

Kapitel 6

Sensitivität und Grenzen der Verfahren

Für die im vorigen Kapitel anhand von *in situ* Daten validierten Verfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe soll in diesem Kapitel anhand von Modelldaten untersucht werden, in wie weit die Verfahren gegenüber fehlerhaften Eingabespektren stabil bleiben. Ebenso sollen die Grenzen der Konzentrationsbestimmung der Verfahren sowie deren Biasfreiheit gegenüber Modelldaten im Gegensatz zu den *in situ* Messungen von Schwebstoff und Gelbstoffabsorption aufgezeigt werden.

6.1 Generalisierungsfähigkeit für untrainierte Daten

Die Abbildungen 6.1 und 6.2 zeigen die Inversionsergebnisse der verwendeten Trainings- und Testdatensätze zur Konzentrationsbestimmung der Wasserinhaltsstoffe. Aufgetragen sind die jeweiligen Konzentrationen der Netzausgaben (TRN, TST) gegen die von den Netzwerken zu lernenden, simulierten Zielgrößen (SIM) für jeweils 100 000 simulierte Eingabespektren. Zur Simulation eines jeden Spektrums wurden alle 3 Inhaltsstoffe verwendet, sodaß bei der Berechnung der Fehler eines jeden Inhaltsstoffes die beiden jeweils anderen Inhaltsstoffe im Rahmen der vorgegebenen Grenzen beliebig variieren können (s. Kap. 4.2.2). Zur Entwicklung der Verfahren wurden nur die Trainingsdatensätze verwendet. Anhand der ungelerten Testdatensätze kann nun die Generalisierungsfähigkeit gegenüber ungelerten Modelldaten überprüft werden. Wie den RMSE-Werten der genannten Abbildungen zu entnehmen ist, zeigen alle Netzwerke im Vergleich zu den gelernten Datensätzen auch für die nicht gelernten Daten gute Funktionsapproximationen mit ähnlichen Fehlerwerten. Beide Abbildungen im Vergleich verdeutlichen die weitaus fehlerträchtigere Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe mit dem 1S-Verfahren aus den Spektren am Oberrand der Atmosphäre.

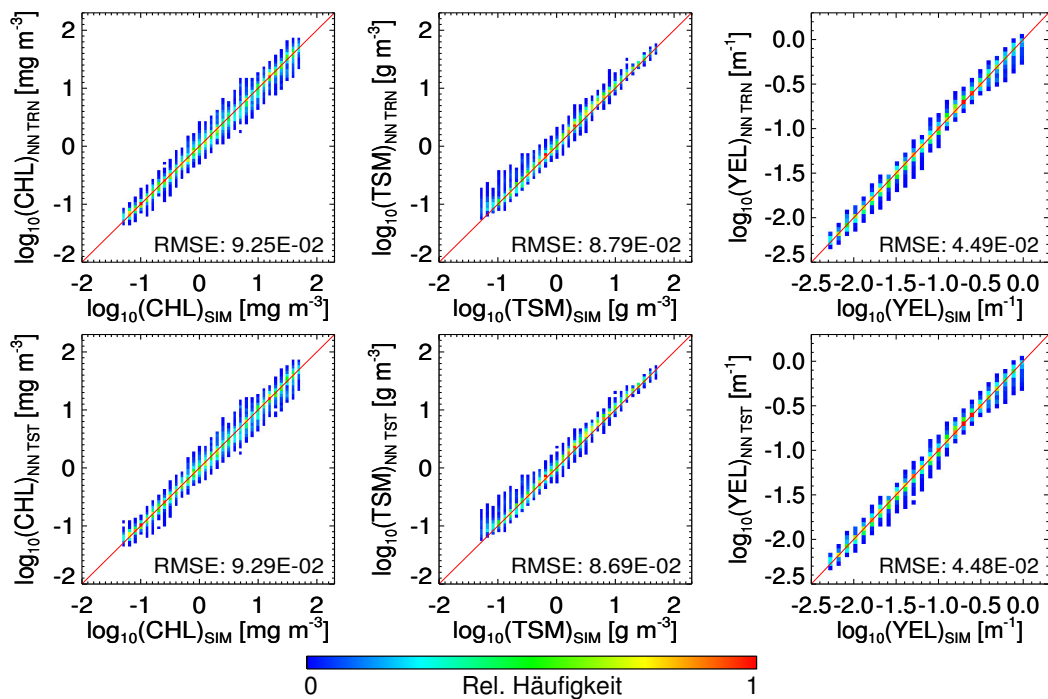


Abbildung 6.1: Streudiagramme der durch die 2S-Verfahren abgeleiteten Konzentrationen von Chlorophyll-a (links), Gesamtschwebstoff (mitte) und Gelbstoff (rechts) aufgetragen gegen die simulierten Konzentrationen für 100 000 Eingabespektren der Trainingsdatensätze (obere Reihe) und der Testdatensätze (untere Reihe).

