

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Küstenzonen der Erde, mit einer Gesamtlänge von über 1 Mio. km (*Kelletat, 1999*) und deren angrenzende Randmeere, sind eines der biologisch vielfältigsten und produktivsten Ökosysteme unserer Erde. Im Vergleich zu den Ozeanen, die 70% der Erdoberfläche bedecken, ist die biologische Aktivität und Artenvielfalt der Küstenzonen und Randmeere aufgrund eines hohen natürlichen Nährstoffeintrages vom Festland weitaus größer. Durch Austauschprozesse mit der Atmosphäre, wie beispielsweise im Kohlenstoffkreislauf, der Produktion von Dimethylsulfid oder beim Ausgleich von Wärmeffüssen, spielen die Ozeane und Küstengewässer im Klimasystem der Erde eine bedeutende Rolle.

Der Ozean und die Küstengewässer sind in der Lage große Mengen an atmosphärischem Kohlendioxid ( $\text{CO}_2$ ) aufzunehmen, über physikalische und biologische Prozesse der Deckschicht zu entziehen und mit der ozeanischen Tiefenzirkulation zu transportieren, oder in den Tiefseesedimenten zu binden. Ungefähr 30% der durch Verbrennung fossiler Energieträger und Brandrodung freigesetzten  $\text{CO}_2$ -Emissionen werden auf diese Weise von den Ozeanen aufgenommen und gespeichert (*Ittekkot et al., 1996*). Der grundlegende Prozeß, der zum  $\text{CO}_2$ -Austausch zwischen Atmosphäre und Oberflächenwasser führt, basiert auf Ungleichgewichten in den  $\text{CO}_2$ -Partialdrücken. Ist der  $\text{CO}_2$ -Partialdruck der Atmosphäre größer als der im Ozean, wird  $\text{CO}_2$  in Abhängigkeit von der Wassertemperatur, dem Salzgehalt und der Windgeschwindigkeit im Oberflächenwasser gelöst. Bei einem, im Vergleich zur Atmosphäre höheren Partialdruck im Ozean, entweicht  $\text{CO}_2$  aus dem Ozean in die Atmosphäre. Doch erst der Transport von gelöstem oder partikulärem Kohlenstoff in die Tiefen der Ozeane, der über die beiden sogenannten Kohlenstoffpumpen, der »biologischen Pumpe« und der »Löslichkeitspumpe«, bewerkstelligt wird, vermag der Deckschicht und der Atmosphäre langfristig  $\text{CO}_2$  zu entziehen (*Steer et al., 1999*). Durch den Prozeß der Photosynthese verarbeiten im Oberflächenwasser der Mee-

re lebende einzellige Pflanzen, das sogenannte Phytoplankton (griech.; phytho=Pflanze, planktos=umherziehend), gelöstes CO<sub>2</sub> und Wasser mit Hilfe von Sonnenlicht zu Glukose und Sauerstoff, und betreiben auf diese Weise ihren Zellaufbau. Bestimmte Planktonarten nehmen den Kohlenstoff auch in Form von Hydrogencarbonat unter Freisetzung von CO<sub>2</sub> auf und bilden so Skelette aus Kalziumcarbonat. Dabei entspricht die Biomasse des Phytoplanktons aller Meere in etwa der pflanzlichen Biomasse der gesamten Landoberfläche. Stirbt das Phytoplankton ab, so wird der gebundene Kohlenstoff nach bakteriellem Abbau der Zelle im Wasser gelöst und teilweise wieder zu CO<sub>2</sub> oxidiert, um erneut zum Zellaufbau zur Verfügung zu stehen oder um größtenteils zurück in die Atmosphäre zu entweichen. Am Beginn der marinen Nahrungskette stehend, wird das Phytoplankton vom Zooplankton gefressen, das wiederum selbst Bestandteil der Nahrungskette ist. Durch Respiration wird ein Großteil des in der Nahrungskette gebundenen CO<sub>2</sub> wieder freigesetzt. Zum Teil sedimentiert der in den abgestorbenen Pflanzenresten eingebaute Kohlenstoff sowie die organischen Ausscheidungen des Zooplanktons und anderer Lebewesen in die Tiefsee. Das gravitationsbedingte Absinken des in organische Substanzen oder Kalkschalen eingebauten Kohlenstoffs wird als biologische Pumpe bezeichnet. Wieviel CO<sub>2</sub> über diesen Mechanismus sedimentieren kann, hängt entscheidend von der biologischen Aktivität der Gewässer ab. Die Küstengewässer und Randmeere haben im Vergleich zum offenen Ozean ein hohes Potential, um entsprechend viel CO<sub>2</sub> zu binden (Steer *et al.*, 1999). Als Löslichkeitspumpe wird der an die Tiefenzirkulation gebundene Vertikaltransport von im Meerwasser gelöstem CO<sub>2</sub> bezeichnet. Der Wirkungsgrad der Löslichkeitspumpe ist an die thermohaline Zirkulation gebunden und unabhängig von der biologischen Aktivität des Gewässers. Regionen, in denen kaltes, salzreiches Wasser absinkt, stellen Kohlenstoffsinken dar. Erst wenn das mit der Ozeanzirkulation transportierte Tiefenwasser nach Jahrhunderten wieder an die Oberfläche steigt, sich erwärmt und mit CO<sub>2</sub> übersättigt, setzt es das gelöste CO<sub>2</sub> wieder frei.

