

Bernhard Ohnmacht¹, Volker Hahn², Christian Pfitzner¹

Vergleich unterschiedlicher Nahinfrarot-Spektrometer und Probenpräsentationen für die Schätzung des Protein- und Stärkegehaltes im Getreidekorn während der Versuchsernte

Comparison of different near infrared spectrometers and sample presentations to estimate the protein and starch content in cereal grains during trial harvest

237

Zusammenfassung

In der Pflanzenzüchtung werden Schnellmethoden benötigt, die möglichst erntezeitnah und kostengünstig Unterschiede in den Qualitätsmerkmalen an großen Probenreihen des Zuchtmaterials feststellen können. Dafür hat sich die Nahinfrarotspektroskopie als geeignete Methode erwiesen. Ziel der vorliegenden Studie war es, die Eignung verschiedener Spektrometersysteme für diesen Zweck zu prüfen.

Im Rahmen eines Verbundprojektes wurden in Technikversuchen die Spektrometer PSS-1720 (Polytec GmbH, Waldbronn) und zwei Varianten des Zeiss Spektrometers, Corona 45 NIR bzw. Corona Remote NIR (Carl Zeiss Jena GmbH, Jena), verwendet. Sie wurden jeweils als System mit einem Bandmodul bzw. einem Trichtermodul im Durchfluss, wie sie zur Probenpräsentation auf Parzellenmähdreschern üblich sind, kombiniert und verglichen. In einem Gerätevergleich am Band wurde außerdem das PSS-2120 (Polytec) mit einbezogen. Dabei wurde die Eignung für die Bestimmung des Stärke- und Proteingehalts an unvermahlenden Kornproben von Weizen, Gerste und Triticale geprüft, außerdem bei Wintergerste der Einfluss von Verunreinigungen.

Mit allen eingesetzten Spektrometern lassen sich für die untersuchten Getreidearten Kalibrationen mit hohen Bestimmtheitsmaßen für den Stärke- und Proteingehalt erstellen. In der Tendenz liefert das Bandmodul in Kombination mit dem Spektrometer PSS-1720 die besseren Kalibrierungsergebnisse, insbesondere bei kleineren Proben-

mengen. Der Proteingehalt ließ sich im Vergleich zum Stärkegehalt besser kalibrieren, was durch einen höheren Fehler der Referenzmethode bei der Stärkebestimmung bedingt ist. Nur bei Sommergerste konnte für den Stärkegehalt keine für ein Screening ausreichende Kalibration ermittelt werden. Der Einfluss von Verunreinigungen bei der Wintergerste ist in seiner Wirkung auf die Kalibrierung bzw. Validierung beim Bandmodul höher als beim Durchflussmodul.

Für die pflanzenzüchterische Versuchsernte eignen sich demnach mit einer Ausnahme alle geprüften Systeme für die Bestimmung des Protein- und Stärkegehaltes. Das System aus PSS-1720 und Bandmodul bietet leichte Vorteile, zumal es auch als Feldrandstation sehr gut einsetzbar ist.

Stichwörter: NIRS, Spektrometer, Getreidekorn, Weizen, Gerste, Triticale, Stärke, Protein

Abstract

Plant breeding requires methods for rapidly detecting the differences in grain quality parameters within the breeding material. Ideally, such methods should be inexpensive and able to be carried out on large samples during or close to the harvest. Therefore, the near infrared spectroscopy has proven to be a suitable method. This research project aims to determine the suitability of various spectrometer systems to achieve this.

Institut

Julius Kühn-Institut – Bundesforschungsinstitut für Kulturpflanzen, Institut für Pflanzenbau und Bodenkunde, Braunschweig¹
Universität Hohenheim, Landessaatzuchtanstalt, Stuttgart²

Kontaktanschrift

Dr. Bernhard Ohnmacht, Julius Kühn-Institut – Bundesforschungsinstitut für Kulturpflanzen, Institut für Pflanzenbau und Bodenkunde, Bundesallee 50, 38116 Braunschweig, E-Mail: bernhard.ohnmacht@jki.bund.de

Zur Veröffentlichung angenommen

2. April 2012

As part of a joint field and laboratory project, a comparison was made of two spectrometers commonly used for the analysis of grain samples during harvesting. The spectrometers PSS-1720 (Polytec GmbH, Waldbronn) and two configurations of the Zeiss spectrometer, Corona 45 NIR and Corona Remote NIR (Carl Zeiss Jena GmbH, Jena) were compared using both a conveyor belt system and funnel flow system commonly used on a plot combine. The PSS-2120 (Polytec) was also tested in the combination with the conveyor belt system. The suitability of these systems for determining the starch and protein content of samples of unground wheat, barley and triticale grain was tested. Also the influence of the occurrence of impurities in winter barley samples was investigated.

All the spectrometers produced calibrations with high coefficients of determination for starch and protein content for the cereals under investigation. Overall, the conveyor belt system, when combined with the PSS-1720 spectrometer produced the more accurate calibrations, especially for smaller sample sizes. The calibrations for protein content were more accurate than for starch content, due to greater errors in the reference method for starch. Only for spring barley could no accurate calibration be made for starch content. Impurities in winter barley were found to have a greater influence on the measurement from the conveyor belt system compared with the funnel flow system.

For the determination of protein and starch content in the harvesting of cereals from plant breeding field trials, with one exception, all the systems tested were suitable. The spectrometer system consisting of PSS-1720 used with the conveyor belt module offers a slight advantage, especially as it is also very suitable for use as mobile station at the site of the field trial.

Key words: NIRS, spectrometer, cereal grain, wheat, barley, triticale, starch, protein

1 Einleitung

Im europäischen Vergleich ist die Getreidezüchtung in Deutschland von kleinen und mittleren Unternehmen geprägt. Mit hohem Aufwand werden in den Unternehmen im Laufe des Züchtungsprozesses Genotypen mit höchstem Ertragspotenzial und sehr guten Qualitätseigenschaften ermittelt. Auch beim Bundessortenamt werden im Rahmen der Sortenzulassung aufwändige, mehrjährige Leistungsprüfungen der Sortenkandidaten auf Standorten mit unterschiedlichen klimatischen Bedingungen durchgeführt. Die Bestimmung der Trockenmasse bei der Ernte der Leistungsprüfungen sowie die Analyse von Qualitätsmerkmalen, wie Stärke- und Proteingehalt, sind dabei sehr personal- und kostenintensiv. Da die Ernte in den Unternehmen eine Arbeitsspitze darstellt, die in der Regel durch Saisonarbeitskräfte abgedeckt wird, ist darüber hinaus eine gute Logistik erforderlich. Daher wird der Entwicklung von Schnellmethoden, die möglichst erntezeitnah und kostengünstig genotypische Unterschiede in den Qualitätsmerk-

malen an großen Probenserien feststellen können, eine große Bedeutung beigemessen. Wichtige Faktoren sind dabei eine im Vergleich mit der Referenzmethode erzielbare Richtigkeit und Präzision sowie ein hoher Proben-durchsatz und eine entsprechende Prozesssicherheit.

