Aus der Professur Hydrologie der Agrar- und Umweltwissenschaftlichen Fakultät

# Detektion und Quantifizierung von Cyanobakterien in der Ostsee mittels Satellitenfernerkundung

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades Doktor der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) an der Agrar- und Umweltwissenschaftlichen Fakultät der Universität Rostock

Rostock, 2012

vorgelegt von: Diplom-Geograph Jan Stefan Riha

Gutachter:

Prof. Dr. Konrad Miegel, Universität Rostock, AUF, Hydrologie

Prof. Dr. Ralf Bill, Universität Rostock, AUF, Geodäsie und Geoinformatik

Prof. Dr. Gunnar Nützmann, Leibniz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei, Forschungsabteilung Ökohydrologie

Prof. Dr. Peter Reinartz, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR), Institut für Methodik der Fernerkundung, Photogrammetrie und Bildanalyse

Datum der Einreichung: 26. Oktober 2012

Datum der Promotionsverteidigung: 05. Juli 2013

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung1				
	1.1	Мо	tivation	1	
	1.2	Zie	l der Arbeit	3	
2	Gr	undla	igen	5	
	2.1	Die	Ostsee	5	
	2.1	.1	Entstehung und Nutzung	5	
2.1.2		.2	Ozeanographie	6	
	2.1	.3	Ökologische Situation	8	
	2.2	Phy	toplankton und Cyanobakterien	11	
	2.2	2.1	Klassifikation des Phytoplanktons	12	
	2.2	2.2	Cyanobakterien	13	
	2.2	2.3	Saisonalität	16	
	2.2	2.4	Wirtschaftliche Bedeutung	19	
	2.2	2.5	Optische Eigenschaften	21	
	2.3	Fer	nerkundung	21	
	2.3	8.1	Überblick	21	
	2.3	8.2	Entwicklung der Satellitenfernerkundung von Gewässern	23	
	2.3	8.3	Vorteile	24	
	2.3	8.4	Einschränkungen	24	
	2.4	Nei	ıronale Netze	25	
	2.5	Star	nd der Forschung zur Phytoplanktonfernerkundung	26	
3	Op	otisch	e Eigenschaften	29	
	3.1	Wa	sserklassifikation	29	
	3.2	Inh	ärente und scheinbare optische Eigenschaften	31	
	3.2	2.1	Das Unterwasser-Lichtfeld	31	
	3.2	2.2	Attenuation, Absorption und Streuung	32	

3.3	Inł	naltsstoffe des Ostseewassers		35
3.4	Wa	asser		36
3.5	Se	esalz		37
3.6	Ge	löste organische Substanzen		38
3.7	Su	spendierte organische und anorganische Partikel		39
3.8	Ph	ytoplankton		39
3	3.8.1	Grünalgen		41
3	3.8.2	Cyanobakterien		42
3	3.8.3	Quantifizierung		43
3	3.8.4	Package-Effekt		45
3	3.8.5	Ermittlung der inhärenten optischen Eigenschaften		46
4 N	Model	lierung und Simulation		58
4.1	Str	ahlungstransport		59
4.2	Oz	zeanmodelle		62
4.3	Ba	lticCyano-Modell		64
4	4.3.1	Grundannahmen		64
4	4.3.2	Modellparameter		65
4.4	Sir	nulation der Reflektanzspektren		66
4	4.4.1	Rahmenwerte		67
4	1.4.2	Ergebnisse		68
5 5	Satellit	tenfernerkundung und Inversion		72
5.1	Ku	urzbeschreibung des Satellitensensors MERIS		72
5.2	Be	obachtungsgeometrie		75
5.3	Vc	prverarbeitung		76
5.4	At	mosphärenkorrektur		77
5.5	Inv	version		78
5	5.5.1	Parameter zur qualitativen und quantitativen	Bestimmung	von
		Cyanobakterien		79

	5.5.2	Künstliche neuronale Netze	80			
	5.5.3	Konstruktion	82			
	5.5.4	Training	83			
	5.5.5	Ergebnisse	85			
	5.5.6	Implementierung	88			
6	Ergebn	isse	89			
7 Validierung						
7	.1 Phy	ytoplanktonsituation in der Ostsee 2010	99			
7.2 Ship-of-opportunity-Projekt – Alg@line						
7	.3 LU	NG-Messnetz	110			
7	.4 Me	esskampagne SYNTAX 2010	113			
8	Bewert	ung und Ausblick	119			
9	Literaturverzeichnis					
10	0 Abkürzungsverzeichnis					
11	Abbildungsverzeichnis					
12	2 Tabellenverzeichnis					
13	3 Danksagung 142					

# 1 Einleitung

## **1.1 Motivation**

Die Meere bedecken mehr als zwei Drittel der Erdoberfläche und erfüllen vielfältige Funktionen im globalen Ökosystem. Sie sind nicht nur Lebensraum für zahlreiche Tier- und Pflanzenarten, sondern auch wichtige Bestandteile des globalen Klimageschehens und dienen den Menschen unter anderem als Nahrungsquelle, Wirtschaftsund Erholungsraum.

Die Einhaltung von Mindestanforderungen an die Wasserqualität ist daher insbesondere in dicht besiedelten Gebieten wie dem Ostseeraum im Interesse der angrenzenden Länder und wird nicht zuletzt seit einigen Jahren durch die EG-Wasserrahmenrichtlinie und die EG-Meeresstrategie Rahmenrichtlinie vorgeschrieben. So verfügt bspw. die Wasserrahmenrichtlinie, dass bis zum Jahr 2015 ein "gute[r] ökologische[r] Zustand[..]" aller Oberflächengewässer des europäischen Raums gesichert werden muss. Um solche Qualitätsstandards zu etablieren und zu erhalten, bedarf es jedoch effektiver Instrumente zu deren Kontrolle.

Die Überwachung großer und schwer zugänglicher Bereiche wie großer Seen oder Meeresflächen wie der Ostsee stellt dabei ein Problem dar. Beprobungen im üblichen Sinne sind nicht nur sowohl lokal als auch temporal stark limitiert, sondern auch mit einem hohen Kosten- und Zeitaufwand verbunden. Normalerweise finden die Probennahmen entweder im Kontext von Forschungskampagnen mit Schiffen oder innerhalb eines permanent unterhaltenen Stationsnetzes statt, bei dem jeder Station in regelmäßigen Abständen Wasserproben entnommen werden, die anschließend im Labor analysiert werden. Für eine holistischeUntersuchung solch großer Ökosysteme und ihrer Dynamik sind derlei punktuelle Untersuchungen daher ungeeignet. Kleinräumigere oder kurzfristige Phänomene sowie Ereignisse an Orten, die keiner ständigen Beprobung unterliegen, bleiben verborgen und fehlen unter Umständen in weitergehenden Untersuchungen oder Modellen.

Satellitenfernerkundung bietet die Möglichkeit, in hoher räumlicher und zeitlicher Auflösung aktuelle Informationen über den Gewässerzustand zu erhalten. Aufgrund der hohen Aufnahmefrequenz ist auch eine kontinuierliche Beobachtung über mehrere Jahre hinweg möglich. Werden in Folgemissionen gleiche oder ähnliche Sensorparameter verwendet, besteht diese Datenkontinuität sogar über die Lebensdauer

einzelner Sensoren und Projekte hinaus. Durch die Archivierung der Daten ist auch eine Reprozessierung mit neuen, verbesserten Algorithmen möglich, um Langzeitbeobachtungen auf Daten der Vergangenheit auszudehnen. Die Fernerkundung kann dabei die In-Situ-Beprobung nicht ablösen. Diese ist auch weiterhin notwendig, um wichtige Informationen zur Entwicklung neuer Algorithmen zu ermitteln und diese zu validieren sowie zu optimieren. Je nach Sensor und Witterungsbedingungen kann mittels Satellitenfernerkundung täglich die Abbildung von Teilen der Ostsee erstellt und innerhalb weniger Tage ein Gesamtbild derselben angefertigt werden. Die Satellitenfernerkundung erlaubt somit auch die kontinuierliche Überwachung anhand von Zeitserien, womit etwaige längerfristige klimatische oder ökologische Veränderungen analysiert und dargestellt werden. Mit computergestützten Verfahren lässt sich die Auswertung von Fernerkundungsdaten zu einem hohen Grad automatisieren, wodurch verschiedene Akteure wie Forscher, Politiker oder lokale Behörden innerhalb kurzer Zeit eine qualitative Aussage in Form von Interpretationskarten erhalten, ohne einschlägiges Fachwissen bezüglich der Interpretation von Satellitendaten zu benötigen. Dadurch können übermäßige Schadstoff- oder Nährstoffeinträge ermittelt und eventuell zurückverfolgt werden. Auf diesem Wege kann zu einer Steigerung der Gewässerqualität beigetragen werden. Unter Einbezug von Strömungsmodellen und Wettervorhersagen können auch Prognosen zur weiteren Entwicklung akuter Ereignisse wie Algenblüten getroffen und gegebenenfalls aktuelle Warnungen an die Fischerei- oder Tourismusindustrie herausgegeben werden.

Automatisierte Satellitendatenverarbeitung ist demnach eine hervorragende Möglichkeit, routinemäßig und effektiv den Gewässerzustand eines Gesamtökosystems von der Größe der Ostsee zu überwachen. Eine Verbesserung und Erweiterung der ableitbaren Ökosystemparameter ist daher von großer Bedeutung. In diesem Kontext muss die Entwicklung von Algorithmen mit der kontinuierlichen Weiterentwicklung von Satellitensensoren Schritt halten. Mit zunehmendem Informationsgehalt fernerkundlich gewonnener Daten steigt auch die Anzahl der ableitbaren Parameter und es kann ein vollständigeres Bild der Untersuchungsregionen ermittelt werden. Seit den ersten Satellitensensoren verbesserte sich die räumliche Auflösung, ebenso erhöhte sich die Anzahl der vorhandenen Spektralkanäle. Außerdem erlauben immer höhere Rechen- und Datenkapazitäten eine schnelle Auswertung umfassender Daten innerhalb kurzer Zeit. So sind auch auf der Anwenderseite häufig bereits umfangreiche Geoinformationssysteme zu finden, an deren Schnittstellen weitere Datenquellen zur Verbesserung des Gesamtbildes eines Ökosystems beitragen können (Bill 2010). Die Erdbeobachtung ist daher ein dynamisches, sich ständig weiterentwickelndes Thema, innerhalb dessen die Entwicklung der Auswertealgorithmen zwar nur eine Teilaufgabe darstellt, die jedoch von hoher Wichtigkeit ist, da sie die Möglichkeiten der technischen Geräte und die wissenschaftlichen Aufgabenstellungen effektiv miteinander verknüpft.

# **1.2 Ziel der Arbeit**

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines Algorithmus zur Ableitung bio-optischer Parameter in Bezug auf oberflächennahes Vorkommen von Cyanobakterien in der Ostsee, wo sie sowohl ökologisch als auch ökonomisch eine wichtige Rolle spielen. Als Quelle für die Entwicklung dienen Datensätze, die von spektral hochauflösenden Satellitensensoren gemessen wurden. Der Algorithmus soll dabei die Ansprüche an ein ,nahes Echtzeitsystem' (engl. *near real-time system – NRT*) erfüllen und auf regelmäßig erhobene Satellitendaten anwendbar sein sowie eine schnelle Auswertung ermöglichen. Er soll daher auf einem Sensor mit großer räumlicher Abdeckung und hoher zeitlicher Frequenz der Aufnahme basieren, was die Verwendung von Sensoren mit mittlerer spektraler und räumlicher Auflösung bedingt.

Im Kontext eines weitgehend holistischen Ansatzes soll dabei nicht nur ein einzelner Parameter beobachtet werden, sondern die bisher ermittelten Parameter für Chlorophyll, Schwebstoff und Gelbstoff, welche als weitere bestimmende Größen für die Gewässeroptik verantwortlich sind, in die Untersuchung einbezogen werden. Im Zuge dessen sollen alle vier genannten Komponenten Eingang in die Modellierung finden und in den Ergebnissen berücksichtigt werden.

Weiterhin soll der Algorithmus leicht anwendbar sein, weshalb er für eine frei verfügbare Auswerteumgebung implementiert wird. Ein solches Verfahren zur Satellitenfernerkundung von Cyanobakterien ermöglicht ein kontinuierliches Monitoring und trägt somit zu einem besseren Verständnis des Ökosystems der Ostsee sowie der Überwachung des Gewässer- und Umweltzustandes bei. Die auf diese Weise gewonnenen Daten sollen helfen, die Gewässerqualität zu steigern und deren Einhaltung zu überwachen sowie den gesetzlichen Vorgaben in Bezug auf die Wasserqualität nachzukommen. Zusätzlich liefern Fernerkundungsergebnisse weitere Daten zur Verbesserung biochemischer Gewässermodelle und können zusammen mit Strömungsmodellen eine Vorhersage oberflächennaher Blüteereignisse an bestimmten Orten ermöglichen oder zur Verbesserung solcher Modelle beitragen.

Die Untersuchungen finden im Rahmen dieser Arbeit am *Institut für Methodik der Fernerkundung, Abteilung Gewässerfernerkundung* des *Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt* und im Rahmen des *Helmholtz EOS.Netzwerk-*Doktorandenprogramms statt. Der entwickelte Algorithmus wird im Rahmen der Arbeit als Plug-In für das Computerprogramm BEAM VISAT (Brockmann Consult) programmiert und lässt sich somit auf beliebige Daten des MERIS-Sensors anwenden. Da das Programm BEAM VISAT frei verfügbar ist, können andere Nutzer prinzipiell ohne Zusatzkosten eigene MERIS-Datensätze interpretieren.

# 2 Grundlagen

## 2.1 Die Ostsee

#### 2.1.1 Entstehung und Nutzung

Die Ostsee ist ein Binnenmeer im nördlichen Europa, welches in der Weichseleiszeit als Schmelzwasserbecken der Gletscher entstanden ist. Zusammen mit dem Kattegat beläuft sich die Gesamtfläche der Ostsee auf 415.000 km<sup>2</sup> bei einem Wasservolumen von 21.700 km<sup>3</sup> und einer mittleren Tiefe von 52 m (Rheinheimer 1995, S. 1). Die frühe (geologische) Geschichte der Ostsee war bestimmt von Meeresspiegeländerungen und der noch bis heute andauernden Hebung, einer isostatischen Ausgleichsbewegung aufgrund der geschmolzenen Eislast (Harff et al. 2011, S. 6). Dabei kam es, abhängig von der Verbindung zur Nordsee und der Zuflussmenge, immer wieder zu Frischwasser- und Seewasserphasen in der Ostsee (Leppäranta und Myrberg 2009; Köster 1995, S. 12–17).

Seit der ersten Besiedlung des Naturraumes durch Menschen wurde auch die Ostsee vielfältig genutzt. Seit jeher verlaufen wichtige Verkehrs- und Handelsrouten vor allem durch die südlichen Gewässer, werden Tiere zur Nahrungsgewinnung gefischt und leben Menschen entlang ihrer Küste, die sowohl direkt als auch indirekt über die Flüsse Schadstoffe und Nährstoffe in die Ostsee leiten. Sand und Kies werden abgebaut und die Hinterlassenschaften diverser Kriege belasten noch heute den Meeresgrund. Einen weiteren Aspekt bildet in der jüngeren Geschichte der Tourismus, der sowohl Auswirkungen auf den Küstenbereich als auch – durch Kreuzfahrten – auf die offenen Gewässer hat. Aber auch in den Einzugsbereichen prägt der menschliche Einfluss das Ökosystem der Ostsee. Abholzung, Landwirtschaft und Einleitung von Schadstoffen, Nährstoffen und Abwässern in die Vorfluter wären hier zu nennen. Für die Zukunft ist darüber hinaus mit einem weiteren Ausbau von Windparks zur Energiegewinnung zu rechnen, der Verkehr auf der Ostsee wird weiter zunehmen und der Bedarf an Transportleitungen für Rohstoffe wie Erdgas befördert auch in diesem Bereich die Ausbaupläne.



Abbildung 1 – Karte ausgewählter Belastungen der Ostsee (Quelle: HELCOM)

#### 2.1.2 Ozeanographie

Trotz der Verbindung zur Nordsee und damit zum Atlantik, dessen Nebenmeer die Ostsee ist, wird die Ostsee durch den geringen Frischwasseraustausch als das größte Brackwasserreservoir der Erde angesehen. Das schwerere Salzwasser aus der Nordsee muss über die Schwellen der Beltsee gelangen, an deren Oberfläche die Süßwasserströme geringerer Dichte Richtung Nordsee fließen. Durch die aus der eiszeitlichen Entstehung resultierende Topographie des Ostseebodens mit Schwellen und Becken erreicht nur ein geringer Teil des Salzwassers die nördlichen und nordöstlichen Gebiete. Zudem ist der fluviale Süßwassereinfluss in der nördlichen Ostsee sehr hoch, da das Einzugsgebiet der Ostsee "viermal größer als die Fläche der Ostsee" ist (Fennel 1995, S. 56). Dadurch entsteht insgesamt ein abnehmender horizontaler Salinitätsgradient von Südwesten Richtung Nordosten. Der Salzgehalt des Oberflächenwassers der Ostsee liegt im Bereich Dänemarks um 25 bis 15 ‰, in der zentralen Ostsee bei 8 bis 6 ‰ und in der Bottnischen Bucht um 1 ‰, was auch die Besonderheit dieses Lebensraums mit Süß- und Salzwasserorganismen ausmacht. Im Vergleich dazu liegt der Salzgehalt in Ozeanen durchschnittlich bei 35 ‰ (vgl. Matthäus 1995, S. 77). Auch in der zentralen Ostsee ist ein höherer Salzgehalt nur in größeren Tiefen festzustellen. In einer Wassertiefe zwischen 40 m und 70 m befindet sich eine permanente Halokline, zusätzlich bildet sich im Frühjahr und Sommer eine saisonale

Halokline zwischen 15 m und 20 m (Kratzer et al. 2011, S. 408). Diese Tiefenschichtung ist auch der Grund dafür, dass die Salinität abhängig von der Witterung ist – so ist der oberflächennahe Salzgehalt nach Sturmereignissen und der einhergehenden Durchmischung höher als bei stabiler Schichtung in ruhiger See. Einen höheren Salzgehalt verursachen zusätzliche Salzwassereinbrüche, bedingt durch längere Süd-West-Winde, welche die Wassermassen in die nördliche Ostsee drücken und somit einen weiteren Zufluss in der Beltsee erlauben. Längere Perioden erhöhten Niederschlags und damit auch erhöhten Frischwassereintrags durch Flüsse führen dagegen zu einem Absinken des Salzgehalts.

Mit dem Salinitätsgradienten einhergehend ist auch die Verbreitung von Huminstoffen zu beschreiben, welche aus den fluvialen Einträgen stammen. Man kann daher eine Zunahme der Huminstoffe von Südwesten bis zur Bottnischen Bucht, invers zum Salzgehalt, feststellen. Eine weitere, wichtige Quelle für Huminstoffe in der Ostsee ist der Abbau von Biomasse wie großer Phytoplanktonmassen.

Neben der bereits erwähnten Salinitätsschichtung kommt es in der Ostsee saisonal auch zu einer deutlichen Temperaturschichtung. Besonders im Hochsommer erreicht die Oberflächentemperatur oft Werte über 20 °C. Auch der Sauerstoffgehalt der Ostsee ist stark an den Austausch mit Salzwasser aus der Nordsee gebunden, was zur Folge hat, dass bei geringem Austausch der Sauerstoffgehalt der Ostsee, insbesondere in den schweren, tiefen Wasserschichten, unter der Halo- und Thermokline weiter abnimmt.



Abbildung 2 – Schematischer Wasserhaushalt der Ostsee (nach Fennel 1995, S. 58)

### 2.1.3 Ökologische Situation

Durch den hohen Druck, verursacht durch die Besiedlung der umliegenden Länder und großen Einzugsflächen, in denen ca. 85 Millionen Menschen leben, zeigen sich in der Ostsee verschiedene problematische Umweltbedingungen (Lepparänta 2009, S. 16). Neben der Zerstörung von natürlichen Lebensräumen und der Gefahr von Umweltkatastrophen, bspw. durch Pipeline- oder Schiffsunglücke, ist der anthropogene Schadstoff- und Nährstoffeintrag in die Ostsee ein wesentliches Problem. Besonders die Eutrophierung (vgl. Bonsdorff et al. 2002), gefördert durch die Düngung in der Landwirtschaft und die Einleitung von menschlichen Abwässern, war und ist ein Hauptproblem des Ostseeraums. Seit dem 19. Jahrhundert wandelte sich die Ostsee von einem oligotrophen in ein eutrophes Gewässer (HELCOM 2006, S. 1). Zu diesem Eutrophierungsprozess leisten Cyanobakterien aufgrund ihrer Fähigkeit zur Stickstofffixierung einen wesentlichen Beitrag. In diesem Zusammenhang vermutet Gerlach (1995, S. 278), die Menge an Stickstoffeinträgen durch Cyanobakterien sei noch höher als die Ammonium- und Nitrateinträge vom Land.

Die ohnehin aufgrund der Absorption durch Gelbstoff geringe Lichtverfügbarkeit in größeren Wassertiefen der Ostsee wird verschärft durch erhöhtes Phytoplanktonwachstum in oberflächennahen Wasserschichten, welche die tieferen Schichten abschatten. Verstärktes Phytoplanktonwachstum führt wiederum zu einer höheren Menge abgestorbenen organischen Materials, welches nach der Blüte an der Oberfläche zu großen Teilen zum Grund herabsinkt. Der Abbau dieser Partikel führt in den tiefen Schichten zu einem erhöhten Sauerstoffverbrauch, welcher in Anbetracht der Topographie des Ostseebodens und des resultierenden geringen Wasseraustauschs der schweren, salzhaltigen Tiefengewässer, bei stagnierenden Zuständen nicht ausgeglichen werden kann. Infolge dessen kann es zur Formierung sauerstofffreier, grundnaher Gewässerbereiche kommen, in denen sich durch den anaeroben Abbau Methan, Ammoniak und Schwefelwasserstoff bilden, und somit ein lebensfeindliches Milieu entsteht (Nehrig 1995, S. 94; Gerdes 2004, S. 8). Bereits ein Drittel des Ostseebodens ist von diesen anoxischen Zuständen zumindest temporär betroffen, wie in der Karte der Helsinki Kommission in Abbildung 3 ersichtlich ist. (Pawlak et al. 2009, S 9)



Abbildung 3 – Karte der anoxischen Gebiete in der Ostsee während der Jahre 2001–2006 (Pawlak et al. 2009, S. 9)

Kabel et al. (2012) untersuchen anhand von Sedimentbohrkernen die Ablagerungen der letzten 1000 Jahre und einen Zusammenhang zwischen Klimawandel und der Zunahme anoxischer Gebiete in der Ostsee. Das Überschreiten eines Temperaturschwellenwerts von 16 °C führt ihren Untersuchungen zufolge zu einem erhöhten Cyanobakterienwachstum. Zudem befördere der Abbau zusätzlicher Biomasse am Grund folglich die Ausbreitung der sauerstoffarmen Gebiete. Der Zusammenhang zwischen verstärktem Cyanobakterienwachstum und dem Schwellenwert von 16 °C Wasseroberflächentemperatur (SST – Sea Surface Temperature) ist in Abbildung 4 dargestellt.



Abbildung 4 – Zusammenhang zwischen der Monatsmitteltemperatur der Wasseroberfläche (SST) und den Cyanobakterienblüten – Die Pfeile markieren Jahre ohne Beobachtung von Cyanobakterienblüten, die grüne Linie entspricht dem 16°C-Schwellenwert. Aus Kabel et al. (2012)

Aufgrund des langsamen Wasseraustauschs ist die Ostsee auch in Bezug auf Schadstoff- und Nährstoffeinträge ein empfindliches Gewässer. Die 1992 von allen Anrainerstaaten als Nachfolger der Helsinki-Konvention von 1974 gegründete Helsinki-Kommission (HELCOM) setzt sich für den Erhalt und die Verbesserung des Ökosystems Ostsee sowie deren Überwachung ein. Seit Einführung der EU-Wasserrahmenrichtlinie ist vorgeschrieben, dass jedes Mitgliedsland die Qualität der natürlichen Wasserkörper regelmäßig überprüfen und auf einen besseren Zustand heben soll. Die Helsinki-Kommission verfolgt dabei einen holistischen Ansatz, der von wissenschaftlichen Untersuchungen und Empfehlungen bis zu politischen Beratungen und Handlungsanweisungen reicht. In den letzten zwei bis drei Jahrzehnten begannen die getroffenen Maßnahmen zu greifen und der Nährstoffeintrag in die Ostsee nahm zu weiten Teilen, die Finnische Bucht ausgenommen, ab (Pawlak et al. 2009).

Ein verbreitetes Phänomen in der Ostsee ist das starke Phytoplanktonwachstum, welches besonders durch den anthropogenen Eintrag von Nährstoffen wie Stickstoff und Phosphat aus Düngung und Abwässern zugenommen hat. Neben den bereits seit längerer Zeit untersuchten Grünalgen, welche vornehmlich während der Frühjahrsblüte auftreten, rückten in jüngerer Vergangenheit auch vermehrt die als Blaualgen bezeichneten Cyanobakterien in den Fokus der Forschung.

Eine Besonderheit der Ostsee ist der hohe Gehalt gelöster organischer Substanz, häufig als Gelbstoff, mariner Humus oder, in der englischen Literatur, CDOM (Coloured Dissolved Organic Matter) bezeichnet. Unter dieser Bezeichnung werden verschiedene gelöste organische Substanzen zusammengefasst, vorwiegend Humin- und Fulvinstoffe, welche zu den besonderen optischen Eigenschaften des Ostseewassers beitragen. Die hohe Absorption im niedrigen, blau-grünen Wellenlängenbereich führt zusammen mit der Wasserabsorption im hohen Wellenlängenbereich zur typischen grünen Erscheinung des Ostseewassers. Wichtigste Quellen der gelösten organischen Substanzen sind das Flusswasser sowie Abbaustoffe des Phytoplanktons (Erhardt 1995, S. 109).

