# Kapitel 5

# Validierung der Inversionsverfahren

Dieses Kapitel beschreibt die Validierung aller, im vorangegangenen Kapitel anhand von synthetischen Daten trainierten Netzwerke, durch einen Vergleich der aus MERIS-Daten invertierten Größen mit *in situ* gemessenen Daten innerhalb einer Zeitdifferenz von maximal $\pm 1$ Stunde zum Satellitenüberflug (*match-up*). Für einen Vergleich der direkten und indirekten Inversionsverfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe wird zunächst das genauste Verfahren zur Atmosphärenkorrektur anhand von *in situ* gemessenen Reflektanzen der Wasseroberfläche sowie von aerosoloptischen Tiefen ermittelt. In einem weiteren Schritt werden dann beide Verfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe unter Anwendung der validierten Atmosphärenkorrektur mit *in situ* gemessenen Wasserinhaltsstoffen verglichen. Eine Übersicht der verwendeten *in situ* Messungen gibt die Tabelle 5.1. Bis auf die auf die Aerosoldaten und die gemessenen Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe vor der Küste Spaniens, im Golf von Cádiz, stammen die verwendeten Daten aus Meßkampagnen, die im Rahmen der MERIS-Validierungsaktivitäten der ESA von verschiedenen Institutionen durchgeführt und freundlicherweise auch zur Validierung der Verfahren dieser Arbeit bereitgestellt wurden. Hierzu zählen die gemessenen Reflektanzen und Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe in der Nordsee, die durch Dr. Roland Doerffer vom Institut für Küstenforschung der GKSS zur Verfügung gestellt wurden sowie die in der Ostsee und dem Mittelmeer gemessenen Chlorophyll-a-Konzentrationen durch Dr. Frank Fell von der Informus GmbH. Die Messungen von Chlorophyll-a und Gesamtschwebstoff im Golf von Cádiz wurden von Dr. Jesus Morales vom spanischen *Centro Experimental de Investigacion en Cultivos Marinos* (CICEM) in Huelva zur Verfügung gestellt. Aus öffentlich zugänglichen Messungen dagegen stammen die zur Validierung der Atmosphärenkorrektur verwendeten aerosoloptischen Tiefen, die im Rahmen des *Aerosol-Robotic-Network* (AERONET) Programms der NASA gemessen wurden.

Tabelle 5.1: Verwendeter Datensatz der *in situ* Messungen zur Validierung der Atmosphärenkorrektur und der Verfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe. (AERONET[1)], GKSS[2)], Informus GmbH[3)], CICEM[4)])

| MERIS-Level1b-Daten | | *In situ* Daten | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| Datum | Auflösung | $RS_{\mathrm{BOA}}$ | $\tau_{\mathrm{a}}$ | $CHL$ | $TSM$ | $YEL$ | Meßorte |
| 29.07.2002 | RR | - | x[1)] | x[2)] | x[2)] | x[2)] | Nordsee |
| 31.07.2002 | RR | - | - | x[3)] | - | - | Mittelmeer |
| 14.08.2002 | RR | - | x[1)] | x[2),3)] | x[2)] | x[2)] | Nord- u. Ostsee |
| 03.09.2002 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 02.04.2003 | RR | - | - | x[4)] | x[4)] | - | Golf v. Cádiz |
| 13.04.2003 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 16.04.2003 | RR | - | - | x[4)] | - | - | Golf v. Cádiz |
| 17.04.2003 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 23.04.2003 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 29.04.2003 | RR | x[2)] | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 26.06.2003 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 14.07.2003 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |
| 15.07.2003 | RR | x[2)] | - | x[2)] | x[2)] | x[2)] | Nordsee |
| 05.08.2003 | RR | x[2)] | x[1)] | x[2)] | x[2)] | x[2)] | Nordsee |
| 06.08.2003 | FR | x[2)] | x[1)] | x[2)] | x[2)] | x[2)] | Nordsee |
| 09.08.2003 | RR | - | x[1)] | - | - | - | Nordsee |

## 5.1 Validierung der Reflektanzen am Unterrand der Atmosphäre

Für die Validierung der Atmosphärenkorrekturverfahren stehen insgesamt die an 4 Meßtagen durch die GKSS in der Nordsee bestimmten spektralen Reflektanzen sowie entsprechende MERIS-Level1b-Daten zur Verfügung. Die Reflektanzmessungen wurden mit dem in Frankreich am *Laboratoire d'Optique Atmosphérique* (LOA) in Lille entwickelten SIMBADA-Radiometer durchgeführt (*Bécu et al.*, 2002). Das Radiometer, in Abbildung 5.1 dargestellt, wird von Hand auf die Meeresoberfläche ausgerichtet und mißt die aufwärtsgerichteten Strahldichten direkt über der Wasseroberfläche in 11 Spektralkanälen (s. Tab. 5.2). Durch Messung der direkten solaren Flußdichte kann mit dem Gerät auch die aerosoloptische Tiefe bestimmt werden, die vom LOA im Strahlungstransport zur Berechnung der Irradianz über der Wasseroberfläche benötigt wird. Mit den berechneten Irradianzen der jeweiligen Meßtage werden die gemessenen Strahldichten durch das LOA

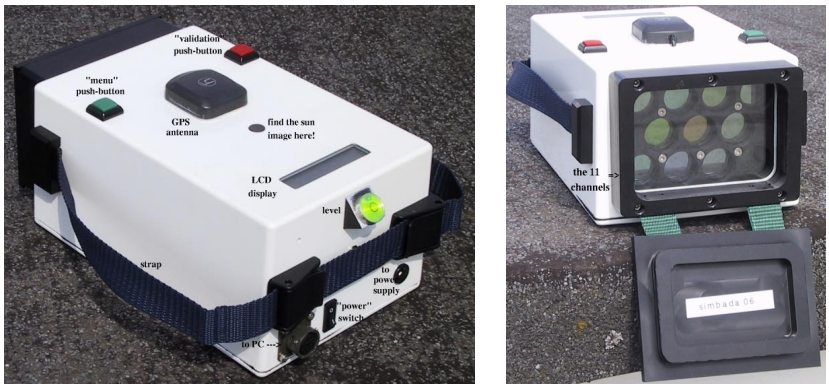


Abbildung 5.1: Das SIMBADA-Radiometer (Photo: LOA).

in Reflektanzen umgerechnet und dem Anwender zur Verfügung gestellt. Die Genauigkeit der gemessenen Reflektanzen wird absolut mit $R = 0,0005$ angegeben. Über einen GPS-Empfänger, mit dem das Gerät ausgestattet, ist wird seine Position während der Messungen bestimmt und aufgezeichnet. Aufgrund der hohen Variabilität der durch die Gezeiten beeinflußten Nordsee werden zur Validierung, wie von *Doerffer* (2002) empfohlen, nur *in situ* Messungen innerhalb eines Zeitfensters von $\pm 30\,\mathrm{min}$ zum MERIS-Überflug zugelassen. Damit stehen insgesamt 16 gemessene Spektren der Wasseroberfläche für eine Validierung der Verfahren zur Verfügung. Die Abbildung 5.2 illustriert die einzelnen, den MERIS-Daten zugeordneten, Positionen der *in situ* Messungen als RGB-Darstellung.

Tabelle 5.2: Spektralkanäle des SIMBADA-Radiometers.

| $\lambda_{\mathrm{SIMBADA}}$ [nm] | 350 | 380 | 410 | 443 | 490 | 510 | 560 | 620 | 670 | 750 | 870 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|

### 5.1.1 Vergleich mit *in situ* Messungen

Bevor die von MERIS am Oberrand der Atmosphäre gemessenen Spektren mit Hilfe der neuronalen Netze zur Atmosphärenkorrektur invertiert werden können, müssen diese zunächst auf die Solarkonstante und eine Ozonkonzentration von 344 Dobson-Einheiten normiert werden. Anschließend werden die entsprechenden Level1b-Masken, insbesondere die Land-See- und Glintmasken und eine Maske zur Markierung von sehr hellen Pixeln, denen meistens Wolken zugeordnet sind, angewendet. Nach Anwendung der im letzten Kapitel beschriebenen geometrischen und der Hauptachsentransformationen können die MERIS-Daten für jedes Pixel zur Bestimmung der *Remote Sensing Reflectances* und der aerosoloptischen Tiefen invertiert werden.

Die absolute Geolokalisierung der MERIS-Daten wird mit einer Pixelgröße von 300 m angegeben (*Colagrande und D'Alba*, 2004). Eine Validierung der abgeleiteten Größen durch Vergleich mit den *in situ* Messungen erfolgt deshalb für den Median eines 3x3 Pixel großen Gebietes, welches um das zu den jeweiligen *in situ* Messungen nächstgelegene MERIS-Pixel zentriert wurde.

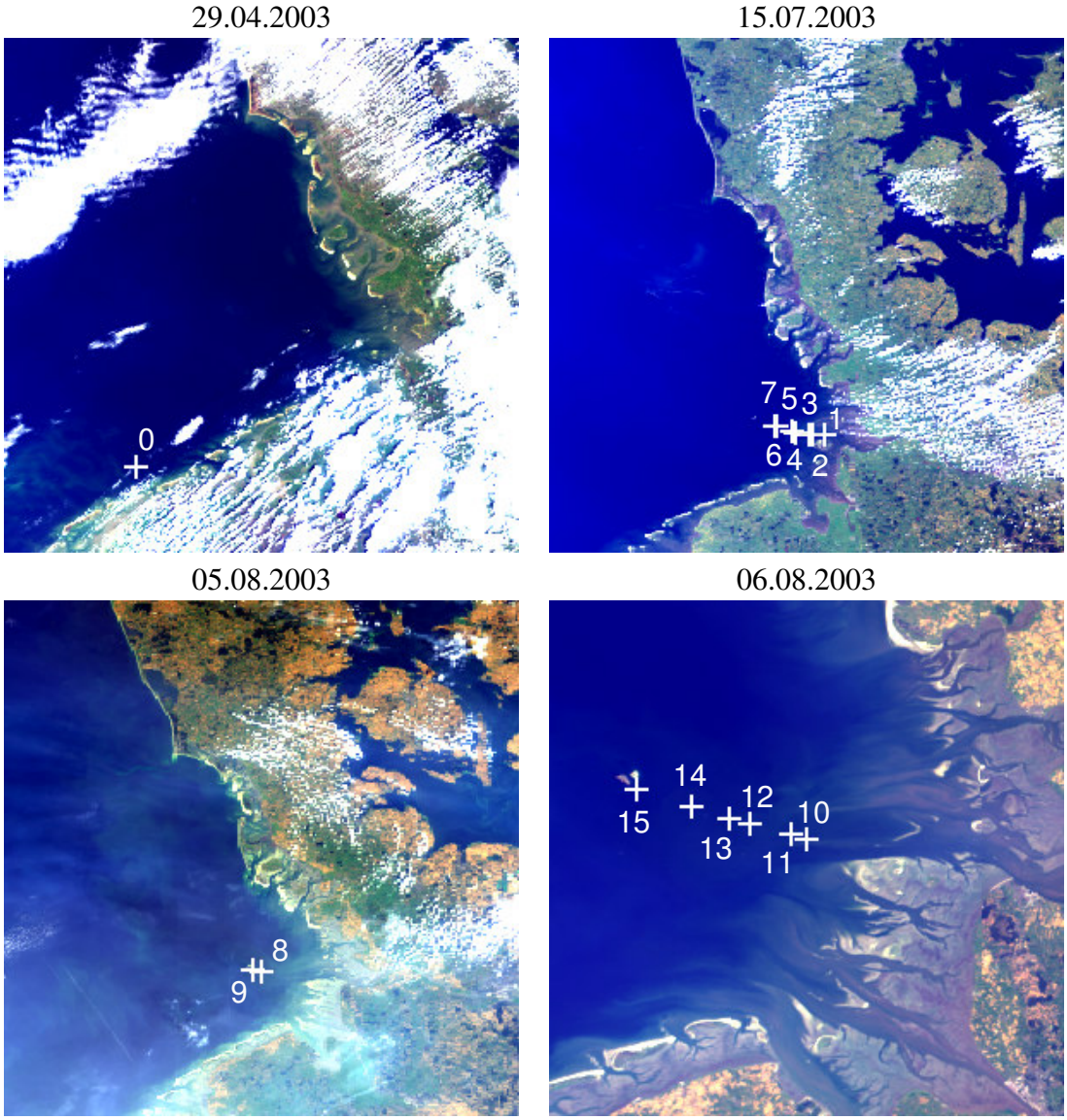


Abbildung 5.2: RGB-Darstellung der verwendeten MERIS-Daten im Bereich der Nordsee mit den Stationen der *in situ* Messungen zur Bestimmung der Reflektanzen mit dem SIMBADA-Radiometer.

