

Institute of Plant Production and Agroecology in the Tropics and
Subtropics
University of Hohenheim
Field: Global Food Security
Prof. Dr. Georg Cadisch (Supervisor)



**Prediction of soil properties for agricultural and
environmental applications from infrared and X-ray
soil spectral properties**

Dissertation

Submitted in fulfillment of the requirements for the degree
"Doktor der Agrarwissenschaften"
(Dr.sc.agr. / Ph.D. in Agricultural Sciences)

to the
Faculty of Agricultural Sciences

presented by
Towett, Erick Kibet
Born on October 3rd 1981 in Kericho, Kenya

2013

6.0 Summary

Prediction of soil properties for agricultural and environmental applications from infrared and X-ray soil spectral properties

Many of today's most pressing problems facing developing countries, such as food security, climate change, and environmental protection, require large area data on soil functional capacity. Conventional assessments (methods and measurements) of soil capacity to perform specific agricultural and environmental functions are time consuming and expensive. In addition, repeatability, reproducibility and accuracy of conventional soil analytical data are major challenges. New, rapid methods to quantify soil properties are needed, especially in developing countries where reliable data on soil properties is sparse, and to take advantage of new opportunities for digital soil mapping. Mid infrared diffuse reflectance spectroscopy (MIR) has already shown promise as a rapid analytical tool and there are new opportunities to include other high-throughput techniques, such as total X-ray fluorescence (TXRF), and X-ray diffraction (XRD) spectroscopy. In this study TXRF and XRD were tested in conjunction with IR to provide powerful diagnostic capabilities for the direct prediction of key soil properties for agricultural and environmental applications especially for Sub-Saharan Africa (SSA) soils. Optimal combinations of spectral methods for use in pedotransfer functions for low cost, rapid prediction of chemical and physical properties of African soils as well as prediction models for soil organic carbon and soil fertility properties (soil extractable nutrients, pH and exchangeable acidity) were tested in this study. These state-of-the-art methods for large-area soil health measurement and monitoring will aid in accelerating economic development in developing sub-Saharan Africa countries with regards to climate change, increasing water scarcity and impacts on local and global food security as well as sustainable agricultural production and ecosystem resilience in the tropics.

This study has developed and tested a method for the use of TXRF for direct quantification of total element concentrations in soils using a TXRF (S2 PICOFOXTM) spectrometer and demonstrated that TXRF could be used as a rapid screening tool for total element concentrations in soils assuming sufficient calibration measures are followed. The results of the current study have shown that TXRF can provide efficient chemical fingerprinting which could be further tested for inferring soil chemical and physical functional properties which is of interest in the African soil context for agricultural and environmental management at large

scale. Further, this thesis has helped to improve understanding of the variation and patterns of element concentration data for 1034 soil samples from 34 stratified randomly-located 100-km² “sentinel” sites across SSA and explored the link between variability of soil properties and climate, parent material, vegetation types and land use patterns with the help of Random Forests statistics. Our results of total element concentration were within the range reported globally for soil Cr, Mn, Zn, Ni, V, Sr, and Y and in the high range for Al, Cu, Ta, Pb, and Ga. There were significant variations ($P < 0.05$) in total element composition within and between the sites for all the elements analysed. In addition, the greatest proportion of total variance and number of significant variance components occurred at the site (55-88%) followed by the cluster nested within site levels (10-40%). Our results also indicated that the strong observed within site as well as between site variations in many elements can serve to diagnose their soil fertility potential. Explorations of the relationships between element composition data and other site factors using “randomForest” statistics have demonstrated that all site and soil-forming factors have important influence on total elemental concentrations in the soil with the most important variables explaining the main patterns of variation in total element concentrations being cluster, topography, landuse, precipitation and temperature. However, the importance of cluster can be explained by spatial correlation at distances of <1 km.