Zum einen absorbieren diese Stoffe das einfallende Licht in diesem Wellenlängenbereich, was sich auf die Artenzusammensetzung des Phytoplanktons auswirkt. So finden sich in der Ostsee vor allem Cyanobakterienarten, welche Licht mithilfe des Pigments Phycocyanin im Bereich von 615–640 nm absorbieren, wohingegen Arten mit überwiegendem Phycoerythrinanteil und starker Absorption im Bereich von 490–575 nm benachteiligt sind. Zum anderen führt die hohe Absorption im niedrigen, blau-grünen Bereich zu einer Maskierung der Fernerkundungsergebnisse in diesen Wellenlängenbereichen, wodurch optische Merkmale dort kaum nachgewiesen werden können.

Einen sehr großen Einfluss auf Flora und Fauna der Ostsee hat der Salzgehalt. Die geringe Salinität in der mittleren Ostsee stellt sowohl für viele Marine- als auch Süßwasserorganismen eine Grenze dar. So findet man in den Süßwasserbereichen der nördlichen Ostsee und der östlichen Finnischen Bucht sowie in Bereichen starken Zuflusses überwiegend Süßwasserorganismen, während Salzwasserarten über die Nordsee eingewandert sind und in der Ostsee ebenfalls an den Rand ihrer Verbreitung stoßen, weshalb sie empfindlicher auf anthropogene Einflüsse reagieren (vgl. Rheinheimer 1995, S. 113).

# 2.2 Phytoplankton und Cyanobakterien

Der Begriff Phytoplankton bezeichnet eine Reihe taxonomisch unterschiedlicher, meist einzelliger, photosynthetischer, aquatischer Organismen, welche im Wesentlichen durch die Strömung im Wasser bewegt werden. Falkowski et al. (2003) beschreiben den Umfang dieser Organismengruppe mit ca. 20.000 verschiedenen Arten in mindestens acht taxonomischen Einheiten bzw. Phyla und im Vergleich zu höheren Pflanzen artenarm, jedoch phylogenetisch von großer Diversität. Aufgrund der klimatischen Bedingungen und des Brackwassermilieus findet man in der Ostsee nur einen kleinen Teil der bekannten marinen Phytoplanktonarten. Von diesen vorkommenden Arten spielen, laut Lenz (1995 S. 139), nur 50–60 eine dominante Rolle in der Phytoplanktongemeinschaft. Vertreter der marinen Spezies sind Diatomeen und Dinoflagellaten, während die Süßwasserartengesellschaft von Grün- und Blaualgen geprägt ist.

Das Phytoplankton kommt in der euphotischen Zone von Gewässern vor und nimmt als Primärproduzent eine besonders wichtige Stellung ein, da es die Grundlage der Nahrungsketten und -netze bildet. Außerdem erfüllt es aufgrund seiner Fähigkeit, atmosphärischen Kohlendioxid in organische Kohlenstoffverbindungen und Sauerstoff umzuwandeln, eine wichtige Funktion für die (chemische) Atmosphärenzusammensetzung.. Die Ozeane sind durch diese Umwandlung die größte Senke atmosphärischen Kohlendioxids. Gleichzeitig wird der Hauptteil des atmosphärischen Sauerstoffs von Cyanobakterien und Algen produziert, was die gravierende Rolle des Phytoplanktons für den Treibhauseffekt verdeutlicht.



Abbildung 5 – Vereinfachte Darstellung der Nahrungskette in Gewässern

# 2.2.1 Klassifikation des Phytoplanktons

Unterteilungen von Plankton sind nach mehreren Systemen möglich, darunter die Unterscheidung nach Stoffwechsel in Zooplankton und Phytoplankton oder nach Zellgröße, durch Sieburth et al. (1978), in Piko-, Nano-, Mikro- und Megaplankton. Auch eine Unterscheidung nach der vertikalen Schichtung ist möglich, wobei in der vorliegenden Untersuchung aufgrund der Einschränkung durch die optische Fernerkundung auf die oberflächennahen Wasserschichten das epilagische Plankton im Vordergrund steht (Falkowski et al. 2003). Auch eine Klassifikation des Phytoplanktons in funktionelle Gruppen wurde vorgenommen, zunächst von Le Quéré et al. (2005). In Bezug auf die Fernerkundung weiterer Phytoplanktonarten nennen Nair et al. (2008) fünf wesentliche Phytoplanktongruppen mit folgenden Eigenschaften, wobei sich manche Arten nicht eindeutig einordnen lassen wie bspw. die Coccolithophore Emiliana Huxleyi, welche sowohl Kalkbildner als auch Dimethylsulfid (DMS)-Produzent ist (Ebert 2009, S. 17).

	Picoauto-	Stickstoff-	Vallahildnan	Kieselsäure-	DMS Produ-
	troph	fixierer		bildner	zenten
Zellgröße (µm)	0,7-2,0	Variabel	5-10	20-200	5
Lichtbedarf	hoch	hoch	niedrig	niedrig	hoch-niedrig
Nährstoffbedarf		N2 Gas	Kalzium	Kieselsäure	
Eisenbedarf	niedrig	hoch	hoch	hoch	hoch
Bio-optische Eigenschaften	hohe Absorp- tion	hohe Absorp- tion im UV	hohe Rück- streuung	geringe, fla- che Absorp- tion	?
Fernerkundung	ja	Ja	Ja	ja	nein

Tabelle 1 – Eigenschaften der funktionalen Phytoplanktongruppen nach Nair et al. (2008, S. 3367)

Generell ist eine Unterscheidung einzelner Arten auf Basis der fernerkundlich messbaren Informationen derzeit nicht möglich und aufgrund der vielen verschiedenen Arten auch nicht sinnvoll. Eine generelle Einteilung in Gruppen soll dabei helfen, neben der allgemeinen Beobachtung von Chlorophyll a als Näherungswert für die Biomasse des Phytoplanktons, weitere Unterscheidungen zu ermöglichen. Verschiedene Meeresgebiete weisen jeweils charakteristische Planktonkompositionen auf, was durch die spezifischen Umweltanforderungen des Planktons verursacht wird. So findet sich bspw. in der Ostsee, für welche der in dieser Arbeit entwickelte Algorithmus gelten soll, eine Artenzusammensetzung, die an die herrschenden Brackwasserbedingungen sowie die Licht- und Nährstoffverfügbarkeit angepasst ist. Aufgrund ihrer Bedeutung, insbesondere für die Sommerblüte der Ostsee, und ihrer optischen Merkmale bieten sich die stickstofffixierenden Cyanobakterien besonders für die fernerkundliche Beobachtung und Überwachung neben den bisherigen Standardparametern Chlorophyll a, Schwebstoff und Gelbstoff an.

#### 2.2.2 Cyanobakterien

Cyanobakterien sind als Bestandteil des Phytoplanktons eine Gruppe aquatischer, photosynthetisch aktiver Bakterien. Häufig werden sie als Blaualgen (engl. *bluegreen-algae*) bezeichnet, was jedoch aufgrund des Fehlens eines abgegrenzten Zellkerns nicht korrekt ist. Das Determinans Blau- rekurriert dabei auf die durch die Pigmentkonfiguration verursachte farbliche Erscheinung. Ähnlichkeiten zu anderem Phytoplankton in Zellbestandteilen und -aufbau sowie die Fähigkeit zur Photosynthese führen zur Bezeichnung als Algen (Stanier et al. 1971). Sie kommen natürlicherweise weltweit in Süßwasser, Salzwasser oder Brackwasser vor und sind meist gut angepasst an das Leben in nährstoffreichen Gewässern, wo sie häufig großflächige und dichte Massenakkumulationen, sogenannte Blüten, bilden. Die in der Ostsee vorkommenden Cyanobakterienarten reichen von Vertretern der kleinen Arten des Picoplankton wie Synechococcus (1 µm) bis zu Mesoplankton wie den Zellkolonien der Sommerblüten aus Nodularia spumigena und Aphanizomenon flos-aquae. Die beiden letztgenannten werden Millimeter bis Zentimeter groß und sind, wie in Abbildung 6, zum Teil mit dem bloßen Auge zu erkennen.



Abbildung 6 - Cyanobakterienkolonien im Mikroskop (links) und an der Wasseroberfläche (rechts)

Cyanobakterien spielen in der biogeochemischen Entwicklung der Erde eine sehr wichtige Rolle, da sie die ersten Organismen waren, welche die Fähigkeit besaßen, durch Umwandlung von Lichtenergie im visuellen Bereich und der Reduktion von Kohlendioxid zu organischem Kohlenstoff Sauerstoff zu produzieren. Sie sind die einzigen prokariotischen Organismen, die im Ozean Photosynthese betreiben. Laut Endosymbiontentheorie sind unter anderem photosynthetisch aktive Prokaryoten bei der Entstehung von Eukaryoten mit anderen Zellvorläufern eine symbiotische Lebensgemeinschaft eingegangen und haben sich später zu Zellorganellen entwickelt. Somit sind photosynthetische Eukaryoten wie Cyanobakterien die Vorläufer für die Chloroplasten in den Zellen heutiger höherer Pflanzen. Durch ihre Fähigkeit zur Photosynthese und damit zur Sauerstoffproduktion haben sie entscheidend zu der sauerstoffreichen Atmosphäre beigetragen, welche die Entwicklung des heutigen Lebens ermöglichte. Auch für den Kohlenstoff- und den Stickstoffkreislauf im Ozean sind die vor 2,8 Milliarden Jahren entstandenen Cyanobakterien von grundlegender Bedeutung (Falkowski et al. 2003).

Neben dem Pigment Chlorophyll a, welches in den Chloroplasten der Landpflanzen und der Grünalgen für die Lichtabsorption verantwortlich ist, ermöglichen sogenannte akzessorische Pigmente, die Phycobiline, den Cyanobakterien ihr Habitat in die Schwachlichtbereiche der Gewässer auszudehnen. Diese Pigmente haben ihre Absorptionsmaxima im grünen Bereich des Lichtspektrums, in dem keine Absorption durch Chlorophyll stattfindet. Dieser häufig als Grünlücke bezeichnete Spektralbereich liegt zwischen den Absorptionsmaxima von Chlorophyll a im blauen Bereich (400–480 nm) und im roten Bereich (630–700 nm). Da im kurzwelligen Bereich Absorption durch Gelbstoff und im langwelligen Bereich Absorption durch Wassermoleküle dominiert, ist insbesondere in zunehmender Wassertiefe vor allem im mittleren optischen Wellenlängenbereich Licht verfügbar, das folglich die Cyanobakterien in ihrer Energiegewinnung bevorteilt.

Zusätzlich zu der Möglichkeit, schwierige Lichtbedingungen besser auszunutzen, besitzen einige Cyanobakterienarten die Fähigkeit, atmosphärischen Stickstoff zu fixieren. Ein vereinfacht dargestellter Zyklus einer von Cyanobakterien dominierten Blüte beginnt meist mit dem Wachstum einzelner Zellen in tieferen Gewässerschichten bei einer Verfügbarkeit von überwiegend blau-grünem Licht. Hier sind die Picocyanobakterien mit dem akzessorischen Pigment Phycoerythrin im Vorteil, jedoch wird Licht in diesem Wellenlängenbereich wiederum bei höheren Gelbstoffkonzentrationen stark absorbiert. Wenn die Nährstoffe in dieser Tiefenschicht aufgebraucht sind, regulieren die Zellen durch Bildung oder Abbau von Gasvakuolen ihre Lage in der Wassersäule und können so Nährstoffe in anderen Tiefen erreichen.

Wie bereits erwähnt, kann eine Unterscheidung einzelner Arten für die Anwendung der Fernerkundung nicht vorgenommen werden. Für die Entwicklung des Algorithmus wurde daher eine Konzentration auf die am weitesten verbreiteten und typischsten Arten vorgenommen.

Insbesondere die in der blütenbildenden, fadenartigen Spezies Nodularia spumigena, Anabaena spp. und Aphanizomenon spp. besitzen darüber hinaus die Fähigkeit, Cyanotoxine zu produzieren (Sivonen 1996, 1999). Diese Gifte wirken entweder durch Aufnahme mit der Nahrung oder durch Hautkontakt und können in Form von Hepatoxinen zu Hautreizungen, Asthmaanfällen oder Leberschäden führen, oder in Form von Neurotoxinen akute Lähmungserscheinungen verursachen (Eis et al. 2010, Carmichael, 1994, Hitzfeld et al. 2000). Eine größere Gefahr stellen diese Toxine jedoch für Fische, Muscheln und Crustaceen dar, über welche die Giftstoffe auch in die Nahrungskette des Menschen gelangen können. Ein Überblick über die Effekte von Nodularia spumigena und dessen Toxin Nodularin auf das Nahrungsgeflecht in der Ostsee wird in der Arbeit von Miina Karjalainen (2005) gegeben. Auch van Buynder et al. (2001) untersuchten die Aufnahme von Nodularin durch Fische und Meeresfrüchte während Blüteereignissen und stellten fest, dass besonders das Muskelfleisch betroffen war und die aufgenommenen Giftstoffe auch während des Kochens nicht zerstört wurden.

Neben der Stickstofffixierung führt auch der bakterielle Abbau von Cyanobakterien am Grund der Ostsee zu einem hohen Sauerstoffverbrauch und damit zu sogenannten toten Zonen am Meeresboden, welche nahezu sauerstofffrei sind und aufgrund des beschriebenen unregelmäßigen Wasseraustauschs auch auf längere Zeit in diesem Zustand verbleiben können.

Toxische Cyanobakterienarten treten überwiegend in Süßwassergebieten auf, jedoch gibt es auch in marinen oder Brackwassergebieten regelmäßige toxische Cyanobakterienblüten. In der Ostsee wurden große Vorkommen stickstofffixierender Cyanobakterien anhand von Biomarker-Pigmentanalysen bereits auf 7000 Jahre vor unserer Zeit datiert (Mazur-Marzec et al. 2006), was zeitlich im Kontext von Salzwassereinfluss in die Ostsee und dem Beginn der derzeitigen Brackwasserphase verortet wird (Bianchi 2000).

Gemäß des bereits beschriebenen horizontalen Gradienten der Salinität, der bestimmend für die gesamte Artenkomposition der Ostsee ist, folgt auch die Zusammensetzung des Phytoplanktons dieser räumlichen Unterscheidung. In der Bottnischen Bucht mit ihrem geringen Salzgehalt finden sich so überwiegend Süßwasserarten, während am Kattegat und dem Eingang der Ostsee überwiegend marine Arten beheimatet sind.

#### 2.2.3 Saisonalität

Die Ostsee weist in Bezug auf das Phytoplanktonwachstum eine ausgesprochene Saisonalität auf, da das Wachstum direkt abhängig ist von der Intensität des eingestrahlten Lichts sowie der daraus resultierenden Temperatur des Wassers. Ein weiterer wichtiger Faktor für das Wachstum ist die Verfügbarkeit von Nährstoffen (Siegel und Gerth 2008). Neben der Menge an verfügbarem Licht wird so durch erhöhten fluvialen Einfluss, wie im Frühjahr zur Tauperiode oder im Sommer zur Hauptniederschlagsperiode, folgender Jahresgang bestimmt. Die bestimmenden Jahresgänge der Gesamteinstrahlung, Primärproduktion, Chlorophyll a-Konzentration und Wassertemperatur sind am Beispiel der westlichen Kieler Bucht in Abbildung 7 dargestellt.



Abbildung 7 – Jahresgang der Einstrahlung, Primärproduktion, des Chlorophyll a-Gehalts und der Wassertemperatur für das Jahr 1973–74 in der Kieler Bucht aus Lenz (1995, S. 147)

Diese saisonal günstigen, abiotischen Bedingungen führen zusammen mit günstigen biotischen Bedingungen (aufgrund mangelnder Konkurrenz) temporär zu einem massenhaften Anstieg der Biomasse. Dieses vermehrte Auftreten von Phytoplankton wird als Algenblüte bezeichnet. Ein typischer Jahresgang verläuft nach Wasmund (2005) wie folgt:

Im Winter, wenn weite Teile der Ostsee zugefroren sind und die euphotische Zone nur in eine geringe Tiefe ragt, wachsen fast ausschließlich Flagellaten, welche in der Lage sind, sich in Wassertiefen mit ausreichender Lichteinstrahlung zu halten. Dadurch ist der Nährstoffverbrauch im Winter sehr eingeschränkt, während weiter Nährstoffe wie Nitrat und Phosphat über die Atmosphäre und die Flüsse eingetragen werden.

Zum Frühling ist das Ostseewasser daher deutlich reicher an Nährstoffen und aufgrund der höheren Sonnenstände ist nicht nur deutlich mehr Licht auch in größeren Wassertiefen verfügbar, auch die Wassertemperaturen steigen langsam. (Aufgrund des geringeren Wärmekoeffizienten geschieht dies jedoch langsamer als an Land.) Dadurch kommt es zur Durchmischung der Wasserschichten, was auch andere Arten wie Kieselalgen in die höheren Wasserschichten transportiert. Sind dort die Stickstoffvorräte aufgebraucht, sind wieder bestimmte Flagellatenarten bevorteilt, welche ihre Wassertiefe regulieren können und somit zur Nährstoffaufnahme entsprechende Schichten erreichen können, bis schließlich sämtliche Nährstoffe verwertet wurden. In dieser Phase findet teilweise in kurzer Zeit eine starke Zunahme des Phytoplanktonwachstums statt, welches dann als Blüteereignis bezeichnet wird. Diese Frühjahrsblüte beginnt nach Voipio (1981) im Mittel in der südlichen Ostsee zur zweiten Aprilhälfte, in der nördlichen Ostsee verzögert sich der Beginn aufgrund der niedrigeren Sonnenstände und der späteren Erwärmung bis in den frühen Mai. Fleming und Kaitala (2006) untersuchten Variationen von Beginn und Intensität der Frühjahrsblüte und stellten fest, dass neben der Erwärmung auch die Nährstoffsituation im Winter ausschlaggebend ist.

Im Sommer, wenn aufgrund tiefer eindringenden Lichts und höherer Wassertemperaturen die Umweltbedingungen geeignet sind für das Wachstum von Cyanobakterien, treten diese im Vergleich zu anderen Phytoplanktongruppen vermehrt auf, da sie in der Lage sind, "den reichlich im Wasser gelösten Luft-Stickstoff (N2) unter Energieeinsatz in biologisch verfügbare Stickstoff-Verbindungen umzuwandeln" (Wasmund 2005).

Abhängig von der Salinität unterscheidet sich regional in der Ostsee auch das Auftreten der verschiedenen Cyanobakterienarten, so finden sich in der nördlichen Ostsee bei geringem Salzgehalt überwiegend Aphanizomenon flos-aquae, während sich das Verhältnis Richtung Süden bei einem Salzgehalt von ca. 15 ‰ zugunsten von Nodularia spumigena wandelt (Lehtimaki et al. 1997).

In den letzten Jahren vermehrt aufgetretene kurze und milde Winter sowie überdurchschnittlich warme Jahre führten zu einer Verschiebung der saisonalen Blüten. Aufgrund von Beobachtungen und Berichten über häufigeres Auftreten und größere Ausbreitung von Cyanobakterienblüten in der Ostsee stellt sich die Frage, inwiefern dieses stärkere Wachstum anthropogen verursacht sein könnte. Die starke Abhängigkeit von Nährstoffen und Wassertemperatur legt einen Zusammenhang zu einer Erwärmung des Ostseewassers sowie dem Nährstoffeintrag nahe (Kahru et al. 1994; Kahru 1997). Andere Theorien gehen davon aus, dass gerade eine bessere Klärung der anthropogen eingebrachten Abwässer und damit der verminderte Phosphoreintrag (P) in den letzten Jahren zu einer Bevorteilung der Cyanobakterien mit ihrer Fähigkeit zur Fixierung atmosphärischen Stickstoffs gegenüber anderen Phytoplanktonarten geführt hat. In ihrer Arbeit aus dem Jahr 2000 gehen Bianchi et al. auf diese Fragestellung ein und konstatieren, dass das Cyanobakterienwachstum in der Ostsee bis zu den Anfängen der Brackwasserzeit nachgewiesen werden kann und somit zu den natürlichen Prozessen in der Ostsee gehört. Sie untersuchten bestimmte Biomarker, welche als Indikator für Cyanobakterien- und Picocyanobakterienanteile an Phytoplankton dienen und datierten Sedimentschichten mit deren Vorkommen auf 8000 Jahre vor unserer Zeit. Das vermehrte Auftreten von Hochdruckwetterlagen und damit stabilen, warmen und windarmen Verhältnissen über einen längeren Zeitraum wären eine weitere Erklärung für die vermehrte Beobachtung von Cyanobakterienblüten. Die bereits erwähnte Untersuchung von Kabel et al. (2012) erklärt die Zunahme von Cyanobakterienblüten mit einer Erhöhung der Wassertemperatur infolge des Klimawandels. Eine größere Zahl beobachteter Blüteereignisse ist jedoch möglicherweise auch auf die verbesserten Möglichkeiten der Beobachtung zurückzuführen. Blüten, welche früher unbeobachtet auf der offenen Ostsee entstanden und zusammenfielen, werden heute aufgrund der Überwachung mittels Flugzeug und Satelliten sowie einer größeren Verkehrsdichte eher zur Kenntnis genommen. Neben einer Zunahme in der Häufigkeit von großen Blüteereignissen, zeigt sich auch die Tendenz zu einem früheren Beginn der Frühjahrsblüte (Fleming und Kaitala, 2006).

Einen Überblick über das Vorkommen von Phytoplanktonarten in der Ostsee gibt der Bericht "Checklist of Baltic Sea Phytoplankton Species" von Guy Hällfors (2004). Jährliche Zustandsberichte für die westliche bis mittlere Ostsee gibt das Leibniz-Institut für Ostseeforschung IOW in Warnemünde heraus.

#### 2.2.4 Wirtschaftliche Bedeutung

#### 2.2.4.1 Fischerei

Abgesehen von der natürlichen Rolle des Phytoplanktons als Grundlage der Nahrungskette in Gewässersystemen, in denen sie als Nahrung des Zooplanktons dienen, stellen dichte Phytoplanktonblüten, insbesondere mit einem hohen Anteil Cyanobakterien und damit einer hohen Konzentration an Cyanotoxinen, eine Gefahr für andere Meereslebewesen dar. Diese nehmen die Gifte auf und lagern sie in ihrem Körper an, wodurch sie in den Nahrungskreislauf gelangen. Vor allem Aquakulturen, sogenannte Aquafarmen, sind von diesem Problem betroffen. Durch eine Toxinaufnahme mit potenziell letalen Folgen für die Fischzucht können wirtschaftliche Schäden entstehen. Cyanobakterienbedingtes Fischsterben kann neben der Intoxikation jedoch auch durch verstopfte Kiemen oder Sauerstoffarmut verursacht werden, welche bei Absterben, Absinken und Zerfall der Blüte auftreten. Eine frühzeitige Erkennung von sich bildenden Cyanobakterien hilft möglicherweise, rechtzeitig Entscheidungen zu Schutzmaßnahmen zu treffen. Neben den negativen Auswirkungen, die durch vermehrtes Phytoplankton- und Cyanobakterienwachstum verursacht werden, wurde auch an Möglichkeiten geforscht, Phytoplankton als Hilfsmittel bei der Lösung von ökologischen oder ökonomischen Fragestellungen einzusetzen, wozu folgende Beispiele genannt sein sollen. Spolaore et al. (2006) stellen verschiedene kommerzielle Nutzungen von Mikroalgen vor, die bereits seit über 2000 Jahren angewandt werden.

# 2.2.4.2 Düngemittelproduktion

Im Kontext der Fähigkeit zur Fixierung atmosphärischen Stickstoffs gibt es Versuche bezüglich des Potenzials, mithilfe von Cyanobakterien den in der Luft verfügbaren Stickstoff für Düngemittelkonzentrat zu binden und diese somit als ökonomisch und ökologisch bessere Alternative zur chemischen Düngung einzusetzen, bspw. in Reisbecken (Fernandez et al. 2000; Mishra und Pabbi 2004).

# 2.2.4.3 Nahrungsmittel

Als Nahrungsergänzung gibt es Algenpräparate heute bspw. in Form von Tabletten, Tropfen oder als Zutat in anderen Speisen. Nicht nur der hohe Proteingehalt, sondern auch diverse, möglicherweise gesundheitsfördernde Eigenschaften sorgen für einen Einsatz im Bereich der menschlichen Ernährung sowie als Tierfutter für Fische in Aquakulturen bis zu Farmtieren (Spolaore et al. 2006).

Algen als Nahrungsbestandteil oder Nahrung finden sich vor allem im asiatischen Raum, wo sie seit Jahrhunderten Bestandteil der traditionellen Küche sind (Kroeger 2007).

# 2.2.4.4 Biotechnologie

Auch im Bereich der Energiegewinnung gibt es Ansätze und Ideen zum Einsatz von Algen, insbesondere Cyanobakterien. Abgase von Kraftwerken sollen bspw. durch Algen- und Cyanobakterienkulturen geleitet werden, welche wiederum Kohlendioxid herausfiltern und Biomasse aufbauen, welche zur Gewinnung von Öl und Bioethanol genutzt werden soll.

#### 2.2.4.5 Geoengineering

Größere Bekanntheit erlangte im Jahr 2009 das Projekt LOHAFEX des Alfred-Wegener-Instituts. Mithilfe von Eisensulfat sollte Wasser im Südatlantik gedüngt werden, um auf diese Weise das Phytoplanktonwachstum zu fördern. Ziel war es, zu messen, inwieweit die dadurch entstehende Algenblüte in der Lage ist, atmosphärisches Kohlendioxid zu binden und dauerhaft der Atmosphäre zu entziehen (Bathmann 2009).

#### 2.2.5 Optische Eigenschaften

Für die optische Gewässerkunde sind in erster Linie optische Unterscheidungsmerkmale wichtig. Im Gegensatz zu Grünalgen, deren optische Eigenschaften im Wesentlichen bestimmt sind von Chlorophyll, welches im grünen Bereich des Spektrums Licht streut, sind in den Zellen der Cyanobakterien weitere Pigmente mit der Fähigkeit des Lichtsammelns vertreten. Mithilfe der Phycobiline können Cyanobakterien im Wellenlängenbereich zwischen den beiden Absorptionsmaxima des Chlorophyll a, der sogenannten Grünlücke zwischen 480 und 630 nm, Licht absorbieren und somit zusätzliche Energie für die Photosynthese gewinnen.

