

ČESKÁ ZEMĚDĚLSKÁ UNIVERZITA V PRAZE
FAKULTA AGROBIOLOGIE, POTRAVINOVÝCH A PŘÍRODNÍCH ZDROJŮ

Ing. Josef Kratina
Katedra pedologie a ochrany půd

MOŽNOSTI VYUŽITÍ SPEKTROSKOPIE VE VIDITELNÉ A BLÍZKÉ INFRAČERVENÉ
OBLASTI PRO PREDIKCI VLASTNOSTÍ LESNÍCH PŮD
(Possibilities of using VNIR spectroscopy for predicting properties of forest soils)

Autoreferát doktorské dizertační práce

Studijní program: D-ADS Zemědělská specializace
Studijní obor: Využití a ochrana přírodních zdrojů
Školitel: Prof. Dr. Ing. Luboš Borůvka
Konzultanti: Ing. Lenka Pavlů, Ph.D.
Ing. Lukáš Brodský, Ph.D.
Oponenti: Prof. Ing. Klement Rejšek, CSc.
Doc. Ing. Vít Šrámek, Ph.D.
RNDr. Lucie Kupková, Ph.D.

Obhajoba doktorské dizertační práce se koná dne 2.listopadu 2015 v 10 hod. na Fakultě agrobiologie, potravinových a přírodních zdrojů ČZU v Praze

S doktorskou dizertační prací je možno se seznámit na děkanátu FAPPZ ČZU v Praze

Praha 2015

OBSAH

1.	ÚVOD	1
2.	PŘEHLED O SOUČASNÉM STAVU POZNÁNÍ	1
2.1.	Difúzně reflexní spektroskopie	1
2.2.	Predikce půdních vlastností pomocí VNIR spektroskopie	2
2.3.	Predikce vlastností lesních půd.....	2
2.4.	Předzpracování spektrálních dat	3
2.5.	Používané statistické metody pro tvorbu modelů	3
3.	VĚDECKÉ HYPOTÉZY, CÍLE PRÁCE	4
4.	METODIKA	4
4.1.	Odběr a zpracování vzorků	4
4.2.	Zpracování dat	5
5.	VÝSLEDKY A DISKUSE	6
5.1.	Celý datový soubor a jeho rozdělení podle horizontů a oblastí.....	6
5.1.1.	Vliv oblastí odběru a horizontu na úspěšnost predikce	6
5.1.2.	Velký datový soubor (celá ČR)	7
5.1.3.	Shrnutí	7
5.2.	Vliv použité jemnozeme na úspěšnost predikce	8
5.3.	Vliv použité statistické metody na úspěšnost predikce	8
5.4.	Predikce jednotlivých vlastností	13
5.5.	Testování a úprava nalezených modelů	16
5.5.1.	Lesní školky	16
5.5.2.	Horizont B – Žofínský prales	17
6.	ZÁVĚR	21
7.	SUMMARY	22
8.	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	23
9.	STRUKTUROVANÝ ŽIVOTOPIS	25
10.	SEZNAM PUBLIKACÍ.....	26

1. ÚVOD

Informace o půdních vlastnostech jsou vyžadovány pro různé účely, například pro precizní zemědělství či lesnictví, pro hodnocení kvality půdy, pro její mapování či ochranu. Při zkoumání půd je zapotřebí získat velké množství analytických dat. Odebírání a následné analyzování půdních vzorků tradičními metodami je časově náročné a finančně nákladné (Kooistra et al., 2001). Stále častěji se proto využívá nepřímých měření a predikcí půdních vlastností pomocí matematických modelů.

Princip většiny nepřímých metod spočívá v senzorovém měření. Senzory identifikují změnu sledované půdní vlastnosti, či vlastnosti, která je s ní úzce vázána a kterou je možné převést do elektronického záznamu. Mezi výhody nepřímých metod patří nižší finanční nákladnost, rychlost stanovení a intenzivní prostorové pokrytí. V praxi se používají různé typy senzorů, nejčastěji elektrické, elektromagnetické a mechanické (Lukas, 2009).

Jednou z metod nepřímého měření půdních vlastností je spektroskopie ve viditelné a blízké infračervené oblasti (VNIR nebo VIS-NIR). Použití VNIR spektroskopie jako alternativy k tradiční analýze půd se ve světě zkoumá již řadu let a výzkumy ukazují, že poskytuje levnou a dostatečně přesnou predikci chemických, fyzikálních a biologických vlastností půd (Hanus et al., 2008, Brown et al., 2006). V ČR se tento způsob půdní analýzy teprve rozvíjí.

Většina prací se zabývá půdami zemědělsky využívanými, které mají odlišné vlastnosti než půdy lesní. Cílem práce je zhodnocení použitelnosti metody pro predikci vlastností lesních půd v České republice.

2. PŘEHLED O SOUČASNÉM STAVU POZNÁNÍ

2.1. Difúzně reflexní spektroskopie

Difúzně reflexní spektroskopie ve viditelné a blízké infračervené části záření je metodou, která se pro svou jednoduchost a přesnost využívá v mnoha oborech, stále častěji i v pedologii. Hyperspektrální průzkum používá senzory, které jsou schopny snímat obrazová data skládající se z desítek až stovek úzkých spektrálních pásem ve viditelné (VIS 400-700 nm) a blízké infračervené (NIR 700-2500 nm) části spektra. Změna intenzity elektromagnetického záření s jeho vlnovou délkou se projevuje při absorpci, odrazu záření, nebo jeho emisí. Pro označení poloh absorpčních pásů se používá veličina vlnová délka (jednotka μm nebo nm). Intenzity pásů jsou vyjádřeny jako transmitance (množství světla určité vlnové délky, které prošlo vzorkem), reflektance (odraz), nebo absorbance (pohlčení). Výstupem spektroskopického měření je spektrální křivka. Tvar spektrální křivky materiálů je definován jejich odrazivostí a absorbancí při různých vlnových délkách.

VNIR spektroskopie je použitelná nejen v laboratoři, ale i v terénu a to jak kontaktně, tak bezkontaktně. Terénní bezkontaktní spektroskopie se používá při dálkovém průzkumu Země. VNIR spektroskopie se ukazuje jako dobrá alternativa ke konvenčním půdním analýzám a může být použita k jejich doplnění, protože překonává některá z jejich omezení (např. časovou a finanční zátěž). Spektroskopie je rychlá, méně nákladná, jednoduchá a někdy i přesnější než konvenční metody.

2.2. Predikce půdních vlastností pomocí VNIR spektroskopie

Bylo prokázáno, že půdní charakteristiky lze odvozovat ze spektrálních dat při laboratorním i terénním měření (Viscarra Rossel et al., 2006, Brown et al., 2006, Bilgili et al., 2010). Půdní odrazivost je ovlivňována mikromorfologií a drsností povrchu, barvou (Metternicht, 1998), půdotvorným substrátem (Reeves a van Kessel, 1999, Shepherd a Walsh, 2002) a při terénním měření především vlhkostí (Chang et al., 2005, Mouazen et al., 2006).

Ve světové literatuře se uvádějí korelace například mezi spektrálními znaky a půdní zrnitostí, půdní reakcí, kationtovou výměnnou kapacitou, obsahem přístupných živin (vápník, draslík, hořčík, fosfor), obsahem hliníku, vlhkostí, elektrickou vodivostí (McBratney et al., 2006, Brown et al., 2006, He a Song, 2006, Shepherd a Walsh, 2002, Viscarra Rossel et al., 2006). Dále byla zjištěna vysoká úspěšnost předpovědi obsahu jílu (Brown et al., 2006), obsahu organického a anorganického uhlíku a dusíku (Reeves et al., 2002), Fe_2O_3 , Al_2O_3 , CaCO_3 (Ben-Dor a Banin, 1995), potenciálně mineralizovatelného dusíku (Morón a Cozzolino, 2002, Reeves a Van Kessel, 1999), poměru C:N a biologických vlastností půd (Chodak et al., 2004, Ludwig et al., 2002). VNIR spektroskopie je také úspěšnou metodou při stanovování obsahů některých rizikových prvků, například niklu, chromu, mědi, rtuti, olova, zinku, antimonu, železa nebo arsenu (Wu et al., 2005, Cozzolino a Morón, 2003, Kooistra et al., 2001, Udelhoven et al., 2003).

Úspěšnost stanovení jmenovaných půdních vlastností VNIR spektroskopií je velmi dobrá. Koeficient determinace R^2 (validační) často překračuje 0,9 (Viscarra Rossel et al., 2006). Brown et al. (2006) velmi úspěšně předpověděli obsah jílu ($R^2 = 0,91$), kationtovou výměnnou kapacitu ($R^2 = 0,83$), obsah organického uhlíku ($R^2 = 0,95$) a obsah anorganického uhlíku ($R^2 = 0,97$). Při zkoumání obsahu rizikových prvků a kovů byly nejvyšší hodnoty R^2 zjištěny u As ($R^2 = 0,84$), Fe ($R^2 = 0,72$), Hg ($R^2 = 0,96$), Pb ($R^2 = 0,95$) a Sb ($R^2 = 0,93$) (Kemper a Sommer, 2002).

Pro předpověď některých vlastností je vhodné použít hodnoty absorbance z celé viditelné a blízké infračervené části spektra, jiné se lépe projeví při použití užšího spektrálního rozsahu.

2.3. Predikce vlastností lesních půd

Modely, které jsou zveřejněny v literatuře, nejsou univerzální, jsou specifické pro dané podmínky, nebo pro určitou skupinu půd. Proto musí být před širším využitím v praxi učiněno detailní

testování a ověřování modelů a jejich modifikace a validace. Většina prací se zabývá půdami zemědělsky využívanými, které mají odlišné vlastnosti než půdy lesní. Lesní půdy mají nadložní humus, jsou neobdělávané, bývají mělčí s méně mocnými horizonty, mohou se nacházet v prudkých horských svazích. Nejsou využívány zemědělsky, ale lesnický, nebo jsou člověkem nevyužívány a vyvíjejí se přirozeně. Vrcholným rostlinným společenstvem je zde les. Lesní půda působí na lesní porost a ostatní rostlinnou vegetaci, a naopak zase dřeviny i s vegetací působí zpětně na půdu chemicky i fyzikálně (Pelíšek, 1956).

Některé studie prokázaly, že VNIR spektroskopie je vhodnou metodou i pro zkoumání lesních půd. Byly úspěšně předpovězeny například obsahy různých forem uhlíku (Ludwig et al., 2002, Tatzber et al., 2010), dusíku a poměr C/N (Ludwig et al., 2002). Hodnoty koeficientu determinace se často pohybovaly kolem 0,9. Tyto studie však často zkoumají lesní půdy ve vzdálených oblastech (např. Austrálie či Asie), kde panují zcela odlišné podmínky než u nás. Prací, které se zabývají lesními půdami střední Evropy, je málo. Komplexnější průzkum pomocí VNIR spektroskopie a následně vytvořené predikční modely pro odhad vlastností půd vyvíjejících se v našich podmínkách zatím chybí.