Der Vergleich mit *in situ* Messungen erfolgt nur dann, wenn keines der Pixel zuvor durch eine Level1b-Maske zurückgewiesen wurde und die Eingabespektren innerhalb der simulierten Wertebereiche liegen. Die Ergebnisse der 8 neuronalen Netzwerke zur Atmosphärenkorrektur werden auf diese Weise mit den 16 gemessenen Spektren verglichen. Für einen direkten Vergleich mit den SIMBADA-Messungen werden die von den Netzen abgeleiteten *Remote Sensing Reflectances* durch Multiplikation mit dem Faktor $\pi$ in Reflektanzen konvertiert und die SIMBADA-Messungen auf die MERIS-Wellenlängen zwischen $412,5\,\mathrm{nm}$ und $708,75\,\mathrm{nm}$ interpoliert. Eine Übersicht aller Validierungsergebnisse der Netzwerke zur Atmosphärenkorrektur gibt die Tabelle A.2 im Anhang der vorliegenden Arbeit.

Abbildung 5.3 zeigt als bestes Ergebnis der Inversion, für ein Netzwerk mit 80 Zwischenschichtneuronen, das Streudiagramm der abgeleiteten Reflektanzen mit den einfachen Standardabweichungen der jeweiligen 3x3 Pixelbereiche und der *in situ* bestimmten Reflektanzen. Als Mittel über alle Wellenlängen und Messungen beträgt die Wurzel des mittleren quadratischen Fehlers $(\mathrm{RMSE})$ der Reflektanzen $0,0028$ bei einer linearen Korrelation von $0,938$. Der entsprechende mittlere absolute prozentuale Fehler $(\mathrm{MAPE})$ ergibt sich zu $18,4\%$. Werden die Fehlermaße, wie in der Abbildung 5.3 dargestellt, spektral aufgetragen, treten die geringsten absoluten Fehler im blauen Spektralbereich bei einer Wellenlänge von $412,5\,\mathrm{nm}$ mit einem $\mathrm{RMSE}$ von $0,0016$ auf. Die größten $\mathrm{RMSE}$-Werte im Vergleich zu den *in situ* gemessenen Reflektanzen sind bei einer Wellenlänge von $560\,\mathrm{nm}$ mit einem $\mathrm{RMSE}$ von $0,0038$ zu beobachten.

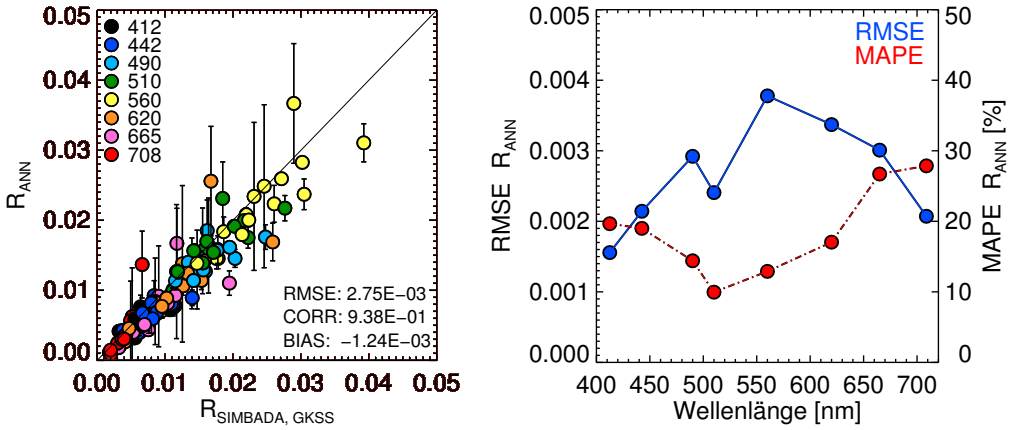


Abbildung 5.3: Ergebnisse der Validierung des entwickelten Atmosphärenkorrekturverfahrens. Links: Vergleich von *in situ* an 4 Tagen (s. Tab. 5.1) von der GKSS direkt an der Wasseroberfläche gemessenen Reflektanzen (SIMBADA) mit den durch das Verfahren dieser Arbeit (ANN) abgeleiteten Reflektanzen als Streudiagramm. Rechts: Spektraler Fehlerverlauf von RMSE und MAPE.

Das relative Fehlermaß des $\mathrm{MAPE}$ dagegen besitzt ein Minimum mit $10\%$ bei einer Wellenlänge von $510\,\mathrm{nm}$. Maximale relative Fehler treten im nahen infraroten Spektralbereich mit $27,9\%$ bei $708,75\,\mathrm{nm}$ auf.

### 5.1.2 Vergleich mit MERIS-Level2-Produkten

Für einen Vergleich mit den MERIS-Level2-Produkten müssen zunächst die zu den relevanten Datenprodukten mitgelieferten sogenannten *Product Confidence Flags (PCD)* und *Science Flags,* für alle den *in situ* Messungen zugeordneten Pixeln, analysiert werden. Insgesamt enthalten die Level2-Daten 29 *Flags*, die sich aus mathematisch logischen JA oder NEIN Aussagewerten zusammensetzen und deren Generierung auf teilweise sehr aufwendigen Algorithmen basiert (*Brockmann*, 2003). Im Rahmen dieser Arbeit sind allerdings lediglich 8 *Flags* für einen Vergleich mit Level2-Produkten von Bedeutung. Die für jedes abgeleitete MERIS-Produkt existierenden *PCD-Flags* sind zu beachten, da die MERIS-Produkte unabhängig von ihrer Qualität, immer in die entsprechenden Datenstrukturen geschrieben werden. Sind die *PCD-Flags* gesetzt sollten, die entsprechenden Datenprodukte nicht verwendet werden. Die *Science Flags* dagegen, charakterisieren und klassifizieren die durch diverse Algorithmen abgeleiteten speziellen Eigenschaften der Pixel, wie beispielsweise Pixel denen absorbierendes Aerosol oder Glint zugeordnet werden.

Die für einen Vergleich mit *in situ* gemessenen Reflektanzen relevanten *Flags* sind: `PCD_1_13`, `MEDI_GLINT` und `HIGH_GLINT`. Das *Flag* `PCD_1_13` bezieht sich auf die in den MERIS-Bändern $1-10$ und $12-14$ abgeleiteten Reflektanzen am Unterrand der Atmosphäre und wird bei geringer Qualität des Produktes (z. B. negative Werte) gesetzt. Die *Science Flags* `MEDI_GLINT` und `HIGH_GLINT` basieren auf dem *Sun Glint Flag* Algorithmus der ESA (*Montagner und Billat*, 2000), der für jedes Wasserpixel abhängig, von der bodennahen Windgeschwindigkeit und Richtung sowie der Sonnen- und Beobachtungsgeometrie den Beitrag des Sonnenreflexes, an den abgeleiteten Reflektanzen bestimmt. Ist der Beitrag des Glints, wie im Falle des gesetzten `MEDI_GLINT`-*Flags*, über einem festgelegten ersten Schwellwert, aber noch unterhalb eines höheren zweiten Schwellwertes, so wird das berechnete Glintsignal von den abgeleiteten Reflektanzen subtrahiert, d. h. korrigiert. Liegt der berechnete Anteil des Glints dagegen über dem zweiten Schwellwert, wird das `HIGH_GLINT`-*Flag* gesetzt, und alle so klassifizierten Pixel von der weiteren Datenprozessierung zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe ausgeschlossen.

Da für den 29.04.2003 keine MERIS-Level2-Daten zur Verfügung stehen, beschränkt sich ein Vergleich der Level2-Produkte mit den *in situ* gemessenen Reflektanzen und den Verfahren dieser Arbeit auf die Termine 15.07., 05.08. und 06.08.2003. Eine Analyse der Level2-*Flags* zeigt jedoch, daß die Daten des 05.08.2003 nicht verwendet werden können, da die beschriebenen `PCD_1_13`, `MEDI_GLINT` und `HIGH_GLINT` *Flags* für alle den *in situ* Messungen zugeordneten 3x3 MERIS-Pixeln gesetzt sind. Für einen Vergleich verbleiben insgesamt 13 von 16 Spektren an den beiden Tagen 15.07. und 06.08.2003.

Die Abbildung 5.4 zeigt die Mediane der abgeleiteten Reflektanzen für die Level2-Produkte und die Verfahren dieser Arbeit mit den jeweiligen einfachen Standardabweichungen der 3x3 Pixelgebiete im Vergleich zu den *in situ* Messungen. Das MERIS-Level2-Produkt der Reflektanzen besitzt einen über alle Messungen und Wellenlängen höheren $\mathrm{RMSE}$ von $0,0054$ mit einer niedrigeren linearen Korrelation von $0,884$ im Vergleich zum Atmosphärenkorrekturverfahren dieser Arbeit mit einem $\mathrm{RMSE}$ von $0,003$ und einer linearen Korrelation von $0,932$. Der mittlere absolute prozentuale Fehler $\mathrm{MAPE}$ beträgt für das MERIS-Level2-Produkt $46,2\%$ im Vergleich zu einem relativen Fehler von $18,9\%$ für das Verfahren dieser Arbeit.

Die in der Abbildung 5.5 dargestellten spektralen Fehlerverläufe von $\mathrm{RMSE}$ und $\mathrm{MAPE}$ beider Verfahren zeigen wesentliche Differenzen im blauen und grünen Spektralbereich. Im blauen Spektralbereich, bei einer Wellenlänge von $412,5\,\mathrm{nm}$, liegt der Fehler des MERIS-Level2-Produktes mit einem $\mathrm{RMSE}$ von $0,0082$ um den Faktor $5$ höher als der $\mathrm{RMSE}$ des Atmosphärenkorrekturverfahrens dieser Arbeit mit einem Wert von $0,0015$. Die entsprechenden relativen Fehler der Verfahren betragen $122,1\%$ und $18,7\%$. Ab einer Wellenlänge von $560\,\mathrm{nm}$ gleichen sich die Ergebnisse beider Verfahren an.

Aufgrund einer im Vergleich zu *in situ* Daten oft zu beobachtenden Überschätzung der MERIS-Level2-Reflektanzen im blauen Spektralbereich, wird zur Zeit im Rahmen der Validierungsaktivitäten der offiziellen MERIS-Atmosphärenkorrektur der ESA diskutiert, sogenannte *Blaue* Aerosolmodelle einzuführen. Diese zeichnen sich mit maximalen Ångströmkoeffizienten von $\alpha = 3$, im Vergleich zu den bisher verwendeten Aerosolmodellen, durch wesentlich höhere Extinktionen im blauen Spektralbereich aus. Der spektrale Verlauf der Aerosolextinktion ist umgekehrt proportional zum Ångströmkoeffizienten mit: $\tau_{\mathrm{a}} \sim \lambda^{-\alpha}$, der in direktem Zusammenhang mit dem Radiienexponenten einer angenommenen Junge-Größenverteilung der Aerosole steht und für $\alpha = 3$ ungewöhnlich kleine Aerosolpartikel beschreibt. Die Ergebnisse dieser Arbeit, die durch die Analyse weiterer Spektren zu bestätigen sind, zeigen jedoch, daß derartige Modelle nicht erforderlich sind.

Eine Darstellung aller 16 invertierten Spektren im Vergleich zu den *in situ* Messungen, einschließlich der zuvor nicht berücksichtigten Spektren des 05.08.2003, zeigt die Abbildung 5.6. Die Nummerierung der Meßstationen ist mit den Stationsangaben der Abbildung 5.2 konsistent.

