Kurzbericht

Teil I des Schlussberichts – Universität Freiburg (UFR), AG Fleck

Verbundprojekt FreshTwin · FKZ 16IS22048D · Laufzeit 01.12.2022 – 30.09.2025 (nach kostenneutraler Verlängerung um 4 Monate)

1. Ausgangspunkt und Zielsetzung

Die Universität Freiburg (UFR, AG Fleck) war von Projektbeginn an Teil des FreshTwin-Konsortiums. FreshTwin verfolgte das Ziel, mittels innovativer Messmethoden (VIS/NIR- und Hyperspektralspektroskopie) und spezialisierter KI-Modelle die Bestimmung und Prognose der Qualitätseigenschaften frischer Lebensmittel zu verbessern, um Produzenten und Händlern bessere, datenbasierte Entscheidungen in Logistik und Warenannahme zu ermöglichen und Verluste durch vorzeitig verdorbene Ware zu reduzieren.

Der Beitrag der UFR bestand in der Entwicklung hybrider Grey-Box-Modelle, die mechanistische Modelle mit Methoden des maschinellen Lernens kombinieren – ein Ansatz, der erklärbar bleibt (Explainable AI) und auch mit kleineren bzw. unsichereren Referenzdatensätzen verlässliche Aussagen ermöglichen soll. UFR war für die Projektziele PZ5 (Dokumentation der Methoden zur Bestimmung von Qualitätsattributen) und PZ7 (Nachweis, dass Grey-Box-Modelle auch mit kleineren Referenzdatensätzen verlässliche Ergebnisse liefern) verantwortlich, leitete die Arbeitspakete AP1.2, AP2.2 und AP3.2 und beteiligte sich an AP1.1, AP1.3, AP2.1, AP2.3 sowie AP4.1–4.5.

2. Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse

Referenzdatensätze (AP1.2). Als Referenzprodukte wurden Trauben und Äpfel (Sorten Braeburn, Elstar) ausgewählt. Für Trauben entstand ein Datensatz von über 800 Einzelmessungen (Süße, Säuregehalt, Trockenmasse, spektral, photographisch und hyperspektral, über 14 Tage bei verschiedenen Temperaturen). Für Äpfel wurde 2024 ein ebenso umfangreicher Datensatz von über 800 Früchten erhoben (Süße, Säure, Festigkeit, Trockenmasse, mehrfache spektrale Vermessung); zusätzlich wurde die Entwicklung induzierter Druckstellen über drei Wochen dokumentiert.

Chemometrische Modelle und Bilderkennung (AP1.2/AP1.3). Aus den Traubendaten entstanden chemometrische Modelle zur Schätzung von Trockenmasse und Süße mit zufriedenstellender Vorhersagegüte ($r^2 \geq 0{,}8$); die Schätzung der Gesamtsäure ist noch nicht ausreichend genau ($r^2 = 0{,}5$). Zur

automatischen Erkennung und Segmentierung der Trauben wurden neuronale Netze trainiert; gemeinsam mit TSN entstanden zudem ein pixelbasierter Verbräunungsindex und ein Modul zur Bewertung des Qualitätszustands von Trauben anhand von RGB-Bildern.

Hybride Grey-Box-Modelle / Digitaler Zwilling (AP2.2). UFR entwickelte ein Konzept für einen lernenden Digitalen Zwilling auf Basis hybrider Grey-Box-Modelle, das KI-Module zur Zustandserfassung mit dynamischen Qualitätsmodellen und Bayes'schem maschinellem Lernen verbindet und so erklärbar bleibt. Das Konzept wurde für Trauben implementiert und in der Cloud-Umgebung von TSN getestet; bei mehreren Messungen entlang der Lieferkette gleicht der Zwilling Prognosen iterativ mit neuen Messungen ab und verbessert dadurch seine Vorhersagegüte.

Für Äpfel erwies sich die übliche manuelle Festigkeitsmessung als ungenau, destruktiv und stark verrauscht. UFR entwickelte daher einen hybriden Ansatz: Kraft-Weg-Kurven wurden unter reproduzierbaren Bedingungen erfasst und mit einem visko-elastischen Modell (Maxwell-Kelvin-Voigt-Element, drei Parameter) gefittet; die Fitparameter wurden per maschinellem Lernen mit den VIS/NIR-Spektren korreliert ($r^2 = 0{,}4$) – ein bemerkenswertes Ergebnis angesichts der groben, destruktiven Referenzmessung und ein direkter Beleg für PZ7.

Für Trauben wurde gemeinsam mit D. Heger (TSN) ein detailliertes, siebenstufiges Bayes'sches Schema zur Vorhersage des Wasserverlusts während der Lagerung ausgearbeitet, das Chemometrie, physikalische Modellierung und Bayes'sche Unsicherheitsquantifizierung zu einem geschlossenen Vorhersage- und Klassifikationswerkzeug verbindet (Basisverteilung, chemometrisches Modell, physikalisches Wasserverlustmodell, iteratives Bayes'sches Update, zeitliche Propagation, Klassifikator inkl. Fuzzy-Logik, iteratives Lernen vor Ort). Es wurde anhand von 150 simulierten Traubenmessungen validiert und stellt einen wesentlichen, über die ursprüngliche Zielbeschreibung hinausgehenden methodischen Beitrag zu PZ7 dar.

