

استفاده از روش طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ در برآورد برخی ویژگی‌های خاک در خاک‌های گچی-آهکی

اکبر حسنی^۱، حسینعلی بهرامی^{۲*}، علی‌اکبر نوروزی^۳ و شاهین اوستان^۴

^۱ دانشجوی دکتری، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، ^۲ دانشیار، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تربیت مدرس، ^۳ استادیار، پژوهشکده حفاظت خاک و آبخیزداری و ^۴ دانشیار، دانشکده کشاورزی، دانشگاه تبریز

تاریخ پذیرش: ۹۲/۰۸/۱۲

تاریخ دریافت: ۹۲/۰۳/۰۷

چکیده

روش‌های طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ بر مبنای حساسیت ترکیبات آلی و معدنی خاک به بازتاب امواج مرئی و فروسرخ استوار شده است و از این ویژگی برای مطالعات کشاورزی و زیست‌محیطی خاک‌ها استفاده می‌شود. علی‌رغم مطالعات گسترده در زمینه طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ خاک‌ها، این مطالعات در خاک‌های گچی ایران انجام نشده است. هدف از این پژوهش، دستیابی به روشی است که بتواند از طریق طیف بازتابی مرئی-فروسرخ پیش‌بینی قابل قبولی از ویژگی‌های شیمیایی خاک‌های گچی-آهکی ارائه دهد. بدین منظور، تعداد ۱۰۲ نمونه خاک از عمق‌های ۰-۳۰ سانتی‌متری در پنج استان جمع‌آوری شد. در نمونه‌ها مقادیر گچ، کربنات کلسیم معادل، ظرفیت تبادل کاتیونی، شوری، pH، کاتیون‌های تبادلی کلسیم، منیزیم، سدیم و پتاسیم، مقادیر رس، شن و سیلت با روش‌های استاندارد، اندازه‌گیری شدند. سپس نمونه‌های خاک با دستگاه طیف‌بین با قدرت تفکیک یک نانومتر در دامنه ۳۵۰ تا ۲۵۰۰ نانومتر اسکن شدند. واسنجی بین داده‌های طیفی و آزمایشگاهی به روش اعتبارسنجی داخلی با کمک مدل‌های PLSR و BRT انجام شد. داده‌های خام طیف بازتاب و داده‌های مشتق اول به‌طور جداگانه و نیز داده‌های ترکیبی این دو مورد استفاده قرار گرفتند. سپس داده‌ها به‌طور تصادفی به دو گروه ۷۰ و ۳۰ درصدی تقسیم شدند و از هر دو گروه یک‌بار به‌عنوان سری واسنجی و بار دیگر به‌عنوان سری اعتبارسنجی استفاده شد. بر اساس نتایج، در بین ویژگی‌های خاک بهترین پیش‌بینی مدل‌ها برای گچ $(R^2=0/79)$ ، کربنات کلسیم معادل $(R^2=0/71)$ ، ظرفیت تبادل کاتیونی $(R^2=0/72)$ ، کلسیم تبادلی $(R^2=0/81)$ ، منیزیم تبادلی $(R^2=0/67)$ ، درصد رس $(R^2=0/82)$ ، درصد شن $(R^2=0/85)$ ، درصد سیلت $(R^2=0/66)$ و مواد آلی خاک $(R^2=0/79)$ به‌دست آمد. مقایسه دو مدل نشان داد که در حالت اعتبارسنجی داخلی، مدل BRT تقریباً در همه متغیرها برآورد بهتری داشت اما وقتی از دو سری جداگانه واسنجی و اعتبارسنجی استفاده شد، بین دو مدل تفاوت چندانی دیده نشد. با توجه به نتایج، به نظر می‌رسد که روش طیف‌سنجی مرئی-فروسرخ می‌تواند به‌عنوان یک روش جایگزین برای روش‌های مرسوم آزمایشگاهی در تعیین ویژگی‌های خاک مطرح باشد و به کاهش تعداد نمونه‌های خاک در پروژه‌های مدیریت منابع طبیعی و آبخیزداری کمک کند.

واژه‌های کلیدی: اعتبارسنجی، بازتاب خاک، واسنجی، BRT، PLSR

مقدمه

خاک یکی از منابع طبیعی و خدادادی می‌باشد که بشر برای تولید غذا، فیبر و انرژی از آن استفاده می‌کند. خاک حرکت آب را تنظیم می‌کند و به‌عنوان فیلتری برای عناصر سمی و سایر آلاینده‌ها عمل می‌نماید. خاک همچنین، نقش مخزن عناصر غذایی در رشد گیاهان را داراست و به‌عنوان مخزنی برای کربن نیز می‌باشد که می‌تواند آثار گرمایش جهانی را تعدیل کند. توانایی خاک در انجام هر کدام از این وظایف به ساختمان، ترکیب و ویژگی‌های شیمیایی، فیزیکی و بیولوژیکی آن دارد که همه این ویژگی‌های خاک در طول زمان و مکان تغییر می‌کند (Bouma, ۱۹۹۷).

طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ بر مبنای حساسیت ترکیبات آلی و معدنی خاک به بازتاب امواج مرئی و فرسرخ استوار شده است و از این ویژگی برای مطالعات کشاورزی و زیست‌محیطی خاک‌ها استفاده می‌شود. طی دو دهه اخیر، تحقیقات در مورد طیف-سنجی بازتاب امواج مرئی (Visible) و فرسرخ (Infrared) در علوم خاک به‌سرعت افزایش یافته است (Stenberg و همکاران، ۲۰۱۰). فرکانس‌های پایه‌ای مولکولی مرتبط با اجزای خاک بیشتر در دو محدوده مرئی و فرسرخ وجود دارد. تمرکز بیشتر مطالعات، روی اجزای اصلی خاک مانند مواد آلی خاک، بافت خاک، مینرالوژی خاک و همچنین، دسترسی عناصر غذایی خاک، حاصلخیزی خاک، ساختمان خاک و فعالیت‌های میکروبی آن می‌باشد (Stenberg و Nordkvist, ۱۹۹۶؛ Stenberg, ۱۹۹۹). دلایل متفاوتی در مورد توجه به طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ در مقایسه با روش‌های آزمایشگاهی وجود دارد. به‌عنوان مثال در این روش آماده‌سازی نمونه فقط شامل هوا خشک کردن و نرم کردن نمونه خاک می‌باشد. نمونه خاک دچار تغییر و تحول نمی‌شود، مواد شیمیایی (که بیشتر آن‌ها خطرناک هستند) مصرف نمی‌شوند، اندازه‌گیری در چند ثانیه انجام می‌شود، تعداد زیادی از ویژگی‌های خاک فقط با یک‌بار اسکن کردن قابل تشخیص هستند و این روش قابلیت اجرا هم در آزمایشگاه و هم در مزرعه را داراست (Viscarrá Rossel و همکاران، ۲۰۰۶).

گسترده‌گی خاک‌های گچی در مناطق خشک و نیمه‌خشک قابل توجه می‌باشد. بیش از ده میلیون هکتار خاک گچی در ایران وجود دارد. این خاک‌ها در دسته خاک‌های با کیفیت متوسط و کم از نظر کشاورزی ارزیابی می‌شوند. اما در صورتی که به خوبی مطالعه و مدیریت شوند، قابلیت تولید بالایی دارند. مقدار گچ در این خاک‌ها عامل مهمی می‌باشد. وقتی مقدار آن کم باشد، برای گیاه مناسب می‌باشد اما در صورتی که مقدار آن افزایش یابد، به‌علت عدم تعادل عناصر غذایی در محلول خاک مشکلاتی به‌وجود خواهد آمد (FAO, ۱۹۹۰). همچنین، وجود گچ در اندازه‌گیری برخی ویژگی‌های خاک چون ظرفیت تبادل کاتیونی (CEC) و توزیع اندازه ذرات با روش‌های رایج آزمایشگاهی ایجاد مزاحمت می‌کند. به‌عنوان مثال روش‌های متداول، CEC را کمتر از مقدار واقعی اندازه‌گیری می‌کنند، زیرا به‌دلیل حل شدن گچ، اشباع مکان‌های تبادل کاتیونی خاک به‌وسیله کاتیون شاخص به‌طور کامل انجام نمی‌شود. هیدرولیز شدن سدیم جذب شده و تثبیت یون آمونیوم نیز از دیگر دلایل هستند. روش‌های ویژه گزارش شده برای خاک‌های گچی نیز زمان‌بر و پرهزینه می‌باشند. به‌علاوه، اندازه‌گیری گچ در خاک‌هایی که مقدار گچ آن‌ها زیاد است نیز با مشکلاتی مواجه می‌باشد (FAO, ۱۹۹۰). از این‌رو نیاز به روش‌هایی که بتوان با استفاده از آن‌ها مقدار گچ و سایر ویژگی‌های شیمیایی خاک را در زمان کم با هزینه معقول و با دقت و صحت قابل قبول تعیین نمود، احساس می‌شود.

