

**Nahinfrarotspektroskopische Bestimmung
des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus
von Zierpflanzenstecklingen
zur Beurteilung des Bewurzelungspotentials**

Von der Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Gartenbauwissenschaften
(Dr. rer. hort.)

genehmigte Dissertation
von

Dipl.-Ing. (FH) Dieter Lohr
geboren am 10. Januar 1977 in Ravensburg

2017

Referent: Prof. Dr. rer. hort. Thomas Rath

Korreferentin: Prof. Dr. rer. hort. Traud Winkelmann

Tag der Promotion: 20. Februar 2017

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis.....	III
Abbildungsverzeichnis.....	VI
Tabellenverzeichnis.....	XII
Abkürzungsverzeichnis.....	XVIII
Zusammenfassung.....	XXI
Summary.....	XXII
1 Einleitung und Hintergrund.....	23
2 Stand des Wissens.....	24
2.1 Bedeutung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus sowie des Trockensubstanzgehaltes für die Stecklingsqualität.....	24
2.2 Nahinfrarotspektroskopie (NIRS).....	30
2.2.1 Bestimmung der Trockensubstanz in Pflanzenmaterial ohne Probenvorbereitung	32
2.2.2 Bestimmung von Stickstoff in Pflanzenmaterial ohne Probenvorbereitung.....	32
2.2.3 Bestimmung von Kohlenhydraten in Pflanzenmaterial ohne Probenvorbereitung.....	33
3 Zielsetzung.....	35
4 (I.1) NIR-spektroskopische Bestimmung des N- und KH-Status sowie des TS-Gehaltes von Chrysanthemen- und Pelargonienstecklingen.....	36
4.1 Material und Methoden.....	36
4.1.1 Herkunft und Zusammensetzung des für die Kalibrierung und Validierung genutzten Probenmaterials.....	36
4.1.2 NIRS-Messungen.....	38
4.1.3 Referenzanalytik.....	39
4.1.3.1 Probenkonservierung und Probenvorbereitung.....	39
4.1.3.2 Trockensubstanz.....	40
4.1.3.3 Stickstofffraktionen.....	40
4.1.3.4 Kohlenhydratfraktionen.....	41
4.1.4 Kalibrationsentwicklung.....	44
4.1.4.1 Entwicklung einer Basiskalibration.....	44
4.1.4.2 Robustheit der Kalibriermodelle.....	49
4.2 Ergebnisse.....	49
4.2.1 Ausreißererkenung, Struktur der Datensätze und Populationsbeschreibung.....	49
4.2.2 Auswahl der Datenvorbehandlungsmethoden.....	52

4.2.3	Bestimmung der Trockensubstanz sowie von Stickstoff- und Blattkohlenhydratfraktionen.....	57
4.2.3.1	Trockensubstanz mit Spektren ganzer Stecklinge.....	57
4.2.3.2	N-Fractionen mit Spektren ganzer Stecklinge	59
4.2.3.3	Blatt-Kohlenhydratfraktionen unter Nutzung von Blatt- bzw. Stecklingspektren.....	73
4.2.3.4	Kalibriermodelle mit transformierten Referenzwerten	81
4.2.4	Robustheit der Kalibriermodelle	88
4.2.4.1	Robustheit über die Zeit	88
4.2.4.2	Robustheit gegenüber Sorteneinflüssen	93
4.2.4.3	Robustheit gegenüber der Herkunft	95
4.3	Diskussion.....	97
4.3.1	Datenvorbehandlung	97
4.3.2	Beurteilung der erreichten Vorhersageleistungen der gemeinsamen Kalibrationen für Chrysanthemen und Pelargonien	99
4.3.2.1	Trockensubstanz.....	99
4.3.2.2	Stickstofffraktionen.....	99
4.3.2.3	Kohlenhydrate	102
4.3.3	Robustheit der Kalibriermodelle	104
4.3.4	Rückführbarkeit der PLS-Faktoren auf bekannte Absorptionsbanden.....	105
5	(I.2) Untersuchung zur Selektivität der NIR-spektroskopischen Bestimmung löslicher Kohlenhydrate (Fructose, Glucose und Saccharose)	107
5.1	Material und Methoden.....	107
5.1.1	Entwicklung einer künstlichen Probe.....	107
5.1.2	Künstliche Proben mit definierten Zuckergehalten.....	111
5.1.3	Selektivität der Zuckerbestimmung.....	111
5.2	Ergebnisse.....	112
5.3	Diskussion.....	119
6	(I.3) Übertragung der Basiskalibriermodelle auf Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienstecklinge.....	121
6.1	Material und Methoden.....	121
6.2	Ergebnisse.....	123
6.2.1	Ausreißererkennung und Populationsbeschreibung	123
6.2.2	Erweiterung der Kalibriermodelle auf Impatiens, Osteospermum und Poinsettien	125
6.2.2.1	Trockensubstanz.....	125

6.2.2.2	Stickstofffraktionen	127
6.2.2.3	Blattkohlenhydratgehalte	132
6.3	Diskussion.....	136
7	(II) Beurteilung des Bewurzelungspotentials auf Basis von NIRS-Analysenwerten.....	137
7.1	Material und Methoden.....	138
7.1.1	Mutterpflanzenkultur	138
7.1.2	Stecklingsbewurzelung.....	139
7.1.3	Bestimmung der Trockensubstanz sowie des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus	141
7.1.4	Statistische Auswertung	143
7.2	Ergebnisse.....	144
7.2.1	Chrysanthemen.....	144
7.2.1.1	Bewurzelung im Gewächshaus	145
7.2.1.2	Bewurzelung in der Klimakammer	147
7.2.2	Pelargonien.....	151
7.2.2.1	Bewurzelung im Gewächshaus	152
7.2.2.2	Bewurzelung in der Klimakammer	155
7.3	Diskussion.....	157
8	Schlussfolgerung	159
9	Literaturverzeichnis.....	164
10	Anhang	180
10.1	Sortenlisten	180
10.2	Zusammensetzung der Kalibrier- und Validierdatensätze.....	181
10.3	Datenvorbehandlungen	188
10.4	Kalibriermodelle für Chrysanthemen und Pelargonien	197
10.5	Übertragung der Kalibriermodelle auf Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienstecklinge	234
	Curriculum Vitae.....	246
	Publikationen.....	247
	Danksagung.....	251

Abbildungsverzeichnis

Abb. 2.1:	Allgemeines Schema der Kalibrationsentwicklung	30
Abb. 4.1:	Verwendetes Messsystem Zeiss Corona 45 NIR Plus 1.7 [A] mit drehbarem Aufsatz "Turnstep" zur Probenpräsentation [B].....	38
Abb. 4.2:	Auflage von Chrysanthemenstecklingen [A] sowie Durchführung der Messung [B].....	39
Abb. 4.3:	Ablaufschema der NIRS-Messungen sowie der Probenaufbereitung und -konservierung für die Referenzanalytik	40
Abb. 4.4:	Schematischer Ablauf der schrittweisen enzymatisch-photometrischen Zuckerbestimmung, die Zahlen (1-4) hinter den Enzymen kennzeichnen die Reihenfolge der Zugabe	42
Abb. 4.5:	Bestimmung der Zuckerkonzentrationen aus der Zunahme der optischen Dichte bei 340 nm nach schrittweiser Zugabe von G6PDH, HK, PIG und Invertase	43
Abb. 4.6:	Segmentierte Regression für den SECV [A] und Verlauf des gemeinsamen Bestimmtheitsmaßes (R_{SR}^2) der segmentierten Regression [B] in Abhängigkeit von der Anzahl PLS-Faktoren in den beiden Abschnitten der Regression	47
Abb. 4.7:	Ablauf der Ausreißererkenung sowie Struktur und Größe der Kalibrier- und Validierdatensätze für die TS-Gehalte sowie die N- und KH-Fraktionen	50
Abb. 4.8:	PCA-Plots für die erste und zweite bzw. die dritte und vierte Hauptkomponente (PC) unter Verwendung der untransformierten $\log 1/R$ -Spektren, die Zahlen in Klammern bezeichnen die erklärte spektrale Varianz.....	51
Abb. 4.9:	Streudiagramm der Kreuzvalidierung für den TNC-Gehalt im Spross für das PLS-2-Modell unter Nutzung der untransformierten Absorptionsspektren ($\log 1/R$ -Spektren), die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R_{CV}^2 , SECV) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)	52
Abb. 4.10:	Mittlere Ränge des Friedman-Test für die unterschiedlichen Datenvorbehandlungsmethoden mit $SECV_{min}$ = minimaler SECV, $SECV_{16}$ = SECV bei Verwendung von 16 PLS-Faktoren und $nPLS_{SECV}$ = Anzahl PLS-Faktoren, bei der der SECV kleiner ist, als der des Modells ohne Datenvorbehandlung und der Verwendung von 16 PLS-Faktoren (Ergebnisse für die untransformierten $\log 1/R$ -Spektren sind gesondert hervorgehoben).....	54
Abb. 4.11:	Gewichtete Regressionskoeffizienten des Kalibriermodells für die Trockensubstanz (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet)	58
Abb. 4.12:	Streudiagramm der Validierung für den Nitrat-N (Modell: SNV mit 12 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)	61
Abb. 4.13:	Streudiagramm der Validierung für den Protein-N (Modell: SNV+DT mit 14 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)	63

- Abb. 4.14: Verlauf des gemeinsamen Bestimmtheitsmaßes (R_{SR^2}) der segmentierten Regression für den Standardfehler der Kreuzvalidierung in Abhängigkeit von der Anzahl PLS-Faktoren nach einer Datenvorbehandlung mittels MSC..... 65
- Abb. 4.15: Streudiagramm der Validierung für den Gesamt-N (Modell: MSC mit 15 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien) 66
- Abb. 4.16: Streudiagramm der Validierung für die eoNF (Modell: SNV+DT mit 12 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien) 68
- Abb. 4.17: Streudiagramm der Validierung für die eNF (Modell: OBC+NM mit 11 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien) 69
- Abb. 4.18: Streudiagramm der Validierung für die oNF (Modell: SNV+DT mit 12 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, R^2 , SEP, BIAS) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien) 71
- Abb. 4.19: Gewichtete Regressionskoeffizienten der Modelle ohne Spektrentransformation für den [A] Amino-N, [B] eNF, [C] Protein-N und [D] Gesamt-N (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet) 72
- Abb. 4.20: Streudiagramme der Validierung für die besten Blattstärkemodelle unter Nutzung der [A] ST-Spektren (Modell: SNV+DT mit 15 PLS-Faktoren), [B] BU-Spektren (Modell: SNV+DT mit 11 PLS-Faktoren) und [C] BO-Spektren (Modell: MSC mit 13 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)..... 75
- Abb. 4.21: Streudiagramme der Validierung für die besten Blatt-TNC-Modelle unter Nutzung der [A] ST-Spektren (Modell: MSC mit 16 PLS-Faktoren), [B] BU-Spektren (Modell: $\log 1/R$ mit 13 PLS-Faktoren) und [C] BO-Spektren (Modell: SNV+DT mit 11 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)..... 78
- Abb. 4.22: Gewichtete Regressionskoeffizienten der Blattstärke-[A] sowie Blatt-TNC-Modelle [B], jeweils bei Verwendung der BO-Spektren (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet) 80
- Abb. 4.23: Häufigkeitsverteilung der Blattstärke- (links) und Blatt-TNC-Gehalte (rechts) aller Pelargonien- und Chrysanthemenproben ($n = 572$, Proben der Jungpflanzenbetriebe in grün, Proben der HSWT in rot); die Linie markiert die Anpassung der Normalverteilung..... 84
- Abb. 4.24: Häufigkeitsverteilung der ln-transformierten Blattstärke- (links) und Blatt-TNC-Gehalte (rechts) aller Pelargonien- und Chrysanthemenproben ($n = 572$; Proben der Jungpflanzenbetriebe in grün, Proben der HSWT in rot); die Linien markieren die Anpassung der Normalverteilung für den gesamten Datensatz (P(I+II)) sowie die zwei mittels des ML-Verfahrens getrennten Untergruppen (P(I) und P(II))... 85
- Abb. 4.25: Streudiagramme der Validierung für die [A] Blattstärke- und [B] Blatt-TNC-Gehalte bei Nutzung der ln-transformierten Werte 86

- Abb. 4.26: Streudiagramme der Validierung der Proben der UG II für die [A] Blattstärke- (Modell: $\log 1/R$ mit 14 PLS-Faktoren) und [B] Blatt-TNC-Gehalte (Modell: SNV+DT mit 11 PLS-Faktoren); die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien) 87
- Abb. 4.27: SEP, BIAS und SEP(C) der Trockensubstanz bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV, nPLS = 6 89
- Abb. 4.28: SEP, BIAS und SEP(C) der [A] Protein-N- und [B] Gesamt-N-Gehalte bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz, sowie der SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparameter SNV+DT, nPLS = 14 beim Protein-N und MSC, nPLS = 15 beim Gesamt-N..... 90
- Abb. 4.29: SEP, BIAS und SEP(C) der [A] eNF- und [B] oNF-Gehalte bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz, sowie SEP der Basiskalibriermodelle mit den Modellparameter OBC+NM, nPLS = 11 bei den eNF und SNV+DT, nPLS = 12 bei den oNF 91
- Abb. 4.30: SEP, BIAS und SEP(C) des Blatt-TNC-Gehalts bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV+DT, nPLS = 11..... 92
- Abb. 4.31: SEP, BIAS und SEP(C) der Trockensubstanz bei Nutzung der einzelnen Sorten (Sortenzuordnung siehe Tab. 10.1, n = Anzahl Proben je Sorte) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV, nPLS = 6 93
- Abb. 4.32: Boxplot der Differenzen zwischen Referenz- und NIRS-Wert bei Nutzung der Sorten als Validierdatensatz für die [A] Protein-N-, [B] oNF- und [C] Gesamt-N-Gehalte für die Chrysanthemensorten (links) und die Pelargonionsorten (rechts), die gestrichelten Linien markieren die Beträge der SEP der Basiskalibriermodelle für jeden Parameter 94
- Abb. 4.33: Boxplot für den SEP, SEP(C) und BIAS bei Nutzung der Sorten als Validierdatensätze für den eNF für die Chrysanthemen- (links) und Pelargonionsorten (rechts), die gestrichelten Linien markieren den SEP des Basiskalibriermodells für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)..... 94
- Abb. 4.34: SEP, BIAS und SEP(C) des Blatt-TNC-Gehalts bei Nutzung der einzelnen Sorten (Sortenzuordnung siehe Tab. 10.1, n = Anzahl Proben je Sorte) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV+DT, nPLS = 11 95
- Abb. 4.35: SEP, BIAS und SEP(C) der Trockensubstanz, der N-Fractionen sowie der Blattkohlenhydratfraktionen bei Nutzung der Proben der einzelnen Lieferanten als Validierdatensätze, die gestrichelte Linie markiert jeweils den SEP der Basiskalibriermodelle für die einzelnen Parameter 96

Abb. 4.36: Boxplot der Differenzen zwischen den Referenz- und NIRS-Wert für den Protein-N-, den oNF- und Gesamt-N-Gehalt der Proben der Fa. Dümmer aufgeteilt nach Lieferterminen	97
Abb. 4.37: Streudiagramme für den Nitrat-N-Gehalt und die [A] Amid-N-, [B] Amino-N- sowie [C] Protein-N-Gehalte.....	102
Abb. 5.1: Unterseite einer Gelrite™-Platte, wie sie für die Messung genutzt wurde (links), und Durchführung der Messung (rechts).....	108
Abb. 5.2: Vergleich der Absorptionsspektren der Gelrite™-Platten im Vergleich zu den Mittelwertsspektren der ganzen Stecklinge sowie der Spektren der Blattober- und -unterseiten nach einer Transformation mittels SNV+DT	108
Abb. 5.3: PCA-Plots für die erste und zweite [A] bzw. die dritte und vierte [B] Hauptkomponente; PCA unter Verwendung der SNV+DT-transformierten Spektren der Stecklinge, der Blattober- und -unterseiten; Projektion der Spektren der Gelrite™-Platten auf die Hauptkomponenten.....	109
Abb. 5.4: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- bzw. Saccharose-Proben und der Validierung mit dem jeweilig entgegengesetzten Datensatz auf Basis der Zuckergehalte in mg/g	113
Abb. 5.5: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- bzw. Saccharose-Proben und der Validierung mit dem jeweilig entgegengesetzten Datensatz auf Basis der Zuckergehalte in mmol/g.....	114
Abb. 5.6: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- bzw. Saccharose-Proben und der Validierung mit dem jeweilig entgegengesetzten Datensatz auf Basis der Zuckergehalte als Monosaccharidäquivalente in mmol/g	114
Abb. 5.7: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- und Saccharose-Proben und die Validierung mit den GS- bzw. GFS-Serien auf Basis der Zuckergehalte in mg/g.....	116
Abb. 5.8: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- und Saccharose-Proben und die Validierung mit den GS- bzw. GFS-Serien auf Basis der Zuckergehalte als Monosaccharidäquivalente in mmol/g.....	116
Abb. 5.9: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- und Saccharose-Proben und die Validierung mit den GS- bzw. GFS-Serien auf Basis der Zuckergehalte in mmol/g	117
Abb. 5.10: Gewichtete Regressionskoeffizienten für die Zuckerkalibration bei Nutzung der Proben der F- und S-Serie ohne Datenvorbehandlung und 14 PLS-Faktoren (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet).....	119
Abb. 6.1: PCA-Plots für die erste und zweite [A] bzw. die dritte und vierte [B] Hauptkomponente unter Verwendung der untransformierten log 1/R-Spektren von Impatiens, Osteospermum und Poinsettien	123
Abb. 6.2: PCA-Plots für die erste und zweite [A] bzw. die dritte und vierte [B] Hauptkomponente unter Verwendung der MSC-transformierten Spektren von Impatiens, Osteospermum und Poinsettien sowie Chrysanthenen und Pelargonien	124

- Abb. 6.3: Streudiagramme der TS-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthenen und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung in allen Fällen SNV; die statistischen Kenngrößen (b, R^2 , SEP, BIAS) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthenen und Pelargonien) 126
- Abb. 6.4: Streudiagramme der Protein-N-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthenen und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung in allen Fällen SNV+DT; die statistischen Kenngrößen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthenen und Pelargonien) 128
- Abb. 6.5: Streudiagramme der oNF-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthenen und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung beim Basiskalibriermodell SNV+DT, bei den Modellen mit dem gesamten bzw. reduzierten Datensatz OBC+NM; die statistischen Kenngrößen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthenen und Pelargonien)..... 131
- Abb. 6.6: Streudiagramme der Blatt-TNC-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthenen und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung bei [A] und [B] SNV+DT, bei [C] MSC; die statistischen Kenngrößen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthenen und Pelargonien)..... 133
- Abb. 7.1: Bewurzelung von Pelargonienstecklingen im Gewächshaus (links) und von Chrysanthenenstecklingen in der Klimakammer (rechts) 140
- Abb. 7.2: Zählscheibe zur Bestimmung der Anzahl Wurzeln in den einzelnen Längsklassen 141
- Abb. 7.3: Verlauf der vier geprüften segmentierten Regressionsmodelle (I-IV) 144
- Abb. 7.4: Klassifizierte Gesamtwurzellänge (Werte z-transformiert für die Sorten C-1 bis C-4) der Chrysanthenenstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom Gesamt-N- und Blattstärkegehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Gesamt-N- bzw. Blattstärke-Gehalt der Stecklinge (n = 204) 146
- Abb. 7.5: Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten C-1 bis C-4) der Chrysanthenenstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom eNF- und Protein-N-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren eNF- bzw. Protein-N-Gehalt der Stecklinge (n = 204) 147

Abb. 7.6:	Streudiagramme für die GWA (oben) bzw. die GWL (unten) gegenüber dem Gesamt-N-Gehalt für die Sorten C-2 bis C-4 (von links nach rechts); die gestrichelten Linien zeigen die Anpassung der segmentierten Regressionsmodelle, die blauen Rechtecke markieren die 95 % Vertrauensintervalle der Bruchpunkte	150
Abb. 7.7:	Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten C-2 bis C-4) der Chrysanthemenstecklinge bei der Bewurzelung in der Klimakammer in Abhängigkeit vom Gesamt-N- und Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Gesamt-N- bzw. Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge (n = 152)	151
Abb. 7.8:	Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom Protein-N- und eNF-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Protein-N- bzw. eNF-Gehalt der Stecklinge (n = 228)	153
Abb. 7.9:	Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom Gesamt-N- und Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Gesamt-N- bzw. Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge (n = 228)	154
Abb. 7.10 :	Klassifizierte Gesamtwurzellänge je Steckling (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung in der Klimakammer in Abhängigkeit vom Blattstärke- und Gesamt-N-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Blattstärke- bzw. Gesamt-N-Gehalt der Stecklinge (n = 228)	156
Abb. 7.11:	Klassifizierte Gesamtwurzellänge je Steckling (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge mit einem Gesamt-N-Gehalte ≥ 33 mg/g bei der Bewurzelung in der Klimakammer in Abhängigkeit vom Blattstärke- und Gesamt-N-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Blattstärke- bzw. Gesamt-N-Gehalt aller Stecklinge (n = 45)	157
Abb. 8.1:	Verteilung der referenzanalytisch bestimmten Gesamtstickstoffgehalte von Chrysanthemenstecklingen aus der laufenden Produktion der Fa. Kientzler (Costa Rica) in den beiden Ernteperioden 2010 und 2011	161
Abb. 8.2:	Verteilung der referenzanalytisch bestimmten Gesamtstickstoffgehalte von Pelargonienstecklingen aus der laufenden Produktion der Firmen Dümme (Äthiopien) und Endisch (Ägypten) in den beiden Ernteperioden 2009/10 und 2010/11	162
Abb. 10.1:	Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum der unbehandelten log 1/R-Spektren	188
Abb. 10.2:	Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach [A] Basislinienkorrektur mit dem kleinsten Absorptionswert (Offset) und [B] Basislinienkorrektur mit einer Trendlinie durch die Absorptionswerte bei 960 bzw. 1690 nm (Linear Baseline Correction)	189
Abb. 10.3:	Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach Bildung der [A] ersten und [B] zweiten Ableitung mit einer Segmentbreite und einer Glättung von jeweils sechs Datenpunkten	191

Abb. 10.4: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach [A] Vektornormierung (NV) und [B] Mittelwertnormierung (NM).....	192
Abb. 10.5: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach Zentrierung und Normierung (SNV).....	193
Abb. 10.6: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach [A] De-Trending mit Polynom zweiter Ordnung und [B] Kombination von SNV+DT.....	194
Abb. 10.7: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach MSC [A] Full, [B] Offset und [C] Amplifikation	195
Abb. 10.8: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach OSC unter Nutzung des Trockensubstanzgehaltes als y-Variable	196

Tabellenverzeichnis

Tab. 2.1: Literaturübersicht zur Bedeutung des N- und KH-Status für die Adventivwurzelbildung (AWB) bei verschiedenen Zierpflanzengattungen sowie zu Wechselwirkungen zwischen dem N- und KH-Status (n.u. = nicht untersucht, + = positive Beziehung, - = negative Beziehung, o = Beziehung nicht eindeutig, ja = existierende Wechselwirkungen)	25
Tab. 4.1: Zusammenstellung (Herkünfte, Termine, Sorten, Düngung) der für die Kalibrierung und Validierung genutzten Chrysanthemen- [A] und Pelargonienproben [B]	37
Tab. 4.2: Spannweiten der Trockensubstanz- und Gesamtstickstoffgehalte sowie der Summe der nicht-strukturbildenden Kohlenhydrate (TNC = lösliche Zucker + Stärke) in den Blättern bzw. Sprossachsen der Chrysanthemen- und Pelargonienstecklinge.....	38
Tab. 4.3: Standardlaborfehler (SEL) für die Bestimmung der vier N-Fractionen sowie des Gesamt-N (n = 35).....	41
Tab. 4.4: Standardlaborfehler (SEL) für die Bestimmung von Glucose, Fructose, Saccharose, Stärke sowie die Summe der drei Zucker (TSS) und die Summe aus TSS und Stärke (TNC) in Blättern bzw. Sprossachsen (n = 51)	43
Tab. 4.5: Einfluss der Datenvorbehandlungsverfahren auf die Modellgüte: Vorbehandlungsmethoden mit gleichen Buchstaben unterscheiden sich nicht signifikant (Wilcoxon-Wilcox-Test mit $p < 0,05$; mit $SECV_{\min}$ = minimaler SECV, $SECV_{16}$ = SECV bei Verwendung von 16 PLS-Faktoren und $nPLS_{SECV}$ = Anzahl PLS-Faktoren, bei der der SECV kleiner ist, als der des Modells ohne Datenvorbehandlung und der Verwendung von 16 PLS-Faktoren).....	56
Tab. 4.6: Statistische Kenngrößen der Validierung für die Trockensubstanz (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	58

Tab. 4.7:	Statistische Kenngrößen der Validierung für den Amid-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	60
Tab. 4.8:	Statistische Kenngrößen der Validierung für den Amino-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	62
Tab. 4.9:	Statistische Kenngrößen der Validierung für den Protein-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV+DT getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	64
Tab. 4.10:	Statistische Kenngrößen der Validierung für den Gesamt-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels MSC getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	66
Tab. 4.11:	Statistische Kenngrößen der Validierung für die eoNF (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV+DT getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	68
Tab. 4.12:	Statistische Kenngrößen der Validierung für die eNF (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels OBC+NM getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	70
Tab. 4.13:	Statistische Kenngrößen der Validierung für die oNF (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV+DT getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	71
Tab. 4.14:	Statistische Kenngrößen der Validierung für den Protein-N (SEP, BIAS in mg/g) ohne und mit Begrenzung des genutzten Wellenlängenbereichs getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)	73
Tab. 4.15:	Statistische Kenngrößen der Validierung für die Blattstärke (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die ST-, BU- und BO-Spektren ohne Transformation (log 1/R) sowie bei Nutzung des für jeden Spektrentyp jeweils am besten geeigneten Datenvorbehandlungsverfahren getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	76
Tab. 4.16:	Statistische Kenngrößen der Validierung für die Blatt-TNC-Gehalte (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die ST-, BU- und BO-Spektren ohne Transformation (log 1/R) sowie bei Nutzung der drei für jeden Spektrentyp am besten geeigneten Datenvorbehandlungsverfahren getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	79
Tab. 4.17:	Kenngrößen der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Trockensubstanz sowie der N-Fractionen im gesamten Chrysanthemen- und Pelargoniendatensatz ($A^2 =$ Testgröße des Anderson-Darling-Test, $p_{AD} =$ Irrtumswahrscheinlichkeit des Anderson-Darling-Tests).....	82

Tab. 4.18:	Kenngrößen der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Blattkohlenhydratfraktionen im gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien) vor und nach einer logarithmischen Transformation (A^2 = Testgröße des Anderson-Darling-Test, p_{AD} = Irrtumswahrscheinlichkeit des Anderson-Darling-Tests)	83
Tab. 4.19:	Statistische Kenngrößen der Validierung für den rücktransformierten Blatt-TSS-Gehalt (\bar{x} , s , R , SEP , $BIAS$ in mg/g) getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe).....	85
Tab. 4.20:	Kenngrößen der für die Prüfung der Robustheit genutzten Kalibriermodelle	88
Tab. 5.1:	Reproduzierbarkeit der Messungen von Gelrite™-Platten bei Platten aus einem Ansatz sowie aus mehreren Ansätzen an einem bzw. an drei verschiedenen Tagen am Beispiel der Trockensubstanzgehalte [mg/g] prognostiziert mittels des Basiskalibriermodells für Chrysanthemen und Pelargonien (Datenvorbehandlung mittels SNV, 6 PLS-Faktoren)	110
Tab. 5.2:	Statistische Kenngrößen (b = Steigung der Regressionsgeraden, a = y-Achsenabschnitt, R^2 = Bestimmtheitsmaß, \bar{x}_{SE} = mittlere Standardfehler und $BIAS$ = Differenz Sollwert – NIRS-Wert) für die Kalibrier- bzw. Validiermodelle für die Saccharose- (S-Serie) und Fructoseprobenserien (F-Serie) unter Nutzung der die massenbezogenen sowie der auf mmol Zuckermoleküle bzw. mmol Monosaccharidäquivalente (MsÄq) bezogenen Sollwerte	115
Tab. 5.3:	Statistische Kenngrößen (b = Steigung der Regressionsgeraden, a = y-Achsenabschnitt, R^2 = Bestimmtheitsmaß, \bar{x}_{SE} = mittlere Standardfehler und $BIAS$ = Differenz Sollwert – NIRS-Wert) für die Kalibriermodelle für die Saccharose- (S-Serie) und Fructoseprobenserien (F-Serie) und die Validierung des Modells mit den GS- und GFS-Probenserien unter Nutzung der massenbezogenen sowie der auf mmol Zuckermoleküle bzw. mmol Monosaccharidäquivalente (MsÄq) bezogenen Sollwerte.....	118
Tab. 6.1:	Zusammenstellung (Herkünfte, Sorten, Düngung und Erntetermine) der für die Kalibrationserweiterung genutzten [A] Poinsettien-, [B] Osteospermum- und [C] Impatiens Neu-Guinea-Proben	122
Tab. 6.2:	Statistische Kenngrößen der Validierung für die TS-, Protein-N-, Gesamt-N-, eNF-, oNF- sowie Blatt-TNC-Gehalte für die Erweiterung des Anwendungsbereichs bei Anwendung der Modelle für Chrysanthemen und Pelargonien (Basis), der Modelle für alle Kulturen (Gesamt) und Modells für den bei Chrysanthemen und Pelargonien Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert), getrennt nach Chrysanthemen (Ch), Pelargonien (Pe) Impatiens (Im), Osteospermum (Os) und Poinsettien (Po) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Alle)	134
Tab. 7.1:	Kenngrößen der für die Bestimmung der Trockensubstanz (TS) sowie der Stickstoff- und Kohlenhydrat-Fractionen genutzten Kalibriermodelle (SEP und $BIAS$ jeweils in mg/g).....	142
Tab. 7.2:	Anzahl Proben aus dem Kalibrier- bzw. Validierdatensatz, sowie Anzahl Proben ohne Referenzwerte bei Chrysanthemen und Pelargonien und Bewurzelung im Gewächshaus bzw. in der Klimakammer (n = Anzahl Proben im Bewurzelungsversuch)	142

Tab. 7.3:	Korrelationsmatrix (Pearsonscher Maßkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten TS-Gehalte, sowie die Gehalte der N- und KH-Fraktionen (n = 204, p < 0,001)	145
Tab. 7.4:	Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fraktionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten C-1 bis C-4 bei Bewurzelung im Gewächshaus (Werte z-transformiert für die Sorten, p < 0,001, n = 204)	145
Tab. 7.5:	Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fraktionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten C-2 bis C-4 bei Bewurzelung in der Klimakammer (Werte z-transformiert für die Sorten, p < 0,001, n = 152, n.s. = nicht signifikant).....	148
Tab. 7.6:	Kenngößen (BP = Bruchpunkt, $b_{x > BP}$ = Steigung für $x > BP$ und SER = Standardfehler der Anpassung) der segmentierten Regressionsmodelle (Modell I) für die GWA (Anzahl Wurzeln/Steckling), die GWL (cm/Steckling) und den BI in Abhängigkeit vom Gesamt-N-Gehalt in mg/g ($\bar{x} \pm s$ = Mittelwert \pm Standardabweichung des jeweiligen Bewurzelungsparameters).....	149
Tab. 7.7:	Korrelationsmatrix (Pearsonscher Maßkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten TS-Gehalte, sowie der Gehalte der N- und KH-Fraktionen (p < 0,001, n = 228, n.s. = nicht signifikant).....	152
Tab. 7.8:	Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fraktionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten P-1 bis P-4 bei Bewurzelung im Gewächshaus (Werte z-transformiert für die Sorten, p < 0,001, n = 228, n.s. = nicht signifikant).....	152
Tab. 7.9:	Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fraktionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten P-1 bis P-4 mit einem Gesamt-N-Gehalt ≥ 33 mg/g bei Bewurzelung im Gewächshaus (Werte z-transformiert für die Sorten, p < 0,05, n = 45, n.s. = nicht signifikant)	155
Tab. 7.10:	Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fraktionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten P-1 bis P-4 bei Bewurzelung in der Klimakammer (Werte z-transformiert für die Sorten, p < 0,001, n = 228, n.s. = nicht signifikant).....	155
Tab. 10.1:	Sortenliste der Chrysanthemen und Pelargonienproben (z = Zonale-, p = Peltaten-Sorten)	180
Tab. 10.2:	Sortenliste der Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienproben	180
Tab. 10.3:	Verteilung der Trockensubstanz und Stickstofffraktionen im Kalibrierdatensatz, aufgeschlüsselt für die drei Kulturen (Ch, Pz, Pp) und für den gesamten Kalibrierdatensatz (Alle)	182
Tab. 10.4:	Verteilung der Blattkohlenhydratfraktionen im Kalibrierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Ch = Chrysanthemen, Pz = Pelargonien Zonale, Pp = Pelargonien Peltaten) sowie für den gesamten Kalibrierdatensatz (Alle).....	183

Tab. 10.5:	Verteilung der Trockensubstanz und der Stickstofffraktionen im Validierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Ch = Chrysanthemen, Pz = Pelargonien Zonale, Pp = Pelargonien Peltaten) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Alle)	184
Tab. 10.6:	Verteilung der Blattkohlenhydratfraktionen im Validierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Ch = Chrysanthemen, Pz = Pelargonien Zonale, Pp = Pelargonien Peltaten) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Alle)	185
Tab. 10.7:	Verteilung der Trockensubstanzgehalte sowie Gehalte der Stickstofffraktionen (Protein-, Gesamt-, eNF- und oNF) und Blattkohlenhydrate (Stärke und TNC) im Kalibrierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Po = Poinsettien, Os = Osteospermum, Im = Impatiens Neu-Guinea) sowie für den gesamten Kalibrierdatensatz (Alle)	186
Tab. 10.8:	Verteilung der Trockensubstanzgehalte sowie Gehalte der Stickstofffraktionen (Protein-, Gesamt-, eNF- und oNF) und Blattkohlenhydrate (Stärke und TNC) im Validierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Po = Poinsettien, Os = Osteospermum, Im = Impatiens Neu-Guinea) für den gesamten Validierdatensatz (Alle)	187
Tab. 10.9:	Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Trockensubstanz sowie die N-Fractionen unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe).....	197
Tab. 10.10:	Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Blattkohlenhydrate bei Verwendung der ST-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe).....	206
Tab. 10.11:	Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Blattkohlenhydrate bei Verwendung der BU-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe).....	212

- Tab. 10.12: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Blattkohlenhydrate bei Verwendung der BO-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe)..... 218
- Tab. 10.13: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die logarithmisch transformierten Blattkohlenhydrate bei Verwendung der BO-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe) 224
- Tab. 10.14: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, $BIAS_{CV}$ = Systematischer Fehler der Kreuzvalidierung, $SECV(C)$ = SECV korrigiert um den $BIAS_{CV}$) der Kalibriermodelle für die Trockensubstanz, den Protein- und Gesamt-N, die extrahierbaren (eNF) und organischen (oNF) N-Fractionen sowie die Blattkohlenhydrate (Blatt-TNC) unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für Chrysanthemen (Ch), Pelargonien (Pe), Impatiens (Im), Osteospermum (Os), Poinsettien (Po) und alle fünf Kulturen gemeinsam (Alle) mit dem gesamten ("Gesamt") bzw. dem reduzierten ("Reduziert") Datensatz..... 234

Abkürzungsverzeichnis

a	y-Achsenabschnitt der Regressionsgeraden
A ²	Testgröße des Anderson-Darling-Tests auf Normalverteilung
AWB	Adventivwurzelbildung
b	Steigung der Regressionsgeraden
BI	Bewurzelungsindex als gewichtetes Mittel aus $0,3 \cdot$ Gesamtwurzellänge je Steckling in cm und $0,7 \cdot$ Gesamtwurzelanzahl je Steckling
BIAS	systematischer Fehler berechnet als Differenz der Referenzwerte und der NIRS-Werte
BO	Spektren aufgenommen von den Blattoberseiten abgetrennter Blätter
BP	Bruchpunkt in segmentierten Regressionsmodellen
BU	Spektren aufgenommen von den Blattunterseiten abgetrennter Blätter
° C	Grad Celsius
Ch	Chrysanthemen
cm	Zentimeter
CO ₂	Kohlendioxid
Diff-Z	Differenz zwischen der mittels NIRS prognostizierten Summe aus löslichen Zuckern und Stärke (TNC) in den Blättern und den Blattstärkegehalten
DT	Basislinienkorrektur mit polynomer Anpassung / De-Trending
eNF	Summe der extrahierbaren N-Fraktionen (Amid-N + Nitrat-N + Amino-N)
eoNF	Summe der extrahierbaren organischen N-Fraktionen (Amid-N + Amino-N)
F-Serie	Gelrite TM -Platten mit variierenden-Fructose-Gehalten
g	Gramm
G6PDH	Glucose-6-Phosphatdehydrogenase
GFS-Serie	Gelrite TM -Platten mit variierenden Saccharose- sowie konstanten Fructose- und Glucose-Gehalten
GS-Serie	Gelrite TM -Platten mit variierenden Saccharose- und konstanten Glucose-Gehalten
GWA	Gesamtwurzelanzahl je Steckling
GWL	Gesamtwurzellänge in cm je Steckling
HK	Hexokinase
i.d.TM	in der Trockenmasse
Im	Impatiens Neu-Guinea
K	Kalium
KH	Kohlenhydrate

l	Liter
LBC	Basislinienkorrektur mit linearer Anpassung / linear baseline correction
LDA	Lineare Diskriminanzanalyse / linear discriminant analysis
ln	Logarithmus naturalis
log	dekadischer Logarithmus
mg	Milligramm
ML	Maximum-Likelihood-Verfahren
mm	Millimeter
MovAvg	Glättung von Spektren durch die Bildung von gleitenden Mittelwerten / Moving Average
MsÄq	Monosaccharidäquivalente
MSC	Normierung der Spektren auf ein "streulichtfreies" Referenzspektrum / multiplicative scatter correction
n	Anzahl Proben im Datensatz
N	Stickstoff
n.s.	nicht signifikant
NAD/NADH	Nicotinamidadenindinukleotid
NIRS	Nahinfrarotspektroskopie
nm	Nanometer
NM	Normalisierung von Spektren auf das Mittelwertsspektrum
nPLS	Anzahl latenter Variablen (PLS-Faktoren) im Regressionsmodell
NV	Normalisierung von Spektren auf den Einheitsvektor
oNF	Summe der organischen N-Fractionen (Amid-N + Amino-N + Protein-N)
OBC	Basislinienkorrektur um einen konstanten Versatz / offset baseline correction
Os	Osteospermum
OSC	Streulichtkorrektur unter Einbeziehung der Referenzwerte / orthogonal signal correction
p	Irrtumswahrscheinlichkeit
P	Phosphor
p _{AD}	Irrtumswahrscheinlichkeit des Anderson-Darling-Tests auf Normalverteilung
PC	Hauptkomponente / Principle component
PCA	Hauptkomponentenanalyse / Principle component analysis
Pe	Pelargonien (Zonale- und Peltatum Hybriden)
PIG	Phosphoglucoisomerase
PLS	Partielle Kleinste Quadrate Regression / Partial least square regression

Po	Poinsettien
Pp	Pelargonien Peltatum-Hybriden
Pz	Pelargonien Zonale-Hybriden
R	Spannweite der Referenzwerte / Range
r	Pearsonscher Maßkorrelationskoeffizient
R ²	Bestimmtheitsmaß
R _{CV} ²	Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung
RER	Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte (R) zum Standardfehler der Validierung (SEP) / range-to-error ratio
RPD	Verhältnis der Standardabweichung (SD) der Referenzwerte zum Standardfehler der Validierung (SEP) / ratio of prediction to deviation
R _{SR} ²	Bestimmtheitsmaß der segmentierten Regressionsanalyse
SD	Standardabweichung / standard deviation
SEC	Standardfehler der Kalibrierung / standard error of calibration
SECV	Standardfehler der Kreuzvalidierung / standard error of cross validation
SEL	Standardfehler der Labormethode / standard error of laboratory
SEP	Standardfehler der Validierung / standard error of prediction
SEP(C)	Um den systematischen Fehler korrigierter Standardfehler der Validierung / standard error of prediction corrected for BIAS
SER	Standardfehler des Regressionsmodells / standard error of regression
SNV	Standardisierung und Normierung auf einen Mittelwert 0 und eine Standardabweichung von 1 / standard normal variate-Transformation
S-Serie	Gelrite TM -Platten mit variierenden Saccharose-Gehalten
ST	Spektren aufgenommen von ganzen Stecklingen
TNC	Summe der löslichen Zucker (Glucose + Fructose + Saccharose) plus Stärke / total non-structural carbohydrates
TS	Trockensubstanz
TSS	Summe der löslichen Zucker (Glucose + Fructose + Saccharose) / total soluble sugars
VI	Vertrauensintervall
z	Z-transformierte Werte (Messwert-Mittelwert der Stichprobe / Standardabweichung der Stichprobe)
ρ	Spearmanscher Rangkorrelationskoeffizient

Zusammenfassung

Das Bewurzelungspotential von Zierpflanzenstecklingen wird maßgeblich vom Stickstoffernährungszustand der Mutterpflanzen und den vorhandenen Assimilatreserven bestimmt. Eine Beurteilung des Bewurzelungspotentials anhand des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus scheitert allerdings am Fehlen geeigneter Analysenverfahren. Etablierte Laborverfahren sind für eine fortlaufende Qualitätskontrolle während der Stecklingsproduktion zu zeit- und kostenintensiv. Eine vielversprechende Alternative ist die Nahinfrarotspektroskopie (NIRS), insbesondere wenn auf jegliche Probenvorbereitung verzichtet wird. Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung von gattungsübergreifenden Kalibriermodellen zur nahinfrarotspektroskopischen Bestimmung des Stickstoff- und Kohlenstoffstatus von Zierpflanzenstecklingen ohne Probenvorbereitung sowie ein Machbarkeitsnachweis, dass auf Basis der NIRS-Messwerte das Bewurzelungspotential von Stecklingen beurteilt werden kann.

In einem ersten Schritt wurden gemeinsame Kalibriermodelle für Chrysanthemen- und Pelargonienstecklinge zur Bestimmung verschiedener Stickstoff- und Kohlenhydratfraktionen erstellt. Die Modelle für die Protein- und Gesamtstickstoffgehalte sowie für die Summe der organisch gebundenen Stickstofffraktionen ganzer Stecklinge und für die Blattkohlenhydrate (lösliche Zucker plus Stärke) sind für eine genaue Quantifizierung geeignet. Für weitere Stickstofffraktionen (u. a. die Summen der löslichen organischen bzw. aller löslichen Stickstoffverbindungen) sowie für die Blattstärke konnten Modelle entwickelt werden, die eine Klassifizierung zulassen. Beim Amino-N sowie der Summe der löslichen Blattzucker können nur Proben mit sehr hohen und sehr geringen Gehalten unterschieden werden. Beim Amid- und Nitrat-N sowie den einzelnen Blattzuckern (Glucose, Fructose, Saccharose) ist die Vorhersageleistung der Modelle nicht einmal hierfür ausreichend. Ursächlich dafür sind beim Amid-N die geringen Gehalte, beim Nitrat-N die fehlende NIR-Aktivität und bei den Zuckern die spektrale Ähnlichkeit. Eine weitergehende Untersuchung mit artifiziellen Proben zeigte, dass in eine Unterscheidung der drei Einzelzucker in einer komplexen, wasserreichen Matrix nicht möglich ist. In einem zweiten Schritt wurden die Kalibriermodelle mit wenigen Proben auf drei weitere Gattungen (Impatiens, Osteospermum und Poinsettien) übertragen.

Im Rahmen eines Machbarkeitsnachweises wurden der Stickstoff- und Kohlenhydratstatus von Chrysanthemen- und Pelargonienstecklingen mit den entwickelten Modellen bestimmt und die Stecklinge bewurzelt. Wurde mittels NIRS ein leichter Stickstoffmangel gemessen, war die Adventivwurzelbildung bei beiden Kulturen deutlich reduziert. Bei unter Schwachlichtbedingungen bewurzelten Pelargonienstecklingen bestand zudem ein positiver Zusammenhang zwischen den gemessenen Kohlenhydratgehalten und der Bewurzelung. Diese Ergebnisse bestätigen publizierte Daten verschiedener Autoren, bei denen der Stickstoff- und Kohlenhydratstatus mit etablierten Verfahren analysiert wurde.

Schlagerworte: Adventivwurzelbildung, Stecklingsqualität, zerstörungsfreie Bestimmung, NIRS

Summary

Adventitious root formation of ornamental cuttings strongly depends on nitrogen nutrition of stock plants and their carbohydrate reserves. However, due to a lack of suitable analytical methods – established laboratory techniques are too time-consuming and expensive – this knowledge cannot be used to predict rooting capacity of cuttings in horticultural practice yet. Near-infrared spectroscopy (NIRS) might be a promising alternative, especially, if no additional sample preparation is done. Aim of the current research was the development of multi-species calibration models to predict nitrogen and carbohydrate status of intact ornamental cuttings. Furthermore, in a proof of concept study, the suitability to assess rooting capacity of ornamental cuttings based on their nitrogen and carbohydrate status predicted by the developed NIRS calibration models was evaluated.

First multi-species calibration models including chrysanthemum and pelargonium cuttings for various nitrogen and carbohydrate fractions were developed. For protein nitrogen, sum of organic bound nitrogen and total nitrogen of entire cuttings as well as for total non-structural carbohydrates (sum of starch and soluble sugars) in leaves prediction performance was sufficient for quantification. For sum of soluble organic and total soluble nitrogen as well as for starch in leaves calibration models were at least suitable for a rough classification. For amino N and for sum of soluble sugars in leaves only samples with very high and very low contents could be distinguished by NIRS. For amid and nitrate N as well as for single sugars in leaves (i.e. fructose, glucose, sucrose) not even this was possible. More in-depth analysis, using an artificial sample with similar spectral properties as real leaves of cuttings, revealed that fructose, glucose and sucrose cannot be separated from each other in a complex and water-rich matrix as cuttings are. In a second step three more species (impatiens, osteospermum and poinsettia) were successfully included in the calibration models previously build for chrysanthemum and pelargonium.

Further on, as proof of concept calibration models were applied to spectra of chrysanthemum and pelargonium cuttings, which were rooted under ambient light in greenhouses and under constant low light conditions in a climate chamber. If only a slight nitrogen deficiency was predicted by NIRS, adventitious root formation of both chrysanthemum and pelargonium cuttings was significantly reduced. Moreover, for pelargonium cuttings rooted under low light conditions, a positive correlation between carbohydrates and adventitious root formation was found. These results are in line with published data of various authors, in which nitrogen and carbohydrate statuses were analyzed using established laboratory techniques.

Keywords: adventitious root formation, cutting quality, non-destructive measurement, NIRS

1 Einleitung und Hintergrund

Qualitativ hochwertige Stecklinge, die schnell, sicher und unter Beibehaltung ihrer Vitalität bewurzeln, sind ein Grundpfeiler des Zierpflanzenbaus in Mitteleuropa. Ein Großteil der Stecklinge wird an Standorten mit günstigen klimatischen Bedingungen, überwiegend in Ost-Afrika, dem Nahen Osten sowie Süd- und Mittelamerika, produziert (BMEL, 2014). Untersuchungen von Kadner et al. (2008) zeigen, dass einheitlich bewurzelnde Stecklinge ausschlaggebend für gleichmäßig wachsende Pflanzenbestände in der Weiterkultur sind. Die Bedeutung der Stecklingsqualität wird zukünftig durch die zunehmende Spezialisierung der Betriebe – einhergehend mit einer stärkeren Automatisierung und Mechanisierung der Produktionsabläufe z. B. durch Steckroboter, Topfmaschinen und computergesteuerte Bewässerungs- und Klimasteuerungssysteme – in Verbindung mit den steigenden Betriebsgrößen weiter zunehmen (van Henten, 2004; Dirksmeyer, 2009; Pekkeriet und van Henten, 2011).

Seit den Versuchen von Kraus und Kraybill (1918) wurde im Zusammenhang mit der Stecklingsqualität die Bedeutung der Stickstoff(N-)versorgung der Mutterpflanzenbestände sowie der Kohlenhydrat(KH-)reserven der geernteten Stecklinge intensiv diskutiert und von verschiedenen Autoren an unterschiedlichen Zierpflanzenkulturen untersucht (Haun und Cornell, 1950; Shanks und Link, 1951; von Hentig, 1959; Röber und Reuther, 1982; Druege et al., 2000; Druege et al. 2004; Rapaka et al., 2005; Zerche und Druege, 2009). Bis heute werden der N-Status der Stecklinge und deren Kohlenhydratreserven aufgrund des Fehlens geeigneter Analyseverfahren aber noch nicht zur Qualitätsbeurteilung von Stecklingen genutzt. Die etablierten Labormethoden wie z. B. die Stickstoffbestimmung mittels Dumas- oder Kjeldahl-Verfahren (Horneck und Miller, 1998) und die Bestimmung von Kohlenhydraten nach dem Luff-Schoorl-Verfahren (Matissek et al., 2010) oder mittels enzymatisch-photometrischer Verfahren (Hendrix, 1993) sind zu zeit- und vor allem durch den Chemikalienverbrauch zu kostenintensiv. Die Nahinfrarot-Spektroskopie (NIRS) könnte hierfür eine schnelle und kostengünstige Alternative darstellen, vor allem wenn auf die vielfach übliche Trocknung und Zerkleinerung der Proben vor der Spektrenaufnahme verzichtet wird (Tillmann, 1996; Williams, 2001).

Das primäre Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung von Kalibriermodellen zur Bestimmung verschiedener Stickstoff- und Kohlenhydratfraktionen in Zierpflanzenstecklingen. Darüber hinaus wurde geprüft, ob mittels des so bestimmten N- und KH-Status Aussagen über das Bewurzelungspotential und damit die Qualität der Stecklinge möglich sind.

2 Stand des Wissens

2.1 Bedeutung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus sowie des Trocken- substanzgehaltes für die Stecklingsqualität

Die Qualität von Stecklingen hängt maßgeblich vom physiologischen Zustand der Mutterpflanzen ab, von denen sie geerntet werden. Ein optimaler physiologischer Zustand der Mutterpflanzen ist nach von Hentig (1996) durch ein rasches und gleichmäßiges Wachstum, eine hohe Nährstoffaufnahme, einen starken Aufbau von Inhaltsstoffen (Chlorophyll, Phytohormone) und eine zunehmende Akkumulation von Assimilaten gekennzeichnet. Erreichen die Mutterpflanzen z. B. auf Grund einer zu starken Beerntung, ungünstiger Klimabedingungen oder einer unzureichenden Nährstoffversorgung nicht ihren optimalen physiologischen Status, wird die Regenerationsfähigkeit der geernteten Stecklinge reduziert (Blazich, 1988; Moe und Andersen, 1988; von Hentig, 1996; da Costa et al., 2013).

Die Bedeutung der Stickstoffversorgung sowie der Kohlenhydratreserven für die Adventivwurzelbildung bei Stecklingen wird bereits von Kraus und Kraybill (1918) folgendermaßen beschrieben: Tomatenstecklinge von gering mit Stickstoff versorgten Mutterpflanzen aber mit hohen Kohlenhydratreserven bildeten mehr Wurzeln als solche von mit Stickstoff überversorgten Mutterpflanzen und geringeren Kohlenhydratgehalten. Das Wechselspiel zwischen Stickstoffversorgung, Kohlenhydratreserven und der nachfolgenden Adventivwurzelbildung wurde seither bei einer Reihe von Zierpflanzenkulturen untersucht. Wesentliche Ergebnisse aus Untersuchungen an *Campanula isophylla*, *Dendranthema* sp., *Euphorbia pulcherrima*, *Fuchsia* x *hybrida*, *Impatiens* x *hawkerii*, *Pelargonium* sp., *Petunia* x *hybrida* und *Scaevola aemula* sind in Tab. 2.1 zusammengestellt.

Tab. 2.1: Literaturübersicht zur Bedeutung des N- und KH-Status für die Adventivwurzelbildung (AWB) bei verschiedenen Zierpflanzengattungen sowie zu Wechselwirkungen zwischen dem N- und KH-Status (n.u. = nicht untersucht, + = positive Beziehung, - = negative Beziehung, o = Beziehung nicht eindeutig, ja = existierende Wechselwirkungen)

Kultur	Referenz	Wirkung auf AWB		Wechselwirkungen		Anmerkungen und wesentliche Ergebnisse
		N-Status	KH-Status	N- und KH-Status	N- und KH-Status	
<i>Campanula isophylla</i>	Haaland, 1976 Moe, 1977	n.u.	+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ beide Arbeiten sind miteinander verknüpft ▪ Variation von Belichtung und CO₂-Konzentration in der Mutterpflanzenphase ▪ Bedingungen, die zu einer Akkumulation von KH führen, fördern die Stecklingsqualität ▪ Variation der NPK-Düngung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungserfolg
<i>Dendranthema</i> sp.	von Hentig, 1959	+	n.u.	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der Belichtung während der Mutterpflanzenkultur ▪ positive Korrelation zwischen der Belichtung und dem Bewurzelungserfolg ▪ positiver Einfluss der KH auf die Adventivwurzelbildung wird auf Grund der bekannteren Beziehung zwischen Belichtung und KH diskutiert
	Fischer und Hansen, 1977	n.u.	+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der verabreichten N-Menge und N-Form (NO₃-/NH₄-N) ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungserfolg ▪ erst bei sehr hohen N-Gaben (Ertragsrückgang) wird ein negativer Effekt auf die AWB beobachtet
	Röber, 1978	+	n.u.	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung ▪ Mutterpflanzenkultur unter Starklicht, Stecklingsbewurzelung unter Schwachlicht ▪ multiple Regression: Anzahl Wurzeln je Steckling = 1,6 · Zucker – 1,9 · Gesamt-N + 12; Stärkeakkumulation ist ein Stressindikator
	Röber und Reuther, 1982	-	+	ja	ja	

Fortsetzung von Tab. 2.1

Kultur	Referenz	Wirkung auf AWB		Wechselwirkungen N- und KH-Status	Anmerkungen und wesentliche Ergebnisse
		N-Status	KH-Status		
<i>Dendranthema</i> sp.	Moe, 1985	n.u.	o	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der Belichtung (Intensität + Lampentyp) ▪ leichte Verzögerung der AWB bei sehr hoher Lichtintensität, anschließend aber bessere Weiterentwicklung der Jungpflanzen
Kadher und Zerche, 1997		+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der Stickstoffdüngung ▪ positive Beziehung zwischen dem Gesamt-N und der AWB
Druege et al., 1998		+	-	ja	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung, Lagerung der Stecklinge ▪ positive Beziehung zwischen dem Gesamt-N und der AWB ▪ negative Korrelation zwischen den N- und KH-Gehalten ▪ Rückgang der KH-Gehalte während der Lagerung und verringerte AWB bei gelagerten Stecklingen
Zerche et al., 1999		+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung bei Substrat- sowie Hydroponikkultur ▪ positive Beziehung zwischen dem Gesamt-N und der AWB unabhängig vom Kultursystem
Druege et al., 2000		+	-	ja	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung, Lagerung der Stecklinge ▪ positive Beziehung zwischen dem Gesamt-N und der AWB ▪ negative Korrelation zwischen N- und KH-Status ▪ Anreicherung von Stärke bei N-Mangel ▪ Rückgang der KH-Gehalte während der Lagerung und verringerte AWB bei gelagerten Stecklingen
<i>Euphorbia pulcherrima</i>	Shanks und Link, 1951	+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und der Bewurzelung
	Zerche und Druege, 2009	+	-	ja	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungserfolg, Mindest-N-Gehalt von 40 mg/g i.d.TM ▪ negative Korrelation zwischen den N- und KH-Gehalten ▪ Stärkeakkumulation bei N-Mangel

Fortsetzung von Tab. 2.1

Kultur	Referenz	Wirkung auf AWB		Wechselwirkungen N- und KH-Status	Anmerkungen und wesentliche Ergebnisse
		N-Status	KH-Status		
<i>Fuchsia x hybrida</i>	von Hentig, 1959	0	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der NPK-Düngung ▪ geringste und höchste N-Düngungsstufe reduzieren die Bewurzelung
<i>Impatiens x hawkerii</i>	Gibson, 2003	+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der NK-Düngung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungs- erfolg ▪ K-Düngung von untergeordneter Bedeutung
<i>Pelargonium</i> sp.	Haun und Cornell, 1951	-	+	ja	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der NPK-Düngung ▪ steigende N-Versorgung reduziert die KH-Gehalte, gleichzeitig steigt auch die Ausfallrate ▪ P- und K-Düngung ohne Effekt
Reuther und Röber, 1980		-	+	ja	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Versorgung und der Lichtintensität in der Mutterpflanzenkultur ▪ Stärkeanreicherung bei N-Mangel, KH-Anreicherung bei N-Überschuss, KH-Anreicherung ist ein Stressindikator ▪ positive Beziehung zwischen Zuckergehalten und Bewurzelungserfolg unter Schwachlichtbedingungen ▪ Stecklinge zeigen eine deutliche Adaption an die Lichtverhältnisse während der Mutterpflanzenkultur
Forschner und Reuther, 1984		n.u.	0	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Mutterpflanzenkultur unter Stark- bzw. Schwachlicht ▪ Einfluss der KH auf den Bewurzelungserfolg ist abhängig von der Lichtadaption ▪ Stärkeakkumulation ist ein Stressindikator

Fortsetzung von Tab. 2.1

Kultur	Referenz	Wirkung auf AWB		Wechselwirkungen N- und KH-Status	Anmerkungen und wesentliche Ergebnisse
		N-Status	KH-Status		
<i>Pelargonium</i> sp.	Ganmore-Naumann und Hagiladi, 1992	+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Versorgung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungserfolg
		0	o/+	ja	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung, Lagerung der Stecklinge ▪ positive Beziehung zwischen N-Status und AWB bei ungelagerten Stecklingen, negative bei gelagerten ▪ KH-Reserven sind entscheidend für die Lagerfähigkeit ▪ N-Überschuss reduziert KH-Reserven ▪ Stärkeakkumulation bei N-Mangel
<i>Petunia</i> x <i>hybrida</i>	Rapaka et al. 2005	n.u.	+	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der Lichtintensität während der Mutterpflanzenkultur und der Stecklingsbewurzelung ▪ unter ungünstigeren Lichtbedingungen (Starklicht während der Mutterpflanzenkultur + Schwachlicht während der Bewurzelung) nimmt die Bedeutung der KH-Reserven zu
		+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der N-Düngung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungserfolg
<i>Scaevola aemula</i>	Gibson, 2003	+	n.u.	n.u.	<ul style="list-style-type: none"> ▪ Variation der NK-Düngung ▪ positive Beziehung zwischen der N-Düngungshöhe und dem Bewurzelungserfolg ▪ K-Düngung von untergeordneter Bedeutung

Aus einer Gesamtbetrachtung der in Tab. 2.1 aufgelisteten Arbeiten ergibt sich, dass durch eine unzureichende Stickstoffversorgung der Mutterpflanzen die Gefahr eines schlechten Bewurzelungsergebnisses erheblich ansteigt. Eine übermäßige Stickstoffversorgung wirkt sich dagegen zumeist nur indirekt negativ auf die Bewurzelungsqualität aus. Entweder wird durch eine übermäßige Stickstoffanreicherung im Substrat und die damit einhergehende Salzbelastung das Wachstum der Mutterpflanzen negativ beeinflusst, worunter in der Regel auch die Qualität der geernteten Stecklinge leidet, oder es kommt durch eine übermäßige N-Aufnahme zu einer Reduktion der KH-Reserven in den geernteten Stecklingen, da der vorhandene Kohlenstoff zur Metabolisierung des überschüssigen Stickstoffs benötigt wird (Kaiser, 1997). Die verringerten KH-Reserven wirken sich insbesondere dann nachteilig auf den Bewurzelungserfolg aus, wenn auf Grund ungünstiger Umweltbedingungen die aktuelle Photosyntheseleistung der Stecklinge nicht ausreicht, um den Energiebedarf zu decken, sobald die KH-Reserven aufgebraucht sind (Veierskov, 1988; Druège, 2009).

Die Bedeutung der Photosyntheserate von Stecklingen für deren Bewurzelung zeigen Davis und Potter (1981 und 1989) in Versuchen mit Erbsenstecklingen, bei denen die Photosyntheseleistung durch eine verringerte CO₂-Konzentration in der Umgebungsluft bzw. die Unterdrückung der Stomataöffnung reduziert wurde. Ganz wesentlich beeinflusst wird die Photosyntheseleistung von der Lichtadaptation der Mutterpflanzen und den Lichtbedingungen während der Stecklingsbewurzelung. So benötigen z. B. Pelargonienstecklinge von starklichtadaptierten Mutterpflanzen eine wesentlich höhere Lichtintensität während der Bewurzelung, um den Lichtkompensationspunkt zu überschreiten, als solche von schwachlichtadaptierten (Forschner und Reuther, 1984; Druège et al., 2004; Rapaka et al., 2005). Allerdings kann dieser Zusammenhang nicht verallgemeinert werden, da gattungstypische Unterschiede sowohl bei der grundsätzlichen als auch der durch Lichtadaptation beeinflussten Photosyntheseleistung von Stecklingen bestehen (Druège, 2009). Neben der Frage der aktuellen Photosyntheseleistung der Stecklinge muss bei der Bewertung der KH-Reserven auch das Verhältnis von Zuckern zu Stärke berücksichtigt werden. Eine starke Akkumulation von Stärke und damit verbunden ein niedriges Zucker-zu-Stärke-Verhältnis sind ein deutlicher Stressindikator mit negativen Folgen für das Regenerationspotential der Stecklinge (Reuther und Röber, 1980; Röber und Reuther, 1982; Druège et al., 2000; Zerche und Druège, 2009).

Ein direkter Einfluss des Trockensubstanz(TS-)gehaltes auf die Bewurzelungsfähigkeit ist zwar nicht bekannt. Da Stecklinge aber anfällig gegenüber Dehydratation sind, kann der TS-Gehalt genutzt werden, um die Frische von Stecklingen abzuschätzen (Andersen, 1986; Hartmann et al., 2011). Da zudem altersbedingte Veränderungen, wie die Verdickung und Verholzung der Epidermis und der Zellwände, die mit einem Rückgang des Regenerationspotentials einhergehen, oder auch Stickstoffmangel zu einem Anstieg der TS-Gehalte führen (von Hentig, 1996, Kadner und Zerche, 1997, da Costa et al., 2013), kann der TS-Gehalt darüber hinaus als indirekter Parameter zur Vitalitätsbeurteilung der Mutterpflanzen genutzt werden.

2.2 Nahinfrarotspektroskopie (NIRS)

Bei der NIRS handelt es sich um ein indirektes analytisches Verfahren. Es basiert auf der Anregung von Molekülschwingungen im Spektralbereich zwischen 800 und 2500 nm, wobei sich der in der vorliegenden Arbeit genutzte Wellenlängenbereich nur von 960 bis 1690 nm erstreckt (siehe Abschnitt 4.1.2). Bei den beobachteten Schwingungen handelt es sich um Kombinations- und Oberschwingungen der im Bereich des mittleren Infrarots (2500 bis 5000 nm) liegenden Grundschwingungen von CH-, NH-, OH-, SH-, CC- sowie CO-Bindungen. Die chemischen und physikalischen Grundlagen der NIRS sind bei Miller (2001) bzw. Dahm und Dahm (2001) ausführlich beschrieben. Ein wesentliches Kennzeichen von NIR-Spektren sind die breiten, sich überlagernden Absorptionsbanden sowie Streulichteffekte, weswegen nicht, wie bei anderen spektroskopischen Verfahren, nur eine einzelne Wellenlänge zur Konzentrationsbestimmung eines bestimmten Inhaltsstoffes genutzt werden kann. Die Informationen müssen vielmehr mittels multivariater Regressionsmodelle aus einer Vielzahl von Einzelspektren und den dazugehörigen Referenzwerten extrahiert werden (Tillmann, 1996; Hruschka, 2001).

Im Folgenden soll der Ablauf der Kalibrationsentwicklung kurz umrissen werden, wobei für Details auf die einschlägige Literatur verwiesen wird. Abb. 2.1 zeigt schematisch den Ablauf der Kalibrationsentwicklung.

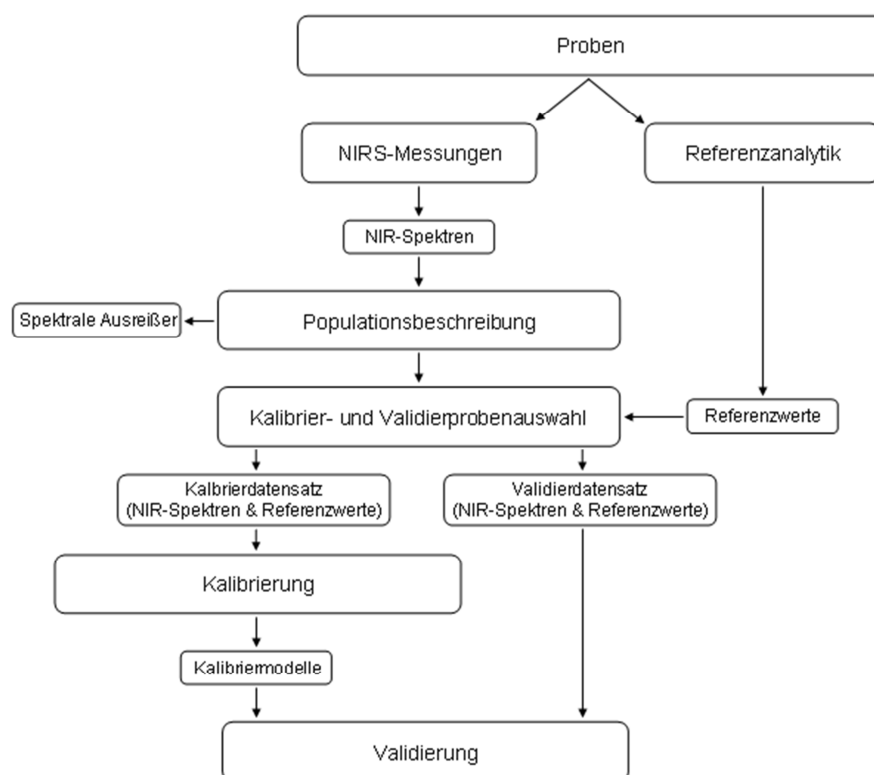


Abb. 2.1: Allgemeines Schema der Kalibrationsentwicklung

Am Anfang stehen die Aufnahme der NIR-Spektren sowie die Analyse der Proben mit einem etablierten Referenzverfahren. Die Auswahl eines geeigneten Referenzverfahrens ist dabei entscheidend für die erreichbare Güte der Kalibriermodelle (Tillmann, 1996; Næs et al., 2004). Die anschließende Populationsbeschreibung dient einmal dazu, spektrale Ausreißer, z. B. durch Fehlmessungen, aufzuspüren und gegebenenfalls aus dem Datensatz zu entfernen. Hierbei ist allerdings Vorsicht geboten: Einerseits vermindern spektrale Ausreißer zwar die Vorhersageleistung des Kalibriermodells, werden aber andererseits zu viele Ausreißer entfernt, wird das Modell sehr probensensitiv (Næs et al., 2004). Der zweite Aspekt der Populationsbeschreibung ist die Strukturierung und Visualisierung der Datenmatrix. Dies erfolgt vielfach mittels einer Hauptkomponentenanalyse (Principal component analysis/PCA). Dabei wird die Variabilität der einzelnen Wellenlängen auf wenige Hauptkomponenten (PC) verdichtet. So können beispielsweise Unregelmäßigkeiten (Häufungen oder Löcher) innerhalb der Population erkannt werden, wie sie unter anderem durch Proben aus verschiedenen Herkünften oder mit unterschiedlicher Aufbereitung (z. B. Vermahlung mit unterschiedlichen Mühlentypen) verursacht werden (Tillmann, 1996; Kessler, 2007).

Der nächste wesentliche Schritt ist die Aufteilung der Gesamtpopulation in einen Kalibrier- und einen Validierdatensatz. Dabei sollten sowohl der Kalibrier- als auch der Validierdatensatz die Variabilität des gesamten Datensatzes sowohl bezüglich der spektralen Eigenschaften als auch der Inhaltsstoffgehalte widerspiegeln. Gleichzeitig muss der Validierdatensatz möglichst unabhängig vom Kalibrierdatensatz sein (Tillmann, 1996; Williams, 2001). Das Kalibriermodell beschreibt den Zusammenhang zwischen der Absorption durch die Probe und dem Gehalt des gesuchten Inhaltsstoffs. Eine kurze Übersicht über die verschiedenen Regressionsverfahren findet sich bei Moschner (2007). Im vorliegenden Fall wurde das PLS-Verfahren (Partial Least Squares) genutzt, das derzeit vermutlich meistgenutzte Regressionsverfahren in der NIR-Spektroskopie (Kessler, 2007). Wie bei der Hauptkomponentenanalyse werden auch beim PLS-Verfahren hochkorrelierte Wellenlängen in Faktoren zusammengefasst. Während aber bei der PCA die Festlegung der Faktoren allein auf Basis der spektralen Varianz erfolgt, wird beim PLS-Verfahren auch die Zielgröße, also der Gehalt des gesuchten Inhaltsstoffes, in die Faktorenerlegung miteinbezogen. Eine detaillierte Beschreibung der mathematischen Hintergründe findet sich bei Del Zotto (2013).

Als letzter Schritt wird bei der Validierung die Güte des Modells mit dem vom Kalibrierdatensatz unabhängigen Validierdatensatz überprüft (Næs et al., 2004). Hierfür sind in der Literatur diverse statistische Maßzahlen sowie Richtgrößen für deren Beurteilung beschrieben (Tillmann, 1996; Williams, 2001; Næs et al., 2004; Saeys et al., 2005; Bellon-Maurel et al., 2010; Alves et al., 2012). Allerdings beschreiben diese Maßzahlen nur die Richtigkeit und Präzision der Kalibriergleichung (Næs et al., 2004). Ein wesentlicher weiterer Punkt bei der Gütebeurteilung von Kalibriermodellen ist deren Robustheit, die Zeaiter et al. (2004) folgendermaßen definieren:

»The robustness of a multivariate calibration model is the stability of its predictive capacity against perturbations centred on standard conditions«

Zur Beurteilung der Robustheit existieren nur wenige Maßzahlen. Ein mögliches Kriterium ist die Veränderung der Genauigkeit bzw. Richtigkeit bei gezielter Veränderung einzelner Störeffekte (Guthrie et al., 2005; Feng et al., 2011), bei der mathematischen Simulation von Störgrößen (Gemperline, 1997) oder bei der gezielten Variation von Einflussgrößen im Kalibrier- und Validierdatensatz (Guthrie et al., 2005; Bobelyn et al., 2010; Wedding et al., 2013).

2.2.1 Bestimmung der Trockensubstanz in Pflanzenmaterial ohne Probenvorbereitung

Da Wasser ein sehr starker Absorber im Bereich des NIR ist und auf Grund der einfachen Molekülstruktur auch über relativ schmale und eindeutige Absorptionsbanden verfügt (Tillmann, 1996; Williams, 2001), lässt sich die Trockensubstanz in einer Vielzahl unterschiedlicher Proben sehr gut bestimmen. Vielfach wird die Güte des Kalibriermodells dabei nur durch die Genauigkeit der Labormethode begrenzt (Thiex und van Erem, 1999). Die besondere Eignung der NIRS zur Bestimmung des Trockensubstanzgehalts zeigt sich unter anderem auch darin, dass dies z. B. bei Futtermais bereits direkt während der Ernte mittels auf Feldhäckslern montierten Spektrometersystemen (On-line) erfolgt (Welle et al., 2003).

2.2.2 Bestimmung von Stickstoff in Pflanzenmaterial ohne Probenvorbereitung

Derzeit wird die NIRS zur Stickstoffbestimmung kaum bei gartenbaulichen Kulturen angewandt. Es existieren lediglich einzelne kleinere Untersuchungen zur Anwendung bei Chinakohl, Chicorée, Tomaten und Gurken (Min et al., 2006; François et al., 2009; Ulissi et al., 2011; Ji-Yong et al., 2012). In allen Arbeiten erfolgten die NIRS-Messungen aber nur an einzelnen Blättern von Pflanzen einer Sorte, wodurch die Proben hinsichtlich ihrer Heterogenität nicht mit Stecklingsproben unterschiedlicher Sorten und Gattungen vergleichbar sind.

Eine Reihe von Untersuchungen finden sich dagegen im landwirtschaftlichen Bereich, überwiegend zur Bestimmung des Rohproteingehaltes – gemessen als Gesamtstickstoff – in Grünfütter bzw. Silagen (Reeves et al., 1989; Reeves und Blosser, 1991; Sinnaeve et al., 1994; Kennedy et al., 1996; Cozzolino und Labandera, 2002; Sørensen, 2004; Vranić et al., 2005; Liu und Han, 2006; Gibaud, 2007; Montes et al., 2008; Park et al., 2014) sowie zur Bestimmung des Stickstoffernährungszustandes von Kulturpflanzen (Morón et al., 2007; Liu et al., 2011). Diese Probenmatrices kommen den in der vorliegenden Arbeit verwendeten Stecklingen bezüglich Wassergehalt und Heterogenität – zwei wesentlichen Störfaktoren bei der Entwicklung von NIRS-Kalibriermodellen (Williams und Norris, 2001a) – relativ nahe. Die überwiegende Zahl der Untersuchungen zeigt, dass eine Gesamtstickstoffbestimmung an heterogenen pflanzlichen Proben mit hohem Wassergehalt zumindest grundsätzlich möglich ist, wobei aber die Güte der Kalibrierungen von kaum brauchbar bis sehr gut schwankt.

Weitere Stickstofffraktionen wurden nur in Ausnahmefällen bestimmt. Sørensen (2004) erreicht gute bis sehr gute Vorhersageleistungen für den NH_3 -Stickstoff in Gras- und Maissilagen, während Gibaud (2007) für denselben Parameter bei Grassilagen keine zufriedenstellende Genauigkeit erreicht. Des Weiteren beschreiben Abrams et al. (1988) sowie Park et al. (1998) auch gute Vorhersageleistungen für zwei bzw. drei Stickstofffraktionen, die in etwa mit der Amino-N- und Protein-N-Fraktion sowie der Summe der extrahierbaren organischen N-Fractionen (eNF) in der vorliegenden Arbeit vergleichbar sind. Allerdings wurden die Grassilagen vor der Spektrenaufnahme tiefgefroren, gemahlen und wieder aufgetaut und auch der Trockensubstanzgehalt der Proben war deutlich höher, was die Kalibrationsentwicklung vermutlich vereinfacht hat. In einer weiteren Untersuchung erzielten Reeves et al. (1989) zwar für den heißwasserunlöslichen Stickstoff bei gemahlenden Silageproben mit hohem Wassergehalt eine zufriedenstellende Vorhersagegenauigkeit, nicht aber für die säureunlösliche N-Fraktion.

Ein Punkt, der bei Gesamt-N-Kalibrationen für Silagen und Grünfütter unbedeutend ist, aber bei Zierpflanzenstecklingen sehr wohl eine Rolle spielt, ist der Nitratstickstoffgehalt der Proben. Während dieser in Silagen und Grünfütter zumeist äußerst gering ist – der Maximalwert für die risikolose Verwertung in der Fütterung liegt bei 1 mg/g (Mayland et al., 2007) – werden bei Stecklingen Gehalte über 10 mg/g erreicht, was über einem Fünftel des Gesamtstickstoffs entspricht (Druege et al., 2000). In der Kalibrationsentwicklung ist dies in zweifacher Hinsicht von Bedeutung. So wird bei der üblichen Gesamt-N-Bestimmung nach Kjeldahl der Nitratstickstoff nicht miterfasst, wohl aber beim Dumas-Verfahren (Horneck und Miller, 1998). Bei nitratarmen Proben sind die beiden Verfahren daher gleichwertig, nicht aber bei nitratreichen. Hier werden mit der Dumas-Methode systematisch höhere Gehalte gemessen als mit dem Kjeldahl-Verfahren: Gesamtstickstoff ist in diesem Fall also nicht gleich Gesamtstickstoff. Zudem weist das Nitratmolekül im NIR-Bereich nur sehr schwache Absorptionsbanden auf, die kaum oder gar nicht detektierbar sind. Es handelt sich dabei um Oberschwingungen dritter, vierter oder höherer Ordnung (Gatehouse et al., 1958; Ehsani et al., 1999). Die nahinfrarotspektroskopische Erfassung des Nitrat-N erfolgt somit in der Regel indirekt über Korrelationen des Nitrat-N zu anderen, besser detektierbaren organischen N-Fractionen. Allerdings besteht zwischen dem Nitrat-N und den organischen Stickstoffverbindungen ein nicht-linearer Zusammenhang (Marschner, 1990), der diese indirekte Modellbildung erschwert. Auf Grund der unzureichenden Erfassung des Nitratstickstoffs werden daher bei der NIR-spektroskopischen Bestimmung des Gesamtstickstoffs Proben mit unter- bzw. überdurchschnittlichen Nitratstickstoffanteilen am Gesamtstickstoff tendenziell über- bzw. unterschätzt (Lohr et al., 2007).

2.2.3 Bestimmung von Kohlenhydraten in Pflanzenmaterial ohne Probenvorbereitung

Bei der Bestimmung von Kohlenhydraten ist zu unterscheiden zwischen den nicht strukturbildenden (u. a. Glucose, Fructose, Saccharose und Stärke) und den strukturbildenden (u. a. He-

mizellulose, Zellulose, Pektine) Kohlenhydraten (von Soest, 1994). Während letztere in Grünfütter und Silage unter dem Oberbegriff Rohfaser in den Fraktionen ADF (acid detergent fiber) und NDF (neutral detergent fiber) relativ häufig kalibriert werden (Reeves et al., 1989; Reeves und Blosser, 1991; Kennedy et al., 1996; Park et al., 1998; Liu und Han, 2006; Montes et al., 2008), sind Kalibrationen für erstere an pflanzlichen Proben ohne Probenvorbereitung sehr selten. Bei Park et al. (1998) sowie Gibaud (2007) finden sich zwar Kalibrationen für die wasserlöslichen Kohlenhydrate (Anthrone-Reaktion; Dreywood, 1946) in Grassilagen, bei denen die Vorhersageleistungen auf den ersten Blick gut bis sehr gut sind: Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung (R_{CV}^2) = 0,81; Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte (SD) und Standardfehler der Kreuzvalidierung (SECV) $\geq 2,3$. Bei der Beurteilung dieser Werte ist allerdings Vorsicht geboten, da in beiden Fällen die Kohlenhydratgehalte eine stark rechtsschiefe Verteilung aufweisen, was die Aussagekraft des Bestimmtheitsmaßes und des SD/SECV-Verhältnisses erheblich reduziert (Bellon-Maurel et al., 2010).

Eine Reihe von sehr guten Kalibrationen zur Bestimmung der Zuckergehalte findet sich bei Zuckerrüben und Zuckerrohr (Meyer, 1997; Madsen et al., 2003; Roggo et al., 2004; Valderama et al., 2007) sowie bei verschiedenen Obst- und Fruchtgemüsearten (Nicolai et al., 2007). Diese Untersuchungen zeigen zwar die grundsätzliche Bestimmbarkeit von Zuckern in Pflanzenmaterial ohne vorherige Trocknung, allerdings sind die Ergebnisse nur bedingt auf die vorliegende Arbeit übertragbar, da die Zuckergehalte insbesondere bei Zuckerrohr und Zuckerrüben deutlich höher sind als in Zierpflanzenstecklingen. Zudem erfolgen die Messungen zum Teil an homogenisierten Proben (z. B. Zuckerrübenbrei) bzw. in Presssäften. Eine wesentliche Schwierigkeit bei der Kalibration von Zuckern an sehr stark wasserhaltigen Proben ist die Unterscheidung der Einzelzucker, dies zeigen unter anderem Untersuchungen von Lanza und Li (1984), Kemsley et al. (1992), Tanaka und Kojima (1996), Rodriguez-Saona et al. (2001) sowie Omar et al. (2012), die bei wässrigen Lösungen, die unterschiedliche Zucker wie Glucose, Fructose und Saccharose enthielten, zwar jeweils sehr gute Vorhersageleistungen für die Summe der Zucker erzielten, die Einzelzucker aber nicht unterscheiden konnten. Dass eine Unterscheidung im Einzelfall durchaus möglich ist, beweisen die Ergebnisse von Giangiacomo und Dull (1986), Rambla et al. (1997), Liu et al. (2006) oder Tewari et al. (2008), die bei Messungen in wässrigen Lösungen, Fruchtsäften bzw. an Äpfeln auch die Einzelzucker quantifizieren konnten. Die Gründe für diese widersprüchlichen Ergebnisse sind aus den vorliegenden Daten nicht eindeutig zu ersehen. Liu et al. (2006) führen als mögliche Ursachen die Art der Spektrenaufnahme (Reflektion, Interaktion, Transmission), den Wellenlängenbereich und die optische Pfadlänge auf. Die zugrunde liegende wesentliche Schwierigkeit bei der Quantifizierung von Einzelzuckern in komplexen Mischungen wird aber in allen Arbeiten deutlich: Die große spektrale Ähnlichkeit der verschiedenen Einzelzucker. So nutzen beispielsweise Lanza und Li (1984), Tanaka und Kojima (1996), Rambla et al. (1997) oder Rodriguez-Saona et al. (2001) jeweils wenige, überwiegend identische Spektralbereiche für die Kalibration der verschiedenen Einzelzucker.

3 Zielsetzung

Aufbauend auf der im Stand des Wissens dargelegten Bedeutung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus für das Bewurzelungspotential, dem Wissen um das Fehlen geeigneter Bestimmungsverfahren und dem aufgezeigten Potential der Nahinfrarotspektroskopie diese Lücke zu schließen, ergeben sich für die vorliegende Arbeit folgende zwei Fragestellungen:

- (I) Können der Stickstoff- und Kohlenhydratstatus sowie der Trockensubstanzgehalt von Zierpflanzenstecklingen ohne Probenaufbereitung nahinfrarotspektroskopisch bestimmt werden?
- (II) Kann auf Basis dieser Messungen ein System zur Qualitätsbeurteilung von Zierpflanzenstecklingen aufgebaut werden?

Die Beantwortung der ersten Frage erfolgt untergliedert in drei Teilaufgaben:

- (I.1) Erstellung einer gemeinsamen Kalibration zur Bestimmung des Trockensubstanzgehaltes sowie der Gehalte definierter Stickstoff- und Kohlenhydratfraktionen für Chrysanthem- und Pelargonienstecklinge
- (I.2) Untersuchung der Selektivität der Zuckerbestimmung in einer inhomogenen und wasserreichen Probenmatrix
- (I.3) Übertragung der für Chrysanthem- und Pelargonienstecklinge entwickelten Kalibriermodelle auf Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienstecklinge

Im Abschnitt I.1 wird der Fokus auf die Entwicklung gemeinsamer Kalibriermodelle für beide Gattungen gelegt, da spezifische Kalibriermodelle für einzelne Kulturen auf Grund des erheblichen Aufwands für die Entwicklung aus ökonomischer Sicht wenig sinnvoll sind. Der Abschnitt I.2 wird auf Grund der beschriebenen Schwierigkeit zur spektralen Unterscheidung von Einzelzuckern (Fructose, Glucose, Saccharose) bei sehr wasserhaltigen Proben in die Untersuchung miteinbezogen. Das Wissen um die Selektivität der Zuckerbestimmung an Proben mit vergleichbaren spektralen Eigenschaften wie Zierpflanzenstecklinge, ermöglicht eine bessere Interpretation der für Stecklinge entwickelten Zuckerkalibrationen. Im Abschnitt I.3 wird untersucht, ob sich die für Chrysanthem- und Pelargonienstecklinge entwickelten Kalibriermodelle mit einer geringen Anzahl Proben auf weitere Kulturen übertragen lassen.

Die Möglichkeit auf Basis der NIRS-Messungen eine Qualitätsbeurteilung von Stecklingen aufzubauen, wird für Chrysanthem- und Pelargonienstecklinge geprüft. Hierzu werden der TS-Gehalt sowie der N- und KH-Status von Stecklingen, die von differenziert mit Stickstoff versorgten Mutterpflanzenbeständen geerntet wurden, nahinfrarotspektroskopisch bestimmt und in Beziehung zur Wurzelbildung gesetzt. Da – wie im Stand des Wissens dargelegt – Wechselwirkungen zwischen der Stickstoffversorgung, den Kohlehydratreserven und der Bewurzelung in Abhängigkeit von der Lichtintensität während der Mutterpflanzenkultur bzw.

der Stecklingsbewurzelung bestehen, erfolgte die Mutterpflanzenkultur zu unterschiedlichen Jahreszeiten und die Stecklinge wurden zum einen unter natürlichen Lichtbedingungen im Gewächshaus sowie unter konstanten Schwachlichtbedingungen in der Klimakammer bewurzelt. Ein Teil der Stecklinge war Bestandteil des Kalibrier- bzw. Validierdatensatzes für die Entwicklung der NIRS-Kalibriermodelle, bei einem weiteren Teil handelte es sich um unbekannte Proben, bei denen die Inhaltsstoffe nicht referenzanalytisch bestimmt wurden.

4 (I.1) NIR-spektroskopische Bestimmung des N- und KH-Status sowie des TS-Gehaltes von Chrysanthemen- und Pelargonienstecklingen

Im folgenden Abschnitt wird die Entwicklung von gemeinsamen Kalibrationsmodellen zur Bestimmung der Trockensubstanz, der verschiedenen N-Fractionen in ganzen Stecklingen sowie der Kohlenhydratgehalte in Sprossachsen und Blättern beschrieben. Die validierten Kalibrationsmodelle werden abschließend auf ihre Robustheit gegenüber der Sorte, der geographischen Herkunft bzw. der Kulturbedingungen sowie des Messtermins untersucht.

4.1 Material und Methoden

4.1.1 Herkunft und Zusammensetzung des für die Kalibrierung und Validierung genutzten Probenmaterials

Die zur Kalibrationsentwicklung genutzten Stecklinge stammten zum Teil von Mutterpflanzenbeständen, die an der Hochschule Weihenstephan-Triesdorf (HSWT) kultiviert und gezielt mit Stickstoff über- bzw. unterversorgt wurden. Sowohl bei Chrysanthemen (Ch) als auch bei Pelargonien Zonale-Hybriden (Pz) wurden über einen Zeitraum von zwei Jahren jeweils vier bzw. fünf aufeinander folgende Mutterpflanzenbestände mit vier Sorten und drei Stickstoffdüngungsniveaus kultiviert und zu jeweils vier bzw. fünf Terminen beerntet. Ein Pelargonienmutterpflanzenbestand wurde nur einmalig beerntet und musste anschließend wegen pflanzenbaulicher Probleme vorzeitig beendet werden. Details zur Kulturführung bei den Mutterpflanzen finden sich im Abschnitt 7.1.1. Die übrigen Stecklinge stammten aus der laufenden Produktion der Jungpflanzenfirmen Endisch, Dümmer und Kientzler an Standorten in Ägypten (Pelargonien), Äthiopien (Pelargonien) und Costa Rica (Chrysanthemen) und wurden zu jeweils acht Terminen verteilt über zwei Ernteperioden geliefert. Eine Zusammenstellung der Probenherkünfte findet sich in Tab. 4.1 [A + B]. Von den Jungpflanzenbetrieben wurden von jeder Gattung jeweils Stecklinge von 20 unterschiedlichen Sorten angeliefert. Bei den Pelargonien umfasste das Sortenspektrum dabei sowohl Zonale(Pz)- als auch Peltatum(Pp)-Hybriden (Sortenliste siehe Tab. 10.1 im Anhang).

Tab. 4.1: Zusammenstellung (Herkünfte, Termine, Sorten, Düngung) der für die Kalibrierung und Validierung genutzten Chrysanthemen- [A] und Pelargonienproben [B]

Herkunft	Sorten	Ernteperioden (KW/Jahr)	Anzahl Erntetermine/ Ernteperiode	Stickstoff- versorgung
[A] Chrysanthemen				
HSWT	C-1 bis C-4	29/2010 - 40/2010	4	3-Stufen ▪ Mangel ▪ Optimum ▪ Überschuss
		03/2011 - 14/2011		
		27/2011 - 40/2011		
		08/2012 - 21/2012		
Kientzler/ Costa Rica	C-1 bis C-20	29/2010 - 40/2010 27/2011 - 40/2011	4	Betriebsübliche Düngung
[B] Pelargonien				
HSWT	P-1 bis P-4	51/2009 - 12/2010	4	3-Stufen ▪ Mangel ▪ Optimum ▪ Überschuss
		51/2010 - 12/2011	5	
		18/2011	1	
		28/2011 - 42/2011	5	
		39/2011 - 51/2011	4	
Endisch/ Ägypten	P-1, P-2 & P-5 bis P-12	51/2009 - 12/2010	4	Betriebsübliche Düngung
		51/2010 - 12/2011		
Dümmen/ Äthiopien	P-3, P-4 & P-13 bis P-20	51/2009 - 12/2010 51/2010 - 12/2011	4	Betriebsübliche Düngung

Durch das breite Sortenspektrum und die unterschiedlichen geografischen Herkünfte bzw. die damit verbundenen unterschiedlichen klimatischen Bedingungen wurde eine große äußerliche Variabilität (Form, Größe, Oberflächenstruktur, Farbe) erreicht, die für die Entwicklung einer robusten Kalibrierung unabdingbar ist (Tillmann, 1996; Williams, 2001). Durch die gezielte Über- bzw. Unterversorgung der Mutterpflanzen mit Stickstoff wurde zudem eine möglichst große Spreizung bei den Gehalten der verschiedenen Stickstofffraktionen erzeugt. Bei den Kohlenhydratgehalten (lösliche Zucker und Stärke) wurde dies nicht durch eine direkte Variation von Kulturmaßnahmen, sondern durch die Kultur zu unterschiedlichen Jahreszeiten und damit Lichtbedingungen sowie die fortlaufende Beerntung erreicht (Röber und Reuther, 1982; Forscher und Reuther, 1984). Durch Wechselwirkungen zwischen dem Stickstoffversorgungszustand und dem Kohlenhydrathaushalt (Druege et al., 2000) wurde eine zusätzliche Variabilität bei den Zucker- und Stärkegehalten angestrebt. In Tab. 4.2 sind die Spannweiten der analysierten Gesamtstickstoff- und Kohlenhydratgehalte (getrennt in Blätter und Sprosse) sowie der Trockensubstanz getrennt nach den drei Gattungen bzw. Arten aufgeführt.

Tab. 4.2: Spannweiten der Trockensubstanz- und Gesamtstickstoffgehalte sowie der Summe der nicht-strukturbildenden Kohlenhydrate (TNC = lösliche Zucker + Stärke) in den Blättern bzw. Sprossachsen der Chrysanthem- und Pelargonienstecklinge

	Chrysanthem	Pelargonien	
		Zonale	Peltaten
TS [mg/g]	72-177	91-166	63-199
Gesamt-N [mg/g]	22,3-57,7	14,9-45,5	26,8-40,8
Blatt-TNC-Gehalte [mg/g]	1,0-106,8	1,5-64,4	1,7-49,2
Spross-TNC-Gehalte [mg/g]	3,1-74,8	9,8-171,1	10,4-102,5

4.1.2 NIRS-Messungen

Für die NIRS-Messungen wurde ein Dioden-Array-Spektrometer Corona Plus 45 NIR 1.7 und die Steuerungssoftware CORA Plus v1.1 (Carl Zeiss Micro Imaging GmbH, Jena) genutzt (Abb. 4.1 [A]). Das Gerät ist mit einem Indium-Gallium-Arsenid-Detektor (InGaAs) ausgerüstet und arbeitet im Wellenbereich von 960 bis 1690 nm mit 256 Einzelementen. Die aufgezeichneten Spektren wurden auf 2 nm interpoliert und bestanden somit aus jeweils 366 Datenpunkten. Die Messung erfolgt in diffuser Reflektion. Die Lichtleiter, von denen die reflektierte Strahlung aufgefangen und zum Detektor geleitet wird, sind dabei in einem Winkel von 45° kreisförmig um die Lichtquelle angeordnet. Zur Probenpräsentation wurde ein Aufsatz mit einer drehbaren Glaspetrischale ("Turnstep") verwendet (Abb. 4.1 [B]). Die Petrischale wurde konzentrisch über den Messkopf bewegt, wodurch die statische Messfläche von ca. 315 mm² auf ca. 2500 mm² vergrößert wurde.

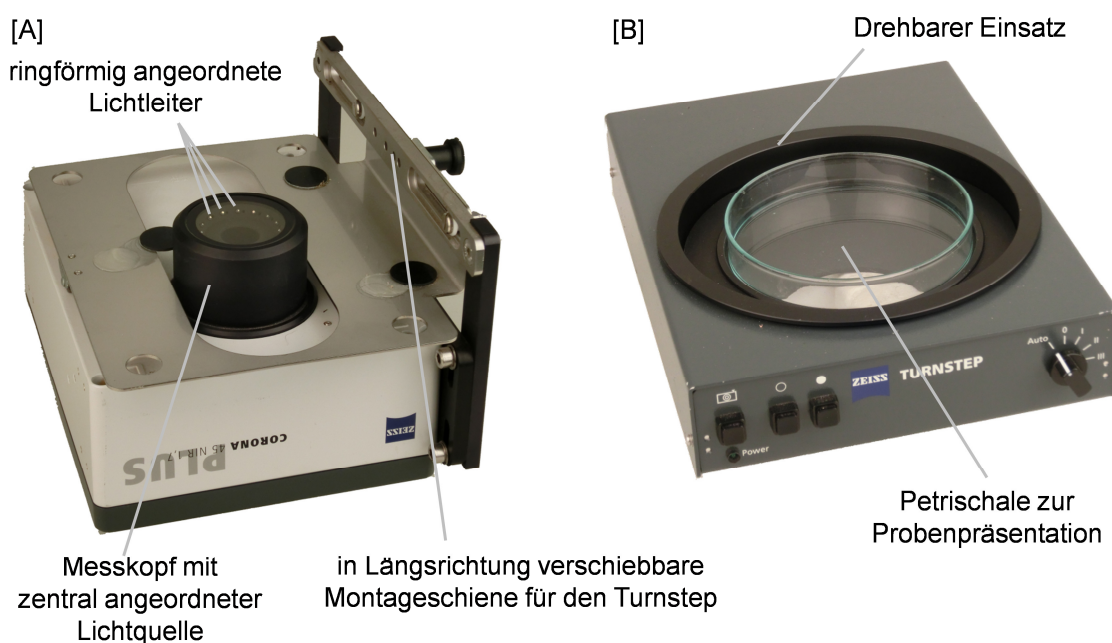


Abb. 4.1: Verwendetes Messsystem Zeiss Corona 45 NIR Plus 1.7 [A] mit drehbarem Aufsatz "Turnstep" zur Probenpräsentation [B]

NIR-Spektren wurden sowohl von ganzen Stecklingen als auch von den Blattober- und -unterseiten abgetrennter, vollständig entwickelter Blätter aufgezeichnet. Bei den Stecklingen wurden für die Messung je nach Größe fünf bis zehn Stecklinge kreisförmig mit der Sprossbasis nach außen in eine Glaspetrischale (Ø 135 mm, Steriplan[®], Duran Group GmbH, Wertheim/Main) gelegt (Abb. 4.2 [A]) und mit einem Glasgefäß (350 g) beschwert, um eine möglichst plane Anlagerung der Stecklinge an die Petrischale zu erreichen, ohne diese dabei zu beschädigen (Abb. 4.2 [B]). Die Blätter wurden nacheinander blattober- bzw. -unterseitig orientiert aufgelegt und wie bei den Stecklingen beschrieben leicht beschwert. Diese Art der Probenpräsentation hatte sich in einer vorangegangenen Arbeit als geeignet erwiesen (Lohr et al., 2007).