Diese Anforderungen werden von der Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) erfüllt. Aufgrund der hohen Energie und der geringeren Absorptionskoeffizienten im Bereich des nahinfraroten Lichtes ist die Eindringtiefe in die Probe hinreichend groß, so dass native Proben ohne aufwändige Aufbereitung und mit größeren Schichtdicken gemessen werden können. Ein Vorteil, der für die Entwicklung von Schnellmethoden von großer Bedeutung ist. Seit den 90iger Jahren stehen Dioden-Array-(DA)-Spektrometer zur Verfügung, die in Millisekunden Spektren über das gesamte, gerätespezifische Wellenlängenintervall aufzeichnen können, und die durch ihre robuste Bauweise die Anwendung der NIRS vom Labor hin zur online-Messung direkt auf der Erntemaschine wesentlich vorange-trieben haben. Erste Anwendungen der NIRS-online-Technologie auf Erntemaschinen wurden für die Bestimmung des Trockensubstanzgehalts auf einem Maishäcksler (DARDENNE und FÉMÉNIAS, 2000; WELLE et al., 2003) und auf einem Grünfüttervollernter (HAEUSLER et al., 2002; PAUL und PFITZNER, 2004) beschrieben. Nur wenig später wurde diese Technik auf die Getreideernte mit dem Mähdrescher übertragen (REYNS et al., 2000; REYNS, 2002; RADEMACHER, 2003; PFITZNER et al., 2004).

Die vorgestellte Studie war Teil eines Verbundvorhabens, an dem sich das Institut für Pflanzenbau und Bodenkunde des Julius Kühn-Instituts in Braunschweig, die Landessaatzuchtanstalt Stuttgart der Universität Hohenheim und vier Züchtungsunternehmen beteiligten (OHNMACHT und HAHN, 2011). Übergeordnetes Ziel war die umfassende Nutzbarmachung der NIRS-Technologie für die pflanzenzüchterische Versuchsernte auf Parzellenmähdreschern und auf mobilen Feldrandstationen. Ein Teilziel des Projektes bestand in der vergleichenden Untersuchung von verschiedenen Spektrometersystemen, die zurzeit in der Getreidezüchtung eingesetzt werden, hinsichtlich ihrer Leistungsfähigkeit zur Schätzung des Protein- und Stärkegehaltes von Winterweizen, Winter- und Sommergerste sowie Triticale. Diese Untersuchungen wurden im Technikumsmaßstab durchgeführt.

2 Material und Methoden

2.1 NIRS-Messsysteme

Für die Technikerversuche wurden zwei Methoden der Probenpräsentation und vier Spektromertypen ausgewählt, die im Züchtungsbetrieb zur online-Messung auf Erntemaschinen bzw. zur atline-Messung als Feldrandstation eingesetzt werden (Tab. 1). Die Kombination aus Spektrometer und Methode der Probenpräsentation kann als Spektrometersystem bezeichnet werden.

Beim so genannten Bandmodul, wie es auf den Mähdreschern der Firma J. Haldrup/Dänemark (Ino-Group) und in baugleichen Feldrandstationen verwendet wird,

Tab. 1. Verwendete Spektrometersysteme in den Technikumsversuchen

Probenpräsentation Spektrometer	Spektralbereich	Messkopf
Bandmodul 1 (Haldrup)		
PSS-1720 (Polytec)	850–1650 nm	PSS-H-A01
Corona Remote NIR (Zeiss)	960–1690 nm	OMK 500, extern
Bandmodul 2 (Haldrup)		
PSS-2120 (Polytec)	1100–2150 nm	PSS-H-A01
Corona 45 NIR (Zeiss)	960–1690 nm	OMK 500, intern
Trichtermodul (Wintersteiger)		
PSS-1720 (Polytec)	850–1650 nm	PSS-H-117 (Prototyp)
Corona Remote NIR (Zeiss)	960–1690 nm	OMK 500, extern

werden die Körner auf einem Förderband unter dem Spektrometermesskopf hindurchgeführt. Beim Trichtermodul (Durchflusszelle), wie es z.B. auf den Mähdreschern der Wintersteiger AG/Österreich verwendet wird, ist der Messkopf des Spektrometers an der Wandung der Durchflusszelle so angebaut, dass der vorbeifließende Gutstrom durch ein Glasfenster hindurch gemessen werden kann (Abb. 1).

Mit dem Corona 45 NIR bzw. Corona Remote NIR kamen zwei Varianten eines verbreiteten Spektrometers der Carl Zeiss Jena GmbH zum Einsatz. Bei dem Corona 45 NIR bildet der Messkopf mit dem Gerät eine konstruktive Einheit, währenddessen bei der Remote-Variante der Messkopf separat über einen Lichtleiter mit dem Gerät gekoppelt ist. Außerdem wurden zwei Spektrometer der Polytec GmbH, Waldbronn ausgewählt, die sich im Wellenlängenbereich unterscheiden.

Für den Vergleich der Spektrometersysteme kam das Bandmodul 1 sowie das Trichtermodul zum Einsatz (Tab. 1, Abb. 1). Mit diesen beiden Modulen wurden sowohl die Inhaltsstoffe (Kap. 3.1) als auch der Einfluss von Verunreinigungen untersucht (Kap. 3.2). Der Gerätever-

gleich (Kap. 3.3) erfolgte mit zwei hintereinandergeschalteten, baugleichen Bandmodulen 1 und 2, die mit unterschiedlichen Spektrometern bestückt waren (Tab. 1, Abb. 2).

2.2 Durchführung der Messungen

Beim **Bandmodul** wurden die Proben über einen Trichter kontinuierlich dem Band zugeführt. Über einen dem Trichter nachgeschalteten Abstreifer konnte die Schichtdicke des zu messenden Gutes reguliert werden. Der Abstand der Messköpfe zum Messgut betrug nach Firmenvorgaben beim Zeiss Corona Remote Messkopf 1,9 cm, beim Polytec Messkopf 20 cm.

Beim **Trichtermodul** wurden beide Messköpfe am Trichter so montiert (Abb. 1), dass der Abstand zwischen der Glasscheibe des Modulfensters und der Messkopfglasscheibe sehr gering aber groß genug war, dass keine Newtonschen Ringe entstehen konnten. Aufgrund der teilweise geringen Probenmengen, die von den Züchtern zur Verfügung gestellt werden konnten, war es erforderlich, den Trichter durch einen Einbau so zu verändern, dass die kontinuierliche Zuführung der Körner über einen

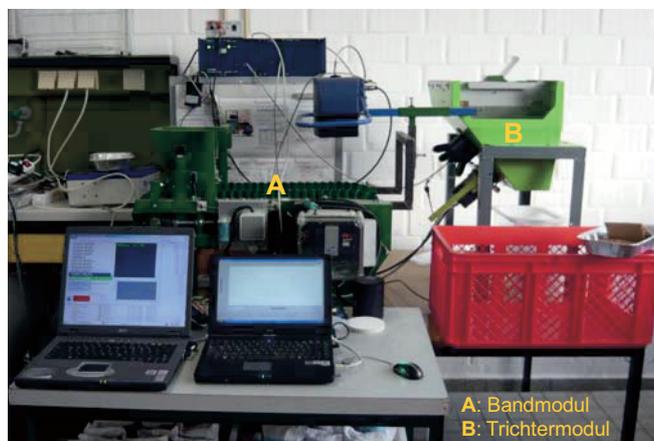


Abb. 1. Versuchsaufbau im Technikum für die Vergleichsmessungen am Band- bzw. Trichtermodul.

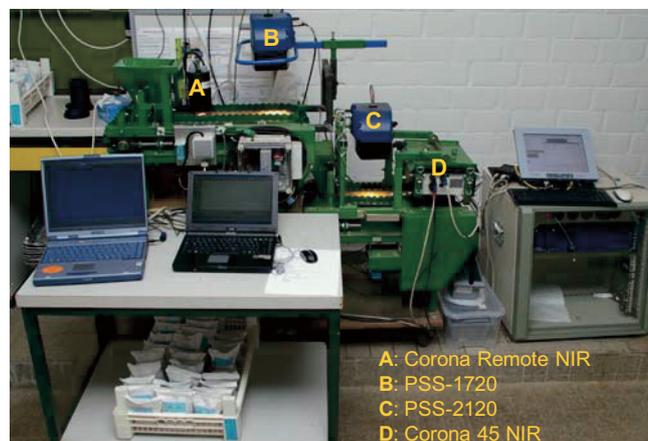


Abb. 2. Versuchsaufbau im Technikum für den Spektrometervergleich am Bandmodul.

