# 5 Arbeitsmethoden

Der methodische Teil dieser Arbeit umfasst die folgenden Teilabschnitte:

- Zu Beginn wird ein Überblick über die zur Verfügung stehende Datenbasis gegeben. Dies schließt eine Beschreibung der Aufnahmesysteme und deren Funktionsweise mit ein, da das Verstehen der Beziehungen der physikalischen Eigenschaften der Beobachtungsobjekte und der Aufnahmetechnik für eine Interpretation der Daten wichtig sind.
- Im Rahmen der Datenverarbeitungsanlage wird kurz die zur Prozessierung der Daten genutzte Bildverarbeitungssoftware vorgestellt.
- Den Hauptteil bildet die Beschreibung der zur Verarbeitung der vorliegenden Daten angewendeten Arbeitsmethoden. Sie bilden eine Kombination der Arbeitsmethoden der geologischen Fernerkundung und der Spektroskopie und umfassen alle Arbeitsschritte ausgehend von den Rohdaten bis hin zum interpretierbaren Bild.

# 5.1 Datenbasis

Im Folgenden wird die Datenbasis der vorliegenden Arbeit vorgestellt. Die Datengrundlage bilden im Wesentlichen Bilddaten der Raumsonde Galileo, die im Dezember 1995 in den Orbit um den Planeten Jupiter einschwenkte und eine nahezu zweijährige Untersuchung des Jupitersystems in elf Umläufen um den Planeten absolvierte. Eine zweijährige erweiterte Mission (Galileo Europa Mission) begann im Dezember 1997 und beinhaltete acht nahe Vorbeiflüge zur intensiven Erkundung des Jupitermondes Europa. Die folgende "Galileo Millenium Mission" verlängerte die Mission um ein weiteres Jahr und erlaubte weitere Vorbeiflüge an den Jupitermonden Io und Ganymed. Dies ermöglichte erstmalig die Beobachtung des Jupitersystems zur gleichen Zeit mittels zweier Raumsonden, als im Dezember 2000 die Raumsonde Cassini den Jupiter auf ihrem Weg zum Saturn passierte. Eine detaillierte Beschreibung der Galileo Mission mit seinen unterschiedlichen Experimenten findet sich bei *Yeates et al.* (1985).

Die Untersuchung der spektralen Variationen auf der Oberfläche des Jupitermondes Ganymed erfolgte auf der Basis räumlich niedrig aufgelöster Bilddaten des abbildenden Spektrometers NIMS ("*Near Infrared Mapping Spectrometer"*) (*Carlson et al.*, 1992). Zur Bestimmung der Lokalisation und des morphologischen und geologischen Kontexts wurden räumlich hochaufgelöste Kameradaten des SSI (Solid State Imaging)-Systems (*Belton et al.*, 1992) genutzt.

Zusätzlich standen Kameradaten der bereits 1977 gestarteten Raumsonden Voyager 1 und Voyager 2 zur Verfügung, welche 1979 das Jupitersystem mit seinen Monden erkundeten *(Smith et al.*, 1977).

# 5.1.1 Abbildendes Infrarot-Spektrometer NIMS

Das *Near-Infrared Mapping Spectrometer* (NIMS) an Bord der Raumsonde Galileo (*Apataker*, 1987; *Carlson et al.*, 1992) kombiniert Eigenschaften eines Spektrometers mit denen einer Kamera, also eines abbildenden Fernerkundungsinstruments. Es erlaubt somit neben der Identifizierung der kompositionellen Einheiten planetarer Oberflächen die räumliche Zuordnung der spektralen Information, was für geologische und meteorologische Interpretationen von großer Wichtigkeit ist. NIMS bildet einen Vorläufer des abbildenden Spektrometers VIMS, das sich an Bord der Raumsonde CASSINI befindet. Die Instrumentbeschreibung folgt den Ausführungen in *Carlson* (1981) und *Carlson et al.* (1992). Die wesentlichen Eigenschaften von NIMS sind in Tabelle 5.1 im Vergleich zu VIMS zusammengestellt.

#### 5.1.1.1 Aufbau und Wirkungsweise

NIMS erfasst die spektralen Eigenschaften der Beobachtungsobjekte im Wellenlängenbereich von 0,7 bis 5,2  $\mu$ m, welcher die elektromagnetische Strahlung im reflektierten Nahen Infrarot (NIR) bzw. kurzwelligem Infrarot (engl.: *Short Wave Infrared* = SWIR) und einen Teilbereich im Thermalen Infrarot repräsentiert. Der Spektralbereich ist vor allem für Materialien oder Molekülstrukturen diagnostisch, deren Vorhandensein auf den Oberflächen von Planeten oder Monden oder in deren Atmosphären bereits bekannt ist oder vermutet wird. Dies schließt vor allem eine große Anzahl möglicher Eiskomponenten wie Wassereis, Methaneis, Ammoniakeis oder Trockeneis, Minerale wie Silikate und Oxide und andere organische und anorganische Verbindungen auf den Oberflächen von Planeten und Monden oder Gasmoleküle in deren Atmosphären ein.

Die Abbildung 5.1 zeigt schematische Darstellungen des Aufbaus des Instruments. Die Abbildung 5.2 verdeutlicht zusätzlich dessen Funktionsweise. NIMS besteht aus drei Hauptelementen: 1. einem Teleskop mit einer Apertur von 228 mm mit einem internen Spiegel, 2. einem Gitterspektrometer und 3. einem zwischen Teleskop und Spektrometer befindlichen mechanischen Zerhacker (nach Stahl & *Miosga*, 1986; engl.: *chopper*), der es ermöglicht, dass wechselweise die aufgenommene Strahlung des Beobachtungsobjektes oder einer Referenzquelle wie zum Messen des instrumentspezifischen Dunkelsignals auf die Detektoren trifft. Während des Überfluges tastet der interne oszillierende Spiegel mit einem Blickfeldwinkel (engl.: FOV = Field of View) von 10 mal 0,5 mrad und einer Winkelauflösung von 0,5 mrad das Beobachtungsobjekt senkrecht zur Flugrichtung ab. Im Rahmen eines Abtastvorgangs ist somit die Aufnahme von 20 Pixeln entlang einer Linie möglich. Die räumliche Auflösung hängt zum einem von der Höhe der Sensorplattform über dem Beobachtungsobjekt und zum anderen von der Winkelauflösung und der Abtastgeschwindigkeit des Sensors ab (List, 1992). Jedes Bildelement bzw. Bodenauflösungselement entspricht der im Moment des Aufnahmevorgangs erfassten Bodenzelle des Abtasters (= IFOV, Instantaneous Field of View). Mit einem IVOF von 0,5 mrad bei einer Entfernung von 10000 km ergibt sich für NIMS eine räumliche Auflösung von 5 km pro Bildelement. Die Bewegung der Raumsonde und der Fernerkundungsplattform in orthogonaler Richtung zur 20-Pixel-Linie ermöglicht die Erstellung einer zweidimensionalen Aufnahme mit einer variablen Anzahl von Linien und 20 Spalten (Abb. 5.2).

Die vom Abtastspiegel aufgenommene, vom Beobachtungsobjekt reflektierte oder emittierte (thermische) elektromagnetische Strahlung wird auf 17 nebeneinander liegende Detektoren (Photodioden), die über die Brennebene des Spektrometers verteilt sind, fokussiert. Die Empfindlichkeit der Detektoren ist wellenlängenabhängig. Zwei Detektoren, bestehend aus Silizium, werden für Wellenlängen kürzer als 1µm genutzt. Für die längeren Wellenlängen werden 15 Detektoren aus InSb verwendet. Um die optimale Leistung der Detektoren zu gewährleisten, das heißt, das Verhältnis von Nutz- zu Störstrahlung (nach *Stahl & Miosga*, 1986) zu verbessern, ist es notwendig, die Detektoren zu kühlen. Während die Nutzstrahlung das vom Beobachtungsobjekt reflektierte Licht repräsentiert, bezeichnet die Störstrahlung die thermisch induzierte Hintergrundstrahlung des Instruments. Diese ist umso höher, je wärmer das Instrument, bzw. die Umgebung der Detektoren ist. Ein passiver Strahlungskühler dient der Gewährleistung einer Betriebstemperatur von 64 K.

Eine stufenweise Rotation des Gitters ermöglicht die Bildung eines kompletten NIMS-Spektrums. Die erste Stufe des Gitters wird selektiert. Dann bewegt sich der Abtastspiegel über die 20-Pixel-Linie während die 17 Detektoren jeden Pixel simultan aufnehmen. Die 17 Detektoren messen 17 verschiedene Spektralkanäle, verteilt über den gesamten Wellenlängenbereich von NIMS, im Idealfall simultan für denselben *IFOV*. Die resultierende Aufnahme besteht aus 20 Bildelementen in jeweils 17 verschiedenen Spektralkanälen. Danach geht das Gitter in die nächste Position über, so dass die benachbarten spektralen Kanäle auf die 17 Detektoren passen und im Idealfall dieselben 20 Pixel wiederum aufgenommen werden. Dies wird wiederholt, bis ein vollständiges Spektrum gebildet ist. Die Anzahl der Spektralkanäle wird bestimmt durch die Anzahl der Gitterpositionen. Es sind mehrere Aufnahmemodi möglich, die sich in ihrer spektralen Auflösung unterscheiden.

Parameter	NIMS	VIMS
Zielobjekt	Jupitersystem	Saturnsystem
Teleskop	Apertur: 228 mm <i>f</i> /3,5 Ritchey-Chretien	Apertur: 228 mm <i>f</i> /3,2 Ritchey-Chretien
Spektrometer	Beugungsgitter	Beugungsgitter
Spektralbereich	0,7-5,2μm	$0,35 - 5,2 \mu m$
Spektrale Auflösung	$0.0125 \mu m (\lambda < 1 \mu m)$ $0.025 \mu m (\lambda > 1 \mu m)$	0,0073μm (0,35 – 1,05μm) 0,0166μm (0,95 – 5,2μm)
Spektralkanäle	Variabel (408 – 17)	352
IVOF	0,5 mrad x 0,5 mrad	Nominal: 0,5 mrad x 0,5 mrad Hires: 0,167 x 0,167 mrad (0,35 - 1,05µm) 0,25x0,5 mrad (0,95 - 5,2µm)
FOV	10 mrad x 0,5mrad (20 Pixel)	32 mrad x 0,5mrad
Detektoren	2 Si ( $\lambda < 1\mu m$ ) 15 InSb ( $\lambda > 1\mu m$ )	$\frac{2 \operatorname{Si} (\lambda < 1 \mu m)}{15 \operatorname{InSb} (\lambda > 1 \mu m)}$
Dynamische Auflösung	10 Bit (0 – 1023)	10 Bit (0 - 4096)

Tab. 5.1: Instrumentparameter des abbildenden Spektrometers *NIMS* (<u>,,*Near Infrared Mapping Spectrometer</u><sup>4</sup>) an Bord der Raumsonde Galileo (nach Carlson et al.; 1992) im Vergleich zu dessen Weiterentwicklung, dem <u>,,<i>Visual and Infrared Mapping Spectrometer*<sup>4</sup> (*VIMS*) an Bord der Raumsonde CASSINI (Brown et al., 2004).</u></u>



Abb. 5.1: Design des abbildenden Spektrometers NIMS. Die Bezeichnungen der einzelnen Bestandteile zeigt die Abb. 5.2 (aus: Carlson et al., 1992).

Die Bandbreite der einzelnen Spektralkanäle beträgt 0,0125  $\mu$ m für Wellenlängen kürzer als 1  $\mu$ m und 0,025 $\mu$ m für Wellenlängen länger als 1  $\mu$ m. Im Aufnahmemodus mit der höchsten spektralen Auflösung von 0,0125 $\mu$ m wird das Gitter in 24 Stufen über die Detektoren bewegt, um 408 Aufnahmen, jede für eine bestimmte Wellenlänge, zu erstellen. Die benachbarten spektralen Kanäle überlappen einander um eine halbe Bandbreite (engl.: *Nyquist sampling*).



Abb. 5.2: Schematische Darstellung des Aufbaus und der Funktionsweise des NIMS-Instruments (aus: Carlson et al., 1992).

Die graphische Darstellung in Abbildung 5.3 zeigt die Empfindlichkeitskurve eines Detektors im IR mit einer zentralen Wellenlänge von 1,15 $\mu$ m. Die Detektoren sind nicht gleichmäßig über deren gesamte Bandbreite bzw. Wellenlängenbereich empfindlich. Ihre Empfindlichkeit sinkt vor allem zu den Randbereichen (DN < 300), wo mehr und mehr die Störstrahlung das Signal dominiert. Diese Bereiche werden beim "*Nyquist sampling*" reduziert. Durch eine Überlappung der Spektralkanäle um eine halbe Bandbreite werden diese Bereiche reduziert und die Aufnahme eines kontinuierlichen Spektrums mit hoher Empfindlichkeit also hoher Nutzstrahlung ermöglicht.



Abb. 5.3: Spektrales Empfindlichkeitsprofil von zwei Detektoren im "Nyquist sampling" (nach: Carlson et al. 1992) (Erklärung im Text).

Andere Aufnahmemodi mit zum Beispiel 12 und 6 Gitterpositionen und mit 204 und 102 Spektralkanälen sind wählbar mit einer spektralen Auflösung von 0,025µm. Im Fall von 204 Spektralkanälen berühren sich die Enden der spektralen Segmente gerade. In einigen Teilen des Spektrums erscheinen sogar Lücken zwischen den Spektralkanälen, da deren Bandbreite gleich bleibt. Der Aufnahmemodus kann für jeden einzelnen Detektor separat gewählt werden. Die einfallenden Photonen werden von NIMS in ein elektronisches Signal umgewandelt und in Form diskreter Helligkeitswerte (DN's) gespeichert. Die Anzahl der möglichen Helligkeitswerte wird durch die dynamische Auflösung des Instruments bedingt. Im Falle von NIMS werden die Helligkeiten in einer 10 Bit-Skala aufgenommen. So wird der Dynamikbereich für die Aufzeichnung der spektralen Strahlungsintensitäten in 1023 Stufen (DN's) wiedergegeben. Das Ergebnis der Messung ist ein Spektrum der Helligkeitswerte für jeden Spektralkanal über den gesamten Wellenlängenbereich von NIMS.

#### 5.1.1.2 Beobachtungen

Während der nominalen Mission im Jupitersystem erfolgten mehrere gezielte Vorbeiflüge an den Monden Ganymed, Callisto und Europa. Sie wurden jeweils nach dem primären Zielobjekt und der Orbitnummer mit G1, G2, C3, E4, E6, G7, G8, C9, C10 und E11 bezeichnet. Der nominalen Mission folgte die zweijährige Galileo Europa Mission (GEM) mit weiteren acht Vorbeiflügen an Europa (E12, E14 bis 19) und vier an Callisto (C20 bis C23). Der Ausfall der Hauptantenne HGA (engl.: High Gain Antenna) der Raumsonde machte jedoch drastische Veränderungen in der Beobachtungsplanung notwendig. Datentransfer über die Low Gain Antenna war nur mit sorgfältiger Auswahl der Beobachtungen und hohen Kompressionsraten möglich. Das Ausmaß der Beobachtungen wurde eingeschränkt und für alle Zielgebiete gab es jeweils nur eine einzelne Aufnahmemöglichkeit. Oft wurde zusätzlich die Anzahl der Spektralkanäle reduziert, um dennoch eine räumliche Abdeckung zu erreichen. Das NIMS-Instrument selbst erlitt ebenfalls Schäden während der Beobachtungen im Jupitersystem, vor allem durch die Strahlungsumgebung des Planeten Jupiter. Der dritte und der achte Detektor fielen zwischen dem dritten und sechsten Orbit aus. Dies verhinderte eine Aufnahme der Spektren zwischen 1 und 1,25µm bzw. zwischen 2,4 und 2,7µm. Daten, die nach dem Ausfall der Detektoren aufgenommen wurden, sind extrem verrauscht und alternieren in Abhängigkeit vom elektrischen Verstärkungsfaktor (engl.: gain state) zwischen extrem niedrigen und hohen Werten. Insgesamt erfolgten 31 NIMS Beobachtungen des Mondes Ganymed (Tabelle 5.2). Von diesen wurden 24 Beobachtungen auf Grund der folgenden Kriterien für die Untersuchung der spektralen Variationen auf Ganymeds Oberfläche ausgewählt:

- der räumlichen Auflösung,
- der spektralen Auflösung (bzw. der Anzahl der detektierten Spektralkanäle) und
- der Aufnahmerichtung.

Die räumlichen Auflösungen für die Beobachtungen von Ganymed liegen zwischen einem bis 400 km/Pixel. Für die Kartierung der räumlichen spektralen Variationen, vor allem im Fall der relativ schwachen Absorptionen wie zum Beispiel der von  $CO_2$  bei 4,25µm, erwiesen sich NIMS-Beobachtungen ab einer räumlichen Auflösung von etwa 150 km/Pixel brauchbar. Aufnahmen von relativ nahen Vorbeiflügen erreichen räumliche Auflösungen von weniger als ein km/Pixel. Jedoch wurde hier die Oberfläche generell mit hohen Phasenwinkeln bis zu 90 Grad beobachtet und ist in den Aufnahmen durch Schattenstrukturen geprägt. Diese sind zwar für die Identifizierung topographischer Strukturen in den Kameradaten vorteilhaft, verursachen jedoch in den Spektren der NIMS-Daten relativ starke Muster, welche schwer zu entfernen sind und im Extremfall eine Kartierung spektraler Variationen unmöglich machen.