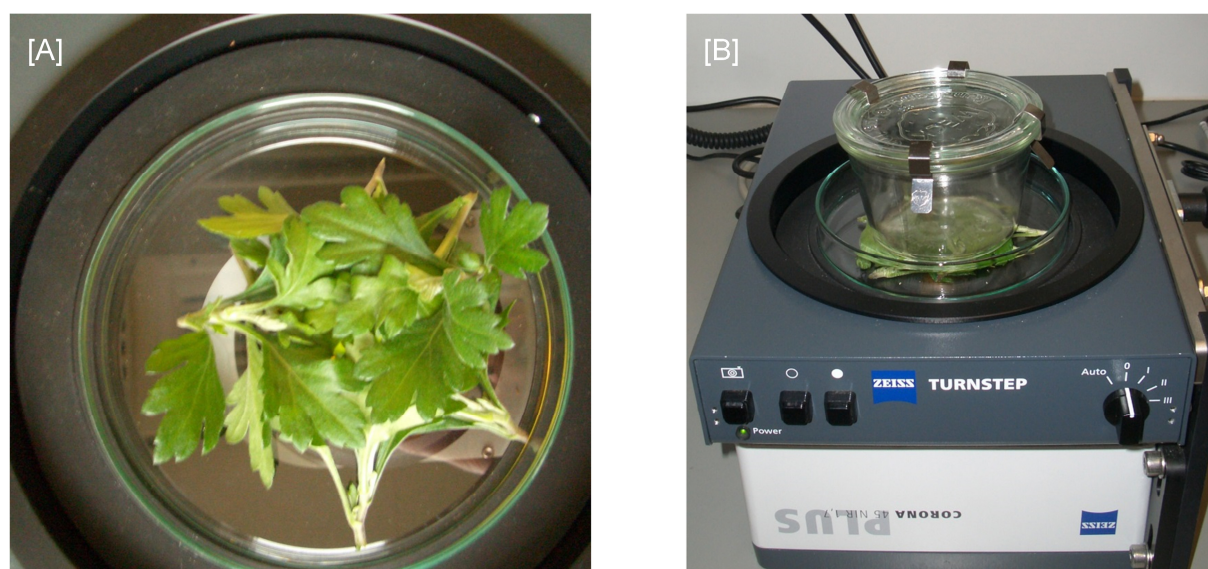


Abb. 4.2: Auflage von Chrysanthemenstecklingen [A] sowie Durchführung der Messung [B]

4.1.3 Referenzanalytik

4.1.3.1 Probenkonservierung und Probenvorbereitung

Nach der Aufnahme der NIR-Spektren wurden die Stecklinge für die spätere referenzanalytische Bestimmung der Stickstofffraktionen bei 60 °C getrocknet, in einer Zentrifugalmühle (Retsch SM 1 mit 0,5 mm Siebeinsatz) vermahlen und bis zur Bestimmung trocken in Kunststoffröhrchen gelagert. Für die Bestimmung der Kohlenhydratfraktionen wurden nach den NIRS-Messungen an den ganzen Stecklingen von jedem Steckling maximal zwei vollentwickelte Blätter abgetrennt und von diesen nochmals NIR-Spektren aufgenommen. Nach den Messungen wurden diese Blätter und die verbliebenen Sprossachsen, nach Entfernen der restlichen Blätter und des Vegetationspunkts, getrennt in Aluminiumfolienbeutel verpackt und zum Schockgefrieren einige Minuten in flüssigen Stickstoff eingetaucht. Die Proben wurden anschließend bei -18 °C gelagert, gefriergetrocknet, mit einer Scheibenschwingmühle (Siebtechnik T 250) vermahlen und bis zur Bestimmung der Kohlenhydratfraktionen wieder bei -18 °C gelagert. Der Ablauf der NIRS-Messungen sowie der Probenaufbereitung und -konservierung ist in Abb. 4.3 dargestellt.

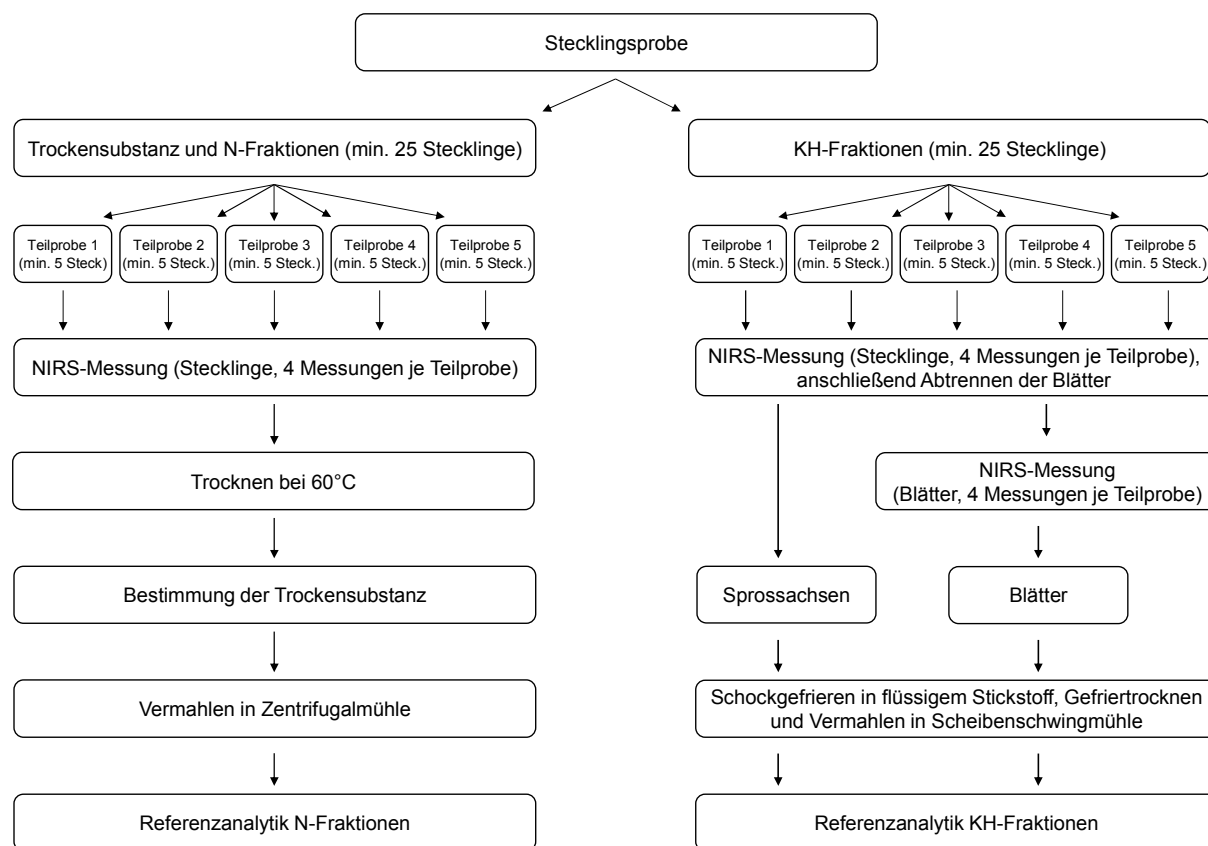


Abb. 4.3: Ablaufschema der NIRS-Messungen sowie der Probenaufbereitung und -konservierung für die Referenzanalytik

4.1.3.2 Trockensubstanz

Die Bestimmung des Trockensubstanzgehaltes (TS) erfolgte durch Trocknung in zwangsbelüfteten Trockenschränken bei 60 °C bis zur Gewichtskonstanz und Wägung. Bei einer Vergleichsmessung mit den verwendeten Trockenschränken wurde ein Standardlaborfehler (SEL) der Methode von 5 mg/g absolut ermittelt (5 Trockenschränke, 9 Wiederholungen je Trockenschrank, Impatiens Neu-Guinea-Stecklinge mit einem TS-Gehalt von 91 mg/g).

4.1.3.3 Stickstofffraktionen

Die Bestimmung der vier Stickstofffraktionen (Amid-, Nitrat-, Amino- und Proteinstickstoff) erfolgte am Leibniz-Institut für Gemüse- und Zierpflanzenbau (IGZ) in Erfurt mittels eines schrittweisen, modifizierten Kjeldahl-Verfahrens (Jakob et al., 1986), das dort für die Analyse von Stecklingen etabliert wurde (Zerche et al., 2007; Zerche und Drüge, 2013). Zuerst wurden die drei löslichen N-Fractionen – Amid-, Nitrat- und Amino-N – mit einer 1 % Kalialaun-Lösung extrahiert. Die drei Fraktionen wurden jeweils in einem 10 ml Aliquot des filtrierten Extraktes mittels Wasserdampfdestillation (B-324 Destillations-Einheit, Büchi-Labortechnik AG, Essen mit Titrino 719 S-Titrator, Metrohm GmbH & Co. KG, Filderstadt) bestimmt. Für die Amid-N-Bestimmung wurde das erste Extrakt-Aliquot direkt genutzt. Die Nitrat-N-Bestimmung erfolgte im zweiten 10 ml Aliquot nach der Zugabe von Devarda-Reduktionsreagenz; die Nitrat-N-Fraktion errechnet sich aus der Differenz des gemessenen N-

Gehaltes und der Amid-N-Fraktion. Das dritte Aliquot – für die Amino-N-Bestimmung – wurde in Schwefelsäure (98 %) unter Zugabe von Kaliumsulfat und eines Selen-Reaktionsgemisches nach Wieninger aufgeschlossen (K-435-Aufschlusseinheit, Büchi-Labortechnik AG, Essen) und anschließend der N-Gehalt in der Aufschlusslösung gemessen. Die Amino-N-Fraktion ergab sich aus der Differenz des gemessenen N-Gehaltes und der Amid-N-Fraktion. Der unlösliche Protein-N wurde im Filtrerrückstand der Kalialaun-Extraktion, der vergleichbar zum Amino-N-Extrakt aufgeschlossen wurde, analysiert. Der Gesamt-N-Gehalt der Proben (Kjeldahl-Aufschluss mit Nitratreduktion) wurde parallel an einer zweiten Teilprobe bestimmt. Zur Qualitätssicherung der Analysenergebnisse wurde der gemessene Gesamt-N-Gehalt mit der Summe der Einzelfraktionen verglichen; die Ergebnisse wurden akzeptiert, wenn die Differenz weniger als 5 % betrug. Für die Kalibrationsentwicklung wurden die vier Einzelfraktionen sowie der gemessene Gesamt-N-Gehalt herangezogen. Zudem wurden aus den Einzelfraktionen noch die folgenden drei Summenparameter gebildet:

- Summe der extrahierbaren organischen N-Fraktionen (eoNF) = Amid-N + Amino-N
- Summe der extrahierbaren N-Fraktionen (eNF) = Amid-N + Nitrat-N + Amino-N
- Summe der organischen N-Fraktionen (oNF) = Amid-N + Amino-N + Protein-N

Die vier Stickstoffeinzelaktionen (Amid-N, Nitrat-N, Amino-N, Protein-N) sowie der Gesamt-N und die drei Summenfraktionen (eoNF, eNF, oNF) werden in Milligramm Stickstoff je Gramm Trockenmasse angegeben.

Aus der wiederholten Messung (n = 35) einer einzelnen Probe (Pelargonienstecklinge) über den gesamten Untersuchungszeitraum hinweg wurden für die vier Fraktionen die in Tab. 4.3 aufgeführten Standardfehler der Labormethode (SEL) ermittelt.

Tab. 4.3: Standardlaborfehler (SEL) für die Bestimmung der vier N-Fraktionen sowie des Gesamt-N (n = 35)

	Amid-N mg/g	Nitrat-N mg/g	Amino-N mg/g	Protein-N mg/g	Gesamt-N mg/g
Mittelwert	2,31	1,02	7,45	23,2	32,9
SEL	0,10	0,15	0,25	0,39	0,55

4.1.3.4 Kohlenhydratfraktionen

Die Bestimmung der löslichen Zucker sowie der Stärke erfolgte wie die Stickstoffbestimmung am IGZ Erfurt nach einem dort über mehrere Jahre hinweg etablierten Protokoll (Druege et al., 1998; Druege et al., 2000; Druege et al., 2004; Rapaka et al., 2005; Klopotek et al., 2010). Dieses basiert auf einer schrittweisen enzymatisch-photometrischen Glucosebestimmung der ethanollöslichen Zucker sowie der Stärke nach Hydrolyse in Kaliumhydroxid und anschließender enzymatischer Spaltung mittels Amyloglucosidase (Hendrix, 1993).

Die gefriergetrockneten und vermahlenden Proben wurden mit einer gepufferten Ethanollösung (80 Vol. %, pH 6,9) im Verhältnis 1 + 100 (m + V) extrahiert. Nach 60 minütiger Inkubation bei 80 °C und anschließender Abkühlung wurden die Proben abzentrifugiert. Der Überstand wurde abgezogen, in mehreren Schritten aufgereinigt, bis zur Trockne in einem Vakuumverdampfer (SpeedVac, Fa. Thermo Fisher Scientific, Waltham/MA) eingengt und der Trockenrückstand vor der Analyse wieder in Wasser (HPLC-Qualität) aufgenommen. Das bei der Zentrifugation zurückbleibende Pellet wurde für die Stärkebestimmung genutzt. Nach einer Aufreinigung wurde das Pellet getrocknet und mit Kaliumhydroxid inkubiert, wodurch die Stärke in kurze Polysaccharidketten zerlegt wurde. Nach der Neutralisation der Kalilauge mit Essigsäure erfolgte die enzymatische Spaltung der Polysaccharide zu Glucose durch die Inkubation mit Amyloglucosidase. Die Bestimmung der löslichen Zucker erfolgte nach schrittweiser Zugabe von Glucose-6-Phosphatdehydrogenase (G6PDH), Hexokinase (HK), Phosphoglucoisomerase (PIG) und Invertase (Abb. 4.4).

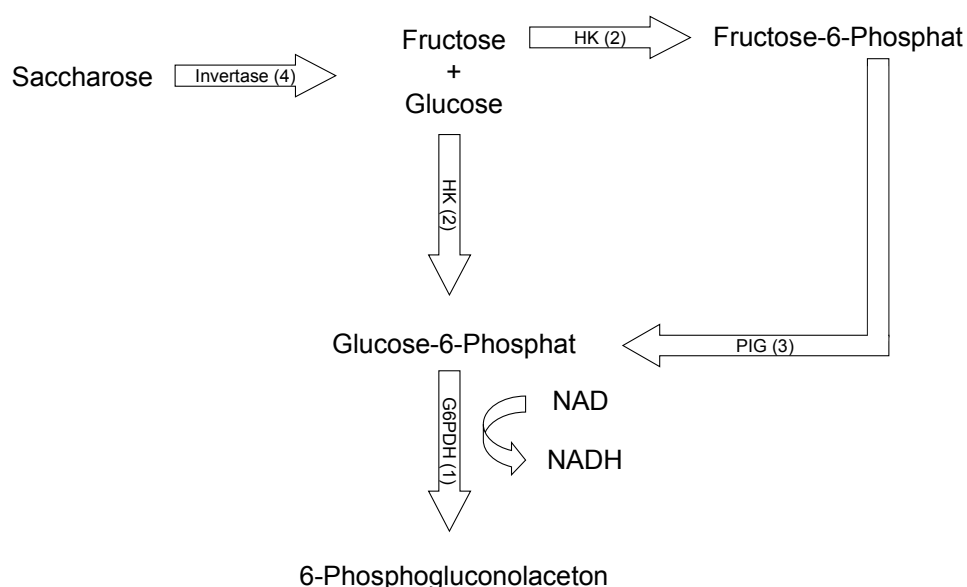


Abb. 4.4: Schematischer Ablauf der schrittweisen enzymatisch-photometrischen Zuckerbestimmung, die Zahlen (1-4) hinter den Enzymen kennzeichnen die Reihenfolge der Zugabe

Das bei der enzymatischen Umwandlung (G6PDH) von Glucose-6-Phosphat zu 6-Phosphogluconolaceton gebildete Nicotinamidadenindinukleotid (NADH) wurde photometrisch bei 340 nm bestimmt. Die Konzentration der einzelnen Zucker errechnete sich aus den Differenzen der optischen Dichten (Abb. 4.5). Die Berechnung der Zuckergehalte in mg/g bezogen auf die Trockenmasse erfolgte über den Extinktionskoeffizienten des NADH und die molaren Massen der einzelnen Zucker.

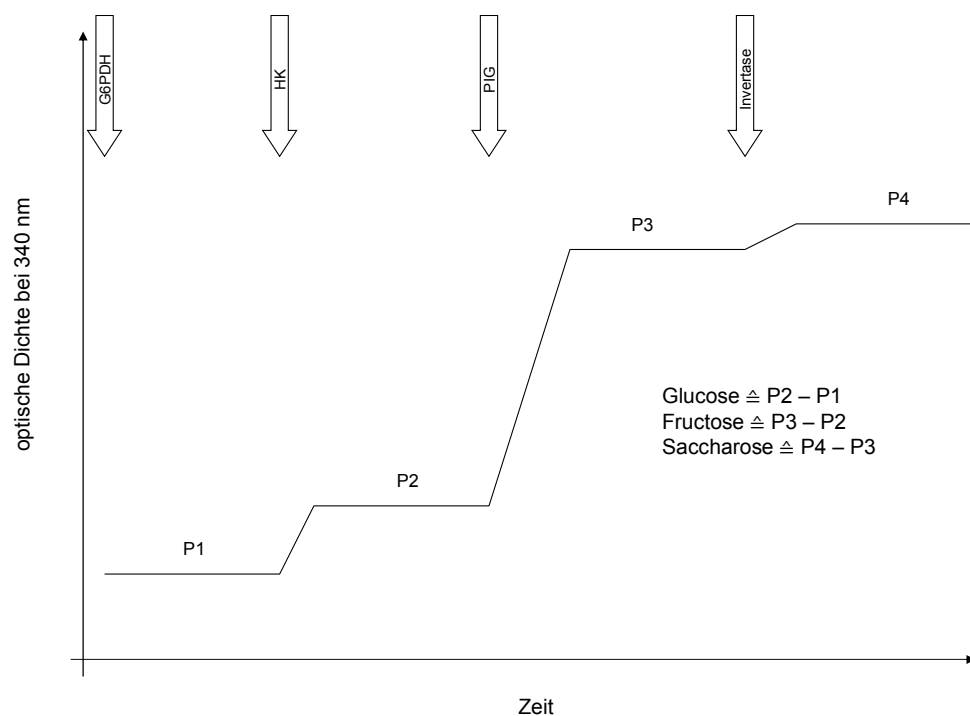


Abb. 4.5: Bestimmung der Zuckerkonzentrationen aus der Zunahme der optischen Dichte bei 340 nm nach schrittweiser Zugabe von G6PDH, HK, PIG und Invertase

Die Bestimmung der Stärke erfolgte analog durch die schrittweise Zugabe von G6DPH und HK aus der Differenz der Plateaus 1 und 2, wobei für die Umrechnung die molare Masse der Glucosemonomere genutzt wurde. Alle Analysen wurden in Doppelbestimmung durchgeführt. Aus den Doppelbestimmungen von jeweils 51 Blatt- und Sprossproben wurden für die drei Einzelzucker, die Stärke sowie die Summe der löslichen Zucker (TSS) und die Summe aus TSS und Stärke (TNC) die in Tab. 4.4 aufgeführten Standardfehler der Labormethode ermittelt.

Tab. 4.4: Standardlaborfehler (SEL) für die Bestimmung von Glucose, Fructose, Saccharose, Stärke sowie die Summe der drei Zucker (TSS) und die Summe aus TSS und Stärke (TNC) in Blättern bzw. Sprossachsen (n = 51)

	Glucose	Fructose	Saccharose	TSS	Stärke	TNC
	mg/g					
Blattproben						
Wertebereich	0,1-13,9	0,1-8,3	0,2-23,2	0,4-45,4	0-21,8	1,4-96,3
SEL	0,3	0,4	0,9	1,5	0,6	2,9
Sprossproben						
Wertebereich	2,5-51,3	1,2-30,2	5,7-30,5	13,0-82,7	0,3-33,8	26,4-193,5
SEL	2,2	1,2	1,9	4,4	0,9	8,9

4.1.4 Kalibrationsentwicklung

Für die Kalibrationsentwicklung wurden jeweils die Spektren der vier Messungen je Teilprobe und anschließend die Spektren der fünf Teilproben gemittelt (Abb. 4.3). Die Kalibrationsentwicklung für den Trockensubstanzgehalt und die Stickstofffraktionen erfolgte dabei unter Nutzung der Spektren der entsprechenden ganzen Stecklinge. Bei den Kohlenhydratfraktionen wurden mit den Spektren der entsprechenden ganzen Stecklinge Kalibriermodelle sowohl für die Blatt- als auch die Sprosskohlenhydrate erstellt, mit den Blattspektren nur solche für die Blattkohlenhydrate. Für die Kalibrationsentwicklung wurde das Chemometrie-Softwarepaket Unscrambler X[®] v10.3 (CAMO Software AS, Oslo) genutzt.

4.1.4.1 Entwicklung einer Basiskalibration

Zuerst erfolgte die Entwicklung einer Basiskalibration unter Verwendung der Chrysanthemen- und Pelargonienproben. Für die Ausreißererkennung und -eliminierung (z. B. von Fehlmessungen durch eine nicht vollständige Abdeckung des Messfeldes) wurde eine Hauptkomponentenanalyse (PCA) mit zehn Faktoren unter Verwendung der gemessenen Absorptionsspektren – ausgedrückt als logarithmierter Kehrwert der relativen Reflektion ($\log 1/R$) – aller Chrysanthemen- und Pelargonienproben durchgeführt. Als Kriterium wurde der mittlere "Leverage" der Proben innerhalb der ersten drei Hauptkomponenten, mit denen ein Großteil der Varianz im Datensatz erklärt werden konnte, herangezogen. Der "Leverage" im Softwarepaket Unscrambler X beschreibt die Einzigartigkeit eines einzelnen Spektrums im Vergleich zum gesamten Datensatz und damit auch dessen Einfluss auf das Regressionsmodell (Kessler, 2007; CAMO, 2012): Ein Spektrum mit einem Leverage von null entspricht dabei dem Mittelwertsspektrum des gesamten Datensatzes. In der vorliegenden Arbeit wurde als Kriterium für einen Ausreißer das Zehnfache des mittleren Leverage aller Proben genutzt, ein Spektrum mit einem solchen Leverage unterscheidet sich erheblich von den übrigen Spektren im Datensatz und hat einen wesentlich größeren Einfluss auf das Regressionsmodell als ein durchschnittliches Spektrum. War der Leverage einer Probe größer, wurde diese als Ausreißer gewertet und aus dem Datensatz entfernt (Næs et al. 2004; Kessler 2007). Anschließend wurden für die Chrysanthemen- sowie Pelargonienproben zwei getrennte Lineare Diskriminanzanalysen (LDA) durchgeführt, bei der die Art der Spektren – Stecklinge (ST), Blattunterseiten (BU), Blattoberseiten (BO) – zur Klassifizierung genutzt wurde. Damit sollten während der Messung falsch zugeordnete Spektren (z. B. Orientierung bei der Messung blattoberseits, Erfassung aber als BU-Spektrum) erkannt werden. Während der späteren Kalibrationsentwicklung erfolgte dann keine weitere Ausreißereliminierung mehr. Für die ausreißerbereinigten Datensätze wurden die PCA mit und ohne Datenvorbehandlung Neuberechnet, um die spektrale Variabilität zu visualisieren (Tillmann, 1996; Bruun et al., 2010).

Die Auswahl der Kalibrier- und Validierproben erfolgte auf Basis der Inhaltstoffe. Dazu wurden jeweils die Chrysanthemen(Ch)- und Pelargonienproben – Pelargonien nochmals getrennt nach den Sortengruppen Peltaten (Pp) und Zonale (Pz) – aufsteigend nach der Höhe der Tro-

ckenssubstanz, des Gesamt-N-Gehalts sowie der Blatt- bzw. Spross-TNC-Gehalte sortiert. Anschließend wurden bei jedem der drei Teildatensätze (Ch, Pz, Pp) schrittweise immer zwei Proben dem Kalibrierset zugeschlagen, die nächste Probe verblieb für die Validierung. Durch diese Verteilung der Proben: 2/3 für die Kalibrierung und 1/3 für die Validierung war der Kalibrierdatensatz für die Modellbildung ausreichend groß, gleichzeitig blieben genügend Proben für eine aussagekräftige Validierung der erstellten Modelle und beide Datensätze umfassten den gesamten Wertebereich der Inhaltsstoffe. Zusätzlich blieb eine möglichst große spektrale Variabilität (Arten, Sorten, Liefer- bzw. Erntetermine, Herkunft) in beiden Datensätzen erhalten, ohne dass eine Abhängigkeit des Validier- vom Kalibrierdatensatz entstand, wie es bei der Auswahl auf Grund spektraler Eigenschaften der Fall sein kann (Tillmann, 1996).

Bei der Entwicklung der Kalibriermodelle wurde zu Beginn eine PLS-2-Regression (Næs et al., 2004) für die N-Fraktionen, den TS-Gehalt sowie die Blatt- bzw. Spross-KH-Fraktionen unter Verwendung der gemessenen Absorptionsspektren ($\log 1/R$ -Spektren), sowie nach Bildung der ersten Ableitung (Schrittweite und Glättung über jeweils sechs Datenpunkte) durchgeführt. Diese Art der Datenvorbehandlung wurde gewählt, da sie sich in einer vorangegangenen Untersuchung für die Bestimmung der TS- und Gesamt-N-Gehalte bei Chrysanthemen- und Poinsettienstecklingen als geeignet erwiesen hatte (Lohr et al., 2007). Die N- bzw. KH-Fraktion, die jeweils die engsten Zusammenhänge zeigten, sowie die TS-Gehalte wurden im Folgenden genutzt, um zu prüfen, mit welcher Art der Datenvorbehandlung zur Korrektur von Stör- und Streulichteffekten (Næs et al., 2004; Rinnan et al., 2009) die besten Resultate erzielt werden können. Zur Datenvorbehandlung wurden einfache Glättungsverfahren mittels gleitender Mittelwerte (Moving Average), verschiedene Verfahren zur Basislinienkorrektur (Offset bzw. Linear Baseline Correction, De-Trending) und Spektrennormierung (Mittelwert- und Vektornormierung, Standard Normal Variate, Multiplicative Scatter Correction) sowie Ableitungen erster und zweiter Ordnung mit unterschiedlicher Glättung genutzt, wobei die Verfahren sowohl einzeln als auch in Kombination angewendet wurden. Neben den genannten Verfahren, die alle nur die spektralen Daten nutzen, wurde auch das Orthogonal-Signal-Correction-Verfahren (OSC) verwendet, bei dem zusätzlich zu den spektralen Daten auch die Daten der Referenzanalysen genutzt werden (Details siehe Anhang 10.3).

Die Leistungsfähigkeit der verschiedenen Datenvorbehandlungsmethoden wurde mit dem Friedman-Test verglichen (Moschner, 2007; Köhler et al., 2012), wobei die Datenvorbehandlungen als Faktoren ($k = 27$) und die kalibrierten Inhaltstoffe bzw. die genutzten Stecklings- und Blattspektren als Wiederholungen ($n = 5$) genutzt wurden. Als Kriterien zur Beurteilung der Leistungsfähigkeit wurden herangezogen:

- $SECV_{\min}$: Minimaler Standardfehler der Kreuzvalidierung (SECV) ohne Berücksichtigung der Anzahl PLS-Faktoren
- $SECV_{16}$: SECV bei Verwendung von 16 PLS-Faktoren
- $nPLS_{SECV}$: Anzahl PLS-Faktoren, bei der der SECV kleiner war als beim PLS-Modell mit den untransformierten $\log 1/R$ -Spektren und 16 Faktoren

Die 16 PLS-Faktoren wurden auf Grund der Ergebnisse vorangegangener Untersuchungen (Lohr et al., 2007) festgelegt. Traten zwischen den Datenvorbehandlungen signifikante Unterschiede auf ($p = 0,05$), wurde mittels des Wilcoxon-Wilcox-Test (Köhler et al., 2012) geprüft, welche der Datenvorbehandlungsmethoden sich signifikant unterschieden. Auf Basis dieser Prüfung, wobei neben der Vorhersageleistung auch die Komplexität der Vorbehandlung Berücksichtigung fand, wurden die am besten geeigneten Verfahren bzw. Verfahrenskombinationen für die weitere Kalibrationsentwicklung ausgewählt.

Mit den ausgewählten Datenvorbehandlungsmethoden wurden anschließend PLS-1-Regressionen (Næs et al., 2004) für alle N- und KH-Fraktionen sowie die Trockensubstanz erstellt. Bei allen PLS-Regressionsmodellen wurde die maximale Anzahl der Faktoren auf 20 begrenzt und es wurden keine Ausreißer eliminiert. Die Güte der erstellten Kalibriermodelle wurde mittels einer Kreuzvalidierung (20 Segmente mit je $x = n/20$ Proben und einer systematischen Aufteilung $\{\{1, x+1, 2x+1, \dots, 19x+1\}; \{2, x+2, 2x+2, \dots, 19x+2\} \dots \{x, 2x, 3x \dots n\}\}$ geprüft. Als Kriterien für die Beurteilung der Güte der Kalibriermodelle wurden die Anzahl der PLS-Faktoren, das Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung (R_{CV}^2), der Standardfehler der Kreuzvalidierung (SECV) und die Komplexität der Datenvorbehandlung (z. B. einfaches oder kombiniertes Datenvorbehandlungsverfahren) herangezogen.

Die optimale Anzahl PLS-Faktoren (Kessler, 2007) wurde aus einer segmentierten Regressionsanalyse abgeleitet (Oosterbaan et al., 1990). Dazu wurden an den Verlauf des SECV in Abhängigkeit von der Anzahl PLS-Faktoren zwei Regressionsgeraden angepasst: Für die erste Regression wurde eine Steigung (b) kleiner null festgelegt (grün gekennzeichnet in Abb. 4.6 [A]), d. h. durch die Hinzunahme weiterer Faktoren steigt die Vorhersageleistung an. Für die zweite Regression wurde eine Steigung (b) von null festgelegt (rot gekennzeichnet in Abb. 4.6 [A]), d. h. durch die Hinzunahme weiterer PLS-Faktoren in das Kalibriermodell wird keine Verbesserung der Vorhersageleistung erzielt, das Kalibriermodell wäre in diesem Fall überangepasst (Kessler, 2007). Zu Beginn wurde die erste Regressionsfunktion ($b < 0$) an die SECV bei Verwendung von einem und zwei PLS-Faktoren und die zweite Regression ($b = 0$)

an die SECV bei zwei bis 20 PLS-Faktoren angepasst. Als Maß für die Anpassung der beiden Regressionsfunktionen wurde das gemeinsame Bestimmtheitsmaß der beiden Regressionsfunktionen (R_{SR}^2) ermittelt (Oosterbaan et al., 1990). Anschließend wurde der Endpunkt der ersten und damit gleichzeitig der Startpunkt der zweiten Regression schrittweise um eins erhöht, bis die erste Regression an die SECV von einem bis 19 und die zweite Regression an die SECV bei 19 und 20 PLS-Faktoren angepasst war. Anschließend wurde das gemeinsame Bestimmtheitsmaß in Abhängigkeit vom Bruchpunkt (entsprechend dem Endpunkt der ersten bzw. dem Startpunkt der zweiten Regression) aufgetragen. Die optimale Anzahl PLS-Faktoren entsprach dem Bruchpunkt, an dem das gemeinsame Bestimmtheitsmaß ein Maximum erreicht hatte und beim nächsthöheren Bruchpunkt ein Rückgang zu beobachten war (rot gekennzeichnet in Abb. 4.6 [B]). Für das in Abb. 4.6 [A-B]) exemplarisch gezeigte Kalibriermodell ist dies bei sechs PLS-Faktoren (nPLS) der Fall.

Im Vergleich zu Verfahren die auf einer schrittweisen Minimierung des SECV bzw. der Summe der Abweichungsquadrate beruhen (Haaland und Thomas, 1988; Oosten, 1988; CAMO, 2012), ist der gewählte Ansatz weniger anfällig gegenüber lokalen Minima und Maxima im Verlauf des SECV, die je nach Verfahren (forward selection bzw. backward elimination) zu einer Unter- bzw. Überanpassung führen können (Höskuldsson, 1996; Wiklund et al., 2007).

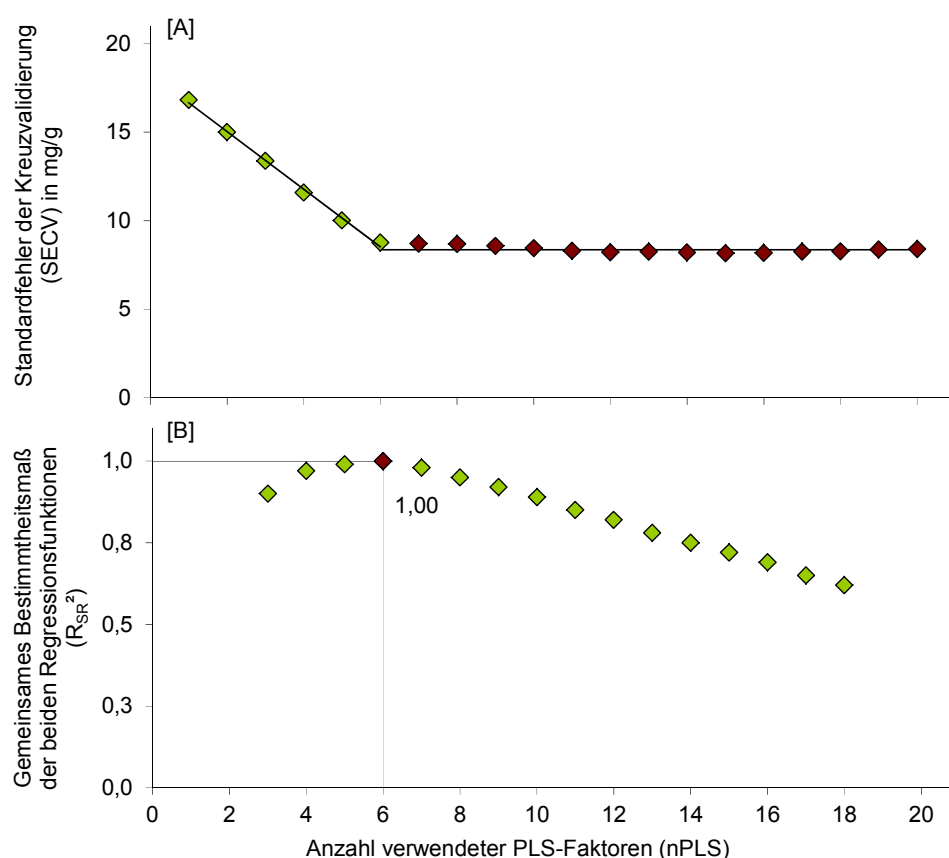


Abb. 4.6: Segmentierte Regression für den SECV [A] und Verlauf des gemeinsamen Bestimmtheitsmaßes (R_{SR}^2) der segmentierten Regression [B] in Abhängigkeit von der Anzahl PLS-Faktoren in den beiden Abschnitten der Regression

Validiert wurde jeweils das Modell für die untransformierten $\log 1/R$ -Spektren sowie das in Kombination aus Komplexität der Datenvorbehandlung (siehe Anhang 10.3), Anzahl verwendeter PLS-Faktoren und Güte der Vorhersage beste Modell. Um zu prüfen, ob sich die auf Basis der Kreuzvalidierung ausgewählte Zahl an PLS-Faktoren bestätigt, wurde die Validierung schrittweise von einem bis 20 PLS-Faktoren berechnet und das Prinzip der segmentierten Regressionsanpassung auch auf den Standardfehler der Vorhersage angewandt, um eine Unter- bzw. Überanpassung der Modelle zu erkennen. Bei einem optimalen Modell sollten die Bruchpunkte und damit die Anzahl der PLS-Faktoren übereinstimmen (Höskuldsson, 1996; Kessler, 2007).

Als statistische Parameter zur Beurteilung der Vorhersageleistung werden jeweils der Standardfehler der Vorhersage (SEP), das Bestimmtheitsmaß (R^2), das Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte (SD) zum SEP ($RPD = SD/SEP$) und das Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte (R) zum SEP ($RER = R/SEP$), sowie die Steigung der Regressionsgeraden (b) und die Differenz zwischen dem Mittelwert der Referenzwerte und der NIRS-Werte (BIAS) für den gesamten Datensatz sowie getrennt für die Chrysanthemen bzw. Pelargonien aufgeführt. Zur Berechnung der statistischen Kenngrößen wird auf die Formeln und Erläuterungen bei Tillmann (1996) sowie Hruschka (2001) verwiesen. Der SEP wird unter anderem im Bezug zum SEL beurteilt. Bei sehr guten Kalibrierungen sollte der SEP kleiner als das Zweifache des SEL sein, da in diesem Fall die Bestimmung mittels NIRS als gleichwertig zur Referenzmethode angesehen werden kann (Marten et al., 1989; Tillmann, 1996; Hruschka, 2001). Für die Steigung der Regressionsgeraden (Referenzwert = $b \cdot \text{NIRS-Wert} + a$) wurde geprüft, ob sich diese signifikant von eins (t-Test mit 95 %-Vertrauensintervall) unterscheidet. Ob der y-Achsenabschnitt (a) signifikant von null verschieden ist, wurde nicht getestet, da die kleinsten Messwerte bei den meisten Parametern deutlich größer als null waren. Damit hätte der Test des y-Achsenabschnitts eine unzulässige Extrapolation des Modells bedeutet. Anstelle des y-Achsenabschnitts wurde geprüft, ob sich die Differenz zwischen Referenz- und NIRS-Wert signifikant von null unterscheidet und damit ein signifikanter systematischer Fehler vorliegt. Dies erfolgte ebenfalls mit einem verbundenen t-Test (Miller und Miller, 1988; Köhler et al., 2012). Für die Beurteilung des RPD-Wertes wurde die Einteilung von Saeys et. al. (2005) für inhomogene Proben herangezogen. Danach ist die Vorhersagegenauigkeit von Modellen mit einem $RPD < 1,5$ ungenügend. Bei Werten zwischen 1,5 und 2,0 kann zwischen Proben mit hohen und niedrigen Gehalten unterschieden werden und bis 2,5 sind semiquantitative Aussagen möglich. Modelle mit Werten über 2,5 sind als gut, solche mit Werten über 3,0 als exzellent einzustufen. RER-Werte sollten für eine Anwendung in der Qualitätskontrolle größer als zehn und für eine genaue Quantifizierung größer als 15 sein (Alves et al., 2012), wobei mögliche Verzerrungen durch einzelne Extremwerte zu berücksichtigen sind (Williams, 2001). Die für die Modellbildung bedeutsamen Spektralbereiche wurden an Hand der Signifikanz ($p = 0,05$) der gewichteten Regressionsfaktoren des jeweils besten PLS-Modells bei der optimalen Anzahl PLS-Faktoren ermittelt (Mar-

tens und Martens, 2000). Für die statistischen Verrechnungen wurden die beiden Softwarepakete Minitab[®] v16 (Minitab Inc., State Collage/PA) und MegaStat[®] für MS-Excel[®] v10.9 (McGraw-Hill Education, Columbus/OH) genutzt.

4.1.4.2 Robustheit der Kalibriermodelle

Um die Zuverlässigkeit der Kalibriermodelle für ausgewählte Parameter mit guter Bestimmbarkeit bei zukünftigen, unbekanntenen Proben zu testen, wurde die Variabilität möglicher Einflussgrößen im Kalibrier- bzw. Validierset unter Einbeziehung aller Chrysanthemen- und Pelargonienproben gezielt verändert (Guthrie et al., 2005; Wedding et al., 2013). In einem ersten Schritt wurde der Einfluss der Messtermine untersucht. Hierzu wurden jeweils alle Proben eines Messtermins aus dem Datensatz entfernt und mit den Proben der verbliebenen Termine neue Kalibriermodelle erstellt. Für die Modellbildung wurde die Datenvorbehandlungsmethode und Anzahl PLS-Faktoren verwendet, die sich bei den Basiskalibrierungen als optimal erwiesen hatten. Dieses Vorgehen wurde anschließend noch auf die Einflussgrößen "Sorte" und "Probenherkunft" angewandt, wobei die Chrysanthemen- und Pelargonienarten, die sowohl an der Hochschule Weihenstephan-Triesdorf kultiviert als auch von den Jungpflanzenbetrieben geliefert wurden, einmal getrennt und einmal zusammengefasst behandelt wurden (siehe Tab. 4.1). Bei den Probenherkünften wurden jeweils nur die von den Jungpflanzenbetrieben gelieferten Proben als Teildatensätze behandelt, die Proben von den Mutterpflanzenbeständen der Hochschule wurden in allen Fällen zur Modellbildung verwendet, um die für die Modellbildung notwendige Variabilität der Inhaltsstoffe zu gewährleisten. Alle so entwickelten Modelle wurden mit den jeweils nicht im Datensatz vorhandenen Proben validiert. Zur Beurteilung der Robustheit werden der SEP, der BIAS sowie der um den BIAS korrigierte SEP (SEP(C)) im Vergleich zum in der Basiskalibrierung mit der gleichen Datenvorbehandlung und Faktorenzahl erreichten SEP herangezogen.

4.2 Ergebnisse

4.2.1 Ausreißerererkennung, Struktur der Datensätze und Populationsbeschreibung

Auf Basis der Hauptkomponentenanalyse (PCA) und der linearen Diskriminanzanalyse (LDA) wurden von den insgesamt 747 Stecklingsspektren aus dem Teilprobensatz für die Trockensubstanz- bzw. Stickstoffbestimmung zwei Proben als spektrale Ausreißer entfernt. Von den verbliebenen 745 Proben lagen für 694 Proben Referenzwerte für die Trockensubstanz und von 584 Proben Referenzwerte für die Stickstofffraktionen vor. Von den 747 Teilproben für die Kohlenhydratbestimmung wurden ebenfalls zwei Stecklingsspektren sowie neun Spektren von Blattoberseiten und zehn von Blattunterseiten entfernt. Um die Ergebnisse bei den Kohlenhydraten für die Spektren der ganzen Stecklinge sowie der Blattober- bzw. -unterseiten besser vergleichen zu können, wurden nur Proben in die Kalibrationsentwicklung (Erstellung der Kalibriermodelle und anschließende Validierung) aufgenommen, von denen alle drei Spektren sowie Referenzwerte vorlagen. Letztendlich standen damit für

die Kalibrationsentwicklung bei den Kohlenhydraten 572 Proben zur Verfügung. Die ausreißerbereinigten und angeglichenen Datensätze für die Trockensubstanz, die Stickstofffraktionen und die Kohlenhydratgehalte im Blatt bzw. in der Sprossachse wurden, wie unter 4.1.4.1 beschrieben, in jeweils einen Kalibrier- und einen Validierdatensatz aufgeteilt. Deren Zusammensetzung findet sich jeweils getrennt nach Kulturen (Ch, Pz, Pp) sowie gemeinsam (Alle) in den Tab. 10.3 bis Tab. 10.6 Anhang. Abb. 4.7 zeigt den Ablauf der Ausreißererkennung und die Struktur bzw. Größe der für die Kalibrationsentwicklung verwendeten Datensätze.

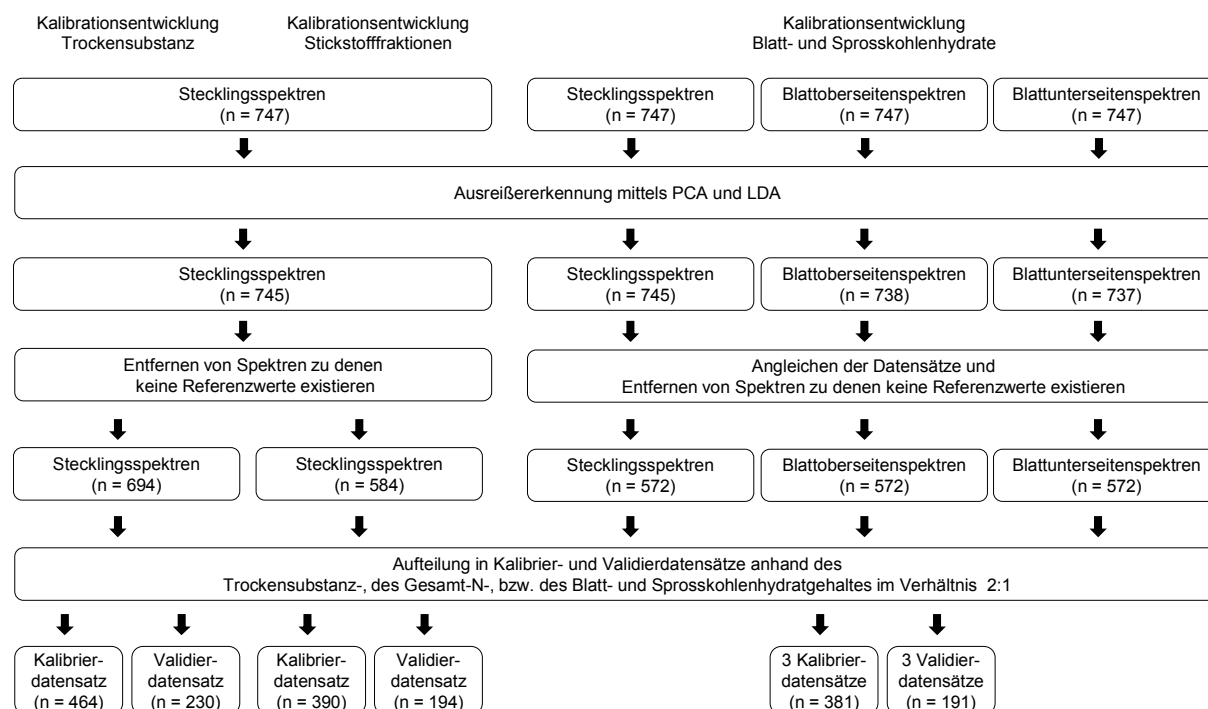


Abb. 4.7: Ablauf der Ausreißererkennung sowie Struktur und Größe der Kalibrier- und Validierdatensätze für die TS-Gehalte sowie die N- und KH-Fractionen

Abb. 4.8 zeigt die Streudiagramme der ersten beiden Hauptkomponenten (oben) sowie der dritten und vierten Hauptkomponente (unten) der Hauptkomponentenanalyse (PCA) für die ausreißerbereinigten log 1/R-Stecklingsspektren (Spektren aus den beiden Datensätzen für die Stickstoff- und Kohlenhydratfraktionen gemeinsam). Vor allem in der ersten Hauptkomponente, die alleine etwa 97 % der spektralen Variabilität erklärt, sind eindeutige Untergruppierungen für die Gattungen bzw. Arten zu erkennen. Auf Grund dieser Unterschiede im spektralen Muster und der im Vergleich zu den beiden anderen Gruppen geringeren Anzahl Pp-Proben, liegt ein relativ hoher Anteil dieser Proben außerhalb der 5 %-Hotellings-T²-Ellipse und weist damit signifikante Unterschiede zum Populationsmittel auf (CAMO, 2012). Bei Betrachtung der dritten und vierten Hauptkomponente ist eine symmetrische Verteilung der Population ohne systematische Unterschiede zu erkennen. Zudem liegen nur noch wenige Pp-Proben außerhalb der 5 %-Hotellings-T²-Ellipse.

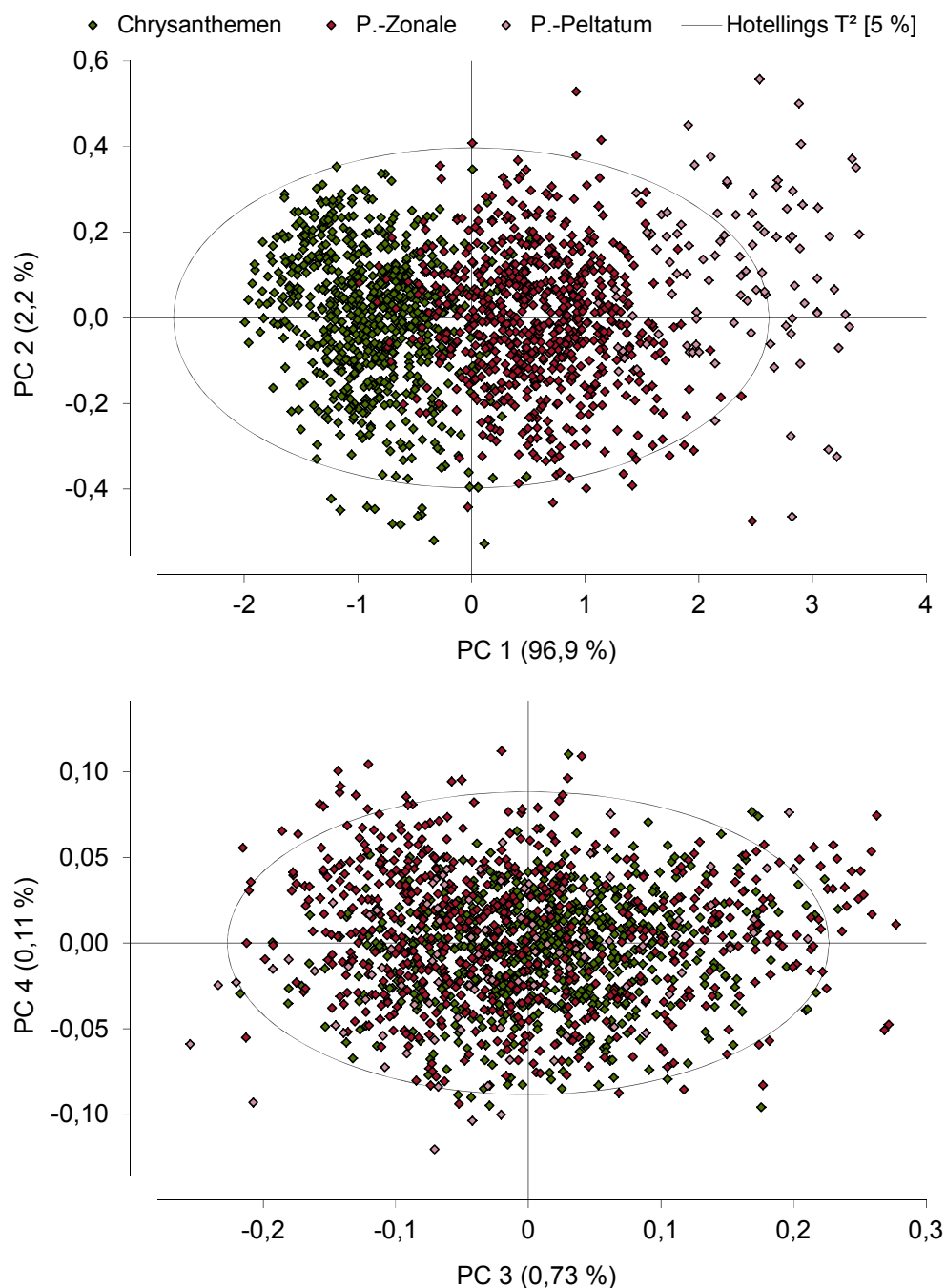


Abb. 4.8: PCA-Plots für die erste und zweite bzw. die dritte und vierte Hauptkomponente (PC) unter Verwendung der untransformierten $\log 1/R$ -Spektren, die Zahlen in Klammern bezeichnen die erklärte spektrale Varianz

Eine weitere PCA unter Verwendung der ersten Ableitung (Schrittweite und Glättung über sechs Datenpunkte) ergibt ein vergleichbares Bild mit einer deutlichen Gruppierung der Ch-, Pz- und Pp-Spektren in der ersten Hauptkomponente. Allerdings sinkt der Anteil der durch diese Hauptkomponente erklärten spektralen Varianz durch die Datenvorbehandlung deutlich von 97 auf 74 %. Bei Betrachtung der weiteren Hauptkomponenten zeigt sich dann wie bei den $\log 1/R$ -Spektren ebenfalls eine symmetrische Verteilung der drei Gattungen bzw. Arten ohne auffällige Häufungen oder Gruppierungen.

4.2.2 Auswahl der Datenvorbehandlungsmethoden

Bei der PLS-2-Kalibration für alle N-Fractionen (Einzel- und Summenfraktionen) werden sowohl mit den $\log 1/R$ -Spektren als auch bei Nutzung der ersten Ableitung (Schrittweite und Glättung über sechs Datenpunkte) die besten Vorhersageleistungen für den Gesamt-N erreicht. Bei den Blatt-KH-Fractionen ist dies bei allen drei Spektren-Typen (BO, BU, ST) jeweils mit und ohne Datenvorbehandlung für den TNC-Gehalt der Fall. Bei den KH-Fractionen in der Sprossachse werden bei keinem Parameter akzeptable Vorhersageleistungen erreicht. Die besten Ergebnisse ergeben sich für den Spross-TNC-Gehalt (Abb. 4.9), was allerdings im Wesentlichen auf das unterschiedliche Gehaltsniveau der beiden Gattungen zurückzuführen ist (Tab. 4.2). Werden Chrysanthemen und Pelargonien getrennt voneinander betrachtet, sinken die R_{CV}^2 auf Werte unter 0,3. Die Spross-KH-Fractionen (sowohl Einzel- als auch Summenfraktionen) wurden daher von der weiteren Kalibrationsentwicklung ausgeschlossen.

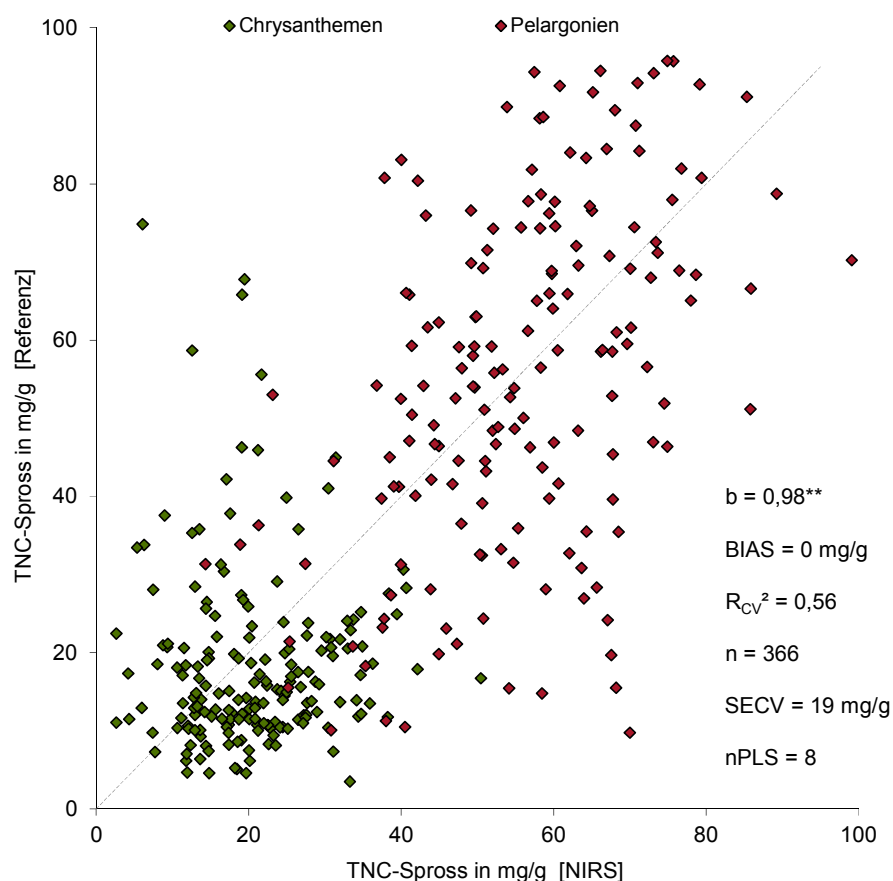


Abb. 4.9: Streudiagramm der Kreuzvalidierung für den TNC-Gehalt im Spross für das PLS-2-Modell unter Nutzung der untransformierten Absorptionsspektren ($\log 1/R$ -Spektren), die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R_{CV}^2 , SECV) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

In Abb. 4.10 sind die mittleren Ränge des Friedman-Test – Datenvorbehandlungen als Faktoren, kalibrierte Inhaltsstoffe (TS, Gesamt-N, TNC-Blatt) und Spektren-Typen (BO, BU, ST) als Wiederholungen – für den mit dem jeweiligen Modell erreichten minimalen SECV ($SECV_{min}$), den SECV bei Verwendung von 16 PLS-Faktoren ($SECV_{16}$) sowie die Anzahl

Faktoren, die notwendig sind, um einen SECV zu erreichen, der kleiner oder gleich dem SECV ist, der beim PLS-Modell mit 16 Faktoren für die $\log 1/R$ -Spektren erreicht wird ($nPLS_{SECV}$), dargestellt. Die Datenvorbehandlungsverfahren sind dabei aufsteigend nach der Summe der mittleren Ränge für die drei Kriterien sortiert und die Balken für die unbehandelten $\log 1/R$ -Spektren sind durch einen roten Rahmen hervorgehoben. Im Folgenden findet sich eine Aufstellung der verwendeten Datenvorbehandlungsmethoden (Abkürzung, Bezeichnung und kurze Erläuterung), wobei nur die jeweiligen Einzelverfahren aufgeführt sind.

Verfahren nur auf Basis der spektralen Daten:

Glättungsverfahren

- MovAvg (Moving Average): gleitender Mittelwert, die Zahl in Klammer beschreibt die Anzahl der verwendeten Datenpunkte (3 bzw. 7)

Verfahren zur Korrektur eines Basislinienanstiegs

- OBC (Offset Baseline Correction): Subtraktion des minimalen Absorptionwertes
- LBC (Linear Baseline Correction): Absorptionswerte beim ersten und letzten Datenpunkt gleich 0 setzen und Korrekturgerade anpassen
- DT (Detrend): Anpassung einer polynomen Korrekturfunktion zweiter Ordnung an die Basislinie

Verfahren zur Spektrennormierung

- NV (Vektornormierung): Division der Absorptionswerte durch die Wurzel der Summenquadrate der Absorptionswerte
- NM (Mittelwertnormierung): Division der Absorptionswerte durch den mittleren Absorptionwert
- SNV (Standard Normal Variate): Subtraktion des mittleren Absorptionwertes und Division durch die Standardabweichung der Absorptionswerte
- MSC (Multiplicative Scatter Correction): Berechnung einer Korrekturfunktion auf Basis des Mittelwertsspektrum
 - Off: Korrekturfunktion für die Basislinie
 - Amp: Korrekturfunktion für die Amplitude
 - Full: Korrekturfunktion für die Basislinie und die Amplitude

Bildung von Ableitungen

- 1,6,6: 1. Ableitung als Differenz aus zwei gleitenden Mittelwerten über sechs Datenpunkte hinweg mit einem Abstand von ebenfalls sechs Datenpunkten

- 1,12,12: 1. Ableitung als Differenz aus zwei gleitenden Mittelwerten über zwölf Datenpunkte hinweg mit einem Abstand von ebenfalls zwölf Datenpunkten
- 2,6,6: 2. Ableitung als Differenz aus zwei gleitenden Mittelwerten über sechs Datenpunkte hinweg mit einem Abstand von ebenfalls sechs Datenpunkten
- 2,12,12: 2. Ableitung als Differenz aus zwei gleitenden Mittelwerten über zwölf Datenpunkte hinweg mit einem Abstand von ebenfalls zwölf Datenpunkten

Verfahren unter Einbeziehung von spektralen Daten und Referenzwerten:

- OSC (Orthogonal Signal Correction): PLS-ähnliches Verfahren zur Eliminierung spektraler Varianz ohne Beziehung zum gesuchten Inhaltsstoff

Bei kombinierten Verfahren (z. B. SNV+DT+1,6,6) kennzeichnet die Reihenfolge der Nennung die Reihenfolge der Anwendung. Für detaillierte Angaben zu den mathematischen Hintergründen wird auf den Abschnitt 10.3 im Anhang und die dort aufgeführte Literatur verwiesen.

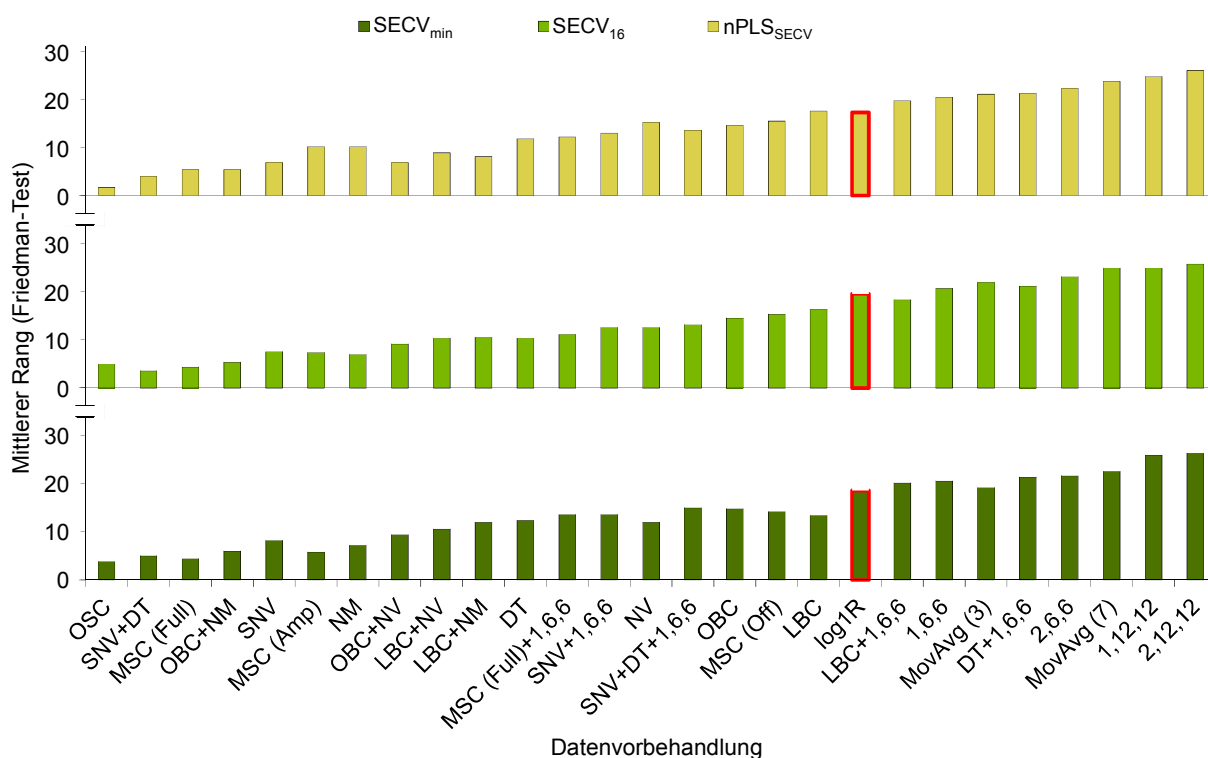


Abb. 4.10: Mittlere Ränge des Friedman-Test für die unterschiedlichen Datenvorbehandlungsmethoden mit $SECV_{min}$ = minimaler SECV, $SECV_{16}$ = SECV bei Verwendung von 16 PLS-Faktoren und $nPLS_{SECV}$ = Anzahl PLS-Faktoren, bei der der SECV kleiner ist, als der des Modells ohne Datenvorbehandlung und der Verwendung von 16 PLS-Faktoren (Ergebnisse für die untransformierten log 1/R-Spektren sind gesondert hervorgehoben)

Für alle drei Kriterien ergibt sich ein vergleichbares Bild: Während die Vorhersageleistungen der Modelle durch Normierungsverfahren (NM; NV; SNV; MSC) im Vergleich zu den Modellen mit den log 1/R-Spektren z. T. deutlich verbessert werden können, hat die Verwendung der ersten und zweiten Ableitung (1,6,6; 1,12,12; 2,6,6; 2,12,12) sowie eine Glättung (MovAvg) tendenziell einen negativen Effekt. Auch beim Vergleich von kombinierten Verfahren (z. B. SNV+1,6,6) mit den jeweiligen Einzelverfahren gehen bei der Verwendung der ersten oder zweiten Ableitung die Vorhersageleistungen zurück. Bei den Verfahren zur Korrektur des Basislinienanstieges erweist sich der nicht-lineare De-Trending-Algorithmus (Polynom 2. Ordnung) gegenüber den linearen Verfahren (OBC; LBC) als überlegen. Die Unterschiede zwischen den Datenvorbehandlungsverfahren sind dabei für alle drei Kriterien signifikant. Allerdings können jeweils nur die besten von den schwächsten Modellen signifikant unterschieden werden. Der OSC-Algorithmus ergibt im Mittel die beste Vorhersageleistung. Zwar kann im Vergleich zur SNV- oder MSC-Transformation die Vorhersageleistung nicht gesteigert werden, aber es werden etwas weniger PLS-Faktoren für die Modellbildung benötigt. Von den log 1/R-Modellen unterscheidet sich allerdings keines der Verfahren signifikant (Tab. 4.5).

Die für die weitere Kalibrationsentwicklung ausgewählten Datenvorbehandlungen sind in Tab. 4.5 durch Fettdruck hervorgehoben. Es wurden die Datenvorbehandlungsmethoden mit den im Mittel kleinsten Rängen ausgewählt, wobei bei ähnlichen Verfahren – z. B. MSC (Full), MSC (Off) und MSC (Amp) – jeweils nur eines einbezogen wurde. Da die Basislinienkorrekturen (OBC, LBC und DT) in Kombination mit der Mittelwertnormierung (NM) bzw. dem SNV-Verfahren eine deutliche Verbesserung erbringen, wurden die drei Verfahren auch einzeln berücksichtigt, obwohl sich bei ihrer alleinigen Anwendung keine eindeutige Verbesserung der Vorhersageleistung im Vergleich zu den untransformierten log 1/R-Spektren ergibt.

Tab. 4.5: Einfluss der Datenvorbehandlungsverfahren auf die Modellgüte: Vorbehandlungsmethoden mit gleichen Buchstaben unterscheiden sich nicht signifikant (Wilcoxon-Wilcox-Test mit $p < 0,05$; mit $SECV_{\min}$ = minimaler SECV, $SECV_{16}$ = SECV bei Verwendung von 16 PLS-Faktoren und $nPLS_{SECV}$ = Anzahl PLS-Faktoren, bei der der SECV kleiner ist, als der des Modells ohne Datenvorbehandlung und der Verwendung von 16 PLS-Faktoren)

Datenvorbehandlung*	$SECV_{\min}$	$SECV_{16}$	$nPLS_{SECV}$
ohne (log 1/R)	ab	ab	abcd
MovAvg (3)	ab	ab	bcd
MovAvg (7)	ab	b	cd
OBC	ab	ab	abcd
LBC	ab	ab	abcd
DT	ab	ab	abcd
NV	ab	ab	abcd
NM	a	ab	abcd
SNV	ab	ab	abcd
SNV+DT	a	a	ab
MSC (Off)	ab	ab	abcd
MSC (Amp)	a	ab	abcd
MSC (Full)	a	a	abc
1,6,6	ab	ab	abcd
1,12,12	b	b	d
2,6,6	ab	ab	bcd
2,12,12	b	b	d
OBC+NV	ab	ab	abcd
OBC+NM	ab	a	abc
LBC+NV	ab	ab	abcd
LBC+NM	ab	ab	abcd
LBC+1,6,6	ab	ab	abcd
DT+1,6,6	ab	ab	bcd
SNV+1,6,6	ab	ab	bcd
SNV+DT +1,6,6	ab	ab	abcd
MSC (Full)+1,6,6	ab	ab	abcd
OSC	a	a	a

*Für die weitere Kalibrationsentwicklung ausgewählte Datenvorbehandlungsverfahren durch Fettdruck hervorgehoben

4.2.3 Bestimmung der Trockensubstanz sowie von Stickstoff- und Blattkohlenhydratfraktionen

Bei jedem Parameter wurde für jedes der zehn ausgewählten Verfahren zur Datenvorbehandlung sowie mit den untransformierten $\log 1/R$ -Spektren ein Kalibriermodell berechnet. Aus den zehn Kalibriermodellen nach einer Datenvorbehandlung wurde auf Basis der in Abschnitt 4.1.4.1 beschriebenen Kriterien das beste Modell ausgewählt. Dieses Modell sowie das Modell für die $\log 1/R$ -Spektren – unabhängig von der erreichten Vorhersageleistung – wurden anschließend validiert. Die Validierung der Kalibriermodelle für die $\log 1/R$ -Spektren diente der Ermittlung des Verbesserungspotentials einer Datenvorbehandlung (Rinnan et al., 2009). Im folgenden Ergebnisteil sind im Wesentlichen die Ergebnisse der Validierung dargestellt. Auf die Ergebnisse der Kalibrierung wird nur kurz eingegangen, um die Modellauswahl zu begründen. Die detaillierten Angaben zu den Kalibriermodellen (Anzahl PLS-Faktoren, Standardfehler, Bestimmtheitsmaße usw.) finden sich in den Tabellen im Anhang (Abschnitt 10.4), auf die jeweils verwiesen wird.

4.2.3.1 Trockensubstanz mit Spektren ganzer Stecklinge

Insgesamt sind die Unterschiede zwischen den verschiedenen Datenvorbehandlungsverfahren bei den Kalibriermodellen für die Trockensubstanz recht gering (ΔSECV ca. 0,5 mg/g). Die besten Ergebnisse werden mittels der verschiedenen Normierungsverfahren (NM, SNV und MSC) erzielt (Tab. 10.9). Die erreichte Vorhersagegenauigkeit ist mit einem R_{cv}^2 von etwa 0,75 und einem Standardfehler für die Kreuzvalidierung (SECV) von knapp 9 mg/g bei den drei genannten Datenvorbehandlungen sowie bei Verwendung der $\log 1/R$ -Spektren vergleichbar, allerdings kann durch die verschiedenen Datenvorbehandlungen die Zahl der PLS-Faktoren etwas verringert werden ($\log 1/R = 8$, NM = 7, SNV = 6, MSC = 6). Für die Validierung wurde das Modell nach einer Datenvorbehandlung mittels SNV ausgewählt, wobei – wie beschrieben – dieses Modell keinen wirklichen Vorteil gegenüber den Modellen nach einer Datenvorbehandlung mittels NM oder MSC bietet.

Die für die Kalibriermodelle ermittelte Anzahl PLS-Faktoren bestätigt sich bei der Validierung. Die Standardfehler der Validierung (SEP) liegen mit 7 bzw. 8 mg/g sogar etwas niedriger als die SECV, die Bestimmtheitsmaße der Validierung mit 0,80 bzw. 0,82 umgekehrt etwas höher als die R_{cv}^2 . Dabei sind die SEP der Chrysanthemen um etwa 2 bis 3 mg/g geringer als die SEP der Pelargonien. Die Steigungen (b) liegen bei beiden Modellen innerhalb der jeweiligen 95 %-Vertrauensintervalle (VI). Die systematischen Fehler (BIAS) sind sehr gering und nicht signifikant. Die RPD-Werte (Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte zum SEP) von 2,2 und 2,3 bzw. die RER-Werte (Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte zum SEP) über 10 zeigen, dass die Genauigkeit für eine Anwendung in der Qualitätskontrolle ausreichend ist. Zudem ist der SEP weniger als doppelt so groß wie der Standardfehler des Referenzverfahrens (SEL) von 5 mg/g. Die statistischen Kenngrößen der

Validierungen für den gemeinsamen Datensatz sowie getrennt für die beiden Kulturen sind in Tab. 4.6 zusammengefasst.

Tab. 4.6: Statistische Kenngrößen der Validierung für die Trockensubstanz (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV getrennt nach Chrysanthemem (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 8										
Ch	102	122	17	82	6	0,88	2,7	13,4	1,13	0
Pe	128	133	14	70	9	0,69	1,7	8,2	0,93	0
Ch+Pe	230	128	17	82	8	0,80	2,2	10,9	0,95	0
SNV; nPLS = 6										
Ch	102	122	17	82	6	0,88	2,9	14,0	1,05	0
Pe	128	133	14	70	8	0,69	1,7	8,4	0,87	0
Ch+Pe	230	128	17	82	7	0,81	2,3	11,2	0,95	0

Bei Betrachtung der bedeutsamen Wellenlängen im SNV-Modell fällt insbesondere auf, dass im Wellenlängenbereich von 960 bis 1130 nm große Spektralbereiche nicht für die Modellbildung bei der Trockensubstanz genutzt wurden (Abb. 4.11). Der restliche Spektralbereich von 1130 bis 1690 nm wurde dagegen fast durchgängig für die Modellbildung genutzt, wobei die drei Bereiche von 1150 bis 1225, von 1250 bis 1350 und von 1550 bis 1600 nm die größte Bedeutung für die Modellbildung besitzen.

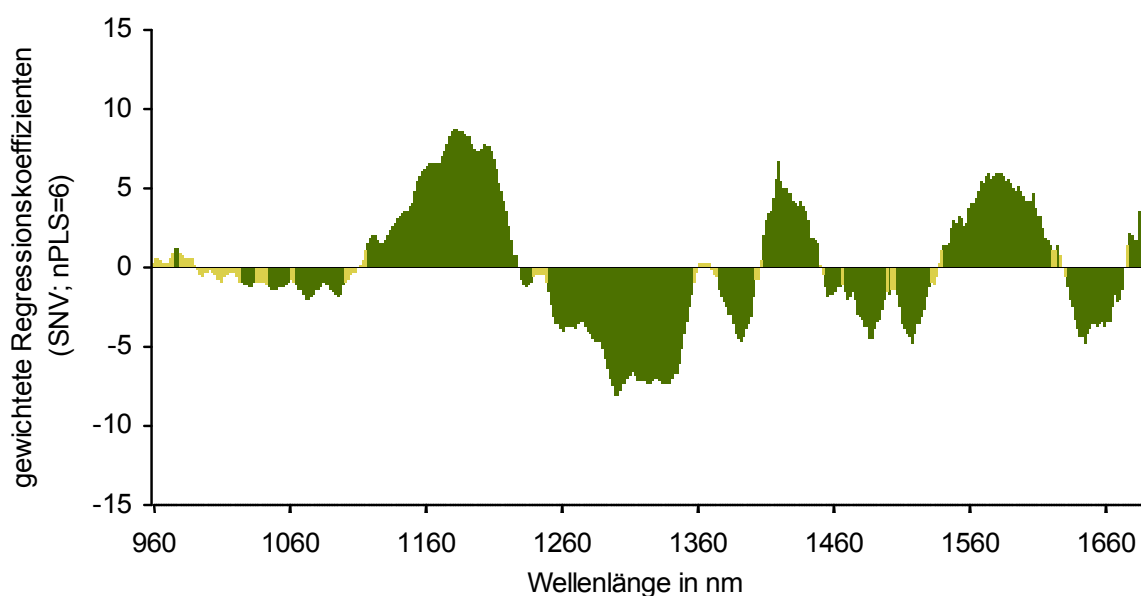


Abb. 4.11: Gewichtete Regressionskoeffizienten des Kalibriermodells für die Trockensubstanz (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet)

4.2.3.2 N-Fraktionen mit Spektren ganzer Stecklinge

Wie bei der Trockensubstanz werden bei den N-Fraktionen mit allen Datenvorbehandlungsmethoden ähnliche Vorhersageleistungen erzielt (Tab. 10.9). Im Vergleich zu den Modellen ohne Datenvorbehandlung kann die Anzahl der notwendigen Anzahl PLS-Faktoren durch die verschiedenen Vorbehandlungsverfahren aber in der Regel etwas verringert werden, was im Hinblick auf die Robustheit der Modelle positiv zu werten ist. Durch die Datenvorbehandlung mit dem OSC-Algorithmus kann im Vergleich zu den anderen Datenvorbehandlungsverfahren die Zahl der PLS-Faktoren meist nochmals um einen bis drei Faktoren reduziert werden. Da aber gleichzeitig drei Faktoren für die Erstellung des OSC-Modells verwendet wurden, bedeutet dies in Summe keine Verbesserung.

Amid-N

Die statistischen Kenngrößen der Kreuzvalidierung für den Amid-N ($R_{cv}^2 = 0,59$ bis $0,62$ und $SECV = 0,5$ mg/g) sind für alle elf Kalibriermodelle vergleichbar. Allerdings werden für das OSC-Modell nur neun PLS-Faktoren benötigt, während es bei Verwendung der unbehandelten Spektren zwölf sind. Bei den übrigen Datenvorbehandlungsmodellen sind es zehn bis 14 (Tab. 10.9). Das insgesamt beste Modell, als Kombination aus Komplexität der Datenvorbehandlung, Anzahl PLS-Faktoren und Vorhersageleistung, wird wie bei der TS nach einer Datenvorbehandlung mittels des SNV-Algorithmus erreicht.

Für den Validierdatensatz werden mittels der segmentierten Regression sowohl für das log 1/R- als auch das SNV-Modell 15 bzw. 16 PLS-Faktoren und damit deutlich mehr als in der Kreuzvalidierung ermittelt. Die Modelle sind also vermutlich leicht unterangepasst, wobei die absolute Verbesserung der Genauigkeit mit zunehmender Faktorenzahl allerdings nur gering ist. So werden beim Modell SNV sowohl mit elf als auch mit 15 Faktoren SEP von $0,5$ mg/g und damit RPD- und RER-Werte von $1,6$ und $7,0$ erreicht. Damit wäre auch mit größerer Faktorenzahl nur eine grobe Unterscheidung in Proben mit sehr hohen und sehr niedrigen Gehalten möglich. Die statistischen Kenngrößen der Validierung für die beiden Modelle sind in Tab. 4.7 zusammengestellt.

Tab. 4.7: Statistische Kenngrößen der Validierung für den Amid-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 12										
Ch	96	1,0	0,5	2,8	0,4	0,46	1,3	6,7	0,85	-0,1
Pe	98	1,8	0,8	3,3	0,6	0,49	1,4	5,5	0,80	0,0
Ch+Pe	194	1,4	0,8	3,4	0,5	0,59	1,5	6,6	0,91	0,0
SNV; nPLS = 11										
Ch	96	1,0	0,5	2,8	0,4	0,43	1,2	6,5	0,76	-0,1
Pe	98	1,8	0,8	3,3	0,6	0,51	1,4	5,7	0,86	0,0
Ch+Pe	194	1,4	0,8	3,4	0,5	0,61	1,6	6,7	0,92	-0,1

Nitrat-N

Beim Nitrat-N werden unabhängig von der Datenvorbehandlung selbst bei Verwendung sehr vieler Faktoren nur recht geringe Vorhersageleistungen ($RPD_{cv} \leq 1,7$, $RER_{cv} \leq 8,4$) erreicht (Tab. 10.9), die zudem im Wesentlichen auf den unterschiedlichen Gehaltsniveaus der beiden Kulturen fußen, wie Abb. 4.12 exemplarisch für die Validierung des Modell nach einer Datenvorbehandlung mittels SNV zeigt. Der erzielte SEP von 1,0 mg/g ist bei den Pelargonien doppelt so groß wie die Standardabweichung der Referenzwerte ($SD = 0,5$ mg/g). Bei den Chrysanthemen existiert zwar eine größere Spreizung der Referenzwerte (Spannweite: 0 bis 8 mg/g), die mittels des Kalibriermodells (SNV mit 12 PLS-Faktoren) geschätzten Werte für den Validierdatensatz gruppieren sich aber in einem engen Bereich ($\bar{x}_{NIRS} = 3,3$ mg/g, $s_{NIRS} = 1,5$ mg/g) um den Mittelwert der Referenzwerte von 3,1 mg/g. Auf eine detaillierte Darstellung der Ergebnisse der Validierung wird daher an dieser Stelle verzichtet.

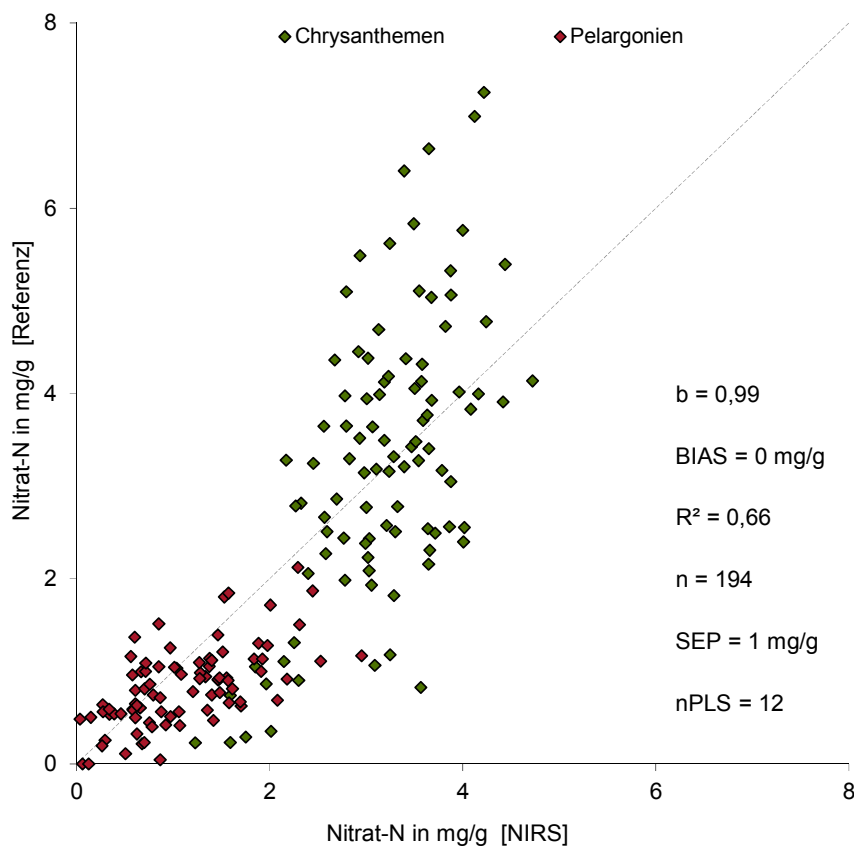


Abb. 4.12: Streudiagramm der Validierung für den Nitrat-N (Modell: SNV mit 12 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Amino-N

Für den Amino-N werden mit allen Modellen R_{cv}^2 um 0,6 sowie SECV von 1,7 bis 1,8 mg/g erreicht. Unterschiede gibt es allerdings bei der Anzahl der verwendeten PLS-Faktoren. Während bei Verwendung der $\log 1/R$ -Spektren 15 Faktoren genutzt werden, sind es nach einer Streulichtkorrektur mittels SNV noch elf. Auch beim Amino-N birgt der OSC-Algorithmus gegenüber den nur auf den spektralen Daten basierenden Verfahren keinen entscheidenden Vorteil (Tab. 10.9). Wie bei den beiden zuvor beschriebenen Inhaltsstoffen das Kalibriermodell nach Transformation der Spektren mittels SNV für die Validierung ausgewählt.

Sowohl für das Modell mit den $\log 1/R$ - als auch das mit den SNV-transformierten Spektren werden vergleichbare Vorhersageleistungen wie bei der Kalibrierung erreicht. Die SEP liegen bei beiden Modellen bei 1,7 bzw. 1,8 mg/g und die Bestimmtheitsmaße bei 0,63 bzw. 0,60. Diese Genauigkeit ist damit allenfalls für eine Klassifizierung ausreichend. Die statistischen Kenngrößen für die beiden Modelle sind in Tab. 4.8 zusammengestellt.

Tab. 4.8: Statistische Kenngrößen der Validierung für den Amino-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 15										
Ch	96	8,9	3,1	14,3	1,9	0,64	1,6	7,5	1,21	0,1
Pe	98	6,5	1,8	8,4	1,4	0,51	1,2	5,8	0,63	0,0
Ch+Pe	194	7,7	2,8	14,3	1,7	0,63	1,6	8,5	0,95	0,1
SNV; nPLS = 11										
Ch	96	8,9	3,1	14,3	2,0	0,59	1,5	7,0	1,20	0,1
Pe	98	6,5	1,8	8,4	1,5	0,47	1,2	5,8	0,64	-0,1
Ch+Pe	194	7,7	2,8	14,3	1,8	0,60	1,6	8,1	0,97	0,0

Protein-N

Im Vergleich zu den drei übrigen Stickstoffeinzelaktionen werden für die Protein-N-Fraktion deutlich bessere Vorhersageleistungen in der Kalibrierung erreicht. Gleichzeitig zeigen sich auch zwischen den verschiedenen Datenvorbehandlungsverfahren größere Unterschiede (Tab. 10.9). So werden für die Kreuzvalidierung bei den drei Verfahren LBC, DT und LBC+NM Bestimmtheitsmaße von 0,79 bis 0,84 erreicht und die Standardfehler bewegen sich zwischen 2,4 und 2,7 mg/g, während es bei den übrigen Modellen 0,86 bis 0,88 für die Bestimmtheitsmaße (R_{CV}^2) bzw. 2,0 bis 2,2 mg/g für die Standardfehler der Kreuzvalidierung (SECV) sind. Insbesondere beim Modell ohne Datenvorbehandlung werden sehr viele PLS-Faktoren (17) verwendet, aber auch nach einer Streulichtkorrektur sind es bei den besten Modellen (OBC+NM, SNV und SNV+DT) noch 14 bis 16. Durch das OSC-Verfahren kann die Faktorenzahl ebenfalls nicht deutlich reduziert werden. Unabhängig von der Datenvorbehandlung ist eine fortlaufende leichte Abnahme des SECV bei der Hinzunahme weiterer PLS-Faktoren zu beobachten. Daher ergibt sich für den Bruchpunkt der segmentierten Regression kein eindeutiges Optimum, was die Festlegung der endgültigen Faktorenzahl schwierig macht. Im Falle des Protein-N wurde das Modell nach einer kombinierten Spektrentransformation mittels SNV+DT und 14 PLS-Faktoren für die Validierung ausgewählt.

Sowohl beim Modell mit den untransformierten log 1/R-Spektren als auch mit den SNV+DT-transformierten deutet sich eine leichte Überanpassung an. Im Vergleich zur segmentierten Regression über den SECV wird bei der Regression über den SEP das Optimum für das Bestimmtheitsmaß der segmentierten Regression mit einem bzw. zwei PLS-Faktoren weniger erreicht. Die Vorhersageleistungen für beide Modelle sind gut bis sehr gut. Die SEP betragen mit Werten von 1,9 bzw. 2,0 mg/g ungefähr das 4,5-fache des SEL. Die Steigungen der Regressionsgeraden sind nicht signifikant von eins verschieden, d.h. auch Proben mit sehr hohen oder sehr geringen Protein-N-Gehalten werden richtig geschätzt und die systematischen Fehler sind vernachlässigbar klein. Die für den gesamten Validierdatensatz erreichten RPD von

3,0 und 2,9 bzw. RER von etwa 13 sind sehr hoch. Dabei ist aber zu berücksichtigen, dass sich die Gehaltsbereiche von Pelargonien und Chrysanthemen nur bedingt überschneiden (Tab. 10.5). Werden die beiden Kulturen getrennt voneinander betrachtet, wird für die Chrysanthemen ein RPD von 1,5 und ein RER von 7,3 erreicht. Für die Pelargonien sind die Werte mit 2,2 und 12,0 deutlich höher (Tab. 4.9). Abb. 4.13 zeigt das Streudiagramm für die mittels des Modells geschätzten Protein-N-Gehalte und die referenzanalytisch bestimmten.

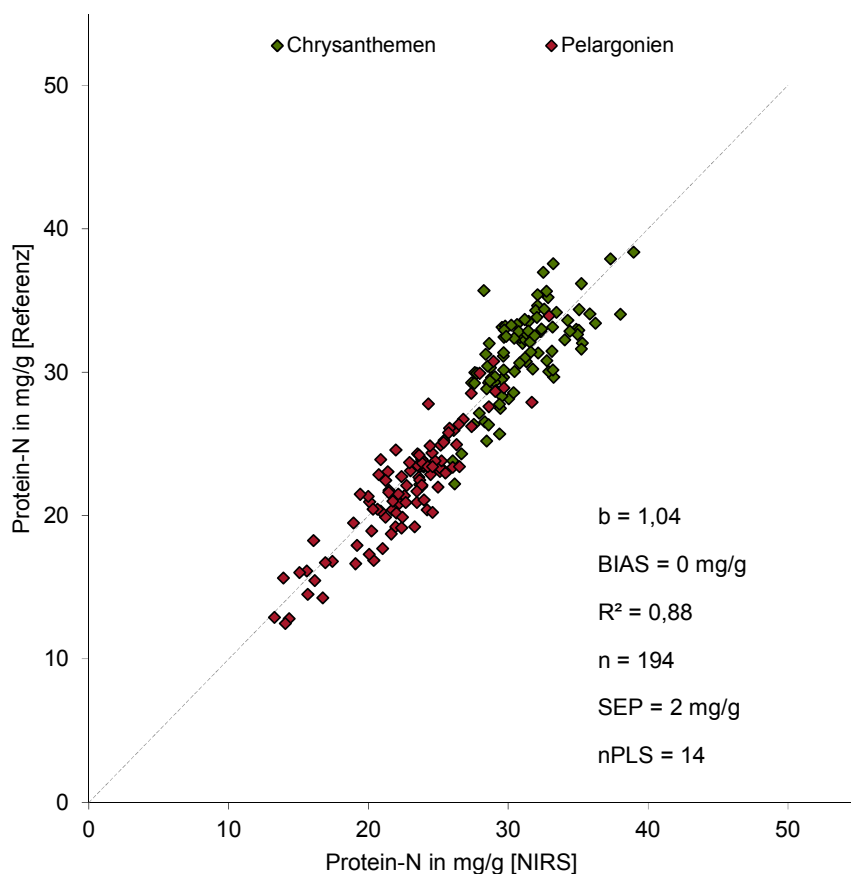


Abb. 4.13: Streudiagramm der Validierung für den Protein-N (Modell: SNV+DT mit 14 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Tab. 4.9: Statistische Kenngrößen der Validierung für den Protein-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV+DT getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 17										
Ch	96	31,1	3,3	16,3	2,1	0,62	1,6	7,9	0,94	0,0
Pe	98	22,0	4,0	21,5	1,8	0,84	2,2	12,0	0,92	-0,8
Ch+Pe	194	26,5	5,9	25,9	1,9	0,90	3,0	13,4	1,02	-0,4
SNV+DT; nPLS = 14										
Ch	96	31,1	3,3	16,3	2,2	0,57	1,5	7,3	0,87	0,2
Pe	98	22,0	4,0	21,5	1,8	0,83	2,2	12,0	0,95	-0,7
Ch+Pe	194	26,5	5,9	25,9	2,0	0,88	2,9	12,8	1,04	-0,3

Gesamt-N

Ähnlich wie beim Protein-N unterscheiden sich auch beim Gesamt-N die Vorhersageleistungen der elf geprüften Modelle zum Teil erheblich (Tab. 10.9). So werden die besten Vorhersageleistungen mit R_{cv}^2 von 0,85 und SECV von 3,4 bzw. 3,5 mg/g bei den Modellen NM und MSC erzielt. Die schwächsten Vorhersageleistungen werden mit dem DT-Algorithmus erreicht ($R_{cv}^2 = 0,77$; SECV = 4,3 mg/g). Allerdings werden für dieses Modell nur zehn PLS-Faktoren verwendet, während es bei den beiden zuvor genannten 15 bzw. 16 sind. Beim Modell ohne Streulichtkorrektur werden ebenfalls 14 PLS-Faktoren genutzt, das Bestimmtheitsmaß ist aber mit 0,82 etwas niedriger und der SECV mit 3,9 mg/g etwas höher. Bei den übrigen Datenvorbehandlungsmethoden nur auf Basis der spektralen Daten werden zwischen zwölf und 14 Faktoren verwendet und die Bestimmtheitsmaße und Standardfehler liegen zwischen 0,80 und 0,83 bzw. 3,7 und 4,0 mg/g. Bei Verwendung des OSC-Algorithmus der zusätzlich zu den spektralen Daten auch die Referenzwerte mit einbezieht, wird eine vergleichbare Vorhersageleistung wie bei einer Datenvorbehandlung mittels MSC bereits mit einem Faktor weniger erzielt (Tab. 10.9). Da allerdings drei OSC-Faktoren, die vergleichbar den PLS-Faktoren für die Modellbildung sind, für die Datenvorbehandlung benötigt werden, bedeutet der OSC-Algorithmus keine Verbesserung. Wie beim Protein-N zuvor, ist auch bei allen Gesamt-N-Modellen eine stetige Abnahme der Standardfehler bis zur maximalen Faktoren Anzahl von 20 zu verzeichnen. Auch in diesem Fall ist daher die Festlegung der optimalen Faktorenzahl auf Basis der segmentierten Regression für den SECV schwierig bzw. nicht eindeutig, wie das Beispiel für das MSC-Modell zeigt (Abb. 4.14). Der Verlauf des R_{SR}^2 zeigt kein eindeutiges Optimum, sondern erreicht für den Bereich von zwölf bis 15 PLS-Faktoren ein Maximum von 0,95 und geht bis 18 Faktoren nur ganz leicht auf 0,93 zurück.

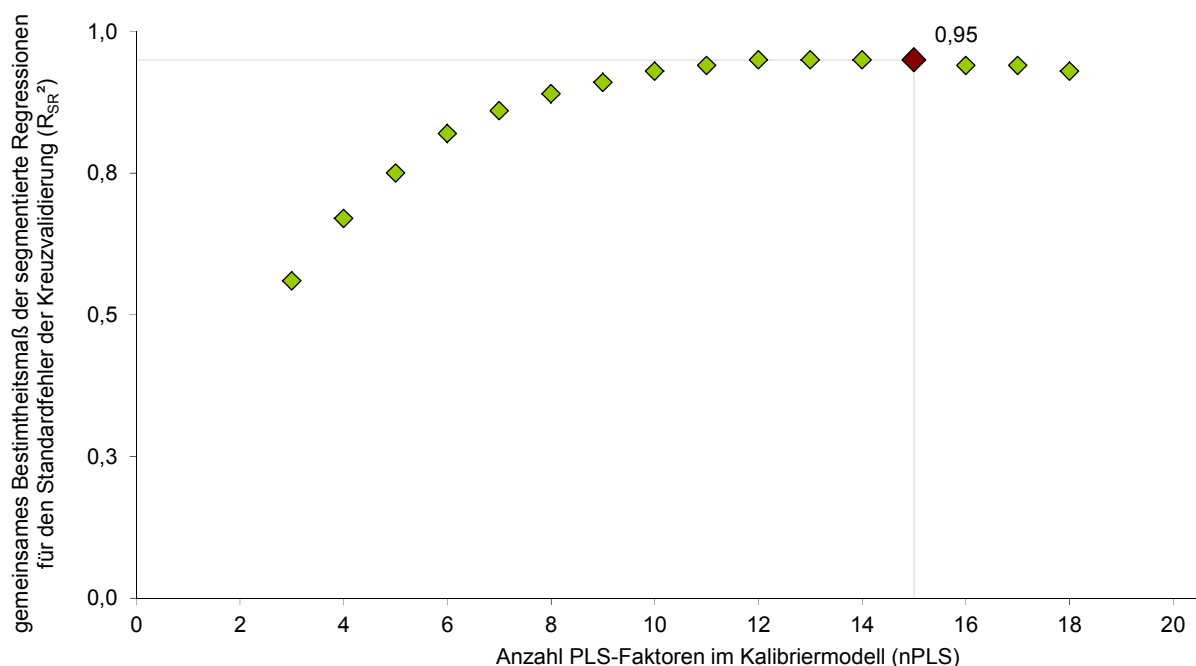


Abb. 4.14: Verlauf des gemeinsamen Bestimmtheitsmaßes (R_{SR}^2) der segmentierten Regression für den Standardfehler der Kreuzvalidierung in Abhängigkeit von der Anzahl PLS-Faktoren nach einer Datenvorbehandlung mittels MSC

Die segmentierte Regression über den SEP für das MSC-Modell bestätigt aber die in der Kreuzvalidierung ermittelte Faktorenzahl. Die SEP für das Modell mit den untransformierten $\log 1/R$ -Spektren sowie das mit den MSC-transformierten sind mit 4,0 bzw. 3,3 mg/g vergleichbar wie die in der Kalibrierung erzielten SECV, gleiches gilt für die Bestimmtheitsmaße mit 0,80 bzw. 0,86 (Abb. 4.15). Die Steigungen der Regressionsgeraden liegen innerhalb der 95 %-VI und auch die BIAS sind für den gesamten Validierdatensatz sehr gering und nicht signifikant von 0 verschieden. Bezüglich der Genauigkeit sind zwischen den beiden Kulturen nur geringfügige Unterschiede auszumachen, wengleich der SEP der Chrysanthemenproben bei beiden Modellen etwas größer ist als der der Pelargonienproben. Die RER- und RPD-Werte sowohl für den gesamten Datensatz (12,8 und 2,7) als auch für die beiden Kulturen getrennt (Chrysanthemen 9,0/1,8; Pelargonien 10,3/1,9) zeigen, dass das Kalibriermodell in jedem Fall für eine Klassifizierung bzw. sogar eine semiquantitative Bestimmung der Gesamt-N-Gehalte geeignet ist. In Tab. 4.10 sind die statistischen Kenngrößen der Validierungen für die beiden Modelle zusammengefasst.