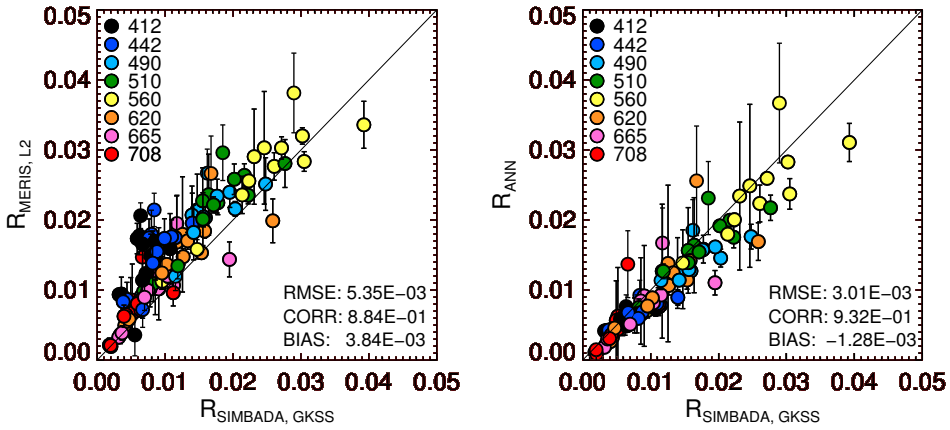


Abbildung 5.4: Vergleich der MERIS-Level2-Reflektanzen am Unterrand der Atmosphäre (links) sowie der, durch das Atmosphärenkorrekturverfahren dieser Arbeit abgeleiteten Reflektanzen (rechts), mit den *in situ* gemessenen Reflektanzen des SIMBADA-Radiometers für den 15.07. und 06.08.2003.

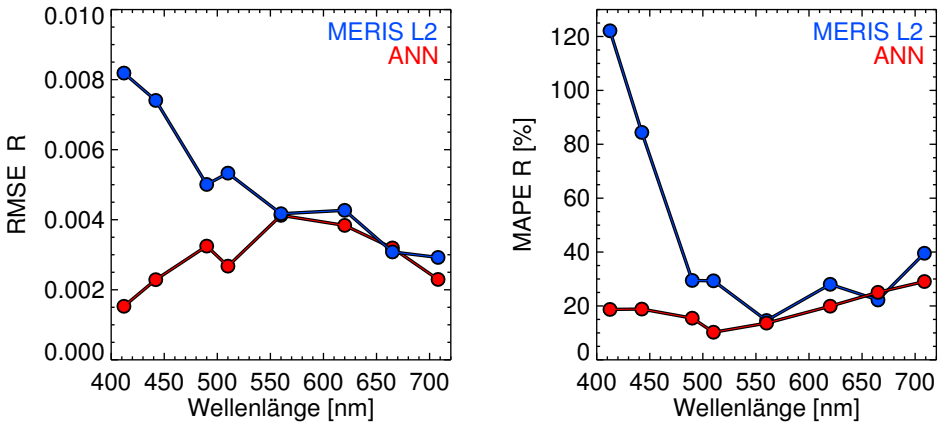


Abbildung 5.5: Durch Vergleich mit *in situ* Messungen ermittelte spektrale Fehlerverläufe von RMSE und MAPE der am Unterrand der Atmosphäre abgeleiteten Reflektanzen des MERIS-Level2-Produktes (blau) und des Atmosphärenkorrekturverfahrens dieser Arbeit (rot) für den 15.07. und 06.08.2003.

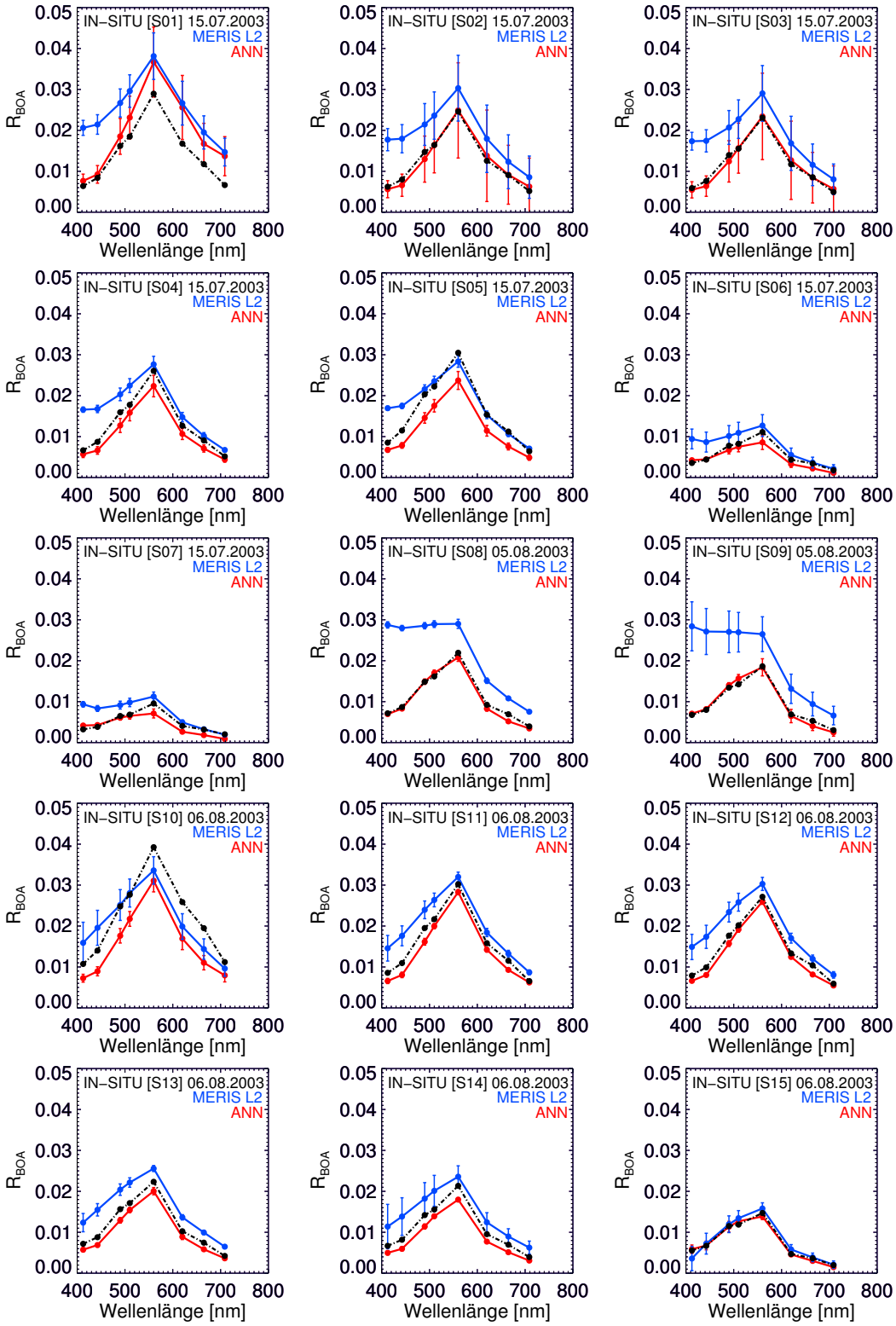


Abbildung 5.6: Mit dem hier entwickelten Atmosphärenkorrekturverfahren abgeleitete spektrale Reflektanzen (rot) im Vergleich zum MERIS-Level2-Produkt (blau) und den *in situ* Messungen der GKSS (schwarz). Die Nummerierung der Stationen [S01-S15] entspricht den in Abb. 5.2 dargestellten Meßorten.

## 5.2 Validierung der aerosoloptischen Tiefe

Zur Validierung der Atmosphärenkorrektur durch *in situ* Sonnenphotometermessungen des AERONET (*Holben et al.*, 1998) wurden neben den Reflektanzen als Netzausgabeparameter der Verfahren zusätzlich $4$ aerosoloptischen Tiefen für die Wellenlängen $440,\ 550,\ 670$ und $870\,\mathrm{nm}$ realisiert. AERONET ist ein weltweites Netzwerk automatisch arbeitender bodengestützter Sonnenphotometer, die aus Messungen der direkten solaren Flußdichte in $8$ Spektralkanälen im Wellenlängenbereich zwischen $340\,\mathrm{nm}$ und $1020\,\mathrm{nm}$ diverse Aerosolparameter bestimmen, unter anderem die spektrale aerosoloptische Tiefe. Eine ideale AERONET-Station für einen Vergleich der abgeleiteten aerosoloptischen Tiefen über Küstengewässern ist die in der Nordsee, in einer Entfernung von ca. $70$ km vom deutschen Festland, gelegene Station auf der Insel Helgoland.

### 5.2.1 Vergleich mit *in situ* Messungen

Zur Validierung stehen für die Station Helgoland an insgesamt $12$ Tagen gemessene spektrale aerosoloptische Tiefen zur Verfügung, an denen auch entsprechende MERIS-Level1b-Daten vorliegen (s. Tab. 5.1). Die verwendeten Aerosoldaten liegen in einer um Wolken bereinigten, Level2-Qualität vor. Da die zeitliche Variabilität der Atmosphäre wesentlich geringer ist als die durch Gezeiten beeinflußten optischen Eigenschaften der Küstengewässer, erfolgt ein Vergleich der abgeleiteten aerosoloptischen Tiefen mit den *in situ* Messungen innerhalb einer Zeitdifferenz von $\pm 1$ Stunde zum MERIS-Überflug. Nach Maskierung der Landoberfläche und Analyse der Level1b-Glintmaske, werden für jeweils über die geographischen Koordinaten der Insel Helgoland zentrierten 20x20 Pixel große Gebiete die Medianwerte der abgeleiteten aeorosoloptischen Tiefen berechnet. Für die hochaufgelöste MERIS-Aufnahme vom 06.08.2003 erfolgt die Berechnung für ein 80x80 Pixel großes Gebiet. Ebenso werden die Mediane für die, in Abständen von 15 Minuten vorliegenden, AERONET-Daten berechnet und eine Interpolation der Daten auf die Wellenlänge von $550\,\mathrm{nm}$ vorgenommen. Die als Netzausgaben realisierten Wellenlängen von $440,\ 670$ und $870\,\mathrm{nm}$ entsprechen AERONET-Wellenlängen und sind somit ohne Interpolation direkt vergleichbar. Das beste Ergebnis der Validierung der aerosoloptischen Tiefen zeigt die Abbildung 5.7 für das bereits durch die *in situ* gemessenen Reflektanzen validierte Netzwerk mit $80$ Zwischenschichtneuronen. Das absolute Fehlermaß des $\mathrm{RMSE}$ beträgt für alle Meßtage und Wellenlängen $0,074$ in Einheiten der aerosoloptischen Tiefe bei einer linearen Korrelation von $0,85$. Wie der spektrale Verlauf des RMSE in Abbildung 5.7 illustriert ist das Verfahren so entwickelt, daß es den absolute Fehler optimiert.

Verfahrensbedingt treten daher höhere relative Fehler bei kleinen aerosoloptischen Tiefen auf. Der mittlere absolute prozentuale Fehler für alle Meßtage beträgt für die Wellenlängen 440 nm und 550 nm knapp 40% und liegt für die geringen aerosoloptischen Tiefen der Wellenlängen 670 nm und 870 nm bei 66% bzw. 96%.

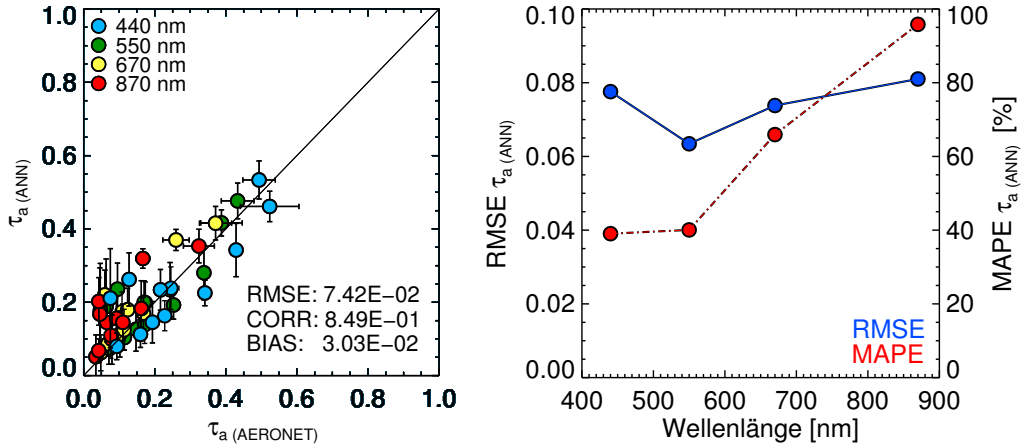


Abbildung 5.7: Links: Ergebnis der Validierung der durch die Atmosphärenkorrektur dieser Arbeit abgeleiteten aerosoloptischen Tiefen, im Vergleich zu den *in situ* Messungen der AERONET-Station auf der Insel Helgoland für einen Datensatz von 12 Tagen als Streudiagramm. Rechts: Absolute und relative spektrale Fehlerverläufe der abgeleiteten aerosoloptischen Tiefen.

