

Autoreferat

**w postępowaniu habilitacyjnym w dziedzinie nauk rolniczych, w dyscyplinie ochrona
i kształtowanie środowiska**

Dr Guillaume Debaene

Instytut Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa -
Państwowy Instytut Badawczy
Zakład Gleboznawstwa Erozji i Ochrony Gruntów

Tytuł osiągnięcia naukowego:

Zastosowania spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do analiz
gleb ornych

Puławy, 26 kwietnia 2019 r.

Guillaume Debaene

Dr Guillaume Debaene
Instytut Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa
Państwowy Instytut Badawczy
Zakład Gleboznawstwa Erozji i Ochrony Gruntów
ul. Czartoryskich 8
24-100 Puławy

1. Dane osobowe:

Imię i nazwisko: Guillaume Debaene

Data i miejsce urodzenia: 18.02.1974 r., Dunkierka (Francja)

Narodowość: Francuska

Miejsce pracy: Instytut Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa – Państwowy Instytut
Badawczy, Zakład Gleboznawstwa Erozji i Ochrony Gruntów

Dane kontaktowe: +48 81 47 86 776 ; gdebaene@iung.pulawy.pl

2. Wykształcenie:

W roku 1998 uzyskałem stopień magistra (Maîtrise) w Zakładzie Nauk o Ziemi, na Uniwersytecie w Lille (USTL - Université des Sciences et Technologies de Lille). Następnie, w roku 1999 uzyskałem stopień magistra (D.E.A.) z Zakładzie Geologii Czwartorzędu w Instytucie Paleontologii w Paryżu (IPH - Institut de Paléontologie Humaine – Muséum National d’Histoire Naturelle – MNHN). W roku 2000 uzyskałem stypendium rządu francuskiego (Bourse de coopération scientifique et culturelle France - Pologne 2000), po którym zostałem przyjęty na 4-letnie dzienne studia doktoranckie w Instytucie Nauk Geologicznych PAN w Warszawie.

Pracę doktorską pt. „Uranium-series dating of carbonate sediments with significant detrital contamination” obroniłem w roku 2004 w Zakładzie Geologii Czwartorzędu w Instytucie Nauk Geologicznych PAN w Warszawie, uzyskując stopień doktora Nauk o Ziemi w zakresie geologii. Promotorem pracy była Profesor Helena Hercman (specjalistka w zakresie geologii czwartorzędu). Recenzentem pracy byli: Profesor Jerzy Głazek (specjalista w zakresie geologii), Profesor Stanisław Hałas (specjalista w zakresie fizyki) oraz

Profesor Tim Atkinson – University College London, Uniwersytet College w Londynie (specjalista w zakresie geologii czwartorzędu).

3. Zatrudnienie:

W latach 2007-2018 pracowałem na stanowisku starszego specjalisty badawczo-technicznego w Zakładzie Gleboznawstwa Erozji i Ochrony Gruntów; Instytut Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa w Puławach – Państwowy Instytut Badawczy. Od roku 2018 pracuję w tym samym Zakładzie, ale na stanowisku adiunkta.

4. Wskazanie osiągnięcia wynikającego z art. 16 ust. 2 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz. U. nr 65, poz. 595 z późn. zm.):

4.1. Tytuł osiągnięcia naukowego

Zastosowania spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do analiz gleb ornych.

4.2. Wykaz publikacji stanowiących osiągnięcie naukowe [A1-6]

Osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę do ubiegania się o stopień naukowy doktora habilitowanego udokumentowane jest cyklem sześciu jednotematycznych publikacji naukowych o łącznej sumie punktów MNiSW w roku wydania wynoszącym 95 i sumarycznym wskaźniku Impact Factor wynoszącym 3,090.

1. **Debaene G.**, Niedźwiecki J., Pecio A., **2010**: Visible and near-infrared spectrophotometer for soil analysis: preliminary results. Polish Journal of Agronomy, 3: 3-9. [A1]
2. **Debaene G.**, Niedźwiecki J., Pecio A., Żurek A., **2014**: Effect of the number of calibration samples on the prediction of several soil properties at the farm-scale. Geoderma, 214: 114-125. [A2]
3. **Debaene G.**, Pikuła D., Niedźwiecki J., **2014**: Use of VIS-NIRS for land management classification with a support vector machine and prediction of soil organic carbon and other soil properties. Ciencia e Investigación Agraria, 41(1), 21-32. [A3]
4. **Debaene G.**, Pikuła A., Niedźwiecki J., Kowalik M., **2015**: Spektroskopia bliskiej podczerwieni jako narzędzie przydatne w określaniu żyzności gleb. Studia i Raporty IUNG-PIB, 46(20): 85-103. [A4]

5. **Debaene G.**, Bartmiński P., Niedźwiecki J., Miturski T., **2017**: Visible and near-infrared spectroscopy as a tool for soil classification and soil profile description. Polish Journal of Soil Science, 50(1): 1-10. [A5]
6. Niedźwiecki J., **Debaene G.**, Kowalik M., **2017**: Spektralna biblioteka gleb użytków rolnych w Polsce - Podstawowe założenia. Studia i Raporty IUNG-PIB, 51(5): 91-110. [A6]

Przedstawione powyżej prace [A1-A6] nie były częścią monotematycznego cyklu prac w żadnym innym postępowaniu habilitacyjnym. Dane szczegółowe dotyczące punktów MNiSW, wskaźnika Impact Factor oraz liczby cytowań wg bazy Web of Science oraz bazy Scopus zestawiono w tabeli poniżej.

Tabela 1. Zestawienie publikacji wraz z punktacją, wskaźnikiem IF oraz liczbą cytowań i procentowym udziałem habilitanta

| Artykuł | Punkty MNiSW w roku wydania | Impact Factor w roku wydania | 5-letni Impact Factor w roku wydania | Liczba cytowań WoS / Scopus stan na 18.04.2019 r. | Procentowy udział |
|--------------|-----------------------------|------------------------------|--------------------------------------|---|-------------------|
| A1 | 6 | - | - | - | 85 |
| A2 | 45 | 2,772 | 3,524 | 30 / 34 | 80 |
| A3 | 20 | 0,318 | 0,436 | 0 / 1 | 85 |
| A4 | 5 | - | - | - | 80 |
| A5 | 14 | - | - | - / 2 | 85 |
| A6 | 5 | - | - | - | 80 |
| Razem | 95 | 3,090 | 3,960 | 30 / 37 | - |

Ponadto jestem autorem lub współautorem artykułów i rozdziałów monografii, których wykaz przedstawiono w Załączniku 6. Mój całkowity dorobek wynosi: **IF = 12,761**, h-index = 3 wg bazy *Web of Science* i h-index = 4 wg bazy *Scopus*. Liczba cytowań wg bazy *Web of Science* 76, wg bazy *Scopus* 94.

4.3. Omówienie celu naukowego ww. pracy i osiągniętych wyników wraz z omówieniem ich ewentualnego wykorzystania

Głównym celem przeprowadzonych badań było wykazanie, że spektroskopia w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni jest narzędziem odpowiednim do przewidywania właściwości gleb ornych w Polsce.

W osiągnięciu naukowym postawiono trzy główne hipotezy:

1. Grunty orne są dobrym materiałem do badań metodą spektroskopii odbiciowej i z tego powodu jest ona rekomendowana do stosowania w rolnictwie precyzyjnym.
2. Spektroskopia w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni jest narzędziem, które można wykorzystać do mapowania właściwości gleb przy niskim koszcie i z precyzją zbliżoną do metody klasycznej.
3. Widma VIS-NIR gleb mineralnych (gleb ornych) zawierają informacje, które umożliwiają klasyfikację gleb.

Celami postawionym w osiągnięciu naukowym były:

- Cel 1. Wprowadzenie i upowszechnienie w Polsce metody spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do analiz gleb ornych. [A1]
- Cel 2. Zbudowanie krajowej biblioteki widm gleb ornych w Polsce i wykorzystanie metody do przewidywania właściwości chemicznych i fizycznych gleb w różnej skali przestrzennej. [A1, A2, A3, A4, A6]
- Cel 3. Redukcja kosztów analiz: poszukiwanie najlepszej metody kalibracji przy jak najmniejszej ilości próbek i wykorzystanie istniejącej bazy danych (IUNG-PIB) o glebach. [A2, A6]
- Cel 4. Wykorzystanie metody do mapowania właściwości gleb w różnej skali przestrzennej (od skali pola do skali kraju). [A2, A4, A6]
- Cel 5. Próba klasyfikowania gleb na podstawie metod spektralnych. [A3, A5]

Wprowadzenie

Wraz z rosnącą liczbą ludności na świecie istnieje potrzeba rozwijania bardziej produktywnego i zrównoważonego rolnictwa (Bongiovanni i Lowenberg-Deboer, 2004; Pimentel, 1991). Wzrost populacji wiąże się z problemami środowiskowymi, takimi jak zanieczyszczenie gleby czy globalne ocieplenie. Rolnictwo precyzyjne oparte na wykorzystaniu czujników bliskiej podczerwieni jest jedną z odpowiedzi na te problemy. Czujniki bliskiej podczerwieni mogą być wykorzystywane w laboratoriach, ale są również obiecującymi narzędziami, które można wykorzystywać w ruchu jako metoda „on the go” (Christy, 2008; A4), on-line na próbkach będących w ruchu (Porep i in., 2015), „in situ” lub w laboratoriach monitoringowych i do celów badań przesiewowych (A2; Nocita i in., 2015; Wenjun i in., 2014). Niestety do wszystkich tych zdań wymagana jest duża liczba próbek. Celem i głównym zadaniem spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej

podczerwieni (VIS-NIR) jest szybkie i tanie scharakteryzowanie produktów czy próbek, wykrywanie anomalii i odstających wartości w trakcie procesu produkcji czy analiz. Po opublikowaniu nowatorskich prac Norris and Hart (1965) oraz Williams (1973), metodę tą wykorzystuje się najczęściej w sektorze rolnym (zboża, pasze, ziarna) i spożywczym do analizy żywności i napojów (García-Sánchez i in., 2017; Roberts i in., 2004), jak również w przemyśle farmaceutycznym (Jamrógiewicz, 2012) czy chemicznym (Chung, 2007; Long i in., 2018). W ostatnich latach metoda ta zyskała również zainteresowanie w sektorze medycznym (Chou i Lan, 2013; Sakudo, 2016). Sektor gospodarki odpadami (Smidt i in., 2011) również aktywnie wykorzystuje i rozwija tę technikę. W najnowszej literaturze obserwuje się również coraz większe zainteresowanie użycia spektroskopii VIS-NIR w różnorodnych zastosowaniach. Analiza gleby tą metodą nadal stanowi wyzwanie z uwagi na specyfikę i złożoność materiału (Ben Dor i in., 2015; Nduwamungu i in., 2009; Roberts i Cozzolino, 2017). Większość badań glebowych opartych na spektroskopii VIS-NIR skupiła się na przewidywaniu właściwości gleb (Nocita i in., 2015), zwłaszcza przewidywaniu zawartości węgla organicznego (Ladoni i in., 2010). W ostatnim czasie podjęto próby klasyfikowania gleb według różnych parametrów tj. np. typ gleby, zawartość węgla organicznego, rodzaj użytkowania terenu (A3, Vasques i in., 2014). Dokładne oszacowanie w glebie zawartości węgla organicznego i nieorganicznego za pomocą spektroskopii VIS-NIR jest szczególnie pożądane ze względu na proces sekwestracji węgla oraz badania nad jakością gleby. Metoda ta ma również duży potencjał zastosowania w rolnictwie precyzyjnym oraz do celów mapowania terenu (np. do cyfrowej kartografii gleb - ang. *digital soil mapping* DSM). Dokładność predykcyjna wskazywana w literaturze jest często zbliżona do klasycznych analiz laboratoryjnych (Sørensen, 2002).

Podstawą spektroskopii VIS-NIR jest absorbowanie promieniowania (światła) w obszarze NIR, przez różne wiązania chemiczne (tj. np. C-H, N-H, O-H, C=O) w związkach obecnych w próbce. Ta absorpcja jest powiązana ze stężeniem tych związków. Dlatego widma w zakresie bliskiej podczerwieni NIR zawierają informacje o składzie organicznym próbek i istnieje ilościowa zależność między składem chemicznym, a widmem. Również właściwości fizyczne (np. wielkość cząstek) są związane z widmem NIR, ponieważ na kształt widma wpływ ma zarówno odbicie, jak i rozproszenie światła. Istnieje wiele zalet pomiarów metodą VIS-NIR w porównaniu z innymi technikami: (1) informacja wibracyjna związana z wiązaniem C-H, ale również z wiązaniami C-O i N-H, jest powtarzana kilka razy w zakresie widm pomiędzy 780 nm a 2500 nm, (2) można wybierać różne regiony kombinacji aby ulepszać modelowanie, (3) stosunkowo łatwo jest budować tani instrument o wysokim

stosunku sygnału do szumów, (4) metoda jest szybka nawet przy zastosowaniu światłowodów niskokosztowych, (5) metoda ta nie niszczy próbek, wymaga tylko minimalnej obróbki (przesianie), a często nie wymaga żadnej obróbki badanego materiału, (6) jest przyjazna dla środowiska z uwagi na wyeliminowanie użycia toksycznych odczynników chemicznych.

Problem z materiałem glebowym polega na tym, że skomplikowana matryca na ogół wymaga użycia pełnego zakresu widm (780-2500 nm). Bardzo często do widm NIR dodawany jest region widzialny VIS (350-780 nm).

W zakresie pasm światła widzialnego (VIS) większość różnic w widmach pomiędzy próbkami wynika z koloru próbki gleby powodowanej przez chromofory, tj. zawartość materii organicznej i tlenków żelaza. W obszarze podczerwieni długości fal są pochłaniane przez kowalencyjne wiązania chemiczne (np. C-H, O-H i N-H). Widma bliskiej podczerwieni składają się z nadtonów i pasm kombinacyjnych tych podstawowych absorpcji molekularnych występujących w obszarze średniej podczerwieni (MIR). W naukach gleboznawczych większość spektrometrów bliskiej podczerwieni (NIR) pracuje na zasadzie spektroskopii odbiciowej (ang. *reflectance spectroscopy*). Oznacza to, że czujnik rejestruje długości fal odbitych przez próbkę w regionie bliskiej podczerwieni NIR. Czujnik jest podłączony do spektrometru, który może obliczyć absorbancję. Absorbancja jest związana ze składem chemicznym próbki i pośrednio z fizycznymi i biologicznymi właściwościami gleby. Widma bliskiej podczerwieni składają się z zachodzących na siebie pasm wibracyjnych, które w przypadku gleb często wydają się niespecyficzne i słabo rozdzielone. Najbardziej typowe piki widm występują przy długościach fal: 1400, 1900 i 2200 nm, i są związane z absorpcją światła przez wiązania O-H (woda). Długość fali 2200 nm związana jest również z występowaniem minerałów ilastych. Występuje również wiele pików związanych z grupami funkcyjnymi materii organicznej, ale często te piki nie są jasno zdefiniowane.