NIMS-Spektren mit 408 Spektraldaten, welche mit der höchst möglichen spektralen Auflösung von etwa 26 nm aufgenommen wurden, eigneten sich am besten für die Analyse der vorhandenen Absorptionen. Eine geringere Anzahl von Spektralkanälen wie 102 und 204 reduziert die spektrale Information. Wenige Spektralkanäle stehen für die Analyse der Absorptionsbanden zur Verfügung. Dies erschwert vor allem die Charakterisierung der Form bzw. des Verlaufs der Absorption und auch

die Bestimmung von deren Absorptionstiefe. Dies wird vor allem im Bereich relativ schmaler Absorptionen wie zum Beispiel der von CO<sub>2</sub> bei 4,25µm deutlich (Kap. 4), welche nur 13 der 24 möglichen Spektralkanäle des 14. Detektors einnimmt. Stehen insgesamt nur 102 Spektralkanäle zur Verfügung nimmt das Band nur 3 bis 4 Spektralkanäle ein. Es ist zwar noch sichtbar, jedoch deutlich schlechter aufgelöst. Eine geringere Anzahl von Spektralkanälen wurde im Allgemeinen selektiert, um Datenvolumen zu sparen (siehe oben) oder weil zu kurze Aufnahmezeiten zur Verfügung standen. Vor allem während sehr naher und relativ schneller Vorbeiflüge waren die NIMS-Beobachtungen an die Beobachtungsplanung der SSI-Kamera gekoppelt (engl.: *"ride alongs"*), die während dieser Vorbeiflüge die Bewegung der Aufnahmeplattform kontrollierte. Deren sehr kurze Aufnahmezeiten reichten nicht aus, um einen größeren Spektralbereich aufzunehmen und resultierten meist in NIMS-Aufnahmen mit nur 17 Spektralkanälen, in denen ein Auffinden von Absorptionsbanden gänzlich unmöglich ist. Einige Beobachtungen dienten dem Versuch, vermutlich vorhandene dünne Atmosphären der Monde zu beobachten (engl.: *"limb scans"*). Diese Beobachtungen zeigen nur einen sehr geringen Teil der Ganymedoberfläche und beinhalten keine räumliche Information. Sie wurden daher nicht in die Analyse mit einbezogen.

Die Abbildung 5.4 zeigt ein auf Kameradaten basierendes Mosaik von Ganymed überlagert mit den Grenzen der 24 NIMS-Beobachtungen. Von diesen weisen 13 räumliche Auflösungen von weniger als 10 km/Pixel auf, die eine detaillierte Kartierung der spektralen Variationen ermöglichen. Die Namen dieser Beobachtungen sind in der Abbildung 5.4 hervorgehoben. Der Großteil der Beobachtungen liegt im Bereich zwischen 80 ° und 240° westlicher Länge auf der dem Planeten Jupiter abgewandten Seite. Von ihnen besitzen 12 eine relativ hohe räumliche Auflösung (~2 bis ~20 km/Pixel) und zwei eine mittlere räumliche Auflösung zwischen etwa 43 und 55 km/Pixel. Den globalen Kontext bieten die beiden globalen Beobachtungen G1GNGLOBAL und E6GNGLOBAL, welche die Oberfläche Ganymeds zwischen 85 und 323°W mit einer räumlichen Auflösung von mehr als 100 km/Pixel und relativ niedrigen Phasenwinkeln kleiner als 32° abbilden. Generell betragen die Phasenwinkel der Beobachtungen von Orbit 1, 2, 6 und 9 weniger als 35°. Daten von 7. und 8. Orbit von Jupiter besitzen Phasenwinkel von etwa 60 bis 90°.

Zwischen ungefähr 240° und 360° westlicher Länge im Bereich der Heckseite, dass heißt in Bereichen der entgegen der Bewegungsrichtung von Ganymed gerichteten Hemisphäre, wurde die Oberfläche von NIMS nur mit einer geringen räumlichen Auflösung, generell größer als 50 km pro spektralem Bildelement (engl.: *spectel = spectral element*) (E6GNGLOBAL) aufgenommen.

Ausnahmen bilden zwei kleine hochauflösende Beobachtungen von Einschlagskratern bei 290° und 340° westlicher Länge sowie 30° und 0° nördlicher Breite. Zwischen 5 bis 50° westlicher Länge wurden effektiv keine Beobachtungen durchgeführt. In geographischen Breiten zwischen 50 und 80° wurde nur einmal mit niedriger räumlicher Auflösung und hohem Phasenwinkel zwischen 60 und 90° beobachtet.

Zu beachten ist, dass die Anzahl der Wellenlängen nicht immer exakt 102, 204 oder 408 entsprechend der oben beschriebenen Aufnahmemodi betragen. So arbeiten zum Beispiel im Falle einer Beobachtung mit 228 Spektralkanälen zwei Detektoren im Aufnahmemodus mit der höchsten spektralen Auflösung (408-Kanal-Modus), während die anderen mit niedriger spektraler Auflösung (204-Kanal-Modus) verblieben.

Die NIMS-Daten liegen in Form spektraler Datenwürfel (engl.: *image cube*) im Allgemeinen im BSQ-Format (engl.: *band sequential format*) vor. Ein Datenwürfel besteht aus einer Reihe von Bildern des Zielobjektes, jedes in einer anderen Wellenlänge (Abb. 5.5)..

Die Datenwürfel wurden aus den Rohdaten der "NIMS *Experiment Data Records" (EDRs)* erstellt und in ein *BSQ*-Format transformiert. Alle Datenwürfel beinhalten zusätzliche Hintergrundinformationen (engl.: *"backplanes"*) wie zum Beispiel zur Aufnahmezeit, Beobachtungsgeometrie.

Beobachtung	Orbit	Mittlere Geographische Position	Größe (Zeilen, Linien)	Spektralkanäle, (Aufnahme- modus)	Räumliche Auflösung (km/Pixel)	Beobachtungswinkel (Phase, Einfall., Ausfall)
GLOBAL01A	G1	$70^{\circ}S - 70^{\circ}N$ $85^{\circ}N - 240^{\circ}W$	100x120	228 (408)	109, 4 - 124, 4	29,33
AMON	G1	25,9°N - 40°N 214,9° –232,5°W	40x50	228 (408)	17,58 - 18,95	24,33
REGIO01A	G1	"Ride along"	33x76	102 (102)	3,7 - 3,85	21,17
LIMBSC02A	G1	Limb-Aufnahme		17 (408)		
MEMPHIOI	G1	Limb-Aufnahme	63x58	102 ( 102)	1,46-1,60	17,67
MEMPHISOIA	G1	$2^{\circ}S - 31^{\circ}$	60x48	228 (408)	40,9 - 43,9	29,46
		12° – 166°W				
MIRRAY01	G1	$6,1^{\circ}S - 2,9^{\circ}S$ $228.4^{\circ}W - 236.2^{\circ}W$	73x57	228 (408)	5, 12 - 7, 1	7,84
NIPPUR01A	G1	21,3°N - 33,1°N	77x52	228 (408)	12,05 - 14,49	25,51
	č	1/3 <sup>~</sup> - 180,3 <sup>~</sup> W				
PTAH	G	83,1°S – 59,9°S 180 7° – 224 7°W	36x50	228 (408)	15,99 - 17,2	24,24
URUSUL01	G1	"Ride along"	263x120	102 (102)	3,63 - 3,73	15,5
ANTUM01	G2	$3,77^{\circ}N - 6,79N$	73x57	204 (204)	2,73 - 3,73	23,73
		218,42° - 221,02°W				
BRFRGR01A	G2	$70,22^{\circ}N - 70,6^{\circ}N$	150x150	204 (204)	56,44	15 - 45
		190,2° - 191,25°W				
NRPOLE01A	G2	$52,28^{\circ}N - 78^{\circ}N$	78x60	204 (204)	17,18 - 19,62	30,5
		168,22° - 228,44°W				
SIPPAR01A	G2	$27,89^{\circ}S - 11,19^{\circ}S$	16x47	204 (408)	36,88 - 37,45	31,21
		172,79° – 182,22°W				
TAMMUZ01A	G2	$9,62^{\circ}N - 15,41^{\circ}N$	69x49	204 (408)	10,51 - 12,78	26,05
		225,73° - 238,47°W				
GLOBAL01A	E4	$48^{\circ}\mathrm{S} - 50^{\circ}\mathrm{N}$	11x31	204 (408)	395,0 - 396,2	50,0
		$325 - 360^{\circ}$ W				
5.2: Zusammenstellung der wich	tigsten Paran	neter der zur Verfügung	stehenden NIMS-Be	eobachtungen von Ganymed.		

57

Tab.

<b>GLOBAL01A</b>	E6	$75^{\circ}S - 75^{\circ}N$	42x77	192 (408)	158,4 - 159,8	34,5
		$255^{\circ} - 323^{\circ}W$				
NHILAT	G7	$30^{\circ}N - 50^{\circ}N$	84x97	192 (408)	32,86 - 37,65	63,0
		325° - 5°				
BRITRL01A	G7	$25^{\circ}N - 30^{\circ}N$	38x49	360 (408)	11,12-2,19	73,5
		285° - 310°W				
GLOBAL01A	G7	$N_{\circ}0L$ - $S_{\circ}0L$	59x124	192 (408)	94,26 - 102,8	61,2
		$335^{\circ} - 5^{\circ}$				
GLOBAL02A	G7	$55^{\circ}S - 50^{\circ}N$	29x86	360 (408)	110,4 - 112,7	119,5
		$227^{\circ} - 270^{\circ} W$				
KITTU0IA	G7	$2,88^{\circ}S - 3,0^{\circ}N$	103x54	360 (408)	4,2-6,37	87,65
		332,27° - 341∘W				
MELKAR01A	G8	$11,66^\circ\mathrm{S}-8,4\mathrm{S}$	58x52	216 (408)	4,55 - 6,54	80,38
		184,21° - 187,45°W				
OSIRISOIA	G8	$61^{\circ}S - 21,39^{\circ}S$	42x75	216 (408)	38,51 - 41,35	62,94
		118,09° - 175,5°W				
URUK	G8	$14,98^{\circ}S - 0,19^{\circ}S$	75x83	216 (408)	14,77 - 19,24	68,66
		155,89° - 137,95°W				
TRANSI	G8	$42,74^{\circ}N - 52,29^{\circ}N$	55x48	216 (408)	12, 19 - 14, 26	ż
		193,62° - 206,65°W				
DARTRL	G8	32,7°N – 34,76°N	21x51	384 (408)	1,91 - 3,24	76
		204,0° - 204,66°W				
LIDARK	G8	$1,07^\circ\mathrm{N}-6,08^\circ\mathrm{N}$	43x48	216 (408)	9,76 - 11,19	ż
		182,27° - 187,25°W				
DRKLIT	C9	$17^{\circ}N - 55^{\circ}N$	170x69	228 (408)	40,0 - 40,96	13,74
		50° - 140°W				
GLOBAL01A	C9	$65,19^{\circ}S - 78,15^{\circ}N$	131x123	228 (408)	82,59 - 93,92	43
		62,64° - 228,77°W				
GLOBAL02A	C9	84,35°S – 82,2°N	43x158	228 (408)	80,81 - 86,41	81
		326,79° - 131,06°W				
Tota 1. Tota 2. O						

Fortsetzung von Tab. 5.2.

58



59



Abb. 5.5: Konzept eines "*image cubes*", mit simultan aufgenommenen Spektralkanälen, welche die Messung eines Reflexionsspektrums für jeden Bildpunkt bzw. Pixel innerhalb der Szene (nach Vane,1985).

#### 5.1.2 Multispektrale Galileo SSI-Kameradaten

Erstmals bei einer interplanetaren Mission wurde als bilderzeugendes System (<u>Solid State Imaging</u> System) eine Kamera vom *CCD*-Typ (*Charged-Coupled-Device* = Ladungsgekoppelte Anordnung) eingesetzt. Es handelt sich dabei um eine zweidimensionale Anordnung einiger 100000 photoempfindlicher Siliziumelemente. Die Sensitivität dieses Instruments liegt um etwa einen Faktor 100 höher als bei den vorhergehenden Kamera-Systemen der Raumsonden Voyager 1 und 2.

Eine ausführliche Instrumentbeschreibung findet sich bei *Belton et al.* (1992) und *Klaasen et al.* (1984). Die wesentlichen Eigenschaften gehen aus Tabelle 5.3 hervor. Das optische System der SSI-Kamera besteht aus einem katadioptrischen Cassegrain-Spiegelteleskop und ist mit einer Brennweite von 1500 mm vergleichbar mit der Schmalwinkel-Kamera der Voyager-Sonden. Der Einsatz einer Weitwinkel-Kamera wie im Falle der Raumsonden Voyager 1 und 2 (siehe Kapitel 5.1.3) wurde aus Budgetgründen unterlassen.

Der erfassbare Spektralbereich der SSI-Kamera ist deutlich breiter verglichen mit den Voyager-Kameras. Die Eigenschaften des CCD-Sensors legen die Obergrenze des maximal erfassbaren Wellenlängenbereichs bei etwa 1100 nm fest (Belton et al., 1992). Die kleinste erfassbare Wellenlänge liegt bei 375 nm, während bei den Voyager-Kameras teilweise auch der ultraviolette Spektralbereich erfasst werden konnte (Belton et al., 1992). Aus dem Materialbestand der Voyager-Mission (Kap. 5.1.3) wurde ein acht Filterpositionen umfassendes Filterrad benutzt. Die Auswahl der zentralen Wellenlängen der Filter erfolgte auf der Basis bereits spektral nachgewiesener Oberflächenmaterialien der Galileischen Satelliten sowie der Jupiteratmosphäre (Klaasen et al., 1984). Die zentralen Wellenlängen und abgedeckte Wellenlängenbereiche der weitgehend im sichtbaren Spektralbereich des Lichts liegenden Breitbandfilter Violett (VLT), Grün (GRN) und Rot (RED) gleichen in etwa denen der Filter der Voyager-Kameras (Abb. 5.6). So sollte eine weitgehende Kontinuität zwischen den beiden Bilddatensätzen gewährleistet werden. Vier weitere Filter sind im Spektralbereich des reflektierten Nahen Infrarots lokalisiert. Der Spektralbereich des bei 986 nm am weitestem im Nahen Infrarot liegenden Filters (IR) überlappt leicht mit dem von NIMS (Kap. 5.1.1) erfassten Wellenlängenbereich. Wie im Falle der Voyager-Kameras wurde ein breitbandiger, panchromatischer oder CLEAR-Filter (CLR) eingesetzt, der alle sieben Farbfilter weitgehend einschließt und seine größte Sensitivität bei etwa 700 nm aufweist (Abb. 5.6).

Parameter		Galileo SSI		
Optik		Apertur: 1500 mm <i>f</i> /8,5 Cassegrain		
Spektralbereich		0,375 – 1,1µm		
Spektralkanäle	Filter (Position): CLEAR (CLR)(0) Violett (VLT)(3) Grün (GRN)(1) Rot (RED)(2) 'Methan'(6) 'Kontinuum'(4) 'Methan'(7) Infrarot (IR)(5)	Zentrale Wellenlänge (in nm): 611 404 559 671 734 756 887 986	Bandbreite (in nm): 440 45 65 60 10 19 16 50	
IVOF	10,16µrad			
FOV	8,1mrad			
Detektoren		CCD		
Dynamische Auflösung		8 Bit $(0-255)$		

Tab.5.3: Instrumenteigenschaften der Galileo-SSI-Kamera (aus: Belton et al., 1992).



Abb.5.6: Spektralbereiche der Breitbandfilter der Galileo-SSI-Kamera (nach Belton et al., 1992).

Die Helligkeitswerte werden in einer 8 Bit-Skala aufgenommen. So wird der Dynamikbereich für die Aufzeichnung der spektralen Strahlungsintensitäten in 256 Stufen (*DNs*) wiedergegeben. Die räumliche Auflösung der Bilddaten ist nominal 50-mal besser als NIMS bei gleicher Distanz vom Zielobjekt und mit einer 20- bis 1000-mal besseren räumlichen Auflösung als die Voyager-Kameras. Befindet sich die Raumsonde Galileo 10000 km vom Zielobjekt entfernt, wird eine räumliche Auflösung von 100 m pro Pixel (NIMS: 5 km/Pixel) erreicht.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden vor allem Bilddaten des *CLEAR*-Filters genutzt. Mit seiner zentralen Wellenlänge bei 700 nm eignet er sich bestens für einen Vergleich mit dem ersten Spektralkanal von NIMS, dessen zentrale Wellenlänge ebenfalls bei 700 nm liegt. In einigen Fällen wurden zusätzlich Farbdaten verwendet.

#### 5.1.3 Multispektrale ISS Kameradaten der Raumsonden Voyager 1 und 2

Auf den Raumsonden Voyager 1 und 2 wurden zum letzten Mal Fernsehkameras vom Vidicon-Typ eingesetzt. Dem Funktionsprinzip einer Fernsehkamera ähnlich basieren die Voyager-Kameras auf der Auslesung einer gespeicherten Signalinformation mittels eines abtastenden Elektronenstrahls. Das optische Bild wird auf eine photoelektrische Schicht projiziert und die Lichtintensität eines jeden Bildpunktes in eine elektrische Spannung (bzw. Elektronenstrom) umgewandelt. Eine Speicherplatte dient der kapazitiven Speicherung der Elektronen und damit des Ladungsbildes. Eine Abtasteinrichtung dient der zeilenweisen Abtastung des Ladungsbildes durch einen Elektronenstrahl (*Stahl & Miosga*, 1986).

Parameter		Telekamera		W	Weitwinkelkamera	
Optik	A	Apertur: ~200 mi f/8,5 Cassegrain	n	Ap f	ertur: ~1500 mn 73,2 Refraktor	1
Spektral- bereich		0,375 – 1,1µm		(	0,32 – 0,64µm	
Spektral- kanäle	Filter (Position): CLR(0,4) UV (7) VI(1) BL(2) GR (5,6) OR(3)	Zentrale Wellelänge (in nm): 497 346 416 479 566 591	Band- breite (in nm): 360 70 140 170 180 140	Filter (Position): CLR (2) VI (3) BL(1) 'Methan' GR (5) 'Na-D- Linie' OR(3) 'Methan'	Zentrale Wellelänge (in nm): 470 426 476 541 560 589 605 618	Band- breite (in nm): 290 100 160 - 200 - 230 -
IVOF	9,25 <sup>x</sup> 10 <sup>-6</sup> µrad			•	70 <sup>x</sup> 10 <sup>-6</sup> µrad	
FOV	7,5 <sup>x</sup> 7,5 mrad			5:	5,6 <sup>x</sup> 55,6 mrad	
Detektoren			Vic	licon		
Dynamische Auflösung		8 Bit (0 – 255)			8 Bit (0 – 255)	

Tab. 5.4: Instrumenteigenschaften der Voyager-Kameras einschließlich der spektralen Charakteristika der eingesetzten Filter: CLEAR = panchromatischer Filter, UV = Ultraviolett, VI = Violett, BL = Blau, GR = Grün, OR = Orange. Zusätzliche Filter der Weitwinkel-Kamera dienten der Detektion von Methan und der Natrium-D-Linie in den Atmosphären von Jupiter, Saturn, Titan und Uranus (siehe auch Abb. 5.7) (nach Smith et al., 1977).

Um den starken Schwankungen der Vorbeiflugdistanzen und Objektgrößen zu entsprechen, entschied man sich für den Einsatz von zwei Kameras unterschiedlicher optischer Öffnung und Brennweite. Es handelt sich um eine abgeänderte Version der früher auf den Marinersonden verwendeten Kameras.

