

Abbildende Spektroskopie erosionsrelevanter Bodenparameter in Agrarökosystemen

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Heike Gerighausen

aus

Dresden

Bonn, 2012

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen
Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. Gutachter: Prof. Dr. Gunter Menz
2. Gutachter: Prof. Dr. Hermann Kaufmann

Tag der Promotion: 13.12.2012

Erscheinungsjahr: 2013

Diese Dissertation ist auf dem Hochschulschriftenserver der ULB Bonn unter
http://hss.ulb.uni-bonn.de/diss_online elektronisch publiziert.

Danksagung

An dieser Stelle sei allen gedankt, die zum Gelingen der vorliegenden Dissertation beigetragen haben. Mein besonderer Dank gilt allen voran Prof. Dr. Gunter Menz, der mir die Möglichkeit gab, am Geographischen Institut der Universität Bonn zu promovieren und Prof. Dr. Hermann Kaufmann für die Übernahme des Zweitgutachtens. Ihnen beiden möchte ich herzlich danken für anregende Diskussionen und kritische Anmerkungen. Prof. Dr. Hermann Kaufmann gilt mein Dank auch für die Möglichkeit, dass Spektrallabor der Sektion 1.4 am Deutschen GeoForschungszentrum (GFZ) in Potsdam für mehrere Wochen nutzen zu können.

Des Weiteren gilt mein Dank dem Deutschen Fernerkundungsdatenzentrum (DFD) des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) in Neustrelitz, an dem diese Arbeit entstand. Bedanken möchte ich mich bei der Leitung der Abteilung Nationales Bodensegment, Herrn Holger Maass, für die Bereitstellung der Infrastruktur und Ressourcen zur Erstellung dieser Arbeit und die Förderung verschiedenster Tagungsreisen. Für die Unterstützung danken möchte ich ebenso Herrn Dr. Erik Borg, meinem Betreuer am DLR. Dank gebührt nicht zuletzt auch meinen Arbeitskollegen für die Aufmunterungen während der Teepausen vor allem zu Beginn der Promotionszeit und für ihre Hilfe bei Geländearbeiten in DEMMIN. Im Besonderen danke ich Martin Bečvář und Manuel Schulz für die sehr gute Zusammenarbeit und ihre Unterstützung während der Durchführung der Feldspektroskopie auf den manchmal schier endlos erscheinenden Ackerflächen in DEMMIN. Ein besonderes Dankeschön geht an Edgar Zabel, der bei der Lösung logistischer Probleme in DEMMIN immer hilfreich zur Seite stand und als Mittelsmann zu den Landwirten agierte. Edgar möchte ich auch danken für die unkomplizierte und schnelle Bereitstellung von Bewirtschaftungsdaten aus DEMMIN.

Für die Einführung in die geometrische und atmosphärische Korrektur der Hyperspektraldaten sowie die Hilfe und Unterstützung bei der Prozessierung der Daten geht ein großes Dankeschön an Stefanie Holzwarth, Dr. Martin Bachmann, Dr. Rudolf Richter und Andreas Müller (seit 2009 Leiter der Abteilung Landoberfläche) vom Team Angewandte Spektroskopie des DFD-DLR in Oberpfaffenhofen. Die Aufenthalte in eurem Team waren immer eine Bereicherung, sowohl aus fachlicher als auch aus menschlicher Sicht. Ein spezielles Dankeschön geht an Martin für die Starthilfen bei der Programmierung in IDL und die vielen wertvollen Hinweise zur Prozessierung und Auswertung der Labor-, Feld- und Bildspektren.

Dr. Sabine Chabrilat vom GFZ gilt mein besonderer Dank für die zahlreichen Anregungen und Diskussionen zu meiner Dissertation und das stets offene Ohr und die Zeit, die sie sich bei meinen Besuchen am GFZ immer genommen hat. Bedanken möchte ich mich auch bei Dr. Sören-Nils Haubrock für fachliche Diskussionen und die Einweisung ins Spektrallabor des GFZ. Nicht zuletzt möchte ich allen Mitarbeitern aus der Sektion 1.4 des GFZ danken für die offene und sehr freundliche Aufnahme ins Team während meiner Arbeitsaufenthalte am GFZ.

Für die zuverlässige und schnelle Erledigung der Bodenlaboranalysen danke ich den Mitarbeitern des Zentrallabors am Leibnitz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung (ZALF) e.V. in Müncheberg, allen voran der Laborleiterin Frau Dagmar Schulz. Des Weiteren gilt mein Dank Herrn Dr. Gerd Böttcher vom Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern (LUNG) für das Interesse an meiner Arbeit, die kritischen Anmerkungen aus bodenkundlicher Sicht und die Bereitschaft zu einer Kooperation, ohne die die Röntgenfluoreszenzanalytik und die Röntgendiffraktometrie der Böden aus DEMMIN nicht möglich gewesen wären. Herrn Frank Idler vom LUNG danke ich für die aufschlussreichen Gespräche zur Bodenschätzung.

Abschließend möchte ich mich bei den fleißigen Korrekturlesern bedanken. Mein besonderer Dank geht an Volker, der mit seinen unermüdlichen Aufmunterungen, viel Geduld und zahllosen Diskussionen fachlicher und nicht-fachlicher Art während der letzten Jahre sehr zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat.

Abstract

Soil is the uppermost, weathered layer of the earth's crust which forms the interface of the lithosphere, biosphere, hydrosphere and atmosphere. As such, it acts as one of the major resources available to man whose conservation must be given high priority (FAO, 1982). This requires profound knowledge of its physical and chemical properties, on a local to global scale. Furthermore, there is a growing demand for precise information on soil conditions in precision farming and in the context of global warming. As CO₂ may be sequestered in agricultural soils, the interest in estimating soil carbon stocks has increased dramatically in the last years. Yet, conventional soil sampling strategies are costly, labor-intensive and time-consuming and thus can not provide detailed information on soil for large areas neither with a sufficient spatial resolution nor with an adequate temporal resolution.

Remote Sensing is a powerful tool to gather information on the earth's surface over large areas at periodic intervals. Imaging spectroscopy, sometimes referred to as hyperspectral remote sensing, acquires such data in many contiguous spectral bands. It offers a new and promising perspective for the quantitative estimation of soil parameters from space to alleviate or solve the existing soil parameter deficit.

The main objective of this study is to investigate the potential of imaging spectroscopy in the spectral range from 400nm to 2500nm for the spatial explicit estimation of physical and chemical soil properties. This was accomplished analyzing three statistical calibration methods, **C**ontinuum **R**emoval and linear regression (CR), **M**ultiple **L**inear **R**egression (MLR) and **P**artial **L**east **S**quares **R**egression (PLSR), in different measurement environments and on different spatial scales using laboratory spectroscopy (LS), field spectroscopy (FS) and image data of the airborne sensor HyMapTM (**I**maging **S**pectroscopy – **I**S) from three flight campaigns in 2004, 2005 and 2008. Research presented herein focuses on two key soil attributes, soil clay and organic carbon content, as they contribute many benefits to the soil's physical, chemical and biological properties. In addition, it is tried to derive spatially explicit information on the sand and silt fraction via intercorrelations with other soil parameters to fully describe soil texture. Finally, a potential application for soil conservation is exemplarily shown. The analysis is carried out on arable land within the test site DEMMIN (**D**urable **E**nvironmental **M**ultidisciplinary **M**onitoring **I**nformation **N**etwork), an intensively used agricultural region in the North-East of Germany.

Because LS, FS and IS were considered within this study, new insights were revealed into each of them whereupon laboratory and field experiments were particularly carried out to derive conclusions for the quantitative estimation of soil parameters using imaging spectroscopy.

Laboratory spectroscopy showed that variable soil water content decreases prediction accuracy for soil clay content no matter which calibration method is used. In contrast, prediction accuracy for soil organic carbon content is not affected as long as multivariate calibration methods (MLR, PLSR) are applied. Experiments also gave evidence that consistent rewetting of dried soil samples in the laboratory can under certain circumstances improve prediction capability for soil clay or organic carbon content. Results of the spectral mixing experiment of soil and vegetation spectra showed that more than 20% of dry vegetation critically reduces the accuracy of the predictions regardless of the calibration method and the parameter of interest. Yet in some cases by far smaller fractions of dry vegetation did strongly deteriorate estimation results. These results do not take mixtures of green and dry vegetation or variations of cover percentage into account. The spectral resolution was found to have no negative impact on soil organic carbon estimates but may increase the standard error of prediction for clay by about 15%.

Field spectroscopy revealed that the major problem for quantitative analysis of VNIR-SWIR reflectance spectra under in-situ conditions is fractions of green or dry plant material. Other confounding factors are in the order of priority variations in soil moisture, as was indicated by LS already, shadow effects due to soil roughness and changing illumination conditions.

Comparing the predictive ability of CR, MLR and PLSR with LS, FS and IS, PLSR mostly performed best. This was particularly the case with respect to disturbing factors such as variable water content or fractions of dry vegetation.

Quantitative estimates of soil parameters with imaging spectroscopy and PLSR were possible with a prediction accuracy of 1.60% to 2.34% clay and 0.161% to 0.213% organic carbon if bare soil is considered only. Strong intercorrelations between sand and clay and sand and silt rendered a prediction of spectrally non-active soil parameters in the VNIR-SWIR region possible and enabled a comprehensive description of the soil particle size fractions. Standard errors of prediction for sand ranged from 3.61% to 5.58% and for silt from 1.69% to 4.13%. With the analysis of multi-annual image data a new approach was provided to subsequently map soil parameters on agricultural fields despite long periods of vegetation coverage. This procedure will be facilitated by future hyperspectral satellite missions such as EnMAP set for launch in 2015. The spatial resolution of the soil parameter maps derived from imaging spectroscopy is by far better than those of existing soil maps from conventional soil surveys. However, prediction accuracy does not yet come up to the standard error of laboratory in conventional soil analyses. Beyond that, a thorough reexamination of accuracy of the soil maps with truly independent reference samples particularly on fields not yet sampled will be a prerequisite for the application of imaging spectroscopy in soil science. For the time being, the gain in areal coverage and spatial resolution using quantitative imaging spectroscopy has to be balanced against the required accuracy in soil conservation, precision farming or carbon sequestration studies. Using pedotransfer functions, a rapid and efficient way is provided to derive qualitative information on the within-field soil erodibility. It exemplarily illustrates the applicability of remotely sensed soil parameters for soil erosion assessment and environmental modeling in general.

Kurzfassung

Die Vielzahl der Funktionen, die der Boden in einem Ökosystem übernimmt, verleiht ihm einen hohen Stellenwert im Mensch-Umwelt-System. Der Boden landwirtschaftlicher Nutzflächen ist im Besonderen eine elementare Säule der Ernährung der Menschheit. Kenntnisse zu seiner spezifischen Ausprägung und seinen physikalisch-chemischen Eigenschaften sind von essentieller Bedeutung für den Schutz des Bodens, für die Präzisionslandwirtschaft und Fragen des globalen Klimawandels. Traditionelle Bodenbeprobungen und Standardlaboranalysen sind arbeitsaufwendig, zeit- und kostenintensiv. Der Bedarf an Bodeninformationen auf lokaler, vor allem aber auf regionaler Ebene kann durch sie nur unzureichend oder gar nicht gedeckt werden. Eine zusätzliche Erschwernis stellt die hohe räumliche und zeitliche Variabilität bestimmter Bodeneigenschaften dar, die nur durch ein sehr engmaschiges Beprobungsnetz und häufig wiederkehrende Beprobungen erfasst werden können. Die Fernerkundung ermöglicht eine systematische und regelmäßige Aufzeichnung großer Gebiete der Erdoberfläche und stellt somit eine potenzielle Alternative oder Ergänzung zur herkömmlichen Bodenparametererhebung dar. Die Hyperspektralfernerkundung, für die im englischsprachigen Raum die Bezeichnung *Imaging Spectroscopy* (Abbildende Spektroskopie) geläufig ist, hat aufgrund der sehr differenzierten Abbildung der Reflexions- und Absorptionseigenschaften der Oberfläche neue Perspektiven für die Erhebung von Bodeninformationen mit Methoden der Fernerkundung eröffnet. Diese Arbeit untersucht das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie zwischen 400nm und 2500nm zur Ableitung räumlich expliziter, quantitativer Aussagen zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften von Böden. Im Mittelpunkt des Interesses stehen der Ton- sowie der organische Kohlenstoffgehalt des Bodens. Zu diesem Zweck werden Analysen mit drei statistischen Kalibrationsverfahren, *Continuum Removal* und lineare Regression (CR), multiple lineare Regression (MLR) und *Partial Least Squares Regression* (PLSR), auf unterschiedlichen räumlichen Ebenen und in unterschiedlichen Messumfeldern mit Laborspektren (LS), Feldspektren (FS) und hyperspektralen Bilddaten (IS) des flugzeuggetragenen Sensors HyMap aus drei Befliegungskampagnen (2004, 2005, 2008) durchgeführt. Das übergeordnete Ziel dieser Analysen ist die großflächige, quantitative Erfassung erosionsrelevanter Bodenparameter in einem Agrarökosystem trotz lang andauernder Phasen der Bodenbedeckung mit Nutzpflanzen. Ferner wird eine Anwendungsmöglichkeit der fernerkundlich gewonnenen Bodeninformationen für den Bodenschutz aufgezeigt. Studienobjekt der vorliegenden Arbeit sind Böden ackerbaulich genutzter Flächen im Testfeld DEMMIN (*Durable Environmental Multidisciplinary Monitoring Information Network*), welches sich in einer stark landwirtschaftlich geprägten Region im Nordosten Deutschlands befindet. Entsprechend der dreigliederten Vorgehensweise unter Verwendung von LS, FS und IS, ergaben sich während der Auswertung neue Erkenntnisse in allen drei Teilbereichen, wobei LS und FS primär der Klärung verschiedener Sachverhalte im Hinblick auf die Abbildende Spektroskopie dienen. Mithilfe der Laborspektroskopie konnte unter anderem gezeigt werden, dass Variationen im Bodenwassergehalt unabhängig von der verwendeten Kalibrationsmethode die Vorhersagegenauigkeit für den Tongehalt senken. Die Schätzgenauigkeit des organischen Kohlenstoffgehaltes bleibt dagegen weitestgehend unberührt, wenn multivariate Kalibrationsverfahren (MLR, PLSR) verwendet werden. Eine Wiederbefeuchtung zuvor getrockneter Bodenproben auf einen einheitlichen Wassergehalt kann unter bestimmten Umständen zu einer Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit bei laborgestützten quantitativen Analysen beitragen. Ferner ergaben die Untersuchungen an spektralen Boden-Vegetationsmischungen, dass photosynthetisch nicht aktive trockene Vegetation (NPV) für die Quantifizierung der Bodenparameter in jedem Fall ab einem Anteil von etwa 20% kritisch zu sehen ist. Je nach Zielparameter und Kalibrationsmethode können starke Fehleinschätzungen aber bereits bei geringeren NPV-Anteilen auftreten. Melangen aus trockener und vitaler Vegetation sowie Variationen im Bedeckungsgrad sind hierbei nicht berücksichtigt. Durch die im Vergleich zum Spektrometer der Firma ASD Inc. (ASD, 2002) größere spektrale Bandbreite hyperspektraler Sensoren ist den Ergebnissen der Arbeit zufolge mit keiner nennenswerten Veränderung der Vorhersagegenauigkeit für den organischen Kohlenstoffgehalt zu rechnen. Bei der Quantifizierung des Tongehaltes ist im ungünstigsten Fall ein Anstieg des Standardfehlers um 15% zu erwarten.

Aus der Feldspektroskopie geht hervor, dass unter in-situ Bedingungen vor allem Pflanzenbestandteile, trockene wie vitale, die Schätzung der Bodenparameter beeinträchtigen. In Übereinstimmung mit Erkenntnissen aus der LS, sind Variationen in der Bodenfeuchte eine weitere Ursache gefolgt von rauigkeitsbedingten Schatteneffekten an der Bodenoberfläche und Änderungen in den Beleuchtungsverhältnissen.

Auf allen drei Ebenen, LS, FS und IS, erwies sich von den drei getesteten Kalibrationsverfahren die PLSR in der überwiegenden Zahl der Fälle als die beste Methode zur Schätzung der Bodenparameter. Dies gilt insbesondere in Bezug auf Störfaktoren, wie Variationen in der Bodenfeuchte oder teilweise Bedeckung des Bodens durch trockene Pflanzenbestandteile.

Die Anwendung der PLSR auf die hyperspektralen Bilddaten des Sensors HyMap ermöglichte eine differenzierte Darstellung der räumlichen Variabilität des Bodens für vegetationsfreie Böden. Mit der Analyse mehrerer Bilddatensätze aus unterschiedlichen Jahren wurde eine neue Möglichkeit präsentiert, die es trotz lang anhaltender Perioden der Vegetationsbedeckung auf landwirtschaftlichen Nutzflächen gestattet, großflächig und auf regionaler Ebene Informationen zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften der Böden bereitzustellen. Diese Vorgehensweise wird besonders vor dem Hintergrund herannahender Satellitenmissionen wie EnMAP an Bedeutung gewinnen, dessen Start für 2015 geplant ist. Die Standardfehler der Schätzung für den Tongehalt liegen zwischen 1,60% und 2,34% und für den organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens zwischen 0,161% und 0,213%. Zudem war eine umfassende Beschreibung der Korngrößenfraktion durch Interkorrelationen zwischen Sand und Ton sowie Sand und Schluff mit Standardfehlern zwischen 3,61% und 5,58% Sand sowie 1,69% und 4,13% Schluff möglich. Diese Angaben erfordern eine weitere Überprüfung mit zusätzlichen Validationsdaten, insbesondere um gesicherte Aussagen zum Fehler der Schätzung auf nicht beprobten Ackerflächen treffen zu können. Obgleich die quantitative Abbildende Spektroskopie damit derzeit noch nicht an die Genauigkeit herkömmlicher Standardlaboranalysen heranreicht, übersteigt sie die räumliche Auflösung existierender Bodenkarten um ein Vielfaches. Der Einsatz der Abbildenden Spektroskopie für die Erhebung von Bodeninformationen für den Bodenschutz, die Präzisionslandwirtschaft oder zur Bilanzierung der Kohlenstoffbestände im Boden unterliegt derzeit somit einer Abwägung zwischen den Anforderungen an die Genauigkeit und dem Zugewinn an Information in der Fläche.

Die Assimilation der fernerkundlich gewonnenen Bodenparameter in Pedotransferfunktionen ermöglichte qualitative Aussagen zur schlaginternen Differenzierung der bodenspezifischen Erodierbarkeit landwirtschaftlicher Nutzflächen, die in Entscheidungsunterstützungssystemen für eine nachhaltige Bodennutzung Verwendung finden können. Sie steht beispielhaft für Anwendungsmöglichkeiten der Fernerkundung in der Erosionsmodellierung im Speziellen und für Prozessmodelle im Allgemeinen.

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	IV
Tabellenverzeichnis.....	XII
Abkürzungsverzeichnis	XIV
1 Einführung	1
2 Stand der Forschung	5
2.1 Quantitative Labor- und Feldspektroskopie von Böden	5
2.2 Quantitative Abbildende Spektroskopie von Böden	8
2.3 Methoden in der quantitativen Spektroskopie von Bodenparametern	9
2.4 Abbildende Spektroskopie für den Bodenschutz	10
3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit.....	12
3.1 Zielsetzung.....	12
3.2 Aufbau der Arbeit	13
4 Grundlagen der Spektroskopie und Bodenerosion	16
4.1 Spektroskopie und Fernerkundung	16
4.1.1 Begriffsklärung und Definition.....	16
4.1.2 Physikalische Grundlagen.....	16
4.1.3 Reflexionseigenschaften ausgewählter Oberflächen.....	22
4.1.4 Abbildende spektrometrische Aufnahmesysteme	27
4.2 Bodenerosion	29
4.2.1 Definition	29
4.2.2 Prozesse der Ablösung und des Transports.....	29
4.2.3 Einflussfaktoren der Bodenerosion	31
5 Untersuchungsgebiet: Testfeld DEMMIN	33
5.1 Lage und naturräumliche Gegebenheiten.....	33
5.1.1 Geologie und Boden	33
5.1.2 Klima und Vegetation	35
5.2 Aktuelle Landnutzung und Bodenbearbeitung.....	35
5.3 Folgen und Risiken der landwirtschaftlichen Nutzung	37
6 Datenerhebung und Methodik	38
6.1 Quantitative Referenzanalytik.....	38
6.1.1 Probenahme im Gelände	38
6.1.2 Laboranalytik	38
6.2 Labor- und Feldspektroskopie	40
6.2.1 Verwendete Spektrometer.....	40
6.2.2 Laborspektroskopie.....	41
6.2.3 Feldspektroskopie	42
6.2.4 Vorverarbeitung der Spektren und Datentransformation	42
6.3 Abbildende Spektroskopie	44

6.3.1	Verwendete Bilddatensätze.....	44
6.3.2	Radiometrische Korrektur.....	44
6.3.3	Atmosphärenkorrektur.....	46
6.3.4	Geometrische Korrektur.....	46
6.3.5	Extraktion von Bildspektren.....	47
6.4	Quantitative Spektroskopie.....	47
6.4.1	Continuum Removal und lineare Regression.....	47
6.4.2	Multiple Lineare Regression.....	49
6.4.3	Partial Least Squares Regression.....	51
6.4.4	Fehlergrößen zur Beurteilung der Modellgüte.....	54
6.5	Abschätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit.....	56
7	Ergebnisse.....	60
7.1	Referenzanalytik.....	60
7.1.1	Physikalisch-chemische Eigenschaften.....	60
7.1.2	Mineralogische Zusammensetzung.....	63
7.2	Visuelle Auswertung der Labor-, Feld- und Bildspektren.....	65
7.2.1	Charakteristik der Laborspektren hinsichtlich der Tonmineralogie.....	65
7.2.2	Charakteristik der Laborspektren hinsichtlich organischer Bodensubstanz.....	66
7.2.3	Auswirkungen der Bodenfeuchte auf das Reflexionsvermögen.....	67
7.2.4	Spektrale Charakteristik der Referenzpunkte in den HyMap-Bilddaten.....	70
7.2.5	Vergleich der Laborspektren mit den Feld- und Bildspektren.....	71
7.3	Abschätzung methodenbedingter Fehler in den Labor-, Feld- und Bildspektren.....	72
7.3.1	Aspekte der Laborspektroskopie.....	72
7.3.2	Aspekte der Feldspektroskopie.....	74
7.3.3	Aspekte der Abbildenden Spektroskopie.....	76
7.4	Voruntersuchungen zu den Modellkalibrationen.....	77
7.5	Quantitative Laborspektroskopie.....	78
7.5.1	Modellkalibration und -validation: Fokus Bodenwassergehalt.....	79
7.5.2	Modellkalibration und -validation: Fokus spektrale Auflösung.....	91
7.5.3	Modellkalibration und -validation: Tonmineralgehalt versus physikalische Tonfraktion.....	93
7.5.4	Modellkalibration und -validation: Fokus Vegetation.....	95
7.6	Quantitative Feldspektroskopie.....	98
7.6.1	Modellkalibration und -validation mit Feldspektren des gesamten Testfeldes DEMMIN.....	98
7.6.2	Modellkalibration und -validation mit Feldspektren der Bodenserie Buchholz....	102
7.7	Quantitative Abbildende Spektroskopie.....	106
7.7.1	Selektion von HyMap-Bildspektren für die Modellkalibration und -validation....	106
7.7.2	Modellkalibration und -validation mit den HyMap-Daten von 2005.....	107
7.7.3	Selektion einer Kalibrationsmethode.....	110
7.7.4	Modellkalibration und -validation mit den HyMap-Daten von 2004 und 2008....	111
7.7.5	Modellkalibration und -validation mit spektral nicht aktiven Bodeneigenschaften.....	113
7.8	Räumlich explizite Schätzung der Bodenparameter mit Bilddaten aus mehreren Jahren...	117
7.8.1	Detektion vegetationsfreier Ackerflächen.....	117
7.8.2	Räumlich explizite Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes....	118
7.8.3	Räumlich explizite Schätzung spektral nicht aktiver Bodenparameter.....	123
7.9	Assimilation der Bodenparameterschätzungen in Pedotransferfunktionen.....	124

8	Diskussion	131
8.1	Quantitative Analyse von Bodenparametern mit labor- und feldspektroskopischen Verfahren	131
8.1.1	Modellfehler und -qualität im Vergleich zu anderen Arbeiten	131
8.1.2	Effekte des Bodenwassergehaltes	132
8.1.3	Effekte der spektralen Auflösung	137
8.1.4	Rückschlüsse aus der Feldspektroskopie	138
8.2	Räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern mit der Abbildenden Spektroskopie.....	142
8.2.1	Modellfehler und -qualität im Vergleich zu existierenden Arbeiten	142
8.2.2	Auswertung mehrjähriger Bilddaten für die räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern – Möglichkeiten und Grenzen	144
8.2.3	Validität der Bodenparameterschätzungen im Raum.....	146
8.2.4	Stabilität der Kalibrationsmodelle	150
8.2.5	Vergleich traditioneller Bodenkarten mit den räumlich expliziten Schätzungen aus der Abbildenden Spektroskopie	151
8.3	Welche Kalibrationsmethode ?	153
8.4	Quantitative Reflexionsspektroskopie - eine Alternative zu Standardlaboranalysemethoden ?.....	156
8.5	Das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie für den Bodenschutz	159
9	Zusammenfassung und Ausblick	162
	Literatur	168
	Anhang	187
	Eidesstattliche Erklärung	219
	Lebenslauf	221

Abbildungsverzeichnis

Abb. 3.2.1:	Übersicht zur Vorgehensweise in der Arbeit, den verwendeten Datensätzen, Methoden und Modellen sowie den zusätzlich betrachteten Kriterien. In geschweiften Klammern sind die Nummern der entsprechenden Ergebniskapitel aufgeführt.	15
Abb. 4.1.1:	Energiespektrum der Sonne und Absorptionsbanden der Erdatmosphäre mit den absorbierenden Elementen (Kronberg, 1985).....	19
Abb. 4.1.2:	Spektrale Signaturen für eine Auswahl geologischer Materialien (Elachi, 1987).....	22
Abb. 4.1.3:	Repräsentative Boden-Reflexionsspektren fünf mineralischer Böden: (A) organisch dominiert (OM=5,61%, schluffig-toniger Lehm, $Fe_xO_x=0,76\%$), (B) geringfügig entwickelt (OM=0,59%, lehmiger Feinsand, $Fe_xO_x=0,03\%$), (C) Eisen beeinträchtigt (OM=1,84%, schluffig-toniger Lehm, $Fe_xO_x=3,68\%$), (D) Organisch beeinträchtigt (OM=3,61%, feinsandiger Lehm, $Fe_xO_x=0,81\%$), (E) Eisen dominiert (OM=2,28%, Ton, $Fe_xO_x=25,6\%$) (Stoner & Baumgardner, 1981).....	23
Abb. 4.1.4:	Reflexionsspektren der Mischreihe Kaolinit – Smektit (Hauff et al., 1990).	23
Abb. 4.1.5:	Reflexionsspektren der Tonminerale Kaolinit, Montmorillonit, Illit, Nontronit und Hectorit und Absorption durch Vibration (-OH, H ₂ O) und Elektronentransfer (Fe^{2+} , Fe^{3+}) (zusammengestellt nach Clark et al., 1990; Hunt & Salisbury, 1970; Clark, 1999). Die Spektren sind der Spektralbibliothek von Clark et al. (1993) entnommen.	24
Abb. 4.1.6:	Typische Spektren vitaler, photosynthetisch aktiver und trockener, photosynthetisch nicht aktiver Vegetation (eigene Feldmessung). Vitale Vegetation: Winterweizen, trockene Vegetation: Winterweizenstopeln. Wasserabsorptionsbanden sind interpoliert.	27
Abb. 4.2.1:	Typische Infiltrationsraten für verschiedene Böden (nach Withers & Vipond (1974); verändert).....	31
Abb. 4.2.2:	Ablösbarkeit und Transportierbarkeit von Bodenbestandteilen in Abhängigkeit von ihrer Teilchengröße (Auerswald, 1998).....	31
Abb. 4.2.3:	Faktoren der Bodenerosion.....	32
Abb. 5.1.1:	Lage des Testfeldes DEMMIN und seiner landwirtschaftlichen Nutzflächen nahe der Stadt Demmin im NO Deutschlands. Das schwarze Polygon kennzeichnet die maximale Ausdehnung der HyMap-Überflüge von 2004, 2005 und 2008. Die schwarzen Kreise markieren die Standorte der bodengestützten Referenzmessungen. Die Flags geben die Lokation ausgewählter Felder (naheliegende Ortschaft) an: blauer Flag – Marienfelde (vgl. Abb. 7.8.4), grüner Flag – Schmarsow Nord (vgl. Abb. 8.2.2), rote Flags – Heydenhof (nördlich), Alt Tellin (südlich) (vgl. Abb. 7.8.3, Abb. 7.8.5, Abb. 8.2.3, Abb. 8.5.1).	34
Abb. 6.2.1:	Messaufbau für die Laborspektroskopie und Beispiel einer aufbereiteten Bodenprobe mit vier unterschiedlichen Bodenwassergehalten.	41
Abb. 6.3.1:	CIR-Darstellung der mosaikierten HyMap-Datensätze vom 09.08.2004 (links), 27.05.2005 (mitte) und 29.07.2008 (rechts) für das Testfeld DEMMIN.....	45
Abb. 6.4.1:	Parametrisierung der Absorptionstiefe für organischen Kohlenstoff (a) und Ton (b). Die Abbildung links illustriert das gesamte Reflexionsspektrum von 400nm bis 2450nm. Die Abbildungen (a) und (b) enthalten die normierten Reflexionsspektren in den gekennzeichneten Spektralbereichen (Boxen). Dargestellt ist das Spektrum eines humusarmen, tonreichen Bodens (rote Linie) und eines humusreichen, tonarmen Bodens (schwarze Linie).....	48

Abb. 6.4.2:	Schematische Darstellung der PLS1 und der beteiligten Matrizen. Zur Erklärung der Variablen siehe Text (nach Kessler, 2007; verändert).....	52
Abb. 7.1.1:	Box-Whisker-Plot der physikalisch-chemischen Eigenschaften der <i>Bodenserie Demmin</i>	61
Abb. 7.1.2:	Bodenarten nach KA4 (AG Boden, 1994) der <i>Bodenserie Demmin</i> (Ls3,Ls4,Lt2,Lts,Sl2,Sl3,Sl4,Ss,Su2,Su3).....	62
Abb. 7.1.3:	a) Zusammenhang zwischen den mittels Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) und Königswasseraufschluss (KWA) ermittelten Eisenkonzentrationen (Fe ₂ O ₃); b) Zusammenhang zwischen den mittels trockener Veraschung im Elementanalysator vario EL und im Elementanalysator CNS-2000 bestimmten Konzentrationen an Gesamtkohlenstoff (TC).....	62
Abb. 7.1.4:	Mineralogische Zusammensetzung der <i>Bodenserie Buchholz</i> im Feinboden (Berechnung der Mineralanteile: G. Böttcher, LUNG, schriftl. Mitteilung, 2008). Bodenarten angegeben nach KA4 (AG Boden, 1994).....	63
Abb. 7.1.5:	Zusammenhang zwischen der physikalischen Tonfraktion (Korngrößenanalyse nach Köhn, 1928) und dem Tonmineralgesamtgehalt (RDA) (a) sowie zwischen dem Calcitgehalt (RDA), angegeben in Carbonat-Kohlenstoff (IC), und dem mittels Phosphorsäurezerersetzung in einer Gasanalysen-Messanlage bestimmten IC-Gehalt (Carmhomat) (b).....	64
Abb. 7.2.1:	Laborspektren ausgewählter Bodenproben (getrocknet bei 105°C) des Testfeldes DEMMIN mit unterschiedlichen Tongehalten. a) Reflektanzen (400-2500nm), b) <i>continuum removed</i> Spektren (400-2500nm), c) <i>continuum removed</i> Spektren zwischen 2125-2400nm, d) <i>continuum removed</i> Spektren zwischen 400-1400nm. Stoffkonzentration der Bodenproben: MP-Nr. 50 (cyan): 4,98% Ton, 0,833% OC, 0,92% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 76 (blau): 17,25% Ton, 1,222% OC, 1,77% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 27 (grün): 23,07% Ton, 1,690% OC, 2,07% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 28 (rosa): 28,36% Ton, 1,686% OC, 2,37% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 502 (rot): 32,95% Ton, 2,119% OC, 2,98% Fe ₂ O ₃	66
Abb. 7.2.2:	Laborspektren ausgewählter Bodenproben (getrocknet bei 105°C) des Testfeldes DEMMIN mit unterschiedlichem organischen Kohlenstoffgehalt. a) Reflektanzen (400-2500nm), b) <i>continuum removed</i> Spektren zwischen 400-1400nm. Stoffkonzentration der Bodenproben: MP-Nr. 300 (cyan): 4,80% Ton, 0,525% OC, 0,82% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 53 (blau): 3,65% Ton, 0,919% OC, 0,66% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 28 (rosa): 28,36% Ton, 1,686% OC, 2,37% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 21 (rot): 31,94% Ton, 2,217% OC, 2,51% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 502 (grau, strichpunkt): 32,95% Ton, 2,119% OC, 2,98% Fe ₂ O ₃ ; MP-Nr. 503 (grau, strich): 28,52% Ton, 2,205% OC, 2,57% Fe ₂ O ₃	67
Abb. 7.2.3:	Mittelwert aller Reflexionsspektren (links) sowie Mittelwert der ersten Ableitung der Absorptionsspektren (rechts) des Testfeldes DEMMIN (<i>Bodenserie Demmin</i>) im getrockneten Zustand und nach gezielter Wiederbefeuchtung bei einem gravimetrischen Wassergehalt (θ) von 7,2M.-%, 10,0M.-% und 13,0M.-%.....	67
Abb. 7.2.4:	Laborspektren eines sandig-tonigen Bodens (Ton=26,68%, OC=1,732%), der in 8 unterschiedlichen Bodenwassergehalten gemessen wurde. Der Bodenwassergehalt [M.-%] der Proben ist auf der rechten Seite des Diagramms angegeben.....	68
Abb. 7.2.5:	Ausprägung der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm und 662nm in Abhängigkeit vom Bodenwassergehalt (otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-% Wasser). Schwarze Symbole symbolisieren den Mittelwert der Absorptionstiefe über alle 135 Böden der <i>Bodenserie Demmin</i> . Die vertikalen Fehlerbalken indizieren die Standardabweichung (SD). Grüne Symbole kennzeichnen die Charakteristik der Bodenprobe mit der kleinsten Absorptionstiefe im getrockneten Zustand (ton- bzw. humusarmer Boden). Rote	

	Symbole kennzeichnen die Charakteristik der Bodenprobe mit der größten Absorptionstiefe im getrockneten Zustand (ton- bzw. humusreicher Boden).	69
Abb. 7.2.6:	Absolute Differenz der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm (a) und 662nm (b) der Bodenproben im getrocknetem Zustand (otro) und bei einem Wassergehalt (θ) von 7,2M.-% sowie bei θ von 7,2M.-% und 13,0M.-%.	69
Abb. 7.2.7:	NDVI-CAI-Diagramm der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008 aller Messpunkte mit Bodenreferenzdaten (<i>Bodenserie Demmin</i> , $n_{\text{ges.}}=135$). Wellenlängen für die Berechnung des NDVI (2004/ 2005/ 2008): Rot=679,8/ 679,0/ 677,3nm; NIR=800,7/ 800,3/ 806,3nm. Wellenlängen für die Berechnung des CAI (2004/ 2005/ 2008): $\rho(2000\text{nm}) = 2028,0/2028,7/2027,2\text{nm}$; $\rho(2100\text{nm}) = 2100,8/2101,7/2102,0\text{nm}$; $\rho(2200\text{nm}) = 2205,1/2207,4 /2209,4\text{nm}$	70
Abb. 7.2.8:	Reflektanz (a,b) und 1.Ableitung der Reflektanz (c,d) für zwei ausgewählte Böden, aufgezeichnet durch den HyMap-Sensor am 27.05.2005 sowie mit dem ASD-Spektrometer im Labor und während der Messkampagne im Gelände im September 2006. Wasserabsorptionsbanden sind ausmaskiert.	72
Abb. 7.3.1:	Standardabweichung der Spektren befeuchteter Proben (jeweils drei pro Wassergehalt) als Funktion der Wellenlänge. Die Position der Maxima der einzelnen Proben für $\lambda[400\text{nm}, 2400\text{nm}]$ ist durch rote vertikale Balken gekennzeichnet.	74
Abb. 7.3.2:	Oberflächenbeschaffenheit verschiedener Messpunkte bei den Geländearbeiten im Testfeld DEMMIN. Zum Größenvergleich der Aggregate dient ein Edding (Länge ca. 14cm) sowie ein Zollstock (Länge ca. 24cm).	75
Abb. 7.3.3:	Quotient der Spektren vom Mai 2006 und September 2006 für die <i>Bodenserie Buchholz</i> als Funktion der Wellenlänge (Mittelwert: schwarze Linie, \pm SD: rote Linie). Wasserabsorptionsbanden sind ausmaskiert.	75
Abb. 7.3.4:	Vergleich der ASD-Feldspektren einer Parkfläche im Testfeld (2004) mit den gemittelten HyMap-Bildspektren dieser Fläche von 2004, 2005 und 2008. Weitere Erklärungen siehe Text.	76
Abb. 7.3.5:	Quotient zweier Bildspektren identischer Bildpunkte im Überlappungsbereich der HyMap-Streifen für unbedeckten Boden (links) und Asphalt (Flugplatzlandebahn, rechts).	77
Abb. 7.3.6:	Variation der Oberflächenreflektanzen bei 543,3nm in <i>across-track</i> Richtung in zwei benachbarten Flugstreifen der Bilddaten vom 09.08.2004 und Vergleich der Aufnahmekonstellation der HyMap-Überflüge von 2004, 2005 und 2008.	77
Abb. 7.5.1:	Vergleich der Modellgüte (R^2 , SEC, SEP) für die Schätzung des Tongehaltes aus Laborspektren der Bodenproben im getrockneten Zustand (otro), mit Bodenwassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).	81
Abb. 7.5.2:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Bodenspektren geschätzten Tongehalte der Bodenproben des Testfeldes DEMMIN für unterschiedliche Bodenwassergehalte (zeilenweise). Abb.a-e: CR, Abb.f-j: MLR, Abb.k-o: PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (\times), Validationsdatensatz: rote Symbole (+). SEC und SEP sind in [%] angegeben.	82
Abb. 7.5.3:	Standardisierte b-Koeffizienten (a) und <i>Variable Importance in the Projection</i> (VIP) (b) der PLSR-Modelle für Ton mit Bodenproben unterschiedlichen Wassergehaltes. Anzahl der PLS-Faktoren in Klammern. Grau-kolorierte Wellenlängen in Abbildung b) sind potentielle Absorptionsbereiche von Tonmineralen. Wasserabsorptionsbanden sind maskiert. Weitere Erklärungen siehe Text.	83

Abb. 7.5.4:	Streudiagramm der X1-Y-Scores (a) und Streudiagramm der X1-X3-Scores (b) des PLSR-Modells zur Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Laborspektren der Bodenproben mit variablen Wassergehalten (mix).....	84
Abb. 7.5.5:	X-Variablen (Wellenlängen) der MLR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt (links) und Varianzinflationsfaktoren (VIF) (rechts).....	84
Abb. 7.5.6:	Zusammenhang zwischen der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm und dem Tongehalt des Bodens bei unterschiedlichen Wassergehalten. otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%, mix: variierende Wassergehalte zwischen 0,0-13,0M.-%. Symbole: (×) Proben des Kalibrationsdatensatzes, (+) Proben des Validationsdatensatzes.....	85
Abb. 7.5.7:	Standardabweichung (SD) der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm der Bodenspektren der <i>Bodenserie Demmin</i> ($n_{ges.}=135$) gruppiert nach Tongehaltsskassen. Für die Klassen mit nur einer Bodenprobe bzw. einem Bodenspektrum ist die Standardabweichung null.....	86
Abb. 7.5.8:	Vergleich der Modellgüte (R^2 , SEC, SEP) für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes aus Laborspektren der Bodenproben im getrockneten Zustand (otro), mit Bodenwassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).....	86
Abb. 7.5.9:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Bodenspektren geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte der Bodenproben des Testfeldes DEMMIN für unterschiedliche Bodenwassergehalte (zeilenweise). Abb.a-e: CR, Abb.f-j: MLR, Abb.k-o: PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+). SEC und SEP sind in [%] angegeben.....	88
Abb. 7.5.10:	Standardisierte b-Koeffizienten (a) und <i>Variable Importance in the Projection</i> (VIP) (b) der PLSR-Modelle für organischen Kohlenstoff mit Bodenproben unterschiedlichen Wassergehaltes. Anzahl der PLS-Faktoren in Klammern. Wasserabsorptionsbanden sind maskiert.....	89
Abb. 7.5.11:	<i>Akaike Information Criterion</i> (AIC) der PLSR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).....	90
Abb. 7.5.12:	X-Variablen (Wellenlängen) der MLR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt (links) und Varianzinflationsfaktoren (VIF) (rechts).....	90
Abb. 7.5.13:	Zusammenhang zwischen der Absorptionstiefe (D) nahe 662nm und dem organischen Kohlenstoffgehalt (OC) des Bodens bei unterschiedlichen Wassergehalten. otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%, mix: variierende Wassergehalte zwischen 0,0-13,0M.-%. Symbole: (×) Proben des Kalibrationsdatensatzes, (+) Proben des Validationsdatensatzes.....	91
Abb. 7.5.14:	Standardabweichung (SD) der Absorptionstiefe (D) nahe 662nm der Bodenspektren der <i>Bodenserie Demmin</i> ($n_{ges.}=135$) gruppiert nach Kohlenstoffklassen. Für Klassen mit nur einer Bodenprobe bzw. einem Bodenspektrum ist die Standardabweichung null.....	92
Abb. 7.5.15:	Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten organischen Kohlenstoffgehalten für die MLR-Modelle mit unterschiedlichen spektralen Auflösungen a) FWHM=10nm, b) HyMap-Konfiguration, c) FWHM=20nm.....	93
Abb. 7.5.16:	VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Kalibrationen für die Regression auf die Tonmineralgesamtsumme (TMG) (a) und die	

	physikalische Tonfraktion (TF) (b). Die schwarzen Balken im unteren Drittel der Diagramme kennzeichnen die selektierten Wellenlängen der MLR-Modelle.....	95
Abb. 7.5.17:	Lineare spektrale Mischung erzeugt aus Boden und photosynthetisch nicht-aktiver Vegetation (NPV) am Beispiel eines ton- und humusreichen Bodens (31,94% Ton, 2,22% OC). Die Abbildung links stellt das gesamte Spektrum zwischen 400-2450nm dar. Die Abbildungen a) und b) beinhalten die normierten Spektren (<i>continuum removed</i>) für die Absorptionsbande von Ton nahe 2200nm (a) und die Absorption von OC im VNIR (b). Die Berechnung der spektralen Mischungen erfolgte in 10%-Schritten.....	96
Abb. 7.5.18:	Relative mittlere Absorptionstiefe (AD) für Ton und OC bezogen auf die AD für reinen Boden (100%) in Abhängigkeit vom Boden- bzw. Vegetationsanteil (NPV).	97
Abb. 7.5.19:	Validationsfehler (SEP) der Kalibrationsmodelle mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro) für Ton (a) und OC (b) in Abhängigkeit vom Boden- bzw. Vegetationsanteil in den linearen spektralen Mischungen (Boden-NPV). MLR: multiple lineare Regression, CR: <i>Continuum Removal</i> , PLSR: <i>Partial Least Squares Regression</i>	97
Abb. 7.6.1:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Feldspektren der <i>Bodenserie Demmin_Feld</i> geschätzten Tongehalte für die Kalibrationen Sept_Demmin mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).	100
Abb. 7.6.2:	Streudiagramm der X1-Y-Scores (a) sowie der X1-X3-Scores (b) des PLSR-Modells zur Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Feldspektren (Sept_Demmin, $n_{ges.}=129$).	100
Abb. 7.6.3:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Feldspektren der <i>Bodenserie Demmin_Feld</i> geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte (OC) für die Kalibrationen Sept_Demmin mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).	101
Abb. 7.6.4:	VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Modelle auf Basis der Feldspektren des gesamten Testfeldes (Sept_Demmin, $n_{ges.}=129$) zur Schätzung des Tongehaltes (a) sowie des organischen Kohlenstoffgehaltes (b). Die schwarzen Balken im unteren Drittel der Diagramme kennzeichnen die selektierten Wellenlängen der entsprechenden MLR-Modelle.	102
Abb. 7.6.5:	Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten Tongehalten auf Basis der Feldspektren für die PLSR-Kalibrationen Sept_Buchholz und Mai_Buchholz. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).	104
Abb. 7.6.6:	VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Kalibrationen zur Schätzung des Tongehaltes mit den Feldspektren der <i>Bodenserie Buchholz</i> vom September (Sept_Buchholz) (a) und vom Mai (Mai_Buchholz) (b).	104
Abb. 7.6.7:	Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten organischen Kohlenstoffgehalten (OC) auf Basis der Feldspektren für die PLSR-Modelle Sept_Buchholz und Mai_Buchholz. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).	105
Abb. 7.6.8:	VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Kalibrationen zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit den Feldspektren der <i>Bodenserie Buchholz</i> vom September (Sept_Buchholz) (a) und vom Mai (Mai_Buchholz) (b).	106
Abb. 7.7.1:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 27.05.2005 geschätzten Tongehalte für die Kalibrationen mit a) CR, b) MLR	

	und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+)	108
Abb. 7.7.2:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 27.05.2005 geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte für die Kalibrationen mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+)	109
Abb. 7.7.3:	VIP (schwarze Symbole) und b-Koeffizienten (graue Symbole) der PLSR-Kalibrationen mit Bildspektren der HyMap-Daten vom 27.05.2005 zur Schätzung des a) Ton- und des b) organischen Kohlenstoffgehaltes (OC). Die schwarzen Balken im unteren Drittel der Diagramme kennzeichnen die selektierten Wellenlängen der entsprechenden MLR-Modelle.....	110
Abb. 7.7.4:	RPD der Modelle zur Schätzung der Tongehaltes (links) und des organischen Kohlenstoffgehaltes (rechts). Modellindex für Ton: (1) Labor (otro, $n_{ges.}=135$), (2) Labor (feu2, $n_{ges.}=135$), (3) Labor (feu3, $n_{ges.}=135$), (4) Labor (feu4, $n_{ges.}=135$), (5) Labor (mix, $n_{ges.}=135$), (6) Labor (TF, $n_{ges.}=43$), (7) Feld Sept_Demmin ($n_{ges.}=129$), (8) HyMap_2005 ($n_{ges.}=67$); Modellindex für OC: (1) Labor (otro, $n_{ges.}=135$), (2) Labor (feu2, $n_{ges.}=135$), (3) Labor (feu3, $n_{ges.}=135$), (4) Labor (feu4, $n_{ges.}=135$), (5) Labor (mix, $n_{ges.}=135$), (6) Feld Sept_Demmin ($n_{ges.}=129$), (7) HyMap_2005 ($n_{ges.}=67$).	110
Abb. 7.7.5:	Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004 und 29.07.2008 geschätzten Tongehalte (a,b) und OC-Gehalte (c,d) für die PLSR-Kalibrationen HyMap_2004 und HyMap_2008.	112
Abb. 7.7.6:	VIP (schwarze Symbole) und b-Koeffizienten (graue Symbole) der PLSR-Kalibrationen auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004 und 29.07.2008 zur Schätzung des Tongehaltes (a,b) und des organischen Kohlenstoffgehaltes (c,d).....	113
Abb. 7.7.7:	Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten Sandgehalten (a-c) bzw. Schluffgehalten (d-f) auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008 für die PLSR-Kalibrationen HyMap_2004, HyMap_2005 und HyMap_2008. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+)	115
Abb. 7.7.8:	VIP (schwarze Symbole) und b-Koeffizienten (graue Symbole) der PLSR-Kalibrationen zur Schätzung der Sandfraktion (a-c) und der Schlufffraktion (d-f) aus den Bildspektren der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008.	116
Abb. 7.8.1:	Karte des Tongehaltes im Oberboden für landwirtschaftliche Nutzflächen im Testfeld DEMMIN geschätzt mittels PLSR auf Basis der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005, 29.07.2008. Karte A: Tongehalt [%], Karte B: feld-spezifische Angabe der Modellgüte nach Chang et al. (2001), Karte C: feld-spezifische Datengrundlage.	119
Abb. 7.8.2:	Karte des organischen Kohlenstoffgehaltes im Oberboden für landwirtschaftliche Nutzflächen im Testfeld DEMMIN geschätzt mittels PLSR auf Basis der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005, 29.07.2008. Karte A: organischer Kohlenstoffgehalt [%], Karte B: feld-spezifische Angabe der Modellgüte nach Chang et al. (2001), Karte C: feld-spezifische Datengrundlage.	120
Abb. 7.8.3:	Räumlich explizite Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes (OC) mittels PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof basierend auf HyMap-Daten vom 27.05.2005 (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1).	121
Abb. 7.8.4:	Differenzenbild der Parameterschätzung für den Ton- und organischen Kohlenstoffgehalt auf Basis der HyMap-Bilddaten von 2004 und 2005 und unter Einsatz der PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Marienfelde (siehe blauer Flag in Abb. 5.1.1).....	122

Abb. 7.8.5:	Räumlich explizite Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes mittels PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Alt Tellin basierend auf den HyMap-Daten vom 27.05.2005 (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1).	123
Abb. 7.9.1:	Häufigkeitsverteilung der gesättigten Wasserleitfähigkeit (k_f) geschätzt mit 6 verschiedenen Pedotransferfunktionen auf Basis der PLSR-Schätzungen des Ton-, Sand-, Schluff- und OC-Gehaltes aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 und 2008.	125
Abb. 7.9.2:	Mittlerer geometrischer Fehlerquotient (GMER) für den paarweisen Vergleich der PTF in Abhängigkeit von der Trockenrohdichte (ρ_t). a) Veränderung des GMER für k_f nach Brakensiek et al. (1984). b) Veränderung des GMER für k_f nach Vereecken et al. (1990). c) Veränderung des GMER für k_f nach Jabro (1992). ε ist der Fehlerquotient (vgl. Glg. 6.5.11).	127
Abb. 7.9.3:	Einfluss des Sand- und Tongehaltes auf die Schätzung von k_f für typische Böden des Testfeldes DEMMIN. a) Einfluss des Sandgehaltes auf die Höhe von k_f für einen Boden mit 11,50% Ton und 0,94% OC. b) Einfluss des Tongehaltes auf die Höhe von k_f für einen Boden mit 63,59% Sand, 25,96% Schluff und 0,94% OC. Die bodenphysikalischen- und chemischen Eigenschaften wurden in Anlehnung an die statistischen Kennwerte der <i>Bodenserie Demmin</i> gewählt (Median).	127
Abb. 7.9.4:	Mittlerer geometrischer Fehlerquotient (GMER) bei Berücksichtigung des maximalen Standardfehlers der Modellschätzungen (\pm SEP bzw. SEC) des Ton-, Sand-, Schluff- bzw. organischen Kohlenstoffgehaltes aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 bzw. 2008 bei der Schätzung von k_f	128
Abb. 7.9.5:	Räumliche Struktur der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f für ein Feld nahe der Ortschaft Alt Tellin (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1). k_f ist normalisiert auf den Wertebereich [0,1] nach Gleichung 6.5.14.	129
Abb. 7.9.6:	Räumliche Struktur der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f für ein Feld östlich der Ortschaft Heydenhof (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1). k_f ist normalisiert auf den Wertebereich [0,1] nach Gleichung 6.5.14.	130
Abb. 8.1.1:	Standardabweichung (SD) der Reflektanz als Funktion der Wellenlänge für die Spektren der getrockneten (otro) Proben der <i>Bodenserie Demmin</i> und die Spektren der Proben mit variablen Wassergehalten zwischen 0,0M.-% und 13,0M.-% (mix). Bereiche der Wasserabsorption sind grau unterlegt und wurden nicht in der Modellkalibrierung verwendet.	134
Abb. 8.1.2:	Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit PLSR und Bodenproben variabler Bodenwassergehalte (mix), gruppiert entsprechend dem Sand- bzw. dem Eisengehalt im Boden. a,c) PLSR mit Böden geringer Sand- bzw. Eisengehalte. b,d) PLSR mit Böden hoher Sand- bzw. Eisengehalte. Teilung des Datensatzes am Medianwert des Bodenparameters (Median _{Sand} : 63,59%; Median _{Fe₂O₃} : 1,36%). Das PLSR-Modell mit Fe ₂ O ₃ < 1,36% ist bereinigt um einen Ausreißer (MP70).	136
Abb. 8.1.3:	Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm als Funktion des Celluloseabsorptionsindex (CAI) für die Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit 10,0M.-% Wasser (feu3) und die Feldspektren. Weitere Erklärungen siehe Text.	139
Abb. 8.1.4:	<i>Variable Importance in the Projection</i> (VIP) der PLSR-Modelle zur Schätzung des Ton- (a) und organischen Kohlenstoffgehaltes (b) mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro, schwarze Linie) und mit Feldspektren (grüne Linie). Die Zahlen in Klammern geben die Anzahl der PLSR-Faktoren an.	140
Abb. 8.1.5:	Zusammenhang zwischen den Laborspektren und den Feldspektren vom September für die Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm für Ton (a) und die Absorptionstiefe nahe 662nm für OC (b). Für die Darstellung der Laborspektren wurden die getrockneten Proben verwendet (otro).	141

Abb. 8.2.1:	Mittlere monatliche Temperatur und monatliche Niederschlagssumme für die Jahre 2004, 2005, 2006 und 2008, gemessen an der Wetterstation Greifswald (Wetterkontor, 2012).	145
Abb. 8.2.2:	Artifizielle Strukturen in den räumlich expliziten Bodenparameterschätzungen durch unterschiedliche Oberflächenrauigkeit und Bodenbearbeitungsstrukturen am Beispiel eines Ackerschlag es nördlich der Ortschaft Schmarsow (siehe grüner Flag in Abb. 5.1.1).....	149
Abb. 8.2.3:	Räumlich explizite Schätzung des Tongehaltes für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof (a) und der Ortschaft Alt Tellin (b) (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1) überlagert mit den Grenzen der Klassenflächen der Bodenschätzung.	152
Abb. 8.5.1:	Karte der bodenspezifischen Erodierbarkeit abgeleitet aus hyperspektralen Bilddaten (HyMap, 27.05.2005) unter Verwendung der PTF von Saxton et al. (1986) zur Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit am Beispiel zweier Schläge nahe der Ortschaft Alt Tellin und Heydenhof im Testfeld DEMMIN (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1).	160

Tabellenverzeichnis

Tab. 4.1.1:	Einteilung und Bezeichnung der in der Fernerkundung genutzten Bereiche des elektromagnetischen Spektrums in Anlehnung an Schowengerdt (2007). VNIR, SWIR-I und SWIR-II werden auch als reflektive Wellenlängenbereiche bezeichnet.	17
Tab. 4.1.2:	Bestandteile organischer Bodensubstanz (Streu- und Huminstoffe) und ausgewählte Absorptionsbanden im VNIR-SWIR. Zusammengestellt aus Elvidge (1990), Ziechmann (1964), Chang & Laird (2002).	26
Tab. 4.1.3:	Überblick zu einigen flugzeug- sowie satellitengetragenen abbildenden Spektrometern und deren Systemcharakteristika.	28
Tab. 5.2.1:	Prozentuale Flächennutzung für Mecklenburg-Vorpommern und den Landkreis Demmin 2005 (SIS Online, 2005).	36
Tab. 5.2.2:	Anbaustruktur der landwirtschaftlichen Flächen der IG DEMMIN (Wirtschaftsjahr 2004-2005) (Zabel, 2005).	36
Tab. 6.3.1:	Verwendete HyMap-Datensätze, Aufnahmekonstellation und Eigenschaften.	44
Tab. 6.4.1:	Lage der Absorptionsbande und Schultern zur Extraktion der Absorptionstiefe für die Parameter Ton und organischer Kohlenstoff (OC).	48
Tab. 6.4.2:	Verwendete Wellenlängenbereiche bei der schrittweisen MLR auf Ton und korrespondierende Absorptionsbanden häufiger Tonminerale.	51
Tab. 6.5.1:	Eigenschaften der ausgewählten Pedotransferfunktionen (PTF).	59
Tab. 7.1.1:	Statistische Kennwerte der physikalisch-chemischen Eigenschaften der <i>Bodenserie Demmin</i> ($n_{\text{ges.}}=135$).	60
Tab. 7.1.2:	Zusammenhang zwischen den auf Basis der RDA bestimmten Mineralgehalten und den Messwerten anderer Analyseverfahren.	64
Tab. 7.5.1:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie der Bodenproben mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).	80
Tab. 7.5.2:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie der Bodenproben mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).	87
Tab. 7.5.3:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben für unterschiedliche spektrale Auflösungen.	92
Tab. 7.5.4:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben für unterschiedliche spektrale Auflösungen.	93
Tab. 7.5.5:	Fehlerkennwerte für die Schätzung der Tonmineralgesamtgehalte (TMG) und der physikalischen Tonfraktion (TF) aus Laborspektren der <i>Bodenserie Buchholz</i> (getrocknete Bodenproben).	95
Tab. 7.6.1:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes mit Feldspektren der <i>Bodenserie Demmin_Feld</i> (Sept_Demmin, $n_{\text{ges.}}=129$).	99
Tab. 7.6.2:	Fehlerkennwerte für die Modellierung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Feldspektren der <i>Bodenserie Demmin_Feld</i> (Sept_Demmin, $n_{\text{ges.}}=129$).	101

Tab. 7.6.3:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes mittels PLSR auf Basis der Feldspektren der <i>Bodenserie Buchholz</i> vom September (Sept_Buchholz) sowie vom Mai (Mai_Buchholz).	103
Tab. 7.6.4:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mittels PLSR auf Basis der Feldspektren der <i>Bodenserie Buchholz</i> vom September (Sept_Buchholz) und vom Mai (Mai_Buchholz).	105
Tab. 7.7.1:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes mit den HyMap-Bildspektren von 2005 (HyMap_2005, $n_{ges.}=67$).	107
Tab. 7.7.2:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit den HyMap-Bildspektren von 2005 (HyMap_2005, $n_{ges.}=67$).	109
Tab. 7.7.3:	Validationsergebnisse für die Übertragung der PLSR-Modelle zur Schätzung des Ton- und OC-Gehaltes mit den HyMap-Bildspektren von 2005 (vgl. Kap. 7.7.2) auf die HyMap-Bildspektren von 2004 und 2008.	111
Tab. 7.7.4:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes mittels PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren von 2004 und 2008.	111
Tab. 7.7.5:	Fehlerkennwerte für die Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes mittels PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren von 2004, 2005 und 2008.	114
Tab. 7.7.6:	Summe der mittels PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren geschätzten Korngrößenfraktionen des Bodens (Sand: S, Schluff: U, Ton: T) und Abweichungen dieser von 100,0M.-%.	116
Tab. 7.8.1:	Absoluter und prozentualer Anteil vegetationsfreier Ackerflächen in den HyMap-Bilddaten vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008. Berechnung auf Grundlage eines verketteten Schwellwertverfahrens mittels NDVI und CAI.	117
Tab. 7.8.2:	Mittlere Abweichung (RMSE) der Parameterschätzungen für Ton und organischen Kohlenstoff [%] in den Überlappungsbereichen (ÜberB) der HyMap-Streifen im Vergleich zu den Standardfehlern der PLSR-Modelle (SEP, SEC). Berechnung der Parameterschätzungen auf Grundlage der Absorption (Abs) sowie auf Grundlage der ersten Ableitung der Absorption (1.Ablg).	122
Tab. 7.9.1:	Statistische Kennwerte der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f in [cm/d] auf den landwirtschaftlichen Flächen des Testfeldes DEMMIN ermittelt mit 6 PTF auf Basis der Schätzungen des Ton-, Sand-, Schluff- und OC-Gehaltes mittels PLSR aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 und 2008 (vgl. Abb. 7.9.1). Trockenrohdichte $\rho_t=1,45\text{g/cm}^3$; gMW (μ_g): geometrischer Mittelwert; gSD (σ_g): geometrische Standardabweichung; $Q_{,995}$: 0,995-Quantil.	125
Tab. 7.9.2:	Mittlerer geometrischer Fehlerquotient (GMER) und geometrische Standardabweichung des Fehlerquotienten (GSDER) für den paarweisen Vergleich der geschätzten, gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f mithilfe 6 verschiedener Pedotransferfunktionen auf Basis der aus den HyMap-Bilddaten mittels PLSR geschätzten Sand-, Schluff-, Ton- und organischen Kohlenstoffgehalte. Die Schätzungen von k_f mit den PTF von Vereecken et al. (1990), Jabro (1992) und Brakensiek et al. (1984) beziehen sich auf eine konstante Trockenrohdichte von $1,45\text{g/cm}^3$	126
Tab. 8.2.1:	Kalibrations- und Validationsschema zur Verifikation der Modellvorhersagegenauigkeit auf nicht beprobten Feldern.	147
Tab. 8.4.1:	Methodische Fehler der Referenzanalytik (SEL, SES) im Vergleich zur Vorhersagegenauigkeit (SEP bzw. SEC) der PLSR-Modelle mit Laborspektren (LS), Feldspektren (FS) und Abbildender Spektroskopie (IS).	157

Abkürzungsverzeichnis

a	Jahr
AHS	<i>Airborne Hyperspectral Scanner</i>
AIC	<i>Akaike Information Criterion</i>
AISA	flugzeuggetragene hyperspektrale Sensorsysteme der Firma Specim Spectral Imaging Ltd.
ANN	<i>Artificial Neural Network</i> ; Künstliches Neuronales Netzwerk
ASD	<i>Analytical Spectral Devices, Inc.</i>
ATCOR	<i>Atmospheric / Topographic Correction for Airborne Imagery</i>
AVIRIS	<i>Airborne Visible/InfraRed Imaging Spectrometer</i>
AVNIR	<i>Airborne Pushbroom VNIR Hyperspectral System</i>
B.P.	<i>before present</i> ; vor heute
BRDF	<i>Bidirectional Reflectance Distribution Function</i> , Bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion
BRT	<i>Boosted Regression Trees</i>
CASI	<i>Compact Airborne Spectrographic Imager</i>
cm/d, $cm \cdot d^{-1}$	Zentimeter pro Tag
cm WS	Zentimeter Wassersäule
CAI	<i>Cellulose Absorption Index</i> ; Celluloseabsorptionsindex
CNES	<i>Centre National d'Etudes Spatiales</i>
CR	<i>Continuum Removal</i>
CT	<i>Committee Trees</i> ; Komitees von Entscheidungsbäumen
cv	<i>cross-validation</i> ; Kreuzvalidation
DAIS	<i>Digital Airborne Imaging Spectrometer</i>
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
EnMAP	<i>Environmental Mapping and Analysis Program</i>
ESA	<i>European Space Agency</i>
FG	Freiheitsgrade
FOV	<i>Field of View</i> ; Gesichtsfeld des Sensors
FS	<i>Field Spectroscopy</i> ; Feldspektroskopie
FWHM	<i>Full Width at Half Maximum</i> ; Halbwertsbreite
GBT	<i>Gradient Boosted Tree Regression</i>
GFZ	Deutsches GeoForschungsZentrum GFZ
Glg.	Gleichung
GMER	<i>Geometric Mean Error Ratio</i> ; mittlerer geometrischer Fehlerquotient
GSDER	<i>Geometric Standard Deviation of Error Ratio</i> ; geometrische Standardabweichung des Fehlerquotienten
h	Stunde
HERO	<i>Hyperspectral Environment and Resource Observer</i>
HyMap	<i>Hyperspectral Mapper</i>
Hyperion	Hyperspektraler Sensor auf EO-1
HySI	<i>Hyper Spectral Imaging camera</i>
HySPEX	Gruppe von Hyperspektralsystemen der Firma Norsk Elektro Optik AS

HypIRI	<i>Hyperspectral Infrared Imager</i>
HyVista	HyVista Corporation Pty Ltd
IC	<i>Inorganic Carbon</i> , Anorganischer Kohlenstoff/Carbonat-Kohlenstoff
IKONOS	kommerzieller Erdbeobachtungssatellit der Firma GeoEye
INTA	<i>Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial</i>
IS	<i>Imaging Spectroscopy</i> ; Abbildende Spektroskopie (Hyperspektralfernerkundung)
KAK	Kationenaustauschkapazität
KA4	Bodenkundliche Kartieranleitung (4. Auflage 1994)
kal	Kalibration
k_f	gesättigte Wasserleitfähigkeit
KWA	Königswasseraufschluss
Landsat	Serie von Erdbeobachtungssatelliten der NASA (z.B. Landsat 7 ETM+)
LR	Lineare Regression
LS	<i>Laboratory Spectroscopy</i> ; Laborspektroskopie
LUNG	Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern
M.-%	Massenprozent
MARS	<i>Multivariate Adaptive Regression Splines</i>
MIR	<i>Middle Infrared</i> ; Mittleres Infrarot
MIVIS	Italienischer Hyperspektralsensor (von INTA betrieben)
MLR	<i>Multiple Linear Regression</i> ; multiple lineare Regression
MMK	Mittelmaßstäbige Landwirtschaftliche Standortkartierung
MP	Messpunkt
MPLS	<i>Modified Partial Least Squares</i>
MVP	Mecklenburg-Vorpommern
MW	Mittelwert (μ)
μ_g	geometrischer Mittelwert
n.a.	nicht angegeben
NASA	<i>National Aeronautics and Space Administration</i>
NDVI	<i>Normalized Difference Vegetation Index</i>
NEO	<i>Norsk Elektro Optikk AS</i>
n.g.	nicht gültig
NPV	<i>Non-Photosynthetic active Vegetation</i> ; photosynthetisch nicht aktive Vegetation
OC	<i>Organic Carbon</i> ; organischer Kohlenstoff
OM	<i>Organic Matter</i> ; Organische Bodensubstanz
PCA	<i>Principal Component Analysis</i> ; Hauptkomponentenanalyse
PCR	<i>Principal Component Regression</i> ; Hauptkomponentenregression
PLSR	<i>Partial Least Squares Regression</i>
PSR	<i>Penalized Spline Regression</i>
PTF	<i>Pedotransfer Function</i> ; Pedotransferfunktion
PV	<i>Photosynthetic active Vegetation</i> ; photosynthetisch aktive Vegetation
R	Pearson Korrelationskoeffizient
R^2	Bestimmtheitsmaß
ρ_t	Trockenrohddichte
RDA	Röntgendiffraktometrie
RF	<i>Random Forests</i> ; Entscheidungswälder

RFA	Röntgenfluoreszenzanalyse
RBFN	<i>Radial Basis Function Networks</i>
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i> ; Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers
RPD	<i>Ratio of Performance to Deviation</i>
RT	<i>Regression Tree</i> ; Entscheidungsbaum
SASI	<i>Shortwave Airborne Spectrographic Imager</i>
SD	Standardabweichung (σ)
σ_g	geometrische Standardabweichung
SEC	<i>Standard Error of Calibration</i> ; Standardfehler der Regression für den Kalibrationsdatensatz
SEL	<i>Standard Error of Laboratory analysis</i> ; Standardfehler der Laboranalysemethoden
SEP	<i>Standard Error of Validation</i> ; Standardfehler der Regression für den Validationsdatensatz
SEP _{corr}	Korrigierter Standardfehler der Regression für den Validationsdatensatz
SES	<i>Standard Error of Sampling</i> ; Standardfehler bei der Entnahme der Bodenproben
SMLR	<i>Stepwise Multiple Linear Regression</i> ; schrittweise multiple lineare Regression
SNR	<i>Signal-to-Noise Ratio</i> , Signal-Rausch-Verhältnis
SPOT	<i>Satellite Pour l'Observation de la Terre</i> ; französisches Satellitensystem des CNES zur Erdbeobachtung
SRTM	<i>Shuttle Radar Topography Mission</i>
SVM	<i>Support Vector Machine</i>
SWIR	<i>ShortWave-Infrared</i> ; kurzwelliges Infrarot (vgl. Tab. 4.1.1)
TC	<i>Total Carbon</i> ; Gesamtkohlenstoff
TIR	<i>Thermal Infrared</i> ; Thermales Infrarot (vgl. Tab. 4.1.1)
u.a.	unter anderem
v.a.	vor allem
val	Validation
VDLUFA	Verband Deutscher Landwirtschaftlicher Untersuchungs- und Forschungsanstalten
vgl.	vergleiche
VIF	Varianzinflationsfaktor
VIP	<i>Variable Importance in the Projection</i>
VIS	<i>Visible light</i> ; sichtbares Licht (vgl. Tab. 4.1.1)
VK	Variationskoeffizient
VNIR	<i>Visible-Near-Infrared</i> , Sichtbarer Spektralbereich und Nahes Infrarot (vgl. Tab. 4.1.1)
VNIRS	VNIR-SWIR-Reflexionsspektroskopie
ZALF	Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung e.V.
ZWL	Zentrumswellenlänge

1 Einführung

Boden ist der verwitterte und belebte, oberste Teil der Erdkruste, der sich im Überschneidungsbereich von Lithosphäre, Biosphäre, Hydrosphäre und Atmosphäre befindet. Er entsteht durch ein komplexes Zusammenspiel bodenbildender Prozesse¹ aus undifferenziertem Gestein. Abhängig von den Faktoren der Bodenentwicklung² entstehen Böden unterschiedlicher Entwicklungsstufe und Profildifferenzierung mit verschiedenartigen Eigenschaften (Scheffer & Schachtschabel, 2010).

Böden übernehmen eine Reihe von wichtigen Funktionen in einem Ökosystem. Sie sind Lebensraum für Menschen, Tiere und Pflanzen (*Lebensraumfunktion*). Sie agieren als Speicher-, Filter-, Puffer- und Transformationssysteme, die Wasser, gelöste und suspendierte Nähr- und Schadstoffe binden und in neue stoffliche Verbindungen umwandeln können (*Regelungsfunktion*). Böden sind Standort verschiedener Nutzungen (*Nutzungsfunktion*). Sie sind Grundlage der Landwirtschaft, der Forstwirtschaft, der Rohstoffgewinnung und Abfalllagerung, und bieten Raum für Siedlungs-, Erholungs- und Freizeitflächen. Als solches sind sie zugleich Archiv der Natur- und Kulturgeschichte einer Landschaft (Scheffer & Schachtschabel, 2010). Die langfristige Sicherung und Wiederherstellung dieser Funktionen ist im Bundesbodenschutzgesetz BBodSchG (1998) fest verankert. Darüber hinaus wird auf die Bedeutung des Bodens in der Weltbodencharta (FAO, 1982) und der Europäischen Bodencharta ausdrücklich hingewiesen. Letztere beschreibt den Boden als „one of humanity’s most precious assets. [...] Farmers and foresters must apply methods that preserve the quality of the soil. [...] Methods of tillage and harvesting should conserve and improve the quality of the soil. [...] Soil must be protected against erosion.“³ (EUROPARAT, 1972).

Trotz seines hohen Stellenwertes im Mensch-Umwelt-System, ergab die erste globale Abschätzung der Bodendegradation (*Global Assessment of Human-induced Soil Degradation*, GLASOD), dass bereits etwa 15% der gesamten Landoberfläche der Erde, 1965Mio.ha ($19,65 \cdot 10^6 \text{ km}^2$), durch menschliche Aktivitäten nachhaltig geschädigt sind (Bridges & Oldeman, 1999). Auch wenn Asien und Afrika den Ergebnissen dieser Studie zufolge mit rund 1528Mio.ha ($15,28 \cdot 10^6 \text{ km}^2$) (~78%) flächenmäßig am meisten zur Degradation beitragen, gelten in Europa 218Mio.ha ($2,18 \cdot 10^6 \text{ km}^2$) Land (~11%) als degradiert. Nach Abholzung und Kahlschlag ist die unsachgemäße, nicht standortangepasste landwirtschaftliche Nutzung des Bodens zur Produktion von Lebensmitteln Hauptursache der Bodendegradation⁴. Cerdà et al. (2009) schreiben: „From the first sowing and planting, agriculture has been synonymous with land degradation and erosion“⁵. Maßgeblicher Prozess, der zur Schädigung des Bodens in Europa führt, ist die Erosion von Boden durch Wasser. Nach Bridges & Oldeman (1999) gehen 52% der gesamten degradierten Fläche Europas auf Bodenerosion durch Wasser zurück. Zur Formulierung von Handlungsrichtlinien und Schutzmaßnahmen ist das Wissen um erosionsgefährdete Gebiete sowie das Ausmaß des Bodenabtrages von essentieller Bedeutung. Verschiedene europäische Initiativen tragen dem Rechnung (z.B. Kirkby et al., 2004; van der Knijff et al., 2000). Sie verdeutlichen aber zugleich die Notwendigkeit weiterer Bemühungen (Gobin et al., 2006). In Deutschland wird der durchschnittliche

¹ Die wichtigsten bodenbildenden Prozesse umfassen Gesteinsverwitterung und Mineralumwandlung, Verlehmung, Verbraunung, Zersetzung organischer Substanz und Humifizierung sowie Umlagerungsprozesse durch perkolierendes und aufsteigendes Bodenwasser (Scheffer & Schachtschabel, 2010).

² Die Faktoren der Bodenentwicklung sind: Klima, Ausgangsgestein, Relief, Flora und Fauna, Bodenwasser, Zeit und anthropogene Nutzung (Scheffer & Schachtschabel, 2010).

³ Deutsche Übersetzung (<http://hypersoil.uni-muenster.de/0/02/03/03/01.htm>): „Boden ist eines der kostbarsten Güter der Menschheit. [...] Land- und Forstwirte müssen Verfahren anwenden, bei denen die Qualität des Bodens erhalten bleibt. [...] Die zum Ackerbau und zum Ernten verwendeten Verfahren sollten die Eigenschaften des Bodens erhalten und verbessern. [...] Der Boden muss gegen Erosion geschützt werden“.

⁴ Bodendegradation in Europa wird zu 38,5% durch Entwaldung, zu 29,4% durch Landwirtschaft, zu 22% durch Überweidung und 10,1% durch Industrie und Raubbau verursacht (Bridges & Oldeman, 1999; Tab. 1).

⁵ Deutsche Übersetzung: „Seit Beginn der ersten Aussaat und Pflanzung ist Landwirtschaft gleichbedeutend mit Landdegradation und Erosion.“

jährliche Bodenverlust auf Ackerland unter den aktuellen Bodenbewirtschaftungspraktiken auf durchschnittlich $5,5 \text{ t ha}^{-1} \text{ a}^{-1}$ geschätzt (Auerswald, 2006), was einem Vielfachen der Boden-neubildungsrate ($0,1\text{-}1 \text{ t ha}^{-1} \text{ a}^{-1}$, Scheffer & Schachtschabel, 2010) entspricht. Für das Bundesland Mecklenburg-Vorpommern wurde eine Abschätzung der Erosionsgefährdung durch das Landesamt für Umwelt, Naturschutz, und Geologie (LUNG, 2002a) veröffentlicht, die deutlich macht, dass etwas mehr als die Hälfte aller Landwirtschaftsflächen von Bodenerosion durch Wasser gefährdet ist (~53%). 10% davon werden als stark bis sehr stark gefährdet eingestuft.

Die Auswirkungen von Bodenerosion auf landwirtschaftlichen Nutzflächen sind vielgestaltig und kommen sowohl vor Ort (*on-site*) auf den Ackerflächen selbst als auch außerhalb (*off-site*) zum Tragen. Beispiele sind die Zerstörung des Bodengefüges, die Verarmung an Nährstoffen und Humus und in Folge dessen die Verringerung der Bodenfruchtbarkeit sowie die Eutrophierung von anrainenden Gewässern und Vorflutern (z.B. Boardman & Poesen, 2006). Bodenerosion auf ackerbaulich genutzten Flächen verursacht erhebliche ökonomische und ökologische Kosten (Pimentel et al., 1995). Sie stellt eine Gefahr für die Umwelt und die Versorgung der Menschheit mit ausreichend Nahrungsmitteln dar (Pimentel, 2006). Dem Schutz des kostbaren Gutes Boden gebührt daher höchste Priorität (FAO, 1982), die durch eine entsprechende Überwachung und Beobachtung gesichert werden muss.

Detaillierte Informationen zur Beschaffenheit des Bodens sind aber nicht allein aus Gründen des Bodenschutzes von maßgeblicher Relevanz. In der Präzisionslandwirtschaft sind es ebenso ökologische als auch ökonomische Aspekte, die zu einem großen Bedarf an räumlich hoch aufgelöster Bodeninformation führen (Bramley & Janik, 2005; Oerke et al., 2010; Patzold et al., 2008).

Der Tongehalt sowie der Anteil an organischer Substanz bzw. organischem Kohlenstoff⁶ im Boden sind aufgrund ihrer positiven Wirkung auf eine Reihe von chemischen, physikalischen und biologischen Bodeneigenschaften von besonderem Interesse und stehen deshalb im Fokus der vorliegenden Arbeit. Ton bzw. Tonminerale erhöhen die Fähigkeit von Böden zur Wasserbindung und sind förderlich für die Gefügebildung und Aggregatstabilität (z.B. Attou et al., 1998). Aufgrund ihrer großen spezifischen Oberfläche und negativen Schichtladungen können Tonminerale auch zur Nährstoffadsorption beitragen. Organische Bodensubstanz ist die Hauptquelle von Stickstoff im Boden sowie wichtiger Lieferant weiterer Pflanzennährstoffe, darunter Phosphor und Schwefel. Sie beeinflusst entscheidend den Wasser-, Luft- und Wärmehaushalt des Bodens und damit die Bodenfruchtbarkeit und die landwirtschaftliche Ertragsleistung (Körschens, 1997). Organische Bodensubstanz erhöht aber auch die Filter- und Pufferkapazität von Böden und fördert die biologische Aktivität. Sie trägt zur Verbesserung des Bodengefüges bei, d.h. zur Erhöhung der Aggregatstabilität (z.B. Le Bissonnais & Arrouays, 1997) sowie zur Verbesserung der Infiltrations- und Wasserkapazität (Körschens, 1997) und verringert dadurch die Anfälligkeit des Bodens gegenüber Erosion und Schadverdichtung. Das Spektrum an Eigenschaften und Funktionen, die Ton bzw. Tonminerale und organische Substanz im Bodenkörper übernehmen, veranschaulicht deren Tragweite und Stellenwert im Rahmen des Bodenschutzes sowie in der Präzisionslandwirtschaft.

Darüber hinaus ist vor dem Hintergrund des globalen Klimawandels in den letzten Jahren eine Debatte um Möglichkeiten und Grenzen der Kohlenstoffbindung im Boden entfacht (IPCC, 2000; Lal, 2004), die das Interesse an der Ermittlung der aktuellen Kohlenstoffvorräte im Boden stark befördert hat. Mittlerweile beschäftigt sich eine Vielzahl von Studien auf internationaler (z.B. Batjes, 1996; Lal & Bruce, 1999; Smith et al., 2000a; Freibauer et al., 2004) und nationaler Ebene (z.B. Smith et al., 2000b; Sleutel et al., 2006; Goidts & Wesemael, 2007; Reijneveld et al., 2009; Hüttl et al., 2008) mit deren Quantifizierung. Aussagekräftige Schätzungen können nur auf der Grundlage adäquater Daten, in räumlicher sowie zeitlicher Dimension, getroffen werden. An diesen mangelt es jedoch. Prechtel et al. (2009) hebt die dringende Notwendigkeit einer neuen und regelmäßigen wiederkehrenden

⁶ Aufgrund großer Schwierigkeiten bei der direkten Bestimmung der organischen Bodensubstanz sowie großer Unsicherheiten in der Laboranalytik, hat sich die Ermittlung des organischen Kohlenstoffanteils im Boden mit hoch präzisen Verfahren, z.B. der trockenen Veraschung, als Proxy etabliert. Unter Verwendung empirisch ermittelter Konvertierungsfaktoren kann der organische Kohlenstoffgehalt des Bodens dann als Schätzer der organischen Bodensubstanz verwendet werden (Körschens et al., 1997). Der traditionell verhaftete Einsatz solcher Konvertierungsfaktoren ist jedoch Gegenstand einer bereits lang anwährenden und nach wie vor aktuellen Diskussion in der Bodenkunde, deren Ausgang offen scheint (Pribyl, 2010). Zur Vermeidung zusätzlicher Fehler, bezieht sich die vorliegende Arbeit ausschließlich auf Angaben zum organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens.

Bodenzustandsinventur zur Charakterisierung der Kohlenstoffvorräte im Boden sowie ihrer Dynamik im Hinblick auf unterschiedliche Landnutzungssysteme in Deutschland deutlich hervor.

Monitoringprogramme zur Erhebung von Bodendaten auf Grundlage traditioneller Bodenbeprobungen und Standardlaboranalysen sind kostspielig, zeit- und arbeitsintensiv. Allein auf ihrer Basis kann der aktuelle Bedarf an Bodeninformationen auf lokaler und insbesondere auf regionaler Ebene nur unzureichend oder gar nicht gedeckt werden. Erschwerend kommt hinzu, dass Böden, d.h. ihre physikalisch-chemischen Eigenschaften eine teils sehr hohe räumliche Variabilität besitzen, für deren Erfassung ein sehr engmaschiges Beprobungsnetz erforderlich ist (z.B. Odlare et al., 2005). Eine hohe zeitliche Variabilität, wie sie bei organischem Kohlenstoff gegeben ist (Leinweber et al., 1994; Ellmer & Baumecker, 2005; Jensen et al., 1997), setzt zudem regelmäßige Erhebungen in definierten zeitlichen Abständen voraus.

Fernerkundung gestattet die systematische und wiederholte Aufzeichnung großer Gebiete der Erdoberfläche und stellt somit potenziell eine Möglichkeit zur Behebung des Datendefizits dar. Ihr Nutzen für die Bodenwissenschaften wurde früh erkannt (Bushnell, 1929⁷). Bodeneigenschaften können dabei entweder direkt aus dem Bodenreflexionssignal oder indirekt aus dem Reflexionsverhalten von Pflanzenbeständen (z.B. Sommer et al., 2003; Kooistra et al., 2003b) abgeleitet werden. Aufgrund der Schwierigkeiten, Rückschlüsse aus dem Vegetationssignal auf einzelne, ursächliche Bodenparameter zu ziehen, nimmt letzterer Ansatz in der Literatur einen kleinen Stellenwert ein. Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist der direkte Zusammenhang zwischen Bodenreflexionssignal und -eigenschaften. Luftbilder und satellitengetragene, multispektrale Bilddaten wurden für die bodenkundliche Kartierung (z.B. Villwock, 1985; Richter, 1987; Kudrat et al., 1992; Ziadat et al., 2002) und für die qualitative Kennzeichnung des Erosionsgrades (z.B. Price, 1993; Hill et al., 1995) erfolgreich angewendet. Die Abbildung der Reflexionseigenschaften der Oberfläche in wenigen breitbandigen Kanälen, meist größer 50nm⁸, setzt derartigen Systemen jedoch Grenzen (Leone & Sommer, 2000; Dwivedi, 2001). Die meisten mineralischen Bodenkomponenten weisen Absorptionsbanden mit geringerer Bandbreite auf (Clark, 1999). Sie können durch multispektrale Systeme nicht adäquat wiedergegeben und in Folge dessen nicht zur Charakterisierung der chemischen und physikalischen Eigenschaften von Böden verwendet werden. Hyperspektrale Systeme oder abbildende Spektrometer⁹, die ihren Anfang in den 80er Jahren in der geologischen Erkundung nahmen, eröffnen hier eine völlig neue Perspektive (Goetz et al., 1985). Sie gestatten die Identifikation von Objekten und deren Materialeigenschaften durch eine differenzierte Abbildung ihrer Absorptions- und Reflexionseigenschaften in zahlreichen spektralen Bändern (Green et al., 1998).

Dass sowohl chemische als auch physikalische Bodenparameter mit reflexionsspektroskopischen Methoden qualitativ und quantitativ beschrieben werden können, haben umfangreiche Studien im Labor gezeigt. Die ersten systematischen Studien erfolgten durch Condit (1970) sowie Stoner & Baumgardner (1981). Ihre Arbeiten beschränkten sich noch auf eine rein qualitative Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Boden- und Reflexionseigenschaften. Wenig später folgten erste quantitative Ansätze (Dalal & Henry, 1986). Inzwischen haben zahlreiche Autoren die Relevanz reflexionsspektroskopischer Methoden für die quantitative und simultane Bestimmung mehrerer Bodeneigenschaften unter standardisierten Bedingungen im Labor aufgezeigt (z.B. Ben-Dor & Banin, 1995a; Reeves et al., 1999; Shepherd & Walsh, 2002; Brown et al., 2006; Viscarra Rossel et al., 2006). Dies gilt auch für Ton bzw. Tonminerale sowie organischen Kohlenstoff und basiert auf ihren zahlreichen charakteristischen Spektralmerkmalen im Bereich des sichtbaren Lichtes und nahen Infrarot (350-2500nm) (Hunt & Salisbury, 1970; Clark et al., 1990; Ben-Dor et al., 1999). Dennoch sind auch bei der Spektroskopie von Böden im Labor nach wie vor Fragen offen. Diese betreffen zum Beispiel die Art und Weise der Probenaufbereitung im Vorfeld der Spektrometrie (Waiser et al., 2007; Morgan et al., 2009). Darüber hinaus sind laborspektroskopische Untersuchungen ein essentieller Baustein bei der Analyse von störenden Einflüssen und der Suche nach möglichen Erklärungen und Lösungen für die quantitative Spektroskopie von Böden im Gelände mittels Feldspektroskopie und Abbildender Spektroskopie. Beide sind aufgrund einer Vielzahl von Faktoren, die das

⁷ Zitiert in Irons et al. (1989); Bushnell, T.M. (1929). Aerial photographs of Jennings County. Proc. Indiana Acad. Sci., 39, 229–230.

⁸ Beispielsweise liegt die spektrale Bandbreite der Kanäle 1-5 und 7 des Landsat 7 ETM+ Instrumentes zwischen 60nm und 260nm.

⁹ Im englischsprachigen Raum ist der Begriff *Imaging Spectrometer* bzw. *Imaging Spectroscopy* (Abbildende Spektroskopie) gebräuchlich.

Bodenreflexionssignal unter in-situ Bedingungen modifizieren, mit ungleich größeren Schwierigkeiten verbunden. Eine zusätzliche Erschwernis der Abbildenden Spektroskopie stellt die Zweidimensionalität der Daten, d.h. die Abbildung in der Fläche, im Gegensatz zur quasi punktuellen, eindimensionalen Betrachtung der Labor- und Feldspektroskopie dar. Bisher hat sich eine überschaubare Zahl von Arbeiten (Ben-Dor et al., 2009) mit der quantitativen Abbildenden Spektroskopie von Böden als mögliche Ergänzung oder Alternative zur aufwendigen, konventionellen Erfassung von Bodeninformationen auseinandergesetzt. Diese Arbeiten verdeutlichen eine Reihe von Schwierigkeiten und Problemen. Zu deren Untersuchung und Lösung sind vor allem im Hinblick auf geplante hyperspektrale Satellitenmissionen wie EnMAP (Deutschland), Prisma (Italien) und HypSPIRI (USA), durch die hyperspektrale Bilddaten großflächig und in periodischen Abständen zur Verfügung stehen werden, weitere Forschungsarbeiten erforderlich.

Vor diesem Hintergrund setzt sich die vorliegende Arbeit mit der räumlich expliziten Schätzung erosionsrelevanter Bodenparameter aus mehreren hyperspektralen Bilddatensätzen in einem Agrarökosystem auseinander. Im Fokus der Betrachtung stehen der Ton- sowie der organische Kohlenstoffgehalt des Bodens. Dabei werden sowohl Methoden der Laborspektroskopie und der Feldspektroskopie als auch der Abbildenden Spektroskopie eingesetzt, wobei labor- und feldspektroskopische Studien insbesondere der Analyse und Klärung ausgewählter Teilaspekte im Vorfeld der quantitativen Abbildenden Spektroskopie dienen. Im folgenden Kapitel (Kap. 2) wird zunächst der aktuelle Stand der Forschung skizziert. Auf dessen Grundlage schließt sich in Kapitel 3 die konkrete Zielsetzung der Arbeit an.

2 Stand der Forschung

2.1 Quantitative Labor- und Feldspektroskopie von Böden

Laborspektroskopische Studien zur Charakterisierung von Böden sind zahlreich. Ein Großteil dieser Arbeiten zielt auf die routinemäßige Analyse mittels spektroskopischer Methoden als kostengünstige und zeitsparende Alternative zu Standardlaboranalysen ab (z.B. Ben-Dor & Banin, 1995a; Reeves et al., 1999; Reeves & McCarty, 2001; Dunn et al., 2002; Shepherd & Walsh, 2002; Islam et al., 2003; Cohen et al., 2005; van Waes et al., 2005; Brown et al., 2006). Malley et al. (2004) führen über hundert Referenzen auf, die sich der quantitativen Bestimmung von verschiedenen chemischen (u. a. C, N, pH, KAK, K, P), physikalischen (u. a. Ton-, Schluff-, Sandgehalt, spezifische Oberfläche) und biologischen (Methanproduktion, Enzymaktivität, mikrobielle Respiration) Eigenschaften von Böden mittels VNIR-SWIR-Reflexionsspektroskopie (VNIRS) widmen. Ton und Kohlenstoff gehören zum Untersuchungsgegenstand vieler Studien. Der weitaus größte Teil setzt sich mit quantitativen Aussagen zu organischem Kohlenstoff, Gesamtkohlenstoff oder organischer Bodensubstanz für Anwendungen in der Präzisionslandwirtschaft und Fragen der Kohlenstofffestlegung in Böden auseinander.

Die Leistungsfähigkeit der quantitativen Laborspektroskopie (LS) zur Bestimmung von Bodeneigenschaften im Allgemeinen, und des Ton- sowie organischen Kohlenstoffgehaltes im Speziellen, kann als Funktion der räumlichen Bezugsgröße (lokal, regional, global) der Referenzdatenbanken (Sankey et al., 2008; Brown et al., 2006) gesehen werden, mit der in der Regel Unterschiede in der Probenanzahl und im Wertebereich der Parameter einhergehen. Modelle zur Schätzung der Tonfraktion aus Laborspektren getrockneter und gesiebter Proben räumlich begrenzten Ursprungs (lokale Ebene/ Feldskala) erzielen Standardfehler (RMSE¹⁰, *Root Mean Square Error*) zwischen 1,54% bis 4,05% Ton (Bilgili et al., 2010; Viscarra Rossel et al., 2006; McCarty & Reeves, 2006; Kooistra et al., 2003a). Umfasst die Kalibrations- und Validationsgrundlage Bodenspektren regionaler Herkunftsgebiete, rangiert der RMSE zwischen 3,12% und 7,45% Ton (Chang et al., 2005; Cozzolino & Morón, 2003; Gomez et al., 2008b; Madari et al., 2006; Waiser et al., 2007; Lagacherie et al., 2008). Autoren, deren Bodenreferenzdaten großen geographischen Gebieten entstammen, teils kontinentübergreifend, berichten RMSE-Werte zwischen 4,06% und 13,76% Ton (Ben-Dor & Banin, 1995a; Chang et al., 2001; Shepherd & Walsh, 2002; Islam et al., 2003; Pirie et al., 2005; Sankey et al., 2008; Viscarra Rossel et al., 2009). Schätzungen des organischen Kohlenstoffgehaltes (OC, *Organic Carbon*) aus Laborspektren von Bodenproben einzelner Ackerschläge bzw. sehr kleiner Untersuchungsgebiete sind mit Standardfehlern zwischen 0,130% und 0,445% OC behaftet (Ingleby & Crowe, 2000; Bilgili et al., 2010; Viscarra Rossel et al., 2006). Brown et al. (2005), Chang & Laird (2002), Cohen et al. (2005), Dalal & Henry (1986), Morgan et al. (2009), Stevens et al. (2008), Vågen et al. (2006), van Waes et al. (2005) u. a. berichten, dass der OC-Gehalt von Böden mittels VNIRS auf regionaler Ebene mit einem Standardfehler von 0,109% bis 2,413% OC geschätzt werden kann. Stevens et al. (2008) zufolge ist es auf dieser räumlichen Ebene mit laborspektroskopischen Methoden möglich, ähnliche Genauigkeiten wie mit herkömmlichen Standardlabormethoden zu erzielen. Für Modelle, die auf Bodenspektren und -proben großer geographischer Gebiete oder globaler Herkunft basieren, werden Genauigkeiten von 0,276% bis 10,61% OC angegeben (Bartholomeus et al., 2008; Brown et al., 2006; Cohen et al., 2007; Hummel et al., 2001; Islam et al., 2003; Shepherd & Walsh, 2002; McCarty et al., 2002). Einen tabellarischen Überblick zu Studien, die sich mit der Quantifizierung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes aus Laborspektren beschäftigen, einschließlich Angaben zum Standardfehler der Schätzungen, gibt auch Anhang G 1 und Anhang G 2. Die Vorhersagegenauigkeit variiert aber nicht nur mit der räumlichen Betrachtungsebene sondern auch in Abhängigkeit vom Bodenparameter (z.B. Dunn et al., 2002; Cohen et al., 2005), dem

¹⁰ kreuzvalidierter oder unabhängig validierter RMSE.

Spektralbereich, d.h. VIS, NIR¹¹, MIR, VIS-NIR¹⁰-MIR (z.B. Viscarra Rossel et al., 2006; Pirie et al., 2005) oder dem verwendeten Spektrometer bzw. der Messumgebung (Ge et al., 2011). Noch nicht abschließend geklärt ist auch die Frage der Probenaufbereitung, d.h. welche Vorbereitungsschritte die Vorhersagegenauigkeit unter Laborbedingungen wie beeinflussen und mit einem vertretbaren Aufwand verbessern können (z.B. Fystro, 2002; Brunet et al., 2007). Dieser Aspekt ist daher immer wieder Thema in aktuellen Forschungsarbeiten (z.B. Morgan et al., 2009).

Für die Charakterisierung spektraler Eigenschaften von Oberflächen im Gelände haben sich in den letzten 20 Jahren feldspektroskopische Methoden und Verfahren (FS) etabliert (Milton et al., 2009), die sowohl der Verifikation laborspektrenbasierter Algorithmen unter variablen Umweltbedingungen dienen, als auch der Gewinnung flächiger Informationen via Interpolation, der Kalibration von flugzeug- und satellitengetragenen Sensoren sowie der Vorbereitung der quantitativen Abbildenden Spektroskopie. Beispielsweise beschreiben Sudduth & Hummel (1993), Mouazen et al. (2007) und Barnes et al. (2003) Spektrometer für den Einsatz auf Traktoren in der Präzisionslandwirtschaft. Untersuchungen in Vorbereitung auf flugzeug- oder satellitengetragene Bodenanalysen setzen häufig tragbare Systeme ein (z.B. Chabrillat et al., 2002; Krüger et al., 1998; Kooistra et al., 2003a; Stevens et al., 2008). Neueste Geräteentwicklungen zielen darauf ab, die spektralen Eigenschaften ganzer Bodenprofile zu charakterisieren (Ben-Dor et al., 2008).

Generell ist die Zahl der Feldstudien vergleichsweise gering und die bei Laborbedingungen erzielten Genauigkeiten sind unter in-situ Gegebenheiten häufig nicht reproduzierbar (vgl. Anhang G 1, Anhang G 2). Kooistra et al. (2003a) untersuchen Möglichkeiten der in-situ Bestimmung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes aus Labor- und Feldspektren für Böden in Flussauen. Der RMSE ihrer Kalibrationsmodelle steigt von 1,052% OC im Labor auf 1,430% OC im Feld. Der RMSE für Ton erhöht sich um mehr als das Doppelte von 2,20% auf 5,15% Ton. Sie sehen die Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeiten vor allem in Unterschieden in der Bodenfeuchte und vegetationsbedingten Veränderungen des Spektralsignals begründet. Auch Stevens et al. (2006) kommen zu dem Schluss, dass Variationen in der Bodenfeuchte die Genauigkeit ihrer PLSR-Modelle senken. Udelhoven et al. (2003) misslingt der Versuch, quantitative Aussagen zu organischem Kohlenstoff mit feldspektroskopischen Methoden zu treffen. Sie führen Probleme bei der Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mittels Feldspektroskopie aber nicht auf Variationen in der Bodenfeuchte oder auf Pflanzenbestandteile zurück, sondern hauptsächlich auf Mikroschatten, die durch Makrobodenaggregate hervorgerufen werden. Der abweichenden Beschaffenheit der Bodenoberfläche (Bodenrauigkeit) im Gelände schreiben auch Lagacherie et al. (2008) Änderungen in der Absorptionstiefe von Ton nahe 2200nm zu, die mit einer Verringerung der Genauigkeit ihrer Feldmodelle einhergeht. Der RMSE ihres Labormodells beträgt 5,8% Ton ($R^2=0,64^{12}$). Für die adäquaten Feldspektren steigt der Fehler auf 7,1% Ton ($R^2=0,58$). Dagegen können Stevens et al. (2008) gleichwertige Fehlerterme für die Schätzung von organischem Kohlenstoff mittels VNIRS im Labor und auf landwirtschaftlichen Nutzflächen in drei Testgebieten in Belgisch-Lothringen sowie den belgischen Ardennen ($RMSE_{LS}=0,12\%$ OC, $RMSE_{FS}=0,12\%$ OC; $RPD_{LS}=2,03$, $RPD_{FS}=2,11$)¹³ erzielen. Auch Viscarra Rossel et al. (2009) vermögen nach Aufstockung einer sehr umfangreichen Spektralbibliothek aus 1287 Laborspektren australischer Böden mit 74 Feldspektren äquivalente Genauigkeiten bei der Schätzung des Tongehaltes aus Labor- und Feldmessungen zu erzeugen ($R^2_{LS}=0,77$, $R^2_{FS}=0,78$; $RMSE_{LS}=8,3\%$, $RMSE_{FS}=7,9\%$). Die aufgeführten Studien zeigen, dass die Wirkung variabler Umweltfaktoren auf das Spektralsignal und hiermit verbundene Unsicherheiten in der quantitativen Spektroskopie von Böden noch nicht vollständig verstanden sind. Das betrifft auch den Stellenwert der einzelnen Umweltfaktoren bzw. die Rangfolge ihrer Priorität für die quantitative Spektroskopie von Böden.

Ein gewichtiger Aspekt, der unter in-situ Bedingungen zu berücksichtigen ist, sind, wie die Arbeiten von Kooistra et al. (2003a) und Stevens et al. (2006) zeigen, Variationen im Bodenwassergehalt. Eine

¹¹ NIR bezieht sich hier auf den Spektralbereich von 700-2500nm.

¹² R^2 : Bestimmtheitsmaß

¹³ RMSE-Werte sind in Stevens et al. (2008) auf ein Zehntel [$g \cdot kg^{-1}$] genau angegeben. RPD – *Ratio of Performance to Deviation*: Verhältnis der Standardabweichung der Referenzdaten des Validationsdatensatzes zu dessen Standardfehler (vgl. Kap. 6.4.4).

sehr frühe Arbeit, die den Einfluss von Wasser auf das Reflexionssignal von Böden untersucht, wurde von Bowers & Hanks (1965) verfasst. Ihre Messungen zeigen einen Abfall der Reflexion bzw. Verstärkung der Absorption mit Zunahme des Wassergehaltes im gesamten Spektralbereich von 400nm bis 2500nm, wobei die Abnahme des Rückstrahlvermögens mit zunehmenden Wassergehalt nichtlinear erfolgt (Lobell & Asner, 2002; Liu et al., 2002). Lobell & Asner (2002) und Haubrock et al. (2008a) stellen fest, dass im VNIR bereits bei Wassergehalten < 20% kaum mehr Veränderungen zu beobachten sind, während das Reflexionssignal im SWIR erst bei deutlich höheren Wassergehalten in einen Sättigungszustand übergeht. Die Absorptionstiefe bei 2200nm nimmt laut Lobell & Asner (2002) mit steigenden Wassergehalten nahezu linear ab.

Neben diesen beschreibenden Studien, zielen die Arbeiten, die sich mit dem Einfluss des Wassers auf das Reflexionssignal beschäftigen, in zwei verschiedene Themenrichtungen:

(i) Einige Autoren erforschen das Bodenreflexionssignal in Abhängigkeit vom Wassergehalt mit dem Ziel, den Bodenwassergehalt an sich zu schätzen (z.B. Muller & Décamps, 2000; Haubrock et al., 2008a; Zhu et al., 2010; Whiting et al., 2004). So klassifizieren und quantifizieren Mouazen et al. (2006) den Bodenwassergehalt von Böden mittels faktorieller Diskriminanzanalyse (*Factorial Discriminant Analysis*, FDA) und PLSR. Sie versprechen sich von der Gruppierung der Bodenspektren nach Wassergehaltsklassen eine Erhöhung der Schätzgenauigkeiten zahlreicher Bodenparameter aus VNIR-SWIR-Messungen. Starke Heterogenitäten in Bodenfarbe, Textur und Herkunftsgebiet erschweren allerdings eine korrekte Einstufung der Spektren nach dem Wassergehalt. Die Eliminierung wasserbedingter Modifikationen des Spektralsignals sechs sandiger Böden aus Südafrika sind Untersuchungsgegenstand einer Studie von Somers et al. (2010). Neben quantitativen Aussagen zum Bodenwassergehalt sehen sie das Potenzial ihrer Methode v.a. für eine verbesserte Charakterisierung der Bodenkomponente bei der spektralen Entmischung.

(ii) Andere Arbeiten stellen die Wirkung standardisierter Probenaufbereitungstechniken auf die Genauigkeit VNIR-SWIR-basierter Vorhersagen in den Mittelpunkt der Betrachtung. Chang et al. (2005) vergleichen die Eignung lufttrockener (lt) und feldfeuchter (ff) Proben aus Testgebieten in Iowa und Minnesota (USA) für die Quantifizierung mehrerer Bodenparameter mittels PLSR. Für beide Probensets kennzeichnen die Ergebnisse der Kreuzvalidierung passable Genauigkeiten für Ton und für organischen Kohlenstoff. Feuchte Bodenproben sind ihren Ergebnissen zufolge für den Parameter Ton mit geringfügig höheren Ungenauigkeiten behaftet (Ton: $R^2_{lt}=0,76$, $RPD_{lt}=2,02$; $R^2_{ff}=0,74$, $RPD_{ff}=1,94$). Für organischen Kohlenstoff sind die Unterschiede vernachlässigbar (OC: $R^2_{lt}=0,91$, $RPD_{lt}=3,26$; $R^2_{ff}=0,90$, $RPD_{ff}=3,19$). Waiser et al. (2007) schlussfolgern hingegen aus Laborexperimenten an 72 Böden aus Texas, dass Bodenaggregation und natürliche Heterogenität die Vorhersagegenauigkeit für Ton nicht beeinträchtigen, wohl aber Unterschiede im Bodenwassergehalt. Während der RMSE in ihrer Arbeit für getrocknete Böden 4,1% Ton beträgt, beläuft sich der RMSE für feldfeuchte Böden auf 6,1% Ton. Am gleichen Probenset konstatieren Morgan et al. (2009) im Unterschied zu Chang et al. (2005) auch negative Effekte variabler Bodenwassergehalte bei der Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes ($RMSE_{lt,in-situ}=0,41\%$ OC; $RMSE_{ff,in-situ}=0,57\%$ OC)¹⁴. In keiner Übereinstimmung mit all diesen Arbeiten stehen die Resultate von Fystro (2002) auf Grundlage norwegischer Bodenproben. Er schlussfolgert, dass mit feuchten Proben tendenziell genauere Vorhersagen möglich sind. Stenberg (2010) untersucht die Effekte einer gezielten Wiederbefeuchtung von Proben mit einheitlichen Wasservolumina und kommt zu der Erkenntnis, dass dies eine substantielle Verbesserung für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes bewirkt, sich aber weniger markant in den Vorhersagen des Tongehaltes niederschlägt. Rückschlüsse auf die Wirkung variabler Bodenwassergehalte, wie sie in-situ zu erwarten sind, lassen sich aus seinen Ergebnissen nicht ableiten. Die Ergebnisse von Chang et al. (2005), Waiser et al. (2007), Morgan et al. (2009) und Fystro (2002) sind widersprüchlich. Ferner wird in keiner der aufgeführten Studien die Verfahrensspezifität der Resultate hinterfragt sondern ausschließlich Kalibrationen und Validationen mittels PLSR betrachtet. Um diese offenen Fragen zu klären ist daher mehr Wissen um die Wirkung von Bodenwasser auf das Spektralsignal sowie deren Einfluss auf die Prognosefähigkeit der VNIR-SWIR-Spektroskopie dringend vonnöten (vgl. auch Malley et al., 2004; Reeves, 2010).

¹⁴ RMSE-Werte sind in Morgan et al. (2009) auf ein Zehntel [$g \cdot kg^{-1}$] genau angegeben.

2.2 Quantitative Abbildende Spektroskopie von Böden

Die ersten Arbeiten, die sich mit der räumlich expliziten Schätzung von Bodenparametern aus hyperspektralen Bilddaten auseinandersetzen, wurden von Krüger et al. (1998), Chabrillat et al. (2002), Ben-Dor et al. (2002) und Galvão et al. (2001) veröffentlicht. In der Zwischenzeit haben weitere Studien das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie zur Schätzung des Ton- oder des organischen Kohlenstoffgehaltes untersucht (z.B. Uno et al., 2005; Selige et al., 2006; Gomez et al., 2008a,b; Stevens et al., 2008, 2010; vgl. auch Anhang G 1, Anhang G 2). Beispielsweise zeigen Selige et al. (2006), dass die Schätzung des Tongehaltes mit Bilddaten des Sensors HyMap in einem landwirtschaftlichen geprägten Testgebiet in Sachsen-Anhalt mit Standardfehlern zwischen 3,8% und 4,2% Ton möglich ist und zwischen 65% und 71% der Variabilität erklärt werden können. Für den organischen Kohlenstoffgehalt (OC) im Boden können sie mit dem gleichen Datensatz zwischen 86% und 90% der Variabilität erklären und erzielen Standardfehler zwischen 0,22% und 0,29% OC¹⁵. In einem Testgebiet in Belgien erzielen Stevens et al. (2006) ähnliche Ergebnisse mit Bilddaten des kanadischen Hyperspektralsensors CASI (405-905nm) ($R^2=0,85$, $RMSE=0,51\%$ OC)¹⁶. Die Zahl der Studien ist aber noch immer begrenzt und viele offene Probleme bestehen weiterhin (Ben-Dor et al., 2009). Schwierigkeiten treten unter anderem im Zusammenhang mit der radiometrischen Korrektur des Sensors und atmosphärischen Effekten (Lagacherie et al., 2008), Variationen im Wassergehalt der Böden (z.B. Stevens et al., 2006; vgl. auch Kap. 2.1), Variationen im Reflexionsverhalten von Böden in Abhängigkeit von der Beobachtungs- und Beleuchtungsgeometrie (Stevens et al., 2010) und Vegetation bzw. Pflanzenrückständen (Kooistra et al., 2003a) auf. Die Bedeckung des Bodens durch Vegetation oder Pflanzenrückstände ist in landwirtschaftlichen Ökosystemen ein besonders großes Problem für die quantitative Abbildende Spektroskopie, da die Ackerflächen die meiste Zeit des Jahres mit Feldfrüchten, abgereiften Pflanzenbeständen oder Ernterückständen bedeckt sind. Nur in sehr kurzen Zeitfenstern von maximal zwei bis drei Wochen im Frühjahr und Herbst sind die Flächen mehr oder weniger frei von Vegetation.

Verschiedene Autoren haben an Laborspektren Untersuchungen zum Einfluss von Vegetation auf das Reflexionssignal und die Absorptionseigenschaften von Gesteinsmaterialien und Böden angestellt. Siegal & Goetz (1977) zufolge maskieren bereits 10% grüne Vegetation charakteristische Absorptionsbanden von Gesteinsmineralen bis zur Unkenntlichkeit. Trockene Vegetation hat ihren Erkenntnissen zufolge lediglich Einfluss auf die Albedo. Murphy & Wadge (1994) und Murphy (1995) kommen zu gegensätzlichen Ergebnissen in einer Studie zum Reflexionsverhalten verschiedener Bodentypen eines ariden Gebietes. Sie zeigen, dass grüne Vegetation zwar das Rückstrahlvermögen im SWIR in größerem Ausmaß reduziert als trockene Vegetation, letztere aber substantielle Veränderungen der Absorption nahe 2200nm in Bezug auf Position, Tiefe und Lage der Schultern hervorruft. Bartholomeus et al. (2011) und Ouerghemmi et al. (2011) widmen sich der Frage, welche Konsequenzen sich hierdurch für die quantitative Reflexionsspektroskopie ergeben und analysieren zu diesem Zweck lineare spektrale Mischungen aus Boden und grüner Vegetation. Ouerghemmi et al. (2011) berichten, dass bis zu 10% grüne Vegetation kaum Einfluss auf Schätzungen des Tongehaltes haben. Bei mehr als 15% steigt der Fehler der Schätzung zunehmend an. Schätzungen des organischen Kohlenstoffgehaltes werden bereits bei einem Anteil von ca. 5% Vegetation hochgradig ungenau (Bartholomeus et al., 2011). Erkenntnisse zum Einfluss trockener Pflanzenbestände auf die Vorhersagegenauigkeit der Bodenparameterschätzungen liegen bisher nicht vor.

Um den negativen Einfluss von Vegetation auf das Reflexionssignal und ergo die Schätzung von Bodenparametern zu minimieren, wurden verschiedene Strategien entwickelt. Bartholomeus et al. (2007) können Fehler bei der Schätzung des Eisengehaltes im Boden durch eine Kombination verschiedener Vegetationsindizes verringern. Allerdings ist diese Vorgehensweise eng an die Gegebenheiten ihrer Studie gebunden. Rodger & Cuhady (2009) präsentieren eine vielversprechende Methode zur Abschwächung des Vegetationseffektes auf die Absorptionstiefe, die *Vegetation Corrected Continuum Depth* (VCCD). Dieses Verfahren beschränkt sich auf Absorptions-

¹⁵ RMSE-Werte sind in Selige et al. (2006) auf zwei Zehntel [%] genau angegeben.

¹⁶ RMSE-Werte sind in Stevens et al. (2006) auf ein Zehntel [$g \cdot kg^{-1}$] genau angegeben.

erscheinungen Al-OH tragender Minerale nahe 2200nm und kann nicht für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden angewandt werden. Bartholomeus et al. (2011) machen sich das Prinzip der spektralen Entmischung zu nutze, um den störenden Vegetationsanteil im Spektralsignal von Mischpixeln im Vorfeld zu eliminieren. Die Methode liefert zufriedenstellende Ergebnisse für ihre spezifischen Untersuchungsflächen, d.h. vegetationsbedeckte Maisfelder. Da der Erfolg des Verfahrens wesentlich von der Qualität der Entmischung abhängt, muss seine Eignung in größeren Gebieten mit einer höheren spektralen Variabilität aber erst noch geprüft werden. Einen *Blind Source Separation* (BSS) Algorithmus zur Isolation des Bodensignals aus Boden-Vegetationsmischungen testen Ouerghemmi et al. (2011). Dieses Verfahren arbeitet in 40% der Testfälle fehlerfrei. Verbesserungen sind den Autoren zufolge vor allem im Selektionsprozess erforderlich, wofür ein besseres Verständnis des BSS Algorithmus erst noch entwickelt werden muss. Eine völlig andersartige Herangehensweise liegt der Studie von Kooistra et al. (2003b) zugrunde, die das Reflexionssignal von Gras als Proxy für die Schätzung der Zinkkonzentration im Boden verwenden. Die wahrscheinlich am weitesten verbreitete Strategie zur Beseitigung des negativen Vegetationseinflusses, und vermutlich die Sicherste in Bezug auf die Vorhersagegenauigkeit der Bodenparameterschätzungen, ist die vollständige Maskierung vegetationsbedeckter Flächen und die Begrenzung der Parameterschätzungen auf unbedeckten Boden (z.B. Lagacherie et al., 2008; Gomez et al., 2008b; Stevens et al., 2008). Für landwirtschaftliche Ökosysteme bedeutet dieses Vorgehen, dass für einen beachtlichen Teil des Ackerlandes keine Bodeninformationen gewonnen werden können und der entscheidende Vorteil der Abbildenden Spektroskopie, großflächig Bodeninformationen zur Verfügung zu stellen, nicht oder nur in Grenzen ausgeschöpft werden kann. Eine Alternative hierzu kann voraussichtlich die Auswertung von Zeitreihen bieten, d.h. mehreren Bilddatensätzen ein und desselben Untersuchungsgebietes unterschiedlicher Aufnahmezeitpunkte. Diese Möglichkeit wurde bisher jedoch noch nicht untersucht.

2.3 Methoden in der quantitativen Spektroskopie von Bodenparametern

Bei einer Durchsicht der Literatur zum Thema quantitative Reflexionsspektroskopie von Böden wird schnell deutlich, dass ein großes Spektrum an Methoden für die Schätzung von Bodenparametern eingesetzt wird (vgl. Anhang G 1, Anhang G 2). Dazu zählen verschiedene multivariate statistische Verfahren, wie *Partial Least Squares Regression* (PLSR) (z.B. Reeves et al., 1999; Dunn et al., 2002; Kooistra et al., 2003a; Brown et al., 2005; Stevens et al., 2006; Cohen et al., 2007), multiple lineare Regression (MLR) bzw. schrittweise multiple lineare Regression (SMLR) (z.B. Dalal & Henry, 1986; Ingleby & Crowe, 2000; Selige et al., 2006), *Penalized Spline Regression* (PSR) und *Support Vector Machine* (SVM) Regression (Stevens et al., 2010). Weitere Verfahren sind die Hauptkomponentenregression (PCR) (z.B. Chang et al., 2001; Pirie et al., 2005) sowie *Multivariate Adaptive Regression Splines* (MARS) (Shepherd & Walsh, 2002). Bei größeren Datensätzen werden häufig Data-Mining Methoden zur Anwendung gebracht. Diese umfassen Neuronale Netzwerke (ANN) (Daniel et al., 2003; Fidêncio et al., 2002), Entscheidungsbäume (RT, BRT, CT)¹⁷ und Entscheidungswälder (RF) (z.B. Brown et al., 2006; Sankey et al., 2008). Während die genannten Verfahren den gesamten Wellenlängenbereich zur Auswertung heranziehen, fokussieren andere Arbeiten auf die Parametrisierung einzelner Absorptionsmerkmale nach dem *Continuum Removal* Verfahren (CR) von Clark & Roush (1984), dem sich eine lineare Regression anschließt (z.B. Palacios-Orueta & Ustin, 1998; Gomez et al., 2008b; Rodger & Cuhady, 2009; Richter et al., 2009). Welches Verfahren sich unter welchen Voraussetzungen und für welchen Parameter am Besten eignet, ist bisher eine ungelöste Frage. Einige Autoren haben versucht, diesen Sachverhalt durch einen Verfahrensvergleich zu ergründen. Den meisten dieser Studien liegen sehr umfangreiche laborspektroskopische Datensätze zugrunde, die zwischen 554 und 4184 Bodenproben umfassen. Von fünf multivariaten Methoden (SMLR, PCR, PLSR, RT, CT) erweist sich in der Studie von Vasques et al. (2008) die PLSR als die zweckdienlichste Technik zur Schätzung des organischen

¹⁷ Hierzu gehören einfache Regressionsbäume (*Regression Trees* – RT), *Boosted Regression Trees* (BRT) sowie Komitees von Entscheidungsbäumen (*Committee Trees* – CT).

Kohlenstoffgehaltes. Sehr gute Ergebnisse werden aber auch mit der SMLR erreicht. PLSR, MARS, RF, BRT und SVM sind Gegenstand einer Untersuchung von Viscarra Rossel & Behrens (2010). Sie erzielen die besten Resultate durch den Einsatz von SVM, dicht gefolgt von PLSR und MARS, während die Entscheidungsbaumtechniken (RF, BRT) am schlechtesten abschneiden. Im Gegensatz dazu kommen Brown et al. (2006) zu der Erkenntnis, dass sich BRT besser eignen als die PLSR. Cohen et al. (2007) stellen fest, dass die Effizienz verschiedener Methoden eine Frage des Zielparameters ist. Für die Abbildende Spektroskopie liegen zum derzeitigen Stand drei Arbeiten vor, die verschiedene Quantifizierungsverfahren testen (Gomez et al., 2008b; Selige et al., 2006; Stevens et al., 2010). Aus einer Gegenüberstellung von CR und PLSR wird deutlich, dass die Vorhersagegenauigkeit für den Ton- und den Carbonat-Kohlenstoffgehalt auf Basis von hyperspektralen Bilddaten des Sensors HyMap größer ist, wenn ein komplexeres Verfahren, die PLSR, eingesetzt wird (Gomez et al., 2008b). Selige et al. (2006) zeigen wiederum, dass für die Parameter Ton und organischer Kohlenstoff die MLR der PLSR überlegen ist¹⁸. Ein Aspekt, der die Verwendung der MLR für die Schätzung von Bodenparametern aus Reflexionsspektren sehr interessant macht, ist, dass relevante Modellvariablen, d.h. Wellenlängen, einfach identifiziert werden können und die Ergebnisse somit direkt interpretierbar sind. In Verfahren wie der PLSR, oder auch der PCR, ist dagegen eine Interpretation der Zusammenhänge zwischen Bodenparameter und Modellparametern, respektive Wellenlängen, durch die ihnen innewohnenden Datentransformationen weitaus schwieriger (Ingleby & Crowe, 2000). Einen Test dreier multivariater Kalibrationsverfahren veröffentlichte Stevens et al. (2010) auf der Grundlage von AHS-160-Daten. Sie vergleichen PLSR, PSR und SVM. Lokale Kalibrationsmodelle sind generell die besseren Schätzer mit den größeren Vorhersagegenauigkeiten. Hier ergeben PLSR und PSR die besten Ergebnisse. Auf globaler Ebene, für den Gesamtdatensatz, erzielen Stevens et al. (2010) die besten Resultate mit SVM. Die vorhandenen Studien zum Vergleich verschiedener Quantifizierungsmethoden veranschaulichen, dass es durchaus sinnvoll ist, mehrere Verfahren auf ihre Zweckmäßigkeit und Eignung für die Bodenparameterschätzung zu prüfen und auf Grundlage dessen ein Verfahren auszuwählen. Ferner kann dies dazu beitragen, weitere Erkenntnisse über Fähigkeiten und Grenzen der Verfahren für die quantitative Reflexionsspektroskopie von Böden zu gewinnen.

2.4 Abbildende Spektroskopie für den Bodenschutz

Die unsachgemäße, nicht standortangepasste landwirtschaftliche Nutzung des Bodens ist eine wesentliche Ursache für die Bodendegradation in Europa. Dabei geht etwa die Hälfte der gesamten degradierten Fläche auf Bodenerosion durch Wasser zurück (Bridges & Oldeman, 1999). Bislang wurden vor allem multispektrale Fernerkundungsdaten (Landsat TM, ETM+), Luftbilder sowie die Daten der Mikrowellen-Fernerkundung (z.B. ERS) verwendet, um erosionsrelevante Fragestellungen mithilfe der Fernerkundung zu beantworten (Metternicht et al., 2010; z.B. Sujatha et al., 2000; Klisch, 2003; Tahir et al., 2010; Meusburger et al., 2010). Hyperspektrale Bilddaten fanden hierfür bisher nur in einem überschaubaren Umfang Einsatz. Die wenigen vorhandenen Studien setzen sich mit der Problematik der Bodenerosion auf unterschiedlichste Weise auseinander. Hill et al. (1995) generieren eine Karte des Bodenerosionsgrades aus AVIRIS-Bilddaten eines Studiengebietes in Südfrankreich nach dem Konzept der linearen spektralen Entmischung mit drei Erosionskategorien (ungestört, geringfügig erodiert, stark erodiert). Ihre Methodik basiert auf der Annahme, dass der Zustand und die Beschaffenheit eines Bodens als Mischreihe des entwickelten Bodensubstrats und seinem Ausgangsmaterial beschrieben werden kann und spezifische spektrale Charakteristika aufweist. Entscheidendes Moment ihrer Methodik ist die Identifikation geeigneter Endmember¹⁹ und nachfolgende Parametrisierung des Mischmodells. Hill & Schütt (2000) schlagen für ein Untersuchungsgebiet in Südost-Spanien mit stark carbonathaltigen Oberböden²⁰ einen Ansatz zur Ausweisung von Flächen aktiver Erosion vor, der sich auf den organischen Kohlenstoffgehalt im

¹⁸ Bezieht sich auf den RMSECV.

¹⁹ Endmember bezeichnen spektral „reine“ Spektren einer Oberflächenklasse, deren Spektralsignal sich nicht aus dem Spektralsignal mehrerer Oberflächenklassen zusammensetzt (Mischspektrum/Mischpixel).

²⁰ Maximaler CaCO₃-Gehalt beträgt 74,6%.

Boden stützt. Sie können zeigen, dass eben dieser umgekehrt proportional zur Häufigkeit gering verwitterten Ausgangsmaterials im Oberboden ist. Bereiche mit geringen Anteilen organischer Bodensubstanz bzw. organischem Kohlenstoff werden auf dieser Grundlage als Zonen aktiver Erosion auskartiert. Für die Schätzung der organischen Kohlenstoffkonzentration aus VNIR-SWIR-Spektren nutzen sie eine Polynomfunktion dritten Grades zur Parametrisierung des Kurvenverlaufes zwischen 350-1400nm. In modifizierter Form wenden sie ihren Ansatz erfolgreich auf drei Landsat-Datensätze an. Die Kartierung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit hyperspektralen Bilddaten des Sensors HyMap in eben diesem Untersuchungsgebiet demonstrieren Jarmer et al. (2007). Ihre Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes basiert auf einer Transformation der Spektralinformation in den CIE-Farbraum²¹ ($R^2=0,65$, $RMSE=0,147\%$ OC). Einem ähnlichen Prinzip folgt die Arbeit von Galvão et al. (2001), die auf AVIRIS-Daten beruht. Ausgehend von der Tatsache, dass tropische Böden im Oberboden durch hohe organische Kohlenstoffanteile gekennzeichnet sind, die beim Übergang in tiefere Bodenhorizonte abnehmen und durch große Mengen Eisenoxid und Ton substituiert werden, schlagen sie vor, Karten der Fe_2O_3 - und Al_2O_3 -Konzentration als Indikator von Oberbodenabtrag durch Erosion zu nutzen.

Während die genannten Arbeiten ausschließlich den Degradationszustand beschreiben, befassen sich andere Autoren mit der Ausweisung erosionsgefährdeter Flächen bzw. der Erosionsgefahr an sich. Im Gegensatz zur vorherigen Methode gestattet dieses Vorgehen einen aktiven Schutz des Bodens vor Bodenerosion durch gezielte Präventionsmaßnahmen. Basierend auf Untersuchungen zum spektralen Verhalten von Bodenkrusten israelischer Böden von Ben-Dor et al. (2003) und Goldshleger et al. (2001) unternehmen Ben-Dor et al. (2004) eine systematische Studie zur Kartierung von Infiltrationsraten über Lössböden in Israel aus hyperspektralen Bilddaten des VNIR-Sensors AISA. Diese gründet auf einer sehr guten Korrelation zwischen der Infiltrationsrate und einem spektralen Indikator, dem NSA (*Normalized Spectral Area*; $R^2_{\text{Labor}}=0,91$). Der NSA beschreibt die Fläche unterhalb des Spektrums, das sich durch Verhältnisbildung zweier Spektren, eines verkrusteten und eines nicht verkrusteten Bodens ergibt. Hohe Infiltrationsraten spiegeln gute Bodenverhältnisse ohne Bodenverkrustung und einem geringen Erosionsrisiko wider. Geringe Infiltrationsraten repräsentieren einen starken Verkrustungsgrad mit hohem Erosionsrisiko. Durch Übertragung ihrer Methode von Laborspektren auf einen AISA-Bilddatensatz können gefährdete Bereiche lokalisiert und für Erosionsschutzmaßnahmen ausgewiesen werden. Das Potenzial der Hyperspektralfernerkundung zur Kartierung von Bodenkrusten ist auch Thema einer Arbeit von de Jong et al. (2011). Sie zeigen, dass mithilfe einer linearen spektralen Entmischung Bodenkrusten auf Brachen und Ackerflächen identifiziert werden können. Für Gebiete, die stark von Waldbränden betroffen sind, präsentieren Kokaly et al. (2007), Lewis et al. (2008) und Finley & Glenn (2010) verschiedene Klassifikationsverfahren auf der Basis von AVIRIS-, Probe-1- und HyMap-Daten, die eine differenzierte Kartierung verbrannter, stark hydrophober und damit erosionsgefährdeter Böden gestatten. Nicht die Eigenschaften des Bodens, sondern die Bedeckung des Bodens durch Kulturpflanzen ziehen Bannari et al. (2006) als ein Maß der aktuellen Erosionsgefährdung heran. Bachmann et al. (2005) und Bachmann (2007) stellen in diesem Zusammenhang einen weitgehend automatisierten Ansatz zur Ableitung von Bodenbedeckungsgraden in semiariden Naturräumen Spaniens aus hyperspektralen Bilddaten vor.

Wie die vorherigen Ausführungen zeigen, werden Aussagen zum Erosionsgrad oder der Erosionsgefährdung bislang entweder direkt aus dem Spektralsignal abgeleitet oder beruhen auf Schlussfolgerungen anhand einzelner Bodenparameter, wie dem organischen Kohlenstoffgehalt im Boden (Hill & Schütt, 2000). Bodenkundliche Rechenmodelle oder komplexe Erosionsmodelle finden bislang keine Verwendung, um das Informationspotenzial hyperspektraler Bilddaten für den Bodenschutz auszuschöpfen. Ihr Einsatz könnte das Anwendungsspektrum für den Bodenschutz möglicherweise erweitern und das Aussagepotenzial erhöhen.

²¹ CIE: Commission Internationale de l'Éclairage

3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

3.1 Zielsetzung

Der Stand der Forschung hat gezeigt, dass die quantitative Spektroskopie von Böden in den letzten 10 Jahren eine beachtliche Entwicklung durchgemacht hat. Besonders die quantitative Abbildende Spektroskopie (IS) hat im Hinblick auf bevorstehende, operationelle, hyperspektrale Satellitenmissionen einen großen Schub erlebt. Dessen ungeachtet existiert nach wie vor nur eine überschaubare und begrenzte Zahl an Studien, die bisher das Potenzial dieser neuen Technologien für den Bodenschutz, die Präzisionslandwirtschaft oder Fragen des globalen Klimawandels untersucht haben. Weitere Arbeiten sind erforderlich, um bestehende Probleme zu analysieren, Lösungsansätze zu formulieren und somit die Leistungsfähigkeit der IS vollständig in Wert zu setzen (Ben-Dor et al., 2009). Die vorliegende Arbeit soll hierzu einen Beitrag leisten.

Das übergeordnete Ziel der Arbeit ist es, das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie für die Ableitung erosionsrelevanter Bodenparameter auf Ackerflächen am Beispiel eines intensiv landwirtschaftlich genutzten Ökosystems im Nordosten Deutschlands (Testfeld DEMMIN) zu analysieren. Hierfür finden Untersuchungen mit drei verschiedenen Quantifizierungsmethoden (*Continuum Removal* - CR, multiple lineare Regression - MLR, *Partial Least Squares Regression* - PLSR) auf unterschiedlichen räumlichen Ebenen und in unterschiedlichen Messumfeldern mit Laborspektren (LS), Feldspektren (FS) und hyperspektralen Bilddaten (IS) des Sensors HyMap aus drei Befliegungskampagnen (2004, 2005, 2008) statt. Im Zentrum der Betrachtungen in dieser Arbeit stehen der organische Kohlenstoffgehalt des Bodens sowie der Tongehalt. Laborspektroskopische Untersuchungen sollen einerseits sicherstellen, dass ein vertrauenswürdiger Zusammenhang zwischen den interessierenden physikalisch-chemischen Bodeneigenschaften und dem Spektralsignal vorausgesetzt werden kann. Andererseits gestatten sie eine gezielte Analyse einzelner Einflussgrößen unter Ausschluss anderer Störfaktoren. Die vorliegende Arbeit setzt den Schwerpunkt hier auf den Einfluss des Bodenwassergehaltes, betrachtet aber auch eine Reihe anderer Teilaspekte (siehe weiter unten im Text). Feldspektroskopische Untersuchungen stellen einen Zwischenschritt auf dem Weg zur Abbildenden Spektroskopie dar. Sie sollen Aufschluss geben, in welchem Maße unter in-situ Bedingungen Komplikationen zu erwarten sind und wie sich diese unter Umständen vermeiden oder mindern lassen. Mit der Abbildenden Spektroskopie erfolgt der entscheidende Schritt von der punktbasierten quantitativen Information hin zu einer flächenbasierten Aussage, der räumlich expliziten Schätzung der Bodenparameter.

Abschließend soll ein Weg aufgezeigt werden, der es ermöglicht, aus den fernerkundlich gewonnenen Bodenparameterschätzungen schnell und effizient Informationen zur Erosionsanfälligkeit landwirtschaftlicher Nutzflächen und somit Informationen zum Bodenschutz bereitzustellen. Dieser Ansatz basiert auf der Ableitung der gesättigten Wasserleitfähigkeit des Bodens k_f unter der Verwendung von bodenkundlichen Rechenmodellen, die als Pedotransferfunktionen (PTF) bekannt sind.

Die zentralen Fragestellungen der Arbeit können wie folgt zusammengefasst werden:

- Welche neuen Möglichkeiten bietet die Analyse hyperspektraler Bilddatensätze aus unterschiedlichen Jahren für die räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern in landwirtschaftlichen Ökosystemen? Welche Rolle spielt der Aufnahmezeitpunkt der Bilddaten, wie hoch ist die zeitliche Stabilität der vorliegenden empirischen Modelle und welche Gültigkeit besitzen sie in der Fläche?
- Können reflexionsspektroskopische Methoden herkömmliche Laboranalyseverfahren ersetzen und welchen Mehrwert bietet die Abbildende Spektroskopie im Vergleich zu existierenden, thematischen Bodenkarten?

- Welche Leistungsfähigkeit haben die hier verwendeten Kalibrationsmethoden (CR, MLR, PLSR) für die Abbildende Spektroskopie sowie die quantitative Labor- und Feldspektroskopie? Wodurch zeichnen sich die einzelnen Verfahren auf den betrachteten räumlichen Ebenen und in den unterschiedlichen Messumgebungen aus?
- Welche spektralen Modifikationen werden durch Wasser hervorgerufen und wie wirken sich diese auf die Quantifizierung der Bodenparameter aus VNIR-SWIR-Reflexionsspektren aus?
- Welche Komplikationen sind unter in-situ Bedingungen zu erwarten und in welcher Reihenfolge der Gewichtung? Was sind mögliche Lösungsansätze zur Vermeidung oder Minderung dieser Komplikationen?
- Sind PTF zur Ableitung des bodenhydrologischen Kennwertes k_f aus den Bodenparameter-schätzungen der Abbildenden Spektroskopie geeignet und welche Möglichkeit bieten sie, Aussagen zur Erosionsanfälligkeit des Bodens zu treffen?

Über diese zentralen Fragestellungen hinaus beleuchtet die Arbeit weitere Teilaspekte der quantitativen Reflexionsspektroskopie von Böden, die bisher nicht oder nur unzureichend geprüft wurden. Ein Kapitel widmet sich der Diskrepanz zwischen der physikalischen Tonfraktion des Bodens, welche auf einer Einteilung der Korngrößenfraktionen anhand des Äquivalentdurchmessers beruht, und dem Tonmineralanteil im Boden, welcher auf einer Zuordnung nach chemischen und strukturellen Eigenschaften basiert. Ferner wird der Einfluss photosynthetisch nicht aktiver Vegetation auf die Vorhersagegenauigkeit des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes an spektralen Boden-Vegetationsmischungen analysiert. Es wird außerdem der Frage nachgegangen, welche Implikationen im Zusammenhang mit der spektralen Bandbreite zukünftiger satellitengetragener Hyperspektralmissionen zu erwarten sind und inwiefern eine umfassende Beschreibung der Korngrößenfraktionen des Feinbodens aus hyperspektralen Bilddaten über bestehende Interkorrelationen zwischen den Bodenparametern zu realisieren ist. Letztere ist vor allem für weiterführende Aussagen zur Erosionsanfälligkeit landwirtschaftlicher Flächen von Bedeutung.

Der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit liegt somit auf der quantitativen Reflexionsspektroskopie von Böden. Mit der Assimilation der fernerkundlich gewonnenen Bodenparameter in bodenkundliche Rechenmodelle, die die Abschätzung bodenhydraulischer Kennwerte gestatten, soll exemplarisch das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie als ergänzende oder alternative Methode zur Parametererhebung für die Erosionsmodellierung und im Allgemeinen für Prozessmodelle aufgezeigt werden.

3.2 Aufbau der Arbeit

Die vorliegende Arbeit ist in drei große Teilbereiche gegliedert. Der erste Teilbereich umfasst Kapitel 4 bis 6 und enthält eine komprimierte Zusammenschau der theoretischen Grundlagen der Arbeit (Kap. 4), eine Übersicht zur Charakteristik des Untersuchungsgebietes (Kap. 5) sowie eine Darstellung der verwendeten Datensätze und Methoden (Kap. 6). Der zweite Teilbereich, Kapitel 7, beinhaltet eine detaillierte Beschreibung der Ergebnisse. Im dritten Teilbereich, Kapitel 8, erfolgt die Diskussion der Ergebnisse.

Im Detail enthält der erste Abschnitt von Kapitel 4 (Kap. 4.1) wesentliche Gesetzmäßigkeiten der Fernerkundung. Er umfasst die fundamentalen Strahlungsgleichungen und wesentliche Elemente der Strahlungsinteraktion in der Atmosphäre und mit der Materie an der Erdoberfläche. Auf Grundlage dessen wird auf die Reflexionseigenschaften von Boden bzw. einzelner Bodenbestandteile und Vegetation eingegangen. Im Anschluss erfolgt eine kurze Darstellung zu den Eigenschaften abbildender Spektrometer. Der zweite Abschnitt, Kapitel 4.2, beinhaltet einen Überblick zu den grundlegenden Prozessen und Faktoren der Bodenerosion.

Kapitel 5 beschreibt die Lage und naturräumlichen Gegebenheiten des Untersuchungsgebietes und geht auf die aktuelle Landnutzung sowie Folgen und Risiken der Landnutzung ein.

Kapitel 6 ist in vier Unterkapitel strukturiert. Kapitel 6.1 schildert die Vorgehensweise und Rahmenbedingungen bei der Auswahl und Erhebung der Referenzproben im Gelände und führt die Analyseverfahren zur Bestimmung der physikalischen und chemischen Eigenschaften sowie der mineralogischen Zusammensetzung der Referenzproben auf. Kapitel 6.2 erläutert wesentliche Aspekte der Datenerhebung und -vorverarbeitung der Labor- und Feldspektroskopie. Daran schließt sich eine Übersicht zu den verwendeten hyperspektralen Bilddatensätzen und angewandten Korrekturverfahren an (Kap. 6.3). Die Methoden und Verfahren zur Schätzung der Bodenparameter aus den Reflexionsspektren werden in Kapitel 6.4 vorgestellt. Das letzte Unterkapitel (Kap. 6.5) umfasst eine Darstellung der eingesetzten PTF zur Ableitung von k_f .

In Kapitel 7 erfolgt zunächst eine Beschreibung der Ergebnisse der Referenzanalytik (7.1). Daran schließt sich in Kap. 7.2 die visuelle Auswertung der Spektraldaten in Bezug auf die im Fokus der Arbeit stehenden Bodenparameter und Einflussgrößen an. Hier wird auch ein übergeordneter Vergleich der Messdaten aus der Laborspektroskopie (LS), der Feldspektroskopie (FS) und der Abbildenden Spektroskopie (IS) vorgenommen. Kapitel 7.3 analysiert methodisch bedingte Fehler der LS, FS und IS. Die Quantifizierung der Bodenparameter, d.h. die Kalibrierung und Prüfung verschiedener Schätzmodelle mit Labor-, Feld- und Bildspektren steht im Mittelpunkt der Kapitel 7.4 bis 7.7. Hierbei wird mit Ausnahme der Kapitel 7.6.2, 7.7.4 und 7.7.5 immer die Tauglichkeit der drei Kalibrationsmethoden, CR, MLR und PLSR, zur Schätzung der Bodenparameter vergleichend geprüft. Die Ergebnisse der quantitativen Laborspektroskopie sind in Kapitel 7.5 erfasst. Der Zielstellung entsprechend liegt der Fokus dieses Kapitels sowohl inhaltlich als auch der Größe nach auf dem Einfluss des Bodenwassergehaltes. Die drei anderen Aspekte nehmen einen geringeren Umfang ein. In Kapitel 7.6 werden die Resultate der quantitativen Feldspektroskopie vorgestellt, wobei einerseits die Leistungsfähigkeit der Feldspektroskopie an sich geprüft wird, andererseits wird an einem reduzierten Datensatz die zeitliche Stabilität schlagspezifischer Kalibrationen getestet. Die Ergebnisse der Abbildenden Spektroskopie sind Inhalt des Kapitels 7.7. Zunächst erfolgt hier die Modellkalibration und -validation mit den HyMap-Bilddaten der Befliegungskampagne von 2005. Daran schließt sich eine vergleichende Betrachtung der Leistungsfähigkeit der drei Kalibrationsmethoden an, welche die Auswahl eines geeigneten Verfahrens für die finale, räumlich explizite Schätzung der Bodenparameter zum Ziel hat. Das selektierte Verfahren dient im weiteren Verlauf zunächst der Modellkalibration mit den Bildspektren der beiden anderen Befliegungsjahre (2004, 2008) sowie einer Machbarkeitsanalyse zur Schätzung spektral nicht aktiver Bodenparameter, der Sand- und Schlufffraktion des Bodens, aus den HyMap-Bilddaten. Diese erfolgt mit Hinblick auf eine umfassende Beschreibung der Korngrößenfraktion des Bodens. Kapitel 7.8 bespricht die Ergebnisse der räumlich expliziten Schätzung der Bodenparameter. Kapitel 7.9 beinhaltet die Untersuchungen zur Assimilation der fernerkundlich gewonnenen Bodenparameter in PTF zur Ableitung eines bodenhydrologischen Kennwertes, der eine entscheidende Rolle für das Infiltrationsverhalten von Böden und damit ihrer Anfälligkeit gegenüber Bodenerosion spielt.

In Kapitel 8, das in vier Abschnitte unterteilt ist, werden die Ergebnisse der Untersuchungen in Bezug auf die zentralen Fragestellungen der Arbeit diskutiert. Der erste Abschnitt setzt sich mit den Experimenten aus der Labor- und Feldspektroskopie auseinander (Kap. 8.1). Im zweiten Abschnitt, Kapitel 8.2, werden verschiedene Sachverhalte der Abbildenden Spektroskopie erörtert, so unter anderem die zeitliche Stabilität der Kalibrationsmodelle, die Validität der räumlich expliziten Bodenparameterschätzungen sowie Grenzen und Möglichkeiten des präsentierten Ansatzes. Ferner wird ein Vergleich zu existierenden thematischen Bodenkarten gezogen. Im Fokus des Kapitels 8.3 steht die Leistungsfähigkeit der verwendeten Kalibrationsmethoden für die quantitative Reflexionsspektroskopie von Böden in unterschiedlichen Messumfeldern und räumlichen Ebenen. Inwiefern die quantitative Reflexionsspektroskopie als Alternative zu herkömmlichen Laboranalyseverfahren eingesetzt werden kann, ist Thema des Kapitels 8.4. Abschließend wird in Kapitel 8.5 das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie für den Bodenschutz exemplarisch anhand der Ergebnisse aus Kapitel 7.9 diskutiert.