Ze względu na trudności w określaniu widm glebowych i niską koncentrację stężeń analitów w matrycy glebowej, pomiary jakościowe i ilościowe za pomocą spektroskopii VIS-NIR wymagają zastosowania wielowymiarowych algorytmów kalibracyjnych (np. regresja metodą cząstkowych najmniejszych kwadratów PLSR, maszyna wektorów nośnych SVM, sieci neuronowe NN) i innych metod statystycznych. Te specyficzne metody należą do działu nauk chemicznych - chemometrii. Wynika to z faktu, że w przeciwieństwie do kalibracji jednowymiarowej, w której jeden pik jest bezpośrednio skorelowany z referencyjnym stężeniem, w spektroskopii uwzględniającej zakres bliskiej podczerwieni całe widmo jest wykorzystywane przy korelacji z referencyjnym stężeniem. Celem jest powiązanie widm NIR z właściwościami chemicznymi lub fizycznymi próbek użytych do kalibracji, a następnie

przewidywanie tych właściwości dla kolejnych (nowych) próbek glebowych. Uzyskanie ilościowych wyników jest możliwe, gdy odpowiedź widm bliskiej podczerwieni będzie proporcjonalna do zmian stężenia składników chemicznych lub do charakterystyki fizycznej próbki.

Tok postępowania w przypadku budowania wielowymiarowego modelu VIS-NIR jest następujący: (1) zbudowanie macierzy zawierającej dane spektralne i wyniki analiz laboratoryjnych; (2) wstępne przetwarzanie (obróbka) z ang. *pre-processing* (Rinnan i in. 2009) widm; (3) wybór odpowiedniego zakresu widmowego (w przypadku analiz glebowych jest to cały zakres widm); (4) strojenie (adiustacja) kalibracji; (5) kalibracja końcowa; (6) walidacja na próbkach niezależnych; (7) opcjonalnie rutynowe analizy (w tym przypadku potrzebne są tylko widma dla nowych próbek).

Głównym przedmiotem niniejszych badań były grunty orne dlatego, że rozwinięcie metod spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni daje ogromne możliwości zastosowania ich w rolnictwie precyzyjnym.

Cel 1. Wprowadzenie i upowszechnienie w Polsce metody spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do analiz gleb ornych. [A1]

Szybkie, hasłowe wyszukiwanie w bazie *Web of Science* (WoS) pozwala zorientować się, że zastosowanie metod spektralnych w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR jest nadal nową metodą w dziedzinie nauk o glebie, co podkreśla oryginalność prowadzonych badań. Wyniki wyszukiwania hasłowego uwydatniają również powszechne nieporozumienie dotyczące różnic pomiędzy tradycyjną metodą teledetekcji (ang. *remote sensing*), a metodą proksymalną (ang. *proximal sensing*). Niniejsza praca dotyczy metod proksymalnych, które polegają na zbieraniu szczegółowych informacji widmowych w pobliżu powierzchni gleby (lub bezpośrednio w kontakcie z glebą), podczas gdy tradycyjne metody teledetekcyjne zbierają informacje spektralne z systemów satelitarnych lub pokładowych (np. dronów, samolotów), a zatem badania wykonywane są w pewnej odległości i w mniej szczegółowy sposób. Aby uprościć proces wyszukiwania informacji w bazie ograniczono się do zastosowania dwóch haseł jednocześnie tj. (a) bliska podczerwień, i (b) gleba. Wyszukiwano tylko takie artykuły, które miały co najmniej jednego autora posiadającego polską afiliację (w kilku przypadkach autorzy byli cudzoziemcami, ale z dwoma afiliacjami). Baza WoS zwróciła 33 wyniki, w tym 10 artykułów nie była bezpośrednio związana z zagadnieniami glebowymi, a dotyczyła m.in. analiz współczynników odbicia liści, korzeni, żywności pochodzenia roślinnego oraz siedem

artykułów związanych z obrazowaniem satelitarnym i teledetekcją. Najstarsze prace obejmują lata 1987-2004 i należą do pozostałych 23 artykułów. Siedem z tych prac opisuje teoretyczne podstawy współczynnika odbicia światła w zakresie bliskiej podczerwieni w odniesieniu do chropowatości powierzchni gleby i nie dotyczą wykorzystania tej metody do analiz glebowych ani do przewidywania jakichkolwiek właściwości gleby. Wśród 16 pozostałych artykułów znajduje się jeden artykuł przeglądowy i jeden dotyczący mieszanki węgla brunatnego z próchnicą, a zatem nie dotyczą gleby. Tylko 14 artykułów koncentruje się na przewidywaniu właściwości gleb. Artykuł przełomowy dla polskiej nauki pochodzi z roku 2003 (Chodak i in., 2003) i dotyczy gleb leśnych, podobnie jak dwie trzecie z tych 14 prac. Tylko cztery artykuły (**A2**; **A3**; Bajorski i in., (2016); Siebielec i in., (2004)) dotyczą gleb uprawnych. Wiele artykułów zostało napisanych przez polskich badaczy za granicą np. (Chodak i in., 2004; Siebielec i in., 2004) z powodu braku w Polsce sprzętu badawczego w ówczesnych latach (informacja ustna – Dr hab. Siebielec i Prof. Chodak). W żadnej z tych prac nie zbadano możliwości obniżenia liczby próbek w celu zmniejszenia kosztów analitycznych (praca **A2**), ani wykorzystania modeli do mapowania terenu (prace **A2**, **A4**, **A6**), ani możliwości wykorzystania widm w zakresie fal VIS-NIR do klasyfikacji gleb (prace **A3**, **A5**).

Dla porównania z innymi dziedzinami badań, to samo zapytanie (w tym samym czasie) zostało wyszukane w przypadku badań w obszarze nauk o glebie i dotyczyło takich zagadnień jak erozja gleby, zanieczyszczenie gleby, a następane ograniczenie hasłowe zawężono do wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych (ang. „soil + PAH”) zamiast bliskiej podczerwieni. Wyniki są następujące: erozja (370 znalezionych prac), zanieczyszczenie gleby (486 prac) i PAH (183 prace). Podkreśla to nowatorstwo prezentowanych badań, które są nadal bardzo aktualne w zakresie badania gleb i wciąż mało rozpowszechnione w Polsce.

Praca (**A1**) zainicjowała zastosowanie metod spektrometrycznych w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do badania gleb ornych w Polsce, ale również poszerzyła informacje dla czytelników zagranicznych. Większość celów postawionych w pracy, które zostały opisane powyżej, zostały szybko wprowadzone jako wstępne wyniki badań, a mianowicie: (1) przewidywanie właściwości fizycznych i chemicznych gleb; (2) dobór próbek kalibracyjnych oraz (3) omówienie możliwości zastosowania metody w celu precyzyjnego mapowania terenu przy niskich nakładach inwestycyjnych.

Badania w skali polowej zostały przeprowadzone na stacji doświadczalnej Instytutu Uprawy Nawożenia i Gleboznawstwa (IUNG-PIB) w Baborówku koło Poznania (woj. wielkopolskie). Stacja badawcza o całkowitej powierzchni (132,1 ha) została podzielona na

kilka mniejszych pól, w których prowadzone były badania terenowe. Pole analizowane w pracy (A1) jest częścią pola nr 1 o powierzchni 9 ha i należy do zestawu trzech pól, na których wprowadzono następujący płodozmiian: pszenica ozima, jęczmień jary i rzepak ozimy. Na omawianym polu dominuje typ gleb Luvisol wg World Reference Base for Soil Resources (WRB), i jest to powszechnie występujący typ gleb w zachodniej części Polski. Za pomocą globalnego systemu pozycjonowania (GPS) wyznaczono georeferencyjną siatkę, w której pobrano 117 próbek glebowych z wierzchniej warstwy tj. z głębokości 0-25 cm. Liczba prób wynosząca 117 jest wystarczająca do zbudowania odpornego modelu. Zgodnie z literaturą zalecana liczba prób do zbudowania modelu wynosi od 100-200 próbek (Viscarra Rossel i McBratney 2008). Następnie zbudowano kilka modeli predykcyjnych, wykorzystujących regresję metodą cząstkowych najmniejszych kwadratów (PLSR) dla zawartości węgla organicznego w glebie (SOC) oraz dla odczynu pH i zawartości przyswajalnych form pierwiastków: Mg, K, P oraz dla zawartości frakcji ilastej. Częściowa regresja najmniejszych kwadratów (PLSR) dotyczy zawsze dwóch macierzy danych X i Y oraz stanowi rozszerzenie modelu liniowej regresji wielorakiej (łączy cechy analizy składowych głównych i regresji wielokrotnej). Macierz X jest reprezentowana przez widma, a Y jest właściwością gleby. W metodzie PLSR zmienne z macierzy X i Y znajdują nowe komponenty (punkty), zwane zmiennymi ukrytymi. Następnie obliczana jest regresja pomiędzy tymi nowymi ukrytymi punktami (Esbensen i in., 2012).

W pracy analizowano 2 schematy doświadczenia, które różniły się sposobem wyboru i ilością prób do kalibracji. W schemacie 1, spośród pobranych 117 próbek, 90 użyto do kalibracji (pierwsze 90 numerów z wyznaczonej siatki referencyjnej), a pozostałe 27 jako niezależny zestaw danych walidacyjnych (kolejne numery prób z siatki referencyjnej). W schemacie 2, do kalibracji użyto podobną ilość próbek, jak w schemacie 1, ale z siatki referencyjnej wybierano co 4 próbkę do walidacji, zgodnie z metodyką proponowaną przez Dunn i in., (2002). Dla każdego z dwóch schematów zbudowano dwa modele kalibracji: uwzględniający i nieuwzględniający wartości odstających. W schemacie 2 uzyskano lepsze modele, które charakteryzowały się niższymi wartościami średnich błędów kwadratowych RMSE (w tekście: RMSE_{cv} - średni błąd kwadratowy określony dla kroswalidacji, RMSE_v - średni błąd kwadratowy określony dla walidacji (predykcji)).

Wynikiem analiz były modele, które dały zadawalające rezultaty przewidywania zawartości węgla organicznego SOC ($r^2 = 0,65$; RMSE_v = 0,14) i zawartości przyswajalnego magnezu ($r^2 = 0,69$; RMSE_v = 2,16), które były porównywalne z modelami przedstawionymi przez Dunn i in. (2002) budowanymi dla gleb w Australii, które miały właściwości zbliżone

do polskich gleb. Uzyskane modele w schemacie 2, które uwzględniały próbki pobrane z równomiernej siatki referencyjnej były bardziej wiarygodne (uzyskano niższe wartości $RMSE_V$) niż modele, które wykorzystywały próbki pobrane z pola z wyjątkiem części zachodniej. W schemacie 1 nie powiodło się przewidywanie niektórych właściwości. Wynika to z faktu, że w schemacie 2 uzyskano lepszą reprezentatywność zestawu danych kalibracyjnych, i próbki kalibracyjne były podobne do tych z zestawu danych walidacyjnych. To wyjaśnia słabą walidację w schemacie nr 1, nawet jeśli wyniki walidacji krzyżowej (kroswalidacji) są akceptowalne. Zawartość frakcji ilastej jest dobrym przykładem, aby wyjaśnić te wyniki (rys. 1, praca **A1**). W schemacie 1 próbki walidacyjne pochodzą z obszaru o dużo większej zmienności zawartości frakcji ilastej, w przeciwieństwie do danych kalibracyjnych. Dlatego np. typ gleby - glina piaszczysta, nie był dobrze reprezentowany w zbiorze danych kalibracyjnych. Ponadto widma badano również za pomocą algorytmu wykrywającego wartości odstające (Filzmoser i in., 2005), który może pracować w przestrzeni wielowymiarowej i może ukryć wartości odstające. Następnie można ponownie uruchamiać algorytm bez tych wartości odstających. Jednakże nie odnotowano poprawy wyników po odrzuceniu wartości odstających. Co ciekawe, algorytm jako wartości odstające zawsze wybierał interesujące próbki np. próbki z miejsc, które były bardziej ubite na skutek pracy maszyn rolniczych np. z miejsc stałego zawracania maszyn, w których często okresowo zbierała się woda. Próbki te nie różniły się od innych próbek pod względem właściwości chemicznych czy fizycznych. Jednak widma VIS-NIR w tym przypadku mogą wskazywać, że populacja jest inna, nawet jeśli skład chemiczny jest podobny. Może to być wskazówką do rozwoju dalszych badań nad zastosowaniem spektroskopii VIS-NIR. Fakt, że wartości odstające widm VIS-NIR czasami nie są wartościami odstającymi pod względem właściwości tych próbek, jest interesujący i zostało to również uwzględnione w pracy (**A2**).

Platforma mobilna Veris® i funkcjonowanie jej systemu do pozyskiwania widm i przetwarzania danych było po raz pierwszy opisane w polskiej literaturze (praca **A1**). Platforma ta była pierwszym dostępnym mobilnym systemem pozyskania widm VIS-NIR pracującym na zasadzie „on-the-go” w Polsce. Zadowalające wyniki prognozowania uzyskane podczas skanowania próbek w trybie laboratoryjnym sugerują możliwość zastosowania metody „in situ” w połączeniu z platformą mobilną.

Przy realizacji celu pierwszego ustalono podstawy pomyślnego przewidywania właściwości gleb. To wymusiło dalsze badania nad ulepszaniem przewidywań i dokładnością modelowania, jak również zainspirowało do dalszych zastosowań metody przy przewidywaniu innych właściwości gleb, zarówno chemicznych jak i fizycznych.

Cel 2. Zbudowanie krajowej biblioteki widm gleb ornich w Polsce i wykorzystanie metody do przewidywania właściwości chemicznych i fizycznych gleb w różnej skali przestrzennej. [A1, A2, A3, A4, A6]

Główną zaletą metody spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni jest możliwość scharakteryzowania jednocześnie wielu właściwości fizycznych, chemicznych lub nawet biologicznych (Zornoza i in., 2008). W pracach (A1, A2, A3, A4, A6) badano przewidywanie takich właściwości gleb jak: zawartość węgla organicznego (SOC), zawartość azotu ogólnego (N_{tot}), zawartość frakcji piasku, łu, pyłu, odczyn pH, zawartość przyswajalnych pierwiastków (Ca, Mg, K, Na) oraz wymiennych kationów (P i K). Próbki do budowania modeli pochodziły z różnej wielkości obszaru od (a) ograniczonego obszaru w doświadczeniu polowym (prace A3, A5), (b) w skali gospodarstwa (prace A1, A2, A6), w skali regionu (praca A6), aż do (d) skali kraju (praca A6).