2.4. Předzpracování spektrálních dat

Před vlastní kalibrací statistického modelu je třeba provést předzpracování dat. Mezi tyto úkony patří například *Splice correction*, což je funkce, která vyhlazuje spektrální křivku a eliminuje tak šumy a skokové změny průběhu křivky. Mezi další možnosti předzpracování dat patří první a druhá derivace, které mohou zvýraznit absorpční vlastnosti (Martens a Naes, 1989), nebo metoda *continuum removal*, která slouží k lepší interpretovatelnosti a srovnatelnosti absorpčních pásů. Provádí se normalizací spekter na společnou základnu (*baseline normalization*) tvorbou křivky (*convex hull*) vytvořené kolem spektrální křivky a následnou projekci poměrů mezi oběma křivkami.

2.5. Používané statistické metody pro tvorbu modelů

Nejčastěji využívanou metodou pro tvorbu modelů pro predikci půdních vlastností je regrese částečných nejmenších čtverců (PLSR). Metodu představili Wold et al. (1983). Jedná se o metodu vícerozměrné regrese, která kombinuje prvky analýzy hlavních komponent a vícenásobné regrese. To je zvláště užitečné, když potřebujeme předvídat sadu závislých proměnných z velmi velké sady nezávislých proměnných, tedy v případech, kdy použití jednoduché regrese není možné (například z důvodů multikolinearity) (Zhang et al., 2009). Podmínkami pro použití regresní metody jsou normální rozdělení dat, absence heteroskedasticity, normalita reziduí, atd. V opačném případě je třeba zvolit jinou statistickou metodu, např. *support vector machines* (SVM).

Dalšími používanými metodami jsou: regrese hlavních komponent (PCR), vícerozměrné adaptivní regresní spliny (MARS), analýza hlavních komponent (PCA), kroková vícenásobná lineární regrese (SMLR), umělé neuronové sítě (ANN), regresní stromy (RT) a další.

Viscarra Rossel a Behrens (2010) srovnali úspěšnost předpovědí organického uhlíku, obsahu jílu a aktivní půdní reakce ($\text{pH}_{\text{H}_2\text{O}}$) použitím šestnácti různých statistických metod. Výsledky ukazují, že nejvhodnějšími predikčními metodami jsou PLSR (regrese částečných nejmenších čtverců) a SVM (*support vector machines*), dále pak kombinace metod, především DWT (diskrétní vlnková transformace) s metodami MARS (vícerozměrné adaptivní regresní spline), SVM (*support vector machines*), RF (*random forests*) a dalšími.

3. VĚDECKÉ HYPOTÉZY, CÍLE PRÁCE

Hypotézy:

- Existuje popsitelný vztah mezi spektrálními znaky lesních půd (ve viditelném a blízkém infračerveném spektru) a jejich vlastnostmi.
- VNIR spektroskopie může sloužit pro predikci vlastností lesních půd.
- Je možné vytvořit univerzální predikční model aplikovatelný na různé oblasti odběru.

Cíle práce:

- Ověření platnosti známých korelací mezi spektrálními znaky a vlastnostmi půd i pro účely zkoumání půd lesních.
- Nalezení dalších predikovatelných vlastností lesních půd, které lze spektroskopii odhadovat.
- Tvorba modelů pro účely zkoumání lesních půd

4. METODIKA

4.1. Odběr a zpracování vzorků

Při zpracování dizertační práce bylo použito přes 5200 vzorků odebraných z celých půdních profilů pomocí sondýrky nebo z kopaných půdních sond. Část půdních vzorků pochází z vlastní diplomové práce, část ze zdrojů katedry, ostatní vzorky byly zapůjčeny z jiných pracovišť. Místa odběrů byla zvolena tak, aby bylo pokryto celé území ČR a aby byly do zkoumání zahrnuty různé lesní půdní typy (podzol, kryptopodzol, kambizem, pseudoglej, luvizem). Celkem bylo k dispozici šest datových souborů z různých oblastí: Jizerské hory (348 vzorků), Novohradské hory (116 vzorků), Moravskoslezské Beskydy - Jablunkovsko (97 vzorků), Žofínský prales (619 vzorků ve frakci 2 mm

a 619 vzorků ve frakci 0,2 mm). Velmi cenný soubor vzorků a dat (dále jen velký soubor) byl zapůjčen z ÚHÚL, ÚKZÚZ a IFER. Jedná se o 3500 vzorků nadložních i minerálních horizontů odebraných z celého území ČR. Posledním souborem jsou vzorky lesních školek, které nepatří mezi typické zástupce lesních půd a jsou v práci zahrnuti pouze pro ukázkou dalšího možného praktického využití VNIR spektroskopie. Data ze školek nejsou použita při tvorbě predikčních modelů, mohou však sloužit pro jejich praktické testování. Práce se nezabývá měřením v terénu, jsou používány pouze vysušené vzorky upravené na jemnozemi I (2 mm), případně jemnozemi II (0,2 mm). Tímto je eliminován vliv vlhkosti půdy, který je na průběh spektrálních křivek zásadní a značně znesnadňuje terénní použití metody. Na půdních vzorcích byly provedeny vybrané analýzy konvenčními laboratorními metodami. Měření spekter a analytické stanovení půdních vlastností je prováděno na vzorcích upravených na jemnozemi I (II) v Petriho miskách v laboratořích KPOP ČZU. Rozsah spektrometru je 350 – 2 500 nm.

4.2. Zpracování dat

Je statisticky hodnocen vztah spektrálních znaků a půdních vlastností, které byly získány tradičními laboratorními metodami. Je testována vhodnost použití různých metod přípravy dat, jako je první a druhá derivace, nebo *Continuum Removal*. Publikované modely pro predikci půdních charakteristik ze spektrálních znaků jsou testovány, upraveny jejich parametry, případně jsou tvořeny nové modely pomocí statistické metody PLSR (*partial least squares regression* - regrese metodou částečných nejmenších čtverců), metody PCR (*principal components regression* – regrese hlavních komponent), nebo metody SVM (*support vector machines*). Pro statistické hodnocení jsou používána nejen všechna data dohromady, ale jsou rovněž dělena do podsouborů podle oblastí odběrů a podle horizontů, aby bylo možné popsat nejvhodnější způsob zadávání dat pro úspěšnou predikci. Dále je testován vliv použitého spektrálního pásma na úspěšnost předpovědi. Některé vlastnosti jsou lépe predikovatelné při použití celého VNIR spektra, pro jiné je vhodnější použití pouze určitého vybraného spektrálního pásma, které je vybíráno buď pokusně, nebo na základě literatury.

Nové modely jsou ověřovány (validovány). Uváděné předpovědi vyjádřené hodnotami R^2 a RMSE, jsou výsledkem cross validace, při které se soubor dat rozdělí na více podsouborů, jeden (10% z celku) se vyjme a zbylé se použijí pro kalibraci modelu, následně je model aplikován na soubor, který byl před tím vyjmut, jsou srovnány hodnoty predikované modelem a změřené v laboratoři. To se opakuje pro všechny podsoubory. Následně jsou spočítány parametry R^2 a RMSE.

Pro takto vzniklé skupiny bude kalibrován model. Posléze budou nové modely ještě podrobeny externí validaci, při které bude model aplikován na jiný soubor dat a zjišťována úspěšnost predikce.

5. VÝSLEDKY A DISKUSE

Jelikož je úspěšnost metody při predikci půdních vlastností vysoce závislá na vhodném způsobu zadávání vstupních dat a jejich statistickém předzpracování a vyhodnocování, je celá kapitola *Výsledky a diskuze* rozdělena na podkapitoly, ve kterých jsou jednotlivé způsoby testovány a rozšiřují výsledky podkapitoly předcházející. Cílem je najít tímto způsobem nejvhodnější kombinaci způsobu zadávání, statistického předzpracování a zpracování spektrálních dat pro dosažení nejlepších výsledků předpovědi půdních vlastností. Pokud nebude uvedeno jinak, jsou parametry R^2 (koeficient determinace) a RMSE (střední kvadratická chyba) výsledkem cross validace.

5.1. Celý datový soubor a jeho rozdělení podle horizontů a oblastí

Jako první byl statisticky hodnocen souhrnný datový soubor (Jizerské hory, Novohradské hory, Moravskoslezské Beskydy, Žofínský prales, velký soubor) bez ohledu na příslušnost k oblasti odběru, či horizontu. Byla použita spektra bez předzpracování v celém rozsahu 350 – 2 500 nm. Statistickou metodou byla, v literatuře často doporučovaná, regrese částečných nejmenších čtverců (PLSR).

Byly hledány vlastnosti společné pro co největší množství měřených vzorků. Konkrétně se jednalo o množství oxidovatelného uhlíku – Cox (4102 vzorků), celkový obsah dusíku (3485 vzorků) a výměnnou půdní reakci – pH_CaCl₂ (3466 vzorků). Výsledky pro nedělený datový soubor po predikci pomocí metody PLSR jsou znázorněny v tabulce 1. Výsledky se zdají být velice dobré, jejich publikace by však byla správná jen v případě výměnné reakce. Normální statistické rozdělení četností je pouze v případě výměnné půdní reakce. Výsledky obsahu oxidovatelného uhlíku a dusíku tvoří dva shluky. Ty pak poskytují při proložení regresní přímkou vysokou hodnotu koeficientu determinace. Výsledky jsou ale zkreslené, nelze je správně interpretovat. Predikce výměnné reakce je i přes nižší hodnotu koeficientu determinace úspěšnější.

Tab. 1 Úspěšnost predikce – souhrnný soubor dat

	pH_CaCl ₂	Cox (%)	N (mg.kg ⁻¹)
R² - validační	0,51	0,92	0,77
RMSE - validační	0,46	4,77	0,309

5.1.1. Vliv oblastí odběru a horizontu na úspěšnost predikce

Výsledky (tabulka 2) ukazují, že při zkoumání tohoto datového souboru (Jizerské hory, Novohradské hory, Jablunkovsko) je úspěšnost predikce půdních vlastností u organominerálních a minerálních horizontů vyšší než u horizontů nadložních. V případě dělení souboru podle příslušnosti

k lokalitě nevykazují výsledky jednoznačný trend a nelze tedy takové dělení nadále chápat jako zásadní způsob přípravy dat, vedoucí k úspěšnější predikci.

