

Zur Visualisierung von Umweltdaten in Umweltinformationssystemen: ein Modul digitaler Basiskarten für das brandenburgische Landesumweltinformationssystem LUIS-BB

H. Asche

Zusammenfassung

Der Beitrag zeigt am Beispiel des brandenburgischen Landesumweltinformationssystems Möglichkeiten und Potential der Visualisierung digitaler Umweltdaten in Umweltinformationssystemen. Durch Bereitstellung eines Moduls digitaler Basiskarten wird die adäquate kartographische Wiedergabe sowie die visuelle Analyse und Kommunikation punkt-, linien- und flächenhafter Umweltdaten signifikant verbessert. Dies gilt insbesondere für die gleichermaßen intuitive und effiziente Erschließung und Nutzung komplexer UIS. Beim gegenwärtigen Entwicklungsstand besitzen die netzbasierten digitalen Basiskarten einige kartographische Modellierungsdefizite, die im wesentlichen aus der Präsentation der ungeneralisierten Geobasisdaten rühren. Sie haben gegenüber der klassischen Papierkarte allerdings den entscheidenden Vorzug der Datenbankintegration, wodurch die Präsentationskarten aus UIS eine wesentlich größere Nutzungstiefe gewinnen.

Summary

During the last decade GIS-based environmental information systems have developed into powerful instruments of documentation, monitoring and analysis of digital environmental data. Unlike maps, a large number of system however lack effective cartographic visualisation of geocoded environmental information limiting successful visual communication, intuitive cognition and efficient exploration of the spatial patterns underlying these data. Combined with competent cartographic data visualisation and presentation options the development of a set of digital base maps for the graphic display and visual analysis of environmental data can help to overcome these shortcomings thus significantly enhancing the application potential of environmental information systems. The design and visualisation of a net-based topographic base map module generated for the environmental information system (LUIS-BB) of the German federal state of Brandenburg is dealt with in this paper facilitating effective visualisation and analysis of geocoded environmental data.

Projektbeschreibung

Visualisierung raumbezogener Umweltdaten

Als spezifische Ausprägung von Geoinformationssystemen (GIS) haben sich regionale Umweltinformationssysteme (UIS) wie das brandenburgische Landesumweltinformationssystem (LUIS-BB) im vergangenen Jahrzehnt in Deutschland als leistungsfähige digitale Instrumente der raumbezogenen Dokumentation, Information und Planung der Umwelt und ihrer Teilsysteme etabliert. UIS sind damit an die Seite analoger Karten getreten, die – sei es als topographische Basis, sei es als thematische Darstellung – in allen raumbezogenen Umweltdisziplinen einen traditionell hohen Stellenwert als Präsentations-, Arbeits- und Forschungsmittel besitzen. Der besondere Stellenwert von Karten für die Analyse raumbezogener Umweltdaten resultiert aus der häufig unbewusst genutzten Tatsache, dass sie als einziges Speichermedium räumliche Daten mittels graphischer Symbole nicht nur in ihren Lage- und thematischen Merkmalen, sondern auch in ihrer räumlichen Anordnung, ihren topologisch-chorographischen Beziehungen dokumentieren. Wegen dieser besonderen Eigenschaft werden Karten im Übrigen auch als analoge Geoinformationssysteme bezeichnet (Wood 1994).

Im Gegensatz zur klassischen Karte verfügen UIS häufig nicht über geeignete Visualisierungsmöglichkeiten raumbezogener Umweltdaten. Hierdurch wird ihre breite Anwendung in raumbezogenen Umweltfragen erschwert (Monmonier/ Johnson 1991). Denn die visuelle Auswertung und Kommunikation räumlicher Sachverhalte durch die Kartengraphik ermöglicht Auswertungen und Erkenntnisse über räumliche Zusammenhänge, die mit grafikfreien Analyseverfahren nicht erreicht werden können. Im Hinblick auf die wirksame verwaltungsinterne wie öffentliche Nutzung von Umweltinformationen kommt daher einem einfachen, effizienten Zugang zu den gespeicherten Umweltdaten besondere Bedeutung zu. Klassisch-analoge topographische und thematische Karten ermöglichen einen solchen Zugang, denn als graphisch abstrahierte Modelle der Umwelt nutzen Karten den „optischen Kanal“ zur komprimierten Vermittlung raumbezogener Informationen. Wie wegweisende Untersuchungen zur Informationsverarbeitung von Massendaten zeigen (McCormick et al. 1987), stellt diese als „Visualisierung“ bezeichnete graphische Informationspräsentation ein entscheidendes Mittel für das Verstehen komplexer Datenzusammenhänge dar. Folglich besitzt die auf dem Stand der Informationstechnik basierende kartographische Modellierung raumbezogener Umweltdaten eine Schlüsselstellung für die intuitive und wirksame Extraktion und Auswertung von Umweltinformationen.

Modellierung der Elementartopographie

Wie bei anderen UIS fehlte bislang auch im LUIS-BB die Möglichkeit der raumbezogenen Analyse und Präsentation unter Einbeziehung kartographischer Analyse- und Visualisierungstechniken. Das brandenburgische UIS wird seit Beginn der neunziger Jahre mit dem Ziel aufgebaut, die Daten aller in Brandenburg verteilten Umweltinformationen zu vernetzen und der Verwaltung wie der Öffentlichkeit zugänglich zu machen. Bislang war die kartographische Präsentation von Umweltdaten auf kleinmaßstäbige Flächenkartogramme mit der Gemeinde als kleinste darstellbarer Raumeinheit begrenzt.

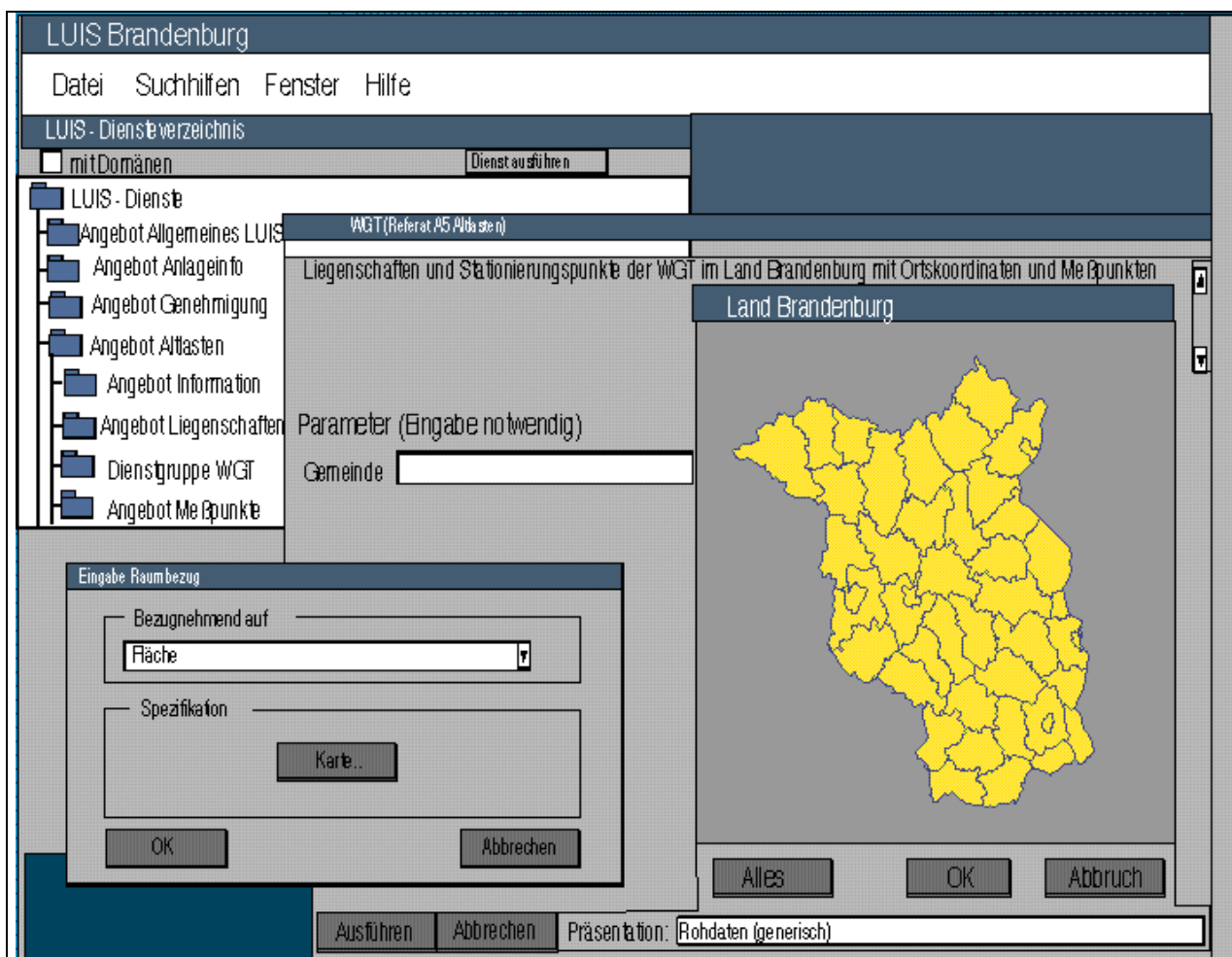


Abb. 1 Dienstangebot LUIS-BB

Positionsbezogene Umweltdaten, z.B. Altlasten oder Immissionsmessungen, wurden inadäquat als Flächeninformation wiedergegeben. Durch Verknüpfung der Konzepte raumbezogener Visualisierung und raumbezogener Informationsverarbeitung auf Grundlage der Geoinformationstechnologie kann das Analyse- und Nutzungspotential von Umweltinformationssystemen signifikant verbessert werden (Asche/Herrmann 1994). Hierzu wurde in einer Forschungskoooperation mit dem Ministerium für Landwirtschaft, Umwelt, Naturschutz und Raumordnung (MLUR) ein Angebot digitaler Basiskarten (DBK) als allgemeine Grundlage für raumbezogene Dienste entwickelt, das die adäquate und wirksame kartographische Präsentation thematischer Fachdaten in LUIS-BB ermöglicht (Hansen 1998, Hansen/Asche/Schöning 2000). Die komplette Modellierung der DBK erfolgte mit der GIS-Software ArcView 3.0 (ESRI), die als vorgeschriebenes Standardwerkzeug der Landesverwaltung auch für LUIS-BB verwendet wird.

Entsprechend den Bedürfnissen der potentiellen LUIS-BB-Nutzer waren bei der Erstellung des Basiskartenmoduls z.T. limitierende Rahmenbedingungen zu berücksichtigen. Sie betreffen u.a. die ausschließliche Nutzung digitaler ATKIS-Geobasisdaten (Das Amtliche topographisch-kartographische Informationssystem (ATKIS) der deutschen Landesvermessung wird seit 1989 in verschiedenen Realisierungsstufen bundesweit aufgebaut, um einen amtlichen, einheitlich strukturierten digitalen Bestand geotopographischer Basisinformationen (Geobasisdaten) für Verwaltung und Öffentlichkeit vorzuhalten, der langfristig an die Stelle der analogen topographischen Karte treten wird.) der Landesvermessung, um den Raumbezug fachthematischer Umweltdaten herzustellen, die Kartenanzeige in den Hauptmaßstäben 1: 300.000

(Übersicht) und 1: 25.000 (Detail), die den Maßstäben der am häufigsten genutzten analogen Karten entsprechen, oder die echtzeitnahe online-Nutzung der Basiskartendaten. Wichtigste Elemente der auf dieser Grundlage entwickelten Modulkonzeption sind die Selektion basiskartenspezifischer Objektarten aus den genutzten Geobasisdaten, die optisch zurücktretende Visualisierung der Elementartopographie sowie die blattschnittfreie und stufenlose Präsentation der Basiskartendaten als Bildschirmkarte oder Papierausgabe.

Um eine stufenlose Nutzung der Basiskartendaten vom Übersichts- bis Detailmaßstab sicherzustellen, ist es aufgrund des ungelösten Problems der automatischen Generalisierung raumbezogener Daten und deren maßstabsabhängiger Visualisierung gegenwärtig (noch) erforderlich, statt eines sogenannten maßstabslosen Datenbestandes eines Raumausschnitts verschiedene Datenbestände unterschiedlicher Bearbeitungsmaßstäbe redundant vorzuhalten. Deshalb wurden für die Erstellung der Basiskartenmodelle ein vektorisierter Rasterdatenbestand 1: 300.000 (VTK300, Übersichtstopographie) und die digitalen Landschaftsmodelle (DLM) der Geobasisdatenbank ATKIS in den Maßstäben 1: 200.000 (DLM 200, Verwaltungsgrenzen) und 1: 25.000 (DLM 25/2, Detailtopographie) verwendet.

Die Heterogenität der Ausgangsdaten erfordert die Bildung zweier Teilmodelle als alphanumerische Datengrundlage des Basiskartenmoduls. Sie entstehen nach dem Import der digitalen Ausgangsdaten durch Selektion von Objektbereichen aus den Ausgangsdaten und Neustrukturierung je eines grafikfreien Objektmodells für die Übersichts- und Detailtopographie. Entsprechend der Funktion der DBK, die Lokalisierung fachthematischer Umweltdaten für den gesamten Geschäftsbereich des MLUR zu ermöglichen, wird nicht der komplette Inhalt der DLM übernommen. Ausreichend ist vielmehr eine unterschiedlich vereinfachte Elementartopographie, deren Visualisierung als Hintergrundinformation gegenüber der thematischen Information optisch zurücktritt. Die Verknüpfung der Detail- und Übersichtstopographie wird dadurch realisiert, dass beide Objektmodelle in ein gemeinsames ArcView-Projekt importiert werden. Anschließend werden alle Kartendaten im Gauss-Krüger-System georeferenziert. Über diese einheitliche Raumbezugsbasis sind beide Visualisierungsmaßstäbe so verknüpft, dass die Detail-BDK in die Übersichts-DBK eingehängt ist. Der Wechsel zwischen beiden Teilmodellen erfolgt automatisch.

Um vielfältige Nutzungen des Basiskartenmoduls zu unterstützen, sind die Objektdaten nach dem Layerprinzip angeordnet. Die wichtigsten Ebenen umfassen: Verwaltungsstruktur mit Grenzen und Ortslagen; Infrastruktur mit Verkehrsnetz; Vegetation mit Wald; bewirtschaftete Landflächen, Sumpf; Siedlungsflächen mit Wohn- und Industrieflächen sowie Gewässernetz mit Seeflächen. Die Layerstruktur ermöglicht, die Basiskartendaten entsprechend den applikationsspezifischen Anforderungen durch Kombination der Ebenen individuell zu visualisieren. Auf diese Weise ist eine schnelle räumliche Übersicht und breite Anwendbarkeit der Digitalen Basiskarte für die Dienste des LUIS-BB gewährleistet.

Präsentation der digitalen Basiskarten

Die Visualisierung der Geobasisdaten erfolgt als Präsentationsgraphik aus dem DOM des Basiskartenmoduls. Als Bearbeitungsmaßstäbe der DBK wurden die Maßstäbe 1:300.000 für die Übersichts- und 1: 25.000 für die Detailtopographie gewählt. Sie entsprechen den Bearbeitungsmaßstäben der grafikfreien Teilobjektmodelle Übersicht und Basis. Entsprechend ihrer Funktion als Hintergrundkarte wird für die graphische Modellierung der DBK eine zurückhaltende Signaturierung und Farbgestaltung gewählt. Hierbei wird berücksichtigt, dass der Struktur des LUIS entsprechend die gesamten Kartendaten nach Aufruf des Dienstes über Datennetze transportiert werden und in naher Echtzeit angezeigt werden müssen. Wie die Kartendaten des DOM sind auch die Kartenmodelle der DBK blattschnittfrei modelliert.

Die einer kartenähnlichen Darstellung entsprechende graphische Präsentation der DBK wurde für die Übersichts-DBK landesweit (Abb. 2), für die Detail-DBK exemplarisch für eine Kachel (Werder) im Blattschnitt der analogen topographischen Karte realisiert (Abb. 3). Dabei entspricht die Kartengraphik beider Basiskartentypen dem gegenwärtigen Forschungs- und Entwicklungsstand der Visualisierung

geotopographischer Informationen. Innerhalb dieses Modellierungsrahmens basiert die graphische Gestaltung der digitalen Basiskarten auf einem zurückhaltenden, fast monochromen Farbsatz, um dem Nutzer auch optisch den Charakter der Hintergrundkarte zu vermitteln. Damit unterstreicht die Farbgestaltung der DBK den Aufforderungscharakter des Kartendienstes, auf der angebotenen Basistopographie thematische Fachdaten anzuzeigen und auszuwerten.

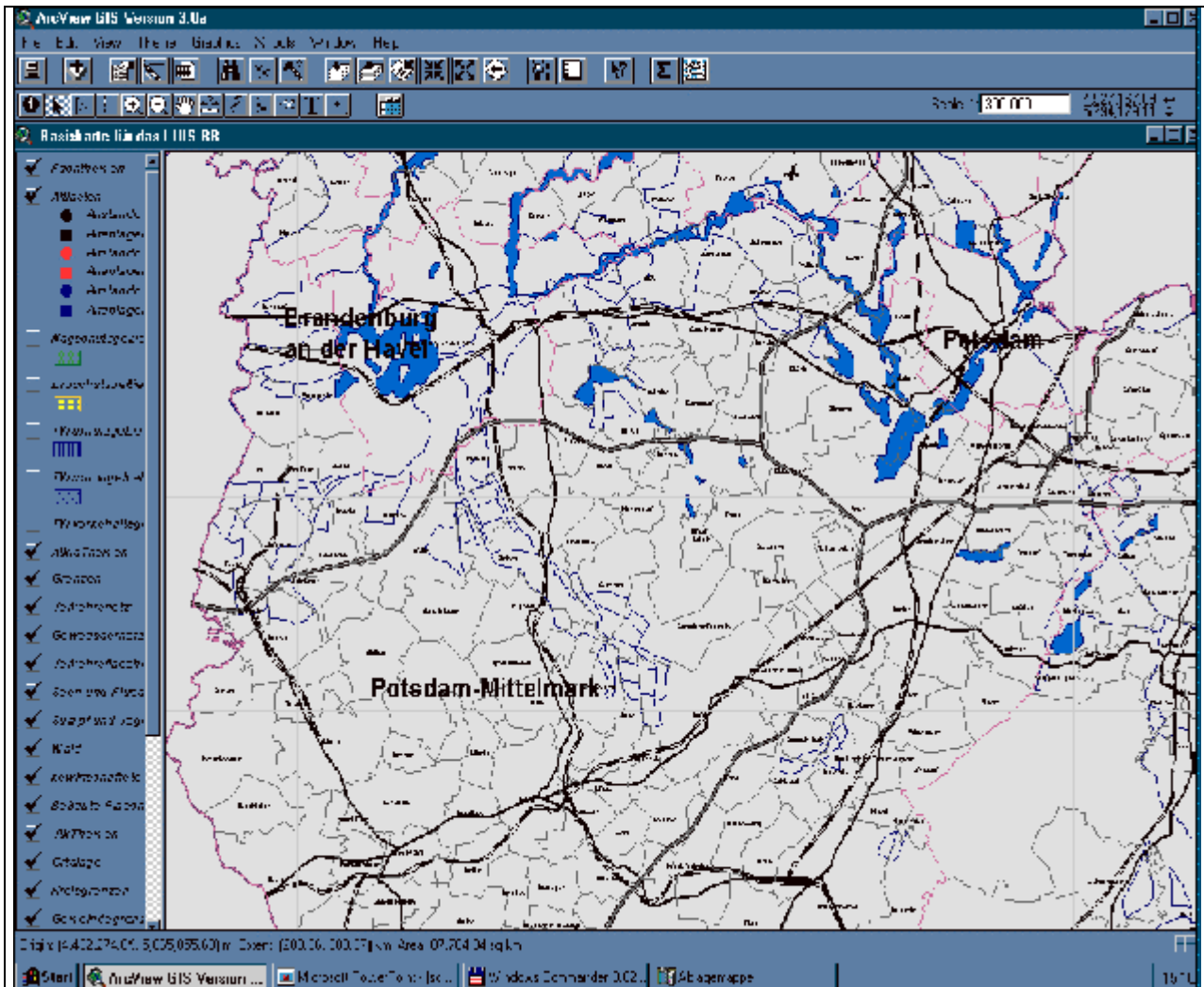


Abb. 2 DBK-Übersicht (Ausschnitt)

