

## Estimation of Some Soil Properties Using Spectral Data Analysis (Vis-NIR) and Various Pre-Processing Methods

SAHAR TAGHDIS<sup>1</sup>, MOHAMMAD HADY FARPOOR<sup>1\*</sup>, MAJID FEKRI<sup>1</sup>, MAJID MAHMOODABADI<sup>1</sup>

1. Department of Soil Science, Faculty of Agriculture, Shahid Bahonar University of Kerman, Kerman, Iran.

(Received: March. 15, 2021- Revised: May. 1, 2021- Accepted: May. 10, 2021)

### ABSTRACT

Soil spectroscopy has overcome many limitations of conventional soil analysis methods due to its rapid, accurate, cost-effective, and non-destructive nature. This study was aimed to investigate the capability of soil spectral data in estimating some key soil properties and comparing different spectral preprocessing methods in determining the performance of the partial least squares regression (PLSR) model. For this purpose, 100 soil surface samples were collected from the study area which was located between Neyriz and Estahban regions in the east of Fars Province. The samples were analyzed for organic carbon (OC), electrical conductivity (EC), calcium carbonate equivalent (CaCO<sub>3</sub>) and gypsum using standard laboratory methods. Then, the spectral reflectance of the soil samples was recorded in the range of 350-2500 nm and various spectral pre-processing methods were applied to the data. Afterwards, the soil properties were estimated using PLSR. The results indicated the desirable capability of PLSR method in estimating the amount of gypsum (RPD >2, R<sup>2</sup> = 0.81, RMSE = 3.87) and its acceptable ability for OC, EC and CaCO<sub>3</sub> (2 < RPD < 1.4). Also, the best modeling systems for OC, gypsum and EC were obtained as the first derivative with Savitzky-Golay smoothing method (FD-SG), the standard normal variate method (SNV), and the second derivative with SG smoothing method (SD-SG), respectively. Besides, non-preprocessing data of soil CaCO<sub>3</sub> provided better estimations than various pre-processing methods. Overall, the results revealed that the visible spectrum range provided the best performance for estimating of OC and EC, and the NIR range for CaCO<sub>3</sub> and gypsum.

**Keywords:** Absorption Bands, Soil Spectral Behavior, Vis-NIR Spectroscopy, PLSR.

---

\* Corresponding Author's Email: [farpoor@uk.ac.ir](mailto:farpoor@uk.ac.ir)

## برآورد برخی خصوصیات خاک با استفاده از تحلیل داده‌های طیفی (Vis-NIR) و انواع روش‌های پیش‌پردازش

سحر طاقدیس<sup>۱</sup>، محمدهادی فرپور<sup>\*</sup>، مجید فکری<sup>۱</sup>، مجید محمودآبادی<sup>۱</sup>

۱. گروه علوم و مهندسی خاک، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شهید باهنر کرمان، کرمان، ایران.

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۲/۲۵ - تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۲/۱۱ - تاریخ تصویب: ۱۴۰۰/۲/۲۰)

### چکیده

طیف‌سنجی خاک به دلیل سرعت و دقت بالا، هزینه پایین و غیرمخرب بودن بر بسیاری از محدودیت‌های روش‌های سنتی تجزیه خاک غلبه کرده است. مطالعه حاضر با هدف امکان‌سنجی استفاده از اطلاعات طیفی خاک به منظور برآورد برخی از ویژگی‌های کلیدی خاک و مقایسه انواع روش‌های پیش‌پردازش طیفی در تعیین عملکرد مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLSR) انجام گردید. بدین منظور ۱۰۰ نمونه خاک سطحی از اراضی واقع در حدفاصل شهرستان‌های نی‌ریز تا استهبان در شرق استان فارس جمع‌آوری و مقادیر کربن آلی، قابلیت هدایت الکتریکی، کربنات کلسیم معادل و گچ با استفاده از روش‌های استاندارد آزمایشگاهی اندازه‌گیری گردید. سپس بازتاب طیفی نمونه‌های خاک در محدوده ۲۵۰۰-۳۵۰ نانومتر ثبت و روش‌های مختلف پیش‌پردازش طیفی بر روی داده‌ها اعمال گردید. در ادامه، برآورد خصوصیات خاک با استفاده از روش PLSR انجام شد. نتایج حاکی از توانایی مطلوب روش PLSR در تخمین میزان گچ ( $RPD > 2$ )،  $R^2 = 0/81$ ،  $RMSE = 3/87$  و توانایی قابل قبول آن برای سایر ویژگی‌ها نظیر کربنات کلسیم معادل، کربن آلی و قابلیت هدایت الکتریکی خاک ( $1/4 < RPD < 2$ ) بود. همچنین، نتایج نشان داد که روش پیش‌پردازش مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای، بهترین مدل‌سازی را برای کربن آلی، روش متغیر نرمال استاندارد (SNV) برای گچ و روش مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای برای قابلیت هدایت الکتریکی خاک ارائه کردند. از طرفی، برآورد کربنات کلسیم خاک با داده‌های بدون پیش‌پردازش، تخمین بهتری نسبت به استفاده از انواع روش‌های پیش‌پردازش ارائه داد. به‌طور کلی، نتایج نشان داد که محدوده طیف مرئی برای برآورد کربن آلی و قابلیت هدایت الکتریکی و محدوده مادون قرمز نزدیک برای کربنات کلسیم معادل و گچ کارایی بهتری ارائه دادند.

واژه‌های کلیدی: باندهای جذبی، رفتار طیفی خاک، طیف‌سنجی مرئی-مادون قرمز، PLSR.

### مقدمه

اندازه‌گیری مستقیم ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک، زمان‌بر و پر هزینه بوده و به دلیل تغییرپذیری زمانی و مکانی ویژگی‌های مذکور، نیاز به انجام مطالعات صحرایی و نمونه‌برداری مختلف می‌باشد. این موضوع باعث افزایش تلاش پژوهشگران علوم خاک برای یافتن روش‌هایی غیرمستقیم، کم‌هزینه و سریع گردیده و به‌عنوان یکی از اولویت‌های مهم پژوهشی در علوم خاک مطرح شده است. از این رو، در سال‌های اخیر، کاربرد تکنیک‌های نوین برای افزایش کارایی تجزیه و تحلیل رفتار و خصوصیات خاک و جایگزین نمودن آن‌ها با روش‌های دشوار و پرهزینه آزمایشگاهی افزایش یافته است (Stenberg et al., 2010). از دلایل عمده استفاده روزافزون از این تکنیک‌ها می‌توان به مراحل اندک آماده-سازی نمونه، عدم استفاده از مواد شیمیایی و اندازه‌گیری آسان در کمتر از چند دقیقه اشاره کرد (Kim et al., 2014). کاربرد روش طیف‌سنجی مرئی-مادون قرمز در علوم خاک به دو دهه اخیر برمی‌گردد. در این روش به‌عنوان یکی از روش‌های

خاک به‌عنوان یک منبع مهم طبیعی، نقش بسیار مهمی در تنظیم انواع اکوسیستم‌های موجود بر روی کره زمین ایفا می‌کند. خاک دارای محیطی بسیار ناهمگن و در عین حال پویا بوده و مکانیسم‌های پیچیده بسیاری، اعم از انواع واکنش‌های شیمیایی و بیولوژیکی و فرآیندهای مختلف فیزیکی به‌طور هم‌زمان در آن در حال رخ دادن است. نوع، سرعت و نحوه انجام فرآیندهای مذکور در خاک باعث بروز ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی مختلفی در آن می‌گردد. به‌عبارت دیگر، رفتار خاک در زمان‌های مختلف تابع فرآیندهای مختلفی است که در طول زمان تشکیل خاک در آن به وقوع می‌پیوندد. مطالعه دقیق خاک و اجزای تشکیل‌دهنده آن به‌عنوان یک راه حل کلیدی در راستای افزایش پتانسیل تولید و نیل به توسعه پایدار مطرح است. این موضوع با جمع‌آوری اطلاعات، مدل‌سازی و مدیریت مکانی خاک قابل انجام است (Summers et al., 2011).

کلسیم در خاک را اثبات نموده‌اند (Viscarra Rossel *et al.*, 2009). کانی‌های کربناته به دلیل وجود یون کربنات ( $\text{CO}_3^{2-}$ ) اغلب دارای مشخصه جذب قوی در محدوده ۲۳۴۰ نانومتر و به نسبت ضعیف‌تر در محدوده ۱۸۶۰، ۱۹۹۰ و ۲۱۴۰ نانومتر می‌باشند (Stenberg *et al.*, 2010). Hassani *et al.* (2014) در مطالعه‌ای بر روی خاک‌های گچی-آهکی، برخی از ویژگی‌های خاک را با استفاده از تکنیک طیف‌سنجی و استفاده از مدل‌های PLSR و درخت رگرسیونی<sup>۲</sup> (BRT) پیش‌بینی کرده و نتایج قابل قبولی برای گچ ( $R^2 = 0.79$ )، کربنات کلسیم معادل ( $R^2 = 0.71$ ) و ماده آلی ( $R^2 = 0.79$ ) گزارش کردند. Khayamim *et al.* (2015a) قابلیت روش طیف‌سنجی را برای برآورد برخی از خصوصیات شیمیایی خاک‌های استان اصفهان از جمله گچ کاملاً مناسب، مواد آلی قابل قبول و برای کربنات‌ها ضعیف گزارش کردند. Rasooli *et al.* (2018) نیز با استفاده از روش‌های پیش‌پردازش مختلف و مدل PLSR برخی خصوصیات خاک را در منطقه بردسیر استان کرمان برآورد و پیش‌بینی مدل را براساس مقادیر شاخص انحراف نسبی<sup>۳</sup> (RPD) برای شن و سیلت، کاملاً مناسب و برای کربنات‌ها و کربن آلی، قابل قبول عنوان کردند. Shahravini *et al.* (2020) در مطالعه‌ای بر روی خاک‌های دشت دویراج در غرب ایران، توانایی قابل قبول تکنیک طیف‌سنجی در پیش‌بینی مقدار کربن آلی، قابلیت هدایت الکتریکی و بافت خاک را با استفاده از مدل‌های مختلف PLSR، آنالیز مولفه اصلی<sup>۴</sup> (PCR)، رگرسیون بردار پشتیبان<sup>۵</sup> (SVR) و جنگل تصادفی<sup>۶</sup> (RF) گزارش کردند.