„längeren“ Zeitraum möglich war. Dies wurde durch den Einbau einer schräg gestellten Platte erreicht, die zusätzlich mit einem Schieber versehen war, mit dem die verbleibende Öffnung des verkleinerten Trichters bis zum Start der Messung verschlossen werden konnte. Im Gegensatz zum Bandmodul erfolgt hier die Messung des Gutes an „bewegtem“ Material, das heißt, die Körner bewegen sich beim Passieren der Messeinrichtung gegeneinander. Um diesen Effekt auf seine eventuelle Wirkung auf die Kalibrierqualität zu erfassen, wurde das Gut auch in angestauter Form gemessen. Dafür wurde zusätzlich eine kastenförmige Klappe eingebaut, mit der das zu messende Gut vor den beiden Messköpfen angestaut werden konnte.

2.3 Referenzproben

Von den beteiligten Züchtungsunternehmen wurden Kornproben der verschiedenen Getreidearten aus den Anbaujahren 2008 und 2009 zur Verfügung gestellt (Tab. 2), die eine möglichst große Spannweite der für die Kalibrationsexperimente vorgesehenen Inhaltsstoffe aufwiesen. (Tab. 3).

Die Referenzwerte für die Inhaltsstoffe der Proben wurden bei den Züchtungsunternehmen mittels Labor-NIRS bestimmt.

Soweit erforderlich, wurden die gelieferten Kornproben nachgetrocknet, um die Lagerfähigkeit sicherzustellen. Bis zur Messung wurden sie dann in einem Raum gelagert, der nur geringe Temperaturschwankungen aufwies. Durch

die Lagerung unter gleichen Bedingungen wurden die Proben equilibriert, so dass innerhalb einer Art die Unterschiede in der Kornfeuchte gering waren. Einige Stunden vor der Messung wurden die Proben in den Messraum gebracht, um sie an die Raumtemperatur anzupassen und damit weitestgehend gleiche Messbedingungen zu erzielen. Die Trockensubstanzgehalte wurden, in Anlehnung an internationale Prüfvorschriften, am jeweiligen Messtag mit einer Doppelbestimmung an fünf Proben je Art, 24 h Trocknung bei 105 °C, überprüft (Internationale Vereinigung zur Prüfung von Saatgut, 1999). Die Auswahl dieser Proben erfolgte über das Programm SL Utilities des CWS (siehe Kap. 2.4) auf Basis der gemessenen Spektren (Subserroutine).

Die Spektrometer wurden zu Beginn und während einer Messreihe mehrmals nach Herstellerangaben referenziert, um die Gerätedrift zu begrenzen. Gemessen wurde nach Kulturarten getrennt in Gruppen von ca. 80 bis 160 Mustern je Messtag. Nach Möglichkeit wurden diese Gruppen am gleichen Tag bzw. an aufeinanderfolgenden Tagen auf dem Band- und dem Trichtermodul mit allen sechs Systemen gemessen. Beim Trichtermodul erfolgte die Messung mit beiden Spektrometersystemen zunächst im Durchfluss und mit der gleichen Probe unmittelbar danach angestaut. Beim Gerätevergleich wurden die Proben je Versuchsjahre an einem Tag mit zwei hintereinander angeordneten Bandmodulen gemessen.

Tab. 2. Von den Züchtungsunternehmen bereitgestellte Proben

Standort	Jahr	Fruchtart			
		Winterweizen	Wintergerste	Sommergerste	Triticale
<u>Technikumsversuche</u>					
Wetze (KWS-Lochow)	2008	112 (2 Wdh.)	128 (2 Wdh.)		
	2009	112	128		
Böhnshausen (Nordsaat)	2008	200		134	113
	2009	100		100	100
Thüle (DSV)	2008		100		
	2009		100 (2 Wdh.)		
Rosenthal (Limagrain)	2008	159			
Σ Proben (incl. Wdh.)		795	684	234	213
ΣΣ Proben					1926
<u>Spektrometervergleich am Bandmodul</u>					
Wetze (KWS-Lochow)	2008	110	64		
Böhnshausen (Nordsaat)	2008				113
	2009	100		95	100
Σ Proben		210	64	95	213

Tab. 3. Spannweite der Inhaltsstoffe Stärke und Protein für die untersuchten Getreidearten

Art	Stärke [%]	Protein [%]
Gerste		
Sommergerste	58,61–64,19	8,97–13,46
Wintergerste	55,40–65,60	8,40–13,50
Winterweizen	63,65–71,30	9,81–14,80
Triticale	61,02–69,11	10,81–16,12

2.4 Kalibration und Validation

Software: Die Aufzeichnung der Spektren erfolgte mit dem Programm CORA (Carl Zeiss Jena GmbH) bzw. mit der Poytec Spectrometer Software (Polytec GmbH, Waldbronn). Es wurden Spektren-Multifiles aufgezeichnet, die mehrere Einzelspektren beinhalten, die sich durch das Scannen der Messstrecke ergeben. Die Multifiles wurden mit dem Programm Spectral Mask Factory der Firma Carl Zeiss Jena gefiltert, um eventuell auftretende Randeffekte bzw. „Löcher“ in der Messstrecke, die z.B. auftraten, wenn sich bei der Gerste Grannen im Aufnahmetrichter des Bandes querstellten, zu eliminieren (PFITZNER et al., 2004). Derartige Effekte traten noch häufiger beim Trichtermodul auf, wenn aufgrund der kleinen Probenmengen am Anfang und Ende der Messzeit keine oder keine ausreichende Zahl von Körnern das Messfenster abdeckten. Das Programm Spectral Mask Factory bildet automatisch aus den gefilterten Spektren des Multifiles ein Mittelwertspektrum. Dieses ist dann die spektrale Kalibriergrundlage der Probe.

Der Datenimport in die Chemometriesoftware CWS (Calibration Work Shop; SensoLogic GmbH, Norderstedt), mit dem auch die Kalibration und Validation durchgeführt wurde, erfolgte über den CWS-Programmteil SL Utilities.

Datensätze: Die Kalibrationen der genannten Inhaltsstoffe wurden für die einzelnen Getreidearten, Spektrometer und Probenpräsentationen getrennt erstellt. Die Kulturart Gerste wurde nochmals in Sommer- und Wintergerste unterteilt, da es sich nach verschiedenen Diversitätsstudien um getrennte Genpools handelt (MALYSHEVA-OTTO et al., 2006; HASENEYER et al., 2010). Parzellenwiederholungen wurden nicht berücksichtigt, da sie statistisch nicht unabhängig sind, zu höheren Freiheitsgraden führen und in der Folge einen geringeren Fehler vortäuschen.

Datenvorbereitung: Die Auswertung der in diffuser Reflexion gemessenen Spektren erfolgte auf der Basis von Absorptionsspektren. Der Spektren-Offset-Effekt infolge der Schüttdichteunterschiede wurde durch die erste Ableitung der Spektren kompensiert.