Die wesentlichen Eigenschaften der Voyager-Kameras gehen aus Tabelle 5.4 hervor. Die eine der beiden Kameras hat ein 200-mm-Weitwinkelobjektiv mit einem Refraktor als optisches System. Die Schmalwinkel-Kamera besitzt ein 1500-mm-Teleobjektiv (f/8,5). Das optische System besteht aus einem Cassegrain-Teleskop.



Abb.5.7: Spektralbereiche der Breitbandfilter der Voyager-ISS-Kameras: (a) Telekamera NAC, (b) Weitwinkelkamera WAC und (c) Vergleich der beiden Kameras (nach Smith et al., 1977).

Filterräder an beiden Kameras ermöglichten Farbaufnahmen in einem Wellenlängenbereich von 0,32 bis 0,64 $\mu$ m (*Jepsen et al.*, 1980). Die Weitwinkel-Kamera umfasste acht Filterpositionen. Die tatsächliche Anzahl der Filterpositionen der Schmalwinkel-Kamera betrug ebenfalls acht Filterpositionen. Jedoch waren jeweils zwei Positionen mit panchromatischen Filtern (Position 0 und 4) bzw. Grünfiltern (Position 5 und 6) bestückt. In Tabelle 5.4 und der Abbildung 5.7 sind die Wellenlängen und die spektralen Überdeckungsbereiche der einzelnen Filter aufgeführt.

Die Voyager-Daten wurden in einer 8 Bit-Skala aufgenommen und die spektralen Strahlungsintensitäten in 256 Stufen aufgezeichnet. Wie im Falle der Galileo Kamera-Daten wurden im Rahmen dieser Arbeit ebenfalls vorwiegend Bilddaten des CLEAR-Filters benutzt. Nur in einzelnen Fällen wurde auf Farbdaten zurückgegriffen.

### 5.2 Datenverarbeitungsanlage

Die Prozessierung der vorliegenden Daten fand hauptsächlich an Unix-Workstations und Linux PC's des Institutes für Planetenforschung in Berlin/Adlershof statt. Für die Verarbeitung der unterschiedlichen Datensätze wurden hauptsächlich die Bildverarbeitungsprogramme ISIS, VICAR, IDL und ENVI verwendet.

ISIS (*Intergrated Software for Imaging Spectrometers*) wurde vom United States Geological Survey (USGS) speziell für die Verarbeitung, Analyse und Darstellung vor allem hyperspektraler Fernerkundungsdaten entwickelt. Es beinhaltet neben zahlreichen Funktionen zur Datenanalyse, Routinen zur radiometrischen, geometrischen und photometrischen Korrektur der Galileo-NIMS-Daten und wurde daher im Rahmen dieser Arbeit hauptsächlich zur initialen Prozessierung der NIMS-Daten genutzt.

VICAR (*Video Image Communication And Retrieval*) wurde vom *Jet Propulsion Laboratory* (Pasadena/USA) speziell für die Verarbeitung von terrestrischen und extraterrestrischen Fernerkundungsdaten entwickelt. VICAR bietet zusätzlich zahlreiche vom DLR entwickelte Prozeduren, die im Rahmen dieser Arbeit vor allem der Verknüpfung der unterschiedlichen Datensätze dienten.

Der Hauptteil der Datenanalyse erfolgte in IDL (*Interactive Data Language*). IDL integriert eine leistungsstarke, zeilenorientierte Sprache mit zahlreichen mathematischen Analyse- und graphischen Darstellungstechniken. Die IDL-Sprache kann sowohl interaktiv als auch zur selbständigen Erstellung von Funktionen, Prozeduren und Anwendungsprogrammen genutzt werden. IDL bietet zusätzlich die Möglichkeit FORTRAN und C-Routinen für spezielle Funktionen in IDL-Programme einzubinden.

Zahlreiche numerische und statistische Analysetechniken stehen dem Anwender zur Verfügung. Für die Verarbeitung und Analyse der zur Verfügungen stehenden NIMS - Daten wurden vor allem speziell zu diesem Zweck eigene Routinen entwickelt. IDL-Anwendungen reichen von einfachen Kommandos bis zu komplexen Programmen mit graphischen Benutzeroberflächen wie zum Beispiel ENVI (Environment for Visualizing Images), welches im Rahmen der vorliegenden Arbeiten vor allem der Visualisierung der Ergebnisse diente.

Zur Visualisierung der Ergebnisse wurde das vom *Environmental Systems Research Institute (ESRI)* entwickelte Geoinformationssystem *ArcView* genutzt. Neben der Visualisierung ermöglicht *ArcView*, jedoch auch räumliche Daten statistisch zu analysieren.

# 5.2 Datenverarbeitung

Die Bildverarbeitung der vorliegenden Daten besteht aus einer Folge von einzelnen Bildverarbeitungsprozessen, die grob in die beiden Arbeitsschritte der Datenvorverarbeitung und Spektralanalyse gegliedert werden können. Die einzelnen Arbeitsschritte werden in den folgenden Kapiteln näher vorgestellt.

# 5.2.1 Datenvorverarbeitung

Ausgehend von den Rohdaten stehen am Beginn der Datenverarbeitung die Verfahren der Datenvorverarbeitung. Ziele der Datenvorverarbeitung sind:

- im Verlauf der Kalibration der Spektraldaten die Korrektur unerwünschter instrumentspezifischer Einflüsse (z.B. thermisches und elektrisches Hintergrundrauschen),
- die Konvertierung der dimensionslosen digitalen Messwerte in physikalische Werte der Strahldichte *I* (engl.: *radiance*) und des Reflexionsgrades,
- die Korrektur des Einflusses der Beobachtungsgeometrie auf die Aussagekraft der Bilddaten (v. a. der Kameradaten). Sie muss im Rahmen der photometrischen Korrektur auf einen einheitlichen Wert normiert werden,
- und schließlich die Projektion der Bilddaten auf ein kartographisches Bezugssystem, welche notwendig ist, um die unterschiedlichen Datensäze miteinander zu kombinieren.

# 5.2.1.1 Kalibration der Spektraldaten

Die Kalibration bzw. Eichung von NIMS beinhaltet drei Kategorien: die spektrale, radiometrische und geometrische Kalibration. Ziel dieser Kalibration ist es, die Effekte auf die Bildinformation zu eliminieren, die von der Reflexion des Lichts an der Oberfläche unabhängig sind und welche die Interpretation der Spektraldaten daher verfälschen würden. Störende Einflüsse auf die Bildinformation werden zum Beispiel durch das Aufnahmesystem und die unterschiedlichen geometrischen Aufnahmebedingungen verursacht. Der Hauptteil der Kalibration erfolgte vor der Mission durch Labormessungen, jedoch waren Verifikationen der Kalibration während der Mission erforderlich. Die Kalibration der NIMS-Daten umfasst die geometrische, spektrale und radiometrische Korrektur der Rohdaten. Die Kalibration wurde zum Teil am *Jet Propulsion Laboratory* (JPL) in Pasadena (USA) und zum Teil in der Arbeitsgruppe von Prof. T.B. McCord an der *University of Hawaii* (UH, Honolulu/USA) durchgeführt. Die verwendeten Prozeduren sind teilweise dokumentiert in den Arbeiten von *McCord* (1997, 1998, 1999) und *Hibbitts et al.* (2000). Die Genauigkeit der Kalibration ist essentiell für das Verstehen der Grenzen der Interpretation. Daher werden die einzelnen Prozeduren noch einmal kurz erläutert.

#### Spektrale Kalibration

Das Ziel der spektralen Kalibration war die Bestimmung der spektralen Wellenlängenposition (mit einer Genauigkeit von 0,001µm oder weniger als ein Zehntel einer Gitterstufe) und des spektralen Profils eines jeden Detektors über die entsprechende Bandbreite für jeden einzelnen Detektor und jede der 32 möglichen Gitterpositionen, welche während der Mission erwartet wurden (siehe Abb. 5.3 in Kapitel 5.1.1).

Die spektrale Kalibration von NIMS erfuhr im Verlauf der Mission relativ zu den vor der Mission erfolgten Messungen leichte Veränderungen, die wahrscheinlich auf Wechselwirkungen mit Jupiters Strahlungsumgebung zurückzuführen sind (McCord et al., 1999; Hibbitts et al. 2000). Die Veränderungen in der Kalibration beziehen sich sowohl auf Verschiebungen der Gitterposition und daher der zentralen Wellenlänge der einzelnen Spektralkanäle eines jeden Detektors ("PSHIFT"; McCord, 1998; Hibbitts, 2000) aber auch auf die Entfernung zwischen den benachbarten Kanälen ("Inflation"; McCord, 1998; Hibbitts, 2000). Obwohl die Abweichungen zu Beginn der Mission gering sind, wurden sie im Verlauf der Beobachtungen vor allem während der späten nominalen Mission und der Galileo Europa Mission (GEM) signifikant (Abb. 5.8 und 5.9). Der PSHIFT der zentralen Wellenlängen aller Kanäle hat sich zwischen dem zweiten und 21. Orbit um ungefähr 2,7 Gitterpositionen verschoben (eine Gitterstufe repräsentiert eine FWHM von 0.026µm (Tab. 5.5). Während desselben Zeitintervalls verbreiterten sich die Abstände zwischen den Kanälen und deren Bandbreiten um etwa 20 % (McCord et al., 1998; Hibbitts, 2000). Die Angaben für die Orbits 10 bis 21 sind jedoch nur für Ganymeds Nachbarmond Callisto von Bedeutung. Im Falle von Ganymed liegen nur NIMS-Daten der Orbits 1 bis 9 vor. Jedoch wurden auch hier ein PSHIFT von 1,77 Gitterstufen und eine Inflation von etwa 8 % gemessen (Tab. 5.5).



Abb. 5.8: Zunehmende Abweichungen der zentralen Wellenlängen (PSHIFT) im Verlauf der Galileo-Mission relativ zu den Labormessungen vor der Mission. Ein Ansteigen des PSHIFT steht für ein Absinken der Wellenlänge. Legende: (o) JPL-Kalibration auf der Basis einer Photodiode und (x) der Absorptionen von  $SO_2$  im Io-Spektrum;( > ) NIMS-Beobachtungen von Ganymed und (<) Callisto (Hibbitts, 2000).

Die Korrektur der UH basiert auf den NIMS-Beobachtungen von Callisto. Die dem Jupiter zugewandte Hemisphäre und der vom Jupiter abgewandte Bereich der Bugseite von Callisto wurden während der Vorbeiflüge 3, 7, 8, 9 und 10 beobachtet. Unter der Annahme, dass die spektralen Eigenschaften der Oberfläche in diesem Zeitraum nicht variierten, wurde die spektrale Kalibration auf der Basis der Wellenlängenposition und Form bzw. dem Verlauf der Absorptionsbande von CO<sub>2</sub> bei 4,25µm durchgeführt (*McCord et al.*, 1998; *Hibbitts*, 2000).



Abb. 5.9: Die Absorptionsbreiten der Spektralkanäle verbreitern sich (Inflation) im Verlauf der Mission relativ zu den Labormessungen vor der Mission. Ein Ansteigen des PSHIFT steht für ein Absinken der Wellenlänge. Legende wie in Abb. 5.6. (Hibbitts, 2000).

Ganymed			Callis	sto
Vorbeiflug	PSHIFT (in Gitterstufen)	Inflation (in %)	PSHIFT (in Gitterstufen)	Inflation (in %)
1	-1,3	Keine	-	-
2	-1,3	Keine	-1,57	Keine
3	-	-	-1,18	2
6	-0,4	5	-	-
7	-0,25 oder -0,30	6	-	-
8	0,13	7	0,15	7
9	0,47	8	0,47	8
10	-	-	0,75	9,5
14	-	-	0,75	15
20	-	-	1,27	19,8
21	-	-	1,123	20

Tab. 5.5: Veränderungen der spektralen Kalibration verglichen mit der Kalibration vor der Mission für Ganymed und Callisto (Hibbitts, 2000).

Während der Vorbeiflüge 2, 14, 20, und 21 wurde nur die Heckseite beobachtet. Es gibt keinen positiven Hinweis darauf, dass Wellenlängenposition und Verlauf der Absorption von  $CO_2$  mit der auf der Bugseite beobachteten übereinstimmt und die UH-Kalibration konsistent ist. Ähnliches gilt für Ganymed. Die verfügbaren NIMS-Daten beinhalten keine einzige Region, die während mehrerer Vorbeiflüge beobachtet wurden. Die Kalibration basiert dennoch auf der Annahme, dass die Wellenlängenposition und der Verlauf der Absorption von  $CO_2$  konstant bleiben. Die Kalibrationen für Beobachtungen von Callisto und Ganymed unterscheiden sich leicht voneinander (siehe Tab. 5.5). Zum Beispiel wurde für den zweiten Vorbeiflug ein PSHIFT von -1,57 für Callisto und -1,3 für Ganymed genutzt. Dies entspricht einer Verschiebung der Wellenlängenposition der Absorption von  $CO_2$  um 3 nm (*Hibbitts*, 2000).

Die offizielle Kalibration erfolgte im Rahmen der Standardprozessierung am JPL (*Carlson et al.*, 1992). Zum einen wurde eine interne Lichtquelle (InGaAs-Photodiode) an Bord der Raumsonde genutzt, um während der Mission eventuelle spektrale Verschiebungen zu verfolgen. Zusätzlich

wurden NIMS-Spektren des Jupitermondes Io mit den Spektren erdgebundener Beobachtungen und mit Laborspektren von gefrorenem Schwefeldioxid, welches durch acht signifikante Absorptionsbanden zwischen 2 und 4,5µm charakterisiert ist, verglichen. Die Genauigkeit der spektralen Kalibration wird auf 1 Prozent oder weniger geschätzt (*Carlson*, 1992).

Die spektrale Kalibration der NIMS-Daten von Ganymed und Callisto ist jedoch oft unterschiedlich zu der, die am besten zu den Beobachtungen von Io während desselben Vorbeifluges passt (*Hibbitts*, 2000). Der Unterschied wird in einer zusätzlichen scheinbaren Abhängigkeit der Kalibration von der momentanen radialen Entfernung der Raumsonde Galileo vom Planeten Jupiter und der veränderlichen Stärke der Strahlungsumgebung von Jupiter vermutet. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit die spektrale Kalibration der *UH* vorgezogen.

#### Radiometrische Kalibration

Im Rahmen der radiometrischen Kalibration erfolgte die Korrektur des Dunkelsignals D und die Konvertierung der Grauwerte in physikalische Werte der Strahldichte I oder des Reflexionsgrades R (Gl. 3.1; Kap. 3). Die Strahldichten wurden von den Grauwerten der 10-Bit-Rohdaten eines jeden Pixels (x,y) durch das Anwenden wellenlängenabhängiger Empfindlichkeiten E der Detektoren berechnet. Diese basieren auf den Kalibrationsdaten vor und während der Mission, dem Verstärkungsfaktor g (engl.: *gain state*, dem "*Chopper*"-Modus (Kap. 5.4.1) und der Temperatur T der Brennebene (*FPA*, engl.: *focal plane assembly*) (*Carlson et al.*, 1992):

$$I(x, y, \lambda) = I_0(x, y, \lambda)E(x, y, \lambda, g, t, T)$$
(5.1)

Der eigentlichen radiometrischen Kalibration geht die Korrektur des Dunkelstroms D, d.h. des Eigenrauschens der Detektoren infolge der Strahlungswechselwirkung mit der Detektorumgebung, voraus. Dieses instrumentbedingte Rauschen, welches durch thermisch induzierte Elektronenübergänge in den Detektoren verursacht wird, ist jeder gemessenen Intensität  $I_0$  additiv überlagert und muss von diesen subtrahiert werden. Die Daten des Dunkelstroms existieren für jeden Verstärkungsfaktor g und beinhalten die Dunkelwerte als Funktion der Detektoren, die Position und Blickrichtung des Scanspiegels. Die Messungen des Dunkelstroms entstammen im Wesentlichen speziellen "*dark sky*"-Aufnahmen während der verschiedenen Vorbeiflüge (*Carlson et al.*, 1992). Die Daten liegen in DN-Werten vor und müssen daher vor der Konvertierung der NIMS-Spektren von diesen abgezogen werden.

Die primäre Quelle der radiometrischen Kalibrationsparameter sind die Labormessungen der Empfindlichkeiten und spektralen Dispersion vor dem Start der Mission (*Carlson et al.*, 1992). Im Verlauf der Mission erfuhr die Kalibration Korrekturen unter Nutzung zweier Messinstrumente an Bord der Raumsonde:

- <u>Photometric Calibration Target (PCT) assoziiert mit einem Photometric Calibration Mirror (PCM)</u> und
- <u>R</u>adiometric <u>C</u>alibration <u>T</u>arget (*RCT*).

Das PCT/PCM-System nutzt reflektiertes Sonnenlicht, um einen relativen Standard für den einfallenden Strahlungsfluss F (Gl. 3.1; Kap. 3.1) zu bilden. Das Reflexionsvermögen von PCM und PCT wurde bereits im Labor, jedoch deren absolute Strahldichte nicht unter akkuraten Beleuchtungsgeometrien gemessen (*Carlson et al.*, 1992).

Das RCT ist ein Schwarzkörper-Strahler, dessen Strahldichte während der Mission auf der Basis der gemessenen momentanen Temperatur und des bekannten Emissionsgrades (engl.: *emissivity*) genau bestimmt werden konnte (*Carlson et al.*, 1992).

Die radiometrische Kalibration der ersten beiden Detektoren ist infolge zeitlicher Veränderungen der spektralen Empfindlichkeiten *E* unsicher, ebenso wie die der zur Kalibration verwendeten Messungen an Bord der Raumsonde (*Carlson et al.*, 1992). Dennoch standen NIMS-Beobachtungen von Ganymed im Bereich dieser Detektoren zur Analyse zur Verfügung. Sie wurden von G.B. Hansen (UH), auf der Basis von NIMS-Beobachtungen und Referenzdaten des Erdmondes kalibriert.

Die Genauigkeit der radiometrischen Korrektur der Detektoren 3 bis 17 bzw. ihre absolute Empfindlichkeiten E wird mit einer Genauigkeit von besser als 10 % angegeben, die größtenteils auf einer exzellenten Übereinstimmung zwischen den gemessenen spektralen Helligkeitstemperaturen und den unabhängig gemessenen physikalischen Temperaturen des RCT (Unterschiede betragen weniger als 5 %) basiert (*Carlson et al.*, 1992).