Tab. 2 Výsledky predikce – horské lesní půdy

	Počet vzorků	R ² (validační)					
		pH_H ₂ O	pH_KCl	Q _{4/6}	Cox (%)	KVK (mmol.100g ⁻¹)	Suma bazických kationtů (mmol.100g ⁻¹)
Celý soubor	240	0,34	0,50	0,61	0,72	0,60	0,58
Nadložní horizonty	124	0,43	0,48	0,39	0,78	-	-
Minerální horizonty	86	0,69	0,80	0,53	-	-	-
Novohradské hory	14	0,90	0,87	0,93	-	0,95	0,92
Jizerské hory	44	0,43	-	-	-	0,86	0,86
Jablunkovsko	95	0,31	0,60	0,60	-	-	-

5.1.2. Velký datový soubor (celá ČR)

V tabulce 3 jsou znázorněny výsledky predikce výměnné půdní reakce a obsahu dusíku při použití celého souboru a při jeho rozdělení na organické a minerální horizonty. Z výsledků je patrné, že na rozdíl od předchozích výsledků vykazuje celý soubor vyšší hodnotu koeficientu R², avšak spolu s ním roste i střední kvadratická chyba (RMSE), která by měla v ideálním případě naopak klesat.

Tab. 3 Úspěšnost predikce podle horizontů – velký soubor

	R ²	RMSE
pH_CaCl ₂ (celý soubor)	0,51	0,46
N (mg.kg ⁻¹) (celý soubor)	0,77	0,31
pH_CaCl ₂ (min. hor.)	0,32	0,44
pH_CaCl ₂ (org. hor.)	0,64	0,44
N (mg.kg ⁻¹) (min. hor.)	0,44	0,11
N (mg.kg ⁻¹) (org. hor.)	0,37	0,25

5.1.3. Shrnutí

Z průběžných výsledků je patrné, že rozdělování datového souboru podle oblastí odběru vzorků nezvyšuje vždy prokazatelně úspěšnost predikce půdních vlastností a nelze tedy tento způsob přípravy dat vždy jednoznačně doporučit. V otázce dělení dat podle příslušnosti k půdnímu horizontu je závěr komplikovanější. V některých případech se takové rozdělení jeví jako výhodnější, v jiných je úspěšnost předpovědí vyjádřená koeficientem determinace výrazně lepší ve prospěch neděleného

souboru. V takovém případě je však třeba sledovat i další veličinu popisující úspěšnost predikce, střední kvadratickou chybu, která by měla na rozdíl od koeficientu determinace klesat, k čemuž však ve výše uvedených případech nedochází.

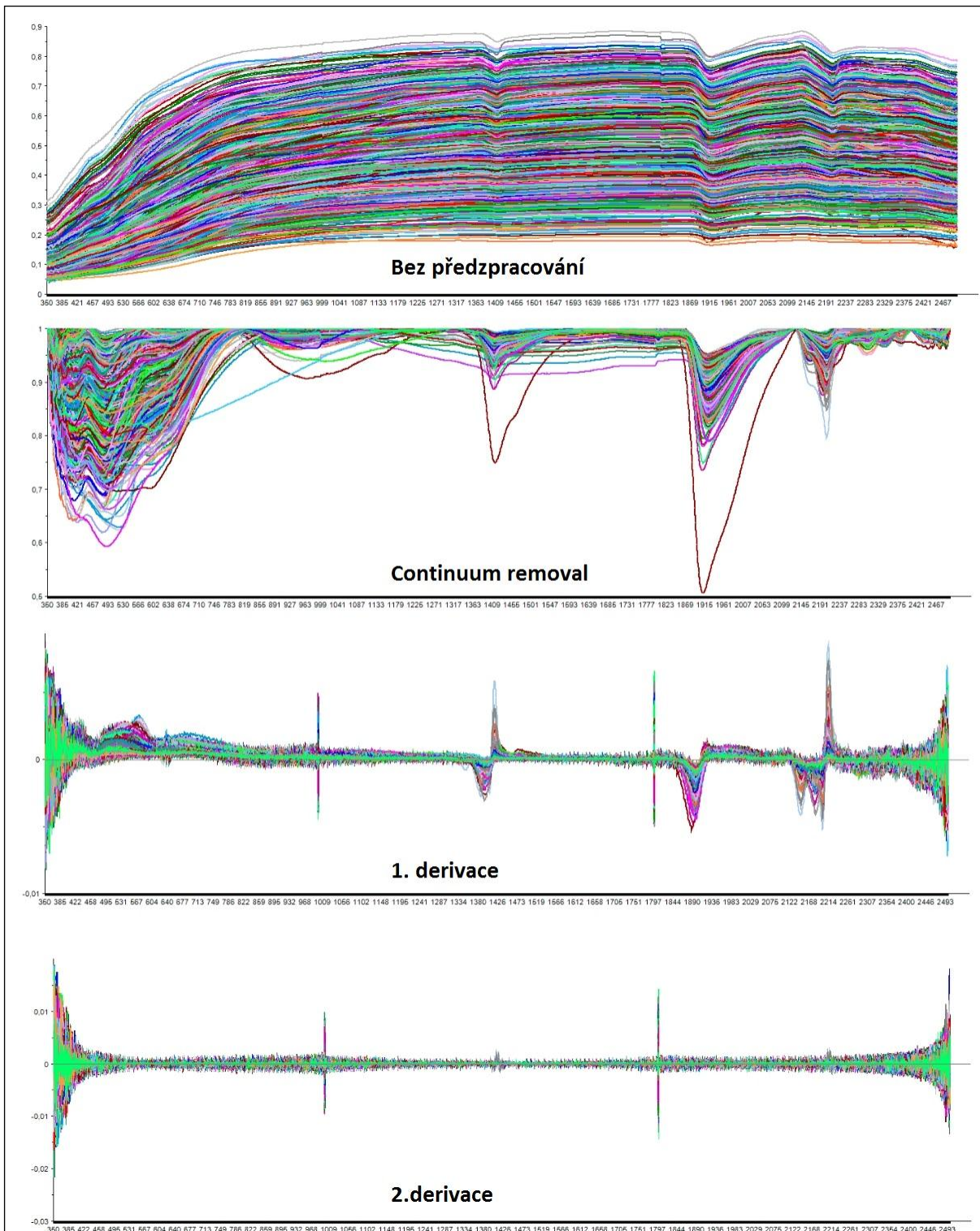
Organické a minerální horizonty mají zásadně odlišný charakter a většinou se u nich laboratorně stanovují rozdílné vlastnosti. Pokud jsou některé vlastnosti společně stanoveny pro horizonty celého půdního profilu, pak jsou na nich jasně patrné rozdíly. Data nemají normální rozdělení (je bimodální) a výsledky nelze správně interpretovat. Tento průběžný závěr bude v dalších kapitolách ověřen použitím metody SVM, která není tak zásadně citlivá na rozdělení dat jako regresní (lineární) metody.

5.2. Vliv použité jemnozeme na úspěšnost predikce

Na vzorcích z Žofinského pralesa je možnost sledovat úspěšnost predikce v závislosti na zrnitosti půdy, jelikož jsou k dispozici vzorky přesáté přes síta o velikosti ok 2 mm a 0,2 mm. Výsledky nenaznačují, že by použití jemnozeme II v jakémkoliv případě zvyšovalo úspěšnost predikce, naopak dochází ke zhoršení.

5.3. Vliv použité statistické metody na úspěšnost predikce

V této kapitole budou data podrobena různým kombinacím předzpracování (bez předzpracování, první a druhá derivace, *continuum removal*, jejichž vliv na průběh křivky znázorňuje obrázek 1) a statistických metod (PLSR, PCR, SVM). Takto budou pro každou vlastnost vždy vybrány dvě nejúčinnější kombinace, které budou v následující kapitole jednotlivě precizovány. V tabulkách 4, 5 a 6 jsou tyto nejlepší modely zvýrazněny tučným písmem a odlišeny barevným pozadím buňky (nejlepší zeleně, druhý nejlepší žlutě). Viscarra Rossel a Behrens (2010) ve své práci určili jako dvě nejúspěšnější metody SVM a PLSR. Výsledky této práce toto potvrzují, především ve prospěch SVM, a dále rozšiřují kombinováním těchto metod s různými způsoby předzpracování. Ve většině případů byla zjištěna nejvyšší úspěšnost predikce při kombinaci první derivace spektrálních dat a metody SVM, dále pak PLSR na datech bez předzpracování a SVM po provedení *continuum removal*. Další úspěšnou kombinací bylo v některých případech použití 2. derivace a SVM. Naopak regresní metody na datech předzpracovaných druhou derivací byly jednoznačně nejméně úspěšné. Regresní metody PLSR a PCR poskytují velmi podobné výsledky, většinou v mírný prospěch PLSR.



Obr. 1 Průběh spektrálních křivek, různé způsoby předzpracování

Tab. 4 Shrnutí úspěšnosti predikce jednotlivých vlastností podle použitých stat. metod – minerální horizonty

