

Validering och implementering av NIR-teknik i jordlaboratoriernas analysrutiner för billigare markkartering

Bo Stenberg och Johanna Wetterlind, *Precisionsodling och Pedometri, Institutionen för mark och miljö, SLU, Box 234, 532 23 Skara. Tel: 0511-67276, E-post: bo.stenberg@slu.se*

Rikard Westbom, *Lantmännen lantbruk.*

Daniel Olsson, *Eurofins Agro Testing Sweden AB, Box 9024, 291 09 Kristianstad, Tel: 010-490 83 21, danielolsson@eurofins.se*

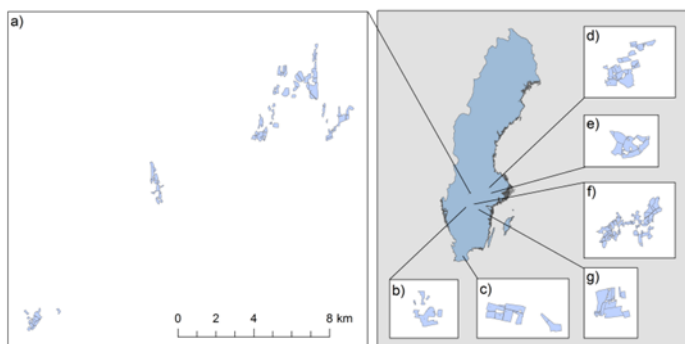
Bakgrund

Att det går utmärkt att bestämma jordart, särskilt ler- och mullhalt, med nära infraröd reflektansspektroskopi (NIR) utifrån ett relativt litet antal gårdsvisa kalibreringsprov har visats i en tidigare studie (Wetterlind and Stenberg, 2010). Detta gör det möjligt att avsevärt förbilliga jordartskarteringen för lantbrukaren eftersom NIR-analysen kostar bara mellan en fjärdedel och en tredjedel av vad en traditionell jordartsanalys kostar, beroende på lab och analyspaket. Genom att använda karteringsprov som lämnats in från ett större antal gårdar för analys enligt jordbruksverkets miljöstödsregler syftar detta projekt till att fastställa vilken analys säkerhet som kan utlovas och hur många referensprov som faktiskt behövs.

Med utgångspunkt i miljöstödsreglerna där ett prov tas per ha, pH och växttillgängligt näring analyseras på varje jordart på vart tredje finns möjligheten att genom att lägga till en NIR-analys på varje prov kunna få jordart bestämd i alla prov till en betydligt lägre kostnad än med nuvarande metod. Jordartsanalysen skulle därmed bli användbar för lantbrukaren, t ex för bestämning av kalkbehov vid platsanpassad giva, för avgränsning av torkkänsliga områden där det lätt gödslas för mycket i förhållande till skördepotentialen och för identifiering av mullrika partier där mineraliseringen av markkväve kan göra ytterligare gödsling mer eller mindre överflödigt.

Metod

Till projektet valdes sju gårdar mellan 81 och 208 ha ur Eurofins ordinarie produktion (Figur 1; Tabell 1). Det är inte omöjligt att åtminstone Storfors består av flera gårdar i en beställning. På gårdarna kompletterades analyserna så att pH, P-AL, K-AL, Mg-AL och jordart fanns tillgängligt på ett prov per ha. Även NIR spektra mättes på samtliga prover. Provupparbetning utfördes enligt metod SS-ISO 11464:2006 vilket kortfattat innebär att provet torkas och torrsiktas (<2 mm). Jordart, d.v.s. ler, silt, sand och mullhalt (OM), bestämdes enligt metod SS-ISO 11277:2006. För bestämning av pH i vattenextrakt av jord följdes SS-ISO 10390:2007 och SS 02 83 10 användes för bestämning av AL extraherbart P, K och Mg. NIR-spektrum mättes med en FOSS NIRSystems 5000 mellan 1300 och 2400 nm med en analysintervall av 2 nm och en upplösning av 5 nm.



Figur 1. De sju gårdarnas arrondering och fördelning i Sverige. Från vänster till höger: a) Storfors, b) Mariestad, c) Sjöbo, d) Västerås, e) Eskilstuna, f) Askersund och g) Linköping.

Prediktionsmodeller kalibrerades på absorptionspektrum transformerade genom första derivatan i mjukvaran Unscrambler 10.3 (Camo, Norge). För kalibrering användes PLS (partial least square) regression på hela spektrumet. Kalibreringar gjordes gårdsvis dels på den tredjedel av proven som jordart ursprungligen analyserats på, dvs. vart tredje prov i ordningsföljd. Dessutom valdes kalibreringsprov ut för att på bästa sätt representera variationen i NIR-spektrum (KS; Kennard &

Stone, 1969). I intervall om 10 valdes upp till hälften av totala antalet prov ut för kalibrering. Kalibreringen användes sedan för att bestämma respektive parameter på resterande prov. Dessa prov benämns i det följande valideringsprov. Noggrannheten i prediktionerna bedömdes med den genomsnittliga avvikelsen av modellen (RMSE) samt med hur stor andel av variationen som förklarades av modellen (E). RPD beräknades som kvoten mellan standardavvikelse och RMSE. Om RPD är ett fungerar medelvärde lika bra. Ett högt värde är bra.