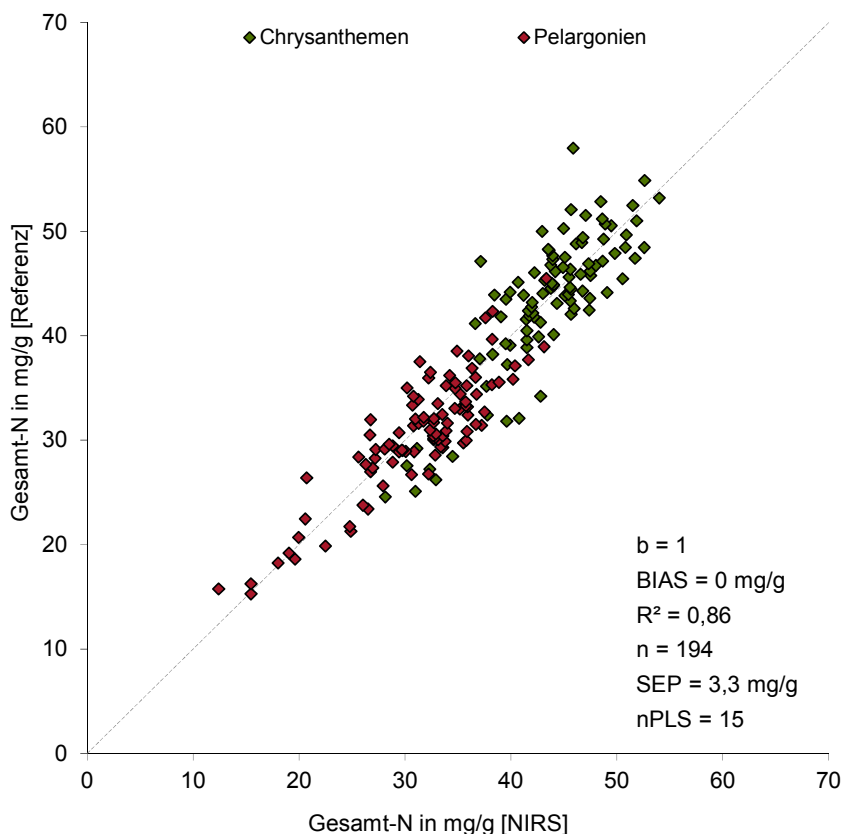


Abb. 4.15: Streudiagramm der Validierung für den Gesamt-N (Modell: MSC mit 15 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Tab. 4.10: Statistische Kenngrößen der Validierung für den Gesamt-N (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels MSC getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 14										
Ch	96	43,6	6,7	33,4	4,3	0,60	1,6	7,8	1,11	0,3
Pe	98	30,7	5,7	30,2	3,7	0,69	1,6	8,2	0,75	-0,9
Ch+Pe	194	37,1	8,9	42,7	4,0	0,80	2,2	10,7	0,99	-0,3
MSC; nPLS = 15										
Ch	96	43,6	6,7	33,4	3,7	0,69	1,8	9,0	1,07	-0,1
Pe	98	30,7	5,7	30,2	2,9	0,78	1,9	10,3	0,84	-0,7
Ch+Pe	194	37,1	8,9	42,7	3,3	0,86	2,7	12,8	1,00	-0,4

extrahierbare organische N-Fraktionen (eoNF)

Für die Summe der extrahierbaren organischen N-Fraktionen (eoNF = Amid-N + Amino-N) werden Vorhersageleistungen für die Kalibrierung erreicht, wie sie auf Grund der Kalibriermodelle für die beiden Einzelfraktionen zu erwarten sind. So werden – mit Ausnahme der Datenvorbehandlungsmethode DT – R_{cv}^2 von 0,56 bis 0,60 erreicht, was vergleichbar ist wie beim Amid-N und geringfügig schlechter als beim Amino-N. Die SECV liegen zwischen 2,0 und 2,2 mg/g und damit etwas höher als beim Amino-N (1,7 bis 1,8 mg/g), der im Mittel etwa 85 % der eoNF ausmacht. Für die Validierung wurde wie beim Protein-N die Datenvorbehandlungsmethode SNV+DT ausgewählt, wengleich die Unterschiede sowohl hinsichtlich Vorhersageleistung als auch Anzahl PLS-Faktoren zwischen allen Datenvorbehandlungsverfahren und auch dem Modell auf Basis der log 1/R-Spektren äußerst gering sind (Tab. 10.9).

Die Ergebnisse der Kalibrierung werden in der Validierung weitestgehend bestätigt. So werden ein SEP von 2,0 bzw. 1,9 mg/g und Bestimmtheitsmaße von 0,59 bzw. 0,62 erreicht. Auch die in der Kreuzvalidierung ermittelte Faktorenzahl wird in der Validierung bestätigt. Die Steigungen der Regressionsgeraden sind für beide Modelle nicht signifikant von eins verschieden und die systematischen Fehler sind vernachlässigbar klein. Allerdings werden bei den Chrysanthemen einige Proben mit sehr hohen eoNF-Gehalten deutlich unterschätzt (Abb. 4.16). Wie beim Amid- und Amino-N werden nur RPD-Werte um 1,5 und RER-Werte < 8 erreicht, womit maximal eine grobe Klassifizierung möglich ist. Die statistischen Kenngrößen der beiden validierten Modelle finden sich in Tab. 4.11.

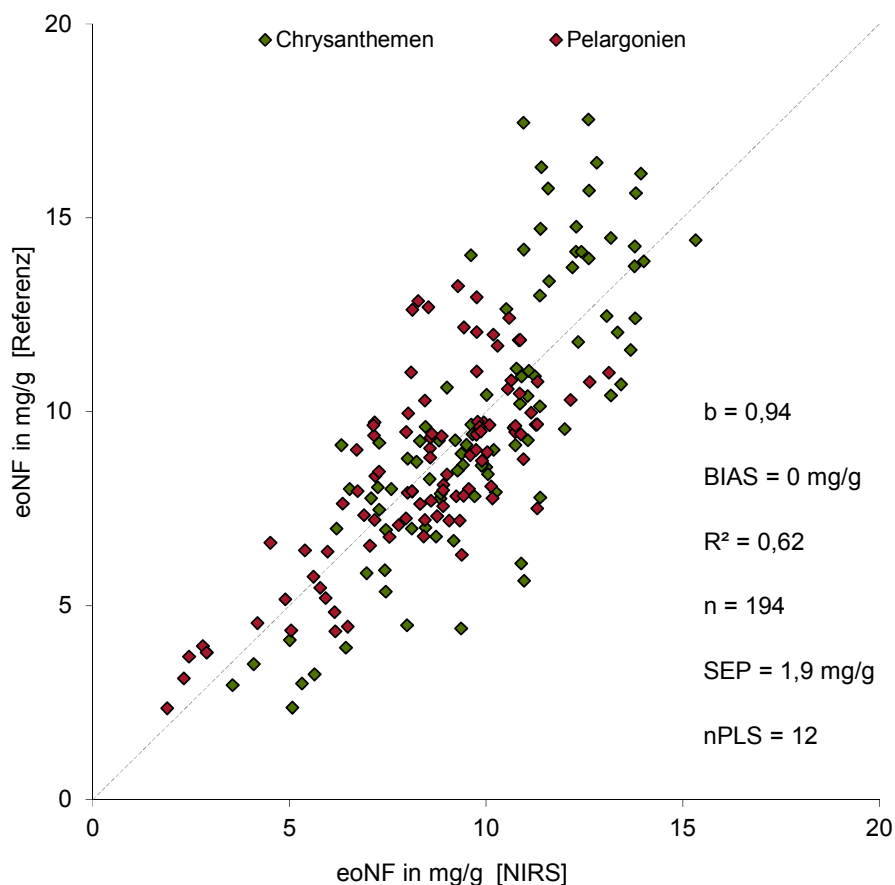


Abb. 4.16: Streudiagramm der Validierung für die eoNF (Modell: SNV+DT mit 12 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Tab. 4.11: Statistische Kenngrößen der Validierung für die eoNF (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV+DT getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 14										
Ch	96	9,9	3,6	15,2	2,2	0,62	1,6	6,8	1,10	0,0
Pe	98	8,4	2,5	10,9	1,8	0,55	1,4	6,0	0,72	0,1
Ch+Pe	194	9,1	3,2	15,2	2,0	0,59	1,6	7,5	0,91	0,1
SNV+DT; nPLS = 12										
Ch	96	9,9	3,6	15,2	2,2	0,65	1,7	7,0	1,15	-0,1
Pe	98	8,4	2,5	10,9	1,7	0,58	1,4	6,3	0,76	0,1
Ch+Pe	194	9,1	3,2	15,2	1,9	0,62	1,6	7,8	0,94	0,0

extrahierbare N-Fractionen (eNF)

Die Vorhersageleistungen für die Summe aller extrahierbaren Stickstofffraktionen (eNF = Amid-N + Nitrat-N + Amino-N) spiegeln, wie zuvor für die eoNF beschrieben, die Bestimmbarkeit der drei Einzelfractionen wider. Für die Kreuzvalidierung werden Bestimmtheitsmaße zwischen 0,62 und 0,65 und Standardfehler von 2,5 bzw. 2,6 mg/g erreicht. Die PLS-Faktorenzahl reicht von elf bis 14 (Tab. 10.9). Auch für die Summe der extrahierbaren N-Fractionen sind die Unterschiede zwischen den verschiedenen Verfahren zur Datenvorbehandlung nur gering. Für die Validierung wurde das Modell nach einer kombinierten Basislinienkorrektur und anschließender Mittelwertnormierung (OBC+NM) ausgewählt.

Bei beiden Modellen (log 1/R und OBC+NM) werden in der Validierung SEP von 2,5 mg/g und Bestimmtheitsmaße von 0,65 bzw. 0,64 erreicht. Auch die Steigungen und die systematischen Fehler sind vergleichbar und jeweils nicht signifikant von eins bzw. null verschieden (Tab. 4.12). Die erreichten RPD- und RER-Werte von 1,7 bzw. 7,8 deuten aber an, dass auch bei den extrahierbaren N-Fractionen nur eine Klassifizierung möglich ist. Insbesondere werden – wie bei der alleinigen Kalibrierung des Nitratstickstoffs – Chrysanthemenproben mit sehr hohen eNF-Gehalten systematisch unter- und umgekehrt solche mit sehr geringen Gehalten systematisch überschätzt (Abb. 4.17).

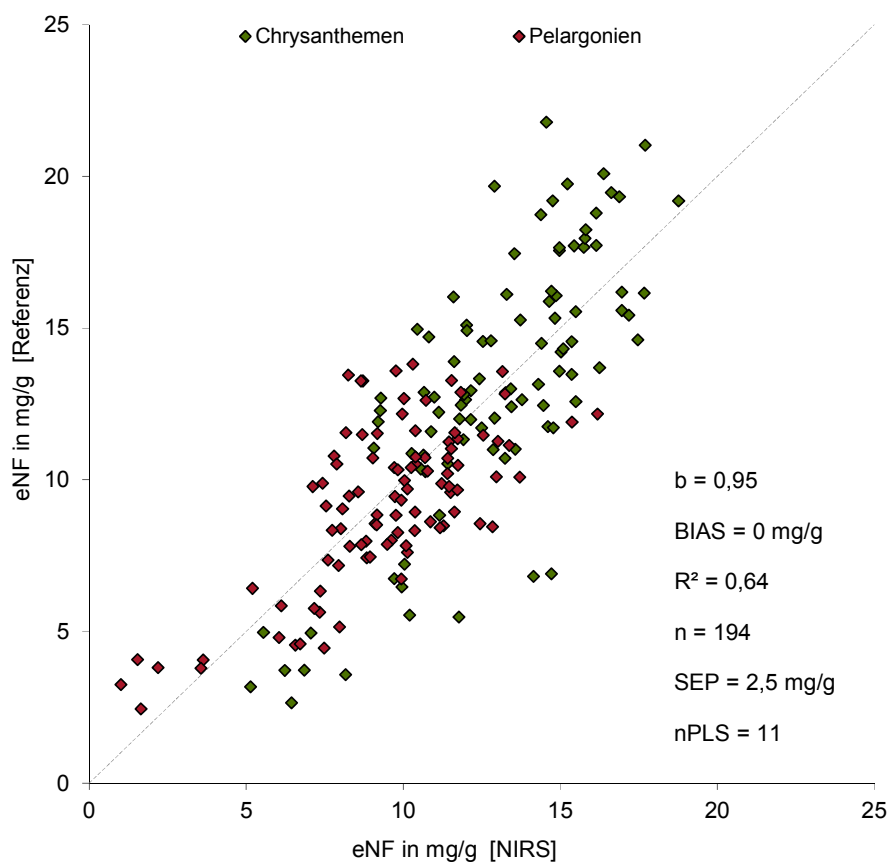


Abb. 4.17: Streudiagramm der Validierung für die eNF (Modell: OBC+NM mit 11 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Tab. 4.12: Statistische Kenngrößen der Validierung für die eNF (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels OBC+NM getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 14										
Ch	96	13,2	4,3	19,1	2,8	0,60	1,6	6,9	1,15	0,2
Pe	98	9,1	2,7	11,4	2,1	0,54	1,3	5,3	0,64	0,0
Ch+Pe	194	11,1	4,1	19,3	2,5	0,65	1,7	7,9	0,93	0,1
OBC+NM; nPLS = 11										
Ch	96	13,2	4,3	19,1	2,8	0,59	1,5	6,8	1,15	0,2
Pe	98	9,1	2,7	11,4	2,1	0,52	1,3	5,3	0,66	-0,2
Ch+Pe	194	11,1	4,1	19,3	2,5	0,64	1,7	7,8	0,95	0,0

organische N-Fraktionen (oNF)

Für die Summe der organischen N-Fraktionen (oNF = Amid-N + Amino-N + Protein-N) werden sehr gute Vorhersageleistungen mit R_{cv}^2 von 0,77 bis 0,83 und SECV von 3,2 bis 3,8 mg/g erreicht. Dies bestätigt die zuvor beschriebenen Ergebnisse für den Protein-N, der im Mittel 75 % der organischen N-Fraktionen ausmacht. Validiert wurde neben dem Modell mit den untransformierten log 1/R-Spektren das Modell nach einer Transformation mittels SNV+DT, die statistischen Kenngrößen der Kalibrierung aller elf Modelle sind in Tab. 10.9 zusammengefasst.

Bei beiden Modellen werden für die Validierung vergleichbare Vorhersageleistungen wie in der Kalibrierung erreicht (Tab. 4.13). So ist der SEP für das Modell mit Datenvorbehandlung bei gleicher Faktorenzahl 0,4 mg/g geringer als beim Modell mit den untransformierten Spektren. Dies gilt auch bei einer kulturspezifischen Betrachtung. Wie in Abb. 4.18 zu erkennen ist, bestehen hinsichtlich der Streuung keine Unterschiede zwischen den Chrysanthemen- und Pelargonienproben und auch systematische Abweichungen, wie beispielsweise beim eNF, sind nicht zu erkennen. Ähnlich wie beim Protein- und Gesamt-N ist die Vorhersagegenauigkeit zumindest für eine halbquantitative Bestimmung ausreichend (RPD = 2,4) und die Modelle können in der Qualitätsbeurteilung eingesetzt werden (RER = 11).

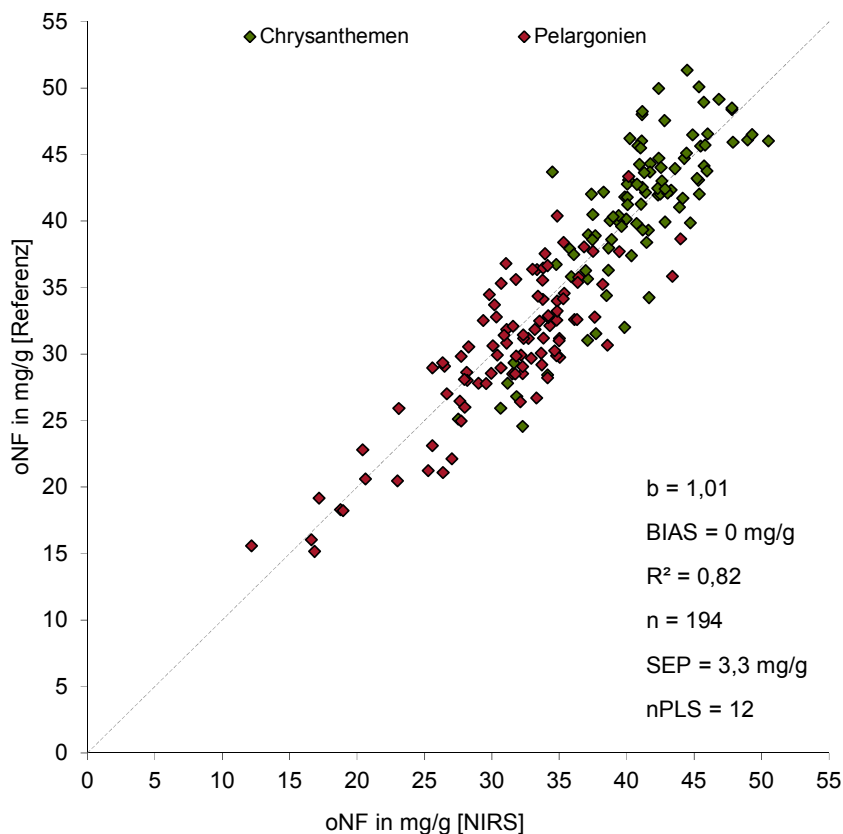


Abb. 4.18: Streudiagramm der Validierung für die oNF (Modell: SNV+DT mit 12 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, R², SEP, BIAS) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Tab. 4.13: Statistische Kenngrößen der Validierung für die oNF (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die untransformierten log 1/R-Spektren sowie nach Transformation der Spektren mittels SNV+DT getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
log 1/R; nPLS = 12										
Ch	96	41,0	5,7	26,8	3,6	0,61	1,6	7,4	1,12	0,3
Pe	98	30,3	5,5	28,2	3,8	0,63	1,4	7,3	0,76	-1,1
Ch+Pe	194	35,6	7,8	36,2	3,7	0,77	2,1	9,7	1,00	-0,4
SNV+DT; nPLS = 12										
Ch	96	41,0	5,7	26,8	3,4	0,65	1,7	7,8	1,07	0,1
Pe	98	30,3	5,5	28,2	3,1	0,73	1,8	9,0	0,84	-0,8
Ch+Pe	194	35,6	7,8	36,2	3,3	0,82	2,4	11,0	1,01	-0,4

Im Gegensatz zur Trockensubstanz (Abb. 4.11), bei der der Wellenlängenbereich bis 1130 nm kaum genutzt wird, liegen bei allen Kalibriermodellen für die verschiedenen N-Fractionen wesentliche Abschnitte mit signifikanten Wellenlängen in diesem Spektralbereich. Umgekehrt wird der für die TS-Kalibrierung wichtige Wellenlängenbereich oberhalb von 1340 nm bei den N-Fractionen kaum genutzt. Dies ist insbesondere beim Protein- sowie Gesamt-N (Abb. 4.19 [C-D]) deutlich zu erkennen. Zwar gibt es im Bereich zwischen 1340 und 1690 nm eine Reihe signifikanter Wellenlängenbereiche, z. B. zwischen 1460 und 1500 nm, allerdings weisen hierbei eng benachbarte Wellenlängen gewichtete Regressionskoeffizienten mit vergleichbaren Beträgen aber umgekehrten Vorzeichen auf. Da die Absorptionen bei diesen Wellenlängen gleichzeitig sehr ähnlich sind, liegt der Schluss nahe, dass sich die Wellenlängen in ihrer Wirkung aufheben und nur als Korrekturglied für spektrales Rauschen dienen. Insgesamt werden bei allen Stickstoff-Einzelfractionen und dementsprechend auch beim Gesamt-N sowie den diversen Summenparametern vergleichbare Wellenlängenbereiche genutzt (Abb. 4.19). Die Art der Spektrentransformation hat bei keinem Parameter einen deutlichen Einfluss auf die genutzten Wellenlängenbereiche.

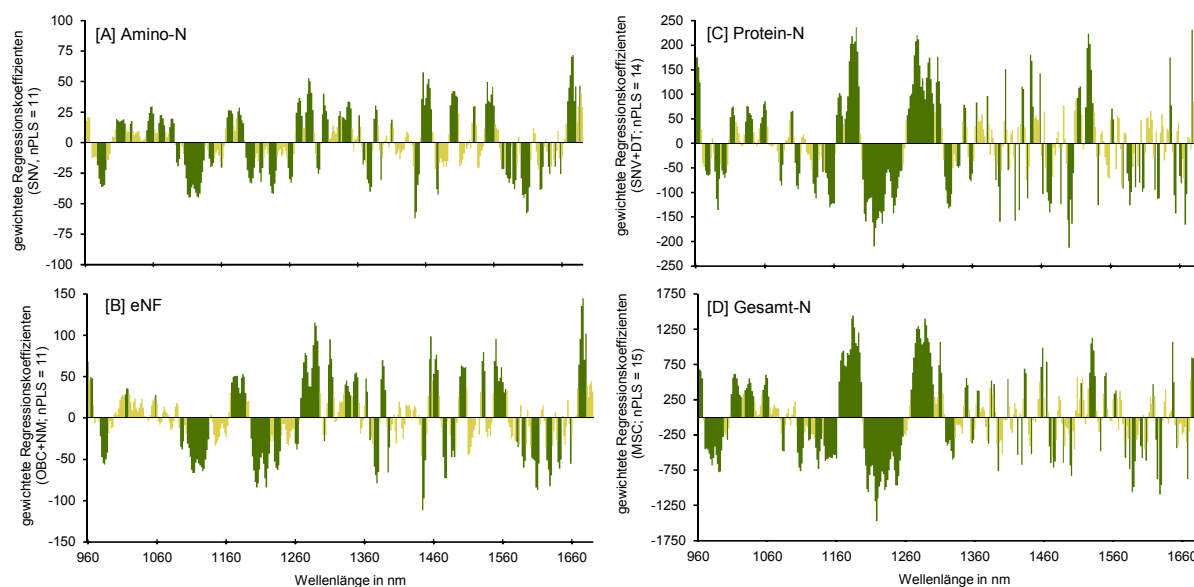


Abb. 4.19: Gewichtete Regressionskoeffizienten der Modelle ohne Spektrentransformation für den [A] Amino-N, [B] eNF, [C] Protein-N und [D] Gesamt-N (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet)

Die geringe Bedeutung des Wellenlängenbereichs oberhalb von 1340 nm für die Modellbildung bestätigt sich bei einer Neuberechnung der Kalibrierung für den Protein-N bei der nur der Bereich bis 1340 nm genutzt wurde: Bei gleicher Datenvorbehandlung und gleicher Anzahl PLS-Faktoren werden nur geringfügig schwächere Vorhersageleistungen erreicht. In Tab. 4.14 sind die statistischen Kenndaten der Validierung für die Bestimmung des Protein-N mit und ohne Begrenzung des Spektralbereiches gegenübergestellt.

Tab. 4.14: Statistische Kenngrößen der Validierung für den Protein-N (SEP, BIAS in mg/g) ohne und mit Begrenzung des genutzten Wellenlängenbereichs getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Validierung [Wellenlängenbereich von 960-1690 nm]						Validierung [Wellenlängenbereich von 960-1340 nm]					
	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
SNV+DT; nPLS = 14												
Ch	2,2	0,57	1,5	7,3	0,87	0,2	2,5	0,46	1,3	6,5	0,81	-0,1
Pe	1,8	0,83	2,2	12,0	0,95	-0,7	1,9	0,78	2,1	11,4	1,01	-0,3
Ch+Pe	2,0	0,88	2,9	12,8	1,04	-0,3	2,2	0,86	2,7	11,7	0,99	-0,2

4.2.3.3 Blatt-Kohlenhydratfraktionen unter Nutzung von Blatt- bzw. Stecklingspektren

Bei den Blattkohlenhydraten wurden Kalibriermodelle jeweils unter Nutzung der ST-, BU- und BO-Spektren erstellt und die erreichten Vorhersageleistungen für die verschiedenen Spektren miteinander verglichen.

Einzelzucker im Blatt (Glucose, Fructose, Saccharose)

Bei den Einzelzuckern können, unabhängig davon ob die BU-, die BO- oder die ST-Spektren genutzt und welche Datenvorbehandlungsverfahren durchgeführt werden, keine zufriedenstellenden Vorhersageleistungen erreicht werden. Die Bestimmtheitsmaße sind für Glucose kleiner als 0,3. Für Fructose und Saccharose liegen sie mit etwa 0,5 bzw. 0,6 zwar besser, dies beruht aber ähnlich wie beim Nitrat-N im Wesentlichen auf den leicht unterschiedlichen Gehaltsniveaus der beiden Gattungen (Tab. 10.4 und Tab. 10.6). Auch sind bei allen drei Einzelzuckern die kulturspezifischen RPD-Werte der Kreuzvalidierung kleiner 1,5. Auf eine Validierung der Modelle wurde daher verzichtet. Die statistischen Kenngrößen der Kalibriermodelle für die drei Spektrentypen (ST, BU und BO) befinden sich im Anhang in den Tab. 10.10 bis Tab. 10.12.

Summe Blattzucker (Blatt-TSS)

Auch für die Summe der drei löslichen Zucker (TSS = Glucose + Fructose + Saccharose) waren die Vorhersageleistungen mit R_{cv}^2 kleiner 0,5 und einem SECV von etwa 4 mg/g bei einem Mittelwert der Referenzwerte von 7,7 mg/g in keinem Fall ausreichend. Ebenso wie bei den Einzelzuckern ist auch die Steigung der Regressionsgeraden der Kreuzvalidierung für die TSS deutlich größer als eins, Werte unterhalb des Mittelwertes werden damit systematisch über- und solche oberhalb des Mittelwertes unterschätzt. Auch für diesen Parameter wurde auf eine Validierung verzichtet, die Kenngrößen der Kalibriermodelle für die drei Spektrentypen (ST, BU und BO) finden sich im Anhang (Tab. 10.10 bis Tab. 10.12).

Blattstärke

Bei der Bestimmung der Blattstärke wurden unabhängig davon, ob für die Modellbildung Spektren von Blattober- bzw. -unterseiten oder solche ganzer Stecklinge genutzt wurden, die besten Vorhersageleistungen mit ähnlichen bzw. gleichen Spektrentransformationen (NM, OBC+NM, SNV+DT und MSC) erzielt. Ein Vergleich der drei Spektrentypen (ST, BU und BO) zeigt eine deutliche Reihung: Bei Verwendung der BO-Spektren werden die besten Vorhersageleistungen (SECV von 5,5 bis 6,1 mg/g) erzielt. Bei Verwendung der BU-Spektren liegen die SECV mit 6,1 bis 6,6 mg/g etwas und bei den ST-Spektren mit 6,1 bis 7,8 mg/g zum Teil deutlich höher (Tab. 10.10 bis Tab. 10.12). Die Anzahl der verwendeten PLS-Faktoren unterscheidet sich dabei kaum.

Diese Unterschiede bestätigen bzw. verstärken sich in der Validierung. So beträgt der SEP für das beste Modell (MSC, nPLS = 13) bei den BO-Spektren 5,0 mg/g und das Bestimmtheitsmaß 0,84, das RPD erreicht sowohl für den gemeinsamen Validierdatensatz als auch bei getrennter Betrachtung der beiden Kulturen Werte zwischen 2,1 und 2,6 und die RER-Werte sind größer als zehn. Die Steigung der Regressionsgeraden von 1,02 ist nicht signifikant von eins ($p = 0,05$) verschieden, somit werden insbesondere auch Proben mit hohen Stärkegehalten richtig erfasst, und der BIAS ist vernachlässigbar klein. Bei Verwendung der ST- (SNV+DT, nPLS = 15) bzw. BU-Spektren (SNV+DT, nPLS = 11) liegen die SEP dagegen bei 6,2 bzw. 5,8 mg/g und die Bestimmtheitsmaße sind $\leq 0,78$. Trotzdem liegen auch hier die RPD-Werte noch bei etwa zwei und die RER-Werte bei Betrachtung des gesamten Validierdatensatzes über zehn. Im Gegensatz zur Summe der löslichen Zucker sollte im Falle der Blattstärke die erreichte Vorhersageleistung für einen Einsatz in der Qualitätskontrolle ausreichend sein.

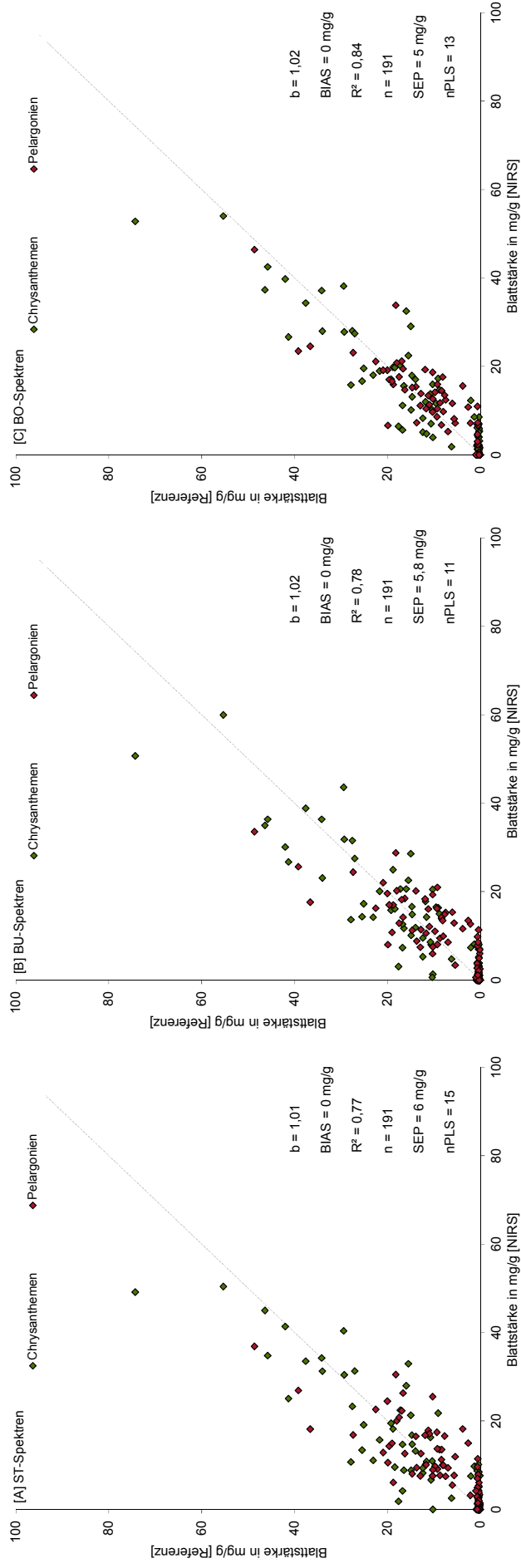


Abb. 4.20: Streudiagramme der Validierung für die besten Blattstärkemodelle unter Nutzung der [A] ST-Spektren (Modell: SNV+DT mit 15 PLS-Faktoren), [B] BU-Spektren (Modell: SNV+DT mit 11 PLS-Faktoren) und [C] BO-Spektren (Modell: MSC mit 13 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemum und Pelargonium)

Tab. 4.15: Statistische Kenngrößen der Validierung für die Blattstärke (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die ST-, BU- und BO-Spektren ohne Transformation (log 1/R) sowie bei Nutzung des für jeden Spektrentyp jeweils am besten geeigneten Datenvorbehandlungsverfahren getrennt nach Chrysanthenen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

Referenzwerte			Validierung ST-Spektren				Validierung BU-Spektren				Validierung BO-Spektren											
n	\bar{x}	s	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS		
log 1/R; nPLS = 17																						
Ch	94	11,2	14,7	74,2	6,6	0,80	2,2	11,2	1,08	0,5	5,9	0,84	2,5	12,6	1,07	0,3	5,6	0,86	2,6	13,2	1,10	-0,3
Pe	97	7,1	9,4	48,6	5,8	0,65	1,6	8,4	0,91	-1,2	5,0	0,74	1,9	9,8	0,95	-1,1	5,0	0,75	1,9	9,7	0,87	-1,2
Ch+Pe	191	9,1	12,4	74,3	6,2	0,75	2,0	12	1,03	-0,4	5,4	0,81	2,3	13,6	1,04	-0,4	5,3	0,82	2,3	14,0	1,02	-0,8
SNV+DT; nPLS = 15																						
Ch	94	11,2	14,7	74,2	6,5	0,80	2,3	11,4	1,03	0,4	6,2	0,82	2,4	12,0	1,03	0,4	5,6	0,86	2,6	13,2	1,08	-0,1
Pe	97	7,1	9,4	48,6	5,5	0,67	1,7	8,8	0,92	-0,9	5,4	0,68	1,7	9,0	0,97	-1,0	4,4	0,79	2,1	11,0	0,93	-0,8
Ch+Pe	191	9,1	12,4	74,3	6,0	0,77	2,1	12,3	1,01	-0,3	5,8	0,78	2,1	12,8	1,02	-0,3	5,0	0,84	2,5	14,7	1,02	-0,5
SNV+DT; nPLS = 11																						
log 1/R; nPLS = 14																						
log 1/R; nPLS = 16																						
MSC, nPLS = 13																						

Summe Blattzucker und -stärke (Blatt-TNC)

Für die Summe aus Zuckern und Stärke in den Blättern (TNC = Glucose + Fructose + Saccharose + Stärke) werden – ähnlich wie für die eng mit den Blatt-TNC korrelierte Blattstärke ($r = 0,95$) – die besten Ergebnisse bei der Verwendung der BO-Spektren erzielt. Die Vorhersageleistungen mit den BU- und ST-Spektren sind merklich schwächer bzw. es werden deutlich mehr PLS-Faktoren benötigt. So erreicht das beste Kalibriermodell für die BO-Spektren (SNV+DT; nPLS = 11) einen SECV von 6,7 mg/g und ein R_{cv}^2 von 0,80, während es beim besten BU-Modell (SNV, nPLS = 12) 7,5 mg/g und 0,75 sowie beim besten ST-Modell (MSC; nPLS = 16) 6,8 mg/g und 0,79 sind (Tab. 10.10 bis Tab. 10.12).

Die Unterschiede in der Leistungsfähigkeit der Vorhersagemodelle für die drei Spektrentypen bestätigen sich in der Validierung. Die besten Vorhersageleistungen werden für die BO-Spektren erzielt (SEP = 6,3 mg/g, $R^2 = 0,83$, RPD = 2,3 RER = 13,3), während sie für die BU- und ST-Spektren etwa geringer sind, wobei im Fall der ST-Spektren – wie beschrieben – auch noch fünf PLS-Faktoren mehr benötigt werden. Bei allen Modellen ist die Steigung der Regressionsgeraden $\leq 0,93$. Für das Modell mit den BO-Spektren ist der Unterschied von eins sogar hochsignifikant. Der systematische Unterschied zwischen den Referenz- und den NIRS-Werten ist dagegen bei allen Modellen vernachlässigbar klein (Tab. 4.16). Die trotz der signifikanten Abweichung der Steigung hohe Leistungsfähigkeit des Kalibriermodells zeigt sich auch darin, dass der SEP nur etwas mehr als doppelt so groß ist wie der SEL von 2,9 mg/g. Die Abb. 4.21 [A-C] zeigt die Streudiagramme der Validierung für das jeweils beste Modell je Spektrentyp. Da bei den Modellen für die BU-Spektren die Spektrenvorbehandlung nur eine äußerst geringe Verbesserung erbrachte (identische Vorhersageleistung und nur ein PLS-Faktor weniger, Tab. 4.16) werden in Abb. 4.21 [B] die Ergebnisse für das Modell mit den untransformierten $\log 1/R$ -Spektren dargestellt.

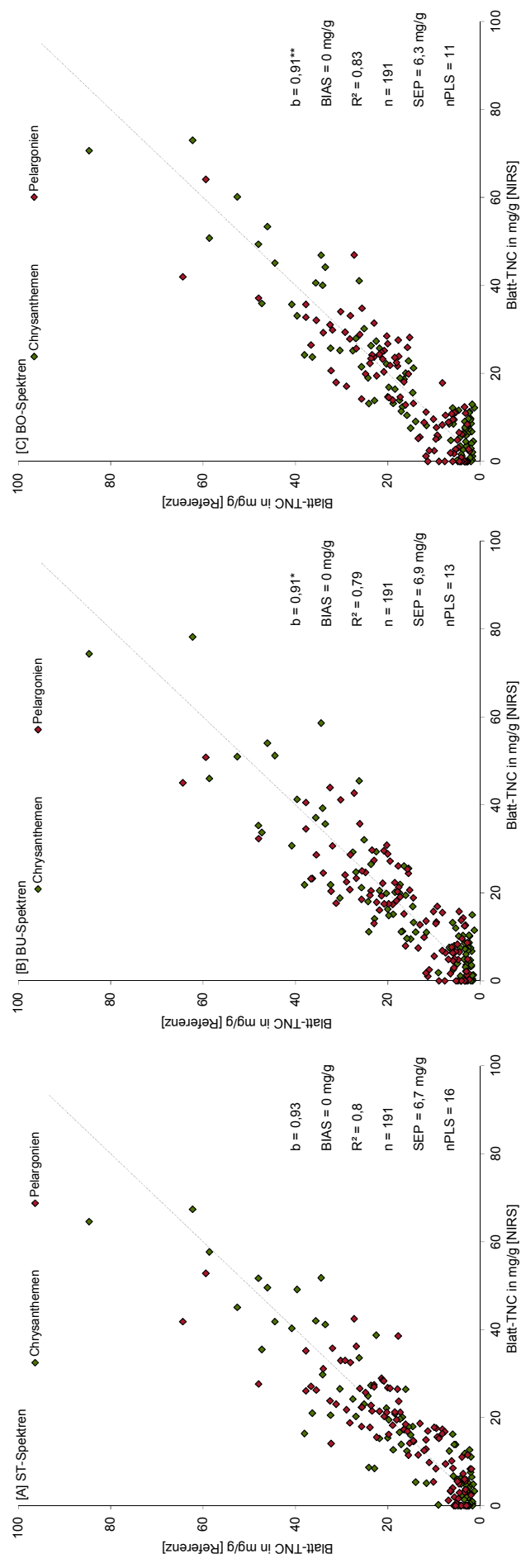


Abb. 4.2.1: Streudiagramme der Validierung für die besten Blatt-TNC-Modelle unter Nutzung der [A] ST-Spektren (Modell: MSC mit 16 PLS-Faktoren), [B] BU-Spektren (Modell: log 1/R mit 13 PLS-Faktoren) und [C] BO-Spektren (Modell: SNV+DT mit 11 PLS-Faktoren), die statistischen Kennzahlen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemem und Pelargonien)

Tab. 4.16: Statistische Kenngrößen der Validierung für die Blatt-TNC-Gehalte (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) für die ST-, BU- und BO-Spektren ohne Transformation ($\log 1/R$) sowie bei Nutzung der drei für jeden Spektrentyp am besten geeigneten Datenvorbehandlungsverfahren getrennt nach Chrysanthenen (Ch) und Pelargonien (Pe) so wie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

Referenzwerte			Validierung ST-Spektren				Validierung BU-Spektren				Validierung BO-Spektren											
n	\bar{x}	s	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS		
log 1/R; nPLS = 17																						
Ch	94	16,3	16,8	83,4	7,0	0,83	2,4	11,9	0,97	0,1	7,1	0,83	2,4	11,8	0,93	-0,4	6,2	0,87	2,7	13,5	1,06	-0,4
Pe	97	16,7	12,5	62,5	7,1	0,69	1,8	8,8	0,87	-0,2	6,8	0,72	1,8	9,2	0,88	0,3	6,7	0,75	1,9	9,3	0,81	0,1
Ch+Pe	191	16,5	14,7	83,4	7,0	0,78	2,1	11,8	0,93	0,2	6,9	0,79	2,1	12,0	0,91	-0,1	6,4	0,81	2,3	12,9	0,94	-0,1
MSC; nPLS = 16																						
Ch	94	16,3	6,1	6,1	6,7	0,84	2,5	12,4	0,94	0,3	7,5	0,81	2,2	11,1	0,90	-0,5	6,1	0,87	2,7	13,6	1,0	-0,7
Pe	97	16,7	6,4	6,4	6,7	0,72	1,9	9,3	0,92	-0,1	6,6	0,72	1,9	9,4	0,94	0,0	6,4	0,76	1,9	9,7	0,80	0,8
Ch+Pe	191	16,5	6,3	6,3	6,7	0,80	2,2	12,5	0,93	0,1	7,1	0,78	2,1	11,8	0,92	-0,3	6,3	0,83	2,3	13,3	0,91	0,1
SNV; nPLS = 12																						
SNV+DT; nPLS = 11																						
log 1/R; nPLS = 13																						

Die Betrachtung der signifikanten Wellenlängenbereiche für die Blattstärke- und Blatt-TNC-Modelle zeigt, dass bei beiden Parametern vergleichbare Wellenlängenbereiche für die Modellbildung genutzt werden (Abb. 4.22 [A+B]). So weisen die gewichteten Regressionskoeffizienten der Kalibriermodelle für die Stärke und den TNC-Gehalt bei den BO-Spektren einen Korrelationskoeffizienten von 0,97 auf. Diese Übereinstimmung ist auch auf Grund der beschriebenen engen Korrelation zwischen den beiden Parametern sowie der ähnlichen bzw. gleichen molekularen Grundstrukturen nicht verwunderlich. Im Vergleich zu den N-Fractionen wird bei diesen beiden Inhaltsstoffen ein wesentlich größerer Wellenlängenbereich für die Kalibration genutzt. Lediglich im Bereich des intensiven Wasserpeaks bei 1450 nm finden sich kaum signifikante Wellenlängen.

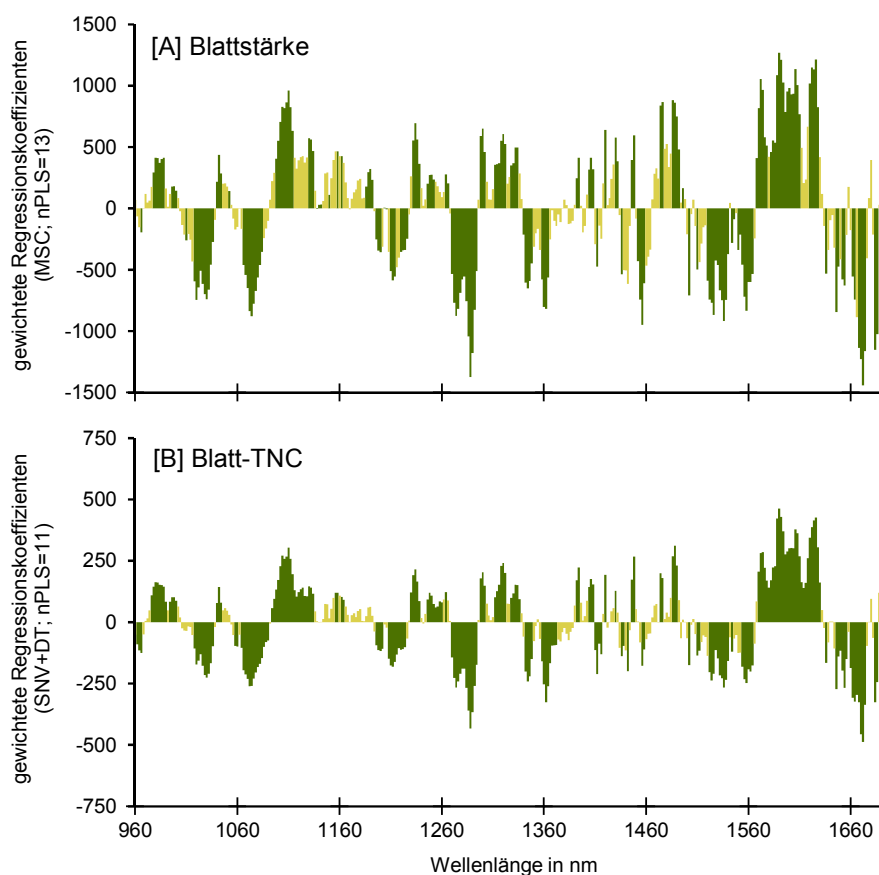


Abb. 4.22: Gewichtete Regressionskoeffizienten der Blattstärke-[A] sowie Blatt-TNC-Modelle [B], jeweils bei Verwendung der BO-Spektren (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet)

4.2.3.4 Kalibriermodelle mit transformierten Referenzwerten

Ein grundsätzliches Problem der meisten bisherigen Kalibriermodelle ist die Verteilung der Referenzwerte. Eine Grundvoraussetzung für die Berechnung von (multiplen) Regressionsanalysen und damit auch der PLS-Modelle ist die Normalverteilung der abhängigen Regressanden, in diesem Fall der Referenzwerte (Marcoulides et al., 2009; Köhler et al., 2012), wobei nach Kessler (2007) multivariate Datenanalysen auch mit nicht normalverteilten Daten *»durchaus Ergebnisse liefern, häufig sind diese aber schwerer zu interpretieren und benötigen mehr Komponenten, als dies mit normalverteilten Daten der Fall wäre«*. Zudem besteht bei nicht-normalverteilten Daten die Gefahr, dass die Aussagekraft der statistischen Parameter, insbesondere des RPD- und RER-Wertes, für deren Berechnung die Standardabweichung bzw. die Spannweite der Referenzwerte genutzt wird, verzerrt wird (Bellon-Maurel et al., 2010; Sarkhot et al., 2011).

Bei der Prüfung der verschiedenen Referenzwerte auf Normalverteilung (Anderson-Darling-Anpassungstest) zeigt sich, dass im vorliegenden Fall nur für wenige Parameter bei einer Irrtumswahrscheinlichkeit des Anderson-Darling-Anpassungstest (p_{AD}) von 0,05 eine Normalverteilung angenommen werden kann (durch Fettdruck hervorgehoben in Tab. 4.17). Bei den Stickstofffraktionen und -summenparametern sowie der Trockensubstanz kann jedoch zumindest näherungsweise von einer Normalverteilung ausgegangen werden, auch wenn in vielen Fällen die Irrtumswahrscheinlichkeit (p_{AD}) $\leq 0,05$ ist, d. h. die Hypothese der Normalverteilung abgelehnt werden muss. Aber die Werte für die Kurtosis und die Schiefe liegen zumeist relativ nahe bei null, d. h. die Verteilungen sind annähernd symmetrisch und ihre Breite entspricht in etwa der Breite einer Normalverteilung (95 % Vertrauensintervall = $\pm 2 \cdot s$). Für die Gesamtdatensätze ergeben sich durch die zumeist leicht unterschiedlichen Gehaltsniveaus der beiden Kulturen zum Teil recht breite Verteilungen mit zwei mehr oder weniger deutlich getrennten Maxima. Auf Grund der insgesamt recht geringen Abweichung der Werteverteilung von der Normalverteilung bei der Trockensubstanz sowie den Stickstofffraktionen wurde auf eine Transformation der Daten und eine Neuberechnung der Kalibriermodelle verzichtet.

Bei den Blattkohlenhydratgehalten sind die Verteilungen in der Regel deutlich rechtsschief bzw. linkssteil (Schiefe $\gg 0$) und weisen sehr schmale Maxima (Kurtosis $\gg 0$) auf. Insbesondere ersteres deutet auf eine lognormal-Verteilung der Werte hin (Limpert et al., 2001). Werden die Werte logarithmisch – Logarithmus naturalis (ln) – transformiert und erneut auf Normalverteilung geprüft, ergeben sich wesentlich weniger schiefe und steile Verteilungen und die A^2 -Werte sind deutlich kleiner. Allerdings muss die Normalverteilung in den meisten Fällen weiterhin abgelehnt werden. Die Kenndaten der Wahrscheinlichkeitsverteilungen für die untransformierten und transformierten Blattkohlenhydratgehalte sind in Tab. 4.18 zusammengestellt.

Tab. 4.17: Kenngrößen der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Trockensubstanz sowie der N-Fractionen im gesamten Chrysanthemen- und Pelargonien Datensatz (A^2 = Testgröße des Anderson-Darling-Test, p_{AD} = Irrtumswahrscheinlichkeit des Anderson-Darling-Tests)

	n	\bar{x}	s	Schiefe	Kurtosis	A²	p_{AD}
TS [mg/g]							
Ch	258	121	18	0,52	0,48	1,11	0,006
Pe	206	133	16	-0,28	1,85	0,63	0,10
Ch+Pe	464	128	18	0,01	0,39	0,32	0,52
Amid-N [mg/g]							
Ch	193	1,1	0,60	1,07	1,31	3,47	<0,005
Pe	197	1,8	0,86	0,31	0,07	0,29	0,62
Ch+Pe	390	1,4	0,83	0,75	0,31	4,23	<0,005
Nitrat-N [mg/g]							
Ch	193	3,1	1,53	0,40	0,39	0,56	0,15
Pe	197	0,8	0,47	0,36	-0,57	1,09	0,007
Ch+Pe	390	1,9	1,64	1,04	0,55	13,14	<0,005
Amino-N [mg/g]							
Ch	193	8,9	3,05	-0,15	-0,10	0,74	0,052
Pe	197	6,4	1,77	-0,53	-0,07	1,38	<0,005
Ch+Pe	390	7,7	2,78	0,37	0,27	1,44	<0,005
Protein-N [mg/g]							
Ch	193	31,0	3,72	-0,58	0,77	1,45	<0,005
Pe	197	22,1	4,03	-0,11	0,07	0,94	0,017
Ch+Pe	390	26,5	5,90	-0,16	-0,74	2,84	<0,005
Gesamt-N [mg/g]							
Ch	193	43,4	6,90	-1,20	1,22	5,38	<0,005
Pe	197	30,6	5,66	-0,70	0,68	3,21	<0,005
Ch+Pe	390	69,9	9,01	-0,1	-0,64	3,12	<0,005
eoNF [mg/g]							
Ch	193	10,0	3,56	0,01	-0,13	0,42	0,264
Pe	197	8,2	2,50	-0,33	-0,33	0,88	0,023
Ch+Pe	390	9,1	3,19	0,19	0,22	0,88	0,025
eNF [mg/g]							
Ch	193	13,1	4,35	-0,53	0,30	2,88	<0,005
Pe	197	9,0	2,75	-0,43	-0,30	1,33	<0,005
Ch+Pe	390	11,1	4,18	0,13	-0,12	0,54	0,167
oNF [mg/g]							
Ch	193	41,0	5,99	-1,04	12,3	4,61	<0,005
Pe	197	30,3	5,53	-0,80	0,64	3,25	<0,005
Ch+Pe	390	35,6	7,84	-0,27	-0,38	1,76	<0,005

Tab. 4.18: Kenngrößen der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Blattkohlenhydratfraktionen im gesamten Datensatz (Chrysanthemem und Pelargonien) vor und nach einer logarithmischen Transformation ($A^2 = \text{Testgröße des Anderson-Darling-Test}$, $p_{AD} = \text{Irrtumswahrscheinlichkeit des Anderson-Darling-Tests}$)

	Originaldaten					ln-transformierte Daten					
	n	\bar{x}	s	Schiefe	Kurtosis	A^2	p_{AD}	Schiefe	Kurtosis	A^2	p_{AD}
Blattglucose [mg/g]											
Ch	189	2,3	1,96	2,54	9,21	10,1	<0,005	0,33	0,24	0,52	0,188
Pe	197	1,7	2,73	6,05	51,4	25,8	<0,005	-0,30	0,01	1,36	<0,005
Ch+Pe	386	2,0	2,39	5,02	43,0	32,7	<0,005	-0,06	-0,11	0,58	0,132
Blattfructose [mg/g]											
Ch	189	1,0	1,23	3,25	13,3	19,2	<0,005	-0,03	0,20	0,31	0,562
Pe	197	2,5	1,61	0,79	0,65	18,0	<0,005	-1,00	0,41	5,13	<0,005
Ch+Pe	386	1,7	1,62	1,37	1,87	16,0	<0,005	-0,44	-0,41	3,12	<0,005
Blattsaccharose [mg/g]											
Ch	189	2,9	1,87	0,80	0,61	1,74	<0,005	-1,82	8,10	2,60	<0,005
Pe	197	5,1	3,12	1,21	4,11	2,11	<0,005	-0,62	0,23	2,96	<0,005
Ch+Pe	386	4,0	2,81	1,41	4,71	6,10	<0,005	-1,28	5,24	2,90	<0,005
Blatt-TSS [mg/g]											
Ch	189	5,6	4,30	2,68	11,6	8,86	<0,005	-0,05	-0,03	0,93	0,018
Pe	197	9,9	5,73	1,67	6,99	3,31	<0,005	-0,77	0,34	6,09	<0,005
Ch+Pe	386	7,8	5,49	1,85	6,78	8,40	<0,005	-0,33	-0,39	2,74	<0,005
Blattstärke [mg/g]											
Ch	189	10,8	14,7	2,07	6,39	15,0	<0,005	0,06	-1,67	12,2	<0,005
Pe	197	6,8	9,14	1,84	3,69	16,2	<0,005	0,11	-1,62	10,0	<0,005
Ch+Pe	386	8,87	12,3	2,29	8,25	32,6	<0,005	0,10	-1,61	21,2	<0,005
Blatt-TNC [mg/g]											
Ch	189	16,4	17,4	1,78	4,49	10,6	<0,005	0,04	-1,38	5,44	<0,005
Pe	197	16,7	12,4	1,05	1,32	3,87	<0,005	-0,41	-0,88	3,52	<0,005
Ch+Pe	386	16,5	15,0	1,62	4,44	13,3	<0,005	-0,22	1,15	7,91	<0,005

Eine Besonderheit ergibt sich bei den Stärke- und den TNC-Gehalten. Hier weisen die Verteilungen der Originaldaten jeweils zwei übereinander liegende lognormal-Verteilungen auf, die aber – anders als bei den Stickstofffraktionen – nicht von unterschiedlichen Gehaltsniveaus der beiden Gattungen verursacht werden. Bei den Blattstärke- bzw. -kohlenhydratgehalten wird das Maximum der ersten Verteilung jeweils von Chrysanthemen- und Pelargonienproben aus den Jungpflanzenbetrieben gebildet (grün dargestellt in Abb. 4.23), die auf Grund der Transportphase überwiegend eine starke Verarmung an Blattkohlenhydraten durch Veratmungs- und Verlagerungsprozesse aufweisen (Druege, 2009; Klotek et al., 2010). Das zweite Maximum bilden die (nicht transportierten bzw. gelagerten) Proben aus den Mutterpflanzenbeständen an der HSWT (rot dargestellt in Abb. 4.23).

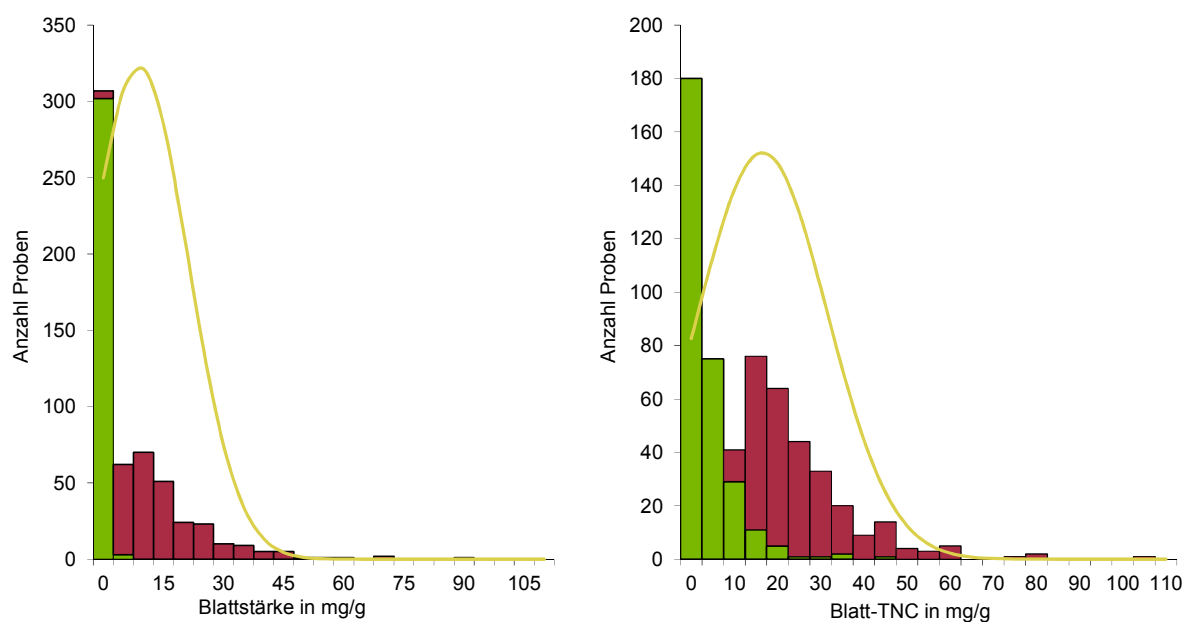


Abb. 4.23: Häufigkeitsverteilung der Blattstärke- (links) und Blatt-TNC-Gehalte (rechts) aller Pelargonien- und Chrysanthemenproben ($n = 572$, Proben der Jungpflanzenbetriebe in grün, Proben der HSWT in rot); die Linie markiert die Anpassung der Normalverteilung

Durch die Logarithmierung der Daten kommt es zu einer deutlichen Trennung der beiden Verteilungen (Abb. 4.24). Im Folgenden wurden für die ln-transformierten Blattkohlenhydratgehalten neue Kalibriermodelle unter Verwendung der BO-Spektren erstellt, wobei bei den Blattstärke- und den Blatt-TNC-Gehalten sowohl Modelle für den gesamten Datensatz als auch für die beiden Untergruppen getrennt berechnet wurden. Die Trennung der beiden Untergruppen erfolgte mittels eines iterativen Maximum-Likelihood (ML)-Verfahrens (Day, 1969; Hosmer, 1973; Vlassis et al., 1999). Als Trennkriterium für die beiden Untergruppen (UG I und UG II) wurde der Schnittpunkt der beiden geschätzten Wahrscheinlichkeitsfunktionen (P I und P II) herangezogen. Die Abb. 4.24 zeigt die Häufigkeitsverteilung der ln-transformierten Werte sowie die drei mittels ML geschätzten Dichtefunktionen für den gesamten Datensatz (P I+II) bzw. die beiden Untergruppen (P I und P II). Für die nach diesem Verfahren getrennten Datensätze kann in allen Fällen von einer Normalverteilung der Werte ausgegangen werden ($p_{AD} \geq 0,07$).

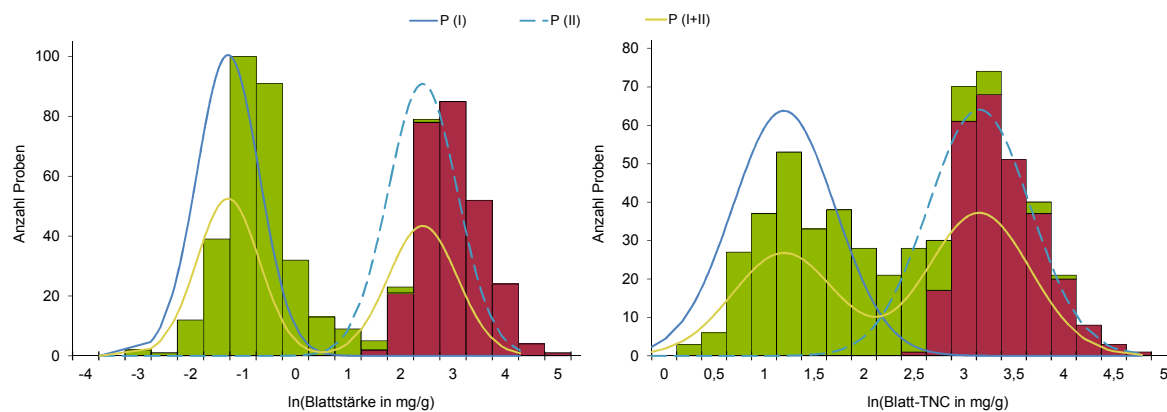


Abb. 4.24: Häufigkeitsverteilung der ln-transformierten Blattstärke- (links) und Blatt-TNC-Gehalte (rechts) aller Pelargonien- und Chrysanthemenproben (n = 572; Proben der Jungpflanzenbetriebe in grün, Proben der HSWT in rot); die Linien markieren die Anpassung der Normalverteilung für den gesamten Datensatz (P(I+II)) sowie die zwei mittels des ML-Verfahrens getrennten Untergruppen (P(I) und P(II))

Bei den drei Einzelzuckern – Fructose, Glucose und Saccharose – wird auch durch die Nutzung der logarithmisch transformierten Daten keine ausreichende Genauigkeit erreicht (Tab. 10.13). Aus den rücktransformierten Werten errechnen sich für alle Einzelzucker Bestimmtheitsmaße (R_{cv}^2) unter 0,3 und SECV von über 2 mg/g bei Medianen von 1,4, 1,1 bzw. 3,3 mg/g. Für die Summe der löslichen Zucker ist – wie bei der Verwendung des Datensatzes ohne logarithmische Transformation (Tab. 10.12) – auf Basis der rücktransformierten TSS-Gehalte allenfalls eine grobe Unterscheidung in zwei Klassen mit sehr geringen bzw. sehr hohen Zuckergehalten möglich (Tab. 4.19).

Tab. 4.19: Statistische Kenngrößen der Validierung für den rücktransformierten Blatt-TSS-Gehalt (\bar{x} , s, R, SEP, BIAS in mg/g) getrennt nach Chrysanthemen (Ch) und Pelargonien (Pe) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Ch+Pe)

	Referenzwerte				Validierung					
	n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS
SNV+DT; nPLS = 9										
Ch	94	5,1	3,1	16,5	3,0	0,38	1,0	5,4	0,51	-0,3
Pe	97	9,6	5,3	32,5	4,5	0,37	1,2	7,2	0,75	1,2
Ch+Pe	191	7,4	4,9	32,9	3,8	0,44	1,3	8,6	0,76	0,5

Sowohl bei der Blattstärke als auch bei den Blatt-TNC-Gehalten ergibt sich bei den Modellen für den gesamten Datensatz eine deutliche Zweiteilung. Während bei der Untergruppe mit den geringeren Blattstärke- und Blatt-TNC-Gehalten (UG I) keine Differenzierung möglich ist, ist dies bei der Untergruppe mit den höheren Gehalten (UG II) der Fall. Allerdings ist auch die Vorhersageleistung bei der UG II nicht zufriedenstellend, so werden insbesondere die Proben mit den höchsten Gehalten um mehrere Zehnerpotenzen überschätzt, daher erfolgt die Darstellung der Validierungen in Abb. 4.25 [A+B] aus Gründen der Übersichtlichkeit auf Basis der logarithmierten Werte.

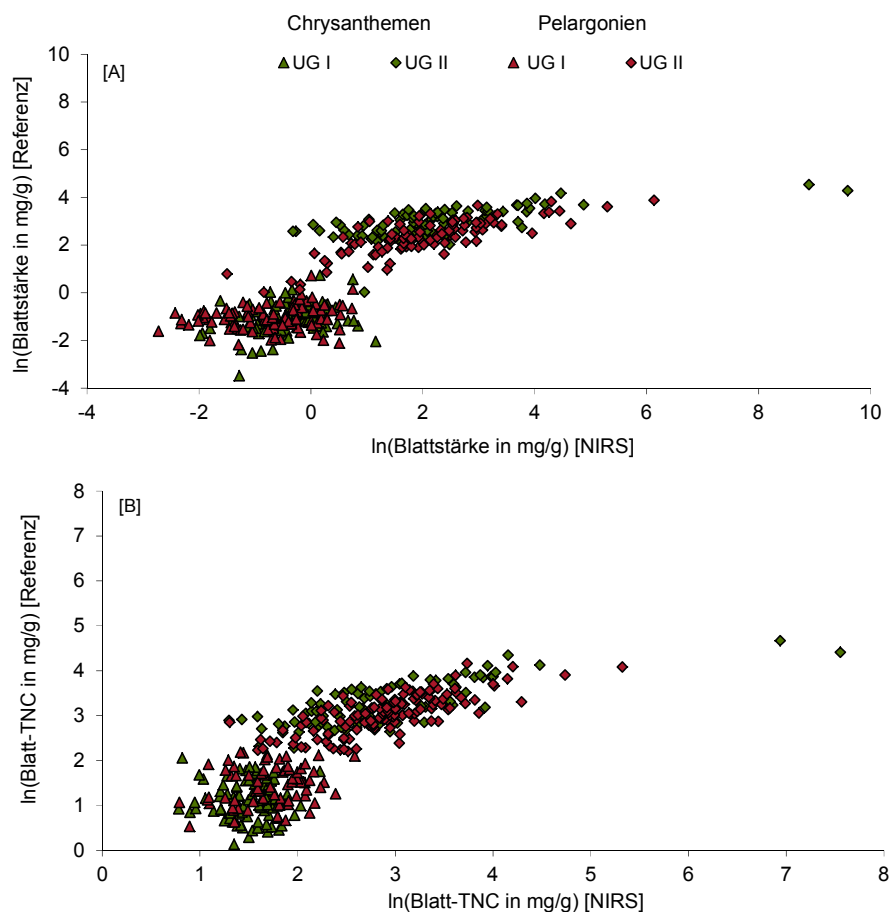


Abb. 4.25: Streudiagramme der Validierung für die [A] Blattstärke- und [B] Blatt-TNC-Gehalte bei Nutzung der ln-transformierten Werte

Auch bei getrennter Betrachtung wird für die UG I keine zufriedenstellende Vorhersageleistung erzielt. Die Bestimmtheitsmaße liegen für die Stärkemodelle unter 0,05 und für die TNC-Modelle unter 0,2. Bei den Modellen für die Untergruppe mit hohen Blattkohlenhydratgehalten werden dagegen sowohl für die Blattstärkegehalte (SEP = 7,4 mg/g; RPD = 1,7; RER = 9,3) als auch die Blatt-TNC-Gehalte (SEP = 6,6 mg/g; RPD = 2,0; RER = 11,5) gute Vorhersageleistungen erzielt. Diese sind aber geringfügig schwächer als die Vorhersageleistungen der Modelle für den gesamten Datensatz unter Nutzung der untransformierten Daten (siehe Tab. 4.15 und Tab. 4.16). Die Abb. 4.26 [A und B] zeigt die Streudiagramme der jeweils besten Modelle für die Validierung mit den rücktransformierten Werten. Sowohl bei der Stärke als auch bei den Blatt-TNC-Gehalten sind vor allem bei Proben mit sehr hohen Gehalten zum Teil erhebliche Abweichungen zu erkennen, während Proben mit niedrigen bis mittleren Gehalten in der Regel sehr gut prognostiziert werden.

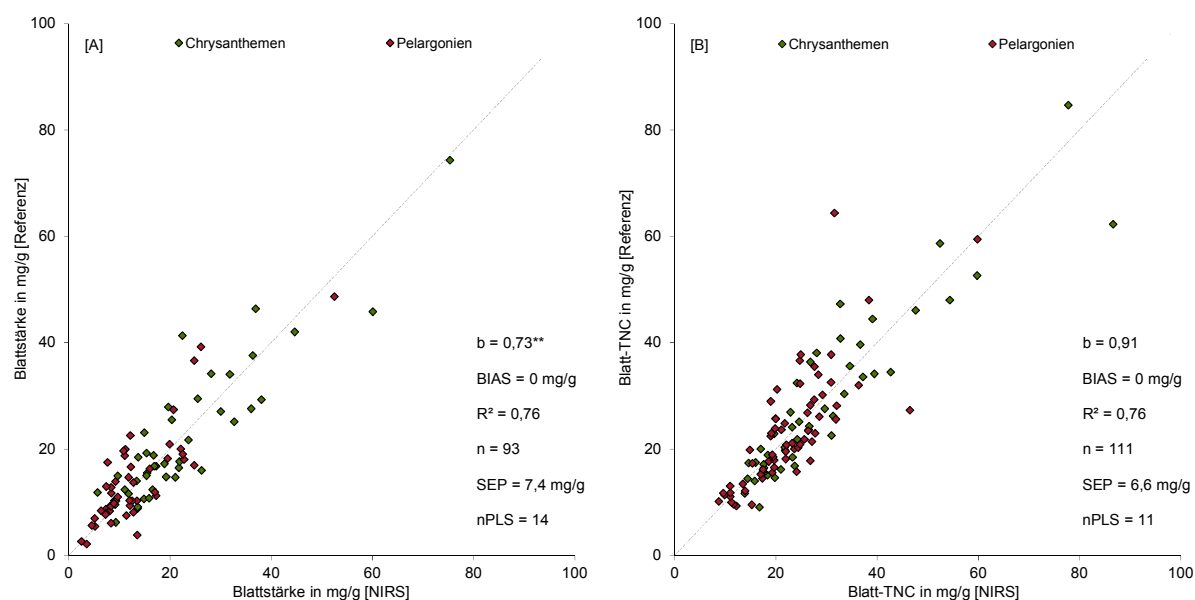


Abb. 4.26: Streudiagramme der Validierung der Proben der UG II für die [A] Blattstärke- (Modell: log 1/R mit 14 PLS-Faktoren) und [B] Blatt-TNC-Gehalte (Modell: SNV+DT mit 11 PLS-Faktoren); die statistischen Kennzahlen (b , BIAS, R^2 , SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

4.2.4 Robustheit der Kalibriermodelle

Die Robustheit der Kalibriermodelle wurde für die TS-, Protein-N-, Gesamt-N-, eNF- und oNF-Gehalte mit den Spektren der ganzen Stecklinge und für die Blattstärke- sowie Blatt-TNC-Gehalte mit den BO-Spektren geprüft. Hierfür wurden die in Tab. 4.20 aufgeführten Modelle, die in den vorangegangenen Abschnitten validiert wurden, genutzt.

Tab. 4.20: Kenngrößen der für die Prüfung der Robustheit genutzten Kalibriermodelle

Parameter	Datenvor- behandlung	Anzahl PLS- Faktoren	SEP [mg/g]	RPD	RER
Trockensubstanz	SNV	6	7	2,3	11,2
Protein-N	SNV+DT	14	2,0	2,9	12,8
Gesamt-N	MSC	15	3,3	2,7	12,8
eNF	OBC+NM	11	2,5	1,7	7,8
oNF	SNV+DT	12	3,3	2,4	11,0
Blattstärke	MSC	13	5,0	2,5	14,7
Blatt-TNC	SNV+DT	11	6,3	2,3	13,3

Die Ergebnisse sind im Folgenden zumeist in der gleichen Art und Weise dargestellt: Die grüne Säule markiert den SEP für den jeweiligen Termin, die Sorte bzw. den Lieferanten, die rote Säule stellt den systematischen Fehler ($BIAS = \bar{x}_{Referenz} - \bar{x}_{NIRS}$) dar und die blaue Säule kennzeichnet den SEP(C), den um den systematischen Fehler korrigierten SEP:

$$SEP(C) = \sqrt{SEP^2 - BIAS^2} \quad (\text{Næs et al., 2004}).$$

Zusätzlich ist der in der Basiskalibration erreichte SEP als gestrichelte, vertikale Linie eingezeichnet. Die Sortierung erfolgt bei den Terminen chronologisch ohne Berücksichtigung, ob zu diesem Termin Chrysanthemen- oder Pelargonienproben gemessen wurden. Die Kultur sowie die Anzahl Proben zum jeweiligen Termin sind angegeben. Bei den Darstellungen für die Sorten sind nur Sortennummern angegeben, die Zuordnung zu den Sortennamen bzw. bei den Pelargonien zusätzlich zu den Lieferanten findet sich in Tab. 10.1.

4.2.4.1 Robustheit über die Zeit

Bei der Trockensubstanz liegen die SEP für fast alle Termine im Bereich des SEP von 7 mg/g, der für die Basiskalibration erreicht wurde. Lediglich zu sechs der insgesamt 34 Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; 2009-51, 2010-51, 2011-02, 2011-12, 2011-51 und 2012-12) sind die SEP größer als 10 mg/g und damit deutlich größer als der SEP der Basiskalibrierung (Abb. 4.27). Beim ersten und vorletzten der genannten sechs Termine liegt jeweils ein deutlicher systematischer Fehler von -7 bzw. +13 mg/g vor, dementsprechend sind die SEP(C) mit 7 bzw. 11 mg/g nicht mehr übermäßig groß. Dagegen sind die systematischen Abweichungen zu den vier weiteren Terminen, im Vergleich zu den zufälligen Fehlern zu vernachlässigen. Bei genauer Betrachtung der verbleibenden vier Termine fällt allerdings auf, dass zumeist

einzelne Proben sehr große Abweichungen aufweisen, während bei einem Großteil der Proben die Abweichungen klein sind. So gibt es beim Termin in KW 2011-02 drei Proben mit Abweichungen über 30 mg/g und fünf weitere mit Abweichungen zwischen 10 und 16 mg/g. Die übrigen 23 Proben werden dagegen sehr genau bestimmt. Ähnlich ist es beim Termin in KW 2012-12, hier fallen zwei der zwölf Proben durch Abweichungen über 15 mg/g auf. Der größere SEP bei der Messung in KW 2010-51 wird ausschließlich von den Stecklingen der Fa. Endisch verursacht, die einen Tag nach den Stecklingen von der HSWT gemessen wurden, die mit einer sehr guten Genauigkeit bestimmt wurden.

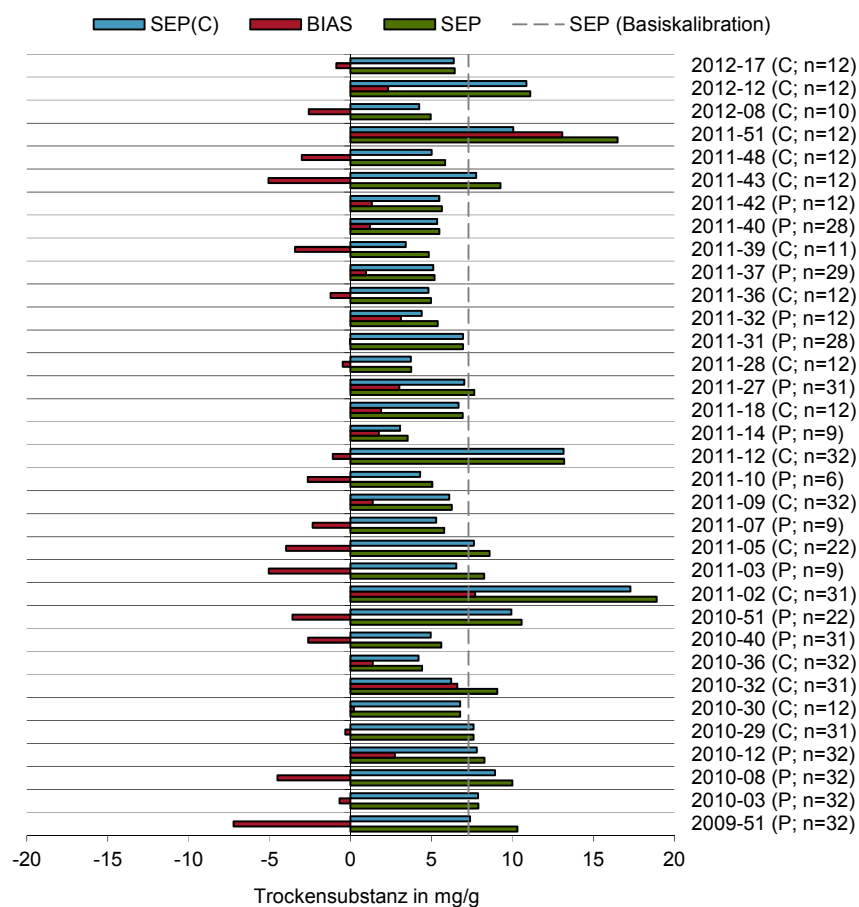


Abb. 4.27: SEP, BIAS und SEP(C) der Trockensubstanz bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV, nPLS = 6

Beim Protein-N fallen zehn Termine mit SEP auf, die mehr als doppelt so groß wie der SEP der Basiskalibration von 2 mg/g sind (Abb. 4.28 [A]). Allerdings ist bei all diesen Terminen auch der BIAS sehr groß. Dementsprechend ist der SEP(C) mit Ausnahme der beiden Termine in KW 2010-08 und 2010-51 vergleichbar groß wie der SEP der Basiskalibration. Zudem fällt die Häufung der Termine mit größeren Abweichungen zu Beginn des Untersuchungszeitraums auf. Bei sieben der ersten neun Messtermine ist der SEP größer als 4,0 mg/g, während dies bei den restlichen 23 Terminen nur noch dreimal der Fall ist. Eine Besonderheit tritt beim Termin in KW 2010-08 auf. Bei allen Pelargonienproben aus der Lieferung der Fa. Dümmer werden Protein-N-Gehalte von 35 bis 40 mg/g geschätzt, während die tatsächlichen Gehalte zwischen 18 und 20 mg/g liegen. Für die übrigen zu diesem Termin gemessenen Proben von der HSWT und der Fa. Endisch ergibt sich nur noch ein SEP von 3,4 mg/g. Eine solche systematische Aufspaltung der Proben war zu keinem weiteren Termin zu beobachten. Die für den Protein-N beschriebenen Ergebnisse gelten in vergleichbarer Weise auch für den Gesamt-N, der in Abb. 4.28 [B] dargestellt ist.

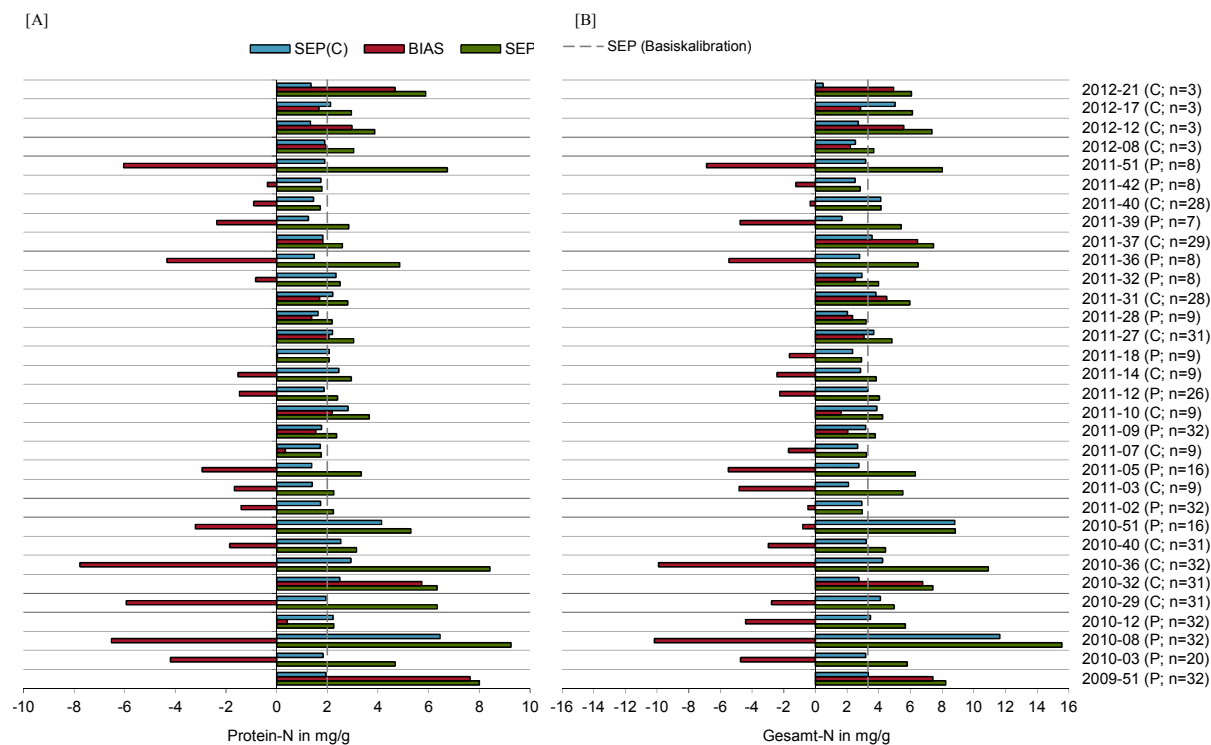


Abb. 4.28: SEP, BIAS und SEP(C) der [A] Protein-N- und [B] Gesamt-N-Gehalte bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz, sowie der SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparameter SNV+DT, nPLS = 14 beim Protein-N und MSC, nPLS = 15 beim Gesamt-N

Beim eNF (Abb. 4.29 [A]) fällt nur der Messtermin in KW 2011-03 mit einer großen systematischen Abweichung von -5,6 mg/g und einem SEP von 6,2 mg/g auf, während zu allen übrigen Terminen die systematischen Abweichungen deutlich kleiner sind ($BIAS < |3|$ mg/g) und die SEP weniger als das zweifache des Standardfehlers der Basiskalibrierung ($SEP = 4,2$ mg/g) betragen. Eine zusätzliche Berechnung ergab für den Termin 2011-03 ebenfalls große systematische Abweichungen beim Amid- und Amino-N, während, wie in Abb. 4.28 [A] gezeigt, beim Protein-N der BIAS und auch der SEP zu diesem Messtermin nicht auffällig groß sind. Bei den oNF (Abb. 4.29 [B]) und mit Abstrichen auch beim Gesamt-N (Abb. 4.28 [B]) ist zu diesem Termin allerdings ebenfalls ein größerer systematischer Fehler zu beobachten. Bei den oNF fallen ansonsten dieselben Termine wie beim Protein-N mit größeren Abweichungen auf. Zwischen den SEP, SEP(C) und BIAS der organischen N-Fractionen und des Protein-N für die einzelnen Termine ergeben sich Korrelationskoeffizienten $\geq 0,84$.

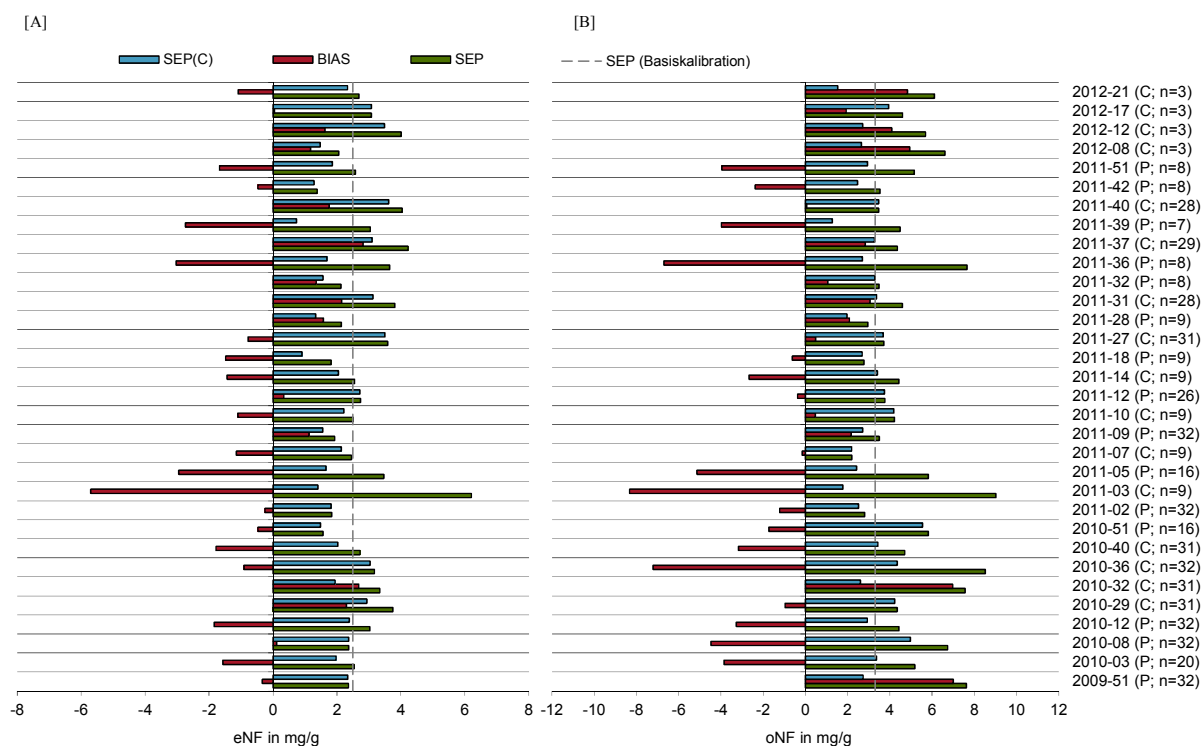


Abb. 4.29: SEP, BIAS und SEP(C) der [A] eNF- und [B] oNF-Gehalte bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz, sowie SEP der Basiskalibriermodelle mit den Modellparameter OBC+NM, nPLS = 11 bei den eNF und SNV+DT, nPLS =12 bei den oNF

Bei der Blattstärke und dem Blatt-TNC-Gehalt sind die Ergebnisse fast identisch, so dass nur letztere grafisch dargestellt (Abb. 4.30) und erläutert werden. In KW 2010-12 werden bei fast sämtlichen Proben negative TNC-Gehalte prognostiziert. Da negative Werte bei der Auswertung gleich null gesetzt wurden, reduziert die systematische Abweichung den SEP(C) nicht deutlicher. Beim Termin in KW 2010-51 wurden – wie bei der Trockensubstanz bereits beschrieben – die Messungen an zwei aufeinanderfolgenden Tagen durchgeführt. Aber im Gegensatz zur TS ist bei der Blatt-TNC-Bestimmung bei den Stecklingen der HSWT (1. Messtag) ein erheblicher BIAS (13 bis 24 mg/g) zu beobachten, während die Stecklinge der Fa. Endisch (2. Messtag) mit einer guten Genauigkeit (SEP = 7,2 mg/g) bestimmt werden. Die recht großen systematischen Abweichungen in KW 2011-10 und KW 2011-14 werden von einzelnen Proben mit hohen bis sehr hohen Blatt-TNC-Gehalten verursacht. Zu diesen Terminen wurden unter anderem die Proben mit dem höchsten sowie dem zweit- und vierthöchsten Blatt-TNC-Gehalt im Datensatz (107, 85 und 77 mg/g) gemessen und alle drei werden um mehr als 20 mg/g unterschätzt. Proben mit geringeren Gehalten weisen dagegen zu beiden Terminen nur geringe Abweichungen auf.

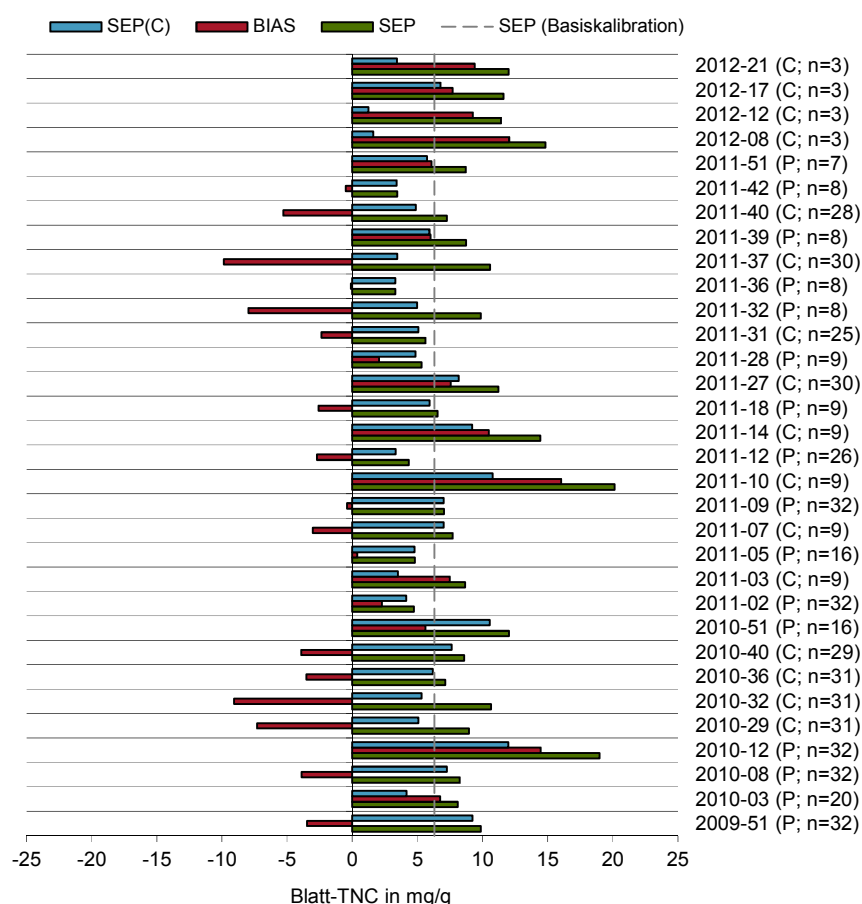


Abb. 4.30: SEP, BIAS und SEP(C) des Blatt-TNC-Gehalts bei Nutzung der einzelnen Messtermine (Jahr-Kalenderwoche; C = Chrysanthemen, P = Pelargonien, n = Anzahl Proben zum jeweiligen Messtermin) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV+DT, nPLS = 11

4.2.4.2 Robustheit gegenüber Sorteneinflüssen

Die Kalibriermodelle für alle Inhaltsstoffe sind sehr robust gegenüber Sorteneinflüssen. Bei der TS ist der SEP nur bei einer Pelargoniensorte (P-18; 'Atlantic Blue', Fa. Dümmer) größer als 10 mg/g, wobei die größeren Abweichungen in wesentlichen von zwei der acht Proben verursacht werden (Abb. 4.31).

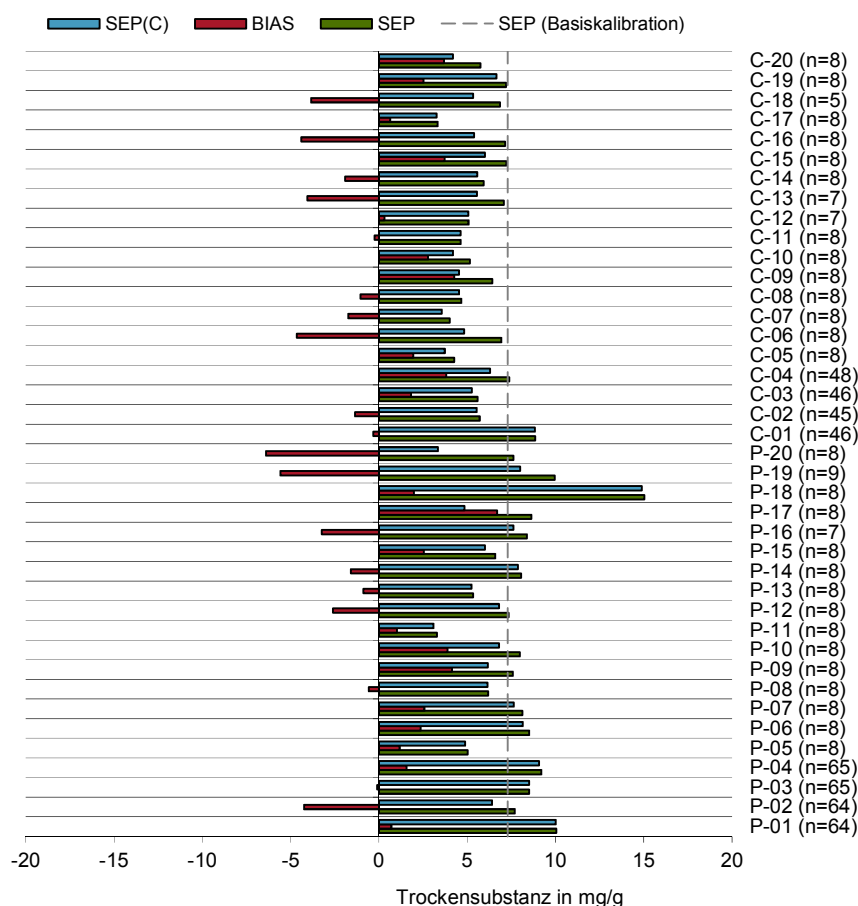


Abb. 4.31: SEP, BIAS und SEP(C) der Trockensubstanz bei Nutzung der einzelnen Sorten (Sortenzuordnung siehe Tab. 10.1, n = Anzahl Proben je Sorte) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV, nPLS = 6

Beim Protein-N, der Summe der organischen N-Fractionen (oNF) und dem Gesamt-N sind die Ergebnisse insgesamt vergleichbar. Hier fallen einzelne Sorten zwar mit etwas größeren Abweichungen auf, diese werden, wie Abb. 4.32 [A-C] zeigt, jedoch nur von einzelnen Proben verursacht. Für einen Großteil der Messungen sind die Abweichungen zwischen Referenz- und NIRS-Werten geringer als die SEP der Basismodelle. Nur sieben (C-05, C-07, C-08, C-09, C-17, P-06 und P-13) der insgesamt 40 Sorten fallen durch systematische Abweichungen auf. Für diese Sorten ist der Median der Differenzen zwischen Referenz- und NIRS-Werten bei den Protein-N-, den oNF- und/oder den Gesamt-N-Gehalten größer als der SEP der Basiskalibriermodelle für den jeweiligen Parameter (gekennzeichnet durch die gestrichelten Linien in Abb. 4.32 [A-C]).

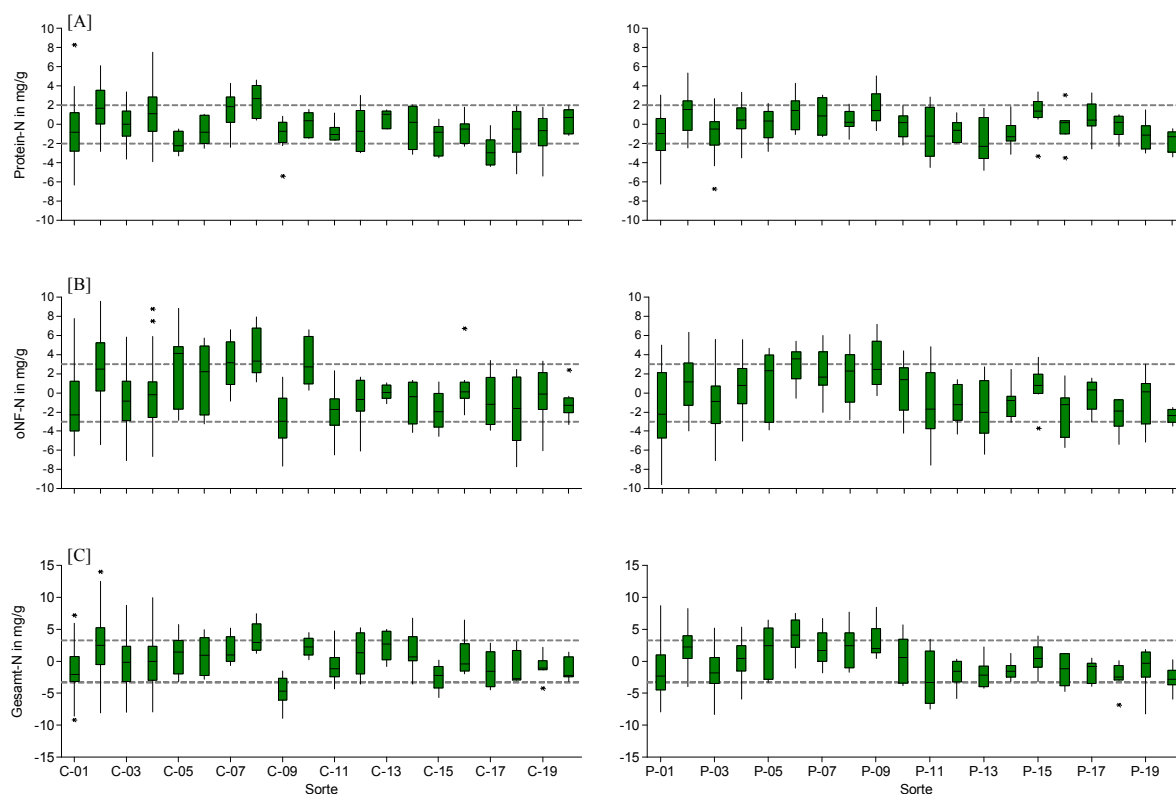


Abb. 4.32: Boxplot der Differenzen zwischen Referenz- und NIRS-Wert bei Nutzung der Sorten als Validierdatensatz für die [A] Protein-N-, [B] oNF- und [C] Gesamt-N-Gehalte für die Chrysanthemensorten (links) und die Pelargonisorten (rechts), die gestrichelten Linien markieren die Beträge der SEP der Basiskalibriermodelle für jeden Parameter

Bei den extrahierbaren N-Fractionen (eNF) fällt lediglich ein Ausreißer mit einem sehr hohen SEP von 5,9 mg/g auf (Abb. 4.33), dabei handelt es sich um die Sorte C-05. Der erhöhte Fehler bei dieser Sorte wird dabei nicht von einzelnen Proben verursacht, vielmehr ist bei sechs der acht Proben die Differenz zwischen dem Referenz- und dem NIRS-Wert größer als der SEP des Basismodells von 2,5 mg/g. Die Abweichungen für alle übrigen Chrysanthemen- und Pelargonisorten liegen im Bereich dessen, was auf Grund der Vorhersageleistung der Basiskalibration zu erwarten war. Ein systematischer Fehler ist weder bei den Chrysanthemen noch bei den Pelargonien zu beobachten.

