Kapitel 4

Entwicklung der Inversionsverfahren

In diesem Kapitel wird der Aufbau der Verfahren durch Strahlungstransportsimulationen und deren anschließende Invertierung durch künstliche neuronale Netze vorgestellt. Die in den vorangegangenen Kapiteln beschriebenen inhärenten optischen Eigenschaften dienen dabei als Eingabeparameter für die Simulationen. Zunächst aber erfolgt eine kurze Beschreibung des MERIS-Instrumentes, für das die Verfahren dieser Arbeit entwickelt wurden, obgleich diese auch auf jeden anderen Sensor mit ähnlicher Spektralcharakteristik übertragbar bleiben.

4.1 Der Sensor MERIS

MERIS ist ein speziell für die Ozeanfernerkundung konzipiertes abbildendes Gitterspektrometer und befindet sich neben diversen anderen Instrumenten zur Erdbeobachtung an Bord des im März 2002 gestarteten Umweltsatelliten ENVISAT der europäischen Raumfahrtbehörde ESA auf einer nahezu polarumlaufenden, sonnensynchronen Umlaufbahn (*Bézy et al.*, 2000). Das im *pushbroom* Modus betriebene Instrument besteht aus 5 identischen Kameras, die das von der Erde reflektierte Licht in 15 Spektralkanälen im Wellenlängenbereich zwischen $412 - 900\,\mathrm{nm}$ messen. Schubweise wird eine Bildzeile senkrecht zur Flugrichtung aufgenommen und über ein optisches System spektral zerlegt auf einem Detektor abgebildet. Als Detektor dient ein zweidimensionales CCD-Element, das die räumliche Information über die Zeilen und die spektrale Information über die Spalten für jedes Bildelement (Pixel) der aufgenommenen Bildzeile verarbeitet. Mit einem Gesamtöffnungswinkel von $68,5°$ überdeckt eine Bildzeile des in $800\,\mathrm{km}$ Höhe fliegenden Instrumentes einen Schwad von etwa $1150\,\mathrm{km}$, wobei sich die Größe der Zeile in Flugrichtung aus der Geschwindigkeit des Satelliten sowie der Integrationszeit mit der das CCD-

Element ausgelesen wird bestimmt. Die aufgenommenen Daten des MERIS-Instrumentes werden durch die ESA global in einer *reduced resolution* (RR)-Auflösung und für spezielle Gebiete auch in der *full resolution* (FR)-Auflösung bereitgestellt. Der Sensor arbeitet allerdings kontinuierlich in der FR-Auflösung mit Pixelgrößen von $260\text{x}300\,\mathrm{m}$ in Nadirrichtung und faßt an Bord des Satelliten $4\text{x}4$ der aufgenommenen Bildelemente zur RR-Standard-Auflösung mit Nadirpixelgrößen von $1040\text{x}1200\,\mathrm{m}$ zusammen. Die RR- und FR-Daten werden zunächst zwischengespeichert und für jeden Erdumlauf etwa alle $100\,\mathrm{min}$ an die Bodenstationen übertragen. In Regionen, in denen keine Bodenstation die Daten aufzunehmen vermag, erfolgt die Übertragung durch Weiterleitung an Relais-Satelliten. Eine globale Überdeckung wird durch MERIS-Aufnahmen etwa alle $2-3$ Tage erreicht. Die Abbildung 4.1 zeigt den im April 2000 noch im Bau befindlichen Satelliten ENVISAT und gibt eine Übersicht zu seiner Instrumentierung.

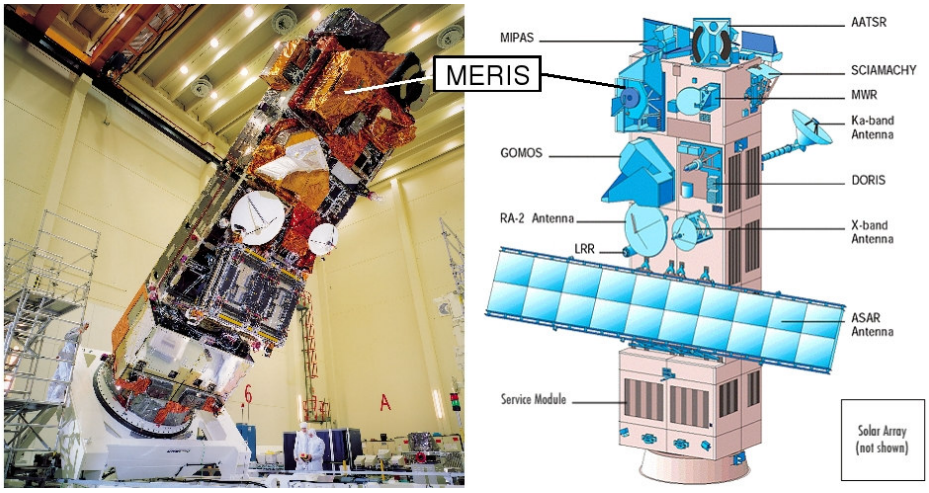

Abbildung 4.1: Der in der Montage befindliche Satellit ENVISAT im April 2000 mit einer Illustration der Instrumentierung (Photo: ESA).

Die radiometrische Genauigkeit der MERIS-Daten, die mit einem Reflexionsstandard relativ zur Sonne bestimmt wird, ist besser als 2%. Das angegebene Signal-Rausch-Verhältnis beträgt $1\,650$ bei einer von Wellenlänge von $412,5\,\mathrm{nm}$ für ein typisches Signal aus dem offenen Ozean. Für die Inversionsverfahren dieser Arbeit werden MERIS-Level1b-Daten verarbeitet, die aus kalibrierten, georeferenzierten Strahldichten am Oberrand der Atmosphäre bestehen. Zusätzlich enthalten die Produkte Informationen über die Beobachter- und Sonnengeometrien, Masken zur Identifizierung von Land- und Wasseroberflächen und Angaben zu Längen- und Breitengraden. Des weiteren werden meteorologische Daten aus Modellanalysen des ECMWF, wie Bodendruck, Windgeschwindigkeit und Ozongehalt bereitgestellt.