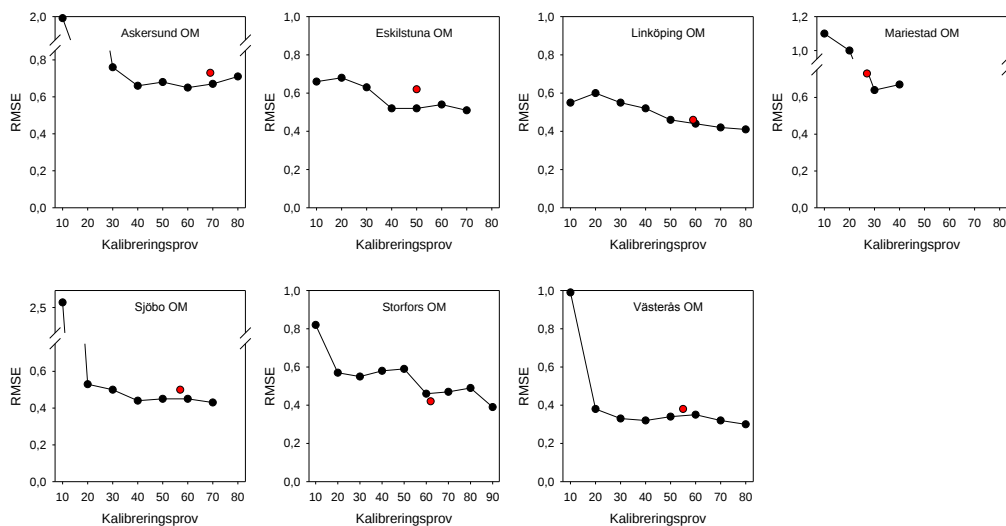
Tabell 1. Beskrivande statistik över samtliga prov på respektive gård.

Åsersund	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	206	206	206	206	206
Medelvärde	6.12	5.24	4.11	12.85	24.89
Max	7.70	39.00	18.97	26.00	88.00
Min	5.50	1.00	1.60	1.00	1.00
Max-Min	2.20	38.00	17.37	25.00	87.00
Stdv	0.23	3.84	1.70	5.86	23.62
Linköping	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	175	175	175	175	175
Medelvärde	6.86	11.89	4.97	43.39	19.09
Max	7.60	46.00	8.32	69.00	61.00
Min	6.20	3.00	2.43	14.00	2.00
Max-Min	1.40	43.00	5.88	55.00	59.00
Stdv	0.23	9.95	1.32	14.72	14.74
Sjöbo	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	169	169	169	169	169
Medelvärde	6.63	6.36	4.72	21.87	31.52
Max	7.70	34.00	9.16	47.00	60.00
Min	5.70	1.00	2.80	11.00	9.00
Max-Min	2.00	33.00	6.36	36.00	51.00
Stdv	0.39	3.37	1.10	7.83	10.62
Västerås	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	165	165	165	165	165
Medelvärde	6.28	9.16	4.30	38.17	11.47
Max	7.10	47.00	8.70	56.00	63.00
Min	5.30	2.10	1.60	8.00	1.00
Max-Min	1.80	44.90	7.10	48.00	62.00
Stdv	0.24	6.19	1.61	7.30	9.80
Eskilstuna	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	149	149	149	149	149
Medelvärde	6.82	6.17	4.13	52.60	4.85
Max	7.40	12.00	11.52	70.00	12.00
Min	6.00	2.30	1.53	41.00	1.00
Max-Min	1.40	9.70	9.99	29.00	11.00
Stdv	0.27	2.27	1.25	5.42	2.02
Mariestad	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	81	81	81	81	81
Medelvärde	6.28	3.23	4.23	40.38	26.19
Max	6.80	22.00	9.50	68.00	86.00
Min	5.50	1.00	1.30	6.00	4.00
Max-Min	1.30	21.00	8.20	62.00	82.00
Stdv	0.30	3.68	1.96	17.16	22.47
Storfors	pH	P-AL	OM	Ler	Sand
Antal prov (ha)	187	187	187	187	187
Medelvärde	6.12	3.87	5.47	40.01	7.84
Max	6.90	15.00	14.10	73.00	55.00
Min	5.50	1.00	2.70	4.00	1.00
Max-Min	1.40	14.00	11.40	69.00	54.00
Stdv	0.30	2.48	1.83	12.75	6.63