در دهه‌های اخیر، تخمین کربن آلی خاک با توجه به نقش کلیدی آن در ارزیابی کیفیت و حاصلخیزی خاک و نیز تعدیل گرمایش جهانی مورد توجه قرار گرفته است (Xie and Li, 2016). مشخصه‌های جذبی کربن آلی به دلیل حرکات کششی و خمشی گروه‌های عامل C-H، N-H و O-H عمدتاً در محدوده مرئی و مادون قرمز میانی (mid-IR و Vis-IR) بروز پیدا می‌کنند. کربن آلی در محدوده ۱۱۰۰، ۱۶۰۰، ۱۷۰۰ تا ۱۸۰۰، ۲۰۰۰ و ۲۳۰۰ نانومتر مشخصه‌های جذب قوی نشان می‌دهد که بسته به نوع و میزان تجزیه ماده آلی متغیر است (Ben-Dor *et al.*, 1997; Stenberg, 2010).

همان‌گونه که اشاره شد، تکنیک طیف‌سنجی به‌عنوان یک روش جایگزین برای برخی از تجزیه‌های خاکی، بر بسیاری از محدودیت‌های روش‌های سنتی غلبه کرده و با توجه به سرعت و

سنجش از نزدیک، انرژی الکترومغناطیس گسیل‌شده از یک منبع نور به پدیده برخورد نموده، بخشی از آن منعکس، بخشی جذب و بخش دیگر عبور داده می‌شود. با استفاده از این روش، اطلاعات مربوط به خاک بدون هیچ تماسی ارزیابی می‌گردد (Farifteh *et al.*, 2006). تکنیک طیف‌سنجی با توجه به منحنی‌های بازتاب پدیده‌ها به بررسی اطلاعات ترکیبی و ساختاری ملکول‌ها در محدوده طول موج مرئی (۷۰۰ - ۳۵۰ نانومتر) و مادون قرمز (۲۵۰۰ - ۷۰۰ نانومتر) می‌پردازد؛ زیرا فرکانس‌های پایه‌ای ملکولی مرتبط با اجزای خاک بیشتر در این محدوده واقع گردیده‌اند (Stenberg *et al.*, 2010).

داده‌های طیف‌سنجی علاوه بر حجم بالا، دارای اثر همپوشانی عوامل مختلف در هر طول موج و اطلاعات تکراری در طول موج‌های مجاور هستند و بنابراین همه داده‌ها حاوی اطلاعات جدید از متغیر مورد نظر نمی‌باشند (Yao *et al.*, 2015). از این رو، استفاده از روش‌های فشرده‌سازی برای استخراج اطلاعات از این داده‌ها رایج است. یکی از معمول‌ترین و بهترین روش‌های آماری چند متغیره موجود در این زمینه، رگرسیون حداقل مربعات جزئی<sup>۱</sup> می‌باشد که از داده‌های طیفی در تمامی طول موج‌ها استفاده نموده و با فشرده‌سازی آن‌ها در تعداد فاکتور کمتر و ایجاد یک مدل رگرسیون خطی، ویژگی مورد نظر خاک (مانند کربنات کلسیم معادل، کربن آلی، گچ، بافت خاک و غیره) را تخمین می‌زند. PLSR از طریق یک رابطه خطی چند متغیره، ارتباطی بین دو ماتریس X و Y ایجاد می‌نماید. این مدل اولین بار توسط Wold *et al.* (2001) معرفی و به‌طور گسترده‌ای در آنالیز داده‌ها مورد استفاده قرار گرفت. از مزایای PLSR تعیین مؤثرترین و یا حساس‌ترین طول موج‌ها نسبت به تغییرات متغیر Y براساس تعیین مؤلفه‌های اصلی انتخاب‌شده از متغیر X (Nawar *et al.*, 2016) و همچنین کارایی زیاد آن در صورت کم بودن تعداد نمونه‌ها می‌باشد (Yitagesu *et al.*, 2012).

در خاک‌های مناطق خشک و نیمه‌خشک که بخش قابل توجهی از خاک‌های ایران را به خود اختصاص داده‌اند، کربنات‌ها، گچ و املاح محلول به‌عنوان اجزای مهم و تأثیرگذار بر ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی خاک و به تبع آن، باروری و بهره‌وری خاک به‌شمار می‌روند (Mohamed *et al.*, 2018). محدوده مرئی و ماورای بنفش طیف الکترومغناطیس خورشیدی، حاوی اطلاعات مهمی از کربنات‌های خاک می‌باشد (Islam *et al.*, 2003). مطالعات متعددی قابلیت بالای طیف‌سنجی در برآورد کربنات

4 Principle Component Regression

5 Support Vector Regression

6 Random Forest

1 Partial Least Square Regression; PLSR

2 Boosted Regression Trees

3 Residual Predictive Deviation

دقت بالا، هزینه پایین، عدم استفاده از مواد شیمیایی و غیرمخرب بودن از مقبولیت بالایی برخوردار است (McBratney *et al.*, 2006). پیش‌بینی خصوصیات مبنایی خاک که تاثیر مهمی بر روی کشاورزی و مدیریت اراضی دارند و نیازمند تجزیه و تحلیل تعداد نمونه‌های بیشتری از خاک هستند، ضرورت کاربرد روش‌های نوین جهت تسهیل و دستیابی به مجموعه داده‌ها را بیشتر می‌نماید. انتظار می‌رود ارائه مدل‌های پیش‌بینی‌کننده ویژگی‌های خاک با استفاده از تکنیک طیف‌سنجی برای نیل به این هدف مناسب باشد. علاوه بر آن، دستیابی به واسنجی رضایت‌بخش با ابزار و روش‌های مقرون به صرفه، سهولت برآورد خصوصیات خاک را به دنبال دارد. با این حال، به دلیل نوظهور بودن تکنیک مذکور، مطالعات موجود در زمینه برآورد ویژگی‌های خاک‌های ایران و همچنین تاثیر مقادیر فراوان کربنات، گچ و نمک در خاک‌های مناطق خشک و نیمه‌خشک بر روی داده‌های طیفی، انگشت‌شمار بوده و پژوهش و بررسی در این زمینه در راستای مشخص نمودن نقاط قوت و ضعف روش مذکور در شرایط مختلف خاکی ضروری به نظر می‌رسد. در پژوهش حاضر، توانایی تکنیک طیف‌سنجی مرئی-مادون قرمز در برآورد برخی از خصوصیات خاک نظیر کربنات کلسیم معادل، گچ، قابلیت هدایت الکتریکی و کربن آلی مورد ارزیابی قرار گرفته و تاثیر روش‌های مختلف پیش‌پردازش طیفی بر دقت مدل‌سازی به روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLSR) مورد مقایسه قرار گرفته است.