4.2 Strahlungstransportsimulationen

Da modellbasierte Methoden zur Entwicklung von Inversionsverfahren, wie bereits im Kapitel 1.2 dargelegt, erhebliche Vorteile gegenüber empirischen Verfahren besitzen, wird dieser Ansatz auch für die im Rahmen dieser Arbeit zu entwickelnden Verfahren gewählt. Hierzu wird mit Hilfe von Strahlungstransportsimulationen in einem gekoppelten Ozean-Atmosphäre-System zunächst eine Datenbasis erzeugt, in der das vom MERIS-Instrument gemessene spektrale Signal am Ober- und Unterrand der Atmosphäre in Abhängigkeit variierender atmosphärischer und ozeanischer Inhaltsstoffe für verschiedene Sonnen- und Beobachtergeometrien beschrieben wird. Anschließend sollen die simulierten funktionalen Zusammenhänge durch künstliche neuronale Netze, unter Verwendung repräsentativer Untermengen der Datenbasis, erlernt werden.

Das zum Aufbau der Datenbasis verwendete, validierte Strahlungstransportmodell MOMO, basiert auf Arbeiten von *Fischer* (1983), *Fischer und Graßl* (1984) sowie *Fell und Fischer* (2001) und beschreibt den Strahlungstransport unter Verwendung der Matrix-Operator-Methode (*Plass et al.*, 1973). Hierfür wird die Atmosphäre und der Wasserkörper in planparallele, horizontal homogene Modellschichten unterteilt, in denen die Art und Konzentration der Aerosole und Wasserinhaltsstoffe durch Vorgabe optischer Größen wie Extinktionskoeffizienten, Einfachstreualbeden und Phasenfunktionen berücksichtigt wird. Ebenso werden die Extinktionskoeffizienten der Rayleigh-Streuung durch die Vorgabe des vertikalen Druckprofils einer vorgegebenen Standard-Atmosphäre auf die Modellschichten umgerechnet. Zur Berechnung der auf- und abwärtsgerichteten Strahldichten wird jede Teilschicht in optisch sehr dünne Elementarschichten untergliedert, für die der Strahlungstransport unter der Annahme von Einfachstreuung gelöst wird. Eine ständige Verdopplung der Elementarschichten (*Doubling*) führt zur Erfassung der Mehrfachstreuung und zum Aufbau homogener Teilschichten. Vertikal inhomogene Modellschichten lassen sich aus einer beliebigen Anzahl homogener Teilschichten zusammensetzen (*Adding*). Für jede Modellschicht erfolgt die Berechnung der azimutal aufgelösten auf- und abwärtsgerichteten monochromatischen Strahlungsfelder an diskreten Stützstellen der Zenit- und Beobachterzenitwinkel. Die äußeren Randbedingungen des Modells bestehen aus der solaren Einstrahlung am Oberrand der Atmosphäre und der Reflexion am Untergrund. Im Wasserkörper konzentriert sich die aus dem oberen Halbraum einfallende Strahlung aufgrund der Brechung in einem Winkelbereich von etwa $49°$.

4.2.1 Parameterisierung der Atmosphäre

Im beschriebenen Modell wird der vertikale Verlauf von Druck, Temperatur und Feuchte durch eine *US-Standard*-Atmosphäre vorgegeben, die sich in 11 Schichten unterteilt und deren Oberrand in $50\,\mathrm{km}$ Höhe angenommen wird. Die Extinktion durch Rayleigh-Streuung (Glg. 3.1) folgt dem vertikalen Druckprofil der Standard-Atmosphäre und wird mit 2 Bodendrücken von $980\,\mathrm{hPa}$ und $1040\,\mathrm{hPa}$ parameterisiert. In den Simulationen wurden insgesamt 8 Aerosolmodelle mit 4 relativen Feuchten zwischen 70% und 99% (vgl. Abs. 3.2.1) und jeweils 5 aerosoloptischen Tiefen berücksichtigt, deren Übersicht die Tabelle 4.1 zeigt.

Tabelle 4.1: Im Strahlungstransport verwendete Aerosolmodelle und ihre vertikale Verteilung und Variation der aerosoloptische Tiefe. Erläuterung im Text.

Modell	Rel. Feuchte [%]	τ_a@ 550 nm Grenzschicht 0-2 km Höhe	τ_a@ 550 nm Troposphäre 2-12 km Höhe	τ_a@ 550 nm Stratosphäre 12-50 km Höhe
1	70			
2	80	Maritim	Kontinental	H_2SO_4
3	95	0,03 0,1 0,3 0,5 1	Anteil 5% der Grenzschicht	0,005
4	99			
5	70			
6	80	Maritim	Kontinental	H_2SO_4
7	95	0,03 0,1 0,3 0,5 1	Anteil 25% der Grenzschicht	0,005
8	99			

Die Angabe der variierten aerosoloptischen Tiefe mit $\tau_a = [0,03;\ 0,1;\ 0,3;\ 0,5;\ 1]$ der zweiten Spalte der Tabelle 4.1 bezieht sich auf die Summe der optischen Tiefen der Grenzschicht und der Troposphäre, sodaß sich die aerosoloptischen Tiefen der Modelle $1-4$ zu 95% auf die Grenzschicht und zu 5% auf die Troposphäre verteilen. Für die Modelle $5-8$ betragen die entsprechenden Anteile 75% und 25%. Der zusätzliche Beitrag des stratosphärischen Aerosols ist für alle 8 Modelle mit $\tau_a = 0,005$ konstant gehalten, sodaß sich als maximale aerosoloptische Tiefe aller Modelle $\tau_a = 1,005$ ergibt. Die Absorption an atmosphärischen Gasen wurde, wie in den Abschnitten 3.3 und 3.4, unter Verwendung der spektralen Filterfunktionen der einzelnen MERIS-Kanäle berücksichtigt. Für die Solarkonstante wurde ein spektral konstanter Wert von Eins angesetzt. Die von MERIS gemessenen Spektren müssen daher vor der Invertierung zunächst auf die aktuellen Werte der spektralen Solarkonstante normiert werden.

4.2.2 Parameterisierung des Wasserkörpers

Der Wasserkörper wird mit 3 Modellschichten simuliert, dessen unterste Schicht einer Tiefe von $500\,\mathrm{m}$ entspricht, wodurch Reflexionen am Modelluntergrund ausgeschlossen sind. Durch Vorgabe zweier Windgeschwindigkeiten von $1,5\,\mathrm{ms}^{-1}$ und $7,2\,\mathrm{ms}^{-1}$ wird eine rauhe Wasseroberfläche nach einem Modell von *Cox und Munk* (1954) modelliert. Die drei berücksichtigten Wasserinhaltsstoffe Chlorophyll-a (CHL), Gesamtschwebstoff (TSM) und die Gelbstoffabsorption bei $\lambda = 443\,\mathrm{nm}$ (YEL) werden als vertikal homogen verteilt angenommen. Ihre simulierten Konzentrationsbereiche können der Tabelle 4.2 entnommen werden, deren Ober- und Untergrenzen anhand von *in situ* Messungen des COASTLOOC-Projektes festgelegt wurden.