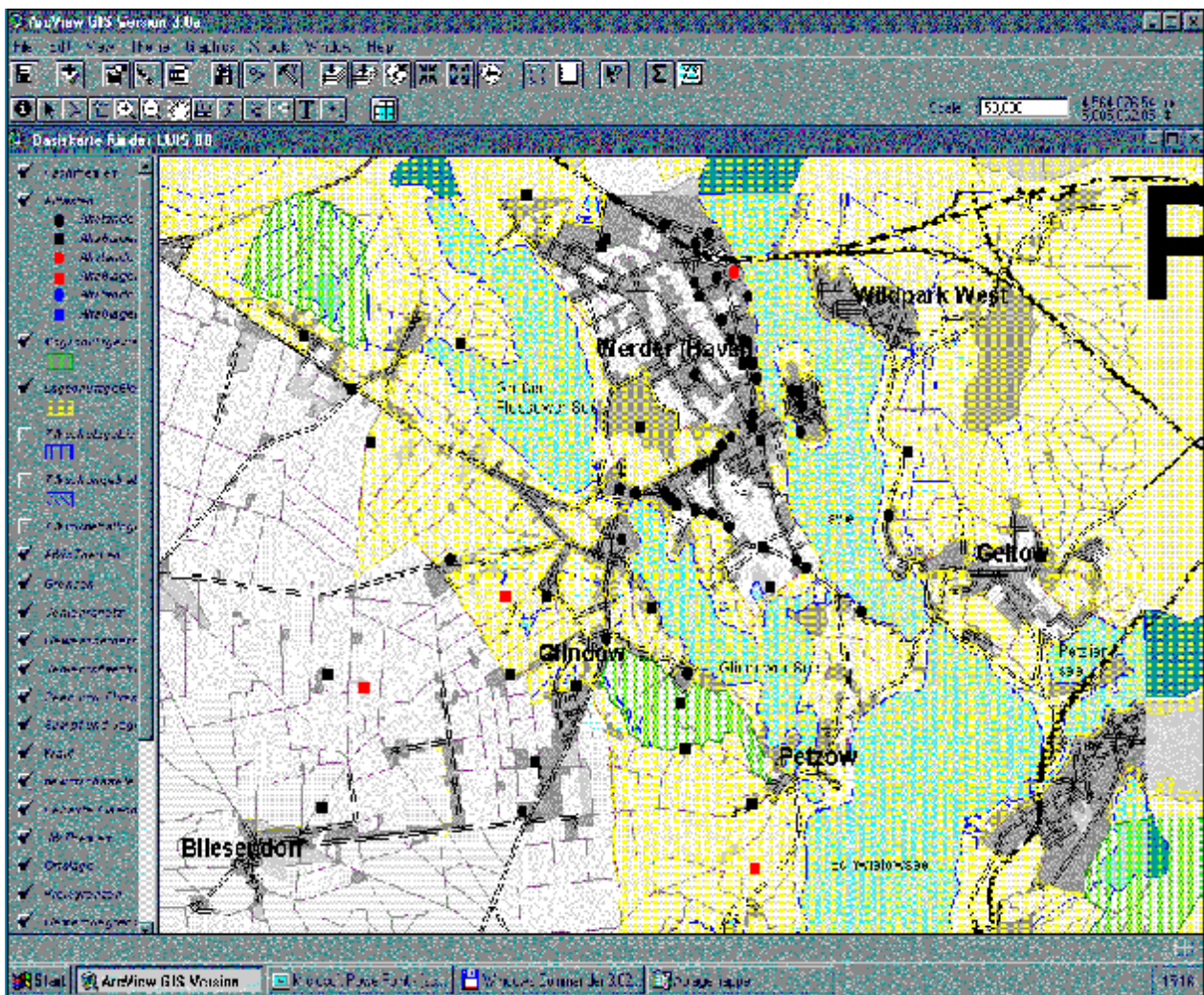


Abb. 3 DBK-Detail mit Fachthematik (Ausschnitt)

Um die volle Funktionalität der Digitalen Basiskarten in allen Anzeigemaßstäben sicherzustellen, wird die Inhaltsdichte mit größer werdendem Raumausschnitt durch automatisches Ausblenden einzelner Kartenelemente der Basiskarte dem jeweils gewählten Anzeigemaßstab angepaßt. Dabei orientiert sich die angebotene Folge der Zwischenmaßstäbe 1: 1 Mill., 1: 750.000, 1: 500.000, 1: 300.000, 1: 100.000, 1:75.000, 1: 5.000 überwiegend an den Maßstäben vergleichbarer analoger Kartenwerke. Unbeschadet der Zwischenmaßstäbe kann der Nutzer jeden Anzeigemaßstab zwischen 1: 5.000 und 1: 2 Mill. wählen. Entsprechend dem Maßstabfenster, in dem der gewählte Anzeigemaßstab liegt, wird dann der zugewiesene Basiskarteninhalt dargestellt. Die maßstabsgesteuerte Ein- und Ausblendung von Kartenelementen stellt eine pragmatische Näherungslösung der automatischen Generalisierung raumbezogener Daten und deren maßstabsabhängiger Visualisierung dar. Damit bleibt bei jeder Bildschirmanzeige der funktionale Charakter der Basiskarte gewahrt. Auf diese Weise wird auch der kartographisch ungeschulte Nutzer bei der effizienten Nutzung des Basiskartendienstes unterstützt. Über die Kartenlegende besteht zusätzlich die Möglichkeit, einzelne Inhaltselemente selbst ein- oder auszublenden.

Schlussbemerkungen

Das Modul digitaler Basiskarten für das LUIS-BB wurde als lauffähiger Prototyp für eine intranetbasierte, interaktive Nutzungsumgebung realisiert (Entsprechend der Zielstellung, netzbasierte Kartenmodelle für das LUIS-BB zu entwickeln, wurde das Basiskartenmodul in einer Intranetumgebung mit verteilten Umweltdatenservern implementiert. Weil das LUIS-BB gegenwärtig (noch) kein Hochgeschwindigkeitsnetz nutzen kann, wurde von einer zentralen Datenhaltung der DBK während des Probetriebs abgesehen. Stattdessen wurden die Daten an verschiedenen LAN-Knoten redundant vorgehalten. Mit dem Einsatz von Hochgeschwindigkeitsnetzen ist aber eine zentrale Vorhaltung des Kartendienstes realisierbar.

Bei informellen Nutzungstests durch potentielle Anwender haben sich die programmierten Funktionalitäten als nutzungsadäquat, leistungsfähig und stabil erwiesen. Im Zuge der Öffnung des LUIS-BB für die Internetnutzung ist vorgesehen, auch den Basiskartendienst der öffentlichen Nutzung zugänglich zu machen. Hierzu haben erfolgreiche Versuche, z.B. unter Nutzung des ESRI-Programmwerkzeugs ArcExplorer (ESRI), stattgefunden.

Literatur

ASCHE, H.; HERRMANN, C. (1994): Designing interactive maps for planning and education. In: MacEachren, A. M., Taylor, D. R. F., (Hrsg.): Visualization in modern cartography. *Modern Cartography*, 2: 215 - 242. Oxford.

HANSEN, D. (1998): Modellierung Digitaler Basiskarten für das Landesumweltinformationssystem Brandenburg. Unveröff. Dipl.-Arb. Univ. Potsdam, Potsdam.

HANSEN, D.; ASCHE, H.; SCHÖNING, C. (2000): Modellierung und Implementierung digitaler Basiskarten im Umweltinformationssystem des Landes Brandenburg. In: *Kartogr. Nachr.* (im Druck).

MONMONIER, M.S.; JOHNSON, B. B. (1991): Using qualitative data gathering techniques to improve the design of environmental maps. In: Rybaczuk, K., Blakemore, M. (Hrsg.), *Mapping the Nations. Proc. 15th Intern. Cartogr. Conference*, Bournemouth, 1: 364 - 373.

MCCORMICK, B. H.; DEFANTI T. A.; BROWN, M. D. (Hrsg., 1987): Visualization in scientific computing. *Computer graphics* 21, 6.

WOOD, M. (1994): The traditional map as a visualization technique. In: Hearnshaw, H. M., Unwin, D. J. (Hrsg.), *Visualization in geographical information systems*: 9 - 17. Chicester-New York.

Anschrift des Autors

Prof. Dr. Hartmut Asche
Universität Potsdam
Institut für Geographie, Abteilung Geoinformatik
Postfach 60 15 53
D-14415 Potsdam

Evaluation of Multi-spectral Lidar Measurements of the Tropo- and Stratosphere via Modern Mathematical Methods for Inverse Ill-posed Problems to Determine the Aerosol Size Distribution

EARLINET - A European Aerosol Research Lidar Network to Establish an Aerosol Climatology

C. Böckmann

Zusammenfassung

Die Meßdatenerfassung und Berechnung optischer Daten ist einerseits eine wichtige Aufgabe, andererseits ist die Inversion mikrophysikalischer Parameter bedeutend. Deshalb entstand ein Programmpaket zur Lösung schlecht gestellter inverser Probleme, d.h. zur Lösung von Fredholmschen Integralgleichungssystemen 1. Art mit zusätzlicher unbekannter Kernfunktion. Es ist modular aufgebaut. Implementiert wurde das speziell neu entwickelte hybride Verfahren mit variabler Projektion und variabler B-Spline-Ordnung vom Kollokationstyp. Fredholmsche Gleichungen 1. Art sind aus mathematischer Sicht schlecht gestellte Operatoren, die mit normalen Quadraturverfahren nicht lösbar sind. Dazu bedarf es spezieller Regularisierungstechniken, die an den speziellen Operator angepaßt werden müssen sowie von der Anzahl der Meßdaten und dem Meßfehlerniveau abhängen.

Für den Lidaroperator erwies sich das hybride Verfahren mit variabler Projektion vom Kollokationstyp als das tragfähigste Verfahren. Zahlreiche Testrechnungen für unterschiedliche Meßsituationen, d.h. unterschiedliche Lidar-Geräte-Typen der einzelnen am Deutschen Lidar-Netz und am Schließungsexperiment in Lindenberg 1998, LACE 98, beteiligten Arbeitsgruppen, (unterschiedliche Anzahl und Werte der Meßwellenlängen) zeigen die ausgezeichneten Rekonstruktionseigenschaften. Sogar für 4 Wellenlängen, d.h. 355, 532 und 1064 nm bezüglich des Rückstreuoeffizienten und 532 nm bezüglich des Extinktionskoeffizienten ist das Verfahren einsetzbar. Eine Analyse des Verfahrens zeigt, daß Meßfehler bis zu 20% gut toleriert werden.

Die Modularität dieses Programmes wird es später gestatten, es auch für andere Partikelzähler-Geräte, die mathematisch durch Fredholmsche Integralgleichungen 1. Art modelliert werden, einzusetzen. Erste Meßdaten vom 9.8.98 und 11.8.98 aus der „golden period“ der LACE 98 – Kampagne in Lindenberg wurden erfolgreich analysiert und invertiert. Außerdem zeigen die Ergebnisse, daß eine Eingrenzung des zusätzlich unbekanntes Brechungsindexes möglich ist.

Das Deutsche Lidar-Netz (erstgenanntes Projekt) konnte anfang des Jahres 2000 auf Europa-Ebene in ein EU-Projekt EARLINET (zweitgenanntes Projekt) münden.

Summary

On the one hand the development and improvement of instruments for environmental monitoring and the provision of measurement data is an important task. On the other hand a second important task is the inversion of microphysical parameters of the aerosols from the optical data. Therefore, a software package was developed which consists of regularization methods to solve ill-posed inverse problems, i.e. to solve a system of Fredholm integral equations of the first kind with additionally unknown kernel function. All parts are modular. We propose the specially newly developed hybrid method with variable projection and variable B-spline order, a collocation type method.

From mathematical point of view Fredholm equations of the first kind are ill-posed operators and with simple integration methods are not solvable. Therefore, one needs special regularization techniques which we had to fit to the special operator, to the number of measurements and to the measurement error level. The best suitable method for the lidar operator is the hybrid method with variable projection. A lot of test computations for different measurement situations, i.e. different lidar devices of the groups which take part in the German lidar network and in the closure experiment in Lindenberg 1998, LACE 98, (different numbers and values of the measurement wavelengths) show the excellent reconstruction properties. In fact, the method is able to reconstruct in the case of only 4 wavelengths, i.e. 355, 532 and 1064 nm with respect to the backscatter coefficient and 532 nm with respect to the extinction coefficient. The method is usable up to 20% noisy data. Because of the separated parts of the software package it is later possible to use it also for other particle counter devices. We adapted the hybrid method to the measurement technique situation. First real-life measurements of the 9. and 11. August 1998 of the golden period of LACE 98 – campaign in Lindenberg were successfully analysed and inverted. Since for lidar measurements the refractive index of the observed aerosol is an unknown parameter, too, one needs nonlinear methods. Moreover, the results show that it is possible to enclose the additionally unknown refractive index domain.

The German lidar network (first-mentioned project) could pour in an EU-project EARLINET (second-mentioned project) at the beginning of the year 2000 on European level.

Introduction

Aerosols affect life on earth several ways. They play an important role in the climate system; the effect of aerosols on the global climate system is one of the major uncertainties of present climate predictions. They play a major role in atmospheric chemistry and hence affect the concentrations of other potentially harmful budget, in particular in the UV-B part of the spectrum. Moreover, one reason for the ozone depletion is the chlorine (Cl) in CFCs in the stratosphere. On the other side, polar stratospheric clouds (PSCs) a type of aerosol particles are believed to play an active role in precursor stages of ozone depletion in the winter-cold stratosphere by catalyzing heterogeneous chemical reactions on their surface and by redistributing HNO_3 through sedimentation (see Turco et al. 1989 and Turco 1985). Such particles can be produced by volcanic eruptions in the stratosphere or by environmental pollution of the air above industrial areas. At ground level, they can be harmful, even toxic, to man, animals, and plants. Because of these adverse effects that aerosols can have on human life, it is necessary to achieve an advanced understanding of the processes that generate, redistribute, and remove aerosols in the atmosphere. A quantitative dataset describing the aerosol vertical, horizontal, and temporal distribution, including its variability on a continental scale, is necessary. Such a dataset could be used to validate and improve models that predict the future state of the atmosphere and its dependence on different scenarios describing economic development, including those actions taken to preserve the quality of the environment. No suitable data set for this purpose presently exists. Moreover, from this optical data it is necessary to determine the microphysical parameters of the particles, e.g. knowledge of the particle size distribution is necessary to model processes involving ozone chemistry (see McCormick et al. 1995). The size distribution of these cloud particles is an important parameter for quantifying those mechanisms, because it relates the total surface to the total mass. This distribution can be determined either by in-situ measurements with optical particle counters or by remote sensing

with lidar (LIDAR = Light Detection and Ranging or Light-Radar). equipment (see Böckmann 1999, 2000 and Müller et al.1999).



Fig. 1: Lidar device of the Ludwig-Maximilians-Universität München, see Wiegner 2000, for environmental monitoring by remote sensing

The mathematical model for a lidar measurement consists of a system of two Fredholm integral equations of the first kind for the backscatter and extinction coefficients β^{Aer} and α^{Aer}

$$\beta^{Aer}(\lambda, z) = \int_{r_0}^{r_1} K_{\pi}(\lambda, r; m) n(r, z) dr = \int_{r_0}^{r_1} \pi r^2 Q_{\pi}(\lambda, r; m) n(r, z) dr, \quad (1)$$

$$\alpha^{Aer}(\lambda, z) = \int_{r_0}^{r_1} K_{ext}(\lambda, r; m) n(r, z) dr = \int_{r_0}^{r_1} \pi r^2 Q_{ext}(\lambda, r; m) n(r, z) dr, \quad (2)$$

where r is the particle radius, m the refractive index, r_0 and r_1 represent suitable lower and upper limits of realistic radii, λ is the wavelength, λ_0 the smallest and λ_1 the largest wavelength, z is the height, n the aerosol size distribution we are looking for, K_{π} the backscatter and K_{ext} the extinction kernel. The kernel function reflects shape, size, and material composition of particles. We assume Mie particles. The following formulas hold for extinction and backscatter efficiencies (see Bohren et al. 1983)

$$Q_{\pi} = \frac{1}{k^2 r^2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1)(-1)^n (a_n - b_n) \right|^2, \quad Q_{ext} = \frac{2}{k^2 r^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n), \quad (3)$$

where k is the wave number defined by $k=2\pi/\lambda$ and a_n and b_n are the coefficients which we get from the boundary conditions for the tangential components of the waves. The determination of the aerosol size distribution function $n(r)$ from a small number of backscatter and extinction measurements is a nonlinear inverse ill-posed problem.

Ill-posed Problem and Regularization

The equations (1) and (2) are ill-posed on all three counts (existence, uniqueness, and stability), where stability means a solution that changes only slightly with a slight change in the problem (see Groetsch 1993). We consider an operator of the form $Tx=y$ where $T: H_1 \rightarrow H_2$ is a compact, linear (but not necessarily self-adjoint) operator from a Hilbert space H_1 into a Hilbert space H_2 . For a bounded linear operator T a solution only exists if and only if $y \in R(T)$, the range of T . Since T is linear, $R(T)$ is a subspace of H_2 , however, it generally does not exhaust H_2 . We may enlarge the class of functions y for which a type of generalized solution exists to a dense subspace of function in H_2 . This accomplished by introducing the idea of a least squares solution. A function $x \in H_1$ is called a least squares solution if

$$\|Tx - y\| = \inf\{\|Tu - y\| : u \in H_1\}. \quad (4)$$

The set of all least squares solutions is closed and convex. Therefore, there is a unique least squares solution of smallest norm which we call generalized solution. The mapping T^H that associates with a given $y \in D(T^H) = R(T) + R(T)^\perp$ the unique least squares solution having smallest norm, $T^H y$, is called the Moore-Penrose generalized inverse of T . In our scheme T^H is then the mechanism which provides a unique solution for any $y \in D(T^H)$. In this sense, T^H settles the issues of existence and uniqueness for generalized solutions. The generalized Pseudoinverse operator $T^H : D(T^H) \rightarrow H_1$ is a closed densely defined linear operator which is bounded if and only if $R(T)$ is closed. Since both lidar integral operators are compact, each of them can have closed range if and only if one has a finite dimensional subspace of H_2 . This is not the case just under the given lidar integral kernels. Therefore, $R(T)$ is not closed so T^H is unbounded, i.e. T^H is discontinuous. Very small changes in the right hand side $y(\lambda)$ can be accounted for by large changes in the solution $x(r)$. That the instability is fundamental, and not just a consequence of some special form of the kernels, follows from the Riemann-Lebesgue lemma. If we wish to obtain a well-posed problem we need a so called regularization. In general regularizations are families of operators

$$T_\gamma : H_2 \rightarrow H_1 \quad \text{with} \quad \lim_{\gamma \rightarrow 0} T_\gamma y = T^+ y \quad \text{for all} \quad y \in D(T^+) , \quad (5)$$

i.e. the convergence is pointwise on $D(T^H)$ (see Louis 1989). The parameter γ is the so called regularization parameter. In the case of noisy data y^δ with $\|y - y^\delta\| \leq \delta$ we determine as solution $x_\gamma^\delta = T_\gamma y^\delta$. However, the total error consists of two parts, i.e. two summands,

$$x_\gamma^\delta - x = T_\gamma(y^\delta - y) + (T_\gamma - T^+)y . \quad (6)$$

The first part is the data error and the second part the approximation error or regularization error. If $\gamma \rightarrow 0$ the approximation error tends to zero while the data error tends to infinity. Therefore, the total error can never be zero and we are in a dilemma. We have to look for an "optimal" regularization parameter γ which minimizes the total error.

Projection methods as regularization

Now our aim is to approximate $T^H y$ in the sense of (5). We know that, ignoring the trivial case in which the kernel $K(\dots)$ is degenerated, the generalized solution $T^H y$ depends discontinuously on y , but we would like to make our approximation continuously depending on y . There are a lot of regularization methods, we refer to Engl et al. 1996. But if one would like to solve a real practical problem the results of regularization for infinite dimensional spaces are unsuitable. Hence we need a discretization (see Engl 1997). On the one hand it is possible to combine any regularization method with any projection method. On the other hand one observes that pure projection methods into finite dimensional spaces act as regularization where the regularization parameter is n . In addition, there is a regularization influence by the basis function choice, too. Let $X_1 \subseteq X_2 \subseteq \dots \subseteq H_1$ be finite dimensional subspaces of H_1 with $\text{closure}(U_{n=1}^\infty X_n) = H_1$, i.e. dense in H_1 , and $T_n := T|_{X_n}$ is the restriction of T to a subspace X_n of H_1 . A natural way to generate a finite dimensional approximation is to find the minimal least squares solution of the equation $T_n x = y$. As an approximation to $T^H y$ one could use the unique least squares solution, i.e. $T_n^H y$ or $T_n^H y^\delta$, respectively where $\|y - y^\delta\| \leq \delta$ represents the noise level of the data. The approximate solution $x_n \in X_n$ minimizes $\|T x - y^\delta\|^2$ over X_n . Since X_n is finite dimensional, $R(T_n)$ is closed, i.e. T_n^H is continuous. This problem is well-posed. For more details we refer to Engl 1997 and Groetsch 1993.