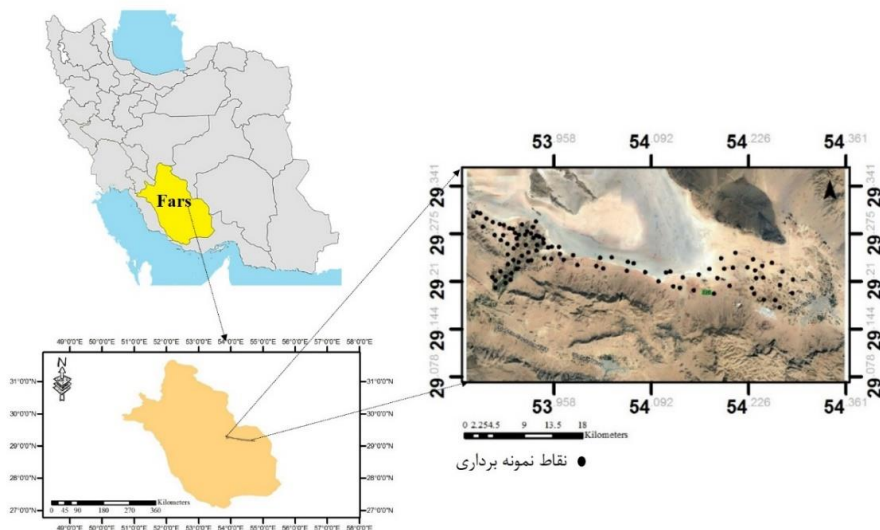
شکل (۱) موقعیت جغرافیایی منطقه مورد مطالعه و نقاط نمونه‌برداری را نمایش می‌دهد. تعیین نقاط نمونه‌برداری به صورت تصادفی انجام شد که در نتیجه این عمل دامنه تغییرات ویژگی‌های خاک بیشتر و کل منطقه پوشش داده شد. همچنین نمونه‌برداری خاک به روش مرکب حاصل از ۵ نمونه (رئوس و مرکز مربعی به ابعاد ۱۰ در ۱۰ متر) از عمق ۲۰-۰ سانتی‌متری انجام و در مجموع تعداد ۱۰۰ نمونه خاک در سال ۹۷ از منطقه مورد مطالعه برداشت گردید. نمونه‌های خاک پس از هوا خشک شدن، کوبیده و از الک دو میلی‌متری عبور داده شدند. قابلیت هدایت الکتریکی خاک (EC) و واکنش خاک (pH) به ترتیب در عصاره و گل اشباع توسط دستگاه هدایت‌سنج الکتریکی و pH متر مدل Jenway، درصد کربنات کلسیم معادل به روش تیتراسیون برگشتی با اسید کلریدریک (Page *et al.*, 1982)، کربن آلی به روش اکسیداسیون تر (Walkley and Black, 1934)، گچ به روش استون (Nelson, 1982) و بافت خاک به روش پیپت (Gee and Bauder, 1986) اندازه‌گیری شد.

شکل (۱) موقعیت منطقه مورد مطالعه در استان فارس به همراه تصویر گوگل ارث محل دقیق نقاط نمونه‌برداری

## مواد و روش‌ها

### نمونه‌برداری و آنالیز خاک

منطقه مورد مطالعه در حدفاصل شهرستان‌های نی‌ریز تا استهبان در شرق استان فارس با عرض‌های جغرافیایی (۱۲' تا ۲۹' ۱۹)

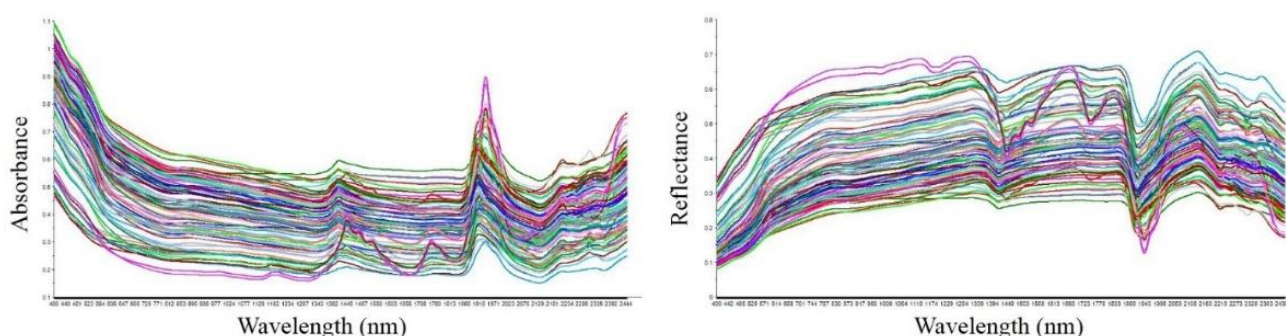


شکل ۱- موقعیت منطقه مورد مطالعه در استان فارس به همراه تصویر گوگل ارث محل دقیق نقاط نمونه‌برداری

## آنالیز طیفی خاک

بازتاب طیفی نمونه‌های خاک با استفاده از دستگاه اسپکترومتر زمینی (FieldSpec@3, ASD, FR, USA) گروه علوم خاک دانشگاه تربیت مدرس تهران با دامنه طیفی کامل (۲۵۰۰ - ۳۵۰۰ نانومتر) با روش پروب تماسی<sup>۱</sup> و در اتاق تاریک به منظور جلوگیری از ورود هرگونه نور و بازتاب اضافی انجام شد. بدین منظور ۲۰ گرم از هر نمونه خاک هوا خشک شده با اندازه کوچکتر از دو میلی‌متر در پتری‌دیش مشکی قرار داده شد و مورد

آنالیز قرار گرفت. برای هر نمونه خاک، پنج تکرار انجام شد و در مجموع ۵۰۰ منحنی طیفی ثبت گردید. سپس با استفاده از نرم-افزار View Spec Pro Version 6.0 یک میانگین از منحنی‌های طیفی برای هر نمونه خاک محاسبه شد. هر منحنی طیفی ثبت شده دارای تفکیک طیفی یک نانومتر بود؛ به گونه‌ای که در گستره ۲۵۰۰-۳۵۰۰ نانومتر هر منحنی شامل ۲۱۵۱ بازتاب طیفی می-باشد. شکل (۲) منحنی‌های خام طیفی ثبت شده از نمونه‌های خاکی در دو حالت بازتاب و جذب را نشان می‌دهد.



شکل ۲- منحنی‌های خام بازتاب و جذب طیفی در خاک‌های مورد مطالعه

## پیش‌پردازش داده‌ها

پیش‌پردازش داده‌های طیفی نقش مؤثری در بهبود واسنجی دارد (Gomez *et al.*, 2008). هدف از پیش‌پردازش داده‌های طیفی، حذف و به حداقل رساندن خطاها یا نوفه‌ها و سایر عوامل ناخواسته و استفاده کارآمد از داده‌ها طی فرآیند تخمین است. تکنیک‌های پیش‌پردازش طیفی شامل روش‌های مختلف ریاضی هستند که برای اصلاح پراش نور در اندازه‌گیری‌های بازتابشی و بهبود کیفیت اطلاعات پیش از استفاده از آن‌ها در مدل‌های پیش‌بینی کننده بر داده‌های طیفی خاک اعمال می‌شوند (Gomez and Coulouma, 2018). بدین منظور، ابتدا دو بخش ابتدایی و انتهایی طیف‌ها در محدوده ۲۴۵۰-۲۵۰۰ و ۳۵۰۰-۴۰۰ نانومتر که دارای آشفتگی نوفه‌ای زیاد بودند حذف گردید (Gomez *et al.*, 2008) سپس با استفاده از رابطه زیر، مقادیر انعکاس به جذب تبدیل شد:

$$A = \log(1/R) \quad (\text{رابطه ۱})$$

که R درصد بازتاب و A جذب ظاهری است.

نرمال بودن خصوصیات مورد مطالعه با کمک آزمون آماری کولموگروف-اسمیرنوف<sup>۲</sup> و مقادیر چولگی بررسی و داده‌های غیرنرمال با استفاده از تبدیل لگاریتمی مناسب (تابع لگاریتم نپیر<sup>۳</sup>)

نرمال شدند. توصیف آماری، بررسی نرمالیت و تعیین ضریب همبستگی داده‌ها با استفاده از نرم‌افزار SPSS 16.0 انجام پذیرفت. با توجه به کمی بودن داده‌ها و نرمال بودن آنها، از آزمون ضریب همبستگی پیرسون استفاده گردید. در این پژوهش از روش‌های پیش‌پردازش مختلف از جمله مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلائی<sup>۴</sup>، مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلائی، متغیر نرمال استاندارد<sup>۵</sup> (SNV) و تصحیح پخشیده چندگانه<sup>۶</sup> (MSC) بر روی داده‌های طیفی استفاده و مدل‌سازی با کمک نرم‌افزار The Unscrambler X 10.4 انجام گردید (Rinnan *et al.*, 2009).

## مدل‌سازی داده‌ها

به منظور برآورد خصوصیات خاک از روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLSR) استفاده شد. یکی از بهترین دلایل استفاده از این روش، عدم وابستگی آن به فرض نرمال بودن جامعه، حجم نمونه و کارایی مناسب آن برای نمونه‌های کم حجم و یا غیرنرمال می‌باشد. در این پژوهش، به دلیل پایین بودن تعداد نمونه‌های خاک، از روش اعتبارسنجی متقابل<sup>۷</sup> به منظور واسنجی

