساختمان، مقدار کربن آلی، نوع و فراوانی کانی‌های رسی، کربنات‌ها، گروه‌های هیدروکسیل آب خاک، ترکیبات آلی و اکسیدهای آهن و آلومینیم از مهمترین ویژگی‌های خاک هستند که مقدار بازتاب طیفی را تحت تأثیر قرار می‌دهند (استنبرگ و همکاران، 2010). شکل 2 طیف انعکاسی محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک را در تعدادی از نمونه‌ها نشان می‌دهد. شکل کلی طیف‌ها تقریباً مشابه و تفاوت‌هایی در شدت انعکاس وجود دارد. ویژگی‌های جذب در 1400، 1900، 2200 و 2300 نانومتر مشاهده می‌شود. ویژگی‌های جذب در 1400 و 1900 نانومتر مربوط به فرکانس ارتعاشات پایه مولکول آب شامل کشش متقارن و نامتقارن پیوند OH و خمش گروه OH می‌باشد. ویژگی‌های جذبی رس در 2200 نانومتر با پیوندهای گروه عاملی OH با فلزات آهن، آلومینیم و منیزیم در شبکه کانی‌های رسی ارتباط دارد (کلارک و همکاران، 1990). پاسخ‌های طیفی کانی‌های رسی در 2200 نانومتر می‌تواند در نتیجه ارتعاش مولکولهای آب ساختمانی، گروه‌های هیدورکسیل، ساختار سیلیکات و کاتیون‌های اکتاهدرال و تتراهدرال بین‌لایه‌ای باشد (فارمر و راسل، 1964). گومز و همکاران (2008) و کلارک و همکاران (1990) مشخصه‌های جذبی در2300 تا 2350 نانومتر به ویژه 2340 نانومتر را به وجود گروههای CO_3 در کانی‌های کربناته مرتبط دانستند. ویژگی‌های جذبی در 2338 نانومتر علاوه بر کربنات می‌تواند نشانه حضور کانی‌های کلرایت و ایلیت نیز باشد و مقادیر متفاوت این دو کانی باعث تغییرات جزئی در ارتفاع و موقعیت موج می‌گردد. لذا یکی از علل تفاوت در دقت تخمین میزان کربنات در خاک‌های مختلف تفاوت‌های کانی‌شناسی می‌باشد (هانت، 1971).

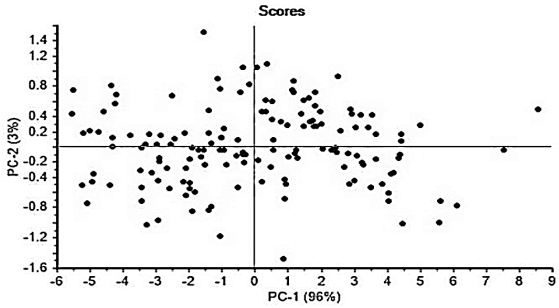


شکل 2- میانگین منحنی‌های خام بازتاب طیفی (الف)، میانگین منحنی‌های جذب (ب) در چند نمونه خاک مورد مطالعه

مواد آلی بدلیل ترکیبات متفاوت، ویژگی‌های جذبی مختلفی در محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک دارند. این ترکیبات شامل لیگنین (2050-2351 نانومتر)، سلولز (1370، 1725 و 2347 نانومتر)، پکتین (1320، 1582، 1761 و 2111 نانومتر) و هوموس (1929و 1932 نانومتر) می‌باشد. تفاوت ترکیبات ماده آلی باعث تغییر عمق جذب در 2327 و 2357 نانومتر می‌گردد (بن‌دور و همکاران، 1997). ویژگی‌های جذبی در 410، 510، 570، 600، 660 و 680 نانومتر نیز همبستگی خوبی با میزان ماده آلی دارد (راسل و همکاران، 2006؛ نوکیتا و همکاران، 2014؛ ناوار و همکاران، 2016). مقادیر انعکاس از رابطه A= log (1/R) به جذب تبدیل شد. شکل2(ب) نمودارهای جذب مربوط به نمونه‌های شکل 2 را نشان می‌دهد.