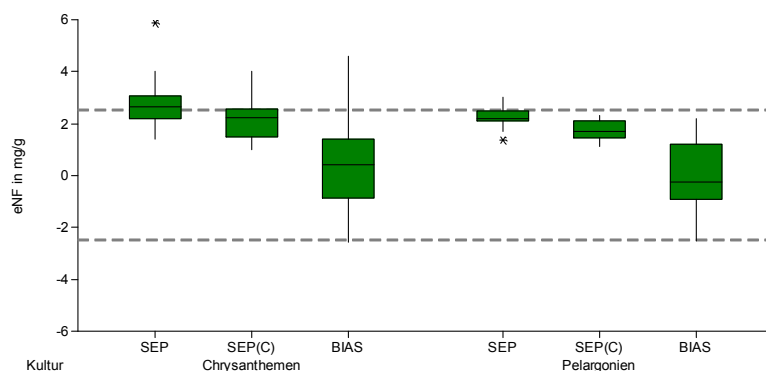


Abb. 4.33: Boxplot für den SEP, SEP(C) und BIAS bei Nutzung der Sorten als Validierdatensätze für den eNF für die Chrysanthemen- (links) und Pelargonisorten (rechts), die gestrichelten Linien markieren den SEP des Basiskalibriermodells für den gesamten Datensatz (Chrysanthemen und Pelargonien)

Ähnlich wie bereits beim Termineinfluss beschrieben, sind die Ergebnisse bei den Blattstärke- und Blatt-TNC-Gehalten sehr ähnlich, so dass wiederum nur letztere dargestellt werden (Abb. 4.34). Die größeren Abweichungen bei den Chrysanthemensorten C-01 bis C-04 sind auf die systematische Unterschätzung der Proben mit hohen bis sehr hohen Gehalten zurückzuführen. Bei den nur von den Jungpflanzenbetrieben gelieferten Sorten mit den größten Abweichungen (C-10, C-14 sowie P-11 und P-12) zeigen nur einzelne Proben größere Abweichungen, während die Mehrzahl mit einer guten Genauigkeit bestimmt wird.

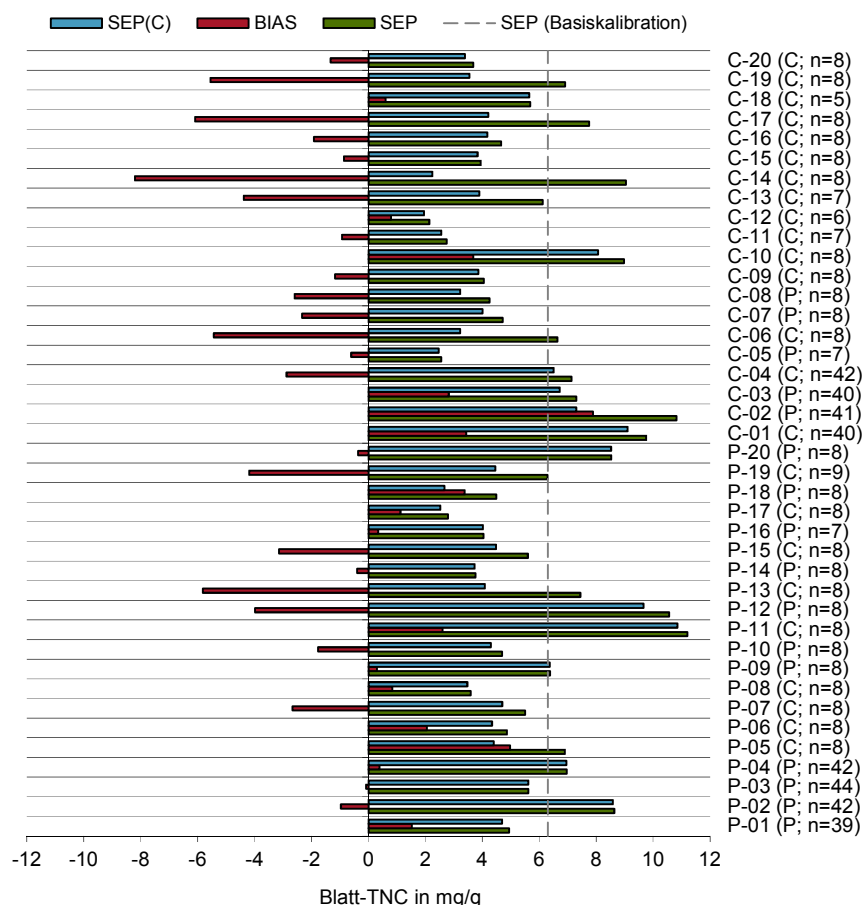


Abb. 4.34: SEP, BIAS und SEP(C) des Blatt-TNC-Gehalts bei Nutzung der einzelnen Sorten (Sortenzuordnung siehe Tab. 10.1, n = Anzahl Proben je Sorte) als Validierdatensatz sowie SEP des Basiskalibriermodells mit den Modellparametern SNV+DT, nPLS = 11

4.2.4.3 Robustheit gegenüber der Herkunft

Bei den Chrysanthemen (Kientzler/Costa Rica) zeigen sich für den TS-Gehalt sowie die N-Fractionen keine wesentlichen Auffälligkeiten. Die Abweichungen, die auch nicht systematisch sind, sind jeweils nur leicht größer als der SEP der Basiskalibration. Lediglich bei der Blattstärke und den Blatt-TNC-Gehalten sind die mittels NIRS prognostizierten Werte systematisch etwas höher als die Referenzwerte. Allerdings waren die Blatt-TNC-Gehalte dieser Stecklinge auch äußerst gering (bei über 80 % der Proben waren die Gehalte < 5 mg/g). Ein gemischtes Bild ergibt sich bei den Pelargonienproben. So ist der SEP für die Trockensubstanz für die Proben der Fa. Endisch deutlich größer als der SEP des Basiskalibriermodells,

während die Proben der Fa. Dümmen diesbezüglich keine Auffälligkeiten zeigen. Umgekehrt sind die SEP für die N-Fractionen sowie die Blattstärke- und die Blatt-TNC-Gehalte bei den Proben der Fa. Endisch vergleichbar wie die SEP der Basiskalibriermodelle, während die Proben von der Fa. Dümmen sowohl beim Protein-N, als auch bei der Summe der organischen N-Fractionen (oNF) und beim Gesamt-N hohe nicht systematische Abweichungen zeigen (Abb. 4.35).

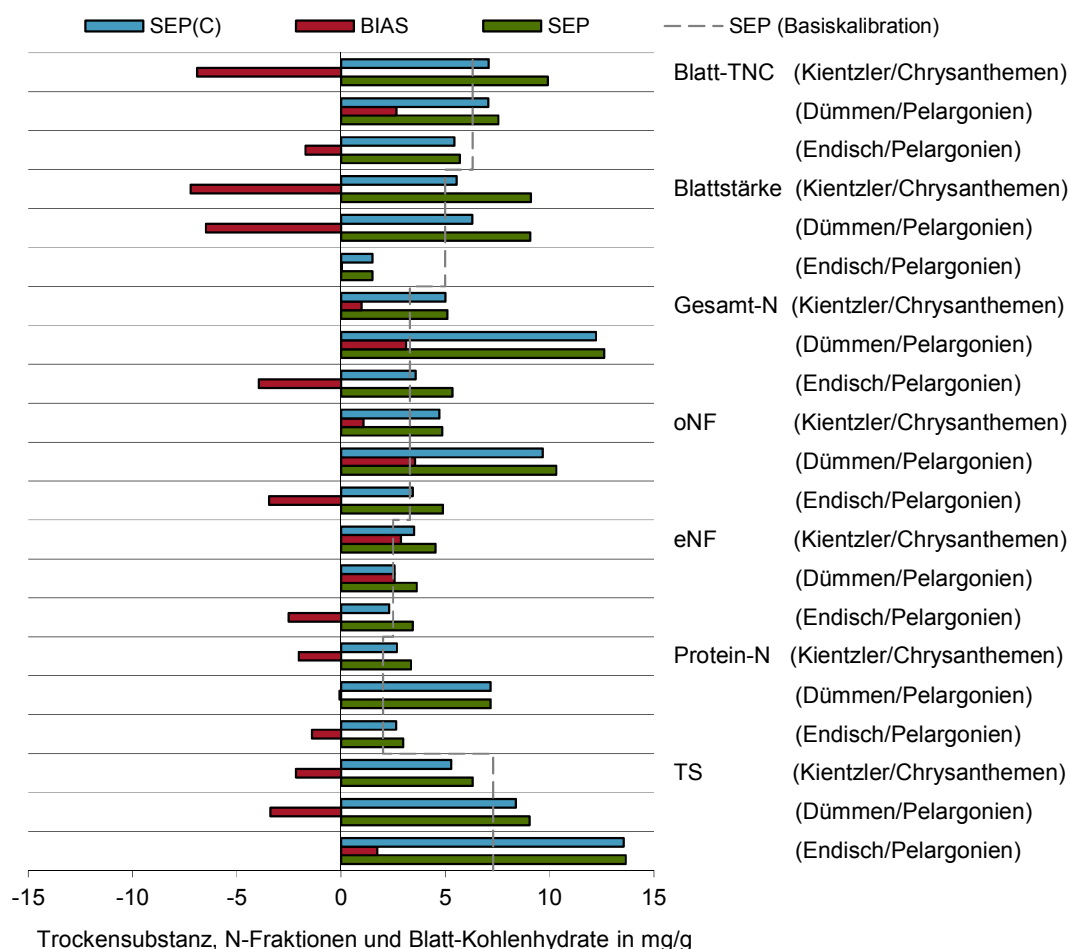


Abb. 4.35: SEP, BIAS und SEP(C) der Trockensubstanz, der N-Fractionen sowie der Blattkohlenhydratfraktionen bei Nutzung der Proben der einzelnen Lieferanten als Validierdatensätze, die gestrichelte Linie markiert jeweils den SEP der Basiskalibriermodelle für die einzelnen Parameter

Eine genauere Analyse der Pelargonienproben der Fa. Dümmen (Äthiopien) zeigt, dass die Abweichungen bei diesen Proben ganz wesentlich von einem der acht Messtermine verursacht werden. Bei der Messung in KW 2010-08 werden die N-Fractionen mittels NIRS fast durchgängig (Ausnahmen bilden die beiden Proben P-06 und P-07) stark überschätzt (Abb. 4.36). Während die tatsächlichen Protein-N-Gehalte zwischen 16 und 22 mg/g liegen, werden mittels NIRS Gehalte zwischen 37 und 43 mg/g prognostiziert. Beim oNF und Gesamt-N sind ebenfalls Unterschiede von 20 bis 35 mg/g zu beobachten. Die Proben der Fa. Dümmen wiesen bereits bei der Untersuchung des Termineinflusses an diesem Messdatum vergleichbare Abweichungen auf. Zusätzlich zum Termin in KW 2010-08 sind auch am ersten Messtermin

in KW 2009-51 beim Protein-N und den oNF sowie beim Gesamt-N in KW 2009-51 und 2010-51 auffällige systematische Abweichungen zu beobachten. Allerdings werden die Proben zu diesem Termin eher unterschätzt und die Unterschiede zwischen den referenzanalytischen und den NIRS-Werten sind mit im Mittel 8 bis 12 mg/g auch weniger als halb so groß. Ein vergleichbarer Termineinfluss zeigt sich auch bezüglich der TS-Bestimmung bei den Proben der Fa. Endisch. In diesem Fall sind im Wesentlichen die in KW 201-51 gemessenen Proben für den höheren SEP verantwortlich.

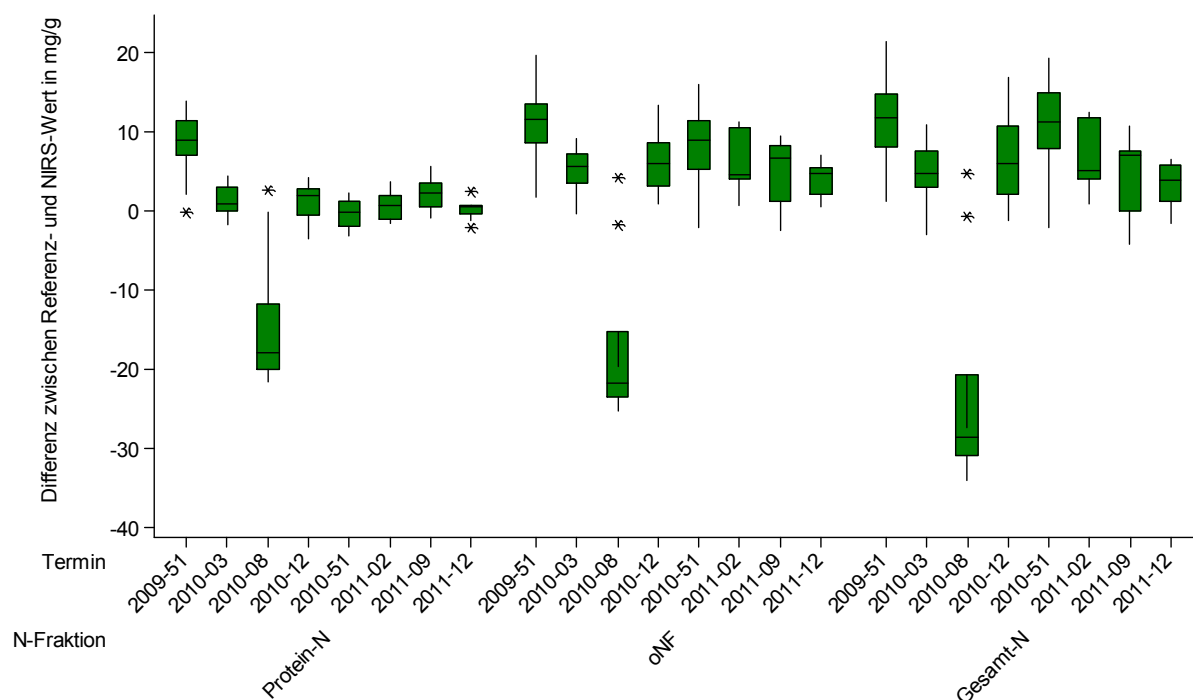


Abb. 4.36: Boxplot der Differenzen zwischen den Referenz- und NIRS-Wert für den Protein-N-, den oNF- und Gesamt-N-Gehalt der Proben der Fa. Dümmer aufgeteilt nach Lieferterminen

4.3 Diskussion

4.3.1 Datenvorbehandlung

Bei allen Parametern wird durch eine Datenvorbehandlung der Spektren nur eine leichte Verbesserung der Vorhersageleistungen erzielt bzw. für vergleichbare Vorhersageleistungen werden etwas weniger PLS-Faktoren benötigt. So werden beispielsweise bei der TS nach einer Vorbehandlung mittels MSC bzw. SNV nur sechs PLS-Faktoren benötigt, um einen SECV von etwa 8,5 mg/g zu erreichen, während ohne Datenvorbehandlung acht Faktoren notwendig sind. Beim Protein-N oder dem Blatt-TNC können die Faktorenzahlen bei gleichem SECV durch eine Streulichtkorrektur von 17 auf 14 bzw. von 13 auf elf reduziert werden (Tab. 10.9 und Tab. 10.12). Ähnliches gilt für auch für die übrigen Parameter. Während bei getrockneten und gemahlten Proben Streulichtkorrekturen oft deutlichere Verbesserungen erbringen (Rinnan et al., 2009), ist bei Messungen an feuchten Proben zumeist nur eine ähnlich geringe Verbesserung der Vorhersageleistung zu beobachten (Dardenne et al., 2000; Cozzolino und

Labandera, 2002). Eine mögliche Ursache hierfür ist die starke Absorption von Wasser im Bereich des NIR. Bei sehr wasserreichen Proben dominieren die Wasserabsorptionspeaks, insbesondere der bei 1460 nm, den Spektrenverlauf maßgeblich und verringern dadurch den Korrektoreffekt bezogen auf den gesamten Wellenlängenbereich (Dardenne et al., 2000). Diese Vermutung wird auch durch die Tatsache gestützt, dass sowohl bei den Kalibrationsmodellen für die N-Fraktionen als auch für die Blattkohlenhydrate vor allem der Wellenlängenbereich um 1460 nm kaum genutzt wird (Abb. 4.19, Abb. 4.22). Von den geprüften Datenvorbehandlungsmethoden (Tab. 4.5) werden die besten Ergebnisse mit den fünf Verfahren NM, OBC+NM, SNV, SNV+DT und MSC (Anhang 10.3) erzielt, wobei die Unterschiede zwischen den einzelnen Verfahren nur äußerst gering sind und auch keine Systematik zu erkennen ist. Diese Beobachtung wird auch von anderen Autoren beschrieben (Helland et al., 1995; Griggs et al., 1999; Azzouz et al., 2003; Rinnan et al., 2009). Erstere zeigen die mathematische Ähnlichkeit der genannten Algorithmen, bei denen eine Normierung bzw. Standardisierung der Spektren auf ein Mittelwertspektrum und bei den kombinierten Verfahren (OBC+NM, SNV+DT) sowie beim MSC-Algorithmus zusätzlich eine Korrektur des Basislinienanstiegs erfolgt. Dies erklärt ihre vergleichbare Leistungsfähigkeit.

Die Ableitungen erster bzw. zweiter Ordnung alleine oder in Kombination mit einer Streulichtkorrektur (SNV, NM, MSC) erbringen bei den Stecklings- bzw. Blattproben in dieser Untersuchung keinen Vorteil. Bei der Bestimmung des organischen Stickstoffs sowie der TS in Grassilagen ohne Probenvorbereitung wird von Cozzolino und Labandera (2002) ebenfalls keine Verbesserung der Vorhersageleistung durch eine Ableitung der Spektren erreicht, während Park et al. (1998), Sørensen (2004) und Gibaud (2007) für dieselben Parameter und dieselbe Probenmatrix die besten Ergebnisse durch die Nutzung der ersten bzw. zweiten Ableitung mit oder ohne zusätzliche Streulichtkorrektur erzielen. Auch für Ganzpflanzensilage aus Mais wird von Cozzolino et al. (2006) die beste Vorhersageleistung durch eine Streulichtkorrektur (SNV+DT) in Kombination mit der zweiten Ableitung erreicht. In einer weiteren Untersuchung an ungetrockneten und ungemahlenen Grassilagen (Sinnaeve et al., 1994) erweisen sich bei Nutzung des gesamten VIS-NIR-Spektrums von 400 bis 2500 nm Ableitungen ebenfalls als vorteilhaft, während dies bei einer Beschränkung auf den kurzwelligen NIR-Bereich (850 bis 1050 nm) nicht der Fall ist. Eine Ursache für den z. T. widersprüchlichen Effekt der Ableitung könnte in dem Problem liegen, dass durch die Ableitung zwar sowohl additive als auch multiplikative Streulichteffekte korrigiert werden können (Rinnan et al., 2009), gleichzeitig aber das Signal-Rausch-Verhältnis verschlechtert wird, weswegen eine anschließende Glättung notwendig ist, wodurch wiederum Informationen verloren gehen (Næs et al., 2004). Je nachdem welcher Effekt überwiegt – die Reduktion der Streulichteffekte oder die Abnahme des Signal-Rausch-Verhältnisses bzw. der Informationsverlust durch die notwendige Glättung – ergibt sich eine Verbesserung oder Verschlechterung der Vorhersageleistung.

Durch den OSC-Algorithmus kann die Anzahl der PLS-Faktoren bei fast allen Parametern im Vergleich zu den Modellen mit einer Streulichtkorrektur alleine auf Basis der spektralen Daten (Anhang 10.3) etwas reduziert werden. Allerdings werden im Gegenzug auch drei OSC-Faktoren benötigt, um das OSC-Modell zu erstellen, weswegen die Modelle in Summe vergleichbar komplex bleiben. Dies entspricht auch den Ergebnissen von Fearn (2000) sowie Trygg und Wold (2002), die bei gleichbleibender Vorhersageleistung durch die Hinzunahme jeweils eines OSC-Faktors einen PLS-Faktor einsparen können. Dadurch ergibt sich unter Umständen eine bessere Interpretierbarkeit der PLS-Modelle. Für die praktische Anwendung ist dies aber ohne Nutzen und es besteht die zusätzliche Gefahr einer Überanpassung (Westerhuis et al., 2001; Azzouz et al., 2003). In Einzelfällen kann der OSC-Algorithmus aber auch zu einer deutlichen Verbesserung der Vorhersageleistung führen (Liu et al., 2011).

4.3.2 Beurteilung der erreichten Vorhersageleistungen der gemeinsamen Kalibrationen für Chrysanthemen und Pelargonien

4.3.2.1 Trockensubstanz

Für die Trockensubstanzbestimmung wurden sehr gute Vorhersageleistungen mit einem SEP von 7 mg/g erreicht. Dies liegt allerdings nur im unteren Bereich dessen was u. a. für Grünfütter- und Silageproben erreicht wird (Kennedy et al., 1996; Cozzolino und Labandera, 2002; Azzouz et al., 2003; Sørensen, 2004; Park et al., 2005; Gibaud, 2007; Morón et al., 2007), wobei zu beachten ist, dass die Proben in den genannten Arbeiten eine wesentlich größere Variabilität bei den TS-Gehalten aufweisen als die Proben in der aktuellen Arbeit. So reicht beispielsweise der Bereich bei Kennedy et al. (1996) von 139 bis 723 mg/g, während die Stecklinge in der vorliegenden Arbeit nur einen Bereich von 63 bis 199 mg/g abdeckten. Da aber der SEP nur das 1,5 fache des SEL ausmacht (Abschnitt 4.1.3.2), ist eine weitere Verbesserung der Vorhersageleistung vermutlich nur über eine verbesserte Referenzanalytik zu erreichen (Thiex und van Erem, 1999). Neben der sehr guten Vorhersageleistung zeichnet sich das TS-Modell auch durch die geringe Anzahl von nur sechs PLS-Faktoren und damit eine geringe Komplexität aus, was durch den einfachen molekularen Aufbau von Wasser und dessen starke Absorption im NIR erklärlich ist (Tillmann, 1996; Bünning-Pfaue, 2003).

4.3.2.2 Stickstofffraktionen

Bei den N-Fraktionen finden sich lediglich für die Summe der organischen N-Fraktionen bzw. den Gesamt-N Vergleichswerte in der Literatur. In der vorliegenden Arbeit wird für beide Parameter ein SEP von 3,3 mg/g erreicht. Dies ist vergleichbar mit dem Bereich der für Grasilagen in der Literatur beschrieben wird: So erreichen Sinnaeve et al. (1994), Kennedy et al. (1996) und Sørensen (2004) mit SEP von weniger als 1,5 mg/g z. B. deutlich bessere Vorhersageleistungen, bei Cozzolino und Labandera (2002) ist der SEP mit 3,2 mg/g allerdings vergleichbar und bei Gibaud (2007) und Morón et al. (2007) sind die Standardfehler mit über 6 mg/g sogar erheblich größer. Die deutlich besseren Vorhersageleistungen in den zuerst ge-

nannten Arbeiten sind vermutlich auf die höheren TS-Gehalte der Proben ($\bar{x} > 350$ mg/g) in Verbindung mit der Nutzung eines weiteren Spektralbereiches (bis 2500 nm) zurückzuführen (Gibaud, 2007). So kann in diesen Fällen die wichtige "Protein-N-Bande" bei 2175 nm genutzt werden (Workmann, 1996; Kokaly, 2001). Auch die Vorhersageleistungen der wenigen für gartenbauliche Kulturen publizierten Gesamt-N-Kalibrationen, die auf Messungen an intakten Blättern basieren, sind mit einem SEP von etwa 4 mg/g (Min et al., 2006; Ulissi et al., 2011) vergleichbar.

Bei den weiteren N-Fractionen können nur die ermittelten statistischen Parameter zur Beurteilung der Vorhersagegüte herangezogen werden, da sich in der Literatur keine Kalibrationen für diese Inhaltsstoffe finden, bei denen eine vergleichbare Referenzanalytik genutzt wurde. Für den Protein-N (SEP = 2,0 mg/g; RPD = 2,9; RER = 12,8) werden die besten Vorhersageleistungen erreicht. Nach den Bewertungsschemata von Saeys et al. (2005) und Alves et al. (2012) ist die Kalibration gut bis sehr gut und für den Einsatz in der Qualitätskontrolle geeignet. Die verbesserte Vorhersageleistung des unlöslichen (organischen) Protein-N im Vergleich zum Gesamt-N bzw. oNF, die zusätzlich auch lösliche organische N-Verbindungen beinhalten, findet sich auch in den Untersuchungen von Abrams et al. (1988) und Park et al. (1998). Erstere führen dies auf mögliche Verluste von flüchtigen Stickstofffraktionen bei der Trocknung zurück, die sich nur auf den Gesamt-N, nicht aber auf den Protein-N-Gehalt auswirken würden. Zwar wurden in der vorliegenden Arbeit die Proben vor der Referenzanalytik nur bei 60 °C getrocknet, um solche Verluste zu vermeiden, diese können aber nach einer Untersuchung von Mayland (1968) auch bei diesen Trocknungstemperaturen nicht vollständig ausgeschlossen werden. Die Hypothese der Trocknungsverluste stützen auch Ergebnisse von Hermida et al. (2005), Valdez et al. (2006), Nie et al. (2008) und Brogna et al. (2009) bei Arbeiten an getrockneten Proben, bei denen eventuelle Trocknungsverluste sich nicht in der Kalibrationsentwicklung auswirken. Im Gegensatz zur vorliegenden Arbeit und zu den weiteren genannten Arbeiten an ungetrockneten Proben (Abrams et al., 1988; Park et al., 1998) erreichen diese Autoren bessere Vorhersageleistungen für den Gesamt-N (entsprechend dem oNF in der vorliegenden Arbeit) als für die unlösliche N-Fractionen (entsprechend dem Protein-N in der vorliegenden Arbeit), wie es auf Grund der höheren Gehalte bzw. größeren Spreizung und ähnlicher spektraler Eigenschaften der verschiedenen organischen N-Verbindungen (Williams und Norris, 2001b) auch zu erwarten ist.

In Übereinstimmung mit der im Absatz zuvor diskutierten Hypothese sind die Vorhersageleistungen für alle löslichen N-Fractionen deutlich geringer. Für den Amino-N, sowie die Summe aller extrahierbaren (eNF) und die Summe der extrahierbaren organischen N-Fractionen (eoNF) sind die Kalibrationen zumindest für eine grobe Klassifizierung geeignet (RPD = 1,6 bis 1,7; RER = 7 bis 8). Beim Amid-N sind die Vorhersageleistungen nochmals etwas geringer. Für diesen Parameter ist allerhöchstens eine sehr grobe Unterscheidung zwischen Proben mit sehr hohen und sehr geringen Gehalten möglich. Neben den bereits erwähnten möglichen

N-Verlusten bei der Trocknung, die diese Fraktion mutmaßlich am stärksten betreffen, sind sicher die recht geringen Amid-N-Gehalte von weniger als 5 mg/g hierfür ausschlaggebend. Da die Absorptionsbanden im nahen Infrarot eine geringe Intensität aufweisen, sehr breit sind und sich stark überlappen (Ozaki et al., 2007), gilt die NIRS allgemein als wenig nachweisstarke Technik, die vor allem zur Analyse von Hauptbestandteilen geeignet ist und bei der erst größere Änderungen in den Inhaltsstoffgehalten spektral erkennbar sind (Johnson, 2001; Blanco und Villarroya, 2002). Gemeinsam haben alle Modelle für die N-Fractionen die recht hohe Anzahl von PLS-Faktoren, die von elf bis 15 reicht. Dies ist insbesondere durch die inhomogene und wasserreiche und damit komplexe Probenmatrix begründbar (Tillmann, 1996; Brimmer und Hall, 2001). Zudem war der Kalibrierdatensatz knapp 400 Proben ausreichend groß, um die Anzahl PLS-Faktoren zu rechtfertigen. Als Faustregel gilt, dass einem PLS-Faktor mindestens zehn Proben gegenüberstehen sollten (Lammertyn et al., 2000).

Für den Nitrat-N konnte keine nutzbare Kalibration entwickelt werden, was auf Grund der im Stand des Wissens (2.2.2) erläuterten geringen NIR-Aktivität des Nitratmoleküls aber nicht verwunderlich ist. Da insbesondere bei den Chrysanthenen eine erhebliche Variabilität der Nitrat-N-Gehalte existiert, die von den NIRS-Kalibriermodellen nicht erfasst wird (Abb. 4.12), und bei dieser Kultur – wie in Abb. 4.37 erkennbar – zwischen dem Nitrat-N und den drei weiteren N-Fractionen nicht-lineare Beziehungen bestehen, ist auch erklärlich, warum bei der Summe der extrahierbaren N-Fractionen, sowie in geringerem Maße auch beim Gesamt-N, Chrysanthenenproben mit sehr hohen N-Gehalten unter- und solche mit sehr geringen N-Gehalten überschätzt werden. Dies bestätigt Ergebnisse aus einer vorangegangenen Arbeit mit Chrysanthenen- und Poinsettienstecklingen (Lohr et al., 2007).

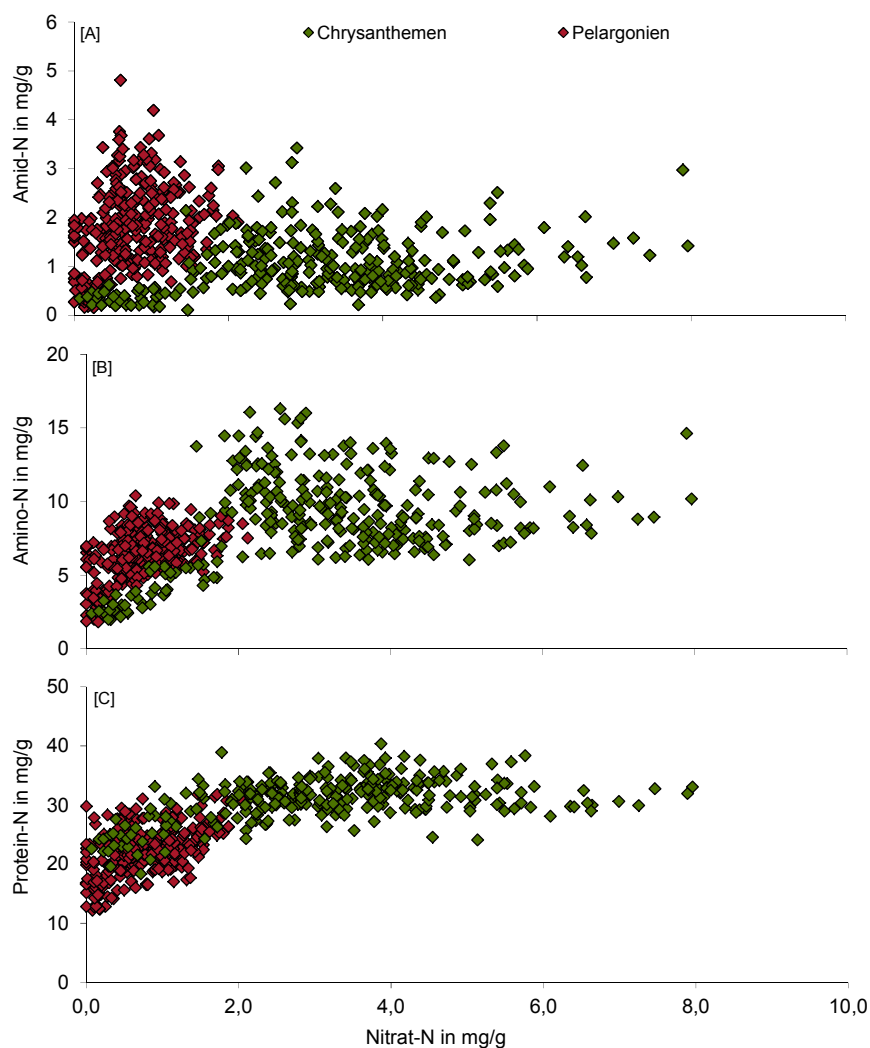


Abb. 4.37: Streudiagramme für den Nitrat-N-Gehalt und die [A] Amid-N-, [B] Amino-N- sowie [C] Protein-N-Gehalte

4.3.2.3 Kohlenhydrate

Die Kohlenhydratgehalte in der Sprossachse konnten auf Grund der Art der Probenpräsentation nicht kalibriert werden. Bei der Messung an ganzen Stecklingen werden die Spektren maßgeblich von den Blattflächen – durch die Art der Anlagerung der Stecklinge an die Petrischale (Abb. 4.2 [C + D]) überwiegend durch die Blattunterseiten – dominiert, während die Sprosse nur einen sehr geringen Einfluss haben. Dies wird an Hand der zur Ausreißererken- nung durchgeführten Linearen Diskriminanzanalyse deutlich: Hierbei weisen die Stecklings- (ST)- und Blattunterseiten-(BU)-spektren eine so große spektrale Ähnlichkeit auf, dass eine Trennung der beiden Gruppen nicht möglich ist, während sich die Spektren der Blattobersei- ten (BO) von den beiden anderen Spektrentypen eindeutig unterscheiden. Eine getrennte Mes- sung der Sprossachsen war nicht möglich, da für eine störungsfreie Messung die gesamte Messfläche von ca. 315 mm² einheitlich bedeckt werden müsste, was insbesondere mit den sehr dünnen Sprossachsen der Chrysanthemenstecklinge nicht möglich ist. Eine punktuelle Messung z. B. über eine Faseroptik könnte hier zwar Abhilfe schaffen, allerdings stellt sich dann die Frage der Repräsentativität der Messung.

Bei den Blattkohlenhydraten können nur für die Stärke sowie die Summe aus Zucker und Stärke (TNC) zufriedenstellende Kalibriermodelle entwickelt werden, wobei die auf den BO-Spektren basierenden Modelle die besten Ergebnisse erbringen. Für die beiden Parameter werden RPD-Werte von 2,5 bzw. 2,3 und RER-Werte von 14,7 bzw. 12,3 erzielt. Allerdings dürfen diese Kenngrößen nicht überinterpretiert werden, da sowohl die Stärke- als auch die TNC-Gehalte nicht normal- sondern stark linksschief verteilt sind. Dies macht eine erfolgreiche Kalibrationsentwicklung nicht per se unmöglich, verringert aber die Aussagekraft der statistischen Parameter (Williams, 2001; Kessler, 2007; Bellon-Maurel et al., 2010). Die Forderung nach einer Normalverteilung der Daten kann aber durch eine logarithmische Transformation und eine anschließende Aufteilung der Datensätze erfüllt werden. Bei einer Neuberechnung ergeben sich für die rücktransformierten Daten vergleichbare Vorhersageleistungen wie bei Nutzung der untransformierten Daten. Bei Stärke beträgt der SEP für die untransformierten Daten 5,0 mg/g und für die transformierten 7,4 mg/g, beim TNC-Gehalt sind es 6,3 und 6,6 mg/g. Die RPD- und RER-Werte sind auf Grund des etwas größeren SEP und der gleichzeitig durch die Aufteilung der Datensätze etwas geringeren Spannweite der Gehalte etwas kleiner (Stärke: RPD = 1,7, RER = 9,3; TNC: RPD = 2,0; RER = 11,5), aber immer noch so hoch, dass die Modelle in der Qualitätsbeurteilung nutzbar sind. Dabei ist aber die Vorhersage bei Proben mit hohen Gehalten mit einer größeren Unsicherheit behaftet. Dementsprechend sollte bei lognormal-verteilten Datensätzen die Berechnung von Vertrauensintervallen auch nicht additiv sondern multiplikativ erfolgen (Limpert und Stahel, 2011). Die bessere Vorhersageleistung der Modelle für die BO-Spektren im Vergleich zu den Modellen für die BU- bzw. ST-Spektren könnte eventuell in der einheitlicheren Struktur der Blattoberflächen und der damit verbundenen besseren Anlagerung an die Petrischale begründet sein. Demgegenüber erzeugen bei der Messung der BU-Spektren die Blattadern und bei der Messungen der ST-Spektren noch stärker die Sprossachsen eine ungleichmäßige Oberfläche, was zu verstärkten Streulichteffekten und damit verbunden einer geringeren Vorhersageleistung der Modelle führen könnte. Nach Shenk (2004) sind Streulichteffekte bei der Messung grobstrukturierter Proben in diffuser Reflektion maßgeblich für spektrale Unterschiede und Cozzolino et al. (2003) vermuten verstärkte Streulichteffekte als wesentliche Ursache für die geringere Güte von Kalibriermodellen zur Prognose der Fleischqualität bei Messungen an intakten Proben im Vergleich zu solchen an homogenisiertem Material.

Für die Blattzuckergerhalte wurde ebenso wie für die drei Einzelzucker keine ausreichende Genauigkeit erzielt. Bestenfalls könnte bei der Summe der drei Zucker eine grobe Unterscheidung vorgenommen werden, wobei hierfür aber auch die Differenz zwischen TNC und Stärke herangezogen werden kann. Mögliche Gründe für das Scheitern der Modellbildung bei den Einzelzuckern und der Summe der löslichen Zucker werden im Zusammenhang mit den Ergebnissen des nächsten Abschnitts diskutiert.

4.3.3 Robustheit der Kalibriermodelle

Beim Vergleich der Modelle für die verschiedenen Inhaltsstoffe (Trockensubstanz, N- und KH-Fraktionen) erweisen sich die Modelle für die TS und die Summe der extrahierbaren N-Fraktionen (eNF) am robustesten, wobei allerdings das Modell für die eNF-Gehalte im Vergleich zu den Modellen für die Protein-N-, oNF- und Gesamt-N-Gehalte sowie für die Blattkohlenhydratgehalte (Stärke und TNC) eine geringere Genauigkeit aufweist. Wesentlich für die größere Robustheit des TS-Modells dürfte die mit sechs im Vergleich zu den anderen Parametern (≥ 11) geringere Anzahl PLS-Faktoren sein, da einfachere Modelle in der Regel weniger empfindlich gegenüber Störeinflüssen sind (Mobley et al., 1996; Brimmer und Hall, 2001).

Bei Betrachtung der drei Einflussgrößen "Termin", "Sorte" und "Lieferant" zeigt sich, dass sowohl die Sorten als auch die Lieferanten – und damit im Wesentlichen die Umwelt- und Kulturbedingungen während der Mutterpflanzenanzucht – nur einen geringen Einfluss auf die Genauigkeit haben. Die zukünftige Anwendung der Kalibriermodelle auf Sorten, die nicht im Kalibriermodell enthalten sind, ebenso wie auf Stecklinge von anderen Produktionsstandorten dürfte daher unproblematisch sein. Die großen systematischen Abweichungen für den Lieferanten "Dümmer" bei den Parametern Protein-N, oNF und Gesamt-N (Abb. 4.35) sind bei genauerer Betrachtung nicht auf den Faktor "Lieferant" zurückzuführen, sondern werden von sehr großen systematischen Abweichungen an einzelnen Messterminen verursacht (Abb. 4.36). Der Faktor Messtermin ist insgesamt der Faktor, gegenüber dem alle Modelle die geringste Robustheit aufweisen (Abb. 4.27 bis Abb. 4.30). Wie in einer Übersichtsarbeit von Nicolai et al. (2007) für Kalibriermodelle zur Prognose der Fruchtqualität bei verschiedenen Obstarten dargelegt, äußert sich auch in der vorliegenden Arbeit die mangelnde Robustheit der Modelle vor allem in einem Anstieg des systematischen Fehlers.

Ein Probeneffekt als Grund für die geringere Robustheit über die Zeit, der z. B. bei Äpfeln mutmaßlich durch saisonale Änderungen der Zellzahlen und -größen verursacht wird (Peirs et al., 2003) und der vergleichbar auch bei Weizenkörnern, Grünfutter oder Oliven beschrieben wird (Osborne et al., 1982; Valdes et al., 1990; Léon et al., 2004), ist unwahrscheinlich, da von den jeweils vier Ernteterminen je Bestand immer nur einzelne Termine betroffen sind. Die Häufung der Abweichungen zu Beginn des Untersuchungszeitraums spricht eher dafür, dass eine mangelnde Standardisierung der Probenpräsentation bzw. des Probenhandlings ursächlich sind und sich im Laufe der Zeit durch die zunehmende Routine bei der Durchführung der Messungen diese Standardisierung machen und nach entwickelte. In einem solchen Fall würden die Spektren an den einzelnen Messterminen zu Projektbeginn durch die unterschiedliche Probenhandhabung ein einzigartiges spektrales Muster aufweisen. Die daraus resultierenden spektralen Unterschiede zwischen den Terminen können vom Modell nicht abgedeckt werden, wenn der jeweilige Termin nicht im Modell enthalten ist. Mit zunehmendem Projektfortschritt und der damit einhergehenden Standardisierung würde die spektrale Variabilität

zwischen den Terminen kleiner und könnte vom Modell abgedeckt werden, auch wenn der jeweilige Termin von der Modellbildung ausgeschlossen wird. Die Bedeutung von standardisierten Messbedingungen ergibt sich aus der Vielzahl von Fehler- bzw. Störquellen, die von Williams und Norris (2001a) angeführt werden. Hierzu zählen unter anderem die Proben- und Gerätetemperatur, die Probenlagerung sowie spektrale Eigenschaften der verwendeten Messzelle. Gerade die Messzelle bzw. in diesem Fall die Petrischale des Turnsteps wird durch die Messung von stark wasserhaltigen Proben und die notwendige häufige Reinigung stark beansprucht. Dies wird so auch von Griggs et al. (1999) und Gibaud (2007) beschrieben. Zwar wurde das Messsystem während der Messungen regelmäßig mit externen Weiß- und Schwarzstandards kontrolliert und bei Bedarf neu referenziert, dennoch können Veränderungen der spektralen Eigenschaften der Petrischale als Ursache nicht ausgeschlossen werden. Im Falle einer späteren praktischen Anwendung ist daher der Standardisierung der Messbedingungen bzw. deren Kontrolle besondere Aufmerksamkeit zu schenken.

4.3.4 Rückführbarkeit der PLS-Faktoren auf bekannte Absorptionsbanden

Neben den statistischen Parametern zur Beurteilung der Vorhersageleistungen sowie der Prüfung der Robustheit bietet die Rückführbarkeit von PLS-Faktoren auf bekannte Absorptionsbanden des gesuchten Inhaltsstoffes wichtige Informationen über die Zuverlässigkeit der Kalibriermodelle. Allgemein sind solche Modelle zu bevorzugen, bei denen die Auswahl der PLS-Faktoren fachlich begründet werden kann (Næs et al., 2004).

Wie in Abschnitt 4.2.3.1 beschrieben, wird bei der Trockensubstanzkalibrierung der Wellenlängenbereich von 1130 bis 1690 nm durchgängig für die Modellbildung genutzt. In diesem Bereich liegen drei der intensivsten Absorptionsbanden von Wasser bei 1180, 1410 und 1460 nm (Workmann 1996; Williams und Norris, 2001a), wobei der intensivste Peak bei 1460 nm nur eine untergeordnete Rolle für die Modellbildung spielt. Dies ist vermutlich auf nicht-lineare Absorptionseffekte zurückzuführen, die in diesem Bereich bei wasserreichen Proben auftreten können (Dardenne et al., 2000). Die starke Absorption durch Wassermoleküle im Wellenlängenbereich um 1450 nm dürften auch der Hauptgrund sein, weshalb der Bereich zwischen 1340 und 1500 nm weder für die Modellbildung bei den N- noch den Blatt-KH-Fractionen genutzt wird (Abb. 4.19 und Abb. 4.22). Der bei den Modellen für die N-Fractionen stark genutzte Wellenlängenbereich von 1000 bis 1200 nm wird nach einer Aufstellung von Workmann (1996) recht häufig in "Protein"-Kalibrationen genutzt. Dies ist auch durch Absorptionsbanden von R-N-H- bzw. R-N-H₂-Bindungen zwischen 1000 und 1050 nm und eine typische Aminosäurebande bei 1150 bis 1200 nm, die allerdings vom bereits erwähnten Wasserpeak bei 1180 nm überlagert wird, fachlich zu begründen (Miller 2001; Williams und Norris 2001a; Xiaobo et al. 2010). Bei den KH-Fractionen ist insbesondere der Bereich von 1550 bis 1690 nm fachlich gut zu begründen, da hier unter anderem Stärke einige deutliche Absorptionsmaxima aufweist (Williams und Norris, 2001a). Auch in Kalibriermodellen für lösliche Zucker, Stärke bzw. deren Summe findet sich dieser Bereich

häufig wieder, z. B. bei Henry (1985), Brown (1992), Batten et al. (1993) und Lanza und Li (1984). Im Bereich von 1100 bis 1200 nm, der ebenfalls stark für die Kohlenhydratkalibrierungen genutzt wird, liegt der zweite Obertonbereich verschiedener C-H- und C-H₂-Streckungs- und -Beugungsschwingungen (Workmann, 1996) und vor allem bei verschiedenen Obstarten sowie Fruchtsäften wird dieser Wellenlängenbereich vielfach für Zuckerkalibrationen – in Form des Brixwerts – genutzt (Sarawong und Kawano, 2007; Omar et al., 2012).

Allerdings zeigt letztendlich die Überschneidung der für die Stärke- und TNC-Modelle genutzten Wellenlängenbereiche mit dem gleichzeitig stark bei den Stickstofffraktionen genutzten Bereich von 960 bis 1200 nm die Schwierigkeiten, die Wellenlängenauswahl in einer komplexen Probenmatrix selektiv auf einzelne Komponenten zurückzuführen. Neben der Überlappung der Absorptionsbanden spielen die z. T. engen Korrelationen zwischen den Inhaltsstoffen hierfür eine Rolle. So bestehen sowohl bei den Chrysanthemen als auch den Pelargonien neben den sehr engen Korrelationen der N- und KH-Fraktionen untereinander auch hochsignifikante Korrelationen zwischen dem TS-Gehalt und den N- bzw. KH-Fraktionen sowie zwischen den N- und KH-Fraktionen (Tab. 7.3 und Tab. 7.7).

5 (I.2) Untersuchung zur Selektivität der NIR-spektroskopischen Bestimmung löslicher Kohlenhydrate (Fructose, Glucose und Saccharose)

Diese Untersuchungen wurden auf Grund der im Stand des Wissens (2.2.3) geschilderten Schwierigkeiten bei der Kalibration von Einzelzuckern in die Arbeit miteinbezogen. Da die verschiedenen Einzelzucker (Fructose, Glucose, Saccharose) eine vergleichbare molekulare Struktur haben, sind sie spektral nur schwer unterscheidbar. Im folgenden Abschnitt wurde mittels artifizierlicher Proben, bei denen die Zuckergehalte gezielt variiert werden konnten, untersucht, ob eine selektive Bestimmung verschiedener Einzelzucker in einer sehr wasserreichen komplexen Matrix möglich ist bzw. inwieweit sich eine unterschiedliche Verteilung der Einzelzucker auf die Gesamtzuckerbestimmung auswirkt.

5.1 Material und Methoden

5.1.1 Entwicklung einer künstlichen Probe

Wie im Abschnitt 2.2.3 dargelegt, können sowohl physikalische als auch chemische Eigenschaften der Probenmatrix darüber entscheiden, ob eine Kalibrationsentwicklung erfolgreich ist oder nicht. Im ersten Schritt der Untersuchungen musste daher eine Probe mit vergleichbaren spektralen Eigenschaften entwickelt werden, wie sie auch die ganzen Stecklinge bzw. die abgetrennten Blätter aufwies, bei der aber eine gezielte Variation einzelner Zucker möglich ist. Die Grundidee basierte auf der Gelierung von gemahlenem Pflanzenmaterial. Dabei musste zunächst die notwendige Menge Geliermittel (GelriteTM, Fa. Duchefa Biochemie, Haarlem) ermittelt und die Reproduzierbarkeit der Herstellung geprüft werden. Dazu wurden an drei verschiedenen Tagen jeweils Lösungen mit sechs, acht, zehn und zwölf Gramm GelriteTM je Liter angesetzt. Die Lösungen wurden auf 75 °C erhitzt, 100 g getrocknetes und gemahlenes Pflanzenmaterial (getrocknete Reste eines Chrysanthemenmutterpflanzenbestandes, gemahlen in einer Retsch Schneidmühle mit einem 0,5 mm Siebeinsatz) je Liter zugemischt und drei Petrischalen (Ø 90 mm) ausgegossen. Mit den 100 g Pflanzenmaterial und dem zugegebenen GelriteTM wurde ein TS-Gehalt von etwa 100 mg/g erreicht, was dem TS-Gehalt der realen Proben sehr nahe kommt. Nach dem Abkühlen und Aushärten der Platten wurden diese vorsichtig aus der Petrischale gelöst und NIRS-Spektren der Plattenunterseite aufgenommen (Abb. 5.1). Dabei wurden wie auch bei den Stecklings- bzw. Blattproben wiederholte Messungen durchgeführt und die Spektren gemittelt (Abschnitt 4.1.2).

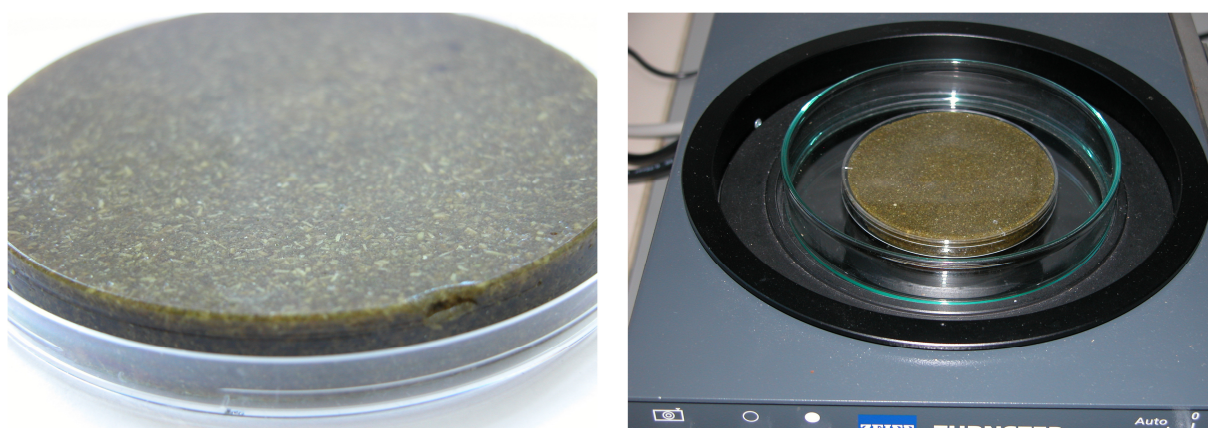


Abb. 5.1: Unterseite einer Gelrite™-Platte, wie sie für die Messung genutzt wurde (links), und Durchführung der Messung (rechts)

Abb. 5.2 zeigt das Mittelwertspektrum sowie den Schwankungsbereich der SNV+DT-transformierten Spektren der verschiedenen Petrischalen (blaue Linien bzw. Fläche) im Vergleich zu den Mittelwertspektren der Stecklingsproben (ST-Spektren, grüne Linie) bzw. der Spektren der Blattober- (BO-Spektren, gelbe Linie) und Blattunterseiten (BU-Spektren, rote Linie). Der Verlauf der Spektren der Petrischalen entspricht weitestgehend dem der realen Proben, lediglich im Bereich der intensiven Wasserbande bei 1450 nm sind die Unterschiede etwas größer.

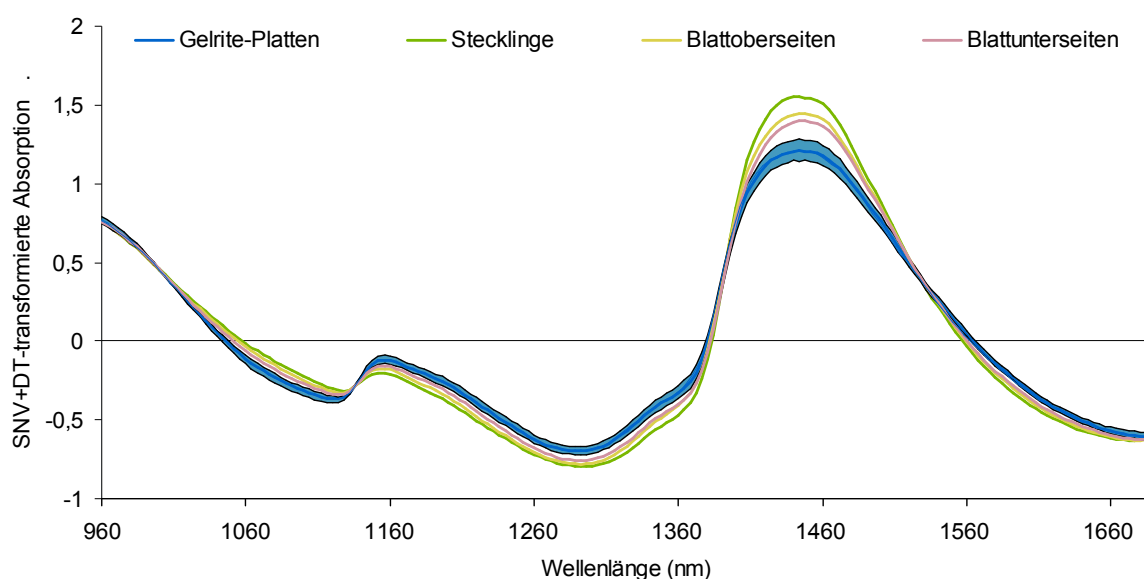


Abb. 5.2: Vergleich der Absorptionsspektren der Gelrite™-Platten im Vergleich zu den Mittelwertspektren der ganzen Stecklinge sowie der Spektren der Blattober- und -unterseiten nach einer Transformation mittels SNV+DT

Die spektrale Ähnlichkeit wird auch aus den beiden PCA-Plots in Abb. 5.3 [A+B] deutlich: Zuerst wurde eine Hauptkomponentenanalyse unter Einbeziehung aller ST-, BO- und BU-Spektren der Chrysanthemen- und Pelargonienproben durchgeführt (Datentransformation mittels SNV+DT). Auf diese PCA wurden anschließend die Spektren der Gelrite™-Platten projiziert. Die Spektren der Gelrite™-Platten bilden zwar in allen gezeigten Hauptkomponenten

eigene Cluster, liegen aber bereits für die ersten beiden Hauptkomponenten, mit denen über 95 % (PC 1: 92,2 % + PC 2: 4,5 %) der Variabilität in den ST-, BO- und BU-Spektren erklärt werden kann, im Randbereich der gesamten Population. Der Unterschied zwischen den Spektren der realen Proben und denen der Gelrite™-Platten ist damit vergleichbar zum Unterschied zwischen den Stecklings- und Blattspektren oder zwischen Spektren unterschiedlicher Gattungen.

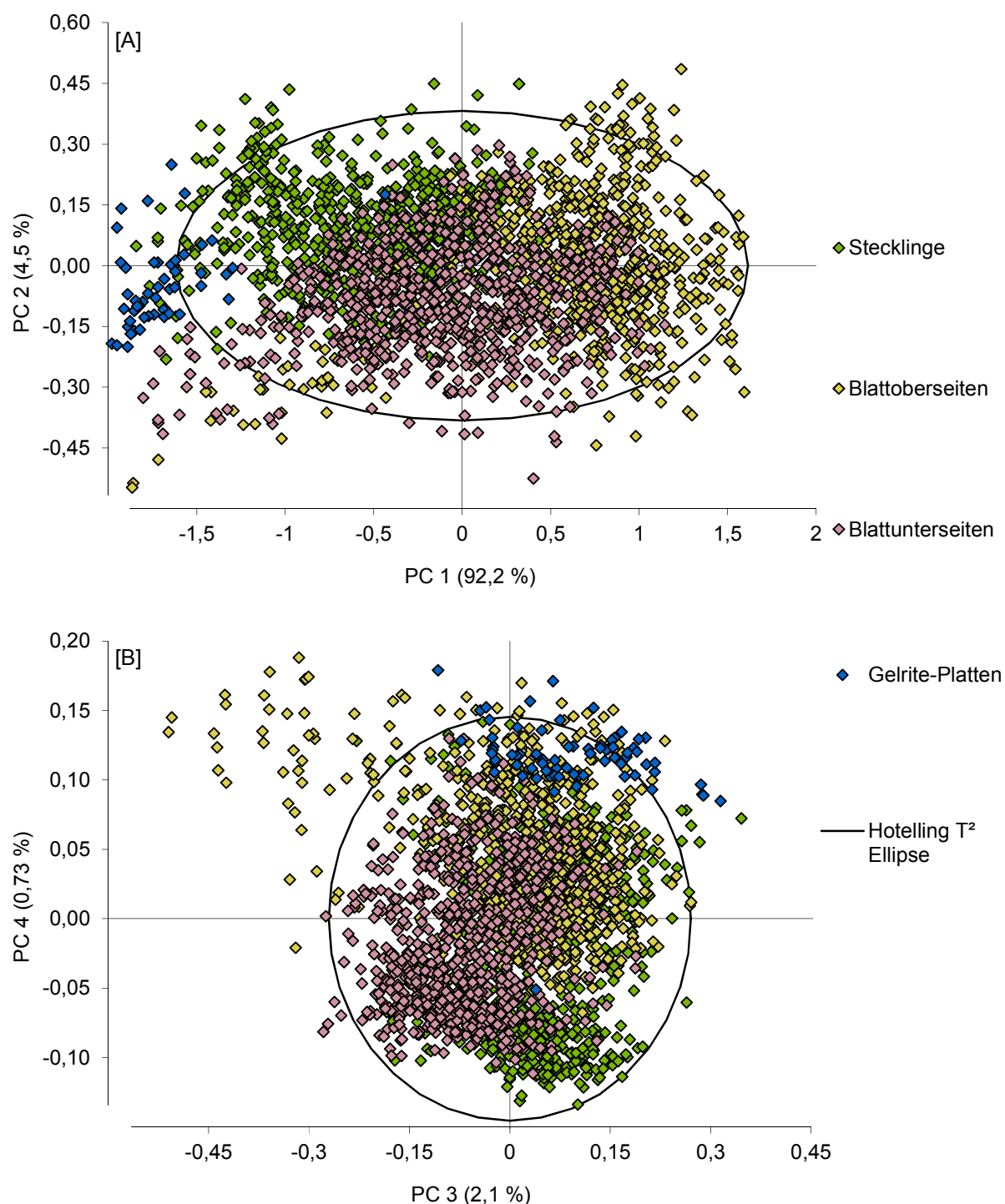


Abb. 5.3: PCA-Plots für die erste und zweite [A] bzw. die dritte und vierte [B] Hauptkomponente; PCA unter Verwendung der SNV+DT-transformierten Spektren der Stecklinge, der Blattober- und -unterseiten; Projektion der Spektren der Gelrite™-Platten auf die Hauptkomponenten

Zur Prüfung der Reproduzierbarkeit der Herstellung wurde die für Chrysanthemen- und Pelargonienstecklinge entwickelte Basiskalibration für den Trockensubstanzgehalt (ST-Spektren) auf die Spektren der GelriteTM-Platten angewandt. Aus den prognostizierten TS-Gehalten von Petrischalen aus einem Ansatz, von Petrischalen aus drei Ansätzen an einem Tag sowie von Petrischalen aus Ansätzen an drei verschiedenen Tagen wurden jeweils der Mittelwert und die Standardabweichung für jede der genannten GelriteTM-Konzentrationen berechnet (Tab. 5.1).

Tab. 5.1: Reproduzierbarkeit der Messungen von GelriteTM-Platten bei Platten aus einem Ansatz sowie aus mehreren Ansätzen an einem bzw. an drei verschiedenen Tagen am Beispiel der Trockensubstanzgehalte [mg/g] prognostiziert mittels des Basiskalibriermodells für Chrysanthemen und Pelargonien (Datenvorbehandlung mittels SNV, 6 PLS-Faktoren)

Gelrite TM - konzentration g/l	Petrischalen aus einem Ansatz		Petrischalen aus drei Ansätzen an einem Tag		Petrischalen aus Ansätzen an drei Tagen	
	\bar{x}	s	\bar{x}	s	\bar{x}	s
6	116	2,7	110	8,1	110	7,2
8	117	0,9	115	3,8	115	4,6
10	95	4,6	100	7,5	101	7,3
12	106	2,8	104	2,7	105	3,5

Wie aus Tab. 5.1 hervorgeht, ist die Reproduzierbarkeit der Platten sehr gut. Die Unterschiede zwischen den Messungen von Platten aus einem Ansatz, denen von Platten aus mehreren Ansätzen an einem bzw. an mehreren Tagen sind nur gering. Die Standardabweichungen liegen im Bereich des SEP des Modells von 7 mg/g. Die GelriteTM-Konzentration hat keinen eindeutigen Einfluss weder auf die Höhe der absoluten Werte noch auf die Reproduzierbarkeit. Der fehlende Anstieg der TS-Gehalte mit steigender GelriteTM-Konzentration ist wahrscheinlich darauf zurückzuführen, dass die Unterschiede im Trockensubstanzgehalt (GelriteTM + Pflanzenmaterial) von 5,5 mg/g zwischen den Platten mit der niedrigsten und der höchsten GelriteTM-Konzentration kleiner als der SEP des Kalibriermodells sind. Zudem bestehen, wie zuvor gezeigt, gewisse spektrale Unterschiede zwischen den Spektren der Platten und solchen von Stecklingen, die die Vorhersageleistung des Modells noch etwas reduzieren. Die Unterschiede liegen damit letztendlich innerhalb des Fehlerbereichs des Modells. Ein Nachteil der Platten mit geringen GelriteTM-Konzentrationen zeigte sich allerdings während der Durchführung der Messungen: Die Platten mit sechs bzw. acht Gramm GelriteTM je Liter waren weniger stabil und nach der Messung verblieb eine größere Wassermenge auf der Petrischale des Turnsteps. Mit einer GelriteTM-Konzentration von 10 g/l waren die Proben dagegen ausreichend stabil und es blieb auch keine Flüssigkeit nach der Messung zurück. Für die weiteren Untersuchungen wurden die Proben daher in der folgenden Weise hergestellt:

- Einwaage von 1,5 g GelriteTM in 150 ml Messkolben und Auffüllen mit destilliertem Wasser

- Vorsichtiges Erhitzen des Messkolbens auf 75 °C
- Einwaage von 15 g getrocknetem und gemahlenem Pflanzenmaterial in einen Erlenmeyerkolben
- Zugabe der erwärmten Gelrite™-Lösung in den Erlenmeyerkolben und Umrühren mit einem Glasstab
- Ausgießen von drei Kunststoffpetrischalen (Ø 90 mm) mit der Lösung aus dem Erlenmeyerkolben
- Lagerung der verschlossenen Petrischalen bei 5 °C

5.1.2 Künstliche Proben mit definierten Zuckergehalten

Zur Untersuchung der Selektivität der Zuckerbestimmung wurden nach dem beschriebenen Verfahren (Abschnitt 5.1.1) Proben mit definierten Zuckergehalten hergestellt. Dazu wurde in den 150 ml Messkolben vor dem Auffüllen eine entsprechende Menge einer Zuckerstamm-lösung zupipettiert. Einer ersten Probenserie wurde je Gramm gemahlenem Pflanzenmaterial nur Fructose gestaffelt von 0 bis 100 mg mit Schrittweiten von fünf mg (F-Serie) zugegeben. Eine zweite Probenserie enthielt entsprechende Mengen an Saccharose (S-Serie). Von beiden Serien wurden zu drei Terminen jeweils drei Petrischalen hergestellt und diese jeweils in unabhängigen Serien mehrfach gemessen. Von der F-Serie standen in Summe 557 und von der S-Serie 634 Spektren für die Modellbildung zur Verfügung. Die ungleiche Probenzahl bei den verschiedenen Probenserien ist darin begründet, dass dieselben Proben an verschiedenen Tagen mehrfach gemessen wurden, allerdings bildete sich nach zwei bis drei Tagen – trotz der Lagerung bei 5 °C – ein Schimmelrasen auf einzelnen Platten. Sobald auf einer Platte oberflächlich Pilzmycel zu erkennen war, wurde diese Platte nicht mehr weiter genutzt.

Zusätzlich zu den Proben nur mit Fructose bzw. Saccharose wurden Proben mit steigenden Saccharosegehalten (0 bis 100 mg/g in Schritten von 5 mg/g) und einem konstanten Glucosegehalt von 100 mg/g ohne Fructose (GS-Serie) bzw. konstanten Glucose- und Fructosegehalten von jeweils 100 mg/g (GFS-Serie) hergestellt. Bei der GS-Serie wurden Petrischalen zu zwei Terminen gemessen (67 Spektren), bei der GFS-Serie erfolgten die Messungen an vier Terminen (132 Spektren). Die Fructose, Glucose und Saccharose waren für biochemische Zwecke geeignet und wurden von der Fa. AppliChem (Darmstadt) bezogen.

5.1.3 Selektivität der Zuckerbestimmung

Es wurde jeweils ein Modell zur Zuckerbestimmung mit den Proben der F-Serie bzw. der S-Serie entwickelt und dieses zur Validierung auf die jeweils andere Probenserie angewendet. Für die Berechnung wurden drei verschiedene Bezugseinheiten genutzt:

- mg Fructose bzw. Saccharose je Gramm gemahlenem Pflanzenmaterial
- mmol Fructose bzw. Saccharose je Gramm gemahlenem Pflanzenmaterial
- mmol Monosaccharid-Äquivalente je Gramm gemahlenem Pflanzenmaterial

Anschließend wurden die Proben der F- und S-Serie zu einem gemeinsamen Datensatz zusammengefasst, neue Modelle zur Zuckerbestimmung entwickelt und diese auf die Proben der GS- und GFS-Serie angewendet. Die Modellbildung erfolgte unter Verwendung der in Abschnitt 4.1.4 genannten Datenvorbehandlungsalgorithmen. Die optimale Anzahl PLS-Faktoren wurde mittels Kreuzvalidierung festgelegt, wobei die Messungen jeweils eines Messtages in einem Kreuzvalidierungssegment zusammengefasst wurden. Bei der Validierung wurden die Kalibriermodelle zunächst auf die einzelnen Spektren angewandt und für die Darstellung anschließend die NIRS-Werte für alle Proben mit gleichem Sollwert gemittelt und deren Standardfehler berechnet.

5.2 Ergebnisse

In Abb. 5.4 bis Abb. 5.6 sind die massenbezogenen sowie die auf mmol Zuckermoleküle bzw. mmol Monosaccharidäquivalente (MsÄq) bezogenen Sollwerte gegen die mittels NIRS prognostizierten Werte aufgetragen. Die statistischen Kenngrößen der Kalibriermodelle und der Validierung sind in Tab. 5.2 zusammengefasst. Dabei wurde je ein Kalibriermodell für die Proben der F- sowie der S-Serie erstellt und dieses mit den Proben der jeweils anderen Serie validiert. Die Daten der Kalibriermodelle sind rot, die der Validiermodelle in grün dargestellt. Sowohl für die Proben der F-Serie (Rauten) als auch die der S-Serie (Dreiecke) wurden gute Kalibriermodelle mit vergleichbaren Vorhersageleistungen für die Kreuzvalidierung erzielt (F-Serie: $R_{CV}^2 = 0,97$; Steigung = 1,3; S-Serie: $R_{CV}^2 = 0,96$, Steigung = 1,4). Bei beiden Modellen besteht somit zwar ein enger Zusammenhang zwischen den Sollwerten und den mittels NIRS prognostizierten Zuckergehalten, allerdings werden bei beiden Modellen Proben mit niedrigen Gehalten etwas überschätzt, während solche mit hohen Gehalten systematisch unterschätzt werden. Die Streuung der Einzelproben ist für beide Modelle ebenfalls vergleichbar: Der mittlere Standardfehler der Einzelwerte für die massenbezogene Kalibration beträgt 2,44 mg/g bei den Proben der F-Serie und 2,55 mg/g bei denen der S-Serie. Mit beiden Probenreihen konnten also nutzbare Kalibriermodelle erstellt werden.

Werden diese Modelle jeweils wechselseitig auf die andere Probenreihe angewandt, zeigt sich, dass mit einer auf Fructose basierenden Kalibrierung Saccharose erfasst wird und umgekehrt. So wird für die Proben der F-Serie ein Bestimmtheitsmaß von 0,93 und für die S-Serie eines von 0,85 erreicht, die Standardfehler der Validierungsproben sind mit 3,97 mg/g (F-Serie) bzw. 4,05 mg/g (S-Serie) etwas größer als die für die Kalibriermodelle ermittelten. Bei Verwenden des Masse- bzw. Monosaccharidäquivalentbezugs (Abb. 5.4 und Abb. 5.6) liegen die Steigungen der Regressionsgeraden mit jeweils 1,7 für die F-Serie bzw. 1,3 und 1,4 für die S-Serie im Bereich dessen, was auf Grund der Kalibrierung zu erwarten ist. In beiden Fällen werden wie bei der im Rahmen der Modellbildung durchgeführten Kreuzvalidierung Proben mit geringen Gehalten systematisch über- und solche mit hohen Gehalten systematisch unterschätzt. Bei den Modellen auf Basis von mmol Zucker – ohne Unterscheidung ob Mono- (Fructose) oder ein Disaccharid (Saccharose) – zeigen sich dagegen deutliche Unterschiede.

Während sich für die F-Proben eine Steigung von 3,3 ergibt, liegt diese bei den S-Proben nur bei 0,7 (Abb. 5.5). Mit steigenden Gehalten werden die Proben der F-Serie also von der Kalibrierung mit den S-Proben zunehmend unterschätzt. Bei den Proben der S-Serie werden die Proben mit steigenden Gehalten umgekehrt zunehmend überschätzt. Die hohen Bestimmtheitsmaße von 0,85 bzw. 0,93 für die Validierung zeigen aber, dass der Zusammenhang zwischen NIRS- und Sollwerten weiterhin hochgradig linear ist.

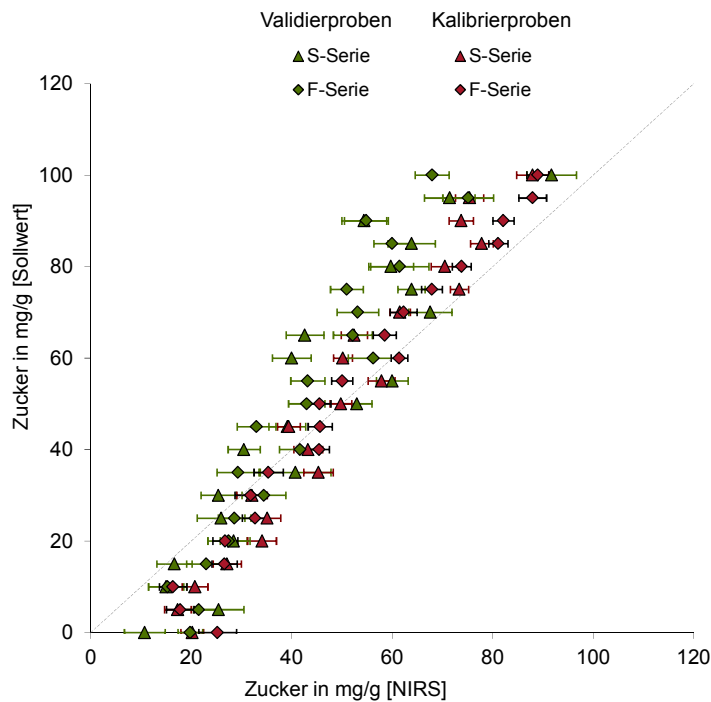


Abb. 5.4: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- bzw. Saccharose-Proben und der Validierung mit dem jeweilig entgegengesetzten Datensatz auf Basis der Zuckergehalte in mg/g

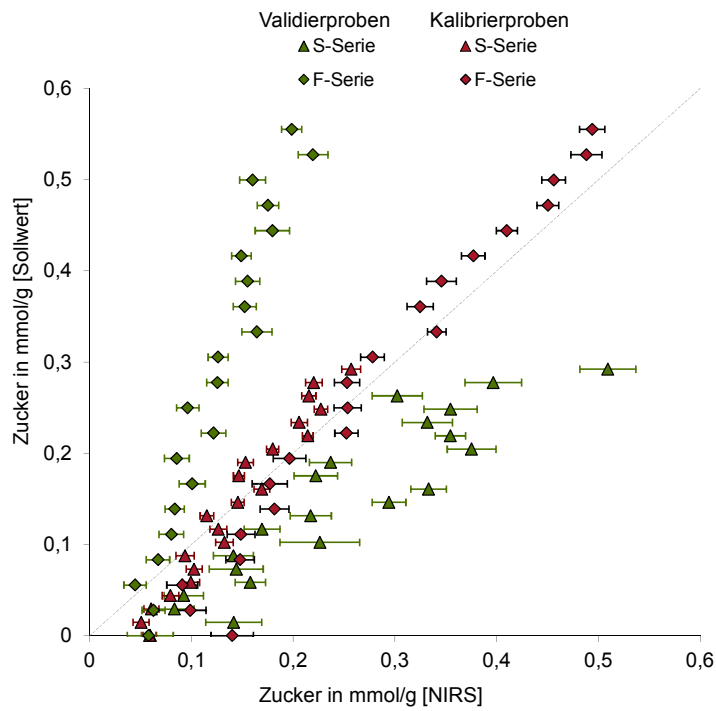


Abb. 5.5: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- bzw. Saccharose-Proben und der Validierung mit dem jeweilig entgegengesetzten Datensatz auf Basis der Zuckergehalte in mmol/g

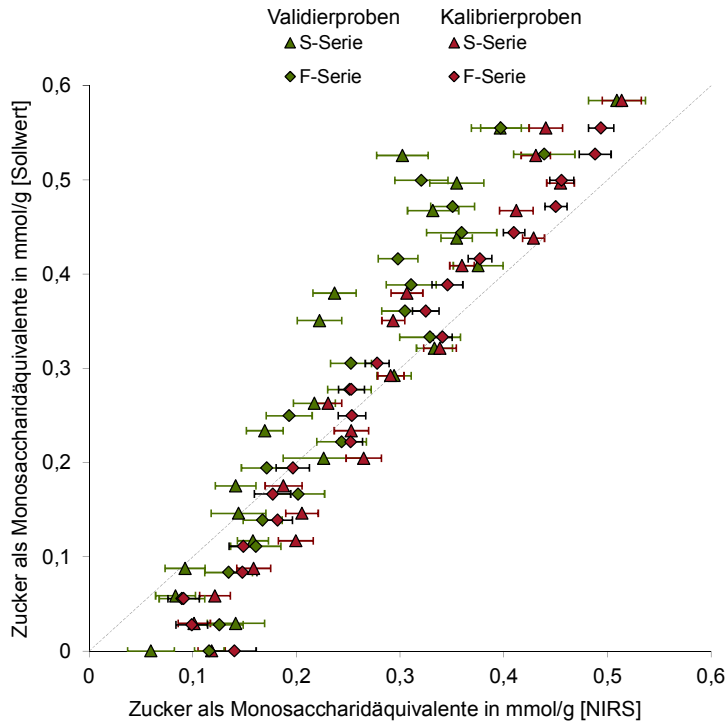


Abb. 5.6: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- bzw. Saccharose-Proben und der Validierung mit dem jeweilig entgegengesetzten Datensatz auf Basis der Zuckergehalte als Monosaccharidäquivalente in mmol/g

Tab. 5.2: Statistische Kenngrößen (b = Steigung der Regressionsgeraden, a = y-Achsenabschnitt, R^2 = Bestimmtheitsmaß, \bar{x}_{SE} = mittlere Standardfehler und BIAS = Differenz Sollwert – NIRS-Wert) für die Kalibrier- bzw. Validiermodelle für die Saccharose- (S-Serie) und Fructoseprobenserien (F-Serie) unter Nutzung der die massenbezogenen sowie der auf mmol Zuckermoleküle bzw. mmol Monosaccharidäquivalente (MsÄq) bezogenen Sollwerte

	Kalibrierung			Validierung		
	mg/g	mmol/g	MsÄq mmol /g	mg/g	mmol/g	MsÄq mmol /g
S-Serie						
b	1,4	1,4	1,4	1,3	0,7	1,4
a	-21,7	-0,1	-0,1	-8,7	0,0	-0,1
R^2	0,96	0,96	0,96	0,85	0,85	0,85
\bar{x}_{SE}	2,55	0,007	0,015	4,05	0,023	0,023
BIAS	-0,2	-0,001	-0,001	-5,9	0,10	-0,05
F-Serie						
b	1,3	1,3	1,3	1,7	3,3	1,7
a	-16,2	-0,1	-0,1	-24,4	-0,1	-0,1
R^2	0,97	0,97	0,97	0,93	0,93	0,93
\bar{x}_{SE}	2,44	0,014	0,014	3,97	0,012	0,023
BIAS	0,7	-0,10	-0,04	-5,9	-0,15	-0,03

Bei den gemeinsamen Kalibriermodellen für die S- und F-Serien auf Basis der Masse (mg/g) bzw. auf Basis von mmol Monosaccharidäquivalenten (MsÄq mmol/g) werden für beide Datensätze vergleichbare Vorhersageleistungen erreicht. So werden sowohl für den gesamten Datensatz als für die beiden einzelnen Datensätze Bestimmtheitsmaße für die Kreuzvalidierung von 0,89 bis 0,94 erreicht (Tab. 5.3). Auch die Steigungen der Regressionsgeraden sind mit 1,6 bzw. 1,7 in allen Fällen vergleichbar. Wie bereits bei den getrennten Kalibriermodellen erfolgen eine systematische Überschätzung bei Proben mit geringen Gehalten und eine systematische Unterschätzung bei Proben mit hohen Gehalten. Für die Modelle auf Basis von mmol Zucker (Fructose + Saccharose) je Gramm ergeben sich zwar ebenfalls hohe Bestimmtheitsmaße ($R_{CV}^2 \geq 0,90$), allerdings unterscheiden sich die Steigungen der Regressionsgeraden für die S-Serie ($b = 1,2$) und die F-Serie ($b = 2,2$) deutlich.

Beim Streudiagramm für die Validierung beim massebezogenen Modell (Abb. 5.7) fällt zuallererst die relative große Streuung bei den Proben der GS-Serie auf. Der mittlere Standardfehler dieser Probenserie beträgt 15,9 mg/g, während er bei der GFS-Serie mit 6,3 mg/g deutlich geringer ist. Zwar liegen alle Werte oberhalb der ersten Winkelhalbierenden, die Summe aller enthaltenen Zucker wird somit systematisch unterschätzt (GS-Serie: BIAS = 67 mg/g, GFS-Serie: BIAS = 107 mg/g). Allerdings wird die in den Kalibriermodellen nicht als Einzelzucker enthaltene Glucose zumindest teilweise von den Modellen miterfasst.

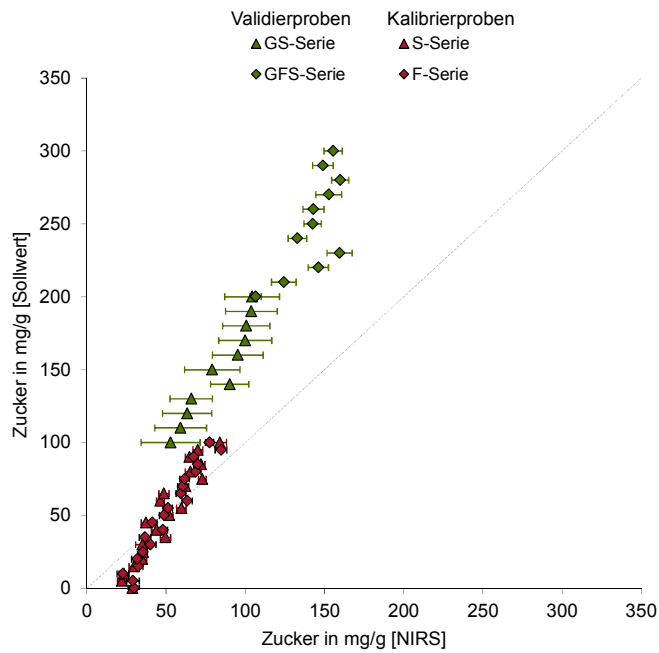


Abb. 5.7: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- und Saccharose-Proben und die Validierung mit den GS- bzw. GFS-Serien auf Basis der Zuckergehalte in mg/g

Ein vergleichbares Bild wie für das massebezogene Modell ergibt sich beim Modell, das auf der Menge Monosaccharidäquivalente basiert (Abb. 5.8). Anders sieht es beim Modell auf Basis von mmol Zucker – ohne Unterscheidung zwischen Mono- und Disaccharid – aus. Während bei den beiden zuvor beschriebenen Modellen der BIAS etwa 25 % des mittleren Sollwerts ausmacht sind es bei diesem Modell fast 40 % (Abb. 5.9).

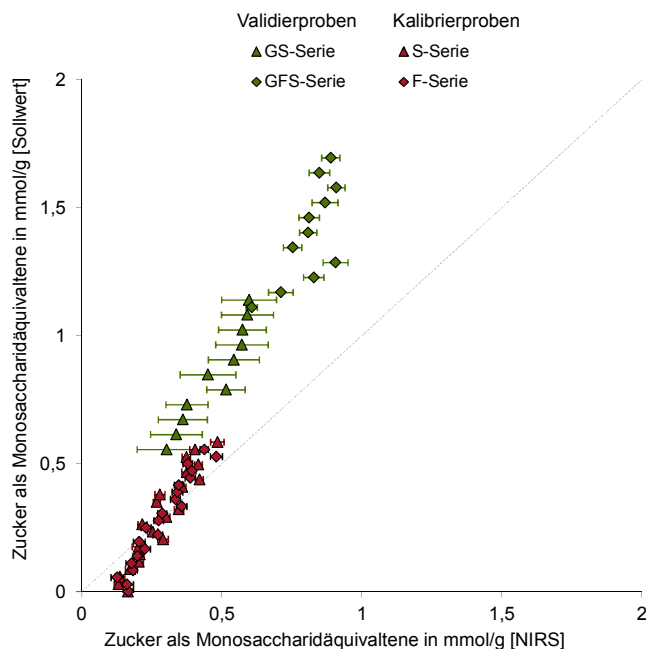


Abb. 5.8: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- und Saccharose-Proben und die Validierung mit den GS- bzw. GFS-Serien auf Basis der Zuckergehalte als Monosaccharidäquivalente in mmol/g

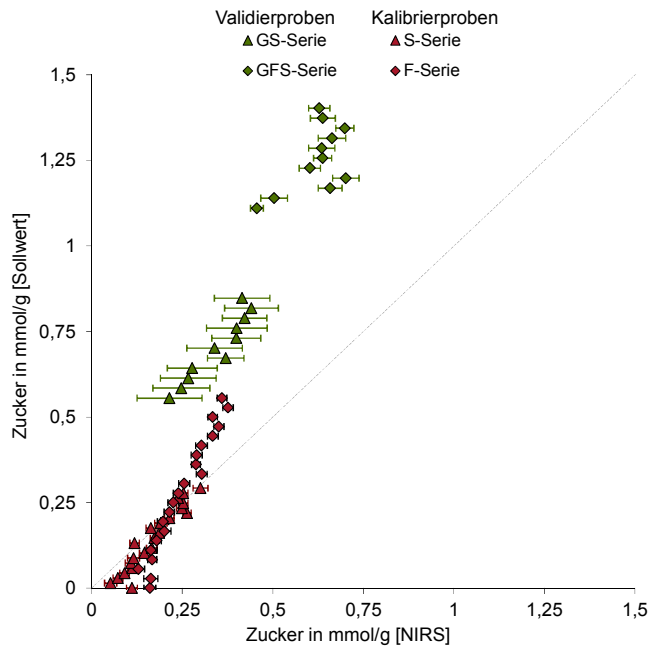


Abb. 5.9: Streudiagramme für die Kreuzvalidierung der Datensätze mit den Fructose- und Saccharose-Proben und die Validierung mit den GS- bzw. GFS-Serien auf Basis der Zuckergehalte in mmol/g

Tab. 5.3: Statistische Kenngrößen (b = Steigung der Regressionsgeraden, a = y-Achsenabschnitt, R^2 = Bestimmtheitsmaß, \bar{x}_{SE} = mittlere Standardfehler und BIAS = Differenz Sollwert – NIRS-Wert) für die Kalibriermodelle für die Saccharose- (S-Serie) und Fructoseprobenserien (F-Serie) und die Validierung des Modells mit den GS- und GFS-Probenserien unter Nutzung der massenbezogenen sowie der auf mmol Zuckermoleküle bzw. mmol Monosaccharidäquivalente (MsÄq) bezogenen Sollwerte

	mg/g	mmol/g	mmol MsÄq/g
Kalibrierung			
S-Serie			
b	1,6	1,2	1,7
a	-30,7	-0,1	-0,2
R^2	0,90	0,91	0,89
\bar{x}_{SE}	2,97	0,014	0,017
BIAS	0,6	0,0	0,0
F-Serie			
b	1,7	2,2	1,7
a	-35,6	-0,3	-0,2
R^2	0,94	0,96	0,94
\bar{x}_{SE}	3,18	0,015	0,018
BIAS	-0,5	0,0	0,0
S- und F-Serie			
b	1,7	1,7	1,7
a	-33,0	-0,2	-0,2
R^2	0,92	0,90	0,91
\bar{x}_{SE}	3,07	0,015	0,017
BIAS	0,0	0,0	0,0
Validierung			
GS-Serie			
b	1,6	1,2	1,6
a	16,2	0,3	0,1
R^2	0,91	0,90	0,91
\bar{x}_{SE}	15,9	0,073	0,090
BIAS	66,9	0,4	0,4
GFS-Serie			
b	1,4	0,7	1,5
a	43,4	0,8	0,2
R^2	0,50	0,34	0,51
\bar{x}_{SE}	6,31	0,031	0,036
BIAS	107,1	0,6	0,6

Zwischen den in den Kalibriermodellen für die F- bzw. S-Serie genutzten signifikanten Wellenlängen besteht eine hochsignifikante Korrelation ($r = 0,84$; $p \leq 0,001$). Wie bei den realen Proben (Abb. 4.22) werden bei den Gelrite™-Platten die Wellenlängenbereiche von 1000 bis 1400 nm und von 1550 bis 1690 nm im Wesentlichen für die Modellbildung genutzt, während der Bereich von 1400 bis 1550 nm fast vollständig ausgespart wird. Im Gegensatz zu den Modellen für die realen Proben, bei denen sich die signifikanten Wellenlängen gleichmäßiger über die genannten Wellenlängenbereiche verteilen (Abb. 4.22), ist bei den Modellen für die Gelrite™-Platten der Abschnitt von 1100 bis 1280 nm von besonderer Bedeutung. Abb. 5.10 zeigt die gewichteten Regressionskoeffizienten für das gemeinsame Modell (F- und S-Serie) ohne Datenvorbehandlung, das für die Vorhersage der Proben aus der GS- und GFS-Serie genutzt wurde.

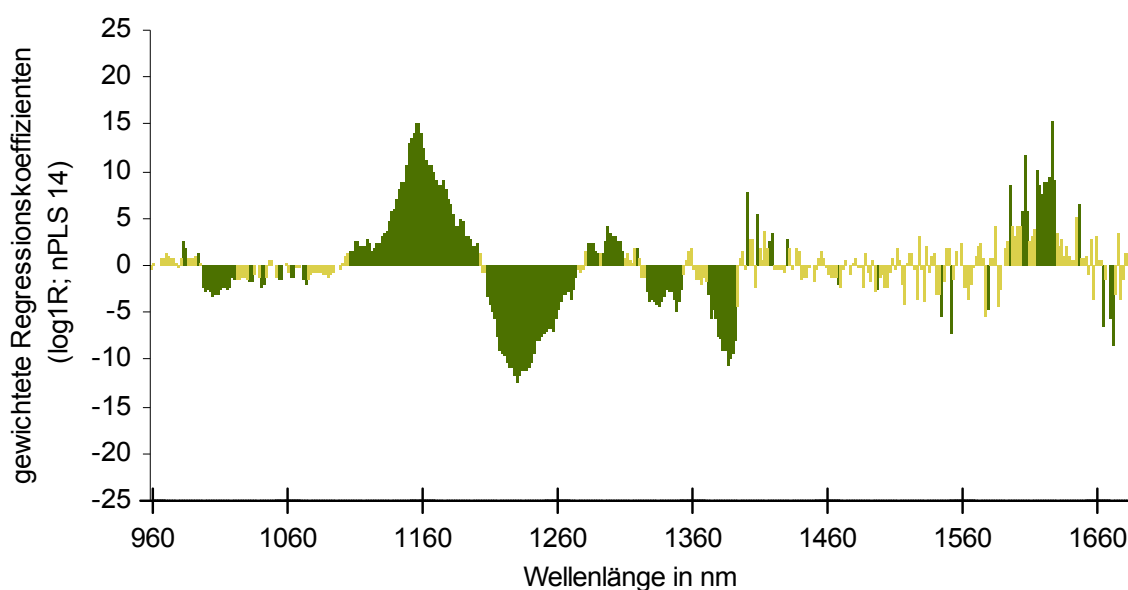


Abb. 5.10: Gewichtete Regressionskoeffizienten für die Zuckerkalibration bei Nutzung der Proben der F- und S-Serie ohne Datenvorbehandlung und 14 PLS-Faktoren (signifikante Wellenlängenbereiche sind grün, nicht signifikante gelb gekennzeichnet)

5.3 Diskussion

Die Ergebnisse zeigen eindeutig die Schwierigkeiten, einzelne Zucker in einer komplexen, wasserreichen Probenmatrix selektiv zu bestimmen. So wird durch eine nur auf Fructose basierenden Kalibration Saccharose vollständig erfasst und vice versa (Abb. 5.4 bis Abb. 5.6). Gleiches gilt für Glucose, die von einer auf Fructose und Saccharose basierenden Kalibrierung erfasst wird (Abb. 5.7 bis Abb. 5.9). Die enge Korrelation ($r = 0,84$; $p \leq 0,001$) zwischen den gewichteten Regressionskoeffizienten für die in den Kalibriermodellen für die Fructose- bzw. Saccharose-Proben genutzten Wellenlängen belegt die große spektrale Ähnlichkeit zwischen diesen beiden Zuckern. Diese Ergebnisse decken sich mit den im Stand des Wissens (2.2.3) erwähnten Arbeiten, bei denen ebenfalls identische Wellenlängen für die Modellbildung für die verschiedenen Einzelzucker genutzt wurden (Lanza und Li, 1984; Kemsley et al.,

1992; Tanaka und Kojima, 1996; Rambla et al., 1997). Dabei nutzen die Autoren allerdings vor allem den Wellenlängenbereich über 2000 nm, der in der vorliegenden Arbeit nicht zur Verfügung stand, so dass ein Vergleich der verwendeten Wellenlängen nicht möglich ist. Eine Aufstellung von Roggo et al. (2004) zeigt aber, dass der Wellenlängenbereich zwischen 1100 und 1270 nm, in dem sich die wichtigsten Wellenlängen der Modelle für die Gelrite™-Platten befinden, für die Bestimmung von Saccharose in unterschiedlichen wasserreichen Matrices genutzt wird. Dies ist vermutlich auf die zweiten Oberschwingungen der CH- bzw. CH₂-Bindungen zurückzuführen, die in diesem Wellenlängenbereich liegen (Xiaobo et al. 2010).

Die nicht selektive Erfassung von Fructose- und Glucosemonomeren zeigt sich auch bei den auf der Zuckermenge (mmol/g) basierenden Modellen an der Überschätzung der Saccharoseproben mit dem Fructose-Modell und der Unterschätzung der Fructoseproben im umgekehrten Fall (Abb. 5.5), während bei den Modellen auf Basis der Zuckermasse (Abb. 5.4) bzw. auf Basis der Einzelzuckeräquivalente (Abb. 5.6) jeweils vergleichbare Vorhersagen erzielt werden. Die beiden in jedem Saccharosemolekül enthaltenen Fructose- bzw. Glucosemonomere lassen sich spektral nicht trennen, dementsprechend entspricht eine Probe mit zwei mol Fructose spektral einer Probe mit einem mol Saccharose. Auf Grund der relativ vergleichbaren Umrechnungsfaktoren von der Zuckermasse auf mmol Einzelzuckeräquivalente bei den drei Zuckern ($5,84 \cdot 10^{-3}$ für Saccharose und $5,55 \cdot 10^{-3}$ für Fructose bzw. Glucose) ergeben sich bei den Modellen auf Basis der Zuckermasse sowie auf Basis von Monosaccharidäquivalenten keine großen Unterschiede. Da, wie in Abschnitt 4.1.3.4 beschrieben, bei der Referenzanalytik Glucoseäquivalente bestimmt und für die Umrechnung auf massebezogene Werte bei der Stärke das Molekulargewicht der Glucose genutzt wurde, ist die Wahl der Bezugsbasis bei den Stecklingsproben nicht von Belang. Die Ergebnisse der Validierung für die GS- und GFS-Serien (Abb. 5.7), bei denen auch die nicht in den Kalibrierproben als Monomer enthaltene Glucose erfasst wird, bestätigen die nicht selektive Erfassung der drei verschiedenen Einzelzucker.

Grundsätzlich zeigen die Arbeiten mit den Gelrite™-Platten aber, dass eine Bestimmung der löslichen Zucker in Stecklingen möglich ist, auch wenn dies in der vorliegenden Arbeit nicht erreicht wurde (Abschnitt 4.2.3.3). Ursächlich hierfür dürften die überwiegend sehr geringen Gehalte sein. So wiesen 75 % der Stecklinge Blatt-TSS-Gehalte von weniger als 7 bzw. 14 mg/g (Chrysanthenen bzw. Pelargonien; Tab. 10.4 und Tab. 10.6) auf. Dies ist im Wesentlichen auf eine starke Verarmung bei den transportierten Stecklingen sowie die relativ geringe Assimilatakkumulation von Stecklingen die während der Winterhalbjahre von Beständen an der HSWT geerntet wurden zurückzuführen. Notwendig für eine erfolgreiche Kalibrationsentwicklung wäre ein größerer Anteil an Proben mit höheren Zuckergehalten, wie sie in der Literatur beschrieben werden (Druege et al., 2000; Rapaka et al., 2005; Rapaka et al., 2008; Zerche und Druege, 2009) und auch in der vorliegenden Untersuchung vereinzelt auftraten.