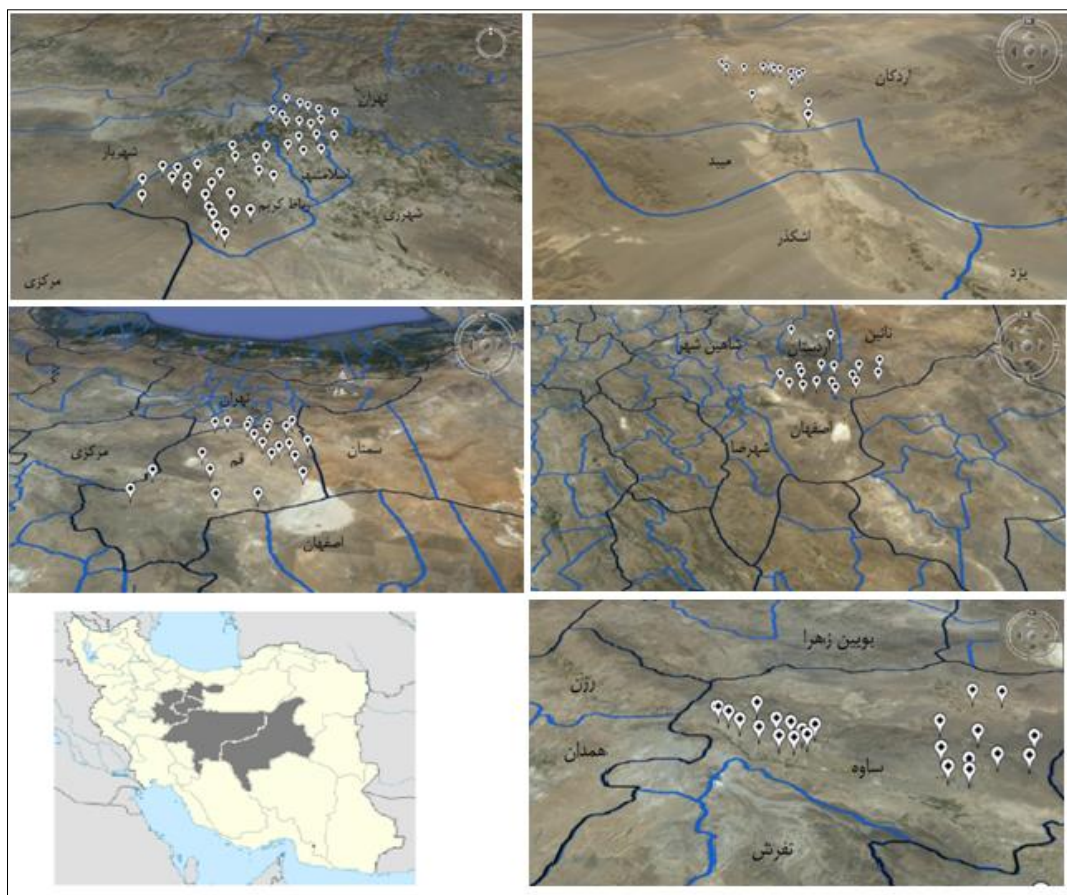
علی‌رغم مطالعات گسترده‌ای که در زمینه طیف‌بینی مرئی-فروسرخ خاک‌ها انجام شده است، این مطالعات در خاک‌های گچی ایران تاکنون انجام نشده است. به‌نظر می‌رسد با توجه به گسترده‌گی خاک‌های گچی در کشور ایران و همچنین، نیاز به دسترسی به روش‌های آنالیز خاک از راه‌های ارزان‌تر، سریع‌تر و ایمن‌تر، جهت مدیریت بهتر این خاک‌ها و تولید بیشتر، تحقیق و بررسی در این مورد ضروری باشد. هدف از این پژوهش، دستیابی به روشی است که بتواند از طریق طیف بازتابی مرئی-فروسرخ تشخیص قابل قبولی از ویژگی‌های شیمیایی خاک‌های گچی

ارائه دهد تا به کاهش تعداد نمونه‌ها در پروژه‌های مدیریت منابع طبیعی و آبخیزداری کمک کند.

مواد و روش‌ها

نمونه‌برداری: نمونه‌های خاک از پنج استان تهران، قم، مرکزی، یزد و اصفهان از خاک‌های با کاربری‌های مختلف جمع‌آوری شد تا مجموعه‌ای از نمونه‌های متفاوت از نظر منشا وجود داشته باشد (شکل ۱). خاک‌های Typic Haplogypsid و Xeric

Calci-gypsid رده‌بندی آمریکایی از نمونه خاک‌های گچی موجود در ایران می‌باشند که از این مناطق نیز نمونه‌برداری انجام شد. تعیین نقاط نمونه‌برداری به شکل تصادفی انجام شد. در نتیجه این عمل، دامنه تغییرات ویژگی‌های خاک بیشتر شد. تعداد ۱۰۲ نمونه خاک در سال ۹۱ انتخاب و هر نمونه از عمق صفر الی ۳۰ سانتی‌متر برداشته شد. نمونه‌های خاک، هواخشک شده و پس از کوبیدن با چکش لاستیکی مخصوص از الک دو میلی‌متری عبور داده شدند.



شکل ۱- نقاط نمونه‌برداری و استان‌های مورد مطالعه در این پژوهش

آنالیز نمونه‌ها در آزمایشگاه: برای اندازه‌گیری گچ موجود در نمونه‌ها، ابتدا نمونه‌های خاک برای حذف سولفات‌های غیرگچی با محلول اتانول ۵۰ درصد تیمار شدند (Berigari و Al-Any، ۱۹۹۴). سپس مقدار کل گچ با استفاده از عصاره‌گیری با آب استخراج شده (Sayegh و Bashour، ۲۰۰۷) و غلظت سولفات موجود در عصاره‌ها به روش کدورت‌سنجی (Greenberg و همکاران، ۱۹۹۵) اندازه‌گیری شد. برای

اندازه‌گیری کربنات کلسیم معادل (CCE) از روش تیتراسیون استفاده شد (Sayegh و Bashour، ۲۰۰۷) و مقدار pH در سوسپانسیون ۱:۲ خاک و آب مقطر با استفاده از دستگاه pH متر با الکتروود شیشه‌ای اندازه‌گیری شد (Janzen، ۱۹۹۳). مقدار EC در عصاره سوسپانسیون ۱:۱ با استفاده از دستگاه EC متر اندازه‌گیری شد. توزیع اندازه ذرات به روش هیدرومتری پس از پیش تیمار با کلرید باریم انجام شد (Bashour و

همکاران، ۱۹۹۵) اندازه‌گیری شد. برای

پس از هر پنج قرائت متوالی، نمونه ۹۰ درجه چرخانده شده و پنج قرائت دیگر انجام شد تا از اختلاف طیفی محتمل که از تغییرات توزیع اندازه ذرات منشا می‌گیرد، جلوگیری شود. سپس از ده طیف به دست آمده میانگین‌گیری شد. دقت و پاسخ آشکارساز با استفاده از یک صفحه سفید استاندارد (whitereference) واسنجی می‌شد، در صورتی‌که قرائت سفید پایداری لازم را نداشت، دستگاه یک‌بار خاموش و روشن می‌شد.

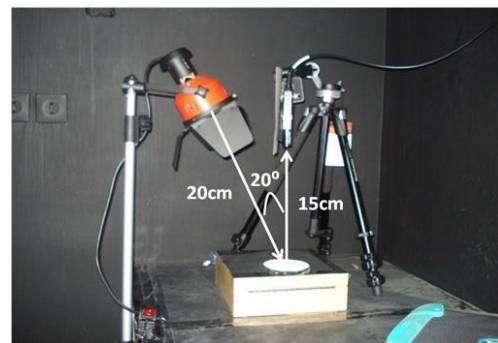
پردازش داده‌ها: از هر نمونه تعداد ده قرائت بازتاب متوالی گرفته و میانگین‌گیری شد و برای هر نمونه خاک یک طیف که بیانگر طیف بازتابی آن بود، در فایل اصلی داده‌ها ثبت شد. داده‌های طیفی با استفاده از پردازنده نرم‌افزار TheUnscramblerX 10.2 به مشتق اول تبدیل شدند. طیف مشتق اول به‌طور کلی عوارض جذبی را بزرگ‌نمایی می‌کند که نشان‌دهنده مقدار مواد مختلف موجود در خاک است و موجب کم شدن تغییرات بین نمونه‌ها می‌شود (Martens و Naes، ۱۹۸۹). مشتق اول و طیف خام هم به‌طور جداگانه و هم به‌طور ترکیبی برای پیش‌بینی تغییرات خاک به‌کار گرفته شدند.

مدل‌سازی: اولین راهکار برای برآورد، استفاده از اعتبارسنجی داخلی (cross validation) با تمام نمونه‌های مورد استفاده در واسنجی بود. سپس آزمون دقت برآوردها با استفاده از اعتبارسنجی، به‌طور جداگانه روی سری زیرنمونه‌ها انجام شد. قبل از انجام واسنجی، نمونه‌ها به‌طور تصادفی به دو زیرنمونه ۳۰ و ۷۰ درصدی تقسیم‌بندی شدند. در مرحله اول از گروه ۷۰ درصدی برای واسنجی و از گروه ۳۰ درصدی برای اعتبارسنجی استفاده شد و در مرحله دوم به‌طور عکس، از گروه ۳۰ درصدی برای واسنجی و از گروه ۷۰ درصدی برای اعتبارسنجی استفاده شد. واسنجی بین بازتاب خاک و پارامترهای خاک با استفاده از دو مدل رگرسیونی حداقل مربعات جزئی (PLSR) و درخت رگرسیونی (BRT) انجام شد.

مدل^۱ PLSR: مدل PLSR از طریق یک رابطه خطی چند متغیره، ارتباطی بین دو ماتریس x و y ایجاد

Sayegh، ۲۰۰۷). تیمار با کلرید باریم باعث تشکیل پوشش نامحلول در سطح ذرات گچ شده و از حل شدن آن‌ها طی مراحل آزمایش هیدرومتری جلوگیری به‌عمل می‌آورد. مواد آلی به‌روش والکلی و بلک اصلاح شده، اندازه‌گیری شد (Somner و Nelson، ۱۹۸۲)، مقدار ظرفیت تبادل کاتیونی (CEC) خاک پس از حذف گچ به‌روش Chapman (۱۹۶۵) اندازه‌گیری شد. سدیم و پتاسیم تبادلی با استات آمونیوم (Knudsen و همکاران، ۱۹۸۲) و کلسیم و منیزیم تبادلی با استات سدیم و الکل (Polemio و Rhoades، ۱۹۷۷) استخراج شده و غلظت سدیم، پتاسیم، کلسیم و منیزیم با دستگاه جذب اتمی اندازه‌گیری شد.