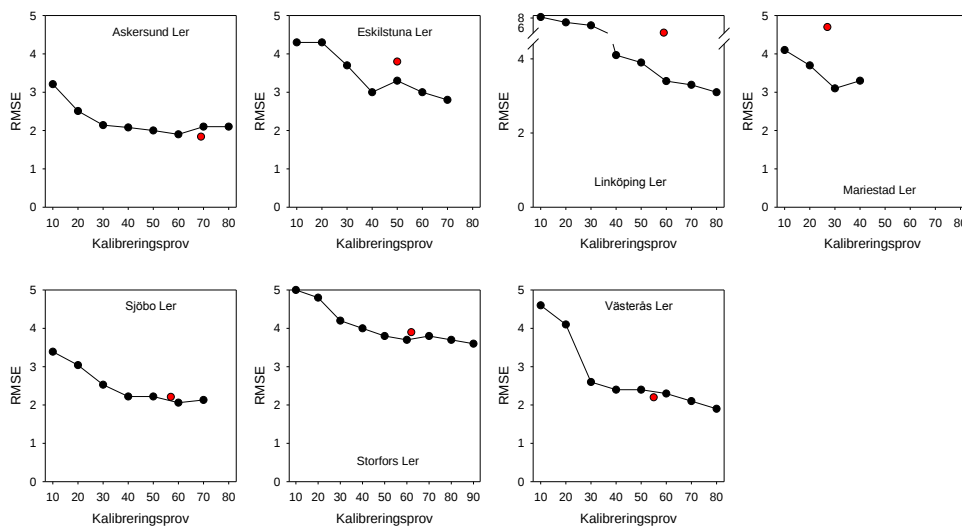
Resultat och diskussion

Prediktionsresultaten för OM, ler, sand, P-AL och pH redovisas i figur 2-6 som RMSE som en funktion av antalet kalibreringsprov. För ler och OM fungerade kalibreringarna med få kalibreringsprov mycket bra. Redan vid 30-40 kalibreringsprov har felen stabiliserat sig på en låg nivå med RMSE på 0,3-0,7 % OM och 2-4 % ler (tabell 2 och figur 7). Detta utgör 5-15 % av medelvärdet vilket skall sättas i relation till referensmetodernas osäkerhet som uppskattas till ca: 10 %. Även sand går bra att prediktera med 40 prov med undantag av Eskilstuna, men där är både sandhalt och variation mycket låg vilket prediktionerna trots allt indikerar (Figur 7). För P-AL och framförallt pH finns det på åtminstone några gårdar samband mellan NIR-spektrum och respektive parameter, men de är svaga och mycket osäkra. När det gäller K-AL och Mg-AL finns inga samband alls och resultaten redovisas inte ytterligare.

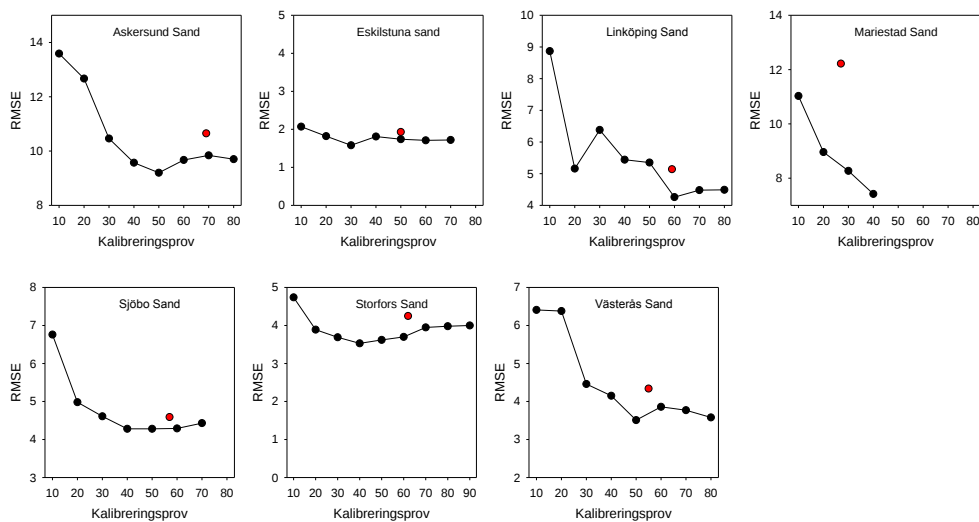
Att jordart och då framförallt ler och mull hör till de parametrar som predikteras bäst av NIR beror på att dessa parametrar är de som påverkar spektrum mest och att de har väldefinierade spektroskopiska egenskaper (Stenberg et al., 2010). Några sådana egenskaper kan inte förväntas för AL-extrakt eller pH utan de samband som finns är förmodligen indirekta. T.ex. buffrar ler och mull pH och utgör dessutom bördighetsfaktorer som påverkar bortförslagen av näringsämnen. Sådana samband är dock mycket opålitliga och kan ointetgöras av intensiv gödsling och kalkning. Resultaten för pH och AL-extrakten är i linje med resultat från ett tidigare projekt där antalet kalibreringsprov som skulle behövas för stabila bestämmingar av K-, Mg-, P-AL och pH studerades på fyra svenska gårdar (Wetterlind, 2012).