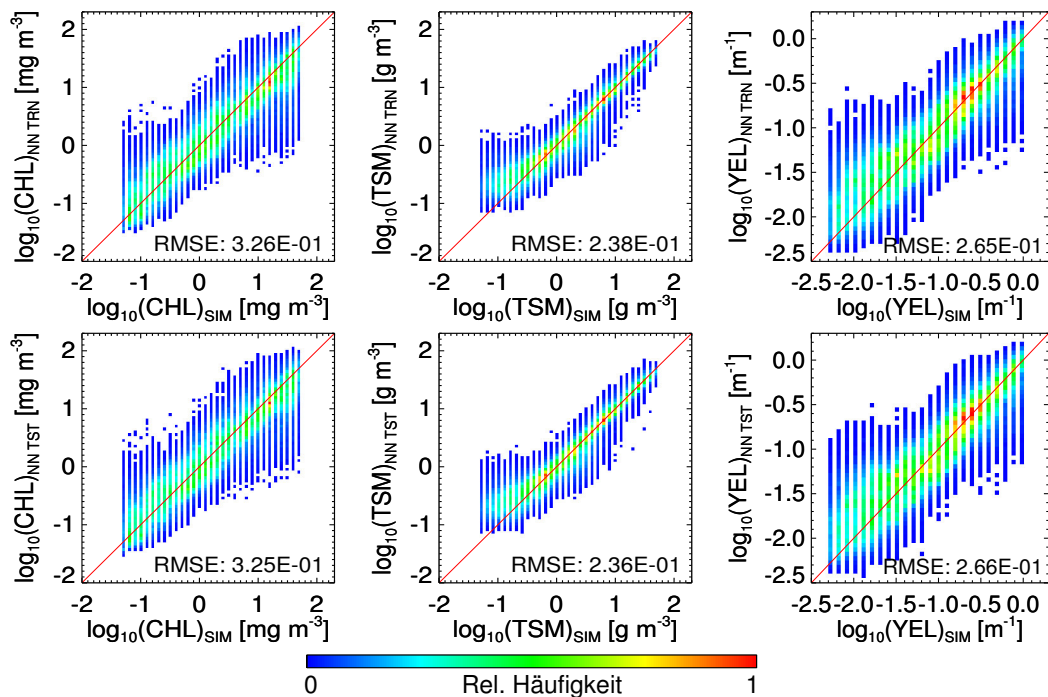


Abbildung 6.2: Wie Abb. 6.1 nur für das 1S-Verfahren.

Das dem eigentlichen informationstragenden Signal des Wasserkörpers überlagerte Signal der Atmosphäre führt für die Vielzahl der Sonnen- und Beobachtungsgeometrien und atmosphärischen Zustände zu einer extremen Erhöhung der von den Netzwerken gefundenen Lösungen. Im Fall der Konzentrationsbestimmung des Chlorophyll-a zeigt sich ein um den Faktor 3, 4 erhöhter mittlerer Fehler des 1S- im Vergleich zum 2S-Verfahren. Der Fehlerunterschied der Verfahren zur Bestimmung der Schwebstoffe beträgt im Mittel etwa 2, 7 und im Fall der Gelbstoffabsorption sogar 5, 9. Im Gegensatz zu den *in situ* Messungen (vgl. Abb. 5.11) zeigen die Inversionsergebnisse der Modelldaten keinen Bias der abgeleiteten Schwebstoffkonzentration und der Gelbstoffabsorption.