بازتاب طیفی: تهیه طیف خاک‌ها در یک اتاق تاریک و با شرایط استاندارد انجام شد. طیف‌سنجی نمونه‌های خاک با استفاده از دستگاه ASD Fieldspec شرکت آمریکا اسکن شدند. بازتاب مطلق نمونه‌ها در دامنه ۳۵۰ تا ۲۵۰۰ نانومتر و با درجه وضوح یک نانومتر ثبت شدند که در مجموع ۲۱۵۰ نقطه در هر طیف به‌دست آمد. نمونه‌های هوا خشک در یک پتری‌دیش با قطر ۱۰ سانتی‌متر و ضخامت یک سانتی‌متر قرار داده شدند. منبع نور یک لامپ تنگستن هالوژن کوارتز بود که داخل محفظه نوری سنجده نگه‌داری می‌شد. نور از فاصله ۲۰ سانتی‌متری با زاویه ۲۰ درجه نسبت به عمود به هر نمونه تابانده شد و بازتاب از طریق یک چشمی فایبراپتیک که به‌طور عمودی با فاصله ۱۵ سانتی‌متری در بالای پتری‌دیش قرار داشت، ثبت شد (شکل ۲).



شکل ۲- نحوه قرارگیری نمونه‌ها نسبت به منبع نور و سنسور دستگاه طیف‌سنج

¹ Partial Least Square Regression

و همچنین، از طریق ریشه میانگین مربعات خطای برآورد (RMSE) تعیین می‌شود:

$$RMSEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_{pred} - y_{meas})^2}{n-1}} \quad (2)$$

سایر پارامترهای آماری برای ارزیابی برآوردها نیز وجود دارند. شاخص RPD که نسبت انحراف معیار برآورد (SD) به RMSE و شاخص RER که نسبت دامنه (Range) به RMSE می‌باشد، از این موارد هستند که در روابط (۳) و (۴) دیده می‌شود.

$$RPD = \frac{SD}{RMSE} \quad (3)$$

$$RER = \frac{Range}{RMSE} \quad (4)$$

نتایج و بحث

ویژگی‌های خاک: برخی داده‌های آماری و ضرایب همبستگی پیرسون بین آن‌ها به ترتیب در جدول‌های ۱ و ۲ دیده می‌شود. متغیرهای pH، EC، K، Na و به‌طور عمده در این داده‌ها دامنه تغییرات باریکی دارند ولی متغیرهای گچ، کربنات کلسیم معادل، رس، شن، کربن آلی، ظرفیت تبادل کاتیونی و کلسیم و منیزیم محلول دامنه تغییرات گسترده‌ای دارند. در میان کاتیون‌های قابل تبادل، کلسیم بیشترین سهم را از ظرفیت تبادل کاتیونی خاک‌ها شامل می‌شد. همبستگی بین بیشتر متغیرهای خاک معنی‌دار بود. مقدار گچ خاک به‌طور قابل توجهی با مقدار رس ($r=0/53$)، شن ($r=0/32$) و کلسیم تبادلی ($r=0/45$) همبستگی داشت. مقدار ظرفیت تبادل کاتیونی به‌طور معنی‌دار با کربن آلی خاک ($r=0/41$)، سیلت ($r=0/58$) و کاتیون‌های قابل تبادل کلسیم ($r=0/97$)، منیزیم ($r=0/82$)، سدیم ($r=0/48$) و پتاسیم ($r=0/32$) همبستگی داشت. همچنین، مقدار رس با مقدار کربنات کلسیم معادل ($r=0/47$)، مواد آلی خاک ($r=0/34$)، کاتیون‌های کلسیم ($r=0/34$) و منیزیم ($r=0/57$)، ظرفیت تبادل کاتیونی ($r=0/86$) و شن ($r=0/39$) همبستگی داشت. بین مقدار مواد آلی خاک و کلسیم ($r=0/46$) و پتاسیم ($r=0/72$) و همچنین، بین کربنات کلسیم معادل و مقدار سدیم تبادلی ($r=0/35$) همبستگی معنی‌دار برقرار بود.

می‌کند که اولین بار توسط Wold و همکاران (۲۰۰۱) معرفی شد و به‌طور گسترده‌ای در آنالیزهای طیفی مورد استفاده قرار می‌گیرد. این مدل زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد که تعداد زیادی متغیر قابل برآورد وجود داشته باشد و بین آن‌ها رابطه خطی قوی باشد. برازش مدل PLSR با استفاده از نرم‌افزار The Unscrambler X 10.2 انجام شد.

مدل BRT^۱: مدل BRT به‌طور کلی به شکل زیر بیان می‌شود (Friedman، ۲۰۰۱):

$$F(x; \{\beta_m, \alpha_m\}_0^M) = \sum_{m=0}^M \beta_m h(x; \alpha_m) \quad (1)$$

که در آن، $h(x; a)$ بیانگر یک تابع طبقه‌بندی ساده با پارامترهای a و متغیرهای x ، m متغیر نشان‌دهنده مرحله مدل و β_m نیز ضریب وزنی مرحله m می‌باشد. فراگیر پایه با استفاده از الگوریتم شناخته شده AdaBoost (Freund و Schapire، ۱۹۹۷) به‌طور متوالی برای بازتوزین سری داده‌های واسنجی مورد استفاده قرار می‌گیرد تا مشاهدات با مقادیر باقی‌مانده بزرگ‌تر، وزن بیشتری در تکرارهای متوالی داشته باشند. طبقه‌بندی نهایی با یک قضاوت متوازن که در رابطه (۱) دیده می‌شود، انجام می‌شود. مزایای این مدل شامل: توانایی مدیریت تعداد زیادی از رابطه‌های ضعیف در یک مدل تخمینگر، حساسیت بالا به برون-هسته‌ها (outliers) در یک سری داده واسنجی، عدم نیاز به تبدیل هم‌شکل داده‌ها و دوری نسبی از بیش‌برازش^۲ (Friedman و Meulman، ۲۰۰۳؛ Brown و همکاران، ۲۰۰۶) می‌باشد. با توجه به ابعاد بالای ماهیت طیف‌بینی بازتابی و وجود تعداد زیادی از روابط ضعیف و تصادفی بین ویژگی‌های خاک و طیف بازتابی به‌نظر می‌رسد مدل BRT ابزار مناسبی برای تعیین ویژگی‌های خاک با استفاده از طیف‌بینی مرئی-فروسرخ باشد. برازش مدل BRT با استفاده از نرم‌افزار The Unscrambler X 10.2 انجام شد.

دقت برآورد: توانایی روش طیف‌بینی مرئی-فروسرخ در پیش‌بینی ویژگی‌های خاک از طریق ضریب تبیین (R^2) بین مقادیر برآورد شده و مقادیر اندازه‌گیری شده

^۱ Boosted Regression Trees

^۲ Overfitting

جدول ۱- دامنه تغییرات ویژگی‌های اندازه‌گیری شده در نمونه‌ها

انحراف معیار	سری دوم (۳۱ نمونه)			سری اول (۷۱ نمونه)			گج (g.Kg ⁻¹)
	میانگین	بیشینه	کمینه	انحراف معیار	میانگین	بیشینه	
۲/۶	۱۹/۲	۴۱/۵	۰/۰۲	۹/۴	۱۸/۱	۴۷/۹	۰/۰۲
۴۸	۱۶۳	۲۱۱	۱/۵	۵۴	۱۵۱	۲۳۲	۰/۵
۲/۳۰	۱۴/۵	۲۴/۶	۸/۳	۳/۲۴	۱۲/۲۴	۲۳/۴	۷/۲
۰/۲۱	۷/۳۱	۸/۲۳	۷/۱۱	۰/۲۸	۷/۴۹	۸/۴۴	۷/۰۷
۱/۳۴	۳/۸۷	۸/۲۰	۰/۲۳	۱/۲۱	۳/۵۲	۸/۷۵	۰/۳۷
۱/۲۳	۱۱/۱۸	۱۹/۷	۶/۱۳	۱/۶۵	۸/۷۲	۱۶/۹۱	۵/۱۲
۰/۹۲	۲/۷۸	۴/۱۱	۱/۶۱	۱/۳۱	۲/۳۴	۴/۴۲	۱/۴۴
۰/۰۷	۰/۴۳	۰/۵۸	۰/۳۶	۰/۱۸	۰/۹۶	۱/۶۱	۰/۵۷
۰/۰۴	۰/۱۶	۰/۲۵	۰/۱۲	۰/۰۶	۰/۲۲	۰/۴۶	۰/۰۶
۶/۸	۱۹/۴	۳۹/۵	۱/۱	۹/۶۸	۲۱/۷	۴۴/۳	۱/۳
۸۴	۲۷۲	۴۶۸	۷۲	۱۰۹	۲۸۴	۴۸۱	۷۹
۸۹	۳۲۴	۶۹۲	۱۵۱	۱۱۸	۳۴۲	۷۰۳	۱۵۶
۵۴	۳۷۱	۵۶۲	۱۸۴	۷۲	۳۸۳	۵۶۰	۱۸۹

CCE, CEC* و EC به ترتیب نماد ظرفیت تبادل کاتیونی، کربنات کلسیم معادل و قابلیت هدایت الکتریکی و ت به معنای تبدالی می‌باشد.