Do budowania modeli predykcyjnych potrzebne są nie tylko widma gleb, ale również wyniki tych właściwości próbek glebowych, które będą przewidywane w modelach dla nowych próbek. W związku z tym podjęto decyzję o zbudowaniu Spektralnej Biblioteki Gleb Polski SBGP (ang. *National Soil Spectral Database*) przy wykorzystaniu istniejącej już bazy danych o glebach IUNG-PIB. Tworzona baza danych SBGP została wzbogacona o wyniki badań próbek pochodzących z różnych stacji eksperymentalnych IUNG-PIB. Zaletą korzystania z tej bazy danych było to, że nie tylko próbki gleb były fizycznie dostępne, ale również baza ta zawierała wyniki badań laboratoryjnych właściwości chemicznych i fizycznych dla każdej próbki. Baza SBGP jest cały czas rozbudowywana. Do dziś włączono do niej ponad 2500 próbek gleb. Stan bazy danych spektralnych w 2017 r. opisano w pracy (A6). Baza ta jest również efektem badań statutowych (temat badawczy 4.02 pt. „Zastosowanie metod chemometrycznych do określania właściwości gleb mineralnych Polski”, którymi kierowałem w latach 2012 - 2014). Widma były uzyskane przy wykorzystaniu spektrofotometru Veris® (Salina, KS, USA), który działa w zakresie długości fal 350-2220 nm. Baza SBGP jest obecnie uaktualniana, przy wykorzystaniu nowego instrumentu o ulepszonych parametrach tj. PSR-3500 (Spectral Evolution, MA, USA), który działa w zakresie fal od 350 do 2500 nm. Nowe próbki są na bieżąco dołączane do bazy danych, a stare skanowane za pomocą nowego instrumentu. Nowe widma próbek glebowych są bardziej kompatybilne z istniejącymi bibliotekami danych spektralnych (Knadel i in., 2012). To bardzo ważne z uwagi na fakt budowania globalnych baz danych spektralnych (Viscarra Rossel i in., 2016). Na spotkaniu warsztatowym FAO w Rzymie (Rome, 2013,

International Workshop „Soil Spectroscopy: the present and future of soil monitoring”) zdecydowano wspólnie, że do baz światowych będą dołączane próbki z Polski, ponieważ w bazie istnieje bardzo mała ilość próbek glebowych pochodzących z Europy Centralnej i Wschodniej. Biblioteka widm nie jest instrumentem statycznym. Baza danych wymaga ciągłej rozbudowy. Dlatego starsze próbki są aktualizowane, a nowe próbki regularnie dodawane do bazy danych.

Pierwsza obszerna (kontynentalna) biblioteka widm została stworzona przez Shepherd i Walsh (2002). Na początku autorzy opisali ramy koncepcyjne do korzystania z bazy w celu przewidywania właściwości gleb. Następnie ponad 1000 próbek gleb pochodzących ze wschodniej i południowej części Afryki zostało zeskanowanych w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni, a następnie dane te zostały zarchiwizowane w bazie danych. Autorzy w modelach uzyskali dobrą korelację dla zawartości węgla organicznego SOC, odczynu pH, kationów wymiennych Ca i Mg oraz rozkładu wielkości cząstek. To zainicjowało budowę globalnej biblioteki widm (ICRAF, 2015). Biblioteka ta została szczegółowo opisana w pracy Viscarra Rossel i in., (2016). Obecnie zawiera ona ponad 23000 widm z kilkoma właściwościami gleb. W Europie działa bibliotek widm pod nazwą LUCAS (Stevens i in., 2013), oparta na badaniach programu LUCAS (ang. *Land Use/Cover Area frame Survey*), opisana w pracy Tóth i in., (2013). Jest ona również imponująca, bo zawiera ponad 20000 próbek. Istnieje również kilka bibliotek krajowych, np. w Danii, Francji, Australii (Gogé i in., 2012; Knadel i in., 2012; Viscarra Rossel and Webster, 2011).

W świetle prac (A2) i (A6) ustalono, że potrzeba kilku kroków celem zbudowania dokładnego modelu predykcyjnego, a mianowicie:

- (1) Wybór próbek, które mają zostać włączone do bazy danych (archiwalne próbki, nowe próbki).
- (2) Skanowanie próbek (należy ustalić czy użyć próbki przesiane czy też nie i w jakiej ilości powtórzeń wykonać skanowanie).
- (3) Zbadanie charakterystyk widmowych dla populacji próbek (np. metodą PCA celem redukcji wymiarów). Daje to wstępny wgląd w populację gleby i ewentualne grupowanie danych oraz pozwala na wykrywanie niektórych odstających próbek. Ta część jest ważna w późniejszych decyzjach co do wyboru prób do danych kalibracyjnych.
- (4) Wybór prób kalibracyjnych. Wybór próbek kalibracyjnych został opisany w pracy (A1), ale przede wszystkim w pracy (A2), w której zaproponowano cztery różne metody wyboru próbek kalibracyjnych. Dwie z tych metod są nowe (schemat 3 i 4 w pracy A2). Opierają się one jedynie na charakterystyce spektralnej, a nie na chemicznych czy fizycznych

właściwościach gleb. Najlepszą ogólną metodą (dającą najbardziej wiarygodne modele o lepszych parametrach predykcji) była metoda grupowania k-średnich (metoda algorytmu centroidów, inaczej zwanym algorytmem klastrowym). Druga proponowana metoda opierała się na wynikach analizy składowych głównych PCA. Dwie pozostałe metody były bardziej klasyczne i opierały się na losowym doborze lub składzie chemicznym prób.

(5) Rzeczywiste modelowanie z wykorzystaniem metody cząstkowych najmniejszych kwadratów PLSR. Zastosowano również inne metody kalibracji wielowymiarowej (np. maszyna wektorów nośnych SVM).

(6) Testowanie niezależnego zbioru danych. Testowanie to wykonano przy użyciu próbek z baz danych widmowych, ale takich, które nie zostały włączone do etapu kalibracji lub na całkowicie nowych, niezależnych próbkach.

Podczas pracy przy wykorzystaniu dużej bazy danych widmowych lub w większej skali eksperymentu (regionalnego lub krajowego) należy wziąć pod uwagę trudności z włączeniem do bazy danych wszystkich rodzajów gleb z całą ich różnorodnością. Dlatego bardzo ważne jest uważne przestrzeganie opisanych powyżej etapów.

Aby przetestować w jaki sposób metoda (a zatem i baza danych SBGP) działa w skali regionalnej, próbki pochodzące z regionu śląskiego zostały wykorzystane do zbudowania modelu przewidywania zawartości węgla organicznego SOC. Były to próbki z projektu mapowania glebowo-geologicznego. Ten zbiór danych nie został wybrany przypadkowo. Wybór ten miał na celu zbadanie wpływu głębokości poboru prób na model. Użyto 60 próbek pobranych z 3 różnych głębokości tj. 15, 30 i 50 cm. Pobierano po jednej próbce z trzech głębokości z 60 profili glebowych. Zastosowano dwa schematy kalibracji (z krosvalidacją – walidacją krzyżową), aby zdecydować, jak wybrać próbki kalibracyjne do modelu. W schemacie nr 1 użyto wszystkich próbek (tj. 60 z jednej głębokości) jako zestawu prób do kalibracji. W drugim schemacie zastosowano metodę grupowania k-średnich (praca **A2**), aby wybrać 20 próbek z każdej głębokości do krosvalidacji. Wykorzystanie próbek z wszystkich 3 głębokości dało nieco lepszą dokładność modelu, z niższymi wartościami $RMSE_{CV}$, dlatego tą metodę zastosowano do modelowania zawartości węgla organicznego, zawartości frakcji ilastej oraz do odczynu pH w KCl. Walidację przeprowadzono na pozostałych próbkach (120), które pochodziły z różnych głębokości (schemat 2). Modele predykcyjne zawartości węgla organicznego SOC ($r^2 = 0,74$; $RMSE_v = 0,48$) i zawartości frakcji ilastej ($r^2 = 0,71$; $RMSE_v = 0,82$). Model predykcyjny odczynu gleb pH (KCl) był mniej skuteczny ($r^2 = 0,51$; $RMSE_v = 0,55$). Może to być wynikiem połączenia w analizach profili gleb ornych z kilkoma profilami pochodzącymi z terenów leśnych.

Na koniec, testowano metodę i dane z bazy SBGP z całym zestawem danych. Do kalibracji zawartości węgla organicznego SOC, zawartości frakcji ilastej i odczynu pH użyto 1200 próbek (po usunięciu odstających i uśrednionych próbek z doświadczenia polowego). W procesie modelowania, odnotowano, że niewiele jest próbek o wysokich wartościach SOC lub zawartości frakcji ilastej. Do modelowania usunięto więc próbki o zawartości węgla organicznego SOC powyżej 5%, oraz próbki, które nie były reprezentatywne dla gleb polskich (praca **A6**). Wyniki kalibracji były następujące: dla zawartości węgla organicznego ($r^2 = 0,69$; $RMSE_{CV} = 0,59$), dla zawartości frakcji ilastej ($r^2 = 0,73$; $RMSE_{CV} = 0,89$), odczyn pH ($r^2 = 0,59$; $RMSE_{CV} = 0,40$). Wyniki walidacji były następujące: dla zawartości węgla organicznego ($r^2 = 0,67$; $RMSE_V = 0,60$), dla zawartości frakcji ilastej ($r^2 = 0,72$; $RMSE_V = 0,88$), dla odczynu pH ($r^2 = 0,62$; $RMSE_V = 0,43$).

Rzadko spotyka się w literaturze użycie naprawdę niezależnego zestawu danych walidacyjnych (Cécillon and Brun, 2007; Hodge and Woodbridge, 2010). W pracy (**A6**) modele zostały zweryfikowane na niezależnym zbiorze danych (próbki pochodzące z artykułu **A5** i próbki z niezależnego projektu badawczego). Probki te zostały zeskanowane (ponieważ nie należą do bazy SBGP) i zastosowano opisany powyżej model predykcyjny zawartości węgla organicznego SOC, zawartości frakcji ilastej i odczynu pH. Wyniki modelowania są następujące: dla zawartości węgla organicznego ($r^2 = 0,63$; $RMSE_V = 0,48$), zawartość frakcji ilastej ($r^2 = 0,67$; $RMSE_V = 0,78$), odczyn pH w KCl ($r^2 = 0,55$; $RMSE_V = 0,75$).

Wyniki modeli predykcyjnych w skali pola zostały przedstawione w pracy (**A1**) i są opisane w celu 1. Praca (**A2**) zwiększyła obszar badany do skali gospodarstwa. Tym razem obszar był znacznie większy (53,6 ha). Ponad 400 próbek zostało pobranych z założonej siatki pomiarowej (referencyjnej). 200 próbek użyto do kalibracji, a 200 do walidacji jako niezależny zbiór danych. Właściwości próbek glebowych były do siebie podobne, czego można się było spodziewać po próbkach pobieranych z sąsiadujących pól.

W pracy (**A2**) analizowano te same właściwości co w pracy (**A1**), ale oprócz frakcji ilastej analizowano cały skład granulometryczny. Modele predykcyjne w pracy (**A2**) były bardziej wiarygodne, co wynika ze zwiększonej ilości próbek (Brown i in., 2005). Przykładowe wyniki modeli predykcyjnych są następujące, np. dla zawartości węgla organicznego ($r^2 = 0,72$; $RMSE_V = 0,12$), dla zawartości frakcji ilastej ($r^2 = 0,73$; $RMSE_V = 0,32$), dla odczynu pH ($r^2 = 0,51$; $RMSE_V = 0,34$), zawartości frakcji piasku ($r^2 = 0,79$; $RMSE_V = 2,6$). Pozostałe wyniki patrz tabela 5 w pracy (**A2**). Wyniki te podkreślają wielki potencjał zastosowania metod spektrometrycznych do analizy zawartości węgla organicznego SOC i do analizy składu granulometrycznego (co zostało zastosowane po

raz pierwszy w Polsce). Uzyskana bardzo niska wartość RMSE_v zarówno dla zawartości węgla organicznego SOC, jak zawartości frakcji ilastej (odpowiednio 0,12 i 0,32%) również wykazała wysoką dokładność tej metody.

Modele predykcyjne w najmniejszej skali obszarowej (eksperyment polowy, w którym analizowaną glebą był piasek gliniasty) zostały przedstawione w pracach (A3) i (A4). W tych pracach badano próbki pochodzące z długoterminowego eksperymentu prowadzonego od 1980 roku (Pikuła i Rutkowska, 2014). Próbki te analizowano pod kątem kilku właściwości glebowych i skanowano w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR. Praca (A3) przedstawia wyniki z płodozmianu z roku 2008 (40 próbek), a praca (A4) z płodozmianu 2011-2012 (80 próbek). W tej skali obszarowej, otrzymane rezultaty dla przewidywania zawartości węgla organicznego i zawartości azotu ogólnego były bardzo dobre, a wartości RMSE_v były możliwie najniższe i wynosiły odpowiednio 0,05 i 0,1%. Taką dokładność rzadko się spotyka w literaturze i jest ona taka sama, a nawet lepsza niż w przypadku stosowania klasycznych metod oznaczania. Niemniej jednak należy wziąć pod uwagę, że takie niskie wartości błędów wynikają również z wąskiego zakresu zawartości węgla organicznego SOC i azotu ogólnego N_{tot}. W pracy (A4) z sukcesem udało się przewidzieć zawartość makroelementów (wymiennych kationów P i K). W przypadku tych kationów udane modelowanie wymagało większej ilości próbek niż 40 (użyte 40 próbek w pracy A3 nie dało satysfakcjonujących rezultatów modelowania). Było to prawdopodobnie spowodowane faktem, że przy 80 próbkach zestaw danych kalibracyjnych miał szerszy zakres wartości danych. W przewidywaniu odczynu pH sytuacja się powtórzyła. Przy zestawie danych zawierających 80 próbek uzyskano wiarygodniejsze prognozy odczynu. Istotny wniosek z pracy (A3) mówi, że zestaw danych do kalibracji powinien zawierać minimum 30 próbek, a najlepiej jeśli liczba próbek będzie większa od 40. Ponadto, gdy badany obszar jest niewielki i ma jednorodną teksturę gleby, rozkład wielkości cząstek nie ma wpływu na widma, a zatem na efekty modelowania. Pomyślna kalibracja była wynikiem zmian w glebie uzyskanych w wyniku stosowania obornika czy nawozów azotowych, w każdym kwadracie w siatce doświadczenia.

Zastosowane metody modelowania (prace A1, A2, A3, A4, A6) wykazały dobrą predykcję zawartości węgla organicznego SOC, azotu ogólnego N_{tot}, przyswajalnego i wymiennego Mg, zawartości frakcji piasku, iłu i pyłu. Uzyskano zadowalające wyniki przewidywania odczynu pH i Na przyswajalnego oraz obiecujące wyniki dla przewidywania kwasowości hydrolitycznej Hh. Według naszej wiedzy, po raz pierwszy spektroskopię w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR użyto do prognozowania

kwasowości hydrolitycznej (Hh). Dla wymiennych kationów P i K przewidywania były dobre, gdy rozkład P i K nie był zbyt skośny w kierunku wysokich wartości. W przeciwnym razie był on zależny od schematu kalibracji (tak samo w przypadku wymiennych kationów Ca i Na). Oznacza to, że dla wszystkich tych kationów zestaw danych kalibracyjnych musi mieć rozkład normalny. Zjawisko to obserwowano również w literaturze Dunn i in., (2002). Obserwowano je również w wynikach prognoz zawartości frakcji ilastej w pracy (A1) (patrz wyjaśnienie w Celu 1).

Niektóre z analizowanych właściwości gleb (zawartość węgla organicznego, azotu ogólnego, zawartość frakcji ilastej czy odczyn gleby) były rozpatrywane we wszystkich zakresach skali obszaru. Zgodnie z oczekiwaniami gdy skala eksperymentu zwiększa się dokładność predykcji maleje (prace A1, A2, A3, A4, A6). W tym zakresie czuje się niedosyt badań, które powinny uwzględniać np. metody sieci neuronowych czy grupowanie próbek do zestawu danych kalibracyjnych.