Diese akzessorischen Pigmente befinden sich in den Lichtsammelkomplexen in der Zellwand der Cyanobakterien, den Phycobilisomen, welche aus einem Reaktionszentrum bestehen, von dem antennenartig mehrere Reihen akzessorischer Pigmente ausgehen. Auf die spezifischen optischen Eigenschaften der Cyanobakterien, aber auch der anderen relevanten Wasserinhaltsstoffe soll im nächsten Kapitel eingegangen werden.

# 2.3 Fernerkundung

# 2.3.1 Überblick

Die Verfahren der Fernerkundung lassen sich je nach der angewandten Methode sowie dem gewählten Maßstab differenzieren. Die Anfänge machte bereits die frühe Ballonfahrt möglich. Heute dienen neben flugzeuggetragenen Sensoren vor allem satellitengestützte Sensoren, aber auch mehr und mehr Drohnensysteme der besseren Aufnahme und Vermessung physikalischer und abgeleiteter biologischer Parameter. In Bezug auf die eingesetzte Methode unterscheidet man grundlegend aktive und passive Verfahren. Bei aktiven Verfahren stammt das elektromagnetische Signal von einer künstlichen Quelle, wird auf die zu beobachtende Stelle gerichtet und das von dort reflektierte Signal am Sensor erfasst und ausgewertet. Zu diesen Verfahren zählen bspw. die im Mikrowellenbereich operierende Radarfernerkundung SAR (Synthetic Aperture Radar) sowie optische LIDAR- (Light Detection And Ranging) Systeme. Im Falle der passiven Fernerkundung dient die von natürlichen Quellen emittierte Strahlung oder das von der Erdoberfläche reflektierte Sonnenlicht als Messgröße. Je nach wissenschaftlicher Fragestellung werden das geeignete Verfahren und der nötige räumliche wie zeitliche Maßstab gewählt.

Für die Erkundung der im Wasser befindlichen Substanzen eignet sich im Wesentlichen die optische Fernerkundung im visuellen und nahen Infrarotbereich (VIS-NIR). Bei höheren Wellenlängen >1 µm ist die Eindringtiefe in das Medium aufgrund der Absorption zu gering, wodurch sich diese lediglich für In-Situ-Messungen kleinerer Wasserproben eignen. Im Bereich der kürzeren Wellenlängen verhindert die abnehmende Strahlungsintensität der Sonne sowie die abnehmende Transmission der Atmosphäre eine Nutzung zur Satellitenfernerkundung (Zimmermann 1994). Aktive Fernerkundungsmethoden bieten den Vorteil größerer Unabhängigkeit vom Aufnahmezeitpunkt, da sie nicht auf die natürliche Sonneneinstrahlung angewiesen sind. Andere Wellenlängenbereiche als die des optisch sichtbaren Lichts ermöglichen zudem größere Wetterunabhängigkeit, da sie weitgehend unbeeinflusst von Wolkenbedeckung sind. Mikrowellenstrahlung dringt jedoch nicht in den Wasserkörper ein, sondern lässt lediglich Aussagen über die Wasseroberfläche zu. Die bei LIDAR-Systemen zum Einsatz kommenden aktiven Infrarotemitter sind nicht ausreichend intensiv, um einen großen räumlichen Bereich abzudecken. Daher werden punktuelle Messungen durchgeführt, welche später zusammengesetzt werden. Derartige Sensoren finden daher häufig in der flugzeuggetragenen Sensorik Verwendung. Zudem umfassen LIDAR-Messungen nur einen geringen Teil des Lichtspektrums. Im Vergleich zu synthetischen Energiequellen, deren optische Eigenschaften selbst bestimmt und justiert werden können, verringert die Nutzung der natürlichen Sonnenstrahlung naturgemäß die Messgenauigkeit (Gege 1994).

#### 2.3.2 Entwicklung der Satellitenfernerkundung von Gewässern

Optische Gewässerfernerkundung wird bereits seit einigen Jahren genutzt, um das Verständnis von Ökosystemen wie dem der Ostsee zu mehren und deren Zustand zu überwachen. Erste Vorschläge und Untersuchungen, den Phytoplanktongehalt aus der vom Flugzeug gemessenen Wasserfarbe abzuleiten, unternahmen bereits Clarke et al. (1970), die wie nachfolgende Arbeiten auch auf dem Radianzverhältnis der Absorptionsmaxima und -minima des Pigments Chlorophyll a beruhen (engl. band ratio algorithm). Ein erster Satellitensensor zur Ermittlung gewässerspezifischer Parameter aus optischen Daten war der Coastal Zone Color Scanner (CZCS) auf dem NASA-Satelliten Nimbus-7, mit welchem erstmals Chlorophyllkonzentrationen abgeleitet werden konnten (Zimmermann 1991). Mit dem Start von IRS-P3 im März 1996 stand erstmals ein deutscher Multispektralsensor für die Ozeanfernerkundung zur Verfügung. Der Modulare Optoelektronische Scanner (MOS) ermöglichte zehn Jahre nach der Abschaltung von CZCS erstmals wieder die Erdbeobachtung mit Fokus auf ozeanographische Anwendungen. Seit 1997 bestand mit dem Sea-viewing Wide Field-of-view Sensor (SeaWIFS) die Möglichkeit, vergleichende Experimente durchzuführen. Aufbauend auf den Erfahrungen des MOS-Projekts wurde das Medium Resolution Imaging Spectrometer (MERIS) entwickelt, das seit dem Start im Jahre 2002 auf dem europäischen Umweltsatelliten ENVISAT die Umweltforschung fortsetzte. Das Instrument bot dabei ähnliche spektrale Eigenschaften wie MOS und war dank der deutlich größeren Schwadbreite von 1150 km gegenüber 200 km für globale Untersuchungen ausgelegt. Durch die größere Schwadbreite wurde auch eine höhere Aufnahmerate ermöglicht, wodurch etwa alle drei Tage eine Aufnahme eines bestimmten Gebiets erstellt werdem konnte.

Mit den Verbesserungen in der räumlichen und spektralen Auflösung nahm auch das Datenvolumen stark zu. Der Fortschritt der Rechnertechnologie und eine höhere Datenübertragungs- und Verarbeitungskapazität ermöglichten eine schnellere Verarbeitung dieser zusätzlichen Daten, deren Auswertung wiederum detailliertere und präzisere Aussagen über die beobachteten Gebiete erlaubte und es konnten immer wertvollere Beitrag zum Verständnis der Umwelt geleistet werden.

#### 2.3.3 Vorteile

Einer der wesentlichen Vorteile der Fernerkundung ist die im Vergleich zu *In-Situ*-Messungen sehr hohe räumliche Abdeckung, welche Beobachtungen und Analysen bis zum globalen Maßstab und auch in schwer zugänglichen Gebieten wie großen Gewässerflächen oder Urwäldern ermöglicht. Zudem erlaubt die hohe zeitliche Auflösung Früherkennungssysteme, Monitoring und Langzeitauswertungen. Je nach Sensor ist eine Beobachtung mit einem Zeitabstand von wenigen Tagen durchführbar. Durch regelmäßige Aufnahmen entstehen lange Datenreihen, die auch eine rückgreifende Auswertung ermöglichen und somit Veränderungen in Ökosystemen noch effizienter nachvollziehbar machen.

#### 2.3.4 Einschränkungen

Neben den genannten Vorteilen der passiven optischen Gewässerfernerkundung, müssen insbesondere im Hinblick auf die weitere Verwendung und Auswertung der Daten auch einige Limitierungen beachtet werden, welche sich aus der Natur des Verfahrens ergeben. Zum einen ist aufgrund atmosphärischer Einflüsse das Nutzsignal, welches aus dem Wasser reflektiert wird, sehr gering und kann bei starken atmosphärischen Einflüssen wie Wolkenbedeckung gegen Null gehen. Die Eindringtiefe der Strahlung in den Wasserkörper ist abhängig von dessen Zusammensetzung. Sehr klares Wasser ermöglicht es, eher eine Aussage über eine größere Wasserschicht zu treffen als trübes Wasser. Bei optischen Fernerkundungsverfahren stammt die gewonnene Information jedoch immer aus den oberflächennahen Schichten und erlaubt es somit nicht, eine Aussage über die gesamte Wassersäule zu treffen. Da auch eine Bestimmung der Tiefenschichtung der lichtdurchfluteten Wasserschicht nicht ohne Weiteres möglich ist, beziehen sich die abgeleiteten Parameter auf einen mittleren Wert einer durchmischten Wasserschicht. Auch horizontal gesehen stellen die Parameter eine Mittelung über die gesamte Fläche dar, mit der der verwendete Sensor auflöst.

# 2.4 Neuronale Netze

Künstliche Neuronale Netze (engl. *Artificial Neural Network*) stellen ein Verfahren des maschinellen Lernens dar, eine Methode, geeignet zur statistischen Auswertung komplexer Datensätze. Sie eignen sich besonders zum Einsatz in der Mustererkennung sowohl im visuellen als auch im auditiven Bereich.

Sie sind sowohl in ihrem Aufbau als auch in ihrer Funktion von der Natur inspiriert. Im menschlichen Gehirn finden sich biologische Neuronen, welche an ihren Dendriten Reize benachbarter Neuronen empfangen. Bei Überschreiten eines bestimmten Aktionspotentials werden Reize über ein Axon und die Synapsen an dessen Ende an die Dendriten eines nächsten Neurons weitergeleitet. Diese Neuronen werden im künstlichen neuronalen Netz abstrahiert durch Knotenpunkte eines mehrschichtigen Netzes, welche ebenfalls die Ausgaben der Nachbarneuronen gewichtet empfangen, verarbeiten und bei Überschreiten eines Schwellenwerts die Ausgabe an die nächsten Neuronen weiterleiten.

Erste Ansätze zur Entwicklung künstlicher neuronaler Netze gab es bereits in den 1940er Jahren. Als solche wurde die Idee jedoch erst in den 1980er Jahren wieder aufgegriffen. Dank der Entwicklung neuer Algorithmen wie dem Backpropagation-Lernverfahren sowie aufgrund immer höherer Rechenleistung war es möglich, umfangreichere mehrschichtige neuronale Netze für verschiedene Probleme zu trainieren.

Anhand des Trainings "lernt" ein künstliches neuronales Netz, aus vorher nicht bekannten Eingabevektoren passende Ausgabevektoren zu berechnen. Es wird also darauf trainiert, von einem vorgegebenen Satz aus Eingangsvektoren und korrespondierenden Ausgabevektoren zu generalisieren und eine Beziehung zwischen diesen herzustellen. Dadurch können auch dazwischenliegende Eingabevektoren entsprechend der erlernten Regeln berechnet werden, um plausible Ausgabevektoren zu produzieren.

Man unterscheidet bei den Lernverfahren generell zwei Strategien, zum einen das überwachte und zum anderen das unüberwachte Lernen. Beim überwachten Lernen werden dem Algorithmus Eingangsvektoren mit bekannten Ausgangsvektoren vorgegeben. Beim unüberwachten Lernen dagegen werden dem Netz lediglich Eingangsvektoren vorgegeben, woraus selbstständig Klassen anhand ihrer charakteristischen Unterschiede erkannt werden. Letztere Methode eignet sich daher vor allem zur Klassifizierung von bspw. Landnutzungskategorien oder ähnlich distinkten Klassen.

Mit Zunahme der Datenmengen, welche durch Fernerkundungssensoren gewonnen wurden, nahm auch der Einsatz von Neuronalen Netzwerken zu deren Auswertung zu. Atkinson und Tatnall (1997) beschreiben unter anderem folgende Vorteile, die zu diesem zunehmenden Einsatz führten: schnellere und genauere Verarbeitung im Vergleich zu anderen Techniken wie statistischen Klassifikationsverfahren; Berücksichtigung von a-priori-Wissen und realistische physikalische Randbedingungen in der Analyse; die Möglichkeit, verschiedenartige Datenquellen in die Analyse einzubeziehen. Häufig werden Neuronale Netze zur Klassifikation oder auch Regressionsanalyse von Fernerkundungsdaten verwendet.

# 2.5 Stand der Forschung zur Phytoplanktonfernerkundung

Die heutigen Standardalgorithmen zur Erkennung von Wasserinhaltsstoffen reichen oft nicht mehr aus, um die Fragestellungen zum Verständnis komplexer Ökosysteme zu beantworten. Für den operationellen Satellitensensor MERIS der europäischen Raumfahrtbehörde ESA werden in den Standardalgorithmen Auswertungen mithilfe von Reflektanzverhältnissen zur Bestimmung des Parameters Algal\_1 vorgenommen, welche überwiegend auf Messungen optisch einfacher Gewässertypen (sogenannte Case 1-Typen) basieren.

Im Laufe der MERIS-Mission wurden neue Algorithmen für die Bestimmung von Wasserinhaltsstoffen entwickelt, welche zum Teil von einer verbesserten Atmosphärenkorrektur und einer regionalen Anpassung profitieren. Durch Einbezug weiterer Spektralbereiche können auch zusätzliche Wasserinhaltsstoffe wie Sediment und Gelbstoffe ermittelt werden. Zwei Auswertealgorithmen seien hier genannt, welche jeweils auf bio-optischen Modellen basieren: Der Case2Regional-Algorithmus von Doerffer (Doerffer 2007) auf der Basis Neuronaler Netze und eines bio-optischen Modells der Nordsee sowie der Level-3-Prozessor zur Bestimmung von Wasserinhaltsstoffen in der Ostsee des DLR auf Basis der Hauptkomponenteninversion und Daten eines Ostseemodells (Krawczyk et al. 1999). Im Rahmen des MARCOAST-GMES-Programms wurde die Auswertung auch in eine automatisierte Prozessierungskette überführt, mit welcher tägliche Analysekarten generiert werden (Krawczyk et al. 2007). Neben der bisher angewandten Bestimmung der Konzentration von Chlorophyll a als Näherungswert für Phytoplankton im Allgemeinen beschäftigt sich die Wissenschaft seit den Anfängen der Gewässeroptik mit der weiteren Unterscheidung verschiedener Gruppen, den sogenannten funktionellen Gruppen des Phytoplanktons (Subramaniam 2008; Platt et al. 2006).

Eine vollständige Beschreibung der ökologischen Situation in der Ostsee, insbesondere in den Sommermonaten, welche häufig durch Blaualgenblüten bestimmt sind, ist mit diesen Standardprodukten jedoch nicht möglich. Um den Gewässerzustand ausreichend zu überwachen, wird ein Parameter zur Detektion und Quantifizierung der ökologisch und ökonomisch bedeutenden Cyanobakterien benötigt. Auch kann die Abwesenheit dieser zusätzlichen, optisch wirksamen Komponente zu einer Verfälschung der anderen Parameter führen, da das zugrunde liegende Modell nur eingeschränkt gültig ist.

Im Hinblick auf regionale Fragestellungen, wie in der vorliegenden Arbeit bezogen auf die Ostsee, ist daher eine Anpassung der Algorithmen an die regionalspezifischen Eigenschaften nötig. So müssen die optischen Eigenschaften der zu erwartenden Wasserinhaltsstoffe ebenso bekannt sein wie die zu erwartenden Größenordnungen der Konzentrationen. Standardalgorithmen zur Chlorophyllbestimmung, die auf dem Bandverhältnis von grünem und blauem Bereich basieren, überschätzen häufig die Chlorophyll-a-Konzentration in der Ostsee, da die höhere Absorption im blauen Bereich des Spektrums nicht auf die hohe Gelbstoffkonzentration, sondern eine erhöhte Chlorophyllkonzentration zurückgeführt wird. Darecki und Stramski (2004) haben dieses Verhalten genauer untersucht.

Die zu erwartenden Konzentrationen sind insbesondere für die Simulation eines Datensatzes wichtig, wenn das Inversionsverfahren eine geringe Toleranz gegenüber Abweichungen des analysierten Bereichs aufweist. Zudem fällt eine Bewertung des Zustandes von Ökosystem zu Ökosystem unterschiedlich aus. Gelten in der Ostsee Bedingungen von >10 mg/l Chlorophyll bereits als Algenblüte, ist dies für viele Binnengewässer ein Normalzustand.

Aufgrund der Häufigkeit und ihrer Ausmaße sowie der potenziell schädlichen Auswirkungen auf Gesundheit, Trinkwasserqualität und den Erholungsraum ist das Interesse an geeigneten Verfahren zur möglichst flächendeckenden Überwachung und Erforschung von Cyanobakterienblüten in den letzten Jahren gestiegen (Kutser 2009). Dekker (1993), Schalles und Jacobi (2000) und Simis et al. (2005) haben mit ihren Arbeiten bewiesen, dass die Detektion von Cyanobakterien anhand ihrer zusätzlichen Pigmente möglich ist. Auch Kutser (2009) stellt in seinem Überblick über verschiedene passive optische Verfahren zur Erkennung von Cyanobakterien- und Phytoplanktonblüten fest, dass derartige Untersuchungen möglich sind. Riuz-Verdú et al. (2008) beschreiben die optischen Besonderheiten bei cyanobakteriendominierten Phytoplanktonspektren und deren Eignung zur Fernerkundung, wobei der Bandverhältnis-Algorithmus von Schalles und Yacobi (2000), der semi-empirische Baseline-Algorithmus von Dekker (1993) und der verschachtelte, semi-empirische Bandverhältnis-Algorithmus von Simis et al. (2005) verglichen und auf radiometrische Felddaten und Pigmentmessungen aus Binnengewässern in Spanien und den Niederlanden angewendet werden. Dabei kommen sie zu dem Ergebnis, dass insbesondere bei niedrigen und sehr hohen Phycocyaninkonzentrationen die Fehlerquelle steigt. Die Algorithmen von Schalles und Yacobi sowie Dekker eignen sich mangels Sensoren mit geeigneten Spektralkanälen nicht zur Satellitenfernerkundung. Im Vergleich zu Bandverhältnis-Algorithmen ermöglichen zusätzliche Spektralinformationen und die Modellierung des Wassersystems mitsamt seinen Inhaltsstoffen möglicherweise eine höhere Genauigkeit der Ergebnisse. Hyperspektralsensoren, welche die Messung eines annähernd kontinuierlichen Spektrums zulassen, nutzen Kutser (2004) für Chris/Proba und Riuz-Verdú et al. (2005) für Hyperion. Diese wiederum unterliegen der Einschränkung, dass sie als experimentelle Sensoren nur einzelne, vorher zu beauftragende Szenen aufnehmen und sich daher nicht zum Monitoring eignen.

# **3** Optische Eigenschaften

Bevor ein Ansatz zur Ableitung von Wasserparametern aus den optischen Messwerten entwickelt werden kann, muss zunächst apriorisches Wissen vorhanden sein, auf welche Weise die unterschiedlichen Wasserinhaltsstoffe und das Wasser selbst diese messbaren optischen Eigenschaften verursachen und beeinflussen. Die dazu nötigen Grundlagen der Gewässeroptik sowie die Eigenschaften der Wasserinhaltsstoffe sollen in diesem Kapitel behandelt werden.

### 3.1 Wasserklassifikation

Abhängig von ihren optischen Eigenschaften unterscheidet man nach Morel und Prieur (1977) zwei Arten von Gewässern. In ihrer ursprünglichen Definition bezeichnen Case-1-Gewässer jene Typen, die von Phytoplankton dominiert werden. Dagegen werden Case-2-Gewässer von anorganischen Partikeln dominiert. In beiden sind Vorkommen von gelöster organischer Materie möglich.

Die Definitionen wurden von Morel und Gordon (Gordon und Morel 1983; Morel 1988) überarbeitet und werden heute folgendermaßen angewandt:

Unter die optisch einfachen, sogenannten Case-1-Gewässern, werden sämtliche Gewässer zusammengefasst, in denen lediglich pures Meerwasser und Phytoplankton sowie dessen Abbauprodukte anzutreffen sind, was in den meisten offenen Ozeanflächen der Fall ist.

Als optisch komplexe, sogenannte Case-2-Gewässer, werden dagegen sämtliche Wasserflächen mit einer höheren Zahl optisch aktiver Inhaltsstoffe bezeichnet. Randmeere, Küstengewässer und Binnengewässer zählen unter anderen zu dieser Kategorie. Typische zusätzliche Wasserinhaltsstoffe im Vergleich zu den einfachen Gewässern sind anorganische Sedimente, welche im küstennahen Bereich noch nicht an den Grund abgesunken oder die durch Windereignisse und der daraus folgenden Durchmischung vom Gewässergrund aufgewirbelt worden sind, sowie natürliche und anthropogene organische, gelöste Eintragungen, die als terrestrische Gelbstoffe bezeichnet werden. Zudem können im Fall der Case-2-Gewässer auch Flachwassereffekte auftreten und der Meeresboden sowie dessen Bewuchs die optischen Eigenschaften des Wassers beeinflussen.

Neben dieser Zweiteilung gibt es auch andere Klassifikationssysteme wie das von Jerlov (1976), der generell zwischen offenen Ozeanen und Küstengewässern unterscheidet und diese jeweils in weitere Untergruppen einteilt. Einen Überblick über weitere Systeme zur Klassifikation von Wassertypen gibt Zimmermann (1994).

Mobley (2004) stellt in seinem Artikel die Frage, ob die Einteilung in Case-1- und Case-2-Gewässer noch nützlich sei. Zwar erkennt er ihren Wert als Grundlage für die Erstellung bio-optischer Modelle der ersten Generation in den späten siebziger und frühen achtziger Jahren an, insofern als ihre vereinfachte Darstellung der Case-1-Gewässer vielleicht überhaupt erst die Entwicklung von Oceancolor-Satelliten ermöglicht hat. Die Unterscheidung sei jedoch unpräzise und könne zu Missverständnissen führen. Schließlich seien auch in Case-1-Gewässern Gelbstoffkonzentrationen anzutreffen, welche durch abgebautes Phytoplankton verursacht würden, jedoch nicht mit der aktuellen Phytoplanktonkonzentration kovariierten (Bricaud et al. 1981). Auch können, verursacht durch Coccolithen, hohe Streueffekte auftreten, die nicht mit der Pigmentkonzentration anderer Planktonarten zusammenhängen (Gordon et al. 1988). Diese Effekte könnten schnell zu einem Versagen von Case-1-Modellen führen, da sie in diesen nicht berücksichtigt würden. Stattdessen beschreibt Mobley natürliche Wasservorkommen als ein komplexes Zusammenspiel verschiedener Partikel und gelöster Substanzen, welche in Abhängigkeit von ihrer Konzentration ein weites Spektrum unterschiedlicher optischer Eigenschaften hervorrufen können.

Obwohl flächenanteilmäßig nur ein geringer Teil der Gewässer der Erde unter die Case-2-Gewässer einzuordnen ist, bilden diese einen sehr wichtigen Bereich, da es sich bei ihnen oftmals um Küsten- oder Binnengewässer von hohem ökologischem, ökonomischem und sozialem Interesse handelt.

Da das in dieser Arbeit verwendete Modell ein auf die regionalen Gegebenheiten der Ostsee angepasstes ist, haben diese Unterscheidungsmerkmale keinen weiteren Einfluss und die von Mobley bemängelte übermäßige Vereinfachung kommt hier nicht zum Tragen. Die Unterscheidung soll lediglich die Verschiedenheit einzelner Gewässertypen und die daraus resultierenden Unterschiede der optischen Eigenschaften darstellen und so eine Einordnung in die Entwicklungsgeschichte der Gewässerfernerkundung vornehmen. Darüber hinaus ist es je nach Maßstab des zu betrachtenden Problems nötig, regional angepasste Algorithmen auf der Grundlage regional angepasster Modelle zu entwickeln. Derartige regionale Algorithmen tragen
den spezifischen Gegebenheiten Rechnung, wie dies im Fall der Ostsee nicht zuletzt die hohe Konzentration von Gelbstoffen erfordert.

# 3.2 Inhärente und scheinbare optische Eigenschaften

Die optischen Eigenschaften differenzieren sich nach Preisendorfer (1961) in inhärente und scheinbare optische Eigenschaften (Zimmermann 1991; Kirk 1994). Inhärente optische Eigenschaften sind dabei jene, welche ausschließlich durch die im Wasser enthaltenen Inhaltsstoffe wie Phytoplankton, Sedimentpartikel und gelöste Substanzen sowie die Wassermoleküle selbst beeinflusst werden. Im Einzelnen sind dies nach Zimmermann (1991) Absorption (a), Streuung (b), Dämpfung bzw. Attenuation (c) und Fluoreszenz. Die scheinbaren optischen Eigenschaften sind dagegen von den inhärenten optischen Eigenschaften und den geometrischen Parametern des Strahlungsfeldes abhängig. Die wichtigsten scheinbaren optischen Eigenschaften sind die Strahldichte (L), die Bestrahlungsstärke (E) und der Reflexionsgrad (R).