Eine weitere klimatisch relevante Eigenschaft des Phytoplanktons ist die Produktion von Dimethylsulfid (DMS), welches als Abbauprodukt durch den Katabolismus schwefelhaltiger Aminosäuren in die Atmosphäre gelangt. In der Atmosphäre wird das DMS schrittweise zu Sulfat-Aerosolen oxidiert. Diese bewirken eine erhöhte Rückstreuung der solaren Strahlung in den Weltraum. Die entstandenen hygroskopischen Sulfat-Aerosole stellen auch Kondensationskerne zur Wolkenbildung dar und beeinflussen indirekt den Wärmehaushalt der Atmosphäre, da eine höhere Anzahl von Wolkentröpfchen eine erhöhte Reflexion der einfallenden Strahlung durch die Wolken bedingt. Aerosolstreuung und Reflexion an den entstandenen Wolken bewirken in der Summe einem kühlenden Effekt für die Erde, da vermehrt solare Strahlung in den Weltraum reflektiert wird. Global betra-

gen die jährlichen DMS-Emissionen der Ozeane zwischen 12 – 42 Mio. Tonnen Schwefel (*Burkett et al.*, 2001). Die große Schwankungsbreite der Emissionen resultiert aus Unsicherheiten der berechneten globalen DMS-Verteilung des Oberflächenwassers der Ozeane, so z. B. auch in der von vielen Modellen genutzten und auf *in situ* Messungen basierenden DMS-Klimatologie von *Kettle et al.* (1999), die zur Berechnung der DMS-Flüsse verwendet wird. Einen anderen, ebenfalls mit großen Unsicherheiten behafteten Ansatz zum Aufbau einer DMS-Klimatologie, verfolgen *Belviso und Moulin* (2004), die einen vier Jahre umspannenden Satellitendatensatz des *Sea-viewing Wide Field-of-View Sensor* (SeaWiFS) verwenden, um DMS im Oberflächenwasser direkt aus abgeleiteten Konzentrationen von Chlorophyll-a zu bestimmen. Die Parameterisierung von DMS in globalen Klima- und Chemietransportmodellen ist zur Zeit Gegenstand aktiver Forschung.

Neben ihrer bereits angeführten klimatischen Bedeutung, sind die Küstenzonen für den Menschen seit jeher Lebens-, Arbeits- und Erholungsraum, der aufgrund steigender wirtschaftlicher und privater Nutzungsanforderungen zunehmendem Stress ausgesetzt ist (*Brückner*, 1999). Mittlerweile leben rund 40% der Weltbevölkerung in einem Grenzgebiet von 100 km Abstand zur Küste (*Burkett et al.*, 2001); und auch zukünftig wird sich das Bevölkerungs- und Wirtschaftswachstum auf die Küstengebiete konzentrieren. In vielen Ländern der Erde steigt das Bevölkerungswachstum der Küstenregionen sogar doppelt so stark wie im Landesdurchschnitt. Die Folgen des zunehmenden Besiedlungsdrucks, auch bedingt durch den Massentourismus, führen zu steigender Eutrophierung der Küstengewässer mit Stickstoff- und Phosphorverbindungen durch das Einleiten privater und industrieller Abwässer. Zusätzlich werden die Gewässer durch den Einsatz von Chemikalien und Düngemitteln in der Landwirtschaft belastet, die nach Niederschlägen in die Flüsse eingetragen werden. Überschüssige Futtermittel und Fäkalien mariner Aquakulturen, deren Zahl sich weltweit seit 1990 verdoppelt hat (*Burkett et al.*, 2001), führen zu einer weiteren Nährstoffbelastung. In der Summe führt die Eutrophierung vermehrt zu gesundheitsgefährdenden Algenblüten, deren Extremfolgen Sauerstoffmangel und Fischsterben sind. In anderen Küstenregionen ist ein Rückgang biologischer Ressourcen aufgrund massiver baulicher Veränderungen von Staudämmen zu beobachten. Das Aufstauen des Flußwassers bewirkt zum einen die Zurückhaltung nährstoffreicher Schwebstoffe und zum anderen die Zerstörung des an die saisonalen Überflutungen angepaßten Lebensraumes vieler Pflanzen- und Tierarten. Als Folgen des Schwebstoffmangels sind Küstenerosion in den Flußmündungen und ein Rückgang der Fischereierträge zu verzeichnen.

Aufgrund der zunehmenden anthropogenen Nutzung der Küstengewässer und Randmeere ist eine Überprüfung und Sicherung der Gewässerqualität durch entsprechende