Als Resultat der radiometrischen Korrektur geben die einzelnen Pixel (x,y) der Spektralkanäle von NIMS nicht mehr diskrete Helligkeitswerte wieder, sondern beinhalten nun die Messwerte der korrigierten reflektierten Strahldichte *I* bzw. des Reflexionsgrades *R* (siehe Gl. 3.1) der Ganymedoberfläche.

## Geometrische Kalibration

Ziel der geometrischen Korrektur ist, jedem Pixel eines jeden Spektralkanals seine korrekte räumliche Position zuzuweisen. Die Korrektur ist notwendig, da der zeitliche Abstand zwischen den Aufnahmen der einzelnen Spektralkanäle der 20 Pixel während eines Aufnahmevorgangs zum Beispiel im Falle einer Aufnahme mit höchster spektraler Auflösung 8,67 *sec* beträgt. Dies erfordert, dass der IFOV während des Aufnahmevorgangs konstant ist und jeder Spektralkanal denselben Bereich des Beobachtungsobjekts abbildet. Bei gleicher Teleskopstellung führt diese Zeitdifferenz in Verbindung mit der relativen Bewegung von dem Beobachtungsobjekt und der Raumsonde zu einer Art Verschiebungseffekt, d.h. die in den einzelnen Spektralkanälen aufgenommenen Bilddaten sind zueinander räumlich versetzt. Wurden die Beobachtungen mit höchster spektraler Auflösung durchgeführt (*Nyquist-sampling*), verschiebt sich der IFOV während des Aufnahmevorgangs kontinuierlich um eine halbe Gitterposition (*McCord et al.*, 1994; *Hibbitts*, 2000).

Eine zusätzliche räumliche Verschiebung wird durch die Bewegung des internen Spiegels während des Aufnahmevorgangs verursacht. Wird die erste Linie von 20 Bildelementen in eine Richtung aufgenommen, erfolgt die Aufnahme der nächsten in entgegen gesetzter Richtung. Die Aufnahmen sind leicht bis zu einem Viertel eines Pixels zueinander verschoben. Zur multispektralen Analyse und zur Verknüpfung mit den Kameradaten ist es jedoch unbedingt notwendig, dass ein Ortspunkt auf der Oberfläche des Beobachtungsobjektes in allen Spektralkanälen auf dem gleichen Bildpunkt abgebildet wird. Andernfalls werden Helligkeit und spektrale Unterschiede unterschiedlicher Ortspunkte vermischt und eventuell maskiert.

Die Registrierung eines jeden spektralen Bildelements auf das Beobachtungsobjekt erfolgte auf der Basis der jeweiligen Aufnahmezeit, der Position der Raumsonde, des Zielobjekts und der Orientierung der Aufnahme- bzw. Abtastplattform während des Aufnahmevorgangs.

Im Rahmen dieser Arbeit standen sowohl projizierte als auch nicht projizierte Daten zur Verfügung. Die NIMS-Daten lagen in der Standardprojektion der Punktperspektive vor. Diese repräsentiert einen Spezialfall der orthographischen Kartenprojektion, in welcher das Bild auf eine tangentiale Ebene in einer unbegrenzten Entfernung projiziert ist (*Snyder & Voxland*, 1989) und entspricht in etwa der Beobachtungsgeometrie.

#### 5.2.1.2 Photometrische Korrektur

Neben den spektralen Eigenschaften einer zu untersuchenden Oberfläche ist die Beobachtungsgeometrie von entscheidendem Einfluss auf die Intensität der reflektierten Strahlung. Die Beobachtungsgeometrie wird durch den Einfallswinkel *i*, den Ausfallswinkel  $\varepsilon$  und Phasenwinkel  $\alpha$  der einfallenden Sonneneinstrahlung definiert (siehe Abb. 3.1). Die vorliegenden Daten wurden unter den unterschiedlichsten Beobachtungsgeometrien aufgenommen. Zur Kartierung der geologischen Einheiten, welche neben den geomorphologischen Eigenschaften der Ganymedoberfläche auch auf der Basis von dessen Variationen im Reflexionsgrad innerhalb der Kameradaten erfolgte, und zum Vergleich der geologischen Einheiten mit den Ergebnissen der Analyse der Reflexionseigenschaften auf der NIMS-Daten, ist es daher notwendig, die Bilddaten auf eine einheitliche Beobachtungsgeometrie ( $\alpha = 0^{\circ}$ ) zu normieren. Eine Reihe empirisch gewonnener photometrischer Funktionen steht für eine Korrektur der vorliegenden Bilddaten zur Verfügung. Sie beschreiben den Zusammenhang zwischen dem Reflexionsgrad einer planetaren Oberfläche als Funktion der Beleuchtungsgeometrie bzw. des Phasenwinkels. Eine häufig verwendete photometrische Funktion stammt von *Minneart* (1941, 1961) und wurde anhand von Beobachtungen des Erdmondes abgeleitet (*Regner*, 1990). Sie hat die folgende Form:

$$\frac{I}{F} = f(\alpha)\mu_0^{k(\alpha)}\mu^{k(\alpha)-1}$$
(5.2)

mit  $\mu_0 = \cos i$  und  $\mu = \cos \varepsilon$ . Die Parameter *f* und *k* sind Funktionen des Phasenwinkels *a*. Sie basieren auf empirischen Messungen. Der Minneart-Exponent *k* beschreibt die Änderung des Reflexionsgrades vom Zentrum bis zum Rand einer beobachteten planetaren Oberfläche. Für *k* kleiner 0,5 erreicht man eine Randaufhellung und für *k* größer als 0,5 eine Randabdunkelung. Die Minnaert-Funktion wird wegen ihrer Einfachheit heute im Allgemeinen nur noch qualitativ genutzt (*Thorpe*, 1973, *Johnson et al.*, 1983; *Veverka et al.*, 1986) und gibt insbesondere die photometrischen Eigenschaften unterschiedlicher geologischer Einheiten der Ganymedoberfläche, vor allem bei großen Phasenwinkeln nur ungenau wieder (*Goguen*, 1985) und versagt vollständig bei Phasenwinkeln nahe 90° (*Verbiscer & Helfenstein*, 1998).

Ein weiterer Vorschlag für eine photometrische Funktion stammt von Squyres & Veverka (1981) und Buratti & Veverka (1984), welcher das Lommel-Seeliger-Gesetz (Verbiscer & Helfenstein, 1998) mit dem Lambertschen Kosinus-Gesetz (Verbiscer & Helfenstein, 1998) additiv kombiniert und mit der sich die Ganymedoberfläche und ihre geologischen Einheiten genauer beschreiben lassen. Das Lommel-Seeliger-Gesetz beschreibt das Rückstreuverhalten von einfach streuenden planetaren Oberflächen des Erdmondes (Rebhan, 1993; Verbiscer & Helfenstein, 1998). Das Lambertsche Kosinus-Gesetz beschreibt den Spezialfall einer rein diffus streuenden Oberfläche (Verbiscer & Helfenstein, 1998).Das Modell ist wie folgt definiert:

$$\frac{I}{F} = A \frac{\mu_0}{\mu_0 + \mu} f(\alpha) + (1 - A)\mu_0$$
(5.3)

mit

$$f(\alpha) = a + b\alpha + ce^{-d\alpha}$$
(5.4)

und  $\mu_0 = \cos i$  und  $\mu = \cos \varepsilon$ . Die Koeffizienten A und *f* sind direkt vom Phasenwinkel  $\alpha$  abhängig. Die Streueigenschaften der geologischen Oberflächeneinheiten von Ganymed sind denen des Erdmondes

vergleichbar und können in Gleichung 5.2 mit A=1 beschrieben werden (*Squyres & Veverka*, 1981). Die Parameter a, b, c und d als Bestandteil der Phasenfunktion  $f(\alpha)$  dienen der Beschreibung der Streueigenschaften planetarer Oberflächen. Sie wurden von *Squyres & Veverka* (1981) empirisch für die geologischen Haupteinheiten von Ganymed erstellt (Tab. 5.6). Der exponentielle Term berücksichtigt zusätzlich den Oppositionseffekt (Kap. 3.1.3).

Squyres & Veverka-Parameter	Helles Gebiet	Dunkles Gebiet
A	0,71	0,57
В	-0,0044	-0,0035
С	0,18	0,14
D	0,14	0,14

Tab. 5.6: Parameter der Phasenkurve  $f(\alpha)$  in Gl. 5.3 von Squyres & Veverka (1981) für die geologischen Haupteinheiten der Ganymedoberfläche.

Die derzeit umfassendste und am weitesten entwickelte photometrische Funktion stammt von *Hapke* (1981, 1984, 1986). Sie beschreibt die photometrischen Eigenschaften in Abhängigkeit physikalischer Oberflächenmerkmale. Ausführliche Beschreibungen des Modells liefern *Jaumann* (1989), *Regner* (1990) und *Rebhan* (1993). Erfolgreiche Anwendungen dieses Modells für photometrische Beobachtungen der Monde im Jupitersystem erfolgten in den Arbeiten von *Helfenstein et al.* (1984), *Helfenstein* (1986), *Buratti* (1985) und *Simonelli & Veverka* (1986). Das Modell von Hapke ist wie folgt definiert:

$$r(i,\varepsilon,\alpha) = \frac{\mu_0'}{(\mu_0'+\mu'}\frac{w}{4\pi}\left\{\left[1+B(\alpha)\right]P(\alpha)+H(\mu_0')H(\mu')-1\right\}\Psi(i,\varepsilon,\alpha)$$
(5.5)

mit  $\mu 0' = \cos i$ ;  $\mu' = \cos \varepsilon$ . Die photometrische Funktion von Hapke setzt sich im Wesentlichen aus fünf Anteilen zusammen:

- das Lommel-Seeliger Streugesetz:  $\mu_0'/(\mu_0'+\mu')$
- die mittlere Partikel-Streu-Funktion  $P(\alpha)$ , welche die durch Einfachstreuprozesse reflektierte Strahlungsintensität in Abhängigkeit des Phasenwinkels  $\alpha$  beschreibt,
- der zu  $[H(\mu_0')H(\mu')-1]$  proportionale Teil, welcher die Prozesse der Mehrfachstreuung zwischen den Bodenpartikeln, die vor allem bei hellen Oberflächen eine Rolle spielen, berücksichtigt (*Chandrasekhar*, 1960) und
- der Einfluss der makroskopischen Oberflächenrauhigkeit, der mittels der so genannten Abschattungfunktion (engl.: *shadowing function*)  $\Psi(i, \varepsilon, \phi)$  modelliert wird.

Die Funktion von Hapke benötigt fünf Parameter, um die physikalischen Eigenschaften einer Oberfläche zu beschreiben:

- *w* entspricht der mittleren Teilchenalbedo,
- Oppositionseffekt B(α),
- h beschreibt den Kompaktionsgrad des Regoliths (fließt mit in  $B(\alpha)$  ein),
- die beiden Koeffizienten b und c des Legrende-Polynoms charakterisieren die mittlere Partikelstreufunktion  $P(\alpha)$ ,
- $\Theta$  entspricht der mittleren makroskopischen Rauhigkeit des Regoliths.

Die verwendeten photometrischen Parameter sind in Tabelle 5.7 zusammengefasst. Sie entstammen der Arbeit von *Oberst et al.* (1999). Es handelt sich hierbei um zwei Reihen von Parametern, welche nach *Helfenstein* (1986) die optischen Eigenschaften des dunklen und hellen Geländes auf Ganymed beschreiben. Da die meisten der bisher veröffentlichten Parameter für Ganymed aus Anpassungen der Funktion von Hapke aus Analysen räumlich nicht aufgelöster Bilddaten entstammen (*Domingue & Verbiscer*, 1997; *Buratti*, 1991, 1995), wurden die verwendeten Parameter von Oberst et al. (1999) mittels räumlich aufgelöster Messungen (engl.: *disk-resolved*) der Oberflächenhelligkeit individueller Geländeformen bestimmt.

Aufgrund der geringen räumlichen Auflösung der NIMS-Daten (>3 km/Pixel) erwies sich die Methode nach *Squyres & Veverka* (1981) für deren photometrische Korrektur als die effektivste Methode. Aus Gründen der Konsistenz wurde sie ebenfalls für die photometrische Korrektur der vorliegenden Kameradaten verwendet. Eine photometrische Korrektur nach Hapke war für eine im Rahmen der vorliegenden Arbeit rein qualitative Auswertung der Kameradaten nicht notwendig. Die bisher zur Verfügung stehenden photometrischen Parameter sind für alle hier vorgestellten Modelle wellenlängenabhängig und gelten nur für den Bereich des sichtbaren Lichts. Zur Bestimmung dieser Parameter ist eine Vielzahl von Bilddaten derselben Region einer planetaren Oberfläche, die unter unterschiedlichsten Beobachtungsbedingungen bzw. Phasenwinkeln aufgenommen wurden, erforderlich. Adäquate Messungen über den Spektralbereich von NIMS stehen aufgrund begrenzter Beobachtungsmöglichkeiten nicht zur Verfügung. Zum Vergleich mit den Kameradaten wurde die photometrische Korrektur jedoch für den ersten Spektralkanal von NIMS mit einer zentralen Wellenlänge bei 0,7μm angewendet.

Hapke Parameter	Helles Gebiet	<b>Dunkles</b> Gebiet
W	0,612±0,005	0,607±0,005
Θ	2,7°±0,1°	25,1°±0,1°
Н	0,10±0,01	0,32±0,007
B(a)	0,69±0,01	0,69±0,01
В	1,22±0,01	0,4±0,02
С	0,22±0,01	0,17±0,03

Tab. 5.7: Hapke Parameter zur photometrischen Korrektur der Bilddaten für eine Wellenlänge von 0,47µm (nach Oberst et al., 1999).

#### 5.2.1.2 Verknüpfung der unterschiedlichen Datensätze

Die Verknüpfung der unterschiedlichen Datensätze basiert im Wesentlichen auf deren Normierung auf ein einheitliches kartographisches Bezugssystem. Die resultierenden Bilddaten ermöglichen:

- den Vergleich von Daten unterschiedlicher räumlicher Auflösung,
- die geographische Lokalisierung von Grenzen zwischen spektralen und geologischen Einheiten,
- die Überlagerung der Kameradaten mit der spektralen Information und somit die Charakterisierung der in den Kameradaten sichtbaren geomorphologischen Oberflächenstrukturen anhand ihrer spektralen Signaturen,
- und schließlich die Kombinierung räumlich benachbarter und/oder mehr oder weniger überlagerter Beobachtungen in Bildmosaiken.

Der Prozess besteht aus zwei Arbeitsschritten:

- Transformation der Bildkoordinaten in das neue Koordinatensystem und
- Interpolation der einzelnen Grauwerte.

Die Berechnung des neuen Koordinatensystems erfolgte auf der Basis der, in den *"backplanes"* der vorliegenden Daten enthaltenen Informationen zur geographischen Lage der einzelnen Pixel. Mit Hilfe eines Transformationsalgorithmus wird ein mathematischer Zusammenhang zwischen den ursprünglichen Koordination des Pixels und denen der neuen Kartenprojektion erstellt. Dem Anwender stehen hierfür Polynome erster bis zehnter Ordnung zur Verfügung. Im Hinblick auf die Auswertung räumlich relativ gering aufgelöster NIMS-Daten wurde ein Transformationsalgorithmus erster Ordnung gewählt. Der Algorithmus ermöglicht, alle Koordinaten in beiden Koordinatenrichtungen unterschiedlich zu skalieren, translatieren sowie eine gemeinsame Drehung der beiden Koordinatenrichtungen um einen Winkel (*Kraus*, 1990). Die "Methode der kleinsten quadratischen Abweichung" (*Kraus*, 1990) wird genutzt, um die Koeffizienten des linearen Transformationsalgorithmus zu ermitteln, die eine Transformation mit dem kleinstmöglichen Fehler ermöglichen. Als einheitliches Koordinatensystem wurde in den meisten Fällen ein orthographisches Bezugssystem gewählt. Es zeigt ähnlich der Standardprojektion der Bilddaten (Punktperspektive, siehe Kapitel 5.3.1) das Beobachtungsobjekt wie von der Raumsonde aus gesehen. Die resultierenden Bilddaten besitzen vor allem den Vorteil einer relativ geringen räumlichen Verzerrung der Datenwerte.



Abb. 5.10: Vergleich der Kamera- und NIMS-Daten vor und nach der Projizierung: 1. farbkodierte nicht projizierte NIMS-Beobachtung (A), projizierte NIMS-Beobachtung (B) und Kombination mit Kameradaten (C).

Die Interpolation der Grauwerte in das neue Koordinatensystem erfolgte nach der Methode des "nächsten Nachbarn" (Kraus, 1990). Nach dieser Methode wird der Pixel, dessen Mittelpunkt dem transformierten Punkt am nächsten liegt, gewählt, um dessen Grauwert in die korrespondierende Gitterstelle zu überführen. Der Vorteil der Methode liegt darin, dass diese als einzige nicht die Grauwerte des Ursprungsbildes verändert. Sie verhindert ein "Verschmieren" der spektralen Signaturen in den Bilddaten, was in Hinsicht auf die Auswertung spektraler Signaturen wichtig ist. Jedoch gehen oft Grauwerte verloren oder können verschoben werden. Dieser Effekt wird durch die Wahl eines gegenüber der ursprünglichen räumlichen Auflösung höheren Bildmaßstabs reduziert. Zusätzlich geht die Projizierung eines vollständigen NIMS-Datenwürfels (siehe Kap. 5.1.1) jedoch stets einher mit einem drastischen Anstiegs des Datenvolumens. Im Zuge einer Kombinierung räumlich höher aufgelöster NIMS-Beobachtungen (5 bis 10 km/Pixel) mit räumlich niedriger aufgelösten NIMS-Beobachtungen wurde der Maßstab der neuen Kartenprojektion den besser aufgelösten Beobachtungen angepasst. Im Falle der globalen NIMS-Beobachtung G1GLOBAL (Dimension: 100<sup>x</sup>120<sup>x</sup>228, ~110 km/Pixel) erhöht sich das Datenvolumen von 11,27 Mb bei einem Maßstab der neuen Kartenprojektion von 1 km/Pixel um das Hundertfache. Die Analyse der spektralen Variationen in den NIMS-Daten erfolgte daher in der Standardprojektion der geometrischen Kalibration (Kapitel 5.3.1). Die Normierung auf ein einheitliches Bezugssystem erfolgte daher erst mit den resultierenden einkanaligen Bilddaten der Spektralanalyse (Kap. 5.3.2.1, Abb. 5.10).