تحلیل مؤلفه‌های اصلی

شکل 3 نمودار امتیاز (Score) تحلیل مؤلفه اصلی برای مقادیر جذب را نشان می‌دهد. روش تحلیل مؤلفه اصلی به عنوان پیش‌نیاز کلیه روش‌های داده کاوی مطرح می‌باشد. لذا با توجه به اینکه در آنالیزهای طیفی، ماتریس داده‌ای بزرگی شامل 120 در 2200 داده موجود می‌باشد آنالیز مؤلفه اصلی به منظور خلاصه کردن اطلاعات طیفی انجام می‌شود. علاوه بر آن هدف دیگر استفاده از این روش، مشخص نمودن نمونه‌هایی با ویژگی‌های طیفی متفاوت می‌باشد. تا در صورت وجود، علت ویژگی‌های جذبی متفاوت بررسی گردد و چنانچه پس از مطالعات لازم داده پرت تشخیص داده شوند از مجموعه داده‌ها حذف شوند. در نمودار جذب نشان داده شده، مؤلفه اول 96 درصد از واریانس داده‌ها را توجیه می‌نماید که مبین این امر است که 96 درصد خاک‌ها از لحاظ خصوصیات طیفی مشابه هستند. براساس این نمودار هیچ گروه‌بندی خاصی در نمودارهای خاک براساس خصوصیات طیفی آنها مشاهده نمی‌شود.



شکل 3- تحلیل مؤلفه‌های اصلی مقادیر جذب داده‌های طیفی

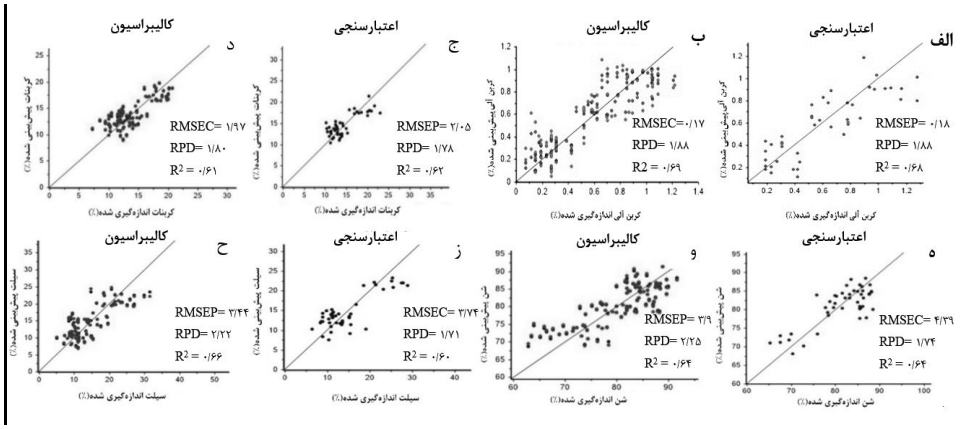
جدول 2 مقادیر R^2، RMSE و RPD حاصل از مدلسازی رگرسیون حداقل مربعات جزئی را نشان می‌دهد. مقادیر ضریب تبیین در گروه اعتبارسنجی برای کربن آلی، کربنات، درصد شن و درصد سیلت، درصد رس و pH به ترتیب 0/68، 0/62، 0/64، 0/66، 0/3 و 0/01 و مقادیر ریشه حداقل مربعات خطا نیز به ترتیب 0/18، 2/05، 3/9 ، 3/44، 1/75، 0/23 برآورد گردید. مقادیر حداقل ریشه میانگین مربعات خطای کالیبراسیون (RMSEC) و حداقل ریشه میانگین مربعات خطای پیش‌بینی (RMSEP) برای سنجش توانایی مدل در تخمین خصوصیات خاک در دو گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی به کار می‌رود. جهت تعیین عملکرد مدل از آماره RPD استفاده می‌شود. برای تفسیر مقادیر RPD سه گروه‌بندی مطرح شده است زمانی که مقدار RPD بیش از 2 باشد پیش‌بینی مدل کاملاً مناسب، اگر مقدار RPD بین 1/4 تا 2 باشد پیش‌بینی قابل قبول است و در صورتیکه کمتر از 1/4 باشد پیش‌بینی مدل ضعیف است (چانگ و همکاران، 2001). بدین لحاظ با توجه به مقادیرRPD پیش‌بینی مدل برای درصد شن و سیلت کاملاً مناسب و برای کربن آلی و کربنات قابل قبول و برای درصد رس و pH ضعیف می‌باشد. شکل4 (الف- ب) و (ج- د) مقادیر اندازه‌گیری شده در مقابل مقادیر پیش‌بینی شده کربن آلی و کربنات و میزان بیش برآوردی و کم‌برآوردی آنها را در دو گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی نشان می‌دهد. نتایج بر قابل قبول بودن تخمین دلالت دارد، چراکه مقادیر پیش‌بینی شده و اندازه‌گیری شده تا حد زیادی بر هم منطبق اند. کانفورتی و همکاران (2015) با استفاده از تکنیک طیف‌سنجی و روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی میزان ماده آلی را در201 خاک در جنوب ایتالیا تخمین زده و نقشه پراکندگی ماده آلی در منطقه را تهیه کردند.