جدول ۲- همبستگی داخلی پیرسون بین ویژگی‌های مختلف خاک

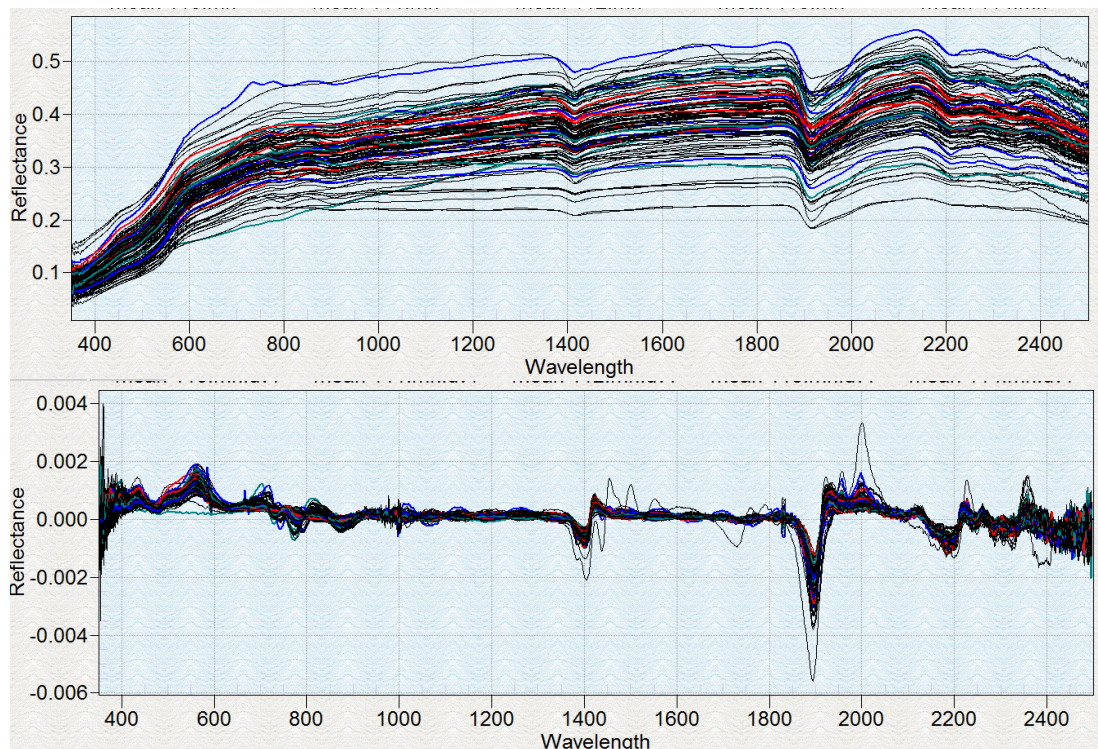
گج	CCE	CEC	pH	EC	OM	کلسیم تبدالی	منیزیم تبدالی	سدیم تبدالی	پتاسیم تبدالی	رس	شن	سیلت
۱/۰۰												
	۱/۰۰											
		۱/۰۰										
			۱/۰۰									
				۱/۰۰								
					۱/۰۰							
						۱/۰۰						
							۱/۰۰					
								۱/۰۰				
									۱/۰۰			
										۱/۰۰		
											۱/۰۰	
												۱/۰۰

** و * به ترتیب در سطح ۰/۰۱ < و ۰/۰۵ ≤ معنی‌دار و ت به معنای تبدالی می‌باشد.

می‌باشد و همچنین، در طول موج‌های ۱۴۰۰، ۱۹۰۰ و ۲۲۰۰ نانومتر عوارض جذبی بارزی در طیف‌ها دیده می‌شود. این باندها در حقیقت به OH آب آزاد در ۱۴۰۰ و ۱۹۰۰ نانومتر و همچنین، OH شبکه رس در طول موج‌های ۱۴۰۰ و ۲۲۰۰ نانومتر (Hunt, ۱۹۸۰) مربوط می‌شود. قله‌های جذب^۱ به‌طور کلی در نمودار مشتق اول به‌طور بارزتری دیده می‌شوند (شکل ۳).

بازتاب خاک: مقدار رطوبت خاک، ماده آلی، اکسیدهای آهن و آلومینیوم و مقدار و نوع رس از اجزای اصلی خاک هستند که طیف بازتابی را به‌طور مستقیم تحت تاثیر قرار می‌دهند و در این مورد با نام متغیرهای اولیه شناخته می‌شوند (Stenberg و همکاران، ۲۰۱۰). در شکل ۳ طیف بازتابی خام همه خاک‌ها و همچنین، مشتق اول آن‌ها دیده می‌شود. بازتاب خاک به‌طور کلی در محدوده مرئی پایین (Islam و همکاران، ۲۰۰۳) و در محدوده فرورسرخ بالا

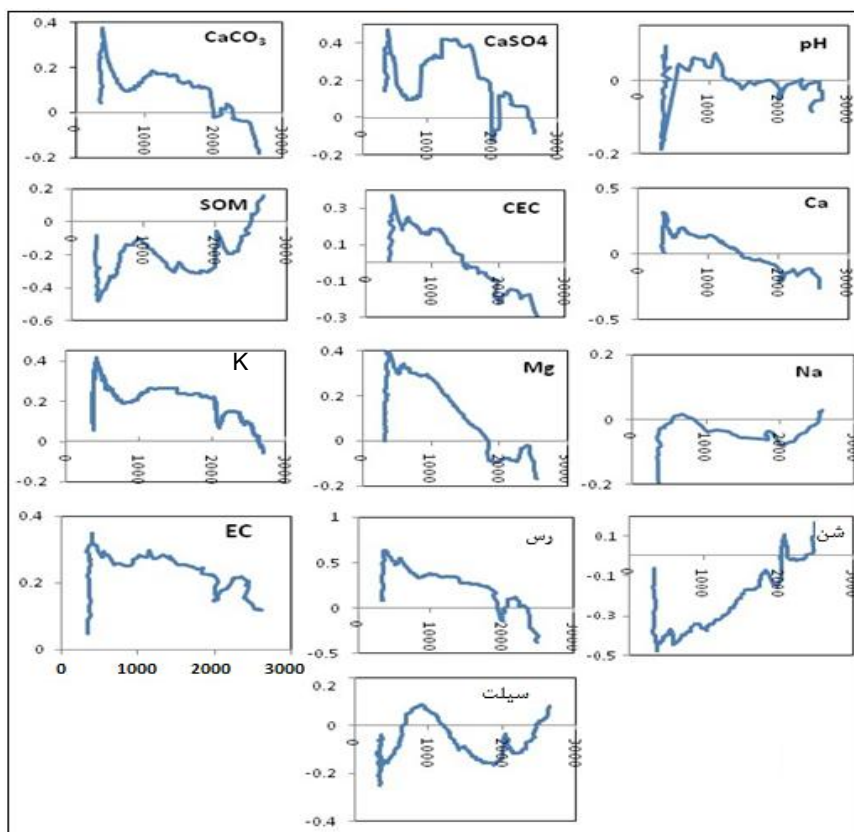
¹ Absorption Peaks



شکل ۳- نمای کلی از طیف خام (بالا) و مشتق اول (پایین) همه نمونه‌های خاک مورد استفاده در این پژوهش

طول موج‌های مختلف موجود در طیف می‌باشد (شکل ۴).

ضرایب همبستگی بین متغیرهای خاک و طیف بازتابی نشان‌دهنده وجود همبستگی مثبت و منفی در



شکل ۴- همبستگی بین ویژگی‌های خاک و میانگین بازتاب در هر طول موج

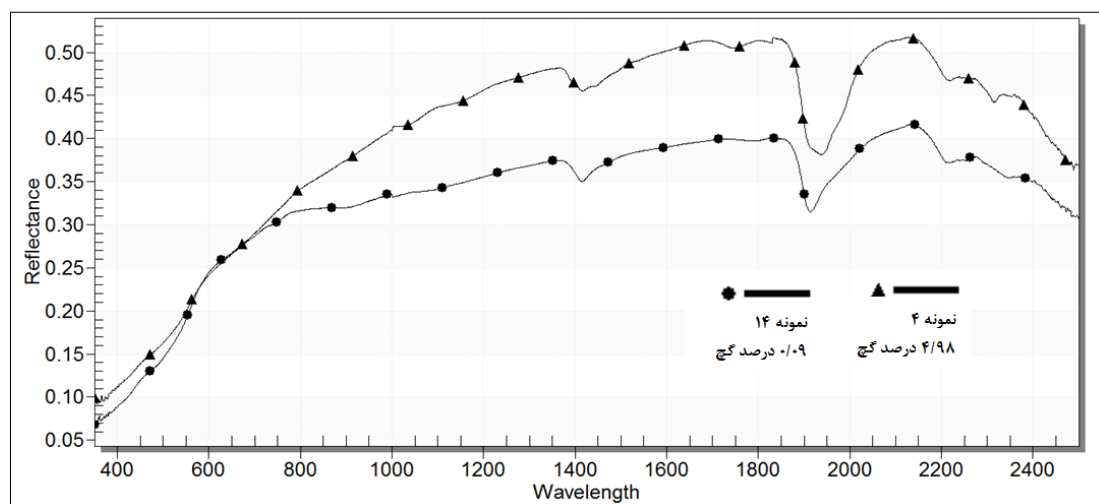
منفی داشت، چرا که در این محدوده بیشتر کانی‌ها فعالیت نوری بالایی دارند. Bowers و Hanks (۱۹۶۵) به‌طور مشابهی گزارش کردند که با افزایش اندازه ذرات مقدار بازتاب کاهش می‌یابد اما Skidmore و همکاران (۱۹۷۵) و Viscarra Rossel و McBratney (۱۹۸۸) مقادیر بازتاب کمتری را گزارش کردند. آنان این اختلاف را با تفاوت‌های کانی‌شناسی رس‌ها در خاک‌های مختلف مرتبط دانستند.