### 3.2.1 Das Unterwasser-Lichtfeld

Das Unterwasser-Lichtfeld wird durch die scheinbaren optischen Eigenschaften beschrieben. Um diese Eigenschaften erfassen zu können, müssen die wesentlichen Attribute des Lichtfeldes dargestellt werden. Dabei handelt es sich zum einen um den Zenitwinkel ( $\vartheta$ ), den vom Zenit aus gemessenen Vertikalwinkel der Strahlrichtung, zum anderen um den Azimutwinkel ( $\varphi$ ) den Winkel zwischen der Nordrichtung und der auf die Horizontalebene projizierten Strahlrichtung. Weitere Strahlungsgrößen sind der **Strahlungsfluss** ( $\Phi$ ), die Menge an **Strahlungsenergie** (Q), welche pro Zeiteinheit transportiert wird in Watt oder Quanten pro Sekunde, sowie die **Strahlungsintensität** (I) und die Strahlungsleistung pro **Raumwinkel** ( $\omega$ ).

$$d\omega = \cos\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi$$

Trifft die Strahlung senkrecht auf eine Fläche (A) und wird komplett diffus reflektiert, entsteht ein Radianzfeld. Die Strahldichte oder **Radianz** (L) ist eine von Azimut- und Zenitwinkel abhängige Funktion und somit eine gerichtete Größe (Kirk 1984). Sie beschreibt die Energie pro Fläche, pro Raumwinkel und pro Zeit.

$$L(\vartheta,\varphi) = \frac{\mathrm{d}^2 \Phi}{\mathrm{d} A \, \mathrm{d} \omega}$$

Der Wert der einfallenden Strahlung auf ein Flächenelement einer Oberfläche ist die Bestrahlungsstärke oder **Irradianz** (E). Sie kann separiert werden in einen aufwärts (E<sub>u</sub>) und einen abwärts (E<sub>d</sub>) gerichteten Teil. In Beziehung zur Strahlungsleistung L wird dabei die Strahlung über die gesamte obere Hemisphäre integriert (Kirk 1984).

$$E_d = \int_{2\pi} L(\vartheta, \varphi) \cos \theta d\omega$$

Das Verhältnis aus aufwärts gerichteter und abwärts gerichteter Irradianz wird als **Reflektanz** oder auch Irradianzreflektanz bezeichnet:

$$R = \frac{E_u}{E_d}$$

Da für die Fernerkundung die Beleuchtungs- und Sensorgeometrie von Bedeutung ist, wird zur Auswertung von Reflektanzdaten oft die sogenannte Fernerkundungsreflektanz (engl. *remote sensing reflectance*)  $R_{RS}$  verwendet, welche sich aus der aufwärts gerichteten Strahldichte (L<sub>u</sub>) und der abwärts gerichteten Irradianz berechnet (Mobley 1994).

$$R_{RS} = \frac{L_u}{E_d}$$

### 3.2.2 Attenuation, Absorption und Streuung

Um die optischen Eigenschaften der einzelnen Wasserinhaltsstoffe beschreiben zu können, sollen im Folgenden die Prozesse erläutert werden, welche beim Auftreffen von Strahlung auf die Substanzen auftreten können.

Die Attenuation (c) stellt die generelle Abschwächung der Strahlung dar und setzt sich nach Jerlov (1968) zusammen aus Absorption (a) und Streuung (b):

$$c = a + b$$

Absorption bewirkt eine Erhöhung des Energiezustandes der Moleküle oder Ionen durch die Aufnahme der Energie des absorbierten Photons. Dabei haben langwellige Photonen eine geringere Energie als kurzwellige. Der größte Teil der absorbierten Energie im aquatischen Ökosystem führt zu einer Erwärmung, indem die Moleküle ihre kinetische oder Rotationsenergie erhöhen. Bei komplexen Molekülen wie Chlorophyll kann diese Energie auch zum Reaktionszentrum weitergeleitet werden und über bio-chemische Vorgänge für die Photosynthese genutzt werden, wodurch Biomasse produziert wird (Kirk 1994).

Der Gesamtabsorptionskoeffizient setzt sich zusammen aus den Absorptionskoeffizienten der Einzelkomponenten wie dem der Wassermoleküle  $(a_w)$ , der Chlorophyllpigmente  $(a_c)$ , der Sedimentpartikel  $(a_s)$ , der Gelbstoffe  $(a_y)$  und der Phycocyaninpigmente  $(a_{pc})$ :

$$a = a_w + a_c + a_s + a_y + a_{pc}$$

Wird ein Teil der aufgenommenen Energie durch Reemission von Strahlung wieder abgegeben, nennt man dies **Fluoreszenz**. Dieses Phänomen betrifft meist nur einen sehr geringen Teil der absorbierten Strahlung bei photosynthetischen Algenzellen (Kirk 1994).

Unter **Streuung** versteht man eine Ablenkung der elektromagnetischen Strahlung bei der Interaktion mit Teilchen im Strahlengang. Streuung lässt sich in Abhängigkeit von Wellenlänge und Teilchendurchmesser in zwei Arten einteilen. Ist der Radius der Teilchen kleiner als die Wellenlänge und finden keine Wechselwirkungen zwischen den Teilchen statt, bezeichnet man dies als Rayleigh-Streuung. Sie wirkt an den Luftmolekülen der Atmosphäre. Findet Streuung an Partikeln mit Durchmessern in der Größenordnung der Wellenlänge statt, wird diese als Mie-Streuung bezeichnet.

Im flüssigen Medium wird das Licht aufgrund von Dichteinhomogenitäten gestreut, wobei die Winkelabhängigkeit der der Rayleigh-Streuung entspricht und der Anteil der Vorwärts- und Rückwärtsstreuung gleich sind. Darüber hinaus nimmt die Streuung mit zunehmender Wellenlänge ab (Kirk 1994).

Ebenso wie die Gesamtabsorption setzt sich auch die Gesamtstreuung aus den Streukoeffizienten der Einzelkomponenten, der Streuung an den Wassermolekülen  $(b_w)$ , der Phytoplanktonstreuung  $(b_c)$ , der Streuung an Sedimentpartikeln  $(b_s)$  sowie der Streuung an Cyanobakterienzellen  $(b_{pc})$  zusammen:

$$b = b_w + b_c + b_s + b_{pc}$$

33

Die Koeffizienten a und b bezeichnen das Verhältnis von absorbierter (a) bzw. gestreuter (b) Strahlung zur einfallenden Strahlung pro Lichtweg (d) und werden daher in m<sup>-1</sup> angegeben.

$$a = \frac{L_{abs}}{L_{ges} \cdot d} \qquad b = \frac{L_{scat}}{L_{ges} \cdot d}$$

In differentieller Form:

$$a = \frac{1}{L_{abs}} \frac{dL_{abs}}{dZ}$$

Zur Beschreibung der Richtungsabhängigkeit der Streuung wird zusätzlich die **Volumenstreufunktion** (VSF)  $\beta(\vartheta)$  der jeweiligen Partikel benötigt, welche im Verhältnis zur einfallenden Bestrahlungsstärke (E) die in Richtung ( $\theta$ ) pro Volumeneinheit (dV) gestreute Intensität angibt. Die Einheit der VSF ist m<sup>-1</sup>sr<sup>-1</sup>(Zimmermann 1994).

$$\beta(\vartheta) = \frac{dI(\vartheta)}{EdV}$$

Die Beziehung zwischen Streufunktion und Streukoeffizient ergibt sich aus der Integration über alle Richtungen pro Pfadlänge und lautet:

$$b = 2\pi \int_0^{\pi} \beta(\vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta$$

Für die Fernerkundung ist dabei insbesondere die Rückstreuung von Bedeutung. Unterteilt man die Streuung in einen vorwärtsgerichteten  $(b_f)$  und rückwärtsgerichteten  $(b_b)$  Teil, ergibt sich für  $b_b$  mit:

$$b = b_f + b_b$$

folgende Formel:

$$b_b = 2\pi \int_{\pi/2}^{\pi} \beta(\vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta$$

## 3.3 Inhaltsstoffe des Ostseewassers

Als Grundlage für den Entwurf bio-optischer Modelle zur Simulation der scheinbaren optischen Eigenschaften bestimmter Gewässerzusammensetzungen sind Kenntnisse über die inhärenten optischen Eigenschaften der einzelnen Komponenten unerlässlich. Seit Beginn optischer Gewässermessungen wurden Absorptions- und Streueigenschaften verschiedener optisch aktiver Stoffe gemessen. Für die Fernerkundung sind insbesondere die in den oberen Gewässerschichten der litoralen Zone anzutreffenden Stoffe bedeutend sowie die Eigenschaften der Wassermoleküle selbst.

In optisch komplexen Gewässern werden üblicherweise die folgenden Kategorien von Inhaltsstoffen unterschieden: das Medium Wasser selbst, darin gelöste Substanzen, sowohl anorganische wie gelöste Salze als auch organische wie Huminsäuren, und suspendierte Substanzen, die unterteilt werden können in lebend oder nichtlebend. Abbildung 8 stellt diese Inhaltsstoffe und ihre Auswirkungen auf die elektromagnetische Strahlung dar.



Abbildung 8 – Schematische Darstellung der wichtigsten optisch aktiven Wasserinhaltsstoffe und deren Auswirkung auf das Messsignal

# 3.4 Wasser

Die optischen Eigenschaften reinen Wassers ohne enthaltene Salze oder andere Inhaltsstoffe sind in der Forschung bereits intensiv untersucht worden (u.a. Morel und Prieur 1977; Smith und Barker 1981; Pope und Fry 1997) und zeichnen sich durch eine sehr geringe Absorption im blauen und grünen Wellenlängenbereich mit einem starken Anstieg im roten Bereich aus. Als in der optischen Ozeanographie anerkannt gelten die in Abbildung 9 dargestellten gemessenen Absorptions- und Streueigenschaften für Wassermoleküle von Robin M. Pope und Edward S. Fry (Pope und Fry 1997; Sathyendranath et al. 2000), welche Eingang in viele Modelle gefunden haben. Die Messungen der Wasserabsorption wurden mithilfe eines Messgerätes auf Basis einer Integrationskugel (*ICAM – Integrating Cavity Absorption Measurement*) mit hochreflexiver Wandbeschichtung durchgeführt, in welcher die Probe isotrop beleuchtet und unabhängig von der Streuung die Wasserabsorption gemessen wurde. Das Absorptionsspektrum verschiedener gereinigter Wasserproben bei 22 °C wurde dabei in Wellenlängenintervallen von 2,5 nm gemessen und geglättet.

Temperaturabweichungen können die Absorptionseigenschaften besonders im roten Wellenlängenbereich beeinflussen, die Unterschiede fallen dabei jedoch gering aus. Speziell in Bezug auf die Umweltfaktoren für das Cyanobakterienwachstum in der Ostsee ist zum einen eine Temperatur von ca. 15 °C an der Gewässeroberfläche anzunehmen, zum anderen wird die Absorption in diesem Wellenlängenbereich hauptsächlich von Chlorophyll dominiert, weshalb eine Temperaturabhängigkeit der Wasserabsorption in dem entwickelten Algorithmus nicht berücksichtigt wird.



Abbildung 9 – Wasserabsorption nach Pope & Fry, 1997 (blau) und Wasserstreuung nach Morel und Prieur, 1977 (violett-gestrichelt) in Abhängigkeit von der Wellenlänge

Zur Berechnung der Streuung durch Wasser wurde von Morel und Prieur (1977) folgende Formel auf Grundlage verschiedener Autoren bestimmt, wobei  $\lambda_0 = 500$  nm entspricht und die Konstante b<sub>w,500</sub> = 0,00288 m<sup>-1</sup> beträgt:

$$b_w(\lambda) = b_{w,500} * (\frac{\lambda}{\lambda_0})^{-4,32}$$

Unter Annahme einer gleichmäßigen Streuung an Wassermolekülen ergibt sich die Rückstreuung b<sub>Bw</sub> aus der Halbierung der Streuung (Morel 1974):

$$b_{Bw} = 0.5 * b_w$$

## 3.5 Seesalz

Wie Morel (1974) experimentell nachwies, findet im Gegensatz zu einer starken Absorption im UV-Bereich im visuellen Bereich des Spektrums keine Absorption durch gelöstes Meersalz statt. Im Vergleich mit purem Wasser führt der Einfluss einer Salinität von 35–38 ‰ zu einer 30 % höheren Streuung im Meerwasser. Laut IOCCG führen die im Meerwasser gelösten Salze mit ihren Hauptabsorptionsbanden im ultravioletten und infraroten Bereich nicht zu einem signifikanten Einfluss auf die Absorptionseigenschaften im visuellen Bereich (Sathyendranath et al. 2000, S. 41).

## 3.6 Gelöste organische Substanzen

In der Gruppe der gelösten organischen Substanzen werden verschiedene organische Stoffe zusammengefasst, die vollständig im Wasser gelöst sind. Die löslichen Huminstoffe entstehen entweder allochthon durch den Abbau organischen Materials an Land und aus anthropogenen Abwässern, von wo sie über den Wasserkreislauf in das Meer gelangen, oder autochthon beim Abbau organischer Substanzen im Wasser selbst. Diese häufig auch als Gelbstoff bezeichnete Gruppe weist besonders hohe Absorptionseigenschaften in den niedrigen visuellen Wellenlängenbereichen des Lichts auf und wird durch eine Exponentialfunktion beschrieben (Mobley 1994).

Im Gegensatz zur genauen chemischen Zusammensetzung sind die optischen Eigenschaften der Gelbstoffe bereits mehrfach untersucht worden. Die Absorption nimmt vom ultravioletten Spektralbereich zum langwelligeren Bereich hin ab. Die Absorption von Gelbstoff lässt sich mit einer Exponentialfunktion mit einem Abstiegsfaktor von S = 0,014 beschreiben (Zimmermann 1994; Siegel et al. 2005).



$$a_{\nu}(\lambda) = a_{\nu}(\lambda_0) \exp[-0.014(\lambda - \lambda_0)]$$

Abbildung 10 - Gelbstoffabsorption in Abhängigkeit von der Wellenlänge

# 3.7 Suspendierte organische und anorganische Partikel

Suspendierte, resuspendierte oder durch Zuflüsse eingespülte Seston- oder Sedimentpartikel sind überwiegend farblos und verursachen daher eine relativ wellenlängenunabhängige Streuung. Ihr Einfluss auf die optischen Eigenschaften des Wassers ist dabei abhängig von der Konzentration der Teilchen, ihrer Größenverteilung, ihrer geometrischen Form und dem Brechungsindex (nach Zimmermann 1994).

Der spezifische Streukoeffizient für Sediment folgt in guter Näherung einem Angstroem-Gesetz mit einem Angstroem-Koeffizienten von 0,5 (Neumann et al. 1998).



Abbildung 11 – Sedimentstreuung (orange) und Sedimentabsorption (hell-orange, gestrichelt) in Abhängigkeit von der Wellenlänge

# 3.8 Phytoplankton

Phytoplankton oder Algen bilden als ein- oder mehrzellige Kleinstlebewesen der Meere die Grundlage der Nahrungskette. Sie nehmen Nährstoffe in Form von Stickstoff und Phosphat auf, wandeln diese mithilfe des Sonnenlichts um und produzieren organische Masse. Zur Gewinnung von Energie aus Sonnenlicht dienen lichtabsorbierende Substanzen, von denen die wichtigsten die Chlorophylle sind. Durch Absorption von Photonen werden die Elektronen im absorbierenden Molekül auf ein höheres Energieniveau angehoben. Die gewonnene Energie kann als Lichtemission (Fluoreszenz) oder Wärme wieder abgegeben oder zu chemischer Arbeit genutzt werden (Nelson und Cox 2009, S. 985). Zur Gruppe des Phytoplanktons (pflanzlichen Planktons) zählt man neben den einzelligen Algen auch Bakterien, welche häufig zu großen Kolonien verbunden sind.

Treten Algen innerhalb kurzer Zeit in großer Masse und zum Teil weiter räumlicher Ausdehnung auf, so spricht man von einer Algenblüte. Große Algenblüten haben verschiedene negative Auswirkungen auf ein Ökosystem, indem sie bspw. Sauerstoffmangel, Lichtmangel oder eine Vergiftung durch Toxine hervorrufen können.

Aufgrund ihrer biologischen Eigenschaften, der Anpassung an bestimmte Umweltbedingungen und Veränderungen während des Zellwachstums, sowie des Auftretens verschiedener Arten variieren die optischen Eigenschaften von Phytoplankton stark und eine einheitliche Definition ist naturgemäß nicht möglich. Auch in Abhängigkeit von Nährstoffen variieren die spektralen Eigenschaften der Absorption von Phytoplankton. Seppälä (2009) beschreibt die durch Unterschiede in Licht- und Nährstoffverfügbarkeit verursachte Variabilität der Absorptionsspektren als geringfügig im Vergleich zur Variabilität zwischen den einzelnen Phytoplanktongruppen.

Auch Subramaniam et al. (1999) beschreiben Differenzen, verursacht durch Artenkonstellation, Umwelteinflüsse oder Package Effect (siehe 3.8.4), konstatieren jedoch die Notwendigkeit eines Querschnittsspektrums zum Zweck der Fernerkundung. Es lassen sich bestimmte Phytoplanktongruppen mit ähnlichen optischen Eigenschaften aufgrund ihrer Pigmentzusammensetzung und ihrer biologischen Eigenschaften zusammenfassen. Für diese lässt sich dann ein generalisiertes Bild ihrer optischen Eigenschaften annehmen (Gege 1994). Die optische Unterscheidung ist möglich, da die verschiedenen Pigmente in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen absorbieren, welche in Abbildung 12 dargestellt sind.



Abbildung 12 – Absorption des sichtbaren Lichts durch Photopigmente aus Nelson und Cox (2009), S. 987

Als geeigneter Näherungswert für die Biomassebestimmung von Phytoplankton hat sich die Chlorophyllkonzentration durchgesetzt. In ihrer Arbeit haben Ruiz-Verdú et al. (2008) nachgewiesen, dass Phycocyanin ebenfalls ein guter Näherungswert für Cyanobakterien-Biomasse ist.

Durch den Satellitensensor MERIS, limitiert auf 15 Kanäle, von denen sich nur 12 im Wellenlängenbereich des sichtbaren Lichts befinden, ist auch der Informationsgehalt der multispektralen Fernerkundungsdaten beschränkt. Weitere Einschränkungen ergeben sich aus der bereits genannten Absorption durch Wassermoleküle, welche eine Nutzung der Wellenlängen oberhalb von 750 nm verbieten, sowie durch die in der Ostsee dominierende Absorption von Gelbstoff im blauen Bereich, die das nutzbare Spektrum stark einschränkt. Eine Reduktion der bestimmbaren Parameter ist demnach naturgemäß vorgegeben.

#### 3.8.1 Grünalgen

Die Gruppe der Grünalgen (Chlorobionta) wird von sämtlichen Phytoplanktonarten gebildet, bei denen die optischen Eigenschaften im Wesentlichen durch Chlorophyll dominiert werden und die photosynthetisch aktiv sind. In der Ostsee kommen etwa 250 Arten vor. Neben den photosynthetischen Pigmenten wie Chlorophyll treten üblicherweise noch weitere Pigmente in den Phytoplanktonzellen auf, die photoprotektive Aufgaben erfüllen und die Zellen vor zu starkem Lichteinfall schützen. Da Fernerkundungsdaten lediglich physikalische optische Messungen sind und demnach eine direkte Übertragung auf biologische Messaussagen schwierig ist, werden als optisch ableitbare Parameter die Eigenschaften der Pigmente, wie in diesem Fall Chlorophyll, als Näherungswert für die Biomasse der Grünalgen verwendet. Zugrunde liegt die Annahme, dass mit der steigenden Biomasse des Phytoplanktons auch die Anzahl der anwesenden Pigmente zunimmt.



Abbildung 13 – Chlorophylla-Absorption (grün) und -Streuung (lila-gestrichelt) in Abhängigkeit von der Wellenlänge

#### 3.8.2 Cyanobakterien

Cyanobakterien unterscheiden sich in ihren optischen Eigenschaften vor allem durch eine andere Pigmentzusammensetzung von Grünalgen, sowie durch die zum Teil geringere Zellgröße. Sie sind in der Lage, akzessorische Pigmente zu synthetisieren, mithilfe derer Licht in Wellenlängen für die Photosynthese verfügbar gemacht wird, das mit dem Pigment Chlorophyll a aufgrund mangelnder Absorptionsbanden nicht genutzt werden kann. Zu den akzessorischen Pigmenten bei den Cyanobakterien zählen Allophycocyanin (AP), Phycocyanin (PC), Phycoerythrin (PE) und Phycoerythrocyanin (PEC). Diese Phycobiliproteine befinden sich in den Phycobilisomen, welche sich als Antennenkomplexe zur Lichtsammlung in der Thylakoidmembran der Cyanobakterienzellen befinden (Bald et al. 1996; Jeffrey und Vesk 1997). Das einfallende Licht wird je nach Phycobilipigment (PE oder PC) absorbiert und über AP auf das Chlorophyll a des Reaktionszentrums übertragen (Abbildung 14).



Abbildung 14 - Phycobilisom aus Nelson und Cox 2009, S. 987

Zusätzlich findet man in Cyanobakterien verschiedene Carotinoide, die ebenfalls photoprotektive Aufgaben erfüllen. Analog zur Chlorophyllabsorption bei Grünalgen eignet sich im Falle der Cyanobakterienbiomasse die Phycobilipigmentabsorption also als deren Näherungswert, da Cyanobakterien diese Pigmente spezifischerweise enthalten (Randolph et al. 2008, S. 4016).

### 3.8.3 Quantifizierung

Die Quantifizierung von Phytoplankton erfolgt in den meisten herkömmlichen Fernerkundungsverfahren anhand der Konzentration des Pigments Chlorophyll a. Bei Cyanobakterienkulturen ist dies aufgrund der genannten Eigenschaften komplexer. Bisherige Ansätze zielten bspw. ebenso auf eine Quantifizierung anhand des Chlorophyllgehalts ab, analog zur Verfahrensweise im Falle der Grünalgen. Da jedoch angepasst an die Lichtbedingungen die Zusammensetzung der Pigmente variabel ist und das spezifische Pigment der Blaualgen, zumindest der blütenbildenden Arten in der Ostsee, Phycocyanin ist, ist eine Quantifizierung mithilfe des grünen Photopigments Chlorophyll a ungünstig. Besonders in den frühen Stadien einer Blüte ist aufgrund der Lichtverfügbarkeit in tieferen Wasserschichten ein höherer Anteil der Phycobiline im Vergleich zur Chlorophyllkonzentration zu erwarten. Zwar enthalten Cyanobakterien ebenso Chlorophyll a und weisen daher auch die entsprechenden optischen Eigenschaften auf, jedoch kann nur mithilfe der akzessorischen Pigmente eine taxonomische Unterscheidung durchgeführt werden (Seppälä et al. 2005).

Im Gegensatz zur Quantifizierung von Chlorophyll a existieren für die akzessorischen Pigmente der Cyanobakterien keine standardisierten Extraktionsmethoden. Lösungsmittel, die zur Extraktion von anderen Pigmenten wie Chlorophyll und Carotinoiden verwendet werden, erwiesen sich in Bezug auf die wasserlöslichen Phycobilipigmente als ineffektiv. Eine Ableitung der Konzentration der Phycobilipigmente aus gemessenen Absorptionsspektren ist mit den Formeln von Bennet und Bogorad (1973) möglich, welche in Abschnitt 3.8.5.5 vorgestellt werden.

Als eine weitere Möglichkeit zur Quantifizierung erscheint zunächst die Bestimmung der Zellzahl von Cyanobakterien. Diese weisen jedoch auch innerhalb einer Art beträchtliche Größenunterschiede auf, wonach die reine Biomasse oder Abundanz durch eine Angabe der Zellzahl nicht ausreichend beschrieben wäre.

Ein geeigneter Parameter zur qualitativen und quantitativen Bestimmung von Cyanobakterien in der Ostsee scheint das Absorptionsmaximum von Phycocyanin bei 620 nm Wellenlänge zu sein. Für diesen Parameter sprechen mehrere Faktoren. Eigene Labormessungen bestätigen die in der Forschung (Seppälä et al. 2005) verbreitete Annahme, dass das akzessorische Pigment Phycocyanin im Gegensatz zu Phycoerythrin in allen in der Ostsee vorkommenden Spezies von Cyanobakterien anzutreffen ist. Die Absorptionseigenschaften von Phycoerythrin werden stark von der Gelbstoffabsorption maskiert, was besonders in der Ostsee eine Detektion erschwert. Kutser (2006) konstatiert in seiner Darstellung der Möglichkeiten, Cyanobakterien in der Ostsee mithilfe von Satellitensensoren zu erkennen, dass eine Detektion anhand von Merkmalen im Bereich unter 550 nm nicht möglich ist. Das Absorptionsmaximum von Phycocyanin liegt dagegen weder im besonders hohen Bereich der Gelbstoff- noch der Wasserabsorption und wird daher kaum von anderen Merkmalen überdeckt. Im Gegensatz zu dem Sensor MODIS bietet MERIS bei 620 nm einen Spektralkanal, der eine Detektion von Cyanobakterien ermöglicht (Kutser 2006). Schließlich spielt auch die Möglichkeit der Validierung bei der Entwicklung eines Algorithmus eine entscheidende Rolle. Bei der ohnehin schmalen Datenlage zu Menge und Verteilung von Cyanobakterien in der Ostsee ist der am besten geeignete Parameter die regelmäßig gemessene Phycocyaninfluoreszenz des Algaline-Projekts. Auch bei dieser Methode erfolgt die Detektion und Quantifizierung anhand der akzessorischen Pigmente der Cyanobakterien.

Eine Verknüpfung der Phycocyaninabsorption mit der Biomasse von Blaualgen ist theoretisch möglich. Die hohe Zahl natürlicher Variabilität der physiologischen Eigenschaften der Cyanobakterien führt jedoch auch hier zu größeren Unsicherheiten. Verschiedene Arbeiten haben für einzelne Gewässer Formeln zur Berechnung der Phycocyaninkonzentration oder der Cyanobakterienmasse aus der ermittelten Phycocyaninabsorption aufgestellt. So stellte Decker (1993) fest, dass die phycocyaninspezifische Absorption etwa fünfmal niedriger ist als die für Chlorophyll a spezifische ( $a_{624} = 0,0032 \text{ m}^2/\text{mg}$ ). Simis et al. (2005) ermittelten für die Seen von Loosdrecht in den Niederlanden einen Wert von  $a_{620}^* = 0,0095 \text{ m}^2/\text{mg}$ . Randolph et al. (2008) untersuchten mit den Methoden von Simis et al. (2005) In-Situ-Messungen des Geist- und des Morse-Reservoirs in den USA und vermerkten eine Überschätzung von Phycocyanin im Vergleich zu Labormessungen von Wasserproben. Li et al. (2006) ermittelten durch Messungen von Wasserproben eine starke Korrelation zwischen Phycocyaninkonzentration und gemessenem Biovolumen sowie eine weniger starke Korrelation zwischen Phycocyaninkonzentration und Phytoplanktonzählung. Die Biomasse erscheint aufgrund der großen Variabilität der Zellgrößen und -formen in Bezug auf Phytoplankton und besonders Cyanobakterien besser geeignet zu sein als die häufig für administrative Aufgaben verwendete Zellenzahl. Zur Berechnung der Parameter Biomasse [mm3/m3] und Natürliche Einheiten [Einheiten/mL] leiten Li et al. (2006) für drei Seen in Indianapolis folgende Formeln ab:

$$Biomasse_{Cyanobakterien} = 110,1 + (3,56 * PC - Konzentration)$$

Natürliche Einheiten<sub>Cyanobakterien</sub> = 3,629 + (67 \* PC - Konzentration)

## 3.8.4 Package-Effekt

Aufgrund der paketförmigen Anordnung der Pigmente in den Phycobilisomen der Cyanobakterien oder den Chloroplasten der Grünalgen kann es zu einer optische Besonderheit, dem sogenannten *package-effect*, kommen. Dabei überschatten sich die Pigmente teilweise gegenseitig, was zu einer geringeren Absorption führt, als dies bei gleichmäßiger Verteilung der Pigmente im Zellinneren der Fall wäre (Kirk 1994). Insbesondere stark pigmentierte Organismen, bspw. aus größeren Tiefen, welche sich unter ungünstigeren Beleuchtungsverhältnissen entwickelt haben, sind von diesem Effekt betroffen (Seppälä 2009).