Neben der Frage der Selektivität zeigen die beschriebenen Arbeiten zusätzlich auch das Potential der entwickelten "künstlichen Probe". Zum einen kann dieser Ansatz zukünftig verwendet werden, um neben der Selektivität auch die Bestimmungsgrenzen zu ermitteln oder den Einfluss von Umgebungsbedingungen (Probentemperatur, Gerätetemperatur) gezielt zu untersuchen. Zum anderen können diese künstlichen Proben für die Qualitätssicherung bei einem zukünftigen Praxiseinsatz genutzt werden. Um langfristig die Richtigkeit der Analysenwerte zu sichern und technische Defekte, z. B. eine Wellenlängendrift des Spektrometers frühzeitig zu bemerken, ist eine regelmäßige Messung von Referenzmaterialien notwendig. Da die entwickelten Gelrite™-Proben eine vergleichbare Matrix wie die realen Proben aufweisen, sind diese hierfür deutlich besser geeignet als getrocknetes Material, dass derzeit in der Regel genutzt wird (Brimmer und Hall, 2001; Dieterle et al., 2003).

6 (I.3) Übertragung der Basiskalibriermodelle auf Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienstecklinge

Wie im ersten Abschnitt (I.1) deutlich wurde, ist die Entwicklung von NIRS-Kalibrationsmodellen mit einem erheblichen Aufwand verbunden. Insbesondere muss eine große Anzahl Proben zusätzlich zu den spektroskopischen Messungen auch referenzanalytisch untersucht werden. Im Rahmen dieses Abschnitts wird untersucht, ob die für Chrysanthemen- und Pelargonienstecklinge entwickelte Basiskalibration bei weiteren Kulturen – Poinsettien (Po), Impatiens (Im) und Osteospermum (Os) – angewandt werden kann bzw. ob die Ausweitung des Anwendungsbereichs mit einer relativ geringen Anzahl Proben möglich ist.

6.1 Material und Methoden

Die Proben dieser drei Gattungen stammten wie bei den Chrysanthemen und Pelargonien von Mutterpflanzen mit differenzierter N-Versorgung sowie aus der laufenden Produktion der drei Jungpflanzenbetriebe. Im Gegensatz zu den Chrysanthemen- und Pelargonienmutterpflanzen erfolgte die Kultur der differenziert mit Stickstoff versorgten Mutterpflanzen jedoch nicht in Deutschland, sondern parallel zur laufenden Produktion an Südstandorten in Äthiopien (Poinsettien), Costa Rica (Osteospermum) und Israel (Impatiens Neu-Guinea). Von jeder Gattung wurde ein Mutterpflanzenbestand mit jeweils drei Sorten und drei Stickstoffdüngungsstufen kultiviert, der jeweils viermal im Abstand von etwa vier Wochen beerntet wurde. Zeitgleich wurden Stecklinge von drei weiteren Sorten aus der laufenden Produktion geerntet (Niederländer, 2012; Dümmer GmbH, 2013; Endisch GmbH, 2013). Die Herkunft und Zusammensetzung der Datensätze für die drei Kulturen ist in Tab. 6.1 [A-C] dargestellt, wobei nur bei den Osteospermumproben alle Lieferungen vollständig waren, während bei den Poinsettien und Impatiens einzelne Proben mit der betriebsüblichen Düngung aus produktionstechnischen

Gründen von den beiden Jungpflanzenfirmen nicht zu jedem der vier Termine geliefert werden konnten.

Tab. 6.1: Zusammenstellung (Herkünfte, Sorten, Düngung und Erntetermine) der für die Kalibrationserweiterung genutzten [A] Poinsettien-, [B] Osteospermum- und [C] Impatiens Neu-Guinea-Proben

Herkunft	Sorten	Stickstoffversorgung	Erntetermine (KW/Jahr)
[A] Poinsettien			
Dümmen/ Äthiopien	E-1 bis E-3	3-Stufen	25/2011
		▪ Mangel	28/2011
		▪ Optimum	32/2011
	▪ Überschuss	35/2011	
	E-4 bis E-6	Betriebsübliche Düngung	
[B] Osteospermum			
Kientzler/ Costa Rica	O-1 bis O-3	3-Stufen	02/2012
		▪ Mangel	07/2012
		▪ Optimum	11/2012
	▪ Überschuss	16/2012	
	O-4 bis O-6	Betriebsübliche Düngung	
[C] Impatiens Neu-Guinea			
Endisch/ Ägypten	I-1 bis I-3	3-Stufen	51/2011
		▪ Mangel	03/2012
		▪ Optimum	07/2012
	▪ Überschuss	11/2012	
	I-4 bis I-5	Betriebsübliche Düngung	

Wie bei den Chrysanthemen und Pelargonien beschrieben, wurden auch bei diesen drei Kulturen die Spektren mittels einer PCA sowie einer LDA auf spektrale Auffälligkeiten geprüft. Die Aufteilung in ein Kalibrier- und ein Validierprobenset erfolgte analog zu den Chrysanthemen und Pelargonien nach den Inhaltsstoffgehalten (TS, Gesamt-N und Blatt-TNC). In Tab. 10.7 und Tab. 10.8 sind die Verteilungen der Inhaltsstoffgehalte in den Kalibrier- und Validierdatensätzen sowie deren Umfang jeweils getrennt nach Kulturen (Po, Os, Im) bzw. gemeinsam (Alle) dargestellt.

In einem ersten Schritt wurden die mit den Chrysanthemen- und Pelargonienproben entwickelten Basiskalibriermodelle für jeden Inhaltsstoff auf die Validierdatensätze der drei Kulturen angewandt ("Basis"). Dabei wurden nur die Inhaltsstoffe berücksichtigt, bei denen die Vorhersageleistung der Basiskalibrierung zumindest zufriedenstellend war (TS, Protein-N, Gesamt-N, eNF, oNF mit den Spektren der ganzen Stecklinge sowie Blatt-TNC mit den BO-Spektren). Die Blattstärke wurde bei der Kalibrationserweiterung ausgeklammert, obwohl nutzbare Kalibriermodelle erreicht wurden, da die Impatiens- und Poinsettienproben mit ma-

ximal 7 mg/g nur sehr geringe Blattstärkegehalte aufwiesen und bei den Osteospermumproben fast gar keine Blattstärke (Maximalwert = 0,8 mg/g) nachweisbar war.

Im nächsten Schritt wurden die Kalibrierdatensätze aller sechs Kulturen (Ch, Pz, Pp, Im, Os, Po) zusammengefügt, die Kalibriermodelle neu erstellt und die Validierung für alle Kulturen neu berechnet ("Gesamt"). Im letzten Schritt wurde geprüft, welchen Einfluss die ungleiche Verteilung der verschiedenen Kulturen im Kalibrierdatensatz (jeweils ca. 200 Ch- und Pz-Proben im Vergleich zu jeweils ca. 30 Proben von Pp, Im, Os und Po) auf die Vorhersagegenauigkeit hat. Hierfür wurde jede zweite Ch- bzw. Pz-Probe aus dem Kalibrierdatensatz entfernt und die Kalibrierungen und Validierungen erneut berechnet ("Reduziert"). Im Unterschied zu den Basiskalibriermodellen, bei denen zehn unterschiedliche Verfahren zur Streulichtkorrektur auf ihre Eignung geprüft wurden (Abschnitt 4.2.2), fanden bei der Ausweitung der Kalibriermodelle nur vier Verfahren (OBC+NM, SNV, SNV+DT und MSC) Verwendung, da diese bei den Basiskalibriermodellen im Mittel die besten Ergebnisse erbrachten (Abschnitt 4.3.1). Zusätzlich wurden noch Modelle mit den untransformierten $\log 1/R$ -Spektren berechnet. Die Güte der verschiedenen Modelle wurde an Hand der im Abschnitt 4.1.4.1 beschriebenen Kenngrößen beurteilt.

6.2 Ergebnisse

6.2.1 Ausreißerererkennung und Populationsbeschreibung

Bei keiner der drei Kulturen traten Ausreißer oder Fehlklassifizierungen auf. Wie bereits bei den Chrysanthemen und Pelargonien unterscheiden sich die Spektren der Blattoberseiten deutlich von denen der Blattunterseiten sowie denen der ganzen Stecklinge, wobei die beiden letzteren nicht eindeutig voneinander zu trennen sind. Bei der PCA ist in den ersten beiden Hauptkomponenten eine deutliche Gruppierung der drei Kulturen zu erkennen: insbesondere die Poinsettien-Spektren bilden einen vollständig eigenen Cluster, während sich die Impatiens- und Osteospermumspektren zumindest teilweise überlagern. In den höheren Hauptkomponenten sind dann aber keine Auffälligkeiten mehr zu erkennen (Abb. 6.1 [A+B]).

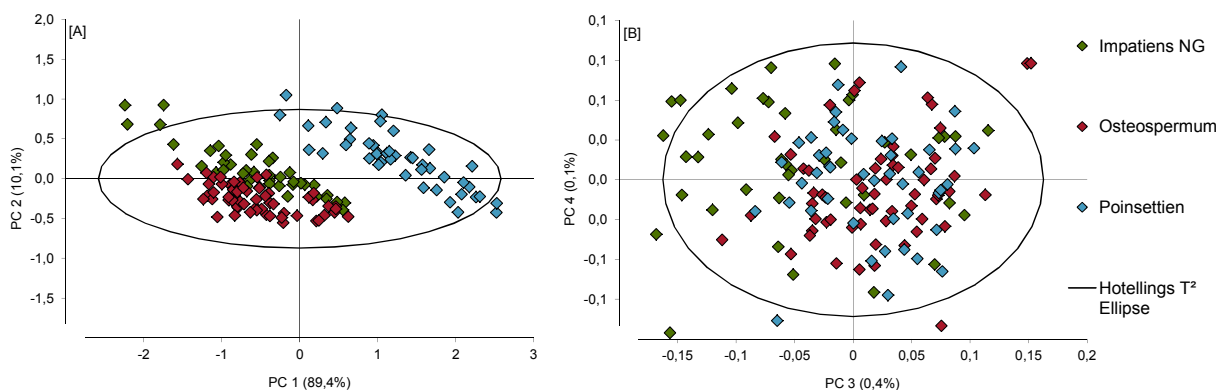


Abb. 6.1: PCA-Plots für die erste und zweite [A] bzw. die dritte und vierte [B] Hauptkomponente unter Verwendung der untransformierten $\log 1/R$ -Spektren von Impatiens, Osteospermum und Poinsettien

Durch eine Streulichtkorrektur vor Berechnung der PCA ändert sich an der Clusterbildung innerhalb der ersten beiden Hauptkomponenten nichts, allerdings wird der Anteil der durch die beiden ersten Faktoren erklärten spektralen Varianz von 89 auf 86 % etwas gesenkt.

Wird die PCA (nach einer MSC-Streulichtkorrektur) auf alle sechs Kulturen ausgedehnt (Abb. 6.2 [A]), zeigen die Poinsettienstecklinge in den ersten beiden Hauptkomponenten weiterhin spektrale Auffälligkeiten und eine Reihe von Proben liegt auch außerhalb der 5 % Hotellings-T²-Ellipse. Die Impatiens- und Osteospermumproben liegen dagegen genau im Zentrum der Population. Ab der dritten Hauptkomponente ist auch bei den Poinsettien keine Clusterbildung mehr zu erkennen und nur noch vereinzelte Proben liegen außerhalb der 5 % Hotellings-T²-Ellipse (Abb. 6.2 [B]). Ohne Streulichtkorrektur liegen auch die Osteospermumproben etwas außerhalb der Gesamtpopulation und die in der ersten Hauptkomponente erklärte Varianz ist mit knapp 95 % etwas größer.

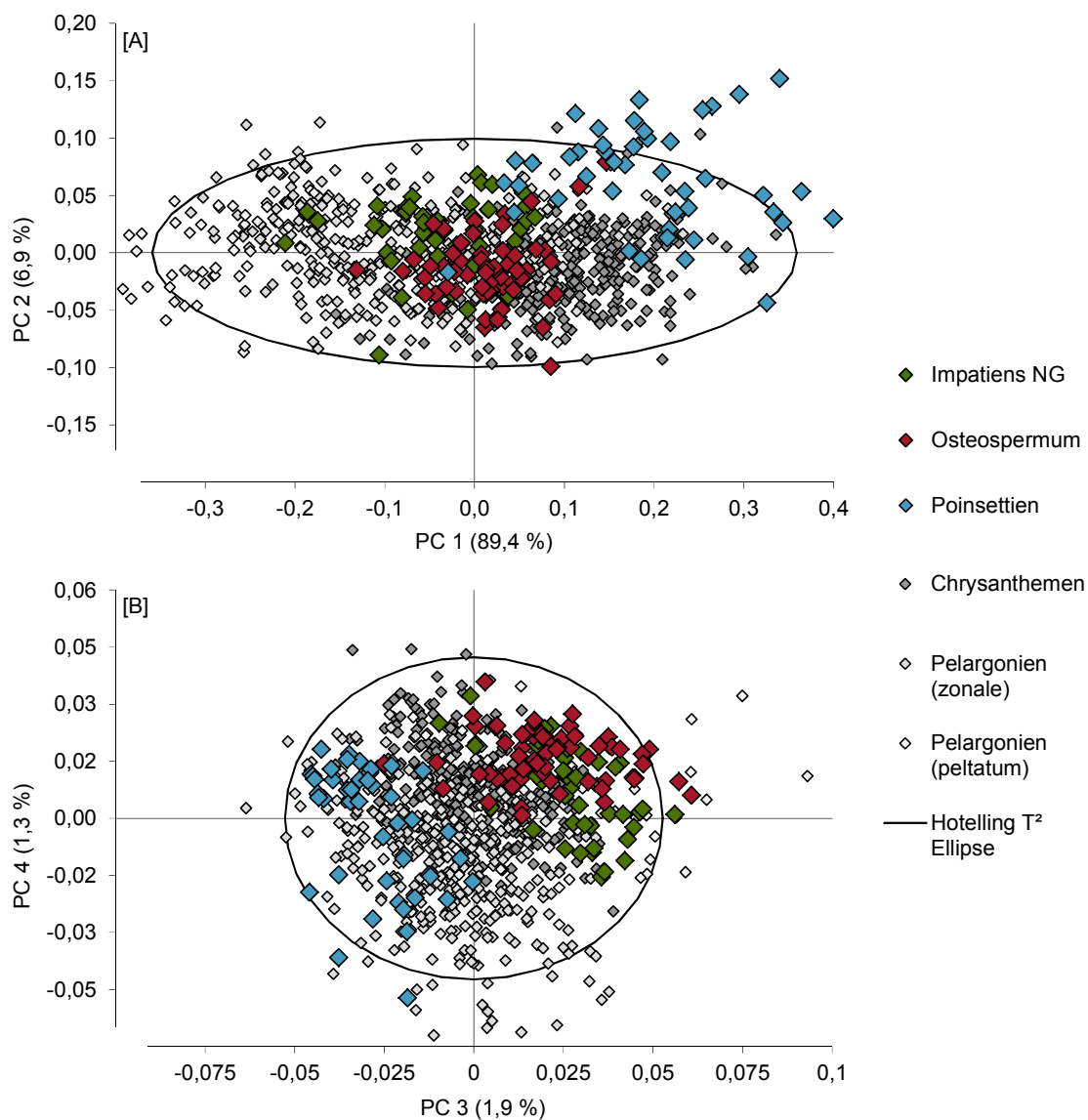


Abb. 6.2: PCA-Plots für die erste und zweite [A] bzw. die dritte und vierte [B] Hauptkomponente unter Verwendung der MSC-transformierten Spektren von Impatiens, Osteospermum und Poinsettien sowie Chrysanthemem und Pelargonien

6.2.2 Erweiterung der Kalibriermodelle auf Impatiens, Osteospermum und Poinsettien

6.2.2.1 Trockensubstanz

Die TS-Gehalte der Impatiens- und Osteospermumproben werden auch mit dem nur für Chrysanthemen- und Pelargonienproben entwickelten Modell recht gut bestimmt (Abb. 6.3 [A]). Beide Kulturen werden systematisch um 5 bis 7 mg/g überschätzt. Bei den Poinsettien ist eine Zweiteilung zu beobachten: Bei neun Proben ist die Abweichung zwischen Referenz- und NIRS-Wert kleiner als 10 mg/g, bei den restlichen sechs Proben ist der NIRS-Wert um 18 bis 26 mg/g größer als der Referenzwert, fünf dieser sechs Proben stammen dabei von einem Messtermin (KW 25/2011).

Eine Hinzunahme der Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienproben in das Kalibrationsmodell reduziert bei Impatiens und Osteospermum den systematischen Fehler (Abb. 6.3 [B]). Bei den Poinsettien werden die Abweichungen ebenfalls reduziert. Alle fünf Proben vom Termin in KW 25/2011 werden zwar weiterhin systematisch überschätzt, allerdings sind die Unterschiede zwischen Referenz- und NIRS-Wert mit 8 bis 15 mg/g nur noch etwa halb so groß.

Die Halbierung der Anzahl Ch- und Pz-Proben von jeweils etwa 200 auf ca. 100 verringert die Abweichung bei den Poinsettienproben nochmals leicht (Abb. 6.3 [C]). Bei den Impatiens und Osteospermum ergeben sich dadurch keine Veränderungen und auch bei den Chrysanthemen und Pelargonien wird die Genauigkeit der Vorhersage durch die reduzierte Probenzahl nicht negativ beeinflusst. Die statistischen Kennwerte der Validierung sind nach Gattungen aufgeschlüsselt in Tab. 6.2 aufgeführt.

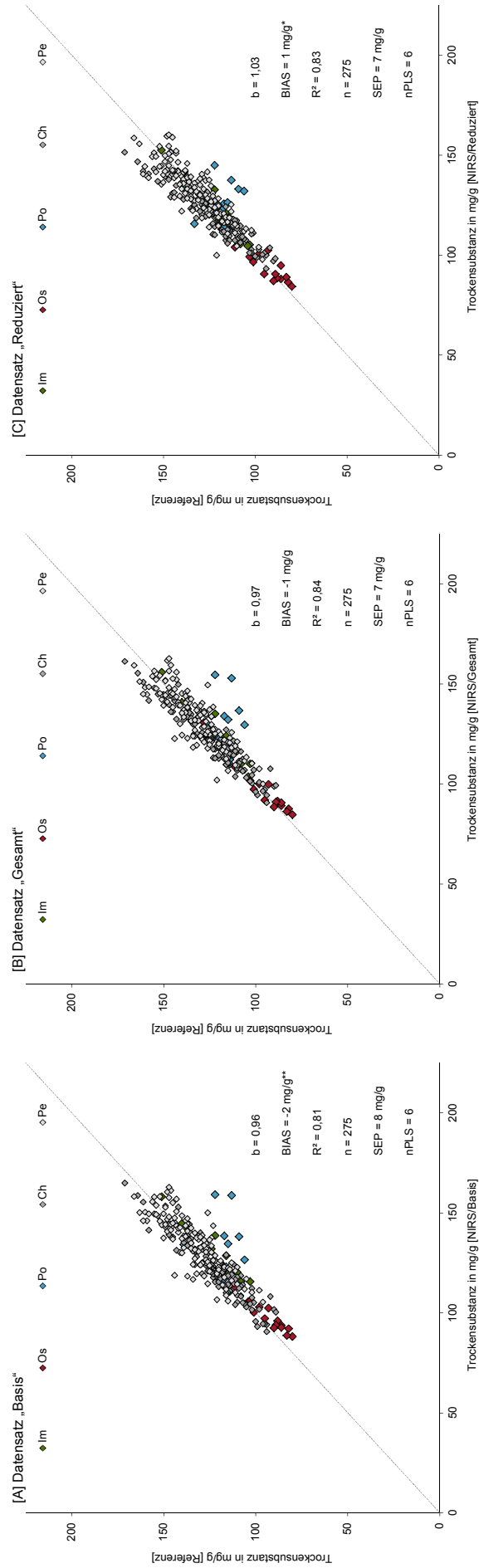


Abb. 6.3: Streudiagramme der TS-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthemem und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung in allen Fällen SNV; die statistischen Kenngrößen (b, R², SEP, BIAS) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthemem und Pelargonien)

6.2.2.2 Stickstofffraktionen

Protein-N

Beim Protein-N sind die Ergebnisse bei Verwendung des Basiskalibriermodells je nach Kultur völlig unterschiedlich. Die Impatiensproben werden systematisch um etwa 5 mg/g unterschätzt. Wird diese Abweichung zum NIRS-Wert hinzuaddiert werden alle Proben mit einer guten bis sehr guten Genauigkeit bestimmt. Bei den Osteospermumproben werden trotz einer relativ großen Spreizung der Referenzwerte von 24 bis 39 mg/g für alle Proben Werte von 30 ± 3 mg/g prognostiziert. Bei den Poinsettien wird für etwa die Hälfte der Proben der Protein-N recht gut prognostiziert, während ein Teil der Proben deutlich überschätzt wird (Abb. 6.4 [A]).

Durch die Erweiterung des Datensatzes wird die Protein-N-Bestimmung bei Impatiens, Osteospermum und Poinsettien deutlich verbessert. Die gilt insbesondere für die Impatiens und die Poinsettien. Auch bei den Osteospermum wird der Vorhersagefehler deutlich reduziert, allerdings werden weiterhin Proben mit geringeren Gehalten tendenziell über- und solche mit höheren tendenziell unterschätzt, d.h. die NIRS-Werte sind leicht um mittleren Protein-N-Gehalt von 31,7 mg/g der Osteospermumpopulation gedrängt. Auf die Genauigkeit der Protein-N-Bestimmung bei den Chrysanthemen und Pelargonien hat die Erweiterung des Datensatzes keine Auswirkung (Abb. 6.4 [B]).

Durch die Halbierung der Probenzahlen bei Chrysanthemen und Zonale-Pelargonien wird zwar die Vorhersageleistung bei den Impatiens, Osteospermum und Poinsettien nicht verbessert und bei den Chrysanthemen und Pelargonien steigt der SEP sogar um etwa 0,3 mg/g, allerdings werden für dieses Modell drei PLS-Faktoren weniger als für das Basismodell verwendet (Abb. 6.4 [C]). Die Kenngrößen zur Bewertung der Kalibriermodelle sind in Tab. 6.2 zusammengefasst.

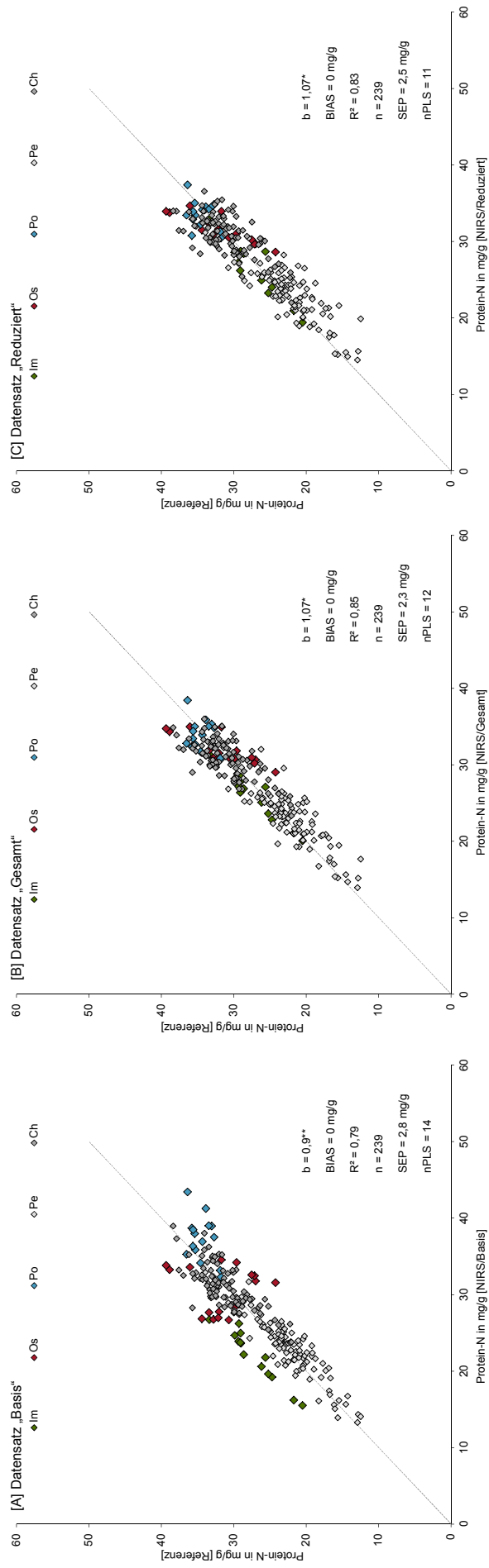


Abb. 6.4: Streudiagramme der Protein-N-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthemem und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung in allen Fällen SNV+DT; die statistischen Kenngrößen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthemem und Pelargonien)

Gesamt-N

Ähnlich wie beim Protein-N werden die Impatiensproben auch beim Gesamt-N mit der Basiskalibration systematisch um 7,2 mg/g unterschätzt. Bei den Osteospermum werden nur Proben mit sehr hohen Gesamt-N-Gehalten stark unterschätzt, während bei Proben mit niedrigen Gehalten die Unterschiede zwischen Referenz- und NIRS-Werten geringer sind. Insgesamt ist der SEP bei dieser Kultur mit 16,8 mg/g aber sehr groß. Bei den Poinsettien ist die Vorhersagegenauigkeit dagegen recht gut (SEP = 5,2 mg/g, BIAS = -3,5 mg/g).

Durch die Erweiterung des Kalibrierdatensatzes können die Vorhersageleistungen bei den Impatiens und Osteospermum deutlich verbessert werden. So sinkt bei den Impatiensproben der BIAS auf 2,0 mg/g und der SEP ist mit 3,8 mg/g sogar etwas kleiner als bei den Chrysanthemen und Pelargonien. Bei den Osteospermum sinkt der SEP zwar deutlich auf 6,2 mg/g, ist damit allerdings immer noch recht hoch. Bei den Poinsettien sinkt der SEP auf 3,4 mg/g und der BIAS wird vernachlässigbar klein. Bei den Chrysanthemen und Pelargonien steigen die SEP um 0,5 bzw. 0,4 mg/g im Vergleich zum Basiskalibriermodell an.

Durch die Herausnahme der Hälfte der Chrysanthemen- und Pelargonienproben wird die Vorhersagegenauigkeit bei Osteospermum nur noch geringfügig verbessert und bei Impatiens und Poinsettien sogar etwa reduziert. Bei den Chrysanthemen und Pelargonien ist – wie bei Impatiens und Osteospermum – ein Anstieg der SEP zu beobachten. Die statistischen Kenngrößen für die Beurteilung der Kalibriermodelle sind in Tab. 6.2 zusammengefasst.

extrahierbare N-Fractionen (eNF)

Bei der Anwendung des eNF-Basismodells auf die drei zusätzlichen Gattungen sind insbesondere bei den Osteospermum die Unterschiede zwischen den Referenz- und NIRS-Werten sehr groß (SEP und BIAS > 12 mg/g). Die Impatiens- und Poinsettienproben werden dagegen einigermaßen genau bestimmt, wobei die Poinsettien eine leichte systematische Überschätzung (BIAS = -2,5 mg/g) aufweisen.

Durch die Erweiterung des Kalibriersets kann die Vorhersageleistung insbesondere bei den Osteospermum deutlich verbessert werden, wobei die Proben weiterhin eine leicht systematische Abweichung aufweisen (SEP = 4,5 mg/g, BIAS = 3,9 mg/g). Mit SEP von 2,2 bzw. 2,7 mg/g und zu vernachlässigenden BIAS liegen die Vorhersageleistungen für die Poinsettien- und Impatiensproben im Bereich derer für die Chrysanthemen und Pelargonien.

Durch die Reduktion der Chrysanthemen- und Pelargonienproben kann die systematische Abweichung bei den Osteospermum nochmals leicht reduziert werden. Allerdings steigen dadurch auch die SEP für die Chrysanthemen- und Pelargonienproben um etwa 0,5 mg/g an (Tab. 6.2).

organische N-Fractionen (oNF)

Beim oNF werden vergleichbare Ergebnisse wie beim Gesamt-N erzielt. Mit der Basiskalibration werden die Impatiens systematisch unterschätzt (BIAS = 5,6 mg/g) und die Osteospermum weisen große Abweichungen auf (SEP = 10,2 mg/g). Zwar werden alle Osteospermumproben unterschätzt (BIAS 8,6 mg/g), allerdings unterscheiden sich die Differenzen zwischen den Referenz- und NIRS-Werten in Abhängigkeit vom oNF-Gehalt der Proben zum Teil erheblich. Bei den Poinsettien sind die Abweichungen geringer. Zudem werden die Poinsettien systematisch überschätzt (SEP = 4,3 mg/g; BIAS -2,8 mg/g).

Im Gegensatz zur Trockensubstanz und den übrigen Stickstofffraktionen, bei denen jeweils die gleiche Art der Streulichtkorrektur die besten Ergebnisse lieferte, wurden bei der Summe der organischen N-Fractionen nach der Hinzunahme der Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienproben in den Kalibrierdatensatz die besten Vorhersageleistungen nicht mehr nach einer Vorbehandlung mittels SNV+DT, sondern mit OBC+NM erzielt. Auch bei der Basiskalibration waren die Vorhersageleistungen mit den beiden Transformationsalgorithmen bereits vergleichbar, wobei mit OBC+NM allerdings mehr PLS-Faktoren benötigt wurden (Tab. 10.9). Die Erweiterung des Kalibrierdatensatzes reduziert die Abweichungen bei Impatiens (BIAS = 1,8 mg/g; SEP = 3,6 mg/g) und Osteospermum (BIAS = 2,6 mg/g; SEP = 4,1 mg/g) erheblich. Auch bei den Poinsettien ist nochmals eine leichte Verbesserung zu beobachten (BIAS = 0,0 mg/g; SEP = 3,1 mg/g). Bei den Chrysanthemen bleibt die Vorhersageleistung gleich, bei den Pelargonien steigt der SEP dagegen um 0,7 mg/g an.

Die Reduktion der Anzahl Chrysanthemen- und Pelargonienproben bewirkt bei Impatiens, Osteospermum und Poinsettien keine weitere Verbesserung der Vorhersageleistung mehr, aber bei den Chrysanthemen und Pelargonien eine geringfügige Verschlechterung. Auch für den reduzierten Datensatz werden die besten Vorhersageleistungen nach einer Transformation der Spektren mittels OBC+NM erzielt. Die Abb. 6.5 [A-C] zeigt die Streudiagramme der Validierungen und die wichtigsten Kenngrößen zur Beurteilung der Modellgüte. Die kulturspezifischen Kennwerte der Validierung finden sich in Tab. 6.2.

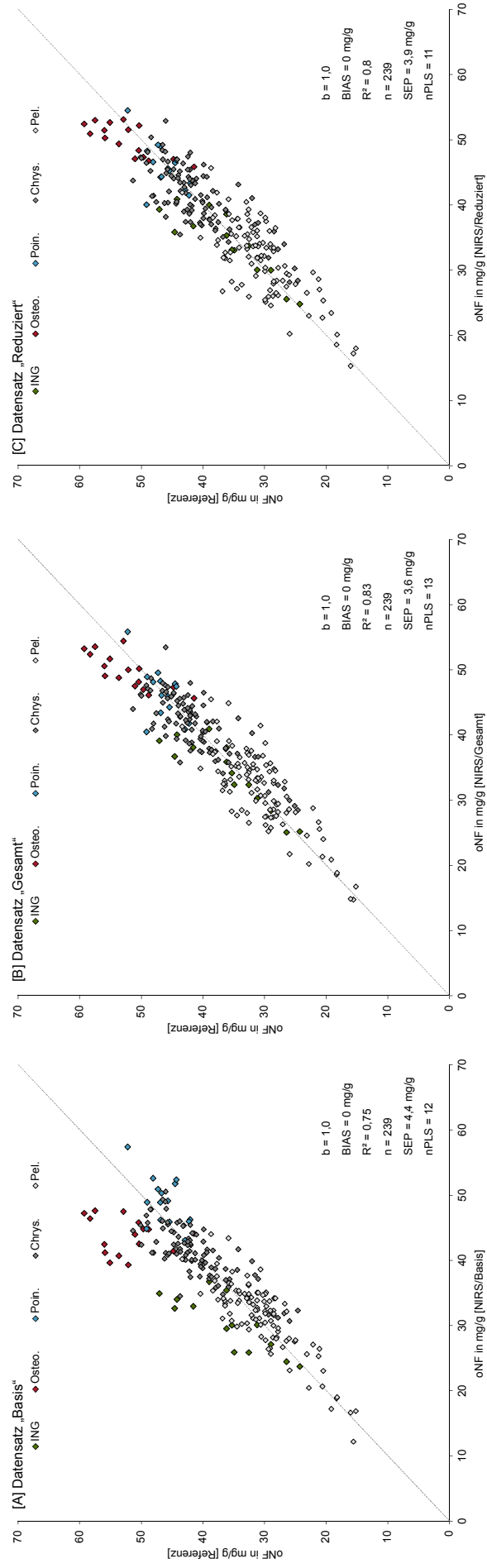


Abb. 6.5: Streudiagramme der oNF-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthemem und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung beim Basiskalibriermodell SNV+DT, bei den Modellen mit dem gesamten bzw. reduzierten Datensatz OBC+NM; die statistischen Kenngrößen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthemem und Pelargonien)

6.2.2.3 Blattkohlenhydratgehalte

Blatt-TNC

Für keine der drei Kulturen werden mit dem Basiskalibriermodell bei den Blatt-TNC-Gehalten auch nur annähernd zufriedenstellende Vorhersageleistungen erzielt. Bei den Impatiensproben ist nur eine grobe Unterscheidung in Proben mit Blatt-TNC-Gehalten über bzw. unter 20 mg/g zu erkennen. Bei den Osteospermum und Poinsettien ist nicht einmal dies möglich. So wird z. B. bei Osteospermum für Proben mit weniger als 10 mg/g und solche mit etwa 30 mg/g derselbe Blatt-TNC-Gehalt von 15 mg/g prognostiziert (Abb. 6.6 [A]).

Durch die Erweiterung des Kalibrierdatensatzes werden die Vorhersageleistungen bei allen Kulturen etwas verbessert, so dass zumindest eine Unterscheidung von stark an Blatt-KH verarmten Proben und solchen mit gewissen KH-Reserven möglich ist. Aber vor allem die wenigen Proben mit sehr hohen Blatt-TNC-Gehalten weisen zumeist sehr große Abweichungen zwischen Referenz- und NIRS-Wert auf (Abb. 6.6 [B]).

Durch die Reduktion der Chrysanthemen- und Pelargonienproben kann die Genauigkeit bei den drei neuen Gattungen nicht merklich gesteigert werden, gleichzeitig steigen die SEP bei Chrysanthemen und Pelargonien wie zuvor bei den N-Fractionen etwas an. Während beim Kalibriermodell unter Nutzung des gesamten Datensatzes für Chrysanthemen ein SEP von 6,5 und bei Pelargonien einer von 6,7 mg/g erreicht werden, sind es nach der Reduktion der Anzahl der Chrysanthemen- und Pelargonienproben 7,9 bzw. 7,0 mg/g (Abb. 6.6 [C]).

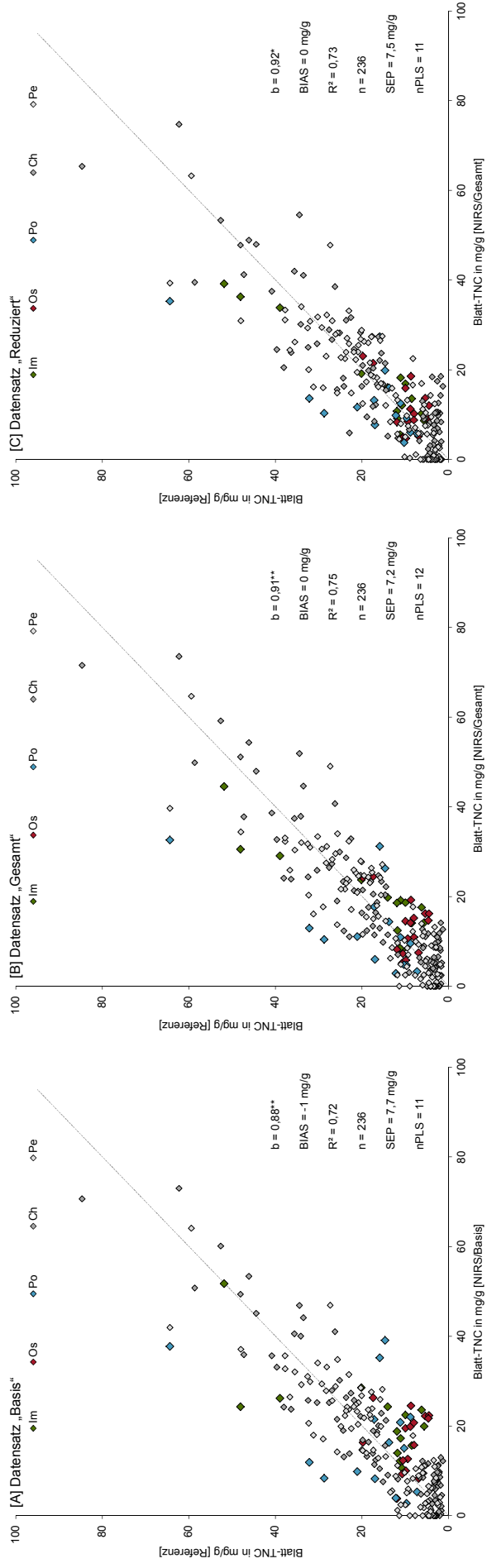


Abb. 6.6: Streudiagramme der Blatt-TNC-Validierungen bei Nutzung von: [A] des Basis-Kalibriermodells (Basis), [B] des Modells für den gesamten Datensatz (Gesamt), sowie [C] des bei den Chrysanthemem und Pelargonien-Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert); Datenvorbehandlung bei [A] und [B] SNV+DT, bei [C] MSC; die statistischen Kenngrößen (b, BIAS, R², SEP) gelten für den gesamten Datensatz (Impatiens, Osteospermum, Poinsettien, Chrysanthemem und Pelargonien)

Tab. 6.2: Statistische Kenngrößen der Validierung für die TS-, Protein-N-, Gesamt-N-, eNF-, oNF-, sowie Blatt-TNC-Gehalte für die Erweiterung des Anwendungsbereichs bei Anwendung der Modelle für Chrysanthemen und Pelargonien (Basis), der Modelle für alle Kulturen (Gesamt) und Modells für den bei Chrysanthemen und Pelargonien Zonale reduzierten Datensatzes (Reduziert), getrennt nach Chrysanthemen (Ch), Pelargonien (Pe) Impatiens (Im), Osteospermum (Os) und Poinsettien (Po) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Alle)

Referenzwerte		Validierung "Basis"					Validierung "Gesamt"					Validierung "Reduziert"										
		n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS					
TS [mg/g]		SNV; nPLS = 6																				
Ch	102	121	17	82	6	0,88	2,9	14,0	1,05	0	6	0,90	2,9	14,3	1,10	1	7	0,88	2,3	11,2	1,28	3
Pe	128	133	14	70	8	0,69	1,7	8,4	0,87	-1	8	0,72	1,8	8,9	0,90	-1	8	0,72	1,9	9,0	0,93	1
Im	14	120	14	48	9	0,89	1,6	5,5	0,92	-7	5	0,92	2,6	8,8	0,93	-3	4	0,91	3,2	10,9	0,98	-1
Os	16	96	14	48	6	0,95	2,2	7,7	1,05	-5	4	0,95	3,7	13,1	1,04	-2	5	0,87	2,7	9,4	1,14	-1
Po	15	119	9	33	15	0,56	0,6	2,2	0,42	18	3	0,64	0,7	2,5	0,53	22	9	0,62	0,9	3,6	0,68	23
Alle	275	125	18	91	8	0,81	2,3	11,5	0,96	-2	7	0,84	2,5	12,7	0,97	-1	7	0,83	2,4	12,3	1,03	1
Protein-N [mg/g i.d.TM]		SNV+DT; nPLS = 14																				
Ch	96	31,1	3,3	16,3	2,2	0,57	1,5	7,3	0,87	0,2	2,4	0,49	1,4	6,8	0,96	0,3	2,6	0,42	1,3	6,3	0,84	0,2
Pe	98	22,0	4,0	21,5	1,8	0,83	2,2	12,0	0,95	-0,7	2,3	0,71	1,7	9,2	0,93	-0,9	2,5	0,67	1,6	8,5	0,95	-1,0
Im	14	27,2	3,4	12,9	5,5	0,93	0,6	2,4	0,96	5,2	1,6	0,92	2,1	7,9	1,05	1,2	1,6	0,86	2,2	8,1	0,89	0,8
Os	16	31,7	4,2	15,1	5,3	0,00	0,8	2,9	0,04	1,1	3,0	0,63	1,4	5,1	1,82	-0,2	2,8	0,75	1,5	5,4	2,07	0,1
Po	15	34,4	1,6	4,7	4,0	0,16	0,4	1,2	0,21	-2,9	2,2	0,10	0,7	2,1	0,24	0,6	2,2	0,11	0,7	2,2	0,29	0,9
Alle	239	27,4	5,9	26,9	2,8	0,79	2,1	9,7	0,90	0,0	2,3	0,85	2,5	11,4	1,07	-0,2	2,5	0,83	2,4	10,8	1,07	-0,2
Gesamt-N [mg/g i.d.TM]		MSC; nPLS = 15																				
Ch	96	43,6	6,7	33,4	3,7	0,69	1,8	9,0	1,07	-0,1	4,2	0,60	1,6	7,9	0,99	-0,4	4,7	0,52	1,4	7,1	0,85	-0,5
Pe	98	30,7	5,7	30,2	2,9	0,78	1,9	10,3	0,84	-0,7	4,3	0,62	1,3	7,0	0,66	-0,9	4,8	0,51	1,2	6,3	0,62	-1,0
Im	14	36,9	7,4	25,6	8,4	0,73	0,9	3,0	1,08	7,2	3,8	0,82	2,0	6,8	1,04	2,0	4,2	0,78	1,8	6,1	0,98	2,3
Os	16	59,4	7,3	22,4	16,8	0,01	0,4	1,3	0,13	14,1	6,2	0,67	1,2	3,6	1,65	3,8	5,7	0,53	1,3	3,9	1,32	3,1
Po	15	46,6	3,0	10,8	5,2	0,23	0,6	2,1	0,35	-3,5	3,4	0,22	0,9	3,1	0,39	0,1	4,2	0,13	0,7	2,6	0,26	0,3
Alle	239	39,2	10,3	55,2	5,7	0,70	1,8	9,7	0,99	0,9	4,3	0,82	2,4	12,8	0,99	-0,2	4,7	0,79	2,2	11,7	0,96	-0,2

Fortsetzung von Tab. 6.2

Referenzwerte		Validierung "Basis"					Validierung "Gesamt"					Validierung "Reduziert"										
n	\bar{x}	s	R	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	SEP	R ²	RPD	RER	b	BIAS	R ²	RPD	RER	b	BIAS		
eNF [mg/g i.d.TM]		OBC+NM; nPLS = 11					OBC+NM; nPLS = 15					OBC+NM; nPLS = 13										
Ch	96	13,2	4,3	19,1	2,8	0,59	1,5	6,8	1,15	0,2	2,7	0,62	1,6	7,0	0,98	-0,6	3,1	0,53	1,4	6,2	0,86	-0,5
Pe	98	9,1	2,7	11,4	2,1	0,52	1,3	5,3	0,66	-0,2	3,1	0,38	0,9	3,6	0,42	-0,1	3,8	0,21	0,7	3,0	0,29	0,0
Im	14	10,3	5,2	16,8	4,4	0,39	1,2	3,9	1,34	1,2	2,7	0,73	1,9	6,1	1,05	0,1	2,7	0,75	1,9	6,2	1,12	0,6
Os	16	29,0	3,2	11,1	13,6	0,06	0,2	0,8	-0,71	12,7	4,5	0,63	0,7	2,4	0,83	3,9	3,6	0,67	0,9	3,0	3,6	3,0
Po	15	12,6	2,4	8,2	3,8	0,07	0,56	2,2	0,28	-2,5	2,2	0,32	1,1	3,7	0,57	-0,2	2,5	0,21	1,0	3,3	2,5	-0,4
Alle	239	12,4	6,0	32,1	4,3	0,52	1,4	7,5	1,19	0,8	3,0	0,75	2,0	10,7	0,97	0,0	3,4	0,70	1,8	9,6	3,4	0,0
oNF [mg/g i.d.TM]		SNV+DT; nPLS = 12					OBC+NM; nPLS = 13					OBC+NM; nPLS = 11										
Ch	96	41,0	5,7	26,8	3,4	0,65	1,7	7,8	1,07	0,1	3,4	0,65	1,7	7,9	0,99	-0,3	3,8	0,56	1,5	7,0	0,90	-0,2
Pe	98	30,3	5,5	28,2	3,1	0,73	1,8	9,0	0,84	-0,8	3,8	0,64	1,5	7,4	0,74	-1,0	4,2	0,56	1,3	6,8	0,72	-1,2
Im	14	35,9	6,9	22,8	7,2	0,65	1,0	3,2	1,29	5,6	3,6	0,81	1,9	6,3	1,18	1,8	3,8	0,79	1,8	6,0	1,21	1,8
Os	16	52,3	4,8	17,8	10,2	0,04	0,5	1,7	0,34	8,6	4,1	0,61	1,2	4,3	1,38	2,6	4,1	0,58	1,2	4,3	1,45	2,3
Po	15	46,2	2,8	10,1	4,3	0,30	0,6	2,4	0,41	-2,8	3,1	0,39	0,9	3,2	0,44	0,0	3,0	0,36	0,9	3,4	0,46	0,4
Alle	239	37,4	8,7	44,1	4,4	0,75	2,0	10,1	1,00	0,4	3,6	0,83	2,4	12,3	1,00	-0,2	3,9	0,80	2,2	11,3	1,00	-0,3
Blatt-TNC [mg/g i.d.TM]		SNV+DT; nPLS = 11					SNV+DT; nPLS = 12					MSC; nPLS = 11										
Ch	94	16,3	14,3	83,4	6,1	0,87	2,3	13,6	0,96	-0,7	6,5	0,86	2,2	12,9	0,94	-1,0	7,9	0,79	1,8	10,6	0,94	-0,9
Pe	97	16,7	12,5	62,5	6,4	0,76	1,9	9,7	0,85	0,8	6,7	0,74	1,9	9,4	0,85	0,3	7,0	0,71	1,8	8,9	0,85	0,2
Im	14	18,5	15,6	46,2	11,5	0,52	1,4	4,0	1,12	-3,5	8,5	0,78	1,8	5,4	1,42	-1,4	6,3	0,90	2,5	7,3	1,37	0,7
Os	16	9,6	4,1	15,3	10,8	0,01	0,4	1,4	-0,06	-6,9	6,9	0,16	0,6	2,2	0,28	-3,7	5,3	0,28	0,8	2,9	0,37	-1,6
Po	15	18,9	14,4	57,1	15,0	0,14	1,0	3,8	0,45	1,7	13,3	0,33	1,1	4,3	0,85	5,7	11,8	0,50	1,2	4,8	1,20	5,5
Alle	236	16,3	14,3	83,4	7,7	0,72	1,9	10,8	0,88	-0,5	7,2	0,75	2,0	11,5	0,91	-0,2	7,5	0,73	1,9	11,1	0,92	0,0

6.3 Diskussion

Die mittels der PCA gezeigte spektrale Ähnlichkeit der verschiedenen Gattungen spiegelt sich auch in den Ergebnissen der Kalibrationserweiterung wider. Werden die für Chrysanthemen und Pelargonien entwickelten Modelle auf die drei zusätzlichen Kulturen angewendet, ergibt sich zumeist ein relativ großer systematischer Fehler. Große systematische Abweichungen bei der Anwendung von Kalibriermodellen auf Proben einer ähnlichen aber nicht gleichen Matrix beschreiben z. B. Shenk und Westerhaus (1993) für getrocknete Heu- und Silageproben oder Peirs et al. (2003) für verschiedene Apfelsorten. Durch die Hinzunahme relativ weniger Proben – im Vergleich zur Probenzahl für die vorgegangene Modellbildung – kann die Vorhersageleistung für die drei neuen Kulturen deutlich gesteigert werden, gleichzeitig verschlechtern sich aber zumeist die Vorhersageleistungen für die Chrysanthemen und Pelargonien gegenüber der Basiskalibration, die nur diese beide Gattungen umfasst, etwas. Auch dieser Effekt ist in Übereinstimmung mit Ergebnissen für verschiedenste Matrices (z.B. bei Silagen und Heuproben, Piniennadeln und Nadelstreu, Äpfeln, ganzen Sonnenblumenkernen oder fettreichen Lebensmitteln) bei denen die Genauigkeit von produktspezifischen Modellen in der Regel etwas besser ist als die für die gemeinsamen Modelle (Shenk und Westerhaus, 1993; Gillon et al., 1999; Griggs et al., 1999; Peirs et al., 2003; von Loggerenberg und Pretorius, 2005; Micklander et al., 2006; Alves et al., 2010; Monono et al., 2012).

Eine Reduktion der Chrysanthemen- und Pelargonienproben im Datensatz führt dagegen nicht zu einer weiteren Verbesserung der Vorhersageleistungen. Während der SEP und der BIAS bei *Impatiens*, *Osteospermum* und *Poinsettia* kaum oder gar nicht sinkt, ist bei Chrysanthemen und Pelargonien vielfach ein leichter Anstieg zu verzeichnen. Entgegen der Beobachtungen von Abrams et al. (1987) bei Grünfuttersilagen werden in der vorliegenden Arbeit trotz der Ungleichverteilung der Proben die spektralen Eigenheiten der drei neuen Kulturen im Modell offensichtlich ausreichend berücksichtigt. Auf der anderen Seite wurde durch die Herausnahme der Chrysanthemen- und Pelargonienproben deren spektrale Variabilität im Datensatz reduziert, wodurch der SEP bei diesen beiden Gattungen zunimmt. Vergleichbare Ergebnisse erzielen Shenk und Westerhaus (1993) für einen Datensatz mit getrockneten Heu- und Silageproben.

Für die spätere praktische Anwendung bedeutet dies, dass die bestehenden, gemeinsamen Kalibriermodelle mit einem relativ geringen referenzanalytischen Aufwand auf weitere Kulturen ausgeweitet werden können. Wenn dann die Datensätze über die Jahre hinweg durch Proben, die im Rahmen der notwendigen fortlaufenden Validierung der Modelle (Brimmer und Hall, 2001) für einzelne Kulturen auf eine ausreichende Probenzahl angewachsen sind, können für diese Gattungen auch produktspezifische Modelle entwickelt werden, die eine etwas größere Genauigkeit bieten (Shenk und Westerhaus, 1993). Allerdings ist zu prüfen, ob dieser Zugewinn an Präzision nicht durch einen Verlust an Robustheit erkauft wird und ob der Zugewinn an Präzision den zukünftig höheren Aufwand für die Pflege der Modelle rechtfertigt

(Gillon et al., 1999; Micklander et al., 2006). Zudem bietet sich durch ein robustes Modell, das eine Vielzahl von Gattungen umfasst, die Möglichkeit, dass damit auch Gattungen, die nicht im Datensatz vorhanden sind und für die sich eine Erweiterung z. B. auf Grund geringer Stückzahlen aus ökonomischen Gründen nicht lohnt, gemessen werden können, wenngleich natürlich diese Messungen mit einer größeren Unsicherheit behaftet sind (Shenk und Westershaus, 1993; Peirs et al., 2003). Ein Kompromiss zwischen spezifischen Modellen für einzelne Kulturen und einem gemeinsamen Modell für alle Kulturen könnte bei ausreichend großen Datensätzen auch ein "local regression model" darstellen, bei dem für jedes Spektrum einer unbekannt Probe aus dem gesamten Datensatz ein Teildatensatz mit der größten spektralen Ähnlichkeit ausgewählt und mit diesem ein probenspezifisches Kalibriermodell erstellt wird. Dardenne et al. (2000) und Micklander et al. (2006) erzielen mit diesem Ansatz bei äußerst heterogenen Datensätzen ausgezeichnete Ergebnisse.

7 (II) Beurteilung des Bewurzelungspotentials auf Basis von NIRS-Analysenwerten

Im Rahmen dieses Abschnitts soll untersucht werden, in wieweit der mittels NIRS ermittelte TS-Gehalt bzw. der Stickstoff- und Kohlenhydratstatus genutzt werden können, um das Bewurzelungspotential von Stecklingen abzuschätzen. Das Ziel dabei war es nicht, neue Erkenntnisse zur Bedeutung dieser Parameter auf das Bewurzelungspotential zu gewinnen. Vielmehr ist dieser Abschnitt als Proof of concept für die Zweckmäßigkeit der NIRS-Analysenwerte zur Abschätzung des Bewurzelungspotentials in der gärtnerischen Praxis gedacht.

Wie in Abschnitt 2.1 erläutert, wurde die Bedeutung des N- und KH-Status für die Bewurzelungsfähigkeit von Stecklingen bereits für eine Reihe von Zierpflanzenkulturen untersucht. Aus den in Tab. 2.1 für Chrysanthemen und Pelargonien zusammengestellten Ergebnissen geht hervor, dass bei Chrysanthemen eine sehr enge positive Korrelation zwischen dem N-Status der Stecklinge und dem Bewurzelungserfolg besteht und nur bei äußerst ungünstigen Kulturbedingungen (z. B. sehr große Unterschiede in der Lichtintensität während der Mutterpflanzenkultur und der Bewurzelung) eine Limitierung der Bewurzelung durch unzureichende KH-Reserven zu befürchten ist. Bei Pelargonien wird die Bewurzelung durch eine unzureichende N-Versorgung der Mutterpflanzen ebenfalls behindert, allerdings haben die KH-Reserven eine wesentlich größere Bedeutung als bei den Chrysanthemen, weswegen bei Pelargonien bei sehr hoher N-Versorgung der Mutterpflanzen – und dadurch reduzierten KH-Reserven in den Stecklingen – häufiger ein Rückgang des Bewurzelungspotentials zu beobachten ist.

In den genannten Arbeiten wurde der N- und KH-Status allerdings mit etablierten analytischen Verfahren (Dumas-N, Kjeldahl-N, ethanollösliche Zucker) bestimmt, die für die gärtne-

rische Praxis auf Grund des hohen Zeit- und Arbeitsaufwandes und der damit verbundenen Kosten nicht geeignet sind. Im folgenden Abschnitt soll daher geprüft werden, ob auf Basis von NIRS-Analysenwerte eine vergleichbare Abschätzung des Bewurzelungspotentials von Chrysanthemen- und Pelargonienstecklingen möglich ist.

7.1 Material und Methoden

7.1.1 Mutterpflanzenkultur

Zwischen April 2010 und Mai 2012 wurden vier Chrysanthemenmutterpflanzenbestände mit jeweils vier Sorten (C-1 bis C-4, Tab. 10.1) kultiviert. Es wurden jeweils acht Jungpflanzen in Kunststoffbalkonkästen (800 x 200 x 150 mm, ca. 18 l Volumen) gepflanzt. Als Substrat diente ein Weißtorf-Perlite-Gemisch (85 Vol. % + 15 Vol. %), das auf einen pH-Wert von 5,5 bis 6,0 aufgekalkt und mit einer Grunddüngung (N, P, K, Mg und Spurenelemente mit Ferty 3 Grün, Fa. Planta, Regenstauf) auf Basis von 150 mg N/l aufgedüngt wurde.

Nach einer sechs- bis achtwöchigen Anzuchtphase wurden die Mutterpflanzenbestände in drei Stufen (Mangel, Normal, Überschuss) differenziert mit Stickstoff versorgt, um eine möglichst große Variabilität der Stickstoffgehalte in den Stecklingen zu erzeugen. Die Höhe der Stickstoffdüngung wurde laufend an die Stickstoffaufnahme der Pflanzen angepasst. Hierzu wurden 14-täglich Substratanalysen (pH-Wert in CaCl₂, Salzgehalt in H₂O, N, P und K im CaCl₂/DTPA-Extrakt nach VDLUFA, 2012a-c) durchgeführt. Ziel war es, die "Normal"-Variante konstant zwischen 100 und 200 mg N/l zu halten, was dem Optimalbereich für Kulturen mit einem hohen N-Bedarf bei Intervalldüngung entspricht (VDLUFA, 2012d). Bei der "Mangel"-Variante wurden dauerhaft Gehalte unter 50 mg N/l und bei der "Überschuss"-Variante solche über 300 mg N/l Substrat angestrebt. Dabei wurde sowohl bei der Mangel- als auch insbesondere bei der Überschussvariante darauf geachtet, dass es nicht zu einer zu starken Schädigung der Mutterpflanzen (Ausbildung starker Chlorosen oder Nekrosen) kam. Lediglich ein gewisser Minderwuchs durch latenten N-Mangel bzw. durch einen leichten osmotischen Stress auf Grund der N-Anreicherung im Substrat wurde akzeptiert. Die Stickstoffdüngung erfolgte mit Calciumnitrat, Ammoniumnitrat und Ammoniumsulfat, das NH₄-N zu NO₃-N Verhältnis wurde zur pH-Steuerung genutzt. Die P- und K-Düngung sowie die Versorgung mit Spurenelementen erfolgten bei den drei N-Stufen jeweils gemäß der üblichen gärtnerischen Praxis. Hierfür wurde Ferty Basis 1 (0 + 14 + 38 + 5 + Spuren, Fa. Planta, Regenstauf) verwendet. Die Konzentration des Düngers wurde dabei – ähnlich wie beim Stickstoff – auf Basis der Ergebnisse der Substratanalysen sowie des aktuellen Wasserbedarfs der Pflanzen kontinuierlich angepasst. Als Richtwerte dienten wie beim Stickstoff die Optimalbereiche für nährstoffbedürftige Kulturen bei Intervalldüngung von 50 bis 200 mg P₂O₅/l bzw. 100 bis 150 mg K₂O/l Substrat (VDLUFA, 2012d).

Die Heizungs- und Lüftungstemperatur betrug bei allen Mutterpflanzenbeständen 18 bzw. 22 °C. Während der Winterhalbjahre wurde bei einer Einstrahlung von weniger als

100 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ im Zeitraum von 7:00 bis 19:00 Uhr eine Assimilationsbelichtung (Philips SON-T 400 W Natriumdampflampen; ca. 75 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$) zugeschaltet. Zusätzlich erfolgte in diesem Zeitraum eine Nachtunterbrechung mit Glühlampen (Tageslänge ≥ 14 h). Bewässert wurden die Pflanzen von Hand nach Bedarf mit Leitungswasser (Leitfähigkeit: 65 mS/m, Säurekapazität bis pH 4,3: 5,7-6,4 mmol/l, Gesamthärte: 3,2-3,6 mmol/l). Der Pflanzenschutz erfolgte vorrangig biologisch mit Nützlingen, nur in Einzelfällen wurden Insektizide eingesetzt. Fungizide oder Wachstumsregulatoren wurden nicht appliziert.

Beginnend mit der differenzierten Stickstoffdüngung wurden die Bestände wöchentlich bearbeitet und bei Bedarf zusätzlich gestutzt, um eine gleichmäßige Stecklingsqualität zu gewährleisten. Zu vier (bzw. bei einem Bestand zu fünf) Terminen – erstmalig vier Wochen nach Beginn der differenzierten Düngung und weiter im Abstand von jeweils vier Wochen – wurden von einer Teilprobe der geernteten Stecklinge NIR-Spektren aufgezeichnet (Abschnitt 4.1.2 und 7.1.3) und eine zweite Teilprobe wurde bewurzelt (Abschnitt 7.1.2).

Die Kultur der Pelargonienmutterpflanzen erfolgte vergleichbar zu den Chrysanthemen, wobei in diesem Fall fünf Mutterpflanzenbestände zwischen Oktober 2009 und Dezember 2011 mit jeweils vier Sorten (P-1 bis P-4, Tab. 10.1) kultiviert und in drei Stufen differenziert mit Stickstoff gedüngt wurden. Bei den Pelargonien wurden jeweils vier Jungpflanzen in die bei den Chrysanthemen beschriebenen Kunststoffbalkonkästen getopft. Als Substrat diente die gleiche Weißtorf-Perlite-Mischung. Auch die weitere Kulturführung (Düngung, Bewässerung, Klimaführung, Pflanzenschutz) erfolgte mit Ausnahme der Nachtunterbrechung wie für die Chrysanthemen beschrieben. Die NIRS-Messungen bzw. die Bewurzelungsversuche erfolgten bei den Pelargonien an insgesamt 19 Terminen.

7.1.2 Stecklingsbewurzelung

Die Bewurzelung erfolgte in Perlite (Perligran 0-6 mm, Fa. Knauf, Dortmund) in gelochten Hydroschalen (Chrysanthemen 30 x 40 cm, Pelargonien 40 x 60 cm), die zur Verbesserung der Wasserversorgung in einen 10-mm-Wasseranstau gestellt wurden (Abb. 7.1). Zu jedem Termin wurden von jeder der zwölf Varianten (4 Sorten x 3 N-Düngungsstufen) 56 Stecklinge bewurzelt. Je Schale wurden jeweils sieben Stecklinge der vier Sorten der gleichen N-Düngungsstufe gesteckt. In Summe umfasste jeder Termin damit 24 Schalen. Die Hälfte der Schalen wurde in einem Folienzelt im Gewächshaus aufgestellt (Heizung/Lüftung: 20/23 °C, Schattierung ab 430 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$, Zusatzbelichtung mit 75 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ mit Philips Son-T 400 W-Lampen für 12 h bei weniger als 100 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ Außenlicht). Bei der anderen Hälfte der Schalen erfolgte die Stecklingsbewurzelung in einer Klimakammer unter konstanten Schwachlichtbedingungen von 50 $\mu\text{mol}/\text{m}^2\cdot\text{s}$ und einer Belichtungsdauer von 12 h mit Osram Lumilux L58W/840 Leuchtstoffröhren. Während der ersten 14 Tage der Bewurzelung wurden die Stecklinge sowohl im Gewächshaus als auch in der Klimakammer mehrmals täglich händisch

mit vollentsalztem Wasser übersprüht. Dünger wurde während der gesamten Bewurzelungsphase nicht appliziert.



Abb. 7.1: Bewurzelung von Pelargonienstecklingen im Gewächshaus (links) und von Chrysanthemenstecklingen in der Klimakammer (rechts)

Die Bewurzelungsdauer betrug sowohl bei Chrysanthemen als auch Pelargonien unter beiden Bewurzelungsbedingungen 21 Tage. Am Ende der 21 Tage wurden die Stecklinge ohne Beschädigung der Wurzeln aus dem Perlite herausgehoben und anhaftende Perlite Körner vorsichtig abgeschüttelt. Die Beurteilung der Bewurzelung erfolgte nach einem am IGZ über mehrere Jahre hinweg etablierten Protokoll (Druege et al., 1998; Zerche et al., 1999; Druege et al., 2004; Zerche und Druege, 2009). Zuerst wurde die Anzahl Stecklinge, bei denen die Sprossachse bzw. der Vegetationspunkt z. B. durch Fäulnis irreversibel geschädigt waren, sowie die Anzahl vitaler aber unbewurzelter Stecklinge festgehalten. Bei den bewurzelten Stecklingen wurde – wie in Abb. 7.2 gezeigt – die Anzahl der Wurzeln in Ein-Zentimeter-Längenklassen händisch ausgezählt ($\{\leq 1 \text{ cm}\}$, $\{1-2 \text{ cm}\}$, $\{2-3 \text{ cm}\}$... $\{9-10 \text{ cm}\}$; Wurzeln über zehn Zentimeter Länge traten nicht auf) und nach folgender Formel die Gesamtwurzellänge je Steckling (GWL) berechnet:

$$GWL = \sum_{i=0}^9 n_i \cdot (i + 0,5)$$

mit GWL = Gesamtwurzellänge je Steckling in cm

n_i = Anzahl Wurzeln mit einer Länge von i bis $i + 1$ cm

Geschädigte und unbewurzelte Stecklinge wurden in die anschließende Mittelwertbildung bei der Gesamtwurzellänge und Gesamtwurzelanzahl (GWA) mit dem Wert null einbezogen. Aus der Gesamtwurzellänge sowie der Gesamtwurzelanzahl wurde zusätzlich ein Bewurze-

lungsindex (BI) als gewichtetes Mittel aus GWL (Faktor 0,3) und GWA (Faktor 0,7) errechnet. Der BI ermöglicht eine kombinierte Beurteilung der beiden Parameter GWL und GWA, wobei durch die stärkere Gewichtung der Wurzelanzahl im Vergleich zur Wurzellänge eine praxisnahe Beurteilung erreicht werden sollte, da beispielsweise ein Steckling mit sechs Wurzeln von jeweils nur einem Zentimeter Länge ($BI = 0,7 \cdot 6 + 0,3 \cdot 6 = 6$) aus Sicht eines Jungpflanzenproduzenten qualitativ besser zu bewerten ist, als ein Steckling mit nur der halben Wurzelzahl, auch wenn die einzelnen Wurzeln im Durchschnitt dreimal so lang sind ($BI = 0,7 \cdot 3 + 0,3 \cdot 9 = 4,8$).



Abb. 7.2: Zählscheibe zur Bestimmung der Anzahl Wurzeln in den einzelnen Längensklassen

7.1.3 Bestimmung der Trockensubstanz sowie des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus

Zu jedem der 17 (Chrysanthemen) bzw. 19 (Pelargonien) Bewurzelungstermine wurden von einer Teilprobe der geernteten Stecklinge NIR-Spektren in der unter Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Art und Weise aufgezeichnet und mit den in Abschnitt 4.2.3 beschriebenen Kalibriermodellen der TS-, der Amid-N-, der Amino-N-, der Protein-N-, der eoNF-, der eNF-, der oNF- und der Gesamt-N-Gehalt der ganzen Stecklinge sowie die Stärke- und TNC-Gehalte in den Blättern ermittelt. Zusätzlich wurde noch die Differenz aus dem Blatt-TNC- und dem Blattstärkegehalt gebildet (Diff-Z). Eine Zusammenfassung der Vorhersageleistungen der genutzten Kalibriermodelle findet sich in Tab. 7.1.

Tab. 7.1: Kenngrößen der für die Bestimmung der Trockensubstanz (TS) sowie der Stickstoff- und Kohlenhydrat-Fractionen genutzten Kalibriermodelle (SEP und BIAS jeweils in mg/g)

Parameter	Datenvorbehandlung	nPLS	SEP	R ²	b	BIAS
TS	SNV	6	7	0,81	0,95	0
Amid-N	SNV	11	0,5	0,61	0,92	-0,1
Amino-N	SNV	11	1,8	0,60	0,97	0,0
Protein-N	SNV+DT	14	2,0	0,88	1,04	-0,3
Gesamt-N	MSC	15	3,3	0,86	1,00	-0,4
eoNF	SNV+DT	11	2,0	0,60	0,93	0,0
eNF	OBC+NM	11	2,5	0,64	0,95	0,0
oNF	SNV+DT	12	3,3	0,82	1,01	-0,4
Blattstärke	MSC	13	5,0	0,84	1,02	-0,5
Blatt-TNC	SNV+DT	11	6,3	0,83	0,91	0,1

Ein Teil der Proben, von denen die Gehalte auch referenzanalytisch bestimmt wurden, war Bestandteil der in Tab. 10.3 bis Tab. 10.6 beschriebenen Kalibrier- und Validierdatensätze. Beim anderen Teil erfolgte keine zusätzliche referenzanalytische Bestimmung. Die Verteilung der Proben – in Abhängigkeit vom Inhaltsstoff (TS, N- bzw. KH-Fractionen) und aufgeteilt nach Kultur sowie Bewurzelungsumgebung – findet sich in Tab. 7.2. Für die folgende Auswertung wurden nur die mittels NIRS prognostizierten Werte genutzt.

Tab. 7.2: Anzahl Proben aus dem Kalibrier- bzw. Validierdatensatz, sowie Anzahl Proben ohne Referenzwerte bei Chrysanthenen und Pelargonien und Bewurzelung im Gewächshaus bzw. in der Klimakammer (n = Anzahl Proben im Bewurzelungsversuch)

	TS-Gehalt	N-Fractionen	KH-Fractionen
Chrysanthenen; Bewurzelung im Gewächshaus, n = 204			
Anzahl Probe im Kalibrierdatensatz	106	88	87
Anzahl Proben im Validierdatensatz	48	47	46
Anzahl Proben ohne Referenzwerte	50	69	71
Chrysanthenen; Bewurzelung in der Klimakammer, n = 152 ¹			
Anzahl Probe im Kalibrierdatensatz	79	67	66
Anzahl Proben im Validierdatensatz	36	34	33
Anzahl Proben ohne Referenzwerte	37	51	53
Pelargonien; Bewurzelung im Gewächshaus und in der Klimakammer, n = 228			
Anzahl Probe im Kalibrierdatensatz	79	67	66
Anzahl Proben im Validierdatensatz	36	34	33
Anzahl Proben ohne Referenzwerte	113	127	129

¹Die Sorte C-1 wurde auf Grund sehr schwacher Bewurzelungsergebnisse vollständig aus der Auswertung herausgenommen, Details siehe Abschnitt 7.2.1.2

7.1.4 Statistische Auswertung

Für die Verrechnung wurden für die Bewurzelungsdaten die Mittelwerte über die 28 Stecklinge je Variante und Bewurzelungsumgebung (Gewächshaus bzw. Klimakammer) gebildet. Die verschiedenen Erntetermine über den gesamten Untersuchungszeitraum werden gemeinsam betrachtet. In einem ersten Schritt wurden Korrelationen zwischen den verschiedenen Inhaltsstoffen sowie zwischen den Inhaltsstoffen und den Bewurzelungsparametern berechnet. Bei den Korrelationen zwischen den Inhaltsstoffen wurde der Pearsonsche Maßkorrelationskoeffizient (r) berechnet. Bei den Korrelationen zwischen den Inhaltsstoffen und den Bewurzelungsparametern wurde der Spearmansche Rangkorrelationskoeffizient (ρ) genutzt, da zu meist nicht-lineare Zusammenhänge zu erwarten waren. Die Niveauunterschiede bei der Wurzellänge und -anzahl zwischen den Sorten wurden durch eine Standardisierung mittels z-Transformation (Subtraktion des Sortenmittelwerts vom gemessenen Wert und anschließend Division durch die Standardabweichung der Sorte) eliminiert und so eine sortenübergreifende Verrechnung des Datensatzes ermöglicht (Kessler, 2007). Für die grafischen Darstellungen wurden die z-transformierten Bewurzelungsparameter aufsteigend sortiert und in fünf gleichgroße Klassen (sehr niedrig, niedrig, mittel, hoch, sehr hoch) eingeteilt. Um prüfen zu können, ob durch eine sehr hohe N-Versorgung der Mutterpflanzen die KH-Reserven der Stecklinge reduziert werden und sich dies negativ auf den Bewurzelungserfolg auswirkt – wie z. B. von Röber und Reuther (1982) für Chrysanthemen und von Druege et al. (2004) für Pelargonien beschrieben – wurden Stecklinge mit überdurchschnittlichen Gesamt-N-Gehalten zusätzlich zur Auswertung des gesamten Datensatzes nochmals separat betrachtet.

Zeigten die Korrelationskoeffizienten einen sehr engen Zusammenhang an ($\rho \geq 0,65$), wurden in einem zweiten Schritt segmentierte Regressionsmodelle mit kontinuierlichem Verlauf erstellt (Vieth, 1989; Ryan und Porth, 2007), um die Zusammenhänge zu quantifizieren und aus den Bruchpunkten der Regressionsmodelle kritische Gehalte einzelner Inhaltsstoffe abzuleiten (Toms und Lesperance, 2003). Im Gegensatz zu den Korrelationsberechnungen wurden die Regressionsmodelle für die einzelnen Sorten getrennt erstellt. Bei der Berechnung der Regressionsmodelle wurden Nebenbedingungen definiert, so dass fachlich unsinnige Prognosewerte – z. B. negative Wurzelanzahlen, -längen bzw. -indices oder Bewurzelungsraten $< 0 \%$ bzw. $> 100 \%$ – für den Gültigkeitsbereich der Regressionsmodelle ausgeschlossen waren. Bei den Regressionsmodellen für die Gesamtwurzellänge in Abhängigkeit vom Gesamt-N wurde beispielsweise eine Nebenbedingung formuliert, die sicherstellte, dass beim kleinsten vorkommenden Gesamt-N-Gehalt vom Regressionsmodell eine $\text{GWL} \geq 0 \text{ cm}$ prognostiziert wurde. Die Startwerte für die Anpassung der Regressionsmodelle wurden händisch gesetzt, wobei bereits eine möglichst gute Anpassung angestrebt wurde. Um die Zuverlässigkeit der gefundenen Optimierung zu prüfen, wurde jedes Modell dreifach mit jeweils leicht veränderten Startwerten berechnet. Geprüft wurden die in Abb. 7.3 skizzierten Regressionsverläufe.

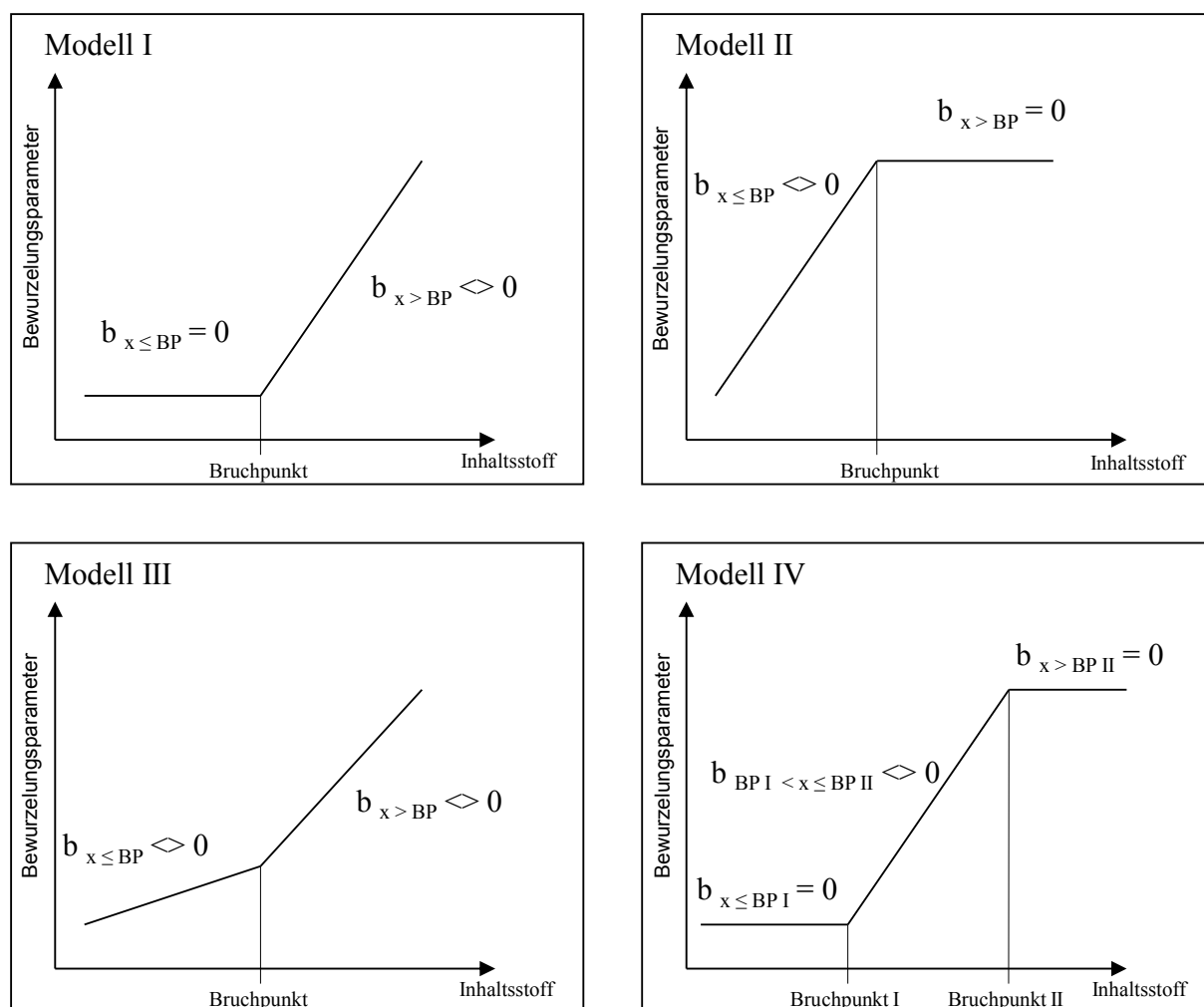


Abb. 7.3: Verlauf der vier geprüften segmentierten Regressionsmodelle (I-IV)

Für den bzw. die Bruchpunkte des besten Regressionsmodells wurde zusätzlich das 95 % Vertrauensintervall aus dem Standardfehler des bzw. der Bruchpunkte(s) berechnet (Oosterbaan, 1994, Addendum von 2005 zu Oosterbaan et al. 1990). Die statistischen Verrechnungen erfolgten mit den beiden Softwarepaketen Minitab[®] v16 (Minitab Inc., State Collage/PA) und MegaStat[®] für MS-Excel[®] v10.9 (McGraw-Hill Education, Columbus/OH).

7.2 Ergebnisse

7.2.1 Chrysanthemen

Zwischen der Trockensubstanz und allen N-Fractionen bestehen hochsignifikante negative Korrelationen, die für den Gesamt-N mit $r = -0,74$ am engsten ist. Ebenfalls hochsignifikante negative Korrelationen bestehen zwischen den drei Blatt-KH-Fractionen und allen N-Fractionen, wobei die Beziehungen zwischen der Stärke und den N-Fractionen durchgängig enger sind als zwischen dem TNC-Gehalt und den N-Fractionen sowie den löslichen Zuckern (Diff-Z) und den N-Fractionen. Sowohl beim Stickstoff als auch bei den Kohlenhydraten bestehen enge positive Beziehungen zwischen den verschiedenen Fractionen (Tab. 7.3). Eine

Berechnung der in Tab. 7.3 gezeigten Korrelationen auf Basis der Referenzwerte ergab vergleichbare Zusammenhänge.

Tab. 7.3: Korrelationsmatrix (Pearsonscher Maßkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten TS-Gehalte, sowie die Gehalte der N- und KH-Fractionen (n = 204, p < 0,001)

	TS	Amid-N	Amino-N	Protein-N	Gesamt-N	eoNF	eNF	oNF	Blattstärke	Blatt-TNC
Amid-N	-0,47									
Amino-N	-0,64	0,80								
Protein-N	-0,63	0,43	0,59							
Gesamt-N	-0,74	0,60	0,81	0,93						
eoNF	-0,62	0,80	0,97	0,52	0,76					
eNF	-0,69	0,81	0,97	0,65	0,85	0,96				
oNF	-0,69	0,69	0,87	0,88	0,96	0,84	0,90			
Blattstärke	0,62	-0,35	-0,70	-0,50	-0,67	-0,72	-0,71	-0,67		
Blatt-TNC	0,55	-0,34	-0,66	-0,43	-0,59	-0,70	-0,65	-0,59	0,97	
Blatt-Diff-Z	0,35	-0,27	-0,48	-0,24	-0,38	-0,54	-0,46	-0,38	0,77	0,90

7.2.1.1 Bewurzelung im Gewächshaus

Zwischen allen N-Fractionen und allen Bewurzelungsparametern ergeben sich hochsignifikante positive Beziehungen (p < 0,001). Mit $\rho > 0,55$ bestehen die engsten Beziehungen zwischen der GWL und dem Gesamt-N- bzw. dem oNF-Gehalt sowie zwischen dem BI und dem Gesamt-N-Gehalt (Tab. 7.4). Umgekehrt ergeben sich auf Grund der in Tab. 7.3 beschriebenen negativen Beziehungen zwischen den N-Fractionen und der Trockensubstanz sowie zwischen den N-Fractionen und den Kohlenhydratgehalten (Stärke, TNC, Diff-Z) sowohl für den TS-Gehalt als auch für alle KH-Fractionen negative Beziehungen zu allen Bewurzelungsparametern. Diese Beziehungen sind mit Korrelationskoeffizienten um -0,5 für die Blattstärke am engsten, während zum TS-Gehalt sowie zum TNC- und Diff-Z-Gehalt mit $|\rho| < 0,5$ zwar immer noch hochsignifikante, aber nur recht lose Beziehungen bestehen.

Tab. 7.4: Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fractionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten C-1 bis C-4 bei Bewurzelung im Gewächshaus (Werte z-transformiert für die Sorten, p < 0,001, n = 204)

	TS _z	Amid-N _z	Amino-N _z	Protein-N _z	Gesamt-N _z	eoNF _z	eNF _z	oNF _z	Blattstärke _z	Blatt-TNC _z	Blatt-Diff-Z _z
BR _z	-0,44	0,43	0,50	0,44	0,50	0,52	0,53	0,48	-0,51	-0,48	-0,36
GWA _z	-0,43	0,38	0,49	0,49	0,54	0,50	0,54	0,51	-0,53	-0,49	-0,35
GWL _z	-0,37	0,46	0,43	0,54	0,58	0,46	0,51	0,56	-0,40	-0,34	-0,21
BI _z	-0,43	0,41	0,48	0,52	0,56	0,49	0,53	0,54	-0,50	-0,45	-0,31

Wie aus Abb. 7.4 zu entnehmen, beruht die negative Beziehung zwischen den Blattkohlenhydratfraktionen und dem N-Status der Stecklinge im Wesentlichen auf einer zunehmenden Stärkeakkumulation bei Stickstoffmangel, während bei ausreichender Stickstoffversorgung kein eindeutiger Zusammenhang zum Stärkegehalt erkennbar ist. Die Verteilung der klassifizierten GWL zeigt eindeutig, dass ein hoher Gesamtstickstoffgehalt keine Garantie für eine hohe GWL bietet, dass aber bei geringem Gesamtstickstoffgehalt kein ungestörtes Wurzel­längenwachstum möglich ist. Als kritische Grenze für den Gesamt-N-Gehalt kann aus der Grafik ein Bereich von 35 bis 40 mg/g abgeleitet werden.

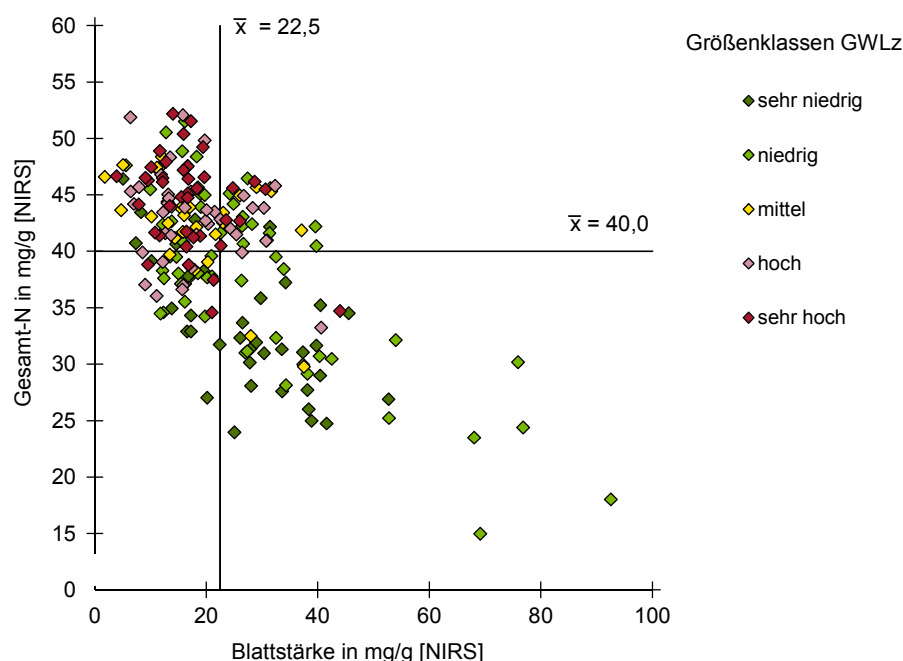


Abb. 7.4: Klassifizierte Gesamtwurzellänge (Werte z-transformiert für die Sorten C-1 bis C-4) der Chrysanthemenstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom Gesamt-N- und Blattstärkegehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Gesamt-N- bzw. Blattstärke-Gehalt der Stecklinge (n = 204)

Die Notwendigkeit einer ausreichenden Stickstoffversorgung für eine gute Bewurzelung wird in Abb. 7.5 nochmals verdeutlicht. Bei unterdurchschnittlichen eNF- und Protein-N-Gehalten wird mit großer Sicherheit nur ein sehr geringer Bewurzelungsindex erzielt. Bei einem unterdurchschnittlichen eNF- aber gleichzeitig überdurchschnittlichen Protein-N-Gehalt und vice versa wird dagegen zumeist ein gutes Bewurzelungsergebnis erreicht. Die größte Wahrscheinlichkeit für eine gute Bewurzelung ist bei überdurchschnittlichen Gehalten beider N-Fractionen gegeben. Die große Streuung der Protein-Gehalte bei einem eNF-Gehalt über 10,5 mg/g von 25 bis 40 mg/g und die umgekehrt ebenfalls große Streuung der eNF-Gehalte von 7 bis 15 mg/g bei Protein-N-Gehalten von über 30 mg/ erklärt den relativ geringen Korrelationskoeffizienten von 0,65 zwischen den beiden Fraktionen (Tab. 7.3).

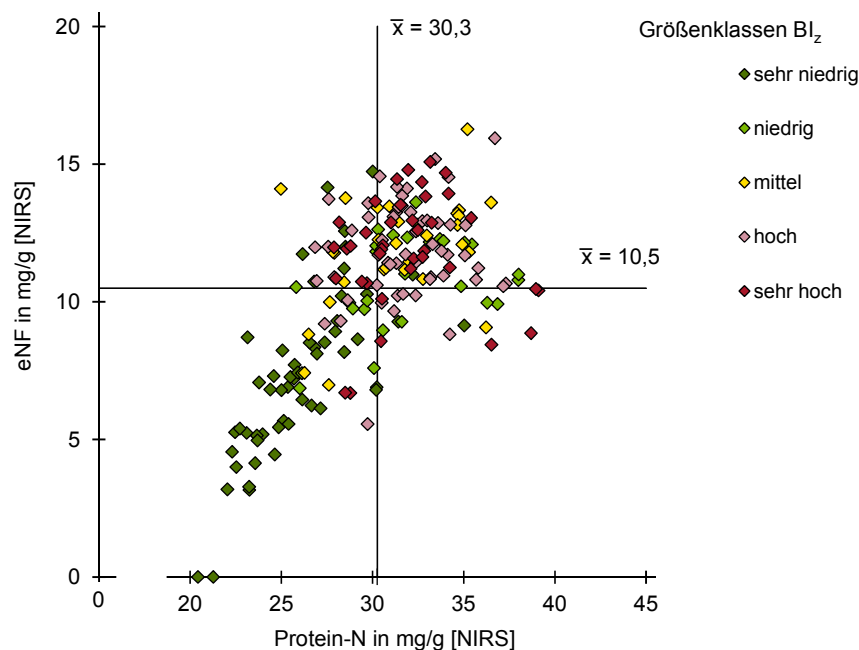


Abb. 7.5: Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten C-1 bis C-4) der Chrysanthemenstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom eNF- und Protein-N-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren eNF- bzw. Protein-N-Gehalt der Stecklinge (n = 204)

Die beiden gezeigten Grafiken sind beispielhaft. Vergleichbare Zusammenhänge bestehen auch zwischen den übrigen Parametern für den Bewurzelungserfolg (Bewurzelungsrate und Gesamtwurzelnanzahl) und den N- bzw. KH-Gehalten sowie der TS. Dies ergibt sich aus den in Tab. 7.3 gezeigten engen Korrelationen zwischen den verschiedenen Inhaltsstoffen.

7.2.1.2 Bewurzelung in der Klimakammer

Auf Grund der äußerst geringen Bewurzelungsrate bei Sorte C-1 – zu keinem Termin und unabhängig von der Stickstoffversorgung bewurzelten mehr als 25 % der Stecklinge – wurde diese Sorte von der weiteren Auswertung ausgenommen. Wie Versuche mit Stecklingen aus der kommerziellen Produktion zeigten, bewurzelt diese Sorte im Vergleich zu den übrigen drei Sorten sehr viel langsamer. Die im Abschnitt 7.1 beschriebene Bewurzelungsdauer von 21 Tagen war unter den ungünstigen Lichtbedingungen in der Klimakammer für diese Sorte zu kurz.

Wie bei der Bewurzelung im Gewächshaus besteht auch bei der Bewurzelung in der Klimakammer ein hochsignifikanter positiver Zusammenhang zwischen den N-Fractionen und dem Bewurzelungserfolg (Tab. 7.5). Mit $\rho > 0,65$ ist dieser Zusammenhang beim Protein- und Gesamt-N-Gehalt am engsten, während die Korrelation zwischen der Bewurzelung und den übrigen N-Fractionen mit Rangkorrelationskoeffizienten zwischen 0,30 und 0,55 zwar deutlich loser, aber in allen Fällen weiterhin hochsignifikant ist. Auf Grund der in Tab. 7.3 gezeigten negativen Beziehungen zwischen den N-Fractionen und den Blatt-KH-Fractionen sowie zwischen den N-Fractionen und dem TS-Gehalt, die auch ohne Berücksichtigung der Proben

der Sorte C-1 Bestand haben, ergeben sich sowohl für den TS-Gehalt als auch für alle der KH-Fractionen durchgängig negative Beziehungen zum Bewurzelungsergebnis. Allerdings sind diese im Falle der löslichen Zucker (Diff-Z) zumeist nicht statistisch absicherbar.

Tab. 7.5: Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fractionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten C-2 bis C-4 bei Bewurzelung in der Klimakammer (Werte z-transformiert für die Sorten, $p < 0,001$, $n = 152$, n.s. = nicht signifikant)

	TS _z	Amid-N _z	Amino-N _z	Protein-N _z	Gesamt-N _z	eoNF _z	eNF _z	oNF _z	Stärke _z	TNC _z	Diff-Z _z
BR _z	-0,28	0,29	0,34	0,57	0,57	0,32	0,40	0,49	-0,37	-0,33	n.s.
GWA _z	-0,34	0,30	0,40	0,62	0,65	0,37	0,46	0,55	-0,44	-0,40	-0,28
GWL _z	-0,35	0,30	0,35	0,67	0,67	0,34	0,43	0,57	-0,38	-0,34	n.s.
BI _z	-0,36	0,31	0,39	0,66	0,68	0,37	0,46	0,58	-0,43	-0,38	n.s.

An die Daten mit den engsten Beziehungen ($\rho \geq 0,65$: GWA, GWL sowie BI jeweils in Abhängigkeit vom Gesamt-N-Gehalt) wurden getrennt für die drei Sorten segmentierte Regressionsmodelle angepasst. Dabei erwies sich von den in Abb. 7.3 schematisch dargestellten vier Modellen in allen Fällen das Modell I ($b_{x \leq BP} = 0$; $b_{x > BP} < > 0$) als am besten geeignet. Bei den Sorten C-2 und C-3 werden für alle Bewurzelungsparameter Bruchpunkte von etwa 35 mg/g mit 95 %-Vertrauensintervalle ± 5 mg/g ermittelt. Bei der Sorte C-4 sind die Streuungen bei allen drei Parametern deutlich größer und die für die GWA und den BI ermittelten Bruchpunkte weichen deutlich vom BP für die GWL ab. Während für die GWA und den BI Bruchpunkte von 29,4 bzw. 30,7 mg/g ermittelt werden, die nur geringfügig über dem Sortenminimum von 26 mg/g liegen, wird für die GWL mit 41 mg/g ein deutlich höherer Bruchpunkt errechnet. Die relativ große Unsicherheit der Regressionsmodelle für diese Sorte zeigt sich auch in den sehr breiten Vertrauensintervallen der Bruchpunkte für die GWA und den BI von ± 11 bzw. $\pm 8,6$ mg/g. Die Steigung (b) der Regressionsgeraden für $x > BP$ ist aber für alle neun Modelle signifikant (95 % Vertrauensintervall) größer als null. Die wesentlichen Kenngrößen der Regressionsmodelle sind in Tab. 7.6 zusammengefasst und Abb. 7.6 zeigt die Streudiagramme für die GWA und die GWL in Abhängigkeit vom Gesamt-N sowie die Anpassungslinien der segmentierten Regressionsmodelle und die Vertrauensintervalle der Bruchpunkte.

Tab. 7.6: Kenngrößen (BP = Bruchpunkt, $b_{x > BP}$ = Steigung für $x > BP$ und SER = Standardfehler der Anpassung) der segmentierten Regressionsmodelle (Modell I) für die GWA (Anzahl Wurzeln/Steckling), die GWL (cm/Steckling) und den BI in Abhängigkeit vom Gesamt-N-Gehalt in mg/g ($\bar{x} \pm s$ = Mittelwert \pm Standardabweichung des jeweiligen Bewurzelungsparameters)

Bewurzelungsparameter	Sorte	$\bar{x} \pm s$	SER	BP	$b_{x > BP}$
		des jeweiligen Bewurzelungsparameters		[\pm 95 % -VI] Gesamt-N in mg/g	[\pm 95 % -VI]
GWA	C-2	6,6 \pm 3,2	1,77	32,6 [\pm 3,6]	0,52 [\pm 0,16]
	C-3	0,8 \pm 0,7	0,57	33,8 [\pm 5,9]	0,10 [\pm 0,05]
	C-4	1,8 \pm 1,2	1,03	29,4 [\pm 11]	0,12 [\pm 0,06]
GWL	C-2	19,8 \pm 13,8	7,51	37,8 [\pm 3,2]	2,54 [\pm 0,78]
	C-3	1,2 \pm 1,1	0,85	35,2 [\pm 4,5]	0,18 [\pm 0,08]
	C-4	3,4 \pm 2,6	2,05	40,8 [\pm 2,4]	0,70 [\pm 0,36]
BI	C-2	5,4 \pm 2,5	1,36	36,6 [\pm 3,3]	0,43 [\pm 0,12]
	C-3	0,9 \pm 0,6	0,45	33,9 [\pm 4,8]	0,10 [\pm 0,02]
	C-4	1,7 \pm 1,0	0,78	30,7 [\pm 8,6]	0,12 [\pm 0,05]

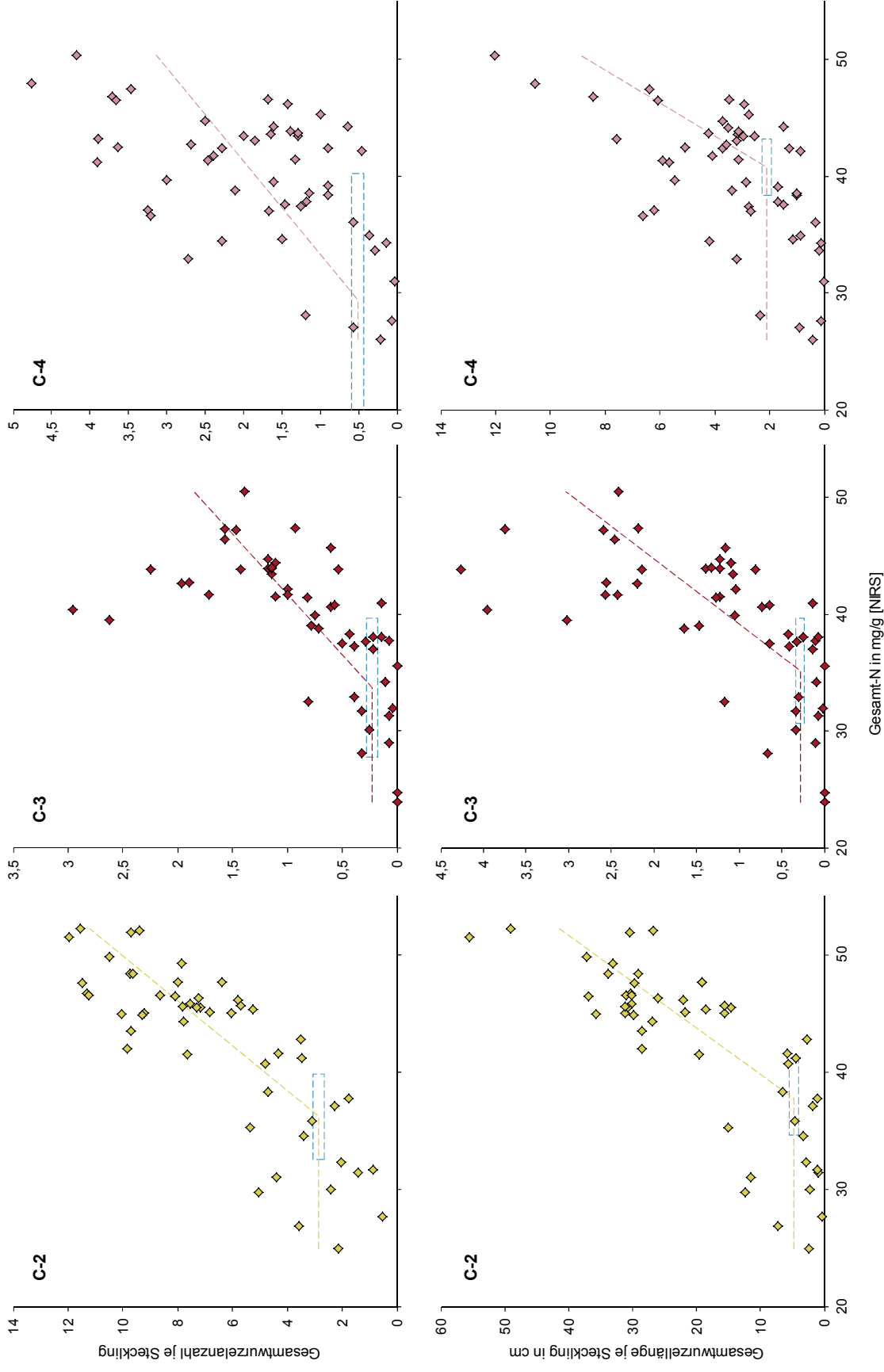


Abb. 7.6: Streudiagramme für die GWA (oben) bzw. die GWL (unten) gegenüber dem Gesamt-N-Gehalt für die Sorten C-2 bis C-4 (von links nach rechts); die gestrichelten Linien zeigen die Anpassung der segmentierten Regressionsmodelle, die blauen Rechtecke markieren die 95 % Vertrauensintervalle der Bruchpunkte

Wie bereits bei der Bewurzelung im Gewächshaus beschrieben, ist auch bei der Bewurzelung in der Klimakammer kein Einfluss der Blatt-KH-Reserven auf den Bewurzelungserfolg zu beobachten, wenn die Stecklinge ausreichend mit Stickstoff versorgt sind. Wie in Abb. 7.7 zu erkennen ist, werden bei Gesamtstickstoffgehalten über 40 mg/g bei Blatt-TNC-Gehalten zwischen 20 und 60 mg/g zumeist gute Bewurzelungsergebnisse erzielt. Die vereinzelt Proben mit einem unterdurchschnittlichen Bewurzelungsindex trotz überdurchschnittlicher Gesamt-N-Gehalte verteilen sich auf den gesamten Wertebereich der Blattkohlenhydrate.