Tabelle 4.2: In den Simulationen verwendete Konzentrationsbereiche der Wasserinhaltsstoffe.

Inhaltsstoff	Minimum	Maximum	Einheit
Chlorophyll-a	0,050	50	$\mathrm{mg\,m^{-3}}$
Gesamtschwebstoff	0,050	50	$\mathrm{g\,m^{-3}}$
Gelbstoff	0,005	1	$\mathrm{m^{-1}}$

Die Messungen zeigen darüber hinaus, daß die genannten Wasserinhaltsstoffe im Rahmen der gewählten Konzentrationsbereiche nicht vollkommen unabhängig voneinander variieren. Für die Konzentration eines beliebigen Inhaltsstoffes variieren die Konzentrationen der beiden anderen Inhaltsstoffe maximal im Bereich von zwei Größenordnungen, sodaß die Anzahl der Simulationen, wie in *Zhang* (2003) beschrieben, und in Abbildung 4.2 dargestellt, durch Vorgabe folgender Konzentrationsabhängigkeiten beschränkt werden können.

$$TSM(CHL)_{\min} = 0,12\,CHL^{0,77} \quad , \quad TSM(CHL)_{\max} = 5,89\,CHL^{0,77} \tag{4.1}$$

$$YEL(CHL)_{\min} = 0,079\,CHL^{0,75} \quad , \quad YEL(CHL)_{\max} = 0,25\,CHL^{0,75} \tag{4.2}$$

$$YEL(TSM)_{\min} = 0,0063\,TSM^{0,9} \quad , \quad YEL(TSM)_{\max} = 0,44\,TSM^{0,9} \tag{4.3}$$

Auf diese Weise werden in den Küstengewässern nicht gemessene Konzentrationstripel (CHL, TSM, YEL) von den Simulationen ausgeschlossen. Alle Konzentrationen werden, wie die Abbildung 4.2 zeigt, im logarithmischen Raum äquidistant gleichverteilt simuliert, sodaß sich bei der Inversion ein konstanter absoluter Fehler im logarithmischen Raum und ein konstanter relativer Fehler im linearen Raum ergibt. Die Auswahl eines jeden simulierten Konzentrationstripels erfolgt stochastisch, unter Verwendung eines Zu-

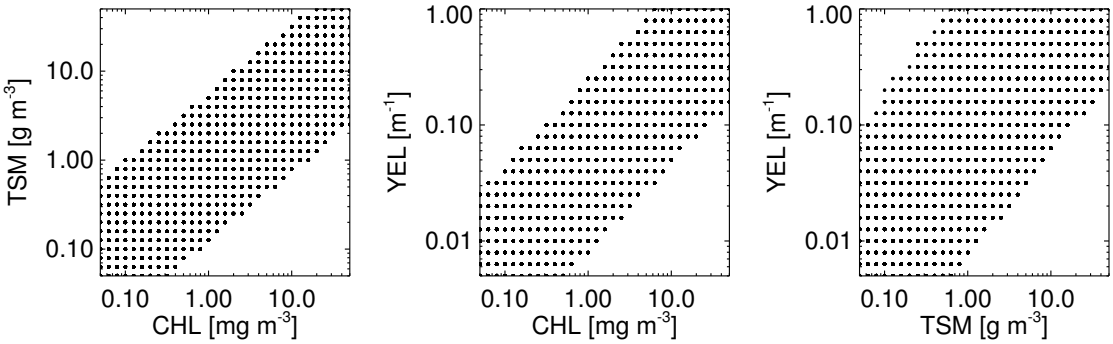

Abbildung 4.2: Darstellung der auf einer logarithmischen Skala gleichverteilt und stochastisch ausgewählten Konzentrationen in den Grenzen der Gleichungen 4.1, 4.2 und 4.3.

fallszahlengenerators, derart, daß zunächst eine zufällige Chlorophyllkonzentration für den in Tabelle 4.2 angegebenen Konzentrationsbereich ermittelt wird. Für die so gewählte Chlorophyllkonzentration wird dann eine zufällige Schwebstoffkonzentration in der unteren und oberen Schranke nach Gleichung 4.1 bestimmt. Für das so bestimmte Tupel von Chlorophyll und Schwebstoff wird schließlich eine zufällige Gelbstoffkonzentration innerhalb der Schranken der Gleichungen 4.2 und 4.3 gewählt. Durch Ermittlung von 20 zufälligen Konzentrationstripeln für je 1 920 Fälle, die sich aus der Kombination der 8 Aerosolmodelle mit 5 aerosoloptischen Tiefen und 2 Bodendrücken für 12 Wellenlängen sowie 2 Windgeschwindigkeiten ergeben, werden insgesamt 38 400 Konzentrationstripel simuliert, wobei eine Simulation jeweils 17 Zenit- und Beobachterzenitwinkel sowie 25 Azimutwinkel in allen Modellschichten umfaßt.

Im Strahlungstransport werden die Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe über ihre optischen Eigenschaften mit Hilfe der in Kapitel 2 vorgestellten bio-optischen Modelle parameterisiert. Neben der Absorption von reinem Seewasser a_{w}, mit einem Salzgehalt von $35 - 38‰$, setzt sich die modellierte, spektrale Gesamtabsorption der Küstengewässer a_{WAT} aus der Absorption an Chlorophyll-a a_{p1} (Glg. 2.9), der Absorption an anorganischen Schwebstoffen a_{p2} (Glg. 2.12) und der Gelbstoffabsorption a_{y} (Glg. 2.14) zusammen.

$$a_{\mathrm{WAT}} = a_{\mathrm{w}}(\lambda) + a_{\mathrm{p1}}(\lambda, CHL) + a_{\mathrm{p2}}(\lambda, TSM) + a_{\mathrm{y}}(\lambda, YEL) \tag{4.4}$$

Die Gesamtstreuung der simulierten Küstengewässer b_{WAT} setzt sich aus der Streuung an reinem Seewasser b_{w} (Glg. 2.7) und der Streuung am Gesamtschwebstoff $b_{\mathrm{p=(p1+p2)}}$ (Glg. 2.13) zusammen.

$$b_{\mathrm{WAT}} = b_{\mathrm{w}}(\lambda) + b_{\mathrm{p}}(\lambda, TSM) \tag{4.5}$$

Nachfolgend soll anhand von ausgewählten Simulationen der Einfluß der einzelnen Wasserinhaltsstoffe sowie der aerosoloptischen Tiefe auf das spektrale Reflexionsvermögen am Ober- und Unterrand der Atmosphäre im Hinblick auf die Entwicklung der Inversionsverfahren diskutiert werden.