1338 vzorků		Bez předzpracování			Continuum removal			1. derivace			2. derivace		
		PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR
pH_CaCl ₂	R ²	0,32	0,23	0,29	0,32	0,34	0,25	0,27	0,44	0,08	0,03	0,16	0,00
	RMSE	0,44	0,46	0,44	0,44	0,43	0,45	0,45	0,40	0,51	0,52	0,48	0,53
pH_H ₂ O	R ²	0,29	0,19	0,26	0,30	0,29	0,18	0,27	0,46	0,03	0,03	0,17	0,00
	RMSE	0,45	0,50	0,46	0,45	0,47	0,49	0,46	0,41	0,53	0,53	0,49	0,54
Cox (%)	R ²	0,61	0,65	0,61	0,55	0,64	0,54	0,59	0,69	0,51	0,02	0,47	0,00
	RMSE	2,06	1,96	2,06	2,20	1,97	2,23	2,11	1,85	2,30	3,26	2,42	3,29
N (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,44	0,50	0,45	0,41	0,49	0,40	0,43	0,58	0,38	0,01	0,38	0,00
	RMSE	0,11	0,11	0,11	0,12	0,11	0,12	0,11	0,01	0,12	0,15	0,12	0,15
P_M3 (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,03	0,04	0,04	0,02	0,06	0,03	0,02	0,10	0,01	0,00	0,02	0,00
	RMSE	26,08	26,39	25,98	26,21	26,14	26,16	26,29	25,72	26,37	26,55	26,70	26,55
K_M3 (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,17	0,15	0,15	0,15	0,20	0,08	0,18	0,31	0,06	0,00	0,09	0,00
	RMSE	58,34	59,63	58,77	58,91	58,44	61,14	58,00	53,93	61,82	63,81	60,98	63,91
Ca_M3 (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,25	0,13	0,15	0,32	0,24	0,15	0,28	0,35	0,00	0,02	0,12	0,00
	RMSE	744,78	853,22	789,58	709,04	795,70	789,32	729,23	729,04	859,42	849,34	830,17	859,53
Mg_M3 (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,19	0,13	0,15	0,26	0,28	0,18	0,21	0,30	0,00	0,00	0,13	0,00
	RMSE	132,89	154,82	136,61	127,40	143,52	133,78	131,88	137,38	147,93	148,00	154,82	148,13
VA (me.100g ⁻¹)	R ²	0,13	0,08	0,06	0,07	0,28	0,06	0,11	0,59	0,02	0,06	0,57	0,01
	RMSE	21,33	23,01	22,09	21,94	21,55	22,09	21,46	16,47	22,60	22,16	15,94	22,69
K_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,06	0,06	0,04	0,04	0,20	0,04	0,07	0,42	0,03	0,02	0,37	0,01
	RMSE	1,04	1,09	1,06	1,05	1,02	1,05	1,04	0,88	1,06	1,06	0,90	1,07
Ca_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,04	0,07	0,05	0,08	0,15	0,05	0,06	0,27	0,01	0,00	0,19	0,00
	RMSE	14,49	14,86	14,47	14,20	14,44	14,47	14,39	13,32	17,73	14,83	13,73	14,79
Mg_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,05	0,06	0,05	0,07	0,20	0,05	0,07	0,32	0,01	0,01	0,21	0,01
	RMSE	3,36	3,43	3,35	3,31	3,32	3,35	3,32	3,00	3,42	3,42	3,15	3,43
Na_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,05	0,05	0,03	0,03	0,18	0,03	0,05	0,35	0,01	0,03	0,34	0,01
	RMSE	0,18	0,21	0,19	0,19	0,20	0,19	0,18	0,18	0,19	0,19	0,19	0,19
Mn_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,05	0,05	0,03	0,05	0,20	0,04	0,04	0,28	0,04	0,01	0,22	0,01
	RMSE	1,65	1,69	1,66	1,65	0,14	1,65	1,65	1,49	1,66	1,68	1,53	1,68
Al_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,12	0,07	0,06	0,07	0,27	0,05	0,11	0,59	0,10	0,06	0,56	0,01
	RMSE	19,51	20,94	20,21	20,07	19,60	20,22	19,64	14,90	19,68	20,20	14,53	20,71
Fe_vym (me.100g ⁻¹)	R ²	0,14	0,16	0,14	0,13	0,30	0,12	0,12	0,39	0,12	0,03	0,26	0,00
	RMSE	1,55	1,63	1,55	1,55	1,53	1,56	1,57	1,37	1,56	1,64	1,48	1,66
KVK (me.100g ⁻¹)	R ²	0,08	0,07	0,05	0,05	0,28	0,05	0,10	0,64	0,10	0,04	0,63	0,01
	RMSE	31,29	32,81	31,90	21,81	30,68	31,86	30,98	22,29	31,06	32,02	21,11	32,46
BS (%)	R ²	0,20	0,13	0,17	0,28	0,17	0,12	0,26	0,44	0,08	0,03	0,16	0,00
	RMSE	22,84	24,99	23,25	21,69	24,50	24,08	22,02	20,65	24,55	25,27	24,11	25,57

Tab. 5 Shrnutí úspěšnosti predikce jednotlivých vlastností podle použitých stat. metod – organické horizonty

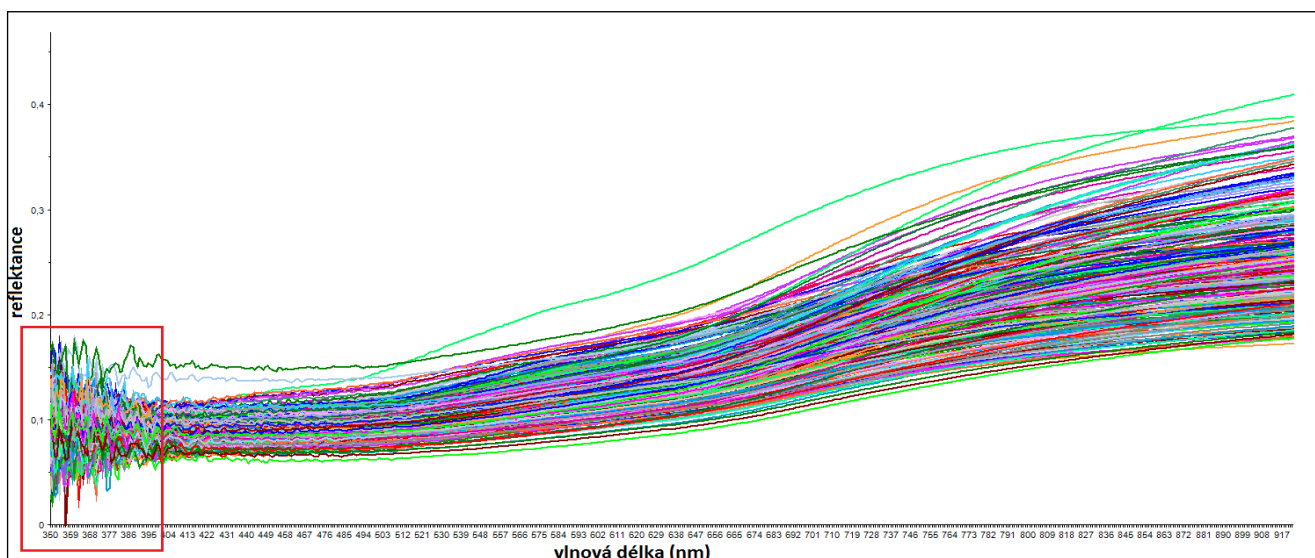
2155 vzorků		Bez předzpracování			Continuum removal			1. derivace			2. derivace		
		PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR
pH_CaCl ₂	R ²	0,64	0,62	0,61	0,66	0,72	0,61	0,59	0,72	0,26	0,16	0,46	0,00
	RMSE	0,44	0,45	0,46	0,43	0,39	0,46	0,47	0,39	0,63	0,67	0,54	0,73
N (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,37	0,41	0,33	0,35	0,54	0,28	0,25	0,62	0,07	0,05	0,13	0,00
	RMSE	0,25	0,24	0,26	0,25	0,21	0,27	0,27	0,19	0,30	0,31	0,29	0,31
cox (%)	R ²	0,76	0,79	0,76	0,78	0,83	0,77	0,75	0,83	0,52	0,40	0,66	0,00
	RMSE	4,52	4,21	4,48	4,30	3,76	4,37	4,59	3,72	6,34	7,12	5,49	9,16
Al_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,58	0,55	0,55	0,61	0,66	0,59	0,60	0,70	0,40	0,31	0,51	0,00
	RMSE	2785,00	2924,70	2881,50	2707,80	2516,80	2765,80	2,73	2396,90	3344,60	3587,60	3044,00	4309,00
Ca_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,65	0,56	0,56	0,69	0,73	0,56	0,59	0,76	0,35	0,22	0,50	0,00
	RMSE	2657,00	2990,80	2975,30	2501,40	2337,90	2971,20	2881,30	2198,40	3615,60	3956,60	3187,30	4478,90
Cd_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,06	0,09	0,04	0,05	0,17	0,04	0,02	0,24	0,01	0,01	0,13	0,00
	RMSE	0,32	0,31	0,32	0,32	0,30	0,32	0,32	0,29	0,32	0,32	0,31	0,33
Cr_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,34	0,34	0,34	0,35	0,39	0,34	0,35	0,41	0,24	0,20	0,30	0,00
	RMSE	12,40	12,94	12,41	12,32	12,56	12,39	12,35	12,43	13,32	13,67	13,07	15,30
Cu_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,30	0,33	0,24	0,26	0,33	0,24	0,23	0,38	0,22	0,18	0,27	0,00
	RMSE	8,18	8,21	8,53	8,37	8,12	8,48	8,56	7,96	8,64	8,83	8,39	9,76
Fe_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,47	0,44	0,42	0,46	0,49	0,45	0,47	0,51	0,40	0,25	0,39	0,00
	RMSE	5383,90	5964,10	5610,70	5437,30	5683,40	5474,30	5390,60	5762,60	5960,20	6386,40	6213,30	7390,00
K_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,38	0,42	0,37	0,44	0,50	0,42	0,31	0,56	0,05	0,02	0,27	0,00
	RMSE	763,56	761,19	772,79	726,59	696,65	736,35	804,10	659,97	943,53	960,54	832,78	969,10
Mg_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,30	0,28	0,25	0,35	0,37	0,35	0,30	0,42	0,01	0,02	0,13	0,00
	RMSE	1195,60	1418,90	1235,30	1151,80	1290,70	1157,10	1195,90	1303,30	1420,10	1451,50	1458,50	1460,00
Mn_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,27	0,31	0,23	0,37	0,45	0,25	0,02	0,50	0,06	0,05	0,19	0,00
	RMSE	1337,60	1341,20	1373,80	1245,30	1197,80	1356,60	1398,90	1143,40	1523,30	1533,10	1412,40	1569,30
Na_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,08	0,08	0,08	0,07	0,13	0,07	0,08	0,23	0,07	0,06	0,21	0,00
	RMSE	42,94	42,97	43,03	43,04	41,90	43,05	43,02	40,39	43,19	43,31	40,51	44,75
P_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,12	0,12	0,02	0,09	0,24	0,05	0,03	0,34	0,01	0,02	0,16	0,00
	RMSE	278,62	280,12	292,78	282,00	260,30	288,79	292,42	243,82	294,75	293,42	271,73	296,37
Pb_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,02	0,00	0,02	0,01	0,01	0,01	0,01	0,02	0,01	0,01	0,02	0,00
	RMSE	440,53	825,79	440,59	441,79	814,00	442,02	441,00	793,38	440,91	440,84	759,65	444,28
Zn_AR (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,06	0,06	0,04	0,07	0,12	0,05	0,04	0,20	0,02	0,02	0,21	0,01
	RMSE	43,54	43,94	44,01	43,20	42,48	43,82	43,98	40,72	44,44	44,31	40,12	44,76

Tab. 6 Shrnutí úspěšnosti predikce jednotlivých vlastností podle použitých stat. metod – A horizonty, Žofínský prales