ناوار و همکاران (2016) با استفاده از مدل (PLSR) مقادیر ماده‌آلی خاک را در 102 نمونه خاک در مصر با ضریب تبیین 0/72 تخمین زدند.

جدول 2- نتایج مدلسازی برخی ویژگی‌های خاک در منطقه مورد مطالعه به روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی

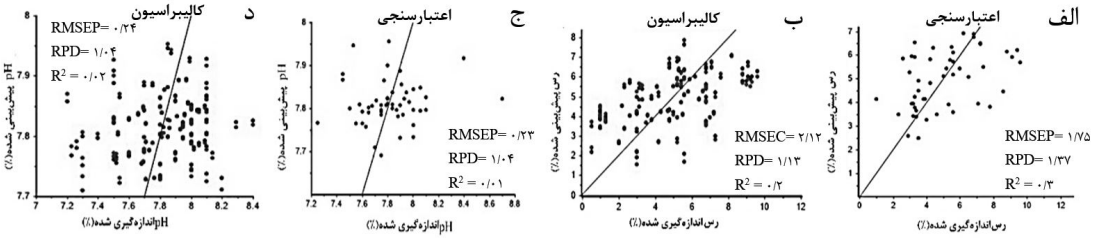
ویژگی‌های خاک	کالیبراسیون			اعتبارسنجی		
	R^2	RMSEC	RPD	R^2	RMSEP	RPD
کربن آلی	0/69	0/17	1/88	0/68	0/18	1/88
کربنات	0/61	1/97	1/80	0/62	2/05	1/78
درصد شن	0/64	4/39	1/74	0/64	3/9	2/25
درصد سیلت	0/60	3/74	1/71	0/66	3/44	2/22
درصد رس	0/2	2/12	1/13	0/3	1/75	1/37
pH	0/02	0/24	1/04	0/01	0/23	1/04

استنبرگ و همکاران (2002) با مطالعه 2060 نمونه خاک سطحی در سوئد ضریب تبیین 0/46 را به دست آوردند. استنبرگ و همکاران (2010) معتقدند اگرچه مواد آلی ویژگی‌های جذبی خاصی در محدوده مادون‌قرمز نزدیک دارند ولی در اغلب موارد این ویژگی‌های جذبی ضعیف‌اند. بنابراین در خاک‌هایی که تنوع کانی‌شناسی بالایی دارند ویژگی‌های جذبی ماده آلی به علت پخش نور پوشیده می‌شود که باعث برآورد ضعیف و تنوع نتایج تخمین ماده آلی در خاک‌های مختلف می‌گردد. سامرز و همکاران (2011) با بررسی 300 خاک در منطقه جنوب استرالیا مقدار کربنات‌های خاک را با ضریب تبیین 0/69 و مقدار RMSE 2/9 پیش‌بینی کردند. بیلگیلی و همکاران (2011) با میزان RPD برابر 1/93 نتایج قابل قبولی را در تخمین میزان کربنات در 512 خاک سطحی در منطقه ترکیه گزارش کردند. هانت (1971) در تحقیقات خود تفاوت‌های کانی‌شناسی خاک‌های مناطق مختلف را در دقت تخمین میزان کربنات مؤثر دانست. شکل4 (ه - و) و (ز - ح) میزان بیش برآوردی و کم‌برآوردی درصد شن و سیلت در مدل را نشان می‌دهد. نتایج، تخمین مناسب درصد شن و سیلت را نشان می‌دهد که این امر می‌تواند با نوع کلاس بافتی منطقه که عمدتاً (Loamy sand و Sand) است در ارتباط باشد. بابائیان و همکاران (2015) در تحقیقات خود بیان کردند که با افزایش اندازه ذرات، مسیر عبور نور از بین ذرات خاک افزایش یافته و نور بیشتری توسط خاک جذب و مقدار بازتاب کاهش می‌یابد. در این وضعیت، مشخصه‌های جذبی واضح‌تر بر روی منحنی‌های طیفی نمایان می‌شوند. البته توجه به این امر که رفتارهای طیفی خاک تابعی از اجزای تشکیل دهنده آن است، بسیار حائز اهمیت است. چانگ و همکاران (2001) نیز شکل و سایز ذرات خاک و نحوه قرارگیری حفرات خاک را در نحوه عملکرد محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک در تخمین ویژگی‌های بافت و ساختمان خاک مؤثر دانستند. در نهایت نتایج دقت آزمایی توابع رگرسیونی