Cel 3. Redukcja kosztów analiz: poszukiwanie najlepszej metody kalibracji przy jak najmniejszej ilości próbek i wykorzystanie istniejącej bazy danych o glebach (IUNG-PIB). [A2, A6]

Jednym z celów pracy (A2) było znalezienie odpowiedzi na pytanie: jak zoptymalizować ilość prób pobieranych do kalibracji, aby uzyskać jak najlepsze efekty modelowania (tzn. jak najwyższe wartości współczynnika determinacji r^2 dla modelu, przy jak najniższej wartości średniego błędu kwadratowego RMSE) przy możliwie najniższych kosztach analiz tzn. przy minimalnej ilości prób kalibracyjnych. W celu uzyskania odpowiedzi przeprowadzono modelowanie testowe. Do analiz pobrano 398 próbek gleb pochodzących z stacji eksperymentalnej IUNG -PIB w Baborówku k. Poznania. Na obszarze (53,6 ha) założono regularną siatkę referencyjną z krokiem co 35 m. Zestaw danych podzielono na dwie części (co druga próbka z siatki była wybierana do zbioru niezależnych danych). Połowę próbek pozostawiono jako niezależne dane do walidacji modelu. Drugą połowę próbek wykorzystano do kalibracji. Selekcję prób do kalibracji przeprowadzono 4 metodami: wybór losowy, wg wzrastającego stężenia, metodą k-średnich, oraz analizą PCA. Dla 199 próbek przeprowadzono kroswalidację przy wzrastającej ilości prób od 20 do 200 z krokiem co ok. 20 prób (patrz tabele 3 i 4 w pracy A2). Uzyskane za pomocą kroswalidacji modele były następnie walidowane na pozostałych 199 niezależnych próbkach. Predykcję na zmiennej ilości prób kalibracyjnych wykonano dla zawartości węgla organicznego SOC, oraz dla zawartości frakcji ilastej. Uzyskane wyniki z doświadczenia zestawiono w tabelach 3 i 4,

oraz na rysunku 3 (A2). Z przeprowadzonych analiz wynika, że zarówno przy analizowaniu zawartości węgla organicznego, jak i zawartości frakcji ilastej można zredukować liczbę próbek kalibracyjnych ze 199 do 80 (a więc można zmniejszyć o około 60% liczbę prób potrzebnych do kalibracji). Na przykład przy predykcji zawartości węgla organicznego przy 79 próbkach kalibracyjnych wyznaczonych metodą k-średnich uzyskano ($r^2 = 0,63$; $RMSE_V = 0,13$). W przypadku pełnego zestawu danych kalibracyjnych (199) wyniki nie różniły się znacząco ($r^2 = 0,72$; $RMSE_V = 0,12$). Przy predykcji zawartości frakcji ilastej przy 79 próbkach kalibracyjnych wyznaczonych metodą k-średnich uzyskano ($r^2 = 0,71$; $RMSE_V = 0,36$). W przypadku pełnego zestawu danych kalibracyjnych (199) wyniki również nie różniły się znacząco ($r^2 = 0,73$; $RMSE_V = 0,32$). Predykcja pozostałych właściwości analizowanych w pracy (A2) tj. zawartość frakcji piasku, pyłu, pH, przyswajalnych pierwiastków Mg, P, K, została przeprowadzona już tylko przy 2 wariantach ilości prób kalibracyjnych (wyznaczonych metodą k-średnich) i wynoszących: 199 (cały zestaw) oraz 79 (opierając się na wynikach z analizy dla węgla organicznego i zawartości frakcji ilastej). W przypadku tych analiz nie wykazano różnic w jakości modelu przy zmiennej ilości prób kalibracyjnych (patrz tabela 5 (A2)).

Zastosowana redukcja liczby próbek kalibracyjnych przekłada się bezpośrednio na obniżenie kosztów analiz. W pracy (A2) obliczono redukcję kosztów dla obniżenia liczby prób kalibracyjnych przy predykcji węgla organicznego. Z analizy wynika, że redukcja liczby próbek kalibracyjnych ze 199 do 79 daje 5-krotną redukcję kosztów (80%) analizy zawartości węgla organicznego (z 12000€ do 2300€). Podobne rezultaty redukcji kosztów podano w literaturze dla Francji 94%, 63% w Kanadzie (Nduwamungu i in., 2009).

Kolejnym sposobem na zredukowanie kosztów analiz jest skorzystanie z już istniejących baz danych spektralnych. Jeżeli ze zbioru danych zawartych w bazie wybierze się zbiór danych o podobnych właściwościach do badanego pola, tzn. np. wybierając próbki z takim samym typem gleb i pochodzących z podobnych warunków klimatycznych, to pobierając tylko niewielką ilość prób z badanego pola, i dodając tę niewielką ilość prób do reszty próbek pochodzących z bazy danych można zbudować wiarygodny model. Ta metoda nazywa się z ang. *spiking* i była już opisana w literaturze Guerrero i in., (2014).

Koszty rozwoju baz danych są wysokie, dlatego tworzone biblioteki widmowe są często opracowywane dla archiwalnych próbek gleby i w oparciu o starsze (już istniejące) bazy danych glebowych, które zawierają informacje o właściwościach fizycznych i chemicznych gleb (Viscarra Rossel i Webster 2011). Korzystanie przy modelowaniu z istniejących baz danych wiąże się również z wystąpieniem błędów z uwagi na to, że istnieje wiele

laboratoryjnych metod pomiaru właściwości gleb, np. zawartość węgla organicznego SOC może być analizowana metodą Tiurina, metodą Walkley-Black itp. (Soriano-Disla i in., 2013). Zostało to również odnotowane w pracy (A1, A2, A3, A4, A6). Im większa była skala obszarowa brana pod uwagę przy modelowaniu, tym mniejsza dokładność modeli. Zwiększenie ilości prób pobranych z bazy danych dla większej skali wiąże się ryzykiem wystąpienia większej ilości próbek mało reprezentatywnych w porównaniu z pozostałymi próbkami (co zostało dokładnie opisane w Celu 2). Idealny rozkład danych powinien być jednostajnie ciągły co rzadko występuje w praktyce. Jednakże w porównaniu z literaturą (np. Brown i in., 2005; Gogé i in., 2012) błędy, które otrzymano dla skali krajowej są i tak dużo niższe. Wynika to z faktu, że próbki glebowe, które wybierano do tworzenia modeli z bazy danych IUNG-PIB były poddane wstępnej selekcji. Mając na uwadze, że gleby orne w Polsce są mało różnorodne pod względem zawartości węgla organicznego i zawartości frakcji ilastej, odrzucano z bazy próbki o odstających wartościach i próbki mało reprezentatywne. Te mało reprezentatywne próbki (np. próbki o dużej zawartości węgla organicznego) nie są eliminowane z bazy danych. Baza danych jest stale aktualizowana, tak, aby każdy typ gleb, nawet taki typ, który występuje na małym obszarze Polski był dobrze reprezentowany (praca A6).

Cel 4. Wykorzystanie metody do mapowania właściwości gleb w różnej skali przestrzennej (od skali pola do skali kraju). [A2, A4, A6]

W pracy (A1) wykazano, że metoda spektrometrii VIS-NIR dobrze się sprawdza do przewidywania zawartości węgla organicznego SOC, zawartości frakcji ilastej, oraz do odczynu pH, co zostało wcześniej opisane. W pracy tej po raz pierwszy opisana została również polowa metoda „on-the-go”, ale nie zaprezentowano jeszcze gotowych map predykcji. Pierwsza mapa z właściwościami w oparciu o badania spektralne prowadzone na siatce referencyjnej (400 punktów) została zaprezentowana w pracy (A2). Na początku na podstawie wyników analiz laboratoryjnych została stworzona dokładna mapa zawartości węgla organicznego, która posłużyła jako wzór (rys. 4, praca A2). Następnie na podstawie widm stworzono mapę predykcji zawartości węgla (rys.5, praca A2). Mapę stworzono w oparciu o model k-średnich przy wykorzystaniu 79 wyselekcjonowanych próbek (co zostało dokładnie opisane w celu 3). Na mapach 4 i 5 (praca A2) trudno uchwycić różnicę pomiędzy zawartością węgla organicznego. Dlatego stworzona została mapa różnic pomiędzy wartościami modelowanymi, a wynikami analiz uzyskanymi w laboratorium (mapa 6, praca A2). Różnice okazały się być niewielkie, 93% obszaru miała różnicę w szacowaniu

zawartości węgla organicznego poniżej 0,1%, pozostały obszar charakteryzował się różnicami < 0,4%. Uzyskano więc satysfakcjonującą dokładność modelu. Wyniki modelu dla 79 próbek wyselekcjonowanych metodą k-średnich wynosiły $r^2 = 0,63$; $RMSE_v = 0,13$. Zapewne można uzyskać lepsze wyniki modelowania i wyższe wartości współczynnika determinacji, ale nie jest to ekonomicznie uzasadnione (patrz cel 3). Przy wyborze prób kalibracyjnych kierowano się tym, aby średni błąd kwadratowy RMSE był stabilny i jak najniższy (patrz rys. 3, praca **A2**). Rysunki 8 i 9 (praca **A2**) pokazują zasadność wyboru metody selekcjonowania próbek metodą k-średnich, w porównaniu z metodą losowego wyboru prób czy wyboru wg wzrastającego stężenia.

W pracy (**A2**) zaprezentowano również mapę różnic dla odczynu pH (rys. 7). Modelowanie predykcji odczynu dla 79 próbek wyselekcjonowanych metodą k-średnich nie dawało tak dobrych rezultatów, jak w przypadku przewidywania zawartości węgla organicznego ($r^2 = 0,52$; $RMSE_v = 0,34$). Największe różnice pH między wartościami modelowanymi, a mierzonymi były powyżej 1,3. Około 70% powierzchni obszaru charakteryzowało się różnicą wartości pH równą około 0,3. Według (Stenberg i in., 2010), takie wyniki mogą mieć ograniczoną użyteczność przy szacowaniu zmienności wymagań wapnowania na polu. Jednakże dostarczają użytecznych informacji na temat rozkładu przestrzennego odczynu pH.

W artykule (**A4**) celem obniżenia kosztów analiz i redukcji czasu pracy wykorzystano ruchomą platformę Veris®, dzięki której uzyskano dużą ilość widm. Platforma została opisana w artykule (**A1**). Platformę podczepiono do ciągnika rolniczego. Widma pozyskano z obszaru o powierzchni powyżej 20 ha na stacji doświadczalnej IUNG-PIB w Baborówku. Była to część obszaru analizowanego w pracy (**A2**), w którym założona została siatka referencyjna, obejmująca 400 punktów. To pole zostało wybrane, ponieważ dla tego miejsca istnieje dokładna mapa referencyjna zawartości węgla organicznego mierzona metodami laboratoryjnymi (rys. 4, praca **A2**). Po tym obszarze ciągnik wraz ruchomą platformą poruszając się z prędkością 7 km h^{-1} , i w połączeniu z systemem GPS pozyskał ponad 8800 widm. Następnie przy wykorzystaniu algorytmu Fuzzy Logic (Christy, 2008) pobrano 20 prób. Algorytm grupował wszystkie uzyskane spektra na narzuconą ilość grup (równą 20). Wśród tych 20 grup wybierał widma najbardziej reprezentatywne dla danej grupy. Wynikiem były dane GPS dla 20 punktów, w których ręcznie zostały pobrane próby do budowania modelu kalibracyjnego. Na podstawie właściwości pomierzonych w 20 punktach zbudowano model kalibracyjny dla zawartości węgla organicznego SOC. Następnie uzyskany model wykorzystano do predykcji zawartości węgla organicznego SOC dla reszty próbek tzn. dla

8780 próbek (8800-20 = 8780). Na podstawie tych wyników oraz mając wartości referencyjne dla tego pola, stworzono mapę różnic między modelowaną zawartością węgla organicznego, a mierzoną laboratoryjnie (rys. 6, praca **A4**), z której wynika, że dla 70% obszaru różnice były mniejsze niż 0,2%, a więc model stworzony tylko na podstawie 20 analiz uzyskał satysfakcjonującą dokładność.

Próby stworzenia map predykcyjnych na skalę Polski podjęto w artykule (**A6**). Stworzono mapę predykcji zawartości węgla organicznego SOC (rys. 15, praca **A6**) oraz predykcji odczynu pH (rys. 16, praca **A6**). Mapy zgodne z naszym stanem wiedzy stworzono na podstawie 250 skanowanych próbek (zestaw do walidacji). Do kalibracji wybrano 1200 próbek gleb ornych. Dane o próbkach pochodziły ze stworzonej i opisanej w artykule **A6** bazy danych spektralnych (SBGP). Na dzień dzisiejszy, obecna ilość prób gleb w tworzonej bazie danych dobrze reprezentuje mineralne gleby orne, dlatego stworzone mapy uwzględniają tylko tę grupę gleb. Obecnie trwają prace nad poszerzaniem bazy o gleby organiczne (prowadzę obecnie temat badań statutowych 3.16 „Wykorzystanie metod chemometrycznych w ocenie jakości rolniczo użytkowanych gleb organicznych oraz pochodzenia organicznego”, a w dalszej kolejności planowane jest rozszerzenie bazy o widma gleb leśnych.

Cel 5. Próba klasyfikowania gleb na podstawie metod spektralnych. [A3, A5]

Ze względu na różnorodność utworów glebowych, ich klasyfikowanie jest trudne i często pracochłonne. Klasyfikowanie gleb np. wg klasyfikacji WRB (Klasyfikacja Zasobów Glebowych Świata) wymaga analiz i przy tym sporego doświadczenia. Metody spektralne w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni dają możliwość szybkiego szacowania właściwości gleb. Mają więc duży potencjał aby stać się narzędziem wspierającym przy klasyfikacji.