4.2.3 Simulierte Reflektanzen in Abhängigkeit variierender Inhaltsstoffe

Die Abbildung 4.3 zeigt die in 12 MERIS-Kanälen (vgl. Tab. 3.3) für ein maritimes Aerosol mit einer optischen Tiefe von $\tau_{\mathrm{a}} = 0,1$ simulierten Reflektanzen am Ober- und Unterrand der Atmosphäre für 3 Küstengewässer, in denen jeweils einer von drei simulierten Wasserinhaltsstoffen variiert. Mit einer Azimutdifferenz von $\Delta\phi = 180°$ zwischen der Sonne und einem in Nadirrichtung $\theta_{\mathrm{o}} = 0°$ aufnehmenden Satelliten, bei einem Sonnenzenit von $\theta_{\mathrm{s}} = 41°$, sind diese Simulationen nicht vom direkten Sonnenreflex beeinflußt. Wie zu erwarten, sind die einzelnen Abstufungen der simulierten Konzentrationsklassen direkt an der Wasseroberfläche differenzierter als am Oberrand der Atmosphäre, die das Signal des Wasserkörpers in Abhängigkeit der Konzentration der atmosphärischen Streuer und Absorber überlagert. Dennoch zeigen auch die Variationen am Oberrand der Atmosphäre deutliche spektrale Signaturen der Wasserinhaltsstoffe, die zur Bestimmung der Konzentrationen genutzt werden können. Besonders ausgeprägt ist die Intensität der Reflektanzen für variierende Schwebstoffkonzentrationen, die im Meeresniveau aufgrund der starken Rückstreuung ab einer Wellenlänge von $500\,\mathrm{nm}$ und bei Konzentrationen ab $5\,\mathrm{gm}^{-3}$ in der Größenordnung der Reflektanzen am Oberrand der Atmosphäre liegen. Für hohe Schwebstoffkonzentrationen erkennt man darüber hinaus, daß der Spektralbereich ab $700\,\mathrm{nm}$ erheblich durch Rückstreuung beeinflußt ist und daher nicht, wie im Fall der Case-1-Gewässer, zur Atmosphärenkorrektur verwendet werden kann. Weniger ausgeprägt sind dagegen die spektralen Änderungen am Oberrand der Atmosphäre für die Variationen der Chlorophyll- bzw. Gelbstoffgehalte. Zunehmende Absorption mit steigender Konzentration bewirkt in beiden Fällen eine Abnahme des Signals derart, daß sich die Reflektanzen für das Maximum der simulierten Konzentrationsbereiche ab etwa $500\,\mathrm{nm}$ den Reflektanzen für ein simuliertes Gewässer ohne Wasserinhaltsstoffe annähern. Da das Chlorophyll-a im Wellenlängenbereich um $450\,\mathrm{nm}$ maximal absorbiert, der Gelbstoff dagegen im Bereich noch kürzerer Wellenlängen, ist der erste MERIS-Kanal bei $412.5\,\mathrm{nm}$ hilfreich für eine Trennung beider Inhaltsstoffe. Die exponentiell ansteigende Gelbstoffabsorption mit abnehmender Wellenlänge läßt sich auch am Oberrand der Atmosphäre im blauen Spektralbereich der Reflektanzen erkennen.