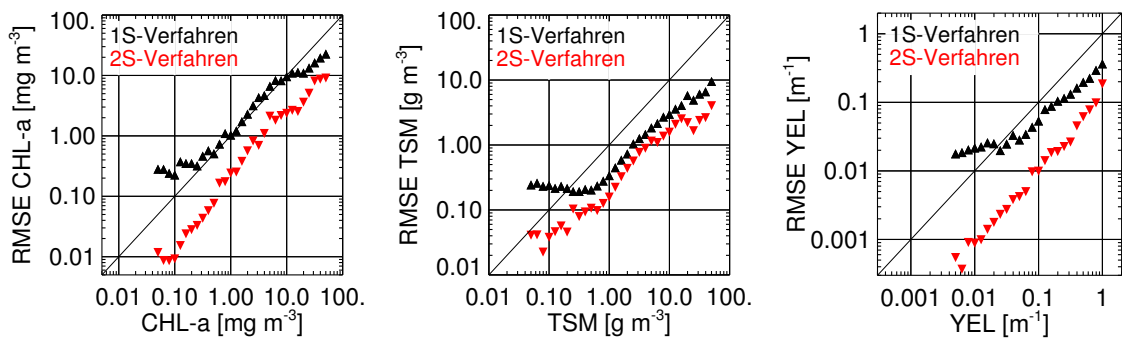


Abbildung 6.3: Genauigkeit des 1S- und 2S-Verfahrens zur Bestimmung von Chlorophyll-a, Gesamtschwebstoff und Gelbstoff bezogen auf die nicht gelernten Testdatensätze mit jeweils 100 000 simulierten Spektren.

Die Auftragung der im linearen Raum berechneten RMSE-Werte für jedes einzelne Konzentrationsintervall der nicht gelernten Testdatensätze veranschaulicht, wie die Abbildung 6.3 zeigt, die Genauigkeitsgrenzen der Konzentrationsbestimmung. In den gewählten Fehlerdarstellungen sollten die Verfahren konstante relative Fehler aufweisen. Wie schon den Abbildungen 6.1 und 6.2 zu entnehmen war, lassen sich alle 3 Wasserinhaltsstoffe durch Anwendung einer Atmosphärenkorrektur wesentlich genauer bestimmen als aus den Spektren vom Oberrand der Atmosphäre. Dabei darf nicht vergessen werden, daß es sich um Modelldaten handelt, deren atmosphärenkorrigierte Eingabespektren entgegen *realen* Daten fehlerfrei sind. Eine Analyse fehlerbehafteter Eingabedaten erfolgt im nächsten Abschnitt. Die Genauigkeitsbestimmung der Chlorophyll-a-Konzentration, bei der alle übrigen simulierten Parameter (τ_a , θ_o , θ_s , $\Delta\phi$, ...) variieren dürfen, zeigt für das 1S-Verfahren im Konzentrationsbereich von etwa $0,5 - 10 \text{ mg m}^{-3}$ Fehler, die in der Größenordnung der simulierten Konzentrationen selbst liegen. Erst ab hohen Konzentrationen von mehr als 10 mg m^{-3} Chlorophyll-a ergeben sich kleinere RMSE-Werte im Vergleich

zu den Simulationen. Konzentrationen von weniger als $0,5 \text{ mg m}^{-3}$ können dagegen nur mit großen Fehlern bestimmt werden.

Gänzlich anders stellt sich der Fehlerverlauf des 1S-Verfahrens für den Gesamtschwebstoff dar. Aufgrund der hohen Rückstreuung der Schwebstoffe lassen sich diese auch vom Oberrand der Atmosphäre aus gut bestimmen, sodaß die Fehler über den weiten Konzentrationsbereich von $0,5 - 50 \text{ g m}^{-3}$ deutlich niedriger als die simulierten Konzentrationswerte bleiben. Für Konzentrationen von etwa $0,2 \text{ g m}^{-3}$ liegt der Fehler in der Größenordnung der Simulationen selbst. Schwebstoffkonzentrationen von weniger als $0,2 \text{ g m}^{-3}$ sind im Vergleich zu den simulierten Konzentrationen mit großen Fehlern behaftet.

Die Gelbstoffbestimmung mit dem 1S-Verfahren zeigt sich unproblematischer als die Bestimmung der Chlorophyll-a-Konzentration. Die Fehler liegen hier im Konzentrationsbereich von $0,05 - 1 \text{ m}^{-1}$ niedriger als die simulierten Werte. Konzentrationen von weniger als $0,01 \text{ m}^{-1}$ gehen im Rauschen der Variabilität aller übrigen Parameter unter und weisen große Fehler auf.

6.2 Stabilität gegenüber verrauschten Eingangsdaten

Das Meßsignal des Satelliten wird durch signalabhängige und signalunabhängige Rauschbeiträge beeinflusst. Als wichtigste Ursache für signalabhängiges Rauschen ist das sogenannte Photonenrauschen anzusehen, das sich in der Quantennatur des Lichtes begründet, da die von einer gleichförmig hellen Lichtquelle auf einen CCD-Sensor einfallende Strahlung in einem beliebigen Zeitintervall nicht konstant, sondern zufälligen Schwankungen unterworfen ist. Die Anzahl der gemessenen Photonen läßt sich nicht deterministisch sondern nur statistisch beschreiben und folgt einer Poisson-Verteilung, die durch eine Gauß-Verteilung genähert werden kann. Als signalunabhängige Rauschterme sind das thermische Rauschen und das Rauschen des Dunkelstroms zu nennen.

