

Mobile Röntgenfluoreszenzanalytik als Baustein für Sensorfusion-Ansätze für die Bestimmung von Makronährstoffen im Boden? - ein Werkstattbericht

Michael Marz¹, Peter Wagner¹ und Linara Arslanova¹

Abstract: Im Rahmen von Sensorfusion-Ansätzen zur On-the-go-Analytik von pflanzenverfügbaren Makronährstoffen, stellt dieser Werkstattbericht eine explorative Arbeit vor, welche die Eignung sowie die methodisch-technischen Grundlagen der Bodenanalytik für die Bestimmung der in dieser Arbeit betrachteten Makronährstoffe Phosphor, Kalium und Magnesium mittels Röntgenfluoreszenz (RF) untersucht. Im Fokus der beginnenden Untersuchungen steht die Identifizierung eines optimalen Messvorganges mit Berücksichtigung der Probenahme und -aufbereitung. Darauf aufbauend wird die Anwendbarkeit des RF-Outputs im Rahmen eines simulierten Sensorfusion-Ansatzes bewertet, um mittels künstlicher neuronaler Netze (KNN) die nicht direkt gemessenen pflanzenverfügbaren Anteile im Boden approximieren zu können. Zum Zeitpunkt stellt sich heraus, dass für die Approximation des pflanzenverfügbaren Phosphors die RF-Analytik als Sensorfusion-Baustein geeignet sein kann. Feldfrische Stechproben sind hierfür geeignet.

Keywords: Röntgenfluoreszenzanalyse, Sensor-Fusion, On-the-go, Makronährstoffe, Precision Farming

1 Einleitung

Die kleinräumige Ermittlung von Makronährstoffgehalten (Phosphor [P], Kalium [K], Magnesium [Mg]) im Boden ist für eine effiziente Düngung von Schlägen relevant. Gängige arbeits- und kostenintensive Verfahren mittels Probennahme vor Ort und anschließender Laboranalytik könnten sowohl in wirtschaftlicher Hinsicht als auch in der räumlichen Auflösung verbessert werden, indem die Analyse sensorgestützt vor Ort während der Befahrung erfolgt. Aktuelle Ansätze verfolgen die Kombination und parallele Prozessierung verschiedener Sensorsysteme zur Bestimmung von Zuständen des Bodens. Dieser Werkstattbericht stellt eine explorative Arbeit vor, welche die Eignung sowie die methodisch-technischen Grundlagen der Bodenanalytik mittels Röntgenfluoreszenzanalytik (RFA) als Baustein von Sensorfusion untersucht. Im Fokus der beginnenden Untersuchungen steht die Identifizierung eines optimalen Messvorganges mit Berücksichtigung der Probennahme und -aufbereitung. Darauf aufbauend wird die Anwendbarkeit der RFA als Baustein von Sensorfusion für die Bestimmung der pflanzenverfügbaren Makronährstoffgehalte im Boden bewertet. Da die RFA nur Elementargeh-

¹ Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg, Professur für Landwirtschaftliche Betriebslehre, Karl-Freiherr-von-Fritsch-Straße 4, 06120 Halle (Saale), michael.marz@landw.uni-halle.de, peter.wagner@landw.uni-halle.de, linara.arslanova@student.uni-halle.de

alte bestimmt [ZWZ11], kommen in einem simulierten (d.h. reale Messwerte, aber nicht parallel erfasst/on-the-go) Sensorfusion-Ansatz künstliche neuronale Netze (KNN) zum Einsatz, welche die parallele Prozessierung von potentiellen (d.h. reale Messwerte zu-nächst laborativ bestimmt) Sensordaten für die Approximation der Zielgrößen pflanzen-verfügbare Anteile ermöglichen.

2 Methoden

Die nachfolgend dargelegten Methoden untergliedern sich in zwei Schwerpunkte. Ersterer beschäftigt sich mit der Identifizierung eines geeigneten Messablaufes zur möglichst genauen Bestimmung von Elementargehalten der betrachteten Makronährstoffe P, K und Mg im Boden. Letzterer untersucht die Anwendbarkeit der RFA unter Berücksichtigung der Messgüte in einen Sensorfusion-Ansatz zur Approximation der pflanzenverfügbaren Gehalte. Die Datengrundlage basiert auf 10 Messstandorten innerhalb eines Versuchsschlages bei Görzig in Sachsen-Anhalt.