Kalibration und Validation: Die Kalibriermodelle wurden mit der Methode Partial Least Squares Regression (PLSR) berechnet. Die Datensätze wurden dafür in jeweils einen Kalibrier- und Validierdatensatz im Verhältnis 70/30 aufgeteilt. Die Zuordnung der Proben zu diesen Datensätzen erfolgte durch Zufallsauswahl mit dem Programm-

teil SL Utilities des CWS, um die Unabhängigkeit des Validationsdatensatzes zu gewährleisten.

Für die Ausreißerdiagnose wurden die programminternen Optionen des CWS auf folgende Limits gesetzt: globaler H-Wert > 3; T-Wert (Student's t-test) > 3; D-Wert (Cook's statistic) > 3 und S-Wert (Spektren-Rekonstruktions-Fehler) > 5. Die Größe des Kreuzvalidationssets wurde auf 10% des Kalibrierdatensatzes festgelegt.

Die Beurteilung der Kalibrierergebnisse erfolgte mit den üblichen Fehlermaßen der Kalibrationsstatistik, dem RM-SECV (Root-mean-square error of cross-validation; gemittelter Standardfehler der Kreuzvalidierung) und dem RMSEP (Root-mean-square error of prediction; Standardfehler der Vorhersage bei Validation an einem externen Testset). Zusätzlich wurde der RPD-Wert (ratio of standard deviation of the reference data set for the validation samples) als dimensionslose Größe zur Beurteilung herangezogen. Der RPD-Wert beschreibt das Verhältnis zwischen der Standardabweichung des Merkmals im Validationsset (SD_{val}) und dem Standardfehler der Vorhersage (SEP) und ist wegen seiner Dimensionslosigkeit geeignet, unterschiedliche Kalibriermodelle miteinander zu vergleichen.

Voraussetzung ist die Normalverteilung des Validationsdatensatzes. Die dabei verwendete Beurteilungsskala folgt dem Vorschlag von WILLIAMS and SOBERING (1996). RPD-Werte < 2 werden als nicht ausreichend für eine gute Kalibration eingestuft. Werte zwischen 2 und 3 reichen für ein Screening aus. RPD-Werte zwischen 3 und 5 bzw. 5 und 10 stufen die Kalibration als zufriedenstellend bzw. gut bis sehr gut, über 10 als exzellent ein. Außerdem ist das Bestimmtheitsmaß (R^2) der Kreuzvalidierung bzw. der externen Validierung dargestellt, das aber nach PLESCH (1982) für die Bewertung der Vorhersageleistung mehr orientierenden Charakter hat.

3 Ergebnisse und Diskussion

3.1 Schätzung des Stärke- und Proteingehaltes

Vorangestellt seien zunächst zwei Ergebnisse, die für alle untersuchten Getreidearten beobachtet werden konnten:

- Generell führten alle Kalibrierexperimente mit der Spektrentransformation „Absorption plus 1. Ableitung“ zu besseren Ergebnissen als mit der Spektrentransformation „Absorption“.
- Die Kalibrierergebnisse, die mit dem angestauten Kornmaterial im Trichtermodul erreicht wurden, waren verglichen mit dem durchfließenden Material schlechter, was darauf zurückgeführt werden kann, dass die spektral beprobte Fläche deutlich kleiner ist.

Daher wurde auf die Einzeldarstellung der Ergebnisse mit der Spektrentransformation „Absorption“ sowie auf die Ergebnisse der angestauten Variante verzichtet.

3.1.1 Sommergerste. Für den Vergleich der Spektrometersysteme wurden Proben von einem Standort aus zwei Erntejahren für die Kalibration verwendet (Tab. 2). Bei

den untersuchten Merkmalen Stärke- und Proteingehalt konnten nur für den Proteingehalt befriedigende Ergebnisse erzielt werden (Tab. 4). Für Protein wurden die besten Ergebnisse auf dem Bandmodul mit RPD-Werten über 3 ermittelt, wobei das Spektrometer PSS-1720 tendenziell bessere Modellvoraussagen lieferte als das Corona. Beim Trichtermodul wurden mit beiden Spektrometern gleichwertige Ergebnisse erzielt, die für ein Screening, gemessen an den erreichten RPD-Werten, ausreichen.

Der Fehler (RMSEP) zur Bestimmung des Proteingehalts war beim Bandmodul am geringsten und lag für das Trichtermodell bei der Durchflussmessung nur wenig höher, im Gegensatz zur angestauten Messung, die einen doppelt so hohen Fehler aufweist.

Bei institutsinternen Proteinkalibrationen an getrockneten, vermahlenden Sommergersteproben, gemessen mit dem NIRSystems 6500 (FOSS NIRSystems, USA), wurde in der Kreuzvalidation ein Fehler (RMSECV) von 0,84% ermittelt, allerdings für die etwas größere Merkmalsspannweite von 7,5 bis 24,1%. Daraus lässt sich ableiten, dass mit den untersuchten Spektrometersystemen an ganzen Körnern praxisnutzbare Ergebnisse erzielbar sind.

3.1.2 Wintergerste. Bei Wintergerste standen Proben von zwei Orten aus zwei Versuchsjahren für die Kalibrierung zur Verfügung (Tab. 2). Im Gegensatz zur Sommergerste konnten für Stärke- und Protein RPD-Werte über 2 ermittelt werden, wobei die Bestimmtheitsmaße und RPD-Werte beim Protein generell höher lagen (Tab. 5).

Die Kalibrationen mit den geringsten Fehlern wurden auch hier mit dem Bandmodul erreicht. Mit einem RMSEP von 0,29 ermittelten WILLIAMS and SOBERING (1993) bei Labormessungen an ganzen Gerstekörnern einen vergleichbaren Wert, was auch in diesem Fall die praktische Nutzbarkeit der Messungen mit dem Bandmodul bestätigt.

3.1.3 Winterweizen. Für die Kalibrierexperimente konnte auf Proben aus zwei Erntejahren zurückgegriffen werden, die von drei Versuchsorten stammten (Tab. 2).

Für Stärke und für Protein konnten mit dem Bandmodul mit beiden eingesetzten Spektrometern zufriedenstellende Ergebnisse erreicht werden (Tab. 6). Die Bestimmtheitsmaße unterscheiden sich nur wenig. In der Validation wurde für beide Merkmale RPD-Werte ermittelt, die für ein Screening ausreichend sind.

Mit dem Trichtermodul wurden im Durchfluss etwas schlechtere Ergebnisse erzielt als mit dem Bandmodul. Der Fehler für die Proteinschätzung liegt beim Bandmodul und Trichtermodul unter 0,36%. Für den Proteingehalt von Weizen ermittelten SINNAEVE (2004) mit einem Zeiss Corona 45 im Durchfluss mit einem Fehler in der Kreuzvalidation (RMSECV) von 0,27% einen vergleichbaren Wert. LONG et al. (2008) erzielten über Transmissionsmessungen mit zwei Spektrometersystemen, die online Situationen mit bewegtem Kornmaterial simulierten, einen RMSEP von 0,31 bzw. 0,45%. WILLIAMS and SOBERING (1993) erreichten bei Reflektionsmessungen im Labor an verschiedenen Weizenformen Fehler für die Proteinschät-

zung (RMSEP) zwischen 0,16 und 0,25% und damit im Vergleich zu den vorgestellten Ergebnissen am Band nur tendenziell bessere Werte.

Die Kalibrationsmodelle für das Spektrometersystem PSS-1720/Bandmodul lieferten im Vergleich zum System Corona 45 NIR/Bandmodul tendenziell bessere Bestimmtheitsmaße und RPD-Werte, sowohl für Stärke als auch für Protein.

