



Szent István Egyetem

Környezettudományi Doktori Iskola

Reflektancia spektroszkópia alkalmazása talajtulajdonságok és  
talajosztályozási egységek meghatározásában

Doktori (Ph.D) értekezés

Csorba Ádám

Gödöllő

2017

**A doktori iskola**

**megnevezése:** Szent István Egyetem Környezettudományi Doktori Iskola

**tudományága:** Környezettudomány

**vezetője:** Csákiné Dr. Michéli Erika  
Egyetemi tanár  
Szent István Egyetem  
Mezőgazdaság-, és Környezettudományi Kar  
Környezettudományi Intézet

**Témavezető** Csákiné Dr. Michéli Erika  
Egyetemi tanár  
Szent István Egyetem  
Mezőgazdaság-, és Környezettudományi Kar  
Környezettudományi Intézet  
Talajtani és Agrokémiai Tanszék

---

**Az iskolavezető jóváhagyása**

---

**A témavezető jóváhagyása**

# Tartalomjegyzék

1. Bevezetés, célkitűzések.....	7
2. Irodalmi áttekintés .....	9
2.1 Egy új irányvonal – A Digitális Talajmorfometria (Digital Soil Morphometrics - DiSoMo).....	9
2.1.1 A legjelentősebb digitális talajmorfometriai technikák áttekintése .....	9
2.1.2 A digitális talajmorfometriai technológiák alkalmazásának előnyei .....	10
2.2 A VIS-NIR reflektancia spektroszkópia elméleti alapjai .....	10
2.2.1 Az EM sugárzás .....	11
2.2.2 Az EM sugárzás és az anyag kölcsönhatása - a talajok spektrális reflektanciáját meghatározó atomi-molekuláris folyamatok .....	12
2.2.2.1 Elektron-átmeneti folyamatok .....	12
2.2.2.2 Rezgési folyamatok .....	13
2.2.3 Szerves alkotók (szerves anyagok) spektrális tulajdonságai.....	15
2.2.4 Szervetlen talajalkotók spektrális tulajdonságai .....	15
2.2.4.1 Fe-oxidok, hidroxidok .....	16
2.2.4.2 Agyagásványok .....	16
2.2.4.3 Karbonátok és egyéb sók.....	17
2.2.4.4 Talajnedvesség.....	18
2.2.4.5 Nehézfémek, szennyezőanyagok.....	18
2.2.5 Talajok spektrális tulajdonságai .....	19
2.3 A VIS-NIR spektroszkópia alkalmazása talajalkotók meghatározásában és talajparaméterek becslésében .....	21
2.3.1 Többváltozós kalibrációs eljárások .....	21
2.3.2 A VIS-NIR spektroszkópia alkalmazásának gazdaságossági előnyei.....	22
2.3.3 A spektrális könyvtárak szerepe.....	23
2.4 A spektrális mérések szerepe a korszerű talajosztályozásban .....	24
2.4.1 A modern talajosztályozás alapkövetelményei .....	24
2.4.2 A WRB felépítése.....	25
2.4.3 Talajosztályozási törekvések VIS-NIR spektroszkópiai módszerek integrálásával.....	25
2.4.3.1 Spektroszkópiai talajosztályozást célzó kutatások áttekintése .....	26
3. Anyag és módszer .....	31
3.1 A spektrális mérések módszere .....	31
3.1.1 A mérési folyamat .....	31
3.1.2 A spektrális adatok elő-feldolgozása.....	33
3.2 A spektrális alapú talajparaméter becslés módszertana.....	34
3.2.1 A mintaterület bemutatása, mintavételi módszer .....	34

3.2.2	Spektrális és laboratóriumi referencia mérések .....	35
3.2.3	Spektroszkópiai transzformációk .....	36
3.2.3.1	A spektroszkópiai transzformációk elméleti alapjai .....	36
3.2.3.2	Az elvégzett spektroszkópiai transzformációk .....	37
3.2.4	Kemometriai elemzések .....	38
3.2.4.1	A Partial Least Squares Regression (PLSR) háttere .....	38
3.2.4.2	A kemometriai elemzés menete .....	39
3.2.5	Az „outlier” minták meghatározásának menete .....	40
3.3	A spektrális tulajdonságokon alapuló talajosztályozás módszertana .....	42
3.3.1	A talajszelvények kiválasztásának szempontjai .....	43
3.3.2	A vizsgált talajszelvények bemutatása .....	43
3.3.3	A talajszelvények helyszíni felvételezése .....	44
3.3.4	Talajmintavételezés .....	44
3.3.5	Laboratóriumi referenciamérések és mélység standardizálás .....	45
3.3.6	Spektrális mérések és spektrális transzformációk .....	45
3.3.7	Spektrális változók kinyerése .....	46
3.3.8	A spektrális változatosság szelvény menti vizsgálatának módszere .....	46
3.3.8.1	Fuzzy C-means klaszterezés .....	46
3.3.9	A spektrális alapú taxonómiai rokonságok megállapításának módszertana .....	47
3.3.9.1	Taxonómiai távolságszámítás .....	47
3.3.9.2	Taxonómiai rokonságok ábrázolása .....	49
4.	Eredmények és értékelésük .....	51
4.1	A kemometriai elemzések eredményei .....	51
4.1.1	A referencia talajparaméterek alapstatisztikai mutatói .....	51
4.1.2	A spektrális adatok statisztikai mutatói .....	51
4.1.3	A PLSR modellezés eredménye .....	52
4.1.3.1	Outlier minták kiszűrése .....	52
4.1.4	A spektroszkópiai transzformációk hatása a modellek statisztikai mutatóira .....	53
4.2	A spektrális tulajdonságokon alapuló talajosztályozás eredményei .....	56
4.2.1	A terepi felvételezés és az osztályozás eredményei .....	56
4.2.2	A spektrális mérések transzformációja és főkomponens analízis .....	58
4.2.3	A főkomponens faktorértékek csoportosítása Fuzzy C-means klaszterezéssel .....	58
4.2.4	A Fuzzy C-means klaszter-tagság és referencia talajparaméterek mélység szerinti eloszlása <sup>64</sup>	
4.2.5	Taxonómiai távolságszámítás .....	72
5.	Következtetések és javaslatok .....	75
6.	Új tudományos eredmények .....	77

7. Összefoglalás .....	79
8. Summary .....	81
9. Irodalomjegyzék .....	83
10. Mellékletek.....	93



# 1. Bevezetés, célkitűzések

Az elmúlt évtizedek környezeti változásai, az energiagazdálkodás új igényei, és a fenntartható fejlődés érdekében megfogalmazott követelmények rávilágítottak talajaink mezőgazdaságban betöltött kiemelt szerepére, illetve számos más környezeti funkciójának jelentőségére. Ennek köszönhető, hogy napjainkban eddig soha nem látott igény mutatkozik megbízható, hozzáférhető, megfelelő mennyiségű talajadatra és információra. Ezek az igények tükröződnek abban a világszintűnek is nevezhető tendenciában, amely környezetünk és talajaink gyors, költséghatékony és környezetbarát vizsgálatát lehetővé tevő új technológiák és módszerek kidolgozását sürgeti (VISCARRA ROSSEL és CHEN, 2011).

Ezeket az igényeket szolgálja a VIS – NIR reflektancia spektroszkópia, mely az elektromágneses (EM) spektrum 350 és 2500 nm közötti, azaz a látható (visible – VIS) és közeli infravörös (near-infrared – NIR) tartományában végzett reflektancia mérésekre épül. Jóllehet, a VIS – NIR reflektancia spektroszkópia a hagyományos talajanalitikai eljárásokhoz képest bizonyos esetekben kevésbé pontos méréseket szolgáltat, alkalmazásával olcsón és gyorsan jutunk nagy mennyiségű talajinformációhoz, jelentősen növelve az adatgyűjtés hatékonyságát (VISCARRA ROSSEL et al., 2009).

Az elmúlt évtizedek, talajok spektrális tulajdonságainak vizsgálatát célzó kutatásai nyilvánvalóvá tették, hogy az EM spektrum VIS – NIR tartományában végzett reflektancia mérések a talajok kvalitatív és kvantitatív jellemzésére egyaránt alkalmasak (VISCARRA ROSSEL et al., 2006). A technológia talajosztályozásban betöltött szerepe annak ellenére háttérben maradt, hogy a modern talajosztályozási rendszerekben alapkövetelmény a standard mérések és számszerű adatok bevonása a szigorú definíciókkal meghatározott diagnosztikai szintek és tulajdonságok meghatározásába (MICHÉLI, 2011). Mivel a spektrális mérések számos olyan talajparaméterről és tulajdonságról nyújtanak egyidejűleg információt, amelyek egyes diagnosztikus talajosztályozási egységek definiálásában kulcsfontosságúak, a technológiának jelentős potenciálja van a talajok elkülönítését célzó rendszerek kidolgozásában, és az osztályozási törekvések támogatásában.

A fent említett követelmények, valamint a doktori képzés során szerzett tapasztalatok alapján munkámban a következő célkitűzéseket fogalmaztam meg:

1. A Gödöllői-dombságban kijelölt mintaterületen gyűjtött talajmintákról felvett spektrális reflektancia, valamint hagyományos laboratóriumi mérési módszerekkel meghatározott referenciaadatok alapján olyan többváltozós matematikai-statisztikai

(kemometriai) modellek létrehozása, melyek alkalmazásával a talajok szervességén, kalcium-karbonát tartalma, valamint kémhatása a spektrális adatok alapján származtatható.

2. Talajszelvények mélységgel változó talajparamétereinek és spektrális tulajdonságainak vizsgálata kiválasztott hazai talajszelvények alapján.
3. A spektrális reflektancia adatok alkalmazása diagnosztikai talajosztályozási egységek meghatározására, valamint generált spektrális változók mélység menti eloszlásának összevetése hagyományos laboratóriumi módszerekkel meghatározott referencia talajparaméter értékek mélység menti lefutásával.
4. A spektroszkópai technológia modern, diagnosztikai, numerikus talajosztályozásban betöltött lehetséges szerepének vizsgálata. A vizsgált talajszelvények taxonómiai rokonságának feltárása taxonómiai távolságszámítási módszerek alkalmazásával. A Világ Talaj Referencia Bázis (World Reference Base for Soil Resources, WRB) (IUSS WORKING GROUP WRB, 2015) egységek, és a taxonómiai távolságszámítás alapján meghatározott talajcsoportok összevetése.



## 2. Irodalmi áttekintés

### 2.1 Egy új irányvonal – A Digitális Talajmorfometria (Digital Soil Morphometrics - DiSoMo)

A talajszelvények vizsgálata és jellemzése elsősorban morfológiai megfigyelésekre épül, amelyek alapján számos talajtulajdonság különböző érzékszerveinkkel megbecsülhető. Ezeket az információkat kémiai, fizikai és ásványtani vizsgálatokkal kombinálva jobban megérthetjük a talajok képződését és sokféleségét. A talajszelvény szintjeinek és tulajdonságainak minél részletesebb ismerete alapvető fontosságú a taxonómiai jellegű munkában, a talajok osztályozásában, és korszerű térképezési projekteken egyaránt (BOCKCKHEIM és GENNADIYIEV, 2000).

A digitális talajmorfometria (Digital Soil Morphometry - DiSoMo) fogalma első ízben HARTEMINK és MINASNY (2014) munkájában jelent meg. A DiSoMo olyan modern módszerek és eszközök alkalmazását foglalja magába, melyek lehetővé teszik a talajszelvények mélység menti tulajdonságainak részletes, objektív műszeres vizsgálatát, illetve matematikai függvények segítségével a szelvények paramétereiről folyamatos kép kinyerését. A DiSoMo technológiákat áttekintő összefoglaló dolgozat végkövetkeztetése, hogy ezeknek a technológiáknak a bevezetése korszerű talajtani vizsgálati módszertanba alapvető fontosságú.

#### 2.1.1 A legjelentősebb digitális talajmorfometriai technikák áttekintése

Az elektromágneses (EM) spektrum látható tartományán kívül eső méréseket a talajok vizsgálatának céljából már az 1920-as években is használták. Elsők között az XRD (X-ray diffraction – röntgendiffrakció) módszere került alkalmazásra az ásványokban lévő atomok meghatározására, segítve ezáltal a talajosztályozást (fide in HELMS et al., 2002). Az EM spektrum további tartományainak bevonására talajtani vizsgálatokba azonban a 80-as évekig várni kellett. Napjainkban az EM spektrum szinte minden régióját használják a talajvizsgálatokban.

A talajok szöveti sajátosságait XRF (röntgenfluoreszcencia, X-ray fluorescence), lézer-diffrakció, illetve VIS – NIR spektroszkópiai módszerekkel lehetséges meghatározni (VISCARRA ROSSEL et al., 2009; WAISER et al., 2007). A hagyományos módon, Munsell színskálával meghatározott talajszín műszeres meghatározása VIS – NIR spektroszkópia módszerek mellett, Ground Penetrating Radar (GPR), illetve akár mobiltelefonok alkalmazásával is lehetséges (BEN DOR et al., 2008; VISCARRA ROSSEL., 2009). A talajok szerkezetét elsősorban röntgen CT-vel (Computed tomography), illetve scanning elektronmikroszkópal (SEM) készített felvételek alapján lehetséges jellemezni (GARBOUET et al., 2013). A talaj nedvességtartalmát TDR (time-

domain reflectometry), ground penetrating radar (GPR), és elektromos ellenállás mérésekre alapuló módszerekkel lehetséges meghatározni (MAHMOUDZADEH ARDEKANI, 2013). Az időszakos víztelítettség, és az oxidációs-redukciós viszonyok váltakozásának jellemző morfológiai (redoximorf) bélyegeit sokcsatornás (hiperspektrális) scannerek, illetve XRF módszerekkel is lehetséges szelvény mentén vizsgálni (STEFFENS és BUDDENBAUM, 2013). A talajok mechanikai ellenállását, plaszticitását, konzisztenciáját röntgen-CT vizsgálatokkal lehetséges indirekt módon jellemezni (MUNKHOLM et al., 2012). A talajok karbonát-tartalmát VIS – NIR spektroszkópiai módszerekkel lehetséges hatékonyan vizsgálni (BEN DOR et al., 2008; LAGACHERIE et al., 2008). A talajok pórusviszonyait röntgen-CT módszerekkel, CAT (computerized axial tomography) módszerével, és különböző képelemző algoritmusokkal lehetséges jellemezni (RAB et al., 2014).

### **2.1.2 A digitális talajmorfometriai technológiák alkalmazásának előnyei**

A DiSiMo eljárásoknak fő előnye a hagyományos talajvizsgálati módszerekhez képest, hogy kvantitatív, folyamatos képet adnak a talajszelvény fontos tulajdonságairól. Alkalmazásuk, gyors, automatizált, és a technológiai fejlesztéseknek köszönhetően jórészt már terepi körülmények között is alkalmazható. A talajszelvények lehető legrészletesebb jellemzése nem csak a talajok környezeti funkcióinak és mezőgazdaságban betöltött szerepének a megismerése szempontjából kiemelkedő fontosságú, hanem a talajosztályozásban is alapvető jelentőségű. A talajosztályozási rendszerek mindegyike a mélység menti tulajdonságok, és a tulajdonságokban mutatkozó különbözőségi/hasonlósági viszonyok megállapítása alapján különítik el a talajokat. A DiSoMo eszköztárával, és ezekre az eszközökre épülő módszertani fejlesztésekkel olyan mennyiségű, minőségű és jellegű információt nyerhetünk a talajokról, melyekhez hagyományos terepi, illetve laboratóriumi eljárásokkal nem juthatunk. A szelvények folyamatos, a mélységgel változó tulajdonságainak egyre részletesebb ismerte, és objektív jellemzése kulcsfontosságú a modern talajtan, illetve a korszerű talajosztályozás módszertanában is (HARTEMINK és MINASNY, 2014).

## **2.2 A VIS-NIR reflektancia spektroszkópia elméleti alapjai**

A VIS-NIR reflektancia spektroszkópiai mérések során szilárd és folyékony halmazállapotú anyagokról visszaverődő elektromágneses (EM) sugárzást vizsgáljuk a hullámhossz függvényében. A méréseket az EM spektrum látható (Visible – VIS) és közeli infravörös (Near-infrared – NIR) tartományában végezzük. A VIS – NIR reflektancia mérések során rögzített reflektancia annak a – 0 és 1 közé eső – mérőszáma, hogy egy adott anyag a rá beeső sugárzási fluxusnak mekkora hányadát veri vissza. A reflektancia értékeket a hullámhossz szerint ábrázolva

kapjuk meg a reflektancia spektrumot. Ez a spektrális reflektancia az adott anyagra diagnosztikus, fizikai és kémiai tulajdonságaitól függő tulajdonság.

### 2.2.1 Az EM sugárzás

Az EM sugárzás és az anyag kölcsönhatásának természetét leíró elméletek két különböző megközelítést alkalmaznak.

A *klasszikus felfogás* az EM sugárzást oszcilláló elektromos és mágneses mezők folyamatos transzverzális hullámának tartja, és az anyaggal való kölcsönhatást makroszkopikus szinten a Maxwell-egyenletek segítségével írja le. Ezek a parciális differenciál egyenletek a sugárzás terjedésének, reflexiójának, diszperziójának jellemzésére alkalmazhatóak. Azonban ez a megközelítés csak makroszkopikus optikai jelenségek leírására alkalmas (HUNT, 1980)

A *kvantummechanikai felfogás* az EM sugárzást meghatározott energiamennyiséget hordozó, diszkrét részecskék áramlásának tekinti. E megközelítés szerint egy atom, vagy molekula csak meghatározott energiaszinteken létezhet, átmeneti szintekkel nem rendelkezik. Az EM sugárzás nem vehet fel tetszőlegesen kis értékeket, hanem csak egy rendkívül kicsi, elemi értéknek a többszöröse lehet. Ezt a jelenséget az elemi energia kvantáltságának, ez elemi energia mennyiséget pedig kvantumnak nevezzük. A fény elemi kvantumját fotonnak hívjuk, melynek viselkedését elemi részecskéként foghatjuk fel. Ezek alapján energia (foton) csak akkor abszorbeálódhat, ha az értéke pontosan megegyezik azzal a mennyiséggel, ami ahhoz szükséges, hogy egy atom, vagy molekula energiaszintjét egy alacsonyabbról magasabb szintre emelje. Hasonlóképpen, ha az atom, vagy molekula energiaszintje magasabb szintről alacsonyabbra esik, az EM sugárzás emittálódik (kisugárzódik).

A klasszikus hullámelmélet az EM sugárzás leírásához alkalmazható, mely a frekvenciával ( $\nu$ ), a hullámhosszal ( $\lambda$ ), illetve a hullámszámmal jellemezhető ( $1/\lambda$ ). A foton által hordozott energia a következő egyenlet szerint viszonyul a frekvenciához

$$E = h \times \nu$$

ahol  $E$  az energia (J),  $h$  a Planck állandó ( $6,626 \times 10^{-34}$  J×s) és  $\nu$  a frekvencia. A frekvencia a következőképpen viszonyul a hullámhosszhoz, és a közegben terjedő sebességhez:

$$\nu = c/\lambda$$

ahol  $\lambda$  a hullámhossz és  $c$  a fény terjedési sebessége (vákuumban  $\sim 3 \times 10^8$  m/s). Mivel a fény terjedési sebessége ( $c$ ) vákuumban állandó, és  $c = \nu \times \lambda$ , a frekvencia és a hullámhossz szorzata csak akkor maradhat konstans, ha a két szorzandó fordított arányban áll egymással. A  $c = \lambda \times \nu$  egyenletből kifejezve  $\nu$ -t, és behelyettesítve az  $E = h \times \nu$ -be, a következő formulát kapjuk:

$$E = \frac{h \times c}{\nu}$$

Ebből a formulából látható, hogy a hullámhossz fordítottan arányos az energiával. Minél nagyobb a hullámhossz, annál kevesebb energiát szállít.

## **2.2.2 Az EM sugárzás és az anyag kölcsönhatása - a talajok spektrális reflektanciáját meghatározó atomi-molekuláris folyamatok**

A spektroszkópai vizsgálatok során az EM sugárzás és a vizsgált anyag közötti kölcsönhatást vizsgáljuk. A talajmintát felépítő szerves és szervetlen alkotókban a beérkező sugárzás hatására az egyedi molekulákban rezgési (pl. hajlítási, nyújtási) folyamatok mennek végbe. Ezzel egy időben a beérkező sugárzás különböző mértékű abszorpciója is lezajlik.

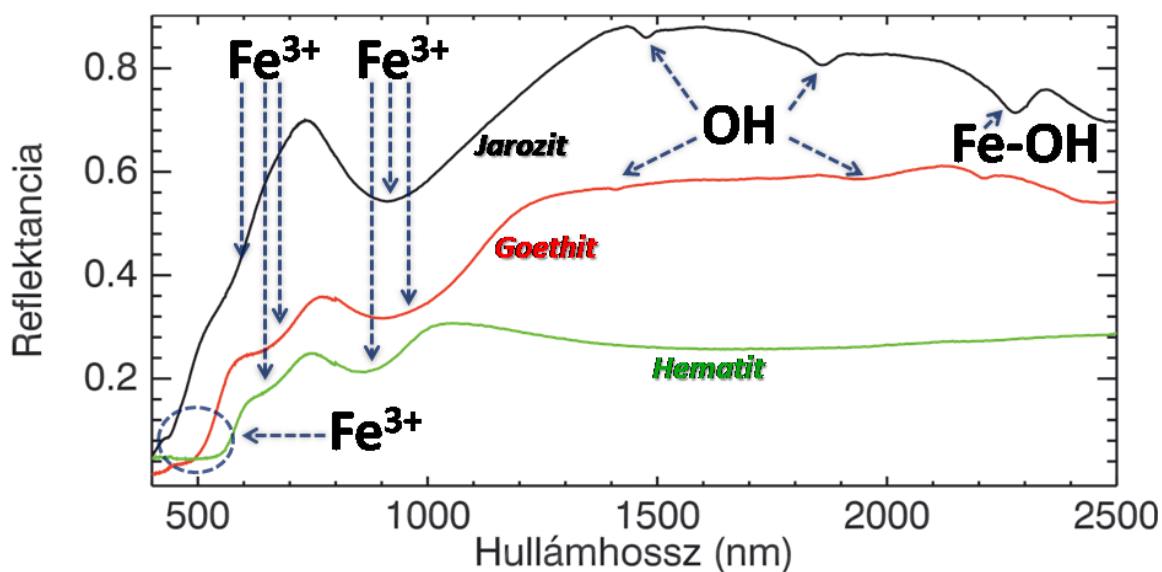
### *2.2.2.1 Elektron-átmeneti folyamatok*

Elektron-átmeneti folyamatok elektronok energiaszintjeihez kapcsolhatók. Egy atomban az elektronok csak meghatározott energiaszinttel jellemezhető pályákon foglalhatnak helyet. Ahhoz, hogy egy elektron alacsonyabb energiaszintről magasabbra kerülhessen át, viszonylag nagy energiamennyiség szükséges, így ezek a folyamatok rövidebb hullámhosszokon (a vizsgált tartomány ~350 és ~1100 nm közötti tartománya) zajlanak le.

E tartományban jelentkező spektrális jelenségek nagy részének oka a kristálytér-hatás (crystal field effect). A kristálytér-hatás azokban az ásványokban jelenik meg, amelyekben átmeneti fémek (pl. Fe, Ni, Cr, Ti) fordulnak elő, amelyek külső d-héjának energiaszintjei izolált állapotban azonosak. Azonban ez az energia felhasad, ha az atom egy kristálytérben foglal helyet. Az eredeti energiaszintek ily módon történő felhasadása teszi lehetővé, hogy egy elektron egy alacsonyabb energiaszintről egy magasabbra kerüljön át az energiaszintek különbségének megfelelő energiával rendelkező foton abszorpciója révén. Ezeket az energiaszinteket az atom vegyértéke, koordinációs száma, illetve a rács szimmetriája, másodsorban pedig a ligandumok típusa (pl. fém – oxigén), és a fém – ligandum interatomi távolsága határozza meg. A kristálytér hatás minden ásványban más. Példának okáért a különböző ásványokban a Fe különböző abszorpciókat hoz létre az energiaszintek különböző mértékű felhasadása miatt (CLARK, 1999).

A másik fő elektromos folyamat a töltésátvitel (Charge transfer) jelensége, ahol a foton abszorpciója egy elektron szomszédos ionok és ligandumok közötti mozgását okozza. Az átmenet ugyanazon elemek között is történhet, melyek vegyértéke eltérő (pl. Fe<sup>2+</sup> és Fe<sup>3+</sup>). Ez a jelenség felelős a vas-oxidok és hidroxidok vörös színéért (CLARK, 1999).

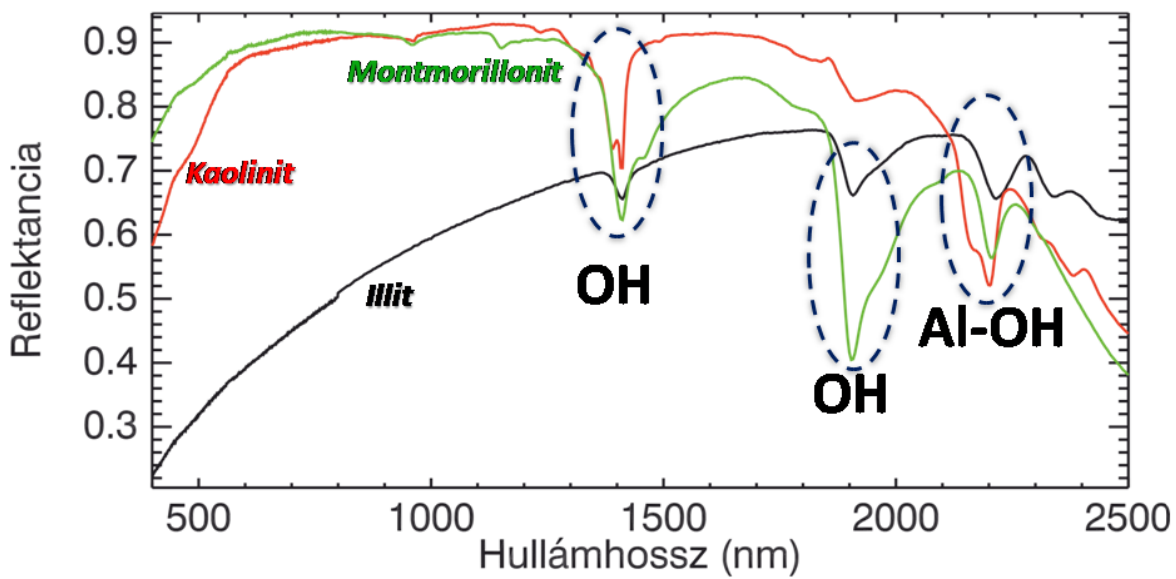
Az elektromos folyamatok közé tartozik a vezetési sáv átmenet (conduction band) és a szín központ (color centers) jelenségei, de a talajok reflektancia spektrumának kialakításban nem játszanak fontos szerepet.



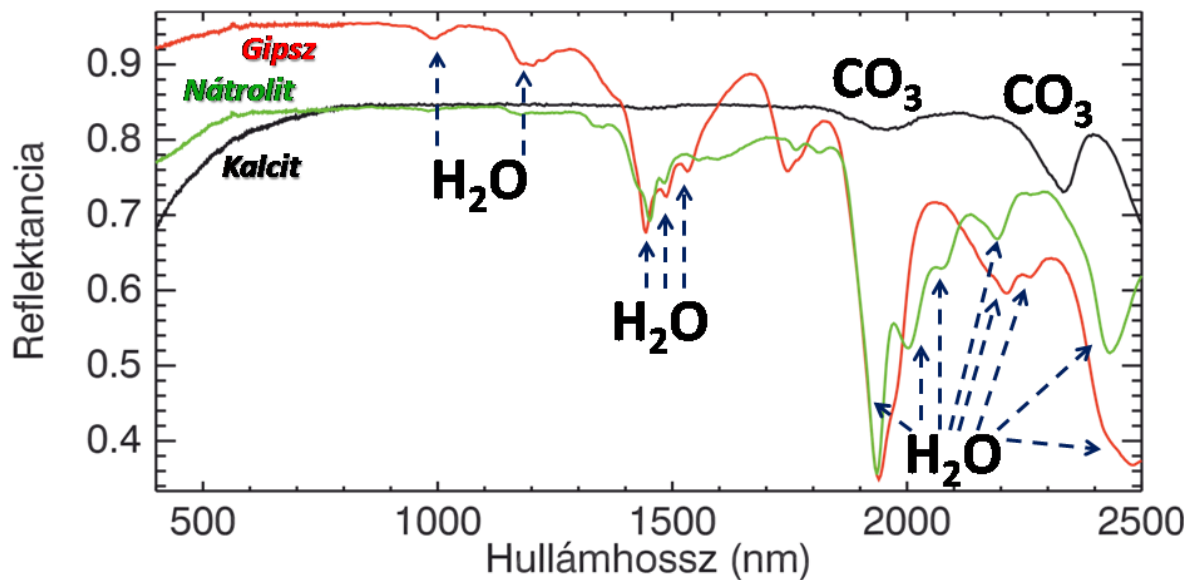
1. ábra: A jarozit, goethit és hematit ásványok reflektancia spektruma (forrás: JPL spektrális könyvtár, GROVE et al., 1992), feltüntetve a karakterisztikus elnyeléseket létrehozó összetevőket CLARK, 1999 alapján.

#### 2.2.2.2 Rezgési folyamatok

A molekulák rezgési folyamatai az atomok egyensúlyi helyzetében bekövetkező atomi léptékű helyváltozásokhoz kapcsolódnak. A rezgések frekvenciája a molekulában lévő összes kötés erejétől és a jelenlévő elemek tömegétől függ. Egy  $n$  számú atomból álló molekulában  $3n$  lehetséges mozgásmód jelentkezik, mivel minden atomnak 3 szabadságfoka van. Ezen mozgásmódokból három alkotja a teljes molekula forgását, három a translációt, és  $3n-6$  alkot független típusú rezgéseket. Minden egyes mozgás meghatározott frekvenciájú rezgéshez vezet. Ezeket az alapállapotból csak egy szinttel magasabb energiaszintre történő átmeneteket nevezzük alaprezgéseknek. Ezeknek az alaprezgések általában az infravörös tartomány 3000 nm-nél hosszabb hullámhosszúságú tartományában jelentkeznek. Rezgések történhetnek azonban az eredeti alaprezgés frekvenciájának többszörösén is. Felharmonikus rezgésről beszélünk akkor, ha a rezgési mód egy energiaszintről egynél több szinttel megy át egy magasabb vagy alacsonyabb állapotba. Alaprezgések, illetve felharmonikus rezgések összegződését kombinációs rezgéseknek hívjuk, melyek akkor mennek végbe, ha az abszorbeált foton egynél több rezgési mód között oszlik meg. Ezen folyamatok által okozott abszorpciós jelenségek jelennek meg az infravörös tartomány 2500 nm-nél rövidebb és 1100 nm-nél hosszabb hullámhosszúságú tartományában (2. és 3. ábra) (CLARK, 1999).



2. ábra: A montmorillonit, illit és kaolinit ásványok reflektancia spektruma (forrás: JPL spektrális könyvtár, GROVE et al., 1992), feltüntetve a karakterisztikus elnyeléseket létrehozó összetevőket CLARK, 1999 alapján.



3. ábra: A gipsz, nátrólit és kalcit ásványok reflektancia spektruma (forrás: JPL spektrális könyvtár, GROVE et al., 1992), feltüntetve a karakterisztikus elnyeléseket létrehozó összetevőket CLARK, 1999 alapján.

### **2.2.3 Szerves alkotók (szerves anyagok) spektrális tulajdonságai**

A reflektancia mérésekre épülő spektroszkópai eljárások hatékonyan alkalmazhatóak a talaj szerves anyagának minőségi és mennyiségi jellemzésére egyaránt (BEN DOR et al., 1999; Stenberg, 2010). A NIR tartományban – szerves molekulákhoz – köthető felharmonikusok és kombinációs rezgések a NH, CH és CO csoportokhoz nyújtási és hajlítási mozgásának eredményei. CLARK (1999) megállapította, hogy a 2300, 1700 és 1100 nm körüli abszorpciós sávok a C–H nyújtási alaprezgés kombinációja valamint első és második felharmonikusa. A NIR tartományban a szerves anyagok abszorpciós sávjainak pontos detektálása nagy bizonytalansággal terhelt, ugyanis számos szerves és egyéb szervesetlen alkotó rendelkezik elnyelési sávval a kérdéses spektrális régióban.

Bár a szerves anyaghoz köthető egyedi abszorpciós sávok a NIR tartományban gyengék, és szabad szemmel nem feltétlenül láthatók, abban egyetértés van, hogy a látható tartomány egészében és a NIR régió rövidebb hullámhosszúságú szakaszában mutatózó széles elnyelési prezenciája a szerves anyag jelenlétének, míg formája a mennyiségének legmegbízhatóbb indikátora (BAUMGARDNER et al., 1985). Ennek köszönhető, hogy számos tanulmány alkalmazta a szerves anyag mennyiségének meghatározására a spektrumokból származtatott talajsínt (VISCARRA ROSSEL et al., 2006). Jóllehet, általánosságban elmondható, hogy a szerves anyag tartalom növekedése a talaj sötétedésével és így a VIS régióban a reflektancia értékek csökkenésével jár, HUMMEL et al., (2001) figyelmeztet, hogy számos talajtulajdonság (pl. textúra, szerkezet, nedvességállapot, ásványi összetétel) mindezt befolyásolja.

STEVENS et al. (2010) kihangsúlyozza, hogy a szerves anyag mennyisége ásványi talajokban viszonylag alacsony, de a spektrumot módosító hatása már ekkora koncentrációban is számottevő. Így mennyiségének megbízható spektrális alapú meghatározásához csak a legkorszerűbb, helyesen kalibrált, magas jel/zaj aránnyal jellemezhető szenzorok, illetve megbízható spektrális modellek együttes alkalmazása képes ennek a fontos talajösszetevőnek a meghatározásához szükséges módszer kifejlesztéséhez.

### **2.2.4 Szervesetlen talajalkotók spektrális tulajdonságai**

A talajalkotó ásványok mennyisége, minősége alapvetően határozza meg a talajok számos fontos tulajdonságát (pl. textúra, szerkezet, kationcsere kapacitás), melyek további hatással vannak egyéb (pl. víz- és tápanyaggazdálkodási) jellemzőkre. Így spektrális tulajdonságuk áttekintése alapvető fontosságú a talajok reflektancia spektrumának megértése érdekében.

#### 2.2.4.1 *Fe-oxidok, hidroxidok*

A vas-oxidok és hidroxidok élénk vörös, vöröses-sárga, sárga színe a látható tartományban lejátszódó elektron-átmeneti folyamatoknak köszönhető. A goethit ( $\alpha$ -FeOOH) széles abszorpciós sávjai 660, 480 és 420 nm valamint 980 nm környékén jelentkeznek. A goethit 1700 nm környékén is rendelkezik egy gyenge elnyelési sávval, mely a kristályszerkezetében jelenlévő O – H nyújtás eredménye (HUNT et al., 1971).

A hematit spektruma ( $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) hosszabb hullámhosszokon egyenletes magas reflektanciával jellemezhető, 880 és 510 nm-nél mutató abszorpciós maximummal. A goethitnél 930, hematit esetében 880 nm-nél mutató széles sáv elektron-átmeneti folyamatokra vezethető vissza, mely az elektronoknak az alapállapotból egy szinttel magasabb energiaállapotba kerülését jelenti. A 660 nm környéki sáv az elektronok az alapállapotból több szinttel magasabb energiaállapotba kerülésének eredménye. A goethitnél 480 és 420, míg a hematit esetében 510 nm környékén megjelenő sáv az UV tartományban lejátszódó intenzív töltésátviteli jelenségek által létrehozott abszorpciós sávok VIS régióba átnyúló részeinek tekinthető (SHERMAN és WAITE, 1985).

#### 2.2.4.2 *Agyagásványok*

Az agyagásványokhoz köthető abszorpciós sávok a MIR tartományban lezajló – OH, H<sub>2</sub>O és CO<sub>3</sub> molekulákhoz köthető – alaprezgések kombinációinak és felharmonikusainak tekinthetők. Olyan ásványokban ahol az OH csoporthoz fémion kapcsolódik, a 2200 – 2300 nm-es régióban jelentkező fém – OH hajlításhoz kapcsolódó abszorpciók jelennek meg. Ez esetben az OH nyújtás és a fém – OH hajlítás kombinációjáról beszélünk. Általánosságban elmondható, hogy 2200 nm-es régió abszorpciós jelenségeiért az Al – OH, 2300 nm környékén az Mg – OH és Fe – OH kötés a felelős (CLARK et al., 1990).

A *kaolinit* (2. ábra) karakterisztikus dupla abszorpcióval rendelkezik 1400 és 2200 nm környékén. Az ~1400 (1395 és 1415) nm-nél jelentkező sávok az O – H nyújtás felharmonikusa, míg a 2200 nm környéki a Al – OH hajlítás és a O – H nyújtás kombinációs rezgése (HUNT és SALISBURY, 1970).

A *montmorillonit* (2. ábra) 1400, 1900 és 2200 nm környékén rendelkezik karakterisztikus abszorpciós sávval. Az 1400 nm környéki elnyelést egyrészt szerkezeti O – H nyújtás felharmonikusának, másrészt (hasonlóan az 1900 nm környéki elnyeléshez) a hidratált kationok rétegeközi, valamint a szemcsék felületén adszorbeált H<sub>2</sub>O molekulában lejátszódó H – O – H nyújtási és O – H hajlítási alaprezgések kombinációjának tekinthetjük. Ilyen fajta víz a kaolinitben nincs, vagy csak kis mennyiségben van jelen. Ennek köszönhető a kaolinit spektrumában (2. ábra)



az 1900 nm környéki abszorpció hiánya, vagy kevésbé kifejezettsége (HUNT és SALISBURY, 1970).

Az *illit* a montmorillonitnál gyengébb abszorpciót mutat 1400, 1900 és 2200 nm környékén, de 2340 és 2445 nm-nél további elnyelési sávokkal rendelkeznek. Ez fontos szerepet játszik a montmorillonittól való elkülönítésben, de számos esetben összetéveszthető a szerves anyagnak, ebben a tartományban mutatkozó gyenge elnyelésével (HUNT és SALISBURY, 1970).

A talajok agyagásvány-tartalmának meghatározását célzó munkák elsősorban a duzzadó agyagok és a nedvességtartalom változásának hatására duzzadó-zsugorodó talajok regionális térképezésére koncentrálnak. A szmektitest (pl. montmorillonit) duzzadó és más nem duzzadó agyagok (pl. kaolinit) elterjedésének és relatív mennyiségének vizsgálata alapján CHABRILLAT et al. (2002) munkája rávilágított arra, hogy a reflektancia spektroszkópiai módszerek alkalmazása hasznos eredményekkel szolgál az elsősorban földcsuszamlással fenyegetett területek lehatárolásában és a katasztrófák elleni hatékony védekezésben is.