309 vzorků		Bez předzpracování			Continuum removal			1. derivace			2. derivace		
		PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR	PLSR	SVM	PCR
Cox (%)	R ²	0,41	0,42	0,43	0,33	0,44	0,26	0,00	0,48	0,02	0,01	0,17	0,00
	RMSE	1,70	1,70	1,68	1,82	1,66	1,92	2,22	1,63	2,22	2,22	2,03	2,22
pH_Kcl	R ²	0,50	0,41	0,50	0,50	0,55	0,41	0,01	0,55	0,01	0,00	0,26	0,01
	RMSE	0,13	0,14	0,13	0,13	0,12	0,14	0,18	0,12	0,18	0,18	0,16	0,18
KVK mmol+.kg ⁻¹	R ²	0,31	0,28	0,28	0,10	0,25	0,11	0,00	0,27	0,01	0,02	0,04	0,02
	RMSE	15,10	15,35	15,40	17,19	15,64	17,11	18,22	15,52	18,04	17,90	17,85	17,97
VA mmol+.kg ⁻¹	R ²	0,49	0,48	0,49	0,32	0,32	0,30	0,07	0,36	0,00	0,00	0,12	0,00
	RMSE	16,53	16,80	16,68	19,25	19,14	19,52	22,42	18,68	23,31	23,30	21,82	23,34
Al_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,57	0,55	0,56	0,40	0,46	0,39	0,19	0,46	0,00	0,00	0,26	0,00
	RMSE	122,57	126,32	123,53	144,76	137,01	144,72	167,54	137,45	188,92	186,80	162,03	187,26
Fe_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,62	0,58	0,62	0,48	0,56	0,46	0,10	0,61	0,01	0,00	0,26	0,01
	RMSE	46,68	49,31	46,67	54,70	50,33	55,28	71,49	47,74	75,12	76,01	66,06	75,21
Mg_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,35	0,37	0,35	0,12	0,42	0,11	0,19	0,43	0,00	0,00	0,18	0,00
	RMSE	16,15	15,91	16,16	18,78	15,34	18,94	18,06	15,22	20,06	20,12	18,21	20,10
Mn_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,42	0,46	0,43	0,46	0,49	0,39	0,14	0,50	0,02	0,00	0,26	0,02
	RMSE	33,62	34,20	33,39	32,56	32,59	34,59	41,03	32,33	43,86	44,46	39,27	43,80
Ca_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,29	0,29	0,29	0,16	0,30	0,14	0,12	0,28	0,00	0,00	0,14	0,00
	RMSE	0,19	0,19	0,19	0,21	0,19	0,21	0,21	0,19	0,23	0,23	0,21	0,23
Na_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,05	0,05	0,04	0,01	0,06	0,02	0,05	0,17	0,00	0,00	0,13	0,00
	RMSE	8,46	8,49	8,52	8,62	8,42	8,61	8,49	7,92	8,70	8,72	8,08	8,72
K_vym (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,43	0,45	0,44	0,32	0,47	0,26	0,33	0,51	0,00	0,00	0,32	0,00
	RMSE	21,93	21,69	21,89	24,13	21,18	25,15	23,81	20,31	29,40	29,31	24,45	29,27
Al_KCl (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,61	0,59	0,59	0,50	0,51	0,46	0,20	0,48	0,00	0,00	0,22	0,00
	RMSE	107,87	110,73	109,56	121,82	120,44	126,04	153,37	124,49	172,27	172,81	153,03	172,75
Mn_KCl (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,40	0,41	0,41	0,43	0,44	0,36	0,13	0,47	0,02	0,00	0,24	0,02
	RMSE	60,51	62,73	59,96	58,79	59,24	62,42	72,80	58,50	77,09	78,19	69,84	77,03
Fe_KCl (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,66	0,63	0,66	0,57	0,62	0,58	0,09	0,65	0,01	0,00	0,26	0,01
	RMSE	70,21	74,30	70,05	78,67	73,78	78,26	114,31	72,04	119,73	121,19	105,08	119,77
Al (X) 1+ (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,58	0,56	0,58	0,39	0,53	0,40	0,03	0,51	0,00	0,00	0,09	0,00
	RMSE	16,59	17,07	16,66	20,04	17,53	19,90	25,18	18,02	25,72	25,81	24,39	25,74
Al (Y) 2+ (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,19	0,16	0,17	0,07	0,23	0,03	0,00	0,22	0,00	0,00	0,03	0,00
	RMSE	2,90	2,97	2,93	3,11	2,77	3,17	3,23	2,87	3,23	3,22	0,84	3,22
Al 3+ (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,57	0,18	0,56	0,47	0,47	0,42	0,21	0,27	0,00	0,00	0,06	0,00
	RMSE	92,68	4,06	93,88	102,31	101,96	107,38	124,84	3,82	141,10	141,32	4,31	141,50
Al_ox (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,58	0,39	0,53	0,50	0,58	0,38	0,05	0,53	0,00	0,00	0,20	0,00
	RMSE	655,93	804,14	688,95	711,01	662,70	792,53	981,59	696,89	1011,50	1010,70	901,60	1012,50
Mn_ox (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,44	0,45	0,44	0,52	0,52	0,40	0,07	0,51	0,01	0,00	0,27	0,01
	RMSE	120,76	125,67	120,71	112,08	113,49	125,08	156,01	114,92	161,33	162,90	141,71	160,71
Fe_ox (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,58	0,41	0,46	0,52	0,58	0,37	0,16	0,58	0,00	0,00	0,25	0,00
	RMSE	2316,20	2742,30	2629,80	2462,10	2314,90	2820,10	3238,50	2362,90	3582,50	3564,00	3125,50	3567,50
Si_ox (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,30	0,22	0,29	0,29	0,34	0,24	0,00	0,35	0,00	0,00	0,18	0,00
	RMSE	124,14	131,85	125,15	124,91	119,96	128,59	150,73	120,37	148,37	148,13	134,67	148,18
Al_dit (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,29	0,20	0,26	0,23	0,31	0,20	0,11	0,46	0,03	0,00	0,34	0,01
	RMSE	914,34	974,46	937,49	948,71	900,52	967,57	1021,70	815,90	1071,20	1089,80	893,98	1077,30
Mn_dit (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,45	0,45	0,45	0,52	0,53	0,41	0,10	0,55	0,02	0,00	0,30	0,03
	RMSE	131,85	137,74	132,04	122,90	124,23	136,95	168,70	122,92	176,08	178,28	152,65	175,02
Fe_dit (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,65	0,43	0,47	0,57	0,54	0,34	0,11	0,56	0,00	0,00	0,20	0,00
	RMSE	2540,90	3275,90	3104,70	2803,70	2899,50	3457,80	4023,50	2893,40	4289,40	4285,00	3830,00	4293,50
Si_dit (mg.kg ⁻¹)	R ²	0,17	0,04	0,03	0,07	0,28	0,07	0,11	0,56	0,13	0,13	0,57	0,13
	RMSE	1365,00	1552,00	1477,30	1452,30	1327,90	1448,00	1403,20	1096,30	1405,80	1401,30	1058,20	1399,30

5.4. Predikce jednotlivých vlastností

V této kapitole bude pro každou vlastnost, na základě literatury a výše uvedených poznatků, hledána nejlepší kombinace použitého typu předzpracování, statistické metody a nově i vybraného spektrálního pásma. Jako trénovací budou použita data z velkého souboru z celé ČR a ze Žofinského pralesa. Pro každou vlastnost budou vybrány dvě neúspěšnější kombinace metod z tabulek 5, 6 a 7, které budou podrobeny dalšímu testování. Pro všechny vlastnosti bude společná úprava spekter oříznutím pásma 350 – 400 nm, jež je na rozhraní UV a viditelného záření a jak ukazuje obrázek 2, je toto pásmo výrazně rušeno šumem.



Obr. 2 Šum v UV části spektra

V tabulce 7 jsou popsány nejlepší modely pro predikci jednotlivých půdních vlastností, včetně validačního R^2 a RMSE. V tabulce 8 jsou na základě těchto údajů popsány nejlepší modely pro nejpřesnější predikci jednotlivých půdních vlastností. V případě, že byl pro jednotlivé vlastnosti, stanovené různými způsoby, určen jako nejlepší pouze jeden model, jsou v tabulce shrnuty do jednoho řádku, označeného pouze názvem vlastnosti, bez informace o způsobu jejího stanovení (např. N, P, nebo K). V případě, že byla stejná vlastnost (např. výměnná acidita) na dvou různých souborech dat nejlépe predikovaná odlišnými modely, byl hledán společný, univerzální model, který dostatečně přesně předpovídá danou vlastnost v obou případech.

Tab. 7 Nejlepší predikce podle metody a pásma – shrnutí

Vlastnost	Horizont (oblast)	Předzpracování	Statistická metoda	Spektrální pásmo (nm)	R ² validační	RMSE validační
pH_H ₂ O	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,46	0,40
pH_CaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,45	0,40
pH_CaCl ₂	org. hor.	1. derivace, CR	SVM	400 - 2500	0,72	0,39
pH_KCl	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,55	0,12
Cox	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,68	1,85
Cox	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,84	3,71
Cox	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,48	1,63
KVK	A horizonty	Žádné	PLSR	400 - 2500	0,37	14,37
KVK	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,64	22,52
BS	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,44	20,65
N	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,57	0,10
N	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,62	0,19
P_M3	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,10	26,68
P_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,34	243,91
K_M3	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,31	54,00
K_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,57	657,13
K_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,51	20,29
K_BaCl ₂	A horizonty	1. derivace	SVM	750 - 2500	0,42	0,87
Ca_M3	min. hor.	CR	PLSR	1100 - 2500	0,36	687,14
Ca_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,76	2198,70
Ca_BaCl ₂	A horizonty	Žádné	PLSR	1100 - 2500	0,33	0,19
Ca_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,27	13,33
Mg_M3	min. hor.	CR	PLSR	1100 - 2500	0,32	146,92
Mg_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,43	1303,50
Mg_BaCl ₂	A horizonty	1. derivace	PLSR	400 - 2500	0,43	15,18
Mg_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,32	3,00
Na_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,23	40,40
Na_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,35	0,18
Na_BaCl ₂	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,16	7,93
Mn_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,28	1,49
Mn_BaCl ₂	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,51	32,22
Mn_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,51	1141,80
Mn_KCl	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,48	58,28
Mn_ox	A horizonty	CR	PLSR	400 - 2500	0,56	107,65
Mn_dit	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 750	0,55	121,04
Fe_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,38	1,38
Fe_BaCl ₂	A horizonty	Žádné	PLSR	400 - 2500	0,65	44,59
Fe_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,51	5757,50
Fe_KCl	A horizonty	Žádné	PCR	400 - 2500	0,67	68,64
Fe_ox	A horizonty	Žádné	PLSR	1100 - 2500	0,68	2033,40
Fe_dit	A horizonty	Žádné	PLSR	750 - 2500	0,69	2370,50
Al_BaCl ₂	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,59	14,99
Al_BaCl ₂	A horizonty	Žádné	PLSR	400 - 800	0,58	120,53
Al_AR	org. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,70	2395,20
Al_KCl	A horizonty	Žádné	PCR	400 - 2500	0,62	106,41
Al_ox	A horizonty	Žádné	PLSR	400 - 2500	0,63	617,01
Al_dit	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,45	824,18
Al (X) 1+	A horizonty	Žádné	PCR	600 - 800	0,63	15,56
Al (Y) 2+	A horizonty	1. derivace	SVM	1100 - 2500	0,44	19,21
Al 3+	A horizonty	Žádné	PCR	400 - 2500	0,58	91,29
VA	min. hor.	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,58	16,58
VA	A horizonty	Žádné	PCR	400 - 2500	0,49	16,64
Si_ox	A horizonty	1. derivace	SVM	400 - 2500	0,35	120,40
Si_dit	A horizonty	2. derivace	SVM	400 - 750	0,59	979,57