### 5.2.2 Spektralanalyse

Der Datenvorverarbeitung folgen die Methoden der Spektralanalyse. Sie umfassen alle Prozesse, die der qualitativen und quantitativen Auswertung der spektralen Signaturen in den Reflexionsspektren von Ganymed dienen. Unterschiedliche Algorithmen stehen mittlerweile für eine mehr oder weniger automatisierte quantitative Analyse von Reflexionsspektren zur Verfügung. Diese Methoden wurden auf ihre Anwendbarkeit zur Analyse der Reflexionsspektren von Ganymed getestet und letztendlich die für die Auswertung der vorliegenden Spektraldaten genutzten Methoden unter folgenden Gesichtspunkten gewählt:

- der Aufgabenstellung,
- der bisherigen Erkenntnisse zur chemischen Zusammensetzung des Oberflächenmaterials und
- der Datenqualität, die sich vor allem auf:
- die spektrale und räumliche Auflösung und
- das Verhältnis von Nutz- zu Störsignal (Stahl & Miosga, 1986) der NIMS-Daten bezieht.

Die Spektralanalyse erfolgt vor allem im Hinblick auf die Charakterisierung der Reflexionseigenschaften der geologischen Einheiten und deren Veränderungen über die Ganymedoberfläche. Die Verarbeitungsprozesse der Spektralanalyse erfordern somit in erster Linie die Extraktion und Quantifizierung der relevanten Information, d.h. wie sich die spektralen Signaturen im Reflexionsspektrum von Ganymed über dessen Oberfläche verändern, um diese in Abhängigkeit der geologischen Oberflächenstrukturen charakterisieren zu können.

Die Ausführungen zu den bisherigen Erkenntnissen der Oberflächenzusammensetzung von Ganymed in Kapitel 4 haben aufgezeigt, dass Wassereis zum einen die Hauptkomponente im Oberflächenmaterial von Ganymed und zum anderen ebenfalls die dominierende spektrale Komponente im Spektralbereich von NIMS zwischen 0,7 und 5,2µm darstellt. Absorptionen von Wassereis im Spektralbereich von NIMS wurden bei 1,04, 1,25, 1,5 (mit der Absorption bei 1,65µm), 2 und 3µm identifiziert. Des Weiteren wurden relativ schwache Absorptionen von Spurenelementen wie unter anderem von  $CO_2$  bei 4,25µm beobachtet. Jede dieser Absorptionen ist durch ihre spektralen Parameter Wellenlängenposition, Absorptionstiefe bzw. Intensität, Absorptionsbreite (FHWM) und Symmetrie bzw. Asymmetrie eindeutig charakterisiert (Kap. 5.2.2). In den Kapiteln 3 und 4 wurde gezeigt, dass Veränderungen dieser spektralen Parameter zum einen in Zusammenhang mit der chemischen Zusammensetzung und den physikalischen Eigenschaften aber auch mit der jeweiligen Beobachtungsgeometrie stehen. Verschiebungen in der Wellenlängenposition stehen in erster Linie mit Veränderungen in der chemischen bzw. mineralogischen Zusammensetzung in Verbindung. Sie können jedoch ebenfalls Auskunft über die Zustandsform (fest, flüssig, gasförmig) leichtflüchtiger Bestandteile (wie z.B. von CO<sub>2</sub>) oder deren Einbindung in die Kristallstruktur von Wirtsmineralen geben (Hibbitts et al, 2000). Im Falle hydratisierter und/oder hydroxylierter Minerale sollte eine Verschiebung der Absorptionen bei 1,5 und 2µm von Wassereis in Richtung kürzerer Wellenlängen bis 1,4 bzw. 1,9µm zu messen sein (Hunt, 1980; McCord et al., 2001). Eine Verschiebung der Wellenlängenpositionen dieser Absorptionen geht oft einher mit Veränderungen von deren Symmetrieeigenschaften (McCord et al., 2001). Dagegen ist die Absorptionstiefe zum einen ein Indikator für den relativen Anteil der Komponenten in einer spektralen Mischung, variiert zum anderen aber auch vor allem im Falle von Wassereis in Abhängigkeit dessen spezifischer Partikelgröße (Kap. 3; Clark, 1980 a, b).

Die angewendeten Methoden sollten somit die Erfassung dieser spektralen Parameter ermöglichen, jedoch auch Veränderungen in diesen spektralen Parametern innerhalb einer NIMS-Beobachtung kompensieren. Dies sollte ermöglichen, Veränderungen im relativen Anteil der Komponenten im Oberflächenmaterial quantitativ zu erfassen und im Falle der leichtflüchtigen Komponenten, wie

Wassereis und CO<sub>2</sub>, Änderungen der Kristallstruktur bzw. der Zustandsform zu detektieren. Zusätzlich sollten die Arbeitsmethoden vor allem im Falle von Wassereis ermöglichen, Veränderungen im relativen Anteil und der Partikelgröße von Wassereis voneinander zu isolieren, um den Einfluss beider Effekte über die Ganymedoberfläche getrennt voneinander analysieren zu können.

Die quantitative Erfassung spektraler Parameter von einzelnen Absorptionen ist Bestandteil der Multiple Gaussian Methode (MGM) (Clark, 1980 a, b). Sie basiert auf der mathematischen Beschreibung der einzelnen Absorptionen nach der Normierung auf das entsprechende Kontinuum, das heißt dem generellen der Absorption überlagertem Verlauf des Spektrums (Kap. 5.2.2.2), durch eine Gaußfunktion approximiert (Clark, 1980 a, b; McCord et al., 1981; Singer, 1981). Im Falle komplex strukturierter Absorptionsbanden, welche einander mehr oder weniger überlagerte Absorptionen aufweisen, wird der Verlauf durch mehrere Gaußkurven beschrieben, wobei die Absorptionsmaxima der einzelnen Gaußkurven die Wellenlängenpositionen der überlagerten Absorptionen bestimmen (Clark & Roush, 1982). Die Wellenlängenposition der einzelnen Gausfunktionen wird vor allem durch Änderungen des lokalen Anstiegs im Reflexionsspektrum bestimmt. Vor allem die Wellenlängenposition einer Absorption dient in erster Linie der Identifizierung von unterschiedlichen Mineralen in der spektralen Mischung. Sie können mit im Labor gewonnenen Referenzspektren gesteinsbildender Minerale verglichen werden. Untersuchungen von Einflüssen des relativen Anteils und der physikalischen Eigenschaften des Oberflächenmaterials, wie zum Beispiel der Partikelgröße (siehe Kapitel 4.3) beschränken sich oft auf Laboruntersuchungen der Referenzmaterialien bzw. deren spektrale Mischungen (Clark 1980 a, b, 1981 a, b; Clark & McCord, 1980; Pollack et al., 1978).

Im Falle der eisreichen Oberflächen von Himmelsobjekten im äußeren Sonnensystem standen vor der Galileo Mission im Wesentlichen nur erdgebundene Teleskopdaten zur Verfügung, d.h. räumlich nicht aufgelöste Punktspektren, die im besten Fall die Untersuchung hemisphärischer Differenzen ermöglichten. Einführungen in die Auswertung planetarer Teleskopdaten insbesondere von eisreichen Oberflächen finden sich unter anderem in den Arbeiten von *Clark* (1980 a, b).

Der erfolgreiche Einsatz der mathematischen Beschreibung mittels multipler Gaußfunktionen ist stark von der spektralen Auflösung und dem Verhältnis von Nutz- zu Störsignal abhängig. Ihre Anwendungsmöglichkeit im Rahmen dieser Arbeit ist vor allem durch die relativ geringe spektrale Auflösung der NIMS-Daten von größer als 26 nm eingeschränkt, die gewählt wurde um vor allem relativ breite Absorptionsbanden zu identifizieren (Kapitel 5.1.1). Die lokalen Änderungen im Anstieg des Reflexionsspektrums, welche die Wellenlängenpositionen der einzelnen Absorptionen anzeigen, resultieren eher aus den Kontaktpunkten zwischen den Spektralkanälen als Veränderungen in der spektralen Signatur. Diese Einschränkung wird vor allem für die relativ schwache Absorption von Wassereis bei 1,65µm deutlich, welche der Absorption bei 1,5µm überlagert ist, deutlich. Sie ist zugleich die einzige Absorption von Wassereis, deren spektrale Parameter (v. a die Absorptionstiefe und Form) Hinweise zur Kristallstruktur von Wassereis (amorph, kristallin) liefert (Kap. 4.1.2). Untersuchungen von Laborspektren ergaben, dass die Absorptionsbreite keine 0,05µm überschreitet (Clark, 1980 a, b). Dies entspricht ungefähr der Breite von zwei Spektralkanälen des NIMS-Instruments für den nominalen Aufnahmemodus. Eine hinreichend genaue Bestimmung der Wellenlängeposition dieser Absorption, die ebenfalls Grundlage der Erfassung der Absorptionstiefe ist, ist im Bereich der spektralen Auflösung der vorliegenden Daten nicht gewährleistet. Zum Vergleich der Veränderungen in den Reflexionseigenschaften der Ganymedoberfläche und der Kristallstruktur von Wassereis wurde daher auf Untersuchungen von Hansen & McCord (2004) zurückgegriffen, die auf der Basis von Modellierungen der Reflexion bei 3,1µm eine Analyse der globale Variationen in der Kristallstruktur von Wassereis auf Ganymed durchführten.

Zusätzlich wird die Analyse mittels multipler Gaußkurven durch Sättigungseffekte im Bereich der Wassereisabsorptionen bei größeren Wellenlängen (>  $1,5\mu$ m) durch Anwachsen der Partikelgröße

erschwert. Diese Effekte äußern sich im Falle von Wassereis vor allem durch die Veränderung im Verlauf bzw. der Form der entsprechenden Absorption (siehe Kap. 4; *Clark*, 1981a). Bereits *Morris et al.* (1982), *Mendell & Morris* (1982) und *Clark* (1981a) beschreiben Probleme bei der möglichst realistischen Beschreibung von gesättigten Absorptionsbanden von Wassereis verschiedener Partikelgrößen bei 2µm mit multiplen Gaußkurven.

Zur mathematischen Beschreibung der Absorptionen in den Reflexionsspektren von Ganymed erwies sich dagegen eine Kombination von Gaußfunktionen und Polynomen unterschiedlicher Ordnung als zweckmäßig. Diese ermöglicht ebenfalls die quantitative Bestimmung der spektralen Parameter und erwies sich als flexibel genug, um Veränderungen in der Wellenlängenposition, der Absorptionstiefe und vor allem dem Verlauf bzw. der Form der Absorption zu kompensieren. Die Beschreibung der Absorption durch "nur" eine einzelne mathematische Funktion ist im Gegensatz zur MGM-Methode weniger empfindlich für Veränderungen im Verlauf des Spektrums, die aus den Kontaktpunkten der Spektralkanäle resultieren (siehe oben). Sie ist jedoch hinreichend genau, um Veränderungen der Wellenlängenposition infolge eventuell neben Wassereis vorhandener hydratisierter und/oder hydroxylierter Minerale (Kap. 4) und in der Absorptionstiefe als Hinweis für den wechselnden relativen Anteil von Wassereis und CO<sub>2</sub> sowie in der Partikelgröße des ersteren zu identifizieren. Durch die Kombination mit Polynomen ist es weiterhin möglich, Veränderungen in der Form der Absorption infolge zunehmender Sättigung zu beschreiben. Dies gewährleistet zum einen die simultane Beschreibung aller Absorptionen in den Reflexionsspektren mit denselben spektralen Parametern und somit deren direkten Vergleich. Zum anderen ermöglicht sie die Identifizierung gesättigter Absorptionen von Wassereis, deren Sättigung möglicherweise in einer spektralen Mischung von Wassereis und Gesteinsmaterial maskiert wird (Kap. 4).

NIMS ist zwar eines der ersten abbildenden Spektrometer, welches bei einer planetaren Mission ins äußere Sonnensystem eingesetzt wurde. Jedoch stehen hyperspektrale Bilddaten bereits seit 1982 mit dem ersten erfolgreichen Einsatz des flugzeugbetriebenen AIS (Airborne Imaging Spectrometer; siehe Goetz & Vane, 1982; Vane et al., 1984; Goetz et al., 1985) von der Erde zur Verfügung. Diese abbildenden Spektrometer produzieren Daten in einem Spektralbereich ausreichender spektraler und räumlicher Auflösung für jedes Bildelement, so dass individuelle Absorptionsmerkmale identifiziert, d.h. die Analyse jedes einzelnen Spektrums möglich ist, aber auch deren räumliche Verbreitung kartiert werden kann (Goetz et al., 1985). Vor allem aufgrund des rapiden Anstiegs der Datenmenge im Zuge der abbildenden Spektroskopie wurden neue Arbeitsmethoden für automatisierte Analysen der Spektren aber auch der räumlichen Analysen der Reflexionseigenschaften erforderlich. So wurden einerseits Bildverarbeitungstechniken, die bisher nur für breitbandige Fernerkundungsdaten mit einer geringen Anzahl von Spektralkanälen (multispektral) eingesetzt wurden, zur Anwendung für Bilddaten mit einer höheren Anzahl von Spektralkanälen (=hyperspektral) weiterentwickelt. Andererseits konzentrieren sich neu entwickelte Algorithmen auf den automatisierten Vergleich der experimentellen Spektren mit Referenzspektren. Detaillierte Diskussionen zu Arbeitsmethoden in der abbildenden Spektroskopie finden sich in den Arbeiten von Goetz et al. (1985), Green & Graig (1985), Kruse et al. (1985,1988), Huntington et al. (1986), Clark et al. (1991), Mazer et al. (1988), Mustard & Pieters (1987), Pieters & Mustard (1988) und Vane & Goetz (1988).

Aufgrund der spektralen Dominanz von Wassereis im Oberflächenmaterial von Ganymed sind die bereits vorhandenen Analysetechniken zur Beschreibung der Variationen in den Reflexionseigenschaften von Ganymed nur bedingt anwendbar und werden im Folgenden kurz diskutiert.

Viele der Bildverarbeitungstechniken multispektraler Datensätze wurden in den siebziger Jahren für die Bearbeitung von *Landsat MSS* (4 Spektralkanäle) entwickelt. Zu diesen gehören unter anderem Farbraumtransformationen, wie die Hauptkomponentenanalyse (HKA, engl.: *PCA, Principle Component Analysis*), (*Sabins*, 1987; *Drury*, 1993) und die Berechnung von Quotientenbildern (*Burger* 1981), die Darstellung der Grauwerte in einem n-dimensionalen Koordinatensystem (engl.:

scatter plot) (Boardman, 1993; Boardman & Kruse, 1994) sowie verschiedene Klassifizierungsalgorithmen (Gillespie, 1980; Gillespie et al., 1986 a, b).

- Die Hauptkomponentenanalyse oder Karhunen-Loéve-Transformation (Sabins, 1986; Drury, 1993) ist ein Verfahren, welches vor allem der Datenreduktion dient. Sie erlaubt es, die relevante Bildinformation multispektraler Datensätze von mehr als drei Kanälen in weniger Kanäle zu beschränken. Die einzelnen Hauptkomponenten sind stark von den initialen Bildinhalten abhängig (Ott, 2001), die unter anderem von der jeweiligen Beobachtungsgeometrie beeinflusst werden. Des Weiteren variieren für die einzelnen NIMS-Beobachtungen sowohl die Anzahl der Spektralkanäle als auch deren zentrale Wellenlängen. Einige NIMS-Beobachtungen decken zusätzlich nicht den gesamten Spektralbereich von NIMS ab (Ausfall einiger Detektoren, siehe Kap. 5.1.1). Daher sind die Hauptkomponenten der unterschiedlichen NIMS-Beobachtungen nicht direkt miteinander vergleichbar. Die Helligkeitswerte der neu berechneten Bilddaten stellen zudem kein Maß für die in einem spezifischen Wellenlängenintervall reflektierte Strahlung dar (Ott, 2001) und ermöglichen keine Rückschlüsse auf die Zusammenhänge mit Variationen in den spektralen Parametern spezifischer Absorptionen bzw. deren chemischen und physikalischen Ursachen. Dennoch ermöglicht die HKA die Trennung relevanter Bildinformation von nicht korrigierten instrumentspezifischen Störsignalen in den NIMS-Daten und wurde daher zur Erhöhung der Datenqualität eingesetzt (siehe Kapitel 5.2.2.1).
- Neben der HKA werden im Rahmen der multispektralen Bildverarbeitung vor allem algebraische Bildoperationen genutzt, um Helligkeitswerte verschiedener Spektralkanäle mittels mehr oder weniger komplexer mathematischer Verfahren zu kombinieren. Häufig werden Quotientenbilder erstellt, indem die Helligkeitswerte zweier ausgewählter Spektralkanäle Pixel für Pixel dividiert werden. Die resultierenden Bilddaten repräsentieren, wie im Falle der HKA, nicht das Maß der in einem bestimmten Wellenlängenintervall reflektierten Strahlung, sondern stellen im Allgemeinen das Verhältnis der Helligkeit zweier Spektralkanäle dar (*Burger*, 1981). Sie dienen der Unterscheidung feiner spektraler Variationen, die durch die Variationen der Helligkeit in ein- oder mehrkanaligen Bildern oft maskiert werden (*Gillespie et al.*, 1987). Im Rahmen dieser Arbeit wurden Quotientenbilder für den direkten Vergleich der räumlichen Variationen der einzelnen spektralen Parameter der unterschiedlichen Absorptionen in den Reflexionsspektren von Ganymed genutzt (siehe Kapitel 5.2.3).
- Ein *n*-dimensionales Punktwolkendiagramm (engl.: *scatter plot*) beinhaltet die Darstellung der einzelnen Helligkeitswerte als Punktwolke in einem *n*-dimensionalen Koordinatensystem, wobei *n* der Anzahl der Spektralkanäle entspricht (*Boardman*, 1993; *Boardman & Kruse*, 1994). Die Koordinaten der Datenpunkte im *n*-dimensionalen Raum bestehen aus den Helligkeitswerten jedes einzelnen Pixels der entsprechenden *n* Spektralkanäle. Die Verteilung der Datenpunkte im *n*dimensionalen Raum wird genutzt, um die Anzahl und spektrale Charakteristik der spektralen Endglieder zu identifizieren. Diese Endglieder bieten im Allgemeinen die Grundlage für weitere Klassifizierungstechniken. Die Methode ist vor allem zur Analyse multimineralischer planetarer Oberflächen nützlich. Aufgrund der steten Präsenz von Wassereis in den Reflexionsspektren von Ganymed ist jedoch eine Selektion unterschiedlicher spektraler Endglieder nicht gegeben. Des Weiteren ermöglicht diese Methode keine Identifizierung und Quantifizierung feiner spektraler Unterschiede, was den relativen Anteil der Komponenten im Oberflächenmaterial sowie die Unterscheidung zwischen Veränderungen des relativen Anteils und der Partikelgröße von Wassereis umfasst. Die Anwendung dieser Methode dient im besten Falle zur Visualisierung und zum Vergleich der Ergebnisse nach einer quantitativen Analyse der spektralen Parameter.
- Digitale Klassifizierungsalgorithmen dienen der automatisierten Zuordnung der Pixel auf der Basis ähnlicher Helligkeitswerte zu einer endlichen Anzahl von Klassen (*Campbell*, 1987; *Richards*, 1994). Generell wird zwischen der unüberwachten und überwachten Klassifizierung unterschieden. Bei der unüberwachten Klassifizierung erfolgt die Zuordnung der Pixel ohne vorheriges Wissen über die Bildinhalte nur auf Grund definierter Parameter wie Anzahl der Klassen und Abstandsmaß. Detaillierte Beschreibungen finden sich bei *Tou & Gonzalez* (1974). Bei der überwachten Klassifizierung werden dagegen Trainingspixel bzw. –gebiete (*ROI*, engl.:

<u>regions of interest</u>) mit bekannter Information als Grundlage für die Zuordnung aller Pixel zu einer der definierten Klassen herangezogen. Detaillierte Ausführungen finden sich bei *Richards* (1994). Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden Klassifizierungsalgorithmen weniger zur eigentlichen Analyse der Reflexionseigenschaften angewendet, sondern eher zur unterstützenden Auswertung der spektralen Parameter in Abhängigkeit der geologischen Einheiten der Ganymedoberfläche.