Számos VIS – NIR spektroszkópiai módszer került kidolgozásra a szöveti sajátságok meghatározására is. WAISER et al. (2007) különböző nedvességállapotú, és eltérő anyakőzetten képződött talajok vizsgálata alapján a teljes és finom agyagfrakció becslésére alkalmazta a spektrumokat. BRICKLMEYER és BROWN (2010) terepi és laboratóriumi körülmények között tesztelte a VIS – NIR spektroszkópia hatékonyságát, és arra jutottak, hogy az agyagtartalom becslésére a laboratóriumi mérések jóval alkalmasabbak az ellenőrzés alatt tartott nedvességtartalom és minta-előkészítés miatt. MYERS et al. (2011) lösszel fedett glaciális tillből származó fűromagok vizsgálatára alkalmazott VIS – NIR módszere hatékonynak bizonyult az agyagos szövetű rétegek meghatározására, illetve az agyagtartalom becslésére.

#### 2.2.4.3 *Karbonátok és egyéb sók*

A karbonátásványoknak számos abszorpciós sávja van a NIR régióban, melyek mindegyike a CO<sub>3</sub> molekula – MIR tartományban lezajló – alaprezgéseinek felharmonikus és kombinációs rezgései. A legerősebb abszorpciós a 2335 nm környéki sáv, de gyengébb elnyelések mutatkoznak 2160, 1990 és 1870 nm-nél is. Fontos megemlíteni, hogy ezeknek a sávoknak a helyzete erősen függ a karbonátásvány összetételétől (HUNT és SALISBURY, 1971).

LAGACHERIE et al. (2008) bebizonyította, hogy a VIS-NIR spektroszkópia rendkívül hatékony eszköz a karbonát tartalom megbecslésében. Erre a következtetésre jutott BEN DOR et al. (2008) is, miszerint többváltozós matematikai-statisztikai módszerekkel ötvözve a spektroszkópiai méréseket, a karbonát-tartalom rendkívül pontosan meghatározható.

TAYLOR et al. (2001) rámutatott arra, hogy a reflektancia spektroszkópia hatékonyan alkalmazható szikesedési folyamatok jellemzésére is, elsősorban a jellegzetes spektrális tulajdonságaik alapján megbízhatóan detektálható sók (3. ábra) és szemektites agyagok jelenléte alapján. BEN DOR et al. (2002) vizsgálatai rávilágítottak a 30-60 cm-es mélységben mért elektromos vezetőképesség és a 400-2500 nm-es tartományban spektrálisan aktív sók felszíni mennyisége közötti erős korrelációra, kihangsúlyozva azt, hogy az említett ásványoknak a térképezése fontos információval bír nemcsak a felszíni, hanem a mélyebb talajszintekben zajló szikesedési folyamatokról is. CSILLAG et al. (1993) szikes talajok felszíni rétegéből (0-5 cm) gyűjtött 90 db magas sótartalmú talajminta vizsgálata alapján hat olyan spektrális tartományt határozott meg, melyek a sófelhalmozódással érintett talajok jellemzésében kulcsfontosságúak. A meghatározott hat sáv közül négy (550-770 nm, 900-1030 nm, 2150-2310 nm és 2330-2400 nm) a műholdas távérzékelésben is alkalmazható a felszínen megjelenő szikesedési folyamatok nyomon követéséhez.

#### 2.2.4.4 *Talajnedvesség*

A talajban különböző formában jelenlévő víz karakterisztikus abszorpciós sávokat hoz létre a NIR régióban. Ezek a sávok a H<sub>2</sub>O molekulában lejátszódó három alaprezgési folyamat felharmonikusai és kombinációihoz köthetők. Egyes agyagásványok szerkezetében kötött víz karakterisztikus elnyeléseket hoz létre 1400 és 1900 nm környékén (2.2.4.2 fejezet), melyek egyértelműen ásványi tulajdonságokat tükröznek. A talajszemcsék felszínén, illetve a talaj pórustérben elhelyezkedő víz mennyiségének növekedése az albedo csökkenését eredményezi, valamint az 1400 és 1900 nm környéki sávokat egyre kifejezettebbé teszi (HUNT 1977).

Mivel az 1400 nm környéki sáv egybeesik a hidroxil ion elnyelési sávjaival, a talajnedvesség spektrális alapú meghatározása az 1900 nm-es sáv alapján hatékonyabbnak bizonyult (DALAL és HENRY, 1986). A talaj nedvességtartamának meghatározása érdekében WHITING et al. (2004), illetve HAUBROCK et al. (2008) munkája rávilágított, hogy e talajparaméter meghatározásában a pontosabb, de számításigényes és bonyolultabb spektrális modell alapú, valamint az egyszerűbben alkalmazható, bár kevésbé megbízható empirikus megközelítés elvén működő módszerek is eredményesen alkalmazhatóak.

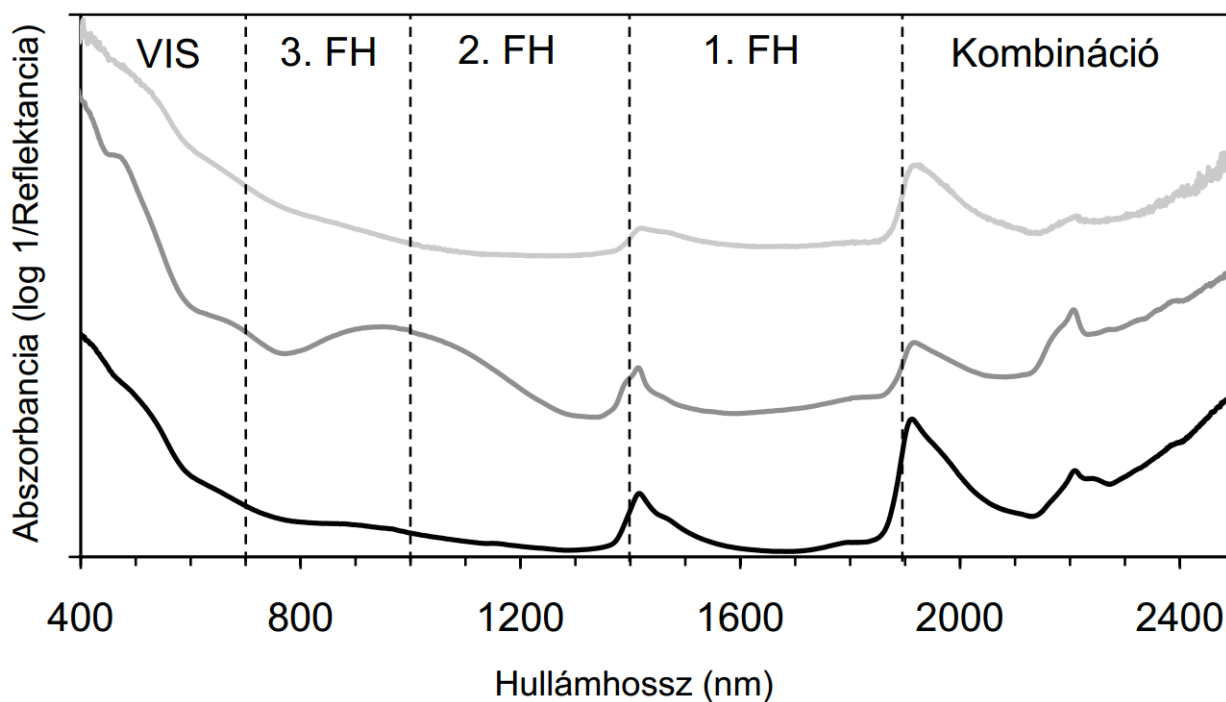
#### 2.2.4.5 *Nehézfémek, szennyezőanyagok*

A nehézfémek nem rendelkeznek abszorpciós sávval a VIS-NIR tartományban. Mennyiségük meghatározása csak olyan összetevőkön keresztül, közvetve valósulhat meg, melyek ebben a régióban spektrálisan aktívak. A nehézfémek komplexeket képezhetnek szerves anyagokkal vagy többek között agyagásványok felületén adszorbeálódhatnak. Kvantitatív jellemzésük csak abban

az esetben végezhető el megbízhatóan, ha mennyiségük szoros korrelációban mutat valamelyik spektrálisan aktív összetevővel (STENBERG et al, 2010). KEMPER (2003) és KEMPER és SOMMER (2002) a katasztrofális Aznalcóllar bányabaleset kapcsán állapította meg, hogy a reflektancia spektroszkópia hatékony eszköz egyrészt a talajokba került toxikus nehézfémek mennyiségének megbecslésében is, másrészt a rekultivációs munkákhoz elengedhetetlen információk meghatározásában (pl. savasodási potenciál vagy a semlegesítéshez szükséges kalcit mennyisége) is. WU et al. (2005) megállapította, hogy a reflektancia spektroszkópia alkalmas az ipari terhelés alatt lévő, mezőgazdasági művelésbe vont talajok Hg tartalmának meghatározására is, melynek kapcsán rendszeres légi hiperspektrális monitoring rendszer kiépítését sürgeti.

### 2.2.5 Talajok spektrális tulajdonságai

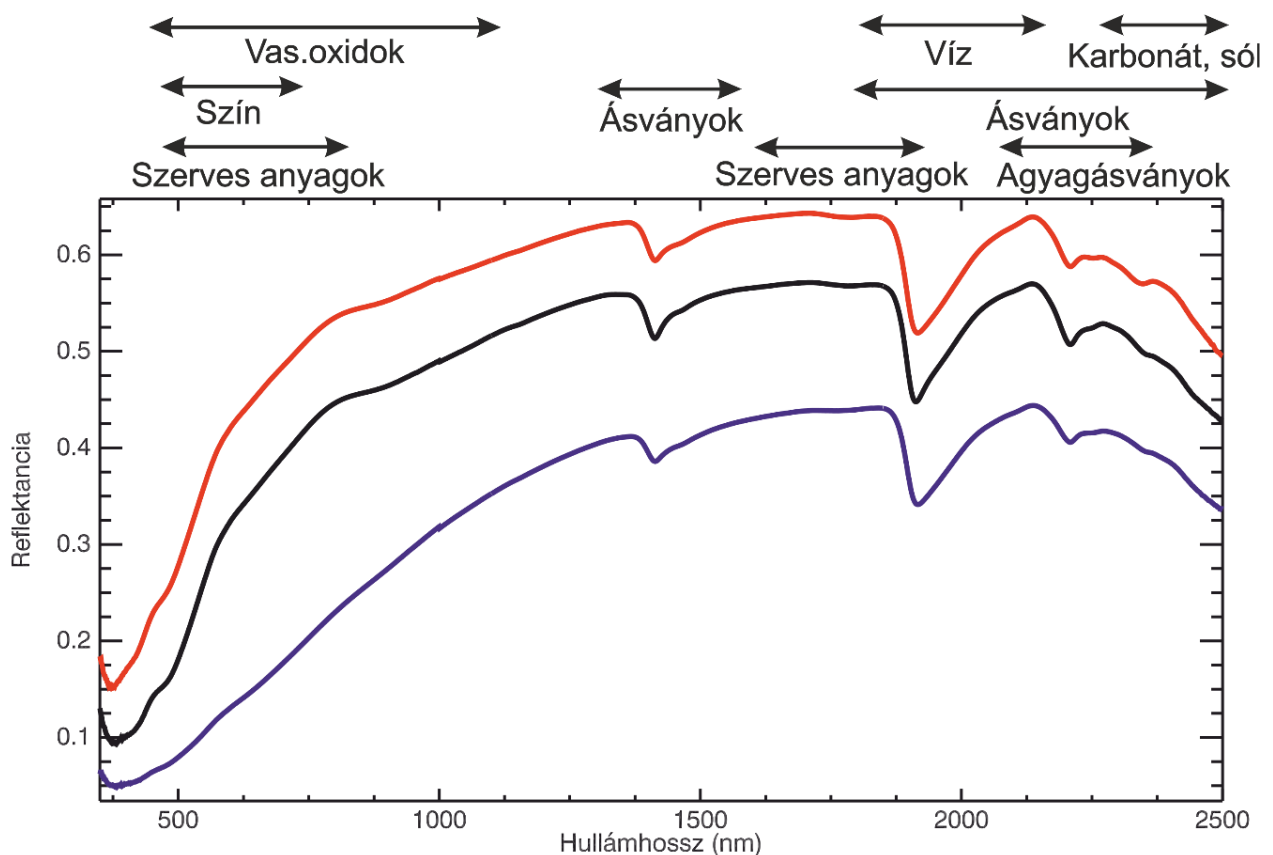
A VIS–NIR talajspektroszkópiai vizsgálatok alapját a talajalkotók hullámhossztól függő spektrális tulajdonságai képezik. Amikor a (akár természetes akár mesterségesen előállított) sugárzás kölcsönhatásba lép a talaj alkotóival, a molekuláris funkciós csoportok által elnyelt sugárzás által létrehozott alaprezgések - hullámhossz csökkenésével gyengülő - felharmonikusait és kombinációit detektáljuk a NIR tartományban (4. ábra). Ennek köszönhető, hogy a NIR tartományban széles, egymást átfedő, gyenge abszorpciós sávokkal találkozunk. A látható tartományban elsősorban az atomi és molekulapályák közötti elektronátmenetekhez köthető abszorpciós sávokat detektálhatunk (CLARK, 1999).



4. ábra: A VIS-NIR régióban lejátszódó kombinációs folyamatok és felharmonikusok tartományai (forrás: STENBERG et al., 2010). VIS = látható tartomány, FH = felharmonikus

Köszönhetően a széles és egymással átfedésben lévő – és a MIR tartományhoz képest jóval kisebb számú – sávoknak a VIS – NIR tartományban felvett spektrumok értelmezése számos esetben nehézségekbe ütközik. Mindezek ellenére a talajokról felvett VIS-NIR spektrum rendkívül sok mennyiségi és minőségi információt hordoz számos szerves és szervetlen talajalkotóról. A vizsgált spektrális tartomány rövidebb hullámhosszain (350 – ~1100 nm) mutatózó, elektronátmenetekre visszavezethető elnyelési maximumok alapján elsősorban a vastartalmú ásványok (pl. goethit, hematit) mutathatók ki (CLARK, 1999), illetve ezekhez a talajalkotókhoz köthető talajtulajdonságokról nyerhető információ (SCHWERTMANN, 1993) (5. ábra). Ebben a tartományban mutatkozik a talaj szerves anyagának jellegzetes spektrális elnyelése is (STEVENS et al., 2008).

A hosszabb hullámhosszokon (~1100 – 2500 nm) mutatózó keskenyebb abszorpciós sávok elsősorban a  $SO_4$ ,  $CO_3$  és OH csoportok, továbbá számos egyéb szervetlen és szerves vegyület – az MIR tartományában mutatózó – alaprezgési folyamatainak kombinációs és felharmonikus rezgéseivel kapcsolhatóak (HUNT, 1982, CLARK, 1999). Ebben a tartományban jelennek meg többek között a legfontosabb talajalkotók közül az agyagásványok, karbonátok és egyéb sók, valamint a víz karakterisztikus spektrális ujjlenyomatai (5. ábra).



5. ábra: Példák a kutatás során vizsgált talajok reflektancia spektrumára, feltüntetve azok a spektrális régiók, melyek információt hordoznak legfontosabb talajalkotókról.

## **2.3 A VIS-NIR spektroszkópia alkalmazása talajalkotók meghatározásában és talajparaméterek becslésében**

Az elmúlt évtizedek a talajok spektrális tulajdonságainak elemzését célzó kutatásai alapján nyilvánvaló, hogy az EM spektrum VIS-NIR tartományában végzett reflektancia mérések a talajok kvalitatív és kvantitatív jellemzésére egyaránt alkalmasak. 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 spektroszkópai vizsgálatokba BEN DOR és BANIN (1990) kvantitatív módszerek bevezetését szorgalmazta. BEN DOR és BANIN (1994) munkája óta szinte az összes kutatás hasonló módszertant követve kísérelte meg a talajok spektrális reflektanciája alapján a talajtani és agronómiai célú kutatásokban és gyakorlatban kulcsfontosságú szerepet betöltő talajparaméterek származtatását. Jelenlegi kutatások rámutattak, 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 (kemometriai) módszerek együttes alkalmazásával VISCARRA ROSSEL et al. (2006) és SORIANO – DISLA et al. (2014) összefoglaló munkája alapján a következő talajparaméterek jó hatásfokkal becsülhetők a spektrális mérések alapján: szerves szén és karbonáttartalom, kation kicserélő kapacitás (CEC), nedvességtartalom, agyag és homoktartalom (fizikai féleség), kicserélhető Ca és Mg, összes N, pH, valamint számos potenciális szennyezőanyag koncentrációja úgymint As, Cd, Hg és Pb. Ezeknek a talajparamétereknek az együttes vizsgálata lehetővé teszi a talaj dinamikus és többkomponensű rendszerként való kezelését és értékelését is. Fontos azonban megjegyezni, hogy csak olyan talajtulajdonságok becslése tekinthető megbízhatónak, melyek szoros korrelációt mutatnak egy vagy több – a vizsgált tartományban spektrálisan aktív – talajalkotó mennyiségével.

### **2.3.1 Többváltozós kalibrációs eljárások**

A talajokról felvett VIS-NIR reflektancia spektrum a talajalkotók egymást átfedő abszorpciós sávjai miatt nem-specifikus mérésnek tekinthető. Ennek a specifikusságnak a hiánya kombinálva a talajminta szerkezeti tulajdonságaihoz, illetve bizonyos talajalkotók (pl. kvarc) jelenlétéhez köthető szóródási jelenségekkel a spektrumok kiértékelését jelentősen megnehezíti. Ezek a tényezők együttesen olyan összetett abszorpciós/reflexiós mintázatot hoznak létre, amelyből a releváns talajinformáció csak matematikai módszerekkel nyerhető ki. Így a talajtulajdonságok

reflektancia spektrum alapú származtatása többváltozós kalibrációs eljárások alkalmazásával valósítható meg (MARTENS és NAES, 1989).

A többváltozós kalibrációs eljárások alkalmazásának célja független változók (X-változók, pl. spektrális adatok) és függő változók (Y-változók, pl. talajparaméter értékek) közötti kvantitatív kapcsolat modellezése. A leggyakrabban alkalmazott eljárások lineáris regresszió alapú módszerek, úgymint a Multiple Linear Regression (MLR), Stepwise Multiple Linear Regression (SMLR), Principal Component Regression (PCR) és a Partial Least Squares Regression (PLSR). A PLSR és a PCR alkalmazásának fő előnye a hagyományos SMLR és MLR módszerekhez képest, hogy bizonyos hullámhossz tartományok spektrumából való kiválasztása helyett, a teljes spektrumot alapul véve, az abban rejlő információt néhány változóba sűrítve megbízhatóbb modellek hozhatók létre. Jóllehet a PCR és a PLSR is jól kezeli a nagyszámú független (spektrális) változót tartalmazó adatokat, utóbbi mégis elterjedtebb a többváltozós modellezésben. Ez annak köszönhető, hogy a PLSR a modellezési folyamat során a függő változók és a független változók közötti kovariancia maximalizálásra törekszik (STENBERG et al., 2010), így a függő változóban rejlő variancia kevesebb faktorra (a varianciát leíró származtatott változóval) magyarázható. Így a számítási idő lerövidül, és csökken annak a kockázata, hogy a talajparaméterek származtatása szempontjából irreleváns információt (zajt) is a modellbe integráljunk.

### **2.3.2 A VIS-NIR spektroszkópia alkalmazásának gazdaságossági előnyei**

Jóllehet, a VIS – NIR spektroszkópia alkalmazása a hagyományos talajanalitikai eljárásokhoz képest bizonyos esetekben kevésbé pontos méréseket szolgáltat, de költség- és időhatékonyságánál fogva jóval több talajadat gyűjtését teszi lehetővé, jelentősen növelve így az információgyűjtés hatékonyságát (VISCARRA ROSSEL et al., 2009).

O'ROURKE és HOLDEN (2011) összevetette a talaj szerves széntartalmának meghatározására használt Walkley-Black módszer, teljes szerves szén (TOC) analizátor valamint a VIS – NIR spektroszkópia alkalmazásának mintákra vetített költségét, analitikai megbízhatóságát és időigényét. A tanulmány rávilágított, hogy bár a VIS – NIR módszerre alapozott szerves szén becslés megbízhatósága elmarad a TOC analizátorétól, előbbi hatékonysága – jóval alacsonyabb működési költségénél fogva – jelentősen felülmúlta az utóbbiét. SCHWARTZ et al. (2012) rámutatott, hogy a hagyományos laboratóriumi eljárásokhoz képest a spektroszkópiai eljárások alacsonyabb költséggel, és megbízhatóbban alkalmazhatók kőolajszármazékok okozta talajszennyezések monitorozásában.

A módszer alkalmazásának költség-és időhatékonysága még szembetűnőbb nagyobb léptékű talajfelvételezési projektek, kutatások esetében, melyek esetében jelentős számú minta elemzése

szükséges. Az „Africa Soil Information System” (AfSIS) projekt keretében, szerves szén spektrális alapú becslésének költsége a C/N analizátorral végzett mérések harmadát teszik ki. Az Európa Bizottság Közös Kutatóközpontja (Joint Research Centre of European Commission, JRC), a LUCAS (land use/cover area frame survey) projekt keretében (TÓTH et al., 2013) elemzett 20.000 talajminta alapján megállapította, hogy a spektroszkópiai alapú szerves szén becslések költsége a hagyományos laboratóriumi referencia mérések kevesebb, mint 1/3-át tették ki (NOCITA et al., 2015).

### **2.3.3 A spektrális könyvtárak szerepe**

Spektrális adatokra alapozott talajparaméter becslési eljárások, illetve a talajok spektrális változatosságának lokális jellemzéséhez a spektrális könyvtárak folyamatos fejlesztése elengedhetetlen. A spektroszkópiai kalibrációk empirikus természete miatt nem, vagy csak korlátozottan alkalmazhatók olyan mintákra, melyekhez hasonló összetételű minták a spektrális könyvtárakban nem szerepelnek. Számos esetben bebizonyosodott, hogy lokális talajvizsgálati projektek esetében egy adott, kisméretű és a talajképző tényezők által hasonló módon befolyásolt területre összeállított spektrális könyvtár elengedhetetlen a talajparaméterek megbízható becsléséhez. Természetesen a lokális talajtani jellegzetességeket reprezentáló spektrális könyvtárak korlátozottan használhatók olyan területek talajainak jellemzéséhez melyek a talajképző tényezők eltérő hatásmechanizmusa alatt állnak.

Világméretű tendenciává fejlődött a regionális spektrális könyvtárak fejlesztése. Ezek a nagy talajtani változatosságot leíró adatbázisok elsősorban általános, robusztus modellek megalkotásához elengedhetetlenek.

Az ICRAF-ISCRIC a talajok világméretű diverzitását reprezentáló adatbázisa Afrika, Ázsia, Észak-Amerika és Dél-Amerika 58 országából származó, összesen 785 talajszelvényből gyűjtött 4438 talajmintáról felvett VIS – NIR spektrumot tartalmaz. A referencia méréseket az ISRIC által, különböző laboratóriumokban végezték el a standard ISRIC mérési módszerekkel (VAN REEUWJIK, 2002).

Az ausztráliai spektrális könyvtár közel 4000 szelvényéből vett 21500 talajminta spektrális reflektanciáját tartalmazó nagyméretű adatbázis. A mintákat különböző – kontinentális, regionális, és farm szintű – talajvizsgálati és térképezési projektek során gyűjtötték. A referenciamérések különböző laboratóriumokban, különböző mérési protokollt követve kerültek elvégzésre (VISCARRA ROSSEL és WEBSTER, 2012).

Az Egyesült Államok nemzeti spektrális könyvtárában szereplő, 6017 mintaterületen, összesen 21084 talajszelvényből gyűjtött 144833 talajminta VIS – NIR spektrumát tartalmazza. A

mintavétel a Rapid Carbon Assesment projekt (USDA, 2013) keretében a szelvények 1 méteres mélységéig történt. Referenciamérésként a talaj szerves széntartalmát állapították meg, égetéssel módszerrel.

Az európai spektrális könyvtár közel 20000 felszíni (0-20 cm) mintáról felvett reflektancia spektrumot tartalmaz. A mintákat a LUCAS (Land Use/Cover Area frame statistical Survey) program keretében az EU 25 tagországból gyűjtötték. A referenciamérések egyetlen laboratóriumban kerültek elvégzésre, tizenhárom talajparamétert meghatározva (STEVENS et al., 2013).

A kontinentális szintű spektrális könyvtárakon túl számos nemzeti adatbázis is folyamatos fejlesztés alatt van. A spektrális adatbázisok bővítésében élen jár Franciaország (GOGÉ et al., 2012, GRINARD et al., 2012), a Cseh Köztársaság (BRODSKY et al., 2011), Dánia (KNADEL et al., 2012), Florida állam (VASQUEZ et al., 2010) és Brazília (BELLINASO et al., 2010)

A spektrális könyvtárak a talajtulajdonságok lokális/regionális/kontinentális szintű meghatározásán, valamint az időbeli változások nyomon követésén túl rendkívül fontos alapját jelentik a jelenleg légi járművekről, a jövőben pedig űrbéli platformokról végzett hiperspektrális távérzékelésnek. A távoli eszközök alkalmazásával rögzített sokcsatornás felvételek, és a spektrális adatbázisok együttes alkalmazásával lehetőség nyílik a talajtulajdonságok eddig soha nem látott részletességű térképezésére (DENG et al., 2013).

## **2.4 A spektrális mérések szerepe a korszerű talajosztályozásban**

### **2.4.1 A modern talajosztályozás alapkövetelményei**

Hazai, genetikai alapokon nyugvó talajosztályozási rendszerünk a talajokat fejlődésükben vizsgálja, és figyelembe veszi a földrajzi törvényszerűségeket. Az osztályozás központi egységeinek (a talajtípusoknak) az elhatárolási alapja a talajban felismerhető morfológiai bélyegek segítségével megállapított folyamattársulás, amely a talaj képződése óta fellépő anyag és energiaátalakulási folyamatok összességét foglalja magában (STEFANOVITS, 1972).

Hasonlóan a dokucsajevi alapokon nyugvó, genetikai szemléletű osztályozási rendszerekhez, a magyar rendszer is az 1950-es években került kifejlesztésre, és hatékonyan szolgálta a térképezési és döntéshozói feladatokat. Az utóbbi évtizedekben a tudomány és informatika eredményei, a megváltozott társadalmi igények, illetve a globális harmonizációs törekvések erősen hatottak az osztályozási rendszerekre. Új, szigorú definíciókra, standard mérésekre és számszerű adatokra épülő diagnosztikai szemlélet terjedt el a modern talajosztályozási rendszerekben. Az USA talajosztályozási rendszerét, a Soil Taxonomy-t (SOIL SURVEY STAFF, 1960) a FAO/UNESCO



talajosztályozási rendszerét (FAO, 1974), valamint a Word Reference Base for Soil Resources-t (IUSS WORKING GROUP WRB, 2014) számos nemzeti osztályozás követte a diagnosztikai szemlélet bevezetésével (MICHÉLI, 2011).

A World Reference Base for Soil Resources (WRB) talajosztályozási rendszerének létrehozása a FAO (Food and Agriculture Organization) és az UNESCO (United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization) szervezetek kezdeményezésére a Nemzetközi Talajtani Társaság (International Soil Science Society – ISSS; azóta Nemzetközi Talajtani Unió, International Union of Soil Science – IUSS) támogatásával kezdődött meg. A munka célja egy olyan keretrendszer kidolgozása volt, mely egy közös rendszerben képes megfeleltetni a nemzeti osztályozási rendszerekben meghatározott talajokat. A projekt további célja a talajcsoportok meghatározásához és elkülönítéséhez szükséges módszertan kidolgozása volt. A WRB 1998-ban, az IUSS 16. Világkongresszusán, Montpellierben a talajosztályozás közös nyelveként, majd az Európai Unió harmonizált talajtérképeinek, valamint adatbázisainak is hivatalos rendszereként került elfogadásra. A folyamatos új tapasztalatok új kiadásokat eredményeztek. Munkám során a 2014-ben nyomtatásban, majd 2015-ben digitálisan frissített verziót alkalmaztam.

#### **2.4.2 A WRB felépítése**

A WRB alapját az osztályozó kulcs alapján definiált referencia talajcsoportok (Reference Soil Groups, RSG's) alkotják. Ezek a RSG-k határértékekkel, pontos definíciókkal megalapozott kritériumok alapján meghatározott diagnosztikai szintek, tulajdonságok és anyagok jelenléte vagy hiánya alapján kerülnek elkülönítésre az osztályozási folyamat első szintjén. A WRB 2015-ös verziójában a második szinten elsődleges minősítők (*principal qualifiers*) és kiegészítő minősítők (*supplementary qualifiers*) kerülnek meghatározásra. Míg az első szinten történő elkülönítés alapja a talajban lejátszódott elsődleges folyamatok eredményeinek meghatározása, addig a második szinten az elsődleges tulajdonságokat jelentősen befolyásoló másodlagos talajképző folyamatok eredményeit rögzítjük. A minősítők kiegészíthetők specifikáló alminősítőkkel (*subqualifiers*), melyek a jellegzetesség megjelenési mélységére, vagy kifejlődésének mértékére utalnak. A WRB diagnosztikai egységei és a minősítők fontos komplex tulajdonságaokat definiálnak, melyek önállóan is alkalmazhatók a talajok jellemzésére vagy tematikus térképezésére.

#### **2.4.3 Talajosztályozási törekvések VIS-NIR spektroszkópiai módszerek integrálásával**

Napjainkra világossá vált, hogy a VIS – NIR spektroszkópiai módszerek gyors, költséghatékony és környezetbarát megoldást kínálnak talajparaméterek meghatározására. Ez elsősorban annak köszönhető, hogy a talajokról felvett spektrum információban rendkívül gazdag, és egyetlen görbe felvételével számos talajtulajdonságról nyerünk egyidejűleg információt. Mindezek ellenére a

technológiának talajosztályozásban betöltött szerepe egyelőre háttérben van, annak ellenére, hogy spektrumok szinte az összes diagnosztikai egység meghatározásához szükséges talajparaméterről kvantitatív információt hordoznak. Az 1. táblázatban a WRB talajosztályozási folyamatában kulcsszerepet játszó, és VIS – NIR spektroszkópiai módszerekkel meghatározható talajparamétereket tüntettem fel. A táblázat bemutatja az egyes diagnosztikai egységek (szintek/tulajdonságok/anyagok) meghatározásához szükséges talajtulajdonságokat, illetve az RSG-k elkülönítésében játszott szerepüket.

#### 2.4.3.1 Spektroszkópiai talajosztályozást célzó kutatások áttekintése

A talajosztályozási célú spektroszkópiai vizsgálatok alapvetően két féle megközelítést alkalmaznak.

1. Az osztályozási folyamatban kulcsszerepet játszó – a spektrális adatokból becsült – talajparaméter értékek szelvény menti eloszlásának vizsgálata, vagy magának a spektrális változatosságnak a mélység szerinti elemzése. Ezt a megközelítést elsősorban a genetikai vagy diagnosztikai talajszintek spektrális alapú meghatározásának céljából alkalmazzák.
2. A spektrális adatok alapján becsült talajparaméter értékek, vagy spektrális változók szelvény menti lefutása alapján a talajok hasonlósági viszonyainak megállapítása, esetleg a talajok osztályozása.

Az első megközelítést alkalmazta BEN DOR et al. (2008) egy olyan terepi eszköz kifejlesztéséhez, mely egy fúrólukba helyezett szonda segítségével alkalmas a talaj spektrális tulajdonságainak mélység szerinti vizsgálatára. Ezzel a módszerrel szelvényfeltárás, illetve mintavétel nélkül, terepi körülmények között vált lehetővé a talajszelvények vizsgálata. Jóllehet a természetes körülmények között felvett talajspektrum az összetevők spektrális jellegzetességein túl számos (a mérés alkalmazhatóságát negatívan befolyásoló) tényező hatását magukon viselik, a módszer hatékony eszköznnek bizonyult szelvények jellemzéséhez.

VISCARRA ROSSEL et al., (2008) 10 db talajszelvény terepi, és a szelvényekből vett minták laboratóriumi vizsgálata alapján megállapította, hogy az *in situ* és *ex situ* körülmények között felvett görbék közötti fő különbség a talajnedvesség spektrumot módosító hatásában mutatkozik. A kutatás során alkalmazott hullámhossz specifikus t-teszt alapján megállapítást nyert, hogy a nedvesség tartalomban mutató különbségek talajtípusonként eltérő hullámhossz-tartományokban mutatkoznak, jelentősen nehezítve így a szelvények fizikai/kémiai tulajdonságaik alapján történő hasonlósági viszonyainak megállapítását.

FAJARDO et al. (2013) kísérletet tett 59 db - 85 és 135 cm közötti mélységig mélyített - fúrómag szelvény menti vizsgálata alapján a terepi szelvényleírás során meghatározott talajgenetikai szintek elkülönítésére. Bár a publikáció nem tér ki referencia talajparaméterek szelvény és a

spektrumokból generált spektrális változók szelvény menti lefutása közötti hasonlóság megállapítására, a dolgozat fontos információval, és módszertani javaslattal szolgál a spektrális adatok talajok szelvény menti spektrális jellemzéséhez.

VASQUES et al. (2014) 291 talajszelvényből, három fix mélységintervallumból (0-20, 40-60 és 80-100 cm) vett minták spektrális reflektanciájának rögzítése, és a spektrumok szelvényenként mélység szerinti rendezése alapján határozta meg a talajok hasonlósági/különbözőségi viszonyait. A talajoknak a brazil talajosztályozási rendszer alapján történő besorolása és a spektrális alapú osztályozás order szinten 67, suborder szinten 48 míg STC (soil textural classification) szinten 24 %-os egyezést mutatott.

1. táblázat: a WRB talajosztályozási folyamatában kulcsszerepet játszó, és VIS-NIR spektroszkópiai módszerekkel meghatározható talajparaméterek

Diagnosztika <sup>1</sup>	RSG <sup>2</sup>	OCARB	CARB	TEXT	BS%	CFC	pH	EC	Color	exch. Al	exch. Na	exch. Mg	exch. Ca	exch. ac	ESP	mineralogy	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	free Fe
Anthraquic hor.	AT CM								X									
Argic hor.	TC AN FR GY CA RT AC LX AL LV			X														
Calcic hor.	LP CH KS CA		X															
Cambic hor.	CM			X					X									
Chernic hor.	TC LP CH	X			X				X									
Cryic hor.	CR																	
Duric hor.	TC DU																	
Ferralic hor.	TC AN FR	X		X		X	X			X								
Ferric hor.	TC								X									
Folic hor.		X																
Fragic hor.	TC CM	X																
Fulvic hor.		X							X									
Gypsic hor.	LP GY																X	
Histic hor.		X																
Hortic hor.	AT	X			X				X									X
Hydragric hor.	AT TC CM								X									
Iragric hor.	AT CM	X		X														
Melanic hor.		X							X									
Mollic hor.	GL KS PH UM	X			X				X									
Natric hor.	TC SN			X			X				X	X	X	X	X			
Nitic hor.	TC NT			X														
Petrocalcic hor.	TC LP CA		X															
Petroduric hor.	TC LP DU																	
Petrogypsic hor.	TC LP GY																X	
Petroplinthic hor.	TC LP AN PT NT CM								X									
Pisoplinthic hor.	TC AN PT NT CM								X									
Plaggic hor.	AT CM	X		X	X				X									
Plinthic hor.	TC AN PT NT CM																	
Pretic hor.	AT CM	X							X			X	X					
Protovertic hor.				X														
Salic hor.	SC CM								X									
Sombric hor.		X							X									
Spodic hor.	TC LP AN PZ	X					X		X									
Terric hor.	AT CM				X				X									
Thionic hor.	SC CM						X										X	
Umbric hor.	GL UM	X		X	X				X									
Vertic hor.	TC VR NT CM			X														
Abrupt text. diff.	PL			X														
Albeluvic glossae				X					X									
Andic prop.	AN CM																	
Anthric prop.																		X
Aridic prop.		X		X	X				X									
Continuous rock	HS TC LP AN ST AC AL																	

Diagnosztika <sup>1</sup>	RSG <sup>2</sup>	OCARB	CARB	TEXT	BS%	CEC	pH	EC	Color	exch. Al	exch. Na	exch. Mg	exch. Ca	exch. ac	ESP	mineralogy	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	free Fe
Geric prop.							X			X	X	X	X					
Gleyic prop.	<b>GL</b>								X									
Lithic discontinuity				X														
Protocalcic prop.			X															
Reducing cond.	<b>GL PT PL ST</b>															X		X
Retic prop.	<b>RT</b>								X									
Shrink-swell cracks	<b>VR</b>																	
Sideralic prop.		X				X												
Stagnic prop.	<b>PT PL ST</b>								X									
Takyric prop.				X				X										
Vitric prop.	<b>AN CM</b>																	
Yermic prop.																		
Albic mat.									X									
Artefacts	<b>TC</b>																	
Calcaric mat.			X															
Colluvic mat.																		
Dolomitic mat.				X														X
Fluvic mat.	<b>FL</b>	X																
Gypsic mat.																		X
Hypersulfidic mat.							X											X
Hyposulfidic mat.																		X
Limnic mat.																		
Mineral mat.		X																
Organic mat.	<b>HS</b>	X																
Ornithogenic mat.																		
Soil organic carbon																		
Sulfidic mat.							X											X
Technic hard mat.	<b>HS TC LP AN ST AC AL</b>																	
Tephric mat.																		