Einen schematischen Überblick zur Vorgehensweise in der Arbeit gibt Abb. 3.2.1.

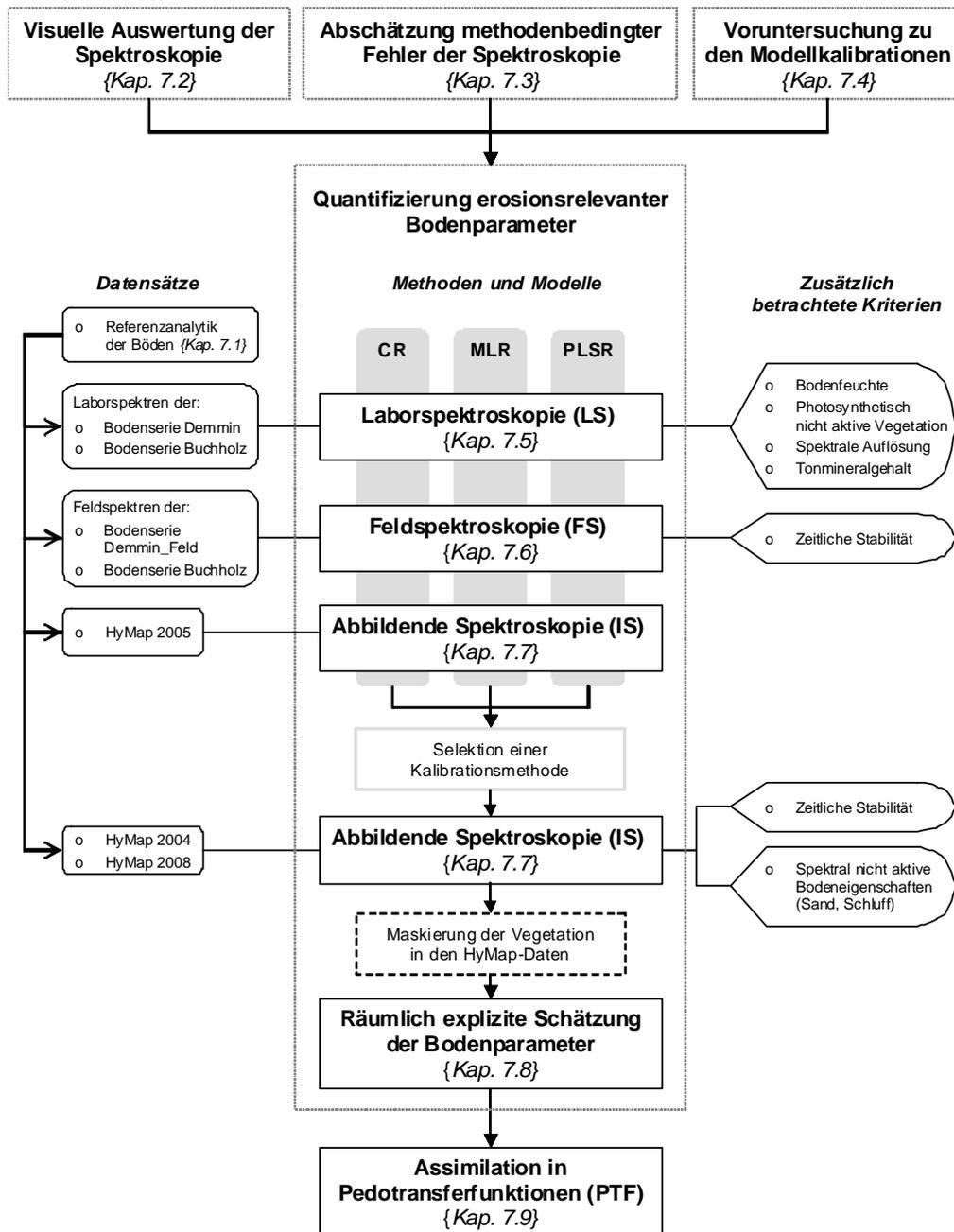


Abb. 3.2.1: Übersicht zur Vorgehensweise in der Arbeit, den verwendeten Datensätzen, Methoden und Modellen sowie den zusätzlich betrachteten Kriterien. In geschweiften Klammern sind die Nummern der entsprechenden Ergebniskapitel aufgeführt.

4 Grundlagen der Spektroskopie und Bodenerosion

4.1 Spektroskopie und Fernerkundung

4.1.1 Begriffsklärung und Definition

In der Literatur existiert eine Reihe von Begriffen in den Themenfeldern Spektroskopie und Fernerkundung, die häufig gleichbedeutend verwendet werden. Hierzu zählen u. a. die Termini Spektroskopie, Spektrometrie und Spektrophotometrie, Abbildende Spektrometrie, Hyperspektralfernerkundung oder Ultraspektralfernerkundung. Eine Klärung dieser Begrifflichkeiten zu Beginn der vorliegenden Arbeit erscheint daher sinnvoll.

Fernerkundung bezeichnet ganz allgemein die Gewinnung von Informationen mittels der von Objekten reflektierten oder emittierten elektromagnetischen Strahlung, ohne mit diesen direkt in Berührung zu stehen (Lillesand et al., 2004). Ist die dazu nötige Strahlungsenergie natürlicher Herkunft (Sonne, Erde), spricht man von passiven Fernerkundungssystemen. Aktive Fernerkundungssysteme nutzen eigene Strahlungsquellen (z.B. Radar). In der vorliegenden Arbeit werden ausschließlich Daten passiver Fernerkundungssysteme genutzt.

Spektroskopie bezeichnet die Wissenschaft von der Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen Materie (Gas, Flüssigkeit, Festkörper) und des von ihr emittierten, reflektierten oder gestreuten Lichtes als Funktion der Wellenlänge (Clark, 1999)²². Reflexionsspektroskopie (*reflectance spectroscopy*) betrachtet ausschließlich den reflektiven Wellenlängenbereich ohne Beachtung der thermischen Emission. Spektrometrie (*spectrometry*), abgeleitet von Spektrophotometrie (*spectrophotometry*) beschäftigt sich mit der Messung von Photonen als Funktion der Wellenlänge. Spektrometrie wird als Terminus aber auch für andere Verfahren verwendet, die nicht auf die Energie sondern auf die Masse von Teilchen abzielen (Massenspektrometrie). Messinstrumente, die elektromagnetische Wellenspektren aufzeichnen, werden Spektrometer (*spectrometer*), Spektrophotometer (*spectrophotometer*) oder auch Spektrograph (*spectrograph*) genannt. In der Fernerkundung hat sich der Begriff Spektrometer durchgesetzt.

Die berührungsfreie, simultane Aufnahme von räumlich koregistrierten Bildern mit einer Vielzahl von schmalen, spektral benachbarten Bändern wird als Abbildende Spektroskopie (*imaging spectroscopy*), als Abbildende Spektrometrie (*imaging spectrometry*), als Hyperspektralfernerkundung (*hyperspectral remote sensing*) oder gelegentlich auch als Ultraspektralfernerkundung (*ultraspectral remote sensing*) bezeichnet (Schaepman et al., 2009). „Hyper-“ steht für „über, oberhalb“, „ultra-“ für „übermäßig“ und bezieht sich auf die detaillierte Wiedergabe des Spektrums in zahlreichen, schmalen Bändern im Vergleich zu den breiten Spektralbändern multispektraler Systeme. In Anlehnung an die in der englischsprachigen Literatur üblichen Termini werden in der vorliegenden Arbeit die Begriffe Laborspektroskopie (*Laboratory Spectroscopy*, LS), Feldspektroskopie (*Field Spectroscopy*, FS) und Abbildende Spektroskopie (*Imaging Spectroscopy*, IS) benutzt. Spektroskopie wird hierbei immer im Sinne von Reflexionsspektroskopie verstanden. Der Begriff „Hyperspektralfernerkundung“ wird stellenweise als analoger Terminus zur Abbildenden Spektroskopie verwendet.

4.1.2 Physikalische Grundlagen

4.1.2.1 Elektromagnetische Strahlung

Elektromagnetische Strahlung ist eine Form der Energieausbreitung, die mithilfe zweier verschiedener Modellvorstellungen beschrieben werden kann, als Welle oder als Teilchen. Der Auffassung der

²² „Spectroscopy is the study of light as a function of wavelength that has been emitted, reflected or scattered from a solid, liquid, or gas.“ (Clark, 1999)

Wellentheorie folgend, kann elektromagnetische Strahlung beschrieben werden als transversal verlaufende Welle aus oszillierenden elektrischen und magnetischen Feldern, die sich mit einer Geschwindigkeit von $2,998 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1}$ im Vakuum ausbreitet und nur durch Interaktion mit Materie „sichtbar“ wird. Sie ist gekennzeichnet durch die Wellenlänge λ [m] und die Frequenz ν [s^{-1}], die sich zueinander umgekehrt proportional verhalten:

$$c = \nu\lambda \quad (4.1.1)$$

Wechselwirkungen elektromagnetischer Wellen mit Materie auf atomarer oder molekularer Ebene können mithilfe dieses Konzeptes nicht vollständig beschrieben werden. Entsprechend der Teilchentheorie müssen elektromagnetische Wellen daher zugleich als ein Strom von Teilchen, den Photonen, gesehen werden, die über eine bestimmte Energie verfügen. Der Wellencharakter bleibt dabei vollständig erhalten. Die Energie Q [Joule, J], die ein einzelnes Photon in sich trägt kann mithilfe des planckschen Wirkungsquantums ($h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$) wie folgt berechnet werden:

$$Q = h\nu \quad (4.1.2)$$

Durch Verknüpfung von Teilchen- und Wellentheorie ergibt sich:

$$Q = \frac{hc}{\lambda} \quad (4.1.3)$$

Die Strahlungsenergie ist demnach umgekehrt proportional zur Wellenlänge. Je größer die Wellenlängen desto geringer die Energie der Photonen und vice versa.

Die Gesamtheit aller elektromagnetischen Wellen ist im elektromagnetischen Spektrum erfasst, welches in Spektral- bzw. Wellenlängenbereiche eingeteilt ist. Eine in der Fernerkundung verbreitete Abgrenzung und Terminologie der Wellenlängenbereiche ist in Tab. 4.1.1 aufgelistet, die auch in dieser Arbeit verwendet wird.

Tab. 4.1.1: Einteilung und Bezeichnung der in der Fernerkundung genutzten Bereiche des elektromagnetischen Spektrums in Anlehnung an Schowengerdt (2007). VNIR, SWIR-I und SWIR-II werden auch als reflektive Wellenlängenbereiche bezeichnet.

Spektalbereich	Akronym	Wellenlänge λ	Strahlungsquelle
Sichtbarer Bereich	VIS	0,4 – 0,7 μm	Solar
Nahes Infrarot	NIR	0,7 – 1,1 μm	Solar
Sichtbares und Nahes Infrarot	VNIR	0,4 – 1,1 μm	Solar
Kurzwelliges Infrarot	SWIR-I	1,1 – 1,35 μm 1,4 – 1,8 μm	Solar
	SWIR-II	2,0 – 2,5 μm	Solar
Mittleres Infrarot	MIR	3,0 – 4,0 μm	Solar & Thermal
		4,5 – 5,0 μm	
Thermales Infrarot	TIR	8,0 – 9,5 μm 10,0 – 14,0 μm	Thermal
Mikrowellen, Radar	-	1,0mm – 1,0m	Thermal (aktiv), Künstlich (passiv)

4.1.2.2 Strahlungsquellen

Passive Fernerkundungssensoren nutzen zwei Strahlungsquellen. Im sichtbaren Bereich bis in das kurzwellige Infrarot ist das die Sonne, im thermalen Infrarot wird die von der Erdoberfläche emittierte Strahlung einschließlich der thermalen Eigenstrahlung der Atmosphäre genutzt. Im mittleren Infrarot dient sowohl die solare Ausstrahlung als auch die emittierte terrestrische Thermalstrahlung als Strahlungsquelle (Tab. 4.1.1). Die folgenden Ausführungen konzentrieren sich entsprechend der Datengrundlage der Arbeit auf den reflektiven Wellenlängenbereich (VNIR-SWIR).

Wie viel Energie ein Körper emittiert, wird in starkem Maße von der Temperatur bestimmt und kann durch das Stefan-Boltzmann-Gesetz beschrieben werden:

$$M = \varepsilon \sigma T^4 \quad (4.1.4)$$

wobei M [$Watt \cdot m^{-2}$] die über das gesamte Spektrum abgegebene Strahlung eines Schwarzkörpers mit der Emissivität ε gleich 1 ist, σ die Stefan-Boltzmann-Konstante ($5,669 \cdot 10^{-8} Wm^{-2} K^{-4}$) und T die Temperatur in Kelvin. Die spezifische Ausstrahlung eines Schwarzkörpers als Funktion der Wellenlänge λ und der Temperatur T beschreibt das Planck'sche Strahlungsgesetz:

$$M_\lambda = \frac{2\pi^5 h c^2}{15} \frac{1}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (4.1.5)$$

Hierbei ist h das plancksche Wirkungsquantum, c die Lichtgeschwindigkeit im Vakuum und k die Boltzmann'sche Konstante ($1,380 \cdot 10^{-23} JK^{-1}$). Die spezifische Ausstrahlung M_λ erhält die Einheit $Watt \cdot m^{-2} \mu m^{-1}$. Die Wellenlänge der maximalen Ausstrahlung λ_{\max} [μm] eines Körpers wird durch das Wien'sche Verschiebungsgesetz beschrieben und ist indirekt proportional zu dessen Temperatur T :

$$\lambda_{\max} = 2898 / T \quad (4.1.6)$$

Die spezifische Ausstrahlung M_λ der Sonne (*solar radiant exitance*) gleicht in etwa der eines Schwarzkörpers (Glg. 4.1.5). Die Bestrahlungsstärke oberhalb der Atmosphäre E_λ^0 (*top-of-atmosphere solar irradiance*) kann dann dargestellt werden durch:

$$E_\lambda^0 = \frac{M_\lambda}{\pi} \times \frac{A}{d^2} \quad (4.1.7)$$

angegeben in $Watt \cdot m^{-2} \mu m^{-1}$, wobei A die Fläche der Sonnenscheibe und d die Entfernung zur Erde. Die solare Bestrahlungsstärke E_λ^0 wird beim Durchlauf der Atmosphäre zur Erdoberfläche durch Streuungs- und Absorptionsprozesse in ihrer Stärke wellenlängenabhängig verändert. Diese Einflüsse der Atmosphäre werden im folgenden Kapitel näher erläutert.

4.1.2.3 Einflüsse der Atmosphäre

Absorptions- und Streuungsprozesse in der Atmosphäre verändern die solare Strahlung auf dem Weg von der Sonne zur Erde ebenso wie auf dem Weg von der Erde zum flugzeug- oder satellitengetragenen Sensor. Die solare Bestrahlungsstärke an der Erdoberfläche (*at-surface irradiance*) berechnet sich aus der Bestrahlungsstärke E_λ^0 oberhalb der Atmosphäre korrigiert um den atmosphärischen Transmissionsgrad τ_s (*solar path atmospheric transmittance*) (dimensionslos) optisch wirksamer Atmosphärenbestandteile sowie dem Einfallswinkel der Sonne zur Erdoberfläche θ (*solar incident angle to the surface*) wie folgt:

$$E_\lambda(x, y) = \tau_s(\lambda) E_\lambda^0 \cos[\theta(x, y)] \quad (4.1.8)$$

Der Transmissionsgrad der Atmosphäre variiert in Abhängigkeit von der Wellenlänge und ihrer Zusammensetzung. Bedeutende Absorber sind Wasserdampf, Sauerstoff, Ozon und Kohlendioxid. Des Weiteren absorbieren Stickstoffdioxid und Methan einen Teil der Strahlungsenergie. Im sichtbaren bis infraroten Bereich des Spektrums wird die Sonnenstrahlung nahe $1,4 \mu m$ und $1,9 \mu m$ nahezu vollständig durch Wasserdampf und Kohlendioxid absorbiert. Weniger tiefgreifende Absorptionsbanden liegen bei $0,9 \mu m$ und $1,1 \mu m$ (Abb. 4.1.1). Diese Bereiche sind für die optische Fernerkundung nicht nutzbar. Die Streuung von Strahlungsenergie, vorrangig kurzwelliger Strahlung, wird durch Gasmoleküle mit einem Durchmesser kleiner λ/π verursacht (*Rayleigh-Streuung*). Langwellige Strahlung wird insbesondere durch Aerosole und Staubpartikel (*Mie-Streuung*) gestreut.

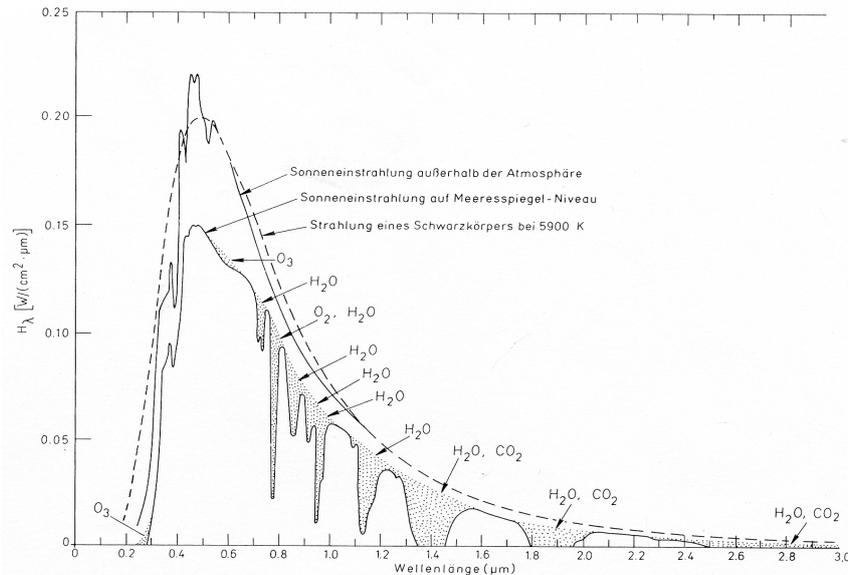


Abb. 4.1.1: Energiespektrum der Sonne und Absorptionsbanden der Erdatmosphäre mit den absorbierenden Elementen (Kronberg, 1985).

Durch Reflexion an der Erdoberfläche wird die Bestrahlungsstärke E_λ in Strahldichte L_λ umgewandelt. Unter Annahme perfekter diffuser (Lambertscher) Reflexion ist die abgegebene Strahldichte unabhängig von der Beleuchtungsrichtung und kann mithilfe eines Geometriefaktors π und des spezifischen Reflexionsgrades ρ (dimensionslos) ermittelt werden:

$$L_\lambda(x, y) = \rho(x, y, \lambda) \frac{E_\lambda(x, y)}{\pi} \quad (4.1.9)$$

wobei L_λ die Einheit $\text{Watt} \cdot \text{m}^{-2} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$ trägt. Die Annahme einer perfekten diffusen Reflexion trifft für viele natürliche Oberflächen nicht zu und kann insbesondere bei Sensoren mit großem Sichtfeld (FOV) zu starken Beleuchtungsunterschieden führen. BRDF-Modelle (**B**i-directional **R**eflectance **D**istribution **F**unction) gestatten eine entsprechende Korrektur (Schott, 1997). Die am Sensor empfangene, vom Boden reflektierte Strahldichte L_λ^{su} (*at-sensor radiance*) ergibt sich aus L_λ modifiziert um die zwischen Oberfläche und Sensor stattfindende Transmission (*view path transmittance*, τ_v). Die gesamte, am Sensor empfangene und gemessene Strahldichte L_λ^s (*total at-sensor solar radiance*) setzt sich neben der am Boden reflektierten Strahlung L_λ^{su} (*unscattered, surface reflected radiance*), zudem aus der gestreuten, vom Boden reflektierten diffusen Himmelsstrahlung L_λ^{sd} (*down-scattered, surface reflected skylight*) und der ohne Bodenkontakt Richtung Sensor gestreuten Strahlung L_λ^{sp} (*path radiance*) zusammen:

$$L_\lambda^s(x, y) = L_\lambda^{su}(x, y) + L_\lambda^{sd}(x, y) + L_\lambda^{sp} \quad (4.1.10)$$

Für eine standardisierte Interpretation der Oberflächeneigenschaften, insbesondere für den Vergleich mit Spektraldatenbanken und multitemporalen Betrachtungen, muss die vom Sensor gemessene Strahldichte (*total at-sensor-radiance*) in Reflektanzen im Rahmen von atmosphärischen Korrekturverfahren unter Beachtung der tatsächlichen solaren Strahlstärke, den Einflüssen der Atmosphäre einschließlich benachbarter Flächen und der Beobachtungsgeometrien umgewandelt werden. Die Transformation erfolgt durch Simulation der solaren Charakteristik und atmosphärischen Einflüsse zum Aufnahmezeitpunkt mithilfe eines Atmosphären-Strahlungstransfermodells. Im Falle des Atmosphärenkorrekturmoduls ATCOR (Richter & Schläpfer, 2002) ist dies MODTRAN-4.

4.1.2.4 Interaktionen elektromagnetischer Strahlung mit Materie

Trifft elektromagnetische Strahlung auf Materie an der Erdoberfläche, können folgende Wechselwirkungen zwischen der Strahlungsenergie und Materie auftreten: Reflexion, Absorption, Emission und Transmission. Sie bestimmen über die spektralen Eigenschaften der betrachteten Materie. Reflexion beschreibt Vorgänge, die durch eine Richtungsänderung der Strahlung gekennzeichnet sind ohne jedoch Strahlungsenergie aufzunehmen oder abzugeben. Je nach Oberflächenbeschaffenheit kann Reflexion gerichtet (*specular reflectance*) oder diffus (*diffuse reflectance*) erfolgen. Ein Teil der Strahlung kann auch innerhalb der Materie an Grenzflächen gebrochen und reflektiert werden. Absorption bezeichnet die Aufnahme eines Teils der Lichtenergie durch Materie. Die hierdurch resultierende Erwärmung führt zur Ausstrahlung (Emission) sekundärer Wärmestrahlung. Die Intensität der emittierten Strahlung kann nach dem Stefan-Boltzmann-Gesetz (Gl. 4.1.4) berechnet werden. Transmission bezeichnet den Durchgang von Strahlung durch Materie ohne Energieänderung.

Nach dem Gesetz der Erhaltung der Energie ist die einfallende Strahlungsenergie (E_I) für reflektive Wellenlängenbereiche ohne thermische Emission immer gleich der Summe der absorbierten (E_A), transmittierten (E_T) und reflektierten Energie (E_R) als Funktion der Wellenlänge:

$$E_I(\lambda) = E_R(\lambda) + E_A(\lambda) + E_T(\lambda) \quad (4.1.11)$$

Durch Division aller Komponenten mit der spektralen Bestrahlungsstärke $E_I(\lambda)$ erhält man die unabhängigen, dimensionslosen Größen zur Beschreibung der Materialeigenschaften: den Reflexionsgrad ρ_λ , den Absorptionsgrad α_λ und den Transmissionsgrad τ_λ .

$$1 = \frac{E_R(\lambda)}{E_I(\lambda)} + \frac{E_A(\lambda)}{E_I(\lambda)} + \frac{E_T(\lambda)}{E_I(\lambda)} = \rho_\lambda + \alpha_\lambda + \tau_\lambda \quad (4.1.12)$$

Grundlage der Fernerkundung ist die am Sensor gemessene, reflektierte Strahlung der Erdoberfläche. Deren Darstellung als Funktion der Wellenlänge ist das Reflexionsspektrum mit $\rho_\lambda = [0,1]$ oder angegeben in Prozent mit $\rho_\lambda = [0,100]$. Maßgebliche Ursache der materialspezifischen Besonderheiten gemessener Reflexionsspektren ist der Vorgang der Absorption, welcher nachfolgend näher erörtert wird.

Absorption, d.h. die Aufnahme von Strahlungsenergie an Oberflächen erfolgt durch Transfer von Elektronen zu höheren Energieniveaus (i) oder durch Vibration, Rotation sowie Translation auf molekularer Ebene (ii).

(i) Elektronische Prozesse finden aufgrund des erforderlichen Energieaufwandes vorwiegend im ultravioletten und sichtbaren Bereich des Spektrums statt (Irons et al., 1989), erzeugen aber auch Absorptionsbanden im nahen Infrarot (Hunt, 1980). Typischerweise äußern sie sich in relativ breitbandigen Merkmalen (Hunt & Salisbury, 1970). Der weitaus größte Teil der durch elektronische Prozesse verursachten Absorptionsbanden im VNIR ist bedingt durch Kristallfeldeffekte (*crystal field effects*) sowie Ladungsübergänge (*charge transfer*). Kristallfeldeffekte treten insbesondere in Mineralen mit Übergangselementen (z.B. Cu, Ni, Fe, Mn) als Haupt- oder Nebengemengebestandteil auf. Besondere Bedeutung kommt hierbei zwei- und dreiwertigem Eisen zu, da es in der Erdkruste sehr stark vertreten ist und die Fähigkeit zur Substitution in Mineralen besitzt. Werden Übergangselemente durch das elektrische Feld (Kristallfeld) negativer Punktladungen (Anionen bzw. Liganden) beeinflusst, können deren Elektronen durch Absorption von Photonen auf höhere Energieniveaus gehoben werden. Die Lage dieser Energieniveaus wird im Wesentlichen durch den Zustand des jeweiligen Valenzbandes (d.h. Fe^{2+} , Fe^{3+}), seiner Koordinationszahl sowie der örtlichen Symmetrie bestimmt. Da die Kristallfelder in Abhängigkeit von der Kristallstruktur von Mineral zu Mineral variieren, können gleiche Elemente in unterschiedlichen Mineralen unterschiedliche Absorptionsmerkmale hervorrufen, was die Identifikation dieser Minerale anhand ihrer spektralen Signatur ermöglicht (Hunt, 1977, 1980). Bei Ladungsübergängen werden Elektronen durch Absorption von Photonen zwischen den Orbitalen zweier verschiedener Atome oder Moleküle übertragen, wobei mehrere Übertragungsmöglichkeiten existieren. So können diese von Ligand zu

Metall, Metall zu Ligand aber auch von Metall zu Metall, wenn dieses in unterschiedlichen Oxidationsstufen (Fe^{2+} , Fe^{3+}) vorliegt, erfolgen. Die Absorptionszentren von Ladungsübergängen treten aufgrund des hohen Energieaufwandes gewöhnlich im Bereich ultravioletter Strahlung auf, prägen aufgrund ihrer Intensität aber auch das Absorptionsverhalten im VIS. Die intensive Färbung vieler Eisenoxide und -hydroxide wird durch Ladungsübergänge hervorgerufen. Weitere Ursachen elektronischer Absorption sind Leitungsbänder (*conduction bands*) sowie Farbzentren (*color centre*).

(ii) Absorption durch Vibrationsprozesse in Molekülen treten größtenteils im MIR und TIR auf, verursachen aber auch Absorptionsbanden im SWIR (Hunt, 1980). Ein Molekül mit n -Atomen verfügt über $3 \cdot n - 6$ Schwingungsmodi ($3 \cdot n - 5$ im Falle linearer Atomanordnung), die man als Grundschnwingungen (*fundamentals*) bezeichnet. Grundschnwingungen sind Übergänge vom niedrigsten Energieniveau auf das nächsthöhere Energieniveau. Sie kommen in der Regel im MIR und TIR größer $3\mu\text{m}$ vor (Elachi, 1987). Anzahl, Position, Stärke und Ausprägung des spektralen Merkmals ist abhängig von den Atommassen, deren Geometrie und der Bindungsstärke. Absorption durch Vibration im SWIR beruht ausschließlich auf Obertönen (*overtones*), d.h. Vielfachen dieser Grundschnwingungen sowie auf Kombinationen (*combinations*), die sich als Verknüpfungen von Grundschnwingungen und Obertönen darstellen. Bedeutende Molekülgruppen, welche die für die Anregung von Obertönen und Kombinationen im SWIR erforderlichen hochfrequenten Grundschnwingungen im MIR aufweisen, sind H_2O und $-\text{OH}$ (Hydroxygruppe). Wasser, bestehend aus drei Atomen, besitzt drei Grundschnwingungsmodi, die bei Anregung in Absorptionsbanden bei $3,106\mu\text{m}$ (ν_1 , symmetrische OH-Streckschnwingung), $6,08\mu\text{m}$ (ν_2 , H-O-H-Beugeschnwingung) und $2,903\mu\text{m}$ (ν_3 , asymmetrische OH-Streckschnwingung) resultieren²³. Obertöne und Kombinationen dieser Grundschnwingungen treten bei $1,875\mu\text{m}$ ($\nu_2 + \nu_3$), $1,454\mu\text{m}$ ($2\nu_1 + \nu_3$), $1,38\mu\text{m}$ ($\nu_1 + \nu_3$), $1,135\mu\text{m}$ ($\nu_1 + \nu_2 + \nu_3$) und $0,942\mu\text{m}$ ($2\nu_1 + \nu_3$) auf (Hunt, 1977). Die einzige Grundschnwingung der OH-Gruppe (Streckschnwingung) verursacht ein Spektralmerkmal nahe $2,75\mu\text{m}$ (Hunt, 1977). Dessen genaue Position bestimmt sich aus der Lage der OH-Gruppe und dem bindenden Ion. Da OH-Gruppen an verschiedenen Stellen anlagern können, treten häufig auch mehrere Absorptionsbanden zwischen $2,67\mu\text{m}$ und $3,45\mu\text{m}$ auf. Absorptionsbanden, die im SWIR beobachtet werden können, beruhen auf dem ersten und zweiten Oberton der OH-Streckschnwingung ($2\nu_{\text{OH}}$: $1,4\mu\text{m}$, $3\nu_{\text{OH}}$: $0,95\mu\text{m}$), auf Kombinationen der OH-Streckschnwingung mit Metall-OH-Beugeschnwingungen (Metall: Al|Mg|Fe) ($2,2$ - $2,5\mu\text{m}$: Al= $2,2\mu\text{m}$, Mg= $2,3\mu\text{m}$, Fe= $2,29\mu\text{m}$) oder auf OH-Streckschnwingung in Verbindung mit Drehung oder leichter Translation (*lattice mode*). Clark et al. (1990) weist darauf hin, dass nicht in allen Fällen von der Bandposition auf das Bindungsmetall geschlossen werden kann, sondern zusätzlich die Position der Grundschnwingung erforderlich ist. Obertöne und Kombinationen erzeugen größtenteils sehr schmale Absorptionsbanden, die eine charakteristische Form zeigen und bereits bei kleinsten Änderungen in der Molekülstruktur variieren. Da Wasser und die Hydroxygruppe wichtige Bestandteile vieler Minerale sind, dienen diese Absorptionsbanden als diagnostische Merkmale zur Identifikation von Mineralen in Bodenreflexionsspektren (vgl. Kap. 4.1.3.1). Rotation und Translation von Molekülen (*lattice mode*) treten typischerweise bei sehr niedrigen Energieniveaus in Wellenlängenbereichen $> 20\mu\text{m}$ auf. Sie sind für die vorliegende Arbeit nicht relevant. Abb. 4.1.2 gibt eine Übersicht über die spektralen Signaturen im VNIR-SWIR und deren Ursachen für eine Auswahl geologischer Materialien. Weiterführende Darstellungen elektronischer und vibratorischer Prozesse, deren Ursachen und Auswirkungen im Absorptionsverhalten insbesondere mineralischer Materie finden sich in Hunt (1977, 1980), Clark et al. (1990) sowie Elachi (1987).

Nach den Grundsätzen der Quantenmechanik besitzen Atome und Moleküle nur diskrete Energieniveaus. Die Aufnahme von Energie durch Absorption kann demnach nur durch Photonen bestimmter Energie erfolgen, so dass jedem Absorptionsprozess nach $\Delta Q = hc\lambda^{-1}$ eine bestimmte Wellenlänge bzw. Frequenz zugeordnet werden kann. Die Höhe der Abschwächung der einfallenden Strahlungsenergie durch Absorptionsprozesse, und damit die Verringerung des Reflexions- und Transmissionsgrades (vgl. Gl. 3.1.12), steht in direktem Zusammenhang mit der Konzentration des absorbierenden Stoffes und wird durch das Lambert-Beersche Gesetz beschrieben:

²³ Gilt für Wasser im flüssigen Aggregatzustand. Im gasförmigen Zustand verschieben sich diese Grundschnwingungen leicht zu $\nu_1=2,738\mu\text{m}$, $\nu_2=6,27\mu\text{m}$ und $\nu_3=2,663\mu\text{m}$.

$$-\lg\left(\frac{I_1}{I_0}\right) = c\epsilon d \tag{4.1.13}$$

wobei I_0 die gemessene spektrale Strahlstärke vor Probendurchlauf, I_1 die gemessene spektrale Strahlstärke nach Probendurchlauf in $W sr^{-1}$, c die Konzentration der absorbierenden Moleküle [$mol l^{-1}$], ϵ der stoffspezifische spektrale Extinktionskoeffizient [$l mol^{-1} cm^{-1}$] und d die Weglänge durch die Probe [cm].

Die wellenlängenabhängigen, oberflächenspezifischen Absorptionsprozesse bilden die Grundlage für die Ableitung qualitativer und quantitativer Informationen anhand der reflektierten Strahlung.

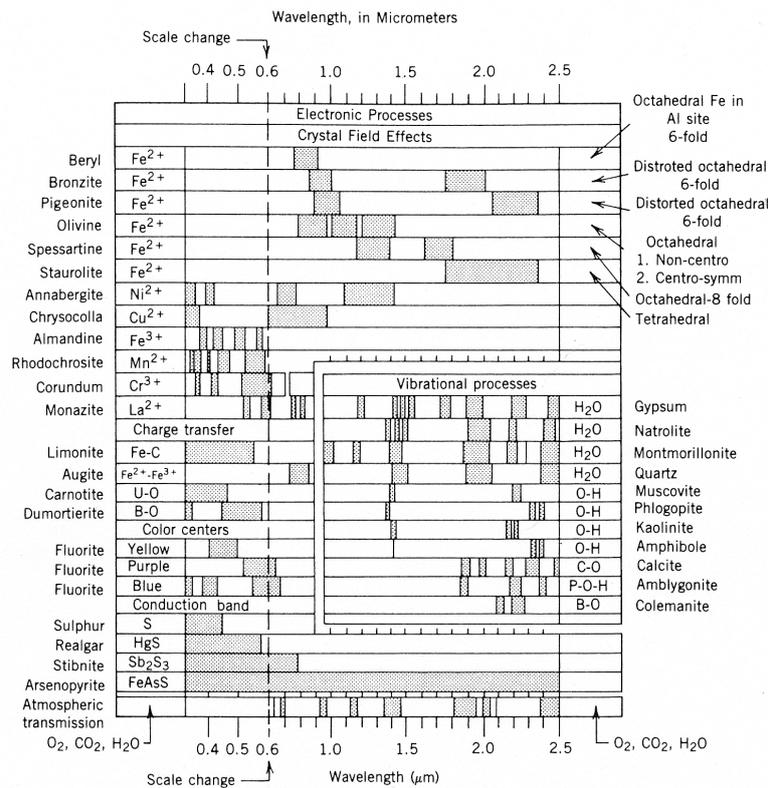


Abb. 4.1.2: Spektrale Signaturen für eine Auswahl geologischer Materialien (Elachi, 1987).

4.1.3 Reflexionseigenschaften ausgewählter Oberflächen

4.1.3.1 Boden

Stoner & Baumgardner (1981) identifizierten in einer umfangreichen Laborstudie zum Reflexionsverhalten von Böden fünf charakteristische Kurvenverläufe mittels visueller Interpretation. Jede Kurve kann mit bestimmten Bodeneigenschaften assoziiert werden: (A) organisch dominiert, (B) geringfügig entwickelt, (C) Eisen beeinträchtigt, (D) organisch beeinträchtigt, und (E) Eisen dominiert (Abb. 4.1.3). Obwohl eine Zuordnung einzelner Bodenspektren zu diesen diskreten Klassen aufgrund der Komplexität und Vielfalt häufig problembehaftet ist (Huete & Escadafal, 1991), zeichnen sie die grundlegenden Reflexionscharakteristika von Böden nach. Dazu zählen ein kontinuierlicher Anstieg der Reflexionskurve im VNIR, der im SWIR-I kulminiert und im SWIR-II abfällt; ausgeprägte Absorptionsbanden bei 1,4µm und 1,9µm verursacht durch Absorption von H₂O und -OH; eine Veränderung des Kurvenverlaufes im Bereich von 0,5µm bis 1,3µm von konvex zu konkav mit zunehmendem Gehalt an organischer Bodensubstanz und einer damit einher gehenden allgemeinen Verringerung des Reflexionsvermögens. Eine Ausnahme bilden Böden mit sehr hohem Eisengehalt.

Deren Reflexionskurve (E, Abb. 4.1.3) fällt bereits ab etwa $0,75\mu\text{m}$ langsam ab. Starke Absorption im gesamten SWIR verdeckt zudem die Absorptionsbanden bei $1,4\mu\text{m}$ und $1,9\mu\text{m}$.

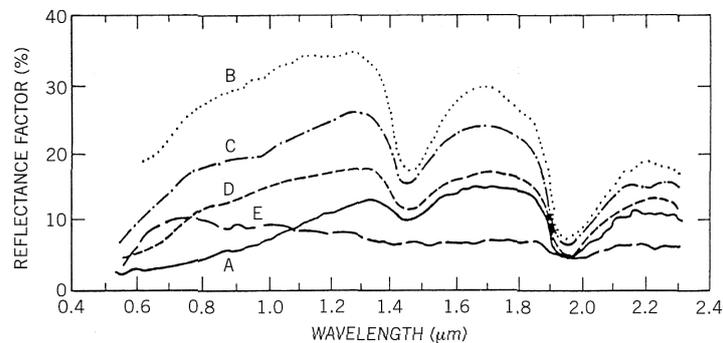


Abb. 4.1.3: Repräsentative Boden-Reflexionsspektren fünf mineralischer Böden: (A) organisch dominiert (OM=5,61%, schluffig-toniger Lehm, $\text{Fe}_x\text{O}_x=0,76\%$), (B) geringfügig entwickelt (OM=0,59%, lehmiger Feinsand, $\text{Fe}_x\text{O}_x=0,03\%$), (C) Eisen beeinträchtigt (OM=1,84%, schluffig-toniger Lehm, $\text{Fe}_x\text{O}_x=3,68\%$), (D) Organisch beeinträchtigt (OM=3,61%, feinsandiger Lehm, $\text{Fe}_x\text{O}_x=0,81\%$), (E) Eisen dominiert (OM=2,28%, Ton, $\text{Fe}_x\text{O}_x=25,6\%$) (Stoner & Baumgardner, 1981).

Aufgrund der zentralen Stellung von Ton sowie organischer Bodensubstanz in dieser Arbeit, sollen die Reflexionscharakteristika dieser beiden Bodenbestandteile nachfolgend detailliert dargestellt werden. Ferner wird auf die spektralen Eigenschaften von Eisen bzw. Eisenoxiden, Carbonat und Bodenwasser eingegangen. Alle drei Komponenten sind wichtige Chromophore und stehen direkt oder indirekt mit dem Gehalt an Ton bzw. organischer Bodensubstanz in Zusammenhang.

Tone, genauer gesagt **Tonminerale**, sind Schichtsilikate, die aus zwei Grundbausteinen aufgebaut sind: SiO_4 -Tetraederschichten mit Si^{4+} als Zentralatom und $\text{Al}(\text{OH})_6$ -Oktaederschichten mit Al^{3+} als Zentralatom. Die Zentralatome können durch isomorphen Ersatz mit Fe^{2+} , Fe^{3+} , Mg^{2+} oder auch Ti^{4+} substituiert werden. Je nach Anordnung der Grundbausteine wird zwischen Zweischicht-Tonmineralen (z.B. Kaolinit), Dreischicht-Tonmineralen (z.B. Illit, Montmorillonit) und Vierschicht-Tonmineralen (z.B. Chlorit) unterschieden. Tonminerale besitzen aufgrund ihres Aufbaus eine große spezifische Oberfläche. Sie verfügen über die Fähigkeit der reversiblen An- und Einlagerung von H_2O -Molekülen und haben die Eigenschaft, Ionen (u. a. Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+) in austauschbarer Form zu adsorbieren (Schroeder, 1992). Die hohe Reaktivität der Tonminerale sowie der unterschiedliche strukturelle Aufbau spiegeln sich auch in ihren spektralen Eigenschaften wider. Häufig in Böden vorkommende Tonminerale sind Kaolinit, Smektit²⁴, Illit sowie Übergangminerale zwischen Illiten, Montmorilloniten und Vermiculiten mit intermediären Eigenschaften. Weniger verbreitet sind Chlorit und Vermiculit (Irons et al., 1989). Da Tonminerale Sekundärsilikate sind, ist deren lokales

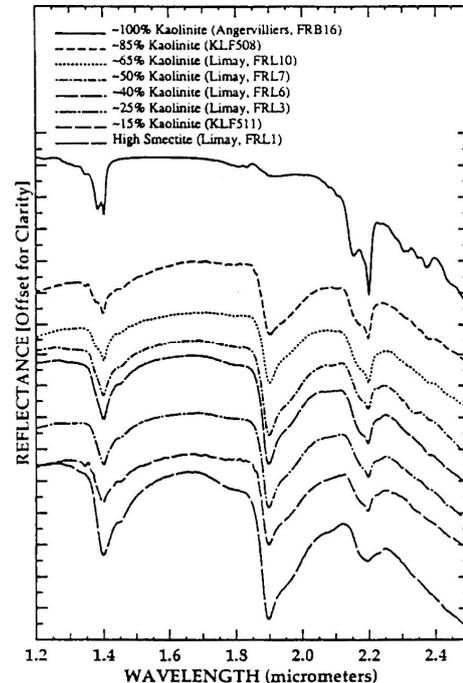


Abb. 4.1.4: Reflexionsspektren der Mischreihe Kaolinit – Smektit (Hauff et al., 1990).

²⁴ Smekтите sind aufweitbare Dreischichttonminerale, deren negative Schichtladung pro Formeleinheit zwischen 0,2 und 0,6 liegt und durch verschiedene austauschbare Kationen im Schichtzwischenraum neutralisiert wird. Zu dieser Gruppe gehören u.a. Montmorillonit (Mg^{2+} -reich), Nontronit (Fe^{3+} -reich) und Beidellit (Al^{3+} -reich) (Scheffer & Schachtschabel, 1998).

Vorkommen und Häufigkeit an das Ausgangsgestein und die Art der Verwitterungsprozesse gekoppelt.

Die spektralen Merkmale der Tonminerale im VNIR-SWIR beruhen im Wesentlichen auf Kombinationen und Obertönen von Grundschwingungen der OH-Gruppe. Diese OH-Gruppen sind entweder Teil der Mineralstruktur (Oktaederschichten, sog. Gitterwasser) oder treten als Bestandteil von Wassermolekülen auf, die an der Oberfläche angelagert sind (Adsorptionswasser) und erzeugen Absorptionsbanden nahe $0,95\mu\text{m}$, zwischen $1,3$ und $1,4\mu\text{m}$, $1,8\mu\text{m}$ und $1,9\mu\text{m}$ sowie zwischen $2,2\mu\text{m}$ und $2,5\mu\text{m}$ (Abb. 4.1.5). Stärke und Ausprägung der Absorptionsbande zwischen $1,8\mu\text{m}$ und $1,9\mu\text{m}$ gibt zum Beispiel Aufschluss über den Anteil an Adsorptionswasser. So weist Kaolinit im Gegensatz zu Montmorillonit oder Illit bedingt durch seinen höheren Anteil an Gitterwasser tiefe Absorptionsbanden nahe $1,4\mu\text{m}$ und $2,2\mu\text{m}$ auf, aber nur eine sehr schwach ausgeprägte Absorptionsbande nahe $1,9\mu\text{m}$. Von entscheidender Bedeutung für die Abbildende Spektroskopie ist der Bereich zwischen $2,2\mu\text{m}$ und $2,5\mu\text{m}$, da alle anderen Absorptionsbanden aufgrund der geringen atmosphärischen Transmission nur für laborspektroskopische Untersuchungen relevant sind. Absorption bei etwa $2,2\mu\text{m}$ wird durch Kombination von OH-Streckschwingungen und Metall-OH-Beugeschwingungen verursacht. Die genaue Position der Absorptionsbanden variiert in Abhängigkeit vom bindenden Metall. So berichten Ben-Dor et al. (1999), dass stark Al-haltiger Montmorillonit zwischen $2,16$ - $2,17\mu\text{m}$, stark Ca-haltiger Montmorillonit bei $2,206\mu\text{m}$, Nontronit (stark Fe-haltig) zwischen $2,21$ - $2,24\mu\text{m}$ und Hectorit (stark Mg-haltig) bei $2,3\mu\text{m}$ spektral aktiv ist. Nach Clark et al. (1990) weist Nontronit eine Absorptionsbande bei $2,29\mu\text{m}$ auf. Zusätzlich zur Absorption nahe $2,2\mu\text{m}$ weist Illit eine Absorptionsbande bei $2,34\mu\text{m}$ sowie eine sehr schwach ausgeprägte Absorptionsbande bei $2,45\mu\text{m}$ auf. Kaolinit zeigt im Unterschied zu Illit und Montmorillonit eine charakteristische Doppelbande nahe $2,2\mu\text{m}$, bei $2,163\mu\text{m}$ und $2,2085\mu\text{m}$ (Clark et al., 1990). Häufig treten verschiedene Tonminerale in Böden gleichsam auf, so dass sich die charakteristischen Absorptionsbanden einzelner Minerale überlagern und als Mischsignale wiedergegeben werden (Abb. 4.1.4). Durch „Verunreinigungen“ von Eisen können Tonminerale auch Absorptionsbanden im VNIR hervorrufen (vgl. Abb. 4.1.5), was nachfolgend dargestellt wird.

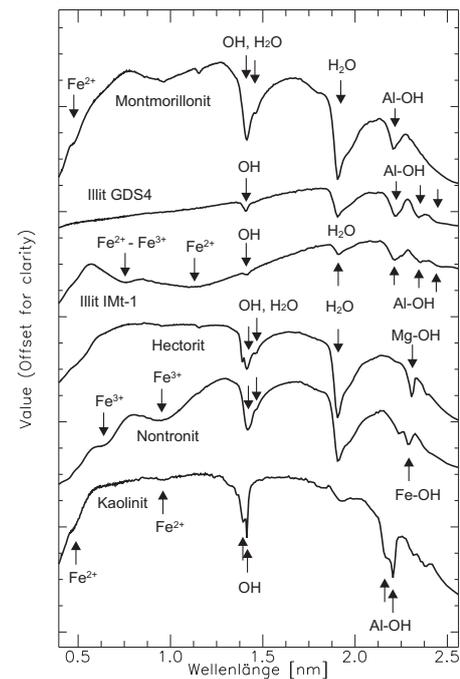


Abb. 4.1.5: Reflexionsspektren der Tonminerale Kaolinit, Montmorillonit, Illit, Nontronit und Hectorit und Absorption durch Vibration (-OH, H₂O) und Elektronentransfer (Fe²⁺, Fe³⁺) (zusammengestellt nach Clark et al., 1990; Hunt & Salisbury, 1970; Clark, 1999). Die Spektren sind der Spektralbibliothek von Clark et al. (1993) entnommen.

Eisen ist nach Sauerstoff, Silizium und Aluminium das vierthäufigste Element der Erdkruste (Scheffer & Schachtschabel, 1998). Es ist Bestandteil in mafischen Silikaten (z.B. Olivin, Pyroxene, Hornblende), Eisenoxiden und -hydroxiden (z.B. Goethit, Limonit, Hämatit), Eisensulfiden, Carbonaten sowie smektitischen Tonmineralen. Absorptionsmerkmale zwei- und dreiwertiger Eisenverbindungen im VNIR werden infolge elektronischer Prozesse hervorgerufen, entweder als Hauptbestandteile (z.B. in Eisenoxiden) oder als Verunreinigungen (z.B. in Tonmineralen). Demnach erzeugt zweiwertiges Eisen typischerweise Absorptionsbanden durch Kristallfeldeffekte nahe $1\mu\text{m}$ sowie durch Ladungstransfer oder Leitungsbänder bei $0,55\mu\text{m}$, $0,51\mu\text{m}$, $0,45\mu\text{m}$ und $0,43\mu\text{m}$. Dreiwertiges Eisen bewirkt Absorptionsmerkmale nahe $0,87\mu\text{m}$, $0,7\mu\text{m}$ und $0,4\mu\text{m}$ (Ben-Dor et al., 1999). Tandon & Gupta (1970)²⁵ berichten von Absorption nahe $0,86\mu\text{m}$ und $0,47\mu\text{m}$, hervorgerufen durch Kristallfeldeffekte, sowie nahe $0,35\mu\text{m}$, $0,29\mu\text{m}$ und $0,23\mu\text{m}$. Letztere führen sie auf FeO-Ladungstransferbänder zurück. Hunt & Salisbury (1970) erklären schwache Absorptionsbanden

²⁵ Zitiert in Hunt (1977): Tandon, S.P., & Gupta, J.P. (1970). Diffuse reflectance spectrum of ferric oxide. *Spectros. Letters*, 3, 297.

nahe $0,5\mu\text{m}$ und $0,97\mu\text{m}$ in Kaolinit durch Ersatz von Al^{3+} mit kleineren Mengen Fe^{2+} . Für Montmorillonit konnten sie ebenso Absorptionsbanden nahe $0,5\mu\text{m}$ und $0,97\mu\text{m}$ beobachten. Clark et al. (1990) geben für Illit Fe^{2+} -Absorption nahe $0,7\mu\text{m}$ und nahe $1,1\mu\text{m}$ sowie Fe^{3+} -Absorption nahe $0,65\mu\text{m}$ und nahe $0,9\mu\text{m}$ für Nontronit an.

Neben Tonmineralen und Eisenoxiden bzw. -hydroxiden zählen **Carbonate** (Calcit, Dolomit) zu den spektralen Chromophoren der mineralischen Bodenfraktion. Ihre spektralen Merkmale im SWIR werden durch Obertöne und Kombinationen der C-O-Bindung im CO_3^{2-} -Ions angeregt. van der Meer (1995) fasst sieben mögliche Absorptionsbanden im SWIR zusammen ($1,75\mu\text{m}$, $1,85\mu\text{m}$, $1,9\mu\text{m}$, $2,17\mu\text{m}$, $2,26\mu\text{m}$, $2,3\mu\text{m}$, $2,5\mu\text{m}$), deren Position sich je nach Carbonattyp und Verunreinigungen verschieben kann. Von Bedeutung in der Abbildenden Spektroskopie ist vor allem die Bande zwischen $2,34\mu\text{m}$ und $2,35\mu\text{m}$ (Calcit) bzw. $2,31\mu\text{m}$ und $2,32\mu\text{m}$ (Dolomit).

Organische Bodensubstanz ist ein hochkomplexes chemisches Gebilde, dass sich aus Streustoffen (Cellulose, Hemicellulose, Pektin, Lignin, Lipide, Proteine und Stärke), in denen Gewebestrukturen größtenteils gut erkennbar sind, und Huminstoffen, hochmolekularen organischen Verbindungen (Ligninbruchstücke, Polysaccharide, Proteine, Aromate, Aliphate) ohne erkennbare Gewebestrukturen, zusammensetzt. Hier werden zunächst die spektralen Eigenschaften stark zersetzter organischer Bestandteile dargelegt. Aufliegende Streustoffe ähneln in ihren spektralen Eigenschaften denen von Ernterückständen und trockener Vegetation. Sie werden in Kapitel 4.1.3.2 näher vorgestellt.

Das Reflexionsverhalten von Huminstoffen wird stark durch funktionelle Gruppen (u. a. -OH, -COOH, -OCH₃, NH₂, -C=O, C-O, N-H, C-H) geprägt, die im NIR und SWIR Absorptionsbanden durch Kombinationen und Obertöne von Grundschwingungen im MIR hervorrufen (Ben-Dor et al., 1997; Workman & Weyer, 2008; Stevenson, 1994). Tab. 4.1.2 enthält eine Übersicht zu Absorptionsbanden einiger organischer Substanzen zusammengestellt aus Arbeiten von Elvidge (1990), Ziechmann (1964) sowie Chang & Laird (2002). Daraus wird deutlich, dass sich die Absorptionsbanden der einzelnen Bestandteile organischer Bodensubstanz häufig überlappen. In komplexen Materialien, wie Boden, führt dieses Verhalten zu Spektren mit sehr breiten, teils schwer interpretierbaren Absorptionerscheinungen. Eine Zuordnung einzelner Merkmale zu bestimmten Absorptionsmodi ist dann kaum möglich (Ben-Dor & Banin, 1995a; Chang & Laird, 2002). Darüber hinaus überdecken andere Bodenkomponenten (z.B. Adsorptions- und Gitterwasser, Carbonate) diese Absorptionsbanden in Böden mit geringen Gehalten organischer Bodensubstanz. Baumgardner et al. (1970)²⁶ berichten, dass der Einfluss organischer Substanz auf das Reflexionssignal in Böden mit kleiner 2% organische Bodensubstanz minimal ist. Zugleich können Konzentrationen größer 1,7% organische Bodensubstanz²⁷ im Boden Absorptionsmerkmale anderer Bodenbestandteile wie zum Beispiel Eisen maskieren (Galvão & Vitorello, 1998).

Allgemein lässt sich festhalten, dass ein Anstieg des Humusgehaltes mit einer Absenkung der Reflexion im VNIR-SWIR einhergeht. Bowers & Hanks (1965) oxidierten die organische Bodensubstanz einer Bodenprobe mit Wasserstoffperoxid (H_2O_2) und stellten im Vergleich der Spektralkurven fest, dass in der originären Probe mindestens 8,2% der einstrahlenden Energie durch organische Bodensubstanz absorbiert wurde. Besonders ausgeprägt waren die Unterschiede im Wellenlängenbereich von $0,44\mu\text{m}$ bis $1,3\mu\text{m}$. Ferner zeigen Böden mit höheren Humusgehalten einen konvexen Verlauf der Spektralkurve im VNIR-Bereich im Unterschied zur konkaven Form humusarmer Böden (Stoner & Baumgardner, 1981; Abb. 4.1.3)²⁸.

Eine Zunahme der **Bodenfeuchte** bewirkt eine allgemeine Abschwächung der Reflexion vom sichtbaren Bereich bis ins kurzwellige Infrarot (Bowers & Hanks, 1965) und geht einher mit einer verstärkten Absorption nahe $1,45\mu\text{m}$ und $1,95\mu\text{m}$. Diese, sowie die etwas schwächer ausgeprägten Banden nahe $0,97\mu\text{m}$, $1,2\mu\text{m}$ und $1,77\mu\text{m}$ sind Obertönen und Kombinationen von

²⁶ Zitiert in Ben-Dor et al. (1999): Baumgardner, M.F., Kristof, S.J., Johannsen, C.J., & Zachary, A. L. (1970). Effects of organic matter on multispectral properties of soils. *Proc. Indian Acad. Sci.*, 79, 413–422.

²⁷ Bei Annahme eines Umrechnungsfaktors von 1,72 entsprechen 2% bzw. 1,7% organische Bodensubstanz ca. 1,16% bzw. 0,99% OC.

²⁸ Stoner & Baumgardner (1981): humusarm hier: 0,59 %, humusreich hier: 5,61 %

Grundsicherungen der Wassermoleküle zuordenbar (Baumgardner et al., 1985). Ben-Dor et al. (1999) erwähnt zusätzlich eine schwächere Absorption bei 0,94µm bzw. 0,95µm. Die wasserbedingte Absenkung der Reflexion führt Ångström (1925)²⁹ auf die Totalreflexion der Strahlung innerhalb des an den Bodenpartikeln angelagerten Wasserfilms zurück. Für eine detaillierte Darstellung der unterschiedlichen Bodenwasserformen (Gitterwasser, Adsorptionswasser, Porenwasser) und ihrer spektralen Wirkung sei auf Ben-Dor et al. (1999) verwiesen.

Tab. 4.1.2: Bestandteile organischer Bodensubstanz (Streu- und Huminstoffe) und ausgewählte Absorptionsbanden im VNIR-SWIR. Zusammengefasst aus Elvidge (1990), Ziechmann (1964), Chang & Laird (2002).

Substanz	Absorptionsbanden im VNIR-SWIR [µm]
Cellulose [†]	1,22; 1,48; 1,93; 2,10; 2,28; 2,34; 2,48
Hemicellulose ^{†, a}	1,45; 1,77; 1,93; 2,09; 2,33; 2,50
Hemicellulose ^{†, b}	1,21; 1,45; 1,72; 1,79; 1,93; 2,09; 2,26; 2,33; 2,50
Stärke [†]	0,99; 1,22; 1,45; 1,56; 1,70; 1,77; 1,93; 2,10; 2,32; 2,48
Pektine ^{†, c}	0,98; 1,19; 1,44; 1,56; 1,68; 1,73; 1,78; 1,93; 2,08; 2,25; 2,32; 2,36; 2,48
Lipide ^d	Absorptionsschulter im VIS 0,93; 1,04; 1,21; 1,39; 1,41; 1,54; 1,73; 1,82; 1,93; 2,01; 2,05; 2,14; 2,31; 2,35; 2,39; 2,43
Proteine ^e	1,50; 1,68; 1,74; 1,94; 2,05; 2,17; 2,29; 2,47
Lignin	starke Absorption im UV (0,25; 0,22-0,23; 0,28) mit ausgedehnter Absorptionsschulter im VNIR 1,45; 1,68; 1,93; 2,05-2,14; 2,27; 2,33; 2,38; 2,50
Huminsäure	starke Absorption im UV (~0,3) und VIS mit ausgedehnter Absorptionsschulter ins VNIR bis 1,6µm 1,92; 2,30; 2,34; 1,70; 2,15; 2,31; 2,35

[†] Gruppe der Polysaccharide, ^aB-Glucan, ^bXylan, ^cZitronenpektin, ^eCarnaubawachs, ^dD-ribulose 1-5-diphosphat carboxylase

4.1.3.2 Vegetation

Obleich unbedeckter Boden im Fokus der vorliegenden Arbeit steht, ist eine Betrachtung der Reflexionseigenschaften von Vegetation aufgrund der zyklischen Bedeckung landwirtschaftlicher Nutzflächen mit verschiedenen Feldfrüchten im Verlauf eines Bewirtschaftungsjahres notwendig. Prinzipiell muss zwischen photosynthetisch aktiver, grüner Vegetation (PV) und nicht photosynthetisch aktiver, trockener Vegetation (NPV) unterschieden werden. Letztere schließt Ernterückstände mit ein. Zwei typische Spektren photosynthetisch aktiver und nicht aktiver Vegetation illustriert Abb. 4.1.6. In photosynthetisch aktiver Vegetation wird die einfallende Strahlung im sichtbaren Bereich weitgehend durch die im Mesophyll enthaltenen Pigmente absorbiert. Entscheidend ist vor allem der Anteil an Chlorophyll a und b, aber auch Carotinoide und Xanthophyll können das Absorptionsverhalten in diesem Wellenlängenbereich bestimmen. Chlorophyll absorbiert die einfallende Strahlung vor allem im blauen (0,4-0,48µm) und im roten (0,6-0,7µm) Wellenlängenbereich. Grünes Licht wird hingegen reflektiert, welches das für grüne Vegetation typische Reflexionsmaximum nahe 0,55µm hervorruft (*green peak*). Zwischen 0,7µm und 1,3µm überwiegt die Reflexion der einfallenden Strahlung. Sie wird hauptsächlich über die interne Gewebestruktur und Zellorganisation der Blätter gesteuert. Entscheidend für Reflexions- und Streuungsprozesse im Mesophyll ist hierbei die Zahl bzw. die Gesamtfläche der Luft-Zellwand Grenzflächen (Knipling, 1970). Je nach Pflanzenart werden zwischen 30% und 70% der eingestrahnten Energie reflektiert (Hildebrandt, 1976)³⁰. Der schmale Übergangsbereich zwischen starker Absorption im VIS und intensiver Reflexion im NIR und SWIR-I wird auch als *red edge* bezeichnet. Im kurzwelligen Infrarot zwischen 1,3µm und 2,5µm fällt die Reflexionskurve wieder ab. Ursache ist die vermehrte Absorption durch das im Blattgewebe enthaltene pflanzeneigene Wasser. Verstärkt tritt diese in den Wasserabsorptionsbanden nahe 0,97µm, 1,2µm und 1,77µm auf und ist bei 1,4µm und 1,9µm extrem ausgeprägt. Diese starke Wasserabsorption maskiert in photosynthetisch aktiver, vitaler

²⁹ Zitiert in Irons et al. (1989); Ångström, A. (1925). The albedo of various surfaces of ground. *Geogr. Ann.*, 7: 323.

³⁰ Zitiert in Kronberg (1985); Hildebrandt, G. (1976). Die spektralen Eigenschaften der Vegetation. In: Remote Sensing in Forestry. Proceedings of the symposium held during the XVI IUFRO World Congress, Oslo 21-26 June, 9-22.

Vegetation alle sonstigen Absorptionsmerkmale weiterer Pflanzeninhaltsstoffe (u. a. Lignin, Cellulose, Stärke, Proteine).

Nicht photosynthetisch aktive, trockene Vegetation (z.B. abgereiftes Getreide, Ernterückstände) ist durch einen mehr oder weniger kontinuierlichen Anstieg der Reflexionskurve von $0,4\mu\text{m}$ bis $1,3\mu\text{m}$ gekennzeichnet, da das leicht zersetzbare Chlorophyll beim Zerfall der Pflanzenbestandteile zuerst abgebaut wird. Zugleich steigt die Reflexion im SWIR durch die Abnahme des Wassergehaltes an, so dass charakteristische Absorptionsbanden anderer Pflanzeninhaltsstoffe hervortreten. Reflexionsspektren von NPV sind im SWIR in hohem Grade durch das Absorptionsverhalten von Cellulose, Lignin und Tanninen gekennzeichnet (vgl. Tab. 4.1.2). Die stark ausgeprägte Absorptionsbande nahe $2,1\mu\text{m}$, verursacht durch Lignin und v.a. durch Cellulose, wird auch als diagnostisches Merkmal zur Unterscheidung von NPV und Boden herangezogen (Daughtry, 2001; Nagler et al., 2003). Streustoffe³¹ weisen ein ähnliches spektrales Verhalten wie NPV auf. Die Reflexion aufrecht stehender trockener Vegetation (Stoppeln) ist aber aufgrund von Schatten in der Regel deutlich geringer als die von Streustoffen, welche auf dem Boden aufliegen (Gausman et al., 1975).

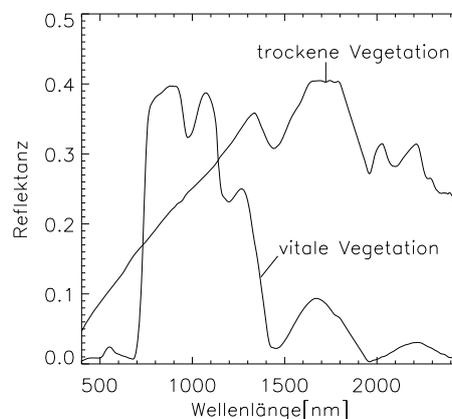


Abb. 4.1.6: Typische Spektren vitaler, photosynthetisch aktiver und trockener, photosynthetisch nicht aktiver Vegetation (eigene Feldmessung). Vitale Vegetation: Winterweizen, trockene Vegetation: Winterweizenstoppeln. Wasserabsorptionsbanden sind interpoliert.

Da die Grundbausteine von Vegetation im Wesentlichen gleich sind, unabhängig von den einzelnen Pflanzenspezies, treten bei Pflanzen im Gegensatz zu Böden zumeist identische Absorptionsmerkmale auf. Das Reflexionssignal variiert jedoch in Abhängigkeit vom Pflanzenzustand (Vitalität, Phänologie) und einzelnen Bestandsparametern (LAI, Blattwinkelstellung, Bedeckungsgrad) und ermöglicht die Unterscheidung verschiedener Zustände sowie die Abschätzung bestimmter Pflanzeninhaltsstoffe (z.B. Kokaly & Clark, 1999).

4.1.4 Abbildende spektrometrische Aufnahmesysteme

Abbildende Spektrometer erfassen die von der Erdoberfläche reflektierte Strahlungsenergie in zahlreichen, sehr schmalbandigen, benachbarten Kanälen (Goetz et al., 1985). Für jedes Bildelement kann so ein nahezu kontinuierliches Spektrum aufgezeichnet werden. Im Gegensatz zu konventionellen, multispektralen Sensorsystemen (z.B. Landsat, SPOT) ermöglicht dies eine differenzierte Abbildung der Absorptions- und Reflexionseigenschaften und damit die Identifikation von Objekten und deren Materialeigenschaften (Green et al., 1998).

Die ersten abbildenden Spektrometer wurden Anfang der 80er Jahre in den USA und Canada gebaut und auf Flugzeugen eingesetzt (AIS, AVIRIS: Vane et al., 1984, 1993). Dadurch inspiriert, wurden in Europa in den 90er Jahren eigene Entwicklungen (z.B. ROSIS und DAIS) vorangetrieben, die später

³¹ Streustoffe sind auf dem Boden liegende abgestorbene Pflanzenreste.

in weiteren Sensor-Projekten (z.B. APEX) mündeten. Zahlreiche Befliegungskampagnen (z.B. MacEurope, HyEurope) vergrößerten die Nutzergemeinde Ende der 90er, insbesondere aber zwischen 2000 und 2010 (Itten, 2009). Die meisten abbildenden Spektrometer zeichnen im VNIR und SWIR (0,4-2,5µm) auf. Einige, wie CASI und CHRIS decken nur das VNIR (0,4-1,0µm) ab. Die spektrale Bandbreite der flugzeug- und satellitengetragenen Systeme liegt häufig nahe bzw. unter 20nm.

Tab. 4.1.3: Überblick zu einigen flugzeug- sowie satellitengetragenen abbildenden Spektrometern und deren Systemcharakteristika.

Sensor (Erstflug)	Typ	GSD [m]	Schwadbreite [Pixel km]	FOV	Kanäle	Spektralbereich [nm]	Bandbreite (FWHM) [nm]	Messintervall [nm]	Referenz	Einrichtung
<i>Operationelle flugzeuggetragene abbildende Spektrometer</i>										
AVIRIS (1987)	WB	4-20 ^(a)	614 Pixel	30°	224	400–2500	10	10	Vane et al. (1993) Green et al. (1998)	NASA, JPL
CASI1500	PB	0,25-1,5 ^(a)	1500 Pixel	40°	≤288	380–1050	<3,5	2,4	ITRES Research Ltd. (2010)	ITRES, NERC
AHS (2003)	WB	2-6 ^(a)	750 Pixel	90°	20 1 42 7 10	430–1030 1550–1650 1900–2550 3300–5400 8200–12700	30 90 18 300 450	-	Sobrino et al. (2006) Gómez et al. (2007)	INTA
DAIS-7915 ^(d) (1994)	WB	5-20 ^(a)	512 Pixel	52°-78° ^(c)	32 8 32 1 6	498–1010 1500–1800 2000–2500 3000–5000 8700–12300	15-30 45 20 2000 900	-	Chang et al. (1993) Strobl et al. (1996)	DLR
HyMap (1997)	WB	2-10 ^(a,b)	512 Pixel	61,3°	128	450–890 890–1350 1400–1800 1950–2480	15-16 15-16 15-16 18-20	15 15 13 17	Cocks et al. (1998)	IS, HyVista
AISA Eagle	PB	0,52-0,68 @1km ^(a,e)	512-1024 Pixel	29,9-37,7° ^(c)	60-488 ^(f)	400–970	3,3	2,3-9,2	Bars et al. (1998) Specim (2009a,b)	Specim
AISA Hawk	PB	0,97-2,00 @1km ^(a,e)	320 Pixel	17,8-35,5° ^(c)	254	970–2500	12	6,3	siehe AISA Eagle	Specim
HySPEX (1995)	PB	-	1600 Pixel 320 Pixel	17° 14°	160 160	400–1000 900–1700	-	3,7 5	Baarstad et al. (2005)	NEO
<i>Künftige flugzeuggetragene abbildende Spektrometer</i>										
APEX (2008)	PB	2-5 ^(a)	1000 Pixel	28°	~140 ~145	400–1050 1050–2500	<7,5 <15	<5 <10	Nieke et al. (2004)	RSL, Vito, ESA
<i>Operationelle satellitengetragene abbildende Spektrometer</i>										
CHRIS (2001)	PB	18 34	13km ⁽ⁱ⁾	-	18 62	415–1050	2-12	<11	Cutter & Lobb (2004) Barnsley et al. (2004)	ESA (TPM)
Hyperion (2000)	PB	30	256Pixel (7,7km)	-	242 ^(h)	357–2576	≤12	10	Folkman et al. (2001) USGS (2003)	NASA
<i>Künftige satellitengetragene abbildende Spektrometer</i>										
PRISMA (2011)	PB	30	30km	2,45°	>200	400–1010 920–2505	≤10	-	Galeazzi et al. (2009)	ASI
EnMAP (2015)	PB	30	1024 Pixel (30km)	2,63°	≥184	420–1030 950–1390 1048–1760 1950–2450	10	5/10 10 10 10	Kaufmann et al. (2010) EnMAP (2011)	DLR, GFZ
HyspIRI ⁽ⁱ⁾ (>2020)	PB	60	>2400 Pixel (>145km)	12,5°	≤210	380–2500	<10	10	HyspIRI (2012)	NASA
HERO	-	30	36km	n.a.	240	430–2450	~10	~10	Staez et al. (2005) Hollinger et al. (2006)	CSA

^{a)} abhängig von der Flughöhe über dem Boden; ^{b)} 5-10m IFOV (along track); ^{c)} abhängig vom Flugzeug: 52° auf einer DO-228; ^{d)} Die technischen Spezifikationen zu DAIS-7915 sind Habermeyer (2001) entnommen; ^{e)} abhängig von der angewandten Optik; ^{f)} abhängig vom Messintervall bzw. der angewandten Optik; ^{g)} vollständige Schwadbreite; ^{h)} effektiv werden nur 196 Kanäle kalibriert; ⁱ⁾ bezieht sich nur auf das VSWIR Instrument

Sonstige Abkürzungen: GSD: *Ground Sampling Distance* (Abstand der Pixelmitten), WB: *Whiskbroom*, PB: *Pushbroom*, ASI: *Agenzia Spaziale Italiana* (IT), CSA: *Canadian Space Agency*, ESA: *European Space Agency*, HyVista: *HyVista Corporation Pty Ltd - airborne hyperspectral remote sensing* (AU), INTA: *Instituto Nacional de Technica Aeroespacial* (ES), IS: *Integratred Spectronics* (AU), ITRES: *ITRES Research Limited - Airborne Hyperspectral and Thermal Remote Sensing* (CA), JPL: *Jet Propulsion Lab* (US), NASA: *National Aeronautics and Space Administration* (US), NEO: *Norsk Elektro Optikk AS* (NO), NERC: *Natural Environment Research Council* (GB), RSL: *Remote Sensing Laboratories* (CH), Specim: *Spectral Imaging Ltd.* (FI), Vito: *Vision on technology* (BE)

Die räumliche Auflösung flugzeuggetragener Systeme beträgt in Abhängigkeit von der Flughöhe zwischen 4m und 20m. Satellitengetragene Systeme weisen eine räumliche Auflösung von 30m bis 80m auf. Einen Überblick zu den Systemcharakteristika und technischen Spezifikationen derzeit existierender und geplanter flugzeuggetragener sowie satellitengestützter abbildender Spektrometer gibt Tab. 4.1.3.

Nach der Art des Aufnahmeprinzips muss zwischen opto-mechanischen und opto-elektronischen Scannern, d.h. *Whiskbroom*-Scannern bzw. *Pushbroom*-Scannern unterschieden werden. *Whiskbroom*-Scanner tasten die Erdoberfläche über ein rotierendes spiegeloptisches System zeilenweise ab, wobei jedes Bildpixel in einem Kanal durch denselben Detektor erfasst wird und somit dieselben spektralen und radiometrischen Eigenschaften besitzt. Von Nachteil ist die relativ geringe Verweildauer pro Bodenelement (*dwell time*) sowie die Spiegelbewegung, die ein geringeres Signal-Rausch-Verhältnis (*Signal-to-Noise Ratio*, SNR) und eine zusätzliche Bildverzerrung bedingen. Bei *Pushbroom*-Scannern erfolgt die Bildaufnahme mittels zeilenweise angeordneter Einzeldetektoren. Alle Pixel der quer zur Flugrichtung orientierten Bildzeile werden dabei gleichzeitig erfasst. Die Vorwärtsbewegung des Sensors trägt dazu bei, individuelle Zeilen zu einem kontinuierlichen Bildstreifen zusammenzufügen. Vorteile dieser Technik sind eine längere Integrationszeit pro Bildelement, die simultane Aufnahme der Reflexionswerte pro Zeile sowie die fehlenden mechanischen Bewegungen des Systems. Der Einsatz einzelner Bilddetektoren erfordert jedoch eine hochgenaue relative Kalibrierung der Bildelemente, um typische Streifenmuster und Verschiebungen der Zentrumswellenlängen im Gesichtsfeld des Sensors (*Field of View*, FOV) zu unterbinden (Elachi, 1987). Um bessere radiometrische Eigenschaften zu erzielen, werden in flugzeuggetragenen Systemen häufig *Whiskbroom*-Scanner verwendet (AVIRIS, DAIS-7915, MIVIS, HyMap, AHS). In satellitengetragenen Systemen werden aufgrund der technisch sehr aufwendigen und kostspieligen *Whiskbroom*-Systeme fast ausschließlich *Pushbroom*-Scanner eingesetzt (Hyperion, CHRIS, EnMAP, PRISMA, u. a.).

Obgleich die Zahl der spektralen Absorptionsmerkmale für viele Oberflächen im MIR und TIR deutlich höher ist, und damit auch deren Differenzierungs- und Identifikationspotential, decken nur sehr wenige Sensorsysteme diesen Bereich ab (z.B. AHS, HypSIRI). Grund hierfür ist, dass nach Gleichung 4.1.3 die Energie eines Photons mit zunehmender Wellenlänge abnimmt. Detektorelemente im langwelligen Spektralbereich weisen ein grundsätzlich schlechteres SNR auf. Die spektrale Bandbreite dieser Systeme ist dementsprechend geringer.

Soweit nicht anders angegeben, sind die Ausführungen in Kapitel 4.1 den Beiträgen von Schowengerdt (2007), Lillesand et al. (2004), Hunt (1980) und Irons et al. (1989) entnommen, auf die für die weitere, detailliertere Betrachtung verwiesen wird.

4.2 Bodenerosion

4.2.1 Definition

Bodenerosion bezeichnet „die durch Eingriffe des Menschen ermöglichten und durch erosive Niederschläge oder Wind ausgelösten Prozesse der Ablösung, des Transportes und der Ablagerung von Bodenpartikeln – losgelöst von der Problematik der rein natürlichen Abtragung ohne anthropogenen Einfluß“ (Bork, 1988). Morgan (1999) spricht auch von einem „Zwei-Phasen-Prozeß, bestehend aus der Ablösung der Partikel aus der Bodenmasse und ihrem Transport durch erosive Medien [...]. Ist nicht mehr genügend Energie vorhanden, stellt sich eine dritte Phase, die Ablagerung, ein“. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich Wasser als erosives Medium betrachtet, weshalb auch von Bodenwassererosion gesprochen wird.

4.2.2 Prozesse der Ablösung und des Transports

Der wichtigste Prozess der Partikelablösung beruht auf der kinetischen Energie der Regentropfen, die mit der Masse und dem Quadrat der Geschwindigkeit zunimmt. Beim Zerspritzen der Regentropfen an der Bodenoberfläche (*splash*) werden durch das radial ausweichende Wasser hohe Scherspannungen

erzeugt, die Teilchen aus ihrem Aggregatverband lösen können. Die Ablösung von Bodenteilchen aus ihrem Bodenverband kann aber auch durch Oberflächenabfluss erfolgen (*wash*). Dieser Prozess tritt ein, wenn die Scherkräfte des fließenden Wassers größer sind als die Kräfte, die die Partikel in ihrer Lage halten. Gleichzeitig führt adsorbiertes Wasser zu einer Verringerung der Aggregatstabilität ebenso wie Verwitterungsprozesse und Bodenbearbeitungsmaßnahmen. Darüber hinaus führt Auerswald (1998) an, dass zu Beginn eines Regenereignisses durch Lufteinschluss im Boden sehr hohe Drücke im Inneren von Bodenaggregaten entstehen können, die zur Bildung von Mikroaggregaten führen, welche häufig bereits transportfähig sind.

Der Transport von Bodenpartikeln geschieht, wenn auch in begrenztem Umfang, durch Spritztropfen, die beim Aufprall der Regentropfen entstehen. Die abgelösten Bodenteilchen werden zusammen mit den Spritztropfen bis zu mehrere Zentimeter durch die Luft geschleudert. Spritztropfen tragen jedoch nur bis zu einer bestimmten Dicke des Wasserfilms zum Transport von Bodenteilchen bei. Erreicht dieser mehr als zwei bis drei Tropfendurchmesser, wird die Tropfenenergie vollständig durch den Wasserfilm kompensiert. Wesentlich effektiver ist der Transport von Bodenpartikeln durch Oberflächenabfluss. Dessen Entstehung wird maßgeblich durch die Rate, mit der Wasser in den Boden eindringen kann, bestimmt. Das Ausmaß der Wasserbewegung im Boden wird gesteuert durch das antreibende Potenzialgefälle und die Wasserleitfähigkeit des Bodens und kann unter stationären Bedingungen für eindimensionale Strömungen und laminares Fließen durch die Darcy-Gleichung beschrieben werden:

$$q = v = \frac{Q}{F} = k_f \cdot \frac{d\psi}{dl} \quad (4.2.1)$$

wobei q die Wassermenge, die je Zeiteinheit durch eine Fläche hindurchströmt mit der Einheit [$cm^3 \cdot cm^{-2} \cdot s^{-1}$], v die Fließgeschwindigkeit [$cm \cdot s^{-1}$], Q die Gesamtwassermenge pro Zeiteinheit [$cm^3 \cdot s^{-1}$], F die Fläche [cm^2], durch die das Wasser strömt, k_f die gesättigte Wasserleitfähigkeit³² in [$cm \cdot s^{-1}$], ψ das antreibende Potenzial in [cm WS] und l die Fließstrecke. $d\psi/dl$ bezeichnet die Veränderung des Potenzials im Verlauf der Fließstrecke und wird auch als Gradient des Potenzials, 'grad ψ ' bezeichnet. Werden Wasserbewegungen im Boden betrachtet, wird für den antreibenden Potenzialgradienten in der Regel das hydraulische Potenzial verwendet:

$$\text{grad } \psi = \frac{\partial \psi_m + \partial \psi_z}{\partial z} = \frac{\partial \psi_m}{\partial z} + 1 \quad (4.2.2)$$

Hierin ist ψ_m das Matrixpotenzial in [cm WS] und ψ_z das Gravitationspotenzial in [cm WS] (Scheffer & Schachtschabel, 2010).

Während eines Niederschlagsereignisses nimmt die Geschwindigkeit, mit der Wasser in den Boden infiltriert, zunächst rasch ab. Mit zunehmender Wassersättigung und abnehmendem Matrixpotenzial ($\psi_m \rightarrow 0$) nähert sich die Infiltrationsrate einer Endinfiltrationsrate an, deren Höhe von den Bodeneigenschaften abhängt (Abb. 4.2.1). Diese Endinfiltrationsrate, d.h. die minimale Infiltrationskapazität, entspricht näherungsweise der Wasserleitfähigkeit eines Bodens im gesättigten Zustand (k_f) und kann als die Bewegungsrate angesehen werden, die allein durch die Schwerkraft hervorgerufen wird (Rowell, 1997). Überschreitet die Regenintensität die Endinfiltrationsrate, kann oberflächlicher Abfluss entstehen. Allerdings wird die Endinfiltrationsrate nicht immer erreicht, da Luft beim Vordringen der Befeuchtungsfront in den Bodenporen eingeschlossen werden kann. Außerdem kann Verschlammung der Bodenoberfläche durch feines Bodenmaterial, das mit dem infiltrierendem Wasser zunächst in größere Bodenporen und später auch in feinere Bodenporen eingespült wird, zu einer frühzeitigen Versiegelung der obersten Bodenschicht führen, so dass kein Wasser mehr in den Boden infiltrieren kann. Am Übergang zwischen Spritztropfen- und

³² k_f wird auch als Wasserleitfähigkeitskoeffizient, gesättigte hydraulische Leitfähigkeit oder Durchlässigkeitsbeiwert bezeichnet.

Abflusstransport tritt tropfeninduzierter Abflusstransport auf. Feinteilchen können in dem dünnen, hangabwärts gerichteten Wasserfilm durch Turbulenzen, die durch fallende Regentropfen verursacht werden, in Suspension gehalten und transportiert werden. Die beschriebenen Transportformen wirken flächenhaft. Mit zunehmender Konzentration des Abflusses gewinnen lineare Formen an Bedeutung. Ablösung und Transport durch Abfluss erfolgen dann in Rillen, Rinnen oder Gräben.

4.2.3 Einflussfaktoren der Bodenerosion

Das Ausmaß von Bodenerosionsereignissen wird durch die Umweltfaktoren Klima, Relief, Bodenbedeckung bzw. Landnutzung und Boden bestimmt (Abb. 4.2.3). Alle Faktoren wirken eigenständig, stehen aber zugleich miteinander in Interaktion (Toy et al., 2002). Klima bezieht sich auf die Charakteristik des gebietspezifischen Niederschlagsgeschehens. Regendauer und Regenintensität beeinflussen die Erosivität eines Regensfalls und damit den Verlauf eines Erosionsereignisses maßgeblich. Sowohl kurze intensive Starkregen als auch lang anhaltende Unwetter geringer Niederschlagsintensität können zu hohen Bodenverlusten führen. Zudem können vorangegangene meteorologische Ereignisse das Erosionsgeschehen prägen, da u.a. die Stabilität bereits wassergesättigter Böden gegenüber der Scherkraft fließenden Wassers stark verringert ist. Eine Zunahme der Reliefenergie durch Anstieg der Hangneigung und -länge fördert im Allgemeinen das Auftreten von Erosion als Folge der Geschwindigkeits- und Volumenzunahme des Oberflächenabflusses. Die Bedeckung des Bodens durch Pflanzen, Ernterückstände oder Steine wirkt hingegen schützend. Abhängig vom Anteil der Bodenbedeckung, der Pflanzenphysiognomie und der Dauer der Bodenbedeckung im Jahresverlauf kann dieser Effekt stark variieren. Intensive Bodenbearbeitung erhöht die Anfälligkeit von Böden gegenüber Erosion durch die Zerstörung von Bodenaggregaten und den Abbau stabilisierender organischer Bodenbestandteile.

Der Widerstand des Bodens gegen Ablösung und Transport wird als Erodibilität oder Erodierbarkeit bezeichnet. Hierbei kommt den Bodeneigenschaften Textur, Aggregatstabilität, Scherfestigkeit, Oberflächenrauigkeit, Infiltrationskapazität sowie den organischen und chemischen Bodenbestandteilen einschließlich der aktuellen Bodenfeuchte die wichtigste Rolle zu. In Bezug auf die **Bodentextur** sind Schluffe und Feinsande sowohl gegenüber der Ablösung als auch dem Transport wegen ihrer geringen Strukturstabilität am wenigsten widerstandsfähig (Abb. 4.2.2).

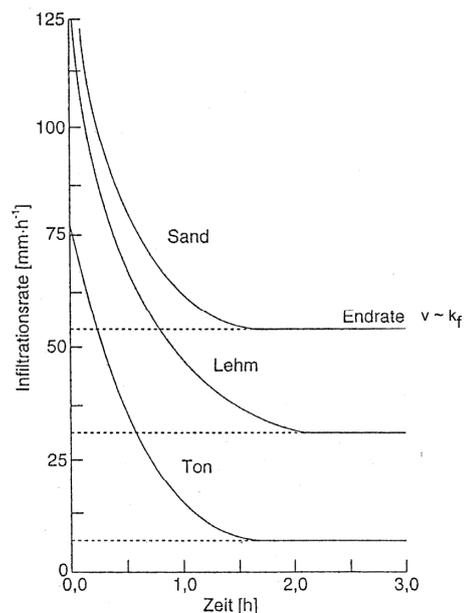


Abb. 4.2.1: Typische Infiltrationsraten für verschiedene Böden (nach Withers & Vipond (1974)³³; verändert).

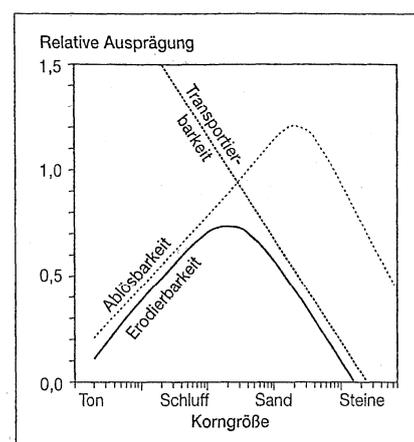


Abb. 4.2.2: Ablösbarkeit und Transportierbarkeit von Bodenbestandteilen in Abhängigkeit von ihrer Teilchengröße (Auerswald, 1998).

³³ Zitiert in Morgan (1999): Withers, B., & Vipond, S. (1974). Irrigation: design and practice. London, Batsford.

Partikel kleiner 0,063mm können aufgrund der adhäsiven oder chemischen Bindungskräfte größeren Widerstand gegen Ablösung und Transport leisten, und Partikel größer 0,2mm aufgrund ihres Gewichts. Die **Aggregatstabilität** wird vor allem durch größere Anteile organischer Bodenbestandteile und der damit verbundenen erhöhten mikrobiellen Aktivität gestärkt. Aber auch Tonminerale, die sich zu Ton-Humuskomplexen zusammenschließen wirken positiv auf die Stabilität der Bodenaggregate gegenüber Erosion, wobei Unterschiede in Abhängigkeit von der Art der Tonminerale bestehen. Grundsätzlich wird die Aggregatbildung durch Illite und Smektite stärker gefördert. Im Gegensatz zu Kaolinit sind sie bedingt durch ihre Gitterstruktur aber in großem Maße Prozessen der Quellung und Schrumpfung ausgesetzt, was ihren Aggregatbildungen weniger Stabilität verleiht. Des Weiteren können chemische Bodenbestandteile wie Oxide, Carbonate oder Salze durch Zementierung stabilisierend auf das Bodengefüge wirken. Gravitation, Fluidbewegung und mechanische Belastung üben Scherkräfte auf den Boden aus. Die **Scherfestigkeit** eines Bodens beschreibt seine Bindigkeit und den Widerstand gegen diese Kräfte. Sie hängt ab vom Reibungswiderstand der einzelnen Bodenpartikel, von der Höhe der Auflast, von den kohäsiven Kräften zwischen den Bodenpartikeln und der Oberflächenspannung im Feuchtigkeitsfilm ungesättigter Böden. Die **Rauigkeit** der Bodenoberfläche hat Einfluss auf das Abflussverhalten und wird durch die Eigenschaften der Bodenpartikel und –aggregate bestimmt. Eine große Oberflächenrauigkeit fördert die Muldenspeicherkapazität und verzögert somit den Oberflächenabfluss. Die **Infiltrationskapazität** von Böden wird vor allem über die Bodentextur, d.h. die Porengröße, die Porenstabilität und das Bodengefüge gesteuert. Ihre zentrale Rolle bei der Entstehung von Oberflächenabfluss und damit dem Abtransport von Bodenpartikeln wurde im vorangegangenen Kapitel erläutert. Grundsätzlich haben Sande und sandige Lehme aufgrund der großen Partikelzwischenräume eine hohe Infiltrationskapazität. Quellfähige Tone und wasserinstabile Minerale setzen die Infiltrationskapazität von Böden dagegen herab. Jedoch können größere Risse und Makroporen in tonreichen Böden deutlich höhere Infiltrationsraten hervorrufen als allein von der Bodentextur zu erwarten wäre. Außerdem ist die Infiltrationskapazität abhängig vom Grad der Bodenverdichtung, d.h. der Lagerungsdichte, und kann innerhalb eines Bodenprofils variieren, wenn zwei oder mehr Schichten unterschiedlicher Wasserleitfähigkeit auftreten. Durch Verschlammung und Verkrustung der Bodenoberfläche kann die Infiltrationskapazität von Böden deutlich herabgesetzt sein. Die aktuelle **Bodenfeuchte** ist entscheidend für den zeitlichen Verlauf der Infiltration von Regenwasser bis zur Wassersättigung des Bodenkörpers. Sie hat aber auch Einfluss auf die Gefügestabilität und damit auf die Ablösbarkeit von Bodenpartikeln aus ihrem Aggregatverband. Soweit nicht anders angegeben, sind die Ausführungen in diesem Kapitel den Beiträgen von Morgan (1999) und Auerswald (1998) entnommen. Für eine detaillierte Einzeldarstellung der Erosionsprozesse und –mechanismen sei an dieser Stelle auf eben diese Autoren bzw. weiterführende Fachliteratur verwiesen (z.B. Schmidt, 1996).

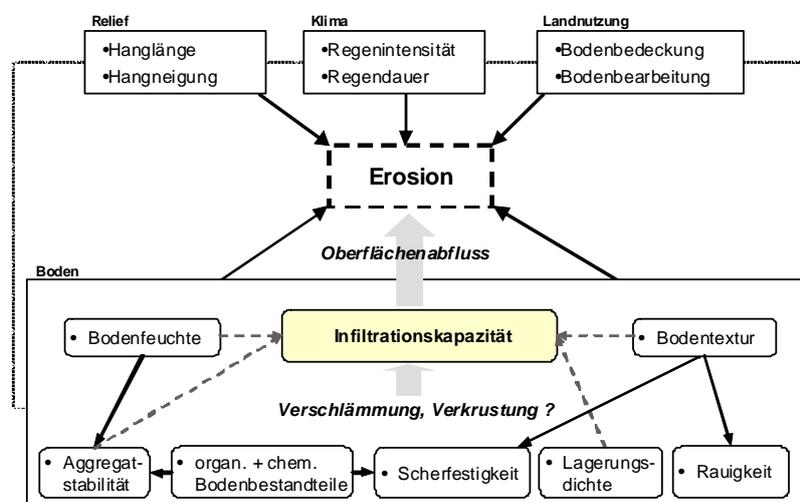


Abb. 4.2.3: Faktoren der Bodenerosion.

5 Untersuchungsgebiet: Testfeld DEMMIN

Das Testfeld DEMMIN (*Durable Environmental Multidisciplinary Monitoring Information Network*) wurde 1999 in einer Kooperation zwischen dem Deutschen Fernerkundungsdatenzentrum des Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR-DFD) und der Interessensgemeinschaft Demmin (IG Demmin) begründet. Die IG Demmin ist ein Zusammenschluss von Landwirten im Landkreis Demmin, die insgesamt ca. 25.000ha (250km²) landwirtschaftliche Nutzfläche in einem etwa 40km x 35km großen Gebiet um die Stadt Demmin bewirtschaften, was ca. 1,7% der gesamten landwirtschaftlichen Nutzfläche Mecklenburg-Vorpommerns entspricht. Zweck dieser Kooperation ist es, einerseits die praktische Relevanz von Informationsprodukten aus der Fernerkundung für die Landwirtschaft abzusichern und andererseits deren Weiterentwicklung und Validierung durch Bodenreferenzdaten zu gewährleisten. Neben einer stetig wachsenden Datenbasis statischer und dynamischer Umweltparameter (z.B. Landnutzungskarten, Schlagkarten, Ertragskarten, Geländemodell), stehen durch ein Agrarmeteorologisches Messnetz mit derzeit 15 Stationen u. a. quasi kontinuierliche Informationen zu Lufttemperatur, Niederschlag, Windrichtung und Strahlungsparametern zur Verfügung (Gerighausen et al., 2007). Seit 2008 ist DEMMIN international als Testfeld zur Kalibrierung und Validierung flugzeug- und satellitenbasierter optischer Sensoren im weltweiten Katalog des Geologischen Dienstes der Vereinigten Staaten gelistet (USGS, 2009).

Die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit konzentrieren sich auf einen ca. 15km x 30km großen Ausschnitt im Ostteil des Testfeldes, der durch die Abdeckung der hyperspektralen Bilddaten vorgegeben ist (Abb. 5.1.1). Aufgrund seiner Lage und Ausdehnung kann dieser Ausschnitt als repräsentativ für das gesamte Testfeld und auch für große Teile der landwirtschaftlich genutzten Flächen in Mecklenburg-Vorpommern angesehen werden.

5.1 Lage und naturräumliche Gegebenheiten

Das Testfeld DEMMIN befindet sich im nordostdeutschen Tiefland, im Herzen des Bundeslandes Mecklenburg-Vorpommern, ca. 200km nördlich von Berlin. In seinem Zentrum, am Gewässerkreuz der Flüsse Tollense, Trebel und Peene, befindet sich die Kreisstadt Demmin (Abb. 5.1.1).

5.1.1 Geologie und Boden

Basierend auf einer physiognomischen Betrachtung der Landschaft, untergliederte Hurtig (1957) Mecklenburg-Vorpommern in sechs Großlandlandschaften. Der nordöstliche Teil des Untersuchungsgebietes gehört demnach dem Vorpommerschen Flachland an, währenddessen sich südlich des Mecklenburgisch-Pommerschen Grenztales³⁴ das Rückland der Seenplatte erstreckt. Ihr charakteristisches Erscheinungsbild verdanken beide Großlandschaften maßgeblich den geologischen Prozessen während des Weichsel-Hochglazials ca. 24-14ka B.P. bzw. der präglazialen Überprägung bis 10ka B.P.³⁵, dem Übergang vom Pleistozän zum Holozän.

Das Vorpommersche Flachland ist gekennzeichnet durch seinen ebenen bis flachwelligen Charakter, das von breiten Talniederungen (u. a. Peene, Tollense bzw. Grenztal) durchzogen wird. Sie dienen mit zunehmendem Eiszerfall als Hauptentwässerungsbahnen (Bremer, 2004). Das Rückland der Seenplatte ist deutlich kuppiger mit beckenartigen, von langgestreckten Seen eingenommenen Talzügen (u. a. Kummerower See) und fällt nach Norden hin entlang des Grenztales von bis zu 96m³⁶

³⁴ Ehemalige Landesgrenze zwischen Mecklenburg und Pommern im 20. Jahrhundert. Verläuft im Untersuchungsgebiet im Südosten entlang der Tollense und setzt sich im Nordosten entlang der Trebel fort.

³⁵ Angaben aus der radiometrischen Altersdatierung mit ¹⁴C (vgl. Bremer, 2004)

³⁶ NW-SO verlaufendes glazigenes Stauchungsgebiet mit Geschiebe- und Tonmergel der Endmoränen nahe Hohenmocker (GK-MVP, 1:25.000)

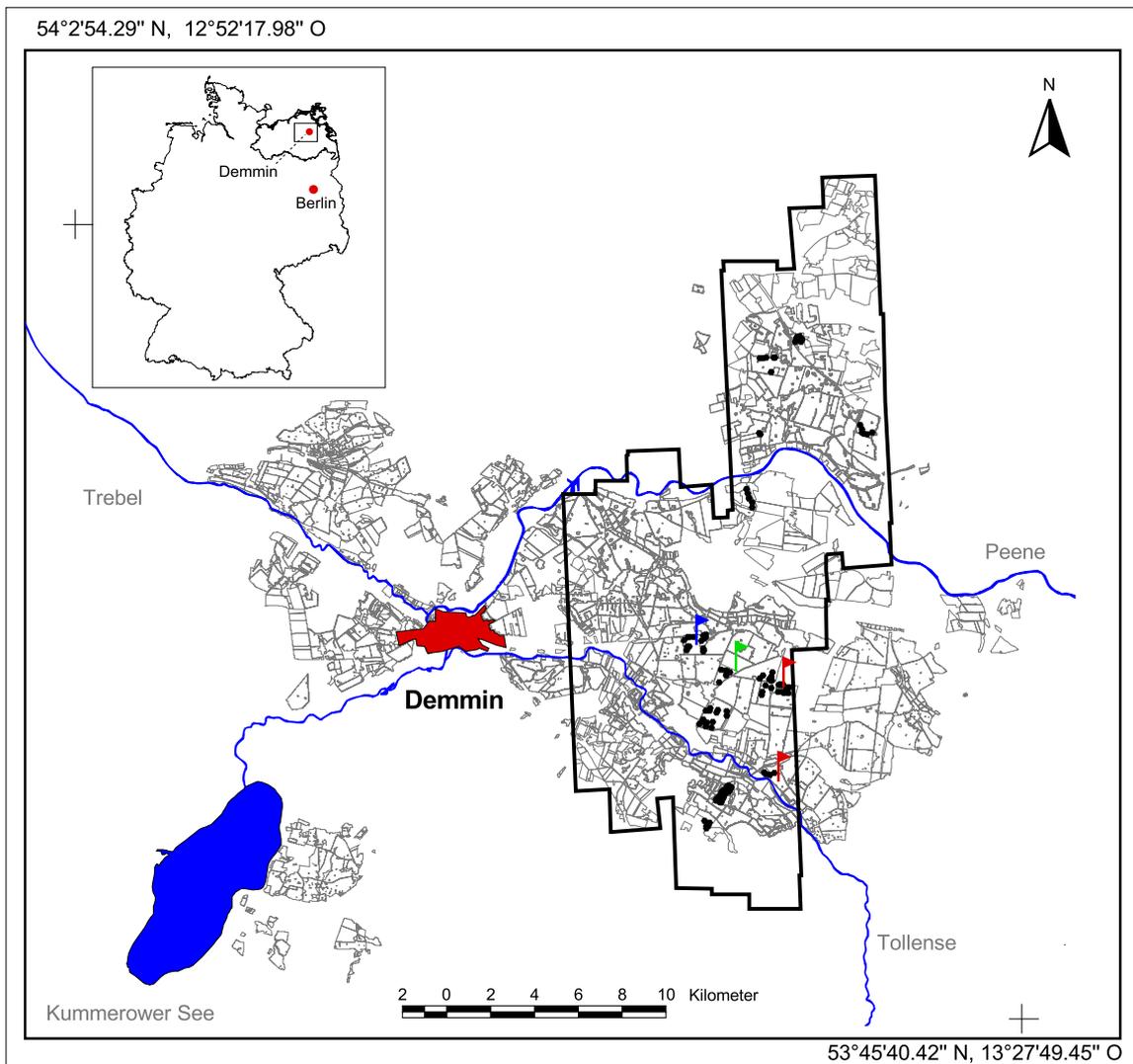


Abb. 5.1.1: Lage des Testfeldes DEMMIN und seiner landwirtschaftlichen Nutzflächen nahe der Stadt Demmin im NO Deutschlands. Das schwarze Polygon kennzeichnet die maximale Ausdehnung der HyMap-Überflüge von 2004, 2005 und 2008. Die schwarzen Kreise markieren die Standorte der bodengestützten Referenzmessungen. Die Flags geben die Lokation ausgewählter Felder (naheliegende Ortschaft) an: blauer Flag – Marienfelde (vgl. Abb. 7.8.4), grüner Flag – Schmarsow Nord (vgl. Abb. 8.2.2), rote Flags – Heydenhof (nördlich), Alt Tellin (südlich) (vgl. Abb. 7.8.3, Abb. 7.8.5, Abb. 8.2.3, Abb. 8.5.1).

auf wenige Meter über Höhengnull (HN)³⁷ ab. Die glazialen Ablagerungen im Untersuchungsgebiet werden im Wesentlichen von Geschiebemergel und Geschiebelehm, sowie teils Geschiebedecksanden der Grundmoränen des Pommerschen Stadiums (W2) sowie des Mecklenburger Vorstoßes (W3) gebildet. In den Niederungen lagern glazifluviale Sedimente des Mecklenburger Vorstoßes. Teils kommen sandig, schluffige glazilimnische Sedimente des Pommerschen Stadiums in Beckenlagen vor. In den Flusstälern sind holozäne Niedermoortorfe und Muddenablagerungen verbreitet (Krienke, 2000; Bremer & Rühberg, 1990).

Die Bodenentwicklung auf den glazialen Sedimenten dieser Jungmoränenlandschaft wurde vor allem von den Bodenbildungsfaktoren Ausgangssubstrat, Relief und Wasserhaushalt bestimmt. Starke Unterschiede in Substrat und Relief haben teilweise zu einer großen Heterogenität der Bodendecke mit kleinräumigen Wechseln geführt (Dann, 2004). Auf den ebenen, flachwelligen Grundmoränen muss

³⁷ Angaben in Normalhöhen über Höhengnull. Diese Bezeichnung wird auch als Höhe über HN56 geführt. Bezugsniveau ist der Kronstädter Pegel mit dem Krassowski-Ellipsoid.

zwischen Bereichen mit hohen Sandanteilen als auch weiten Flächen mit Geschiebemergel und –lehm differenziert werden. Auf den sandigeren Gebieten haben sich Braunerden, Bänder-Parabraunerden, Parabraunerden und Fahlerden entwickelt. In den sandarmen, lehmigen Gebieten dominieren Parabraunerden, Fahlerden, Parabraunerde-Pseudogleye und Pseudogleye. Bei oberflächennahem Grundwasser oder Stauwassereinfluss herrschen Pseudogleye und Gleye vor. Auf den kuppigen Grundmoränen des Rücklandes sind häufig Hang-Senken-Gefüge mit gekappten Böden auf den Kuppen und Kolluvisoln an den Unterhängen ausgebildet, die durch Umlagerungsprozesse entstanden sind. In den Tal- und Niederungsbereichen entwickelten sich infolge der Litorina Transgression seit etwa 6ka B.P. hydromorphe Böden, v.a. Niedermoore und Mudden.

Bereits seit ca. 4,5ka B.P. ist die durch Gletscher und Eis geformte charakteristische Landschaft mit den natürlich gewachsenen Bodentypen anthropogenen Eingriffen ausgesetzt, die die Naturlandschaft überprägt und verändert haben. Pollen- und Makrorest-Analysen belegen seit der Bronzezeit eine zunehmende Waldausdünnung und Ackerbau (Janke, 2004).

5.1.2 Klima und Vegetation

Die Region befindet sich in einem Übergangsbereich von kontinental und ozeanisch geprägtem Klima, was sich in der großräumigen Verteilung der mittleren jährlichen Niederschläge und Temperaturen widerspiegelt. Von Nordwest nach Südost sinken die mittleren jährlichen Niederschläge von >600mm auf <600mm³⁸. Die Temperaturen fallen von >8°C auf <8°C. Das langjährige Niederschlagsmittel für die Stadt Demmin beträgt 555,2mm mit monatlichen Maximalwerten zu Beginn der landwirtschaftlichen Erntesaison im Juni und im Juli (DWD, 1996-2011). Das langjährige Temperaturmittel in Demmin beträgt 7,8°C³⁹. Insbesondere im Bereich des Rücklandes der Seenplatte können kleinräumig jedoch stark reliefgebundene klimatische Unterschiede auftreten.

Die natürliche Vegetation im Bereich des Vorpommerschen Flachlandes ist der Buchen-Eschenwald. Im Rückland der Mecklenburger Seenplatte sind Buchen-Traubeneichenwälder heimisch, in den Niederungen Erlenwälder. Die natürliche Vegetation ist durch großflächig angelegte Rodungen v.a. im 12./13. Jahrhundert mehr oder weniger verschwunden. Bis auf wenige zusammenhängende Mischwaldbestände dominiert heute die ackerbauliche Nutzung.

5.2 Aktuelle Landnutzung und Bodenbearbeitung

Mecklenburg-Vorpommern ist mit knapp 64% der gesamten Landesfläche hinter Schleswig-Holstein das Bundesland mit der zweithöchsten landwirtschaftlichen Flächennutzung. Im Landkreis Demmin werden fast 75% der Fläche landwirtschaftlich genutzt (Tab. 5.2.1). Die Bodengesellschaften der Parabraunerden, Pseudogley-Parabraunerden und Pseudogleye, die auf den sandarmen, lehmigen ebenen bis welligen Grundmoränenplatten verbreitet sind, gehören zu den ertragreichsten Böden Mecklenburg-Vorpommerns mit Ackerzahlen⁴⁰ zwischen 34 und 43, teilweise auch höher (Thiere & Kiesel, 2001; LUNG, 2003). Die sandhaltigeren Standorte der Grundmoränenplatten weisen Ackerzahlen zwischen 28 und 33 auf. Das Testfeld DEMMIN liegt somit im „Kerngebiet des intensiven Ackerbaus“ (Dann, 2004). Kennzeichen dieser Agrarlandschaft sind die sehr großen, ausgeräumten Bewirtschaftungsflächen, die im Zuge der Kollektivierung und Industrialisierung der Landwirtschaft in der DDR⁴¹ angelegt wurden. Die durchschnittlichen Schlaggrößen betragen 50ha (0,5km²). Nicht selten nehmen einzelne Bewirtschaftungsflächen mehr als 100ha (1km²) ein.

Die Landwirtschaftsflächen der IG Demmin sind zu ca. 60% mit Wintergetreidesorten in wechselnder Fruchtfolge bestellt, wobei Weizen den größten Anteil stellt. Hackfrüchte einschließlich Mais nehmen knapp 13% der Fläche ein. Während Mais in der Regel in Monokultur auf Minderertragsstandorten (Sande) angebaut wird, werden Zuckerrüben und Kartoffeln in Rotation mit Wintergetreidesorten

³⁸ Station Ribnitz-Dammgarten: 646,7mm; Station Pasewalk: 529,6mm. Normalwerte der Periode 1961-1990 (DWD, 1996-2011)

³⁹ Angaben für die Periode 1881-1930 aus Hurlig (1957), S. 132

⁴⁰ Ackerzahlen dienen als Maß der Ertragsfähigkeit landwirtschaftlicher Böden. Sie werden auf Basis der Bodenzahlen des Ackerschätzungsrahmens von 1936 durch Zu- und Abschläge in Abhängigkeit von Klima, Relief und weiteren Faktoren ermittelt.

⁴¹ Deutsche Demokratische Republik (1949-1990)

bestellt. In Abhängigkeit von der Marktpreisentwicklung sowie den tatsächlich verfügbaren Flächen können diese Fruchtfolgen variieren. Die übrigen Gebiete, knapp ein Viertel der Fläche, werden als Grünland und Weideland bewirtschaftet oder dienen als Stilllegungsflächen bzw. Flächen sonstiger Nutzung. Damit entsprechen die fruchtartspezifischen Anteile an der Landwirtschaftsfläche der IG Demmin in etwa auch denen des Landkreises Demmin sowie Mecklenburg-Vorpommerns (SIS Online, 2005).

Tab. 5.2.1: Prozentuale Flächennutzung für Mecklenburg-Vorpommern und den Landkreis Demmin 2005 (SIS Online, 2005).

Flächennutzung [%]	Landwirtschaft	Wald	Wasser	Siedlung, Verkehr	Sonstige Nutzung
MVP	63,78	21,35	5,68	7,35	1,84
Landkreis Demmin	74,97	13,72	3,99	6,03	1,29

Tab. 5.2.2: Anbaustruktur der landwirtschaftlichen Flächen der IG DEMMIN (Wirtschaftsjahr 2004-2005) (Zabel, 2005).

Anbau	davon [ha]		Gesamt		Gesamt*	Gesamt**
			[ha]	[km ²]	[%]	[%]
Wintergetreide	Weizen	7181,73	14802,29	148,02	60,06	79,24
	Roggen	894,52				
	Gerste	2348,42				
	Raps	4377,62				
Hackfrüchte	Mais	1612,63	3177,08	31,77	12,89	17,01
	Kartoffeln	946,60				
	Zuckerrüben	617,85				
Sonstige Feldfrüchte	u. a. Erbsen, Lupine, Spargel, Sommergetreide		700,37	7,00	2,84	3,75
Sonstige Flächen	u. a. Grünland, Weide, Wiese, Stilllegungsflächen		5964,35	59,64	24,20	-
Summe			24644,09	246,44	100,00	100,00

*bezogen auf die gesamte landwirtschaftliche Nutzfläche einschließlich Grünland, Wiese, Weide, etc. (sonstige Flächen)

**bezogen auf das Ackerland

Die Bodenbearbeitung im Ackerbau lässt sich grundsätzlich in drei Phasen gliedern: (i) Teilbrachebearbeitung, (ii) Grundbodenbearbeitung und (iii) Saat- und Pflanzbettbereitung (Diepenbrock et al., 2009). Die Teilbrachebearbeitung (i) soll zunächst günstige Bedingungen für das Keimen von Ausfallgetreide und Unkrautsamen sowie die Strohverrottung schaffen. Je nach eingesetztem Verfahren kann die Bearbeitungstiefe bis zu 20cm erreichen. Im Ergebnis dessen ist die Ackerfläche stark (Scheibenegge, 5-10cm) bis mäßig (Grubbern, bis 20cm) mit Ernterückständen bedeckt bzw. durchsetzt. Die Grundbodenbearbeitung (ii) dient der Lockerung der Ackerkrume bis zu einer Tiefe von ca. 40cm, wobei der Boden vollständig umgebrochen und durchmischt wird. Nach dieser Bearbeitungsphase ist der Boden i. d. R. völlig vegetationsfrei, wobei die Bodenrauigkeit maßgeblich von der Bodenart abhängt. Die Größe der Bodenaggregate steigt mit zunehmendem Lehm- bzw. Tongehalt. Die Aufgabe der Saatbettbereitung (iii) ist es, den Boden einzuebnen, oberflächennah zu zerkleinern und rückzuverfestigen. Bis zum Auflaufen der Neuaussaat nach etwa zwei Wochen ist der Boden zu diesem Zeitintervall frei von Vegetation. Wird alternativ das Mulchsaatverfahren (Mais, Rüben) angewendet, erfolgt die Neuaussaat nach vorheriger Pflugfurche meist in die über Winter abgefrorenen oder kurz zuvor chemisch behandelten Zwischenfruchtbestände. Welche Technik bzw. welches Verfahren in den Bearbeitungsphasen zum Einsatz kommt ist unter anderem abhängig von der Fruchtart, der Fruchtfolge und den Bodeneigenschaften aber auch von den Arbeitspraktiken und Ansichten des einzelnen Landwirtes. So wird in DEMMIN in der Regel pfluglos bewirtschaftet (gegrubbert, Bearbeitungstiefe 20-25cm), nur nach Winterweizen erfolgt eine Pflugbearbeitung (Bearbeitungstiefe 30-40cm) (E. Zabel, Geoinformatik Zabel, mündl. Mitteilung, 2008). Mulchsaatverfahren werden vereinzelt auf stark geneigten Flächen eingesetzt. Die zeitlichen Abstände zwischen diesen Bearbeitungsphasen werden im Wesentlichen durch die Phänologie der einzelnen Fruchtarten sowie die Fruchtfolge vorgegeben. Während die Zeit zwischen Ernte und Aussaat bei Wintergetreide nur 6 bis 8 Wochen beträgt (Mitte/Ende Juli – Mitte/Ende September), erfolgt bei Hackfrüchten, Mais und Sommergetreide die Saatbettbereitung und Aussaat erst im darauf folgenden Frühjahr. Geerntet wird je nach Frucht von August bis Oktober, so dass diese Flächen

mehrere Monate ungenutzt brach liegen können. Dies ist vor allem bei Mais in Monokultur der Fall. Zuckerrüben und Kartoffeln werden häufig mit Zwischenfruchtanbau betrieben (E. Zabel, Geoinformatik Zabel, mündl. Mitteilung, 2008).

Die bewirtschaftungsbedingte Beschaffenheit der Ackerbodenoberfläche, d.h. die Bodenrauigkeit, die Bodenverdichtung (Lagerungsdichte), der Bedeckungsgrad (grüne Vegetation oder Ernterückstände), ist über das Jahr hinweg stark variabel und wird von verschiedenen Faktoren beeinflusst. Die in Winterfeldfruchtfolge bestellten Flächen sind einen Großteil des Jahres mit Vegetation oder Ernterückständen bedeckt und nur zwischen Grundbodenbearbeitung (Mitte/Ende September) und Auflaufen der Neuaussaat (Mitte/Ende Oktober) frei von Vegetation. Flächen mit Hackfrucht-Wintergetreidefolgen können je nach vorheriger Feldfrucht und Bodenbearbeitung von Anfang/Mitte November vegetationsfrei, teils mit Ernterückständen oder grüner Vegetation (Zwischenfeldfrucht) bestanden sein. Bei Mais in Monokultur werden die Flächen in der Regel Anfang/Mitte November gegrubbert, so dass bis zur Saatbettbereitung im Frühjahr der Boden unbedeckt und nur teils mit Ernterückständen durchsetzt ist. Bei allen Hackfrüchten ist der Boden im Frühjahr für einen Zeitraum von 4 bis 6 Wochen von Ende März (Zuckerrüben, Kartoffeln) bzw. Anfang/Mitte April (Mais) bis zum Auflaufen Anfang Mai bzw. Mitte/Ende Mai vegetationsfrei.

5.3 Folgen und Risiken der landwirtschaftlichen Nutzung

Bis zu Beginn der großflächigen Rodungen ab dem 9. Jahrhundert, vor allem aber im 12./13. Jahrhundert, waren mehr als 80% der Flächen in Mecklenburg-Vorpommern bewaldet oder von Mooren eingenommen. Die den Rodungen folgende landwirtschaftliche Nutzung der Flächen hatte vielseitige Folgen. So führte der Ackerbau in Hanglagen verstärkt zur Kappung von Bodenprofilen und Ablagerung der Kolluvien am Hangfuß. Dadurch bildeten sich typische Hang-Senken-Gefüge aus. Die Urbarmachung grund- und stauwasserbeeinflusster Böden durch Komplexmelioration verursachte die großflächige Degradierung der Moorböden in den Niederungen durch Humifizierung und Mineralisierung der Torfkörper bis hin zur Vermulmung. Die Pflugarbeit schaffte auf allen Ackerflächen einen ca. 20-30cm mächtigen, künstlichen Ap-Horizont⁴², in dem der Abbau organischer Bodensubstanz durch die regelmäßige Bodenbearbeitung und damit Belüftung gefördert wird. Die dadurch bedingte Verringerung der Aggregatstabilität und die zeitweilig fehlende bzw. lückige Bodenbedeckung erhöhen die Verschlammungs- und Erosionsanfälligkeit (Wasser- und Winderosion) landwirtschaftlich genutzter Böden (Scheffer & Schachtschabel, 1998). Einer Studie des Landesamtes für Umwelt, Naturschutz und Geologie zufolge sind 53% aller Landwirtschaftsflächen in Mecklenburg-Vorpommern potenziell durch Wassererosion gefährdet, davon 10% stark bis sehr stark (LUNG, 2002a). Im Testfeld DEMMIN ist insbesondere das Rückland der Seenplatte aufgrund der größeren Reliefenergie einer höheren Gefährdung ausgesetzt (vgl. Anhang H 1).

Zu den Risiken agrarischer Produktion zählt ferner die Bodenschadverdichtung durch technogene Überlastung. Durch die Reduktion des Porensystems verschlechtern sich die Luft- und Wasserversorgung der Pflanzenbestände und die Infiltrationseigenschaften des Bodens. Es kommt zu Ertragsminderung und Oberflächenabfluss. Eine landesweite Einschätzung der potenziellen Verdichtungsgefährdung in fünf Klassen berechnet auf Basis der mittelmaßstäbigen landwirtschaftlichen Standortkartierung (MMK) wurde durch das Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie (LUNG, 2002b) veröffentlicht. Demnach sind die Flächen der IG Demmin mäßig bis stark, teils sehr stark durch Bodenverdichtung gefährdet.

⁴² Ap: Pflughorizont, Ackerkrume. Ap-Horizonte können je nach Bearbeitungstiefe auch deutlich mächtiger sein.

6 Datenerhebung und Methodik

6.1 Quantitative Referenzanalytik

6.1.1 Probenahme im Gelände

Die Auswahl der Probenahmepunkte erfolgte maßgeblich unter drei Gesichtspunkten: Flächennutzung, Repräsentativität für das Untersuchungsgebiet und Reflexionscharakteristik in den HyMap-Aufnahmen. Als Erstes erfolgte eine Einschränkung auf ackerbaulich genutzte Flächen auf Grundlage der Bewirtschaftungsdaten des Testfeldes DEMMIN (Zabel, 2005). Dauergrünland, wie Wiesen und Weiden wurden in diesem Zuge als Messstandorte ausgeschlossen. Um die Bodencharakteristik des Untersuchungsgebietes möglichst vollständig zu erfassen, wurde auf den verbleibenden Flächen mit der Karte der Bodenschätzung (Scheffer & Schachtschabel, 1998), der mittelmaßstäbigen landwirtschaftlichen Standortkartierung (MMK, Lieberoth et al., 1983) und einem digitalen Geländemodell eine erste Standortauswahl getroffen. Ein Abgleich mit den in-situ Gegebenheiten zum Aufnahmezeitpunkt der Hyperspektraldaten, v.a. dem Vegetationsbestand (vgl. Kap. 6.3.1), ergab die finale Messpunktlokation. Falls erforderlich oder zweckmäßig, erfolgte noch eine Anpassung der Probenahmepunkte an besondere Geländegegebenheiten. Insgesamt wurden 135 Messpunkte auf 14 Feldern festgelegt, die sich ca. 22km in N-S-Richtung und ca. 8km in O-W-Richtung erstrecken (vgl. Abb. 5.1.1). Sie werden nachfolgend als *Bodenserie Demmin* bezeichnet. Acht der Felder wurden intensiv beprobt mit 6 bis 43 Messpunkten pro Feld. Auf weiteren 6 Feldern wurden an 2 bis 5 Stellen Bodenproben entnommen. Der durchschnittliche Abstand eines Probenahmepunktes zum benachbarten Messpunkt beträgt ca. 138m und maximal ca. 743m. 43 Messpunkte der 135 Probenahmestellen der *Bodenserie Demmin* befinden sich auf einem reliefbewegten, heterogenen Schlag nahe der Ortschaft Buchholz. Auf diesen Teil der Proben wird im weiteren Verlauf der Arbeit unter dem Begriff *Bodenserie Buchholz* Bezug genommen. Die Verteilung der Messpunkte im Raum wurde maßgeblich durch die Bodencharakteristik im Untersuchungsgebiet bestimmt. Diese zeichnet sich durch weite Flächen mit lehmigen Sanden und sandigen Lehmen aus, die aber kleinräumig mit Arealen aus reinen Sanden oder lehmigen Tonen durchsetzt sind. In Verbindung mit den Aufnahme Fenstern der Bilddaten konnten Referenzproben ton- und humusreicher Böden nur erfasst werden, indem einzelne Felder intensiv beprobt wurden.

Die Lokalisierung der Messpunkte im Feld erfolgte mithilfe des Mobile Mapper CE der Firma Thales, welches Genauigkeiten im Sub-Meterbereich erreicht. Bis auf wenige Ausnahmen, wurden die Bodenreferenzproben im Gelände direkt im Anschluss an die feldspektrometrischen Messungen (vgl. Kap. 6.2.3) als Schürfproben der oberen 10cm in einem Umkreis von 2m von der Messstelle entnommen. Um ausreichend Probenmaterial für laborspektrometrische sowie laboranalytische Untersuchungen zur Verfügung zu haben, wurden etwa 1500g Boden pro Messpunkt entnommen.

6.1.2 Laboranalytik

Für alle 135 Bodenproben (*Bodenserie Demmin*) wurden die physikalischen Korngrößenfraktionen, der Gesamtkohlenstoff (TC), der Carbonat-Kohlenstoff (IC), der pH-Wert sowie der Eisengehalt bestimmt. Die Analysen erfolgten durch das Zentrallabor des Leibnitz-Zentrums für Agrarlandschaftsforschung (ZALF). Für die 43 Proben der *Bodenserie Buchholz* konnten in Kooperation mit dem Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie (LUNG) zusätzlich Haupt- und Spurenelemente röntgenfluoreszenzanalytisch (RFA) sowie C-, N-, S- und H₂O-Gehalte nach trockener Verbrennung bestimmt werden. Außerdem wurde durch das LUNG eine mineralogische Charakterisierung der Proben mittels Röntgendiffraktometrie (RDA) vorgenommen.

6.1.2.1 Analyseverfahren zur Bestimmung der physikalischen und chemischen Bodeneigenschaften

Die Bestimmung der Korngrößenfraktionen erfolgte nach DIN ISO 11277 (2002-08). Die Proben wurden zunächst mit Wasserstoffperoxid zur Zerstörung der organischen Substanz vorbehandelt und anschließend mit Natriumpyrophosphatlösung zur Dispergierung der Mineralbestandteile versetzt. Aus der Suspension wurden die Kornfraktionen $>0,063$ mm mittels Siebanalyse und die Kornfraktionen $<0,063$ mm mittels Pipettanalyse nach Köhn (1928) ermittelt. Die Messung des pH-Wertes erfolgte mit dem TitraMaster 85 (Radiometeranalytik) nach VDLUFA A 5.1.1 (VDLUFA, 1991) unter Verwendung einer 0,1 mol/l KCl-Lösung⁴³. Die Menge an IC wurde durch Zersetzung mit Phosphorsäure (H_3PO_4) ermittelt, wobei das entstehende CO_2 abgetrennt und mit einer Gasanalysen-Meßanlage vom Typ Carmomat 12D mittels elektrischer Leitfähigkeit gemessen wird. Die Bestimmung des TC erfolgte durch Veraschung von etwa 500mg Probensubstanz als aufgemahlenes Pulver bei $1250^\circ C$ im Sauerstoffstrom und Messung der entstehenden Oxide (CO_2) in einer Infrarotzelle mit dem Elementanalysator CNS-2000 der Firma LECO (Verfahren nach DIN ISO 10694, 1996-08; Durchführung 7a). Der Gehalt an organischem Kohlenstoff (OC) berechnet sich aus der Differenz des TC und des IC. Der Gehalt an organischer Bodensubstanz wurde aus den OC-Gehalten durch Multiplikation mit dem Faktor 1,72 näherungsweise ermittelt (AG Boden, 1994).⁴⁴ Zur Bestimmung des Eisengehaltes wurden die Proben mittels Königswasseraufschluss nach VDLUFA A 2.4.3.1 (VDLUFA, 1991) und DIN 38414-S 7 (1983-01) aufgeschlossen. Die quantitative Elementbestimmung erfolgte nach dem Prinzip der optischen Emissionsspektrometrie mittels induktiv gekoppeltem Plasma (ICP-OES⁴⁵) mit einem ICP Ultrace JY 138 der Firma Jobin Yvon (Horiba Jobin Yvon, 1996-2012). Auf diese Weise können etwa 80-95% des Eisens erfasst werden (A. Höhn, Institut für Bodenlandschaftsforschung, Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung e.V., mündl. Mitteilung, 2006). Die Standardfehler (SEL) der vorhergehend beschriebenen Laboranalysemethoden sind in Anhang A 7 aufgeführt (D. Schulz, Zentrallabor, Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung e.V., schriftl. Mitteilung, 2008).

Mittels Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA; Hahn-Weinheimer et al., 1995) wurden 10 Haupt- und 20 Spurenelemente (SiO_2 , Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MnO , MgO , CaO , Na_2O , K_2O , P_2O_5 , TiO_2 ; Ba, Ce, Cr, Cu, Ga, La, Mo, Nb, Ni, Pb, Rb, Sc, Sn, Sr, Th, U, V, Y, Zn, Zr) in den Proben quantitativ erfasst. Für die RFA wurden Borosilikatglas-Schmelztabletten aus der Fraktion <2 mm, aufgemahlen auf $<0,063$ mm, hergestellt. Die Analysen erfolgten mit einem SPECTRO X-LAB 2000 der Firma Spectro. Bei diesem System handelt es sich um ein energiedispersives System. Die Proben werden mit Röntgenstrahlen bestrahlt und dadurch zur Emission von elementspezifischer Fluoreszenzstrahlung angeregt. Diese Energie wird von einem Si(Li)-Halbleiterdetektor absorbiert und gemessen. Die Lage der Röntgenlinie im Spektrum gibt Aufschluss über das jeweilige Element. Die Intensität hängt maßgeblich von der Konzentration des Elements in der Probe ab. Für alle röntgenfluoreszenzanalytisch untersuchten Bodenproben erfolgten ebenso Bestimmungen des Gesamtkohlenstoffgehaltes durch trockene Veraschung nach DIN ISO 10694 (1996-08) sowie des Schwefel- und Stickstoffgehaltes nach DIN ISO 15178 (1998-06) und DIN ISO 13878 (1998-11) mit dem Elementaranalysator vario EL der Firma Elementar. Durch Trocknung bei $105^\circ C$ nach DIN ISO 11465 (1996-12) und Bestimmung des Massenverlustes durch Wägung sowie durch Verglühung bei $550^\circ C$ nach DIN 18128 (1990-11) und $1030^\circ C$ nach TGL 34323/03 (1981-05-00) werden die Wassergehalte des Feinbodens sowie die Glühverluste bestimmt. Als gültige Näherung zur Prüfung der RFA-Ergebnisse gilt, dass die Summe aller Elementgehalte aus der RFA (als Oxide) und der Glühverlust etwa 100 Massenprozent (M.-%) ergibt.

Mit Ausnahme der Spurenelemente (RFA) und dem pH-Wert (dimensionslose Zahl) werden die Ergebnisse der physikalisch-chemischen Laboranalysen (Korngrößenfraktionen des Bodens, TC, IC, OC, Fe bzw. Fe_2O_3) in Massenprozent der Trockenmasse des Bodens angegeben. Die Konzentration der Spurenelemente ist in [$\mu g/g$] gegeben.

⁴³ Alternativ werden auch 0,01 mol/l $CaCl_2$ -Lösung oder Wasser eingesetzt.

⁴⁴ Dieses Vorgehen beruht auf dem C-Gehalt der Huminstoffe, der bei deutlich über 50% liegt und demjenigen von Streu, der 40-50% beträgt bzw. dem von Cellulose mit etwa 44%. Der Faktor wird näherungsweise für mineralische Böden angenommen (vgl. dazu auch Pribyl, 2010).

⁴⁵ *Inductively Coupled Plasma-Optical Emission Spectrometry*

6.1.2.2 Analyse der mineralogischen Zusammensetzung

Die Bestimmung der mineralogischen Zusammensetzung der Geländeproben (Gesamtmineralogie) erfolgte mittels Röntgenbeugungsanalysen an fein gemahlenem Bodempulver nach DIN EN 13925 (2003-07). Das Prinzip der Röntgendiffraktometrie (RDA) beruht auf der Beugung von Röntgenstrahlung unter einem bestimmten Einfallswinkel am Kristallgitter (Borchardt-Ott, 1990). Ursache der Röntgenbeugung ist die Reflexion von Röntgenstrahlung an Ebenen des Kristallgitters, den Netz- oder Gitterebenen. Um Reflexion an den Gitterebenen beobachten zu können, muss die Bragg'sche Gleichung erfüllt sein:

$$n\lambda = 2d \sin(\theta) \quad (6.1.1)$$

Hierbei ist n die Ordnung der Interferenz, d der Abstand der Netzebenenscharen⁴⁶ im Kristallgitter, λ die Wellenlänge und θ der Einfallswinkel zwischen Röntgenstrahl und Gitterebene. Die Identifikation eines Minerals basiert auf seinem charakteristischen Röntgenbeugungsmuster, das sich aus der Spezifik des jeweiligen Kristallgitters ergibt.

Die Analysen in der vorliegenden Arbeit wurden mit dem Diffraktometer D5000 der Firma Siemens bei Beugungswinkeln von 2°-70° bzw. 2°-90° (2 Theta-Werte) durchgeführt. Die qualitative Bestimmung des Mineralbestandes stützt sich auf den Vergleich der Röntgenbeugungsmuster mit der im Diffraktometer integrierten JCPDS-Datenbank (Joint Committee on Powder Diffraction Standards). Eine quantitative Abschätzung der Mineralgehalte erfolgte durch Verschneidung der in den Diffraktogrammen identifizierten Phasen mit den Ergebnissen der RFA und idealisierten Mineralformeln nach der SVD-Methode von Fischer (1993).

Zur genaueren Identifikation der Tonmineralogie wurde eine kleine Auswahl von Proben zusätzlich Röntgenbeugungsanalysen an aufgeschlammten Texturpräparaten der Tonfraktion unterzogen (Tributh, 1991). Die Separation der Tonfraktion erfolgte mit dem Zentrifugen-Atterberg-Verfahren. Nach 7 Tagen in einer standardisierten Atmosphäre aus gesättigter Ammoniumnitrat-Lösung, wurden die Proben als Suspension auf Keramikträger aufsedimentiert. Die so erzeugten Texturpräparate wurden zunächst ohne weitere Behandlung im Diffraktometer im Winkelbereich von 2°-20° vermessen. Zwei weitere Messungen erfolgten nach Bedampfung mit Ethylenglykol und nach Verglühung bei 500°C für 1h.

6.2 Labor- und Feldspektroskopie

6.2.1 Verwendete Spektrometer

Die Reflexionsmessungen im Labor und im Feld erfolgten mit dem FieldSpec® Pro Spektrometer der Firma Analytical Spectral Devices Inc. (ASD, 2002). Dieses Instrument, nachfolgend auch vereinfachend als ASD bezeichnet, zeichnet mithilfe von drei Spektrometern (VNIR: 0,35-1,0µm, SWIR-I: 1,0-1,8µm, SWIR-II: 1,8-2,5µm) Reflexionsspektren in einem Wellenlängenbereich von 0,35-2,5µm auf. Das Messintervall (*spectral sampling interval*) des ASD FieldSpec® Pro beträgt 1,4nm im VNIR und 2nm im SWIR. Die spektrale Auflösung entspricht der Bandbreite (FWHM) und beläuft sich im VNIR auf 3nm und im SWIR auf 10nm (ASD, 1999). Systemintern werden die Spektren auf 1nm interpoliert, so dass ein Datenpunkt pro 1nm ausgegeben wird. Eine detaillierte technische Spezifikation des Spektrometers kann ASD (1999) entnommen werden.

⁴⁶ Schichten von identischen Atomen innerhalb eines Kristalls.

6.2.2 Laborspektroskopie

Abb. 6.2.1 illustriert den Instrumentenaufbau der Spektrometernmessungen im Labor. Alle Messungen im Labor erfolgten bei gleicher Sensoranordnung und Einstrahlung ohne Voroptik am Sensor bei einem Öffnungswinkel von 25° und einem Abstand zwischen Sensor und Messobjekt von 15cm, d.h. einem Messfleckdurchmesser von etwa 6,6cm. Als künstliche Lichtquelle diente eine 2000W Wolfram-Lampe, welche das Messobjekt in einem Einfallswinkel von 30° beleuchtete. Zur Kalibrierung des Spektrometers wurde der Weißstandard Spectralon verwendet. Spectralon zeichnet sich durch ein nahezu Lambertsches Streuverhalten aus und reflektiert fast hundert Prozent im Wellenlängenbereich von 350-2500nm. Von jeder Bodenprobe wurden zehn Spektren aufgezeichnet, wobei die bodengefüllten Petrischalen zwischen den Messungen in einem beliebigen Winkel gedreht wurden. Ein Spektrum wurde systemintern aus dem Mittelwert von 50 Einzelmessungen generiert. Der Mittelwert aus den zehn gemessenen Spektren wurde als repräsentatives Laborspektrum der jeweiligen Bodenprobe angesehen.

Vor der Erhebung von Laborspektren wurden alle Proben luftgetrocknet, gesiebt (<2mm) und bei 105°C im Ofen 48h getrocknet. Diese Trocknungstemperatur entspricht der in der Bodenkunde üblichen Vorgehensweise zur Bestimmung des Bodenwassergehaltes (Schlichting et al., 1995). Dematté et al. (2006) konnten zeigen, dass die Höhe der Trocknungstemperatur bei Verwendung getrockneter Proben keinen wesentlichen Einfluss auf die Ergebnisse hat. Die von ihnen untersuchten spektralen Signaturen von Böden, die bei 45°C und 110°C im Ofen getrocknet wurden, wiesen eine sehr hohe Ähnlichkeit auf.

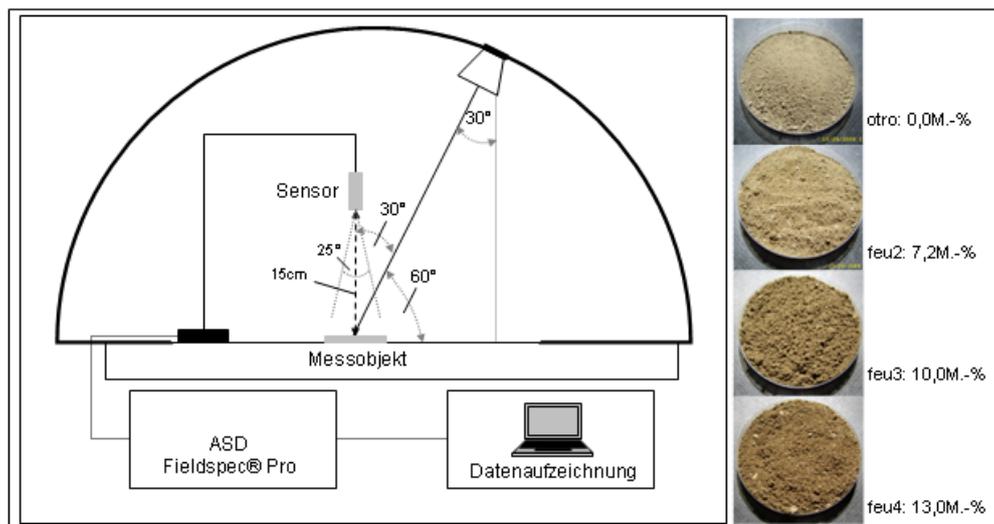


Abb. 6.2.1: Messaufbau für die Laborspektroskopie und Beispiel einer aufbereiteten Bodenprobe mit vier unterschiedlichen Bodenwassergehalten.

Von jeder Bodenprobe wurden vier Petrischalen mit je 80g getrocknetem Bodenmaterial vorbereitet. Eine der vier Petrischalen wurde für die Messung des Reflexionsverhaltens des getrockneten Bodens (otro) verwendet. Die drei weiteren Schalen dienten der Messung des Reflexionsverhaltens bei definierten Bodenwassergehalten: 7,2 Massenprozent [M.-%] (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4)⁴⁷. Die Befeuchtung der Proben erfolgte mit einer Spritzflasche, durch die eine entsprechende Wassermenge hinzugefügt wurde. Die Einwaage erfolgte mit einer Präzisionswaage, deren Genauigkeit 10mg ist. Um eine homogene Verteilung des Wassers zu erreichen, wurden die Proben nach der Befeuchtung mithilfe eines Stabes sorgfältig durchgemischt und gegebenenfalls zur Vermeidung von Schatten geglättet. Die Präparation der Proben erfolgte jeweils nur für eine Probe pro Messung, um mögliche Fehler durch Austrocknung der Oberfläche gering zu halten. Für einige ausgewählte

⁴⁷ Angegeben als gravimetrischer Bodenwassergehalt: $\theta_g = m_{H_2O} / m_{Festsbstanz} [M. - \%]$

Bodenproben wurden Messungen mit zusätzlichen Bodenwassergehaltsstufen bis zu 30,5M.-% erhoben.

6.2.3 Feldspektroskopie

Bedingt durch Pflanzenphänologie und Bewirtschaftungsturnus sind Messungen des Reflexionsverhaltens von Böden landwirtschaftlicher Flächen im Testfeld DEMMIN auf kleine Zeitfenster im Frühjahr und Herbst beschränkt. Zwei bis drei Wochen zwischen Aussaat und Auflaufen der Saat sind die landwirtschaftlichen Flächen zu diesem Zeitpunkt mehr oder weniger vegetationsfrei. Das Gros der feldspektroskopischen Erhebungen erfolgte zusammen mit der Entnahme der Bodenproben im September 2006 an 129 der insgesamt 135 Probenahmepunkte im Gelände. Diese sind nachfolgend als *Bodenserie Demmin_Feld* gekennzeichnet (Anhang A 1⁴⁸). Zusätzlich wurden im Mai an 43 Probenpunkten der *Bodenserie Buchholz* Feldspektrometermessungen durchgeführt sowie an beiden Terminen einige wenige Messungen an vitalen und seneszenten Ackerfeldfrüchten. Für die Messungen im Mai wurden die Messpunkte einige Tage zuvor in einem Quadrat von 2m x 2m von Vegetation (Winterraps) freigelegt. Die Messungen im September wurden ausschließlich auf unbewachsenen Ackerschlägen durchgeführt, so dass die Messpunkte nicht speziell präpariert werden mussten.

Die Reflexionsmessungen erfolgten ± 1 -2h um den Sonnenhöchststand in einem Winkel von ca. 90° zur Sonne (Anhang C 1). Gemessen wurde mit einem Öffnungswinkel von 25° bei einem Abstand von ca. 1m zwischen Optik und Messobjekt. Alle Messungen wurden gleich der Laborspektroskopie relativ zum Reflexionsstandard Spectralon durchgeführt. Der Abgleich der Weißreferenz erfolgte zu Beginn jeder Messreihe an einem neuen Messpunkt, bei schwankenden Witterungsbedingungen (einzelne Wolken, cumulus humilis) häufiger. Mit einer systeminternen Abtastrate von 50 Einzelmessungen pro Spektrum wurden pro Messpunkt zehn Reflexionsspektren in einem Umkreis von 2m erhoben.

Vor und während der gesamten Messperiode im Mai herrschten trockene und sonnige Bedingungen. Die Aufnahmen im September 2006 fielen bis auf den letzten Messtag⁴⁹ ebenso in eine andauernde Trockenphase.

6.2.4 Vorverarbeitung der Spektren und Datentransformation

In den Rohdaten der ASD-Messungen kann trotz Einhaltung der empfohlenen 90 Minuten Vorlaufzeit ein Versatz nahe den Grenzwellenlängen der Spektrometerdetektoren auftreten. Häufig tritt dies bei Feldmessungen im Akkubetrieb und sehr heterogenen Oberflächen auf. Die exakte Lage der Detektorübergänge ist instrumentenspezifisch und befindet sich zwischen VNIR und SWIR-I nahe 1000nm und zwischen SWIR-I und SWIR-II nahe 1800nm. Zur Korrektur dieser Signalsprünge wurde ein additives Verfahren bezogen auf das zweite Spektrometer gewählt. Umgesetzt wurden diese Prozessierungsschritte mithilfe der AS Toolbox von Dorigo et al. (2006).

Das Reflexionsvermögen von Spectralon beträgt im Wellenlängenbereich von 350-2500nm nahezu 100%. Abweichungen davon treten vor allem kleiner 400nm und größer 2000nm auf. Hier liegt die Reflexion im Mittel bei etwa 95% (Labsphere Inc., 2011). Die tatsächliche Reflexion kann zudem von Spectralon zu Spectralon variieren und muss als Funktion der Zeit und Intensität der Nutzung, insbesondere bei Geländemessungen, angesehen werden. Eine korrekte Wiedergabe der Reflexionseigenschaften von Oberflächen erfordert deshalb eine Korrektur des verwendeten Weißstandards. Dies gewinnt insbesondere bei der Verwendung verschiedener Weißstandards und Messungen über einen längeren Zeitraum an Bedeutung. Alle aufgezeichneten Spektren wurden deshalb mithilfe des jeweiligen Laborkalibrationsspektrums des eingesetzten Spectralons korrigiert.