Inspiracją do klasyfikowania gleb na podstawie metod spektralnych były przede wszystkim udane próby użycia spektrometrii VIS-NIR do przewidywania takich właściwości gleb jak na przykład zawartość węgla organicznego czy tekstura. Ponadto literatura przedmiotu, w szczególności artykuły Ben-Dor i in., (2008) oraz Mouazen i in., (2005), które dotyczyły klasyfikowania próbek glebowych stały się załączkiem do powstania pracy **A3**. Ben-Dor i in., (2008) dokonali z sukcesem próby klasyfikowania profilu glebowego na podstawie widm oraz badań laboratoryjnych. Z kolei praca Mouazen i in., (2005) klasyfikowała próbki gleb w zależności od tekstury tj. zawartości frakcji piasku, iłu oraz pyłu. W celu klasyfikowania próbek glebowych na podstawie widm przeprowadzono wstępne badania na stacji eksperymentalnej IUNG-PIB zlokalizowanej w Grabowie n. Wisłą (IUNG-PIB). Na

polu tym jest przeprowadzany długoterminowy eksperyment prowadzony od 1980 roku (Pikuła i Rutkowska, 2014), w którym na poletkach badawczych stosuje się dwa sposoby nawożenia: obornikiem i mineralnymi nawozami azotowymi w różnych dawkach. Na polu tych stosowane są również 2 różne płodozmiany (A i B). Zmianowanie A z roślinami prowadzącymi do zubożenia gleby w węgiel organiczny i zmianowanie B z roślinami prowadzącymi do zwiększenia zawartości węgla organicznego w glebie. Szczegółowy opis rodzaju roślin w płodozmianie i dawek stosowanych nawozów opisano w pracy **A3** i **A4**. Postawiono hipotezę, że tak długo prowadzony eksperyment ma wpływ na widma uzyskane spektrometrem VIS-NIR. Celem pracy było stwierdzenie czy na podstawie widm: (1) da się określić rodzaj płodozmiaru, (2) da się klasyfikować próbki w zależności od dawki obornika oraz (3) czy da się klasyfikować próbki w zależności od dawki mineralnego nawożenia azotem. Do stworzenia modelu na podstawie uzyskanych 40 widm zastosowano metodę SVM (maszyna wektorów nośnych). Analizowano dane w 2 schematach. Dla każdego schematu budowano 3 modele do klasyfikowania próbek w zależności od rodzaju płodozmiaru, oraz wielkości dawki obornika i mineralnych nawozów azotowych. W schemacie 1 zastosowano 40 widm do krosvalidacji. W drugim schemacie, do zwiększenia wiarygodności modelu pobrano 30 próbek do krosvalidacji i wykonano walidację modelu na 10 pozostałych próbkach (tzn. klasyfikowano te 10 próbek). Procedurę powtarzano trzy krotnie, aby przy tak małej ilości próbek pobranych do walidacji wyeliminować sytuację, kiedy większość próbek będzie pochodziła z tego samego poletka (tzn. np. z taką samą dawką określonego nawozu). Najważniejsze wyniki przedstawiono w tabeli 4 (**A3**). Najwyższą dokładność uzyskano dla klasyfikowania płodozmiaru (100% dokładności w schemacie 2). Identyczne wyniki uzyskano w klasyfikowaniu próbek wg dawki obornika i dawki zastosowanego azotu mineralnego, które wynoszą 75% w przypadku zastosowania schematu 1 i 60% przy schemacie 2. Najważniejsze wnioski z pracy (**A3**): możliwe jest stworzenie modelu do klasyfikowania gleb pod względem rodzaju płodozmiaru i stosowanej dawki nawozu tylko i wyłącznie na podstawie uzyskanych widm spektralnych (eliminując drogie badania laboratoryjne). Użycie w schemacie 2 tylko 30 próbek w 3 powtórzeniach jest za mało reprezentatywne, ponieważ złe sklasyfikowanie 1 próbki obniża dokładność modelu o 10%.

Praca (**A5**) przedstawia wstępne wyniki badań z trzech niezależnych eksperymentów. W eksperymencie 1 zbadano wpływ wilgotności na widma spektralne. Do tego celu pobrano 3 typy gleb różniące się znacząco od siebie. Próbki zostały skanowane w trakcie procesu suszenia od stanu pełnego nasycenia wodą do próbek powietrznie suchych. Skanowano próbki gleb co 3 dni przez okres 2 tygodni. Uzyskane widma przedstawiono na rys. 1 (praca

A5). Najważniejszy wniosek z pierwszego eksperymentu: można klasyfikować gleby na podstawie uzyskanych widm, ale różnice w widmach będą widoczne tylko pod warunkiem jednakowych warunków uwilgotnienia próbek glebowych. W drugim przeprowadzonym eksperymencie (praca **A5**) zbadano wpływ zawartości węgla organicznego na kształt widm. Doświadczenie przeprowadzono na 3 poletkach badawczych znajdujących się w IUNG-PIB w Puławach, które zawierały tą samą glebę ale z różną zawartością węgla organicznego tak, że poletko 1 charakteryzowało się dużą ilością węgla organicznego, poletko 2 charakteryzowało się niską zawartością węgla organicznego, a poletko 3 średnią zawartością węgla organicznego. Wyniki z eksperymentu przedstawiono na rys. 4 (praca **A5**), z którego wynika, że zawartość węgla organicznego ma wpływ na przebieg widm. Im większa zawartość węgla organicznego tym większa absorpcja światła. Daje to podstawę sądzić, że na podstawie widm możliwe jest klasyfikowanie próbek gleb w zależności od zawartości węgla organicznego w próbkach glebowych. Ostatni - 3 eksperyment dotyczył możliwości klasyfikowania próbek glebowych pobranych z różnych głębokości, na podstawie uzyskanych widm. Próbki pochodziły z 1 profilu glebowego. Próbki do analizy skanowano od głębokości 10 cm do 150 cm z krokiem co 20 cm. Na każdej głębokości wykonywano 3 skanowania próbek. Analiza PCA (rys. 5, praca **A5**) wykazała, że możliwe jest klasyfikowanie widm wg głębokości pobrania próbek glebowych (również w przypadkach, gdy metodą organoleptyczną nie obserwowano różnic). Wszystkie przeprowadzone eksperymenty w pracy (**A5**) dają podstawy sądzić, że możliwe jest zastosowanie widm celem klasyfikowania próbek. Praca (**A5**) jest podstawą do dalszych badań nad klasyfikowaniem próbek glebowych.

Podsumowanie

Do najważniejszych osiągnięć wyżej wymienionych prac zaliczam:

1. Wprowadzenie i popularyzowanie metody spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR w Polsce.
2. Stworzenie bazy danych spektralnych SBGP. Określenie metodyki budowania tej bazy dla gleb mineralnych oraz wykorzystanie bazy do przewidywania właściwości gleb ornych. Wykazanie potrzeb dalszego rozwijania bazy.
3. Wykazanie, że przy tworzeniu modelu ogromne znaczenie ma poprawne i dokładne selekcjonowanie próbek kalibracyjnych.
4. Udowodnienie, że zastosowanie metody spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR może zredukować koszty analiz o 80%.

5. Wykazanie, że przy wykorzystaniu metody spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR można stworzyć mapy właściwości gleb, które nie odbiegają dokładnością od map powstałych na podstawie kosztownych badań laboratoryjnych. Stworzono pierwszą w Polsce mapę na podstawie zastosowania metody „on-the-go”.

Wykorzystanie wyników badań

Badania wchodzące w skład osiągnięcia mają wysoką wartość naukową. Przede wszystkim metodycznie wyjaśniają zasadę działania metody spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR. Oprócz zastosowania tej metody do przewidywania właściwości gleb, badania pokazują, że może być z powodzeniem wykorzystana w innych zastosowaniach np. do badań ekstraktów glebowych. Ocenia się, że w przyszłości będzie ją można również stosować do klasyfikowania profili glebowych.

Badania spektrometryczne mające na celu przewidywanie różnorodnych właściwości gleb mogą być prowadzone na różnej skali obiektu, od skali pola, po skalę kraju. Pokazuje to, że jest to metoda uniwersalna, która z powodzeniem może zastąpić kosztowne badania laboratoryjne.

Metodę spektrometrii VIS-NIR udało się z powodzeniem zastosować do tworzenia map właściwości gleb zarówno w skali pola, jak i kraju. Metoda wydaje się więc być bardzo przydatnym narzędziem, które będzie odgrywało ogromną rolę praktyczną w rolnictwie precyzyjnym. Zastosowanie metody w skali pola do przewidywania np. zawartości węgla organicznego, pH i innych właściwości, w sposób precyzyjny da odpowiedź rolnikowi co do miejsca aplikacji i wielkości dawek nawozów.

W skali kraju prowadzone przeze mnie badania są unikatowe. Tworzona Spektralna Biblioteka Gleb Polski może być wykorzystywana do szybkiego oszacowania zawartości węgla organicznego, zawartości frakcji ilastej czy odczynu gleb w Polsce. Tworzenie map np. zawartości węgla organicznego, pozwoli klasyfikować gleby i wyznaczać miejsca cenne przyrodniczo. Monitorowanie zasobności gleb w próchnicę ma również ogromne znaczenie w monitorowaniu i zapobieganiu zmianom klimatu. Może stać się więc narzędziem wykorzystywanym lokalnie przez organy administracji samorządowej czy globalnie przez władze krajowe, np. do tworzenia planów ochrony itp.

Literatura

- Bajorski, P., Kazmierowski, C., Cierniewski, J., Piekarczyk, J., Kusnierek, K., Krolewicz, S., Terelak, H., Stuczynski, T., Maliszewska-Kordybach, B., 2014. Use of clustering with partial least squares regression for prediction based on hyperspectral data. 6th Workshop on Hyperspectral Image and Signal Processing.
- Ben Dor, E., Ong, C., Lau, I.C., 2015. Reflectance measurements of soils in the laboratory: Standards and protocols. *Geoderma* 245-246, 112–124.
- Ben-Dor, E., Heller, D., Chudnovsky, A., 2008. A Novel Method of Classifying Soil Profiles in the Field using Optical Means. *Soil Science Society of America Journal* 72 (4), 1113.

- Bongiovanni, R., Lowenberg-Deboer, J., 2004. Precision Agriculture and Sustainability. *Precision Agriculture* 5 (4), 359–387.
- Brown, D.J., Brickleyer, R.S., Miller, P.R., 2005. Validation requirements for diffuse reflectance soil characterization models with a case study of VNIR soil C prediction in Montana. *Geoderma* 129 (3-4), 251–267.
- Cécillon, L., Brun, J.J., 2007. Near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS): a practical tool for the assessment of soil carbon and nitrogen budget, in: Jandl, R., Olsson, M. (Eds.), *Greenhouse-gas budget of soils under changing climate and land use (BurnOut)*. BFW, Vienna, pp. 103–110.
- Chodak, M., Khanna, P., Beese, F., 2003. Hot water extractable C and N in relation to microbiological properties of soils under beech forests. *Biology and Fertility of Soils* 39 (2), 123–130.
- 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.
- Chou, P.-H., Lan, T.-H., 2013. The role of near-infrared spectroscopy in Alzheimer's disease. *Journal of Clinical Gerontology and Geriatrics* 4 (2), 33–36.
- Christy, C.D., 2008. Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture* 61 (1), 10–19.
- Chung, H., 2007. Applications of Near-Infrared Spectroscopy in Refineries and Important Issues to Address. *Applied Spectroscopy Reviews* 42 (3), 251–285.
- Dunn, B.W., Batten, G.D., Beecher, H.G., Ciavarella, S., 2002. The potential of near-infrared reflectance spectroscopy for soil analysis — a case study from the Riverine Plain of south-eastern Australia. *Aust. J. Exp. Agric.* 42 (5), 607.
- Esbensen, K., Guyot, D., Westad, F., Houmoller, L.P., 2012. *Multivariate data analysis-in practice: An introduction to multivariate data analysis and experimental design*, 5th ed. ed. CAMO, Oslo, xx, 598.
- Filzmoser, P., Garrett, R.G., Reimann, C., 2005. Multivariate outlier detection in exploration geochemistry. *Computers and Geosciences* 31, 579-587.
- García-Sánchez, F., Galvez-Sola, L., Martínez-Nicolás, J.J., Muelas-Domingo, R., Nieves, M., 2017. Using Near-Infrared Spectroscopy in Agricultural Systems, in: Kyprianidis, K.G., Skvaril, J. (Eds.), *Developments in Near-Infrared Spectroscopy*. InTech.
- Gogé, F., Joffre, R., Jolivet, C., Ross, I., Ranjard, L., 2012. Optimization criteria in sample selection step of local regression for quantitative analysis of large soil NIRS database. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 110 (1), 168–176.
- Guerrero, C., Stenberg, B., Wetterlind, J., Viscarra Rossel, R.A., Maestre, F.T., Mouazen, A.M., Zornoza, R., Ruiz-Sinoga, J.D., Kuang, B., 2014. Assessment of soil organic carbon at local scale with spiked NIR calibrations: Effects of selection and extra-weighting on the spiking subset. *European Journal of Soil Science* 65 (2), 248–263.
- Hodge, G.R., Woodbridge, W.C., 2010. Global near Infrared Models to Predict Lignin and Cellulose Content of Pine Wood. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 18 (6), 367–380.
- ICRAF, 2015. A globally distributed soil spectral library visible near infrared diffuse reflectance spectra URL
http://worldagroforestry.org/sites/default/files/Description_ICRAFISRIC
- Jamrógiewicz, M., 2012. Application of the near-infrared spectroscopy in the pharmaceutical technology. *Journal of pharmaceutical and biomedical analysis* 66, 1–10.
- Knadel, M., Deng, F., Thomsen, A., Greve, M., 2012. Development of a Danish national Vis-NIR soil spectral library for soil organic carbon determination, in: Minasny, B., Malone, B.P., McBratney, A.B. (Eds.), *Digital soil assessments and beyond*. Proceedings of the 5th Global Workshop on

- Digital Soil Mapping, 2012, Sydney, Australia, 10-13 April 2012. CRC Press, Boca Raton, Fla., pp. 403–408.
- Ladoni, M., Bahrami, H.A., Alavipanah, S.K., Norouzi, A.A., 2010. Estimating soil organic carbon from soil reflectance: A review. *Precision Agriculture* 11 (1), 82–99.
- Long, J., Wang, K., Yang, M., Zhong, W., 2018. Rapid crude oil analysis using near-infrared reflectance spectroscopy. *Petroleum Science and Technology* 37 (3), 354–360.
- Mouazen, A.M., Karoui, R., Baerdemaeker, J. de, Ramon, H., 2005. Classification of soil texture classes by using soil visual near infrared spectroscopy and factorial discriminant analysis techniques. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 13, 231–240.
- Nduwamungu, C., Ziadi, N., Parent, L.-É., Tremblay, G.F., Thuriès, L., 2009. Opportunities for, and limitations of, near infrared reflectance spectroscopy applications in soil analysis: A review. *Canadian Journal of Soil Science* 89 (5), 531–541.
- Nocita, M., Stevens, A., van Wesemael, B., Aitkenhead, M., Bachmann, M., Barthès, B., Ben Dor, E., Brown, D.J., Clairotte, M., Csorba, A., Dardenne, P., Demattê, J.A.M., Genot, V., Guerrero, C., Knadel, M., Montanarella, L., Noon, C., Ramirez-Lopez, L., Robertson, J., Sakai, H., Soriano-Disla, J.M., Shepherd, K.D., Stenberg, B., Towett, E.K., Vargas, R., Wetterlind, J., 2015. Soil Spectroscopy: An Alternative to Wet Chemistry for Soil Monitoring, in: Sparks, D.L. (Ed.), *Advances in agronomy*. Volume 132, vol. 132. *Advances in Agronomy* 132. Academic Press, Amsterdam, pp. 139–159.
- Norris, K.H., Hart, J.R., 1965. Direct spectrophotometric determination of moisture content of grain and seeds 4 (Proc. 1963 International Symposium on Humidity and Moisture), 19–25.
- Pikuła, D., Rutkowska, A., 2014. Effect of leguminous crop and fertilization on soil organic carbon in 30-years field experiment. *Plant, Soil and Environment* 60 (11), 507-511.
- Pimentel, D., 1991. Global warming, population growth, and natural resources for food production. *Society & natural resources* 4 (4), 347–363.
- Porep, J.U., Kammerer, D.R., Carle, R., 2015. On-line application of near infrared (NIR) spectroscopy in food production. *Trends in Food Science & Technology* 46 (2), 211–230.
- Rinnan, Å., van den Berg, F., Engelsen S.B., 2009. Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra. *Trends in Analytical Chemistry* 28 (10), 1201-1222.
- Roberts, C.A., Workman, J., Reeves, J.B., 2004. Near-infrared spectroscopy in agriculture: Craig A. Roberts, Jerry Workman, James B. Reeves ; managing editor: Lisa Al-Amoodi. *Agronomy* no. 44. American Society of Agronomy, Madison, Wis.
- Roberts, J.J., Cozzolino, D., 2017. Wet or dry?: The challenges of NIR to analyse soil samples. *NIR news* 28 (4), 3–5.
- Sakudo, A., 2016. Near-infrared spectroscopy for medical applications: Current status and future perspectives. *Clinica chimica acta; international journal of clinical chemistry* 455, 181–188.
- Shepherd, K.D., Walsh, M.G., 2002. Development of Reflectance Spectral Libraries for Characterization of Soil Properties. *Soil Science Society of America Journal* 66 (3), 988.
- Siebielec, G., McCarty, G.W., Stuczynski, T.I., Reeves III, J.B., 2004. Near- and mid-infrared reflectance spectroscopy for measuring soil metal content. *Journal of Environmental Quality* 33 (6), 2056–2069.
- Smidt, E., Böhm, K., Schwanninger, M., 2011. The Application of FT-IR Spectroscopy in Waste Management, *Fourier Transforms - New Analytical Approaches and FTIR Strategies*, in: Nikolić, G.S. (Ed.), *Fourier transforms. New analytical approaches and FTIR strategies*. InTech, Rijeka, Croatia.
- Sørensen, L.K., 2002. True accuracy of near infrared spectroscopy and its dependence on precision of reference data. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 10, 15–25.