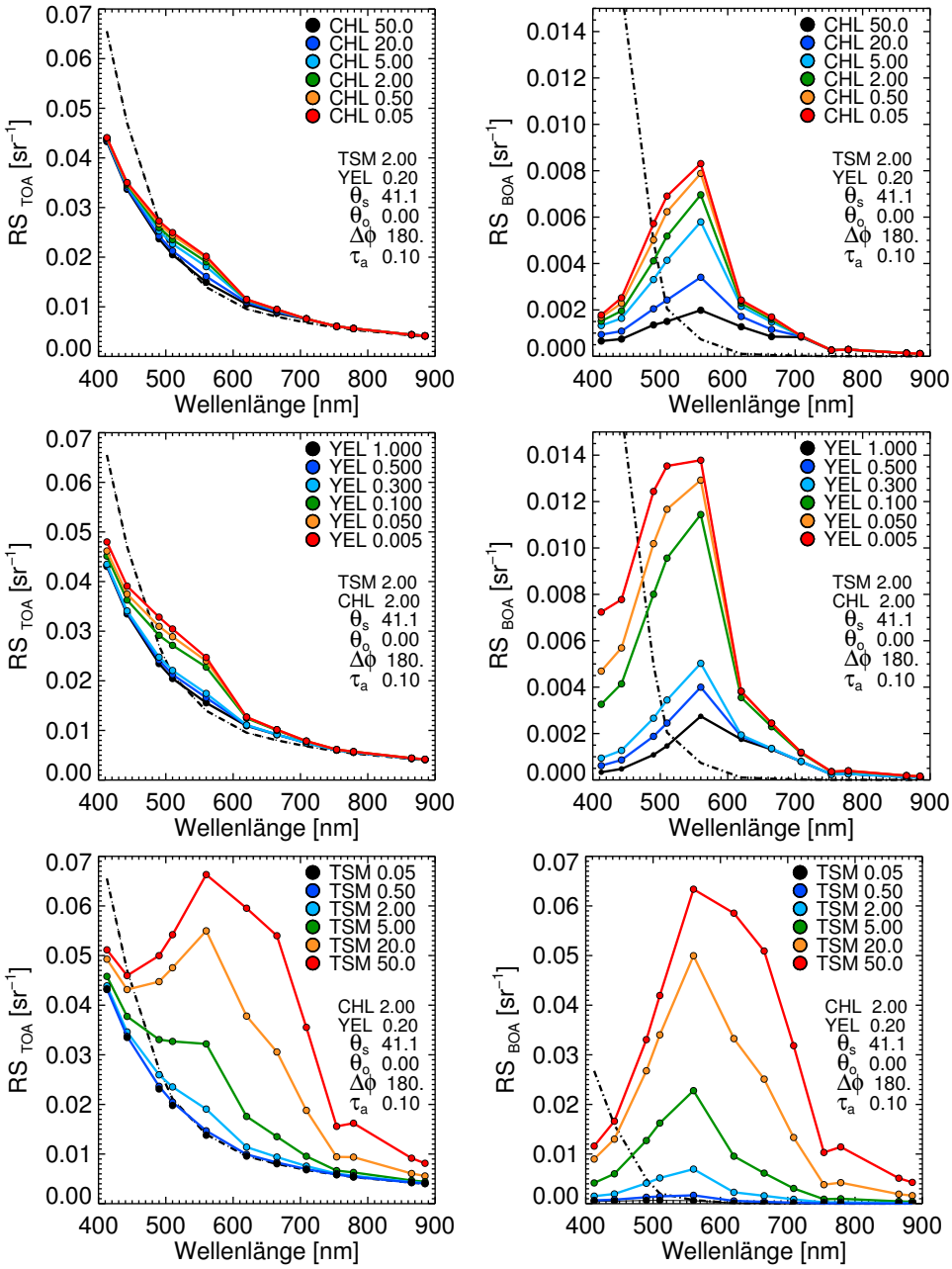

Abbildung 4.3: Spektrale Änderungen simulierter MERIS-Reflektanzen am Oberrand der Atmosphäre (linke Spalte) und direkt an der Meeresoberfläche (rechte Spalte) in Abhängigkeit jeweils eines variablen Wasserinhaltsstoffes. Die gestrichelten Graphen entsprechen der Reflektanz für ein Gewässer ohne Wasserinhaltsstoffe mit einem Salzgehalt von 35-38 ‰. Zu beachten ist die unterschiedliche Skalierung der Abbildungen der Reflektanzen am Ober- und Unterrand der Atmosphäre für die variierten Inhaltsstoffe Chlorophyll-a und Gelbstoff.

Im Gegensatz zum Einfluß der Wasserinhaltsstoffe, der sich auf einzelne Spektralbereiche beschränkt, bewirkt eine Zunahme der aerosoloptischen Tiefe bei gleichbleibenden Wasserinhaltsstoffkonzentrationen, wie die Abbildung 4.4 zeigt, eine Anhebung des Signals im gesamten Spektralbereich ohne den durch die Wasserinhaltsstoffe verursachten, charakteristischen Spektralverlauf zu verändern.

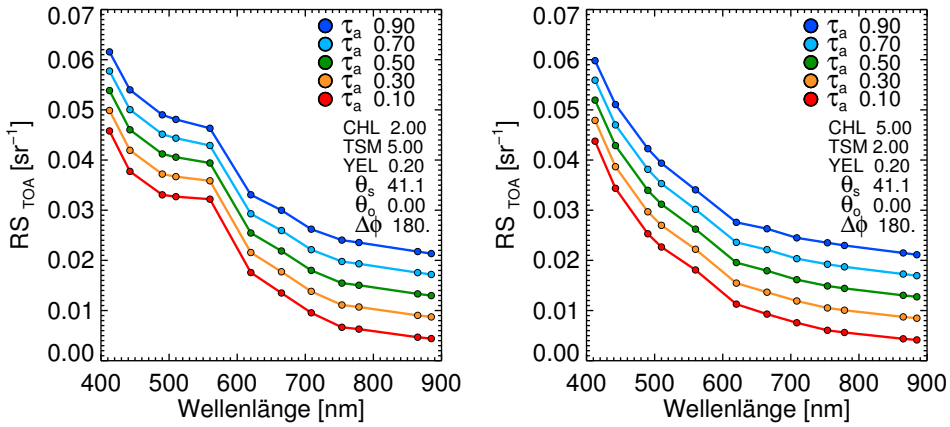

Abbildung 4.4: Spektrale Änderungen simulierter MERIS-Reflektanzen am Oberrand der Atmosphäre für zwei Küstengewässer mit unterschiedlichen Konzentrationstripeln in Abhängigkeit variierender aerosoloptischer Tiefen für das maritime Aerosolmodell 1 der Tabelle 4.1.

Die sich am Oberrand der Atmosphäre durchpausende spektrale Information der Wasserinhaltsstoffe bleibt daher auch bei zunehmender atmosphärischer Trübung erhalten, und kann durch Analyse des gesamten Spektralverlaufs zur Bestimmung der Konzentrationen genutzt werden. In dieser Arbeit erfolgt die Analyse der Spektren, wie im folgenden Abschnitt beschrieben, durch künstliche neuronale Netze.

4.3 Inversion durch künstliche neuronale Netze

Die künstlichen neuronalen Netze in dieser Arbeit werden als Mehrschicht-Perzeptrone (MLP), unter Anwendung der *backpropagation* Lernregel realisiert, die auf den Arbeiten von *Werbos* (1974) und *Rumelhart und McClelland* (1986) basiert. Das Modell des Perzeptrons selbst ist etwas älter und geht auf die Arbeit von *Rosenblatt* (1959) am Anfang der 60er Jahre zurück, das von *Minsky und Papert* (1969) in verschiedene Klassen unterteilt wurde. Perzeptrone bestehen aus Schichten einzelner, idealisierter Neuronen, die untereinander von einer Schicht zur anderen gewichtet vernetzt sind. Verbindungen von Neuronen innerhalb einer Schicht existieren nicht. Wie ihre biologischen Vorbilder, beste-

hen die künstlichen Neuronen aus einem Zellkörper mit zwei Arten von Auswüchsen, den Dendriten und den Axonen. Die Dendriten summieren alle eingehenden Signale auf. Das Summensignal wird im Neuron weiter transformiert und dessen Ausgabesignal über das Axon weitergeleitet. Am Axonende steuert eine weitere Zelle, die Synapse, den Signalfluß durch Verstärkung oder Abschwächung. Die Stärke der synaptischen Aktivität wird im Modell durch ein Gewicht beschrieben, welches mit einem numerischen Wert belegt ist. Wie in Abbildung 4.5 schematisch dargestellt, lassen sich die Verbindungsgewichte zwischen zwei Neuronenschichten als Matrix darstellen. Im Vergleich zum menschlichen Gehirn, das aus etwa 10^{11} Neuronen mit bis zu 10^{14} Synapsen besteht, ist die Neuronenanzahl von $10^2 - 10^4$ in künstlichen Netzen wesentlich geringer. Alle im Rahmen dieser Arbeit erzeugten Netzwerke bestehen, wie in Abbildung 4.5 schematisch dargestellt, aus drei Schichten - einer Eingabeschicht, einer Zwischenschicht und einer Ausgabeschicht.