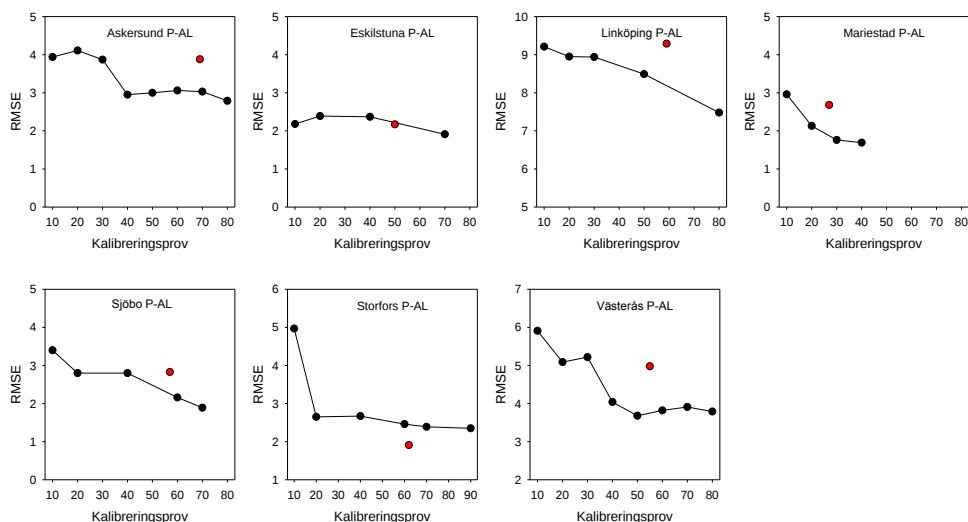
Figur 2. Genomsnittligt absolut prediktionsfel (RMSE) för multhalt (OM) som funktion av antalet kalibreringsprov. Röd symbol markerar kalibrering gjord med var tredje prov.



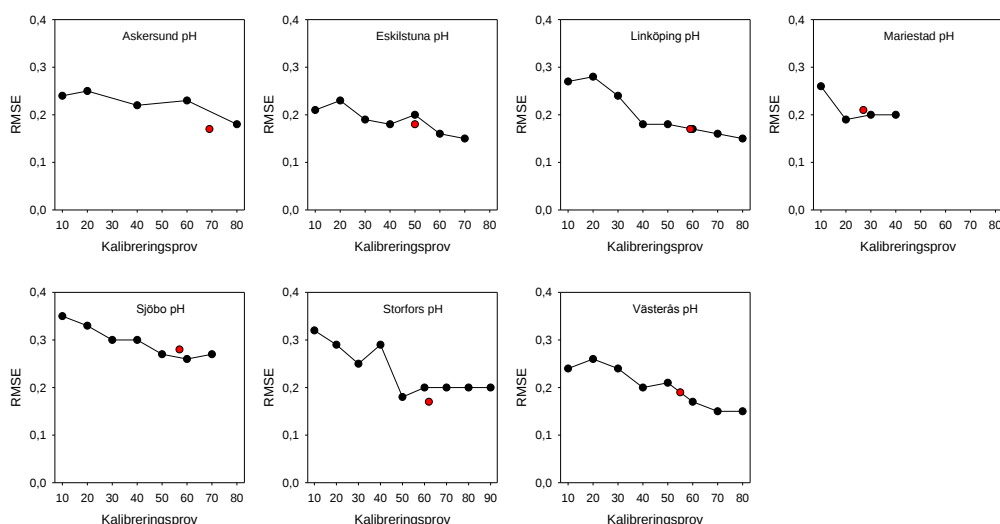
Figur 3. Genomsnittligt absolut prediktionsfel (RMSE) för lerhalt som funktion av antalet kalibreringsprov. Röd symbol markerar kalibrering gjord med var tredje prov.



Figur 4. Genomsnittligt absolut prediktionsfel (RMSE) för sandhalt som funktion av antalet kalibreringsprov. Röd symbol markerar kalibrering gjord med var tredje prov.



Figur 5. Genomsnittligt absolut prediktionsfel (RMSE) för P-ALt som funktion av antalet kalibreringsprov. Röd symbol markerar kalibrering gjord med var tredje prov.



Figur 6. Genomsnittligt absolut prediktionsfel (RMSE) för pH som funktion av antalet kalibreringsprov. Röd symbol markerar kalibrering gjord med var tredje prov.

Som framgår av figur 2-4 är kalibreringar med 40 prov valda med KS ungefär lika bra eller avsevärt bättre än kalibreringar gjorda på vart tredje prov. Detta beror på att med KS-metoden hamnar extrema prov i kalibreringssetet och dessa behöver därför inte predikteras. Extrema prov i valideringssetet innebär att de inte representeras av modellen vilket skulle kunna innebära ett viss mått av extrapolering med osäkrare resultat som följd. Med var tredje prov är det slumpen som avgör var eventuella extrema prov hamnar. KS-metoden kan innebära ett måttligt merarbete och framförallt att NIR-spektrum måste tas på samtliga prov innan referensanalyserna kan göras. Vi drar ändå slutsatsen att den ökade stabiliteten i kalibreringarna är värt det.