Hybrid method with variable projection via B-Splines

From the theoretical studies of the lidar operators we get the knowledge how to develop the regularization method. Because of computer time consuming we decided to use a Collocation method which is a special case of the Galerkin method. We propose now a hybrid regularization technique, a combination of a variable dimension projection method with truncated singular value decomposition. To turn into a finite dimensional problem we might simply try to solve the problem over a finite dimensional subspace of H_1 . For example, if X_n is an n -dimensional subspace of H_1 spanned by the linearly independent functions $\{\phi_1, \dots, \phi_n\}$ then the function $x_{n,\gamma}^\delta \in X_n$ minimizes $\|Tx - y^\delta\|$ over X_n with a truncation level γ . The solution $x_{n,\gamma}^\delta$ can be represent as $x_{n,\gamma}^\delta = \sum_{i=1}^n d_i \phi_i$ where the unknown coefficients $d_i, i=1, \dots, n$, are the generalized solution of the linear equation system

$$\sum_{i=1}^n \int_{r_0}^{r_1} K(r, \lambda_j) \phi_i(r) dr \quad d_i = y(\lambda_j), \quad j = 1, \dots, N + M, \quad (7)$$

which may be underdeterminate or overdeterminate, respectively. The points $\lambda_j, j=1, \dots, N+M$, are so-called collocation points, in general they are the measurement points. We solve (7) by using truncated singular value decomposition with level γ . We might call this type of discretization a "finite element" discretization because the computed numbers d_i are coefficients of certain basis functions $\{\phi_i\}$ which often will be taken as B-spline functions on some grid. A spline of degree $k-1$ (order k) is a function $s \in C^{k-2}[r_0, r_1]$ which in every interval $[r_i, r_{i+1}]$, ($i=0, \dots, 1$), consists of a polynomial s_i with degree $\leq k-1$. The spline space of degree $k-1$ we denote by $S_{k,\Delta}$. Obviously the dimension is $\dim(S_{k,\Delta})=k+l=:n$, where $l+2$ is the number of different nodes. An advantageous basis we get with the recursion ($\chi[\tau_i, \tau_{i+1}]$ denotes the characteristic function)

$$N_{i1}(r) := \chi[\tau_i, \tau_{i+1}](r) = \begin{cases} 1 & : r \in [\tau_i, \tau_{i+1}) \\ 0 & : \text{otherwise} \end{cases}, \quad (8)$$

$$N_{ik}(r) := \frac{r - \tau_i}{\tau_{i+k-1} - \tau_i} N_{i,k-1}(r) + \frac{\tau_{i+k} - r}{\tau_{i+k} - \tau_{i+1}} N_{i+1,k-1}(r), \quad (9)$$

where $\tau_1 \leq \dots \tau_n$ are the extended nodes, $N_{ik}(r)$ are the B-splines of order $k, k=1, \dots, n; i=1, \dots, n-k$. The support $N_{ik} \subset [\tau_i, \dots, \tau_{i+k}]$ is a local one, $N_{ik}(r) \geq 0$ for all $r \in \mathbb{R}$, $N_{ik}(r)$ is a piecewise polynomial of degree $\leq k-1$ with respect to the intervall $[\tau_j, \tau_{j+1}]$; furthermore $N_{ik}, i=1, \dots, n$ are local linear independent. Moreover, $B = \{N_{1k}, \dots, N_{n,k}\}$ is a well-conditioned basis of $S_{k,\Delta}$ (see Deuffhard 1991). Now our regularized solution has the description

$$x_{n,\gamma}^\delta(r) = \sum_{i=1}^{n-k+1} d_i N_{ik}(r) \quad (10)$$

thus we have three regularization parameters k, n and γ . For more details see Böckmann 2000.

Numerical results

From numerical point of view, it is reasonable to formulate equations (1) and (2) into a more specific form

$$y(\lambda_j) = \int_{r_0}^{r_1} \tilde{K}^v(r, \lambda_j; m) v(r) dr \quad (11)$$

with

$$\tilde{K}^v(r, \lambda_j; m) := \begin{cases} K_\pi^v(r, \lambda_j; m) & : \lambda_j \in \lambda^\pi \\ K_{ext}^v(r, \lambda_j; m) & : \lambda_j \in \lambda^{ext} \end{cases}, \quad (12)$$

where $y(\lambda_j)$ are the optical data (whether it is backscatter β or extinction α) depending on λ_j where $\lambda^\pi = \{355, 400, 532, 700, 800, 1064 \text{ [nm]}\}$, i.e. $N=6$ while $\lambda^{\text{ext}} = \{355, 532 \text{ [nm]}\}$ (two Raman channels), i.e. $M=2$. The $v(r)$ term is the volume concentration distribution obtaining from $n(r)$ with multiplying by $4\pi r^3/3$ and

$$K_{\pi/\text{ext}}^v(r, \lambda; m) = \frac{3}{4r} Q_{\pi/\text{ext}}(r, \lambda; m) \quad , \quad (13)$$

we refer to the equations (1) and (2).

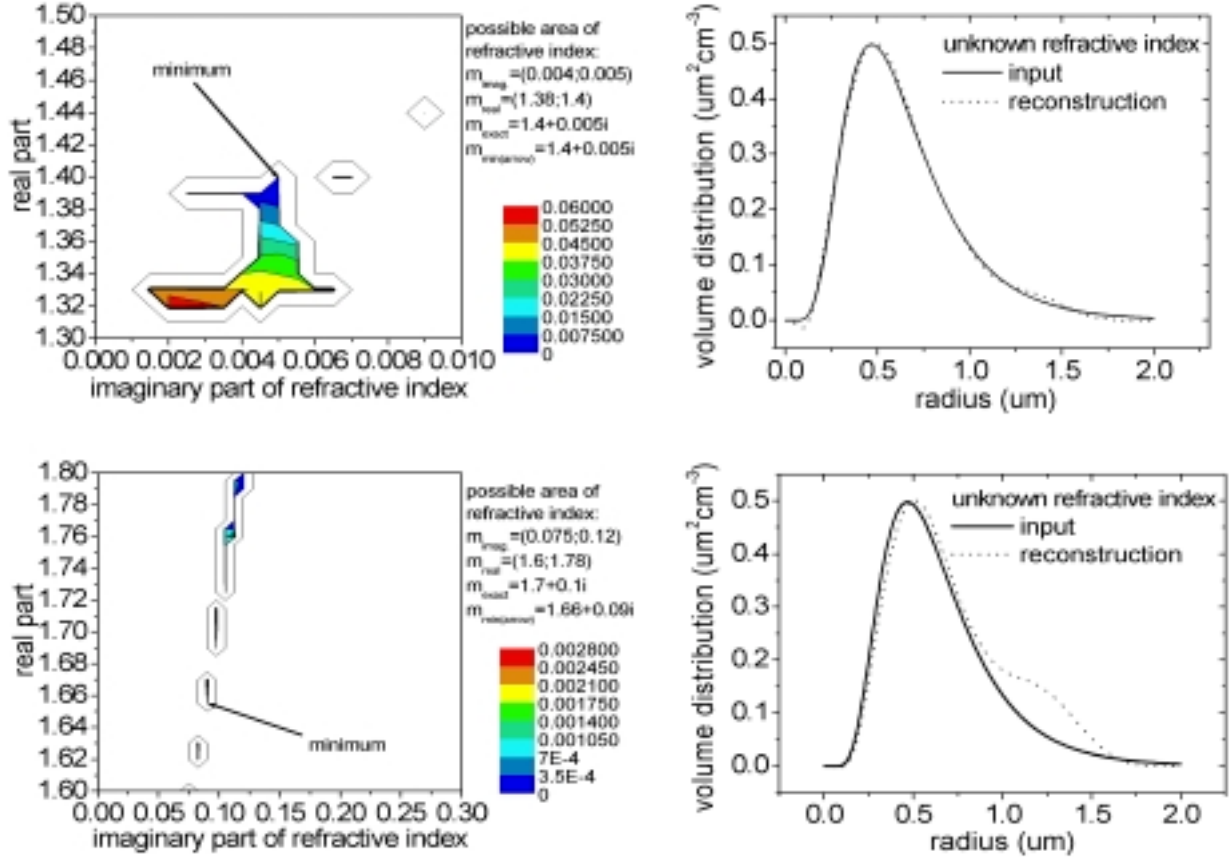


Fig. 2: Inversion results with unknown refractive index with weak absorption (on the top left) and (on the top right) as well as with strong absorption (on the bottom left) and (on the bottom right).

The reconstruction results of the inversion by using synthetically optical data were compared with the input distribution and the input refractive index. Logarithmic-normal distributions are used to describe the particle size distribution spectrum

$$n(r) = \frac{1}{r} \frac{1}{\sqrt{2\pi} \ln \sigma} \exp\left(-0.5 \frac{(\ln r - \ln r_{\text{mod}})^2}{\ln^2 \sigma}\right). \quad (14)$$

The particle parameters are the mode radius $r_{\text{mod}}=300 \text{ nm}$ and the mode width $\sigma=1.6$. Moreover, for the inversion we use the refractive index $m_1=1.4+0.005i$ (see Fig. 2 top) or $m_2=1.7+0.1i$ (see Fig. 2 bottom) and the lower and upper integration limits $r_0=1 \text{ nm}$ and $r_1=2000 \text{ nm}$, respectively.

Beside the volume distribution, the complex refractive index is the second unknown quantity in the inversion. This problem is a highly nonlinear one and in general, no explicit information on the refractive index is available. Although we know that the refractive index depends on the wavelength as well

as on the particle size, we assume the index to be constant. By using a refractive index grid we try to enclose the area of possible refractive indices and actually with that technique one obtains a much promising result, see Fig. 2 left. The resulting area is the black one with respect to an assumed noise level. The point with an arrow is with respect to a special norm choice, here simple Euklidean norm, the best one in that sense. But we have to remark that in the case of noisy data the point with the arrow must not be the best one. All points of the black area must be considered as a possible solution. Note that the white area can be definitely excluded as a solution area since no positive size distribution exists with respect to a suitable non-negative level. Otherwise one observes the same effect as with known refractive index, specifically if the imaginary part of the complex refractive index becomes larger then the problem gets more ill-posed, see Fig. 2 on the bottom right. Because the imaginary part is large, i.e. 0.1i, the black area obtains a shape so that on the one hand the imaginary part can be estimated, but on the other hand the real part cannot be limited with this method. This is an ongoing work in the second-mentioned project.

EARLINET

EARLINET will establish a quantitative comprehensive statistical database of the horizontal, vertical, and temporal distribution of aerosols on a continental scale. The goal is to provide aerosol data with unbiased sampling, for important selected processes, and air-mass history, together with comprehensive analyses of these data.

The objectives will be reached by implementing a network of 21 stations distributed over most of Europe, using advanced quantitative laser remote sensing to directly measure the vertical distribution of aerosols, supported by a suite of more conventional observations. Special care will be taken to assure data quality, including intercomparisons at instrument and evaluation levels. Moreover, an improvement of the ill-posed inversion to determine the microphysical parameters will be carried out. A major part of the measurements will be performed according to a fixed schedule to provide an unbiased statistically significant data set. Additional measurements will be performed to specifically address important processes that are localised either in space or time. Back-trajectories derived from operational weather prediction models will be used to characterise the history of the observed air parcels, accounting explicitly for the vertical distribution.

EARLINET will make a major contribution to the quantification of anthropogenic and biogenic emissions and concentrations of aerosol, quantification of their budgets, radiative properties and prediction of future trends. It will also further the understanding of physical and chemical processes related to these species, their long range transport and disposition, and the interaction of aerosols with clouds. The project will also make an important contribution to the improved model treatment of physical and biospheric processes, in particular clouds and aerosols.

The data to be collected will be used to improve the quality of a number of satellite retrieval systems that are affected by the presence of aerosols, and will provide the necessary basis for future satellite missions that employ laser remote sensing.

EARLINET will provide information about transboundary transport of aerosols that can also be used as a tracer for other substances in the planning of pollution abatement strategies.

Co-operation within the network will lead to a very efficient transfer of know-how in two important areas: advanced remote sensing using high-tech instruments, and the application of these techniques to address complex environmental problems. It will be a very effective training area for young scientist, both from well-developed and less-developed countries, providing equal opportunities to use the common data, see project coordinator Bösenberg et al. 2000.

Acknowledgments

The first project has been supported by the Bundesministerium für Bildung, Wissenschaft, Forschung und Technologie (BMBF) under grant 07AF310/2 and the second project by the European Commission under EVR1-CT-1999-40003.

References

- BÖCKMANN, C. (submitted 2000): Hybrid regularization method for the ill-posed inversion of multi-wavelength lidar data to retrieve aerosol size distribution, *Appl. Opt.*
- BÖCKMANN, C.; WAUER, J. (to appear 2000): Algorithms for the Inversion of Light Scattering Data from Uniform and Non-Uniform Particles, *J. Aerosol Science*
- BÖCKMANN, C.; SARKÖZI, J. (1999): The Ill-posed Inversion of Multiwavelength Lidar Data by a Hybrid Method of Variable Projection, *SPIE-Publication*, 3816, 282 - 293
- BÖSENBERG J. et al. (2000): EARLINET – A European Aerosol Research Lidar Network to Establish an Aerosol Climatology, <http://lidarb.dkrz.de/earlinet/abstractfinal.pdf>
- BOHREN, G. F.; HUFFMAN, D. R. (1983): *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, John Wiley and Sons, New York
- DEUFLHARD, P.; HOHMANN, A. (1991): *Numerische Mathematik*, de Gruyter, Berlin - New York
- ENGL, H. W.; HANKE, M.; NEUBAUER, A. (1996): *Regularisation of Inverse Problems*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston and London
- ENGL, H. W. (1997): *Integralgleichungen*, Springer, Wien - New York
- GROETSCH, C. W. (1993): *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*, Vieweg und Sohn, Braunschweig - Wiesbaden
- HANSEN, P. C. (1998): *Rank-Deficient and Discrete Ill-posed Problems*, SIAM, Philadelphia
- HOFMANN, B. (1999): *Mathematik inverser Probleme*, B.G. Teubner, Stuttgart - Leipzig
- LOUIS, A. K. (1989): *Inverse und schlecht gestellte Probleme*, B.G. Teubner, Stuttgart
- MC CORMICK, M. P.; THOMASON, L. W. (1995): Atmospheric effects of the Mt. Pinatubo eruption, *Nature*, 373, 399 - 404
- MÜLLER, D.; WANDINGER, U.; ANSMANN, A. (1999): Microphysical particle parameters from extinction and backscatter lidar data by inversion with regularization: Theory }, *Appl. Opt.*, 38, 2346 - 2357
- TURCO, R. (1985): *The photochemistry of atmospheres; Earth, the other planets and comets*, Academic Press, Orlando
- TURCO, R.; TOON, O. B. (1989): Heterogeneous Physicochemistry of the Polar ozone hole, *J. Geophys. Res.*, 94, 16493 - 16510
- WIEGNER, M. (2000): *Persönliche Mitteilungen*

Author

Dr. Christine Böckmann
Universität Potsdam
Institut für Mathematik
Am Neuen Palais 10
144 15 Potsdam
Germany

Klimaeinfluß auf die Zerstörung von Baudenkmalern durch lösliche Salze am Beispiel des Grottensaals im Neuen Palais, Potsdam

S. Laue

Zusammenfassung

Der Grottensaal im Neuen Palais (1763-1769) ist mit Mineralen, Gesteinen, Fossilien und Conchylien reich ausgestattet und sollte - entsprechend der Mode zur Zeit des Barocks - eine Grotte darstellen. Zahlreiche Schäden durch Salzverwitterung insbesondere in Fensternähe führen zum Zerfall einzelner Ausstattungsstücke, teilweise sind ganze Wände betroffen.

Eine Schadensanalyse mit möglichst zerstörungsfreien Untersuchungsmethoden sollte die ablaufenden Schadensprozesse ermitteln. Es wurden Salzausblühungen entnommen und analysiert. Das Klima im Grottensaal wurde mit einem digitalen Thermohygrographen gemessen. Referenzflächen sind angelegt worden, an denen Neukristallisationen in Abhängigkeit zum Raumklima beobachtet worden sind.

Nach einem Untersuchungszeitraum von einem Jahr war es möglich, die Ursache für die Schadensprozesse zu nennen. Temperatur und Luftfeuchteschwankungen führen zu erhöhter Salzkristallisation der Natriumsulfat-Salze Thenardit und Mirabilit, die für die Schäden im Grottensaal verantwortlich sind. Als Konservierungsschritte können die Verhinderung von weiterem Feuchteintrag und Entsalzungsmaßnahmen mittels Kompressen dienen.

Summary

The „Grottensaal“ of the „New Palace“, constructed between 1763-1769, is a highly decorated hall with different natural specimens like minerals, rocks, fossils and shells - thus, the hall looks like a grotto.

Today, extreme damage to various decorative pieces is apparent and stems from salt crystallization especially near the windows. The aim of this investigation is to determine the weathering processes with non-destructive methods.

Salt efflorescences were taken from the surface of the building materials and investigated. The climate of the „Grottensaal“ was measured by a digital thermo-hygrograph. The occurrence of salt efflorescences was observed in defined areas, where newly crystallized salts were periodically removed to predict under which climate situation salts are crystallizing in the hall. The moisture content of two walls was investigated using infrared cameras.

After one year of monitoring the climate and the behaviour of the salts, it was possible to predict under which conditions salts will efflorescence. Decay in the "Grottensaal" has been caused mainly by the

transformation of the salts mirabilite to thenardite and vice versa, which depends on the temperature and relative humidity in the hall.

Because of the high moisture content and concentration of salts and concrete in the walls, it will be very difficult to minimise damage processes. But they can be reduced, if it is possible to prevent the influx of water and remove the source of the salt ions. The salt content of the walls will be reduced by compresses.

Einleitung

Die Erhaltung von historischer Bausubstanz stellt Kunstwissenschaftler, Restauratoren, Architekten, Bauingenieure und Naturwissenschaftler nach wie vor große Probleme. Bei Restaurierungsprojekten werden heute in der Regel immer Naturwissenschaftler beteiligt, die Voruntersuchungen durchführen, Maßnahmen begleiten und das Ergebnis in einer Qualitätskontrolle überprüfen (Snethlage 1997).

Die Verwitterung historischer Bausubstanz hat viele Einflußfaktoren, wie z.B. Eintrag von Luftschadstoffen, komplex zusammengesetzte Baumaterialien, angereicherte Salzminerale, erhöhten Feuchtigkeitseintrag oder Klimaschwankungen. Aus diesem Grund wird heute vor einer Restaurierungsmaßnahme in einem Innenraum eines historischen Gebäudes generell eine Schadensanalyse erstellt, die eine Schadensdokumentation, das Herausfinden der Schadensprozesse und in der Regel auch Klimamessungen beinhaltet.

Salzsprengung ist einer der häufigsten und stärksten Schadensprozesse an Baudenkmalern. Es existieren ca. 50 verschiedene Mauerwerkssalze, die unterschiedlich auf wechselnde Klimabedingungen reagieren (Arnold et al. 1990).

Um für ein unter Salzverwitterung leidendes Gebäude Konservierungskonzepte vorzuschlagen, ist es erforderlich, die vorherrschenden Salzsysteme und die klimatischen Verhältnisse zu kennen.

Der Grottenaal im Neuen Palais ist ein solcher Raum, in dem sichtbare Salzschäden insbesondere im Fensterbereich auftreten, deren Ursache und Entwicklung nicht bekannt sind.

Ziel des Projektes ist es, eine Schadensanalyse für den Grottenaal zu erstellen, um anschließend geeignete Konservierungs- bzw. Restaurierungsmaßnahmen zur Verhinderung des weiteren Zerfalls vorzuschlagen.

Grottenaal im Neuen Palais

Das Neue Palais und damit auch der Grottenaal ist unter König Friedrich II. 1763-69 von den Architekten Manger, Büring und Gonthard gebaut worden. Der Grottenaal befindet sich im Erdgeschoß im östlichen Teil des Neuen Palais im Anschluß zum Park Sanssouci.

Die Verkleidung der einzelnen Wände und Säulen ist in jeweils sechs ca. 30 cm breite Streifen unterteilt: weiß-grauer (Großkuzendorfer) Marmor einerseits, Grottierung andererseits.

Drei dieser sechs Streifen sind mit einer einzigartigen Sammlung von verschiedensten Mineralen, Gesteinen und Fossilien unterschiedlichster Herkunft ausgestattet, die im Laufe des Zeitraums von ca. 1765 bis Anfang des 20. Jahrhunderts entstanden ist. Die Ausstattungsstücke wurden von den Preußischen Herrschern gesammelt, bestellt oder sie sind ihnen geschenkt worden, anschließend sind sie dann in die drei Streifen mit Gips als Bettungsmörtel eingebaut worden.