2.1 Röntgenfluoreszenzanalytik – Identifizierung geeigneter Messabläufe

In diesem Abschnitt wird geprüft, mit welchem Messablauf die besten Messergebnisse im Vergleich zu Referenzmessungen nach VDLUFA erreicht werden können. Zentrale Bestandteile bilden die Wahl der Bodenprobe (RF-Messbereich 6mm; Stechprobe 30cm) und die Ermittlung des notwendigen Grades der Probenaufbereitung. Die Tab. 1 fasst das Probenwahl- und Probenaufbereitungsschema zusammen. Zusätzlich zu den Elementargehalten nach VDLUFA werden die pflanzenverfügbaren Anteile, der pH-Wert und die Korngrößenverteilung bestimmt.

Methoden	Symb.	Gerät	Ort	n	A / m / B
RF-Analyse	RFA1	NITON XL3t-900	F	10	RF-Messbereich mit Schutzaufsatz direkt bestrahlt, verdichtete Bodenoberfläche / - / -
RF-Analyse	RFA2	NITON XL3t-900	L	20	Stechprobe und RF-Messbereich, feldfrisch/ 8-10g / -
RF-Analyse	RFA3	NITON XL3t-900	L	20	Stechprobe und RF-Messbereich, luftgetrocknet auf 2mm gesiebt / 8-10g / -
Königswasser-aufschluss	KW	UV-VIS Spektralphotometer/ AAS (Mg, K)	L	20	Stechprobe und RF-Messbereich, luftgetrocknet, auf 2mm gesiebt/ 3g / Aufschluss HNO_3+3HCl
Doppellactat Auszug	DL	UV-VIS Spektralphotometer/ AAS (Mg, K)	L	20	Stechprobe und RF-Messbereich, luftgetrocknet, auf 2mm gesiebt/ 2g / Aufschluss $\text{C}_6\text{H}_{10}\text{CaO}_6 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

F - Feld; L - Labor; n - Stichprobenumfang, A / B - Ausbereitungsschritt 1 / 2, m – Probengewicht, AAS - Atomabsorptionspektrometrie

Tab. 1 Probennahme- und Probenaufbereitungsschema

2.2 Sensorfusion-Simulation - Approximation pflanzenverfügbarer Gehalte

In diesem Abschnitt wird ein Sensorfusion-Ansatz simuliert (d.h. reale Messwerte, aber nicht parallel erfasst/on-the-go) und die Anwendbarkeit des RF-Outputs u.a. in Bezug auf die Messgüte für die Bestimmung bzw. Approximation pflanzenverfügbarer Nährstoffgehalte bewertet. Hierfür wird ein KNN verwendet, welches die nichtlinearen Zusammenhänge zwischen erklärenden Variablen (u.a. z.Z. laborativ bestimmte potentielle Sensordaten) und einer Zielgröße (zu bestimmende Größe) abbilden kann. Die Datenbasis bilden die mittels RF-Analytik und VDLUFA-konform ermittelten elementaren und pflanzenverfügbaren Gehalte von P, K, Mg sowie der pH-Wert, die scheinbare elektrische Leitfähigkeit und die Korngrößenverteilung. In einem zweistufigen Verfahren werden zunächst die Referenzwerte bei der Modellierung herangezogen und im Anschluss diese durch die RF-Messwerte ersetzt. Darüber hinaus wird auch geprüft, ob die Information zu den Elementargehalten eine Bestimmung pflanzenverfügbarer Gehalte verbessern kann. Die Modellgüte bestimmt die Anwendbarkeit des RF-Outputs. Diese ist gegeben, wenn die RFA die Approximation der Zielgröße verbessern kann (Sinn der Messung) und die Messgüte hinreichend ist und die Modellgenauigkeit hoch bleibt.