För att ge en uppfattning om värdet av den ökade information som 40 labbmätta prov kombinerat med resterande prov upp till 1 prov per ha ger i förhållande till 1 prov per 3ha interpolerade vi kalkbehovskartor och sandhaltskartor. Kalkbehovet kombinerar lerhalt och mullhalt och behovet i form av kalkstensmjöl (50 % CaO) för att höja pH en halv enhet har beräknats enligt:

$$\text{kalkbehov (ton/ha)} = 0,5 * (1,9 + (((3,5 * OM) + \text{lerhalt})/3,8))$$

I figur 8-9 exemplifieras resultatet med de gårdar där kalibreringarna var bäst respektive sämst och i tabell 3 och 4 redovisas resultatet som skillnaden till en karta interpolerad enbart på data analyserade med traditionell metod på 1 prov per ha (referenskartan). Det skall observeras att denna referenskartan

inte är en exakt återspeglning av verkligheten eftersom även 1 prov per ha är relativt lite för att fånga all variation som finns på fälten.

Tabell 2. Prediktionsresultat för kalibreringar med 40 prov. Standardavvikelsen (STDV) och därmed RPD är beräknat på valideringssetet.

Parameter	Mått	Askersund	Eskilstuna	Linköping	Mariestad	Sjöbo	Storfors	Västerås
OM	<i>E</i>	0,59	0,58	0,83	0,82	0,79	0,83	0,95
OM	RMSEP	0,66	0,52	0,52	0,67	0,44	0,58	0,32
OM	STDV	1,03	0,81	1,29	1,58	0,97	1,39	1,47
OM	RPD	1.6	1.6	2.5	2.4	2.2	2.4	4.6
Ler	<i>E</i>	0,85	0,65	0,92	0,95	0,91	0,88	0,81
Ler	RMSEP	2,08	3,00	4,10	3,30	2,22	4,00	2,40
Ler	STDV	5.8	5,1	14,2	14,3	7,5	11,3	5,5
Ler	RPD	2.6	1.7	3.5	4.3	3.4	2.8	2.3
Sand	<i>E</i>	0,79	0,10	0,85	0,83	0,80	0,66	0,33
Sand	RMSEP	9,57	1,81	5,44	7,42	4,28	3,53	4,15
Sand	STDV	20,8	1,9	13,9	17,8	10,3	7,2	5,1
Sand	RPD	2.2	1.0	2.6	2.4	2.4	2.0	1.2
P-AL	<i>E</i>	0,04	0,0	0,12	0,34	0,0	0,00	0,42
P-AL	RMSEP	2,95	2,37	8,50	1,69	2,80	2,67	4,04
P-AL	STDV	3,0	2,2	9,2	2,1	2,1	2,4	5,3
P-AL	RPD	1.0	0.9	1.1	1.2	0.8	0.9	1.3
pH	<i>E</i>	0,22	0,47	0,42	0,11	0,39	0,11	0,03
pH	RMSEP	0,22	0,18	0,18	0,20	0,30	0,29	0,20
pH	STDV	0,22	0,25	0,23	0,21	0,39	0,30	0,21
pH	RPD	1.0	1.4	1.3	1.1	1.3	1.0	1.1

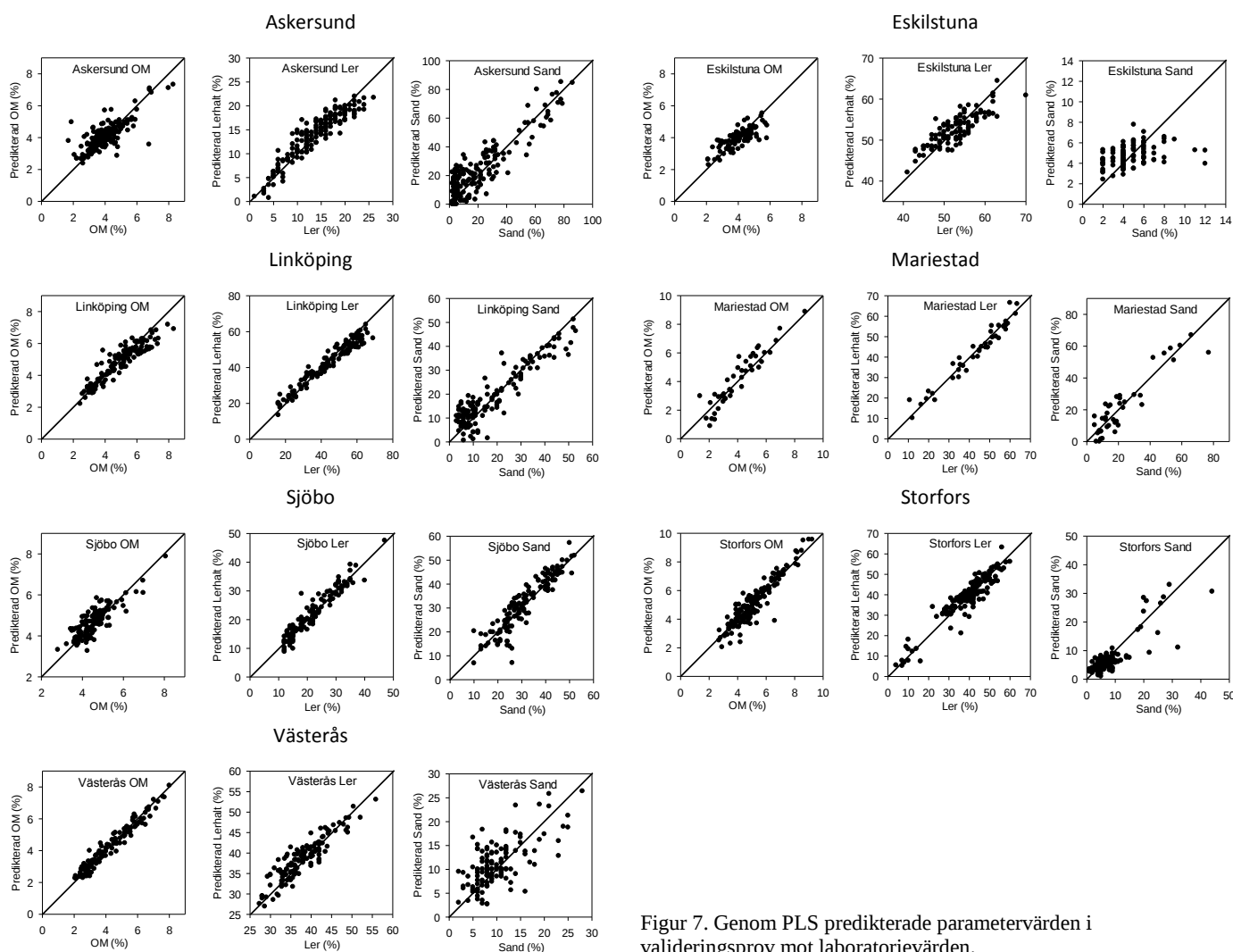
I tabell 3 är det tydligt att NIR-metoden reducerar skillnaden till referenskartan jämfört med ett prov per 3 ha. Inte minst är de värsta avvikelserna måttliga. Där skillnaden är liten mellan metoderna, som i fallet Eskilstuna, är orsaken att jordartsvariationen är liten och att en högre provtäthet därför inte tillför så mycket, snarare än att NIR-prediktionerna är dåliga. När det gäller sandhalt (tabell 4) är skillnaderna inte lika uppenbara, men på de flesta gårdarna är avvikelsen mindre och de extrema avvikelserna är måttligare.