Die anderen drei - im Wechsel mit den Sammlungsstücken - weniger reich ausgestatteten Streifen sind entweder mit Quarzkristallen oder mit glasbestreuten Tropfsteinimitationen aus Stuckgips verkleidet. Die Streifen werden seitlich durch rechteckige Muschel-Schneckenornamente und -rosetten begrenzt.

An einigen Stellen im Grottensaal werden die Streifen durch Muschel- und Schnecken-Grottenornamente sowie glasbestreuten Tropfsteinimitationen aus Stuckgips unterbrochen. Diese Muschel- und Schnecken-Grottenornamente bestehen aus unterschiedlichsten Muscheln-, Schnecken-, Cephalopodenarten, glasbestreuten Blattimitationen aus Eisenblech, Imitationen von Korallen (z.B. aus rotgefärbten Buschzweigen), getrockneten und ausgestopften Tieren (z.B. Fischen und Eidechsen) und dunklen, meist blauen Glasschlackenbruchstücken, die bei der Verhüttung von Eisen anfallen.

Schadenssituation und Untersuchungsmethoden

Es ist eine Schadensdokumentation angefertigt worden, um die derzeitige Schadenssituation im Grottensaal zu erfassen.

Generell nimmt die Schadensintensität nach Westen hin, in Richtung Schloßmitte, ab. Die stärksten Schäden sind in den Fensterbereichen zum Park hin zu verzeichnen.

Die Schadensdokumentation hat gezeigt, daß Salzkristallisationen eine große Rolle bei den Verwitterungsprozessen im Grottensaal spielen. Salzminerale kristallisieren in unmittelbarer Nähe und auf den Wandoberflächen: Zerstörungen der Baumaterialien sind die Folge.

Die Untersuchung der Salzausblühungen verschafft Kenntnis über das schädigende Salzsystem. Begleitende Klimamessungen ermöglichen es, das Risiko weiterer Schädigungen in der Zukunft abzuschätzen. Sind die ablaufenden Schadensprozesse im Grottensaal bekannt, können aufgrund der gewonnenen Erkenntnisse Vorschläge für geeignete Restaurierungs- bzw. Konservierungsmaßnahmen unterbreitet werden.

Ein digitaler Thermohygrograph zeichnete die Lufttemperatur und die relative Luftfeuchte vom Oktober 1997 bis Juli 1999 auf.

Zur Bestimmung der Salze wurden ca. 30 Ausblühungsproben entnommen. Im Labor wurden die Salze mittels Mikroskopie und Mikrochemie (nach Bläuer Böhm 1994) sowie mit Hilfe eines Röntgendiffraktometers identifiziert.

Es wurden 5 Referenzflächen im Grottensaal angelegt, an denen das Kristallisationsverhalten der Salze in Bezug auf das Raumklima beobachtet wurde. Nach der jeweiligen Begutachtung wurden die Referenzflächen mit einem Pinsel gereinigt, so daß nur das Kristallisationsverhalten bis zum nächsten Untersuchungstag festgehalten wurde.

Salze und Raumklima

In allen Salzproben konnte Natriumsulfat festgestellt werden, das in den zwei verschiedenen Phasen Thenardit [Na_2SO_4] und Mirabilit [$\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$] ausblühen kann.

Die Quellen der Na^+ -Salzionen sind alkalische Baumaterialien, die zu verschiedenen Zeiten zur Stabilisierung in die Bausubstanz eingebracht worden sind. Diese Baustoffe enthalten Alkalien (u.a. Na^+), die zu Alkalikarbonaten reagieren. Diese gehen bei geeigneten Feuchtebedingungen mit anderen autochthonen Salzen, z.B. mit den SO_4^{2-} -Ionen des Grotterungsmörtels Gips, Reaktionen ein und wandeln sich in leichtlöslichere Salze - wie z.B. in Natriumsulfate - um.

Verschiedene Untersuchungen (Künzel et al. 1991 oder Laue 1997) haben erwiesen, daß das wechselnde Raumklima eine Rolle bei Zerstörungsprozessen spielen kann, z.B. kann ein Wechsel der relativen Luftfeuchte ein Sichauflösen bzw. die Kristallisation von Salzen hervorrufen.

Das Innenklima des Grottensaals für das Jahr 1998 ist in Fig.1 dargestellt und spiegelt ein gedämpftes Außenklima wider. Die Temperatur pendelt zwischen 5°C und 22°C , die relativen Luftfeuchten variieren überwiegend zwischen 45% und 77%, nur während längerer Trockenperioden sank die relative Luftfeuchte auf Werte um ca. 40%.

Im Frühjahr 1998 und 1999 konnten Kondensationsereignisse beobachtet werden: relative warme Luft dringt in den noch kühlen Grottsaal ein, an kalten Oberflächen kommt es zur Kondensation von Wasserdampf.

Klimamessungen und die Beobachtung der Referenzflächen haben ergeben, daß während des gesamten Untersuchungszeitraums, also das ganze Jahr über, im Grottsaal Salzkristallisationen stattfinden. Dafür sind folgende Gründe ausschlaggebend: Im Oberflächenbereich der Wände verdunstet Wasser aus den mit Ionen angereicherten Mauerwerkslösungen, es handelt sich dabei um aufgestiegene Feuchte und an den Außenwänden zusätzlich dazu um eingedrungenes Oberflächenwasser. Beim Verdunsten konzentriert sich die Salzlösung auf, und es kommt zur Kristallisation von Mirabilit.

Mirabilit [$\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$] ist aber bei den gegebenen Luftfeuchteverhältnissen nicht stabil, sondern wandelt sich bei trockener Luft in Thenardit [Na_2SO_4] um. Bei wieder ansteigender Luftfeuchte rekristallisiert Mirabilit, das geht mit einer Volumenvergrößerung um das 4-fache einher. Das System Wasser - Natriumsulfat ist ausführlich bei Steiger et al. (1998) erklärt.

Jedesmal, wenn die kritische relative Luftfeuchtigkeit, die zur Kristallisation der jeweilig anderen Phase führt, über- oder unterschritten wird, kommt es zu Ausdehnungs- bzw. Schrumpfungprozessen, die der eigentliche Motor für die Zerstörung im Grottsaal sind (Laue et al. 1999).

Raumklima Grottsaal 1998, Tagesmittelwerte

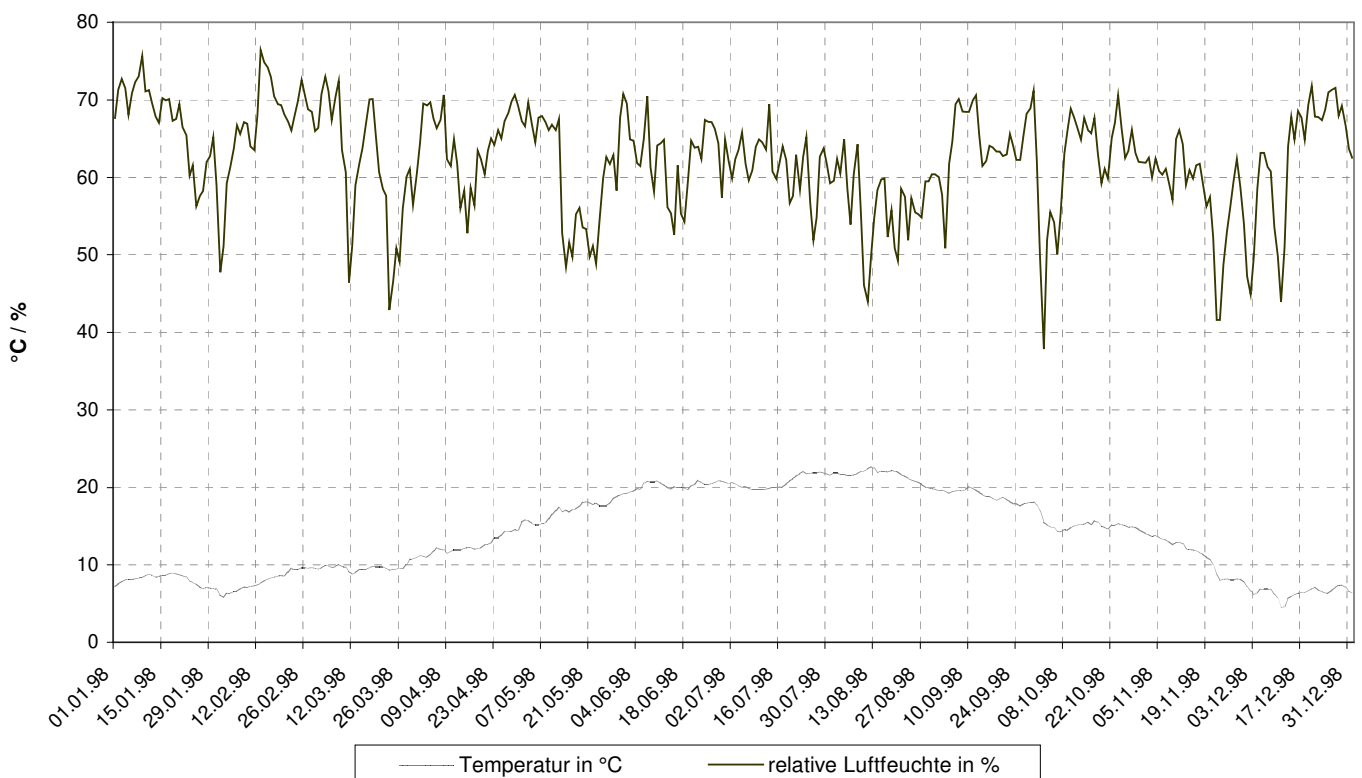


Abb. 1: Raumklima im Grottsaal 1998, Tagesmittelwerte der Temperatur und relativen Luftfeuchte

Schadensentwicklung

Die Kristallisation von Salzen ist die Hauptursache für die zur Zeit im Grottenaal stattfindenden Schäden.

Folgender Ablauf der Schadensprozesse konnte ermittelt werden: Es existiert ein Feuchteeintrag ins Mauerwerk, durch Grundfeuchte und Oberflächenwasser (Spritzwasser). Beim Verdunsten der Mauerwerkslösung konzentriert sich die Salzlösung auf, und es kommt - bei den gegebenen Temperaturbereichen - zur Kristallisation von Mirabilit. Bei trockenen Klimaverhältnissen – zwischen ca. 60% und 75% relativer Luftfeuchte, je nachdem welche Temperatur vorherrscht – findet eine Dehydratisierung von Mirabilit [$\text{Na}_2\text{SO}_4 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$] zu Thenardit [Na_2SO_4] statt. Mirabilit ist bei diesen Feuchteverhältnissen nicht mehr stabil, es verliert sein Kristallwasser, und es kristallisiert Thenardit (siehe Fig.2). Beim erneuten Anstieg der relativen Luftfeuchte findet die Hydratation von Thenardit zu Mirabilit (Einbau von Wasser in das Kristallgitter) statt.

Dieser Effekt, Hydratation und Dehydratation, führt zum stetigen Umkristallisieren der Salze, was jeweils mit einer Volumenzunahme bzw. -abnahme einhergeht, woraus wiederum die beschriebenen Schäden resultieren.

Für die Schadensphänomene sind also einerseits die Kristallisation von neuen Salzen durch Verdunstung der eindringenden Feuchte und andererseits die Umwandlungen der Natriumsulfate von der dehydratisierten in die hydratisierte Form (und umgekehrt) verantwortlich.

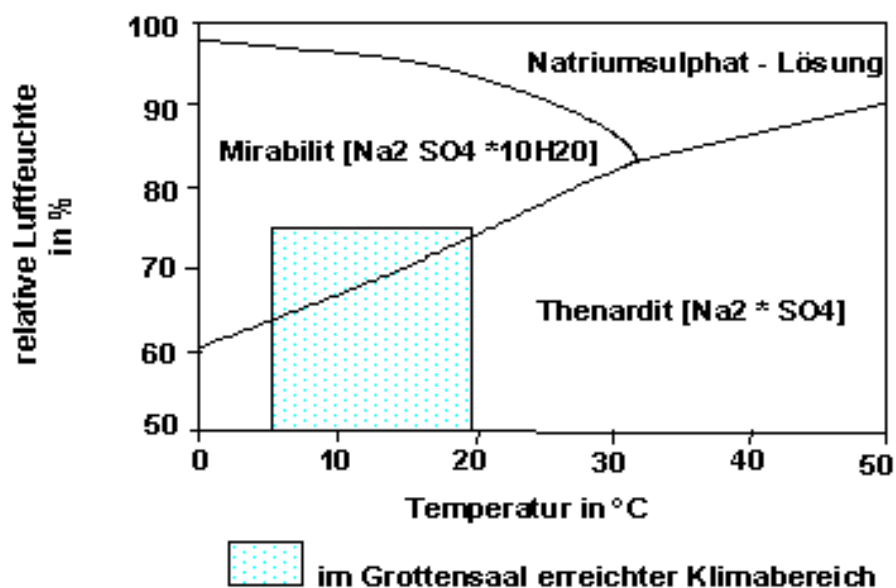


Abb. 2: System Thenardit/Mirabilit/ H_2O in Abhängigkeit von Temperatur und relativer Luftfeuchte (vereinfacht nach Steiger et al. 1998), die erreichten Klimawerte im Grottenaal sind eingetragen

Konservierungsvorschläge

Will man die beschriebenen Schadensprozesse aufhalten, müssten idealerweise der Feuchtenachschub verhindert sowie die Salzquellen entfernt werden.

Die dazu erforderlichen umfangreichen Eingriffe in die historische Bausubstanz sind allerdings aus der Sicht der Denkmalpflege nicht vertretbar.

Aber es ist möglich, an den Stellen, wo zur Zeit eine massive Zerstörung der Baumaterialien durch Salzkristallisation stattfindet, die Salzbelastung in den oberflächennahen Schichten durch den Einsatz von Kompressen zu verringern und damit den Zerstörungsprozess, der durch das wechselnde Raumklima hervorgerufen wird, aufzuhalten. Der Einsatz von mehrmaligem Auftrag (3- bis 4-mal) von feuchten z.B. Cellulose-Kompressen würde zur Verminderung der Salzkristallisation in den Oberflächenschichten führen und damit die Zerstörung verlangsamen.

Solange der Feuchtigkeitseintrag durch Grundfeuchte und durch Oberflächenwasser (Spritzwasser des Niederschlags und bei starkem Regen vom Dach herunterfallendes Wasser) von der Gartenseite her nicht gestoppt wird, muß mit aufsteigender Feuchte in den Wandbereichen zum Garten hin gerechnet werden.

Literatur

ARNOLD, A.; ZEHNDER, K. (1990): Salt weathering on monuments.- Advanced workshop on anal. methodologies for the investigation of damaged stones, Pavia, Italy, 14.-21.September.

BLÄUER BÖHM, C. (1994): Salzuntersuchungen an Baudenkmalern.- Kunsttechnologie und Konservierung, 8, 85 - 103.

KÜNZEL, H.; HOLZ, D. (1991): Bauphysikalische Untersuchungen in unbeheizten und beheizten Gebäuden alter Bauart.- IBP-Bericht FB-32/1991, IRB-Verlag, 88 S.

LAUE, S. (1997): Einfluß des Porenraums und des Raumklimas auf die Verwitterung von Steinen durch lösliche Salze.- Dissertation, Universität Mainz, Tectum Verlag Marburg, Edition Wissenschaft, Reihe Geowissenschaften, 28, 209 S.

LAUE, S.; LORENZ, E. (1999): The „Grottensaal“ of the „New Palace“ in Potsdam, Germany - Non destructive investigations for a conservation concept.- In: Proceedings of 6th International Conference on "Non-destructive testing and microanalysis for the Diagnostics and Conservation of the Cultural and Environmental Heritage", Rom, May 17th - 20th, 843 - 859.

SNETHLAGE, R. (1997): Leitfaden Steinkonservierung: Planung von Untersuchungen und Maßnahmen zur Erhaltung von Denkmälern aus Naturstein.- Fraunhofer-IRB-Verlag, 215 S.

STEIGER, M.; DANNECKER, W. (1998): Die Bedingungen für die Kristallisation verschiedener Salzhydrate am Beispiel Thenardit/Mirabilit.- In: Jahresband „Steinzerfall-Steinkonservierung“, Band 6, 1994 - 1996.

Anschrift des Autors

Dr. Steffen Laue
Universität Potsdam
Institut für Geowissenschaften
Postfach 601553
14415 Potsdam
Tel.: 0331/9775409
Fax: 0331/9775060
Email: laue@geo.uni-potsdam.de

In-situ Analytik von organischen Bodenkontaminationen mit Laser-induzierter Fluoreszenz

H.-G. Löhmannsröben, M. Lemke, L. Schober, R. Schultze

Zusammenfassung

Die Laser-induzierte Fluoreszenz Spektroskopie (LIF-Spektroskopie), ein *in-situ* Meßverfahren für die Bestimmung von Mineralöl und polycyclischen aromatischen Verbindungen in Böden, wird weiter validiert. Hierzu werden standardisierte Referenzböden (sog. Eurosoils) mit verschiedenen Kontaminanten (Mineralöle, Bioöle, polycyclische aromatische Verbindungen) dotiert und LIF-spektroskopisch untersucht. Ein Ringversuch unter Einsatz von Standardverfahren wird im Projektverlauf vorbereitet.

Summary

The validation of *in-situ* laser-induced fluorescence (LIF) spectroscopy for the detection of petroleum hydrocarbons and polycyclic aromatic compounds (PAC), proceeds. Standardized reference soils (the so-called Eurosoils) are doped with different contaminants (petroleum hydrocarbons, vegetable oils, polycyclic aromatic compounds) and analysed using LIF spectroscopy. A round robin test comprising standard methods is prepared in the course of the project.

Projektbeschreibung

Zielsetzung

Die LIF-Spektroskopie für die Untersuchung von Ölkontaminationen und polycyclischen aromatischen Verbindungen in Böden steht kurz vor der Marktreife. Ein praxistaugliches, transportables Demonstrationspektrometer wurde zusammen mit dem Umweltmeßtechnikhersteller Optimare (Wilhelmshaven) bereits fertiggestellt (Projektförderung: Deutsche Bundestiftung Umwelt, Osnabrück) und auf zahlreichen Messen und Ausstellungen präsentiert. Innovative vor-Ort Meßtechnik wie die LIF-Spektroskopie kann jedoch am Markt nur Erfolg haben, wenn eine Validierung des Verfahrens erfolgt ist. Hierzu ist der Vergleich der Resultate mit denen von Standardverfahren notwendig. Für die neue Methode müssen Einsatzbereiche unter Nennung dafür spezifizierter Nachweisgrenzen definiert werden. Ringversuche sind zu konzeptionieren und durchzuführen.

Methoden

Die Arbeitsgruppe von Prof. Löhmannsröben beschäftigt sich sowohl grundlegend als auch anwendungsbezogen mit Photochemie und Laserspektroskopie, wobei die Umweltmeßtechnik ein traditio-

nelles Tätigkeitsfeld der Arbeitsgruppe darstellt. Im Bereich Umweltanalytik wird die Entwicklung der Laser-induzierten Fluoreszenz (LIF) Spektroskopie anwendungsbezogen vorangetrieben. Die LIF-Spektroskopie ist ein innovatives Schnellmeßverfahren, welches für in-situ Messungen von Mineralöl und polycyclischen aromatischen Verbindungen in Böden und Wässern geeignet ist. Die Methode nutzt flexible Lichtwellenleitertechnik und kommt ohne Probenahme und Lösungsmitelesatz aus. LIF-Spektroskopie basiert auf der Fluoreszenzfähigkeit vieler Mineral- und Bioöle.