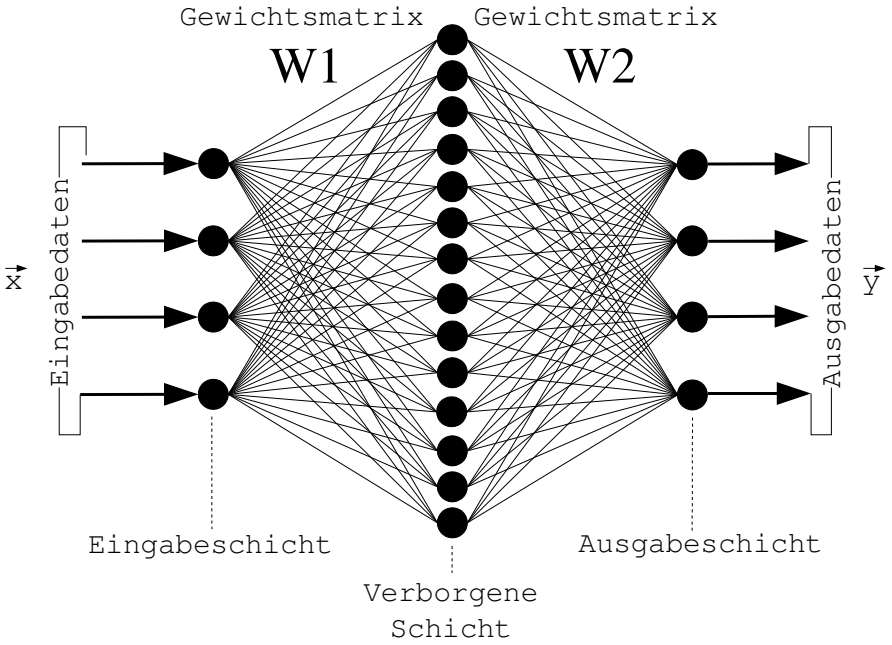

Abbildung 4.5: Struktur eines Mehrschicht-Perzeptrons mit einer verborgenen Zwischenschicht. Die Gewichtsmatritzen W1 und W2 werden in der Lernphase modifiziert.

Für die Ein- und Ausgabeschicht bestimmt sich die Anzahl der Neuronen anhand der für die Problemstellung gewählten Ein- und Ausgabeparameter. Zur Bestimmung der optimalen Anzahl an Zwischenschichtneuronen existieren keine Berechnungsvorschriften, so daß die optimale Netzwerkarchitektur durch Variation der Neuronen der Zwischenschicht erst am Ende der Lernphase feststeht. In der überwachten Lern- oder Trainingsphase werden dem Netzwerk simulierte Eingabemuster in Form von Vektoren $\overrightarrow{x}$ vorge-

geben und durch das Netz propagiert. Die erzeugten Ausgabewerte $\overrightarrow{y}$ werden mit den zu lernenden, ebenfalls simulierten Zielgrößen $\hat{\overrightarrow{y}}$, durch Berechnung der Fehlerfunktion $E = \frac{1}{n}\sum(\overrightarrow{y} - \hat{\overrightarrow{y}})^2$, für alle Vektoren n verglichen. Das iterative Gradientenabstiegsverfahren des *backpropagation*-Algorithmus modifiziert und bestimmt die Gewichtsmatrizen $\mathbb{W}1,\ \mathbb{W}2$ zwischen den Neuronenschichten derart, daß die Fehlerfunktion E für alle Ein- und Ausgabepaare minimiert wird. In dieser Arbeit werden die Perzeptrone mit einer von *Preusker* (2001) implementierten Version des *backpropagation*-Algorithmus generiert. Unter Verwendung der nichtlinearen sigmoiden Aktivierungsfunktion $S(x) = (1+e^{-x})^{-1}$ für jedes Neuron berechnet sich der Ausgabevektor $\overrightarrow{y}$ für ein Eingabemuster $\overrightarrow{x}$ durch Multiplikation der Matrizen $\mathbb{W}1,\ \mathbb{W}2$ wie folgt:

$$\overrightarrow{y} = S\left\{\mathbb{W}2 \cdot S(\mathbb{W}1 \cdot \overrightarrow{x})\right\}. \tag{4.6}$$

Mehrschicht-Perzeptrone sind universelle Approximatoren, die durch die Wahl beliebig vieler Zwischenschichtneuronen mit nichtlinearen Aktivierungsfunktionen in der Lage sind, jeden funktionalen Zusammenhang beliebig genau zu approximieren (*Lippmann*, 1987). Da Perzeptrone mit linearen Aktivierungsfunktionen auch nur lineare funktionale Zusammenhänge abbilden können, ist die Wahl einer sigmoiden Aktivierungsfunktion zur Approximation nichtlinearer Zusammenhänge von entscheidender Bedeutung. Bei der Suche nach der optimalen Anzahl von Zwischenschichtneuronen besteht allerdings folgendes Dilemma. Die Trainingsdaten stellen die vom Netzwerk zu approximierenden Stützstellen dar. Werden auf der einen Seite zu viele Neuronen für die Zwischenschicht gewählt, findet eine zu genaue Anpassung an den Trainingsdatensatz statt. Das Netz verliert dann seine Generalisierungsfähigkeit für ungelernte Daten. Darüber hinaus steigt die notwendige Rechenkapazität mit jedem weiteren Neuron. Werden auf der anderen Seite zu wenig Neuronen gewählt, läßt sich die Fehlerfunktion des verwendeten Algorithmus nicht oder nur schlecht minimieren. Die Generalisierungsfähigkeit für ungelernte Daten wird am einem zweiten, vom Trainingsdatensatz unabhängigen, Testdatensatz durch Berechnung des mittleren quadratischen Fehlers für alle Vektoren der Testmenge bestimmt.

4.3.1 Datenaufbereitung und Training

Die zum Aufbau der Verfahren benötigten Trainings- und Testdatensätze werden stochastisch aus der durch Simulationen erzeugten Datenbasis entnommen. Für alle Datensätze werden vor Beginn der Trainingsphase nachfolgend beschriebene Transformationen ausgeführt.