- Soriano-Disla, J.M., Janik, L.J., Viscarra Rossel, R.A., Macdonald, L.M., McLaughlin, M.J., 2013. The Performance of Visible, Near-, and Mid-Infrared Reflectance Spectroscopy for Prediction of Soil Physical, Chemical, and Biological Properties. *Applied Spectroscopy Reviews* 49 (2), 139–186.
- Stenberg, B., Viscarra Rossel, R.A., Mouazen, A.M., Wetterlind, J., 2010. Visible and Near Infrared Spectroscopy in Soil Science, in: Sparks, D.L. (Ed.), *Advances in agronomy*, vol. 107, 1st ed. ed. *Advances in Agronomy*. Academic Press, San Diego, CA, pp. 163–215.
- Stevens, A., Nocita, M., Tóth, G., Montanarella, L., van Wesemael, B. 2013. Prediction of soil organic carbon at the European scale by visible and near infrared reflectance spectroscopy. *PLoS ONE* 8 (6), e66409.
- Tóth, G., Jones, A., Montanarella, L., 2013. The LUCAS topsoil database and derived information on the regional variability of cropland topsoil properties in the European Union. *Environmental monitoring and assessment* 185 (9), 7409–7425.
- Vasques, G.M., Demattê, J.A.M., Viscarra Rossel, R.A., Ramírez-López, L., Terra, F.S., 2014. Soil classification using visible/near-infrared diffuse reflectance spectra from multiple depths. *Geoderma* 223-225, 73–78.
- Viscarra Rossel, R.A., Behrens, T., Ben-Dor, E., Brown, D.J., Demattê, J.A.M., Shepherd, K.D., Shi, Z., Stenberg, B., Stevens, A., Adamchuk, V., Aichi, H., Barthès, B.G., Bartholomeus, H.M., Bayer, A.D., Bernoux, M., Böttcher, K., Brodský, L., Du, C.W., Chappell, A., Fouad, Y., Genot, V., Gomez, C., Grunwald, S., Gubler, A., Guerrero, C., Hedley, C.B., Knadel, M., Morrás, H.J.M., Nocita, M., Ramirez-Lopez, L., Roudier, P., Campos, E.R., Sanborn, P., Sellitto, V.M., Sudduth, K.A., Rawlins, B.G., Walter, C., Winowiecki, L.A., Hong, S.Y., Ji, W., 2016. A global spectral library to characterize the world's soil. *Earth-Science Reviews* 155, 198–230.
- Viscarra Rossel, R.A., McBratney, A.B., 2008. Diffuse reflectance spectroscopy as a tool for digital soil mapping, in: Hartemink, A.E., McBratney, A.B., Mendonça-Santos, M.d.L. (Eds.), *Digital soil mapping with limited data*. Springer, Dordrecht, London, pp. 165–172.
- Viscarra Rossel, R.A., Webster, R., 2011. Discrimination of Australian soil horizons and classes from their visible-near infrared spectra. *European Journal of Soil Science* 62 (4), 637–647.
- Wenjun, J., Zhou, S., Jingyi, H., Shuo, L., 2014. In situ measurement of some soil properties in paddy soil using visible and near-infrared spectroscopy. *PloS one* 9 (8), e105708.
- Williams, P.C., 1973. The application of the Neotec grain quality analyzer to the analyses of cereal grains and oilseeds. *Cereals Science Today* 18, 284–285.
- Zornoza, R., Guerrero, C., Mataix-Solera, J., Scow, K.M., Arcenegui, V., Mataix-Beneyto, J., 2008. Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. *Soil Biology & Biochemistry* 40 (7), 1923–1930.

5. Omówienie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

Geochemia izotopów

Podczas moich studiów doktoranckich w Instytucie Nauk Geologicznych PAN byłem zaangażowany w badanie zachowania izotopów uranu U i toru Th w „brudnych” kalcytach (lista ustnych prezentacji na ten temat wymieniona w załączniku 6 „Przed obroną doktoratu”). Celem moich badań rozpoznanie zjawiska sorpcji/desorpcji uranu U i toru Th na minerałach ilastych (montmorylonit, illit, kaolinit) w osadach jeziornych. W przeciwieństwie do „czystych” węglanów (które są idealnym materiałem do datowania tą metodą, Bard i in., 1990), „brudne” węglany zawierają ^{230}Th , co nie jest związane z rozpadem „in situ” ^{234}U (Schwarcz i Latham, 1989). Wyzwaniem było wykorzystanie tego do wypróbowania datowania tych materiałów za pomocą metody datowania serii U (Edwards i in., 1986). Próba zakończyła się sukcesem, a nowa metodologia została zastosowana w licznych dokumentach (**Gradziński i in., 2002, Tatur i in., 2002, Debaene 2003**) do datowania stromatolitów pochodzących z Patagonii, nacieków jaskiniowych ze Słowacji i osadów jeziornych z Polski. Stworzono trzy oryginalne metody budowania „izochronów” i wykorzystano je do uzyskania poprawnego datowania tych materiałów.

Wyczerpujące badania minerałów ilastych i osadów jeziornych były dla mnie źródłem inspiracji do pracy z osadami organicznymi (np. gytią) i złożenia wniosku grantowego pt. „Wpływ mineralogii gleb, substancji organicznej i niektórych środowiska glebowego na stabilność gleb, opisanego poniżej”. W przyszłości chciałbym wykorzystać wiedzę o wysokiej mobilności ^{234}U i bezruchu jego produktu rozpadu (córka, ang. *daughter*) ^{230}Th , do zbadania profili gleb organicznych i ostatecznie do dokładnego datowania wszystkich warstw.

Bard E., Hamelin B., Fairbanks R.G. (1990) U-Th ages obtained by mass spectrometry in corals from Barbados: sea level during the past 130,000 years. *Nature*. 346, 456-458.

Edwards R.L., Chen J.H., Wasserburg G.J. (1986) ^{238}U - ^{234}U - ^{230}Th - ^{232}Th systematics and the precise measurement of time over the past 500,000 years. *Earth and Planetary Science Letters*. 81, 175-192.

Debaene, G., 2003. Uranium-series dating of marly sediments: applications to Jarosłów fossil lake (SW Poland). *Geochronometria*, 22, 15-26.

Gradziński M., Hercman H., Bella P., **Debaene G.**, Nowicki T., 2002: Tmavé laminácie v sintrových nátekoach jaskyne Domica ako indikátor aktivít pravekých ľudí (Dark coloured laminae within speleothems of the Domica Cave as an indicator of the prehistoric men activity). *Slovenský Kras*, 40, 41-48.

Schwarcz H.P. and Latham A.G. (1989) Dirty calcites. 1. Uranium-series dating of contaminated calcite using leachate alone. *Chemical Geology*. 80, 35-43.

Tatur, A., del Valle, R., Bianchi, M. M., Outes, V., Villarosa, G., Niegodzisz, J., & Debaene, G., 2002. Late Pleistocene palaeolakes in the Andean and Extra-Andean Patagonia at mid-latitudes of South America. *Quaternary International*, 89(1), 135-150.

Wpływ mineralogii gleb, substancji organicznej i niektórych środowisk glebowych na stabilność gleb

W roku 2013 uzyskałem dofinansowanie projektu badawczego z Narodowego Centrum Nauki. Tytuł projektu: Wpływ mineralogii gleb, substancji organicznej i niektórych środowiska glebowego na stabilność gleb. Projekt był prowadzony od 2013 do 2017 roku. Umowa nr UMO-2012/07/B/ST10/04387.

Podstawowym celem projektu było zbadanie wpływu odczynu gleb, składu mineralogicznego frakcji koloidalnej gleb i składu jakościowego próchnicy na stabilność gleb określaną na podstawie zawartości łu łatwo dyspergującego (RDC) w funkcji potencjału wodnego gleb oraz zbadanie wpływu frakcji koloidalnej gleby na sorpcję pierwiastków śladowych. W tym celu przeprowadzono doświadczenie wazonowe. Glebą pobraną do eksperymentu był piasek gliniasty z pola w Osinach (IUNG-PIB) koło Puław. Do połowy gleby dodawano węglan wapnia (CaCO_3), a więc doświadczenie prowadzono przy dwóch odczynach gleb – lekko kwaśnej i obojętnej. W doświadczeniu wazonowym do gleby dodawano również minerały ilaste (illit, montmorylonit, kaolinit) w trzech różnych ilościach: 0,5%, 2%, 5%, oraz pierwiastki śladowe (Ni, Zn, Cd, Pb). Doświadczenie wykazało, że dodanie metali śladowych (tj. Ni, Zn, Cd, Pb w ilości 3-krotnie wyższej od przyjętego w Polsce poziomu dopuszczalnego w postaci soli) do próbek glebowych (bez minerałów ilastych) nie ma wpływu na zawartość łu łatwo-dyspergującego (RDC). Dodanie illitu i montmorylonitu do kontroli powodowało wzrost pH do maksymalnej wartości 7,5 przy dodaniu minerałów ilastych w ilości 5%. Dodanie kaolinitu do gleby nie zwiększało znacząco odczynu gleby. Dodanie CaCO_3 do badanych próbek, jak również dodanie minerałów ilastych powodowało spadek kwasowości hydrolitycznej Hh od 2 do 0,75 cmol(+)/kg. Przy 5% zawartości illitu i montmorylonitu w próbkach glebowych zarówno bez, jak i z zawartością węglanu wapnia obserwowano znaczny wzrost zawartości łu łatwo-dyspergującego RDC w przypadku próbek zanieczyszczonych pierwiastkami śladowymi w stosunku do próbek czystych (przykładowo wzrost z 0,28 do 0,67 g/100g dla mieszaniny gleb z 5% dodatkiem montmorylonitu). Z kolei w przypadku kaolinitu w większości przypadków obserwowano odwrotną zależność. W przypadku zawartości kaolinitu wynoszącej 2% bez i z zawartością

CaCO₃ oraz przy zawartości kaolinitu wynoszącej 5% bez węglanu wapnia ilość ilów łatwo dyspergujących była wyższa w próbkach bez zawartości pierwiastków śladowych.

Drugim celem projektu było zbudowanie modelu do prognozowania zawartości RDC w glebie na podstawie widm uzyskanych metodą spektrometryczną VIS-NIR. Analizowane próbki zostały również skanowane w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR tzn. w zakresie długości fal 350-2500 nm. Po wstępnej obróbce matematycznej widm (np. średnia krocząca i SNV Standard Normal Variate - procedura do normalizacji widm) możliwe było określenie na podstawie samych widm (po kalibracji wieloczynnikowej) tekstury gleb, co z kolei z uwagi na relacje pomiędzy RDC a minerałami ilastymi, pozwoliło zbudować model (regresja metodą cząstkowych najmniejszych kwadratów PLS) do prognozowania zawartości RDC w glebie. Wynikiem regresji PLS był współczynnik regresji $r^2 = 0,744$ i RMSE = 0,01. Oznacza to, że zawartość RDC przewidziano z dokładnością 0,01g/100g. Wykazano, że potencjał wodny nie miał wpływu na model, pod warunkiem skanowania próbek posiadających taką samą wilgotność.

Wyżej opisany model pomyślnie zastosowany do przewidywania zawartości RDC w próbkach gleb pochodzących z miejscowości Baborówko i Grabów, które prezentowały podobną teksturę. Do badań wykorzystano wyżej opisany model, ale dodatkowo zastosowano metodę „spiking” polegającą na dodawaniu do modelu kilku dodatkowych próbek z badanego pola w celu podwyższenia dokładności predykcji modelu.

Wykonano również pomiar przestrzennej zmienności RDC. Mapę uzyskano przy użyciu mobilnej platformy Veris wyposażonej w czujnik VIS-NIR, czujnik przewodności elektrycznej (EC) oraz czujnik temperatury. Walidacja map była przeprowadzona na niezależnych próbkach, jak również w odniesieniu do map zawartości węgla organicznego, zawartości frakcji ilastej, EC, wskaźnik NDVI oraz ortofotomap. Najlepszy model PLSR ($r^2 = 0,74$; RMSE = 0,03) do szacowania RDC i frakcji ilastej uzyskano stosując połączenie danych VIS-NIR z pomiarem EC (pomiar głęboki).

Uzyskane wyniki były licznie prezentowane w postaci referatów i posterów (wymienione w załączniku 6) i stanowiły podstawę do napisania publikacji: **A3**, **A5** oraz **Ukalska-Jaruga i in., 2018**.

Do najważniejszych wyników projektu zaliczam:

1. Wykazanie, że spośród minerałów ilastych największymi zdolnościami do absorbowania (unieruchamiania) metali ciężkich odznaczał się montmorylonit i illit, natomiast kaolinit wykazywał najsłabsze właściwości w tym zakresie.

2. Wykazanie ogromnej roli próchnicy w stabilizacji gleb. W glebach o wyższej zawartości próchnicy ilość iltu łatwo dyspergującego RDC była niższa.
3. Wykazanie, że stabilność gleb w lasach liściastych jest wyższa niż stabilność gleb w lasach mieszanych i iglastych. Najmniej stabilne gleby stwierdzono na użytkach z intensywną produkcją rolną.
4. Stworzenie map stabilności gleb w skali pola. Mapy takie mogą być potencjalnie przydatne przy planowaniu np. działań ochronnych przeciwko niekorzystnym zjawiskom, które mogą zachodzić w środowisku glebowym. Również szeroko rozumiane rolnictwo precyzyjne może być odbiorcą tego typu wyników badań przy planowaniu zabiegów agrotechnicznych szczególnie na terenach narażonych na zjawiska erozyjne
5. Przeprowadzenie próby przewidywania kwasowości hydrolitycznej za pomocą spektroskopii VIS-NIR. Kwasowość hydrolityczna Hh jest ważnym parametrem opisującym gleby z punktu widzenia rolnictwa, ponieważ niesie ze sobą informację o potrzebie wapnowania gleb kwaśnych.