Im Anschluss erfolgte eine Durchsicht der Spektren und Mittelung der zehn Einzelmessungen eines Objektes. Stark abweichende Spektren durch Mess- oder Instrumentenfehler wurden vor der Mittelwertbildung eliminiert.

⁴⁸ Die *Bodenserie Demmin_Feld* umfasst die Messpunkte 1 bis 308 der *Bodenserie Demmin*.

⁴⁹ Niederschlag in der Nacht zum letzten Messtag.

Trotz eines sehr guten SNR des ASD-Spektrometers kann vor allem in den kurz- und langwelligen Bereichen und bei niedrigen Lichtintensitäten Rauschen auftreten. Eine in der Spektroskopie häufig angewandte Methode zur Eliminierung bzw. Reduzierung dieser Störsignale ist der Savitzky-Golay Filter (Savitzky & Golay, 1964). Sein Vorteil gegenüber gleitenden Mittelwertfiltern ist, dass die absoluten Höhen und Tiefen von Extremwerten sowie deren Breite und alle höheren Momente weitgehend erhalten bleiben. Innerhalb eines gleitenden Fensters werden dazu quasi-kontinuierliche Datenpunkte nach der Methode der kleinsten Quadrate durch ein Polynom höherer Ordnung angenähert. Die Filterung und Glättung der Spektren wurde mit den IDL-Routinen SAVGOL und CONVOL bewerkstelligt. Die Qualität des Ergebnisses hängt maßgeblich von der Wahl der Parameterwerte der SAVGOL Funktion ab. Eine optimale Glättung bei gleichzeitiger Konservierung relevanter Information konnte für die ASD-Spektren mit 32 Datenpunkten links und rechts des zu filternden Elementes und einem Polynom 4. Ordnung erzielt werden (M. Bachmann, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., mündl. Mitteilung, 2006). Da das übergeordnete Ziel der Arbeit die Schätzung der Bodenparameter mittels Abbildender Spektroskopie ist, wurden die Wasserabsorptionsbanden sowie rauschanfällige Wellenlängenbereiche von allen quantitativen Analysen ausgeschlossen. Folgende Regionen sind davon betroffen: 1345-1415nm, 1795-1950nm und Wellenlängenbereiche kleiner 400nm bzw. größer 2450nm. Die Korrektur des Weißstandards, der Signalsprünge und die Signalglättung mittels Savitzky-Golay-Filter wurden standardmäßig für alle ASD-Spektren durchgeführt.

Systembedingt unterscheidet sich die spektrale Auflösung der ASD- und der HyMap-Spektren. Einige der nachfolgenden Analysen setzen jedoch eine konsistente Datengrundlage voraus. Diese Übereinstimmung wurde durch ein spektrales Resampling in IDL/ENVI unter Berücksichtigung der Zentrumswellenlängen und Bandbreiten auf die Konfiguration der HyMap-Daten vom 27.05.2005 erreicht. Des Weiteren wurden Spektralbibliotheken mit einer Bandbreite (FWHM) von 10nm und 20nm erstellt.

Zahlreiche Autoren (z.B. Reeves et al., 1999; Dunn et al., 2002; Kooistra et al., 2003a; Vasques et al., 2008) zeigen, dass eine Verbesserung multivariater Modellschätzung durch eine vorherige Transformation der Spektren erzielt werden kann. Eine allgemeingültige, daten- und modellunabhängige Transformationsmethode existiert aber nicht. Eine in der Chemometrie gebräuchliche Transformation, ist die Umrechnung der Reflexions- bzw. Transmissionswerte in Absorption. Dem zu Grunde liegt das Lambert-Beersche Gesetz (Glg. 4.1.13), das für klare Flüssigkeiten einen linearen Zusammenhang zwischen der Stoffkonzentration und der Absorption beschreibt. In der Reflexionsspektroskopie ist dieser Zusammenhang näherungsweise gültig. Streueffekte können hierdurch nicht berücksichtigt werden. Die Transformation der Reflexionswerte R in Absorption A geschieht durch Logarithmierung des Umkehrwertes der Reflexion nach folgender Gleichung:

$$A = \log_{10}(1/R) \quad (6.2.1)$$

Eine Methode, systematische Abweichungen und Störeffekte in Spektren zu beseitigen, ist die Ableitung der Spektren. Unterschiede in der Gesamtintensität (Albedo) durch schwankende Beleuchtungsverhältnisse können auf diese Weise eliminiert werden. Außerdem bewirkt die Ableitung eine Verstärkung der spektralen Merkmale, die mit der Höhe der Ableitung zunimmt. Höhere Ableitungen sind allerdings zunehmend von Sensorrauschen beeinflusst. Generell verliert das Spektrum durch die Ableitung seine spektrale Form, wodurch eine Interpretation in der nachfolgenden statistischen Analyse erschwert wird. Für die Analysen in der vorliegenden Arbeit wurden die Reflexionsspektren in Absorption transformiert und die erste und zweite Ableitung der Reflexions- sowie der Absorptionsspektren berechnet. Die Bestimmung der Ableitungsspektren erfolgte in einem Arbeitsschritt zusammen mit der Glättung durch den Savitzky-Golay-Filter (siehe oben). Welche Spektrentransformation für welches Modell und welchen Datensatz die größte Eignung aufweist, wurde in Voruntersuchungen ermittelt und wird in Kapitel 7.4 besprochen. Die den Modellrechnungen in Kapiteln 7.5 bis 7.7 zugrunde liegende Datentransformation ist in der Ergebnisdarstellung gesondert gekennzeichnet.

6.3 Abbildende Spektroskopie

6.3.1 Verwendete Bilddatensätze

Für die Analysen standen drei Bilddatensätze des flugzeuggetragenen, australischen Sensors HyMap zur Verfügung, die in Abb. 6.3.1 in einer CIR-Darstellung abgebildet sind. HyMap erfasst den Spektralbereich von 450nm bis 2480nm in 128 Spektralbändern mit einer Bandbreite von 15-16nm im VNIR und SWIR-I sowie 18-20nm im SWIR-II (vgl. Tab. 4.1.3, FWHM). Die Aufnahmekonstellation und die spezifischen Eigenschaften der drei verwendeten Bilddatensätze sind in Tab. 6.3.1 aufgelistet. Alle drei Datensätze wurden aus einer Flughöhe von knapp 2000 Meter aufgezeichnet. Der Abstand der Pixelmitten (GSD, *Ground Sampling Distance*) beträgt dementsprechend etwa 4 Meter. 2005 und 2008 herrschten zum Zeitpunkt der Befliegung ideale Beleuchtungsverhältnisse (Zenitwinkel <38°, geringe Abweichung von Azimutwinkel und Flugrichtung). 2004 bestanden zum Zeitpunkt des Überfluges in den Nachmittagsstunden weniger günstige Beleuchtungsverhältnisse. Die Zenitwinkel betragen mehr als 45° und die Divergenz zwischen Azimut und Flugrichtung erreichte bis zu 62,8°. Während die Befliegung in den Jahren 2004 und 2008 in den Sommermonaten Juli und August erfolgte, fand der Überflug 2005 bereits im Frühsommer Ende Mai statt. Die Aufnahmen reflektieren daher sehr unterschiedliche phänologische Stadien der landwirtschaftlichen Feldfrüchte.

Tab. 6.3.1: Verwendete HyMap-Datensätze, Aufnahmekonstellation und Eigenschaften.

Datum der Aufnahme	Uhrzeit Start – Ende in UTC*	Sonnenwinkel [°]	Flugrichtung** [°] ($\pm 2^\circ$)	Mittl. Flughöhe über Meeresspiegel [m]	GSD [m]
09.08.2004	13:30 – 14:20	Azimut: 117,2-130,0 Zenit: 46,3-52,2	0/180	~1990	4
27.05.2005	9:50 – 10:50	Azimut: 152,7-178,3 Zenit: 31,7-34,0	1/180	~1940	4
29.07.2008	9:50 – 11:20	Azimut: 147,1-183,1 Zenit: 35,3-38,7	0/180	~1934	4

* Lokalzeit = UTC+2, ** benachbarte Streifen weisen immer die entgegengesetzte Flugrichtung auf., GSD: *Ground Sampling Distance*

An allen Flugtagen herrschte trockenes und wolkenarmes Wetter. Mit Ausnahme von 2005 waren die Tage zuvor ebenso von hoher Sonnenscheindauer und Niederschlagsarmut geprägt, so dass der Boden unbedeckter Ackerflächen oberflächlich trocknen konnte. 2005 sind leichte Niederschläge und Wolkenbedeckung 4-5 Tage vor dem Befliegungstermin zu verzeichnen (Anhang C 2). Insbesondere in Senkenbereichen können daher höhere Bodenwassergehalte an der Oberfläche auftreten.

6.3.2 Radiometrische Korrektur

Alle HyMap-Daten wurden von der Firma HyVista systemkorrigiert als Strahldichten am Sensor geliefert (Cocks et al., 1998) und durch die Arbeitsgruppe „Abbildende Spektroskopie“ des Deutschen Fernerkundungsdatenzentrums des DLR e.V. zur Verfügung gestellt.

Zur Prüfung und Verbesserung der von HyVista gelieferten Laborkalibration wurden alle Datensätze zunächst einer *Inflight*-Kalibration mit dem im Atmosphärenkorrekturverfahren ATCOR-4 (Richter, 2005, 2008) implementierten Modul unterzogen. Als Grundlage der Neuberechnung bandspezifischer Kalibrationskoeffizienten dienten möglichst zeitnah zu den Überflügen erhobene Feldspektrometermessungen homogener Referenzflächen. Mit diesen Spektraldaten wurde für jedes Jahr ein Rekalibrationsdatensatz mit angepassten *Gain*- und *Offset*-Faktoren berechnet und auf die Flugstreifen des jeweiligen Jahres angewendet. Für die *Inflight*-Kalibration der Daten von 2004 wurden Feldspektren einer relativ homogenen Parkbetonfläche im Testfeld DEMMIN aus dem Jahr 2004 herangezogen. Mangels Feldspektroskopie im Folgejahr, musste für die radiometrische Korrektur der 2005er-Daten ebenso auf die Messungen von 2004 zurückgegriffen werden. Dies geschah unter der Maßgabe, dass das Spektralsignal der Parkplatzfläche als zeitlich invariabel angesehen werden kann. Für die radiometrische Korrektur der Daten von 2008 wurden Feldspektren einer homogenen

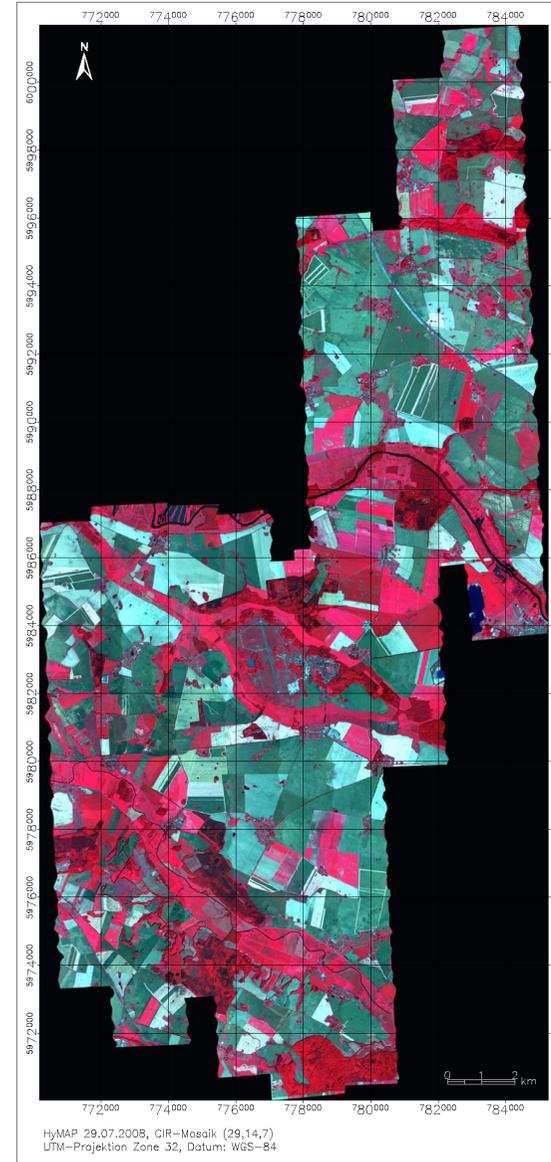
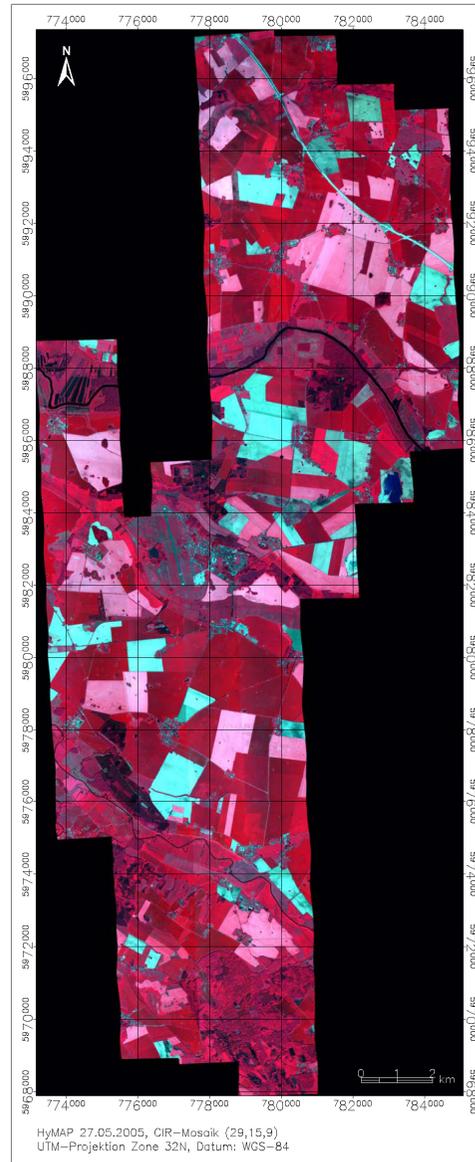


Abb. 6.3.1: CIR-Darstellung der mosaikierten HyMap-Datensätze vom 09.08.2004 (links), 27.05.2005 (mitte) und 29.07.2008 (rechts) für das Testfeld DEMMIN.

Sandfläche eingesetzt, die im Rahmen der HyEurope-Kampagne 2008 erhoben und zuvor bereits an Messungen anderer Testgebiete validiert wurden (M. Bachmann, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., mündl. Mitteilung, 2008). Zur Prüfung der Neuberechneten Kalibrationskoeffizienten von 2008 konnten zeitgleich zur Befliegung im Testfeld DEMMIN erhobene Spektren einer Parkplatzfläche und eines unbedeckten Ackerbodens herangezogen werden.

Aufgrund der jährlichen Laborkalibration des HyMap-Sensors durch HyVista können Verschiebungen der Zentrumswellenlängen (ZWL) und Variationen in den tatsächlichen Bandbreiten (FWHM, *Full Width at Half Maximum*) zwischen den Datensätzen aus unterschiedlichen Jahren auftreten. Zwischen den Bilddaten von 2005 und 2004 betragen die Abweichungen der ZWL abgesehen von einem Kanal im Übergangsbereich vom VIS- zum NIR-Modul maximal 5nm. Die Bandbreiten variieren zwischen ± 2 nm. Eine Ausnahme bildet Band 1, dessen FWHM 2005 fast 7nm größer ist als 2004. Zwischen Bilddaten von 2005 und 2008 treten in den Zentrumswellenlängen im VIS-Modul und SWIR-I-Modul Differenzen bis zu ± 20 nm auf. Die Unterschiede im VIS-Modul werden durch die Lage der ersten ZWL in den Daten von 2008 (ZWL=457,2nm) verursacht. Diese entspricht etwa der ZWL des zweiten Bandes von 2005 (ZWL=452,0nm) (siehe Anhang C 3). Um eine konsistente Datenbasis für die quantitative Auswertung der Bilddaten zu schaffen, wurden die HyMap-Daten von 2004 und 2008 auf die spektrale Konfiguration von 2005 im Zuge eines spektralen Resampling angepasst.

6.3.3 Atmosphärenkorrektur

Die Atmosphärenkorrektur der HyMap-Daten und Umrechnung der am Sensor gemessenen spektralen Strahldichten in Reflexionswerte am Boden erfolgte mit dem Softwaremodul ATCOR-4 (Richter, 2005, 2008; Richter & Schläpfer, 2002), dessen physikalischer Ansatz auf dem Strahlungstransfermodell von MODTRAN beruht. Durch die Atmosphärenkorrektur können atmosphärische Absorptions- und Streuungsprozesse, die spezifische Aufnahme- und Einstrahlungsgeometrie sowie Einstrahleffekte aus der Nachbarschaft berücksichtigt und korrigiert werden.

Da reliefbedingte Beleuchtungseffekte aufgrund des verhältnismäßig flachen Territoriums vernachlässigt werden können, erfolgte die Atmosphärenkorrektur der HyMap-Daten des Testfeldes mit den Prozessierungsschritten für „flaches Gelände“ (*flat terrain*). Als Aerosoltyp wurde aufgrund der geographischen Lage des Testfeldes DEMMIN das Aerosolmodell „ländlich“ (*rural*) gewählt. Die Abschätzung der optischen Dicken erfolgte, gestützt auf den Vorschlagswerten von ATCOR, für jede Szene separat. Die Ergebnisse wurden anschließend im Modul SPECTRA interaktiv überprüft und gegebenenfalls korrigiert. Da zum Zeitpunkt der Befliegung in allen drei Jahren Standardaufnahmebedingungen (wolkenlos) herrschten, wurde für einen kompletten Flugstreifen immer ein konstanter Wert angenommen. Die Wasserdampfsäule wurde aus den Bilddaten anhand der Spektralbanden in den Wasserabsorptionsbanden pixelweise berechnet. Erforderliche Angaben zur Aufnahme- und Einstrahlungsgeometrie sowie zu Einstrahleffekten aus der Nachbarschaft berechnen sich ATCOR-intern aus der Navigationsdatendatei.

6.3.4 Geometrische Korrektur

Nach Anwendung der Atmosphärenkorrektur wurde die geometrische Korrektur der Daten mit dem Softwaremodule ORTHO (Müller et al., 2005a) vorgenommen. ORTHO ist Bestandteil der Datenverarbeitungs- und Archivierungskette OpAiRS (*Optical Airborne Remote Sensing*) des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) zur Prozessierung und Generierung höherwertiger Produkte flugzeuggetragener Bilddaten (Müller et al., 2005b, Bachmann et al., 2007). ORTHO gestattet eine automatische Geokorrektur anhand der für jedes Bildelement aufgezeichneten Fluglagedaten (Position, Rollen, Nicken, Gieren). Des Weiteren werden die Korrekturwinkel der inneren Orientierung (*Boresight*-Winkel) zwischen Sensor und inertialem Messsystem (IMU, *Inertial Measurement Unit*) sowie Reliefeigenschaften der Landoberfläche bei der Korrekturberechnung berücksichtigt.

Im Zuge der geometrischen Korrektur wurden alle Datensätze in das Universal Transverse Mercator (UTM) Koordinatensystem, Zone 32 Nord mit dem Bezugsellipsoid WGS84 transformiert und auf 4m x 4m resampelt. Die Neuberechnung der Pixel erfolgte mit dem *Nearest Neighbour* (NN)

Verfahren. Hierbei werden lediglich die Werte des am nächsten liegenden Pixels der Eingangsmatrix übernommen. Im Gegensatz zur bilinearen und kubischen Interpolation, wo die Spektralwerte der umliegenden Pixel gewichtet in die Neuberechnung eines Pixels einfließen, bleibt die originäre Spektralinformation so weitestgehend erhalten (Lillesand et al., 2004).

Als digitales Geländemodell diente der Datensatz der SRTM-Mission mit einer räumlichen Auflösung von 25m x 25m.

6.3.5 Extraktion von Bildspektren

Um repräsentative Bildspektren zu erhalten, wurden die Reflektanzen an den Referenzpunkten in einem 3x3 Fenster zentriert um den Messpunkt extrahiert. Ihr Mittelwert bildet die Grundlage für die Quantifizierung der Bodenparameter aus den HyMap-Bilddaten. Pixel mit stark abweichendem Reflexionssignal innerhalb dieses Fensters wurden bei der Mittelwertbildung außen vor gelassen. Gehäuft trat dies auf teilweise abgeernteten Feldern im Datensatz vom August 2004 auf.

Die Absorption sowie die erste und zweite Ableitung der HyMap-Spektren wurde nach dem für die Labor- und Feldspektren beschriebenen Verfahren (vgl. Kap. 6.2.4) mit 5 Datenpunkten links und rechts des zu filternden Elementes und einem Polynom 5. Grades erzeugt (M. Bachmann, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., mündl. Mitteilung, 2006). Wellenlängen auf beiden Seiten der großen atmosphärischen Wasserabsorptionsbanden nahe 1400nm und 1900nm sowie kleiner 500nm und größer 2400nm wurden von der quantitativen Analyse ausgeschlossen.

6.4 Quantitative Spektroskopie

Für die quantitative Schätzung der Bodenparameter aus VNIR-SWIR-Spektren werden in den Kapiteln 7.4 bis 7.7⁵⁰ drei unterschiedliche methodische Ansätze hinsichtlich ihrer Eignung evaluiert. Diese umfassen die Parametrisierung einzelner Absorptionsbanden mittels *Continuum Removal* und linearer Regression (CR, Kap. 6.4.1) sowie die Analyse des gesamten Reflexionsspektrums mittels zweier multivariater statistischer Verfahren, der multiplen linearen Regression (MLR, Kap. 6.4.2) und der *Partial Least Squares Regression* (PLSR, Kap. 6.4.3).

6.4.1 Continuum Removal und lineare Regression

Jedes Reflexionsspektrum enthält zwei Komponenten, die Informationen über Beschaffenheit und Eigenschaften des gemessenen Objektes liefern: das Kontinuum (*continuum*), welches das allgemeine Rückstrahlvermögen des Objektes beschreibt sowie einzelne, das Kontinuum überlagernde Absorptionsbanden. Die Lage dieser Absorptionsbanden sowie deren Tiefe können durch eine Normierung des Reflexionsspektrums hinsichtlich des Kontinuums korrekt beschrieben werden (Clark & Roush, 1984; Clark, 1999). Jedes Reflexionsspektrum wird dazu durch die entsprechende Hüllfunktion (*continuum hull*) dividiert, die durch Verbinden lokaler Reflexionsmaxima mit Geradensegmenten bestimmt werden kann. Die Absorptionstiefe in Abhängigkeit der Wellenlänge berechnet sich durch Subtraktion des *continuum removed* Spektrums von 1 nach:

$$D(\lambda) = 1 - \frac{R_b(\lambda)}{R_c(\lambda)} \quad (6.4.1)$$

wobei R_b das Reflexionsspektrum, R_c das Kontinuum beschrieben durch die Hüllfunktion, D die Absorptionstiefe und λ die Wellenlänge ist (Clark & Roush, 1984).

Zur quantitativen Bestimmung des Tongehaltes wurde die Tonabsorptionsbande nahe 2200nm parametrisiert. Für die Ermittlung des organischen Kohlenstoffgehaltes wurde der Kurvenverlauf im VNIR beschrieben. Die Lage der Absorptionsschultern für die Extraktion der Absorptionstiefen wurde empirisch ermittelt und ist zusammen mit den Absorptionsmaxima in Tab. 6.4.1 erfasst. Die exakte

⁵⁰ Mit Ausnahme der Kapitel 7.6.2, 7.7.4 und 7.7.5.

Position der Tonabsorptionsbande eines individuellen Spektrums entspricht dem minimalen Reflexionswert bzw. der maximalen Absorption im Schulterintervall (Abb. 6.4.1b). Die Berechnung des *continuum removed* Spektrums im Schulterintervall erfolgte für den Parameter Ton mithilfe der ENVI-Routine *continuum_remove_doit*.

Tab. 6.4.1: Lage der Absorptionsbande und Schultern zur Extraktion der Absorptionstiefe für die Parameter Ton und organischer Kohlenstoff (OC).

Parameter	Absorptionsmaximum [nm]	Linke Schulter (λ_{lS})* [nm]	Rechte Schulter (λ_{rS})* [nm]
Ton	~2200	2125/ 2119,8	2280/ 2293,4
OC	~662	525/ 525,9	800/ 800,3

*ASD-Spektren / HyMap-Spektren (27.05.2005)

Wie in Kapitel 4.1.3.1 beschrieben, ist das breitbandige Merkmal im Zusammenhang mit organischem Kohlenstoff bzw. organischer Bodensubstanz im VNIR durch einen Wechsel von einem konkaven zu einem konvexen Kurvenverlauf gekennzeichnet. Zur Parametrisierung dieses Verhaltens wurde das Kontinuum der Geraden zwischen den Schulterbereichen gleichgesetzt (Abb. 6.4.1, links). Die Absorptionstiefe kann somit für konkav verlaufende Spektren auch negative Werte annehmen. Wie in Abb. 6.4.1a deutlich wird, ist eine Verschiebung des Absolutwertes der Absorptionstiefe mit steigenden Kohlenstoffgehalten zu längeren Wellenlängen hin zu beobachten. Berechnungen des Korrelationskoeffizienten für alle Wellenlängenkombinationen im Schulterintervall offenbarten nur geringe Vorhersagequalitäten bei Bestimmung der maximalen absoluten Absorptionstiefe in Analogie zu Ton. Auch eine Berücksichtigung der Verschiebung von maximaler Reflexion hin zu maximaler Absorption, d.h. Beachtung des Wechsels von konkav (negativ) nach konvex (positiv), lieferte keine zufriedenstellenden Resultate. Im Ergebnis dieser Voruntersuchungen wurde die Absorptionstiefe für organischen Kohlenstoff für alle Spektren für die Mittelpunktwellenlänge $(\lambda_{lS} - \lambda_{rS})/2$ des Schulterintervalls (~662nm) bestimmt. Die *continuum removed* Spektren für organischen Kohlenstoff im Schulterintervall wurden mithilfe einer IDL-Routine erzeugt.

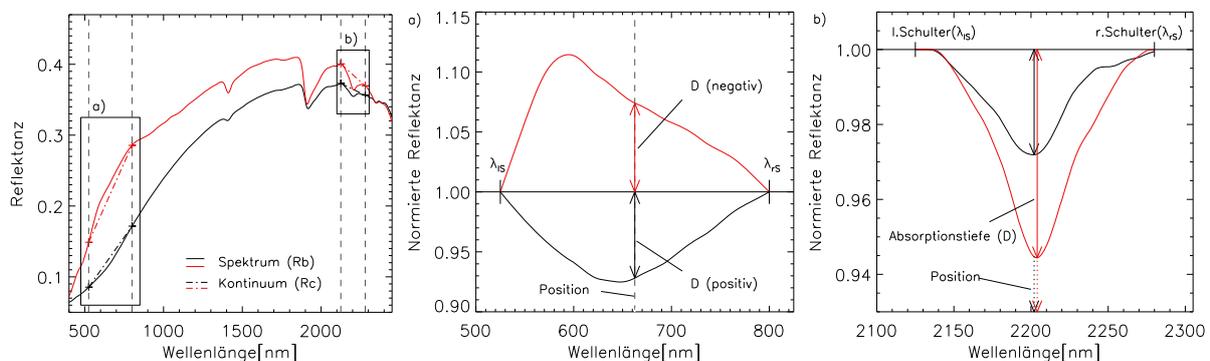


Abb. 6.4.1: Parametrisierung der Absorptionstiefe für organischen Kohlenstoff (a) und Ton (b). Die Abbildung links illustriert das gesamte Reflexionsspektrum von 400nm bis 2450nm. Die Abbildungen (a) und (b) enthalten die normierten Reflexionsspektren in den gekennzeichneten Spektralbereichen (Boxen). Dargestellt ist das Spektrum eines humusarmen, tonreichen Bodens (rote Linie) und eines humusreichen, tonarmen Bodens (schwarze Linie).

Die Beziehung zwischen der Absorptionstiefe und dem organischen Kohlenstoff- bzw. Tongehalt wird mithilfe einer einfachen linearen Regression nach folgender Schätzgleichung untersucht:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x \quad (6.4.2)$$

wobei x der Datenvektor mit den probenspezifischen Absorptionstiefen, y der Datenvektor mit den Stoffkonzentrationen bzw. \hat{y} die Schätzfunktion von y , b_0 die Regressionskonstante und b_1 der Vektor mit den Koeffizienten von x (z.B. Bahrenberg et al., 1999). Das spektrale Merkmal fungiert also als Prädiktor der Zielgrößen organischer Kohlenstoff- bzw. Tongehalt angegeben in

Massenprozent. Die Regressionskoeffizienten b_0 und b_1 werden über eine Minimierung der Fehlerquadrate nach der Methode der Kleinsten Quadrate (*least squares*) geschätzt (vgl. Kap. 6.4.2). Sie beschreiben die Regressionsgerade, für welche die Summe der Abweichungsquadrate aller Punkte von der Geraden ein Minimum ergibt. Die Abweichung zwischen einem beobachteten Werte y_i und dem geschätzten Regressionswert \hat{y}_i wird als Residuum e_i bezeichnet und berechnet sich nach Gleichung 6.4.3:

$$e_i = y_i - \hat{y}_i \quad (6.4.3)$$

Die Bildung eines korrekten Regressionsmodells setzt die Erfüllung mehrerer Bedingungen voraus, die sowohl für die einfache als auch für die multiple lineare Regression gelten. Sie werden in Kapitel 6.4.2 erörtert.

Das Verfahren zur Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes aus der Absorptionstiefe $D(\lambda)$ wird im weiteren Verlauf der Arbeit unter dem Terminus *Continuum Removal* (CR) geführt.

6.4.2 Multiple Lineare Regression

Bei der multiplen linearen Regression (MLR) wird im Gegensatz zur einfachen linearen Regression der Zusammenhang zwischen einer abhängigen Variable y und mehreren unabhängigen Variablen x_i gesucht. Im vorliegenden Fall soll von gemessenen Spektralwerten (x_i) zum Beispiel auf den Gehalt an Ton oder organischen Kohlenstoff im Boden (y) geschlossen werden.

Die Schätzgleichung der multiplen linearen Regression zur Beschreibung einer Beziehung kann wie folgt dargestellt werden (z.B. Bahrenberg et al., 1992):

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_{m-1}x_{m-1} \quad (6.4.4)$$

Die unabhängigen Variablen x_i werden mit den Regressionskoeffizienten b_i gewichtet und zusammen mit der Regressionskonstante b_0 aufsummiert. \hat{y} beinhaltet die geschätzten Werte von y . Wie bei der einfachen linearen Regression geben die Residuen e_i Auskunft über die Güte der Modellvorhersage (Glg. 6.4.3). Die Regressionsparameter b_0 und $b_{1..m-1}$ werden nach dem *least squares* Verfahren geschätzt, so dass die Summe der quadrierten Residuen minimal wird. In Matrixschreibweise lässt sich das lineare Gleichungssystem für n Messungen der Zielgröße y (Glg. 6.4.4) auch verkürzt darstellen als

$$\hat{y} = Xb \quad (6.4.5)$$

mit der Datenmatrix X der Dimension (N×M), dem Vektor y mit N-Messwerten und dem Vektor b mit M-Regressionsparametern. Die *least squares* Lösung für b lautet

$$b = (X^T X)^{-1} X^T \hat{y} \quad (6.4.6)$$

Die Anzahl der Regressionsparameter muss dabei kleiner/gleich der Zahl der N-Messungen der Zielgröße y sein. Andernfalls ist das Gleichungssystem unterbestimmt und kann nicht eindeutig gelöst werden. Gleichzeitig muss einer Überanpassung (*overfitting*) des Systems vorgebeugt werden, da hierdurch das Bestimmtheitsmaß künstlich erhöht und die tatsächliche Anpassungsgüte verschleiert wird. Im Allgemeinen wird für die Kalibration multipler Regressionsmodelle empfohlen, dass mindestens zehnmal so viele Messobjekte wie unabhängige Variablen vorliegen. Von entscheidender Bedeutung bei der Aufstellung des Regressionsmodells ist also die (Aus-)Wahl relevanter Regressoren in X für die Erklärung von y .

Ein weiteres Problem bei der multiplen Regressionsanalyse ist ihre Anfälligkeit für Multikollinearität. Diese liegt vor, wenn zwei oder mehrere erklärende Variablen stark miteinander korrelieren, was bei benachbarten Wellenlängen eines Spektrums stets der Fall ist. Durch Multikollinearität wird die

Annahme unabhängiger, erklärender Variablen verletzt, wodurch die Schätzfehler der Regressionskoeffizienten stark erhöht werden und die Modellinterpretation mehrdeutig wird. Verschiedene Maßzahlen können Aufschluss liefern, wie stark ein Modell durch Multikollinearität beeinträchtigt wird. Im Rahmen der vorliegenden Untersuchungen dient der Varianzinflationsfaktor (*Variance Inflation Factor*, VIF) als ein solcher Indikator. Der VIF berechnet sich aus dem multivariaten Bestimmtheitsmaß R_i^2 nach:

$$VIF_i = \frac{1}{1 - R_i^2} \quad \text{mit} \quad R_i^2 = 1 - \frac{1}{R_{ii}^{-1}} \quad (6.4.7)$$

R_i^2 entspricht dem Quadrat des multiplen Korrelationskoeffizienten, der aus den Diagonalwerten der inversen Korrelationsmatrix abgelesen werden kann. Ein hoher Varianzinflationsfaktor weist auf das Vorliegen von Multikollinearität hin (Belsley et al., 2004). Eindeutige Richtwerte existieren nicht. Als Faustregel für die Interpretation gilt im Allgemeinen, dass Varianzinflationsfaktoren größer 10 als kritisch erachtet werden⁵¹. VIF größer 100 lassen eindeutig auf das Vorliegen von Multikollinearität schließen.

Die Bildung eines vollständigen und korrekten Regressionsmodells setzt außerdem die Erfüllung einer Reihe von Bedingungen voraus. Eine grundlegende Annahme ist, dass zwischen den Variablen ein linearer Zusammenhang besteht. Ist dies nicht der Fall, kann diese Voraussetzung durch eine entsprechende Transformation der Variablen (z.B. Logarithmierung) erzielt werden. Weitere Voraussetzungen sind:

- Normalverteilung der Residuen
- Homoskedastizität⁵² der n-untersuchten Proben bzw. Residuen
- Keine Autokorrelation der Residuen.

Eine Abweichung der Häufigkeitsverteilung der Variablen sowie der Residuen von der Normalverteilung wurde mit dem Kolmogorov-Smirnov-Test nach Lilliefors geprüft. Hierbei wird die beobachtete kumulative Verteilungsfunktion für eine Variable mit einer theoretischen Verteilung, in diesem Fall der Standardnormalverteilung, für die der Mittelwert und die Standardabweichung der Stichprobe angenommen werden, verglichen. Die Teststatistik dient der Ermittlung der größten absoluten Differenz zwischen der beobachteten und der theoretischen kumulativen Verteilung. Dieser Wert wird mit den kritischen Tabellenwerten des KS-Tests nach Lilliefors verglichen. Die Nullhypothese, die Daten der zu untersuchenden Stichprobe liegen normalverteilt vor, wird verworfen, wenn der kritische Wert kleiner als der Wert der Teststatistik ist (Klemm, 2002). Zusätzlich wurde die Annahme einer Normalverteilung mit graphischen Verfahren (Histogramme) kontrolliert. Dass die Varianz der Residuen über alle betrachteten Fälle konstant ist, wurde mithilfe von Streudiagrammen der Residuen ($\hat{y}_i - e_i$) überprüft. Als Testgröße auf Autokorrelation der Residuen diene der Durbin-Watson-Koeffizient (D_w). Er berechnet sich aus den Residuen e_i wie folgt:

$$D_w = \frac{\sum_{i=1}^n (e_i - e_{i+1})^2}{\sum_{i=1}^n e_i^2} \quad \text{mit} \quad 0 \leq D_w \leq 4 \quad (6.4.8)$$

Als Faustregel lässt sich für $1,5 \leq D_w \leq 2$ annehmen, dass keine Autokorrelation vorliegt. Bei kleineren Stichproben kann D_w aber stark von 2 abweichen, auch wenn keine Autokorrelation vorliegt (Lozán & Kausch, 2004). Liegt eine Korrelation der Residuen vor, können die berechneten Standardfehler der Regressionskoeffizienten deutlich kleiner sein, als sie in Wirklichkeit sind. Ist dies der Fall, müssen Konfidenzintervalle und Signifikanztests der Parameter kritisch betrachtet werden.

⁵¹ Einige Autoren setzen einen Wert größer 20 an (vgl. dazu auch Dietze, 2007; S.72).

⁵² Die Varianz der Residuen und damit die Varianz der erklärten Variable selbst ist über alle n-untersuchten Proben nicht signifikant unterschiedlich.

Die Identifikation einzelner Messwerte, die einen überaus starken Einfluss auf die Lage der Regressionsgeraden ausüben, erfolgte mithilfe der Residualanalyse. Fälle, die Extremwerte größer drei Standardabweichungen lieferten, wurden als Ausreißer deklariert. Erfolgte aufgrund der Ausreißeranalyse eine Eliminierung von Datenpunkten aus dem Regressionsmodell, wurde dies gesondert vermerkt.

Wie bereits angesprochen, ist die Auswahl relevanter X-Variablen für die Erklärung der Zielgröße y von entscheidender Bedeutung für die Erstellung eines korrekten Regressionsmodells, insbesondere bei der Vielzahl der Wellenlängen der mit dem Fieldspec® Pro Spektrometer erhobenen Labor- oder Feldspektren ($n_\lambda=2151$). Um eine Überbestimmung der Modelle zu vermeiden und zugleich Datenredundanz und Rechenaufwand zu reduzieren, wurden die Labor- und Feldspektren für die multiple Regressionsanalyse zunächst einem spektralen Resampling auf eine Bandbreite (FWHM) von 10nm unterzogen. Absorptionsbanden von Tonmineralen bzw. Absorptionsbanden in Verbindung mit Eisenverunreinigungen in Tonmineralen im VNIR sind sehr gut untersucht (Hauff et al., 1990; Clark et al., 1990; Ben-Dor et al., 1999; Bishop et al., 2008). Für die Vorhersage des Tongehaltes mittels MLR wurden die X-Variablen deshalb weiter auf tonspezifische, absorptionsrelevante Wellenlängenbereiche beschränkt (Tab. 6.4.2). Absorption organischer Bodensubstanz bzw. organischer Kohlenstoffverbindungen im VNIR-SWIR beruht auf deutlich schwächeren, sich häufig überlappenden Obertönen und Kombinationen von Grundschwingungen im MIR (Workman & Weyer, 2008). Komplexere Materialien wie Boden, mit einer in der Regel sehr niedrigen Stoffkonzentration ($OC < 2,5\%$), erschweren oder verhindern eine Identifikation schmalbandiger Absorptionsbereiche im VNIR-SWIR. Für die Zielgröße organischer Kohlenstoff wurde infolgedessen im Gegensatz zum Parameter Ton keine weitere Einschränkung auf bestimmte Wellenlängenbereiche vorgenommen. Die Selektion der finalen Prädiktoren des Regressionsmodells erfolgte mit einer schrittweisen Vorwärtsregression basierend auf dem F-Test-Kriterium. Das Signifikanzniveau für die Aufnahme von Variablen in das Modell bzw. den Ausschluss von Variablen aus dem Modell betrug $\alpha=0,05$ bzw. $\alpha=0,1$.

Tab. 6.4.2: Verwendete Wellenlängenbereiche bei der schrittweisen MLR auf Ton und korrespondierende Absorptionsbanden häufiger Tonminerale.

Wellenlängen für MLR [µm]	Mineralspezifische Position [µm]	Tonmineral	Autor
Absorption in Verbindung mit Tonmineralen			
2,1-2,5	2,16-2,17	Al-Montmorillonit	Ben-Dor et al. (1999)
	2,206	Ca-Montmorillonit	Ben-Dor et al. (1999)
	2,21-2,24	Nontronit	Ben-Dor et al. (1999)
	2,163, 2,208	Kaolinit	Clark et al. (1990)
	2,30, 2,39	Hektorit	Clark et al. (1990)
	2,34, 2,45	Illit	Clark et al. (1990)
0,9*	-	Tonminerale allgemein	z.B. Ben-Dor et al. (1999)
1,3-1,4*	-	Tonminerale allgemein	z.B. Ben-Dor et al. (1999)
1,8-1,9*	-	Tonminerale allgemein	z.B. Ben-Dor et al. (1999)
Absorption in Verbindung mit Eisenverunreinigungen in Tonmineralen			
0,5	0,50	Montmorillonit	Hunt & Salisbury (1970)
0,6-0,7	0,65	Fe ³⁺ in Nontronit	Clark et al. (1990)
	0,70	Fe ²⁺ in Illit	Clark et al. (1990)
0,9-1,0	0,9	Fe ³⁺ in Nontronit	Clark et al. (1990)
	0,97	Montmorillonit	Hunt & Salisbury (1970)
1,1	1,1	Fe ²⁺ in Illit	Clark et al. (1990)

* Diese Wellenlängen wurden aufgrund ihrer Lage in den atmosphärischen Wasserabsorptionsbanden nicht bei der multiplen linearen Regression berücksichtigt.

6.4.3 Partial Least Squares Regression

Die PLSR gehört, wie auch die Hauptkomponentenanalyse, zu den bilinearen multivariaten Modellen, wobei für den Zusammenhang $\hat{y} = f(X)$ unzählige X-Variablen $X = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_k)$ auf einige wenige, sogenannte „latente Variablen“ $T = (t_1, t_2, t_3, \dots, t_A)$ abgebildet und als erklärende Variablen

für die Vorhersage von y benutzt werden. Im Unterschied zur Hauptkomponentenanalyse werden die y -Variablen bei der PLSR aktiv in die Zerlegung der X -Variablen in latente Variablen einbezogen (Abb. 6.4.2). Für y nicht relevante Informationen in X , wie Rauschen oder Störkomponenten, können auf diese Weise aus dem Kalibrationsmodell ausgeklammert werden (Martens & Næs, 1989; Wold et al., 2001). Das Problem der Variablenselektion, wie es bei der MLR besteht, wird in der PLSR somit minimiert.

Das Konzept der PLSR geht auf Arbeiten von Herman Wold zurück, der Ende der 1960er, Anfang der 1970er Jahre im Bereich der Wirtschafts- und Sozialwissenschaften einen Algorithmus zur Auswertung ökonomischer Daten entwickelte (Wold, 1982, 1985). In der Chemometrie fand die PLS-Regression erste Anwendung Ende der 1970er Jahre (Gerlach et al., 1979) und wurde hier insbesondere durch Arbeiten von Swante Wold und Harald Martens vorangetrieben (Wold et al., 1983). Mit dem Aufkommen der NIR-Spektroskopie seit Mitte der 1980er hat die PLSR in der Chemometrie weite Verbreitung gefunden (z.B. Geladi & Kowalski, 1986a,b; Haaland & Thomas, 1988a,b) und gehört heute zu den Standardmethoden (Otto, 1999). Aber auch in anderen Wissenschaftsgebieten, wie der Medizin, Bioinformatik oder Sozialwissenschaften hat sich die PLSR inzwischen zur Auswertung von komplexem Datenmaterial etabliert (z.B. Hulland, 1999; Nguyen & Rocke, 2002).

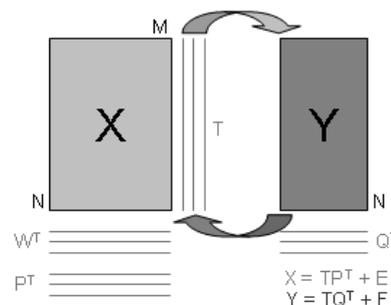


Abb. 6.4.2: Schematische Darstellung der PLS1 und der beteiligten Matrizen. Zur Erklärung der Variablen siehe Text (nach Kessler, 2007; verändert).

Alle multivariaten Datenanalysen mittels PLSR erfolgen mit der Software ParLes von Viscarra Rossel (2008). In ParLeS ist die orthogonale PLSR für eine y -Variable (auch PLS1 genannt) nach Martens & Næs (1989) umgesetzt, die hier nachfolgend beschrieben wird (vgl. dazu auch Kessler, 2007).

Ausgangspunkt einer orthogonalen PLS-Regression mit einer y -Variable ist die Datenmatrix X der Dimension $(N \times M)$ mit N Objekten und M gemessenen Objekteigenschaften (z.B. Spektralwerte), und der Vektor y mit N gemessenen Zielgrößen (z.B. Bodeneigenschaften: OC-Gehalt) (Abb. 6.4.2). Vor Beginn der PLSR-Schätzung wird die maximale Zahl der zu berechnenden PLS-Komponenten A_{\max} festgelegt. Die Datenmatrix X und die y -Daten werden zudem mittenzentriert. Der eigentliche Schätzalgorithmus zur Bestimmung der latenten Variablen setzt sich aus einer Reihe von linearen Regressionen zusammen (Haaland & Thomas, 1988a). Begonnen wird mit der PLS-Komponente 1, wobei $a = 1$, $X_a = X$ und $y_a = y$. Für jede PLS-Komponente $a = 1, 2, \dots, A_{\max}$ werden dann die Schritte 1 bis 6 ausgeführt:

1. Berechnung der gewichteten Loadings w_a für das lokale Modell $X_a = y_a w_a^T + E$, so dass die Kovarianz zwischen y_a und $X_a w_a$ maximal wird bzw. der Fehler E minimal. Als Nebenbedingung gilt, dass die gewichteten Loadings orthogonal zueinander sein müssen. Es gilt demnach $w_a^T w_a = 1$. Die *least squares* Lösung für w_a lautet hierfür $w_a = c X_a^T y_a$ mit dem Skalierungsfaktor $c = 1 / \sqrt{(X_a^T y_a)(X_a^T y_a)^T}$, der w_a auf die Länge 1 normiert. Die gewichteten Loadings w drücken somit den Zusammenhang zwischen X und y aus.

2. Berechnung der Scores t_a für das a-te lokale PLS Modell durch Abbildung der X-Daten auf die gewichteten Loadings w_a für $X_a = t_a w_a^T + E$ und Suche der *least squares* Lösung, d.h. $t_a = X_a w_a$.
3. Berechnung der spektralen Loadings p_a durch Abbildung von X auf die t-Scores für das lokale Modell $X_a = t_a p_a^T + E$ und Suche der *least squares* Lösung, d.h. $p_a = X_a^T t_a / (t_a^T t_a)$.
4. Berechnung der Variable q_a durch Regression des y-Vektors auf die in Schritt 2 bestimmten Scores t_a für das lokale Modell $y_a = t_a q_a + f$, d.h. $q_a = t_a^T y_a / (t_a^T t_a)$. q_a wird auch als chemischer Loading bezeichnet.
5. Subtraktion der Information der a-ten PLS-Komponente von X_a bzw. y_a :
 $X_{a+1} = X_a - t_a p_a^T$ bzw. $y_{a+1} = y_a - q_a t_a$
6. Erhöhung von a um 1: $a = a + 1$ und erneuter Beginn mit Punkt 1. Ist A_{\max} erreicht, sind alle Komponenten berechnet und Schritt 7 folgt.
7. Berechnung der Restvarianzen E und f von X und y: $E = X_{A_{\max}+1}$ und $f = y_{A_{\max}+1}$.

Die Vorhersage von y aus den gemessenen X-Werten erfolgt über einen Regressionsansatz nach der Gleichung $y = b_0 + Xb$. b bzw. b_0 werden berechnet mithilfe der p-, q- und w-Loadings nach $b = W(P^T W)^{-1} q$ und $b_0 = \bar{y} - \bar{x}^T b$. Will man für gemessene X-Werte mit unbekanntem y-Werten die Zielgrößen vorhersagen, so kann dies mit den bei der Kalibration bestimmten Regressionskoeffizienten b bzw. der Regressionskonstante b_0 nach $y_i = b_0 + x_i^T b$ erfolgen.

Bei der PLS1 wird für jede Zielgröße ein eigenes Modell mit einem eigenen Satz Loadings und Scores erstellt. Im Unterschied dazu wird bei der PLS-Regression für mehrere Y-Variablen (PLS2) (Martens & Næs, 1989) ein Modell mit jeweils einem Satz Loadings und Scores für die X-Seite und für die Y-Seite erzeugt. Dies kann insbesondere bei der Suche nach Wechselwirkungen untereinander stark korrelierter y-Größen vorteilhaft sein. In der Regel liefern aber nacheinander berechnete PLS1-Modelle bessere Vorhersagen (Haaland & Thomas, 1988a; Kessler, 2007). Für eine detaillierte Beschreibung der PLS1 und PLS2 aus mathematisch-statistischer Sicht sei auf Höskuldsson (1988) verwiesen.

Trotz der Transformation der X-Variablen in einige wenige „latente Variablen“ kommt der Bestimmung der optimalen Anzahl der PLS-Komponenten zur Erstellung eines robusten Kalibrationsmodells große Bedeutung zu. Diese wurde im Zuge einer *Leave-One-Out*-Kreuzvalidierung des Kalibrationsdatensatzes (vgl. Kap. 6.4.4) mit dem *Akaike Information Criterion* (AIC) für $a = 1, 2, \dots, A_{\max}$ ermittelt. Das AIC berechnet sich nach:

$$AIC = N \log(RMSE) + 2 \cdot m \quad (6.4.9)$$

wobei N die Probenanzahl, m die Anzahl der Faktoren und der $RMSE$ die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers der Kreuzvalidierung (Viscarra Rossel, 2008; Li et al., 2002). Als finales Kalibrationsmodell wurde in der vorliegenden Arbeit im Allgemeinen das Modell gewählt, für welches der AIC einen Minimalwert erreicht. Häufig erfolgt die Auswahl des PLS-Modells ausschließlich anhand des RMSE. Der AIC bietet durch Integration der Probenmenge und der Anzahl der PLS-Faktoren ein verbessertes Selektionskriterium insbesondere hinsichtlich einer potenziellen Überbestimmung des Modells.

Ein großer Vorteil der PLSR gegenüber der MLR ist, dass die Verwendung multikollinerer X-Variablen unproblematisch ist, da eine Transformation zu orthogonalen, d.h. miteinander nicht korrelierten latenten Variablen erfolgt (vgl. Schritt 1 der PLSR). Durch die Transformation in einige wenige latente Variablen eignet sie sich auch besonders gut für kleine Datensätze mit einer großen Anzahl von X-Variablen wie es häufig in der Spektroskopie der Fall ist. Zudem werden bei der PLSR

keine besonderen Annahmen bezüglich Verteilung und Skalierung der Daten (Haenlein & Kaplan, 2004) getroffen.

Zur Interpretation der Kalibrationsmodelle der PLSR können die Loadings (p, w), die Scores (t) und die Regressionskoeffizienten des finalen PLSR-Modells herangezogen werden (Haaland & Thomas, 1988a,b; Wold et al, 2001). Die Identifikation signifikanter Wellenlängen beruht auf dem *Variable Importance in Projection* (VIP), der u. a. die gewichteten Loadings w mit einbezieht. Der VIP berechnet sich wie folgt:

$$VIP_k(a) = K \sum_a w_{ak}^2 \left(\frac{SSY_a}{SSY_t} \right) \quad (6.4.10)$$

wobei der $VIP_k(a)$ die Bedeutung der k -ten Prädiktor-Variable für ein Model mit a Faktoren angibt. w_{ak} ist der entsprechende Loadings-Wert der k -ten Variable im a -ten PLSR Faktor, SSY_a die erklärte Quadratsumme von y in einem Model mit a Faktoren, SSY_t die Gesamtsumme der Quadrate von y , und K die Anzahl der Prädiktorvariablen (Viscarra Rossel, 2008). Weisen beide Indikatoren, b -Koeffizienten und VIP, große Zahlwerte auf, wird die entsprechende Wellenlänge als gewichtig für das PLSR-Modell eingeschätzt (Wold et al., 2001). Als minimaler Grenzwert wird in Abhängigkeit vom Autor ein VIP von 0,8 (SAS/STAT(R), 2011) bzw. ein VIP von 1 (Chong & Jun, 2005) angenommen. In der vorliegenden Arbeit soll ein Wert von 0,8 als untere Grenze für einen tatsächlichen Beitrag der k -ten X-Variable im jeweiligen Regressionsmodell angenommen werden.

6.4.4 Fehlergrößen zur Beurteilung der Modellgüte

Die Qualität der Kalibrierung, d.h. die Genauigkeit der angenäherten y -Werte durch das Schätzverfahren, kann mithilfe unterschiedlicher Maßzahlen angegeben werden. Folgende Fehlerkennwerte werden für die Beurteilung der Modellgüte benutzt:

- Bestimmtheitsmaß (R^2),
- Standardfehler der Regression für den Kalibrationsdatensatz (*Standard Error of Calibration*, SEC),
- Standardfehler der Regression für den Validationsdatensatz (*Standard Error of Prediction*, SEP) bzw. der korrigierte Standardvalidationsfehler (SEP_{corr}),
- Verhältnis des Standardfehlers zur Standardabweichung (*Ratio of Performance to Deviation*, RPD).

Das Bestimmtheitsmaß ist ein Maß für die Stärke des Zusammenhangs zwischen Prädiktoren und Zielgröße und trifft eine Aussage zum Anteil der erklärten Variabilität der Zielgröße y durch das jeweilige statistische Modell. Es gilt $0 \leq R^2 \leq 1$. R^2 berechnet sich aus dem Quotienten der Varianz der Regressionswerte und der Varianz der abhängigen Variablen nach Gleichung 6.4.11, wobei y_i der Messwert der Probe i , \hat{y}_i der Schätzwert und \bar{y} der Mittelwert aller y_i :

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} = \frac{\text{Varianz der Regressionswerte}}{\text{Varianz der Messwerte}} \quad (6.4.11)$$

Der SEC ist der mittlere Standardfehler der Kalibrierung, wobei die Anzahl der Freiheitsgrade berücksichtigt wird. Er berechnet sich aus den Modellresiduen wie folgt:

$$SEC = \sqrt{\frac{1}{n - df - 1} \cdot \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (6.4.12)$$

Hierbei entspricht \hat{y}_i dem Schätzwert, y_i dem Messwert der Probe i , df der Anzahl der Freiheitsgrade und n der Anzahl aller Proben des Kalibrationsdatensatzes.

Der SEP liefert ein Maß für den zu erwartenden mittleren Fehler aller Schätzwerte und wird aus dem Validationsdatensatz nach Gleichung 6.4.13 ermittelt:

$$SEP = \sqrt{\frac{1}{n-1} \cdot \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (6.4.13)$$

Hierbei ist \hat{y}_i der Schätzwert des jeweiligen Bodenparameters und y_i der Labormesswert der Probe i . n ist gleich der Anzahl der Proben des Validationsdatensatzes. Der SEP überschätzt die tatsächliche Messunsicherheit, da er die Standardfehler der Laboranalysemethoden (SEL) einschließt. Durch eine einfache Korrektur des SEL errechnet sich der korrigierte Standardvalidationsfehler SEP_{corr} (Stevens et al., 2008):

$$SEP_{corr} = \sqrt{SEP^2 - SEL^2} \quad (6.4.14)$$

SEP und SEC stehen in direktem Zusammenhang mit der Standardabweichung des Validations- bzw. Kalibrationsdatensatzes. Je kleiner die Standardabweichungen desto kleiner auch der Standardfehler und vice versa. Eine wertebereichsunabhängige und dimensionslose Maßzahl, die für die vergleichende Bewertung der Modellgüte herangezogen werden kann, ist der RPD. Dieser setzt den Standardfehler der Validation in Bezug zur Standardabweichung der Daten und berechnet sich aus dem Verhältnis der Standardabweichung der Referenzdaten des Validationsdatensatzes SD_{val} zu dessen Standardfehler (SEP) (Glg. 6.4.15, Malley et al., 2004).

$$RPD = \frac{SD_{val}(y)}{SEP} \quad (6.4.15)$$

Malley et al. (2004) und Chang et al. (2001), und in dessen Folge Dunn et al. (2002) und Cohen et al. (2005), veröffentlichten Vorschläge für die Kategorisierung von Modellen hinsichtlich ihrer Vorhersagegenauigkeit und analytischen Leistungsfähigkeit auf Grundlage des RPD. Malley et al. (2004) fokussieren dabei auf Umweltparameter im weitesten Sinne ohne Angabe eines spezifischen Messverfahrens (LS, FS oder IS). Chang et al. (2001) beschränken sich ausschließlich auf Bodenparameter und gründen ihre RPD-Klassen auf Kalibrationen an Laborspektren. In der Literatur zu quantitativer Bodenspektroskopie, v.a. in der Abbildenden Spektroskopie, ist die Einschätzung nach Chang et al. (2001) weit verbreitet (z.B. Vasques et al., 2009; Bilgili et al., 2010; Stevens et al., 2006, 2008; Gomez et al., 2008a). Die Bewertung der Leistungsfähigkeit der in dieser Arbeit generierten Kalibrationsmodelle zur Schätzung von Bodenparametern erfolgt deshalb nach den Richtwerten von Chang et al. (2001). Sie klassifizieren Modelle zur Schätzung von Bodenparametern mittels VNIRS anhand des RPD in drei Gruppen. Gruppe A – exzellent (*excellent*): $RPD > 2,0$ ($0,8 < R^2 < 1,0$), Gruppe B – moderat (*acceptable*): $1,4 < RPD < 2,0$ ($0,5 < R^2 < 0,8$), Gruppe C – mangelhaft (*poor*): $RPD < 1,4$ ($R^2 < 0,5$). Modelle der RPD-Klasse B können nach Chang et al. (2001) durch verschiedene Kalibrationsstrategien verbessert werden. Bodenparameter in der Modellkategorie C können nicht zuverlässig geschätzt werden. Dunn et al. (2002) und Cohen et al. (2005) nehmen eine vergleichbare Klassifikation vor, setzen jedoch die Grenze zwischen moderat und mangelhaft auf 1,6 bzw. 1,5. Modelle mit RPD zwischen 1,6 und 1,7 bezeichnen Dunn et al. (2002) als nützlich für die Differenzierung eines Parameters in drei Kategorien.

Zusätzlich kann der Quotient aus der Standardabweichung der Referenzdaten des Kalibrationsdatensatzes ($SD_{cal}(y)$) und dem SEC Aufschluss in einer vergleichenden Betrachtung der Kalibrationsmodelle liefern.

Soweit für die Modellkalibration eine ausreichend große Grundgesamtheit der Daten zur Verfügung stand, wurde der Gesamtdatensatz ungefähr im Verhältnis 3 zu 2 in einen Kalibrations- und einen Validationsdatensatz aufgeteilt. Kalibrations- und Validationsdatensatz sollten dabei für den Gesamtdatensatz möglichst repräsentativ sein. Die statistischen Kennwerte aller verwendeten Kalibrations- und Validationskonfigurationen sind in Anhang B tabellarisch erfasst. Bei zu kleiner

Grundgesamtheit⁵³ erfolgte die Modellkalibrierung und -validierung im Zuge einer *Leave-One-Out*-Kreuzvalidierung⁵⁴.

Die hier aufgeführten Fehlermaße zur Bewertung der Modellgüte und Auswahl eines geeigneten Modells sind in der Literatur allgemein etabliert (z.B. Bahrenberg et al., 1999; Martens & Næs, 1989; Malley et al., 2004). Sie gestatten einen direkten Vergleich der vorliegenden Ergebnisse mit Resultaten thematisch nahe stehender Forschungsarbeiten.

Die mittlere Abweichung zwischen zwei Variablen wird durch den RMSE (*Root Mean Square Error*) beschrieben. Er findet in der vorliegenden Arbeit Verwendung beim Vergleich von Parameterschätzungen unterschiedlicher Jahre oder ein und desselben Jahres (siehe Kap. 7.8.2, 7.8.3). Während der SEC die Anzahl der Freiheitsgrade berücksichtigt, wird beim RMSE lediglich die Anzahl der Proben (n) in Betracht gezogen. In einigen Studien in der Literatur dient der RSME aber auch als Fehlerkennwert von Kalibrationsmodellen (z.B. Kooistra et al., 2003a; Gomez et al., 2008a,b).

Zur Beschreibung des Kausalzusammenhangs zwischen zwei Variablen wurde der Korrelationskoeffizienten nach Pearson eingesetzt:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} = \frac{\text{Kovarianz}(XY)}{SD(X) \times SD(Y)} \quad (6.4.16)$$

wobei x_i und y_i die Einzelmessung der jeweiligen Variablen, \bar{x} und \bar{y} deren Mittelwerte und SD die Standardabweichung. Zudem gilt $-1 \leq R \leq 1$ (z.B. Klemm, 2002).

6.5 Abschätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit

Die experimentelle Bestimmung der gesättigten Wasserleitfähigkeit von Böden ist im Labor sowie im Feld mit einem sehr hohen Mess- und Zeitaufwand verbunden. Hinzu kommt, dass die hydraulischen Eigenschaften von Böden kleinräumig sehr stark variieren können, so dass repräsentative Werte eine große Zahl von Messungen erfordern. Bagarello & Sgroi (2004) berichten von Variationskoeffizienten zwischen 36% und 372% bei Feldmessungen der gesättigten Wasserleitfähigkeit auf landwirtschaftlich genutzten Flächen.

Bouma & van Lanen (1987)⁵⁵ prägten Ende der 80er Jahre erstmals den Begriff der *transfer function* bzw. *pedotransfer function* (Bouma, 1989) in der Bodenkunde, der sich auf die Verknüpfung von bodenkundlicher Bestandsaufnahme und Bodenhydrologie bezieht. Sie beruht auf der Übersetzung einfach messbarer oder routinemäßig bestimmter und daher leichter zugänglicher Bodenparameter, wie der Bodentextur oder dem Gehalt an organischem Kohlenstoff, in komplexere und schwer messbare bodenhydraulische Kennwerte für die Modellierung der Bodenwassercharakteristik. Seither wurde eine Vielzahl von Pedotransferfunktionen (PTF) zur Schätzung des Bodenwassergehaltes, des Matrixpotentials oder der gesättigten Wasserleitfähigkeit generiert. Allerdings ist das *pedotransfer*-Konzept keineswegs auf die Beschreibung der Wasserbewegung im Boden beschränkt. So wurden auch PTF zur Schätzung bodenphysikalischer, -mechanischer, -chemischer oder -biologischer Parameter entwickelt (vgl. McBratney et al., 2002, Tab. 1).

Dem Verfahrensansatz nach zufolge können PTF in zwei große Gruppen gegliedert werden: in empirische PTF und mechanistisch-empirische PTF, wobei die überwiegende Mehrheit der PTF auf empirischen Regressionsansätzen beruht (McBratney et al., 2002). Von der Verwendung

⁵³ Für eine Aufteilung in Kalibrations- und Validationsdatensatz wurde eine Gesamtprobenzahl >40 vorausgesetzt.

⁵⁴ Bei der *Leave-One-Out*-Kreuzvalidierung dient jeweils ein Messwert als Validationswert, während alle anderen Messwerte zur Modellkalibration herangezogen werden. Dieser Vorgang wird wiederholt, bis jeder Messwert genau einmal als Validationswert genutzt wurde.

⁵⁵ Zitiert in Pachepsky & Rawls (2004): Bouma, J., & van Lanen, H.A.J. (1987). Transfer functions and threshold values: from soil characteristics to land qualities. In: Proc. of the Int. Workshop on Quantified Land Evaluation Procedures, 27/04-2/05/1986, Washington, DC, USA, 106-110.

mechanistisch-empirischer PTF (z.B. Bloemen, 1980; Campbell, 1985) wurde in der vorliegenden Arbeit abgesehen, da ein erfolgreicher Einsatz eine möglichst detaillierte Beschreibung der Bodentextur (>3 Korngrößenfraktionen) voraussetzt (Wagner et al., 2001), die hier nicht bereitgestellt werden kann. Insgesamt wurden sechs empirisch basierte PTF zur Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit selektiert. Dazu gehören die PTF von Vereecken et al. (1990), Saxton et al. (1986), Brakensiek et al. (1984), Cosby et al. (1984), Jabro (1992) und Puckett et al. (1985) (Glg. 6.5.1-6.5.6). Ein Kriterium bei der Auswahl dieser PTF war die Art der Eingangsparameter. Es wurden PTF gewählt, die die Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f aus Angaben zum Tongehalt und/oder Schluffgehalt und/oder Sandgehalt und/oder organischem Kohlenstoffgehalt ermöglichen (Tab. 6.5.1). Die Pedotransferfunktionen von Vereecken et al. (1990), Brakensiek et al. (1984) und Jabro (1992) erfordern zusätzlich Angaben zur Trockenrohdichte bzw. zum Porenvolumen der Böden. Soweit bekannt, wurde ferner die Bodendatenbasis der PTF, d.h. ihr Gültigkeitsbereich, auf Übereinstimmungen zu den Böden im Testfeld DEMMIN geprüft.

Folgende PTF wurden zur Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f eingesetzt:

1. Ermittlung von k_f nach Vereecken et al. (1990):

$$k_f = \exp[20,62 - 0,96 \cdot \ln(T) - 0,66 \cdot \ln(S) - 0,46 \cdot \ln(OM) - 8,43 \cdot \rho_t] \quad (6.5.1)$$

2. Ermittlung von k_f nach Saxton et al. (1986):

$$k_f = 24 \exp \left[12,012 - 7,55 \cdot 10^{-2} \cdot S + \left(\frac{-3,895 + 3,671 \cdot 10^{-2} \cdot S - 0,1103 \cdot T + 8,7546 \cdot 10^{-4} \cdot T^2}{0,332 - 7,251 \cdot 10^{-4} \cdot S + 0,1276 \cdot \log_{10}(T)} \right) \right] \quad (6.5.2)$$

3. Ermittlung des k_f -Wertes nach Brakensiek et al. (1984):

$$k_f = 24 \cdot \exp \left[\begin{array}{l} 19,52348 \cdot p - 8,96847 - 0,028212 \cdot T + 0,00018107 \cdot S^2 \\ - 0,0094125 \cdot T^2 - 8,395215 \cdot p^2 + 0,077718 \cdot S \cdot p \\ - 0,00298 \cdot S^2 \cdot p^2 - 0,019492 \cdot T^2 \cdot p^2 + 0,0000173 \cdot S^2 \cdot T \\ + 0,02733 \cdot T^2 \cdot p + 0,001434 \cdot S^2 \cdot p - 0,0000035 \cdot T^2 \cdot S \end{array} \right] \quad (6.5.3)$$

4. Ermittlung von k_f nach Cosby et al. (1984):

$$k_f = 60,96 \cdot 10^{(-0,6 + 0,0126 \cdot S - 0,0064 \cdot T)} \quad (6.5.4)$$

5. Ermittlung von k_f nach Jabro (1992):

$$k_f = 24 \cdot 10^{(9,56 - 0,81 \cdot \log(U) - 1,09 \cdot \log(T) - 4,64 \cdot \rho_t)} \quad (6.5.5)$$

6. Ermittlung von k_f nach Puckett et al. (1985):

$$k_f = 376,704 \cdot \exp(-0,1975 \cdot T) \quad (6.5.6)$$

Hierin entspricht k_f der gesättigten Wasserleitfähigkeit [$cm \cdot d^{-1}$], T dem Tongehalt (< 2 μ m) [%], U dem Schluffgehalt (2-50 μ m) [%], S dem Sandgehalt (50-2000 μ m) [%], OM dem Gehalt an

organischer Bodensubstanz [%], ρ_t der Trockenrohddichte [$g \cdot cm^{-3}$] und p der Porosität [$m^3 \cdot m^{-3}$].

Wie die Gleichungen 6.5.1-6.5.6 zeigen, sind die gewählten PTF unterschiedlich komplex. Nach Puckett et al. (1985) erfolgt die Schätzung von k_f ausschließlich auf Grundlage des Tongehaltes, während nach Vereecken et al. (1990) Informationen zum Ton-, Sand- und organischen Kohlenstoffgehalt sowie der Trockenrohddichte einfließen. Jabro (1992) verwendet als einziger Angaben zum Schluffgehalt für die Schätzung von k_f .

Der Gehalt an organischer Bodensubstanz (OM) wurde durch Multiplikation des organischen Kohlenstoffgehaltes mit dem Faktor 1,72 ermittelt (AG Boden, 1994, vgl. dazu auch Pribyl, 2010). Für die Trockenrohddichte wurde ein mittlerer, konstanter Wert angenommen. Die Porosität oder das Porenvolumen p eines Bodens wurde aus der Trockenrohddichte ρ_t und der Dichte der mineralischen Festsubstanz ρ_{FS} [$g \cdot cm^{-3}$] nach folgender Gleichung bestimmt:

$$p = 1 - \rho_t / \rho_{FS} \quad (6.5.7)$$

Da die hier verwendeten PTF alle auf Korngrößenfraktionen der amerikanischen Nomenklatur beruhen, deren Äquivalentdurchmesser für die Grenze von Schluff- und Sandfraktion von der deutschen Nomenklatur abweicht⁵⁶, wurden die Korngrößenfraktionen durch eine loglineare Interpolation in die amerikanische Nomenklatur nach Gleichung 6.5.8 überführt:

$$kG_n = kG_{n-1} + \frac{\ln(\phi_n) - \ln(\phi_{n-1})}{\ln(\phi_{n+1}) - \ln(\phi_{n-1})} (kG_{n+1} - kG_{n-1}) \quad (6.5.8)$$

Hierbei ist kG der kumulierte Gewichtsanteil der Korngrößenfraktion in der Körnungssummenkurve in [%], ϕ die auf dem Äquivalentdurchmesser beruhende Grenze der Korngrößenfraktion in [mm], n die fehlende bzw. gesuchte Korngrößengrenze, $n-1$ die benachbarte, vorangehende Korngrößengrenze und $n+1$ die benachbarte, nachfolgende Korngrößengrenze.

Da angenommen werden kann, dass k_f eine logarithmisch normalverteilte Variable ist (Tietje & Hennings, 1996), erfolgt die Charakterisierung der Verteilung durch den geometrischen Mittelwert μ_g (Glg. 6.5.9) und die geometrische Standardabweichung σ_g (Glg. 6.5.10). Hierin repräsentiert y die Schätzwerte der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f .

$$\mu_g = \exp\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln(y_i)\right) \quad (6.5.9)$$

$$\sigma_g = \exp\left(\sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\ln(y_i) - \mu_g)^2}\right) \quad (6.5.10)$$

Für das Intervall $[\mu_g/\sigma_g, \mu_g \cdot \sigma_g]$ kann unter Vernachlässigung der Schätzfehler für μ_g und σ_g angenommen werden, dass in ca. 68% aller Fälle k_f in diesem Bereich liegt. Mit 95%-iger Wahrscheinlichkeit liegt k_f im Intervall $[\mu_g/\sigma_g^2, \mu_g \cdot \sigma_g^2]$.

Die Evaluierung der PTF erfolgt nach einem statistischen Ansatz von Tietje & Hennings (1996). Der mittlere geometrische Fehlerquotient (GMER, *Geometric Mean Error Ratio*) berechnet sich nach Gleichung 6.5.11 und 6.5.12, wobei ε der Fehlerquotient aus dem k_f -Wert der PTF, die als Referenz dient ($k_f^{p,ref}$), und dem k_f -Wert des zu vergleichenden Schätzwertes ($k_f^{p,val}$).

$$\varepsilon = k_f^{p,val} / k_f^{p,ref} \quad (6.5.11)$$

⁵⁶ Äquivalentdurchmesser der Korngrößenfraktionen in der amerikanischen Nomenklatur: Ton=<2µm, Schluff=2-50µm, Sand=50-2000µm; Äquivalentdurchmesser der Korngrößenfraktionen in der deutschen Nomenklatur: Ton=<2µm, Schluff=2-63µm, Sand=63-2000µm.

$$GMER = \exp\left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln(\varepsilon_i)\right) \quad (6.5.12)$$

Die geometrische Standardabweichung des Fehlerquotienten (GSDER, *Geometric Standard Deviation of Error Ratio*) berechnet sich nach:

$$GSDER = \exp\left[\left(\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n [\ln(\varepsilon_i) - \ln(GMER)]^2\right)^{1/2}\right] \quad (6.5.13)$$

Zur Normierung der k_f -Werte der unterschiedlichen Pedotransferfunktionen wurde eine Transformation der Daten auf den Wertebereich von [0,1] nach Gleichung 6.5.14 durchgeführt:

$$x' = (x - \min) \cdot \frac{\max_{norm} - \min_{norm}}{\max - \min} + \min_{norm} = \frac{x - \min}{\max - \min} \quad (6.5.14)$$

wobei x' die normierten Werte darstellen, x die Originalwerte, \min und \max die Wertespanne der Originaldaten und \min_{norm} und \max_{norm} die vorgegebene Wertespanne der normalisierten Werte, d.h. in diesem Fall 0 und 1.

Tab. 6.5.1: Eigenschaften der ausgewählten Pedotransferfunktionen (PTF).

PTF	Eingangsparameter	Eigenschaften der verwendeten Bodendaten	Geographische Herkunft der Bodendaten
Cosby et al. (1984)	Sand (50-2000 μ m) [%] Ton (< 2 μ m) [%]	Ton: 3,0 – 58,0% Schluff: 5,0 – 70,0% Sand: 6,0 – 92,0%	USA
Saxton et al. (1986)	Sand (50-2000 μ m) [%] Ton (< 2 μ m) [%]	Sand: 5,0 – 30,0% (wobei Ton: 8,0 – 58,0%) Sand: 30,0 – 95,0% (wobei Ton: 5,0 – 60,0%)	USA
Vereecken et al. (1990)	Sand (50-2000 μ m) [%] Ton (< 2 μ m) [%] Rohdichte (ρ_t) [g · cm ⁻³] OM [%]	Ton: 0,0 – 54,46% ($\mu=10,93\%$) Schluff: 0,0 – 80,7% ($\mu=36,81\%$) Sand: 5,6 – 97,8% ($\mu=52,14\%$) OM: 0,01 – 6,6% ($\mu=1,03\%$) ρ_t : 1,04 – 1,23 g · cm ⁻³ ($\mu=1,47$ g · cm ⁻³) ⁵⁷	Belgien: Provinz Namur
Brakensiek et al. (1984)	Sand (50-2000 μ m) [%] Ton (< 2 μ m) [%] Porosität (p)	n.a.	USA
Puckett et al. (1985)	Ton (< 2 μ m) [%]	Ton: 1,4 – 42,1% Schluff: 7,4 – 35,8% Sand: 34,6 – 88,5%	USA: Lower Coastal Plain von Alabama
Jabro (1992)	Schluff (2-50 μ m) [%] Ton (< 2 μ m) [%] Rohdichte (ρ_t) [g · cm ⁻³]	Ton: 1,0 – 44,0% Schluff: 0,2 – 52,0% Sand: 17,0 – 96,0% ρ_t : 1,26 – 1,97 g · cm ⁻³	USA: Virginia, North Carolina, South Carolina, Pennsylvania

OM: organische Bodensubstanz

⁵⁷ Möglicherweise liegt hier ein Fehler in der Originalquelle (Vereecken et al., 1989) vor. Denkbar ist eine Verwechslung von Maximum und Mittelwert.

7 Ergebnisse

7.1 Referenzanalytik

7.1.1 Physikalisch-chemische Eigenschaften

Insgesamt wurden 135 Messpunkte auf 14 Feldern während der Feldkampagnen beprobt. Tab. 7.1.1 fasst die im Labor ermittelten bodenchemischen- und physikalischen Kennwerte dieser Proben (*Bodenserie Demmin*) zusammen. Die Anteile der Sand- und Schlufffraktionen variieren zwischen 38,02% und 89,96% sowie 6,19% und 39,57%, wobei besonders hohe Anteile an Fein- und Mittelsand sowie Grobschluff zu verzeichnen sind. Der Anteil der Tonfraktion an der Korngrößenverteilung beträgt minimal 3,65% und maximal 32,95%. Wie in Abb. 7.1.1 zu sehen ist, weist die Verteilung eine deutliche Rechtsschiefe auf. 75% der Bodenproben besitzen weniger als 16,3% Ton, der Median beträgt 11,55%. Die Böden der beprobten Messpunkte im Testfeld DEMMIN zeigen demnach eine Dominanz lehmiger Sande und sandiger Lehme (Abb. 7.1.2). Der Gewichtsanteil an organischem Kohlenstoff liegt in den untersuchten Proben zwischen 0,431% und 2,479%. Allerdings besitzt die Hälfte der Proben weniger als 1% organischen Kohlenstoff. Das 0,75-Quantil beträgt 1,162%. Die Gehalte an Carbonat-Kohlenstoff (IC) sind stark variabel (VK=237,56), generell aber als gering einzustufen. Das wird durch mittlere pH-Werte um 7 bestätigt. Das Auftreten lokal erhöhter Kalkanteile kann geologisch bedingt sein (Geschiebemergelvorkommen im Bereich der Grundmoränen) oder durch Kalkung⁵⁸ hervorgerufen werden. Einige stark sandige, ton- und humusarme Flächen weisen Böden mit pH-Werten im sauren Milieu (pH=4,43) auf. Der mittels Königswasseraufschluss (KWA) ermittelte Anteil an Eisen (angegeben in Fe₂O₃) beträgt minimal 0,66% und maximal 2,93%.

Mithilfe einer Korrelationsmatrix wurde Aufschluss über Abhängigkeiten und Wechselbeziehungen zwischen den Bodenparametern gewonnen (Anhang A 3). Ein besonders starker, positiver Zusammenhang besteht zwischen Eisen und Ton. Er zeichnet sich durch einen Korrelationskoeffizienten (R) von 0,93 aus. Ebenso besteht zwischen Eisen und organischem Kohlenstoff eine positive Abhängigkeit, die jedoch deutlich schwächer ausgeprägt ist

Tab. 7.1.1: Statistische Kennwerte der physikalisch-chemischen Eigenschaften der *Bodenserie Demmin* (n_{ges.}=135).

Parameter	Einheit	Min	Max	Range	MW	Median	SD	VK
GS (630-2000 µm)	%	1,54	11,94	10,40	4,44	4,07	1,60	36,08
MS (200-630 µm)	%	9,52	53,92	44,40	23,21	22,89	6,31	27,17
FS (63-200 µm)	%	22,10	49,41	27,32	33,94	35,01	4,80	14,13
S _{ges.}	%	38,02	89,96	51,95	61,59	63,59	10,31	16,74
GU (20-63 µm)	%	3,55	27,11	23,56	15,31	15,67	3,87	25,31
MU (6,3-20 µm)	%	1,72	11,06	9,34	6,77	6,70	1,68	24,87
FU (2-6,3 µm)	%	0,65	7,09	6,45	3,64	3,55	1,14	31,23
U _{ges.}	%	6,19	39,57	33,37	25,72	25,96	5,89	22,89
T (<2 µm)	%	3,65	32,95	29,29	12,69	11,55	6,53	51,44
TC	%	0,501	2,479	1,978	1,102	1,006	0,409	37,15
IC	%	0,000	1,079	1,079	0,072	0,010	0,172	237,56
OC	%	0,431	2,479	2,048	1,030	0,936	0,391	37,98
Fe ₂ O ₃	%	0,66	2,98	2,32	1,48	1,36	0,55	36,89
pH		4,43	7,67	3,24	6,92	7,12	0,61	8,75

MW: Mittelwert, SD: Standardabweichung, VK: Variationskoeffizient

⁵⁸ Beispielsweise belegen die landwirtschaftlichen Betriebsdaten aus dem Jahr 2005, dass Beigaben von Kalkammonsalpeter auf einem Ackerschlag nahe der Ortschaft Buchholz erfolgten.

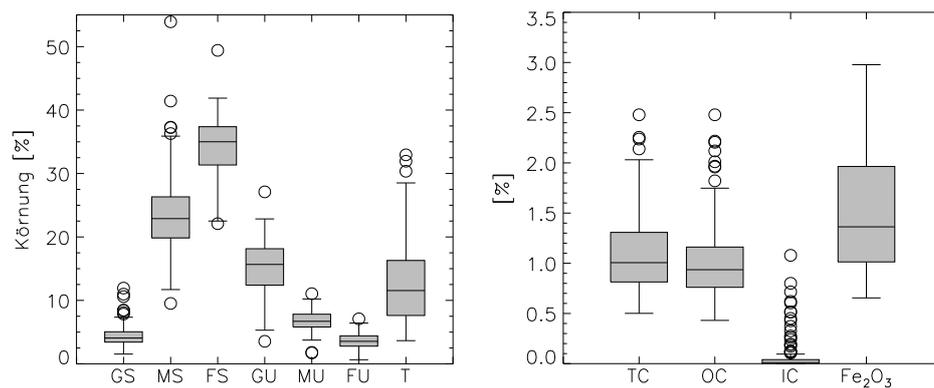


Abb. 7.1.1: Box-Whisker-Plot der physikalisch-chemischen Eigenschaften der *Bodenserie Demmin*.

($R=0,57$). Erwartungsgemäß existiert auch ein relativ enger Zusammenhang zwischen dem Anteil an Ton und organischem Kohlenstoff ($R=0,73$). Teils starke negative Abhängigkeiten treten zwischen dem Anteil an Sand und Schluff ($R=-0,81$), Sand und Ton ($R=-0,85$), Sand und OC ($R=-0,71$) sowie Sand und Eisen ($R=-0,77$) auf.

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird in einigen Kapiteln auf eine Untermenge der *Bodenserie Demmin* Bezug genommen. Diese umfasst 43 Probenahmestellen auf einem Feld nahe der Ortschaft Buchholz und wird nachfolgend als *Bodenserie Buchholz* bezeichnet. Der etwa 23ha (0,23km²) große Ackerschlag weist eine starke Heterogenität der Bodenverhältnisse auf. Bis auf extrem sandige Böden ist hier auf relativ kleinem Raum beinahe die gesamte Bodencharakteristik der *Bodenserie Demmin* anzutreffen (Anhang A 2). Es dominieren v.a. schluffhaltige Böden mit bis zu 32% Ton, deren Humusgehalt eine ähnliche Spannweite aufweist wie der der *Bodenserie Demmin*.

Wie die Ergebnisse der bodenchemischen und –physikalischen Laboranalysen zeigen, sind die Böden des Testfeldes DEMMIN hinsichtlich ihrer Bodenart (Korngrößenverteilung) und dem Gehalt an organischer Bodensubstanz für eine Vielzahl von Ackerböden in Nordostdeutschland (LUNG, 2003), aber auch für einen großen Teil der ackerbaulich genutzten Flächen Deutschlands (Düwel & Utermann, 2008) sowie für Teile der mitteleuropäischen Agrarregion (z.B. Stevens et al., 2008) repräsentativ.

Zur Ermittlung methodischer Fehler bei der Probenentnahme (SES) und zur Abschätzung der Standortheterogenität wurden an 18 ausgewählten Messpunkten je 5 Proben im Umkreis von 2 Metern entnommen und analysiert. Dieser methodische Fehler ist kleiner 2,45% für die Korngrößenfraktionen Sand, Schluff und Ton. Für TC, IC und OC beträgt er 0,069%, 0,043% und 0,077% respektive. Mit Ausnahme des IC- und OC-Gehaltes ist der SES erwartungsgemäß etwas größer als der SEL (vgl. Anhang A 7).

Für die statistische Auswertung der mittels Röntgenfluoreszenzanalyse erhobenen geochemischen Daten der *Bodenserie Buchholz* wurde eine Gruppierung nach Bodenarten entsprechend der KA4 (AG Boden, 1994) auf Basis der Korngrößenverteilung vorgenommen. Die Durchschnittschemismen sind in Anhang A 5 zusammengefasst. Für einige Spurenelemente liegen die ermittelten Gehalte nur geringfügig oberhalb der Bestimmungsgrenzen der RFA (Sc, Ni, Cu, La) bzw. darunter (Mo, Sn, Th, U). Eine Gegenüberstellung der Durchschnittschemismen der Bodenarten zeigt, dass sandige Proben (Su3, Sl3, Sl4) im Vergleich zu lehmig-tonigen Proben (Lts, Lt2, Ls3, Ls4) durch höhere SiO₂ und Na₂O-Gehalte sowie niedrigere Gehalte an Al₂O₃, Fe₂O₃, MgO, TiO₂ gekennzeichnet sind. Ebenso ist der Anteil der Spurenelemente, die Elemente Ba und Zr ausgenommen, in den sandigen Proben geringer als in den lehmig-tonigen Proben (v.a. Rb, V, Zn, Cr). Für die Elemente Mn, Ca und K (angegeben als Oxide) lassen sich keine Tendenzen erkennen. Diese Elementverteilung kann auf die erhöhte Konzentration tonmineralogischer Komponenten und organischer Bestandteile in den lehmig-tonigen Proben zurückgeführt werden. Die höheren Na₂O-Konzentrationen in den sandigen Proben korrelieren gut mit den röntgendiffraktometrisch ermittelten höheren Albitgehalten der sandigen Proben. Eine ausführliche Auflistung der Ergebnisse der RFA der *Bodenserie Buchholz* befindet sich in Anhang A 4. Um einen Anhaltspunkt zur Qualität der RFA-Ergebnisse zu erhalten,

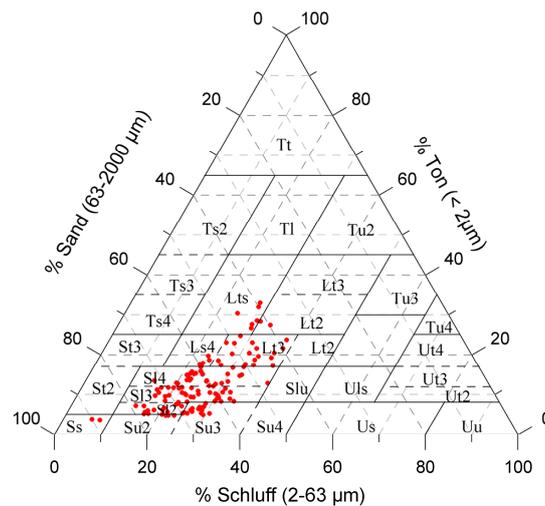


Abb. 7.1.2: Bodenarten nach KA4 (AG Boden, 1994) der *Bodenserie Demmin* (Ls3,Ls4,Lt2,Lts,Sl2,Sl3,Sl4,Ss,Su2,Su3).

kann als gültige Näherung angenommen werden, dass die Summe aller Elementgehalte aus der RFA zusammen mit dem Glühverlust etwa 100M.-% ergeben sollte. Die mittlere Abweichung in den analysierten Proben beträgt 0,2M.-%, so dass von vertrauenswürdigen Ergebnissen auszugehen ist.

Um die Validität der anderen Laboranalysen zu sichern, erfolgte, wenn möglich, ein Vergleich der Ergebnisse verschiedener Analyseverfahren. Für die ermittelten Gesamtkohlenstoffgehalte (TC) mithilfe des Elementanalysators vario EL und mithilfe des Elementanalysators CNS-2000 besteht eine sehr gute Übereinstimmung der Messwerte (nur *Bodenserie Buchholz*) (Abb. 7.1.3b). Der Pearson Korrelationskoeffizient R für den Zusammenhang zwischen TC(vario EL) und TC(CNS-2000) beträgt 0,96. Höhere Abweichungen zwischen diesen beiden Analyseverfahren sind für tonreiche Böden mit mehr als 2% TC zu beobachten (3 Bodenproben). Sie beeinflussen maßgeblich den RMSE, der 0,126% TC beträgt. Schließt man diese drei Proben aus, beziffert sich der RMSE auf 0,058% und liegt somit im Bereich des Fehlers, der durch die Probenheterogenität (SES) hervorgerufen wird (vgl. Anhang A 7).

Verfahrensbedingt kann mithilfe des KWA nicht das gesamte elementare Eisen erfasst werden, da einige mineralische Oxide nicht aufgeschlossen werden können und zurück bleiben. Im Durchschnitt belaufen sich die mittels KWA bestimmten Eisengehalte auf etwa 76% des mithilfe der RFA erfassten Gesamt-Eisens. Der mittels KWA bestimmte Eisenanteil fällt damit geringer aus als angenommen (vgl. Kap. 6.1.2.1). Ungeachtet dieser systematischen Messabweichung besteht ein guter

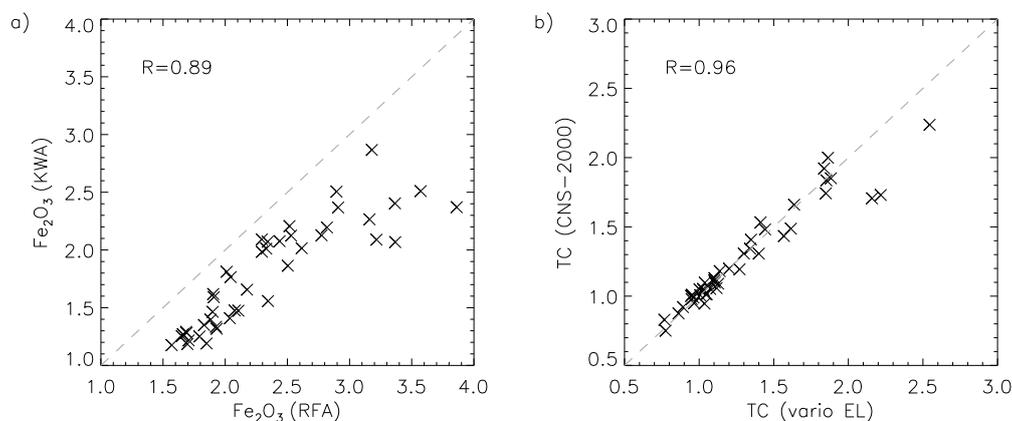


Abb. 7.1.3: a) Zusammenhang zwischen den mittels Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA) und Königwasseraufschluss (KWA) ermittelten Eisenkonzentrationen (Fe_2O_3); b) Zusammenhang zwischen den mittels trockener Veraschung im Elementanalysator vario EL und im Elementanalysator CNS-2000 bestimmten Konzentrationen an Gesamtkohlenstoff (TC).

Zusammenhang zwischen den Messwerten dieser beiden Verfahren ($R=0,89$). Allerdings sind die Abweichungen in den Analyseergebnissen auch hier für sehr tonige Proben höher (Abb. 7.1.3a).

7.1.2 Mineralogische Zusammensetzung

In den Bodenproben des Testfeldes DEMMIN liegen neben variierenden Gehalten an Quarz, Kalifeldspat (Mikroclin), Plagioklas (Albit), Calcit, Dolomit und Amphibolen (Magnesio-, Ferro-Hornblende) Mischungen unterschiedlicher Tonminerale vor. Bei den röntgendiffraktometrischen Untersuchungen aufgeschlammter Texturpräparate wurden nicht quellfähige Dreischichttonminerale (Illit, Al-Mg-Chlorite), quellfähige Dreischichttonminerale (Smekтите, Montmorillonit, Übergangsmminerale, Vermiculit) und geringe Mengen des Zweisechichtsilikats Kaolinit als Haupttonminerale identifiziert. Aufgrund eines irreparablen Gerätedefekts erfolgten die tonmineralogischen Untersuchungen an Texturpräparaten nur für 7 Bodenproben. Da die untersuchten Substrate im Testfeld DEMMIN alle glazialen Ursprungs sind und dem gleichen Liefergebiet entstammen, kann angenommen werden, dass die qualitative Zusammensetzung der Tonminerale, wie sie sich in diesen Analyseergebnissen darstellt, für alle Bodenproben des Testfeldes repräsentativ ist. Sie spiegelt auch die übliche quartäre Zusammensetzung in Mecklenburg-Vorpommern wider (Hammer, 2003a).

In Abb. 7.1.4 sind die Ergebnisse der quantitativen Abschätzung der mineralogischen Zusammensetzung aller Proben der *Bodenserie Buchholz* unter Vernachlässigung des Gehaltes an organischem Material graphisch dargestellt (vgl. Anhang A 6). Lehmige bis schluffige Sande (SI3, Su3, SI4) sind im Vergleich zu sandigen bis tonigen Lehmen (Ls3, Ls4, Lt2, Lts) erwartungsgemäß durch etwas höhere Quarz- und Feldspatgehalte und geringere Tonmineralanteile gekennzeichnet. Im Mittel summieren sich die Anteile pro Probe zu ca. 96%. Die Differenz im berechneten Mineralbestand zu 100% resultiert aus mehreren Faktoren. Dazu zählen Abweichungen des idealisierten Chemismus zum tatsächlichen, realen Chemismus, nicht berücksichtigte Komponenten (z.B. Phosphat, Titan, organ. Kohlenstoff) und Ungenauigkeiten in der chemischen Analytik sowie das Vorhandensein röntgenamorpher Phasen (z.B. Eisenoxide), die phasenanalytisch nicht diagnostiziert werden können (G. Böttcher, LUNG, mündl. Mitteilung, 2008).

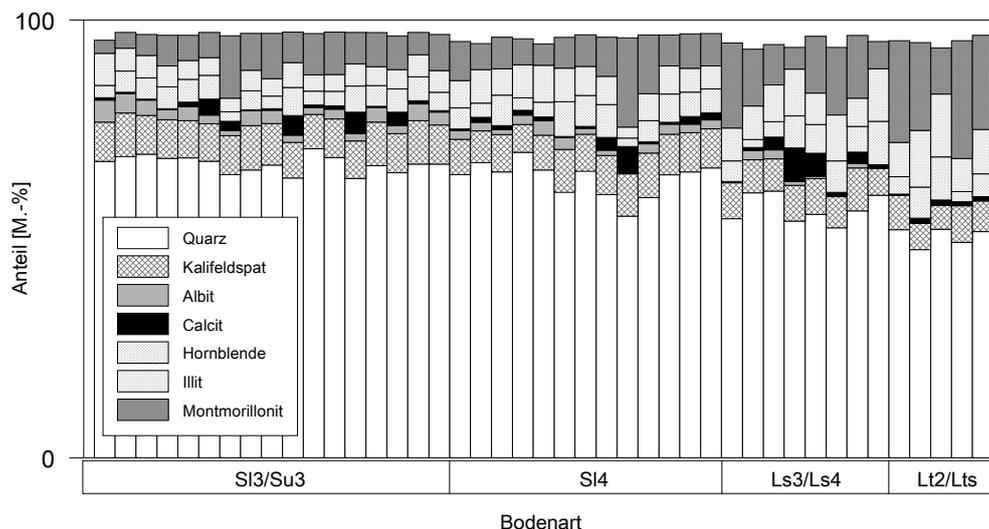


Abb. 7.1.4: Mineralogische Zusammensetzung der *Bodenserie Buchholz* im Feinboden (Berechnung der Mineralanteile: G. Böttcher, LUNG, schriftl. Mitteilung, 2008). Bodenarten angegeben nach KA4 (AG Boden, 1994).

Die berechneten Tonmineralgesamtgehalte schwanken zwischen 8,8% für schluffige Sande (Su3) und 34,4% für tonige Lehme (Lts). In Abb. 7.1.5a ist die berechnete Summe der Tonmineralgehalte aus der RDA gegen den Anteil der Tonfraktion der Korngrößenanalyse aufgetragen. Es besteht ein positiver linearer Zusammenhang, wobei die Schwankungsbreite mit Zunahme der Tonfraktion steigt. Für Proben mit 25% bis 30% Tonfraktionsgehalt liegt der Tonmineralanteil in der Regel zwischen 30%

und 35%. Andererseits beträgt der berechnete Tonmineralanteil einer Probe mit über 30% Tonfraktionsgehalt nur 25%. Proben mit 10% bis 15% Tonfraktionsgehalt weisen einen Tonmineralanteil zwischen 10% bis 23% auf. Jedoch treten auch Proben mit 20% bis 23% Tonfraktionsgehalt auf, deren Tonmineralanteil zwischen 16% und 18% liegt. Aus der Kenntnis der Tonfraktion kann daher nicht unmittelbar auf den Tonmineralanteil geschlossen werden. Sie gestattet vielmehr eine erste solide Schätzung mit einem mittleren Fehler (RMSE) von ca. 3% (Tab. 7.1.2). Zu ähnlichen Ergebnissen kommen Hammer (2003b) bei Untersuchungen zur Verteilung und dem Anteil von Tonmineralen in Sedimenten der Deponie Ihlenberg in Mecklenburg-Vorpommern.

Da aufgrund des hohen Kosten- und Zeitaufwandes keine Vergleichsanalysen durchgeführt werden konnten, lässt sich die Genauigkeit der Mineralquantifizierung nur abschätzen. Ergebnisse eines Forschungsprojektes, bei dem verschiedene Methoden zur Mineralquantifizierung, u. a. mittels Röntgendiffraktometrie, verglichen wurden, zeigen, dass der absolute Fehler mit ca. 2% und der relative Fehler mit ca. 15% in Abhängigkeit vom Phasenanteil angegeben werden muss (G. Böttcher, LUNG, mündl. Mitteilung, 2008, vgl. dazu Hammer, 2003a). Da alle Substrate glazigenen Ursprungs mit gleichem Liefergebiet sind, lassen sich Abweichungen aber weniger auf unterschiedliche Mineralchemismen als vielmehr auf die mengenmäßige Verteilung zurückführen.

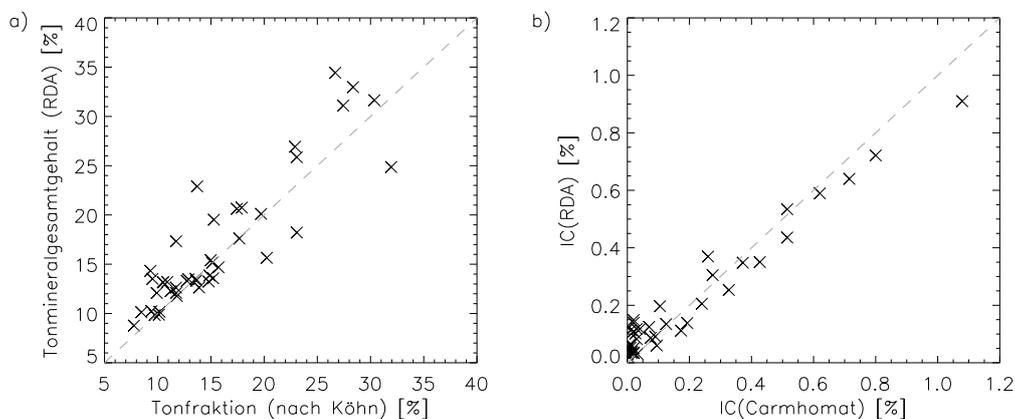


Abb. 7.1.5: Zusammenhang zwischen der physikalischen Tonfraktion (Korngrößenanalyse nach Köhn, 1928) und dem Tonmineralgesamtgehalt (RDA) (a) sowie zwischen dem Calcitgehalt (RDA), angegeben in Carbonat-Kohlenstoff (IC), und dem mittels Phosphorsäurezersetzung in einer Gasanalysen-Messanlage bestimmten IC-Gehalt (Carmhomat) (b).

Ein sehr guter Zusammenhang kann zwischen den mittels Gasanalysen-Messanlage vom Typ Carmhomat 12D ermittelten Konzentrationen an IC und der röntgendiffraktometrisch ermittelten Konzentrationen an Calcit festgestellt werden (Abb. 7.1.5b). Eine noch engere Beziehung besteht für den röntgenfluoreszenzanalytisch bestimmten Gehalt an CaO und dem Calcitgehalt (Tab. 7.1.2).

Tab. 7.1.2: Zusammenhang zwischen den auf Basis der RDA bestimmten Mineralgehalten und den Messwerten anderer Analyseverfahren.

Chemisch-physikalische Komponente (Verfahren), x	Mineralgehalt (RDA), y	Lineare Abhängigkeit	R ²	RMSE [%]
% Tonfraktion (KA)	% Summe Tonminerale	$y = 0,954 \cdot x + 1,931$	0,80	2,98
% SiO ₂ (RFA)	% Quarz	$y = 1,419 \cdot x - 50,563$	0,95	1,46
% Al ₂ O ₃ (RFA)	% Summe Tonmineral	$y = 5,007 \cdot x - 15,239$	0,66	3,87
% Fe ₂ O ₃ (RFA)	% Summe Tonmineral	$y = 9,567 \cdot x - 5,584$	0,72	3,53
% CaO (RFA)	% Calcit	$y = 1,554 \cdot x - 0,862$	0,99	0,20
% IC (Carmhomat)	% Calcit	$y = 6,794 \cdot x + 0,404$	0,96	0,36

KA: Körnungsanalyse; RFA: Röntgenfluoreszenzanalyse; RDA: Röntgendiffraktometrie; Carmhomat: vgl. Kap. 6.1.2.1

7.2 Visuelle Auswertung der Labor-, Feld- und Bildspektren

7.2.1 Charakteristik der Laborspektren hinsichtlich der Tonmineralogie

Die Bodenlaborspektren des Testfeldes DEMMIN sind gekennzeichnet durch ausgeprägte Absorptionsbanden nahe $1,4\mu\text{m}$ und $1,9\mu\text{m}$ sowie eine symmetrische Absorptionsbande nahe $2,2\mu\text{m}$. Charakteristisch ist außerdem das Auftreten einer, wenn auch schwach ausgeprägten, Absorption nahe $2,35\mu\text{m}$ (Abb. 7.2.1a-c). Die Intensität der Absorption nahe $2,2\mu\text{m}$ nimmt mit steigendem Tongehalt zu (Abb. 7.2.1c). Die Position des Absorptionsmaximums der $2,2\mu\text{m}$ -Bande schwankt zwischen 2197nm und 2208nm für die getrockneten Proben und weicht für die befeuchteten Laborproben nur geringfügig ab. Das mittlere Absorptionsmaximum befindet sich unabhängig vom Bodenwassergehalt bei 2203nm . Nach Ben-Dor et al. (1999) und Clark et al. (1990) lässt das auf das Vorkommen von stark Ca-haltigem Montmorillonit und/oder Illit schließen, wobei letzterer zusätzlich zur $2,2\mu\text{m}$ -Bande schwach ausgeprägte Absorptionsmerkmale nahe $2,34\mu\text{m}$ und $2,35\mu\text{m}$ aufweist. Absorptionsbanden nahe $2,34\mu\text{m}$ bzw. $2,35\mu\text{m}$ können aber auch durch Anteile organischer Bodensubstanz (Elvidge, 1990) oder Carbonat (CO_3^{2-} -Ion) (van der Meer, 1995; Clark et al., 1990) hervorgerufen werden.

Beide Substanzen treten in den untersuchten Bodenproben auf, weshalb Ursache und Wirkung nicht eindeutig identifiziert werden können. Die für Kaolinit typische Doppelabsorptionsbande nahe $2,2\mu\text{m}$ ist in keiner der Spektren sichtbar. In allen Proben ist zudem eine starke Absorption nahe $1,9\mu\text{m}$ zu beobachten, die für Kaolinit untypisch ist. Es kann daher davon ausgegangen werden, dass keine oder nur sehr geringe Mengen Kaolinit in der Tonmineralfraktion vorkommen. Diese Annahmen werden gestützt durch die Ergebnisse der RDA (vgl. Kap. 7.1.2). Entsprechend der röntgendiffraktometrischen Untersuchungen setzt sich die Tonmineralogie vorwiegend aus Illit, Smektit (v.a. Montmorillonit), Übergangsmaterialen sowie Tonmineralen der Chlorit-Gruppe (Al-Mg) und Vermiculit zusammen. Kaolinit tritt nur in sehr geringen Mengen auf. Darüber hinaus offenbart die Auswertung der RFA, dass tonige Böden (Lts, Lt2) im Vergleich zu lehmigen Sanden (Sl3, Sl4, Su3) durch deutlich höhere Aluminium-, Eisen- und Magnesiumgehalte (Al_2O_3 , Fe_2O_3 , MgO) gekennzeichnet sind. Die Korrelationskoeffizienten zwischen dem Tonfraktionsanteil und der Konzentration an Al_2O_3 , Fe_2O_3 und MgO betragen $0,92$, $0,96$ und $0,90$. Die Korrelationskoeffizienten zwischen dem Tonmineralanteil und der Konzentration an Al_2O_3 , Fe_2O_3 und MgO betragen $0,81$, $0,85$ und $0,77$. Dies gibt Grund zur Annahme, dass diese Verbindungen zu großen Teilen dem Tonmineralbestand zuzuschreiben sind⁵⁹.

Neben den genannten Absorptionsbanden kann Ton auch spektrale Aktivität im VNIR durch Verunreinigungen von Eisen in Tonmineralen verursachen. Abb. 7.2.1d zeigt die *continuum removed* Spektren von fünf Bodenproben zwischen 400nm und 1400nm . Alle Spektren weisen Absorptionsbanden nahe 500nm und 650nm auf, die besonders charakteristisch für die humusarmen Bodenproben ausgebildet sind. Sehr schwache Absorptionsbanden sind nahe 900nm und 1100nm zu erkennen. Nach Hunt & Salisbury (1970) sowie Clark et al. (1990) können diese Banden in Verbindung mit Eisenersatz in Tonmineralen stehen. Allerdings wird dieser Bereich des Spektrums stark durch organische Bodensubstanz beeinflusst. Mit Ausnahme der Probe 502 ist mit zunehmendem Gehalt an organischem Kohlenstoff eine Aufweitung der Absorption zwischen 400nm und 800nm zu beobachten (vgl. dazu auch Kap. 7.2.2). Eine schmale Absorptionsbande zwischen 400nm und 500nm , die auch mit Eisen in Verbindung gebracht werden kann (Ben-Dor et al., 1999), ist außerdem nur in Proben mit sehr geringen OC-Anteilen (MP-Nr. 50, 76) zu erkennen. Ein direkter Zusammenhang zwischen dem probenspezifischen Eisengehalt und der Ausprägung der Absorptionsbande konnte nicht unmittelbar festgestellt werden. So ist trotz geringerer Eisen- und Tonkonzentration für Probe 50 eine stärkere Absorption im Vergleich zu Probe 76 zu beobachten. Ähnlich verhält sich Probe 27 im Vergleich zu Probe 28 und 502. Diese beiden Beispiele stehen dabei exemplarisch für die Charakteristik im gesamten Spektraldatensatz.

⁵⁹ Die Angaben beruhen auf den Analysen der *Bodenserie Buchholz*.

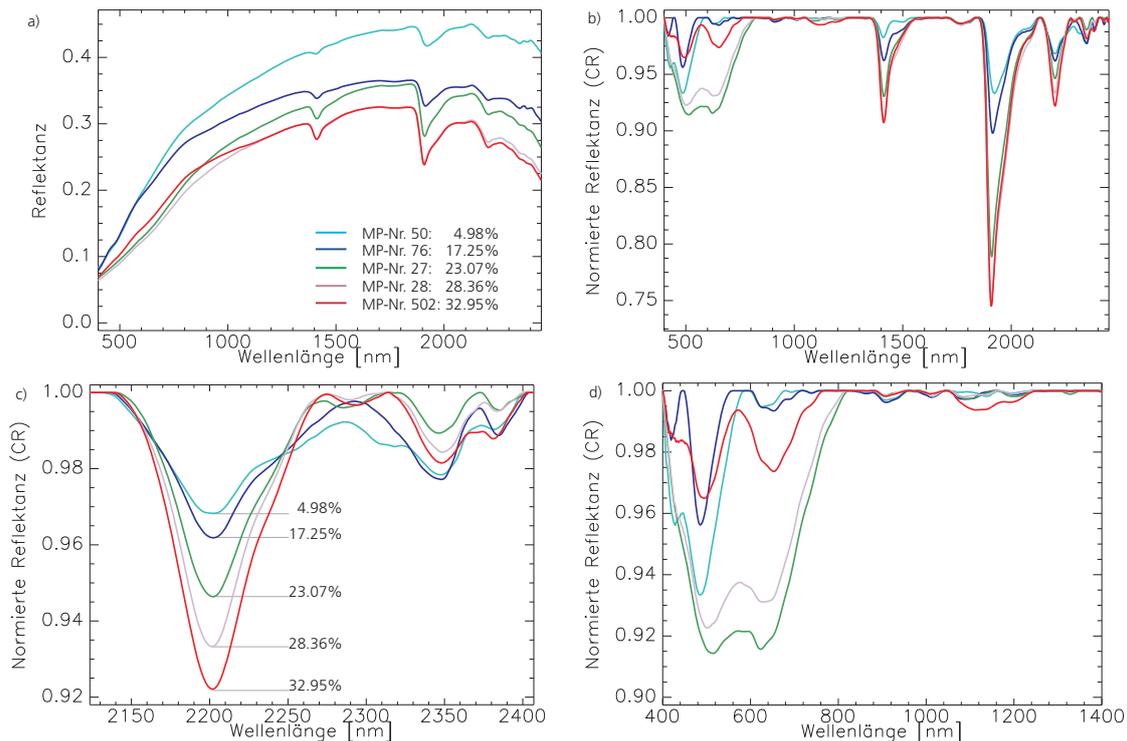


Abb. 7.2.1: Laborspektren ausgewählter Bodenproben (getrocknet bei 105°C) des Testfeldes DEMMIN mit unterschiedlichen Tongehalten. a) Reflektanzen (400-2500nm), b) *continuum removed* Spektren (400-2500nm), c) *continuum removed* Spektren zwischen 2125-2400nm, d) *continuum removed* Spektren zwischen 400-1400nm. Stoffkonzentration der Bodenproben: MP-Nr. 50 (cyan): 4,98% Ton, 0,833% OC, 0,92% Fe₂O₃; MP-Nr. 76 (blau): 17,25% Ton, 1,222% OC, 1,77% Fe₂O₃; MP-Nr. 27 (grün): 23,07% Ton, 1,690% OC, 2,07% Fe₂O₃; MP-Nr. 28 (rosa): 28,36% Ton, 1,686% OC, 2,37% Fe₂O₃; MP-Nr. 502 (rot): 32,95% Ton, 2,119% OC, 2,98% Fe₂O₃.

7.2.2 Charakteristik der Laborspektren hinsichtlich organischer Bodensubstanz

In Abb. 7.2.2 sind 6 Bodenspektren des Testfeldes DEMMIN mit sehr geringen und sehr hohen organischen Kohlenstoffgehalten dargestellt. Deutlich zu erkennen ist die charakteristische Reduktion des Reflexionssignals über den gesamten Spektralbereich mit Zunahme des organischen Kohlenstoffgehaltes bzw. der organischen Bodensubstanz. Besonders deutlich wird dies für Böden mit mehr als 2% organischer Bodensubstanz⁶⁰ und ist in Übereinstimmung mit den Beobachtungen von Baumgardner et al. (1985). Auffällig ist eine Änderung im Verlauf der Spektralkurve zwischen 400nm und 1000nm von einer konkaven hin zu einer konvexen Form. So sind die Spektren der Proben 300 und 53 mit weniger als 1% organischem Kohlenstoff durch einen konkaven Kurvenverlauf gekennzeichnet wohingegen die Proben 21 und 503 mit mehr als 2% organischem Kohlenstoff von einem deutlich konvexen Verlauf gekennzeichnet sind. Keine eindeutige Tendenz lässt sich für die Spektren der Proben 28 und 502 ablesen. In Abb. 7.2.2b sind die zugehörigen *continuum removed* Spektren zwischen 400nm und 1400nm dargestellt. Die Proben 503 und 21 mit 2,21% und 2,22% OC sind charakterisiert durch eine stark aufgeweitete, breite Absorption im VNIR, die Absorptionserscheinungen anderer Bodenbestandteile, wie zum Beispiel Eisen, vollständig maskieren. Trotz der im Vergleich zu Probe 21 und 503 fast adäquaten physikalisch-chemischen Eigenschaften der Probe 502 weist diese einen abweichenden Kurvenverlauf auf (vgl. auch Kap. 7.2.1). Eine Erklärung hierfür konnte nicht gefunden werden. Dieses Verhalten verdeutlicht aber die Komplexität des Materials Boden und die damit verbundenen Schwierigkeiten bei der Interpretation seines Spektralsignals.

⁶⁰ Der Anteil an organischer Bodensubstanz (OM) entspricht näherungsweise dem 1,72-fachen des organischen Kohlenstoffanteils, d.h. die Proben 21, 28, 502 und 503 weisen mehr als 2% OM auf.

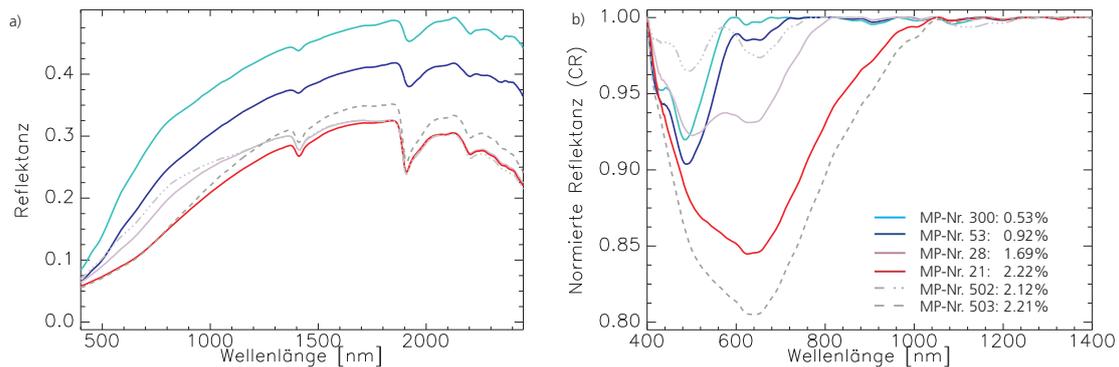


Abb. 7.2.2: Laborspektren ausgewählter Bodenproben (getrocknet bei 105°C) des Testfeldes DEMMIN mit unterschiedlichem organischen Kohlenstoffgehalt. a) Reflektanzen (400-2500nm), b) *continuum removed* Spektren zwischen 400-1400nm. Stoffkonzentration der Bodenproben: MP-Nr. 300 (cyan): 4,80% Ton, 0,525% OC, 0,82% Fe₂O₃; MP-Nr. 53 (blau): 3,65% Ton, 0,919% OC, 0,66% Fe₂O₃; MP-Nr. 28 (rosa): 28,36% Ton, 1,686% OC, 2,37% Fe₂O₃; MP-Nr. 21 (rot): 31,94% Ton, 2,217% OC, 2,51% Fe₂O₃; MP-Nr. 502 (grau, strichpunkt): 32,95% Ton, 2,119% OC, 2,98% Fe₂O₃; MP-Nr. 503 (grau, strich): 28,52% Ton, 2,205% OC, 2,57% Fe₂O₃.

7.2.3 Auswirkungen der Bodenfeuchte auf das Reflexionsvermögen

Um Aufschluss über das Reflexionsverhalten der entnommenen Bodenproben des Testfeldes DEMMIN in Abhängigkeit vom Wassergehalt und dessen Einfluss auf die Schätzung der Bodenparameter mittels VNIRS zu gewinnen, wurden alle Böden im getrockneten Zustand sowie bei einem Wassergehalt (θ) von 7,2M.-%, 10,0M.-% und 13,0M.-% spektrometriert. Für ausgewählte Proben wurde das Reflexionssignal bis zu einem Wassergehalt von 30,5M.-% aufgezeichnet (vgl. Kap. 6.2.2).

Für alle Bodenproben ist die charakteristische Abnahme der Reflexion mit Zunahme des Bodenwassergehaltes im gesamten Wellenlängenbereich von 350nm bis 2500nm zu beobachten. Im Mittel erreicht das Reflexionsvermögen aller Böden mit 7,2M.-% Wasser ca. 67% und beträgt minimal 46%, maximal 77% des Reflexionsvermögens der getrockneten Böden (Abb. 7.2.3, links). Das bodenspezifische Ausmaß dieses Rückgangs wird dabei durch die physikalisch-chemischen Bodeneigenschaften gesteuert, so dass das mittlere Reflexionsvermögen einiger Proben mit θ 7,2M.-% nur 53% des Reflexionsvermögens ihres getrockneten Pendanten beträgt, das anderer Bodenproben aber 94%. Besonders stark verringert sich die Reflexion sehr sandiger, ton- und humusarmer Böden, wohingegen sich die Anreicherung mit Wasser bis 7,2M.-% bei humus- und tonreichen Böden weniger gravierend auf das Rückstrahlvermögen niederschlägt.

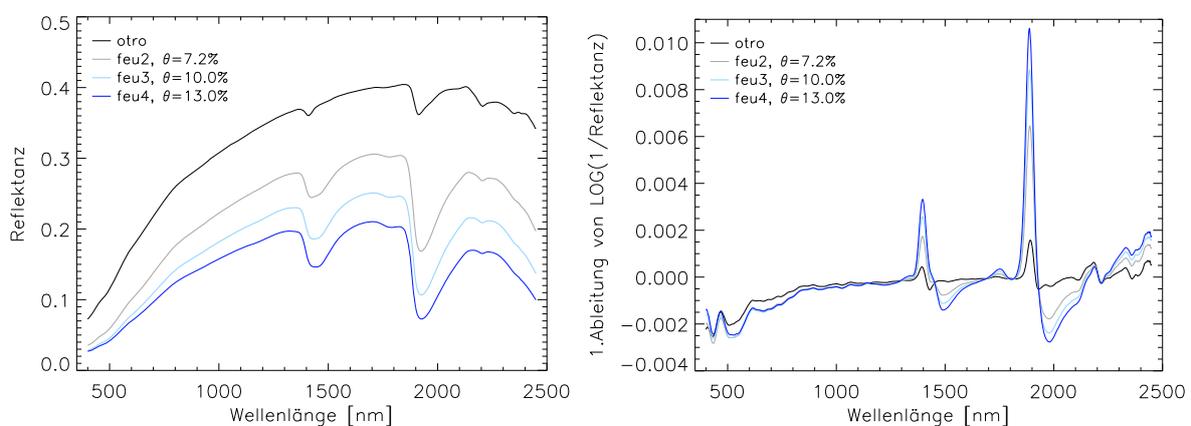


Abb. 7.2.3: Mittelwert aller Reflexionsspektren (links) sowie Mittelwert der ersten Ableitung der Absorptionsspektren (rechts) des Testfeldes DEMMIN (*Bodenserie Demmin*) im getrockneten Zustand und nach gezielter Wiederbefeuchtung bei einem gravimetrischen Wassergehalt (θ) von 7,2M.-%, 10,0M.-% und 13,0M.-%.

Wie Abb. 7.2.4 zeigt, äußert sich die Zunahme des Bodenwassergehaltes in Abhängigkeit von der Wellenlänge und der Höhe des Wassergehaltes unterschiedlich. Im visuellen Bereich kleiner 700nm wird das Reflexionsvermögen durch Wassergehalte größer 10,0M.-% nur noch geringfügig abgeschwächt. Im NIR und SWIR verursachen auch höhere Wassergehalte eine weitere Abnahme des Reflexionsvermögens. Für den verhältnismäßig humusreichen, sandig-lehmigen Boden in Abb. 7.2.4 konnte selbst bei θ 30,5M.-% keine Sättigung des Reflexionssignals im SWIR erreicht werden. Für ton- und humusarme Böden wird aufgrund der verminderten Fähigkeit zur Wasserbindung früher mit einer Sättigung gerechnet. Eigene Messungen hierzu liegen nicht vor. Das beschriebene Verhalten in Abhängigkeit vom Bodenwasseranteil führt zu einer Änderung des Verlaufs der Reflexionskurve. Die positive Tendenz des Kurvenverlaufs ab ca. 1,1 μ m bei getrockneten Böden schlägt mit steigendem Wassergehalt in einen negativen Trend um.

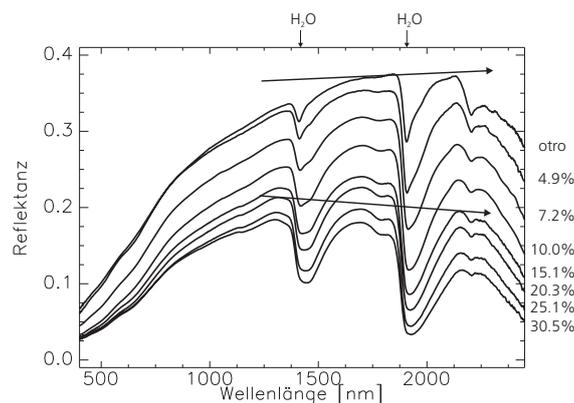


Abb. 7.2.4: Laborspektren eines sandig-tonigen Bodens (Ton=26,68%, OC=1,732%), der in 8 unterschiedlichen Bodenwassergehalten gemessen wurde. Der Bodenwassergehalt [M.-%] der Proben ist auf der rechten Seite des Diagramms angegeben.

Zusätzlich zur Verringerung des Rückstrahlvermögens im gesamten Spektralbereich, nimmt die Absorption nahe 1400nm und nahe 1900nm mit steigenden θ stark zu. Diese steht im Zusammenhang mit Obertönen und Kombinationen von Grundschwingungen freier Wassermoleküle oder oberflächlich an Tonmineralen oder organischer Bodensubstanz angelagerten Wassermolekülen (Adsorptionswasser) (Hunt & Salisbury, 1970; Ben-Dor et al., 1999). Die Absorptionsbanden nehmen sowohl an Tiefe als auch Weite zu, was in den Mittelwertspektren der ersten Ableitung der Absorption gut zu erkennen ist. Weitere wasserbedingte Modifikationen treten nahe 430nm, zwischen 500nm und 600nm, nahe 700nm, 1500nm und 1780nm, zwischen 2000nm und 2150nm, und zwischen 2300nm und 2450nm auf (Abb. 7.2.3, rechts).

Um den Einfluss des Wassergehaltes auf die weniger stark ausgeprägten Absorptionserscheinungen durch Tonminerale nahe 2200nm sowie durch organische Verbindungen im VNIR zu analysieren, wurden die Absorptionstiefen nach dem in Kapitel 6.4.1 beschriebenen Verfahren bestimmt. Im Ergebnis dessen zeigt sich, dass die Höhe der Absorptionstiefe in beiden Fällen als Funktion des Wassergehaltes gesehen werden muss. Die Tiefe der Absorptionsbande nahe 2200nm, die durch OH-Streckschwingungen und Metall-OH-Beugeschwingungen verursacht wird (Clark et al., 1990), sinkt mit Zunahme des Bodenwassergehaltes nichtlinear ab. Gleichzeitig wird die Absorptionsbande aufgeweitet. Besonders stark verringert sich die Absorptionstiefe nach Befeuchtung der getrockneten Proben. Tonarme Böden sind davon im Allgemeinen stärker betroffen als tonreiche Böden. Bei weiterer Wasserzugabe erfolgt eine allmählichere Abnahme (Abb. 7.2.5, links). Die Differenz der Absorptionstiefen zwischen θ von 7,2M.-% und 13,0M.-% ist für tonarme Böden absolut, aber auch in Relation zur Differenz zwischen getrocknetem Zustand und θ von 7,2M.-% deutlich kleiner als für tonreiche Böden. Für Letztere ist die Differenz zwischen den befeuchteten Proben in vielen Fällen ähnlich, teilweise sogar größer als die Differenz zwischen der Absorptionstiefe im getrocknetem Zustand und bei θ von 7,2M.-% (Abb. 7.2.6a).

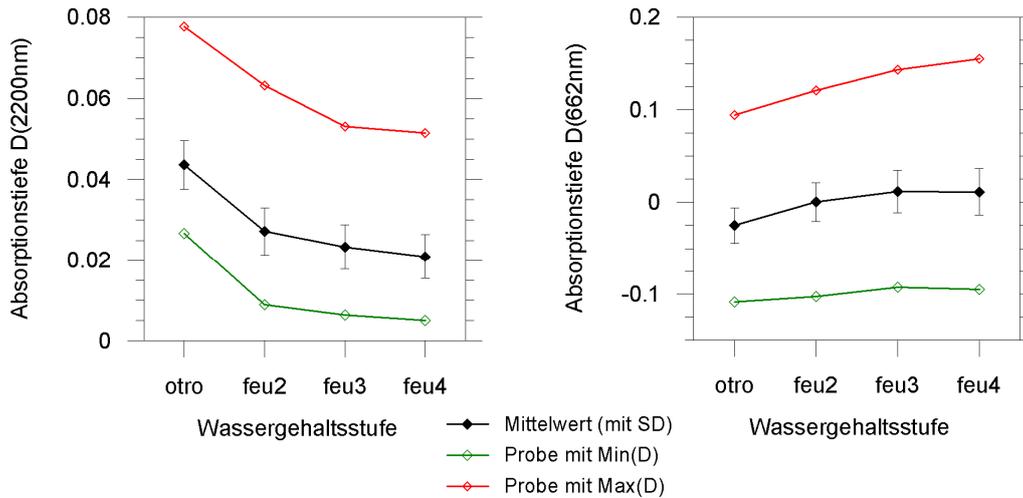


Abb. 7.2.5: Ausprägung der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm und 662nm in Abhängigkeit vom Bodenwassergehalt (otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-% Wasser). Schwarze Symbole symbolisieren den Mittelwert der Absorptionstiefe über alle 135 Böden der *Bodenserie Demmin*. Die vertikalen Fehlerbalken indizieren die Standardabweichung (SD). Grüne Symbole kennzeichnen die Charakteristik der Bodenprobe mit der kleinsten Absorptionstiefe im getrockneten Zustand (ton- bzw. humusarmer Boden). Rote Symbole kennzeichnen die Charakteristik der Bodenprobe mit der größten Absorptionstiefe im getrockneten Zustand (ton- bzw. humusreicher Boden).

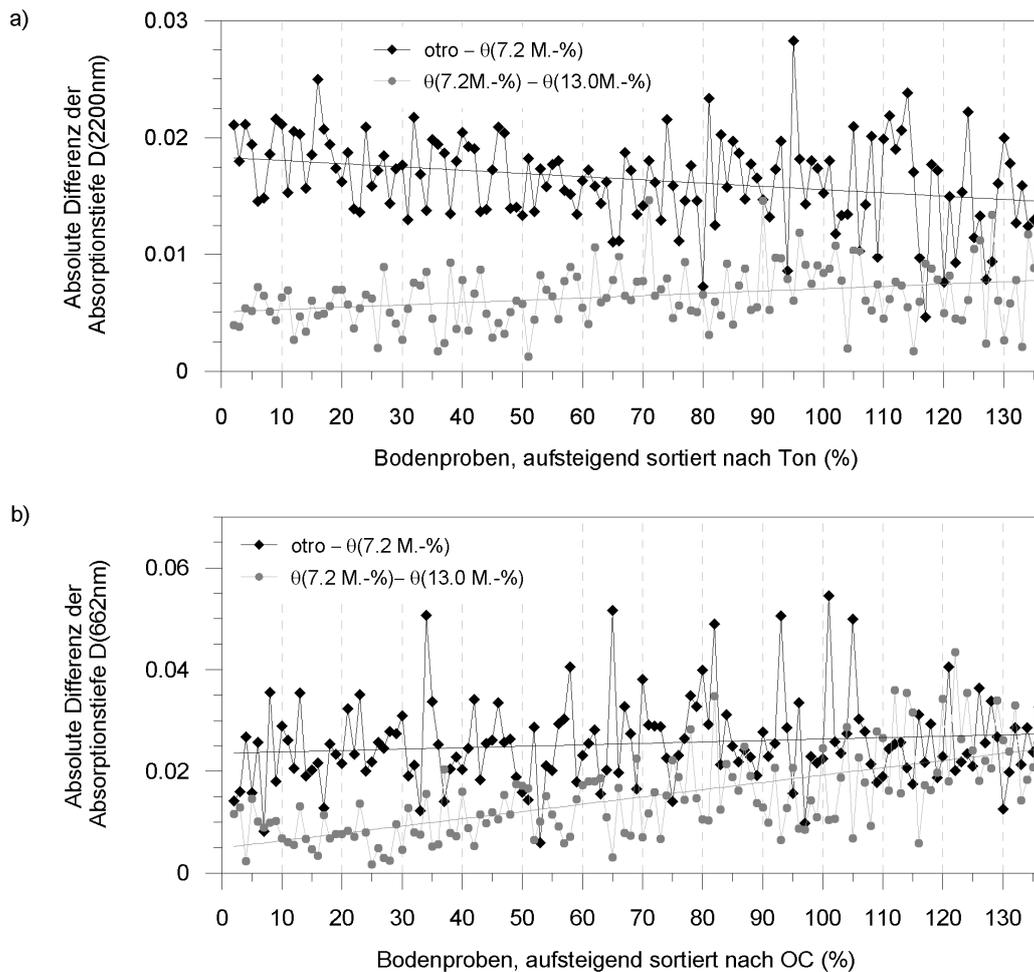


Abb. 7.2.6: Absolute Differenz der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm (a) und 662nm (b) der Bodenproben im getrocknetem Zustand (otro) und bei einem Wassergehalt (θ) von 7,2M.-% sowie bei θ von 7,2M.-% und 13,0M.-%.

Im Gegensatz zur Tonabsorptionsbande ist das Absorptionsmerkmal im VNIR im Zusammenhang mit organischer Bodensubstanz bzw. organischem Kohlenstoff durch eine Zunahme der Absorptionstiefe nahe 662nm gekennzeichnet (Abb. 7.2.5). Der konkave Verlauf des Reflexionssignals humusarmer Böden wird durch Wasser gedämpft, wobei die Reflexion besonders nahe 650nm stark zurückgeht. Ab einem Wassergehalt von 10,0M.-% finden kaum noch Veränderungen in der Ausprägung des Absorptionsmerkmals statt. Bei humusreichen Böden prägt sich der konvexe Kurvenverlauf bis zu Wassergehalten von 13,0M.-% weiter aus und die Tiefe der Absorption steigt. Die Differenz der Absorptionstiefe innerhalb der befeuchteten Proben ist für humusarme Böden geringer als die Differenz aus der Absorptionstiefe im getrockneten Zustand und bei θ von 7,2M.-%. Bei humusreichen Böden ist die Differenz der Absorptionstiefe dieser beiden Vergleichspaare ähnlich (Abb. 7.2.6b). Die Messungen an einem sandig-tonigen Boden mit Wassergehalten bis zu 30,5M.-% deuten darauf hin, dass die Absorptionstiefe nahe 662nm auch über einem θ von 13,0M.-% noch leicht ansteigen kann und erst bei θ von 20,0-25,0M.-% eine Sättigung erreicht.

7.2.4 Spektrale Charakteristik der Referenzpunkte in den HyMap-Bilddaten

Abb. 7.2.7 veranschaulicht die spektrale Charakteristik der Geländemesspunkte in den HyMap-Bilddatensätzen von 2004, 2005 und 2008 in einem NDVI-CAI-Streudiagramm. Der *Normalized Difference Vegetation Index* (NDVI, Tucker, 1979) wurde mit Wellenlängen nahe 680nm und 800nm, der Celluloseabsorptionsindex (*Cellulose Absorption Index*, CAI) mit Wellenlängen nahe 2000nm, 2100nm und 2200nm berechnet. Der NDVI ist trotz seiner Schwächen (Baret & Guyot, 1991; Huete, 1989) als robuster Indikator für grüne Vegetation etabliert. Der CAI gestattet die Unterscheidung von trockener, seneszenten Vegetation und Boden (Nagler et al., 2000). Die Messpunkte im Streudiagramm lassen eine Gruppierung der Spektren nach CAI und NDVI in vier Oberflächentypen zu: reiner Boden (Beispielspektrum B), grüne, vitale Vegetation (Beispielspektrum D), trockene Vegetation (Beispielspektrum C) und Boden mit trockenen Ernterückständen oder aufliegendem Streumaterial (Beispielspektrum A).

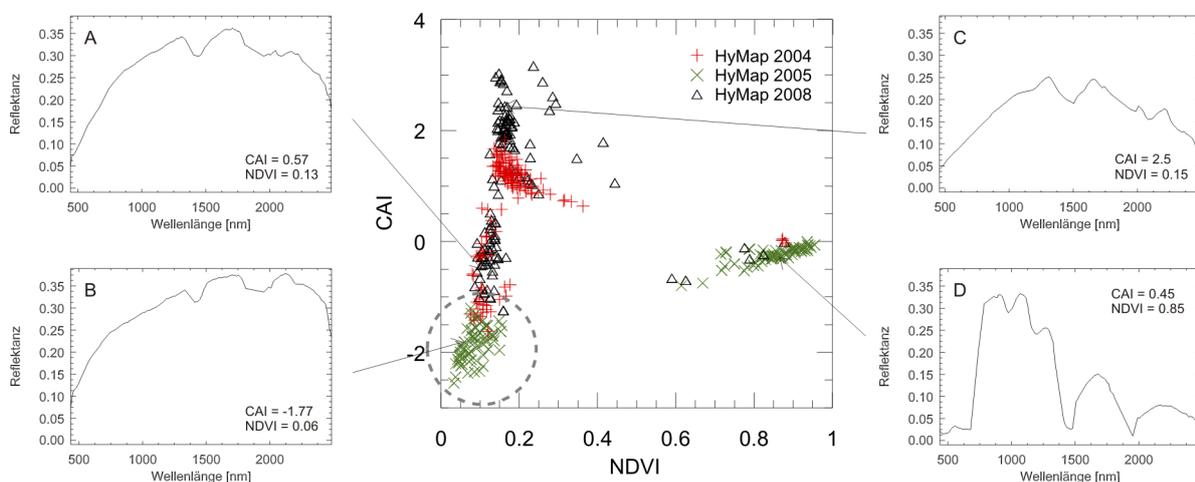


Abb. 7.2.7: NDVI-CAI-Diagramm der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008 aller Messpunkte mit Bodenreferenzdaten (*Bodenserie Demmin*, $n_{\text{ges.}}=135$). Wellenlängen für die Berechnung des NDVI (2004/2005/2008): Rot=679,8/ 679,0/ 677,3nm; NIR=800,7/ 800,3/ 806,3nm. Wellenlängen für die Berechnung des CAI (2004/2005/2008): $\rho(2000\text{nm}) = 2028,0/2028,7/2027,2\text{nm}$; $\rho(2100\text{nm}) = 2100,8/2101,7/2102,0\text{nm}$; $\rho(2200\text{nm}) = 2205,1/2207,4/2209,4\text{nm}$.

Die HyMap-Spektren der Geländemesspunkte des Datensatzes von 2005 weisen in etwa der Hälfte der Fälle die spektrale Charakteristik unbedeckter Böden auf. Sie sind Ackerschlägen zuzuschreiben, die zum Zeitpunkt der Aufnahme der Saatbettbereitung für Mais, Zuckerrüben oder Kartoffeln unterlagen. Alle anderen Spektren der Geländemesspunkte sind durch NDVI-Werte größer 0,6 gekennzeichnet, was auf dichte Vegetationsbestände, wie sie für Winterfeldfrüchte Ende Mai typisch sind, hinweist. In

den HyMap-Datensätzen von 2004 und 2008 befinden sich nur einige wenige Geländemesspunkte auf umgepflügten, vegetationsfreien Ackerflächen. In der überwiegenden Zahl der Fälle treten CAI-Werte größer -1,0 auf, d.h. die Felder sind von abgereiften, trockenen Feldfrüchten oder von Ernterückständen bedeckt. Weitere Messpunkte befinden sich auf Feldern mit vitalen Vegetationsbeständen (vermutlich Mais, Kartoffeln, Rüben oder Zwischenfrüchte).

7.2.5 Vergleich der Laborspektren mit den Feld- und Bildspektren

Um im Vorfeld der quantitativen Schätzung der Bodenparameter einen Eindruck von der Qualität und Übereinstimmung der Spektraldaten der Laborspektroskopie (LS), Feldspektroskopie (FS) und Abbildenden Spektroskopie (IS) zu gewinnen, wurden die Laborspektren der Bodenproben mit den zugehörigen Feldspektren der Messpunkte und den HyMap-Spektren der entsprechenden Bildpixel visuell verglichen. Das vorliegende Kapitel konzentriert sich dabei auf die Feldspektren vom September 2006 sowie die HyMap-Daten aus dem Jahr 2005. Im Falle der HyMap-Daten wurden nur Spektren mit reinem Bodensignal betrachtet.

Abb. 7.2.8 zeigt beispielhaft die Reflektanzen und die erste Ableitung der Reflektanz zweier Messobjekte der LS, FS und IS. Die maximale Reflektanz des Messpunktes 70 beträgt zwischen 25% und 37%, die des Messpunktes 121 zwischen 24% und 34% (Abb. 7.2.8a,b). Das vergleichsweise große Rückstrahlvermögen der Laborspektren ist wahrscheinlich auf die Trocknung der Proben zurückzuführen, da Wasser die Reflexion im gesamten Wellenlängenbereich vermindert (Bowers & Hanks, 1965; vgl. Kap. 7.2.3). Zusätzlich wurden die Rauigkeit und dadurch bedingte Schatteneffekte durch Siebung der Proben im Vorfeld der Spektralmessungen auf ein Minimum reduziert. Die mittlere Reflektanz der Feldspektren ist, wie in beiden Beispielen zu sehen, in der Regel niedriger als die der Labor- und HyMap-Spektren. In wenigen Fällen erreicht die absolute Reflektanz der Feldspektren das Niveau der Bildspektren (nicht dargestellt). Es wird vermutet, dass das Reflexionssignal der FS aufgrund der relativ großen Zenitwinkel zum Zeitpunkt der Geländearbeiten (vgl. Anhang C 1) und der damit verbundenen geringeren Energie pro Fläche niedriger ausfällt. In Abhängigkeit von der Lage des jeweiligen Messfleckes hat möglicherweise auch die Abschattung durch Bodenaggregationen in den Feldspektren einen stärkeren Effekt als in den Bilddaten. Ähnliche Differenzen im absoluten mittleren Reflexionsvermögen von Labor-, Feld- und Bildspektren berichten auch Stevens et al. (2008) und Kemper (2003). Darüber hinaus sind acht Feldspektren, die am letzten Messtag erhoben wurden, von erhöhter Bodenfeuchte gekennzeichnet (nicht dargestellt). Niederschläge am Vortag hatten für eine Anreicherung des Bodens mit Wasser gesorgt, während im gesamten Zeitraum der Geländearbeiten sonst trockene Witterungsbedingungen bestimmend waren.

Trotz der Unterschiede in den absoluten Reflexionswerten ähnelt sich der Kurvenverlauf des Gros der Labor-, Feld- und Bildspektren in weiten Bereichen des Spektrums. In allen Spektren des Messpunktes 70 spiegelt sich der hohe organische Kohlenstoffgehalt (2,479%) durch einen konvexen Verlauf des Signals im VNIR wider. In den Labor-, Feld- und Bildspektren des Messpunktes 121 ist der Verlauf dem geringeren organischen Kohlenstoffgehalt (1,040%) entsprechend konkav. Auch sind die Spektren in beiden Beispielen in Abb. 7.2.8 unabhängig vom Messverfahren durch die charakteristische Tonabsorptionsbande nahe 2200nm gekennzeichnet. Während sich Labor- und Feld-Spektren in deren Ausprägung fast entsprechen, tritt sie in den HyMap-Spektren markant hervor, wie an der ersten Ableitung der Reflektanzen gut zu erkennen ist (Abb. 7.2.8c,d). Weitere Differenzen im Auftreten und in der Ausprägung einzelner Absorptionsbanden werden in der ersten Ableitung der Reflexion zwischen 650nm und 800nm, nahe 900nm, 1100nm, 1400nm, 1900nm und bei 2350nm sichtbar. Merkmale nahe 900nm und 1100nm, die besonders in den Feldspektren aber auch geringfügig in den HyMap-Spektren ausgeprägt sind, stehen wahrscheinlich in Zusammenhang mit weniger tiefgreifenden atmosphärischen Absorptionsbanden von Wasser. Nahe 1400nm und 1900nm wird die Sonneneinstrahlung nahezu vollständig durch CO₂ und H₂O absorbiert, was als Ursache der Abweichungen in den beiderseitig angrenzenden Bereichen in den HyMap-Spektren angesehen werden kann. Sehr schwache Absorptionserscheinungen nahe 2350nm im Zusammenhang mit der Tonmineralogie und/oder der organischen Bodensubstanz spiegeln sich in den Feld- und HyMap-Spektren wahrscheinlich aufgrund der unterschiedlichen Oberflächenbeschaffenheit im Labor und im Gelände geringfügig oder gar nicht wider. Welcher Faktor bzw. welche Faktoren die Diskrepanzen zwischen 650nm und 800nm in den Feldspektren verursachen, konnte nicht eindeutig geklärt werden.