<sup>1</sup> Diagnosztikus szintek, tulajdonságok és anyagok

<sup>2</sup> Reference Soil Group – **Vastaggal szedett kódok** szimbolizálják azokat a RSG-ek, melyek esetében a diagnosztikai egység jelenléte kritérium

*Dőlt betűvel szedett kódok* szimbolizálják azokat az RSG-eket, melyek esetében a diagnosztikai egység hiánya kritérium, amennyiben nem teljesít egyéb követelményeket

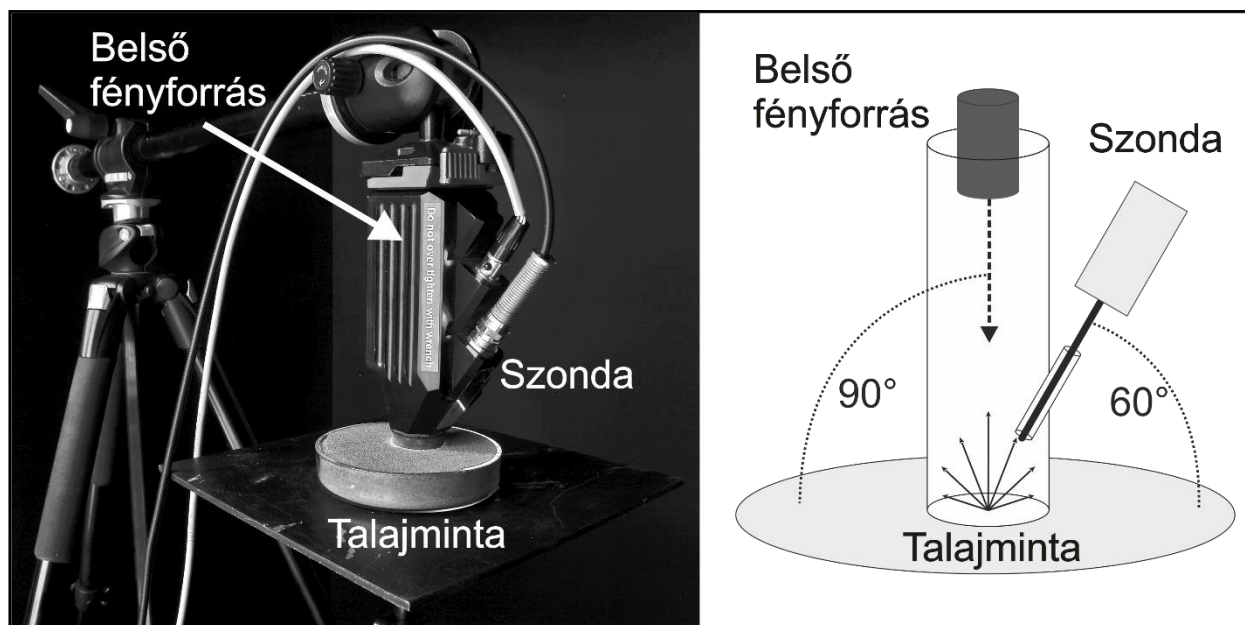
HS – Histosols, AT – Anthrosols, TC – Technosols, CR – Cryosols, LP – Leptosols, SN – Solonetz, VR – Vertisols, SC – Solonchaks, GL – Gleysols, AN – Andosols, PZ – Podzols, PT – Plinthosols, NT – Nitisols, FR – Ferralsols, PL – Planosols, ST – Stagnosols, CH – Chernozems, KS – Kastanozems, PH – Phaeozems, UM – Umbrisols, DU – Durisols, GY – Gypsisols, CL – Calcisols, RT – Retisols, AC – Acrisols, LX – Lixisols, AL – Alisols, LV – Luvisols, CM – Cambisols, AR – Arenosols, FL – Fluvisols, RG - Regosols



## 3. Anyag és módszer

### 3.1 A spektrális mérések módszere

A VIS-NIR reflektancia spektroszkópiai méréseket a Nemzeti Agrárkutató és Innovációs Központ (NAIK) Mezőgazdasági Gépesítési Intézetének (MGI) tulajdonában lévő Analytical Spectral Devices (ASD) FieldSpec 3 MAX hordozható spektrométerrel végeztem el a 350 és 2500 nm közötti spektrális tartományban. A műszer 2151 csatornán rögzíti a spektrumokat. A mérések során a talajminták kétirányú reflektanciáját rögzítettem az ASD High Intensity Contact Probe (HICP) szondával, amely a mérés során lehetővé teszi a mintával való közvetlen érintkezést. E szonda használatával a méréseket negatívan befolyásoló környezeti tényezők (pl. légköri pára, por) hatásának minimalizálása biztosítva volt. A HICP-t használva egy mérés alkalmával 10 mm átmérőjű területről kaptam spektrális információt. A mérések megkezdése előtt a petri csészékbe töltött légszáraz, darált, örölt és szitált mintákat a mérés helyszínéül szolgáló laboratóriumban tároltam annak érdekében, hogy a minták nedvességtartalma egyensúlyba kerüljön a helység levegőjének nedvességtartalmával. Az ASD High Intensity Contact Probe alkalmazása esetén a mérési elrendezés a 6. ábrán bemutatottak szerint valósul meg.

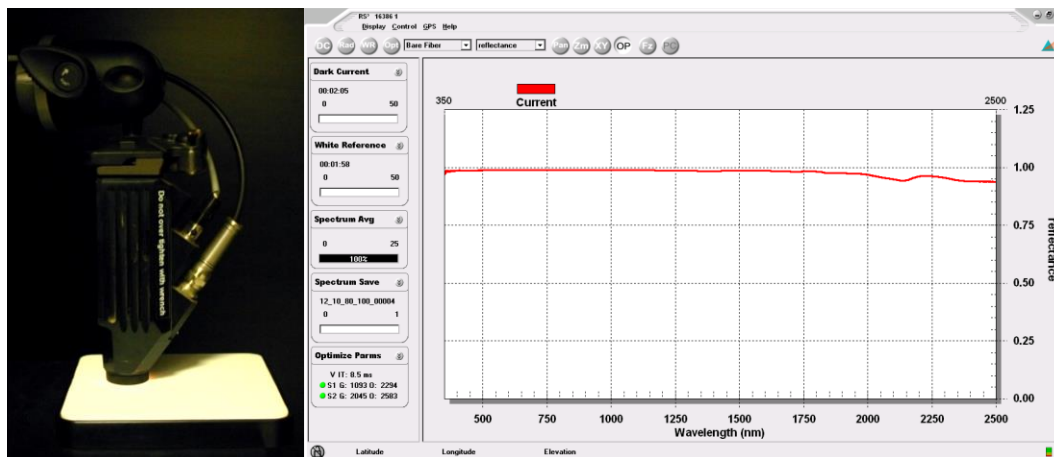


6. ábra: A kétirányú reflektancia-mérések során alkalmazott mérési elrendezés (forrás: CSORBA et al., 2012)

#### 3.1.1 A mérési folyamat

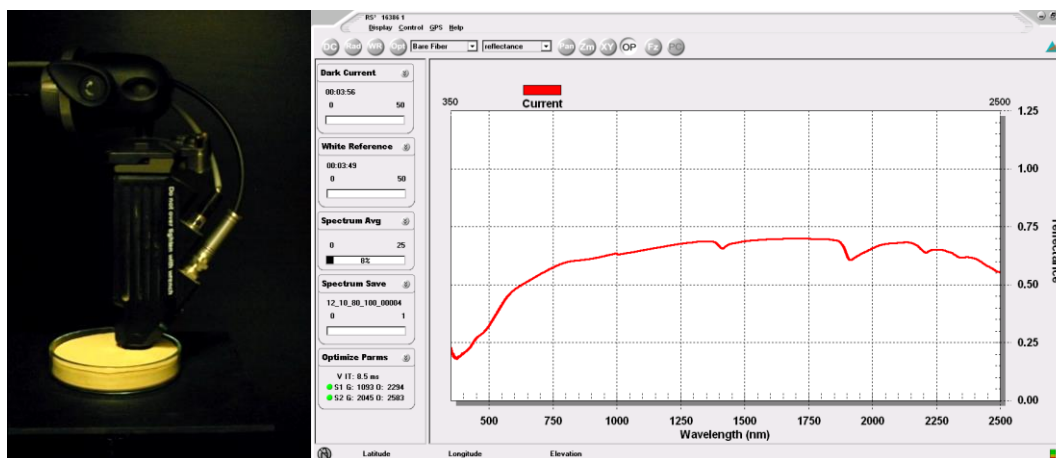
A laboratóriumi spektrális mérésekhez alkalmazott ASD FieldSpec 3 MAX spektrométer az erre a célra speciálisan kifejlesztett fényizolált, fekete szekrényben áll, így a mérések megbízhatóságát negatívan befolyásoló külső fényforrások hatásának kizárása biztosítva volt. A mérések előtt (a megfelelő működési állapot elérését követően) a műszert minden esetben

optimalizálni kell, amelynek során a mindenkor alkalmazott (mesterséges vagy természetes) fényforrás spektrális jellegének megfelelő detektor-erősítési beállítások kerülnek meghatározásra. Az optimalizálás után a szenzorokat kalibrálni kell. Erre egy bárium-szulfátból készült, az EM spektrum látható tartományában 98 %-os visszaverési értékekkel rendelkező fehér Spectralon® referenciapanel szolgált, amelynek visszaverődési görbéjét a 7. ábrán tüntettem fel..



7. ábra: A „fehér-referencia” kalibráció lépése. Az ábrán a kalibrált BaSO<sub>4</sub> Spectralon® referenciapanel spektruma látható

A spektrális méréseket a légszáraz, darált, örölt és 2 mm-es szitán átszitált, Petri csészébe helyezett mintákon végeztem el. Bár a HICP lehetővé teszi a mérések kézből történő elvégzését, az apróbb mozgásokból adódó mérési pontatlanságok minimalizálása érdekében a szondát egy háromlábú állványra szereltem. A talajmintát a szonda üveglencséje alá helyezve, azzal kontaktusba hozva, a spektrumkép rögzülését követően a spektrális mérés elvégezhető. Minden talajmintáról 5 db, egyenként 50 mérés átlagából számított reflektancia spektrumot rögzítettem (8. ábra). Így a magas jel/zaj arány, illetve a minták esetleges inhomogenitásából származó bizonytalanságok kiszűrése biztosított volt. Az optimalizálási és kalibrációs lépéseket, valamint a spektrumok felvételezését az ASD RS3™ szoftverrel végeztem el.

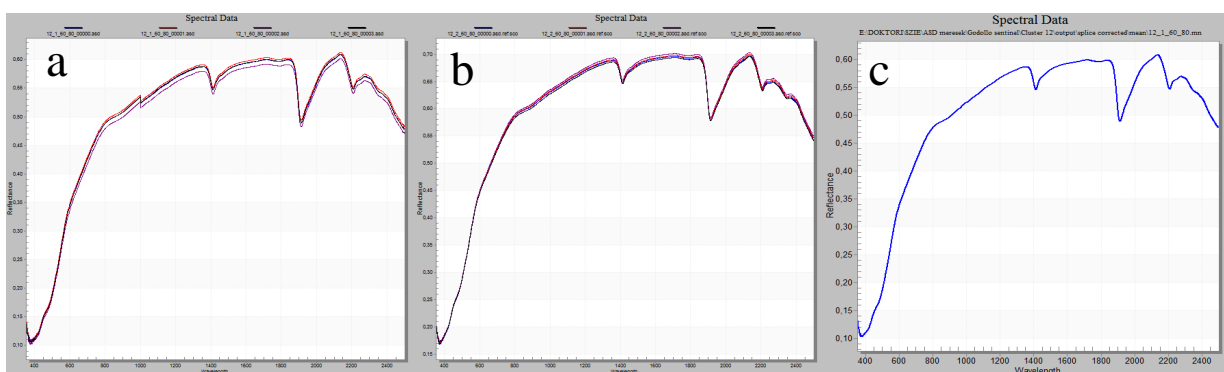


8. ábra: A talaj-spektrum felvételezés folyamata.



### 3.1.2 A spektrális adatok elő-feldolgozása

Az adatelemzés megkezdése előtt a nyers spektrumokon elő-feldolgozási lépéseket kell végrehajtani, melyeket az ASD ViewSpec Pro szoftverrel végeztem el. Az első lépés a spektrumokon tapasztalható „ugrások” kiszűrése (9/a. ábra), melyek a spektrométer három detektorának eltérő érzékenységének köszönhető. A lépés során a középső (SWIR1) detektor által felvett görbe két szélénél a szomszédos (VNIR és SWIR2) detektorok által rögzített görbéhez illesztése történik (*Splice correction*) (9/b. ábra). A korrekció után a mintánkénti 5 mérés eredményének átlagolása következik. Az átlagolás előtt elvégzett statisztikai vizsgálat alapján kiszűrésre kerültek azok a mérések, melyek (minden esetben) mérési hibák folytán kiugró értékeket mutattak (9/c ábra).



9. ábra: A reflektancia spektrumok elő-feldolgozása. a.) a nyers spektrumok b.) a splice korrekción átesett spektrumok c.) az átlagolás eredményeképpen kapott spektrumok

## **3.2 A spektrális alapú talajparaméter becslés módszertana**

Kutatásom e részében célkitűzésem a VIS – NIR reflektancia spektroszkópiai mérések talajparaméter becslés alkalmazási lehetőségeinek tesztelése volt. A vizsgálat elvégzését a Gödöllői-dombságban kijelölt mintaterületen a talajok szerves szénkészletének térképezését célzó mintavételi projekt során gyűjtött nagy mennyiségű talajminta szerves szén és karbonáttartalmának, valamint kémhatásának a meghatározási igénye indokolta. A spektrális adatok alapján történő talajparaméter-becsléshez a spektrális mérések mellett laboratóriumi referencia elemzések elvégzése is szükséges. A teljes mintasorozat fizikai/kémiai tulajdonságait reprezentáló „kalibrációs” minták kiválasztásával, és azokon elvégzett szerves szén, karbonáttartalom és kémhatás mérések alapján, valamint a mintákról felvett reflektancia spektrumok ismeretében olyan többváltozós matematikai-statisztikai alapokon nyugvó kemometriai modelleket hozhatunk létre, melyek alkalmazásával a többi mintára vonatkozó tulajdonságok becslése lehetséges, a spektrális információ ismerete alapján. Tudományterülettől függetlenül a kemometriai módszerek alkalmazásának célja, hogy költséges, időigényes, vagy környezetszennyező mérési módszert egyszerűbb és gyorsabb eljárással részben vagy egészben helyettesítsük. Ezzel lehetővé válik adott mennyiségű minta tulajdonságainak olcsóbb és gyorsabb meghatározása, vagy adott idő- és költségegység alatt több minta elemzése.

A doktori kutatás keretében felépített spektrális könyvtár, valamint a laboratóriumi referenciamérések egy része számos, általam koordinált diplomadolgozat alapját, vagy fontos részét képezte. A kalcium-karbonát valamint a kémhatás spektrális kalibrációjának kezdeti lépései NAGY (2014), valamint TAKÁCS (2013) diplomadolgozatában szerepelnek.

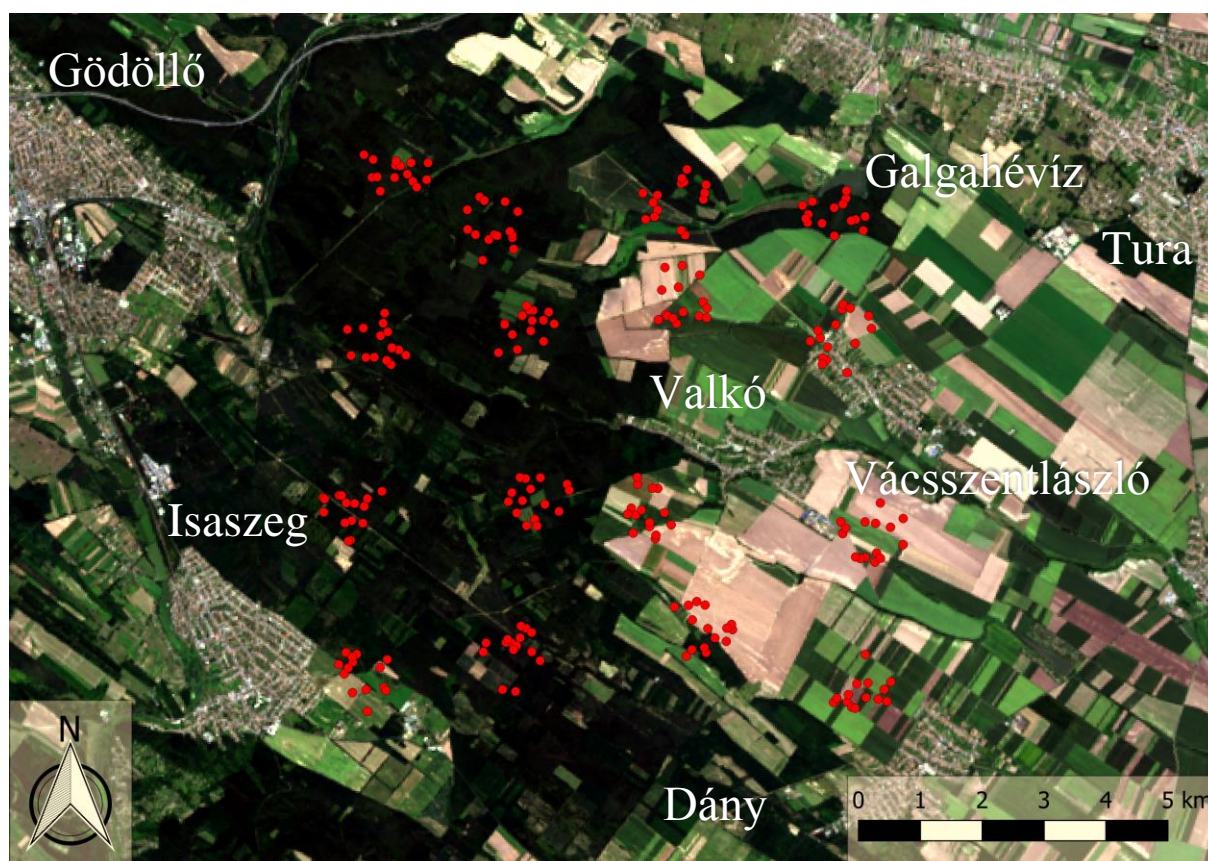
### **3.2.1 A mintaterület bemutatása, mintavételi módszer**

A kutatás célja a Gödöllői-dombságban kijelölt mintaterületen – digitális talajtérképezési projekt alapját képező – talajminták vétele, spektrális reflektancia rögzítése és referencia adatok segítségével szerves szén, CaCO<sub>3</sub> és kémhatást becslését lehetővé tevő modellek létrehozása. A Gödöllői-dombságban megjelenő talajtípusok áthalmazott homokon és löszön képződött barnaföldek, csernozjom barna erdőtalajok, agyagbemosódásos barna erdőtalajok, humuszkarbonátok, öntés és réti talajok valamint láptalajok fordulnak elő.

A kutatás során a meghatározott 10 × 10 km-es mintaterületen 16 db, egyenként 6,25 km<sup>2</sup> (2,5 × 2,5 km) területű klaszterben 10 db random – az Africa Soil Information System (AfSIS) projektben alkalmazott Land Degradation Surveillance Framework (LDSF) – módszerrel (VÅGEN et al., 2015), összesen 160 db kiválasztott mintázási pont került kijelölésre. (10. ábra). A kutatás alatt végül felkeresett 154 mintaponton számos kiegészítő vizsgálat mellett (NAGY,

2014) fűrt szelvényekből 0-20, 20-40, 40-60, 60-80 és 80-100 cm-es mélység intervallumokból vettünk bolygatott talajmintát.

A talajmintákat laboratóriumban szobahőmérsékleten légszárazsáig szárítottuk, majd megdaráltuk, megőröltük és 2 mm lyukátmérőjű szitán átszitáltuk. Az eredeti és az előfeldolgozáson átesett mintákat egyedi azonosítóval ellátott zacskókban archiváltuk.



10. ábra: A Gödöllői-dombságban kijelölt mintaterület

### 3.2.2 Spektrális és laboratóriumi referencia mérések

A mintavételezési kampány során gyűjtött összesen 770 talajminta laboratóriumi spektrális reflektanciáját a 3.1. fejezetben bemutatott módszertan szerint rögzítettem.

Laboratóriumi referenciaelemzések céljából a minták ~10 %-át (80 db-ot) választottam ki random módszerrel laboratóriumi referenciaelemzések céljából. A véletlenszerűen kiválasztott mintákon felül további minták kerültek kijelölésre, amelyek bevonását a spektrális görbék vizuális interpretációja, valamint a kemometriai elemzés során felmerülő – további minták bevonását igénylő – részeredmények indokolták. Mindezek alapján szerves széntartalom mérést a Walkey-Black módszerrel 135,  $\text{CaCO}_3$  tartalom meghatározást Scheibler módszerrel 140, míg pH mérést elektrokémiai módszerrel (részletek a 2. táblázatban) 160 talajmintán végeztünk el a Talajtani és Agrokémia Tanszék laboratóriumában.

### 3.2.3 Spektroszkópiai transzformációk

#### 3.2.3.1 A spektroszkópiai transzformációk elméleti alapjai

Az ASD FieldSpec MAX 3 spektrométerrel a mintákról kétirányú reflektancia spektrumokat vettem fel. A mérések során figyelembe kell venni, hogy a végső spektrális görbék kialakításáért számos tényező felelős, melyek nem, vagy nehezen tartatók ellenőrzés alatt. A diffúz reflektancia mérésektől eltérően, a kétirányú reflektancia mérések során a minták által spekulárisan (tükrözötten), és diffúz módon visszavert sugárzás is részt vesz a spektrumok kialakításában. Ez a két fajta módon visszavert sugárzás mértéke nagyban függ a szemcsemérettől, a minta szerkezetétől és felszínének mikrodomborzati jellemzőitől, illetve egyéb más – a felszín állapotát – jellemző tulajdonságoktól is. Többek között 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 venni. Mindebből következik, hogy a kétirányú reflektancia-mérések során számos olyan folyamattal és jelenséggel kell számolni, amelyeket az adatok kiértékelésénél figyelembe kell venni, és spektrum-transzformációs technikákkal zavaró hatásukat csökkenteni kell (SELITTO et al., 2009).

Az spektrális értékek és különböző alkotók koncentrációja közötti linearizációra tett kísérletek közül a leggyakrabban alkalmazott eljárás a reflektancia spektrumokon elvégzett  $\log I/\text{Reflektancia}$  transzformáció. A transzformáció elvégzését a Lambert-Beer törvény indokolja, mely kimondja, hogy egyrészt a minta által visszavert és az elnyelt 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:  $A_{\lambda}$  a minta abszorbancia értéke meghatározott ( $\lambda$ ) hullámhosszon;  $\varepsilon_{\lambda}$  az anyag abszorpciós együtthatója az adott hullámhosszon;  $b$  a sugárzás által a mintában megtett út hossza; és  $C$  az összetevő koncentrációja.

A minták szemcseméretbeli különbözőségei jelentősen befolyásolják a szóródási jelenségeket. A durvább szemcseméret növeli a szóródást, csökkenti a reflexiót és növeli a látszólagos abszorbanciát. A talajtulajdonságok meghatározása szempontjából releváns spektrális csúcsok kihangsúlyozása, a spektrumok általános alakjának befolyásának csökkentése érdekében további transzformációs technikák állnak rendelkezésre. A leggyakrabban alkalmazott módszerek a Multiplicative Scatter Correction (MSC) (GELADI et al., 1985), Standard Normal Variate (SNV) (BARNES et al., 1989) transzformáció valamint az első és második rendű deriváltak kiszámítása a Savitzky-Golay módszerrel (SAVITZKY and GOLAY, 1964).

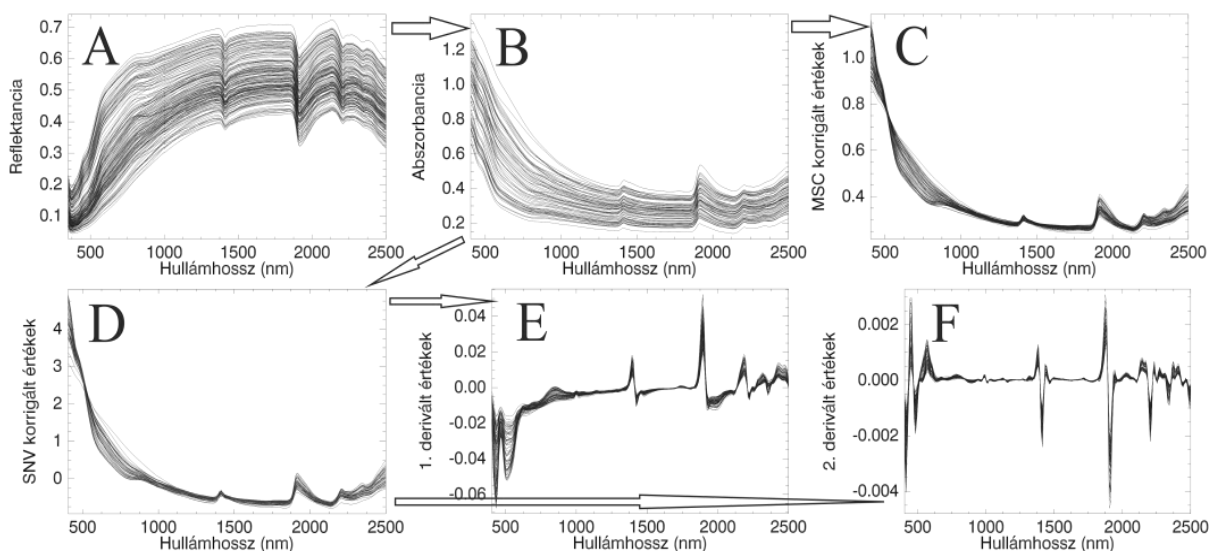
Fontos megjegyezni, hogy talajvizsgálati célokra nincs elfogadott spektroszkópai transzformáció kombináció, mely általánosan, minden esetben alkalmazható. A legnépszerűbb eljárás mégis az abszorbanciává konvertált spektrumokon elvégzett első és másodrendű derivált számítás. A deriváltak kiszámításának az alapvonal korrekcióban (*baseline shift correction*), simítási módszerekkel kombinálva a zajcsökkentésben, a gyenge abszorpciós sávokat kihangsúlyozásában, valamint az egymást átfedő sávok felbontásában van jelentős szerepe.

### 3.2.3.2 Az elvégzett spektroszkópai transzformációk

Első lépésként a reflektancia spektrumok abszorbanciává számítását végeztem el a következő egyenlet szerint:

$$\text{Abszorbancia} = \log\left(\frac{1}{\text{Reflektancia}}\right)$$

Következő lépésként az abszorbancia spektrumokon Multiplicative Scatter Correction (MSC) és Standard Normal Variate (SNV) transzformációt végeztem el. Mindkét eljárásnak a zavaró hatások, illetve a hullámhossztól függő szóródási jelenségek hatásának csökkentésében van nagy jelentősége. Az SNV módszerrel korrigált spektrumokon elvégeztem 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 12. ábrán látható spektrumokat használtam a kemometriai elemzésekhez, és teszteltem az egyes transzformációs eljárások – a prediktív modellek robusztusságát befolyásoló – hatását.



12. ábra: A kutatás keretében felvett reflektancia spektrumok (A), és azok spektroszkópai transzformációi: B. abszorbancia, C. abszorbancia + MSC (Multiplicative Scatter Correction) korrekció, D. abszorbancia + SNV (Standard Normal Variate) korrekció, E. abszorbancia + SNV + 1. deriváltak, F. abszorbancia + SNV korrekció + 2. deriváltak

### 3.2.4 Kemometriai elemzések

#### 3.2.4.1 A Partial Least Squares Regression (PLSR) háttere

A reflektancia spektrumok gazdag információtartalmán felül figyelembe kell venni, hogy a VIS–NIR régióban lejátszódó bonyolult atomi-molekuláris szintű rezgési és elektron-átmeneti folyamatok, és az azok eredményeképpen megjelenő elnyelési sávok együttes, és akár egymást átfedő jelenléte rendkívül bonyolulttá teszi a spektrumok kiértékelését (DUCKWORTH, 1998). A spektrumokat mindemellett további folyamatok, úgymint a hullámhossztól függő szóródási jelenségek, műszeres zaj, és egyéb ismert vagy ismeretlen forrásból származó folyamatok teszik még komplexebbé. Mindezekből következik, hogy rendkívül nehéz, vagy akár lehetetlen specifikus abszorpciós sávokat, illetve spektrális tulajdonságokat talajok összetevőihöz közvetlenül hozzárendelni. A VIS–NIR reflektancia spektrumokban rejlő információt azonban megfelelő többváltozós statisztikai (kemometriai) módszerekkel lehetséges hatékonyan kinyerni. A kemometria, mint gyűjtőfogalom, olyan többváltozós matematika-statisztikai alapokra épülő módszereket foglal magába, melyek alkalmazása lehetővé teszi független ( $X$ ) változók (pl. talajmintákról felvett reflektancia spektrumok) és függő ( $Y$ ) változók (pl. talajparaméterek) közötti kvantitatív kapcsolat megállapítását (DUCKWORTH, 1998). A spektrális tulajdonságoknak anyagi jellemzőkhöz való kvantitatív hozzárendelése lehetővé teszi számos olyan talajparaméter becslését a reflektancia mérések alapján, amelyeknek a hagyományos laboratóriumi eljárásokkal történő meghatározása idő- és költségigényes, és sok esetben környezetre káros kémiai anyagok alkalmazását igényli.

A kemometriai gyakorlatban a Partial Least Squares Regression (PLSR) az egyik leggyakrabban alkalmazott modellezési eljárás (DUCKWORTH, 1998). A számos kemometriai módszer közül a PLSR alkalmazható a leghatékonyabban prediktív modellek létrehozására, amikor a független ( $X$ ) változók (a spektrum hullámhosszain mutatkozó spektrális értékek) száma meghaladja a minták számát, és változók között jelentős multikollinearitás mutatkozik. Az eljárás szoros rokonságban áll a főkomponens regresszióval (principal component regression - PCR) módszerrel, ám attól eltérően a PLSR algoritmus egymást követő ortogonális faktorok kiválasztásával a spektrális adatok ( $X$  változók) és a talajparaméterek ( $Y$  változók) közötti kovariancia maximalizására törekszik. Egy PLSR modell megalkotásánál annyi PLSR faktornak a definiálása a cél, mely mind a független  $X$ , és mind a függő  $Y$  változóknál jelenlévő változékonyság legnagyobb hányadát kifejezi, de az adatokban jelenlévő zajt nem tartalmazza. A PLSR eljárás az  $X$  és  $Y$  változókat faktorértékekké ( $T$ ) és faktorsúlyokká ( $P$  és  $Q$ ) bontja szét a következők szerint:

$$X = TP + E,$$

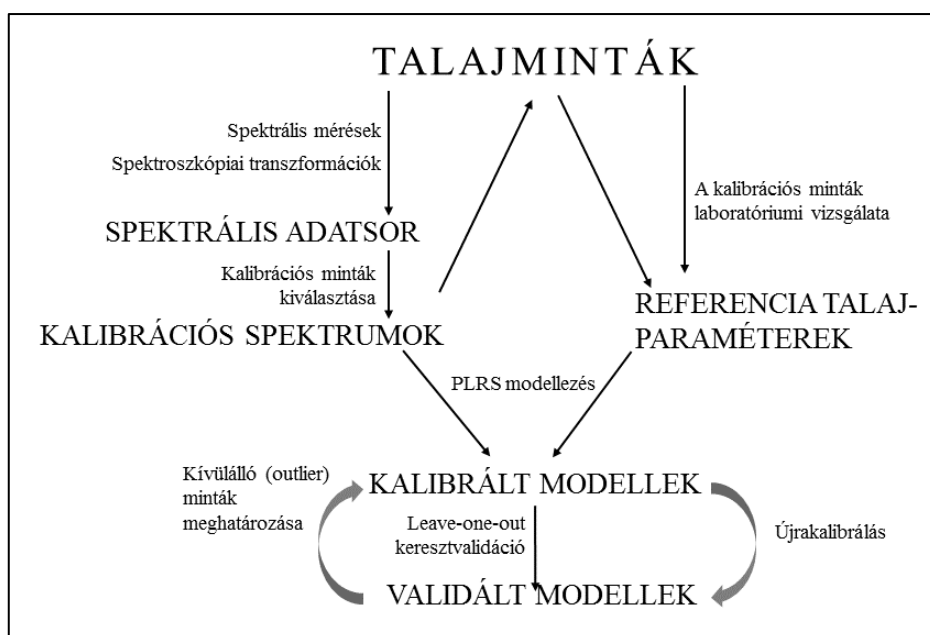
$$Y = TQ + F.$$

A két mátrix szétbontása egyidejűleg történik úgy, hogy az első néhány faktor kifejezze a  $X$  és  $Y$  változóiban jelenlévő változékonyság legnagyobb hányadát. Az elemzés során megállapításra kerül a legmegbízhatóbb modell létrehozásához szükséges faktorok száma. A modell megalkotásában részt nem vevő, visszamaradó faktorok figyelmen kívül hagyhatók, 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, amelyről 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.

### 3.2.4.2 A kemometriai elemzés menete

A PLSR elemzést a The Unscrambler 9.7 szoftverrel (CAMO® software) végeztem el. A PLSR elemzés alábbi főbb, lépéseit az 13. ábrán mutatom be.

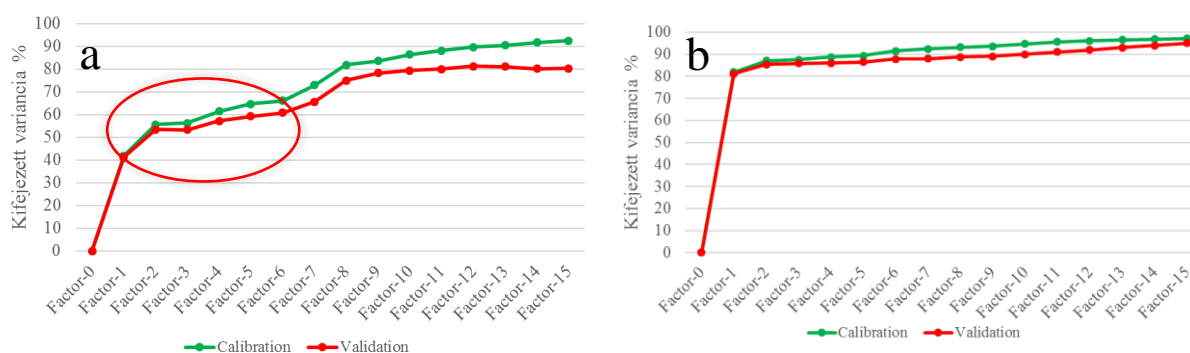
1. Az összes talajminta spektrális reflektanciájának rögzítése a 350 – 2500 nm közötti spektrális tartományban – SPEKTRÁLIS ADATSOR
2. A spektrális adatok alapján a minták kiválasztása a kalibrációhoz – KALIBRÁCIÓS SPEKTRUMOK
3. A kalibrációhoz kiválasztott minták szerves szén,  $\text{CaCO}_3$  tartalmának, és kémhatásának megállapítása – REFERENCIA TALAJPARAMÉTEREK
4. A kalibrációs spektrumok és referencia paraméterek közös mátrixba rendezése, PLSR modellezés elvégzése – KALIBRÁLT MODELLEK
5. Leave-one-out keresztvalidáció elvégzése – VALIDÁLT MODELLEK



13. ábra: a kemometriai elemzés-sorozat főbb lépései

### 3.2.5 Az „outlier” minták meghatározásának menete

A kemometriai elemzések egyik legfontosabb lépése azoknak a mintáknak a kiszűrése, melyek a létrehozott modellekbe nem illeszkednek. Az illeszkedés mértékének alacsony fokát okozhatja (spektrális, vagy referencia laboratóriumi) mérési hiba, esetleg a minta összetételénél fogva más populációba tartozása. Ezeknek a modelleknek robusztusságát csökkentő mintáknak a kalibrációs mintasorból való kiszűrésére több módszer létezik. A validációs lépés során számos olyan diagram készül, melyekből már vizuális interpretációval láthatjuk, ha „outlier” minta van az adatsorban. Az első módja az „outlierek” jelenlétének megállapítására a PLSR faktorok által kifejezett összvarianciát kifejező diagram szemrevételezése. Ez a diagram elsősorban arra alkalmazható, hogy megállapítsuk, hány faktor bevonása szükséges egy adott paraméter modellezéséhez. Ha túl kevés faktort vonunk be, kevés változatosságot magyarázunk, ha túl sokat, zajt integrálunk a modellbe. Azonban „outlier” minták jelenléte feltételezhető, ha a faktoronként kifejezett varianciát jelölő pontokat összekötő vonal meredeksége nem konstans, hanem néhány faktor után egyre kisebb értékeket mutat (14/a. ábra). Ha ezeket a mintákat kiszűrtük, és újra elvégeztük a kalibráció-validáció folyamatát, a 14/b ábrán láthatóhoz hasonló görbe lefutást kapunk.



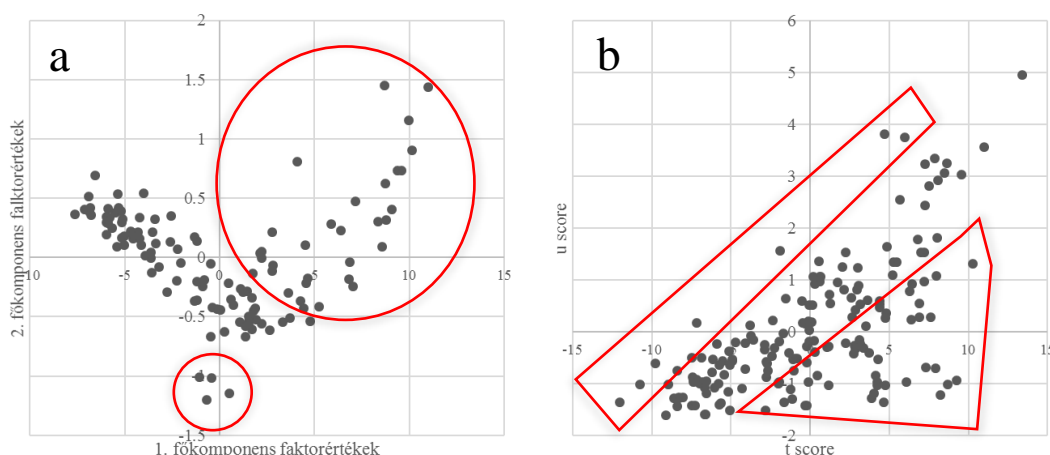
14. ábra: A faktoronként kifejezett varianciát jelző diagram abban az esetben ha a modellünk a.) „outlier” mintákat tartalmaz b.) abból az „outlier” mintákat kiszűrtük.

Az „outlier” minták meghatározásának egyik módszere a mintapontok szóródásának vizsgálata az első – a variancia legnagyobb hányadát kifejező főkomponens tengelyek mentén (15/a ábra). Ez a diagram a spektrális adatsorra elvégzett főkomponens analízis eredménye. Segítségével a spektrális adatok alapján „outlier” mintákat választhatjuk ki. A minták többségétől távol álló mintákról feltételezhetjük, hogy más populációba tartoznak.

Az „outlier” minták meghatározásának következő módja - csak a PLSR algoritmus módszer során rendelkezésre álló - „t” és „u” score diagram vizsgálata is. Ez a szóródási diagram eltérően a főkomponens faktorértékek diagramjától már tartalmazza az X változók (spektrális adatok) és Y-változók (referencia talajparaméterek) közötti kovariancia maximalizálási törekvés eredményét

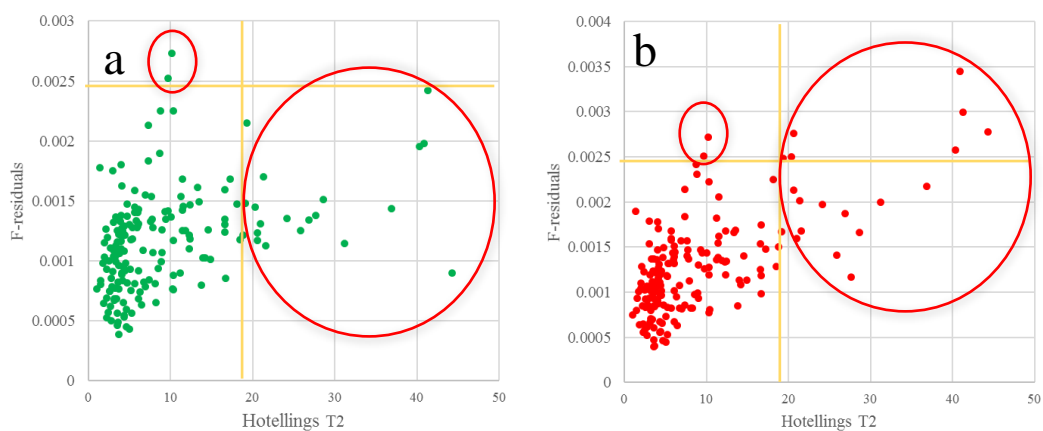


(15/b ábra). A diagramon a modell „közepétől” távol eső mintákat meghatározzuk. Ezek a minták általában azonosak a főkomponens faktorérték diagramon (15/a ábra) kijelölt pontokkal.