5 Standard Normal Variate  
6 Multiplicative Scatter Correction  
7 Leave One-out Cross Validation

1 Contact Probe  
2 Kolmogorov-Smirnov Test  
3 Ln  
4 Savitzky - Golay

می‌شود، میانگین قابلیت هدایت الکتریکی در خاک‌های مورد مطالعه ۴۴/۹ دسی‌زیمنس بر متر بوده و بیشترین ضریب تغییرات (۲۱۶٪) را به خود اختصاص داده است. همچنین، مقادیر گچ در منطقه مورد مطالعه از صفر تا ۳۵ درصد متغیر بوده و پس از قابلیت هدایت الکتریکی، بیشترین میزان ضریب تغییرات در میان متغیرهای مطالعه را دارد. این موضوع حاکی از توزیع غیریکنواخت گچ و املاح محلول در منطقه مورد مطالعه می‌باشد. مهم‌ترین شکل اراضی مشاهده شده در منطقه شامل دشت آبرفتی، دشت سیلابی و اراضی پست (حاشیه دریاچه شور و سدیمی بختگان) می‌باشند، لذا با پیشروی به سمت اراضی پست به دلایل مختلف از جمله رواناب، شرایط زهکشی و تبخیر شاهد انتقال ذرات خاک به همراه نمک‌های محلول به این مناطق بوده و مقدار نمک در اراضی پست و گچ ثانویه در دشت سیلابی (وجود رسوبات تبخیری گچ) به مقدار قابل توجهی افزایش یافته‌است. مقدار کربنات - کلسیم معادل در منطقه مورد مطالعه نسبتاً بالا بوده و دارای مقدار میانگین ۳۶/۳٪ با ضریب تغییرات ۳۰٪ می‌باشد. این موضوع را می‌توان به نوع مواد مادری غالب در منطقه مورد مطالعه که عمدتاً از نوع آهکی بوده و شامل سنگ‌آهک، مارن، ماسه‌سنگ و کنگلومرا می‌باشد، نسبت داد که از این لحاظ تمامی خاک‌های منطقه مورد مطالعه را تحت تأثیر قرار داده است. مقادیر کربن آلی در خاک‌های مورد مطالعه با ضریب تغییرات ۵۳٪ در محدوده صفر تا ۲/۲۶٪ متغیر می‌باشد. همچنین بافت خاک در منطقه از رسی تا لوم‌شنی متغیر می‌باشد. با توجه به گستره نسبتاً وسیع ویژگی‌های مورد مطالعه، انتظار می‌رود نتایج به‌دست آمده از اعتبار بیشتری برای استفاده در دیگر انواع خاک‌ها برخوردار باشند.

و اعتبارسنجی استفاده شد (Williams et al., 2017). مدل‌های آماری PLSR استفاده شده در این پژوهش، با پارامترهای ضریب تبیین ( $R^2$ )، جذر حداقل مربعات خطا<sup>۱</sup> (RMSE) و شاخص انحراف نسبی (RPD) که نسبت انحراف معیار مقادیر اندازه‌گیری شده (SD) به حداقل مربعات خطای مدل می‌باشد، ارزیابی و با روابط زیر تعیین گردیدند (Chang et al., 2001).

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} \quad (\text{رابطه ۲})$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2}{n}} \quad (\text{رابطه ۳})$$

$$RPD = \frac{SD}{RMSE} \quad (\text{رابطه ۴})$$

که در روابط بالا،  $Y$ ،  $\hat{Y}$  و  $\bar{Y}$  به ترتیب، مقادیر اندازه‌گیری شده، مقادیر پیش‌بینی شده و میانگین مقادیر اندازه‌گیری شده،  $n$  تعداد نمونه خاک و SD انحراف استاندارد می‌باشند.

لازم به ذکر است که برای تعیین عملکرد مدل از آماره RPD استفاده گردید. بر این اساس، چنانچه مقدار RPD بیش از ۲ باشد پیش‌بینی مدل کاملاً مناسب، اگر مقدار RPD بین ۱/۴ تا ۲ باشد پیش‌بینی قابل قبول و در صورتی که کمتر از ۱/۴ باشد پیش‌بینی‌های ارائه شده به وسیله مدل ضعیف است (Chang et al., 2001).

در نهایت به منظور معرفی طول موج‌های بهینه، ابتدا داده‌ها نرمال شدند و برای تعیین طول موج‌های مهم از روش آزمون عدم قطعیت مارتنز<sup>۲</sup> استفاده شد.

## نتایج و بحث

### توصیف آماری

توصیف آماری برخی از ویژگی‌های شیمیایی خاک‌های مورد مطالعه در جدول (۱) ارائه گردیده است. همان‌گونه که مشاهده

جدول ۱- توصیف آماری ویژگی‌های مورد مطالعه خاک

ویژگی خاک	میانگین	حداقل	حداکثر	چولگی	کشیدگی	انحراف استاندارد	%CV
کربنات‌ها (%)	۳۶/۳	۷	۷۸	۰/۳	۲/۱۵	۱۱/۱۲	۳۰
کربن آلی (%)	۰/۸۶	۰	۲/۲۶	۰/۴۵	۰/۰۸	۰/۴۶	۵۳
گچ (%)	۴/۷	۰	۳۵	۱/۹۴	۲/۶۳	۸/۹	۱۹۰
EC (dS m <sup>-1</sup> )	۴۴/۹	۰/۴۶	۵۳۰	۳/۶۶	۱۳/۵۹	۹۷/۲	۲۱۶
pH	۷/۵	۶/۵	۸/۳	-۰/۴	۰/۳۶	۰/۳	۴
شن (%)	۲۴/۹۴	۱/۶	۶۷/۶	۰/۸۶	۰/۳۸	۱۳/۹	۵۵
سیلت (%)	۵۲	۲۱/۶	۷۱/۲	-۰/۵۳	۰/۲۵	۱۰/۵	۲۰
رس (%)	۲۲/۹	۶/۸	۶۷/۲	۱/۱	۱/۳	۱۲/۲	۵۳

مربوطه به صورت شماتیک در شکل (۳) نمایش داده شده است. همان‌گونه که در جدول (۲) مشاهده می‌شود، همبستگی منفی و معنی‌داری بین گچ و کربنات کلسیم معادل ( $r = -۰/۳۵$ ) و

برای درک بهتر ارتباط میان متغیرهای مورد مطالعه، ضرایب همبستگی آنها محاسبه و در جدول (۲) ارائه گردیده است. علاوه بر آن، همبستگی میان خصوصیات خاک و طیف جذبی

افزایش میزان کربن آلی است. میزان همبستگی گچ از ۰/۴۵ تا ۰/۶۵- در طول موج‌های مختلف متفاوت بوده و بیشترین میزان همبستگی مثبت گچ با طیف جذبی در محدوده ۱۹۰۰ نانومتر مشاهده گردید. در این محدوده، با افزایش مقدار گچ، میزان جذب به‌طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. همبستگی قابلیت هدایت الکتریکی با طیف جذبی در همه طول موج‌ها منفی بود. بدین صورت که با افزایش EC میزان جذب کاهش و بازتاب طیفی افزایش یافت. بیشترین همبستگی منفی EC با طیف جذبی در محدوده مرئی مشاهده شد. (Summers *et al.*, 2011) ( $r = -0/5$ )  
 بیشترین همبستگی EC با طیف مرئی- مادون قرمز را در طول موج‌های ۴۵۶، ۹۸۴ و ۱۰۱۴ نانومتر و برای  $\text{CaCO}_3$  در طول موج‌های ۸۰۰، ۱۲۰۰ و ۱۶۰۰ نانومتر گزارش کردند. به دلیل تفاوت در بازتاب‌های مختلف و شرایط متفاوت خاک، طول موج و پیک‌های خاک‌های مختلف ممکن است مشابه نباشد (Pinheiro *et al.*, 2017).

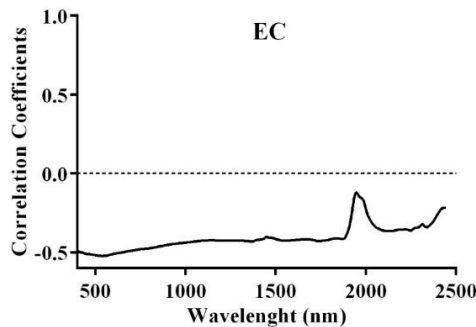
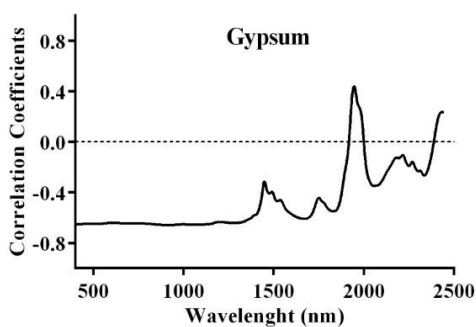
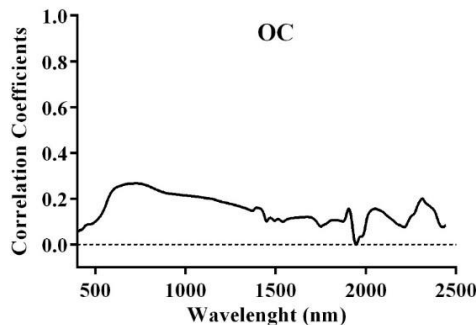
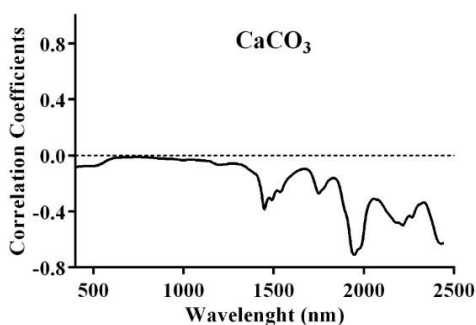
همبستگی مثبت و معنی‌داری میان EC و گچ ( $r = 0/27$ ) مشاهده می‌شود. با این حال، در مورد سایر متغیرهای مورد مطالعه همبستگی معنی‌داری مشاهده نگردید.

جدول ۲- ضرایب همبستگی پیرسون بین متغیرهای مورد مطالعه

Ln EC	Gypsum	OC	$\text{CaCO}_3$
		۱	$\text{CaCO}_3$
		۰/۱۷	OC
۱	-۰/۰۲	-۰/۳۵**	Gypsum
۱	۰/۲۷**	-۰/۰۱	Ln EC

\*\* و \* به ترتیب در سطح  $<0/01$  و  $<0/05$  معنادار می‌باشد.