Neue Analysetechniken der abbildenden Spektroskopie beruhen im Wesentlichen auf dem automatisierten Vergleich der experimentellen Spektren mit den spektralen Signaturen definierter spektraler Endglieder oder mit im Labor produzierten Referenzspektren zur Identifizierung der spektralen Endglieder und deren Verbreitung in den Bilddaten (*Boardman*, 1989, 1992; *Clark et al.* 1990, 1991, 1992, 1995; *Crowley & Clark*, 1992; *Swayze & Clark*, 1995; *Kruse et al.*, 1993). Der Vergleich erfolgt nach unterschiedlichen wählbaren Parametern, wie zum Beispiel nach der Wellenlängenposition oder der Winkel der Flügel der Absorptionsbanden.

- Der "<u>Spectral Angle Mapper</u>" (SAM) (Kruse et al., 1993) definiert die spektrale Ähnlichkeit zwischen zwei Spektren auf der Basis der Winkel zwischen den Spektren und behandelt diese als Vektoren im n-dimensionalen spektralen Merkmalsraum. Pixel mit Spektren, deren Winkel einen vom Benutzer definierten Toleranzwert überschreiten, werden nicht klassifiziert.
- Die SFF-Methode (engl.: <u>spectral feature fitting</u>) (Kruse et al., 1993) vergleicht die Absorptionsbanden von zwei Spektren für jeden selektierten Spektralkanal mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadratsumme. Die Prozedur beinhaltet die Normierung der beiden Spektren auf das jeweilige Kontinuum (siehe Kapitel 5.3.2.1.2) und das Skalieren der Referenzspektren passend zu den experimentellen Spektren. Ein RMS-Fehler (engl.: <u>root mean square error</u>) wird für jedes Spektrum berechnet und bestimmt die Genauigkeit der Analyse (Clark et al. 1990, 1991, 1992, 1995; Crowley & Clark, 1992; Swayze & Clark, 1995)
- Der Klassifizierungsalgorithmus "*Binary encoding*" (*Goetz et al.*, 1985; *Mazer et al.*, 1988) vergleicht zwei Spektren nach der Kodierung der einzelnen Datenwerte und Spektren mit 0 und 1, je nachdem ob Werte unter oder über dem Mittelwert des Spektrums liegen. Alle Pixel werden klassifiziert nach der Anzahl der Spektralkanäle, welche zum Referenzspektrum passen. Detaillierte Beschreibungen finden sich bei *Mazer et al.* (1988).
- Algorithmen zur Trennung der spektralen Endglieder aus einer spektralen Mischung werden in den Arbeiten von Adams & Smith (1986), Clark (1987), Mustard & Pieters (1987a, b), Boardman (1989, 1992) und Smith & Adams (1985) diskutiert. Sie erfordern jedoch ein Vorwissen der spektralen Endglieder und Veränderungen in der Partikelgröße und der Art der spektralen Mischung. Spektrale Mischungen basieren auf zwei wesentlichen Aspekten: 1. makroskopische Mischung der Oberflächenkomponenten, d.h. die Oberflächenkomponenten sind räumlich voneinander getrennt und deren spektralen Signaturen einander überlagert (lineare Mischung), und 2. mikroskopische Mischung der Oberflächenkomponenten, d.h. die einzelnen Komponenten sind bereits im mikroskopischen (molekularen) Bereich miteinander vermischt (nicht lineare Mischung) (Kap. 3).

Vergleiche mit Referenzspektren scheitern vor allem an der spektralen Dominanz von Wassereis und der fehlenden Identifizierbarkeit des dunklen Gesteinsmaterials. Zum anderen erlauben die Algorithmen keine genaue Bestimmung der einzelnen spektralen Parameter, welche die Variationen in den Reflexionseigenschaften von Ganymed verursachen und sind nicht effektiv bei der Analyse der Absorptionen von Nebenbestandteilen wie  $CO_2$  in den Reflexionsspektren von Ganymed und feinen Variationen in der Beschaffenheit von Wassereis. Dies gilt auch für die Berechnung des relativen Anteils der Oberflächenkomponenten bzw. deren Entmischung, welche ohne die Identifizierung der dunklen Gesteinskomponente nicht möglich ist. Sie erfordern zum einen das Wissen, welche spektralen Endglieder an der Mischung beteiligt sind, und wie sich deren physikalische Eigenschaften

auf die Reflexionseigenschaften auswirken. Zum anderen ist auch das Wissen über die Art und Weise wie die spektralen Endglieder miteinander vermischt sind essentiell für die erfolgreiche Anwendung dieser Methoden. Dies ist für Ganymed nicht eindeutig geklärt (Kap. 4).

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass sich zur Analyse der vorliegenden Reflexionsspektren von Ganymed sowohl Methoden der traditionellen Spektroskopie als auch der multispektralen Bildanalyse am effektivsten erwiesen haben. Die spezielle Aufgabenstellung erfordert jedoch eine Anpassung bzw. eine teilweise Veränderung der Arbeitsmethoden. Für die Spektralanalyse der vorliegenden Daten wurden folgende Arbeitsmethoden gewählt:

- die Anwendung der Hauptkomponentenanalyse soll in erster Linie der Erhöhung der Datenqualität dienen,
- die quantitative Erfassung der spektralen Parameter der einzelnen Absorptionen erfolgt mittels Approximation einer mathematischen Funktion an das experimentelle Spektrum und
- Quotientenbilder werden abschließend zum direkten Vergleich der erfassten spektralen Parameter genutzt.

### 5.2.2.1 Hauptkomponentenanalyse

Zu Beginn der Spektralanalyse steht die Erhöhung der Datenqualität mit dem Ziel, eine hinreichende Genauigkeit der Messung der spektralen Parameter der vorliegenden Reflexionsspektren zu gewährleisten. Diese bezieht sich vor allem auf die Reduzierung instrumentspezifischer Einflüsse, die im Rahmen der Kalibration der Daten nicht vollständig entfernt wurden. Hierzu wurde das Verfahren der Hauptkomponentenanalyse eingesetzt. Es basiert auf der Transformation des Koordinationssystems des spektralen Merkmalraums in die Hauptachsen des durch die Korrelationsmatrix oder die Varianz-Kovarianz-Matrix beschriebenen Hyperellipsoids (*Gillespie*, 1980; *Burger*, 1980). Detaillierte Ausführungen zum mathematischen Hintergrund der Hauptkomponentenanalyse finden sich bei *Anderson* (1958), *Überla* (1968), *Malinowski* (1977), *Gillespie* (1980) und *Jaumann* (1989).

Besitzen die Originaldaten eine normale bis annähernd normale Verteilung, formen ihre Werte in einem zweidimensionalen Raum eine Ellipse, bzw. einen Ellipsoid/Hyperellipsoid in einem ndimensionalen Raum. Die Verteilung der Helligkeitswerte wird durch deren Mittelwert und Kovarianz wiedergegeben und durch die Varianz-Kovarianz-Matrix oder die Korrelationsmatrix ausgedrückt (*Ott*, 2001). Die Hauptachsen bzw. Hauptkomponenten, welche das Ellipsoid beschreiben, sind voneinander statistisch unabhängig bzw. zueinander orthogonal (*Jaumann*, 1989). Die erste Hauptkomponente zeigt die Richtung und die Länge der höchsten Ausdehnung der Verteilung. Die Richtung ist als erster Eigenvektor und die Länge als erster Eigenwert definiert. Die zweite Hauptkomponente beschreibt die längste Ausdehnung der Ebene, die orthogonal zur ersten Hauptkomponente liegt und durch den Schwerpunkt des Ellipsoids geht. In n Dimensionen gibt es nHauptkomponenten. Jede folgende Hauptkomponente beschreibt die größte Ausdehnung des Ellipsoids, welche orthogonal zur vorausgehenden Komponente im n-dimensionale Merkmalsraum ausgerichtet ist (*Faust*, 1989).

Während der Hauptkomponentenanalyse werden die Achsen des *n*-dimensionalen spektralen Merkmalsraumes rotiert, bis die resultierenden Achsen parallel zu den Achsen des ersten Hauptkomponentenbandes liegen. Sie verändern so die Position eines jeden Pixels im spektralen Merkmalsraum. Die mathematische Beschreibung der Hauptkomponentenanalyse gibt die lineare Transformation der Helligkeitswerte im originalen Koordinatensystem und denen des neuen Koordinatensystems wieder (*Sabins*, 1987; *Lillesand & Kieffer*, 1994).

Die Länge der Hauptkomponenten ist proportional zur Größe der Varianzen in der Richtung der jeweiligen Komponente bzw. dessen Eigenvektor. Die Varianz nimmt von der ersten bis zur *n*-ten Hauptkomponente ab. Somit ermöglicht die Hauptkomponentenanalyse die Maximierung der Varianz

#### 5 Arbeitsmethoden

in wenigen bzw. den ersten Hauptkomponenten (Hotelling, 1933; Anderson, 1958; Überla, 1968; Jaumann, 1989). Im Allgemeinen beschreibt die erste Hauptkomponente die Gesamthelligkeit, während die anderen Komponenten die Restvarianz, das heißt die "Farbunterschiede" erfassen. Je höher die Hauptkomponenten, desto niedriger ist die relevante Bildinformation. Daher können die höheren Hauptkomponenten oft Rauschanteile enthalten (Sabins, 1987). Die Anzahl der Hauptkomponenten ist abhängig von der Anzahl der Spektralkanäle, d.h. im Falle der verwendeten Spektraldaten eine Anzahl von 408, 360, 228, 216, 204 oder 192 (Kap. 5.1). Die einzelnen Hauptkomponenten sind von den Bildinhalten der einzelnen NIMS-Beobachtungen abhängig. Die Bildinhalte variieren wiederum mit der zentralen Wellenlänge der Spektralkanäle und mit den Beobachtungsbedingungen. In Kapitel 5.1 wurde gezeigt, dass die einzelnen NIMS-Beobachtungen neben der unterschiedlichen Anzahl von Spektralkanälen auch unter unterschiedlichsten Beobachtungsbedingungen aufgenommen wurden. Weiterhin wurde nicht für jede Beobachtung der komplette Spektralbereich von NIMS (0,7 -5,2µm) abgedeckt, und die zentralen Wellenlängen der Spektralkanäle variieren beträchtlich. Daher können die Hauptkomponenten benachbarter NIMS-Beobachtungen unterschiedlich sein (Ott, 2001). Jedoch gilt, dass die resultierenden Hauptkomponenten für alle NIMS-Beobachtungen die Trennung der relevanten Bildinformation, d.h. dem "echten" von der Ganymedoberfläche reflektiertem Signal von intrumentbedingten Störeffekten ermöglicht.

In Abbildung 5.11 sind ausgewählte Hauptkomponenten am Beispiel der NIMS-Beobachtungen G1GNMIRRAY und G1GNMEMPHIS zusammengestellt. In beiden Beobachtungen konzentriert sich der Hauptteil der spektralen Information in den ersten beiden Hauptkomponenten. Der Informationsgehalt der höheren Hauptkomponenten ist sehr gering. Sie beinhalten im Wesentlichen nur den instrumentbedingten Rauschanteil des Fernerkundungssignals. Die 15. Hauptkomponente von G1GNMIRRAY und die 5. Hauptkomponente bei G1GNMEMPHIS verdeutlichen besonders den Scaneffekt, der durch die unterschiedliche Kalibration der einzelnen Detektoren zustande kommt.



Abb. 5.11.: Hauptkomponentenanalyse der NIMS-Daten: Ausgewählte Hauptkomponenten am Beispiel der NMS-Beobachtungen G1GNMIRRAY und G1GNMEMPHIS (Erklärung im Text).

Die Abbildung 5.12. zeigt eine graphische Darstellung der Eigenwerte der einzelnen 228 Hauptkomponenten der NIMS-Beobachtung G1GNMEMPHIS. Die Eigenwerte sinken drastisch mit steigender Anzahl an Hauptkomponenten. Die Analyse der einzelnen Hauptkomponenten ermöglicht die Separierung der relevanten Bildinformation vom Rauschanteil der Daten. Die Hauptkomponenten lassen sich somit in zwei generelle Gruppen unterteilen (siehe auch *Malinowski*, 1977; *Jaumann*, 1989). Die erste Gruppe umfasst die Hauptkomponenten mit relativ großen Eigenwerten und relevanten Bildinhalten. Die zweite Gruppe bilden die Hauptkomponenten, welche vollständig vom Rauschanteil bzw. vom Scaneffekt geprägt sind bzw. deren Eigenwerte verhältnismäßig gering sind. Der Mittelwert der Summe der Eigenwerte der zweiten Gruppe ist vergleichbar mit dem experimentellen Messfehler (*Malinowski*, 1977), der durch die radiometrische Genauigkeit der Kalibration des NIMS-Instruments von 10% festgelegt ist (Kap. 5.2.1.1).

Werden die Hauptkomponenten dieser beiden Gruppen getrennt voneinander in den ursprünglichen Merkmalsraum zurück transformiert, repräsentieren die resultierenden Bild- bzw. Spektraldaten der ersten Gruppe die Reflexionsspektren des Oberflächenmaterials mit einem verbesserten Verhältnis von Nutz- zu Störsignal und diejenigen der zweiten Gruppe das Signal des separierten Störsignals. Die Abbildung 5.13 verdeutlicht die Anwendung der Hauptkomponentenanalyse an einem Beispielspektrum der NIMS-Beobachtung G1GNMEMPHIS. Die Abbildung zeigt ein Reflexionsspektrum vor und nach der Hauptkomponentenanalyse. Zusätzlich wurde das resultierende Spektrum des separierten Störsignals hinzugefügt.



Abb. 5.12: Die im Verlauf der Hauptkomponentenanalyse berechneten Eigenwerte der 228 Hauptkomponenten am Beispiel der NIMS-Beobachtung G1GNMEMPHIS. Die Eigenwerte der einzelnen HKs liegen ab der 21. Hauptkomponente unterhalb des Messfehlers der radiometrischen Korrektur des NIMS-Intruments. Somit umfassen die Hauptkomponenten 1 bis 20 die für die Spektralanalyse relevante Bildinformation, d.h. das "echte" von der Ganymedoberfläche reflektierte Signal. Hauptkomponenten  $\geq 21$  repräsentieren dagegen durch das NIMS-Instrument bedingte Störsignal.



Abb. 5.13: Separierung des "echten" Signals (rotes Spektrum), d.h. der spektralen Signatur der Ganymedoberfläche vom instrumentbedingten Störsignal (grünes Spektrum) mittels der Hauptkomponentenanalyse am Beispiel des Datenpunktes (34,21) der NIMS-Beobachtung GIGNMEMPHIS. Zu beachten ist, dass Verbesserungen vor allem im Spektralbereich größer als  $3\mu$ m zu beobachten sind. So sind z.B. das Reflexionsmaximum von Wassereis bei  $3,1\mu$ m und schwache Absorptionsbanden wie zum Beispiel von CO<sub>2</sub> bei  $4,25\mu$ m im resultierenden Spektrum besser zu erkennen und somit auch besser messbar. Zur besseren Darstellung wurden die Einzelspektren unterschiedlich skaliert.

Beide Spektren der Ganymedoberfläche zeigen dieselben spektralen Signaturen von Wassereis und die Absorption von  $CO_2$  bei 4,25µm. Während in den Wellenbereichen vor 3µm kein Unterschied im Verlauf der beiden Spektren zu erkennen ist, ist das resultierende Spektrum oberhalb von 3µm durch ein deutlich besseres Verhältnis von Nutz- zu Störsignal charakterisiert. Diese Region ist generell durch einen relativ geringen Reflexionsgrad und einen hohen Anteil an Störsignal charakterisiert. Dies zeigt sich ebenfalls in dem Spektrum des separierten Störsignals. Im resultierenden Spektrum sind jedoch sowohl dessen Gesamtverlauf als auch die einzelnen spektralen Signaturen wie z.B. das Reflexionsmaximum von Wassereis bei 3,1µm (Kap. 4) und die relativ schwache Absorption von  $CO_2$  deutlich besser identifizierbar und messbar.

## 5.2.2.2 Erfassung der spektralen Parameter

Der wesentliche Arbeitschritt der Spektralanalyse umfasst die mathematische Beschreibung der experimentellen Spektren mit dem Ziel der quantitativen Erfassung der spektralen Parameter der einzelnen Absorptionen hinsichtlich von Wellenlängenposition, Absorptionstiefe, Absorptionsbreite und Asymmetrie. Grundlegende Arbeiten zur Quantifizierung wissenschaftlicher Ergebnisse durch die Beschreibung mit passenden mathematischen Funktionen liefern unter anderem Arbeiten von *Bevington* (1969) und *Lancester & Salkauskas* (1986). Die Prozedur erfolgte sowohl für die Absorptionen von Wassereis bei 1,04, 1,25, 1,5, 2, 2,4 und 3µm als auch für die Absorptionen der Spurenelemente CO<sub>2</sub> bei 4,25µm, SO<sub>2</sub> bei 4,05µm, C≡N-Verbindungen bei 4,57µm und S-H-Verbindungen bei 3,88µm. Sie beinhaltet im Wesentlichen vier Arbeitschritte:

- a. Normieren der Absorption auf das korrespondierende Kontinuum,
- b. Entwicklung von mathematischen Modellfunktionen,
- c. Angleichung der Modellfunktion an das experimentelle Spektrum und letztendlich
- d. Erfassung der spektralen Parameter.