Korrektur des Sonnenreflexes

Der in den Simulationen implizit enthaltene Strahlungsbeitrag der direkten spiegelnden Reflexion an der rauhen Wasseroberfläche (*glint*) wird zur leichteren Funktionsapproximation der neuronalen Netze korrigiert. Da die vom direkten Sonnenreflex beeinflußten MERIS-Daten aufgrund des im Vergleich zur diffusen Reflexion hohen Signals nicht auswertbar bleiben, ist eine Korrektur der simulierten Daten gerechtfertigt. Mit Hilfe von Simulationen für eine gas- und aerosolfreie Atmosphäre, über einem absolut absorbierenden Gewässer, werden zunächst die Strahlungsbeiträge des spiegelnden Sonnenreflexes bestimmt. Diese werden dann mit den Transmissionen, die sich mit den optischen Tiefen der atmosphärischen Inhaltsstoffe einzeln berechnen lassen, multipliziert und von den Simulationen, die den Sonnenreflex implizit enthalten, subtrahiert. Abbildung 4.6 illustriert beispielhaft die am Oberrand der Atmosphäre simulierten Strahldichten im direkten Sonnenreflex für zwei Sonnenstände θ_s als Funktion des Beobachterzenitwinkels θ_o über einer rauhen Wasseroberfläche für eine Windgeschwindigkeit von $1,5\,\mathrm{ms}^{-1}$. Mit einer Azimutdifferenz von $\Delta\phi = 0°$ entsprechen die Simulationen einer Blickrichtung in den Vorwärtsstreubereich direkt zur Sonne. Deutlich erkennt man das reflexionsbedingte Maximum für die Konstellationen gleicher Beobachter- und Sonnenzenitwinkel. Die rot gestrichelten Funktionsverläufe zeigen die um den direkten Sonnenreflex korrigierten Strahlungsbeiträge am Oberrand der Atmosphäre.

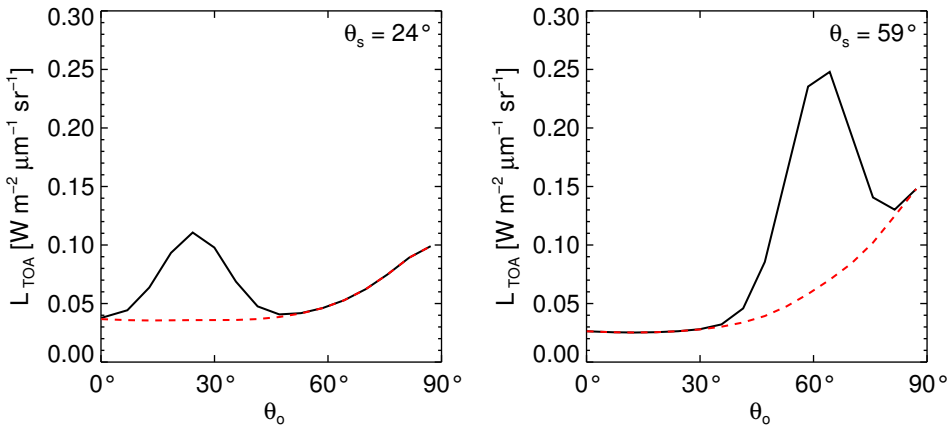

Abbildung 4.6: Simulierte Strahldichten am Oberrand der Atmosphäre als Funktion des Beobachterzenits θ_o für zwei Sonnenstände θ_s bei einer Azimutdifferenz von $\Delta\phi = 0°$. Die in schwarz dargestellten unkorrigierten Werte zeigen den direkten Sonnenreflex der aufwärtsgerichteten Strahldichte am Oberrand der Atmosphäre über einer rauhen Wasseroberfläche mit einer Windgeschwindigkeit von $1,5\,\mathrm{ms}^{-1}$. Die rot dargestellten Verläufe zeigen die Strahldichten nach Anwendung der Glint-Korrektur.

Winkeltransformationen

Zur Vermeidung von Unstetigkeiten, die bei der Invertierung durch die Berechnung der Azimutdifferenzen zwischen Beobachter und Sonne entstehen können, werden die Winkel durch folgende Transformationen in kartesische Koordinaten umgerechnet. Zuvor sind die Azimutdifferenzen des simulierten Datensatzes durch Spiegelung auf den Winkelbereich von $[0°, -180°]$ zu erweitern.

$$\begin{aligned} x &= \sin(\theta_o)\ \cos(\Delta\phi) \\ y &= \sin(\theta_o)\ \sin(\Delta\phi) \\ z &= \cos(\theta_o) \end{aligned} \tag{4.7}$$

Abbildung 4.7 zeigt das Ergebnis der nach den Gleichungen 4.7 durchgeführten Transformationen für eine Zeile einer MERIS-Aufnahme senkrecht zur Flugrichtung des Instrumentes. Die linke Abbildung in 4.7 zeigt deutlich die Unstetigkeiten für das Nadirpixel beim Wechsel der Azimutdifferenz und des Beobachterwinkels. Nach Anwendung der Transformationen sind die Winkelverläufe stetig, wie die linke Abbildung in 4.7 zeigt. Durch diese Vorbehandlung der Eingabedaten werden Mehrdeutigkeiten eliminiert, und eine sichtbare Zweiteilung der durch die pixelbasierten Verfahren prozessierten MERIS-Aufnahmen auf diese Weise vermieden.

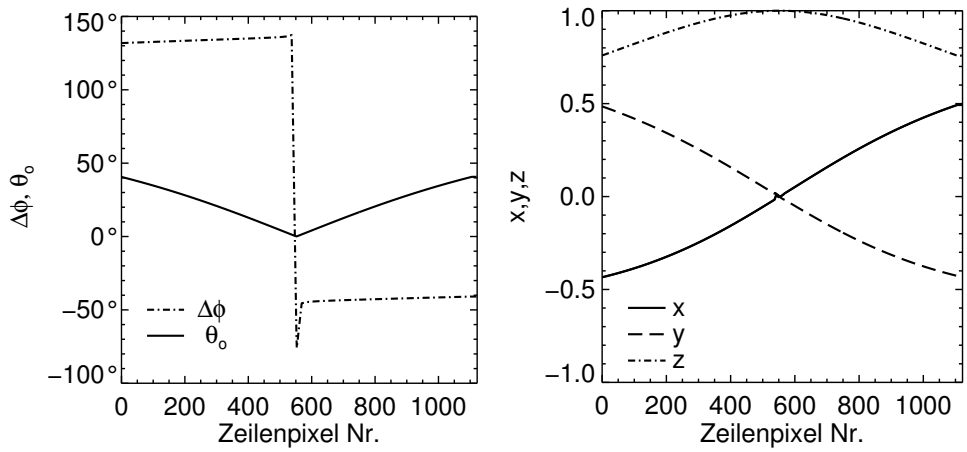

Abbildung 4.7: Rechts: Winkelverläufe der Azimutdifferenzen und Beobachterwinkel für eine Zeile einer MERIS-Aufnahme senkrecht zur Flugrichtung. Links: Transformierte Winkelverläufe der linken Abbildung zur Umgehung der Unstetigkeiten der pixelbasierten Inversionsverfahren.