15. ábra: Az outlier minták meghatározása a.) főkomponens analízis alapján és a b.) „t” és „u” score értékek alapján

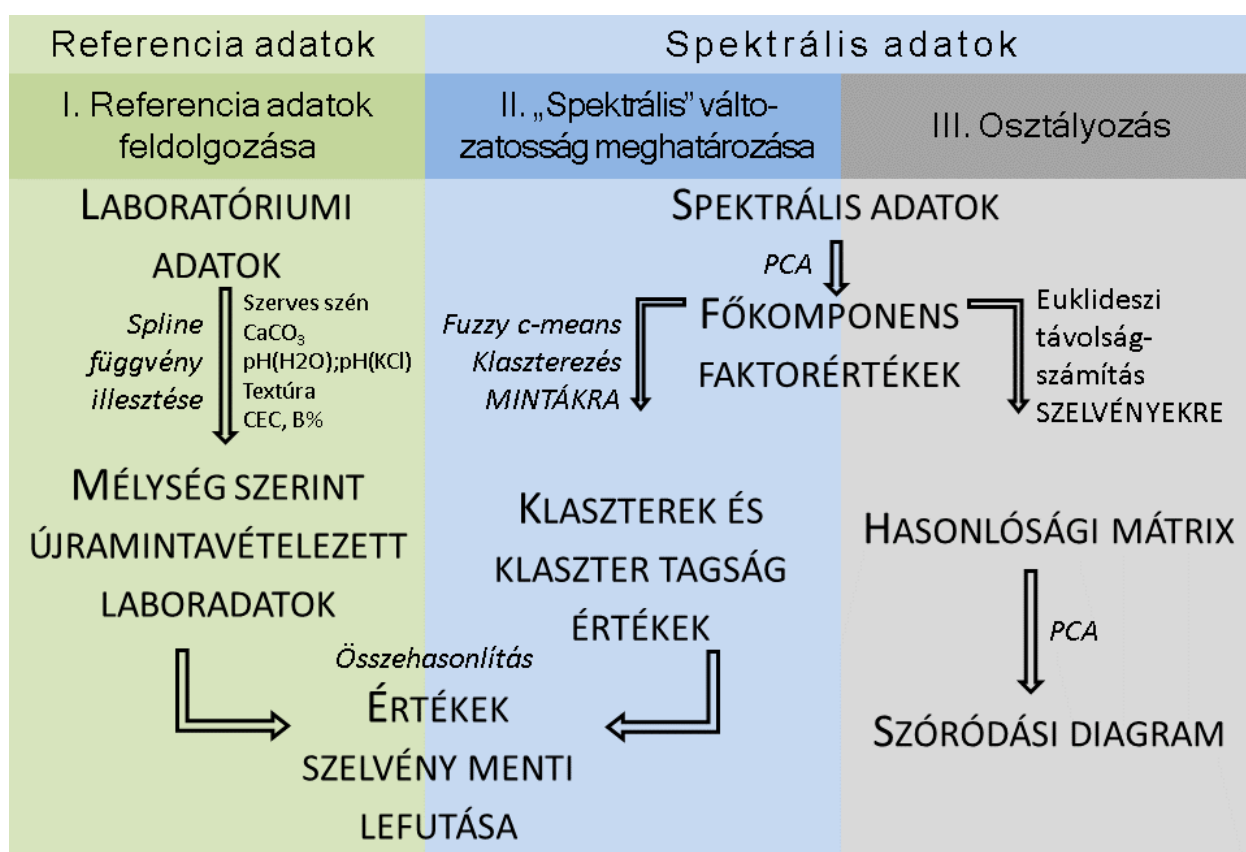
Az outlier minták meghatározásának hatékony módszere az „influence” diagram vizsgálata. Ezen a diagramon a Hotelling  $T^2$  és a F-residuals statisztikáit tüntetjük fel. Egy adott mintára kiszámított Hotelling  $T^2$  érték a mintáknak a modell közepétől való távolságát adja meg. Azok a minták, melyeknek F-residuals értéke magas, a modellbe nem illeszkednek. Beillesztésükhöz megoldás lehet nem-lineáris modellezési eljárások alkalmazása, de míg a PLSR csak lineáris modellek alkotására alkalmas, így a kalibrációs adatsorból való eltávolításuk szükséges. Az „influence” diagram megjeleníthető a kalibrációs (16/a ábra) és validációs (16/b ábra) lépés után is. Amennyiben nagy különbség mutatkozik a két lépés szóródási diagramja között, a modell további vizsgálata szükséges. Egy minta „outlier”-ként való definiálásához kritikus határértékek meghatározása a F-residuals és a Hotelling  $T^2$  értékek eloszlását Student-t eloszlásnak feltételezve, és a 95 %-os konfidenciaintervallumot figyelembe véve történik.



16. ábra: Az „Influence” diagramok vizsgálata. A Hotellings  $T^2$  és a F-residuals értékek szóródás diagramja a.) a kalibráció b.) a validáció lépése után. A vízszintes és függőleges vonalak az 95 %-os konfidencia intervallumot jelölik

### 3.3 A spektrális tulajdonságokon alapuló talajosztályozás módszertana

Doktori kutatásomnak e részében a VIS-NIR spektroszkópai mérések talajosztályozásban betöltött lehetséges szerepét vizsgáltam. A vizsgálat alapja az a tény, hogy a görbékben számos olyan talajalkotó spektrális ujjlenyomata megjelenik, melyek az osztályozás szempontjából kulcsfontosságúak, és a mintákról felvett spektrumok alapján ezekről az összetevőkről és tulajdonságokról egyidejűleg nyerünk kvantitatív és kvalitatív információt. A talajok leírása és osztályozása során pedig ezeknek a talajtulajdonság-értékeknek mélység menti lefutása alapján jelöljük ki a talajszinteket. A talajok hasonlóságát (vagy különbözőségét) pedig az határozza meg, hogy ezeknek a tulajdonságoknak a mélység menti lefutása alapján milyen mértékben különböznek vagy hasonlítanak a vizsgált szelvények. Munkám alapelgondolása, hogy mivel a spektrális adatokban benne rejlik az információ ezekről a talajtulajdonságokról, a mélység menti spektrális változatosságnak az ábrázolásával képet kaphatunk a főbb talajalkotók és paraméterek mélységgel változó tulajdonságairól, valamint numerikus módszerekkel a talajok taxonómiai rokonságfoka is kifejezhető. A vizsgálat menetét vázlatosan az 17. ábrán mutatom be.



17. ábra: A spektrális alapú osztályozás módszerének vázlata

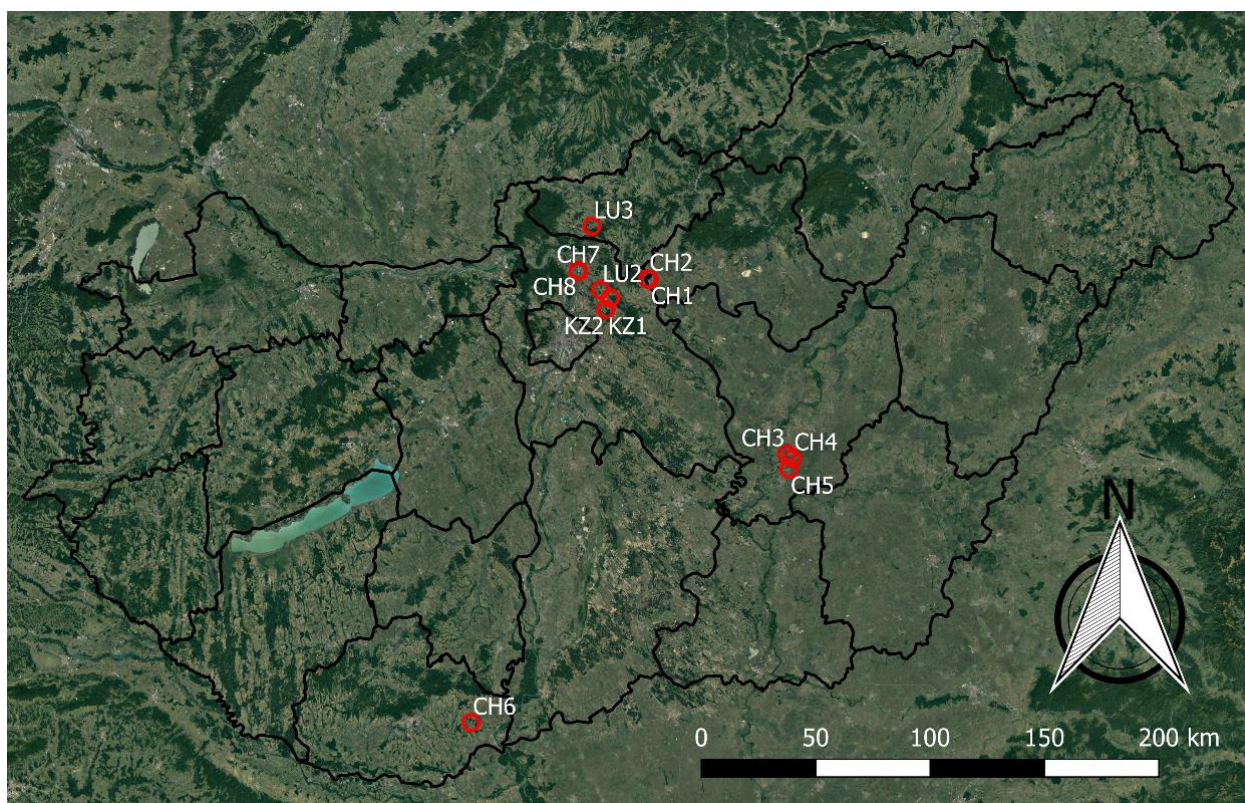
### 3.3.1 A talajszelvények kiválasztásának szempontjai

A vizsgálatba vont talajokat elsősorban tulajdonságaikról, szelvényfelépítésük és az alábbi szempontok alapján választottam ki:

1. Puha, karbonátos lösz talajképző kőzeten fejlődött,
2. Nem mutatkozik litológiai diszkontinualitás,
3. A szelvény legalább 1,5 méterig feltárható, vagy a mélység fúrással elérhető,
4. Területét mezőgazdasági művelésen kívül antropogén hatások nem érték.

### 3.3.2 A vizsgált talajszelvények bemutatása

A kiválasztott talajok szelvényei a Talajtani és Agrokémiai Tanszék nappali és szakmérnöki oktatási tevékenységéhez kapcsolódó talajokban tartam fel és mintáztam. A talajtípusok csernozjom, csernozjom barna erdőtalaj, agyagbemosódásos barna erdőtalaj és pangóvízes barna erdőtalaj típusába tartoznak. A WRB szerint a Chernozems (CH), Kastanozems (KZ) és Luvisols (LU) referencia csoportba tartoznak. A részletes besorolásokat, megfeleltetéseket és rövidítéseket az Eredmények és értékelésük 4.2.1. fejezetében mutatom be.



18. ábra: A talajszelvények feltárásának helyszínei

### 3.3.3 A talajszelvények helyszíni felvételezése

A helyszíni felvételezés minden esetben a feltárt talajszelvények vizsgálatára alapult. A talajok felvételezését az FAO „Guidelines for Soil Description – Útmutató a talajok leírásához” című, nemzetközileg elismert útmutatója (FAO, 2006) alapján végeztem el, mely a talajok környezeti jellemzőinek és morfológiai tulajdonságainak rögzítését valamint a vizsgálatok alapján megállapított genetikai talajszintek, illetve másodlagos tulajdonságok megállapítását foglalta magába.

### 3.3.4 Talajmintavételezés

A helyszíni vizsgálatok és szelvényleírást követően a talajszelvények homlokfalából két módon vettem mintát. A referencia laboratóriumi vizsgálatokhoz a meghatározott genetikai talajszintekből vettem bolygatott talajmintát. A spektrális mérésekhez fix, 1 méteres mélységig 5, míg 1 és 1,5 méter között 10 cm-es mélység-intervallumokból vettem mintát. Ahol a talaj keménysége miatt (pl. mészapadok jelenléte) miatt nem volt lehetséges 1,5 méterig kimélyíteni a szelvényt, a mintákat fúrással vettem meg. Egy feltárásból a szelvény két eltérő pontját mintáztam (KZ1 és KZ2) annak érdekében, hogy megállapítsam két, szinte azonos helyről származó talajszelvény hasonlóságát. A talajmintákat laboratóriumban szobahőmérsékleten légszáraz állapotig szárítottam, majd darálás és dörzsmozsárban őrlés után 2 mm-es szitán átszitáltam. A talajminták fizikai és kémiai paramétereit a SZIE Talajtani és Agrokémiai Tanszékének laboratóriumában határoztam meg a 2. táblázatban feltüntetett módszerek alkalmazásával.

2. táblázat: A referencia talajparaméterek meghatározásához alkalmazott módszerek

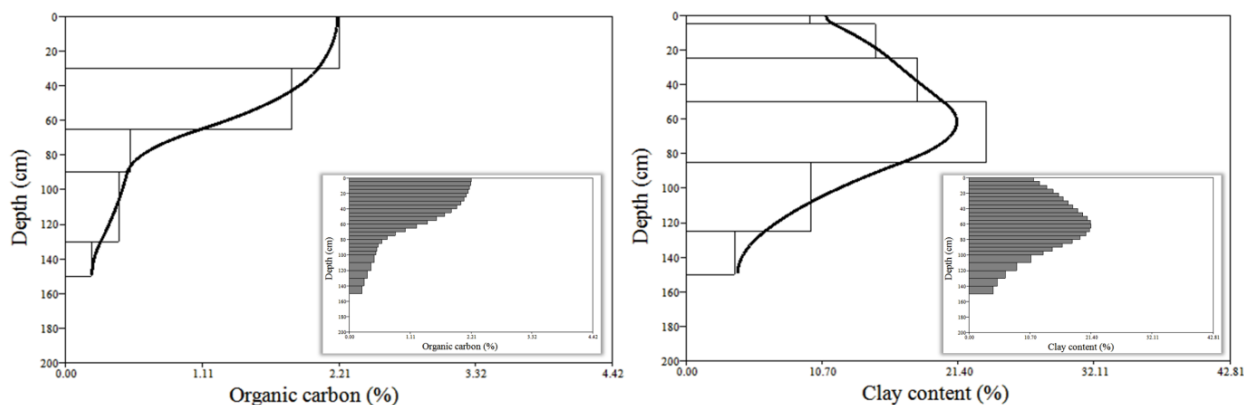
<b>Paraméter</b>	<b>Módszer</b>
Szervesszén	Walkley-Black (VAN REEUWIJK, 2002)
Szénsavas mésztartalom	Scheibler-féle kalciméter (MSZ-08-0206/2:1978, BUZÁS, 1988)
Kémhatás (pH <sub>H2O</sub> , pH <sub>KCL</sub> )	Elektrometria (MSZ-08-0206/2:1978; BUZÁS, 1988)
Kicserélhető bázikus kationok	Ca, Mg – spektrofotométer; Na, K – lángfotometria (MSZ-08-0214/2:1978, BUZÁS, 1988)
Kationcsere-kapacitás (CEC)	Módosított Mehlich eljárás (MSZ-08-0215:1978, BUZÁS, 1988)
Bázistelítettség	Kicserélhető bázikus kationok/CEC (STEFANOVITS, 1999)
Összes vízdoldható só	Telített talajpép elektromos vezetőképességéből számított összessó % (MSZ-08-0206/2:1978, BUZÁS, 1988)
Textúra/Szemcseösszetétel	Pipettás módszer (MSZ-08-0205:1978, BUZÁS, 1988)

### 3.3.5 Laboratóriumi referenciamérések és mélység standardizálás

A hagyományos laboratóriumi módszerekkel felvett talajadatok mélységi harmonizálására azért volt szükség, mert a genetikai szintenkénti mintázás az egyes szelvények esetében eltérő mintavételi mélységben történt. Így a szelvények mélység menti tulajdonságai nem vehetők össze közvetlenül. Az egyenlőtlen mintavételezési mélység továbbá megnehezíti a talajparaméterek és a spektrális mérések eredményeinek összevetését is, mivel az utóbbiakhoz vett mintákat 5, illetve 10 cm-ként vettem.

A kvantitatív talajtanban függvények illesztése gyakran alkalmazott módszerek közé tartozik az eltérő mélységekből (pl. genetikai szintekből) vett mintákból származó adatok standard mélységben történő elméleti újramintavételezése. Dolgozatomban a SplineTool v2.0 szoftvert (ASRIS, 2011) alkalmaztam, mely a talajparaméterekre a mélység függvényében nem lineáris Spline függvényt illeszt. A függvény paramétereiből szabadon választott mélység-intervallumokban becsülhetjük meg a talajparamétereket (19. ábra).

Munkám során a spektrális mérésekhez alkalmazott mintavételt követve 1 méteres mélyséig 5, 1 és 1,5 méter között 10 cm-es mélység-tartományokban végeztem el az adatok újramintavételezését. Ez lehetőséget kínált 1.) az egyes talajparaméterek mélyégi eloszlásának szelvényenkénti összevetésére, illetve 2.) a spektrális mérések és hagyományos laboratóriumi mérések eredményeinek összehasonlítására.



19. ábra: A Mass Preserving Spline függvény illesztésének példái

### 3.3.6 Spektrális mérések és spektrális transzformációk

A tizenhárom talajszelvényből gyűjtött összesen 325 db talajminta szolgált a VIS – NIR spektroszkópiai mérések alapjául. A méréseket (a NAIK Mezőgazdasági Gépesítési Intézetének tulajdonában lévő ASD FieldSpec 3 MAX hordozható spektroradiométerrel) a 350 és 2500 nm közötti spektrális tartományban a 3.1. fejezetben bemutatott mérési módszertant követve végeztem el. A felvett reflektancia spektrumokat először az  $Abszorbancia = \log I/Reflektancia$  képlet alapján abszorbanciává transzformáltam, majd az anyagi tulajdonságokat hordozó abszorpciós

(abszorbanca esetében reflexiós) sávok kihangsúlyozása érdekében az első rendű deriváltam kiszámítását is elvégeztem.

### **3.3.7 Spektrális változók kinyerése**

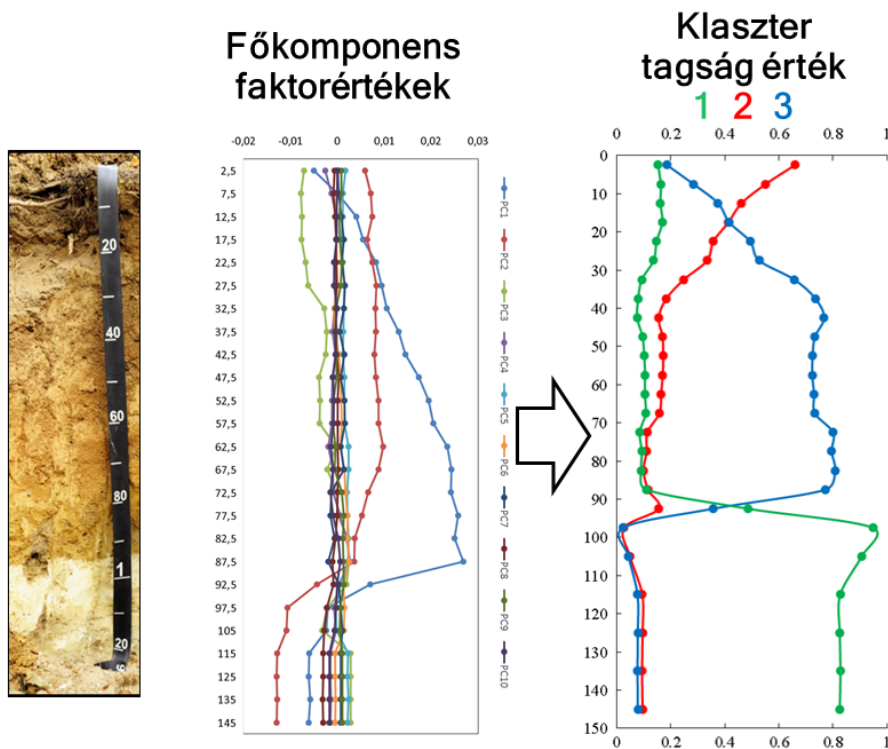
A spektrális mérésekhez alkalmazott ASD FieldSpec 3 MAX spektrométer 2151 csatornán rögzíti a reflektancia spektrumot, azaz mintánként 2151 változóval kell dolgozni. A spektrális adatokban rejlő információ kinyerése egyszerű statisztikai módszerekkel nem, vagy csak igen korlátozottan valósítható meg. Ha az adatsor sok változót tartalmaz, azaz nagy dimenzionalitású, különböző dimenzió-csökkentő módszereket kell alkalmazni, hogy az elsőre kaotikusnak nevezhető adatsorban rejlő információ áttekinthetővé, és a szelvény mentén ábrázolhatóvá váljon. Egy adatsor annyi dimenzióval bír, ahány változóból áll. A spektrális adatok 2151 változót tartalmaznak, így a rögzített adatsor rendkívül nagy dimenzionalitással bír.

Munkám során arra törekedtem, hogy a spektrális adatokból olyan változókat generáljak, melyek kifejezik a spektrális adatokban rejlő információt, illetve a szelvény mentén ábrázolhatók. A dimenzionalitás csökkentésére a főkomponens analízist (Principal Component Analysis - PCA) alkalmaztam. Az eljárás úgynevezett főkomponensek alkalmazásával lecsökkenti az adatsor dimenzionalitását oly módon, hogy az első néhány komponens kifejezi az adatokban rejlő változékonyság legnagyobb hányadát. A talajok mélység menti spektrális tulajdonságait kifejező változókként pedig a PCA egyik fő eredményét, a mintákra kiszámított főkomponens faktorértékeket használtam.

### **3.3.8 A spektrális változatosság szelvény menti vizsgálatának módszere**

#### *3.3.8.1 Fuzzy C-means klaszterezés*

Annak érdekében, hogy a spektrális adatok „szelvény leíró képességéről” képet kapjak Fuzzy C-means klaszterezést végeztem el a PC faktorértékek mátrixán. Ennek a módszernek a segítségével minden adatpontot előre meghatározott számú klaszter mindegyikébe sorolunk úgy, hogy az adott klaszterbe tartozását egy „klaszter tagság” értékkel jellemezzük (20. ábra).



20. ábra: Példa a főkomponens faktorértékek mélység szerinti eloszlására, és klaszterezésére a Fuzzy C-means clustering módszerrel

A Fuzzy-C közép klaszterezés elvégzéséhez az adatokat az 3. táblázatban bemutatottak szerint rendeztem. A fix mélységekből vett mintákra meghatározott PC faktorértékeket a PC száma szerint rendeztem. Ez az elrendezés lehetővé teszi a mintáknak – a PC faktorértékek által leírt spektrális tulajdonságuk alapján történő – klasszifikációját. A Fuzzy-C közép klaszter tagság értékeknek mélység szerinti ábrázolásával grafikusán ábrázolhatjuk a szelvény menti spektrális változatosságot.

3. táblázat: A Fuzzy C-means klaszterezéshez alkalmazott adat-elrendezés

	PC1_score	PC2_score	PC3_score	...	PC7 score
ProfileID1 0-5 cm	<i>Főkomponensenként rendezett faktorértékek</i>  <i>Mélység szerint rendezett 13 talajszelvény (ID1-13) mintái</i>				
ProfileID1 5-10 cm					
....					
ProfileID1 140-150 cm					
ProfileID2 0-5 cm					
ProfileID2 5-10 cm					
....					
ProfileID2 140-150 cm					

### 3.3.9 A spektrális alapú taxonómiai rokonságok megállapításának módszertana

#### 3.3.9.1 Taxonómiai távolságszámítás

A talajok hasonlóságának illetve különbözőségének számszerű kifejezéséhez a taxonómiai jellegű munkákban gyakran alkalmazott taxonómiai távolságszámítás módszerét alkalmaztam. A

hagyományos, genetikai szemléletű rendszerek értékelésében, és a modern osztályozási rendszerek kidolgozásában gyakori a numerikus módszerek alkalmazása (FUCHS et al., 2011). A taxonómiai távolságszámítás módszerét MINASNY ÉS MCBRATNEY (2007) az ausztrál osztályozás, majd MINASNY et al. (2009) a WRB rendszerére alkalmazta az egyes egységek pedológiai tartalmának összehasonlítására. A módszert LÁNG et al. (2013) fejlesztette tovább, és nemzetközi korrelációs vizsgálatokra alkalmazták.

A távolságszámítást a spektrális adatokból kinyert főkomponens faktorértékek szelvény menti lefutása alapján végeztem el. A távolságokat MINASNY et al. (2009) által is alkalmazott egyszerű euklidészi távolság felhasználásával számítottam.

Az euklideszi távolságszámítás a következő képlet szerint történik:

$$d_{ij} = \sqrt{(x_{i1} - x_{j1})^2 + (x_{i2} - x_{j2})^2}$$

ahol a Püthagorasz tétel alapján kiszámított  $d_{ij}$  egy két dimenziós térben két pont ( $x_i$  és  $x_j$ ) közötti távolságot jelenti. Több dimenzió (azaz több változó) esetében a képlet az alábbi szerint módosul.

$$d_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^p (x_{ik} - x_{jk})^2}$$

ahol  $p$  a dimenziók (változók) száma.

A távolságszámítás eredménye a távolságmátrix. Ebben a táblázatban az egyes talajok hasonlóságát kifejező euklideszi távolság-értékeket tüntetjük fel. A talaj-páronként meghatározott érték minél magasabb, annál nagyobb az euklideszi távolság két talaj között, azaz annál különbözőbbek. Azok a talajok, melyek között kis euklideszi távolság mutatkozik, valószínűsíthetően azonos, vagy legalább egymáshoz közel álló osztályokba sorolhatók.

A 4. táblázat mutatja az adatok - hasonlósági viszonyok megállapításához szükséges - elrendezését. Ebben az esetben az egyes szelvények tekinthetők a mintáknak, míg a PC száma és standard mélység szerint rendezett faktorértékek, mint változók szerepelnek. Így a szelvények spektrális tulajdonságait kifejező főkomponens faktorértékek tekinthetők a szelvény menti változatosságot kifejező változóknak.

4. táblázat: Az Euklideszi távolságszámításhoz alkalmazott adat elrendezés

Sample name	PC1score	PC1score	...	PC1score	PC2score	PC2score	...	PC2score								
	0-5 cm	5-10 cm		140-150 cm	0-5 cm	5-10 cm		140-150 cm								
ProfileID1	<i>Mélységintervallumok szerint rendezett faktorértékek</i>															
ProfileID2																
ProfileID3																
....																
ProfileID13									<i>Azonosító (ID) szerint rendezett talajszelvények</i>							



### 3.3.9.2 *Taxonómiai rokonságok ábrázolása*

Bár a hasonlósági mátrix leírja a hasonlósági/különbözőségi viszonyokat, de taxonómiai rokonságok megállapításához azok grafikus megjelenítése jelentős segítséget nyújt. Annak érdekében, hogy a talajok csoportosulását, illetve e lehetséges átmeneti jellegeket grafikusán ábrázoljam az euklideszi távolság-értékeket tartalmazó mátrixon főkomponens analízist végeztem el. Ezáltal lehetőség nyílt arra, hogy az egyes talajszelvények hasonlóságát, vagy különbözőségét egy főkomponens koordinátarendszerben ábrázoljam.

A spektroszkópiai tulajdonságokon alapuló talajosztályozás feldolgozási lépéseit a Spline Tool v2.0 (ASRIS, 2011), az R aqp (BEAUDETTE et al., 2012) és a KNIME (Konstanz Information Miner) Analytics platform (BERTHOLD et al., 2007) szoftvercsomaggal végeztem el.



## 4. Eredmények és értékelésük

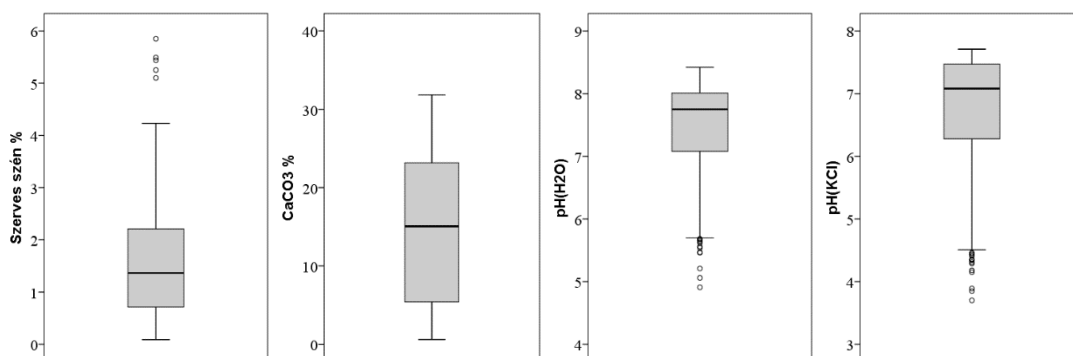
### 4.1 A kemometriai elemzések eredményei

#### 4.1.1 A referencia talajparaméterek alapstatisztikai mutatói

A hagyományos laboratóriumi módszerekkel meghatározott szerves szén, kalcium-karbonát és kémhatás értékek statisztikai mutatóit az 5. táblázatban, valamint a 21. ábrán boxplotok segítségével is bemutatom. A talajparaméterek alapstatisztikai mutatói összhangban vannak a Gödöllői-dombságra jellemző viszonyokkal.

5. táblázat: A referencia talajparaméterek alapstatisztikai mutatói

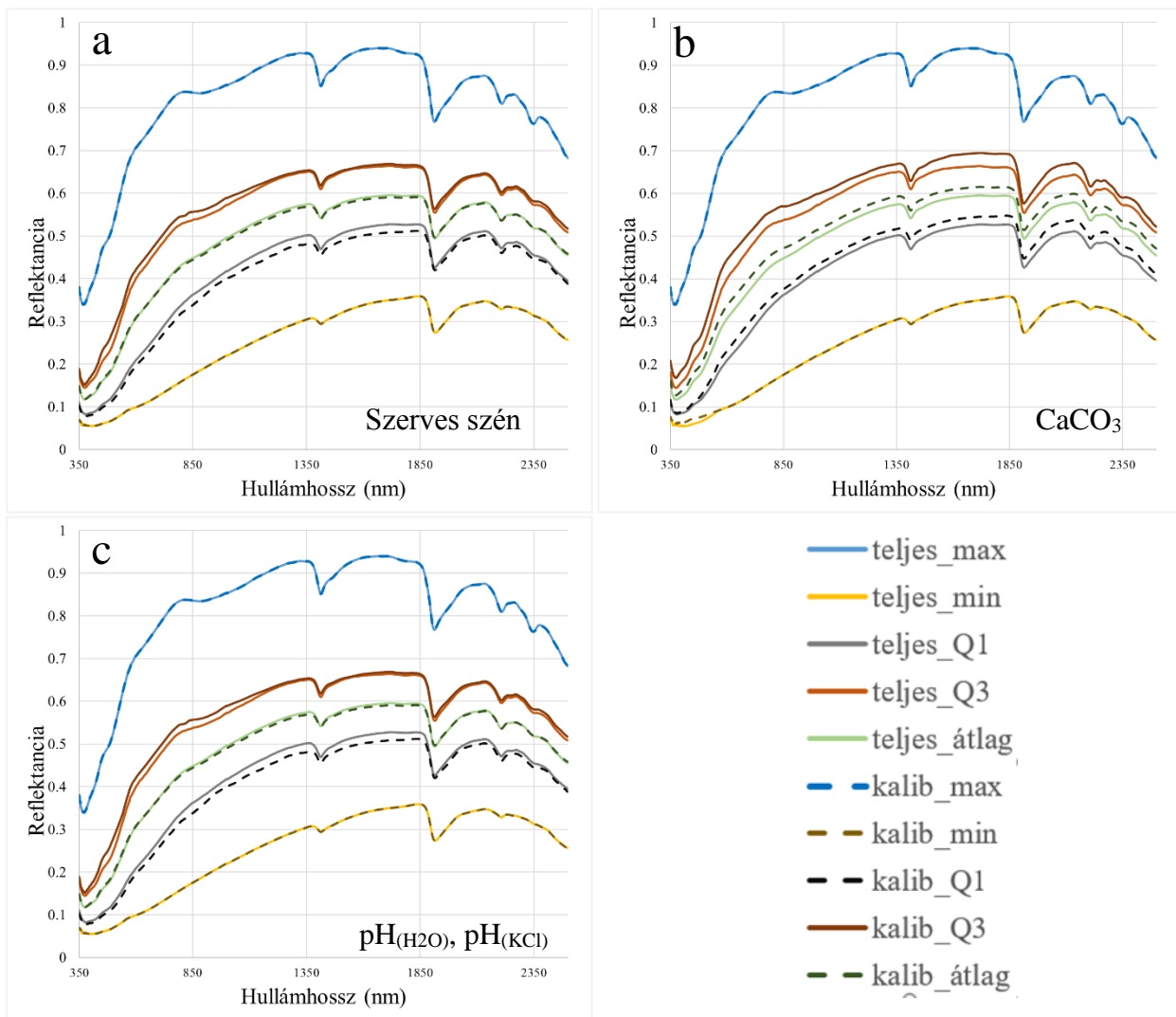
	Átlag	Max	Min	Szórás	Medián	Q1	Q3
Sz. szén	1.6	5.9	0.1	1.1	1.4	0.7	2.2
CaCO <sub>3</sub>	14,7	31.8	0.6	9.6	15	5.4	23.1
pH <sub>(H<sub>2</sub>O)</sub>	7.4	8.4	5.1	0.8	7.7	7.0	8.0
pH <sub>(KCl)</sub>	6.7	7.7	3.8	1.1	7.0	6.3	7.4



21. ábra: A vizsgált referencia talajparaméterek értékeinek ábrázolása boxplotokon

#### 4.1.2 A spektrális adatok statisztikai mutatói

Az összes, 770 mintáról, valamint a kiválasztott kalibrációs mintákról felvett spektrális reflektancia adatok alapstatisztikai mutatóit az 22. ábrán tüntettem fel. A diagram a hullámhossz függvényében folyamatos vonallal ábrázolja a teljes adatsorra, míg pontozott vonallal a kalibrációhoz kiválasztott mintákra vonatkozó minimum, maximum felső és alsó kvartilis és átlagértékeket. A pH<sub>(H<sub>2</sub>O)</sub> és a pH<sub>(KCl)</sub> kalibrálásához ugyanazok a minták kerültek kiválasztásra. A diagramok alapján elmondható, hogy a kalibrációs minta adatsor alapstatisztikai mutatói hasonlóak a teljes adatsor mutatóihoz, így a kiválasztott minták reprezentatívnak tekinthetők.



22. ábra: A teljes spektrális adatsor (folyamatos vonalak) és a kalibrációs spektrális mintasor (vastagabb, pontozott vonalak) alapstatisztikai mutatói a.) szerves szén b.) CaCO<sub>3</sub>, c.) pH<sub>(H<sub>2</sub>O)</sub> és pH<sub>(KCl)</sub>

### 4.1.3 A PLSR modellezés eredménye

#### 4.1.3.1 Outlier minták kiszűrése

Az „outlier” minták meghatározását a 3.2.5. fejezetben bemutatott módszerekkel végeztem el, melynek eredményét a 7. táblázatban mutatom be. Az „outlier” minták kiválasztása a következő lépésekből áll:

1. PLSR faktorok által kifejezett összvarianciát kifejező diagram vizsgálata – vizuális interpretáció.
2. mintapontok szóródásának vizsgálata a variancia legnagyobb hányadát kifejező főkomponens tengelyek mentén – vizuális interpretáció.
3. A „t” és „u” score értékek diagramjának vizsgálata – vizuális interpretáció.
4. Influence diagram vizsgálata – F-residuls és Hotelling T<sup>2</sup> értékek eloszlását Student-t eloszlásnak feltételezve, 95 %-os konfidencia intervallumon kívül eső minták szűrése.

A „outlier”-nek bizonyult minták összes – kalibrációra kiválasztott – mintához viszonyított aránya a kémhatás esetében bizonyult a legkedvezőbbnek (összes minta 16 %-a outlier). A szerves szén esetében ez az érték 25 %, a CaCO<sub>3</sub> esetében 26 %.

7. táblázat: Az „outlier” minták aránya az összes (N=160) kalibrációra kiválasztott mintához képest a vizsgált referencia paraméterek esetében

	Szerves szén	CaCO <sub>3</sub>	pH <sub>(H<sub>2</sub>O)</sub>	pH <sub>(KCL)</sub>
N <sub>outlier</sub> /N	35/135	36/140	135/160	135/160
% outlier	25	26	16	16

#### 4.1.4 A spektroszkópai transzformációk hatása a modellek statisztikai mutatóira

A PLSR elemzést az eredeti reflektancia adatok mellett a 12. ábrán, és 3.2.3. fejezetben bemutatott transzformációk eredményeképpen kapott spektrumok alapján is elvégeztem. A transzformációk – modellekre gyakorolt – hatását a 8. táblázatban tüntettem fel. A R<sup>2</sup> értékek azt fejezik ki, hogy a becsült változók (talajparaméterek) változatossága milyen mértékben fejeződik ki a becslések alapját képező (spektrális) adatokban. Az RMSE értéke pedig azt fejezi, hogy a modell kalibrációs és a validációs lépések során mekkora közepes négyzetes eltéréssel becsülte az adott talajparamétert. Az RMSE értéke minden esetben az adott talajparaméter mértékegységében kerül kifejezésre, és alacsony értéke a becslések kisebb hibáját jelenti.

A szerves szén esetében az abszorbancia transzformáció, a CaCO<sub>3</sub> esetében az abszorbancia kiszámítása és SNV korrekció együttes alkalmazása, a kémhatás esetében pedig az SNV korrekción átesett abszorbancia spektrumok első rendű deriváltja adta a legalacsonyabb RMSE és a legmagasabb R<sup>2</sup> értéket (8. táblázat).