Für die Entwicklung des Fernerkundungsalgorithmus wird dieses Problem ausgeklammert, da zwar eine Früherkennung der Cyanobakterienblüten angestrebt wird, die Pigmentkonfiguration an der Oberfläche sich jedoch rasch an die besseren Beleuchtungsverhältnisse anpasst.

Die Absorption des auftreffenden Lichts ist zudem abhängig von der Form der absorbierenden Teilchen. Die maximale Effektivität stellt sich bei gleichmäßig verteilten kugelförmigen Zellen ein, da in diesem Fall die Wegstrecke des Lichts auf besonders viele Pigmente trifft. Bei einer Ansammlung in Zellen interagiert der Lichtstrom nur mit einer geringeren Anzahl von Pigmenten (Gege 1994).

## 3.8.5 Ermittlung der inhärenten optischen Eigenschaften

Grundlage für eine bio-optische Modellierung der Ostsee sind weitreichende Kenntnisse über die optischen Eigenschaften der einzelnen Wasserinhaltsstoffe und des Wassers selbst. Die inhärenten optischen Eigenschaften der Parameter Wasserabsorption, Chlorophyllstreuung bzw. -absorption und Sedimentstreuung sowie Gelbstoffabsorption wurden zu diesem Zwecke aus dem im Rahmen des MARCOAST-Projektes entwickelten und auf empirischen Daten von Herbert Siegel (Institut für Ostseeforschung Warnemünde – IOW) basierenden Ostseemodell übernommen (Neumann et al. 1998). Daten zu Absorptions- und Streueigenschaften von Cyanobakterien lagen nicht vor.

## 3.8.5.1 Laboruntersuchungen

Um detaillierte Ergebnisse zu Absorptions- und Streueigenschaften von Cyanobakterienkulturen zu erhalten, wurden in Kooperation mit dem finnischen Umweltinstitut SYKE Labormessungen durchgeführt. Unter verschiedenen Licht- und Nährstoffbedingungen bei einer Temperatur von konstant 16 °C und einem 12/12 Stunden Licht-/Dunkel-Rhythmus mit grünem Licht wurden folgende Phytoplanktonkulturen in Ostsee-Puffer-Nährlösung auf Basis von BG-11 (Stainer, 1971) mit 50% Stickstoff für Cyanobakterien und auf Basis von Chu-10 (Chu 1942) für Diatomeen gezüchtet: Chlorophyten wurden in BG-11 und Chu-10 gezüchtet.

Code	Name	Klasse	Herkunft
9201/CCY9201	Synechococcus sp.	Cyanobakterium	Culture Collection Yerseke,
9202/CCY9202	Synechococcus sp.	Cyanobakterium	NIOO-KNAW
Hem	Nodularia spumigena	Cyanobakterium	Helsinki University, Micro-
			biology division
KAC15	Aphanizomenon sp.	Cyanobakterium	Linnaeus University, Aquatic
KAC16	Anabaena lemmer-	Cyanobakterium	ecology division
	mannii		
TV15	Brachiomonas subma-	Chlorophyt	Tvärminne Zoological Sta-
	rina		tion, Helsinki University
TV5	Thalassiosira pseudo-	Diatomeen	
	nana		

Tabelle 2 – Übersicht über Art und Herkunft der für Laboruntersuchungen verwendeten Phytoplanktonkulturen

## 3.8.5.2 Aufbau

Proben dieser Kulturen wurden mit einem UV/Vis-Spektrophotometer der Marke PerkinElmer – Lambda 650 mit einem 150 mm Integrating-Sphere-Modul (Kugel) untersucht.

In einem Spektrophotometer werden zwei monochromatische Lichtstrahlen durch zwei Glasküvetten mit bekannter Pfadlänge gelenkt, von denen die eine die Probenlösung und die andere eine blanke Pufferlösung enthält. Dahinter wird die Intensität der Lichtstrahlen gemessen. Das Spektrophotometer misst dabei die optische Dichte (OD), einen Parameter, der definiert ist als der dekadische Logarithmus des Verhältnisses von einfallender Strahlung (I<sub>0</sub>) zu transmittierter Strahlung (I) (Kirk 1994).

$$OD = \log_{10} \frac{I_0}{I}$$

Dazu wurden die Proben in einer 10 mm Küvette an unterschiedlichen Positionen im Lichtstrahl des Spektrophotometers positioniert und die optische Dichte (OD) der Pufferlösung und der enthaltenen Probenkulturen gemessen. Zu dichte Proben wurden mit der Pufferlösung verdünnt, um im linearen Messbereich des Spektrophotometers zu liegen. Durchgängige blaue Pfeile stellen in den folgenden Abbildungen den Probenlichtstrahl dar, rot-gestrichelte Pfeile den Referenzlichtstrahl. Weitere Elemente sind die Lichtquelle (a), die Probenküvette (b), die Küvette mit Pufferlösung (c) und der Detektor (d).



Abbildung 15 – Photospektrometer Messaufbau 1, Messung der Attenuation

Im ersten Messaufbau (Abbildung 15) befinden sich die Proben im Probenhalter 65 cm vor der Eintrittsöffnung der Kugel. Für diese Position wurde ein Streuakzeptanzwinkel von 0,8° geschätzt. Die gemessenen Werte folgen demnach der Definition der Attenuation c (Kirk 1994). Insgesamt wurden in diesem Aufbau 95 Messungen durchgeführt.



Abbildung 16 – Photospektrometer Messaufbau 2, Messung von Absorption und Rückstreuung

Im zweiten Messaufbau (Abbildung 16) befinden sich die Proben an der Eintrittsöffnung der Kugel um das gestreute Licht zu berücksichtigen. In diesem Versuchsaufbau wird die Strahlung zunächst durch Absorption und Rückwärtsstreuung geschwächt und somit transmittiert. Die geräteinterne Auswertung der gemessenen Transmissionen repräsentieren die Summe aus Absorption und Rückstreuung  $a+b_b$ .



Abbildung 17 – Photospektrometer Messaufbau 3, Messung der Absorption

Im dritten Messaufbau (Abbildung 17) befinden sich die Proben im Zentrum der Kugel. Die Strahlung wird lediglich durch Absorption abgeschwächt, das gestreute Licht bleibt in der Kugel erhalten. Die Messwerte repräsentieren die Absorption a. Im Referenzlichtstrahl wurde die Pufferlösung ohne Probenkulturen gemessen, um die Ergebnisse um die Absorption der Pufferlösung zu korrigieren. Die Messungen wurden nicht fluoreszenzkorrigiert. Ein Vergleich zwischen Messungen innerhalb und vor der Kugel (wo die Hälfte des Fluoreszenzlichts gemessen wird) deutete auf einen Fluoreszenzeffekt von 5% in den Anregungswellenlängen der Photosynthesepigmente hin.

### 3.8.5.3 Absorptionsbestimmung

Anschließend wurde die dimensionslose optische Dichte der reinen Pufferlösung vom Messwert subtrahiert und diese um die Pfadlänge in der Küvette (L) sowie den Verdünnungsfaktor (V) der Probenkultur korrigiert, um die tatsächliche Absorption [m<sup>-1</sup>] der Probenkulturen zu ermitteln, wobei 2,303 der Umrechnungsfaktor vom natürlichen auf den Zehnerlogarithmus ist.

$$a = \left(\frac{2,303 * OD}{L}\right) / V$$

#### 3.8.5.4 Korrektur der Streuung

Auch bei einer Platzierung der Probenküvette an der Eingangsöffnung des Integrating-Sphere-Moduls wird ein kleiner Teil der gestreuten Strahlung nicht erfasst. Dieser Effekt lässt sich aufgrund der Annahme korrigieren, dass die wahre Absorption der Pigmente oberhalb von 750 nm gleich Null ist ( $a_{ph}(750)=0$ ). Der Wellenlängenbereich zwischen 750 nm und 800 nm wurde daher zur Korrektur von Streueffekten in der Probenküvette verwendet, indem der Mittelwert der Absorption in diesem Bereich von den berechneten Absorptionsspektren subtrahiert wurde (Stramski und Piskozub 2003).

$$a(\lambda)' = a(\lambda) - a(750 - 800nm)$$

#### 3.8.5.5 Bestimmung der Pigmente

Die Pigmentbestimmung wurde nach Annex C der Anleitung der *HELCOM Monitoring and Assessment Strategy* (MONAS Annex C-4. Phytoplankton Chlorophyll a) durchgeführt. Hierzu wurden die Proben mit GF/F-Filtern einer Porengröße von 0,7 µm gefiltert und der Filter in Ethanol aufbewahrt. Nach dem Zentrifugieren wurde der Überstand auf einer Mikrotiterplatte in einem Cary-Varian-Eclipse-Spektrofluorometer gegen eine Reihe kalibrierter Chlorophyll-a-Standardproben gemessen, um die Pigmentkonzentration zu bestimmen.

Versuche, die deutlich kleineren akzessorischen Pigmente zum Zwecke der Konzentrationsbestimmung zu extrahieren, führten zu keinen verwertbaren Ergebnissen. Versuche, mit einem abwechselnden Einfrieren und Auftauen die Zellwände aufzubrechen (Sarada et al. 1999), schlugen wiederum fehl, da die Zellen vermutlich zwischen den sich bildenden Eiskristallen weitgehend intakt blieben. Zusätzlich durchgeführte Versuche zur Pigmentextraktion mit Ultraschall (Bennett und Bogorad 1973) oder hohem Druck in einer *French Pressure Cell* (Schalles und Yacobi 2000) blieben ebenfalls erfolglos. Die Ausbeute an Pigmenten deutete jeweils darauf hin, dass eine Extraktion in repräsentativem Maße nicht möglich war. Zu ähnlichen Ergebnissen und dem Schluss, dass es derzeit keine geeignete Methode zur effektiven Pigmentextraktion aus Cyanobakterien gibt, kommt auch Simis, da die Ausbeute an Phycobilipigmenten nicht nur abhängig von der Größe der Zellen ist, sondern auch von der Robustheit der Zellwände (Simis et al. 2005).

Eine Möglichkeit der Quantifizierung stellt eine Berechnung der Pigmentkonzentration aus den gemessenen Absorptionwerten in spezifischen Wellenlängen dar. Bennet und Bogorad (1997) stellen für die Phycobilipigmente Phycocyanin, Allophycocyanin und Phycoerythrin folgende Formeln zur Berechnung der Konzentration vor.

$$[PC] = \frac{OD_{615} - 0.474(OD_{652})}{5.34}$$

$$[APC] = \frac{OD_{652} - 0.208(OD_{615})}{5.09}$$

$$[PE] = \frac{OD_{562} - 2,41(PC) - 0,849(APC)}{9,62}$$

Auf diese Art und Weise lassen sich analog zu chlorophyllspezifischen Spektren phycocyaninspezifische Spektren berechnen. Anders als in der Arbeit von Bennet und Bogorad (1973) wurden die Berechnungen mit den gemessenen *In-Vivo-*

Absorptionsspektren durchgeführt anstelle von Pigmentextrakten (Simis und Kauko, 2012).

Da es sich bei den gemessenen Absorptionsspektren um Mischspektren der vorkommenden Pigmente handelt, die sich im wesentlichen aus Chlorophyll a und den akzessorischen Pigmenten der Cyanobakterien zusammensetzen, ist eine Entmischung nötig.

## 3.8.5.6 Ergebnisse und Vergleich

Durch Normierung der ermittelten Absorptionsspektren auf Konzentrationseinheiten lässt sich ein spezifischer Absorptionskoeffizient bestimmen (Frauendorf 2002). Die gemessenen optischen Dichten aller Kulturen und verschiedener Licht- und Nährstoffbedingungen sind in Abbildung 18 dargestellt.



Abbildung 18 – Sämtliche gemessene Absorptionsspektren verschiedener Phytoplanktonkulturen mit unterschiedlicher Licht- und Nährstoffbedingungen

Ein Vergleich der auf Phycocyanin normalisierten Absorption zeigt die unterschiedlichen Chlorophyllkonzentrationen in Abhängigkeit zu den Lichtbedingungen (Abbildung 19). Besonders im blauen Spektralbereich um 440 nm sind deutlich abweichende Absorptionswerte erkennbar. Bei hoher Lichteinwirkung sind zudem stärkere Absorptionsmerkmale durch Carotinoide festzustellen, welche aufgrund des starken Lichteinfalls zu photoprotektiven Zwecken gebildet wurden. Der Einfluss unterschiedlicher Carotinoidkonzentration lässt sich im Wellenlängenbereich um 475 nm erkennen.



Abbildung 19 – Phycocyaninspezifische Absorption von Nodularia (links) und Aphanizomenon (rechts)



Abbildung 20 – Spezifische Absorptionsspektren verschiedener Phytoplanktongruppen

### 3.8.5.7 Ableitungsanalyse

Die gemessenen Absorptionsspektren können mithilfe der Ableitungsanalyse genauer hinsichtlich ihrer Zusammensetzung untersucht werden (Owen 1996). Durch die sogenannte Derivativspektroskopie können Schultern oder überlagerte Absorptionsbänder besser sichtbar gemacht werden. Die Ableitungen der Kurven werden dabei wie folgt berechnet:

Die Ableitung der nullten Ordnung ist das gemessene Absorptionsspektrum selbst:  $A = f(\lambda)$ 

Die Ableitungen der ersten bis vierten Ordnung (A1 bis A4) werden aus der gemessenen Absorption berechnet. In der Darstellung der Ableitung erster Ordnung  $\frac{dA}{d\lambda} = f'(\lambda)$  sind positive Werte beim Anstieg einer gaußförmigen Absorptionsbande ersichtlich, mit einem Maximum am Wendepunkt des Anstiegs, und negative Werte beim Abstieg, wiederum mit einem Minimum am Wendepunkt. Die Nulllinie wird von der ersten Ableitung auf Höhe des Wendepunkts eines Absorptionsbands, also dem Wellenlängenwert des Absorptionsmaximums der Bande durchlaufen.

Die zweite Ableitung  $\frac{d^2A}{d\lambda^2} = f''(\lambda) = A2$  weist ein Minimum bei der Wellenlänge des Maximums der gemessenen Absorptionsbande auf. Davor und dahinter liegen im Bereich des An- und Abstiegs Nachbarmaxima.

Das Maximum der Ableitung vierten Grades liegt auf der Wellenlänge des gemessenen Absorptionsmaximums einer Bande.

Mit zunehmender Ordnung der Ableitung treten jedoch vermehrt Maxima auf, die keine im Originalspektrum enthaltenen Merkmale wiedergeben.

Die Ableitungen wurden weder elektronisch noch optisch gemessen, sondern aus den Absorptionsspektren berechnet und in jedem Ableitungsschritt geglättet.



Abbildung 21 – Ableitungsanalyse eines Cyanobakterienabsirotuibsspektrums (A0) und Absorptionsbanden der wichtigsten Pigmente. Ableitungen erster (A1), zweiter (A2) und vierter Ordnung (A4)

Um die Absorptionsspektren in einzelne Gauß'sche Absorptionsbanden zu separieren, wurden weiterhin von anderen Autoren (Ficek et al. 2004; Lohrenz et al. 2003) veröffentlichte Absorptionsbanden von den gemessenen Spektren subtrahiert, wobei die Merkmale der akzessorischen Pigmente als Residuen übrig blieben. Jedoch sind die verwendeten Absorptionsbanden nicht ausreichend geeignet für die gemessenen Spektren, da sie nicht auf die Pigmentzusammensetzung abgestimmt sind.

Insgesamt weisen die gemessenen Spektren der Cyanobakterien in der sogenannten Grünlücke ein bis zwei Absorptionsmaxima der akzessorischen Pigmente auf. Diese Pigmente (Phycoerythrin ~570 nm und Phycocyanin 620–630 nm) sammeln zusätzlich Energie für die Photosynthese, weshalb Cyanobakterien im Gegensatz zu anderen Phytoplanktonarten auch in Schwachlichtbereichen wie in tieferen Gewässerschichten wachsen können.

Anhand der gemessenen Spektren lassen sich auch Picocyanobakterien und größere, filamentöse Arten unterscheiden. Erstere treten meist zu Beginn der Blütenentwicklung auf und bilden mehr Phycoerythrin (PE), letztere bilden die dichten, zum Teil als Blüten aufschwimmenden Aggregationen und enthalten ausschließlich Phycocyanin (PC). In den gemessenen Absorptionsspektren zeigen Picocyanobakterien sowohl einen PE-Peak als auch einen schwächeren PC-Peak. Die filamentösen Arten weisen dagegen einen deutlicheren PC-Peak, aber keine PE-Absorption auf.

Im Vergleich mit anderen Messergebnissen (N. Strömbeck, Univ. Uppsala) zeigt sich eine ähnliche Form der Absorptionsspektren. Die insgesamt geringere Absorption der Strömbeck-Spektren lässt sich durch andere Umweltbedingungen während des Wachstums erklären. Auch die verhältnismäßig geringere Absorption im Bereich des Phycocyanin und die stärkere Absorption durch Chlorophyll deuten auf bessere Lichtbedingungen hin. Dabei werden weniger akzessorische Pigmente gebildet, ein höherer Anteil des Lichts wird durch Chlorophyll absorbiert.

Diese Ergebnisse zeigen, dass kein einheitliches Absorptionsspektrum der Cyanobakterien existiert. Je nach Art und Umweltbedingungen treten spektrale Eigenschaften unterschiedlich stark hervor. Die Ursache dafür liegt in der komplementären, chromatischen Adaption, also der Modifikation der Pigmentzusammensetzung (Verhältnis Phycocyanin/Phycoerythrin) in Abhängigkeit von den Lichtbedingungen. Die Fähigkeit zur komplementären, chromatischen Adaption ist nach Seppälä (2009) nur in Arten mit Phycoerythrin nachgewiesen. Diese spielen jedoch bei der Ausprägung oberflächennaher und zum Teil großflächiger Algenblüten eine untergeordnete Rolle, da sie eher zu Beginn einer Blüte und in tieferen Wasserschichten auftreten. Für den Fall der Fernerkundung spielen daher die großen koloniebildenden Arten eine wesentlich größere Rolle. Aber auch die Synthese von akzessorischen Pigmenten wie Phycocyanin kann zugunsten der Chlorophyllbildung bei ausreichender Lichtverfügbarkeit vermindert sein.



Abbildung 22 – Absorptionsspektren von Nodularia spp. und Aphanizomenon spp. (dunkelblau) (Niklas Strömbeck (nicht veröffentlicht))

Zu Beginn des Zellwachstums, meist in größeren Wassertiefen ist vor allem bläulichgrünliches Licht verfügbar, da mit zunehmender Wellenlänge die Absorption des Wassers für geringere Durchlässigkeit gegenüber der eintreffenden Strahlung sorgt. Picocyanobakterien, welche üblicherweise zu Beginn einer Blaualgenblüte auftreten, sind mit dem Pigment Phycoerythrin, das in diesem Bereich (570 nm) ein Absorptionsmaximum hat, bevorteilt und können so Energie gewinnen. Im Falle der Ostsee fällt die Lichtintensität im grünen Bereich, speziell nach Norden, jedoch geringer aus, da hier die Absorption durch Gelbstoff die zur Verfügung stehende Lichtmenge einschränkt.

Zur Vereinfachung im Hinblick auf einen Fernerkundungsalgorithmus wurden aus den gemessenen Spektren je ein gemitteltes Absorptions- und Streuspektrum berechnet, welche später in das Modell zur Berechnung der optischen Wasserparameter integriert wurden. Die zugrunde gelegten Messungen repräsentieren einen Querschnitt der gemessenen Cyanobakterienspektren.

Dazu wurden die optischen Daten der für Oberflächenblüten maßgeblichen Arten Nodularia und Aphanizomenon ausgewählt. Aus sämtlichen gemessenen Absorptions- und Streuspektren mit unterschiedlichen Nährstoff- und Beleuchtungsbedingungen wurde jeweils ein Mittelwert berechnet. Die mittleren Absorptionsspektren der beiden Spezies sind in Abbildung 23 dargestellt und weisen einen vergleichbaren Verlauf auf. Beide Spektren zeigen die Absorptionsmerkmale von Chlorophyll und Phycocyanin. Die höhere Absorption im mittleren Wellenlängenbereich bei Aphanizomenon ist möglicherweise auf einen höheren Anteil an Carotinoiden zurückzuführen. Aus den beiden mittleren Spektren der jeweiligen Spezies wurde wiederum ein Spektrum aus Mittelwerten berechnet, welches dann als Mischspektrum der blütenbildenden, in der Ostsee auftretenden Cyanobakterien fungiert.



Abbildung 23 – Absorptionsspektren von Nodularia spp. und Aphanizomenon spp.

Da es sich hierbei um ein Mischspektrum der Pigmentzusammensetzung der jeweiligen Arten handelt und folglich ein Mittelwert sämtlicher vorhandener Pigmente enthalten ist, wurde im nächsten Schritt die Absorption bzw. die Streuung von Chlorophyll subtrahiert, um lediglich die Eigenschaften der akzessorischen Pigmente der Cyanobakterien im Vergleich zu den in früheren Algorithmen berücksichtigten, durch Chlorophyll a dominierten, Phytoplanktonarten zu erhalten. Dazu wurden sowohl das typische Chlorophyll-a-Spektrum sowie das gemessene Cyanobakterienspektrum der filamentösen Cyanobakterienarten auf das Absorptionsmaximum von Chlorophyll a bei 440 nm normalisiert und das Chlorophyll-a-Spektrum vom Cyanobakterienspektrum subtrahiert. Als Ergebnis erhält man ein um die Chlorophyll-a-Absorption bereinigtes Spektrum, das deutlich den zu erwartenden Verlauf eines Phycocyaninabsorptionsspektrums wiedergibt. Das daraus resultierende Absorptionsspektrum wurde auf die Absorption bei 620 nm normalisiert, um eine anschlie-Bende Quantifizierung zu ermöglichen.

#### 3.8.5.8 Selektive Bleichung

Ein weiteres, neues Verfahren zur differenzierten Messung der Absorptionseigenschaften von Phycobilipigmenten und anderen Pigmenten beschreiben Simis und Kauko (2012). Durch Bleichung mittels β-Cyclocitral werden innerhalb weniger Minuten Chlorophylle, Carotinoide und Xantophylle gebleicht, während die Bleichung der Phycobilipigmente langsamer abläuft. In kurzer zeitlicher Abfolge gemessene Absorptionsspektren erlauben so eine Distinktion der einzelnen Absorptionseigenschaften der verschiedenen Pigmente.

In Abbildung 24 wurden die durch Simis und Kauko ermittelten spezifischen Absorptionsspektren für Chlorophyll a (violett-gepunktet) und Phycocyanin (türkisgestrichelt) mit den aus den Laborspektren berechneten Spektren (Chl.-a in blau, Phycocyanin in rot-gestrichelt) verglichen und wiesen eine durchaus ähnliche Form auf.



Abbildung 24 – Vergleich von Absorptionsspektren ( $a^*_{Ch1}$  und  $a^*_{PC}$ ), gewonnen durch Subtraktion (blau und rot-gestrichelt) und Bleichung (violett-gepunktet, türkis-gestrichelt)

# 4 Modellierung und Simulation

Morel und Gordon (1980) stellen drei verschiedene Ansätze zur Entwicklung von Fernerkundungsalgorithmen vor: empirische, semi-empirische bzw. semi-analytische und analytische Methoden. Diese stellen jeweils unterschiedliche Anforderungen in Bezug auf Datenverfügbarkeit und Komplexität der Methode.

Bei den empirischen Ansätzen werden die Beziehungen zwischen dem reflektierten Sonnenlicht und den Wasserinhaltsstoffen lediglich auf der Grundlage weniger, unterschiedlicher Messdaten vor Ort hergestellt, indem die Reflektanzen und Konzentrationen einer Korrelationsanalyse unterzogen werden. Ein weitergehendes Wissen über die optischen Eigenschaften der Wasserinhaltsstoffe ist nicht nötig, weshalb dies einfache und wenig rechenintensive Methoden sind, die sich jedoch im Wesentlichen nicht zur Ableitung mehr als eines Inhaltsstoffes eignen. Einen empirischen Ansatz zur Unterscheidung von verschiedenen Phytoplanktongruppen in spanischen Gewässern haben Peña-Martinez et al. (2003) verfolgt.

Größere Genauigkeit und Gültigkeit bieten die semi-analytischen und analytischen Verfahren. Sie basieren auf statistischen Beziehungen zwischen den Reflektanzwerten und den Wasserinhaltsstoffen und beziehen die optischen Eigenschaften der einzelnen Stoffe mit ein. Dabei wird die volle zur Verfügung stehende spektrale Information genutzt. Da diese Ansätze jedoch auf einem Modell aufbauen, sind detaillierte Informationen über die Eigenschaften der Modellkomponenten notwendig.