Quantitativ läßt sich das Rauschen durch das Signal-Rausch-Verhältnis (SNR) als das Verhältnis von Signal-Elektronen zu Rausch-Elektronen angeben. Für ein typisches Signal über dem offenen Ozean beträgt das gemessene Signal-Rausch-Verhältnis des MERIS-Instrumentes im blauen Spektralbereich ($\lambda = 412,5 \text{ nm}$) etwa 1400 und fällt mit zunehmender Wellenlänge auf einen Wert von etwa 400 im nahen infraroten Spektralbereich ($\lambda = 885 \text{ nm}$) ab.

Nachfolgend soll der Einfluß von signalabhängigem Rauschen auf die Genauigkeit der Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe untersucht werden. Der Einfluß der signalunabhängigen Komponente wird dabei vernachlässigt. Hierzu werden die jeweiligen 100 000

Eingabespektren der beiden Testdatensätze zum einen unkorreliert, signalabhängig und stochastisch mit maximalen Fehlern von 2% verrauscht, um ein Photonenrauschen zu simulieren. Zum anderen werden die einzelnen Kanäle der Spektren korreliert, signalabhängig und stochastisch mit Fehlern von bis zu 20% verrauscht, um den Einfluß von Atmosphärenkorrekturfehlern auf die Genauigkeit der Verfahren zu untersuchen. Die Fehler werden als spektral konstant mit einer gaußförmigen Verteilungsfunktion angenommen. Die auf diese Weise verrauschten Datensätze werden anschließend invertiert und die entsprechenden RMSE-Werte in Abhängigkeit der Konzentrationsintervalle bei Variabilität aller übrigen Modellparameter berechnet.

Das Ergebnis der Fehleranalyse für unkorreliert verrauschte Eingangsspektren ist in der Abbildung 6.4 für ausgewählte Konzentrationen der einzelnen Wasserinhaltsstoffe dargestellt. Beide Verfahren zeigen selbst bei einem für das MERIS-Instrument am ungünstigsten angenommenen spektral konstanten SNR von 400 keine bedeutenden Fehleranstiege in der Konzentrationsbestimmung. Maximale Fehleranstiege um den Faktor 1,25 sind für das 1S-Verfahren für Konzentrationswerte von weniger als $0,5 \text{ mg m}^{-3}$ Chlorophyll und weniger als $0,08 \text{ m}^{-1}$ Gelbstoff zu beobachten. Das 2S-Verfahren zeigt bei einem SNR von 400 maximale Fehleranstiege um einen Faktor von 1,15, bei der Bestimmung von Chlorophyllkonzentrationen von weniger als $0,5 \text{ mg m}^{-3}$. Die Genauigkeit der Konzentrationsbestimmung der Schwebstoffe bleibt für ein angenommenes SNR von 400 unbeeinflusst. Lediglich der Konzentrationsbereich um 25 g m^{-3} zeigt eine leichte Fehlererhöhung um den Faktor 1,08. Ebenso bleibt die Inversion der Gelbstoffabsorption bei einem SNR von 400 stabil gegenüber unkorreliert verrauschten Eingabespektren.

Die Ergebnisse der Fehleranalyse der korreliert verrauschten Eingabespektren mit maximalen Fehlern bis zu 20% zeigt die Abbildung 6.5. Im Vergleich zu den Auswirkungen des unkorrelierten Rauschens bleiben beide Verfahren auch bei prozentual wesentlich höheren Fehlern des korrelierten Rauschens stabil. Der im Kapitel 5.1.1 durch Vergleich mit *in situ* gemessenen Reflektanzen bestimmte mittlere absolute prozentuale Fehler des Atmosphärenkorrekturverfahren für Wellenlängen bis $708,75 \text{ nm}$ betrug 18,4%. Werden wie zur 2S-Inversion nur Wellenlängen bis 665 nm berücksichtigt, beträgt der relative Fehler der Atmosphärenkorrektur 17%. Für das 1S-Verfahren wird jedoch mit deutlich geringeren Fehlern der Spektren am Oberrand der Atmosphäre gerechnet. Auch bei Fehlern von bis zu 20% zeigen sich die beiden Verfahren bei der Bestimmung der Chlorophyllkonzentration im Bereich von $2,5 - 50 \text{ mg m}^{-3}$ unbeeinflusst. Für Konzentrationen von weniger als $0,5 \text{ mg m}^{-3}$ steigt der RMSE beider Verfahren um etwa einen Faktor 3 an.