3 Ergebnisse

3.1 Geeignete Probenwahl und Probenaufbereitung in Bezug auf die Messgüte

Zum Zeitpunkt der laufenden Untersuchungen können erste Ergebnisse für die Bestimmung des Makronährstoffs Phosphor dargelegt werden. Der Elementargehalt (z. Vgl. Doppellactat, DL) des Phosphors beträgt bei allen Proben im Mittel 46,17 mg/100g Boden (DL: 12,3), wobei das Minimum bei 24,54 mg/100g (DL: 0,4) und das Maximum bei 117,51 mg/100g (DL: 40,5) zu verorten ist. Bezugnehmend auf das Untersuchungsschema von Tabelle 1 stellt sich heraus, dass die Bestimmung des absoluten Phosphorgehaltes im Boden anhand einer feldfrischen Stechprobe die geringsten Abweichungen zu den Referenzwerten aufweist. Dieses Analyseschema bestimmt die Gehalte im Mittel um das 1,44-fache höher bei einer mittleren Abweichung vom 0,29-fachen. Das Schema zu RFA1 weist die höchsten und RFA3 die zweithöchsten Abweichungen bzw. Messwerte im Vergleich zur Referenz auf.

3.2 Anwendbarkeit von RFA und Modellgenauigkeit für Sensorfusion

Die nachfolgende Tabelle 2 fasst die Ergebnisse eines simulierten Sensorfusion-Ansatzes zusammen. Die RF-Analytik kann die Approximationsfähigkeit der Zielgröße pflanzenverfügbarer Phosphor verbessern. Darüber hinaus ist die Messgüte als Input ausreichend, sodass die Modellgenauigkeit im Testverfahren (bzw. Anwendung) hoch bleibt.

	Training mit Elementargehalten	Test/Anwendung mit Elementargehalten	Training/Test ohne Elementargehalte
Modellgenauigkeit	97,1%	97,1%	81,5%
Korrelation r	0,992	0,982	0,929
Standardabweichung	1,137	1,741	3,257

Tab. 2 Ergebnisse eines simulierten Sensorfusion-Ansatzes, Zielgröße pflanzenverfügbares P

4 Diskussion und Ausblick

In Bezug auf Probenwahl und Probenprozessierung wäre zu erwarten gewesen, dass Schema RFA3 (vgl. Tab. 1) der Referenz näher ist. Jedoch ermöglicht RFA2 bessere Messergebnisse, was für die angestrebte on-the-go-Analytik bei VDLUFA-konformer Probenahme von Bedeutung ist. Ursachen in Bezug auf den Vergleich zur Messgüte werden bei der Probenprozessierung und der RF-Messmethodik sowie bei der KW-Analytik verortet [MGT12, ZWZ11, RHT11, GS15]. Weitere Untersuchungen und Validierungen sind jedoch notwendig, um im Sensorfusion-Ansatz robuste Mess- und Approximationsergebnisse erreichen zu können.

Literaturverzeichnis

- [GS15] Gebbers, R.; Schirrmann, M.: Potential of using portable x-ray fluorescence spectroscopy for rapid soil analysis. In (Stafford, J. V. Hrsg.): Precision agriculture '15. Papers presented at the 10th European Conference on Precision Agriculture, Volcani Center, Israel, 12-16 July 2015. Wageningen Academic Publishers, Wageningen, The Netherlands, 2015; S. 27–34.
- [MGT12] McLaren, T. I. et al.: Rapid, Nondestructive Total Elemental Analysis of Vertisol Soils using Portable X-ray Fluorescence. In Soil Science Society of America Journal, 2012, 76; S. 1436.
- [RHT11] Repmann, F. et al.: Messung von Schwermetallen und Hauptelementen in anthropogen geprägten Böden mittels feldportabler Röntgenfluoreszenzanalyse (FP RFA): Böden verstehen - Böden nutzen - Böden fit machen, 3. - 9. September 2011, Berlin.
- [ZWZ11] Zhu, Y.; Weindorf, D. C.; Zhang, W.: Characterizing soils using a portable X-ray fluorescence spectrometer. 1. Soil texture. In Geoderma, 2011, 167-168; S. 167–177.