Unter der Voraussetzung ausreichender Kenntnis der optischen Eigenschaften der Einzelkomponenten (siehe Kapitel 3) ist der nächste Schritt bei der Entwicklung einer modellbasierten Inversion die Vorwärtsmodellierung. Sie dient dazu, einen repräsentativen Datensatz der zu erwartenden Messwerte zu simulieren, mit dem im Anschluss ein Inversionsverfahren entwickelt wird (siehe Kapitel 5).

Um eine Simulation des Unterwasserlichtfeldes durchzuführen, wird ein Modell benötigt, welches die Beziehungen zwischen den einzelnen optisch wirksamen Komponenten und der resultierenden reflektierten Strahlung herstellt. Die meisten Modelle basieren dabei auf den Koeffizienten für Absorption und Streuung bzw. Rückstreuung, welche sich jeweils aus der Summe der spezifischen Koeffizienten der einzelnen Wasserinhaltstoffe bzw. des Wassers selbst ergeben (Heege 2000, S. 48).

Obwohl in der Natur die optischen Eigenschaften je nach Zellaufbau und Wachstum von Phytoplankton, Zusammensetzung von Sedimenten oder dem Einfluss anderer Umweltfaktoren variieren (Kirk 1994; Seppälä 2009, S. 38), muss zum Zwecke der Modellierung ein Streu- bzw. Absorptions-Querschnitt für jede Komponente gefunden werden (Bukata et al. 1995). Je besser dieser Querschnitt mit den tatsächlich auftretenden Eigenschaften übereinstimmt, desto genauer sind die resultierenden Aussagen. Für die Modellierung der Ostsee wurde die Anzahl auf fünf optisch aktive Komponenten limitiert, deren optische Eigenschaften im vorangegangenen Kapitel erläutert wurden. Im Folgenden soll nun dargestellt werden, wie aus den Eigenschaften der Einzelkomponenten und variierenden Konzentrationen die optischen Eigenschaften der Ostsee simuliert wurden.

## 4.1 Strahlungstransport

Die Hauptaufgabe bei der Auswertung von Fernerkundungsdaten besteht darin, die Relation zwischen den gemessenen physikalischen Parametern und den biophysikalischen Zielparametern herzustellen. Die Messgröße, in diesem Fall die am Satellitensensor gemessenen Strahldichten, wird beeinflusst von der Sonneneinstrahlung und den Absorptions- und Streuprozessen, denen sie auf dem Weg zwischen Sonne und Sensor unterliegt, bzw. den reflektierenden oder absorbierenden Materialien auf diesem Weg. Diese Wechselwirkungen werden durch die Strahlungstransportgleichung beschrieben, welche somit das "Zentralproblem der optischen Ozeanografie" (Zimmermann 1991, S. 36) darstellt.



Abbildung 25 – Prozesse des Strahlungstransfers (nach Kirk 1994, S. 24)

Beim Passieren eines Lichtstrahls durch ein Medium werden durch Streuung zusätzliche Photonen aus ursprünglich anderen Richtungen ( $\vartheta$ ,  $\varphi$ ) in Richtung des Lichtstrahls ( $\vartheta$ ,  $\varphi$ ) hinzugewonnen, andere Photonen durch Streuung aus der Richtung des Lichtstrahls herausgestreut. Dabei ist  $\vartheta$  der Zenitabstand und  $\varphi$  der Azimut zur Sonne. Eine weitere Reduktion der Photonen des Lichtstrahls erfolgt durch Absorption. Die Streuung aus dem Lichtstrahl heraus sowie der Verlust durch Absorption bilden die Attenuation, den ersten Term auf der rechten Seite der im Folgenden dargestellten Strahlungstransfergleichung... Der zweite Term beschreibt den Zugewinn durch Einstreuung (Kirk 1994, S. 23; Zimmermann 1991, S. 37).

Die räumliche Verteilung des Strahlungsfeldes im Wasser wird nach Zimmermann (1991) als eine Funktion der Wassertiefe (z), des Zenit- ( $\vartheta$ ) sowie des Azimutwinkels ( $\varphi$ ), des Raumwinkels ( $\omega$ ) der Phasenfunktion der Streuung (P), der Koeffizienten für Extinktion (c(z)) und Streuung (b(z)) beschrieben und lautet "für unpolarisierte Strahlung ohne Fluoreszenz":

$$\cos\vartheta \frac{dL(z,\vartheta,\varphi)}{dz} = -c(z)L(z,\vartheta,\varphi) + b(z) \int_{\Omega'} L(z,\vartheta',\varphi') P(z,\vartheta,\varphi;\vartheta'\varphi') \, d\omega'$$

Um die Berechnung optischer Eigenschaften verschiedener Gewässertypen durchzuführen, muss zunächst ein Modell erstellt werden, welches die natürlichen Gegebenheiten möglichst exakt nachbildet. Zur Simulation des reflektierten Lichts aus Gewässern ist daher eine Modellierung des Strahlungstransports auf dem Weg von der Sonne als Energiequelle bis zum Sensor ausschlaggebend. Die zugrunde liegende Theorie für sämtliche Methoden der optischen Ozeanographie ist dabei die Theorie des Strahlungstransfers.

Das eingestrahlte Sonnenlicht trifft zunächst auf die Erdatmosphäre, wo in der obersten Schicht vor allem Ozon zu einer Absorption im ultravioletten (UV) Bereich führt. Innerhalb des Wassers ist der Strahlungstransfer bestimmt von der Interaktion des Lichts mit dem Wasser und dem darin enthaltenen suspendierten oder gelösten Material (Zaneveld 1974).

Die Intensität des eingestrahlten Lichts ist somit von mehreren Faktoren abhängig. Entlang des Pfades durch die Atmosphäre sind diese: Der **Sonnenstand**: Je nach Sonnenwinkel ist der Weg der Strahlung durch die Atmosphäre kürzer oder länger, wodurch die Absorption und die Streuung an atmosphärischen Partikeln und Molekülen zunehmen.

Die **Atmosphärenzusammensetzung**: Je nach Art und Menge der anzutreffenden Gase und Aerosole ist die Attenuation unterschiedlich hoch. Insbesondere über Ozeanflächen findet sich eine typische maritime Aerosolzusammensetzung mit einem hohen Anteil an Wassermolekülen (Nebel).

Die Gelände- oder Gewässerhöhe: Auch die Höhe des beobachteten Objekts über Normalnull (NN) beeinflusst die Länge des Weges, welchen die Strahlung durch die Atmosphäre zurücklegen muss und bedingt daher die Stärke der gemessenen Strahlung. Für Ozeane und Meere hat vor allem der Druck der Atmosphäre eine Auswirkung auf den Strahlengang, da die Pfadlänge durch die Atmosphäre dementsprechend variiert.

Die **Bewölkung**: Im Bereich der optischen Fernerkundung spielt die Bewölkung eine besondere Rolle. Während sich dünne, transparente Wolkenschichten mit einer geeigneten Atmosphärenkorrektur noch aus dem Signal herausrechnen lassen, führt dichte, insbesondere hohe Quellbewölkung jedoch dazu, dass das gemessene Signal keine Informationen aus dem Wasser trägt, da es bereits an der Wolkenobergrenze reflektiert wird.

An der Erd- bzw. Gewässeroberfläche wird die Stärke der Rückstrahlung von weiteren Faktoren beeinflusst:

Die **Oberflächenalbedo**: Eis- und Schneebedeckung haben einen besonders hohen Reflexionsgrad, wohingegen insbesondere Wasserflächen einen geringen Albedowert aufweisen.

Der **Einfallswinkel**: Abhängig von der Exposition der Oberfläche wird die Strahlung bei flachem Einfall unter Umständen zu großen Teilen direkt an der Oberfläche reflektiert. Besonders in der Gewässerfernerkundung bei flachem Einfallswinkel mit welliger Gewässeroberfläche kann dies auftreten, wodurch das gemessene Signal kaum Informationen über den Inhalt des Wasserkörpers trägt. Dieser Effekt wird als Glitter bezeichnet.



Abbildung 26 – Strahlungstransfer in der Atmosphäre

Von den vorab genannten Einflussfaktoren ist für die Gewässerfernerkundung, wie sie in dieser Arbeit angewandt wird, vor allem die Atmosphärenzusammensetzung von Bedeutung, um die atmosphärischen Einflüsse aus dem Messsignal herauszurechnen. In Bezug auf die Inversion der Reflektanzspektren, die den an der Wasseroberfläche gemessenen Werten entsprechen, sind die Haupteinflussfaktoren die Beleuchtungs- und Beobachtungsgeometrie und die Prozesse im Wasser selbst. Diese wiederum werden von den im vorigen Kapitel beschriebenen inhärenten optischen Eigenschaften beeinflusst.

## 4.2 Ozeanmodelle

Analytisch kann die Strahlungstransfergleichung nur im Fall der Einfachstreuung gelöst werden. Dieser Fall gilt näherungsweise für optisch dünne Medien, in denen die Streuung klein gegen die Absorption ist. Zur numerischen Lösung der Strahlungstransportgleichung existieren verschiedene, aufwendige Verfahren wie Monte-Carlo-Methoden, Matrix-Operator-Methoden oder Finite-Elemente-Methoden. Daneben wurden verschiedene analytische Verfahren entwickelt, um aus den Absorptions- und Streukoeffizienten, also den inhärenten optischen Parametern, die scheinbaren optischen Parameter wie Reflexion und Extinktion zu berechnen (Heege 2000, S. 48).

Auf Grundlage von Korrelationsuntersuchungen beschreibt Zimmermann (1991, S. 117) die Beziehung zwischen Reflektanz an der Wasseroberfläche (R), aufwärtsgerichteter Radianz (L<sub>u</sub>) und abwärtsgerichteter Irradianz (E<sub>d</sub>):

$$R(\lambda) = \frac{\pi L_u(\lambda)}{E_d(\lambda)}$$

Nach Zimmermann (1991, S. 281) haben Kozlyaninov und Pelevin bereits 1965 aus dem Strahlungstransport im Wasser folgende Relation zwischen der Wasserreflektanz (R) und den Absorptions- und Rückstreukoeffizienten (a bzw. b<sub>b</sub>) in Abhängigkeit von Wellenlänge ( $\lambda$ ) und Wassertiefe (z) bestimmt, die später durch Gordon et al. (1975) und Morel (1988) präzisiert wurde:

$$R(\lambda, z) = \gamma \frac{b_b(\lambda, z)}{a(\lambda, z)}$$

Der Proportionalitätsfaktor ( $\gamma \approx 0,331$ ) ist dabei abhängig von der räumlichen Verteilung der einfallenden Strahlung (Gege, 1994). Die Gesamtkoeffizienten für Absorption und Streuung setzen sich, abhängig von der Komposition des Wassers mit seinen Inhaltsstoffen, aus den Absorptions- und Rückstreukoeffizienten der Einzelkomponenten zusammen. Im Falle der gängigen Wassermodelle sind dies die Absorptionskoeffizienten des Wassers bzw. der Wassermoleküle ( $a_w$ ), des Chlorophylls ( $a_c$ ), des Sediments ( $a_s$ ) sowie des Gelbstoffes ( $a_y$ ). Gleichermaßen bilden die Streukoeffizienten des Wassers ( $b_w$ ), des Chlorophylls ( $b_c$ ), des Sediments ( $b_s$ ), sowie des Gelbstoffes ( $b_y$ ) den Gesamtstreukoeffizienten. Für das in dieser Arbeit entwickelte Ostseemodell wurden weiterhin die Absorptions- und Streukoeffizienten für Phycocyanin ( $a_{pc}$  und  $b_{pc}$ ) in das Modell integriert.

$$a = a_w + a_c + a_s + a_y + a_{pc}$$
$$b = b_w + b_c + b_s + b_y + b_{pc}$$

Ein Verfahren zur Simulation der Wasserfarbe in Abhängigkeit zu den Wasserinhaltsstoffen bietet Gege (2004) mit dem Water Color Simulator (WASI). Das Matrix-Operator-Model (MOMO) von Fell und Fischer (2001) ermöglicht ebenfalls die Berechnung des Lichtfeldes im Gesamtsystem Atmosphäre-Ozean. Die häufig verwendete Methode von Mobley (1989) namens Hydrolight berechnet ausschließlich das Unterwasserlichtfeld.

Insbesondere die möglichst genaue Lösungsnäherung mithilfe von Monte-Carlo-Berechnungen ist jedoch sehr zeitaufwendig. Zur Validierung anderer Methoden werden diese Ergebnisse aufgrund ihrer hohen Genauigkeit häufig herangezogen.

# 4.3 BalticCyano-Modell

#### 4.3.1 Grundannahmen

Bei der Entwicklung von Modellen, die natürliche Prozesse und Eigenschaften abbilden, werden spezifische Annahmen gemacht, deren Einhaltung letztlich auch die Gültigkeit eines Modells bedingen. Ein solches Modell ist nur auf Situationen anwendbar, in denen die einbezogenen Bestandteile und Rahmenbedingungen hinreichend genau gegeben sind. Im Falle des für diese Arbeit entwickelten Ostseemodells sind dies einerseits die Grundkomponenten der Zusammensetzung des Wasserkörpers, deren optische Eigenschaften, anhand derer die Absorptions- und Streueigenschaften beschrieben werden, sowie die Annahme einer glatten Wasseroberfläche und direkter Sonneneinstrahlung. Die letztgenannte Annahme ist aufgrund des zu erwartenden Wetters über dem Beobachtungsraum der Ostsee oft nicht gegeben, für die Entwicklung eines optischen Fernerkundungsalgorithmus jedoch eine gültige Voraussetzung, da bei Bewölkung ohnehin nur der Oberrand der Wolkenschicht durch den Sensor abgebildet wird. Nicht einbezogen wird bei dem vorliegenden Modell die Fluoreszenz von Phytoplankton. Bei Fluoreszenzmessungen mit gezielter Anregung eignet sich dieser Parameter zur Bestimmung von Phytoplanktonpigmenten. Im Gegensatz zu diesen aktiven Methoden beschreibt Gege (1994) die Effekte der passiven In-vivo-Fluoreszenz bei 685 nm und 730 nm als zu gering, um einen wesentlichen Einfluss auf den Spektralverlauf der Reflexion im Hinblick auf die Fernerkundung zu haben. Auch Kutser et al. (2008) konstatieren, dass die Chlorophyll-Fluoreszenz, insbesondere bei Cyanobakterien, vernachlässigbar ist, da sich dort der größte Teil des Chlorophylls im nichtfluoreszierenden Photosystem I befindet.

#### 4.3.2 Modellparameter

Für die Entwicklung des Algorithmus zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe der Ostsee in dieser Arbeit wurde aufgebaut auf dem spezifischen Ostseemodell des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt aus dem Projekt MAPP (Neumann et al. 1998). Dieses Ostseemodell lehnt sich an dem generischen Case-2-Modell desselben Projekts an und basiert auf Langzeitmessungen der inhärenten optischen Eigenschaften und Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe der Ostsee. Generische Standardalgorithmen und Modelle lassen sich nur beschränkt auf die Ostsee anwenden, da diese weder die dichten Algenblüten noch die Absorption durch akzessorische Pigmente der Cyanobakterien sowie die hohe Gelbstoffabsorption berücksichtigen, die für die Ostsee typisch sind. Aus diesem Grund wurde dem regionalspezifischen Ostseemodell eine weitere Komponente, das akzessorische Pigment Phycocyanin mit spezifischer Absorption und Streuung, hinzugefügt.

Zur Simulation der scheinbaren optischen Eigenschaften wird die Finite-Elemente-Methode auf die Lösung der Strahlungstransfergleichung angewendet (Bulgarelli et al. 1999), wobei das weiterentwickelte Modell mit bekannten und gemessenen Absorptions- und Streueigenschaften des Wassers und seiner Inhaltsstoffe (Abbildung 27) zum Einsatz kommt. Die gesamte Absorption und Streuung setzt sich dabei wie folgt zusammen. c bezeichnet dabei die Konzentration des jeweiligen Wasserinhaltsstoffes (siehe S. 63), wohingegen a\* und b\* die jeweiligen spezifischen Absorptions- und Streukoeffizienten sind.

$$a(\lambda) = a_w(\lambda) + a_c^*(\lambda) \times c_c + a_s^*(\lambda) \cdot c_s + a_y^*(\lambda) \cdot c_y + a_{pc}^*(\lambda) \cdot c_{pc}$$
$$b(\lambda) = b_w(\lambda) + b_c^*(\lambda) \cdot c_c + b_s^*(\lambda) \cdot c_s + b_{pc}^*(\lambda) \cdot c_{pc}$$

Die Absorptions- und Streueigenschaften von Chlorophyll, Schwebstoff und Gelbstoff wurden bereits im vorherigen Kapitel erläutert. Die optischen Eigenschaften der Cyanobakterien wurden aus den Labormessungen bestimmt und mit den zuvor genannten Daten kombiniert. Der Streuwinkel  $\theta$  wird durch die Phasenfunktion  $\beta$  berücksichtigt, welche von der Größe und Form der streuenden Partikel abhängt. Im verwendeten Modell wurde eine Zwei-Term-Heyney-Greenstein-Phasenfunktion (Heyney und Greenstein 1941) verwendet. Diese findet aufgrund ihrer guten Übereinstimmung mit experimentell ermittelten Phasenfunktionen (Petzold 1972) häufig in Strahlungstransportberechnungen Anwendung (Haltrin 2002, S. 1).



Abbildung 27 – Eingangsspektren des BalticCyano-Modells, Absorption von Wasser ( $a_w$ ), Chlorophyll-a ( $a_c$ ), Phycocyanin ( $a_{pc}$ ), Sediment ( $a_s$ ) und Gelbstoff ( $a_y$ ) sowie Streuung von Wasser ( $b_w$ ), Chlorophyll a ( $b_c$ ), Phycocyanin ( $b_{pc}$ ) und Sediment ( $b_s$ )

## 4.4 Simulation der Reflektanzspektren

Auf der Grundlage der oben genannten Annahmen und Eingangsspektren sowie der zu berechnenden Konzentrationswerte wurde zur Datensimulation das Programm FEMWAT zur Berechnung der Wasserfarbe mithilfe der Finite-Elemente-Methode (Bulgarelli et al. 1999) eingesetzt. Dieses Programm wurde speziell für die Vorwärtsmodellierung von Gewässerspektren erstellt und bereits für den DLR-PCI-Algorithmus (Krawczyk et al. 1999) verwendet. In dem Programm werden sowohl die Atmosphäre als auch der Wasserkörper als ein planparallel-geschichtetes System angenommen. Dieses wird in mehrere homogene Schichten unterteilt und für jede einzelne Schicht werden die zu erwartenden Strahldichten und Strahlungsflüsse berechnet, wobei auch die Prozesse an der Grenze zwischen Atmosphäre und Wasserkörper berücksichtigt werden. In ihrer Arbeit stellen Bulgarelli et al. (1999) die näherungsweise Lösung der Strahlungstransfergleichung vor und validieren die Methode anhand eines umfangreichen Beispiels nach Mobley et al. (1993), einer Konsistenzprüfung durch Test der Strahlungsflusserhaltung in einem rein streuenden Medium, und durch einen Vergleich mit Daten aus Monte-Carlo-Berechnungen. Somit stellt die Finite-Elemente-Methode eine zuverlässige Methode zur Berechnung des Strahlungsfeldes in einem planparallelen, vertikal-inhomogenen Medium dar.
Für die Strahlungssimulation des Wassermodells wurden die Atmosphärenschichten nicht berücksichtigt, da für die Auswertung bereits atmosphärenkorrigierte Daten verwendet wurden. Ziel der Simulation war die Berechnung der Reflektanzwerte an der Wasseroberfläche, sogenannter Spektren am Unterrand der Atmosphäre (BOA – Bottom of Atmosphere).

Grundlagen für die Modellierung des Strahlungstransportes waren die Absorptions- und Streueigenschaften der einzelnen Wasserinhaltsstoffe. Bei diesem Vier-Komponentensystem sind dies Chlorophyll, Schwebstoff, Gelbstoff und Phycocyanin.

#### 4.4.1 Rahmenwerte

Um die benötigte Rechenzeit für die Analyse des Trainigsdatensatzes, also das Training des Neuronalen Netzes für die Lösung der Inversion, gering zu halten, muss die Größe des Simulationsdatensatzes möglichst klein gehalten werden. Andererseits soll der zu erwartende Werteraum des natürlichen Vorkommens entsprechend repräsentiert sein. Die Werte der Parameter der Wasserinhaltsstoffe wurden aus diesem Grund ähnlich einer logarithmischen Skala gewählt. Die Schrittgröße zur nächsthöheren Konzentration fällt dabei umso größer aus, je höher die Konzentration ist. Somit sind geringe Konzentrationen im simulierten Datensatz stärker repräsentiert, als hohe oder sehr hohe Konzentrationen, was auch die natürliche Verteilung widerspiegelt. In der folgenden Tabelle sind die gewählten Konzentrationswerte, Absorptionssowie Streukoeffizienten für die Wasserinhaltsstoffe gemäß dem zu erwartenden Auftreten in der Ostsee und die Geometriewerte für den MERIS-Sensor und die Sonnenstände über der Ostsee, die für die Simulation gewählt wurden, beschrieben.

Parameter	Wert
Chlorophyllkonzentration [mg/m <sup>3</sup> ]	0,001; 0,01; 0,1; 1; 5; 10; 30; 60
Sedimentstreuung [bs(550)] [m <sup>-1</sup> ]	0,001; 0,01; 0,1; 0,5; 1; 10
Gelbstoffabsorption [ay(440)] [m <sup>-1</sup> ]	0,001; 0,01; 0,1; 0,5; 1; 2
Phycocyaninabsorption [apc(620)] [m <sup>-1</sup> ]	0,001; 0,01; 0,05; 0,1; 0,5; 1,5; 5
Sonnenzenitwinkel [°]	20; 30; 40; 50; 60; 70; 80
Sensorzenitwinkel [°]	0; 10; 20; 30; 40
Azimutdifferenz [°]	0; 30; 60; 90; 120; 150; 180

Tabelle 3 – Parameterwerte zur Simulation des Trainingsdatensatzes

Die Geometriewerte ergeben sich aus der geographischen Lage der Ostsee, der Überflugszeit des Envisat-Satelliten und den Sensoreigenschaften (siehe Kapitel 5.2). In Nadir-Richtung beträgt der Sensorzenitwinkel 0°, zu den Rändern des Schwads hin nimmt dieser bis 40° zu.



Abbildung 28 – Schematische Darstellung der Vorwärtsmodellierung

### 4.4.2 Ergebnisse

Als Ausgabe des FEMWAT-Programms werden Tabellen mit Ergebnissen des Strahlungsflusses und der Strahldichten in den 12 Bändern des MERIS-Sensors für jede Parameterkombination generiert. Aus diesen wird schließlich die benötigte Fernerkundungsreflektanz (R<sub>RS</sub>) an der Wasseroberfläche berechnet. Der simulierte Datensatz hat einen Umfang von über 300.000 Zeilen, wobei jede Zeile eine Kombination aus Konzentrationen und Geometrien darstellt. In der folgenden Abbildung soll der Einfluss der variierenden Konzentrationen einzelner Parameter auf das Spektrum bei einem Sonnenzenitwinkel von 40° dargestellt werden.



Abbildung 29 – Reflektanzspektren mit variierender Chlorophyll-a-Konzentration [mg/m<sup>3</sup>], Gelbstoffabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>, Sedimentstreuung = 0,1 m<sup>-1</sup>, Phycocyaninabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>

Der Einfluss der Chlorophyll-a-Konzentration ist besonders im blauen Wellenlängenbereich festzustellen, wenn in den angezeigten Spektren eine geringe Gelbstoffkonzentration vorherrscht (Abbildung 29). Auch die Auswirkung des zweiten Absorptionsmaximums von Chlorophyll a im roten Wellenlängenbereich ist zu erkennen, jedoch geringer ausgeprägt, da die Überlagerung durch die Absorption der Wassermoleküle in diesem Bereich bereits deutlich zunimmt.



Abbildung 30 – Reflektanzspektren mit variierender Chlorophyll-a-Konzentration [mg/m<sup>3</sup>], Gelbstoffabsorption =  $0.5 \text{ m}^{-1}$ , Sedimentstreuung =  $0.1 \text{ m}^{-1}$ , Phycocyaninabsorption =  $0.1 \text{ m}^{-1}$ 

Bei höherer Gelbstoffkonzentration (Abbildung 30) tritt die Auswirkung der Absorptionsbande im blauen Bereich aufgrund der Maskierung durch die Gelbstoffabsorption weniger deutlich auf. In beiden Fällen sichtbar ist das Maximum der Chlorophyll-a-Streuung im Bereich um 560 nm.



Abbildung 31 – Reflektanzspektren mit variierender Phycocyaninabsorption  $[m^{-1}]$ , Chlorophyll a = 1 mg/m<sup>3</sup>, Gelbstoffabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>, Sedimentstreuung = 0,1 m<sup>-1</sup>

Unterschiede in der Phycocyaninkonzentration schlagen sich in den Reflektanzspektren im mittleren Wellenlängenbereich, verursacht durch das Absorptionsmaximum bei 620 nm, nieder (Abbildung 31). Deutlicher wird der Einfluss variierender Phycocyaninkonzentration bei höherer Chlorophyll-a-Konzentration (Abbildung 32). Aufgrund der höheren Absorption durch Chlorophyll a tritt der Einfluss der Phycocyaninstreuung stärker hervor.



Abbildung 32 – Reflektanzspektren mit variierender Phycocyaninabsorption  $[m^{-1}]$ , Chlorophyll a = 1 mg/m<sup>3</sup>, Gelbstoffabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>, Sedimentstreuung = 0,1 m<sup>-1</sup>



Abbildung 33 – Reflektanzspektren mit variierender Sedimentstreuung  $[m^{-1}]$ , Chlorophyll a = 1 mg/m<sup>3</sup>, Gelbstoffabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>, Phycocyaninabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>

Die Sedimentstreuung bewirkt bei zunehmender Konzentration von Sedimenten eine höhere Reflektanz über das gesamte Spektrum (Abbildung 33). Die Gelbstoffabsorption und damit auch ihr Einfluss auf das Reflektanzspektrum nehmen mit zunehmender Wellenlänge ab (Abbildung 34).