ضرایب همبستگی بین متغیرهای خاک و طیف جذبی، نشان‌دهنده وجود همبستگی‌های مثبت و منفی در طول موج‌های مختلف طیفی می‌باشد (شکل ۳). بیشترین میزان همبستگی کربنات کلسیم معادل ( $r = -0/7$ ) در طول موج ۱۹۵۰ نانومتر و بیشترین میزان همبستگی کربن آلی در محدوده مرئی ( $r = 0/27$ ) مشاهده گردید که نشان‌دهنده افزایش مقدار جذب در اثر



شکل ۳- ضرایب همبستگی میان ویژگی‌های خاک و میانگین طیف جذبی در هر طول موج

(1992). به‌طور کلی، تفاوت‌های طیفی از طریق شکل کلی منحنی‌های طیفی، شدت بازتاب، باندهای جذبی و زاویه جهت روند آنها قابل تشخیص هستند (Demattê, 2002). همان‌گونه که در طیف‌های به‌دست آمده مشخص است، در تمامی آنها سه مشخصه جذبی برجسته در طول موج‌های ۱۴۰۰، ۱۹۰۰ و ۲۲۰۰ نانومتر با شدت و ضعف متفاوت مشاهده می‌گردد. مشخصه‌های

### ویژگی‌های طیفی خاک

شکل (۴) طیف جذبی محدوده مرئی - مادون قرمز نزدیک را در هشت نمونه از خاک‌های مورد مطالعه نشان می‌دهد که دارای مقادیر متفاوتی از کربنات کلسیم معادل، گچ، کربن آلی و نمک بودند. ویژگی‌های جذبی در خاک نتیجه هم‌پوشانی باندهای اجزای مختلف معدنی و ماده آلی خاک است (Henderson *et al.*,

بر روی بلورهای نمک و در ۱۹۵۰ به دلیل حرکات کششی H-O- H ملکول‌های آب به دام افتاده در ساختار بلورهای نمک باشد. Seifi *et al.* (2020) در مطالعه‌ای بر روی خاک‌های شور، دو محدوده ۵۵۰ و ۷۵۰ نانومتر و برخی از باندهای جذبی در محدوده ۱۴۰۰، ۱۹۰۰، ۲۲۰۰ و ۲۳۵۰ نانومتر را برای تشخیص نمک‌های موجود در خاک گزارش و بیان نمودند که با افزایش کلاس شوری خاک، میزان بازتاب طیفی در محدوده Vis-NIR افزایش می‌یابد. Wang *et al.* (2018) نیز گزارش کردند که خاک‌های شور به دلیل وجود پوسته سطحی نرم‌تر، میزان بازتاب زیادی در محدوده Vis-NIR دارند.

طیف‌های شماره ۲، ۳ و ۷ موجود در شکل (۴) حاوی بیشترین مقادیر کربن آلی می‌باشند. در حالی که طیف جذبی مربوط به کربن آلی در Vis-NIR در اغلب اوقات ضعیف بوده و به راحتی قابل تشخیص نیست به طوری که ویژگی جذبی این ترکیبات در محدوده مرئی به صورت یک پیک پهن و قابل تشخیص نمایان می‌گردد. به همین دلیل، مطالعات بسیاری تشخیص بهتر ماده آلی خاک را براساس طیف Vis-NIR نسبت به محدوده NIR به تنهایی ارائه نموده‌اند (Rossel *et al.*, 2006). یکی از راه‌های تشخیص بهتر ماده آلی خاک به استفاده از رنگ خاک نسبت داده می‌شود. در حالی که سایر خصوصیات خاک از جمله بافت، ساختمان، رطوبت و کانی‌شناسی می‌توانند بر این مهم تأثیرگذار باشند (Hummel *et al.*, 2001).

در محدوده مرئی، باندهای جذبی مهم در برآورد کربن آلی در محدوده ۴۱۰، ۵۷۰، ۶۶۰ نانومتر وجود دارند (Rossel *et al.*, 2006). در محدوده ۱۳۰۰-۵۰۰ نانومتر تقریباً بیشتر در طیف بازتابی (جذب بیشتر) نشان‌دهنده ماده آلی بیشتر خاک و تحذب بیشتر طیف بازتابی (جذب کمتر) حاکی از کمتر بودن مقادیر آن‌ها می‌باشد (Rossel *et al.*, 2006). پژوهشگران مختلف طول موج‌های حساس به حضور ماده آلی را به صورت باندهای جذبی در محدوده ۹۶۰، ۱۱۰۰ (Daniel *et al.*, 2004)، ۱۴۰۰، ۱۹۰۰، ۱۷۲۰، ۲۱۸۰ و ۲۳۰۹ نانومتر (Hummel *et al.*, 2001) و ۱۷۴۴، ۱۸۷۰ و ۲۰۵۲ نانومتر (Stenberg *et al.*, 2010) گزارش کرده‌اند. لازم به ذکر است که عمده مطالعات انجام‌شده در راستای تشخیص اجزای آلی خاک در مناطق با مقدار کربن آلی زیاد و دخالت کم سایر اجزای خاک صورت پذیرفته و در خاک‌های مناطق خشک و نیمه‌خشک وجود مقادیر کم کربن آلی و مقادیر متفاوتی از کربنات‌ها و گچ و نمک رفتار طیفی خاک را تحت تأثیر قرار داده و تشخیص آنها را با محدودیت مواجه می‌سازد.

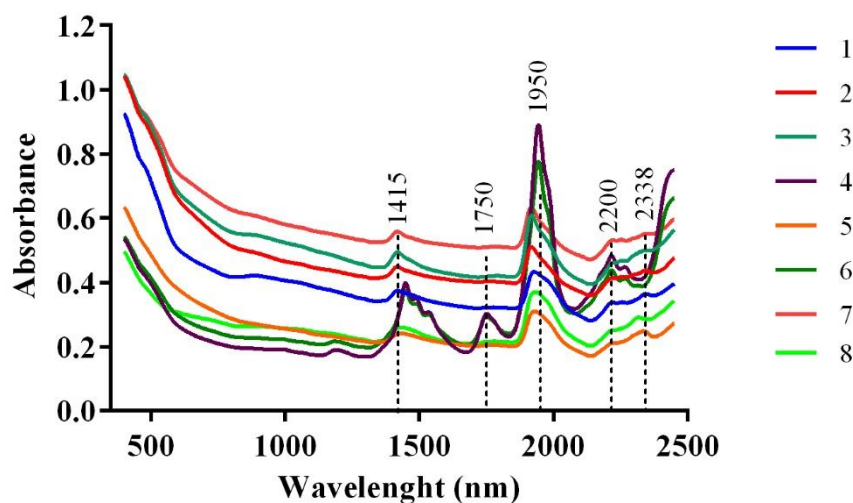
جذبی در طول موج‌های ۱۴۰۰ و ۱۹۰۰ نانومتر مربوط به گروه OH و ارتعاشات ملکول‌های آب شامل کشش متقارن و نامتقارن پیوند OH و خمش گروه OH می‌باشد. ویژگی جذبی در ۲۲۰۰ نانومتر نشانگر پاسخ طیفی کانی‌های رسی در نتیجه ارتعاش مولکول‌های آب ساختمانی، گروه‌های هیدروکسیل، سیلیکات‌های ساختمانی و کاتیون‌های اکتاهدرال، تتراهدرال و بین‌لایه‌ای است. در این باند جذبی، ویژگی‌های جذبی رس با پیوندهای گروه‌های عامل OH با فلزات آهن، آلومینیوم و منیزیم در شبکه کانی‌های رس مرتبط می‌باشد (Demattê, 2002).

ویژگی جذبی در طول موج ۲۳۳۸ نانومتر به حضور کربنات‌ها مرتبط می‌باشد که طیف شماره ۵ در شکل (۴) حاوی بیشترین مقادیر کربنات (۰.۷۸٪) است و به وضوح قابل مشاهده است. تمامی خاک‌های مورد مطالعه متأثر از مقادیر متفاوتی از کربنات‌ها می‌باشند؛ به طوری که در این طول موج، با افزایش درصد کربنات‌ها میزان جذب افزایش می‌یابد و با کاهش تقعر، یک پیک پهن در این منطقه ایجاد می‌کند. همچنین ویژگی‌های مشخصه مختلفی در محدوده طول موج‌های مادون قرمز نزدیک- مرئی (Vis-NIR) در طیف بازتابی  $\text{CaCO}_3$  وجود دارد که در اثر ارتعاشات بنیادی داخلی و ارتعاشات شبکه‌ای رادیکال کربنات ایجاد می‌شود (Viscarra Rossel *et al.*, 2009).