3.1.4 Triticale. Triticaleproben wurden nur von einem Standort bereitgestellt. Hier konnten für die Kalibration Proben aus zwei Versuchsjahren berücksichtigt werden (Tab. 2).

Wie bei der Sommergerste konnten auch bei Triticale zufriedenstellende RPD-Werte nur für den Proteingehalt gefunden werden (Tab. 7). Auch bei dieser Kulturart wurden die besten Ergebnisse mit dem Bandmodul ermittelt, wobei das Spektrometer PSS-1720 hier deutlich besser abschnitt. Ein sehr hohes Bestimmtheitsmaß für die Validation konnte mit dem PSS-1720 am Bandmodul erreicht werden.

Für ein Screening ausreichende RPD-Werte für die Proteinschätzung wurden auch mit dem Trichtermodul im Durchfluss erreicht. Diese Ergebnisse wurden mit vergleichsweise geringen Probenzahlen ermittelt. Da nur Proben von einem Ort für die Kalibrierung zur Verfügung standen, ist die Extrapolation auf mehrere Orte nicht untermauert. Es kann aber davon ausgegangen werden, dass sich die Kalibration unter Einbeziehung einer größeren Variabilität im Merkmal Proteingehalt entsprechend verbessert. Der RMSEP war beim Proteingehalt sowohl beim Band- wie auch beim Trichtermodul gering, stieg aber von der Bandpräsentation zur Trichterpräsentation an.

3.2 Der Einfluss von Verunreinigungen auf die Schätzgenauigkeit

Der Einfluss von Verunreinigungen wurde bei der Wintergerste untersucht, da hier Verunreinigungen nicht nur die Bestimmung der Inhaltsstoffe erschweren, sondern auch der Anteil an Grannen den Materialfluss behindern kann. Der Vergleich mit dem Trichtermodul wurde nur mit dem besser zu kalibrierenden Merkmal Proteingehalt durchgeführt.

Aufgrund der in den Materialgruppen „gereinigt“ bzw. „ungereinigt“ unterschiedlichen Anzahl an Jahren und Orten, die in die jeweilige Kalibration eingingen, können die Ergebnisse (Tab. 8) nur der Größenordnung nach verglichen werden. Für den Stärkegehalt wurde ein etwas höherer Fehler für die gereinigte Variante ermittelt. Dies scheint paradox, ist aber durch die Berücksichtigung des zweiten Versuchsortes begründet, der eine höhere Standardabweichung in der Stärke aufweist. Bei der Validation wurden deutlich bessere RPD-Werte für die gereinigte Variante ermittelt. In der nicht dargestellten, angestauten Variante war der Fehler deutlich größer, was darauf hindeutet, dass durch die Erfassung einer größeren Messfläche, das heißt größeren Materialmenge, der durch die Verunreinigung bedingte Fehler verringert wird.

Tab. 4. PLSR-Kalibrations- und Validationsergebnisse für den Stärke- und Proteingehalt von Sommergerste

Spektrometer Präsentation	Kalibration				Validation					
	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	N _{val}	RMSEP	Bias	R ² _{val}	RPD	
Stärke										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	153	6	0,82	0,75	73	0,74	0,06	0,58	1,54	
Trichtermodul	155	5	0,83	0,75	73	0,93	0,15	0,31	1,19	
PSS-1720										
Bandmodul	157	8	0,75	0,80	73	0,78	-0,17	0,25	1,41	
Trichtermodul	153	8	0,77	0,85	73	0,86	-0,09	0,37	1,18	
Protein										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	157	9	0,23	0,98	73	0,27	-0,03	0,90	3,10	
Trichtermodul	157	10	0,37	0,97	73	0,33	-0,14	0,87	2,77	
PSS-1720										
Bandmodul	155	9	0,23	0,97	73	0,24	-0,02	0,93	3,67	
Trichtermodul	156	9	0,26	0,97	73	0,29	0,03	0,87	2,77	

Tab. 5. PLSR-Kalibrations- und Validationsergebnisse für den Stärke- und Proteingehalt von Wintergerste

Spektrometer Präsentation	Kalibration				Validation					
	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	N _{val}	RMSEP	Bias	R ² _{val}	RPD	
Stärke										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	216	9	0,71	0,93	109	0,77	0,10	0,85	2,54	
Trichtermodul	217	6	0,79	0,91	109	0,86	-0,07	0,82	2,32	
PSS-1720										
Bandmodul	217	10	0,74	0,92	109	0,66	-0,05	0,90	3,07	
Trichtermodul	215	8	0,72	0,94	109	0,72	-0,06	0,86	2,66	
Protein										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	261	9	0,27	0,98	130	0,26	0,01	0,94	3,96	
Trichtermodul	260	9	0,39	0,96	130	0,39	0,04	0,86	2,67	
PSS-1720										
Bandmodul	256	10	0,27	0,98	130	0,25	-0,02	0,94	4,00	
Trichtermodul	261	9	0,24	0,98	130	0,28	0,05	0,93	3,70	

Beim Proteingehalt unterschieden sich die Fehler und Bestimmtheitsmaße der Kalibration in der Regel nur wenig voneinander. Bei den System-Kombinationen mit dem PSS-1720-Messkopf werden im Vergleich zu den Kombinationen mit dem Corona-Messkopf jedoch die höheren RPD-Werte ermittelt.

Zur eingehenderen Überprüfung des Reinigungseffektes wurde ein Probensatz der Wintergerste aus dem Erntejahr 2009 verwendet, von dem gereinigte und ungereinigte Muster der gleichen Stichprobe zur Verfügung standen. Dazu wurde mit dem PSS-1720 und dem Bandmodul das Spektrometersystem mit dem höchsten RPD-Wert aus

Tab. 6. PLSR-Kalibrations- und Validationsergebnisse für Stärke- und Proteingehalt von Winterweizen

Spektrometer Präsentation	Kalibration				Validation					
	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	N _{val}	RMSEP	Bias	R ² _{val}	RPD	
Stärke										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	216	9	0,61	0,97	107	0,62	-0,03	0,91	3,28	
Trichtermodul	211	8	0,72	0,96	106	0,61	0,02	0,90	3,13	
PSS-1720										
Bandmodul	213	8	0,57	0,97	107	0,55	-0,05	0,92	3,53	
Trichtermodul	210	7	0,60	0,96	106	0,73	-0,17	0,86	2,73	
Protein										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	314	10	0,25	0,96	159	0,27	< 0,01	0,90	3,12	
Trichtermodul	312	9	0,34	0,94	159	0,36	0,06	0,80	2,26	
PSS-1720										
Bandmodul	314	10	0,23	0,96	159	0,22	-0,02	0,92	3,56	
Trichtermodul	308	9	0,23	0,96	157	0,27	0,02	0,89	3,03	

Tab. 7. PLSR-Kalibrations- und Validationsergebnisse für Stärke- und Proteingehalt von Triticale

Spektrometer Präsentation	Kalibration				Validation					
	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	N _{val}	RMSEP	Bias	R ² _{val}	RPD	
Stärke										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	138	7	0,58	0,87	71	0,64	-0,15	0,66	1,68	
Trichtermodul	141	7	0,81	0,87	71	0,73	-0,01	0,42	1,25	
PSS-1720										
Bandmodul	138	9	0,50	0,93	71	0,47	-0,004	0,65	1,58	
Trichtermodul	140	10	0,53	0,95	70	0,79	0,06	0,59	1,57	
Protein										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul	138	8	0,30	0,96	71	0,28	-0,01	0,91	3,51	
Trichtermodul	140	10	0,33	0,98	71	0,35	-0,03	0,88	2,85	
PSS-1720										
Bandmodul	140	9	0,22	0,98	71	0,22	0,05	0,96	4,86	
Trichtermodul	138	9	0,20	0,99	70	0,30	0,003	0,93	3,63	

dem Gesamtvergleich herangezogen (Tab. 5). Durch die einheitliche Begrenzung der PLS-Faktoren auf 10, können die Fehler direkt verglichen werden.