Grüne Vegetation kann bei den Aufnahmen im September weitestgehend ausgeschlossen werden. An einigen Messpunkten wurden während der Feldarbeiten auffällige lokale Verfärbungen festgestellt, die auf die oberflächige Akkumulation von Eisen hindeuten. Eisen ist in diesem Bereich des Spektrums spektral aktiv (vgl. Kap. 4.1.3.1). Möglicherweise steht Eisen daher in Zusammenhang mit diesen schwachen Absorptionserscheinungen.

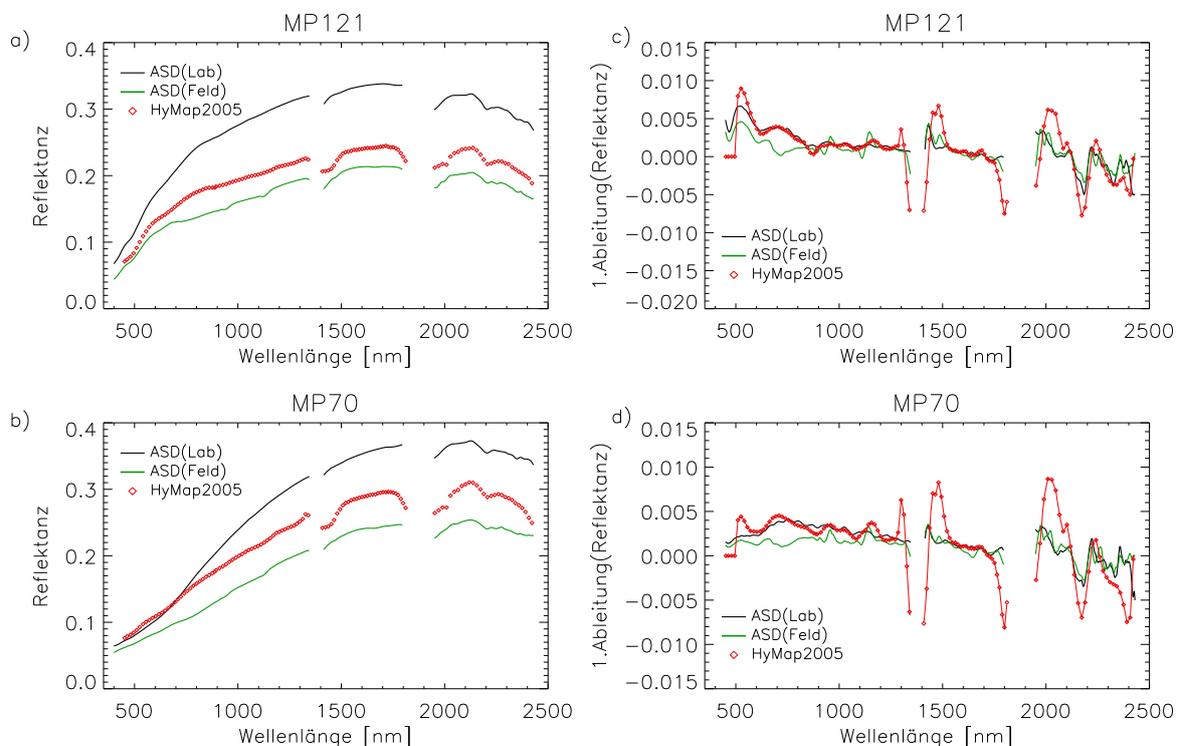


Abb. 7.2.8: Reflektanz (a,b) und 1.Ableitung der Reflektanz (c,d) für zwei ausgewählte Böden, aufgezeichnet durch den HyMap-Sensor am 27.05.2005 sowie mit dem ASD-Spektrometer im Labor und während der Messkampagne im Gelände im September 2006. Wasserabsorptionsbanden sind ausmaskiert.

7.3 Abschätzung methodenbedingter Fehler in den Labor-, Feld- und Bildspektren

7.3.1 Aspekte der Laborspektroskopie

Um Aufschluss über potentielle methodisch bedingte Fehler in den Laborspektren der Bodenproben des Testfeldes DEMMIN zu gewinnen, wurden im Vorfeld der Laborspektroskopie des Gesamtdatensatzes vier Experimente mit einigen ausgewählten Bodenproben durchgeführt. Folgenden Fragen wurde nachgegangen:

- (i) Wie groß ist die Heterogenität des spektralen Signals innerhalb einer Probe einzuschätzen?
- (ii) Welcher Streuung unterliegt das Spektralsignal in den gezielt mit unterschiedlichen Wassergehalten manipulierten Proben?
- (iii) Hat die Trocknung der Bodenproben bei 105°C Einfluss auf die Ausprägung der Absorptionsbanden bei 2200nm und 662nm in wiederbefeuchteten Proben unterschiedlichen Wassergehaltes im Vergleich zur Verwendung luftgetrockneter Proben?
- (iv) Wie hoch ist die Variation des Wassergehaltes in den luftgetrockneten Proben des Testfeldes DEMMIN?

(i) Heterogenität des spektralen Signals innerhalb einer Probe

Jeweils vier Probenschalen von insgesamt fünf, die Charakteristik des Gesamtdatensatzes widerspiegelnden Bodenproben wurden mit getrocknetem Probenmaterial gefüllt und spektrometriert. Für jede der fünf Bodenproben wurden anschließend Mittelwert und Standardabweichung in Abhängigkeit von der Wellenlänge bestimmt. Die gemessenen Spektren der zufällig gewählten Probenuntermengen weisen eine mittlere bzw. maximale Standardabweichung von 0,006 bzw. 0,02 für den gesamten Wellenlängenbereich von 350-2500nm auf. Schließt man die Wellenlängen im äußersten SWIR von der Betrachtung aus (350-2450nm), sinkt die maximale Standardabweichung auf 0,014. Diese erhöhte Streuung ab 2450nm ist auf das absinkende Signal-Rausch-Verhältnis des verwendeten ASD-Spektrometers in diesem Wellenlängenbereich zurückzuführen (ASD, 1999). Geht man von Reflexionswerten zwischen 0 und 1 aus, kann die mittlere Abweichung durch die Heterogenität innerhalb einer Probe auf weniger als 1% Reflexion beziffert werden. In Relation zum probenspezifischen maximalen Rückstrahlvermögen bedingt die Probenheterogenität eine mittlere Abweichung von 1,34%. Im Allgemeinen ist eine höhere Streuung im SWIR zu beobachten. So beträgt die mittlere Abweichung bei 2100nm 0,01. Bezogen auf das wellenlängenspezifische mittlere Rückstrahlvermögen entspricht das 2,7%. Die Streuung der Absorptionstiefe für Ton nahe 2200nm beläuft sich im Mittel auf 0,0014 mit einem Maximum von 0,0019, die der Absorptionstiefe von organischem Kohlenstoff nahe 662nm auf 0,0011 bzw. 0,002. Bezogen auf die mittleren Absorptionstiefen der spektrometrierten Proben beträgt der relative probeninhärente Fehler für beide Absorptionsbanden ca. 2,8%.

(ii) Fehler bei der gezielten Manipulation von Proben mit unterschiedlichen Bodenwassergehalten

Die Fehlerabschätzung bei der gezielten Befeuchtung der Böden erfolgte mit zehn Bodenproben verschiedener Bodenarten. Für fünf von diesen Proben wurden jeweils drei Probenschalen in drei Bodenwassergehaltsstufen, d.h. insgesamt 9 Probenschalen pro Probe, spektrometriert. Für die restlichen fünf Proben wurde das Spektralsignal für eine Bodenwassergehaltsstufe dreifach aufgezeichnet. Für jede Messreihe, d.h. immer drei Probenschalen, wurden anschließend die Mittelwertspektren und Standardabweichung in Abhängigkeit von der Wellenlänge ermittelt.

Durch die gezielte Erzeugung von Proben mit unterschiedlichen Bodenwassergehalten streut das Spektralsignal einer Probe im Wellenlängenbereich zwischen 350-2450nm im Mittel um 0,005 und maximal um 0,015. Die relative Abweichung bezogen auf Reflexionswerte zwischen 0 und 1 liegt demnach im Bereich der Variabilität durch die Probenheterogenität mit kleiner 1%. Im Verhältnis zum probenspezifischen maximalen Reflexionsvermögen beträgt die mittlere Abweichung durch gezielte Manipulation der Wassergehalte 2,15%. Diese, verglichen mit der Probenheterogenität, fast doppelt so hohe Abweichung lässt sich auf das generell geringere Rückstrahlvermögen feuchter Proben zurückführen. Im Allgemeinen nimmt die Variabilität vom VNIR ins SWIR zu und erreicht die größte Streuung bei nahe 2100nm bzw. nahe 2400nm. Bei einigen Spektren liegt sie bei nahe 900nm bzw. nahe 1700nm (Abb. 7.3.1). Eine Beziehung zwischen dem Anteil an Bodenwasser und der Höhe des Fehlers konnte nicht festgestellt werden. Auch ein Zusammenhang zwischen den physikalisch-chemischen Eigenschaften des Bodens und der Höhe des Fehlers war nicht zu erkennen.

Der mittlere Standardfehler der Absorptionstiefe nahe 2200nm bzw. 662nm beträgt 0,0018 bzw. 0,0013, der maximale 0,0045 bzw. 0,0038. Bezogen auf die mittleren Absorptionstiefen der Proben ergibt sich ein relativer Fehler für die Absorptionstiefe der Tonbande von 6,1% (Median: 3,7%) und für die Absorptionstiefe von organischem Kohlenstoff von 6,2% (Median: 3,6%). Eine auffällig hohe Variation der Absorptionstiefen ist bei Proben mit sehr geringen Ton- und organischen Kohlenstoffgehalten, aber sehr hohen Sandanteilen festzustellen. Hierdurch wird die deutliche Verschiebung des Mittelwertes verursacht. Für den Großteil der Proben kann angenommen werden, dass die Variabilität der Absorptionstiefe durch gezielte Manipulation mit unterschiedlichen Wassergehalten im Schnitt jedoch nur 1% über der probenheterogenitätsbedingten Abweichung der Absorptionstiefe liegt. Ein Zusammenhang zwischen Bodenwassergehalt und Höhe des Fehlers ist nicht ersichtlich.

(iii) Einfluss der Trocknung bei 105°C auf einzelne Absorptionsbanden

Ziel dieses Experimentaufbaus war eine Untersuchung der Absorptionstiefen bei 2200nm und 662nm in befeuchteten Proben in Abhängigkeit von der Probenaufbereitung. Insbesondere sollte der Frage

nachgegangen werden, ob eine irreversible Zerstörung der Gitterstruktur der Tonminerale und damit eine Veränderung der Quelleigenschaften für die Proben des Testfeldes DEMMIN ausgeschlossen werden kann.

Von 15 luftgetrockneten Proben wurde die Hälfte der Proben abgetrennt und bei 105°C im Ofen getrocknet. Jedes Probenpaar wurde im Anschluss auf einen einheitlichen Bodenwassergehalt befeuchtet und spektrometriert. Die mittlere absolute Differenz der Absorptionstiefe bei 2200nm zwischen befeuchteter getrockneter Probe und befeuchteter luftgetrockneter Probe beziffert sich auf 0,002. Bezogen auf die mittlere Absorptionstiefe der jeweiligen Probe entspricht das einem relativen Fehler von 4,9%. Der Median des relativen Fehlers liegt etwas niedriger bei 3,7%. Die Abweichung liegt somit im Bereich des Fehlers durch gezielte Manipulation der Proben mit unterschiedlichen Wassergehalten. Die Absorptionstiefe bei 662nm zur Parametrisierung des organischen Kohlenstoffanteils differiert im Mittel um 0,007, d.h. einem mittleren relativen Fehler von 10,4% bei einem Medianwert von 11,8%. Im Gegensatz zur Absorption bei 2200nm, divergieren die Absorptionstiefen in Abhängigkeit der Probenaufbereitung bei 662nm unerwartet stark. Wie die Untersuchungen deutlich machen, geht eine Ofentrocknung vor der Befeuchtung im Vergleich zur Verwendung luftgetrockneter Proben mit einer Verringerung der Absorptionstiefe bei 662nm einher. Dabei verringern sich positive als auch negative Werte der Absorptionstiefe in etwa gleichem Maße, d.h. die Konvexität der *continuum removed* Spektren sinkt, während die Konkavität etwas steigt (Abb. 6.4.1). Da sich die Streuung innerhalb der ofen- bzw. luftgetrockneten Proben nur geringfügig ändert, kann davon ausgegangen werden, dass dieses Verhalten keinen Einfluss auf die quantitativen Analysen der Laborspektroskopie hat.

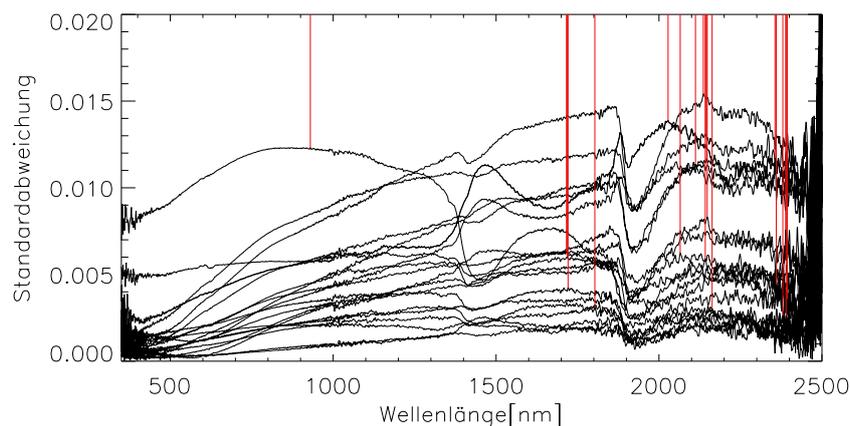


Abb. 7.3.1: Standardabweichung der Spektren befeuchteter Proben (jeweils drei pro Wassergehalt) als Funktion der Wellenlänge. Die Position der Maxima der einzelnen Proben für λ [400nm, 2400nm] ist durch rote vertikale Balken gekennzeichnet.

(iv) Unterschiede in den Wassergehalten luftgetrockneter Proben

25 luftgetrocknete Proben mit Tongehalten zwischen 3,65% und 32,95% der Bodenarten Ss, Su2, Su3, Sl3, Sl4, Ls3, Ls4, Lts und Lt2 wurden vor und nach der Trocknung bei 105°C über 24h ein- bzw. ausgewogen. Die Analysen ergaben, dass die gravimetrischen Wassergehalte luftgetrockneter Proben zwischen 0,71% und 7,08% schwanken und ein exponentieller Zusammenhang zwischen dem Gehalt an Ton und dem Bodenwassergehalt besteht ($R^2=0,96$).

7.3.2 Aspekte der Feldspektroskopie

Während die spektrometrische Datenaufzeichnung im Labor unter kontrollierten Bedingungen stattfindet, ist die Zahl der variablen Einflussfaktoren bei Reflexionsmessungen im Feld ungleich höher. Dies erfordert die Beachtung verschiedener Regeln (Anderson, 2002; Salisbury, 1998), welche durch die in Kapitel 6.2.3 beschriebene Vorgehensweise berücksichtigt wurden. Trotz Beschränkung



Abb. 7.3.2: Oberflächenbeschaffenheit verschiedener Messpunkte bei den Geländearbeiten im Testfeld DEMMIN. Zum Größenvergleich der Aggregate dient ein Edding (Länge ca. 14cm) sowie ein Zollstock (Länge ca. 24cm).

der Feldarbeiten im September auf $\pm 1-2h$ um den Sonnenhöchststand liegen die Zenitwinkel jahreszeitlich bedingt zwischen 55° und 65° (Anhang C 1). Aufgrund der geringen Gesamteinstrahlung und großen Schattenlängen bei dieser Beleuchtungskonstellation muss daher mit einer Reduzierung der Gesamtalbedo und Erhöhung des Signalrauschens in den Feldspektren vom September gerechnet werden. Das Spektralsignal unbedeckter landwirtschaftlicher Nutzflächen unterliegt zudem durch Bodenbearbeitung und witterungsbedingten Bodenfeuchteunterschieden einer zeitlichen Variabilität. Ferner wird es durch die bodenspezifischen Eigenschaften (Aggregatbildung) geprägt sowie durch pflanzliche Rückstände, grüne Keimlinge oder oberflächliche Moosbildung. Abb. 7.3.2 illustriert die Beschaffenheit der Bodenoberfläche für unterschiedliche Messpunkte während der Feldarbeiten. Das Bodenspektrum einer Feldmessung kann daher selbst unter idealen Beleuchtungsverhältnissen differieren, auch wenn effektiv keine Änderung der physikalisch-chemischen Eigenschaften des Bodens vorliegt.

Vergleicht man die Feldspektren der *Bodenserie Buchholz* vom Mai und September 2006, sind die Mai-Spektren durch ein generell höheres Rückstrahlvermögen im gesamten Wellenlängenbereich gekennzeichnet, mit abfallender Tendenz vom VNIR zum SWIR (Abb. 7.3.3). Es sind Anzeichen spektraler Absorptionsbanden von Chlorophyll a auffallend, insbesondere eine erhöhte Absorption nahe 660nm. Ein leichter Einbruch der Reflexion zeichnet sich auch bei 490nm ab. Dass in den Feldspektren vom Mai teilweise Signaturen grüner Vegetation zu finden sind, wird auf oberflächliches Moos (vgl. Abb. 7.3.2, Messpunkt vom 05.05.2006) zurückgeführt. Dass spektrale Signaturen grüner Pflanzenbestandteile in einigen Fällen auch an Messpunkten mit „reinen“ Bodenoberflächen vorkommen, wird Nachbarschaftseffekten durch die umgebende Vegetation außerhalb des präparierten Messflecks zugeschrieben. Darüber hinaus tritt im Mai eine verstärkte Absorption zwischen 1450-1500nm bzw. 1950-2100nm

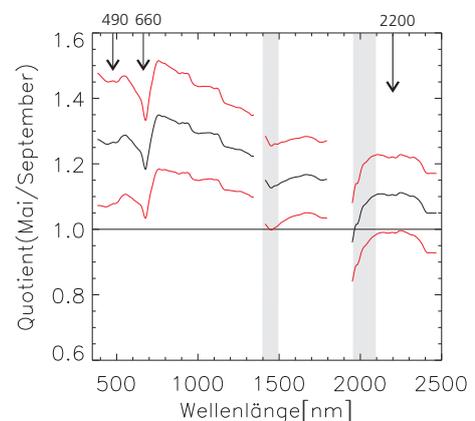


Abb. 7.3.3: Quotient der Spektren vom Mai 2006 und September 2006 für die *Bodenserie Buchholz* als Funktion der Wellenlänge (Mittelwert: schwarze Linie, \pm SD: rote Linie). Wasserabsorptionsbanden sind ausmaskiert.

sowie nahe 2350nm im Vergleich zum September auf (graue Balken). Zwischen 1500nm und 1800nm bzw. 2100nm und 2300nm sind kaum Unterschiede im Verlauf der Kurven zu beobachten. Die leichte Vertiefung des Quotienten bei 2200nm deutet auf eine etwas stärkere Ausprägung der Tonabsorptionsbande in den Spektren vom Mai hin.

7.3.3 Aspekte der Abbildenden Spektroskopie

7.3.3.1 Evaluierung der Atmosphärenkorrektur

Zur Beurteilung der Atmosphärenkorrektur wurden die Feldmessungen einer homogenen Parkplatzfläche von 2004 mit den gemittelten HyMap-Spektren der Referenzfläche aus den Jahren 2004, 2005 und 2008 verglichen. Wie in Abb. 7.3.4 zu sehen, stimmen die Bildspektren in der Form des Spektrums relativ gut überein. Für die HyMap-Spektren von 2005 und 2008 ist im Vergleich zur Feldmessung und den HyMap-Spektren von 2004 ein leichter Abfall der Reflektanz zum SWIR-II hin zu beobachten, wobei die Reflektanz der HyMap-Spektren von 2008 im VNIR am höchsten ist. Mit kleineren Ausnahmen liegen aber alle Messungen im Bereich der Standardabweichung ($\pm\sigma$) der Feldmessung von 2004. Innerhalb der spektralen Variabilität der Bezugsfläche (Parkplatz) sind die Daten daher korrekt zueinander korrigiert.

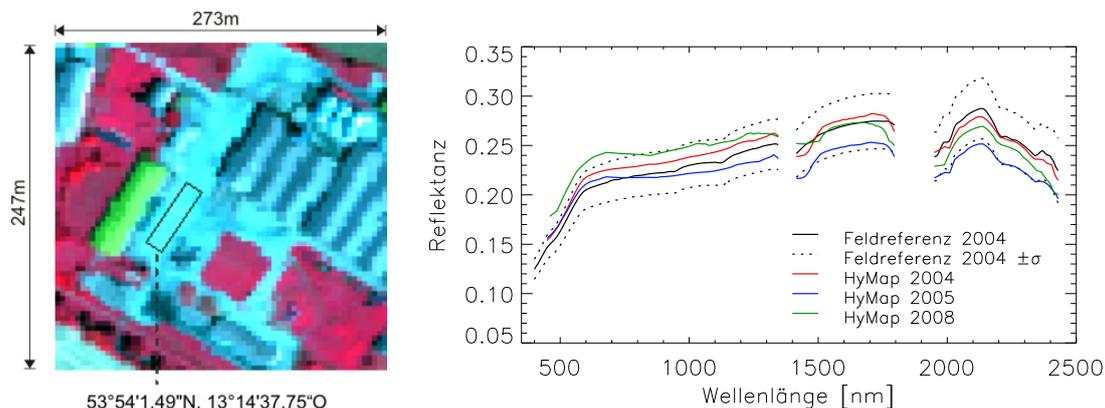


Abb. 7.3.4: Vergleich der ASD-Feldspektren einer Parkfläche im Testfeld (2004) mit den gemittelten HyMap-Bildspektren dieser Fläche von 2004, 2005 und 2008. Weitere Erklärungen siehe Text.

Um die Genauigkeit der Atmosphärenkorrektur relativ zueinander abschätzen zu können, wurden Spektren homogener Flächen (unbedeckter Ackerboden, Flugplatzlandebahn) im Überlappungsbereich der Flugstreifen jeweils eines Jahres miteinander verglichen. In Abb. 7.3.5 ist der Quotient zweier Bildspektren eines identischen Bildpunktes (innerhalb der gegebenen geometrischen Genauigkeit) im Überlappungsbereich der Flugstreifen aufgetragen. Mit Ausnahme der Bodenspektren von 2004 weist der mittlere Faktor von 0,95 die zu erwartende relative Genauigkeit der Atmosphärenkorrektur auf, wenn man leichte BRDF-Effekte bei optimalen Beleuchtungsverhältnissen berücksichtigt. Das erhöhte Rauschen im VIS bis $0,5\mu\text{m}$ sowie im SWIR-II ab $2,4\mu\text{m}$ ist dem verringerten SNR von HyMap in diesen Bereichen geschuldet und somit systembedingt. Artefakte bei $1,4\mu\text{m}$ und zwischen $1,7-1,9\mu\text{m}$ sind auf die Wasserabsorption in diesen Bereichen zurückzuführen. Der geringere Quotient der Bodenspektren von 2004 signalisiert signifikante Unterschiede in der Gesamtalbedo dieses Oberflächentyps und konnte in den Überlappungsbereichen aller Flugstreifen von 2004 beobachtet werden. Vergleichsweise große Zenitwinkel und kleine Azimutwinkel quer zur Flugrichtung zum Zeitpunkt der Aufnahme fördern das Auftreten von BRDF-Effekten in den Bilddaten von 2004 (Tab. 6.3.1). Dies wird bestätigt durch hohe Helligkeitsgradienten in den Oberflächenreflektanzen quer zur Flugrichtung von West nach Ost in den Bildstreifen der Befliegung vom 09.08.2004 (Abb. 7.3.6).

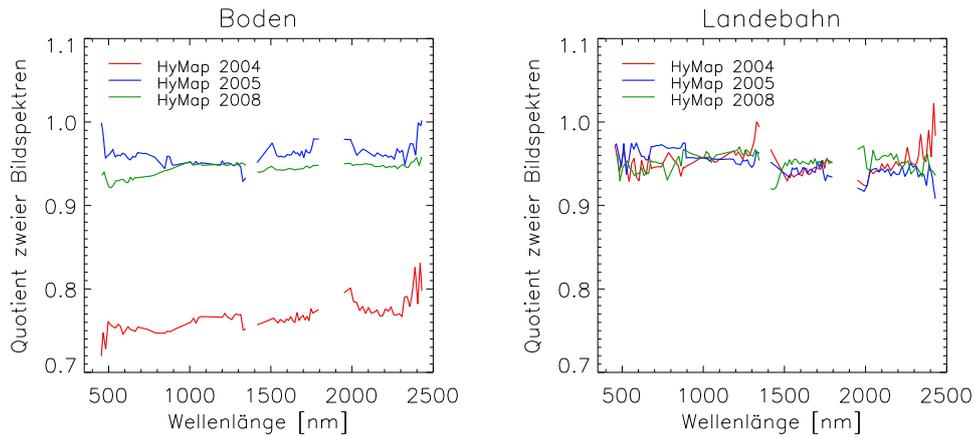


Abb. 7.3.5: Quotient zweier Bildspektren identischer Bildpunkte im Überlappungsbereich der HyMap-Streifen für unbedeckten Boden (links) und Asphalt (Flugplatzlandebahn, rechts).

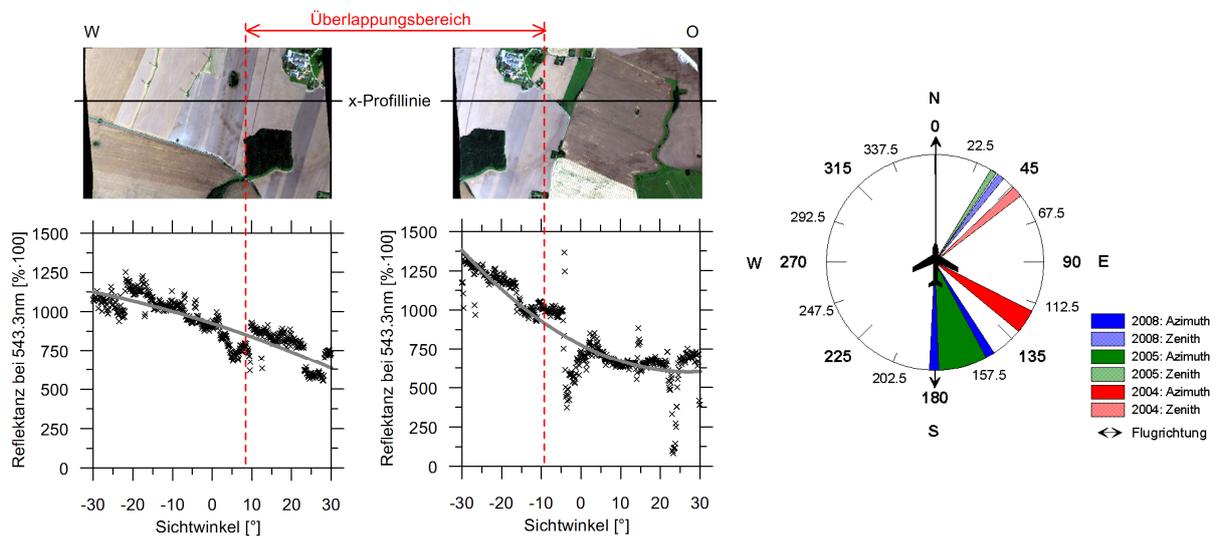


Abb. 7.3.6: Variation der Oberflächenreflektanzen bei 543,3nm in *across-track* Richtung in zwei benachbarten Flugstreifen der Bilddaten vom 09.08.2004 und Vergleich der Aufnahmekonstellation der HyMap-Überflüge von 2004, 2005 und 2008.

7.3.3.2 Evaluierung der geometrischen Korrektur

Der Lagefehler nach der geometrischen Korrektur der Bilddaten wurde sowohl relativ, d.h. Bild zu Bild, als auch absolut, d.h. Bild zu Karte ermittelt. Der relative Lagefehler zwischen den Flugstreifen unterschiedlicher Jahre beträgt max. 2 Pixel in x- und y-Richtung, was bei einer räumlichen Auflösung von 4 Metern $\pm 8m$ bedeutet. Im Überlappungsbereich der Flugstreifen eines Jahres beträgt die Abweichung im Mittel 3 Pixel (vgl. Anhang C 4). Ein Vergleich der HyMap-Daten mit der topographischen Karte 1:25.000 ergab einen absoluten Lagefehler von kleiner 25m. Die erzielte Genauigkeit entspricht in Anbetracht des vergleichsweise schlecht aufgelösten Geländemodells der SRTM-Mission (Faktor 6,25) der erwarteten Präzision und ist für die vorgesehene Anwendung im Rahmen dieser Arbeit als hinreichend gut einzuschätzen.

7.4 Voruntersuchungen zu den Modellkalibrationen

Abhängig von der Spektrentransformation kann die Güte der Parameterschätzungen mit multivariaten statistischen Methoden variieren. In einem Vergleich 30 verschiedener Transformationsverfahren für fünf multivariate Methoden (MLR, PLSR, PCR, RT, CT) kommen Vasques et al. (2008) zur Erkenntnis, dass die ideale Transformation abhängig vom angewendeten Modell ist. Wie die Arbeiten

anderer Autoren (Kooistra et al., 2001; Kooistra et al., 2003a; Reeves et al., 1999; Selige et al., 2006) zeigen, lässt sich keine allgemeingültige Regel formulieren. Die Eignung einer bestimmten Transformationsmethode scheint außerdem abhängig vom Zielparameter sowie dem spezifischen Spektraldatensatz zu sein. Aus der Vielzahl möglicher Transformationsmethoden (z.B. Min-Max-Normalisierung, Standardisierung, LOG-Transformation zu Absorption, Ableitung) wurden für die vorliegende Arbeit deshalb im Vorfeld drei verbreitete Verfahren hinsichtlich ihrer Eignung für die Quantifizierung der Bodenparameter mittels MLR und PLSR an einzelnen Datensätzen getestet (vgl. Kap. 6.2.4). Die Parametrisierung der Absorptionsmerkmale nahe 2200nm und 662nm erfolgte in jedem Fall mit den Reflexionsspektren.

Wurden Reflexions- oder Absorptionsspektren für die MLR verwendet, trat in den Modellen beider Bodenparameter in fast allen Fällen starke Multikollinearität auf. Die Varianzinflationsfaktoren (VIF) überschritten allgemeine Richtwerte um ein 10- bis 1000-faches. Allein die Modelle auf Basis der Feldspektren waren davon nicht betroffen. Durch Transformation der Reflexions- oder Absorptionsspektren in die erste bzw. zweite Ableitung konnte dieses Phänomen behoben oder abgeschwächt werden. Allerdings muss ein Verlust an Vorhersagegenauigkeit in Kauf genommen werden, der bei Verwendung der zweiten Ableitung größer ist als bei Verwendung der ersten Ableitung. Um die Effekte starker Multikollinearität, wie instabile Schätzungen der Regressionskoeffizienten und ungenaue Aussagen zur Schätzung der Regressionskoeffizienten, möglichst gering zu halten und trotzdem akzeptable Genauigkeiten zu erzielen, wurden alle MLR-Modelle auf Basis der ersten Ableitung der Reflexionsspektren berechnet.

Durch die verfahrensbedingte Transformation der X- und y-Variablen zu latenten Variablen wird bei der PLSR eine Korrelation zwischen den erklärenden Variablen vermieden. In einem Vergleich der Fehlergrößen von reflexions-, absorptions- und ableitungsbasierten Modellschätzungen wurde festgestellt, dass die Absorptionsspektren sowohl für Ton als auch für organischen Kohlenstoff im Allgemeinen die besten Resultate liefern bzw. eine zu den anderen Transformationen zumindest gleichwertige Modellschätzung ermöglichen. Abweichend davon traten in den Modellschätzungen auf Basis der in die Absorption transformierten HyMap-Bildspektren in mehreren Fällen höhere Standardfehler auf als auf Basis der ersten Ableitung der Absorptionsspektren. Der Einsatz der zweiten Ableitung erbrachte keine Verbesserung gegenüber der Absorption oder der ersten Ableitung der Absorption. Die PLSR-Modelle mit Labor- und Feldspektren wurden deshalb in der Regel mit den Absorptionsspektren generiert. Die PLSR-Modelle mit den HyMap-Bildspektren beruhen teilweise auf der Absorption, teilweise auf der ersten Ableitung der Absorption. Welche Spektrentransformation der Modellkalibration im Einzelfall zu Grunde liegt, ist in den Tabellen in der Ergebnisdarstellung (Kap. 7.5-7.7) vermerkt.

7.5 Quantitative Laborspektroskopie

Mithilfe der Laborspektroskopie wurden verschiedene Faktoren betrachtet, die Einfluss auf das Reflexionssignal und damit höchstwahrscheinlich auf die Vorhersagegenauigkeit des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes haben. Dazu gehören: der Bodenwassergehalt (Kap. 7.5.1), die spektrale Auflösung (Kap. 7.5.2) und trockene Pflanzenbestandteile (NPV) (Kap. 7.5.4). In Kapitel 7.5.3 wird der Frage nachgegangen, inwiefern sich die physikalische Tonfraktion, die auf einer Klassifikation der Bodenpartikel nach dem Korn-Äquivalentdurchmesser ($<2\mu\text{m}$) beruht, zur Quantifizierung des Tongehaltes eignet, oder ob der Zusammenhang durch den tonmineralogischen Bestandteil des Bodens, d.h. seiner chemischen Zusammensetzung, besser beschrieben werden kann.

Den Analysen in diesem Kapitel liegt mit Ausnahme des Abschnittes 7.5.3 der gesamte Bodendatensatz (*Bodenserie Demmin*) zugrunde. Die Kalibration der Modelle erfolgte mit 87 Bodenproben bzw. -spektren. Die Validierung wurde mit den übrigen 48 Datensätzen durchgeführt. Die deskriptive Statistik der Kalibrations- und Validationsdatensätze ist in Anhang B 1 erfasst. Beide, Kalibrations- und Validationsdatensatz, spiegeln die Charakteristik des Gesamtdatensatzes gut wider (vgl. Tab. 7.1.1), wenngleich die Spannweite des Validationsdatensatzes geringfügig eingeschränkt ist. Da die Ergebnisse der RFA und der RDA nur für die *Bodenserie Buchholz* vorliegen, beruhen die Betrachtungen in Kap. 7.5.3 auf diesen 43 Bodenproben. Der hierfür verwendete Kalibrationsdatensatz setzt sich aus 25, der Validationsdatensatz aus 18 Proben zusammen (Anhang B

1). Validations- und Kalibrationsdatensatz können auch hier als repräsentativ für die gesamte *Bodenserie Buchholz* angesehen werden. Der bei identischem Median des Kalibrations- und Validationsdatensatzes relativ hohe Mittelwert des Validationsdatensatzes deutet darauf hin, dass in eben diesem einige Proben mit vergleichsweise hohen Tongehalten zu verzeichnen sind.

Bis auf Kapitel 7.5.2 wurden die Berechnungen mit der originalen spektralen Auflösung des ASD-Spektrometers vorgenommen.

7.5.1 Modellkalibration und –validation: Fokus Bodenwassergehalt

Wie sich eine Zunahme des Bodenwassergehaltes auf das Spektralsignal der untersuchten Böden auswirkt, wurde in Kapitel 7.2.3 beschrieben. Nachfolgend wird untersucht, inwiefern sich dies in der Genauigkeit der Parameterschätzungen in Abhängigkeit von der eingesetzten Methode niederschlägt.

Für beide Bodenparameter (Ton, OC) wurden mit den in Kapitel 6.4.1 bis 6.4.3 beschriebenen Verfahren (CR, MLR, PLSR) je fünf Kalibrationsmodelle erstellt. Diese basieren auf den spektralen Datensätzen der getrockneten Bodenproben (otro), der gezielt manipulierten Proben mit unterschiedlichen Bodenwassergehalten (7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3), 13,0M.-% (feu4)) und einer zufälligen Zusammenstellung aus allen vier Bodenwassergehaltsstufen (mix). In letzterem Fall wurden von jeder Feuchtestufe Spektren zu gleichen Teilen aufgenommen.

7.5.1.1 Ton

Ergebnisse der Modellkalibration und -validation

Aus der Gegenüberstellung der methodenspezifischen Fehlerkennwerte in Tab. 7.5.1 und Abb. 7.5.1 wird deutlich, dass die genauesten Vorhersagen für den Parameter Ton unabhängig vom Wassergehalt mithilfe der PLSR mit R^2 größer 0,91, SEC kleiner 1,95% und SEP kleiner 2,12% möglich sind. Bei diesen Kalibrationsmodellen treten die geringsten Fehler mit den Datensätzen feu2 (SEC: 1,50%), feu3 (SEC: 1,31%) und feu4 (SEC: 1,42%) auf. Die Validation lässt jedoch keinen klaren Rückschluss über eine gegebenenfalls bessere Vorhersagegüte feuchter Bodenproben zu. Die geringsten Standardvalidationsfehler weisen das otro- bzw. das feu4-Modell (SEP: 1,85% bzw. 1,80%) auf. Die SEP des feu2-, feu3- und mix-Modells sind dagegen größer und liegen bei 2,12%, 2,05% bzw. 2,09%. Generell ist festzustellen, dass die Fehlerabweichungen zwischen den fünf PLSR-Modellen im Unterschied zu den Ergebnissen der MLR und des CR gering sind (Abb. 7.5.1). In Abb. 7.5.2k-o sind die gemessenen gegen die geschätzten Tongehalte der PLSR-Modelle aufgetragen. Die Streuung entlang der 1:1-Geraden ist in Übereinstimmung mit den niedrigen Standardfehlern gering und über den gesamten Datensatz in allen Fällen relativ gleichmäßig verteilt. Ein Messpunkt des Validationsdatensatzes mit 13,5% Tongehalt (MP89) tritt in den Modellen mit befeuchteten Bodenproben mit einem sehr großen positiven Residuum hervor (Abb. 7.5.2l-o). Mit 71% Sandgehalt ist der Tonanteil dieser Probe relativ hoch. Der Großteil der Referenzproben des Testfeldes DEMMIN mit einem vergleichbaren Sandgehalt enthält im Mittel nur 5-6% Ton. Es muss davon ausgegangen werden, dass die vorliegenden Kalibrationsmodelle Böden mit einer derartigen Korngrößenzusammensetzung nur unzureichend erfassen. Der organische Kohlenstoffgehalt kann mit weniger als 1% als Störfaktor ausgeschlossen werden. Davon abgesehen, betragen die RPD-Werte der PLSR-Modelle zwischen 3 und 4. Sie weisen auf die sehr gute Eignung der Modelle zur Schätzung des Tongehaltes aus den Reflexionsspektren hin und können nach Chang et al. (2001) in Gruppe A (exzellent) eingeordnet werden.

Vergleicht man die Fehlergrößen der fünf CR-Modelle mit den MLR-Modellen, zeigt sich, dass mit Ausnahme der Datensätze feu3 und feu2 die Absorptionstiefe nahe 2200nm als Indikator des Tongehaltes weniger gut geeignet ist als die MLR. Mit dem CR wird ein R^2 von maximal 0,83 erreicht. Die getrockneten Proben weisen einen R^2 von 0,63 auf. Für den Datensatz mit variierenden Wassergehalten (mix) können sogar nur 47% der Variabilität in y erklärt werden. Die Standardfehler der Kalibration reichen von 2,94% bis 4,84%. Sie sind damit in einigen Fällen mehr als doppelt so hoch wie die Standardkalibrationsfehler der PLSR und im Mittel ein Drittel höher als die Standardkalibrationsfehler der MLR (SEC: 1,78-3,25%). In der Validation sind die Fehlerdiskrepanzen zwischen CR und MLR bzw. PLSR mit Ausnahme der getrockneten (otro) und gemischten (mix) Datensätze weniger stark ausgeprägt. Für die Parameterschätzung auf Basis der

Proben mit 10,0M.-% Wasser (feu3) ist der Standardvalidationsfehler der CR-Methode sogar geringer als der der MLR (SEP: 3,77%). Tatsächlich ist der überraschend hohe SEP des entsprechenden MLR-Modells aber einem Ausreißer geschuldet (Abb. 7.5.2h, Skalierung!), der die Höhe des Standardfehlers stark beeinflusst (vgl. dazu weiter unten im Text). Auffällig sind die gegenüber den Datensätzen mit konstantem Wassergehalt (feu2, feu3, feu4) sehr hohen Vorhersagegenauigkeiten der CR-Modelle mit getrockneten Proben und der Probenzusammenstellung mit variablen Wassergehalten. Dementsprechend weisen die Streudiagramme in Abb. 7.5.2a und e im Vergleich zu Abb. 7.5.2b bis d eine höhere Streuung entlang der x-Achse auf. Die Fehlergrößen (R^2 , SEC, SEP) der feu2-, feu3- und feu4-Modelle variieren nur geringfügig, wobei eine leichte Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit mit Zunahme des Wassergehaltes zu beobachten ist. Unabhängig davon werden in allen CR-Modellen Tongehalte größer 25% unterschätzt (Abb. 7.5.2a-e). Zudem liegt Heteroskedastizität vor, d.h. die Streuung der Residuen variiert in Abhängigkeit vom Tongehalt. Ein Indiz der mäßigen Schätzqualität sind auch die Standardabweichungen der Vorhersagewerte des Kalibrations- und Validationsdatensatzes. Sie liegen teilweise deutlich unter denen der Referenzwerte (vgl. Anhang B 1). Die RPD-Werte der CR-Modelle betragen zwischen 1,42 und 2,56. Nach Chang et al. (2001) besitzen das feu2-, feu3- und feu4-Modell eine exzellente Vorhersagegenauigkeit (Gruppe A), das otro- und mix-Modell eine moderate Vorhersagefähigkeit (Gruppe B).

Tab. 7.5.1: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie der Bodenproben mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).

Parameter	Ton														
	CR					MLR*					PLSR**				
$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	otro	feu2	feu3	feu4	mix	otro	feu2	feu3	feu4	mix	otro	feu2	feu3	feu4	Mix
UV/Faktoren	1	1	1	1	1	5	6	5	5	4	8	8	6	6	7
$SD_{\text{kal}}^{\dagger}$ [%]	5,37	5,44	5,45	5,28	3,86	5,80	6,18	6,53	6,52	5,47	6,11	6,14	6,17	6,19	6,09
$SD_{\text{val}}^{\dagger}$ [%]	5,71	6,13	5,81	5,44	4,32	6,47	7,91	8,95	7,80	7,17	6,90	7,09	6,39	6,68	7,00
R^2	0,63	0,82	0,83	0,83	0,47	0,82	0,91	0,94	0,92	0,79	0,93	0,95	0,96	0,95	0,91
SEC [%]	4,13	3,16	2,94	2,94	4,84	2,66	2,12	1,78	2,14	3,25	1,82	1,50	1,31	1,42	1,95
SD/SEC	1,53	2,00	2,15	2,15	1,31	2,38	2,99	3,56	2,96	1,95	3,47	4,21	4,70	4,45	3,24
SEP [%]	3,86	2,72	2,71	2,99	4,88	2,41	2,78	3,77	2,69	3,57	1,85	2,12	2,05	1,80	2,09
RPD	1,79	2,55	2,56	2,31	1,42	2,87	2,49	1,83	2,57	1,94	3,73	3,27	3,38	3,84	3,32

[†]Standardabweichung der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **Spektren wurden transformiert in Absorption für PLSR-Modelle.

Ähnlich dem CR sind auch die Standardkalibrationsfehler der MLR-Modelle für die einheitlich feuchten Labordatensätze (feu2, feu3, feu4) geringer als die SEC der getrockneten Proben (otro) und der Proben mit variablen Wassergehalten (mix). Hingegen übersteigen die Standardvalidationsfehler der feuchten Proben den SEP der getrockneten Proben. Der auffallend hohe SEP des feu3-Modells ist, wie bereits erwähnt, durch einen Ausreißer bedingt. Durch Eliminierung dieses Datenwertes sinkt der SEP des feu3-Modells auf 2,13% Ton. Eine Abhängigkeit der Vorhersagegüte von der Höhe des Wassergehaltes besteht nicht. Alle MLR-Modelle sind von einer Zunahme der Residuen mit wachsenden Tongehalten gekennzeichnet (Abb. 7.5.2f-j). In den Validationsdaten der feu2-, feu3- und feu4-Modelle fallen sehr hohe negative Residuen für Proben mit mehr als 25% Ton auf (Abb. 7.5.2g-i). Die Tongehalte werden demnach durch die MLR-Modelle merklich überschätzt. Ähnlich der PLSR, kann die Bodenprobe 89 in den Modellen mit befeuchteten Bodenproben nicht korrekt mit der Kalibrationsmodellen erfasst werden (Abb. 7.5.2g-i). Die RPD-Werte der MLR-Modelle betragen zwischen 1,83 und 2,87. Nach Chang et al. (2001) gehören das otro-, feu2- und feu4-Modell, sowie das feu3-Modell bei Eliminierung des Ausreißerwertes, der Gruppe A (exzellent) an. Das Modell mit variablen Bodenwassergehalten (mix) ist in Gruppe B (moderat) einzustufen.

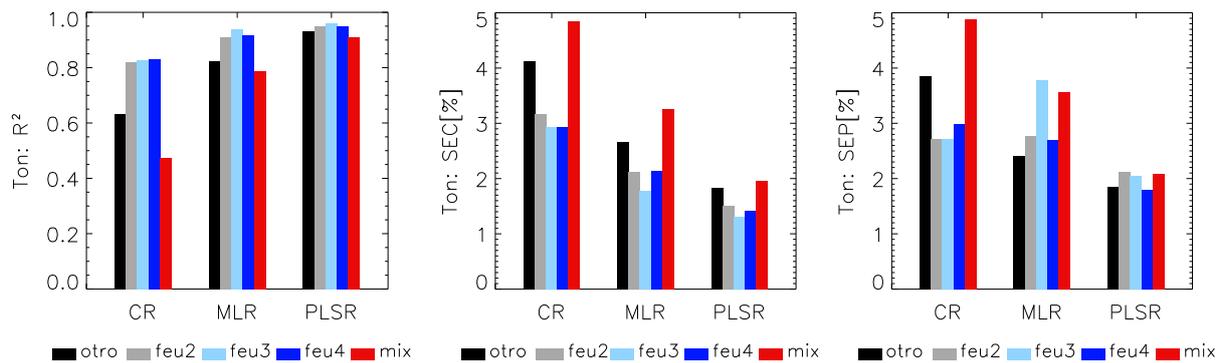


Abb. 7.5.1: Vergleich der Modellgüte (R^2 , SEC, SEP) für die Schätzung des Tongehaltes aus Laborspektren der Bodenproben im getrockneten Zustand (otro), mit Bodenwassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).

Interpretation der Modellparameter

In Abb. 7.5.3 sind die b-Koeffizienten und der *Variable Importance in the Projection* (VIP) der fünf PLSR-Modelle dargestellt. Potenzielle Absorptionsbanden der Tonminerale bzw. mit Eisenverunreinigungen in Tonmineralen in Verbindung stehende Absorptionsbanden sind grau hinterlegt (vgl. Kap. 4.1.3.1). b-Koeffizienten und VIP zeigen im VNIR und SWIR-I einen gleichmäßigen Verlauf, während im SWIR-II einzelne Wellenlängen einer stärkeren Akzentuierung unterliegen. Dabei sind die VIP der feu3- und feu4-Modelle im gesamten Spektralbereich ausgeglichener als die VIP des otro- und feu2-Modells. Es bestehen hohe Übereinstimmungen im Kurvenverlauf der beiden Parameter des otro-Modells und des feu2-Modells einerseits sowie andererseits für die Parameter des feu3- und feu4-Modells. Die b-Koeffizienten und VIP des mix-Modells weisen nur geringe Ähnlichkeiten mit den anderen Modellen auf.

Anhand der VIP und b-Koeffizienten lassen sich spektrale Bereiche identifizieren, die für die Schätzung des Tongehaltes maßgeblich sind. Dies sind Wellenlängen, in denen beide Indikatoren große Zahlwerte aufweisen. Für alle Modelle und damit unabhängig vom Wassergehalt betrifft dies Wellenlängen zwischen 500nm und 600nm, 700nm und 1000nm, 2150nm und 2250nm sowie nahe 2450nm. Im VNIR sind Absorptionserscheinungen durch Tonminerale auf Eisenverunreinigungen beschränkt. Beispielsweise berichten Hunt & Salisbury (1970) von Absorptionsbanden nahe 500nm und 970nm für Montmorillonit, Clark et al. (1990) von Absorptionsbanden nahe 650nm, 700nm und 900nm für Illit. Diese können Ursache der modellübergreifenden hohen Gewichtung von Wellenlängen zwischen 500nm und 600nm bzw. 700nm und 1000nm sein. Allerdings bestimmen weitere Chromophore ebenfalls das Spektralsignal im VNIR. Dazu gehören organische Bodensubstanz und Eisenoxide oder -hydroxide in der Bodenmatrix. Beide Substanzen sind mit dem Tongehalt der Bodenproben gut (R_{OC} : 0,73) bzw. sehr gut (R_{Fe} : 0,93) korreliert, weshalb ein indirekter Einfluss auf die PLSR-Modelle nicht ausgeschlossen werden kann. Die hohen b-Koeffizienten und VIP-Werte um 2200nm im SWIR-II sind der Tonabsorption durch Kombination von OH-Streckschwingungen und Metall-OH-Beugeschwingungen zuzuschreiben (Clark et al., 1990). Besonders starke Gewichtung erlangen diese Wellenlängen in den getrockneten Proben. Die hohen Zahlwerte der b-Koeffizienten und VIP im äußersten SWIR-II nahe 2450nm stehen möglicherweise im Zusammenhang mit Absorptionsmerkmalen von Illit. Da diese Absorptionserscheinung in der Regel nur sehr schwach ausgeprägt ist (Clark et al., 1990), ist ein statistischer Effekt durch erhöhtes Signalrauschen in diesem Bereich (ASD, 1999) als Ursache aber nicht auszuschließen.

In allen anderen Bereichen des Spektrums variiert die Gewichtung der Wellenlängen modellspezifisch. In den getrockneten Proben fallen zwei charakteristische Spitzen im SWIR-II nahe 2300nm und 2350nm auf. Clark et al. (1990) berichten für diese Wellenlängen Absorptionsbanden von Hectorit und Illit. Die Röntgendiffraktometrie der Bodenproben des Testfeldes DEMMIN, in deren Folge Illit neben Montmorillonit und Übergangsmaterialen als dominierendes Tonmineral identifiziert wurde (Kap. 7.1.2), deutet darauf hin, dass Absorption durch Illit diese charakteristischen Spektralmerkmale hervorruft. Mit Zunahme des Wassergehaltes sinkt die Bedeutung dieser Wellenlängen für die

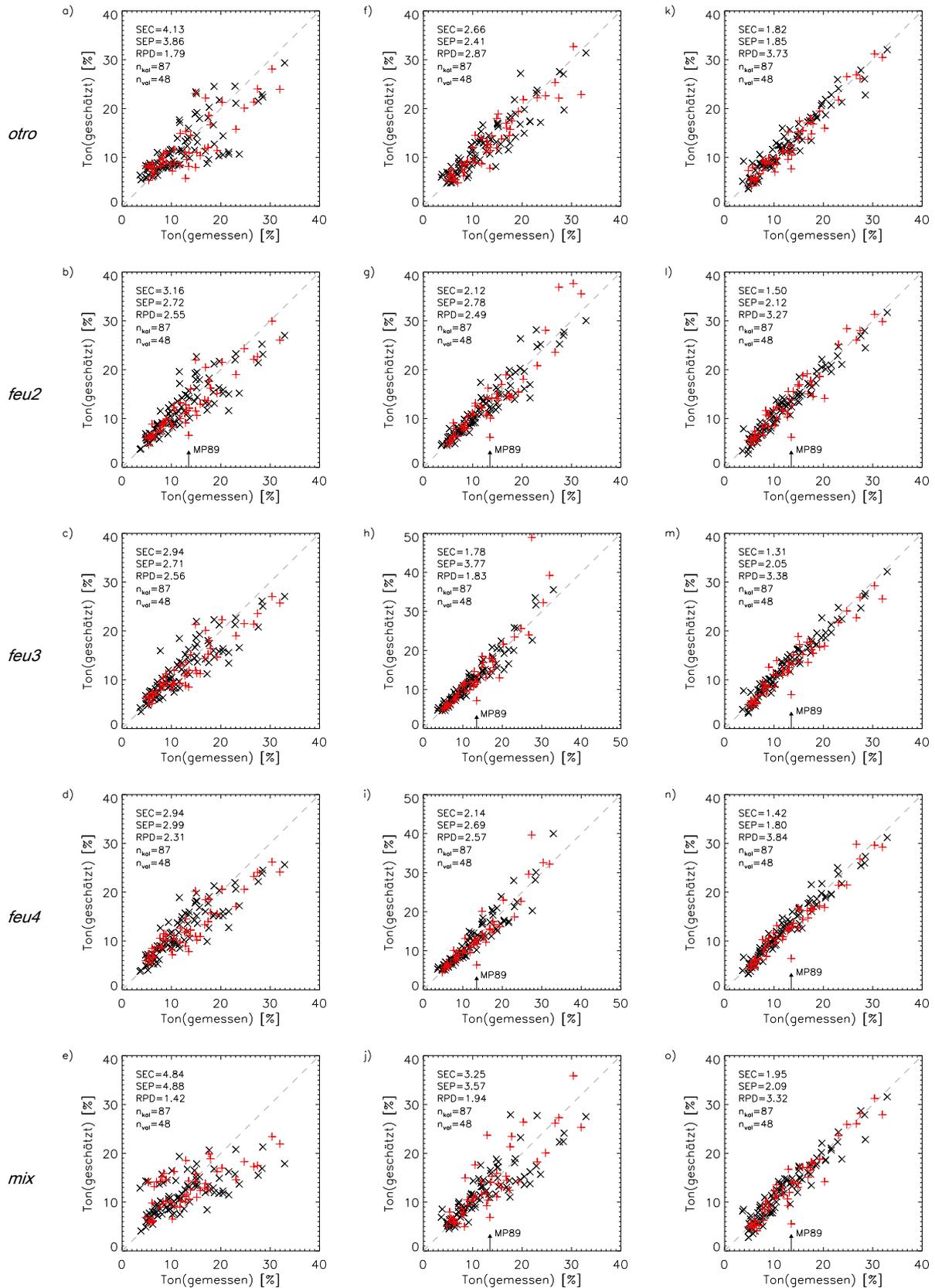


Abb. 7.5.2: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Bodenspektren geschätzten Tongehalte der Bodenproben des Testfeldes DEMMIN für unterschiedliche Bodenwassergehalte (zeilenweise). Abb.a-e: CR, Abb.f-j: MLR, Abb.k-o: PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (x), Validationsdatensatz: rote Symbole (+). SEC und SEP sind in [%] angegeben.

PLSR-Modelle (feu2, feu3, feu4). Gleiches trifft auf die Absorptionsbande nahe 2200nm zu. Im Gegensatz zu den feu3- und feu4-Modellen erfahren in den otro-, feu2- und mix-Modellen die Wellenlängen kleiner 500nm starke Gewichtung. Dieser Bereich des Spektrums wird vor allem durch Ladungsübergänge bestimmt. Eisenoxide und -hydroxide sind aufgrund ihrer verschiedenen Oxidationsstufen häufig Verursacher solcher Ladungsübergänge. Die geringe Gewichtung dieser Wellenlängenbereiche in den feu3- und feu4-Modellen legt die Vermutung nahe, dass Wassergehalte größer 10,0M.-%, diese, wahrscheinlich auf Eisenverbindungen zurückzuführenden Absorptionsbanden, maskieren. Ein Trend, der ebenso mit zunehmendem Wassergehalt beobachtet werden kann, ist eine Verschiebung des Kurvenmaximums der VIP zwischen 700nm und 1000nm von 800nm für das otro- und feu2-Modell nach 900nm für das feu3- und feu4-Modell (schwarzer Pfeil). Wasser weist nahe 900nm eine schwache Absorptionsbande, verursacht durch Kombination ($2\nu_1\nu_3$) und Obertöne ($3\nu_3$) von Grundschwingungen auf. Die Verschiebung der lokalen Maxima des VIP kann daher als Manifestation des steigenden Wassergehaltes im Boden gewertet werden. Im mix-Modell ist diese Verschiebung nicht zu beobachten. Es wird vermutet, dass die Variabilität der Wassergehalte in den Bodenproben dieses Modells eine entsprechende Gewichtung dieser Wellenlängenbereiche verhindert. Die Zahl der PLSR-Komponenten der fünf Modelle liegt bei minimal sechs und maximal acht Faktoren. Bei höheren Bodenwassergehalten (10,0M.-%, 13,0M.-%) fließen tendenziell weniger PLSR-Komponenten in die Kalibrationsmodelle ein.

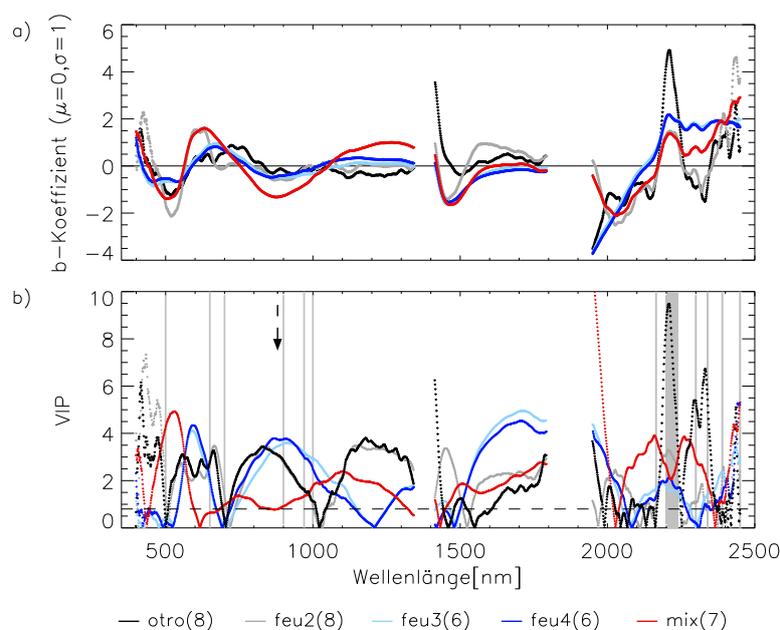


Abb. 7.5.3: Standardisierte b-Koeffizienten (a) und *Variable Importance in the Projection* (VIP) (b) der PLSR-Modelle für Ton mit Bodenproben unterschiedlichen Wassergehaltes. Anzahl der PLS-Faktoren in Klammern. Grau-kolorierte Wellenlängen in Abbildung b) sind potentielle Absorptionsbereiche von Tonmineralen. Wasserabsorptionsbanden sind maskiert. Weitere Erklärungen siehe Text.

Durch grafische Darstellung der X- und Y-Scores der PLSR können Ähnlichkeiten bzw. Unterschiede der Proben im Spektralsignal und Tongehalt veranschaulicht werden. Starke Gruppierungen in den Daten können Ursache einer schlechten Modellkalibration sein. Eine Verbesserung der Modellkalibration kann dann durch eine separate Modellkalibration mit den detektierten Gruppen erreicht werden. In den X-Scores der ersten PLS-Komponente des mix-Modells ist eine klare Trennung in Abhängigkeit vom Wassergehalt zu erkennen (Abb. 7.5.4a). Die getrockneten (otro) Proben sowie die Proben mit 7,2M.-% Wassergehalt (feu2) weisen negative Scores auf. Die Scores der Proben mit mehr als 10,0M.-% Wasser (feu3, feu4) sind positiv. Je geringer der Wassergehalt desto geringer die Werte der X-Scores. In Bezug auf die Y-Scores, d.h. die Tongehalte, ist keine Gruppierung zu erkennen. Trägt man die X-Scores der ersten und dritten PLS-Komponente gegeneinander auf, wird eine weitere grobe Distinktion in zwei Gruppen, die otro- und feu4-Proben

mit positiven X-Scores sowie die feu2- und feu3-Proben mit negativen X-Scores sichtbar (Abb. 7.5.4b). Die Ursache dieser Gruppierung konnte nicht identifiziert werden. Eine Klassifizierung der Proben nach dem organischen Kohlenstoffgehalt bzw. der Bodenart lässt einen Einfluss dieser beiden Bodeneigenschaften ausschließen. Dass die PLSR-Modelle trotz der hohen Unterschiede im Spektralsignal und der Gruppierung in den X-Scores bei variablen Wassergehalten eine exzellente bzw. sehr gute Vorhersagegenauigkeit (nach Chang et al., 2001) aufweisen, attestiert dem PLSR-Verfahren eine hohe Eignung für die Schätzung von Bodenparametern mittels VNIRS. Dies ist insbesondere für Anwendungen auf in-situ Spektren (FS und IS), die in der Regel von einer hohen spektralen Variabilität hinsichtlich verschiedener Einflussfaktoren betroffen sind, vielversprechend.

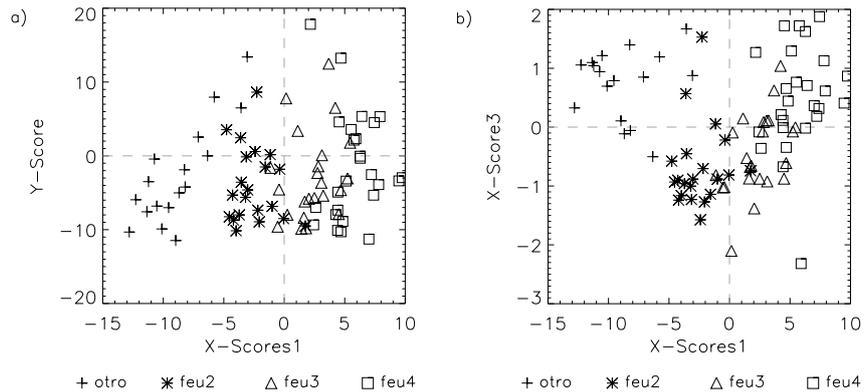


Abb. 7.5.4: Streudiagramm der X1-Y-Scores (a) und Streudiagramm der X1-X3-Scores (b) des PLSR-Modells zur Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Laborspektren der Bodenproben mit variablen Wassergehalten (mix).

Die Schätzung des Tongehaltes mit der MLR basiert auf vier bis sechs unabhängigen Variablen. Die Varianzinflationsfaktoren (VIF) liegen mit Ausnahme zweier Variablen des mix-Modells unterhalb des kritischen Richtwertes für Multikollinearität (Abb. 7.5.5, rechts). In alle Modelle fließt mindestens eine Variable im SWIR zwischen 2,1µm und 2,3µm (Kombination von OH-Streck- und Beugeschwingungen) ein. Eine zweite Variable befindet sich in allen Modellen nahe 0,65µm. Das bestärkt die bereits bei der Besprechung der PLSR-Modelle angestellte Vermutung, dass Eisenverbindungen oder Eisenverunreinigungen in Tonmineralen für die Schätzung des Tongehaltes eine wichtige Rolle spielen. Die feu2-, feu3- und feu4-Modelle weisen zusätzlich eine X-Variable nahe 0,5µm auf, die ebenso in Verbindung mit Absorptionseigenschaften von Eisen bzw. Eisenverunreinigungen in Tonmineralen gebracht werden kann. Allerdings steht das Auftreten in den feuchten Proben im Gegensatz zur PLSR, wo dieser Wellenlängenbereich nur in den otro- und feu2-Modellen Relevanz hat. Eine Tendenz bei der Wahl der Wellenlängen in Abhängigkeit vom Wassergehalt ist grundsätzlich nicht zu erkennen (Abb. 7.5.5, links).

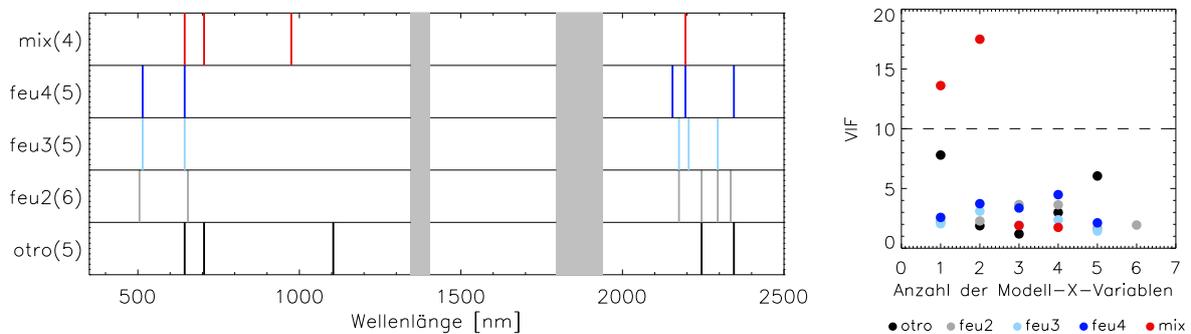


Abb. 7.5.5: X-Variablen (Wellenlängen) der MLR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt (links) und Varianzinflationsfaktoren (VIF) (rechts).

Abb. 7.5.6 beschreibt den Zusammenhang zwischen der Absorptionstiefe nahe 2200nm und dem Tongehalt des Bodens für die getrockneten Proben, die Proben mit 7,2M.-%, 10,0M.-% und 13,0M.-% sowie die Proben mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0M.-% und 13,0M.-% graphisch (CR-Methode). Zur Bildung eines korrekten Regressionsmodells machte sich eine logarithmische Transformation der Daten erforderlich, da die Proben des Testfeldes DEMMIN keine Normalverteilung für den Tonanteil aufweisen. Aus der Abbildung wird deutlich, dass sich die Beziehung zwischen Absorptionstiefe und Tongehalt abhängig vom Wassergehalt verändert. Dies äußert sich sowohl in einer Änderung des Anstiegs der Regressionsgerade als auch der Nullpunktordinate (Konstante).

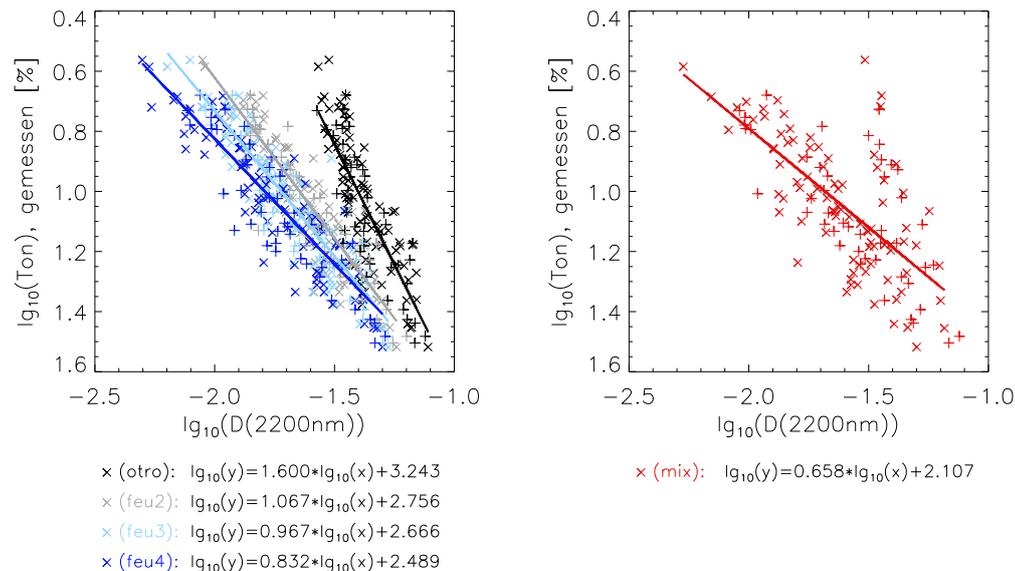


Abb. 7.5.6: Zusammenhang zwischen der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm und dem Tongehalt des Bodens bei unterschiedlichen Wassergehalten. otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%, mix: variierende Wassergehalte zwischen 0,0-13,0M.-%. Symbole: (x) Proben des Kalibrationsdatensatzes, (+) Proben des Validationsdatensatzes.

Besonders ausgeprägt sind die Abweichungen der Regressionsgeraden zwischen getrockneten (otro) und feuchten Proben (feu2, feu3, feu4). Zwischen den Proben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) oder 13,0M.-% (feu4) sind die Unterschiede in den Regressionsparametern geringer. Bei der Regression der Absorptionstiefe auf den Tongehalt mit Proben variabler Wassergehalte (mix) kommt es folgerichtig zu Problemen. Aufgrund der hohen Standardabweichung des beschriebenen Parameters Absorptionstiefe in diesem Datensatz können nur 47% der Variabilität von y erklärt werden, weniger als für alle anderen Probenreihen mit konstanten Wassergehalten (vgl. Tab. 7.5.1). Generell bewirkte die Verwendung befeuchteter Bodenproben eine Erhöhung der Vorhersagegenauigkeit. Die Zugabe von Wasser in gleichen Anteilen resultiert in einer Verringerung der Streuung der Absorptionstiefe für Bodenproben mit ähnlichen Tongehalten (Abb. 7.5.7). Dies wirkt sich positiv auf die Beschreibung des Zusammenhangs aus. Zwischen den gravimetrischen Wassergehalten von 7,2M.-% und 10,0M.-% bestehen kaum Unterschiede in der positiven Wirkung. Der Standardfehler des feu4-Modells ist etwas größer. Es ist daher anzunehmen, dass höhere Wassergehalte zu keiner weiteren Verbesserung führen. Die Standardabweichung der Absorptionstiefe der Proben mit variablen Wassergehalten (mix) ist besonders hoch bei Bodenproben mit weniger als 14% Ton (Klassennummer 1-6).

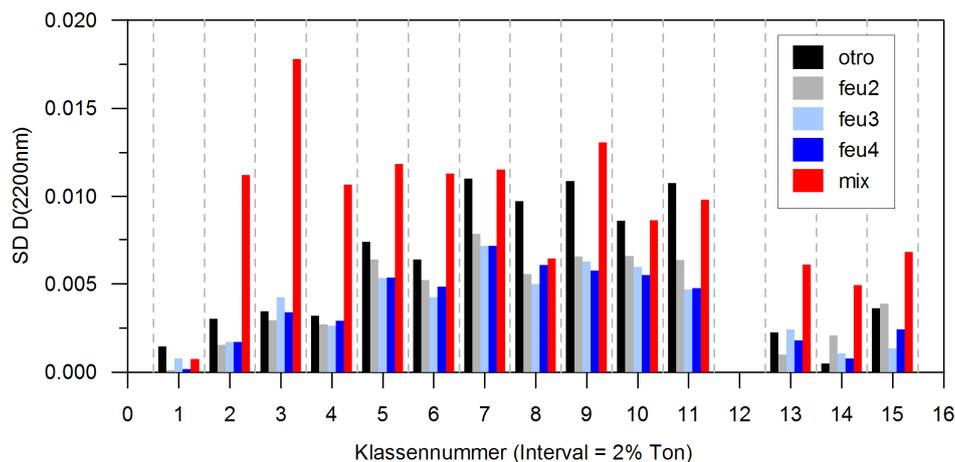


Abb. 7.5.7: Standardabweichung (SD) der Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm der Bodenspektren der *Bodenserie Demmin* ($n_{\text{ges.}}=135$) gruppiert nach Tongehaltsklassen. Für die Klassen mit nur einer Bodenprobe bzw. einem Bodenspektrum ist die Standardabweichung null.

7.5.1.2 Organischer Kohlenstoff

Ergebnisse der Modellkalibration und -validation

In Tab. 7.5.2 sind die Fehlerkennwerte aller Kalibrationsmodelle für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes auf Grundlage der Laborspektroskopie mit gezielt manipulierten Wassergehalten erfasst. Abb. 7.5.8 veranschaulicht das Bestimmtheitsmaß (R^2), den Standardkalibrationsfehler (SEC) und den Standardvalidationsfehler (SEP) der fünf Eingangsdatensätze (otro, feu2, feu3, feu4, mix) für CR, MLR und PLSR graphisch.

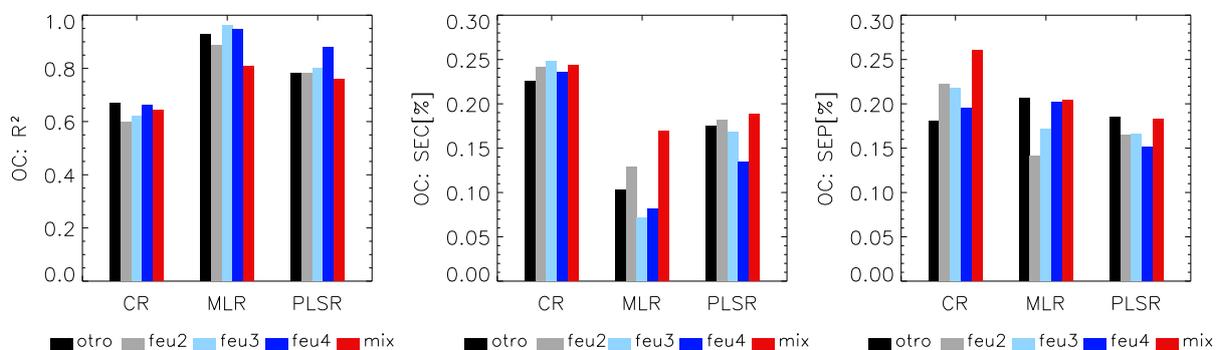


Abb. 7.5.8: Vergleich der Modellgüte (R^2 , SEC, SEP) für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes aus Laborspektren der Bodenproben im getrockneten Zustand (otro), mit Bodenwassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).

Mit den Kalibrationsmodellen des CR-Verfahrens können zwischen 60% und 67% der Variabilität in y erklärt werden. Die SEC betragen zwischen 0,226% und 0,248% OC. Für Böden mit mehr als 1,3% OC nimmt die Streuung der Residuen stark zu. Die Fehler der Validation sind mit Ausnahme des mix-Modells geringer als die Fehler der Kalibrationsmodelle (SEP: 0,180-0,222%). Die Streuung der Residuen im Validationsdatensatz ist über den gesamten Wertebereich konstant und geringer als im Kalibrationsdatensatz. Allerdings werden Proben mit mehr als 1,3% OC auch hier konsequent unterschätzt. Das Kalibrationsmodell beschreibt den Zusammenhang zwischen der Absorptionstiefe nahe 662nm und dem organischen Kohlenstoffgehalt für höhere OC-Gehalte offensichtlich nur unzureichend (Abb. 7.5.9a-e). Eine Befeuchtung der Proben führt unabhängig von der Höhe des Wasseranteils zu einer Verschlechterung der Vorhersagegüte, wobei sich höhere Wassergehalte (13,0M.-%, feu4) weniger negativ auswirken als geringere Wassergehalte (7,2M.-%, 10,0M.-%; feu2, feu3). Variable Bodenwassergehalte wirken sich am stärksten negativ auf die Vorhersagegenauigkeit aus. Die RPD-Werte der CR-Modelle betragen zwischen 1,66 und 2,39. Demnach können das otro-

und feu3-Modell in Gruppe A (exzellent), das feu2-, feu4- und mix-Modell in Gruppe B (moderat) nach Chang et al. (2001) eingeordnet werden.

Ein wesentlich höherer Anteil der Variabilität in den y-Daten kann durch die MLR erfasst werden (R^2 : 0,81-0,96). Die SEC der otro-, feu2-, feu3- und feu4-Modelle beziffern sich auf 0,103%, 0,129%, 0,071% und 0,082% OC. Die Abbildung der gemessenen gegen die geschätzten Parameterwerte bezeugt eine geringe Streuung der Proben des Kalibrationsdatensatzes, die zudem im gesamten Wertebereich relativ gleichmäßig ist (Abb. 7.5.9f-i). Die Validation der Kalibrationsmodelle untermauert deren Robustheit, obgleich für die Proben größer 1,5% OC eine etwas höhere Streuung zu beobachten ist. Im Modell mit den Bodenspektren der getrockneten Proben zeichnet sich eine leichte Tendenz zur Unterschätzung höherer OC-Gehalte ab (Abb. 7.5.9f). Eine Befeuchtung der Bodenproben geht im Gegensatz zum CR mit einer Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit im Vergleich zu den getrockneten Proben einher. Selbst variable Wassergehalte erweisen sich trotz eines fast doppelt so hohen Standardfehlers in der Kalibration (SEC: 0,170%) bei der Validation als ebenbürtig zum otro- und zum feu4-Modell (SEP_{mix} : 0,204%, SEP_{otro} : 0,206%, SEP_{feu4} : 0,202%). Die Streuung der Residuen nimmt hier jedoch mit Zunahme der OC-Gehalte stark zu. Außerdem werden höhere Kohlenstoffgehalte (>2%) unterschätzt (Abb. 7.5.9j). Die RPD-Werte der MLR-Modelle liegen unabhängig vom Wassergehalt der Bodenproben über 2 und können nach Chang et al. (2001) als Modelle mit exzellenter Vorhersageeignung in Gruppe A eingestuft werden.

Tab. 7.5.2: Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie der Bodenproben mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).

Parameter	Organischer Kohlenstoff (OC)														
	CR					MLR*					PLSR**				
$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	otro	feu2	feu3	feu4	mix	otro	feu2	feu3	feu4	mix	otro	feu2	feu3	feu4	mix
UV/Faktoren	1	1	1	1	1	12	7	15	12	6	4	8	4	9	7
$SD_{\text{kal}}^{\dagger}$ [%]	0,323	0,286	0,297	0,308	0,305	0,343	0,347	0,358	0,367	0,319	0,331	0,335	0,339	0,350	0,332
$SD_{\text{val}}^{\dagger}$ [%]	0,315	0,275	0,273	0,299	0,264	0,415	0,454	0,435	0,469	0,426	0,384	0,423	0,363	0,407	0,371
R^2	0,67	0,60	0,62	0,66	0,64	0,93	0,89	0,96	0,95	0,81	0,78	0,78	0,80	0,88	0,76
SEC [%]	0,226	0,242	0,248	0,235	0,244	0,103	0,129	0,071	0,082	0,170	0,175	0,181	0,168	0,134	0,189
SD/SEC	1,62	1,52	1,48	1,56	1,51	3,56	2,84	5,14	4,48	2,16	2,10	2,02	2,18	2,73	1,94
SEP [%]	0,180	0,222	0,218	0,195	0,260	0,206	0,141	0,172	0,202	0,204	0,185	0,164	0,166	0,152	0,183
RPD	2,39	1,94	1,98	2,21	1,66	2,09	3,06	2,52	2,14	2,11	2,33	2,62	2,60	2,85	2,35

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **PLSR-Modelle berechnet auf Grundlage der Absorption.

Ähnlich der MLR ist bei der PLSR eine bessere Vorhersagegüte durch vorherige Befeuchtung der Proben mit gleichen Anteilen Wasser zu erzielen. Je höher der Wasseranteil in den Proben, desto stärker der positive Effekt. Dies gilt sowohl für die Kalibration als auch für die Validation. Im Vergleich zu den MLR-Modellen liegt der Anteil der erklärten Variabilität der PLSR-Modelle niedriger (R^2_{PLSR} : 0,76-0,88). Die Standardkalibrationsfehler sind dementsprechend höher (SEC_{PLSR} : 0,134-0,189%; vgl. Tab. 7.5.2). Trotzdem ergibt die Validation der PLSR-Modelle mit SEP zwischen 0,152% und 0,185% OC eine der MLR gleichrangige Vorhersagegenauigkeit. Mit Ausnahme des feu2-Modells sind die modellspezifischen SEP sogar etwas niedriger. In allen Modellen zeichnet sich aber eine Tendenz zur Unterschätzung höherer Kohlenstoffgehalte (größer ca. 2%) ab, die besonders im otro- und im mix-Modell ausgeprägt ist (Abb. 7.5.9k,o). Eine Probe des Validationsdatensatzes (MP70) mit ca. 2,5% OC liegt in ihrem Vorhersagewert in allen Modellen um ein Vielfaches unter ihrem tatsächlichen Kohlenstoffgehalt. Diese Bodenprobe weist im Vergleich zu Proben mit ähnlich hohen Kohlenstoffgehalten relativ geringe Anteile Ton auf (12,85%). Typische Tongehalte der übrigen Referenzproben mit mehr als 2% OC betragen 25% und mehr. Dies lässt vermuten, dass die PLSR-Modelle Böden mit einer derartigen physikalisch-chemischen Charakteristik nicht erfassen. Es legt außerdem die Vermutung nahe, dass die Schätzung des organischen

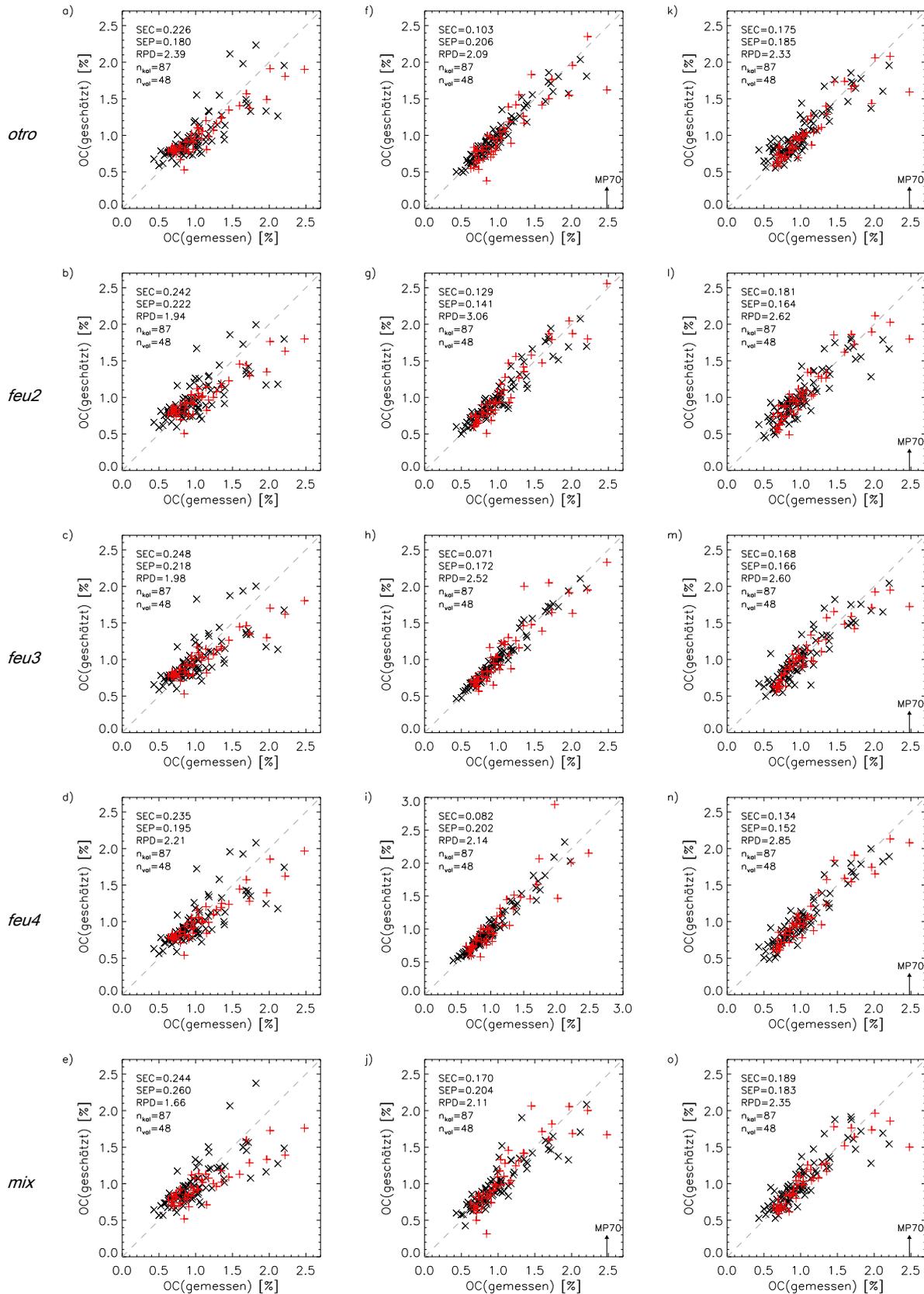


Abb. 7.5.9: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Bodenspektren geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte der Bodenproben des Testfeldes DEMMIN für unterschiedliche Bodenwassergehalte (zeilenweise). Abb.a-e: CR, Abb.f-j: MLR, Abb.k-o: PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (x), Validationsdatensatz: rote Symbole (+). SEC und SEP sind in [%] angegeben.

Kohlenstoffgehaltes aus VNIR-SWIR-Spektren nicht ausschließlich auf Absorptionserscheinungen organischer Bodensubstanz beruht, sondern Korrelationen mit anderen Bodeneigenschaften wie dem Tongehalt eine Rolle spielen. Den RPD-Werten nach zu urteilen, können alle PLSR-Modelle in Gruppe A nach Chang et al. (2001) mit einer exzellenten Vorhersagegenauigkeit eingeordnet werden.

Interpretation der Modellparameter

In Abb. 7.5.10 sind die VIP sowie die b-Koeffizienten der fünf PLSR-Modelle als Funktion der Wellenlänge aufgetragen. Ähnlichkeiten in deren Verlauf bestehen zwischen dem otro- und dem feu3-Modell sowie zwischen dem feu2- und dem feu4-Modell. Die VIP und b-Koeffizienten des mix-Modells weisen nur eine geringe Übereinstimmung mit diesen Modellen auf. Für das otro-Modell liegen die VIP im gesamten Spektrum unterhalb 0,8 und damit unterhalb der Grenze, die für einen tatsächlichen Beitrag der k-ten X-Variable im Regressionsmodell allgemein angenommen wird (SAS/STAT(R), 2011). Die b-Koeffizienten deuten auf eine hohe Gewichtung des sichtbaren Wellenlängenbereiches (VIS) um 600nm hin. Ebenso steigen beide Modellkennwerte nahe 400nm und nahe 900nm. Im SWIR-II nahe 2200nm ist ein weiterer leichter Anstieg zu beobachten. Im feu2- als auch im feu4-Modell signalisieren hohe VIP und b-Koeffizienten nahe 500nm, 730nm, 1000nm, 1420nm und größer 2400nm eine Priorisierung dieser Spektralbereiche. Zusätzlich sind im feu2-Modell Wellenlängen nahe 1560nm, 2000nm und 2190nm mit hohen Zahlwerten belegt. Im feu3-Modell sind ausschließlich Bereiche im SWIR-II zwischen 1900nm und 2100nm sowie 2200nm und 2450nm maßgeblich an der Modellbildung zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes beteiligt. Das Modell mit Böden variabler Bodenwassergehalte (mix) basiert wiederum im Wesentlichen auf Wellenlängen nahe 500nm, nahe 600nm und größer 2400nm. Modelle mit mehr als 6 PLSR-Faktoren sind im SWIR-II durch ein auffälliges Zappeln der VIP und b-Koeffizienten gekennzeichnet. Das spricht dafür, dass bei der Klärung des Zusammenhangs zwischen X und y, der durch die w-Loadings beschrieben wird und die in den VIP einfließen, bereits ein Teil Signalauschen enthalten ist.

Vergleicht man die VIP des mix-Modells in Abb. 7.5.10b mit den VIP des mix-Modells zur Schätzung des Tongehaltes in Abb. 7.5.3b, treten auffällige Übereinstimmungen zu Tage. Analogien bestehen vor allem im VNIR und SWIR-I. In gleicher Weise trifft das auf die p- und w-Loadings beider Modelle zu (nicht dargestellt). Diese Ähnlichkeiten können als Hinweis gedeutet werden, dass die Modelle mit

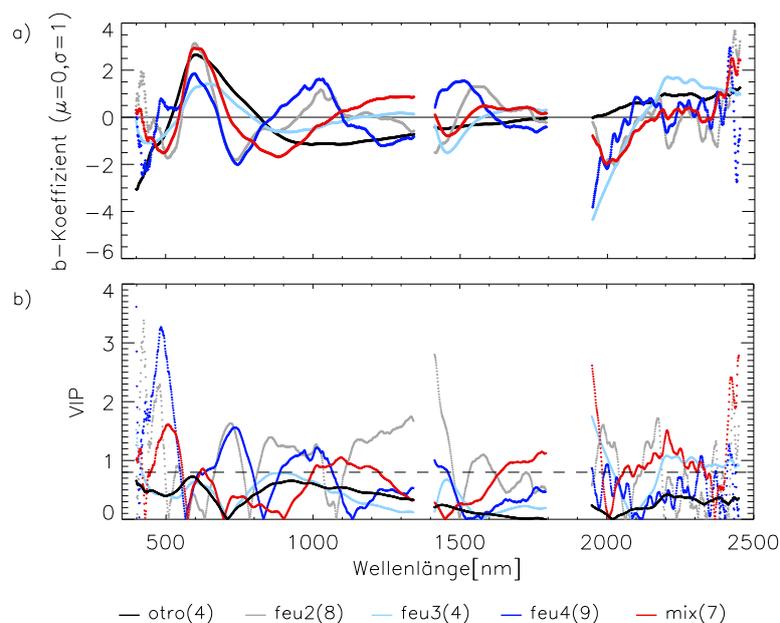


Abb. 7.5.10: Standardisierte b-Koeffizienten (a) und *Variable Importance in the Projection* (VIP) (b) der PLSR-Modelle für organischen Kohlenstoff mit Bodenproben unterschiedlichen Wassergehaltes. Anzahl der PLS-Faktoren in Klammern. Wasserabsorptionsbanden sind maskiert.

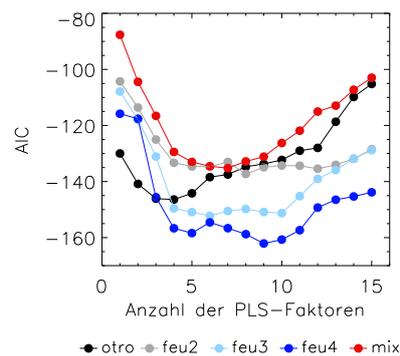


Abb. 7.5.11: *Akaike Information Criterion* (AIC) der PLSR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit Wassergehalten von 7,2M.-% (feu2), 10,0M.-% (feu3) und 13,0M.-% (feu4) sowie mit variierenden Wassergehalten zwischen 0,0 und 13,0M.-% (mix).

Bodenproben variabler Wassergehalte offenbar weniger durch die spektrale Charakteristik der jeweiligen Zielgröße (Ton bzw. OC) bestimmt werden, als vielmehr durch eine dritte Komponente, den Wassergehalt des Bodens.

Die Zahl der latenten Variablen, die in die PLSR einfließen, schwankt für die PLSR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt der Proben zwischen vier und neun Faktoren (Tab. 7.5.2, Abb. 7.5.11). Das *Akaike Information Criterion* (AIC), welches neben dem RMSE auch die Anzahl der Proben sowie der Modellkomponenten berücksichtigt (vgl. Kap. 6.4.3), erreicht seinen Minimalwert für das Modell mit getrockneten Proben (otro) bei 4 Faktoren. Für die PLSR-Modelle mit befeuchteten Proben befinden sich die minimalen AIC-Werte bei 8 (feu2), 6 (feu3), 9 (feu4) und 7 (mix) Faktoren. Wasser erhöht somit die Anzahl der latenten Variablen, die zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen den X und y erforderlich sind. Um eine Überbestimmung zu vermeiden, wurde für das feu3-Modell trotz des AIC-Minimums bei 6 Faktoren eine PLSR mit 4 Faktoren gewählt, da zwischen 4 und 10 Faktoren keine oder nur eine unwesentliche Verbesserung der Modellgüte festzustellen war.

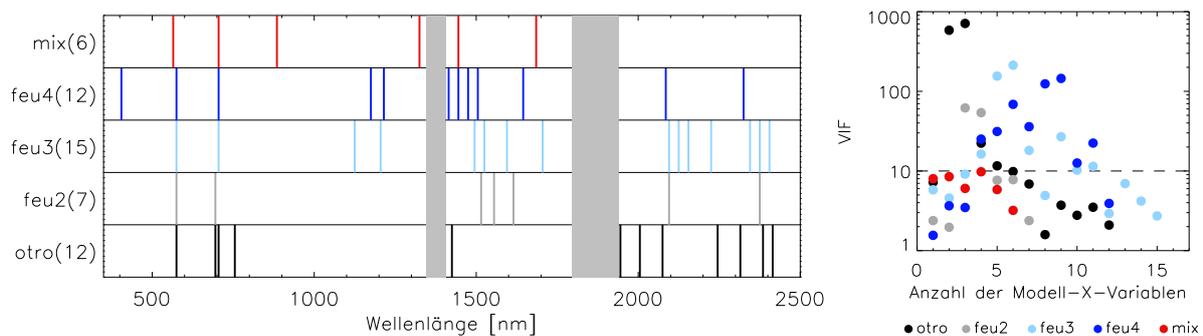


Abb. 7.5.12: X-Variablen (Wellenlängen) der MLR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes in Abhängigkeit vom Wassergehalt (links) und Varianzinflationsfaktoren (VIF) (rechts).

Bei der MLR wurden im Rahmen der schrittweisen Vorwärtsselektion der X-Variablen auf Basis des F-Kriteriums zwischen 6 und 15 Wellenlängen für die Modellgleichungen der fünf Datensätze ausgewählt (Abb. 7.5.12, links). Alle Modelle basieren auf Wellenlängen im VIS nahe 580nm und 700nm, denen auch in einigen PLSR-Modellen eine hohe Gewichtung zuteil wurde. Die otro-, feu2-, feu3- und feu4-Modelle beinhalten zudem eine X-Variable nahe 2100nm. In die feu2-, feu3- und feu4-Modelle fließen darüber hinaus mehrere X-Variablen aus dem SWIR-I und dem SWIR-II ein. Das otro-Modell basiert fast ausschließlich auf X-Variablen im SWIR-II. Im SWIR-I, zwischen der ersten und zweiten Wasserabsorptionsbande, ist mit steigendem Wassergehalt der Bodenproben ein Trend zu kürzeren Wellenlängen hin zu beobachten. Das mix-Modell basiert auf nur sechs X-Variablen und ist

im Gegensatz zu den übrigen Modellen auf das VNIR und SWIR-I beschränkt. Die VIF signalisieren, dass mit Ausnahme des mix-Modells trotz vorheriger Transformation in die erste Ableitung alle Modelle von Multikollinearität betroffen sind und die Schätzung der Regressionskoeffizienten als instabil gewertet werden muss (Abb. 7.5.12, rechts).

Ähnlich dem Vorgehen bei der Schätzung des Tongehaltes mit dem CR, erfolgte auch für die lineare Regression zwischen der Absorptionstiefe nahe 662nm und dem organischen Kohlenstoffgehalt eine Transformation zur Normalverteilung durch vorausgehende Logarithmierung der Daten. Die Absorptionstiefe wurde nicht in den Logarithmus überführt, da negative Zahlwerte auftreten. In Kapitel 7.2.3 wurde festgestellt, dass die Absorptionstiefe nahe 662nm eine Funktion des Bodenwassergehaltes ist. Infolge dessen ändern sich die Regressionsparameter der Modelle in Abhängigkeit vom Wassergehalt der Bodenproben. Nur sehr geringe Unterschiede bestehen zwischen den Regressionsparametern der feu3- und feu4-Modelle (10,0M.-% bzw. 13,0M.-% Wassergehalt) (Abb. 7.5.13). Das Modell mit Laborspektren von Böden unterschiedlicher Wassergehalte (mix) kann den Zusammenhang zwischen Absorptionstiefe und OC-Gehalt nur schlecht abbilden. Dass die Zugabe von Wasser in gleichen Anteilen zu einer Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit gegenüber dem Einsatz getrockneter Proben führt, ist in einem Anstieg der Standardabweichung der Absorptionstiefe für Böden mit ähnlichen organischen Kohlenstoffgehalten begründet (Abb. 7.5.14).

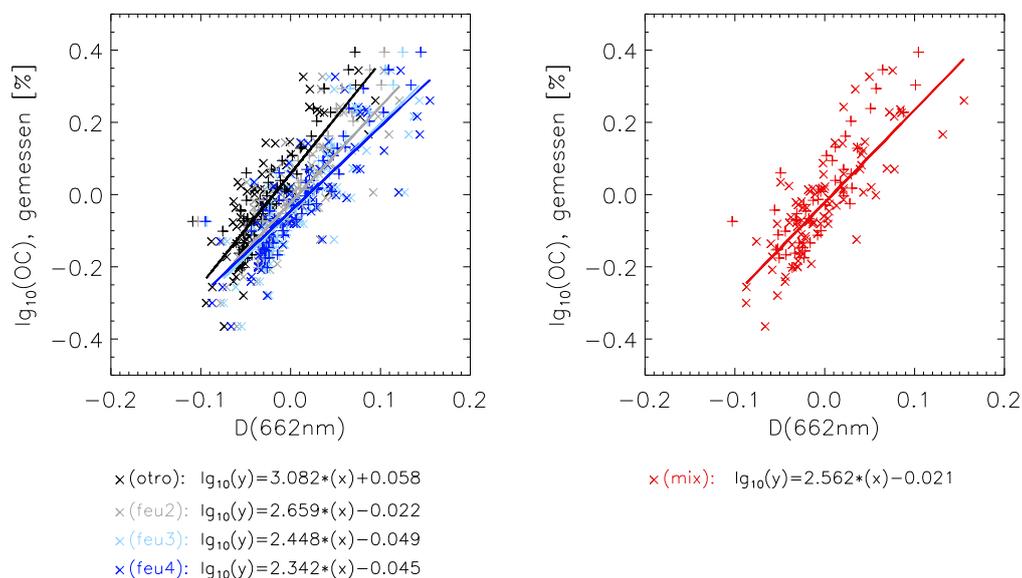


Abb. 7.5.13: Zusammenhang zwischen der Absorptionstiefe (D) nahe 662nm und dem organischen Kohlenstoffgehalt (OC) des Bodens bei unterschiedlichen Wassergehalten. otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%, mix: variierende Wassergehalte zwischen 0,0-13,0M.-%. Symbole: (x) Proben des Kalibrationsdatensatzes, (+) Proben des Validationsdatensatzes.

7.5.2 Modellkalibration und –validation: Fokus spektrale Auflösung

Datengrundlage der Untersuchungen in diesem Kapitel sind die Laborspektren der getrockneten Bodenproben. Auf diese wird in diesem Kapitel Bezug genommen unter der Bezeichnung ASD (2151 Bänder). Auf ihrer Basis wurden durch ein spektrales Resampling unter Vorgabe der Zentrumswellenlängen und der Halbwertsbreite (FWHM) drei weitere Datensätze mit einer Bandbreite von 10nm (215 Bänder), 20nm (108 Bänder) sowie der Konfiguration des HyMap-Sensors⁶¹ (126 Bänder) generiert. Für diese neuen Konfigurationen wurden Kalibrationen mit CR, MLR und PLSR durchgeführt und den Ergebnissen der Laborspektren mit der spektralen Auflösung des ASD-Spektrometers gegenübergestellt (Tab. 7.5.3, Tab. 7.5.4). Aufgrund der in Kap 6.4.2

⁶¹ Für das Resampling wurde die Konfiguration der HyMap-Daten vom 27.05.2005 verwendet.

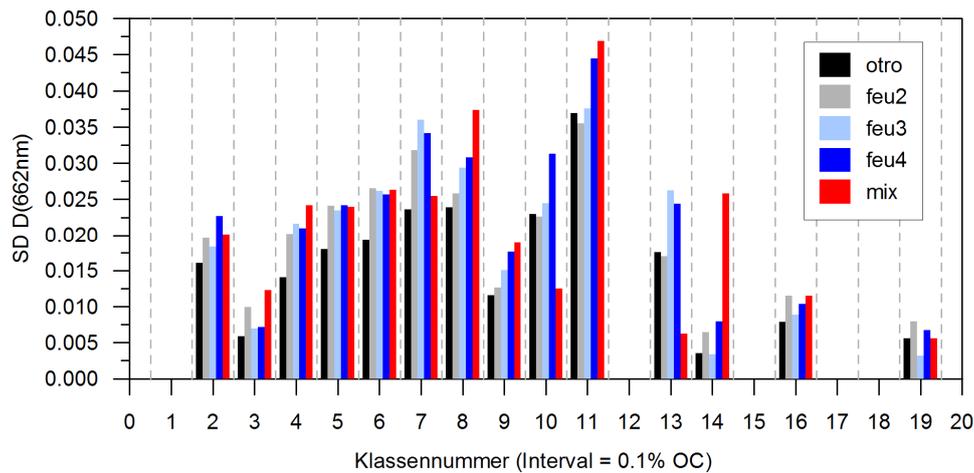


Abb. 7.5.14: Standardabweichung (SD) der Absorptionstiefe (D) nahe 662nm der Bodenspektren der *Bodenserie Demmin* ($n_{\text{ges.}}=135$) gruppiert nach Kohlenstoffklassen. Für Klassen mit nur einer Bodenprobe bzw. einem Bodenspektrum ist die Standardabweichung null.

Tab. 7.5.3: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben für unterschiedliche spektrale Auflösungen.

Parameter	Ton										
	CR				MLR*			PLSR**			
Halbwertsbreite (FWHM)	ASD [‡]	10	HyMap [‡]	20	10	HyMap [‡]	20	ASD [‡]	10	HyMap [‡]	20
$n_{\text{kai}}=87, n_{\text{val}}=48$											
Bandanzahl	2151	215	126	108	215	126	108	2151	215	126	108
UV/Faktoren	1	1	1	1	5	5	7	8	9	6	9
SD _{kai} [†] [%]	5,37	5,35	5,32	5,35	5,80	5,96	5,82	6,11	6,14	6,07	6,16
SD _{val} [†] [%]	5,71	5,72	5,66	5,69	6,47	6,64	6,50	6,90	6,76	6,63	6,59
R ²	0,63	0,64	0,66	0,64	0,82	0,83	0,85	0,93	0,93	0,92	0,94
SEC [%]	4,13	4,15	4,18	4,13	2,66	2,55	2,46	1,82	1,73	1,85	1,65
SEP [%]	3,86	3,99	4,03	3,89	2,41	2,33	2,78	1,85	2,07	1,99	1,98
RPD	1,79	1,73	1,72	1,77	2,87	2,98	2,49	3,73	3,34	3,47	3,49

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; [‡] ASD- bzw. HyMap-Konfiguration (vgl. Kap. 6.2.1, 6.3.1); *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **PLSR-Modelle berechnet auf Grundlage der Absorption.

beschriebenen Vorgehensweise liegen keine Kalibrationsmodelle mittels MLR auf Basis der originalen ASD-Spektren vor.

In den Kalibrationsmodellen für **Ton** bedingt die Verringerung der spektralen Auflösung in fast allen Fällen etwas höhere Standardfehler. Bei Verwendung des CR bewirkt ein Resampling der Spektren auf 10nm und HyMap-Konfiguration eine Erhöhung des SEP um ca. 4%. Das Resampling auf eine Halbwertsbreite von 20nm hat praktisch keine Auswirkungen auf die Vorhersagegenauigkeit. Möglicherweise besteht hier ein Zusammenhang zur Lage der Zentrumswellenlängen. Trotz einer Veränderung der absoluten Absorptionstiefe weist die Form der Absorptionsbande nahe 2200nm in den Spektren bei einer Halbwertsbreite von 20nm mehr Ähnlichkeiten zu den ASD-Spektren auf als zu den anderen beiden Konfigurationen (FWHM10, HyMap). Die Zentrumswellenlängen für die Halbwertsbreite von 10nm liegen bei 2195nm und 2205nm, die für 20nm bei 2185nm und 2205nm und die für HyMap bei 2189,7nm und 2207,4nm (Anhang D 7). In den Kalibrationsmodellen der PLSR verringern sich bei Reduktion der Bandanzahl von 2151 auf 215 und 108 zwar die Standardfehler der Kalibration (SEC) (SEC_{ASD} : 1,82%, SEC_{10} : 1,73%, SEC_{20} : 1,65%; vgl. Tab. 7.5.3). Die Validation resultiert indes in einer Verschlechterung, die für die Halbwertsbreite von 10nm am stärksten ausgeprägt ist (11,9%) und bei einem FWHM von 20nm bzw. HyMap-Konfiguration zwischen 7% und 8% liegt. Im Gegensatz dazu werden bei Verwendung der MLR die besten Resultate grundsätzlich mit der HyMap-Konfiguration erzielt. Der SEP ist kleiner als für die Konfigurationen

mit einer Bandbreite von 10nm oder 20nm. Hauptursache dieses Ergebnisses ist, dass stark tonhaltige Böden (>25% Ton) mit den HyMap-resampelten Spektren besser beschrieben werden können.

Die Vorhersagegenauigkeit des **organischen Kohlenstoffgehaltes** im Boden wird durch eine Verringerung der spektralen Auflösung bis 20nm Bandbreite bei Kalibrationen mit PLSR und CR nicht beeinflusst (Tab. 7.5.4). Ein Vergleich der gemessenen und geschätzten Kohlenstoffgehalte bei ASD-Konfiguration, FWHM 10, FWHM 20 und HyMap-Konfiguration lässt kaum Differenzen erkennen (nicht dargestellt). Im Unterschied zur Tonabsorptionsbande hat das Resampling auf die Absorptionstiefe nahe 662nm bedingt durch die große Bandbreite (ca. 275nm) keine nennenswerte Auswirkung. Die SEP und RPD der MLR-Modelle signalisieren auf den ersten Blick eine Aufwertung der Modellqualität durch die Reduktion der Bandanzahl. Tatsächlich aber bewirkt das Resampling der ASD-Spektren auf 108 bzw. 126 Bänder eine Unterschätzung der Kohlenstoffgehalte größer 2% (Abb. 7.5.15).

Tab. 7.5.4: Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben für unterschiedliche spektrale Auflösungen.

Parameter	Organischer Kohlenstoff (OC)										
	CR				MLR*				PLSR**		
Halbwertsbreite (FWHM)	ASD [†]	10	HyMap [†]	20	10	HyMap [†]	20	ASD [†]	10	HyMap [†]	20
Bandanzahl	2151	215	126	108	215	126	108	2151	215	126	108
UV/Faktoren	1	1	1	1	12	5	7	4	4	3	3
SD _{kal} [†] [%]	0,323	0,324	0,324	0,323	0,343	0,323	0,335	0,331	0,331	0,327	0,325
SD _{val} [†] [%]	0,315	0,316	0,316	0,315	0,415	0,363	0,388	0,384	0,384	0,388	0,393
R ²	0,67	0,67	0,67	0,67	0,93	0,85	0,88	0,78	0,78	0,78	0,77
SEC [%]	0,226	0,226	0,226	0,227	0,103	0,147	0,133	0,175	0,175	0,176	0,179
SEP [%]	0,180	0,179	0,180	0,181	0,206	0,181	0,174	0,185	0,185	0,183	0,186
RPD	2,39	2,40	2,40	2,39	2,09	2,38	2,49	2,33	2,33	2,36	2,32

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; [†] ASD- bzw. HyMap-Konfiguration (vgl. Kap. 6.2.1, 6.3.1); *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **PLSR-Modelle berechnet auf Grundlage der Absorption.

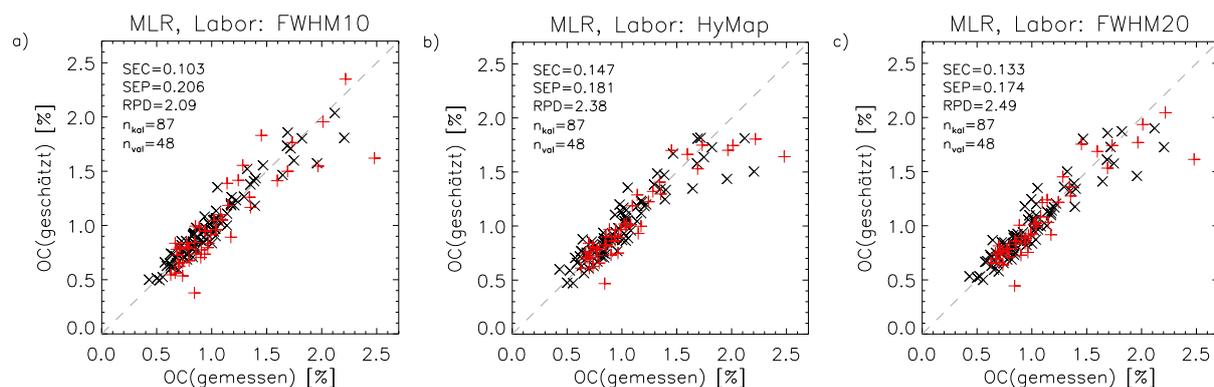


Abb. 7.5.15: Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten organischen Kohlenstoffgehalten für die MLR-Modelle mit unterschiedlichen spektralen Auflösungen a) FWHM=10nm, b) HyMap-Konfiguration, c) FWHM=20nm.

7.5.3 Modellkalibration und -validation: Tonmineralgehalt versus physikalische Tonfraktion

Die Position und Ausprägung stoffspezifischer Absorptionsmerkmale wird maßgeblich durch seine chemische Zusammensetzung bestimmt. Physikalische Eigenschaften verursachen im Allgemeinen Modifikationen des Rückstrahlvermögens und können die Intensität einzelner Absorptionsmerkmale beeinflussen. Sie bewirken aber keine Änderung der chemisch bedingten Absorptionsbanden (Ben-Dor, 2002). Idealerweise sollte bei der Quantifizierung des Tonanteils im Boden aus Reflexionsspektren daher das chemische Äquivalent im Mittelpunkt der Betrachtung stehen. Arbeiten,

in deren Fokus die Quantifizierung des Tonmineralbestandes steht, tragen dieser Tatsache Rechnung (Goetz et al., 2001; Krüger et al., 1998). Die nach wie vor wichtigste Methode zur Erfassung der mineralogischen Zusammensetzung feinkörniger Sedimente ist die Röntgendiffraktometrie (Hiltmann & Stribny, 1998). Der Einsatz derartiger Verfahren zur qualitativen und quantitativen Bestimmung der Tonmineralogie wird allerdings durch die sehr aufwendige, mit vielen methodischen Schwierigkeiten verbundene Laboranalytik erschwert und ist häufig nicht möglich. In der vorliegenden Arbeit erfolgten röntgendiffraktometrische Analysen für einen Teil der Bodenproben (*Bodenserie Buchholz*, vgl. Kap. 7.1.2).

Der Großteil der Studien zur quantitativen Reflexionsspektroskopie untersucht indes den Zusammenhang zwischen der physikalischen Tonfraktion und dem Spektralsignal (z.B. Lagacherie et al., 2008; Vågen et al., 2006; Kooistra et al., 2001). Die Tonfraktion wird routinemäßig in fast jedem Bodenlabor analysiert und ist wesentlicher Bestandteil einer Bodencharakterisierung (Schlichting et al., 1995), so auch in der vorliegenden Arbeit (vgl. Kap. 7.1.1). Sie ist eine physikalische Größe und gibt unabhängig vom Mineralbestand den Anteil aller Primärteilchen mit einem Korn-Äquivalentdurchmesser kleiner $2\mu\text{m}$ an. Demnach spiegelt die Tonfraktion nicht notwendigerweise die Summe der Tonminerale im Boden wider. Ihr können auch andere Minerale innewohnen. Gleichermaßen können Teile der Tonminerale in der Schlufffraktion enthalten sein. Abweichungen zwischen Tonmineralgesamtgehalt und der Tonfraktion können teils beträchtlich sein (Hammer, 2003b; vgl. auch Kap. 7.1.2). Welche Auswirkung diese Diskrepanz für die quantitative Reflexionsspektroskopie hat, soll hier mithilfe von Kalibrationsversuchen an der *Bodenserie Buchholz* (vgl. Anhang A 2) erhellet werden. Das Experiment soll vor allem Aufschluss darüber geben, ob der Mehraufwand, der mit einer Bestimmung der Tonmineralzusammensetzung verbunden ist, durch einen Zugewinn an Vorhersagegenauigkeit gerechtfertigt werden kann. Zu diesem Zweck wurden mit der *Bodenserie Buchholz* einerseits Kalibrationsmodelle mit der Zielvariable Tonfraktion (TF) und andererseits Kalibrationsmodelle mit der Zielvariable Tonmineralgesamtgehalt (TMG) generiert.

Die Ergebnisse in Tab. 7.5.5 zeigen, dass ein Zusammenhang zwischen der berechneten Summe der Tonminerale (TMG) und dem Spektralsignal der Böden mit keinem der Kalibrationsverfahren zufriedenstellend beschrieben werden kann. In allen drei Fällen werden weniger als 50% der Variabilität in y erklärt. Das CR-Modell, das ausschließlich auf dem Zusammenhang zwischen Tonmineralgehalt und Absorptionstiefe aufbaut und für das eine deutliche Verbesserung erwartet wurde, weist lediglich ein Bestimmtheitsmaß (R^2) von 0,27 auf. Dagegen resultiert die Verwendung der Zielvariable TF in einem R^2 von 0,69. Die Kalibrationsmodelle mit MLR und PLSR erzielen unter dieser Voraussetzung ein R^2 von 0,78 und 0,90 respektive. Auch ein Vergleich der Validationsfehler (SEP) legt nahe, dass Kalibrationen, deren erklärte Variable die Summe der Tonminerale ist, im Gegensatz zur physikalischen Tonfraktion nicht zielführend sind.

Verschiedene Ursachen kommen als Erklärung für dieses Ergebnis in Frage. Eine Möglichkeit ist, dass der Tonmineralbestand im Boden mit röntgendiffraktometrischen Methoden nicht ausreichend genau erfasst werden kann. So stellten zum Beispiel Viscarra Rossel et al. (2009) fest, dass einige Minerale, die mittels VNIR-Reflexionsspektroskopie detektiert wurden, mittels Röntgendiffraktometrie nur schlecht oder gar nicht aufgezeichnet wurden. Des Weiteren schildern Hammer & Kleeberg (2003) in ihren Ausführungen, dass die Angaben aus der RDA zur Konzentration der Tonminerale im Boden in Abhängigkeit von den eingesetzten Untersuchungsverfahren, Vorbehandlungen, Präparationstechniken und Kalibrationssubstanzen stark differieren können. Sie ermittelten im Rahmen einer Ringanalyse beträchtliche Schwankungen für die Tonmineralgehalte in carbonatfreiem, quartärem Lehm von 15-58% für Illit, 7-58% für Vermiculit und 8-50% für Kaolinit. Eine weitere mögliche Ursache ist, dass die Berechnung der Mineralanteile mit der SVD-Methode fehlerbehaftet ist und die getroffenen Annahmen den tatsächlichen Mineralbestand nicht ausreichend präzise beschreiben. Es ist auch denkbar, dass die physikalische Tonfraktion einen Großteil des tatsächlichen Tonmineralbestandes beinhaltet und unter den gegebenen analytischen Messfehlern den Zusammenhang hinreichend genau bzw. besser beschreibt als dies mit der RDA und der SVD-Methode der Fall ist. Beide Annahmen werden gestützt durch die Ausprägung der Modellparameter von MLR und PLSR zur Schätzung von TF und TMG. Wesentliche Wellenlängenbereiche tonspezifischer Absorption sind in den Kalibrationsmodellen mit der Zielvariable TMG von untergeordneter Bedeutung. Das MLR-Modell basiert nur auf einer einzigen X-Variable im VIS nahe 645nm. Clark et al. (1990) zufolge können Absorptionserscheinungen in diesem Bereich unter Umständen auf dreiwertiges Eisen in Illiten

zurückgeführt werden. Der charakteristische Absorptionsbereich von Tonmineralen zwischen 2200nm und 2500nm ist indes nicht modellrelevant. Ähnlich dem MLR-Modell zeigen die b-Koeffizienten und VIP des PLSR-Modells für den TMG eine Gewichtung der Wellenlängen zwischen 600nm und 700nm. Außerdem werden die Wellenlängen kleiner 450nm und größer 2400nm, in denen das Signalrauschen hoch ist, stark gewichtet (Abb. 7.5.16a). Im Gegensatz dazu fließen in das MLR-Modell, das die Schätzung der TF zum Ziel hat, Wellenlängen nahe 655nm, 1105nm und 2345nm ein. Im PLSR-Modell zur Schätzung der TF werden einschlägige Bereiche der Tonabsorption (nahe 1400nm, nahe 1900nm, 2100-2300nm, 2350nm) betont (Abb. 7.5.16b). Ferner treten im VNIR hohe VIP nahe 500nm und 650nm auf, die, wie bereits angesprochen, in Verbindung mit Eisenverunreinigungen in Tonmineralen gebracht werden können (Hunt & Salisbury, 1970; Clark et al., 1990).

Tab. 7.5.5: Fehlerkennwerte für die Schätzung der Tonmineralgesamtgehalte (TMG) und der physikalischen Tonfraktion (TF) aus Laborspektren der *Bodenserie Buchholz* (getrocknete Bodenproben).

Parameter	CR		MLR*		PLSR**	
	TF	TMG	TF	TMG	TF	TMG
UV/Faktoren	1	1	3	1	7	3
SD _{kal} [†] [%]	3,73	2,51	3,99	3,55	4,85	4,16
SD _{val} [†] [%]	4,21	2,79	4,50	3,45	8,23	6,19
R ²	0,69	0,27	0,78	0,50	0,90	0,40
SEC [%]	2,99	4,92	2,34	4,30	1,85	4,66
SD/SEC	1,87	1,14	2,39	1,30	3,02	1,20
SEP [%]	5,22	6,64	4,33	7,11	1,85	4,47
RPD	1,45	1,22	1,75	1,14	4,10	1,81

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **Spektren wurden transformiert in Absorption für alle PLSR-Modelle.

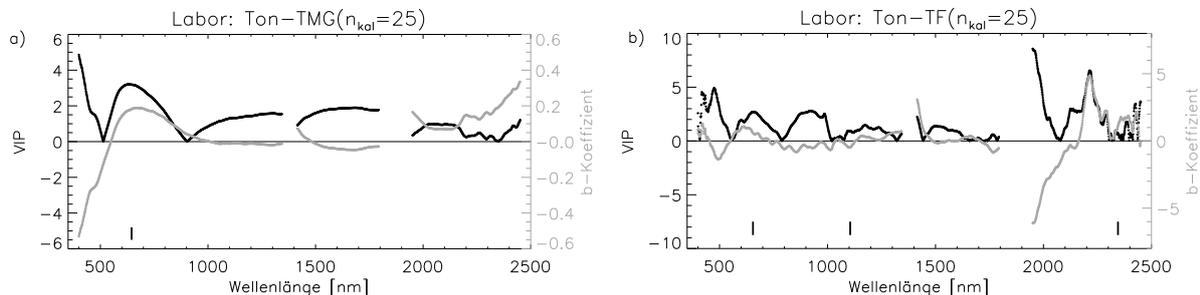


Abb. 7.5.16: VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Kalibrationen für die Regression auf die Tonmineralgesamtsumme (TMG) (a) und die physikalische Tonfraktion (TF) (b). Die schwarzen Balken im unteren Drittel der Diagramme kennzeichnen die selektierten Wellenlängen der MLR-Modelle.

7.5.4 Modellkalibration und -validation: Fokus Vegetation

Aus spektroskopischer Sicht lassen sich verallgemeinernd zwei Pflanzenzustände unterscheiden: photosynthetisch aktive, grüne Vegetation (PV) und photosynthetisch nicht aktive, seneszente, trockene Vegetation (NPV) (vgl. Abb. 4.1.6). Im Fokus dieses Kapitels steht der Einfluss trockener Vegetationsrückstände auf das Bodensignal und infolgedessen auf die Modellgüte.

Für die Untersuchungen wurde ein vereinfachter Ansatz unter Verwendung des Konzeptes der linearen spektralen Mischung (z.B. Smith et al., 1990) bei ausschließlicher Betrachtung der Ausgangsmaterialien (Endmember) Boden und Vegetation (NPV) gewählt⁶².

⁶² Das lineare spektrale Mischungsmodell kann in diesem Fall mathematisch beschrieben werden durch: $\rho_{mix} = \rho_{Boden} \cdot f_{Boden} + \rho_{Veg} \cdot f_{Veg}$ wobei ρ_{mix} der gemessene Reflexionsgrad, ρ_{Boden} der Reflexionsgrad von Boden, f_{Boden} der Anteil von Boden im Messfleck, ρ_{Veg} der Reflexionsgrad von Vegetation und f_{Veg} der Anteil von Vegetation im Messfleck.

Die Generierung der synthetischen Spektren mit unterschiedlichen Vegetationsanteilen erfolgte mit den Laborspektren der getrockneten Bodenproben als Boden-Endmember. Als Vegetations-Endmember diente eine Labormessung trockener Rückstände von Winterweizen.

Am Beispiel eines ton- und humusreichen Bodens sind in Abb. 7.5.17 die reinen Endmemberspektren und die synthetisch erzeugten Mischspektren veranschaulicht. In den Abbildungen a) und b) sind die normierten Reflexionskurven in den Spektralintervallen für die Parametrisierung der Absorptionsmerkmale von Ton und organischem Kohlenstoff dargestellt (vgl. Kap. 6.4.1). Mit Zunahme der seneszenten Vegetation wächst das Rückstrahlvermögen der Boden-NPV-Mischungen im VNIR und SWIR-I an. Im VIS ruft seneszente Vegetation keine, im NIR und SWIR-I nur schwache Absorptionsbanden hervor, welche im Vegetationsspektrum nahe 1200nm und 1750nm sichtbar sind. Der für organische Bodensubstanz charakteristische Kurvenverlauf im VNIR (vgl. Kap. 4.1.3.1) wird unter dem Einfluss trockener Vegetation gedämpft. Mit Zunahme der seneszenten Vegetationsanteile wird die Absorptionstiefe für organischen Kohlenstoff an Null angeglichen. Das SWIR-II wird maßgeblich durch die starke Absorption von Cellulose und Lignin nahe 2100nm sowie weiteren Absorptionsbanden zwischen 2300nm und 2500nm beeinträchtigt. Die Tonabsorptionsbande nahe 2200nm wird durch die Celluloseabsorption überlagert. Erreicht der Anteil trockener Vegetation mehr als 40% verlagert sich das Absorptionsmaximum in den Boden-NPV-Mischungen zwischen 2125nm und 2280nm von 2200nm nach 2260nm.

In Abb. 7.5.18 ist die relative mittlere Absorptionstiefe für organischen Kohlenstoff und Ton bezogen auf die tatsächliche Absorptionstiefe der reinen Bodenspektren gegen den Anteil an Boden aufgetragen. Bereits bei einem Anteil von 10% NPV verringert sich die Absorptionstiefe nahe 2200nm im Durchschnitt um ca. 27% und sinkt mit weiterer Zunahme des NPV-Anteils exponentiell ab. Die Absorptionstiefe nahe 662nm nimmt unter dem Einfluss trockener Vegetation linear ab. 10% NPV bewirken im Mittel eine Abnahme um ca. 7%. Diese Ergebnisse stützen die Aussagen von Murphy & Wadge (1994) sowie Murphy (1995), die trockenen Vegetationsrückständen im SWIR einen größeren Einfluss auf das Absorptionsverhalten von Böden attestierten als im VNIR.

Um Aussagen treffen zu können inwiefern sich trockene Vegetationsrückstände auf die Schätzungen des Ton- und OC-Gehaltes aus VNIR-SWIR-Spektren auswirken, wurden die Kalibrationsgleichung mit CR, MLR und PLSR auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro) aus Kap. 7.5.1 auf die spektralen Mischungen aus Boden und NPV übertragen. Dabei erfolgten die Schätzungen der Bodenparameter aus den Mischspektren in 10%-Schritten mit 10%, 20%, 30% ... bis 90% Vegetation.

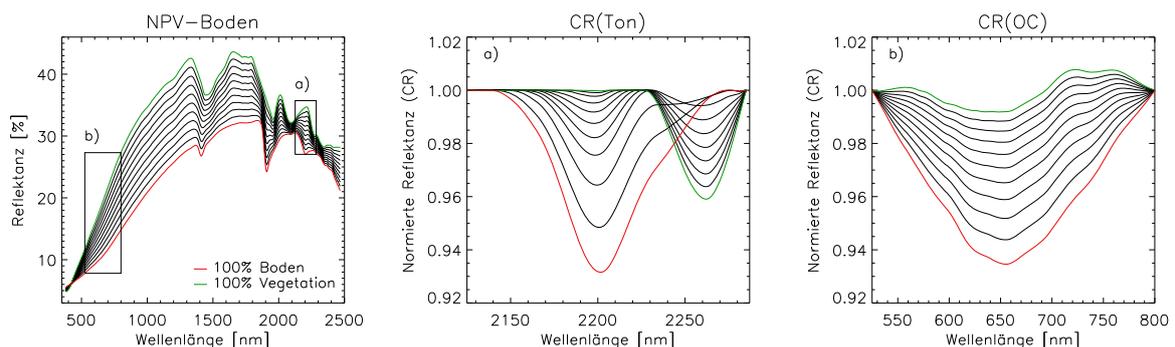


Abb. 7.5.17: Lineare spektrale Mischung erzeugt aus Boden und photosynthetisch nicht-aktiver Vegetation (NPV) am Beispiel eines ton- und humusreichen Bodens (31,94% Ton, 2,22% OC). Die Abbildung links stellt das gesamte Spektrum zwischen 400-2450nm dar. Die Abbildungen a) und b) beinhalten die normierten Spektren (*continuum removed*) für die Absorptionsbande von Ton nahe 2200nm (a) und die Absorption von OC im VNIR (b). Die Berechnung der spektralen Mischungen erfolgte in 10%-Schritten.

Wird der **Tongehalt** mittels CR geschätzt, verursachen schon geringe Anteile NPV (<10%) im Reflexionssignal sehr hohe Fehler (Abb. 7.5.19a). Die Verringerung der Absorptionstiefe nahe 2200nm durch trockene Vegetationsbestandteile (Abb. 7.5.18) führt erwartungsgemäß zu einer systematischen Unterschätzung des Tongehaltes im Boden. MLR und PLSR können Boden-

Vegetationsmischungen bis zu 10% NPV besser kompensieren. Der SEP steigt um ca. 25% und 31% respektive. Übersteigt der NPV-Anteil in den spektralen Mischungen jedoch mehr als 10%, werden die geschätzten Tongehalte mittels MLR hochgradig ungenau. Unabhängig von der Höhe des Tongehaltes werden die tatsächlichen Messwerte stark überschätzt. Das PLSR-Modell ist durch einen allmählichen Anstieg des Validationsfehlers gekennzeichnet, der aus einer Unterschätzung der Tonanteile im Boden resultiert. Diese nimmt mit Zunahme der photosynthetisch nicht aktiven Vegetation im Reflexionssignal systematisch zu und ist in Böden mit hohen Tongehalten besonders hoch. Schätzungen des Tongehaltes bei mehr als 20% NPV sind daher, obwohl der SEP (z.B. 3,90% bei 30% NPV) für bestimmte Anwendungen vielleicht akzeptabel erscheint, auch mittels PLSR als kritisch anzusehen.

Schätzungen des **organischen Kohlenstoffgehaltes** werden durch geringe Anteile trockener Vegetation unabhängig vom Kalibrationsverfahren weniger stark beeinträchtigt als dies für Ton beobachtet wurde (Abb. 7.5.19b). Bis zu 10% NPV sind praktisch keine Auswirkungen auf die Vorhersagegenauigkeit des MLR- und PLSR-Modells zu verzeichnen.

Der SEP des CR-Modells nimmt um ca. 12% zu. Bei mehr als 10% NPV steigt der SEP des MLR-Modells deutlich an. Ähnlich dem MLR-Modell für Ton bewirkt auch hier eine Zunahme des NPV-Anteils eine zunehmende Überschätzung der OC-Gehalte im Boden. Bei sehr hohen NPV-Anteilen (>70%) kehrt sich diese Tendenz um, wodurch die erneute Verringerung im SEP hervorgerufen wird. Der SEP von CR und PLSR beträgt bei etwa 40% NPV 0,270% OC. Inwiefern die Kalibrationsmodelle unter diesen Umständen noch verwertbare Ergebnisse bereitstellen können, hängt in erster Linie von der Anwendung ab. Für Böden mit sehr geringen OC-Gehalten, wie sie im Untersuchungsgebiet typisch sind, entspricht ein SEP von 0,270% bei einem Messwert von 0,761% OC ($Q_{0,25}$) einem Fehler von 35%.

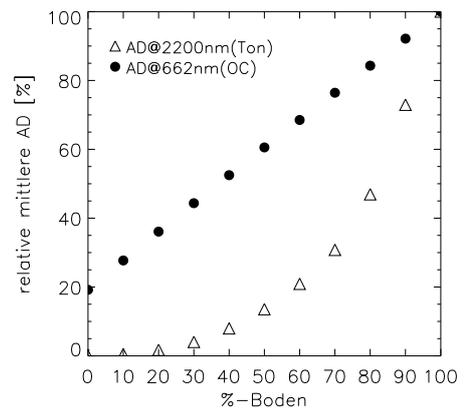


Abb. 7.5.18: Relative mittlere Absorptionstiefe (AD) für Ton und OC bezogen auf die AD für reinen Boden (100%) in Abhängigkeit vom Boden- bzw. Vegetationsanteil (NPV).

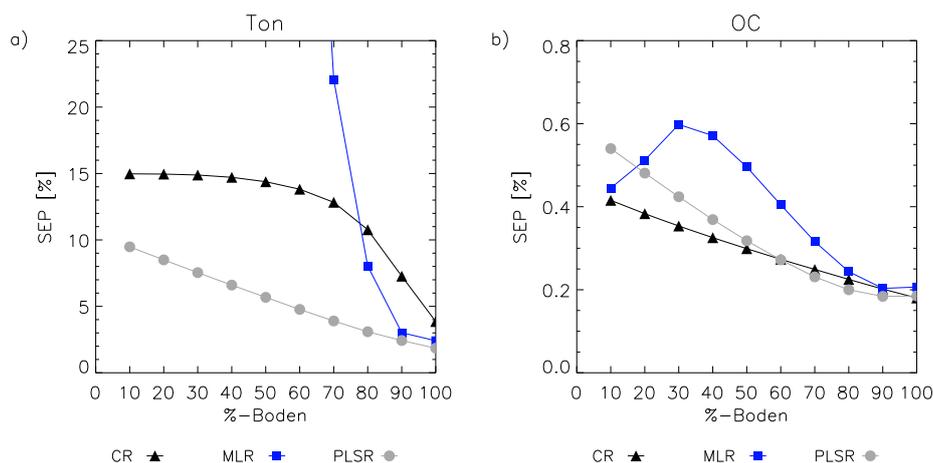


Abb. 7.5.19: Validationsfehler (SEP) der Kalibrationsmodelle mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro) für Ton (a) und OC (b) in Abhängigkeit vom Boden- bzw. Vegetationsanteil in den linearen spektralen Mischungen (Boden-NPV). MLR: multiple lineare Regression, CR: *Continuum Removal*, PLSR: *Partial Least Squares Regression*.

Das Experiment mit linearen spektralen Mischungen aus Boden und NPV zeigt, dass Vorkommen trockener Vegetation einen stärkeren Einfluss auf die Schätzung des Tongehaltes als auf die Schätzung des OC-Gehaltes hat, unabhängig von der Kalibrationsmethode. Wird der Tongehalt des Bodens geschätzt, können geringe Mengen trockener Vegetation (<10%) durch die multivariaten Methoden

(MLR, PLSR) grundsätzlich besser kompensiert werden als durch das CR. Für Schätzungen des OC-Gehaltes im Boden ist den Ergebnissen des Experimentes zufolge bei allen Methoden ein Anteil von bis zu 10% NPV unproblematisch. Werden PLSR oder CR zur Quantifizierung des OC-Gehaltes eingesetzt, können den Analyseergebnissen zufolge verwertbare Resultate für bestimmte Anwendungen möglicherweise bis zu einem Anteil von 40% NPV erzielt werden. Bei einer solchen Aussage muss aber berücksichtigt werden, dass alle Ergebnisse in diesem Kapitel auf Datensätzen mit einem homogenen Vegetationsanteil, d.h. 10%, 20%, ... 90% NPV beruhen. Im Gelände kann der Vegetationsanteil schon innerhalb eines Ackerschlauges sehr heterogen sein. Zudem können Melangen trockener und vitaler Vegetationsbestandteile auftreten, die hier nicht berücksichtigt wurden. Es muss daher davon ausgegangen werden, dass Modifikationen des reinen Bodensignals durch Vegetationsanteile in der Realität einen stärkeren Einfluss auf die Modellschätzungen ausüben als hier angenommen. Ein Indiz dafür geben die Experimente in Kapitel 7.5.1. Ein heterogener Wassergehalt der Bodenproben führte hier zu einer signifikanten Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeiten der CR- und MLR-Modelle.

7.6 Quantitative Feldspektroskopie

Spektrometermessungen unbedeckter Böden landwirtschaftlicher Nutzflächen des Testfeldes DEMMIN liegen vom Mai sowie September 2006 vor. Während im Mai 2006 jahreszeitlich bedingt ausschließlich Messungen der *Bodenserie Buchholz* (n=43) erhoben wurden, erstreckt sich die Feldspektroskopie im September 2006 auf 129 Messpunkte im Untersuchungsgebiet (*Bodenserie Demmin_Feld*) einschließlich der Messpunkte der *Bodenserie Buchholz*. In Kapitel 7.6.1 wird zunächst die Leistungsfähigkeit der drei Quantifizierungsmethoden (CR, MLR, PLSR) für die komplette Feldspektroskopie vom September 2006 (nachfolgend bezeichnet als Sept_Demmin, $n_{\text{kal/val}}=82/47$) evaluiert. Kapitel 7.6.2 greift die Feldspektren vom Mai 2006 der *Bodenserie Buchholz* auf und zieht einen Vergleich zu einer adäquaten Kalibrations- und Validationskonfiguration mit den Feldspektren vom September (nachfolgend bezeichnet als Mai_Buchholz bzw. Sept_Buchholz, $n_{\text{kal/val}}=25/18$). Dabei kommt ausschließlich das PLSR-Verfahren zum Einsatz. Ziel dieser Betrachtungen ist es, den Einfluss zeitlich bedingter spektraler Divergenzen (vgl. Kap. 7.3.2) auf die Modellkalibrationen zu untersuchen und einen Anhaltspunkt zu deren Robustheit und Stabilität und damit ihrer Übertragbarkeit zu gewinnen.

Angaben zu den statistischen Kennwerten aller Kalibrations- und Validationsdatensätze der Feldspektroskopie finden sich in Anhang B 2.

7.6.1 Modellkalibration und -validation mit Feldspektren des gesamten Testfeldes DEMMIN

7.6.1.1 Ton

Die Kalibrationsmodelle mit CR, MLR und PLSR mit den Feldspektren vom September 2006 sind durch Bestimmtheitsmaße (R^2) von 0,03, 0,76 und 0,87 respektive gekennzeichnet. Die Standardkalibrationsfehler (SEC) betragen 5,57% (CR), 2,96% (MLR) und 2,09% (PLSR) (Tab. 7.6.1). Mit einem Anteil an der erklärten Variabilität in y von beinahe Null, unterliegen die Schätzungen des CR-Modells rein dem Zufall. Gesicherte Rückschlüsse auf den Tongehalt im Boden durch Parametrisierung der stoffspezifischen Absorptionsbande nahe 2200nm sind mit den Feldspektren demzufolge nicht möglich. Davon zeugt auch ein Validationsfehler (SEP) von 6,85% Ton. Mithilfe der MLR können immerhin 76% der Variabilität in y erklärt werden. Die Zunahme des Standardfehlers der Regression mit Zunahme des Tongehaltes deutet aber an, dass der Zusammenhang zwischen dem Tongehalt und dem Reflexionssignal auch durch dieses Kalibrationsmodell nicht völlig korrekt beschrieben wird, was sich in der Validation mit 47 Datenpunkten bestätigt. Tongehalte größer 25% werden durch das MLR-Modell systematisch unterschätzt (Abb. 7.6.1b). Der SEP ist mit 3,26% Ton dementsprechend hoch. Für das PLSR-Modell besteht eine gute Übereinstimmung zwischen geschätzten und gemessenen Tonanteilen. Die Streuung der Datenpunkte des Kalibrations- und

Validationsdatensatzes ist im gesamten Wertebereich konstant (Abb. 7.6.1c). Vorhersagen zum Tongehalt von Böden mit dem PLSR-Modell sind mit einem Fehler (SEP) von 2,48% Ton behaftet. Klassifiziert man die Vorhersagefähigkeit der Kalibrationsmodelle nach Chang et al. (2001), ist das CR-Modell erwartungsgemäß in Gruppe C einzuordnen. MLR und PLSR gehören beide der Gruppe A an. Im Falle der MLR täuscht diese Gruppierung jedoch über die beschriebenen Probleme hinweg. Im Vergleich zu den Kalibrationen mit Laborspektren der getrockneten Böden (Tab. 7.5.1, otro) verlieren alle Kalibrationsmodelle mit Feldspektren an Vorhersagegenauigkeit.

Tab. 7.6.1: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes mit Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* (Sept_Demmin, $n_{\text{ges.}}=129$).

Parameter	Ton									
Methode	n_{kal}	n_{val}	UV/Faktoren	$SD_{\text{kal}}^{\dagger}$ [%]	$SD_{\text{val}}^{\dagger}$ [%]	R^2	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
CR	82	47	1	0,83	1,03	0,03	5,57	0,99	6,85	0,99
MLR*	82	47	6	4,50	5,06	0,76	2,96	1,86	3,26	2,08
PLSR**	82	47	9	5,32	6,27	0,87	2,09	2,63	2,48	2,73

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung;

**Spektren wurden transformiert in Absorption für alle PLSR-Modelle.

Interpretation der Modellparameter

Die *Variable Importance in the Projection* (VIP) und die b-Koeffizienten des PLSR-Modells implizieren eine sehr hohe Gewichtung der Wellenlängen nahe den Wasserabsorptionsbanden zwischen 1425nm und 1500nm sowie 1950nm und 1970nm. Außerdem treten hohe b-Koeffizienten und VIP zwischen 500nm und 600nm, nahe 940nm, 2000nm und 2060nm, 2200nm und 2400nm auf (Abb. 7.6.4a). Die Gewichtung der Wellenlängen um 2200nm kann auf die charakteristischen Absorptionserscheinungen von Tonmineralen durch die Kombination von OH-Streckschwingungen und Metall-OH-Beugeschwingungen zurückgeführt werden (Clark et al., 1990). Absorptionsbanden, die im VNIR auftreten, können nicht direkt in Verbindung mit Tonmineralen gebracht werden, aber mit Eisen, das Bestandteil der Gitterstruktur der Tonminerale sein kann. Hunt & Salisbury (1970), zum Beispiel, schrieben Absorptionsmerkmale nahe 500nm zweiwertigem Eisen in Montmorillonit zu. Clark et al. (1990) beobachteten Absorption nahe 650nm, verursacht durch dreiwertiges Eisen in Illit. Die Proben aus DEMMIN sind durch eine sehr enge Korrelation zwischen Eisen und Ton gekennzeichnet (Anhang A 3), so dass ihre Gewichtung in den PLSR-Modellen hiermit in Zusammenhang stehen kann. Ob die Wellenlängen nahe 2400nm in Beziehung mit Absorptionsmerkmalen von Tonmineralen stehen, lässt sich nicht eindeutig sagen. Illit weist schwache Absorptionsbanden nahe 2350nm und 2450nm auf (Clark et al., 1990). Die Gewichtung der Wellenlängen um 940nm und die starke Akzentuierung der b-Koeffizienten und VIP nahe 2000nm und 2060nm lässt sich nicht durch Absorption von Tonmineralen erklären. Ihre Ursachen werden in Kapitel 8.1.4 diskutiert.