به‌طور کلی مقدار بازتاب خاک با افزایش کربن آلی خاک کاهش یافت، در حالی که وجود کربنات کلسیم معادل و گچ مقدار بازتاب خاک را افزایش داد. در خاک‌هایی که مقدار کربن آلی بیش از دو درصد باشد، ممکن است تاثیر کربن آلی، اثرات سایر ویژگی‌های خاک روی طیف بازتابی را تحت پوشش قرار دهد (Stoner و Baumgardner، ۱۹۸۱). نتایج این تحقیق با این موضوع مغایرت دارد و به نظر می‌رسد که تاثیر کربنات کلسیم معادل، گچ و مواد آلی، بیشتر تحت تاثیر اندازه ذرات خاک‌ها روی طیف‌ها قرار گرفته باشد. همبستگی بین بازتاب طیفی خاک و متغیرهای ثانویه مانند پتاسیم، کلسیم، منیزیم و سدیم تبادلی، ظرفیت تبادل کاتیونی از الگوی متغیرهای اولیه تبعیت کرده چرا که این متغیرها خود با فاکتورهایی مانند مقدار رس و مواد آلی خاک همبستگی قوی دارند. همبستگی بین بازتاب طیفی خاک و متغیرهای pH و شوری از الگوی منظمی پیروی نکرد.

بیشترین همبستگی مربوط به مقدار رس خاک ($r=0/60$) در طول موج ۴۵۰ نانومتر بود و با افزایش مقدار رس، مقدار کل بازتاب افزایش می‌یافت. همبستگی بین طیف بازتاب خاک و مقدار گچ کل موجود در خاک ($r=0/46$) کربنات کلسیم معادل ($r=0/37$) و کربن آلی خاک ($r=-0/49$) در دامنه مرئی طیف بازتابی نیز قابل توجه بود.

مقدار کل بازتاب به‌طور نسبی پایین بود (حداکثر ۵۵ درصد)، Ben-Dor و Banin (۱۹۹۵) در خاک‌های آنتی‌سول و اریدی‌سول فلسطین اشغالی به نتایج مشابهی رسیده بودند. مقدار گچ با مقدار کلی بازتاب در بیشتر محدوده طیف همبستگی مثبت داشت و در محدوده ۱۹۰۰ نانومتر همبستگی منفی دیده شد. به نظر می‌رسد حضور دو مولکول آب در ساختار کانی ژپس ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$) در جذب طیف نوری در این دو محدوده موثر باشد، زیرا این دو محدوده جذبی مربوط به جذب آب می‌باشد و در خاک‌های گچی علاوه بر رطوبت سطحی موجود در سطح خاک، آب موجود در ساختار کانی ژپس باعث کاهش بیشتر بازتاب طیف نوری در این دو محدوده می‌شود (شکل ۵).

مقدار کربنات کلسیم معادل نیز به‌طور مشابهی خاک با طیف بازتابی همبستگی مثبت و منفی داشت. مقدار رس با مقدار کلی بازتاب در محدوده مرئی همبستگی مثبت و در محدوده فروسرخ همبستگی



شکل ۵- طیف خام دو نمونه خاک گچی و غیر گچی

مدل PLSR و BRT برای تمام نمونه خاک‌ها (۱۰۲ نمونه) برآورد شد. جدول ۳ آماره‌های اعتبارسنجی داخلی برآورد ویژگی‌های خاک را با استفاده از طیف‌های خام و مشتق اول به‌طور جداگانه (۲۱۵۰ نقطه) و توام (۴۳۰۰ نقطه) نشان می‌دهد.

همان‌طور که در شکل ۵ ملاحظه می‌شود، کاهش بازتاب در نمونه خاک گچی در محدوده ۱۹۰۰ و ۱۴۰ نانومتر به دلیل وجود مولکول آب در ساختار کانی ژبیسیم بیشتر از خاک غیرگچی می‌باشد. **پیش‌بینی ویژگی‌های خاک:** ویژگی‌های خاک با استفاده از روش Ten out cross validation در دو

جدول ۳- آماره‌های اعتبارسنجی تقاطعی (10-out cross validation) برآوردهای طیف‌بینی مرئی-فروسرخ با روش‌های PLSR و BRT طیف خام، مشتق اول و طیف ترکیبی نمونه‌ها

طیف ترکیبی		مشتق اول		طیف خام		مدل PLSR
RMSE	R ²	RMSE	R ²	RMSE	R ²	
۰/۷۹	۰/۷۱	۰/۸۱	۰/۷۴	۰/۷۷	۰/۷۱	گچ
۱۶/۱۱	۰/۶۲	۱۵/۹۱	۰/۶۳	۱۶/۷۸	۰/۶۲	CCE
۰/۵۸	۰/۷۰	۰/۴۹	۰/۶۹	۰/۵۸	۰/۶۹	CEC
۰/۱۴	۰/۳۴	۰/۱۲	۰/۳۶	۰/۱۱	۰/۳۴	pH
۱/۱۶	۰/۱۴	۱/۱۰	۰/۱۴	۱/۱۷	۰/۱۵	EC
۰/۳۳	۰/۷۳	۰/۳۵	۰/۷۲	۰/۳۶	۰/۷۲	کلسیم تبادل
۰/۲۹	۰/۶۲	۰/۳۱	۰/۶۱	۰/۲۸	۰/۶۱	منیزیم تبادل
۰/۱۹	۰/۲۷	۰/۱۷	۰/۲۵	۰/۱۹	۰/۲۸	سدیم تبادل
۰/۰۶	۰/۴۴	۰/۰۶	۰/۴۵	۰/۰۶	۰/۴۲	پتاسیم تبادل
۳/۶۸	۰/۷۲	۳/۶۲	۰/۷۳	۳/۷۳	۰/۷۱	OM
۳۲/۲۱	۰/۷۸	۳۱/۵۰	۰/۷۸	۳۵/۵۰	۰/۷۸	رس
۴۵/۹۰	۰/۶۳	۴۶/۶۱	۰/۶۳	۴۵/۶۱	۰/۶۱	سیلت
۴۷/۸۰	۰/۸۴	۴۵/۸۷	۰/۸۴	۴۷/۸۷	۰/۸۱	شن

طیف ترکیبی		مشتق اول		طیف خام		مدل BRT
RMSE	R ²	RMSE	R ²	RMSE	R ²	
۰/۶۲	۰/۷۳	۰/۵۸	۰/۷۹	۰/۶۱	۰/۷۴	گچ
۱۴/۸۱	۰/۶۵	۱۰/۲۳	۰/۷۱	۱۴/۷۸	۰/۶۵	CCE
۰/۵۵	۰/۶۸	۰/۴۸	۰/۷۲	۰/۵۵	۰/۶۸	CEC
۰/۱۱	۰/۳۸	۰/۱۰	۰/۳۸	۰/۱۱	۰/۳۷	pH
۱/۲۳	۰/۱۵	۰/۹۸	۰/۲۱	۱/۲۱	۰/۱۶	EC
۰/۲۱	۰/۷۲	۰/۲۴	۰/۸۱	۰/۲۱	۰/۷۱	کلسیم تبادل
۰/۲۳	۰/۶۲	۰/۲۱	۰/۶۷	۰/۲۴	۰/۶۲	منیزیم تبادل
۰/۲۰	۰/۳۳	۰/۱۷	۰/۳۴	۰/۱۹	۰/۳۲	سدیم تبادل
۰/۰۶	۰/۴۵	۰/۰۵	۰/۴۵	۰/۰۶	۰/۴۳	پتاسیم تبادل
۳/۵۷	۰/۶۸	۲/۸۶	۰/۷۹	۳/۵۲	۰/۷۱	OM
۳۳/۱۴	۰/۷۶	۲۶/۱۳	۰/۸۲	۳۲/۴۳	۰/۷۷	رس
۴۴/۰۸	۰/۶۰	۳۹/۹۲	۰/۶۶	۴۴/۲۱	۰/۶۱	سیلت
۴۷/۶۱	۰/۸۱	۳۶/۱۸	۰/۸۵	۴۷/۶۹	۰/۸۰	شن

باشد، از کیفیت برآوردها کاسته می‌شود و این موضوع در هر دو روش PLSR و BRT صادق است (جدول ۴). در پژوهشی Ben-Dor و Banin (۱۹۹۵) با استفاده از یک سری نمونه جداگانه، به مقادیر همبستگی ۰/۶۹ برای مقدار کربنات کلسیم، ۰/۵۵ برای مقدار مواد آلی و ۰/۸۶ برای مقدار رس رسیدند. در این مطالعه نتایج تقریباً مشابهی در مورد مقدار کربنات کلسیم و رس به دست آمد، اما دقت برآورد مواد آلی بیشتر بود.

برآوردهای ظرفیت تبادل کاتیونی و کلسیم و منیزیم تبادلی بهتر از برآورد سدیم و پتاسیم تبادلی می‌باشند. برآورد بهتر کلسیم و منیزیم تبادلی ممکن است به دلیل همبستگی بالای این دو با ظرفیت تبادل کاتیونی و مقدار رس باشد که به خوبی از طریق طیف‌سنجی مرئی-فروسرخ قابل پیش‌بینی هستند. در یک بررسی Chang و همکاران (۲۰۰۱) اذعان کردند که برآورد دقیق ویژگی‌هایی از خاک که عارضه جذبی مستقیمی در طیف مرئی-فروسرخ ندارند، با همبستگی آن‌ها با رس و مواد آلی خاک قابل توجهی هستند. برآوردهای ضعیف سدیم، پتاسیم، pH و شوری احتمالاً به دلیل دامنه کوتاه مقادیر آن‌ها، (جدول ۱) و همچنین، همبستگی ضعیف آن‌ها با متغیرهای اولیه همچون کربنات کلسیم معادل، گچ، رس و مواد آلی می‌باشد.