Slutsatser

Från ett tiotal slumpvisa gårdar från Eurofins produktion valdes de sju med störst variation i ler- och mullhalt. För dessa sju gårdar visar våra resultat att jordart, d.v.s. mullhalt, lerhalt och sandhalt, kan bestämmas med samma geografiska upplösning som pH och växttillgängliga näringsämnen, men där flertalet prov analyseras med betydligt snabbare och billigare NIR-analys istället för med traditionella metoder. Beroende på jordartsvariation på den analyserade gården ger denna metod mer information i form av mer detaljerade kartor som t.ex. kan användas för platsanpassad kalkning eller andra jordartsberoende åtgärder som gödsling, bevattning och för att bestämma utsädesmängd. Även om sandhalt inte fungerar riktigt lika bra och stabilt som lerhalt och OM innebär det ändå i flertalet fall en förbättring jämfört med nuvarande situation med analys på vart tredje prov. Om NIR-spektrum redan är analyserade för ler och OM bestämning är merarbetet för en sandhaltskalibrering minimalt.

En ytterligare vinst hade varit om man även hade kunnat reducera antalet prover som måste analyseras för pH och AL-extrakt med traditionell metod, men för detta är NIR-metoden för osäker.

Att göra ett räkneexempel för kostnadsbesparingen med NIR-metoden är svårt eftersom tjänsten inte finns och prissättningen för NIR-analysen blir väldigt avgörande. Utgångspunkten är ändå att provtagning och provberedning redan är betalt via pH och AL-analyserna. NIR-analysen inklusive provpresentation tar några minuter och kan delvis automatiseras. NIR-instrument kostar i storleksordning en halv miljon kronor och används även till bl.a. foder och spannmålsanalyser. Kalibrerings- och prediktionsförfarandet inklusive urval av kalibreringsprov är i projektet utfört på ett mycket standardiserat sätt och skall inte behöva ta mer än 5-15 minuter per gård. Processen borde dessutom i hög grad gå att automatisera.

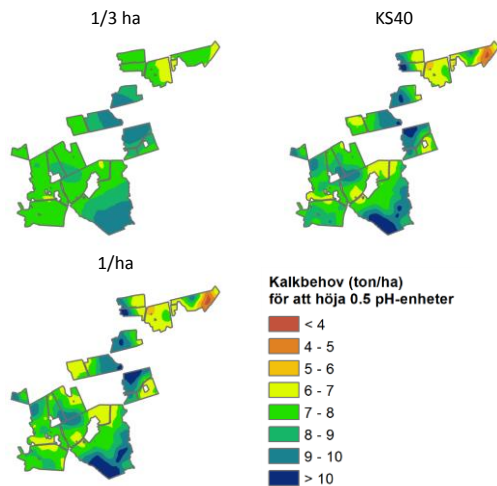


Figur 7. Genom PLS predikerade parametervärden i valideringsprov mot laboratorievärden.