## 5.3 Räumliche Strukturen der Reflektanzen und aerosoloptischen Tiefen

Zur Illustration der räumlichen Verteilung der durch das Atmosphärenkorrekturverfahren abgeleiteten Größen zeigt die Abbildung 5.8 die über der Nord- und Ostsee für eine MERIS-Aufnahme vom 15.07.2003 abgeleiteten aerosoloptischen Tiefen bei 440 nm und die *Remote Sensing Reflectances* für die Wellenlängen 442 und 560 nm. Aufgrund der Rückstreuung an den Schwebstoffen und in Übereinstimmung mit den im Abschnitt 4.2.3 beschriebenen Simulationen (vgl. Abb. 4.3), zeigen die küstennahen Zonen im Bereich der Nordsee hohe Anteile der reflektierten Strahlung für die gewählte Wellenlänge von 560 nm. Die küstenfernen Zonen der offenen Nordsee dagegen, deren Wasser weniger sedimentgetrübt ist, zeigen geringere Beiträge der reflektierten Strahlung. Umgekehrt zeichnen sich die küstenfernen Gebiete für die Wellenlänge von 442 nm durch höhere *Remote Sensing Reflectances*, als die küstennahen Bereiche aus. Die abgeleitete räumliche Struktur für die Wellenlänge 442 nm läßt sich mit der, bei dieser Wellenlänge ma-

ximalen, Chlorophyllabsorption des Phytoplanktons sowie dem Einfluß der Gelbstoffabsorption interpretieren. Somit zeigen die weniger nährstoffreichen küstenfernen Gebiete höhere *Remote Sensing Reflectances* als nährstoffreichen küstennahen Gebiete, die sich durch eine hohe Absorption von Chlorophyll und Gelbstoff auszeichnen. In der räumlichen Verteilung der abgeleiteten aerosoloptischen Tiefe lassen sich keine Strukturen des Wasserkörpers erkennen. Das Verfahren ist somit in der Lage das atmosphärische Signal vom Signal des Wasserkörpers zu trennen. Lediglich für die sehr küstennahen Bereiche der Weser- und Elbmündung ist eine leichte Erhöhung der aerosoloptischen Tiefe durch die Schwebstoffe zu beobachten.

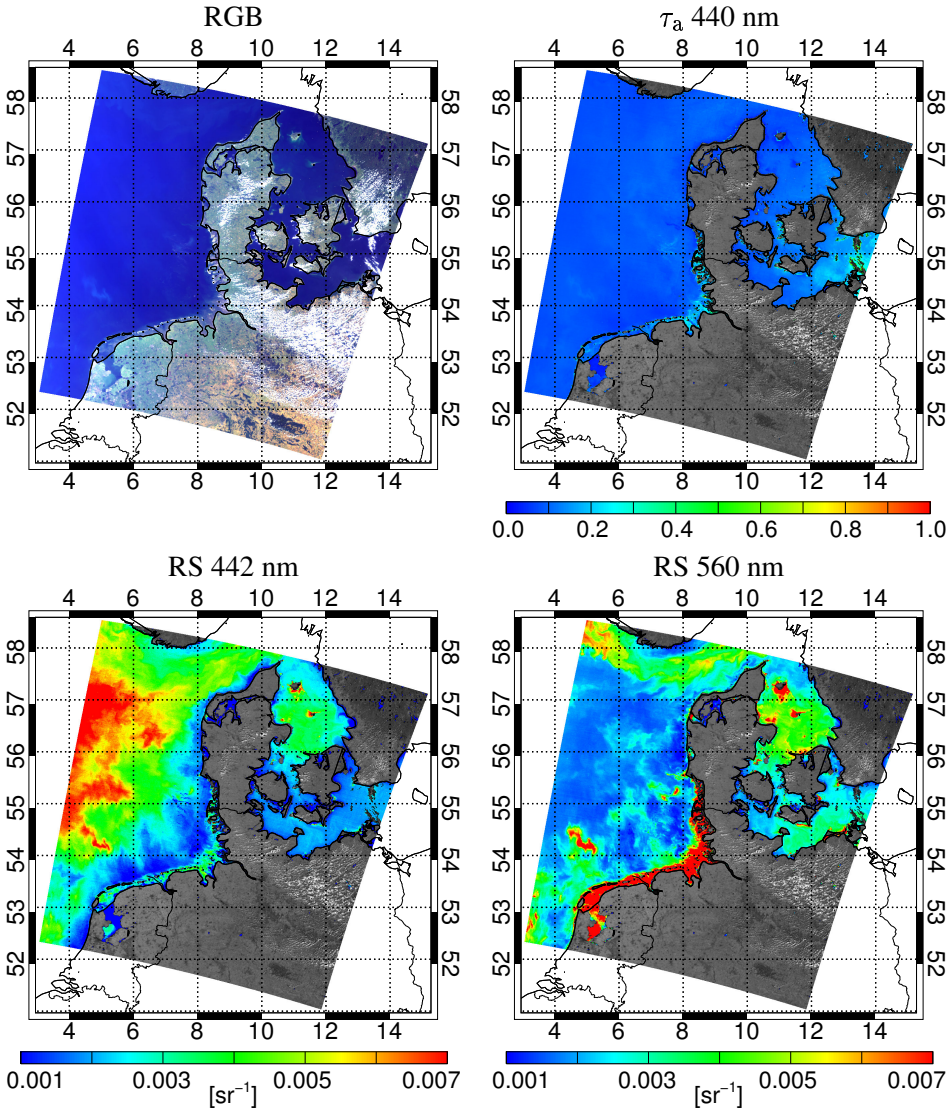


Abbildung 5.8: RGB-Darstellung einer MERIS-Aufnahme vom 15.07.2003 über Bereichen der Nord- und Ostsee mit Beispielen der durch das Atmosphärenkorrekturverfahren abgeleiteten räumlichen Strukturen der aerosoloptischen Tiefe bei 440 nm und der *Remote Sensing Reflectances* für die Wellenlängen 442 und 560 nm.

## 5.4 Validierung der Wasserinhaltsstoffe

Unter Anwendung des in den vorangegangenen Abschnitten validierten Atmosphärenkorrekturverfahren, beschreibt dieser Abschnitt die Validierung der aus den atmosphärenkorrigierten Spektren am Unterrand der Atmosphäre abgeleiteten Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe anhand von *in situ* Messungen. Ebenso erfolgt eine Validierung der Verfahren, mit denen die Inhaltsstoffe aus dem Signal am Oberrand der Atmosphäre abgeleitet werden. Die durch *in situ* Messungen bestimmten Wasserinhaltsstoffe sind das Chlorophyll-a, das Gesamtschwebstoff und die Gelbstoffabsorption bei einer Wellenlänge von $440\,\mathrm{nm}$. Eine Übersicht zur geographischen Lage der in den MERIS-Daten lokalisierten Meßorte zeigt die Abbildung 5.9. Im Rahmen dieser Arbeit soll lediglich ein grober Überblick über die Verfahrensschritte zur *in situ* Bestimmung der genannten Wasserinhaltsstoffe gegeben werden. Auf eine detaillierte Beschreibung der speziellen Methoden der Laboranalytik wird daher verzichtet.

Das Chlorophyll-a wurde von den bereits genannten Institutionen unter Anwendung von 3 verschiedenen Analysemethoden bestimmt. So wurden die in der Nordsee von der GKSS und die im Golf von Cádiz durch das CICEM bestimmten Konzentrationen mit der Hochdruckflüssigkeits-Chromatographie (HPLC) ermittelt. Bei dieser Methode werden die abfiltrierten Pigmente zunächst mit Hilfe von Lösungsmitteln (z. B. Aceton) aus ihren Zellmembranen gelöst und anschließend in einem Laufmittel unter hohem Druck durch die Trennsäule des Chromatographen gepumpt. Unter Ausnutzung der unterschiedlichen Polaritäten der einzelnen Pigmente lassen sich diese in Abhängigkeit der aus der Polarität und Molekülgröße resultierenden Retentionszeit, die vom Einspritzen bis zum Signalmaximum verstreicht, nachweisen. Quantitativ lassen sich die Pigmente, so auch das Chlorophyll-a, durch Messung der Absorption oder der Fluoreszenz aus dem Integral der Meßkurven bestimmen. Die relativen Genauigkeiten dieser Methode zur Bestimmung des Chlorophyll-a betragen typischerweise $\pm\,20\%$ (*Heymann*, 2004). Aus den Gewässerproben im Mittelmeer vor der Küste Israels wurde das Chlorophyll-a über die Fluoreszenz-Emission bestimmt (*Holm-Hansen et al.*, 1965). Das Chlorophyll-a der Ostsee dagegen wurde mit der photometrischen Methode (*Jeffrey und Humphrey*, 1975) bestimmt, bei der das Filtrat zunächst auch in einem organischen Lösungsmittel aufgelöst wird, um anschließend die Konzentration aus der gemessenen Extinktion relativ zu einer Probe mit reinem Wasser zu bestimmen. Beide Methoden sind prinzipiell ungenauer als die HPLC-Methode, da die spektralen Einflüße co-variierender Pigmente (Chlorophyll-b, -c, u. a.) zu erheblichen Über- oder Unterschätzungen des Chlorophyll-a führen können (*Mueller et al.*, 2003).

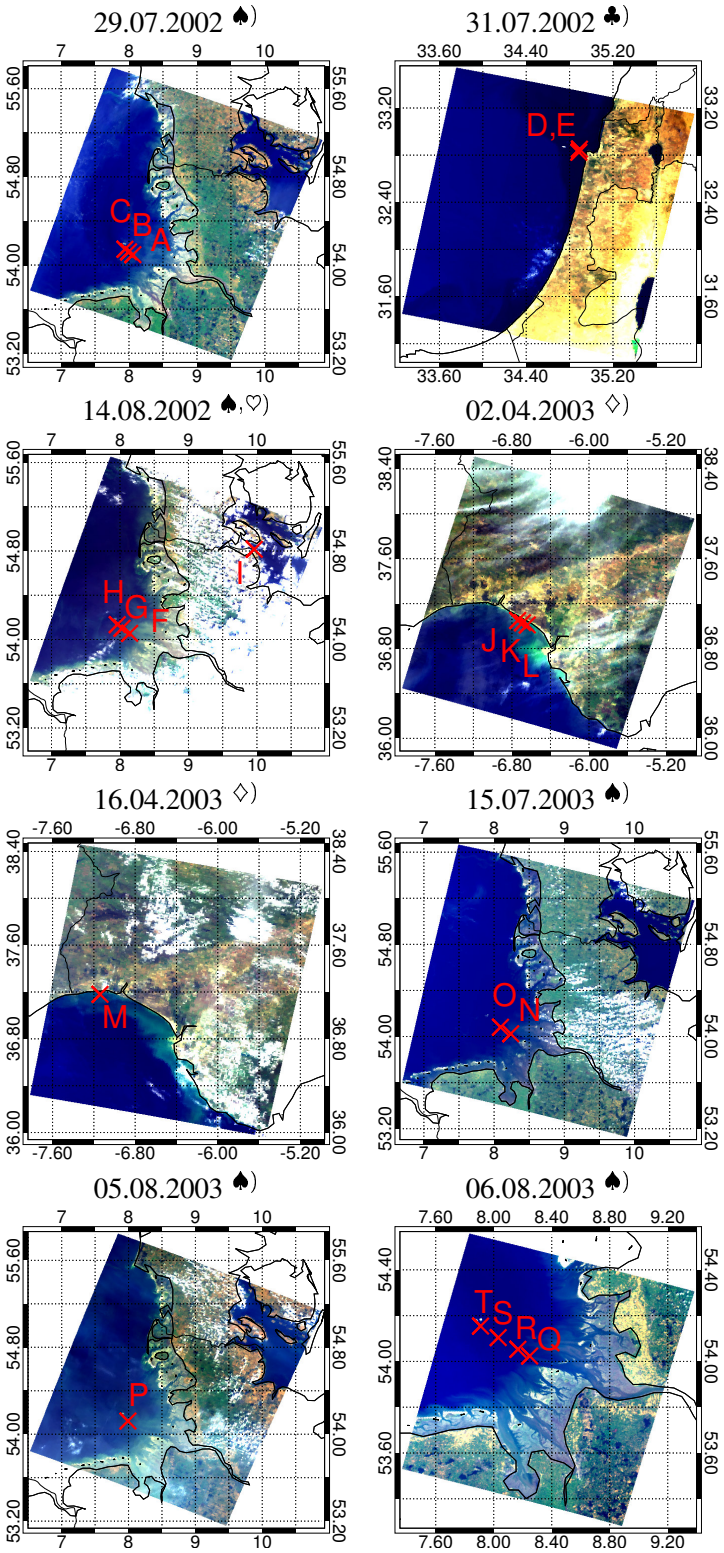


Abbildung 5.9: Geographische Lage der *in situ* Meßorte zur Validierung der Wasserinhaltsstoffe. (Nordsee ♠), Ostsee ♡), Mittelmeer ♣), Golf von Cádiz ♢)).