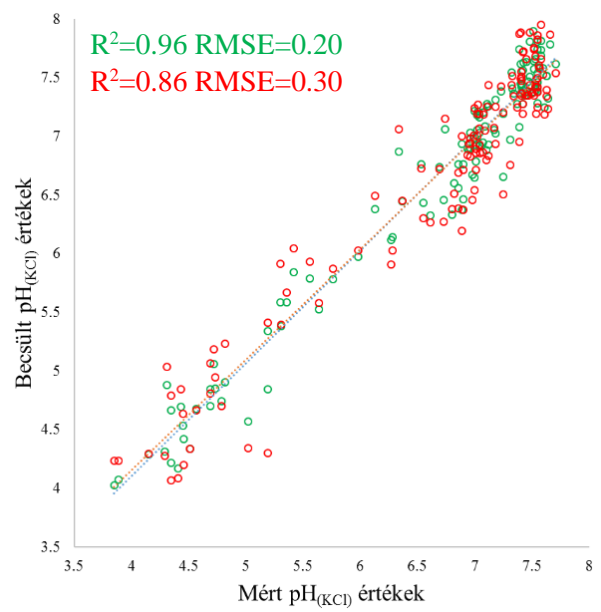
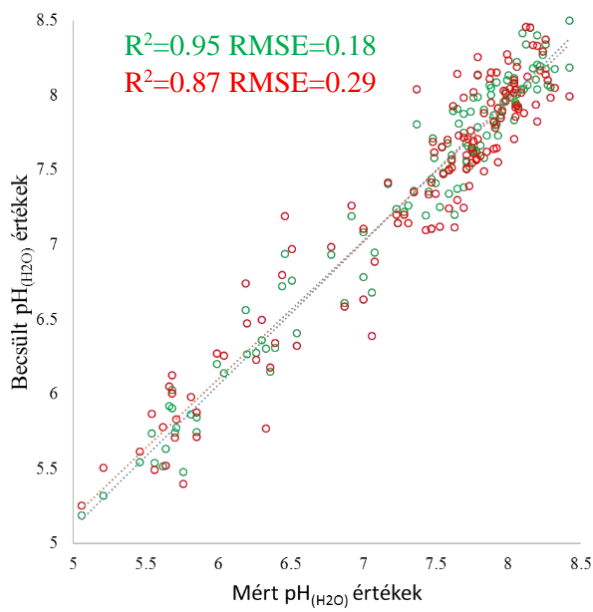
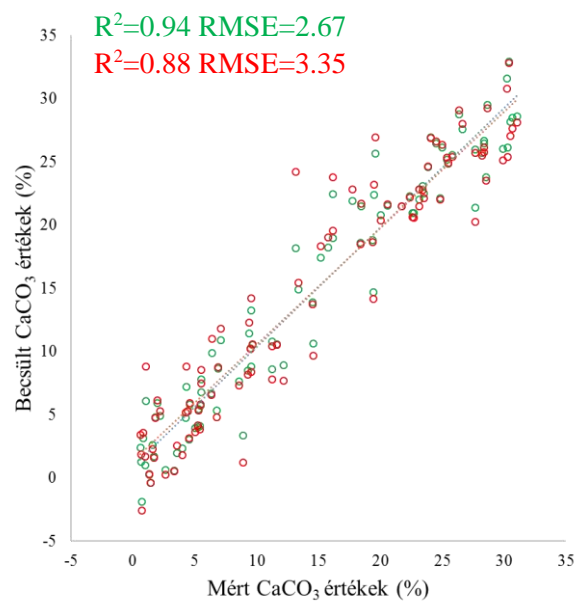
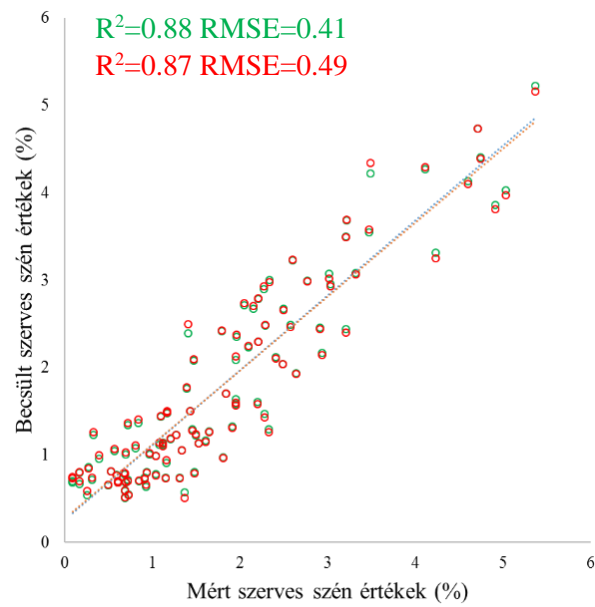
8. táblázat: A spektroszkópai transzformációk hatása a kalibrációs és validációs lépés eredményeire. Kiemelve a legkedvezőbb statisztikai mutatókkal rendelkező modellek.

		Szerves szén (%)		CaCO <sub>3</sub> (%)		pH <sub>(H<sub>2</sub>O)</sub>		pH <sub>(KCL)</sub>	
		R <sup>2</sup>	RMSE	R <sup>2</sup>	RMSE	R <sup>2</sup>	RMSE	R <sup>2</sup>	RMSE
Reflektancia	Cal	0.84	0.47	0.88	3.41	0.93	0.20	0.93	0.28
	Val	0.82	0.51	0.86	3.61	0.87	0.29	0.85	0.41
Abszorbancia	Cal	0.84	0.47	0.83	3.32	0.94	0.19	0.94	0.25
	Val	0.83	0.49	0.81	3.68	0.88	0.28	0.87	0.39
Absz+MSC	Cal	0.87	0.45	0.88	3.32	0.92	0.23	0.92	0.29
	Val	0.84	0.49	0.86	3.68	0.83	0.34	0.82	0.45
Absz+SNV	Cal	0.87	0.44	0.88	3.30	0.90	0.25	0.91	0.29
	Val	0.85	0.47	0.86	3.62	0.83	0.34	0.82	0.45
Absz+SNV+1der	Cal	0.87	0.43	0.92	2.67	0.95	0.18	0.96	0.20
	Val	0.84	0.47	0.89	3.28	0.87	0.29	0.92	0.30
Absz+SNV+2der	Cal	0.88	0.41	0.94	2.67	0.93	0.21	0.93	0.25
	Val	0.87	0.49	0.88	3.35	0.86	0.31	0.86	0.39

A laboratóriumban mért és a modell által becsült szervesszén,  $\text{CaCO}_3$  és kémhatás értékeket a 23. ábrán feltüntetett szóródási diagramokon ábrázoltam. A diagramok elemzése alapján a következő főbb megállapításokat tettem:

- A validációs lépés során számított minden esetben magasabb  $R^2$  és alacsonyabb RMSE érték mutatkozik, mint a kalibrációs lépés során. Ez annak köszönhető, hogy a kalibrációs folyamat során a modell önmagát ugyanazzal az adatokkal ellenőrzi, amivel a modellt létrehoztuk, míg a validáció során egy „módosított” statisztikai paraméterekkel jellemezhető adatsor értékeit látjuk, mely a modell valós „prediktív kapacitását” közelíti.
- A modell tesztelése során kapott  $R^2$ -érték a szervesszén és  $\text{CaCO}_3$  esetében magas, mely a vizsgált paraméterek jelentős spektrális aktivitásával magyarázható a vizsgált VIS-NIR tartományban. Az RMSE érték alapján a modellek pontossága 0,49 % a szerves szén, míg 3,35 % a  $\text{CaCO}_3$  esetében, mely közepesnek mondható.
- A szakirodalomban közölt adatokhoz képest (VISCARRA ROSSEL et al., 2006) a vártnál magasabb RMSE értékek elsősorban annak köszönhetőek, hogy a mérések nem hagyományos laboratóriumi spektrométerrel, hanem hordozható spektrométerrel történtek, mely műszer használata rendkívül sok – a mérések pontosságát negatívan befolyásoló – tényező figyelembe vételét követeli meg. A modellek pontosságának növelésére elsősorban a mérési előírások fejlesztése és standardizálása nyújthat megoldást (BEN-DOR et al., 2010)
- A kémhatás becslése a desztillált vizes és a kálium-kloridos szuszpenzió esetén is jó statisztikai mutatókkal jellemezhető. Ez az eredmény azért jelentős, mert a talajokról felvett spektrumokban anyagi tulajdonságok tükröződnek, és elsősorban a szerves anyag, vas-oxidok/hidroxidok, agyagásványok, szulfátok, karbonátok és egyéb sók, illetve számos más talajalkotó – kémiai és fizikai tulajdonságai által szabályozott – spektrális ujjlenyomata figyelhető meg a görbéken. Ennek ellenére jelentős eredmény, hogy olyan talajparaméter becslése is lehetséges a reflektancia spektrumok alapján, melyek számos talajalkotó által együttesen meghatározott kémiai tulajdonság, és nincs közvetlen lenyomata a spektrumokban. Következésképpen a pH becslése nem közvetlenül, hanem – jellegzetes spektrális lenyomattal rendelkező, és a kémhatással szoros korrelációt mutató – anyagi összetevők mennyiségén keresztül közvetve történik.

A kutatás egyik fő eredménye, hogy spektrális mérések, valamint a laboratóriumi referencia mérések alapján egy – a Gödöllői-dombság talajaira reprezentatív – spektrális adatbázist hoztam létre, mely elengedhetetlen feltétele további minták szerves szén,  $\text{CaCO}_3$  tartalmának spektrális alapú sikeres származtatására.



23. ábra: A vizsgált referencia paraméterek laboratóriumban mért és a modell által becsült értékei

## 4.2 A spektrális tulajdonságokon alapuló talajosztályozás eredményei

### 4.2.1 A terepi felvételezés és az osztályozás eredményei

A terepi vizsgálatok alapján a 13 vizsgált talajszelvény közül 8 a *Chernozems*, 2 a *Kastanozems*, míg 3 szelvény a *Luvissols* WRB RSG-be tartozik.

A nyolc *Chernozem* (CH1 – CH8) közös tulajdonsága a mély, nagyon sötét, szervesszénben gazdag, magas bázistelítettséggel jellemezhető **Chernic** szint, és a **Chernic** alsó határa alatt 50 cm-en belül kezdődő - másodlagos karbonátokban gazdag – **Calcic** szint jelenléte. A CH3, CH4, CH5, CH6 és CH7 szelvények mindegyike 70 cm-nél mélyebb Chernic szinttel rendelkezik. A CH5 és CH7 szelvények esetében 100 cm-es mélység alatt, a CH6 szelvényben 100 cm-en belül talajvíz okozta glejes foltosság jelentkezik, mely mintázat kielégíti a **Gleyic properties** kritériumait. A CH1, CH2 és CH8 szelvények **Chernic** szintje kevésbé mély (< 70 cm), de jól fejlett **Calcic** szinttel rendelkeznek.

Két szelvény (KZ1 és KZ2) a *Kastanozem* RSG-be tartozik. Ezeknek a szelvényeknek a **Chernic** szintnél világosabb, de még sötétnek mondható **Mollic** szintjük, valamint a **Mollic** szint alsó határa alatt 50 cm-en belül kezdődő **Calcic** szintjük van. Ezeknek a szelvények rendelkeznek **Argic** szinttel is, mely a felette lévő szintekhez képest lényegesen nagyobb anyagtartalommal jellemezhető.

Három szelvény tartozik a *Luvissols* (LU1, LU2, LU3) RSG-be. Ezeknek a szelvényeknek a közös jellemzője, hogy 100 cm-en belül rendelkeznek **Argic** (agyagfelhalmozódási) szinttel, mely magas kationcsere kapacitással (> 24 cmol/kg), és magas bázistelítettséggel (> 50 %) jellemezhető. Míg a LU1 és LU2 szelvények az agyagbemosódás morfológiai jellegzetességeit csak 50 cm alatt mutatják, a LU3 erodáltságának köszönhetően már a felszíntől, agyaghártyák formájában. A LU1 és LU2 szelvények 100 cm-en belül **Calcic** szinttel is rendelkeznek.

A szelvények vizsgálata során megállapított diagnosztikai egységeket, WRB referenciacsoportot és a magyar osztályozás szerinti talajtípust a 9. táblázatban mutatom be.

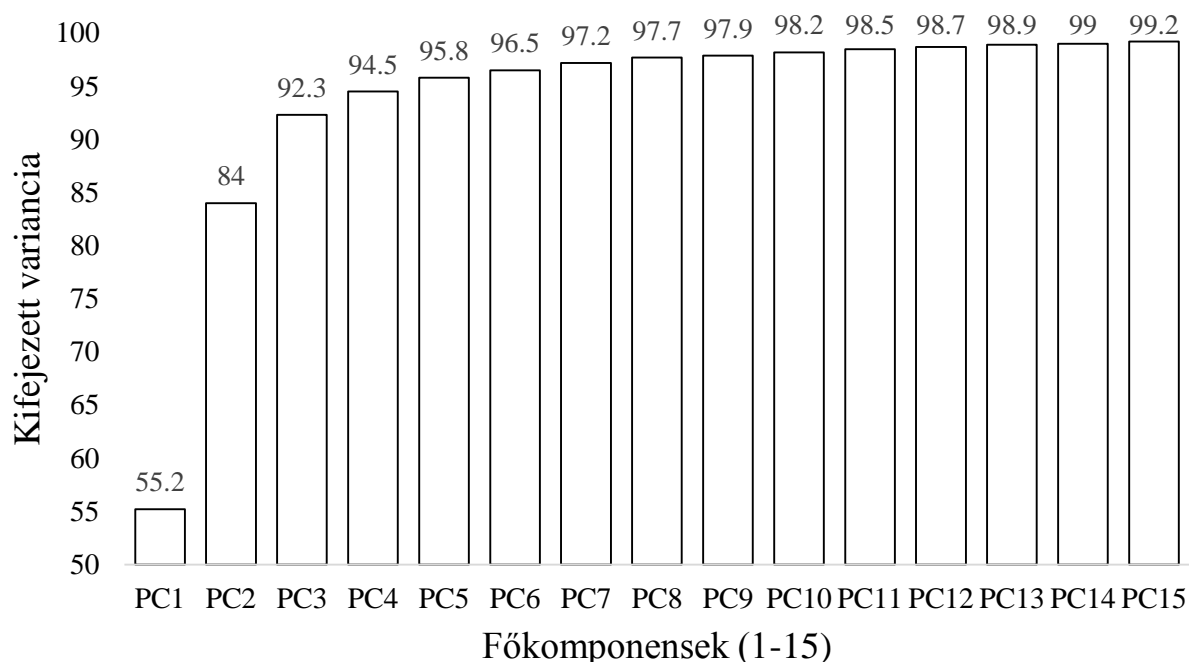


9. táblázat: A szelvények vizsgálata során megállapított diagnosztikai egységek, WRB referenciacsoportok és a magyar osztályozás szerinti talajtípusok

ID	Diagnosztikus szintek	Diagnosztikus tulajdonságok/anyagok	WRB osztályozás IUSS WORKING GROUP (2015)	Magyar osztályozás STEFANOVITS (1972), JASSÓ (1989)
CH1	Calcic (90-); Chernic (0-65)	Protocalcic properties	Endocalcic Vermic CHERNOZEM (Pantoloamic, Pachic)	Kilúgzott csernozjom talaj (180)
CH2	Calcic (50 -); Chernic (0-50)	Protocalcic properties	Katocalcic CHERNOZEM (Pantoloamic)	Típusos meszes vagy mészlepedékes csernozjom talaj (191)
CH3	Calcic (80-); Chernic (0-80)	Protocalcic properties;	Endocalcic Vermic CHERNOZEM (Pantoloamic, Pachic)	Kilúgzott csernozjom talaj (180)
CH4	Calcic (80-); Chernic (0-80)	Protocalcic properties;	Endocalcic Vermic CHERNOZEM (Episiltic, Katoloamic, Pachic)	Típusos meszes vagy mészlepedékes csernozjom talaj (191)
CH5	Calcic (70-); Chernic (0-70)	Protocalcic properties; Gleyic properties	Endocalcic Bathyglyeyic Vermic CHERNOZEM (Pantoloamic, Pachic)	Típusos meszes vagy mészlepedékes csernozjom talaj (191)
CH6	Calcic (70-); Chernic (0-70)	Protocalcic properties; Gleyic properties	Endocalcic Endogleyic CHERNOZEM (Pantoloamic, Pachic)	Típusos meszes vagy mészlepedékes csernozjom talaj (191)
CH7	Calcic (60-); Chernic (0-70)	Protocalcic properties; Gleyic properties	Endocalcic Bathyglyeyic CHERNOZEM (Pantoloamic, Pachic)	Típusos meszes vagy mészlepedékes csernozjom talaj (191)
CH8	Calcic (60-); Chernic (0-70)	Protocalcic properties	Endocalcic CHERNOZEM (Pantoloamic, Pachic)	Típusos meszes vagy mészlepedékes csernozjom talaj (191)
KZ1	Argic (75-90); Calcic (90-); Mollic (0-30)	Protocalcic properties	Endocalcic Endoluvic KASTANOZEM (Pantoloamic)	Nem karbonátos csernozjom barna erdőtalaj (161)
KZ2	Argic (65-90); Calcic (90-); Mollic (0-25)	Protocalcic properties	Endocalcic Endoluvic KASTANOZEM (Pantoloamic)	Nem karbonátos csernozjom barna erdőtalaj (161)
LU1	Argic (30-95); Calcic (95-)	Protocalcic properties	Endocalcic LUVISOL (Epiloamic, Amphiclayic Cutanic, Differentic)	Nem podzolos agyagbemosódásos barna erdőtalaj (112)
LU2	Argic (50-95); Calcic (95-)	Protocalcic properties	Endocalcic LUVISOL (Epiloamic, Amphiclayic, Cutanic, Differentic)	Nem podzolos agyagbemosódásos barna erdőtalaj (112)
LU3	Argic (0-150)	Stagnic properties	Nudiargic Amphistagnic LUVISOL (Pantoclayic Cutanic Epidystric Pantoclayic)	Agyagbemosódásos pszeudoglejes (pangóvízes) barna erdőtalaj (122)

#### 4.2.2 A spektrális mérések transzformációja és főkomponens analízis

A mintákról felvett spektrális reflektancia mintánként 2151 változót tartalmaz (a spektrális csatornákon 1 nm-ként mért reflektancia értékek). A spektrális adatbázison elvégzett – az adatok dimenzionalitását csökkentő – főkomponens analízis 9 főkomponenst eredményezett, amelyek kifejezik a spektrális változatosság 98 %-át (24. ábra). A teljes variancia 2 %-át kifejező főkomponenseket kizártam az elemzésből.



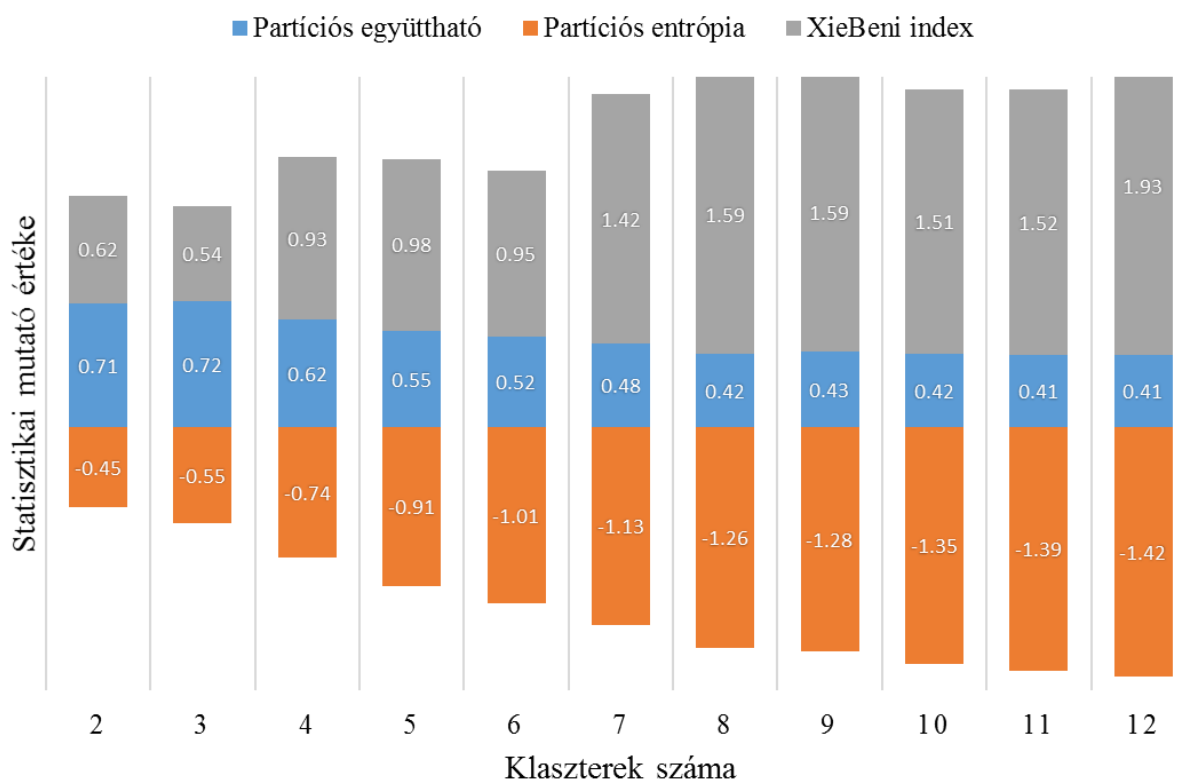
24. ábra: Az első 15 főkomponens által kifejezett variancia. Az további elemzésbe a teljes variancia 98 %-át kifejező első 9 főkomponenst vontam be

#### 4.2.3 A főkomponens faktorértékek csoportosítása Fuzzy C-means klaszterezéssel

A Fuzzy C-means klaszterezés elvégzése során a klaszterek számát előre definiálni kell. A létrehozandó csoportok számát a szelvények vizsgálata során leírt diagnosztikai szintek alapján határoztam meg. A 9. táblázatban feltüntetett négy diagnosztikai szint a Chernic, Mollic, Argic és Calcic szint. A Chernic és Mollic szint definíció szerint szerves széntartalmukban, sötétségükben és vastagságukban csak kismértékben különböző diagnosztikai szintek, így a klaszterek meghatározásánál egy kategóriába tartozónak tekintettem őket. Mindezek alapján a klaszterek számát háromban állapítottam meg.

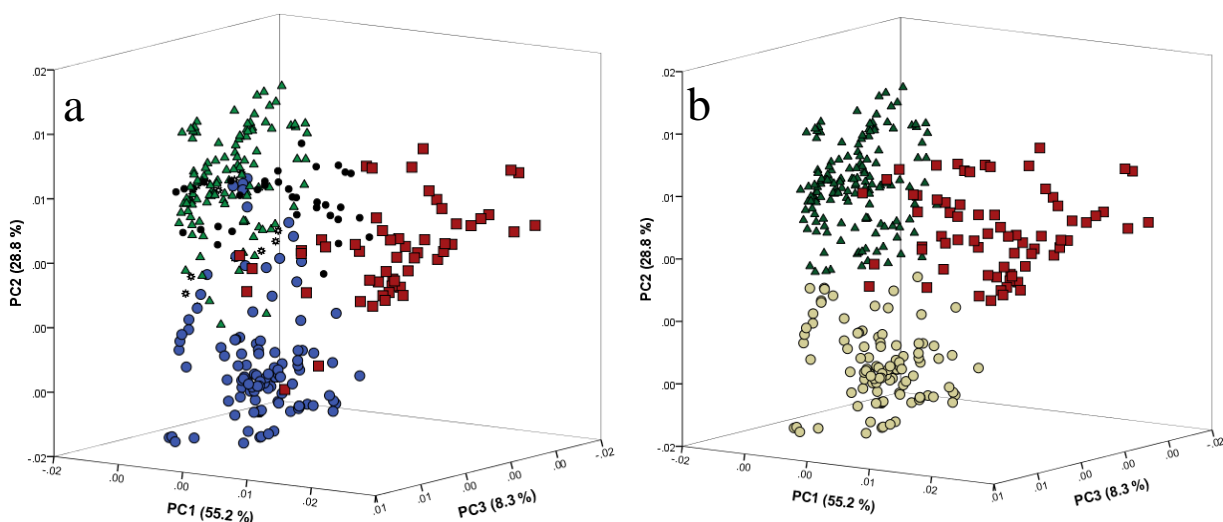
A szubjektív döntésen alapuló klaszterszám validitását a klasztereződés erősségének fokát összefoglaló statisztikai mutatók vizsgálatával ellenőriztem. A Fuzzy C-means klaszterezést 2-12 klaszterszám definiálásával is elvégeztem és a különböző klaszterszámok esetében összevettem a kiszámított partíciós együttható (PE), partíciós entrópia (PEnt) és XieBeni index (XBi) értékeket.

WU és YANG (2005) alapján valid klaszterszámnak tekinthető az az eset, amikor a PE értéke a legnagyobb, a PEnt és XBi értéke a legkisebb. Bár a PEnt értéke két klaszternél éri el a legkisebb értéket, a két másik statisztikai mutató alapján három klaszter jelenléte igazolható megbízhatóan (25. ábra).



25. ábra: A Fuzzy C-means klaszterezés statisztikai mutatói 2-12 klaszter létrehozása esetében

Az 26. ábra a faktorértékek elrendeződését mutatja a teljes variancia 92,3 %-át kifejező első három főkomponens tengely mentén. A szín- és jelkódolás azokat diagnosztikai szinteket jelölik, melyekből a mintavételezés történt (26/a ábra), illetve azt a Fuzzy C klasztert, amelybe tartozik (26/b ábra). A háromdimenziós szóródási diagramok vizuális interpretációja alapján az „A” Klaszterbe tartozó pontok szóródása nagyfokú egyezőséget mutat a **Calcic** szintekből származó mintákat reprezentáló pontok szóródásával. A „B” Klaszterbe tartozó minták elterjedése hasonló a **Mollic** szintet jelölő pontok elterjedésével. A „C” klaszter mintázata pedig az **Argic** szintet reprezentáló pontok által kirajzolt mintázattal mutat hasonlóságot. Azok a minták, melyek **Calcic** és **Mollic** szintek átfedéséből származnak vagy „A” és „B” Klaszterbe kerültek.



26. ábra: A minták szóródása az első 3 főkomponens tengely mentén.

- a.) a színek és a szimbólumok a diagnosztikai szinteket jelölik. Calcic: ● Argic: ■ Mollic: ▲ Mollic - Calcic: ○ Nem diagnosztikai szint: ●
- b.) a színek és a szimbólumok a Fuzzy C-közép klasztereket jelölik
- c.) A Klaszter: ○ B Klaszter B: ■ C Klaszter: ▲

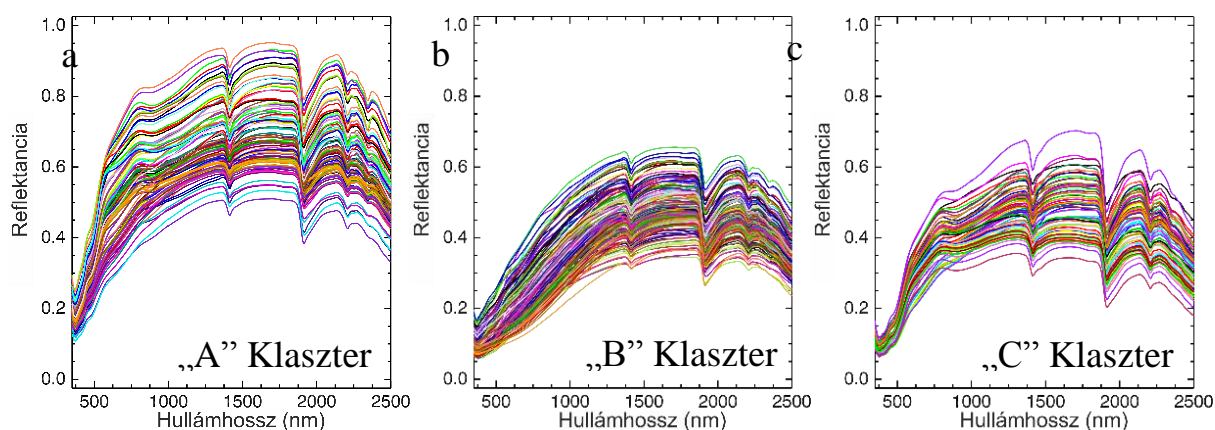
A 27. ábrán a Fuzzy C-means klaszterezés alapján csoportosított minták eredeti, a spektroszkópiai transzformációkon még át nem esett reflektancia görbéit tüntetem fel. Bár a klaszterezés a reflektancia spektrumok alapján számított abszorbanica spektrumok 1. rendű deriváltjain került elvégzésre, a transzformált görbék vizuális interpretációja rendkívül nehéz.

Összevetve a „B” és C klaszterbe tartozó mintákról felvett spektrumokkal az „A” Klaszterbe tartozó spektrumok rendelkeznek a legmagasabb átlagos reflektancia értékekkel (27/a ábra). A 450, 550 és 850 nm környéki széles kevésbé mély abszorpciós sávok a vas-oxidok, hidroxidok és oxihidroxidok (pl. hematit, goethit) jelenlétének bizonyítéka (SCHWERTMANN, 1993). A 2340 nm-nél jelentkező keskeny abszorpciós sáv az ebbe a klaszterbe tartozó mintáról felvett görbékben a legkifejezettebb, mely a jelentős mennyiségű karbonátásvány jelenlétének köszönhető (LAGACHERIE et al., 2008).

Összevetve az „A” és „C” klaszter spektrumaival a „B” klaszter spektrumaik rendelkeznek a legalacsonyabb átlagos reflektancia értékekkel (27/b ábra). A látható és közeli infravörös tartomány rövidebb hullámhosszain (350 - ~1000 nm) számos görbe mutat konvex jelleget, mely a nagy mennyiségű szerves anyag általános reflektanciát csökkentő és konvexitást növelő hatásával magyarázható. A csökkenő konvexitás a szerves anyag tartalom csökkenésével magyarázható (STEVENS et al., 2010). A „B” klaszterbe tartozó spektrumok 1300 nm-nél rövidebb és 2000 nm-nél hosszabb hullámhosszúságú tartományában a széles, kevésbé mély valamint keskeny és mély abszorpciós sávok hiánya illetve az „A” klaszter görbéihez képest

kevésbé kifejezettsége tapasztalható. Ez elsősorban a szerves anyagok spektrális jellegzetességeinek a többi összetevő – kevésbé kifejezett – lenyomatainak „elfedésével” magyarázható (O’ROURKER és HOLDEN, 2011).

A „C” klaszterbe tartozó spektrumok rendelkeznek a legkifejezettebb – a vas-oxidok, hidroxidok és oxihidroxidok nagy mennyiségét jelentő – abszorpciós sávokkal a ~1000 nm-nél rövidebb hullámhossz tartományban (27/c ábra). Az 1400 és 1900 nm-nél jelentkező (a többi klaszterhez képest) mélyebb abszorpciós sávok a H<sub>2</sub>O tartalmú ásványok jelentős koncentrációjával magyarázható. Az 1400 nm környéki sáv az OH nyújtási alaprezgés első felharmonikusa, míg az 1900 nm környéki sáv a H-O-H hajlítási és OH nyújtási alaprezgés kombinációja (CHABRILLAT et al., 2003). A 2200 nm környéki keskeny mély abszorpciós sáv ebben a klaszterben kifejezett. Ez annak az indikátora, hogy az ebbe a klaszterbe tartozó minták rendelkeznek a legtöbb olyan ásvánnyal, mely a kristályszerkezetében Al-OH csoportot tartalmaz, melyek főként agyagásványok. A 2340 nm környéki sáv hiánya, illetve kevésbé kifejezettsége a karbonátok hiányát, vagy alacsony koncentrációját jelenti.



27. ábra: A minták spektrális reflektanciája Fuzzy C klaszterenként csoportosítva. a.) „A” Klaszter b.) „B” Klaszter c.) „C” Klaszter

A mintákra kiszámított Fuzzy C-means tagsáértékek és a referencia talajparaméterek közötti lineáris korrelációs együtthatókat a 10. táblázatban adom meg,

Az „A” Klaszter Fuzzy C-means tagság értékei a szerves széntartalom értékekkel negatív ( $r = -0,52$ ), míg a CaCO<sub>3</sub> tartalom értékekkel pozitív ( $r = 0,72$ ) korrelációt mutatnak. Az ebbe a klaszterbe tartozó mintákról felvett spektrumok (25/a ábra) rendelkeznek a legmagasabb általános reflektanciával, és legkifejezettebb (a karbonát tartalomhoz köthető) 2340 nm-es abszorpciós sávval, mely jellegzetességek mind a minták magas karbonát tartalmára utalnak.

A B klaszter tagság értékei pozitív ( $r = 0,78$ ) korrelációt mutatnak a szerves széntartalom értékekkel. Az ebbe a klaszterbe tartozó spektrumok rendelkeznek a legalacsonyabb általános reflektanciával, és mutatnak az 1000 nm-nél rövidebb hullámhosszakon konvex jelleget.

A C klaszter a CaCO<sub>3</sub> tartalommal negatív ( $r = -0,51$ ) korrelációt mutat. Jóllehet a spektrumok vizuális interpretációja alapján ezekben a mintákban az agyagásványok, valamint vas-oxidok, hidroxidok és oxihidroxidok spektrális jellegzetességei dominánsak.

10. táblázat: a Fuzzy C-közép tagság értékek és a referencia talajparaméterek közötti korrelációs mátrix

	A klaszter	B klaszter	C klaszter	OC	CaCO <sub>3</sub>	Agyag	Homok	pH(H <sub>2</sub> O)	BS	CEC <sub>agyag</sub>	CEC
A klaszter	1,00										
B klaszter	-0,67	1,00									
C klaszter	-0,44	-0,37	1,00								
OC	-0,52	0,78	-0,29	1,00							
CaCO <sub>3</sub>	0,73	-0,33	-0,51	-0,49	1,00						
Agyag	-0,23	0,22	0,02	-0,07	-0,03	1,00					
Homok	0,20	-0,21	0,00	0,06	-0,04	-0,88	1,00				
pH(H <sub>2</sub> O)	0,37	0,12	-0,61	-0,13	0,69	0,09	-0,23	1,00			
BS	0,35	0,15	-0,62	-0,10	0,67	0,08	-0,23	0,99	1,00		
CEC <sub>agyag</sub>	-0,48	0,40	0,11	0,13	-0,23	0,77	-0,86	0,09	0,09	1,00	
CEC	-0,45	0,35	0,15	0,07	-0,22	0,80	-0,87	0,05	0,05	0,99	1,00

A Fuzzy C-means klaszter (FCMC) tagság és a referencia talajparaméter Mass Preserving Spline Function (MPSF) alkalmazásával újramintavételezett értékeinek mélység szerinti eloszlását a 27. ábrán tüntettem fel. Az „A” Klaszter FCMC tagság értékeinek eloszlása nagyfokú hasonlóságot mutat a MPSF újramintavételezett CaCO<sub>3</sub> értékeivel. A karbonátok jelentősebb mértékű kilúgzódásának jeleit mutató talajokban (LU1, LU2, KZ1, KZ2, CH1, CH2) az értékek a mélységgel hirtelen, átmenet nélkül vesznek fel magas értéket. Azon szelvények esetében, amelyekben a kilúgzási folyamatok jelei kevésbé kifejezettek (CH3, CH4, CH5, CH6, CH7, CH8) az értékek növekedése folyamatos. Az „A” Klaszter minden esetben a szelvények mélyebb szintjeiben fordul elő, mely mélység-intervallumok jó egyezést mutatnak a terepi munka során meghatározott **Calcic** szinttel.

A „B” Klaszter FCMC tagság értékei a MPSF alkalmazásával újramintavételezett szerves szén értékek eloszlásával mutat nagyfokú hasonlóságot. A B Klaszter minden esetben a szelvények felszínén kezdődik, és az általa kijelölt mélység-intervallum jó egyezést mutat a **Mollic** és **Chernic** szint mélység-tartományaival.

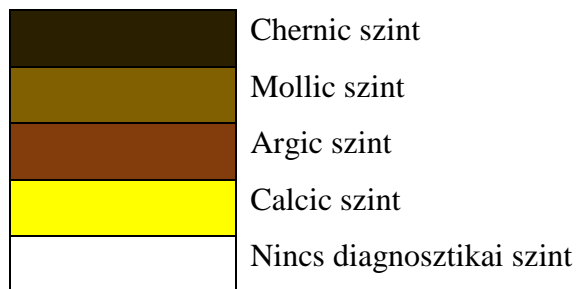
A „C” Klaszter FCMC tagság értékeinek szelvény menti eloszlásának magyarázata más megközelítést igényel. Az értékek mélység szerinti eloszlása csak az olyan szelvények esetében mutat hasonlóságot az agyagtartalommal, melyekben jelentős mértékű agyagmozgás és felhalmozódás történt (LU1, LU2, LU3, KZ1, KZ2). Az LU3 szelvény kivételével a C klaszter minden esetben felszín alatti szintként jelenik meg, és az általa kijelölt mélység intervallum jó egyezést mutat a terepen meghatározott **Argic** szinttel. Az LU3 szelvény esetében a C Klaszter már a felszínen megjelenik, és az egész szelvény ebbe a csoportba tartozik. Ezt a szelvényt érintették a legerősebben az eróziós folyamatok, amelynek következtében az agyag-

felhalmozódási szintig erodálódott. Továbbá az LU3 szelvény az egyedüli, mely nem rendelkezik **Calcic** szinttel a karbonátok jelentős mértékű kilúgzódása miatt. Tehát ez a klaszter nem az agyagtartalommal, hanem az agyagtartalom növekedésével mutat összefüggést.

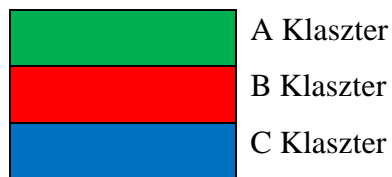
#### 4.2.4 A Fuzzy C-means klaszter-tagság és referencia talajparaméterek mélység szerinti eloszlása

A Fuzzy C-means klasztertagság értékek valamint a spline függvénnyel mélység szerint újramintavételezett referencia talajparaméter értékek mélység szerinti eloszlását az 28. ábrán tüntettem fel. Az ábrák első blokkjában a szelvény főfaláról készített fénykép látható.