Monitoring-Programme im Rahmen des integrierten Küstenzonenmanagements vorrangiges Ziel vieler Staaten. Erst durch ein besseres Verständnis der Zusammenhänge in den Stoffkreisläufen können die Auswirkungen des Menschen besser abgeschätzt und Maßnahmen für eine nachhaltige Nutzung erarbeitet werden. Dabei kann die Gewässergüte durch *in situ* Beprobungen vom Schiff aus; oder mit Methoden der Fernerkundung vom Flugzeug oder Satelliten aus bestimmt werden. Der Vorteil der *in situ* Beprobung gegenüber der Fernerkundung liegt in der wesentlich höheren Anzahl der durch Laboranalysen bestimmbaren Wasserinhaltsstoffe. Die grundlegenden, der Fernerkundung aus Spektalmessungen der Gewässerfarbe zugänglichen, optisch aktiven Inhaltsstoffe, sind das Chlorophyll-a - ein Pigment des Phytoplanktons, die gelösten organischen Substanzen, die auch als Gelbstoffe bezeichnet werden, sowie alle nicht chlorophyllhaltigen, anorganischen Partikel. *In situ* Beprobungen großer Untersuchungsgebiete besitzen jedoch auch Nachteile gegenüber fernerkundlichen Methoden. So kann die Extrapolation der punktuellen Meßdaten zur Bestimmung von räumlichen Konzentrationsverteilungen mit großen Fehlern behaftet sein, wenn die gemessenen Inhaltsstoffe, wie während einer Algenblüte, inhomogen verteilt sind oder die Probenanzahl zu gering gewählt wurde. Außerdem sind die mit der *in situ* Beprobung verbundenen hohen Kosten, der große Zeitaufwand aber auch der zeitliche Versatz der Probenentnahmen zu nennen. Dagegen liegen die Vorteile fernerkundlicher Methoden in der großflächigen Bestimmung von Gewässerparametern, die z. B. aus Satellitendaten nahezu täglich und global bestimmt werden können. Die geeignetste Technik zur Überwachung großräumiger Umweltveränderungen ist somit die Erdbeobachtung mit Hilfe von Fernerkundungssatelliten. Dennoch bleiben *in situ* Daten, gerade auch zur Algorithmenentwicklung und Validierung von Fernerkundungsverfahren, unverzichtbar.

## **1.1 Satellitengestützte Fernerkundung von Wasserinhaltsstoffen**

Als Beginn der satellitengestützten Fernerkundung von Wasserinhaltsstoffen kann der im Jahre 1978 erfolgte Start des *Coastal Zone Color Scanner* (CZCS) an Bord des US-amerikanischen NIMBUS-7 Satelliten der Weltraumbehörde NASA angesehen werden (Hovis *et al.*, 1980). Obgleich schon vor dem Start des CZCS andere satellitengestützte Instrumente den Ozean fernerkundet haben, waren diese Instrumente mit ihrem Dynamikbereich und ihren Kanaldefinitionen vorwiegend für meteorologische Anwendungen und zur Analyse von Landoberflächen konzipiert (Gordon *et al.*, 1985). Der CZCS jedoch

war das erste Instrument, das speziell für die Anforderungen der Ozeanfernerkundung gebaut wurde. Aus Spektralmessungen des CZCS in fünf Kanälen konnte erstmals die globale Verteilung der Chlorophyllkonzentration des Oberflächenwassers der Weltmeere bestimmt werden. Ursprünglich für nur ein Jahr geplant, lieferte das Instrument schließlich bis in das Jahr 1986 Daten über die Gewässerfarbe der Ozeane und Küstenzonen. Erst zehn weitere Jahre nach dem Ende der CZCS-Mission wurden 1996 mit dem deutschen *Modularen Optischen Scanner* (MOS), dem japanischen *Ocean Colour and Temperature Scanner* (OCTS) und dem französischen *Polarization and Directionality of the Earth's Reflectances* (POLDER) gleich mehrere neue Instrumente zur Sondierung der Ozeane gestartet. Eine Übersicht der zur Zeit durch internationale Raumfahrtbehörden in Betrieb befindlichen Sensoren zur Gewässerfernerkundung findet sich in Tabelle 1.1.

Tabelle 1.1: Zur Zeit in Betrieb befindliche passive satellitengestützte Sensoren zur Gewässerfernerkundung. Stand 07/2004, (IOCCG, 2004).

Sensor	Agentur / Land	Satellit	Start	Schwadbreite [km]	Räumliche Auflösung [m]	Spektralbereich [nm]	Anzahl d. Kanäle	Orbit
COCTS	CNSA (China)	Hai-Yang-1	05/2002	1400	1100	402-12500	10	Polar
MERIS	ESA (Europa)	ENVISAT	03/2002	1150	300/1200	412-900	15	Polar
MMRS	CONAE (Argentinien)	SAC-C	05/2000	360	175	480-1700	5	Polar
MODIS	NASA (USA)	Aqua	05/2002	2330	1000	405-14385	36	Polar
MODIS	NASA (USA)	Terra	12/1999	2330	1000	405-14385	36	Polar
OCI	NSPO (Japan)	ROCSAT-1	01/1999	690	825	433-12500	6	Polar
OCM	ISRO (Indien)	IRS-P4	05/1999	1420	350	402-885	8	Polar
OSMI	KARI (Süd-Korea)	KOMPSAT	12/1999	800	850	400-900	6	Polar
SeaWiFS	NASA (USA)	OrbView-2	08/1997	2806	1100	402-885	8	Polar

Die technischen Verbesserungen heutiger Sensoren gegenüber dem CZCS-Instrument sind zum einen in einer teilweise bis auf 175 m gestiegenen räumlichen Auflösung (vgl. 1.1), und zum anderen in einer erhöhten spektralen Auflösung der Geräte bei gleichzeitig ver-

besserem Signal-Rauschverhältnis zu sehen. Dabei ist die technische Weiterentwicklung durch Definition einer Vielzahl zusätzlicher Spektralkanäle eng mit den Anforderungen neuer Auswertelgorithmen auf Basis theoretischer Studien verknüpft. So verfügen heutige Sensoren im Vergleich zum CZCS über mehrere Kanäle im nahen infraroten (NIR) Spektralbereich, die zur Atmosphärenkorrektur über dem offenen Ozean genutzt werden. Der amerikanische Sensor MODIS verfügt darüber hinaus über einen Kanal bei der Wellenlänge  $\lambda = 1375 \text{ nm}$ , der sich zur Detektion und Maskierung von Bildbereichen mit Zirrus-Bewölkung besonders eignet. Eine Nichterkennung semi-transparenter Wolken führt häufig zu Fehlinterpretationen bei der Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe.