Zur Bestimmung der Gelbstoffabsorption werden die Gewässerproben zunächst mit einem Glasfaserfilter mit einer Porengröße von $0,22\,\mu\mathrm{m}$ filtriert. Dabei werden alle im Wasser gelösten Substanzen, die nicht auf dem Filter verbleiben, definitionsgemäß als Gelbstoff bezeichnet. Durch Analyse des Filtrats mit einem Spektrophotometer wird anschließend die Absorption bestimmt. Allerdings umfaßt die Gesamt-Gelbstoffabsorption, so wie sie als MERIS-Level2-Produkt definiert ist, zusätzlich die Absorption durch nicht-chlorophyllhaltige Partikel. Diese läßt sich über eine Bleichungsprozedur aller auf dem Filter verbliebenen Partikel bestimmen. Der Bleichungsprozeß zerstört alle Chlorophyllpigmente, sodaß sich die dann gemessene Absorption den nicht-chlorophyllhaltigen Partikeln zuordnen läßt. Diese ebenfalls von der GKSS vorliegenden Absorptionsmessungen werden zu den Gelbstoffmessungen addiert, um das MERIS-Level2-Gelbstoffprodukt zu validieren und mit den Verfahren dieser Arbeit zu vergleichen.

Das Gesamtschwebstoff wird gravimetrisch aus allen, nach Filtration einer Gewässerprobe von einem Liter, auf einem vorgewogenen Glasfaserfilter verbleibenden Partikeln bestimmt und im Trockengewicht angegeben. Die Filter werden hierzu in einem Ofen bei $65°$-$70°$ getrocknet. Das Gewicht des Schwebstoffs ergibt sich aus der Differenz der Gewichtsmessungen des Filters vor und nach der Filtration. Idealerweise sollten die Gewässerproben unmittelbar nach der Probenentnahme filtriert werden. Ist dies nicht möglich, wird empfohlen, durch den Zusatz einer bestimmten Menge einer 4%-igen Formalin-Lösung die Vermehrung des Phytoplanktons zu unterbinden.

### 5.4.1 Vergleich mit *in situ* Messungen

Wie in der Tabelle 5.1 aufgeführt, stehen für eine Validierung der abgeleiteten Wasserinhaltsstoffe an insgesamt 8 Tagen *in situ* Messungen und entsprechende MERIS-Level1b-Daten zur Verfügung. Für einen Vergleich werden allerdings nur *in situ* Daten verwendet, deren Probenentnahme innerhalb einer Zeitdifferenz von maximal $\pm 30\,\mathrm{min}$ zum MERIS-Überflug erfolgte. Des weiteren müssen die gemessenen Konzentrationen innerhalb der in Tabelle 4.2 dargestellten, simulierten Konzentrationsbereiche liegen und die simulierten Konzentrationsabhängigkeiten der Gleichungen 4.1, 4.2 und 4.3 erfüllen. Für die auf diese Weise eingeschränkte Anzahl von *in situ* Messungen werden in den entsprechenden MERIS-Daten 3x3 große Pixelbereiche bestimmt, die um das zu den jeweiligen *in situ* Messungen nächstgelegenen Pixel zentriert werden. Anschließend werden für die ermittelten Pixelbereiche die angewendeten Level1b-Masken zur Ausblendung von Land-, Wolken- und Glintpixeln überprüft. Diese dürfen für kein Pixel der den *in situ* Messungen jeweils zugeordneten Bereiche gesetzt sein. Bevor das zu jedem Pixel gehörende Spek-

trum mit Hilfe der neuronalen Netze zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe invertiert werden kann, wird überprüft, ob die Eingabewerte der Spektren innerhalb der Trainingsbereiche der Netzwerke liegen, und ob alle Sonnenzenitwinkel weniger als $60°$ betragen. Erst wenn die *in situ* Messungen *und* die MERIS-Daten die genannten Anforderungen erfüllen, werden sie zur Validierung verwendet. Diesen hohen Anforderungen genügen insgesamt noch $20$ Messungen von Chlorophyll-a, $16$ Messungen des Gesamtschwebstoffs und $13$ Messungen der Gelbstoffabsorption bei $443\,\mathrm{nm}$ mit den zugeordneten Bereichen der MERIS-Daten.

Zur Ermittlung des besten 1S- und 2S-Verfahrens werden die den *in situ* Messungen zugeordneten Bildbereiche mit allen $48$ trainierten neuronalen Netzen zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe invertiert. Anschließend werden die für jeden 3x3 Pixel großen Bildbereich bestimmten Mediane mit den *in situ* Daten durch Berechnung des RMSE verglichen. Da für alle Netzwerke eine logarithmische Konzentrationsskala als Ausgabe gewählt wurde, die einen konstanten absoluten Fehler im logarithmischem Raum erzwingt, werden die *in situ* Daten zur Berechnung der RMSE-Werte zunächst logarithmisch transformiert. Eine Übersicht aller Validierungsergebnisse zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe mit beiden Verfahren geben die Tabellen A.3 und A.4 im Anhang dieser Arbeit. Die jeweils besten Ergebnisse der 1S- und 2S-Verfahren faßt die Abbildung 5.10 zusammen.

Die Bestimmung des Chlorophyll-a durch Inversion der MERIS-Daten an allen $20$ Orten der *in situ* Messungen zeigt bessere Ergebnisse für das indirekte 2S-Verfahren mit einem RMSE von $0,214$ im Vergleich zu einem RMSE von $0,275$ für das direkte 1S-Verfahren. Der gemessene und zur Validierung verwendete Konzentrationsbereich des Chlorophyll-a umfasst Werte über 3 Größenordnungen zwischen $0,12\,\mathrm{mg\,m^{-3}}$ und $12,6\,\mathrm{mg\,m^{-3}}$. Da ein konstanter absoluter Fehler im logarithmischen Raum einem konstanten relativen Fehler im linearen Raum entspricht, werden die relativen Fehlermaße zur Beschreibung der Verfahren im linearen Raum berechnet. Die Abbildung 5.11 zeigt die relativen Einzelfehler beider Verfahren an den jeweiligen Stationen mit einer Angabe der nach Größen sortierten gemessenen Konzentrationswerte. Bis auf die küstennahen Stationen der Nordsee A, F, Q, R (vgl. Abb. 5.9) zeigt das 2S-Verfahren mit expliziter Atmosphärenkorrektur in allen Fällen bessere Ergebnisse als die direkte Inversion vom Oberrand der Atmosphäre. Als Ursache für die hohen Abweichungen des 2S-Verfahrens von über $100\%$ an den Stationen Q und F sind die erhöhten Schwebstoffgehalte von $12,2\,\mathrm{g\,m^{-3}}$ und $14,3\,\mathrm{g\,m^{-3}}$ denkbar (vgl. Abb. 5.11 mitte), die zu Ungenauigkeiten in der Atmosphärenkorrektur geführt haben mögen. Die maximalen Abweichungen des 1S-Verfahrens an den Stationen N, M lassen sich dagegen nicht interpretieren.

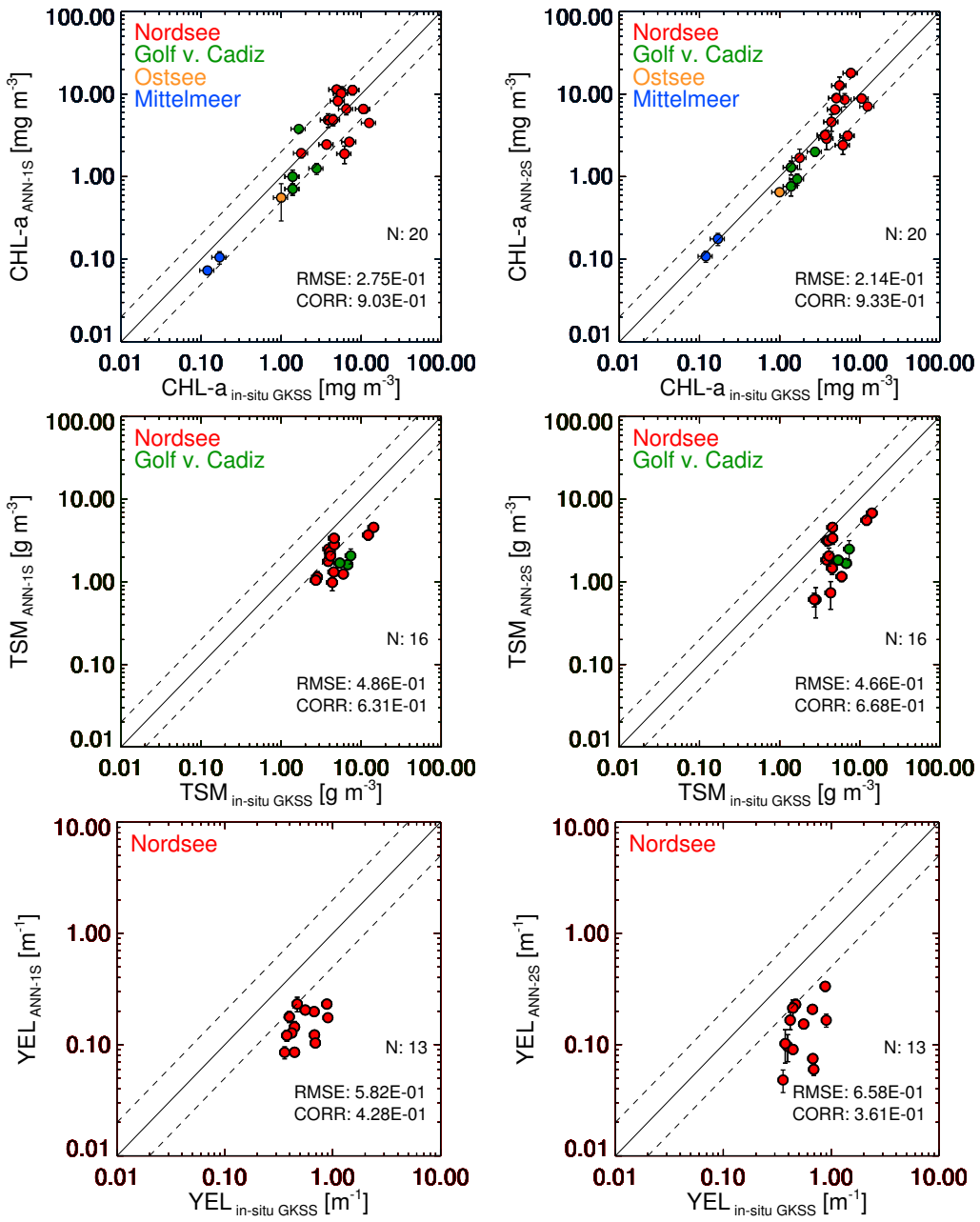


Abbildung 5.10: Beste Ergebnisse der Validierung der 1S-Verfahren (links) und der 2S-Verfahren (rechts) anhand von *in situ* gemessenen Konzentrationen von Chlorophyll-a (oben), Gesamtschwebstoff (mitte) und Gelbstoffabsorption (unten). Dargestellt sind die Mediane und einfachen Standardabweichungen für jeweils 3x3 Pixel große Datenbereiche an den Orten *in situ* Messungen.