Die graphische Darstellung der X- und Y-Scores gibt einen Hinweis darauf, dass das PLSR-Modell durch Variationen im Wassergehalt beeinflusst wird (Abb. 7.6.2). Abweichend von den vorwiegend negativen X-Scores der Böden mit niedrigen Tongehalten, die durch negative Y-Scores gekennzeichnet sind, weisen vier Datenpunkte trotz negativer Y-Scores auffallend hohe X-Scores auf (Dreiecke). Auch bei der Abbildung der X-Scores der ersten PLS-Komponente auf die X-Scores der dritten Komponente erscheinen diese Datenpunkte separiert von den übrigen Datenpunkten im rechten unteren Quadranten. Ein ähnliches Phänomen wurde in den X-Y-Score-Plots der Laborspektren mit variablen Wassergehalten beobachtet. Hier zeigten Spektren von Böden mit Wassergehalten größer gleich 10,0M.-% (feu3, feu4) positive X-Scores trotz negativer Y-Scores, d.h. geringer Tongehalte (vgl. Abb. 7.5.4). Gleichwohl war eine Gruppierung in den X-Scores der ersten und dritten PLSR-Komponente zu verzeichnen. Dass es Variationen im Wassergehalt sind, die das PLSR-Modell mit Feldspektren beeinflussen, bestätigen die vier abweichenden Datenpunkte (Dreiecke) mit niedrigen Y-Scores aber hohen X-Scores. Sie konnten anhand der Messpunktnummern den Feldspektrometermessungen des letzten Geländetages, an dem die Bodenfeuchte witterungsbedingt höher war als an den anderen Messtagen (vgl. Kap. 7.2.5), zugeordnet werden. Auffällig ist auch, dass die Skalierung der X1-Scores für die Feldspektren sehr ähnlich der Skalierung der Laborspektren mit

variablen Bodenwassergehalten (mix; vgl. Abb. 7.5.4) ist. Die Skalierung der X-Scores der otro-, feu2-, feu3- und feu4-Modelle erstreckt sich dagegen maximal von -5 bis 6. Entfernt man die Feldspektren des letzten Messtages aus dem Kalibrations- und Validationsdatensatz, verringert sich der SEP der PLSR auf 2,21% Ton. In den Kalibrationen mit MLR und CR bewirkt dies fast keine Änderung des SEP.

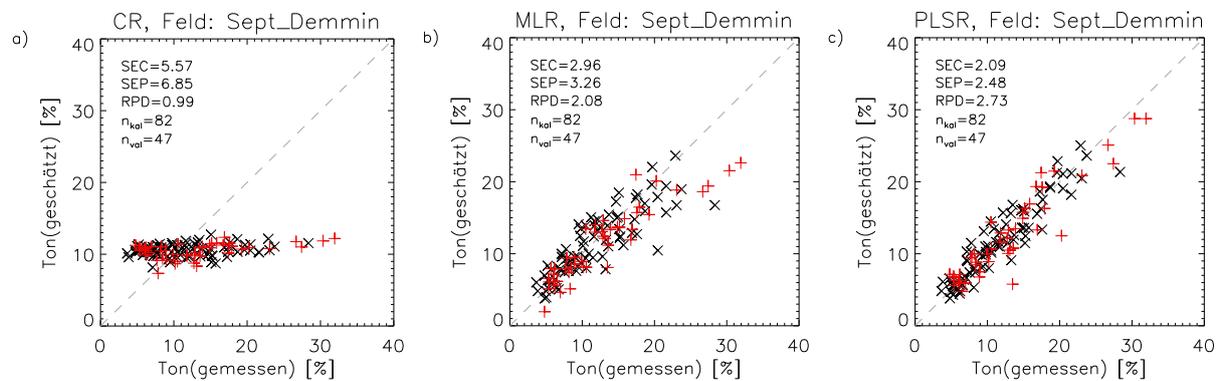


Abb. 7.6.1: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* geschätzten Tongehalte für die Kalibrationen Sept_Demmin mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (\times), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

Im Zuge der schrittweisen Variablenselektion der MLR wurden Wellenlängen bei 655nm, 705nm, 2175nm, 2205nm, 2245nm und 2345nm in das MLR-Modell aufgenommen. Sehr ähnliche Wellenlängenbereiche wurden auch für das PLSR-Modell mit Laborspektren der getrockneten Böden selektiert (Abb. 7.6.4a, schwarze Balken). Die geringere Vorhersagefähigkeit des MLR-Modells mit Feldspektren ist daher vermutlich auf eine schlechtere Ausprägung bzw. Modifikationen dieser Absorptionsmerkmale zurückzuführen. Da im Gegensatz zur PLSR in die MLR für Ton ausschließlich Wellenlängen mit Bezug zu Absorptionerscheinungen von Tonmineralen einfließen (vgl. Tab. 6.4.2), wirken sich Änderungen im Spektralsignal durch Umweltfaktoren stärker aus. Multikollinearität kann für das MLR-Modell mit Feldspektren ausgeschlossen werden, da die VIF-Werte unter 3,5 liegen.

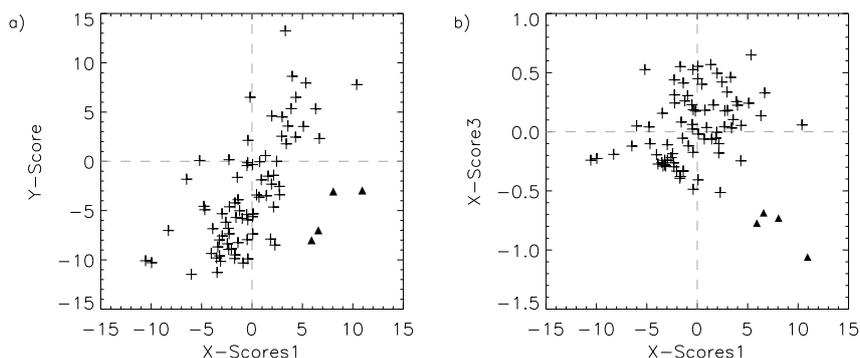


Abb. 7.6.2: Streudiagramm der X1-Y-Scores (a) sowie der X1-X3-Scores (b) des PLSR-Modells zur Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Feldspektren (Sept_Demmin, $n_{ges.}=129$).

7.6.1.2 Organischer Kohlenstoff

Die Kalibrationsmodelle mit CR, MLR und PLSR zu Schätzung des OC-Gehaltes mit den Feldspektren vom September 2006 sind durch Bestimmtheitsmaße (R^2) von 0,15, 0,83 und 0,54 gekennzeichnet. Die Standardkalibrationsfehler (SEC) betragen 0,296% (CR), 0,119% (MLR) und 0,222% (PLSR) (Tab. 7.6.2). Auch hier zeigt sich, dass einzelne Absorptionsbanden unter in-situ Bedingungen kein verlässlicher Schätzer sind. Der Anteil der erklärten Variabilität in den y-Daten beträgt mit dem CR-Modell 15%. Der Standardvalidationsfehler (SEP) beläuft sich auf 0,376% OC.

Tab. 7.6.2: Fehlerkennwerte für die Modellierung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* (Sept_Demmin, $n_{\text{ges.}}=129$).

Methode	Organischer Kohlenstoff (OC)		UV/Faktoren	SD _{kal} [†] [%]	SD _{val} [†] [%]	R ²	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
	n _{kal}	n _{val}								
CR	82	47	1	0,108	0,104	0,15	0,296	1,07	0,376	1,10
MLR*	82	47	9	0,281	0,341	0,83	0,119	2,65	0,238	1,74
PLSR**	82	47	4	0,258	0,273	0,54	0,222	1,42	0,227	1,82

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **Spektren wurden transformiert in Absorption für alle PLSR-Modelle.

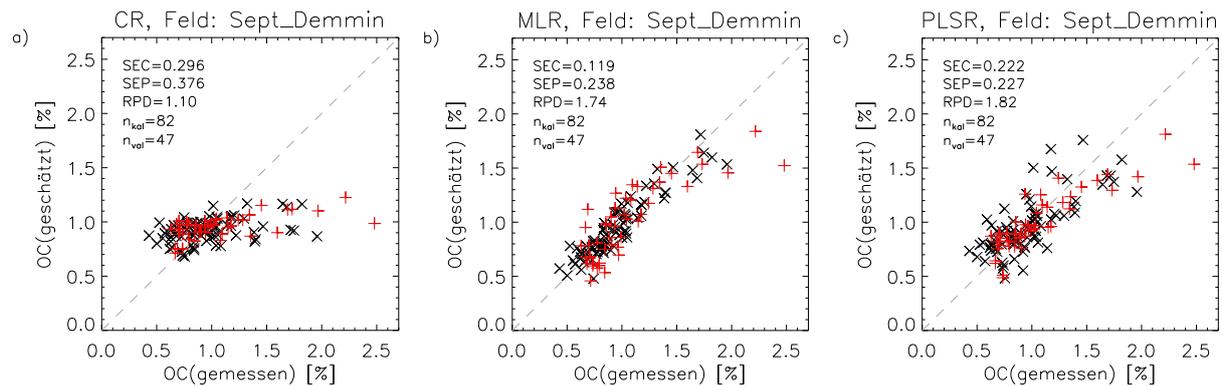


Abb. 7.6.3: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte (OC) für die Kalibrationen Sept_Demmin mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

Eine bessere Übereinstimmung zwischen gemessenen und geschätzten OC-Gehalten besteht für die multivariaten Methoden. Mithilfe der MLR lassen sich 83% der Variabilität in den y-Daten erklären, mithilfe der PLSR 54%. Während in der Kalibration die Streuung der Datenpunkte entlang der 1:1-Linie mehr oder weniger homogen ist und von robusten Modellen zeugt, tritt bei der Validation der Modelle eine Tendenz zur Unterschätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes humusreicher Böden mit mehr als ca. 2,0% OC auf (Abb. 7.6.3). Die Standardvalidationsfehler von 0,238% (MLR) und 0,227% (PLSR) sind damit nicht im gesamten Wertebereich gleichermaßen gültig. Auch für organischen Kohlenstoff sinkt die Vorhersagegenauigkeit der Schätzverfahren auf Basis der Feldspektroskopie im Vergleich zur Laborspektroskopie der getrockneten Böden (Tab. 7.5.2, otro).

Interpretation der Modellparameter

VIP und b-Koeffizienten des PLSR-Modells zeigen eine hohe Gewichtung der Wellenlängen nahe 400nm und 600nm im VIS, und für Wellenlängen größer 2250nm im SWIR-II. Außerdem ist der Bereich zwischen 1100nm und 1350nm vergleichsweise hoch priorisiert (Abb. 7.6.4b). Wie bereits für das PLSR-Modell mit Laborspektren der getrockneten Böden (otro) beobachtet, liegen die VIP auch für das PLSR-Modell mit den Feldspektren im gesamten Spektralbereich unter dem Grenzwert von 0,8. Eine Zuordnung der Wellenlängen zu Absorptionsbanden von organischen Kohlenstoffverbindungen ist schwierig, da Kohlenstoff sehr viele komplexe Verbindungen eingeht, die eine Vielzahl von Absorptionsbanden verursachen, die sich häufig überlappen (Ben-Dor et al., 1997; Workman & Weyer, 2008). Ferner bestehen enge Korrelationen zum Ton- und Eisengehalt im Boden, so dass der tatsächliche kausale Zusammenhang zwischen Modellparametern und seinen physikalischen Ursachen schwierig aufzuklären ist. Hinweise auf Faktoren, die zu der Verschlechterung der Vorhersagegenauigkeit geführt haben, konnten aus den VIP und b-Koeffizienten nicht direkt abgelesen werden. Diese werden in einem Vergleich mit den Modellparametern des otro-Modells aus Kapitel 7.5.1.2 wie für Ton in Kapitel 8.1.4 diskutiert.

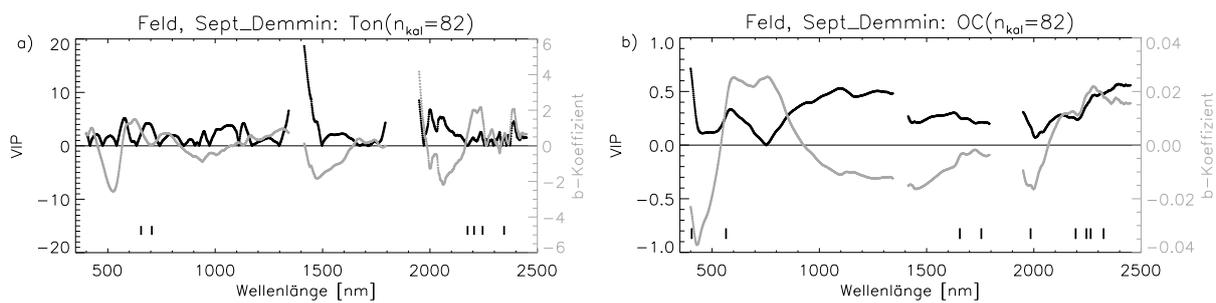


Abb. 7.6.4: VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Modelle auf Basis der Feldspektren des gesamten Testfeldes (Sept_Demmin, $n_{\text{ges.}}=129$) zur Schätzung des Tongehaltes (a) sowie des organischen Kohlenstoffgehaltes (b). Die schwarzen Balken im unteren Drittel der Diagramme kennzeichnen die selektierten Wellenlängen der entsprechenden MLR-Modelle.

Ähnlich dem Kalibrationsmodell für Ton mit Feldspektren ist in den X- und Y-Scores des PLSR-Modells für OC eine Separation der Feldspektren des letzten Messtages zu beobachten (nicht dargestellt). Erneut bestehen Parallelen zur Skalierung der X1-Scores der PLSR-Modelle mit Laborspektren des Datensatzes mit variierenden Bodenwassergehalten (mix). Wie aus den Untersuchungen in Kapitel 7.5.1.2 hervorging, verringern Variationen im Wassergehalt vor allem die Vorhersagegenauigkeit für Böden mit OC-Gehalten größer 2,0%. Genau dieser Effekt ist auch im MLR- und PLSR-Modell mit Feldspektren zu beobachten (Abb. 7.6.3). Eine Eliminierung der Spektren des letzten Messtages dämmt diesen Trend etwas ein, entfernt ihn aber nicht. Die SEP in diesen Modellen verbessern sich nur geringfügig um 0,01% OC.

Das MLR-Modell basiert ähnlich der PLSR auf Wellenlängen nahe 400nm und 600nm sowie auf mehreren Wellenlängen im SWIR-II (Abb. 7.6.4b, schwarze Balken). Darüber hinaus fließen zwei zusätzliche X-Variablen im SWIR-I nahe 1650nm und 1750nm ein, für die im PLSR-Modell keine Entsprechung existiert. Der Bereich zwischen 700-800nm und eine Wellenlänge nahe der ersten Wasserabsorptionsbande, welche in das MLR-Modell mit den Laborspektren der getrockneten Proben (otro) einfließen (vgl. Abb. 7.5.12), entfallen im MLR-Modell mit den Feldspektren.

7.6.2 Modellkalibration und -validation mit Feldspektren der Bodenserie Buchholz

Für die Untersuchungen in diesem Kapitel wurden zwei PLSR-Modelle neu generiert. Eines basiert auf knapp zwei Drittel der Feldspektren des Ackerschlagel bei Buchholz (*Bodenserie Buchholz*) vom Mai 2006 (Mai_Buchholz), das andere auf Feldspektren eben dieses Ackerschlagel vom September 2006 (Sept_Buchholz). Jeweils etwas mehr als ein Drittel der Feldspektren wurde von der Kalibration zurückgehalten und für die Validation verwendet. Darüber hinaus erfolgte eine Validation mit dem zeitlich divergenten Drittel der Feldspektren, d.h. das Kalibrationsmodell Mai_Buchholz wurde mit Feldspektren vom September validiert und das Kalibrationsmodell Sept_Buchholz mit Feldspektren vom Mai.

7.6.2.1 Ton

Das Kalibrationsmodell Sept_Buchholz ist durch einen Bestimmtheitsmaß (R^2) von 0,57, das Kalibrationsmodell Mai_Buchholz durch ein R^2 von 0,69 gekennzeichnet. Die Standardkalibrationsfehler (SEC) betragen 3,92% bzw. 3,15% Ton respektive (Tab. 7.6.3). Den SD/SEC-Werten zufolge besitzen beide Kalibrationsmodelle eine geringere Vorhersagefähigkeit als das PLSR-Modell Sept_Demmin, welches auf Böden aus dem gesamten Testfeld beruht (vgl. Tab. 7.6.1). Indes zeigt die Validation mit den verbleibenden Daten, die nicht in der Kalibration verwendet wurden, dass die Modelle dennoch eine hohe Validität besitzen. Beide PLSR-Modelle, Sept_Buchholz und Mai_Buchholz lassen sich dem RPD nach zu urteilen in Gruppe A nach Chang et al. (2001) einordnen. Während sich die gemessenen und geschätzten Tonanteile für das Modell Sept_Buchholz gleichmäßig entlang der 1:1-Linie verteilen (Abb. 7.6.5a), werden Böden mit höheren Tongehalten im PLSR-Modell Mai_Buchholz leicht unterschätzt (Abb. 7.6.5b). Umso erstaunlicher ist es, dass die

Validation dieses Modells mit dem zeitlich divergierenden Datensatz zufriedenstellende Ergebnisse liefert (Tab. 7.6.3, Abb. 7.6.5d). Der RPD beträgt 1,69. Auch wenn der Validationsfehler (SEP) bei einer Übertragung des Modells auf Spektrometermessungen eines anderen Aufnahmezeitpunktes höher ist, scheint eine Übertragung grundsätzlich möglich zu sein. Im Gegensatz dazu können die spektralen Charakteristika der Feldspektren vom Mai mit dem Kalibrationsmodell vom September (Sept_Buchholz) nicht bzw. nicht ausreichend erfasst werden. Der SEP (5,66%) ist etwa anderthalb mal so hoch wie der Fehler der Kalibration (SEC) und mehr als doppelt so hoch wie beim Einsatz des Modells für zeitlich übereinstimmende Spektrometermessungen (2,48%) (Abb. 7.6.5c). Durch Integration einiger weniger charakteristischer Feldspektren vom Mai in den Kalibrationsdatensatz Sept_Buchholz konnte die Robustheit des Kalibrationsmodells verbessert werden (nicht dargestellt). Dieses neue Kalibrationsmodell weist einen SEC von 4,18% Ton auf. Der Transfer dieses Modells auf die Validationsdaten vom Mai resultiert dann in einem SEP von 4,38% und einem RPD von 1,71⁶³, wobei die Streuung der Residuen für den gesamten Wertebereich konstant ist. Eine Übertragung gelingt demnach erst dann, wenn in den Kalibrationsmodellen auch die spektrale Charakteristik der Validationsdaten erfasst ist. Andererseits kann eine zu große Heterogenität des Kalibrationsdatensatzes zur Folge haben, dass der Standardfehler der Schätzung für quantitative Anwendungen zu groß wird (Brown et al., 2006).

Die VIP und b-Koeffizienten der PLSR-Modelle Sept_Buchholz und Mai_Buchholz zeigen Ähnlichkeiten mit dem PLSR-Modell Sept_Demmin in der Gewichtung der Wellenlängen zwischen 500nm und 600nm sowie 1950nm und 1970nm (Abb. 7.6.6 im Vergleich zu Abb. 7.6.4a). Die Rolle der tonspezifischen Absorption nahe 2200nm ist indifferent ausgeprägt. Darüber hinaus sind im PLSR-Modell Sept_Buchholz in Analogie zum PLSR-Modell Sept_Demmin Wellenlängen zwischen 2050nm und 2150nm hoch gewichtet. Dies ist im PLSR-Modell Mai_Buchholz nicht der Fall und deckt sich mit Differenzen, die in den spektralen Signaturen der Feldspektren vom Mai und vom September beobachtet wurden. Ferner zeichnen sich Unterschiede im Absorptionsverhalten nahe 490nm und 660nm in den VIP und b-Koeffizienten durch, die auf oberflächliches Moos und Nachbarschaftseffekte durch umgebende grüne Vegetation außerhalb des Messfleckes zurückgeführt wurden (vgl. Kap. 7.3.2). In diesen Wellenlängenbereichen treten im PLSR-Modell Mai_Buchholz Spitzen in den VIP und b-Koeffizienten auf, die im PLSR-Modell Sept_Buchholz nicht zu beobachten sind. Während die Feldspektren vom Mai aber offenbar zu Teilen die spektrale Charakteristik der Feldspektren vom September mit erfassen, ist dies umgekehrt nicht der Fall und schränkt die Übertragbarkeit des PLSR-Modells Sept_Buchholz ein.

Tab. 7.6.3: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes mittels PLSR auf Basis der Feldspektren der *Bodenserie Buchholz* vom September (Sept_Buchholz) sowie vom Mai (Mai_Buchholz).

Parameter	Ton										
Validation an zeitlich zugehörigen Datensätzen											
Datensatz*	n _{kal}	n _{val}	F	SD _{kal} [†]	SD _{val} [†]	R ²	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD	
Sept_Buchholz	25	18	5	4,87	6,74	0,57	3,92	1,28	2,48	3,06	
Mai_Buchholz	25	18	5	4,42	5,88	0,69	3,15	1,60	3,11	2,44	
Validation an zeitlich nicht zugehörigen Datensätzen (Transfer)											
Datensatz*	n _{kal}	n _{val}	F	SD _{kal} [†]	SD _{val} [†]	R ²	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD	
Sept_Buchholz (kal) an Mai_Buchholz (val) ^a	25	17	5	4,87	4,62	0,57	3,92	1,28	5,66	1,33	
Mai_Buchholz (kal) an Sept_Buchholz (val)	25	18	5	4,42	5,77	0,69	3,15	1,60	4,48	1,69	

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; [†]Spektren wurden transformiert in Absorption. ^aausreißerbereinigt (1 Ausreißer). F: Anzahl der PLSR-Faktoren.

⁶³ Das Modell wurde um einen Ausreißer bereinigt.

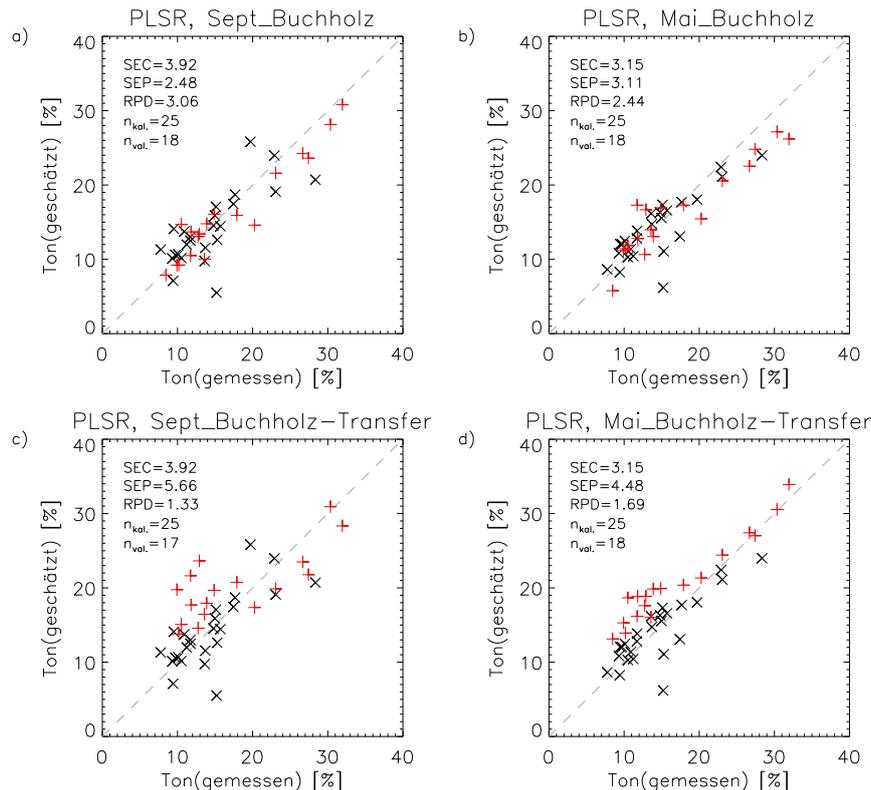


Abb. 7.6.5: Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten Tongehalten auf Basis der Feldspektren für die PLSR-Kalibrationen Sept_Buchholz und Mai_Buchholz. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (x), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

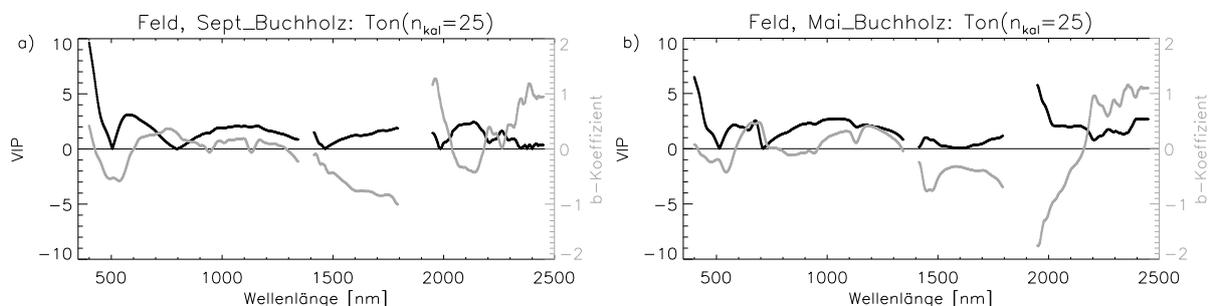


Abb. 7.6.6: VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Kalibrationen zur Schätzung des Tongehaltes mit den Feldspektren der *Bodenserie Buchholz* vom September (Sept_Buchholz) (a) und vom Mai (Mai_Buchholz) (b).

7.6.2.2 Organischer Kohlenstoff

Bei der Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes aus Feldspektren vom September resultiert die räumliche Beschränkung auf einen Ackerschlag in einer Verringerung der Vorhersagegüte. Zwar beziffert sich der Anteil der erklärten Variabilität in y sowohl für das PLSR-Modell Sept_Demmin als auch für das PLSR-Modell Sept_Buchholz auf 57%. Der Standardfehler der Kalibration (SEC) bzw. der Validation (SEP) ist im PLSR-Modell Sept_Buchholz aber ca. 22% bzw. 12% höher und beziffert sich auf 0,271% bzw. 0,253% OC respektive (Tab. 7.6.4). Fließen die Feldspektren vom Mai in die Kalibration ein (Mai_Buchholz), verbessert sich dagegen die Vorhersagegenauigkeit. Das Bestimmtheitsmaß (R^2) beträgt 0,72. SEC und SEP belaufen sich auf 0,199% und 0,227% OC. Während beide Modelle, Sept_Buchholz und Mai_Buchholz, für die Kalibrationsdaten eine relativ homogene Streuung entlang der 1:1-Linie zeigen, sind die Residuen der Validationsdaten fast ausnahmslos negativ, so dass die tatsächlichen OC-Gehalte der Böden durch die Modelle stets zu

niedrig eingeschätzt werden (Abb. 7.6.7a,b). Werden die Validationsdaten eines anderen Aufnahmezeitpunktes verwendet, ist dies überraschenderweise nicht der Fall. Mit dem PLSR-Modell Mai_Buchholz ist die Vorhersagegenauigkeit für die Validationsdaten vom September sogar größer als für die Validationsdaten vom Mai. Sie weisen zudem eine gleichmäßige Streuung entlang der 1:1-Linie auf (Abb. 7.6.7d). Der Fehler des Sept_Buchholz-Modells ist unabhängig vom Aufnahmezeitpunkt der Validationsdaten ähnlich hoch. Ausschließlich negative Residuen sind hier nur für höhere OC-Gehalte zu beobachten (Abb. 7.6.7c). Inwiefern die hohe zeitliche Variabilität von OC die Kalibrationen und Validationen beeinflussen kann, wird in Kapitel 8.2.2 diskutiert.

Tab. 7.6.4: Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mittels PLSR auf Basis der Feldspektren der *Bodenserie Buchholz* vom September (Sept_Buchholz) und vom Mai (Mai_Buchholz).

Parameter	Organischer Kohlenstoff (OC)									
Validation an zeitlich zugehörigen Datensätzen										
Datensatz*	n _{kal}	n _{val}	F	SD _{kal} [†]	SD _{val} [†]	R ²	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
Sept_Buchholz	25	18	4	0,325	0,297	0,54	0,271	1,29	0,253	1,69
Mai_Buchholz	25	18	3	0,313	0,346	0,72	0,199	1,75	0,227	1,89
Validation an zeitlich nicht zugehörigen Datensätzen (Transfer)										
Sept_Buchholz (kal) an Mai_Buchholz (val) ^a	25	17	4	0,325	0,247	0,54	0,271	1,29	0,259	1,69
Mai_Buchholz (kal) an Sept_Buchholz (val)	25	18	3	0,313	0,332	0,72	0,199	1,75	0,198	2,16

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *Spektren wurden transformiert in Absorption. ^aausreißerbereinigt (1 Ausreißer). F: Anzahl der PLSR-Faktoren.

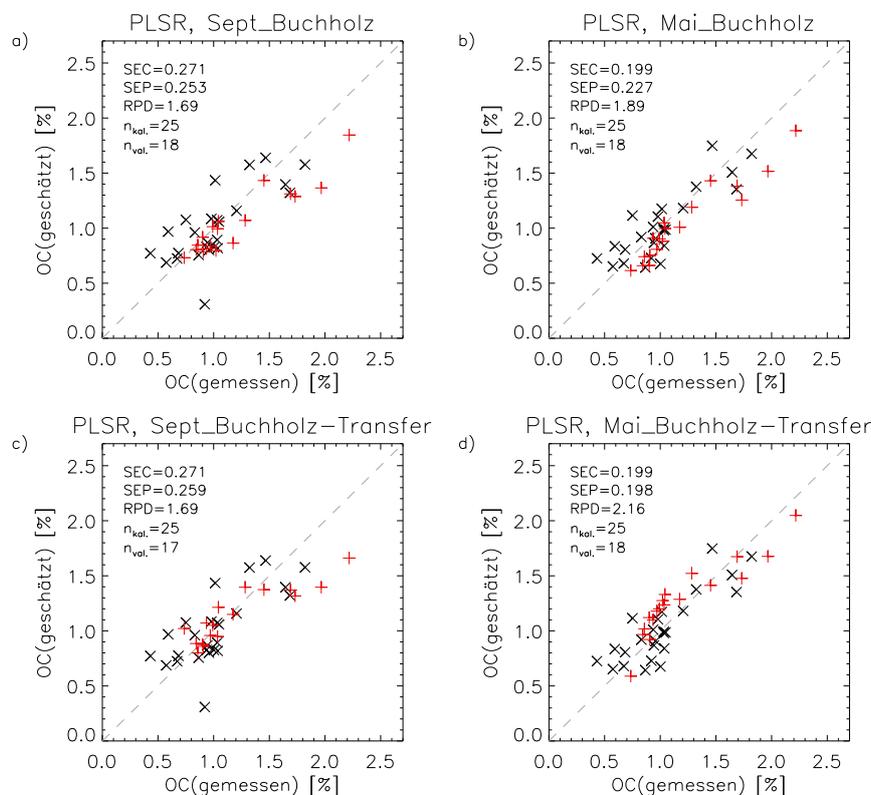


Abb. 7.6.7: Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten organischen Kohlenstoff-Gehalten (OC) auf Basis der Feldspektren für die PLSR-Modelle Sept_Buchholz und Mai_Buchholz. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (x), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

Die präsentierten Experimente mit den schlagspezifischen Kalibrationen machen deutlich, dass die PLSR-Modelle für OC weniger empfindlich gegenüber zeitpunktbedingten Variationen im Spektralsignal sind als die für Ton. Dies kann zweierlei Ursachen haben. Eine mögliche Ursache ist, dass typische Absorptionscharakteristika von Ton durch zeitliche Modifikationen der Oberflächenbeschaffenheit stärker beeinflusst werden als die von organischer Bodensubstanz. Eine andere Erklärung könnte sein, dass die Modellparameter der Kalibrationsmodelle für OC aufgrund der breitbandigen Absorption im VNIR allgemein weniger spezifisch ausgeprägt sind als für Ton, was sich in der prinzipiell geringeren Vorhersagefähigkeit der PLSR-Modelle für OC äußert, d.h. RPD kleiner oder nahe 2, während die RPD der Ton-Modelle alle über 2 liegen. Zeitpunktbedingte Variationen des Spektralsignals fallen dadurch möglicherweise weniger ins Gewicht.

In den VIP und b-Koeffizienten der PLSR-Modelle sind wie für Ton sowohl Gemeinsamkeiten als auch Unterschiede zwischen den Kalibrationsmodellen zu erkennen (Abb. 7.6.8). Charakteristisch für alle Kalibrationsmodelle zur Schätzung des OC-Gehaltes mit Feldspektren ist eine starke Gewichtung der Wellenlängen zwischen 400nm und 600nm. Anders als im PLSR-Modell Sept_Demmin spielt das SWIR in den schlagspezifischen PLSR-Modellen eine untergeordnete Rolle. Ebenso kommt dem NIR zwischen 1100nm und 1300nm keine große Bedeutung zu. Dass grüne Pflanzenbestandteile das Spektralsignal der Feldspektren im Mai im VIS beeinflusst (vgl. Kap. 7.3.2), manifestiert sich in den Modellkoeffizienten zur Schätzung des OC-Gehaltes durch eine hohe Gewichtung nahe 660-680nm. RPD von 1,89 bzw. 2,16 (Tab. 7.6.4) zeigen aber, dass dies für die Vorhersagefähigkeit des Modells nicht nachteilig ist.

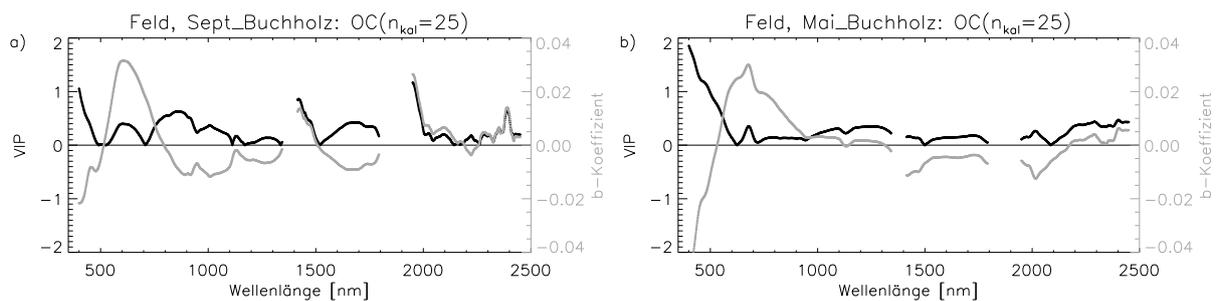


Abb. 7.6.8: VIP (schwarze Linie) und b-Koeffizienten (graue Linie) der PLSR-Kalibrationen zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit den Feldspektren der *Bodenserie Buchholz* vom September (Sept_Buchholz) (a) und vom Mai (Mai_Buchholz) (b).

7.7 Quantitative Abbildende Spektroskopie

7.7.1 Selektion von HyMap-Bildspektren für die Modellkalibration und -validation

Vegetation beeinflusst bereits in geringen Mengen die Quantifizierung des Ton- und OC-Gehaltes aus VNIR-SWIR-Spektren. Das belegen die Arbeiten von Bartholomeus et al. (2011) und Ouerghemmi et al. (2011) für vitale, grüne Vegetationsbestände. Dass auch photosynthetisch nicht aktive Vegetation (NPV) die Vorhersagegenauigkeit für Ton und organischen Kohlenstoff verringert, zeigt das Experiment mit linearen spektralen Mischungen aus Boden und NPV in Kapitel 7.5.4. Für Modellkalibrationen mit HyMap-Bildspektren wurden deshalb ausschließlich Bildspektren vegetationsfreier Referenzmesspunkte verwendet. In den HyMap-Daten von 2005 weisen 67 der 135 Messpunkte die spektrale Charakteristik unbedeckter Böden auf. In den Bilddaten von August 2004 sind 20 Messpunkte und in den Bilddaten vom Juli 2008 11 Messpunkte nicht von Vegetation bedeckt (vgl. Kap. 7.2.4).

Durch die Reduzierung der verwertbaren Referenzmesspunkte verändert sich der Wertebereich der Kalibrations- und Validationsdatensätze für die HyMap-Bilddaten. Für das Befliegungsjahr 2005 verengt sich der Tonanteil im Boden von ursprünglich 3,65% bis 32,95% auf 3,65% bis 23,75%. Minimum und Maximum des OC-Gehaltes bleiben unverändert, es steigt aber der Anteil der Böden

mit geringen OC-Gehalten. Die nutzbaren Referenzproben der Datensätze von 2004 und 2008 haben einen Tongehalt zwischen 4,80-18,66% und 5,22-19,72%, sowie einen organischen Kohlenstoffgehalt zwischen 0,53-1,96% und 0,43-1,03% (Anhang B 3).

In Analogie zu den Labor- und Feldspektren erfolgt in Kapitel 7.7.2 zunächst ein Vergleich der drei Kalibrationsmethoden (CR, MLR, PLSR) auf Basis der HyMap-Bildspektren von 2005 (HyMap_2005). Die Ergebnisse der Modellkalibrationen mit den HyMap-Daten von 2004 und 2008 (HyMap_2004, HyMap_2008) werden nach der Auswahl einer Kalibrationsmethode (Kap. 7.7.3) in Kapitel 7.7.4 vorgestellt.

7.7.2 Modellkalibration und -validation mit den HyMap-Daten von 2005

7.7.2.1 Ton

Ähnlich den Kalibrationen mit Labor- und Feldspektren werden die besten Ergebnisse auf Basis der HyMap-Bildspektren mit der PLSR erzielt (Tab. 7.7.1). Das Kalibrationsmodell weist ein Bestimmtheitsmaß (R^2) von 0,85 auf. Die Validation des Modells mit 29 Datensätzen, die von der Kalibration zurückgehalten wurden, resultiert in einem Standardfehler (SEP) von 1,94% Ton. Der RPD kennzeichnet ein Modell der Gruppe A nach Chang et al. (2001). Schätzungen des Tongehaltes aus den Bildspektren mit diesem Modell können demnach als zuverlässig betrachtet werden. Das MLR-Modell kann einen nahezu vergleichbar hohen Anteil der Variabilität in y erklären wie das PLSR-Modell. Der R^2 beträgt 0,82. Die Validationsdaten weisen wie bei der PLSR eine homogene Streuung entlang der 1:1-Linie auf (Abb. 7.7.1b,c), besitzen aber größere Residuen. Der SEP des MLR-Modells beträgt 2,46% Ton. Mit einem RPD von 2,13 ist auch dieses Modell der Gruppe A nach Chang et al. (2001) zuzuordnen. Wenig zufriedenstellende Resultate liefert das CR beim Versuch, ein Kalibrationsmodell mit den HyMap-Bildspektren zu generieren. Der R^2 beläuft sich auf nur 0,53. Der Standardfehler der Validation ist mit 3,81% Ton fast doppelt so hoch wie der SEP des PLSR-Modells. Ferner kann der Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten Tongehalten für Böden mit mehr als 15% Ton nur unzureichend abgebildet werden (Abb. 7.7.1a). Dass Schätzungen des Tongehaltes mit diesem Kalibrationsansatz als problematisch eingestuft werden müssen, zeigt auch ein RPD von 1,37 (Gruppe C nach Chang et al., 2001). In Analogie zu Beobachtungen bei der Laborspektroskopie wird der Tongehalt des Referenzpunktes 89 mit einem Tongehalt von 13,5% im Validationsdatensatz durch alle drei Kalibrationsmethoden stark unterschätzt. Für eine Erklärung sei an dieser Stelle auf Kapitel 7.5.1.1 verwiesen.

Tab. 7.7.1: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Tongehaltes mit den HyMap-Bildspektren von 2005 (HyMap_2005, $n_{\text{ges.}}=67$).

Parameter	Ton									
Methode	n_{kal}	n_{val}	UV/Faktoren	$SD_{\text{kal}}^{\dagger}$ [%]	$SD_{\text{val}}^{\dagger}$ [%]	R^2	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
CR	38	29	1	3,04	2,98	0,53	3,08	1,62	3,81	1,37
MLR*	38	29	4	4,40	5,42	0,82	1,93	2,60	2,46	2,13
PLSR**	38	29	3	4,72	5,05	0,85	2,03	2,46	1,94	2,70

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **Spektren wurden transformiert in erste Ableitung der Absorption für PLSR-Modelle.

VIP und b-Koeffizienten belegen, dass tonspezifische Absorptionsbanden auch für den Kalibrationsprozess der PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren maßgeblich sind. Das Modell stützt sich in hohem Maße auf Wellenlängen zwischen 2000nm bis 2500nm (Abb. 7.7.3a). Besondere Berücksichtigung findet die Absorption nahe 2200nm, die durch Kombination von OH-Streckschwingungen mit Metall-OH-Beugeschwingungen hervorgerufen wird und deren genaue Position vom bindenden Metall abhängt (Clark et al., 1990; Ben-Dor et al., 1999). Darüber hinaus treten hohe VIP und b-Koeffizienten im VIS zwischen 500nm und 650nm auf. Es wird vermutet, dass diese in Zusammenhang mit Absorptionscharakteristika von Eisen und Eisenverunreinigungen in Tonmineralen stehen. Details hierzu wurden im Zuge der Labor- und Feldspektroskopie bereits diskutiert. Keine Entsprechung ist in den Labormodellen zur Schätzung des Tongehaltes für die

Betonung der Wellenlängen nahe 700nm und 780nm im PLSR-Modell HyMap_2005 zu finden. Sie geben Grund zu der Annahme, dass einige HyMap-Spektren trotz vorheriger Selektion mit CAI und NDVI gerinfügig durch kleine Mengen vitaler Vegetation verändert sind. Das MLR-Modell weist für drei von vier X-Variablen eine direkte Entsprechung zum PLSR-Modell auf. Dies betrifft die HyMap-Bänder 6 (510,1nm), 16 (663,8nm) und 109 (2207,4nm). Ferner fließt in das MLR-Modell ein Band nahe 959,1nm ein (Abb. 7.7.3a, schwarze Balken im unteren Drittel). VIF kleiner 3,3 lassen darauf schließen, dass das MLR-Modell HyMap_2005 nicht von Multikollinearität betroffen ist (vgl. Anhang D 17).

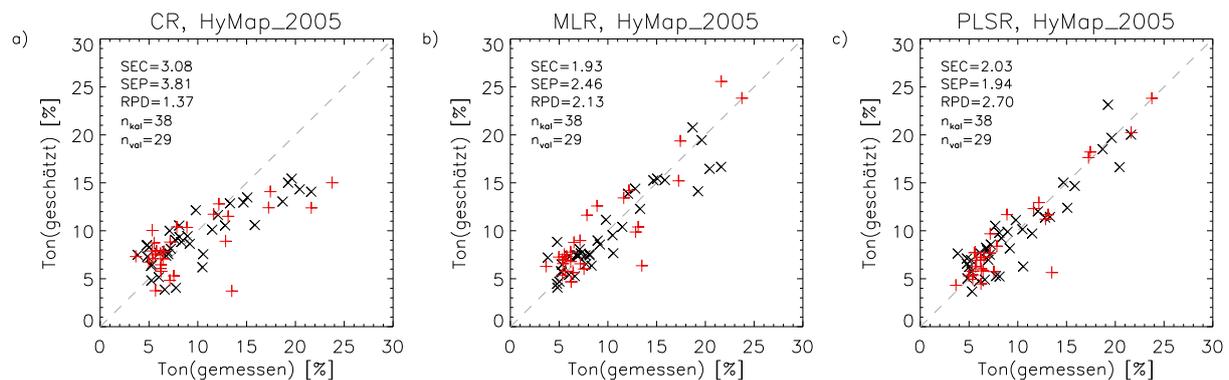


Abb. 7.7.1: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 27.05.2005 geschätzten Tongehalte für die Kalibrationen mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (×), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

7.7.2.2 Organischer Kohlenstoff

Kalibrationen mit CR, MLR und PLSR zur Schätzung des OC-Gehaltes aus HyMap-Bildspektren resultieren in Bestimmtheitsmaßen (R^2) von 0,48, 0,74 und 0,70 respektive (Tab. 7.7.2). Am wenigsten erfolgversprechend sind Schätzungen des OC-Gehaltes auf Basis der Absorptionstiefe nahe 662nm. Der Fehler der Validation beträgt 0,319% OC und wird flankiert von einem RPD von 1,17 (Modell der Gruppe C nach Chang et al., 2001). Die Kalibrationen mit MLR und PLSR weisen einander ähnliche Vorhersagequalitäten auf. Die SEC betragen 0,135% und 0,164% OC. Die SEP belaufen sich auf 0,195% und 0,207% OC respektive, wobei die Residuen beider Modelle homogen entlang der 1:1-Linie verteilt sind (Abb. 7.7.2b,c). Eine Ausnahme bildet ein Messpunkt des Validationsdatensatzes mit ca. 2,5% OC (MP70), der auch mit der Labor- und Feldspektroskopie nicht korrekt erfasst werden konnte. Dieser Messpunkt deutet darauf hin, dass höhere OC-Gehalte unterschätzt werden. Da sowohl im Kalibrations- als auch im Validationsdatensatz der HyMap-Daten von 2005 keine weiteren Referenzproben mit OC-Gehalten zwischen 1,5-2,5% oder größer 2,5% enthalten sind, ist eine finale Aussage zur Tendenz der Modelle bei höheren OC-Gehalten nicht möglich. Beruft man sich auf die Ergebnisse der Labor- und Feldspektroskopie, muss davon ausgegangen werden, dass die Modelle den OC-Gehalt von humusreichen Böden unterschätzen. Diese Annahme wird gestützt durch Untersuchungen von Gerighausen et al. (2012). Hierin trat ein nichtlinearer Trend auch in den PLSR-Modellen mit exakt der gleichen Kalibrationskonfiguration ($n_{\text{kai}}=38$) und Laborspektren auf, die zuvor durch ein spektrales Resampling an die HyMap-Daten von 2005 angepasst wurden. Ursachen des nicht-linearen Trends und alternative Vorgehensweisen werden in Kapitel 8.1.2 und 8.3 diskutiert.

Den VIP und b-Koeffizienten zufolge, basiert die Kalibration der PLSR in Übereinstimmung mit der Labor- und Feldspektroskopie (Abb. 7.5.10, Abb. 7.6.4) maßgeblich auf spektraler Information im VNIR, dem Wellenlängenbereich mit einem charakteristischen Reflexions- bzw. Absorptionsverhalten für organische Bodensubstanz (z.B. Baumgardner et al., 1985; Ben-Dor et al., 1999). Die Unterschiede in der spezifischen Ausprägung der Modellkoeffizienten der Labor-, Feld- und HyMap-Modelle sind Folge der Spektrentransformation. Modelle der LS und FS basieren auf den Absorptionsspektren. Das

Tab. 7.7.2: Fehlerkennwerte für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit den HyMap-Bildspektren von 2005 (HyMap_2005, $n_{\text{ges.}}=67$).

Parameter	Organischer Kohlenstoff (OC)									
	n_{kal}	n_{val}	UV/Faktoren	$SD_{\text{kal}}^{\dagger}$ [%]	$SD_{\text{val}}^{\dagger}$ [%]	R^2	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
CR	38	29	1	0,192	0,158	0,48	0,202	1,46	0,319	1,17
MLR*	38	29	3	0,262	0,266	0,74	0,135	2,19	0,195	1,91
PLSR**	38	29	2	0,258	0,220	0,71	0,164	1,80	0,207	1,80

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *MLR-Modelle berechnet auf Grundlage der 1. Ableitung; **Spektren wurden transformiert in erste Ableitung der Absorption für die PLSR-Modelle.

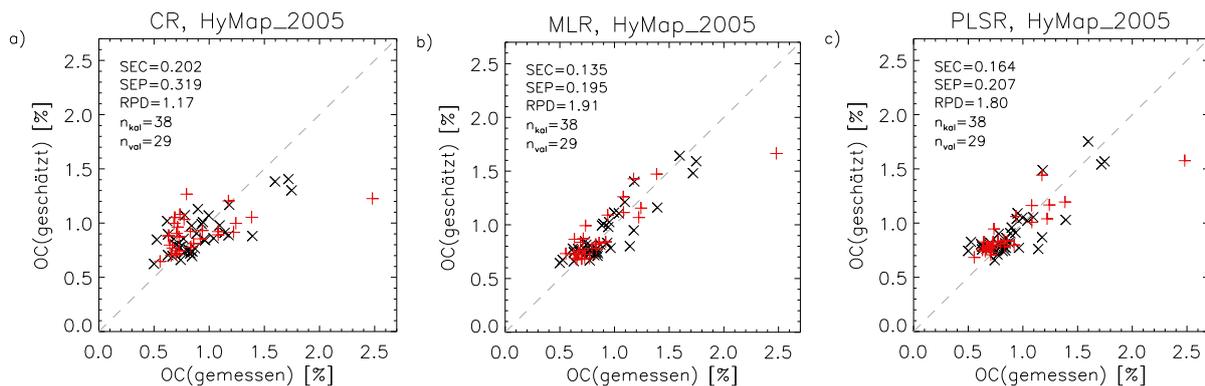


Abb. 7.7.2: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 27.05.2005 geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte für die Kalibrationen mit a) CR, b) MLR und c) PLSR. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (\times), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

PLSR-Modell zur Schätzung des OC-Gehaltes auf Basis der HyMap-Daten von 2005 wurde mit der ersten Ableitung der Absorption generiert. Besonders hohe Werte treten in diesem Modell nahe 550nm und 680nm auf (Abb. 7.7.3b). Ähnlich dem PLSR-Modell für Ton im vorigen Kapitel erfahren auch im PLSR-Modell für OC Wellenlängen nahe 770nm Gewichtung, obwohl im Labor-Modell der getrockneten Bodenproben (otro) hierfür keine unmittelbare Entsprechung existiert. Gleiches gilt für Wellenlängen nahe 1050nm, 1340nm und für Wellenlängen im SWIR-II nahe 2000nm, 2200nm und 2350nm. Wellenlängen nahe 1340nm stehen mit großer Wahrscheinlichkeit im Zusammenhang mit der starken atmosphärischen Wasserabsorption um 1400nm. Die Betonung des SWIR-II deutet darauf hin, dass das PLSR-Modell für OC mit den HyMap-Spektren auch Interkorrelationen zu Ton nutzt. Für die Wellenlängen nahe 1050nm konnte keine plausible Erklärung gefunden werden.

Die selektierten Wellenlängen des MLR-Modells zeigen nur eine geringfügige Übereinstimmung mit dem PLSR-Modell. Das MLR-Modell nutzt Wellenlängen nahe 602,5nm ähnlich dem PLSR-Modell sowie Wellenlängen nahe 1465,8nm und 1715,0nm (Abb. 7.7.3b, schwarze Balken im unteren Drittel). Eine Zuordnung dieser beiden Wellenlängen zu spektralen Merkmalen organischer Bodensubstanz ist aufgrund der sehr komplexen chemischen Verbindungen von organischem Kohlenstoff im Boden mit zahlreichen überlappenden Absorptionsmerkmalen schwierig (Ben-Dor & Banin, 1995a; Chang & Laird, 2002).

Mit drei Wellenlängen als X-Variablen der MLR und zwei PLSR-Komponenten ist die Zahl der Prädiktoren der multivariaten Modelle verhältnismäßig gering. Ein Zusammenhang zwischen der Zahl der Prädiktoren und der spektralen Auflösung oder der Größe des Datensatzes konnte nicht festgestellt werden.

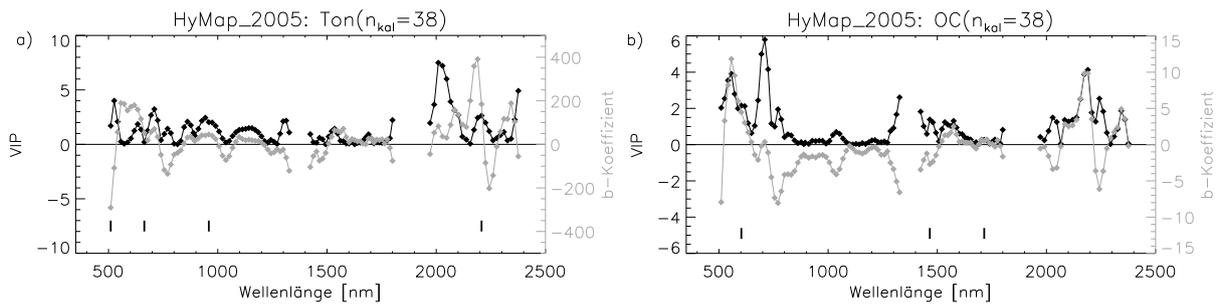


Abb. 7.7.3: VIP (schwarze Symbole) und b-Koeffizienten (graue Symbole) der PLSR-Kalibrationen mit Bildspektren der HyMap-Daten vom 27.05.2005 zur Schätzung des a) Ton- und des b) organischen Kohlenstoffgehaltes (OC). Die schwarzen Balken im unteren Drittel der Diagramme kennzeichnen die selektierten Wellenlängen der entsprechenden MLR-Modelle.

7.7.3 Selektion einer Kalibrationsmethode

In den vorangegangenen Kapiteln wurden drei methodische Ansätze (CR, MLR, PLSR) hinsichtlich ihrer Eignung für die Schätzung der Bodenparameter Ton und organischer Kohlenstoff aus Laborspektren unter verschiedenen Gesichtspunkten getestet. Hierzu zählten das Verhalten in Bezug auf (1) die Probenaufbereitung (getrocknet oder befeuchtet), (2) Variationen im Bodenwassergehalt, (3) die spektrale Auflösung und (4) Anteile photosynthetisch nicht aktiver Vegetation. Ferner wurden die Verfahren an Feldspektren und an Spektren abbildender Verfahren getestet. Die RPD dieser Modellkonfigurationen sind für alle drei Kalibrationsmethoden in Abb. 7.7.4 vergleichend gegenübergestellt. Hieraus wird deutlich, dass die PLSR der MLR und dem CR bei der Schätzung des Tongehaltes aus VNIR-SWIR-Spektren klar überlegen ist. Sie konnte Variationen im Wassergehalt der Bodenproben und Anteile photosynthetisch nicht aktiver Vegetation (NPV) am besten kompensieren (Kap. 7.5.1.1, 7.5.4). Auch beim Einsatz der Feldspektroskopie und der Abbildenden Spektroskopie (HyMap_2005) wurden die größten Vorhersagegenauigkeiten mit Kalibrationen der PLSR erzielt (Abb. 7.7.4, links). Für die räumlich explizite Schätzung des Tongehaltes aus den HyMap-Bilddaten wird nachfolgend deshalb die PLSR favorisiert.

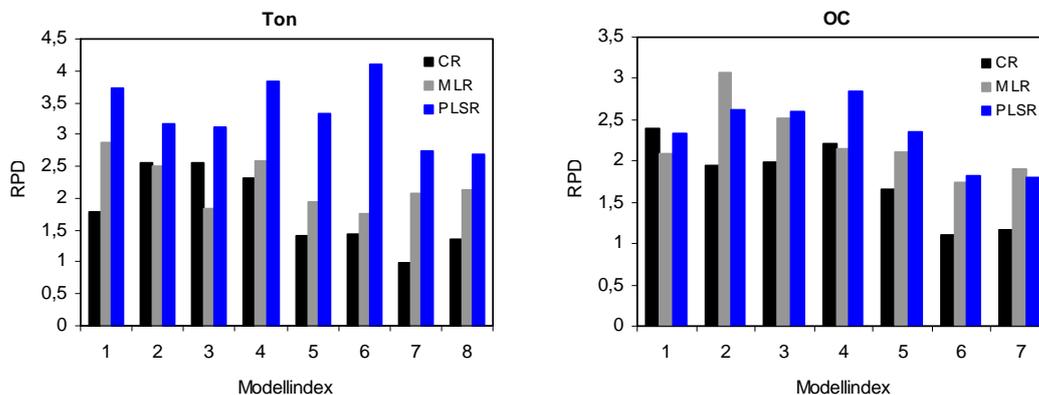


Abb. 7.7.4: RPD der Modelle zur Schätzung der Tongehaltes (links) und des organischen Kohlenstoffgehaltes (rechts). Modellindex für Ton: (1) Labor (otro, $n_{ges.}=135$), (2) Labor (feu2, $n_{ges.}=135$), (3) Labor (feu3, $n_{ges.}=135$), (4) Labor (feu4, $n_{ges.}=135$), (5) Labor (mix, $n_{ges.}=135$), (6) Labor (TF, $n_{ges.}=43$), (7) Feld Sept_Demmin ($n_{ges.}=129$), (8) HyMap_2005 ($n_{ges.}=67$); Modellindex für OC: (1) Labor (otro, $n_{ges.}=135$), (2) Labor (feu2, $n_{ges.}=135$), (3) Labor (feu3, $n_{ges.}=135$), (4) Labor (feu4, $n_{ges.}=135$), (5) Labor (mix, $n_{ges.}=135$), (6) Feld Sept_Demmin ($n_{ges.}=129$), (7) HyMap_2005 ($n_{ges.}=67$).

Bei der Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes ergibt sich kein so klares Bild zugunsten eines Kalibrationsverfahrens wie bei Ton. Mit Ausnahme des Kalibrationsmodells mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro) schneidet das CR-Verfahren immer am schlechtesten ab, d.h. es weist die geringsten RPD auf (Abb. 7.7.4, rechts). MLR und PLSR erzielen in einer Vielzahl der getesteten Konfigurationen nahezu gleichwertige Ergebnisse. Eine Ausnahme stellt das MLR-Modell mit den Laborspektren der 7,2M.-% wasserhaltigen Böden (feu2) dar, welches eine deutlich höhere

Modellgüte (RPD) als das entsprechende PLSR-Modell besitzt. Allerdings wiesen VIF größer 10 darauf hin, dass eben dieses Modell, sowie die MLR-Modelle otro und feu3 von Multikollinearität betroffen sind. Dagegen waren die Kalibrationen mittels PLSR mit den Laborspektren der getrockneten Proben (otro), der Proben mit 13,0M.-% Wassergehalt (feu4) und der Proben mit variablen Wassergehalten (mix) denen der MLR überlegen. Zudem zeigte sich im Experiment mit Boden-Vegetationsmischungen, dass das PLSR-Modell NPV-Anteile größer 10% besser abpuffern kann als die MLR. Für die räumlich explizite Schätzung des OC-Gehaltes aus den HyMap-Bilddaten wird im Folgenden die PLSR bevorzugt, da entgegen der MLR selbst mit stark multikollinearen Daten solide und robuste Modelle generiert werden können und Fehleinschätzungen durch Vegetationsanteile (NPV) geringer ausfallen als mittels MLR.

7.7.4 Modellkalibration und -validation mit den HyMap-Daten von 2004 und 2008

Auf Grundlage der Teilerfolge beim Transfer der schlagspezifischen Kalibrationsmodelle der Feldspektroskopie in Kapitel 7.6.2 wurde in einem ersten Versuch geprüft, inwiefern sich die PLSR-Modelle mit den HyMap-Daten von 2005 (Kap. 7.7.2) für die Schätzung des Ton- bzw. OC-Gehaltes aus den HyMap-Daten von 2004 und 2008 eignen (Tab. 7.7.3). Obwohl die Ergebnisse aus der Atmosphärenkorrektur belegen, dass die Bilddatensätze zueinander korrekt korrigiert wurden (Abb. 7.3.4) und der Wertebereich der Kalibrationsdaten für 2004 bzw. 2008 mit denen aus 2005 vergleichbar ist, sind die PLSR-Modelle HyMap_2005 für die Jahre 2004 und 2008 dem RPD nach zu urteilen weder für Ton noch für OC aussagekräftig. Für die multitemporale Auswertung der Bilddaten zur Schätzung der Bodenparameter wurden deshalb datensatzspezifische Kalibrationsmodelle erstellt (Tab. 7.7.4). Für den Parameter Ton wurden die besten Resultate durch Transformation der Bildspektren von 2004 und 2008 in die Absorption (Glg. 6.2.1) erzielt. Die Kalibrationsgleichungen zur Vorhersage des organischen Kohlenstoffgehaltes basieren in beiden Fällen auf der ersten Ableitung der Absorption.

Tab. 7.7.3: Validationsergebnisse für die Übertragung der PLSR-Modelle zur Schätzung des Ton- und OC-Gehaltes mit den HyMap-Bildspektren von 2005 (vgl. Kap. 7.7.2) auf die HyMap-Bildspektren von 2004 und 2008.

Übertragung des PLSR-Modells HyMap_2005 auf:	Ton		OC	
	SEP [%]	RPD	SEP [%]	RPD
HyMap_2004**	17,50	0,28	0,482	0,66
HyMap_2008**	23,97	0,19	0,158	0,93

**Spektren wurden transformiert in erste Ableitung der Absorption.

Tab. 7.7.4: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes mittels PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren von 2004 und 2008.

Parameter	Datensatz	n_{kal}	PLSR-Faktoren	SD_{kal}^{\dagger} [%]	R^2	SEC [%]	SD/SEC
Ton	HyMap_2004*	20	3	4,47	0,80	2,34	2,07
Ton	HyMap_2008*	11	3	4,24	0,92	1,60	2,86
OC	HyMap_2004**	20	3	0,270	0,62	0,213	1,48
OC	HyMap_2008**	11	5	0,120	0,45	0,161	0,91

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; *Spektren wurden transformiert in Absorption, **Spektren wurden transformiert in erste Ableitung der Absorption.

In Analogie zu den bereits vorgestellten Ergebnissen aus der LS, FS und IS ist die Vorhersagegenauigkeit für Ton auch hier größer als für organischen Kohlenstoff. Die Kalibrationsmodelle für **Ton** mit den HyMap-Bildspektren von 2004 (HyMap_2004) und 2008 (HyMap_2008) sind mit einem Quotienten aus Standardabweichung und Standardkalibrationsfehler (SD/SEC) von 2,07 und 2,86 in Gruppe A nach Chang et al. (2001) einzuordnen. Das Bestimmtheitsmaß (R^2) der Kalibrationen ist 0,80 und 0,92 respektive. Die Streudiagramme in Abb. 7.7.5 belegen, dass für alle Datenpunkte von 2008 eine sehr gute Übereinstimmung besteht. Beim Einsatz des Kalibrationsmodells von 2004 muss davon ausgegangen werden, dass Datenpunkte mit weniger als 8% Ton nur unzureichend beschrieben werden, da die Variabilität der Schätzwerte für nahezu identische Tongehalte (gemessene Werte) in diesem Bereich sehr hoch ist. Die Fehlerkennwerte in Tab. 7.7.4 legen nahe, dass das Kalibrationsmodell für den Datensatz vom Juli 2008 die größte Vorhersagegenauigkeit erzielt, gefolgt vom Kalibrationsmodell HyMap_2005 (vgl.

Tab. 7.7.1, PLSR) und HyMap_2004. Im Unterschied zum Kalibrationsmodell HyMap_2005 beruhen Angaben zur Validität und Vorhersagegenauigkeit der Kalibrationsmodelle HyMap_2004 und HyMap_2008 bedingt durch die geringe Anzahl von Referenzpunkten ohne Vegetationseinfluss ausschließlich auf der Kreuzvalidierung ohne eine externe Validation, was bei Aussagen zur Vorhersagegenauigkeit zu berücksichtigen ist. Dennoch bekräftigten Untersuchungen an Laborspektren von Gerighausen et al. (2012)⁶⁴, dass die Standardkalibrationsfehler selbst bei sehr wenigen Referenzdaten ein aussagekräftiges Fehlermaß darstellen können. So bezifferten sich die SEC der PLSR-Modelle der Laborspektroskopie in Gerighausen et al. (2012) mit eben diesen 20 bzw. 11 Messdaten auf 2,93% bzw. 3,57% Ton. Die Validation mit den übrigen 115 bzw. 124 Referenzproben des Labordatensatzes resultierte in SEP von 2,66% und 3,55% Ton.

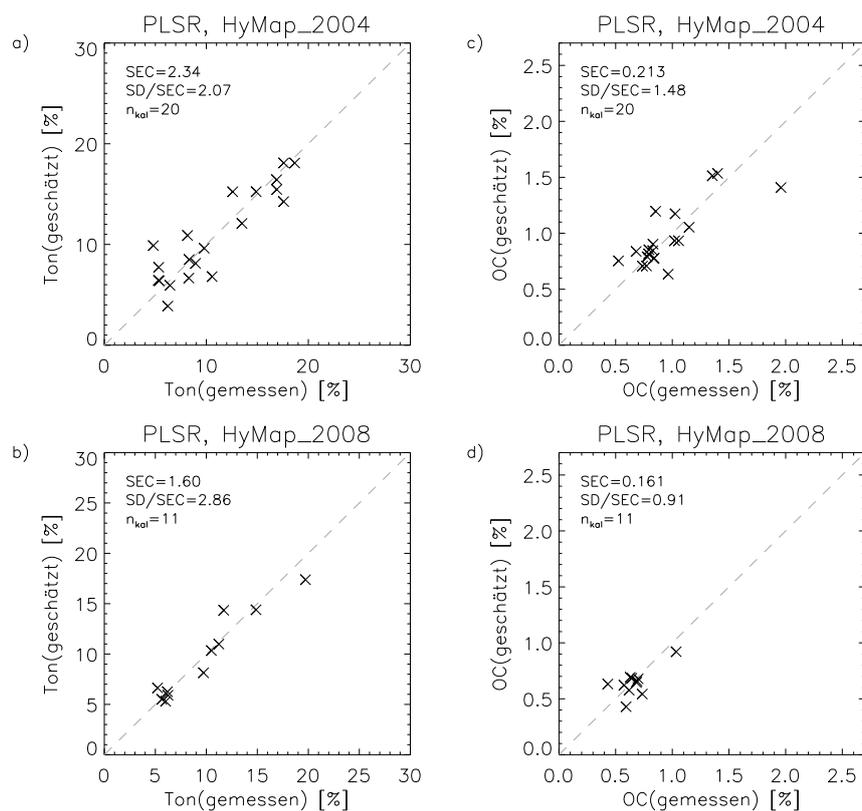


Abb. 7.7.5: Zusammenhang zwischen gemessenen und auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004 und 29.07.2008 geschätzten Tongehalte (a,b) und OC-Gehalte (c,d) für die PLSR-Kalibrationen HyMap_2004 und HyMap_2008.

VIP und b-Koeffizienten der PLSR-Modelle von 2004 und 2008 signalisieren ebenso wie das PLSR-Modell von 2005 eine hohe Gewichtung der Wellenlängen zwischen 2000nm und 2500nm mit einer Akzentuierung der Tonabsorptionsbande nahe 2200nm (Abb. 7.7.6a,b; vgl. dazu Abb. 7.7.3a). Dies ist im PLSR-Modell von 2008 weniger stark ausgeprägt. Hier spielen vielmehr Wellenlängen im VIS und NIR eine gewichtige Rolle. Anders als für die PLSR-Kalibrationen HyMap_2004 und HyMap_2005 wird hier der Bereich zwischen 900nm und 1300nm betont. Nahe 1100nm ist ein Maximum zu beobachten, für welches unter Umständen ein Zusammenhang zu Absorptionserscheinungen von zweiwertigem Eisen in Illit hergestellt werden kann (Clark et al., 1990). Wellenlängen zwischen 500nm und 650nm sind sehr wahrscheinlich verknüpft mit Absorptionsmerkmalen von Eisen oder Eisenverunreinigungen wie dies bereits in vorangegangenen Kapiteln diskutiert wurde (vgl. Kap. 7.5.1, 7.6.1.1).

⁶⁴ Die Laborspektren wurden in dieser Studie durch spektrales Resampling an die Konfiguration der HyMap-Daten von 2005 angepasst.

Das PLSR-Modell zur Schätzung des **organischen Kohlenstoffgehaltes** aus den HyMap-Bildspektren von 2004 (HyMap_2004) ist durch einen R^2 von 0,62 und einen SD/SEC-Quotient von 1,48 gekennzeichnet. Nach Chang et al. (2001) ist es ein Modell der Gruppe B mit moderaten Vorhersagequalitäten. Das Kalibrationsmodell HyMap_2008 für OC erreicht nur einen R^2 von 0,45. Mit einem SD/SEC-Quotienten kleiner 1 ist es ein Modell der Gruppe C nach Chang et al. (2001), dessen Eignung für Vorhersagen des OC-Gehaltes einer Prüfung bedarf (Tab. 7.7.4). Eine Ursache für Probleme bei der Kalibration können die sehr niedrigen OC-Konzentrationen der eingehenden Referenzdaten sein, die im Mittel bei 0,67% OC liegen und maximal 1,03% OC erreichen (Abb. 7.7.5). So berichtete Krüger et al. (1998), dass die Quantifizierung des organischen Kohlenstoffgehaltes aus Abraumhalden eines Braunkohletagebaus aufgrund sehr geringer Kohlenstoffanteile in den Böden nicht möglich war. Ferner ist es möglich, dass die zeitliche Variabilität von organischem Kohlenstoff einen negativen Einfluss auf die Kalibrationen ausübt. Eine ausführliche Diskussion hierzu folgt in Kapitel 8.2.2.

Die VIP und b-Koeffizienten der PLSR-Kalibrationen für OC für die Jahre 2004 und 2008 (Abb. 7.7.6c,d) weisen Ähnlichkeiten mit denen des PLSR-Modells für 2005 auf (Abb. 7.7.3b). Hohe Werte treten vor allem im VIS und NIR auf. Ebenso sind Wellenlängen nahe 2000nm, 2200nm und 2350nm im SWIR-II hoch gewichtet, die auf einen Bezug zum Tongehalt der Böden hinweisen.

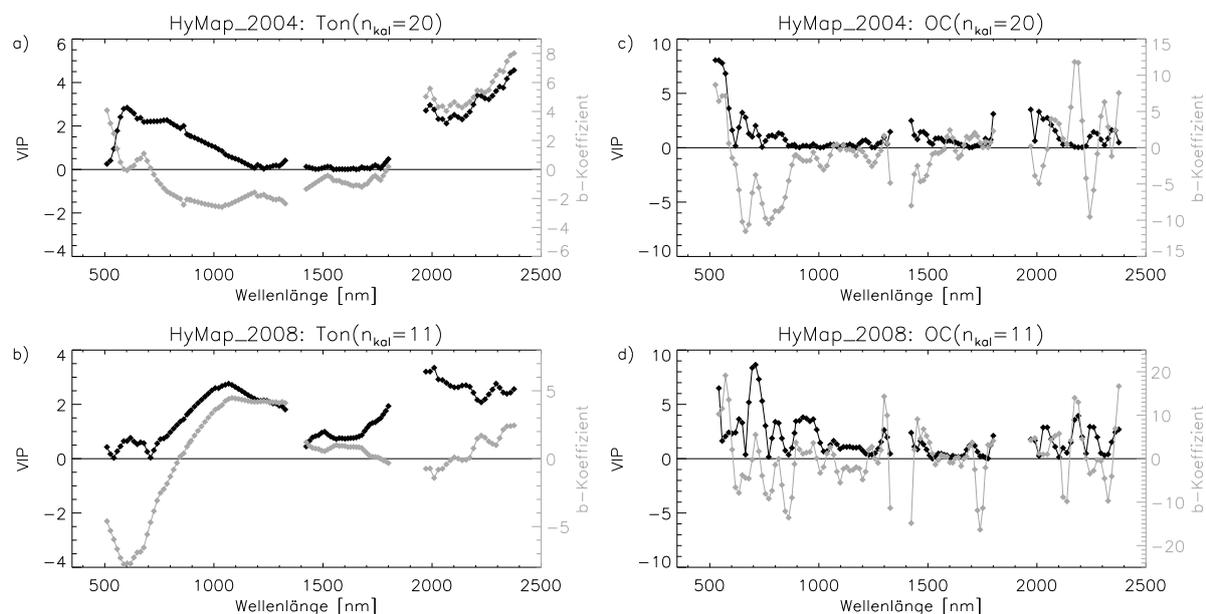


Abb. 7.7.6: VIP (schwarze Symbole) und b-Koeffizienten (graue Symbole) der PLSR-Kalibrationen auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004 und 29.07.2008 zur Schätzung des Tongehaltes (a,b) und des organischen Kohlenstoffgehaltes (c,d).

7.7.5 Modellkalibration und -validation mit spektral nicht aktiven Bodeneigenschaften

Eine wesentliche Voraussetzung für die erfolgreiche Anwendung spektroskopischer Methoden zur Ermittlung von Stoffbestandteilen ist, dass diese über Absorptionsmerkmale im entsprechenden Spektralbereich verfügen. Alle vorangegangenen Kapitel beschäftigten sich mit der Vorhersage zweier Bodeneigenschaften, dem Ton- und organischen Kohlenstoffgehalt, die diesen Anforderungen genügen. Quarz, Hauptbestandteil der Sand- und Schlufffraktion des Bodens, ist im VNIR-SWIR spektral nicht aktiv (Ben-Dor, 2002). Einige Autoren konnten an Laborspektren zeigen, dass die Vorhersage derartiger Bodenbestandteile aber unter Umständen über Korrelationen zu spektral aktiven Komponenten möglich ist (z.B. Ben-Dor & Banin, 1995b; Cozzolino & Morón, 2003; Sørensen & Dalsgaard, 2005). Wären darüber hinaus verlässliche Schätzungen zum Sand- und Schluffgehalt des Bodens mit der Abbildenden Spektroskopie auf regionaler Ebene möglich, würde dies eine umfassende Charakterisierung der Korngrößenverteilung des Bodens gestatten, die „eine der

wichtigsten Eigenschaften für die Bodenentwicklung, die Ertragsfähigkeit und die Puffer- und Filtereigenschaften eines Bodens“ ist (Scheffer & Schachtschabel, 1998). Vorhersagen zur Höhe der Sand- oder Schlufffraktion im Boden sind vor allem im Hinblick auf die angestrebte Anwendung von Pedotransferfunktionen (PTF), von denen fünf der insgesamt sechs PTF neben dem Gehalt an Ton und organischem Kohlenstoff auch auf Angaben zum Sand- oder Schluffgehalt des Bodens aufbauen (Tab. 6.5.1), von hohem Wert.

Der Sandgehalt der Böden des Testfeldes DEMMIN ist mit dem Tongehalt stark negativ korreliert. Ebenso besteht ein negativer Zusammenhang zwischen dem Sandgehalt und dem organischen Kohlenstoffanteil sowie dem Eisenanteil im Boden (Anhang A 3). Die Schlufffraktion zeigt nur eine schwache Korrelation mit den spektral aktiven Bodenkomponenten wie Ton, organische Bodensubstanz, Carbonat-Kohlenstoff oder Eisen. Auf ihren Anteil lässt sich aber indirekt über die Menge an Sand schließen. Aufgrund dieser engen Wechselbeziehungen zwischen den Bodeneigenschaften wird ein Versuch unternommen, PLSR-Modelle mit den Zielvariablen Sand- und Schluffgehalt auf Basis der HyMap-Bildspektren zu generieren. Die Ergebnisse dieses Experimentes werden nachfolgend beschrieben. Die statistischen Kennwerte dieser Kalibrations- und Validationsdatensätze sind in Anhang B 4 erfasst.

Mit den HyMap-Bildspektren von 2005 und 2008 lassen sich aussagekräftige PLSR-Modelle zur Schätzung des **Sandgehaltes** generieren. Das Bestimmtheitsmaß (R^2) beträgt 0,75 und 0,76. Die Standardkalibrationsfehler (SEC) belaufen sich auf 5,64% und 3,61% Sand (Tab. 7.7.5). Für den Datensatz von 2005 konnte die Vorhersagegenauigkeit der Modelle zusätzlich durch eine Validation an 29 Datenpunkten, die nicht während der Kalibration verwendet wurden, bestätigt werden (SEP=4,51%, RPD=2,46; Abb. 7.7.7b). Der RPD bzw. der SD/SEC-Quotient kennzeichnet Modelle der Gruppe A (HyMap_2005) und B (HyMap_2008) nach Chang et al. (2001). Die Schätzung des Sandgehaltes mit dem PLSR-Modell HyMap_2004 resultierte nur in einem R^2 von 0,30 (Abb. 7.7.7a) sowie einem vergleichsweise hohen Standardfehler und geringen SD/SEC-Quotienten (SEC=5,58%, RPD=1,11). Nach Chang et al. (2001) ist das Modell in Gruppe C einzustufen.

Tab. 7.7.5: Fehlerkennwerte für die Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes mittels PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren von 2004, 2005 und 2008.

Parameter	Datensatz	n_{kal}	n_{val}	F	SD_{kal}^{\dagger} [%]	SD_{val}^{\dagger} [%]	R^2	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
Sand	HyMap_2004**	20	-	2	4,28	-	0,30	5,58	1,11	-	-
Sand	HyMap_2005**	38	29	3	9,77	9,64	0,75	5,64	1,93	4,51	2,46
Sand	HyMap_2008**	11	-	2	5,12	-	0,76	3,61	1,78	-	-
Schluff	HyMap_2004**	20	-	1	2,88	-	0,44	3,14	1,30	-	-
Schluff	HyMap_2005**	38	29	2	5,44	6,22	0,62	4,43	1,57	4,13	1,73
Schluff	HyMap_2008**	11	-	2	1,66	-	0,57	1,69	1,35	-	-

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; ^{**}Spektren wurden transformiert in erste Ableitung der Absorption für PLSR-Modelle; F: Anzahl der PLSR-Faktoren.

Die Kalibrationen zur Schätzung des **Schluffgehaltes** gestalteten sich wie erwartet problematischer als für Sand. Mit den Bilddaten von 2005 wurden analog zu den PLSR-Modellen für Sand die besten Ergebnisse erzielt, wobei die Streuung zwischen gemessenen und geschätzten Schluffgehalten sichtbar größer ist (Abb. 7.7.7e). Das Kalibrationsmodell besitzt einen R^2 von 0,62. Der Fehler der Schätzung beträgt 4,13%. Der RPD (1,73) kennzeichnet ein Modell der Gruppe B nach Chang et al. (2001). Die Fehlermaße der Modelle HyMap_2004 und HyMap_2008 für Schluff signalisieren ähnlich dem Modell HyMap_2004 für Sand mit SD/SEC-Werten von 1,30 und 1,35, dass der Zusammenhang zwischen dem Schluffgehalt der Proben und ihrem spektralen Signal mit diesem Modell für quantitative Aussagen wahrscheinlich nicht hinlänglich genau beschrieben werden kann (Abb. 7.7.7d,f). Dass Kalibrationen mit den Daten von 2004 für Sand und Schluff und den Daten von 2008 für Schluff in ihrer Vorhersagefähigkeit mangelhaft sind, die Daten von 2005 aber akzeptable bis gute Ergebnisse erzielen, lässt die Schlussfolgerung zu, dass der Wertebereich der verfügbaren Daten höchstwahrscheinlich eine ausschlaggebende Rolle bei der Kalibration spielt und Verbesserungen durch umfangreichere Kalibrationsdatensätze erzielt werden können.

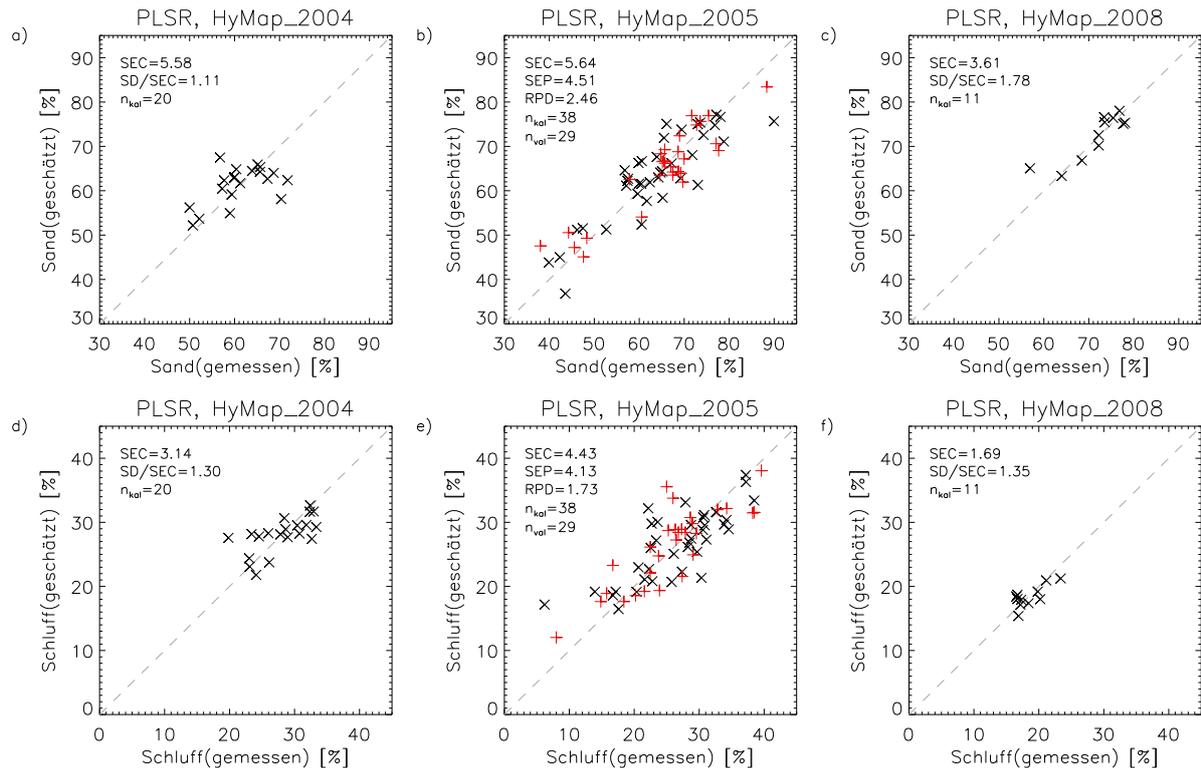


Abb. 7.7.7: Zusammenhang zwischen gemessenen und geschätzten Sandgehalten (a-c) bzw. Schluffgehalten (d-f) auf Basis der HyMap-Bildspektren vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008 für die PLSR-Kalibrationen HyMap_2004, HyMap_2005 und HyMap_2008. Kalibrationsdatensatz: schwarze Symbole (x), Validationsdatensatz: rote Symbole (+).

Die VIP und b-Koeffizienten der PLSR-Modelle zur Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes können Auskunft über die physikalische Basis dieser Kalibrationsmodelle liefern (Abb. 7.7.8). Alle PLSR-Modelle für Sand sind durch sehr hohe VIP und b-Koeffizienten im SWIR-II gekennzeichnet (Abb. 7.7.8a-c). Ferner sind die Modellkoeffizienten im visuellen Bereich des Spektrums zwischen 500nm und 600nm hoch gewichtet. In den PLSR-Modellen für 2004 und 2005 sind davon auch Wellenlängen zwischen 700nm und 800nm betroffen. Ein ähnliches Verhalten wurde in den PLSR-Modellen zur Schätzung des Tongehaltes festgestellt, nur mit umgekehrten Vorzeichen (vgl. Abb. 7.7.3a, Abb. 7.7.6a,b). In der Tat besteht zwischen den b-Koeffizienten der PLSR-Modelle für Sand und den b-Koeffizienten der PLSR-Modelle für Ton eine sehr enge negative Korrelation. Der Pearson Korrelationskoeffizient bezieht sich auf -0,84, -0,88 und -0,73 für die Modelle von 2004, 2005 und 2008⁶⁵. Der Zusammenhang zu den b-Koeffizienten der OC-Modelle ist weniger prägnant bis gar nicht ausgeprägt. Die b-Koeffizienten der Schluff-Modelle weisen mit umgekehrten Vorzeichen Parallelen zu den b-Koeffizienten der Sand-Modelle auf. Der Pearson Korrelationskoeffizient für die Modelle von 2005 und 2008 beträgt -0,85 und -0,89. Kein nennenswerter Zusammenhang zu anderen Bodenparametern, d.h. Sand, Ton oder OC, konnte für die b-Koeffizienten des Schluffmodells von 2004 gefunden werden. Hohe b-Koeffizienten und VIP nahe 500nm, 700nm, 800nm und 2200nm deuten aber auf einen mittelbaren Zusammenhang zu Ton und organischem Kohlenstoff hin.

⁶⁵ Diese Angaben beruhen auf der Korrelationsanalyse der b-Koeffizienten der PLSR-Modelle für Ton mit den Bildspektren von 2004 und 2008, die zuvor in die 1. Ableitung der Absorption transformiert wurden (Ergebnisse nicht dargestellt). Die Ausführungen in Kap. 7.7.4 beziehen sich auf die Absorption ($\log_{10}(1/R)$).

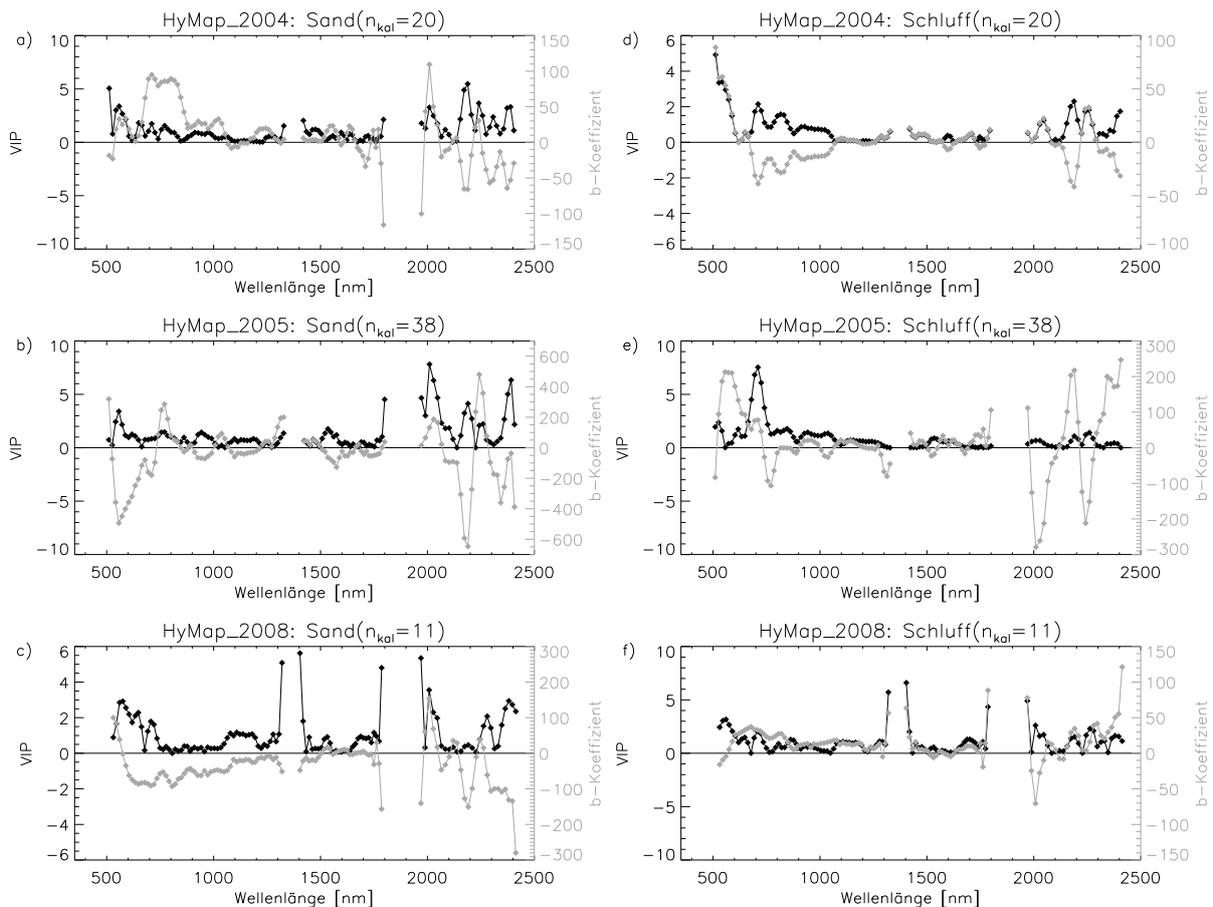


Abb. 7.7.8: VIP (schwarze Symbole) und b-Koeffizienten (graue Symbole) der PLSR-Kalibrationen zur Schätzung der Sandfraktion (a-c) und der Schlufffraktion (d-f) aus den Bildspektren der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008.

Bei der Bestimmung der Korngrößenverteilung werden die Anteile der Sand-, Schluff- und Tonteilchen nach ihrer Korngröße⁶⁶ an der Gesamtmasse der Bodenprobe bestimmt. Diese Anteile summieren sich zu 100% auf und beschreiben die Bodenart. Abweichungen der Summe von 100% können Aufschluss über methodische Fehler bei der Korngrößenanalyse geben. In der laboranalytischen Kennzeichnung von Böden wird diese daher auch als Indikator der Analysegenauigkeit herangezogen. Die Schätzung der Korngrößenfraktionen Sand, Schluff und Ton mit reflexionsspektrometrischen Methoden sollte dieser Anforderung im Rahmen der gegebenen Modellgenauigkeiten ebenso Genüge tun. Die Angaben in Tab. 7.7.6 bestätigen, dass die Summe der geschätzten Fraktionsanteile der PLSR-Modelle im Mittel 100% bei einem RMSE von 2,14% beträgt. Das Summenminimum beläuft sich auf 93,81%. Maximal ergibt die Summe der drei Fraktionen 105,80%.

Tab. 7.7.6: Summe der mittels PLSR auf Basis der HyMap-Bildspektren geschätzten Korngrößenfraktionen des Bodens (Sand: S, Schluff: U, Ton: T) und Abweichungen dieser von 100,0M.-%.

Datenbasis	Anzahl n	Minimum (S+U+T) _{gesch.} [%]	Maximum (S+U+T) _{gesch.} [%]	Mittelwert (S+U+T) _{gesch.} [%]	Abweichung von 100,0M.-%, RMSE [%]
HyMap 09.08.2004	20	95,31	104,30	100,22	1,96
HyMap 27.05.2005	67	93,81	105,80	100,07	2,14
HyMap 29.07.2008	11	98,95	103,28	100,27	1,12

⁶⁶ Sand: 2000-63µm, Schluff: 63-2µm, Ton: <2µm

7.8 Räumlich explizite Schätzung der Bodenparameter mit Bilddaten aus mehreren Jahren

7.8.1 Detektion vegetationsfreier Ackerflächen

Die spektrale Charakteristik der Referenzmesspunkte in den HyMap-Bilddaten (Abb. 7.2.7) ist kennzeichnend für die Beschaffenheit der gesamten landwirtschaftlichen Nutzfläche in DEMMIN zum Zeitpunkt der jeweiligen Überfliegung im August 2004, im Mai 2005 und im Juli 2008. Das verdeutlicht ein repräsentativer Ausschnitt der HyMap-Bilddaten in Anhang F 1, für den der CAI und der NDVI berechnet wurden. Beide Indizes offenbaren die Präsenz grüner, vitaler Vegetation (PV) sowie trockener, photosynthetisch nicht aktiver Vegetation (NPV), deren Ausmaß und Ausprägung vom Zeitpunkt der Aufnahme abhängt. Dass sich sowohl PV als auch NPV nachteilig auf die Modellgüte der PLSR-Kalibrationen auswirken, bekräftigten eigene Untersuchungen in Kapitel 7.5.4 sowie Arbeiten von Bartholomeus et al. (2011) und Ouerghemmi et al. (2011). Bartholomeus et al. (2011) und Ouerghemmi et al. (2011) zeigten, dass der Fehler von PLSR-Schätzungen des organischen Kohlenstoff- bzw. des Tongehaltes aus VNIR-SWIR-Reflexionsspektren bereits ab 5% bzw. 10% Bodenbedeckung mit grüner Vegetation stark ansteigt. Auch vergleichbare Mengen trockener, photosynthetisch nicht aktiver Vegetation erhöhen die Standardfehler für Vorhersagen des Tongehaltes mittels PLSR (vgl. Kap. 7.5.4). Eine kritische Grenze stellten 20% NPV dar. Schätzungen des organischen Kohlenstoffgehaltes erwiesen sich weniger empfindlich gegenüber dem Einfluss trockener Vegetation. Dem Experiment mit linearen spektralen Mischungen zufolge sind bis zu 10% NPV unproblematisch. Erst bei größeren Bodenbedeckungsgraden erhöhten sich auch hier die Standardfehler der Schätzung, wobei die Untersuchungen Melangen aus PV und NPV und Variationen des PV- und NPV-Anteils unberücksichtigt ließen.

Um Fehler dieser Art bei der räumlich expliziten Schätzung der Bodenparameter aus den HyMap-Bilddaten zu vermeiden, wurden vegetationsbedeckte Flächen nach einem Ansatz von Daughtry et al. (2001) von der Schätzung der Bodenparameter ausgeschlossen. Sie erzielten am Beispiel eines AVIRIS-Datensatzes bessere Ergebnisse durch Kombination der Vegetationsindizes CAI und NDVI als durch lineare spektrale Entmischung. In der vorliegenden Arbeit wurde die Höhe der Schwellwerte für den CAI und NDVI wissenschaftlich und interaktiv bestimmt (vgl. Kap. 7.2.4) und auf -2,5 bis -1,0 (CAI) und 0,0 bis 0,2 (NDVI) festgesetzt. Im Ergebnis der Maskierung wiesen die HyMap-Daten vom Mai 2005 mit 8,21% den größten Anteil vegetationsfreier Areale auf. In den Aufnahmen von 2004 und 2008 Ende Juli und Anfang August wurden 2,20% bzw. 1,29% der Gesamtfläche als vegetationsfrei identifiziert (Tab. 7.8.1). Da die Gesamtfläche der Bilddaten von 2008 etwa ein Drittel größer ist als die von 2004, ist die absolute Zahl der Bildpixel in diesen beiden Jahren etwa gleich groß. Insgesamt stehen durch den Einsatz hyperspektraler Bilddaten aus mehreren Jahren ca. 2401ha (24,01km²) landwirtschaftlicher Nutzfläche für quantitative Aussagen zum Tongehalt sowie dem Sand- und Schluffgehalt und dem Gehalt an OC zur Verfügung.

Die Anwendung eines verketteten Schwellwertverfahrens zur Maskierung vegetationsbedeckter Flächen bietet grundsätzlich die Möglichkeit, Schätzungen der Bodenparameter auch auf nicht landwirtschaftlich genutzten Flächen vorzunehmen. Da ausschließlich Referenzmessungen auf Ackerflächen erhoben wurden, wurden diese Bereiche mithilfe eines vektorbasierten Datensatzes der Feldgrenzen aber von der weiteren Analyse ausgeschlossen.

Tab. 7.8.1: Absoluter und prozentualer Anteil vegetationsfreier Ackerflächen in den HyMap-Bilddaten vom 09.08.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008. Berechnung auf Grundlage eines verketteten Schwellwertverfahrens mittels NDVI und CAI.

Datum der Aufnahme	Bildpixel gesamt	Bildpixel mit NDVI* < 0,2 und -2,5 < CAI** < -1,0	Prozentualer Anteil an der Gesamtfläche [%] NDVI* < 0,2 und -2,5 < CAI** < -1,0
09.08.2004	12.076.995	266.019	2,20
27.05.2005	12.495.804	1.026.187	8,21
29.07.2008	16.125.125	208.374	1,29

Wellenlängen für die Berechnung der Indizes angegeben in der Reihenfolge 2004/2005/2008:

*NDVI_{Rot} = 679,8/679,0/677,3nm; NDVI_{NIR} = 800,7/800,3/806,3nm;

**CAI_{p(2000nm)} = 2028,0/2028,7/2027,2nm; CAI_{p(2100nm)} = 2100,8/2101,7/2102,0nm; CAI_{p(2200nm)} = 2205,1/2207,4/2209,4nm.

Eine Überprüfung der Klassifikationsgenauigkeit der Boden-Vegetationsmaske für die landwirtschaftlich genutzten Flächen mit 200 Referenzpunkten (Pixel), die zufällig und zu gleichen Teilen auf die Klassen Vegetation und Boden verteilt wurden, ergab einen Kappa-Koeffizienten von 0,83. Dabei erfolgte die Kontrolle der Klassenzuordnung wissensbasiert auf Grundlage des zugehörigen Bildspektrums. Beinahe keine Fehleinschätzungen traten in der Klasse Vegetation auf. Fehlzuzuweisungen in der Klasse Boden sind der spektralen Charakteristik nach zu urteilen im Wesentlichen auf grüne Vegetation zurückzuführen. Trotz NDVI-Werten kleiner 0,2 wies ein Großteil dieser falsch klassifizierten Pixel ein markantes Absorptionsmerkmal nahe 680nm auf, das typisch für Chlorophyll a ist. Die aus der Konfusionsmatrix abgeleiteten Genauigkeitsmaße ergaben eine Herstellergenauigkeit (*producer's accuracy*) von 99% und 84%, und eine Nutzergenauigkeit (*user's accuracy*) von 86,1% und 98,8% für die Klassen Vegetation und Boden.

7.8.2 Räumlich explizite Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes

Abb. 7.8.1 und Abb. 7.8.2 veranschaulichen die Ergebnisse der räumlich expliziten Schätzung des Ton- und des organischen Kohlenstoffgehaltes aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 und 2008. Vollständig vegetationsbedeckte Ackerflächen sind maskiert und grau unterlegt. Flächen sonstiger Nutzung (z.B. Wald, Wiese, Wasser, versiegelte Flächen) sind weiß dargestellt. Die Prozessierung mit den parameter- und datensatzspezifischen PLSR-Modellen erfolgte jeweils pro Flugstreifen, aus denen im Anschluss Bodenparametermosaie erstellt wurden. In den finalen Bodenkarten sind die Bodenparametermosaie der drei Jahre zusammengeführt. Karte A gibt Auskunft zum Massenanteil [%] des jeweiligen Bodenparameters im Oberboden. Aus Karte B kann die schlagspezifische Information zur Modellgüte, d.h. der RPD bzw. SD/SEC, klassifiziert nach Chang et al. (2001) entnommen werden. Karte C gibt Auskunft über den zugrunde liegenden Bilddatensatz der Schätzung. Zusätzlich sind in der Legende die Standardfehler der Schätzung sowie die Wertebereiche der Kalibrationsmodelle vermerkt. Der sorgfältigen Dokumentation von Modellfehlern, dem Wertebereich der Modellkalibration und der feldspezifischen Datengrundlage wird eine hohe Bedeutung beigemessen, da diese bei der Auswertung multitemporaler Daten variiert.

Der geschätzte Tongehalt in Oberboden der Ackerflächen beträgt im Mittel 8,7% Ton. 95,45% aller Messwerte ($\mu \pm 2\sigma$) liegen zwischen ca. 3% und 15% Ton. Der organische Kohlenstoffgehalt beziffert sich im Mittel auf 0,87%. Die Schätzwerte im Intervall von $\pm 2\sigma$ liegen zwischen ca. 0,6% bis 1,2% OC. Die Parameterschätzungen aus den Bilddaten spiegeln damit annähernd die Charakteristik der 135 Referenzmesspunkte im Testfeld wider (vgl. Tab. 7.1.1, Abb. 7.1.1). Differenzen zwischen den Bodeneigenschaften der Messstellen und den Bodenkarten entstehen einerseits durch die Schätzung von Ackerflächen bzw. Bildpixeln ohne Referenzmesspunkte; andererseits verhindert eine dichte Vegetationsbedeckung an allen drei Überflugterminen eine Schätzung der Bodenparameter auf einigen Ackerflächen mit zahlreichen Referenzmesspunkten. Dies ist u.a. der Fall für den Ackerschlag bei Buchholz (*Bodenserie Buchholz*, vgl. Anhang A 2). Nur während des Überfluges in 2008 ist dieser Ackerschlag in einigen Bereichen vegetationsfrei. Dies betrifft allerdings nur 2,5% der gesamten Ackerfläche.

Trotz der Dominanz sandiger Lehme und lehmiger Sande im Untersuchungsgebiet treten entstehungsbedingt lokal große Heterogenitäten in der Bodendecke mit kleinräumigen Wechseln auf. Charakteristisch hierfür ist ein etwa 40ha (0,40km²) großer Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof, der durch seine auffällig hohen Tongehalte bis zu 30% hervortritt (Abb. 7.8.3). Überdurchschnittlich hoch ist auch der Anteil an organischem Kohlenstoff im Oberboden, der auf bis zu 1,75% OC geschätzt wurde. Ähnlichkeiten in der räumlichen Verteilung des Ton- und des organischen Kohlenstoffgehaltes auf diesem Ackerschlag sind nicht festzustellen. Eine Beobachtung, die auch an anderer Stelle für tonarme Böden gemacht wurde (vgl. Anhang F 4). Dies ist in Übereinstimmung mit einer mäßigen Korrelation zwischen dem Ton- und organischen Kohlenstoffgehalt in den Referenzproben (Anhang A 3) sowie dem Vorkommen einiger Böden mit sehr hohen Sand- und organischen Kohlenstoffgehalten, aber sehr geringen Tongehalten. Da auf dem Ackerschlag bei Heydenhof keine bemerkenswerten Höhenunterschiede auftreten, ist das Vorkommen von Ton und organischem Kohlenstoff in diesem Bereich nicht an reliefbedingte Transport- und Akkumulationsprozesse gebunden.

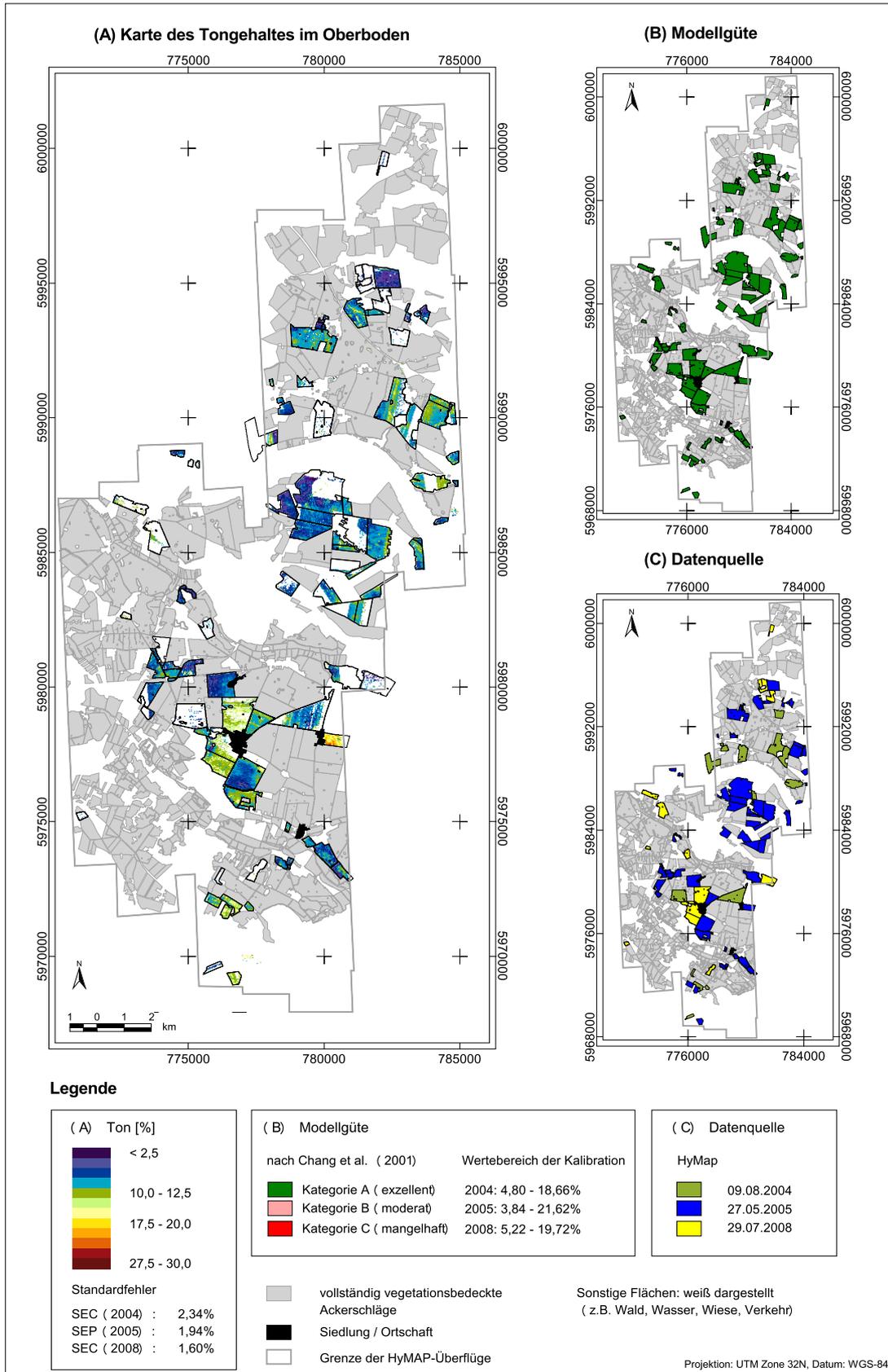


Abb. 7.8.1: Karte des Tongehaltes im Oberboden für landwirtschaftliche Nutzflächen im Testfeld DEMMIN geschätzt mittels PLSR auf Basis der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005, 29.07.2008. Karte A: Tongehalt [%], Karte B: feld-spezifische Angabe der Modellgüte nach Chang et al. (2001), Karte C: feld-spezifische Datengrundlage.

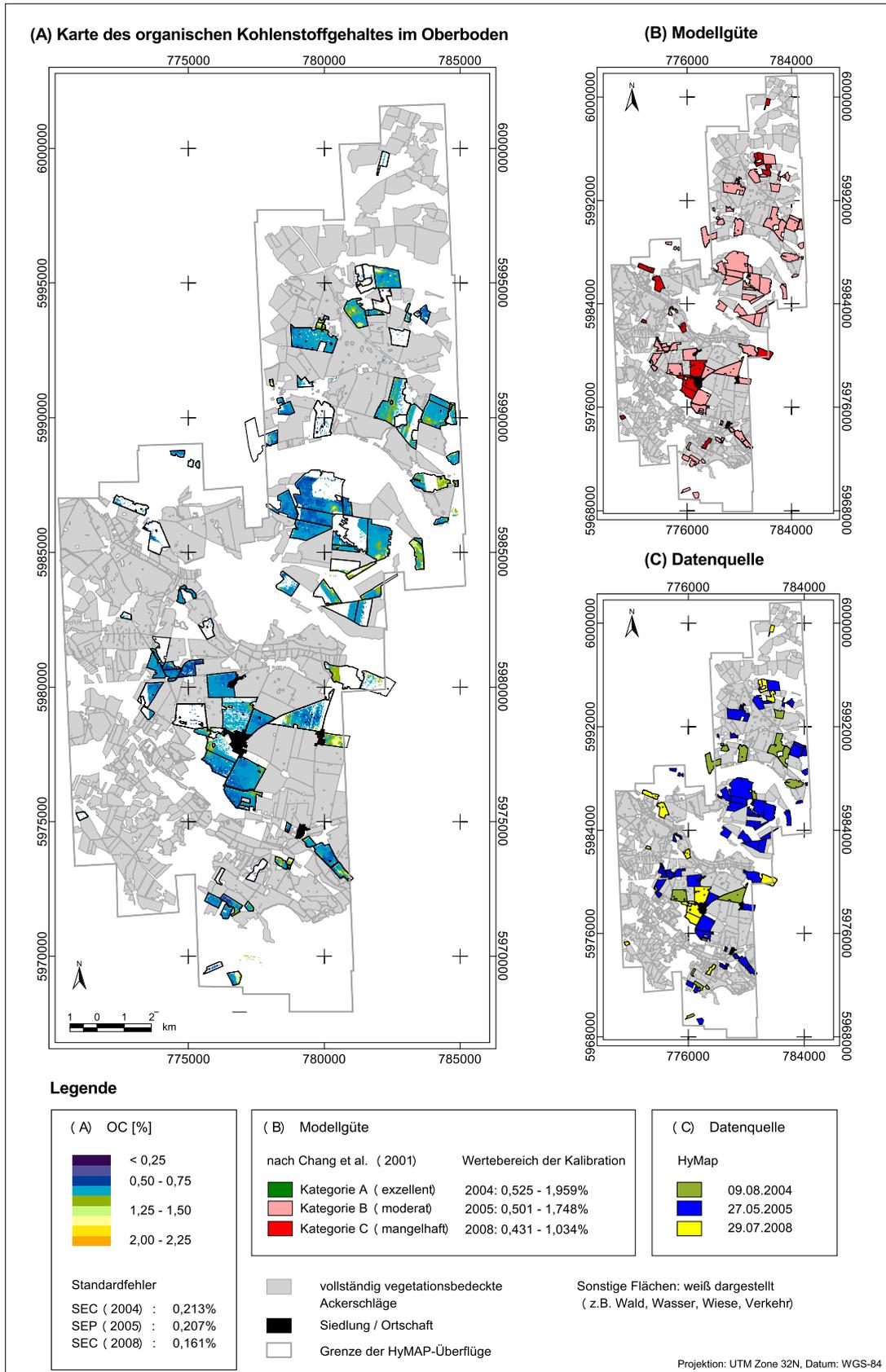


Abb. 7.8.2: Karte des organischen Kohlenstoffgehaltes im Oberboden für landwirtschaftliche Nutzflächen im Testfeld DEMMIN geschätzt mittels PLSR auf Basis der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005, 29.07.2008. Karte A: organischer Kohlenstoffgehalt [%], Karte B: feld-spezifische Angabe der Modellgüte nach Chang et al. (2001), Karte C: feld-spezifische Datengrundlage.

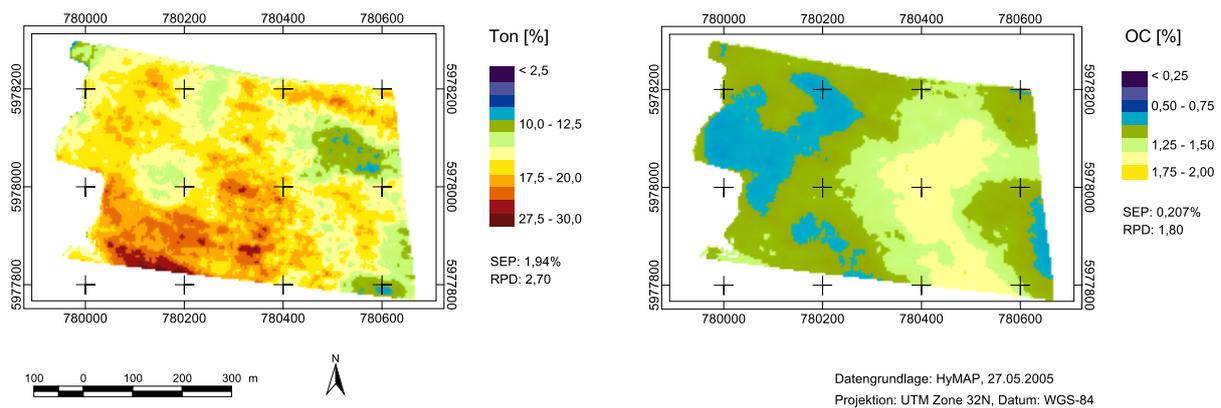
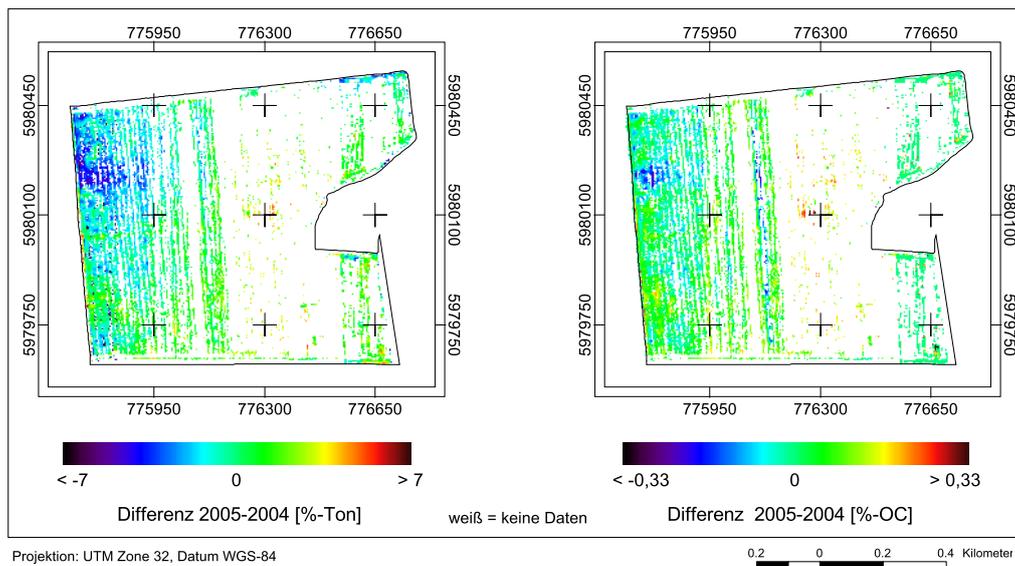


Abb. 7.8.3: Räumlich explizite Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes (OC) mittels PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof basierend auf HyMap-Daten vom 27.05.2005 (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1).

Die Schätzung von Bodenparametern aus mehreren Bilddatensätzen unterschiedlicher Aufnahmetermine bietet die Möglichkeit, über die Fehlermaße der Modelle (SEC, SEP, RPD) hinaus Rückschlüsse zur Genauigkeit der Parameterschätzungen zu ziehen. Infolge der Aufnahmetermine der drei Datensätze existieren keine Flächen, die in allen drei Datensätzen gleichermaßen vegetationsfrei sind. Im paarweisen Vergleich der Aufnahmejahre konnten zwei Ackerschläge identifiziert werden, für die teilweise Parameterschätzungen aus beiden Jahren vorliegen. Ein Ackerschlag nahe der Ortschaft Marienfelde ist im Bilddatensatz von 2005 nahezu vollständig, im Bilddatensatz von 2004 teilweise vegetationsfrei. Ebenso ist ein Ackerschlag südlich der Ortschaft Schmarsow im Bilddatensatz von 2005 komplett vegetationsfrei. Im Bilddatensatz von 2008 ist dieser Schlag partiell ohne Vegetationsbedeckung. In beiden Fällen modifizieren Ernterückstände während der Überflüge im August 2004 bzw. Juli 2008 das Bodenreflexionssignal auf diesen Feldern. Abb. 7.8.4 zeigt das Differenzbild der Parameterschätzungen aus dem Jahr 2004 und 2005 für das Feld nahe Marienfelde. Der Tonanteil im Oberboden wurde auf Basis der Bilddaten von 2005 im Mittel 0,34% geringer eingeschätzt als auf Basis der Bilddaten von 2004. 50% aller verfügbaren Datenpunkte weisen Differenzen zwischen -1,42% und 0,91% Ton auf. Die mittlere Abweichung der geschätzten organischen Kohlenstoffgehalte ist nahe null. Auch die Hälfte der verfügbaren Datenpunkte weist nur sehr geringe Abweichungen zwischen -0,011% und 0,057% OC auf. Vergleicht man das räumliche Muster der Differenzbilder für Ton und OC, sind starke Ähnlichkeiten zu erkennen. Hohe negative Differenzen bestehen im linken, oberen Teil des Feldes (dunkelblau). Hohe positive Differenzen treten in einem kleinen Bereich im Zentrum des Feldes auf (dunkelorange-rot). In den Differenzbildern aller vier Parameter weisen einige isolierte Bildpixel extreme Abweichungen auf. Diese werden auf Artefakte oder Mischpixelprobleme zurückgeführt. Die RMSE der Parameterschätzung ist sowohl für Ton als auch für OC adäquat oder kleiner als der Standardfehler der Modelle (vgl. Tab. 7.7.1, Tab. 7.7.2, Tab. 7.7.4). Die Analyse der Parameterschätzungen für den Ackerschlag südlich von Schmarsow basierend auf den Bilddaten von 2005 und 2008 ergab RMSE von 2,47%, und 0,015% für Ton und OC respektive. Somit ist die Abweichung (RMSE) der Parameterschätzungen in 2005 und 2008 für Ton größer als der Standardfehler der zugehörigen Kalibrationsmodelle (vgl. Tab. 7.7.1, Tab. 7.7.4). Es besteht Grund zu der Vermutung, dass insbesondere der Fehler der Kreuzvalidierung der Kalibrationsdaten von 2008 aufgrund der geringen Datenzahl nicht repräsentativ für den tatsächlichen Fehler der Tonschätzungen mit dem PLSR-Modell HyMap_2008 ist. Um einen aussagekräftigen Fehler für die räumlich expliziten Schätzungen des Tongehaltes angeben zu können, ist daher eine Validation mit zusätzlichen Referenzmessungen unerlässlich (vgl. dazu auch Kap. 8.2.3).

Das Reflexionsverhalten der meisten natürlichen Oberflächen variiert in Abhängigkeit von der Beobachtungs- und Beleuchtungsgeometrie zum Zeitpunkt der Aufnahme. Beschrieben werden kann dies durch die Bidirektionale Reflektanzverteilungsfunktion (BRDF, *Bi-directional Reflectance Distribution Function*) (z.B. von Schönemark et al., 2004). Helligkeitsgradienten, die nach einer Atmosphärenkorrektur quer zur Flugrichtung auftreten, werden durch derartige BRDF-Effekte



Parameter	Min	Max	MW	Q1	Median (Q2)	Q3	RMSE 2004-2005
Ton	-25,47	7,15	-0,34	-1,42	-0,28	0,91	1,95
OC	-1,262	0,330	0,019	-0,011	0,008	0,057	0,072

Abb. 7.8.4: Differenzbild der Parameterschätzung für den Ton- und organischen Kohlenstoffgehalt auf Basis der HyMap-Bilddaten von 2004 und 2005 und unter Einsatz der PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Marienfelde (siehe blauer Flag in Abb. 5.1.1).

hervorgehoben (Richter, 2008; vgl. Abb. 7.3.6). Das Ausmaß und die Schwere werden bei flugzeuggetragenen Sensoren durch das Sichtfeld des Sensors (FOV) und den Winkel der Sonne relativ zur Flugrichtung bestimmt. Ein großes Sichtfeld und ein Azimutwinkel senkrecht zur Flugrichtung begünstigen das Auftreten von BRDF-Effekten. HyMap besitzt mit 60° bereits ein relativ großes FOV. Nur der flugzeuggetragene Sensor AHS mit einem Sichtfeld von 45° beiderseits der Nadirposition zeichnet Daten in einem größeren Schwenkbereich auf (FOV=90°). Während durch die Aufnahmekonstellation der Überflüge 2005 und 2008 Variationen im Reflexionsverhalten von Oberflächen außerhalb des Nadir-Bereiches bestmöglich abgeschwächt werden konnten, begünstigte die Aufnahmekonstellation während des Überfluges von 2004 das Auftreten von BRDF-Effekten (vgl. Tab. 6.3.1 und Abb. 7.3.6).

Tab. 7.8.2: Mittlere Abweichung (RMSE) der Parameterschätzungen für Ton und organischen Kohlenstoff [%] in den Überlappungsbereichen (ÜberB) der HyMap-Streifen im Vergleich zu den Standardfehlern der PLSR-Modelle (SEP, SEC). Berechnung der Parameterschätzungen auf Grundlage der Absorption (Abs) sowie auf Grundlage der ersten Ableitung der Absorption (1.Ablg).

Datum der Aufnahme	Anzahl der Pixel	Ton				OC			
		RMSE _{ÜberB}		SEP* bzw. SEC**		RMSE _{ÜberB}		SEP* bzw. SEC**	
		Abs	1.Ablg [†]	Abs	1.Ablg [†]	Abs	1.Ablg [†]	Abs	1.Ablg [†]
09.08.2004	36015	6,96	3,90	2,34**	2,84**	0,386	0,220	0,235**	0,213**
27.05.2005	260206	2,25	1,70	2,10*	1,94*	0,234	0,060	0,313*	0,207*
29.07.2008	60308	1,29	1,54	1,60**	2,29**	0,221	0,079	0,188**	0,161**

[†]1. Ableitung bezieht sich auf die Absorption. Die fettgedruckten Zahlen entsprechen den Ergebnissen aus den Kapiteln 7.7.2 und 7.7.4.

Um eine Aussage hinsichtlich der Auswirkungen von BRDF-Effekten auf die Quantifizierung der Bodenparameter treffen zu können, wurden die Modellschätzungen in den Überlappungsbereichen der Bilddatensätze analysiert und deren RMSE berechnet (Tab. 7.8.2). In den Datensätzen von 2005 und 2008 differieren die Parameterschätzungen in den überlappenden Bildrändern unabhängig von der Vorprozessierung der Bildspektren im Bereich der Standardfehler (SEC, SEP) der Modelle. Anders

stellt sich die Situation im Datensatz von 2004 dar. Hier beträgt der RMSE der auf Basis der Absorptionsspektren geschätzten Tongehalte in den Überlappungsbereichen der Streifen das 3-fache des Standardfehlers ($RMSE_{Abs}: 6,96$, $SEC_{Abs}: 2,34\%$). Bei Verwendung der ersten Ableitung der Absorption beträgt er etwa das 1,4-fache ($RMSE_{1.Abl}: 3,90$, $SEC_{1.Abl}: 2,84\%$). Für organischen Kohlenstoff ist dieser Effekt weniger stark ausgeprägt. Dennoch beziffert sich der RMSE im Falle der Absorption etwa auf das 1,6-fache des Standardfehlers ($RMSE_{Abs}: 0,386$, $SEC_{Abs}: 0,235\%$). Bei Verwendung der ersten Ableitung bewegen sich die Abweichungen zwischen den Parameterschätzungen im Bereich des Standardfehlers der Modellschätzungen ($RMSE_{1.Abl}: 0,220$, $SEC_{1.Abl}: 0,213\%$).

7.8.3 Räumlich explizite Schätzung spektral nicht aktiver Bodenparameter

In Kapitel 7.7.5 wurde der Versuch angestellt, auch spektral nicht aktive Bodenparameter wie Sand und Schluff aus Reflexionsspektren der HyMap-Bilddaten zu schätzen. Primär zielten diese Untersuchungen darauf ab, die Zahl hochwertiger Eingangsparameter für die Pedotransferfunktionen (PTF) zu erhöhen. Dadurch soll eine Alternative zu der sehr unpräzisen Annahme, dass der Sand- oder Schluffanteil im Boden näherungsweise der Hälfte der verbleibenden Differenz aus $100,0 [M. - \%] - \text{Ton} [M. - \%]$ entspricht, bereitgestellt werden. Während sich Schätzungen des Sand- und Schluffgehaltes aus den Bilddaten von 2004 und 2008 aufgrund der geringen Anzahl der Referenzpunkte und deren Wertebereich teilweise problematisch gestalteten, bestätigte die Validation der Kalibrationsmodelle HyMap_2005 für Sand und Schluff eine gute bis sehr gute Vorhersagefähigkeit (vgl. Tab. 7.7.5). Das Ergebnis der räumlich expliziten Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes für das gesamte Untersuchungsgebiet ist in Anhang F 2 bzw. Anhang F 3 (Karte A) erfasst. Die Datengrundlage sowie die Modellgüte der feld-spezifischen Parameterschätzungen sind, wie in Kap. 7.8.2 beschrieben, den Karten B und C zu entnehmen.

Typisch für die glaziale Genese des Untersuchungsgebietes ist nicht nur das Vorkommen tonreicher Böden auf kleinem Raum sondern auch das Auftreten fast reiner Sande, häufig in Form von Sandlinsen. Ackerschläge mit einer solchen Typlokalität werden häufig für den Maisanbau genutzt. So auch das in Abb. 7.8.5 dargestellte Feld nahe der Ortschaft Alt Tellin⁶⁷. Der Anteil der Sandfraktion im Oberboden beziffert sich für dieses Feld im Mittel auf ca. 76%. Auf 14% der Gesamtfläche liegt der Anteil an Sand bei über 80%. Entsprechend niedrig sind die Anteile der anderen

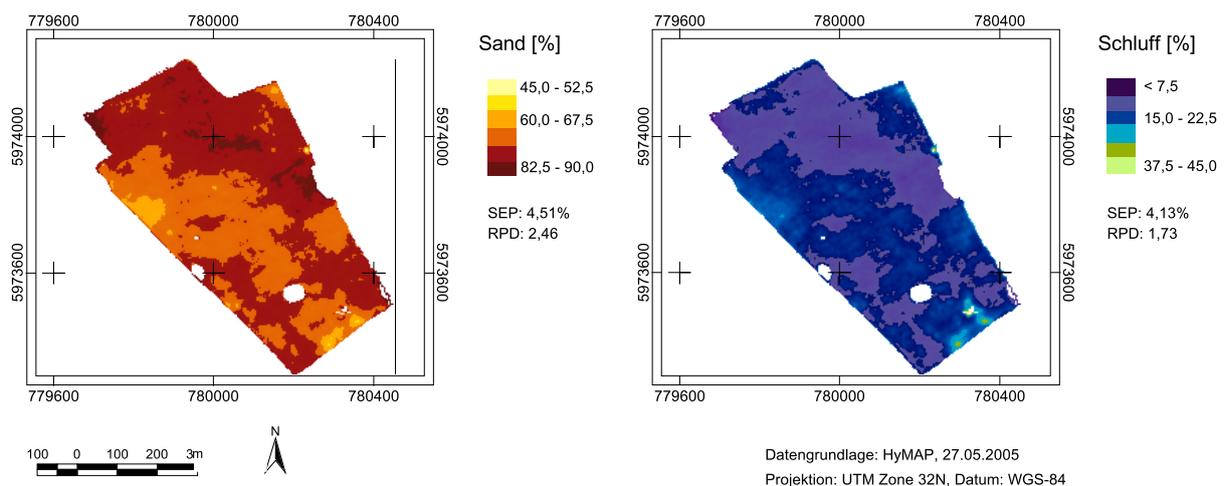


Abb. 7.8.5: Räumlich explizite Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes mittels PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Alt Tellin basierend auf den HyMap-Daten vom 27.05.2005 (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1).

⁶⁷ Maisanbau in den Jahren 2000 und 2004 bis 2006 und 2011 (E. Zabel, Zabel Geoinformatik Alt Tellin, schriftl. Mitteilung, 2011). Zur Fruchtart in den Jahren 2001 bis 2003, 2007 und 2009 liegen keine Informationen vor.

Korngrößenfraktionen. Der Sand- und Schluffgehalt, aber auch der Tongehalt dieses Ackerschlag, dessen räumliche Verteilung in Anhang F 4 abgebildet ist, weisen ein sehr ähnliches räumliches Muster auf. In Übereinstimmung mit der hohen negativen Korrelation zwischen dem Sand- und Schluffgehalt in den Referenzproben treten in sandreichen Arealen die niedrigsten und in sandärmeren Arealen die höchsten Schluffgehalte auf. In Ergänzung zu Abb. 7.8.3 sind in Anhang F 5 auch die geschätzten Sand- und Schluffgehalte für den Ackerschlag nahe Heydenhof abgebildet. Die Schätzungen des Sand- bzw. Schluffgehaltes beider Schläge finden Eingang in die Berechnung der PTF in Kapitel 7.9.

Der Vergleich der Parameterschätzungen von 2004 und 2005 für den Ackerschlag nahe Marienfelde resultierte in RMSE von 3,46% Sand und 3,07% Schluff. Die Abweichungen liegen somit im Bereich der Standardfehler der Modelle (vgl. Tab. 7.7.5). Schätzungen aus 2005 und 2008 (Ackerschlag südlich von Schmarsow) differierten um 3,12% Sand und 4,02% Schluff (RMSE). In Analogie zum Tongehalt wird der Fehler der Schätzungen durch den SEC des PLSR-Modells HyMap_2008 für Schluff (SEC: 1,69%) nicht hinlänglich beschrieben.

7.9 Assimilation der Bodenparameterschätzungen in Pedotransferfunktionen

Sechs Pedotransferfunktionen (PTF) wurden für die Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit (k_f) selektiert (vgl. Kap. 6.5). Deren Eingangsparameter umfassen quantitative Informationen zum Anteil der Sand-, Schluff- bzw. der Tonfraktion im Boden und/oder der organischen Bodensubstanz. Diese Informationen wurden aus den hyperspektralen Bilddaten des Sensors HyMap für alle vegetationsfreien Ackerflächen bereitgestellt (Kap. 7.7, 7.8) und stellen die Datengrundlage der PTF zur Schätzung von k_f dar. Die PTF von Brakensiek et al. (1984), Vereecken et al. (1990) und Jabro (1992) bedürfen darüber hinaus Angaben zur Lagerung der Primärteilchen, die u.a. durch die Trockenrohddichte beschrieben wird. Die Trockenrohddichte von Mineralböden variiert mit der Bodenart und dem Gehalt an organischer Bodensubstanz. Häufige Werte für die Lagerungsdichte betragen für Sandböden zwischen 1,67–1,19g/cm³, für Lehm Böden zwischen 1,96–1,19g/cm³, für Schluffböden zwischen 1,53–1,19g/cm³ und für Tonböden zwischen 1,32–0,92g/cm³ (Hartge & Horn, 1999). Auf landwirtschaftlich genutzten Böden ist die Trockenrohddichte vor allem stark abhängig von der vorausgegangenen Bodenbearbeitung und unterliegt hohen Schwankungen im Verlauf eines Bewirtschaftungsjahres (Scheffer & Schachtschabel, 2010; Abb. 6.3-11). Aufgrund dieser hohen zeitlichen Variabilität und in Ermangelung entsprechender Messdaten oder Modellschätzungen wurde zunächst eine mittlere Trockenrohddichte von 1,45g/cm³ für die Schätzung von k_f mit den PTF von Brakensiek et al. (1984), Vereecken et al. (1990) und Jabro (1992) angenommen. Das Ergebnis dieser Schätzung ist in Abb. 7.9.1 in Form der Häufigkeitsverteilung veranschaulicht. Weitere statistische Kennwerte sind in Tab. 7.9.1 erfasst. Daraus wird deutlich, dass die absoluten k_f -Werte eng an die jeweilige Pedotransferfunktion gebunden sind. So resultiert die Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit mit der PTF von Vereecken et al. (1990) in einem geometrischen Mittelwert (μ_g) von 29,48cm/d während die PTF von Brakensiek et al. (1984) im Mittel k_f -Werte von 175,20cm/d aufweist. Etwa 95% aller k_f -Werte liegen nach Vereecken et al. (1990) zwischen 15,15cm/d und 57,36cm/d. Nach Brakensiek et al. (1984) erstreckt sich das Werteintervall von k_f für [μ_g/σ^2 , $\mu_g*\sigma^2$] von 62,45cm/d bis 491,53cm/d und beträgt damit zwischen dem 4- und 8,5-fachen der k_f -Werte von Vereecken et al. (1990). Ferner variiert die Form der Häufigkeitsverteilung der k_f -Werte um den Mittelwert. Die k_f -Werte der PTF von Puckett et al. (1985) weisen eine hohe Streuung auf ($\sigma_g=1,81$ cm/d). Dagegen besitzen die k_f -Werte der PTF von Cosby et al. (1984) und Vereecken et al. (1990) eine geometrische Standardabweichung von nur 1,24cm/d bzw. 1,39cm/d.

Nichtsdestotrotz lassen die Histogramme und statistischen Kennwerte Übereinstimmungen erkennen, insbesondere im Fall der PTF von Saxton et al. (1986) und Puckett et al. (1985). Um dies näher zu untersuchen, wurde ein paarweiser Vergleich der PTF unter Verwendung des mittleren geometrischen Fehlerquotienten (GMER, vgl. Glg. 6.5.12) angestellt. Dieser ist in Tab. 7.9.2 in der unteren Hälfte der Matrix notiert. Für die Berechnung des GMER diente die in der ersten Zeile notierte PTF als Referenzwert ($k_f^{p,ref}$), während die PTF in der ersten Spalte als Vergleichswert herangezogen wurde

($k_f^{p, val}$) (vgl. Glg. 6.5.11). Der GMER beschreibt den durchschnittlichen Faktor, mit dem die k_f -Werte der Vergleichs-PTF von denen der Referenz-PTF abweichen. Im besten Fall, d.h. bei einer 100-prozentigen Übereinstimmung der k_f -Werte, nimmt der GMER einen Wert von 1 an. Beträgt der GMER kleiner 1 werden die k_f -Werte der fraglichen PTF im Vergleich zur Referenz-PTF unterschätzt. Weist der GMER einen Wert größer 1 auf, sind die k_f -Werte der fraglichen PTF größer als die der Referenz-PTF. In der oberen Hälfte der Matrix ist die geometrische Standardabweichung des Fehlerquotienten (GSDER) notiert. Auch hier gilt, je näher die Werte an 1 heranreichen, desto geringer ist die Streuung des Fehlerquotienten um den GMER.

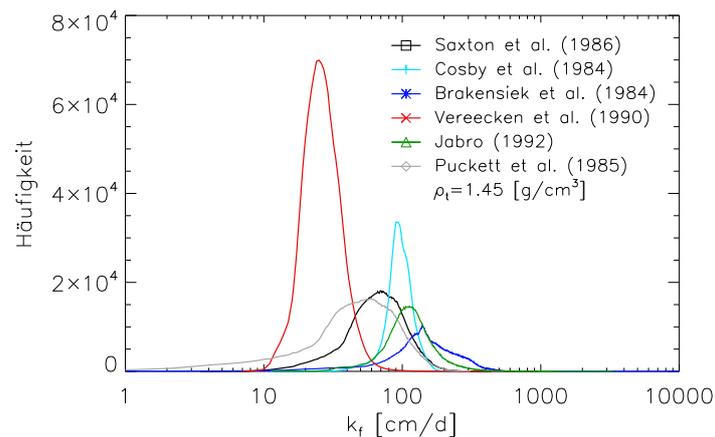


Abb. 7.9.1: Häufigkeitsverteilung der gesättigten Wasserleitfähigkeit (k_f) geschätzt mit 6 verschiedenen Pedotransferfunktionen auf Basis der PLSR-Schätzungen des Ton-, Sand-, Schluff- und OC-Gehaltes aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 und 2008.

Tab. 7.9.1: Statistische Kennwerte der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f in [cm/d] auf den landwirtschaftlichen Flächen des Testfeldes DEMMIN ermittelt mit 6 PTF auf Basis der Schätzungen des Ton-, Sand-, Schluff- und OC-Gehaltes mittels PLSR aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 und 2008 (vgl. Abb. 7.9.1). Trockenrohdichte $\rho_t=1,45\text{g/cm}^3$; gMW (μ_g): geometrischer Mittelwert; gSD (σ_g): geometrische Standardabweichung; $Q_{,995}$: 0,995-Quantil.

PTF	gMW (μ_g)	gSD (σ_g)	Min	Max	μ_g/σ_g^2	$\mu_g \cdot \sigma_g^2$	$Q_{,995}$
Brakensiek et al. (1984)	175,20	1,68	0,55	11857,50	62,45	491,53	534,53
Saxton et al. (1986)	78,71	1,56	3,48	439,25	32,33	191,64	231,07
Cosby et al. (1984)	99,76	1,24	11,16	255,02	64,95	153,24	170,16
Vereecken et al. (1990)	29,48	1,39	7,02	928,06	15,15	57,36	94,93
Jabro (1992)	132,84	1,57	11,70	3306,25	53,68	328,76	688,27
Puckett et al. (1985)	65,76	1,81	0,14	309,19	20,11	215,00	236,11

Die beste Übereinstimmung zwischen den geschätzten k_f -Werten ist demnach, wie auf Grundlage der Histogramme vermutet, für die PTF von Puckett et al. (1985) und Saxton et al. (1986) mit einem $\text{GMER}_{\text{Saxton/Puckett}}$ von 1,19 festzustellen, wobei der Fehlerquotient für ca. 68% der Fälle Werte zwischen ca. 0,89 und 1,58 und in 95% der Fälle Werte zwischen 0,67 und 2,10 annimmt. Generell fallen die Schätzungen von k_f mit der PTF von Puckett et al. (1985) im Mittel etwas niedriger aus als die der PTF von Saxton et al. (1986). Eine ähnliche Situation ist für die k_f -Werte nach Cosby et al. (1984) und Saxton et al. (1986) zu beobachten mit einem $\text{GMER}_{\text{Saxton/Cosby}}$ von 0,79 und einem GSDER von 1,38. Allerdings sind die geschätzten k_f -Werte nach Cosby et al. (1984) im Gegensatz zu Puckett et al. (1985) im Mittel größer als die nach Saxton et al. (1986). Der Fehlerquotient liegt hier in 68% der Fälle zwischen 0,57 und 1,09 und in 95% aller Fälle zwischen 0,41 und 1,50. Jede dieser drei PTF nutzt für die Herleitung von k_f ausschließlich Angaben zur Bodentextur, d.h. dem Tongehalt oder dem Ton- und dem Sandgehalt.

Für die PTF, die Informationen zur Lagerung der Primärteilchen in die Schätzung von k_f einbeziehen, bestehen die besten Übereinstimmungen zwischen Brakensiek et al. (1984) und Jabro (1992) mit einem GMER von 0,76 bei einem GSDER von 1,50, und zwischen Jabro (1992) und Cosby et al.

(1984) mit einem GMER von 0,75 bei einem GSDER von 1,36. Jedoch verursachen bereits geringe Änderungen der Trockenrohdichte eine starke Erhöhung bzw. Verringerung der geschätzten k_f -Werte. Nach Jabro (1992) verursachen Modifikationen der Trockenrohdichte von $\pm 0,1\text{g/cm}^3$ eine Änderung von k_f um den Faktor 2,91 und nach Vereecken et al. (1990) um den Faktor 2,32. Für die PTF von Brakensiek et al. (1984) ist der Faktor abhängig von der Höhe der Trockenrohdichte und beträgt bei $1,45\text{g/cm}^3$ etwa 1,58. Unter Berücksichtigung dieser Tatsache, können minimale GMER, d.h. GMER nahe 1, für die Schätzungen von k_f nach Jabro (1992) im Vergleich zu den Schätzungen nach Cosby et al. (1984), Saxton et al. (1986) bzw. Puckett et al. (1985) bei einer Trockenrohdichte von etwa $1,5\text{g/cm}^3$ erzielt werden (Abb. 7.9.2c). Die PTF nach Vereecken et al. (1990) zeigt die größte Übereinstimmung in k_f mit diesen drei ausschließlich von der Bodentextur abhängigen PTF bei geringeren Trockenrohdichten zwischen $1,30\text{g/cm}^3$ und $1,35\text{g/cm}^3$ (Abb. 7.9.2b). Mit der PTF von Brakensiek et al. (1984) nimmt k_f einen ähnlichen Wertebereich erst für sehr hohe Trockenrohdichten größer $1,55\text{g/cm}^3$ an (Abb. 7.9.2a). Abb. 7.9.2a zeigt auch, dass sich durch Änderungen in der Höhe der Trockenrohdichte die Abweichungen zwischen den k_f -Werten nach Brakensiek et al. (1984), Jabro (1992) und Vereecken et al. (1990) minimieren lassen. Allerdings ist dies nur bei gleichzeitiger Annahme unterschiedlicher Trockenrohdichten für ein und denselben Boden möglich und stellt somit ein nicht realistisches Szenario dar. Die Frage, welche der sechs getesteten PTF wirklichkeitsnahe k_f -Werte für die landwirtschaftlichen Flächen im Testfeld DEMMIN liefert, kann in Ermangelung von Referenzmesswerten der gesättigten Wasserleitfähigkeit nicht beantwortet werden. Die hohe Variabilität der Trockenrohdichte auf landwirtschaftlichen Flächen legt den Einsatz einer PTF nahe, die die Höhe derselben steuern lässt. Nach Tietje & Hennings (1996) erzielte die PTF von Vereecken et al. (1990) die höchsten Genauigkeiten für Ton- und Schluffböden, die PTF von Brakensiek et al. (1984) für sandige Lehm Böden. Eine Betrachtung der PTF von Jabro (1992) erfolgte nicht. Typische Bodenarten im Untersuchungsgebiet sind hingegen sandige und tonige Lehme, lehmige Sande, schluffige Sande und reine Sande. Für diese Bodenarten eignet sich Tietje & Hennings (1996) zufolge die PTF nach Saxton et al. (1986) am besten, d.h. eine PTF die sich auf die Parameter Sand und Ton als Eingangsparameter beschränkt.