Abbildung 34 – Reflektanzspektren mit variierender Gelbstoffabsorption  $[m^{-1}]$ , Chlorophyll a = 1 mg/m<sup>3</sup>, Sedimentstreuung = 0,1 m<sup>-1</sup>, Phycocyaninabsorption = 0,1 m<sup>-1</sup>

# 5 Satellitenfernerkundung und Inversion

## 5.1 Kurzbeschreibung des Satellitensensors MERIS

Der Multispektralsensor MERIS (Medium Resolution Imaging Spectrometer) ist eines der Geräte auf dem europäischen Umweltsatelliten Envisat, das seit dessen Start im Jahre 2002 durch die ESA routinemäßig betrieben wird. Der etwa acht Tonnen schwere Umweltsatellit ist mit verschiedenen Sensorinstrumenten zur Überwachung des Ökosystems ausgestattet, zu denen Radarmessgeräte, Mikrowellenradiometer und verschiedene Spektrometer gehören.

Hauptanwendungsgebiet des MERIS-Sensors ist die optische Gewässerfernerkundung von Ozeanen und Küstengewässern im visuellen und nahen Infrarotbereich des Spektrums (VIS/NIR). Der digitale Zeilenscanner (Push-broom-Prinzip) hat einen Öffnungswinkel von 68,5°.

Satellitenhöhe	782 km SSO (Sun-synchronous orbit)		
Bahnneigung	98,52°		
Äquatorüberquerungszeit	10:30 LST (Local Solar Time)		
	ascending mode		
Signal-Rausch-Abstand (SNR)	1700 in den Ocean-Color-Kanälen		
Umlaufdauer um die Erde	100,5 min		
Orbitwiederholzeit / Überflugrate	35 Tage		
Reduzierte räumliche Auflösung (RR)	1040m x 1200m		
Volle räumliche Auflösung (FR)	260m x 300m		
Radiometrische Auflösung	16 Bit/Pixel		
Schwadbreite	1150 km		
Globale Abdeckung	Alle drei Tage		
Wellenlänge	VIS-NIR: 15 auswählbare Bänder im		
	Bereich 400 nm bis 1050 nm (Bandbreite		
	programmierbar zwischen 2,5 und 30 nm		

Tabelle 4 – Technische Daten von Envisat und MERIS (CEOS EO Handbook – Update 2012)

Die Entscheidung, den in dieser Arbeit erstellten Algorithmus für den Satellitensensor MERIS zu entwickeln, trägt mehreren Vorteilen in Bezug auf die Fernerkundung von Cyanobakterien in der Ostsee Rechnung. Das Instrument bietet mit einer Schwadbreite von 1150 km und einer räumlichen Pixel-Auflösung von 1040x1200 m im Reduced-Resolution (RR)-Modus die Möglichkeit, große Gebiete in einer Aufnahme abzudecken und im Full-Resolution (FR)-Modus mit 260x300 m eine gute Auflösung für Küstenbereiche. Mit den insgesamt 15 Kanälen im optischen Wellenlängenbereich und im nahen Infrarotbereich werden wichtige Spektralbereiche für die Gewässerfernerkundung erfasst. Die Aufteilung der Kanäle wurde dabei im Hinblick auf die Gewässerfernerkundung entsprechend der wesentlichen optischen Merkmale der Wasserinhaltsstoffe und Atmosphäreneinflüsse gewählt. Das wichtigste Argument im Hinblick auf eine langfristige Überwachung und Beobachtung liegt im operationellen Betrieb des Sensors. Täglich werden in der Empfangsstation des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt in Neustrelitz Daten der Ostsee empfangen und archiviert. So lässt sich alle drei Tage eine vollständige Aufnahme der Ostsee zusammensetzen. Im Gegensatz zu experimentellen Satelliten müssen keine Aufnahmeaufträge für einzelne Orte und Termine erstellt werden. Diese Kontinuität der Datenaufnahme erlaubt die Untersuchung über große Zeiträume bspw. durch Erstellen von Zeitreihen. Mögliche Umweltveränderungen und Trends lassen sich über die gesamte Zeit der Operationsphase des Instruments analysieren. Auch eine Reprozessierung mit neuen Algorithmen ist mit den archivierten Daten möglich.

Ursprünglich war die Missionszeit von Envisat auf fünf Jahre festgelegt, wurde bis 2010 und schließlich nochmals bis 2013 verlängert. Seit einigen Jahren laufen im Rahmen des GMES-(*Global Monitoring for Environment and Security*) Programms bereits Planungen für die Zeit nach Envisat. Anstelle eines großen, teuren Satelliten wie Envisat sollen künftig kleinere, günstigere Satelliten die Aufgaben der Sensoren auf Envisat übernehmen. In der Reihe der kommenden ESA-Sentinel-Satelliten wird das Sentinel-3-Programm das Aufgabenspektrum der Gewässertopographie, Wasserund Landoberflächentemperaturmessung sowie Wasser- und Landoberflächenspektroskopie zum Zweck der Umweltbeobachtung und -vorhersage übernehmen. Für den Multispektralbereich werden diese Satelliten einen OLCI (*Ocean and Land Colour Instrument*) genannten Sensor auf Basis von MERIS einsetzen. Dadurch ist auch über das Missionsende von Envisat hinaus die Datenkontinuität sichergestellt. Verbesserungen werden im Wesentlichen durch die Anhebung der Kanalzahl von 15 auf 21 im Spektralbereich von 400–1050 nm sowie ein Design zur Verringerung von Sun-glint-Effekten erreicht. Die räumliche Auflösung von 260x300 m bleibt auf dem Niveau von MERIS. Ein zweiter Sensor auf Sentinel-3 wird das SLSTR (*Sea and Land Surface Temperature Radiometer*) sein, dessen Schwad sich mit dem des OLCI deckt und neben dem Feuermonitoring mit einer Genauigkeit von 0,3 K die Erfassung der Wasseroberflächentemperatur ermöglicht. Als drittes Instrument wird ein *Synthetisches Apertur Radaraltimeter* im Ku- und C-Band zur Untersuchung der Seeoberfläche in einer Auflösung von ebenfalls 300x300 m zum Einsatz kommen. Durch den Betrieb zweier Sentinel-3-Satelliten wird zudem eine höhere temporale Auflösung erreicht werden (vgl. Aguirre et al. 2007).

Seit dem 8. April 2012 ist die Kommunikation mit dem Flugkörper ENVISAT gestört. Sämtliche Versuche, die Kommunikation mit dem Satelliten wiederherzustellen, schlugen fehl, weshalb in einer Pressemitteilung am 9. Mai 2012 das offizielle Missionsende von Envisat bekannt gegeben wurde. Da die Sentinel-Satelliten frühestens im Jahre 2013 gestartet werden, ergibt sich so eine größere Lücke in der eigentlich geplanten Datenkontinuität. Der in dieser Arbeit entwickelte Algorithmus eignet sich jedoch weiterhin für die Prozessierung der im Laufe der zehn Missionsjahre aufgenommenen Daten und wird, nach entsprechender Adaption und Validierung, auf Daten des Folgesensors OLCI anwendbar sein. Eine Anpassung für den Sensor MODIS Aqua ist in Bezug auf die Untersuchung von Cyanobakterienwachstum nicht möglich, da der für diese Aufgabe wichtige Kanal bei 620 nm fehlt und so im Bereich der Phycocyaninabsorption keine Daten aufgenommen werden. Derselbe Umstand gilt auch für den NASA-Sensor SeaWiFS (Sea-viewing Wide Field-of-view Sensor), womit auch dieser für die Ableitung von phycocyaninspezifischen Parametern im Rahmen des hier entwickelten Algorithmus ungeeignet ist. Auch Reinart und Kutser (2006) kommen, bei einem Vergleich verschiedener Satellitensensoren zur Erkennung von Cyanobakterienblüten, zu dem Ergebnis, dass von den aktuellen Multispektralsensoren lediglich MERIS die Kapazität zum speziellen Nachweis von Cyanobakterien aufweist.

MERIS-Kanalnummer	Wellenlängenbereiche in nm		
	MERIS	MODIS	
1	407,5 - 417,5	405 - 420	
2	437,5 - 447,5	438 - 448	
3	485 - 495	483 - 493	
4	505 - 515	526 - 536	
5	555 – 565	546 - 556	
6	615 - 625		
7	660 - 670	662 - 672	
8	677,5 - 685	673 - 683	
9	700 - 710		
10	750 - 757,5	743 - 753	

Tabelle 5 - Kanäle zur Gewässerfernerkundung der Sensoren MERIS und MODIS und annähernde Farbwerte (Quelle: ESA, NASA)

## 5.2 Beobachtungsgeometrie

Wichtig für die Auswertung passiver optischer Fernerkundungsdaten ist neben den Informationen über den Wasserkörper und seine optischen Eigenschaften die Kenntnis über die Beleuchtungs- und Beobachtungsgeometrie. Die wesentlichen Parameter hierfür sind, wie in Abbildung 35 dargestellt, der Zenitwinkel der Sonne  $\Theta_s$ , der Zenitwinkel des Satelliten  $\Theta_v$  und die Azimutaldifferenz  $\Delta \phi$  (in Abbildung 35 mit  $\emptyset \phi$ beschriftet), also der Winkelabstand zwischen Sonnenazimut ( $\phi_s$ ) und Satellitenazimut ( $\phi_v$ ). Diese Parameter beeinflussen den Weg des Signals durch die Atmosphäre ebenso wie die Effekte an der Wasseroberfläche und somit die Intensität des gemessenen Signals (siehe Kapitel 4.1).



Abbildung 35 – Envisat Beleuchtungs- und Beobachtungsgeometrie (aus dem "MERIS Product Handbook" der ESA, 2006, S. 46)

## 5.3 Vorverarbeitung

Bei dem vom Satellitensensor gemessenen Signal handelt es sich zunächst um Rohdaten, welche reine Instrumentenausgaben darstellen. Bevor diese Daten bezüglich der Wasserinhaltsstoffe ausgewertet werden können, müssen sie vorverarbeitet werden. In der sogenannten Level-1-Verarbeitung werden die Daten georeferenziert und radiometrisch kalibriert. Als Ergebnis erhält man die Radianzen am Oberrand der Atmosphäre L<sub>TOA</sub> (Top of Atmosphere) in  $\frac{W}{m^2 sr nm}$ . Im nächsten Schritt, der Level-2-Verarbeitung, werden die atmosphärischen Einflüsse auf das Signal korrigiert. Level-2-Daten repräsentieren die Reflektanzen am Unterrand der Atmosphäre, entsprechend dem Signal an der Gewässeroberfläche L<sub>BOA</sub> (Bottom of Atmosphere). Diese Daten werden durch eine Level-3-Prozessierung ausgewertet, um Informationen über den Wasserkörper abzuleiten.



Abbildung 36 – Verarbeitungsstufen der Satellitendaten

## 5.4 Atmosphärenkorrektur

Da das am Satellitensensor gemessene Signal  $L_{sat}$  sowohl beim abwärtsgerichteten Weg von der Sonne als auch beim aufwärtsgerichteten Weg zum Sensor die Atmosphäre passiert, stellen die daraus resultierenden Einflüsse einen erheblichen Anteil des gemessenen Signals dar. Für die Analyse des Wasserkörpers muss das Signal daher um diese Anteile korrigiert werden, um das aus dem Wasser stammende Nutzsignal ( $L_W$ ) zu erhalten. Wesentliche Prozesse sind die Streuung an Luftmolekülen und Wasserdampf ( $L_R$  – Rayleigh-Streuung), Streuung an Aerosolen ( $L_M$  – Mie-Streuung) sowie Absorption durch Aerosole und Spurengase ( $L_A$ ) (Zimmermann 1999, S. 140f.). Weitere Störterme sind direkte Reflexionen des direkten oder diffusen Lichts an der Wasseroberfläche  $L_G$  (*glitter* oder *glint*) und, durch Mehrfachwechselwirkungen verursachte, zusätzliche Störsignale  $L_S$ .

$$L_{sat} = L_W + L_A + L_R + L_M + L_G + L_S$$

Diese Störterme müssen aus dem gemessenen Signal herausgerechnet werden, um Aussagen über den Signalanteil zu gewinnen, der in den Gewässerkörper eingedrungen ist und mit den Wasserinhaltsstoffen interagiert hat. Algorithmen zur Lösung dieser Aufgabe werden als Atmosphärenkorrektur bezeichnet.

Je nach Gewässertyp fällt die Atmosphärenkorrektur unterschiedlich komplex aus. Bei optisch einfachen Gewässern (Case 1) wird unter Voraussetzung völliger Absorption der Strahlung im infraroten (IR) Bereich der dort gemessene Wert auf den visuellen (VIS) Bereich extrapoliert. Im Falle optisch komplexer Gewässer (Case 2) ist diese auch als *black water condition* bezeichnete Annahme nicht gültig, da die am Unterrand der Atmosphäre (an der Wasseroberfläche) zu erwartenden Reflektanzwerte aufgrund zusätzlicher Wasserinhaltsstoffe sehr unterschiedlich ausfallen können. So kann bspw. Sedimentstreuung für Reflektanzen in diesem Wellenlängenbereich ursächlich sein. Die Atmosphärenkorrektur ist über Case-2-Gewässern also von mehreren Faktoren abhängig. Auch ist die Aerosolzusammensetzung in Küstennähe eine andere als über offenen Ozeangebieten.

Mithilfe der Atmosphärenkorrektur werden aus den am Sensor gemessenen Strahldichten am Oberrand der Atmosphäre die aus dem Wasser tretenden Reflektanzen abgeleitet. Wie der in dieser Arbeit beschriebene Auswertealgorithmus basiert auch die hier verwendete Atmosphärenkorrektur auf Strahlungstransfersimulationen und wird mithilfe neuronaler Netze realisiert. Für die Berechnung mit dem entwickelten Inversionsalgorithmus zur Bestimmung von Wasserinhaltsstoffen der Ostsee wird auf die Atmosphärenkorrektur des Case2Regional-Prozessors von Doerffer und Schiller zurückgegriffen (vgl. Schroeder et al. 2007; Doerffer 2011).

Wolken und Kondensstreifen sowie Effekte durch direkt an der Wasseroberfläche gespiegelte Strahlung können eine Auswertung der betroffenen Pixel einer Satellitenaufnahme auch verhindern. Sofern möglich, werden diese Effekte berücksichtigt oder, wenn nicht möglich, als ungültige Pixel markiert.

## 5.5 Inversion

Satellitenfernerkundung ist aufgrund der Messung physikalischer Parameter, wie der optischen Messung, eine indirekte Messung im Vergleich zur Laboranalyse von Wasserproben. Der wesentliche Schritt bei der Interpretation von Fernerkundungsdaten ist demnach die Gewinnung geophysikalischer Informationen aus den gemessenen physikalischen Parametern wie der gemessenen Strahlung pro optischem Kanal eines Multispektralsensors. Für die automatische Auswertung großer Mengen von Fernerkundungsdaten, wie dies im Fall einer regulären Umweltüberwachung (Monitoring) nötig ist, müssen folglich automatisierte Verfahren entwickelt werden, die die Basis-Fernerkundungsdaten auswerten und die gesuchten Parameter ermitteln. Komplexe Auswertungen durch einen menschlichen Operator sind sowohl zu zeit- als auch zu personalaufwendig.

Ein derartiger Erfassungsalgorithmus lässt sich nach Krasnopolsky und Schiller (2003) in folgender Formel für einzelne geophysische Parameter G darstellen, wobei

S der gemessene physikalische Wert der Satellitenmessung ist, in diesem Fall die als Gewässerfarbe gemessenen Radianzen in den einzelnen Spektralkanälen, und f eine Transferfunktion zur Ableitung der gewünschten Parameter: G = f(S)

Die Transferfunktion wird in diesem Fall von mehreren Faktoren beeinflusst. Neben den optischen Einflüssen der Wasserinhaltsstoffe und des Wassers selbst sind dies die Beleuchtungs- und Beobachtungsgeometrie. Die Berechnung der biophysikalischen Parameter aus den optischen Messwerten, also die Trennung des Mischsignals in seine Einzelkomponenten, ist ein Inversionsproblem, welches auf verschiedene Art und Weise gelöst werden kann wie zum Beispiel über eine lineare Matrixinversion, Look-up-Tabellen, oder nichtlineare multivariate Verfahren wie neuronale Netze.

Für die Entwicklung von anwendungsorientierten Fernerkundungsalgorithmen ist die Prozessierungsdauer neben der Qualität der Ergebnisse ein weiteres, wichtiges Merkmal der Praxistauglichkeit. Wie bei dem in dieser Arbeit entwickelten Algorithmus findet die aufwendige Analysearbeit daher im Rahmen der Entwicklung statt, sodass die Rechenzeit bei der Ausführung der Inversion minimiert wird. Die Analyse wird bei der modellbasierten Inversion mittels simulierter Daten durchgeführt, weshalb eine vollständige Abdeckung des Geltungsbereichs in diesem Datensatz entscheidend für die Güte der späteren Ergebnisse ist. Bei neuronalen Netzen findet diese Analyse im Rahmen des Trainings eines neuronalen Netzes statt, bei der Hauptkomponenteninversion (engl. *Principal Component Inversion – PCI*) bspw. in der Hauptkomponentenanalyse. Bei der Anwendung der Inversion wird dann lediglich das auf dem apriorischen Wissen basierende Inversionsverfahren, in diesem Fall das trainierte Netz, aufgerufen, was eine sehr schnelle Ergebnisgenerierung gewährleistet. Die Güte der Ergebnisse basiert dabei auf dem Datensatz, der dem Analyseverfahren zugrunde lag.

# 5.5.1 Parameter zur qualitativen und quantitativen Bestimmung von Cyanobakterien

Wie in Kapitel 2.5 erwähnt, werden in Kutsers (2009) Übersicht über die Fernerkundungsverfahren und Sensoren in Bezug auf Phytoplankton und Cyanobakterien bereits einige Methoden dargestellt. Die Detektion und Quantifizierung von Cyanobakterien soll in dieser Arbeit anhand des akzessorischen Pigments Phycocyanin realisiert werden, da dieses in allen blütenbildenden Cyanobakterienarten in der Ostsee vorkommt und in keinen anderen Organismen der Ostsee auftritt. Die bereits genannte Variabilität der Pigmentkonfiguration birgt dabei das Risiko, dass das Vorkommen über- oder unterschätzt wird. Eine Unterscheidung verschiedener Wachstumsstadien ist jedoch auf Grundlage der fernerkundlich gewonnenen Reflektanzwerte in wenigen Bändern des optischen Lichtspektrums nicht möglich, weshalb ein Durchschnittsspektrum für filamentöse Cyanobakterienarten angenommen wurde. Eine Detektion mithilfe des weiteren akzessorischen Pigments Phycoerythrin wurde nicht verfolgt, da dieses laut Seppälä et al. (2007) eher in den Picocyanobakterienarten anzutreffen ist, welche sich aufgrund ihrer tieferen Lebensräume in der Wassersäule nicht zur Fernerkundung eignen. Das grüne Pigment Chlorophyll a ist in Cyanobakterienzellen ebenfalls enthalten, befindet sich dort jedoch im Reaktionszentrum der Phycobilisomen und eignet sich aufgrund des Vorkommens in Grünalgen nicht zur Unterscheidung der Phytoplanktongruppen. Nicht zuletzt hat eine Bestimmung des Pigments Phycocyanin den Vorteil, dass dessen Absorptionsmaximum bei 620 nm weitgehend unbeeinflusst von der Absorption durch Gelbstoff ist.

#### 5.5.2 Künstliche neuronale Netze

Die Inversion der Reflektanzspektren zur Ableitung der Wasserinhaltsstoffe erfordert eine multivariate, nichtlineare Regressionsanalyse. Die verschiedenen Variablen sind dabei die inhärenten optischen Eigenschaften der einzelnen Wasserinhaltsstoffe. Struktur und Begrifflichkeiten der künstlichen neuronale Netze sind angelehnt an die eines natürlichen neuronalen Netzes wie dem des menschlichen Gehirns. Es setzt sich aus vielen einzelnen, untereinander verbundenen Neuronen zusammen, unter denen ein Informationstransfer stattfindet.

Sie bestehen aus einer Eingabeschicht und einer Ausgabeschicht, zwischen denen beliebig viele sogenannte Hidden-Layer als Zwischenschichten liegen können. Auch die Dimension der jeweiligen Schichten ist beliebig bzw. durch die bestimmte Anwendung vorgegeben. Die einzelnen Knotenpunkte der Schichten werden als Neuronen bezeichnet und besitzen jeweils ein Gewicht sowie eine Aktivierungsfunktion.

In Abhängigkeit von der verwendeten Aktivierungsfunktion der einzelnen, künstlichen Neuronen lässt sich das neuronale Netz dem Problem anpassen. Im Falle einer nichtlinearen Regression eignet sich eine nichtlineare Aktivierungsfunktion, in diesem Fall eine Sigmoidfunktion.

Neuronale Netze lassen sich auf eine Vielzahl mathematischer Probleme anwenden. Der Einsatzbereich reicht von Mustererkennung über Sprach- und Klanganalyse bis zur Regelung verschiedener Prozesse. Sie sind besonders zur schnellen Verarbeitung großer Datenmengen geeignet. Der größere Rechenaufwand und die zeitaufwendige Analyse finden vorab statt, sodass ein fertig trainiertes Netz eine bestimmte Aufgabe in sehr kurzer Zeit erledigen kann. Im Gegensatz zu anderen Analysemethoden wie den *Support-Vector-Machines* eignen sich neuronale Netze nicht nur zur Klassifikation, sondern auch zur Regressionsanalyse von Fernerkundungsdaten.

Ein weiterer Vorteil der neuronalen Netze liegt in der Fähigkeit zur Interpolation, das heißt Daten, die im Rahmen der im Trainingsdatensatz vorgegebenen Werte liegen, können von hinreichend trainierten Netzen ebenso interpretiert werden wie die Werte der Trainingsdaten selbst. Außerhalb liegende Werte führen dagegen häufig zu falschen Ergebnissen aufgrund der mangelnden Fähigkeit zur Extrapolation bzw. der Unsicherheit bezüglich der Interpretation in Datenbereichen, welche nicht im Training berücksichtigt wurden.

Im Vergleich zu anderen in der Fernerkundung eingesetzten Inversionstechniken, wie der Hauptkomponenteninversion (Krawczyk et al. 2007), tragen die künstlichen neuronalen Netze der Nichtlinearität des Problems der Ableitung biologischer Parameter aus optischen Fernerkundungsdaten besser Rechnung.

Zum Einsatz kommt bei diesem Algorithmus ein mehrschichtiges, vorwärtsgerichtetes, künstliches neuronales Netzwerk (engl. *multilayer feedforward artificial neural network*). Die Topologie besteht aus zwölf Eingangsneuronen, vier Ausgangsneuronen und dazwischenliegenden, verdeckten Schichten. Die Eingangsneuronen erhalten für jeden Bildpunkt der Satellitenaufnahme neun atmosphärenkorrigierte Reflektanzwerte an der Wasseroberfläche (RL<sub>w</sub>) sowie die nötigen Winkel zur Beschreibung der Beobachtungs- und Beleuchtungsgeometrie ( $\Theta_s$  Sonnenzenitwinkel,  $\Theta_v$  Beobachtungszenitwinkel und  $\Delta \phi$  Azimutdifferenz).

Die Entwicklung und Umsetzung der neuronalen Netze erfolgte in der Programmiersprache *Python*. Das *Feed-forward-neural-network-for-python*-Paket (*ffnet*) von Wojciechowski (2011) erlaubt eine schnelle und einfache Realisierung. Darin enthalten sind Methoden zur Erstellung neuronaler Netze verschiedener Architekturen in Python sowie verschiedene Trainingsalgorithmen, die in der Programmiersprache Fortran 77 geschrieben sind und mit f2py von Python aufgerufen werden. Durch die Verwendung von Fortran ist eine deutlich effektivere Abarbeitung der nötigen Operationen gewährleistet, als dies bei der Bearbeitung mit einer Skriptsprache wie Python möglich wäre. Ab Version 0.7 des *ffnet*-Pakets ist auch eine simultane Berechnung auf mehreren Prozessorkernen (multithreading) möglich, was auf einfachen Rechenanlagen mit mehreren Prozessorkernen das Training beschleunigt.

#### 5.5.3 Konstruktion

Für den Inversionsalgorithmus kommt als Netzwerkkonstruktion ein Mehrschicht-Perzeptron (engl. *multi-layer-perceptron – MLP*) zum Einsatz. Bei der Bestimmung der Dimensionen und Größe des neuronalen Netzes gilt es, ein Netzwerk zu finden, welches im Hinblick auf die Aufgabe ausreichend, jedoch nicht übermäßig komplex ist. Atkinson und Tatnall (2007 S. 703) beschreiben das Problem der Suche nach der geeigneten Dimension folgendermaßen: Je größer die Zahl der verdeckten Neuronen, desto besser kann der Trainingsdatensatz wiedergegeben werden, was jedoch zulasten der Generalisierungsfähigkeit geht.

Zu berücksichtigen ist ebenfalls, dass jede weitere Schicht im Netz sowie größere Schichten die Trainingsdauer deutlich verlängern. Einen Richtwert bezüglich der Größe von neuronalen Netzen gibt es nicht. Die Arbeit besteht im Wesentlichen in der Konfiguration und dem Test verschiedener Netz-Topographien. In mehreren Versuchen erwies sich für die Lösung des Inversionsproblems der Einsatz von einer versteckten Schicht mit 24 Neuronen zwischen der Ein- und Ausgabeschicht als geeignet. Die Eingabeschicht besteht aus zwölf Neuronen, davon drei für die geometrischen Parameter Sonnenzenitwinkel ( $\theta_s$ ), Sensorzenitwinkel ( $\theta_v$ ) und Azimutdifferenz ( $\Delta \phi$ ), sowie neun atmosphärenkorrigierten Reflektanzkanälen (R<sub>RS</sub>). Abbildung 37 zeigt eine schematische Darstellung des konstruierten neuronalen Netzes zur Inversion der Satellitendaten. Die obere Zeile mit den Neuronen 1 bis 12 stellt die Eingabeschicht, den sogenannten Input Layer dar, die mittlere Zeile mit den Neuronen 13 bis 36 bildet die versteckte Zwischenschicht, den Hidden Layer. Die untere Zeile repräsentiert mit den Neuronen 37 bis 40 die Ausgabeschicht, den Output Layer. Das Neuron 0 in der Eingabeschicht ist ein Bias-Neuron, das mit jedem Neuron verbunden ist und das Netz erweitert. Sein Ausgabewert ist konstant. Durch die unterschiedliche Gewichtung entspricht die Ausgabe des Bias-Neurons einem variablen Schwellenwert.