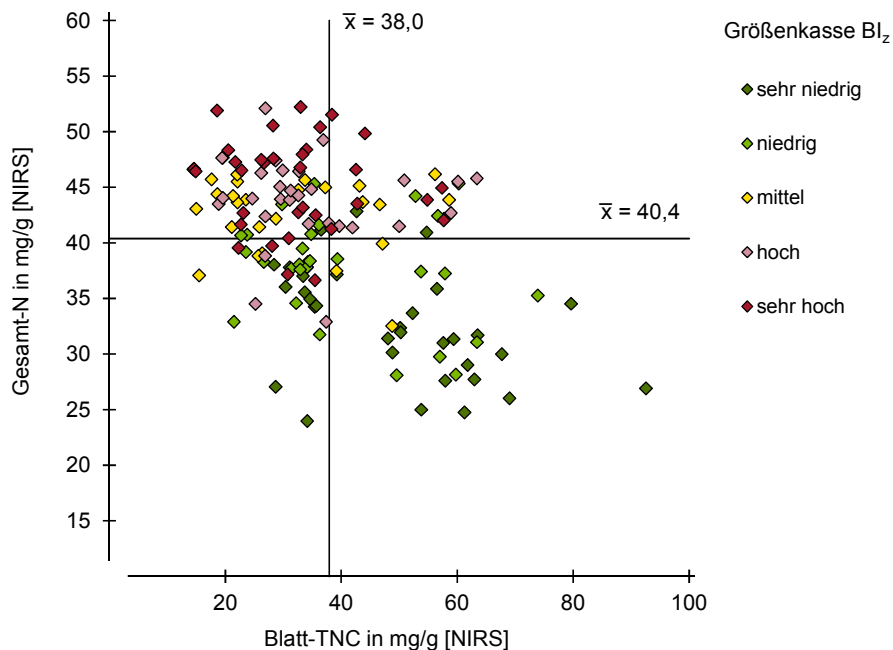


Abb. 7.7: Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten C-2 bis C-4) der Chrysanthemenstecklinge bei der Bewurzelung in der Klimakammer in Abhängigkeit vom Gesamt-N- und Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Gesamt-N- bzw. Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge (n = 152)

7.2.2 Pelargonien

Ähnlich wie bei den Chrysanthemen bestehen auch bei den Pelargonien negative Korrelationen zwischen allen N-Fractionen und dem TS-Gehalt sowie zwischen allen N-Fractionen und den KH-Fractionen, die aber vor allem bei den löslichen Zuckern nur lose und nicht in allen Fällen signifikant sind. Zwischen allen N-Fractionen untereinander bestehen durchgängig sehr enge positive Korrelationen. Lediglich für die Beziehungen des Amid-N zu den übrigen Einfeldfraktionen werden etwas kleinere Korrelationskoeffizienten (0,56 bis 0,74) erreicht. Für alle anderen Kombinationen liegen die Korrelationskoeffizienten zwischen 0,76 und 0,96.

Bei den KH-Fractionen fällt die relativ lose Beziehung ($r = 0,55$) zwischen der Blattstärke und den löslichen Zuckern – die als Differenz aus dem Blatt-TNC- und dem Blattstärkegehalt ermittelt wurden – auf. Deutlich schwächer als bei den Chrysanthemen sind bei den Pelargonien auch die Korrelationen zwischen den KH-Fractionen und dem Trockensubstanzgehalt ausgeprägt. Wie bei den Chrysanthemen zuvor, sind auch bei den Pelargonien die Korrelatio-

nen zwischen den verschiedenen Inhaltsstoffen auf Basis der referenzanalytischen Werte vergleichbar zu den hier gezeigten NIRS-basierten.

Tab. 7.7: Korrelationsmatrix (Pearsonscher Maßkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten TS-Gehalte, sowie der Gehalte der N- und KH-Fractionen ($p < 0,001$, $n = 228$, n.s. = nicht signifikant)

	TS	Amid-N	Amino-N	Protein-N	Gesamt-N	eoNF	eNF	oNF	Blattstärke	Blatt-TNC
Amid-N	-0,43									
Amino-N	-0,70	0,74								
Protein-N	-0,59	0,56	0,78							
Gesamt-N	-0,64	0,69	0,87	0,96						
eoNF	-0,64	0,85	0,93	0,76	0,89					
eNF	-0,70	0,81	0,96	0,82	0,91	0,96				
oNF	-0,66	0,75	0,92	0,93	0,97	0,90	0,93			
Blattstärke	0,27	-0,58	-0,65	-0,59	-0,68	-0,71	-0,69	-0,64		
Blatt-TNC	0,28	-0,49	-0,59	-0,58	-0,66	-0,65	-0,64	-0,61	0,94	
Blatt-Diff-Z	n.s.	n.s.	-0,30	-0,38	-0,42	-0,34	-0,35	-0,37	0,55	0,80

7.2.2.1 Bewurzelung im Gewächshaus

Bei den Pelargonien ist, wie bei den Chrysanthemen, eine positive Korrelation zwischen dem Bewurzelungsergebnis und dem Stickstoffversorgungszustand gegeben, wenngleich die Rangkorrelationskoeffizienten mit 0,26 bis 0,46 deutlich kleiner als bei den Chrysanthemen sind. Auf Grund der in Tab. 7.7 gezeigten negativen Korrelationen zwischen den N-Fractionen und des Trockensubstanzgehaltes bzw. den N- und KH-Fractionen ergeben sich für die TS und die KH-Fractionen durchgängig negative Korrelationen zu den Bewurzelungsparametern, wobei die Korrelationskoeffizienten relativ klein und im Falle der KH-Fractionen vielfach auch nicht signifikant sind (Tab. 7.8).

Tab. 7.8: Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fractionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten P-1 bis P-4 bei Bewurzelung im Gewächshaus (Werte z-transformiert für die Sorten, $p < 0,001$, $n = 228$, n.s. = nicht signifikant)

	TS _z	Amid-N _z	Amino-N _z	Protein-N _z	Gesamt-N _z	eoNF _z	eNF _z	oNF _z	Blattstärke _z	Blatt-TNC _z	Blatt-Diff-Z _z
BR _z	-0,34	n.s.	0,32	0,30	0,26	0,27	0,31	0,31	n.s.	n.s.	n.s.
GWA _z	-0,32	0,28	0,38	0,37	0,34	0,34	0,39	0,40	n.s.	n.s.	n.s.
GWL _z	-0,34	0,32	0,44	0,44	0,41	0,40	0,45	0,46	-0,25	-0,25	n.s.
BI _z	-0,33	0,31	0,41	0,41	0,38	0,37	0,42	0,43	-0,22	n.s.	n.s.

Die Bedeutung einer ausreichenden N-Versorgung für ein gutes Bewurzelungsergebnis wird in Abb. 7.8 verdeutlicht. Der Großteil der Proben mit den höchsten Bewurzelungsindices liegt im rechten, oberen Quadranten und weist damit überdurchschnittlich hohe Protein-N- und eNF-Gehalte auf. Umgekehrt ist bei der Mehrzahl der Proben mit niedrigen Protein-N- und eNF-Gehalten – im linken, unteren Quadranten – der Bewurzelungsindex nur durchschnittlich, wobei aber einzelne Proben in diesem Quadrat durchaus einen hohen oder sogar sehr hohen Bewurzelungsindex aufweisen. Darüber hinaus zeigt die Grafik auch den recht engen Zusammenhang zwischen den beiden N-Fractionen ($r = 0,82$). Anders als bei den Chrysanthemen bleibt diese Beziehung auch bei hohen Protein-N-Gehalten relativ stabil. Auffällig sind nur zwölf Proben, die einen systematischen Versatz im Vergleich zum übrigen Datensatz aufweisen. Diese Proben haben sehr hohe Protein-N-Gehalte bei gleichzeitig nur durchschnittlichen eNF-Gehalten. Bei diesen Proben handelt es sich um alle Proben eines einzelnen Mess- bzw. Bewurzelungstermins (4 Sorten x 3 N-Düngungsstufen). Der Abgleich der NIRS-Werte mit den in diesem Fall für alle Proben vorliegenden Referenzwerten zeigt, dass diese Proben tatsächlich ein abweichendes Muster bei den N-Fractionen aufweisen, der Versatz also nicht durch eine NIRS-Fehlbestimmung verursacht wird.

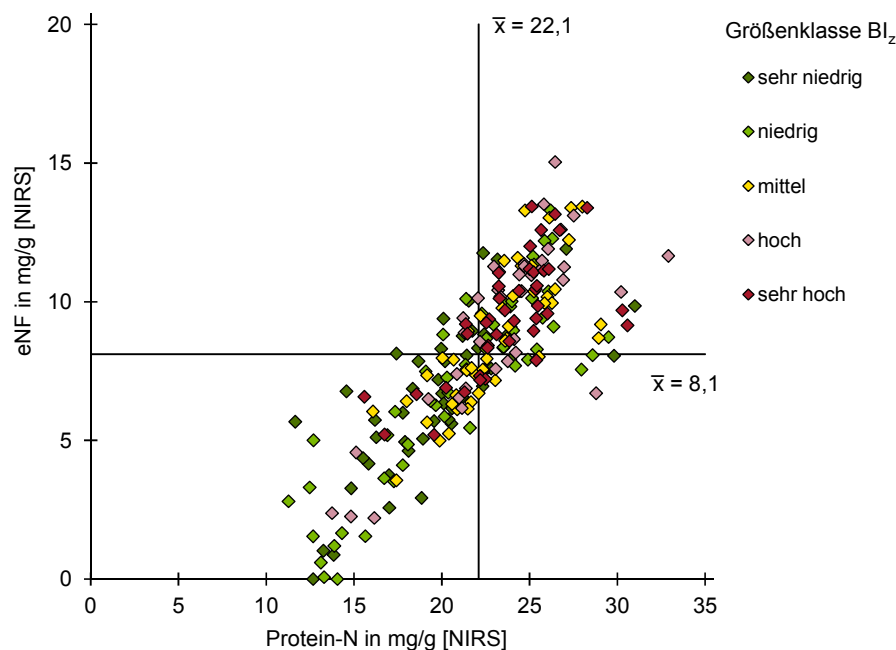


Abb. 7.8: Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom Protein-N- und eNF-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Protein-N- bzw. eNF-Gehalt der Stecklinge ($n = 228$)

Abb. 7.9 zeigt den Zusammenhang zwischen dem Gesamt-N-, dem Blatt-TNC-Gehalt und dem Bewurzelungsindex für die im Gewächshaus bewurzelten Pelargonien. Deutlich ist die Blatt-KH-Akkumulation bei Stecklingen mit Stickstoffmangel zu erkennen, während insbesondere bei den Proben mit einem überdurchschnittlichen Gesamt-N-Gehalt ($> 29,5$ mg/g)

kein Zusammenhang mehr zwischen Stickstoff- und Blattkohlenhydratgehalten zu erkennen ist. Wie bereits in Abb. 7.8 aufgezeigt, ist bei einem unzureichenden Stickstoffversorgungsstatus keine ungestörte Bewurzelung möglich, allerdings garantiert im Umkehrschluss ein hoher Stickstoffversorgungsstatus nicht automatisch ein gutes Bewurzelungsergebnis. Ein direkter Zusammenhang zwischen den Blatt-KH-Reserven unabhängig von der beschriebenen KH-Akkumulation in den Blättern unter Stickstoffmangel und der daraus resultierenden negativen Beziehung zwischen den Blatt-KH-Fractionen und dem Bewurzelungsergebnis ist nicht zu erkennen.

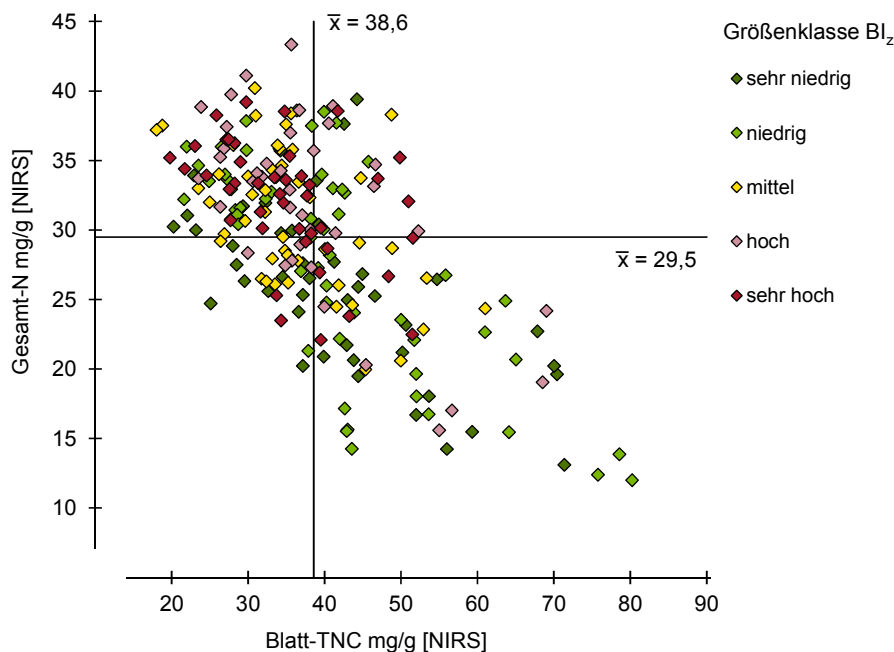


Abb. 7.9: Klassifizierter Bewurzelungsindex (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus in Abhängigkeit vom Gesamt-N- und Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Gesamt-N- bzw. Blatt-TNC-Gehalt der Stecklinge ($n = 228$)

Unter den Lichtbedingungen im Gewächshaus ist keine Limitierung der Bewurzelung durch zu geringe Blatt-KH-Gehalte bei einer sehr hohen N-Versorgung zu beobachten. Auch bei der alleinigen Betrachtung von Stecklingen mit einem überdurchschnittlichen Gesamt-N-Gehalt ≥ 33 mg/g (damit umfasst der Datensatz noch 20 % der Proben jeder Sorte), bei denen am ehesten eine Reduktion der KH-Reserven durch die Stickstoffübersversorgung zu befürchten ist, ergibt sich kein statistisch gesicherter Zusammenhang zwischen der Bewurzelung und den KH-Fractionen, während aber weiterhin positive Korrelationen zwischen den löslichen N-Fractionen (Amid-N, Amino-N, eoNF und eNF) und dem Bewurzelungsergebnis bestehen, die im Falle der Bewurzelungsrate und der Gesamtwurzelanzahl mit $p < 0,05$ signifikant sind (Tab. 7.9).

Tab. 7.9: Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fractionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten P-1 bis P-4 mit einem Gesamt-N-Gehalt ≥ 33 mg/g bei Bewurzelung im Gewächshaus (Werte z-transformiert für die Sorten, $p < 0,05$, $n = 45$, n.s. = nicht signifikant)

	TS _z	Amid-N _z	Amino-N _z	Protein-N _z	Gesamt-N _z	eoNF _z	eNF _z	oNF _z	Blattstärke _z	Blatt-TNC _z	Blatt-Diff-Z _z
BR _z	n.s.	n.s.	0,36	n.s.	n.s.	0,38	0,36	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.
GWA _z	-0,36	0,30	n.s.	n.s.	n.s.	0,31	0,31	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.
GWL _z	-0,34	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.
BI _z	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.	n.s.

7.2.2.2 Bewurzelung in der Klimakammer

Für die Bewurzelung in der Klimakammer ergibt sich ein vergleichbares Bild wie für die Bewurzelung im Gewächshaus. Zwischen allen Bewurzelungsparametern und allen N-Fractionen bestehen signifikante positive Beziehungen. Mit 0,3 bis 0,5 bewegen sich die Rangkorrelationskoeffizienten im selben Bereich wie bei den Versuchen im Gewächshaus. Während die negativen Beziehungen zwischen den Bewurzelungsparametern und dem TS-Gehalt weiterhin signifikant sind, ist kein statistisch abgesicherter Zusammenhang mehr zwischen den KH-Fractionen und der Bewurzelung zu erkennen (Tab. 7.10).

Tab. 7.10: Korrelationsmatrix (Spearmanischer Rangkorrelationskoeffizient) für die mittels NIRS bestimmten Inhaltsstoffe (TS, N- und KH-Fractionen) und die Stecklingsbewurzelung (BR, GWA, GWL und BI) für die Sorten P-1 bis P-4 bei Bewurzelung in der Klimakammer (Werte z-transformiert für die Sorten, $p < 0,001$, $n = 228$, n.s. = nicht signifikant)

	TS _z	Amid-N _z	Amino-N _z	Protein-N _z	Gesamt-N _z	eoNF _z	eNF _z	oNF _z	Blattstärke _z	Blatt-TNC _z	Blatt-Diff-Z _z
BR _z	-0,28	0,34	0,27	0,36	0,37	0,32	0,34	0,38	n.s.	n.s.	n.s.
GWA _z	-0,26	0,40	0,30	0,38	0,41	0,36	0,37	0,42	n.s.	n.s.	n.s.
GWL _z	-0,32	0,41	0,38	0,47	0,49	0,40	0,44	0,50	n.s.	n.s.	n.s.
BI _z	-0,29	0,41	0,34	0,43	0,46	0,39	0,41	0,46	n.s.	n.s.	n.s.

Wie Abb. 7.10 verdeutlicht, ist auch unter den Bewurzelungsbedingungen in der Klimakammer eine ausreichende Stickstoffversorgung die grundlegende Voraussetzung für ein gutes Bewurzelungsergebnis. So ist bei der Mehrzahl der Proben mit einem Gesamt-N-Gehalt von weniger als 30 mg/g die GWL unterdurchschnittlich. Nur vier der Proben mit einer sehr hohen GWL weisen einen unterdurchschnittlichen Gesamt-N-Gehalt auf. Umgekehrt bedeutet aber ein überdurchschnittlicher Gesamt-N-Gehalt nicht zwangsläufig eine überdurchschnittliche GWL. So weisen eine Reihe von Proben zwar sehr hohe Gesamt-N-Gehalte aber gleichzeitig nur eine sehr geringe GWL auf.

Trotz der deutlich erkennbaren Stärkeakkumulation bei Stickstoffmangel und des negativen Einflusses von Stickstoffmangel auf die Bewurzelung bestehen keine signifikanten Korrelationen zwischen der Bewurzelung und den Blattkohlenhydratfraktionen (Tab. 7.10).

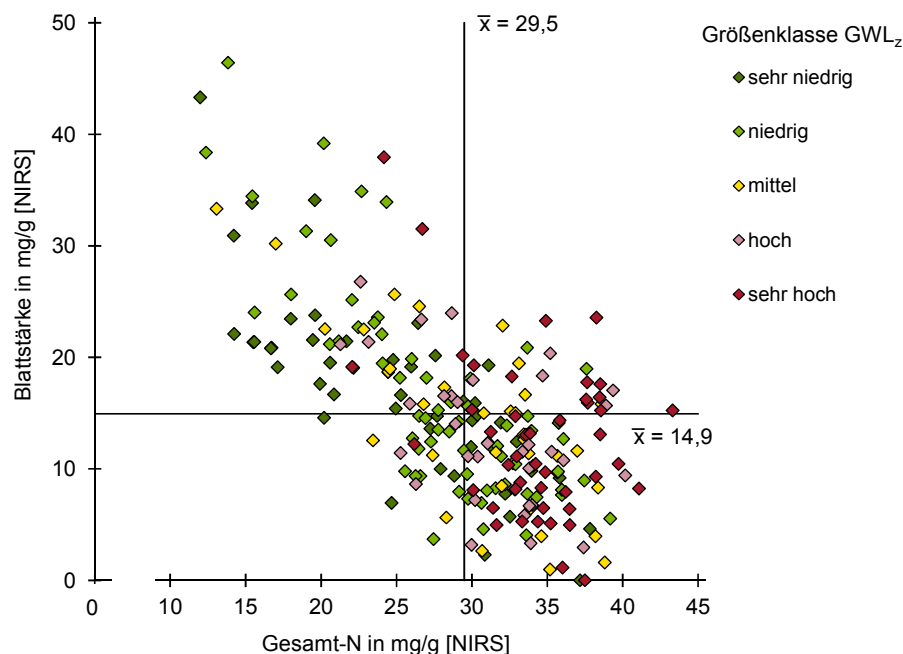


Abb. 7.10 : Klassifizierte Gesamtwurzellänge je Steckling (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung in der Klimakammer in Abhängigkeit vom Blattstärke- und Gesamt-N-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Blattstärke- bzw. Gesamt-N-Gehalt der Stecklinge (n = 228)

Ursächlich hierfür dürfte eine positive Beziehung zwischen den Blattkohlenhydraten und der Bewurzelung sein, die sich ergibt, wenn die Stecklinge mit den höchsten Gesamt-N-Gehalten separat betrachtet werden. Für die Proben mit einem Gesamt-N ≥ 33 mg/g (n = 45) ergibt sich ein Rangkorrelationskoeffizient von 0,41 für die Beziehung GWL und Blattstärkegehalt und von 0,35 für die Beziehung des BI zur Blattstärke. Diese Beziehungen sind mit $p < 0,05$ statistisch absicherbar. Abb. 7.11 zeigt, dass von den Proben mit hohen Stärkegehalten die Mehrzahl eine sehr hohe GWL aufweist, während von den Proben mit geringen Stärkegehalten etwa die Hälfte maximal eine mittlere GWL erzielt. Für die weiteren Bewurzelungsparameter (BR, GWA) werden zwar ebenfalls positive Rangkorrelationskoeffizienten erzielt, diese sind aber mit einer sehr hohen Unsicherheit behaftet. Gleiches gilt für die Korrelationen zwischen den Bewurzelungsparametern und den Blatt-TNC-Gehalten.

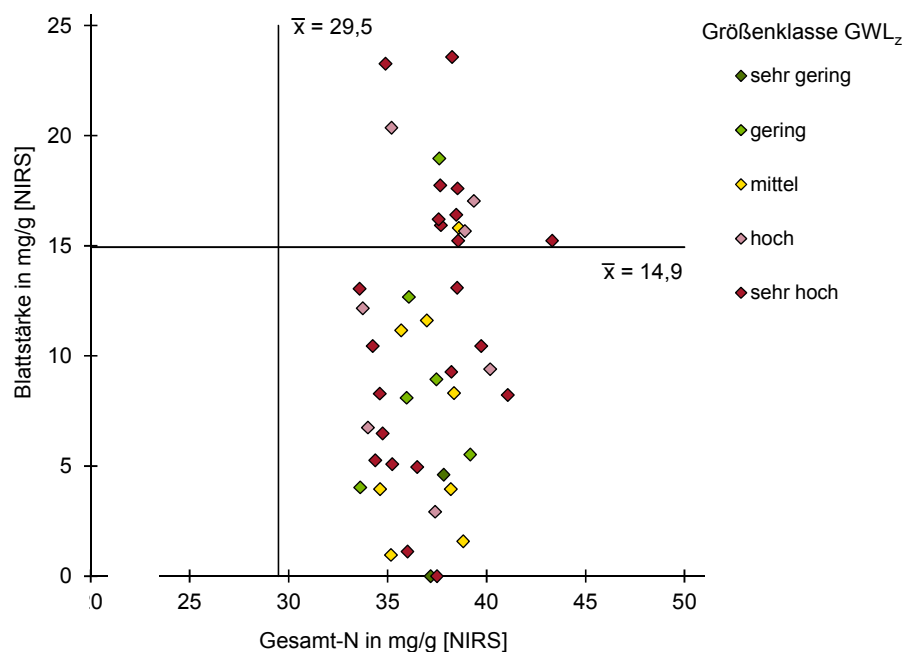


Abb. 7.11: Klassifizierte Gesamtwurzellänge je Steckling (Werte z-transformiert für die Sorten P-1 bis P-4) der Pelargonienstecklinge mit einem Gesamt-N-Gehalte ≥ 33 mg/g bei der Bewurzelung in der Klimakammer in Abhängigkeit vom Blattstärke- und Gesamt-N-Gehalt der Stecklinge, die Referenzlinien kennzeichnen den mittleren Blattstärke- bzw. Gesamt-N-Gehalt aller Stecklinge ($n = 45$)

7.3 Diskussion

Entsprechend dem zu Beginn des Abschnitts formulierten Ziel – Prüfung der Zweckmäßigkeit der NIRS-Analyse für die Ableitung des Bewurzelungspotential – sollen die Ergebnisse im Folgenden mit den in der Literatur beschriebenen Zusammenhängen zwischen N- und KH-Status der Stecklinge sowie dem Bewurzelungspotential abgeglichen werden. Sowohl bei den Chrysanthemen als auch bei den Pelargonien ist in beiden Bewurzelungsumgebungen – Gewächshaus und Klimakammer – die Adventivwurzelbildung positiv mit dem Stickstoffversorgungszustand korreliert, wobei die Zusammenhänge bei den Chrysanthemen deutlich enger ausgeprägt sind ($\rho = 0,50$ bis $0,67$) als bei den Pelargonien ($\rho = 0,25$ bis $0,50$). Diese Unterschiede sind im Wesentlichen auf die unterschiedlichen Reaktionen von Stecklingen mit hohen bis sehr hohen Stickstoffgehalten zurückzuführen. So wird bei Chrysanthemen die Stecklingsbewurzelung durch steigende Stickstoffgehalte kontinuierlich gesteigert, sobald ein kritischer unterer Stickstoffgehalt überschritten wird (Abb. 7.6). Diese Ergebnisse bestätigen im Wesentlichen die in Tab. 2.1 aufgeführten Untersuchungen. So beschreiben unter anderem Zerche et al. (1999) und Druège et al. (2000) einen engen positiven Zusammenhang zwischen der Stickstoffversorgung von Chrysanthemenmutterpflanzen und der nachfolgenden Bewurzelung der gernteten Stecklinge. Dieser Zusammenhang blieb auch erhalten, wenn die Stickstoffgaben die für einen maximalen Stecklingsertrag notwendigen Mengen überschritten und sogar ein leichter Ertragsrückgang zu beobachten war.

Bei den Pelargonien ist zwar ebenfalls eine eindeutige Limitierung der Bewurzelung bereits bei einer leichten Stickstoffunterversorgung zu erkennen, gleichzeitig bietet aber eine sehr hohe Stickstoffversorgung keine Gewähr für ein gutes Bewurzelungsergebnis (Abb. 7.8 und Abb. 7.10). Vergleichbare Ergebnisse werden von Reuther und Röber (1980) sowie von Druge et al. (2004) beschrieben. Während in diesen Untersuchungen die Limitierung der Bewurzelung durch Stickstoffmangel ebenfalls eindeutig war, bestanden bei einer hohen bis sehr hohen Stickstoffversorgungen komplexe Wechselwirkungen zwischen den Umweltbedingungen (Mutterpflanzenkultur, Stecklingslagerung, Bewurzelungsumgebung), dem Ernährungszustand und der Adventivwurzelbildung. Dieser Zusammenhang wird in der vorliegenden Arbeit beim Vergleich der Bewurzelungsergebnisse der Pelargonienstecklinge bei der Bewurzelung im Gewächshaus und in der Klimakammer zumindest ansatzweise ersichtlich. Unter den konstanten Schwachlichtbedingungen in der Klimakammer (Tageslichtintegral = $2,5 \pm 0,5$ mol je m^2 und Tag) war bei alleiniger Betrachtung von Stecklingen mit sehr hohen Stickstoffgehalten (Gesamt-N ≥ 33 mg/g) ein positiver Einfluss hoher Kohlenhydratreserven zu beobachten ($\rho = 0,41$ Blattstärkegehalt zu GWL, $\rho = 0,35$ Blattstärkegehalt zu BI). Wurden die Stecklinge dagegen unter natürlichen Lichtbedingungen im Gewächshaus bewurzelt (Tageslichtintegral = $5,7 \pm 2,2$ mol je m^2 und Tag) blieb auch bei alleiniger Betrachtung dieses Teildatensatzes ein positiver Einfluss einzelner N-Fraktionen bestehen, während keine signifikanten Zusammenhänge zwischen den Bewurzelungsparametern und den KH-Fraktionen bestanden (Tab. 7.9). Ursächlich hierfür dürfte sein, dass die Stecklinge unter den Lichtbedingungen im Gewächshaus – im Gegensatz zu denen in der Klimakammer – in der Lage waren ihren Kohlenhydratbedarf bereits kurz nach dem Stecken aus der laufenden Photosynthese zu decken, wodurch die Kohlenhydratreserven zum Steckzeitpunkt nachrangig wurden (Rapaka et al., 2005). Insbesondere während der Sommermonate geerntete Stecklinge waren vermutlich, wie Forscher und Reuther (1984) es beschreiben »Teile von Starklichtpflanzen«, die unter den Schwachlichtbedingungen in der Klimakammer keine ausreichende Photosyntheseleistung etablieren konnten und daher auf ausreichend hohe Kohlenhydratreserven angewiesen waren. Bei Chrysanthenen ist diese Lichtadaption der Stecklinge in Abhängigkeit von den Lichtbedingungen während der Mutterpflanzenkultur weniger stark ausgeprägt (Stoop et al., 1990) und Stecklinge weisen auch unter Schwachlichtbedingungen bereits kurz nach dem Stecken wieder eine positive Nettophotosyntheserate auf (Hegewald et al., 1999). Aus diesem Grund ist bei Chrysanthenen nur unter besonders ungünstigen Bedingungen – sehr hohe Einstrahlung während der Mutterpflanzenkultur und sehr geringes Lichtangebot während der Bewurzelung wie z.B. in den Versuchen von Röber und Reuther (1982) – eine Limitierung der Bewurzelung durch zu geringe Kohlenhydratreserven bei sehr hoher Stickstoffversorgung zu beobachten. In der vorliegenden Arbeit bestanden keine vergleichbar großen Unterschiede zwischen dem Lichtangebot während der Mutterpflanzenkultur und der Stecklingsbewurzelung, so dass dieser Effekt nicht zum Tragen kam.

Bezüglich der Stickstoffversorgung kann aus den vorliegenden Daten für Chrysanthemen eine kritische Grenze für den Gesamt-N-Gehalt, unterhalb derer die Adventivwurzelbildung stark limitiert wird, von etwa 40 mg/g abgeleitet werden (Tab. 7.6 und Abb. 7.6). Dies ist in Übereinstimmung mit Ergebnissen von Zerche und Druëge (2009) für Poinsettien. Bei Pelargonien liegt diese Grenze mit knapp 30 mg/g deutlich niedriger (Abb. 7.9). Im Gegensatz zu Chrysanthemen, bei denen die Bewurzelung durch höhere Stickstoffgehalte weiter gefördert wird, sollte bei Pelargonien eine obere Grenze von etwa 35 mg/g nicht überschritten werden, da eine starke Stickstoffübersversorgung zu einer Reduktion der Kohlenhydratreserven führt (Druëge, 2009). Eine Überschreitung dieser oberen Grenze ist insbesondere bei der in der Praxis üblichen Bewurzelung von Stecklinge von hochlichtadaptierten Mutterpflanzen (aus Südbetrieben) nach einer Transportphase unter Schwachlichtbedingungen (in den Wintermonaten in Mitteleuropa) als kritisch anzusehen. Ein Grenzwert für die notwendigen KH-Reserven, der unter solchen Bedingungen zum Steckzeitpunkt nicht unterschritten werden sollte, lässt sich aus den vorliegenden Daten allerdings nicht ableiten.

8 Schlussfolgerung

Die erste Frage, ob die nahinfrarotspektroskopische Bestimmung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus sowie des Trockensubstanzgehalts von Zierpflanzenstecklingen ohne Probenaufbereitung möglich ist, kann zumindest teilweise mit ja beantwortet werden. So wurden für die verschiedenen Stickstoff- und Kohlenhydratfraktionen sowie den Trockensubstanzgehalt Kalibrierungen entwickelt, die bezüglich ihrer Leistungsfähigkeit folgendermaßen untergliedert werden können:

quantitative bzw. halbquantitative Bestimmung bei:

- TS
- Protein-N, oNF, Gesamt-N
- Blatt-TNC

Klassifizierung bzw. halbqualitative Aussagen möglich bei:

- eoNF, eNF
- Blattstärke, Blatt-TSS

nicht oder kaum nutzbare Kalibriermodelle bei:

- Amid-N, Nitrat-N
- Fructose, Glucose, Saccharose

Die erreichten Vorhersageleistungen für die TS, den Protein-, oNF- und Gesamt-N (siehe Abschnitt 4.2.3) sind dabei vergleichbar zu Ergebnissen an Grassilagen ohne Probenvorbereitung, die eine ähnliche komplexe Matrix – heterogenes Probenmaterial, hoher Wassergehalt – wie die Zierpflanzenstecklinge darstellen (siehe Abschnitt 2.2). Die Vorhersageleistungen für die Blattkohlenhydrate sind zwar ebenfalls recht gut, aber auf Grund der rechtsschiefen Verteilung der Referenzwerte (Abb. 4.23) vor allem bei Proben mit hohen Gehalten mit einer größeren Unsicherheit behaftet. Um diese Unsicherheit zu reduzieren, sollte der Datensatz um Proben mit hohen Blatt-TNC-Gehalten erweitert werden. Im gleichen Maße sollten Proben mit sehr geringen Gehalten aus dem Datensatz herausgenommen werden. Dazu müssten die Mutterpflanzen bei möglichst hoher Lichtintensität kultiviert, die Stecklinge erst spät am Tag geerntet und die NIRS-Messungen ohne jeden Zeitverzug durchgeführt werden.

Für die geringere Genauigkeit bei der Bestimmung der löslichen N-Summenfraktionen (eNF, eoNF) sind vermutlich mehrere Gründe ausschlaggebend: Zum einen die relativ geringen Gehalte ($\bar{x} < 15$ mg/g), zum anderen nicht ganz vermeidbare gasförmige Verluste bei der Trocknung der Proben für die Referenzanalytik. Eine Verbesserung der NIRS-Vorhersageleistung wäre in diesem Fall in erster Linie durch eine Verbesserung der Referenzanalytik bzw. der Probenvorbereitung zu erreichen. Beim eNF kommt noch die geringe NIR-Aktivität des Nitrat-Moleküls hinzu. Diese zeigt sich ganz deutlich in der Nichtbestimmbarkeit des Nitratstickstoffs (Abb. 4.12). Die Kombination aus sehr geringen Gehalten (< 5 mg/g) und Trocknungsverlusten ist vermutlich auch beim Amid-N ursächlich für die unzureichende Genauigkeit, die maximal eine Unterscheidung von Proben mit sehr hohen und sehr geringen Gehalten zulässt.

Bei der Blattstärke sowie den löslichen Blutzuckern, sowohl als Summen- wie auch als Einzelfraktionen, ist die größte Schwierigkeit die Selektivität. Die gute Bestimmbarkeit des Blatt-TNC-Gehalts zeigt, dass Kohlenhydrate zwar erfasst werden, wie die Untersuchungen an den künstlichen Proben in Abschnitt 5.2 nachdrücklich belegen, sind die spektralen Unterschiede zwischen den verschiedenen Zuckern (Fructose, Glucose, Saccharose) aber so gering, dass keine Unterscheidung möglich ist. Da dies auch für die Unterscheidung von Mono- und Disacchariden gilt (Abb. 5.9), ist zu vermuten, dass bei den Kalibrierungen für die Summe der löslichen Zucker eine Querbeeinflussung durch wechselnde Stärkegehalte und umgekehrt besteht.

Der gewählte Ansatz, Kalibriermodelle auf Basis umfangreicher Datensätze zweier Modellkulturen, die eine große Variabilität aufweisen, zu entwickeln und deren Anwendungsbereich durch wenige Proben weiterer Kulturen auf diese zu erweitern, hat sich als zielführend erwiesen. Zwar erreichen die gemeinsamen Kalibriermodelle eine etwas geringere Genauigkeit als gattungsspezifische Modelle, dies wird im Routinebetrieb aber durch die größere Variabilität, die von den Kalibriermodellen abgedeckt wird, und dem geringeren Aufwand für die laufende Pflege und Weiterentwicklung ausgeglichen. Zudem kann die Technologie damit eventuell

auch auf Kulturen mit einer geringeren wirtschaftlichen Bedeutung angewandt werden. Die Robustheit der Modelle gegenüber Einflüssen einzelner Sorten sowie der Stecklingsherkunft (Abschnitte 4.2.4.2 und 4.2.4.3) ist sehr gut, so dass eine dementsprechende Ausweitung problemlos möglich sein sollte. Kritischer mit Blick auf einen Routineeinsatz sind die z. T. erheblichen (systematischen) Abweichungen zu einzelnen Messterminen zu sehen (Abschnitt 4.2.4.1). Die Ursachen hierfür konnten nicht eindeutig geklärt werden, doch spielt vermutlich die Standardisierung der Messbedingungen bzw. des Messvorgangs eine wesentliche Rolle. Vor einem Praxiseinsatz besteht hier noch Optimierungsbedarf. Ein Ansatzpunkt für eine bessere Standardisierung bzw. für deren Kontrolle könnten die in Abschnitt I.2 verwendeten künstlichen Proben auf Basis von GelriteTM-Platten sein. Da diese ein vergleichbares spektrales Muster wie die realen Stecklingsproben aufweisen, könnten durch sie Veränderungen der Messbedingungen bzw. des Messgerätes frühzeitig erkannt und korrigiert werden.

Die zweite Frage, ob auf Basis dieser Messungen ein System zur Qualitätsbeurteilung von Zierpflanzenstecklingen aufgebaut werden kann, lässt sich eindeutig mit ja beantworten. Dies gilt sowohl für Chrysanthemen als auch für Pelargonien. Bei beiden Kulturen ist der Stickstoffstatus von primärer Bedeutung und die Bewurzelung wird bereits durch leichten Stickstoffmangel limitiert. Bei den Chrysanthemen kann aus den vorliegenden Daten ein Mindestgehalt für den Gesamtstickstoff von etwa 40 mg/g und bei den Pelargonien von etwa 28 mg/g abgeleitet werden. Dass diese Mindestgehalte in der Praxis nicht selten unterschritten werden, zeigen die Abb. 8.1 und Abb. 8.2. Bei den Chrysanthemen weisen von den über zwei Erntejahre hinweg gelieferten 155 Proben aus der laufenden Produktion der Fa. Kientzler 14 einen Gesamtstickstoffgehalt von weniger als 40 mg/g auf.

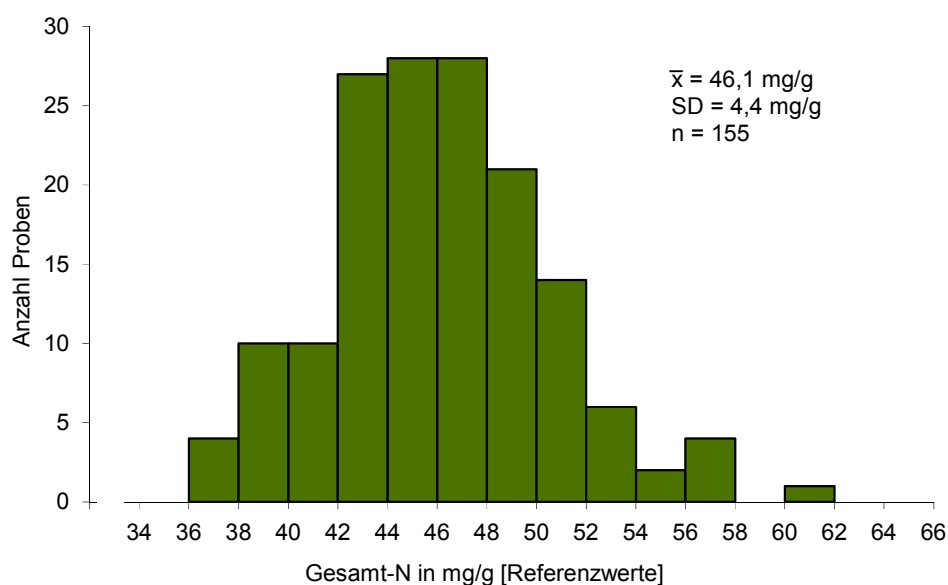


Abb. 8.1: Verteilung der referenzanalytisch bestimmten Gesamtstickstoffgehalte von Chrysanthemenstecklingen aus der laufenden Produktion der Fa. Kientzler (Costa Rica) in den beiden Ernteperioden 2010 und 2011

Bei den Pelargonien ergibt sich ein vergleichbares Bild. Hier unterschreiten 15 der insgesamt 160 Proben den geforderten Mindestgehalt. Diese Ergebnisse werden in einer Untersuchung von Santos et al. (2011a) bestätigt, die den Gesamtstickstoffgehalt von etwa 300 Pelargonienstecklingen (Peltaten und Zonale) bestimmt haben und bei einer Reihe von Proben ebenfalls Gehalte unter 28 mg/g fanden.

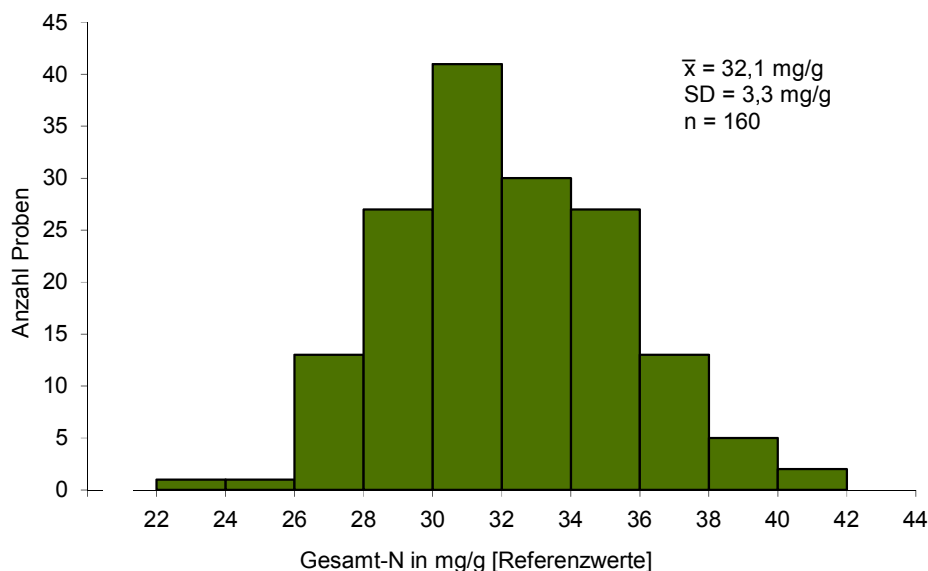


Abb. 8.2: Verteilung der referenzanalytisch bestimmten Gesamtstickstoffgehalte von Pelargonienstecklingen aus der laufenden Produktion der Firmen Dümmen (Äthiopien) und Endisch (Ägypten) in den beiden Ernteperioden 2009/10 und 2010/11

Des Weiteren zeigt Abb. 8.2, dass gleichzeitig 20 Proben sehr hohe Stickstoffgehalte zwischen 36 und 42 mg/g aufweisen. In der Untersuchung von Santos et al. (2011a) werden sogar noch höhere Gehalte bis 48 mg/g erreicht. Das Risiko eines schlechten Bewurzelungsergebnisses ist bei diesen Proben auf Grund der in der Literatur beschriebenen (Reuther und Röber, 1980, Druege et al., 2004) und auch in der vorliegenden Arbeit gezeigten Wechselwirkungen zwischen N-Versorgung und KH-Reserven und der daraus resultierenden Limitierung der Adventivwurzelbildung bei einer zu hohen N-Versorgung deutlich erhöht. Dies gilt insbesondere bei der in der Praxis üblichen Kombination aus Starklichtbedingungen während der Mutterpflanzenkultur und Schwachlichtbedingungen während der Bewurzelung.

Die Daten aus drei Jungpflanzenbetrieben sowie die Daten aus der Untersuchung von Santos et al. (2011a) zeigen, dass eine bedarfsgerechte Stickstoffversorgung der Mutterpflanzen und damit ein optimaler Stickstoffstatus der Stecklinge trotz regelmäßiger Substrat- und Drainwasseranalysen nicht immer gewährleistet sind. Die Nahinfrarotspektroskopie bietet hier ein nicht unerhebliches Verbesserungspotential, wobei die Kalibriermodelle für einen Routineeinsatz noch weiter optimiert und insbesondere die Zuverlässigkeit über die Zeit noch verbessert werden müssen. Auch die Kohlenhydratreserven in den Blättern lassen sich mittels NIRS gut bestimmen, allerdings werden diese bereits kurz nach der Ernte stark in den Spross verlagert bzw. veratmet (Druege et al., 2004; Rapaka et al., 2005; Klopotek et al., 2010). Die Bestim-

mung der Blattkohlenhydrate kann daher vor allem genutzt werden, um die Vitalität der Mutterpflanzen am Produktionsstandort zu beurteilen, da es unter Stressbedingungen (u. a. Nährstoffmangel, intensive Beerntung, zunehmendes Mutterpflanzenalter) vielfach zu einer starken Kohlenhydratakkumulation – insbesondere von Stärke – kommt (Reuther und Röber, 1980; von Hentig, 1996; Rapaka et al., 2005). Um die Kohlenhydratreserven der Stecklinge, die wie beschrieben bei ungünstigen Bewurzelungsbedingungen an Bedeutung gewinnen, zum Steckzeitpunkt abschätzen zu können, müssen die Sprosskohlenhydrate in zukünftige Untersuchungen miteinbezogen werden. Wie in Abschnitt 4.3.2.3 dargelegt, war dies in der aktuellen Untersuchung auf Grund der verwendeten Messtechnik mit einem sehr großen Messfeld nicht möglich, da dies durch die z. T. sehr dünnen Sprosse nicht sicher abgedeckt werden konnte und bei den Spektren der ganzen Stecklinge der Anteil der Blätter stark überwog. Abhilfe könnte hier entweder der Einsatz einer auf einen kleinen Bereich fokussierten Optik über Lichtleiter oder eine gewisse Probenaufbereitung (z. B. Zerkleinerung der Sprossachsen ohne Trocknung) schaffen.

9 Literaturverzeichnis

- Abrams, S.M., Shenk, J.S. und Harpster, H.W. (1988): Potential of near infrared reflectance spectroscopy for analysis of silage composition. *Journal of Dairy Science* 71(7), 1955-1959.
- Abrams, S.M., Shenk, J.S., Westerhaus, M.O. und Barton II, F.E. (1987): Determination of forage quality by near infrared reflectance spectroscopy: efficacy of broad-based calibration equations. *Journal of Dairy Science* 70(4), 806-813.
- Alves, A., Santos, A., Rozenberg, P., Pâques, L.E., Charpentier, J.-P., Schwanninger, M. und Rodrigues, J. (2012): A common near-infrared based partial least squares regression model for the prediction of wood density of *Pinus pinaster* and *Larix x eurolepsis*. *Wood Sciences Technologies* 46(1-3), 157-175.
- Andersen, A.S. (1986): Environmental influences on adventitious rooting in cuttings of non-woody species. (223-253). In Jackson, M.B. (Hrsg.): *New root formation in plants and cuttings*. Martinus Nijhoff Publishers, Dordrecht.
- Azzouz, T., Puigdoménech, A., Aragay, M. und Tauler, R. (2003): Comparison between different data pre-treatment methods in the analysis of forage samples using near-infrared diffuse reflectance spectroscopy and partial least-squares multivariate calibration method. *Analytica Chimica Acta* 484(1), 121-134.
- Barnes, R. J., Dhanoa, M. S. und Lister, S. J. (1989): Standard normal variate transformation and de-trending of near-Infrared diffuse reflectance spectra. *Applied Spectroscopy* 43(5), 772-777.
- Batten, G.D., Blakeney, A.B., Mc Grath, V.B. und Ciavarella, S. (1993): Non-structural carbohydrate: analysis by near infrared reflectance spectroscopy and its importance as an indicator of plant growth. *Plant and Soil* 155/156(1), 243-246.
- Bellon-Maurel, V., Fernandez-Ahumada, E., Palagos, B., Roger, J.-M. und McBratney A. (2010): Critical review of chemometric indicators commonly used for assessing the quality of the prediction of soil attributes by NIR spectroscopy. *Trends in Analytical Chemistry* 29(8), 1073-1081.
- Blanco, M., Castillo, M., Peinado, A. und Beneyto, R. (2007): Determination of low analyte concentration by near-infrared spectroscopy: effect of spectral pretreatments and estimation of multivariate detection limits. *Analytica Chimica Acta* 581(2), 318-323.
- Blanco M., Coello, J., Montoliu, I. und Romero, M. A. (2001): Orthogonal signal correction in near infrared calibration. *Analytica Chimica Acta* 434(1), 125-132.
- Blanco, M. und Villarroya, I. (2002): NIR spectroscopy: a rapid-response analytical tool. *Trends in Analytical Chemistry* 21(4), 240-250.

- Blazich, F.A. (1988): Mineral nutrition and adventitious rooting. (61-69). In Davis, T.D., Haissig, B.E. und Sankhla, N. (Hrsg.): Adventitious root formation in cuttings. Dioscorides Press, Portland (OR).
- BMEL (2014): Jahreseinfuhrstatistik 2014: Einfuhr von lebenden Pflanzen und Waren des Blumenhandels, KN 06. Bundesministerium für Ernährung und Landwirtschaft.
- Bobelyn, E., Serban, A.-S., Nicu, M., Lammertyn, J., Nicolai, B.M. und Saeys, W. (2010): Postharvest quality of apple predicted by NIR-spectroscopy: study of the effect of biological variability on spectra and model performance. *Postharvest Biology and Technology* 55(3), 133-143.
- Brimmer, P.J. und Hall, J.H. (2001): Method development and implementation of near-infrared spectroscopy in industrial manufacturing support laboratories. (187-189). In Williams, P.C. und Norris, K. (Hrsg.): Near-infrared technology in the agricultural and food industries. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).
- Brogna, N., Pacchioli, M.T., Immovilli, A., Ruozi, F., Ward, R. und Formigoni, A. (2009): The use of near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) in the prediction of chemical composition and in vitro neutral detergent fibre (NDF) digestibility of Italian alfalfa hay. *Italian Journal of Animal Science* 8(2), 271-273.
- Brown, P.J. (1992): Wavelength selection in multicomponent near-infrared calibration. *Journal of Chemometrics* 6(3), 151-161.
- Bruun, S., Wagner Jensen, J., Magid, J., Lindedam, J. und Engelsen, S.B., (2010): Prediction of the degradability and ash content of wheat straw from different cultivars using near infrared spectroscopy. *Industrial Crops and Products* 31, 21-326.
- Bünning-Pfaue, H. (2003): Analysis of water in food by near infrared spectroscopy. *Food Chemistry* 82(1), 107-115.
- CAMO (2012): The Unscrambler X[®] - User Manual, CAMO AS, Oslo.
- Cozzolino, D., Barlocco, N., Vadell, A., Ballesteros, F., und Gallieta, G. (2003): The use of visible and near-infrared reflectance spectroscopy to predict colour on both intact and homogenised pork muscle. *LWT-Food Science and Technology*, 36(2), 195-202.
- Cozzolino, D., Fassio, A., Fernández, E., Restaino, E. und La Manna, A. (2006): Measurement of chemical composition in wet whole maize silage by visible and near infrared reflectance spectroscopy. *Animal Feed Science and Technology* 129(3), 329-336.
- Cozzolino, D. und Labandera, M. (2002): Determination of dry matter and crude protein contents of undried forages by near-infrared reflectance spectroscopy. *Journal of the Science of Food and Agriculture* 82(4), 380-384.

- Da Costa, C.T., de Almeida, M.R., Ruedell, C.M., Schwammbach, J., Maraschin, F.S. und Fett-Neto, A.G. (2013): When stress and development go hand in hand: main hormonal controls of adventitious rooting in cuttings. *Frontiers in Plant Science* 4/133, 1-19.
- Dahm, D.J. und Dahm, K.D. (2001): The physics of near-infrared technology. (1-17). In Williams, P.C. und Norris, K. (Hrsg.): *Near-infrared technology in the agricultural and food Industries*. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).
- Dardenne, P., Sinnaeve, G. und Baeten, V. (2000): Multivariate calibration and chemometrics for near infrared spectroscopy: which method?. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 8(4), 229-237.
- Davis, T.D. und Potter, J.R. (1981): Current photosynthate as a limiting factor in adventitious root formation on leafy pea cuttings. *Journal of the American Society of Horticultural Science* 106(3), 278-282.
- Davis, T.D. und Potter, J.R. (1989): Relations between carbohydrate, water status and adventitious root formation in leafy pea cuttings rooted under various levels of atmospheric CO₂ and relative humidity. *Physiologia Plantarum* 77(2), 185-190.
- Day, N.E. (1969): Estimating the components of a mixture of normal distributions. *Biometrika* 56(3), 463-474.
- Del Zotto, S. (2013): The PLS regression model: algorithms and application to chemometric data. Dissertation, Università degli Studi di Udine, Udine.
- Dieterle, P., Engling, F.P., Horst, H., Paul, C., Robowsky, K.-D. und Tillmann, P. (2003): Die Anwendung der Nahinfrarotspektroskopie (NIRS) bei der Untersuchung von Futtermitteln und pflanzlichen Produkten. VDLUFA Standpunkt, Bonn.
- Dirksmeyer, W. (2009): Betriebsstrukturen im Produktionsgartenbau. (3-43). In: Dirksmeyer, W. (Hrsg.): *Status Quo und Perspektiven des deutschen Produktionsgartenbaus*. *Landbauforschung* 330.
- Dreywood, R. (1946). Qualitative test for carbohydrate material. *Industrial & Engineering Chemistry Analytical Edition*, 18(8), 499-499.
- Druege, U. (2009): Involvement of carbohydrates in survival and adventitious root formation of cuttings within the scope of global horticulture. *Adventitious root formation of forest trees and horticultural plants - from genes to applications*. *Research Signpost* 37/661(2), 187-208.
- Druege, U., Zerche, S. und Kadner, R. (1998): Relation between nitrogen and soluble carbohydrate concentrations and subsequent rooting of chrysanthemum cuttings. *Advances in Horticultural Science* 12, S. 78-84.

Druege, U., Zerche, S. und Kadner, R. (2004): Nitrogen- and storage-affected carbohydrate partitioning in high-light-adapted pelargonium cuttings in relation to survival and adventitious root formation under low light. *Annals of Botany* 94(6), 831-842.

Druege, U., Zerche, S., Kadner, R. und Ernst, M. (2000): Relation between nitrogen status, carbohydrate distribution and subsequent rooting of chrysanthemum cuttings as affected by pre-harvest nitrogen supply and cold-storage. *Annals of Botany* 85(5), 687-701.

Dümmen GmbH (2013): Schlussbericht zum Forschungsvorhaben: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Beurteilung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen Teilprojekt III: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie als Basis eines Systems zur Qualitätssicherung bei Pelargonien- und Poinsettienstecklingen durch eine gezielte Optimierung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus. Tobias Dümmen Jungpflanzen GmbH & Co. KG, FKZ BMBF 2815305007.

Ehsani, M.R., Upadhyaya, S.K., Slaughter D., Shafii, S. and Pelletier, M. (1999): A NIR technique for rapid determination of soil mineral nitrogen. *Precision Agriculture* 1(2), 217-234.

Endisch GmbH (2013): Schlussbericht zum Forschungsvorhaben: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Beurteilung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen Teilprojekt IV: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie als Basis eines Systems zur Qualitätssicherung bei Pelargonien- und Poinsettienstecklingen durch eine gezielte Optimierung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus. Endisch Gartenbau GmbH & Co. KG, FKZ BMBF 2815305007.

Fearn, T. (2000): On orthogonal signal correction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 50(1), 47-52.

Feng, J., McGlone, A.V., Currie, M., Clark, C.J. und Jordan, B.R. (2011): Assessment of yellow-fleshed kiwifruit (*Actinidia chinensis* 'Hort16A') quality in pre- and post-harvest conditions using a portable near-infrared spectrometer. *HortScience* 46(1), 57-63.

Fischer, P. und Hansen, J. (1977): Rooting of chrysanthemum cuttings. Influence of irradiance during stock plant growth and of decapitation and disbudding of cuttings. *Scientia Horticulturae* 7(2), 171-178.

Forscher, W. und Reuther, G. (1984): Photosynthese und Wasserhaushalt von Pelargonienstecklingen während der Bewurzelung unter dem Einfluß verschiedener Licht- und CO₂-Bedingungen. *Gartenbauwissenschaft*, 49(4), 182-190.

François, I.M., Mariën, E., Brijs, K. und De Proft, M. (2009): The use of Vis/NIR spectroscopy to predict the optimal root harvesting date of chicory (*Cichorium intybus* L.). *Postharvest Biology and Technology* 53(1-2), 77-83.

- Ganmore-Neumann, R. und Hagiladi, A. (1992): Importance of temperature and ammonium nitrate for production and cutting quality in pelargonium stock plants. *Acta Horticulturae* 314, 309-316.
- Gatehouse, B.M., Livingstone S.E. and Nyholm R.S. (1958): Infrared spectra of some nitrate and other oxyanion co-ordination complexes. *Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry* 8, 75-78.
- Geladi, P., McDougall, D. und Martens, H. (1985): Linearization and scatter correction for near-infrared reflectance spectra of meat. *Applied Spectroscopy* 39(3), 491-500.
- Gemperline, P.J. (1997): Rugged spectroscopic calibration for process control. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 39(1), 29-40.
- Giangiaco, R. und Dull, G.D. (1986): Near infrared spectrophotometric determination of individual sugars in aqueous mixtures. *Journal of Food Science* 51(3), 679-683.
- Gibaud, H. (2007): Nahinfrarotspektroskopische Erfassung und Charakterisierung der nutritiven und fermentativen Qualität von Grassilagen im ungetrockneten Zustand. Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen.
- Gibson, J.L. (2003): Influence of mineral nutrition on stock plant yield and subsequent rooting of stem cuttings of scaevola, New Guinea impatiens, and vegetative strawflower. Dissertation, North Carolina State University, Raleigh (NC).
- Gillon, D., Houssard, C. und Joffre, R. (1999): Using near-infrared reflectance spectroscopy to predict carbon, nitrogen and phosphorus content in heterogeneous plant material. *Oecologia* 118(2), 173-182.
- Griggs, T.C., Lobos, K.B. und Kingery, P.E. (1999): Digestibility analysis of undried, unground, and dry ground herbage by near-infrared reflectance spectroscopy. *Crop Science* 39(4), 1164-1170.
- Guthrie, J.A., Reid, D.J. und Walsh, K. (2005): Assessment of internal quality attributes of mandarin fruit: 2. NIR calibration model robustness. *Australian Journal of Agricultural Research* 56(4), 417-426.
- Haaland, E. (1976): The effect of light and CO₂ on the carbohydrates in stock plants and cuttings of *Campanula isophylla* 'Moretti'. *Scientia Horticulturae* 5(4), 353-361.
- Haaland D.M. und Thomas E.V. (1988): Partial least-squares methods for spectral analysis. 1. Relation to other quantitative calibrations methods and the extraction of qualitative information. *Analytical Chemistry* 60(1), 1193-1202.
- Hartmann, H.T., Kester, D.E., Davies Jr., F.T. und Geneve, R.L. (2011): Plant propagation – Principles and practices. 8. Ausgabe, Prentice Hall, Upper Saddle River (NJ).

- Haun J.R. und Cornell, P.W. (1950): Rooting response of geranium (*Pelargonium hortorum* Bailey var. Ricard) cuttings as influenced by nitrogen, phosphorus and potassium nutrition of stock plants. *American Journal for Horticultural Science* 58(12), 317-323.
- Hegewald, J., Kadner, R., Drüge, U. und Zerche, S. (1999): Photosyntheserate von Chrysanthemenstecklingen während der Bewurzelung unter dem Einfluß unterschiedlicher Stickstoffversorgung der Mutterpflanzen und Lichtbedingungen während der Vermehrung. *BDGL-Schriftenreihe* 17, 159-159.
- Helland, I.S., Næs, T., Isaksson, T. (1995): Related versions of multiplicative scatter correction method for preprocessing spectroscopic data. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 29(2), 233-241.
- Hendrix, D.L. (1993): Rapid extraction and analysis of nonstructural carbohydrates in plant tissue. *Crop Science* 33(6), 1306-1311.
- Henry, R.J. (1985): Near-infrared reflectance analysis of carbohydrates and its application to the determination of (1→3), (1→4)-β-D-Glucan in barley. *Carbohydrate Research* 141(1), 13-19.
- Hermida, M., Lois, A. und Rodriguez-Otero, J.L. (2005): Analysis of nitrogen fractions in silage by near-infrared spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 53(5), 1374-1378.
- Horneck, D.A. und Miller, R.O. (1998): Determination of total nitrogen in plant tissue. (75-83). In Kalra, Y.P. (Hrsg.): *Handbook of reference methods for plant analysis*. CRC Press, Boca Raton (FL).
- Hosmer Jr., D.W. (1973): A comparison of iterative maximum likelihood estimates of the parameters of a mixture of two normal distributions under three different types of sample. *Biometrics* 29(4), 761-770.
- Höskuldsson, A. (1996): Dimension of linear models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 32(1), 37-55.
- Hruschka, W.R. (2001): Data Analysis: wavelength selection methods. (39-58). In Williams, P.C. und Norris, K. (Hrsg.): *Near-infrared technology in the agricultural and food industries*. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).
- Jakob, F., Vielemeyer, H.P., und Podlesak, W. (1986): Studies in the suitability of nitrogen fractions for diagnosing the nitrogen status of winter-wheat (*Triticum-Aestivum* L). *Archiv für Acker- und Pflanzenbau und Bodenkunde* 30, 599-605.
- Ji-Yong, S., Xiao-Bo, Z., Jie-Wen, Z., Kai-Liang, W., Zheng-Wei, C., Xiao-Wei, H., De-Tao, Z. und Holmes, M. (2012): Nondestructive diagnostics of nitrogen deficiency by cucumber

leaf chlorophyll distribution map based on near infrared hyperspectral imaging. *Scientia Horticulturae* 138, 190-197.

Johnson, L.F. (2001): Nitrogen influence on fresh-leaf NIR spectra. *Remote Sensing of Environment* 78(3), 314-320.

Kadner, R., Druège, U. und Zerche, S. (2008): Influence of the quality of rooted cuttings on the growth and final quality of cut chrysanthemum. *European Journal of Horticultural Sciences* 76(6), 237-243.

Kadner, R. und Zerche, S. (1997): Einfluss einer gestaffelten Stickstoffernährung der Mutterpflanzen auf die Lagerfähigkeit und Bewurzelung von Chrysanthemenstecklingen (*Dendranthema-Grandiflorum*-Hybriden). *Gartenbauwissenschaft*, 62(4), 184-189.

Kaiser, W.M. (1997): Regulatory interaction of carbon- and nitrogen metabolism. (150-163). In Behnke, H.D, Lüttge, U., Esser, K., Kadereit, J.W., und Runge, M. (Hrsg.): *Progress in botany*, Volume 58, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.

Kemsley, E.K., Zhuo, L., Hammouri, M.K. und Wilson, R.H. (1992): Quantitative analysis of sugar solutions using infrared spectroscopy. *Food Chemistry* 44(4), 299-304.

Kennedy, C.A., Shelford, J.A. und Williams, P.C. (1996): Near infrared spectroscopic analysis of intact grass silage and fresh grass for dry matter, crude protein and acid detergent fibre. (524-530). In: Davies, A.M.C. und Williams, P.C. (Hrsg.): *Near Infrared Spectroscopy: The future waves*. NIR-Publications, Charlton (UK).

Kessler, W. (2007): *Multivariate Datenanalyse für die Pharma-, Bio- und Prozessanalytik*. WILEY-VCH Verlag, Weinheim.

Klopotek, Y., Haensch, K.-T., Hause, B. Hajirezaei, M.-R. und Druège, U. (2010): Dark exposure of petunia cuttings strongly improves adventitious root formation and enhances carbohydrate availability during rooting in the light. *Journal of Plant Physiology* 167(7), 547-557.

Köhler, W., Schachtel, G. und Voleske P. (2012): *Biostatistik eine Einführung für Biologen und Agrarwissenschaftler*. 5. Auflage, Springer-Verlag, Heidelberg.

Kokaly, R.F. (2001): Investigating a physical basis for spectroscopic estimates of leaf nitrogen concentration. *Remote Sensing of Environment* 75(2), 153-161.

Kraus, E.J. und Kraybill, H.R. (1918): *Vegetation and reproduction with special reference to the tomato*. Dissertation, University of Chicago (IL).

Lammertyn, J., Peirs, A., De Baerdemaeker, J. und Nicolaï, B. (2000): Light penetration properties of NIR radiation in fruit with respect to non-destructive quality assessment. *Post-harvest Biology and Technology* 18(2), 121-132.

- Lanza, E. und Li, B.W. (1984): Application of near infrared spectroscopy for predicting the sugar content of fruit juices. *Journal of Food Science* 49(4), 995-998.
- Léon, L., Garrido-Varo, A. und Downey, G. (2004): Parent and harvest year effects on near-infrared reflectance spectroscopic analysis of olive (*Olea europaea* L.) fruit traits. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 52(16), 4957-4962.
- Limpert, E. und Stahel, W.A. (2011): Problems with using the normal distribution – and ways to improve quality and efficiency of data analysis. *PLoS One* 6(7), 1-8.
- Limpert, E., Stahel, W.A. und Abbt, E. (2001): Lognormal distributions across the sciences: keys and clues. *BioScience* 51(5), 341-352.
- Liu, X. und Han, L. (2006): Evaluation of near-infrared reflectance spectroscopy (NIRS) for predicting chemical composition of straw silage. *Journal of Animal and Feed Sciences* 15(2), 329-336.
- Liu, F., Nie, P.C., Huang, M., Kong, W.W. und He, Y. (2011): Nondestructive determination of nutritional information in oilseed rape leaves using visible/near infrared spectroscopy and multivariate calibrations. *Science China* 54(3), 598-608.
- Liu, Y., Ying, Y., Yu, Haiyan und Fu, X. (2006): Comparison of the HPLC method and FT-NIR analysis for quantification of glucose, fructose, and sucrose in intact apple fruits. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 54(8), 2810-2815.
- Lohr, D., Tillmann, P., Zerche, S., Meinken, E., Röber, R. und Nast, D. (2007): Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie zur Bestimmung des Stickstoffgehaltes in frischen Zierpflanzenstecklingen. *VDLUFA-Schriftenreihe* 62, 462-468
- Madsen II, L.R., White, B.E. und Rein, P.W. (2003): Evaluation of a near infrared spectrometer for the direct analysis of sugar cane. *Journal American Society of Sugarcane Technologists* 23, 80-92.
- Marcoulides, G.A., Chin W.W. und Saunders, C. (2009): A critical look at partial least squares modelling *MIS Quarterly* 33(1), 171-175.
- Marschner, H. (1990): Mineral nutrition of higher plants. 4. Ausgabe, Academic Press, London.
- Marten, G.C., Shenk, J.S und Barton, II, F.E (1989): Near infrared reflectance spectroscopy (NIRS): Analysis of forage quality (39). *Agric. Handb.* 643. USDA-ARS, Washington, DC.
- Martens, H. und Martens, M. (2000): Modified jack-knife estimation of parameter uncertainty in bilinear modelling by partial least squares regression (PLSR). *Food Quality and Preference* 11(1), 5-16.

- Matissek, R., Steiner, G. und Fischer, M. (2010): Kohlenhydrate. (127-172). In: Matissek, R., Steiner, G. und Fischer, M. (Hrsg.): Lebensmittelanalytik. 4. Auflage, Springer, Berlin.
- Mayland, H.F. (1968): Effect of drying methods on losses of carbon, nitrogen and dry matter from alfalfa. *Agronomy Journal* 60(6), 658-659.
- Mayland, H.F., Cheeke, P.R., Majak, W. und Goff, J.P. (2007): Forage-induced animal disorders. (687-707). In Barnes, R., Nelson, C., Moore, K. und Collins, M. (Hrsg.): The science of grassland agriculture. Blackwell Publishing, Ames (IA).
- Meyer, J.H. (1997): Review of near infrared spectroscopy research in the South African sugar industry. *Proceedings of the Annual Congress South African Sugar Technologists' Association* 71, 33-37.
- Micklander, E., Kjeldahl, K., Egebo, M. und Nørgaard, L. (2006): Multi-product calibration models of near infrared spectra of foods. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 14(6), 395-401.
- Miller, C. E. (2001): Chemical principles of near-infrared technology. (19-37). In Williams, P.C. und Norris, K. (Hrsg.): Near-infrared technology in the agricultural and food industries. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).
- Miller J.C. und Miller J.N. (1988): Basic statistical methods for analytical chemistry part I. Statistics of repeated measurements - a review. *Analyst* 113(9), 1351-1356.
- Min, M., Lee, W.S., Kim, Y.H. und Bucklin, R.A. (2006): Nondestructive detection of nitrogen in Chinese cabbage leaves using VIS-NIR spectroscopy. *HortScience* 41(1), 162-166.
- Mobley, P.R., Kowalski, B.R., Workman Jr., J.J. und Bro, R. (1996): Review of chemometrics applied to spectroscopy 1985-1995, part 2. *Applied Spectroscopic Reviews* 31, 347-368.
- Moe, R. (1977): Effect of light, temperature and CO₂ on the growth of *Campanula isophylla* stock plants and the subsequent growth and development of their cuttings. *Scientia Horticulturae* 6(2), 129-141.
- Moe, R. (1985): The effect of stock plant treatments on rooting and lateral branching in some greenhouse plants. *Acta Horticulturae* 166, 45-49.
- Moe, R. und Andersen, A.S. (1988): Stock plant environment and subsequent adventitious rooting. (214-234). In Davis, T.D., Haissig, B.E. und Sankhla, N. (Hrsg.): Adventitious root formation in cuttings. Dioscorides Press, Portland (OR).
- Monono, E.M., Haagenson, D.M. und Pryor, S.W. (2012): Developing and evaluating NIR calibration models for multi-species herbaceous perennials. *Industrial Biotechnology* 8(5), 285-292.

- Montes, J.M., Mirdita, V., Prasad, K., Blummel, M. und Melchinger, A.E. (2008): Feeding quality assessment of fresh maize stover by means of near-infrared spectroscopy with a new sample presentation unit. *Plant Breeding* 127(2) (Short Communication), 214-216.
- Morón, A., Garcia, A., Sawchik, J. und Cozzolino, D. (2007): Preliminary study on the use of near-infrared reflectance spectroscopy to assess nitrogen content of undried wheat plants. *Journal of the Science of Food and Agriculture*, 87(1), 147-152.
- Moschner, C.R. (2007): Methodische Untersuchung zum Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie (NIRS) zur Qualitätsbeurteilung von High-Oleic-Sonnenblumen. Dissertation, Georg-August-Universität Göttingen.
- Næs, T., Isaksson, T., Fearn, T. und Davies, T. (2004): *Multivariate Calibration and Classification*. NIR Publications, Chichester.
- Nicolaï, B.M., Beullens, K., Bobelyn, E., Peirs, A., Sayes, W., Theron, K.I. und Lammertyn, J. (2007): Nondestructive measurement of fruit and vegetable quality by means of NIR spectroscopy: a review. *Postharvest Biology and Technology* 46(2), 99-118.
- Nie, Z., Liu, T. und Liu, X. (2008): Hot topic: application of support vector machine method in prediction of alfalfa protein fractions by near infrared reflectance spectroscopy. *Journal of Dairy Science* 91(6), 2361-2369.
- Niederländer, A. (2012): Schlussbericht zum Forschungsvorhaben: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Beurteilung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen Teilprojekt V: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie als Basis eines Systems zur Qualitätssicherung bei Chrysanthemen- und Osteospermumstecklingen durch eine gezielte Optimierung des Stickstoff- und Kohlenhydratstatus. Kientzler GmbH & Co. KG, FKZ BMBF 2815305007.
- Norris, K.H. und Williams, P.C. (1984): Optimization of mathematical treatments of raw near-infrared signal in the measurement of protein in Hard Red Spring wheat. I. Influence of particle size. *Cereal Chemistry*, 61(2), 158-165.
- Omar, A.F., Atan, H. und Mat Jafri, M.Z. (2012): Peak response identification through near-infrared spectroscopy analysis on aqueous sucrose, glucose, and fructose solution. *Spectroscopy letters* 45(3), 190-201.
- Oosterbaan, R.J. (1994): Chapter 6: Frequency and regression analysis of hydrologic data. (175-223). In Ritzema H.P. (Hrsg.): *Drainage principles and applications*. Publication 16, 2. überarbeitete Ausgabe, International Institute for Land Reclamation and Improvement, Wageningen.
- Oosterbaan, R.J., Sharma, D.P., Singh, K.N. und Rao, K.V.G.K. (1990): Crop production and soil salinity: evaluation of field data from India by segmented linear regression with break-

- point. Proceedings of the Symposium on Land drainage for salinity control in arid and semi-arid regions. 3, 373-383.
- Oosten D.W. (1988): Selection of optimal regression models via cross-validation. *Journal of Chemometrics* 2(1), 39-48.
- Osborne, B.G., Douglas, S., Fearn, T. und Willis, K.H. (1982): The development of universal calibrations for measurement of protein and moisture in UK home-grown wheat by near-infrared reflectance analysis. *Journal of the Science of Food and Agriculture* 33(8), 736-740.
- Ozaki, Y., Morita, S. und Du, Y. (2007): Chapter 3: Spectral analysis (47-72). In Ozaki Y., McClure, F.W. und Christy A.A. (Hrsg.): *Near-infrared spectroscopy in food science and technology*. John Wiley & Sons Inc., Hoboken (NJ).
- Park, R.S., Agnew, R.E., Gordon, F.J. und Steen, R.W.J. (1998): The use of near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) on undried samples of grass silage to predict chemical composition and digestibility parameters. *Animal Feed Science Technology* 72(1), 155-167.
- Park, H. S., Lee, S. H., Choi, K. C., Lim, Y. C., Kim, J. H., Lee, K. W., & Choi, G. J. (2014). Prediction of the chemical composition and fermentation parameters of winter rye silages by near-infrared spectroscopy. *Journal of the Korean Society of Grassland and Forage Science* 34(3), 209-213.
- Park, H.S., Lee, J.K., Fike, J.H., Kim, D.A., Ko, M.S. und Ha, J.K. (2005): Effect of sample preparation on prediction of fermentation quality of maize silage by near infrared reflectance spectroscopy. *Asian-Australian Journal of Animal Science* 18(5), 643-648.
- Peirs, A., Tirry, J., Verlinden, B., Darius, P. und Nicolai, B.M. (2003): Effect of biological variability on the robustness of NIR models for soluble solids content of apples. *Postharvest Biology and Technology* 28, S. 269-280.
- Pekkeriet, E.J. und van Henten, E.J. (2011): Current developments of high-tech robotic and mechatronic systems in horticulture and challenges for the future. *Acta Horticulturae* 893, 85-94.
- Rambla, F.J., Garrigues, S. und de la Guardia, M. (1997): PLS-NIR determination of total sugar, glucose, fructose and sucrose in aqueous solutions of fruit juices. *Analytica Chimica Acta* 344(1), 41-53.
- Rapaka, V.K., Bessler, B., Schreiner, M. und Druege, U. (2005): Interplay between initial carbohydrate availability, current photosynthesis, and adventitious root formation in *Pelargonium* cuttings. *Plant Science* 168(6). 1547-1560.
- Rapaka, V.K., Faust, J.E., Dole, J.M. und Runkle, E.S. (2008): Endogenous carbohydrate status affects postharvest ethylene sensitivity in relation to leaf senescence and adventitious root formation in *Pelargonium* cuttings. *Postharvest Biology and Technology* 48(2), 272-282.

- Reeves III, J.B. und Blosser, T.H. (1991): Near infrared spectroscopic analysis of undried silages as influenced by sample grind, presentation method, and spectral region. *Journal of Dairy Science* 74(3), 882-895.
- Reeves III, J.B., Blosser, T.H. und Colenbrander, V.F. (1989): Near infrared reflectance spectroscopy for analyzing undried silage. *Journal of Dairy Science* 72(1), 79-88.
- Reuther, G. und Röber, R. (1980): Einfluss unterschiedlicher N-Versorgung auf Photosynthese und Ertrag von Pelargonienmutterpflanzen. *Gartenbauwissenschaft* 45(1), 21-29.
- Rinnan, Å., van den Berg, F. und Engelsen, S.B. (2009): Review of the most common pre-processing techniques for near-infrared spectra. *Trends in Analytical Chemistry* 28(10), 1201-1222.
- Röber, R. (1978): Beziehung zwischen Ertrag, Qualität und Mineralstoffgehalt von Chrysanthemenstecklingen. *Gartenbauwissenschaft* 43(5), 200-204.
- Röber, R. und Reuther G. (1982): Der Einfluß unterschiedlicher N-Formen und – Konzentrationen auf den Ertrag und die Qualität von Chrysanthemen-Stecklingen. *Gartenbauwissenschaft* 47(4), 182-188.
- Rodriguez-Saona, L.E., Fry, F.S., McLaughlin, M.A. und Calvey, E.M. (2001): Rapid analysis of sugars in fruit juices by FT-NIR spectroscopy. *Carbohydrate Research* 336(1), 63-74.
- Roggo, Y., Duponchel, L. und Huvenne, J.-P. (2004): Quality evaluation of sugar beet (*Beta vulgaris*) by near-infrared spectroscopy. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 52(5), 1055-1061.
- Ryan, S.E. und Porth, L.S. (2007): A tutorial on the piecewise regression approach applied to bedload transport data. General Technical Report (RMRS-GTR-189), 1-41.
- Saeys, W., Mouazen, A.M. und Ramon, H. (2005): Potential of onsite and online analysis of pig manure using visible and near infrared reflectance spectroscopy. *Biosystems Engineering* 91(4), 393-402.
- Santos, K.M., Fisher, P.R. und Argo, W.R. (2011a): Survey of tissue nutrient levels in vegetative cuttings. *Communications in Soil Science and Plant Analysis* 42(6), 669-693.
- Santos, K.M., Fisher, P.R., Yeager, T.H., Simonne, E.H., Carter, H.S. und Argo, W.R. (2011b): Effect of petunia stock plant nutritional status on fertilizer response during propagation. *Journal of Plant Nutrition* 34(10), 1424-1436.
- Sarawong, S. und Kawano, S. (2007): Fruits and vegetables. (219-245). In Ozaki Y., McClure W.F. und Christy A.A. (Hrsg.): *Near-infrared spectroscopy in food science and technology*. John Wiley & Sons Inc., Hoboken (NJ).

- Sarkhot, D.V., Grunwald, S., Ge, Y. und Morgan, G.L.S. (2011): Comparison and detection of total and available soil carbon fractions using visible/near infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma* 164(1), 22-32.
- Savitzky A. und Golay, M.J.E. (1964): Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures. *Analytical Chemistry* 36(8), 1627-1639.
- Shanks, J.B. und Link, C.B. (1951): Poinsettia stock plant nutrition in relation to production, rooting and growth of cuttings. *American Journal for Horticultural Science* 59(6), 487-495.
- Shenk, J.S. (2004): Standardization and calibration transfer. (207-227). In: Roberts, C.A., Workmann Jr. und Reeves III, J.B. (Hrsg.): *Near-infrared spectroscopy in agriculture*. *Agronomy* 44, ASA, Madison (WI).
- Shenk, J.S. und Westerhaus, M.O. (1993): Near infrared reflectance analysis with single- und multiproduct calibrations. *Crop Science* 33(3), 582-584.
- Sinnaeve, G., Dardenne, P., Agneessens, R. und Biston, R. (1994): The use of near infrared spectroscopy for the analysis of fresh grass silage. *Journal of Near Infrared Spectroscopy* 2(2), 79-84.
- Sørensen, L.K. (2004): Prediction of fermentation parameters in grass and corn silage by near infrared spectroscopy. *Journal of Dairy Science* 87(11), 3826-3835.
- Stoop, J.M.H., Peet, M.M., Willits, D.H. und Nelson, P.V. (1990): Photosynthetic dynamics in chrysanthemum in response to single step increases and decreases in photon flux density. *Plant Physiology* 94(1), 46-53.
- Svensson, O., Kourti, T. und MacGregor, J. F. (2002): An Investigation of orthogonal signal correction algorithms and their characteristics. *Journal of Chemometrics* 16(4), 176-188.
- Tanaka, M. und Kojima, T. (1996): Near-infrared monitoring of the growth period of Japanese pear fruit based on constituent sugar concentration. *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 44(8), 2272-2277.
- Tewari, J.C., Dixit, V., Cho, B.-K. und Malik, K.A. (2008): Determination of origin and sugars of citrus fruits using genetic algorithm, corresponding analysis and partial least square combined with fibre optic NIR spectroscopy. *Spectrochimica Acta Part A* 71(3), 1119-1127.
- Thiex, N. und van Erem, T. (1999): Comparisons of Karl Fischer method with oven methods for determination of water in forages and animal feeds. *Journal of AOAC International* 82(4), S. 799-808.
- Tillmann, P. (1996): *Kalibrationsentwicklung für NIRS-Geräte - Eine Einführung*. Cuvallier Verlag, Göttingen.

- Toms, J.D. und Lesperance, M.L. (2003): Piecewise regression: A tool for identifying ecological thresholds. *Ecology* 84(4), 2034-2041.
- Trygg, J. und Wold, S. (2002): Orthogonal projections to latent structures (O-OLS). *Journal of Chemometrics* 16(3), 119-128.
- Ulissi, V., Antonucci, F., Benincasa, P., Farneselli, M., Tosti, G., Guiducci, M., Tei, F., Costa, C., Pallottino, F., Pari, L. und Menesatti, P. (2011): Nitrogen concentration estimation in tomato leaves by VIS-NIR non-destructive spectroscopy. *Sensors*, 11(6), 6411-6424.
- Valderrama, P., Braga, J.W.B und Poppi, R.J. (2007): Validation of multivariate calibration models in the determination of sugar cane quality parameters by near infrared spectroscopy. *Journal of Brazilian Chemical Society* 18(2), 259-266.
- Valdes, E.V., Jones, G.E. und Hoekstra, G.J. (1990): Effect of growing year and application of a multi-year calibration for predicting quality parameters by near infrared reflectance spectroscopy in whole-plant corn forage. *Canadian Journal of Plant Science*, 70(3), 747-755.
- Valdez, C., Andrés, S., Giráldez, J.F., García, R. und Calleja, A. (2006): Potential use of visible and near infrared reflectance spectroscopy for the estimation of nitrogen fractions in forages harvested from permanent meadows. *Journal of the Science of Food and Agriculture* 86(2), 308-314.
- van Henten, E.J. (2004): Greenhouse mechanization: state of the art and future perspective. *Acta Horticulturae* 710, 55-70.
- VDLUFA (2012a): A 5.1.1: Bestimmung des pH-Wertes. *VDLUFA-Methodenbuch, Bd. I: Die Untersuchung von Böden. 4. Auflage, 1. bis 6. Teillieferung*, VDLUFA Verlag, Darmstadt.
- VDLUFA (2012b): A 10.1.1: Bestimmung des Salzgehaltes in Böden, gärtnerischen Erden und Substraten. *VDLUFA-Methodenbuch, Bd. I: Die Untersuchung von Böden. 4. Auflage, 1. bis 6. Teillieferung*, VDLUFA Verlag, Darmstadt.
- VDLUFA (2012c): A 13.1.1: Bestimmung von Haupt- und Spurennährstoffen in Kultursubstraten im Calciumchlorid/DTPA-Auszug (CAT-Methode). *VDLUFA-Methodenbuch, Bd. I: Die Untersuchung von Böden. 4. Auflage, 1. bis 6. Teillieferung*, VDLUFA Verlag, Darmstadt.
- VDLUFA (2012d): A 13.1.1 Anlage 1: Richtwerte zur Bewertung der Untersuchungsergebnisse von gärtnerischen Substraten mit der CAT-Methode. *VDLUFA-Methodenbuch, Bd. I: Die Untersuchung von Böden. 4. Auflage, 1. bis 6. Teillieferung*, VDLUFA Verlag, Darmstadt.

- Veierskov, B. (1988): Relations between carbohydrates and adventitious root formation. (70-78). In Davis, T.D., Haissig, B.E. und Sankhla, N. (Hrsg.): Adventitious root formation in cuttings. Dioscorides Press, Portland (OR).
- Vieth, E. (1989): Fitting piecewise linear regression functions to biological responses. *Journal of Applied Physiology* 67(1), 390-396.
- Vlassis, N.A., Papakonstantinou, G. und Tsanakas, P. (1999): Mixture density estimation based on maximum likelihood and sequential test statistics. *Neural Processing Letters* 9(1), 63-76.
- Von Hentig, W.-U. (1959): Untersuchung über den Einfluß der Ernährung von Chrysanthemen- und Fuchsienmutterpflanzen auf die Stecklingsproduktion und -bewurzelung. *Gartenbauwissenschaft* 6(3). 334-362.
- Von Hentig, W.-U. (1996): Vegetative Vermehrung. (207-239). In Horn, W. (Hrsg.): Zierpflanzenbau. Blackwell Wissenschaftsverlag, Berlin.
- Von Loggerenberg, D. und Pretorius, A. (2005): Determination of oil and protein content of striped and black sunflower seeds using NIR technology. *Communications in Soil Science and Plant Analysis* 36(4-6), 729-741.
- Von Soest, P.J. (1994): Nutritional Ecology of the Ruminant. (156-176). 2. Ausgabe, Cornell University Press, Ithaca (NY).
- Vranić, M., Knežević, M., Seregély, Z., Bošnjak, K., Leto, J. und Perčulija, G. (2005): Prediction of dry matter and crude protein content in fresh grass silage by near infrared spectroscopy. *Progress in Agricultural Engineering Sciences* 1(1), S. 57-75.
- Wedding, B.B., Wright, C., Grauf, S., White, R.D., Tilse, B. und Gadek, P. (2013): Effects of seasonal variability on FT-NIR prediction of dry matter content for whole Hass avocado fruit. *Postharvest Biology and Technology* 75, 9-16.
- Welle, R., Greten, W., Rietmann, B., Alley, S., Sinnaeve, G. und Dardenne, P. (2003): Near-infrared spectroscopy on chopper to measure maize forage quality parameters online. *Crop Sciences* 43(4), 1407-1413.
- Westerhuis, J.A., de Jong, S. und Smilde, A.K. (2001): Direct orthogonal signal correction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 56(1), 13-25.
- Wiklund, S., Nilsson, D., Eriksson, L., Sjöström, M., Wold, S. und Faber, K. (2007): A randomization test for PLS component selection. *Journal of Chemometrics* 21(10-11), 427-439.
- Williams, P.C. (2001): Implementation of near-infrared technology. (145-169). In Williams, P.C. und Norris, K. (Hrsg.): Near-infrared technology in the agricultural and food industries. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).

- Williams, P.C. und Norris, K. (2001a): Variables affecting near-infrared spectroscopic analysis. (171-185). In Williams, P.C. und Norris, K. (Hrsg.): Near-infrared technology in the agricultural and food Industries. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).
- Williams, P.C. und Norris, K. (2001b): Near-infrared technology in the agricultural and food Industries. 2. Ausgabe, American Association of Cereal Chemists, St. Paul (MN).
- Wold, S., Antti, H., Lindgren, F. und Öhmann, J. (1998): Orthogonal signal correction of near-infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 44(1), 175-185.
- Workman Jr., J.R. (1996): Interpretative spectroscopy for near infrared. *Applied Spectroscopy Reviews* 31(3), 251-320.
- Xiaobo, Z., Jiewen, Z., Povey, M.J.W., Holmes M. und Hanpin, M. (2010): Variables selection methods in near-infrared spectroscopy. *Analytica Chimica Acta* 667(1), 14-32.
- Zeaier, M., Roger, J.-M., Bellon-Maurel, V. und Rutledge, D.N. (2004): Robustness of models developed by multivariate calibration. Part I: the assessment of robustness. *Trends in Analytical Chemistry* 23(2), 157-170.
- Zerche, S. und Drüge, U. (2013): Schlussbericht zum Forschungsvorhaben: Einsatz der Nahinfrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Beurteilung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen Teilprojekt II: Ermittlung der Genotyp- und Umweltreaktion der Stickstoff- und Kohlenhydratfraktionen von Zierpflanzenstecklingen in der Jungpflanzenproduktion als Grundlage einer Qualitätsbewertung mittels Nahinfrarot-Spektroskopie. BLE-FKZ 313-06.01-28-1-53.048-07.
- Zerche, S. Kadner, R. und Druege, U. (1999): Effect of cultivar, nitrogen nutrition and cultivating system of *Chrysanthemum* mother plants on cutting yield, nitrogen concentration, and subsequent rooting of cuttings. *Gartenbauwissenschaft* 64(6), 272-278.
- Zerche, S. und Druege, U. (2009): Nitrogen content determines adventitious rooting in *Euphorbia pulcherrima* under adequate light independently of pre-rooting carbohydrate depletion of cuttings. *Scientia Horticulturae* 121(3), 340-347.
- Zerche, S., Drüge, U. und Kadner, R. (2007): Stickstofffraktionen und Adventivwurzelregeneration in Chrysanthemen-Stecklingen bei differenzierter Stickstoffernährung der Mutterpflanzen. *BHGL-Schriftenreihe* 25, 31-31.

10 Anhang

10.1 Sortenlisten

Tab. 10.1: Sortenliste der Chrysanthemen und Pelargonienproben (z = Zonale-, p = Peltaten-Sorten)

Chrysanthemen			Pelargonien		
Nr.	Sorte	Lieferant	Nr.	Sorte (Zonale/Peltaten)	Lieferant
C-1	Senso	Kientzler	P-1	Serena Nova (z)	Endisch
C-2	Kipli	Kientzler	P-2	Astra (z)	Endisch
C-3	Malibu	Kientzler	P-3	Bianca (z)	Dümmen
C-4	Yahou Golden	Kientzler	P-4	Präludium (z)	Dümmen
C-5	May Shoesmith	Kientzler	P-5	Trend Red (z)	Endisch
C-6	Bigoudi	Kientzler	P-6	Trend Orange (z)	Endisch
C-7	Anastasia	Kientzler	P-7	Trend Lavender (z)	Endisch
C-8	Lilac Eleonora	Kientzler	P-8	Trend Dark Red (z)	Endisch
C-9	Inga	Kientzler	P-9	Arenas Nova (z)	Endisch
C-10	Snowdown	Kientzler	P-10	Rosario Nova (z)	Endisch
C-11	Tipik	Kientzler	P-11	Sunflair Fireball (p)	Endisch
C-12	Titane	Kientzler	P-12	Sunflair Night Nova (p)	Endisch
C-13	Casa	Kientzler	P-13	Gabrielli (z)	Dümmen
C-14	Tictac	Kientzler	P-14	Survivor salmon (z)	Dümmen
C-15	Tonka	Kientzler	P-15	Fuerto (z)	Dümmen
C-16	Solero	Kientzler	P-16	Blanko (z)	Dümmen
C-17	Polodor	Kientzler	P-17	Ville rot (p)	Dümmen
C-18	Ministrel Weiss	Kientzler	P-18	Atlantic blue (p)	Dümmen
C-19	Malabar	Kientzler	P-19	Pacific soft pink (p)	Dümmen
C-20	Casimir	Kientzler	P-20	Pacific red star (p)	Dümmen

Tab. 10.2: Sortenliste der Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienproben

Impatiens (Endisch/Ägypten)		Osteospermum (Kientzler/Costa Rica)		Poinsettien (Dümmen/Äthiopien)	
Nr.	Sorte	Nr.	Sorte	Nr.	Sorte
I-1	Lyon	O-1	Banana	E-1	Premium Red
I-2	Pisa	O-2	Mango	E-2	Euro Glory Red
I-3	Verona	O-3	Orange	E-3	Artic White
I-4	Davos	O-4	White	E-4	Viking Red
I-5	Cannes	O-5	Margenta	E-5	Marco Polo
I-6	Capri	O-6	Terracotta	E-6	Champion Red

10.2 Zusammensetzung der Kalibrier- und Validierdatensätze

In den folgenden Tabellen sind die Verteilungen der Inhaltstoffgehalte in den Kalibrier- und Validierdatensätzen dargestellt. Die Tab. 10.3 bis Tab. 10.6 umfassen die Datensätze für die Basiskalibrierungen mit Chrysanthemem und Pelargonien jeweils getrennt für die Gattungen bzw. Arten sowie zusammengefasst für die gesamten Datensätze. In Tab. 10.7 und Tab. 10.8 erfolgt die Darstellung für die Poinsettien-, Impatiens- und Osteospermumproben für die Ausweitung der Kalibriermodelle in der gleichen Art und Weise.