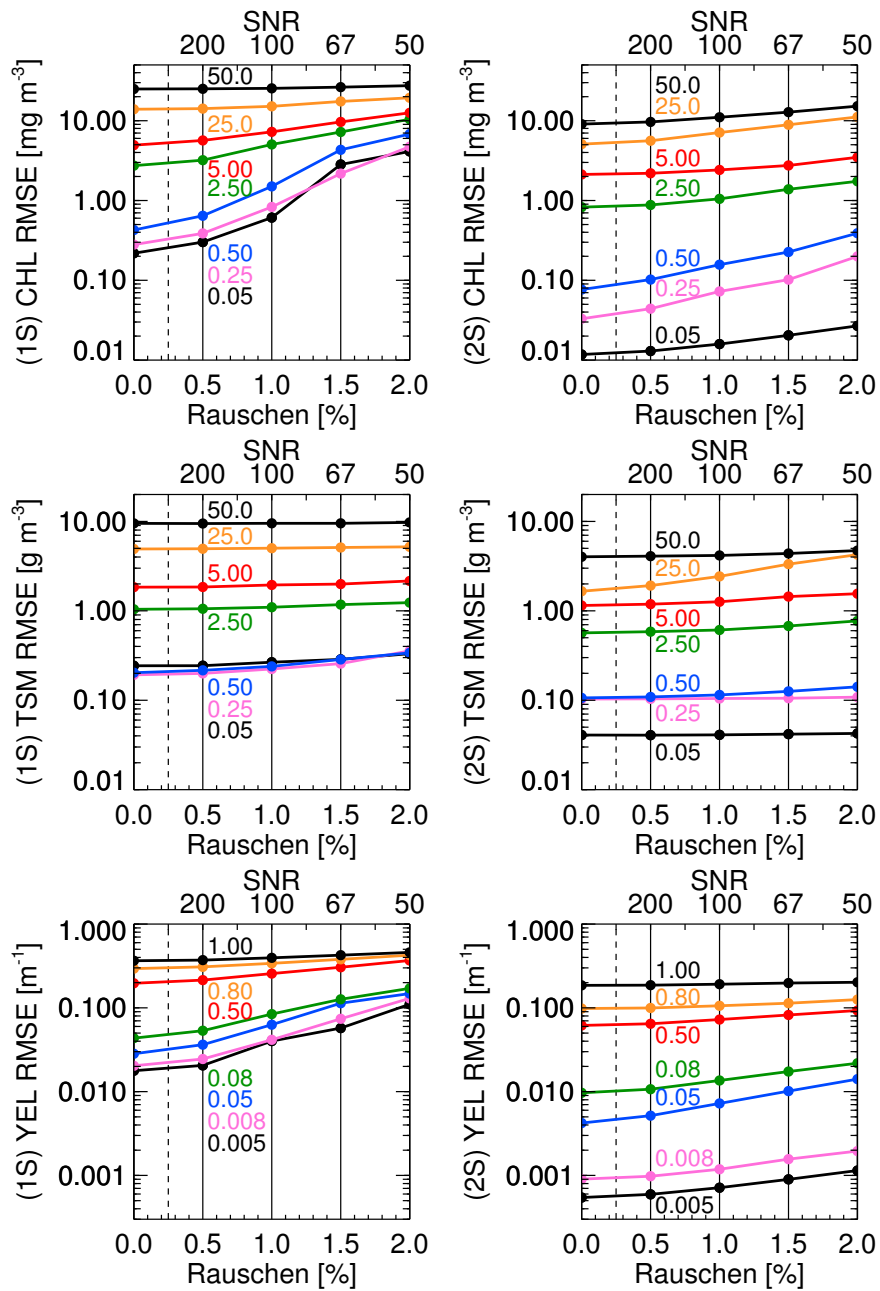


Abbildung 6.4: Fehlerentwicklung in der Konzentrationsbestimmung von Chlorophyll-a (oben), Gesamtschwebstoff (mitte) und Gelbstoff (unten) für unkorreliert und signalabhängig verrauschte Eingabespektren der Testdatensätze des 1S-Verfahrens (links) und des 2S-Verfahrens (rechts).