شکل 4- مقادیر اندازه گیری شده در مقابل مقادیر پیش‌بینی شده در گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی ماده آلی (الف، ب)، کربنات (ج، د)، درصد شن (ه، و)، درصد سیلت (ز، ح) با استفاده از مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی

در هر دو سری کالیبراسیون و اعتبارسنجی برای کربن آلی، کربنات، شن و سیلت نشان می‌دهد که اختلاف مقادیر اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده توسط مدل چشمگیر نبوده و کم‌برآوردی و بیش‌برآوردی داده‌های پیش‌بینی شده با توجه به مقادیر RMSE وRPD درحدی نبوده که باعث عدم اعتبار مدل رگرسیونی گردد (شکل4). از سوی دیگر نتایج نشان می‌دهد که پیش‌بینی مدل برای درصد رس خاک ضعیف بوده است (جدول 2) که علت این امر با مقادیر کم رس در نمونه‌های مورد مطالعه در ارتباط است. چانگ و همکاران (2001) مشخصه‌های جذبی در 1450-1300 نانومتر،1950-1850 نانومتر و2400-2200 نانومتر را در ارتباط با رس خاک گزارش نمودند. از سوی دیگر ژی و همکاران (2012) در تحقیقات خود 5 ویژگی جذبی در محدوده مادون قرمز نزدیک شامل 1401-1386 نانومتر، 2138-2133 نانومتر، 2171-2194 نانومتر، 2229- 2273 نانومتر و 2315-2327 نانومتر را مربوط به ماده‌آلی دانستند. کارنلیتو و همکاران (2017b) بیان کردند با توجه به همپوشانی مشخصه‌های جذبی ترکیبات رس و ماده آلی در ناحیه مادون قرمز نزدیک، در صورت کم بودن میزان رس خاک ویژگی‌های جذبی رس تحت تأثیر خصوصیات طیفی ماده آلی قرار گرفته و پوشیده می‌شود و مدل دقت لازم برای تخمین میزان رس را نخواهد داشت. بیلگیلی و همکاران (2011) و دیمت و ترا (2014) نیز در تحقیقات خود اثر پوشانندگی برخی خصوصیات خاک را تحت تأثیر ماده آلی بیان داشتند. شکل5 (الف - ب) و (ج - د) نشان دهنده اختلاف چشمگیر مقادیر واقعی و پیش‌بینی شده در هر دو گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی توسط مدل می‌باشد. و بیش‌برآوردی و کم‌برآوردی میزان رس و pH مشاهده می‌شود. علاوه بر این نتایج حاکی از تخمین ضعیف مقادیر pH می‌باشد (جدول 2). مطالعات حاکی از آن است که pH خاک بر خصوصیات طیفی خاک تأثیر مستقیم ندارد و سایر خصوصیات خاک در تخمین pH مؤثرند. پیری و همکاران (2005) و اسلام و همکاران (2005) همبستگی طیفی میان pH و رس را در تحقیقات خود نشان داده‌اند. لذا تخمین ضعیف درصد رس در این پژوهش، می‌تواند از علل تخمین ضعیف مقادیر pH باشد.



شکل 5- مقادیر اندازه‌گیری شده در مقابل پیش‌بینی شده در گروه کالیبراسیون و اعتبارسنجی درصد رس (الف، ب)، pH (ج، د)، با استفاده از مدل رگرسیون حداقل مربعات

البته بیلگلی و همکاران (2011) و راسل و همکاران (2006) با وجود تخمین مقدار رس، نتایج ضعیف در تخمین میزان pH را در مطالعات خود را به رنج تغییرات محدود pH در منطقه مورد مطالعه می‌دانند.

تأثیر روش‌های مختلف پیش‌پردازش بر پیش‌بینی مدل

پیش‌پردازش طیفی یکی از مراحل مهم در تخمین خصوصیات خاک به روش طیف‌سنجی است. در طیف‌سنجی میزان انعکاس امواج الکترو مغناطیس علاوه بر اینکه به ترکیب شیمیایی نمونه وابسته است به شدت تحت تأثیر خصیصه‌های فیزیکی نمونه نیز می‌باشد که این امر منجر به پخش غیرخطی نور و افزایش پراکنش سطحی امواج می‌گردد. روش‌های پیش‌پردازش با به کارگیری توابع ریاضی، روابط غیرخطی ایجاد شده در ارتباط با میزان جذب نور را تصحیح نموده و با حذف نویز، وضوح مشخصه‌های جذبی و در نهایت بهبود کالیبراسیون را باعث می‌گردند (استنبرگ و همکاران، 2010).