طیف‌های شماره ۴ و ۶ موجود در شکل (۴) به ترتیب دارای مقادیر ۲۸ و ۳۲ درصد گچ می‌باشند. ویژگی‌های جذبی گچ در ۱۰۰۰، ۱۲۰۰، ۱۴۰۰، ۱۶۰۰، ۱۷۴۰، ۱۹۰۰ و ۲۲۰۰ نانومتر به علت کشش یون هیدروکسیل و ارتعاشات خمشی مولکول آب رخ می‌دهد (Hunt and Salisbury, 1971). به نظر می‌رسد که حضور دو ملکول آب در ساختار کانی گچ ( $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ )، در جذب طیف نوری، به خصوص در محدوده ۱۴۰۰ و ۱۹۰۰ نانومتر مؤثر باشد زیرا این محدوده مربوط به جذب آب بوده و در خاک-های گچی علاوه بر رطوبت سطحی موجود در سطح خاک، آب موجود در ساختار کانی گچ باعث کاهش بازتاب و افزایش جذب نور می‌گردد (Hassani *et al.*, 2014). همچنین، حضور مقادیر فراوان گچ در برخی از نمونه‌های خاک باعث انحراف موقعیت جذبی از حالت متعارف در محدوده مورد نظر گردیده است.

طیف‌های شماره ۱ و ۸ موجود در شکل (۴) مربوط به خاک‌های با کلاس شوری زیاد می‌باشند. در خاک‌های شور، بلورهای سفیدرنگ نمک معمولاً در سطح خاک تجمع یافته و منجر به افزایش بازتاب طیفی خاک می‌گردند. مشاهده ویژگی جذبی در محدوده ۱۶۰۰ نانومتر می‌تواند به دلیل آب جذب شده





شکل ۴- منحنی‌های جذب طیفی در محدوده مرئی-مادون قرمز در ۸ نمونه خاک

### پیش‌بینی ویژگی‌های خاک

جدول (۳) مقادیر حاصل از برآورد خصوصیات خاک با استفاده از نرم‌افزار The Unscrambler X 10.4 کاربرد مدل حداقل رگرسیون مربعات جزئی (PLSR) به همراه شاخص‌های  $R^2$ ، RMSE و RPD در حالت واسنجی و اعتبارسنجی را نشان می‌دهد. بهترین مدل PLSR برآزش داده شده میان ویژگی‌های خاک و طیف بازتابی با استفاده از روش‌های مختلف پیش‌پردازش با توجه به بیشترین مقدار ضریب تبیین، کمترین مقدار RMSE و آماره RPD انتخاب و به‌طور خلاصه ارائه گردید. به‌منظور تعیین عملکرد مدل با استفاده از آماره RPD می‌توان عملکرد را برای پیش‌بینی گچ کاملاً مناسب ( $RPD > 2$ ) و برای کربنات، کربن آلی و EC قابل قبول ( $2 < RPD < 1/4$ ) عنوان کرد (جدول ۳). پژوهش‌های مختلف نشان داده‌اند که آن دسته از ویژگی‌های

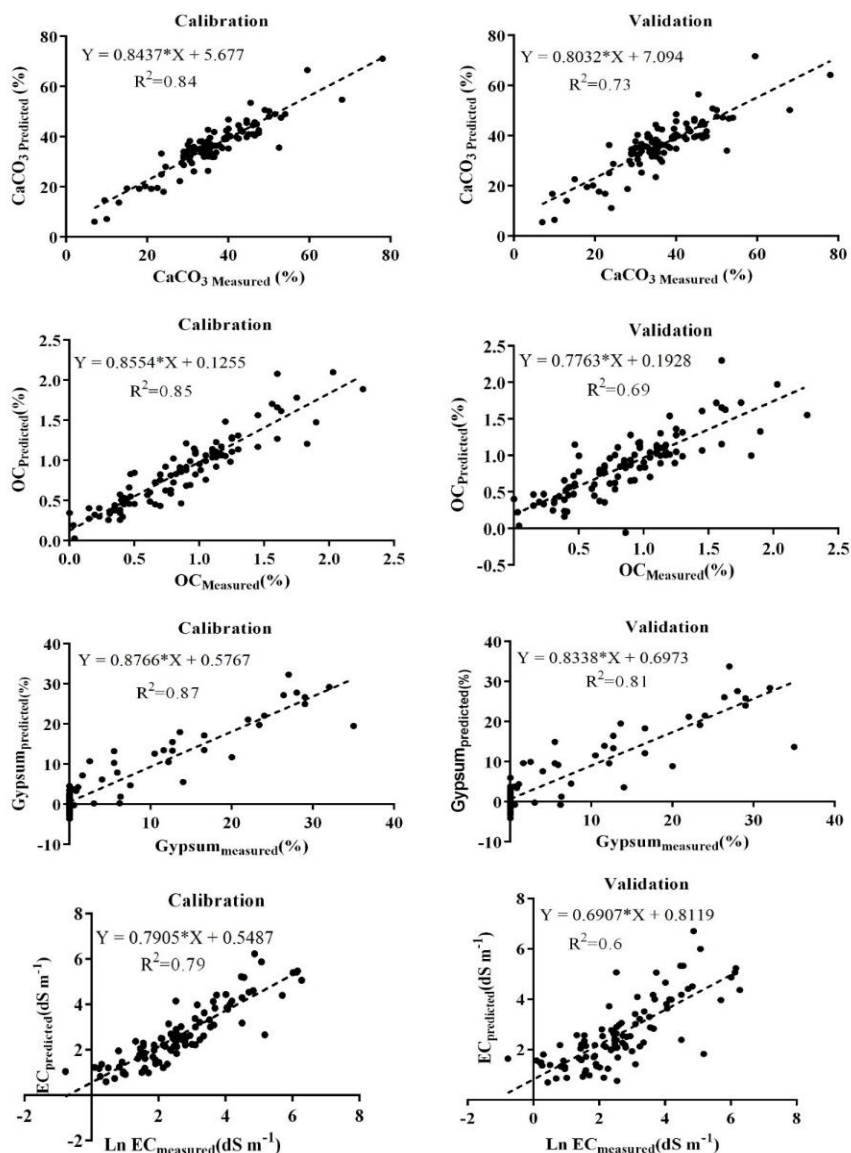
خاک که در ارتباط با بخش جامد خاک می‌باشند (مانند بافت، کربن آلی، ظرفیت تبادل کاتیونی، کربنات کلسیم، گچ و غیره) برخلاف ویژگی‌هایی از خاک که با منافذ خاک در ارتباط هستند، می‌توانند با دقت بیشتری توسط داده‌های طیفی برآورد شوند (Ostovari et al., 2018). (Minasny et al., 2008). در پژوهشی بر روی خاک‌های جنوب ایران تخمین قابل قبولی از ماده آلی خاک توسط مدل PLSR با  $R^2 = 0/67$  و  $RMSE = 0/28$  و  $CaCO_3$  با  $R^2 = 0/51$  و  $RMSE = 7/62$  گزارش کردند. Mousavi et al. (2020) تخمین مناسب کربن آلی خاک با استفاده از داده‌های بازتاب طیفی و مشتق اول توسط مدل PLSR، برآورد قابل قبول را برای مقادیر EC و pH و برآورد ضعیف را برای  $CaCO_3$  گزارش نمودند.

جدول ۳- نتایج مدل‌سازی خصوصیات مورد مطالعه با استفاده از روش رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLSR)

اعتبارسنجی			واسنجی			فاکتور بهینه	ویژگی خاک
RPD	RMSE	$R^2$	RPD	RMSE	$R^2$		
۱/۹۲	۵/۷۷	۰/۷۳	۲/۵۴	۴/۳۷	۰/۸۴	۱۱	کربنات‌ها (%)
۱/۷۹	۰/۲۵	۰/۶۹	۲/۶۲	۰/۱۷	۰/۸۵	۱۰	کربن آلی (%)
۲/۳	۳/۸۷	۰/۸۱	۲/۸۶	۳/۱۱	۰/۸۷	۷	گچ (%)
۱/۵۶	۰/۹۳	۰/۶۰	۲/۲۱	۰/۶۶	۰/۷۹	۶	EC ( $dS m^{-1}$ )

گرفته در این پژوهش است. Wang et al. (2018) با استفاده از طیف‌های جذبی و بازتابی ۱۰۰ نمونه خاک سطحی در چین، میزان شوری خاک را با روش‌های PLSR و RF برآورد نموده و گزارش کردند که طیف جذبی نتایج دقیق‌تری برای برآورد شوری ارائه می‌دهد. آنها کاربرد روش PLSR را برای پیش‌بینی شوری خاک مناسب دانستند.

شکل (۵) مقادیر اندازه‌گیری شده در مقابل مقادیر پیش‌بینی شده گچ، کربن آلی، کربنات‌ها و EC را در دو گروه واسنجی و اعتبارسنجی نشان می‌دهد. بیشترین مقادیر  $R^2$  مربوط به گچ (۰/۸۱) و سپس به ترتیب برای کربنات‌ها (۰/۷۳)، کربن آلی (۰/۶۹) و EC (۰/۶۰) می‌باشد. انطباق نسبی مقادیر پیش‌بینی شده و اندازه‌گیری شده حاکی از قابل قبول بودن تخمین صورت



شکل ۵- نمودار پراکنش مقادیر اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده ویژگی‌های خاک در دو حالت واسنجی و اعتبارسنجی برای بهترین مدل برآوردی با استفاده از روش‌های پیش‌پردازش مختلف

در پی داشته‌است. روش متغیر نرمال استاندارد (SNV) برای پیش‌بینی گچ نتایج بهتری در برداشت و روش پیش‌پردازش مشتق دوم به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای برای قابلیت هدایت الکتریکی خاک تخمین بهتری ارائه کرد (جدول ۴). فیلتر ساویتزکی و گلای یک الگوریتم میانه‌یابی است که منحنی حداقل مربعات را بر نقاط داده برازش می‌دهد و سپس مقدار میانه را بر اساس این منحنی پیش‌بینی می‌کند (Savitzky and Golay, 1964). روش‌های مشتق‌گیری از پرکاربردترین روش‌های پیش‌پردازش در مطالعات طیف‌سنجی محسوب می‌گردند. در روش‌های مشتق‌گیری سیگنال‌های ضعیف ثبت‌شده تقویت می‌گردند و باعث بهبود برآورد خصوصیات خاکی می‌شوند (Stenberg et al., 2010).