A *Diag* blokkban a terepi vizsgálatok és laboratóriumi adatok alapján megállapított diagnosztikai szinteket tüntettem fel. Jelmagyarázat:



A *Fuzzy klasz* blokkban a Fuzzy C-means algoritmus által meghatározott klasztereket tüntettem fel. Jelmagyarázat:

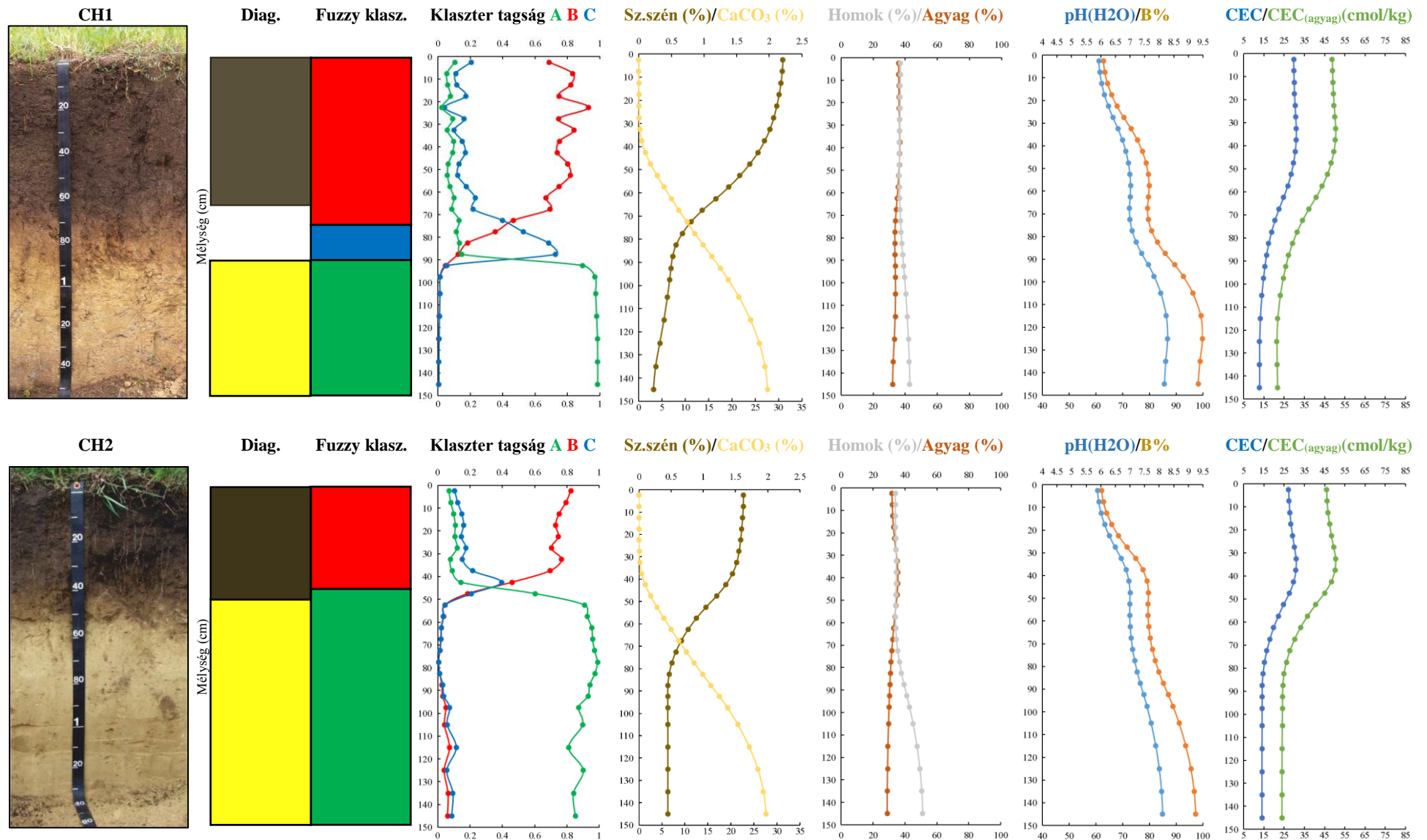


A *Klasztertagság* blokkban a Fuzzy C-means klaszterezés eredményeképpen – az egyes mintákra kiszámított – klasztertagság értéket tüntettem fel. **Zöld** színnel az 1. **piros** színnel a 2., míg **kék** színnel a 3. klaszter tagság értékeit tüntettem fel. A diagram elsődleges és másodlagos vízszintes tengelyén is a 0-1 közötti tagságérték olvasható le.

A *referencialajparaméterek* blokkjaiban két talajparaméter értékeinek szelvény menti lefutását tüntettem fel. Az elsődleges vízszintes (felső) tengelyen a blokk nevében szereplő első talajparaméter értékei olvashatók le. A másodlagos vízszintes (alsó) tengelyen a blokk nevében szereplő második talajparaméter értékei olvashatók le.



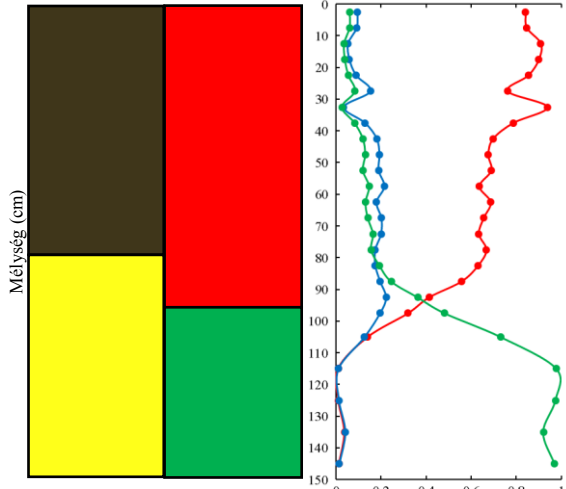
28. ábra: A Fuzzy C-means klaszterek, klasztertartság értékek és a referencia talajparaméter értékek mélység szerinti lefutásának összehasonlítása



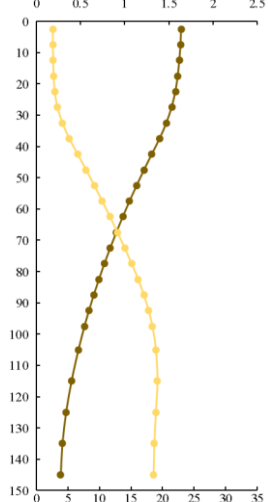
CH3



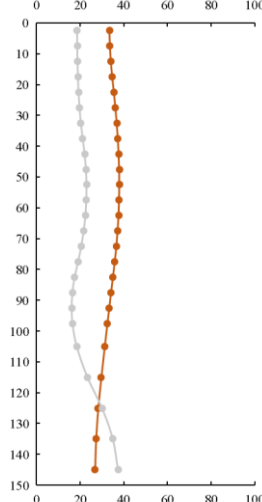
Diag. Fuzzy klasz. Klaszter tagság A B C



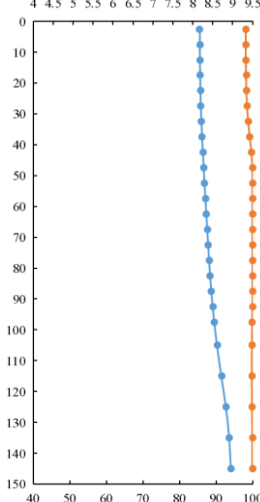
Sz. szén (%) / CaCO<sub>3</sub> (%)



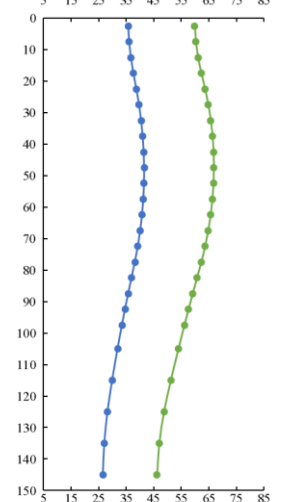
Homok (%) / Agyag (%)



pH(H<sub>2</sub>O) / B%



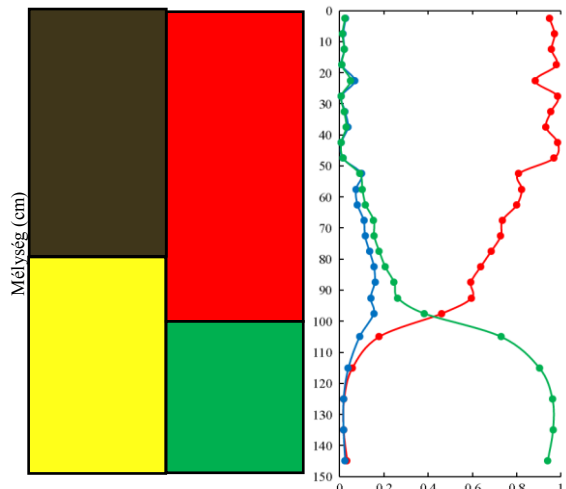
CEC / CEC<sub>(agyag)</sub> (cmol/kg)



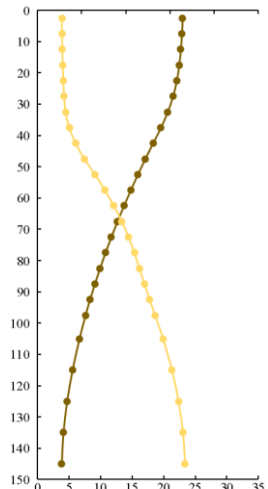
CH4



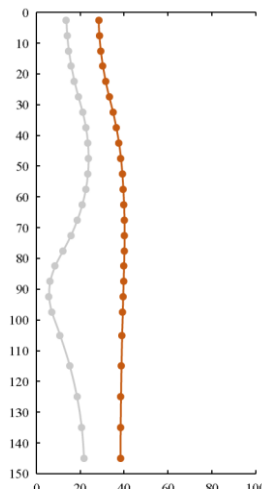
Diag. Fuzzy klasz. Klaszter tagság A B C



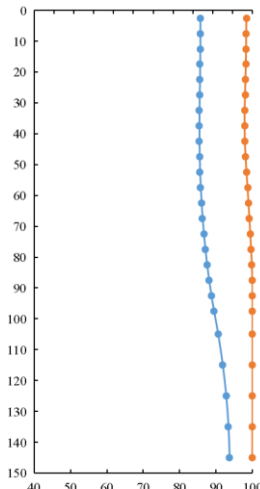
Sz. szén (%) / CaCO<sub>3</sub> (%)



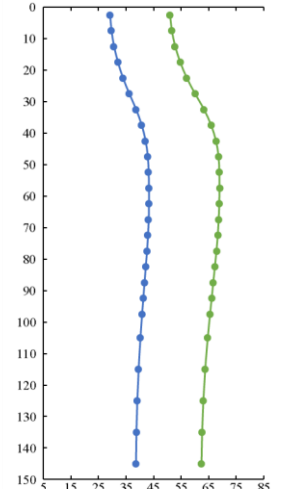
Homok (%) / Agyag (%)



pH(H<sub>2</sub>O) / B%



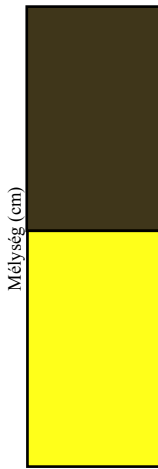
CEC / CEC<sub>(agyag)</sub> (cmol/kg)



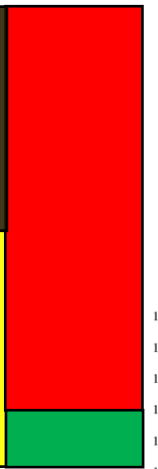
CH5



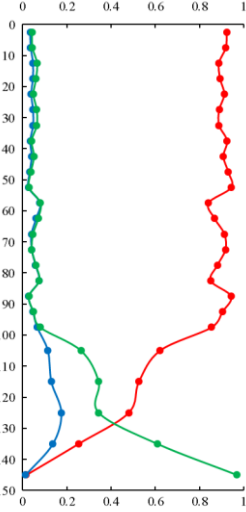
Diag.



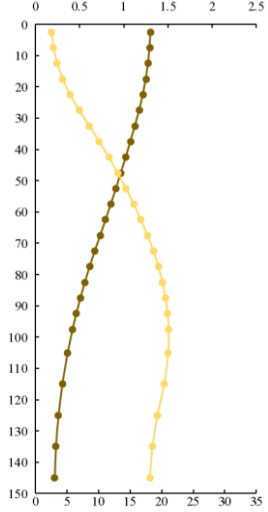
Fuzzy klasz.



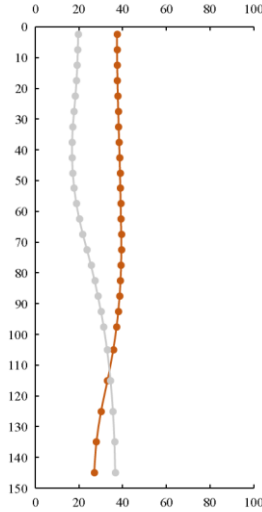
Klaszter tagság A B C



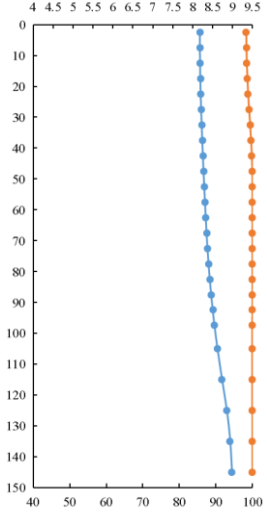
Sz. szén (%) / CaCO<sub>3</sub> (%)



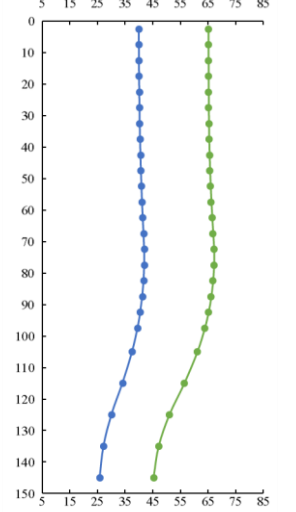
Homok (%) / Agyag (%)



pH(H<sub>2</sub>O) / B%



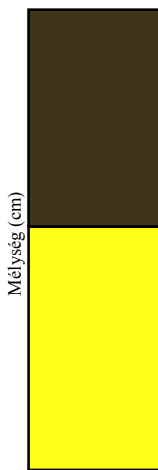
CEC / CEC<sub>(agyag)</sub> (cmol/kg)



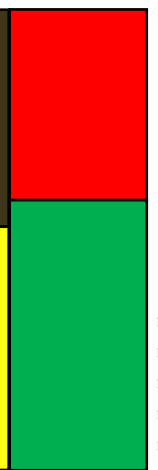
CH6



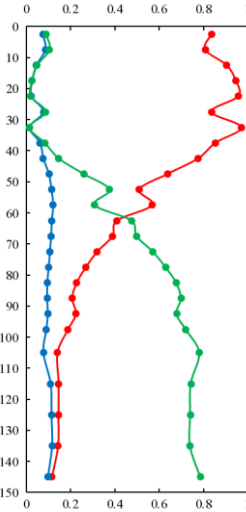
Diag.



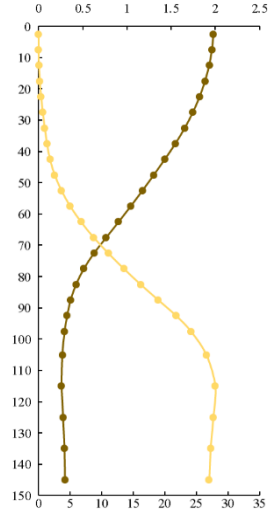
Fuzzy klasz.



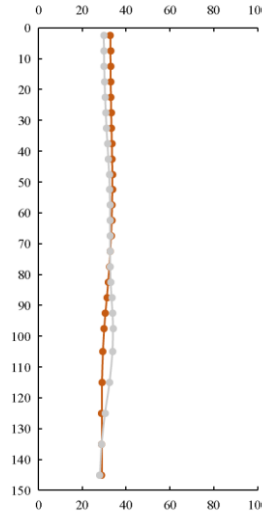
Klaszter tagság A B C



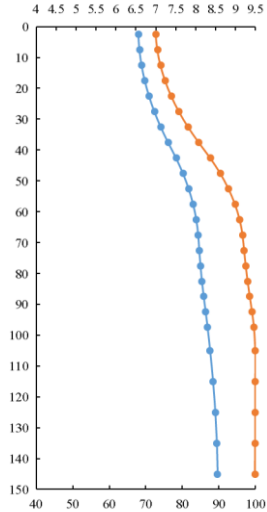
Sz. szén (%) / CaCO<sub>3</sub> (%)



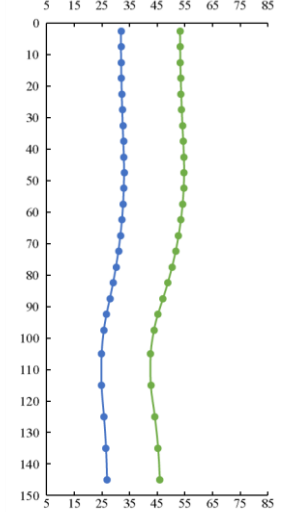
Homok (%) / Agyag (%)



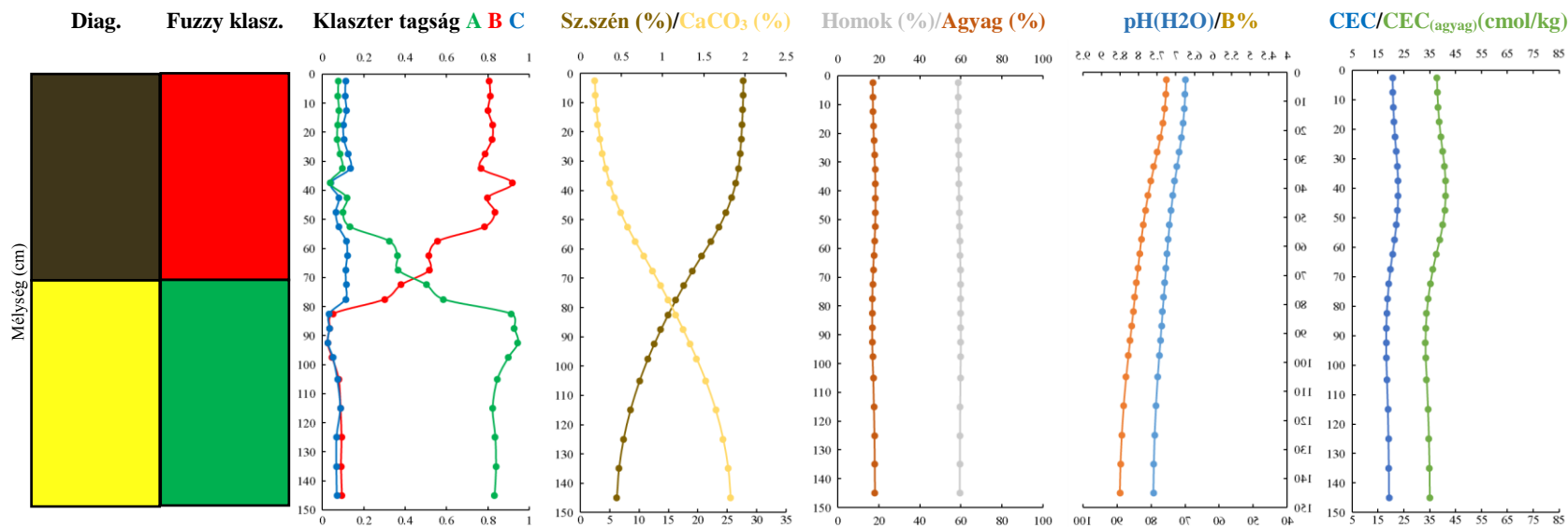
pH(H<sub>2</sub>O) / B%



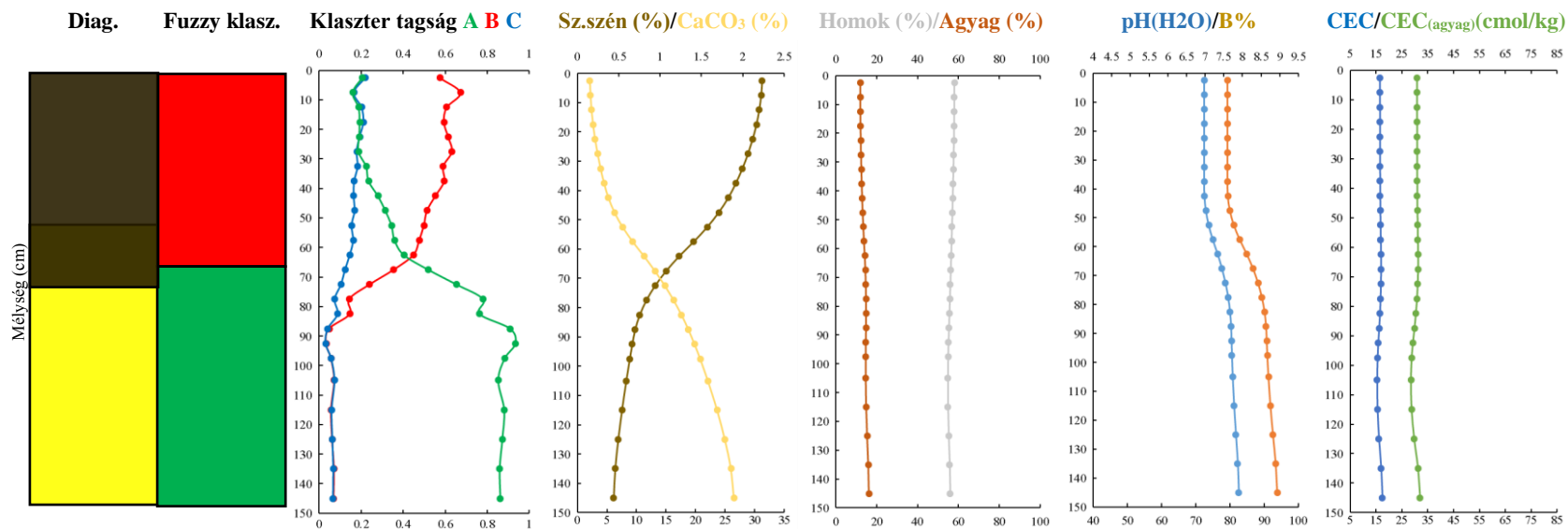
CEC / CEC<sub>(agyag)</sub> (cmol/kg)



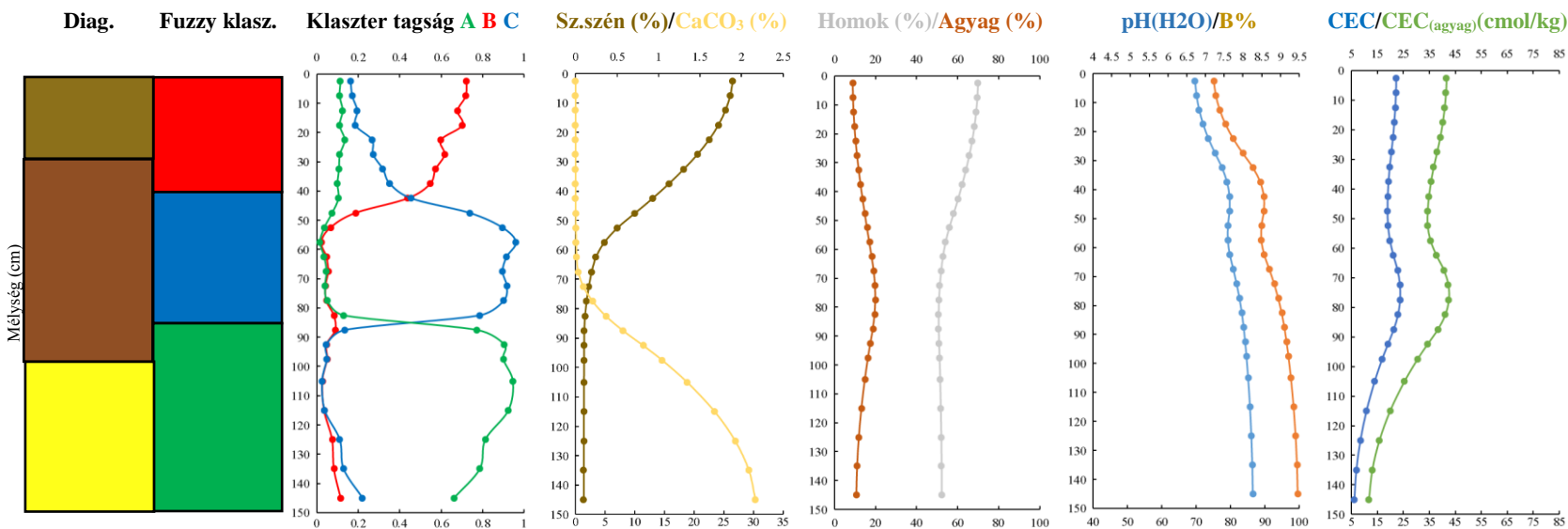
CH7



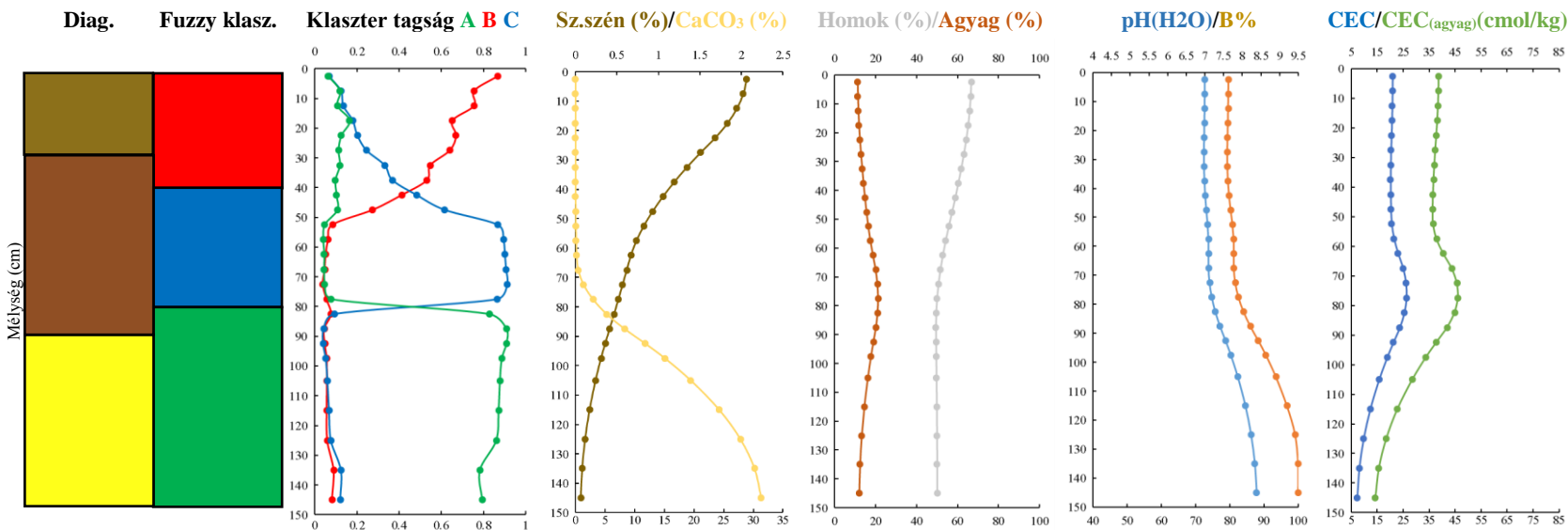
CH8



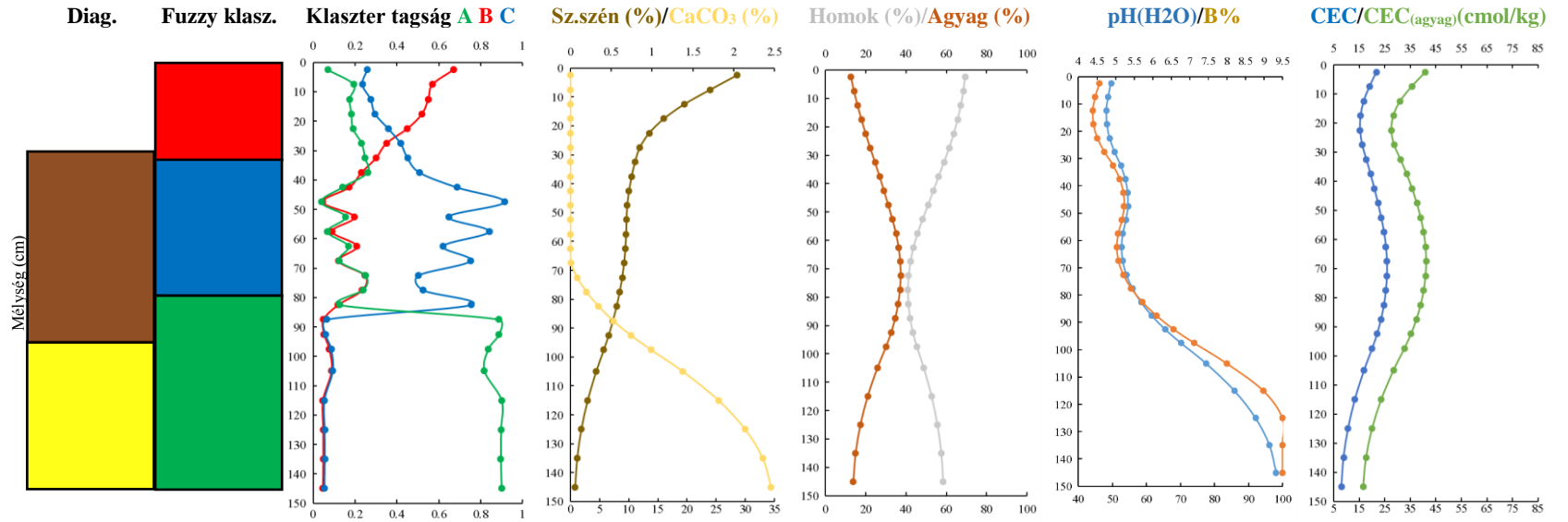
KZ1



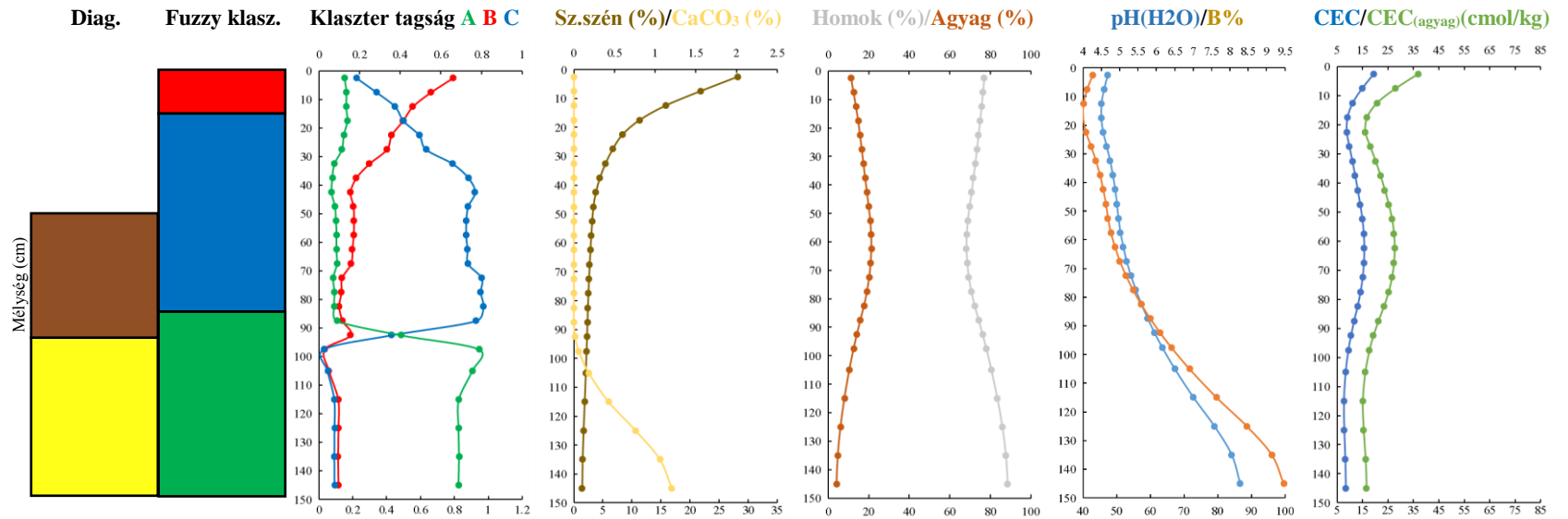
KZ2



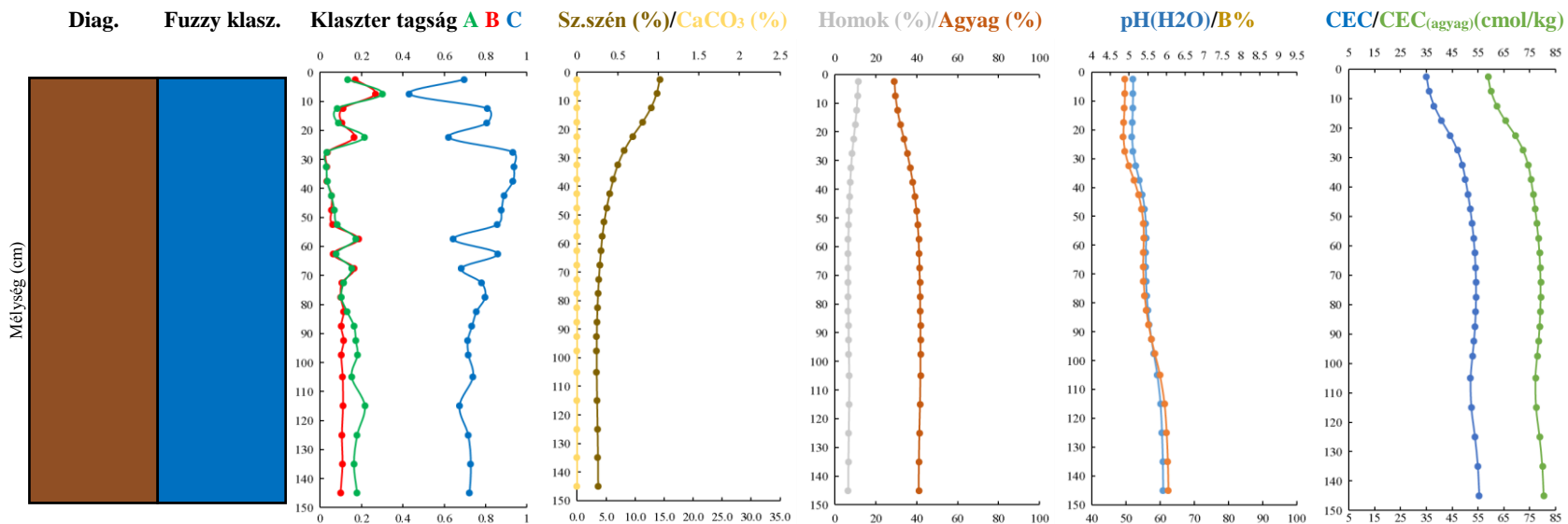
LU1



LU2



LU3



#### 4.2.5 Taxonómiai távolságszámítás

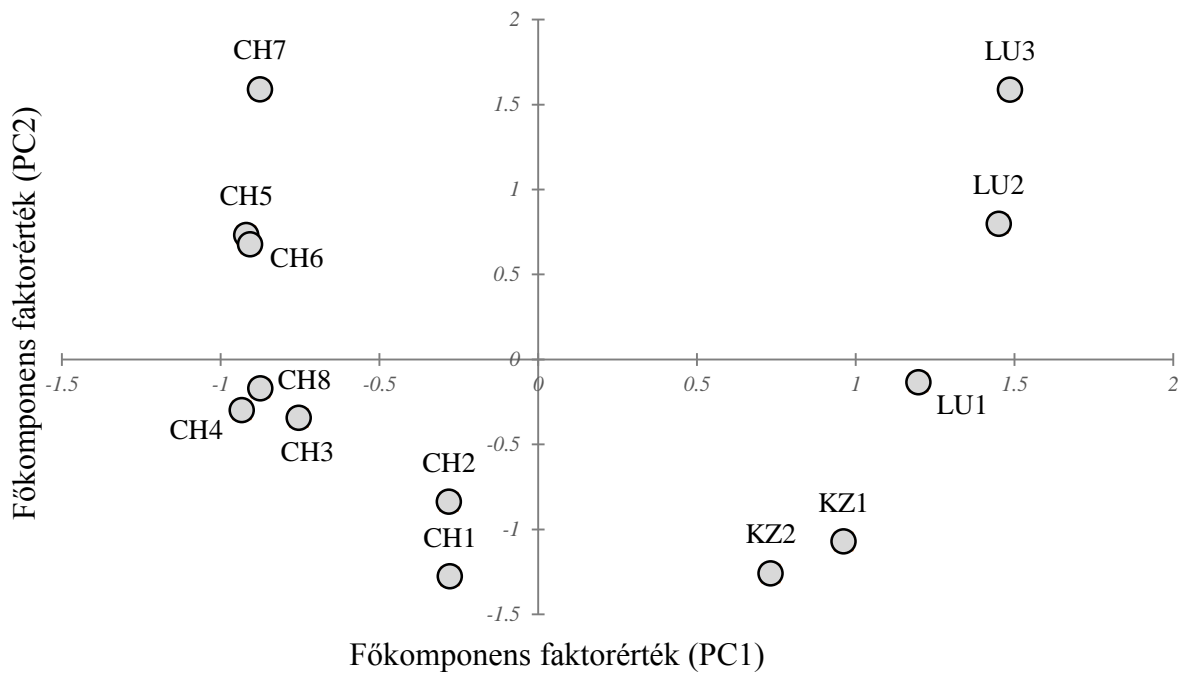
Az Euklideszi távolságszámítás eredményeit egy színkóddal ellátott távolságmátrixban mutatom be (11. táblázat). Ebben a mátrixban a taxonómiai rokonságokat egyrészt a taxonómiai távolságértékek, valamint az ezeknek az értékeknek megfelelő színkódok fejezi ki. A zöld árnyalatok (alacsony értékek) kis, míg a vörös árnyalatok (magas értékek) nagy taxonómiai távolságot jelentenek.

11. táblázat: A talajszelvények spektrális tulajdonságai alapján számított hasonlósági mátrix

	CH1	CH2	CH3	CH4	CH5	CH8	CH6	CH7	KZ1	KZ22	LU1	LU2	LU3
CH1	0.000	0.052	0.038	0.043	0.058	0.047	0.064	0.074	0.054	0.054	0.069	0.077	0.092
CH2	0.052	0.000	0.059	0.052	0.069	0.040	0.057	0.072	0.062	0.055	0.077	0.093	0.090
CH3	0.038	0.059	0.000	0.024	0.040	0.046	0.054	0.055	0.075	0.070	0.088	0.103	0.108
CH4	0.043	0.052	0.024	0.000	0.027	0.036	0.037	0.050	0.078	0.071	0.091	0.106	0.114
CH5	0.058	0.069	0.040	0.027	0.000	0.048	0.046	0.059	0.094	0.087	0.106	0.121	0.129
CH8	0.047	0.040	0.046	0.036	0.048	0.000	0.036	0.053	0.082	0.074	0.097	0.111	0.118
CH6	0.064	0.057	0.054	0.037	0.046	0.036	0.000	0.053	0.093	0.083	0.105	0.122	0.132
CH7	0.074	0.072	0.055	0.050	0.059	0.053	0.053	0.000	0.106	0.097	0.117	0.137	0.143
KZ1	0.054	0.062	0.075	0.078	0.094	0.082	0.093	0.106	0.000	0.022	0.040	0.049	0.066
KZ22	0.054	0.055	0.070	0.071	0.087	0.074	0.083	0.097	0.022	0.000	0.043	0.061	0.074
LU1	0.069	0.077	0.088	0.091	0.106	0.097	0.105	0.117	0.040	0.043	0.000	0.054	0.067
LU2	0.077	0.093	0.103	0.106	0.121	0.111	0.122	0.137	0.049	0.061	0.054	0.000	0.070
LU3	0.092	0.090	0.108	0.114	0.129	0.118	0.132	0.143	0.066	0.074	0.067	0.070	0.000

A mátrixon elvégzett főkomponens analízis két olyan főkomponenst eredményezett, melyek sajátértéke (eigenvalue) magasabb 1-nél. Ez a két főkomponens kifejezi a szelvények közötti hasonlóságot leíró mátrixban rejlő változékonyság 83.7 %-át. Az 1. és 2. főkomponens tengelyen a szelvényeket reprezentáló pontokat a 29. ábrán tüntettem fel.