This study has also analysed the potential of combining analyses undertaken using MIR spectroscopy and TXRF on 700 soil samples from 44 “sentinel” sites distributed across SSA. MIR prediction models for soil organic carbon, and other soil fertility properties (such as soil extractable nutrients, pH, exchangeable acidity and soil texture) were developed using Random Forests (RF) regression and the current study has added total element concentration data to the residuals of the MIRS predictions to test how they can improve the MIR prediction accuracies. The RF approach out-performed the conventional partial least squares regression (PLSR) on simultaneous determination of soil properties; and in addition, RF results were also easily interpretable, computationally much faster and did not rely on data transformations or any other assumptions about data distributions compared to PLSR. With respect to the potential of combining TXRF and MIR spectra, including total element concentration data from TXRF analysis in the RF models significantly reduced root mean square error of prediction by 63% for Ecd, 54% for Mehlich-3 S, and 53% for Mehlich-3 Na. Thus, TXRF spectra were a useful supplement to improve prediction of soil properties not well predicted by MIRS. The prediction improvement from including TXRF was due to detection of a few outliers that did not appear as

MIR spectral outliers. MIR showed remarkable ability to capture total elemental composition effects on physico-chemical soil properties but TXRF may have potential for outlier detection in large studies. This study has also helped to develop high-throughput spectral analytical methods and provided recommendations on optimal spectral analytical methods for the Globally Integrated Africa Soil Information Service (AfSIS) Project. Successfully developed methods in this study will become part of the standard AfSIS procedures.

7.0 Zusammenfassung

Vorhersage physikalischer und chemischer Bodeneigenschaften für landwirtschaftliche und umwelttechnische Anwendungen mittels Infrarot und Röntgen-Spektral Methoden

Viele der heutigen dringendsten Problemfelder der Entwicklungsländer wie Gewährleistung der Ernährungssicherheit, Anpassung an Klimawandel und verbesserter Umweltschutz erfordern umfangreiche, flächendeckende Daten über die funktionelle Kapazität von Böden. Herkömmliche Verfahren (Methoden und Messungen) zur Bestimmung von spezifischen landwirtschaftlichen und ökologischen Bodenfunktionen sind zeitaufwendig und teuer. Neben den Kosten sind die Wiederholbarkeit, Reproduzierbarkeit und Genauigkeit von herkömmlichen analytischen Methoden große Herausforderungen. Neue, schnelle Methoden zur Quantifizierung von Bodeneigenschaften sind notwendig, vor allem in Entwicklungsländern, wo zuverlässige Daten über Bodenqualität schwer zu beschaffen sind, und um die Vorteile der neuen Möglichkeiten einer digitalen Bodenkartierung auszunutzen. Infrarot-Spektroskopie mit diffuser Reflexion (IR) hat bereits gute Ergebnisse als ein schnelles Analyse-Instrument gezeigt und es gibt neue Möglichkeiten, um andere Hochdurchsatz-Techniken wie die Total-Röntgenfluoreszenz (TXRF) und Röntgenbeugungs-Spektroskopie (XRD) einzusetzen. In dieser Studie wurden TXRF und XRD in Verbindung mit IR getestet, um leistungsstarke Diagnosefunktionen für die direkte Vorhersage der wichtigsten funktionellen Eigenschaften von Böden für Landwirtschaft und Umwelt-Anwendungen besonders für die Böden Afrikas südlich der Sahara zur Verfügung zu stellen. In dieser Studie wurden optimale Kombinationen von spektralen Methoden getestet, die für den Einsatz in Pedotransferfunktionen mit niedrigen Kosten, einer schnellen Vorhersage der chemischen und physikalischen Eigenschaften der afrikanischen Böden, sowie in Prognosemodellen für organischen Kohlenstoff im Boden und die Bestimmung von Bodenfruchtbarkeitsparametern (extrahierbare Nährstoffe, pH-Wert und austauschbare Säuren) geeignet sind. Diese aktuellen Methoden zur großflächigen Messung und Überwachung der Bodengesundheit können dazu beitragen, die wirtschaftliche Entwicklung in den Ländern Afrikas südlich der Sahara positiv zu fördern, besonders in Bezug auf den Klimawandel, die lokale und globale Ernährungssicherheit sowie die Nachhaltigkeit der landwirtschaftlichen Produktion und der Stabilität der Ökosysteme.