#### تأثیر روش‌های مختلف پیش‌پردازش در پیش‌بینی مدل

جدول (۴) عملکرد مدل PLSR را در پیش‌بینی ویژگی‌های خاک تحت روش‌های پیش‌پردازش مختلف نشان می‌دهد. همان‌گونه که از نتایج برمی‌آید، استفاده طیف جذبی بدون پیش‌پردازش، بهترین کارایی را در پیش‌بینی کربنات‌ها داشته است. Reeves and Smith (2009) ضریب تبیین  $0.83$  و  $RPD = 2/5$  را در آمریکا و Khayamim et al. (2015b)  $R^2 = 0.54$  را در خاک‌های استان اصفهان برای تخمین کربنات‌ها گزارش کردند.

نتایج پیش‌پردازش داده‌های طیفی نشان داد که روش مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای با اندازه پنجره ۱۵ و درجه چندجمله‌ای ۲ بهترین نتایج مدل‌سازی را برای کربن آلی

*et al.* (2016) در پژوهشی بر روی روش‌های مختلف پیش-پردازش، روش مشتق اول به همراه فیلتر ساویتزکی و گلای را به‌عنوان روشی مناسب که باعث بهبود عملکرد مدل می‌گردند، معرفی کردند. نتایج تخمین ممکن است بر مبنای روش‌های مختلف پردازش آماری داده‌ها و مشتقات طیف‌ها تغییر کند.

فرآیند مشتق اول برای حذف اثرات اندازه ذرات و پراکنش نوری مناسب است (Reeves Iii *et al.*, 2002). از طرفی در روش مشتق دوم ممکن است همراه با تقویت سیگنال‌های ضعیف، نوفه‌ها هم افزایش یابند. در نتیجه دقت مدل کاهش می‌یابد. Nawar

جدول ۴- عملکرد مدل رگرسیون حداقل مربعات جزئی (PLSR) با استفاده از روش‌های پیش‌پردازش مختلف

اعتبارسنجی			واسنجی			روش پیش‌پردازش	ویژگی خاک
RPD	RMSE	R <sup>2</sup>	RPD	RMSEC	R <sup>2</sup>		
۱/۹۲	۵/۷۷	۰/۷۳	۲/۵۴	۴/۳۷	۰/۸۴	جذب بدون پیش‌پردازش	کربنات‌ها
۱/۸۱	۶/۱۷	۰/۶۹	۲/۱۹	۵/۰۶	۰/۷۹	مشتق اول+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۱/۷۷	۶/۲۵	۰/۶۸	۲/۳۶	۴/۷	۰/۸۱	مشتق دوم+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۱/۸۱	۶/۱۲	۰/۷۰	۲/۴۸	۴/۴۷	۰/۸۳	SNV	
۱/۵۷	۷/۰۱	۰/۶	۲/۱۴	۵/۱۹	۰/۷۷	MSC	
۱/۷۱	۰/۲۶	۰/۶۶	۲/۳۳	۰/۱۹	۰/۸۱	جذب بدون پیش‌پردازش	کربن آلی
۱/۷۹	۰/۲۵	۰/۶۹	۲/۶۲	۰/۱۷	۰/۸۵	مشتق اول+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۱/۳۳	۰/۳۴	۰/۴۵	۱/۵۸	۰/۲۹	۰/۵۸	مشتق دوم+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۱/۶۴	۰/۲۸	۰/۶۳	۲/۳	۰/۲	۰/۷۹	SNV	
۱/۷	۰/۲۷	۰/۶۵	۲/۴۲	۰/۱۹	۰/۸۲	MSC	
۲/۳	۳/۸۹	۰/۸۱	۲/۸۱	۳/۱۷	۰/۸۷	جذب بدون پیش‌پردازش	گچ
۲/۲	۴/۰۷	۰/۷۹	۲/۵۲	۳/۵۳	۰/۸۴	مشتق اول+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۲/۲۵	۳/۹۶	۰/۸	۲/۷۱	۳/۲۸	۰/۸۶	مشتق دوم+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۲/۳	۳/۸۷	۰/۸۱	۲/۸۶	۳/۱۱	۰/۸۷	SNV	
۲/۱۱	۴/۲۱	۰/۷۷	۲/۶۵	۳/۳۶	۰/۸۵	MSC	
۱/۵۶	۰/۹۳	۰/۵۹	۱/۷۵	۰/۸۳	۰/۶۶	جذب بدون پیش‌پردازش	EC
۱/۶۸	۰/۸۷	۰/۶۴	۱/۸۷	۰/۷۸	۰/۷۱	مشتق اول+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۱/۵۶	۰/۹۳	۰/۵۹	۲/۲۱	۰/۶۶	۰/۷۹	مشتق دوم+فیلتر ساویتزکی و گلای	
۱/۵۶	۰/۹۳	۰/۵۹	۱/۷۱	۰/۸۵	۰/۶۵	SNV	
۱/۴۷	۰/۹۹	۰/۵۴	۱/۵۸	۰/۹۲	۰/۵۹	MSC	

## نتیجه‌گیری

کلسیم معادل خاک با داده‌های بدون پیش‌پردازش، تخمین بهتری ارائه داد. با توجه به نتایج به‌دست آمده، محدوده طیف مرئی حاوی اطلاعات مفیدی برای تشخیص و برآورد کربن آلی و قابلیت هدایت الکتریکی بود. در حالی که محدوده مادون قرمز نزدیک برای کربنات کلسیم معادل و گچ کارایی بهتری ارائه داد. با این حال، حضور مقادیر فراوان گچ، کربنات کلسیم معادل و نمک در برخی از خاک‌ها موقعیت جذبی آنها را تحت تأثیر قرار داده و باعث تغییر شدت و موقعیت باندهای جذبی گردید. به‌طور کلی، نتایج پژوهش حاضر نشان داد که با توجه به ماهیت تجربی توابع رگرسیونی و تغییرپذیری مکانی و زمانی ویژگی‌های خاک در مناطق مختلف از جمله خاک‌های شور، خاک‌های آهکی و خاک‌های گچی که اثرات متفاوتی بر طیف خاک دارند، استخراج و ارزیابی این توابع برای مناطق و خاک‌های متنوع ضروری به‌نظر می‌رسد.

در مطالعه حاضر قابلیت داده‌های طیفی در برآورد برخی ویژگی‌های خاک نظیر میزان گچ، شوری، کربنات کلسیم معادل و کربن آلی در تعدادی از خاک‌های سطحی واقع در اقلیم خشک و نیمه-خشک که حاوی مقادیر متنوعی از ویژگی‌های مذکور بودند، مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج حاکی از توانایی مطلوب روش طیف-سنجی در تخمین میزان گچ ( $RPD > 2$ ) با استفاده از مدل PLSR و همچنین توانایی قابل قبول تخمین سایر ویژگی‌ها شامل کربنات کلسیم معادل، کربن آلی و EC خاک ( $RPD < 2$ ) بود. همچنین ترکیب طیف‌ها با روش‌های پیش‌پردازش مناسب، نتایج به‌مراتب قوی‌تری در ارائه مدل نشان داد. در این پژوهش، از ۴ روش پیش‌پردازش شامل مشتق اول و دوم + فیلتر ساویتزکی و گلای، SNV و MSC برای پردازش داده‌های طیفی استفاده گردید که قابلیت روش‌های مورد استفاده برای پارامترهای مورد مطالعه نتایج متفاوتی به دنبال داشت. از طرفی، برآورد کربنات

"هیچ‌گونه تعارض منافع توسط نویسندگان وجود ندارد."