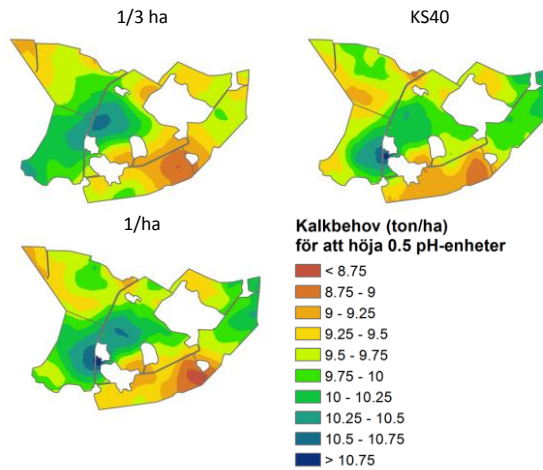
Arbetsflödet från provtagning till leverans av färdiga resultat skulle se ut som följer:

- 1) Provtagning med ett prov per ha (eller mer).
- 2) Provberedning inklusive inregistrering–uppackning–torkning–malning–neddelning.
- 3) NIR-analys av samtliga prov.
- 4) Import av spektrum till mjukvara för multivariat statistik.
- 5) Transformerings av reflektansspektrum till absorbansspektrum med efterföljande derivering. Många NIR-instrument kan ställas in så att detta görs direkt.
- 6) Val av 40 kalibreringsprov baserat på enbart NIR-spektrum. Detta innebär en enkel PCA-analys vilket också ger en koll på att alla spektrum är rimliga. Urval med implementerad Kennard-Stone algoritmen.
- 7) Traditionell labbanalys av de 40 valda proverna beträffande jordart och av alla prov för AL-extrakt, pH mm.
- 8) Kalibrering av PLS-modeller för OM, ler och sand på de 40 referensproven.
- 9) Prediktion av resterande prov med dessa modeller beträffande OM, ler och sand.
- 10) Geostatistisk bearbetning och interpolering av kartor om sådana önskas.

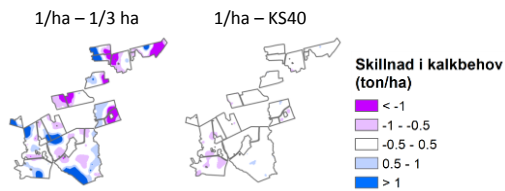
Kalkbehov Västerås



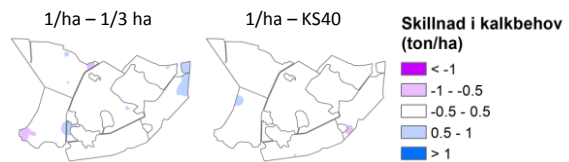
Kalkbehov Eskilstuna



Diff. Kalkbehov Västerås

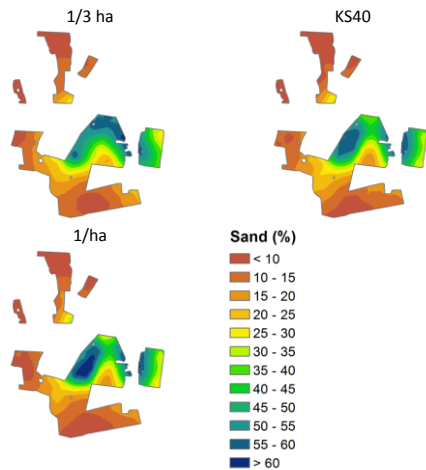


Diff. Kalkbehov Eskilstuna

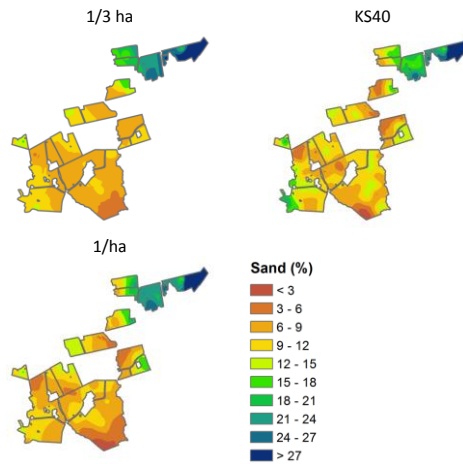


Figur 8. Kalkbehovskartor där Västerås utgör ett exempel där kalibreringarna för ler och OM gick mycket bra och Eskilstuna ett exempel där kalibreringarna blev något sämre. Kalkbehovsberäkningen inkluderar både ler och OM. Diff-kartorna visar skillnaden till kartan där 1 prov per ha analyserats med referensmetoden.

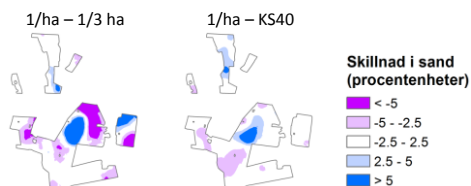
Sand Mariestad



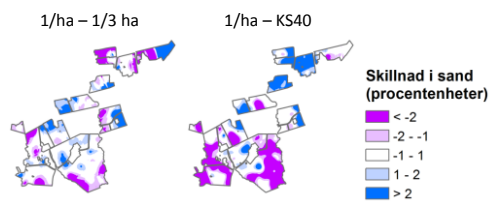
Sand Västerås



Diff. sand Mariestad



Diff. sand Västerås



Figur 9. Sandhaltsskartor där Mariestad utgör ett exempel där kalibreringarna för sand gick bra Eskilstuna ett exempel där kalibreringarna blev sämre. Diff-kartorna visar skillnaden till kartan där 1 prov per ha analyserats med referensmetoden.

