

Brandenburg. Geowiss. Beitr.	Cottbus	Bd. 32/2025	S. 153–156	3 Abb.
------------------------------	---------	-------------	------------	--------

Aufbau einer Spektrenbibliothek im nahen und mittleren Infrarot zur Ableitung von Bodenparametern

JÜRGEN MÜLLER, TINA THRUM, JUDITH WALTER, HOLGER MÜLLER & ALBRECHT BAURIEGEL

Viele bodenkundliche Parameter werden visuell nach qualitativen morphologischen Kriterien erfasst und besitzen damit naturgemäß eine größere Unsicherheit. Bisher ist keine quantitative Methode zur Analyse qualitativer Charakteristika, wie z. B. der Pedogenese oder der Substratspezifikation, für Moorböden etabliert. Spektroskopische Untersuchungen an Bodenproben im mittleren Infrarotspektrum (MIRS) haben sich mittlerweile als geeignete Methoden zur Charakterisierung von Mineralböden und deren Substrateigenschaften erwiesen und bieten somit die Möglichkeit, diese Lücke zu schließen. Im Falle von organogenen Böden stoßen vornehmlich Farbinformationen wiedergebende Wellenlängenbereiche allerdings an ihre Grenzen, so dass es zur Differenzierung von komplexen inhaltsstofflichen Merkmalen, wie z. B. den Zersetzungsgraden der Torfe, auch Informationen zur Chemie der charakterisierenden organischen Verbindungen bedarf. Diese vermag insbesondere das nahe Infrarotspektrum (NIRS) zu liefern. Spektroskopische Verfahren sind darüber hinaus sehr arbeits- und kostensparend, was eine wesentlich höhere Anzahl von Analysen und damit die Abbildung räumlicher Heterogenität ermöglicht. NIR-spektroskopische Daten ermöglichen in der Bodenkunde zwei Hauptanwendungen: Zum einen die Nutzung der gesamten spektralen Information als eine Art inhaltsstofflicher Fingerabdruck zur Diskriminierung und Klassifizierung von Substraten. Zum anderen die Entwicklung von Kalibrationen zur quantitativen Schätzung einzelner Inhaltsstoffe, indem diejenigen Spektrenabschnitte selektiert und gewichtet werden, die Informationen zum entsprechenden Zielmerkmal aufweisen.

Das Dezernat Bodengeologie am Landesamt für Bergbau, Geologie und Rohstoffe Brandenburg (LBGR) verfolgt beide Ansätze und kooperiert daher mit wissenschaftlichen Einrichtungen, die derartige spektroskopische Methoden entwickeln. Neben der notwendigen Messtechnik stellt die Entwicklung von statistisch begründeten und regional gültigen Klassifikationsalgorithmen und Merkmalskalibrationen eine wesentliche Voraussetzung für den Einsatz dieser Verfahren dar. Durch die Kooperationspartner (Universität Rostock, Lehrstuhl für Grünland- und Futterbauwissenschaften und Universität Leipzig, Institut für Geographie) wurden bzw. werden bereits erfasste und umfassend ana-

lysierte Bodenproben aus Brandenburg (archivierte Rückstellproben, Mineralböden und Torfe) spektroskopisch im Bereich des nahen und mittleren Infrarots (NIR, MIR) untersucht. Im Rahmen der laufenden Projekte soll überprüft werden, ob sich die qualitative Klassifikation der Bodenhorizonte über Ähnlichkeiten in den spektroskopischen Mustern fassen lassen. Darüber hinaus soll bewertet werden, inwieweit die Verfahren der spektroskopischen Untersuchung konventionelle Analysemethoden ergänzen bzw. ersetzen können.

Charakterisierung von klassifizierten Substraten organogener Referenzstandorte Brandenburgs mittels Fourier-Transfer-Nahinfrarot-Reflexionsspektroskopie (FT-NIRS)

Aufgrund ihres Flächenumfangs und ihrer Funktion als Kohlenstoffspeicher spielen Moorböden eine große Rolle im landschaftsökologischen Kontext des Landes Brandenburg. Eine möglichst zuverlässige und reproduzierbare Charakterisierung ihrer Substrate ist Voraussetzung für die Einschätzung ihres biogeochemischen Verhaltens unter verschiedensten hydrologischen Regimen. Wichtige Merkmale zur Charakterisierung des aktuellen Zustandes von Torfen sind u. a. die Torfart und deren Zersetzungsgrad (Humifizierungsgrad nach KA6).