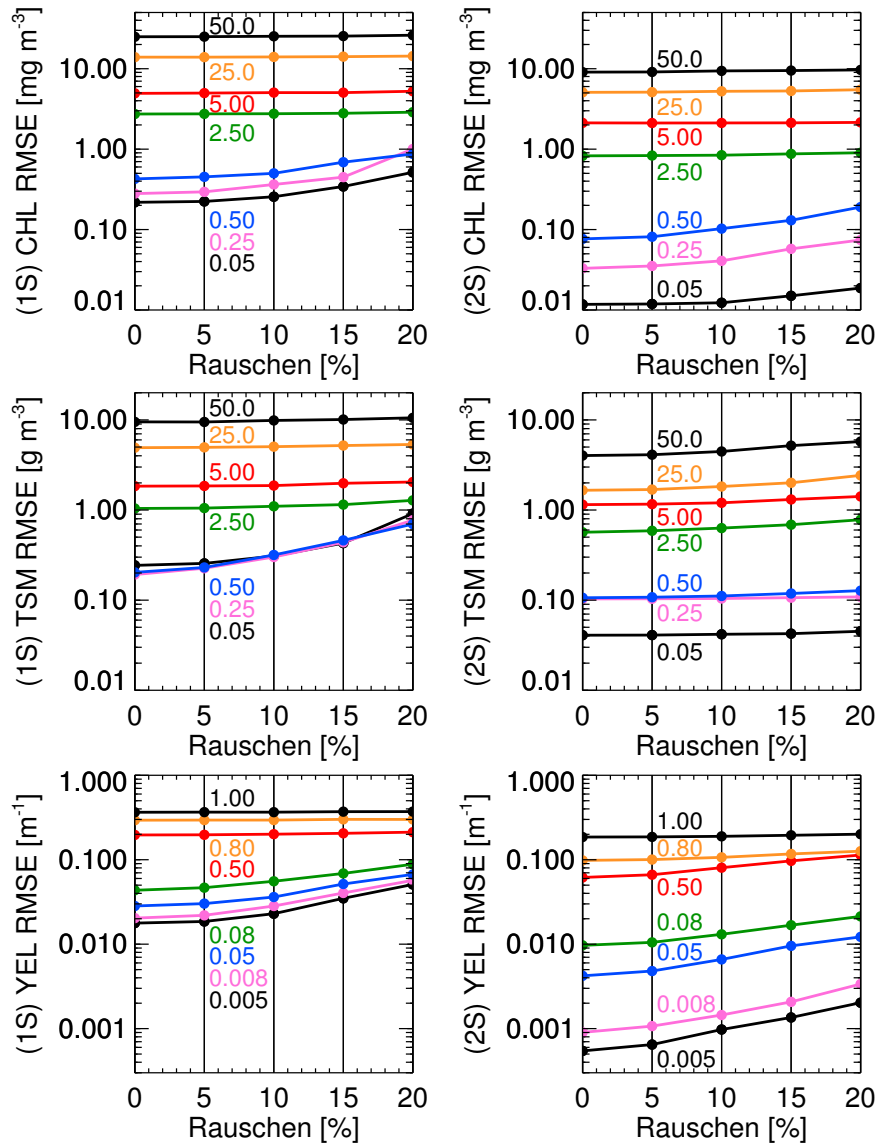


Abbildung 6.5: Fehlerentwicklung in der Konzentrationsbestimmung von Chlorophyll-a (oben), Gesamtschwebstoff (mitte) und Gelbstoff (unten) für korreliert und signalabhängig verrauschte Eingabespektren der Testdatensätze des 1S-Verfahrens (links) und des 2S-Verfahrens (rechts).

Die Schwebstoffbestimmung des 2S-Verfahrens bleibt im Konzentrationsbereich von $0,05 - 50 \text{ g m}^{-3}$ robust gegenüber Eingabefehlern von bis zu 20%. Bei Konzentrationen von weniger als $0,5 \text{ g m}^{-3}$ zeigt sich für das 1S-Verfahren deutlich die Genauigkeitsgrenze der Konzentrationsbestimmung (vgl. Abb. 6.4). Für das 1S-Verfahren steigen die RMSE-Werte der Schwebstoffbestimmung bei Fehlern von 20% um etwa einen Faktor 4 an. Die Ableitung von Schwebstoffkonzentrationen von mehr als $2,5 \text{ g m}^{-3}$ sind nur unwesentlich durch das korrelierte Verrauschen der Eingangsspektren beeinflusst.

Bei der Bestimmung der Gelbstoffabsorption mit dem 2S-Verfahren für Konzentrationen von weniger als $0,05 \text{ m}^{-1}$ erhöht sich der RMSE um den Faktor 4 und im Konzentrationsbereich von $0,05 - 0,8 \text{ m}^{-1}$ etwa um den Faktor 2. Das 1S-Verfahren zeigt für Konzentrationen von weniger als $0,08 \text{ m}^{-1}$ eine maximale Erhöhung des RMSE um den Faktor 2,8.