Die Kalibrationsergebnisse der Probenpräsentation mit dem System PSS-1720 und Bandmodul zeigen, dass die Fehlervarianz der Proben sowohl beim Stärke- als auch

beim Proteingehalt durch die Verunreinigung nur wenig erhöht war (Tab. 9). Bei der gemeinsamen Kalibration der gereinigten und ungereinigten Proben lag der Fehler für den Proteingehalt etwas höher, insgesamt nahm der Fehler durch die Verunreinigung jedoch nicht so stark zu, wie man das möglicherweise erwartet hätte. In der Validation wurde

Tab. 8. PLSR-Kalibrations- und Validationsergebnisse für Stärke- und Proteingehalt von ungereinigter und gereinigter Wintergerste

Spektrometer Präsentation Reinigung	Kalibration				Validation					
	N _{kal}	Fakoren	RMSECV	R ² _{kal}	N _{val}	RMSEP	Bias	R ² _{val}	RPD	
<u>Stärke</u>										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul										
ungereinigt*	199	10	0,68	0,90	99	0,55	-0,06	0,76	1,97	
gereinigt**	216	9	0,71	0,93	109	0,77	0,10	0,85	2,54	
PSS-1720										
Bandmodul										
ungereinigt*	199	10	0,56	0,91	99	0,60	0,01	0,73	1,92	
gereinigt**	217	10	0,74	0,92	109	0,66	-0,05	0,90	3,07	
<u>Protein</u>										
Corona 45 NIR/Remote NIR										
Bandmodul										
ungereinigt#	198	10	0,28	0,97	99	0,33	0,06	0,92	3,52	
gereinigt###	261	9	0,27	0,98	130	0,26	0,01	0,94	3,96	
Trichter										
ungereinigt#	200	9	0,41	0,96	99	0,38	-0,06	0,85	2,61	
gereinigt###	260	9	0,39	0,96	130	0,39	0,04	0,86	2,67	
PSS-1720										
Bandmodul										
ungereinigt#	200	10	0,23	0,98	99	0,23	-0,01	0,95	4,28	
gereinigt###	256	10	0,27	0,98	130	0,25	-0,02	0,94	4,00	
Trichter										
ungereinigt#	198	10	0,23	0,98	99	0,25	0,03	0,93	3,83	
gereinigt###	261	9	0,24	0,98	130	0,28	0,05	0,93	3,70	

* 1 Ort; 2 Jahre; ** 2 Orte; 1 Jahr

1 Ort; 2 Jahre; ### 2 Orte; 2 Jahre

für den Stärkegehalt im Gegensatz zum Proteingehalt kein für ein Screening ausreichender RPD-Wert erreicht.

3.3 Kalibrations- und Validationsergebnisse im Gerätevergleich

Mit den Geräten beider Hersteller lassen sich für alle drei Getreidearten, Sommer- bzw. Wintergerste, Winterweizen und Triticale Kalibrationen mit hohen Bestimmtheitsmaßen für den Stärke- und Proteingehalt erstellen (Tab. 10 bis 12).

Bei den Zeiss Spektrometern zeigt sich, dass sich mit beiden Bandmodulen in der Regel vergleichbare Ergebnisse erzielen lassen. Leichte Abweichungen können durch die Größe des Kreuzvalidationssets bedingt sein, da nicht mit der Leave-One-Out-Methode (DAVIES, 1998) gearbeitet wurde.

Die beiden Geräte von Polytec liefern ebenfalls vergleichbare Ergebnisse. Durch die einheitliche Festlegung

der PLS-Faktoren auf 5 lassen sich die Fehler (RMSECV) der Kreuzvalidierung direkt vergleichen. Hier liegt der Fehler beim PSS-2120-Spektrometer häufig etwas über dem des PSS-1720.

Nur beim Stärkegehalt von Winterweizen ist ein deutlicher Jahreseffekt mit einem fast doppelt so hohen Fehler 2009 im Vergleich zu 2008 zu erkennen (Tab. 10). Der Jahreseffekt kann entweder an Unterschieden im Stärkeaufbau oder Differenzen in den gelieferten NIR/NIT-Referenzdaten liegen. Bei Triticale bestätigte sich dieser Jahreseffekt nicht, weshalb hier nur die gemeinsame Kalibration beider Jahre dargestellt ist (Tab. 11). Es liegt die Vermutung nahe, dass die Abweichungen bei Weizen in den Referenzdaten begründet sind, da im Gegensatz zu Triticale die Weizenproben aus verschiedenen Unternehmen stammten. Beim Proteingehalt konnte dieser Effekt nicht gefunden werden.

Tab. 9. PLSR-Kalibrations- und Validationsergebnisse für Stärke- und Proteingehalt von Wintergerste; (1-jährige, 1-ortige Ergebnisse, identischer Probensatz gereinigt und ungereinigt)

Spektrometer und Präsentation	Kalibration				Validation				
	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	N _{val}	RMSEP	Bias	R ² _{val}	RPD
PSS-1720/Bandmodul									
				Stärke					
ungereinigt (1)	197	10	0,52	0,87					
gereinigt (2)	198	10	0,49	0,88					
1 + 2 gesamt	395	10	0,52	0,84					
1 + 2 Kal./Val.	261	10	0,53	0,85	133	0,51	-0,03	0,67	1,73
				Protein					
ungereinigt (1)	197	10	0,20	0,94					
gereinigt (2)	197	10	0,17	0,95					
1 + 2 gesamt	394	10	0,23	0,89					
1 + 2 Kal./Val.	263	10	0,21	0,92	133	0,20	-0,002	0,83	2,39

Bei der Wintergerste wurde aufgrund der niedrigen Probenzahl mit dem Proteingehalt nur das besser zu kalibrierende Merkmal für den Vergleich berücksichtigt. Auch bei der Gerste bestätigt sich, dass mit den Geräten beider Firmen vergleichbare Ergebnisse zu erzielen sind (Tab. 12).

Dass mit dem PSS-1720 die besseren Ergebnisse zu erzielen sind, kann in der Tendenz für alle untersuchten Getreidearten bestätigt werden, da der Fehler bei diesem Gerät in der Regel am niedrigsten war. Die Unterschiede zu den anderen Spektrometern waren jedoch nicht sehr groß. Der Vergleich der beiden Polytec Spektrometer bestätigt Laborergebnisse von WILLIAMS and SOBERING (1993), dass der Wellenlängenbereich über 1800 nm für die Stärke- und Proteinbestimmung an ganzen Körnern keinen Vorteil bringt.

4 Schlussfolgerungen

Aufgrund der unterschiedlichen Zusammensetzung der Kalibrationsdatensätze, das heißt Anzahl der Orte und Jahre sowie der Materialgruppen, sind die erzielten RPD-Werte nur innerhalb der Art direkt in Beziehung zu setzen. Bei einer vergleichenden Betrachtung der Güte der Kalibrationen anhand dieser Werte können die Gemeinsamkeiten in den Probenpräsentationen wie folgt zusammengefasst werden:

- Generell sind die Spektrometer beider Hersteller für die Erfassung der untersuchten Qualitätsmerkmale gut einsetzbar. Das am Band zusätzlich geprüfte PSS-2110 zeigt, dass der höhere Wellenlängenbereich dieses Gerätes zu tendenziell schlechteren Ergebnissen führt.