In diese Studie wurde zunächst ein Verfahren zur Verwendung von TXRF zur direkten Quantifizierung der gesamten Elementkonzentration in 15 Bodenproben unter Verwendung eines

TXRF (S2 PICOFOXTM) Spektrometers entwickelt und mit 20 weiteren Bodenproben getestet. Die Ergebnisse zeigten, dass bei ausreichender Kalibrierung TXRF als ein schnelles Screening-Werkzeug für die meisten Elemente verwendet werden kann. Die Ergebnisse der aktuellen Studie haben ausserdem gezeigt, dass TXRF effiziente chemische Fingerabdrücke liefern kann, die zum Ableiten von chemischen und physikalischen Bodeneigenschaften dienen können.

Diese Arbeit hat weiter dazu beigetragen, den Zusammenhang zwischen Variabilität der Bodeneigenschaften und Klima, Bodenausgangsmaterial, Vegetationstypen und Landnutzung mit Hilfe von TXRF, XRD und IR-spektralen Methoden zu verstehen. Dafür wurden 1034 Bodenproben analysiert, die im Rahmen des 'Africa Soil Information Service' (AfSIS) Projektes von 34 randomisiert ausgewählten stratifizierten Standorten von jeweils 100 km² in zahlreichen Ländern Afrikas südlich der Sahara entnommen wurden. Die Ergebnisse der Gesamt-Elementkonzentrationen dieser Bodenproben lagen im Bereich der dokumentierten Konzentrationen für die Elemente Cr, Mn, Zn, Ni, V, Sr und Y, lagen aber höher als gewöhnlich für die Elemente Al, Cu, Ta, Pb, and Ga. Signifikante Unterschiede ($P < 0,05$) der Gesamt-Elementkonzentrationen wurden sowohl innerhalb als auch zwischen den beprobten 34 Standorten gefunden. Die Variabilität war deutlich grösser zwischen den 34 Standorten (55-88 % Varianz) als innerhalb der Standorte (10-40 % Varianz). Mit Hilfe von 'Random Forests'-Regressionen konnte gezeigt werden, dass die Gesamt-Elementkonzentrationen der untersuchten Bodenproben von umweltbezogenen Standortvariablen wie Topographie und Landnutzungstyp als auch Klimafaktoren wie Temperatur und Niederschlag wesentlich beeinflusst werden.

In einem weiteren Schritt wurde die Aussagekraft einer Kombination von MIR und TXRF-Methoden und der 'Random Forests'-Regression anhand von 700 Bodenproben von 44 Standorten in Afrika südlich der Sahara getestet. Dazu wurden zunächst MIR-Vorhersagemodelle für organischen Bodenkohlenstoff und andere Bodenfruchtbarkeitsparameter (extrahierbare Nährstoffe, pH-Wert und austauschbare Säuren) mit Hilfe von 'Random Forests' (RF)-Regressionen entwickelt. Durch Einbringen der Gesamtelement-Daten zu den Residuen der IR-Vorhersagen konnten die MIR-Regressionsmodelle signifikant verbessert werden. Im Vergleich zu der gewöhnlich benutzten 'partial least square'-Regression (PLSR) zeigte die entwickelte RF-Regression deutlich bessere Ergebnisse, war schneller anzuwenden und einfacher zu interpretieren und war nicht auf zeitaufwändige und fehleranfällige Datentransformationen wie die PLSR angewiesen. Durch die Kombination von TXRF- und MIR-Spektren konnte

ausserdem die Vorhersage-Genauigkeit der Bodenparameter deutlich verbessert werden, z.B. für Ecd um 63%, Mehlich-3 S um 54%, Mehlich-3 Na um 53% verglichen zur alleinigen Nutzung der MIRS-Spektren.

Zusammenfassend hat die vorliegende Studie dazu beigetragen, neue spektrale Bodenanalysemethoden mit hohem Durchsatz zu entwickeln und Empfehlungen für die optimierte Anwendung dieser Methoden zu erarbeiten, die bereits erfolgreich von dem oben erwähnten AfSIS-Projekt übernommen und in die Standard-AfSIS Verfahren integriert worden sind.