## 1.2 Stand der Forschung

Passive Fernerkundungssensoren messen das von der Erdoberfläche reflektierte Licht als ein Mischsignal, das sich aus einem Beitrag vom Wasserkörper und einem Beitrag aus atmosphärischer Streustrahlung zusammensetzt. Aber nur die vom Wasserkörper selbst zurückgestreute Strahlung trägt Information über dessen Inhaltsstoffe. Die Farbe des Gewässers steht daher in direktem Zusammenhang zu seinen Inhaltsstoffen. Um über dem offenen Ozean aus dem am Sensor gemessenen Signal auf die Wasserinhaltsstoffe rückschließen zu können, unterteilen sich klassische Auswerteverfahren üblicherweise in zwei Datenverarbeitungsschritte. In einem ersten Schritt wird zunächst mit Hilfe eines Atmosphärenkorrekturverfahrens das spektrale Reflexionsvermögen direkt über- oder unterhalb der Wasseroberfläche bestimmt, um dann in einem zweiten Schritt, unter Verwendung eines bio-optischen Modells vom Reflexionsvermögen, auf die Wasserinhaltsstoffe zu schließen. Dabei basieren die Atmosphärenkorrekturen auf der Annahme, daß der Ozean im nahen infraroten Spektralbereich für Wellenlängen größer als 700 nm als schwarz, d. h. völlig absorbierend, angesehen werden kann *Gordon (1978)*. Unter dieser Voraussetzung lassen sich die Signale von Atmosphäre und Ozean trennen, da das vom Satelliten gemessene Signal im NIR nur noch aus der atmosphärischen Komponente besteht. Aus dem Verhältnis zweier NIR-Kanäle, die frei von Gasabsorption sind, kann nun, nach vorheriger Korrektur, der Rayleigh-Streuung und durch Vergleich mit Modellaerosolen, auf den Aerosoltyp geschlossen werden. Der spektrale Verlauf der Aerosolextinktion kann für alle Kanäle korrigiert werden, um die vom Ozean reflektierte Strahlung oder das Reflexionsvermögen zu bestimmen. Für den offenen Ozean kann unter Verwendung von empirischen Beziehungen der so bestimmten Strahldichten oder Reflektanzen im blauen und grünen Spektralbereich (*blue-green ratios*) mit hinreichender Genauigkeit auf die Chloryllkonzentration geschlossen werden (*IOCCG 2000, O'Reilly et al. 1998*). Die Güte

der Atmosphärenkorrektur bestimmt bei dieser Methode maßgeblich die Genauigkeit mit der die Wasserinhaltsstoffe bestimmt werden können. In Küstengewässern, in denen neben dem Phytoplankton und dessen Abbauprodukten weitere Inhaltsstoffe (anorganische Schwebstoffe, terrestrische Huminsäuren, etc.) die optischen Eigenschaften des Wassers beeinflussen, versagen die auf Kanalverhältnissen basierenden Algorithmen (*Doerffer und Fischer, 1994*), da alle Inhaltsstoffe gleichzeitig und unabhängig voneinander variieren können. Auch kann der alleinige Betrag der atmosphärischen Komponente im Wellenlängenbereich größer als 700 nm, aufgrund der starken Rückstreuung der Schwebstoffe, nicht mehr direkt bestimmt werden. In diesen optisch komplexen Gewässern ist die Korrelation der verschiedenen Inhaltsstoffe zum Teil sehr gering. Zur Bestimmung der verschiedenen Inhaltsstoffe in Küstengewässern müssen daher Verfahren entwickelt werden, die nicht auf einer Entkoppelung von Atmosphäre und Ozean basieren und die spektrale Information möglichst aller zur Verfügung stehenden Kanäle einbeziehen.

Für die Verfahrensentwicklung stellt sich zunächst die Frage nach dem Informationsgehalt der zur Verfügung stehenden Spektren, seien sie nun am Oberrand der Atmosphäre oder im Meeresniveau gemessen. Wieviele Parameter können aus den multispektralen Daten abgeleitet werden und welche spektralen Bereiche sind hierfür in welcher Auflösung am besten geeignet? Dieser Thematik haben sich einige Autoren anhand von simulierten Datensätzen genähert, deren Informationsgehalt durch multivariate statistische Analyseverfahren, wie der Hauptkomponenten- oder Faktorenanalyse, ermittelt wurde (*Doerffer 1981, Fischer 1985, Fischer et al. 1986, Sathyendranath et al. 1989*).