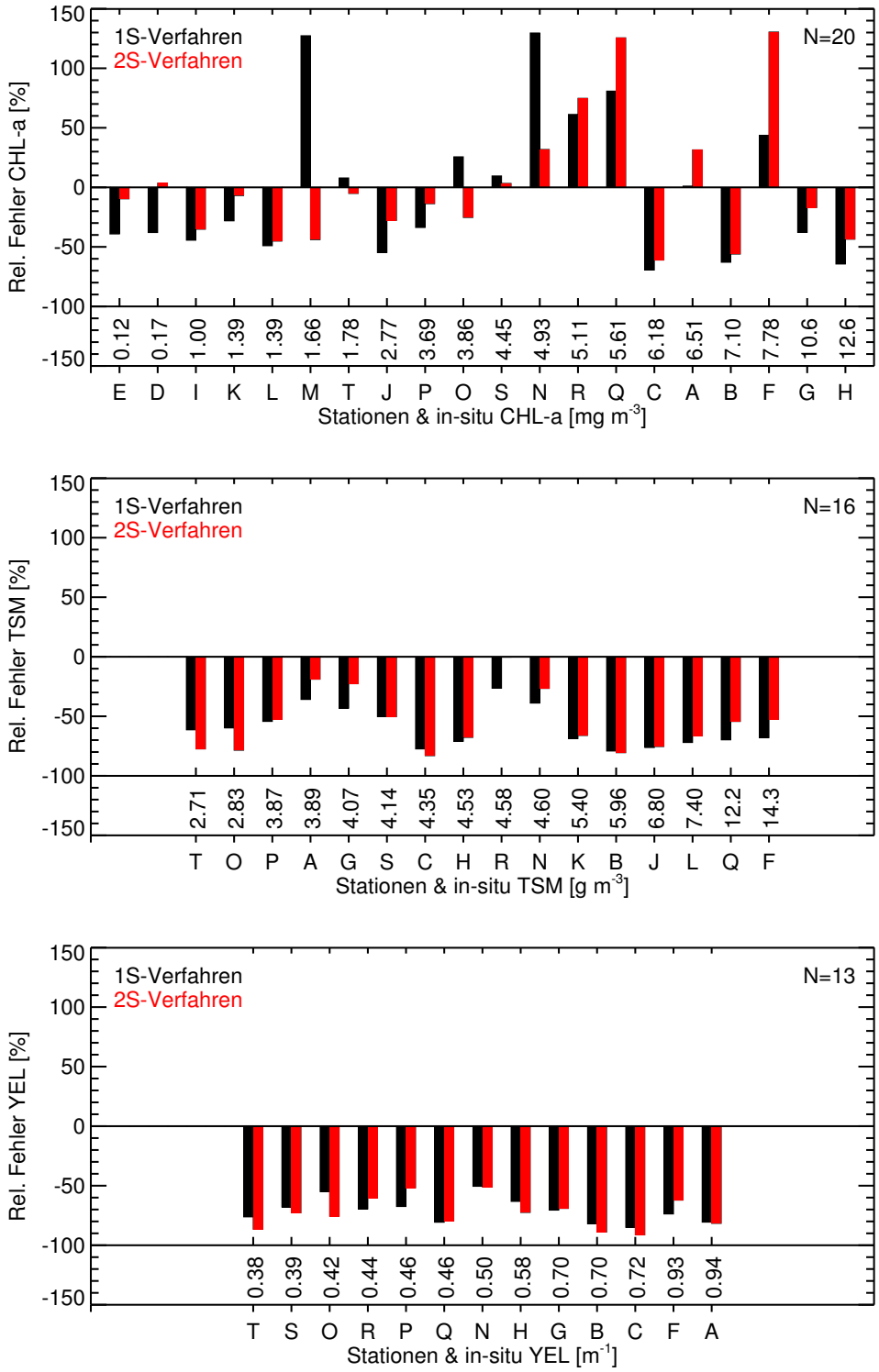


Abbildung 5.11: Relative Fehler der besten 1S-Verfahren (schwarz) und 2S-Verfahren (rot) im Vergleich zu den *in situ* Messungen von Chlorophyll-a (oben), Gesamtschwebstoff (mitte) und Gelbstoff (unten) jeweils nach Konzentrationen geordnet mit Angaben der Stationsnamen (vgl. Abb. 5.9).

Für die sehr geringen Konzentrationen unter $1\,\mathrm{mg\,m^{-3}}$ Chlorophyll-a an den Stationen E und D zeigt das 2S-Verfahren unter Anwendung der Atmosphärenkorrektur deutlich bessere Ergebnisse. Der mittlere absolute prozentuale Fehler (MAPE) aller Stationen beträgt für das 2S-Verfahren $39,6\%$ im Vergleich zu $50,4\%$ für das 1S-Verfahren. Bis auf $4$ Stationen zeigen beide Verfahren das gleiche Fehlervorzeichen und tendieren mit $13$ von $20$ Stationen zu einer leichten, wie in der Abbildung 5.11 illustriert, Unterschätzung der Chlorophyll-a-Konzentrationen.

Der *in situ* an $16$ Stationen gemessene Gesamtschwebstoff umfaßt einen Konzentrationsbereich von $2,71 - 14,3\,\mathrm{g\,m^{-3}}$, welches von beiden Inversionsverfahren, unabhängig vom Betrag der Konzentration (mit Ausnahme der Station R für das 2S-Verfahren) in allen Fällen unterschätzt wird. Etwas bessere Ergebnisse sind durch das 2S-Verfahren mit einem RMSE von $0,466$ und einem MAPE von $54,7\%$ im Vergleich zum 1S-Verfahren mit einem RMSE von $0,486$ und einem MAPE von $59,5\%$ zu erzielen.

Ebenso wird die *in situ* an $13$ Stationen bestimmte Gelbstoffabsorption für den gemessenen Konzentrationsbereich von $0,38 - 0,94\,\mathrm{m^{-1}}$ von beiden Verfahren und an allen Stationen deutlich unterschätzt. Die Verteilung die Fehler ist für beide Verfahren unabhängig von der Konzentration und es zeigt ein unwesentlich besseres Ergebnis für das 1S-Verfahren mit einem RMSE von $0,582$ und einem MAPE von $71\%$ im Vergleich zum 2S-Verfahren mit einem RMSE von $0,658$ bei einem MAPE von $72,6\%$.

### 5.4.2 Vergleich mit MERIS-Level2-Produkten

Streng genommen ist ein Vergleich der hier entwickelten Verfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe mit den entsprechenden MERIS-Level2-Produkten aufgrund diverser in den Daten gesetzter *Flags* nicht möglich. Es soll jedoch ein Vergleich ermöglicht werden, indem die MERIS-Daten, wie in der Tabelle 5.3 aufgelistet, in 3 verschiedene Qualitätsklassen Q1, Q2 und Q3 unterteilt werden. Die Abstufung der Qualitätsklassen erfolgt entsprechend der qualitativen Gruppierung von Level2-*Flags* und ihrer Auswirkung auf die Datenprodukte. Den Qualitätsklassen werden folgende *Flags* mit den Abkürzungen J=Ja und N=Nein zugeordnet:

```
Q1 = CASE2_S:(J), PCD_1_13:(N), HIGH_GLINT:(N), MEDI_GLINT:(N)
Q2 = CASE2_S:(J), PCD_1_13:(N), HIGH_GLINT:(N)
Q3 = CASE2_S:(J)
```

Somit wird für die Klasse Q1 der geringste negative Einfluß auf die Level2-Produkte erwartet, da mit den beiden *Flags* `MEDI-` und `HIGH_GLINT` mittlerer und hoher Glint

ausgeschlossen werden und mit dem *Flag* `PCD_1_13` das Produkt der abgeleiteten Reflektanzen, die zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe verwendet werden, keine negativen Werte enthält. Das *Science Flag* `CASE2_S` kennzeichnet die hier betrachteten Case2-Gewässer durch einen Schwellwerttest der am Oberrand der Atmosphäre bestimmten Reflektanzen bei einer Wellenlänge von 560 nm und steuert so den Ablauf der Atmosphärenkorrektur, da die durch das *Flag* klassifizierten Pixel statt mit dem Case1-Atmosphärenkorrekturverfahren, durch ein iteratives Verfahren speziell für Küstengewässer korrigiert werden. Dieses *Flag* soll für alle der hier gewählten Datenklassen gesetzt sein. In der Datenklasse Q2 wird eine herabgesetzte Produktgüte erwartet, da zwar die atmosphärenkorrigierten Spektren auf negative Werte überprüft werden, nun aber auch mittlerer Glint in Daten enthalten sein kann, dessen Einfluß allerdings in den Auswerteverfahren des MERIS-Level2-Prozessors berücksichtigt wird. Hohe Glintbeiträge sollen aber weiterhin in der Datenklasse Q2 ausgeschlossen sein. Die einzige Bedingung der Datenklasse Q3 ist nur noch Pixel über Case2-Gewässern zuzulassen. Für diese Klasse werden die größten Abweichungen erwartet, da die Spektren fehlerhaft und zusätzlich durch hohe Glintbeiträge beeinflußt sein können, die weder korrigiert noch für eine Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe auswertbar sind. Die Datenklasse Q3 wird lediglich für ein Studium des mit den Klassen Q1, Q2 und Q3 erwartenden Fehleranstiegs aufgenommen.

Darüber hinaus sind die MERIS-Daten in den so gewählten Klassen, wie die Tabelle 5.3 zeigt, von den weiteren *Flags* `ABSOA_CONT`, `ABSOA_DUST`, `PCD_16` und `PCD_17` beeinflußt. Die *Science Flags* `ABSOA_CONT` und `ABSOA_DUST` werden geschaltet, wenn die Atmosphärenkorrektur der ESA absorbierendes Aerosol klassifiziert. In der Regel sollte das Atmosphärenkorrekturverfahren auch für diesen Aerosoltyp verläßliche Spektren ableiten. Allerdings kennzeichnet der sensible Algorithmus auch absorbierendes Aerosol über Gebieten, die nicht durch diesen Typ beeinflußt sind, und liefert folglich falsch atmosphärenkorrigierte Spektren. An einer besseren Feinabstimmung der Aerosolklassifikation wird zur Zeit gearbeitet (*Colagrande und D'Alba*, 2004). Die zusätzlich beachteten *Flags* `PCD_16` und `PCD_17` geben an, ob die Ein- oder Ausgabewerte für den Case2-Algorithmus zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe außerhalb der vorgegebenen Wertebereiche liegen. Da diese Flags mit Ausnahme der Station R für alle Messungen gesetzt sind, dürfte ein Vergleich mit den entsprechenden MERIS-Level2-Produkten streng genommen nicht durchgeführt werden. Da aber der Algorithmus zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe im MERIS-Prozessor ebenfalls durch ein gegenüber fehlerhaften Eingabedaten robustes neuronales Netz realisiert ist, soll dennoch ein Vergleich unternommen werden. Die Station R ist die einzige Station für die ein Vergleich

Tabelle 5.3: Unterteilung der für einen Vergleich mit den MERIS-Level2-Produkten verwendeten Stationen in 3 Qualitätsklassen mit einer Angabe der Anzahl relevanter Level2-*Flags* für die jeweiligen 3x3 Pixel großen Untersuchungsgebiete (s. Text).