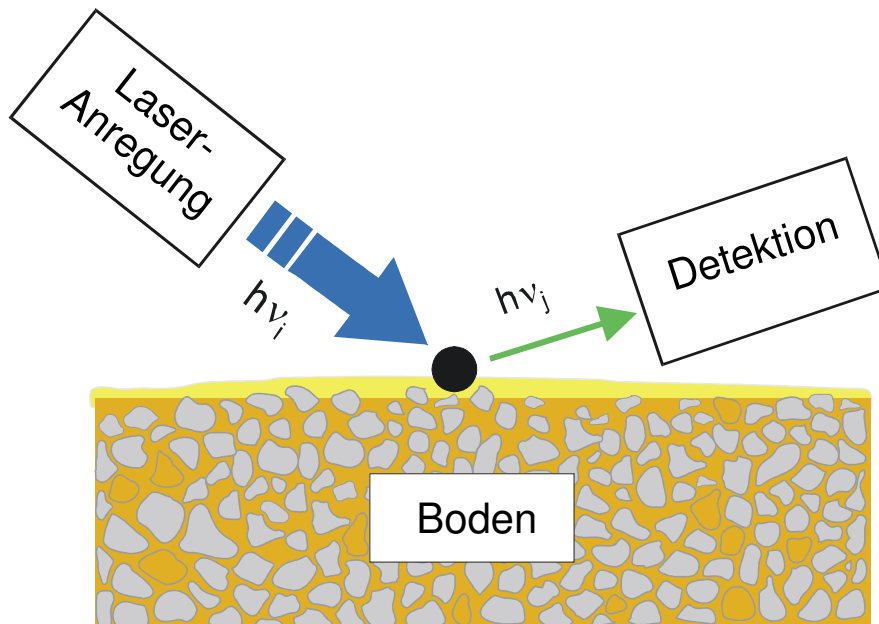


Abb. 1 Funktionsprinzip LIF-Spektroskopie

Typische Nachweisgrenzen der Methode für Mineralölkohlenwasserstoffe (Summe) in Böden liegen unter 200 mg / kg und damit deutlich unter gesetzlichen Richtwerten, wie sie beispielsweise die sog. Holland-Liste nennt (Interventionswert 5000 mg/kg).

Ergebnisse und Diskussion

Abb. 2 zeigt LIF-Spektren einer Feldmeßkampagne, aufgenommen in der mikrobiologischen Bodensanierungsanlage Bilfinger & Berger in Roth (Mittelfranken). Deutlich ist das ausgeprägte Fluoreszenzsignal des kontaminierten Bodens im Vergleich zum Recyclingmaterial der Bauschutt aufbereitung zu erkennen.

LIF-Untersuchung von Realproben

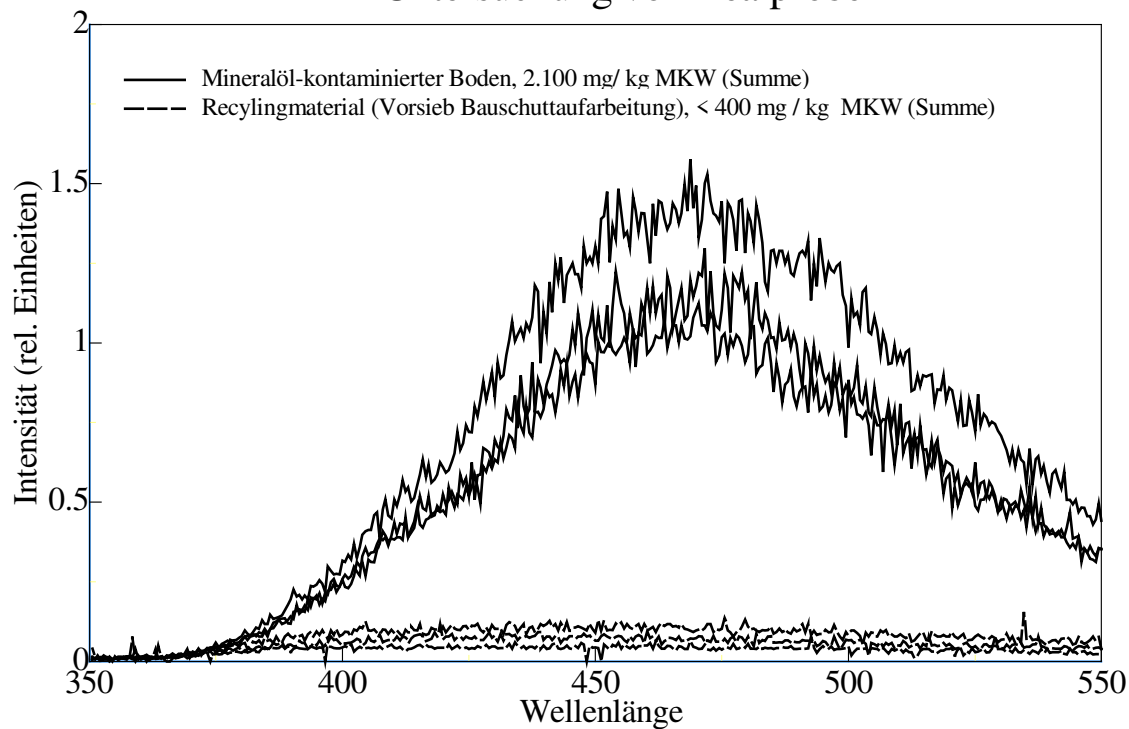


Abb. 2 LIF-Spektrum von Mineralöl-kontaminiertem Boden

Im hier beschriebenen Projekt werden nun weitere repräsentative real-kontaminierte Bodenproben (Realproben) und geeignete Referenzmaterialien (Referenzproben) ausgewählt und charakterisiert. Anhand dieser Proben werden LIF-Kalibrierverfahren entwickelt und optimiert. Bereits bestehende Bibliotheken von MKW- und PAC-LIF-Spektren werden erweitert und optimiert. Zur Vereinheitlichung der Kalibrierverfahren (Berücksichtigung der optischen Bodeneigenschaften) kommt neben der LIF-Spektroskopie auch die diffuse Reflexionsspektroskopie zum Einsatz.

Die im Projekt untersuchten Proben sind sowohl vom Bodentyp her als auch von der Art der Kontamination typisch für europäische Schadensfälle. Die Proben orientieren sich an den Eigenschaftsmustern der sogenannten „Eurosoils“ (fünf repräsentative Böden aus Sizilien, Wales, Schleswig-Holstein, der Normandie und des Peloponnes). Die Kontaminanten umfassen Diesel, Ottokraftstoff, Rohöle und Teeröle. Der Einfluß der Bodenfeuchte wird systematisch untersucht. Die Charakterisierung der Proben beinhaltet insbesondere die Untersuchung der fundamentalen photophysikalischen Eigenschaften von Bodenmatrix, Kontamination sowie der Art und Weise ihrer gegenseitigen Beeinflussung. Vorzugsweise kommen zertifizierte Referenzmaterialien (ZRM) zum Einsatz.

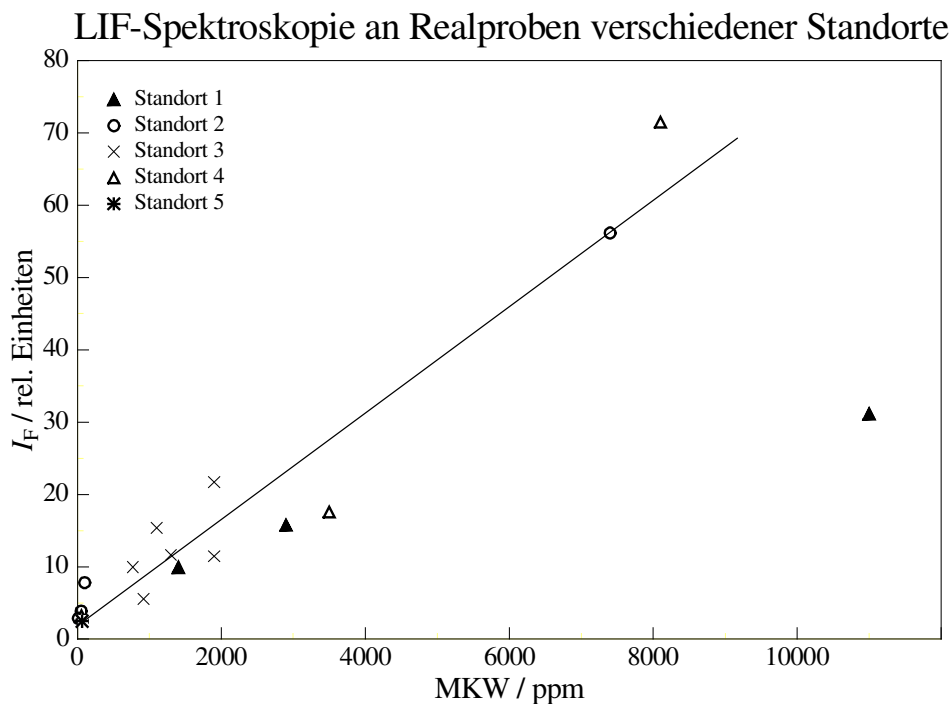


Abb. 3 Validierung der LIF-Spektroskopie mittels Realproben und Referenzanalytik

Das Projekt soll insbesondere zeigen, inwieweit die LIF-Spektroskopie (im Gegensatz zur Analyse gemäß DIN 38409 H18) den toxischen Aromatenanteil im Vergleich zum Aliphatenanteil risikobezogen nachweisen kann. Hierzu kommt vergleichend nicht nur Referenzanalyse nach DIN 38409 H18 (Extraktion mit Freon und nachfolgende infrarotspektroskopische Quantifizierung) zum Einsatz. Insbesondere soll durch ausführliche gaschromatografische Analyse (GC-FID, GC-MS) der Gehalt verschiedener Aromaten- und Aliphatenfraktionen in den Realproben charakterisiert werden, um risikobezogene Daten für die Kalibrierung bereitzustellen.

Literatur

LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; ROCH, T. (2000): „*In-situ* laser-induced fluorescence (LIF) analysis of petroleum product-contaminated soil samples”, J. Environ. Monit., Vol. 2, 17 - 22

ILLENSEER, C.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; ROCH, T.; ZIMMERMANN, U. (1999) „Combination of Laser-Induced Fluorescence (LIF) Spectroscopy and Laser-Based Ion Mobility (LIMS) Spectroscopy for the Detection of PAC and Petroleum Products in Soils“, J. Environ. Monit., zur Publikation eingereicht

LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; SCHÖBER, L. (1999): „Combination of Laser-Induced Fluorescence and Diffuse-Reflectance Spectroscopy for the *In-Situ* Analysis of Diesel-Fuel Contaminated Soils“, Applied Optics, Vol. 38, 1404 - 1410

KUMKE, M. U.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; ROCH, T. (1995): „Fluorescence Spectroscopy of Polynuclear Aromatic Compounds in Environmental Monitoring“, Journal of Fluorescence, Vol. 5, No. 2, 139 - 153

LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; ROCH, T. (1996): "Laserfluoreszenzspektroskopie als extraktionsfreies Nachweisverfahren für PAK und Mineralöle in Bodenproben", Analytiker-Taschenbuch 15, 217 - 253, Springer, Heidelberg

Anschrift der Autoren

Prof. Dr. Hans-Gerd Löhmannsröben
Dr. Matthias Lemke
Lars Schober
Rainer Schultze
Universität Potsdam
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
Professur für Physikalische Chemie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14469 Potsdam

Entwicklung eines optischen Meßsystems zur in-situ Bestimmung von Fluoreszenztracern, Sauerstoff und pH-Wert in Gewässern (FLUTRAS: Fluorescence Tracer Detection System)

H.-G. Löhmannsröben, T. Hengstermann, M. Lemke, L. Schober, R. Schultze

Zusammenfassung

Im Projekt FLUTRAS wird ein praxistauglicher integrierter Multi-Parameter Sensor of der Basis optischer Meßtechnik (sog. Optroden) zur Bestimmung von Umweltschadstoffen, Sauerstoff und pH-Wert in Wässern entwickelt. Das Gerät wird darüberhinaus für hydrogeologische Untersuchungen mit Fluoreszenztracern geeignet sein.

Summary

The project „FLUTRAS“ will produce a practically orientated, integrated multi-parameter sensor based on optical measuring technology (so-called optrodes). The sensor will serve for the detection of environmental pollutants, oxygen und pH in waters. FLUTRAS will also be suitable for hydrogeological investigations using fluorescence tracers.

Projektbeschreibung

Ziel des Projekts FLUTRAS ist ein praxistauglicher integrierter Multi-Parameter Sensor of der Basis optischer Meßtechnik (sog. Optroden) zur Bestimmung von Umweltschadstoffen, Sauerstoff, pH-Wert sowie Fluoreszenzmarkern in Wässern. Aufgabe der AG Löhmannsröben sind photophysikalische und photochemische Grundlagenuntersuchungen insbesondere zu Kalibrierung und Querempfindlichkeit des Sensors.

Zum Nachweis von fluoreszierenden organischen Verbindungen (FOC, fluorescent organic compounds) wie Mineralölen, und den persistenten, toxikologisch besonders relevanten polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen wird FLUTRAS mit Laser-induzierter Fluoreszenzspektroskopie arbeiten. Insbesondere unter Einsatz zeitaufgelöster Fluoreszenzmeßtechnik können Ölsorten voneinander unterschieden werden und es gelingt die Diskriminierung von Hintergrundsignalen, verursacht durch in allen realen Wasserproben vorhandenen Huminstofffraktionen.

Die Bestimmung des im Wasser gelösten Sauerstoffs ist ebenfalls mittels Fluoreszenzmeßtechnik (z.B. Phasenfluorimetrie) möglich. In Gegenwart von Sauerstoff beobachtet man Fluoreszenzlöschung, d.h. einen Rückgang der Intensität des Fluoreszenzlichts, der über Kalibrierfunktionen zum Sauerstoffgehalt in Bezug gesetzt werden. Die Bestimmung des pH-Werts von Wasserproben erfolgt ebenfalls fluoreszenzspektroskopisch. Bei Fluoreszenzfarbstoffen, die polare, protische Gruppen enthalten (Carboxylate, Hydroxylgruppen...), ist die Fluoreszenzfähigkeit pH-abhängig und kann ebenfalls über Kalibrierverfahren zur pH-Bestimmung verwendet werden.

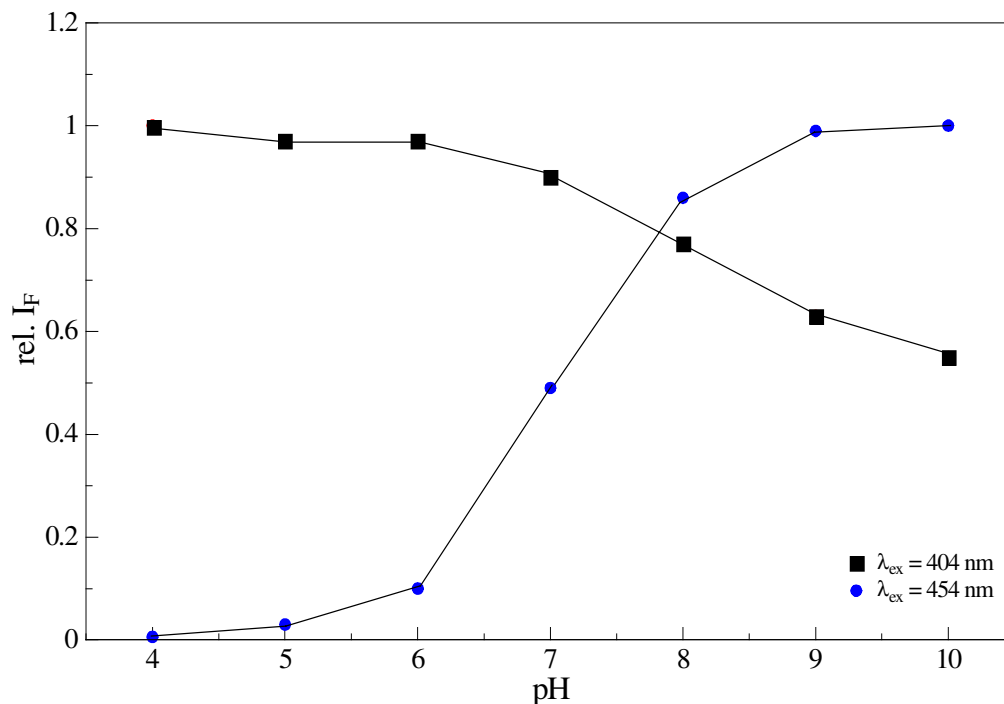


Abb. 1 Optische Bestimmung des pH-Werts

Literatur

KUMKE, M. U.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; ROCH, T. (1995): „Fluorescence Spectroscopy of Polynuclear Aromatic Compounds in Environmental Monitoring“, *Journal of Fluorescence*, Vol. 5, No. 2, 139 - 153

LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; KUMKE, M. U.; MEYER, T.; ROCH, T.; ZIMMERMANN, U. (1995): "Laser-Induced Fluorescence Spectroscopy of Polynuclear Aromatic Compounds and Model Oils in Humic Acid- and Soil-Containing Compartments" *Field Screening Methods for Hazardous Wastes and Toxic Chemicals*, Proc. AWMA, Vol. VIP-47, 825 - 836 (1995). 2172

KRETSCHMANN, S.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; MEYER, T. (1996): "Aqueous Ozonation of 3,9-Perylenedicarboxylic Acid (PDA) in the Presence of Humic Substances and Soil Investigated with LIF-Spectroscopy" *Polycyclic Aromatic Compounds* 9, 357 - 363

SHIRSHOVA, L. T.; KHOMUTOVA, T. E.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; SKRIVANEK, T.; RICHTER, J.: "The Response of Humic Substances to Soil Percolation" *Proc. 7th Nordic Symposium on Humic Substances in Soil and Water*, D. O. Andersen, G. Becher (Eds.), Agder College 1999, 77 – 79, ISBN 82-7117-384-7 (extended abstract)

ILLENSEER, C.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; SKRIVANEK, T.; ZIMMERMANN, U. (1999): "Laser spectroscopy of humic substances" in: *Understanding Humic Substances. Advanced Methods, Properties and Applications*, E. H. Ghabbour, G. Davies (Eds.), Royal Society of Chemistry, 129 – 145

ZIMMERMANN, U.; SKRIVANEK, T.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G. (1999): „Fluorescence quenching of polycyclic aromatic compounds by humic substances: 1. Methodology for the determination of sorption coefficients“ *J. Environ. Monit.*, 1, 525 – 532

Anschrift der Autoren

Prof. Dr. Hans-Gerd Löhmannsröben
Theo Hengstermann
Dr. Matthias Lemke
Lars Schober
Rainer Schultze
Universität Potsdam
Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
Professur für Physikalische Chemie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14469 Potsdam

Untersuchung von organischer Bodensubstanz und Bodengasen mit laser-spektroskopischer in-situ Meßtechnik

H.-G. Löhmannsröben, F. Schael, O. Reich, M. Lemke, L. Schober

Zusammenfassung

Im Projekt werden natürliche organische Bodenbestandteile (Humus) charakterisiert und in Hinblick auf ihre Rolle bei der CO₂-Bilanz untersucht. Die Untersuchungen werden in einem Modellsystem (Bodenkammer) mittels eines *in-situ* Lasermeßsystems (Humus/Bodengas-Monitor) durchgeführt. Das Verbundprojekt soll Hinweise liefern, welche Regulationsmechanismen Böden in Hinblick auf die anthropogen bedingte Erhöhung der atmosphärischen CO₂-Konzentration aufweisen.

Summary

In the course of the project natural organic soil constituents (humics) are characterized. The investigations focusses on the role of humic substances in the formation and deposition of carbon dioxide (CO₂ balance). Research is conducted with the help of a soil containing model system and an *in-situ* laser-based monitoring system for humic substances and soil gases.

Projektbeschreibung

Die organische Bodensubstanz und der CO₂-Austausch zwischen Boden und Atmosphäre sind von großer Bedeutung für den lokalen und den globalen Kohlenstoffhaushalt. Die natürlichen organischen Bodenbestandteile (Humus) spielen bei der CO₂-Bilanz eine wichtige Rolle, so daß die Mechanismen der Humus-Stabilisierung und damit verbundene Regulationsmechanismen relevant sind insbesondere in Hinblick auf die anthropogen bedingte erhöhte atmosphärische Kohlendioxidkonzentration und die Reaktion der Böden auf diese Veränderungen. Im Verbundprojekt wird die Humus-Fraktion in Böden charakterisiert und quantitativ bestimmt. Bodengaskonzentrationen und -flüsse werden empfindlich und in Hinblick auf mikrobiologische Aktivitäten möglichst isotopenselektiv analysiert. Des weiteren werden zusätzlich Parameter wie Wassergehalt, Temperatur, pH-Wert der Böden ermittelt.

Im Vorhaben werden seitens der AG Löhmannsröben vorrangig drei Ziele verfolgt. Erstens wird eine Bodenkammer zur Untersuchung von Böden aufgebaut und in Betrieb genommen. Die Kammer wird zweitens mit einem laserspektroskopischen Meßsystem versehen (Humus/Bodengas-Monitor), wobei *in-situ* Meßtechniken (u.a. Laser-induzierte Fluoreszenz (LIF) Spektroskopie, Diodenlaserspektroskopie für Absorptions- und Remissionsmessungen) zum Einsatz kommen, um das Verhalten der Böden störungsfrei untersuchen zu können.