- Die Messungen mit dem Bandmodul führten im Vergleich zum Trichtermodul sowohl mit dem Corona- als auch mit dem PSS-1720-Messkopf zu den besseren Kalibrationsergebnissen.
- Eine mögliche Ursache für die schlechteren Ergebnisse beim Trichtermodul ist in der für diese Präsentation zu geringen Probenmenge zu suchen, die für die Messungen zur Verfügung stand. Beim Einbau am Mähdscher, wie beim System Wintersteiger, treten generell weit größere Massenströme auf, die im vorliegenden Experiment auf Grund der züchterseitig begrenzten Probenmengen nicht realisiert werden konnten. Für die züchterische Selektion ist bei geringen Probenmengen die Messung mit dem Bandmodul geeigneter und daher empfehlenswert. Eine Probenmenge von ca. 500 g ist hier bereits ausreichend.
- Auf dem Bandmodul wurden mit dem PSS-1720 die besseren Kalibrationsergebnisse (RPD-Werte) erzielt. Ausnahme war die Stärkekalibration mit Sommergeste, die aufgrund der niedrigen RPD-Werte keine weitere Interpretation zulässt.
- Der Proteingehalt ließ sich im Vergleich zur Stärke besser kalibrieren. Eine Ursache dafür dürfte in der Problematik der Stärkebestimmung im Labor zu suchen sein, da aufgrund des größeren Fehlers der Labormethode bereits die zur Verfügung gestellten Referenzwerte einen größeren Fehler aufweisen dürften.

Für züchterische Zwecke eignet sich demnach, insbesondere bei kleinen Probenmengen, das Spektrometersystem aus PSS-1720 und Bandmodul am besten. Der leichte Vorteil der Kalibrationsergebnisse des PSS-1720 gegenüber dem CORONA 45 NIR könnte in der kollimierten Messgeometrie des PSS-H-A01-Messkopfes begründet sein, die

Tab. 10. PLSR-Kalibrationsergebnisse für Stärke und Protein von Winterweizen im Gerätevergleich

Merkmal Spektrometer	Band- modul	N _{ges}	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	bei 5 Faktoren	
							RMSECV	R ² _{kal}
Stärke								
<u>2008</u>								
Corona 45 NIR	1	110	108	10	0,36	0,89	0,45	0,63
Corona 45 NIR	2	110	110	10	0,34	0,93	0,44	0,73
PSS-1720	1	110	109	10	0,30	0,92	0,42	0,76
PSS-2120	2	110	107	8	0,37	0,89	0,42	0,77
<u>2009</u>								
Corona Remote NIR	1	100	100	10	0,69	0,93	0,79	0,84
Corona 45 NIR	2	100	100	6	0,69	0,86	0,73	0,82
PSS-1720	1	100	99	9	0,72	0,92	0,75	0,81
PSS-2120	2	100	100	6	0,72	0,89	0,74	0,85
<u>2008 + 2009</u>								
Corona 45/Remote NIR	1	210	210	8	0,64	0,97	0,83	0,93
Corona 45 NIR	2	210	209	8	0,58	0,97	0,85	0,93
PSS-1720	1	210	208	7	0,59	0,97	0,68	0,96
PSS-2120	2	210	207	8	0,63	0,97	0,79	0,94
Protein								
<u>2008</u>								
Corona 45 NIR	1	110	107	10	0,25	0,96	0,46	0,79
Corona 45 NIR	2	110	108	8	0,17	0,98	0,25	0,93
PSS-1720	1	110	108	8	0,17	0,97	0,34	0,87
PSS-2120	2	110	108	10	0,22	0,98	0,40	0,86
<u>2009</u>								
Corona Remote NIR	1	100	100	8	0,26	0,97	0,33	0,94
Corona 45	2	100	100	7	0,19	0,98	0,27	0,96
PSS-1720	1	100	99	9	0,19	0,99	0,27	0,96
PSS-2120	2	100	97	6	0,20	0,98	0,27	0,97
<u>2008 + 2009</u>								
Corona 45/Remote NIR	1	210	210	10	0,25	0,95	0,53	0,74
Corona 45 NIR	2	210	208	9	0,19	0,97	0,40	0,85
PSS-1720	1	210	209	10	0,19	0,97	0,44	0,80
PSS-2120	2	210	207	9	0,22	0,97	0,48	0,78

das System relativ unempfindlich gegenüber wechselnden Oberflächeneigenschaften des zu messenden Gutes macht.

Im Vergleich zu den anderen Getreidearten scheint bei Winterweizen die Stärke besser kalibrierbar zu sein, was seine Ursache im höheren HL-Gewicht und der besseren Fließfähigkeit haben könnte. Wie der Vergleich der Kalibrationsparameter von NIRS-Messung im Labor mit der

NIRS-Messung ganzer Körner am Beispiel des Winterweizens zeigt, ist bei geeigneter Wahl des Spektrometersystems eine Vermahlung der Körner nicht zwingend erforderlich.

Entscheidend für die Zuverlässigkeit der Kalibrationen ist der Methodenfehler der Referenzanalytik. ISENGARD et al. (2010) weisen darauf hin, dass eine Kalibration mit

Tab. 11. PLSR-Kalibrationsergebnisse für Stärke und Protein von Triticale im Gerätevergleich (2-jährige Ergebnisse: 2008 und 2009)

Merkmal Spektrometer	Band- modul	N _{ges}	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	bei 5 Faktoren	
							RMSECV	R ² _{kal}
Stärke								
Corona 45/Remote NIR	1	213	208	10	0,51	0,90	0,70	0,74
Corona 45 NIR	2	213	208	8	0,47	0,90	0,55	0,85
PSS-1720	1	213	208	10	0,47	0,92	0,59	0,84
PSS-2120	2	213	207	10	0,54	0,92	0,79	0,69
Protein								
Corona 45/Remote NIR	1	213	207	9	0,21	0,98	0,39	0,93
Corona 45 NIR	2	213	207	10	0,17	0,99	0,35	0,94
PSS-1720	1	213	206	9	0,20	0,98	0,31	0,95
PSS-2120	2	210	209	10	0,21	0,99	0,37	0,94

Tab. 12. PLSR-Kalibrationsergebnisse für Stärke und Protein von Sommer- und Wintergerste im Gerätevergleich (1-jährige Ergebnisse: 2009)

Merkmal Spektrometer	Band- modul	N _{ges}	N _{kal}	Faktoren	RMSECV	R ² _{kal}	bei 5 Faktoren	
							RMSECV	R ² _{kal}
Sommergerste								
Stärke								
Corona Remote NIR	1	95	93	10	0,83	0,91	0,83	0,78
Corona 45 NIR	2	95	95	10	0,87	0,89	0,84	0,71
PSS-1720	1	95	95	10	0,68	0,92	0,83	0,76
PSS-2120	2	95	95	7	0,79	0,83	0,84	0,71
Protein								
Corona Remote NIR	1	95	95	10	0,22	0,98	0,43	0,91
Corona 45 NIR	2	95	94	9	0,21	0,98	0,36	0,92
PSS-1720	1	95	95	8	0,25	0,97	0,38	0,92
PSS-2120	2	95	94	10	0,28	0,98	0,49	0,87
Wintergerste								
Protein								
Corona Remote NIR	1	64	64	10	0,27	0,94	0,36	0,71
Corona 45 NIR	2	64	64	10	0,22	0,96	0,37	0,77
PSS-1720	1	64	64	10	0,22	0,95	0,32	0,83
PSS-2120	2	64	64	9	0,32	0,96	0,39	0,82

guten statistischen Parametern noch keine Garantie für eine korrekte Messung ist. Dass die NIRS-Schätzungen nur so gut wie die Labormethode sein können, spiegelt sich in den im Vergleich zum Proteingehalt niedrigeren RPD-Werten für die Stärkegehaltsbestimmung wieder, da die Genauigkeit der Stärkebestimmung im Labor immer noch zu wünschen übrig lässt.