Seit 2022 wurden insgesamt 495 Torfproben organogener Referenzstandorte, für die sowohl pedogenetische und substratrelevante Klassifizierungen als auch Daten zur chemischen Charakterisierung vorliegen (TOC, TC, TN, TS, P, KAK), an der Universität Rostock (Lehrstuhl für Grünland- und Futterbauwissenschaften/Steinbeis-Transferzentrum Soil-Biotechnology) spektral analysiert. Das Dezernat Bodengeologie verfügt damit über einen Datenpool, welcher die spektralen Informationen von 1154 Wellenlängen je Torfprobe als FT-NIR-gemessene Absorbanzwerte beinhalten.

Die Messung erfolgte mit einem stationären FT-NIR Gerät MPA (Multi-Purpose-Analyzer) der Fa. Bruker im Wellenlängenbereich von 3594 bis 12488 Wellen cm^{-1} in zweifa-

cher Wiederholung à 64 Scans pro Messung. Dieser Teilbereich des infraroten Lichts ist potentiell geeignet, spektrale Reflexionssignale zu erhalten, die die chemische Signatur der organischen Komponente der Torfe widerspiegeln. Die Messwiederholungen wurden gemittelt und in einer Spektrenbibliothek abgelegt, die somit die inhaltsstofflich-molekulare Bandbreite der Torfsubstrate im Land Brandenburg repräsentiert. Die weitere Spektrenvorbehandlung erfolgte mit der Bruker-Software QUANT2, der CAMO-Software „Unscrambler“ sowie mittels eigener R-Skripte. Abbildung 1 zeigt die gemittelten, aber noch nicht vorbehandelten Spektren der Torfproben.

Mit dem Ziel der Entwicklung von Kategorisierungsmodellen wurden verschiedene chemometrische Methoden (h-CA, PCA, PLS-DA, ML-SV) auf den vorbereiteten Datenpool angewendet, um zu untersuchen, welche spektralen (= inhaltsstofflichen) Ähnlichkeiten bzw. Unähnlichkeiten zwischen den Torfproben bestehen. Abbildung 2 zeigt ein Beispiel einer solchen Anwendung auf die Kategorien des Zersetzungsgrades. Mittels PCA konnten zudem diejenigen Spektrenbereiche ausfindig gemacht werden, die die Hauptinformation zu dessen Charakterisierung beherbergen. Diese waren an beiden Rändern des untersuchten Spektralbereichs ausgeprägt, während das mittlere NIR wenig zur inhaltsstofflichen Differenzierung beitrug.

Abbildung 3 zeigt am Beispiel des Gehaltes an organischem Kohlenstoff die Ergebnisse einer Kalibration und der unabhängigen Validation derselben. Anhand des Standardschätzfehlers kann der Anwender unter Abwägung des Genauigkeitsanspruches und des notwendigen Probenumfangs entscheiden, ob er die Kalibration oder die klassische Labor-Referenzmethode bevorzugen möchte.

Schlussfolgerung und Ausblick

Das Dezernat Bodengeologie ist aktuell damit befasst, sein wertvolles Archiv an klassifizierten und auf wesentliche chemisch-inhaltliche Parameter analysierten Bodenproben aus Brandenburg weitergehenden spektroskopischen Untersuchungen zu unterziehen. Auf der Grundlage der im Aufbau befindlichen Spektrendatenbank lassen sich bereits jetzt Kalibrationsfunktionen zur kostengünstigen Schätzung von Schlüsselmerkmalen ableiten und nutzen. Als erwartungsgemäß schwieriger gestaltete sich eine mit geltenden Kartieranleitungen übereinstimmende Klassifizierung der untersuchten Torfe. Dies liegt jedoch nicht nur an den angewandten chemometrischen Modellen, sondern auch an den Limitierungen der Referenzkategorien selbst. Es steht außer Zweifel, dass sich zukünftig KI-gestützte Klassifizierungsalgorithmen auch in der bodenkundlichen