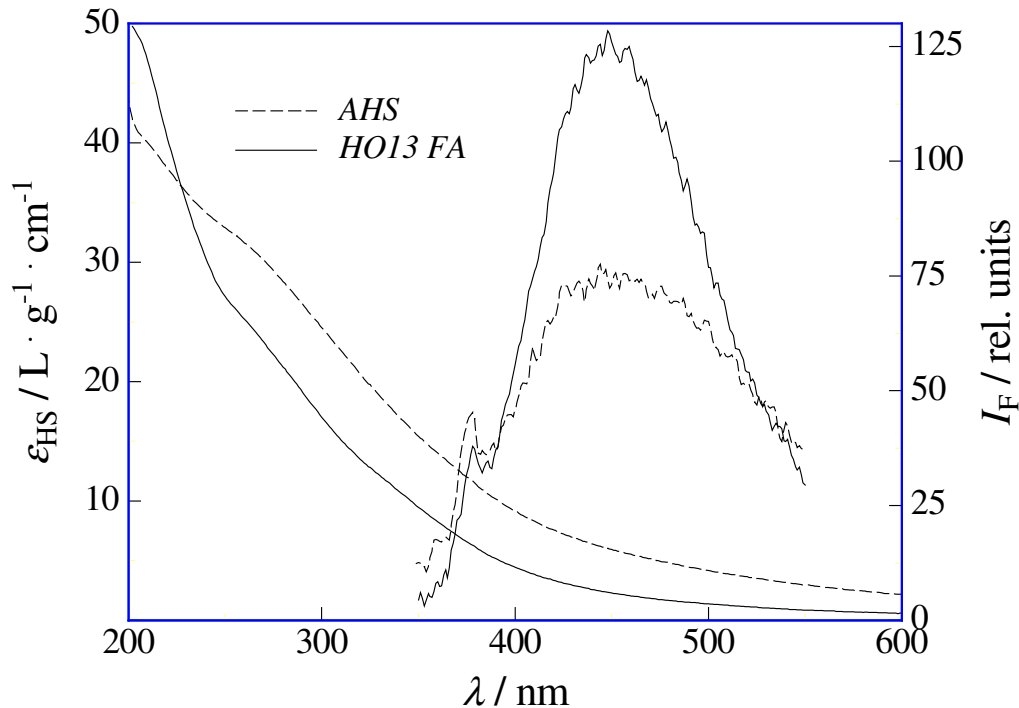


Abb. 1 Absorptions- und fluoreszenzspektroskopische Charakterisierung von Huminstoffen

Schließlich werden drittens im Rahmen interdisziplinärer Kooperationen Bodenproben untersucht, die z.B. aus Freilandexperimenten mit erhöhten atmosphärischen CO₂-Konzentrationen stammen (Projekt FACE, free carbon dioxide enrichment)

Literatur

ILLENSEER, C.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G.; SKRIVANEK, T.; ZIMMERMANN, U. (1999): "Laser spectroscopy of humic substances" in: Understanding Humic Substances. Advanced Methods, Properties and Applications, E. H. Ghabbour, G. Davies (Eds.), Royal Society of Chemistry, 129 – 145

ZIMMERMANN, U.; SKRIVANEK, T.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G. (1999): „Fluorescence quenching of polycyclic aromatic compounds by humic substances: 1. Methodology for the determination of sorption coefficients“ J. Environ. Monit., 1, 525 – 532

SCHAEEL, F.; REICH, O.; LÖHMANNSRÖBEN, H.-G. (1999): "Near infrared diode laser spectroscopy of organic compounds in turbid aqueous solution" J. Near Infrared Spectrosc., submitted for publication

Anschrift der Autoren

Prof. Dr. Hans-Gerd Löhmannsröben
 Dr. Frank Schael
 Oliver Reich
 Dr. Matthias Lemke
 Lars Schober
 Universität Potsdam
 Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
 Professur für Physikalische Chemie
 Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
 14469 Potsdam

Automatisierung der Leckageerkennung an Deponieoberflächenabdichtungen

E. Lück, M. Eisenreich, U. Spangenberg, M. Schütte

Zusammenfassung

Zur Kontrolle von Deponieoberflächenabdichtungen mit eingebauter Kunststoffolie werden zum Teil Überwachungssysteme eingesetzt, die auf gleichstromgeoelektrischen Methoden beruhen. Die um Größenordnung unterschiedlichen Leitfähigkeiten der Kunststoffbahnen gegenüber den Erd- und Müllschichten führen dazu, daß Leckagen innerhalb des Kunststoffes erkannt und geortet werden können. Allerdings ist die elektrische Leitfähigkeit von Böden keine Materialkonstante, sondern variiert in Abhängigkeit von den Witterungsbedingungen. Zeitlich variable Bodenfeuchte und Variationen in der Bodentemperatur führen zu Änderungen in der elektrischen Leitfähigkeit und damit zu zeitlich veränderlichen Abbildern entsprechender Leckagen.

In dem an der Universität Potsdam gemeinsam mit der Firma PROGEO Monitoring begonnenen Forschungsvorhaben sollen diese Zusammenhänge detailliert untersucht werden.

Auf einer bereits abgedeckten Deponie (Deponie Kleinmachnow bei Potsdam) sind elektrische Widerstandsmessungen, Wassergehaltsbestimmungen und Temperaturmessungen vorgesehen, die die Korrelationen zwischen den elektrischen und hydrologischen Größen liefern. Mit Hilfe entsprechender Software werden Szenarien erstellt, die für verschiedene Deponieaufbauten das Abbild der Leckagen modellieren.

Das Projekt wird finanziert durch die Stiftung Industrieforschung.

Summary

Waste deposits which are sealed at the surface can be controlled by geophysical methods. Especially geoelectrical measurements are often used. The great differences in the electrical conductivities between plastics and soil are useful to detect and locate a leakage within the synthetics. Nevertheless the electrical conductivity of soil is not constant but depends on water content and Temperature. The temporal variation of soil Moisture and Temperature leads to different images of a leakage.

The University of Potsdam started together with PROGEO Monitoring GmbH a project to investigate these correlation in detail. At a covered deposit (Kleinmachnow near Potsdam) electrical measurements are planed. Additional hydrological investigations and measurements of soil Temperature should be carried out. With help of special software we want to model several situations concerning the image of different leakage.

This project is supported by the Stiftung Industrieforschung.

Projektbeschreibung

Nach groben Schätzungen des Bundesumweltamtes gibt es in Deutschland momentan ca. 80.000 alte Deponieflächen, von denen schätzungsweise 10% zu sanieren sind. Es wird davon ausgegangen, daß zusätzlich ca. 80.000 Altlastenflächen existieren. Genauere Zahlen existieren im Moment nicht.

Altlasten werden häufig durch Abdeckungs- bzw. Abdichtungssysteme gesichert. TA Abfall (TA - Technische Anleitung) und TA Siedlungsabfall fordern eine äußerst teure Kombinationsabdichtung, bestehend aus mineralischen Schichten und Kunststoffdichtungsbahnen. Die TA räumen allerdings auch die Möglichkeit einer gleichwertigen Abdichtung ein. Eine Vielzahl von Systemen (einfache Bodenabdeckungen, Oberflächenversiegelung, mehrschichtige Abdecksysteme mit einer Dichtung, Mehrschichtsysteme mit Verbunddichtungsbahnen) sind auf dem Markt (Melchior, 1995). Abb. 1 zeigt schematisch den Schnitt durch Deponieoberflächenabdichtungssysteme.

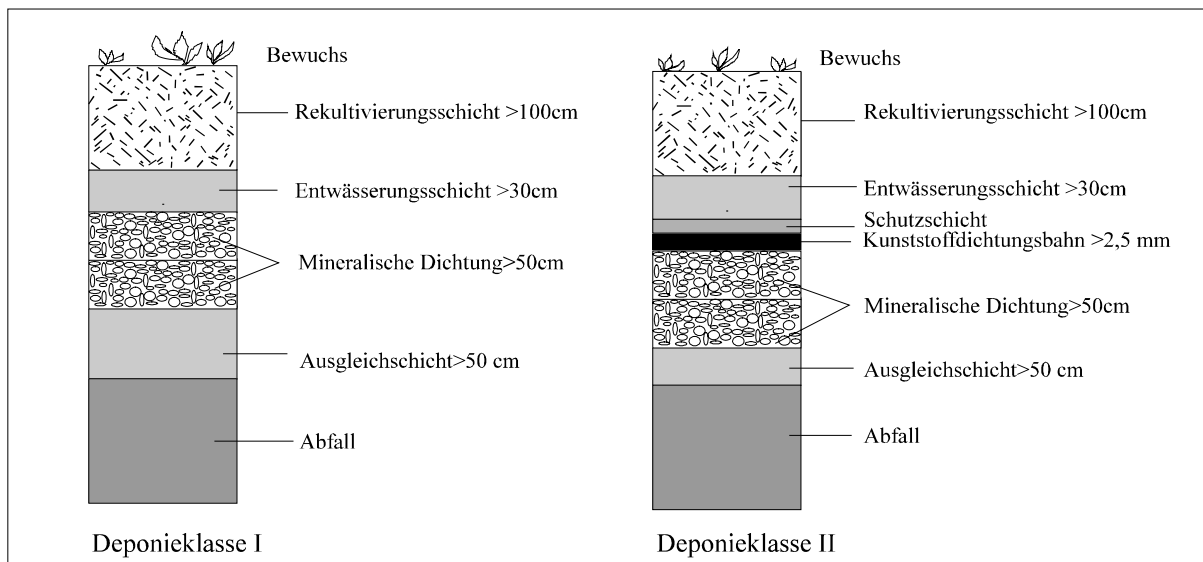


Abb. 1 Deponieoberflächenabdichtungssysteme (umgezeichnet nach TA Siedlungsabfall)

Deponien bedürfen der Nachsorge. Gefordert werden regelmäßige Kontrollen der Funktionalität der Oberflächenabdichtungssysteme. Die TA Abfall fordert: "Das Deponieoberflächenabdichtungssystem ist so auszuführen, daß Undichtigkeiten für die Dauer der Nachsorgephase lokalisiert und repariert werden können". Als Deponieüberwachungssysteme sind unmittelbare und mittelbare Überwachungen denkbar. Die flächige Verlegung von entsprechenden Kontrollsensoren ist einer Überwachung mit punktuell angelegten Pegeln oder zusätzlich eingebrachte Drainschichten vorzuziehen, da eine sofortige Erkennung der Leckagen möglich ist und die Ortung der Fehlstellen schnell und in Abhängigkeit von der Dichte der Sensoren punktgenau erfolgen kann. Zur Überwachung von Deponieabdichtungen sind in den letzten Jahren mehrere Systeme entwickelt worden bzw. noch in der Entwicklung, die alle gemeinsam die Änderung physikalischer Parameter auswerten. Die von PROGEO (H. Hahn und A. Rödel, 1995), ORPHEUS (Kuchenbrod, 1997) und SENSOR (Nosko, 1998) entwickelten Systeme basieren auf der Änderung der elektrischen Widerstände. Andere Verfahren werten die Dielektrizitätszahlen bzw. die Ausbreitungsgeschwindigkeiten elektromagnetischer Wellen (Brandelik, 1998) oder die Temperaturänderungen (Hurtig, 1994) aus.

Abb. 2 zeigt schematisch den Aufbau des von PROGEO entwickelten Leckageerkennungssystems, welches auf gleichstromgeoelektrischen Messungen beruht. Es werden unterhalb und oberhalb der

Kunststoffdichtungsbahn spezielle Elektrodenarrays verlegt. Eine Steuerelektronik erlaubt es, verschiedene Elektroden miteinander zu kombinieren und die jeweiligen Widerstandsmessungen durchzuführen. Die Leckortung erfolgt, indem jede einzelne obere Elektrode mit jeder einzelnen unteren Elektrode verknüpft wird und die Widerstandswerte ermittelt werden.

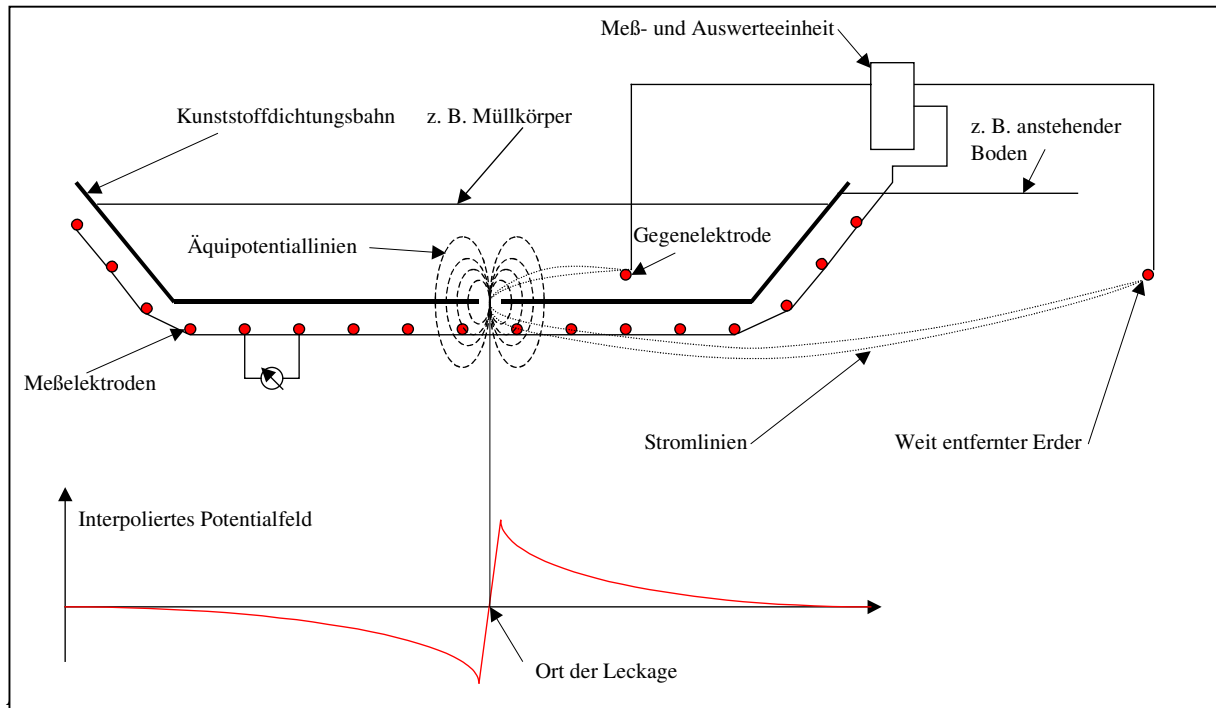


Abb. 2 Schematischer Aufbau eines Leckageerkennungssystems (umgezeichnet nach GEOLOGGER SYSTEMS, 1999)

Mit hoher Zuverlässigkeit können Leckagen durch Auswertung der aufgezeichneten Zeitreihen qualitativ erkannt werden. Es ist aber noch weitgehend unklar, welche Korrelationen quantitativ zwischen Leckageanzeige und Art und Ausmaß der Leckage bestehen. Beschädigungen der Abdichtung können nur dann erkannt werden, wenn aufgrund von Durchfeuchtungen signifikante Änderungen der physikalischen Parameter auftreten. Beschädigungen an der Kunststoffdichtungsbahn lassen sich somit nur bei ausreichender Feuchte an der Schadstelle erkennen. Die Feuchteverhältnisse sind von einer Reihe von Randbedingungen abhängig. Faktoren wie Mächtigkeit und Zusammensetzung der Rekultivierungsschicht, Geometrie der abgedeckten Altlast, Wasserhaushalt der Oberflächenabdichtung, Vegetation und Klima beeinflussen die gemessenen Größen, die zur Leckagedetektion ausgewertet werden. Die Kenntnisse vom Wasserhaushalt und Korrelation zwischen diesem und den elektrischen Kenngrößen sind unumgängliche Voraussetzungen für quantitative Aussagen.

Durch die Arbeiten auf der Deponie in Kleinmachnow sollen Korrelationsanalysen zwischen den geoelektrischen Meßgrößen einerseits und den hydrologischen Kennwerten andererseits ermöglicht werden. Entlang einer Trasse werden zeitgleich sowohl gleichstromgeoelektrische Untersuchungen durchgeführt als auch Wassergehalts- und Temperaturmessungen vorgenommen. Für einen sandigen, gewachsenen Boden im Land Brandenburg ist dies von uns bereits schon einmal realisiert worden.

Abb. 3 zeigt den Zusammenhang zwischen den gemessenen elektrischen Widerständen und den jeweiligen Bodenfeuchtwerten. Letztendlich ist der hier abgebildete funktionale Zusammenhang zwischen der Feuchte und dem elektrischen Widerstand auch die physikalische Grundlage für die auf Gleichstromgeoelektrik basierenden Überwachungsmethoden von Deponien.

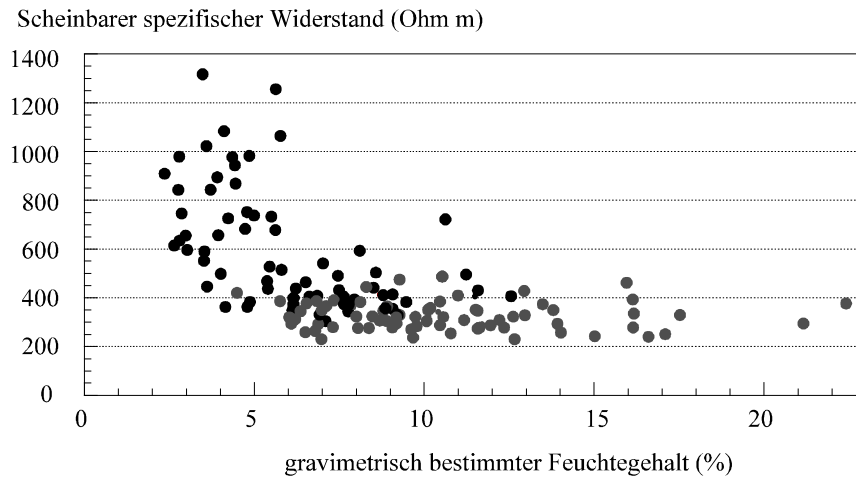


Abb. 3 Zusammenhang zwischen elektrischem Widerstand und gravimetrisch bestimmter Bodenfeuchte

Auf Grund der zahlreichen Faktoren, die die elektrischen Meßgrößen beeinflussen, sind die Verhältnisse sehr komplex und variieren von Deponie zu Deponie. Die verschiedenen Einflußfaktoren bewirken unterschiedliche Abbilder der Lecks. Über Modellrechnungen und statistische Auswertungen sollen die Ergebnisse verallgemeinert werden bzw. Algorithmen entwickelt werden, die die Anpassung an die jeweiligen konkreten Standortbedingungen erlauben. Modellierungen sollen den Einfluß unterschiedlicher Schichtaufbauten und der Geometrie der Systeme sowie den Klima- und Vegetationseinfluß simulieren. Über Modellrechnungen soll z.B. die Frage beantwortet werden, unter welchen Bedingungen eine Leckageerkennung möglich ist und wie groß der Schaden sein muß, der erkannt werden kann. Diese Modellierungsergebnisse münden in Algorithmen zur Bewertung unterschiedlicher Deponien und Altlasten und zur Anpassung der Erkennungsroutinen an die jeweiligen Standortbedingungen. In allen früheren Arbeiten ist immer wieder betont worden, daß eine wesentliche Fehlerquelle für die Modellierungen darin zu suchen ist, daß zu wenig Meßwerte aus dem Gelände vorliegen. Deshalb ist in dem Projekt die Kombination von Felduntersuchungen und Modellierung vorgesehen.

Die geplanten Untersuchungen - insbesondere die Feldexperimente - können nicht losgelöst von Praxisbetrieben erfolgen. Sie werden gemeinsam mit der Firma PROGEO durchgeführt, die derartige Überwachungssysteme schon lange anbietet.