Ukalska-Jaruga, A., Debaene, G., & Smreczak, B., 2018. Particle and structure characterization of fulvic acids from agricultural soils. *Journal of Soils and Sediments*, 18(8), 2833-2843.

Rolnictwo precyzyjne

Rolnictwo precyzyjne lub zarządzanie uprawami specyficznymi dla danego miejsca (ang. *site specific crop management* SSCM) to system zarządzania rolnictwem polegający na obserwowaniu, mierzeniu i reagowaniu na zmienność pola. Celem rolnictwa precyzyjnego jest zdefiniowanie systemu wspomagania decyzji (ang. *decision support system* DSS) dla zarządzania gospodarstwem w celu optymalizacji zwrotów z poniesionych nakładów przy jednoczesnym zachowaniu zasobów (Pedersen i Lind, 2017). W rolnictwie precyzyjnym możliwe jest wykorzystanie jednocześnie wielu czujników. Jednym z celów moich badań było zastosowanie metody spektrometrii VIS-NIR w rolnictwie precyzyjnym, z uwagi na fakt, że metoda ta okazała się być bardzo wrażliwa na zmiany właściwości fizycznych i chemicznych gleb. Zmienność gleb może być również badana za pomocą tradycyjnej teledetekcji (ang. *remote sensing*) i innych czujników, co zostało opisane w artykule **Pudielko i in., 2012**, którego jestem współautorem. Wykorzystując zdjęcia lotnicze, zdjęcia satelitarne, przewodność elektryczną i mapy plonów, modelowano potencjalną produktywność pola w Baborówku (stacja doświadczalna IUNG-PIB). Powstałe mapy przedstawiają różne strefy produktywności na polu, i z uwagi na to, że ich rozdzielczość odpowiada praktyce rolniczej mogą one być narzędziem powszechnie stosowanym przez rolników. Kolejne badania nad

zastosowaniem kilku czujników jednocześnie w rolnictwie precyzyjnym przedstawiono w pracy **Pecio i in. (2016)**. Badaniami objęto cztery nowe pola na stacji doświadczalnej Baborówko (o łącznej powierzchni 78,5 ha). W celu pomyślnego przewidywania zawartości węgla organicznego SOC, odczynu pH, zawartości dostępnych pierwiastków (Mg, P, K) i zawartości części sypialnych (średnica cząstek < 0,02 mm) pobrano 154 próbki glebowe z siatki referencyjnej. Zawartość części sypialnych jest ważnym parametrem w ocenie kategorii agronomicznych gleb (**Jadczyzyn i in., 2017**). W pracy zastosowano metodykę przedstawioną w artykule (**A2**). Wykorzystano również platformę mobilną Veris® do stworzenia map kilku właściwości metodą „on-the-go”. W tym przypadku z uwagi na wielkość pola konieczne było podzielenie skanowania na kilka sesji. Stworzone mapy nie odbiegały dokładnością od oryginalnych map, co wskazuje na zasadność korzystania z metod spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do mapowania terenu.

Jadczyzyn, J., Niedźwiecki, J., & **Debaene, G.**, 2017. Analysis of Agronomic Categories in Different Soil Texture Classification Systems. Polish Journal of Soil Science, 49(1): 61-72.

Pecio A., Niedźwiecki, J., & **Debaene, G.**, 2016. Rozpoznanie pola podstawą precyzyjnego nawożenia roślin. Studia i Raporty IUNG-PIB, 48(2): 105-129.

Pedersen, S.M., Lind, K.M., 2017. Precision agriculture: Technology and economic perspectives. Progress in Precision Agriculture. Springer, Cham, 1 Online-Ressource (xii, 276 Seiten).

Pudęko, R., Niedźwiecki, J., **Debaene, G.**, Igras, J., & Kubsik, K., 2012. The remote sensing assessment of potential productivity of a field with soil spatial variability. Journal of Food, Agriculture and Environment, 10(2), 790-793.

Nowe zainteresowania badawcze:

1. Zagadnienia zwilżalności materiałów biologicznych

Od roku 2015 prowadzę naukową współpracę z Katedrą Kształtowania Środowiska Wydziału Budownictwa i Inżynierii Środowiska Szkoły Głównej Gospodarstwa Wiejskiego w Warszawie, czego efektem są następujące publikacje:

1. **Papierowska i in. (2018a)**. (IF: 3,740 dla roku 2017)

2. **Papierowska i in. (2018b)**. (IF: 1,782 dla roku 2017)

Ad.1

Pierwszy artykuł dotyczy porównania metod oceny zwilżalności gleb organicznych i mineralno-organicznych. Artykuł ten dotyczy bardzo ważnego zagadnienia niezwilżalności (hydrofobowości) gleb. Jest to bardzo ważne zagadnienie z uwagi na to, że zjawisko nie zwilżalności ma swoje konsekwencje w środowisku. Przede wszystkim powoduje

ograniczenie zdolności infiltracyjnych gleb, wpływa na proces ruchu wody glebowej, znacząco wpływa na zwiększenie spływu powierzchniowego, wywołuje przepływ preferencyjny wody w glebie oraz prowadzi do pojawienia się zjawiska erozji wodnej gleby.

Celem niniejszego artykułu było określenie zgodności metod oceny zwilżalności gleb wykorzystując metody statystyczne. Zaproponowano zastosowanie ważonego współczynnika kappa (κ_w), który pozwolił oszacować wartość kąta zwilżania na podstawie prostych testów, takich jak czas wsiąkania kropli wody (WDPT) i molarność kropli etanolu (MED). W pracy pomierzono laboratoryjnie zwilżalność 106 próbek gleb organicznych i mineralno-organicznych, pobranych z różnych lokalizacji w północno-wschodniej Polsce. Badania zwilżalności gleb przeprowadzono za pomocą czterech metod pomiarowych, tj. pomiar kąta zwilżania metodą osadzonej kropli i metodą płytki Wilhelmy'ego, pomiar czasu wsiąkania kropli wody (WDPT) oraz wykonano test molarności alkoholu (MED).

Uzyskane wyniki badań wykazały, że ważony współczynnik kappa, przyjmowany jako miara zgodności obserwatora, wskazuje na silną zależność ($\kappa_w = 0,84$) między średnim kątem zwilżania mierzonym metodą osadzonej kropli, a wartością mediany czasu wsiąkania kropli wody. Stwierdzono również, że próbki hydrofilowe o czasie wsiąkania mniejszym niż 5 s mają średnie wartości kąta zwilżania poniżej 40° , podczas gdy próbki o ekstremalnie hydrofobowych właściwościach z czasem wsiąkania powyżej 3600 s mają wartości kąta zwilżania wyższe niż 130° . Badania dowiodły, że metody WDPT i MED, które są stosunkowo proste i nie wymagają drogiej aparatury, mogą być dobrym estymatorem wartości kąta zwilżania dla oznaczania zwilżalności zarówno w warunkach laboratoryjnych jak i polowych.

Ad.2

Drugi artykuł dotyczy określenia zwilżalności liści drzew liściastych i krzewów gatunków powszechnie występujących w Polsce.

Głównym celem badań było zbadanie różnic w zwilżalności liści 19 gatunków drzew i krzewów (w tym 16 drzew liściastych i 3 krzewy) powszechnie występujących w polskich lasach w strefie klimatu umiarkowanego. Dla każdego gatunku wybrano dwadzieścia nieuszkodzonych liści, i przeprowadzono badania laboratoryjne w celu określenia zwilżalności na podstawie pomiarów kąta zwilżania za pomocą goniometru optycznego CAM 100 przy użyciu metody osadzonej kropli. Pomiar wykonano dla górnej i dolnej strony liści. Wartości kąta zwilżania wykazywały spadek wartości w czasie pomiaru (pomiar kąta zwilżania co 1 s w czasie 2 minut) i wahały się od 60° do 140° w zależności od gatunku i analizowanej strony liścia. Wykazano, że dolna strona liścia była bardziej hydrofobowa

w przypadku 14 z 19 analizowanych gatunków. Analizowane liście sklasyfikowano od wysoce zwilżalnych do wysoce niezwilżalnych, prawdopodobnie w zależności od strategii przetrwania roślin. W celu zbadania wpływu gatunku na wartość kąta zwilżania wykorzystano analizę skupień oraz porównano te wyniki z zaproponowaną przeze mnie metodą analizy głównych składowych (PCA).

Papierowska, E., Matysiak, W., Szatyłowicz, J., **Debaene, G.**, Urbanek, E., Kalisz, B., Łachacz, A. 2018a. Compatibility of methods used for soil water repellency determination for organic and organo-mineral soils. *Geoderma*, 314, 221-231.

Papierowska, E., Szporak-Wasilewska, S., Szewińska, J., Szatyłowicz, J., **Debaene, G.**, Utratna, M. 2018b. Contact angle measurements and water drop behavior on leaf surface for several deciduous shrub and tree species from a temperate zone. *Trees*, 32(5), 1253-1266.

2. Badanie ekstraktów z gleby za pomocą spektrometrii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR

Efektom badań ekstraktów glebowych przy wykorzystaniu widm VIS-NIR jest artykuł **Ukalska-Jaruga i in., (2018)** opublikowany w czasopiśmie *Journal of Soils and Sediments* (IF 2017 wynoszący 2,627).

Wszystkie opisane wcześniej prace wykazały, że spektroskopia odbiciowa jest dobrym narzędziem do badania gleb. Metoda ta nie została jednak nigdy wykorzystana do analizy ekstraktu glebowego pochodzącego np. z izolacji i oczyszczania kwasów fulwowych lub humusowych. Dzięki zastosowaniu specjalnie skonstruowanej kuwety, która jest połączona ze spektrometrem PSR-3500 i światłowodem, możliwe jest mierzenie absorpcji ekstraktów glebowych. Urządzenie to wykorzystano do pomiaru właściwości spektroskopowych kwasów fulwowych (FA) z ekstraktu otrzymanego przez izolację i oczyszczanie kwasów fulwowych metodą IHSS (Hayes 1985; Swift, 1985). Widma wykazały, że kwasy fulwowe FA zachowują się jak anionowy lub kationowy heterogeniczny ligand z wieloma grupami metylowymi, etylenowymi, aminowymi i karboksylowymi o różnej sile wiązań. Ta obserwacja i inne analizy przeprowadzone w tym badaniu (tj. zawartość węgla organicznego, średnica wielkości cząstek i potencjał elektrokinetyczny zeta) pozwoliły uzyskać szczegółowy opis kwasów fulwowych z gleb rolniczych. Ich złożoność i niejednorodność były potwierdzone przez metody (widma VIS-NIRS i potencjał zeta). Ponadto odkryto, że kwasy fulwowe występują głównie jako małe cząsteczki, które tworzą agregaty molekularne. Ładunek i zachowanie tych agregatów wpływa na właściwości gleby. Nowość metody i uzyskanie interesujących wyników dają podstawy do kontynuowania w przyszłości badań nad ekstraktem glebowym.

- Hayes M.B.H. 1985. Extraction of humic substances from soil. In: Aiken, G.R., McKnight, D.M., Wershaw, R.L., MacCarthy, P. (eds) Humic substances in soil, sediment, and water. Geochemistry, isolation, and characterization. Wiley-Interscience, New York, pp 329-362.
- Ukalska-Jaruga, A., **Debaene, G.**, & Smreczak, B., 2018. Particle and structure characterization of fulvic acids from agricultural soils. *Journal of Soils and Sediments*, 18(8), 2833-2843.
- Swift, R.S. 1985. Fractionation of soil humic substances. In: Aiken, G.R., McKnight, D.M., Wershaw, R.L., MacCarthy, P. (eds) Humic substances in soil, sediment, and water. Geochemistry, isolation, and characterization. Wiley-Interscience, New York, pp 387-408.

3. Badanie gleb organicznych metodami spektrometrycznymi w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni VIS-NIR

W mojej dotychczasowej pracy dużo uwagi poświęciłem przewidywaniu zawartości węgla organicznego w glebach ornych, ponieważ jego zawartość jest kluczowym parametrem do oceny jakości gleb. Jest to interesująca właściwość gleb, ponieważ zawartość węgla organicznego jest zmienna zarówno w czasie, jak i w przestrzeni. Moje dotychczasowe prace wykazały, że zastosowanie spektroskopii w zakresie długości fal (350-2500 nm) daje dobre wyniki przewidywania zawartości węgla w glebach mineralnych. Przykładowe wyniki dla zbudowanych modeli ($r^2 = 0,68$; RMSE = 0,11; $r^2 = 0,71$; RMSE = 0,12) wykazują, że w przypadku gleb ornych jakość przewidywań jest satysfakcjonująca i zbliżona dokładnością do analiz laboratoryjnych (**Niedźwiecki i Debaene, 2013**). To doświadczenie stało się inspiracją do zastosowania metody spektroskopii VIS-NIR do badania zawartości węgla organicznego w glebach organicznych tj. torfy, gytie. Obecnie jestem kierownikiem badań statutowych (3.16 „Wykorzystanie metod chemometrycznych w ocenie jakości rolniczo użytkowanych gleb organicznych oraz pochodzenia organicznego”) w tej tematyce. Badania widm gleb organicznych są cenne, ponieważ brak w literaturze krajowej i światowej wyników dla tego typu badań. Obecnie wraz z zespołem prowadzę również badania nad wykorzystaniem metod spektralnych do klasyfikowania utworów organicznych na potrzeby rozwijania Spektralnej Biblioteki Gleb Polski (SBGP). Wstępne wyniki badań zostały przedstawione w pracy **Niedźwiecki i in., 2017**. Poszerzenie bazy danych o gleby organiczne jest ważne przy mapowaniu terenu Polski. Dodanie do bazy gleb organicznych przyczyni się do poprawy dokładności map predykcyjnych dla Polski, które zostały przedstawione w pracy (**A6**), i które do tej pory opierały się na danych dla gleb mineralnych.

Niedźwiecki, J., **Debaene G.**, 2013. Nowoczesne chemometryczne metody oznaczania substancji organicznej w glebach. *Studia i Raporty IUNG-PIB*, 35(9): 199-212.

Niedźwiecki J., **Debaene, G.**, Smreczak, B., Łysiak M., Ukalska-Jaruga, A., 2017. Wstępne badania nad wykorzystaniem metod spektralnych do klasyfikacji utworów organicznych na potrzeby spektralnej biblioteki gleb Polski. *Studia i Raporty IUNG-PIB*, 54(8): 41-55.

Podsumowanie pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych

Do najważniejszych osiągnięć w zakresie pozostałego dorobku naukowego zaliczam:

- 1) Badania nad zwilżalnością materiałów pochodzenia biologicznego. Zjawisko niezwilżalności (hydrofobowości) występuje powszechnie i ma wiele konsekwencji dla środowiska.
- 2) Badania ekstraktów glebowych metodami spektralnymi w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni udowodniły, że tą metodą można charakteryzować kwasy fulwowe.
- 3) Zastosowanie metody spektralnej w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni do badania gleb organicznych.
- 4) Rozbudowanie bazy Spektralnej Biblioteki Gleb Polski (SBGP) o widma gleb organicznych w celu dokładniejszego mapowania kraju.