Botrytis-Keimungswahrscheinlichkeit (AP2.2/AP2.3). Es wurden erste Trainingsdatensätze zur Schimmelausbreitung (Botrytis) auf Trauben erhoben (Laborprotokolle, Sporengewinnung, Mikroskopiebild-Zeitreihen) und automatisiert ausgewertet; die Keimungswahrscheinlichkeit zeigt eine deutliche Abhängigkeit von den Lichtverhältnissen. Verzögerungen bei der Gerätebeschaffung und eine Kontamination der Proben mit Aspergillus Niger – behoben mit Unterstützung von Prof. Matthias Hahn (Universität Kaiserslautern) – verhinderten den Abschluss der Arbeiten; die etablierten Verfahren bilden jedoch die Grundlage für neue, spezifische Anträge.

Wahrscheinlichkeitsbasierte Qualitätsprüfung (AP2.3/AP4.2). UFR entwickelte ein Schema, das die Unsicherheiten von Messmethoden und Prognosemodellen systematisch berücksichtigt und den Schluss von der Stichprobe auf die Gesamtlieferung ermöglicht. Demonstriert wurde dies an der Apfelgrößenbestimmung (74 Äpfel, RGB-Bild-Modul von TSN): Eine kombinatorisch sehr aufwendige Berechnung (ca. 17 Billionen Summanden) konnte durch eine geschickte mathematische Transformation um den Faktor 1000 beschleunigt werden, was Echtzeitfähigkeit für den Praxiseinsatz ermöglicht. Das in Zusammenarbeit mit TSN und BENE entwickelte Schema ist adaptiv, auf zeitabhängige Prognosemodelle übertragbar und erlaubt zusätzlich die Bewertung, ob ein zerstörungsfreies Messverfahren ausreichend genau ist – ein Ansatz, der erheblich über die ursprünglich vorgesehenen Arbeiten hinausgeht.

Abweichungen. Die Beschaffung der Botrytis-Ausrüstung verzögerte sich und konnte erst 2024 weitgehend abgeschlossen werden; die zugehörigen Versuche wurden bis 2025 fortgeführt (genehmigte Änderung der Geräteliste). Alle übrigen Arbeiten verliefen plangemäß; Änderungen der Zielsetzung waren zu keinem Zeitpunkt erforderlich.

3. Zusammenfassung

UFR konnte ihre Projektziele (PZ5, PZ7) sowie die geleiteten Arbeitspakete (AP1.2, AP2.2, AP3.2) im Wesentlichen plangemäß bzw. mit Erweiterungen erfüllen: umfangreiche, gut dokumentierte Referenzdatensätze für Trauben und Äpfel, funktionsfähige chemometrische Modelle mit guter Vorhersagegüte, ein implementierter und getesteter lernender Digitaler Zwilling auf Basis hybrider Grey-Box-Modelle, ein bis zur Publikationsreife ausgearbeitetes Bayes'sches Schema zur Vorhersage des Wasserverlusts von Trauben, ein innovativer hybrider Ansatz zur Festigkeitsbestimmung trotz unsicherer Referenzdaten, erste Modelle zur Botrytis-Keimung sowie – als Erweiterung über die ursprüngliche Planung hinaus – ein praxistaugliches, deutlich beschleunigtes Schema zur wahrscheinlichkeitsbasierten Qualitätsprüfung. Die einzige nennenswerte zeitliche Abweichung betrifft die Botrytis-Arbeiten.

4. Verbreitung, Veröffentlichung und Ausblick

Mit TSN liegt bereits ein gemeinsames wissenschaftliches Manuskript vor („Predicting Water Loss of Grapes", D. Heger und C. Fleck, Stand Mai 2025), das das siebenstufige Bayes'sche Vorhersageschema beschreibt und mit In-silico-Demonstrationen validiert; eine gemeinsame Veröffentlichung ist nach weiteren

Validierungsschritten geplant. Die mathematische Herleitung und Erprobung des Schemas zur wahrscheinlichkeitsbasierten Qualitätsprüfung soll gemeinsam mit Prof. Thorsten Schmidt (Mathematische Stochastik, Universität Freiburg) publiziert werden.

Die Arbeiten an Botrytis bieten erhebliches Potenzial für eine wissenschaftliche Weiterführung; ebenso lässt sich das Schema zur wahrscheinlichkeitsbasierten Qualitätsprüfung gut publizieren und auf weitere, insbesondere zeitabhängige Prognoseprobleme übertragen. Im Projektverlauf entstanden neue Kontakte zu Prof. Matthias Hahn (Universität Kaiserslautern) sowie zu Prof. Reinhard Fischer und Prof. Peter Nick (KIT Karlsruhe); UFR plant, bei passenden Ausschreibungen gemeinsame Projektskizzen einzureichen, die biologisches Fachwissen mit den verfolgten quantitativen, mathematisch-statistischen Ansätzen verbinden. Eine kommerzielle Verwertung durch UFR ist nicht vorgesehen; der Schwerpunkt liegt auf wissenschaftlichen Publikationen und der Ausbildung von Promovierenden/Postdocs.