Tab. 7.9.2: Mittlerer geometrischer Fehlerquotient (GMER) und geometrische Standardabweichung des Fehlerquotienten (GSDER) für den paarweisen Vergleich der geschätzten, gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f mithilfe 6 verschiedener Pedotransferfunktionen auf Basis der aus den HyMap-Bilddaten mittels PLSR geschätzten Sand-, Schluff-, Ton- und organischen Kohlenstoffgehalte. Die Schätzungen von k_f mit den PTF von Vereecken et al. (1990), Jabro (1992) und Brakensiek et al. (1984) beziehen sich auf eine konstante Trockenrohdichte von $1,45\text{g/cm}^3$.

GMER \ GSDER	Brakensiek et al. (1984)	Vereecken et al. (1990)	Jabro (1992)	Cosby et al. (1984)	Puckett et al. (1985)	Saxton et al. (1986)
Brakensiek et al. (1984)	-	1,71	1,50	1,38	1,83	1,61
Vereecken et al. (1990)	0,17	-	1,45	1,36	1,57	1,39
Jabro (1992)	0,76	4,51	-	1,36	1,36	1,33
Cosby et al. (1984)	0,57	3,38	0,75	-	1,63	1,38
Puckett et al. (1985)	0,38	2,23	0,50	0,66	-	1,33
Saxton et al. (1986)	0,45	2,67	0,59	0,79	1,19	-

Welchen Einfluss die Änderung der Stoffkonzentration der Eingangsparameter, dem Anteil an Sand, Schluff, Ton und organischer Bodensubstanz, auf die Ermittlung von k_f ausübt, wurde im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse untersucht. Diese diente auch dazu, erste Anhaltspunkte über den Einfluss der Standardfehler der PLSR-Modelle auf die PTF zu ermitteln. Für die Analyse wurde jeweils nur ein Parameter verändert, während alle anderen konstant gehalten wurden. Eine sehr hohe Sensitivität gegenüber Änderungen im Sandgehalt besteht für die PTF von Brakensiek et al. (1984) und Cosby et al. (1984), wobei k_f mit Zunahme des Sandgehaltes exponentiell ansteigt (Abb. 7.9.3a). Änderungen im Tongehalt haben dagegen starke Auswirkungen auf die PTF von Puckett et al. (1985), Saxton et al. (1986), Vereecken et al. (1990) und Jabro (1992). Diese Funktionen zeigen eine starke lineare oder exponentielle Abnahme, so dass bereits geringe Schwankungen des Tongehaltes vor allem in Böden mit weniger als 20% Ton extreme Unterschiede in k_f verursachen (Abb. 7.9.3b). Die PTF nach Saxton et al. (1986) besitzt für Böden mit Tongehalten kleiner 3% eingeschränkte Gültigkeit, da die Kalibration dieser PTF an Böden mit mindestens 5% Ton (vgl. Tab. 6.5.1) erfolgte. Es wird vermutet, dass hierdurch die atypische Abnahme von k_f für Ton $< 3\%$ verursacht wird.

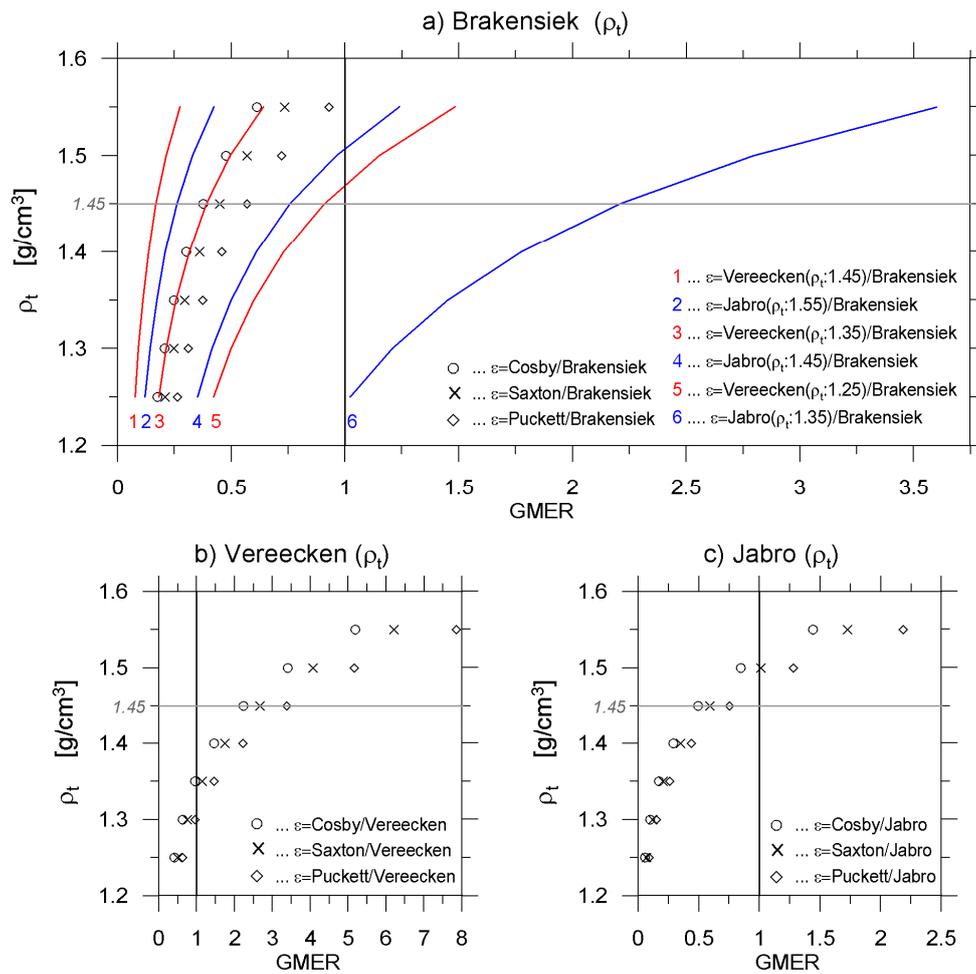


Abb. 7.9.2: Mittlerer geometrischer Fehlerquotient (GMER) für den paarweisen Vergleich der PTF in Abhängigkeit von der Trockenrohdichte (ρ_t). a) Veränderung des GMER für k_f nach Brakensiek et al. (1984). b) Veränderung des GMER für k_f nach Vereecken et al. (1990). c) Veränderung des GMER für k_f nach Jabro (1992). ϵ ist der Fehlerquotient (vgl. Glg. 6.5.11).

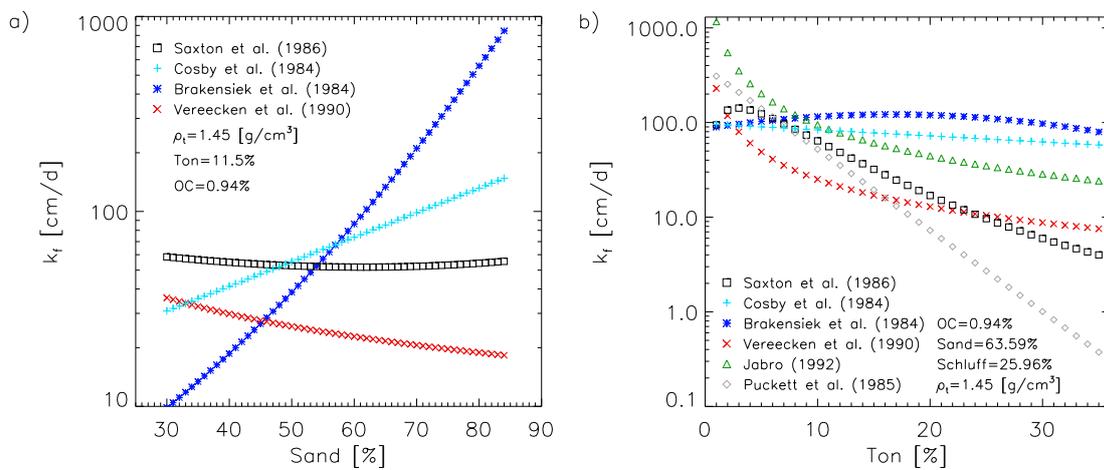


Abb. 7.9.3: Einfluss des Sand- und Tongehaltes auf die Schätzung von k_r für typische Böden des Testfeldes DEMMIN. a) Einfluss des Sandgehaltes auf die Höhe von k_r für einen Boden mit 11,50% Ton und 0,94% OC. b) Einfluss des Tongehaltes auf die Höhe von k_r für einen Boden mit 63,59% Sand, 25,96% Schluff und 0,94% OC. Die bodenphysikalischen- und chemischen Eigenschaften wurden in Anlehnung an die statistischen Kennwerte der *Bodenserie Demmin* gewählt (Median).

Die Quantifizierung des mittleren Fehlers, der aufgrund der Standardfehler der Bodenparameterschätzungen (vgl. Kap. 7.7⁶⁸) für die Berechnungen von k_f zu erwarten ist, ergab, dass eine Erhöhung des Tongehaltes um 2,34% (T+SEP) nach Puckett et al. (1985) in einem Rückgang von k_f um ca. 37% (GMER=0,63) resultiert (Abb. 7.9.4). Eine Verringerung des Tongehaltes zu gleichen Teilen (T-SEP) hat eine Zunahme von ca. 56% zur Folge (GMER= 1,56). Nach Jabro (1992) und Vereecken et al. (1990) nimmt k_f bei einer Verringerung des Tongehaltes entsprechend dem Standardfehler der Schätzung im Mittel um 48% und 42% zu. Bei einer Zunahme des Tongehaltes sinkt k_f im Durchschnitt um 25% und 22%. Ähnlich verhält es sich mit der PTF von Saxton et al. (1986). Für die PTF von Brakensiek et al. (1984) und Cosby et al. (1984) haben Schwankungen des Tongehaltes in diesen Dimensionen im Mittel Änderungen um weniger als 10% zur Folge. Allerdings zeigen sich beide PTF stark empfindlich gegenüber Änderungen im Sandgehalt, was die Resultate der Sensitivitätsanalyse bestätigt. Nach Brakensiek et al. (1984) bewirkt ein Anstieg des Sandgehaltes um 5,58% eine Zunahme von k_f um 63% (GMER=1,63). Eine Verminderung des Sandgehaltes um eben diesen Wert resultiert im Mittel in einem Rückgang von k_f um 37% (GMER=0,63). Nach Cosby et al. (1984) bewirkt ein Fehler von $\pm 5,58\%$ Sand Änderungen von k_f um 18% bzw. 25%. Quantitative Aussagen zur Höhe der gesättigten Wasserleitfähigkeit sind vor diesem Hintergrund für alle betrachteten PTF in hohem Maße ungenau.

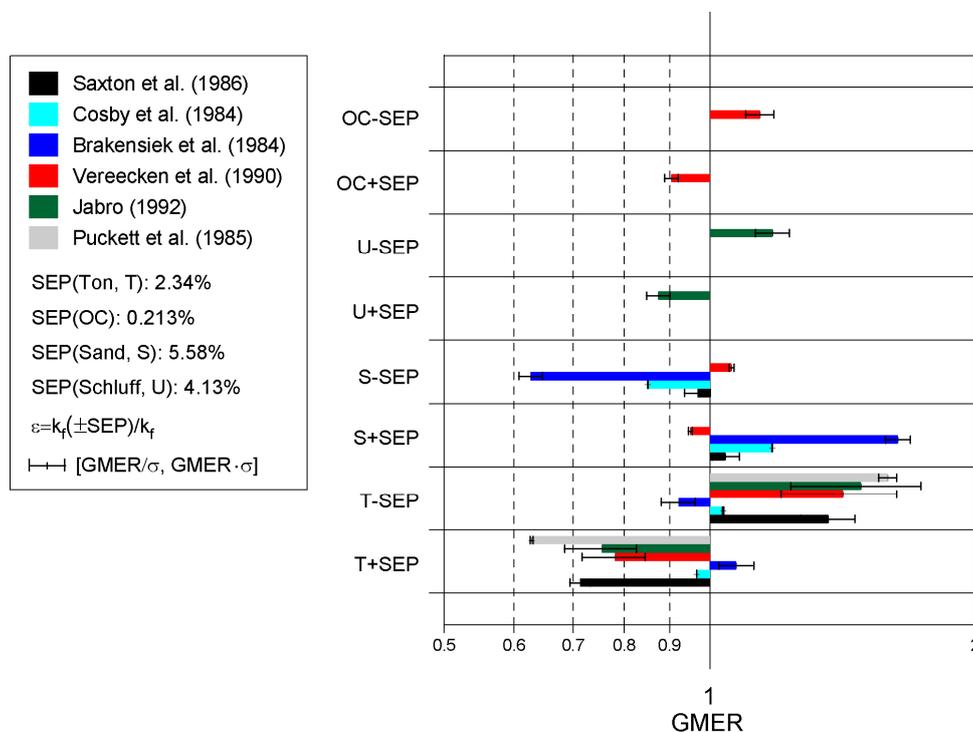


Abb. 7.9.4: Mittlerer geometrischer Fehlerquotient (GMER) bei Berücksichtigung des maximalen Standardfehlers der Modellschätzungen (\pm SEP bzw. SEC) des Ton-, Sand-, Schluff- bzw. organischen Kohlenstoffgehaltes aus den HyMap-Bilddaten von 2004, 2005 bzw. 2008 bei der Schätzung von k_f .

Ungeachtet der hohen Abhängigkeit von k_f von der Wahl der Pedotransferfunktion sowie der hohen Sensitivität der PTF bezüglich ihrer Eingangsparameter, deckt eine flächenhafte Darstellung auffallend ähnliche räumliche Muster auf. Die Schätzwerte von k_f wurden dafür zuvor normiert auf den Wertebereich $[0, 1]$ nach Gleichung 6.5.14. Aufgrund einiger weniger extremer Ausreißerwerte wurde für die Normierung das 0,995-Quantil (Tab. 7.9.1) als Maximumwert der Normierung angenommen. Abb. 7.9.5 und Abb. 7.9.6 veranschaulichen das Ergebnis für zwei Ackerschläge, die bereits zuvor im Fokus der Untersuchungen standen (vgl. dazu auch Abb. 7.8.3, Abb. 7.8.5). Für den Schlag nahe Alt Tellin (Abb. 7.9.5) erstreckt sich unabhängig von der PTF im Osten des Schleges ein

⁶⁸ Für die Analysen wurde jeweils der größte Standardfehler der drei betrachteten Jahre (2004, 2005, 2008) verwendet.

Band erhöhter k_f -Werte, welches am nördlichen Ende diagonal über den Schlag verläuft. Ebenso sind hohe k_f -Werte im südwestlichen Bereich des Schlages zu beobachten. Für den Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof (Abb. 7.9.6) ist die gesättigte Wasserleitfähigkeit flächendeckend relativ gering. Dennoch zeichnet sich auch hier ein übergreifendes räumliches Muster ab, mit extrem niedrigen k_f -Werten im zentralen Bereich des Schlages sowie zum südwestlichen Feldrand hin. Inwiefern dieses Ergebnis für den Bodenschutz Verwendung finden kann, wird in Kapitel 8.5 erörtert.

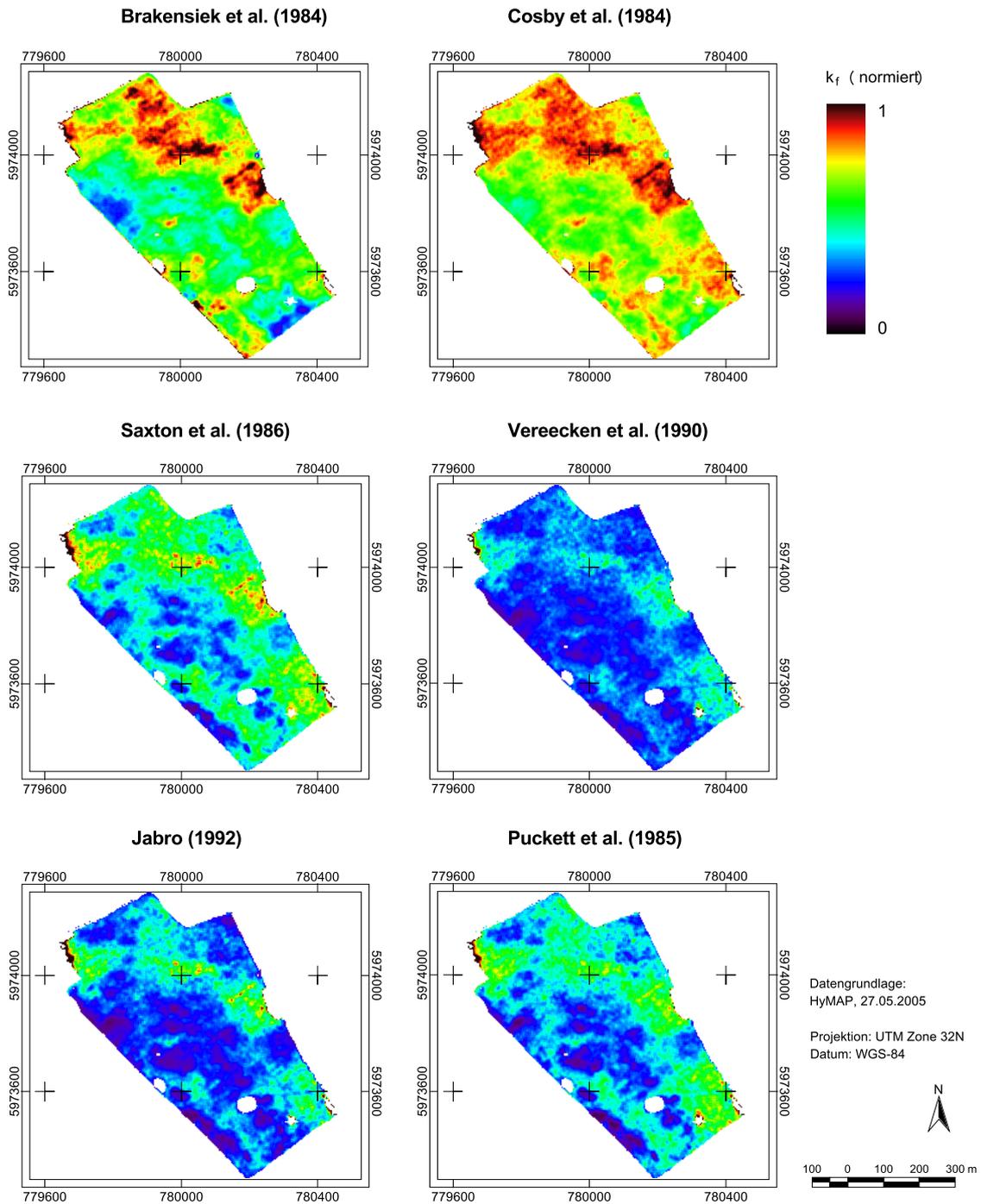


Abb. 7.9.5: Räumliche Struktur der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f für ein Feld nahe der Ortschaft Alt Tellin (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1). k_f ist normalisiert auf den Wertebereich $[0,1]$ nach Gleichung 6.5.14.

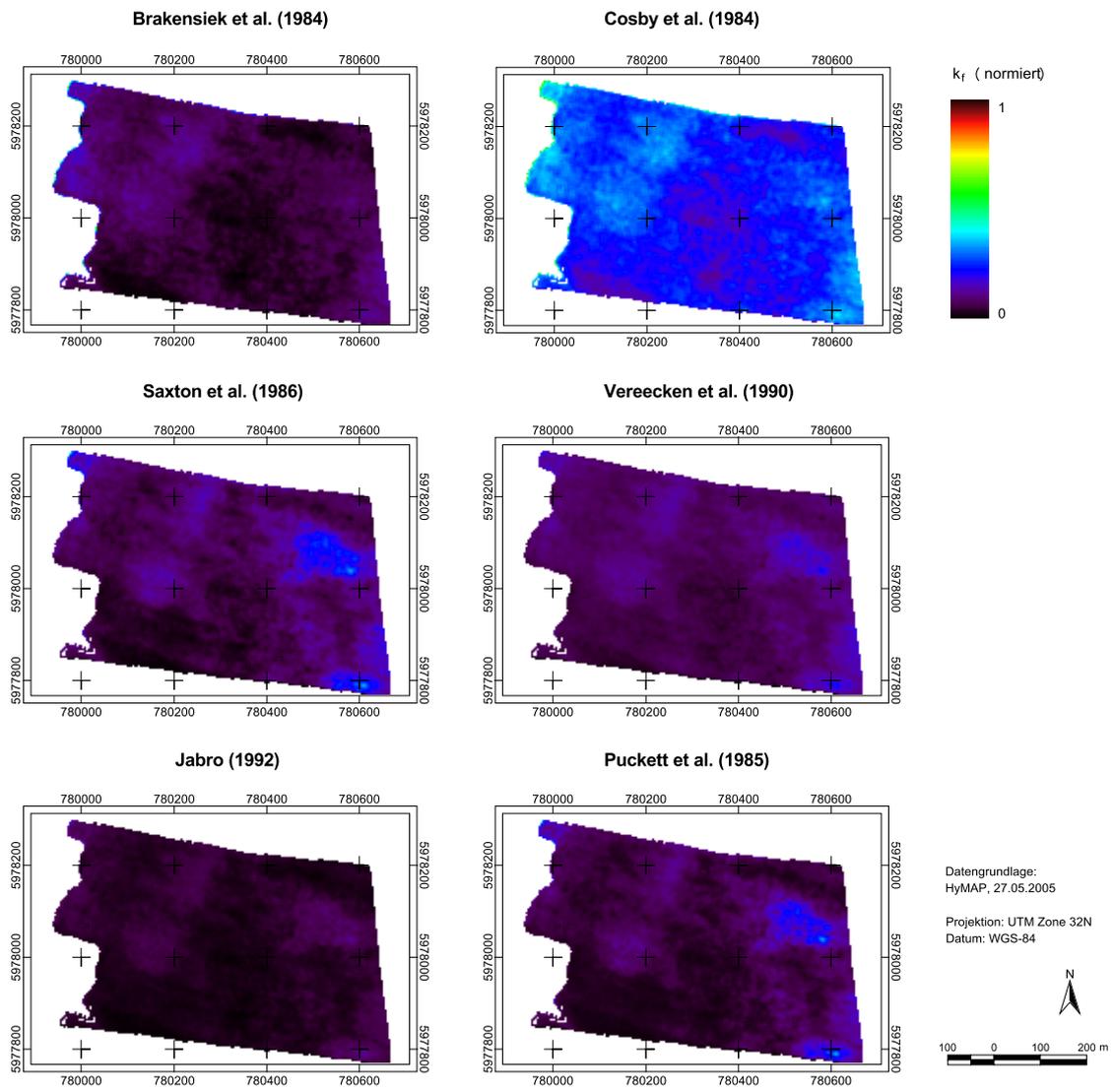


Abb. 7.9.6: Räumliche Struktur der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f für ein Feld östlich der Ortschaft Heydenhof (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1). k_f ist normalisiert auf den Wertebereich $[0,1]$ nach Gleichung 6.5.14.

8 Diskussion

8.1 Quantitative Analyse von Bodenparametern mit labor- und feldspektroskopischen Verfahren

Anhand der Fehlerkennwerte der Kalibrationsmodelle erfolgt in Kapitel 8.1.1 zunächst ein Vergleich mit Resultaten, die in Arbeiten anderer Autoren erzielt wurden. Im Fokus der Betrachtung stehen hierbei ausschließlich die Ergebnisse der PLSR mit den Laborspektren der getrockneten Bodenproben (vgl. Kap. 7.5.1, *otro*, PLSR). Die Ergebnisse themenspezifischer Experimente mit der Laborspektroskopie (Wassergehalt, spektrale Auflösung) sind Gegenstand der Diskussion in den Kapiteln 8.1.2 und 8.1.3. In Kapitel 8.1.4 folgt eine Einordnung der feldspektrenbasierten Resultate der PLSR in Bezug auf die Arbeiten anderer Autoren. Ferner beinhaltet dieses Kapitel eine Gegenüberstellung von Labor- und Feldspektroskopie, auf deren Grundlage Einflussfaktoren der quantitativen Spektroskopie von Böden *in-situ* erörtert werden. Eine ausführliche Besprechung der Vor- und Nachteile aller drei getesteten Quantifizierungsmethoden (PLSR, MLR, CR) folgt in einer Zusammenschau für Labor-, Feld- und Abbildende Spektroskopie in Kapitel 8.3.

8.1.1 Modellfehler und -qualität im Vergleich zu anderen Arbeiten

Schätzungen des **Tongehaltes** konnten mit dem PLSR-Modell auf Basis der Laborspektren der getrockneten Bodenproben (*otro*) mit einer Genauigkeit von 1,85% Ton vorgenommen werden. Mit einem RPD von 3,73 gehört das Modell der Gruppe A nach Chang et al. (2001) an. Ähnlich gute Ergebnisse auf Basis von Laborspektren sind in den Arbeiten von Sørensen & Dalsgaard (2005) sowie Waiser et al. (2007) anzutreffen. Beide Arbeiten fußen wie die vorliegende Arbeit auf Bodenproben bzw. -spektren regionaler Herkunftsgebiete. Sørensen & Dalsgaard (2005) konnten unter bestimmten Kalibrations- und Validationskonfigurationen mit Böden aus Dänemark RPD zwischen 3,2 und 4,1 erreichen, wobei ihre Bodenproben maximal 26% Ton enthielten. In DEMMIN reichte die Tonfraktion bis zu ca. 33%. Waiser et al. (2007) testeten vier verschiedene Probenaufbereitungstechniken für Böden aus Texas und erzielten RPD zwischen 1,95 und 3,51. Interessanterweise erwiesen sich in ihrer Studie getrocknete Proben⁶⁹ ohne weitere Probenaufbereitung (RPD: 3,51) zweckmäßiger zur Schätzung der Tonfraktion im Boden als getrocknete und auf 2mm gemahlene Proben (RPD: 2,32). Andere Autoren, die Studien zur Schätzung des Tongehaltes aus Bodenproben regionaler Herkunftsgebiete mittels VNIRS veröffentlichten, berichten RPD von 2,7 (Cozzolino & Morón, 2003) und 1,71 (Chang et al., 2001). Kooistra et al. (2001, 2003a) geben keinen RPD an. RMSE zwischen 2,2% und 3,82% Ton bei einem maximalen Anteil der Tonfraktion von 25% deuten darauf hin, dass mit dem PLSR-Modell der getrockneten Bodenproben aus DEMMIN bessere Ergebnisse erzielt wurden (vgl. Anhang G 1).

Auch das PLSR-Modell zur Schätzung des **organischen Kohlenstoffgehaltes** mit den Laborspektren der getrockneten Proben ist nach Chang et al. (2001) ein Modell der Gruppe A (RPD: 2,33). Der Standardvalidationsfehler (SEP) der Schätzungen beträgt 0,185% OC, wobei für Böden mit größeren OC-Gehalten mit einem größeren Fehler gerechnet werden muss (vgl. Abb. 7.5.9k). Dieses Resultat ordnet sich auf einer Ebene mit den Ergebnissen zahlreicher anderer Autoren ein, die Schätzungen des organischen Kohlenstoffgehaltes unter standardisierten Bedingungen im Labor aus Böden regionaler Herkunftsgebiete durchgeführt haben (z. B. Sørensen & Dalsgaard, 2005; Stevens et al., 2008; Hummel et al., 2001; Pirie et al., 2005; Brown et al., 2005; Fystro, 2002; vgl. Anhang G 2). Beispielsweise berichten Stevens et al. (2008) für ihr PLSR-Modell auf Basis von 117 Bodenproben aus Belgisch-Lothringen einen RPD von 2,11. Die gleiche Modellgüte konnten Hummel et al. (2001) mit einer schrittweisen multiplen Regression für etwa 380 Proben aus dem mittleren Westen der USA

⁶⁹ Trocknung bei 44°C für 2 Tage.

(US Corn Belt) erreichen. Die PLSR-Modelle von Sørensen & Dalsgaard (2005) zur Schätzung des Gesamtkohlenstoffgehaltes von Proben aus Dänemark haben RPD von 2,3 und 2,4. Arbeiten ohne Angaben zum RPD mit einem ähnlichen Wertebereich des organischen Kohlenstoffgehaltes wie die eigenen Proben (ca. 0,4-2,5% OC) erzielen RMSE zwischen 0,12% und 0,30% OC (Reeves et al., 2002; Jarmer et al., 2010; Dalal & Henry, 1986). Der SEP der eigenen Untersuchungen bewegt sich hier im oberen Mittelfeld. Indes konnten in einigen Studien auch bessere Ergebnisse bei Kalibrationsversuchen mit VNIR-Spektren erzielt werden. Dazu zählt u. a. die Arbeit von Chang et al. (2001), die für ihr Kalibrationsmodell auf Basis einer Hauptkomponentenregression einen RPD von 2,79 angeben. Der RPD bei van Waes et al. (2005) beträgt 2,9. Die Kalibration mittels BRT (*Boosted Regression Trees*) von Cohen et al. (2005), deren Datensatz Bodenproben mit bis zu 48% OC enthält, ist sogar durch einen RPD von 5,89 charakterisiert. Eine ähnlich große Wertespanne für organischen Kohlenstoff weisen die Böden von Couëteaux et al. (2003) aus Schweden und Frankreich auf. Deren PLSR-Modell⁷⁰ mit organischen sowie mineralischen Böden hat einen RPD von 9,7. Dass es unter standardisierten Laborverhältnissen aber bei weitem nicht immer gelingt, Kalibrationsmodelle der Gruppe A nach Chang et al. (2001) zu generieren, zeigen zum Beispiel die Ergebnisse von Dunn et al. (2002) und Udelhoven et al. (2003).

8.1.2 Effekte des Bodenwassergehaltes

In Kapitel 7.2.3 wurden die Auswirkungen des Bodenwassergehaltes auf das Reflexionssignal untersucht. Demnach resultierte die Zugabe von Wasser zu den Bodenproben des Testfeldes DEMMIN in einer charakteristischen Abnahme des Reflexionsvermögens im gesamten Wellenlängenbereich. Ein Effekt, der schon zeitig anhand von Messungen belegt werden konnte (Bowers & Hanks, 1965). Angstrom (1925)⁷¹ führte das dunklere Erscheinen von feuchten Böden auf Totalreflexionen innerhalb des Wasserfilms an den Teilchenoberflächen zurück, die eine Reflexion des Lichtes in den umgebenden Raum verhindert. Für die Böden aus DEMMIN wurde bei gleichen Wassergehalten für ton- und humusarme Proben ein stärkerer Rückgang des Reflexionsvermögens festgestellt als für ton- und humusreiche Proben. Im sichtbaren Bereich des Spektrums (VIS) traten rückläufige Reflexionswerte bis etwa 10,0M.-% Wasser auf. Bei höheren Wassergehalten fanden hingegen nur noch geringfügige Änderungen statt. Im nahen und kurzwelligen Infrarot (NIR-SWIR) bewirkte eine Wasserzugabe bis etwa 30,0M.-% eine stete Abnahme des Reflexionsvermögens ohne dass eine Sättigung eintrat. Diese Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit Beobachtungen anderer Autoren (Lobell & Asner, 2002; Liu et al., 2002; Haubrock et al., 2008a). Die frühzeitige Sättigung des Reflexionssignals im VIS erklärten Lobell & Asner (2002) mit der Änderung des Brechungsindex an Teilchenoberflächen. Wasser, das sich in Makro- oder Mikroporen im Bodenkörper ansammelt, hat im VIS keinen Einfluss auf das Reflexionssignal. Im NIR-SWIR verursacht die starke Absorption durch Wasser den weitaus größeren Rückgang der Reflexion. Eine Studie von Lobell & Asner (2002) zeigte, dass eine Sättigung erst bei $\geq 30,0M.-%$ Wasser zu erwarten ist, abhängig von den Bodeneigenschaften. Wasser verändert aber nicht nur die Albedo von Bodenoberflächen. Es verursacht auch Modifikationen einzelner Absorptionsbanden. Je höher der Wassergehalt ist, desto geringer ist die Tiefe der Tonabsorptionsbande nahe 2200nm. Eine Feststellung, zu der Lobell & Asner (2002) ebenso kamen. Während sie aber von einer nahezu linearen Abnahme der Absorptionstiefe berichteten, wurde in der vorliegenden Arbeit ein nichtlinearer Trend beobachtet (vgl. Abb. 7.2.5). Im Gegensatz zu dieser und bisherigen Arbeiten (Lobell & Asner, 2002) stehen die Erkenntnisse von Stenberg (2010), die keinerlei wasserbedingte Veränderungen der Tonabsorptionsbande diagnostizierten. Das charakteristische Absorptionsverhalten von Böden im VNIR in Zusammenhang mit organischer Bodensubstanz, das in dieser Arbeit durch die Absorptionstiefe nahe 662nm beschrieben wurde, ist gekennzeichnet durch eine Zunahme der Absorptionstiefe mit zunehmender Bodenfeuchte. In humusarmen Böden änderte sich die Absorptionstiefe nahe 662nm ab einem Wassergehalt von 10,0M.-% nur noch geringfügig. In

⁷⁰ Couëteaux et al. (2003) nutzen einen modifizierten PLSR-Ansatz zur Schätzung des OC-Gehaltes.

⁷¹ Zitiert in Baumgardner et al. (1985): Angstrom, D. (1925). The albedo of various surfaces of ground. *Geogr. Ann.*, 7: 323.

humusreichen Böden stieg sie dagegen auch bei 13,0M.-% Wasser weiter an (vgl. Abb. 7.2.5). Vergleichende Studien hierzu liegen nicht vor.

Der Einfluss dieser spektralen Modifikationen auf die Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes war Gegenstand des Kapitels 7.5.1. Im Fokus dieser Betrachtung standen die Auswirkung variabler Bodenwassergehalte, Effekte durch eine Wiederbefeuchtung der Proben und die Rolle der Quantifizierungsmethode im Hinblick auf den besten Verfahrensansatz zur Schätzung der Bodenparameter.

Die Schätzung des **Tongehaltes** bei variablen Bodenwassergehalten⁷² resultierte modellübergreifend in einer Verschlechterung der Modellgüte. Es wird angenommen, dass dieser negative Effekt auf die höhere spektrale Variabilität bei unterschiedlichen Wassergehalten zurückzuführen ist. Die Standardabweichung der Reflektanz der Proben mit variablen Wassergehalten (mix) ist im gesamten Wellenlängenbereich größer als die der getrockneten Proben (otro), insbesondere aber in unmittelbarer Nachbarschaft zu den Wasserabsorptionsbanden nahe 1,4 μ m und 1,9 μ m sowie im SWIR ab ca. 1,1 μ m (Abb. 8.1.1). Genau in diesen Bereichen treten charakteristische Absorptionerscheinungen von Tonmineralen auf, die als Prädiktoren in den multivariaten Modellen dienen (vgl. Abb. 7.5.3, Abb. 7.5.5). Sie werden durch Obertöne und Kombinationen von Grundschwingungen molekularen Wassers oder OH-Streckschwingungen nahe 1,4 μ m, 1,9 μ m und 2,2 μ m (Clark et al., 1990) in unterschiedlichem Ausmaß modifiziert bzw. überlagert und erschweren die Schätzung des Tongehaltes mit MLR und PLSR. Das schlechte Abschneiden des CR-Ansatzes erklärt sich durch die starke Streuung der Absorptionstiefe nahe 2,2 μ m bei variablen Wassergehalten, die vor allem in Böden mit niedrigen Tongehalten hoch ist (vgl. Abb. 7.5.7). Im Vergleich zur Verwendung standardisierter Proben (otro) nahmen die Standardfehler für das CR um ca. 26% und für die MLR um ca. 48% zu. Der Standardfehler des PLSR-Modells stieg bei Verwendung unterschiedlich feuchter Böden um 13% an. Das entspricht einem Anstieg des Fehlers von 1,85% Ton (otro) auf 2,09% Ton (mix). Es ist daher festzuhalten, dass Variationen im Wassergehalt trotz eines etwas höheren Modellfehlers durch die PLSR sehr gut kompensiert werden können. Im Hinblick auf die Schätzung des Tongehaltes mit in-situ Messverfahren (FS, IS) kann das als vielversprechend gewertet werden. Dass Variationen in der Bodenfeuchte die Vorhersagegenauigkeit negativ beeinträchtigen können, wurde auch in Untersuchungen von Waiser et al. (2007) an 72 Bohrkernen texanischer Böden deutlich. Sie notierten RMSE-Werte von 6,1% Ton für feldfeuchte-ungestörte Proben mit unterschiedlicher Bodenfeuchte⁷³ und einen RMSE von 4,1% Ton für getrocknete⁷⁴-ungestörte Proben, d.h. eine Zunahme des Standardfehlers um etwa 49%. Smektit gehört zur Gruppe der quellfähigen Dreischichttonminerale. Bei mehreren Versuchen, den Smektitgehalt von schweren Tonböden in der Front Range im Osten Colorados (USA) zu schätzen, konnten Goetz et al. (2001) ebenso bessere Resultate durch Trocknung ihrer Proben über einen längeren Zeitraum bei Zimmertemperatur erwirken. Auch wenn eine Lagerung der Proben bei Zimmertemperatur nicht mit einer Trocknung unter standardisierten Bedingungen verglichen werden kann, ist davon auszugehen, dass die Variabilität des Bodenwassergehaltes dadurch vermindert wird. Dessen ungeachtet existieren Studien, die im Gegensatz zu diesen Untersuchungen und zur vorliegenden Arbeit kaum Unterschiede in der Modellgüte in Abhängigkeit des Wassergehaltes feststellten (Chang et al., 2005; Viscarra Rossel et al., 2009). Chang et al. (2005) spektrometrierten Böden mit Wassergehalten zwischen 2,8M.-% und 25,0M.-% und deren getrocknete Pendanten. Trotz der deutlich höheren Variabilität des Wassergehaltes ihrer Böden im Vergleich zum vorliegenden Experimentaufbau, waren die Unterschiede in der Genauigkeit ihrer PLSR-Kalibrationen für Ton gering. Die Kalibration mit getrockneten Böden erwies sich zwar als vorteilhaft (R^2 : 0,76, RPD: 2,02), die Leistungsfähigkeit der Kalibration mit feuchten Proben stand dieser aber nur um 4% nach (R^2 : 0,74, RPD: 1,94). Viscarra Rossel et al. (2009) stellten sogar die Vermutung an, dass sich die natürliche Variabilität des Wassergehaltes unter in-situ Bedingungen günstig auf die Schätzung des Tongehaltes mittels Feldspektroskopie auswirkt. Tatsächlich konnte in einer Auswahl von Bodenproben aus DEMMIN ein sehr enger Zusammenhang zwischen dem natürlichen Wassergehalt (lufttrockener Zustand) und dem Tongehalt festgestellt

⁷² Bezieht sich auf die Kalibrationsmodelle mix (Tab. 7.5.1).

⁷³ Die Bodenfeuchte ist hier angegeben als Wasserpotential und beträgt zwischen 0 und -5,8MPa.

⁷⁴ Trocknung bei 44°C für 2d.

werden (vgl. Kap. 7.3.1). Die Untersuchungen zur Vorhersagegenauigkeit bei variablen Wassergehalten machten indes deutlich, dass dieser Zusammenhang zumindest bei höheren Wassergehalten, wie sie nach intensiven Regenfällen zu erwarten sind, abgeschwächt wird.

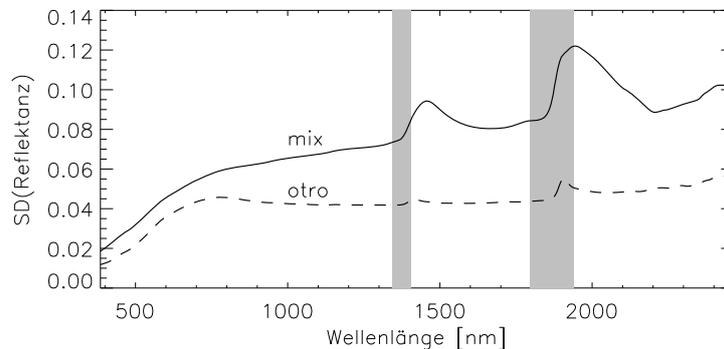


Abb. 8.1.1: Standardabweichung (SD) der Reflektanz als Funktion der Wellenlänge für die Spektren der getrockneten (otro) Proben der *Bodenserie Demmin* und die Spektren der Proben mit variablen Wassergehalten zwischen 0,0M.-% und 13,0M.-% (mix). Bereiche der Wasserabsorption sind grau unterlegt und wurden nicht in der Modellkalibrierung verwendet.

Wie die Untersuchungen in Kapitel 7.5.1 zeigten, führt eine Wiederbefeuchtung zuvor getrockneter Bodenproben auf einen einheitlichen Bodenwassergehalt von 7,2M.-%, 10,0M.-% und 13,0M.-% nicht zu einer Verbesserung der MLR- und PLSR-Kalibrationen für Ton. Diese Ergebnisse stehen im Widerspruch zu den Resultaten von Stenberg (2010), die durch eine Wiederbefeuchtung auf einen Wassergehalt von 12,5M.-% und 20,0M.-% den RMSEP ihrer PLSR-Modelle um bis zu ca. 16% senken konnten. Bei einem Wassergehalt von 30,0M.-% hob sich dieser positive Effekt weitestgehend auf. Der zusätzliche Aufwand, der mit einer Wiederbefeuchtung der Proben verbunden ist, rechtfertigt daher seiner Meinung nach den Zugewinn an Vorhersagegenauigkeit nicht in jedem Fall (Stenberg, 2010). Den Ergebnissen der vorliegenden Arbeit zufolge würde eine Wiederbefeuchtung nicht nur einen erhöhten Arbeitsaufwand mit sich bringen, sondern wäre sogar kontraproduktiv. Die Ursache für die unterschiedlichen Resultate bleibt jedoch unbeantwortet. In Böden mit unterschiedlicher Bodenfeuchte führten die Absorptionseigenschaften von Wasser und Interaktionen von Wasser mit anderen Bodenbestandteilen zu Problemen bei der Schätzung von Ton (siehe im Text weiter oben). Stenberg vermutete, dass bei konstanten Wassergehalten diese Änderungen ebenso konstant sind und so zu einer Verbesserung der Kalibrationen beitragen (Reeves, 2010⁷⁵). Allerdings wurde in einer Studie von Bogrekci & Lee (2005) deutlich, dass Schätzungen des Phosphorgehaltes in sandigen, tonarmen Böden nicht von der Zugabe von Wasser profitieren, auch nicht bei gleichen Anteilen des Bodenwassers. Die Böden in der vorliegenden Arbeit weisen einen mittleren Tongehalt von 12,7% auf. Der Sandgehalt beträgt im Mittel 61,6%. Stenberg's Datensatz ist im Mittel durch einen fast doppelt so hohen Tongehalt (24% Ton) und einen halb so großen Sandgehalt (35% Sand) gekennzeichnet. Der Mehrwert an Vorhersagegenauigkeit, der durch eine Zugabe von Wasser in gleichen Teilen gewonnen werden kann, ist daher möglicherweise an die Eigenschaften der Böden gebunden. Bei mäßigen Tongehalten und höheren Sandanteilen gehen positive Effekte offenbar verloren.

Wird das CR, d.h. die Absorptionsbande nahe 2200nm, zur Quantifizierung des Tongehaltes eingesetzt, kann eine Wiederbefeuchtung erheblich zu einer Verbesserung beitragen. Die Standardfehler können dadurch um etwa 27% verringert werden. Dieser positive Effekt durch die Zugabe von Wasser in gleichen Teilen ist, wie Untersuchungen in Kap. 7.5.1.1 aufdeckten, einer Verringerung der Streuung der Absorptionstiefe in Böden mit ähnlichen Tongehalten geschuldet (vgl. Abb. 7.5.7). Vorteile, die das CR-Verfahren trotz der absolut gesehen schlechteren Leistungsfähigkeit im Vergleich zu MLR und PLSR für Laboranwendungen bieten kann, werden in Kapitel 8.3 diskutiert.

⁷⁵ Stenberg, B.: persönliche Mitteilung in Reeves (2010).

Die Schätzung des **organischen Kohlenstoffgehaltes** bei variablen Bodenwassergehalten resultierte bei Anwendung des CR in einer starken Verringerung der Modellgüte. Der Standardfehler erhöhte sich um ca. 44% von 0,180% OC auf 0,260% OC. Wie bei Ton nimmt auch hier die Variabilität der Absorptionstiefe nahe 662nm durch Variationen im Wassergehalt zu (Abb. 7.5.13). Da die Absorptionstiefe als alleiniger Prädiktor für die Höhe des OC-Kohlenstoffgehaltes dient, ist dies mit großer Wahrscheinlichkeit die Hauptursache für die schlechte Modellperformance unter diesen Bedingungen. Für die Leistungsfähigkeit der MLR- und PLSR-Modelle sind Variationen im Wassergehalt hingegen vernachlässigbar. Dass variable Bodenfeuchten offenbar keine ausschlaggebende Rolle für die Vorhersagegenauigkeit von PLSR-Kalibrationen zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes spielen, schlussfolgerten auch Chang et al. (2005), wobei ihre Proben noch größeren Variationen im Wassergehalt unterlagen, als in der vorliegenden Arbeit. Fystro (2002) erhielt sogar etwas bessere Ergebnisse bei der Verwendung von in-situ Proben mit unterschiedlichen Wassergehalten.

Absorptionserscheinungen von organischem Kohlenstoff im VNIR-SWIR werden durch Obertöne und Kombinationen von Grundschwingungen funktioneller Gruppen (z.B. $-\text{COOH}$, $-\text{OCH}_3$, $-\text{C}=\text{O}$) im MIR hervorgerufen, die in komplexen Materialien wie Boden aber häufig nur schwach ausgeprägt sind und sich gegenseitig überlappen (Workman & Weyer, 2008; Ben-Dor et al., 1997; Chang & Laird, 2002; Ziechmann, 1964). Besonders charakteristisch ist der konvexe Kurvenverlauf humusreicher Böden im VNIR (Stoner & Baumgardner, 1981). In der Analyse der Modellparameter wurde deutlich, dass dieser Bereich, in dem die wasserinduzierte spektrale Variabilität vergleichsweise niedrig ist (vgl. Abb. 8.1.1), sowohl in den mix-Modellen mit PLSR als auch mit MLR hoch gewichtet ist, wenn die Bodenfeuchte variiert (vgl. Abb. 7.5.10, Abb. 7.5.12). Eine Tatsache, die erklären könnte, warum die Leistungsfähigkeit der PLSR- und MLR-Modelle für OC mit getrockneten Proben ähnlich hoch ist wie mit Proben, die unterschiedliche Bodenwassergehalte aufweisen. Allerdings befinden sich modellrelevante Informationen auch im SWIR, für das eine hohe wasserinduzierte spektrale Variabilität charakteristisch ist (Abb. 8.1.1). Die Prozesse, die die Modellkalibrationen bei Schwankungen in der Bodenfeuchte beeinflussen, bleiben daher weitestgehend ungeklärt. Es muss außerdem erwähnt werden, dass zum Beispiel Morgan et al. (2009) die Erkenntnisse der vorliegenden Arbeit nicht teilen. In ihrer Studie wirkten sich variable Bodenwassergehalte negativ auf die Standardfehler aus. Der RMSE auf Basis von Bodenspektren trockener-ungestörter Böden betrug hier 0,41% OC, der auf Basis von Bodenspektren feldfeuchter-ungestörter Böden 0,57% OC.

Die Standardfehler und RPD der otro- und mix-Modelle mit den multivariaten statistischen Modellansätzen sind nahezu identisch (vgl. Tab. 7.5.2). Die Streudiagramme (Abb. 7.5.9f,k,j,o) zeigen, dass OC-Gehalte größer ca. 2,0% tendenziell unterschätzt werden. Besonders deutlich ist diese Tendenz für beide Kalibrationsmethoden bei Verwendung von Proben mit variablen Bodenwassergehalten (mix) ausgeprägt (Abb. 7.5.9j,o). Nichtlineares Verhalten in den Modellen mit variablen Bodenwassergehalten legt zunächst die Vermutung nahe, dass dieser Effekt durch Interaktionen von Wasser mit organischem Kohlenstoff hervorgerufen wird. Gegen diese Vermutung spricht, dass auch die Modelle mit getrockneten Bodenproben davon betroffen sind, wengleich in geringerem Ausmaß. Eine Befeuchtung der Proben mit einheitlichen Wassergehalten (feu2, feu3, feu4) wirkte dieser Tendenz in einigen Fällen wiederum entgegen (Abb. 7.5.9g-i). Weder die Höhe des Bodenwassergehaltes noch deren Variabilität sind demzufolge alleiniger Verursacher dieses Effekts. Ein weiterer bedeutender Chromophor im visuellen Bereich ist Eisen, aber auch der Sandanteil kann Einfluss auf die Reflexionseigenschaften im VIS und damit auf die Modellierung des organischen Kohlenstoffgehaltes ausüben (Palacios-Orueta & Ustin, 1998). Absorptionsmerkmale von zwei- und dreiwertigem Eisen treten zwischen 400nm und 900nm auf (Ben-Dor et al., 1999), d.h. in einem Wellenlängenbereich, in dem auch organische Bodensubstanz einen typischen Spektralverlauf aufweist. Die Ergebnisse einer PLSR mit gruppierten Datensätzen entsprechend der Höhe der Eisenkonzentration bzw. der Höhe des Sandgehaltes machen deutlich, dass weniger der Bodenwassergehalt als vielmehr spektrale Interaktionen mit Sand oder Eisenverbindungen wahrscheinlich Verursacher des nichtlinearen Trends sind. Durch Teilung des Gesamtdatensatzes in Böden mit hohem (>63,5% Sand) und geringem (<63,5% Sand) Sandgehalten bzw. hohem (>1,36% Fe_2O_3) und geringem (<1,36% Fe_2O_3) Eisengehalten treten diese nichtlinearen Effekte nicht mehr auf. Dies ist auch der Fall, wenn die Proben einen ähnlichen Wertebereich des OC-Gehaltes abdecken wie im Gesamtdatensatz (d.h. ca. 0,4-2,5% OC) und die Bodenfeuchte variabel ist (Abb. 8.1.2, vgl. auch

Anhang D 20). Da der Gehalt an Eisen und Sand in den Böden des Testfeldes DEMMIN stark miteinander korreliert ist ($R=-0,77$, vgl. Anhang A 3), lässt sich der tatsächliche Ursprung des nichtlinearen Trends nicht eindeutig identifizieren. Dieser kann durch spektrale Interaktion zwischen Eisen und organischer Bodensubstanz, Sand und organischer Bodensubstanz oder mit beiden bedingt sein und wird durch Variationen im Bodenwassergehalt, verstärkt.

Ein nichtlineares Verhalten bei der Schätzung des OC-Gehaltes beobachteten auch Sørensen & Dalsgaard (2005) und Kooistra et al. (2003a). In ihren Arbeiten findet sich jedoch kein Anhaltspunkt zu dessen möglicher Ursache. Stevens et al. (2010) gelang es durch Teilung der Daten nach Bodentyp und Region, nichtlineare Effekte bei der Kalibration mittels PSR (*Penalized Spline Regression*) und PLSR zu eliminieren. Da ihre Proben regional sehr unterschiedliche Eisenkonzentrationen aufweisen, werteten sie dies als Indiz dafür, dass Eisen in unmittelbarem Zusammenhang mit diesen nichtlinearen Effekten steht.

Sowohl MLR als auch PLSR sind lineare Methoden. Sie können den Zusammenhang zwischen organischem Kohlenstoff und dem Reflexionssignal daher nur umfassend beschreiben, wenn diese Voraussetzung gegeben ist. Dies könnte, wie diskutiert, durch Gruppierung der Böden nach Eisen- oder Sandgehalten erfolgen. Eine weitere Möglichkeit ist der Einsatz von Methoden, die nichtlineares Verhalten erfassen können (vgl. dazu Kap. 8.3).

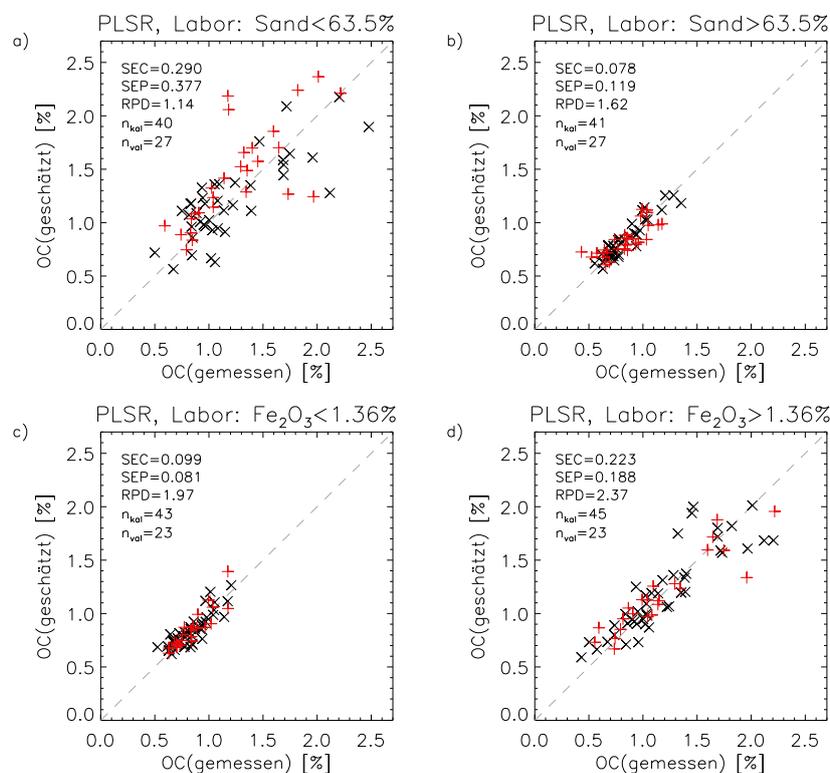


Abb. 8.1.2: Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit PLSR und Bodenproben variabler Bodenwassergehalte (mix), gruppiert entsprechend dem Sand- bzw. dem Eisengehalt im Boden. a,c) PLSR mit Böden geringer Sand- bzw. Eisengehalte. b,d) PLSR mit Böden hoher Sand- bzw. Eisengehalte. Teilung des Datensatzes am Medianwert des Bodenparameters (Median_{Sand}: 63,59%; Median_{Fe₂O₃}: 1,36%). Das PLSR-Modell mit $Fe_2O_3 < 1,36\%$ ist bereinigt um einen Ausreißer (MP70).

Anders als für Ton wirkt sich eine Wiederbefeuchtung getrockneter Proben im Labor mit gleichen Teilen Wasser günstig auf die Vorhersagegenauigkeit für MLR und PLSR aus. Bei Verwendung der MLR zur Schätzung des OC-Gehaltes erbringt die Befeuchtung mit geringen Wassergehalten (7,2M.-%) den größten Zugewinn. Je höher der Wassergehalt, desto stärker wird der positive Effekt wieder ausgeglichen. Bei 13,0M.-% Wasser ergibt sich aus einer Wiederbefeuchtung kein Vorteil mehr für die Vorhersagegenauigkeit. Für die PLSR gilt, je höher der Wassergehalt, desto größer die Schätzgenauigkeit. Der Standardvalidationsfehler konnte in dieser Arbeit durch die Wiederbefeuchtung um bis zu 17% verringert werden (13,0M.-% H₂O). Dass dies auch bei noch größeren

Wassergehalten der Fall ist, zeigen die Ergebnisse von Stenberg (2010), deren Standardfehler sich bei einem Wassergehalt von 12,5M.-% um 22%, bei einem Wassergehalt von 20,0M.-% um 28% und bei einem Wassergehalt von 30,0M.-% um ca. 30% verringern. Bei der Bestimmung des OC-Gehaltes mittels Reflexionsspektroskopie im Labor und multivariaten statistischen Verfahren, wie MLR v.a. aber PLSR, ist es daher sinnvoll, den Mehraufwand, der durch eine zusätzliche Befeuchtung entsteht, gegen den Zugewinn an Vorhersagegenauigkeit abzuwägen. Derweilen ist es schwierig, die Ursachen dieses Effektes zu identifizieren. Die Parameter der PLSR-Modelle (VIP, b-Koeffizienten, vgl. Abb. 7.5.10) geben Hinweis darauf, dass abweichend vom Modell mit getrockneten Proben (otro), in den feu2-, feu3- und feu4-Modellen einzelne Wellenlängenbereiche relevant sind, die durch die Zugabe von Wasser zu Änderungen im Reflexionssignal geführt haben (vgl. Kap. 7.2.3). Das würde bedeuten, dass die Interaktion von Wasser, wenn es in allen Bodenproben in gleichen Anteilen vorliegt, die Schätzung des OC-Gehaltes fördert. Da die Ausprägung der Modellparameter aber weder konsistent ist, noch einen Trend mit zunehmendem Wassergehalt erkennen lässt, bleibt es eine vage Vermutung. Dies ist umso mehr der Fall, als ein Zusammenhang in den MLR-Modellen noch schwerer zu erkennen ist. Wird das CR-Verfahren zur Schätzung des OC-Gehaltes im Labor verwendet, sollte ausschließlich mit getrockneten Proben gearbeitet werden. Eine nachträgliche Befeuchtung der Bodenproben mit gleichen Teilen Wasser wirkt kontraproduktiv, da hierdurch die Standardabweichung der Absorptionstiefe nahe 662nm für Böden mit ähnlichen Kohlenstoffgehalten ansteigt (vgl. Abb. 7.5.14). Infolgedessen ist der Zusammenhang zwischen Absorptionstiefe und OC-Gehalt schlechter ausgeprägt und Schätzungen des OC-Gehaltes mit größeren Fehlern behaftet.

Die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit haben gezeigt, dass der Bodenwassergehalt in sehr komplexen Wechselwirkungen mit anderen Bodeneigenschaften steht, die sich abhängig vom Bodenparameter, von der Höhe des Wassergehaltes und von seiner Variabilität ganz unterschiedlich im Reflexionssignal von Böden widerspiegeln. Für einige der Folgen, die sich daraus für die quantitative Reflexionsspektroskopie ergeben, konnte eine Erklärung oder zumindest eine Vermutung gefunden werden. Nach wie vor bleiben aber Fragen offen. Nur ein noch besseres Verständnis der Prozesse, die durch Wasser im Boden ausgelöst werden, kann hier zu einer Klärung beitragen.

8.1.3 Effekte der spektralen Auflösung

Die spektrale Auflösung bzw. Bandbreite (FWHM) des flugzeuggetragenen Hyperspektralsensors HyMap beträgt zwischen 15-16nm bzw. 18-20nm im VNIR-SWIR-I bzw. im SWIR-II, das Messintervall liegt zwischen 13-17nm. Zukünftige hyperspektrale Satellitenmissionen sind mit einer Bandbreite von ~10nm und einem ähnlichem großen Messintervall konzipiert (z.B. EnMAP; vgl. Tab. 4.1.3). Das Fieldspec® Pro Spektrometer der Firma ASD Inc. (ASD, 2002) zeichnet Daten mit einer Bandbreite von 3nm im VNIR und 10nm im SWIR mit einem Messintervall von 1,4nm bzw. 2nm auf. Den Ergebnissen dieser Arbeit nach zu urteilen (vgl. Kap. 7.5.2), führt diese Diskrepanz je nach Bodenparameter zu unterschiedlichen Erkenntnissen. Für **Ton** ergibt sich ein widersprüchliches Bild in Abhängigkeit von der verwendeten Quantifizierungsmethode und der Höhe der spektralen Auflösung. Während der Standardvalidationsfehler (SEP) bei der Kalibration mit CR und PLSR nach einem spektralen Resampling der Spektren im Allgemeinen höher ist, resultierte ein spektrales Resampling auf die Konfiguration des HyMap-Sensors mit der MLR in einer Verbesserung. Das MLR-Modell auf Basis der Spektren mit einer Halbwertsbreite von 20nm war dagegen wie CR und PLSR durch einen größeren SEP gekennzeichnet. Des Weiteren wurde deutlich, dass die kontinuierliche Verringerung der spektralen Auflösung (FWHM 10→HyMap→FWHM 20) nicht notwendigerweise mit einer kontinuierlichen Verringerung der Vorhersagegenauigkeit einher geht. So führte zum Beispiel das Resampling auf 20nm (FWHM 20) zu genaueren PLSR-Modellen als das Resampling auf 10nm (FWHM 10). Ben-Dor & Banin (1995a) erzielten die besten Ergebnisse bei der Schätzung des Tongehaltes durch eine Reduktion ihrer ursprünglichen Bandanzahl (3113 zw. 1,0-2,5µm) um den Faktor 50. Das entspricht einer spektralen Auflösung von 40nm für kleinere Wellenlängen (1,0µm) und 90nm für größere Wellenlängen (2,5µm). Ein Resampling über derartig große Wellenlängenintervalle wurde in der vorliegenden Arbeit nicht durchgeführt, da primär Aufschluss über den Effekt einer spektralen Konfiguration vergleichbar mit der von HyMap oder künftiger hyperspektraler Satellitenmissionen gewonnen werden sollte. Unter diesem Gesichtspunkt ist

durch ein spektrales Resampling im schlechtesten Fall eine Zunahme der Schätzunsicherheiten für Ton um bis zu 15,4% (MLR, FWHM=20nm) zu erwarten. Im besten Fall stieg der SEP nur um 4,4% Ton an (CR, HyMap) (vgl. Tab. 7.5.3). Bei der Quantifizierung des **organischen Kohlenstoffgehaltes** spielten Änderungen der spektralen Auflösung bis 20nm keine entscheidende Rolle (vgl. Tab. 7.5.4). Das ist in Übereinstimmung mit Resultaten von Gomez et al. (2008a). Die Genauigkeit ihrer PLSR-Kalibrationen war mit originalen ASD-Spektren⁷⁶ ähnlich gut wie mit neu berechneten Spektren entsprechend der Konfiguration des satellitengetragenen Sensors Hyperion. Nocita et al. (2011) konstatierten sowohl mittels Labor- als auch Feldspektroskopie einen Anstieg des Standardfehlers bei der Schätzung des OC-Gehaltes durch ein Resampling von ASD-Spektren auf die Konfiguration des geplanten satellitengetragenen Sensors EnMAP. Während ihre PLSR-Modelle mit den Neuberechneten Laborspektren dennoch eine zuverlässige Schätzung des OC-Gehaltes (RPD>2) gestatteten, war die Genauigkeit des PLSR-Modells auf Basis der neu berechneten Feldspektren unzureichend (RPD<1) und deutet darauf hin, dass eine Verringerung der spektralen Auflösung unter in-situ Bedingungen zu größeren Problemen führt, als es die Laboruntersuchungen zunächst vermuten lassen. Die Ursache für den Trend zur Unterschätzung in den MLR-Modellen nach dem Resampling der Spektren auf 20nm und HyMap-Konfiguration für OC-Gehalte größer 2,0% (vgl. Abb. 7.5.15) konnte nicht aufgeklärt werden.

8.1.4 Rückschlüsse aus der Feldspektroskopie

Feldspektroskopische Studien zur Abschätzung von Bodenparametern aus VNIR-SWIR-Reflexionspektren sind im Vergleich zu laborspektroskopischen Studien verhältnismäßig selten (vgl. Anhang G 1, Anhang G 2). Die vorliegende Arbeit konnte zeigen, dass es bei Verwendung eines geeigneten Quantifizierungsverfahrens auch mit in-situ Messungen möglich ist, Modelle zur Schätzung des **Tongehaltes** zu generieren, die nach Chang et al. (2001) in Gruppe A einzustufen sind (vgl. Kap. 7.6.1). Für das PLSR-Modell der *Bodenserie Demmin_Feld* betrug der RPD 2,73. Der mittlere Fehler der Schätzung (SEP) bezifferte sich auf 2,48% Ton. In der Arbeit von Lagacherie et al. (2008) ist der Standardfehler fast dreimal so hoch (7,1%). Ein RPD ist in ihren Untersuchungen nicht vermerkt, aber auch wenn die Tongehalte ihrer Böden im Mittel etwa 10%⁷⁷ höher liegen und die Tonfraktion in einigen Fällen bis zu 45% an der Korngrößenverteilung im Boden ausmacht, dürften ihre Schätzungen stärker fehlerbehaftet sein. Darauf deutet nicht zuletzt das Bestimmtheitsmaß (R^2) hin, dass bei Lagacherie et al. (2008) 0,58 und im Kalibrationsmodell der *Bodenserie Demmin_Feld* 0,87 beträgt. Bei Kooistra et al. (2003a) ist der SEP in den Untersuchungen mit Feldspektren etwa doppelt so hoch wie in der vorliegenden Arbeit, obwohl ihre Bodenproben nur maximal 25% Ton aufweisen.

Schätzungen des **organischen Kohlenstoffgehaltes** aus Feldspektren waren, wie unter standardisierten Bedingungen im Labor, im Vergleich zu Ton mit größeren Unsicherheiten verbunden. Das drückt sich in einem RPD von 1,82 für das beste Kalibrationsmodell (PLSR) aus. Der Standardfehler des PLSR-Modells bezifferte sich auf 0,227% OC, wobei die Schätzungen höherer OC-Gehalte (>2,0%) mit größeren Fehlern behaftet sind. Vergleichbare Resultate mit Feldspektren erzielten Gomez et al. (2008a) (RPD: 1,92) und Stevens et al. (2006) (RPD: 1,79). Durch Selektion der trockenen Messpunkte zum Zeitpunkt der Spektrometerehebungen im Gelände konnten Stevens et al. (2006) den RPD auf 2,33 steigern. Die Eliminierung der Feldspektren nachweislich feuchter Messpunkte erbrachte in dieser Arbeit keine nennenswerte Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit (vgl. Kap. 7.6.1).

Im Vergleich zur Laborspektroskopie⁷⁸ resultierte die Schätzung der Bodenparameter Ton und organischer Kohlenstoff aus Feldspektren unabhängig von der eingesetzten Quantifizierungsmethode in einer schlechteren Vorhersagefähigkeit. Der Zusammenhang zwischen den Bodenparametern und der Absorptionstiefe nahe 2200nm (Ton) bzw. 662nm (OC) war nicht signifikant, eine Vorhersage der Bodenparameter mit dem CR generell nicht zielführend. Die Vorhersagegenauigkeit (SEP) von MLR

⁷⁶ Die Messungen wurden mit dem Agrispec Spektrometer der Firma ASD Inc. durchgeführt.

⁷⁷ 10M.-% Ton

⁷⁸ Bezieht sich hier auf die Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro).

und PLSR verringerte sich für Ton um etwa 35%. Zusätzlich trat im MLR-Modell eine Tendenz zur Unterschätzung höherer Tongehalte (>25%) auf. Für OC erhöhte sich der SEP der PLSR um ca. 23%, der SEP der MLR um ca. 16%. Außerdem waren beide Modelle durch eine Unterschätzung höherer OC-Gehalte (>2,0% OC) gekennzeichnet (vgl. Kap. 7.6.1). Die Auswertung einzelner Modellkennwerte gab erste Hinweise darauf, dass Variationen im Wassergehalt der Böden in-situ die Modellkalibrationen negativ beeinflussen, wie dies die Laborexperimente in Kap. 7.5.1 erwarten ließen und in Kapitel 8.1.2 diskutiert wurde. Ein zusätzliches Indiz dafür, dass die Feldspektren durch Variationen im Wassergehalt gekennzeichnet sind, gibt der Celluloseabsorptionsindex (CAI). Der CAI ist eigentlich ein Indikator trockener Pflanzenrückstände (NPV) (Nagler et al., 2000). NPV ist durch einen positiven CAI gekennzeichnet, während der CAI von Böden typischerweise negativ ist (Nagler et al., 2003). Die spezifische Ausprägung des CAI ist aber nicht nur abhängig vom Bedeckungsgrad, der Pflanzenart und vom Bodentyp (Nagler et al., 2003), sondern ebenso vom Wassergehalt des Bodens (Daughtry et al., 2004; Daughtry & Hunt, 2008). Dies drückt sich in dem umgekehrt proportionalen, linearen Verhältnis zwischen dem CAI und der Absorptionstiefe nahe 2200nm aus, das für Böden unterschiedlicher Bodenfeuchte in Abb. 8.1.3 dargestellt ist. Die Laborspektren der getrockneten Böden weisen CAI-Werte zwischen -2,35 und -0,94 auf. Durch Wasserzugabe verringert sich dieser Wertebereich und verschiebt sich mit zunehmender Bodenfeuchte hin zu größeren CAI-Werten. Für die Feldspektren vom September 2006 (rote Symbole) beläuft sich der CAI auf Werte zwischen -2,72 und -0,35. Ca. 64% der Feldspektren weisen CAI kleiner -0,94 auf und befinden sich somit im Wertebereich der Laborspektren. Die große Streuung dieser Feldspektren wird, wie vermutet, teilweise durch Variationen im Wassergehalt verursacht. Das verdeutlichen insbesondere die Feldspektren vom letzten Messtag (rote gefüllte Symbole), für die witterungsbedingt von einer erhöhten Bodenfeuchte ausgegangen werden kann. Sie, sowie einige andere Feldspektren treten in der Abbildung im Bereich der Laborspektren der wiederbefeuchteten Proben auf.

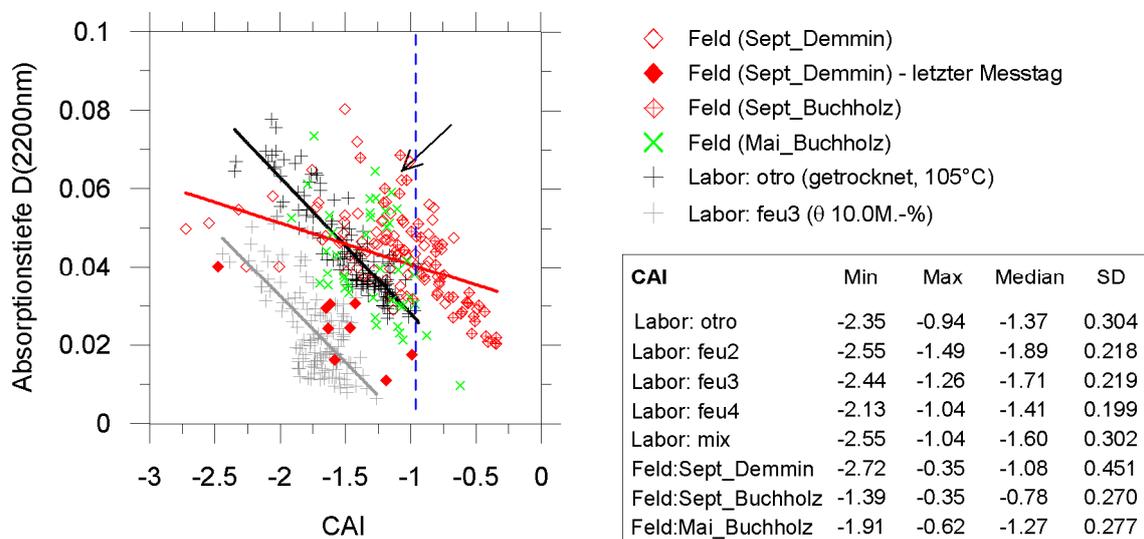


Abb. 8.1.3: Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm als Funktion des Celluloseabsorptionsindex (CAI) für die Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro), der Bodenproben mit 10,0M.-% Wasser (feu3) und die Feldspektren. Weitere Erklärungen siehe Text.

Die Variationen im Bodenwassergehalt können die Verschlechterung der Vorhersagefähigkeit aber nur zu Teilen erklären. Modellkalibrationen ohne die Spektren mit markant höheren Wassergehalten resultierten zwar sowohl für Ton und für OC in etwas geringeren Standardfehlern. Die Vorhersagegenauigkeit war dennoch bedeutend schlechter als unter Laborbedingungen. Ein direkter Vergleich der Modellkoeffizienten der PLSR-Modelle der Laborspektren und der Feldspektren weist auf eine weitere Ursache hin, die höchstwahrscheinlich zur Verschlechterung der Vorhersagefähigkeit beiträgt, nicht nur in den PLSR-Modellen, sondern in allen getesteten Verfahrensansätzen. Im PLSR-Modell für Ton mit den Laborspektren erfahren die charakteristischen Absorptionsbanden von Tonmineralen

im SWIR-II nahe 2200nm, 2300nm und 2350nm eine sehr starke Gewichtung (Abb. 8.1.4). Werden die Feldspektren verwendet, spielen diese in Relation zu Wellenlängen zwischen 2000nm und 2100nm eine eher untergeordnete Rolle. Das gleiche Phänomen tritt in abgeschwächter Form in den PLSR-Modellen für OC auf und deutet auf einen Einfluss trockener Pflanzenrückstände auf die Modellkalibrationen hin. In diesem Wellenlängenbereich sind zahlreiche Bestandteile trockener Pflanzenreste (Hemicellulose, Cellulose, Tannine, Lignin) spektral aktiv (z.B. Elvidge, 1990). Ferner verliert das VNIR im PLSR-Modell für OC an Bedeutung. Die Wirkung trockener Vegetation auf das Reflexionssignal von Böden ist im SWIR aufgrund der Celluloseabsorption nahe 2100nm besonders hoch (Murphy & Wadge, 1994). Im VNIR ist der Einfluss geringer, geht aber dennoch mit einer Änderung der Albedo (Siegal & Goetz, 1977) und einer Modifikation der Absorptionseigenschaften im VNIR (vgl. Kap. 7.5.4) einher und könnte der Auslöser des beschriebenen Effekts im VNIR sein.

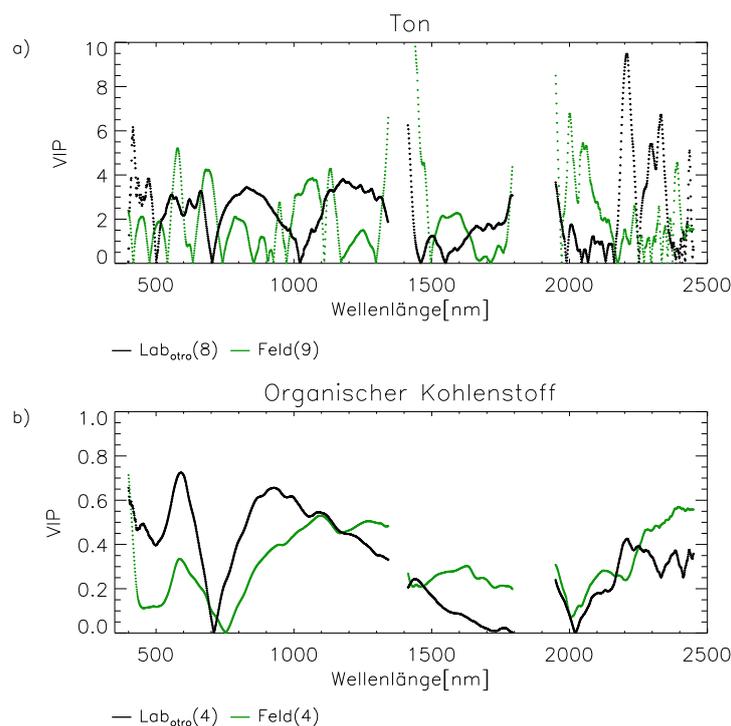


Abb. 8.1.4: *Variable Importance in the Projection* (VIP) der PLSR-Modelle zur Schätzung des Ton- (a) und organischen Kohlenstoffgehaltes (b) mit Laborspektren der getrockneten Bodenproben (otro, schwarze Linie) und mit Feldspektren (grüne Linie). Die Zahlen in Klammern geben die Anzahl der PLSR-Faktoren an.

Die Geländearbeiten zur Feldspektroskopie erfolgten prinzipiell auf vegetationsfreien Böden. Deren Bodenoberfläche war je nach Zeitpunkt, Stand der Bodenbearbeitung und den Bodeneigenschaften unterschiedlich beschaffen. Kleine Bruchstücke von trockenen Pflanzenresten traten vermengt mit den Bodenaggregaten besonders im September an der Oberfläche häufig auf (vgl. Abb. 7.3.2). Sie wurden nicht entfernt, um ein möglichst realistisches Abbild der Reflexionseigenschaften der Oberflächen in-situ zu erhalten. Dass in einem Teil der Feldspektren das Reflexionssignal im SWIR durch diese Bruchstücke trockener Pflanzenreste offenbar bereits leicht modifiziert ist, erklärt, dass der CAI für ca. 36% der Feldspektren vom September größer -0,94 ist und sich rechts der blauen Linie in Abb. 8.1.3 befindet. Spektren von Böden, auf denen geringe Mengen NPV lagern (<20%) haben typischerweise noch negative CAI, die aber nahe Null liegen und bei größeren Bedeckungsgraden positiv werden (Nagler et al., 2003). Vegetation und Variationen in der Bodenfeuchte sahen auch Kooistra et al. (2003a) als Hauptursachen für die größeren Modellfehler der quantitativen Feldspektroskopie an. In ihrer Studie erhöhte sich der Standardfehler für Ton um mehr als das Doppelte und für OC um ca. 36%, wobei nicht trockene Pflanzenrückstände sondern grüne, vitale Vegetation Probleme verursachten. Dass geringe Anteile photosynthetisch nicht aktiver, trockener Pflanzenreste ebenso eine Erhöhung des Standardfehlers der Modellkalibrationen bewirken, vor allem für Ton, demonstrierten

die Ergebnisse in Kapitel 7.5.4. In einigen Spektrometermessungen vom Mai fanden sich im Gegensatz zu den Feldspektren vom September geringfügige, aber typische Absorptionsmerkmale von Chlorophyll (vgl. Abb. 7.3.3). Dagegen gab es bis auf zwei Ausnahmen keine Anzeichen photosynthetisch nicht aktiver Vegetation (vgl. auch Abb. 8.1.3). Bartholomeus et al. (2011) und Ouerghemmi et al. (2011) schlussfolgerten aus Experimenten mit linearen spektralen Mischungen von Boden und PV im Labor, dass Modellschätzungen schon ab 5-10% Vegetationsbedeckung in hohem Maße ungenau werden. Grüne Vegetation führte in Übereinstimmung mit der Studie von Ouerghemmi et al. (2011) in den schlagspezifischen PLSR-Kalibrationen für Ton mit den Feldspektren vom Mai tatsächlich zu einem noch größeren Rückgang der Vorhersagegenauigkeit. Nicht eingängig war dagegen das Ergebnis des PLSR-Modells Mai_Buchholz zur Schätzung des OC-Gehaltes, welches bessere Resultate erzielte als mit der Laborspektroskopie.

Udelhoven et al. (2003) führten nicht den Einfluss von Vegetation oder Variationen in der Bodenfeuchte als maßgeblichen Grund für Schwierigkeiten in der quantitativen Feldspektroskopie an. Sie sahen eine wesentliche Ursache in Mikroschatten, die durch Makroaggregate unter natürlichen Geländebedingungen hervorgerufen werden. Derartige Effekte werden im Labor durch Siebung der Böden umgangen. Da die Oberflächenrauigkeit der Messflecken bei den Geländearbeiten in DEMMIN stark variierte (Abb. 7.3.2), könnte dies eine weitere Ursache für die Ergebnisse der Feldspektroskopie sein. Möglicherweise erklärt dies auch die Charakteristik der Feldspektren in Abb. 8.1.3 links der blauen Linie mit CAI zwischen -1,0 und -1,5 (schwarzer Pfeil). Lagacherie et al. (2008) stellten fest, dass Änderungen in der Oberflächenrauigkeit mit Veränderungen in der Absorptionstiefe nahe 2200nm einhergehen. Das Bestimmtheitsmaß (R^2) zwischen der Absorptionstiefe der Laborspektren und der Absorptionstiefe der Feldspektren war in ihrer Arbeit trotzdem vergleichsweise hoch und betrug 0,91. In der vorliegenden Arbeit beläuft sich das R^2 auf 0,21 für Ton und 0,36 für OC (Abb. 8.1.5). Es wird deshalb davon ausgegangen, dass Änderungen in der Oberflächenrauigkeit nur einen Teil dieser Differenzen erklären.

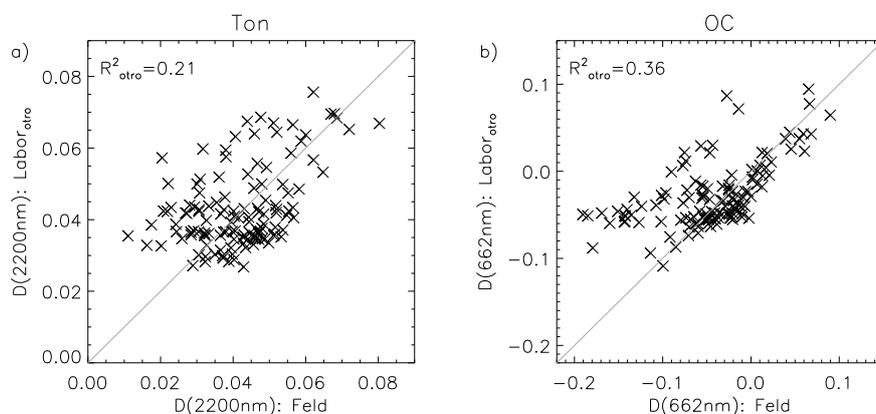


Abb. 8.1.5: Zusammenhang zwischen den Laborspektren und den Feldspektren vom September für die Absorptionstiefe (D) nahe 2200nm für Ton (a) und die Absorptionstiefe nahe 662nm für OC (b). Für die Darstellung der Laborspektren wurden die getrockneten Proben verwendet (otros).

Eine andere Größe, die beim Wechsel vom Labor ins Feld eine Rolle spielt, sind die Beleuchtungsverhältnisse (vgl. Kap. 7.3.2). Welche Auswirkung das auf die quantitative Feldspektroskopie hatte, lässt sich nicht unmittelbar bestimmen. Um jedoch eine erste Vorstellung zu erhalten, wurde der Anteil des Rauschens im Signal durch Subtraktion des gefilterten Spektrums vom gemessenen Spektrum (Rohdaten) abgeschätzt. Diese Differenz kann als objektives Indiz für den Rauschanteil im Signal dienen (M. Bachmann, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., mündl. Mitteilung, 2011). In fast allen Feldspektren war das Signal-Rausch-Verhältnis nahe den großen atmosphärischen Wasserabsorptionsbanden (~1400nm, ~1900nm) erwartungsgemäß höher als in den Laborspektren. Darüber hinaus trat nahe 940nm und 1130nm ein erhöhtes Rauschen auf, das bereits bei der visuellen Inspektion der Feldspektren auffiel und weniger tiefgreifenden Wasserabsorptionsbanden zugeschrieben werden kann (z.B. Kronberg, 1985; vgl. Abb. 4.1.1). Unterschiede im Rauschpegel wurden weniger prägnant auch nahe 780nm und 1340nm observiert. Im

PLSR-Modell für Ton konnten Anzeichen dafür gefunden werden, dass sich diese Wellenlängen bei Verwendung der Feldspektren zumindest teilweise in den Modellkoeffizienten niederschlagen. Im PLSR-Modell für OC war dies nicht der Fall (Abb. 8.1.4, vgl. dazu auch die b-Koeffizienten in Abb. 7.6.4). Das Gewicht der Beleuchtungsverhältnisse auf die Modellschätzungen wird deshalb als eher gering eingestuft.

Die hier durchgeführte Ursachenanalyse legt die Vermutung nahe, dass die geringere Vorhersagegenauigkeit der Feldspektren in besonderem Maße auf Anteile trockener Pflanzenrückstände zurückzuführen ist, sowie zu Teilen auf Variationen im Wassergehalt beruht. Weitere Untersuchungen sind erforderlich, um den Einfluss der Oberflächenrauigkeit zu erhellen. Den Beleuchtungsverhältnissen wird ein vergleichsweise geringer Einfluss zugeschrieben. Dass der Einsatz feldspektroskopischer Methoden nicht immer an einen Verlust der Vorhersagegenauigkeit gebunden ist, belegt die Studie von Stevens et al. (2008). Sie führten dies auf eine effektive Vorverarbeitung der Feldspektren zurück sowie geringfügige Variationen in der Bodenfeuchte und der Oberflächenrauigkeit im Gelände. Das Vegetationsproblem lösten sie durch Entfernen beeinflusster Spektren. Dabei geht aus der Arbeit nicht eindeutig hervor, ob grüne oder trockene Vegetation das Reflexionssignal der Böden veränderte. Der Erfolg der feldspektroskopischen Methoden ist also an eine ganze Reihe von Bedingungen gekoppelt, die nicht immer erfüllt werden können.

8.2 Räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern mit der Abbildenden Spektroskopie

Entsprechend Kapitel 8.1.1 und 8.1.4 (erster Absatz) bezieht sich Kapitel 8.2.1 ausschließlich auf die Ergebnisse der PLSR. Die Ergebnisse der Kalibrationen mit MLR und CR werden weiter hinten im Text in Kapitel 8.3 aufgegriffen. Kapitel 8.2.2 thematisiert die neuen Möglichkeiten aber auch die Grenzen der Auswertung mehrjähriger hyperspektraler Bilddaten in der quantitativen Spektroskopie von Böden einschließlich der Konsequenzen für die erzielbare Vorhersagegenauigkeit. Welche Einschränkungen darüber hinaus hinsichtlich der Gültigkeit der Modellfehler in den Bodenkarten bestehen, ist Gegenstand der Diskussion in Kapitel 8.2.3. Kapitel 8.2.4 setzt sich mit der Stabilität und Robustheit der generierten PLSR-Modelle auseinander. Abschließend werden die hier generierten Bodenkarten in Bezug auf existierende thematische Bodenkarten in Wert gesetzt (Kap. 8.2.5).

8.2.1 Modellfehler und –qualität im Vergleich zu existierenden Arbeiten

Die Fehler der PLSR-Modelle zur Schätzung des **Tongehaltes** aus den HyMap-Bildspektren von 2004, 2005 und 2008 belaufen sich auf 2,34% (SEC), 1,94% (SEP) und 1,60% (SEC). Den RPD bzw. SD/SEC-Quotienten nach zu urteilen ordnen sich alle drei Modelle in Gruppe A nach Chang et al. (2001) ein (vgl. Tab. 7.7.1, Tab. 7.7.4). Bisher war die Quantifizierung des Tongehaltes aus hyperspektralen Bilddaten Forschungsgegenstand in Studien von Selige et al. (2006), Gomez et al. (2008b), Lagacherie et al. (2008) und DeTar et al. (2008) (vgl. Anhang G 1). Ein objektiver Vergleich zu diesen Arbeiten ist allerdings beschwerlich, da keiner der Autoren Aussagen zum RPD bzw. SD/SEC trifft. In der Studie von Selige et al. (2006), die analog zur vorliegenden Arbeit auf Bilddaten des flugzeuggetragenen Sensors HyMap in einer landwirtschaftlich geprägten Region (Magdeburger Börde) aufbaut, entspricht der Wertebereich der Tonfraktion im Boden in etwa dem der vorliegenden Arbeit, so dass eine Vergleichbarkeit der Modellfehler gegeben ist. Selige et al. (2006) erzielten mittels MLR ein Bestimmtheitsmaß (R^2) von 0,65 und einen RMSE von 3,8% Ton. Die Anwendung einer PLSR resultierte in einem R^2 von 0,71 und einem RMSE von 4,2% Ton. Ihre Modellfehler sind unabhängig vom eingesetzten Verfahren somit etwa doppelt so hoch. Gomez et al. (2008b) und Lagacherie et al. (2008), deren Böden im Mittel ca. 10%⁷⁹ mehr Ton enthalten, berichteten Modellfehler von mehr als 5% Ton und ein R^2 von 0,64 bzw. 0,61. Urteilt man allein auf Basis dieser Fehlerkennwerte, konnten in der vorliegenden Arbeit bessere Ergebnisse erzielt werden.

⁷⁹ 10M.-% Ton

Die PLSR-Modelle zur Schätzung des **organischen Kohlenstoffgehaltes** mit den HyMap-Spektren von 2004 und 2005 sind durch RPD von 1,48 und 1,80 gekennzeichnet. Gemäß der Klassifikation von Chang et al. (2001) sind es Modelle der Gruppe B. Der mittlere Fehler der Schätzungen beläuft sich auf 0,213% und 0,207% OC respektive. Das PLSR-Modell auf Basis der HyMap-Spektren von 2008 muss in Gruppe C (RPD: 0,91) eingeordnet werden. Die Ergebnisse, die mit den Bilddaten von 2004 und 2005 erzielt wurden, sind vergleichbar mit Resultaten von Gomez et al. (2008a) oder Stevens et al. (2006, 2008). Letztere berichteten RPD von 1,40 und 1,86 bei der Schätzung von OC aus Bilddaten der Sensoren AHS-160 und CASI. Stevens et al. (2010) konnten zeigen, dass durch eine Differenzierung des Gesamtdatensatzes nach Bodentyp in mehrere kal-val-Konfigurationen eine Verbesserung der Kalibration möglich ist. Sie erzielten auf diese Weise RPD größer 3. Eine solche Vorgehensweise setzt voraus, dass eine große Anzahl von Referenzdaten sowie Zusatzinformationen zu den Bodenverhältnissen im Untersuchungsgebiet zugänglich sind. Nur so kann die Abgrenzung unterschiedlicher Bodentypen und eine korrekte Anwendung der Kalibrationsmodelle gewährleistet werden. Die begrenzte Verfügbarkeit derartiger Informationen dürfte die Umsetzung dieser Methodik aber in vielen Fällen behindern. Darüber hinaus ist die Praktikabilität dieses Ansatzes zur Generierung von Bodenkarten auf regionaler Ebene in Frage zu stellen. Ein wichtiger Aspekt, der bei der Beurteilung der HyMap-basierten Kalibrationsmodelle zur Schätzung des OC-Gehaltes im Boden Berücksichtigung finden muss, ist die zeitliche Variabilität dieses Bodenparameters. Dafür sei an dieser Stelle auf die Diskussion in Kapitel 8.2.2 verwiesen.

Aufgrund ihrer positiven Wirkung auf eine Reihe von chemischen, physikalischen und biologischen Bodeneigenschaften (vgl. Kap. 1) ist sowohl der Tongehalt als auch der OC-Gehalt im Boden von großem Interesse für seine Nutzung und für seinen Schutz zugleich. Die vorliegende Arbeit konnte zeigen, dass sich quantitative Angaben zur Stoffkonzentration beider Bodenparameter mittels Abbildender Spektroskopie auf regionaler Ebene herleiten lassen. Unterschiede bestanden indes in der Qualität der Schätzungen. Die Gruppierung der Modelle nach Chang et al. (2001) belegt anschaulich, dass bei Vorhersagen zum OC-Gehalt im Boden stets größere Unsicherheiten in Kauf genommen werden müssen als bei Vorhersagen zum Tongehalt. Eine analoge Hierarchie beobachteten eine Reihe weiterer Autoren (Bilgili et al., 2010; Cozzolino & Morón, 2003; Islam et al., 2003; Kooistra et al., 2003a; Sørensen & Dalsgaard, 2005). Kalibrationsmodelle von Selige et al. (2006) oder auch von Chang et al. (2001) zeichneten sich dagegen durchweg durch ein höheres Bestimmtheitsmaß für OC aus als für Ton. Beispielsweise erzielten Chang et al. (2001) einen RPD von 2,79 für Schätzungen des Gesamtkohlenstoffanteils (TC) im Gegensatz zu einem RPD von 1,7 für Ton. Eine mögliche Ursache dafür könnte die Höhe des OC-Gehaltes im Boden sein. Die Böden von Selige et al. (2006) und Chang et al. (2001) wiesen OC- bzw. TC-Gehalte bis 3,85% bzw. 28,58% respektive auf. Die Böden in DEMMIN enthalten dagegen durchschnittlich etwa 1,03% OC und maximal 2,48% OC. Sehr niedrige OC-Gehalte kleiner 2% waren zum Beispiel bei Krüger et al. (1998) der Grund dafür, dass Quantifizierungen mit DAIS-Daten scheiterten. Andererseits ist das Vorkommen kohlenstoffreicher Böden keine Gewähr für eine erfolgreiche Anwendung reflexionsspektroskopischer Methoden. Das verdeutlicht die Arbeit von Kooistra et al. (2003a), die trotz eines hohen organischen Kohlenstoffgehaltes (0,06-7,44%) nur 69% der Variabilität für OC, aber über 90% der Variabilität für Ton erklären konnten. Dabei wiesen ihre Böden eine ähnliche Toncharakteristik auf wie die Böden aus DEMMIN.

Der Versuch, spektral im Bereich des VNIR-SWIR nicht aktive Bodeneigenschaften, wie die Korngrößenfraktionen Sand oder Schluff, zu schätzen, wurde bislang fast ausschließlich für Laborspektren unternommen (z.B. Ben-Dor & Banin, 1995b; Cozzolino & Morón, 2003; Sørensen & Dalsgaard, 2005). Nur eine Arbeit widmet sich diesem Unterfangen mit hyperspektralen Bilddaten (Selige et al., 2006). Abhängig vom eingesetzten Kalibrationsmodell berichteten Selige et al. (2006) von einem RMSE von 9,7% Sand (MLR) bzw. 12,9% Sand (PLSR), wobei die Sandfraktion ihrer Referenzproben zwischen 16% und 84% der Korngrößenverteilung ausmachte. In der vorliegenden Arbeit lag der Standardfehler (SEP) bei Verwendung der HyMap-Spektren von 2005 bei 4,51% Sand (vgl. Tab. 7.7.5) bei einem Sandanteil in den Referenzproben zwischen 38% und 90%. Der RPD dieses Modells betrug 2,46 (Gruppe A nach Chang et al., 2001) und verdeutlicht, dass es durchaus möglich ist, auch spektral nicht aktive Bodeneigenschaften zuverlässig aus Bilddaten zu schätzen. Mit

den HyMap-Daten von 2008 war es möglich, ein Modell der Gruppe B (SD/SEC: 1,78) zur Vorhersage des Sandgehaltes zu erzeugen. Ebenso konnte mit den HyMap-Daten von 2005 mit der Zielvariable Schluff ein Modell der Gruppe B (RPD: 1,73) generiert werden. Ein erheblicher Nachteil dieser Art von Kalibrationen ist jedoch, dass sie ausschließlich auf Interkorrelationen des gesuchten Parameters mit anderen spektral aktiven Bodeneigenschaften basieren. Das birgt die Gefahr, dass auch zufällige Übereinstimmungen zu einer Kalibration führen, die scheinbar gute Ergebnisse liefert (vgl. dazu auch Kap. 8.2.3: Einfluss der Oberflächenbeschaffenheit auf Schätzungen des Schluffgehaltes), oder Kalibrationen in Modellen resultieren, die nur eine sehr geringe Aussagekraft haben, wie dies für den HyMap-Datensatz von 2004 der Fall war (SD/SEC_{Sand}: 1,11, SD/SEC_{Schluff}: 1,30).

Die Auswertung mehrjähriger Bilddatensätze bietet die Möglichkeit, die Fehlerkennwerte der Modelle (SEC, SEP) zusätzlich durch einen Vergleich der Bodenparameterschätzungen aus unterschiedlichen Jahren zu verifizieren. Die Ergebnisse dieser vergleichenden Analyse (Kap. 7.8.2) stützen in der Mehrzahl der Fälle die getroffenen Aussagen zur Vorhersagegenauigkeit der PLSR-Modelle. Abweichungen zwischen den Parameterschätzungen unterschiedlicher Jahre waren hier kleiner oder gleich dem ermittelten Standardfehler der Modelle. Ausgenommen davon sind das PLSR-Modell für Ton und für Schluff mit den HyMap-Daten von 2008. Deren Standardfehler spiegelten den Analysen zufolge die tatsächliche Vorhersageunsicherheit der Modelle nicht ausreichend wider.

Trotz dieser mehrheitlich positiven Ergebnisse, sind weitere Untersuchungen erforderlich, um die Fehlerkennwerte der Parameterschätzung abzusichern. Im Fokus sollten vor allem ton- und kohlenstoffreiche Böden stehen sowie die Überprüfung der Bodenparameterschätzungen auf Ackerflächen, auf denen derzeit keine Referenzwerte verfügbar sind. Diese Problematik wird in Kap. 8.2.3 ausführlicher diskutiert.

8.2.2 Auswertung mehrjähriger Bilddaten für die räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern – Möglichkeiten und Grenzen

Die Verwendung mehrerer hyperspektraler Bilddatensätze aus unterschiedlichen Jahren stellt einen neuartigen Ansatz dar, der die räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern auf landwirtschaftlichen Flächen trotz lang anhaltender Perioden mit Vegetationsbedeckung gestattet. Im Untersuchungsgebiet DEMMIN konnten durch diese Vorgehensweise auf insgesamt ca. 2401ha⁸⁰ (24,01km²) landwirtschaftlicher Nutzfläche die Stoffkonzentration ausgewählter Bodenparameter geschätzt werden. 68,4% davon entfallen auf die Daten von 2005, weitere 17,7% auf die Daten von 2004. Ca. 13,9% wurden durch die Daten von 2008 erfasst. Der präsentierte Ansatz gewinnt vor allem im Hinblick auf zukünftige hyperspektrale Satellitenmissionen wie EnMAP an Bedeutung, durch die die Datenverfügbarkeit stark verbessert wird. Anforderungen unterschiedlicher Anwendungsrichtungen mit dem Fokus Boden, Vegetation oder Wasser könnten dann erstmals gleichermaßen bedient werden. Dem Bewirtschaftungszyklus geschuldet sind für die quantitative Spektroskopie von Böden in landwirtschaftlichen Ökosystemen im Besonderen Aufnahmen im Frühjahr (April-Mai) und im Herbst (September-Oktober) von hohem Interesse. Auch wenn letztere für die vorliegende Arbeit nicht zur Verfügung standen, verspricht ein Anteil von ca. 60% Winterfeldfrüchten im Untersuchungsgebiet (vgl. Tab. 5.2.2) bei der Verwendung von Aufnahmen aus dem September oder Oktober einen noch größeren Zugewinn an Fläche als mit den Daten vom Mai. Zusätzlich können Aufnahmen aus dem Sommer hinzugezogen werden. Sie bieten aber, wie die Ergebnisse der Arbeit zeigen, einen geringeren Informationszugewinn.

Grenzen werden diesem Ansatz gesetzt, wenn die zeitliche Variabilität des Untersuchungsparameters hoch ist. Für den Tongehalt sowie die Sand- und Schlufffraktion des Bodens kann davon ausgegangen werden, dass sie nur geringfügigen Änderungen im Verlauf der Zeit unterliegen (Heuvelink & Webster, 2001). Ausgenommen davon sind größere Erosionsereignisse, die zum Transport und zur Verlagerung beträchtlicher Mengen Boden führen können, aber für den betrachteten Zeitraum im Untersuchungsgebiet nicht dokumentiert sind. Anders stellt sich die Situation für den organischen

⁸⁰ Das entspricht etwa 10% der Gesamtfläche der HyMap-Bilddaten.

Kohlenstoffgehalt des Bodens dar. Dieser unterliegt sowohl saisonalen als auch jährlichen Schwankungen, die im Wesentlichen auf Unterschiede im Witterungsgeschehen, d.h. der Temperatur sowie dem Niederschlag (Bodenfeuchte), zurückzuführen sind (Leinweber et al., 1994; Trumbore et al., 1996; Wang et al., 2000). Leinweber et al. (1994) berichten von ausgeprägten jahreszeitlichen Schwankungen des organischen Kohlenstoffgehaltes in Ackerböden zwischen 0,24% und 0,43% OC. Ihre Angaben beruhen auf wöchentlichen Messungen des OC-Gehaltes von April bis September auf zwei Versuchseinheiten des „Statischen Düngungsversuches Bad Lauchstädt“. Sie beobachteten einen besonders prägnanten Abfall der Kohlenstoffgehalte zwischen Juni und August und führten dies auf die Zersetzung von Pflanzenrückständen (des vergangenen Jahres) im Frühjahr zurück. Dieser Effekt kann laut Leinweber et al. (1994) durch die spürbare Bodenverdichtung⁸¹ im Sommer möglicherweise künstlich verstärkt worden sein, da bei gleichbleibender Probenahmetiefe die Entnahme und Vermengung mit kohlenstoffärmerem Material aus tieferen Schichten nicht völlig auszuschließen ist. Für das Winterhalbjahr ermittelten Rogasik et al. (2000) geringere Schwankungen zwischen 0,040% und 0,115% OC. Ihre Messungen erfolgten monatlich zwischen November und April auf Dauerversuchsflächen in Müncheberg. Jährliche Bestimmungen des organischen Kohlenstoffgehaltes im Oberboden über einen Zeitraum von mehr als 20 Jahren deuten darauf hin, dass sich annuelle Schwankungen der Kohlenstoffgehalte etwa in derselben Größenordnung bewegen wie die jahreszeitlichen Schwankungen. Aus den Arbeiten von Ellmer & Baumecker (2005) sowie Jensen et al. (1997) lassen sich jährliche Schwankungen von 0,194% bis 0,440% OC ablesen. Der absolute Betrag der Konzentrationsänderungen hängt dabei von den angewandten Düngemaßnahmen, der Intensität der Bodenbearbeitung und der Art der Pflanzenrückstände (Art der Feldfrucht) ab.

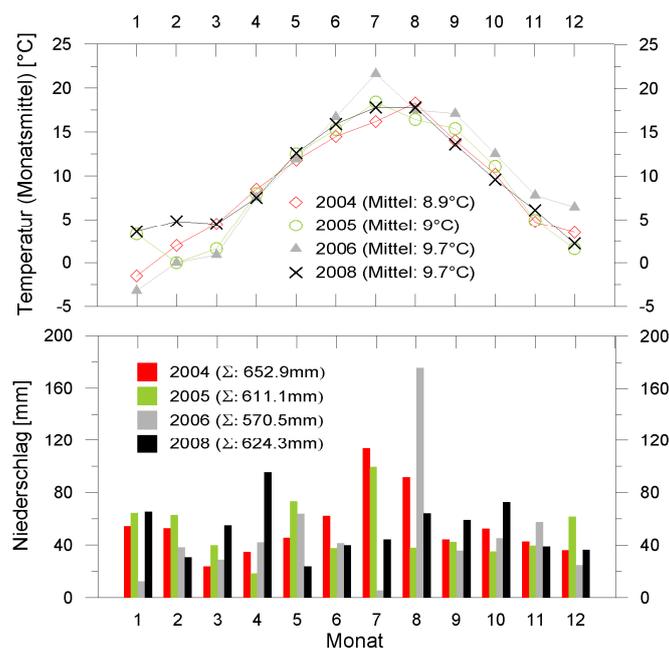


Abb. 8.2.1: Mittlere monatliche Temperatur und monatliche Niederschlagssumme für die Jahre 2004, 2005, 2006 und 2008, gemessen an der Wetterstation Greifswald (Wetterkontor, 2012).

In dieser Arbeit standen drei Bilddatensätze des australischen Sensors HyMap, aufgezeichnet Anfang August 2004, Ende Mai 2005 und Ende Juli 2008, und Referenzwerte der Bodenanalytik aus dem Jahr 2006 zur Verfügung. Der zeitliche Versatz zwischen der Akquise der Referenzanalytik und den Bilddaten beträgt demzufolge mindestens ein Jahr, maximal aber zwei Jahre. Bei der Beurteilung der Vorhersagegenauigkeit der Kalibrationsmodelle mit den HyMap-Bilddaten müssen daher sowohl saisonale als auch jährliche Schwankungen des OC-Gehaltes im Boden Berücksichtigung finden. Im

⁸¹ Zunahme der Trockenrohdichte von $1,11\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ bzw. $1,15\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ auf $1,60\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$ bzw. $1,40\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$.

ungünstigsten Fall, d.h. bei einer jährlichen Schwankung von 0,44% OC, unterliegen die Schätzungen des OC-Gehaltes im Boden dann einem Fehler von etwa 0,6-0,7% OC. Das entspricht der Summe aus SEC bzw. SEP und der maximalen zeitlichen Variabilität. In Anbetracht der Höhe des OC-Gehaltes in den Böden in DEMMIN würde dieses Szenario nur noch qualitative Aussagen zum OC-Gehalt im Boden zulassen.

Betrachtet man das Temperatur- und Niederschlagsdiagramm der nächstgelegenen Wetterstation (Greifswald) für die Jahre 2004, 2005, 2006 und 2008 (Abb. 8.2.1), werden ausgeprägte Schwankungen im Niederschlagsverhalten aber auch im Temperaturverlauf zwischen diesen Jahren sichtbar. Besonders markant sind die hohen Niederschlagswerte für August 2006 sowie ungewöhnlich hohe Temperaturen und extreme Trockenheit im Juli. Dagegen fallen mehr als 120mm Niederschlag im gleichen Monat in den Jahren 2004 und 2005. Diesen Unterschieden im Witterungsgeschehen zufolge sind Schwankungen in den Kohlenstoffgehalten im Boden, wie sie in der Literatur berichtet werden, im Zeitraum 2004 bis 2008 wahrscheinlich. Dennoch lassen sich aufgrund der Komplexität der Kohlenstoffdynamik im Boden aus dieser Grafik in Abwesenheit von Messwerten aus den Jahren 2004, 2005 und 2008 keine konkreten Schlussfolgerungen zur Variabilität des OC-Gehaltes im Boden in diesem Zeitraum ziehen. Abgesehen davon sprechen die Erkenntnisse von Leinweber et al. (1994) dafür, dass die Kohlenstoffgehalte ein und desselben Messpunktes selbst innerhalb eines Jahres im Mai und Ende Juli bzw. Anfang August differieren, was selbst Vermutungen zu Differenzen im OC-Gehalt der Böden während der Überfliegungen verkompliziert. Die Untersuchungen von Gerighausen et al. (2012) gestatteten aufgrund einer identischen Konfiguration der Datengrundlage⁸² einen direkten Vergleich der Modellgüte der Laborspektroskopie und der Abbildenden Spektroskopie. Hieraus wurde deutlich, dass die Vorhersagegenauigkeit der Kalibrationsmodelle für OC auf Basis der HyMap-Bilddaten von 2005 und 2008 durch eine geringere Modellgüte und höhere Fehler gekennzeichnet sind als ihre Entsprechungen mit der Laborspektroskopie. Zugleich konnte ein derartiger Effekt für die Kalibrationsmodelle für Ton nicht beobachtet werden. Diese Diskrepanz kann ein Hinweis dafür sein, dass die Kalibrationen mit den HyMap-Bilddaten für OC in dieser Arbeit durch dessen zeitliche Variabilität erschwert wurden. In der Konsequenz empfiehlt sich für zukünftige Arbeiten, die dem Vorschlag dieser Arbeit zur räumlich expliziten Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes auf landwirtschaftlichen Nutzflächen folgen, eine zeitnahe Beprobung zum Zeitpunkt jeder einzelnen Überfliegung vorzunehmen. Finanzielle Zwänge und logistische Gründe führten in dieser Arbeit zu einem Kompromiss, der in einer einmaligen Geländekampagne im Jahr 2006 resultierte.

8.2.3 Validität der Bodenparameterschätzungen im Raum

Die Validation ist essentieller Bestandteil jeder Modellierung. Nur so lassen sich Aussagen treffen, wie genau, d.h. mit welchem Fehler ein Modell die Wirklichkeit abbilden kann. Trotz ihrer Relevanz und Bedeutung bestehen nicht selten Engpässe bei der Verfügbarkeit oder Einschränkungen bezüglich ihrer Unabhängigkeit von den Daten, die zur Kalibration des Modells verwendet wurden. Infolge einer Validation mit nicht vollständig unabhängigen Daten kann die Vorhersagegenauigkeit des Modells aufgrund räumlicher Autokorrelation überschätzt werden. Dieses Phänomen tritt unabhängig von der Validationstrategie auf, d.h. sowohl bei einem Splitting des Datensatzes in Kalibrations- und Validationsdatensatz als auch bei einer Kreuzvalidierung (Brus et al., 2011).

Den Rahmenbedingungen bei der Auswahl der Messpunkte im Gelände ist geschuldet (vgl. Kap. 6.1.1), dass eine räumliche Autokorrelation zwischen den Daten des Kalibrationsdatensatzes und denen des Validationsdatensatzes in dieser Arbeit nicht gänzlich auszuschließen ist. Diese Tatsache ist von besonderem Interesse, wenn Aussagen zur Gültigkeit der Modellfehler auf nicht beprobten Ackerflächen getroffen werden sollen. Um eine erste Abschätzung zur Gültigkeit der Modellfehler der Abbildenden Spektroskopie für Ackerflächen ohne Referenzinformationen vornehmen zu können, wurde ein spezielles Kalibrations- und Validationsschema geprüft, welches nachfolgend beschrieben wird. Für diese Analyse wurden aufgrund der größten Anzahl vegetationsfreier Referenzpunkte die

⁸² Laborspektroskopie und Abbildende Spektroskopie weisen in dieser Untersuchung exakt die gleiche spektrale Konfiguration und identische Wellenlängenbereiche (500-2400nm) auf.

Spektren der HyMap-Bilddaten von 2005 verwendet. Insgesamt wurden sechs Kalibrationsmodelle generiert. In allen sechs Modellen wurden Datensätze von jeweils drei Feldern von der Kalibration zurückgehalten und ausschließlich für die Validation benutzt (Tab. 8.2.1). In fünf von diesen Modellen ist der Wertebereich der Kalibrationsdaten stets größer oder gleich dem des Validationsdatensatzes. Für eine kal-val-Konfiguration (Typ F) ist der Wertebereich der Kalibrationsdaten kleiner als der der Validationsdaten.

In drei von sechs Fällen treten für das beschriebene kal-val-Schema sowohl für Ton als auch für OC geringere Fehler (negative Abweichung) auf als in den Kalibrationsmodellen, die für die räumlich explizite Schätzung der Bodenparameter (SEP_{HyMap_2005} : 1,94% Ton bzw. 0,207% OC) verwendet wurden (Tab. 8.2.1). Sie weisen somit auch hinlänglich Gültigkeit für Felder auf, deren spektrale Charakteristik nicht in den Kalibrationsdaten erfasst wurde. In den drei anderen Fällen würden die Standardvalidationsfehler der HyMap-Modelle die tatsächliche Vorhersagegenauigkeit unterschätzen. Für die Kalibrationsmodelle, deren Wertebereich mindestens so groß ist, wie der der Validationsdaten, ist ein Anstieg des SEP um ca. 10% Ton (Typ D) sowie 15% Ton (Typ E) und ca. 9% OC (Typ C) sowie 29% OC (Typ E) zu beobachten. Maximal beziffert sich der Standardfehler der Schätzung somit auf 2,23% Ton und 0,268% OC. Die Kalibrationen mit Typ F zeigen, dass diese Fehler wie erwartet höher liegen, wenn Böden mit Ton- oder OC-Gehalten geschätzt werden, deren Stoffkonzentrationen die des Kalibrationsmodells übersteigen. Obwohl ein Anstieg der Modellfehler um ca. 30% noch akzeptabel erscheint, werden vor allem Schätzungen des Ton- und Kohlenstoffgehaltes in ton- und/oder humusarmen Böden zunehmend ungenau. Für einen Boden mit 0,5% OC würde der relative Fehler dann 50% betragen.

Tab. 8.2.1: Kalibrations- und Validationsschema zur Verifikation der Modellvorhersagegenauigkeit auf nicht beprobten Feldern.

Modell [†]	n_{kal}/n_{val}	Anz. Faktoren	Wertebereich Kalibration	Wertebereich Validation	SEC	SEP	RPD	Abweichung des SEP [%] [‡]	
Ton			[% Ton]	[% Ton]	[% Ton]	[% Ton]			
1	Typ A	40/27	4	4,78-23,75	3,65-15,08	2,18	1,65	1,71	-14,9
2	Typ B	42/25	4	3,65-23,75	4,80-15,08	2,18	1,85	1,47	-4,6
3	Typ C	37/30	4	3,65-23,75	4,80-15,08	2,21	1,67	1,71	-13,9
4	Typ D	42/25	3	4,78-23,75	3,65-15,84	1,76	2,23	1,51	+14,9
5	Typ E	35/32	4	3,65-23,75	4,80-15,84	1,89	2,15	1,13	+10,3
6	Typ F**	43/24	6	3,65-15,84	4,78-23,75	1,98	2,55	2,39	+31,4
OC				[% OC]	[% OC]	[% OC]	[% OC]		
1	Typ A	40/27	3	0,619-2,479	0,501-1,176	0,223	0,184	0,84	-11,1
2	Typ B	42/25	3	0,619-2,479	0,501-0,964	0,237	0,123	0,98	-40,6
3	Typ C	37/30	3	0,619-2,479	0,501-1,242	0,237	0,226	0,77	+9,2
4	Typ D	42/25	3	0,525-2,479	0,501-1,176	0,228	0,186	0,95	-10,1
5	Typ E	35/32	3	0,501-2,479	0,525-1,095	0,239	0,268	0,46	+29,4
6	Typ F**	43/24	5	0,501-1,176	0,667-2,479	0,119	0,279	1,53	+34,8

[†] Alle Proben von jeweils drei Feldern fließen nicht in die Kalibration ein, sondern werden ausschließlich zur Validation verwendet. ^{**} Typ F beschreibt ein Modell, dessen Validationsdaten einen größeren Wertebereich haben, als die Kalibrationsdaten. [‡] Abweichung des SEP vom Standardvalidationsfehler des PLSR-Modells mit den HyMap-Daten von 2005 (SEP_{Ton} : 1,94%, SEP_{OC} : 0,207%, vgl. Tab. 7.7.1 und Tab. 7.7.2).

Aus diesen Resultaten ergeben sich mehrere Konsequenzen für die vorliegende Arbeit. Die Standardfehler der in Kapitel 7.7 generierten HyMap-Modelle unterschätzen unter Umständen die Vorhersagegenauigkeit der ermittelten Parameterkonzentrationen auf Feldern, die nicht während der Geländearbeiten beprobt wurden. Die Fehleramplitude ist für OC größer als für Ton. Abweichungen vom Standardfehler der Modelle können für OC bis ca. 30%, für Ton bis ca. 15% betragen. Vor allem für humusarme Böden steigt dadurch der relative Fehler stark an. Parameterschätzungen für Böden, deren Ton- oder OC-Gehalt größer ist als der Wertebereich der Kalibrationsmodelle, unterliegen mit hoher Wahrscheinlichkeit einem noch etwas größeren Fehler. Die durchgeführten Untersuchungen geben Hinweis darauf, dass sich der Fehler der Schätzung für Ton in diesem Fall um ca. 31% erhöht, d.h. auf ca. 2,55% Ton beläuft. Für OC steigt der Fehler um etwa 35% an. Der Fehler würde dann bei ca. 0,279% OC liegen. Es ist davon auszugehen, dass dies auch auf die Schätzungen des Sand- und des

Schluffgehaltes zutrifft. Da kein direkter Zusammenhang zwischen Reflexionssignal und dem Gehalt an Sand bzw. Schluff besteht, muss mit etwas höheren Abweichungen gerechnet werden.

Die Ergebnisse dieser speziellen kal-val-Konfiguration untermauern die Dringlichkeit einer zusätzlichen, unabhängigen Validation. Die Notwendigkeit nach einer zusätzlichen, unabhängigen Validation in der quantitativen Abbildenden Spektroskopie von Böden ist auch eine zentrale Schlussfolgerung der Arbeiten von Stevens et al. (2008, 2010). Bodenkarten, die auf bildgebende spektroskopische Verfahren zurückzuführen sind, können erst dann für die Bodenkunde und Umweltwissenschaften voll in Wert gesetzt werden, wenn statistisch gesicherte Aussagen zur Genauigkeit der Zielparameter auch auf nicht beprobten Feldern vorliegen. Brus et al. (2011) geben einen Überblick über die Restriktionen herkömmlicher Probenahmen- und Validationsstrategien und exerzieren anhand zweier Beispiele die Vorteile von Wahrscheinlichkeitsstichproben (*probability sampling*) und designbasierten Gütemaßen (*design-based quality measures*) für die Validation digitaler Bodenkarten vor. Sofern die Möglichkeit und das Budget zur Erhebung zusätzlicher Validationsdaten bestehen, sollten solche Validationsstrategien fester Bestandteil zukünftiger Arbeiten sein. Aufgrund des begrenzten Budgets und Rahmenbedingungen, die in Kapitel 6.1.1 beschrieben wurden, war eine Validation in der vorliegenden Arbeit nur durch Teilung des gesamten Referenzdatensatzes in Kalibrations- und Validationsdatensatz bzw. durch Kreuzvalidierung realisierbar.

Ein Aspekt, der Einfluss auf die Validität der räumlich expliziten Parameterschätzungen außerhalb des Nadir-Bereiches der Flugstreifen haben kann, sind BRDF-Effekte, die sich aus der Beobachtungs- und Beleuchtungsgeometrie zum Zeitpunkt der Aufnahme ergeben. Sensoren mit einem weiten Sichtfeld, wie HyMap (FOV=60°), sind besonders anfällig für BRDF-Effekte. So vermuteten Stevens et al. (2010), dass die Schwierigkeiten bei ihren Modellkalibrationen mit Bilddaten des Sensors AHS, der ein FOV von 90° aufweist, durch die starke Vorwärts- und Rückwärtsstreuung quer zur Flugrichtung (*across-track*) in den äußeren Bereichen der Flugstreifen verursacht wurden. Über die Höhe des Fehlers konnten sie keine Aussagen treffen. In der vorliegenden Arbeit wurde der potenzielle Einfluss von BRDF-Effekten in Kapitel 7.8.2 durch einen Vergleich der Bodenparameterschätzungen im Überlappungsbereich der Bildstreifen quantifiziert. In zwei der drei Bilddatensätze aus den Jahren 2005 und 2008 waren keinerlei negative Auswirkungen festzustellen. In den Bilddaten von 2004 hingegen waren die Standardfehler in den Überlappungsbereichen benachbarter Flugstreifen bis zu dreimal höher als es die Standardfehler der Modellvalidation annehmen ließen. Dieses Ergebnis verdeutlicht, dass nicht das Sichtfeld des Sensors HyMap als solches, sondern vielmehr ungünstige Aufnahmebedingungen, d.h. sehr große Zenit- und kleine Azimutwinkel, zu unerwünschten Effekten in den Randbereichen der Bilddaten führen und prinzipiell vermeidbar sind. Treten starke Helligkeitsgradienten in den Bilddaten auf (vgl. Abb. 7.3.6), empfiehlt sich eine gezielte Transformation der Spektren in die erste Ableitung der Absorption. BRDF-bedingte Fehler in den Modellschätzungen konnten hierdurch abgeschwächt werden, wenngleich die Genauigkeit des Kalibrationsmodells dadurch etwas sinkt.

Unabhängig von der Lage im Raum sind in den räumlich expliziten Bodenparameterschätzungen in Abb. 7.8.1 und Abb. 7.8.2 in einigen Ackerschlägen artifizielle Strukturen zu beobachten, die sich nicht in Einklang mit natürlichen Verteilungsmustern bringen lassen. Ein Abgleich mit den Reflexionseigenschaften dieser Strukturen deckte große Unterschiede im Rückstrahlvermögen dieser Oberflächen auf, die sich in den Bodenparameterschätzungen teilweise durchzeichnen (Abb. 8.2.2). Zur besseren Erkennung wurde für die Darstellung der Bodenparameterschätzungen in Abb. 8.2.2 eine andere Farblegende gewählt als in Abb. 7.8.1 und Abb. 7.8.2. Zwei Bodeneigenschaften, die in der quantitativen Laborspektroskopie in der Regel zuvor standardisiert werden, sind bekannt dafür, einen signifikanten Einfluss auf das Reflexionsvermögen im gesamten Wellenlängenbereich zu haben: die Feuchte des Bodens und dessen Oberflächenrauigkeit (z.B. Ben-Dor et al., 1999). Beide können in-situ stark variieren. Wasser senkt das Reflexionsvermögen im SWIR stärker als im VNIR (Lobell & Asner, 2002, vgl. Kap. 7.2.3). Im Ergebnis dessen kehrt sich der positiv gerichtete Trend der Reflexionskurve von Böden ab 1,1µm in einen negativen Trend um (vgl. Abb. 7.2.4). Das im Vergleich zu glatten Oberflächen geringere Reflexionsvermögen rauer Oberflächen beruht vor allem auf der Abschattung

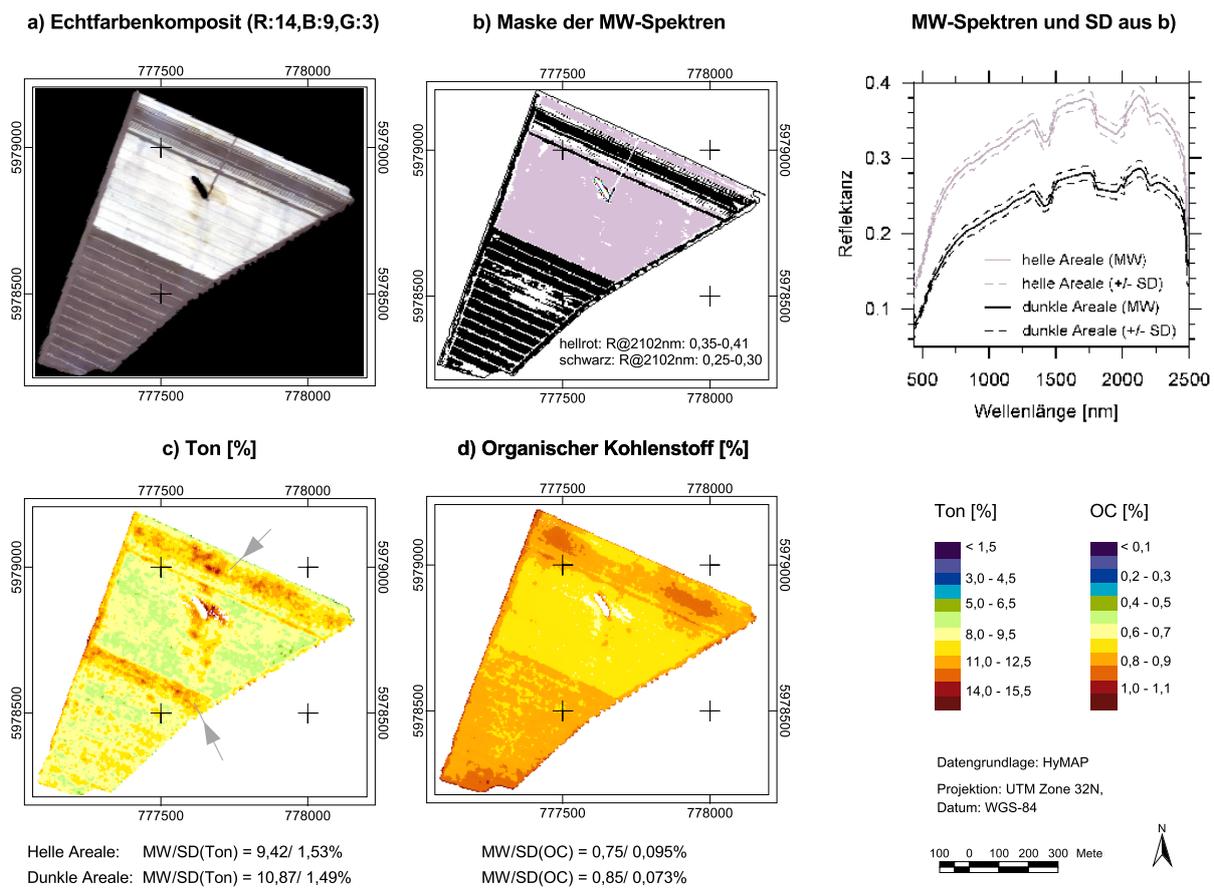


Abb. 8.2.2: Artificielle Strukturen in den räumlich expliziten Bodenparameterschätzungen durch unterschiedliche Oberflächenrauigkeit und Bodenbearbeitungsstrukturen am Beispiel eines Ackerschlages nördlich der Ortschaft Schmarsow (siehe grüner Flag in Abb. 5.1.1).

des Bodens durch Bodenaggregate und Ackerschollen und ist eine Funktion der Beleuchtungs- und Beobachtungsgeometrie (Cierniewski & Verbrugghe, 1997; Cierniewski et al., 2002). Die Verringerung des Reflexionsvermögen durch Abschattung ist dabei im NIR und SWIR im Gegensatz zu wasserbedingten Effekten relativ gleichförmig (z.B. Wu et al., 2009; Denis et al., 2009). Die Unterschiede im Reflexionsvermögen unmittelbar benachbarter Bodenareale von etwa 10% Reflexion, wie sie in dem Beispiel in Abb. 8.2.2 (a,b) auftreten, sind daher mit großer Wahrscheinlichkeit auf Unterschiede in der Bodenrauigkeit zurückzuführen. Aggregatzerkleinerung durch Tropfenaufschlag, Quell- und Schrumpfungsprozesse oder Peptisation über längere Zeiträume bewirken ein Ausgleich der Bodenoberfläche und vermindern die Bodenrauigkeit (helle Areale in Abb. 8.2.2a). Durch die Bodenbearbeitung der Ackerflächen zum Beispiel zur Saatbettbereitung, werden diese Strukturen aufgebrochen (dunkle Areale in Abb. 8.2.2a). Je bindiger ein Boden desto stärker tendiert er zu Aggregat- und Schollenbildung, d.h. zu einer großen Oberflächenrauigkeit und starken Abschattung. Transformationen des Reflexionssignals, zum Beispiel die Umwandlung in Absorption (vgl. Glg. 6.2.1), Polynomglättung und Ableitung zielen darauf ab, Störeffekte in den Spektren, wie systematische Abweichungen von der Grundlinie oder Signalrauschen, zu beseitigen. Außerdem können durch sie einzelne Absorptionsmerkmale verstärkt werden. Wie eine Studie von Denis et al. (2009) zeigt, kann durch eine geeignete Transformation der Spektren ein großer Teil dieser Störeffekte erfasst werden. Durch eine Vorprozessierung der Spektren erreichten sie eine Verbesserung der Vorhersagegenauigkeit für OC um 25%. Erfolgte zusätzlich eine Korrektur der Schatten, verbesserte sich die Vorhersagegenauigkeit um weitere 3% bzw. 5% abhängig von der Korrekturmethode. Schatteneffekte konnten durch die Vorprozessierung der Spektren also nicht vollständig kompensiert werden. Dass dies auch auf die vorliegende Arbeit zutrifft, verdeutlichen die Abb. 8.2.2c und d. Der OC-Gehalt des Bodens in den hellen Arealen liegt nahezu systematisch 0,1% OC niedriger als der

OC-Gehalt des Bodens in den dunklen Arealen. Für den Tongehalt ist das Bild etwas differenzierter. Dennoch sind die Konzentrationen im Boden in den hellen Arealen tendenziell niedriger als in den dunklen Arealen ($\Delta \approx 1,45\%$ Ton) und lassen das geometrische Muster des Echtfarbenkomposits in Abb. 8.2.2a erkennen. Da sich die Differenzen in den Ton- und Kohlenstoffschätzungen im Bereich des Standardfehlers der Modelle (SEP_{HyMap_2005} : 1,94% Ton bzw. 0,207% OC) bewegen, ist die Vorhersagegenauigkeit der Modelle hiervon prinzipiell nicht betroffen. Keine hinreichende Erklärung konnte für die streifenartig angeordneten Bereiche mit höheren Tongehalten gefunden werden (graue Pfeile). Die Schätzungen des Sand- und Schluffgehaltes für diesen Ackerschlag zeigen ganz ähnliche artifizielle Strukturen wie sie für Ton und OC beschrieben wurden. Die hierdurch bedingten Abweichungen bewegen sich für Sand im Rahmen des Modellfehlers. Für Schluff traten größere Differenzen auf.

8.2.4 Stabilität der Kalibrationsmodelle

Durch multivariate Kalibrationsmethoden werden in einem iterativen, komplexen Prozess Regressionskoeffizienten geschätzt, die eng an die Variabilität der Prädiktoren, d.h. die Charakteristik des Spektralsignals gebunden sind (vgl. Kap. 6.4.3). Verändern sich die Eigenschaften der Prädiktoren zum Beispiel durch gerätespezifische Abweichungen (Ge et al., 2011; Castro-Esau et al., 2006) oder veränderte Umweltbedingungen, hat das Auswirkungen auf die Höhe, Lage und Gewichtung der Regressionskoeffizienten. Dieses Phänomen beschreibt das Problem der Stabilität multivariater Kalibrationen (Marx & Eilers, 2002) und erklärt Schwierigkeiten, die bei der Anwendung auf zeitlich divergierende Messungen oder bei der Übertragung auf andere geographische Räume auftreten können. Die Stabilität der Labormodelle konnte in der vorliegenden Arbeit nicht überprüft werden. Ge et al. (2011) konstatierten, dass Kalibrationsmodelle auf Basis laborspektroskopischer Messungen erst dann auf andere Bodenspektren übertragen werden können, wenn Instrumentierung, Messumgebung und Probenaufbereitung weitestgehend standardisiert sind, einschließlich einer einheitlichen Weißreferenz während der Messungen und geeigneten Spektrentransformationen. Die Ergebnisse in Kapitel 7.6.2 zeigten, dass eine Übertragung der Kalibrationsmodelle der Feldspektroskopie auf lokaler Ebene (Ackerschlag) unter Umständen möglich ist. Als besonders robust erwiesen sich die Kalibrationsmodelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes, deren Vorhersagegenauigkeit unabhängig vom Aufnahmezeitpunkt der Feldspektren ähnlich hoch war. Ein Transfer der Kalibrationsmodelle zur Schätzung des Tongehaltes aus zeitlich divergierenden Messungen war dagegen nicht immer zielführend und in jedem Fall mit größeren Unsicherheiten verbunden. Unterschiede in den Lichtverhältnissen zum Zeitpunkt der Aufnahme können als Ursache weitestgehend ausgeschlossen werden, da vor jeder Messung eine Kalibrierung des Spektrometers auf einen einheitlichen Weißstandard erfolgte. Vielmehr ist davon auszugehen, dass Differenzen in den spektralen Signaturen zwischen den Kalibrationsdaten und den Validationsdaten eines anderen Aufnahmezeitpunktes, hervorgerufen durch eine unterschiedliche Beschaffenheit der Bodenoberfläche (Abb. 7.3.2), die Übertragung der Modellkoeffizienten erschweren. Dass die schlagspezifischen Kalibrationen für OC weniger empfindlich gegenüber zeitpunktbedingten Variationen im Spektralsignal sind als die für Ton kann zweierlei Ursachen haben. Eine mögliche Ursache ist, dass typische Absorptionscharakteristika von Ton durch zeitliche Modifikationen der Oberflächenbeschaffenheit stärker beeinflusst werden als die von organischer Bodensubstanz. Bestärkt wird diese Vermutung durch die Analysen in Kapitel 7.5.1, die in Kapitel 8.1.2 diskutiert wurden. Variationen in der Bodenfeuchte waren für die PLSR-Kalibrationen für OC kaum von Bedeutung, verringerten aber sehr wohl die Leistungsfähigkeit der PLSR-Modelle für Ton. Eine andere Erklärung könnte sein, dass die Modellparameter der Kalibrationsmodelle für OC aufgrund der breitbandigen Absorption im VNIR generell weniger spezifisch ausgeprägt sind als die für Ton, was in Übereinstimmung mit der grundsätzlich geringeren Vorhersagefähigkeit der PLSR-Modelle für OC wäre. Zeitpunktbedingte Variationen des Spektralsignals und des OC-Gehaltes fallen in den Schätzungen dadurch möglicherweise weniger ins Gewicht. Die Robustheit der Kalibration für Ton konnte erhöht werden, indem Bodenspektren mit charakteristischen spektralen Abweichungen in die Kalibration aufgenommen wurden (Kap. 7.6.2.1). Nachteil ist, dass bei dieser Vorgehensweise die Genauigkeit des Kalibrationsmodells sinkt. Die Vorhersagegenauigkeit ist demnach eng an die Stabilität der

Kalibrationen gekoppelt und ist gegen den Mehraufwand einer zeitspezifischen Neukalibration abzuwiegen.

Auf regionaler Ebene und mit der Abbildenden Spektroskopie scheiterte trotz Anpassung der spektralen Konfiguration der Versuch, die Kalibrationsmodelle auf Basis der Bilddaten von 2005 (HyMap_2005) für Ton und OC auf die Bilddaten von 2004 und 2008 zu übertragen (Kap. 7.7.4). Ähnlich der Feldspektroskopie erwiesen sich beim Transferversuch die Kalibrationsmodelle für Ton als besonders problematisch. Obwohl die Bodencharakteristik der Probenahmepunkte in den HyMap-Daten von 2004 und 2008 denen der Kalibrationsdaten von 2005 ähnelte und die Bilddaten zueinander korrekt korrigiert wurden (vgl. Kap. 7.3.3.1), waren beide Kalibrationsmodelle nicht repräsentativ für die Bilddaten von 2004 und 2008. Nicht auszuschließen ist, dass der geometrische Lagefehler zwischen den Bilddaten der unterschiedlichen Jahre, der sich auf $\pm 8\text{m}$ beläuft (vgl. Kap. 7.3.3.2), Probleme bei der Übertragung der Kalibrationsansätze bedingt. Besonders dem organischen Kohlenstoffgehalt im Boden wurde in verschiedenen Arbeiten eine sehr hohe räumliche Variabilität attestiert (z.B. Odlare et al., 2005). Als Hauptursache werden aber umweltbedingte Variationen im Spektralsignal ein und desselben Bodens vermutet. Für den erfolgreichen Einsatz abbildender Systeme in der quantitativen Bodenspektroskopie scheinen datensatzspezifische Neukalibrationen der zielführendste Lösungsansatz zu sein.

8.2.5 Vergleich traditioneller Bodenkarten mit den räumlich expliziten Schätzungen aus der Abbildenden Spektroskopie

Im Rahmen des Forschungsprojektes „Anwendung von Bodendaten in der Klimaforschung - BOKLIM“ erfolgte eine Inventarisierung der derzeit in Deutschland laufenden und geplanten bodenbezogenen Mess- und Erhebungsaktivitäten einschließlich verfügbarer Karteninformation zum Thema Boden. Nach wie vor das einzige Kartenwerk, welches die Heterogenität landwirtschaftlich genutzter Böden deutschlandweit parzellenscharf in einem Maßstab von 1:2.000 abbildet, ist die Bodenschätzung (ahu AG Wasser – Boden – Geomatik, 2009), die auf ein Gesetz zur Bewertung des Kulturbodens vom 16.10.1934 zurückgeht⁸³ (Scheffer & Schachtschabel, 2010). Der bodenkundliche Parameterumfang der Bodenschätzung ist allerdings begrenzt: sie gibt Information zur Bodenart, dem geologischen Alter⁸⁴, der Zustandsstufe⁸⁵ und der Boden- bzw. Ackerzahl⁸⁶. Die Beschreibung der Bodenarten weicht darüber hinaus stark von der modernen bodenkundlichen Nomenklatur⁸⁷ ab und erfordert eine Übersetzung. Der Stand dieser Auswertung, die Verfügbarkeit der Daten und ihre Qualität variiert stark je nach Bundesland (ahu AG Wasser – Boden – Geomatik, 2009). In Mecklenburg-Vorpommern (MVP) sind Bodeninformationen aus der Bodenschätzung digital bisher nur in Form der Auswertekarte der Bodenschätzung in einem Maßstab von 1:10.000 verfügbar. Kleinste gemeinsame Einheit der Auswertekarte sind die Klassenflächen, innerhalb derer die Bodenparameter der Grablochbeschriebe⁸⁸ einem Homogenitätskriterium genügen. Die Angaben zur Bodenart einer Klassenfläche entsprechen einem mittleren Wert und beziehen sich auf die durchwurzelbare Bodenschicht bis auf einen Meter unter Flur.

Abb. 8.2.3 zeigt das Ergebnis der räumlich expliziten Schätzung des Tongehaltes aus den HyMap-Daten für die beiden Ackerschläge nahe Alt Tellin und Heydenhof (vgl. Abb. 7.8.3, Abb. 7.8.5), überlagert mit den Grenzen der Klassenflächen der Bodenschätzung. Die Kennzeichnung der Klassenflächen kann anhand der Legende der Nomenklatur der Bodenschätzung sowie einer Übersetzung in die moderne Nomenklatur nach LUNG (2003) zugeordnet werden. Die Übersetzung in die moderne Nomenklatur basiert auf Erfahrungswerten von Bodenkundlern und wurde ursprünglich

⁸³ Letzte Aktualisierung 20.12.2007

⁸⁴ Geologisches Alter des Ausgangsgesteins (Dilluvialböden, D; Alluvialböden, Al; Lössböden, Lö; Verwitterungsböden, V (Scheffer & Schachtschabel, 2010).

⁸⁵ Entwicklungsgrad (Scheffer & Schachtschabel, 2010)

⁸⁶ Wertzahlen, die die Reinertragsunterschiede zum Ausdruck bringt (Scheffer & Schachtschabel, 2010).

⁸⁷ Korngrößenkennzeichnung nach der Bodenkundlichen Kartieranleitung AG Boden (1994). In den Bodenarten der Bodenschätzung fehlt die Schlufffraktion.

⁸⁸ Die Datenerhebung erfolgte in einem Rasterbohrnetz von 50x50m bzw. 40x40m bis zu 1m Tiefe.