29. ábra: A hasonlósági mátrixon elvégzett főkomponens analízis eredménye. A szóródási diagram az 1. és 2. főkomponen mentén ábrázolja a szelvények elhelyezkedését

A hasonlósági mátrix (11. táblázat) és a szóródási diagram (29. ábra) alapján a **Chernozems** a **Kastanozems** valamint a **Luvissols** RSG-be tartozó szelvények csoportja jól elkülöníthető egymástól. Azok a Chernozem RSG-be tartozó szelvények, melyekben időszakosan fellépő anaerob viszonyok hatására kialakuló – talajvíz okozta – glejesedés morfológiai bélyegei jelentkeznek (**Gleyic properties**), valamint 70 cm-nél mélyebb **Chernic** szinttel rendelkeznek (**Pachic**) a tulajdonságtérben egymáshoz közel helyezkednek el (CH5, CH6, CH7 szelvények). Azok a szelvények, melyek esetében a **Gleyic properties** nem került meghatározásra, de mély (> 70 cm), nagyon sötét humuszos szinttel rendelkeznek (**Pachic**) szintén közel helyezkednek el egymáshoz (CH3, CH4, CH8). A kevésbé mély (40 – 60 cm) **Chernic** szinttel rendelkező CH1 és CH 2 szelvények, melyekben az előző talajokhoz képest a kilúgzási folyamatok jóval kifejezettebbek, és karbonátfelhalmozódási szintjük (**Calcic**) élesebben válik el a felette lévő szinthez képest szintén közel helyezkednek el egymáshoz. A **Chernic** szinthez képest világosabb, de még sötétnek mondható **Mollic**, valamint **Argic**, és a **Mollic** alsó határa alatt 50 cm-en belül kezdődő **Calcic** szinttel rendelkező KZ1 és KZ2 talajok szelvény menti spektrális tulajdonságaik alapján közel helyezkednek el egymáshoz. A három Luvisols RSG-be tartozó szelvény nem formál egyértelmű csoportot. Tulajdonságtérbeli eloszlásuk átmeneti jelleget mutat kezdve a vékony, de szerves szénben gazdag felszíni szinttel, valamint 100 cm-en belül kezdődő **Calcic** szinttel rendelkező LU1 szelvénnel, folytatva a hasonló tulajdonságokat mutató, de szerves szénben szegényebb felszíni szinttel rendelkező LU2 szelvénnel, zárva az LU3 szelvénnel, mely az

eróziós folyamatok miatt alacsony szerves széntartalmú felszíni szinttel rendelkezik, de az erőteljes kilúgzási folyamatok miatt nem rendelkezik **Calcic** szinttel.

## 5. Következtetések és javaslatok

A doktori kutatásom eredményei alátámasztják, hogy a látható és közeli infravörös tartományban végzett reflektancia mérésekkel számos talajtulajdonságról nyerünk egyidejűleg minőségi és mennyiségi információt, így a technológiának jelentős szerepe lehet a talajfelvételezésben és talajosztályozásban. A technológia alkalmazásával gyorsan, olcsón és környezetbarát módon jutunk megfelelő minőségű és mennyiségű talajadathoz. Azonban a módszer talajtani gyakorlatba illesztésének sikere érdekében számos, a doktori kutatás során felmerült tényezőt kell figyelembe vennünk.

Talajfelvételezési, térképezési célú munkák során a talajmintavételi helyszínek random módszerrel történő kiválasztása mellett, vagy helyett olyan eljárásokat is alkalmaznunk kell, melyek figyelembe veszik a vizsgált terület domborzati, földtani adottságait, a vegetáció jellegzetességeit, illetve egyéb olyan tényezőket, melyek a talajképződési folyamatokat meghatározzák. A tanszéken futó egyéb kutatások során alkalmazott – a terület heterogenitását figyelembe vevő – módszer, a Conditioned Latin Hypercube Sampling (CLHS) bizonyult a leghatékonyabbnak. A CLHS a mintapontok kiválasztását (a talajképző tényezőket reprezentáló) környezeti változók vizsgálata alapján végzi el.

A spektrális tulajdonságokon alapuló talajtani vizsgálatokban is alapvető fontosságú a jó minőségű talajadat, esetünkben a spektrális reflektancia biztosítása. A mérési módszertan minden részletre kiterjedő kidolgozása, és követése abban az estében még hangsúlyosabb, amikor a spektrumok rögzítéséhez hordozható műszert alkalmazunk. Bár a munkám során alkalmazott ASD FieldSpec MAX 3 hordozható spektroradiométer terepi, természetes körülmények között is lehetővé teszi a spektrális méréseket, laboratóriumi eszközként használva a hagyományos asztali műszerekhez képest jóval szigorúbb protokoll követése elengedhetetlen.

A talajparaméter becslési eljárás következő kritikus eleme a többváltozós elemzéshez szükséges kalibrációs minták kiválasztása. Fontos, hogy a teljes sokaságból olyan mintákat válasszunk ki referenciaelemzések céljára, melyek kellően reprezentatívak. A minták random módszerrel történő, és szubjektív döntésen alapuló kiválasztása mellett olyan eljárásokat (pl. Kennard-Stone algoritmus) is alkalmaznunk kell, melyek a teljes sokaság statisztikai mutatóinak figyelembe vételével jelölik ki a jellemzőket.

A többváltozós kalibrációs eljárások során kiemelt figyelmet kell szentelni azoknak a mintáknak, amelyek mérési hiba miatt, vagy összetételüknél fogva a létrehozott modellekbe nem illeszkednek. Mérési hiba esetén a mérést meg kell ismételni. Ha a minta más talajpopulációba tartozása miatt

nem illeszkedik a modellbe, elengedhetelen hasonló összetételű minták bevonása a kalibrációba, vagy nem-lineáris modellezési eljárások alkalmazása.

A technológia numerikus talajosztályozásban betöltött szerepének lehetősége is a mérések integratív természetében rejlik, azaz hogy egyetlen spektrum rögzítésével számos olyan talajparamétról nyerünk információt, amelyek az osztályozásban kulcsszerepet játszanak. Azon felül, hogy a mintákról felvett spektrális reflektancia a talajoknak csak bizonyos tulajdonságaira fókuszáló hagyományos mérésekhez képest többletinformációval szolgál, a megfelelő mérési protokoll betartása mellett a nemzetközi adatharmonizációs törekvések szempontjából standard mérésnek számít.

A talajok mélység menti tulajdonságainak vizsgálata során megállapítottam, hogy egyszerű többváltozós módszerekkel a spektrális adatokból kinyerhetők olyan változók, melyek kifejezik a spektrális változatosságot, szelvény mentén ábrázolva összefüggést mutatnak hagyományos talajparaméter-értékek eloszlásával, melyek alapján diagnosztikai talajszintekkel jó egyezést mutató szintek jelölhetők ki, valamint alkalmasnak bizonyulnak a talajok közötti taxonómiai rokonságok feltárására.

Munkám során három WRB referenciacsoportba tartozó 13 talaj szelvényét vizsgáltam, amelyek viszonylag szűk talaj-populációt képviselnek. A spektrális mérések alkalmazási lehetőségeinek további feltárása érdekében szükséges további, talajképző tényezőket tekintve eltérő talajok bevonását, és a módszer tesztelését.

Munkám végkövetkeztetése, hogy a VIS-NIR reflektancia spektroszkópia alkalmazása rendkívüli lehetőségeket nyithat a talajtani gyakorlatban, melynek alapvető feltétele a hazai talajok sokféleségét reprezentáló spektrális könyvtár létrehozása. Egy ilyen léptékű adatbázis létrehozásával és folyamatos bővítésével a talajparaméterek spektrális alapú becslése egyre hatékonyabbá, a talajosztályozási folyamat standard mérésekre épülve pedig egyre objektívabbá válna.

## 6. Új tudományos eredmények

1. Létrehoztam egy – a Gödöllői-dombsági talajok spektrális változatosságát reprezentáló – spektrális könyvtárat.
2. Kemometriai módszerekkel olyan spektrális modellt hoztam létre, melyek alkalmazásával a Gödöllői-dombsági talajok szerves szén, kalcium-karbonát tartalma, valamint kémhatása ismert megbízhatósággal meghatározható.
3. A talajok mélységgel változó spektrális tulajdonságainak vizsgálatával megállapítottam, hogy a spektrális reflektancia adatok tartalmazznak a szelvények jellemzéséhez és a vizsgált diagnosztikai szintek kijelöléséhez szükséges fizikai és kémiai információt.
4. Megállapítottam, hogy a talajok mélységgel változó spektrális tulajdonságaira alapozott taxonómiai távolságszámítás lehetővé teszi a vizsgált talajszelvények WRB referenciacsoportok szerinti megfeleltetését.



## 7. Összefoglalás

Az elmúlt évtizedekben tapasztalt környezeti változások, természeti erőforrásainkkal való gazdálkodás új igényei, valamint a fenntartható fejlődés érdekében megfogalmazott követelmények rávilágítottak talajaink mezőgazdaságban betöltött kiemelt szerepére, illetve számos más környezeti funkciójának jelentőségére. Napjainkban soha nem látott igény mutatkozik megfelelő minőségű és mennyiségű, hozzáférhető talajadatra és információra. Ennek köszönhető az a világszintű tendencia, melynek hatására egyre több talajfelvételezési projektben olyan technikák kerülnek előtérbe, melyek alkalmazásával a talajokat idő-, és költséghatékony, valamint környezetbarát módon tudjuk vizsgálni. Az alkalmazott technikákkal szemben támasztott további igény az „integratív” mérések biztosítása, azaz hogy egyidejűleg több paraméterről nyújtsanak minőségi és mennyiségi információt.

Ezeket az igényeket figyelembe véve tűztem ki munkám céljául VIS-NIR reflektancia spektroszkópiai módszerek alkalmazását talajparaméterek becslésében, és talajszelvények mélységgel változó talajparamétereinek és spektrális tulajdonságainak vizsgálatában.

A talajparaméterek becslését célzó kutatásaim a Gödöllői-dombságban gyűjtött talajminták vizsgálatára épült. A mintaterületen 154 mintaponton gyűjtött, összesen 770 db talajminta spektrális reflektanciáját rögzítettem. Többváltozós kalibrációs modellek létrehozásához szükséges laboratóriumi referenciaelemzésekhez kiválasztott mintáknak a teljes sokaságra vonatkoztatott reprezentativitását a két adatsor alapstatisztikai mutatóinak összevetésével vizsgáltam. A mintákról felvett spektrális reflektancia, és a referenciaadatok alapján Partial Least Squares Regression módszerrel olyan többváltozós matematikai statisztikai (kemometriai) modelleket hoztam létre, amelyek a talaj- és spektrális tulajdonságok közötti kapcsolatot számszerűsítik. Teszteltem a spektroszkópiai transzformációk prediktív modellek statisztikai mutatóira gyakorolt hatásait. Az elemzés során létrehozott modellek alkalmazásával hasonló populációból származó talajminták szerves szén, kalcium-karbonát tartalma, valamint kémhatása ismert megbízhatósággal származtatható.

A talajok mélységgel változó spektrális tulajdonságainak elemzését tizenhárom talajszelvény vizsgálatára alapoztam. A feltárt szelvények felvételezése során rögzítettem a diagnosztikai szinteket, tulajdonságokat és anyagokat, megállapítottam a WRB referenciacsoportokat, valamint az elsődleges (principal) és kiegészítő (supplementary) minősítőket. Referenciaelemzések céljából a talajok genetikai szintjeiből, a spektrális mérésekhez fix mélység-intervallumokból vettem talajmintát. A laboratóriumi referenciamérések eredményeképpen kapott talajparaméter-értékeket

spline spline függvény alkalmazásával a mélység szerint standardizáltam. A spektrális méréseket tartalmazó mátrixon főkomponens analízist végeztem el, amelynek eredményeképpen kapott főkomponens faktorértékeket használtam, mint a szelvények mélység menti spektrális tulajdonságait leíró változókat. A spektrális információ egyértelműsítése érdekében a faktorértékeket mélység szerint Fuzzy C-means klaszterezést alkalmazva csoportosítottam, és a klaszter tagság értékeket mélység mentén összevettem a referencia talajparaméterekkel. A taxonómiai rokonságok megállapítása érdekében a faktorértékek mélység menti eloszlása alapján a talajok közötti Euklideszi távolságot számítottam, és a hasonlósági/különbözőségi viszonyokat vizualizáltam. Megállapítottam, hogy a spektrális reflektancia adatok tartalmazzák a főbb talajtulajdonságok mélység menti eloszlására vonatkozó, valamint talajszintek kijelöléséhez szükséges fizikai és kémiai információt. A talajok mélységgel változó spektrális tulajdonságaira alapozott taxonómiai távolságszámítás alapján a szelvények a WRB referenciacsoportoknak megfelelő csoportosulást mutatnak.



## 8. Summary

The significance of the agricultural and other environmental functions of soils have been highlighted by environmental changes, new demands for energy, the need for sustainable development and the recognition of global problems. This growing interest towards our soils has revealed the spatial, temporal and financial limits of conventional soil sampling methods. Nowadays there is a serious need for accessible soil data of good quality and quantity. This explains the global trend towards the development and use of technologies allowing data collection and analysis to be performed in rapid, cheap and environment-friendly way. Furthermore the technologies have to provide integrative measurement of soils, namely to provide quantitative and qualitative information of a wide range of soil properties simultaneously. Reflectance spectroscopy, based on reflectance measurements in the visible (VIS) and near-infrared (NIR) regions of the electromagnetic spectrum (350–2500 nm), is able to satisfy these requirements.

Considering the above mentioned requirements the objectives of my research are the use of VIS-NIR reflectance spectroscopy to predict soil properties and the evaluation of the depth wise change of spectral and soil properties of chosen soil profiles.

For the research of the spectral based soil parameter prediction soil samples on 154 sampling points were collected from the Gödöllő Hilly Region. The spectral reflectance of the collected, overall 770 samples were recorded. The representativity of samples chosen for the development of multivariate calibration models regarding to the total population was determined by the evaluation of the descriptive statistics of both data sets. Partial Least Squares Regression were used to develop chemometric models which quantify the relationship between the spectral and soil properties. The effect of spectroscopic transformations on the predictive capacity of the models was also evaluated. By the application of the developed models the prediction of organic carbon, calcium carbonate content and pH of samples from similar population can be determined by known reliability statistical measures.

The evaluation of the depth wise spectral properties of soils is based on the study of thirteen soil profiles. Based on the investigation of the soil profiles the diagnostic horizons, properties, materials, WRB Reference Soil Groups primary and supplementary qualifiers were defined. For the spectral measurements samples were collected in standard depth intervals. For reference laboratory measurements samples from genetic horizons were collected from each soil profile. To estimate the reference soil parameters in the fixed depth intervals mass preserving spline function was fitted on the reference dataset. Principal Component Analysis was performed on the spectral dataset to

reduce the high dimensionality. The PC scores were used as variables describing the vertical spectral properties of the soils. To test the “profile description ability” of the spectral dataset Fuzzy C-means clustering was performed on the matrix of the PC factors scores. The resulting fuzzy membership values and the spline estimated” reference values were plotted against the depth. To determine the taxonomic relationships (similarities) of the profiles Euclidean distance values were calculated using the PC factor scores as profile descriptor variables. PCA was performed on the similarity matrix to visualize the similarities. The resulting patterns were compared to the WRB classification determined for the profiles. Based on the results the reflectance data contain physical and chemical information regarding to the depth wise distribution of main soil parameters, and to the delineation of soil horizons. The taxonomic distance calculation based on the depth function spectral properties, and visualization the relationships provided good match with the WRB Reference Soil Groups determined for the soils.

## 9. Irodalomjegyzék

ASRIS. (2011): ASRIS-Australian Soil Resource Information System. <http://www.asris.csiro.au>  
Accessed 05 November 2014

BARNES, R. J., DHANOA, M. S., LISTER, S. J. (1989): Standard normal variate transformation and detrending of near-infrared diffuse reflectance spectra. *Applied Spectroscopy*. 43, 772 – 777 pp.

BAUMGARDNER, M. F., SILVA, L. F., BIEHL, L. L., STONER, E. R. (1985): Reflectance Properties of Soils. *Advances in Agronomy*, 38, 1 – 44 pp.

BEAUDETTE, D.E., ROUDIER P., O'GEEN, A. T. (2012): Algorithms for Quantitative Pedology: A Toolkit for Soil Scientists.

BELLINASO, H., DEMATTE, J.A.M., ARAUJO, S.R. (2010): Spectral library and its use in soil classification. *Brazilian Journal of Soil Science*. 34, 861-870 pp.

BEN-DOR, E., BANIN, A. (1990): Near-infrared reflectance analysis of carbonate concentration in soils. *Applied Spectroscopy*, 44, 6, 1064 – 1069 pp.

BEN-DOR, E., BANIN, A. (1994): Visible and near-infrared (0.4 – 1.1  $\mu\text{m}$ ) analysis of arid and semiarid soils. *Remote Sensing of Environment*, 48, 3, 261 – 274 pp.

BEN-DOR, E., CHABRILLAT, S., DEMATTE, J. A. M., TAYLOR, G. R., HILL, J., WHITING, M. L., SOMMER, S. (2008): Using Imaging Spectroscopy to study soil properties. *Remote Sensing of Environment*, 113, S38 – S55 pp.

BEN-DOR, E., IRONS, J. R., EPEMA, J. F. (1999): Soil reflectance, In: Rencz, N. (1999): *Remote Sensing for the Earth Science*. Wiley and Sons Inc., New York USA, 111 – 188 pp.

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 pp.

BERTHOLD, M. R., CEBRON, N., DILL, F., GABRIEL, T. R., KOTTER, T. K., MEINL, T., OHL, P., SIEB, C., THIEL, K., WISWEDEL, B. (2007): *KNIME: The Konstanz Information Miner. Studies in Classification, Data Analysis and Knowledge Organization*. Springer.

BOCKHEIM, J. G., GENNADIYEV, A. N. (2000): The role of soil forming processes in the definition of taxa in Soil Taxonomy and World Soil Reference Base. *Geoderma*, 95, 53-72 pp.

BRICKLENMEYER, R. S., BROWN, D. J. (2010): On-the-go VisNIR: potential and limitations for mapping soil clay and organic carbon. *Computers and Electronics in Agriculture*, 70, 209-216 pp.

BRODSKY, L., KLEMENT, A., PENIZEK, V., KODESOVA, R., BORUVKA, L. (2011): Building soil spectral library of the Czech soils for quantitative digital soil mapping. *Soil and Water Research* 6/4, 165 – 172 pp.

BÚZÁS I. (szerk.), 1988. Talaj- és agrokémiai vizsgálati módszerkönyv 2. A talajok fizikai-kémiai és kémiai vizsgálati módszerei. Mezőgazda Kiadó. Budapest.

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 pp.

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 pp.

CLARK, R. N. TRUDE, V. V. K., KLEJWA, M., SWAYZE, G. A. (1990): High Spectral Resolution Reflectance Spectroscopy of Minerals. *Journal of Geophysical Research*. 95, B8, 12653 – 12680 pp.

CONDIT, H. R. (1970): The Spectral Reflectance of American Soils. *Photogrammetric Engineering*, 36, 955 – 966 pp.

CSILLAG, F., PÁSZTOR, L., BIEHL, L. L. (1993): Spectral band selection for the characterization of salinity status of soils. *Remote Sensing of Environment*. 43/3, 231 – 242 pp.

CSORBA Á., LÁNG, V., FENYVESI, L., MICHÉLI, E. (2012): Reflektancia spektroszkópia alkalmazása talajok szervesszén- és CaCO<sub>3</sub>- tartalmának becslésében. *Agrokémia és Talajtan*, 61/2, 277-290 pp.

DALAL, R. C., HENRY, R. J. (1986): Simultaneous determination of soil moisture, organic carbon, and total nitrogen by near infrared reflectance spectrophotometry. *Soil Science Society of America Journal*. 50, 120 – 123 pp.

DENG, F., MINASNY, B., KNADEL, M., MCBRATNEY, A., HECKRATH, G., GREVE, M.H. (2013): Using vis-NIR spectroscopy for monitoring temporal changes in soil organic carbon. *Soil Science*. 178, 389 – 399 pp.

- DUCKWORTH, J. H., 1998. Spectroscopic quantitative analysis. In: Applied Spectroscopy (Eds.: WORKMAN, J. & SPRINGSTEEN, A.) Academic Press. San Diego, California. 93–163 pp.
- FAJARDO, M., MCBRATNEY, A., WHELAN, B. (2016): Fuzzy clustering of Vis-NIR spectra for the objective recognition of soil morphological horizons in soil profiles. *Geoderma*, 263, 244 – 253 pp.
- FAO (2006): Guidelines for Soil Description. Fourth Edition. FAO, Rome.
- FUCHS, M., WALTNER, I. SZEGI, T., LÁNG, V., MICHÉLI, E. (2011): A hazai talajtípusok taxonómiai távolsága a képződésüket meghatározó folyamattársulások alapján. *Agrokémia és Talajtan*, 60/1, 33-44 pp.
- GARBOU, A., MUNKHOLM, L. J., HANSEN, S. B. (2013): Tillage effects on topsoil structural quality assessed using X-ray CT, soil cores and visual soil evaluation. *Soil Tillage Research*, 128, 104-109 pp.
- GELADI, P., MACDOUGALL, D., MARTENS, H. (1985): Linearization and scatter-correction for near-infrared reflectance of meat. *Applied Spectroscopy*. 39, 491 – 500 pp.
- GOGÉ, F., JOFFRE, R., JOLIVET, C., ROSS, I., RANJARD, L. (2012): Optimization criteria in sample selection step of local regression for quantitative analysis of large soil NIRS database. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 110/1, 168 – 176 pp.
- GRINAND, C., BARTHES, B.G., BRUNET, D., KOUAKOUA, E., ARROUAYS, D., JOLIVET, C., CARIA, G., BERNOUX, M. (2012): Prediction of soil organic and inorganic carbon contents at a national scale (France) using mid-infrared reflectance spectroscopy (MIRS). *European Journal of Soil Science*. 63, 141 – 151 pp.
- GROVE, C. I., HOOK, S. J., PAYLOR II, E. D. (1992): Laboratory Reflectance Spectra of 160 Minerals, 0.4 to 2.5 Micrometers. – Jet Propulsion Laboratory, California, 394 p.
- HARTEMINK, A. E., MINASNY, B. (2014): Towards digital soil morphometrics. *Geoderma*, 230 – 231, 305 – 317 pp.
- HAUBROCK S., N., CHABRILLAT, S., KUHNHERT, 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
- HELMS, D., EFFLAND, A. B. W., DURANA, P. J. (2002): Profile in the History of the U.S. Soil Survey. Iowa State Press, Ames.

- HUMMEL, J. W., SUDDUTH, K. A., HOLLINGER, S. E. (2001): Soil moisture and organic matter prediction of surface and subsurface soils using an NIR soil sensor. *Computers and Electronics in Agriculture*. 32/2, 149 – 165 pp.
- HUNT, G. R. (1977): Spectral signatures of particulate minerals in visible and near infrared. *Geophysics*, 42/3, 501 – 513 pp.
- HUNT, G. R. (1980): Electromagnetic radiation: The communication link in remote sensing. In: Siegal, B. S., Gillespie, A. R. (szerk): *Remote Sensing in Geology*. John Wiley, New York, 4 – 45 pp.
- HUNT, G. R. (1982): Spectroscopic properties of rocks and minerals. In: *Handbook of Physical Properties of Rocks*. (Ed.: CARMICHAEL, R. S.) 295–385. CRC Press Inc. Boca Raton, Florida.
- HUNT, G. R., SALISBURY, J. W. (1970): Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks. I. Silicate minerals. *Modern Geology*, 1, 283-300 pp.
- HUNT, G. R., SALISBURY, J. W. (1971): Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks. II. Carbonates. *Modern Geology*, 2, 23-30 pp.
- HUNT, G. R., SALISBURY, J. W., LENHOFF, C. J. (1971): Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks. III. Oxides and hydroxides. *Modern Geology*, 2, 195 – 205 pp.
- IUSS WORKING GROUP WRB (2015): *World Reference Base for Soil Resources*. World Soil Resources Reports No. 103. FAO. Rome.
- JASSÓ, F. (szerk.)(1989): *Melioráció-öntözés és talajvédelem. Útmutató a nagyméretarányú országos talajtérképezés végrehajtásához* 89 melléklet, Agroinformációs vállalat, Budapest.
- KEMPER, T. (2003): *Reflectance spectroscopy for mapping and monitoring of metal mining related contamination. A case study of the Aznalcóllar mining accident, Spain*. PhD thesis, Universität Trier, Germany, 218 p.
- KEMPER, T., SOMMER, S. (2002): Estimate of heavy metal contamination in soils after a mining accident using reflectance spectroscopy. *Environment, Science & Technology*. 36/12, 2742-7
- KNADEL, M., DENG, F., THOMSEN, A., GREVE, H.M.(2012): *Development of a Danish National Vis-NIR Soil Spectral Library for Soil Organic Carbon Determination*. *Digital Soil Assessments and beyond*. Proceedings of the 5th Global Workshop on Digital Soil Mapping, Sydney, Australia, CRC Press, 403 – 408 pp.

- LAGACHERIE, P., BARET, F., FERET, J-B., NETTO, J. M., ROBBEZ-MASSON, J. M. (2008): Estimation of soil clay and calcium carbonate using laboratory, field and airborne hyperspectral measurements. *Remote Sensing Environment*, 112, 825 – 835 pp.
- LÁNG, V., FUCHS, M., WALTNER, I., MICHÉLI, E. (2013): Soil taxonomic distance, a tool for correlation: As exemplified by the Hungarian Brown Forest Soils and related WRB Reference Soil Groups. *Geoderma*. 192, 269 – 276 pp.
- MAHMOUDZADEH ARDEKANI, M. R. (2013): Off and on-ground GPR techniques for field-scale soil moisture mapping. *Geoderma*, 200-201, 55-66 pp.
- MARTENS, H., NAES, T. (1989): *Multivariate Calibration*. John Wiley & Sons, Chichester, Egyesült Királyság, 419 p.
- MICHÉLI, E. (2011): A talajképző folyamatok megjelenése a diagnosztikai szemléletű talajosztályozásban. *Agrokémia és Talajtan*, 60/1. 17-32 pp.
- MICHÉLI, E., STEFANOVITS, P., FENYVESI, L. (1989): Infrared reflectance of artificially prepared organo-mineral complexes. *International Agrophysics*, 5, 99 – 105 pp.
- MINASNY, B., MCBRATNEY, A. B. (2007): Incorporating taxonomic distance into spatial prediction and digital mapping of soil classes. *Geoderma*, 142, 2856-293 pp.
- MINASNY, B., MCBRATNEY, A. B., BELLON-MAUREL, V., ROGER, J. M., GOBRECHT, A., FERRAND, L., JOALLAND, S. (2011): Removing the effect of soil moisture from NIR diffuse reflectance spectra for the prediction of soil organic carbon. *Geoderma*, 167, 118-124 pp.
- MSZ-08-0205:1978 (1978): A talaj fizikai és vízgazdálkodási tulajdonságainak vizsgálata. Magyar Szabványügyi Hivatal, Budapest MSZH nyomda, 39 p.
- MSZ-08-0206/2:1978 (1978): A talaj egyes kémiai paramétereinek vizsgálata. Laboratóriumi vizsgálatok (pH érték, szódában kifejezett fenoftalein lúgosság, vízben oldható összes só, hidrolitos ( $y_1$  érték) és kicserélődési aciditás ( $y_2$  érték)). Magyar Szabványügyi Hivatal, Budapest MSZH nyomda, 12 p.
- MSZ-08-0214/2:1978 (1978): A talajkicserélhető kationjainak minőségi és mennyiségi meghatározása. Laboratóriumi vizsgálatok. Magyar Szabványügyi Hivatal, Budapest MSZH nyomda, 8 p.
- MSZ-08-0215:1978 (1978): A talaj kation adszorpciós kapacitásának meghatározása. Módosított Mehlich eljárás. Magyar Szabványügyi Hivatal, Budapest MSZH nyomda, 12 p.

- MUNKHOLM, L. J., HECK, R. J., DEEN, B. (2012): Soil pore characteristics assessed from X-ray micro-CT derived images and correlations to soil friability. *Geoderma* 181-182, 22-29 pp.
- MYERS, D. B., KITCHEN, N. R., SUDDUTH, K. A., MILES, R. J., SADLER, E. J., GRUNWALD, S. (2011): Peak functions for modeling high resolution soil profiled data. *Geoderma*, 166, 74-83 pp.
- NAGY, R. (2014): A Gödöllői-dombsági talajok kalcium-karbonát tartalmának mennyiségi modellezése környezeti paraméterek és a reflektancia spektroszkópia alkalmazásával. Diplomadolgozat. Gödöllő, 51 p.
- NOCITA, M., STEVENS, A., VAN WESEMAEL, B., AITKENHEAD, M., BACHMANN, M., BARTHÈS, B., BEN-DOR, E., BROWN, D., CLAIROTTE, M., CSORBA, A., DARDENNE, P., DEMATTÊ, J. A. M., GENOT, V., GUERRERO, C., KNADEL, M., MONTANARELLA, L., NOON, C., RAMIREZ-LOPEZ, L., ROBERTSON, J., SAKAI, H., SORIANO-DISLA, J. M., SHEPHERD, K. D., STENBERG, B., TOWETT, E. K., VARGAS, R., WETTERLIND, J. (2015): Soil Spectroscopy: An Alternative to Wet Chemistry for Soil Monitoring. In: Sparks D. L. (Ed.): *Advances in Agronomy*. 132, 139 – 159 pp.
- O'ROURKE, S. M., HOLDEN, N. M. (2011): Optical sensing and chemometric analysis of soil organic carbon – a cost effective alternative to conventional laboratory methods? *Soil Use Manage*, 27, 143 – 155 pp.
- RAB, M. A., HALING, R. E., AARONS, S. R., HANNAH, M., YOUNG, I. M., GIBSON, D. (2014): Evaluation of X-ray computed tomography for quantifying macroporosity of loamy pasture soils. *Geoderma*, 213, 460-470 pp.
- SAVITZKY, A., GOLAY, M. (1964): Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry*. 36, 1627 – 1639 pp.
- SCHWARTZ, G., BEN-DOR, E., ESHEL, G. (2012): Quantitative analysis of total petroleum hydrocarbons in soils: comparison between reflectance spectroscopy and solvent extraction by 3 certified laboratories. *Applied Environmental Soil Science*, Article ID 751956, 11 p.
- SCHWERTMANN, U. (1993): Relations between iron oxides, soil color and soil formation. In: *Soil Color, Special Publication*. (Eds.: BIGHAM, J. M. & CIOLKOSZ, E. J.) 51–70. Soil Science Society of America. Madison, Wisconsin.



- 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.
- SHERMAN, D. M., WAITE, T. D. (1985): Electronic spectra of Fe<sup>3</sup> oxides and oxihydroxides in the near infrared to ultraviolet. *American Mineralogist*, 70, 1262 – 1269 pp.
- SOIL SURVEY STAFF (1999): *Soil Taxonomy – A Basic System of Soil Classification for Making and Interpreting Soil Surveys*. 2<sup>nd</sup> edition. Agriculture Handbook No. 436. USDA-NRCS, 869 p.
- FAO-UNESCO (1974): *Soil map of the world, 1:5 000 000. Vol. 1 Legend*, United Nations Educational, Scientific, and Cultural Organization, Paris
- SORIANO-DISLA, J. M., JANIK, L. J., VISCARRA ROSSEL, R. A., MACDONALD, L. M., MCLAUGHLIN, M. J. (2014): The Performance of Visible, Near-, and Mid-Infrared Reflectance Spectroscopy for Prediction of Soil Physical, Chemical, and Biological Properties. *Applied Spectroscopy Reviews*, 49/2, 139 – 186 pp.
- STEFANOVITS, P. (1972): *TALAJTAN. MEZŐGAZDA KIADÓ, BUDAPEST*
- STEFANOVITS, P. (1999): A hazai talajtan fejlődése. In: STEFANOVITS, P., FILEP, GY., FÜLEKY, GY. (1999): *Talajtan. Mezőgazda Kiadó. Budapest*, 445 – 456 pp.
- STEFFENS, M., BUDDENBAUM, H. (2013): Laboratory imaging spectroscopy of a stagnic Luvisol profile – high resolution soil characterization, classification and mapping of elemental concentrations. *Geoderma*, 195, 122-132 pp.
- STENBERG, B. (2010): Effects of soil sample pretreatments and standardized rewetting as interacted with sand classes on Vis – NIR predictions of and soil organic carbon. *Geoderma*. 158, 15 – 22 pp.
- STENBERG, B., VISCARRA ROSSEL, R. A., MOUAZEN, A., WETTERLIND, J. (2010): Visible and near infrared spectroscopy in soil science. In: Sparks, D. L.: *Advances in Agronomy*. 107, 163 – 215 pp.
- STEVENS, A., NOCITA, M., TÓTH, G., MONTANARELLA, L., VAN WESEMAEL, B. (2013): Prediction of soil organic carbon at the European scale by visible and near infrared reflectance spectroscopy. *PLoS One* 8/6

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 pp.

STEVENS, A., WASEMAEL, B., BARTHOLOMEUS, H., ROSILLON, D., TYCHON, B., BENDOR, E. (2008): Laboratory, field and airborne spectroscopy for monitoring organic carbon content in agricultural soils. *Geoderma*, 144, 395 – 404 pp.

STONER, E. R., BAUMGARDNER, M. F. (1981): Characteristic variations in reflectance on surface soils. *Soil Science Society of America Journal*, 45, 1161 – 1165 pp.

TAKÁCS, ZS. (2013): A reflektancia spektroszkópia alkalmazása talajok kémhatásának becslésében. Diplomadolgozat. Gödöllő, 44 p.

TAYLOR, G. R., HEMPHILL P., CURRIE, D., BROADFORD, T., DEHAAN, R. I. (2001): Mapping dryland 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 pp.

TÓTH, G., JONES, A., MONTANARELLA, L. (2013): LUCAS topsoil database and derived information on the regional variability of cropland topsoil properties in the European Union. *Environmental Monitoring and Assessment*. 185, 7409 – 7425 pp.

USDA – United States Department of Agriculture (2013): Rapid Carbon Assessment (RaCA) Methodology. Available at:

[https://www.nrcs.usda.gov/Internet/FSE\\_DOCUMENTS/nrcs142p2\\_052841.pdf](https://www.nrcs.usda.gov/Internet/FSE_DOCUMENTS/nrcs142p2_052841.pdf)

VÅGEN, T-G., WINOWIECKI, L.A., TAMENE DESTA, L., TONDOH J.E. (2015): The Land Degradation Surveillance Framework (LDSF) – Field Guide v 4.1. World Agroforestry Centre, Nairobi, Kenya 14 pp.

VAN REEUWIJK L. P., 2002. Procedures for Soil Analysis. International Soil Reference and Information Centre. Wageningen.

VASQUES, G.M., GRUNWALD, S., HARRIS, W.G. (2010): Spectroscopic models of soil organic carbon in Florida, USA. *Journal of Environmental Quality*. 39/3, 923 – 934 pp.

VASQUEZ, G. M., DEMATTÊ, J. A. M., VISCARRA ROSSEL, R. A., RAMÍREZ-LÓPEZ, L., TERRA, F. S. (2014): Soil Classification using visible/near infrared diffuse reflectance spectra from multiple depths. *Geoderma*, 223 – 225, 73 – 78 pp.

- VISCARRA ROSSEL, R. A., CATTLE, S. R., ORTEGA, A., FOUAD, Y. (2009): Insitu measurements of soil colour, mineral composition and clay content by vis-NIR spectroscopy. *Geoderma*, 150: 253-266 pp.
- 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 assesment of various soil properties. *Geoderma*, 131, 59 – 75 pp.
- VISCARRA ROSSEL, R. A., WEBSTER, R. (2012): Predicting soil properties from the Australian soil visible near infrared spectroscopic database. *European Journal of Soil Science*. 63/6, 848 – 860 pp.
- VISCARRA ROSSEL, R.A., CHEN, C. (2011): Digitally maping the information content of visible-near infrared spectra of surficial Australian soils. *Remote Sensing of Environment*. 115/6, 1443 – 1455 pp.
- WAISER, T. H., MORGAN, C. L. S., BROWN, D. J. HALLMARK, C. T. (2007): In situ characterization of soil clay content with visible and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Soil Sci. Soc. Am. J.* 71, 389-396 pp.
- WHITING, M., LI, A., USTIN, S. L. (2004): Predicting water content using Gaussian model on soil spectra. *Remote Sensing of Environment*, 89, 535 – 552 pp.
- WU, K. L., YANG, M. S. (2005): A cluster validity index for fuzzy clustering. *Pattern Recognition Letters*. 26, 1275 – 1291 pp.
- WU, Y. Z., CHEN, J., JI, J., TIAN, Q. J., WU, X. M. (2005): Feasibility of reflectance spectroscopy for the assesment of soil mercury contamintaion. *Environmental Science and Technology*, 39, 873 – 878 pp.