6. Dalsze plany rozwoju naukowego

W dalszej pracy zawodowej chciałbym pracować nad następującymi zagadnieniami:

- 1) Udoskonalać modele predykcyjne właściwości gleb. Wykorzystać metodę sieci neuronowych (NN) do budowania modeli predykcyjnych opartych na dostępnej bazie danych.
- 2) Stale rozwijać Spektralną Bibliotekę Gleb Polski (SBGP) o nowe widma dla gleb mineralnych, ale również dodać widma gleb organicznych (część widm już została dodana do bazy) oraz widma gleb leśnych. Na podstawie rozszerzonej bazy danych stworzyć dokładniejsze mapy predykcji różnych właściwości gleb.
- 3) Testować czy możliwy jest za pomocą metod spektrometrii VIS-NIR pomiar zmian w czasie zawartości węgla organicznego w glebie i spróbować wykorzystać metodę do obliczenia zapasu węgla organicznego gleb (ang. *soil carbon-stock*). Co byłoby przydatne ze względu na monitoring zmian klimatu.
- 4) Bazując na widmach w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni poszukiwać wskaźników jakości gleb przydatnych w ich klasyfikacji. Celem jest uzyskanie narzędzia, które by w szybki sposób usprawniało klasyfikowanie profili metodą WRB.
- 5) Prowadzić dalsze badania nad wykorzystaniem metody spektralnej do badania płynów (ekstraktów glebowych). Obecnie trwają prace nad zastosowaniem metody do oznaczania poza kwasami fulwowymi również kwasów humusowych i huminowych.

- 6) Stosować metodę spektralną jako szybką metodę oszacowania czy zawartość wielopierścieniowych węglowodorów aromatycznych (WWA) w glebie odpowiada dopuszczalnej ilości określonej w Rozporządzeniu Ministra Środowiska z dnia 1 września 2016 r. w sprawie sposobu prowadzenia oceny zanieczyszczenia powierzchni ziemi (Dz.U. 2016 poz. 1395). Artykuł z tego tematu jest w trakcie realizacji.
- 7) Stosować metodę spektralną do badania czarnego węgla (ang. *black carbon*). Artykuł z tego tematu jest aktualnie w recenzji.
- 8) Powiązać metodę spektroskopii w zakresie światła widzialnego i bliskiej podczerwieni ze zjawiskiem niezwilżalności (hydrofobowości) materiałów biologicznych (gleba, roślina).

7. Wykaz publikacji nie stanowiących dzieła

Poza publikacjami stanowiącymi dzieło jestem autorem lub współautorem wielu publikacji. Dodatkowo 1 artykuł jest obecnie w recenzji. Zestawienie wszystkich prac wraz z liczbą punktów MNiSW, liczbą cytowań i wartością wskaźnika Impact Factor zestawilem w załączniku nr 6.

Dodatkowo jestem autorem i współautorem 2 recenzowanych materiałów konferencyjnych oraz dwóch publikacji popularnonaukowych (załącznik 6).

8. Udział w projektach badawczych

W latach 2013 - 2017 byłem kierownikiem projektu badawczego Narodowego Centrum Badań nr rejestracyjny: 2012/07/B/ST10/04387 pt. „Wpływ mineralogii gleb, substancji organicznej i niektórych środowiska glebowego na stabilność gleb”. Brałem udział również w innych projektach badawczych.

W latach 2001-2002 byłem kierownik projektu badawczego nr 6 PO4D 012 21 KBN pt. U-series dating of lake sediments. Na lata 2000-2001 otrzymałem stypendium rządu francuskiego (Bourse de coopération scientifique et culturelle France - Pologne 2000).

W latach 2010-2012 byłem wykonawcą w projekcie „Opracowanie metodyczne zagadnień gleboznawczych wynikających z planowanej Dyrektywy Parlamentu Europejskiego i Rady ustanawiającej ramy dla ochrony gleby oraz zmieniającej Dyrektywę 2004/35/WE (COM (2006) 232, wersja ostateczna) z utworzeniem narzędzi informatycznych do analizy zagrożeń gleb” Umowa 5/2010 z PIG-PIB. Byłem też wykonawcą w granicie grantu NCN: N N310 079836 – Ocena przestrzennej zmienności właściwości fizycznych i chemicznych gleb innowacyjnymi metodami „on-the-go” (ECOMP).

Moje kompetencje były wykorzystane również w projekcie europejskim prowadzonym w IUNG-PIB nr FP7-ENV- Projekt „Environmental Optimization of irrigation management with the combined use and integration of high precision satellite data, Advanced Modeling, Process Control and Business Innovation”. ENORASIS (Grant Agreement 282949)

Podczas pracy w IUNG-PIB czynnie uczestniczyłem w przygotowaniu następujących wniosków:

- 1) Stalenga J., **Debaene G.** 2014. Opracowanie części projektu międzynarodowego „Building Ecological Recycling Agriculture and Societies in Burundi” (Akronim: BERAS-Burundi) złożonego na konkurs “Sustainable Food Security” w ramach programu **Horyzont 2020** (2020-SFS-2014-1).
- 2) Pecio A., **Debaene G.**, Niedźwiecki J., Pudełko R., Wawer R. 2014. Opracowanie metod szybkiej oceny (proximal sensing) właściwości gleby i łanu roślin z wykorzystaniem metod teledetekcji i narzędzi rolnictwa precyzyjnego na potrzeby zarządzania zrównoważoną produkcją roślinną i kontroli środowiska rolniczego. Współautorstwo jako partner naukowy. FARMCOM. Program Sektorowy **BIOSTRATEG**, Narodowe Centrum Badań i Rozwoju. Nr wniosku 270284.
- 3) Siebielec G., **Debaene G.** 2015. Sustainable soil-improving cropping systems - CROP4SOIL. Program **Horyzont 2020** (ID: SFS-02b-2015).
- 4) Pecio A., **Debaene G.**, Niedźwiecki J., Pudełko R., Wawer R. 2015. FARMCOM innowacyjny system zarządzania gospodarstwem rolnym i produkcją roślinną z wykorzystaniem zintegrowanych metod informatycznych, teledetekcyjnych i narzędzi rolnictwa precyzyjnego na potrzeby zrównoważonej produkcji rolniczej i kontroli środowiska. Współautorstwo projektu jako partner naukowy. Program Sektorowy **BIOSTRATEG**, Narodowe Centrum Badań i Rozwoju. Nr wniosku 298796.
- 5) Kowalik M., **Debaene G.** 2015. Badania zależności pomiędzy strukturą porów glebowych, a występowaniem i aktywnością fauny glebowej metodą spektroskopii MIR ‘in-situ” Narodowe Centrum Nauki. **SONATA Bis**. 2015/18/E/ST10/00281.
- 6) Niedźwiecki J., **Debaene G.**, Miturski T. 2015. Wykorzystanie pomiarów hiperspektralnych gleb do charakterystyki i klasyfikacji profili glebowych. **OPUS 8** Narodowe Centrum Nauki, wniosek ID 296071.
- 7) Kowalik M., **Debaene G.** 2016. Spectrometry VIS-NIR as a tool to study dynamic changes of soil biodiversity on different agricultural land use. Program POWROTNY, Fundacja Nauki Polskiej, Wniosek nr 0052.

- 8) Ukalska-Jaruga, A., **Debaene G.** 2018. Wniosek o finansowanie projektu badawczego realizowanego w ramach współpracy międzynarodowej. Tytuł złożonego projektu: Wpływ preparatów humusowych na fizjologię kukurydzy oraz właściwości mikrobiologiczne gleby i glebowej materii organicznej. Konkurs Narodowe Centrum Nauki, program **HARMONIA 9**, wniosek nr 2018/30/M/ST10/00043.

Obecnie jestem podwykonawcą w grantcie (SONATA 11 nr 2016/21/D/ST10/01947 - NCN) dr. Piotra Bartmińskiego z Uniwersytetu Marii Curie-Skłodowskiej w Lublinie. Tytuł grantu: „Zastosowanie zobrazowań hiperspektralnych do parametryzacji sezonu wegetacyjnego w kontekście właściwości pokrywy glebowej”. Brałem też udział w badaniach statutowych IUNG-PIB prowadzonych przez mgr. Piotra Kozę, które dotyczyły tej samej tematyki. W obu współpracach zajmuję się połączeniem zdjęć satelitarnych z metodą statystyczną PLS oraz analizą spektralną.

W tematyce teledetekcji tradycyjnej i proksymalnej prowadzę obecnie ścisłą współpracę z dr Marią Knadel z Aarhus University, Dania oraz z Centrum Badań Kosmicznych PAN, czego efektem jest wspólny poster na konferencji w Chile (IUSS). Tytuł posteru: Space-borne remote spectroscopy for soil properties determination. Autorstwa: Knadel M., Debaene G., i in. 2019.

Badania statutowe

Prowadziłem i prowadzę następujące badania statutowe:

1. Projekt nr 4.02 pt. „Zastosowanie metod chemometrycznych do określania właściwości gleb mineralnych Polski”, lata 2012 – 2014.
2. Projekt nr 3.16 „Wykorzystanie metod chemometrycznych w ocenie jakości rolniczo użytkowanych gleb organicznych oraz pochodzenia organicznego”, lata 2017-2019.

Brałem udział jako wykonawca w następujących badaniach statutowych:

1. Projekt badawczy nr 4.2.5. Zakwaszenie gleb jako czynnik zagrożenia dla jakości płodów rolnych oraz wód podziemnych i powierzchniowych.
2. Projekt badawczy nr 4.1.6. Ocena przydatność zaawansowanych metod do określania przestrzennej zmienności gleb użytkowanych rolniczo.

3. Projekt badawczy nr 4.3.4. Ocena zawartości pierwiastków śladowych w ziarnie pszenicy w zależności od właściwości gleby i innych czynników w ujęciu przestrzennym.
4. Projekt badawczy nr 2.3.9. Rozpoznanie przestrzennej zmienności właściwości fizycznych i agrochemicznych gleb na polu uprawianym metodą uproszczoną.
5. Projekt badawczy nr 2.3.16. Ocena ilości i jakości glebowej materii organicznej zależnie od nawożenia oraz gatunków w zmianowaniu.
6. Projekt badawczy nr 4.1.11. Doskonalenie zdalnych metod oceny glebowych i struktury krajobrazu, opartych na wykorzystaniu zdjęć satelitarnych i lotniczych.
7. Projekt badawczy nr 4.3.6. Wielkoskalowa parametryzacji modeli symulacyjnych jako narzędzi oceny oddziaływania rolnictwa na środowisko.

9. Recenzje oryginalnych prac

9.1 Recenzja czasopism posiadających Impact Factor:

- 2019: Precision Agriculture – 1
- 2018: Geoderma – 4, International Agrophysics – 1
- 2017: Journal of Soils and Sediments – 2; Soil Science Society America Journal – 1; Geoderma – 1; Nature – Scientific Reports – 1
- 2016: Computers and Electronics in Agriculture – 1; Plant and Soil – 1
- 2015: Journal of Environmental Management – 2
- 2014: Plant and Soil – 1; Geoderma – 2; European Journal of Soil Science – 1; Environmental Monitoring and Assessment – 1
- 2012: Philippine Agricultural Scientist – 1

9.2 Recenzja czasopism nieposiadających Impact Factor:

- 2019: Soil Science Annual – 1; Mathematics – 1
- 2018: Soil Science Annual – 1
- 2017: Polish Journal of Soil Science – 1

9.3 Recenzja normy ISO:

Ponadto wykonałem recenzję normy ISO nr: ISO/DIS 17184: Soil quality – Determination of carbon and nitrogen by near-infrared spectrometry (NIRS).

10. Staże i szkolenia

Brałem udział w następujących szkoleniach, warsztatach terenowych:

1. „R-analiza danych, uczenie maszynowe – poziom podstawowy” szkolenie prowadzone przez firmę Comarch SA. 17-19.12.2018 r.
2. „Gleby wytworzone z utworów gytowych i mułowych”, warsztaty terenowe Komisji Genezy, Klasyfikacji i Kartografii Gleb, Polskiego Towarzystwa Gleboznawczego.. Pojezierze Olsztyńskie i Brodnickie, Rytebłota 3-6.10.2018 r.
3. „Transfer technologii oraz komercjalizacja wyników badań”. Szkolenia CoWinners Sp. Z.o.o., Puławy, 19-21.06.2018 r.
4. „Prognozowanie i analiza szeregów czasowych” szkolenie organizowane przez firmę StatSoft Polska. 1-2.07.2015 r.
5. „Soil Spectroscopy: the present and future of Soil Monitoring”, Międzynarodowe warsztaty organizowane przez FAO, Rzym, Włochy. 4-6.12.2013 r.
6. „Zastosowanie wybranych technik regresyjnych w STATISTICA” kurs organizowany przez firmę StatSoft Polska. 14.11.2013 r.
7. „Zapoznanie się z przetwarzaniem obrazów satelitarnych za pomocą oprogramowania do cyfrowej analizy obrazów ENVI” - szkolenie. Puławy 24-26.09.2012 r.
8. „Zastosowanie statystyki w opracowywaniu wyników badań przyrodniczych – metody podstawowe” kurs organizowany przez firmę StatSoft Polska. 13.12.2011 r.

Ponadto odbyłem staż u dr Marii Knadel w Katedrze Agroekologii na Uniwersytecie w Aarhus w Danii w terminie 26-30.10.2011 r.

11. Udział w konferencjach naukowych

Brałem udział w licznych konferencjach międzynarodowych i krajowych, na których przedstawiałem postery i referaty. Wykaz referatów i posterów z podziałem na lata i z podziałem na wydarzenia krajowe i międzynarodowe znajduje się w załączniku 6.

12. Działalność dydaktyczna i organizacyjna

Od 2012 r. do chwili obecnej jestem członkiem Polskiego Towarzystwa Gleboznawczego. Obecnie pełnię funkcję przewodniczącego w zarządzie komisji rewizyjnej Puławskiego Oddziału PTG. Od 2016 r. jestem członkiem Komisji Fizyki Gleb Polskiego

Towarzystwa Gleboznawczego. należę również do International Union of Soil Sciences (IUSS) oraz do The International Soil Carbon Network (ISCN).

W dniu 27.05.2009 r. przeprowadziłem wykład popularnonaukowy pt. „Wino – szlaki turystyczne Francji” na konferencji „Turystyka – Uczy, Bawi, Wychowuje” w Wyższej Szkole Społeczno-Przyrodniczej im. Wincentego Pola w Lublinie.

W latach 2012/2013 i 2013/2014 prowadziłem wykłady dla studentów w Wyższej Szkole Społeczno-Przyrodniczej im. Wincentego Pola w Lublinie, na Wydziale Turystyki i Wychowania Fizycznego. Prowadziłem wykłady z geografii Francji i turystyki ze szczególnym uwzględnieniem francuskich szlaków winnych.

13. Sumaryczne zestawienie dorobku

Mój dotychczasowy dorobek naukowy łącznie z pracami stanowiącymi osiągnięcie obejmuje (stan na dzień 17.04.2019 r.):

- Liczba publikacji wg bazy *Web of Science*: **7**
- Liczba publikacji wg bazy *Scopus*: **10**
- Liczba cytowań wg bazy *Web of Science*: **76**
- Liczba cytowań wg bazy *Scopus*: **94**
- Index Hirscha wg bazy *Web of Science* wynosi **3**
- Index Hirscha wg bazy *Scopus* wynosi **4**
- Sumaryczny Impact Factor publikacji (wg roku wydania): **12,761**
- Liczba punktów wg listy MNiSW (wg roku wydania): **277**.