### a) Normieren der Absorption auf das korrespondierende Kontinuum

Um die einzelnen spektralen Parameter quantitativ messen zu können, ist es notwendig die spezifische Absorptionsbande aus dem Gesamtspektrum zu isolieren, um Effekte benachbarter und überlagerter Absorptionsbanden und unterschiedlicher Aufnahmebedingungen zu reduzieren. Dies erfolgt durch die Normierung der Absorptionsbande auf das jeweilige Kontinuum, d.h. das dem Absorptionsband überlagerten generellen Verlauf des Spektrums (*Clark & Roush*, 1984; *Clark et al.*, 1987, 2003; *McCord et al.*, 1981; *Pieters*, 1977; *Singer*, 1981; *Smith et al.*, 1985).

Das Kontinuum beschreibt den generellen Verlauf des Spektrums, welcher den Absorptionsbanden überlagert ist. Es wird zum einen von der Partikelgröße und dem relativen Anteil von Wassereis und von den spektralen Eigenschaften, des an der spektralen Mischung beteiligten Gesteinsmaterials, beeinflusst (*Clark*, 1981, Kap. 4). Zum anderen sind auch die Beobachtungsbedingungen ein wesentlicher Faktor (Abb. 5.14). So sinkt im Allgemeinen der Reflexionsgrad (siehe Kap. 3.1.1) mit wachsendem Phasenwinkel im gesamten beobachteten Spektralbereich bzw. das Kontinuum verflacht. Der spektrale Kontrast wird zusätzlich stark reduziert. Diagnostische Absorptionsmerkmale von Wassereis sind möglicherweise verdeckt und deren Wellenlängenposition verändert sich bis hin zum Verschwinden eines lokal existierenden Reflexionsminimums (*Clark*, 1999, *Morris et al.*, 1982; *Wendlandt & Hecht*, 1966). Vor der Erfassung der spektralen Parameter müssen diese Effekte durch die Normierung des Spektrums auf das korrespondierende Kontinuum zunächst reduziert werden.

Verschiedene Möglichkeiten der Approximation eines Kontinuums an ein Spektrum wurden versucht. Sie reichen von der tangentialen Anpassung einer linearen Funktion bis hin zu Polynomen höherer Ordnung an das Spektrum (*Pieters*, 1977; *Singer*, 1981; *McCord et al.*, 1981). Im Rahmen dieser Arbeit wurde das jeweilige Kontinuum separat für jedes Absorptionsband und jedes Pixel ermittelt. Aufgrund der zueinander relativ dicht liegenden Absorptionsbanden in den Reflexionsspektren von Ganymed erwies sich die Anpassung einer linearen Funktion, welche die benachbarten Reflexionsmaxima miteinander verbindet, am zuverlässigsten. Die Wahl des spezifischen Wellenlängenbereichs schließt einen entsprechenden Wellenlängenbereich auf beiden Seiten des spektralen Merkmales mit ein, um Verschiebungen der Reflexionsmaxima und der Wellenlängenposition der Absorption zu kompensieren (Abb. 5.15).



Abb. 5.14: Einfluss der Beobachtungsgeometrie auf den generellen Verlauf eines Reflexionsspektrums am Beispiel des Vergleich der Reflexionsspektren des Einschlagskraters Melkart (10.5°S/185.8°W), welcher Bestandteil von zwei unterschiedlichen NIMS-Beobachtungen ist: 1. G1GNGLOBAL (228 Spektralkanäle, ~115 km/Pixel, Phasenwinkel: 29.3°) und 2. G8GNMELKART (216 Spektralkanäle, 5 km/Pixel, Phasenwinkel: 80.4°). Das Reflexionsspektrum der Beobachtung G8GNMELKART stellt ein Mittelwertspektrum von 23x23 Einzelspektrum dar, um der räumlichen Auflösung von G1GNGLOBAL zu entsprechen. Der beträchtliche Unterschied im Reflexionsgrad über den gesamten Spektralbereich von NIMS wird als Resultat des deutlichen höheren Phasenwinkels während G8GNMELKART angesehen.



Abb. 5.15: Normierung einer Absorption auf das korrespondierende Kontinuum am Beispiel der Absorption von Wassereis in den Reflexionsspektren des Einschlagskraters Melkart basierend auf den NIMS-Beobachtungen G1GNGLOBAL und G8GNMELKART aus Abb. 5.14: 1. Bestimmen des spektralen Kontinuums mittels tangentialer Anpassung einer linearen Funktion an die lokalen Reflexionsmaxima (links). 2. Normierung des Absorptionsbandes auf das Kontinuum erfolgt nach Clark (1980) durch Division der Werte des Reflexionsgrades des Spektrums durch die entsprechenden Werte des Kontinuums (rechts). Durch die Normierung der Absorptionsbande auf das korrespondierende Kontinuum ist der Einfluss des Kontinuums und somit auch der unterschiedlichen Beobachtungsbedingungen weitgehend reduziert. Die Absorptionen unterschiedlicher NIMS-Beobachtungen und somit auch deren spektrale Parameter sind nun direkt miteinander vergleichbar.

Die Normierung der Absorption auf das jeweilige Kontinuum erfolgt durch die Division der Werte des Reflexionsgrades durch den entsprechenden Wert des Kontinuums (*Clark & Roush*, 1984). In der Abbildung 5.15 ist die Prozedur am Beispiel der Absorption von Wassereis bei 2µm in den Reflexionsspektren des Einschlagskraters Melkart aus Abbildung 5.14 dargestellt. Die Reflexionsspektren zeigen vor der Normierung, wie oben erläutert, deutliche Unterschiede in Abhängigkeit von der Beobachtungsgeometrie (Abb. 5.15 links). Die Werte relativ zum Kontinuum zeigen diese Abhängigkeiten nicht mehr (Abb. 5.15 rechts). Die Normierung der Absorptionsbanden auf das korrespondierende Kontinuum ergibt somit ein relatives Absorptionsspektrum, welches die eindeutige Bestimmung der spektralen Parameter und den direkten Vergleich der in unterschiedlichen NIMS-Beobachtungen erfassten spektralen Parameter ermöglicht.

#### b) Entwicklung von mathematischen Modellfunktionen

Die Approximation der Absorptionsbanden durch eine mathematische Funktion basiert auf initialen Modellfunktionen. Diese werden spezifisch für jedes Absorptionsband auf der Basis von Mittelwertspektren der verschiedenen NIMS-Beobachtungen nach der Normierung auf das Kontinuum entwickelt. Zu beachten ist, dass Mittelwertspektren der Vorbeiflüge G1 oder G2, G7 oder G8, C9 und E6 zur Entwicklung der Modelle genutzt wurden. Die zentralen Wellenlängenpositionen der einzelnen Spektralkanäle sind für diese Vorbeiflüge unterschiedlich. Die Verwendung von Beobachtungen verschiedener Vorbeiflüge erhöht die spektrale Auflösung bzw. die Anzahl der verfügbaren Stützstellen zur Entwicklung der Modellfunktionen und trägt somit zu einer höheren Genauigkeit dieser Modellfunktionen bei. Jedoch verhinderten, wie bereits im Kapitel 5.1.1.2 beschrieben wurde, die Ausfälle des dritten und des achten Detektors teilweise die Aufnahme der Spektren im Bereich der Absorptionen bei 1,04 und 1,25µm (Orbits G7 und G8) und bei 2,4µm (Orbit E6).

Die Aufgabe besteht nun darin, die bekannten Stützstellen durch mathematische Modellfunktionen zu ersetzen, welche die Absorptionsbanden möglichst gut approximieren. Im Allgemeinen werden Gaußfunktionen zur Approximation der Absorptionsbanden genutzt (*Clark*, 1980; *Hawthorne*, 1988). Vielfach ist jedoch eine Kombination mit Polynomen notwendig, um den oft asymmetrischen Verlauf der Absorptionen beschreiben zu können (*Bevington*, 1969; *Hawthorne*, 1988; *Hibbitts*, 2000). Für die Entwicklung von Modellfunktionen für die Absorptionen in den Reflexionsspektren von Ganymed lieferte eine lineare Kombination einer Gauß- und einer polynomischen Funktion zweiten Grades die besten Ergebnisse. Diese erwies sich als flexibel genug, um Veränderungen im Verlauf der Absorptionsbanden bzw. deren Abweichung von einer Gaußfunktion zu kompensieren. Die Funktionsgleichung lautet wie folgt:

$$y(x) = a_1 e^{-z^2} + a_4 + a_5 x + a_6 x^2$$
(5.5)

mit

$$z = \frac{x - a_2}{a_3} \tag{5.6}$$

mit den 6 variablen Parametern  $a_1$  bis  $a_6$ , wobei  $a_1$  dem minimalen Funktionswert f(x) (=Reflexionsminimum),  $a_2$  dem korrespondierenden x-Wert des Minimums (=Wellenlängenposition) und  $a_3$  der Breite der Funktion bzw. der *FWHM* der Absorptionsbande (Kap. 5.2.2) entspricht. Ein konstanter Term ( $a_4$ ), ein linearer Term ( $a_5$ ) und ein quadratischer Term ( $a_6$ ) beschreiben die Abweichung von einer Gauß-Funktion. Die Modellfunktionen für die einzelnen Absorptionen sind in der Abbildung 5.16 dargestellt.



Abb. 5.16: Darstellung der initialen Bandenmodelle im Bereich von 1.04, 1.25, 1.5, 2 und 2.4, 3 und 4.25 $\mu$ m. Die Grundlage bilden gemittelte Spektren der NIMS-Beobachtungen der Vorbeiflüge G1, G2, G7, G8, C9 und E6. Zu beachten ist, dass im Bereich von 2 $\mu$ m zwei Modelle (I und II) verwendet wurden (Erläuterungen im Text.)

#### c) Annäherung der Modellfunktionen an die experimentelle Kurve

Die schrittweise Annäherung der entwickelten Modellfunktionen an die tatsächliche Absorptionsbande erfolgte separat für jeden Pixel nach der Methode der kleinsten Fehlerquadratsummen (*Zeidler*, 2003). Ausgehend von den initialen Bandenparametern wird die Abweichung des Modells von der

experimentellen Kurve in Form der Summe der Fehlerquadrate bestimmt. Im nächsten Schritt werden die Modellparameter variiert. Jede Variation der Modellparameter erzeugt einen neuen Wert der Fehlerfunktion. Iterationen wurden durchgeführt, bis die Summe der Fehlerquadrate zwischen der tatsächlichen Absorptionsbande und der Modellfunktion bis zu einem kleinsten möglichen absoluten Fehler minimiert wurde. Die Anzahl der Iterationen ist für jedes Spektrum unterschiedlich und ist bedingt durch die initialen Modellparameter.

Das Wissen über die Genauigkeit der Kurvenannäherung ist essentiell für ein tieferes Verständnis der Grenzen in der Interpretation der spektralen Parameter. Der absolute Fehler  $\sigma$  der approximierten Modellfunktion ergibt sich aus der folgenden Gleichung:

$$\sigma = \sqrt{\sum \frac{(y_i - Y_i)^2}{n}}$$
(5.7)

wobei y die Werte der Modellfunktion, Y die tatsächlichen Werte der Absorptionsbande und n die Anzahl von Datenpunkten der spezifischen Absorptionsbande bezeichnen. Daraus ergibt sich ein relativer Fehler  $\delta$ :

$$\delta = \left(\frac{\sigma}{\sum \frac{y_i}{n}}\right) * 100 \tag{5.8}$$

mit y und  $\sigma$  wie in Gleichung (5.7). Dieser kann als Maß für die Genauigkeit der angenäherten Modellfunktion angesehen werden. Um eine Genauigkeit der Ergebnisse von mindestens 10% zu gewährleisten, was der Genauigkeit der radiometrischen Korrektur der der NIMS-Daten entspricht (Kap. 5.1), gingen in der Regel nur Modellfunktionen, welche einen relativen Fehler von weniger als 10% aufweisen in die weitere Analyse ein. Die Absorptionen von Wassereis bei 1,5, 2, 2,4 und 3µm sind in jedem Reflexionsspektrum von Ganymed deutlich ausgeprägt. Im Falle dieser Absorptionen wurden Genauigkeiten der approximierten Modellfunktionen zwischen 3 und 9% erreicht (Tab. 5.7). Dagegen weisen die schwach ausgebildeten Absorptionen von Wassereis bei 1,04, 1,25 und die von CO<sub>2</sub> bei 4,25µm oft Fehler von über 10% auf, was auf das generell geringe Verhältnis von Nutz- zu Störsignal zurückzuführen ist. Dies ist vor allem in Bereichen zu beobachten, wo die Absorptionen nahezu vollständig verschwinden bzw. die Absorptionstiefen geringer als das Rauschsignal sind (siehe unten). Dagegen wurden die Absorptionen von S-H-Verbindungen bei 3,88µm, SO<sub>2</sub> bei 4,05µm und C≡N-Verbindungen bei 4,57µm innerhalb der analysierten NIMS-Beobachtungen nicht eindeutig identifiziert. Dies resultiert in einem relativen Fehler von weit über 20% für jede dieser Absorptionen. Entweder sind diese chemischen Verbindungen nicht im Oberflächenmaterial von Ganymed enthalten oder ihre Absorptionstiefen sind so gering (<10%) oder existieren nur in eng begrenzten Bereich auf der Oberfläche, dass deren Absorptionen von NIMS nicht eindeutig detektiert werden können.

#### d) Bestimmung der spektralen Parameter

Die Bestimmung der spektralen Parameter Wellenlängenposition, Absorptionstiefe und –breite erfolgen teilweise direkt aus der Gleichung der angenäherten Modellfunktion (siehe Gl. 5.5 und 5.6). Die Wellenlängenposition entspricht dem Funktionsparameter  $a_2$ . Mathematisch lässt sich die Wellenlängenposition durch die 1. Ableitung der Funktionsgleichung definieren (Perkampus, 1986):

$$y'(x) = \Delta y / \Delta x$$
 mit  $x = 0$  (5.9)

Wo die erste Ableitung der Funktionsgleichung gleich dem Wert Null ist, liegt das Reflexionsminimum bzw. die Wellenlängenposition der spezifischen Absorption.

Die Absorptionstiefe  $A_{max}$  (siehe Abb. 5.17) entspricht dem Reflexionsminimum  $a_1$  relativ zum korrespondierenden Kontinuum gemessen. Sie ist wie folgt definiert:

$$A_{\max} = \frac{R_C - R_H}{R_C} \tag{5.10}$$

mit  $R_H$  als Reflexionswert im Zentrum der Absorption bzw. im Bereich der Wellenlängenposition und  $R_C$  als Reflexionsgrad des Kontinuums im Zentrum der Absorption (*Clark*, 1981a, 1983; *Clark & Roush*, 1984).

Nach der Modellfunktion wie in Gleichung 5.5 und 5.6 entspricht dem  $R_H$  der Parameter  $a_I$  und dem Kontinuum der spezifischen Absorption in normierter Darstellung der Wert 1 (Abb. 5.15). Somit ergibt sich aus Gleichung 5.10:

$$A_{\max} = 1 - a_1 \tag{5.11}$$

Im weiteren Verlauf der Arbeit wird die Absorptionstiefe in Prozent angegeben und als *BD* (engl.: *band depth*) bezeichnet (Clark, 1980). Dafür gilt:

Absorption (µm)	Wellenlängenbereich	Anzahl der Spektralkanäle	Absoluter Fehler der Modellfunktion	Relativer Fehler der Modellfunktion (%)
1,04	0,98 - 1,13	8	0,069 - 0,421	7-43*
1,25	1,11 – 1,41	14	0,058 - 0,326	6-34*
1,5	1,33 – 1,89	36	0,034 - 0,0597	4 – 7
2	1,78 - 2,28	34	0,0247 - 0,0578	3 – 7
2,4	2,20 - 2,66	19	0,0471 - 0,0848	5 - 9
3	2,58-3,10	21	0,0256 - 0,0461	5 – 9
3,88	3,81 - 3,95	6	>0,4292	> 43*
4,05	3,95 - 4,10	8	>0,3251	> 33*
4,25	4,10 - 4,39	12	0,058 - 0,3772	6 – 39*
4,57	4,46 - 4,65	8	0,2187	> 22*

$$BD = A_{\max} \times 100\% \tag{5.12}$$

Tab. 5.7: Mittelwerte der absoluten und relativen Fehler der approximierten Modellfunktionen für die analysierten Absorptionen in den Reflexionsspektren der 24 untersuchten NIMS-Beobachtungen von Ganymed (Kap. 5.1). (\*) Im Falle der schwächeren Absorptionen von Wassereis bei 1,04 und 1,25 $\mu$ m und von CO<sub>2</sub> bei 4,25 $\mu$ m übersteigt der relative Fehler in einigen NIMS-Beobachtungen deutlich 10%. Dies erfolgt vor allem in Regionen, wo die entsprechenden Absorptionstiefen verschwindend gering. Um eine Genauigkeit der Auswertung der Messdaten von mindestens 10% zu gewährleisten, wurden Messpunkte, für die der relative Fehler 10% übersteigt, vor der weiteren Analyse der Spektraldaten aus dem Datensatz entfernt. Im Falle der anderen Spurenelemente mit Absorptionen bei 3,88 (S-H-Verbindungen), 4,05 (SO<sub>2</sub>) und 4,57 (C=N-Verbindungen) liegen die relative Fehler weit über 20% (weitere Erläuterungen im Text).