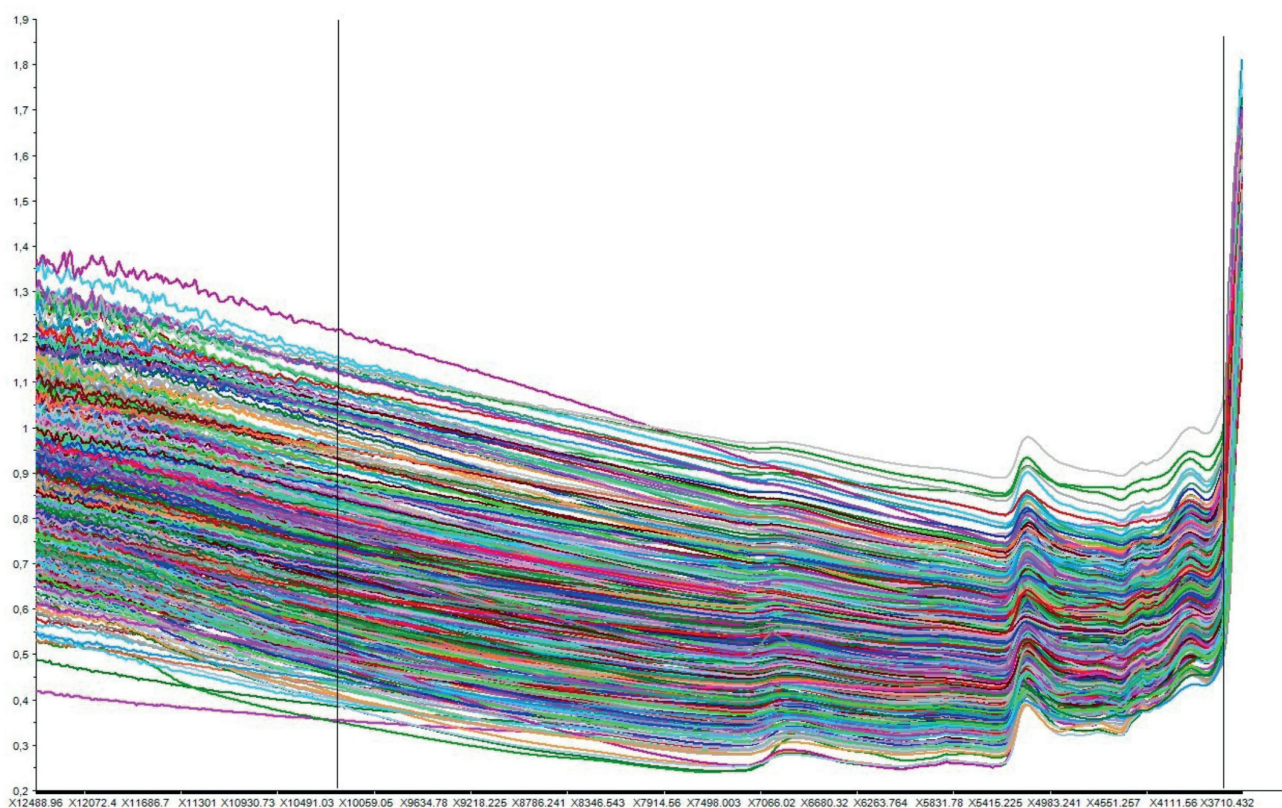


Abb. 1: Darstellung der gemittelten, aber noch nicht vorbehandelten Spektren der Torfproben ($n = 495$). Die Wellenzahl auf der x-Achse ist nach dem Energieniveau der Strahlung sortiert. Die y-Achse stellt die Absorbanzwerte [Einheit ist das logarithmierte Reziprok der detektierten Reflexion, $\log(1/R)$] dar.