Der verwendete Prototyp des Polytec-Messkopfes, der am Trichtermodul zum Einsatz kam, wurde inzwischen

vom Hersteller zu einem robusten, kompakten und selbstreferenzierenden Kontaktmesskopf (PSS-H-B01) weiterentwickelt, der statt der drei Lichtquellen á 5 W mit einer 20 W Lampe ausgestattet ist. Von der Firma Zeiss ist mit dem Corona Plus 45 NIR ein ebenfalls selbstreferenzierendes Gerät auf den Markt gekommen, das mit einer Saphirscheibe ausgestattet ist und als Kontaktmesskopf genutzt werden kann. Die zweite Glasscheibe, die beim Trichtermodul in der vorliegenden Studie verwendet

wurde, kann deshalb hier entfallen. Inwieweit beide Entwicklungen bessere Ergebnisse liefern, wäre Gegenstand weiterer Untersuchungen.

Danksagung

Wir danken der Deutschen Saatveredelung (DSV) in Käßschütztal; Limagrain GmbH, Zuchtstation Rosenthal; Nordsaat Saatzuchtgesellschaft mbH, Langenstein sowie der KWS-Lochow GmbH, Zuchtstation Wetze für die Bereitstellung der Proben, Dr. Christian PAUL, Sabine KAISER, Stefanie RITSCHEL und Thorsten MELLIN für die Unterstützung bei der Planung und Durchführung des Projektes.

Das Vorhaben 15439 N/1 der Gemeinschaft zur Förderung der privaten deutschen Pflanzenzüchtung e.V. (GFP), Bonn, wurde über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen „Otto von Guericke“ (AiF) im Rahmen des Programms zur Förderung der Industriellen Gemeinschaftsforschung und -entwicklung (IGF) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Literatur

- DARDENNE, P., N. FÉMÉNIAS, 2000: Diode array near infrared instrument to analyse fresh forages on a harvest machine. In: A.M.C. DAVIES, and R. GIANGIACOMO (eds), Near infrared spectroscopy: Proc. 9th Int. Conf. 1999, Verona, Italy. NIR Publications, Chichester, 121-124.
- DAVIES, A., 1998: Cross-validation: do we love it too much? *Spectroscopy Europe* **10** (2), 24-25.
- HASENEYER, G., S. STRACKE, C. PAUL, C. EINFELDT, A. BRODA, H.-P. PIEPHO, A. GRANER, H.H. GEIGER, 2010: Population structure and phenotypic variation of a spring barley world collection set up for association studies. *Plant Breeding* **129**, 271-279. DOI: 10.1111/j.1439-0523.2009.01725.x.
- HAEUSLER, A., M. RODE, C. PAUL, 2002: Compositional analysis by near infrared diode array instrumentation on forage harvesters. In: A.M.C. DAVIES, and R.K. CHO (eds), Near infrared spectroscopy: Proc. 10th Int. Conf. 2001, Kyongju, Korea. NIR Publications, Chichester, 345-347.
- INTERNATIONALE VEREINIGUNG FÜR DIE PRÜFUNG VON SAATGUT, 1999: Vorschriften 1999. *Seed Sci. & Technol.* **27**, Supplement, 55-58.
- IENSGARD, H.-D., G. MERKH, K. SCHREIB, I. LABITZKE, C. DUBOIS, 2010: The influence of the reference method on the results of the secondary method via calibration. *Food Chemistry* **122**, 429-435. DOI: 10.1016/j.foodchem.2010.02.056.
- LONG, D.S., R.E. ENGEL, M.C. SIEMENS, 2008: Measuring grain protein with in-line near infrared reflectance spectroscopy. *Agronomy Journal* **100**, 247-252.
- MALYSHEVA-OTTO, L.V., M.W. GANAL, M.S. RÖDER, 2006: Analysis of molecular diversity, population structure and Linkage disequilibrium in a worldwide survey of cultivated barley germplasm (*Hordeum vulgare* L.). *BMC Genetics* **7**, 6. DOI: 10.1186/1471-2156-7-6.
- OHNMACHT, B., V. HAHN, 2011: Entwicklung und Optimierung eines neuartigen NIRS-basierten Sensorsystems zur Erfassung wertbestimmender Inhaltsstoffe von Körnerfrüchten bei der pflanzenzüchterischen Versuchsernte auf dem Parzellenmährescher sowie in Feldrandstationen. Schlussbericht des Verbundvorhabens. <https://www.uni-hohenheim.de/qisserver/rds?state=medialoader&objectid=6160&application=lsf> (Stand: 30.05.2012).
- PAUL, C., C. PFITZNER, 2004: Analytical use of NIR diode array spectrometers on forage harvesters. In: A.M.C. DAVIES, and A. GARRIDO-VARO (eds.), Near infrared spectroscopy: Proc. 11th Int. Conf. 2003, Cordoba, Spain. NIR Publications, Chichester, 333-338.
- PFITZNER, C., H. MEYER, G. ZIEGER, C. PAUL, 2004: Erfassung der Kornfeuchte von Mais auf Parzellenmähreschern mittels Diodenarrayspektrometer. Computer-Bildanalyse in der Landwirtschaft – Workshop 2004. Bornimer Agrartechnische Berichte, Heft 37, 56-69.
- PLESCH, R., 1982: Der Korrelationskoeffizient – Prüfgröße der Analytik? *GIT Fachz. Lab.* **11/82**.
- RADEMACHER, J., 2003: Kontinuierliche Messung der Getreidequalität während des Mähdruschs. Forschungsbericht Agrartechnik 146. Diss., Univ. Kiel.
- REYNS, P., 2002: Continuous measurement of grain and forage quality during harvest. *Dissertationes de agricultura*. Doctoraatsproefschrift Nr. 522 aan de Faculteit Landbouwkundige en Toegepaste Biologische Wetenschappen van de K. U. Leuven.
- REYNS, P., P. SPAEPEN, J. DE BEARDEMAKER, 2000: Site-specific relationship between grain quality and yield. *Precision Agriculture* **2**, 231-246.
- SINNAEVE, G., 2004: Quality assessment of wheat and forage using diode array NIR instrument on the harvester. In: A.M.C. DAVIES and A. GARRIDO-VARO (eds), Near infrared spectroscopy: Proc. 11th Int. Conf. 2003, Cordoba, Spain. NIR Publications, Chichester, 319-325.
- WELLE, R., W. GRETEN, B. RIETMANN, S. ALLEY, G. SINNAEVE, P. DARDENNE, 2003: Near-infrared spectroscopy on chopper to measure maize forage quality parameters online. *Crop Science* **43**, 1407-1413.
- WILLIAMS, P.C., D.C. SOBERING, 1993: Comparison of commercial near infrared transmittance and reflectance instruments for analysis of whole grains and seeds. *J. Near Infrared Spectrosc.* **1**, 25-32.
- WILLIAMS, P.C., D.C. SOBERING, 1996: How do we do it: a brief summary of the methods we use in developing near infrared calibrations. In: Near Infrared Spectroscopy: The Future Waves, NIR Publications, Chichester, 185-188.