جدول 3- تأثیر روش‌های مختلف پیش‌پردازش بر دقت مدلسازی به روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی

ویژگی خاک	روش پیش پردازش	کالیبراسیون(n=100)			اعتبارسنجی(n=50)		
		R^2	RMSEC	RPD	R^2	RMSEP	RPD
کربن‌آلی	جذب بدون پیش پردازش	0/58	0/2	1/6	0/61	0/2	1/7
	فیلتر میانه	0/63	0/19	1/68	0/68	0/19	1/78
	مشتق اول + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/61	0/2	1/6	0/51	0/22	1/54
	مشتق دوم + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/37	0/25	1/28	0/37	0/25	1/36
	SNV	0/69	0/17	1/88	0/68	0/18	1/88
	MSC	0/66	0/18	1/7	0/66	0/19	1/78
کربنات	جذب بدون پیش پردازش	0/59	1/99	1/78	0/57	2/15	1/7
	فیلتر میانه	0/61	1/97	1/80	0/57	2/15	1/7
	مشتق اول + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/61	1/97	1/80	0/62	2/05	1/78
	مشتق دوم + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/36	2/79	1/27	0/33	2/96	1/23
	SNV	0/58	2/05	1/73	0/53	2/24	1/63
	MSC	0/58	2/05	1/73	0/53	2/24	1/63
درصد شن	جذب بدون پیش پردازش	0/62	4/73	1/61	0/62	4/51	1/95
	فیلتر میانه	0/62	4/57	1/67	0/63	4/4	2
	مشتق اول + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/64	4/39	1/74	0/64	3/9	2/25
	مشتق دوم + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/35	6/32	1/2	0/3	7/72	1/14
	SNV	0/59	4/48	1/70	0/61	4/59	1/91
	MSC	0/59	4/48	1/70	0/6	4/6	1/91
درصد سیلت	جذب بدون پیش پردازش	0/54	3/91	1/63	0/62	3/85	1/98
	فیلتر میانه	0/57	3/75	1/70	0/62	3/85	1/98
	مشتق اول + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/60	3/74	1/71	0/66	3/44	2/22
	مشتق دوم + فیلتر ساویتزکی و گلای	0/24	5/82	1/1	0/3	5/37	1/42
	SNV	0/58	3/72	1/72	0/56	4/13	1/85
	MSC	0/55	4/08	1/57	0/57	4/05	1/88

کارنلیتو و همکاران (2017a) در مطالعات خود برخی روش‌های پیش‌پردازش طیفی را در غالب دو بخش شامل تصحیح پراکندگی طیفی (متغیر نرمال استاندارد و تصحیح پخشیده چندگانه) و مشتق‌گیری طیفی (ساویتزکی و گلای) مورد بررسی قرار دادند و افزایش عملکرد مدل‌های برازش داده شده را گزارش نمودند. لذا در این پژوهش تأثیر برخی روش‌های پیش‌پردازش بر دقت پیش‌بینی مدل رگرسیونی مورد بررسی قرار گرفت (جدول3). نتایج پیش‌پردازش نشان داد که روش مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای به جزء در مورد کربن آلی بهترین نتایج مدلسازی برای خصوصیات مورد مطالعه را در پی داشته است. در مورد ماده آلی روش متغیر نرمال استاندارد (SNV) نتایج بهتری را در برداشت. کارنلیتو و همکاران (2017a) جهت تخمین میزان ماده آلی خاک در 592 نمونه خاک با استفاده از مدل رگرسیون خطی چند متغیره بهترین عملکرد را در روش پیش‌پردازش SNV گزارش نمودند. همچنین ضعیف‌ترین عملکرد مدلسازی مربوط به روش مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای می‌باشد. روش‌های مشتق‌گیری از پرکاربردترین روش‌های پیش‌پردازش در مطالعات طیف‌سنجی محسوب می‌گردند در روش‌های مشتق‌گیری سیگنال‌های ضعیف ثبت شده تقویت می‌گردند و منجر به بهبود برآورد خصوصیات خاک می‌گردند (استنبرگ و همکاران، 2010). اما در روش مشتق دوم به علت اینکه همراه با تقویت سیگنال‌های ضعیف نویزها نیز افزایش می‌یابند دقت مدل کاهش پیدا می‌کند. ناوار و همکاران (2016) در مطالعه خود بر روی روش‌های مختلف پیش‌پردازش، روش مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای را به عنوان روشی مناسب که تأثیر مثبت بر عملکرد مدل دارد معرفی کردند.گرس و همکاران (2014) در تحقیق خود تأثیر 42 روش پیش‌پردازش مختلف را به صورت منفرد و ترکیبی استفاده نموده و روش‌های MSC، SNV D-trending، مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای و را به عنوان بهترین روش‌های پیش‌پردازش

گزارش نمودند. در مقابل روش مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای نتایج کالیبراسیون ضعیفی را داشته که علت آن را افزایش میزان نویز در این روش بیان داشتند. کازنیرک (2011) در مطالعات خود افزایش30 درصدی دقت مدلسازی را با بکارگیری روش‌های مختلف پیش‌پردازش در مقایسه با شرایط بدون پیش‌پردازش گزارش نمود.

نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از تکنیک طیف‌سنجی مرئی و مادون قرمز نزدیک برخی ویژگی‌های خاک برآورد گردید. همچنین تأثیر پنج روش پیش‌پردازش در بهبود عملکرد مدل رگرسیونی مورد ارزیابی واقع گردید. یافته ها حاکی از آن است که اعمال روش‌های پیش‌پردازش به جزء در مورد مشتق دوم باعث بهبود نتایج کالیبراسیون گردیده است. این امر بیانگر این واقعیت است که کاربرد بهینه روش‌های پیش پردازش در افزایش دقت و بهبود کالیبراسیون و به تبع آن افزایش عملکرد مدل‌های رگرسیونی مؤثر می‌باشد. همچنین علت نتایج ضعیف کالیبراسیون در روش مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای افزایش میزان نویز می‌باشد در این روش با آنکه برخی ویژگی‌های طیفی ضعیف، تقویت می‌گردد ولی همزمان میزان نویز نیز افزایش می‌یابد. همچنین نتایج مدلسازی خصوصیات خاک به روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی با استفاده از آماره‌های مختلف مورد ارزیابی قرار گرفت که با توجه به میزان مقادیر RPD، پیش‌بینی مدل برای درصد شن و سیلت کاملاً مناسب، برای ماده آلی و کربنات قابل‌قبول و برای رس و pH ضعیف برآورد گردید. نتایج مبین آن است که مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی روشی مناسب برای استنتاج روابط خطی بین مقادیر اندازه‌گیری شده و مقادیر برآورد شده می باشد. در مجموع یافته‌های این پژوهش نشان می‌دهد که می‌توان از تکنیک طیف‌سنجی مرئی-مادون قرمز نزدیک به عنوان یک روش غیر مستقیم، کم هزینه و غیرمخرب در برآورد خصوصیات خاک استفاده نمود. البته با توجه به تغییر پذیری مکانی و روابط پیچیده موجود در محیط ناهمگن خاک ضروری است انواع روش‌های رگرسیونی در برآورد خصوصیات خاک مورد ارزیابی قرار گیرد. همچنین می‌توان علاوه بر محدوده مرئی و مادون قرمز نزدیک از محدوده امواج مادون قرمز میانی نیز جهت تخمین خصوصیات خاک بهره برد.

فهرست منابع:

1. Babaeian, E., M. Homaee, H. Vereecken, C. Montzka, A. Norouzi, and M.van Genuchten. 2015. A Comparative Study of Multiple Approaches for Predicting the Soil-Water Retention Curve: Hyperspectral Information vs. Basic Soil Properties. Soil Science Society of America Journal. 79:1043-1058.
2. Ben-Dor, E., Y. Inbar, and Y. Chen. 1997. The reflectance spectra of organic matter in the visible near-infrared and short wave infrared region (400-2500 nm) during acontrolled decomposition process. Remote Sens. Environ. 61(1):1-15.
3. Bilgili, A., H. van Es, F. Akbas, and A. Durak. 2010. Visible-near infrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in a semi-arid area of Turkey. Journal of Arid Environments, 74(2): 229-238.
4. Bouyoucos, G. 1962. Hydrometer method improved for making particle size analysis of soils. Agron. J. 54:464-465.
5. Buddenbaum, H., and M. Steffens. 2012. The effects of spectral pretreatments on chemometric analyses of soil profiles using laboratory imaging spectroscopy. Applied and Environmental Soil Science. 1-12.
6. Carnieletto Dotto, A., R. Dalmolin, A. Caten, and S. Grunwald. 2017a. A systematic study on the application of scatter-corrective and spectral derivative preprocessing for multivariate prediction of soil organic carbon by Vis-NIR spectra. Geoderma. 314:262-274.
7. Carnieletto Dotto, A., R. Dalmolina, S. Grunwaldb, A. Catenc, and W. Filhod. 2017b. Two preprocessing techniques to reduce model covariables in soil property predictions by Vis-NIR spectroscopy. Soil & Tillage Research. 172:59-68.