Tab. 10.3: Verteilung der Trockensubstanz und Stickstofffraktionen im Kalibrierdatensatz, aufgeschlüsselt für die drei Kulturen (Ch, Pz, Pp) und für den gesamten Kalibrierdatensatz (Alle)

		Anzahl Proben	\bar{x}	SD	Median	Minimum	Maximum	25 % Quartile	75 % Quartile
Trockensubstanz [mg/g]	Ch	206	121	17	121	75	174	109	131
	Pz	225	135	15	136	63	199	125	146
	Pp	33	119	17	117	91	151	105	132
	Alle	464	128	18	127	63	199	116	140
Amid-N [mg/g]	Ch	193	1,1	0,6	0,9	0,1	3,4	0,6	1,4
	Pz	164	1,7	0,8	1,7	0,2	3,7	1,1	2,3
	Pp	33	2,5	0,9	2,4	0,7	4,8	1,8	3,0
	Alle	390	1,4	0,8	1,3	0,1	4,8	0,8	2,0
Nitrat-N [mg/g]	Ch	193	3,1	1,5	3,0	0,1	8,0	2,2	4,0
	Pz	164	0,8	0,5	0,7	0,0	2,1	0,4	1,1
	Pp	33	0,7	0,3	0,7	0,0	1,5	0,6	0,9
	Alle	390	1,9	1,6	1,4	0,0	8,0	0,6	3,0
Amino-N [mg/g]	Ch	193	8,9	3,1	9,0	2,0	16,1	7,1	10,7
	Pz	164	6,3	1,9	6,5	1,8	9,9	5,3	7,8
	Pp	33	7,0	1,1	6,9	4,3	9,0	6,2	7,9
	Alle	390	7,7	2,8	7,4	1,8	16,1	5,9	9,2
Protein-N [mg/g]	Ch	193	31,0	3,7	31,4	18,4	40,4	29,0	33,4
	Pz	164	21,9	4,2	22,1	12,2	31,8	19,1	24,6
	Pp	33	23,1	2,7	22,0	19,9	29,8	21,3	25,6
	Alle	390	26,5	5,9	26,6	12,2	40,4	21,9	31,5
Gesamt-N [mg/g]	Ch	193	43,4	6,9	44,5	22,0	60,8	41,3	47,6
	Pz	164	30,2	6,0	30,5	15,0	42,4	27,8	34,3
	Pp	33	32,5	3,0	31,9	28,6	40,4	30,4	33,9
	Alle	390	36,9	9,0	36,1	15,0	60,8	30,1	44,4
eoNF [mg/g]	Ch	193	10,0	3,6	10,0	2,3	19,4	7,8	12,1
	Pz	164	8,0	2,5	8,2	2,4	13,6	6,5	10,1
	Pp	33	9,5	1,9	9,7	5,6	13,8	8,0	10,8
	Alle	390	9,1	3,2	9,1	2,3	19,4	7,2	11,0
eNF [mg/g]	Ch	193	13,1	4,3	13,7	2,6	25,5	11,5	15,9
	Pz	164	8,8	2,8	8,9	2,5	14,7	7,2	10,9
	Pp	33	10,1	2,1	10,5	6,0	14,4	8,5	11,4
	Alle	390	11,1	4,2	11,1	2,5	25,5	8,1	13,8
oNF [mg/g]	Ch	193	41,0	6,0	42,0	21,8	53,1	38,7	44,7
	Pz	164	29,9	5,8	30,0	14,8	41,3	27,6	34,5
	Pp	33	32,6	2,9	32,1	27,7	40,2	30,6	33,8
	Alle	390	35,6	7,8	35,4	14,8	53,1	29,9	41,9

Tab. 10.4: Verteilung der Blattkohlenhydratfraktionen im Kalibrierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Ch = Chrysanthemen, Pz = Pelargonien Zonale, Pp = Pelargonien Peltaten) sowie für den gesamten Kalibrierdatensatz (Alle)

		Anzahl Proben	\bar{x}	SD	Median	Minimum	Maximum	25 % Quartile	75 % Quartile
Glucose [mg/g]	Ch	184	1,7	2,8	1,0	0,1	28,6	0,5	1,9
	Pz	164	1,9	1,2	1,7	0,2	6,6	1,0	2,5
	Pp	33	3,5	3,0	3,1	0,3	13,3	1,0	4,6
	Alle	381	2,0	2,3	1,4	0,1	28,6	0,7	2,4
Fructose [mg/g]	Ch	184	1,0	1,3	0,6	0,0	8,6	0,3	1,1
	Pz	164	2,6	1,6	2,6	0,2	8,0	1,2	3,6
	Pp	33	1,9	1,8	1,4	0,1	8,0	0,7	2,3
	Alle	381	1,8	1,6	1,1	0,0	8,6	0,5	2,8
Saccharose [mg/g]	Ch	184	2,9	1,9	2,7	0,0	8,9	1,5	4,2
	Pz	164	5,1	2,7	5,5	0,0	10,1	2,7	7,3
	Pp	33	4,6	4,3	3,3	0,6	22,3	2,0	5,6
	Alle	381	4,0	2,8	3,3	0,0	22,3	1,9	5,9
TSS [mg/g]	Ch	184	5,6	4,3	5,0	0,7	33,7	2,6	6,8
	Pz	164	9,6	4,4	10,5	1,4	23,5	5,6	12,2
	Pp	33	10,0	8,9	7,7	1,0	43,6	4,3	10,9
	Alle	381	7,7	5,3	6,4	0,7	43,6	3,6	11,0
Stärke [mg/g]	Ch	184	10,9	14,8	1,0	0,0	92,7	0,3	18,5
	Pz	164	8,1	9,5	5,3	0,1	45,8	0,4	12,3
	Pp	33	1,1	2,1	0,4	0,1	9,8	0,3	0,5
	Alle	381	8,8	12,4	1,4	0,0	92,7	0,3	13,5
TNC [mg/g]	Ch	184	16,5	17,5	9,9	1,0	106,8	3,1	24,7
	Pz	164	17,7	12,3	17,6	1,7	61,0	6,1	25,7
	Pp	33	11,1	10,1	8,8	1,5	49,2	4,6	13,2
	Alle	381	16,6	15,0	14,3	1,0	106,8	4,0	24,2

Tab. 10.5: Verteilung der Trockensubstanz und der Stickstofffraktionen im Validierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Ch = Chrysanthemen, Pz = Pelargonien Zonale, Pp = Pelargonien Peltaten) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Alle)

		Anzahl Proben	\bar{x}	SD	Median	Minimum	Maximum	25 % Quartile	75 % Quartile
Trockensubstanz [mg/g]	Ch	102	121	17	121	89	171	110	130
	Pz	112	135	13	136	106	166	125	146
	Pp	16	120	16	119	96	147	106	133
	Alle	230	128	17	127	89	171	116	140
Amid-N [mg/g]	Ch	96	1,0	0,5	0,9	0,2	3,0	0,6	1,4
	Pz	82	1,7	0,8	1,8	0,3	3,6	1,2	2,1
	Pp	16	2,4	0,6	2,5	0,9	3,2	1,9	2,9
	Alle	194	1,4	0,8	1,3	0,2	3,6	0,8	1,9
Nitrat-N [mg/g]	Ch	96	3,3	1,5	3,3	0,2	7,3	2,4	4,1
	Pz	82	0,8	0,5	0,7	0,0	2,1	0,5	1,1
	Pp	16	0,7	0,4	0,7	0,0	1,2	0,4	1,0
	Alle	194	2,0	1,7	1,2	0,0	7,3	0,6	3,3
Amino-N [mg/g]	Ch	96	8,9	3,1	8,5	2,0	16,3	7,2	11,3
	Pz	82	6,5	1,9	6,4	2,0	10,4	5,4	7,9
	Pp	16	6,9	0,8	6,8	5,6	8,4	6,3	7,5
	Alle	194	7,7	2,8	7,5	2,0	16,3	6,0	8,9
Protein-N [mg/g]	Ch	96	31,1	3,3	31,5	22,0	38,3	29,4	33,2
	Pz	82	21,7	4,2	21,7	12,5	33,9	19,2	24,0
	Pp	16	23,3	2,1	23,3	19,9	27,9	22,2	23,8
	Alle	194	26,5	5,9	26,4	12,5	38,3	22,1	31,7
Gesamt-N [mg/g]	Ch	96	43,6	6,7	44,5	24,6	58,0	41,4	47,6
	Pz	82	30,4	6,0	30,5	15,3	45,5	27,9	34,5
	Pp	16	32,6	2,8	31,9	28,9	38,9	30,6	34,1
	Alle	194	37,1	8,9	36,1	15,3	58,0	30,3	44,6
eoNF [mg/g]	Ch	96	9,9	3,6	9,3	2,4	17,5	7,8	12,6
	Pz	82	8,2	2,6	8,0	2,4	13,2	6,7	9,7
	Pp	16	9,2	1,2	9,4	6,4	11,0	8,8	9,9
	Alle	194	9,1	3,2	9,0	2,4	17,5	7,2	10,8
eNF [mg/g]	Ch	96	13,2	4,3	13,1	2,7	21,8	11,1	16,0
	Pz	82	9,0	2,8	9,0	2,5	13,8	7,4	11,2
	Pp	16	9,9	1,5	10,1	6,4	12,2	9,5	10,9
	Alle	194	11,1	4,1	11,0	2,5	21,8	8,4	13,5
oNF [mg/g]	Ch	96	41,0	5,7	42,0	24,6	51,3	38,7	44,7
	Pz	82	29,9	5,8	30,1	15,2	43,3	27,6	34,2
	Pp	16	32,5	2,8	32,0	29,0	38,7	30,7	33,7
	Alle	194	35,6	7,8	35,8	15,2	51,3	29,9	42,0

Tab. 10.6: Verteilung der Blattkohlenhydratfraktionen im Validierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Ch = Chrysanthemen, Pz = Pelargonien Zonale, Pp = Pelargonien Peltaten) sowie für den gesamten Validierdatensatz (Alle)

		Anzahl Proben	\bar{x}	SD	Median	Minimum	Maximum	25 % Quartile	75 % Quartile
Glucose [mg/g]	Ch	94	1,4	1,3	0,9	0,1	7,4	0,6	1,7
	Pz	81	1,8	1,1	1,8	0,2	5,5	1,1	2,3
	Pp	16	4,0	3,4	3,2	0,5	12,3	0,9	6,0
	Alle	191	1,8	1,7	1,3	0,1	12,3	0,7	2,3
Fructose [mg/g]	Ch	94	0,8	1,0	0,5	0,0	5,3	0,3	1,0
	Pz	81	2,5	1,4	2,4	0,1	5,7	1,4	3,4
	Pp	16	2,1	2,1	1,3	0,3	7,5	0,7	3,0
	Alle	191	1,6	1,5	1,1	0,0	7,5	0,4	2,6
Saccharose [mg/g]	Ch	94	2,9	1,6	2,7	0,0	6,9	1,6	4,1
	Pz	81	5,2	2,8	5,2	0,0	15,6	2,6	7,1
	Pp	16	4,4	3,3	3,4	0,7	14,1	2,5	5,4
	Alle	191	4,0	2,6	3,5	0,0	15,6	2,1	5,3
TSS (Blatt) [mg/g]	Ch	94	5,1	3,1	5,0	1,0	17,6	2,6	6,4
	Pz	81	9,5	4,4	10,5	1,8	25,2	5,7	12,0
	Pp	16	10,5	8,5	8,4	1,4	33,9	4,6	13,8
	Alle	191	7,4	4,9	6,3	1,0	33,9	3,8	10,8
Stärke [mg/g]	Ch	94	11,2	14,7	1,7	0,1	74,3	0,4	16,9
	Pz	81	8,4	9,8	7,0	0,1	48,6	0,4	13,3
	Pp	16	0,6	0,9	0,4	0,0	3,8	0,2	0,6
	Alle	191	9,1	12,4	1,0	0,0	74,3	0,4	14,8
TNC [mg/g]	Ch	94	16,3	16,8	10,4	1,3	84,6	3,1	24,5
	Pz	81	17,8	12,8	17,6	2,0	64,4	6,1	25,6
	Pp	16	11,1	9,2	8,7	1,9	37,7	4,7	14,4
	Alle	191	16,5	14,7	14,4	1,3	84,6	4,1	24,1

Tab. 10.7: Verteilung der Trockensubstanzgehalte sowie Gehalte der Stickstofffraktionen (Protein-, Gesamt-, eNF- und oNF) und Blattkohlenhydrate (Stärke und TNC) im Kalibrierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Po = Poinsettien, Os = Osteospermum, Im = Impatiens Neu-Guinea) sowie für den gesamten Kalibrierdatensatz (Alle)

		Anzahl Proben	\bar{x}	SD	Median	Minimum	Maximum	25 % Quartile	75 % Quartile
Trockensubstanz [mg/g]	Po	30	118	8	117	103	139	114	121
	Os	32	94	13	91	78	125	85	101
	Im	20	112	9	114	93	127	106	118
	Alle	82	107	15	112	78	139	95	118
Protein-N [mg/g]	Po	30	33,9	2,2	34,1	29,0	37,2	31,8	35,7
	Os	32	30,8	4,0	31,4	22,7	38,0	27,1	34,1
	Im	28	27,2	4,1	27,8	18,7	34,4	23,9	30,1
	Alle	90	30,7	4,4	31,6	18,7	38,0	27,4	34,4
Gesamt-N [mg/g]	Po	30	46,0	3,0	46,6	37,9	50,7	43,9	48,3
	Os	32	58,5	7,7	57,6	40,3	70,3	52,1	65,7
	Im	28	35,7	7,1	36,3	21,8	47,8	30,9	41,3
	Alle	90	47,2	11,3	46,9	21,8	70,3	40,2	52,9
eNF [mg/g]	Po	30	12,6	2,0	12,5	8,5	16,6	11,4	13,7
	Os	32	29,5	4,1	29,4	19,3	35,0	26,5	33,0
	Im	28	9,0	3,9	7,8	3,6	17,3	6,2	12,1
	Alle	90	17,5	9,7	13,7	3,6	35,0	10,3	27,6
oNF [mg/g]	Po	30	45,6	3,2	46,4	37,6	50,4	43,7	48,2
	Os	32	50,8	6,1	54,3	40,8	58,6	44,1	55,7
	Im	28	35,0	6,5	35,4	22,0	47,9	31,0	40,0
	Alle	90	44,1	8,5	44,5	22,0	58,6	39,0	49,5
Blattstärke [mg/g]	Po	31	2,0	1,6	1,3	0,4	6,1	0,7	3,0
	Os	30	0,5	0,2	0,5	0,1	0,8	0,4	0,6
	Im	28	1,9	2,0	0,9	0,4	7,1	0,5	2,7
	Alle	89	1,4	1,6	0,7	0,1	7,1	0,5	1,7
Blatt-TNC [mg/g]	Po	31	17,8	9,8	15,7	4,9	43,4	9,6	22,1
	Os	30	11,1	8,6	7,1	4,9	37,3	6,1	11,2
	Im	28	21,3	16,9	15,1	6,2	67,8	8,5	26,5
	Alle	89	16,6	12,7	11,2	4,9	67,8	7,7	21,3

Tab. 10.8: Verteilung der Trockensubstanzgehalte sowie Gehalte der Stickstofffraktionen (Protein-, Gesamt-, eNF- und oNF) und Blattkohlenhydrate (Stärke und TNC) im Validierdatensatz, aufgeschlüsselt nach Kulturen (Po = Poinsettien, Os = Osteospermum, Im = Impatiens Neu-Guinea) für den gesamten Validierdatensatz (Alle)

		Anzahl Proben	\bar{x}	SD	Median	Minimum	Maximum	25 % Quartile	75 % Quartile
Trockensubstanz [mg/g]	Po	15	119	9	117	106	139	114	122
	Os	16	96	14	92	80	128	86	103
	Im	10	115	10	115	103	138	107	120
	Alle	41	109	15	113	80	139	97	119
Protein-N [mg/g]	Po	15	34,4	1,6	34,6	31,7	36,5	33,0	35,6
	Os	16	31,7	4,2	31,9	24,2	39,3	28,0	34,1
	Im	14	27,2	3,4	28,8	20,5	33,3	25,1	29,3
	Alle	45	31,2	4,3	31,9	20,5	39,3	28,8	34,5
Gesamt-N [mg/g]	Po	15	46,6	3,0	46,8	42,0	52,7	44,1	48,3
	Os	16	59,4	7,3	58,6	48,1	70,5	52,6	66,6
	Im	14	36,9	7,4	37,0	24,8	50,4	31,0	42,6
	Alle	45	48,1	11,2	47,6	24,8	70,5	42,0	54,1
eNF [mg/g]	Po	15	12,6	2,4	12,0	8,7	17,0	10,9	13,9
	Os	16	29,0	3,2	28,9	23,5	34,6	26,5	32,0
	Im	14	10,3	5,2	8,4	4,3	21,1	6,2	13,2
	Alle	45	17,7	9,3	13,9	4,3	34,6	10,9	27,0
oNF [mg/g]	Po	15	46,2	2,8	46,7	42,1	52,2	44,3	48,1
	Os	16	52,3	4,8	52,5	41,4	59,2	49,8	55,9
	Im	14	35,9	6,9	35,7	24,3	47,0	30,6	42,2
	Alle	45	45,2	8,4	46,7	24,3	59,2	41,5	50,7
Blattstärke [mg/g]	Po	14	1,4	0,9	1,0	0,4	3,6	0,8	1,8
	Os	16	0,4	0,2	0,5	0,1	0,7	0,3	0,5
	Im	14	1,4	1,6	0,7	0,4	6,4	0,5	1,8
	Alle	44	1,0	1,1	0,7	0,1	6,4	0,5	1,1
Blatt-TNC [mg/g]	Po	14	15,7	7,3	14,2	7,3	32,2	10,1	18,1
	Os	16	9,6	4,1	9,1	4,5	19,8	7,2	10,7
	Im	14	18,5	15,6	11,5	5,6	51,8	9,6	24,8
	Alle	44	14,4	10,5	10,9	4,5	51,8	8,7	16,7

10.3 Datenvorbehandlungen

Spektren im NIR-Bereich sind häufig durch einen Anstieg der Basislinie (Trend) sowie durch eine Basislinienverschiebung in y-Richtung (Offset) gekennzeichnet. Ursächlich hierfür sind Streulichteffekte, die unter anderem durch die unterschiedliche Anlagerung der Proben an die Glasfläche der Messzelle und die Partikelgröße bei gemahlten Proben verursacht werden (Barnes et al., 1989; Tillmann, 1996). Zudem steigt die Absorption bei höheren Wellenlängen an, da der Bereich der ersten Oberschwingungen bzw. der Grundschwingungen erreicht wird (Barnes et al., 1989; Miller, 2001). Durch die Verwendung von ungemahlenem und sehr wasserreichem Material, wie in der vorliegenden Arbeit, werden diese Effekte nochmals verstärkt (Gibaud, 2007; Morón et al., 2007). Durch eine mathematische Transformation der gemessenen Absorptionswerte können diese Störeinflüsse reduziert werden. Im Folgenden werden die mathematischen Hintergründe der genutzten Datenvorbehandlungen kurz beschrieben und die Auswirkungen auf die Spektren gezeigt. Die graphische Darstellung umfasst dabei immer das Mittelwert- (rote Linie) sowie das Minimum- und Maximum-Spektrum (grünes Band) der ganzen Stecklinge (siehe Abb. 10.1). Für eine detaillierte Beschreibung wird auf die angeführte Literatur verwiesen.

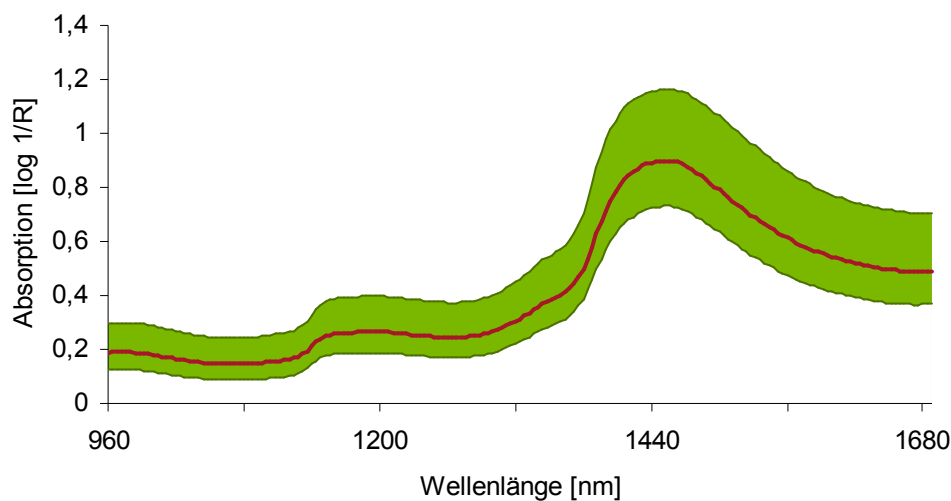


Abb. 10.1: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum der unbehandelten log 1/R-Spektren

Glättung

Die Glättung ist die einfachste Art der Datenvorbehandlung. Sie dient dazu vom Spektrometer verursachte Störsignale ("Rauschen") zu entfernen. In der vorliegenden Arbeit wurde dazu das Verfahren mit gleitenden Mittelwerten (MovAvg) verwendet, wobei als Schrittweite 3 bzw. 7 Datenpunkte, dies entspricht einem Wellenlängenbereich von 6 bzw. 14 nm, gewählt wurden. Da die Störsignale im Vergleich zur Absorption durch die Proben sehr gering waren (Abb. 10.1), war kein Effekt der Glättung zu erkennen.

Basislinienkorrektur

Bei der Basislinienkorrektur wurden zwei unterschiedliche Algorithmen verwendet. Beim Offset-Verfahren (OBC) wird vom Absorptionswert bei jeder Wellenlänge der kleinste Absorptionswert des jeweiligen Spektrums abgezogen (CAMO, 2012). Durch dieses Vorgehen wird eine Parallelverschiebung der Spektren in y-Richtung korrigiert (Abb. 10.2 [A]). Bei der linearen Basislinienkorrektur (LBC) werden zwei Wellenlängen ausgewählt, für diese werden die Absorptionswerte gleich null gesetzt (im vorliegenden Fall 960 und 1690 nm) und die Absorptionswerte bei den übrigen Wellenlängen werden auf die so definierte neue Basislinie transformiert (CAMO, 2012). Neben einer parallelen Verschiebung in y-Richtung (Offset) wird dadurch auch ein linearer Anstieg (Trend) in der Basislinie korrigiert (Abb. 10.2 [B]).

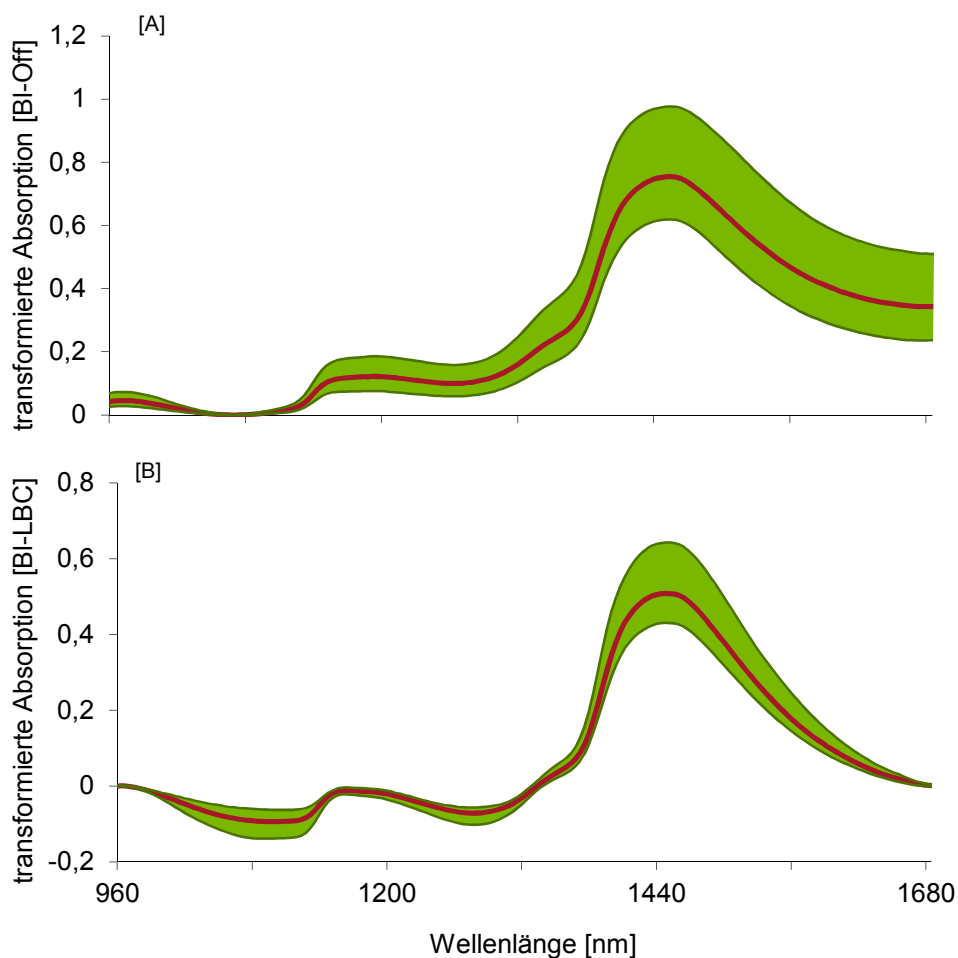


Abb. 10.2: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach [A] Basislinienkorrektur mit dem kleinsten Absorptionswert (Offset) und [B] Basislinienkorrektur mit einer Trendlinie durch die Absorptionswerte bei 960 bzw. 1690 nm (Linear Baseline Correction)

Ableitung

Mittels Ableitungen können sowohl additive als auch multiplikative Streulichteffekte eliminiert werden. Während durch die Bildung der ersten Ableitung nur eine Parallelverschiebung der Basislinie korrigiert wird, eliminiert die zweite Ableitung zusätzlich auch einen linearen Trend der Basislinie (Rinnan et al., 2009). Ableitungen höherer Ordnungen liefern nur in Einzelfällen gute Ergebnisse und werden nur selten verwendet, da zwar feinere Absorptionsbanden betont werden, gleichzeitig aber auch das Rauschen stark ansteigt (Norris und Williams, 1984; Tillmann, 1996). Bei der Bildung von Ableitungen sind zwei Verfahren zu unterscheiden:

Bei der "Norris-Williams"- oder auch "Gap"-Ableitung wird die Differenz aus gleitenden Mittelwerten gebildet. Die beiden Parameter Gap und Smoothing beschreiben die Anzahl der Datenpunkte, aus denen der gleitende Mittelwert gebildet wird, und den Abstand der beiden Mittelwerte, aus denen die Differenz gebildet wird (Norris und Williams, 1984). Die Abb. 10.3 [A und B] zeigt die nach diesem Verfahren gebildete erste und zweite Ableitung mit einer Segmentbreite und einer Glättung von jeweils sechs Datenpunkten (entsprechend einem Wellenlängenbereich von zwölf nm).

Beim Savitzky-Golay-Algorithmus wird dagegen ein Polynom mittels eines Kleinst-Quadrat-Verfahrens in einem symmetrischen Fenster mit einer vorgegebenen Anzahl Datenpunkte an das Rohspektrum angepasst. Dies erfolgt schrittweise über das gesamte Spektrum. Die Ableitung des Rohspektrums ergibt sich aus den Ableitungen dieser angepassten Polynome (Savitzky und Golay, 1964; Kessler, 2007).

Bei beiden Verfahren muss durch die Festlegung der Parameter (Ordnung der Ableitung, Anzahl der Datenpunkte, Ordnung der Polynome) ein Kompromiss zwischen der Erhöhung der spektralen Auflösung und der damit verbundenen Trennung von sich überlagernden Banden einerseits und der Zunahme des Rauschens bzw. des Informationsverlustes durch die hierdurch notwendige Glättung andererseits gefunden werden (Tillmann, 1996; Kessler, 2007).

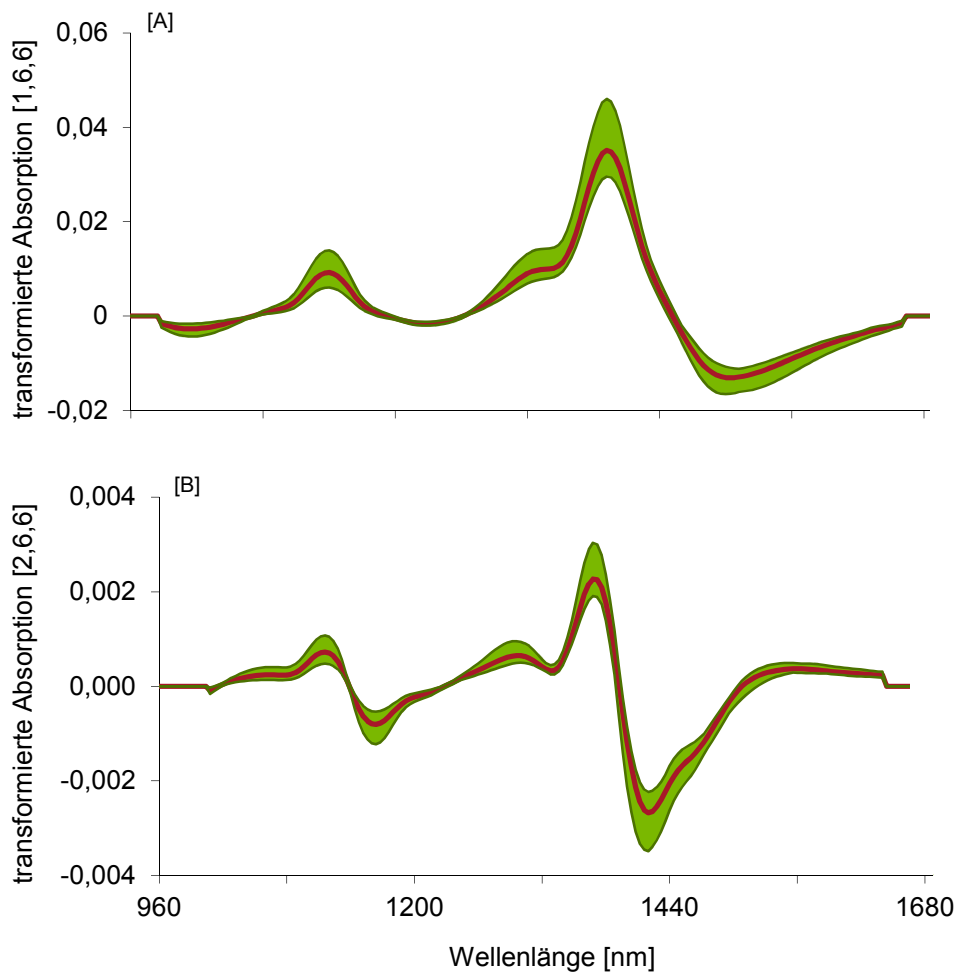


Abb. 10.3: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach Bildung der [A] ersten und [B] zweiten Ableitung mit einer Segmentbreite und einer Glättung von jeweils sechs Datenpunkten

Normierung

Für die Normierung wurden zwei Normierungsgrößen gewählt. Bei der Vektornormierung (NV) werden die Absorptionswerte für jede Wellenlänge durch die Wurzel der Summenquadrate aller Absorptionswerte geteilt. Bei der Mittelwertnormierung (NM) erfolgt die Division entsprechend mit dem Spektralmittelwert (Kessler, 2007). Durch beide Verfahren wird eine Parallelverschiebung der Spektren in y-Richtung korrigiert (Abb. 10.4 [A und B]).

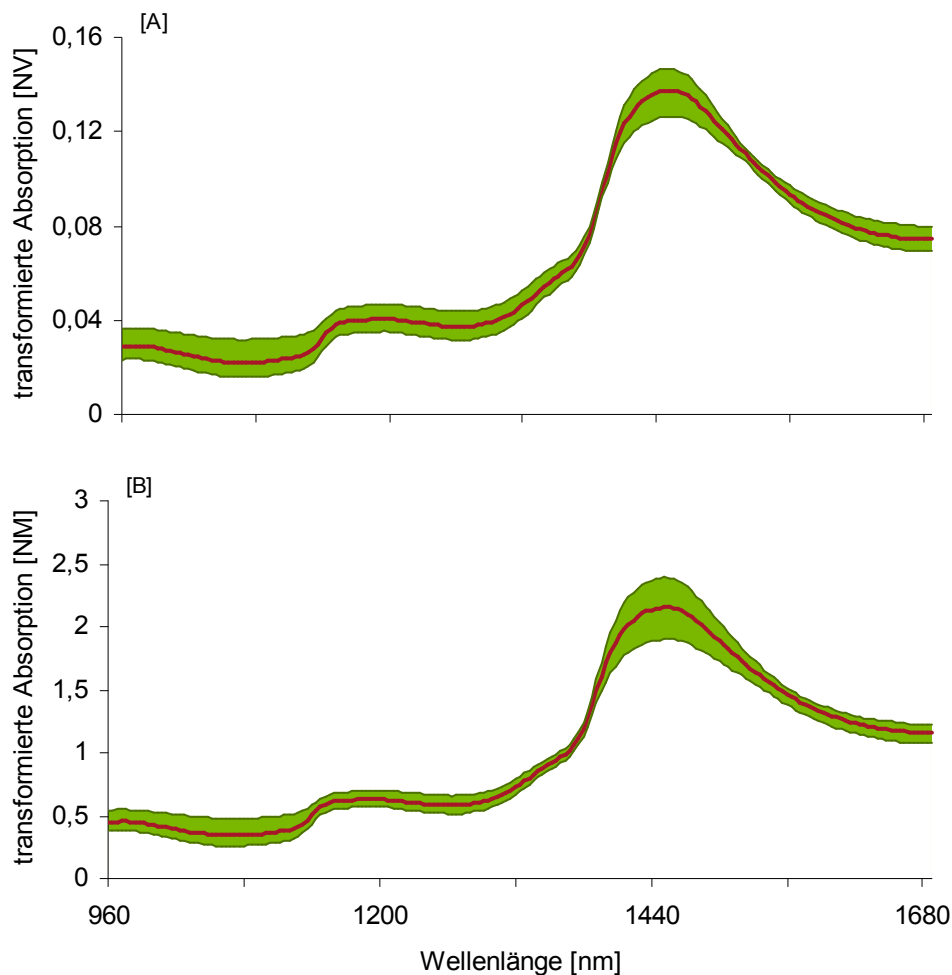


Abb. 10.4: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach [A] Vektornormierung (NV) und [B] Mittelwertnormierung (NM)

Standard normal variate-Transformation (SNV)

Hierbei erfolgt eine Zentrierung und Normierung der Spektren. Dazu wird der Spektralmittelwert vom Absorptionswert bei jeder Wellenlänge abgezogen und anschließend durch die über das gesamte Spektrum hinweg berechnete Standardabweichung dividiert (Barnes et al., 1989). Wie bei der Normierung wird hierdurch eine Basislinienverschiebung korrigiert. Zusätzlich werden die Absorptionswerte aber noch auf null zentriert, d.h. z. T. werden die y-Werte negativ (Abb. 10.5).

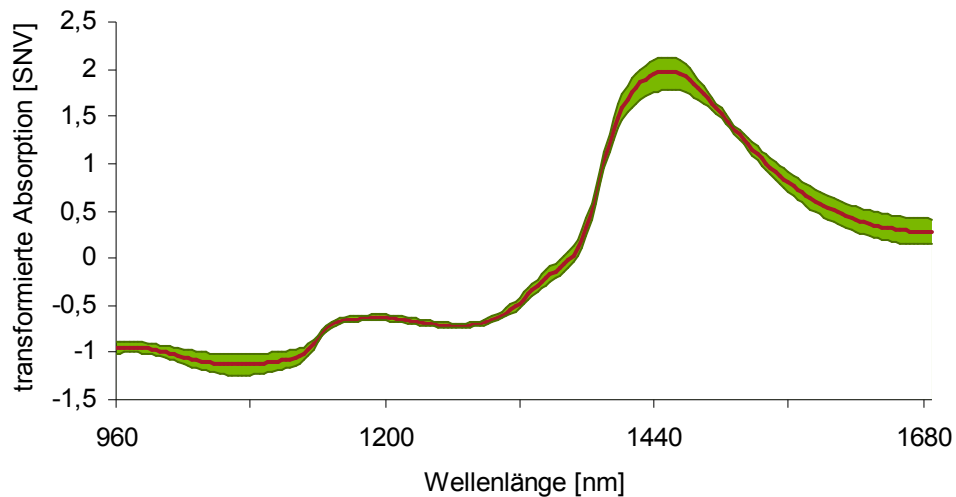


Abb. 10.5: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach Zentrierung und Normierung (SNV)

De-Trending

Durch das De-Trending (DT) wird ähnlich wie bei der LBC ein Anstieg der Basislinie mit zunehmender Wellenlänge korrigiert. Der wesentliche Unterschied ist, dass beim DT-Algorithmus ein Polynom zweiter oder höherer Ordnung an die Basislinie der Spektren angepasst wird (Barnes et al., 1989). Damit wird ein nicht-linearer Trend der Basislinie korrigiert (Abb. 10.6 [A]). Die beiden Algorithmen SNV und DT werden oft gemeinsam angewendet (Tillmann, 1996), da hierdurch die Parallelverschiebung in y-Richtung sowie der globale Basislinienanstieg gleichzeitig korrigiert werden (Abb. 10.6 [B]).

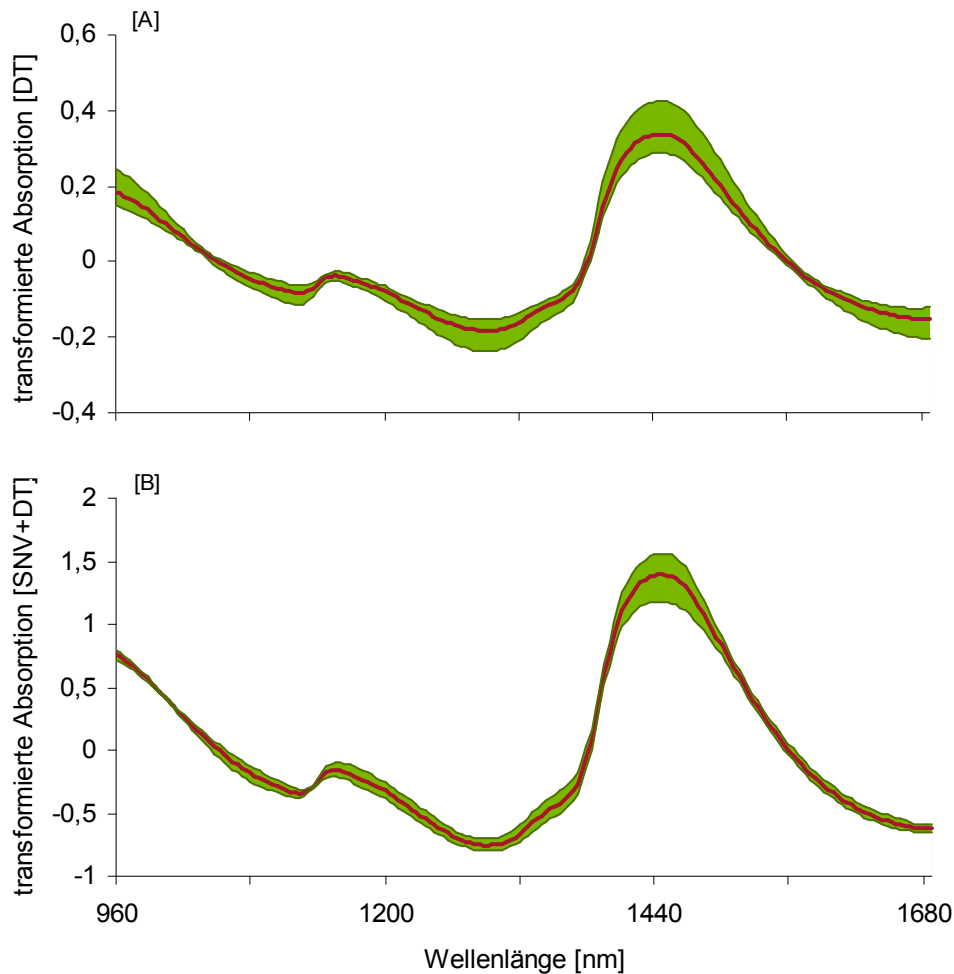


Abb. 10.6: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach [A] De-Trending mit Polynom zweiter Ordnung und [B] Kombination von SNV+DT

Multiplicative scatter correction (MSC)

Die MSC wurde von Geladi et al. (1985) erstmalig für die Transformation von NIR-Spektren genutzt. Sie beruht auf der Berechnung von Regressionen (Kleinste-Quadrate-Verfahren) für alle Einzelspektren gegen ein "optimales, streulichtfreies" Spektrum. Da es ein solches Spektrum meist nicht gibt, wird stattdessen in der Regel das Mittelwertspektrum genutzt. Mit den erhaltenen Regressionskoeffizienten (a und b) werden dann die Einzelspektren korrigiert. Dabei ist zwischen drei Korrekturverfahren zu unterscheiden:

- MSC-Full: $x'_{ij} = (x_{ij} - a) / b$
- MSC-Offset: $x'_{ij} = (x_{ij} - a)$
- MSC-Amplification: $x'_{ij} = x_{ij} / b$ mit $i = \text{Spektren}, j = \text{Wellenlängen}$

Während beim Full-Verfahren (Abb. 10.7 [A]) multiplikative und additive Effekte korrigiert werden, sind es beim Offset-Verfahren (Abb. 10.7 [B]) nur additive und beim Amplification-Verfahren (Abb. 10.7 [C]) nur multiplikative (CAMO, 2012). Mathematische sind die Verfahren SNV bzw. SNV+DT und MSC sehr ähnlich und führen daher meist auch zu vergleichbaren Ergebnissen (Helland et al., 1995; Tillmann 1996; Næs et al. 2004).

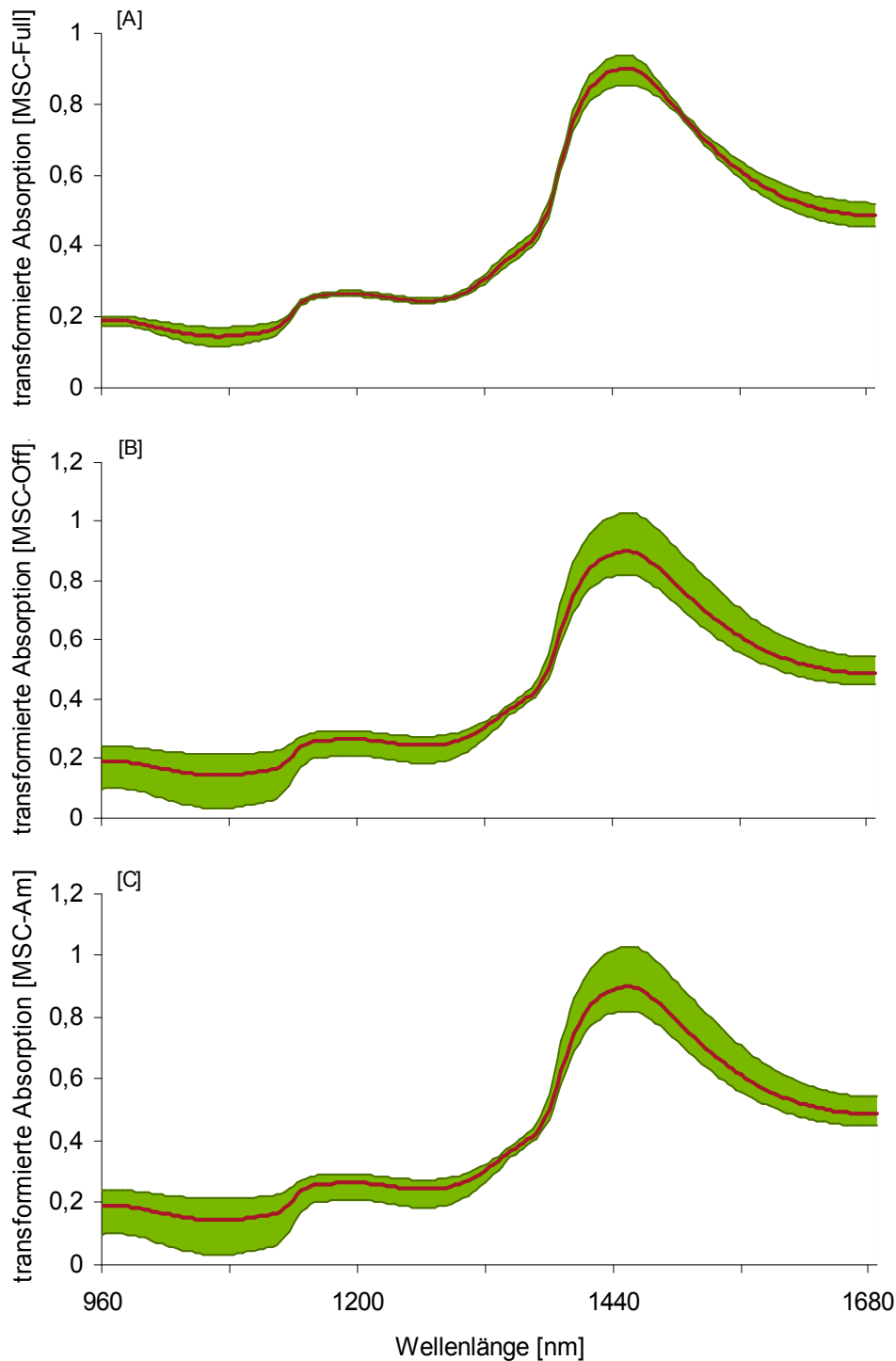


Abb. 10.7: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach MSC [A] Full, [B] Offset und [C] Amplifikation

Orthogonal signal correction (OSC)

Beim OSC-Algorithmus werden im Gegensatz zu allen zuvor beschriebenen Verfahren zusätzlich zu den spektralen Daten auch die Referenzwerte verwendet. Das Prinzip der OSC-Transformation ist vergleichbar zur Vorgehensweise bei der PLS. Allerdings werden die Faktoren dabei so gelegt, dass sie einen möglichst großen Anteil der Varianz in den spektralen Daten erklären, der in keinem Zusammenhang zur Variabilität des gesuchten Inhaltsstoffes (im gezeigten Beispiel die Trockensubstanz) steht. Nach Wold et al. (1998) werden durch die OSC-Faktoren schrittweise Verschiebungen der Basislinie sowie multiplikative Streulichteffekte entfernt. Im Vergleich zu anderen Vorbehandlungsverfahren werden bei Verwendung der OSC in der Regel für die anschließende Modellbildung weniger PLS-Faktoren benötigt, vor allem wenn in den ersten Faktoren ein Großteil der spektralen Variabilität steckt, diese aber nicht durch den gesuchten Inhaltsstoff verursacht wird (Blanco et al., 2001; Azzouz et al., 2003). Allerdings besteht bei der OSC, analog zur PLS, die Gefahr der Überanpassung, weswegen nur wenige – meist ein bis drei – Faktoren verwendet werden (Svensson et al., 2002; Blanco et al., 2007). In der Literatur werden unterschiedliche OSC-Verfahren beschrieben (Svensson et al., 2002). In der vorliegenden Arbeit wurde der Algorithmus nach Fearn (2000) mit maximal drei OSC-Faktoren verwendet, wie er im Softwarepaket Unscrambler X[®] implementiert ist. Optisch haben die OSC-transformierten Spektren nichts mehr mit den Ursprungsspektren gemein (Abb. 10.8).

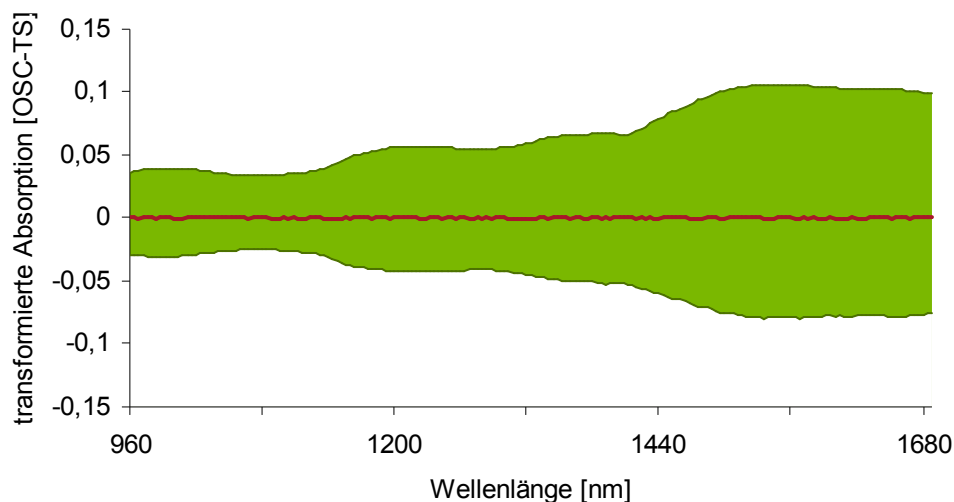


Abb. 10.8: Mittelwert-, Minimum- und Maximum-Spektrum nach OSC unter Nutzung des Trockensubstanzgehaltes als y-Variable

10.4 Kalibriermodelle für Chrysanthenen und Pelargonien

Tab. 10.9: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_c^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Trockensubstanz sowie die N-Fractionen unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthenen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe)

Trockensubstanz in mg/g								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_c^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	8	6,7	0,87	6,7	0,87	2,6	14,8
	OBC	7	7,0	0,86	7,0	0,86	2,5	14,1
	LBC	7	7,5	0,84	7,5	0,84	2,3	13,2
	NM	7	6,2	0,88	6,2	0,88	2,8	15,9
	OBC+NM	6	6,4	0,88	6,4	0,88	2,7	15,5
	LBC+NM	7	7,2	0,86	7,2	0,86	2,4	13,8
	SNV	6	6,4	0,87	6,4	0,87	2,7	15,4
	DT	6	7,2	0,86	7,2	0,86	2,4	13,7
	SNV+DT	6	6,3	0,87	6,3	0,87	2,8	15,7
	MSC	6	6,4	0,87	6,4	0,87	2,7	15,5
	OSC	5	6,7	0,87	6,7	0,87	2,6	14,8
	Pe	log 1/R	8	10,1	0,60	10,1	0,60	1,6
OBC		7	10,0	0,60	10,0	0,60	1,6	13,6
LBC		7	10,4	0,58	10,4	0,58	1,5	13,1
NM		7	10,0	0,60	10,0	0,60	1,6	13,6
OBC+NM		6	10,2	0,59	10,2	0,59	1,5	13,3
LBC+NM		7	10,4	0,57	10,4	0,57	1,5	13,1
SNV		6	9,9	0,61	9,9	0,61	1,6	13,8
DT		6	10,8	0,54	10,8	0,54	1,4	12,5
SNV+DT		6	10,5	0,55	10,5	0,55	1,5	12,9
MSC		6	9,9	0,61	9,9	0,61	1,6	13,7
OSC		5	10,1	0,60	10,1	0,60	1,6	13,5
Ch+Pe		log 1/R	8	8,7	0,75	8,7	0,75	2,0
	OBC	7	8,8	0,75	8,8	0,75	2,0	15,4
	LBC	7	9,2	0,72	9,2	0,72	1,9	14,8
	NM	7	8,5	0,76	8,5	0,76	2,1	16,0
	OBC+NM	6	8,7	0,75	8,7	0,75	2,0	15,6
	LBC+NM	7	9,1	0,73	9,1	0,73	1,9	15,0
	SNV	6	8,5	0,76	8,5	0,76	2,1	16,0
	DT	6	9,4	0,71	9,4	0,71	1,9	14,5
	SNV+DT	6	8,9	0,74	8,9	0,74	2,0	15,3
	MSC	6	8,5	0,76	8,5	0,76	2,1	16,0
	OSC	5	8,7	0,75	8,7	0,75	2,0	15,6

Fortsetzung von Tab. 10.9

Amid-N in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	12	0,4	0,46	0,5	0,38	1,3	6,9
	OBC	12	0,4	0,50	0,5	0,40	1,3	7,1
	LBC	12	0,4	0,46	0,5	0,35	1,2	6,8
	NM	12	0,4	0,47	0,5	0,38	1,2	6,9
	OBC+NM	11	0,4	0,48	0,5	0,39	1,3	6,9
	LBC+NM	14	0,4	0,53	0,5	0,43	1,3	7,2
	SNV	11	0,4	0,48	0,5	0,37	1,2	6,8
	DT	10	0,5	0,42	0,5	0,32	1,2	6,6
	SNV+DT	11	0,4	0,50	0,5	0,40	1,3	7,0
	MSC	11	0,4	0,48	0,5	0,39	1,3	7,0
	OSC	9	0,4	0,46	0,5	0,39	1,3	7,0
Pe	log 1/R	12	0,5	0,66	0,6	0,57	1,5	8,2
	OBC	12	0,5	0,66	0,6	0,56	1,5	8,1
	LBC	12	0,5	0,67	0,6	0,58	1,5	8,3
	NM	12	0,5	0,66	0,6	0,58	1,5	8,4
	OBC+NM	11	0,5	0,65	0,6	0,58	1,5	8,3
	LBC+NM	14	0,5	0,69	0,6	0,59	1,5	8,3
	SNV	11	0,5	0,66	0,6	0,58	1,5	8,4
	DT	10	0,5	0,67	0,6	0,59	1,5	8,4
	SNV+DT	11	0,5	0,66	0,6	0,58	1,5	8,4
	MSC	11	0,5	0,66	0,6	0,58	1,5	8,3
	OSC	9	0,5	0,66	0,6	0,58	1,5	8,3
Ch+Pe	log 1/R	12	0,5	0,67	0,5	0,60	1,6	9,0
	OBC	12	0,5	0,68	0,5	0,60	1,6	9,0
	LBC	12	0,5	0,68	0,5	0,60	1,6	8,9
	NM	12	0,5	0,67	0,5	0,61	1,6	9,0
	OBC+NM	11	0,5	0,67	0,5	0,61	1,6	9,1
	LBC+NM	14	0,4	0,71	0,5	0,62	1,6	9,2
	SNV	11	0,5	0,68	0,5	0,61	1,6	9,0
	DT	10	0,5	0,67	0,5	0,59	1,6	8,9
	SNV+DT	11	0,5	0,69	0,5	0,61	1,6	9,1
	MSC	11	0,5	0,68	0,5	0,61	1,6	9,1
	OSC	9	0,5	0,67	0,5	0,61	1,6	9,1

Fortsetzung von Tab. 10.9

Nitrat-N in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	11	1,2	0,40	1,3	0,29	1,2	6,0
	OBC	10	1,2	0,40	1,3	0,29	1,2	6,0
	LBC	12	1,2	0,44	1,3	0,30	1,2	6,1
	NM	12	1,2	0,46	1,3	0,31	1,2	6,1
	OBC+NM	12	1,1	0,47	1,3	0,31	1,2	6,2
	LBC+NM	11	1,2	0,38	1,3	0,24	1,1	5,9
	SNV	12	1,1	0,48	1,3	0,33	1,2	6,2
	DT	7	1,3	0,33	1,3	0,26	1,1	5,9
	SNV+DT	8	1,3	0,34	1,4	0,24	1,1	5,8
	MSC	14	1,1	0,52	1,3	0,34	1,2	6,3
	OSC	14	1,0	0,58	1,2	0,42	1,3	6,7
Pe	log 1/R	11	0,6	0,35	0,7	0,31	0,7	3,1
	OBC	10	0,6	0,36	0,7	0,32	0,7	3,1
	LBC	12	0,5	0,41	0,6	0,34	0,8	3,3
	NM	12	0,6	0,37	0,6	0,31	0,7	3,2
	OBC+NM	12	0,6	0,38	0,7	0,31	0,7	3,2
	LBC+NM	11	0,5	0,38	0,6	0,32	0,8	3,4
	SNV	12	0,6	0,40	0,7	0,33	0,7	3,1
	DT	7	0,7	0,28	0,7	0,25	0,7	3,0
	SNV+DT	8	0,6	0,34	0,6	0,31	0,8	3,3
	MSC	14	0,5	0,42	0,6	0,34	0,7	3,3
	OSC	14	0,5	0,42	0,6	0,35	0,7	3,2
Ch+Pe	log 1/R	11	1,0	0,65	1,0	0,60	1,6	7,7
	OBC	10	1,0	0,65	1,0	0,60	1,6	7,7
	LBC	12	0,9	0,69	1,0	0,62	1,6	7,9
	NM	12	0,9	0,69	1,0	0,62	1,6	7,9
	OBC+NM	12	0,9	0,70	1,0	0,62	1,6	7,9
	LBC+NM	11	0,9	0,67	1,0	0,60	1,6	7,7
	SNV	12	0,9	0,70	1,0	0,63	1,6	7,9
	DT	7	1,0	0,61	1,1	0,58	1,5	7,5
	SNV+DT	8	1,0	0,63	1,0	0,59	1,6	7,6
	MSC	14	0,9	0,72	1,0	0,64	1,7	8,1
	OSC	14	0,8	0,75	1,0	0,67	1,7	8,4

Fortsetzung von Tab. 10.9

Amino-N in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	15	1,8	0,65	2,0	0,56	1,5	6,9
	OBC	13	1,9	0,65	2,1	0,55	1,5	6,9
	LBC	13	1,9	0,64	2,1	0,56	1,5	6,9
	NM	13	1,9	0,63	2,1	0,54	1,5	6,8
	OBC+NM	12	1,9	0,63	2,1	0,54	1,5	6,8
	LBC+NM	13	1,9	0,64	2,1	0,55	1,5	6,9
	SNV	11	1,9	0,62	2,1	0,54	1,5	6,8
	DT	12	1,9	0,64	2,1	0,54	1,5	6,7
	SNV+DT	11	1,9	0,63	2,1	0,54	1,5	6,8
	MSC	13	1,8	0,64	2,1	0,54	1,5	6,8
	OSC	10	1,9	0,65	2,0	0,57	1,5	7,0
Pe	log 1/R	15	1,2	0,58	1,4	0,48	1,2	5,7
	OBC	13	1,3	0,56	1,5	0,45	1,2	5,4
	LBC	13	1,3	0,56	1,5	0,46	1,2	5,5
	NM	13	1,2	0,56	1,4	0,48	1,3	6,0
	OBC+NM	12	1,2	0,55	1,4	0,48	1,3	5,9
	LBC+NM	13	1,2	0,60	1,4	0,50	1,3	5,8
	SNV	11	1,3	0,51	1,5	0,44	1,2	5,5
	DT	12	1,2	0,58	1,4	0,49	1,2	5,7
	SNV+DT	11	1,3	0,54	1,4	0,47	1,3	5,8
	MSC	13	1,2	0,59	1,4	0,50	1,3	6,0
	OSC	10	1,4	0,49	1,5	0,42	1,2	5,3
Ch+Pe	log 1/R	15	1,6	0,69	1,8	0,61	1,6	8,1
	OBC	13	1,6	0,68	1,8	0,59	1,6	8,0
	LBC	13	1,6	0,67	1,8	0,59	1,6	8,0
	NM	13	1,6	0,68	1,7	0,61	1,6	8,2
	OBC+NM	12	1,6	0,67	1,8	0,60	1,6	8,1
	LBC+NM	13	1,6	0,68	1,7	0,61	1,6	8,2
	SNV	11	1,6	0,66	1,8	0,59	1,6	8,0
	DT	12	1,6	0,67	1,8	0,59	1,6	8,0
	SNV+DT	11	1,6	0,67	1,8	0,60	1,6	8,1
	MSC	13	1,6	0,69	1,7	0,61	1,6	8,2
	OSC	10	1,6	0,66	1,8	0,59	1,6	8,0

Fortsetzung von Tab. 10.9

Protein-N in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	17	2,0	0,71	2,3	0,62	1,6	9,5
	OBC	17	1,9	0,74	2,2	0,65	1,7	10,0
	LBC	16	2,2	0,67	2,5	0,55	1,5	8,8
	NM	17	1,9	0,73	2,2	0,64	1,7	9,8
	OBC+NM	16	1,9	0,74	2,2	0,66	1,7	10,1
	LBC+NM	15	2,2	0,65	2,5	0,55	1,5	8,8
	SNV	15	2,1	0,69	2,3	0,60	1,6	9,4
	DT	11	2,6	0,53	2,8	0,42	1,3	7,8
	SNV+DT	14	2,1	0,68	2,4	0,58	1,5	9,1
	MSC	17	1,9	0,75	2,2	0,67	1,7	10,2
	OSC	15	2,0	0,73	2,2	0,66	1,7	10,0
Pe	log 1/R	17	1,7	0,84	2,0	0,78	2,0	9,8
	OBC	17	1,7	0,83	2,0	0,78	2,0	9,9
	LBC	16	1,9	0,79	2,2	0,71	1,8	8,8
	NM	17	1,7	0,83	2,0	0,77	2,0	9,8
	OBC+NM	16	1,7	0,83	2,0	0,77	2,0	10,0
	LBC+NM	15	1,9	0,77	2,3	0,69	1,8	8,5
	SNV	15	1,8	0,80	2,1	0,74	1,9	9,3
	DT	11	2,2	0,70	2,6	0,62	1,6	7,7
	SNV+DT	14	1,8	0,81	2,0	0,76	2,0	9,7
	MSC	17	1,6	0,84	1,9	0,78	2,1	10,2
	OSC	15	1,6	0,84	1,9	0,79	2,1	10,2
Ch+Pe	log 1/R	17	1,9	0,90	2,2	0,87	2,7	13,0
	OBC	17	1,8	0,91	2,1	0,87	2,8	13,5
	LBC	16	2,0	0,88	2,4	0,84	2,5	12,0
	NM	17	1,8	0,91	2,1	0,87	2,8	13,3
	OBC+NM	16	1,8	0,91	2,1	0,88	2,9	13,6
	LBC+NM	15	2,1	0,87	2,4	0,83	2,5	11,7
	SNV	15	1,9	0,89	2,2	0,86	2,7	12,7
	DT	11	2,4	0,84	2,7	0,79	2,2	10,5
	SNV+DT	14	2,0	0,89	2,2	0,86	2,7	12,7
	MSC	17	1,8	0,91	2,0	0,88	2,9	13,8
	OSC	15	1,8	0,91	2,1	0,88	2,9	13,7

Fortsetzung von Tab. 10.9

Gesamt-N in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	3,7	0,72	4,1	0,65	1,7	9,4
	OBC	14	3,6	0,73	4,0	0,66	1,7	9,6
	LBC	14	3,8	0,71	4,2	0,63	1,6	9,2
	NM	16	3,3	0,77	3,7	0,72	1,9	10,5
	OBC+NM	13	3,6	0,74	4,1	0,65	1,7	9,5
	LBC+NM	13	3,9	0,70	4,3	0,62	1,6	9,0
	SNV	14	3,5	0,75	3,9	0,69	1,8	10,0
	DT	10	4,1	0,65	4,6	0,56	1,5	8,5
	SNV+DT	12	3,7	0,72	4,1	0,65	1,7	9,4
	MSC	15	3,3	0,78	3,7	0,72	1,9	10,6
	OSC	14	3,2	0,79	3,7	0,73	1,9	10,6
Pe	log 1/R	14	3,1	0,73	3,6	0,65	1,6	7,6
	OBC	14	3,0	0,74	3,5	0,66	1,6	7,7
	LBC	14	3,1	0,72	3,7	0,64	1,5	7,5
	NM	16	2,7	0,79	3,2	0,71	1,8	8,6
	OBC+NM	13	3,0	0,74	3,5	0,65	1,6	7,9
	LBC+NM	13	3,2	0,70	3,7	0,62	1,5	7,3
	SNV	14	2,9	0,76	3,5	0,67	1,6	7,9
	DT	10	3,6	0,63	4,1	0,55	1,4	6,7
	SNV+DT	12	3,0	0,73	3,5	0,66	1,6	7,8
	MSC	15	2,8	0,77	3,3	0,70	1,7	8,4
	OSC	14	2,7	0,80	3,2	0,73	1,8	8,5
Ch+Pe	log 1/R	14	3,4	0,86	3,9	0,82	2,3	11,9
	OBC	14	3,3	0,86	3,8	0,82	2,4	12,1
	LBC	14	3,4	0,85	4,0	0,81	2,3	11,6
	NM	16	3,0	0,89	3,4	0,85	2,6	13,3
	OBC+NM	13	3,3	0,87	3,8	0,82	2,4	12,1
	LBC+NM	13	3,6	0,84	4,0	0,80	2,2	11,4
	SNV	14	3,2	0,87	3,7	0,83	2,5	12,4
	DT	10	3,9	0,81	4,3	0,77	2,1	10,6
	SNV+DT	12	3,4	0,86	3,8	0,82	2,4	12,0
	MSC	15	3,0	0,89	3,5	0,85	2,6	13,2
	OSC	14	3,0	0,89	3,4	0,85	2,6	13,3

Fortsetzung von Tab. 10.9

eoNF in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	2,2	0,63	2,4	0,54	1,5	7,1
	OBC	14	2,1	0,65	2,4	0,55	1,5	7,2
	LBC	14	2,2	0,63	2,4	0,54	1,5	7,1
	NM	16	2,1	0,66	2,4	0,55	1,5	7,2
	OBC+NM	13	2,1	0,64	2,4	0,53	1,5	7,0
	LBC+NM	13	2,2	0,63	2,4	0,54	1,5	7,1
	SNV	14	2,1	0,64	2,4	0,55	1,5	7,1
	DT	10	2,4	0,57	2,5	0,50	1,4	6,7
	SNV+DT	12	2,2	0,64	2,4	0,54	1,5	7,1
	MSC	15	2,1	0,66	2,4	0,56	1,5	7,3
	OSC	14	2,1	0,66	2,3	0,57	1,5	7,3
Pe	log 1/R	14	1,6	0,64	1,8	0,54	1,4	6,3
	OBC	14	1,5	0,65	1,8	0,55	1,4	6,4
	LBC	14	1,5	0,65	1,8	0,56	1,4	6,5
	NM	16	1,4	0,69	1,6	0,61	1,6	7,2
	OBC+NM	13	1,5	0,66	1,7	0,57	1,5	6,8
	LBC+NM	13	1,5	0,66	1,7	0,58	1,5	6,7
	SNV	14	1,4	0,68	1,6	0,60	1,5	7,0
	DT	10	1,6	0,62	1,8	0,54	1,4	6,5
	SNV+DT	12	1,5	0,68	1,6	0,60	1,5	7,0
	MSC	15	1,4	0,69	1,6	0,60	1,5	7,0
	OSC	14	1,4	0,69	1,7	0,59	1,5	6,8
Ch+Pe	log 1/R	14	1,9	0,65	2,1	0,56	1,5	8,0
	OBC	14	1,8	0,67	2,1	0,57	1,5	8,1
	LBC	14	1,9	0,65	2,1	0,57	1,5	8,1
	NM	16	1,8	0,69	2,0	0,60	1,6	8,5
	OBC+NM	13	1,8	0,67	2,1	0,57	1,5	8,2
	LBC+NM	13	1,9	0,66	2,1	0,57	1,5	8,2
	SNV	14	1,8	0,68	2,1	0,59	1,6	8,3
	DT	10	2,0	0,60	2,2	0,53	1,5	7,8
	SNV+DT	12	1,8	0,67	2,1	0,59	1,6	8,3
	MSC	15	1,8	0,69	2,0	0,60	1,6	8,5
	OSC	14	1,8	0,69	2,0	0,60	1,6	8,4

Fortsetzung von Tab. 10.9

eNF in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	2,6	0,65	2,9	0,57	1,5	7,9
	OBC	13	2,6	0,65	2,9	0,56	1,5	7,9
	LBC	12	2,7	0,62	3,0	0,54	1,5	7,7
	NM	12	2,6	0,64	2,9	0,56	1,5	7,9
	OBC+NM	11	2,6	0,64	2,9	0,56	1,5	7,9
	LBC+NM	13	2,6	0,65	2,9	0,57	1,5	7,9
	SNV	12	2,6	0,65	2,9	0,57	1,5	8,0
	DT	11	2,7	0,63	3,0	0,54	1,5	7,7
	SNV+DT	11	2,6	0,65	2,9	0,56	1,5	7,9
	MSC	11	2,6	0,64	2,9	0,57	1,5	7,9
	OSC	11	2,6	0,65	2,9	0,57	1,5	8,0
Pe	log 1/R	14	1,9	0,60	2,1	0,51	1,3	5,7
	OBC	13	1,8	0,61	2,1	0,52	1,3	5,7
	LBC	12	1,9	0,59	2,1	0,50	1,3	5,7
	NM	12	1,9	0,57	2,1	0,49	1,3	5,7
	OBC+NM	11	1,9	0,57	2,1	0,50	1,3	5,7
	LBC+NM	13	1,7	0,64	2,0	0,55	1,4	6,0
	SNV	12	1,8	0,60	2,1	0,52	1,3	5,8
	DT	11	1,9	0,60	2,1	0,52	1,3	5,8
	SNV+DT	11	1,8	0,60	2,1	0,52	1,3	5,9
	MSC	11	2,0	0,54	2,2	0,47	1,3	5,5
	OSC	11	1,9	0,60	2,1	0,52	1,3	5,7
Ch+Pe	log 1/R	14	2,3	0,71	2,5	0,63	1,6	9,0
	OBC	13	2,3	0,71	2,5	0,63	1,6	9,0
	LBC	12	2,3	0,69	2,6	0,62	1,6	8,9
	NM	12	2,3	0,70	2,5	0,63	1,6	9,1
	OBC+NM	11	2,3	0,70	2,5	0,63	1,7	9,1
	LBC+NM	13	2,2	0,72	2,5	0,65	1,7	9,2
	SNV	12	2,2	0,71	2,5	0,64	1,7	9,2
	DT	11	2,3	0,69	2,6	0,63	1,6	9,0
	SNV+DT	11	2,2	0,71	2,5	0,64	1,7	9,1
	MSC	11	2,3	0,69	2,6	0,63	1,6	9,0
	OSC	11	2,3	0,71	2,5	0,64	1,7	9,1

Fortsetzung von Tab. 10.9

oNF in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	12	3,5	0,67	3,8	0,60	1,6	8,3
	OBC	12	3,5	0,68	3,7	0,62	1,6	8,4
	LBC	14	3,4	0,68	3,8	0,60	1,6	8,3
	NM	14	3,3	0,70	3,6	0,63	1,6	8,6
	OBC+NM	14	3,1	0,73	3,5	0,67	1,7	9,1
	LBC+NM	12	3,6	0,65	3,9	0,58	1,5	8,0
	SNV	15	3,0	0,75	3,3	0,69	1,8	9,4
	DT	11	3,6	0,66	3,9	0,58	1,5	8,0
	SNV+DT	12	3,3	0,71	3,6	0,64	1,7	8,7
	MSC	14	3,1	0,74	3,4	0,68	1,8	9,2
	OSC	13	3,1	0,74	3,5	0,67	1,7	9,0
Pe	log 1/R	12	3,4	0,65	3,8	0,59	1,5	7,1
	OBC	12	3,2	0,68	3,6	0,62	1,5	7,4
	LBC	14	2,9	0,74	3,4	0,65	1,6	7,8
	NM	14	2,7	0,76	3,1	0,69	1,8	8,5
	OBC+NM	14	2,7	0,76	3,1	0,70	1,8	8,6
	LBC+NM	12	3,0	0,70	3,5	0,63	1,6	7,6
	SNV	15	2,6	0,78	3,1	0,71	1,8	8,6
	DT	11	3,2	0,69	3,6	0,61	1,5	7,3
	SNV+DT	12	2,8	0,75	3,2	0,68	1,7	8,3
	MSC	14	2,7	0,77	3,1	0,71	1,8	8,6
	OSC	13	2,5	0,80	3,0	0,73	1,9	8,9
Ch+Pe	log 1/R	12	3,5	0,80	3,8	0,77	2,1	10,2
	OBC	12	3,3	0,82	3,7	0,78	2,1	10,5
	LBC	14	3,2	0,84	3,6	0,79	2,2	10,7
	NM	14	3,0	0,85	3,4	0,81	2,3	11,3
	OBC+NM	14	2,9	0,86	3,3	0,83	2,4	11,7
	LBC+NM	12	3,3	0,82	3,7	0,78	2,1	10,3
	SNV	15	2,8	0,87	3,2	0,83	2,4	12,0
	DT	11	3,4	0,82	3,8	0,77	2,1	10,2
	SNV+DT	12	3,0	0,85	3,4	0,81	2,3	11,2
	MSC	14	2,9	0,87	3,2	0,83	2,4	11,8
	OSC	13	2,8	0,87	3,2	0,83	2,4	11,9

Tab. 10.10: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_c^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Blattkohlenhydrate bei Verwendung der ST-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe)

Glucose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_c^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	11	2,6	0,14	2,7	0,06	1,0	10,5
	OBC	10	2,6	0,14	2,7	0,07	1,0	10,5
	LBC	10	2,6	0,14	2,7	0,07	1,0	10,5
	NM	7	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6
	OBC+NM	6	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6
	LBC+NM	8	2,6	0,12	2,7	0,07	1,0	10,6
	SNV	6	2,6	0,09	2,7	0,05	1,0	10,5
	DT	7	2,6	0,12	2,7	0,07	1,0	10,7
	SNV+DT	6	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6
	MSC	6	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6
	OSC	8	2,6	0,14	2,7	0,07	1,0	10,5
	Pe	log 1/R	11	1,3	0,45	1,5	0,25	1,2
OBC		10	1,3	0,42	1,5	0,25	1,1	8,6
LBC		10	1,3	0,44	1,5	0,26	1,2	8,7
NM		7	1,6	0,17	1,7	0,10	1,1	7,9
OBC+NM		6	1,6	0,17	1,7	0,09	1,0	7,8
LBC+NM		8	1,5	0,28	1,6	0,17	1,1	8,2
SNV		6	1,6	0,21	1,6	0,12	1,1	8,0
DT		7	1,5	0,24	1,6	0,15	1,1	8,1
SNV+DT		6	1,6	0,20	1,6	0,12	1,1	8,0
MSC		6	1,6	0,19	1,7	0,12	1,1	7,9
OSC		8	1,3	0,45	1,5	0,27	1,2	8,7
Ch+Pe		log 1/R	11	2,0	0,24	2,2	0,12	1,1
	OBC	10	2,0	0,23	2,2	0,13	1,1	13,1
	LBC	10	2,0	0,24	2,2	0,13	1,1	13,1
	NM	7	2,1	0,13	2,2	0,08	1,0	12,8
	OBC+NM	6	2,2	0,13	2,2	0,08	1,0	12,8
	LBC+NM	8	2,1	0,17	2,2	0,10	1,1	13,0
	SNV	6	2,1	0,13	2,2	0,08	1,0	12,8
	DT	7	2,1	0,16	2,2	0,10	1,1	13,0
	SNV+DT	6	2,1	0,14	2,2	0,09	1,0	12,9
	MSC	6	2,1	0,13	2,2	0,09	1,0	12,9

Fortsetzung von Tab. 10.10

Fructose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	17	0,7	0,65	0,9	0,52	1,4	9,6
	OBC	16	0,8	0,64	0,9	0,52	1,4	9,6
	LBC	17	0,7	0,66	0,9	0,52	1,4	9,7
	NM	16	0,8	0,62	0,9	0,50	1,4	9,4
	OBC+NM	15	0,8	0,62	0,9	0,50	1,4	9,4
	LBC+NM	16	0,8	0,63	0,9	0,49	1,4	9,4
	SNV	15	0,8	0,61	0,9	0,49	1,4	9,4
	DT	14	0,8	0,63	0,9	0,52	1,4	9,6
	SNV+DT	14	0,8	0,62	0,9	0,50	1,4	9,4
	MSC	15	0,8	0,62	0,9	0,50	1,4	9,4
	OSC	14	0,7	0,65	0,9	0,53	1,4	9,6
Pe	log 1/R	17	0,9	0,67	1,1	0,51	1,4	7,0
	OBC	16	1,0	0,66	1,1	0,51	1,4	6,9
	LBC	17	1,0	0,66	1,1	0,51	1,4	7,0
	NM	16	1,0	0,61	1,2	0,46	1,4	6,6
	OBC+NM	15	1,0	0,62	1,2	0,47	1,4	6,7
	LBC+NM	16	1,0	0,64	1,2	0,48	1,4	6,8
	SNV	15	1,0	0,61	1,2	0,46	1,4	6,6
	DT	14	1,0	0,64	1,2	0,50	1,4	6,9
	SNV+DT	14	1,0	0,61	1,2	0,47	1,4	6,7
	MSC	15	1,0	0,63	1,2	0,48	1,4	6,7
	OSC	14	0,9	0,67	1,1	0,52	1,4	7,0
Ch+Pe	log 1/R	17	0,9	0,73	1,0	0,61	1,6	8,4
	OBC	16	0,9	0,72	1,0	0,61	1,6	8,4
	LBC	17	0,9	0,73	1,0	0,61	1,6	8,4
	NM	16	0,9	0,69	1,1	0,58	1,5	8,1
	OBC+NM	15	0,9	0,69	1,1	0,58	1,5	8,1
	LBC+NM	16	0,9	0,71	1,1	0,59	1,6	8,2
	SNV	15	0,9	0,69	1,1	0,58	1,5	8,1
	DT	14	0,9	0,71	1,0	0,60	1,6	8,3
	SNV+DT	14	0,9	0,69	1,1	0,58	1,5	8,1
	MSC	15	0,9	0,70	1,1	0,59	1,6	8,2
	OSC	14	0,9	0,73	1,0	0,62	1,6	8,5

Fortsetzung von Tab. 10.10

Saccharose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	17	1,3	0,55	1,5	0,44	1,2	5,8
	OBC	16	1,3	0,55	1,5	0,44	1,2	5,8
	LBC	16	1,3	0,56	1,5	0,45	1,2	5,9
	NM	14	1,4	0,49	1,6	0,40	1,2	5,6
	OBC+NM	13	1,4	0,50	1,6	0,42	1,2	5,8
	LBC+NM	15	1,4	0,54	1,5	0,44	1,2	5,8
	SNV	14	1,4	0,50	1,6	0,40	1,2	5,5
	DT	13	1,4	0,48	1,6	0,39	1,2	5,6
	SNV+DT	15	1,3	0,57	1,5	0,47	1,2	6,0
	MSC	17	1,3	0,60	1,5	0,49	1,3	6,1
	OSC	14	1,3	0,55	1,5	0,45	1,2	5,9
Pe	log 1/R	17	1,7	0,69	2,2	0,46	1,4	9,9
	OBC	16	1,7	0,68	2,3	0,45	1,3	9,9
	LBC	16	1,7	0,68	2,3	0,44	1,3	9,8
	NM	14	1,9	0,60	2,3	0,42	1,3	9,6
	OBC+NM	13	1,9	0,60	2,3	0,41	1,3	9,5
	LBC+NM	15	1,8	0,66	2,3	0,43	1,3	9,6
	SNV	14	1,9	0,63	2,3	0,42	1,3	9,6
	DT	13	1,8	0,65	2,3	0,43	1,3	9,7
	SNV+DT	15	1,9	0,64	2,3	0,41	1,3	9,5
	MSC	17	1,8	0,67	2,3	0,44	1,3	9,8
	OSC	14	1,7	0,69	2,2	0,48	1,4	10,1
Ch+Pe	log 1/R	17	1,5	0,69	1,9	0,52	1,4	11,5
	OBC	16	1,6	0,68	1,9	0,52	1,4	11,5
	LBC	16	1,6	0,68	1,9	0,51	1,4	11,5
	NM	14	1,7	0,61	2,0	0,48	1,4	11,1
	OBC+NM	13	1,7	0,62	2,0	0,48	1,4	11,1
	LBC+NM	15	1,6	0,66	2,0	0,50	1,4	11,3
	SNV	14	1,7	0,63	2,0	0,48	1,4	11,1
	DT	13	1,6	0,65	2,0	0,49	1,4	11,2
	SNV+DT	15	1,6	0,66	2,0	0,50	1,4	11,3
	MSC	17	1,6	0,68	1,9	0,52	1,4	11,6
	OSC	14	1,5	0,69	1,9	0,54	1,5	11,7

Fortsetzung von Tab. 10.10

Summe lösliche Zucker (TSS) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	17	3,3	0,44	3,8	0,32	1,1	8,7
	OBC	12	3,5	0,37	3,8	0,28	1,1	8,6
	LBC	10	3,6	0,32	3,9	0,26	1,1	8,5
	NM	12	3,6	0,36	3,9	0,26	1,1	8,4
	OBC+NM	12	3,5	0,39	3,9	0,29	1,1	8,5
	LBC+NM	12	3,5	0,38	3,8	0,29	1,1	8,6
	SNV	12	3,5	0,40	3,8	0,30	1,1	8,6
	DT	14	3,4	0,42	3,7	0,32	1,1	8,8
	SNV+DT	7	3,7	0,28	3,8	0,24	1,1	8,6
	MSC	14	3,4	0,41	3,8	0,30	1,1	8,6
	OSC	14	3,3	0,44	3,8	0,32	1,1	8,8
Pe	log 1/R	17	3,2	0,67	4,2	0,39	1,3	10,0
	OBC	12	3,7	0,56	4,5	0,32	1,2	9,5
	LBC	10	3,9	0,50	4,5	0,32	1,2	9,5
	NM	12	3,9	0,49	4,5	0,29	1,2	9,4
	OBC+NM	12	3,8	0,53	4,5	0,30	1,2	9,4
	LBC+NM	12	3,7	0,56	4,4	0,33	1,2	9,6
	SNV	12	3,8	0,54	4,5	0,29	1,2	9,4
	DT	14	3,4	0,63	4,3	0,37	1,3	9,9
	SNV+DT	7	4,6	0,29	4,8	0,21	1,1	8,9
	MSC	14	3,6	0,57	4,4	0,33	1,2	9,6
	OSC	14	3,2	0,67	4,2	0,40	1,3	10,2
Ch+Pe	log 1/R	17	3,3	0,62	4,0	0,44	1,3	10,7
	OBC	12	3,6	0,54	4,2	0,39	1,3	10,3
	LBC	10	3,7	0,50	4,2	0,38	1,3	10,2
	NM	12	3,8	0,50	4,3	0,37	1,2	10,1
	OBC+NM	12	3,7	0,52	4,2	0,38	1,3	10,1
	LBC+NM	12	3,6	0,54	4,2	0,40	1,3	10,3
	SNV	12	3,6	0,53	4,2	0,38	1,3	10,2
	DT	14	3,4	0,59	4,0	0,43	1,3	10,6
	SNV+DT	7	4,2	0,39	4,3	0,33	1,2	9,9
	MSC	14	3,5	0,56	4,1	0,41	1,3	10,4
	OSC	14	3,3	0,62	4,0	0,45	1,3	10,8

Fortsetzung von Tab. 10.10

Stärke in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	12	8,0	0,73	8,8	0,66	1,7	10,5
	OBC	12	7,4	0,78	8,2	0,72	1,8	11,4
	LBC	12	7,5	0,77	8,3	0,70	1,8	11,2
	NM	16	6,0	0,84	6,8	0,79	2,2	13,6
	OBC+NM	15	5,9	0,85	6,7	0,80	2,2	13,9
	LBC+NM	15	5,9	0,85	6,8	0,80	2,2	13,6
	SNV	13	6,4	0,82	7,2	0,77	2,0	12,8
	DT	15	6,1	0,84	6,9	0,79	2,2	13,5
	SNV+DT	15	5,9	0,85	6,8	0,79	2,2	13,7
	MSC	15	5,8	0,85	6,8	0,79	2,2	13,6
	OSC	12	6,6	0,81	7,4	0,76	2,0	12,4
Pe	log 1/R	12	6,0	0,63	6,7	0,56	1,4	6,8
	OBC	12	5,7	0,68	6,5	0,61	1,4	7,1
	LBC	12	5,9	0,65	6,9	0,55	1,3	6,6
	NM	16	4,5	0,77	5,2	0,70	1,7	8,7
	OBC+NM	15	4,8	0,74	5,5	0,68	1,7	8,4
	LBC+NM	15	5,1	0,72	6,1	0,63	1,5	7,5
	SNV	13	5,3	0,70	6,1	0,62	1,5	7,5
	DT	15	5,1	0,72	6,1	0,62	1,5	7,4
	SNV+DT	15	4,7	0,75	5,6	0,66	1,6	8,2
	MSC	15	4,8	0,74	5,6	0,66	1,6	8,2
	OSC	12	4,9	0,75	5,8	0,67	1,6	7,8
Ch+Pe	log 1/R	12	7,0	0,68	7,8	0,61	1,6	11,9
	OBC	12	6,5	0,72	7,3	0,65	1,7	12,6
	LBC	12	6,7	0,71	7,6	0,63	1,6	12,2
	NM	16	5,3	0,82	6,1	0,76	2,0	15,3
	OBC+NM	15	5,3	0,81	6,1	0,76	2,0	15,3
	LBC+NM	15	5,5	0,80	6,4	0,73	1,9	14,4
	SNV	13	5,8	0,78	6,7	0,71	1,9	13,9
	DT	15	5,6	0,80	6,5	0,73	1,9	14,3
	SNV+DT	15	5,3	0,82	6,2	0,75	2,0	15,0
	MSC	15	5,3	0,82	6,2	0,75	2,0	14,9
	OSC	12	5,8	0,78	6,7	0,71	1,9	13,9

Fortsetzung von Tab. 10.10

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	17	6,5	0,86	7,5	0,82	2,3	14,1
	OBC	15	7,0	0,84	7,9	0,80	2,2	13,4
	LBC	17	6,3	0,87	7,2	0,84	2,4	14,8
	NM	15	7,0	0,84	8,0	0,79	2,2	13,2
	OBC+NM	14	6,9	0,85	7,9	0,80	2,2	13,4
	LBC+NM	16	6,2	0,88	7,1	0,84	2,5	15,0
	SNV	12	7,4	0,82	8,3	0,78	2,1	12,8
	DT	15	6,6	0,86	7,3	0,83	2,4	14,4
	SNV+DT	14	6,9	0,85	7,8	0,80	2,2	13,6
	MSC	16	6,2	0,88	7,1	0,84	2,5	14,9
	OSC	13	6,7	0,85	8,0	0,79	2,2	13,1
Pe	log 1/R	17	5,5	0,80	6,8	0,71	1,8	8,8
	OBC	15	5,7	0,79	7,1	0,69	1,7	8,4
	LBC	17	5,6	0,80	6,8	0,71	1,8	8,8
	NM	15	5,7	0,78	6,9	0,69	1,8	8,6
	OBC+NM	14	5,8	0,77	7,1	0,68	1,7	8,4
	LBC+NM	16	5,7	0,79	6,8	0,71	1,8	8,7
	SNV	12	6,5	0,73	7,6	0,64	1,6	7,8
	DT	15	5,6	0,80	6,8	0,71	1,8	8,7
	SNV+DT	14	5,6	0,79	6,8	0,70	1,8	8,7
	MSC	16	5,5	0,80	6,6	0,72	1,9	9,1
	OSC	13	5,6	0,79	6,7	0,72	1,8	8,9
Ch+Pe	log 1/R	17	6,0	0,84	7,1	0,77	2,1	14,8
	OBC	15	6,4	0,82	7,5	0,75	2,0	14,1
	LBC	17	5,9	0,84	7,0	0,78	2,2	15,2
	NM	15	6,4	0,82	7,4	0,75	2,0	14,2
	OBC+NM	14	6,4	0,82	7,5	0,75	2,0	14,2
	LBC+NM	16	5,9	0,84	6,9	0,79	2,2	15,3
	SNV	12	6,9	0,78	7,9	0,72	1,9	13,4
	DT	15	6,1	0,84	7,1	0,78	2,1	15,0
	SNV+DT	14	6,2	0,83	7,3	0,76	2,1	14,5
	MSC	16	5,8	0,85	6,8	0,79	2,2	15,5
	OSC	13	6,2	0,83	7,4	0,76	2,0	14,3

Tab. 10.11: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Blattkohlenhydrate bei Verwendung der BU-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe)

Glucose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	8	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6
	OBC	7	2,6	0,11	2,7	0,07	1,0	10,6
	LBC	8	2,6	0,13	2,7	0,08	1,0	10,7
	NM	7	2,6	0,10	2,7	0,05	1,0	10,5
	OBC+NM	6	2,6	0,12	2,7	0,08	1,0	10,7
	LBC+NM	7	2,6	0,13	2,7	0,08	1,0	10,7
	SNV	6	2,6	0,11	2,7	0,07	1,0	10,6
	DT	7	2,6	0,12	2,7	0,08	1,0	10,7
	SNV+DT	6	2,6	0,12	2,7	0,07	1,0	10,6
	MSC	6	2,6	0,11	2,7	0,08	1,0	10,7
	OSC	5	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6
	Pe	log 1/R	8	1,5	0,29	1,6	0,21	1,1
OBC		7	1,5	0,27	1,6	0,20	1,1	8,3
LBC		8	1,5	0,30	1,6	0,20	1,1	8,3
NM		7	1,5	0,22	1,6	0,15	1,1	8,1
OBC+NM		6	1,5	0,23	1,6	0,16	1,1	8,1
LBC+NM		7	1,5	0,26	1,6	0,17	1,1	8,2
SNV		6	1,5	0,24	1,6	0,20	1,1	8,3
DT		7	1,5	0,31	1,6	0,22	1,1	8,4
SNV+DT		6	1,5	0,26	1,6	0,18	1,1	8,3
MSC		6	1,6	0,22	1,6	0,14	1,1	8,0
OSC		5	1,5	0,29	1,6	0,22	1,1	8,5
Ch+Pe		log 1/R	8	2,1	0,16	2,2	0,11	1,1
	OBC	7	2,1	0,16	2,2	0,12	1,1	13,1
	LBC	8	2,1	0,18	2,2	0,12	1,1	13,1
	NM	7	2,1	0,14	2,2	0,09	1,0	12,9
	OBC+NM	6	2,1	0,16	2,2	0,11	1,1	13,1
	LBC+NM	7	2,1	0,17	2,2	0,11	1,1	13,1
	SNV	6	2,1	0,16	2,2	0,11	1,1	13,1
	DT	7	2,1	0,19	2,2	0,13	1,1	13,2
	SNV+DT	6	2,1	0,17	2,2	0,11	1,1	13,1
	MSC	6	2,1	0,15	2,2	0,10	1,1	13,0

Fortsetzung von Tab. 10.11

Fructose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	0,8	0,56	1,0	0,43	1,3	8,9
	OBC	12	0,9	0,53	1,0	0,43	1,3	8,8
	LBC	12	0,8	0,55	1,0	0,44	1,3	8,9
	NM	14	0,8	0,57	1,0	0,43	1,3	8,8
	OBC+NM	12	0,8	0,58	1,0	0,45	1,3	8,9
	LBC+NM	11	0,8	0,55	1,0	0,44	1,3	8,9
	SNV	14	0,8	0,58	0,8	0,58	1,5	10,6
	DT	13	0,8	0,57	0,8	0,57	1,5	10,4
	SNV+DT	13	0,8	0,59	1,0	0,46	1,3	9,0
	MSC	14	0,8	0,59	1,0	0,46	1,3	9,0
	OSC	11	0,8	0,56	1,0	0,44	1,3	8,9
Pe	log 1/R	14	1,1	0,57	1,2	0,42	1,3	6,4
	OBC	12	1,1	0,57	1,2	0,42	1,3	6,4
	LBC	12	1,1	0,55	1,3	0,40	1,3	6,3
	NM	14	1,1	0,56	1,2	0,42	1,3	6,4
	OBC+NM	12	1,1	0,53	1,3	0,39	1,3	6,2
	LBC+NM	11	1,1	0,53	1,3	0,39	1,3	6,2
	SNV	14	1,1	0,55	1,1	0,55	1,5	7,3
	DT	13	1,0	0,60	1,0	0,60	1,6	7,6
	SNV+DT	13	1,1	0,57	1,2	0,43	1,3	6,5
	MSC	14	1,1	0,57	1,2	0,43	1,3	6,4
	OSC	11	1,1	0,57	1,2	0,43	1,3	6,5
Ch+Pe	log 1/R	14	1,0	0,66	1,1	0,54	1,5	7,7
	OBC	12	1,0	0,64	1,1	0,53	1,5	7,7
	LBC	12	1,0	0,64	1,1	0,53	1,5	7,7
	NM	14	1,0	0,65	1,1	0,54	1,5	7,7
	OBC+NM	12	1,0	0,64	1,1	0,53	1,4	7,6
	LBC+NM	11	1,0	0,63	1,1	0,52	1,4	7,6
	SNV	14	1,0	0,65	1,0	0,65	1,7	9,0
	DT	13	0,9	0,67	0,9	0,67	1,7	9,1
	SNV+DT	13	1,0	0,66	1,1	0,55	1,5	7,8
	MSC	14	1,0	0,66	1,1	0,55	1,5	7,8
	OSC	11	1,0	0,66	1,1	0,55	1,5	7,8

Fortsetzung von Tab. 10.11

Saccharose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	16	1,4	0,52	1,6	0,41	1,2	5,7
	OBC	14	1,4	0,47	1,6	0,38	1,2	5,6
	LBC	12	1,5	0,47	1,6	0,39	1,1	5,5
	NM	12	1,4	0,46	1,6	0,37	1,1	5,5
	OBC+NM	12	1,4	0,48	1,6	0,39	1,2	5,6
	LBC+NM	11	1,4	0,47	1,6	0,38	1,1	5,4
	SNV	12	1,5	0,45	1,6	0,37	1,1	5,5
	DT	12	1,5	0,46	1,7	0,38	1,1	5,3
	SNV+DT	12	1,4	0,50	1,6	0,41	1,2	5,7
	MSC	11	1,5	0,46	1,6	0,38	1,2	5,5
	OSC	13	1,4	0,52	1,6	0,41	1,2	5,7
Pe	log 1/R	16	2,0	0,58	2,5	0,34	1,2	8,9
	OBC	14	2,0	0,56	2,5	0,33	1,2	8,9
	LBC	12	2,2	0,50	2,7	0,25	1,1	8,4
	NM	12	2,2	0,47	2,6	0,29	1,2	8,7
	OBC+NM	12	2,2	0,49	2,6	0,30	1,2	8,7
	LBC+NM	11	2,2	0,48	2,6	0,25	1,2	8,4
	SNV	12	2,2	0,50	2,5	0,30	1,2	8,8
	DT	12	2,1	0,54	2,6	0,28	1,2	8,6
	SNV+DT	12	2,1	0,51	2,5	0,31	1,2	8,8
	MSC	11	2,2	0,47	2,6	0,30	1,2	8,7
	OSC	13	2,0	0,58	2,5	0,36	1,2	9,1
Ch+Pe	log 1/R	16	1,7	0,62	2,1	0,44	1,3	10,6
	OBC	14	1,8	0,59	2,1	0,43	1,3	10,5
	LBC	12	1,9	0,54	2,2	0,37	1,2	10,1
	NM	12	1,9	0,53	2,2	0,40	1,3	10,3
	OBC+NM	12	1,9	0,54	2,1	0,40	1,3	10,4
	LBC+NM	11	1,9	0,53	2,2	0,37	1,2	10,1
	SNV	12	1,9	0,54	2,1	0,40	1,3	10,4
	DT	12	1,8	0,56	2,2	0,38	1,3	10,1
	SNV+DT	12	1,8	0,56	2,1	0,42	1,3	10,5
	MSC	11	1,9	0,53	2,1	0,40	1,3	10,4
	OSC	13	1,7	0,62	2,1	0,45	1,3	10,8

Fortsetzung von Tab. 10.11

Summe lösliche Zucker (TSS) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD _{CV}	RER _{CV}
Ch	log 1/R	9	3,5	0,33	3,7	0,29	1,2	8,9
	OBC	9	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,8
	LBC	8	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,9
	NM	8	3,6	0,32	3,8	0,27	1,1	8,7
	OBC+NM	8	3,6	0,34	3,7	0,29	1,2	8,8
	LBC+NM	8	3,5	0,34	3,7	0,29	1,2	8,8
	SNV	8	3,5	0,34	3,7	0,30	1,2	8,9
	DT	7	3,5	0,33	3,7	0,30	1,2	9,0
	SNV+DT	7	3,5	0,36	3,7	0,31	1,2	8,9
	MSC	8	3,6	0,34	3,7	0,29	1,2	8,8
	OSC	6	3,5	0,33	3,7	0,29	1,2	9,0
Pe	log 1/R	9	4,5	0,32	4,8	0,21	1,1	8,8
	OBC	9	4,3	0,36	4,7	0,24	1,1	9,0
	LBC	8	4,5	0,32	4,8	0,22	1,1	8,9
	NM	8	4,6	0,28	4,9	0,19	1,1	8,8
	OBC+NM	8	4,5	0,32	4,8	0,22	1,1	8,9
	LBC+NM	8	4,4	0,34	4,7	0,23	1,1	9,0
	SNV	8	4,5	0,31	4,8	0,21	1,1	8,9
	DT	7	4,5	0,32	4,8	0,22	1,1	8,9
	SNV+DT	7	4,5	0,33	4,8	0,22	1,1	8,9
	MSC	8	4,5	0,32	4,8	0,22	1,1	8,9
	OSC	6	4,5	0,32	4,8	0,23	1,1	8,9
Ch+Pe	log 1/R	9	4,0	0,42	4,3	0,34	1,2	10,0
	OBC	9	4,0	0,44	4,3	0,36	1,2	10,1
	LBC	8	4,1	0,42	4,3	0,35	1,2	10,0
	NM	8	4,1	0,39	4,4	0,33	1,2	9,8
	OBC+NM	8	4,1	0,41	4,3	0,35	1,2	10,0
	LBC+NM	8	4,0	0,43	4,3	0,35	1,2	10,0
	SNV	8	4,1	0,41	4,3	0,35	1,2	10,0
	DT	7	4,0	0,42	4,3	0,35	1,2	10,0
	SNV+DT	7	4,0	0,43	4,3	0,35	1,2	10,0
	MSC	8	4,1	0,42	4,3	0,35	1,2	10,0
	OSC	6	4,0	0,42	4,3	0,36	1,2	10,0