Tabell 3. Statistisk redovisning av den pixelvisa (5*5 m) skillnaden mellan referenskartan (1 prov/ha) och 1 prov/3 ha och NIR-metod 1 prov/ha. Standardavvikelsen indikerar den genomsnittliga skillnaden i ton/ha.

	Referenskartan - 1 prov /3 ha				Referenskartan - KS40			
	min	max	medel	stdav	min	max	medel	stdav
Askersund	-2.1	2.6	-0.1	0.49	-0.6	1.0	-0.0	0.22
Eskilstuna	-0.7	0.9	0.0	0.26	-0.5	0.6	0.0	0.18
Linköping	-3.5	2.6	-0.2	0.77	-1.1	1.5	0.2	0.41
Mariestad	-4.5	3.1	0.1	1.03	-1.7	1.0	0.0	0.34
Sjöbo	-1.1	1.7	-0.0	0.29	-0.9	0.5	-0.1	0.19
Storfors	-4.0	4.7	-0.2	0.96	-1.9	3.2	0.0	0.43
Västerås	-3.3	3.4	-0.0	0.86	-0.9	0.9	-0.1	0.24

Tabell 4. Statistisk redovisning av den pixelvisa (5*5 m) skillnaden mellan referenskartan (1 prov/ha) och 1 prov/3 ha och NIR-metod 1 prov/ha. Standardavvikelsen indikerar den genomsnittliga skillnaden i % sand.

	Referenskartan - 1 prov /3 ha				Referenskartan - KS40			
	min	max	medel	stdav	min	max	medel	stdav
Askersund	-17	30	0.6	5.3	-20	14	-1.7	6.0
Eskilstuna	-2.4	4.3	-0.1	0.88	-2.2	4.3	0.0	0.97
Linköping	-24	23	-0.2	5.6	-15	14	-0.3	4.0
Mariestad	-22	24	-1.0	5.4	-4.8	11	0.1	2.4
Sjöbo	-14	7.6	-0.3	3.2	-17	22	-0.2	3.3
Storfors	-21	42	0.3	4.8	-8.5	21	1.0	2.6
Västerås	-9.1	26	0.3	3.7	-10	8.6	-0.6	2.7

Referenser

Kennard, R. W. and Stone, L. A. 1969. Computer aided design of experiments. *Technometrics* , **11**, 137-148.

Wetterlind, J. & Stenberg, B. 2010. Near-infrared spectroscopy for within-field soil characterization: small local calibrations compared with national libraries spiked with local samples. *European Journal of Soil Science*, **61**, 823-843.

Wetterlind, J. 2012. Slutrapport till Stiftelsen Svensk Växtnäringsforskning, KSLA, H09-0011-SVX.

Publikationer inom projektet

En mer utförlig rapport som tar upp material och metod i detalj och där resultaten redovisas mer fullständigt finns som manuskript och publiceras i POS (Precisionsodling Sverige) rapportserie och kommer att finnas tillgänglig i SLU's öppna arkiv Epsilon: *Jordartskartering för precisionsodlingsändamål är möjligt med nära infraröd spektroskopi*. Bo Stenberg, Johanna Wetterlind, Rikard Westbom och Daniel Olsson

En vetenskaplig artikel finns som manuskript: *Can small NIR calibrations at the farm scale be an alternative to large calibrations for farm soil mapping of soil type?* Bo Stenberg, Johanna Wetterlind, Rikard Westbom och Daniel Olsson

Resultatförmedling

Johanna Wetterlind presenterat resultaten vid den regionala växtodlingskonferensen i Uddevalla i januari 2014 och inför markkarteringsrådet i september 2014. I markkarteringsrådet deltar representanter för myndigheter, hushållningssällskap, laboratorieföretag, m.fl.

Resultaten har redovisats muntligt av Bo Stenberg vid den internationell vetenskapliga workshopen *Soil Spectroscopy: the present and future of Soil Monitoring*". *FAO HQ, Rome, Italy, 4-6 December 2013*. Presentationen rönt stort intresse bland deltagande forskare med samma specialistområde från hela världen: http://www.fao.org/fileadmin/user_upload/GSP/docs/Spectroscopy_dec13/Stenberg.pdf

En träff på Eurofins i Kristianstad kommer att ske den 6/5 2015 där Bo Stenberg och Daniel Olsson presenterar vad vi kommit fram för berörd personal. Detta följs av en diskussion om hur metoden skall kunna komma till användning i praktiken.

Dessutom kommer delar av resultaten att ingå i en muntlig presentation vid "*The 4th global workshop on proximal soil sensing*". *Hangzhou, China, May 12-15, 2015*.