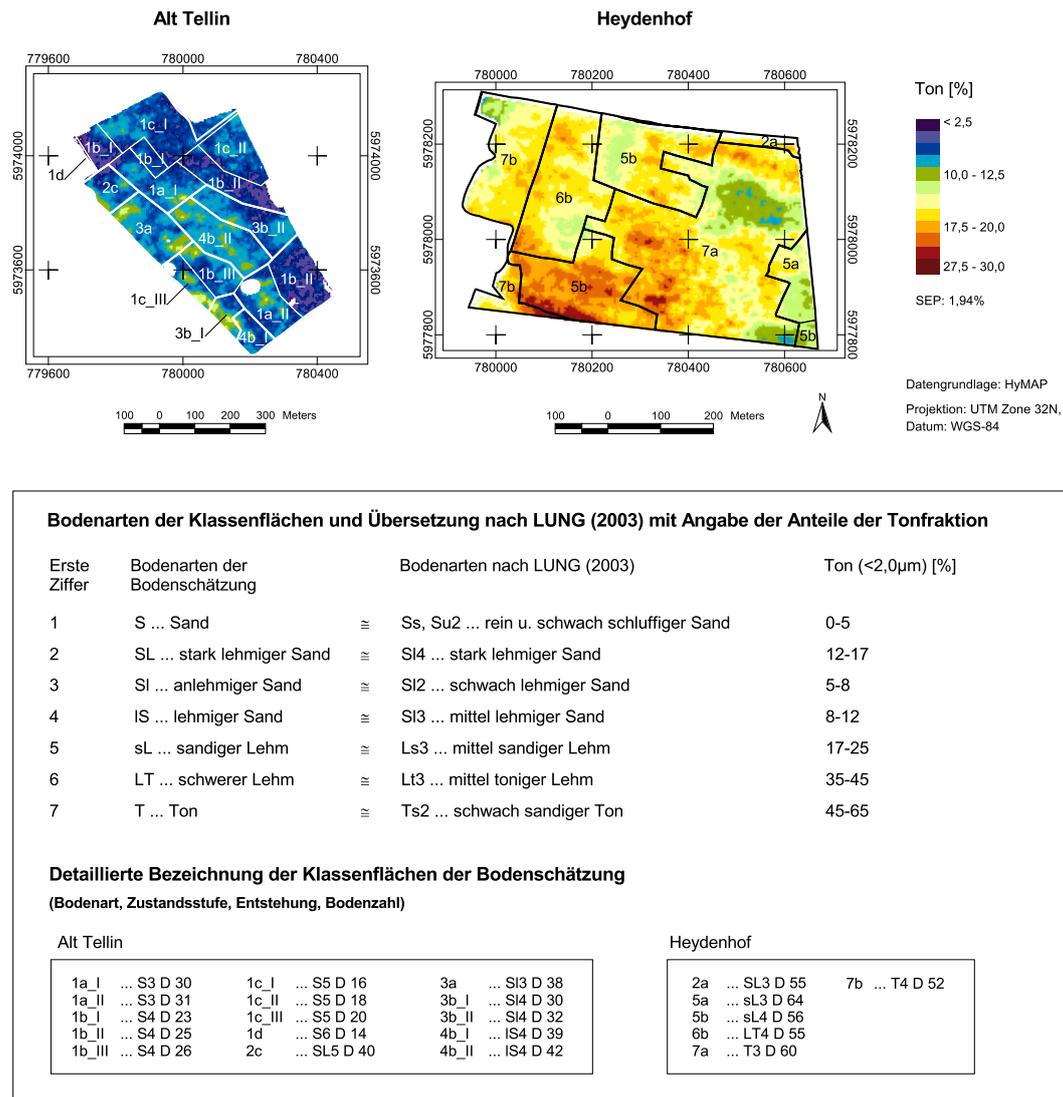


Abb. 8.2.3: Räumlich explizite Schätzung des Tongehaltes für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof (a) und der Ortschaft Alt Tellin (b) (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1) überlagert mit den Grenzen der Klassenflächen der Bodenschätzung.

für die Grablochbeschriebe erstellt (F. Idler, LUNG, telef. Mitteilung, 2011)⁸⁹. In der Legende rechts sind die Anteile der Tonfraktion für die Bodenarten nach AG Boden (1994) aufgelistet. Die geometrisch gezogenen Grenzen der Klassenflächen der Bodenschätzung erschweren einen Vergleich zwischen den Bodenarten der Bodenschätzung und dem räumlichen Muster der Tonkarten. Auf den ersten Blick sind nur schwer Parallelen zu erkennen. Für den Ackerschlag bei Alt Tellin lassen sich zu einem gewissen Grad Übereinstimmungen zwischen den sehr tonarmen Bereichen und den Grenzen der als Sand ausgewiesenen Flächen (erste Ziffer 1) erkennen, in denen Tongehalte kleiner 5% zu erwarten sind. In den Klassenflächen mit einer 2, 3, oder 4 an erster Stelle liegen die Tongehalte prinzipiell etwas höher, wie dies auch aus der Bodenartenzuordnung der Bodenschätzung zu erwarten ist. Die Heterogenität innerhalb der Flächen ist jedoch weitaus größer als dies maßstabsbedingt aus der Bodenschätzung hervorgeht, so dass sich keine Ähnlichkeiten zwischen den Klassenflächengrenzen und dem räumlichen Muster der Tonverteilung feststellen lassen. Für den Ackerschlag bei Heydenhof zeigen die Grenzlinien der Klassenflächen praktisch keine Gemeinsamkeiten mit der räumlichen

⁸⁹ Anders als in anderen Bundesländern (z.B. Niedersachsen, Schleswig-Holstein) existiert in MVP noch kein einheitlicher Übersetzungsschlüssel.

Verteilung des Tongehaltes. Den Schätzungen aus den hyperspektralen Bilddaten zufolge bewegt sich der Tonanteil im Oberboden auf diesem Ackerschlag etwa zwischen 7,5% und 30% Ton. Die Bodenarten der Bodenschätzung lassen für die Klassenflächen 6 und 7 allerdings weitaus höhere Tongehalte vermuten (35-65% Ton). Diese starken Differenzen zu den Angaben aus der Bodenschätzung können mehrere Ursachen haben. Eine mögliche Ursache sind Unstimmigkeiten, die sich aus der Übersetzung der Nomenklatur der Bodenarten der Bodenschätzung in die moderne Nomenklatur ergeben. Eine andere Ursache ist das Bodenvolumen, auf das Bezug genommen wird. Für die Ergebnisse aus der quantitativen Abbildenden Spektroskopie wird angenommen, dass sie aufgrund der regelmäßigen Bodenbearbeitung nicht nur für die obersten Zentimeter Boden, sondern auch für den Oberboden (20-30cm unter Flur) Gültigkeit besitzen, der für das Pflanzenwachstum und den Bodenschutz von entscheidender Bedeutung ist. Die Bodenarten der Klassenflächen geben hingegen einen Mittelwert über den obersten ersten Meter Boden. Schichtungen, die im vertikalen Profilverlauf auftreten, können durch die Reflexionsspektroskopie nicht erfasst werden, sind aber Bestandteil der Erhebungen zur Bodenschätzung, wobei sich detaillierte Informationen hierzu nur aus den Grablochbeschrieben ablesen lassen. Durch die Auswertung der Grablochbeschriebe, die in einem Rasterbohrnetz von 50m x 50m vorliegen (d.h. ca. 4 Datenpunkte pro ha), kann möglicherweise auch ein größerer Teil der räumlichen Variabilität der Tonkarten erklärt werden. Dennoch übertreffen die Daten des Sensors HyMap, die Grundlage der Schätzungen des Tongehaltes sind, die räumliche Auflösung der Bodenschätzung um ein Vielfaches (ca. 625 Datenpunkte pro ha). Selbst zukünftige satellitengetragene hyperspektrale Systeme weisen eine höhere Datenpunktdichte als die Bodenschätzung auf (ca. 16 Datenpunkte pro ha bei einer räumlichen Auflösung von 30x30m²) und versprechen differenziertere räumliche Informationen zur Verteilung des Tongehaltes als die Bodenschätzung. Ferner sind die Angaben zur Höhe der Tonfraktion, die indirekt aus der Bodenschätzung gewonnen werden können, mit steigendem Tonanteil zunehmend ungenau. Die Wertespanne der Bodenarten LT und T der Bodenschätzung beträgt 10% bzw. 20% Ton. Selbst wenn der Fehler der Modellschätzungen auf Ackerflächen ohne Referenzpunkte 31% höher ist als es der Validationsfehler des PLSR-Modells annehmen lässt, d.h. 2,55% Ton beträgt (vgl. Kap. 8.2.3), bietet die quantitative Auswertung hyperspektraler Bilddaten ein größeres Informationspotenzial als die Karte der Bodenschätzung.

Während mit der Bodenschätzung mit den genannten Einschränkungen grundsätzlich Informationen zum Tongehalt des Bodens zugänglich sind, existiert derzeit keine großmaßstäbige Kartengrundlage zur räumlichen Verteilung der organischen Bodensubstanz bzw. des organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden. Angaben hierzu können der Bodenschätzung nicht entnommen werden (F. Idler, LUNG, telef. Mitteilung, 2011). Im Rahmen der Bodenzustandserhebung Landwirtschaft (BZE-L) wird unter Beteiligung des Umweltbundesamtes (UBA), der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) und dem Johann Heinrich von Thünen-Institut (vTI) derzeit erstmals der organische Kohlenstoffgehalt landwirtschaftlicher Böden bundesweit mit einer einheitlichen Methodik in einem 8km x 8km Raster an insgesamt 4000 Messpunkten erhoben (ahu AG Wasser – Boden – Geomatik, 2009). Die Rastergitterweite schließt im Gegensatz zur Abbildenden Spektroskopie aber eine Anwendung dieser Daten für die Präzisionslandwirtschaft und den Bodenschutz aus.

8.3 Welche Kalibrationsmethode ?

In den Kapiteln 7.4 bis 7.7 wurden drei Methoden auf ihre Eignung zur Schätzung des Ton- und des organischen Kohlenstoffgehaltes aus Laborspektren, Feldspektren und HyMap-Bildspektren⁹⁰ untersucht: *Continuum Removal* (CR), multiple lineare Regression (MLR) und *Partial Least Squares Regression* (PLSR). Auf der Grundlage einer vergleichenden Übersicht dieser Ergebnisse (vgl. Abb. 7.7.4) wurde die PLSR für die räumlich explizite Schätzung aller Bodenparameter aus den HyMap-Bilddaten der Jahre 2004, 2005 und 2008 selektiert. An dieser Stelle soll eine differenzierte Betrachtung die Vor- und Nachteile dieser drei Methoden beleuchten und ihre Möglichkeiten und Grenzen in der quantitativen Reflexionsspektroskopie von Böden aufzeigen.

⁹⁰ Bezieht sich auf die HyMap-Bildspektren vom 27.05.2005

Für die Quantifizierung des **Tongehaltes** erwies sich die PLSR für Laborspektroskopie (LS), Feldspektroskopie (FS) und Abbildende Spektroskopie (IS) als das beste Verfahren. Dennoch war es in vielen Fällen möglich, auch mittels MLR gute bis sehr gute Ergebnisse zu erzielen. Das belegen RPD größer oder nahe 2 (Gruppe A nach Chang et al., 2001). Die MLR kann daher als alternative Methode zur Quantifizierung des Tongehaltes mit LS, FS und IS eingesetzt werden. Sie bietet sich vor allem dann an, wenn eine hohe Transparenz zwischen den erklärenden Variablen, d.h. den Wellenlängen, und der erklärten Variable, also Ton, gewünscht ist. Im Vergleich zur PLSR muss einerseits eine etwas größere Streuung in den Schätzwerten in Kauf genommen werden. Andererseits ist die Sensitivität des Modellfehlers gegenüber trockenen Pflanzenrückständen ungleich höher als die der PLSR (Abb. 7.5.19a). Die Quantifizierung von Ton anhand seiner typischen Absorptionsbande nahe 2200nm mittels CR gelingt unter standardisierten Bedingungen im Labor. Die Standardvalidationsfehler (SEP) übersteigen die der PLSR aber um 28% bis 133%. Gomez et al. (2008b) kommen zu ähnlichen Ergebnissen. In ihrer Arbeit war der SEP⁹¹ des CR-Verfahrens etwa 41% höher als der SEP der PLSR. Zwei Ursachen liegen diesem Verhalten vermutlich zu Grunde. Zum einen treten Tonminerale in der Bodenmatrix als kleinste Kristalle auf und sind weniger perfekt ausgebildet als die reiner Vorkommen (Scheffer & Schachtschabel, 1998). Zum anderen können Tonminerale mit einem dünnen Film aus anderen Teilchen der Bodenmatrix überzogen sein, ein Vorgang der als *coating* bezeichnet wird (Ben-Dor et al., 1999). Typische Absorptionsmerkmale von Tonmineralen sind in Böden dadurch weniger charakteristisch ausgeprägt und teilweise verdeckt, wodurch deren Quantifizierung allein anhand der Absorptionstiefe mit dem CR-Verfahren erschwert wird. Unter in-situ Verhältnissen im Gelände (FS, IS) eignet sich das CR nicht zur Quantifizierung des Tonanteils im Boden. Die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit zeigten, dass die Absorptionsbande nahe 2200nm durch den Bodenwassergehalt beeinflusst wird (vgl. Kap. 7.5.1.1, 8.1.2). Variationen im Bodenwassergehalt, die in der Natur durch Reliefunterschiede (Senken, Kuppen) und die Witterung bedingt sind, beeinträchtigen den Zusammenhang zwischen der Ausprägung der Absorptionstiefe und dem Tongehalt. In dieser Hinsicht stehen die Ergebnisse dieser Arbeit im Widerspruch zu der Vermutung von Viscarra Rossel et al. (2009) (vgl. dazu Kap. 8.1.2). Ferner verändern schon geringe Anteile grüner und trockener Vegetation die Absorption von Böden nahe 2200nm (Siegal & Goetz, 1977; Murphy & Wadge, 1994; Murphy, 1995; Abb. 7.5.18). Das hat zur Folge, dass bereits ein Anteil von 10% trockener Vegetation in einer Verdopplung des Standardfehlers des CR-Modells resultierte (vgl. Kap. 7.5.4). Da unter in-situ Verhältnissen zudem Variationen im Vegetationsanteil und Mischungen des Vegetationstyps (NPV, PV) zu erwarten sind, die im Experiment in Kapitel 7.5.4 nicht berücksichtigt wurden, ist davon auszugehen, dass die Absorptionstiefe nahe 2200nm selbst bei einer Bodenbedeckung von weniger als 10% Vegetation für die FS und IS kein geeigneter Prädiktor ist.

Für die Quantifizierung des **organischen Kohlenstoffgehaltes** bewährte sich keine der drei Methoden als ausnahmslos souverän. Die Modelltauglichkeit variierte in Abhängigkeit von der Art der Spektraldaten (LS, FS, IS) und von der Probenaufbereitung (Abb. 7.7.4). Die besten Resultate, d.h. die größten RPD, wurden mit MLR und PLSR erzielt. Eine Ausnahme stellen die Spektren der getrockneten Bodenproben (otro) dar, für die überraschenderweise das CR-Modell den größten RPD aufwies. Einzelheiten dazu werden weiter unten im Text diskutiert. Im Gegensatz zur MLR zeichnete sich in allen PLSR-Modellen der Laborspektroskopie und in der Feldspektroskopie eine Tendenz zur Unterschätzung OC-Gehalte größer ca. 2% ab. Für die Kalibrationsdatensätze der Laborspektroskopie mit getrockneten Bodenproben (otro), mit Bodenproben variabler Wassergehalte (mix) und mit einer Halbwertsbreite (FWHM) von 20nm bzw. der spektralen Konfiguration des Sensors HyMap sowie für die Feldspektren war dieses Phänomen aber auch in den MLR-Modellen zu beobachten. Für die Modelle auf Basis der HyMap-Daten konnte in Ermangelung entsprechender Validationsdaten keine eindeutige Schlussfolgerung gezogen werden. Die Laborspektroskopie und die Feldspektroskopie deuteten darauf hin, dass eine solche Tendenz auch in den Modellen der Abbildenden Spektroskopie wahrscheinlich ist. Einen Tendenz zur Unterschätzung höherer OC-Gehalte beobachteten auch Sørensen & Dalsgaard (2005), Kooistra et al. (2003a) sowie Stevens et al. (2010), obwohl zur gleichen Zeit in einem Großteil existierender Studien, die sich mit der Schätzung des OC-Gehaltes mit MLR

⁹¹ Angabe des Standardfehlers in Gomez et al. (2008b) als RMSE.

oder PLSR aus VNIR-SWIR-Reflexionsspektren beschäftigen, nicht über ein derartiges Verhalten berichtet wird (z.B. Chang & Laird, 2002; Dalal & Henry, 1986; Fystro, 2002; Dunn et al., 2002; Reeves et al., 1999). In einigen MLR-Modellen für OC deuteten darüber hinaus Varianzinflationsfaktoren (VIF) größer 10 Multikollinearität an. Aussagen zur Schätzung der Regressionskoeffizienten werden dadurch zunehmend ungenau und die Modellinterpretation vage, weshalb die PLSR der MLR für die räumlich explizite Schätzung des OC-Gehaltes vorgezogen wurde. Vasques et al. (2008) testeten fünf Verfahren zur Schätzung des Gesamtkohlenstoffgehaltes (TC) aus Laborspektren, darunter PLSR und SMLR⁹². Sie attestierten, wie in der vorliegenden Arbeit, der PLSR die höchste Vorhersageeignung, vor der SMLR und den anderen drei Methoden (CT, PCR, RT⁹³), wobei die RMSE und RPD der besten PLSR- und SMLR-Modelle ähnlich zu den eigenen Untersuchungen nah beieinander lagen. Vasques et al. (2008) beobachteten keine Tendenzen zu einer Unterschätzung höherer Kohlenstoffgehalte. Dass PLSR und MLR nicht notwendigerweise die besten Ergebnisse erzielen, zeigen die Arbeiten von Viscarra Rossel & Behrens (2010) und Brown et al. (2006), die größere Vorhersagegenauigkeiten durch den Einsatz von *Support Vector Machines* (SVM) bzw. Entscheidungsbaumtechniken (BRT) erreichten⁹⁴. Eine Besonderheit ihrer Untersuchungen ist die sehr große Datenbasis. Sie verwendeten Spektraldatenbanken mit 1104 (Viscarra Rossel & Behrens, 2010) bzw. 4184 (Brown et al., 2006) Datensätzen. Wie Mouazen et al. (2010), Fidêncio et al. (2002) und Stevens et al. (2010) zeigen konnten, stellen diese Verfahren auch für kleinere Datensätzen (n<300) möglicherweise eine Alternative dar. Dies ist von besonderem Interesse, da Verfahren wie SVM (Stevens et al., 2010) oder neuronale Netzwerke (Mouazen et al., 2010: BPNN; Fidêncio et al., 2002: RBFN) die Komplexität nichtlinearer Systeme zu beschreiben vermögen. PLSR, MLR und CR gehen dagegen von einem linearen Zusammenhang zwischen Zielparameter und dessen Reflexionssignal aus. Unabhängig von der Ursache nichtlinearer Effekte bei der Modellierung des OC-Gehaltes (vgl. Kap. 8.1.2), sollten daher SVM oder ANN Untersuchungsgegenstand zukünftiger Arbeiten sein.

Es wurde bereits andiskutiert, dass unter standardisierten Laborbedingungen das CR, ebenso wie für Ton, optional zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes eingesetzt werden kann. Sehr gute Ergebnisse wurden durch die Parametrisierung der Absorptionsbande nahe 662nm mit den Spektren der getrockneten Proben (otro) erreicht, die denen der MLR und der PLSR in Bezug auf den RPD überlegen waren. Aufgrund der sehr breitbandigen, unspezifischen Absorptionerscheinung von organischer Bodensubstanz im VNIR wurde vor Beginn der Analysen das Gegenteil erwartet. Die eigenen Ergebnisse widerlegen somit die Schlussfolgerungen von Palacios-Orueta & Ustin (1998) auf der Basis von Laboranalysen kalifornischer Böden, dass die spektrale Analyse von Bodenparametern nicht auf einzelne Absorptionsmerkmale an spezifischen Wellenlängen reduziert werden kann, sondern nur durch Betrachtung des gesamten Spektrums erfassbar ist. Sie geben Grund zur Annahme, dass unter standardisierten Bedingungen im Labor und bei Verwendung gesiebter und getrockneter Böden die Schätzung von organischem Kohlenstoff sehr wohl auch mittels CR erfolversprechend ist. Unter in-situ Verhältnissen treten ähnliche Probleme wie bei der Schätzung des Tongehaltes auf. Variable Wassergehalte (vgl. Kap. 7.5.1.2) und Vegetation (vgl. Kap. 7.5.4) sind zwei der Faktoren, die der Parametrisierung einzelner Absorptionsbanden zur Schätzung des Kohlenstoffgehaltes aus Feld- oder Bildspektren entgegen stehen.

Die Effizienz von CR, MLR und PLSR zur Quantifizierung von Bodenparametern aus Reflexionsspektren muss demnach als Funktion des Zielparameters, d.h. der Art und Ausprägung seiner Absorptionsmerkmale, und als Funktion des Messverfahrens, d.h. LS, FS oder IS, gesehen werden. Beispielsweise stellten auch Cohen et al. (2007) bei der Schätzung einer Reihe chemischer Bodeneigenschaften fest, dass die PLSR in der Modellvalidation zwar in den meisten Fällen mit geringeren Standardfehlern behaftet ist. Zwei Bodenparameter konnten jedoch besser durch ein anderes Verfahren, der *Gradient Boosted Tree Regression*⁹⁵ (GBT), erfasst werden. Gomez et al.

⁹² Bei Vasques et al. (2008) ist die multiple lineare Regression explizit als schrittweise multiple Regression (SMLR) ausgewiesen, was dem Verfahren in Kapitel 6.4.2 entspricht.

⁹³ in der Reihenfolge der Vorhersagegenauigkeit

⁹⁴ Die Vorhersagegenauigkeit der untersuchten Modelle bei Viscarra Rossel & Behrens (2010) nimmt in der Reihenfolge SVM > PLSR ≥ MARS > RF,BRT ab und bei Brown et al. (2006) in der Reihenfolge BRT > PLSR.

⁹⁵ Klassifikationsverfahren, das auf der Verknüpfung von Entscheidungsbäumen beruht.

(2008b) favorisieren zur Bestimmung des Carbonat-Kohlenstoffs im Labor das CR, bei der Verwendung abbildender Verfahren aber die PLSR. Die hier durchgeführten Untersuchungen haben gezeigt, dass die Quantifizierung von Ton und organischem Kohlenstoff in-situ (FS, IS) nicht durch die Parametrisierung einzelner Absorptionsbanden zu bewältigen ist, sondern nur durch eine ganzheitliche Betrachtung des Spektrums mit multivariaten Verfahren wie MLR oder PLSR. Diese boten ferner die Option, spektral im VNIR-SWIR nicht aktive Bodenparameter unter bestimmten Umständen über Interkorrelationen zu spektral aktiven Bodenparametern zu erfassen. Modifikationen des Spektralsignals durch Umweltfaktoren (z.B. Wasser, Vegetation) konnten in der Regel besser durch die PLSR kompensiert werden (vgl. Kap. 7.5.1, 7.5.4). Zu einer, in diesem Zusammenhang interessanten Feststellung kamen auch Stevens et al. (2008) in ihren Analysen zur Detektion von organischem Kohlenstoff aus VNIR-SWIR-Spektren in Böden dreier verschiedener belgischer Testgebiete. Sie beobachteten eine markante Gruppierung in den X-Y-Score-Diagrammen der PLSR nach den spektralen und bodenchemischen Eigenschaften der Proben der drei Testgebiete, konnten aber dennoch kreuzvalidierte RPD der Gruppe A nach Chang et al. (2001) erzielen (RPD_{CV} : 2,84). In der Laborspektroskopie ist der Gebrauch aller drei Verfahren grundsätzlich möglich. Die Wahl des Verfahrens hängt von der erforderlichen Genauigkeit ab. Soll beispielsweise eine erste Vorstellung über die Bodeneigenschaften eines Datensatzes gewonnen werden, kann das CR eine schnelle und unkomplizierte Methode zur Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes bieten, die auf dem direkten Zusammenhang zwischen Stoffkonzentration und Intensität der Absorption basiert.

8.4 Quantitative Reflexionsspektroskopie - eine Alternative zu Standardlaboranalysemethoden ?

Seit vielen Jahren werden reflexionsspektroskopische Laborverfahren als kostengünstige- und zeitsparende Alternative zu Standardlaboranalysen für die Bestimmung physikalisch-chemischer Bodeneigenschaften geprüft (z.B. Ben-Dor & Banin, 1995a; Reeves et al., 1999; Shepherd & Walsh, 2002; Cohen et al., 2005). Ebenso wurden und werden tragbare Systeme für den Feldeinsatz auf ihre Praktikabilität und Eignung getestet. Mit ihrer Hilfe könnten weite Transportwege und aufwendige Probenaufbereitungen stark reduziert werden oder bestenfalls sogar entfallen (z.B. Sudduth & Hummel, 1993; Christy, 2008). Der Einsatz der Abbildenden Spektroskopie für quantitative Bodenanalysen ist Thema der aktuellen Forschung (Ben-Dor et al., 2009). Nachfolgend soll das Leistungspotential der Reflexionsspektroskopie durch einen Vergleich der Standardfehler der reflexionsspektroskopischen Methoden (SEP) mit den Standardfehlern der Laboranalysemethoden (SEL) beleuchtet werden. Dabei werden sowohl die Ergebnisse aus der Laborspektroskopie (LS) und der Feldspektroskopie (FS) als auch die Ergebnisse aus der Abbildenden Spektroskopie (IS) betrachtet. Grundlage dieser Betrachtung bilden die Kalibrationen mittels PLSR.

Obwohl eine zuverlässige Referenzanalytik eine entscheidende Voraussetzung für den Erfolg reflexionsspektroskopischer Methoden ist (Malley et al., 2004), finden sich in der Literatur nur in ausgewählten Arbeiten Angaben zum SEL (van Waes et al., 2005; Fystro, 2002; Cohen et al., 2007; Sankey et al., 2008; Stevens et al., 2006, 2008, 2010). Tab. 8.4.1 listet die SEL der hier verwendeten Referenzanalytik zur Bestimmung der Korngrößenfraktionen sowie des organischen Kohlenstoffgehaltes auf (vgl. Anhang A 7). Die Validität und Reproduzierbarkeit dieser Referenzanalytik konnte für organischen Kohlenstoff in einem Vergleich der Ergebnisse zweier adäquater Analyseverfahren zur Bestimmung des TC und IC an einer Auswahl von 43 Bodenproben bestätigt werden (vgl. Kap. 7.1). Abgesehen vom Standardfehler der Laboranalytik können Fehler aber auch durch die Probenentnahme (Malley et al., 2004) und durch die Bodenprobeentnahme verursacht werden. Dieser Fehler (SES, *Standard Error of Sampling*) wurde für die geleisteten Geländearbeiten durch eine fünffache Mehrfachbeprobung von 18 Messpunkten nach Lozán & Kausch (2004) ermittelt (vgl. Anhang A 7) und ist ebenso in Tab. 8.4.1 aufgeführt. Für eine Gegenüberstellung von SEP und SEL ist es sinnvoll, vorab eine Korrektur des SEP um den SEL vorzunehmen, da der SEP den Standardfehler der Laboranalysemethoden einschließt und somit die tatsächliche Messunsicherheit überschätzt. Deshalb ist der korrigierte Standardvalidationsfehler (SEP_{corr} , Glg. 6.4.14) Grundlage der nachfolgenden Ausführungen.

Der Vergleich von SEL und SEP_{corr} macht deutlich, dass die Vorhersagegenauigkeit der reflexionspektroskopischen Methoden für **Ton** unabhängig vom Messverfahren (LS, FS, IS) nicht an die Genauigkeit der Laboranalyseverfahren heranreicht. Das trifft auch für die im VNIR-SWIR spektral nicht aktiven Bodenparameter Sand und Schluff zu. Der Quotient aus SEP_{corr} und SEL ist in allen Fällen größer 1. Mit einem SEP_{corr} zwischen 1,52% und 2,29% Ton ist die Messunsicherheit für den Tongehalt im Boden aus hyperspektralen Bilddaten mindestens drei- bis viereinhalb Mal größer als die traditioneller Laboranalysemethoden. Auch labor- und feldspektroskopische Methoden bewegen sich in diesem Bereich, wobei durch Hinzuziehung der großen Wasserabsorptionsbanden nahe 1,4 μm und 1,9 μm , die in der vorliegenden Arbeit ausgespart wurden, Verbesserungen für die Laborspektroskopie (vgl. Kap. 6.2.4) zu erwarten sind, da Tonminerale zwischen 1,3-1,4 μm und 1,8-1,9 μm typische Absorptionscharakteristika aufweisen (Ben-Dor et al., 1999). Vergleichbare Ergebnisse erzielten Sankey et al. (2008). Sie berichten Standardvalidationsfehler zwischen 4,92% und 13,8% Ton und einen SEL von 2,53%⁹⁶. Besonders hoch sind die Differenzen zwischen SEL und SEP_{corr} für Sand. Sie sind u.a. dem geringen SEL für Sand (0,11%) geschuldet. Das Vorhersagepotenzial für spektral im VNIR-SWIR nicht aktive Bodenparameter ist im Allgemeinen geringer einzuschätzen als das spektraler Chromophore wie Ton und muss immer im Einzelfall geprüft werden, da die Modellkalibrationen ausschließlich auf Interaktionen mit diesen beruhen.

Tab. 8.4.1: Methodische Fehler der Referenzanalytik (SEL, SES) im Vergleich zur Vorhersagegenauigkeit (SEP bzw. SEC) der PLSR-Modelle mit Laborspektren (LS), Feldspektren (FS) und Abbildender Spektroskopie (IS).

Parameter	SES	SEL	SEP_{corr}^*			SEP_{corr}^*/SEL			$SEP_{\text{corr}}^*/(SES+SEL)$		
			LS	FS	IS ^a	LS	FS	IS ^a	LS	FS	IS ^a
Sand	2,45 [†]	0,11 [†]	-	-	3,61 – 5,58	-	-	32,8 – 50,7	-	-	1,41 – 2,18
Schluff	1,78 [†]	1,09 [†]	-	-	1,29 – 3,98	-	-	1,18 – 3,65	-	-	0,45 – 1,39
Ton	0,80	0,50	1,78	2,43	1,52 – 2,29	3,56	4,86	3,04 – 4,58	1,37	1,87	1,17 – 1,76
TC	0,069	0,017	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.
IC	0,043	0,288	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.	n.a.
OC	0,077	0,305 [‡]	n.g., <SEL	n.g., <SEL	n.g., <SEL	n.g.	n.g.	n.g.	n.g.	n.g.	n.g.
OC_{corr}	0,077	0,100	0,156	0,204	0,126 – 0,188	1,56	2,04	1,26 – 1,88	0,881	1,153	0,712 – 1,062

[†] Wurzel der Quadratsumme der Fehler für Grobsand, Mittelsand und Feinsand bzw. Grobschluff, Mittelschluff und Feinschluff; [‡] Summe der Fehler aus TC und IC; SES: Fehler bei Entnahme der Bodenproben; SEL: Standardfehler der Laboranalysemethoden; * SEP der PLSR-Modelle; ^a Angaben beruhen auf dem kleinsten und dem größten Standardfehler der PLSR-HyMap-Modelle. Für die HyMap-Daten von 2005 beruhen die Angaben auf dem SEP. Für die HyMap-Daten von 2004 und 2008 dient der SEC als Grundlage (vgl. Tab. 7.7.1, Tab. 7.7.2, Tab. 7.7.4, Tab. 7.7.5). OC_{corr} : angenommener SEL für OC gleich 0,1 gesetzt (siehe Text); n.g.: nicht gültig; n.a.: nicht angegeben.

Die SEP der Kalibrationsmodelle für **organischen Kohlenstoff** betragen 0,185% OC (LS), 0,227% OC (FS) und 0,161-0,213% OC (IS) und sind somit kleiner als der SEL für die laboranalytische Bestimmung des organischen Kohlenstoffgehaltes (0,305%). Ursache hierfür ist die Berechnung des SEL_{OC} als Summe des SEL_{TC} und SEL_{IC} , wobei der Standardfehler bei der Bestimmung des Carbonat-Kohlenstoffs über eine Gasanalysen-Messanlage stark zu Buche schlägt (0,288%). Eine Korrektur des SEP nach Gleichung 6.4.14 ist in diesem Fall ungültig. Aufgrund der sehr guten Übereinstimmung zwischen den röntgendiffraktometrisch bestimmten Calcitgehalten und den Ergebnissen der Carbonat-Kohlenstoffanalyse in der Gasanalysen-Messanlage (Carmhomat) (R^2 : 0,96; Abb. 7.1.5) kann davon ausgegangen werden, dass der tatsächliche Fehler der Laboranalytik zur Bestimmung des Carbonat-Kohlenstoffes in den Untersuchungen niedriger ist als die Summe aus SEL_{OC} und SEL_{TC} , d.h. die angenommene Fehlersumme für den SEL_{OC} zu hoch ist. Darauf weisen

⁹⁶ SEP_{corr} nach Glg. 6.4.14: 4,2%-13,5%.

auch die Ergebnisse der Mehrfachbeprobung hin, bei denen ein Fehler (SES) von 0,077% OC auftrat. Nimmt man einen SEL von 0,1% OC an, wie zum Beispiel in den Arbeiten von Stevens et al. (2008, 2010), d.h. einen SEL_{IC} von 0,083, betragen die korrigierten Standardvalidationsfehler 0,156% OC (LS), 0,204% OC (FS) und 0,126-0,188% OC (IS). Unter dieser Voraussetzung würden reflexionsspektroskopische Methoden den Gehalt an organischem Kohlenstoff unter Umständen mit einer annähernd ähnlichen Genauigkeit bestimmen können wie herkömmliche Standardlaboranalysen. Zu analogen Schlussfolgerungen kommen Cohen et al. (2007), die laborspektroskopische Untersuchungen an mehr als 1900 Bodenproben aus ganz Florida durchführten. Arbeiten, die hyperspektrale Bilddaten für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes einsetzen, konnten bisher keine derartigen Erfolge berichten. Stevens et al. (2006) erzielten SEP, die mindestens fünfmal höher sind als die Standardfehler der Laboranalytik. Stevens et al. (2010) berichteten SEP von 0,3% OC im Vergleich zu einem SEL von 0,1% OC.

Trotz dieser ermutigenden Ergebnisse wäre eine alleinige Betrachtung der Fehlermaße zur Evaluierung des Potenzials reflexionsspektroskopischer Methoden, v.a. der Abbildenden Spektroskopie, kurzsichtig und unter Umständen irreführend. Für eine objektive Einschätzung müssen mehrere Aspekte berücksichtigt werden, unabhängig vom Bodenparameter. Oberste Priorität gilt der unabhängigen Validierung. Nur auf diese Weise lässt sich feststellen, inwiefern die getroffenen Aussagen zur Vorhersagegenauigkeit auch im Raum tatsächlich Bestand haben (vgl. Kap. 8.2.3). Erste Abschätzungen deuteten darauf hin, dass die Modellfehler der Abbildenden Spektroskopie die Vorhersagegenauigkeit auf Ackerflächen, für die keine Referenzproben zur Verfügung stehen, teilweise überschätzen. Des Weiteren muss berücksichtigt werden, dass jedwede Fehlerangaben nur für den Wertebereich des Kalibrationsmodells gelten. Schätzungen außerhalb des Wertebereiches sind möglicherweise mit größeren Fehlern behaftet. Auch dass wurde im Experiment in Kap. 8.2.3 deutlich. Zu guter Letzt ist eine Prüfung des Verhaltens der HyMap-basierten Modelle zur Schätzung des OC-Gehaltes im Boden größer ca. 2% OC dringend geboten. Sollte sich der Verdacht auf Nichtlinearität bestätigen, sind andere Vorgehensweisen oder Methoden zur Schätzung des OC-Gehaltes aus den reflexionsspektrometrischen Messungen erforderlich (vgl. Kap. 8.3). Die Genauigkeit reflexionsspektroskopischer Methoden zur Bestimmung des organischen Kohlenstoffgehaltes, vor allem die bildgebender Verfahren, auf eine Stufe mit herkömmlichen Laboranalysen zu stellen, wäre daher verfrüht.

Aber auch wenn reflexionsspektroskopische Methoden nicht oder noch nicht an die Präzision herkömmlicher Laboranalytik heranreichen, bieten sie eine Reihe von Vorteilen, die gegen die erforderliche Genauigkeit abzuwiegen sind. Sollen Änderungen der Kohlenstoffvorräte im Boden von $5t\ ha^{-1}\ a^{-1}$ ⁽⁹⁷⁾ detektiert werden, ist bereits auf der Feldskala aufgrund der hohen räumlichen Variabilität von OC eine hohe Dichte von Probenahmepunkten (9-156) erforderlich (Stevens et al., 2008). Auf regionaler Ebene wäre diese ungleich höher. Stevens et al. (2008) schätzten das Probenaufkommen für ihre drei Untersuchungsgebiete zusammen auf mehr als 486 Stück, wenn Änderungen von $5t\ C\ ha^{-1}\ a^{-1}$ diagnostiziert werden sollen. Die hohe räumliche Variabilität der Bodeneigenschaften verlangt auch in einem Teilgebiet der Präzisionslandwirtschaft, dem teilschlagspezifischen Pflanzenschutz (*Precision Crop Protection*, PCP), immer mehr nach räumlich hoch aufgelösten Bodeninformationen und Alternativen zur kosten- und zeitintensiven klassischen Probeentnahme im Gelände (Patzold et al., 2008). Der Vergleich traditioneller Bodenkarten in Kapitel 8.2.5 zeigte, dass existierende Bodenkarten den Anforderung der PCP nicht gerecht werden. Mertens et al. (2008), die elektrische Leitfähigkeitsmessungen mit EM38 zur Erfassung der räumlichen Bodenheterogenität prüften, kommen zu einem ähnlichen Ergebnis. Mehrere weitere Beispiele ließen sich an dieser Stelle aufführen (vgl. Kap. 1), die die Grenzen traditioneller Bodenprobenahmen und Laboranalytik aufzeigen. Bereits laborspektroskopische Methoden könnten zu einer Minderung der immensen Kosten beitragen, die durch eine adäquate Probenahmedichte entstehen würde, auch wenn nach wie vor Arbeiten im Gelände und eine entsprechende Probenaufbereitung notwendig sind. Mit feldspektroskopischen Methoden könnte die Variabilität von organischem Kohlenstoff und anderen Bodenparametern ohne diesen Zwischenschritt erfasst werden. Dennoch setzt auch dieses Verfahren

⁹⁷ Bei einer angenommenen Rohdichte von $1,3g\ cm^{-3}$ und einer Tiefe von 30cm entsprechen $5t\ ha^{-1}\ a^{-1}$ $1,2g\ C\ kg^{-1}$, d.h. 0,12% OC (Stevens et al., 2008).

die Interpolation der Punktdaten in die Fläche sowie eine Rekalibration der Modellansätze vor jeder Messkampagne voraus. Mit hyperspektraler Fernerkundung (IS) wären nach kampagnenspezifischer Rekalibrationen (vgl. Kap. 8.2.4) räumlich explizite Schätzungen auf lokaler und regionaler Ebene verfügbar. Die Untersuchungen in dieser Arbeit demonstrieren, dass mit abbildenden spektroskopischen Verfahren durchaus ähnliche Genauigkeiten erreicht werden können wie mit punktbezogenen spektroskopischen Verfahren. Der Einsatz reflexionsspektroskopischer Methoden, vor allem der quantitativen Abbildenden Spektroskopie als Alternative zu traditionellen Verfahren unterliegt daher im Wesentlichen einer Abwägung zwischen den Anforderungen und Ansprüchen an die Genauigkeit, und der Kostenersparnis sowie dem Zugewinn an Informationen in der Fläche.

8.5 Das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie für den Bodenschutz

Die Infiltrationsrate, mit der Wasser in den Boden eindringen kann, steuert maßgeblich die Entstehung von Oberflächenabfluss. Während eines Niederschlagsereignisses kann Wasser zunächst mit hoher Geschwindigkeit in den Boden eindringen. Mit zunehmender Sättigung des Bodenkörpers sinkt jedoch das antreibende Potentialgefälle und es wird eine nahezu konstante Infiltrationsrate erreicht, die allein durch die Schwerkraft angetrieben wird und näherungsweise der gesättigten Wasserleitfähigkeit (k_f) des Bodens entspricht (vgl. Abb. 4.2.1). Überschreitet die Regenintensität diese Endinfiltrationsrate, kann oberflächlicher Abfluss entstehen, der ganz wesentlich für den Transport und die Verlagerung von Bodenpartikeln verantwortlich ist. Informationen zur gesättigten Wasserleitfähigkeit des Bodens können daher Auskunft über dessen Erosionsanfälligkeit geben. So fanden Jadczyzyn & Niedzwieki (2005) bei Bodenabtragsmessungen nach natürlichen Regenfällen an 10 charakteristischen Bodentypen Polens zwischen 1997 und 2002 einen statistisch signifikanten Zusammenhang zwischen der gesättigten Wasserleitfähigkeit und dem Bodenabtrag. Ebenso erzielten Kang et al. (2010) bei Experimenten an südkoreanischen Böden eine enge Korrelation zwischen Bodenabtrag und gesättigter Wasserleitfähigkeit. Einen exponentiellen Zusammenhang zwischen Bodenabtrag und der minimalen gesättigten Wasserleitfähigkeit stellten Ramos et al. (2000) für Böden in SO-Spanien bei simulierten Beregnungsversuchen fest. Ihre Messungen berücksichtigten Effekte durch Verschlammung und Verkrustung der Oberfläche.

In Kapitel 7.9 wurden sechs Pedotransferfunktionen (PTF) zur Beschreibung der gesättigten Wasserleitfähigkeit für die landwirtschaftlichen Nutzflächen im Testfeld DEMMIN evaluiert. Als Datengrundlage dienten die Bodenparameterschätzungen auf Basis der HyMap-Bilddaten. Aus den Analysen ging hervor, dass der Wertebereich von k_f einerseits eng an die jeweilige PTF gebunden ist. Im Falle der PTF von Jabro (1992), Vereecken et al. (1990) und Brakensiek et al. (1984) bestand andererseits eine starke Abhängigkeit von der Höhe der Trockenrohdichte. Diese schwankt im Verlauf eines Bewirtschaftungsjahres je nach Bodenbearbeitungsphase und führt bei Berücksichtigung zu einer hohen Variabilität von k_f für ein und dasselbe Bildpixel bzw. ein und denselben Boden. Ferner zeigte eine Sensitivitätsanalyse, dass Änderungen der Eingangsparameter im Bereich des Standardfehlers der PLSR-Modelle eine extreme Ab- bzw. Zunahme der k_f -Werte bedingen, vor allem für Sand (37 bzw. 63%) und Ton (37 bzw. 56%). Quantitative Angaben zu k_f auf Basis der Bodenparameterschätzungen sind damit auch in hohem Grade ungenau. Eine rein qualitative Betrachtung der Ergebnisse der PTF ermöglichte jedoch die Identifikation übergreifender räumlicher Muster (vgl. Abb. 7.9.6, Abb. 7.9.5). Sie gestatten eine relative Darstellung von Bereichen hoher, mittlerer und geringer gesättigter Wasserleitfähigkeit.

Ausgehend von dem beschriebenen negativen Zusammenhang zwischen gesättigter Wasserleitfähigkeit und Erosionsraten (z.B. Jadczyzyn & Niedzwieki, 2005), zeichnen sich Bereiche geringer Wasserleitfähigkeit durch eine hohe Erosionsanfälligkeit aus, Bereiche hoher Wasserleitfähigkeit sind aufgrund der höheren Wasseraufnahmekapazität weniger anfällig gegenüber Erosion. Dies kommt einer Invertierung gleich, deren Resultat beispielhaft für die beiden Schläge nahe Heydenhof und Alt Tellin dargestellt ist (Abb. 8.5.1). Als Grundlage der Darstellung in Abb. 8.5.1 diente die Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit nach der PTF von Saxton et al. (1986), die wegen ihrer sehr breiten bodenartenübergreifenden Anwendbarkeit für Sande und Lehme selektiert wurde (Tietje & Hennings, 1996). Durch den Einsatz der Abbildenden Spektroskopie können auf diese Weise erste qualitative Informationen zur Erosionsanfälligkeit landwirtschaftlicher Flächen, d.h. ihrer

bodenspezifischen Erodierbarkeit, zur Verfügung gestellt werden. Die niedrigen Infiltrationsraten auf dem Schlag nahe Heydenhof machen diesen in weiten Teilen anfällig für die Entstehung von oberflächlichem Abfluss. Gegensätzlich ist die Situation auf dem Schlag nahe Alt Tellin, der fast flächendeckend durch mittlere bis hohe Infiltrationsraten gekennzeichnet ist und daher eine geringere Erodierbarkeit aufweist. Die Beispiele zeigen auch, dass Angaben zur Erodierbarkeit nicht auf den Schlag als ganzes beschränkt sind, sondern ferner eine schlaginterne Differenzierung möglich ist. Anders als die Kartierung des Erosionsgrades (Hill et al., 1995; Galvão et al., 2001) bietet die Kennzeichnung der Erosionsgefahr den großen Vorteil, in entsprechenden Bereichen Präventivmaßnahmen für den Bodenschutz treffen zu können. Dies ist auf landwirtschaftlich genutzten Flächen nicht nur aus ökologischen sondern auch aus ökonomischen Gesichtspunkten von hoher Bedeutung. Ben-Dor et al. (2004) unterbreiteten vor diesem Hintergrund einen Vorschlag für Lössböden in Israel, der sich auf die Identifikation von Bodenkrusten anhand charakteristischer spektraler Eigenschaften stützt. Verkrustete Areale minimieren bzw. verhindern die Infiltration von Wasser und unterliegen somit einer erhöhten Erosionsgefahr. Auch eine Arbeit von de Jong et al. (2011) in Südfrankreich beschäftigt sich mit der Kartierung von Bodenkrusten. Im Gegensatz zu Ben-Dor et al. (2004), der seine Analysen auf einen einzelnen Index (NSA, *Normalized Spectral Area*) stützt, verwenden sie für ihre Untersuchungen zwei Klassifikationsalgorithmen. Da die Entstehung und Zerstörung von Bodenkrusten ein dynamischer Prozess ist, bietet dieser Ansatz vor allem ein Bild der aktuellen Erosionsgefährdung, welches eng an den Zeitpunkt der Aufnahme gekoppelt ist. Damit entspricht das Resultat einer momentanen Zustandsbeschreibung ohne bzw. nur mit einem geringen zeitübergreifenden Aussagewert. Entgegen den genannten Arbeiten beruht das hier vorgeschlagene Verfahren auf Basis der PTF von Saxton et al. (1986) nicht auf dem Reflexionssignal der Böden sondern auf zeitlich relativ invariablen Bodeneigenschaften (Ton, Sand), die wesentlichen Einfluss auf die Wasserleitfähigkeit haben. Auf diese Weise werden räumliche Muster der potenziellen Erosionsgefährdung identifiziert, die wenig veränderlich sind. Sie liefern grundlegende Hinweise, wo sich den Bodeneigenschaften nach zu urteilen wenig und stark gefährdete Areale, d.h. Zonen geringer und hoher bodenspezifischer Erodierbarkeit, befinden. Eine Einschätzung der tatsächlichen Erosionsgefährdung kann dann durch Hinzuziehen weiterer erosionsrelevanter Größen erfolgen. Dazu gehören insbesondere der Bedeckungsgrad des Bodens mit Pflanzenmaterial oder der aktuelle Bodenwassergehalt, d.h. die tatsächliche Wasseraufnahmekapazität bis zum Erreichen eines nahezu gesättigten Zustandes. Für beide Parameter wurde das Potenzial hyperspektraler Daten bereits aufgezeigt (Bannari et al., 2006; Haubrock et al., 2005, 2008a,b).

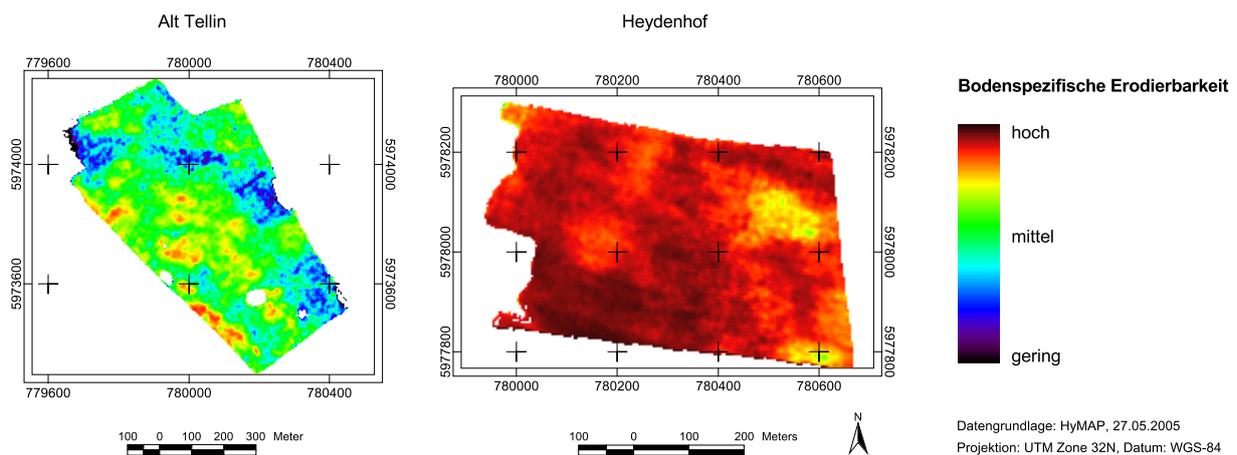


Abb. 8.5.1: Karte der bodenspezifischen Erodierbarkeit abgeleitet aus hyperspektralen Bilddaten (HyMAP, 27.05.2005) unter Verwendung der PTF von Saxton et al. (1986) zur Schätzung der gesättigten Wasserleitfähigkeit am Beispiel zweier Schläge nahe der Ortschaft Alt Tellin und Heydenhof im Testfeld DEMMIN (siehe rote Flags in Abb. 5.1.1).

Für den Verlauf der Infiltration sind zwei Dinge von Bedeutung, die durch die beschriebene Vorgehensweise unberücksichtigt bleiben. Einer dieser Faktoren ist die Stabilität der Bodenoberfläche gegenüber Verschlämmung, die die Infiltration von Wasser in den Boden frühzeitig vermindert oder

gar stoppt. Die Anfälligkeit des Bodens gegenüber Verschlammung kann je nach dem Grad der Durchfeuchtung, dem Bearbeitungszustand oder einer schützenden Vegetationsdecke sehr unterschiedlich sein. Besonders betroffen davon sind Böden mit einem hohen Gehalt an Schluff und Feinsand, wie z.B. Lössböden, deren Verbreitungsgebiet sich jedoch nicht bis Mecklenburg-Vorpommern erstreckt. Der zweite Aspekt ist, dass bei hohen Niederschlagsintensitäten häufig Luft in den Boden eingeschlossen wird. Dadurch kommt es zu einem raschen Ausgleich des Potenzialgefälles und zum Stillstand der Wasserbewegung, obwohl der Boden nicht wassergesättigt ist. In beiden Fällen wird die Entstehung von Abfluss und damit von Erosion gefördert. Eine Einschätzung der bodenbedingten Erosionsgefahr auf Grundlage des gesättigten Wasserleitfähigkeitskoeffizienten hat dann nur eingeschränkte Gültigkeit. Weitere Annahmen, die getroffen werden sind, dass der Pflughorizont ungeschichtet und homogen in der Vertikalen ist, dass die Bodenstruktur während des Infiltrationsvorgangs stabil ist und dass keine Makroporen auftreten. Derartige Vereinfachungen unterliegen auch der Beschreibung des Infiltrationsvorgangs in komplexen Erosionsmodellen (z.B. Schmidt, 1996; von Werner, 1995).

Traditionell werden zur Abschätzung der potenziellen oder aktuellen Erosionsgefahr Erosionsmodelle eingesetzt (z.B. ABAG, EROSION 3D, EUROSEM). Sie gestatten Aussagen zur Erosionsgefahr und zum Bodenabtrag auf unterschiedlichen räumlichen und zeitlichen Skalen. Darüber hinaus ist die Simulation von Szenarien möglich, die die Erosionsgefahr zum Beispiel unter veränderter Landnutzung beleuchten. Ihr Einsatz erfordert aber nicht nur eine große Anzahl von Eingangsparametern sondern auch zusätzliches Expertenwissen. Der hier unterbreitete Ansatz zur Bereitstellung von Informationen zur bodenbedingten Erosionsgefahr kann die Anwendung von Erosionsmodellen in keinerlei Hinsicht ersetzen. Er bietet aber, mit den genannten Einschränkungen, eine sehr schnelle und effiziente erste Informationsquelle zur Erosionsanfälligkeit des Oberbodens landwirtschaftlicher Nutzflächen.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassung

Der Boden hat aufgrund einer Reihe von Funktionen einen hohen Stellenwert im Mensch-Umwelt-System. Der Boden landwirtschaftlicher Nutzflächen ist im Besonderen eine fundamentale Säule für die Ernährung der Menschheit. Kenntnisse zu seiner spezifischen Ausprägung und seinen physikalisch-chemischen Eigenschaften sind von essentieller Bedeutung für den Schutz des Bodens, die Präzisionslandwirtschaft und Fragen des globalen Klimawandels. Häufig genug entsprechen existierende Informationen aber nicht der erforderlichen Qualität in Bezug auf das Skalenniveau⁹⁸ sowie die räumliche und zeitliche Auflösung, oder sie fehlen gänzlich.

In der vorliegenden Arbeit wurde das Potenzial der Abbildenden Spektroskopie zwischen 400nm und 2500nm zur Ableitung räumlich expliziter, quantitativer Aussagen über die physikalisch-chemischen Eigenschaften von Böden untersucht. Hierfür wurden Untersuchungen mit drei statistischen Kalibrationsmethoden, (i) lineare Regression mit einzelnen Absorptionsparametern (CR), (ii) multiple lineare Regression (MLR) und (iii) *Partial Least Squares Regression* (PLSR) auf unterschiedlichen räumlichen Ebenen und in unterschiedlichen Messumfeldern mit Laborspektren (LS), Feldspektren (FS) und hyperspektralen Bilddaten (IS) des flugzeuggetragenen Sensors HyMap durchgeführt. Aufgrund ihrer positiven Wirkung auf eine Reihe von chemischen, physikalischen und biologischen Bodeneigenschaften standen der Tongehalt und der organische Kohlenstoffgehalt des Bodens im Fokus der Arbeit. Als Studienobjekt dienten Böden landwirtschaftlicher Nutzflächen nahe der Stadt Demmin im Nordosten Deutschlands (Testfeld DEMMIN).

Inhaltlicher Schwerpunkt der Laborspektroskopie war der Einfluss des Bodenwassergehaltes auf das Reflexionssignal und in Folge dessen auf die Schätzung der Bodenparameter. Die Betrachtungen bezogen Variationen im Wassergehalt, wie sie unter in-situ Bedingungen zu erwarten sind, ebenso ein wie die Wirkung gleichförmiger Wasseranteile. Weitere Aspekte, die beleuchtet wurden, sind die Diskrepanz zwischen der physikalischen Tonfraktion und dem Tonmineralgehalt des Bodens sowie der Einfluss photosynthetisch nicht aktiver Vegetation und der spektralen Auflösung auf die Vorhersagegenauigkeit der Bodenparameterschätzungen. Die Feldspektroskopie setzte sich mit Problemen der Reflexionsspektroskopie unter in-situ Bedingungen auseinander. Mit der Abbildenden Spektroskopie erfolgte der Wechsel von der punktbasierten hin zu einer flächenbasierten Betrachtung. Auf ihrer Grundlage erfolgte die räumlich explizite Schätzung der Bodenparameter. Auf dieser Ebene fanden ferner ausgewählte Analysen zur vollständigen Beschreibung der Körnung des Bodens statt.

Aufbauend auf den Ergebnissen der quantitativen Reflexionsspektroskopie wurde die Zweckmäßigkeit verschiedener Pedotransferfunktionen (PTF) zur Herleitung eines bodenhydrologischen Kennwertes, der gesättigten Wasserleitfähigkeit k_f , geprüft und ein Vorschlag für die Abschätzung der Erosionsanfälligkeit landwirtschaftlicher Nutzflächen unterbreitet.

Aus den Untersuchungen mit Labor- und Feldspektren ergaben sich im Einzelnen folgende Erkenntnisse:

- Die Laborspektren der Bodenproben aus DEMMIN weisen typische Absorptionseigenschaften von Tonmineralen und organischer Bodensubstanz auf. Die Ausprägung der Absorptionsbanden nahe 1,3-1,4 μm , 1,8-1,9 μm sowie 2,2-2,5 μm deutete darauf hin, dass die Tonmineralogie der Böden in DEMMIN durch die Tonminerale Montmorillonit und Illit dominiert wird. Dieses Ergebnis deckt sich mit den Resultaten der Röntgendiffraktometrie (RDA).
- Mit Zunahme des Bodenwassergehaltes sank das Rückstrahlvermögen im gesamten Wellenlängenbereich. Während im visuellen Bereich des Spektrums (VIS) ab einem Wassergehalt

⁹⁸ nominalskaliert, ordinalskaliert oder metrisch skaliert

von etwa 10,0M.-% kaum noch Änderungen des Reflexionssignals beobachtet wurden, bewirkte eine Wasserzugabe bis etwa 30,0M.-% im NIR und SWIR eine Abnahme des Reflexionsvermögens ohne dass eine Sättigung eintrat. Diese Ergebnisse sind in Übereinstimmung mit Beobachtungen anderer Autoren (Lobell & Asner, 2002; Liu et al., 2002; Haubrock et al., 2008a).

- Die Tiefe der Absorptionsbande nahe 2200nm wird durch Wasser modifiziert. Gleiches trifft auf die Absorptionstiefe nahe 662nm zu. Im Unterschied zu bisherigen Beobachtungen (Lobell & Asner, 2002) wurde eine nichtlineare Abnahme der Absorptionstiefe nahe 2200nm festgestellt. Die Tiefe der Absorption nahe 662nm steigt mit Zunahme der Bodenfeuchte und geht bei höheren Wassergehalten allmählich in Sättigung über.
- Untersuchungen an Laborspektren deckten auf, dass Variationen im Wassergehalt des Bodens die Schätzung des Tongehaltes erschweren und eine Zunahme des Standardfehlers bedingen. Besonders davon betroffen sind Kalibrationen mit MLR und CR, für die der Standardfehler durch Wassergehaltsschwankungen im Vergleich zu Bodenproben, die durch Trocknung standardisiert wurden, um etwa 48% und 26% anstieg. Einen geringeren Einfluss haben Schwankungen der Bodenfeuchte auf Kalibrationen mittels PLSR. Der Standardfehler der Schätzung nahm hierdurch um 13% zu. Eine Ursachenforschung ergab, dass dieser negative Effekt auf einer erhöhten spektralen Variabilität einschlägiger Wellenlängenbereiche der Tonabsorption beruht. Die Absorptionstiefe nahe 2200nm ist unter diesen Umständen kein geeigneter Indikator des Tongehaltes, da die Streuung derselben in Böden mit einem ähnlichen Tongehalt stark anwächst. Besonders davon betroffen sind tonarme Böden.
- Für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes ist der Einfluss variabler Bodenwassergehalte auf den Standardfehler vernachlässigbar, wenn multivariate Kalibrationsverfahren (MLR, PLSR) verwendet werden. Diese Tatsache erklärt sich zu Teilen durch eine sehr hohe Gewichtung des visuellen Spektralbereiches (VIS), in dem die wasserinduzierte spektrale Variabilität gering ist. Die Absorptionsbande nahe 662nm ist aus den gleichen Gründen wie die Absorptionstiefe nahe 2200nm bei Variationen in der Bodenfeuchte kein geeigneter Prädiktor des organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden.
- Unter Laborbedingungen kann die Genauigkeit der Bodenparameterschätzungen unter bestimmten Voraussetzungen durch einen zusätzlichen Arbeitsschritt, d.h. die Wiederbefeuchtung der getrockneten Bodenproben auf einen einheitlichen Bodenwassergehalt, verbessert werden. Dieser Mehraufwand empfiehlt sich für Schätzungen des organischen Kohlenstoffgehaltes mit MLR oder PLSR ebenso wie für die Schätzung des Tongehaltes auf Basis der Absorptionstiefe nahe 2200nm (CR). Im letzteren Fall ist der Nutzen gegen die Vor- und Nachteile der beiden anderen Verfahren abzuwiegen. Für Vorhersagen zum Tongehalt unter Verwendung der MLR oder PLSR sowie für Vorhersagen zum OC-Gehalt anhand der Absorptionstiefe nahe 662nm (CR) ist eine Wiederbefeuchtung nicht zweckdienlich.
- Spektrale Interaktionen zwischen organischem Kohlenstoff und Eisen oder organischem Kohlenstoff und Sand sind Ursache einer nicht-linearen Tendenz zwischen dem organischen Kohlenstoffgehalt des Bodens und seinem Reflexionssignal. Variationen im Bodenwassergehalt verstärken diese Erscheinung. Dieser unerwünschte Effekt kann durch eine Stratifizierung des Datensatzes nach dem Eisen- oder dem Sandgehalt vermieden werden.
- Die Verringerung der spektralen Auflösung auf Halbwertsbreiten von 10nm, 20nm sowie die spektrale Konfiguration des Sensors HyMap hat keine nennenswerten Auswirkungen auf Schätzungen des organischen Kohlenstoffgehaltes, wenn Laborspektren verwendet werden. Der Standardfehler der Schätzungen für Ton steigt im ungünstigsten Fall um ca. 15% an.
- Obwohl die physikalische Tonfraktion nicht notwendigerweise mit dem Tonmineralanteil im Boden übereinstimmt, ergab ein Vergleich dieser Zielvariablen, dass die physikalische Tonfraktion ein geeigneter Indikator des Tongehaltes im Boden ist. Die sehr aufwendige und mit vielen

methodischen Schwierigkeiten verbundene Analyse des Tonmineralanteils lohnt sich daher nur, wenn speziell die Tonmineralogie im Mittelpunkt des Interesses steht.

- Experimente mit linearen spektralen Mischungen aus Boden und trockenen Pflanzenrückständen legten offen, dass der Einfluss photosynthetisch nicht aktiver Vegetation (NPV) auf die Genauigkeit der Bodenparameterschätzungen eine Funktion des NPV-Anteils, des Zielparameters und der verwendeten Kalibrationsmethode ist. Mehr als 20% NPV wirkten sich in jedem Fall kritisch auf die Standardfehler der Bodenparameterschätzungen aus. Keine Berücksichtigung finden in dieser Angabe Melangen trockener und vitaler Vegetation sowie Variationen im Bedeckungsgrad.
- Aus dem Wechsel von der standardisierten Messumgebung im Labor zu in-situ Verhältnissen im Gelände folgte eine Verringerung der Vorhersagegenauigkeit. In der Reihenfolge der Bedeutung wurde dies zurückgeführt auf (i) den Einfluss trockener und vitaler Vegetation (NPV, PV), (ii) Variationen in der Bodenfeuchte, (iii) Schatteneffekte durch die Rauigkeit der Bodenoberfläche und (iv) Änderungen in den Beleuchtungsverhältnissen. In der Konsequenz kann eine Schätzung von Bodenparametern auf landwirtschaftlichen Nutzflächen nur erfolgen, wenn der störende Einfluss von Vegetation ausgeschlossen oder gemindert wird.

Für die Abbildende Spektroskopie lassen sich aus der Arbeit folgende Aussagen ableiten:

- Basierend auf den hyperspektralen Bilddaten des flugzeuggetragenen Sensors HyMap sind unter Einsatz einer PLSR räumlich explizite Schätzungen des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes für vegetationsfreie Ackerflächen auf regionaler Ebene möglich. Die Standardfehler der PLSR-Modelle belaufen sich auf 2,34% Ton, 1,94% Ton und 1,60% Ton sowie 0,213% OC, 0,207% OC und 0,161% OC für die HyMap-Daten von 2004, 2005 und 2008. Die hohe Interkorrelation zwischen Sand- und Tongehalt sowie Sand- und Schluffgehalt im Boden gestatteten ferner räumlich explizite Vorhersagen zu den im VNIR-SWIR spektral nicht aktiven Bodenparametern Sand und Schluff. Die Standardfehler der PLSR-Modelle für Sand bzw. Schluff betragen 5,58%, 4,51% und 3,61% Sand bzw. 3,14%, 4,13% und 1,69% Schluff.
- Aufgrund der regelmäßigen Bodenbearbeitung der landwirtschaftlichen Nutzflächen kann angenommen werden, dass das Reflexionssignal der Bodenoberfläche und somit die räumlich expliziten Schätzungen der Bodenparameter repräsentativ für die obersten 20-30cm Boden (Ap-Horizont, Ackerkrume) sind.
- Die quantitative Abbildende Spektroskopie erlaubt eine differenzierte Abbildung der räumlichen Variabilität des Bodens, die die räumliche Auflösung existierender großmaßstäbiger Bodenkarten um ein Vielfaches übersteigt.
- Pflanzenbestandteile stellen unter in-situ Bedingungen selbst in geringen Mengen das größte Hindernis für die Schätzung von Bodenparametern dar. Mit der Auswertung mehrjähriger hyperspektraler Bilddatensätze wurde ein neuartiger Ansatz präsentiert, der es trotz lang anhaltender Phasen der Vegetationsbedeckung auf landwirtschaftlichen Nutzflächen gestattet, großflächig Informationen zu den physikalisch-chemischen Eigenschaften der Böden bereitzustellen. Diese Vorgehensweise ermöglichte die räumlich explizite Schätzung von Bodenparametern auf insgesamt 2401ha (24,01km²) landwirtschaftlicher Nutzfläche und entspricht für die Bilddaten aus 2004, 2005 und 2008 im Einzelnen einem Anteil von 17,7%, 68,4% und 13,9%. Die Effizienz des Ansatzes wird mit der operationellen Verfügbarkeit hyperspektraler Bilddaten steigen.
- Obwohl sich die Bodeneigenschaften der verfügbaren, vegetationsfreien Referenzpunkte in den Bilddaten von 2004, 2005 und 2008 ähnelten und die Bilddaten zueinander korrekt korrigiert wurden, war eine Übertragung des Kalibrationsmodells auf Basis der HyMap-Daten von 2005 auf

die beiden anderen Bilddatensätze nicht zielführend. Um das Potenzial hyperspektraler Bilddaten unterschiedlicher Erhebungszeitpunkte auszuschöpfen, sind daher datensatzspezifische Kalibrationen erforderlich.

- Die Gültigkeit der Kalibrationsmodelle auf Basis der HyMap-Daten von 2004 und 2005 konnte durch einen Vergleich der räumlich expliziten Bodenparameterschätzungen bestätigt werden. Für die räumlich expliziten Schätzungen mit den Bilddaten von 2008 ist der Fehler der Schätzung für den Ton- und Schluffgehalt dem Vergleich zufolge höher einzuschätzen als es der angegebene Standardfehler der Modelle vorgibt.
- Das große Sichtfeld des Sensors HyMap beeinträchtigt nicht per se die Genauigkeit der Parameterschätzungen außerhalb des Nadir-Bereiches. Infolge ungünstiger Beleuchtungs- und Beobachtungsverhältnisse zum Zeitpunkt des Überfluges (großer Zenit- und kleiner Azimutwinkel) können BRDF-Effekte den Fehler der Bodenparameterschätzungen aber auf das Dreifache erhöhen. Dieses unerwünschte Phänomen kann entweder durch eine gezielte Vorprozessierung der Spektren in die erste Ableitung der Absorption abgeschwächt oder a priori durch eine optimale Aufnahmekonstellation vermieden werden.
- Die Vorhersagegenauigkeit der quantitativen Abbildenden Spektroskopie reicht nicht an die Genauigkeit traditioneller laboranalytischer Methoden heran. Dies gilt auch für die labor- und feldspektroskopischen Messdaten. Der Einsatz reflexionsspektroskopischer Methoden, vor allem der Abbildenden Spektroskopie, stellt somit eine Abwägung zwischen den Anforderungen und Ansprüchen an die Genauigkeit einerseits und dem Zugewinn an Informationen in der Fläche andererseits dar.
- Vorhersagen zum Tongehalt sind mit geringeren Unsicherheiten behaftet als Vorhersagen zum organischen Kohlenstoffgehalt der Böden. Schwierigkeiten bei der Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes werden zurückgeführt auf den verhältnismäßig geringen Kohlenstoffanteil der Böden in DEMMIN, der für landwirtschaftliche Nutzflächen in Mitteleuropa aber durchaus typisch ist, sowie auf spektrale Interaktionen zwischen organischem Kohlenstoff und Eisen oder Sand.
- Der Vergleich der drei Kalibrationsmethoden, CR, MLR und PLSR, ergab, dass die PLSR für die Schätzung der Bodenparameter aus Bilddaten zu favorisieren ist. Einzelne Absorptionsbanden bzw. Parameter derselben (CR) sind unter in-situ Bedingungen kein geeigneter Indikator des Ton- oder organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden. Sie bieten gegebenenfalls unter standardisierten Bedingungen im Labor eine einfache und schnelle Methode für eine grobe Abschätzung dieser Bodeneigenschaften.
- Die räumlich expliziten Bodenparameterschätzungen wurden in sechs Pedotransferfunktionen (PTF) assimiliert, um einen bodenhydrologischen Kennwert der Wasserinfiltration, die gesättigte Wasserleitfähigkeit k_f , abzuleiten. Der Vergleich von k_f nach den verschiedenen Ansätzen ergab wegen der unterschiedlichen zugrunde liegenden mathematischen Funktionen und Eingangsparameter teilweise sehr hohe Differenzen. Quantitativen Angaben zu k_f sind ferner wegen der hohen Sensitivität der Eingangsparameter, dem Sand- und Tongehalt des Bodens, im Bereich des Fehlers der Bodenparameterschätzungen Grenzen gesetzt.
- Ungeachtet der verwendeten PTF bestehen hohe Ähnlichkeiten in den räumlichen Mustern der gesättigten Wasserleitfähigkeit. Durch einen engen Zusammenhang zwischen k_f und dem Bodenabtrag bietet die Verknüpfung von Abbildender Spektroskopie und PTF somit eine Möglichkeit, schnell und effizient qualitative Aussagen zur Erosionsanfälligkeit landwirtschaftlicher Nutzflächen, d.h. ihrer bodenspezifischen Erodierbarkeit, abzuleiten.

Ausblick

Aus der vorliegenden Arbeit lassen sich folgende Problemstellungen und Themen ableiten, die Inhalt künftiger Forschungsarbeiten sein könnten:

- Die Untersuchungen der vorliegenden Arbeit waren an Bodenreferenzdaten einer Geländekampagne im Jahr 2006 gebunden. Aufgrund der hohen zeitlichen Variabilität von organischem Kohlenstoff empfiehlt es sich für künftige Studien, die den hier präsentierten Ansatz zur räumlich expliziten Schätzung von Bodenparametern aus hyperspektralen Bilddatensätzen aufgreifen, zeitnahe Referenzmessungen des organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden zugrunde zu legen.
- Die Standardfehler der Modellschätzungen können auf landwirtschaftlichen Flächen mit Referenzmessungen als statistisch gesicherte Informationen zur Vorhersagegenauigkeit der Bodenparameter gelten. Um die Ergebniskarten voll in Wert zu setzen, ist eine zusätzliche, unabhängige Validation der Bodenparameterschätzungen auf Ackerflächen erforderlich, für die bisher keine Referenzinformationen vorliegen. Eine erste Fehlerabschätzung machte deutlich, dass die Fehler der Bodenparameterschätzungen auf diesen Flächen für Ton unter Umständen um bis zu 15% und für organischen Kohlenstoff um bis zu 30% erhöht sein können.
- Die Relevanz und Effektivität des hier präsentierten Ansatzes zur Bereitstellung regionaler Bodenkarten der landwirtschaftlichen Nutzfläche wird mit dem Start hyperspektraler Satellitenmissionen wie EnMAP, PRISMA oder HypSI, die das Reflexionssignal der Erdoberfläche großflächig und in regelmäßigen Abständen aufzeichnen, steigen. Gleichermaßen erfordert dies die Absicherung der Ergebnisqualität, weshalb künftige Arbeiten großes Augenmerk auf eine unabhängige Validation der Bodenparameterschätzungen richten sollten. Dies umfasst einerseits die Erhebung und Bereitstellung entsprechender Validationsdaten. Initiativen wie TERENO (TERENO, 2012), welche die kontinuierliche Erfassung von Umweltdaten in mehreren sogenannten Observatorien zum Ziel hat, kann vor diesem Hintergrund nicht genug Bedeutung beigemessen werden. Andererseits beinhaltet dies die Prüfung von Validationsstrategien, wie sie beispielsweise von Brus et al. (2011) vorgeschlagen wurden.
- Die PLSR erwies sich als mächtige und zielführende Methode zur Quantifizierung von Bodenparametern aus Daten der LS, FS und IS sofern ein linearer Zusammenhang zwischen Prädiktor und Zielvariable besteht. Die vorliegende Arbeit veranschaulicht, dass diese Voraussetzung nicht in jedem Fall gegeben ist. Künftige Forschungsarbeiten sollten daher verstärkt das Einsatzpotenzial von Methoden testen, die in der Lage sind nichtlineares Verhalten zu erfassen. Beispiele hierfür sind *Support Vector Machines* (SVM) oder Neuronale Netzwerke (ANN).
- Die Transformation der Spektren in die erste Ableitung der Absorption gestattete zumindest teilweise eine Kompensation BRDF-bedingter Fehler in den Bodenparameterschätzungen. Es bleibt zu prüfen, inwiefern durch empirische Methoden der BRDF-Korrektur, wie sie in ATCOR-4 zur Verfügung stehen (Richter, 2008) oder durch semi-empirische Methoden, wie sie von Feingersh et al. (2005) für hyperspektrale Bilddaten präsentiert wurden, eine weitere Verbesserung erzielt werden kann.
- Die räumliche Auflösung der dieser Arbeit zugrunde liegenden hyperspektralen Bilddaten des Sensors HyMap beträgt 4m x 4m, die zukünftiger satellitengetragener hyperspektraler Bilddaten 30m x 30m und weniger (Galeazzi et al., 2009; Kaufmann et al., 2010; HypSI, 2012). Die Aufgabe nachfolgender Forschungsarbeiten muss es daher sein, damit zusammenhängende Probleme zu identifizieren.
- Der Einfluss der Bodenrauigkeit, vor allem der Abschattung von Bodenaggregaten, auf die Bodenparameterschätzungen konnte durch Transformation der Spektren von Reflexion in Absorption oder durch Transformation in die erste Ableitung der Absorption nicht vollständig ausgeschaltet werden. Die Prüfung alternativer Verfahren, die diesen Effekt besser kompensieren

können, aber bislang nur unter Laborbedingungen getestet wurden (Denis et al., 2009), ist eine weitere Aufgabe künftiger Arbeiten.

- Auch wenn davon ausgegangen werden kann, dass aus dem Reflexionssignal der Bodenoberfläche auf landwirtschaftlichen Nutzflächen Rückschlüsse zu den chemisch-physikalischen Eigenschaften der oberen 20-30cm Boden (Ackerkrume) gezogen werden können, ist eine vollständige Charakterisierung des Bodenkörpers im bodenkundlichen Sinne hierdurch nicht möglich. Die Verknüpfung der Abbildenden Spektroskopie mit neuartigen Messgeräten, die die Aufzeichnung des Bodenreflexionssignals in der Vertikalen zulassen (Ben-Dor et al., 2008), könnte die getroffene Annahme einerseits überprüfen und andererseits eine dreidimensionale Darstellung des gesamten Bodenkörpers ermöglichen.
- Die im Rahmen dieser Arbeit aus hyperspektralen Bilddaten abgeleiteten Bodenparameter lassen sich über die qualitative Einschätzung der Erosionsanfälligkeit, konkret der bodenspezifischen Erodierbarkeit, hinaus als Eingangsparameter für vollwertige Prozessmodelle (z.B. EROSION 3D) nutzen und könnten zur Ermittlung des Bodenabtrages oder zur Simulation von Erosionsereignissen mit einer besseren räumlichen Auflösung als herkömmliche thematische Bodenkarten beitragen.
- Absorptionserscheinungen im SWIR beruhen ausschließlich auf Obertönen und Kombinationen von Grundschrwingungen im mittleren (MIR) und thermalen (TIR) Infrarot. Neben Grundschrwingungen tritt im MIR und TIR zusätzlich thermische Emission auf. Der Informationsgehalt dieser beiden Spektralregionen ist daher deutlich größer als der des SWIR und erleichtert die Vorhersage von Bodeneigenschaften (Viscarra Rossel et al., 2006; Pirie et al., 2005). Eine Erweiterung des Spektralbereiches auf das MIR und TIR könnte wesentlich zu einer Verbesserung der Vorhersagegenauigkeiten und damit zur Akzeptanz der quantitativen Spektroskopie als Alternative zu traditionellen Labormethoden beitragen. Ein Hindernis stellen derzeit noch die sehr hohen Kosten der MIR-TIR-Technologie dar (Viscarra Rossel et al., 2006).

Literatur

- AG Boden (1994). *Bodenkundliche Kartieranleitung*, 4. Aufl., Hannover.
- ahu AG Wasser – Boden – Geomatik (2009). *Mess- und Erhebungsaktivitäten für Böden in Deutschland. Bodendaten für Fragen zu Klimawandel, Klimafolgen und Anpassung. Broschüre im Auftrag des Umweltbundesamt, Dessau-Roßlau.*
- Anderson, K. (2002). *Field Guide for the ASD FieldSpec Pro – White Reference Mode. ASD/Gen/02/02, NERC EPFS 2002.*
- ASD (1999). *ASD – Analytical Spectral Devices Inc. Technical Guide. 4th edition, Boulder, Colorado, USA.*
- ASD (2002). *ASD – Analytical Spectral Devices Inc. FieldSpec® Pro User's Guide, Boulder, Colorado, USA, URL: <http://www.asdi.com/>*
- Auerswald, K. (1998). *Bodenerosion durch Wasser. In: Richter, G. (Hrsg.). Bodenerosion: Analyse und Bilanz eines Umweltproblems. Wissenschaftliche Buchgesellschaft, Darmstadt.*
- Auerswald, K. (2006). *Germany. In: Boardman, J., & Poesen, J. (Hrsg.). Soil erosion in Europe. John Wiley & Sons, Chichester, 213–230.*
- Attou, F., Bruand, A., & Le Bissonnais, Y. (1998). *Effect of clay content and silt-clay fabric on stability of artificial aggregates. European Journal of Soil Science, 49, 569–577.*
- Baarstad, I., Løke, T., & Kaspersen, P. (2005). *ASI - A new airborne hyperspectral imager. In: Zagajewski, B., Sobczak, M., & Wrzesień, M. (Hrsg.). Proceedings of the 4th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. New quality in environmental studies, 26-29 April 2005, Warsaw, Poland, 107–110.*
- Bachmann, M., Müller, A., Habermeyer, M., Schmidt, M., & Dech, S. (2005). *Iterative MESMA Unmixing for Fractional Cover Estimates - Evaluating the Portability. In: Zagajewski, B., Sobczak, M., & Wrzesień, M. (Hrsg.). Proceedings of the 4th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. New quality in environmental studies, 26-29 April 2005, Warsaw, Poland, 467–473.*
- Bachmann, M. (2007). *Automatisierte Ableitung von Bodenbedeckungsgraden durch MESMA-Entmischung. Dissertation, Universität Würzburg.*
- Bachmann, M., Habermeyer, M., Holzwarth, S., Richter, R., & Müller, A. (2007). *Including quality measures in an automated processing chain for airborne hyperspectral data. In: Proceedings of the 5th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. Imaging spectroscopy: innovation in environmental research (CD-ROM), 23-25 April 2007, Bruges, Belgium.*
- Bagarello, V., & Sgroi, A. (2004). *Using the single-ring infiltrometer method to detect temporal changes in surface soil field-saturated hydraulic conductivity. Soil and Tillage Research, 76, 13–24.*
- Bahrenberg, G., Giese, E., & Nipper, J. (1992). *Statistische Methoden in der Geographie. Band 2: Multivariate Statistik, 2. Aufl., B.G. Teubner Stuttgart.*
- Bahrenberg, G., Giese, E., & Nipper, J. (1999). *Statistische Methoden in der Geographie. Band 1: Univariate und bivariate Statistik, 4. überarb. Aufl., B.G. Teubner Stuttgart, Leipzig.*
- Bannari, A., Pacheco, A., Staenz, K., McNairn, H., & Omari, K. (2006). *Estimating and mapping crop residues cover on agricultural lands using hyperspectral and IKONOS data. Remote Sensing of Environment, 104: 4, 447–459.*
- Baret, F., & Guyot, G. (1991). *Potentials and limits of vegetation indices for LAI and APAR assessment. Remote Sensing of Environment, 35: 2-3, 161–173.*
- Barnes, E.W., Sudduth, K.A., Hummel, J.W., Lesch, S.M., Corwin, D.L., Yang, C., Daughtry, C.S.T., & Bausch, W.C. (2003). *Remote- and ground-based sensor techniques to map soil properties. Photogrammetric Engineering and Remote Sensing, 69, 619–630.*

- Barnsley, M.J., Settle, J.J., Cutter, M.A., Lobb, D.R., & Teston, F. (2004). The PROBA/CHRIS mission: A low-cost smallsat for hyperspectral multiangle observations of the earth surface and atmosphere. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 42: 7, 1512–1520.
- Bars, R., Okkonen, J., & Bernard, W. (1998). Fast hyperspectral information production by ASIA airborne imaging spectrometer. Proceedings of the 1st EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy, 6-8 October 1998, Zurich, Schweiz, 173–182.
- Bartholomeus, H., Epema, G., & Schaepman, M. (2007). Determining iron content in Mediterranean soils in partly vegetated areas, using spectral reflectance and imaging spectroscopy. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 9, 194–203.
- Bartholomeus, H.M., Schaepman, M.E., Kooistra, L., Stevens, A., Hoogmoe, W.B., & Spaargaren, O.S.P. (2008). Spectral reflectance based indices for soil organic carbon quantification. *Geoderma*, 145, 28–36.
- Bartholomeus, H., Kooistra, L., Stevens, A., van Leeuwen, M., van Wesemael, B., Ben-Dor, E., & Tychon, B. (2011). Soil organic carbon mapping of partially vegetated agricultural fields with imaging spectroscopy. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 13: 1, 81–88.
- Batjes, N.H. (1996). Total carbon and nitrogen in the soils of the world. *European Journal of Soil Science*, 47, 151–163.
- Baumgardner, M.F., Silva, L.F., Biehl, L.L., & Stoner, E.R. (1985). Reflectance properties of soils. *Advances in Agronomy*, 38, 1–44.
- BBodSchG (1998). BBodSchG – Bundes-Bodenschutzgesetz. Gesetz zum Schutz vor schädlichen Bodenveränderungen und zur Sanierung von Altlasten. URL: <http://www.gesetze-im-internet.de/bbodschg/index.html>
- Belsley, D.A., Kuh, E., & Welsch, R.E. (2004). Regression diagnostics: identifying influential data and sources of collinearity. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey.
- Ben-Dor, E., & Banin, A. (1995a). Near Infrared Analysis (NIRA) as a rapid method to simultaneously evaluate several soil properties. *Soil Science Society America Journal*, 59, 364–372.
- Ben-Dor, E., & Banin, A. (1995b). Near Infrared Analysis (NIRA) as a rapid method to simultaneously evaluate spectral featureless constituents in soils. *Soil Science*, 159: 4, 259–270.
- Ben-Dor, E., Inbar, Y., & Chen, Y. (1997). The reflectance spectra of organic matter in the visible near-infrared and short wave infrared region (400–2500nm) during a controlled decomposition process. *Remote Sensing of Environment*, 61, 1–15.
- Ben-Dor, E., Irons, J.R., & Epema, G. (1999). Soil reflectance. In: Rencz, A.N. (Hrsg.). Manual of Remote Sensing, 3rd Edition, Volume 3, Remote Sensing for the Earth Sciences, Chapter 3, John Wiley & Sons, New York, 111–188.
- Ben-Dor, E. (2002). Quantitative remote sensing of soil properties. *Advances in Agronomy*, 75, 173–243.
- Ben-Dor, E., Patkin, K., Banin, A., & Karnieli, A. (2002). Mapping of several soil properties using DAIS-7915 hyperspectral scanner data - a case study over clayey soils in Israel. *International Journal of Remote Sensing*, 23: 6, 1043–1062.
- Ben-Dor, E., Goldshleger, N., Benyamini, Y., Agassi, M., & Blumberg, D.G. (2003). The spectral reflectance properties of soil structural crusts in the 1.2- to 2.5- μm spectral region. *Soil Science Society of America Journal*, 67, 289–299.
- Ben-Dor, E., Goldshleger, N., Braun, O., Kindel, B., Goetz, A.F.H., Bonfil, D., Margalit, N., Binaymini, Y., Karnieli, A., & Agassi, M. (2004). Monitoring of infiltration rates in semiarid soils using airborne hyperspectral technology. *International Journal of Remote Sensing*, 25: 13, 2607–2624.
- Ben-Dor, E., Heller, D., & Chudnovsky, A. (2008). A novel method of classifying soil profiles in the field using optical means. *Soil Science Society of America Journal*, 72, 1113–1123.

- Ben-Dor, E., Chabrilat, S., Demattê, J.A.M., Taylor, G.R., Hill, J., Whiting, M.L., & Sommer, S. (2009). Using Imaging Spectroscopy to study soil properties. *Remote Sensing of Environment*, 113, Supplement 1, Imaging Spectroscopy Special Issue, S38–S55.
- Bilgili, A.V., van Es, H.M., Akbas, F., Durak, A., & Hively, W.D. (2010). Visible-near infrared reflectance spectroscopy for assessment of soil properties in a semi-arid area of Turkey. *Journal of Arid Environments*, 74: 2, 229–238.
- Bishop, J.L., Lane, M.D., Dyar, M.D., & Brown, A.J. (2008). Reflectance and emission spectroscopy study of four groups of phyllosilicates: smectites, kaolinite-serpentines, chlorites and micas. *Clay Minerals*, 43, 35–54.
- Bloemen, G.W. (1980). Calculation of hydraulic conductivities from texture and organic matter content. *Zeitschrift für Pflanzenernährung und Bodenkunde*, 143, 581–605.
- Boardman, J., & Poesen, J. (2006). Soil erosion in Europe: major processes, causes and consequences. In: Boardman, J., & Poesen, J. (Hrsg.). *Soil Erosion in Europe*. John Wiley & Sons, Chichester, West Sussex, England, 479–488.
- Bogrekcı, I., & Lee, W.S. (2005). The effects of soil moisture content on reflectance spectra of soils using UV–VIS–NIR spectroscopy. Proceedings of the 7th International Conference on Precision Agriculture, 25–28 July 2004, Minneapolis (MN), University of Minnesota, 1307–1317.
- Borchardt-Ott, W. (1990). *Kristallographie*. 3. überarb. Auflg., 1990, Springer Verlag Berlin.
- Borg, E., Jahncke, D., Renke, F., & Zabel, E. (2005, 2008). Niederschlagsdaten, Lufttemperatur - Wettermessnetzdaten des Autonomen Automatischen Wettermessnetzes im Kalibrations- und Validationsstandort DEMMIN.
- Bork, H.-R. (1988). *Bodenerosion und Umwelt. Landschaftsgenese und Landschaftsökologie*, Heft 13, Selbstverlag der Abteilungen für Physische Geographie und Landschaftsökologie und für Physische Geographie und Hydrographie, Technische Universität Braunschweig.
- Bouma, J. (1989). Using soil survey data for quantitative land evaluation. *Advances in Soil Sciences*, 9, 177–213.
- Bowers, S.A., & Hanks, R.J. (1965). Reflection of radiant energy from soils. *Soil Science*, 100: 2, 130–138.
- Brakensiek, D.L., Rawls, W.J., & Stephenson, G.R. (1984). Modifying SCS hydrologic soil groups and curve numbers for rangeland soils. ASAE Paper No. PNR–84–203, St. Joseph, Michigan.
- Bramley, R.G.V., & Janik, L.J. (2005). Precision agriculture demands a new approach to soil and plant sampling and analysis – examples from Australia. *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 36, 9–22.
- Bremer, F. (2004). Glaziale Morphologie. In: Katzung, G. (Hrsg.). *Geologie von Mecklenburg-Vorpommern*. Kap. 4.4, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung (Nägele u. Obermiller), Stuttgart, 284–291.
- Bremer, F., & Rühberg, N. (1990). *Geologische Karte von Mecklenburg-Vorpommern. Karte der quartären Bildungen – Oberfläche bis 5m, 1:200.000, Blatt 23 Güstrow*. Geologisches Landesamt Mecklenburg Vorpommern (Hrsg.), Schwerin.
- Bridges, E.M., & Oldeman, L.R. (1999). Global assessment of human-induced soil degradation. *Arid Soil Research and Rehabilitation*, 13: 4, 319–325.
- Brown, D.J., Brickleyer, R.S., & Miller, P.R. (2005). Validation requirements for diffuse reflectance soil characterization models with a case study of VNIR soil C prediction in Montana. *Geoderma*, 129, 251–267.
- Brown, D.J., Shepherd, K.D., Walsh, M.G., Mays, M.D., & Reinsch, T.G. (2006). Global soil characterization with VNIR diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 132, 273–290.
- Brunet, D., Barthès, B.G., Chotte, J.-L., & Feller, C. (2007). Determination of carbon and nitrogen contents of Alfisols, Oxisols and Ultisols from Africa and Brazil using NIRS analysis: effects of sampling grinding and set heterogeneity. *Geoderma*, 139, 106–117.

- Brus, D.J., Kempen, B., & Heuvelink, G.B.M. (2011). Sampling for validation of digital soil maps. *European Journal of Soil Science*, 62, 394–407.
- Campbell, G.S. (1985). Soil physics with BASIC. *Developments in Soil Science*, 14, Elsevier, Amsterdam.
- Castro-Esau, K.L., Sánchez-Azofeifa, G.A., & Rivard, B. (2006). Comparison of spectral indices obtained using multiple spectroradiometers. *Remote Sensing of Environment*, 103, 276–288.
- Cerdà, A., Flanagan, D.C., Le Bissonnais, Y., & Boardman, J. (2009). Soil erosion and agriculture (Preface). *Soil & Tillage Research*, 106, 107–108.
- Chabrillat, S., Goetz, A.F.H., Krosley, L., & Olsen, H.W. (2002). Use of hyperspectral images in the identification and mapping of expansive clay soils and the role of spatial resolution. *Remote Sensing of Environment*, 82, 431–445.
- Chang, S.-H., Westfield, M.J., Lehmann, F., Oertel, D., & Richter, R. (1993). 79-channel airborne imaging spectrometer. In: Vane, G. (Hrsg.). *Imaging Spectrometry of the Terrestrial Environment*, SPIE Proceedings volume, 1937, 164–172.
- Chang, C.-W., Laird, D.A., Mausbach, M.J., & Hurburgh, C.R. (2001). Near-Infrared reflectance spectroscopy - Principal components regression analyses of soil properties. *Soil Science Society America Journal*, 65: 2, 480–490.
- Chang, C., Laird, D.A., & Hurburgh, C.R. (2005). Influence of soil moisture on near-infrared reflectance spectroscopic measurement of soil properties. *Soil Science*, 170, 244–255.
- Chang, C.-W., & Laird, D.A. (2002). Near-infrared reflectance spectroscopic analysis of soil C and N. *Soil Science*, 167, 110–116.
- Chong, I.-G., & Jun, C.-H. (2005). Performance of some variable selection methods when multicollinearity is present. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 78, 103–112.
- Christy, C.D. (2008). Real-time measurement of soil attributes using on-the-go near infrared reflectance spectroscopy. *Computers and Electronics in Agriculture*, 61, 10–19.
- Cierniewski, J., & Verbrugge, M. (1997). Influence of soil surface roughness on soil bidirectional reflectance. *International Journal of Remote Sensing*, 18: 6, 1277–1288.
- Cierniewski, J., Verbrugge, M., & Marlewski, A. (2002). Effects of farming works on soil surface bidirectional reflectance measurements and modelling. *International Journal of Remote Sensing*, 23: 6, 1075–1094.
- Clark, R.N., King, T.V.V., Klejwa, M., Swayze, G.A., & Vergo, N. (1990). High spectral resolution reflectance spectroscopy of minerals. *Journal of Geophysical Research*, 95, B8, 12653–12680.
- Clark, R.N., Swayze, G.A., Gallagher, A.J., King, T.V.V., & Calvin, W.M. (1993). The U.S. Geological Survey, Digital Spectral Library: Version 1: 0.2 to 3.0 microns, U.S. Geological Survey Open File Report, 93–592.
- Clark, R.N. (1999). Spectroscopy of rocks and minerals, and principles of spectroscopy, In: Rencz, A.N. (Hrsg.). *Manual of Remote Sensing*, 3rd Edition, Volume 3, Remote Sensing for the Earth Sciences, Chapter 1, John Wiley & Sons, New York, 3–58.
- Clark, R.N., & Roush, T.L. (1984). Reflectance spectroscopy: Quantitative analysis techniques for remote sensing applications. *Journal of Geophysical Research*, 89, B7, 6329–6340.
- Cocks, T., Jansen, T., Steward, A., Wilson, I., & Shields, T. (1998). The HyMapTM airborne hyperspectral sensor: the system, calibration, and performance. In: Schaepman, M., Schläpfer, D., & Itten, K. (Hrsg.). *Proceedings of the 1st EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy*, 6-8 October 1998, Zurich, Switzerland, 37–42.
- Cohen, M.J., Prenger, J.P., & DeBusk, W.F. (2005). Visible-near infrared reflectance spectroscopy for rapid, nondestructive assessment of wetland soil quality. *Journal of Environmental Quality*, 34, 1422–1434.
- Cohen, M., Mylavarapu, R.S., Bogrekcı, I., Lee, W.S., & Clark, M.W. (2007). Reflectance spectroscopy for routine agronomic analyses. *Soil Science*, 172, 469–485.

- Condit, H.R. (1970). The spectral reflectance of American soils. *Photogrammetric Engineering*, 36, 955–966.
- Cosby, B.J., Hornberger, G.M., Clapp, R.B., & Ginn, T.R. (1984). A statistical exploration of the relationship of soil moisture characteristics to the physical properties of soils. *Water Resources Research*, 20, 682–690.
- Coûteaux, M.-M., Berg, B., & Rovira, P. (2003). Near infrared reflectance spectroscopy for determination of organic matter fractions including microbial biomass in coniferous forest soils. *Soil Biology & Biochemistry*, 35, 1587–1600.
- Cozzolino, D., & Morón, A. (2003). The potential of near-infrared reflectance spectroscopy to analyse soil chemical and physical characteristics. *Journal of Agricultural Science*, 140: 1, 65–71.
- Cutter, C., & Lobb, D. (2004). Design of the Compact High-Resolution Imaging Spectrometer (CHRIS), and future developments. Proceedings of the 5th International Conference on Space Optics (ICSO), 30 March – 02 April 2004, Toulouse, France, 554–564. URL: http://earth.esa.int/pub/ESA_DOC/PROBA/Sira5thICSO2004CHRISpaperSP-554.PDF
- Dalal, R.C., & Henry, R.J. (1986). Simultaneous determination of moisture, organic carbon, and total nitrogen by near infrared reflectance spectrophotometry. *Soil Science Society America Journal*, 50, 120–123.
- Daniel, K.W., Tripathi, N.K., & Honda, K. (2003). Artificial neural network analysis of laboratory and in situ spectra for the estimation of macronutrients in soils of Lop Buri (Thailand). *Australian Journal of Soil Research*, 41, 47–59.
- Dann, T., unter Mitarbeit von Ratzke, U. (2004). Böden. In: Katzung, G. (Hrsg.). Geologie von Mecklenburg-Vorpommern. Kap. 6.12, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung (Nägele u. Obermiller), Stuttgart, 489–508.
- Daughtry, C.S.T. (2001). Discriminating crop residues from soil by shortwave infrared reflectance. *Agronomy Journal*, 93, 125–131.
- Daughtry, C.S.T., Hunt Jr., E.R., Walthall, C.L., Gish, T.J., Liang, S., & Kramer, E.J. (2001). Assessing the spatial distribution of plant litter. Proceedings of the 10th AVIRIS Earth Science and Applications Workshop, 27 February - 02 March, Pasadena, California (NASA, Jet Propulsion Lab, Pasadena, California), 105–114.
- Daughtry, C.S.T., Hunt Jr., E.R., & McMurtrey III, J.E. (2004). Assessing crop residue cover using shortwave infrared reflectance. *Remote Sensing of Environment*, 90, 126–134.
- Daughtry, C.S.T., & Hunt Jr., E.R. (2008). Mitigating the effects of soil and residue water contents on remotely sensed estimates of crop residue cover. *Remote Sensing of Environment*, 112, 1647–1657.
- Demattê, J.A.M., Sousa, A.A., Alves, M.C., Nanni, M.R., Fiorio, P.R., & Campos, R.C. (2006). Determining soil water status and other soil characteristics by spectral proximal sensing. *Geoderma*, 135, 179–195.
- Denis, A., Tychon, B., Stevens, A., & van Wesemael, B. (2009). Improving soil organic carbon (SOC) prediction by field spectrometry in bare cropland by reducing the disturbing effect of soil roughness. IEEE International Symposium on Geoscience and Remote Sensing IGARSS, 12-17 July 2009, Cape Town, South Africa, V-351–V-354.
- de Jong, S.M., Addink, E.A., van Beek, L.P.H., & Duijsings, D. (2011). Physical characterization, spectral response and remotely sensed mapping of Mediterranean soil surface crusts. *CATENA*, 86: 1, 24–35.
- DeTar, W.R., Chesson, J.H., Penner, J.V., & Ojala, J.C. (2008). Detection of soil properties with airborne hyperspectral measurements of bare fields. *Transactions of the ASABE*, 51: 2, 463–470.
- Diepenbrock, W., Ellmer, F., & Léon, J. (2009). Ackerbau, Pflanzenbau und Pflanzenzüchtung. 2. korrigierte Auflage, Verlag Eugen Ulmer, Stuttgart.

- Dietze, L.H. (2007). Externe Performancemessung von Corporate Bond-Fonds. Neue Betriebswirtschaftliche Studienbücher. Band 31. Berliner Wissenschafts-Verlag GmbH, Berlin.
- DIN ISO 10694 (1996-08). Bodenbeschaffenheit - Bestimmung von organischem Kohlenstoff und Gesamtkohlenstoff nach trockener Verbrennung (Elementaranalyse) (ISO 10694: 1995-03).
- DIN ISO 11465 (1996-12). Bodenbeschaffenheit - Bestimmung der Trockensubstanz und des Wassergehalts auf Grundlage der Masse - Gravimetrisches Verfahren (ISO 11465:1993).
- DIN ISO 13878 (1998-11). Bodenbeschaffenheit - Bestimmung des Gesamt-Stickstoffs durch trockene Verbrennung (Elementaranalyse) (ISO 13878: 1998-03).
- DIN EN 13925 (2003-07). Zerstörungsfreie Prüfung - Röntgendiffraktometrie von polykristallinen und amorphen Materialien.
- DIN ISO 15178 (1998-06). Bodenbeschaffenheit - Bestimmung des Gesamtschwefels nach trockener Verbrennung (ISO 15178: 2000-11).
- DIN 18128 (1990-11). Baugrund; Versuche und Versuchsgeräte; Bestimmung des Glühverlusts.
- DIN ISO 11277 (2002-08). Bodenbeschaffenheit - Bestimmung der Partikelgrößenverteilung in Mineralböden - Verfahren mittels Siebung und Sedimentation.
- DIN 38414-S 7 (1983-01). Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung, Schlamm und Sedimente (Gruppe S), Aufschluss mit Königswasser zur nachfolgenden Bestimmung des säurelöslichen Anteils an Metallen.
- Dorigo, W., Bachmann, M., & Heldens, W. (2006). AS Toolbox & processing of field spectra – User's manual. Version 1.12, Technical report, German Aerospace Center (DLR), German Remote Sensing Data Center, Team Imaging Spectroscopy.
- Düwel, O., & Utermann, J. (2008). Humusversorgung der (Ober-)Böden in Deutschland – Status quo. In: Hüttel, R.F., Prechtel, A., & Bens, O. (Hrsg.). Humusversorgung von Böden in Deutschland. Publikationen des Umweltbundesamtes, Berlin, Abschnitt II, Kap. 8.1.
- Dunn, B.W., Batten, G.D., Beecher, H.G., & Ciavarella, S. (2002). The potential of near-infrared reflectance spectroscopy for soil analysis — a case study from the Riverine Plain of south-eastern Australia. *Australian Journal of Experimental Agriculture*, 42: 5, 607–614.
- DWD (1996-2011). DWD – Deutscher Wetterdienst. Kostenfreie online Klimadaten für den Referenzzeitraum 1961–1990. Mittelwerte der Periode 1961 bis 1990. URL: <http://www.dwd.de>
- Dwivedi, R.S. (2001). Soil resource mapping: A remote sensing perspective. *Remote Sensing Reviews*, 20, 89–122.
- Elachi, C. (1987). Introduction to the physics and techniques of remote sensing. John Wiley & Sons, New York, USA.
- Ellmer, F., & Baumecker, M. (2005). Static nutrient depletion experiment Thyrow. Results after 65 experimental years. *Archives of Agronomy and Soil Science*, 51: 2, 151–161.
- Elvidge, C.D. (1990). Visible and near infrared reflectance characteristics of dry plant materials. *International Journal of Remote Sensing*, 11: 10, 1775–1795.
- EnMAP (2011). EnMAP – Environmental Mapping and Analysis Program. URL: <http://www.enmap.org/>
- EUROPARAT (1972). Europäische Bodencharta. Brüssel. URL: <https://wcd.coe.int/ViewDoc.jsp?id=654589>. (Deutsche Übersetzung: URL: <http://hypersoil.uni-muenster.de/0/02/03/03/01.htm>)
- FAO (1982). FAO – Food and Agriculture Organization of the United Nations. World soil charter.
- Feingersh, T., Dorigo, W., Richter, R., & Ben-Dor, E. (2005). A new model-driven correction factor for BRDF effects in HRS data. In: Zagajewski, B., Sobczak, M., & Wrzesień, M. (Hrsg.). Proceedings of the 4th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. New quality in environmental studies, 26-29 April 2005, Warsaw, Poland, 501–511.

- Fidêncio, P.H., Poppi, R.J., & de Andrade, J.C. (2002). Determination of organic matter in soils using radial basis function networks and near infrared spectroscopy. *Analytica Chimica Acta*, 453, 125–134.
- Finley, C.D., & Glenn, N.F. (2010). Fire and vegetation type effects on soil hydrophobicity and infiltration in the sagebrush-steppe: II. Hyperspectral analysis. *Journal of Arid Environments*, 74: 6, 660–666.
- Fischer, G.W. (1993). An improved method for algebraic analysis of metamorphic mineral assemblages. *American Mineralogist*, 78, 1257–1261.
- Folkman, M.A., Pearlman, J., Liao, L.B., & Jarecke, P.J. (2001). EO-1/Hyperion hyperspectral imager design, development, characterization, and calibration. In: William, L.S., & Yoshifumi, Y. (Hrsg.). *Hyperspectral Remote Sensing of the Land and Atmosphere*, SPIE Proceedings volume 4151, 40–51.
- Freibauer, A., Rounsevell, M.D.A., Smith, P., & Verhagen, J. (2004). Carbon sequestration in the agricultural soils of Europe. *Geoderma*, 122, 1–23.
- Fyströ, G. (2002). The prediction of C and N content and their potential mineralisation in heterogeneous soil samples using Vis-NIR spectroscopy and comparative methods. *Plant and Soil*, 246, 139–149.
- Galeazzi, C., Carpentiero, R., De Cosmo, V., Garramone, L., Longo, F., Lopinto, E., & Varacalli, G. (2009). The PRISMA System and PAN/HYP instrument. In: Proceedings of the 6th EARSel Imaging Spectroscopy SIG Workshop. An Innovative Tool for Scientific and Commercial Applications (CD-ROM), 16-18 March 2009, Tel-Aviv, Israel.
- Galvão, L.S., & Vitorello, I. (1998). Role of organic matter in obliterating the effects of iron on spectral reflectance and colour of Brazilian tropical soils. *International Journal of Remote Sensing*, 19: 10, 1969–1979.
- Galvão, L.S., Pizarro, M.A., & Epiphanyo, J.C.N. (2001). Variations in reflectance of tropical soils: Spectral-chemical composition relationships from AVIRIS data. *Remote Sensing of Environment*, 75, 245–255.
- Gausman, H.W., Gerbermann, A.H., Wiegand, C.L., Leamer, R.W., Rodriguez, R.R., & Noriega, J.R. (1975). Reflectance differences between crop residues and bare soils. *Soil Science Society America Journal*, 39: 4, 752–755.
- Ge, Y., Morgan, C.L.S., Grunwald, S., Brown, D.J., & Sarkhot, D.V. (2011). Comparison of soil reflectance spectra and calibration models obtained using multiple spectrometers. *Geoderma*, 161, 202–211.
- Geladi, P., & Kowalski, B. (1986a). Partial least squares regression: A tutorial. *Analytica Chimica Acta*, 35, 1–17.
- Geladi, P., & Kowalski, B. (1986b). An example of 2-block predictive partial least squares regression with simulated data. *Analytica Chimica Acta*, 35, 19–32.
- Gerlach, R.W., Kowalski, B.R., & Wold, H. (1979). Partial least squares path modelling with latent variables. *Analytica Chimica Acta*, 112, 417–421.
- Gerighausen, H., Borg, E., Wloczyk, C., Fichtelmann, B., Günther, A., Vajen, H.-H., Rosenberg, M., Schulz, M., & Engler, H.-G. (2007). DEMMIN – a test site for the validation of remote sensing data products. General description and application during AgriSAR 2006. In: Proceedings on AGRISAR and EAGLE Campaigns Final Workshop. AGRISAR and EAGLE Campaigns Final Workshop, 15-16 October 2007, ESA/ESTEC, Noordwijk, The Netherlands.
- Gerighausen, H., Menz, G., & Kaufmann, H. (2012). Spatially explicit estimation of clay and organic carbon content in agricultural soils using multi-annual imaging spectroscopy data. Special Issue on Quantitative Soil Spectroscopy, *Applied and Environmental Soil Science*, Volume 2012, Article ID 868090 (Article in Press).
- Giesen, J. (2008). Azimuth and Elevation Applet, URL: <http://www.jgiesen.de/azimuth/>

- GK-MVP (1:25.000). GK-MVP – Geologische Karte von Mecklenburg-Vorpommern 1:25.000. Blatt 2145 Daberkow. Aufnahme 1953-1967. Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern, Güstrow.
- Gobin, A., Govers, G., & Kirkby, M. (2006). Pan-European soil erosion assessment and maps. In: Boardman, J., & Poesen, J. (Hrsg.). *Soil Erosion in Europe*. John Wiley & Sons, Chichester, West Sussex, England, 661–674.
- Goetz, A.F.H., Vane, G., Solomon, J.E., & Rock, B.N. (1985). Imaging spectrometry for earth remote sensing. *Science*, 228: 4704, 1147–1153.
- Goetz, A.F.H., Chabrillat, S., & Lu, Z. (2001). Field reflectance spectrometry for detection of swelling clays at construction sites. *Field Analytical Chemistry and Technology*, 5: 3, 143–155.
- Goidts, E., & van Wesemael, B. (2007). Regional assessment of soil organic carbon changes under agriculture in Southern Belgium (1955–2005), *Geoderma*, 141, 341–354.
- Goldshleger, N., Ben-Dor, E., Benyamini, Y., Agassi, M., & Blumberg, D.G. (2001). Characterization of soil's structural crust by spectral reflectance in the SWIR region (1.2-2.5 μm). *Terra Nova*, 13, 12–17.
- Gómez, J.A., de Miguel, E., Gutiérrez de la Cámara, Ó., & Fernández-Renau, A. (2007). Status of the INTA AHS Sensor. In: Proceedings of the 5th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. Imaging spectroscopy: innovation in environmental research (CD-ROM), 23-25 April 2007, Bruges, Belgium.
- Gomez, C., Viscarra Rossel, R.A., & McBratney, A.B. (2008a). Soil organic carbon prediction by hyperspectral remote sensing and field vis-NIR spectroscopy: An Australian case study. *Geoderma*, 146, 403–411.
- Gomez, C., Lagacherie, P., & Coulouma, G. (2008b). Continuum removal versus PLSR method for clay and calcium carbonate content estimation from laboratory and airborne hyperspectral measurements. *Geoderma*, 148, 141–148.
- Green, R.O., Eastwood, M.L., Sarture, C.M., Chrien, T.G., Aronsson, M., Chippendale, B.J., Faust, J.A., Pavri, B.E., Chovit, C.J., Solis, M., Olah, M.R., & Williams, O. (1998). Imaging Spectroscopy and the Airborne Visible/Infrared Imaging Spectrometer (AVIRIS), *Remote Sensing of Environment*, 65: 3, 227–248.
- Haaland, D.M., & Thomas, E.V. (1988a). Partial least-squares methods for spectral analysis. 1. Relation to other quantitative calibration methods and the extraction of qualitative information. *Analytica Chimica Acta*, 60, 1193–1202.
- Haaland, D.M., & Thomas, E.V. (1988b). Partial least-squares methods for spectral analysis. 2. Application to simulated and glass spectral data. *Analytica Chimica Acta*, 60, 1202–1208.
- Habermeyer, M. (2001). The Digital Airborne Imaging Spectrometer DAIS 7915, DLR German Aerospace Centre, URL: <http://www.op.dlr.de/dais/dais-scr.htm>
- Haenlein, M., & Kaplan, A.M. (2004). A beginner's guide to partial least squares analysis. *Understanding statistics*, 3: 4, 283–297.
- Hahn-Weinheimer, P., Hirner, A., & Weber-Diefenbach, K. (1995). Röntgenfluoreszenzanalytische Methoden. Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig – Wiesbaden.
- Hammer, J. (Hrsg.) (2003a). Quartärsedimente als geologische Barrieren. Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten, Bd. 9. Springer-Verlag Berlin, Heidelberg.
- Hammer, J. (2003b). Tonminerale in den Sedimenten des Ihlenberges. In: Hammer, J. (Hrsg.). Quartäre Sedimente als geologische Barrieren. Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten. Bd. 9, Kapitel 11.3, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 412–423.
- Hammer, J., & Kleeberg, R. (2003). Röntgenographische Phasenanalyse. In: Hammer, J. (Hrsg.). Quartäre Sedimente als geologische Barrieren. Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten. Bd. 9, Kapitel 7.1, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 229–244.
- Hartge, K.H., & Horn, R. (1999). Einführung in die Bodenphysik. 3. überarb. Aufl., Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.

- Haubrock, S.-N., Chabrillat, S., & Kaufmann, H. (2005). Application of hyperspectral imaging for the quantification of surface soil moisture in erosion monitoring and modelling. In: Zagajewski, B., Sobczak, M., & Wrzesień, M. (Hrsg.). Proceedings of the 4th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. New quality in environmental studies, 26-29 April 2005, Warsaw, Poland, 163–171.
- Haubrock, S.-N., Chabrillat, S., Kuhnert, M., Hostert, P., & Kaufmann, H. (2008a). Surface soil moisture quantification models from reflectance data under field conditions. *International Journal of Remote Sensing*, 29: 1, 3–29.
- Haubrock, S.-N., Chabrillat, S., Lemmnitz, C., & Kaufmann, H. (2008b). Surface soil moisture quantification and validation based on hyperspectral data and field measurements. *Journal of Applied Remote Sensing*, 2, 023552, DOI: 10.1117/1.3059191.
- Hauff, P.L., Kruse, F.A., & Thiry, M. (1990). Characterization of interstratified kaolinite/smectite clays using infrared reflectance spectroscopy (1.2-2.5 μ m). Proceedings on 2nd International Symposium on Geochemistry of the earth's surface and of mineral formation., 2-8 July 1990, Aix en Provence, France, 267–270.
- Heuvelink, G.B.M., & Webster, R. (2001). Modelling soil variation: past, present, and future. *Geoderma*, 100, 269–301.
- Hill, J., Mégier, J., & Mehl, W. (1995). Land degradation, soil erosion and desertification monitoring in Mediterranean ecosystems. *Remote Sensing Reviews*, 12, 107–130.
- Hill, J., & Schütt, B. (2000). Mapping complex patterns of erosion and stability in dry Mediterranean ecosystems. *Remote Sensing of Environment*, 74: 3, 557–569.
- Hiltmann, W., & Stribrny, B. (Hrsg.) (1998). Tonmineralogie und Bodenphysik. Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten, Bd. 5, Springer, Heidelberg.
- Hollinger, A., Bergeron, M., Maskiewicz, M., Qian, S.E., Othman, H., Staenz, K., Neville, R.A., & Goodenough, D.G. (2006). Recent developments in the Hyperspectral Environment and Resource Observer (HERO) mission. IEEE International Conference on Geoscience and Remote Sensing Symposium, IGARSS 2006. DOI: 10.1109/IGARSS.2006.418, 1620–1623.
- Horiba Jobin Yvon (1996-2012). URL: <http://www.horiba.com/us/en/scientific/about-us/horiba-jobin-yvon/>
- Höskuldsson, A. (1988). PLS regression methods. *Journal of Chemometrics*, 2, 211–228.
- Huete, A.R. (1989). Soil influences in remotely sensed vegetation-canopy spectra. In: Asrar, G. (Hrsg.). Theory and applications of optical remote sensing. John Wiley & Sons, New York, 107–141.
- Huete, A.R., & Escadafal, R. (1991). Assessment of biophysical soil properties through spectral decomposition techniques, *Remote Sensing of Environment*, 35, 149–159.
- Hüttl, R.F., Prechtel, A., & Bens., O. (Hrsg.) (2008). Humusversorgung von Böden in Deutschland. Publikationen des Umweltbundesamtes, Berlin.
- Hulland, J.S. (1999). Use of partial least squares (PLS) in strategic management research: A review of four recent studies. *Strategic Management Journal*, 20, 195–204.
- Hummel, J.W., Sudduth, K.A., & Hollinger, S.E. (2001). Soil moisture and organic matter prediction of surface and subsurface soils using an NIR soil sensor. *Computers and Electronics in Agriculture*, 32, 149–165.
- Hunt, G.R., & Salisbury, J.W. (1970). Visible and near-infrared spectra of minerals and rocks. I. Silicate minerals. *Modern Geology*, 1, 283–300.
- Hunt, G.R. (1977). Spectral signatures of particulate minerals in the visible and near infrared. *Geophysics*, 42: 3, 501–513.
- Hunt, G.R. (1980). Electromagnetic radiation: The communication link in remote sensing. In: Siegal, B.S., & Gillespie, A.R. (Hrsg.). Remote Sensing in Geology, John Wiley & Sons, New York, 6–45.

- Hurtig, Th. (1957). *Physische Geographie von Mecklenburg*. VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin.
- HyspIRI (2012). HyspIRI mission study website, URL: <http://hyspiri.jpl.nasa.gov/>
- Ingleby, H.R., & Crowe, T.G. (2000). Reflectance models for predicting organic carbon in Saskatchewan soils. *Canadian Agricultural Engineering*, 42: 2, 57–63.
- IPCC (2000). IPCC – Intergovernmental Panel on Climate Change special report. Land use, land-use change, and forestry. URL: <http://www.ipcc.ch/pdf/special-reports/spm/srl-en.pdf>
- Irons, J.R., Weismiller, R.A., & Peterson, G.W. (1989). Soil reflectance. In: Asrar, G. (Hrsg.). *Theory and applications of optical remote sensing*, John Wiley & Sons, New York, 66–106.
- Islam, K., Singh, B., & McBratney, A. (2003). Simultaneous estimation of several soil properties by ultra-violet, visible, and near-infrared spectroscopy. *Australian Journal of Soil Research*, 41, 1101–1114.
- ITRES Research Ltd. (2010). Alberta, Canada, URL: <http://www.itres.com/pdf/CASI-1500.pdf>
- Itten, K.I. (2009). The Emergence of Imaging Spectroscopy in Europe. In: *Proceedings of the 6th EARSeL Imaging Spectroscopy SIG Workshop. An Innovative Tool for Scientific and Commercial Applications (CD-ROM)*, 16-18 March 2009, Tel-Aviv, Israel.
- Jabro, J.D. (1992). Estimation of saturated hydraulic conductivity of soils from particle size distribution and bulk density data. *Transactions of the ASAE*, 35: 2, 557–560.
- Jadczyzyn, J., & Niedzwieki, J. (2005). Relation of saturated hydraulic conductivity to soil losses. *Polish Journal of Environmental Studies*, 14: 4, 431–435.
- Jarmer, T., Hill, J., & Mader, S. (2007). The use of hyperspectral remote sensing data for the assessment of chemical properties of dryland soils in SE-Spain. In: Reusen, I. & Cools, J. (Hrsg.). *Proceedings of the 5th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy: Innovation in Environmental Research (CD-ROM)*, 23-25 April 2007, Bruges, Belgium.
- Jarmer, T., Hill, J., Lavée, H., & Sarah, P. (2010). Mapping topsoil organic carbon in non-agricultural semi-arid and arid ecosystems of Israel. *Photogrammetric Engineering & Remote Sensing*, 75: 1, 85–94.
- Janke, W. (2004). Holozän im Binnenland. In: Katzung, G. (Hrsg.). *Geologie von Mecklenburg-Vorpommern*. Kap. 4.3.3, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung (Nägele u. Obermiller), Stuttgart, 265–284.
- Jensen, L.S., Mueller, T., Nielsen, N.E., Hansen, S., Crocker, G.J., Grace, P.R., Klír, J., Körschens, M., & Poulton, P.R. (1997). Simulating trends in soil organic carbon in long-term experiments using the soil-plant-atmosphere model DAISY. *Geoderma*, 81, 5–28.
- Kaufmann, H., Guanter, L., Segl, K., Chabrillat, S., Hofer, S., Foerster, K.-P., Sang, B., Stuffer, T., Mueller, A., Mueller, R., Richter, R., Chlebek, C., & Rossner, G. (2010). EnMAP – An advanced optical payload for Earth observation. In: *Proceedings of ASD and IEEE GRS Art, Science and Applications of Reflectance Spectroscopy Symposium*, Boulder, Colorado.
- Kang, H.-J., Lee, S., Yang, S.-H., Lee, S.-S., Koh, S.-J., Ha, S.-K., & Hur, S.O. (2010). Soil erosion characteristics under rainfall simulator conditions of the Jeju soil in Korea. *Proceedings of the 19th World Congress of Soil Science, Soil Solutions for a Changing World*, 1–6 August 2010, Brisbane, Australia, 71–74.
- Kemper, T. (2003). *Reflectance Spectroscopy for mapping and monitoring of metal mining related contamination. A case study of the Aznalcóllar mining accident, Spain*. Dissertation, Universität Trier.
- Kessler, W. (2007). *Multivariate Datenanalyse für die Pharma-, Bio- und Prozessanalytik*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Kirkby, M.J., Jones, R.J.A., Irvine, B., Gobin, A., Govers, G., Cerdan, O., Van Rompaey, A.J.J., Le Bissonnais, Y., Daroussin, J., King, D., Montanarella, L., Grimm, M., Vieillefont, V., Puigdefabregas, J., Boer, M., Kosmas, C., Yassoglou, N., Tsara, M., Mantel, S., Van Lynden, G.J., & Huting, J. (2004). *Pan-European Soil Erosion Risk Assessment: The PESERA Map*, Special Publications Ispra No. 73, S.P.I.04.73.

- Klemm, E. (2002). Einführung in die Statistik. Westdeutscher Verlag, Wiesbaden.
- Klisch, A. (2003). Ableitung von Blattflächenindex und Bedeckungsgrad aus Fernerkundungsdaten für das Erosionsmodell EROSION 3D. Dissertation, Universität Potsdam.
- Knipling, E.B. (1970). Physical and physiological basis for the reflectance of visible and near-infrared radiation from vegetation. *Remote Sensing of Environment*, 1: 3, 155–159.
- Köhn, M. (1928). Bemerkungen zur mechanischen Bodenanalyse, III. Ein neuer Pipettapparat. *Zeitschrift für Pflanzenernährung, Düngung und Bodenkunde*, 11, 50–54.
- Körschens, M. (1997). Abhängigkeit der organischen Bodensubstanz (OBS) von Standort und Bewirtschaftung sowie deren Einfluss auf Ertrag und Bodeneigenschaften. *Archives of Agronomy and Soil Science*, 41: 6, 435–463.
- Körschens, M., Schulz, E., Klimanek, E.-M., & Franko, U. (1997). Die organische Bodensubstanz – Bedeutung, Definition, Bestimmung. *Archives of Agronomy and Soil Science*, 41: 6, 427–433.
- Kokaly, R.F., & Clark, R.N. (1999). Spectroscopic determination of leaf biochemistry using band-depth analysis of absorption feature and stepwise multiple linear regression. *Remote Sensing of Environment*, 67, 267–287.
- Kokaly, R.F., Rockwell, B.W., Haire, S.L., & King, T.V.V. (2007). Characterization of post-fire surface cover, soils, and burn severity at the Cerro Grande Fire, New Mexico, using hyperspectral and multispectral remote sensing. *Remote Sensing of Environment*, 106: 3, 305–325.
- Kooistra, L., Wehrens, R., Leuven, R.S.E.W., & Buydens, L.M.C. (2001). Possibilities of visible–near-infrared spectroscopy for the assessment of soil contamination in river floodplains. *Analytica Chimica Acta*, 446, 97–105.
- Kooistra, L., Wanders, J., Epema, G.F., Leuven, R.S.E.W., Wehrens, R., & Buydens, L.M.C. (2003a). The potential of field spectroscopy for the assessment of sediment properties in river floodplains. *Analytica Chimica Acta*, 484, 189–200.
- Kooistra, L., Leuven, R.S.E.W., Wehrens, R., Niehuis, P.H., & Buydens, L.M.C. (2003b). A comparison of methods to relate grass reflectance to soil metal contamination. *International Journal of Remote Sensing*, 24: 24, 4995–5010.
- Krienke, H.-D. (2000). Geologische Karte von Mecklenburg-Vorpommern. Karte der quartären Bildungen – Oberfläche bis 5m, 1: 200.000. Blatt 24/25 Neubrandenburg/ Torgelow. Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern (Hrsg.), Güstrow.
- Kronberg, P. (1985). Fernerkundung der Erde. Grundlagen und Methoden des Remote Sensing in der Geologie. Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart.
- Krüger, G., Erzinger, J., & Kaufmann, H. (1998). Laboratory and airborne reflectance spectrometric analyses of lignite overburden dumps. *Journal of Geochemical Exploration*, 64, 47–65.
- Kudrat, M., Tiwari, A.K., Saha, S.K., & Bhan, S.K. (1992). Soil resource mapping using IRS-1A-LISS-II digital Data - A case-study of Kandi area adjacent to Chandigarh-India. *International Journal of Remote Sensing*, 13: 17, 3287–3302.
- Labsphere Inc. (2011). Technical guide: Reflectance materials and coatings. URL: <http://www.labsphere.com/products/reflectance-standards-and-targets/reflectance-targets/spectralon-targets.aspx>
- Lagacherie, P., Baret, F., Feret, J.-B., Madeira Netto, J., & Robbez-Masson, J.M. (2008). Estimation of soil clay and calcium carbonate using laboratory, field and airborne hyperspectral measurements. *Remote Sensing of Environment*, 112: 3, 825–835.
- Lal, R. (2004). Soil carbon sequestration to mitigate climate change. *Geoderma*, 123, 1–22.
- Lal, R., & Bruce, J.P. (1999). The potential of world cropland soils to sequester C and mitigate the greenhouse effect. *Environmental Science & Policy*, 2: 2, 177–185.

- Le Bissonnais, Y., & Arrouays, D. (1997). Aggregate stability and assessment of soil crustability and erodibility: II. Application to humic loamy soils with various organic carbon contents. *European Journal of Soil Science*, 48, 39–48.
- Leinweber, P., Schulten, H.-R., & Körschens, M. (1994). Seasonal variations of soil organic matter in a long term agricultural experiment. *Plant and Soil*, 160, 225–235.
- Leone, A.P., & Sommer, S. (2000). Multivariate analysis of laboratory spectra for the assessment of soil development and soil degradation in the southern Apennines (Italy). *Remote Sensing of Environment*, 72, 346–359.
- Lewis, S.A., Robichaud, P.R., Frazier, B.E., Wu, J.Q., & Laes, D.Y.M. (2008). Using hyperspectral imagery to predict post-wildfire soil water repellency. *Geomorphology*, 95, 192–205.
- Li, B., Morris, J., & Martin, E.B. (2002). Model selection for partial least squares regression. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 64: 1, 79–89.
- Lieberoth, I., Dunkelgod, P., Gunia, W., & Thiere, J. (1983). Auswertungsrichtlinie MMK, Stand 1983. Akademie der Landwirtschaftswissenschaften der DDR. Forschungszentrum für Bodenfruchtbarkeit Müncheberg, Bereich Bodenkunde/ Fernerkundung, Eberswalde-Finow.
- Lillesand, T.M., Kiefer, R.W., & Chipman, J.W. (2004). Remote Sensing and Image Interpretation. 5th edition, John Wiley & Sons, Inc.
- Liu, W.D., Baret, F., Gu, X.F., Tong, Q.X., Zheng, L.F., & Zhang, B. (2002). Relating soil surface moisture to reflectance. *Remote Sensing of Environment*, 81, 238–246.
- Lobell, D.B., & Asner, G.P. (2002). Moisture effects on soil reflectance. *Soil Science Society America Journal*, 66, 722–727.
- Lozán, J.L., & Kausch, H. (2004). Angewandte Statistik für Naturwissenschaftler. 3. überarb. und ergänzte Auflg., Wissenschaftliche Auswertungen, Hamburg.
- LUNG (Hrsg.) (2002a). LUNG – Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern. Beiträge zum Bodenschutz in Mecklenburg-Vorpommern. Bodenerosion. 2. überarb. Auflg., Güstrow.
- LUNG (Hrsg.) (2002b). LUNG – Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern. Beiträge zum Bodenschutz in Mecklenburg-Vorpommern. Bodenverdichtung. Güstrow.
- LUNG (Hrsg.) (2003). LUNG – Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie Mecklenburg-Vorpommern. Beiträge zum Bodenschutz in Mecklenburg-Vorpommern. Böden in Mecklenburg-Vorpommern. Güstrow.
- Luo, Z., Yaolin, L., Jian, W., & Jing, W. (2008). Quantitative mapping of soil organic material using field spectrometer and hyperspectral remote sensing. The International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences. Vol. XXXVII. Part B8. Beijing 2008, 901–906. URL: http://www.isprs.org/proceedings/XXXVII/congress/8_pdf/9_WG-VIII-9/09.pdf
- Madari, B.E., Reeves III, J.B., Machado, P.L.O.A., Guimarães, C.M., Torres, E., & McCarty, G.W. (2006). Mid- and near-infrared spectroscopic assessments of soil compositional parameters and structural indices in two Ferralsols. *Geoderma*, 136, 245–259.
- Marx, B.D., & Eilers, P.H.C. (2002). Multivariate calibration stability: a comparison of methods. *Journal of Chemometrics*, 16, 129–140.
- McBratney, A.B., Minasny, B., Cattle, S.R., & Vervoort, R.W. (2002). From pedotransfer functions to soil inference systems. *Geoderma*, 109, 41–73.
- McCarty, G.W., Reeves III, J.B., Reeves, V.B., Follett, R.F., & Kimble, J.M. (2002). Mid-infrared and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for soil carbon measurement. *Soil Science Society of America Journal*, 66, 640–646.
- McCarty, G.W., & Reeves III, J.B. (2006). Comparison of near infrared and mid infrared diffuse reflectance spectroscopy for field-scale measurement of soil fertility parameters. *Soil Science*, 171, 94–102.

- Malley, D.F., Martin, P.D., & Ben-Dor, E. (2004). Application in analysis of soils. In: Roberts, C.A., Workman Jr., J., & Reeves III, J.B. (Hrsg.). *Near-Infrared Spectroscopy in Agriculture*. American Society of Agronomy, Madison, 729–784.
- Martens, H., & Næs, T. (1989). *Multivariate calibration*. John Wiley & Sons Ltd., Guildford, GB.
- Mertens, F.M., Pätzold, S., & Welp, G. (2008). Spatial heterogeneity of soil properties and its mapping with apparent electrical conductivity. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 171, 146–154.
- Metternicht, G., Zinck, J.A., Blanco, P.D., & del Valle, H.F. (2010). Remote Sensing of Land Degradation: Experiences from Latin America and the Caribbean. *Journal of Environmental Quality*, 39: 1, 42–61.
- Meusburger, K., Banninger, D., & Alewell, C. (2010). Estimating vegetation parameter for soil erosion assessment in an alpine catchment by means of QuickBird imagery. *International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation*, 12: 3, 201–207.
- Milton, E.J., Schaepman, M.E., Anderson, K., Kneubühler, M., & Fox, N. (2009). Progress in field spectroscopy. *Remote Sensing of Environment*, 113, Supplement 1, Imaging Spectroscopy Special Issue, S92–S109.
- Morgan, R.P.C. (1999). *Bodenerosion und Bodenerhaltung*. Enke im Georg Thieme Verlag, Stuttgart.
- Morgan, C.L.S., Waiser, T.H., Brown, D.J., & Hallmark, C.T. (2009). Simulated in-situ characterization of soil organic and inorganic carbon with visible near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 151, 249–256.
- Mouazen, A.M., Karoui, R., De Baerdemaeker, J., & Ramon, H. (2006). Characterization of soil water content using measured visible and near infrared spectra. *Soil Science Society of America Journal*, 70, 1295–1302.
- Mouazen, A.M., Maleki, M.R., De Baerdemaeker, J., & Ramon, H. (2007). On-line measurement of some selected soil properties using a VIS-NIR sensor. *Soil & Tillage Research*, 93, 13–27.
- Mouazen, A.M., Kuang, B., De Baerdemaeker, J., & Ramon, H. (2010). Comparison among principal component, partial least squares and back propagation neural network analyses for accuracy of measurement of selected soil properties with visible and near infrared spectroscopy. *Geoderma*, 158, 23–31.
- Muller, E., & Décamps, H. (2000). Modeling soil moisture-reflectance. *Remote Sensing of Environment*, 76, 173–180.
- Müller, R., Lehner, M., Reinartz, P., & Schroeder, M. (2005a). Evaluation of spaceborne and airborne line scanner images using a generic ortho image processor. In: Heipke, C., Jacobsen, K., & Gerke, M. (Hrsg.). *High Resolution Earth Imaging for Geospatial Information*, IAPRS, Vol. XXXVI, 17.-20. Mai 2005, Hannover, ISBN ISSN No. 1682–1777.
- Müller, R., Holzwarth, S., Habermeyer, M., & Müller, A. (2005b). Ortho image production within an automatic processing chain for hyperspectral airborne scanner ARES. In: Jacobsen, K., Goossens, R., & Winkler, P. (Hrsg.). *Proceedings of the EARSel Workshop 3D-Remote Sensing*, Porto, 10-11 Juni 2005, Portugal.
- Murphy, R.J. (1995). The effects of surficial vegetation cover on mineral absorption feature parameters. *International Journal of Remote Sensing*, 16: 12, 2153–2164.
- Murphy, R.J., & Wadge, G. (1994). The effects of vegetation on the ability to map soils using imaging spectrometer data. *International Journal of Remote Sensing*, 15: 1, 63–86.
- Nagler, P.L., Daughtry, C.S.T., & Goward, S.N. (2000). Plant litter and soil reflectance. *Remote Sensing of Environment*, 71: 2, 207–215.
- Nagler, P.L., Inoue, Y., Glenn, E.P., Russ, A.L., & Daughtry, C.S.T. (2003). Cellulose absorption index (CAI) to quantify mixed soil-plant litter scenes. *Remote Sensing of Environment*, 87, 310–325.
- Nanni, M.R., & Demattê, J.A.M. (2006). Spectral reflectance methodology in comparison to traditional soil analysis. *Soil Science Society of America Journal*, 70, 393–407.

- Nguyen, D.V., & Roche, D.M. (2002). Tumor classification by partial least squares using microarray gene expression data. *Bioinformatics*, 18, 39–50.
- Nieke, J., Itten, K.I., Kaiser, J.W., Schläpfer, D., Brazile, J., Debruyne, W., Meuleman, K., Kempeneers, P., Neukom, A., Feusi, H., Adolph, P., Moser, R., Schilliger, T., van Quickelberghe, M., Alder, J., Mollet, D., De Vos, L., Kohler, P., Meng, M., Piesbergen, J., Strobl, P., Schaepman, M.E., Gavira, J., Ulbrich, G., & Meynart, R. (2004). APEX: Current status of the airborne dispersive pushbroom imaging spectrometer. In: Barnes, W.L., & Butler, J.J. (Hrsg.). *Earth Observing Systems IX*, SPIE Proceedings volume 5542, 109–116.
- Nocita, M., Kooistra, L., Bachmann, M., Müller, A., Powell, M., & Wedel, S. (2011). Predictions of soil surface and topsoil organic carbon content through the use of laboratory and field spectroscopy in the Albany Thicket Biome of Eastern Cape Province of South Africa. *Geoderma*, 167–168, 295–302.
- Oerke, E.-C., Gerhards, R., Menz, G., & Sikora, R.A. (Hrsg.) (2010). *Precision crop protection – the challenge and use of heterogeneity*, Springer Verlag, Heidelberg.
- Odlare, M., Svensson, K., & Pell, M. (2005). Near infrared reflectance spectroscopy for assessment of spatial soil variation in an agricultural field. *Geoderma*, 126, 193–202.
- Otto, M. (1999). *Chemometrics: statistics and computer application in analytical chemistry*. Wiley-VCH, Weinheim.
- Ouerghemmi, W., Gomez, C., Nacer, S., & Lagacherie, P. (2011). Applying blind source separation on hyperspectral data for clay content estimation over partially vegetated surfaces. *Geoderma*, 163, 227–237.
- Pachepsky, Ya., & Rawls, W.J. (2004). Development of pedotransfer functions in soil hydrology. *Developments in Soil Science*, Volume 30, Elsevier B.V., Amsterdam, The Netherlands.
- Palacios-Orueta, A., & Ustin, S.L. (1998). Remote sensing of soil properties in the Santa Monica mountains: I. Spectral analysis. *Remote Sensing of Environment*, 65, 170–183.
- Patzold, S., Mertens, F.M., Bornemann, L., Kolczek, B., Franke, J., Feilhauer, H., & Welp, G. (2008). Soil heterogeneity at field scale: a challenge for crop precision protection. *Precision Agriculture*. DOI 10.1007/s11119-008-9077-x.
- Pimentel, D. (2006). Soil erosion: a food and environmental threat. *Environment, Development and Sustainability*, 8, 119–137.
- Pimentel, D., Harvey C., Resosudarmo, P., Sinclair, K., Kurz, D., McNair, M., Crist, S., Shpritz, L., Fitton, L., Saffouri, R., & Blair, R. (1995). Environmental and Economic Costs of Soil Erosion and Conservation Benefits. *Science*, 267, 1117–1123.
- Pirie, A., Singh, B., & Islam, K. (2005). Ultra-violet, visible, near-infrared, and mid-infrared diffuse reflectance spectroscopic technique to predict several soil properties. *Australian Journal of Soil Research*, 43, 713–721.
- Prechtel, A., von Lütow, M., Schneider, B.U., Bens, O., Bannick, C.G., Kögel-Knabner, I., & Hüttl, R.F. (2009). Organic carbon in soils of Germany: Status quo and the need for new data to evaluate potentials and trends of soil carbon sequestration. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 172, 601–614.
- Pribyl, D.W. (2010). A critical review of the conventional SOC to SOM conversion factor. *Geoderma*, 156, 75–83.
- Price, K.P. (1993). Detection of soil erosion within Pinyon-Juniper woodlands using Thematic Mapper (TM) data*. *Remote Sensing of Environment*, 45, 233–248.
- Puckett, W.E., Dane, J.H., & Hajek, B.F. (1985). Physical and mineralogical data to determine soil hydraulic properties. *Soil Science Society of America Journal*, 49, 831–836.
- Ramos, M.C., Nacci, S., & Pla, I. (2000). Soil sealing and its influence on erosion rates for some soils in the Mediterranean area. *Soil Science*, 165: 5, 398–403.
- Reeves III, J.B., McCarty, G.W., & Meisinger, J.J. (1999). Near-infrared reflectance spectroscopy for the analysis of agricultural soils. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 7, 179–193.

- Reeves III, J.B., & McCarty, G.W. (2001). Quantitative analysis of agricultural soils using near infrared reflectance spectroscopy and a fibre-optic probe. *Journal of Near Infrared Spectroscopy*, 9, 25–34.
- Reeves III, J., McCarty, G., & Mimmo, T. (2002). The potential of diffuse reflectance spectroscopy for the determination of carbon inventories in soils. *Environmental Pollution*, 116, S1, S277–S284.
- Reeves III, J.B. (2010). Near- versus mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy for soil analysis emphasizing carbon and laboratory versus on-site analysis: Where are we and what needs to be done? *Geoderma*, 158, 3–14.
- Reijneveld, A., van Wensem, J., & Oenema, O. (2009). Soil organic carbon contents of agricultural land in the Netherlands between 1984 and 2004. *Geoderma*, 152, 231–238.
- Richter, A. (1987). Großmaßstäbige Bodenkartierung unter Nutzung des Luftbildes. *Archiv für Acker- und Pflanzenbau und Bodenkunde – Archives of Agronomy and Soil Science*, 31: 10, 627–634.
- Richter, R. (2005). Atmospheric/ Topographic Correction for Airborne Imagery. ATCOR-4 User Guide, Version 4.1.
- Richter, R. (2008). Atmospheric/ Topographic Correction for Airborne Imagery. ATCOR-4 User Guide, Version 4.3.
- Richter, N., Jarmer, T., Chabrillat, S., Oyonarte, C., Hostert, P., & Kaufmann, H. (2009). Free iron oxide determination in Mediterranean soils using diffuse reflectance spectroscopy. *Soil Science Society of America Journal*, 73: 1, 72–81.
- Richter, R., & Schläpfer D. (2002). Geo-atmospheric processing of airborne imaging spectrometry data, Part 2: Atmospheric / topographic correction. *International Journal of Remote Sensing*, 23: 13, 2631–2649.
- Rodger, A., & Cudahy, T. (2009). Vegetation corrected continuum depths at 2.20 μm : An approach for hyperspectral sensors. *Remote Sensing of Environment*, 113: 10, 2243–2257.
- Rogasik, J., Schnug, E., & Rogasik, H. (2000). Landbau und Treibhauseffekt – Quellen und Senken für CO_2 bei unterschiedlicher Landbewirtschaftung. *Archives of Agronomy and Soil Science*, 45: 2, 105–121.
- Rowell, D.L. (1997). *Bodenkunde: Untersuchungsmethoden und ihre Anwendungen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Salisbury, J.W. (1998). *Spectral Measurements Field Guide*. Defense Technology Information Center. Report No. ADA362372.
- Sankey, J.B., Brown, D.J., Bernard, M.L., & Lawrence, R.L. (2008). Comparing local vs. global visible and near-infrared (VisNIR) diffuse reflectance spectroscopy (DRS) calibrations for the prediction of soil clay, organic C and inorganic C. *Geoderma*, 148, 149–158.
- Sarkhot, D.V., Grunwald, S., Ge, Y., & Morgan, C.L.S. (2011). Comparison and detection of total and available soil carbon fractions using visible/near infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 164, 22–32.
- SAS/STAT(R) (2011). 9.2 User's Guide, 2nd edition, SAS Institute Inc., URL: http://support.sas.com/documentation/cdl_main/
- Savitzky, A., & Golay, M.J.E. (1964). Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry*, 36: 8, 1627–1639.
- Saxton, K.E., Rawls, W.J., Romberger, J.S., & Papendick, R.I. (1986). Estimating generalized soil-water characteristics from texture. *Soil Science Society of America Journal*, 50, 1031–1036.
- Schaepman, M.E., Ustin, S.L., Plaza, A.J., Painter, T.H., Verrelst, J., & Liang, S. (2009). Earth system science related imaging spectroscopy—An assessment. *Remote Sensing of Environment*, 113, Supplement 1, Imaging Spectroscopy Special Issue, S123–S137.
- Scheffer, F., & Schachtschabel, P. (1998). *Lehrbuch der Bodenkunde*. 14. neu bearbeitete und erweiterte Auflage, Stuttgart, Ferdinand Enke Verlag.