## 10. Mellékletek

M1: A nyers reflektancia spektrumok, és az azokon elvégzett spektroszkópai transzformációk

M2/a: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei  
A szerves szén mért és becsült értékei (%), és a beclés statisztikai mutatói

M2/b: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei  
A kalcium-karbonát mért és becsült értékei (%), és a beclés statisztikai mutatói

M2/c: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei  
A  $\text{pH}_{(\text{H}_2\text{O})}$  mért és becsült értékei, és a beclés statisztikai mutatói

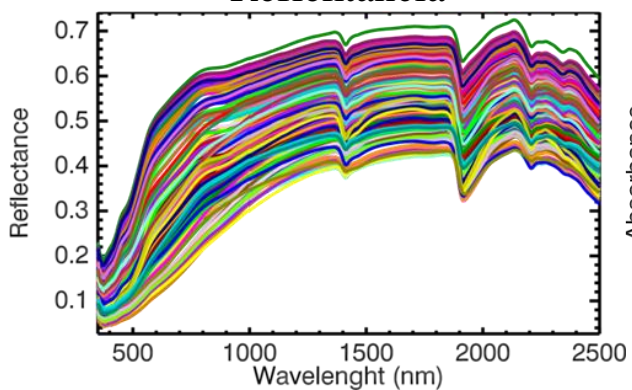
M2/d: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei  
A  $\text{pH}_{(\text{KCl})}$  mért és becsült értékei, és a beclés statisztikai mutatói

M3: a Mass Preserving Spline függvény illesztésének bemenő adatai

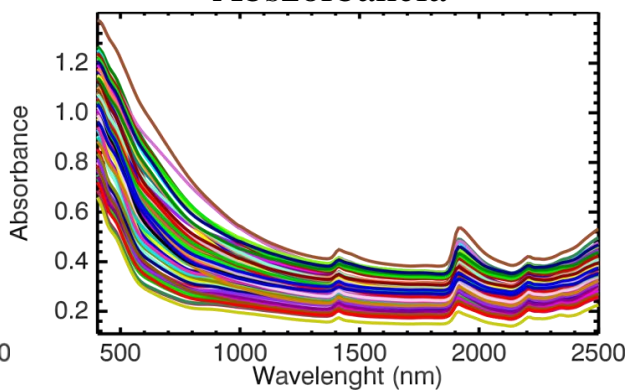
M4: a szövegben előforduló rövidítések jegyzéke

# M1: A nyers reflektancia spektrumok, és az azokon elvégzett spektroszkópai transzformációk

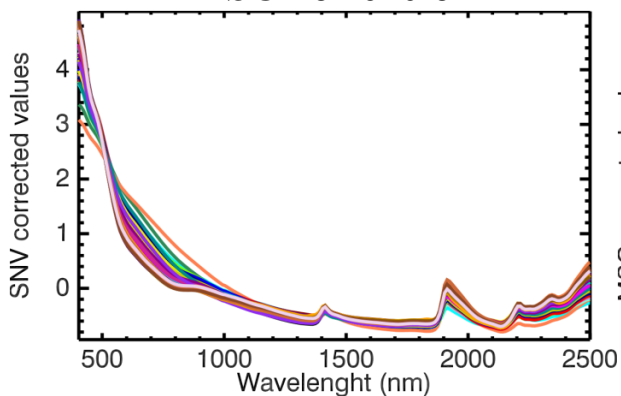
### Reflektancia



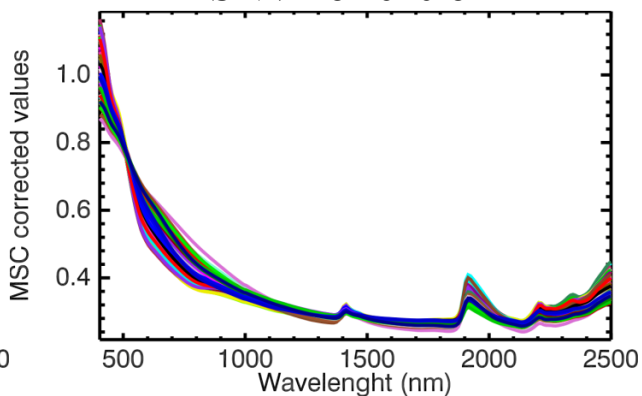
### Abszorbancia



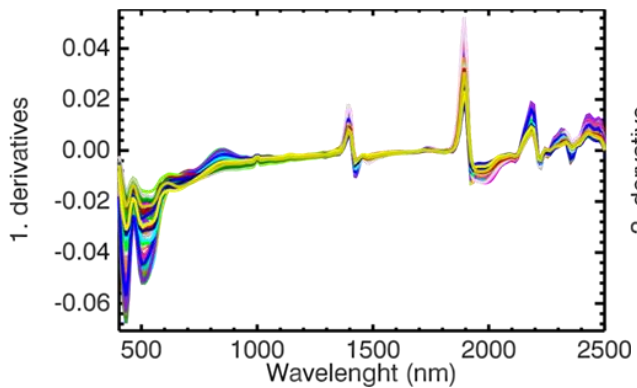
### Abszorbancia MSC korrekció



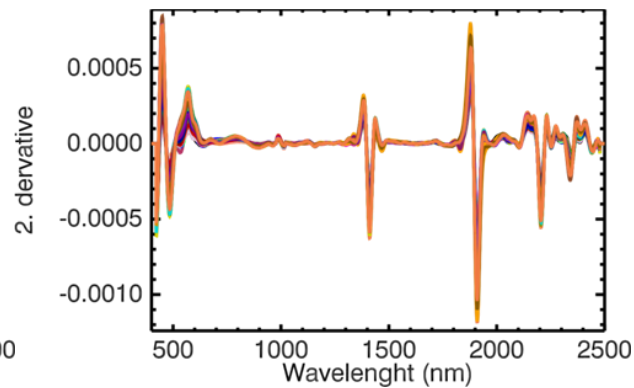
### Abszorbancia SNV korrekció



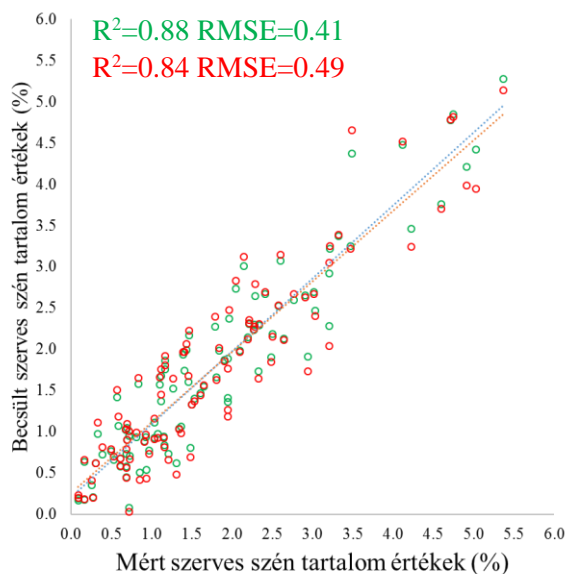
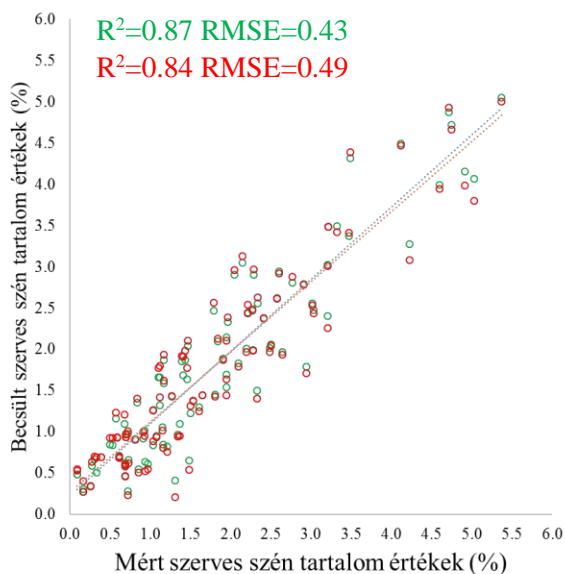
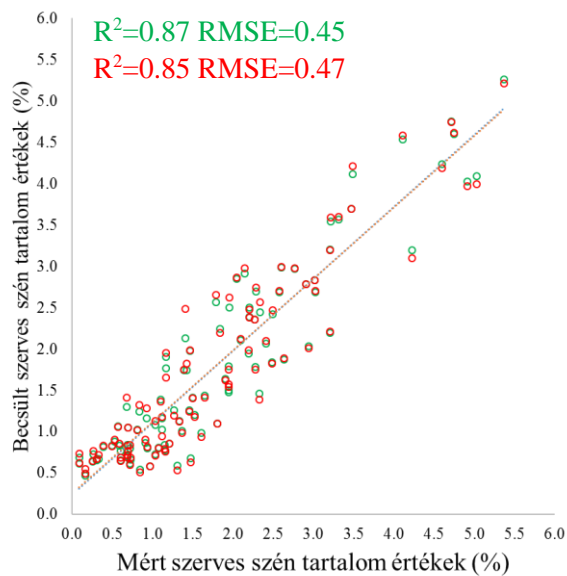
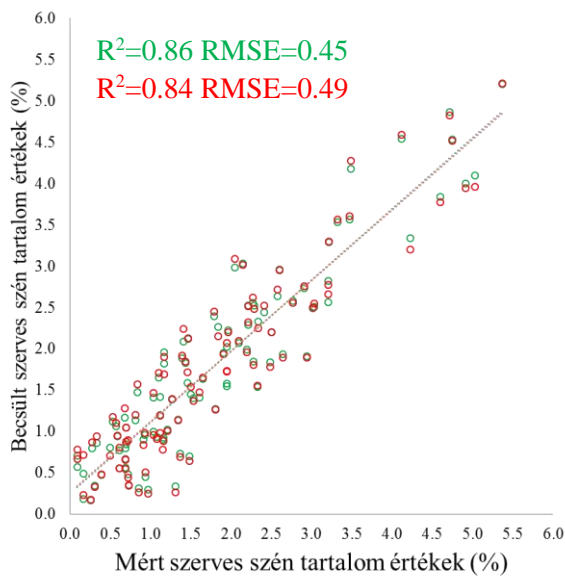
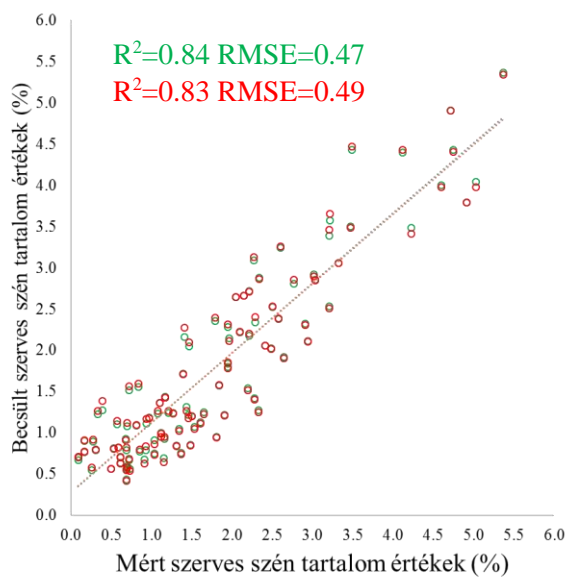
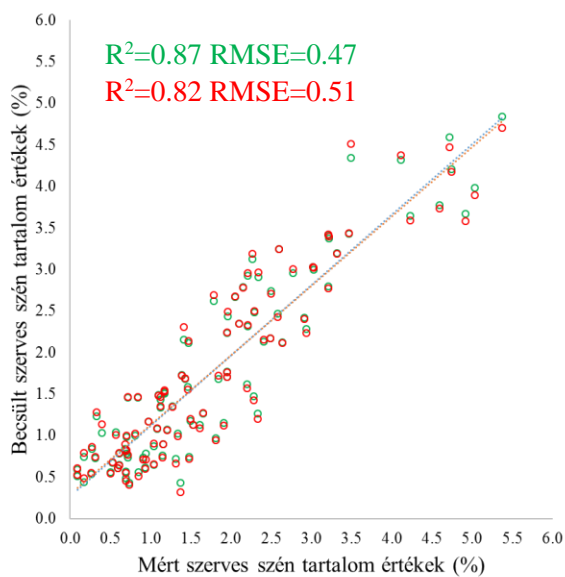
### Abszorbancia SNV korrekció 1. rendű deriváltak



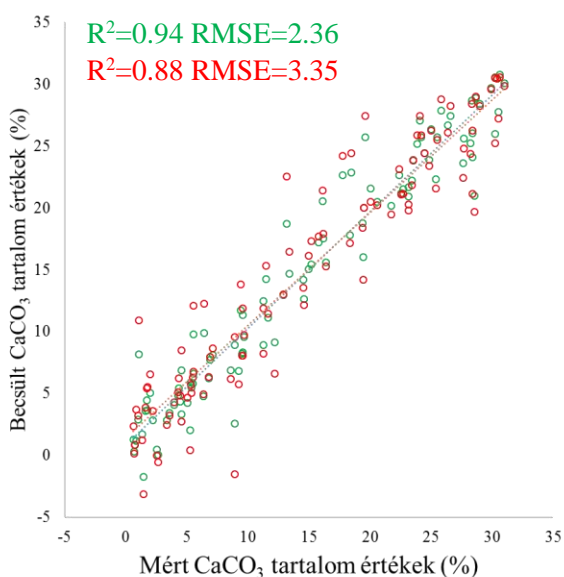
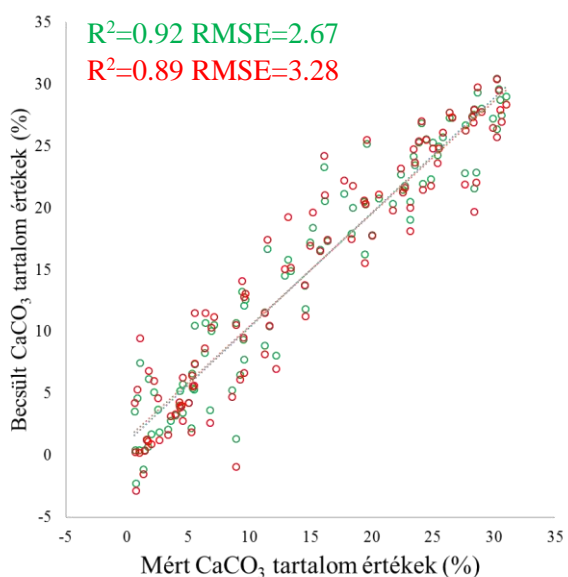
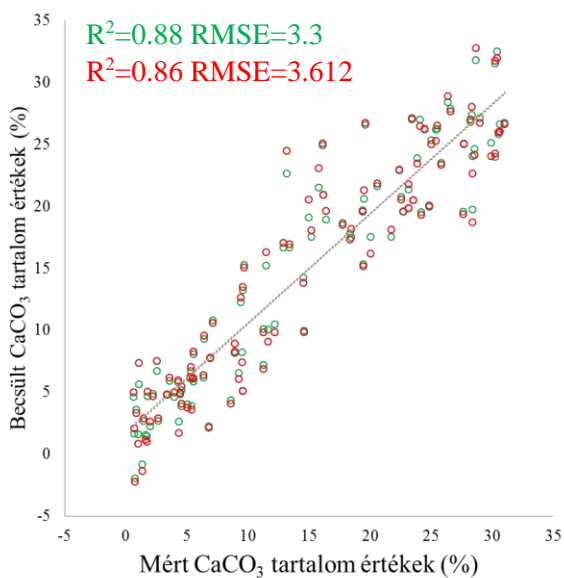
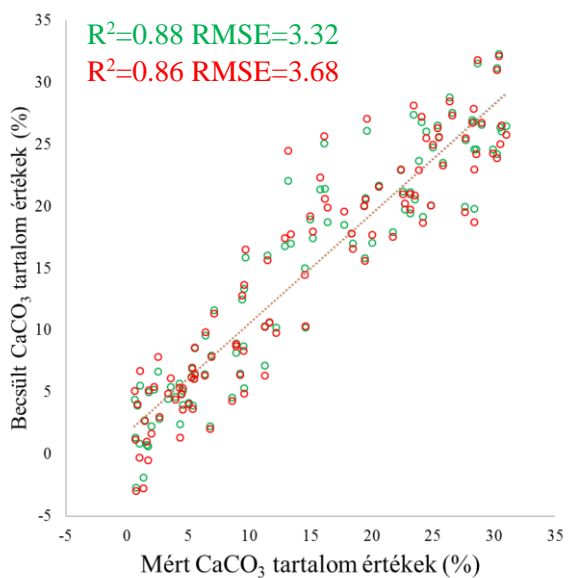
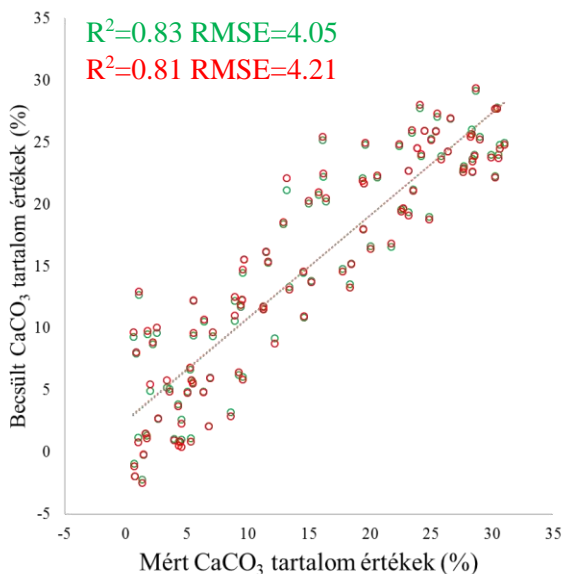
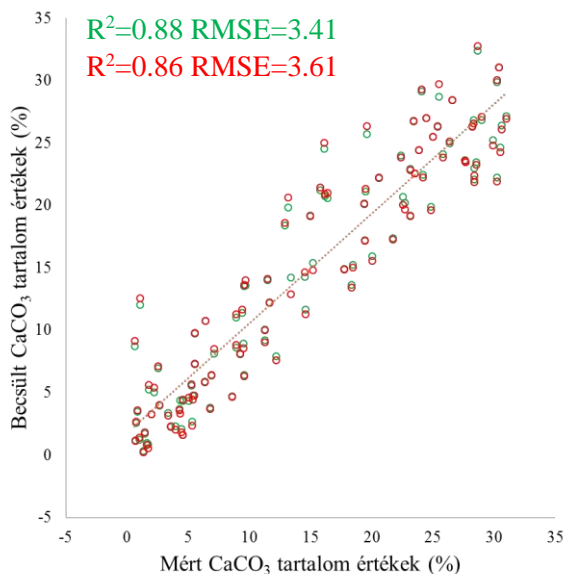
### Abszorbancia SNV korrekció 2. rendű deriváltak



**M2/a: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei. A szerves szén mért és becslt értékei (%), és a becslés statisztikai mutatói**

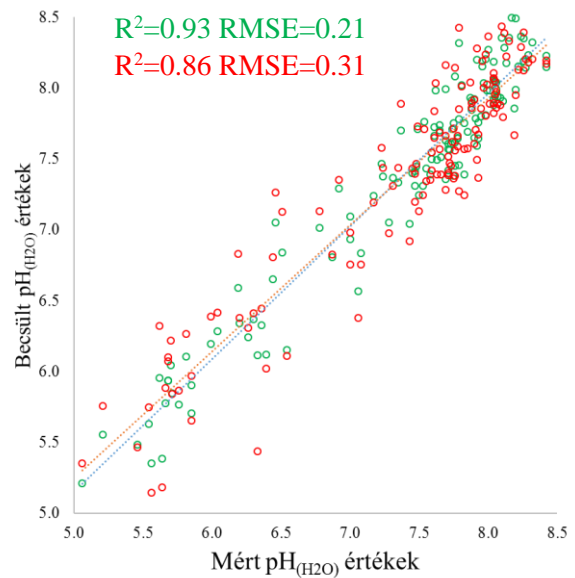
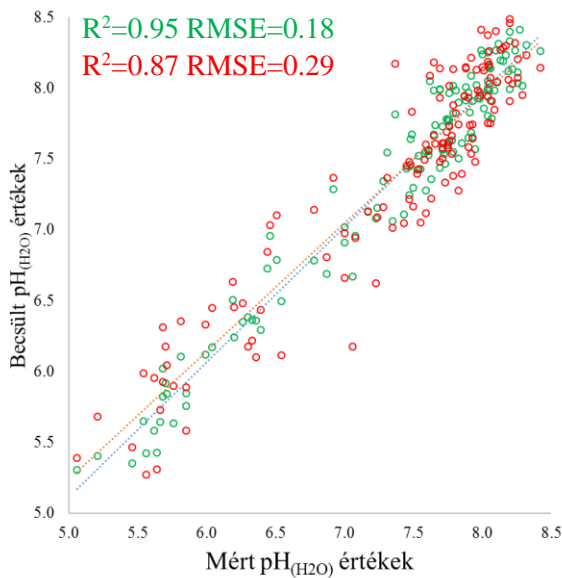
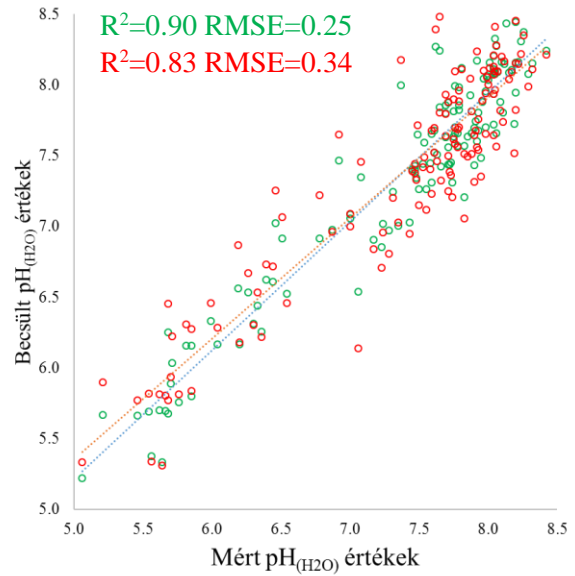
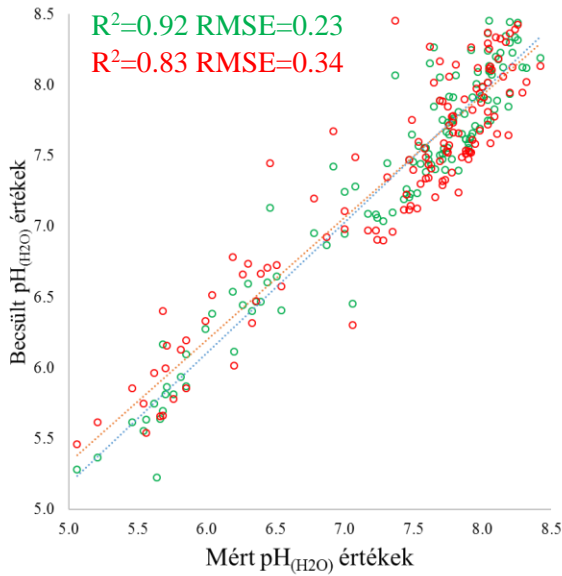
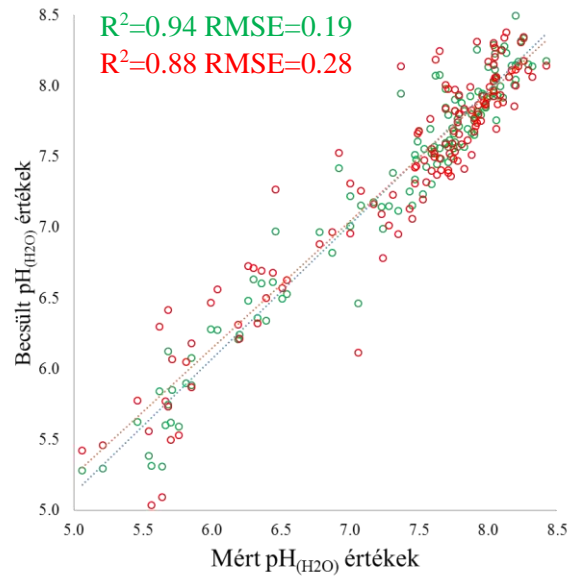
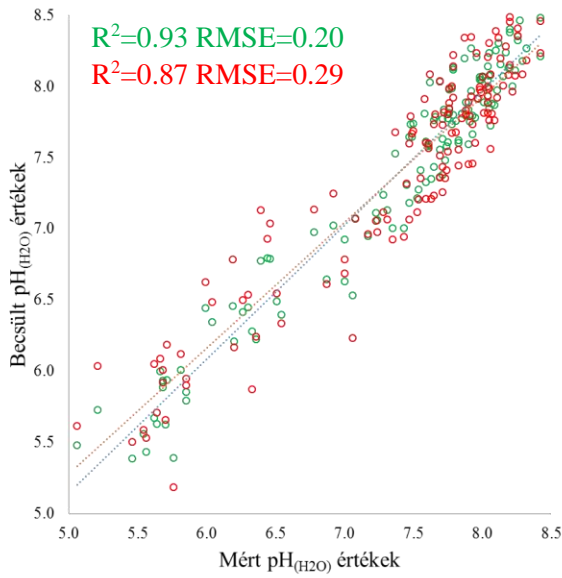


**M2/b: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei. A CaCO<sub>3</sub> mért és becslt értékei (%), és a becslés statisztikai mutatói**

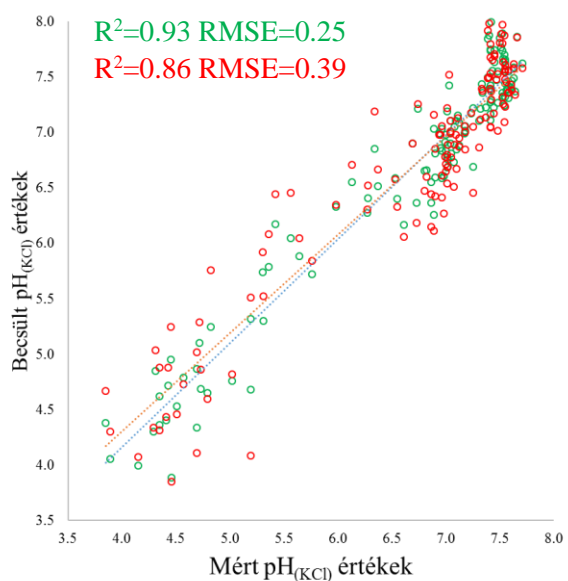
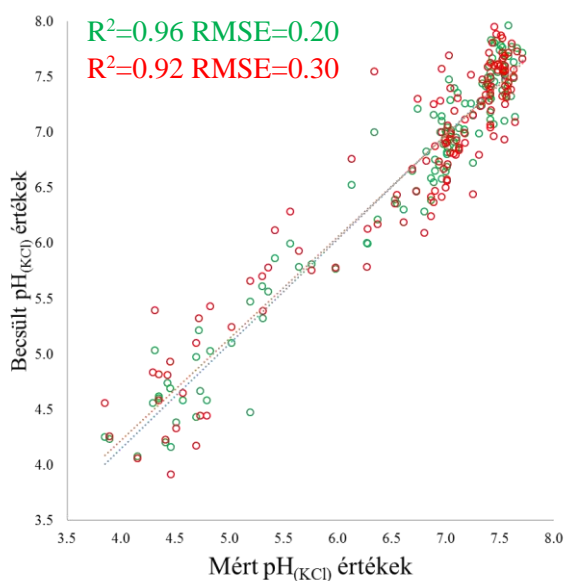
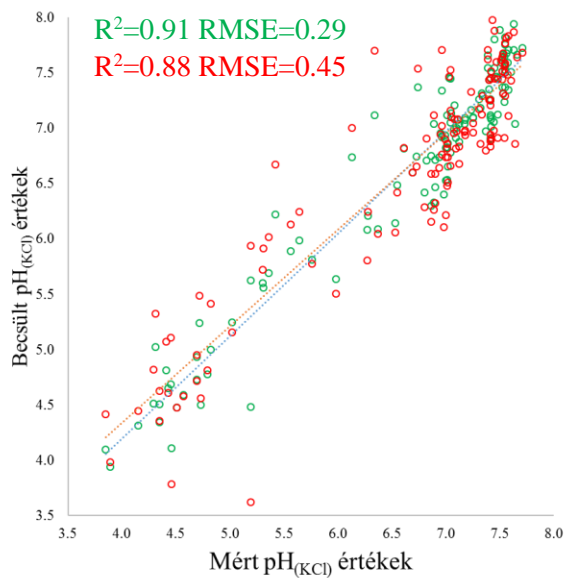
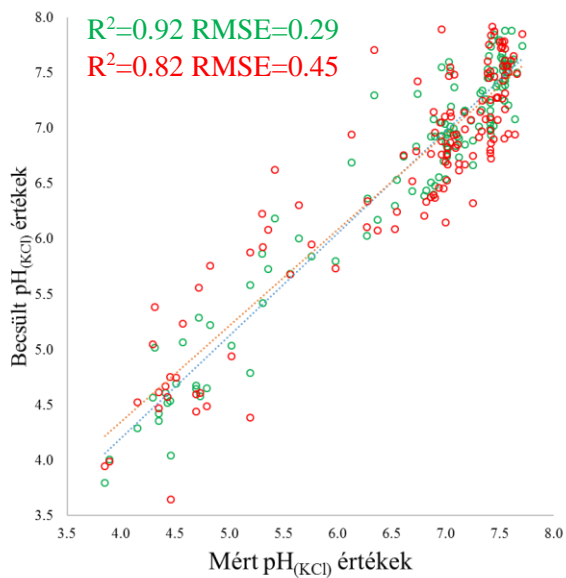
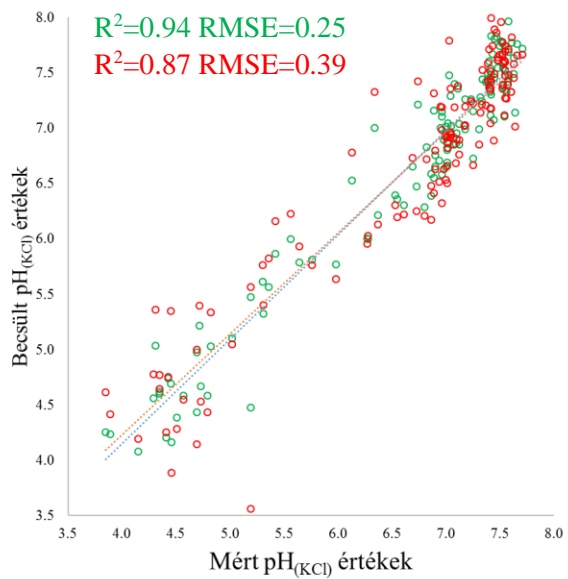
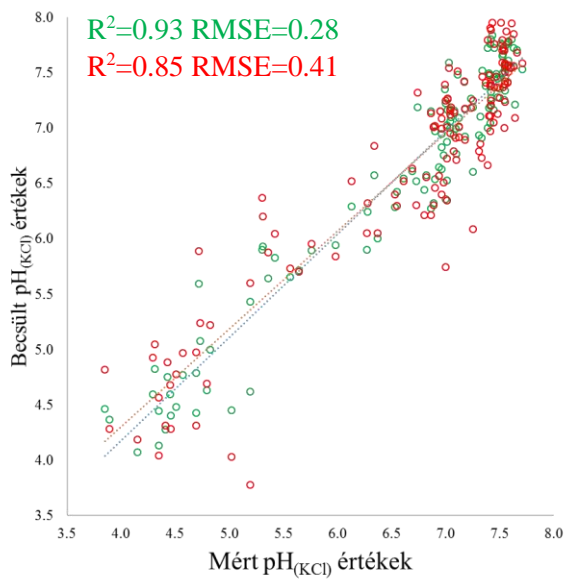




**M2/c: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei. A  $\text{pH}_{(\text{H}_2\text{O})}$  mért és becslt értékei, és a becslés statisztikai mutatói**



**M2/d: az M1 mellékletben bemutatott transzformációkon elvégzett PLSR modellezés eredményei. A  $\text{pH}_{(\text{KCl})}$  mért és becült értékei, és a becslés statisztikai mutatói**



### M3: a Mass Preserving Spline függvény illesztésének bemenő adatai

ID	Horizon upper boundary	Horizon lower boundary	Genetikai szint	Szerves szén	CaCO <sub>3</sub>	pH	pH	Homok	Agyag	CEC	CEC agyag	Bázistelítettség
	cm	cm		%	%	H <sub>2</sub> O	KCl	%	%	cmol/kg	cmol/kg	
CH1	0	30	Ap	2.2	0.0	6.1	5.7	37.0	36.0	30.1	49.2	65.4
CH1	30	65	A2	1.8	0.0	6.9	6.3	36.0	37.0	29.3	47.7	78.0
CH1	65	90	Bw	0.5	0.0	7.1	6.7	37.0	33.0	19.1	31.9	81.2
CH1	90	130	BCK1	0.4	26.3	8.1	7.6	41.0	34.4	13.8	22.8	97.0
CH1	130	150	BCK2	0.2	31.5	8.2	7.8	43.0	32.0	12.9	21.7	98.6
CH2	0	30	Ap	1.6	0.0	6.1	5.6	34.0	32.1	28.2	47.3	65.4
CH2	30	50	AB	1.5	0.0	6.9	5.6	35.0	36.8	30.2	49.2	78.0
CH2	50	90	BCK	0.5	9.1	7.1	6.7	34.0	31.9	18.1	30.4	81.2
CH2	90	150	BCK2	0.5	25.5	7.9	7.3	49.0	29.2	14.1	24.1	93.8
CH3	0	20	Asz	1.7	2.6	8.2	7.6	18.6	33.1	36.4	60.7	98.2
CH3	20	40	Asz2	1.6	2.6	8.2	7.7	19.4	36.9	40.0	65.2	98.7
CH3	40	80	Bw	1.0	11.2	8.3	7.7	24.7	38.7	40.8	65.7	100.6
CH3	80	120	BCK	0.5	19.4	8.6	7.9	13.2	32.2	33.2	55.6	100.0
CH3	120	150	Ck	0.3	18.6	8.9	8.1	37.9	26.7	27.3	47.3	100.0
CH4	0	30	Asz	1.6	3.9	8.2	7.8	13.6	28.4	31.5	54.0	98.2
CH4	30	50	A2	1.5	4.0	8.2	7.8	25.1	38.1	41.2	66.5	97.9
CH4	50	80	AB	1.3	13.4	8.2	7.9	23.2	40.6	43.2	68.7	99.0
CH4	80	100	Bk	0.9	17.2	8.4	8.0	0.0	39.7	41.5	66.5	100.0
CH4	100	150	BCK	0.4	22.9	8.8	8.1	20.1	38.5	39.2	63.3	100.0
CH5	0	30	Asz	1.3	2.8	8.2	7.8	19.6	37.6	40.2	65.2	98.6
CH5	30	70	Ak	1.0	13.9	8.3	7.8	16.2	39.0	40.9	65.9	100.0
CH5	70	120	BCKl	0.4	21.7	8.5	8.2	31.3	38.5	39.4	63.6	100.0
CH5	120	150	Clk	0.2	18.2	8.9	8.8	36.7	27.2	27.7	47.8	100.0
CH6	0	20	Asz	3.4	0.0	6.8	6.5	30.0	33.0	32.2	53.6	76.7
CH6	40	70	A2	2.0	2.7	7.9	6.8	33.2	34.2	32.8	54.3	93.0
CH6	70	90	Abk	0.7	15.2	8.1	7.4	32.4	32.5	29.7	49.8	97.6
CH6	90	120	Bkl	0.4	29.0	8.4	7.7	35.4	29.0	25.2	43.1	100.0
CH6	120	150	BCKl	0.3	27.0	8.5	7.6	27.9	29.0	26.5	45.2	100.0
CH7	0	40	Asz	2.2	2.3	7.0	6.7	58.0	12.1	16.5	30.9	79.3
CH7	40	60	A2	1.7	5.7	7.1	6.9	57.0	13.2	16.7	31.0	80.5
CH7	60	90	ABkl	0.8	16.2	7.6	7.4	56.0	15.2	16.8	30.9	88.4
CH7	90	130	Bkl	0.6	23.2	7.8	7.6	54.5	14.5	15.6	28.9	91.6
CH7	130	150	Ckl	0.4	26.8	7.9	7.7	56.2	16.4	17.3	31.7	93.7
CH8	0	30	Asz	2.0	2.6	6.8	6.5	58.7	17.2	21.2	38.6	76.4
CH8	30	60	A2	1.9	5.7	7.1	6.9	59.2	18.8	22.5	40.7	81.2
CH8	60	100	Bk	1.1	15.7	7.3	7.1	60.1	16.7	18.9	34.6	85.0
CH8	100	150	Ck	0.5	24.7	7.6	7.2	59.6	18.0	19.0	34.5	88.4
KZ1	0	30	Ap	1.9	0.0	6.9	6.5	74.1	13.2	21.7	40.4	78.0
KZ1	30	50	A2	1.1	0.0	7.6	7.2	71.3	15.7	19.2	35.3	89.1
KZ1	50	74	AB	0.2	0.0	7.6	7.5	63.9	21.8	19.8	35.3	89.1
KZ1	75	90	Bt	0.1	0.0	7.9	7.6	60.9	21.6	23.4	41.7	93.8
KZ1	90	150	Ck	0.1	27.0	8.2	8.0	61.7	16.0	10.6	19.5	98.6
KZ2	0	25	Ap	2.1	0.0	7.0	6.9	75.2	14.6	20.8	38.4	79.6
KZ2	25	50	A2	1.2	0.0	7.0	6.8	76.2	17.4	20.2	36.8	79.6
KZ2	50	65	AB	0.7	0.0	7.1	6.8	65.2	23.5	21.4	37.7	81.2
KZ2	65	90	Bt	0.5	0.0	7.2	6.9	62.8	24.2	25.8	45.3	82.8
KZ2	90	150	Ck	0.1	27.9	8.1	7.9	63.0	15.0	12.1	22.4	97.0
LU1	0	5	A	2.5	0.0	4.9	4.3	70.3	11.0	22.3	42.0	46.4
LU1	5	30	E	0.9	0.0	4.8	4.4	67.3	17.1	16.2	29.6	44.8
LU1	30	55	Bt1	0.7	0.0	5.3	4.9	53.9	29.3	20.8	35.5	52.7
LU1	55	95	Bt2	0.7	0.0	5.6	5.1	37.7	40.3	24.6	39.3	57.5
LU1	95	150	Ck	0.1	32.1	8.6	8.2	57.0	15.7	11.5	21.2	100.0
LU2	0	5	A	2.7	0.0	4.7	4.3	77.9	9.7	20.5	38.8	43.3
LU2	5	25	A2	0.5	0.0	4.5	4.1	75.5	14.9	10.4	19.2	40.1
LU2	25	50	Bw	0.2	0.0	4.8	4.4	72.0	18.2	12.0	21.8	44.8
LU2	50	95	Bt	0.2	0.0	5.2	4.8	65.7	23.6	15.2	26.8	51.2
LU2	95	125	BC	0.2	0.0	6.5	5.9	81.2	9.8	8.8	16.7	71.7
LU2	125	150	Ck	0.1	18.2	8.1	7.8	89.2	3.8	8.3	16.3	97.0
LU3	0	20	A	1.3	0.0	5.1	3.9	12.0	34.3	36.9	61.1	49.6
LU3	20	35	AB	0.7	0.0	5.1	3.8	8.0	45.4	46.8	72.3	49.6
LU3	35	60	Btg1	0.3	0.0	5.4	4.1	6.5	51.2	51.9	77.2	54.3
LU3	60	100	Btg2	0.2	0.0	5.5	4.2	6.3	53.5	54.0	79.1	55.9
LU3	100	120	Btg3	0.2	0.0	5.8	4.3	7.3	51.6	52.1	77.3	60.6
LU3	120	150	Btg4	0.3	0.0	5.9	4.4	6.4	54.3	54.8	79.9	62.2

#### M4: A szövegben előforduló rövidítések jegyzéke

AfSIS	African Soil Information System
ASD	Analytical Spectral Devices
CAT	Computed axial tomography
CEC	Cation Exchange Capacity (kationcsere kapacitás)
CT	Computed tomography
DiSoMo	Digital Soil Morphometrics
EM	Electromagnetic
FAO	Food and Agriculture Organization of the United Nations (Az Egyesült Nemzetek Szervezetének Élelmezésügyi és Mezőgazdasági Világszervezete)
FCMC	Fuzzy C-means clustering
GPR	Ground Penetrating Radar
HICP	High Intensity Contact Probe
ICRAF	International Council for Research in Agroforestry (World Agroforestry Centre)
ISRIC	International Soil Reference and Information Centre (World Soil Information)
ISSS	International Soil Science Society (Nemzetközi Talajtani Társaság)
IUSS	International Union of Soil Science (Nemzetközi Talajtani Unió)
JRC	Joint Research Centre of European Commission
LDSF	Land Degradation Surveillance Framework
LUCAS	Land Use/Cover Area frame statistical Survey
MGI	Mezőgazdasági Gépesítési Központ
MIR	Middle-Infrared
MPSF	Mass preserving spline function
MSC	Multiplicative Scatter Correction
NAIK	Nemzeti Agrárkutató és Innovációs Központ
NIR	Near-Infrared
PCR	Principal Component Regression
PE	Partition coefficient (partíciós együttható)
PEnt	Partition Entropy (partíciós entrópia)
PLSR	Partial Least Squares Regression
RSG	Reference Soil Group
SEM	Scanning Electron Microscope

SNV	Standard Normal Variate
TOC	Total Organic Carbon
UNEP	United Nations Environment Programme
UNESCO	United Nations Educational, Scientific and Cultural Organization (Egyesült Nemzetek Nevelésügyi, Tudományos és Kulturális szervezete)
USDA	United States Department of Agriculture
VIS	Visible
WRB	World Reference Base
XBi	XieBeni index
XRD	X-ray diffraction
XRF	X-ray fluorescence