

Beiträge zur 7. Wissenschaftstagung zum Ökologischen Landbau ÖKOLOGISCHER LANDBAU DER ZUKUNFT



24. – 26. Februar 2003
im Museumsquartier der Stadt Wien

Herausgegeben von
Bernhard Freyer

Universität für Bodenkultur Wien –
Institut für Ökologischen Landbau



Pflanzenernährung und Düngung Bestimmung des Leguminosenanteiles in Klee gras mit FT-NIRS: Modellvalidierung

Felix Locher, Hauke Heuwinke, Reinhold Gutser, Urs Schmidhalter

Problemstellung/Ziele: Der Leguminosenanteil in Vielartengemengen ist eine wichtige Kenngröße zur Quantifizierung der biologischen Stickstoffbindung. Die Nah-Infrarot-Reflektions-Spektroskopie (NIRS) zeigte sich als eine vielversprechende Methode zur Messung des Leguminosenanteiles. Die Entwicklung eines genauen und robusten Modells mit definierten Standards (=Kalibration) kann jedoch mehrere Jahre in Anspruch nehmen, da die verwendeten Standards die natürlich vorkommende Variabilität des Klee grasses so weit wie möglich abdecken sollen (Bretton, 2000). Interne Validierungen mit abhängigen, d.h. zur Kalibration verwendeten Proben zeigen Aufschluss über die tatsächliche Genauigkeit der NIRS-Vorhersage. Deshalb wurde die bestehende Kalibration an externen, d.h. modellunabhängigen Proben anderer Erntetermine, Artzusammensetzung und Herkunft validiert.

Hypothesen: Die Messung des Leguminosenanteiles mit NIRS ist eine einfache und schnelle Methode, um den Leguminosenanteil in Gemengeproben unabhängig von Erntetermin, Herkunft und Artzusammensetzung mit hoher Genauigkeit und Reproduzierbarkeit zu bestimmen.

Methoden: Die Modellentwicklung (Kalibration) erfolgte an Proben mit definiertem Leguminosenanteil (= calibration-set). Für die Standardherstellung wurde Klee gras (FAM-Versuchsgut Scheyern, Bayern) von fünf Ernteterminen und drei Schlägen in Klee- und Grasfraktion sortiert, getrocknet (60°C, 72 h) und gemahlen (1,5 mm). Für die Kalibration wurden sowohl reine Leguminosen- und Grasproben als auch genau definierte Mischproben verwendet (n=387). Aus deren NIR-Spektren (Vektor 22/N, Bruker) wurde mittels der Partial Least Square Regression (PLSR) ein multivariates Modell entwickelt, mit dessen Hilfe der Leguminosenanteil unbekannter Proben vorhergesagt werden kann. Die interne Validierung (Kreuzvalidierung) ergab einen Vorhersagefehler (root mean square error of cross validation = RMSECV) von <3% Leguminosenanteil für die Standards. Für die externe Validierung stand Material unterschiedlicher Erntetermine und Artzusammensetzung aus Buchloe, Gieszen, Würzburg und Viehausen zur Verfügung. Nach gleicher Probenaufbereitung wurden daraus Standards in 10%-Schritten gemischt. Der Vorhersagefehler der externen Validierung (root mean square error of prediction = RMSEP) für diese Proben gibt Auskunft über die tatsächliche Leistungsfähigkeit des bestehenden NIRS-Modells.

Ergebnisse/Diskussion: Die externe Modellvalidierung zeigte in der Vorhersage der unabhängigen Standards (= test-sets) hervorragende Linearität, eine fast ideale Steigung der Regressionsgeraden und ein Höchstmaß an erklärter Varianz (Abb. 1). Erwartungsgemäß erhöhte sich der Vorhersagefehler gegenüber der internen Validierung (Tab. 1). Es zeigte sich je test-set eine unterschiedliche Vorhersagegenauigkeit, wobei jeweils ein systematischer Fehler (Bias) beobachtet wurde. Worauf dieser systematische Fehler schlussendlich beruht, kann nicht genau festgestellt werden. Unterschiedliche Wachstumsbedingungen sowie Art- oder Sorteneinflüsse kommen hierbei ebenso in Frage, wie kleine Unterschiede in der