از آنجایی که آماره‌های RPD و RER بر اساس دامنه و انحراف معیار نمونه‌های مرجع در سری اعتبارسنجی تغییر می‌کنند، لذا برای آن‌ها در مورد ویژگی‌های شیمی و حاصلخیزی خاک مقادیر حد بحرانی وجود ندارد.

در پژوهشی Chang و همکاران (۲۰۰۱) کیفیت برآورد ویژگی‌های خاک به دست آمده از طیف‌سنجی مرئی-فروسرخ را در سه گروه برآورد خیلی خوب، برآورد قابل قبول و برآورد ضعیف گروه‌بندی کردند که مقدار RPD در این سه گروه به ترتیب بیشتر از دو، بین دو تا ۱/۴ و کمتر از ۱/۴ بود. آن‌ها پیشنهاد کردند که برآوردهای گروه قابل قبول با استفاده از استراتژی-های آماری متفاوت، بهتر می‌شوند اما برآوردهای ضعیف، پیش‌بینی‌های قابل اعتمادی را دربر نخواهند داشت. براساس این نوع گروه‌بندی، در این پژوهش

همبستگی طیف خاک با ویژگی خاک در هر دو روش PLSR و BRT نسبتاً بالاست. با ترکیب طیف خام و مشتق اول مقدار همبستگی تغییر چندانی نداشته است. بهترین تخمین مربوط به طیف مشتق اول روش BRT می‌باشد.

در پژوهشی Reeves و همکاران (۲۰۰۲) بیان کردند که نتایج تخمین ممکن است بر مبنای روش‌های مختلف پردازش آماری داده‌ها و مشتقات طیف‌ها تغییر کند. فرایند مشتق اول برای حذف اثرات اندازه ذرات و پراکنش نوری مناسب است (Tsai و Philpot, ۱۹۹۸). در این مطالعه پراکنش نوری ثابت بود و خاک‌ها با یک چرخش ۹۰ درجه‌ای پس از ده قرائت دوباره اسکن می‌شدند. در بین ویژگی‌های خاک بهترین تشخیص مدل‌ها برای گچ ($R^2=0/79$)، کربنات کلسیم ($R^2=0/71$)، ظرفیت تبادل کاتیونی ($R^2=0/72$)، کلسیم تبادلی ($R^2=0/81$)، منیزیم تبادلی ($R^2=0/67$)، رس ($R^2=0/82$)، شن ($R^2=0/85$) و سیلت ($R^2=0/66$) به دست آمد. مقادیر R^2 برای برآورد سایر ویژگی‌های خاک کمتر از ۰/۵۰ بود.

روش اعتبارسنجی n-out cross validation در برآورد نمونه‌های جدید ناشناخته منجر به نتایج خوش‌بینانه (over-optimistic) می‌شود. مدل‌های ایجاد شده برای طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ به‌طور عمده تجربی هستند و لذا بهتر است، اعتبارسنجی آن‌ها روی یک سری نمونه جدید که مستقل از سری نمونه‌های واسنجی هستند، انجام شود. پارامترهای آماری برآورد طیف‌سنجی مرئی-فروسرخ با روش‌های PLSR و BRT در شکل ۵ و جدول ۴ دیده می‌شود.

مقادیر R^2 در سری اعتبارسنجی کمتر از سری واسنجی و مقادیر RMSE در سری اعتبارسنجی بیشتر از مقادیر مشابه آن در سری واسنجی است ولی با این وجود کارکرد آماری آن تغییر چندانی نداشته است. هنگامی که از نمونه‌های مستقل برای اعتبارسنجی استفاده می‌شود، رسیدن به سطوح برآوردی مشابه غیرمعمول است، حتی اگر هر دو سری داده‌ها خاستگاه مکانی مشابهی داشته باشند (Dardanne و همکاران، ۲۰۰۰). نتایج نشان می‌دهد که وقتی سری واسنجی کمتر از سری اعتبارسنجی

برآورد مقدار گچ، کربنات کلسیم معادل، ظرفیت تبادل کاتیونی، کلسیم، منیزیم، رس و سیلت با مقدار RPD به ترتیب ۲/۸۶، ۲/۶۵، ۲/۱۳، ۲/۵۶، ۲/۷۵، ۲/۸۲ و ۲/۳۳ در گروه خیلی خوب و برآورد مواد آلی و مقدار شن با مقدار RPD به ترتیب ۱/۶۴ و ۱/۶۲ در گروه قابل قبول قرار می‌گیرند.

جدول ۴- آماره‌های اعتبارسنجی تقاطعی برآوردهای طیف‌بینی مرئی-فروسرخ با روش‌های PLSR و BRT طیف خام، مشتق اول و طیف ترکیبی نمونه‌ها

سری دوم اعتبارسنجی (۳۱ نمونه واسنجی و ۷۱ نمونه اعتبارسنجی)						سری اول اعتبارسنجی (۷۱ نمونه واسنجی و ۳۱ نمونه اعتبارسنجی)						
RPD	RER	RMSE val	R ² val	RMSE cal	R ² cal	RPD	RER	RMSE val	R ² val	RMSE cal	R ² cal	
												مدل PLSR
۲/۶۵	۵۷/۶۷	۰/۸۳	۰/۷۱	۰/۶۱	۰/۷۶	۳/۲۱	۵۱/۲۱	۰/۸۱	۰/۷۲	۰/۶۹	۰/۷۵	گچ
۲/۸۶	۱۳/۲۴	۱۷/۴۸	۰/۶۲	۱۵/۷۸	۰/۶۶	۲/۶۸	۱۱/۷۰	۱۷/۹۲	۰/۶۵	۱۶/۱۴	۰/۶۸	CCE
۳/۱۳	۲۴/۱۷	۰/۶۷	۰/۶۸	۰/۵۵	۰/۷۲	۳/۲۳	۲۲/۹۶	۰/۷۱	۰/۶۹	۰/۶۲	۰/۷۳	CEC
۱/۶۴	۷/۶۱	۰/۱۸	۰/۳۷	۰/۰۹	۰/۴۱	۱/۵۰	۸/۰۰	۰/۱۴	۰/۳۵	۰/۱۰	۰/۳۹	pH
۰/۸۳	۵/۷۸	۱/۴۵	۰/۱۵	۱/۰۱	۰/۱۷	۱/۰۵	۶/۲۳	۱/۲۸	۰/۱۶	۱/۰۸	۰/۲۱	EC
۲/۵۶	۲۸/۷۵	۰/۴۱	۰/۷۲	۰/۲۹	۰/۷۵	۳/۱۵	۳۴/۸۰	۰/۳۹	۰/۷۳	۰/۳۱	۰/۷۶	کلسیم تبادلی
۲/۷۵	۹/۳۱	۰/۳۲	۰/۶۱	۰/۲۶	۰/۶۴	۲/۸۷	۷/۸۱	۰/۳۲	۰/۶۱	۰/۲۶	۰/۶۴	منیزیم تبادلی
۰/۳۵	۴/۵۲	۰/۲۳	۰/۲۸	۰/۱۲	۰/۳۳	۰/۳۶	۱/۱۶	۰/۱۹	۰/۲۹	۰/۱۱	۰/۳۲	سدیم تبادلی
۱/۰۰	۶/۶۷	۰/۰۶	۰/۴۲	۰/۰۴	۰/۴۶	۰/۶۷	۲/۱۷	۰/۰۶	۰/۴۳	۰/۰۴	۰/۴۶	پتاسیم تبادلی
۱/۶۲	۱۰/۴۳	۴/۱۲	۰/۷۱	۳/۱۱	۰/۷۸	۱/۷۳	۹/۸۲	۳/۹۱	۰/۷۴	۳/۱۲	۰/۷۷	OM
۲/۸۲	۱۰/۴۰	۳۸/۶۴	۰/۷۹	۳۴/۵۰	۰/۸۴	۲/۲۴	۱۰/۵۶	۳۷/۵۰	۰/۷۹	۳۴/۵۴	۰/۸۳	رس
۲/۳۳	۱۰/۷۸	۵۰/۷۲	۰/۶۱	۴۲/۵۸	۰/۶۵	۱/۸۳	۱۱/۱۳	۴۸/۶۱	۰/۶۱	۴۴/۳۷	۰/۶۴	سیلت
۱/۳۹	۷/۱۵	۵۱/۸۷	۰/۷۷	۴۵/۸۸	۰/۸۱	۱/۰۴	۷/۲۸	۵۱/۸۷	۰/۸۱	۴۶/۲۳	۰/۸۳	شن
												مدل BRT
۲/۵۰	۵۴/۴۱	۰/۸۸	۰/۶۸	۰/۶۶	۰/۸۱	۳/۴۷	۵۵/۳۱	۰/۷۵	۰/۷۱	۰/۶۹	۰/۷۸	گچ
۲/۴۱	۱۱/۱۸	۲۰/۷۰	۰/۵۶	۱۴/۴۹	۰/۶۳	۲/۹۲	۱۲/۷۴	۱۶/۴۴	۰/۶۳	۱۵/۱۰	۰/۶۹	CCE
۳/۰۰	۲۳/۱۴	۰/۷۰	۰/۶۷	۰/۵۱	۰/۷۱	۴/۱۱	۲۹/۱۰	۰/۵۶	۰/۷۰	۰/۵۲	۰/۷۷	CEC
۲/۳۳	۱۱/۴۱	۰/۱۲	۰/۳۳	۰/۰۹	۰/۴۲	۱/۹۱	۱۰/۱۸	۰/۱۱	۰/۳۶	۰/۱۰	۰/۳۶	pH
۰/۹۰	۶/۲۱	۱/۳۵	۰/۱۵	۱/۰۱	۰/۲۲	۱/۱۷	۶/۹۹	۱/۱۴	۰/۱۷	۱/۰۵	۰/۲۵	EC
۲/۵۰	۲۸/۰۷	۰/۴۲	۰/۷۰	۰/۳۱	۰/۷۴	۳/۵۱	۳۸/۷۷	۰/۳۵	۰/۷۷	۰/۳۲	۰/۷۵	کلسیم تبادلی
۲/۷۵	۹/۳۱	۰/۳۲	۰/۵۵	۰/۲۵	۰/۶۴	۳/۲۸	۸/۹۳	۰/۲۸	۰/۶۱	۰/۲۵	۰/۶۵	منیزیم تبادلی
۰/۴۲	۵/۴۷	۰/۱۹	۰/۲۱	۰/۱۷	۰/۲۷	۰/۳۷	۱/۱۶	۰/۱۹	۰/۲۸	۰/۱۷	۰/۴۱	سدیم تبادلی
۰/۸۵	۵/۷۱	۰/۰۷	۰/۳۶	۰/۰۶	۰/۳۸	۰/۶۷	۲/۱۷	۰/۰۶	۰/۴۲	۰/۰۵	۰/۴۲	پتاسیم تبادلی
۱/۵۶	۱۰/۰۵	۴/۲۸	۰/۷۲	۳/۲۳	۰/۷۸	۱/۸۶	۱۰/۵۲	۳/۶۵	۰/۷۵	۳/۳۵	۰/۸۳	OM
۲/۶۱	۹/۶۲	۴۱/۷۹	۰/۷۳	۳۱/۶۲	۰/۸۸	۲/۴۳	۱۱/۴۷	۳۴/۵۲	۰/۷۸	۳۱/۹۵	۰/۸۶	رس
۲/۲۵	۱۰/۴۳	۵۲/۴۱	۰/۶۰	۳۹/۴۰	۰/۶۶	۲/۰۱	۱۲/۱۹	۴۴/۳۷	۰/۲	۴۱/۰۵	۰/۶۷	سیلت
۱/۳۱	۶/۷۵	۵۵/۰۰	۰/۷۷	۴۱/۸۷	۰/۸۴	۱/۱۵	۸/۰۶	۴۶/۹۱	۰/۸۰	۴۳/۰۸	۰/۸۱	شن