## REFERENCES

- Banaie M. H. (2001). Map of Iran soils moisture and temperature regimes. *Soil and Water research institute*. Tehran. Iran. (in Farsi)
- Ben-Dor, E., Inbar, Y., & Chen, Y. (1997). The reflectance spectra of organic matter in the visible near-infrared and short wave infrared region (400–2500 nm) during a controlled decomposition process. *Remote Sensing of Environment*, 61(1), 1-15 .
- Chang, C.-W., Laird, D. A., Mausbach, M. J., & Hurburgh, C. R. (2001). Near-infrared reflectance spectroscopy–principal components regression analyses of soil properties. *Soil Science Society of America Journal*, 65(2), 480-490 .
- Daniel, K., Tripathi, N., Honda, K., & Apisit, E. (2004). Analysis of VNIR (400–1100 nm) spectral signatures for estimation of soil organic matter in tropical soils of Thailand. *International Journal of Remote Sensing*, 25(3), 643-652 .
- Demattê, J. A. M. (2002). Characterization and discrimination of soils by their reflected electromagnetic energy. *Pesquisa Agropecuária Brasileira*, 37(10), 1445-1458
- Farifteh, J., Farshad, A., & George, R. (2006). Assessing salt-affected soils using remote sensing, solute modelling, and geophysics. *Geoderma*, 130(3-4), 191-206 .
- Gee, G.W., & Bauder, J.W. (1986) Particle-size analysis Methods of soil analysis: Part 1 Physical and mineralogical methods. 5:383-411.
- Gomez, C., P. Lagacherie, and G. Coulouma. 2008. Continuum removal versus PLSR method for clay and calcium carbonate content estimation from laboratory and airborne hyperspectral measurements. *Geoderma*, 148:141-148.
- Gomez, C., & Coulouma, G. (2018). Importance of the spatial extent for using soil properties estimated by laboratory VNIR/SWIR spectroscopy: Examples of the clay and calcium carbonate content. *Geoderma*, 330, 244-253
- Hassani, A., Bahrami, H.A., Noroozi, A.A., & Oustan, Sh., (2014). Visible-near infrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in gypseous and calcareous soils. *Watershed engineering and management*, 6(2), 125-138. (In Farsi)
- Henderson, T., Baumgardner, M., Franzmeier, D., Stott, D., & Coster, D. (1992). High dimensional reflectance analysis of soil organic matter. *Soil Science Society of America Journal*, 56(3), 865-872 .
- 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 .
- Hunt, G. R., & Salisbury, J. W. (1971). Visible and near infrared spectra of minerals and rocks. II. Carbonates. *Modern Geology*, 2, 23-30 .
- Iran Geology Organization (1995) Neyriz and Estahban map 1:250000. Tehran map publication
- Islam, K., Singh, B., & McBratney, A. (2003). Simultaneous estimation of several soil properties by ultra-violet, visible, and near-infrared reflectance spectroscopy. *Soil Research*, 41(6), 1101-1114.
- Khayamim, F., Khademi, H., Stenberg, B., & Wetterlind, J. (2015a) Capability of vis-NIR Spectroscopy to Predict Selected Chemical Soil Properties in Isfahan Province. *JWSS*. 19 (72) :81-92. (In Farsi)
- Khayamim, F., Wetterlind, J., Khademi, H., Robertson, A. J., Cano, A. F., & Stenberg, B. (2015b). Using visible and near infrared spectroscopy to estimate carbonates and gypsum in soils in arid and subhumid regions of Isfahan, Iran. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 23(3), 155-165 .
- Kim, I., Pullanagari, R., Deurer, M., Singh, R., Huh, K., & Clothier, B. (2014). The use of visible and near-infrared spectroscopy for the analysis of soil water repellency. *European journal of soil science*, 65(3), 360-368.
- McBratney, A. B., Minasny, B., & Rossel, R. V. (2006). Spectral soil analysis and inference systems: A powerful combination for solving the soil data crisis. *Geoderma*, 136(1-2), 272-278 .
- Minasny, B., McBratney, A., Tranter, G., & Murphy, B. (2008). Using soil knowledge for the evaluation of mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for predicting soil physical and mechanical properties. *European journal of soil science*, 59(5), 960-971 .
- Mohamed, E.S., Saleh, A.M., Belal, A.B., & Gad, A., (2018). Application of near-infrared reflectance for quantitative assessment of soil properties. *Egypt. J. Rem. Sens. Space Sci*, 21 (1), 1 – 14.
- Mousavi, F., Abdi, E., Ghalandarzadeh, A., Bahrami, H & Majnounian, B. (2020). Investigating the ability of Visible-NIR spectrometry to estimate some soil properties. *Iranian Journal of Forest*, 11(4), 443-458 . (in Farsi)
- Nawar, S., Buddenbaum, H., Hill, J., Kozak, J., & Mouazen, A. M. (2016). Estimating the soil clay content and organic matter by means of different calibration methods of vis-NIR diffuse reflectance spectroscopy. *Soil and Tillage Research*, 155, 510-522 .
- Nelson, R.E. (1982). Carbonate and gypsum. In: Page, A.L. (Ed.), *Methods of Soil Analysis*. Agron. Monger. vol. 9. ASA and SSSA, Madison, WI, pp. 181–196.
- Ostovari, Y., Ghorbani-Dashtaki, S., Bahrami, H.-A., Abbasi, M., Dematte, J. A. M., Arthur, E & Panagos, P. (2018). Towards prediction of soil erodibility, SOM and CaCO<sub>3</sub> using laboratory Vis-NIR spectra: A case study in a semi-arid region of Iran. *Geoderma*, 314, 102-112 .
- Page, A., Miller, R., & Keeney, D. (1982). *Methods of soil analysis, Part 2: Chemical and*

- microbiological properties 2nd ed. *Madison, Wisconsin, USA* .
- Pinheiro, É. F., Ceddia, M. B., Clingensmith, C. M., Grunwald, S., & Vasques, G. M. (2017). Prediction of soil physical and chemical properties by visible and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy in the central Amazon. *Remote Sensing*, 9(4), 293 .
- Rasooli, N., Farpoor, M., Khayamim, F., & Ranjbar, H. (2018). Prediction of selected soil properties using visible and near infrared spectroscopy in Bardsir area, Kerman Province. *Iranian Journal of Soil Research*, 32(2), 231-243. (in Farsi)
- Reeves III, J. B., & Smith, D. B. (2009). The potential of mid-and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for determining major-and trace-element concentrations in soils from a geochemical survey of North America. *Applied Geochemistry*, 24(8), 1472-1481 .
- Reeves Iii, J., McCarty, G., & Mimmo, T. (2002). The potential of diffuse reflectance spectroscopy for the determination of carbon inventories in soils. *Environmental pollution*, 116, S277-S284 .
- Rinnan, Å., Van Den Berg, F., & Engelsen, S. B. (2009). Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 28(10), 1201-1222 .
- Rossel, R. V., McGlynn, R., & McBratney, A. (2006). Determining the composition of mineral-organic mixes using UV-vis-NIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 137(1-2), 70-82 .
- Savitzky, A., & Golay, M. J. (1964). Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical chemistry*, 36(8), 1627-1639 .
- Seifi, M., Ahmadi, A., Neyshabouri, M.-R., Taghizadeh-Mehrjardi, R., & Bahrami, H.-A. (2020). Remote and Vis-NIR spectra sensing potential for soil salinization estimation in the eastern coast of Urmia hyper saline lake, Iran. *Remote Sensing Applications: Society and Environment*, 20, 100398 .
- Shahrayini, E., Noroozi, A., & Eghbal, M. K. (2020). Prediction of Soil Properties by Visible and Near-Infrared Reflectance Spectroscopy. *Eurasian Soil Science*, 53(12), 1760-1772 .
- Stenberg, B. (2010). Effects of soil sample pretreatments and standardised rewetting as interacted with sand classes on Vis-NIR predictions of clay and soil organic carbon. *Geoderma*, 158(1-2), 15-22 .
- Stenberg, B., Rossel, R. A. V., Mouazen, A. M., & Wetterlind, J. (2010). Visible and near infrared spectroscopy in soil science. *Advances in agronomy*, 107, 163-215 .
- Summers, D., Lewis, M., Ostendorf, B., & Chittleborough, D. (2011). Visible near-infrared reflectance spectroscopy as a predictive indicator of soil properties. *Ecological Indicators*, 11(1), 123-131 .
- Viscarra Rossel, R.A., Cattle, S.R., Ortega, A., and Fouad, Y. 2009. In situ measurements of soil colour, mineral composition and clay content by Vis-NIR spectroscopy. *Geoderma*, 150, 253-266.
- Walkley, A., & Black, I. A. (1934). An examination of the Degtjareff method for determining soil organic matter, and a proposed modification of the chromic acid titration method. *Soil science*, 37(1), 29-38 .
- Wang, J., Ding, J., Abulimiti, A., & Cai, L. (2018). Quantitative estimation of soil salinity by means of different modeling methods and visible-near infrared (VIS-NIR) spectroscopy, Ebinur Lake Wetland, Northwest China. *PeerJ*, 6, e4703 .
- Williams, P., Dardenne, P., & Flinn, P. (2017). Tutorial: Items to be included in a report on a near infrared spectroscopy project. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 25(2), 85-90 .
- Wold, S., Sjöström, M., & Eriksson, L. (2001). PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, 58(2), 109-130 .
- Xie, X.-L., & Li, A.-B. (2016). Improving spatial estimation of soil organic matter in a subtropical hilly area using covariate derived from vis-NIR spectroscopy. *Biosystems engineering*, 152, 126-137 .
- Yao, X., Huang, Y., Shang, G., Zhou, C., Cheng, T., Tian, Y., . . . Zhu, Y. (2015). Evaluation of six algorithms to monitor wheat leaf nitrogen concentration. *Remote Sensing*, 7(11), 14939-14966 .
- Yitagesu, F. A., van der Werff, H., van der Meer, F., & Hecker, C. (2012). On the relationship between plasticity and spectral characteristics of swelling soils: The 3-5 µm wavelength region. *Applied clay science*, 69, 67-78 .