(Wellenlängenposition aus der Literatur in µm)	Wellenlängenposition in 2. (G <sub>mad</sub> )	Absorptionstiefe in % relativ zum Kontinuum (6 <sub>ma</sub> )	Absorptionsbreite ( $\sigma_{max}$ )	Symmetrie (G <sub>max</sub> )
1,04 (Clark et al., 1980)	$1,0369 \pm 0,008 \ (0,043)$	$\sim 0 - 7 ~(\pm 0,7)$	$0,0523 \pm 0,05 \ (0,078)$	$1,023 \pm 0,03 \ (0,064)$
1,25 (Clark et al., 1980)	$1,263\pm0,0049\ (0,033)$	$4~(\pm 0,4) - \overline{15}~(\pm 1,5)$	$0,0935 \pm 0,03 \ (0,06)$	$1,076 \pm 0,01 \ (0,05)$
1,5 (Clark et al., 1980)	$1,507\pm0,0024\ (0,027)$	$\frac{14,2}{(\pm 2,57)} \frac{(\pm 1,0)-64,2}{(\pm 2,57)}$	$0,4609\pm0,02\;(0,04)$	$0,362 \pm 0,02 \ (0,02)$
2 (Clark et al., 1980) 24	1,963 - 2,002 (0,04)	$\frac{12,8}{(\pm 2,44)}$	$0,2342 \pm 0,022 \ (0,042)$	0,342 - 1,132 (0,04)
2,4 (Pieters & Englert, 1993)	$2,408 \pm 0,0024 \ (0,026)$	11 (±1,0)) - 29,7 (±1,5)	$0,2541 \pm 0,02 \ (0,03)$	$0,676 \pm 0,03 \ (0,04)$
3 (Clark et al., 1980) 4.25	$2,843 \pm 0,0019 \ (0,042)$	$63,2 (\pm 5,7) - 99,2 (4,96)$	$0,293 \pm 0,02 \ (0,04)$	$0,903 \pm 0,06 \ (0,05)$
(McCord et al., 1998 b)	$4,2587 \pm 0,004 \ (0,05)$	$\sim 0 - 28.9$ (2.9)	$0,0292 \pm 0,02 \ (0,02)$	$0.973 \pm 0.04 \ (0.03)$

	len	
	tior	
	aria	ext
	Š	ц
	her	н. С
	tlic	run
	det	ŀklä
	nit	Ē
	er 1	üğt
	met	gef
	arai	bei
	2. P	gen
	Ô	Bun
	pu (	ess
	s ui	Σ
	erei	de
	ass	<u></u>
	M	I. 5.
	von	J
	en	лg
	ion	shle
	orpt	Ъ
	vbsc	lut
	√ u	bsc
	erte	le a
	ysi	ma
	mal	laxi
	en a	r n
	elne	s de
	inz	/eil
	ie e	jew
	ir d	ist
	r fü	ern
	lete	met
	ran	araı
	Pa	nP
	ulen	De
	ktra	en.
	spe	hob
	en	rgel
	nen	IV0
	von	he
	gev	lich
	ler	arb
	ht e	ld f
	rsic	Sir
	Jbe	ned
	le (	nyr
2	senc	Ga
	fass	von
	len	he v
	mn	läc
	usa	berf
	Z. Z	õ
	5.8	die
	ab.	ber
	Г	ü

Die Absorptionsbreite und –symmetrie dienen vor allem der Definierung von Veränderungen im Verlauf bzw. der Form der spezifischen Absorptionsbande. Die Absorptionsbreite entspricht dem Modellparameter  $a_3$  (Gl. 5.6). Die Asymmetrie *S* einer Absorptionsbande basiert auf der Abweichung der Funktionsgleichung von einer Normalverteilung bzw. dem Verhältnis der Breite des linken und rechten Flügels der Absorption (siehe Abb. 5.9):

$$S = \frac{(\lambda_{\max} - \lambda_1)}{(\lambda_{\max} - \lambda_2)}$$
(5.13)

mit der Wellenlängenposition der Absorption  $\lambda_{max}$ , der Wellenlängenposition des ersten Reflexionsmaximums  $\lambda_1$  und des zweiten Reflexionsmaximums  $\lambda_2$ . Die ermittelten spektralen Parameter sind in der Tabelle 5.8 zusammengefasst. Sie beinhaltet alle Messwerte auf der Basis von Modellfunktionen mit einer Genauigkeit von mindestens 10% (siehe oben).

Den Parametern ist jeweils der absolute Fehler, d.h. die Abweichung des Messwertes der Modellfunktion von dem des experimentellen Spektrums, beigefügt. Dieser wurde separat für den jeweiligen Parameter ähnlich Gleichung 5.7 berechnet:

$$\left|\sigma_{i}\right| = \sqrt{\left(y'_{i} - y_{i}\right)^{2}} \tag{5.14}$$

wobei  $y'_i$  den Messwert des spektralen Parameters der Modellfunktion und  $y_i$  dem des experimentellen Spektrums entspricht.



Abb.5.17: Spektrale Parameter eines Absorptionsbandes am Beispiel der Absorption von Wassereis bei 1.04 $\mu$ m mit: 1. Wellenlängenposition  $\lambda$ , 2. Absorptionstiefe ( $A_{max}$ ) bzw. Intensität, 3. Absorptionsbreite (FHWM, engl.: <u>full width at half</u> <u>maximum</u>) und 4. Symmetrie bzw. Asymmetrie S (Verhältnis von  $\lambda_2 - \lambda_{max}$  zu  $\lambda_{max} - \lambda_1$ . Die spektralen Parameter werden jeweils nach der Normierung der Absorption auf das entsprechende Kontinuum, d.h. dem überlagerten Gesamtverlauf des Reflexionsspektrums gemessen.

Für alle messbaren Absorptionsbanden wurden mehr oder weniger deutliche Variationen in der Absorptionstiefe gemessen, die auf signifikante Veränderungen im Anteil und Partikelgröße von Wassereis und dem Gehalt an CO<sub>2</sub> über die Ganymedoberfläche hinweisen. Mit Ausnahme der Absorptionen bei 1,04 und 4,25µm sind die Messwerte deutlich höher als der entsprechende Fehler und stellen somit reelle Variationen in den Absorptionstiefen dar. In einigen NIMS-Beobachtungen

wurden Absorptionstiefen bei 1,04 und 4,25µm gemessen, welche geringer als der korrespondierende Messfehler sind. In diesen Bereichen spiegeln die Messwerte keine Absorption wieder, sondern nur den Rauschanteil der NIMS-Daten. Die Absorptionen sind nicht mehr eindeutig identifizier- oder messbar und deren Absorptionstiefen nahe dem Wert 0. Die übrigen spektralen Parameter der Absorptionen bei 1,04, 1,25, 1,5, 2,4, 3 und 4,25µm bleiben über die Ganymedoberfläche weitestgehend konstant. Die Schwankungen liegen insgesamt im Bereich der jeweiligen absoluten Fehlers der Messungen und sind daher vernachlässigbar gering. Es werden demnach keine wesentlichen Veränderungen in der chemischen Zusammensetzung angezeigt.

Im Falle der Wellenlängenposition entsprechen die absoluten Fehler in etwa der Breite von 1 bis 2 Spektralkanälen (0,026 bzw. 0,052µm) im nominalen Aufnahmemodus bzw. 2 bis 4 Spektralkanälen im "*Nyquist sampling*" und variieren scheinbar in Abhängigkeit der spektralen Auflösung des NIMS-Instruments. Der relative Fehler beträgt im Schnitt etwa 2% und liegt damit unter der Genauigkeit der spektralen Kalibration (1%, siehe Kap. 5.2). Vor allem für die Absorption von Wassereis bei 1,5µm wurde keine Verschiebung in Richtung kürzerer Wellenlängen bzw. keine Hinweise für eine zusätzliche Absorption bei 1,4µm beobachtet. Dies wird durch die ebenfalls relativ konstante Form der Absorption unterstützt. Daher kann des Vorhandenseins hydratisierter und/oder hydroxylierter Minerale auf Ganymed nicht bestätigt werden.

Dagegen zeigt die Absorption von Wassereis bei 2µm deutliche Verschiebungen der Wellenlängenposition in Richtung kürzerer Wellenlängen und Veränderungen in der Form. Dies deutete sich bereits bei der Entwicklung der initialen Modellfunktionen an (siehe oben), wo zwei verschiedene Modellfunktionen notwendig waren, um die Veränderungen über die Ganymedoberfläche zu beschreiben. Dies deutet jedoch nicht notwendiger Weise auf hydratisierte Minerale hin. Das Fehlen der Verschiebung der Absorption bei 1,5µm und die relativ konstante Breite der Absorption bei 2µm lässt eher auf Sättigungseffekte im Bereich der Absorption schließen (Kap. 6.1.2).

### 5.2.2.3 Quotientenbilder

Im Kapitel 4 wurde bereits gezeigt, dass neben der Partikelgröße von Wassereis die spektralen Eigenschaften des Gesteinsmaterials sowie die Art der spektralen Mischung der einzelnen Komponenten (makroskopisch oder molekular) den Reflexionsgrad und die Absorptionstiefen der einzelnen Absorptionen von Wassereis beeinflussen (*Clark*, 1980; *Hibbitts*, 2001; *McCord & Hansen*, 2001). Im Falle relativ tiefer Wassereisbanden muss das jeweilige Spektrum einen hohen Reflexionsgrad im NIR und einen signifikanten Anteil von Wassereis im Pfad des einfallenden Lichts aufweisen (*Hibbitts*, 2001). Das heißt, entweder existiert nur ein geringer Anteil an Gesteinsmaterial, feinkristallines Wassereis bedeckt die Oberfläche und maskiert die spektrale Signatur des Gesteinsmaterials, oder eine Kombination von beiden liegt vor. Variiert nur die Partikelgröße von Wassereis oder dessen relativer Anteil an der spektralen Mischung, dann korreliert der Reflexionsgrad mit der Absorptionstiefe, wenn auch nicht linear. Variieren jedoch beide Parameter, zerbricht diese Korrelation.

Die Variationen in den Reflexionsspektren von Ganymed in Abhängigkeit des relativen Anteils und der Partikelgröße sind auf der Basis der spektralen Parameter nicht getrennt voneinander messbar. Jedoch variiert der Einfluss der Partikelgröße in Abhängigkeit der Wellenlänge (*Dozier*, 1989; *Calvin et al.*, 1995). Demnach sollten im direkten Vergleich der spektralen Parameter der Absorptionen von Wassereis, und hier vor allem deren Absorptionstiefen, feine spektrale Unterschiede infolge von Variationen in der Partikelgröße messbar sein.

In Abbildung 5.18 sind Wassereisspektren unterschiedlicher Partikelgröße (1 bis 500µm) zusammengestellt. Zwar vertiefen sich die Absorptionen von Wassereis mit wachsender Partikelgröße, jedoch verringern sich die Unterschiede im Reflexionsgrad zwischen den Spektren in Richtung des sichtbaren Lichts und vergrößern sich dann wieder in Richtung des UV. Im Bereich des sichtbaren Lichts bei 0,464 µm sind die Helligkeitsunterschiede vernachlässigbar gering (*Calvin et al.*, 1995; *Hibbitts*, 2001). Dieser Spektralbereich wird durch die CLEAR-Filter der Voyager-ISS- (317 bis 677 nm) und Galileo-SSI- (391 bis 831 nm) Kameras abgedeckt. Helligkeitsunterschiede in diesen Kameradaten können daher als Indikator für Variationen des relativen Anteils von Wassereis am Oberflächenmaterial von Ganymed angesehen werden, dass heißt, ein zunehmender Anteil an Gesteinsmaterial geht einher mit sinkenden Werten des Reflexionsgrades ohne zusätzlichen Einfluss von Variationen in der Partikelgröße von Wassereis. Variationen in der Partikelgröße von Wassereis können somit durch das Verhältnis bzw. den Quotienten des Reflexionsgrades in den Kameradaten und den Absorptionstiefen von Wassereis dargstellt werden (*Hibbitts*, 2001).

Quotientenbilder basieren auf algebraischen Bildoperationen, welche der Unterscheidung feiner spektraler Variationen dienen, die durch die Variationen der Helligkeit in ein- oder mehrkanaligen Bildern oft maskiert werden (*Gillespie et al.*, 1987). Objekte, die sich durch ihren Helligkeitswert weder im Spektralkanal i noch j signifikant unterscheiden, können durch die Normierung auf den Helligkeitswert  $I_i$ ,

$$Q_{ij} = \frac{I_i}{I_j} \tag{5.15}$$

getrennt bzw. unterschieden werden. Diese Quotientenbildung besitzt den großen Vorteil, dass photometrische Unterschiede zwischen den verwendeten Spektralkanälen vernachlässigt werden können. Sie erscheinen sowohl im Nenner und im Zähler der Gleichung und fallen bei der Quotientenbildung heraus.



Abb. 5.18: Wassereisspektren unterschiedlicher Partikelgröße: Zu beachten ist, dass die visuelle Helligkeit bei etwa 0.46µm in etwa gleich bleibt, obwohl sich die Absorptionsbanden sich mit wachsender Partikelgröße vertiefen (Modell zur Berechnung der Wassereisspektren wurde von G. B. Hansen zur Verfügung gestellt).

Bezieht man die Gleichung 5.16 auf das Verhältnis des Reflexionsgrades in den Kameradaten bei  $0,464\mu m$  zu den absorptionstiefen von Wassereiseis, erhält man für einen spezifischen Bildpunkt (*x*,*y*) wie folgt ausdrücken:

$$Q_{(x,y)} = \frac{K_{(0.5\mu m)_{(x,y)}}}{BD_{(x,y)}}$$
(5.16)

mit  $R_{(0,5\mu m)}$  als Reflexionsgrad bei 0,5 $\mu$ m und *BD* als Absorptionstiefe der spezifischen Absorption relativ zum Kontinuum. Korrelieren die Absorptionstiefen von Wassereis mit dem Reflexionsgrad der Kameradaten, ist die Partikelgröße konstant bzw. die Variationen folgen den visuellen Helligkeiten.



Abb. 5.19: Graphische Darstellung der Variationen der Absorptionstiefen in Abhängigkeit der Partikelgröße von Wassereis am Beispiel der Absorptionen bei 1,04, 1,25, 1,5, 2 und 3µm (Erläuterungen im Text).

Wenn die Korrelation zerbricht, weist dies auf unkontrollierte Variationen in der Partikelgröße hin. Der Quotient steigt, wenn die Partikelgröße sinkt, und fällt, wenn die Partikelgröße wächst. Dies gilt jedoch nur solange nur die Partikelgröße variiert (*Hibbitts*, 2001). Zu beachten ist jedoch, dass im Gegensatz zur Gleichung 5.15 in diesem Fall vor der Quotientenbildung die photometrischen Einflüsse auf den Reflexionsgrad in den Kameradaten korrigiert werden müssen (Kap. 5.2). Da durch Normierung der Absorption auf das korrespondierende Kontinuum die photometrischen Einflüsse auf die spektralen Parameter reduziert wurden, befindet sich die Information zu den photometrischen

Einflüssen nur in den Kameradaten bzw. im Zähler der Gleichung 5.16. Ohne eine photometrische Korrektur würden diese im Quotientenbild zusammen mit den Partikelgrößenunterschieden verstärkt werden.



Abb. 5.20: Variationen in den Quotienten der Absorptionstiefen von jeweils zwei verschiedenen Absorptionen in Abhängigkeit der Partikelgröße von Wassereis am Beispiel der Absorptionen bei 1,04, 1,25, 1,5, 2 und 3µm (Erläuterungen im Text).

Dieser Effekt kann jedoch umgangen werden, indem man den Quotient aus den Absorptionstiefen zweier verschiedener Absorptionsbanden misst. Wie oben beschrieben, wurden die photometrischen Einflüsse durch die Normierung der Absorptionsbanden auf ihr spezifisches Kontinuum bereits reduziert (siehe Kapitel 5.2.2.2). Der Einfluss der Partikelgröße ist in den verschiedenen Absorptionen von Wassereis unterschiedlich stark ausgeprägt. Vor allem die relativ schwachen Absorptionen bei kürzeren Wellenlängen, wie bei 1,04 und 1,25 $\mu$ m liegen im Spektralbereich, in dem Wassereis den größten Anteil zum reflektierten Sonnenlicht beiträgt. In diesem Bereich dringen Photonen verglichen mit den Absorptionen bei größeren Wellenlängen (>1,5 $\mu$ m) tiefer in die Oberfläche ein, bevor sie absorbiert werden (*McCord & Hansen*, 2001).

Die Absorptionstiefen bei 1,04 und 1,25µm wären somit ein besserer Indikator für die mittlere Weglänge im Wassereis des Oberflächenmaterials und Veränderungen in dessen Partikelgröße (*Calvin* 

*et al.*, 1995). Bei ansteigender Partikelgröße vertiefen sich somit die Absorptionsbanden bei kürzeren Wellenlängen ( $<1,4\mu$ m) stärker relativ zu denen bei längeren Wellenlängen.

Mittels der Quotientenbildung werden die Unterschiede zwischen zwei Absorptionstiefen verstärkt und feine Variationen in der Partikelgröße, welche durch den relativen Anteil von Wassereis an der spektralen Mischung maskiert werden, können durch die Darstellung des Verhältnisses Q für einen spezifischen Bildpunkt (x,y):

$$R(x, y) = \frac{BD_{i(x,y)}}{BD_{j(x,y)}}$$
(5.7)

mit den Absorptionstiefen BD der Absorptionen i und j unterschieden werden.

Die Abbildung 5.19 zeigt die Gegenüberstellung der Absorptionstiefen von Wassereis für Partikelgrößen zwischen 1µm und 1mm. Die Absorptionstiefen wurden auf der Basis der Wassereismodelle von Abbildung 5.18 berechnet. Die Graphen verdeutlichen zum einen, dass die Absorptionstiefen der verschiedenen Absorptionstiefen nicht gleichmäßig mit wachsender Partikelgröße ansteigen. Zum anderen zeigen die Absorptionstiefen bei 1,5 und 2µm deutlich den Effekt von deren Sättigung an. So erreicht die Absorptionstiefe bei 1,5µm bei einer Partikelgröße von etwa 500µm ein Maximum und sinkt bei größeren Partikelgrößen wieder ab. Die Absorptionstiefen steigen nicht weiter mit zunehmender Partikelgröße von Wassereis an sondern nehmen wieder ab. Im Falle der Absorption bei 2µm ist dieser Effekt bereits ab einer Partikelgröße von 200µm erkennbar. Besonders ausgeprägt zeigt er sich jedoch bei 3µm. In den Spektren der Abbildung 5.18 ist erkennbar, dass diese Absorption unabhängig von der Partikelgröße stets gesättigt ist. Die Absorptionstiefen sind somit nicht eindeutig. Sie können sowohl einer ungesättigten als auch einer gesättigten Absorption entsprechen. Betrachtet man dagegen die Quotienten der Absorptionstiefen von zwei spezifischen Absorptionen (Abb. 5.20) lässt sich mittels des Quotienten eindeutig die entsprechende Partikelgröße definieren.