Probenaufbereitung (z. B. Restwassergehalt, Probenalter) (Shaffer et al. 1990). Der systematische Fehler wurde in einem zweiten Schritt von den vorhergesagten Werten der Standards abgezogen (Diller, 2002). Dies ist bei der beobachteten Linearität legitim. Mit dieser Vorgehensweise ließ sich der RMSEP auf 2-3 % reduzieren (=RMSEP_{biacor}, Tab. 1). Da jedoch die Gültigkeit eines Modells grundsätzlich durch die in der Kalibration befindlichen Proben limitiert ist, ist es unter Umständen sinnvoll, das etablierte Vorhersagemodell mit den neu gewonnenen Standards zu erweitern, indem sie dem Kalibrations-set zugefügt werden. Dadurch wird die im Modell vorhandene Variabilität erhöht und der systematische Vorhersagefehler durch das neu berechnete Modell für zukünftige Proben schrittweise minimiert. Die Entwicklung eines stabilen ('universellen') Modells kann jedoch mehrere Jahre dauern.

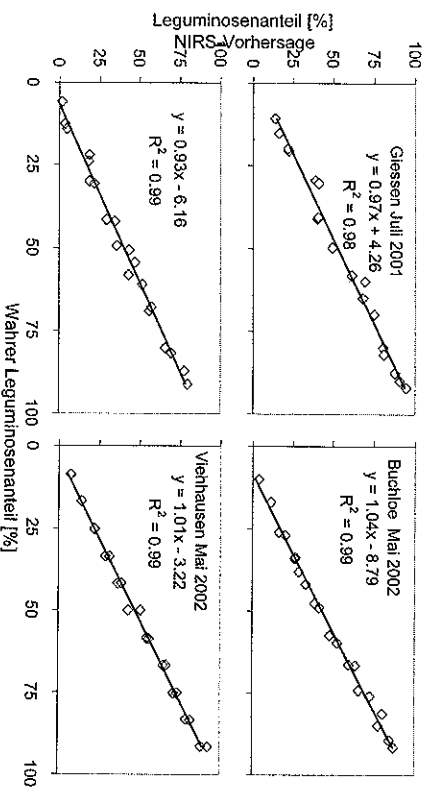


Abbildung 1 Externe Validierung eines NIRS Modells zur Vorhersage des Leguminosenanteiles in Mischproben von vier unterschiedlichen Standorten. Dargestellt sind die wahren Leguminosenanteile im Gemenge und die Leguminosenanteile, die sich aus der NIRS- Vorhersage ergaben.

Tabelle 1 Externe Validierung eines NIRS Modells zur Vorhersage des Leguminosenanteiles in Mischproben von vier Standorten. Dargestellt sind Anzahl der Proben, der Vorhersagefehler (RMSEP), die mittlere Abweichung vom wahren Wert (Bias) und der Vorhersagefehler, wenn die vorhergesagten Werte um den Bias korrigiert wurden.

Herkunft und Datum	n	RMSEP [%]	Bias [%]	RMSEP _{biacor} [%]
Buchloe Mai 2002	20	6,8	-6,5	2,3
Giessen Juli 2001	20	5,0	2,7	3,3
Viehhausen Mai 2002	20	7,7	-7,3	1,8
Würzburg Mai 2002	20	6,9	-9,8	3,1

Fazit: Das hier vorgestellte aus fünf Ernteterminen entwickelte Modell lieferte über alle test-sets berechnet auch ohne Biaskorrektur sehr zufriedenstellende Ergebnisse. Die beobachtete Präzision und Linearität der Schätzung des Leguminosenanteiles ermöglicht unabhängig von Erntetermin, Herkunft und Artzusammensetzung genaue Aussagen zur räumlichen Variabilität des Leguminosenanteiles in einem Gemenge. Die Genauigkeit und Reproduzierbarkeit ist selbst ohne Biaskorrektur höher als bei visuellen Schätzungen. Damit stellt die Schätzung des Leguminosenanteiles mit NIRS eine schnelle Methode dar, um über Ertrag und Leguminosenanteil die N₂-Bindung im Feld zu quantifizieren und deren räumliche Variabilität darzustellen.

Literaturangaben:

- Bereton R.G. (2000): Introduction to multivariate calibration in analytical chemistry. Analyst 125, S. 2125-2154.
 Diller, M. (2002): Untersuchungen zur NIRS-Methodenentwicklung für Kartoffeln aus dem Organischen Landbau unter Berücksichtigung von Jahrgangs und Sorteneinflüssen. Diss. Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität, Bonn
 Shaffer J. A., Jung G.A., Shenk J.S. u. S.M. Abrams (1990): Estimation of botanical composition in alfalfa/ryegrass mixtures by Near Infrared Reflectance Spectroscopy. Agron. J. 82, S. 669-673.