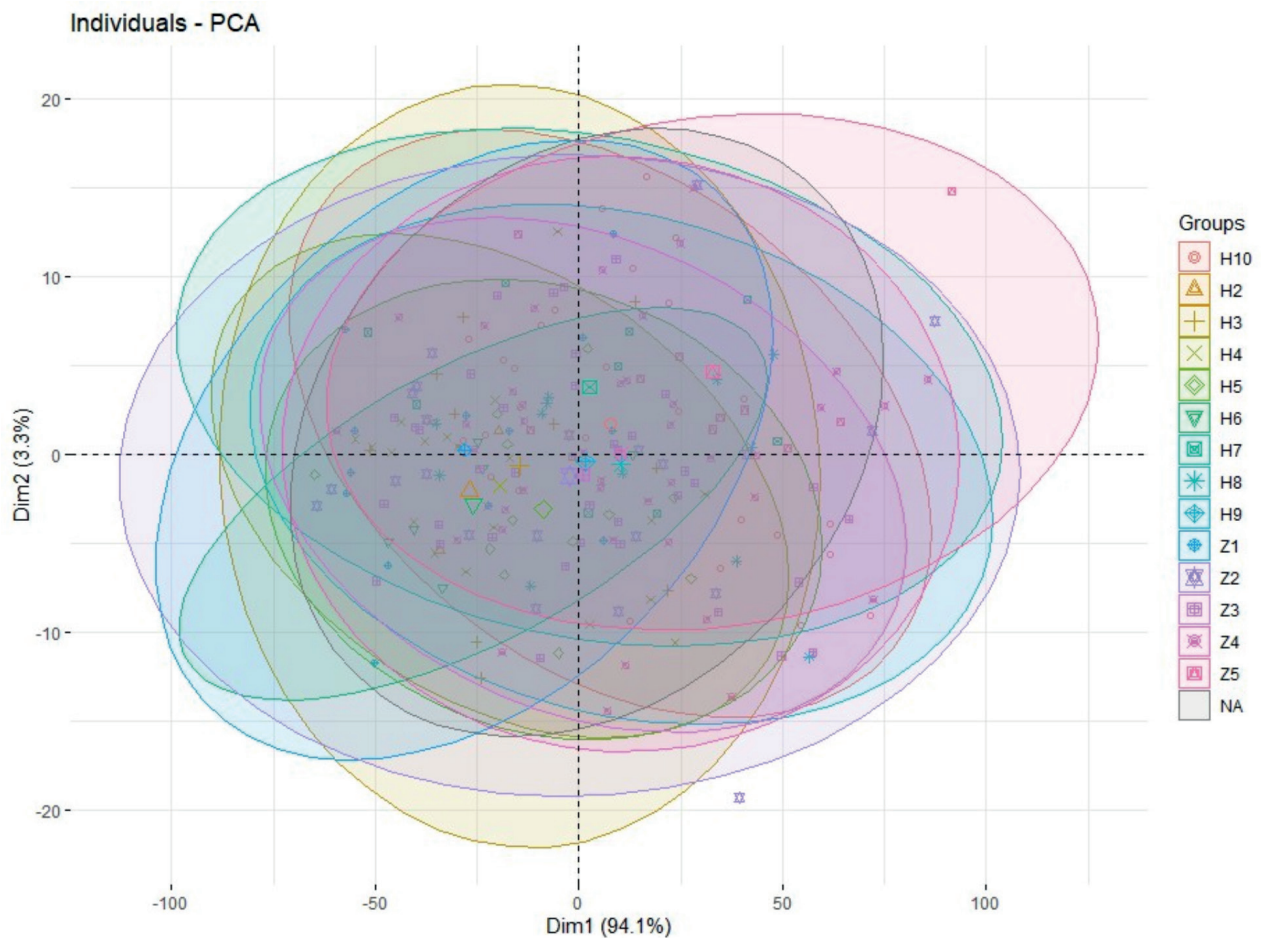


Abb. 2: Anordnung der Spektren von Torfproben mit unterschiedlichem Zersetzungsgrad im Dimensionsraum der beiden Hauptfaktoren, die bereits 97,4 % der Datensatzvarianz erklären. Die Ellipsen umschließen den Raum der von den einzelnen Zersetzungsgraden besetzten Positionen (siehe Legende).