آوردند. این نکته را نیز باید در نظر گرفت که آن‌ها از روش cross-validation استفاده کردند که این روش برآوردهای ظاهری متفاوتی نسبت به کارکرد واقعی مدل به دست می‌دهد (Dardanne و همکاران، ۲۰۰۰). در پژوهشی دیگر Islam و همکاران (۲۰۰۳) از روش آماری مشابه با تحقیق حاضر استفاده کردند و به

برآورد مقادیر پتاسیم، سدیم، شوری و شن با مقادیر RPD بین ۰/۳۵ تا ۱/۳۹ در گروه ضعیف قراردارند. در همان پژوهش، Chang و همکاران (۲۰۰۱) مقادیر RPD را برای کربن آلی، رس، شن، ظرفیت تبادل کاتیونی، کلسیم و منیزیم به ترتیب ۲/۷۱، ۱/۷۱، ۱/۳۲، ۲/۲۸، ۲/۴۹، ۱/۴۹ و ۱/۷۵ به دست

برهمکنشی آن و همچنین، ترکیب خطی متغیرهای خاک باشد.

روابط غیرخطی بین طیف خاک (در محدوده فرورسرخ میانه) و ویژگی‌های خاک معمولاً در داده‌های با دامنه گسترده به وجود می‌آید و ممکن است به علت اعوجاج سیگنال‌های قوی و اختلافات مینرالوژیکی در مقادیر کم و زیاد ویژگی‌های خاک‌ها در سری واسنجی باشد (Janik و Skjemstad, ۱۹۹۵). در یک پژوهش Brown و همکاران (۲۰۰۶) دو مدل PLSR و BRT را در برآورد برخی ویژگی‌های فیزیکوشیمیایی خاک‌ها مورد استفاده قرار دادند و مدل BRT را بهتر از مدل PLSR معرفی کردند. آنان علت برتری این مدل را توانایی آن در مدیریت روابط غیرخطی و برهمکنش‌ها و همچنین، جلوگیری از بیش‌برازش عنوان کردند. در پژوهشی دیگر Viscarra Rossel و Behrens (۲۰۱۰) با روش‌های مختلف داده‌کاو (data mining) از مدل‌های مختلف خطی و غیرخطی از جمله دو مدل PLSR و BRT در تفسیر طیف خاک‌ها استفاده کردند که در نهایت مدل PLSR بهتر از مدل BRT قادر به تفسیر و برآورد ویژگی‌های خاک‌ها بود.

با این وجود، برخلاف روش cross validation، هنگامی که از دو زیرسری داده جداگانه اعتبارسنجی استفاده شود، نتایج حاصل از دو مدل PLSR و BRT چندان تفاوتی با هم ندارند و حتی مدل PLSR در برخی موارد بهتر عمل می‌کند. این احتمالاً به علت نوع روش آماری مدل BRT می‌باشد که نسبت به مدل PLSR منطقه‌ای‌تر است و لذا هر قدر تعداد نمونه در سری اعتبارسنجی افزایش یابد، مدل‌های عام‌تر موفق‌تر عمل می‌کنند.

در این تحقیق استفاده از طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ در پیش‌بینی ویژگی‌های شیمیایی خاک‌های گچی-آهکی برخی مناطق ایران و کارایی دو مدل آماری PLSR و BRT مورد بررسی قرار گرفت. استفاده از این روش منجر به برآوردهای خوبی از مقادیر گچ، کربنات کلسیم معادل، ظرفیت تبادل کاتیونی، کلسیم و منیزیم تبادلی، مواد آلی و مقدار رس و شن در نمونه‌های خاک شد. نتایج حاصل از این

مقادیر RPD ۱/۸، ۱/۹، ۱/۵، ۱/۶، ۱/۷ و ۱/۷ به ترتیب برای مقادیر pH، رس، شن، ظرفیت تبادل کاتیونی، کلسیم قابل تبادل و منیزیم قابل تبادل رسیدند.

برآورد ضعیف pH در این تحقیق ممکن است به دلیل دامنه بسیار کوتاه آن باشد که این موضوع توسط Viscarra Rossel و همکاران (۲۰۰۶) نیز تایید شده است. همچنین، ممکن است که مقدار pH به‌طور ذاتی برآورد ضعیفی با طیف‌سنجی بازتابی مرئی-فروسرخ داشته باشد. در یک پژوهش میدانی Shepherd و Walsh (۲۰۰۲) با بررسی خاک‌های شرق و جنوب آفریقا برآوردهای خوبی از pH (نسبت آب به خاک ۱:۲/۵ و دامنه ۱۰-۴/۲ و تعداد ۷۵۸ نمونه) با مقدار R^2 و RMSE به ترتیب ۰/۸۳ و ۰/۳۴ رسیدند. همچنین، در بررسی دیگری Dunn و همکاران (۲۰۰۲) با بررسی ۵۵۰ نمونه خاک جنوب شرقی استرالیا با دامنه pH ۳/۸ تا ۷/۳ (نسبت آب به محلول کلرید کلسیم ۱:۵) به مقادیر $R^2=0/۸۰$ ، $SEP=0/۳۲$ و $RPD=2/۳$ رسیدند. به‌طور مشابه Islam و همکاران (۲۰۰۳) نیز با بررسی نمونه خاک‌هایی از مناطق مختلف از یازده رده خاک در استرالیا با دامنه pH بین ۳/۷ تا ۹/۷ با مقدار $R^2=0/۷۱$ و SEP برابر با ۰/۶۱ رسیدند. این نکته را باید در نظر گرفت که در این مطالعات سطح منطقه مورد مطالعه و دامنه مقادیر pH بالا بوده است که قادر به برآورد نسبتاً خوبی از pH بوده‌اند در حالی که دامنه pH در تحقیق حاضر بین ۷/۰۷ تا ۸/۴۴ می‌باشد. همچنین، Volkan Bilgili و همکاران (۲۰۱۰) در تحقیق مشابهی در خاک‌های آهکی ترکیه به برآورد ضعیفی از pH با مقدار R^2 و RPD به ترتیب ۰/۲۱ و ۱/۰۴ رسیدند.

مقایسه دو مدل: در روش 10-out cross validation مدل BRT تقریباً در همه موارد نسبت به مدل PLSR عملکرد بهتری داشت (جدول ۳). مدل PLSR قبل از این نیز توسط محققان برای واسنجی بسیاری از متغیرهای خاک از جمله غلظت کاتیون‌های فلزی و مواد آلی خاک مورد استفاده قرار گرفته بود. برتری مدل BRT ممکن است به علت غیرخطی بودن و اثرات

تاثیر نوع مدل واسنجی و یا نوع تیمار اعمال شده بر طیف‌های خاک چندان موثر نباشد. با توجه به تغییرپذیری ویژگی‌های خاک از نظر مکانی و همچنین، پرهزینه و وقت‌گیر بودن روش‌های مرسوم آزمایشگاهی در تعیین ویژگی‌های خاک، به نظر می‌رسد که روش طیف‌بینی مرئی-فروسرخ می‌تواند به‌عنوان یک روش جایگزین مطرح باشد و به کاهش تعداد نمونه‌ها در پروژه‌های مدیریت منابع طبیعی و آبخیزداری کمک کند.