8. Chang, C.W., D.A. Laird, M.J. Mausbach, and C.R. Hurburgh. 2001. Near-Infrared Reflectance Spectroscopy-Principal Components Regression Analyses of Soil Properties . Soil Sci. Soc. Am. J. 65:480-490.
9. Clark, R. N. 1999. Spectroscopy of rocks and minerals, principles of spectroscopy. PP. 3-58. In: A. N. Rencz (Ed.), Remote Sensing for the Earth Sciences: Manual of Remote Sensing. John Wiley & Sons, New York.
10. Clark, R., T. King, M. Klejwa, and N.Vergo. 1990. High spectral resolution reflectance spectroscopy of minerals. Geophysical Research, 95:12653-12680.
11. climate-data for cities worldwide. 2012. Retrieved from http://www.climate-data.org. Germany, Oedheim.
12. Conforti, M., A. Castrignano, G. Robustelli, F. Scarciglia, M. Stelluti, and G. Buttafuoco. 2015. Laboratory-based Vis–NIR spectroscopy and partial least square regression with spatially correlated errors for predicting spatial variation of soil organic matter content. Catena,124:60-67
13. Demattê, J., and f. Terra. 2014. A new perspective on evaluation of soils along pedogenetic alterations Geoderma, (217-218):190-200.
14. Farmer, V., and J. Russell. 1964. The infrared spectra of layer silicates. Spectrochim. Acta, 20:1149-1173.
15. Farifteh, J., A. Farshad, and R.J. George. 2006. Assessing salt-affected soils using remote sensing, solute modeling, and geophysics. Geoderma, 130(3–4):191 −206.
16. Gomez, C., P. Lagacherie, and G. Coulouma. 2008. Continuum removal versus PLSR method for clay and calcium carbonate content estimation from laboratory and airborne hyperspectral measurements. Geoderma,148:141-148.
17. Gras, J., B. Barthès, B. Mahaut, and S. Trupin. 2014. Best practices for obtaining and processing field visible and near infrared (VNIR) spectra of topsoil. Geoderma, 215:126-134.
18. Hunt, G. 1980. Spectroscopic properties of rock and minerals. (p. 295). In C. Stewart (Ed.), Handbook of Physical Properties of Rocks. Florida: CRC Press Inc.
19. Hunt, G., and J. Salisbury. 1971. “Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks: II. Carbonates”. Modern Geology. 2:23-30.
20. Islam, K., B. Singh, and A. McBratney. 2003. Simultaneous estimation of several soil properties by ultra-violet, visible, and near-infrared reflectance spectroscopy. Aust. J. Soil Res. 41:1101-1114.
21. Kim, I., R. Pullanagari, M. Deurer, R. Singh, K. hub, and B. Clothier. 2014.The use of visible and near-infrared spectroscopy for the anlysis of soil water repellency.European Journal of Soil Science. 65:360-368.
22. Kuśnierek, K. 2011. Pre-processing of soil visible and near infrared spectra taken in laboratory and field conditions to improve the within-field soil organic carbon multivariate calibration. The Second Global Workshop on Proximal Soil Sensing, Montreal, Canada. 100-103.
23. Maselli, F., L. Gardin, and L. Bottai. 2006. Automatic mapping of soil texture through the integration of ground, satellite and ancillary data. International Journal of Remote Sensing.TRES-PAP- 427.
24. Mouazen, A., B. Kuang, J. De Baerdemaeker, and H. Ramon. 2010. Comparison amongprincipal component, partial least squares and back propagation neural network analyses for accuracy of measurement of selected soil properties with visible and near infrared spectroscopy. Geoderma,158:23-31.
25. Nawar, S., H. Buddenbaum, J. Hill, J. Kozak, and A. Mouazen. 2016. Estimating the soil clay content and organic matter by means of different calibration methods of vis-NIR diffuse reflectance spectroscopy. Soil & Tillage Research.155:510-522.