Literatur

BRANDELIK, A. (1998): Dichtungskontrollsystem *TAUPE* - Abschlußbericht zum Forschungsprojekt

GEOLOGGER SYSTEMS (1998): Systemlösungen für den vorbeugenden Gewässerschutz. Leckmeldeanlagen für Großflächenabdichtungen. Firmenprospekt

HAHN, H.; RÖDEL, A. (1995): Entwicklung eines Verfahrens zur Leckdetektion und -ortung an Deponieabdichtungen. In: H. AUGUST, U. HOLZLÖHNER, T. MEGGYES: Optimierung von Deponieabdichtungssystemen, Teilprojekt 61, BMBF-Verbundforschungsvorhaben 'Weiterentwicklung von Deponieabdichtungssystemen

KUCHENBROD, W. (1997): Long time experiences with extensive high resolution geomagnetic and geoelectric mappings of former waste disposals and industrial sites, in: Field Screening Europe, Hrsg. J. Gottlieb, Kluwer Academic Publishers, S. 117 - 120

LÜCK, E., EISENREICH, M., DOMSCH, H., BLUMENSTEIN, O. (2000): Geophysik für Landwirtschaft und Bodenkunde. Hrsg. von der Arbeitsgruppe Stoffdynamik in Geosystemen im Umweltzentrum der Universität Potsdam durch O. BLUMENSTEIN und H. SCHACHTZABEL

MELCHIOR, S. (1995): Systeme zur Oberflächenabdichtung von Deponien und Altlasten. Mitt. Dt. Bodenkundliche Gesellschaft 76, S. 1337 – 1340

NOSKO, V., F-OIRY (1998): SENSOR DDS technology - modern and high effective way of testing integrity of geomembranes, 14. Fachtagung: Die sichere Deponie, 26./27. Februar 1998, Weiterbildungs- und Technologie-Forum Würzburg, pp. 11

TA Abfall, Teil 1 (1991): Technische Anleitung zur Lagerung, chemisch/physikalischen, biologischen Behandlung, Verbrennung und Ablagerung von besonders überwachungsbedürftigen Abfällen vom 12.03.1991. Der Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit

TA Siedlungsabfall (1993): Technische Anleitung zur Verwertung, Behandlung und sonstigen Entsorgung von Siedlungsabfällen, vom 14.05.1993. Der Bundesminister für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit

Anschriften der Autoren

Erika Lück
Manfred Eisenreich
Ute Spangenberg
Universität Potsdam
Institut für Geowissenschaften
PF: 60 15 53
14415 Potsdam

Marc Schütte
GEOLOGGER SYSTEMS GmbH
GVZ
Hauptstraße 2
14979 Großbeeren

Einführung geophysikalischer Meßverfahren zur Ermittlung von Bodenkennwerten für die teilflächenspezifische Bewirtschaftung in der KSG Agrargesellschaft mbH Kassow

E. Lück, M. Eisenreich, H. Domsch

Zusammenfassung

Durch die teilflächenspezifische Landwirtschaft sollen sowohl ökonomische als auch ökologische Effekte erzielt werden. Optimierte Aussaat, bedarfsgerechte Düngung und variable Herbizidausbringung reduzieren die Aufwandsmenge und die Grundwasserbelastung. Eine wesentliche Voraussetzung für eine teilflächenspezifische Bewirtschaftung ist die Kenntnis der Heterogenität der Felder und Schläge. Die Variabilität innerhalb eines Schlages ist aus der normalen Perspektive in den meisten Fällen nicht sichtbar. Momentan werden Ertragskarten, Daten der Reichsbodenschätzung, Luftbilder, Geländemodelle und punktuelle Bodenanalysen zur Flächendifferenzierung herangezogen. Auf der Suche nach effektiven und zuverlässigen Methoden zur Erfassung der Heterogenitäten werden in jüngster Zeit auch geophysikalische Verfahren getestet. Insbesondere die Kartierung der elektrischen Leitfähigkeit der Böden kann eine wesentliche Informationsebene liefern. Zwischen der elektrischen Leitfähigkeit und der Bodentextur bestehen enge Zusammenhänge. Die Textur wiederum hat einen wesentlichen Einfluß auf weitere landwirtschaftlich relevante Größen. Momentan wird die Geophysik in der Landwirtschaft noch nicht routinemäßig eingesetzt. In dem Pilotbetrieb - KSG Agrar GmbH Kassow in Nord-Ost-Deutschland - wird die Methode der elektromagnetischen Leitfähigkeitskartierung unter Praxisbedingungen getestet.

Das Projekt wird finanziert durch die Deutsche Bundesstiftung Umwelt und das Hochschulsonderprogramm HSP III.

Summary

The site specific agriculture allows a cost reduction and also the protection of the environment. Different processes can be done in dependence on the particular variation of soil conditions. The success depends mainly on the knowledge about the spatial heterogeneity of the field. Different methods are used to divide large fields into sub areas with nearly the same soil conditions. Yield maps, earlier soil valuations, air photographs, topography models and soil samples could be taken account. At the moment geophysical methods are also under consideration. Especially maps of the soil conductivity could be helpful. Yield potency within one field depends mainly on the soil texture, the topography and the soil Moisture. There is a good correlation between the soil conductivity and the soil texture. The method of the electromagnetic mapping is tested now in the company KSG Agrar GmbH Kassow in the Northern Germany under field conditions.

This project is supported by the 'Deutsche Bundesstiftung Umwelt' and the 'Hochschulsonderprogramm HSP III.

Projektbeschreibung

Die Entwicklung der satellitengestützten Orientierung im Gelände (GPS, global position system), die technischen Möglichkeiten der schnellen Verarbeitung großer Datenmengen und die computergestützte Maschinensteuerung haben in der Landwirtschaft die Perspektive eröffnet, landwirtschaftliche Maßnahmen differenziert in der Fläche anzuwenden. Luftbilder und Ertragskartierungen zeigen, daß das Pflanzenwachstum innerhalb eines Schlages oftmals sehr unterschiedlich ist. Ertragsdifferenzierungen sind wesentlich abhängig von den Heterogenitäten der Böden, der Geländetopographie und der Bodenfeuchteverteilung.

Die Reaktion auf die Ungleichförmigkeit des Bodens durch den Landwirt ist die teilflächenspezifische Bewirtschaftung, bei der Arbeitsgänge wie Aussaat, Düngung und Pflanzenschutz den Erfordernissen des jeweiligen Standortes weitgehend angepaßt und innerhalb eines Schlages die Betriebsmittel in Menge und ggf. Zusammensetzung entsprechend variiert werden.

Erst das Wissen über die räumliche Verteilung der interessierenden Größen ermöglicht die Einführung einer teilflächenspezifischen Bewirtschaftung. Wissenschaftler, Landwirte, Agrar-Berater, Ökologen und Agrarökonomien stellen in gleichem Maße die Frage nach den Steuergrößen für eine standortangepaßte Bewirtschaftung. Während die landwirtschaftliche Technik vorhanden ist, stellt die großflächige und repräsentative Erfassung der Schlageigenschaften die Hauptschwierigkeit dar. Zur Zeit werden als wichtigste Grundlagen für eine Flächendifferenzierung die Reichsbodenschätzung, Luftbilder und Ertragskarten, Geländemodelle sowie punktuell gewonnene Bodenanalysen verwendet. Jeder dieser Datensätze liefert eine Informationsebene zur Beschreibung der räumlichen Heterogenitäten der Felder. Dennoch ist das Problem der Heterogenitätserfassung noch nicht hinreichend gelöst.

An dieser Stelle kann die Geophysik einen wichtigen Beitrag leisten. Geophysikalische Methoden bieten die Möglichkeit, große Flächen engmaschig und vergleichsweise schnell zu kartieren. Dadurch kann eine zusätzliche Informationsebene zur Präzisierung der Applikationsdateien gewonnen werden. Insbesondere die Größe der elektrischen Leitfähigkeit des Bodens korreliert eng mit den landwirtschaftlich interessierenden Größen wie Textur, Bodenfeuchte und Gehalt an organischer Bodensubstanz. Im Rahmen des Projektes "Geophysikalische Kennwerte zur Kennzeichnung landwirtschaftlicher Flächen für die teilflächenspezifische Bewirtschaftung" wurde an der Universität Potsdam gemeinsam mit dem ATB untersucht, welche Möglichkeiten geophysikalische Verfahren bieten, um dem Landwirt großflächige Kartierungen zur Verfügung stellen zu können.

Die von 1997 bis 1999 innerhalb dieses Projektes durchgeführten umfangreichen Studien haben bewiesen, daß geophysikalische Kartierungen der elektrischen Leitfähigkeit des Bodens eine sehr wertvolle Ergänzung zur Charakterisierung der Bodeneigenschaften liefern können (LÜCK u.a., 2000). Es hat sich gezeigt, daß geophysikalische Kartierungen als Zwischenglied zwischen der großmaßstäbigen Datenaufnahme aus der Luft und der punktuellen Beprobung einen wertvollen Beitrag darstellen. Es wurden Testfelder sowohl auf sandigen als auch auf lehmigen Böden untersucht, um die Ergebnisse verallgemeinern zu können. Nachgewiesen werden konnte ein sehr enger Zusammenhang zwischen der elektrischen Leitfähigkeit einerseits und Textur und Wassergehalt andererseits (vgl. Abb. 1).

Da verschiedene Ursachen für die physikalische Differenzierung verantwortlich sein können, sind gezielte Probenahmen notwendig. Während ohne geophysikalische Kartierungsmethoden enge Proberaster und Laboruntersuchungen notwendig sind, kann man durch eine Kopplung beider Methoden die Zahl der Proben erheblich reduzieren.

Für die Erstellung der Leitfähigkeitskarten werden die Schläge abgefahren und in gleichmäßigen Zeitintervallen Leitfähigkeitswerte ermittelt. Die räumliche Dichte der Meßwerte hängt von dem Abstand der Fahrspuren (Abb. 2, links), der Fahrgeschwindigkeit und dem gewählten Zeittakt der

Messungen innerhalb der Fahrspuren ab. Bei einer Geschwindigkeit von 15 km/h und einer Abtastrate von 1 s erhält man einen mittleren Meßpunktabstand von etwa 4 m in den Fahrspuren. Die Ortskoordinate wird zeitgleich über DGPS ermittelt und aufgezeichnet.

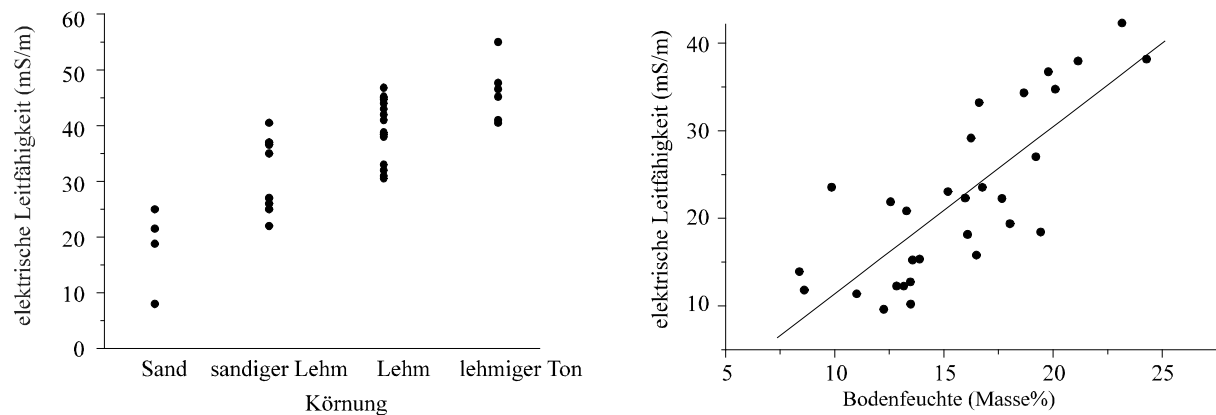


Abb. 1 Zusammenhang zwischen der elektrischen Leitfähigkeit und der Bodenart (links) und der elektrischen Leitfähigkeit und der Bodenfeuchte (rechts) für einen lehmigen Standort

Leitfähigkeitskartierungen bilden deutlich flächenhafte Änderungen der Bodentextur ab. Abb. 2 zeigt im rechten Teil ein Beispiel einer elektromagnetisch kartierten Leitfähigkeitsverteilung für ein Feld in Kassow. Ähnlich wie in den Karten der Reichsbodenschätzung wird bei der elektromagnetischen Kartierung mittels EM-38 (hergestellt von GEONICS) ein Tiefenbereich (hier bis 1.5 m Tiefe) integral erfaßt. Das Feld kann durch einen sandigen Lehmboden charakterisiert werden. Hellere Gebiete mit Leitfähigkeiten kleiner als 7 mS/m bilden sandige Regionen ab. Die Regionen mit Leitfähigkeiten größer als 20 mS/m weisen auf lehmige und/oder torfhaltige Strukturen hin. Die Feldarbeiten wurden gemeinsam mit der Universität Rostock durchgeführt, die über DGPS-Messungen die Georeferenzierung der geophysikalischen Daten ermöglicht hat. Der Einsatz eines hochgenau arbeitenden GPS-Systems gestattete die gleichzeitige Erstellung eines digitalen Geländemodells.

Der Vergleich der Leitfähigkeitskarte und der topographischen Informationen führt zu einem besseren Verständnis der Leitfähigkeitsunterschiede innerhalb des Schlags. So kann man z.B. zwischen sandigen bzw. lehmigen Kuppen und sandigen bzw. lehmigen Senken unterscheiden.

Auf diesen Untersuchungen aufbauend soll die Leitfähigkeitskartierung in einem landwirtschaftlichen Produktionsbetrieb eingeführt und erprobt werden. Die KSG Kassow (Mecklenburg-Vorpommern) bietet mit ihrem technischen Potential und den bereits gesammelten Erfahrungen zur Teilflächenspezifik einen ausgezeichneten Standort für die geplanten Arbeiten. Für einen definierten Feuchtestatus (Feldkapazität) soll die "Grundinventur" der Flächen durchgeführt werden. Wiederholungskartierungen zu unterschiedlichen Jahreszeiten liefern Aussagen über den aktuellen Wasserhaushalt des Bodens. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse über die räumliche Heterogenität des Bodens sollen in die Praxis umgesetzt werden und in Düngeempfehlungen münden, die den konkreten Standortbedingungen angepaßt sind.

Die KSG Kassow ist außerdem einer der Beispielbetriebe für das vom BMBF geförderte Verbundprojekt "Managementsystem ortsspezifischer Pflanzenbau zur Erhöhung der Wirtschaftlichkeit der Landwirtschaft und zur Förderung ihrer Umweltleistungen" (bekannt unter dem Namen "PREAGRO"), was zu einer engen Kooperation zwischen beiden Projekten führt.

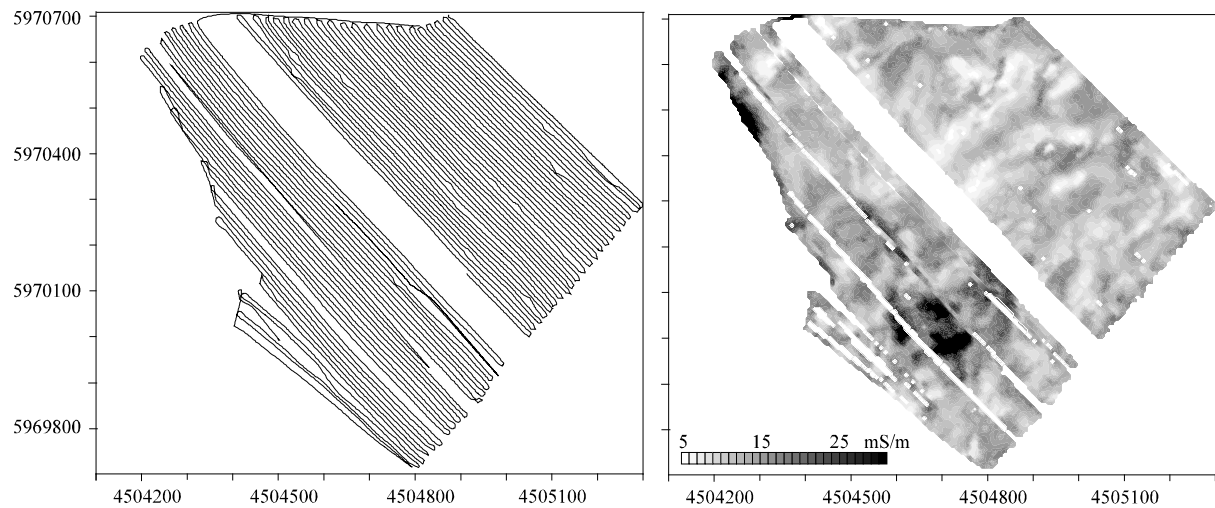


Abb. 2 Elektromagnetische Kartierung für den Schlag 111 in Kassow
 links: Meßraster in Form der Fahrspuren bestimmt über DGPS
 rechts: Karte der elektrischen Leitfähigkeit

Literatur

LÜCK, E.; EISENREICH, M.; DOMSCH, H.; BLUMENSTEIN, O. (2000): Geophysik für Landwirtschaft und Bodenkunde (Hrsg.: Stoffdynamik in Geosystemen, Band 4, ISSN 0949-4731)

Anschriften der Autoren

Erika Lück
 Manfred Eisenreich
 Universität Potsdam
 Institut für Geowissenschaften
 PF 60 15 53
 14415 Potsdam

Horst Domsch
 Institut für Agrartechnik Bornim
 Abteilung Technik im Pflanzenbau
 Max-Eyth-Allee 100
 14469 Potsdam-Bornim

Entwicklung von Labormustern zur Analyse von phosphororganischen Verbindungen und Pestiziden

A. Makower

Zusammenfassung

Es wurde eine neue Methode zur Analyse von reversiblen und irreversiblen Inhibitoren (Carbamate und phosphororganische Verbindungen) der Butyrylcholinesterase entwickelt. Hierbei wird ein Inhibitor an die mit Peroxidase markierte Butyrylcholinesterase (Bienzym) gebunden. Die Abtrennung des nicht umgesetzten Bienzymkonjugates erfolgt an einer Affinitätsmatrix, die mit Paraoxon-Derivat belegt ist. Über die Peroxidaseaktivität des nicht an die Affinitätsmatrix gebundenen Inhibitor-Bienzymkonjugat-Komplexes wird die Inhibitorkonzentration gemessen. Mit diesem universellen Prinzip wurde für die drei reversiblen Inhibitoren, Carbofuran, Carbetamid, Carbaryl eine untere Nachweisgrenze von 10^{-10} - 10^{-11} mol/L (2×10^{-2} - 2×10^{-3} µg/L) erreicht. Für die irreversiblen Inhibitoren, Paraoxon, Diisopropylfluorophosphat, Trichlorphon, erzielten wir eine untere Nachweisgrenze von 10^{-12} mol/L (2×10^{-4} µg/L). Mit dieser Methodik wurden phosphororganische Verbindungen und Carbamate weltweit am empfindlichsten analysiert.

Summary

A new method for the detection of reversible and irreversible inhibitors of butyrylcholinesterase (carbamates and organophosphorus compounds) has been developed. In the first step, the inhibitor is bound to a peroxidase-labelled butyrylcholinesterase (bienzyme). Free bienzyme is separated from inhibitor-bound bienzyme using an affinity matrix, covered with a paraoxon-derivative. The inhibitor-bound bienzyme passes the affinity matrix and is detected by the peroxidase activity. Using this general principle, the lower detection limits for three reversible inhibitors, carbofuran, carbetamid and carbaryl were determined to be 10^{-10} - 10^{-11} mol/L (2×10^{-2} - 2×10^{-3} µg/L). For the irreversible inhibitors, paraoxon, diisopropylfluorophosphate and trichlorphon, the lower detection limit was 10^{-12} mol/L (2×10^{-4} µg/L). This method allows the most sensitive analysis of carbamates and organophosphorus compounds world-wide.

Literatur

MAKOWER, A.; BARMIN, A.; MORZUNOVA, T.; EREMENKO, A.; KUROCHKIN, I.; BIER, F.; SCHELLER, F. W. (1997): Affinity enzymometric assay for detection of organophosphorus compounds. *Anal. Chim. Acta* 357 (1997) 13-20

MAKOWER, A.; BARMIN, A.; SCHELLER, F. W. (2000): Eine neue Methode zur hochempfindlichen Analyse von Pestiziden. *Biospektrum* 2 (2000) 119-121

Anschrift des Autors

Dr. Alexander Makower
Universität Potsdam
Institut für BiochemieBiologie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14476 Golm

Biomolekulare Erkennungssysteme für die Biochemische Analytik

F. W. Scheller

Zusammenfassung

An der Professur für Analytische Biochemie wurden unter anderem die Bindungs-Eigenschaften monoklonaler Antikörper (von Prof. B. Micheel, Professur für Biotechnologie) gegen Diuron und andere Harnstoff-Pestizide charakterisiert. Dazu wurde in erster Linie mit dem Biacore 2000 Gerät gearbeitet, das auf der Grundlage der Oberflächen-Plasmon-Resonanz die direkte Messung der Antikörper-Antigen-Bindung erlaubt. Bindungskonstanten, Assoziations- und Dissoziationsraten sowie die Abhängigkeit der Bindung von der Temperatur und von Lösungsmittelzusätzen wurden bestimmt. Bindungsstudien wurden auch mit synthetischen Peptiden durchgeführt.

Es wurde auch gezeigt, daß in ELISA (Enzymimmunoassays) Antigene in organischen Lösungsmitteln wie Hexan oder Ethanol eingesetzt werden können. Solche Lösungsmittel werden z.B. für die Extraktion von Pestiziden aus Bodenproben verwendet.