6.3 Grenzen der direkten Inversion

Im Abschnitt 6.1 wurden die Fehlerverläufe der Konzentrationen des 1S-Verfahrens bereits anhand der kompletten Testdatensätze, d. h. in Abhängigkeit aller variablen Parameter, beschrieben. Abschließend soll nun der Einfluß spezieller Parameter, wie der aerosoloptischen Tiefe und der Beobachter- und Sonnenzenitwinkel, auf die Genauigkeit des 1S-Verfahrens untersucht werden. Hierzu werden erneut die Inversionsergebnisse der unverrauschten Testdatensätze in Bezug auf die genannten Parameter anhand der RMSE-Verläufe betrachtet und deren Ergebnisse in der Abbildung 6.6 zusammengetragen.

Der Einfluß der aerosoloptischen Tiefe auf die Genauigkeit der Verfahren, bei Variation aller übrigen simulierten Parameter, zeigt sich bei der Bestimmung von geringen Konzentrationswerten, die aber, wie bereits beschrieben, im Vergleich zu den simulierten Werten, nur mit großen Ungenauigkeiten abgeleitet werden können. Im Fall kleiner aerosoloptischer Tiefen ($\tau_a = 0,04$) läßt sich das Chlorophyll-a für Konzentrationen von weniger als 1 mg m^{-3} im Mittel um den Faktor 2,4 genauer bestimmen als bei hohen aerosoloptischen Tiefen ($\tau_a = 1$). Dennoch liegen die Fehler der Konzentrationsbestimmung bei kleinen aerosoloptischen Tiefen in der Größenordnung der simulierten Konzentrationen selbst. Die Bestimmung der Schwebstoffe zeigt sich über den weiten Konzentrationsbereich von $1 - 50 \text{ g m}^{-3}$ nur unwesentlich von der aerosoloptischen Tiefe beeinflusst. Bei geringer atmosphärischer Trübung ($\tau_a = 0,04$) zeigt sich eine um den Faktor 1,5 leicht verbesserte Bestimmung der Konzentrationen von weniger als 1 g m^{-3} Schwebstoff. Die Fehler für Schwebstoffkonzentrationen von weniger als $0,2 \text{ g m}^{-3}$ lie-