Zur Untersuchung der maximal unabhängig bestimmbarer Parameter eines in 6 Spektralkanälen simulierten Küstengewässers unter Berücksichtigung der Wasserinhaltsstoffe Chlorophyll, anorganischer Schwebstoff und Gelbstoff, führt *Fischer (1985)* eine Eigenwertanalyse der simulierten Spektren durch. Bei Annahme eines wellenlängenabhängigen Instrumentenfehlers von bis zu 2%, können aus den simulierten 6 Spektralkanälen im Wellenlängenbereich von 415 – 740 nm, unabhängig von der atmosphärischen Trübung, 4 Parameter direkt an der Meeresoberfläche bestimmt werden. Am Oberrand der Atmosphäre, die mit 10 Kilometern Höhe angesetzt wurde, verringert sich die Anzahl auf 3 unabhängig von der atmosphärischen Trübung bestimmbarer Parameter. Werden stattdessen nur Fehler aus der Atmosphärenkorrektur mit 1% angenommen, zeigt sich deutlich der Einfluß der atmosphärischen Trübung auf die Anzahl der bestimmbarer Parameter. Im Fall sehr geringer atmosphärischer Trübung, bei der die aerosoloptische Tiefe die Hälfte der Rayleigh-optischen Tiefe beträgt, können am Oberrand der Atmosphäre maximal 4 unabhängige Parameter bestimmt werden. Bei mäßiger Trübung mit aerosoloptischen

Tiefen von maximal dem 1,5-fachen Wert der Rayleigh-optischen Tiefe, lassen sich nur noch 3 Parameter bestimmen, deren Anzahl sich weiter auf 2 bestimmbare Parameter in stark getrübbten Atmosphären reduziert.

Ebenfalls durch Anwendung einer Hauptkomponentenanalyse auf die für Küstengewässer durchgeführten Simulationen eines Drei-Komponenten Modells, das die optischen Eigenschaften von Chlorophyll, anorganischem Schwebstoff und Gelbstoff berücksichtigt, untersuchten *Sathyendranath et al.* (1989) den Informationsgehalt der simulierten Spektren direkt an der Wasseroberfläche im Hinblick auf die Bestimmbarkeit des Chlorophyllgehaltes in Abhängigkeit der beiden anderen Inhaltsstoffgruppen sowie der Anzahl der gewählten Spektralkanäle. Durch den Vergleich der Summe der Varianzanteile der ersten 5 Hauptkomponenten für eine variierende Anzahl von 5, 10, 14, 23 und 27 simulierten Spektralkanälen im Wellenlängenbereich von 400 – 700 nm, unter Ausschluß der Chlorophyllfluoreszenz im Bereich von 660 – 690 nm, kommen die Autoren zu dem Ergebnis, daß die maximal simulierte Anzahl von 27 Kanälen auf lediglich 5 Spektralkanäle reduziert werden kann, ohne einen Verlust in der Ableitungsgenauigkeit in Kauf nehmen zu müssen. In beiden Fällen werden annähernd 100% der Varianz durch die ersten 5 Hauptkomponenten beschrieben. Allerdings bleibt zu bedenken, daß Instrumenten- bzw. Atmosphärenkorrekturfehler in den Simulationen unberücksichtigt bleiben. Der erste Eigenvektor besaß in allen untersuchten Fällen einen über 96%-igen Anteil an der Gesamtvarianz und wurde durch eine Korrelationsanalyse als hoch korreliert mit der Stoffgruppe der anorganischen Schwebstoffe gefunden. Die Autoren folgern daraus, daß diese Stoffgruppe am leichtesten einer Inversion zugänglich sein sollte. Das Signal des Chlorophyll für Konzentrationen kleiner als  $1 \text{ mg m}^{-3}$  geht im Rauschen der beiden anderen Inhaltsstoffe unter und kann somit kaum bestimmt werden. Liegt die Chlorophyllkonzentration dagegen über  $1 \text{ mg m}^{-3}$  ist ihre Bestimmung auch in Anwesenheit der beiden anderen Substanzen problemlos. Ihren Analysen zur Folge ist der Gelbstoff die am schwierigsten zu bestimmende Komponente.

Die von *Fischer* (1985) und *Sathyendranath et al.* (1989) durchgeführten Studien erlauben somit den Schluß, daß sich aus den Spektraldaten heutiger Satellitensensoren, wie beispielsweise dem MERIS-Instrument, das einen Instrumentenfehler von weniger als 0,5% in allen Spektralbereichen und darüber hinaus 5 zusätzliche Spektralkanäle im nahen infraroten Wellenlängenbereich ( $\lambda > 700 \text{ nm}$ ) besitzt, alle 3 zuvor genannten Inhaltsstoffgruppen bestimmen lassen.

Zur Bestimmung von Wasserinhaltsstoffen existieren zahlreiche Verfahren, die sich in empirische und modell-basierte Ansätze unterteilen lassen (*IOCCG*, 2000). Empiri-



sche Algorithmen, wie die bereits erwähnten Kanalverhältnisse, versuchen statistische Beziehungen zwischen optischen Messungen, wie z. B. dem Reflexionsvermögen an der Wasseroberfläche, und der Konzentration der Inhaltsstoffe abzuleiten, die durch Regression auf Basis von *in situ* Messungen gewonnen werden. Mehr als ein Parameter kann aus einem Kanalverhältnis allerdings nicht bestimmt werden. Zwar sind die empirischen Verfahren mathematisch einfach zu entwickeln und zu implementieren; neben der sehr eingeschränkten Anwendbarkeit in Küstengewässern besteht ihr grundsätzlicher Nachteil darin, daß sie selten räumlich und zeitlich übertragbar sind. Auf Kanalverhältnissen beruhende Verfahren versagen, wenn sich die Zusammensetzung der Wasserinhaltsstoffe im Vergleich zu den durchgeführten Messungen zur Bestimmung der Regressionskoeffizienten mit der Zeit verändert. Die empirischen Verfahren gelten daher streng genommen nur für den Ort und den Zeitraum der durchgeführten Beprobung.