پژوهش به‌طور کلی در توافق با پژوهش‌های سایر پژوهشگران در سایر کشورها و با مقیاس‌های متفاوت بود. مقایسه دو مدل PLSR و BRT نشان داد که در حالت cross validation مدل BRT تقریباً در همه متغیرها برآوردهای بهتری داشت اما وقتی که از دو سری جداگانه واسنجی و اعتبارسنجی استفاده شد، بین دو مدل تفاوت چندانی دیده نشد. به نظر می‌رسد دقت مدل‌های واسنجی بیشتر به دامنه مقادیر داده‌ها و درجه همبستگی داخلی آن‌ها ارتباط داشته باشد و

منابع مورد استفاده

1. Bashour, I.I. and A.H. Sayegh. 2007. Methods of analysis for soils of arid and semi-arid regions. 1st ed. FAO, USA.
2. Ben-Dor, E. and A. Banin. 1995. Nearinfrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 59: 364–372.
3. Berigari, M.S. and F.M.S. Al-Any. 1994. Gypsum determination in soils by conversion to water-soluble sodium sulfate. *Soil Science Society of America Journal*, 58: 1624–1627.
4. Bouma, J. 1997. Soil environmental quality: A European perspective. *Journal of Environmental Quality*, 26: 26–31.
5. Bowers, S.A. and R.J. Hanks. 1965. Reflection of radiant energy from soils. *Soil Science*, 100: 130–137.
6. Brown, D.J., K.D. Shepherd, M.G. Walsh, M.D. Mays and T.G. Reinsch. 2006. Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 132: 273–290.
7. Chapman, H.D. 1965. Cation exchange capacity. In C.A. Black et al. (ed.) *Methods of soil analysis*. Agronomy 9:891-901. American Society of Agronomy, Inc., Madison, Wisconsin.
8. Chang, C.W., D.A. Laird, M.J. Mausbach, J. Maurice and J.R. Hurburgh. 2001. Near-Infrared reflectance spectroscopy–principal components regression analyses of soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 65: 480–490.
9. Dardanne, P., G. Sinnaeve and V. Baeten. 2000. Multivariate calibration and chemometrics for near infrared spectroscopy: which method? *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 8: 229–237.
10. Dunn, B.W., H.G. Beecher, G.D. Batten and S. Ciavarella. 2002. The potential of nearinfrared reflectance spectroscopy for soil analysis, a case study from the Riverine Plain of south-eastern Australia. *Australian Journal of Experimental Agriculture*, 42: 607–614.
11. FAO. 1990. Management of gypsiferous soils. Bulletin 69, FAO, Rome.
12. Freund, Y. and R.E. Schapire. 1997. A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting. *Journal of Computer and System Sciences*, 55(1): 119–139.
13. Friedman, J.H. 2001. Greedy function approximation: a gradient boosting machine. *The Annals of Statistics*, 29: 1189–1232.
14. Friedman, J.H. and J.J. Meulman. 2003. Multiple additive regression trees with application in epidemiology. *Statistics in Medicine*, 22(9): 1365–1381.
15. Greenberg, A.E., L.S. Clesceri and A.D. Eaton. 1995. Standard methods for the examination of water and wastewater. 19th ed., American Public Health Association, Washington, USA.
16. Hunt, G.R. 1980. Spectroscopic properties of rock and minerals. In: Stewart, C.R. (ed.), *Handbook of Physical Properties of Rocks*. CRC Press Inc., Florida. 295 pages.
17. Islam, K., B. Singh and A. McBratney. 2003. Simultaneous estimation of several soil properties by ultraviolet, visible and nearinfrared reflectance spectroscopy. *Australian Journal of Soil Research*, 41: 1193–1202.
18. Janik, L.J. and J.O. Skjemstad. 1995. Characterization and analysis of soils using midinfrared partial least squares. II. Correlations with some laboratory data. *Australian Journal of Soil Research*, 33: 637–650.
19. Janzen, H.H. 1993. Soluble salts. In: M.R. Carter (ed.), *Soil Sampling and Methods of Analysis*. CRC Press Inc., Florida, 161–166.
20. Knudsen, D., G.A. Peterson and P.F. Pratt. 1982. Lithium, sodium, and potassium. In: A.L. Page (ed), *Methods of Soil Analysis, Part 2.*, Pages 225-246, ASA-SSSA, Madison, WI, USA.

21. Martens, H. and T. Naes. 1989. *Multivariate calibration*. Second ed., John Wiley and Sons Ltd, Chichester, UK. 419 pages.
22. Nelson, D.W. and L.E. Sommers. 1982. Total carbon, organic carbon, and organic matter. In: A.L. Page, R.H. Miller and D.R. Keeney, (eds.), *Methods of Soil Analysis (Part II)*. Agronomy Monograph, 9: 570–571.
23. Polemio, M. and J.D. Rhoades. 1977. Determining cation exchange capacity: a new procedure for calcareous and gypsiferous soils. *Journal of the Soil Science Society of America*, 41: 524-528.
24. Reeves, J., G. McCarty and T. Mimmo. 2002. The potential of diffuse reflectance spectroscopy for the determination of carbon inventories in soils. *Environmental Pollution*, 116: 277–284.
25. Shepherd, K.D. and M.G. Walsh. 2002. Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 66: 988–998.
26. Skidmore, E.L., J.D. Dickerson and H. Schimmelpfenning. 1975. Evaluating surface soil water content by measuring reflectance. *Soil Science Society of America Journal*, 39: 238–242.
27. Stenberg, B., R.A. Viscarra Rossel, A.M. Mouazen and J. Wetterlind. 2010. Visible and nearinfrared spectroscopy in soil science. *Advances in Agronomy*, 107: 163-215.
28. Stenberg, B. 1999. Monitoring soil quality of arable land: microbiological indicators. *Acta Agriculturae Scandinavica, Section B, Soil and Plant Science*, 49: 1–24.
29. Stenberg, B. and E. Nordkvist. 1996. Nearinfrared reflectance measurements to assess the chemical and physical variations in arable soils. In: *NearInfrared Spectroscopy, The Future Waves*, (A.M.C. Davies and P. Williams (eds.)), NIR Publications, Chichester, UK/Montreal, Canada, pages 498–504.
30. Stoner, E.R. and M.F. Baumgardner. 1981. Characteristic variations in reflectance of surface soils. *Soil Science Society of America Journal*, 45: 1161–1165.
31. Tsai, F. and W. Philpot. 1998. Derivative analysis of hyperspectral data. *Remote Sensing Environment*, 66: 41–51.
32. Viscarra Rossel, R.A. and T. Behrens. 2010. Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma*, 158: 46–54.
33. Viscarra Rossel, R.A. and A.B. McBratney. 1998. Soil chemical analytical accuracy and costs: implications from precision agriculture. *Australian Journal of Experimental Agriculture*, 38: 765–775.
34. Viscarra Rossel, R.A., D.J.J. Walvoort, A.B. McBratney, L.J. Janik and J.O. Skjemstad. 2006. Visible, nearinfrared, midinfrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. *Geoderma*, 131: 59–75.
35. Volkan Bilgili, A., H.M. Van Es, F. Akbas, A. Durak and W.D. Hively. 2010. Visible nearinfrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in a semi-arid area of Turkey. *Journal of Arid Environments*, 74: 229–238.
36. Wold, S., M. Sjostrom and L. Eriksson. 2001. PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 58: 109–130.

Visible-near infrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in gypseous and calcareous soils

Akbar Hassani¹, Hosseinali Bahrami^{*2}, Aliakbar Noroozi³ and Shahin Oustan⁴

¹ PhD Student, Faculty of Agriculture, Tarbiat Modares University, Iran, ² Associate Professor, Faculty of Agriculture, Tarbiat Modares University, Iran, ³ Assistant Professor, Soil Conservation and Watershed Management Research Institute, Iran and ⁴ Associate Professor, Faculty of Humanities and Social Science, Tabriz University, Iran

Received: 28 May 2013

Accepted: 03 November 2013

Abstract

Reflectance spectroscopy can be used to study agricultural and environmental aspect of soil that are sensitive to soil organic and inorganic compounds. Despite the extensive studies in the field of visible-near infrared reflectance spectroscopy, there are rare researches in gypseous and calcareous soils. The objective of this study was to obtain a model that can predict chemical properties of gypseous soils via reflectance spectroscopy methods. Soil samples were collected from 102 locations in five different provinces in 0-30 cm of depth. Some chemical properties of soils, such amount of gypsum, equivalent calcite, cation exchange capacity, pH, EC, exchangeable calcium, magnesium, sodium and potassium and amount of silt, clay and sand were measured by standard methods in the laboratory. Air-dried soil samples were scanned at one nm resolution from 350 to 2500 nm, and calibrations between properties and reflectance spectra were developed using cross-validation under Partial Least Squares Regression (PLSR) and Boosted Regression Trees (BRT). Raw reflectance and first derivative reflectance data were used separately and combined for all samples in the data set. Data were additionally divided into two random subsets of 70 and 30 percent of the full data, which were each used for calibration and validation. Strongest correlations were obtained with gypsum, equivalent calcium carbonate, cation exchange capacity, exchangeable Ca and Mg, organic matter, sand and clay contents. Overall, BRT provided better predictions when under cross-validation. However, PLSR and BRT results were comparable in terms of prediction accuracy when using separate data sets for calibration and validation. In conclusion, VNIR spectroscopy was variably successful in estimating soil properties and showed its potential for substituting laboratory analyses or providing inexpensive co-variable data in environmental studies.

Key words: Calibration, BRT, PLSR, Soil reflectance, Validation

* Corresponding author: bahramih@modares.ac.ir