| Datum | Station | PCD_1_13 | PCD_16 | PCD_17 | ABSOA_CONT | ABSOA_DUST | CASE2_S | MEDI_GLINT | HIGH_GLINT | Klasse |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 15.07.03 | N | 0 | 9 | 9 | 0 | 9 | 9 | 0 | 0 | Q1 |
| 15.07.03 | O | 0 | 9 | 9 | 0 | 9 | 9 | 0 | 0 | Q1 |
| 06.08.03 | Q | 0 | 3 | 3 | 0 | 9 | 9 | 0 | 0 | Q1 |
| 06.08.03 | R | 0 | 0 | 0 | 0 | 9 | 9 | 0 | 0 | Q1 |
| 06.08.03 | S | 0 | 2 | 2 | 0 | 9 | 9 | 0 | 0 | Q1 |
| 14.08.03 | F | 0 | 5 | 5 | 0 | 0 | 9 | 9 | 0 | Q2 |
| 14.08.03 | G | 0 | 9 | 9 | 0 | 0 | 9 | 9 | 0 | Q2 |
| 14.08.03 | H | 0 | 8 | 8 | 0 | 0 | 9 | 9 | 0 | Q2 |
| 29.07.02 | A | 9 | 9 | 9 | 0 | 0 | 9 | 9 | 9 | Q3 |
| 29.07.02 | B | 9 | 9 | 9 | 6 | 0 | 3 | 9 | 9 | Q3 |
| 05.08.03 | P | 9 | 9 | 9 | 0 | 9 | 9 | 9 | 9 | Q3 |

aufgrund der diskutierten *Flags* zulässig ist. In der Abbildung 5.12 sind die Inversionsergebnisse der hier entwickelten Verfahren, die entsprechenden Mediane der MERIS-Level2-Produkte und die *in situ* Messungen dargestellt. Da das MERIS-Level2-Produkt der Gelbstoffabsorption zusätzlich die Absorption der nicht-chlorophyllhaltigen Partikel beinhaltet, erfolgt die Validierung dieses Produktes gegen die Summe beider Absorptionen. Die Verfahren dieser Arbeit werden dagegen mit der *reinen* Gelbstoffabsorption validiert. Die von der ESA angegebene zu erwartende Genauigkeit der Level2-Produkte beträgt für das Chlorophyll und die Schwebstoffe 30% und für die Gelbstoffabsorption 50% (*Bézy et al.*, 2000). Wie die Abbildung 5.12 zeigt, treten die in der Klasse Q3 erwarteten großen Fehler des MERIS-Level2-Produktes an nur an der Station B auf, ansonsten zeigt sich kein qualitativer Unterschied zu den Klassen Q1 und Q2. Die Tabelle 5.4 zeigt die für jede Datenklasse berechneten, mittleren absoluten prozentualen Fehler der einzelnen Verfahren. Trotz der Vielzahl der zuvor diskutierten kritischen *Flags* zeigen die MERIS-Level2-Produkte der Klassen Q1 und Q2, bis auf den Gelbstoff der Klasse Q2, bessere Ergebnisse, als die Verfahren dieser Arbeit. Auffallend ist die generelle Unterschätzung der Gelbstoffabsorption aller 3 Verfahren. Bei Betrachtung der relativen Fehler der Verfahren an der Station R zeigen die MERIS-Level2-Produkte der Chlorophyll-a-

Konzentration und der Gelbstoffabsorption geringere Fehler als die hier entwickelten Verfahren. Der Gesamtschwebstoff an der Station R konnte jedoch mit den hier entwickelten Verfahren genauer als das entsprechende MERIS-Level2-Produkt bestimmt werden.

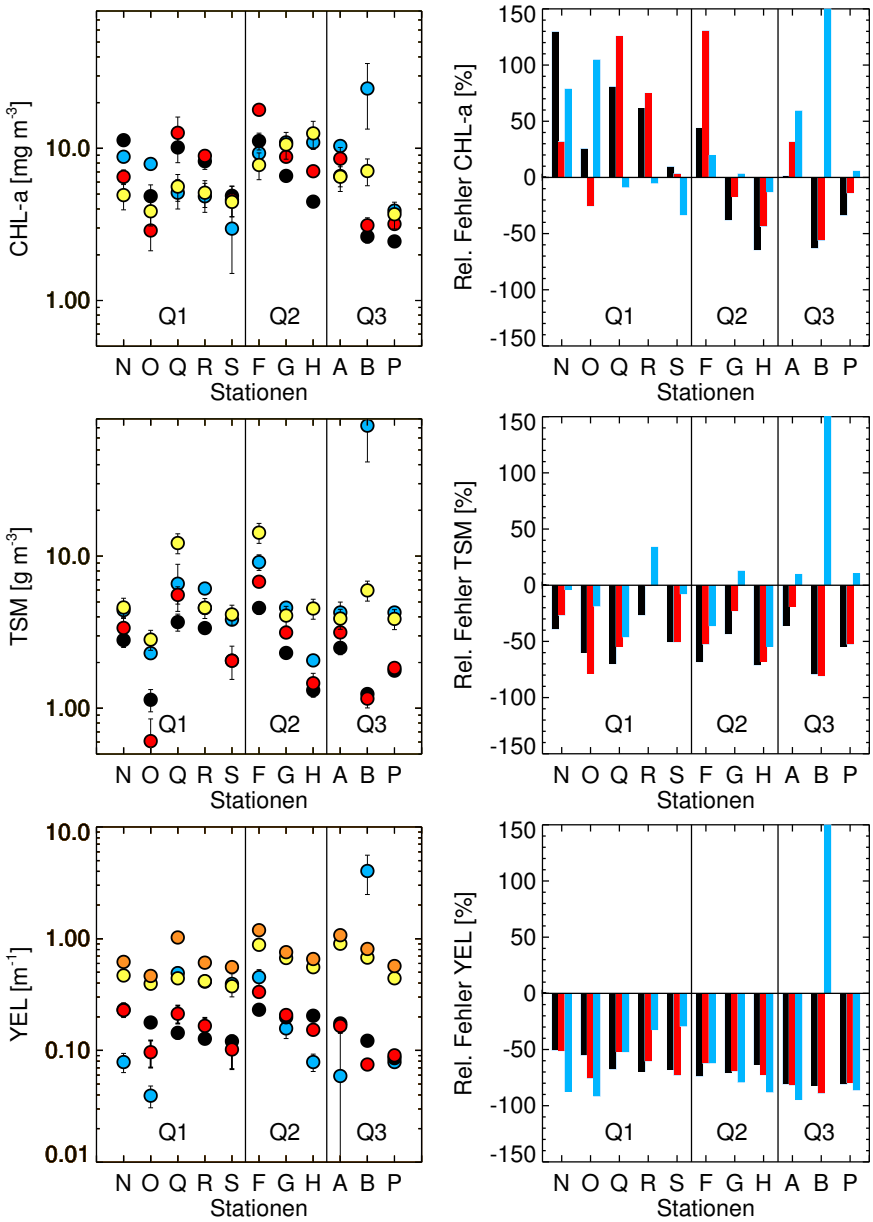


Abbildung 5.12: Vergleich der 1S- und 2S-Verfahren (schwarz, rot) mit den entsprechenden MERIS-Level2-Produkten (blau) und den *in situ* Messungen (gelb) für ausgewählte Stationen in 3 verschiedenen Datenqualitätsklassen Q1, Q2 und Q3, in Abhängigkeit der Level2-*Flags* (s. Text) sowie Darstellung der relativen Genauigkeit der 3 Methoden, bezogen auf die *in situ* Messungen. Zum Vergleich mit dem MERIS-Level2-Produkt sind die *in situ* Messungen des Gelbstoffs, inklusive der Absorption der nicht-chlorophyllhaltigen Partikel, in orange abgebildet.

Tabelle 5.4: Angabe der mittleren absoluten prozentualen Fehler (MAPE) der Verfahren dieser Arbeit und der entsprechenden MERIS-Level2-Produkte im Vergleich zu *in situ* gemessenen Konzentrationen für eine Unterteilung der MERIS-Daten in 3 Qualitätsstufen (s. Text). Zusätzlich sind die absoluten prozentualen Fehler (APE) für die Station R tabelliert.

| | | MAPE [%] | | | APE [%] |
|---|---|---|---|---|---|
| | | Q1 | Q2 | Q3 | Station R |
| 1S-Verfahren | CHL | 61,4 | 48,7 | 32,6 | 61,2 |
| | TSM | 49,1 | 60,7 | 56,5 | 26,5 |
| | YEL | 62,1 | 69,2 | 81,1 | 69,5 |
| 2S-Verfahren | CHL | 52,2 | 63,7 | 33,8 | 74,8 |
| | TSM | 42,0 | 47,6 | 50,6 | 0,3 |
| | YEL | 62,3 | 67,9 | 83,4 | 60,2 |
| MERIS-Level2 | CHL | 46,1 | 11,8 | 104,5 | 5,2 |
| | TSM | 22,0 | 34,8 | 376,8 | 33,8 |
| | YEL+B | 58,5 | 76,4 | 193,1 | 32,3 |

### 5.4.3 Fehlerquellen der Konzentrationsbestimmung

Die bereits genannten Genauigkeitsziele der ESA für ihre Level2-Produkte (CHL: 30%; TSM: 30%; YEL: 50%), verdeutlichen die Größenordnung der zu erwartenden Fehler im Bereich der optisch äußerst komplexen Küstengewässer. Im Vergleich zu den angestrebten Genauigkeitszielen der ESA übersteigen die Fehler der im Rahmen dieser Arbeit erzielten Genauigkeiten zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe die Vorgabe der ESA um etwa 10-20% für das Chlorophyll, 25-30% für den Schwebstoff und etwa 20% für die Gelbstoffabsorption. Nachfolgend sollen einige Fehlerquellen diskutiert werden, die zu Abweichungen zwischen den *in situ* gemessenen Konzentrationen und den Ergebnissen der Inversionsverfahren führen können.

**Verfahrensbedingte Fehlerquellen:**

Als verfahrensbedingte Fehlerquellen sind verbleibende Ungenauigkeiten der Atmosphärenkorrektur, die Wahl des bio-optischen Modells sowie in den Simulationen nicht berücksichtigte physikalische Effekte zu nennen.

Wie die Abbildung 5.6 zeigt, können in den sehr küstennahen und sedimentgetrübten Bereichen der Nordsee, die auch für einen Vergleich mit den MERIS-Level2-Produkten verwendet wurden, größere Fehler in den atmosphärenkorrigierten Spektren auftreten.

Insgesamt ergab die Validierung des expliziten Atmosphärenkorrekturverfahrens einen geringen negativen Bias von $R = -0,0012$, der eine leichte Unterschätzung der Schwebstoffkonzentrationen erklären läßt. Für den Gelbstoff sollte ein negativer Bias jedoch entgegen den erzielten Ergebnissen zu einer Überschätzung der Absorption führen. In wieweit die hier entwickelten Verfahren stabil gegenüber fehlerhaften Eingabespektren bleiben, soll abschließend im letzten Kapitel dieser Arbeit untersucht werden. Das letzte Kapitel untersucht auch die Ableitungsgenauigkeit der Verfahren im Hinblick auf das Mischungsverhältnis der einzelnen Wasserinhaltsstoffe. So wird im allgemeinen die Genauigkeit der Bestimmung von Chlorophyll-a und Gelbstoff im Bereich hoher Schwebstoffkonzentrationen erschwert.

Von entscheidender Bedeutung für die Genauigkeit der Konzentrationsbestimmung ist auch die Wahl des bio-optischen Modells, welches die Zusammenhänge zwischen den für die Simulationen verwendeten optischen Eigenschaften der Inhaltsstoffe und den Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe beschreibt. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete bio-optische Modell basiert zum Teil auf umfangreichen *in situ* Messungen in europäischen Küstengewässern (*Babin*, 2000), aus denen durch Regression die funktionalen Zusammenhänge zwischen den gemessenen Konzentrationen und den optischen Eigenschaften abgeleitet wurden. Die auf diese Weise gefundenen Parameterisierungen stellen jedoch immer nur mittlere Zustandsbeschreibungen dar, so daß ein Vergleich mit einzelnen *in situ* Messungen in Abhängigkeit vom Untersuchungsgebiet und der Jahreszeit zu größeren Abweichungen führen kann. Zur Validierung der Gelbstoffe konnten beispielsweise nur Messungen im Bereich der Nordsee verwendet werden, obgleich die in den Simulationen verwendete Parameterisierung der Gelbstoffabsorption die Gesamtheit der europäischen Küstengewässer beschreibt. Doch gerade die Gruppe der Gelbstoffe ist im Bereich der Küstengewässer je nach Art und Zusammensetzung der über die Flüsse eingetragenen gelösten organischen Substanzen starken regionalen Schwankungen unterworfen.

Darüber hinaus führen in den Verfahren dieser Arbeit nicht berücksichtigte oder nicht maskierte Effekte, wie der Sonnenreflex, die Schaumbedeckung oder die Gelbstofffluoreszenz zu Fehlern in der Konzentrationsbestimmung der Wasserinhaltsstoffe. Die Auswirkung der genannten Effekte wurde bereits im Kapitel 2 disskutiert.

### Fehlerquellen der *in situ* Bestimmung

Fehler in der *in situ* Bestimmung der Konzentrationen können zum einen durch den zeitlichen Versatz von *in situ* Messung und Satellitenaufnahme entstehen. Insbesonde-

re die durch den Gezeitenstrom beeinflußten Bereiche der Nordsee unterliegen kurzfristig großen Veränderungen in der Zusammensetzung der Wassermassen. Zur Minimierung des zeitlichen Versatzes wurden daher nur *in situ* Daten verwendet, die innerhalb einer Zeitdifferenz von $\pm 30\,\mathrm{min}$ zum MERIS-Überflug gemessen wurden. Zum anderen, kann eine zum Zeitpunkt der Beprobung vorliegende stark inhomogene Verteilung der Wasserinhaltsstoffe zu Differenzen in der Konzentrationsbestimmung führen, da die aus Satellitendaten für einen Bildbereich von mehreren Quadratkilometern abgeleitete Konzentration mit einer Probe wenigen Litern verglichen wird (*Doerffer*, 2002).