Fortsetzung von Tab. 10.11

Stärke in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	6,4	0,82	7,2	0,77	2,1	12,8
	OBC	15	6,1	0,84	6,9	0,79	2,2	13,5
	LBC	15	5,9	0,84	6,7	0,80	2,2	13,9
	NM	12	6,8	0,79	7,5	0,75	2,0	12,3
	OBC+NM	13	6,3	0,83	7,1	0,77	2,1	13,1
	LBC+NM	14	5,9	0,84	6,8	0,80	2,2	13,7
	SNV	11	6,9	0,79	7,6	0,74	1,9	12,1
	DT	13	6,1	0,84	6,8	0,80	2,2	13,6
	SNV+DT	11	6,7	0,80	7,4	0,75	2,0	12,4
	MSC	13	6,3	0,82	7,1	0,77	2,1	13,0
OSC	10	6,7	0,80	7,4	0,75	2,0	12,5	
Pe	log 1/R	14	4,8	0,75	5,5	0,68	1,7	8,4
	OBC	15	4,7	0,75	5,3	0,69	1,7	8,6
	LBC	15	4,7	0,76	5,5	0,68	1,7	8,3
	NM	12	5,0	0,72	5,5	0,67	1,7	8,4
	OBC+NM	13	4,8	0,74	5,3	0,69	1,7	8,6
	LBC+NM	14	4,7	0,75	5,5	0,68	1,7	8,3
	SNV	11	5,1	0,72	5,5	0,67	1,7	8,3
	DT	13	5,3	0,70	6,0	0,64	1,5	7,7
	SNV+DT	11	5,1	0,72	5,5	0,67	1,7	8,3
	MSC	13	4,8	0,74	5,4	0,69	1,7	8,5
OSC	10	5,1	0,71	5,7	0,66	1,6	8,1	
Ch+Pe	log 1/R	14	5,6	0,79	6,4	0,74	1,9	14,5
	OBC	15	5,4	0,81	6,1	0,76	2,0	15,1
	LBC	15	5,3	0,82	6,1	0,76	2,0	15,3
	NM	12	5,9	0,77	6,5	0,72	1,9	14,2
	OBC+NM	13	5,5	0,80	6,2	0,75	2,0	14,9
	LBC+NM	14	5,3	0,81	6,1	0,75	2,0	15,1
	SNV	11	6,0	0,76	6,6	0,71	1,9	14,0
	DT	13	5,7	0,79	6,4	0,73	1,9	14,5
	SNV+DT	11	5,9	0,77	6,5	0,72	1,9	14,2
	MSC	13	5,6	0,80	6,3	0,74	2,0	14,8
OSC	10	6,0	0,77	6,6	0,72	1,9	14,1	

Fortsetzung von Tab. 10.11

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	13	7,3	0,83	8,1	0,79	2,2	13,1
	OBC	13	7,2	0,83	8,0	0,79	2,2	13,2
	LBC	14	6,8	0,85	7,6	0,81	2,3	13,9
	NM	12	7,4	0,82	8,2	0,78	2,1	13,0
	OBC+NM	11	7,4	0,82	8,3	0,78	2,1	12,8
	LBC+NM	12	7,3	0,83	8,1	0,79	2,2	13,1
	SNV	12	7,2	0,83	7,9	0,80	2,2	13,4
	DT	12	7,1	0,84	7,8	0,80	2,2	13,5
	SNV+DT	11	7,3	0,83	8,1	0,79	2,2	13,1
	MSC	11	7,5	0,82	8,4	0,77	2,1	12,7
	OSC	10	7,3	0,83	8,0	0,79	2,2	13,2
Pe	log 1/R	13	6,5	0,72	7,5	0,64	1,6	8,0
	OBC	13	6,1	0,76	7,1	0,68	1,7	8,4
	LBC	14	6,1	0,76	7,0	0,69	1,7	8,4
	NM	12	6,5	0,72	7,3	0,65	1,7	8,1
	OBC+NM	11	6,4	0,73	7,1	0,66	1,7	8,3
	LBC+NM	12	6,3	0,74	7,1	0,68	1,7	8,4
	SNV	12	6,1	0,75	7,1	0,67	1,7	8,4
	DT	12	6,3	0,74	7,3	0,66	1,7	8,1
	SNV+DT	11	6,4	0,72	7,2	0,66	1,7	8,2
	MSC	11	6,5	0,72	7,3	0,65	1,7	8,1
	OSC	10	6,5	0,72	7,3	0,65	1,7	8,1
Ch+Pe	log 1/R	13	6,9	0,79	7,8	0,73	1,9	13,6
	OBC	13	6,6	0,80	7,5	0,75	2,0	14,0
	LBC	14	6,4	0,82	7,3	0,76	2,0	14,5
	NM	12	7,0	0,78	7,7	0,73	1,9	13,7
	OBC+NM	11	6,9	0,79	7,7	0,74	1,9	13,7
	LBC+NM	12	6,8	0,79	7,6	0,74	2,0	14,0
	SNV	12	6,6	0,80	7,5	0,75	2,0	14,2
	DT	12	6,7	0,80	7,6	0,75	2,0	14,0
	SNV+DT	11	6,9	0,79	7,6	0,74	2,0	13,9
	MSC	11	7,0	0,78	7,8	0,73	1,9	13,5
	OSC	10	6,9	0,79	7,7	0,74	2,0	13,8

Tab. 10.12: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die Blattkohlenhydrate bei Verwendung der BO-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe)

Glucose in mg/g i.d.TM									
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}	
Ch	log 1/R	8	2,6	0,10	2,7	0,06	1,0	10,6	
	OBC	8	2,6	0,13	2,7	0,08	1,0	10,7	
	LBC	8	2,6	0,14	2,6	0,09	1,0	10,8	
	NM	8	2,6	0,12	2,7	0,08	1,0	10,7	
	OBC+NM	6	2,6	0,11	2,7	0,08	1,0	10,7	
	LBC+NM	7	2,6	0,12	2,7	0,08	1,0	10,7	
	SNV	6	2,6	0,12	2,7	0,08	1,0	10,7	
	DT	7	2,6	0,13	2,6	0,09	1,0	10,8	
	SNV+DT	6	2,6	0,13	2,6	0,09	1,0	10,8	
	MSC	7	2,6	0,13	2,7	0,09	1,0	10,7	
	OSC	5	2,6	0,10	2,7	0,07	1,0	10,7	
	Pe	log 1/R	8	1,4	0,34	1,5	0,25	1,2	8,6
		OBC	8	1,4	0,34	1,5	0,25	1,1	8,5
LBC		8	1,5	0,31	1,6	0,23	1,1	8,4	
NM		8	1,5	0,30	1,5	0,23	1,1	8,5	
OBC+NM		6	1,5	0,26	1,6	0,21	1,1	8,4	
LBC+NM		7	1,5	0,28	1,6	0,22	1,1	8,4	
SNV		6	1,5	0,27	1,6	0,22	1,1	8,4	
DT		7	1,5	0,30	1,6	0,23	1,1	8,4	
SNV+DT		6	1,5	0,29	1,5	0,23	1,1	8,5	
MSC		7	1,5	0,29	1,5	0,23	1,1	8,5	
OSC		5	1,4	0,34	1,5	0,27	1,2	8,7	
Ch+Pe		log 1/R	8	2,1	0,18	2,2	0,13	1,1	13,2
		OBC	8	2,1	0,20	2,1	0,14	1,1	13,3
	LBC	8	2,1	0,19	2,1	0,14	1,1	13,2	
	NM	8	2,1	0,18	2,2	0,13	1,1	13,2	
	OBC+NM	6	2,1	0,16	2,2	0,12	1,1	13,2	
	LBC+NM	7	2,1	0,18	2,2	0,13	1,1	13,2	
	SNV	6	2,1	0,17	2,2	0,13	1,1	13,2	
	DT	7	2,1	0,19	2,1	0,14	1,1	13,3	
	SNV+DT	6	2,1	0,18	2,1	0,14	1,1	13,3	
	MSC	7	2,1	0,18	2,1	0,13	1,1	13,2	

Fortsetzung von Tab. 10.12

Fructose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	15	0,8	0,55	1,0	0,42	1,3	8,8
	OBC	14	0,8	0,54	1,0	0,42	1,3	8,9
	LBC	12	0,9	0,51	1,0	0,40	1,2	8,6
	NM	14	0,8	0,55	1,0	0,41	1,2	8,6
	OBC+NM	15	0,8	0,59	1,0	0,44	1,3	8,9
	LBC+NM	13	0,9	0,54	1,0	0,42	1,3	8,6
	SNV	16	0,8	0,59	1,0	0,44	1,3	8,9
	DT	13	0,8	0,55	1,0	0,43	1,3	8,9
	SNV+DT	13	0,8	0,57	1,0	0,43	1,3	8,8
	MSC	13	0,8	0,56	1,0	0,41	1,3	8,7
	OSC	12	0,8	0,55	1,0	0,43	1,3	8,9
Pe	log 1/R	15	0,9	0,67	1,1	0,53	1,5	7,1
	OBC	14	1,0	0,65	1,1	0,52	1,4	7,0
	LBC	12	1,0	0,62	1,2	0,50	1,4	6,9
	NM	14	1,0	0,63	1,2	0,50	1,4	6,9
	OBC+NM	15	1,0	0,64	1,1	0,51	1,4	7,0
	LBC+NM	13	1,0	0,64	1,1	0,51	1,4	6,9
	SNV	16	1,0	0,66	1,1	0,52	1,4	7,0
	DT	13	1,0	0,65	1,1	0,52	1,4	7,1
	SNV+DT	13	1,0	0,63	1,1	0,51	1,4	6,9
	MSC	13	1,0	0,63	1,2	0,50	1,4	6,9
	OSC	12	0,9	0,67	1,1	0,54	1,5	7,1
Ch+Pe	log 1/R	15	0,9	0,70	1,1	0,59	1,6	8,2
	OBC	14	0,9	0,69	1,1	0,59	1,6	8,2
	LBC	12	1,0	0,66	1,1	0,57	1,5	8,0
	NM	14	0,9	0,68	1,1	0,57	1,5	8,0
	OBC+NM	15	0,9	0,70	1,1	0,59	1,5	8,2
	LBC+NM	13	0,9	0,68	1,1	0,58	1,5	8,0
	SNV	16	0,9	0,70	1,1	0,59	1,6	8,2
	DT	13	0,9	0,70	1,0	0,59	1,6	8,2
	SNV+DT	13	0,9	0,69	1,1	0,58	1,5	8,1
	MSC	13	0,9	0,68	1,1	0,57	1,5	8,0
	OSC	12	0,9	0,70	1,0	0,60	1,6	8,3

Fortsetzung von Tab. 10.12

Saccharose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	15	1,4	0,49	1,6	0,39	1,2	5,6
	OBC	14	1,4	0,49	1,6	0,39	1,2	5,7
	LBC	12	1,5	0,43	1,7	0,36	1,1	5,3
	NM	14	1,4	0,51	1,6	0,40	1,2	5,5
	OBC+NM	12	1,5	0,47	1,7	0,37	1,1	5,3
	LBC+NM	10	1,6	0,40	1,7	0,33	1,1	5,1
	SNV	13	1,5	0,47	1,7	0,37	1,1	5,4
	DT	13	1,4	0,47	1,6	0,38	1,1	5,5
	SNV+DT	12	1,4	0,48	1,6	0,38	1,1	5,4
	MSC	13	1,4	0,51	1,6	0,39	1,2	5,5
	OSC	12	1,4	0,49	1,6	0,40	1,2	5,6
Pe	log 1/R	15	1,8	0,67	2,3	0,45	1,3	9,8
	OBC	14	1,8	0,66	2,3	0,45	1,3	9,8
	LBC	12	1,9	0,62	2,4	0,39	1,3	9,4
	NM	14	1,9	0,64	2,3	0,43	1,3	9,7
	OBC+NM	12	1,9	0,62	2,3	0,43	1,3	9,7
	LBC+NM	10	2,1	0,57	2,4	0,38	1,3	9,2
	SNV	13	1,9	0,62	2,3	0,42	1,3	9,6
	DT	13	1,8	0,67	2,3	0,43	1,3	9,7
	SNV+DT	12	1,9	0,63	2,3	0,43	1,3	9,7
	MSC	13	1,9	0,63	2,3	0,42	1,3	9,6
	OSC	12	1,8	0,67	2,2	0,47	1,4	10,0
Ch+Pe	log 1/R	15	1,6	0,66	2,0	0,50	1,4	11,3
	OBC	14	1,6	0,66	2,0	0,50	1,4	11,3
	LBC	12	1,7	0,60	2,1	0,45	1,3	10,8
	NM	14	1,6	0,64	2,0	0,48	1,4	11,1
	OBC+NM	12	1,7	0,61	2,0	0,47	1,4	11,0
	LBC+NM	10	1,9	0,54	2,1	0,42	1,3	10,5
	SNV	13	1,7	0,62	2,0	0,47	1,4	11,0
	DT	13	1,6	0,65	2,0	0,48	1,4	11,1
	SNV+DT	12	1,7	0,62	2,0	0,48	1,4	11,1
	MSC	13	1,7	0,64	2,0	0,48	1,4	11,1
	OSC	12	1,6	0,66	1,9	0,51	1,4	11,5

Fortsetzung von Tab. 10.12

Summe lösliche Zucker (TSS) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	9	3,5	0,33	3,7	0,29	1,2	9,0
	OBC	8	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,9
	LBC	9	3,5	0,34	3,7	0,30	1,2	8,9
	NM	9	3,6	0,32	3,7	0,27	1,1	8,8
	OBC+NM	8	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,8
	LBC+NM	8	3,6	0,32	3,8	0,28	1,1	8,7
	SNV	8	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,9
	DT	7	3,5	0,33	3,7	0,30	1,2	9,0
	SNV+DT	6	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,9
	MSC	8	3,6	0,33	3,7	0,29	1,2	8,9
	OSC	6	3,5	0,33	3,6	0,30	1,2	9,0
	Pe	log 1/R	9	4,0	0,46	4,3	0,36	1,3
OBC		8	4,1	0,43	4,4	0,35	1,2	9,7
LBC		9	4,0	0,47	4,3	0,36	1,3	9,9
NM		9	4,1	0,42	4,4	0,34	1,2	9,7
OBC+NM		8	4,2	0,41	4,4	0,34	1,2	9,7
LBC+NM		8	4,1	0,44	4,3	0,36	1,2	9,8
SNV		8	4,1	0,43	4,4	0,35	1,2	9,7
DT		7	4,2	0,40	4,4	0,32	1,2	9,6
SNV+DT		6	4,3	0,38	4,5	0,31	1,2	9,5
MSC		8	4,1	0,42	4,4	0,34	1,2	9,7
OSC		6	4,0	0,46	4,3	0,38	1,3	10,0
Ch+Pe		log 1/R	9	3,8	0,50	4,0	0,43	1,3
	OBC	8	3,8	0,48	4,0	0,42	1,3	10,6
	LBC	9	3,8	0,50	4,0	0,43	1,3	10,7
	NM	9	3,9	0,47	4,1	0,41	1,3	10,5
	OBC+NM	8	3,9	0,46	4,1	0,41	1,3	10,5
	LBC+NM	8	3,8	0,47	4,1	0,41	1,3	10,5
	SNV	8	3,9	0,47	4,1	0,42	1,3	10,6
	DT	7	3,9	0,46	4,1	0,41	1,3	10,5
	SNV+DT	6	4,0	0,44	4,1	0,40	1,3	10,4
	MSC	8	3,9	0,47	4,1	0,41	1,3	10,5
	OSC	6	3,8	0,50	4,0	0,44	1,3	10,8

Fortsetzung von Tab. 10.12

Stärke in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	5,9	0,86	6,6	0,81	2,3	14,1
	OBC	14	5,6	0,87	6,3	0,84	2,4	14,7
	LBC	15	5,3	0,88	6,0	0,85	2,5	15,5
	NM	14	5,3	0,88	6,1	0,84	2,5	15,3
	OBC+NM	13	5,3	0,88	6,0	0,85	2,5	15,5
	LBC+NM	14	5,1	0,89	5,9	0,85	2,5	15,6
	SNV	11	6,1	0,84	6,8	0,80	2,2	13,7
	DT	13	5,1	0,89	5,9	0,86	2,5	15,7
	SNV+DT	11	5,8	0,86	6,4	0,82	2,3	14,5
	MSC	13	5,2	0,88	5,9	0,85	2,5	15,6
	OSC	11	5,9	0,86	6,5	0,82	2,3	14,2
Pe	log 1/R	14	4,8	0,77	5,6	0,70	1,6	8,1
	OBC	14	4,8	0,78	5,7	0,70	1,6	8,0
	LBC	15	4,6	0,78	5,5	0,70	1,6	8,3
	NM	14	4,3	0,80	5,0	0,75	1,8	9,2
	OBC+NM	13	4,6	0,78	5,2	0,73	1,7	8,8
	LBC+NM	14	4,6	0,78	5,5	0,70	1,7	8,3
	SNV	11	5,0	0,74	5,5	0,69	1,7	8,3
	DT	13	4,9	0,75	5,9	0,67	1,5	7,7
	SNV+DT	11	4,9	0,75	5,5	0,69	1,7	8,3
	MSC	13	4,5	0,78	5,2	0,72	1,8	8,8
	OSC	11	4,8	0,77	5,6	0,70	1,6	8,2
Ch+Pe	log 1/R	14	5,4	0,81	6,1	0,76	2,0	15,2
	OBC	14	5,2	0,82	6,0	0,77	2,1	15,4
	LBC	15	4,9	0,84	5,7	0,78	2,2	16,1
	NM	14	4,8	0,85	5,5	0,80	2,2	16,8
	OBC+NM	13	5,0	0,84	5,6	0,80	2,2	16,6
	LBC+NM	14	4,8	0,85	5,7	0,79	2,2	16,2
	SNV	11	5,6	0,80	6,1	0,75	2,0	15,1
	DT	13	5,0	0,84	5,9	0,77	2,1	15,7
	SNV+DT	11	5,4	0,81	6,0	0,77	2,1	15,6
	MSC	13	4,9	0,84	5,6	0,80	2,2	16,7
	OSC	11	5,4	0,81	6,0	0,76	2,0	15,3

Fortsetzung von Tab. 10.12

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	13	7,1	0,85	7,7	0,82	2,3	13,7
	OBC	13	6,7	0,86	7,4	0,83	2,4	14,3
	LBC	14	6,2	0,88	7,0	0,85	2,5	15,1
	NM	12	7,0	0,85	7,6	0,81	2,3	13,8
	OBC+NM	12	6,4	0,87	7,0	0,84	2,5	15,0
	LBC+NM	13	6,2	0,88	7,0	0,84	2,5	15,1
	SNV	12	6,8	0,85	7,5	0,82	2,3	14,1
	DT	12	6,2	0,88	7,0	0,85	2,5	15,1
	SNV+DT	11	6,7	0,86	7,3	0,83	2,4	14,5
	MSC	11	6,9	0,85	7,5	0,82	2,3	14,0
	OSC	10	7,1	0,85	7,7	0,82	2,3	13,8
Pe	log 1/R	13	5,7	0,81	6,7	0,74	1,8	8,8
	OBC	13	5,4	0,82	6,3	0,77	1,9	9,4
	LBC	14	5,1	0,84	6,2	0,77	2,0	9,5
	NM	12	5,5	0,80	6,3	0,75	1,9	9,5
	OBC+NM	12	5,3	0,82	6,0	0,77	2,0	9,9
	LBC+NM	13	5,1	0,83	6,2	0,77	2,0	9,6
	SNV	12	5,4	0,81	6,1	0,77	2,0	9,8
	DT	12	5,5	0,81	6,5	0,75	1,9	9,1
	SNV+DT	11	5,4	0,81	6,2	0,76	2,0	9,6
	MSC	11	5,6	0,80	6,4	0,75	1,9	9,3
	OSC	10	5,7	0,81	6,7	0,74	1,8	8,9
Ch+Pe	log 1/R	13	6,4	0,82	7,2	0,77	2,1	14,6
	OBC	13	6,1	0,83	6,8	0,79	2,2	15,5
	LBC	14	5,7	0,86	6,6	0,81	2,3	16,0
	NM	12	6,3	0,82	7,0	0,78	2,2	15,2
	OBC+NM	12	5,8	0,85	6,5	0,81	2,3	16,2
	LBC+NM	13	5,7	0,86	6,6	0,81	2,3	16,1
	SNV	12	6,1	0,83	6,8	0,79	2,2	15,6
	DT	12	5,9	0,85	6,8	0,80	2,2	15,7
	SNV+DT	11	6,0	0,84	6,7	0,80	2,2	15,7
	MSC	11	6,3	0,82	6,9	0,79	2,2	15,2
	OSC	10	6,4	0,82	7,2	0,77	2,1	14,7

Tab. 10.13: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, RPD_{CV} = Verhältnis der Standardabweichung der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV, RER_{CV} = Verhältnis der Spannweite der Referenzwerte im Kalibrierdatensatz zum SECV) der Kalibriermodelle für die logarithmisch transformierten Blattkohlenhydrate bei Verwendung der BO-Spektren unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für die Chrysanthemen (Ch), die Pelargonien (Pe) und die beiden Kulturen gemeinsam (Ch+Pe)

Glucose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	9	2,8	0,06	2,8	0,04	1,0	10,1
	OBC	8	2,8	0,05	2,9	0,03	1,0	10,0
	LBC	11	2,7	0,08	2,9	0,04	1,0	9,9
	NM	13	2,7	0,11	2,9	0,05	0,9	9,7
	OBC+NM	12	2,7	0,12	2,8	0,06	1,0	10,0
	LBC+NM	10	2,8	0,07	3,0	0,03	0,9	9,4
	SNV	8	2,8	0,05	2,9	0,03	1,0	9,8
	DT	11	2,7	0,09	2,9	0,04	1,0	9,9
	SNV+DT	6	2,9	0,04	3,0	0,03	0,9	9,6
	MSC	12	2,7	0,11	2,9	0,05	0,9	9,6
	OSC	6	2,7	0,06	2,7	0,08	1,0	10,4
	Pe	log 1/R	9	1,5	0,32	1,7	0,22	1,0
OBC		8	1,6	0,28	1,8	0,20	1,0	7,4
LBC		11	1,4	0,40	1,7	0,24	1,0	7,6
NM		13	1,3	0,45	1,5	0,29	1,1	8,6
OBC+NM		12	1,4	0,38	1,6	0,25	1,1	8,3
LBC+NM		10	1,4	0,40	1,6	0,29	1,1	8,5
SNV		8	1,4	0,35	1,5	0,29	1,2	8,6
DT		11	1,4	0,43	1,6	0,28	1,1	8,1
SNV+DT		6	1,5	0,26	1,6	0,22	1,1	8,2
MSC		12	1,4	0,38	1,6	0,23	1,1	8,0
OSC		6	1,8	0,26	3,0	0,14	0,6	4,4
Ch+Pe		log 1/R	9	2,2	0,15	2,3	0,10	1,0
	OBC	8	2,2	0,13	2,4	0,09	1,0	12,1
	LBC	11	2,2	0,18	2,3	0,11	1,0	12,1
	NM	13	2,1	0,22	2,3	0,12	1,0	12,3
	OBC+NM	12	2,1	0,20	2,3	0,12	1,0	12,5
	LBC+NM	10	2,2	0,16	2,4	0,10	1,0	11,9
	SNV	8	2,2	0,14	2,3	0,11	1,0	12,4
	DT	11	2,1	0,20	2,3	0,12	1,0	12,3
	SNV+DT	6	2,3	0,10	2,4	0,08	1,0	12,0
	MSC	12	2,1	0,20	2,4	0,11	1,0	12,0
	OSC	6	2,3	0,13	2,9	0,08	0,8	9,9

Fortsetzung von Tab. 10.13

Fructose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	1,7	0,20	2,8	0,08	0,4	3,1
	OBC	13	1,8	0,18	3,0	0,07	0,4	2,9
	LBC	12	1,7	0,17	2,7	0,08	0,5	3,2
	NM	12	1,9	0,16	3,4	0,05	0,4	2,5
	OBC+NM	11	1,9	0,16	3,2	0,07	0,4	2,7
	LBC+NM	11	1,9	0,16	3,3	0,06	0,4	2,6
	SNV	12	1,7	0,19	3,0	0,06	0,4	2,9
	DT	11	1,8	0,14	3,0	0,06	0,4	2,9
	SNV+DT	11	2,0	0,14	3,8	0,05	0,3	2,3
	MSC	11	1,9	0,17	3,2	0,07	0,4	2,7
	OSC	11	1,9	0,17	3,2	0,07	0,4	2,7
Pe	log 1/R	14	1,3	0,50	1,5	0,41	1,1	5,2
	OBC	13	1,3	0,48	1,5	0,40	1,1	5,2
	LBC	12	1,4	0,44	1,6	0,36	1,0	4,9
	NM	12	1,2	0,50	1,4	0,42	1,2	5,8
	OBC+NM	11	1,2	0,48	1,4	0,41	1,2	5,8
	LBC+NM	11	1,3	0,45	1,5	0,38	1,1	5,3
	SNV	12	1,2	0,49	1,4	0,41	1,2	5,7
	DT	11	1,5	0,45	1,7	0,37	0,9	4,5
	SNV+DT	11	1,4	0,46	1,6	0,38	1,0	5,1
	MSC	11	1,2	0,49	1,4	0,41	1,2	5,8
	OSC	11	1,3	0,52	1,5	0,42	1,1	5,2
Ch+Pe	log 1/R	14	1,5	0,43	2,2	0,24	0,7	3,9
	OBC	13	1,6	0,41	2,4	0,22	0,7	3,7
	LBC	12	1,6	0,39	2,2	0,24	0,7	3,9
	NM	12	1,6	0,36	2,6	0,15	0,6	3,3
	OBC+NM	11	1,6	0,36	2,4	0,17	0,7	3,6
	LBC+NM	11	1,6	0,35	2,5	0,17	0,6	3,4
	SNV	12	1,5	0,41	2,3	0,19	0,7	3,7
	DT	11	1,6	0,39	2,4	0,22	0,7	3,6
	SNV+DT	11	1,7	0,35	2,8	0,15	0,6	3,0
	MSC	11	1,6	0,37	2,4	0,17	0,7	3,6
	OSC	11	1,6	0,39	2,5	0,21	0,7	3,5

Fortsetzung von Tab. 10.13

Saccharose in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	17	2,0	0,31	2,5	0,19	0,8	3,6
	OBC	15	2,0	0,27	2,5	0,18	0,8	3,6
	LBC	15	2,0	0,26	2,5	0,17	0,8	3,6
	NM	14	2,5	0,26	3,5	0,15	0,5	2,5
	OBC+NM	14	2,2	0,29	2,9	0,17	0,6	3,1
	LBC+NM	15	2,4	0,30	3,2	0,19	0,6	2,8
	SNV	15	2,3	0,30	2,9	0,18	0,6	3,0
	DT	13	2,3	0,23	2,7	0,16	0,7	3,3
	SNV+DT	13	2,1	0,30	2,6	0,19	0,7	3,4
	MSC	16	2,1	0,35	2,8	0,22	0,7	3,2
	OSC	12	2,4	0,24	2,9	0,17	0,7	3,1
Pe	log 1/R	17	2,8	0,34	3,5	0,19	0,9	6,4
	OBC	15	2,9	0,32	3,6	0,21	0,9	6,3
	LBC	15	3,0	0,32	3,7	0,16	0,8	6,1
	NM	14	3,0	0,33	3,4	0,22	0,9	6,6
	OBC+NM	14	2,9	0,32	3,4	0,20	0,9	6,6
	LBC+NM	15	2,8	0,32	3,5	0,16	0,9	6,4
	SNV	15	2,9	0,33	3,4	0,21	0,9	6,6
	DT	13	3,0	0,37	3,4	0,25	0,9	6,5
	SNV+DT	13	2,9	0,36	3,4	0,22	0,9	6,5
	MSC	16	2,6	0,33	3,1	0,20	1,0	7,2
	OSC	12	3,4	0,36	3,6	0,26	0,8	6,2
Ch+Pe	log 1/R	17	2,4	0,40	3,0	0,25	0,9	7,4
	OBC	15	2,5	0,38	3,1	0,26	0,9	7,2
	LBC	15	2,6	0,38	3,1	0,23	0,9	7,1
	NM	14	2,8	0,35	3,5	0,22	0,8	6,4
	OBC+NM	14	2,6	0,36	3,1	0,23	0,9	7,1
	LBC+NM	15	2,6	0,35	3,3	0,20	0,8	6,7
	SNV	15	2,6	0,37	3,2	0,24	0,9	7,0
	DT	13	2,7	0,38	3,1	0,27	0,9	7,2
	SNV+DT	13	2,5	0,40	3,1	0,26	0,9	7,3
	MSC	16	2,4	0,38	2,9	0,25	0,9	7,6
	OSC	12	3,0	0,37	3,3	0,27	0,8	6,8

Fortsetzung von Tab. 10.13

Summe lösliche Zucker (TSS) in mg/g i.d.TM								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	11	5,2	0,17	7,0	0,10	0,6	4,7
	OBC	11	5,8	0,15	8,0	0,09	0,5	4,1
	LBC	12	5,2	0,20	7,1	0,12	0,6	4,6
	NM	10	5,0	0,17	6,6	0,11	0,7	5,0
	OBC+NM	10	5,9	0,15	8,3	0,09	0,5	4,0
	LBC+NM	10	6,1	0,16	9,1	0,09	0,5	3,6
	SNV	10	5,3	0,17	7,4	0,10	0,6	4,5
	DT	9	5,2	0,17	6,8	0,11	0,6	4,8
	SNV+DT	9	5,3	0,17	7,5	0,10	0,6	4,4
	MSC	9	4,9	0,19	6,2	0,12	0,7	5,3
	OSC	8	5,3	0,17	6,7	0,11	0,6	4,9
Pe	log 1/R	11	3,8	0,53	4,3	0,41	1,3	9,9
	OBC	11	3,8	0,53	4,3	0,41	1,3	9,9
	LBC	12	4,0	0,48	4,6	0,35	1,2	9,3
	NM	10	4,0	0,48	4,4	0,38	1,2	9,7
	OBC+NM	10	3,9	0,51	4,3	0,41	1,3	10,0
	LBC+NM	10	3,9	0,50	4,3	0,40	1,3	9,9
	SNV	10	4,0	0,50	4,3	0,40	1,3	9,9
	DT	9	3,9	0,50	4,4	0,38	1,2	9,6
	SNV+DT	9	4,0	0,48	4,4	0,38	1,2	9,6
	MSC	9	4,0	0,48	4,3	0,39	1,2	9,8
	OSC	8	3,9	0,51	4,4	0,41	1,2	9,7
Ch+Pe	log 1/R	11	4,6	0,39	5,7	0,24	0,9	7,5
	OBC	11	4,9	0,34	6,3	0,20	0,8	6,8
	LBC	12	4,6	0,38	5,9	0,24	0,9	7,2
	NM	10	4,5	0,36	5,6	0,24	1,0	7,7
	OBC+NM	10	5,0	0,31	6,5	0,17	0,8	6,6
	LBC+NM	10	5,1	0,30	7,0	0,16	0,8	6,1
	SNV	10	4,6	0,35	6,0	0,21	0,9	7,2
	DT	9	4,6	0,37	5,7	0,24	0,9	7,5
	SNV+DT	9	4,7	0,35	6,1	0,21	0,9	7,1
	MSC	9	4,4	0,38	5,3	0,26	1,0	8,1
	OSC	8	4,6	0,38	5,6	0,26	0,9	7,6

Fortsetzung von Tab. 10.13

Stärke in mg/g i.d.TM (Gesamter Datensatz)								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	13	344,5	0,28	707,3	0,27	0,0	0,1
	OBC	12	298,4	0,29	585,0	0,27	0,0	0,2
	LBC	13	390,5	0,25	880,0	0,21	0,0	0,1
	NM	14	601,0	0,25	1927,4	0,21	0,0	0,0
	OBC+NM	12	542,7	0,27	1297,0	0,25	0,0	0,1
	LBC+NM	13	586,3	0,27	1637,0	0,24	0,0	0,1
	SNV	12	524,8	0,26	1314,6	0,22	0,0	0,1
	DT	10	324,3	0,24	598,2	0,22	0,0	0,2
	SNV+DT	13	535,5	0,26	1591,9	0,22	0,0	0,1
	MSC	13	494,8	0,26	1214,0	0,21	0,0	0,1
	OSC	11	415,6	0,27	960,4	0,24	0,0	0,1
Pe	log 1/R	13	17,8	0,55	22,5	0,47	0,4	2,0
	OBC	12	15,0	0,61	19,8	0,49	0,5	2,3
	LBC	13	14,6	0,58	19,0	0,49	0,5	2,4
	NM	14	13,8	0,62	16,8	0,51	0,5	2,7
	OBC+NM	12	10,3	0,67	12,0	0,61	0,8	3,8
	LBC+NM	13	16,0	0,55	24,6	0,40	0,4	1,9
	SNV	12	11,0	0,61	15,4	0,48	0,6	3,0
	DT	10	11,9	0,60	15,5	0,49	0,6	2,9
	SNV+DT	13	11,2	0,60	16,9	0,47	0,5	2,7
	MSC	13	13,2	0,59	19,0	0,45	0,5	2,4
	OSC	11	14,5	0,57	19,3	0,47	0,5	2,4
Ch+Pe	log 1/R	13	239,4	0,23	491,1	0,21	0,0	0,2
	OBC	12	207,3	0,23	406,2	0,21	0,0	0,2
	LBC	13	271,2	0,20	610,9	0,16	0,0	0,2
	NM	14	417,2	0,20	1337,6	0,15	0,0	0,1
	OBC+NM	12	376,7	0,21	900,1	0,19	0,0	0,1
	LBC+NM	13	407,0	0,21	1136,1	0,18	0,0	0,1
	SNV	12	364,3	0,20	912,4	0,17	0,0	0,1
	DT	10	225,2	0,19	415,2	0,17	0,0	0,2
	SNV+DT	13	371,7	0,20	1104,8	0,16	0,0	0,1
	MSC	13	343,5	0,20	842,6	0,16	0,0	0,1
	OSC	11	288,6	0,22	666,6	0,19	0,0	0,1

Fortsetzung von Tab. 10.13

Stärke in mg/g i.d.TM (UG I)								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	2	0,3	0,06	0,3	0,03	1,0	6,7
	OBC	1	0,3	0,02	0,3	0,10	1,0	6,5
	LBC	2	0,3	0,01	0,3	0,00	1,0	6,5
	NM	1	0,3	0,06	0,3	0,04	1,0	6,7
	OBC+NM	1	0,3	0,00	0,3	0,06	1,0	6,4
	LBC+NM	1	0,3	0,00	0,3	0,03	1,0	6,4
	SNV	1	0,3	0,01	0,3	0,07	1,0	6,4
	DT	2	0,3	0,01	0,3	0,00	1,0	6,6
	SNV+DT	1	0,3	0,01	0,3	0,07	1,0	6,5
	MSC	1	0,3	0,01	0,3	0,07	1,0	6,4
	OSC	2	0,2	0,12	0,3	0,09	1,0	6,8
Pe	log 1/R	2	0,3	0,08	0,3	0,05	1,0	5,7
	OBC	1	0,4	0,00	0,4	0,00	1,0	5,6
	LBC	2	0,3	0,09	0,3	0,06	1,0	5,7
	NM	1	0,3	0,08	0,3	0,05	1,0	5,7
	OBC+NM	1	0,4	0,01	0,4	0,00	1,0	5,6
	LBC+NM	1	0,3	0,06	0,3	0,02	1,0	5,7
	SNV	1	0,4	0,01	0,4	0,00	1,0	5,6
	DT	2	0,3	0,05	0,4	0,02	1,0	5,6
	SNV+DT	1	0,4	0,01	0,4	0,00	1,0	5,6
	MSC	1	0,4	0,01	0,4	0,00	1,0	5,6
	OSC	2	0,3	0,15	0,3	0,11	1,0	5,9
Ch+Pe	log 1/R	2	0,3	0,07	0,3	0,04	1,0	6,7
	OBC	1	0,3	0,00	0,3	0,00	1,0	6,5
	LBC	2	0,3	0,07	0,3	0,04	1,0	6,6
	NM	1	0,3	0,07	0,3	0,05	1,0	6,7
	OBC+NM	1	0,3	0,01	0,3	0,00	1,0	6,5
	LBC+NM	1	0,3	0,03	0,3	0,01	1,0	6,6
	SNV	1	0,3	0,01	0,3	0,00	1,0	6,5
	DT	2	0,3	0,04	0,3	0,01	1,0	6,5
	SNV+DT	1	0,3	0,01	0,3	0,00	1,0	6,5
	MSC	1	0,3	0,01	0,3	0,00	1,0	6,5
	OSC	2	0,3	0,14	0,3	0,11	1,0	6,9

Fortsetzung von Tab. 10.13

Stärke in mg/g i.d.TM (UG II)								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	14	12,1	0,77	18,3	0,67	0,8	4,9
	OBC	13	16,7	0,68	11,6	0,76	1,2	7,8
	LBC	13	11,2	0,77	17,9	0,66	0,8	5,1
	NM	13	14,4	0,73	20,5	0,65	0,7	4,4
	OBC+NM	12	11,3	0,79	17,7	0,68	0,8	5,1
	LBC+NM	12	11,6	0,78	17,7	0,68	0,8	5,1
	SNV	9	9,3	0,74	12,9	0,65	1,1	7,0
	DT	8	8,5	0,73	10,0	0,67	1,4	9,1
	SNV+DT	11	13,8	0,77	20,2	0,68	0,7	4,5
	MSC	11	11,4	0,76	17,8	0,63	0,8	5,1
	OSC	8	9,1	0,72	11,6	0,63	1,2	7,8
Pe	log 1/R	14	4,0	0,81	5,2	0,68	1,8	8,4
	OBC	13	5,4	0,65	4,2	0,79	2,2	10,4
	LBC	13	4,1	0,81	5,1	0,69	1,8	8,5
	NM	13	4,4	0,78	5,4	0,66	1,7	8,1
	OBC+NM	12	4,6	0,75	5,7	0,61	1,6	7,6
	LBC+NM	12	4,4	0,78	5,4	0,66	1,7	8,1
	SNV	9	5,4	0,65	6,2	0,54	1,5	7,0
	DT	8	6,6	0,49	8,6	0,20	1,1	5,1
	SNV+DT	11	4,7	0,75	5,8	0,61	1,6	7,6
	MSC	11	4,7	0,74	5,8	0,60	1,6	7,6
	OSC	8	5,0	0,70	5,7	0,61	1,6	7,7
Ch+Pe	log 1/R	14	8,8	0,76	13,1	0,63	1,0	6,9
	OBC	13	12,1	0,64	8,5	0,75	1,5	10,6
	LBC	13	8,2	0,76	12,8	0,63	1,0	7,1
	NM	13	10,4	0,70	14,6	0,60	0,9	6,2
	OBC+NM	12	8,5	0,76	12,8	0,63	1,0	7,1
	LBC+NM	12	8,5	0,76	12,7	0,64	1,0	7,1
	SNV	9	7,5	0,72	9,9	0,62	1,3	9,1
	DT	8	7,5	0,68	9,2	0,57	1,4	9,8
	SNV+DT	11	10,0	0,73	14,5	0,61	0,9	6,3
	MSC	11	8,5	0,74	12,9	0,60	1,0	7,0
	OSC	8	7,2	0,73	9,0	0,64	1,4	10,1

Fortsetzung von Tab. 10.13

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g i.d.TM (Gesamter Datensatz)								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	12	79,4	0,28	129,0	0,23	0,1	0,8
	OBC	12	69,4	0,32	108,5	0,27	0,2	1,0
	LBC	11	100,2	0,27	67,2	0,32	0,3	1,6
	NM	13	210,0	0,22	110,2	0,27	0,2	1,0
	OBC+NM	12	99,2	0,29	165,3	0,24	0,1	0,6
	LBC+NM	11	88,0	0,30	146,7	0,24	0,1	0,7
	SNV	11	105,5	0,25	193,8	0,19	0,1	0,5
	DT	11	70,8	0,30	115,6	0,24	0,2	0,9
	SNV+DT	11	95,7	0,29	165,6	0,23	0,1	0,6
	MSC	12	102,5	0,27	190,0	0,21	0,1	0,6
	OSC	9	79,5	0,28	128,0	0,23	0,1	0,8
Pe	log 1/R	12	7,8	0,73	9,0	0,67	1,4	6,6
	OBC	12	8,7	0,73	10,0	0,68	1,2	6,0
	LBC	11	8,4	0,68	7,7	0,73	1,6	7,7
	NM	13	8,7	0,68	7,7	0,73	1,6	7,7
	OBC+NM	12	7,6	0,75	8,4	0,70	1,5	7,1
	LBC+NM	11	7,6	0,72	8,7	0,67	1,4	6,9
	SNV	11	6,6	0,75	7,2	0,71	1,7	8,3
	DT	11	8,3	0,74	9,8	0,66	1,2	6,1
	SNV+DT	11	7,9	0,73	8,9	0,67	1,4	6,7
	MSC	12	7,6	0,74	8,6	0,68	1,4	6,9
	OSC	9	7,8	0,73	8,9	0,67	1,4	6,7
Ch+Pe	log 1/R	12	55,4	0,26	89,7	0,19	0,2	1,2
	OBC	12	48,6	0,31	75,6	0,24	0,2	1,4
	LBC	11	69,8	0,23	47,0	0,30	0,3	2,3
	NM	13	145,9	0,17	76,7	0,24	0,2	1,4
	OBC+NM	12	69,0	0,25	114,9	0,20	0,1	0,9
	LBC+NM	11	61,3	0,26	102,0	0,20	0,1	1,0
	SNV	11	73,3	0,21	134,6	0,15	0,1	0,8
	DT	11	49,5	0,29	80,5	0,21	0,2	1,3
	SNV+DT	11	66,6	0,25	115,1	0,19	0,1	0,9
	MSC	12	71,4	0,24	132,0	0,17	0,1	0,8
	OSC	9	55,4	0,26	89,1	0,19	0,2	1,2

Fortsetzung von Tab. 10.13

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g i.d.TM (UG I)								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	9	1,5	0,14	1,6	0,04	1,0	4,7
	OBC	9	1,5	0,12	1,6	0,02	1,0	4,6
	LBC	3	1,6	0,01	1,6	0,00	1,0	4,7
	NM	8	1,4	0,14	1,6	0,02	1,0	4,7
	OBC+NM	4	1,6	0,00	1,6	0,00	1,0	4,6
	LBC+NM	1	1,6	0,00	1,6	0,00	1,0	4,7
	SNV	1	1,6	0,00	1,6	0,00	1,0	4,7
	DT	8	1,5	0,14	1,6	0,02	1,0	4,6
	SNV+DT	9	1,4	0,16	1,6	0,02	0,9	4,6
	MSC	1	1,6	0,00	1,6	0,00	1,0	4,7
	OSC	9	1,4	0,20	1,6	0,04	1,0	4,7
Pe	log 1/R	9	1,5	0,39	1,9	0,15	1,0	3,9
	OBC	9	1,5	0,44	1,8	0,19	1,1	4,0
	LBC	3	1,8	0,12	1,9	0,03	1,0	3,8
	NM	8	1,6	0,33	1,8	0,16	1,0	4,0
	OBC+NM	4	1,8	0,13	1,9	0,04	1,0	3,8
	LBC+NM	1	1,8	0,14	1,8	0,11	1,0	3,9
	SNV	1	2,0	0,03	2,0	0,02	1,0	3,7
	DT	8	1,6	0,35	1,9	0,12	1,0	3,8
	SNV+DT	9	1,6	0,32	2,0	0,08	0,9	3,6
	MSC	1	2,0	0,03	2,0	0,02	1,0	3,7
	OSC	9	1,4	0,47	2,0	0,16	0,9	3,6
Ch+Pe	log 1/R	9	1,5	0,36	1,7	0,18	1,1	4,6
	OBC	9	1,5	0,37	1,7	0,19	1,1	4,6
	LBC	3	1,7	0,17	1,7	0,13	1,0	4,5
	NM	8	1,5	0,34	1,7	0,18	1,1	4,6
	OBC+NM	4	1,7	0,17	1,7	0,12	1,0	4,5
	LBC+NM	1	1,7	0,17	1,7	0,16	1,1	4,6
	SNV	1	1,7	0,12	1,8	0,11	1,0	4,4
	DT	8	1,5	0,34	1,8	0,15	1,0	4,4
	SNV+DT	9	1,5	0,33	1,8	0,13	1,0	4,3
	MSC	1	1,7	0,12	1,8	0,11	1,0	4,4
	OSC	9	1,4	0,42	1,8	0,19	1,0	4,3

Fortsetzung von Tab. 10.13

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g i.d.TM (UG II)								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	RPD_{CV}	RER_{CV}
Ch	log 1/R	15	7,8	0,83	11,2	0,72	1,5	8,7
	OBC	11	9,4	0,70	11,2	0,62	1,5	8,6
	LBC	12	8,2	0,79	10,2	0,70	1,6	9,5
	NM	12	9,2	0,77	11,9	0,68	1,4	8,2
	OBC+NM	10	9,4	0,74	9,4	0,74	1,7	10,3
	LBC+NM	10	8,1	0,79	9,8	0,72	1,7	9,9
	SNV	9	8,1	0,77	9,2	0,71	1,8	10,6
	DT	12	8,7	0,78	11,1	0,70	1,5	8,7
	SNV+DT	11	10,1	0,76	13,7	0,67	1,2	7,1
	MSC	11	8,3	0,79	10,9	0,70	1,5	8,9
	OSC	11	8,8	0,79	10,9	0,71	1,5	8,9
	Pe	log 1/R	15	4,1	0,84	6,0	0,68	1,7
OBC		11	5,6	0,71	6,6	0,61	1,6	7,8
LBC		12	5,0	0,78	6,3	0,65	1,6	8,2
NM		12	5,2	0,75	6,4	0,63	1,6	8,1
OBC+NM		10	5,8	0,69	5,8	0,69	1,8	8,9
LBC+NM		10	5,5	0,72	6,6	0,62	1,6	7,9
SNV		9	6,1	0,66	6,7	0,60	1,5	7,8
DT		12	4,5	0,82	6,4	0,65	1,6	8,2
SNV+DT		11	5,1	0,76	6,5	0,62	1,6	8,0
MSC		11	5,2	0,75	6,4	0,63	1,6	8,1
OSC		11	4,3	0,83	6,2	0,66	1,7	8,4
Ch+Pe		log 1/R	15	5,9	0,83	8,5	0,71	1,6
	OBC	11	7,4	0,71	8,8	0,63	1,5	11,1
	LBC	12	6,5	0,78	8,1	0,69	1,7	12,0
	NM	12	7,1	0,76	9,1	0,66	1,5	10,7
	OBC+NM	10	7,5	0,72	7,5	0,72	1,8	13,0
	LBC+NM	10	6,7	0,77	8,1	0,69	1,7	12,1
	SNV	9	7,0	0,74	7,8	0,68	1,7	12,5
	DT	12	6,6	0,79	8,7	0,68	1,6	11,3
	SNV+DT	11	7,6	0,75	10,1	0,64	1,3	9,6
	MSC	11	6,7	0,78	8,6	0,68	1,6	11,4
	OSC	11	6,5	0,80	8,5	0,69	1,6	11,5

10.5 Übertragung der Kalibriermodelle auf Impatiens-, Osteospermum- und Poinsettienstecklinge

Tab. 10.14: Kenngrößen (nPLS = Anzahl PLS-Faktoren, SEC = Standardfehler der Kalibrierung, R_C^2 = Bestimmtheitsmaß der Kalibrierung, SECV = Standardfehler der Kreuzvalidierung, R_{CV}^2 = Bestimmtheitsmaß der Kreuzvalidierung, $BIAS_{CV}$ = Systematischer Fehler der Kreuzvalidierung, $SECV(C)$ = SECV korrigiert um den $BIAS_{CV}$ der Kalibriermodelle für die Trockensubstanz, den Protein- und Gesamt-N, die extrahierbaren (eNF) und organischen (oNF) N-Fractionen sowie die Blattkohlenhydrate (Blatt-TNC) unter Nutzung der geprüften Datenvorbehandlungsverfahren getrennt für Chrysanthemen (Ch), Pelargonien (Pe), Impatiens (Im), Osteospermum (Os), Poinsettien (Po) und alle fünf Kulturen gemeinsam (Alle) mit dem gesamten ("Gesamt") bzw. dem reduzierten ("Reduziert") Datensatz

Trockensubstanz in mg/g; Datensatz "Gesamt"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	$SECV(C)$
Ch (n=206)	log 1/R	9	6,6	0,88	6,8	0,87	1,0	6,7
	OBC+NM	6	7,9	0,86	8,0	0,85	1,5	7,9
	SNV	6	6,6	0,88	6,8	0,87	1,5	6,7
	SNV+DT	6	6,6	0,87	6,7	0,86	1,3	6,6
	MSC	6	6,6	0,88	6,7	0,87	1,4	6,6
Pe (n=258)	log 1/R	9	9,8	0,62	10,2	0,59	0,3	10,2
	OBC+NM	6	10,6	0,56	10,8	0,54	-0,3	10,8
	SNV	6	10,0	0,60	10,2	0,59	0,2	10,2
	SNV+DT	6	10,5	0,56	10,7	0,54	0,4	10,7
	MSC	6	10,0	0,60	10,2	0,59	0,2	10,2
Im (n=28)	log 1/R	9	7,6	0,81	7,9	0,79	-5,2	6,0
	OBC+NM	6	7,3	0,70	7,3	0,69	0,0	7,3
	SNV	6	7,1	0,78	7,2	0,77	-3,6	6,3
	SNV+DT	6	7,7	0,78	7,8	0,77	-4,7	6,3
	MSC	6	6,8	0,79	7,0	0,78	-3,1	6,2
Os (n=32)	log 1/R	9	3,8	0,92	3,9	0,91	-0,4	3,9
	OBC+NM	6	4,3	0,89	4,3	0,89	-0,7	4,3
	SNV	6	4,2	0,92	4,2	0,92	-2,3	3,6
	SNV+DT	6	4,8	0,91	4,9	0,91	-3,1	3,8
	MSC	6	4,0	0,92	4,0	0,92	-1,9	3,6
Po (n=30)	log 1/R	9	8,5	0,57	8,8	0,55	-4,1	7,8
	OBC+NM	6	12,1	0,44	12,4	0,43	-7,2	10,1
	SNV	6	11,3	0,55	11,7	0,54	-5,8	10,1
	SNV+DT	6	11,0	0,48	11,1	0,47	-4,5	10,2
	MSC	6	12,0	0,52	12,3	0,52	-6,3	10,5
Alle (n=554)	log 1/R	9	8,3	0,80	8,6	0,79	0,0	8,6
	OBC+NM	6	9,3	0,75	9,5	0,74	0,0	9,5
	SNV	6	8,5	0,79	8,7	0,78	0,0	8,7
	SNV+DT	6	8,8	0,77	9,0	0,76	0,0	9,0
	MSC	6	8,6	0,79	8,7	0,78	0,0	8,7

Fortsetzung von Tab. 10.14

Trockensubstanz in mg/g; Datensatz "Reduziert"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=51)	log 1/R	8	7,9	0,87	8,6	0,84	3,0	8,1
	OBC+NM	7	7,6	0,84	8,2	0,81	2,9	7,7
	SNV	6	9,1	0,79	9,8	0,75	3,6	9,1
	SNV+DT	4	17,0	0,48	17,4	0,43	10,6	13,7
	MSC	6	8,7	0,80	9,2	0,77	3,1	8,6
Pe (n=89)	log 1/R	8	7,6	0,80	8,3	0,76	0,2	8,3
	OBC+NM	7	7,5	0,80	8,0	0,77	0,5	8,0
	SNV	6	7,8	0,78	8,2	0,76	0,3	8,2
	SNV+DT	4	11,9	0,48	12,3	0,45	-0,5	12,3
	MSC	6	7,9	0,77	8,4	0,75	0,3	8,4
Im (n=28)	log 1/R	8	7,3	0,73	7,6	0,70	-2,6	7,1
	OBC+NM	7	5,8	0,83	6,1	0,81	-2,1	5,7
	SNV	6	7,0	0,71	7,2	0,69	-1,0	7,2
	SNV+DT	4	8,7	0,65	9,0	0,63	4,1	7,9
	MSC	6	6,8	0,72	7,1	0,69	-0,2	7,1
Os (n=32)	log 1/R	8	3,7	0,92	3,9	0,91	-0,4	3,9
	OBC+NM	7	3,7	0,94	3,8	0,93	-0,8	3,8
	SNV	6	4,1	0,92	4,4	0,90	-1,3	4,2
	SNV+DT	4	13,5	0,78	13,6	0,76	-10,3	8,9
	MSC	6	3,9	0,92	4,1	0,91	-0,5	4,1
Po (n=30)	log 1/R	8	6,8	0,59	7,3	0,54	-2,6	6,9
	OBC+NM	7	9,0	0,63	9,7	0,59	-3,4	9,1
	SNV	6	8,2	0,62	8,7	0,58	-4,4	7,6
	SNV+DT	4	11,7	0,35	12,1	0,30	-9,3	7,8
	MSC	6	8,8	0,60	9,4	0,56	-5,0	7,9
Alle (n=230)	log 1/R	8	7,0	0,86	7,6	0,83	0,0	7,6
	OBC+NM	7	7,1	0,85	7,6	0,83	0,0	7,6
	SNV	6	7,6	0,83	8,1	0,81	0,0	8,1
	SNV+DT	4	13,0	0,51	13,3	0,49	0,0	13,3
	MSC	6	7,6	0,83	8,0	0,81	0,0	8,0

Fortsetzung von Tab. 10.14

Protein-N in mg/g; Datensatz "Gesamt"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=193)	log 1/R	15	2,4	0,60	2,7	0,50	0,2	2,7
	OBC+NM	14	2,3	0,63	2,6	0,54	0,1	2,5
	SNV	17	2,1	0,67	2,4	0,57	0,1	2,4
	SNV+DT	12	2,5	0,57	2,7	0,47	0,2	2,7
	MSC	15	2,2	0,64	2,6	0,53	0,0	2,6
Pe (n=197)	log 1/R	15	2,1	0,74	2,4	0,66	-0,1	2,4
	OBC+NM	14	2,0	0,76	2,4	0,66	-0,2	2,4
	SNV	17	1,9	0,79	2,2	0,73	-0,1	2,2
	SNV+DT	12	2,3	0,69	2,5	0,62	-0,2	2,5
	MSC	15	2,0	0,77	2,2	0,71	-0,2	2,2
Im (n=28)	log 1/R	15	1,6	0,86	1,9	0,81	0,6	1,8
	OBC+NM	14	2,3	0,85	2,5	0,81	1,7	1,8
	SNV	17	2,0	0,83	2,3	0,77	1,2	2,0
	SNV+DT	12	2,0	0,83	2,2	0,79	1,1	1,9
	MSC	15	2,3	0,84	2,5	0,79	1,7	1,9
Os (n=32)	log 1/R	15	2,9	0,50	3,3	0,33	-0,6	3,3
	OBC+NM	14	2,9	0,50	3,3	0,33	-0,3	3,3
	SNV	17	2,8	0,52	3,3	0,33	-0,3	3,3
	SNV+DT	12	3,2	0,36	3,5	0,24	-0,2	3,5
	MSC	15	2,9	0,50	3,4	0,30	-0,3	3,3
Po (n=30)	log 1/R	15	1,6	0,52	1,7	0,42	-0,3	1,7
	OBC+NM	14	1,9	0,42	2,1	0,32	-0,4	2,1
	SNV	17	1,9	0,40	2,1	0,29	-0,2	2,1
	SNV+DT	12	2,0	0,39	2,2	0,33	-0,6	2,1
	MSC	15	1,9	0,37	2,1	0,27	-0,3	2,1
Alle (n=480)	log 1/R	15	2,2	0,86	2,5	0,82	0,0	2,5
	OBC+NM	14	2,2	0,86	2,5	0,82	0,0	2,5
	SNV	17	2,1	0,88	2,4	0,84	0,0	2,4
	SNV+DT	12	2,4	0,83	2,6	0,80	0,0	2,6
	MSC	15	2,2	0,87	2,5	0,83	0,0	2,5

Fortsetzung von Tab. 10.14

Protein-N in mg/g; Datensatz "Reduziert"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=97)	log 1/R	14	2,2	0,64	2,6	0,47	0,2	2,6
	OBC+NM	12	2,3	0,61	2,7	0,45	0,3	2,7
	SNV	13	2,2	0,62	2,7	0,46	0,4	2,7
	SNV+DT	11	2,3	0,61	2,6	0,47	0,2	2,6
	MSC	13	2,2	0,64	2,7	0,47	0,3	2,6
Pe (n=115)	log 1/R	14	2,1	0,73	2,6	0,60	-0,2	2,6
	OBC+NM	12	2,3	0,67	2,8	0,54	-0,3	2,8
	SNV	13	2,2	0,70	2,7	0,58	-0,2	2,7
	SNV+DT	11	2,3	0,68	2,7	0,57	-0,3	2,7
	MSC	13	2,2	0,71	2,6	0,59	-0,2	2,6
Im (n=28)	log 1/R	14	1,5	0,88	1,8	0,84	0,2	1,8
	OBC+NM	12	1,6	0,85	1,9	0,80	0,3	1,9
	SNV	13	1,7	0,84	1,9	0,81	0,6	1,8
	SNV+DT	11	1,7	0,85	1,9	0,81	0,6	1,8
	MSC	13	1,7	0,86	1,9	0,82	0,7	1,8
Os (n=32)	log 1/R	14	2,5	0,65	3,1	0,43	-0,4	3,0
	OBC+NM	12	2,9	0,56	3,3	0,35	-0,5	3,3
	SNV	13	2,7	0,63	3,2	0,41	-0,6	3,2
	SNV+DT	11	2,9	0,54	3,3	0,34	-0,2	3,3
	MSC	13	2,7	0,61	3,2	0,38	-0,5	3,2
Po (n=30)	log 1/R	14	1,6	0,50	1,8	0,37	0,1	1,8
	OBC+NM	12	1,4	0,62	1,7	0,51	-0,1	1,7
	SNV	13	1,5	0,59	1,8	0,46	-0,2	1,8
	SNV+DT	11	1,6	0,51	1,8	0,42	-0,1	1,8
	MSC	13	1,5	0,57	1,8	0,46	-0,3	1,7
Alle (n=302)	log 1/R	14	2,1	0,87	2,5	0,81	0,0	2,5
	OBC+NM	12	2,2	0,85	2,7	0,79	-0,1	2,7
	SNV	13	2,2	0,86	2,6	0,80	0,0	2,6
	SNV+DT	11	2,2	0,85	2,6	0,80	0,0	2,6
	MSC	13	2,1	0,86	2,6	0,80	0,0	2,6

Fortsetzung von Tab. 10.14

Gesamt-N in mg/g; Datensatz "Gesamt"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=193)	log 1/R	13	4,0	0,67	4,3	0,62	-0,2	4,3
	OBC+NM	13	3,7	0,71	4,2	0,64	0,0	4,2
	SNV	14	3,7	0,72	4,0	0,66	-0,1	4,0
	SNV+DT	11	4,9	0,67	5,1	0,62	2,6	4,3
	MSC	14	3,7	0,72	4,1	0,65	-0,1	4,1
Pe (n=197)	log 1/R	13	4,3	0,56	4,8	0,48	-0,5	4,8
	OBC+NM	13	4,1	0,59	4,7	0,50	-0,4	4,7
	SNV	14	4,1	0,59	4,6	0,52	-0,4	4,6
	SNV+DT	11	3,8	0,61	4,1	0,55	-0,2	4,1
	MSC	14	4,0	0,61	4,6	0,53	-0,3	4,6
Im (n=28)	log 1/R	13	4,1	0,69	4,7	0,60	0,8	4,6
	OBC+NM	13	3,8	0,72	4,3	0,64	0,7	4,3
	SNV	14	3,8	0,72	4,2	0,66	0,3	4,2
	SNV+DT	11	4,4	0,64	4,7	0,57	1,0	4,7
	MSC	14	3,8	0,72	4,2	0,65	0,4	4,2
Os (n=32)	log 1/R	13	5,9	0,65	6,6	0,51	2,9	5,9
	OBC+NM	13	6,4	0,58	7,2	0,39	3,3	6,4
	SNV	14	6,6	0,55	7,2	0,37	3,2	6,5
	SNV+DT	11	11,8	0,36	12,1	0,27	9,9	7,0
	MSC	14	6,7	0,52	7,4	0,33	3,4	6,6
Po (n=30)	log 1/R	13	3,2	0,39	3,5	0,32	0,3	3,5
	OBC+NM	13	2,8	0,44	3,3	0,35	-0,5	3,3
	SNV	14	2,7	0,49	3,2	0,39	-0,4	3,1
	SNV+DT	11	2,6	0,54	2,9	0,45	-0,2	2,9
	MSC	14	2,8	0,43	3,1	0,34	-0,7	3,0
Alle (n=480)	log 1/R	13	4,2	0,83	4,7	0,79	0,0	4,7
	OBC+NM	13	4,1	0,84	4,6	0,80	0,1	4,6
	SNV	14	4,0	0,85	4,5	0,81	0,0	4,5
	SNV+DT	11	5,1	0,80	5,3	0,77	1,7	5,1
	MSC	14	4,0	0,85	4,5	0,81	0,0	4,5

Fortsetzung von Tab. 10.14

Gesamt-N in mg/g; Datensatz "Reduziert"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=97)	log 1/R	13	3,9	0,71	4,5	0,61	-0,4	4,4
	OBC+NM	12	3,9	0,70	4,6	0,59	-0,3	4,6
	SNV	13	3,8	0,72	4,5	0,61	-0,3	4,5
	SNV+DT	10	4,2	0,66	4,6	0,59	-0,3	4,6
	MSC	11	4,0	0,69	4,5	0,61	-0,4	4,5
Pe (n=115)	log 1/R	13	4,0	0,57	4,9	0,45	-0,6	4,9
	OBC+NM	12	4,0	0,58	4,9	0,46	-0,8	4,8
	SNV	13	4,0	0,59	4,7	0,49	-0,7	4,7
	SNV+DT	10	4,4	0,54	5,1	0,45	-1,0	5,0
	MSC	11	4,3	0,56	5,1	0,46	-0,9	5,0
Im (n=28)	log 1/R	13	4,1	0,71	4,7	0,63	0,2	4,7
	OBC+NM	12	3,8	0,72	4,4	0,63	0,3	4,4
	SNV	13	3,8	0,73	4,3	0,65	0,3	4,3
	SNV+DT	10	4,0	0,70	4,6	0,61	0,1	4,6
	MSC	11	3,9	0,71	4,5	0,64	0,0	4,5
Os (n=32)	log 1/R	13	5,0	0,74	5,9	0,56	1,9	5,5
	OBC+NM	12	5,7	0,62	6,6	0,41	2,2	6,2
	SNV	13	5,8	0,63	6,6	0,42	2,2	6,2
	SNV+DT	10	6,1	0,67	6,7	0,51	2,9	6,1
	MSC	11	6,1	0,67	6,8	0,51	3,1	6,0
Po (n=30)	log 1/R	13	3,3	0,39	3,8	0,31	0,7	3,7
	OBC+NM	12	2,9	0,50	3,4	0,39	0,1	3,4
	SNV	13	2,8	0,49	3,3	0,40	0,0	3,3
	SNV+DT	10	3,2	0,47	3,7	0,38	0,1	3,7
	MSC	11	3,0	0,47	3,6	0,38	0,2	3,6
Alle (n=302)	log 1/R	13	4,0	0,86	4,7	0,81	-0,1	4,7
	OBC+NM	12	4,0	0,86	4,8	0,80	-0,1	4,8
	SNV	13	4,0	0,86	4,7	0,81	-0,1	4,7
	SNV+DT	10	4,4	0,84	5,0	0,79	-0,2	5,0
	MSC	11	4,2	0,85	4,9	0,80	-0,1	4,9

Fortsetzung von Tab. 10.14

eNF in mg/g; Datensatz "Gesamt"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=193)	log 1/R	16	2,5	0,67	2,8	0,58	-0,3	2,8
	OBC+NM	15	2,5	0,68	2,8	0,60	-0,3	2,8
	SNV	15	2,4	0,69	2,7	0,62	-0,2	2,7
	SNV+DT	13	2,6	0,64	2,9	0,58	-0,4	2,9
	MSC	15	2,5	0,68	2,8	0,60	-0,4	2,8
Pe (n=197)	log 1/R	16	2,5	0,50	2,9	0,40	0,1	2,9
	OBC+NM	15	2,7	0,46	3,1	0,38	-0,1	3,1
	SNV	15	2,6	0,46	3,1	0,35	-0,1	3,1
	SNV+DT	13	2,9	0,42	3,3	0,35	-0,1	3,3
	MSC	15	2,6	0,48	3,0	0,40	-0,1	3,0
Im (n=28)	log 1/R	16	3,2	0,56	3,7	0,47	-1,5	3,3
	OBC+NM	15	3,0	0,58	3,3	0,51	-1,2	3,0
	SNV	15	3,0	0,58	3,1	0,53	-1,3	2,9
	SNV+DT	13	2,9	0,56	3,1	0,51	-1,2	2,9
	MSC	15	3,0	0,59	3,3	0,53	-1,3	3,0
Os (n=32)	log 1/R	16	4,0	0,50	4,6	0,37	3,0	3,4
	OBC+NM	15	4,7	0,40	5,3	0,27	3,7	3,7
	SNV	15	4,6	0,35	5,1	0,26	3,4	3,8
	SNV+DT	13	5,1	0,39	5,5	0,29	4,2	3,6
	MSC	15	4,9	0,36	5,4	0,25	3,8	3,8
Po (n=30)	log 1/R	16	2,2	0,17	2,4	0,11	0,1	2,4
	OBC+NM	15	2,3	0,18	2,7	0,11	-0,1	2,7
	SNV	15	2,3	0,15	2,7	0,07	0,1	2,7
	SNV+DT	13	2,3	0,17	2,7	0,11	0,0	2,7
	MSC	15	2,3	0,17	2,7	0,09	-0,1	2,7
Alle (n=480)	log 1/R	16	2,6	0,82	3,0	0,76	0,0	3,0
	OBC+NM	15	2,8	0,80	3,1	0,74	0,0	3,1
	SNV	15	2,7	0,81	3,1	0,75	0,0	3,1
	SNV+DT	13	2,9	0,77	3,3	0,72	0,0	3,3
	MSC	15	2,8	0,80	3,1	0,75	0,0	3,1

Fortsetzung von Tab. 10.14

eNF in mg/g; Datensatz "Reduziert"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=97)	log 1/R	16	2,6	0,68	3,1	0,56	-0,5	3,0
	OBC+NM	13	2,7	0,65	3,2	0,53	-0,3	3,2
	SNV	15	2,5	0,71	3,0	0,58	-0,3	3,0
	SNV+DT	11	3,0	0,57	3,5	0,47	-0,4	3,4
	MSC	14	2,6	0,67	3,2	0,54	-0,4	3,2
Pe (n=115)	log 1/R	16	2,5	0,46	3,0	0,35	0,0	3,0
	OBC+NM	13	2,9	0,34	3,4	0,24	-0,3	3,4
	SNV	15	2,6	0,42	3,2	0,29	-0,1	3,2
	SNV+DT	11	3,1	0,30	3,5	0,23	-0,4	3,5
	MSC	14	2,8	0,40	3,3	0,30	-0,1	3,3
Im (n=28)	log 1/R	16	3,0	0,60	3,6	0,48	-1,2	3,4
	OBC+NM	13	2,8	0,58	3,3	0,44	-0,9	3,2
	SNV	15	2,8	0,63	3,3	0,51	-1,2	3,1
	SNV+DT	11	3,2	0,44	3,6	0,35	-0,9	3,5
	MSC	14	2,8	0,61	3,2	0,51	-1,1	3,0
Os (n=32)	log 1/R	16	3,4	0,52	4,1	0,37	2,2	3,4
	OBC+NM	13	4,0	0,40	4,6	0,27	2,6	3,8
	SNV	15	4,0	0,37	4,6	0,26	2,5	3,9
	SNV+DT	11	4,2	0,44	4,7	0,34	3,1	3,5
	MSC	14	4,1	0,36	4,7	0,25	2,7	3,9
Po (n=30)	log 1/R	16	2,2	0,22	2,5	0,14	0,0	2,5
	OBC+NM	13	2,6	0,14	2,9	0,08	-0,1	2,9
	SNV	15	2,3	0,19	2,8	0,07	-0,2	2,8
	SNV+DT	11	2,5	0,20	2,8	0,15	-0,1	2,8
	MSC	14	2,4	0,15	2,8	0,09	-0,3	2,7
Alle (n=302)	log 1/R	16	2,6	0,86	3,2	0,80	0,0	3,2
	OBC+NM	13	2,9	0,83	3,4	0,76	0,0	3,4
	SNV	15	2,7	0,85	3,3	0,78	0,0	3,3
	SNV+DT	11	3,1	0,80	3,6	0,74	-0,1	3,6
	MSC	14	2,8	0,84	3,4	0,77	0,0	3,4

Fortsetzung von Tab. 10.14

oNF in mg/g; Datensatz "Gesamt"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=193)	log 1/R	13	3,4	0,67	3,7	0,62	-0,1	3,7
	OBC+NM	13	3,2	0,71	3,6	0,64	0,0	3,6
	SNV	13	3,3	0,69	3,6	0,64	0,0	3,6
	SNV+DT	12	3,3	0,69	3,6	0,63	0,1	3,6
	MSC	13	3,3	0,69	3,6	0,63	0,1	3,6
Pe (n=197)	log 1/R	13	3,7	0,62	4,1	0,54	-0,4	4,1
	OBC+NM	13	3,5	0,63	3,9	0,57	-0,3	3,9
	SNV	13	3,5	0,65	3,9	0,59	-0,4	3,9
	SNV+DT	12	3,5	0,65	3,9	0,58	-0,3	3,9
	MSC	13	3,5	0,65	3,9	0,57	-0,3	3,9
Im (n=28)	log 1/R	13	3,5	0,72	4,0	0,63	0,5	4,0
	OBC+NM	13	3,4	0,75	3,8	0,67	0,6	3,8
	SNV	13	3,5	0,71	3,9	0,64	0,2	3,9
	SNV+DT	12	3,4	0,73	3,9	0,65	0,3	3,8
	MSC	13	3,5	0,72	3,8	0,65	0,2	3,8
Os (n=32)	log 1/R	13	4,8	0,51	5,2	0,39	2,0	4,8
	OBC+NM	13	5,0	0,52	5,4	0,38	2,2	5,0
	SNV	13	5,2	0,45	5,6	0,35	2,4	5,1
	SNV+DT	12	5,2	0,50	5,8	0,32	2,5	5,2
	MSC	13	5,1	0,50	5,4	0,40	2,2	5,0
Po (n=30)	log 1/R	13	2,8	0,49	3,1	0,41	0,4	3,1
	OBC+NM	13	2,6	0,57	2,9	0,46	-0,4	2,9
	SNV	13	2,3	0,61	2,7	0,50	-0,2	2,7
	SNV+DT	12	2,6	0,54	3,0	0,46	-0,8	2,9
	MSC	13	2,6	0,59	2,9	0,50	-0,5	2,9
Alle (n=480)	log 1/R	13	3,6	0,83	4,0	0,79	0,0	4,0
	OBC+NM	13	3,5	0,84	3,8	0,80	0,0	3,8
	SNV	13	3,5	0,84	3,8	0,80	0,0	3,8
	SNV+DT	12	3,5	0,84	3,9	0,80	0,0	3,9
	MSC	13	3,5	0,84	3,8	0,80	0,0	3,8

Fortsetzung von Tab. 10.14

oNF in mg/g; Datensatz "Reduziert"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=97)	log 1/R	12	3,3	0,71	3,7	0,62	-0,3	3,7
	OBC+NM	11	3,2	0,72	3,7	0,63	-0,1	3,7
	SNV	11	3,2	0,73	3,7	0,64	-0,6	3,6
	SNV+DT	11	3,1	0,73	3,6	0,64	-0,2	3,6
	MSC	12	3,1	0,74	3,5	0,65	-0,2	3,5
Pe (n=115)	log 1/R	12	3,6	0,60	4,4	0,48	-0,5	4,4
	OBC+NM	11	3,6	0,62	4,2	0,52	-0,6	4,2
	SNV	11	3,7	0,59	4,3	0,51	-0,5	4,3
	SNV+DT	11	3,4	0,65	4,1	0,55	-0,6	4,0
	MSC	12	3,5	0,64	4,2	0,53	-0,5	4,1
Im (n=28)	log 1/R	12	3,6	0,71	4,1	0,63	0,2	4,1
	OBC+NM	11	3,4	0,73	4,0	0,63	0,0	4,0
	SNV	11	3,8	0,67	4,2	0,60	0,1	4,2
	SNV+DT	11	3,3	0,75	3,8	0,68	0,4	3,8
	MSC	12	3,4	0,74	3,9	0,66	-0,1	3,9
Os (n=32)	log 1/R	12	4,3	0,63	4,8	0,49	1,5	4,6
	OBC+NM	11	4,5	0,73	5,0	0,56	1,7	4,7
	SNV	11	5,5	0,44	5,9	0,32	2,8	5,2
	SNV+DT	11	4,7	0,64	5,2	0,44	1,7	5,0
	MSC	12	4,5	0,65	5,0	0,50	1,6	4,7
Po (n=30)	log 1/R	12	3,3	0,43	3,7	0,36	0,6	3,6
	OBC+NM	11	2,3	0,58	2,8	0,48	-0,4	2,8
	SNV	11	3,0	0,56	3,5	0,48	0,3	3,4
	SNV+DT	11	2,3	0,61	2,8	0,49	-0,1	2,8
	MSC	12	2,6	0,61	3,0	0,52	0,1	3,0
Alle (n=302)	log 1/R	12	3,5	0,84	4,1	0,79	-0,1	4,1
	OBC+NM	11	3,4	0,85	4,0	0,80	-0,1	4,0
	SNV	11	3,7	0,83	4,2	0,78	0,0	4,2
	SNV+DT	11	3,4	0,86	3,9	0,81	-0,1	3,9
	MSC	12	3,4	0,86	3,9	0,81	-0,1	3,9

Fortsetzung von Tab. 10.14

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g; Datensatz "Gesamt"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=184)	log 1/R	13	7,6	0,82	8,1	0,79	-0,3	8,1
	OBC+NM	12	7,1	0,84	7,7	0,81	-0,2	7,7
	SNV	12	7,4	0,83	8,0	0,79	0,0	8,0
	SNV+DT	12	6,8	0,85	7,5	0,82	0,2	7,5
	MSC	12	7,3	0,83	7,9	0,80	-0,1	7,9
Pe (n=197)	log 1/R	13	5,8	0,81	6,6	0,75	-0,4	6,6
	OBC+NM	12	5,6	0,80	6,3	0,75	-0,2	6,3
	SNV	12	5,5	0,80	6,2	0,76	-0,1	6,2
	SNV+DT	12	5,4	0,81	6,2	0,76	-0,3	6,2
	MSC	12	5,6	0,80	6,3	0,75	-0,2	6,3
Im (n=28)	log 1/R	13	7,3	0,88	7,9	0,84	2,2	7,6
	OBC+NM	12	6,8	0,90	7,6	0,86	0,8	7,6
	SNV	12	7,6	0,84	8,4	0,79	0,0	8,4
	SNV+DT	12	7,9	0,85	8,6	0,82	0,7	8,5
	MSC	12	7,2	0,87	7,9	0,83	0,8	7,9
Os (n=32)	log 1/R	13	8,2	0,26	9,0	0,14	0,8	9,0
	OBC+NM	12	8,0	0,29	9,2	0,12	1,3	9,1
	SNV	12	8,8	0,17	9,7	0,07	-0,4	9,7
	SNV+DT	12	8,6	0,18	9,8	0,07	0,3	9,8
	MSC	12	8,0	0,28	9,1	0,15	1,3	9,0
Po (n=30)	log 1/R	13	5,6	0,65	6,2	0,57	1,1	6,1
	OBC+NM	12	7,3	0,58	8,2	0,53	0,2	8,2
	SNV	12	7,1	0,62	8,0	0,55	0,5	7,9
	SNV+DT	12	7,0	0,60	7,8	0,54	0,1	7,8
	MSC	12	7,0	0,59	7,9	0,52	-0,3	7,9
Alle (n=471)	log 1/R	13	6,8	0,78	7,4	0,74	0,0	7,4
	OBC+NM	12	6,5	0,80	7,3	0,75	0,0	7,3
	SNV	12	6,8	0,78	7,4	0,74	0,0	7,4
	SNV+DT	12	6,5	0,80	7,2	0,75	0,0	7,2
	MSC	12	6,6	0,79	7,4	0,75	0,0	7,4

Fortsetzung von Tab. 10.14

Summe lösliche Zucker und Stärke (TNC) in mg/g; Datensatz "Reduziert"								
Datensatz	Datenvorbehandlung	nPLS	SEC	R_C^2	SECV	R_{CV}^2	$BIAS_{CV}$	SECV(C)
Ch (n=92)	log 1/R	12	8,5	0,74	9,5	0,67	-0,9	9,5
	OBC+NM	10	8,5	0,73	9,4	0,67	-0,5	9,4
	SNV	10	9,2	0,69	10,0	0,63	0,2	10,0
	SNV+DT	10	7,8	0,78	9,0	0,70	-0,5	9,0
	MSC	11	7,8	0,78	8,9	0,71	-0,5	8,9
Pe (n=115)	log 1/R	12	5,7	0,79	7,1	0,69	0,0	7,1
	OBC+NM	10	5,5	0,79	6,2	0,74	0,2	6,2
	SNV	10	5,8	0,76	6,6	0,70	0,6	6,6
	SNV+DT	10	5,6	0,78	7,1	0,67	0,2	7,1
	MSC	11	5,5	0,79	6,5	0,72	0,0	6,5
Im (n=28)	log 1/R	12	6,8	0,87	7,8	0,81	0,1	7,8
	OBC+NM	10	7,2	0,86	8,0	0,82	-0,7	8,0
	SNV	10	7,6	0,85	8,3	0,81	-2,6	7,9
	SNV+DT	10	7,1	0,88	8,0	0,83	-0,6	8,0
	MSC	11	6,8	0,87	7,7	0,83	-0,1	7,7
Os (n=32)	log 1/R	12	6,7	0,50	7,6	0,35	1,2	7,5
	OBC+NM	10	7,2	0,40	8,0	0,29	1,1	7,9
	SNV	10	7,2	0,41	7,9	0,31	0,7	7,9
	SNV+DT	10	7,8	0,34	8,9	0,18	2,0	8,7
	MSC	11	6,8	0,48	7,7	0,34	1,5	7,5
Po (n=30)	log 1/R	12	5,7	0,64	6,2	0,58	1,1	6,1
	OBC+NM	10	6,4	0,67	7,0	0,62	0,5	7,0
	SNV	10	6,1	0,64	6,8	0,57	-0,2	6,8
	SNV+DT	10	6,2	0,64	6,7	0,60	1,0	6,6
	MSC	11	6,7	0,58	7,4	0,51	0,1	7,4
Alle (n=297)	log 1/R	12	6,8	0,75	7,9	0,67	0,0	7,9
	OBC+NM	10	6,9	0,74	7,7	0,68	0,0	7,7
	SNV	10	7,3	0,71	8,1	0,65	0,1	8,1
	SNV+DT	10	6,8	0,76	7,9	0,67	0,2	7,9
	MSC	11	6,6	0,77	7,6	0,69	0,0	7,6

Curriculum Vitae

Persönliche Daten

Name	Dieter Lohr
Geburtstag	10. Januar 1977
Geburtsort	Ravensburg

Berufliche Tätigkeiten

März 2006 – März 2017	Hochschule Weihenstephan-Triesdorf 85350 Freising, Wissenschaftlicher Mitarbeiter
März 2004 – September 2004	Centro Jardin Botánico de Mérida Mérida, Venezuela, Gärtnergehilfe
August 2002 – Februar 2003	Baumschule Conrad Appel, GmbH 64295 Darmstadt, Gärtnergehilfe
März 2001 – September 2001 & August 2000 – Oktober 2000	Gärtnerei – Blumenhaus Haug 88094 Oberteuringen, Gärtnergehilfe

Ausbildung und Studium

Oktober 2001 – Februar 2006	Fachhochschule Weihenstephan 85350 Freising Diplomstudiengang Gartenbau, Abschluss Dipl.-Ing. (FH) Diplomarbeit: Eignung der Nah-Infrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Bestimmung des Proteinstickstoffs und des Bewurzelungspotentials an Kopfstecklingen von Chrysanthemen und Poinsettien
Oktober 2000 – Februar 2001	Technische Universität München 85350 Freising Studiengang Gartenbauwissenschaften
September 1998 – August 2000	Gärtnerei – Blumenhaus Haug 88094 Oberteuringen Gärtnerlehre, Fachrichtung Zierpflanzenbau, Abschluss Gärtnergehilfe

Publikationen

Begutachtete Beiträge in Zeitschriften und Tagungsbänden

- Lohr, D., Tillmann, P., Druège, U., Zerche S., Rath, T. und Meinken, E. (2017): Non-destructive determination of carbohydrate reserves in leaves of ornamental cuttings by near-infrared spectroscopy (NIRS) as a key indicator for quality assessments. *Biosystems Engineering* 158, 51-63.
- Lohr, D., Wöck, C. und Meinken, E. (2017): Use of ergosterol as an indicator for colonization of peat-based growing media by saprophytic fungi. *European Journal of Horticultural Science* 82(1), 3-11.
- Lohr, D., Wöck, C. und Meinken, E. (2017): Pyrolytic combustion analysis of carbon – A new approach for characterizing growing media. *Acta Horticulturae* (im Druck).
- Lohr, D., Wöck, C., von Tucher, S. und Meinken, E. (2017): Analysing carbon fraction of growing media by near-infrared spectroscopy. *Acta Horticulturae* (im Druck).
- Meinken, E, Lohr, D. und Wöck, C. (2017): Colonization of growing media by saprophytic fungi - Importance of carbon and nitrogen fractions. *Acta Horticulturae* (im Druck).
- Neumaier, D., Lohr, D., Voßeler, R., Girmann, S., Kolbinger, S. und Meinken, E. (2017): Hydrochars as peat substitute in growing media for organically grown potted herbs. *Acta Horticulturae* (in Druck).
- Lohr, D., Tillmann, P., Zerche S., Druège, U., Rath, T. und Meinken, E. (2016): Non-destructive measurement of nitrogen status of leafy ornamental cuttings by near infrared reflectance spectroscopy (NIRS) for assessment of rooting capacity. *Biosystems Engineering* 148, 157–167.
- Link, F., Lohr, D. und Meinken, E. (2015): Compost as phosphorus fertilizer for organically grown potted herbs – Characterisation of P availability. *DGG-Proceedings*, Vol. 5(2), 1-5.
- Lohr, D., Zerche, S. Druège, U. und Meinken, E. (2015): Near-infrared spectroscopy: A promising sensor technique for quality assessment of ornamental cuttings. *Acta Horticulturae* 1099, 71-78.
- Seibold, G., Lohr, D. und Meinken, E. (2015): Waste sheep wool – an alternative nitrogen source for organically grown potted herbs? *DGG-Proceedings* Vol. 5(7), 1-5.
- Lohr, D., Meinken, E. Zerche, S. Druège und U. Tillmann, P. (2013): Rapid and non-destructive measurement of nitrogen status in ornamental cuttings by near infrared spectroscopy as part of a quality assessment system in supply chains of young plant production. *Acta Horticulturae* 970, 121-128.

Taylor, M.D. und Lohr, D. (2013): Effects of ammonium to nitrate ratios on substrate pH shifts during growth of *Calibrachoa* with alkaline water. *Acta Horticulturae* 1014, 301-304.

Amberger-Ochsenbauer, S., Taylor, M.D., Lohr, D. und Meinken, E. (2012): Effect of increasing ratios of urea-N in the nutrient solution on growth of pelargonium (*Pelargonium x hortorum*). *Acta Horticulturae* 938, 243-250.

Neumaier, D., Lohr, D. und Meinken, E. (2012): An overview of pH-management in substrates during cultivation of pot plants. *Acta Horticulturae* 927, 1013-1020.

Lohr, D., Tillmann, P., Zerche, S., Drüge, U. und Meinken, E. (2011): Nutzung der Nah-Infrarot-Spektroskopie (NIRS) zur zerstörungsfreien Analyse von Stickstofffraktionen in Zierpflanzenstecklingen. *DGG-Proceedings Vol. 1(4)*, 1-5.

Vorträge auf wissenschaftlichen Tagungen

Lohr, D., C. Wöck und Meinken, E. (2015): Pyrolytic combustion analysis of carbon – A new approach for characterizing growing media. *SusGro 2015 - International Symposium on Growing Media, Composting and Substrate Analysis*, 07.-11.09.2015 in Wien.

Lohr, D., Zerche, S., Druege, U. und Meinken, E. (2014): Near infrared spectroscopy as a rapid tool to predict rooting capacity depending on nitrogen and carbohydrate status of cuttings. *7th International Symposium on Root Development*, 15.-19.09.2014 in Weimar.

Lohr, D., Zerche, S., Druege, U. und Meinken, E. (2013): Einsatz der Nah-Infrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Bestimmung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen. *48. Gartenbauwissenschaftliche Jahrestagung*, 27.02.-02.03.2013 in Bonn.

Lohr, D., Zerche, S., Druege, U. und Meinken, E. (2012): Einsatz der Nah-Infrarot-Spektroskopie zur zerstörungsfreien Bestimmung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen. *GKL-Jahrestagung*, 11.-12.09.2012 in Osnabrück.

Posterpräsentationen und Beiträge in Tagungsbänden

Lohr, D., Tillmann, P. und Meinken, E. (2016): Verwendung von Agar-Platten als Kontrollproben in der Nahinfrarotspektroskopie 128. *VDLUFA-Kongress*, 13.-16.09.2016 in Rostock, *VDLUFA-Schriftenreihe* 73, S. 617-624 + Poster

Lohr, D., Tillmann, P., Zerche, S., Druege, U. und Meinken, E. (2016): Multi-species near infrared calibration models for predicting nitrogen status of ornamental cuttings – strategies for scope extension. *SHE 2016 - III International Symposium on Horticulture in Europe*, 17-21.10.2016 in Chania/Kreta (Poster).

Meinken, E., Burmann, J. und Lohr, D. (2016): Characterization of nitrogen and carbon pools of organic fertilizers to predict their nitrogen release. *SHE 2016 - III International Symposium on Horticulture in Europe*, 17-21.10.2016 in Chania/Kreta (Poster).

- Ebertseder, F., Homeier, E., Lohr, D., Fischer-Kaiser, K., Henkelmann, G., Haas, Ch., von Tucher, S. und Heuwinkel, H. (2015): Prüfung alternativer Labormethoden mit dem Ziel der Bewertung der N-Düngewirkung organischer Dünger. 127. VDLUFA-Kongress, 15.-18.09.2015 in Göttingen; VDLUFA-Schriftenreihe 71, S. 228-237.
- Lohr, D. und Meinken, E. (2015): Qualitätssicherung in der Analytik – Verdeckter Ringversuch mit Kultursubstraten. 127. VDLUFA-Kongress, 15.-18.09.2015 in Göttingen; VDLUFA-Schriftenreihe 71, 753-759 + Poster.
- Lohr, D. und Meinken, E. (2015): Sorptionsisothermen – Ein geeignetes Verfahren zur Charakterisierung des Phosphatspeichervermögens von Biokohlen? 127. VDLUFA-Kongress, 15.-18.09.2015 in Göttingen; VDLUFA-Schriftenreihe 71, 760-767 + Poster.
- Lohr, D., Wöck, C. und Meinken, E. (2015): Use of ergosterol as an indicator for colonization of peat based growing media by saprophytic fungi. SusGro 2015 - International Symposium on Growing Media, Composting and Substrate Analysis, 07.-11.09.2015 in Wien (Poster).
- Meinken, E., Lohr, D. und Wöck, C. (2015): Significance and determination of carbon and nitrogen fractions in peat to predict colonisation with saprophytic fungi. 50. Gartenbauwissenschaftliche Jahrestagung und Internationales WeGa-Symposium, 24.-28.02.2015 in Freising (Poster).
- Obermaier, S., Lohr, D., Meinken, E., Beck, R. und Heißenhuber, A. (2014): Einfluss von HTC- und Pyrolysekohle auf die Nährstoffverfügbarkeit im Boden. 49. Gartenbauwissenschaftliche Jahrestagung, 05.-08.03.2014 in Dresden (Poster).
- Obermaier, S., Lohr, D., Meinken, E., Beck, R. und Heißenhuber, A. (2014): Nährstoffanreicherung von Biokohlen - Einfluss von Anreicherungslösung und -dauer. 49. Gartenbauwissenschaftliche Jahrestagung, 05.-08.03.2014 in Dresden (Poster).
- Lohr, D., Tillmann, P., Zerche, S., Drüge, U. und Meinken, E. (2011): Nah-Infrarot-Spektroskopie als Basis einer präzisierten N-Düngung bei der Produktion von Zierpflanzenstecklingen. Gemeinsame Tagung der Deutschen Gesellschaft für Pflanzenernährung e. V. und der Gesellschaft für Pflanzenbauwissenschaften e. V., 27.-29.09.2011 in Kiel; Mitt. Ges. Pflanzenbauwiss. 23, 225 + Poster.
- Mata, D.A., Lohr, D. und Meinken E. (2011): Estudio de síntomas de déficit y toxicidad de micronutrientes en *Calibrachoa* sp.. Congreso Argentino de Horticultura., 27.30.10.2011 in Buenos Aires (Poster).
- Lohr, D., Konnemann, H., Bucher, A. und Meinken, E. (2009): Möglichkeiten zur schnellen Vor-Ort-Bestimmung des Mineralstickstoffs im Boden durch ein vereinfachtes Extraktionsverfahren und die Nutzung von gerätegestützten Nmin-Schnelltestsystemen. 45. Gartenbauwissenschaftliche Jahrestagung, 25.02.-28.02.2009 in Berlin (Poster).

Lohr, D., Tillmann, P., Zerche, S., Meinken, E., Röber, R., und Nast, D. (2007): Einsatz der Nah-Infrarot-spektroskopie zur Bestimmung des Stickstoffgehaltes in frischen Zierpflanzenstecklingen. 118. VDLUFA-Kongress, 19.-22.09.2006 in Freiburg; VDLUFA-Schriftenreihe 62, 462-468 + Poster.

Tillmann, P., Lohr, D., Röber, R., Meinken, E., Nast, D. und Zerche, S. (2007): Usage of NIRS to determine the N content in fresh cuttings of ornamental plants. 13th International Conference on Near Infrared Spectroscopy, 15.06.-21.06.07 in Umeå-Vasa (Poster).

Veröffentlichungen in praxisorientierten Zeitschriften

Lohr, D. und Meinken, E. (2015): Verbesserung der pflanzenbaulichen Eignung von HTC-Kohle durch eine Co-Kompostierung. Versuche im deutschen Gartenbau - Gemüsebau, ePaper.

Lohr, D., Voßeler, R., Girmann, S. und Meinken, E. (2014): Biokohle als Torfersatz in Kultursubstraten für den Topfkräuteranbau. Versuche im deutschen Gartenbau - Gemüsebau, ePaper.

Lohr, D., Richter, D. und Meinken, E. (2014): Siebrückstände aus der Faserhanfaufbereitung als Torfersatzstoff. Versuche im deutschen Gartenbau - Zierpflanzenbau, ePaper.

Lohr, D., Meinken, E., Zerche, S. und Drüge, U. (2013): Pelargonien-Stecklinge: Die innere Qualität im Blick. Gärtnerbörse 113, 48-51.

Lohr, D., Zerche, S., Druege, U. und Meinken, E. (2012): Nah-Infrarot-Spektroskopie: Beurteilung der Qualität von Zierpflanzenstecklingen. Monatsschrift 11/2012, 690-691.

Lohr, D., Eilers, H. und Meinken, E. (2010): Die Wiederbenetzbarkeit von Kultursubstraten. Gartenbau Report 11/2010, 30-31.

Taylor, M.D. und Lohr, D. (2010): Addressing pH Problems - Fine-tuning your substrate pH is all about the nitrogen. Greenhouse Grower 01/2010, 42-48.

Neumaier, D., Lohr, D. und Meinken, E. (2009): Den pH-Wert steuern. DeGa 02/2009, 34-37.

Lohr, D. und Meinken, E. (2008): Es geht auch ohne Torf. DeGa 43/2008, 15-17.

Lohr, D. und Meinken, E. (2007): Xylit als Torfersatz. DeGa 43/2007, 18-19.

Danksagung

Die experimentellen Untersuchungen zur vorliegenden Arbeit erfolgten im Rahmen des aus Mitteln des Bundesministeriums für Landwirtschaft und Ernährung (BMEL) über die Bundesanstalt für Landwirtschaft und Ernährung (BLE) im Rahmen des Programms "Innovationsförderung" unterstützten Forschungsprojektes: "Einsatz der Nahinfrarotspektroskopie zur zerstörungsfreien Beurteilung des Bewurzelungspotentials von Zierpflanzenstecklingen".

Herrn Prof. Dr. Thomas Rath, dem Leiter des Labors für Biosystemtechnik an der Hochschule Osnabrück, danke ich für die Betreuung der Dissertation und die kritische Begleitung während ihrer Anfertigung. Mein besonderer Dank gilt Frau Dr. Elke Meinken, der Leiterin der Fachgruppe Pflanzenernährung am Institut für Gartenbau der Hochschule Weihenstephan-Triesdorf: Ohne ihre Unterstützung wäre die vorliegende Arbeit nie zu Stande gekommen. Des Weiteren danke ich Frau Prof. Dr. Traud Winkelmann und Herrn Prof. Dr. Edgar Maiß für die Übernahme des Korreferates bzw. die Leitung der Prüfungskommission.

Für die hervorragende Zusammenarbeit im Rahmen des Forschungsprojektes sowie die vielen hilfreichen Hinweise und anregenden Diskussionen danke ich Herrn Dr. Siegfried Zerche und Herrn Dr. Uwe Drüge vom Institut für Gemüse- und Zierpflanzenbau (IGZ) in Erfurt, ebenso wie Herrn Dr. Peter Tillmann von der VDLUFA Qualitätssicherung NIRS GmbH in Kassel. Des Weiteren gilt mein Dank Herrn Michel LiPuma von der Fa. Dümmer, Herrn Dr. Wilfried Pagel von der Fa. Endisch und Herrn Andreas Niederländer von der Fa. Kientzler für ihre engagierte Mitarbeit im Rahmen des Forschungsprojektes.

Abschließend möchte ich mich bei den Mitarbeitern des IGZ in Erfurt für die sorgfältige Durchführung der Stickstoff- und Kohlenhydratanalysen sowie bei meinen Kollegen am Institut für Gartenbau der Hochschule Weihenstephan-Triesdorf sowohl für die Unterstützung bei den pflanzenbaulichen Versuchen und NIRS Messungen als auch für die vielen Anregungen und Diskussionen bedanken.