Modell-basierte Methoden dagegen simulieren das am Sensor zu erwartende Strahlungsfeld in Abhängigkeit der optischen Eigenschaften von Atmosphäre und Wasserkörper mit Hilfe von Strahlungstransportprogrammen. Durch Inversion der simulierten Strahlungsfelder können die Inhaltsstoffe aus den gemessenen Strahlungsfeldern bestimmt werden (*Fischer und Doerffer, 1987*). Die Qualität der Inversion hängt dabei vor allem von der Qualität der Atmosphärenkorrektur sowie der Repräsentativität der zugrundeliegenden bio-optischen Modelle in Bezug auf den zu untersuchenden Wasserkörper ab. Mögliche Methoden zum Aufbau von Inversionsverfahren auf der Basis simulierter Datensätze sind nichtlineare Optimierungstechniken, Hauptkomponentenverfahren und Verfahren auf Basis künstlicher neuronaler Netzwerke (*IOCCG, 2000*).

Die Methoden der nichtlinearen Optimierungstechniken basieren auf einer iterativen Minimierung einer Differenz zwischen modelliertem und gemessenem Strahlungsfeld durch Variation von Modellparametern, wie beispielsweise der einzelnen Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe oder der Aerosolmodelle und ihrer aerosoloptischen Tiefen (*Doerffer und Fischer 1994, Land und Haigh 1996*). Zur Invertierung von Spektraldaten des CZCS-Sensors über Küstengewässern entwickelten *Doerffer und Fischer (1994)* ein Verfahren unter Verwendung eines Zwei-Strom-Strahlungsmodells und eines Simplex-Optimierungsverfahrens. Aus den um die Rayleigh-Streuung korrigierten Strahldichten der ersten vier Kanäle des CZCS bestimmt das Verfahren die räumliche Verteilung und Konzentration der Wasserinhaltsstoffe von Chlorophyll, Schwebstoff und Gelbstoff sowie die atmosphärische Streustrahlung des Aerosols. Zusätzlich wird als Maß für die Eindringtiefe der Strahlung in den Wasserkörper, die sogenannte Z-90 Tiefe, abgeleitet. Durch Subtraktion der Streustrahlung vom Gesamtsignal lassen sich die Daten atmosphä-

risch korrigieren. Damit wird das Signal direkt an der Wasseroberfläche bestimmbar. Die durch das Verfahren abgeleiteten Konzentrationen von Chlorophyll und Schwebstoff zeigten gute Übereinstimmung mit *in situ* Messungen. Nachteil der nichtlinearen Optimierungstechniken ist ihr hoher Rechenaufwand.

Eine weitere Methode zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe ist mit den Hauptkomponenten-Verfahren gegeben (*Krawczyk et al.* 1993, *Neumann et al.* 1995), mit denen die Inhaltsstoffe über eine Datenbasis (*Look-up*-Tabelle) aus dem am Oberrand der Atmosphäre gemessenen Signal abgeleitet werden können. Zum Aufbau dieser Verfahrensmethode werden ebenfalls simulierte Datensätze benötigt, die beispielsweise den funktionalen Zusammenhang zwischen dem spektralen Reflexionsvermögen am Oberrand der Atmosphäre und den einzelnen Wasserinhaltsstoffen beschreiben. Da die einzelnen Spektralkanäle eines Instrumentes mehr oder weniger miteinander korreliert sind, enthalten sie auch redundante Information, die durch Anwendung der linearen Transformationen der Hauptkomponentenanalyse in einen neuen, reduzierten Satz von Merkmalen, überführt werden kann, die voneinander unabhängig und unkorreliert sind. Durch lineare Regressionsanalyse zwischen den gefundenen Hauptkomponenten und den bekannten simulierten Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe werden Regressionskoeffizienten bestimmt und in einer *Look-up*-Tabelle gespeichert. Mit ihnen werden die Wasserinhaltsstoffe aus »realen« Messungen vom Satelliten durch Interpolation der *Look-up*-Tabelle invertiert. Als Nachteil aller Hauptkomponenten-Verfahren ist zu nennen, daß die durchgeführten Transformationen linear sind, obgleich die Beziehungen zwischen den optischen Eigenschaften der Wasserinhaltsstoffe und den Reflektanzen von nichtlinearer Natur sind.

Ein weiterer Ansatz, der eine Approximation auch nichtlinearer funktionaler Zusammenhänge gestattet, basiert auf der Inversion mit Hilfe von künstlichen neuronalen Netzen (*Bishop*, 1995). Im Vergleich zu ihren biologischen Vorbildern sind künstliche neuronale Netze vereinfachte mathematische Modelle, die ihre Fähigkeiten zur Informationsverarbeitung und Datenanalyse, anhand von Beispielen erlernen können. Als Lernmuster können entweder *in situ* Daten oder simulierte physikalischen Zusammenhängen vorgegeben werden. Auch im Rahmen dieser Arbeit sollen simulierte funktionale Zusammenhänge durch neuronale Netze erlernt werden, so z. B. der Zusammenhang zwischen den Reflektanzen am Ober- und Unterrand der Atmosphäre und den entsprechenden Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe. Eine ausführliche Beschreibung des in dieser Arbeit verwendeten Netzwerktypus, dem Mehrschicht-Perzeptron und der benutzten Lernregel erfolgt im vierten Kapitel. In der Fernerkundung ist das Modell des Perzeptrons weitverbreitet, da es sich relativ leicht implementieren läßt, und mit dem *backpropagation* ein im Vergleich