Datensätze für das direkte 1S-Verfahren

Zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe aus dem Signal am Oberrand der Atmosphäre wird, für jeden Wasserinhaltstoff getrennt, ein Trainings- und Testdatensatz mit je $100\,000$ stochastischen Lernmustern (Eingabevektoren) aus der simulierten Datenbasis erstellt. Die entnommenen Eingabevektoren $\overrightarrow{x}$ bestehen aus insgesamt 18 Parametern: den in *Remote Sensing Reflectances* umgerechneten Strahldichten in den MERIS-Bändern $1-7,\ 9, 10$ und $12-14$, den Geometrieparametern $x, y, z, \cos(\theta_{\mathrm{s}})$ sowie den Angaben zum Bodendruck P und der Windgeschwindigkeit W. Die von den Netzwerken zu lernenden Ausgaben $\overrightarrow{y}$ bestehen aus den zu $\overrightarrow{x}$ gehörenden logarithmierten Konzentrationen der einzelnen Wasserinhaltsstoffe.

$$\overrightarrow{x}_{\mathrm{1S,WAT}} = [\, RS_{\mathrm{TOA}}(1-7,\ 9, 10,\ 12-14)\,, x,\ y,\ z,\ \cos(\theta_{\mathrm{s}}),\ P,\ W\,]^{\mathrm{T}}$$

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{y}_{\mathrm{1S,WAT}_{CHL}} &= [\,\log(CHL)\,] \\
\overrightarrow{y}_{\mathrm{1S,WAT}_{TSM}} &= [\,\log(TSM)\,] \\
\overrightarrow{y}_{\mathrm{1S,WAT}_{YEL}} &= [\,\log(YEL)\,]
\end{aligned}$$

Zur Dekorrelation der spektralen Information werden die *Remote Sensing Reflectances* einer Hauptachsentransformation (PCA) unterzogen. Da reale Daten immer mit einer gewissen Messungenauigkeit behaftet sind, werden zusätzliche Trainings- und Testdatensätze mit je $100\,000$ Lernmustern erstellt, die signalabhängig und gaußförmig verrauscht werden. Die Tabelle 4.3 zeigt die für die einzelnen Parameter angenommenen Unsicherheiten als prozentuales Rauschen.

Tabelle 4.3: In den Trainingsdatensätzen verwendetes signalabhängiges Rauschen.

	$RS_{\mathrm{TOA}}(1-7,\ 9, 10,\ 12-14)$	W	P	x	y	z	$\cos(\theta_{\mathrm{s}})$
Rauschen [%]	0,2	2	2	0,001	0,001	0,001	0,001

Durch Variation der Neuronenanzahl der Zwischenschicht mit $40,\ 60,\ 80$ und 100 Neuronen, bei verrauschten und unverrauschten Datensätzen für Netze mit je einem Inhaltsstoff als Ausgabe, werden für das direkte Verfahren auf diese Weise insgesamt 24 Netzwerke trainiert. Die Güte ihrer Funktionsapproximation wird, wie im nächsten Kapitel beschrieben, anhand von *in situ* Daten bestimmt.

Datensätze für das indirekte 2S-Verfahren

Die zu erstellenden Trainings- und Testdatensätze für das 2S-Verfahren unterteilen sich zum einen in die Datensätze zur Durchführung der Atmosphärenkorrektur und zum anderen in die Datensätze zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe aus den atmosphärenkorrigierten Spektren. Auch für das 2S-Verfahren erfolgt eine Zusammenstellung von jeweils $100\,000$ Lernmustern, die der simulierten Datenbasis stochastisch entnommen werden. Die Eingabevektoren $\overrightarrow{x}$ der Atmosphärenkorrektur setzten sich aus den gleichen Eingabeparametern wie denen des 1S-Verfahrens zusammen. Die zu lernenden Ausgaben $\overrightarrow{y}$ dagegen bestehen aus den zu den Eingabevektoren zugehörigen *Remote Sensing Reflectances* am Unterrand der Atmosphäre für die MERIS-Bänder $1-7$, und 9. Zur Validierung der Atmosphärenkorrektur wurden 4 zusätzliche Ausgänge als aerosoloptische Tiefen für die Wellenlängen $440,\ 550,\ 670$ und $870\,\mathrm{nm}$ realisiert.

$$\overrightarrow{x}_{\mathrm{2S,ATM}} = [\, RS_{\mathrm{TOA}}(1-7,\ 9, 10,\ 12-14),\ x,\ y,\ z,\ \cos(\theta_{\mathrm{s}}),\ P,\ W\,]^{\mathrm{T}}$$

$$\overrightarrow{y}_{\mathrm{2S,ATM}} = [\, RS_{\mathrm{BOA}}(1-7,\ 9),\ \tau_{\mathrm{a}}(440,\ 550,\ 670,\ 870)\,]^{\mathrm{T}}$$

Die Eingabevektoren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe aus den Spektren am Unterrand der Atmosphäre setzen sich aus den abgeleiteten *Remote Sensing Reflectances* der MERIS-Bänder $1-7$, den Geometrieparametern $x, y, z, \cos(\theta_{\mathrm{s}})$ sowie den Angaben zum Bodendruck P und der Windgeschwindigkeit W zusammen. Die zugehörigen, zu lernenden Ausgaben, die durch separate Netzwerke implementiert werden, bestehen aus den logarithmierten Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe CHL, TSM und YEL.

$$\overrightarrow{x}_{\mathrm{2S,WAT}} = [\, RS_{\mathrm{BOA}}(1-7),\ x,\ y,\ z,\ \cos(\theta_{\mathrm{s}}),\ P,\ W\,]^{\mathrm{T}}$$

$$\begin{aligned}
\overrightarrow{y}_{\mathrm{2S,WAT}_{CHL}} &= [\,\log(CHL)\,] \\
\overrightarrow{y}_{\mathrm{2S,WAT}_{TSM}} &= [\,\log(TSM)\,] \\
\overrightarrow{y}_{\mathrm{2S,WAT}_{YEL}} &= [\,\log(YEL)\,]
\end{aligned}$$

Für beide Verfahren werden die Eingänge der Spektren hauptachsentransformiert und alle Daten nach Tabelle 4.3 signalabhängig, gaußförmig verrauscht. Das Training erfolgt durch Variation der Anzahl der Zwischenschichtneuronen mit $40, 60, 80$ und 100. Als Verfahren zur Atmosphärenkorrektur werden auf diese Weise insgesamt 8 Netzwerke erstellt. Für die Verfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe werden 24 Netzwerke generiert, die im folgenden Kapitel anhand von *in situ* gemessenen Daten validiert werden.