Tab. 8 Shrnutí nejlepších statistických modelů pro predikci jednotlivých vlastností

Vlastnost	Předzpracování	Statistická metoda	Spektrální pásmo (nm)
pH_H ₂ O	1. derivace	SVM	400 - 2500
pH_CaCl ₂	1. derivace	SVM	400 - 2500
pH_KCl	1. derivace	SVM	400 - 2500
Cox	1. derivace	SVM	400 - 2500
KVK	1. derivace	SVM	400 - 2500
BS	1. derivace	SVM	400 - 2500
N	1. derivace	SVM	400 - 2500
P	1. derivace	SVM	400 - 2500
K	1. derivace	SVM	400 - 2500
Ca_M3	Continuum removal	PLSR	1100 - 2500
Ca_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Ca_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mg_M3	Continuum removal	PLSR	1100 - 2500
Mg_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mg_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Na	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mn_AR, KCl	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mn_ox	Continuum removal	PLSR	400 - 2500
Mn_dit	1. derivace	SVM	400 - 750
Fe_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Fe_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Fe_KCl	Bez předzpracování	PCR	400 - 2500
Fe_ox	Bez předzpracování	PLSR	1100 - 2500
Fe_dit	Bez předzpracování	PLSR	750 - 2500
Al_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Al_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Al_KCl	Bez předzpracování	PCR	400 - 2500
Al_ox	Bez předzpracování	PLSR	400 - 2500
Al_dit	1. derivace	SVM	400 - 2500
Al (X) 1+	Bez předzpracování	PCR	600 - 800
Al (Y) 2+	2. derivace	SVM	1100 - 2500
Al 3+	Bez předzpracování	PCR	400 - 2500
VA	1. derivace	SVM	400 - 2500
Si_ox	1. derivace	SVM	400 - 2500
Si_dit	2. derivace	SVM	400 - 750

Jako všeobecně nejlepší se ukazuje kombinace metody předzpracování spektrálních dat pomocí 1. derivace a statistické metody *support vector machine* při použití celého VNIR spektrálního pásma (400 – 2500 nm). Existují ale případy, kdy se jako nejvhodnější ukázaly být jiné kombinace metod a jiná, užší spektrální pásma. Například vápník a hořčík stanovený ve výluhu lučavky královské byl nejlépe predikovatelný metodou PLSR aplikovanou na spektrální data upravená funkcí *continuum*

removal v blízké infračervené části spektra 1100 - 2500 nm. Pro prvky stanovené v oxalátu byla místo SVM ve většině případů nejlepší metoda PLSR (Mg, Mn, Fe, Al). Rozmanitost modelů byla sledována především v případě predikce železa a hliníku, tedy dvou velmi sledovaných prvků v lesních půdách. Velmi rozdílná je spektrální detekovatelnost jednotlivých forem hliníku. Nejméně úspěšně predikovatelná dvojmocná forma, která se váže na organickou hmotu, avšak je obsažena v extrémně malých množstvích, lze alternativně predikovat odečtením obsahu jednomocných a trojmocných komplexů od celkového obsahu stanoveného ve společném výluhu, v tomto případě výluhu KCl.

5.5. Testování a úprava nalezených modelů

V této kapitole budou nalezené modely aplikovány na nezávislé soubory dat. Konkrétně se jedná o data z lesních školek a o B horizont ze Žofínského pralesa. Budou porovnávány úspěšnosti predikcí jednotlivých vlastností před a po aplikaci modelů. Data uváděná jako ta „před aplikací modelu“ byla podrobena standardnímu statistickému zpracování, tedy metodě PLSR v celém VNIR pásmu na nepředzpracovaných spektrech. Modely, které zlepší výsledky predikce (zeleně označené), budou uznány za vhodné a univerzální. Pokud úspěšnost predikce vzroste jen velmi málo, zůstane beze změny (žlutě označené), nebo dokonce klesne (červeně označené), budou hledány jiné modely na základě dosavadních znalostí. Pokud ani toto nepovede k vytvoření univerzálního modelu, nebudou modely vyhodnoceny jako univerzální, ale jako vhodné k použití pro predikci vlastností konkrétní datové skupiny (např. náležící určitému horizontu), případně mohou být určité vlastnosti označeny jako spektrálně nedetekovatelné.

5.5.1. Lesní školky

Půdy lesních školek nepatří mezi typické zástupce lesních půd, v tomto případě však byly použity jako nezávislý soubor dat, na kterém byly ověřeny nově vzniklé modely. Jde rovněž o ukázkou využití spektroskopické metody v praxi. Jak ukazuje tabulka 9, aplikací modelů z předchozí kapitoly bylo dosaženo významného zpřesnění předpovědi půdních vlastností ve většině případů, pouze v případě vápníku, stanoveného ve výluhu Mehlich III, bylo zlepšení jen mírné. Model na predikci hliníku musel být tedy podroben dalšímu zkoumání, kterým bylo dojito k závěru, že metoda, která byla na trénovacím souboru dat určena jako druhá nejlepší (1. derivace, SVM, 400 – 2500 nm) poskytuje mnohem lepší výsledky v případě predikce vápníku v testovaném souboru, zatímco pokles u souboru trénovacího je minimální. Upravený model lze proto prohlásit za univerzálnější. Zlepšení předpovědi po úpravě modelu jsou znázorněny v tabulce 10.

Tab. 9 Porovnání základního modelu s nalezeným modelem – lesní školky

	Před aplikací modelu		Po aplikaci modelu	
	R ²	RMSE	R ²	RMSE
pH_KCl	0,52	0,56	0,70	0,45
pH_H ₂ O	0,59	0,54	0,75	0,43
N (mg.kg ⁻¹)	0,57	0,04	0,67	0,04
Cox (mg.kg ⁻¹)	0,53	0,89	0,65	0,77
P (mg.kg ⁻¹)	0,19	94,78	0,58	70,07
K (mg.kg ⁻¹)	0,09	70,64	0,28	63,58
Mg (mg.kg ⁻¹)	0,52	95,26	0,61	86,14
Ca (mg.kg ⁻¹)	0,71	580,99	0,73	571,71

Tab. 10 Predikce po úpravě modelů – lesní školky

	Před aplikací modelu		Po aplikaci modelu	
	R ²	RMSE	R ²	RMSE
pH_KCl	0,52	0,56	0,70	0,45
pH_H ₂ O	0,59	0,54	0,75	0,43
N (mg.kg ⁻¹)	0,57	0,04	0,67	0,04
Cox (mg.kg ⁻¹)	0,53	0,89	0,65	0,77
P (mg.kg ⁻¹)	0,19	94,78	0,58	70,07
K (mg.kg ⁻¹)	0,09	70,64	0,28	63,58
Mg (mg.kg ⁻¹)	0,52	95,26	0,61	86,14
Ca (mg.kg ⁻¹)	0,71	580,99	0,81	490,98

5.5.2. Horizont B – Žofinský prales

Modely, natrénované na ostatních datových souborech, budou dále aplikovány i na vzorky z horizontů B odebrané v Žofinském pralesi. Výsledky jsou znázorněny v tabulce 11. Ve 13 z 25 případů bylo dosaženo výrazného zlepšení predikce, v 11 případech bylo zlepšení mírné, v jednom případě vedla aplikace modelu ke zhoršení predikce.

Tab. 11 Porovnání základního modelu s nalezeným modelem – B horizonty, Žofínský prales

	Před aplikací modelu		Po aplikaci modelu	
	R ²	RMSE	R ²	RMSE
Cox (%)	0,59	0,47	0,72	0,39
pH_KCl	0,33	0,10	0,62	0,08
KVK (mmol ⁺ .kg ⁻¹)	0,17	17,52	0,34	15,66
VA (mmol ⁺ .kg ⁻¹)	0,37	11,34	0,50	10,16
Al_vym (mg.kg ⁻¹)	0,47	69,10	0,54	64,07
Fe_vym (mg.kg ⁻¹)	0,18	8,45	0,29	7,90
Mg_vym (mg.kg ⁻¹)	0,21	11,20	0,22	11,19
Mn_vym (mg.kg ⁻¹)	0,19	4,25	0,20	6,24
Ca_vym (mg.kg ⁻¹)	0,01	0,38	0,02	0,44
Na_vym (mg.kg ⁻¹)	0,07	9,61	0,28	8,56
K_vym (mg.kg ⁻¹)	0,33	9,92	0,43	9,28
Al_KCl (mg.kg ⁻¹)	0,38	68,48	0,38	68,47
Mn_KCl (mg.kg ⁻¹)	0,41	4,92	0,45	4,75
Fe_KCl (mg.kg ⁻¹)	0,29	6,29	0,30	6,26
Al (X) 1+ (mg.kg ⁻¹)	0,48	2,68	0,55	2,51
Al (Y) 2+ (mg.kg ⁻¹)	0,17	3,94	0,27	3,85
Al 3+ (mg.kg ⁻¹)	0,37	67,30	0,37	67,30
Al_ox (mg.kg ⁻¹)	0,67	2779,00	0,68	2739,20
Mn_ox (mg.kg ⁻¹)	0,26	157,33	0,35	132,52
Fe_ox (mg.kg ⁻¹)	0,51	2553,60	0,51	2544,90
Si_ox (mg.kg ⁻¹)	0,59	552,82	0,64	523,54
Al_dit (mg.kg ⁻¹)	0,57	2327,40	0,57	2317,80
Mn_dit (mg.kg ⁻¹)	0,20	172,76	0,25	167,87
Fe_dit (mg.kg ⁻¹)	0,38	3641,50	0,38	3640,25
Si_dit (mg.kg ⁻¹)	0,24	527,17	0,16	554,55

Úspěšnost predikce výměnného hořčíku se aplikací vítězného modelu (1. derivace, SVM, 400 – 2500 nm) zvýšila jen mírně. Aplikace jiných modelů ovšem úspěšnost nezvýšila téměř vůbec, nebo ji dokonce zhoršila. Byla tedy potvrzena vhodnost použití nejlepšího modelu. Stejná situace je i v případě výměnného manganu v roztoku BaCl₂ i KCl. Predikce výměnného vápníku je v tomto datovém souboru velice slabá. Kromě nejlepšího modelu z předchozí kapitoly byly zkoušeny i další, ale žádný z nich předpověď výrazně nezlepšil. Původní model (1. derivace, SVM, 400 – 2500 nm) tedy zůstává jako nejlepší, koeficient determinace přesto nepřekonal hranici R² = 0,02. Vzorčky tohoto datového souboru obsahovaly velmi nízké množství vápníku. Je tedy patrné, že vápník je spektroskopicky detekovatelný pouze při vyšším obsahu v půdě. Predikce hliníku ve výluhu KCl zůstala po aplikaci modelu (PCR, 400 – 2500) bez zlepšení. Byl tedy aplikován druhý nejlepší model (PLSR, 400 – 2500), který v případě trénovacího souboru poskytl pouze zanedbatelně horší výsledek, ale u testovacího souboru hodnota predikce stoupla. Model byl uznán univerzálnějším. Stejná situace a stejná změna modelu nastala i v případě trojmocného hliníku. V případě Al_{ox} ke zlepšení nedošlo, jelikož model PLSR v celém VNIR spektru je uznán jako nejvhodnější. Drobné vylepšení je způsobeno oříznutím spektra ve vlnových délkách 350 – 400 nm z důvodu odstranění šumu. Obdobná

situace nastala i v případě Fe_{ox}, kde byla použita část spektra v rozsahu 1100 – 2500 nm a Fe_{dit} se zvoleným rozsahem 750 – 2500 nm.