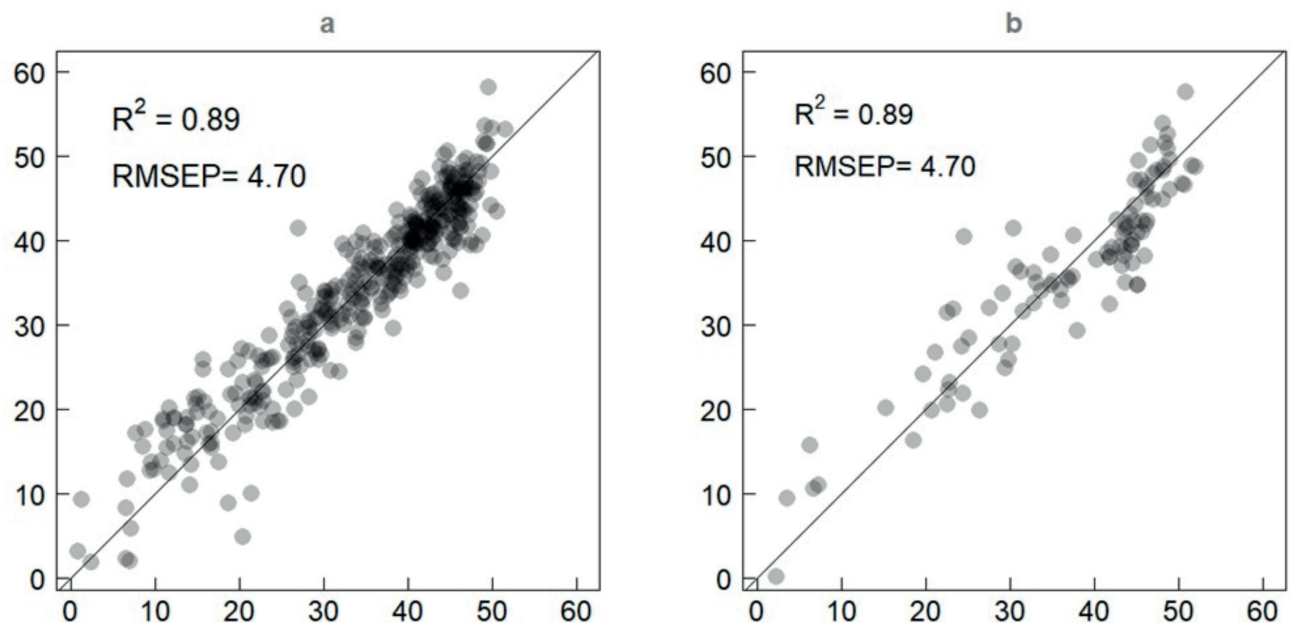


Abb. 3: Darlegung der Ergebnisse der Kalibration (a, links) sowie der Validation (b, rechts) auf das Merkmal organischer Kohlenstoffgehalt in % nach Modellbildung mittels der Partial Least Square (PLS) Regressionsanalyse bei Verwendung der kompletten, manipulierten Spektrenmatrix.

Praxis durchsetzen werden. Diese benötigen erfahrungsgemäß mehr als 5000 Referenzfälle, um valide Modelle generieren zu können. In einem ersten Testlauf (Machine Learning mit Support-Vector-Algorithmus) mit den bisher lediglich 495 Torfproben der Spektrendatenbank konnten dennoch bereits ermutigende Ergebnisse in den Bereichen mit hinreichender Klassenbesetzung erzielt werden. Daher gilt es, den eingeschlagenen Weg fortzusetzen und die Datengrundlage sukzessive zu erweitern. Dazu könnten auch länderübergreifende Kooperationen beitragen. Für den Erfolg derartiger Bestrebungen ist ein hohes Niveau (gute Reproduzierbarkeit unabhängig von Personal und Ausstattung) sowohl der Feldklassifizierung als auch der klassischen chemischen Laboranalytik vonnöten.

Anschriften der Autoren:

Dr. Jürgen Müller
Universität Rostock, Lehrstuhl für Grünland-
und Futterbauwissenschaften
Justus-von-Liebig-Weg 6
18059 Rostock

Tina Thrum,
Dr. Judith Walter,
Holger Müller,
Dr. Albrecht Bauriegel
Landesamt für Bergbau, Geologie
und Rohstoffe Brandenburg
Inselstraße 26
03046 Cottbus