Aber auch die *in situ* Meßverfahren selbst besitzen nur eine beschränkte Genauigkeit, die für die Messungen der GKSS mit etwa 20% für das Chlorophyll, 15% für den Schwebstoff und etwa 10% für den Gelbstoff angegeben wurde (*Heymann*, 2004).

Darüber hinaus zeigen Ringlaborunteruchungen, wie sie beispielsweise im Rahmen des EU-Projektes *Regional Validation of MERIS Chlorophyll products in North Sea coastal waters* (REVAMP) durchgeführt wurden (*Tilstone et al.*, 2002), daß es zu erheblichen Abweichungen in den Ergebnissen der für alle Labors gleich aufbereiteten Gewässerproben kommt. So betragen die Differenzen der im REVAMP-Projekt durchgeführten Laborvergleiche im Einzelfall bis zu 32% bei der Bestimmung der Chlorophyllkonzentration, bis zu. 77% bei der Bestimmung der Schwebstoffe und bis zu 54% für die Bestimmung der Gelbstoffabsorption. Bemerkenswert ist auch, daß 6 von 9 durch die GKSS untersuchten Schwebstoffproben im Vergleich zu anderen Labors im Mittel um bis zu 47% überschätzt werden. Als Gründe für die Abweichungen lassen sich neben unterschiedlich kalibrierten Meßgeräten, die Alterung der Proben und deren Transportbedingungen aber auch die Vorbehandlung der Filter der gravimetrischen Untersuchungen der Schwebstoffe sowie die Reinheit der Referenzstandards der spektrophotometrischen Untersuchungen der Gelbstoffabsorption anführen.

## 5.5 Räumliche Strukturen der Wasserinhaltsstoffe

Die Abbildung 5.13 illustriert die durch das 2S-Verfahren abgeleiteten Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe für die schon in der Abbildung 5.8 vorgestellte MERIS-Aufnahme vom 15.07.2003 über Bereichen der Nord- und Ostsee.

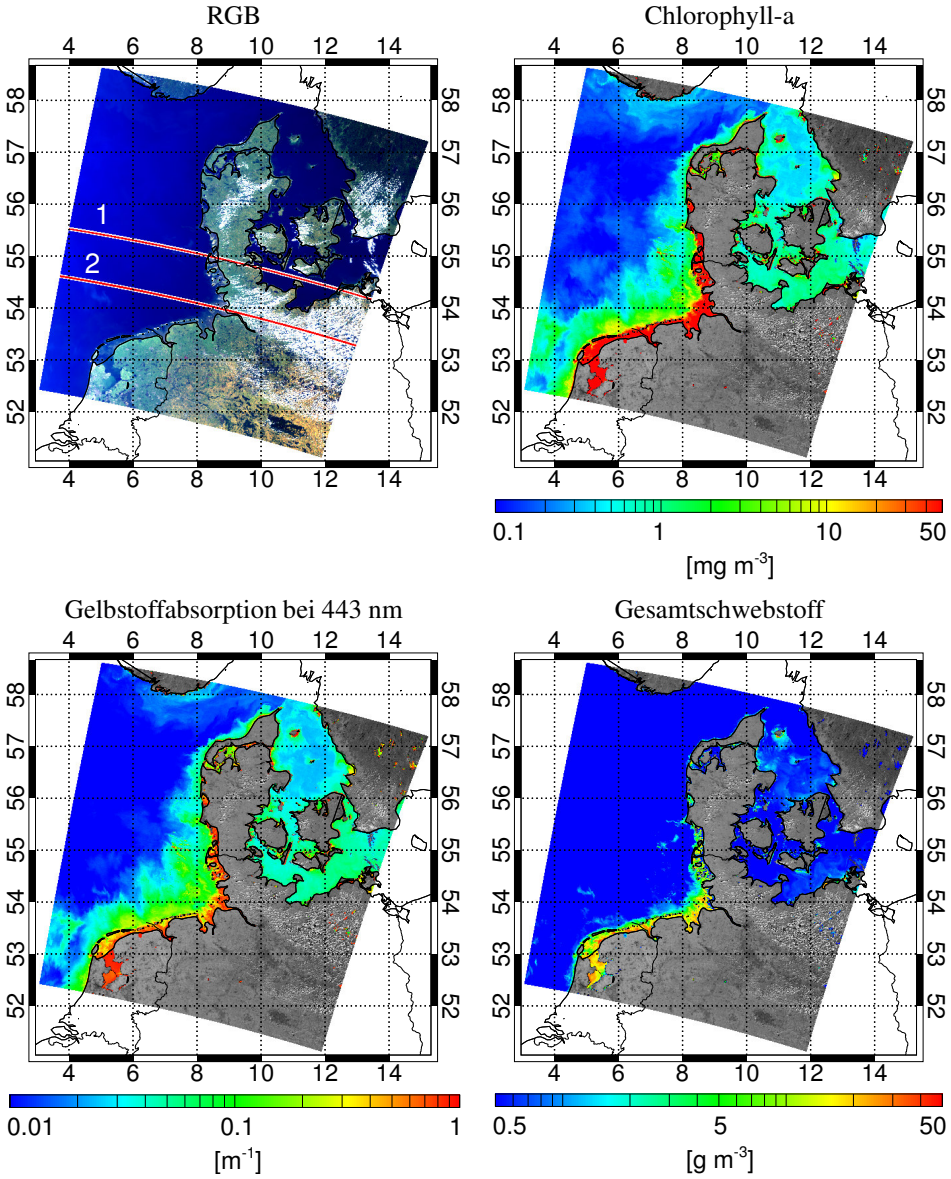


Abbildung 5.13: Beispiele der durch das 2S-Verfahren für Bereiche der Nord- und Ostsee abgeleiteten Konzentrationsverteilung von Chlorophyll-a, Gesamtschwebstoff und Gelbstoffabsorption bei 443 nm für eine MERIS-Aufnahme vom 15.07.2003 (vgl. Abb. 5.8). Die Schnittlinien der RGB-Darstellung beziehen sich auf die Abbildung 5.14.

Erwartungsgemäß befinden sich die Bereiche hoher Schwebstoffkonzentrationen an der Küste der Nordsee, für die auch die abgeleiteten Reflektanzen bei der Wellenlänge von $560\,\mathrm{nm}$ maximale Werte zeigten. Die hohen Konzentrationen der Schwebstoffe, die extrem durch den Gezeitenstrom beeinflußt werden, beschränken sich auf die Küstenzone und fallen mit zunehmender Entfernung zur Küste stark ab. Ebenso besitzt das abgeleitete Chlorophyll-a maximale Werte in der nährstoffreichen Küstenrandzone der Nordsee, wobei das Verfahren zur Bestimmung des Chlorophyllgehaltes für die unmittelbar an der Küste liegenden Bereiche mit hohen Schwebstoffkonzentrationen an seine Grenzen geführt wird. Die Verteilung der Gelbstoffabsorption ähnelt der Verteilung des Chlorophylls und zeigt, wie auch durch Messungen bestätigt, höhere Konzentrationen im Bereich der Ostsee, als in den Bereichen der offenen Nordsee.

Anhand von zwei gewählten Schnittlinien entlang des Beobachterzenits der MERIS-Aufnahme, deren Lage in der RGB-Darstellung der Abbildung 5.13 links oben rot skizziert sind, soll der Verlauf der abgeleiteten Konzentrationen und der aerosoloptischen Tiefe, bei einer Wellenlänge von $550\,\mathrm{nm}$, mit der Abbildung 5.14 veranschaulicht werden. Die Lage der Schnitte wurde so gewählt, daß ein starker Gradient im Bereich der Elbmündung erkennbar wird und küstenferne Bereiche und Teile der Ostsee erfaßt werden. Ebenso werden mit beiden Schnitten Algenblüten erfaßt, deren sprunghafter Konzentrationsverlauf die Grenzen der Verfahren vergegenwärtigt.

Der Schnitt Nr. 1 zeigt dieses Phänomen zwischen den Pixelnummern $200 - 220$, durch das alle 3 Konzentrationen, nicht aber die aerosoloptische Tiefe, beeinflußt werden. Ebenso zeigt die aerosoloptische Tiefe in Küstennähe keinen Werteanstieg, trotz steigender Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe, was eine gute Separierung von Atmosphäre und Wasserkörper zeigt.

Im Schnitt Nr. 2, im Bereich der Pixelnummer $50$, zeigt sich der Einfluß einer weiteren Algenblüte auf die Schwebstoffkonzentrationen, die auch gut in den abgeleiteten Karten der Reflektanzen (Abb. 5.8) wiederzuerkennen ist. Die Konzentrationsverläufe von Chlorophyll und Gelbstoff zeigen in beiden Schnitten eine hohe Korrelation, anders als die Verläufe der Schwebstoffkonzentrationen, die weitaus unabhängiger variieren. Auch für den Schnitt Nr. 2 zeigt der Verlauf der aerosoloptischen Tiefe weitläufig einen, von den Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe unbeeinflußten, Verlauf. Erst in unmittelbarer Nähe zur Küste zeigt die aerosoloptische Tiefe leicht steigende Werte. In der Regel zeigen die Ergebnisse des 1S-Verfahrens, die in der Abbildung 5.14 gepunktet dargestellt sind, höhere Konzentrationen als das 2S-Verfahren.

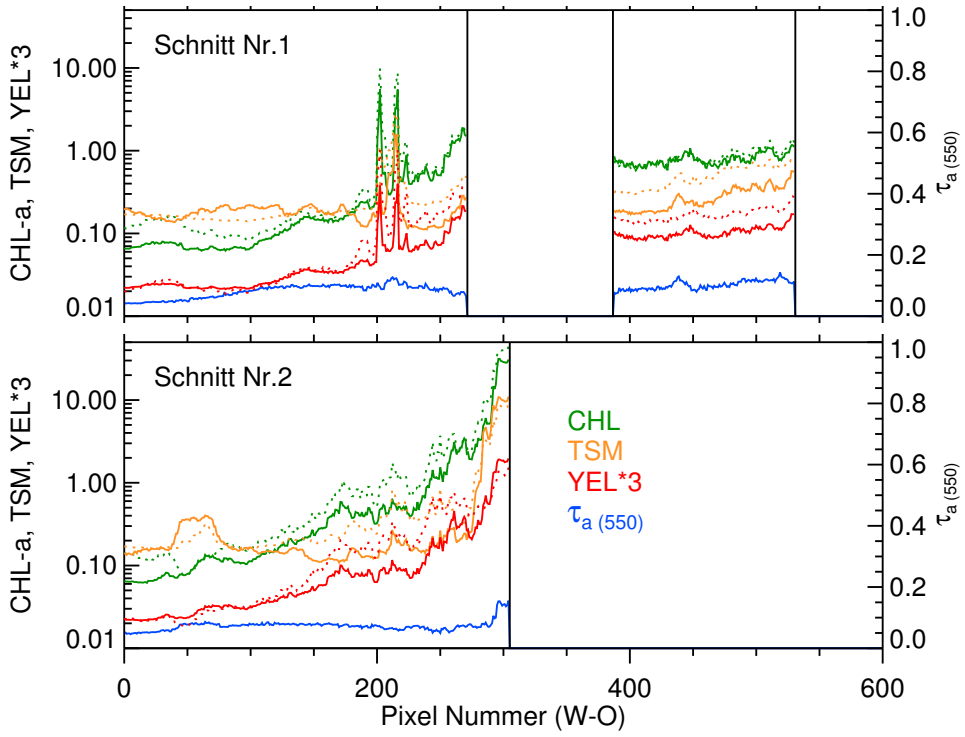


Abbildung 5.14: Mit den 1S- und 2S-Verfahren abgeleitete Konzentrationsverläufe für Chlorophyll-a, Gesamtschwebstoff und Gelbstoff sowie der aerosoloptischen Tiefe entlang zweier Schnittlinien, im Bereich der Nord- und Ostsee. (Verläufe: 1S=gestrichelt, 2S=durchgezogen).