zu anderen Lernverfahren gut beschriebener schneller und robuster Lernalgorithmus existiert (Werbos 1974, Rumelhart und McClelland 1986). Weitere in der Fernerkundung gebräuchliche Netzwerktypen sind Netze mit radialen Basisfunktionen sowie selbstorganisierende Karten, die im Rahmen dieser Arbeit nicht detailliert besprochen werden können. Viele Netzwerktypen können mit Modellen der Statistik gleichgesetzt werden (Sarle, 1994). Das Modell des Mehrschicht-Perzeptrons mit nichtlinearen Aktivierungsfunktionen entspricht beispielsweise einer klassischen nichtlinearen Regressionsanalyse. Weitere Vorteile in der Anwendung neuronaler Netze zur Datenanalyse liegen in der kontinuierlichen Funktionsapproximation der Ausgabedaten, bei gleichzeitiger Stabilität der Verfahren gegenüber fehlerhaften Eingabedaten. Darüber hinaus gestattet diese Inversionsmethode die Verarbeitung großer Datenmengen in kurzer Zeit, da die Eingabedaten nur mit Gewichtsmatrizen verrechnet und einfachen nichtlinearen Transformationen unterzogen werden müssen. Zeitaufwendig ist jedoch der Schritt der Algorithmenentwicklung, der neben der Simulation der Trainingsdaten, die Anwendung eines Lernalgorithmus zur Bestimmung der freien Netzwerkparameter beinhaltet. Ohne Anspruch auf Vollständigkeit seien einige, das Thema dieser Arbeit betreffende, relevante Arbeiten auf der Basis neuronaler Netzwerke angeführt.

Zur Inversion von simulierten MERIS-Daten über Küstengewässern beschreiben Schiller und Doerffer (1999) ein Verfahren unter Verwendung eines Mehrschicht-Perzeptrons mit zwei verdeckten Schichten, das die Inhaltsstoffe Chlorophyll, Schwebstoff und Gelbstoff sowie die Streustrahlung der Aerosole aus Rayleigh-korrigierten Strahldichten am Oberrand der Atmosphäre bestimmt. Auch der im Bodensegment der Europäischen Raumfahrt Behörde (ESA) durch Doerffer und Schiller (1997) implementierte operationelle MERIS-Algorithmus zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe im Ozean und den Küstengewässern basiert auf neuronalen Netzen, die das spektrale Reflexionsvermögen direkt an der Wasseroberfläche verarbeiten. Ebenso berichtet die Arbeit von Zhang (2003) über die Konzentrationsbestimmung von Wasserinhaltsstoffen aus MERIS-Daten am Oberrand der Atmosphäre und der aerosoloptischen Tiefe bei einer Wellenlänge von 550 nm für jeweils eine durch ein Perzeptron invertierte Szene über der Deutschen Bucht sowie dem Chinesischen Meer. Aus Mangel an *in situ* Daten konnte in der genannten Arbeit jedoch keine Validierung der Konzentrationen vorgenommen werden. Die Arbeit von Tanaka *et al.* (2004) beschreibt einen Algorithmus unter Verwendung eines neuronalen Netzes zur Bestimmung von Wasserinhaltsstoffen aus dem Reflexionsvermögen im Meeresniveau aus Daten OCTS-Instrumentes. Des weiteren berichten Jamet *et al.* (2004) über die Bestimmung von aerosoloptischen Tiefen und Angström-Koeffizienten aus Daten des SeaWiFS-Sensors unter Verwendung eines Perzeptrons.

### 1.3 Ziel der Arbeit

Das Ziel der Arbeit ist die Entwicklung und Validierung von Inversionsverfahren zur Bestimmung der Konzentration und räumlichen Verteilung von Wasserinhaltsstoffen in Küstengewässern aus Spektraldaten des MERIS-Instrumentes. Da sich die Fehler von Atmosphärenkorrekturen direkt auf die Genauigkeit der zu bestimmenden Wasserinhaltsstoffe auswirken, soll im Rahmen dieser Arbeit ein implizites Atmosphärenkorrekturverfahren entwickelt werden, mit dem die Wasserinhaltsstoffe aus dem vom Satelliten am Oberrand der Atmosphäre gemessenen Signal bestimmt werden können. Die Anwendungsgrenzen dieses direkten Einschnitt-Verfahrens sollen mit einem ebenfalls zu entwickelnden indirekten Zweischritt-Verfahren, das die Inhaltsstoffe erst nach Anwendung einer expliziten Atmosphärenkorrektur aus dem spektralen Reflexionsvermögen in Meeresniveau bestimmt, verglichen werden. Damit leistet die vorliegende Arbeit einen Beitrag auf dem aktiven Forschungsgebiet der Verfahrensentwicklung und trägt so zum Verständnis von Anwendungsgrenzen operationell einsetzbarer Algorithmen bei. Beide Verfahren, nachfolgend mit 1S- bzw. 2S-Verfahren abgekürzt, sollen durch einen modellbasierten Ansatz, unter Verwendung von Strahlungstransportsimulationen und der Invertierung durch künstliche neuronale Netze, aufgebaut werden. Alle Verfahrensschritte werden mit Hilfe von *in situ* Daten validiert. Ein Übersichtsschema zur Entwicklung der Verfahren, das sich in die Hauptarbeitsschritte Simulation, Inversion und Validierung untergliedert, ist in Abbildung 1.1 dargestellt.