In Kooperation mit anderen Arbeitsgruppen werden weiterhin Möglichkeiten untersucht, rekombinante, bispezifische, gentechnisch gezielt veränderte und modifizierte Antikörper für vereinfachte Immuntests einzusetzen. Nachweisverfahren für katalytische Antikörper wurden ausgearbeitet und optimiert.

Summary

Amongst the activities of our group within the INK only those with direct relevance for environmental analysis are described here. Monoclonal antibodies (prepared within the INK from Prof. B. Micheel, Chair of Biotechnologie) against diuron and other phenylurea pesticides were characterized. The binding studies were performed using a Biacore 2000 instrument, which is based on surface plasmon resonance and allows the direct monitoring of binding events, e.g. of antibody binding to immobilized antigen. Binding equilibrium constants, association and dissociation rates as well as the dependence of the binding behaviour on temperature and concentration of organic solvents. Besides, binding of synthetic peptides to the model antigen was studied.

It was also shown that antigens can be presented in pure organic solvents (ethanol, n-hexane) in microtiter plate ELISAs. Such solvents are used for the extraction of various pesticides from soil samples.

Our investigations also include the use of recombinant, bispecific, genetically engineered and modified antibodies for improved immunoassays. Finally, methods for the detection of catalytic antibodies were developed.

Projektbeschreibung

In derzeit 11 Teilprojekten des Innovationskollegs werden sowohl grundlegende als auch angewandte Aspekte der biomolekularen Erkennung mit Relevanz für die biochemische Analytik untersucht.

Ein zentrales Thema ist die Erzeugung verschiedenartiger biologischer Erkennungselemente, die eine Modellverbindung binden und ggf. auch spalten können. Als Erkennungselemente werden Antikörper (nur bindende und katalytische), Peptide (Peptid-Bibliotheken), Nucleinsäuren (Aptamere, Aptazyme) und Peptidnucleinsäuren (PNA) untersucht. Als Modellverbindung wurde ein Phenylharnstoff-Derivat gewählt und synthetisiert, das strukturell eng verwandt ist mit einer Reihe von Phenylharnstoff-Pestiziden und auch selbst ein potentiell Pestizid ist.

Andere Teilprojekte beschäftigen sich z.B. mit der Modifizierung von Sensor-Oberflächen, dem gerichteten Elektronentransport in Modellsystemen oder der Struktur und Stabilität von Antikörpern und Enzymen.

Literatur (Auswahl)

STÖCKLEIN, W. F. M.; WARSINKE, A.; MICHEEL, B.; HÖHNE, W.; WOLLER, J.; KEMPTER, G.; SCHELLER, F. W. (1997): Detection of phenylurea pesticides with biospecific interaction analysis (BIA): Kinetic investigations. NATO-ASI Series 2 Environment, Vol. 38 (D.P. Nikolelis, U.J. Krull, J. Wang and M. Mascini, eds.) Biosensors for direct monitoring of environmental pollutants in field, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht 1997, 155 - 162

STÖCKLEIN, W. F. M.; WARSINKE, A.; MICHEEL, B.; KEMPTER, G.; HÖHNE, W.; SCHELLER, F. W. (1998): Diphenylurea hapten sensing with a monoclonal antibody and its Fab fragment: kinetic and thermodynamic investigations. Anal. Chim. Acta 362 (1998) 101 - 111

STÖCKLEIN, W. F. M.; Rohde, M.; Scharte, G.; Behrsing, O.; WARSINKE, A.; MICHEEL, B.; SCHELLER, F. W. (2000): Sensitive detection of triazine and phenylurea pesticides in pure organic solvent by enzyme linked immunosorbent assay (ELISA): stabilities, solubilities and sensitivities . Anal. Chim. Acta 405 (2000) 255 - 265

Anschrift des Autors

Prof. Dr. Frieder W. Scheller
Universität Potsdam
Institut für Biochemie und Biologie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14476 Golm

Biosensor-Stabilität

F. Scheller

Zusammenfassung

Auf verschiedenen Workshops wurden Ergebnisse zur Stabilität von Biosensoren vorgestellt und diskutiert.

Summary

On several workshops results concerning the stability of biosensors were represented and discussed.

Projektbeschreibung

Im Mittelpunkt dieses Projekts stehen vier Workshops, auf denen die Teilnehmer über die Ursachen der Instabilität von Proteinen (Enzymen, Antikörpern) in Biosensoren und Maßnahmen zur Erhöhung der Konformations- und funktionellen Stabilität der Proteine sowie der Lebensdauer von Biosensoren diskutieren und ihre eigenen Ergebnisse präsentieren können. Die Workshops bieten zudem ein Forum zur Vereinigung der Interessen von Forschern aus der Industrie und aus den staatlichen Forschungseinrichtungen. Außerdem wird der Austausch von Wissenschaftlern zwischen den Partnern finanziell gefördert.

Die Schwerpunkte der Workshops sind:

1. Workshop: Protein-Stabilität
2. Workshop: Immobilisierung / Stabilisierung
3. Workshop: Matrix-Effekte
4. Workshop: Mikroumgebung von Biokomponenten und Biokompatibilität

Außerdem fand eine vergleichende Studie zur Immobilisierung und Stabilisierung des Enzyms Lactat-Oxidase statt, an der 12 Gruppen teilnahmen. Die Ergebnisse wurden auf dem 3. Workshop vorgetragen und diskutiert.

Literatur

ICB Münster: Biosensor Stability (gesammelte Beiträge der einzelnen Workshops)

Anschrift des Autors

Prof. Dr. Frieder W. Scheller
Universität Potsdam
Institut für Biochemie und Molekulare Physiologie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14476 Golm

Biosensoren für die direkte vor-Ort Überwachung von Umwelt-Schadstoffen

W. Stöcklein

Zusammenfassung

Auf verschiedenen Workshops wurden Ergebnisse zur Stabilität von Biosensoren vorgestellt und diskutiert.

Summary

On several workshops results concerning the application of biosensors for direct field monitoring of environmental pollutants were represented and discussed.

Projektbeschreibung

Im Mittelpunkt dieses Projekts stehen sechs Workshops, auf denen die Teilnehmer über die Entwicklung neuer preiswerter Biosensoren zur direkten Überwachung oder zum Screening von Schadstoffen in der Umwelt diskutieren und ihre eigenen Ergebnisse präsentieren können. Außerdem wird der Austausch von Wissenschaftlern zwischen den Partnern finanziell gefördert. Damit soll die Zusammenarbeit insbesondere zwischen Partnern der EU- und osteuropäischer Staaten katalysiert und die Anbahnung von Forschungsprojekten erleichtert werden. Darüberhinaus fanden zwei Strategie-Diskussions-Treffen auf der Führungsebene in Athen statt, im Mai 1999 und Mai 2000.

Die Schwerpunkte der sechs Workshops sind:

1. Workshop: *Umwelt-Aspekte der Biosensorik* (u.a. Raumluft-Analytik; Methodik, Strategien)
2. Workshop: *Direkte Transduktion der molekularen Erkennung* (u.a. Probenahme, Sensor-Oberflächen, Erkennungselemente, Immunosensoren, DNA-Sensoren)
3. Workshop: *Biosensoren für vor-Ort-Messungen* (u.a. tragbare Geräte, Automation, kontinuierliche Messung, Einweg-Sensoren, mikrobielle Sensoren)
4. Workshop: *Multidimensionale Sensoren* (u.a. Sensor Arrays, synthetische Rezeptoren, Biosensoren für Schadstoffe in organischen Lösungsmitteln)
5. Workshop: *Labor-Prototypen* (u.a. Mikro-Manufaktur; Evaluierung, Validierung, Massenproduktion)
6. Workshop: *Kommerzialisierung* (u.a. Biosonden, Test Kits, ökonomische Aspekte)

Literatur

NATO-ASI Series 2 Environment, Vol. 38 (D.P. Nikolelis, U.J. Krull, J. Wang and M. Mascini, eds.)
Biosensors for direct monitoring of environmental pollutants in field, Kluwer Acad. Publ., Dordrecht
1997

INCO Copernicus IC15-CT96-0804 Biosensors for direct monitoring of environmental pollutants in
field. Mehrere Newsletters.

Anschrift des Autors

Dr. Wolfgang Stöcklein
Universität Potsdam
Institut für Biochemie und Biologie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14476 Golm

Integrierte Immuno-Extraktions-Probenahme und tragbarer Biosensor-Prototyp für vor-Ort Messungen (Kurztitel: INExSPORT)

U. Wollenberger

Zusammenfassung

Im bisherigen Projektzeitraum sind Antikörper gegen Phenol, 4-Nitrophenol (4-NP) und Trichlorphenol gewonnen worden, mit denen Mikrotiterplatten-ELISA (enzyme linked immunosorbent assays) entwickelt worden sind. Mit diesen konventionellen ELISA Tests sind nun die genannten Phenole in komplexen Medien meßbar. Die Matrixeffekte sind vernachlässigbar gering. In Kombination mit sensitiven Biosensoren zur Quantifizierung der Enzym- bzw. Redoxmarker gelang es bereits, eine Labor-Version eines Immunofließsystems zur Messung von 4-Nitrophenol zu entwickeln (E-FIA). Beispielsweise kann die in homogener Phase ablaufende Bindung des Haptens (4-Nitrophenol) an den Antikörper in Konkurrenz mit β -GAL-Hapten-Konjugat (Tracer) nach einer Trennung in einer Protein G Säule mit einem GDH- oder CDH-Sensor gemessen werden (Abb. 1). Dabei wird entweder die freie oder die gebundene Fraktion des Tracers nach dem Trennschritt bestimmt.

Für einen Einsatz dieser Methode in einem portablen Prototyp war eine Miniaturisierung der Arbeitselektrode und der Fließzelle notwendig. Der erste Schritt in dieser Richtung war die Verwendung einer Dickschicht-Enzymelektrode und einer speziell entwickelten miniaturisierten Fließzelle. Abb. 2 zeigt Kalibrierkurven für 4-NP, die mit einer E-FIA gekoppelt mit einem GDH-Biosensor erhalten wurden, sowohl für die Messung von freier als auch gebundener Tracer-Fraktion. Der Prototyp eines portablen Meßgeräts ist bereits erfolgreich für Phenolmessungen in Abwasserproben bei einem kürzlich durchgeführten Feldtest eingesetzt worden.

Summary

The work so far in INExSPORT has led to that antibodies for phenol, 4-nitrophenol (4-NP) and trichlorophenol. The ELISAs developed are able to perform accurate measurements of these analytes when present in a complex mixture of structurally related compounds. The matrix effect was negligible. An appropriate combination of immunoassays may allow to specifically determine which nitrophenols are present in a sample, independently of if they are alone or in combination with other analytes also recognised by the antibodies.

Two different label-detecting biosensors have been developed, that could be potential candidates as detectors in the biosensor prototype and these have been incorporated as detection units in some of the developed FIAs for 4-NP.

E-FIAs based on the flow principles shown in Fig. 1 were developed for the 4-NP using either a CDH or a GDH biosensor as label detector. Each of the systems was tested in two different configurations, by measuring either the free or the bound tracer fractions after the separation step.

In order to be suitable for a final portable prototype, the miniaturisation of the working electrode and the flow cell was necessary. The first step in this direction was done by coupling the previously developed E-FIA with a GDH biosensor detection, using a thick-film-enzyme modified electrode and a specially designed miniaturised flow cell. Fig. 2 shows calibration graphs for E-FIAs coupled with a GDH-biosensor, both for the measurement of the free and the bound tracer fractions. Potentially the label and biosensor can be exchanged to others, but the protein G or A will be used as the basic format.

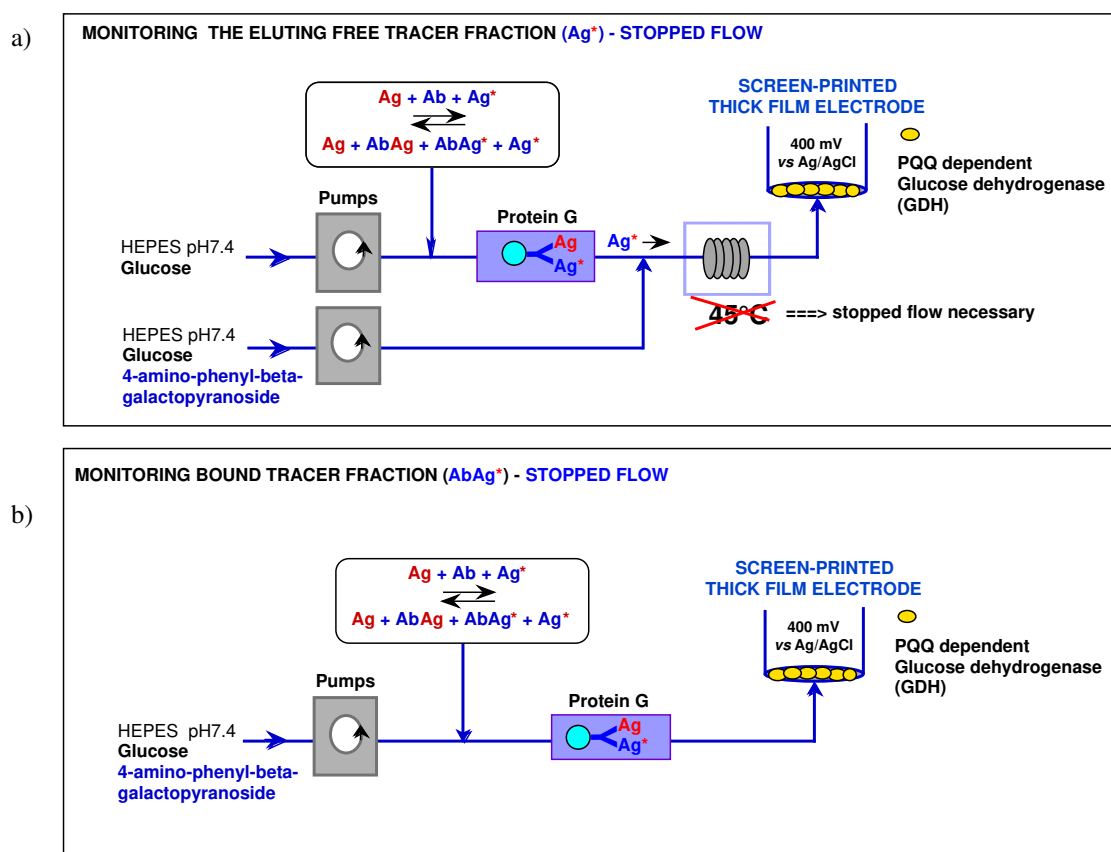


Figure 1 Two different flow principles based on separation with a protein G column for measurement of either bound (Fig. 1b) or free tracer fraction (Fig. 1a), exemplified for a GDH sensor as the label detector.

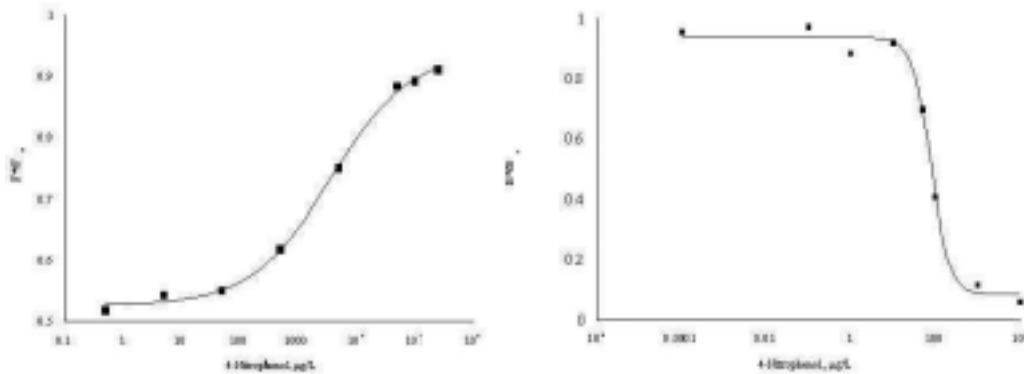


Figure 2: Calibration for 4-NP and main assay parameters in an E-FIA using β -GAL as label and GDH biosensor as label detector. Measurement of free (A) vs. bound fraction (B).

Projektbeschreibung

Ziel ist die Entwicklung eines tragbaren Biosensor-Prototypen zur selektiven vor-Ort-Messung von Detergenzien und deren Metaboliten. Der Biosensor soll on-line mit einer Probenahme-Einheit gekoppelt werden. Vorgesehen ist ein aktiver Austausch und Vergleich mit Ergebnissen, die mit anderen fortgeschrittenen Probenahme- und Messtechniken erzielt wurden, in einem koordinierenden WASTE WATER CLUSTER (WWC).

Der WWC vereinigt fünf europäische Forschungsprojekte innerhalb des Bereichs *Umwelttechnologien*. Das Ziel ist ein besseres Verständnis der Umwandlung, des Verbleibs und der Toxizität einer ausgewählten Gruppe industrieller Schadstoffe, die in die Wasser-Resourcen eingetragen wurden, unter Zuhilfenahme ergänzender Probenahme- und fortgeschrittener Messtechniken. Die erwarteten Ergebnisse sollten bessere Überwachungs-Daten für die Risikobewertung von Abwässern ermöglichen, und auf lange Sicht zu einer saubereren, gesünderen und nachhaltigen Umwelt für die europäischen Bürger führen.

Phenole, Detergenzien und Metabolite davon (z.B. Phenolderivate) in Oberflächen-, Ab- und Grundwasser stellen ein zunehmendes Umweltproblem in ganz Europa dar. Die meisten der Metabolite sind ebenso wie ihre Toxizität unbekannt aufgrund des Fehlens analytischer Methoden. Es gibt daher einen dringenden Bedarf nach neuen und selektiven Techniken, die die spezifische und empfindliche Bestimmung verschiedener Phenole und Detergenzien erlauben, und zwar sowohl vor-Ort als Frühwarnsystem, als auch im Labor für die Identifizierung neuer Detergens-Metabolite.

Das Projekt konzentriert sich auf die Entwicklung einer immuno-basierenden Probenahme-Vorrichtung auf der Grundlage von „unterstützten Flüssigmembranen“ (supported liquid membranes, SLM), die on-line an einen Biosensor-Prototypen gekoppelt ist. Dieser soll leicht austauschbare biologische Einweg-Einheiten enthalten, unter Einschluß von: 1) Erkennung der Zielsubstanz durch Antikörper schon bei der Probenahme, 2) Trennung von freiem und gebundenem Antikörper bzw. Analyt in kontinuierlichen Immuno-Fließsystemen, und 3) Messung des eluierten Tracers (markierter Analyt) mit einem Enzym-Biosensor. Das Immuno-Fließsystem und der Enzymsensor werden im Biosensor-Prototyp untergebracht sein, welcher in einfacher Weise on-line an die SLM Probenahmevorrichtung zu koppeln sein soll. Der Biosensor-Prototyp wird so konstruiert, daß die Technologie leicht auf andere Gebiete als Phenol- und Detergens-Messung übertragen werden kann.

Literatur

NISTOR, C.; ROSE, A.; MORENO, A.; WOLLENBERGER, U.; EMNÉUS, J.: Enzyme based biosensors as label detectors in competitive flow immunoassays. In Vorbereitung.

NISTOR, C.; EMNÉUS, J. (1998): An enzyme flow immunoassay using alkaline phosphatase as the label and a tyrosinase biosensor as the label detector. *Anal. Commun.* 35 (1998) 417 - 419

ROSE, A.; PFEIFFER, D.; SCHELLER, F. W.; WOLLENBERGER, U.: Enzyme modified thickfilm sensor for sensitive measurements of phenolic compounds. *Fresenius Z. Anal. Chem.*, eingereicht

OUBIÑA, A., BALLESTEROS, B.; GALVE, R.; BARCELÓ, D.; MARCO, M.-P. (1999): Development and Optimization of an Indirect Enzyme-Linked ImmunoSorbent Assay for 4-Nitrophenol. Application in Certified Water Samples. *Anal. Chim. Acta* 387 (1999) 255 - 266

Wollenberger, U.; Neumann, B. (1997): Quinoprotein glucose dehydrogenase modified carbon paste electrode for the detection of phenolic compounds. *Electroanal.* 9 (1997) 366 - 371

Scheller, F. W.; Bauer, C.; Makower, A.; Wollenberger, U.; Warsinke, A.; Bier, F. (im Druck): Immunoassays using enzymatic amplification electrodes, in: *Immunosensors and Devices for Molecular Recognition* (Ed. G.Gizeli, C.Lowe) Taylor and Francis

Anschrift der Autorin

Dr. Ursula Wollenberger
Universität Potsdam
Institut für Biochemie und Biologie
Karl-Liebknecht-Str. 24 - 25
14476 Golm