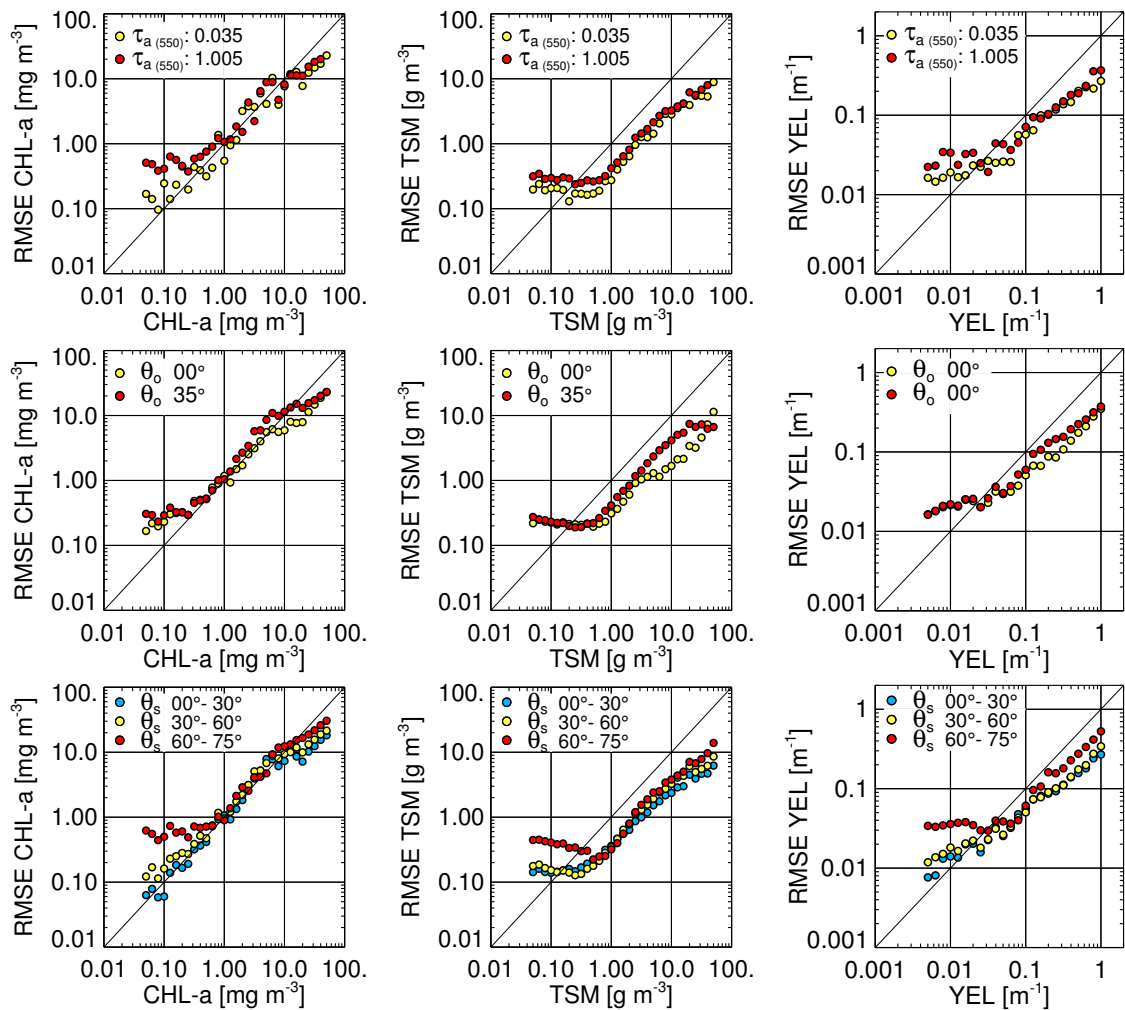


Abbildung 6.6: Genauigkeit des 1S-Verfahrens in Bezug auf unverrauschte Modelldaten für Chlorophyll-a, Gesamtschwebstoff und Gelbstoff in Abhängigkeit von der aerosoloptischen Tiefe (oben), dem Beobachterzenit- (mitte) und dem Sonnenzenitwinkel (unten).

gen dennoch deutlich höher als die Größenordnung der simulierten Konzentrationen. Unbeeinflusst von der atmosphärischen Trübung zeigt sich der Fehlerverlauf der Bestimmung der Gelbstoffabsorption im Bereich von $0,1 - 1 \text{ m}^{-1}$. Konzentrationen von weniger als $0,1 \text{ m}^{-1}$ lassen sich bei geringen aerosoloptischen Tiefen im Mittel um den Faktor 1,7 besser bestimmen als in Fällen hoher atmosphärischer Trübung ($\tau_a = 1$).

Betrachtet man den Einfluß des Beobachterzenits auf die Genauigkeit der Konzentrationsbestimmung, zeigen die Fehlerverläufe aller 3 Wasserinhaltsstoffe einen schmalen Bereich, in dem sich die Konzentrationen für die Nadirrichtung ($\theta_o = 0^\circ$) etwas besser bestimmen lassen als unter einem Winkel von $\theta_o = 35^\circ$. Dieser Bereich liegt für das

Chlorophyll-a bei $5-20 \text{ mg m}^{-3}$, für die Schwebstoffe bei $5-30 \text{ g m}^{-3}$ und die Gelbstoffabsorption bei etwa $0,1 - 0,5 \text{ m}^{-1}$. In den übrigen Konzentrationsbereichen bleibt der Beobachterwinkel ohne Einfluß auf die Genauigkeit der Konzentrationsbestimmung.

Der Einfluß unterschiedlicher Sonnenzenitwinkel dagegen beeinflusst die Genauigkeit der Bestimmung kleiner und großer Konzentrationen. So ergeben sich für kleine Konzentrationen wesentlich größere Fehler im Winkelbereich zwischen $\theta_s = 60^\circ - 75^\circ$ als bei Sonnenzenitwinkeln zwischen $0^\circ - 30^\circ$. Für Chlorophyll-a von weniger als 1 mg m^{-3} lassen sich die Konzentrationen für die genannten Winkelbereiche im Mittel um den Faktor 4,8 genauer bestimmen. Dennoch bleibt der Fehler der Konzentrationsbestimmung auch hier in der Größenordnung der simulierten Konzentrationswerte. Konzentrationen von mehr als 10 mg m^{-3} lassen sich um den Faktor 1,7 genauer ableiten. Für Schwebstoffe im Konzentrationsbereich von weniger als 1 g m^{-3} beträgt die Verbesserung im Winkelbereich von $0^\circ - 30^\circ$ etwa den Faktor 3. Schwebstoffkonzentrationen größer als 1 g m^{-3} lassen sich um den Faktor 1,7 besser bestimmen. Die Gelbstoffabsorption im Konzentrationsbereich von weniger als $0,1 \text{ m}^{-1}$ läßt sich im Bereich kleiner Sonnenzenitwinkel im Mittel um den Faktor 2,1 genauer bestimmen. Für Konzentrationen von mehr als $0,1 \text{ m}^{-1}$ dagegen um den Faktor 1,6.