26. Nocita, M., A. Stevens, G. Toth, P. Panagos, B. van Wesemael, and L. Montanarella. 2014. Prediction of soil organic carbon content by diffuse reflectance spectroscopy using a local partial least square regression approach. Soil Biol. Biochem. 68:337–347.
27. page, A., R. Miller, and D. Kenney. 1992. Methods of Soil Analysis part II, Chemical and Mineralogical Properties. Madison: SSSA Pub.
28. Pirie, A., B. Singh, and K. Islam. 2005. Ultra-violet, visible, near-infrared, and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopic techniques to predict several soil properties. Aust. J. Soil Res. 43: 713-721.
29. Post, J., and P. Noble. 1993. The near-infrared combination band frequencies of dioctahedral smectites, Micas, and Illites. Clays Clay Min. 41:639-644.
30. Rinnan, Å., F. van denBerg, and S. Engelsen. 2009. Review of the most common preprocessing techniques for near-infrared spectra. TrAC Trends in Analytical Chemistry. 28(10):1201-1222.
31. Smith, K. 1991. Soil Analysis. 2nd ed., Marcel Decker. New York.
32. Stenberg, B., R.Viscarra Rossel, A. Mouazen, and J. Wetterlind. 2010. Visible and near infrared spectroscopy in soil science. Advances in Agronomy. 107:163-215.
33. Stenberg, B., A. Jonsson, and T. Börjesson. 2002. Near infrared technology for soil analysis with implications for precision agriculture. In Near Infrared Spectroscopy: NIR Publications. Proceeding of the 10th International Conference. (pp. 279-284).
34. Summers, D., M. Lewis, B. Ostendorf, and D. Chittleborough. 2011. Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. Ecol. Indic. 11(1):123-131.
35. Viscarra Rossel, R., and T. Behrens. 2010. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. Geoderma, 158:46-54.
36. Viscarra Rossel, R., S.R. Cattle, A. Ortega, and Y. Fouad. 2009. In situ measurements of soil colour, mineral composition and clay content by vis–NIR spectroscopy. Geoderma. 150:253-266.
37. Viscarra Rossel, R., D. Walvoort, A. McBratney, L. Janik, and J. Skjemstad. 2006. Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. Geoderma, 131:59-75.
38. Xie, X.-L., and A.-B. Li. 2016. Improving spatial estimation of soil organic matter in a subtropical hilly area using covariate derived from vis-NIR spectroscopy. Biosystems engineering. 152:126-137.
39. Xie, X.-L., X.-Z. Pan, and B. Sun. 2012. Visible and near-Infrared diffuse reflectance spectroscopy for prediction of soil properties near a copper smelter. Pedosphere. 22:351-366.
40. Xuemei, L., and L. Jianshe. 2013. Measurement of soil properties using visible and short wave-near infrared spectroscopy and multivariate calibration. Measurement. 46(10):3808-3814.

Prediction of Selected Soil Properties Using Visible and Near Infrared Spectroscopy in Bardsir Area, Kerman Province

N. Rasooli, M. H. Farpoor[1], F. Khayamim, and H. Ranjbar

PhD, Student, Department of Soil Science, Faculty of Agriculture, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran; E-mail: Najmehrasooli@yahoo.com

Professor, Dept. of Soil Science, Faculty of Agriculture, Shahid Bahonar University of Kerman; Kerman, Iran; E-mail: farpoor@uk.ac.ir

PhD Graduate, Dept. of Soil Science, Faculty of Agriculture, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran;
E-mail: f.khayamim@ag.iut.ac.ir

Professor, Dept. of Mining Engineering, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran;
E-mail: h.ranjbar@uk.ac.ir

Received: Junuary, 2018 and Accepted: May, 2018

Abstract

Soil spectroscopy in the visible and near infrared (Vis-NIR) range has widely been used as a rapid, cost-effective, and non-destructive technique to predict soil properties. Since little data is available about soil properties determined by using this technique, the present research was carried out to evaluate the efficiency of Vis-NIR spectroscopy to estimate several soil properties in Bardsir area, Kerman Province. About 150 complex surface soil samples were collected from four different land uses from depth of 0-20 cm. Soil organic carbon, equivalent calcium carbonate, pH, and the amount of silt, clay and sand particles were measured by routine laboratory methods. Reflectance spectra were obtained from air-dried samples under controlled laboratory conditions using an ASD FieldSpec Pro spectroradiometer in 350-2500 nm wavelength range. Partial least squares regression was used for calibration of spectral and laboratory data using cross validation. Coefficient of variation for organic carbon, equivalent calcium carbonate, sand, silt, clay, and pH values were 0.68, 0.62, 0.64, 0.66, 0.3, and 0.01, respectively. Based on RPD values (Ratio of Prediction to Deviation), the precision of the prediction model for sand and silt contents was quite suitable, and for organic carbon and equivalent calcium carbonate it was suitable. However, the predictions of the model for clay content and pH were poor. Furthermore, standard normal variate (SNV) was the best pre-processing method to predict organic carbon, whereas, first derivative with SG smoothing (FD-SG) showed better estimation for carbonate, sand, and silt. Consequently, Vis-NIR spectroscopy is capable of predicting several soil properties at the same time. As the model accuracy is acceptable, it has the potential to substitute conventional laboratory analyses of selected soil properties.

Keywords: Validation, Spectral pre-processing, Partial least-squares regression, Reflective spectroscopy

[1.] Corresponding author: Department of Soil Science, Faculty of Agriculture, Shahid Bahonar University of Kerman.