Neben einigen Grundlagen werden in den Kapiteln 2 und 3 die im Strahlungstransport für die Küstengewässer und die Atmosphäre verwendeten optischen Eigenschaften der Streuer und Absorber vorgestellt. Des Weiteren werden die Auswirkungen einiger, in den Simulationen nicht berücksichtigter Effekte, im Hinblick auf die Genauigkeit der Verfahren diskutiert. Im nachfolgenden Kapitel 4 werden die zum Aufbau der Verfahren benötigten Werkzeuge, das Strahlungstransportmodell und das Modell zur Generierung der neuronalen Netze, beschrieben. Weiter wird die Parameterisierung des Strahlungstransportmodells zum Aufbau der Datenbasis erläutert, sowie die Datenaufbereitung und Entwicklung der Inversionsalgorithmen anhand der durchgeführten Simulationen vorgestellt. Im Kapitel 5 erfolgt die Validierung der entwickelten Verfahren anhand von *in situ* gemessenen Daten. Darüber hinaus werden die Ergebnisse mit den MERIS-Level2-Produkten verglichen. Die Sensitivität und Grenzen, der durch Validierung mit *in situ* Daten gefundenen Algorithmen, werden im Kapitel 6 unter Verwendung von simulierten Daten bestimmt. Im Anhang finden sich die Ergebnisse der Validierung aller im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Verfahren tabelliert.

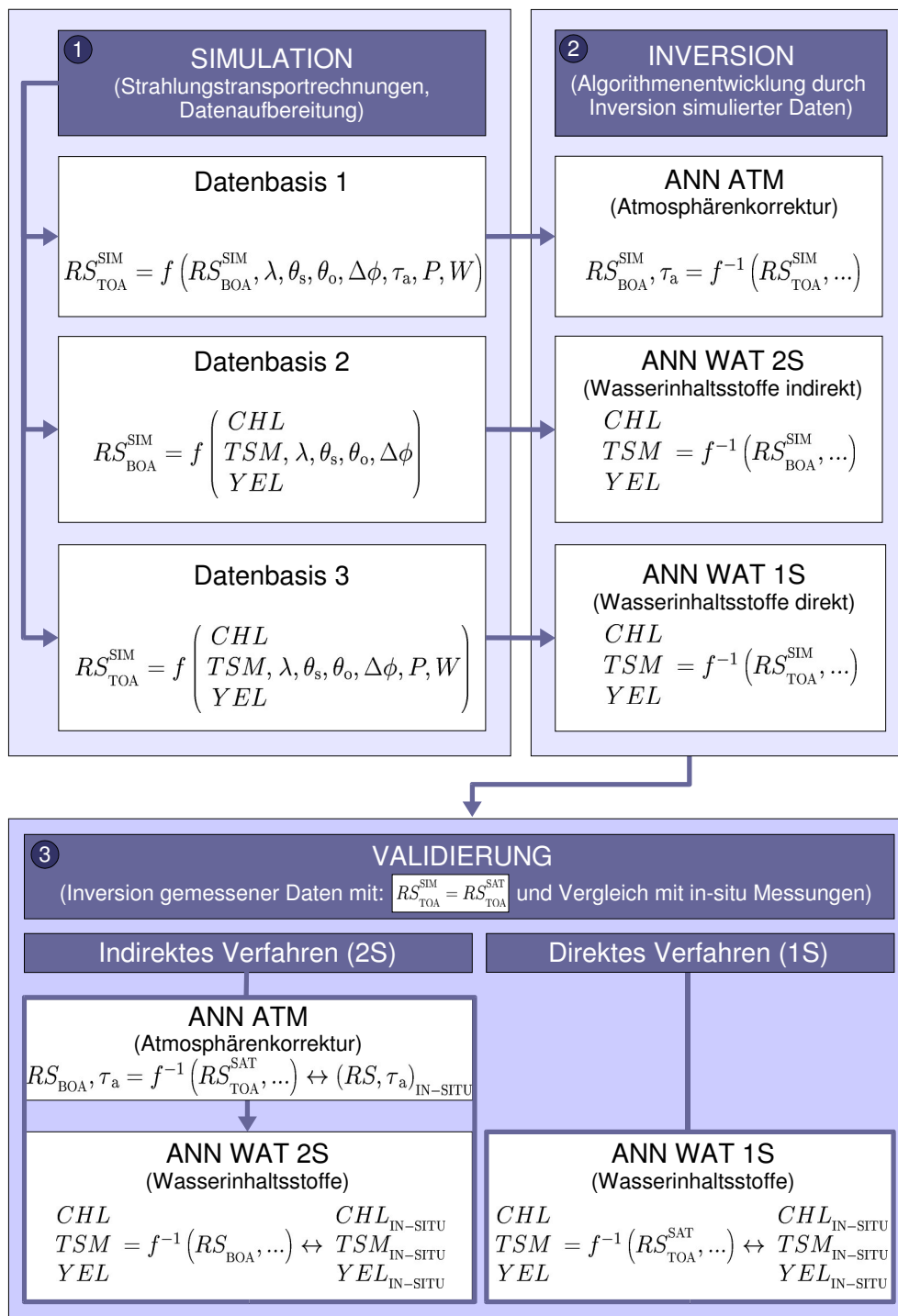


Abbildung 1.1: Übersicht der Verfahrensschritte zur Entwicklung der in dieser Arbeit vorgestellten Inversionen. Ein Verzeichnis der verwendeten Symbole findet sich am Anfang der Arbeit.