- Scheffer, F., & Schachtschabel, P. (2010). Lehrbuch der Bodenkunde. 16. neu bearbeitete Auflage, Stuttgart, Ferdinand Enke Verlag.
- Schlichting, E., Blume, H.-P., & Stahr, K. (1995). Bodenkundliches Praktikum. 2. neubearbeitete Auflage, Blackwell Wissenschaftsverlag Berlin, Wien.
- Schmidt, J. (1996). Entwicklung und Anwendung eines physikalisch begründeten Simulationsmodells für die Erosion geneigter landwirtschaftlicher Nutzflächen. Berliner Geographische Abhandlungen, Heft 61, Selbstverlag des Instituts für Geographische Wissenschaften, Berlin.
- Schott, J.R. (1997). Remote sensing. The image chain approach. Oxford University Press, New York.
- Schowengerdt, R.A. (2007). Remote sensing: models and methods for image processing, 3rd Edition. Academic Press, Elsevier.
- Schroeder, D. (1992). Bodenkunde in Stichworten. 5. rev. u. erw. Auflage von Blum, W.E.H., Ferdinand Hirt i.d. Gebrüder Bornträger Verlagsbuchhandlung, Berlin, Stuttgart.
- SIS Online (2005). Statistisches Amt Mecklenburg-Vorpommern, Statistisches Informationssystem – SIS Online, URL: <http://www.mvnet.de/inmv/land-mv/stala/sis/>, Schwerin, 2005.
- Selige, T., Böhner, J., & Schmidhalter, U. (2006). High resolution topsoil mapping using hyperspectral image and field data in multivariate regression modeling procedures. *Geoderma*, 136, 235–244.
- Shepherd, K.D., & Walsh, M.G. (2002). Development of reflectance spectral libraries for characterization of soil properties. *Soil Science Society America Journal*, 66, 988–998.
- Siegal, B.S., & Goetz, A.F.H. (1977). Effects of vegetation on rock and soil type discrimination. *Photogrammetric Engineering and Remote Sensing*, 43: 2, 191–196.
- Sleutel, S., De Neve, S., Singier, B., & Hofman, G. (2006). Organic C levels in intensively managed arable soils – long-term regional trends and characterization of fractions. *Soil Use and Management*, 22, 188–196.
- Smith, M.O., Ustin, S.L., Adams, J.B., & Gillespie, A.R. (1990). Vegetation in deserts: I. A regional measure of abundance from multispectral images, *Remote Sensing of Environment*, 31: 1, 1–26.
- Smith, P., Powlson, D.S., Smith, J.U., Falloon, P., & Coleman, K. (2000a). Meeting Europe's climate change commitments: quantitative estimates of the potential for carbon mitigation by agriculture. *Global Change Biology*, 6, 525–539.
- Smith, P., Powlson, D.S., Smith, J.U., Falloon, P., & Coleman, K. (2000b). Meeting the U.K.'s climate change commitments: options for carbon mitigation on agricultural land. *Soil Use and Management*, 16, 1–11.
- Sobrino, J.A., Jiménez-Muñoz, J.C., Zarco-Tejada, P.J., Sepulcre-Cantó, G., & de Miguel, E. (2006). Land surface temperature derived from airborne hyperspectral scanner thermal infrared data. *Remote Sensing of Environment*, 102, 99–115.
- Somers, B., Gysels, V., Verstraeten, W.W., Delalieux, S., & Coppin, P. (2010). Modelling moisture-induced soil reflectance changes in cultivated sandy soils: a case study in citrus orchards. *European Journal of Soil Science*, 61, 1091–1105.
- Sommer, M., Wehrhan, M., Zipprich, M., Weller, U., zu Castell, W., Ehrlich, S., Tandler, B., & Selige, T. (2003). Hierarchical data fusion for mapping soil units at field scale. *Geoderma*, 112, 179–196.
- Sørensen, L.K., & Dalsgaard, S. (2005). Determination of clay and other soil properties by near infrared spectroscopy. *Soil Science Society America Journal*, 69, 159–167.
- Specim (2009a). Specim Spectral Imaging Ltd., Oulu, Finland, URL: http://www.specim.fi/media/pdf/aisa-datasheets/eagle_datasheet_ver1-09.pdf
- Specim (2009b). Specim Spectral Imaging Ltd., Oulu, Finland, URL: http://www.specim.fi/media/pdf/aisa-datasheets/hawk_datasheet_ver1-09.pdf
- Staenz, K., Neville, R.A., Hitchcock, R., Assouad, P., Omari, K., Sun, L., Bergeron, M., & White, H.P. (2005). The potential of the proposed Canadian HERO mission for geoscience

- applications. In: Zagajewski, B., Sobczak, M., & Wrzesień, M. (Hrsg.). Proceedings of the 4th EARSeL Workshop on Imaging Spectroscopy. New quality in environmental studies, 26-29 April 2005, Warsaw, Poland, 35–45.
- Stenberg, B. (2010). Effects of soil sample pretreatments and standardised rewetting as interacted with sand classes on Vis-NIR predictions of clay and soil organic carbon. *Geoderma*, 158, 15–22.
- Stevens, A., van Wesemael, B., Vandenschrick, G., Touré, S., & Tychon, B. (2006). Detection of carbon stock change in agricultural soils using spectroscopic techniques. *Soil Science Society of America Journal*, 70, 844–850.
- Stevens, A., van Wesemael, B., Bartholomeus, H., Rosillon, D., Tychon, B., & Ben-Dor, E. (2008). Laboratory, field and airborne spectroscopy for monitoring organic carbon content in agricultural soils. *Geoderma*, 144, 395–404.
- Stevens, A., Udelhoven, T., Denis, A., Tychon, B., Lioy, R., Hoffmann, L., & van Wesemael, B. (2010). Measuring soil organic carbon in croplands at regional scale using airborne imaging spectroscopy. *Geoderma*, 158, 32–45.
- Stevenson, F.J. (1994). Humus chemistry: genesis, composition and reactions. John Wiley & Sons, New York.
- Stoner, E.R., & Baumgardner, M.F. (1981). Characteristic variations in reflectance of surface soils. *Soil Science Society America Journal*, 45, 1161–1165.
- Strobl, P., Richter, R., Lehmann, F., Mueller, A., Zhukov, B., & Oertel, D. (1996). Preprocessing for the airborne imaging spectrometer DAIS 7915. In: Iverson, A.E. (Hrsg.). Algorithms for Multispectral and Hyperspectral Imagery II, SPIE Proceedings volume, 2758, 375–382.
- Sudduth, K.A., & Hummel, J.W. (1993). Soil organic matter, CEC, and moisture sensing with a portable NIR spectrophotometer. *Transactions of the ASAE*, 36, 1571–1582.
- Sujatha, G., Dwivedi, R.S., Sreenivas, K., & Venkataratnam, L. (2000). Mapping and monitoring of degraded lands in part of Jaunpur district of Uttar Pradesh using temporal spaceborne multispectral data. *International Journal of Remote Sensing*, 21: 3, 519–531.
- Tahir, M.E., Kaab, A., & Xu, C.Y. (2010). Identification and mapping of soil erosion areas in the Blue Nile, Eastern Sudan using multispectral ASTER and MODIS satellite data and the SRTM elevation model. *Hydrology and earth system sciences*, 14: 7, 1167–1178.
- TERENO (2012). TERENO – Terrestrial Environmental Observatories, URL: www.tereno.net
- TGL 34323/03 (1981-05-00). Geologische Industrie. Gesteinsanalyse. Gravimetrie. Glühverlust.
- Thiere, J., & Kiesel, J., unter Mitwirkung von Laacke, L., Lentz-Worobjew, M., & Völker, L. (2001). Abiotische Standortbedingungen in Brandenburg und Mecklenburg-Vorpommern: Agrarflächen im naturräumlichen und administrativen Standortvergleich. *Mitteilungen der Deutschen Bodenkundlichen Gesellschaft*, 96: 2, 567–568.
- Thiere, J., Altermann, M., Lieberoth, I., & Rau, D. (1991). Zur Beurteilung landwirtschaftlicher Nutzflächen nach technologisch wirksamen Standortbedingungen. *Arch. Acker- Pflanzenbau Bodenkunde – Archives of Agronomy and Soil Science*, 35: 3, 171–183.
- Tietje, O., & Hennings, V. (1996). Accuracy of the saturated hydraulic conductivity prediction by pedo-transfer functions compared to the variability within FAO textural classes. *Geoderma*, 69, 71–84.
- Toy, T.J., Foster, G.R., & Renard, K.G. (2002). Soil erosion: processes, prediction, measurement, and control. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Tributh, H. (1991). Die qualitative Bestimmung von Bodentonen. In: Tributh, H. & Lagaly, G. (Hrsg.). Identifizierung und Charakterisierung von Tonmineralen. Berichte der Deutschen Ton- und Tonmineralogiegruppe e.V. - DTTG - Gießen, 52–63.
- Trumbore, S.E., Chadwick, O.A., & Amundson, R. (1996). Rapid exchange between soil carbon and atmospheric carbon dioxide driven by temperature change. *Science*, 272, 393–396.
- Tucker, C.J. (1979). Red and photographic infrared linear combinations for monitoring vegetation, *Remote Sensing of Environment*, 8: 2, 127–150.

- Udelhoven, T., Emmerling, C., & Jarmer, T. (2003). Quantitative analysis of soil chemical properties with diffuse reflectance spectrometry and partial least-square regression: a feasibility study. *Plant and Soil*, 251, 319–329.
- USGS (2003). USGS – United States Geological Survey, EO-1 User Guide v.2.3 (2003), URL: <http://edcsns17.cr.usgs.gov/eo1/documents/EO1userguidev2pt320030715UC.pdf>
- USGS (2009). USGS – United States Geological Survey. Catalog of worldwide test sites for sensor characterization, Site location: Demmin URL: http://calval.cr.usgs.gov/sites_catalog_template.php?site=demm
- Uno, Y., Prasher, S.O., Patel, R.M., Strachan, I.B., Pattey, E., & Karimi, Y. (2005). Development of field-scale soil organic matter content estimation models in Eastern Canada using airborne hyperspectral imagery. *Canadian Biosystems Engineering*, 47, 1.9-1.14.
- Vågen, T.-G., Shepherd, K.D., & Walsh, M.G. (2006). Sensing landscape level change in soil fertility following deforestation and conversion in the highlands of Madagascar using Vis-Nir spectroscopy. *Geoderma*, 133, 281–294.
- van der Knijff, J.M., Jones, R.J.A., & Montanarella, L. (2000). Soil erosion risk assessment in Europe. EUR 19044 EN, European Commission, Brussels.
- van der Meer, F.D. (1995). Spectral reflectance of carbonate mineral mixtures and bidirectional reflectance theory: Quantitative analysis techniques for application in remote sensing. *Remote Sensing Reviews*, 13, 67–94.
- Vane, G., Goetz A.F.H, & Wellman, J.B. (1984). Airborne Imaging Spectrometer: a new tool for remote sensing. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, GE-22: 6, 546–549.
- Vane, G., Green, R., Chrien, T., Enmark, H., Hansen, E., & Porter, W. (1993). The airborne visible infrared imaging spectrometer (AVIRIS). *Remote Sensing of Environment*, 44, 127–143.
- van Waes, C., Mestdagh, I., Lootens, P., & Carlier, R. (2005). Possibilities of near infrared spectroscopy for the prediction of organic carbon concentrations in grassland soils. *The Journal of Agricultural Science*, 143, 487–492.
- Vasques, G.M., Grunwald, S., & Sickman, J.O. (2008). Comparison of multivariate methods for inferential modeling of soil carbon using visible/near-infrared spectroscopy. *Geoderma*, 146, 14–25.
- Vasques, G.M., Grunwald, S., & Sickman, J.O. (2009). Modeling of soil organic carbon fractions using visible–near-infrared spectroscopy. *Soil Science Society of America Journal*, 73, 176–184.
- VDLUFA (1991). VDLUFA Methodenbuch I, Die Untersuchung von Böden, 4. Aufl., VDLUFA-Verlag, Darmstadt.
- Vereecken, H., Maes, J., Feyen, J., & Darius, P. (1989). Estimating the soil moisture retention characteristic from texture, bulk density, and carbon content. *Soil Science*, 148: 6, 389–403.
- Vereecken, H., Maes, J., & Feyen, J. (1990). Estimating unsaturated hydraulic conductivity from easily measured soil properties. *Soil Science*, 149, 1–12.
- Villwock, G. (1985). Abbildungsverhalten bodenbedingter Standortmerkmale in multispektralen Luftbildern als Grundlage zur Erfassung der Heterogenität landwirtschaftlicher Nutzflächen. *Wissenschaftliche Zeitschrift der Universität Halle*, XXXIV'85, M, Heft 3, 37–45.
- Viscarra Rossel, R.A., Walvoort, D.J.J., McBratney, A.B., Janik, L.J., & Skjemstad, J.O. (2006). Visible, near-infrared, mid-infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. *Geoderma*, 131, 59–75.
- Viscarra Rossel, R.A. (2008). ParLeS: Software for chemometric analysis of spectroscopic data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 90, 72–83.
- Viscarra Rossel, R.A., Cattle, S.R., Ortega, A., & Fouad, Y. (2009). In situ measurements of soil colour, mineral composition and clay content by vis–NIR spectroscopy. *Geoderma*, 150, 253–266.

- Viscarra Rossel, R.A., & Behrens, T. (2010). Using data mining to model and interpret soil diffuse reflectance spectra. *Geoderma*, 158, 46–54.
- von Werner, M. (1995). GIS-orientierte Methoden der digitalen Reliefanalyse zur Modellierung von Bodenerosion in kleinen Einzugsgebieten. Dissertation, Freie Universität Berlin.
- von Schönemark, M., Geiger, B., & Röser, H. (Hrsg.) (2004). Reflection properties of vegetation and soil with a BRDF data base. Wissenschaft und Technik Verlag, Berlin.
- Wagner, B., Tarnawski, V.R., Hennings, V., Müller, U., Wessolek, G., & Plagge, R. (2001). Evaluation of pedo-transfer functions for unsaturated soil hydraulic conductivity using an independent data set. *Geoderma*, 102, 275–297.
- Waiser, T.H., Morgan, C.L.S., Brown, D.J., & Hallmark, C.T. (2007). In situ characterization of soil clay content with visible near-infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Soil Science Society America Journal*, 71, 389–396.
- Wang, Y., Amundson, R., & Niu, X.-F. (2000). Seasonal and altitudinal variation in decomposition of soil organic matter inferred from radiocarbon measurements of soil CO₂ flux. *Global Biogeochemical Cycles*, 14: 1, 199–211.
- Wetterkontor (2012). Monats- und Jahreswerte der Temperatur und des Niederschlages der Station Greifswald für die Jahre 2004, 2005, 2006, 2008. URL: <http://www.wetterkontor.de/de/monatswerte-station.asp?id=10184&yr=2012&mo=-1>
- WetterOnline (2004). WetterOnline – Rückblick für die Station Greifswald vom 3.08.-09.08.2004, URL: <http://www.wetteronline.de/Mecklenburg-Vorp/Greifswald.htm>
- WetterOnline (2005). WetterOnline – Rückblick für die Station Greifswald vom 21.05.-27.05.2005, URL: <http://www.wetteronline.de/Mecklenburg-Vorp/Greifswald.htm>
- WetterOnline (2008). WetterOnline – Rückblick für die Station Greifswald vom 23.07.-29.07.2008, URL: <http://www.wetteronline.de/Mecklenburg-Vorp/Greifswald.htm>
- Whiting, M.L., Li, L., & Ustin, S.L. (2004). Predicting water content using Gaussian model on soil spectra. *Remote Sensing of Environment*, 89, 535–552.
- Wold, H. (1982). Soft modeling: the basic design and some extensions. In: Jöreskog, J.-K., & Wold, H. (Hrsg.). Systems under indirect observation: causality, structure, prediction. Volume 2, Elsevier Science, Amsterdam, North Holland, 1–53.
- Wold, H. (1985). Partial least squares. In: Kotz, S., & Johnson, N.L. (Hrsg.). Encyclopedia of the Statistical Sciences, Volume 6, John Wiley & Sons, New York, 581–591.
- Wold, S., Martens, H., & Wold, H. (1983). The multivariate calibration problem in chemistry solved by the PLS method. In: Ruhe, A., & Kågström, B. (Hrsg.). Lecture Notes in Mathematics 973, Proceedings of the Conference on Matrix Pencils, 22-24 March 1982, Springer-Verlag, Heidelberg, 286–293.
- Wold, S., Sjöström, M., & Eriksson, L. (2001). PLS-regression: a basic tool of chemometrics. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 58, 109–130.
- Workman, J. Jr., & Weyer, L. (2008). Practical guide to interpretive near-infrared spectroscopy. CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, Florida, USA.
- Wu, C.-Y., Jacobson, A.R., Laba, M., & Baveye, P.C. (2009). Accounting for surface roughness effects in the near-infrared reflectance sensing of soils. *Geoderma*, 152, 171–180.
- Zabel, E. (2005). Zabel Geoinformatik. Alt Tellin.
- Zhu, Y.D., Weindorf, D.C., Chakraborty, S., Haggard, B., Johnson, S., & Bakr, N. (2010). Characterizing surface soil water with field portable diffuse reflectance spectroscopy. *Journal of Hydrology*, 391, 135–142.
- Ziadat, F.M., Taylor, J.C., & Brewer, T.R. (2002). Merging Landsat TM imagery with topographic data to aid soil mapping in the Badia region of Jordan. *Journal of Arid Environments*, 54, 527–541.
- Ziechmann, W. (1964). Spectroscopic investigations of lignin, humic substances and peat. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 28, 1555–1566.

Anhang

A. Referenzanalytik

Anhang A 1: Bodenchemische und -physikalische Eigenschaften aller Bodenproben (*Bodenserie Demmin*).

Nr.	MP-Nr.	Bodenart nach KA4	S (63-2000µm)	U (2-63µm)	T (<2µm)	TC	IC	OC	pH	Fe ₂ O ₃
			[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	-
1	1	Sl4	55,06	29,82	15,12	1,660	0,014	1,646	7,15	1,77
2	2	Lt2	39,70	32,87	27,43	1,999	0,032	1,967	7,19	2,87
3	3	Ls4	49,71	27,38	22,91	1,487	0,020	1,467	7,24	2,37
4	4	Ls4	55,37	27,19	17,44	1,851	0,030	1,821	7,28	2,01
5	5	Ls4	59,87	22,46	17,67	1,308	0,372	0,936	7,44	2,21
6	6	Ls4	51,54	28,21	20,25	1,922	1,079	0,843	7,49	2,51
7	7	Sl4	63,13	21,67	15,21	1,114	0,193	0,920	7,45	2,09
8	8	Sl4	63,77	21,44	14,80	1,131	0,173	0,958	7,51	2,07
9	9	Sl4	67,24	19,86	12,90	1,408	0,125	1,283	7,36	1,62
10	10	Sl4	64,63	21,75	13,62	1,058	0,026	1,032	7,33	1,98
11	11	Sl3	65,89	24,69	9,42	0,949	0,010	0,943	7,19	1,46
12	12	Su3	63,49	28,75	7,77	0,751	0,000	0,751	6,51	1,18
13	13	Sl3	63,88	26,01	10,11	0,979	0,000	0,979	6,54	1,26
14	14	Sl4	62,51	21,78	15,71	1,052	0,020	1,032	7,24	2,02
15	15	Sl4	63,98	21,14	14,87	0,830	0,095	0,735	7,39	2,08
16	16	Sl3	66,59	21,61	11,80	1,052	0,013	1,042	7,30	1,59
17	17	Sl3	71,90	19,63	8,47	1,090	0,070	1,020	7,45	1,29
18	18	Sl4	60,56	24,45	14,98	1,099	0,427	0,672	7,37	2,12
19	19	Sl3	73,41	16,86	9,73	1,199	0,515	0,684	7,55	1,27
20	20	Ls4	56,92	23,36	19,72	1,307	0,715	0,592	7,49	2,13
21	21	Lts	39,98	28,08	31,94	2,237	0,020	2,217	7,25	2,51
22	22	Lts	44,20	29,12	26,68	1,742	0,010	1,732	7,12	2,27
23	23	Sl4	64,15	22,14	13,71	1,836	0,800	1,036	7,52	1,66
24	24	Sl3	69,56	18,71	11,73	1,533	0,327	1,206	7,54	1,35
25	25	Lts	45,34	24,30	30,36	1,482	0,030	1,452	7,44	2,40
26	26	Sl3	61,19	28,30	10,51	1,002	0,000	1,002	7,04	1,40
27	27	Ls3	45,76	31,17	23,07	1,730	0,040	1,690	7,31	2,07
28	28	Lt2	41,40	30,25	28,36	1,706	0,020	1,686	7,33	2,37
29	29	Ls4	59,04	23,06	17,90	1,181	0,275	0,906	7,54	2,20
30	30	Sl4	61,90	22,82	15,28	0,875	0,010	0,865	7,19	1,86
31	31	Sl3	65,38	25,30	9,32	1,048	0,000	1,048	7,15	1,18
32	32	Sl3	68,46	19,83	11,71	0,946	0,515	0,431	7,65	1,47
33	33	Sl3	72,23	17,27	10,50	1,044	0,010	1,034	7,38	1,22
34	34	Sl3	71,35	19,14	9,51	0,921	0,090	0,831	7,43	1,28
35	35	Sl4	64,01	22,42	13,57	1,012	0,020	0,992	7,54	1,56
36	36	Sl3	72,23	16,55	11,23	1,194	0,620	0,574	7,65	1,41
37	37	Ls4	51,38	25,55	23,07	1,343	0,020	1,323	7,40	2,09
38	38	Sl3	66,67	23,42	9,92	0,990	0,020	0,970	7,05	1,32
39	39	Sl3	71,06	17,21	11,74	1,434	0,260	1,174	7,55	1,34
40	40	Sl3	66,75	23,08	10,18	1,010	0,075	0,935	7,67	1,25

Fortsetzung auf der nächsten Seite.

Nr.	MP.- Nr.	Bodenart nach KA4	S (63- 2000µm)	U (2-63µm)	T (<2µm)	TC	IC	OC	pH	Fe ₂ O ₃
			[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	-	[%]
41	41	SI3	63,59	25,51	10,90	1,014	0,000	1,014	7,16	1,19
42	42	SI4	67,03	20,23	12,75	1,097	0,240	0,857	7,62	1,48
43	43	SI4	63,60	22,51	13,89	1,006	0,105	0,901	7,60	1,81
44	44	Ls3	47,72	31,81	20,47	1,384	0,090	1,294	7,51	2,00
45	45	SI4	55,97	30,79	13,24	1,063	0,010	1,053	7,59	1,17
46	46	SI4	53,13	30,13	16,74	1,745	0,605	1,140	7,59	1,69
47	47	Su3	65,67	28,95	5,38	0,794	0,000	0,794	6,67	1,02
48	48	Ss	89,96	6,19	3,84	1,161	0,020	1,141	6,80	0,70
49	49	Su3	68,70	25,96	5,33	0,681	0,000	0,681	6,71	0,90
50	50	Su3	65,45	29,57	4,97	0,833	0,000	0,833	6,93	0,92
51	51	SI2	78,83	13,94	7,23	1,176	0,000	1,176	7,24	0,99
52	52	SI2	77,08	15,75	7,17	0,859	0,000	0,859	7,43	0,99
53	53	Ss	88,36	7,99	3,65	0,919	0,000	0,919	7,28	0,66
54	54	Su3	65,15	28,77	6,08	0,638	0,010	0,628	6,53	0,91
55	55	Su3	64,75	28,50	6,75	0,871	0,000	0,871	6,57	0,90
56	56	SI3	56,78	32,66	10,56	0,964	0,000	0,964	5,02	1,35
57	57	Su3	67,02	26,46	6,52	0,703	0,000	0,703	6,92	0,89
58	58	Su3	65,23	27,89	6,87	0,776	0,000	0,776	6,99	0,85
59	59	Su3	63,91	30,78	5,31	0,779	0,000	0,779	6,66	0,93
60	60	Su3	65,15	28,63	6,23	0,812	0,040	0,772	6,83	0,81
61	61	SI3	64,63	23,74	11,63	0,554	0,000	0,554	6,27	1,65
62	62	SI3	57,12	34,55	8,32	0,846	0,000	0,846	6,04	1,13
63	63	SI4	57,51	29,68	12,81	0,838	0,000	0,838	6,32	1,59
64	64	SI4	62,36	22,56	15,08	0,501	0,000	0,501	6,26	2,12
65	65	SI3	59,97	30,85	9,18	0,830	0,000	0,830	6,01	1,11
66	66	SI3	59,86	30,34	9,80	0,849	0,000	0,849	6,48	1,23
67	67	SI3	57,40	31,11	11,48	0,815	0,000	0,815	6,17	1,45
68	68	Ls3	42,36	37,20	20,44	1,783	0,065	1,718	7,19	1,94
69	69	Ls3	39,90	38,48	21,62	1,788	0,040	1,748	7,25	2,07
70	70	Ls3	47,58	39,57	12,85	2,479	0,000	2,479	7,05	1,01
71	71	Ls3	48,33	34,23	17,43	1,090	0,010	1,080	7,07	1,93
72	72	Ls3	47,45	33,85	18,70	1,402	0,010	1,392	7,07	2,06
73	73	Ls3	43,57	37,17	19,26	1,637	0,040	1,597	7,34	1,79
74	74	Ls3	38,02	38,23	23,75	1,197	0,115	1,082	7,36	2,69
75	75	Ls3	45,55	32,82	21,63	1,450	0,065	1,385	7,29	2,33
76	76	Ls3	44,28	38,47	17,25	1,242	0,020	1,222	7,19	1,77
77	77	SI4	52,68	32,63	14,69	0,952	0,000	0,952	6,42	1,81
78	78	SI4	60,55	23,60	15,84	1,095	0,000	1,095	6,86	1,75
79	79	SI3	67,23	22,29	10,48	0,996	0,000	0,996	6,58	1,24
80	80	SI2	75,42	18,40	6,18	0,688	0,000	0,688	6,08	0,88
81	81	SI2	78,07	16,71	5,22	0,619	0,000	0,619	5,76	0,83
82	82	SI2	77,66	16,70	5,63	0,643	0,000	0,643	5,52	0,87
83	83	SI2	76,83	17,16	6,01	0,698	0,000	0,698	6,47	0,84
84	84	SI2	73,54	20,21	6,24	0,629	0,000	0,629	5,49	0,87
85	85	SI2	69,98	22,47	7,55	0,727	0,000	0,727	6,17	0,90
86	86	SI2	69,45	22,79	7,76	0,767	0,000	0,767	7,41	0,97
87	87	SI2	68,97	23,89	7,14	0,653	0,020	0,633	7,45	1,06
88	88	SI2	72,77	21,56	5,67	0,714	0,000	0,714	6,91	0,83

Fortsetzung auf der nächsten Seite.

Nr.	MP.- Nr.	Bodenart nach KA4	S (63- 2000µm)	U (2-63µm)	T (<2µm)	TC	IC	OC	pH	Fe ₂ O ₃
			[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	-	[%]
89	89	Sl4	71,67	14,85	13,48	0,706	0,000	0,706	7,03	0,94
90	90	Sl2	73,01	20,37	6,62	0,679	0,000	0,679	6,48	0,85
91	91	Sl2	77,15	17,59	5,25	0,629	0,000	0,629	6,26	0,75
92	92	Su2	73,56	21,60	4,84	0,841	0,000	0,841	6,16	0,78
93	93	Sl2	69,68	24,98	5,33	0,667	0,000	0,667	6,09	0,92
94	94	Sl4	60,59	26,11	13,30	0,752	0,010	0,742	7,39	2,04
95	95	Su2	73,05	22,16	4,78	0,668	0,000	0,668	6,14	0,85
96	96	Su2	74,30	20,67	5,03	0,754	0,000	0,754	6,02	0,85
97	97	Sl3	69,20	22,69	8,10	0,731	0,000	0,731	6,28	1,17
98	104	Sl4	57,82	29,07	13,11	1,242	0,000	1,242	6,65	1,53
99	105	Sl3	68,65	22,46	8,89	0,825	0,090	0,735	7,36	1,40
100	106	Sl3	66,10	25,78	8,13	0,933	0,000	0,933	6,06	1,11
101	107	Su3	64,76	27,39	7,85	0,948	0,010	0,938	5,63	1,22
102	108	Su3	65,52	27,36	7,12	0,898	0,000	0,898	6,13	1,13
103	110	Su3	61,68	30,62	7,69	0,943	0,000	0,943	6,27	1,16
104	121	Ls3	46,18	34,19	19,63	1,040	0,000	1,040	7,07	2,28
105	127	Sl4	52,16	32,96	14,89	1,363	0,010	1,353	6,25	1,63
106	128	Ls3	50,02	32,40	17,58	1,959	0,000	1,959	6,88	1,52
107	129	Sl3	57,70	33,36	8,94	0,840	0,000	0,840	6,45	1,19
108	130	Sl3	70,38	19,82	9,79	0,797	0,060	0,737	7,44	1,46
109	131	Sl3	61,26	30,42	8,32	0,836	0,000	0,836	7,38	1,08
110	132	Sl3	59,89	31,82	8,29	0,830	0,000	0,830	7,03	1,05
111	133	Sl4	50,74	32,37	16,90	1,400	0,000	1,400	6,93	1,87
112	134	Sl4	58,98	28,43	12,58	1,025	0,000	1,025	7,11	1,55
113	135	Ls4	59,38	23,03	17,59	1,149	0,000	1,149	7,00	2,11
114	136	Ls4	57,24	24,09	18,66	1,056	0,000	1,056	7,06	2,19
115	137	Sl4	60,40	26,11	13,49	1,020	0,000	1,020	6,51	1,59
116	138	Sl4	60,00	23,10	16,90	0,792	0,000	0,792	6,35	2,08
117	139	Sl3	67,32	24,52	8,16	0,853	0,000	0,853	6,19	1,04
118	149	Sl4	62,29	22,56	15,16	1,534	0,190	1,344	7,50	1,46
119	150	Sl3	58,42	31,03	10,56	0,968	0,000	0,968	5,55	1,13
120	151	Sl3	60,17	29,62	10,21	1,039	0,000	1,039	6,25	1,20
121	300	Su2	71,80	23,39	4,80	0,610	0,085	0,525	7,57	0,82
122	301	Su3	67,49	26,32	6,18	0,727	0,000	0,727	7,21	0,91
123	302	Su3	69,23	25,24	5,53	0,655	0,000	0,655	7,24	0,82
124	303	Su3	67,43	26,80	5,77	0,698	0,000	0,698	7,04	0,83
125	304	Su3	64,28	28,74	6,97	0,784	0,010	0,774	6,80	0,87
126	305	Su3	65,71	27,86	6,43	0,828	0,000	0,828	6,60	0,77
127	306	Sl4	59,67	28,26	12,07	1,302	0,120	1,182	7,47	1,36
128	307	Sl4	60,54	27,29	12,17	1,175	0,000	1,175	7,13	1,27
129	308	Sl3	60,47	30,58	8,95	0,896	0,010	0,886	4,43	1,13
130	500	Sl4	67,37	21,08	11,55	1,363	0,010	1,353	6,73	1,44
131	501	Lts	43,58	28,81	27,61	1,721	0,030	1,691	7,24	2,55
132	502	Lts	39,15	27,90	32,95	2,139	0,020	2,119	7,36	2,98
133	503	Lts	42,02	29,46	28,52	2,255	0,050	2,205	7,43	2,57
134	504	Ls4	47,54	27,73	24,73	2,031	0,020	2,011	7,42	2,16
135	505	Ls4	55,36	26,14	18,51	1,588	0,450	1,138	7,55	1,94

S: Sand, U: Schluff, T: Ton, TC: Gesamtkohlenstoff, IC: Carbonat-Kohlenstoff, OC: organischer Kohlenstoff

Anhang A 2: Statistische Kennwerte der bodenchemischen und -physikalischen Eigenschaften der *Bodenserie Buchholz*.

Parameter	Min	Max	Range	MW	Median	SD	VK
GS (630-2000 μm) [%]	2,61	7,35	4,74	4,68	4,75	1,11	23,60
MS (200-630 μm) [%]	13,14	35,66	22,52	22,26	23,06	4,55	20,45
FS (63-200 μm) [%]	23,39	49,41	26,02	33,88	35,45	5,18	15,30
S _{ges.} [%]	39,70	73,41	33,71	60,82	63,60	9,26	15,22
GU (20-63 μm) [%]	8,91	20,39	11,47	13,60	12,83	2,66	19,53
MU (6,3-20 μm) [%]	3,96	9,56	5,60	6,42	6,25	1,36	21,25
FU (2-6,3 μm) [%]	1,73	6,43	4,70	3,63	3,50	0,94	25,99
U _{ges.} [%]	16,55	32,87	16,33	23,65	23,06	4,08	17,26
T (<2 μm) [%]	7,77	31,94	24,17	15,53	13,71	6,30	40,54
TC [%]	0,751	2,237	1,486	1,270	1,114	0,358	28,19
IC [%]	0,00	1,079	1,079	0,181	0,040	0,257	141,68
OC [%]	0,431	2,217	1,786	1,098	1,002	0,391	35,59
Fe ₂ O ₃ [%]	1,18	2,87	1,69	1,78	1,77	0,46	25,62
pH	6,51	7,67	1,16	7,34	7,38	0,25	3,38

S: Sand, GS: Grobsand, MS: Mittelsand, FS: Feinsand, U: Schluff, GU: Grobschluff, MU: Mittelschluff, FU: Feinschluff, T: Ton, TC: Gesamtkohlenstoff, IC: Carbonat-Kohlenstoff, OC: organischer Kohlenstoff, MW: Mittelwert, SD: Standardabweichung, VK: Variationskoeffizient

Anhang A 3: Korrelationsmatrix der physikalisch-chemischen Kennwerte der *Bodenserie Demmin*.

	S	U	T	TC	IC	OC	Fe ₂ O ₃	pH
S	1							
U	-0,81	1						
T	-0,85	0,38	1					
TC	-0,69	0,34	0,78	1				
IC	-0,03	-0,15	0,18	0,31	1			
OC	-0,71	0,42	0,73	0,91	-0,11	1		
Fe ₂ O ₃	-0,77	0,32	0,93	0,65	0,26	0,57	1	
pH	-0,21	-0,09	0,42	0,44	0,40	0,28	0,42	1

S: Sand, U: Schluff, T: Ton, TC: Gesamtkohlenstoff, IC: Carbonat-Kohlenstoff, OC: organischer Kohlenstoff

Anhang A 4: Ergebnisse der Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA), der CNS-Bestimmung mittels Elementanalysator vario EL und der Bestimmung der Wassergehalte des Feinbodens und der Glühverluste (GV) für die *Bodenserie Buchholz*.

MP-Nr.		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
SiO ₂	[%]	81,02	73,51	75,36	77,92	77,34	70,87	81,50	81,29	82,75	81,09
Al ₂ O ₃	[%]	6,05	7,69	7,47	6,65	6,63	7,36	5,85	5,95	5,28	6,43
Fe ₂ O ₃	[%]	2,04	3,18	2,91	2,33	2,52	2,90	2,29	2,34	1,90	2,30
MnO	[%]	0,04	0,03	0,04	0,05	0,03	0,04	0,03	0,04	0,03	0,05
MgO	[%]	0,47	0,76	0,71	0,56	0,62	1,06	0,55	0,55	0,46	0,56
CaO	[%]	0,82	0,97	1,03	1,06	2,57	5,41	1,31	1,42	1,32	1,09
Na ₂ O	[%]	0,59	0,42	0,53	0,62	0,61	0,57	0,51	0,53	0,51	0,65
K ₂ O	[%]	1,82	1,94	1,97	1,91	1,96	2,28	1,87	1,89	1,64	2,06
TiO ₂	[%]	0,42	0,56	0,49	0,44	0,39	0,41	0,35	0,35	0,33	0,36
P ₂ O ₅	[%]	0,11	0,10	0,10	0,12	0,12	0,12	0,11	0,11	0,11	0,13
Ba	[µg/g]	293,95	264,54	293,20	306,65	298,30	309,75	289,95	281,25	263,90	315,65
Ce	[µg/g]	34,05	38,12	42,55	43,95	44,35	45,00	41,25	37,75	33,35	36,65
Cr	[µg/g]	30,85	57,64	42,80	31,15	30,70	34,00	24,90	27,30	24,35	25,55
Cu	[µg/g]	-	-	-	-	11,80	11,55	-	14,80	-	-
Ga	[µg/g]	6,90	10,95	11,65	7,90	8,95	11,20	10,05	7,20	6,75	9,20
La	[µg/g]	-	21,09	-	-	-	-	22,35	-	-	-
Mo	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Nb	[µg/g]	6,40	7,06	7,55	6,75	4,85	5,40	5,15	5,30	4,60	6,25
Ni	[µg/g]	-	14,08	16,10	12,15	-	14,15	-	15,15	-	-
Pb	[µg/g]	11,75	12,11	12,05	13,30	9,65	12,60	10,75	9,70	10,10	10,95
Rb	[µg/g]	68,45	75,52	78,95	76,55	68,65	75,55	65,75	65,10	58,20	78,10
Sc	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	15,40	-
Sn	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sr	[µg/g]	71,10	82,44	85,75	83,55	89,55	100,40	65,50	67,90	65,15	70,85
Th	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
U	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V	[µg/g]	31,90	61,67	58,60	40,25	38,55	47,60	32,75	35,60	34,45	36,65
Y	[µg/g]	10,90	13,23	13,40	13,10	14,50	15,00	12,15	12,35	9,20	13,45
Zn	[µg/g]	33,10	40,04	35,55	34,45	34,00	41,20	33,00	36,55	29,00	38,70
Zr	[µg/g]	244,65	211,76	214,10	222,25	180,20	173,35	189,55	183,95	195,80	198,70
Kristall- wasser	[%]	2	4,85	4,11	3,05	2,39	1,79	1,7	1,62	1,62	1,56
H ₂ O	[%]	1,62	4,35	3,61	2,66	1,89	1,29	1,2	1,12	1,12	1,06
C-gesamt	[%]	1,637	1,864	1,615	1,883	1,299	1,838	1,102	1,103	1,348	1,117
N-gesamt	[%]	0,177	0,213	0,183	0,199	0,119	0,105	0,107	0,105	0,136	0,111
S-gesamt	[%]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
GV 105°C	[%]	1,62	4,35	3,61	2,66	1,89	1,29	1,2	1,12	1,12	1,06
GV 550°C	[%]	5,98	10,02	8,63	7,72	5,84	5,6	4,78	4,74	4,91	4,54
GV 1030°C	[%]	6,36	10,63	9,13	8,11	6,99	8,71	5,39	5,31	5,43	5,06
Summe (Oxide+GV 1030°C)	[%]	99,76	99,78	99,74	99,76	99,77	99,74	99,77	99,77	99,77	99,78

Fortsetzung auf der nächsten Seite.

MP-Nr.		11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
SiO ₂	[%]	83,14	84,81	84,54	79,65	81,88	83,79	83,58	77,81	82,01	74,25
Al ₂ O ₃	[%]	6,19	5,80	5,55	7,24	6,22	5,45	5,27	6,50	4,96	6,89
Fe ₂ O ₃	[%]	1,90	1,57	1,65	2,62	2,44	1,91	1,69	2,53	1,66	2,78
MnO	[%]	0,05	0,05	0,05	0,06	0,04	0,04	0,04	0,04	0,04	0,03
MgO	[%]	0,45	0,34	0,38	0,62	0,57	0,43	0,41	0,61	0,48	0,69
CaO	[%]	0,75	0,64	0,61	0,95	0,99	0,73	1,41	2,82	2,93	3,92
Na ₂ O	[%]	0,79	0,76	0,67	0,74	0,55	0,58	0,68	0,61	0,56	0,56
K ₂ O	[%]	2,13	2,07	1,89	2,24	1,92	1,83	1,76	2,00	1,75	1,92
TiO ₂	[%]	0,35	0,37	0,35	0,38	0,38	0,36	0,30	0,37	0,28	0,41
P ₂ O ₅	[%]	0,11	0,09	0,10	0,12	0,09	0,10	0,09	0,10	0,11	0,10
Ba	[µg/g]	329,05	343,95	310,45	332,40	287,55	299,25	294,80	304,80	271,35	295,20
Ce	[µg/g]	39,35	35,85	34,40	45,65	41,20	34,85	32,80	43,05	29,25	41,05
Cr	[µg/g]	20,15	20,70	21,45	24,75	28,05	23,90	19,25	29,90	18,75	34,40
Cu	[µg/g]	-	-	-	12,10	-	-	-	-	-	-
Ga	[µg/g]	5,40	7,10	5,20	10,25	9,80	7,95	6,50	9,05	6,15	11,05
La	[µg/g]	-	-	-	22,80	-	-	-	-	-	-
Mo	[µg/g]	-	-	-	-	3,00	-	-	-	-	-
Nb	[µg/g]	5,10	5,45	4,80	6,80	5,75	4,70	-	5,55	-	5,15
Ni	[µg/g]	-	-	-	15,70	-	-	-	12,85	-	16,35
Pb	[µg/g]	12,90	10,00	10,70	14,95	10,65	11,25	13,90	10,15	-	9,85
Rb	[µg/g]	80,30	77,90	72,30	86,40	66,65	68,80	63,95	69,75	59,65	68,65
Sc	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	11,60	17,40	-	-
Sn	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sr	[µg/g]	68,85	68,00	65,55	73,25	63,00	64,80	69,00	82,45	72,80	97,45
Th	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
U	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V	[µg/g]	31,30	27,20	25,80	37,65	34,00	30,75	24,70	34,05	29,10	48,65
Y	[µg/g]	11,20	11,45	10,50	15,50	12,85	11,10	9,15	14,40	9,35	16,65
Zn	[µg/g]	34,35	25,30	28,10	44,40	32,65	31,25	26,85	37,70	28,30	34,85
Zr	[µg/g]	199,25	241,85	207,95	209,75	212,20	209,00	184,25	190,55	159,25	178,25
Kristall- wasser	[%]	1,1	0,9	1,12	1,65	1,64	1,52	1,29	1,99	1,3	2,8
H ₂ O	[%]	0,77	0,68	0,79	1,2	1,14	1,02	0,79	1,49	0,8	2,3
C-gesamt	[%]	0,9663	0,7746	0,9504	1,0736	0,7674	1,0261	1,128	1,1053	1,2012	1,4004
N-gesamt	[%]	0,0986	0,0888	0,111	0,1224	0,0923	0,1178	0,1031	0,0906	0,0869	0,1068
S-gesamt	[%]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
GV 105°C	[%]	0,77	0,68	0,79	1,2	1,14	1,02	0,79	1,49	0,8	2,3
GV 550°C	[%]	3,6	3,05	3,66	4,71	4,09	4,06	4,05	5,2	3,44	5,61
GV 1030°C	[%]	3,93	3,27	3,99	5,16	4,72	4,58	4,56	6,38	5,02	8,21
Summe (Oxide+GV 1030°C)	[%]	99,78	99,78	99,79	99,77	99,78	99,78	99,78	99,78	99,80	99,76

Fortsetzung auf der nächsten Seite.

MP-Nr.		21	22	23	24	25	26	27	28	29	30
SiO ₂	[%]	71,47	72,29	74,18	81,03	73,12	83,09	72,73	69,71	76,57	79,47
Al ₂ O ₃	[%]	8,95	8,01	5,65	5,17	8,32	6,01	8,16	9,26	7,12	7,01
Fe ₂ O ₃	[%]	3,57	3,16	2,18	1,83	3,37	1,88	3,37	3,86	2,82	2,50
MnO	[%]	0,04	0,03	0,03	0,03	0,03	0,05	0,04	0,04	0,05	0,05
MgO	[%]	0,91	0,82	0,63	0,47	0,89	0,42	0,81	0,93	0,67	0,63
CaO	[%]	1,26	1,05	4,27	1,75	1,14	0,67	1,13	1,16	2,17	0,80
Na ₂ O	[%]	0,45	0,51	0,54	0,51	0,42	0,71	0,49	0,45	0,62	0,69
K ₂ O	[%]	2,05	2,00	1,82	1,73	1,97	2,07	2,01	2,03	2,14	2,18
TiO ₂	[%]	0,58	0,54	0,33	0,31	0,52	0,38	0,62	0,65	0,41	0,38
P ₂ O ₅	[%]	0,13	0,10	0,14	0,12	0,09	0,10	0,12	0,12	0,12	0,09
Ba	[µg/g]	283,19	278,36	286,15	270,00	277,75	314,75	285,34	285,38	320,05	332,50
Ce	[µg/g]	45,76	46,49	39,45	30,10	50,20	40,80	42,20	43,16	48,50	43,20
Cr	[µg/g]	51,67	46,22	22,95	21,80	48,35	19,45	56,74	58,47	29,10	26,35
Cu	[µg/g]	15,28	-	11,75	-	12,75	-	12,65	-	-	-
Ga	[µg/g]	11,34	10,74	9,25	7,80	11,30	8,25	11,39	13,58	11,65	11,05
La	[µg/g]	22,23	23,60	-	-	23,00	-	21,89	23,44	-	21,55
Mo	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Nb	[µg/g]	7,75	7,59	5,05	-	6,80	5,15	7,71	8,36	6,10	6,40
Ni	[µg/g]	26,17	17,43	-	-	22,15	-	16,50	18,04	13,75	12,00
Pb	[µg/g]	13,98	13,84	9,65	9,55	13,80	11,85	13,50	13,67	10,55	13,50
Rb	[µg/g]	89,09	79,49	61,50	60,45	86,95	76,90	80,73	86,42	77,90	84,20
Sc	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	20,39	29,15	-
Sn	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sr	[µg/g]	92,27	81,89	86,80	66,05	85,90	62,90	87,64	91,02	81,35	70,75
Th	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
U	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V	[µg/g]	72,24	67,03	38,70	30,25	67,30	34,50	70,59	80,40	47,65	40,65
Y	[µg/g]	14,52	14,68	11,00	9,60	15,05	11,60	14,40	15,83	14,30	13,95
Zn	[µg/g]	46,56	41,96	37,40	29,00	42,35	32,95	40,23	49,27	39,90	38,70
Zr	[µg/g]	193,96	221,84	166,95	163,70	192,45	207,20	228,47	217,72	187,50	197,70
Kristall- wasser	[%]	2,71	5,57	4,07	2,88	4,64	1,8	3,42	4,46	3	2,84
H ₂ O	[%]	2,21	5,07	3,57	2,38	4,14	1,3	2,92	3,96	2,5	2,34
C-gesamt	[%]	2,5448	1,8487	1,8526	1,412	1,4422	0,9467	2,2174	2,1579	1,1384	0,8617
N-gesamt	[%]	0,2712	0,2146	0,1305	0,1357	0,1702	0,111	0,2492	0,2504	0,1107	0,1046
S-gesamt	[%]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
GV 105°C	[%]	2,21	5,07	3,57	2,38	4,14	1,3	2,92	3,96	2,5	2,34
GV 550°C	[%]	8,89	10,02	7,21	5,48	8,61	3,85	9,03	9,98	5,51	5,15
GV 1030°C	[%]	10,37	11,28	9,99	6,81	9,89	4,42	10,3	11,55	7,1	5,96
Summe (Oxide+GV 1030°C)	[%]	99,78	99,78	99,76	99,76	99,75	99,79	99,78	99,77	99,78	99,77

Fortsetzung auf der nächsten Seite.

MP-Nr.		31	32	33	34	35	36	37	38	39	40
SiO ₂	[%]	83,56	79,48	84,83	84,12	81,82	79,29	77,23	83,63	80,60	83,63
Al ₂ O ₃	[%]	5,57	5,75	4,82	5,21	6,40	5,56	7,86	5,77	5,38	5,88
Fe ₂ O ₃	[%]	1,70	2,11	1,71	1,69	2,34	2,04	3,22	1,93	1,93	1,79
MnO	[%]	0,05	0,03	0,03	0,04	0,04	0,03	0,04	0,05	0,04	0,05
MgO	[%]	0,37	0,50	0,37	0,40	0,54	0,53	0,77	0,44	0,52	0,45
CaO	[%]	0,74	3,49	0,79	1,04	0,76	3,55	0,99	0,69	2,43	1,01
Na ₂ O	[%]	0,66	0,58	0,49	0,58	0,64	0,56	0,51	0,71	0,56	0,74
K ₂ O	[%]	1,90	1,80	1,59	1,77	2,04	1,82	1,96	2,00	1,83	2,05
TiO ₂	[%]	0,37	0,33	0,31	0,34	0,39	0,30	0,51	0,38	0,31	0,35
P ₂ O ₅	[%]	0,10	0,09	0,11	0,08	0,09	0,10	0,10	0,12	0,14	0,11
Ba	[µg/g]	307,35	281,85	268,15	288,85	313,20	284,80	281,20	317,80	286,85	316,05
Ce	[µg/g]	37,20	31,75	35,35	34,05	43,65	38,15	44,75	42,15	31,25	36,40
Cr	[µg/g]	20,35	21,80	20,55	19,60	25,25	20,75	42,45	20,85	20,40	21,60
Cu	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	11,80	-
Ga	[µg/g]	6,70	7,70	6,40	6,55	7,80	8,25	12,75	8,50	6,95	7,45
La	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	28,90	22,85	-	-
Mo	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Nb	[µg/g]	5,45	4,55	-	-	5,75	-	7,15	5,30	4,65	4,65
Ni	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	19,30	-	-	-
Pb	[µg/g]	11,80	-9,30	-9,30	-9,30	11,75	-	12,35	10,40	10,20	11,75
Rb	[µg/g]	73,40	62,35	55,95	62,70	75,65	61,10	78,25	72,30	63,80	74,50
Sc	[µg/g]	-	-	-	-	-	17,80	-	-	-	-
Sn	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Sr	[µg/g]	64,45	76,45	62,25	64,00	65,80	77,10	84,10	65,20	71,30	67,85
Th	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
U	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
V	[µg/g]	31,25	35,50	29,20	30,10	40,60	31,60	60,50	34,75	33,90	25,60
Y	[µg/g]	10,60	9,70	9,95	8,15	12,50	11,00	14,85	12,75	9,60	11,75
Zn	[µg/g]	27,20	32,25	28,10	24,35	32,55	31,65	37,75	32,80	32,80	34,30
Zr	[µg/g]	218,80	156,60	183,70	198,65	202,30	143,20	218,05	241,45	161,70	199,55
Kristall- wasser	[%]	2,16	1,57	1,96	2,03	1,6	1,59	1,72	1,64	1,65	1,19
H ₂ O	[%]	1,66	1,07	1,46	1,53	1,1	1,09	1,22	1,14	1,15	0,69
C-gesamt	[%]	1,0025	1,036	1,0307	0,8909	1,0445	1,2706	1,3419	0,9616	1,5683	0,9534
N-gesamt	[%]	0,1161	0,0627	0,1164	0,0956	0,12	0,0835	0,1593	0,1071	0,1374	0,1046
S-gesamt	[%]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
GV 105°C	[%]	1,66	1,07	1,46	1,53	1,1	1,09	1,22	1,14	1,15	0,69
GV 550°C	[%]	4,2	3,7	4,11	3,89	3,94	3,65	5,26	3,48	4,41	3,07
GV 1030°C	[%]	4,77	5,64	4,76	4,52	4,71	6,01	6,57	4,07	6,05	3,73
Summe (Oxide+GV 1030°C)	[%]	99,79	99,79	99,79	99,79	99,78	99,79	99,76	99,77	99,79	99,78

Fortsetzung auf der nächsten Seite.

MP-Nr.		41	42	43	MW	SD	Min	Max
SiO ₂	[%]	83,36	81,57	82,13	79,46	4,34	69,71	84,83
Al ₂ O ₃	[%]	5,74	5,88	5,73	6,39	1,09	4,82	9,26
Fe ₂ O ₃	[%]	1,85	2,08	2,01	2,33	0,60	1,57	3,86
MnO	[%]	0,06	0,04	0,04	0,04	0,01	0,03	0,06
MgO	[%]	0,40	0,51	0,49	0,58	0,17	0,34	1,06
CaO	[%]	0,70	1,63	1,57	1,57	1,13	0,61	5,41
Na ₂ O	[%]	0,65	0,58	0,58	0,59	0,09	0,42	0,79
K ₂ O	[%]	1,88	1,93	1,90	1,94	0,15	1,59	2,28
TiO ₂	[%]	0,39	0,35	0,34	0,40	0,09	0,28	0,65
P ₂ O ₅	[%]	0,08	0,11	0,11	0,11	0,01	0,08	0,14
Ba	[µg/g]	315,20	294,60	300,10	297,10	19,42	263,90	343,95
Ce	[µg/g]	36,90	37,75	34,75	39,27	5,15	29,25	50,20
Cr	[µg/g]	23,85	25,45	22,35	29,23	11,35	18,75	58,47
Cu	[µg/g]	-	-	-	12,72	1,38	11,55	15,28
Ga	[µg/g]	9,25	8,90	7,90	8,85	2,07	5,20	13,58
La	[µg/g]	-	-	-	23,06	2,08	21,09	28,90
Mo	[µg/g]	-	-	-	3,00	-	3,00	3,00
Nb	[µg/g]	6,60	4,60	4,90	5,87	1,08	4,55	8,36
Ni	[µg/g]	-	-	-	16,37	3,75	12,00	26,17
Pb	[µg/g]	10,55	10,45	11,05	10,09	5,71	-9,30	14,95
Rb	[µg/g]	72,60	69,35	67,75	72,06	8,50	55,95	89,09
Sc	[µg/g]	-	-	13,40	17,88	5,76	11,60	29,15
Sn	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-
Sr	[µg/g]	65,75	67,55	67,45	74,72	10,50	62,25	100,40
Th	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-
U	[µg/g]	-	-	-	-	-	-	-
V	[µg/g]	30,05	29,45	31,65	40,34	14,40	24,70	80,40
Y	[µg/g]	11,55	11,20	11,05	12,30	2,13	8,15	16,65
Zn	[µg/g]	27,85	34,40	32,85	34,57	5,68	24,35	49,27
Zr	[µg/g]	226,75	190,05	196,65	198,18	23,49	143,20	244,65
Kristall- wasser	[%]	1,78	1,73	1,63	2,27	1,12	0,90	5,57
H ₂ O	[%]	1,28	1,23	1,13	1,79	1,11	0,68	5,07
C-gesamt	[%]	1,0514	1,0384	1,0067	1,30	0,42	0,77	2,54
N-gesamt	[%]	0,1143	0,0973	0,0941	0,13	0,05	0,06	0,27
S-gesamt	[%]	-	-	-	-	-	-	-
GV 105°C	[%]	1,28	1,23	1,13	1,79	1,11	0,68	5,07
GV 550°C	[%]	4,07	3,99	3,83	5,34	2,04	3,05	10,02
GV 1030°C	[%]	4,68	5,09	4,9	6,37	2,29	3,27	11,55
Summe (Oxide+GV 1030°C)	[%]	99,78	99,77	99,79	99,77	0,01	99,74	99,80

MW: Mittelwert, SD: Standardabweichung, GV: Glühverlust

Anhang A 5: Durchschnittschemismen der *Bodenserie Buchholz* basierend auf den Ergebnissen der RFA gruppiert nach Bodenart nach KA4 (AG Boden, 1994).

Bodenart (KA4)	Ls3*			Ls4			Lt2		Lts		Sl3		Sl4		Su3*
	MW	MW	SD	MW	SD	MW									
Sand [%]	45,76	54,83	4,01	40,55	1,20	43,17	2,82	68,13	3,68	63,20	3,04	63,49			
Schluff [%]	31,17	25,32	2,35	31,56	1,86	27,17	2,54	21,45	3,79	22,46	2,49	28,75			
Ton [%]	23,07	19,85	2,39	27,89	0,66	29,66	2,70	10,42	1,02	14,34	0,97	7,77			
SiO ₂ [%]	72,73	75,65	2,46	71,61	2,68	72,29	0,82	82,73	1,73	80,47	2,30	84,81			
Al ₂ O ₃ [%]	8,16	7,14	0,45	8,47	1,11	8,43	0,48	5,52	0,37	6,17	0,55	5,80			
Fe ₂ O ₃ [%]	3,37	2,78	0,29	3,52	0,48	3,37	0,21	1,83	0,14	2,27	0,22	1,57			
MnO [%]	0,04	0,04	0,01	0,03	0,01	0,04	0,01	0,04	0,01	0,04	0,01	0,05			
MgO [%]	0,81	0,73	0,16	0,84	0,12	0,87	0,05	0,44	0,05	0,55	0,06	0,34			
CaO [%]	1,13	2,45	1,69	1,06	0,14	1,15	0,11	1,45	1,05	1,52	0,99	0,64			
Na ₂ O [%]	0,49	0,57	0,04	0,44	0,02	0,46	0,05	0,63	0,08	0,59	0,07	0,76			
K ₂ O [%]	2,01	2,02	0,14	1,99	0,06	2,00	0,04	1,86	0,14	1,95	0,16	2,07			
TiO ₂ [%]	0,62	0,44	0,05	0,60	0,06	0,55	0,03	0,34	0,03	0,36	0,03	0,37			
P ₂ O ₅ [%]	0,12	0,11	0,01	0,11	0,01	0,11	0,02	0,10	0,02	0,11	0,01	0,09			
Ba [µg/g]	285,34	300,62	12,68	274,96	14,74	279,76	2,98	297,28	19,21	299,69	19,82	343,95			
Ce [µg/g]	42,20	44,31	2,31	40,64	3,57	47,48	2,38	35,30	3,75	39,37	3,99	35,85			
Cr [µg/g]	56,74	34,94	5,56	58,05	0,58	48,75	2,75	20,91	1,47	26,00	2,48	20,70			
Cu [µg/g]	12,65	11,68	0,18	-	-	14,02	1,79	11,80	-	12,88	1,67	-			
Ga [µg/g]	11,39	10,74	1,70	12,26	1,86	11,12	0,34	7,19	1,14	8,78	1,36	7,10			
La [µg/g]	21,89	28,90	-	22,27	1,66	22,94	0,69	22,85	-	22,23	0,63	-			
Mo [µg/g]	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3,00	-	-			
Nb [µg/g]	7,71	6,14	1,05	7,71	0,92	7,38	0,51	1,61	4,67	5,58	0,72	5,45			
Ni [µg/g]	16,50	15,30	2,51	16,06	2,81	21,92	4,37	-	-	13,93	1,78	-			
Pb [µg/g]	13,50	11,48	1,44	12,89	1,10	13,87	0,10	4,90	9,94	11,18	1,53	10,00			
Rb [µg/g]	80,73	74,93	4,43	80,97	7,71	85,18	5,04	67,57	7,17	70,53	8,35	77,90			
Sc [µg/g]	-	29,15	-	20,39	-	-	-	14,70	4,38	15,40	2,00	-			
Sr [µg/g]	87,64	88,88	7,35	86,73	6,06	86,69	5,24	67,77	4,54	70,58	6,91	68,00			
V [µg/g]	70,59	48,83	8,31	71,03	13,25	68,86	2,93	30,52	3,23	35,24	3,48	27,20			
Y [µg/g]	14,40	14,54	1,17	14,53	1,84	14,75	0,27	10,47	1,19	12,35	1,71	11,45			
Zn [µg/g]	40,23	36,81	2,85	44,65	6,53	43,63	2,55	30,13	3,01	35,46	3,96	25,30			
Zr [µg/g]	228,47	196,24	21,03	214,74	4,21	202,75	16,55	191,31	28,10	198,37	18,01	241,85			
C (CNS) [%]	2,22	1,50	0,28	2,01	0,21	1,95	0,56	1,09	0,19	1,16	0,30	0,77			
N (CNS) [%]	0,25	0,14	0,04	0,23	0,03	0,22	0,05	0,11	0,02	0,11	0,02	0,09			

MW: Mittelwert; *Keine Angaben zur Standardabweichung (SD) für Ls3 und Su3, da je nur ein Datenpunkt vorhanden.

Anhang A 6: Mineralogische Zusammensetzung der *Bodenserie Buchholz*. Quantitative Mineralgehalte (G. Böttcher, LUNG, schriftl. Mitteilung, 2008).

MP-Nr.	Quarz	Kalifeldspat	Albit	Calcit	Hornbende	Illit	Montmorillonit	Summe
1	64,7	7,99	2,04	0,32	4,85	6,19	8,97	95,06
2	52,07	7,88	-	0,26	3,94	7,86	23,24	95,25
3	54,58	8,22	-	0,28	4,71	7,51	19,42	94,72
4	60,51	7,52	2,13	0,69	1,82	7,63	13,00	93,30
5	60,87	7,41	2,02	2,90	3,53	8,39	9,22	94,34
6	54,04	8,14	0,96	7,58	7,32	10,73	4,92	93,69
7	67,38	7,23	1,96	1,15	3,24	7,71	5,87	94,54
8	65,24	8,54	1,10	0,93	6,98	6,02	7,22	96,03
9	69,74	6,37	2,11	1,12	2,81	7,60	5,87	95,62
10	65,68	7,98	3,28	0,85	3,39	8,48	4,86	94,52
11	67,67	8,96	5,05	0,55	2,82	7,33	2,91	95,29
12	68,77	9,96	4,46	0,26	4,88	5,17	3,60	97,10
13	69,30	8,90	3,50	0,20	4,83	5,16	4,72	96,61
14	60,58	9,84	2,68	0,29	7,92	7,70	6,99	96,00
15	65,44	8,44	1,31	0,50	7,04	6,63	7,22	96,58
16	68,41	8,76	2,28	0,28	4,99	4,77	7,00	96,49
17	68,51	8,49	3,17	1,04	5,15	4,36	5,77	96,49
18	60,09	8,95	1,20	2,92	7,49	6,46	8,96	96,07
19	67,72	8,56	1,98	3,63	5,42	4,05	5,79	97,15
20	55,56	8,17	0,47	5,33	6,60	7,15	12,96	96,24
21	52,18	5,42	-	1,24	9,90	14,32	10,54	93,60
22	49,22	8,32	-	0,94	2,30	7,53	26,90	95,21
23	55,17	9,63	0,24	6,01	1,94	2,50	20,40	95,89
24	64,68	8,86	1,16	2,11	2,21	3,10	14,23	96,35
25	51,65	6,95	-	0,98	5,24	10,16	21,48	96,46
26	65,67	10,15	3,37	0,27	4,27	4,78	8,39	96,90
27	52,51	7,09	-	0,98	7,21	10,5	15,36	93,65
28	47,53	6,01	-	1,16	7,12	12,91	20,06	94,79
29	56,39	9,82	1,05	2,54	5,87	6,47	14,28	96,42
30	59,41	10,18	2,09	0,44	4,89	6,11	13,41	96,53
31	66,84	9,49	3,00	0,40	2,86	3,96	10,37	96,92
32	63,86	8,11	1,69	4,45	6,43	5,70	6,93	97,17
33	70,57	7,80	1,63	0,52	3,19	3,70	9,47	96,88
34	68,55	8,79	2,25	0,76	3,33	3,81	9,71	97,20
35	64,61	9,23	2,33	0,42	6,45	6,45	7,07	96,56
36	63,76	8,54	1,68	4,91	5,96	5,09	7,18	97,12
37	59,95	6,04	0,01	0,91	9,92	11,99	6,23	95,05
38	66,66	9,98	3,34	0,29	4,72	4,32	7,76	97,07
39	65,11	8,89	1,82	3,08	5,32	4,46	7,63	96,31
40	67,08	9,91	3,79	0,72	5,48	5,05	5,12	97,15
41	67,08	8,93	2,93	0,35	4,15	4,97	8,23	96,64
42	65,25	9,01	1,92	1,71	5,57	5,48	7,84	96,78
43	66,16	8,93	2,04	1,64	5,45	5,26	7,38	96,86

Anhang A 7: Standardfehler der Laboranalytik (SEL) (D. Schulz, Zentrallabor, Leibniz-Zentrum für Agrarlandschaftsforschung e.V., schriftl. Mitteilung, 2008) und methodischer Fehler in der Referenzanalytik durch die Art und Weise der Probenahme (SES), ermittelt für 18 Messpunkte mit je 5 Bodenproben pro Messpunkt.

Berechnung des Messfehlers SES nach Lozán & Kausch (2004):

$$SES = \sqrt{\sum_{i=1}^m \left(\sum_{j=1}^k x_{ij}^2 - \left(\sum_{j=1}^k x_{ij} \right)^2 / k \right) / (n - m)}$$

wobei x der Messwert, k gleich der Anzahl der entnommenen Proben pro Messpunkt (5), m die Anzahl der Messpunkte (18), n die Anzahl aller Bestimmungen (90).

Parameter	SEL [M.-%]	Relativer SEL [%] [†]	SES [M.-%]	Relativer SES [%] [‡]
% TC	0,017	2,230	0,069	5,48
% IC	0,288	2,895	0,043	28,66
% OC	0,305	5,125	0,077	6,89
pH	n.A.	-	0,15	2,12
ppm Fe [†]	344,00	3,04	907,37	6,77
% Fe [†]	0,0344	0,000304	0,091	0,000677
% Fe ₂ O ₃ [†]	0,0492	0,000304	0,130	0,000677
ppm Mn	n.A.	-	20,03	6,85
GS	0,05	36,99	0,50	10,64
MS	0,03	7,47	0,96	4,36
FS	0,10	6,49	0,99	2,93
GU	0,76	1,61	0,87	6,08
MU	0,70	3,12	0,51	7,90
FU	0,35	5,95	0,40	10,64
T	0,50	2,17	0,80	5,31

[†] Bestimmung des Eisens durch Königswasseraufschluss (KWA). [‡] Relativer Messfehler bezogen auf den Mittelwert des jeweiligen Parameters. TC: Gesamtkohlenstoff, IC: Carbonat-Kohlenstoff, OC: organischer Kohlenstoff, GS: Grobsand, MS: Mittelsand, FS: Feinsand, GU: Grobschluff, MU: Mittelsand, FU: Feinsand, T: Ton

B. Statistik der verwendeten Kalibrations- und Validationsdatensätze

Anhang B 1: Statistische Kennwerte der Kalibrations- und Validationsdatensätze (kal, val) für die Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren (CR, MLR, PLSR).

Labor	Ton [%]				Summe der Tonminerale[%]		OC [%]	
	otro, feu2, feu3, feu4, mix		-		-		otro, feu2, feu3, feu4, mix	
Name (vgl. Kap. 7.5.1)	ASD, FWHM10, FWHM20, HyMap		TF		TMG		ASD, FWHM10, FWHM20, HyMap	
Name (vgl. Kap. 7.5.2,7.5.3)	-		-		-		-	
Typ	kal	val	kal	val	kal	val	kal	val
Anzahl (n)	87	48	25	18	25	18	87	48
Mittelwert	12,44	13,15	14,38	17,12	15,98	17,81	1,004	1,077
Median	11,23	12,75	13,71	13,71	14,33	14,33	0,933	0,943
SD	6,33	6,92	5,03	7,59	5,59	8,09	0,367	0,432
Minimum	3,65	4,78	7,77	8,47	8,77	10,13	0,431	0,63
Maximum	32,95	31,94	28,36	31,94	32,97	34,43	2,205	2,479

Anhang B 2: Statistische Kennwerte der Kalibrations- und Validationsdatensätze (kal, val) für die Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes mit Feldspektren (CR, MLR, PLSR).

Parameter	Ton [%]				OC [%]			
	Sept_Demmin		Mai_Buchholz Sept_Buchholz		Sept_Demmin		Mai_Buchholz Sept_Buchholz	
Name (vgl. Kap.7.6)	-		-		-		-	
Typ	kal	val	kal	val	kal	val	kal	val
Anzahl (n)	82	47	25	18	82	47	25	18
Mittelwert	11,75	12,90	14,38	17,12	0,961	1,057	1,018	1,208
Median	10,56	11,80	13,71	13,71	0,919	0,938	0,979	1,034
SD	5,51	6,78	5,03	7,59	0,316	0,414	0,349	0,427
Minimum	3,65	4,78	7,77	8,47	0,431	0,628	0,431	0,735
Maximum	28,36	31,94	28,36	31,94	1,959	2,479	1,821	2,217

Anhang B 3: Statistische Kennwerte der Kalibrations- und Validationsdatensätze (kal, val) zur Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden für die HyMap-Bilddaten (CR, MLR, PLSR für 2005; nur PLSR für 2004 und 2008; vgl. Kap. 7.7.2, 7.7.4).

Parameter	Ton [%]				OC [%]			
	HyMap_2004	HyMap_2005	HyMap_2008	HyMap_2004	HyMap_2005	HyMap_2008	HyMap_2004	HyMap_2008
Name	-		-		-		-	
Typ	kal	kal	val	kal	kal	kal	val	kal
Anzahl (n)	20	38	29	11	20	38	29	11
Mittelwert	10,81	9,91	9,21	9,73	0,960	0,916	0,889	0,666
Median	9,79	8,13	6,52	9,73	0,840	0,846	0,735	0,643
SD	4,84	5,00	5,24	4,57	0,317	0,295	0,373	0,147
Minimum	4,80	3,84	3,65	5,22	0,525	0,501	0,555	0,431
Maximum	18,66	21,62	23,75	19,72	1,959	1,748	2,479	1,034

Anhang B 4: Statistische Kennwerte der Kalibrations- und Validationsdatensätze (kal, val) zur Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes im Boden für die HyMap-Bilddaten (nur PLSR; vgl. Kap. 7.7.5).

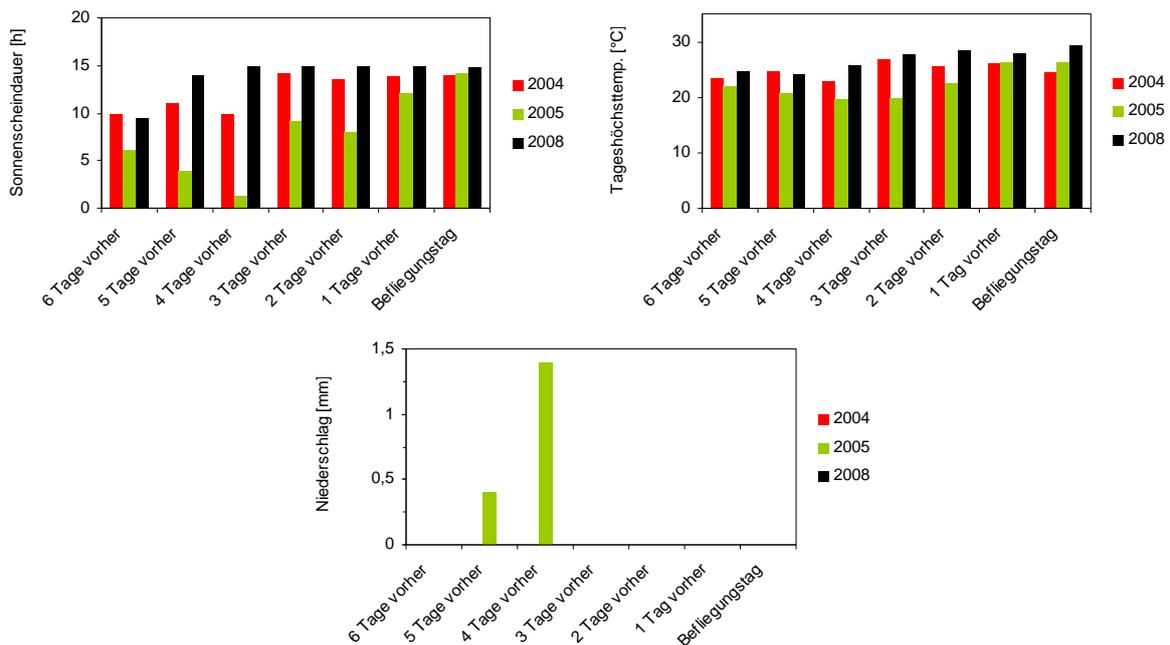
Parameter	Sand [%]				Schluff [%]			
	HyMap_2004	HyMap_2005	HyMap_2008	HyMap_2004	HyMap_2005	HyMap_2008	HyMap_2004	HyMap_2008
Name	-		-		-		-	
Typ	kal	kal	val	kal	kal	kal	val	kal
Anzahl (n)	20	38	29	11	20	38	29	11
Mittelwert	61,16	63,51	65,07	71,70	28,03	26,57	25,72	18,56
Median	60,40	64,28	67,43	73,41	28,63	28,26	26,32	17,28
SD	6,20	10,89	11,10	6,41	4,07	6,95	7,16	2,27
Minimum	50,02	39,90	38,02	56,92	19,82	6,19	7,99	16,55
Maximum	71,81	89,96	88,36	78,07	33,36	38,48	39,57	23,36

C. Laborspektroskopie, Feldspektroskopie und Abbildende Spektroskopie: Aspekte der Datenerhebung und –aufbereitung

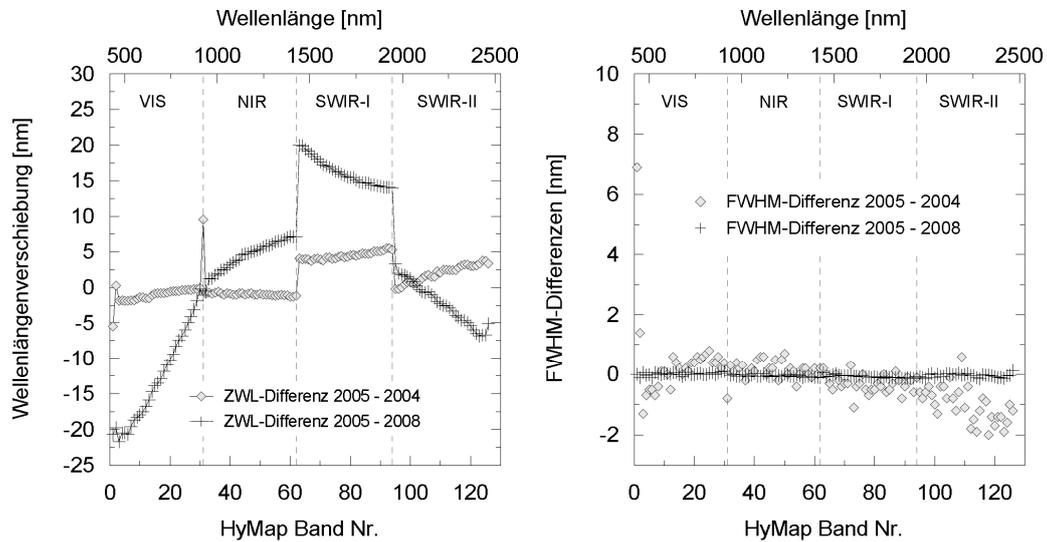
Anhang C 1: Elevation und Zenitwinkel während der Feldmesstage bei Sonnenhöchststand, $\pm 1h$ und $\pm 2h$ für das Testfeld DEMMIN (53,91N, 13,04E; UT+2h) (Giesen, 2008).

Tag	Sonnenhöchststand		-1h/+1h		-2h/+2h	
	Uhrzeit	Elevation/Zenit [°]	Elevation	Zenit	Elevation	Zenit
05.05.2006	13:05	52,4/37,6	50,7/50,6	39,3/39,4	45,8/45,7	44,2/44,3
06.05.2006	13:04	52,7/37,3	50,9/50,9	39,1/39,1	46,0/46,0	44,0/44,0
08.05.2006	13:04	53,2/36,8	51,4/51,4	38,6/38,6	46,5/46,5	43,5/43,5
10.05.2006	13:04	53,8/36,2	51,9/51,9	38,1/38,1	47,0/47,0	43,0/43,0
15.09.2006	13:03	39,1/51,9	37,7/37,6	52,3/52,4	33,5/33,4	56,5/56,6
21.09.2006	13:01	36,8/53,2	35,4/35,3	54,6/54,7	31,4/31,2	58,6/58,8
22.09.2006	13:01	36,4/53,6	35,0/34,9	55,0/55,1	31,0/30,8	59,0/59,2
23.09.2006	13:00	36,0/54,0	34,6/34,6	55,4/55,4	30,6/30,5	59,4/59,5
24.09.2006	13:00	35,6/54,4	34,2/34,2	55,8/55,8	30,3/30,1	59,7/59,9
25.09.2006	13:00	35,2/54,8	33,9/33,8	56,1/56,2	29,9/29,7	60,1/60,3
09.10.2006	12:55	29,8/61,2	28,5/28,5	61,5/61,5	24,8/24,7	65,2/65,3

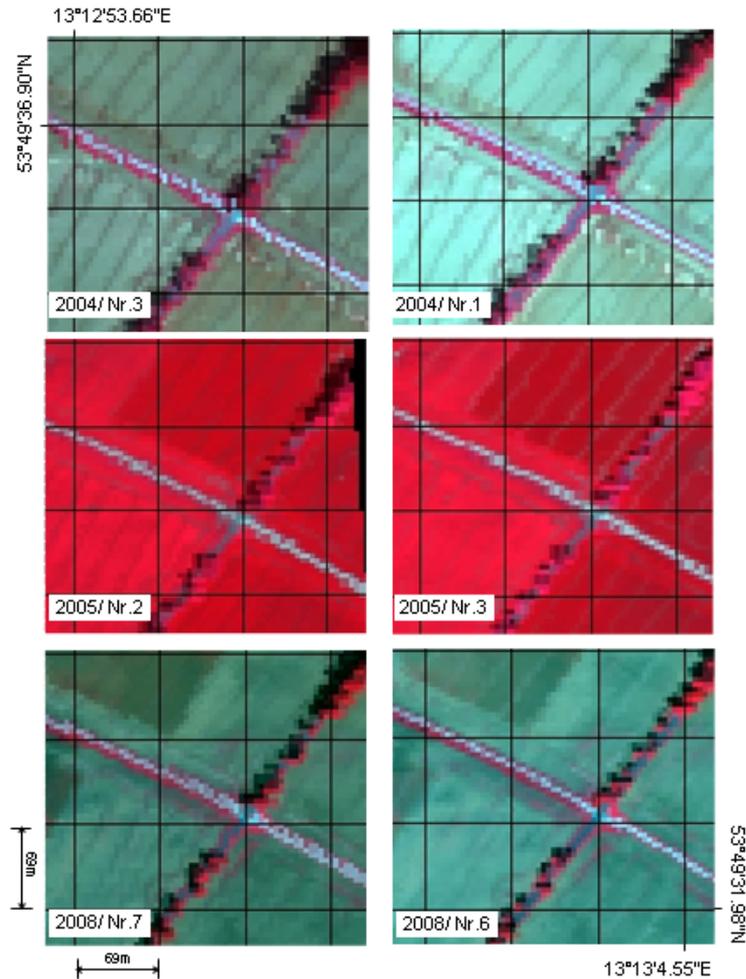
Anhang C 2: Sonnenscheindauer, maximale Tagestemperatur und Niederschlag eine Woche vor und während der Befliegungskampagnen 2004, 2005 und 2008. Alle Angaben für das Jahr von 2004 beruhen auf Angaben von WetterOnline (2004) zur Station Greifswald. Temperatur- und Niederschlagsdaten der Jahre 2005 und 2008 beruhen auf Messdaten der Station Buchholz des Wettermessnetzes im Testfeld DEMMIN (Borg et al., 2005, 2008). Die Informationen zur Sonnenscheindauer 2005 und 2008 sind den Angaben von WetterOnline (2005, 2008) zur Station Greifswald entnommen.



Anhang C 3: Differenz der Zentrumswellenlängen (ZWL) und Bandbreiten (FWHM) zwischen den HyMap-Daten von 2005 und 2004 sowie 2005 und 2008.



Anhang C 4: Ergebnisse der Geokorrektur der HyMap-Bilddaten in den Überlappungsbereichen der Flugstreifen. Gridweite: 69m, Pixel: 4x4m². Beschriftung: ‚Jahr/ Flugstreifennummer‘, z.B. 2004/Nr.3.



D. Parameter ausgewählter Kalibrationsmodelle

Anhang D 1: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit Laborspektren in Abhängigkeit vom Wassergehalt (otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%) (Kap. 7.5.1.1).

$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
otro	3,243	1,600	0,89	1,70
feu2	2,756	1,067	1,04	1,83
feu3	2,666	0,967	1,14	1,87
feu4	2,489	0,832	1,08	1,82
mix	2,107	0,658	1,43	1,71

Anhang D 2: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit Laborspektren in Abhängigkeit vom Wassergehalt (otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%) (Kap. 7.5.1.1).

$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
otro	1,679	645	-220,404	1,24	2,41	7,79
		705	122,013			6,05
		1105	-169,456			1,19
		2245	98,733			1,88
		2345	-64,914			2,99
feu2	1,408	505	71,380	1,54	2,05	2,22
		655	-123,368			2,28
		2175	-136,104			3,66
		2245	71,165			3,64
		2295	106,448			1,67
		2335	32,776			1,94
feu3	1,336	515	60,669	1,67	1,67	2,05
		645	-95,654			3,10
		2175	-163,228			1,94
		2205	-93,934			2,38
		2295	147,608			1,44
feu4	1,231	515	34,013	1,51	1,73	2,58
		645	-81,650			3,73
		2155	-195,768			3,36
		2195	-142,687			4,48
		2345	41,926			2,13
mix	1,266	645	-296,589	1,31	1,80	13,62
		705	224,935			17,50
		975	-158,391			1,90
		2195	-127,470			1,75

Anhang D 3: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren in Abhängigkeit vom Wassergehalt (otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%) (Kap. 7.5.1.2).

$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
otro	0,058	3,082	1,01	1,11
feu2	-0,022	2,659	0,99	1,04
feu3	-0,049	2,448	1,02	1,06
feu4	-0,045	2,342	1,00	1,06
mix	-0,021	2,562	1,16	1,11

Anhang D 4: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren in Abhängigkeit vom Wassergehalt (otro: getrocknet bei 105°C, feu2: 7,2M.-%, feu3: 10,0M.-%, feu4: 13,0M.-%) (Kap. 7.5.1.2).

$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF				
otro	0,419	575	-90,371	1,71	1,90	7,24				
		695	-782,942			584,25				
		705	1048,490			711,17				
		755	-262,025			22,35				
		1425	114,882			11,60				
		1945	-83,077			9,84				
		2005	-64,263			6,86				
		2075	-91,012			1,59				
		2245	-59,967			3,72				
		2315	39,181			2,78				
		2385	-37,145			3,51				
		2415	-41,390			2,10				
		feu2	0,321			575	-89,208	1,41	2,07	2,38
695	121,502			1,97						
1515	-287,190			61,87						
1555	211,629			53,97						
1615	216,096			7,65						
2095	-77,482			7,77						
2375	-52,121			2,38						
feu3	0,202	575	-67,471	2,02	1,92	5,80				
		705	163,187			4,58				
		1125	-80,438			9,13				
		1205	298,370			16,27				
		1495	-153,023			155,17				
		1525	-185,664			212,78				
		1595	318,670			18,13				
		1705	-356,440			4,917				
		2095	-53,198			26,91				
		2125	-91,903			10,26				
		2155	72,789			11,46				
		2225	-72,813			2,92				
		2345	-88,196			6,95				
		2375	-53,337			4,19				
		2405	-40,644			2,73				
feu4	0,189	405	-30,956	1,63	1,70	1,56				
		575	-102,189			3,66				
		705	208,003			3,48				
		1175	-244,909			25,13				
		1215	389,065			31,33				
		1415	-117,618			68,60				
		1445	160,502			35,97				
		1475	-246,506			124,13				
		1505	-180,177			145,20				
		1645	419,388			12,59				
		2085	-77,467			22,39				
		2325	-56,911			3,91				
		mix	0,207			565	-135,901	1,67	2,10	7,99
						705	136,421			8,48
885	-99,020			6,05						
1325	117,024			9,78						
1445	44,664			5,84						
1685	-172,417			3,20						

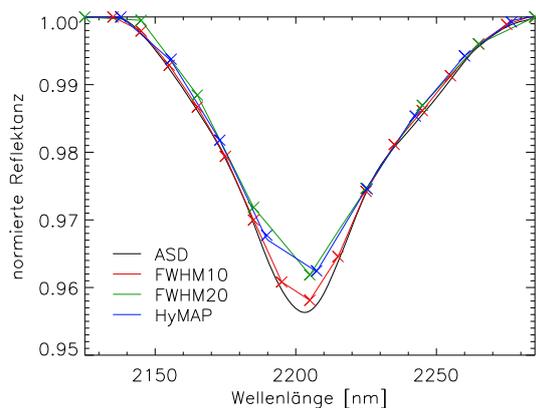
Anhang D 5: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit Laborspektren unterschiedlicher spektraler Auflösung bzw. Konfiguration (Kap. 7.5.2).

$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	Konstante	Koeffizienten	DW_{kal}	DW_{val}
ASD	3,243	1,600	0,89	1,70
FWHM 10	3,289	1,618	0,90	1,68
HyMap	3,276	1,557	0,88	1,68
FWHM 20	3,246	1,538	0,86	1,64

Anhang D 6: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit Laborspektren unterschiedlicher spektraler Auflösung bzw. Konfiguration (Kap. 7.5.2).

$n_{\text{kal}}=87$ $n_{\text{val}}=48$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW_{kal}	DW_{val}	VIF
FWHM 10	1,679	645	-220,404	1,24	2,41	7,79
		705	122,013			6,05
		1105	-169,456			1,19
		2245	98,733			1,88
		2345	-64,914			2,99
HyMap	1,524	648,7	-127,821	1,36	2,25	7,76
		709,8	65,959			6,41
		1112,8	-123,726			1,31
		2189,7	-31,086			3,49
		2342,8	-49,825			4,55
FWHM 20	1,614	665	-181,533	1,58	2,25	22,26
		705	149,997			17,18
		1105	-107,805			1,57
		2145	111,622			13,13
		2165	-55,045			22,98
		2245	41,108			4,06
		2345	-68,735			6,64

Anhang D 7: Mittlere normierte Reflektanz zwischen 2125nm und 2285nm für unterschiedliche spektrale Auflösungen: ASD-Konfiguration (ASD), 10nm FWHM (FWHM10), 20nm FWHM (FWHM20) und HyMap-Konfiguration (HyMAP: 27.05.2005). Die Position der Zentrumswellenlängen für FWHM10, FWHM20 und HyMap-Konfiguration sind durch (x) Symbole gekennzeichnet.



Anhang D 8: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren unterschiedlicher spektraler Auflösung bzw. Konfiguration (Kap. 7.5.2).

n _{kal} =87 n _{val} =48	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
ASD	0,058	3,082	1,01	1,11
FWHM 10	0,056	3,218	1,01	1,12
HyMap	0,064	3,110	1,01	1,11
FWHM 20	0,061	3,015	1,01	1,11

Anhang D 9: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Laborspektren unterschiedlicher spektraler Auflösung bzw. Konfiguration (Kap. 7.5.2).

n _{kal} =87 n _{val} =48	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
FWHM 10	0,419	575	-90,371	1,71	1,90	7,24
		695	-782,942			584,25
		705	1048,490			711,17
		755	-262,025			22,35
		1425	114,882			11,60
		1945	-83,077			9,84
		2005	-64,263			6,86
		2075	-91,012			1,59
		2245	-59,967			3,72
		2315	39,181			2,78
2385	-37,145	3,51				
2415	-41,390	2,10				
HyMap	0,532	510,1	-20,946	1,36	1,57	12,37
		571,9	-65,412			10,52
		694,4	72,047			5,57
		846,0	-57,086			6,34
		2083,3	-92,327			1,26
FWHM 20	0,538	565	-51,745	1,63	1,81	7,65
		705	101,713			16,62
		765	-99,920			8,99
		1445	28,878			7,72
		2085	-100,830			1,28
		2305	69,474			14,28
		2325	-45,555			16,21

Anhang D 10: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des Tonmineralgesamtgehaltes (TMG) und der physikalischen Tonfraktion (TF) mit Laborspektren der *Bodenserie Buchholz* (Kap. 7.5.3).

n _{kal} =25 n _{val} =18	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
TF	2,640	1,150	0,95	0,94
TMG	2,102	0,703	0,84	0,72

Anhang D 11: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des Tonmineralgesamtgehaltes (TMG) und der physikalischen Tonfraktion (TF) mit Laborspektren der *Bodenserie Buchholz* (Kap. 7.5.3).

n _{kal} =25 n _{val} =18	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
TF	1,488	655	-89,577	1,38	1,66	1,31
		1105	-74,857			1,05
		2345	-100,980			1,30
TMG	1,742	645	-138,503	1,73	1,11	-

Anhang D 12: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* (Kap. 7.6.1.1).

$n_{\text{kal}}=82$ $n_{\text{val}}=47$	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
Sept_Demmin	1,409	0,278	0,71	0,91

Anhang D 13: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* (Kap. 7.6.1.1).

$n_{\text{kal}}=82$ $n_{\text{val}}=47$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
Sept_Demmin	1,192	655	-190,827	1,45	1,72	1,45
		705	-58,722			1,81
		2175	-88,180			2,41
		2205	-147,753			1,98
		2245	-142,322			2,17
		2345	-41,215			1,50

Anhang D 14: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* (Kap. 7.6.1.2).

$n_{\text{kal}}=82$ $n_{\text{val}}=47$	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
Sept_Demmin	0,0063	0,91	0,97	1,16

Anhang D 15: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit Feldspektren der *Bodenserie Demmin_Feld* (Kap. 7.6.1.2).

$n_{\text{kal}}=82$ $n_{\text{val}}=47$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
Sept_Demmin	0,261	405	45,168	2,29	1,73	2,45
		565	-68,937			4,26
		1655	-188,095			2,96
		1755	128,630			2,78
		1985	70,451			1,67
		2195	44,721			2,14
		2245	75,290			4,33
		2265	-138,213			8,73
		2325	51,578			2,59

Anhang D 16: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit HyMap-Bildspektren von 2005 (Kap. 7.7.2.1).

$n_{\text{kal}}=38$ $n_{\text{val}}=29$	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
HyMap_2005	2,728	1,285	1,11	1,36

Anhang D 17: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des Tongehaltes mit HyMap-Bildspektren von 2005 (Kap. 7.7.2.1).

$n_{\text{kal}}=38$ $n_{\text{val}}=29$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
HyMap_2005	1,613	510,1	-40,318	1,75	1,84	3,30
		663,8	-118,286			2,02
		959,1	-108,972			1,27
		2207,4	-223,729			2,25

Anhang D 18: Regressionsparameter der CR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit HyMap-Bildspektren von 2005 (Kap. 7.7.2.2).

$n_{\text{kal}}=38$ $n_{\text{val}}=29$	Konstante	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}
HyMap_2005	0,029	1,789	1,46	1,28

Anhang D 19: Regressionsparameter der MLR-Modelle zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit HyMap-Bildspektren von 2005 (Kap. 7.7.2.2).

$n_{\text{kal}}=38$ $n_{\text{val}}=29$	Konstante	UV (λ) [nm]	Koeffizienten	DW _{kal}	DW _{val}	VIF
HyMap_2005	0,156	602,5	-146,087	1,52	2,28	4,88
		1465,8	68,353			4,86
		1715,0	-124,022			1,16

Anhang D 20: Fehlerkennwerte für die PLSR-Kalibrationen zur Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes im Boden mit Laborspektren der Böden variabler Wassergehalte (mix) gruppiert entsprechend dem Sand- und dem Eisengehalt im Boden (Kap. 8.1.2).

Parameter		Organischer Kohlenstoff (OC)									
Typ	PLSR-Modell*	n_{kal}	n_{val}	F	SD _{kal} [†] [%]	SD _{val} [†] [%]	R ²	SEC [%]	SD/SEC	SEP [%]	RPD
a)	Sand < 63,5%	40	27	3	0,375	0,469	0,62	0,290	1,56	0,377	1,14
b)	Sand > 63,5%	41	27	9	0,183	0,148	0,87	0,078	2,44	0,119	1,62
c)	Fe ₂ O ₃ < 1,36%	43	23	9	0,156	0,180	0,72	0,099	1,64	0,081	1,97
d)	Fe ₂ O ₃ > 1,38%	45	23	5	0,392	0,357	0,76	0,223	1,92	0,188	2,37

[†]Standardabweichung (SD) der geschätzten Parameterwerte; * Spektren wurden transformiert in erste Ableitung der Absorption; F: Anzahl der PLSR-Faktoren.

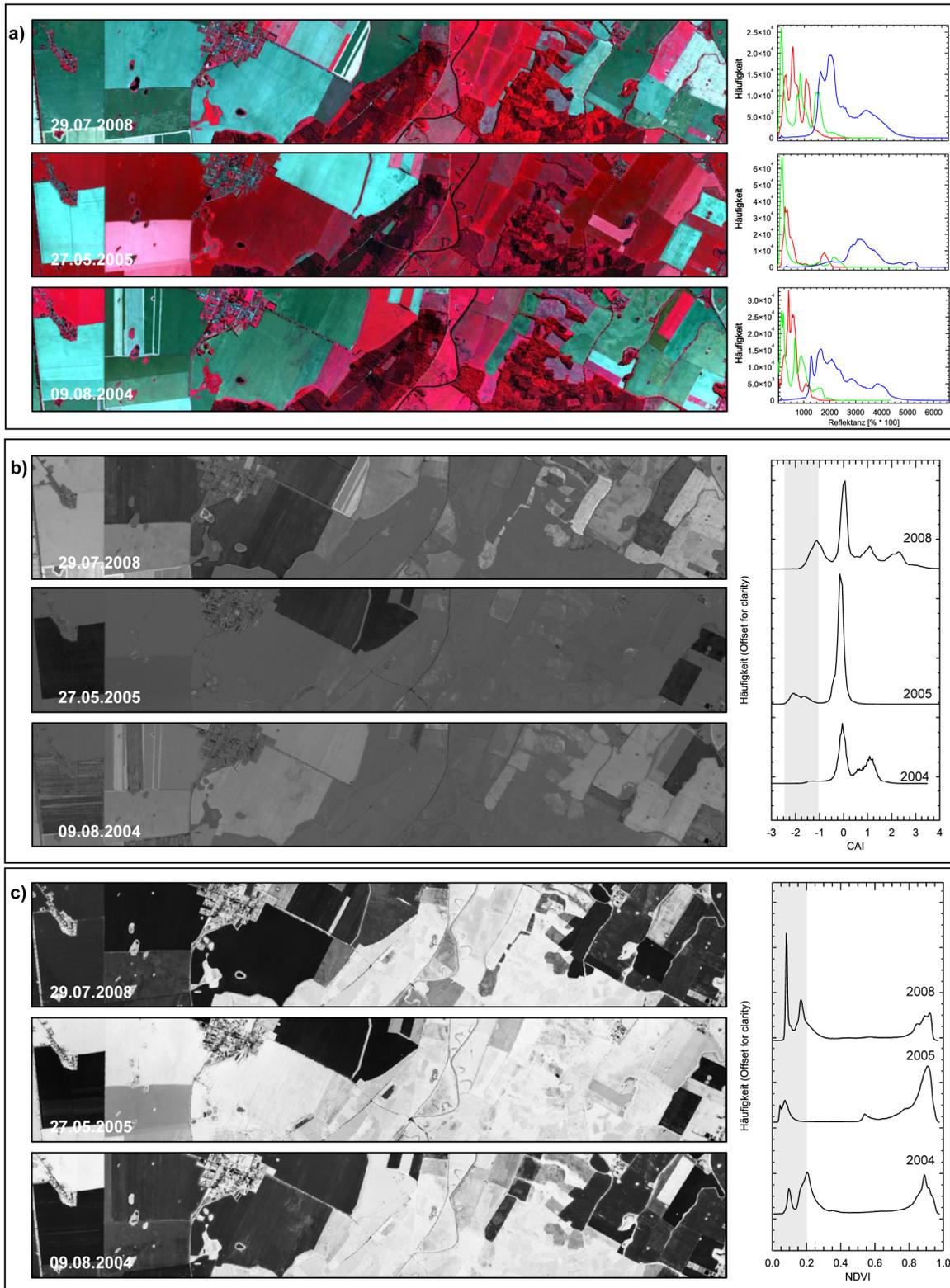
E. NDVI- und CAI-Werte der Spektraldatensätze

Anhang E 1: Statistische Kennwerte des NDVI und des CAI der Labor- und Feldspektren.

Spektren	NDVI				CAI			
	Min	Max	Median	SD	Min	Max	Median	SD
Labor: otro	0,08	0,19	0,11	0,019	-2,35	-0,94	-1,37	0,304
Labor: feu2	0,10	0,22	0,15	0,019	-2,55	-1,49	-1,89	0,218
Labor: feu3	0,12	0,24	0,16	0,021	-2,44	-1,26	-1,71	0,219
Labor: feu4	0,11	0,24	0,16	0,025	-2,13	-1,04	-1,41	0,199
Labor: mix	0,08	0,24	0,15	0,027	-2,55	-1,04	-1,60	0,302
Feld: Sept_Demmin	0,00	0,17	0,10	0,038	-2,72	-0,35	-1,08	0,451
Feld: Sept_Buchholz	0,08	0,17	0,12	0,024	-1,39	-0,35	-0,78	0,270
Feld: Mai_Buchholz	0,12	0,32	0,19	0,035	-1,91	-0,62	-1,27	0,277

F. Räumlich explizite Schätzung der Bodenparameter

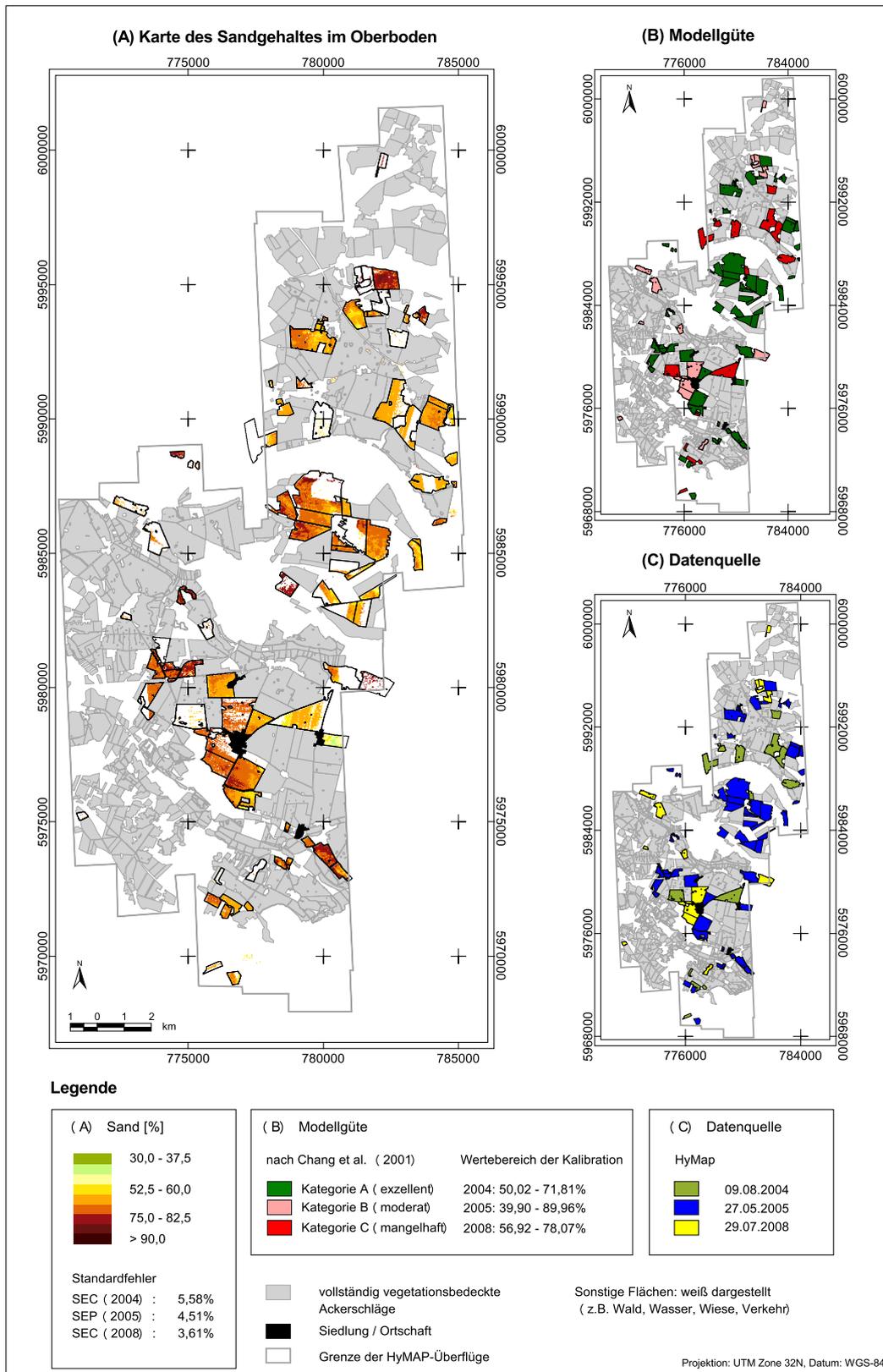
Anhang F 1: CIR-Darstellung, CAI und NDVI eines HyMap-Flugstreifens (Ausschnitt) vom 08.09.2004, 27.05.2005 und 29.07.2008 sowie zugehörige Bild-Histogramme. NDVI dargestellt im Intervall von 0 bis 1. CAI dargestellt im Intervall von -3 bis 4. Schwarz indiziert niedrige Index-Werte. Weiß indiziert hohe Index-Werte.



Die Abbildung in Anhang F 1 veranschaulicht den Zustand des Vegetationsbestandes zum Zeitpunkt der drei Überflüge für einen repräsentativen Ausschnitt der HyMap-Bilddaten. In der Aufnahme vom Mai 2005 überwiegen dichte, grüne Pflanzenbestände (Winterfeldfrüchte) auf den landwirtschaftlichen Nutzflächen in DEMMIN. Das spiegelt sich im Histogramm in NDVI-Werten größer 0,5 mit zwei Maxima nahe 0,55 und 0,9 wider. Der CAI der entsprechenden Bildpixel bewegt sich zwischen -0,5 und 0,5. Der Teil der landwirtschaftlichen Nutzfläche, der für den Anbau von Hackfrüchten, Sommerfeldfrüchten und Mais vorgesehen ist (ca. 13%; vgl. Tab. 5.2.2), befindet sich in der Phase der Bestellung, d.h. Saatbettbereitung, Aussaat oder beginnendes Auflaufen. Diese Felder sind weder von grüner Vegetation noch von Ernterückständen oder trockener Vegetation beeinflusst. Sie verursachen die Häufung von NDVI-Werten kleiner 0,1 und CAI-Werten kleiner -1,5.

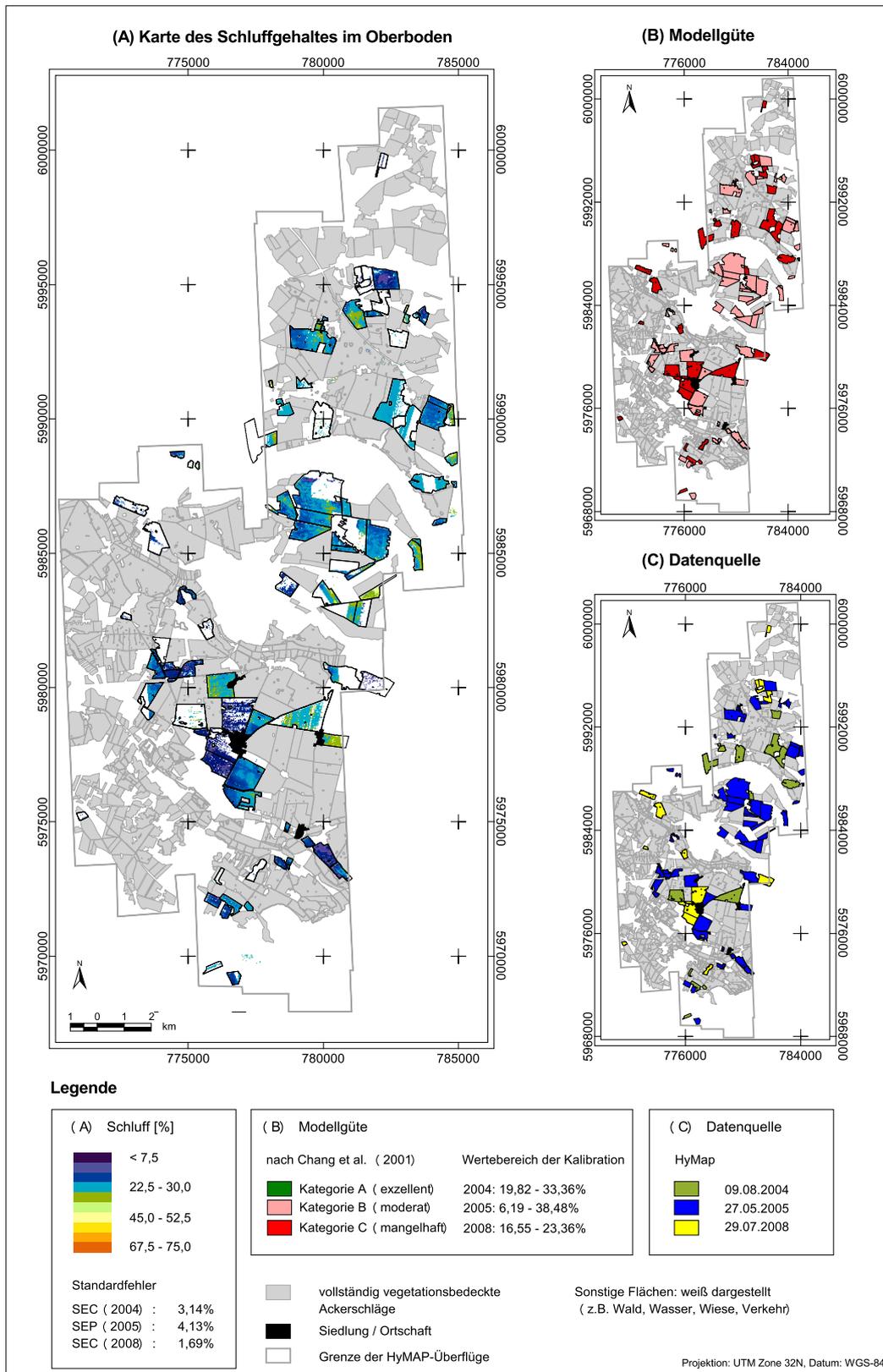
In den Bilddaten von 2004 und 2008 dominieren Ackerflächen, deren Feldfrüchte bereits in der generativen Phase, d.h. nicht mehr photosynthetisch aktiv sind (Winterfeldfrüchte, ca. 60%; vgl. Tab. 5.2.2). Sie verursachen zwei Maxima in den CAI-Histogrammen um 1,0 und 2,0 und tragen zu einer Häufung des NDVI zwischen 0,1 und 0,3 bei. Auf einigen dieser Flächen hat bereits die Ernte begonnen. Je nach Erntefortschritt und Bearbeitungsphase reflektieren diese Ackerschläge ein zumindest teilweise ungestörtes Bodenreflexionssignal. Sie sind verantwortlich für CAI kleiner -1 und NDVI um 0,1. Der verbleibende Teil der landwirtschaftlichen Nutzfläche weist das typische Reflexionssignal photosynthetisch aktiver grüner Vegetation auf. Sie sind gekennzeichnet von NDVI nahe 0,9 und CAI nahe 0.

Anhang F 2: Karte des Sandgehaltes im Oberboden für landwirtschaftliche Nutzflächen im Testfeld DEMMIN geschätzt mittels PLSR auf Basis der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005, 29.07.2008. Karte A: Sandgehalt [%], Karte B: feld-spezifische Angabe der Modellgüte nach Chang et al. (2001), Karte C: feld-spezifische Datengrundlage.



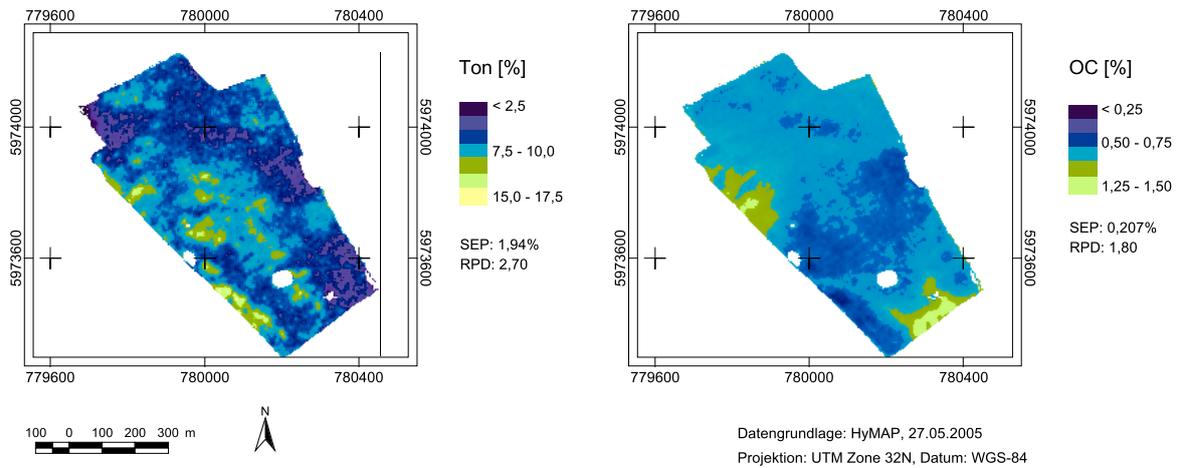
Der mittlere geschätzte Sandgehalt beträgt 67,7% mit Werten zwischen 55% bis 81% Sand im Bereich von $\mu \pm 2\sigma$.

Anhang F 3: Karte des Schluffgehaltes im Oberboden für landwirtschaftliche Nutzflächen im Testfeld DEMMIN geschätzt mittels PLSR auf Basis der HyMap-Daten vom 09.08.2004, 27.05.2005, 29.07.2008. Karte A: Schluffgehalt [%], Karte B: feld-spezifische Angabe der Modellgüte nach Chang et al. (2001), Karte C: feld-spezifische Datengrundlage.

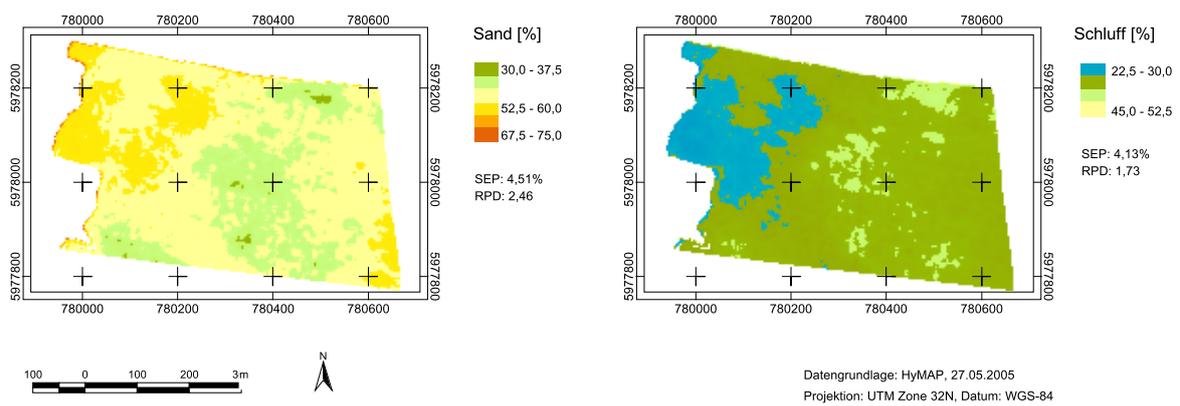


Die Schluffgehalte belaufen sich im Mittel auf 23,9%. 95,45% aller Schätzwerte liegen zwischen 13% bis 35% Schluff ($\mu \pm 2\sigma$).

Anhang F 4: Räumlich explizite Schätzung des Ton- und OC-Gehaltes mittels PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Alt Tellin basierend auf HyMap-Daten vom 27.05.2005 und PLSR.



Anhang F 5: Räumlich explizite Schätzung des Sand- und Schluffgehaltes mittels PLSR für einen Ackerschlag nahe der Ortschaft Heydenhof basierend auf HyMap-Daten vom 27.05.2005.



G. Übersicht zu vorhandenen Arbeiten zur Schätzung des Ton- und organischen Kohlenstoffgehaltes mit reflexionsspektroskopischen Methoden (LS, FS, IS)

Anhang G 1: Beispiele für die Schätzung des Tongehaltes mit LS, FS und IS (nur Literatur mit Angaben zum Standardfehler enthalten).

Spektralregion	Wellenlänge [nm]	Methode [†]	N _{cal} /N _{val}	Wertebereich [%]-Ton, Cal/Val	R ²	RMSE [‡] [%]	RPD	Referenz
Laborspektroskopie (LS)								
SWIR	1000-2500	MLR	35/56	4,1-61,2/ 6,3-65,3	0,56	10,3	n.a.	Ben-Dor & Banin (1995a)
VNIR-SWIR	350-2500	BRT PLSR	4184	1,0-93,0	0,73-0,91 n.a.	5,4-9,5 ^{cv} 7,2-10,8 ^{cv}	n.a.	Brown et al. (2006)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR MARS PLSR MARS	359/153 153/359	7,3-47,8/10,7-50,2 10,7-50,2/7,3-47,8	0,87 0,90 0,83 0,85	3,83 ^{cv} , 4,05 3,19 ^{cv} , 3,39 3,45 ^{cv} , 4,03 3,17 ^{cv} , 3,66	2,58 3,08 2,28 2,51	Bilgili et al. (2010)
VNIR-SWIR	400-2498	PCR	743	0,7-35,2	0,67	4,06 ^{cv}	1,71	Chang et al. (2001)
SWIR	1100-2498	PLSR	187/87 187/18	3,8-43,3/13,5-43,8 3,8-43,3/20,4-23,4	0,79-0,76 0,25-0,13	4,82-5,25 5,19-7,45	1,58-1,45 0,17-0,12	Chang et al. (2005)
VNIR-SWIR	400-2500	MPLS	321	8,0-53,0	0,86	3,80 ^{cv}	2,7	Cozzolino & Morón (2003)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR CR	52	6,5-45,2	0,85 0,73	3,12 ^{cv} 4,40 ^{cv}	n.a.	Gomez et al. (2008b)
UV-VNIR-SWIR	250-2500	PCR	121/40	1,7-71,7/6,7-66,7	0,72	8,90	1,9	Islam et al. (2003)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	54/13	1,0-23,0	n.a.	2,34-3,82	n.a.	Kooistra et al. (2001)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	70/35	0,3-25,2	0,84-0,92	2,2-2,7	n.a.	Kooistra et al. (2003a)
VNIR-SWIR	350-2500	CR	33 19 52	6,0-45,0	0,78 0,64 0,73	3,5 ^{cv} 5,8 ^{cv} 4,4 ^{cv}	n.a. n.a. n.a.	Lagacherie et al. (2008)
SWIR MIR	1100-2500 2500-25000	PLSR	120	46,9-85,1	0,94 0,96	3,24 ^{cv} 2,47 ^{cv}	n.a.	Madari et al. (2006)
VNIR-SWIR MIR	400-2498 2500-25000	PLSR	529 (176/353)	11,0-29,0	0,78 (0,69) ^a 0,84 (0,77) ^a	1,54 ^{cv} (1,8) ^a 1,32 ^{cv} (1,6) ^a	n.a.	McCarty & Reeves (2006)
VNIR-SWIR	400-2500	SMLR	184/184 184/184	8,0-68,0/7,0-80,0 7,0-80,0/8,0-68,0	0,81 0,46	9,1 11,87	n.a.	Nanni & Dematté (2006)
UV-VIS-NIR MIR UV-VIS-NIR-MIR	250-2500 2500-22222 250-22222	PCR	207/208	1,0-77,0/ 0,1-88,0	0,61 0,72 0,72	12,3 10,5 10,1	1,6 1,6 1,9	Pirie et al. (2005)
VNIR-SWIR	350-2500	BRT	4184/52; 52 4184/54; 54 4184/234; 210/234	1,0-93,0/6,6-58,5 1,0-93,0/9,2-64,7 1,0-93,0/n.a.; 0-41,1	0,21; 0,02 0,49; 0,09 0,38; 0,52	9,62; 10,85 ^{cv} 12,31; 13,76 ^{cv} 6,51; 4,92	1,09; 0,97 1,13; 1,01 1,1; 1,4	Sankey et al. (2008)
VNIR-SWIR	350-2500	MARS	457/225	5,0-79,0/10,85-77,15	0,78	7,5	n.a.	Shepherd & Walsh (2002)
VNIR-SWIR	408-2492	PLSR	645/139 645/32	2,0-26,0/1,0-26,0 2,0-26,0/2,0-24,0	n.a.	2,0 1,9	2,9 3,7	Sørensen & Dalsgaard (2005)
VNIR-SWIR SWIR	460-2500 980-2500	PLSR PLSR	346/50	0-67,0/1,0-61,0	0,86-0,92 0,87-0,91	4,54-6,06 5,42-6,52	n.a. n.a.	Stenberg (2010)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	67/34	2,0-54,0	0,72	6,10	n.a.	Vågen et al. (2006)
VIS NIR MIR VIS-NIR-MIR	400-795 810-2400 2500-14286 400-14286	PLSR	116	8,0-24,14	0,43 ^{adj} 0,6 ^{adj} 0,67 ^{adj} 0,67 ^{adj}	2,28 ^{cv} 1,91 ^{cv} 1,74 ^{cv} 1,73 ^{cv}	n.a.	Viscarra Rossel et al. (2006)
VNIR-SWIR	380-2450	PLSR	1361 ^b /39	n.a./-4,0-55,0 ^c	0,77 ^{adj}	8,3	n.a.	Viscarra Rossel et al. (2009)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	188/82	1,2-52,5/2,8-57,8	0,75-0,92	4,1-7,4	1,95-3,51	Waiser et al. (2007)
Feldspektroskopie (FS)								
VNIR-SWIR	350-2500	CR	19	6,0-45,0	0,58	7,1 ^{cv}	n.a.	Lagacherie et al. (2008)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	70/35	0,3-25,2	0,38-0,43	5,06-5,31	n.a.	Kooistra et al. (2003a)
VNIR-SWIR ^e (contact probe)	380-2450	PLSR	1361/39	n.a./-4,0-55,0	0,78 ^{adj}	7,9	n.a.	Viscarra Rossel et al. (2009)
Abbildende Spektroskopie (IS)								
HyMap	400-2500	PLSR CR	52	6,5-45,2	0,64 0,58	4,96 ^{cv} 8,2 ^{cv}	n.a.	Gomez et al. (2008b)
HyMap	350-2500	CR	33 19 52	6,0-45,0	0,61 0,60 0,58	5,4 ^{cv} 13,0 ^{cv} 8,2 ^{cv}	n.a.	Lagacherie et al. (2008)
HyMap	420-2480	MLR PLSR	60	7,0-26,0	0,65 0,71	3,8 ^{cv} 4,2 ^{cv}	n.a.	Selige et al. (2006)
AVNIR	429-1010	MLR	321	n.a.	0,67 ^d	3,23 ^d	n.a.	DeTar et al. (2008)

[†] Statistische Methoden: CR: *Continuum Removal*, MLR: *Multiple Linear Regression* (multiple lineare Regression), MPLS: *Modified Partial Least Squares*, PLSR: *Partial Least Squares Regression*, PCR: *Principal Component Regression*, BRT: *Boosted Regression Trees*, MARS: *Multivariate Adaptive Regression Splines*; [‡] RMSE: *Root Mean Square Error*. Der RMSE steht hier stellvertretend für den Fehlerkennwert der Modelle (RMSE, RMSEP, RMSECV, SEP, SEC, etc.); cv: *cross-validation* (Kreuzvalidation); adj: *adjusted* R² (berücksichtigt die Zahl der Regressoren in der Modellgleichung).

^a Zahlen in Klammern beziehen sich auf Validationsergebnisse an 353 Proben, die nicht in der Kalibration benutzt wurden.

^b Spektralbibliothek umfasst 1287 Laborspektren und 74 Feldspektren.; ^c Werte sind abgelesen aus Diagramm.; ^d RMSE und R² für Gesamtdatensatz, keine gesonderte Validation.; ^e Feldspektroskopie mit Kontaktprobe.

Anhang G 2: Beispiele für die Schätzung des organischen Kohlenstoffgehaltes mit LS, FS und IS (nur Literatur mit Angaben zum Standardfehler enthalten). Wenn erforderlich, wurden Angaben der organischen Bodensubstanz (OM) in der Originalstudie in organischen Kohlenstoffgehalt (OC) durch Division mit dem Faktor 1,72 in OC transformiert.

Spektralbereich	Wellenlänge [nm]	Methode ¹	N _{cal} /N _{val}	Wertebereich [%] OC, Cal/Val	R ²	RMSE ² [%] OC	RPD	Referenz
Laborspektroskopie (LS)								
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR LR ²	20/20	0,06-45,1	0,87-0,76 0,80-0,71	4,07-4,84 3,7-10,61	2,68-2,08 2,72-1,03	Bartholomeus et al. (2008)
SWIR	1000-2500	MLR	39/52	0,05-7,69/0,05-6,22	0,55	0,78	n.a.	Ben-Dor & Banin (1995a)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR MARS PLSR MARS	359/153 153/359	0,27-3,99/0,29-1,97 0,29-1,97/0,27-3,99	0,76 0,74 0,73 0,72	0,16 ^{CV} , 0,17 0,15 ^{CV} , 0,17 0,13 ^{CV} , 0,18 0,15 ^{CV} , 0,18	1,94 1,92 1,93 1,90	Bilgili et al. (2010)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	198/85	0,193-1,582	0,68-0,86	0,109-0,147	1,73-2,62	Brown et al. (2005)
VNIR-SWIR	350-2500	BRT PLSR	3794	0,0-24,16 (53,68 ^b)	0,82-0,87 n.a.	0,79-0,9 ^{CV} 1,22-1,27 ^{CV}	n.a.	Brown et al. (2006)
SWIR	1100-2500	MPLS	92/193	0,167-4,24 ^a	0,81	0,369 ^a	n.a.	Brunet et al. (2007)
VNIR-SWIR	400-2498	PCR	743	0,13-28,58 ^a	0,87	0,786 ^{CV,*}	2,79	Chang et al. (2001)
SWIR	1100-2498	PLSR	76/32	1,54-14,49	0,89	0,62	4,2	Chang & Laird (2002)
SWIR	1100-2498	PLSR	161/83 161/122	0,05-4,08/0,07-3,80 0,05-4,08/1,62-4,06	0,88-0,91 0,67-0,48	0,328-0,381 0,253-0,304	2,72-3,16 1,55-1,29	Chang et al. (2005)
VNIR-SWIR	350-2500	RT	180/93	0-47,67	0,93	2,41	5,89	Cohen et al. (2005)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR GBT	1300/600	0,12-22,91	0,75 0,57	0,276 0,353	2,12 1,65	Cohen et al. (2007)
VNIR-SWIR	400-2500	MPLS	142/51	2,1-45,9	0,75-0,99	0,45-3,012 ^a	3,5-9,7 ^a	Coûteaux et al. (2003)
SWIR	1100-2500	MLR	48/48 72/72	0,42-2,51 0,27-2,51	0,86 0,86	0,16-0,24 0,22-0,30	n.a.	Dalal & Henry (1986)
VNIR	400-2498	PLSR	270/90	0,64-3,00	0,66	0,25	1,7	Dunn et al. (2002)
NIR-SWIR	1000-2500	PLSR RBFN MLP	140/60	0,40-4,88/0,54-4,00	0,77 0,92 0,88	0,25 0,145 0,186	n.a. n.a. n.a.	Fidêncio et al. (2002)
VNIR-SWIR	400-2500	MPLS	75/48	0,6-7,9	0,76-0,87	0,57-0,74 ^{CV}	2,0-2,7	Fystro (2002)
SWIR	1603-2598	SMLR	~384	0,139-5,348	0,79	0,45	2,11	Hummel et al. (2001)
UV-VNIR-SWIR	249-2500	MLR	45/45 45/45 45/45 45/45 30/30	0,87 - 3,23 1,26 - 2,19 1,30 - 5,34 0,55 - 1,81 0,78 - 4,04	0,85 0,85 0,73 0,86 0,89	0,38 0,196 0,208 0,414 0,445	n.a.	Ingleby & Crowe (2000)
UV-VNIR-SWIR	250-2500	PCR	121/40	0,06-4,95/0,15-3,93	0,76	0,44	1,7	Islam et al. (2003)
VNIR-SWIR	350-2500	LR ²	55 50	0,3-4,0 0,687-2,787	0,91 0,80	0,283 ^{CV} 0,211 ^{CV}	n.a.	Jarmer et al. (2010)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	54/13	~0,30-9,5	n.a.	0,62-0,95	n.a.	Kooistra et al. (2001)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	70/35	0,06-7,44	0,6-0,69	1,052-1,430	n.a.	Kooistra et al. (2003a)
SWIR	1100-2500	PLSR	120	0,79-4,80	0,99 0,93	0,072 ^{CV,*} 0,173 ^{CV,*}	n.a.	Madari et al. (2006)
SWIR	1100-2498	PLSR	177/60; 257/16	0,023-9,80	0,82; 0,98 0,94; 0,98	0,55; 0,79 0,32; 0,60	n.a.	McCarty et al. (2002)
VNIR-SWIR	400-2498	PLSR	544 (181/363)	0,36-2,92 ^a	0,902 ^{CV} (0,88) ^{a,c} 0,964 ^{CV} (0,95) ^{a,c}	0,15 ^{CV*} (0,16) ^{a,c} 0,094 ^{CV*} (0,11) ^{a,c}	n.a.	McCarty & Reeves (2006)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	376/164	0-7,44/0-4,0	0,47-0,77	0,41-0,57	1,92-1,40	Morgan et al. (2009)
VNIR-SWIR	306-1711	PLSR	306	0,7-6,0	0,74	0,48 ^{CV}	1,97	Mouazen et al. (2007)
VNIR-SWIR	400-2500	SMLR	184/184 184/184	~0,0-14,0/~0,0-30,0 ~0,0-30,0/~0,0-14,0	0,28 0,13	0,61 0,36	n.a.	Nanni & Dematié (2006)
UV-VIS-NIR	250-2500	PCR	207/208	<0,1-9,2/<0,1-15,0	0,76	0,50	2,0	Pirrie et al. (2005)
MIR	2500-22222				0,85	0,55	2,6	
UV-VIS-NIR-MIR	250-22222				0,79	0,62	2,2	
SWIR	1100-2498	PLSR	179; 120/59	0,613-3,39 ^a	0,952 ^{CV} ; 0,964	1,02 ^{CV*} ; 0,939 ^a	n.a.	Reeves et al. (1999)
VNIR-SWIR	400-2498	PLSR	179	0,61-3,39	0,955-0,969	0,082-0,086	n.a.	Reeves et al. (2002)
MIR	2500-25000		64 136 179 136	0,53-2,80 0,68-2,92 0,61-3,39 0,68-2,92	0,782-0,926 0,843 0,976 0,95	0,118-0,204 0,139 0,071 0,079	n.a.	
VNIR-SWIR	3500-2500	BRT	4184/52; 52 4184/54; 54 4184/118; 107/118	0,0-53,68/0,0-10,76 0,0-53,68/0,0-6,49 0,0-53,68/n.a.; 0,34-33,5	0,93; 0,39 0,60; 0,31 0,80; 0,73	0,74; 1,81 ^{CV} 0,78; 1,13 ^{CV} 3,26; 4,6	2,51; 1,03 1,55; 1,07 2,1; 1,5	Sankey et al. (2008)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR CT	360/154	0,05-4,96/0,08-3,72	0,86 0,65	0,288 0,46	2,65 1,66	Sarkhot et al. (2011)
VNIR-SWIR	350-2500	MARS	674/337	0,23-5,58/0,14-4,72	0,80	3,1	n.a.	Shepherd & Walsh (2002)
VNIR-SWIR	408-2492	PLSR	699/139	0,06-5,6/0,12-6,0 ^a	0,66	4,3 ^a	2,4	Sørensen & Dalsgaard (2005)
VNIR-SWIR	460-2500	PLSR	346/50	0,4-6,9/0,8-6,6	0,70-0,86	0,62-0,88	n.a.	Stenberg (2010)
SWIR	980-2500	PLSR	346/50		0,62-0,85	0,64-1,0	n.a.	
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	117	0,59-2,21	-	0,12 ^{CV}	2,11	Stevens et al. (2008)
SWIR	1630-2650	PLSR	30	0,45-3,16	0,92	0,22 ^{T, CV}	n.a.	Sudduth & Hummel (1993)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	114 67; 97	1,4-2,4 n.a. ^a ; 1,18-5,19	0,60 0,69; 0,88	0,14 ^{CV} 0,71 ^{CV} ; 0,42 ^{CV}	1,57 0,74; 2,04	Udelhoven et al. (2003)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	67/34	0,33-12,08	0,92	0,84	n.a.	Vågen et al. (2006)

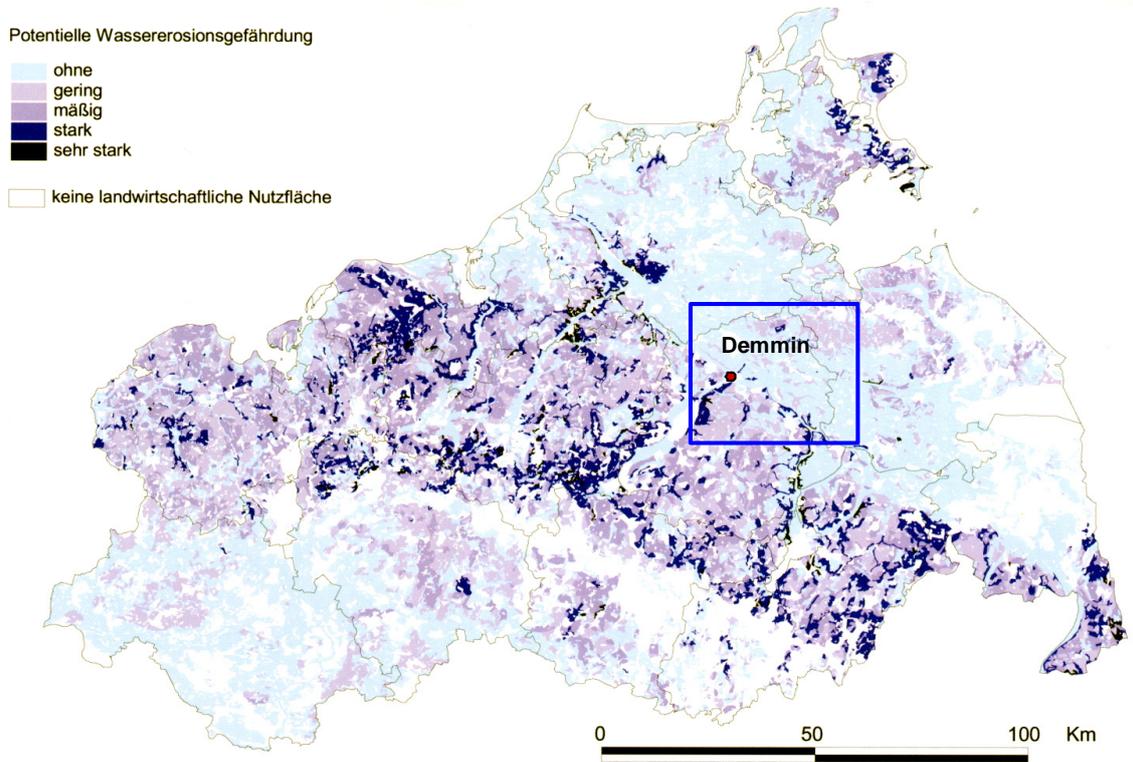
Spektralbereich	Wellenlänge [nm]	Methode [†]	N _{cal} /N _{val}	Wertebereich [%] OC, Cal/Val	R ²	RMSE [‡] [%] OC	RPD	Referenz
Laborspektroskopie (Fortsetzung)								
NIR-SWIR	1100-2500	MPLS	1038/500	0,05-11,5	0,88	0,395	2,9	van Waes et al. (2005)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR SMLR PCR RT CT	400/154	0,02-26,89/ 0,03-10,97 ^{**}	0,86-0,68 0,88-0,66 0,84-0,56 0,76-0,51 0,86-0,62	0,18-0,26 ^{**} 0,18-0,27 ^{**} 0,18-0,31 ^{**} 0,23-0,32 ^{**} 0,17-0,29 ^{**}	2,57-1,76 2,59-1,69 2,49-1,48 2,01-1,40 2,68-1,59	Vasques et al. (2008)
VNIR-SWIR	350-2500	SMLR PCR PLSR RT CT	102/39	0,27-20,20/0,35-2,39	0,77 0,79 0,86 0,68 0,72	0,102 ^b 0,095 ^b 0,078 ^b 0,131 ^b 0,129 ^b	2,02 2,17 2,64 1,58 1,60	Vasques et al. (2009)
VIS NIR MIR VIS-NIR-MIR	400-795 810-2400 2500-14286 400-14286	PLSR	118	0,81-1,98	0,6 ^{adj} 0,6 ^{adj} 0,73 ^{adj} 0,72 ^{adj}	0,18 ^{cv} 0,18 ^{cv} 0,15 ^{cv} 0,15 ^{cv}	-	Viscarrá Rossel et al. (2006)
Feldspektroskopie (FS)								
NIR-SWIR	920-1718	PCR	119	0,30-2,64	0,67-0,80	0,232-0,302 ^{cv}	n.a.	Christy (2008)
VNIR-SWIR (contact probe)	350-2500	PLSR	72 56 146 72	0,54-1,00 1,08-5,10 0,002-5,10 0,002-5,10	0,16-0,04 0,42-0,43 0,71-0,73 0,66-0,67	0,10-1,11 ^{cv} 0,69-0,68 ^{cv} 0,53-0,52 ^{cv} 0,61-0,60 ^{cv}	0,98-1,03 1,32-1,33 1,87-1,92 1,69-1,75	Gomez et al. (2008a)
VNIR-SWIR	400-2500	PLSR	70/35	0,06-7,44	0,29-0,45	1,43-1,59	n.a.	Kooistra et al. (2003a)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	108/37; 77/24	~0,8-5,8	0,82; 0,90	0,33; 0,24	1,79; 2,33	Stevens et al. (2006)
VNIR-SWIR	350-2500	PLSR	99	0,59-2,21	-	0,12 ^{cv}	2,03	Stevens et al. (2008)
SWIR	1640-2640	PLSR	294/102	0,45-3,16/1,36-3,42	n.a.	0,53 [†]	n.a.	Sudduth & Hummel (1993)
Abbildende Spektroskopie (IS)								
AVNIR	429-1010	MLR	321	n.a.	0,49 [†]	0,048 [†]	n.a.	DeTar et al. (2008)
Hyperion	400-2500	PLSR	52	0,002-5,10	0,51	0,73 ^{cv}	1,43	Gomez et al. (2008a)
Hyperion	400-2500	MLR ^k	30	0,055-1,419	0,78	0,262	n.a.	Luo et al. (2008)
HyMap	420-2480	MLR PLSR	60	0,7-3,85	0,86 0,90	0,22 ^{cv} 0,29 ^{cv}	n.a. n.a.	Selige et al. (2006)
CASI	405-950	PLSR	170/57	~0,8-5,8	0,85	0,51	1,86	Stevens et al. (2006)
AHS-160	400-12700 ^o	PLSR	110	0,59-2,21	n.a.	0,17 ^{cv}	1,47	Stevens et al. (2008)
AHS-160	430-2411	PLSR PSR SVMR	200/100 198/100 201/102	0,7-6,10	0,53 0,62 0,74	0,622 0,557 0,535	1,47 1,63 1,97	Stevens et al. (2010) ^m
HyMap	450-2500	PLSR	9	0,5-1,5	0,74	0,16 ^{cv}	n.a.	Patzold et al. (2008)
CASI	408-947	PCA-SMLR PCA-ANN	47	1,948-3,855	0,74 0,59	0,285 ^{cv} 0,344 ^{cv}	n.a.	Uno et al. (2005)

[†] Statistische Methoden: LR: lineare Einfachregression, MLR: **Multiple Linear Regression** (multiple lineare Regression), MPLS: **Modified Partial Least Squares Regression**, PLSR: **Partial Least Squares Regression**, PCR: **Principal Component Regression**, BRT: **Boosted Regression Trees**, GBT: **Gradient Boosted Tree Regression**, RT: **Regression Trees**, CT: **Committee Trees**, MARS: **Multivariate Adaptive Regression Splines**, RBFN: **Radial Basis Function Networks** (ANN), ANN: **Artificial Neural Network**, MLP: **Multi-Layer Perceptron** (ANN); [‡] RMSE: **Root Mean Square Error**. Der RMSE steht hier stellvertretend für den Fehlerkennwert der Modelle (RMSE, RMSEP, RMSECV, SEP, SEC, etc.). Die Genauigkeit der Angaben (Stellen hinterm Komma) variiert und entspricht den Angaben der Autoren.; [†] Werte beziehen sich auf den Gesamt-Kohlenstoff.; ^{**} Gesamtkohlenstoff, angegeben in [log(mg kg⁻¹)]; cv: *cross-validation* (Kreuzvalidation); adj: *adjusted* R² (berücksichtigt die Zahl der Regressoren in der Modellgleichung).

^a Lineare Regression mit spektralen Indizes (1/Slope 400-600); ^b Das eigentliche Maximum von 53,68% OC stellt einen einzelnen Extremwert dar.; ^c RPD des kreuzvalidierten Kalibrationsmodells (entspricht SD/SEC_{cv}); ^d Lineare Regression mit spektral abgeleiteten Bodenfarben (C.I.E. Normfarbsystem); ^e Zahlen in Klammern beziehen sich auf Validationsergebnisse an 363 Proben, die nicht in der Kalibration benutzt wurden.; ^f Oven-dry only, 100-scan average data, 40nm data spacing; ^g Es sind nur der Mittelwert (1,75% OC) und die Standardabweichung (0,52) der verwendeten Bodenproben (n=67) vermerkt. Der Wertebereich ist nicht angegeben.; ^h RMSE angegeben in LOG₁₀(mg kg⁻¹); ⁱ Kalibrationsgleichung fußt auf Laborspektren und wurde an Messungen eines beweglichem Spektrometers im Feld validiert.; ^j RMSE und R² für Gesamtdatensatz, keine gesonderte Validation.; ^k MLR mit spektralen Indizes.; ^m Hier nur Ergebnisse der „globalen Kalibration“ angegeben.; ⁿ Spektralbereich von 1900-2500nm und MIR aufgrund des sehr niedrigen SNR und starken Abweichungen zur Labor- und Feldspektroskopie von der Modellkalibration ausgeschlossen.

H. Sonstige Ergänzungen

Anhang H 1: Potentielle Wassererosionsgefährdung auf landwirtschaftlich genutzten Standorten für Mecklenburg-Vorpommern und das Testfeld DEMMIN, abgeleitet aus der mittelmaßstäbigen landwirtschaftlichen Standortkartierung (Lieberoth et al., 1983) und einer Methodik von Thiere et al. (1991) (veröffentlicht in: LUNG (2002a); verändert).



Eidesstattliche Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit mit dem Titel „Abbildende Spektroskopie erosionsrelevanter Bodenparameter in Agrarökosystemen“ persönlich, selbständig und nur unter Nutzung der angegebenen Hilfsmittel und Quellen angefertigt habe, dass diese oder eine ähnliche Arbeit noch an keiner anderen Stelle als Dissertation eingereicht worden ist und dass sie an den nachstehenden Stellen auszugsweise veröffentlicht worden ist.

Gerighausen, H., Menz, G., & Kaufmann, H. (2012). Spatially explicit estimation of clay and organic carbon content in agricultural soils using multi-annual imaging spectroscopy data. Special Issue on Quantitative Soil Spectroscopy, *Applied and Environmental Soil Science*, Volume 2012, Article ID 868090 (Article in Press).

Neustrelitz, 2012

Heike Gerighausen