V případě predikce železa ve výluhu KCl vyšly původně jako dva nejlepší modely PLSR a PCR na nepředzpracovaných vzorcích v celém VNIR spektru. V těsném závěsu, co se týče úspěšnosti, byl model 1. derivace, SVM, v celém VNIR spektru. Tento model výrazně zlepšil predikci Fe KCl u testovacího souboru, zatímco u souboru trénovacího predikci zhoršil minimálně. Byl tedy uznán univerzálnějším. Hliník stanovený v dithioničnanu byl aplikací modelu predikován jen s velmi mírným zlepšením, ale žádný jiný model predikci nezlepšil, proto je model (1. derivace, SVM, VNIR spektrum) uznán jako nejlepší a univerzální. Křemík stanovený v dithioničnanu byl pomocí vítězného modelu predikován neúspěšně. Byl tedy hledán takový model, který predikci významně vylepší a zároveň příliš nezhorší predikci u trénovacího souboru. Takovým modelem se ukázala být kombinace metod 1. derivace, SVM, v pásmu 400 – 2500 nm.

Po úpravě modelů v případech, kdy to bylo zapotřebí, byla ve všech případech zvýšena úspěšnost predikce. Výsledky predikce po úpravě modelů jsou znázorněny v tabulce 12.

Tab. 12 Predikce po úpravě modelů – B horizonty, Žofinský prales

	Před aplikací modelu		Po aplikaci modelu	
	R ²	RMSE	R ²	RMSE
Cox (%)	0,59	0,47	0,72	0,39
pH_KCl	0,33	0,10	0,62	0,08
KVK (mmol ⁺ .kg ⁻¹)	0,17	17,52	0,34	15,66
VA (mmol ⁺ .kg ⁻¹)	0,37	11,34	0,5	10,16
Al _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,47	69,10	0,54	64,07
Fe _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,18	8,45	0,29	7,90
Mg _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,21	11,20	0,22	11,19
Mn _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,19	4,25	0,2	6,24
Ca _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,01	0,38	0,02	0,44
Na _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,07	9,61	0,28	8,56
K _{vym} (mg.kg ⁻¹)	0,33	9,92	0,43	9,28
Al_KCl (mg.kg ⁻¹)	0,38	68,48	0,42	65,95
Mn_KCl (mg.kg ⁻¹)	0,41	4,92	0,45	4,75
Fe_KCl (mg.kg ⁻¹)	0,29	6,29	0,42	5,82
Al (X) 1+ (mg.kg ⁻¹)	0,48	2,68	0,55	2,51
Al (Y) 2+ (mg.kg ⁻¹)	0,17	3,94	0,27	3,85
Al 3+ (mg.kg ⁻¹)	0,37	67,30	0,42	64,53
Al _{ox} (mg.kg ⁻¹)	0,67	2779,00	0,68	2739,20
Mn _{ox} (mg.kg ⁻¹)	0,26	157,33	0,35	132,52
Fe _{ox} (mg.kg ⁻¹)	0,51	2553,60	0,51	2544,90
Si _{ox} (mg.kg ⁻¹)	0,59	552,82	0,64	523,54
Al _{dit} (mg.kg ⁻¹)	0,57	2327,40	0,57	2317,80
Mn _{dit} (mg.kg ⁻¹)	0,20	172,76	0,25	167,87
Fe _{dit} (mg.kg ⁻¹)	0,38	3641,50	0,38	3640,25
Si _{dit} (mg.kg ⁻¹)	0,24	527,17	0,47	442,88

V tabulce 13 jsou znázorněny vítězné modely pro predikci vlastností lesních půd. Kromě úspěšnosti predikce byl kladen důraz i na univerzálnost použití daných modelů. V případě potřeby modelu pro konkrétní oblast, či horizont, jsou tyto modely popsány v předchozích kapitolách. V případě, že byla určitá vlastnost stanovena různými způsoby, avšak model je pro všechny tyto způsoby společný, je v tabulce označena pouze daná vlastnost. Pokud způsob stanovení měl vliv na spektrální detekovatelnost a vyžadoval tedy použití jiného modelu, jsou vlastnosti jednotlivě popsány i se způsobem stanovení.

Tab. 13 Nejlepší univerzální statistické modely pro predikci jednotlivých vlastností

Vlastnost	Předzpracování	Statistická metoda	Spektrální pásmo (nm)
pH H ₂ O,	1. derivace	SVM	400 - 2500
pH CaCl ₂	1. derivace	SVM	400 - 2500
pH KCl	1. derivace	SVM	400 - 2500
Cox	1. derivace	SVM	400 - 2500
KVK	1. derivace	SVM	400 - 2500
BS	1. derivace	SVM	400 - 2500
N	1. derivace	SVM	400 - 2500
P	1. derivace	SVM	400 - 2500
K	1. derivace	SVM	400 - 2500
Ca	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mg_M3	Continuum removal	PLSR	1100 - 2500
Mg_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mg_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Na	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mn_AR, KCl	1. derivace	SVM	400 - 2500
Mn_ox	Continuum removal	PLSR	400 - 2500
Mn_dit	1. derivace	SVM	400 - 750
Fe_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Fe_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Fe_KCl	1. derivace	SVM	400 - 2500
Fe_ox	Bez předzpracování	PLSR	1100 - 2500
Fe_dit	Bez předzpracování	PLSR	750 - 2500
Al_vym (BaCl ₂)	1. derivace	SVM	400 - 2500
Al_AR	1. derivace	SVM	400 - 2500
Al_KCl	Bez předzpracování	PLSR	400 - 2500
Al_ox	Bez předzpracování	PLSR	400 - 2500
Al_dit	1. derivace	SVM	400 - 2500
Al (X) 1+	Bez předzpracování	PCR	600 - 800
Al (Y) 2+	2. derivace	SVM	1100 - 2500
Al 3+	Bez předzpracování	PLSR	400 - 2500
VA	1. derivace	SVM	400 - 2500
Si	1. derivace	SVM	400 - 2500

6. ZÁVĚR

Cílem předložené doktorské dizertační práce bylo objektivní zhodnocení použitelnosti spektroskopie ve viditelné a blízké infračervené části spektra pro predikci vlastností lesních půd. Tyto půdy se od zemědělských zásadně liší svým vzhledem, vývojem, fyzikálními i chemickými procesy, přítomností organických horizontů atd. Také se u nich obvykle sledují jiné vlastnosti. Vždy je nezbytné stanovit před vlastní predikcí základní statistické charakteristiky daného souboru, například normalitu rozložení dat, aby se předešlo chybným postupům a závěrům. Bylo zjištěno, že dělení datového souboru podle oblastí odběru vzorku není významným vstupním kritériem, podstatnější je právě rozložení dat. Z důvodů velké rozdílnosti mezi organickými a minerálními horizonty se v práci doporučuje zkoumání těchto horizontů zvlášť. Testováním, zda je vhodnější použít pro měření spekter a následnou predikci místo jemnozeme I (2 mm) jemnozeme II (0,2 mm), bylo zjištěno zhoršení předpovědi a použití jemnozeme II není doporučeno.

Jelikož bylo k dispozici velké množství dat, bylo možné tato data rozdělit na větší soubor trénovací, na kterém byly postupně důkladně trénovány jednotlivé modely, a soubor testovací, na kterém byly tyto modely testovány a na základě výsledků dále případně upravovány. Takto byly pro každou půdní vlastnost nalezeny nejvhodnější kombinace metod statistického předzpracování a zpracování v určitých spektrálních pásmech. Jako všeobecně nejúspěšnější se ukazuje kombinace metod 1. derivace a support vector machine v celém VNIR spektrálním pásmu (400 – 2500 nm). V některých případech se však osvědčily modely jiné. Mezi nejlépe predikovatelné vlastnosti ($R^2 > 0,6$) patří pH, obsah oxidovatelného uhlíku, obsahy hliníku, železa, křemíku, nebo vápníku (ve vyšších koncentracích). Nepříliš vysoká úspěšnost predikce ($R^2 < 0,3$) byla zjištěna u ukazatelů, které nabývají nízkých hodnot (obsah sodíku, manganu, nebo dvojmocné komplexy hliníku).

Výsledky ukazují, že VNIR spektroskopie je použitelnou metodou pro predikci vlastností lesních půd. Nemůže zcela nahradit klasickou analýzu, ale může ji velice dobře doplňovat a to především v praxi. Například při půdním mapování může pomoci zahustit síť údajů a zpřesnit informace lépe, než při použití jiných metod prostorového odhadu. Je použitelná v případech, kdy je zapotřebí velké množství údajů v krátkém časovém horizontu a s minimálními náklady. Je vhodná pro sledování trendů v čase, nebo pro rychlý průzkum určité oblasti. Její používání je stále ještě v začátcích. Spolu se zdokonalováním modelů a zlepšováním technických možností však její význam do budoucna poroste.

7. SUMMARY

The aim of this PhD thesis was an objective assessment of application of VNIR spectroscopy for predicting properties of forest soils. Forest soils are fundamentally different in its appearance, evolution, physical and chemical processes, the presence of organic horizon, etc. Also, they usually pursue other properties. It is always necessary to establish before the actual predictions basic statistical characteristics of the file, such as normality distribution of data in order to avoid erroneous procedures and conclusions. Dividing the data file by area is not an important input factor. For reasons big differences between organic and mineral horizons is recommended exploring these horizons separately. Using the soil samples with a particle size up to 0.2 mm is not recommended.

Because it was a large amount of data, it was possible to distribute the data to a larger set of training, which were gradually thoroughly trained individual models and test file on which these models were tested and the results of further revised where necessary. For each soil property were found the most appropriate combination of statistical methods for pre-processing and processing of certain spectral bands. As generally successful shows a combination of methods 1. derivation and support vector machine throughout the VNIR spectral range (400-2500 nm). In some cases, however, they proved to other models. Among the best predictable features include pH, content of oxidizable carbon, aluminum, iron, silicon, or calcium (at higher concentrations). Not very high success rate prediction was found in indicators that take low values (sodium, manganese, aluminum or ferrous complexes).

The results show that VNIR spectroscopy method is applicable for predicting properties of forest soils. It can not completely replace traditional analysis, but it can very well complement, especially in practice. For example, when the soil mapping can help thicken network data and refine the information better than other methods of spatial estimation. It is applicable in cases where it is required large amounts of data in a short timeframe and at minimal cost. It is suitable for monitoring trends over time, or for a quick survey of an area. Its use is still in its infancy. Along with the improvement of models and improving technical possibilities but its importance will grow in the future.

8. SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- Ben-Dor, E., Banin, A. (1995): Near infrared analysis as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. *Soil Science Society of America Journal* 59: 364–372
- Bilgili, A.V., van Es, H.M., Akbas, F., Durak, A., Hively, W.D. (2010): Visible-near infrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in a semi-arid area of Turkey. *Journal of Arid Environments* 74, 229 - 238
- Brown, D.J., Shepherd, K.D., Walsh, M.G., Mays, M.D., Reinsch, T.G. (2006): Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma* 132, 273-290
- Cozzolino, D., Morón, A. (2003): The potential of near-infrared reflectance spectroscopy to analyse soil chemical and physical characteristics. *Journal of Agricultural Science* 140, 65 -71
- Hanuš, J., Malenovský, Z., Homolová, L., Kaplan, V., Lukeš, P., Cudlín P. (2008): Potentials of the VNIR airborne hyperspectral system AISA Eagle. *Konference GIS, 2008. Ostrava*. Dostupné z www: < http://gis.vsb.cz/GIS_Ostrava/GIS_Ova_2008/sbornik/index.htm >
- He, Y., Song, H. (2006): Prediction of soil content using near-infrared spectroscopy. *SPIE Newsroom*
- Chang, G.W., Laird, D.A., Hurburgh, G.R. (2005): Influence of soil moisture on near-infrared reflectance spectroscopic measurement of soil properties. *Soil Science* 170, 244-255
- Chodak, M., Khanna, P., Horvath, B., Beese, F. (2004): Near infrared spectroscopy for determination of total and exchangeable cations in geologically heterogeneous forest soils. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 12, 315 - 324
- Kemper, T., Sommer, S. (2002): Estimate of heavy metal contamination in soils after a mining accident using reflectance spectroscopy. *Environmental Science & Technology* 36, 2742 - 2747
- Kooistra, L., Wehrens, R., Leuven, R.S.E.W., Buydens, L.M.C. (2001): Possibilities of visible-near-infrared spectroscopy for the assessment of soil contamination in river floodplains. *Analytica Chimica Acta* 446, 97-105
- Ludwig, B., Khanna, P.K., Bauhus, P., Hopmans, P. (2002): Near infrared spectroscopy of forest soils to determine chemical and biological properties related to soil sustainability. *Forest Ecology and Management* 171, 121 - 132
- Lukas, V. (2009): Podklad pro diferencované provádění pěstebních zásahů. *Dizertační práce. Mendelova zemědělská a lesnická univerzita v Brně*
- Martens, H., Naes, T. (1989). *Multivariate Calibration*, second ed. John Wiley and Sons Ltd, Chichester, UK, 419 pp.
- McBratney, A.B., Minasny, B., Viscarra Rossel, R. (2006): Spectral soil analysis and inference systems: A powerful combination for solving the soil data crisis. *Geoderma* 136, 272 - 278

- Metternicht, G.I. (1998): Analysing the relationship between ground-based reflectance and environmental indicators of salinity processes in the Cochabamba Valleys (Bolivia). *International Journal of Ecology and Environmental Sciences* 24, 359 - 370
- Morón, A., Cozzolino, D. (2002): Application of near infrared reflectance spectroscopy for the analysis of organic C, total N and pH in soils of Uruguay. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 10, 215 - 221
- Mouazen, A.M., De Baerdemaeker, J., Ramon, H. (2006): Effect of wavelength range on the measurement accuracy of some selected soil constituents using visual-near infrared spectroscopy. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 14, 189-199
- Pelíšek, J. (1956): *Pedologie lesnická*. Státní nakladatelství technické literatury Praha
- Reeves, J.B., McCarty, G., Mimmo, T. (2002): The potential of diffuse reflectance spectroscopy for the determination of carbon inventories in soils. *Environmental Pollution* 116, 277 - 284
- Reeves, J.B., Van Kessel, J.S. (1999): Investigations into near-infrared analysis as an alternative to traditional procedures in manure N and C mineralization studies. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 7, 195 - 212
- Shepherd, K.D., Walsh, M.G. (2002): Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. *Soil Science Society of America Journal* 66, 988 - 998
- Tatzber, M., Mutsch, F., Mentler, A., Leitgeb, E., Englisch, M., Gerzabek, M.H. (2010): Determination of organic and inorganic carbon in forest soil samples by mid-infrared spectroscopy and partial least squares regression. *Applied Spectroscopy* 64, 1167-1175
- Udelhoven, T., Emmerling, C., Jarmer, T. (2003): Quantitative analysis of soil chemical properties with diffuse reflectance spectrometry and partial-least square regression: a feasibility study. *Plant and Soil* 251, 319 - 329
- Viscarra Rossel, R. A. Behrens, T. (2010): Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma* 158, 46-54
- Viscarra Rossel, R.A., Walvoort, D.J.J., McBratney, A.B., Janik, L.J., Skjemstad, J.O. (2006): Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. *Geoderma* 131, 59 - 75
- Wold, S., Martens, H. and Wold, H. (1983): The Multivariate Calibration Problem in Chemistry solved by the PLS Method. *Proc. Conf. Matrix Pencils*, (A. Ruhe and B. Kågström, eds.), March 1982, *Lecture Notes in Mathematics*, Springer Verlag, Heidelberg, 286-293.
- Wu, Y.Z., Chen, J., Wu, X.M., Tian, Q.J., Ji, J.F., Qin, Z.H. (2005): Possibilities of reflectance spectroscopy for the assessment of contaminant elements in suburban soils. *Applied Geochemistry* 20, 1051 - 1059

9. STRUKTUROVANÝ ŽIVOTOPIS

Ing. Josef Kratina
Nar. 16.12.1984 v Praze
Hrdoňovice 43, Újezd pod Troskami, 512 63
Telefon: 605 420 333
e-mail: josef.kratina@email.cz

Vzdělání

- 1996 – 2004 Gymnázium U Balvanu, Jablonec nad Nisou
- 2004 – 2008 Bakalářský program **Udržitelné využívání přírodních zdrojů**, Česká zemědělská univerzita v Praze. Téma bakalářské práce: *Acidifikace půd Jizerských hor v závislosti na geologickém podloží*
- 2008 – 2010 Magisterský program **Hodnocení a Ochrana půdy**, Česká zemědělská univerzita v Praze. Téma diplomové práce: *Rozdíly ve vlastnostech horských lesních půd na kyselých a bazických matečných horninách*
- Probíhající: 2010 – září 2015 Doktorský program **Využití a ochrana přírodních zdrojů**, Česká zemědělská univerzita v Praze. Téma dizertační práce: *Možnosti využití spektroskopie ve viditelné a infračervené oblasti pro predikci vlastností lesních půd*

Pracovní zkušenosti

- 2006 – 2010 Pomocný vědecký pracovník, Katedra pedologie a ochrany půd, Česká zemědělská univerzita v Praze
- 2010 – únor 2015 Laboratorní technik, laborant, Katedra pedologie a ochrany půd, Česká zemědělská univerzita v Praze

Zkušenosti s podáváním a řešením grantů, s hodnocením životního prostředí, s chemickou a fyzikální analýzou půd, s pokročilou statistikou, s interpretací dat, s prací v kolektivu, s pedagogickou činností

Jazykové znalosti

Anglický jazyk – pokročilý
Německý jazyk – mírně pokročilý

Počítačové znalosti

Výborné: Microsoft Office, tvorba webových stránek, práce s internetem, práce s grafickým software, práce se statistickým software
Základy: GIS

10. SEZNAM PUBLIKACÍ

Článek k řešené problematice v impaktovaném časopise

Gholizadeh, A., Borůvka, L., Vašát, R., Saberioon, M., Klement, A., Kratina, J., Tejnecký, V., Drábek, O. (2015): Estimation of Potentially Toxic Elements Contamination in Anthropogenic Soils on a Brown Coal Mining Dumpsite by Reflectance Spectroscopy: A Case Study. Plos One. DOI: 10.1371/journal.pone.0117457

Článek k řešené problematice v recenzovaném časopise

Kratina, J., Borůvka, L., Tejnecký, V., Drábek, O., Šebek, O. (2010): Rozdíly ve vlastnostech horských lesních půd na kyselých a bazických matečních horninách. Geologické výzkumy na Moravě a ve Slezsku. 66 - 72

Článek a abstrakty k řešené problematice ve sborníku

Kratina, J., Klement, A., Borůvka, L. (2010): Korelace spektrálních znaků ve viditelné a blízké infračervené oblasti s vybranými vlastnostmi lesních půd. In Sborník abstraktů "Pôda v krajine v meniacom sa režime využívania a ochrany". Konferencia Pedologické dni 2012, s.31. ISBN: 978-80-89128-96-9

Kratina, J., Borůvka, L., Tejnecký, V., Drábek, O., Šebek, O. (2010): Rozdíly ve vlastnostech horských lesních půd na kyselých a bazických matečních horninách. In Sborník abstraktů „Ekosystémové služby pôdy v pol'nohospodárskej a lesnej krajine“. Pôdoznalecké dni 2014, Skalica 9.- 11.9.2014. Bratislava: NPPC- VÚPOP Bratislava 2014, Societas slovac, s. 42

Houška, J., Kratina, J., Cafourek, J., Vašát, R., Němeček, K., Borůvka, L. (2014): Soil properties detection via Visible-IR spectroscopy: impact of sample selection method and memory-based learning in comparison to PLSR - new perspective for agronomists? In Sborník abstraktů „Ekosystémové služby pôdy v pol'nohospodárskej a lesnej krajine“. Pôdoznalecké dni 2014, Skalica 9.- 11.9.2014. Bratislava: NPPC- VÚPOP Bratislava 2014, Societas slovac, s. 41