Abbildung 37 – Schematische Darstellung des neuronalen Netzes mit zwölf Eingabe-Neuronen (1–12), einer versteckten Schicht mit 24 Neuronen (13–36) und 4 Ausgabe-Neuronen (37–40) sowie einem Bias-Neuron (0)

$$\begin{split} NN_{input} &= \theta_{sun}; \; \theta_{sensor}; \; \Delta \phi; \\ R_{RS}(\lambda = 412,5; 442,5; 490; 510; 560; 620; 665; 681; 708) \end{split}$$

NN<sub>output</sub> = Chlorophyll - a - Konzentration; Schwebstoffstreukoeffizient(bs550); Gelbstoffabsorptionskoeffizient(ay440); Phycocyaninabsorptionskoeffizient(apc620)

### 5.5.4 Training

Nach der Konzipierung des Netzes erfolgt als nächster Schritt der Lernprozess. Dabei werden die Gewichte der Verbindungen zwischen den Neuronen solange variiert und angepasst, bis die berechneten Ausgaben des Netzes den gewünschten Ausgaben entsprechen. Dazu wird eine beliebige Zeile aus dem Trainingsdatensatz als Netzeingabe X verwendet und die Netzausgabe Y mit den gewünschten Ergebniswerten Z aus dem Trainingsdatensatz verglichen, wobei ein Fehlerwert bestimmt wird ( $\Delta = Y$  - Z). Ein häufiges Problem beim Training von neuronalen Netzen ist das Verharren der Fehlerfunktion in einem lokalen Minimum bzw. das Nicht-Erreichen des absoluten Minimums der Fehlerfunktion, da die Schrittweite der Variation der Gewichte zu groß oder zu klein ist. Das Training verursacht daher einen hohen Zeitaufwand, da nicht umgehend ersichtlich ist, ob die Fehlerfunktion erfolgreich minimiert wird oder nicht.

Die in Kapitel 4 simulierten Datensätze werden dazu geladen und daraus die Werte für die Fernerkundungs- oder Radianzreflektanz (Ed/Lu) berechnet. Mit dem kompletten Datensatz an Radianzreflektanzwerten für die neun MERIS-Kanäle im visuellen und nahen Infrarotbereich sowie den jeweiligen Zenitwinkeln der Sonne, des Sensors und der Azimutaldifferenz wird zusammen mit den korrespondierenden Inhaltsstoffparametern die Trainingsfunktion des neuronalen Netzes aufgerufen.

Wie vorab skizziert, werden alle Datensätze nacheinander vom neuronalen Netz verarbeitet und nach jedem Durchlauf der Fehler Z bestimmt. Im sogenannten Backpropagation-Verfahren wird dann die Gewichtung der Verbindungen Schritt für Schritt variiert, damit der Fehler mit jedem Durchlauf reduziert wird. Für diese Minimierung existieren verschiedene Methoden wie der Gradientenabstieg zur Minimierung der Fehlerfunktion (Summe der quadratischen Fehler zwischen berechneter und gewünschter Ausgabe). In wissenschaftlichen Hilfspaketen für die Programmiersprache Python wie SciPy (Jones et al. 2001) sind bereits viele Optimierungsalgorithmen umgesetzt und effizient programmiert. Als besonders effektiv erwies sich für das Training des neuronalen Netzes zur Inversion der Reflektanzspektren mit einem sehr großen Trainingsdatensatz das Truncated-Newton-Verfahren (Nash 1984). Minimierungen nach einem Quasi-Newton-Verfahren sind geeignet zur Lösung von nichtlinearen Minimierungsproblemen und ermöglichen im Fall des Neuronalen-Netz-Trainings eine schnelle Konvergenz, da deutlich weniger Iterationen nötig sind als mit normalen Gradientenabstiegsverfahren. Für das Training wurden die Eingangsdaten für jedes Eingangsneuron normalisiert.

Ein weiterer möglicher Fehler beim Training neuronaler Netze ist das sogenannte Übertraining, welches man mit dem menschlichen Auswendiglernen vergleichen kann. In diesem Fall gibt die Netzwerkausgabe für jeden Trainingsdatensatz Werte sehr nah dem erwarteten Wert zurück, ist jedoch nicht mehr in der Lage, andere Daten zu verarbeiten, deren Werte zwischen denen des Trainingsdatensatzes liegen. Es besteht somit ein Interpolationsproblem (Atkinson und Tatnall 1997, S. 704).

#### 5.5.5 Ergebnisse

Die Stärke eines neuronalen Netzes liegt in der Fähigkeit zur Abstraktion des Problems aus den Trainingsdaten. Richtig für das Problem trainiert soll es in der Lage sein, nicht nur die im Training erlernten Beispiele zu bearbeiten, sondern Fälle aus dem gesamten Werteraum, der durch die Trainingsdaten abgedeckt ist. Diese Fähigkeit zur Interpolation ermöglicht eine Auswertung sämtlicher Wasserinhaltsstoffkonstellationen, die innerhalb der Minimal- und Maximalwerte des Trainingsdatensatzes liegen. Das Netz konvergiert, wenn der Fehler zwischen berechneten Ausgaben und denen des Trainingsdatensatzes ein gewünschtes Niveau erreicht. Die Regression zwischen den Ausgabewerten und den erwarteten Werten aus dem Training ist erwartungsgemäß sehr hoch. Um die Generalisierungsfähigkeit zu bewerten, wird ein neuronales Netz üblicherweise auf einen dem Netz unbekannten Satz von Eingangsdaten angewendet, anschließend werden die Resultate mit den erwarteten Werten verglichen. Weisen diese Zwischenwerte eine ähnlich hohe Regression und einen geringen Fehler auf wie die Ergebnisse des Trainingsdatensatzes, ist das Netzwerk ausreichend trainiert.

Zur Erzeugung des Testdatensatzes wurde eine Simulation mit dem Programm FEMWAT (siehe Kapitel 4.4) mit folgenden Werten der Wasserinhaltsstoffparameter für alle möglichen Kombinationen durchgeführt.

Parameter	Wert
Chlorophyllkonz. [mg/m <sup>3</sup> ]	0,006; 0,019; 0,08; 0,139; 1,24; 7,68; 24; 53
Sedimentstreuung [bs(550)] [m <sup>-1</sup> ]	0,003; 0,014; 0,074; 3,1; 7,2
Gelbstoffabsorption [ay(440)] [m <sup>-1</sup> ]	0,007; 0,016; 0,06; 0,45; 1,19; 2,3
Phycocyaninabs. [apc(620)] [m <sup>-1</sup> ]	0,004; 0,0075; 0,068; 0,084; 0,13; 0,22;
	0,48; 0,79; 1,02; 2,23
Sonnenzenitwinkel [°]	20; 30; 40; 50; 60; 70; 80
Sensorzenitwinkel [°]	0; 10; 20; 30; 40
Azimutdifferenz [°]	0; 30; 60; 90; 120; 150; 180

 Tabelle 6 – Parameterwerte zur Simulation des Testdatensatzes

Während des Trainings wurden alle Parameter auf den Bereich [0,1] normiert. Nach dem Training wird das Netz in einer Regressionsanalyse auf Konvergenz hin untersucht. Die Regression zwischen den erwarteten und den errechneten Ausgabewerten gibt dabei die Qualität des Netzes an. Die Konvergenz wurde nach maximal 2500 Iterationen zur Evaluierung der Residuen (Summe der quadratischen Fehler) erreicht. Nach dem Training lag der Regressionskoeffizient für den Testdatensatz bei 0,993, die Regressionskonstante (intercept) bei -0,013 und die Steigungskonstante (slope) bei 1,049. Der Standardfehler der Schätzung (estim. stderr) ist ein weiteres Gütemaß und gibt den mittleren Fehler an, der bei der Anwendung der Regressionsfunktion gemacht wird (vgl. Backhaus 2003, S. 73). Dieser liegt für den Testdatensatz für alle Parameter bei 0,086.

	Trainingsdatensatz	Testdatensatz
Slope	0,992442	1,048903
Intercept	0,001870	-0,012814
r-value	0,997025	0,992494
slope stderr.	0,000131	0,000269
estim. Stderr	0,041872	0,085839

Tabelle 7 – Parameter der Regressionsgeraden berechneter und erwarteter Ausgabedaten für den Trainingsdatensatz und den Testdatensatz

Zur genaueren Untersuchung der Eignung des neuronalen Netzes wurde ein zusätzlicher Datensatz simuliert, welcher 781.250 verschiedene Komponentenzusammensetzungen beinhaltet (50 verschiedene, zufällig gewählte Werte im Gültigkeitsbereich des neuronalen Netzes für die Chlorophyllkonzentration und 25 verschiedene, zufällig gewählte Werte im Gültigkeitsbereich für die Einzelkomponenten Phycocyanin, Sediment und Gelbstoff für eine festgelegte Geometrie). Diese Reflektanzspektren wurden mit dem neuronalen Netz ausgewertet und die errechneten Ergebnisse in Abbildung 38 mit den erwarteten Ausgaben verglichen.



Abbildung 38 – Vergleich der erwarteten und der errechneten Werte für die einzelnen Wasserinhaltsstoffparameter für 781.250 Testfälle

Eine sehr gute Korrelation ist für die Phytoplanktonparameter Chlorophyll a und Phycocyanin mit Regressionskoeffizienten von 0,998 (Chl a) bzw. 0,992 (Cya) festzustellen. Die Standardfehler der Schätzung liegen bei 1,012 (Chl a) bzw. 0,136 (Cya). Die Korrelation der Sediment- und Gelbstoffwerte ist weniger hoch und weist höhere Fehler auf.

Die oben für die Gesamtergebnisse des Testdatensatzes genannten Daten der Regressionsgeraden sind in Tabelle 8 für die einzelnen Ausgabeneuronen für die 781.250 normierten Testfälle dargestellt.

	Chlorophyll a	Sediment	Gelbstoff	Phycocyanin
Slope	1,058005	0,802698	0,972867	1,061899
Intercept	-0,027971	0,157184	-0,030456	1,475111
r-value	0,997869	0,903026	0,986354	0,995887
slope stderr.	0,000078	0,000432	0,000184	0,000109
estim.	1,011523	0,104529	0,044540	0,135590
Stderr				

 Tabelle 8 – Parameter der Regressionsgeraden für die Einzelkomponenten für 781.250 Testfälle

#### 5.5.6 Implementierung

Um die Anwendung auf MERIS-Daten zu erleichtern und eine unkomplizierte Auswertung zu ermöglichen, wurde der in Python entwickelte Algorithmus als Plug-in für die frei verfügbare BEAM-VISAT-Toolbox (Fomferra und Brockmann 2005), eine Software zur Verarbeitung von Satellitendaten, implementiert. Für diese Software stehen auch andere Auswertealgorithmen wie der erwähnte Case-2-Regional-Prozessor (Doerffer und Schiller 2007) oder der DLR-PCI-Algorithmus (Krawczyk et al. 2007) zur Verfügung. Der in dieser Arbeit entwickelte Auswertealgorithmus kann in dem Programm auf atmosphärenkorrigierte MERIS-Daten angewendet werden und erstellt nach Auswahl über das Plug-in-Menü automatisch die Ergebnisdatensätze (Bänder) für Chlorophyll a, Schwebstoffstreuung, Gelbstoffabsorption und Phycocyaninabsorption in einem neuen Produkt. Von dort können die Daten gemäß den Möglichkeiten von BEAM VISAT weiter ausgewertet, gespeichert oder exportiert werden, bspw. als Shapefile für Geoinformationssysteme (GIS), GeoTIFF oder Google Earth KMZ-Dateien.

# 6 Ergebnisse

Das optische Mischsignal, welches sich aus den MERIS-Kanälen im roten, grünen und blauen Bereich zusammensetzt, ein sogenanntes RGB-Bild, entspricht etwa dem vom menschlichen Auge wahrgenommenem. Eine Aufnahme der gesamten Ostsee in reduzierter räumlicher Auflösung ist in Abbildung 39 dargestellt. Die Szene zeigt die Ostsee am 11. Juli 2010, an dem Beobachtungen des Schwedischen Meteorologischen Hydrologischen Instituts (SMHI) zufolge die Cyanobakterienblüte in der Ostsee ihre größte Ausdehnung im Jahr 2010 erreichte (siehe Kapitel 7.1). Die mit dem Inversionsalgorithmus erstellten Analysekarten in Abbildung 40 zeigen eine gute Trennung der einzelnen Wasserinhaltsstoffe.



Abbildung 39 – RGB-Komposit einer MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom 11.07.2010 – Ostsee



Abbildung 40 – Analysekarten für die Wasserinhaltsstoffe Chlorophyll a, Phycocyanin, Schwebstoff und Gelbstoff, berechnet aus der MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom 11.07.2010 – gesamte Ostsee

Gut zu erkennen ist eine hohe Phycocyaninabsorption in der zentralen Ostsee mit einem Schwerpunkt am Eingang des Finnischen Meerbusens und einem zweiten Schwerpunkt südlich von Gotland. Eine Satellitenaufnahme mit voller Auflösung stellt die Situation wenige Tage später in Abbildung 41 dar. Das RGB-Komposit vom 19. Juli 2010 zeigt die südliche Ostsee. Zu erkennen ist eine starke Bewölkung über der Beltsee, die Insel Bornholm etwa im Zentrum der Aufnahme und nordwestlich davon hellere Schlieren, die sich von der restlichen Wasserfarbe abheben. Auch im Bereich des Stettiner Haffs fällt eine grünlichere Wasserfarbe auf.



Abbildung 41 – RGB-Komposit einer MERIS-Full-Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – Südliche Ostsee

Die Dissoziation des optischen Mischsignals in die einzelnen Komponenten lässt sich in den folgenden Abbildungen gut erkennen. In der Szene vom 19. Juli 2010 zeigt sich eine hohe Chlorophyll-a-Konzentration östlich von Rügen, im Stettiner Haff sowie in der zentralen Ostsee nordöstlich von Bornholm. Höhere Phycocyaninwerte werden im Stettiner Haff und in der zentralen Ostsee detektiert. Dies ist nachvollziehbar, da Chlorophyll und Phycocyanin in Cyanobakterienblüten gemeinsam auftreten, in Grünalgenvorkommen ist Phycocyanin hingegen nicht enthalten.

Die Verteilung der Schwebstoffvorkommen deutet auf eine höhere Konzentration zwischen Rügen und Schonen (*Skåne*) hin. Auch im Bereich der Algenblüte in der zentralen Ostsee sind die Schwebstoffwerte im Vergleich zur restlichen offenen Ostsee höher, was auf die Partikelstreuung durch intaktes oder abgestorbenes Phytoplankton hinweist. Die Gelbstoffverteilung zeigt hohe Werte östlich von Rügen und im Stettiner Haff sowie in der Danziger Bucht und der südlichen Ostsee der polnischen Küste folgend.



Abbildung 42 – Analysekarte für Chlorophyll-a, berechnet aus der MERIS-Full-Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee



Abbildung 43 – Analysekarte für Phycocyanin, berechnet aus der MERIS-Full-Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee



Abbildung 44 – Analysekarte für Schwebstoff, berechnet aus der MERIS-Full-Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee



Abbildung 45 – Analysekarte für Gelbstoff, berechnet aus der MERIS-Full-Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee

Im Vergleich zu den zuvor gezeigten Blütezuständen im Hochsommer stellt Abbildung 46 eine Satellitenaufnahme der gesamten Ostsee im Winter dar. Im Norden der Bottnischen Bucht, im Osten der Finnischen Bucht, in der Rigaischen Bucht sowie im Kurischen Haff und im Frischen Haff ist noch die Vereisung zu erkennen.



Abbildung 46 – RGB-Komposit einer MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom 15.03.2010 – Ostsee

Die Analysekarten in Abbildung 47 verzeichnen kaum eine Anwesenheit von Chlorophyll und Phycocyanin, was ebenso aus den Histogrammen in Abbildung 48 hervorgeht.



Abbildung 47 – Analysekarten für die Wasserinhaltsstoffe Chlorophyll a und Phycocyanin, berechnet aus der MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom 15.03.2010

An den Wolkenrändern treten teilweise erhöhte Werte auf. Solche Wolkenrandeffekte entstehen, wenn durch die Atmosphärenkorrektur das von Wolken verursachte Streulicht nicht richtig korrigiert oder als Wolkenpixel markiert wird. Die dadurch erhöhten Reflektanzwerte bedingen eine Fehlinterpretation des Inversionsalgorithmus. Ähnliche Fehler treten auch über Eisflächen auf, welche durch die Atmosphärenkorrektur nicht ausmarkiert wurden. Auch Wasserpixel in Nähe der Küstenlinie sind von dem Effekt betroffen, dass über dem Land reflektierte Strahlung in das Sichtfeld streut und somit zu einer signifikanten Erhöhung der gemessenen Reflektanz führt. Der Einsatz eines verfügbaren Algorithmus zur Korrektur dieser Nachbarschaftseffekte (ICOL – Improved Contrast between Ocean and Land Processor) führte ebenso wie in anderen Untersuchungen (bspw. Binding et al. 2010) zu keiner Verbesserung der Ergebnissen.



Abbildung 48 – Histogramme der Chlorophyll-a- (oben) und Phycocyaninwerte (unten) in den Satellitendaten der südlichen Ostsee vom 15.03.2010

## 7 Validierung

Zur Überprüfung und Verbesserung von Fernerkundungsverfahren ist es notwendig, diese mit vor Ort ermittelten Daten zu vergleichen und so einen möglichst genauen Abgleich zu den tatsächlichen In-Situ-Messwerten herzustellen. Für viele Wasserparameter werden regelmäßig Messwerte ermittelt. Forschungseinrichtungen und Landesämter unterhalten zum Teil umfangreiche Gewässerüberwachungssysteme mit Messnetzen, deren Beprobungsstellen regelmäßig aufgesucht und deren Wasserproben im Labor analysiert werden. Hinzu kommen Messkampagnen oder automatische Messplattformen. Parameter wie Temperatur, Salinität, Nährstoffe und Schadstoffe sind daher, besonders im Küstenbereich, oft gut abgedeckt. Auch Parameter zur Beobachtung von Algenwachstum wie Chlorophyllgehalt oder der Schwebstoffgehalt bzw. die Wassertransparenz werden vergleichsweise häufig gemessen, während optische Messungen im Vergleich dazu seltener durchgeführt werden. Eine Erhebung von Absorptionsparametern zur Ableitung der Konzentrationen gelöster, organischer Substanzen bspw. oder andere optische Messungen sind ebenfalls eher selten. Auch auf hoher See, abseits der Küstenmessstellen, nimmt die Menge der verfügbaren Messdaten ab, da Messungen dort mit einem höheren Aufwand verbunden sind und nur im Rahmen von Messkampagnen durchgeführt werden können.

Im Falle der Cyanobakterien in der Ostsee ist die Datenlage vor Ort gemessener Werte schmal. Nicht nur im Bereich der Fernerkundung fehlen bisher geeignete Verfahren zur Beobachtung von Vorkommen und Verbreitung, auch bei *In-situ*-Messungen in der Ostsee hat sich noch kein Standardverfahren etabliert. Gewässerüberwachungssysteme, wie zum Beispiel jene von Landesumweltämtern, bestimmen mehrmals jährlich die Konzentrationen verschiedener Nähr- und Schadstoffe sowie den Salinitätsgrad, die Wassertemperatur und zum Teil einige optische Parameter. In Bezug auf Cyanobakterien finden sich jedoch keine geeigneten Messwerte. Tiit Kutser (2004, S. 2187) beschreibt, welche Schwierigkeiten selbst bei einer Wasserprobennahme vor Ort auftreten. Vor allem bei dichten Blüten an der Wasseroberfläche stellt bereits die Entnahme einer repräsentativen Wasserprobe ein Problem dar. Doch auch nach der Entnahme einer geeigneten Wasserprobe fehlen brauchbare Methoden hinsichtlich spezifischer optischer Eigenschaften und der Quantifizierung (siehe Kapitel 3.8.3), weshalb meist nur die Chlorophyllkonzentration bestimmt wird. Auch *In-situ*-Messergebnisse verschiedener Methoden weichen voneinander ab, je nachdem, welches Verfahren angewandt wurde. Diese Tatsache sollte beim Vergleich unterschiedlich ermittelter Daten stets berücksichtigt werden. Mit der Angabe eines absoluten Messwertes repräsentieren die Ergebnisse jeweils auch die Ungenauigkeiten der genutzten Methode. Aus diesem Grund können Abweichungen sowohl von Fernerkundungsdaten als auch von anderen *In-Situ*-Messungen ihre Ursache sowohl in sehr kleinräumig-unterschiedlichen Wasserproben, verursacht durch die sogenannte Patchiness, als auch in der Andersartigkeit der Methode haben.

Eine weitere Schwierigkeit bei der Validierung von Fernerkundungsdaten ist der Bewölkungsgrad bei der Probennahme. Häufige und dichte Bewölkung über dem Messgebiet führt zu einem Mangel an korrespondierenden Fernerkundungsdaten. In solchen Fällen könnte man auf Daten der umliegenden räumlichen und zeitlichen Messungen zurückgreifen. Jedoch ist das aquatische System sehr dynamisch, sodass sich die Verteilung der Wasserinhaltsstoffe bereits innerhalb kurzer Zeit ändern kann. Ursachen sind sowohl äußere Einwirkungen wie die Durchmischung mittels Wind als auch interne Veränderungen wie das Absterben und Absinken von Zellen aufgrund veränderter Beleuchtungs- oder Nährstoffverfügbarkeit. Ein Ausweichen auf einen Datensatz des Vor- oder Folgetags ist daher nicht empfehlenswert und oft auch abhängig vom Aufnahmeorbit und der Bewölkungssituation nicht möglich. Im Falle einer Verfügbarkeit können Nachbarbildpunkte oder Mittelwerte aus einem größeren Raster um den eigentlichen Messpunkt verwendet werden. Jedoch muss beachtet werden, dass dabei über eine noch größere Fläche als die normale Bodenauflösung gemittelt wird und somit der Bezug zum In-situ-Messwert schwächer wird. Des Weiteren sind diese Wolkenrandpixel abhängig von der eingesetzten Atmosphärenkorrektur unter Umständen vom Streulicht benachbarter Wolkenpixel betroffen. Für den direkten Vergleich eignen sich demnach nur Satellitendaten, deren Bildpunkt möglichst die Messstelle beinhaltet und deren Aufnahmezeitpunkt nur um wenige Stunden vom Messzeitpunkt abweicht.

Das Auftreten von Phytoplankton- und Cyanobakterienblüten unterliegt von Jahr zu Jahr einer starken Fluktiation. So gibt es in manchen Jahren sehr ausgeprägte und weiträumige Blüteereignisse, wohingegen in anderen Jahren nur sehr leichte oder gar keine Blüten festzustellen sind. Auch regionale Unterschiede können auftreten, da diese Ereignisse naturgemäß nicht immer gleich ablaufen. Findet ein Ereignis also außerhalb der beprobten Gebiete und abseits der Transekte von Gelegenheitsschiffen statt oder verhindern gerade zu interessanten und akuten Zeiten dicke Wolkendecken eine Satellitenaufnahme, so erschwert dies einen Vergleich der Satellitendaten mit der tatsächlichen Situation und verschärft somit den Mangel an Validierungsdaten. Durch Einsatz sämtlicher zur Verfügung stehender Daten, zum Teil auch nur mit einzelnen Vergleichsparametern, kann dieser Schwierigkeit bestmöglich begegnet werden. Am geeignetsten erscheint die *In-Situ* gemessene Phycocyaninfluoreszenz. An Bord von Forschungsschiffen und regulären Fracht- und Fährschiffen werden dieser und andere Parameter mit großer Regelmäßigkeit und entlang der gesamten Fahrstrecke aufgezeichnet. Auch Simis et al. (2007) bewerten das Potenzial dieser Methode als ausgesprochen hoch.

## 7.1 Phytoplanktonsituation in der Ostsee 2010

Der Schwerpunkt der Validierung des entwickelten Algorithmus liegt auf dem Jahr 2010, da in diesem Jahr im Rahmen einer internationalen Messkampagne eigene Messdaten erhoben wurden und erst für dieses Jahr Phycocyanindaten des Algaline-Projekts vorlagen. Darüber hinaus waren die Rahmenbedingungen für eine Cyanobakterienblüte in diesem Jahr sehr gut, so war besonders der Sommer überdurchschnittlich warm und unterdurchschnittlich windig (Nausch et al. 2011). Im Folgenden wird die klimatische und biologische Situation der Ostsee in Bezug auf Phytoplanktonblüten im Jahr 2010 betrachtet. Abbildung 49 zeigt die zeitliche Verteilung der Tage mit Cyanobakterienblüten im Jahr 2010, während auf der Karte in Abbildung 50 die räumliche Verteilung der Beobachtungen, erhoben für die gesamte Ostsee, dargestellt ist. Das Schwedische Metereologische und Hydrologische Institut (SMHI) stellt in dieser Abbildung pro Bildpunkt die Anzahl der Tage dar, an denen Cyanobakterienblüten beobachtet wurden. Die Auswertung basiert auf einem Verfahren von Kahru et al. (2007), bei welchem das Überschreiten von Schwellenwerten in zwei Kanälen des MODIS-Sensors überprüft wird um Aussagen über Oberflächenblüten zu treffen.



Abbildung 49 – Tägliche Ausdehnung von Cyanobakterienblüten in der Ostsee 2010 (SMHI)



Number of days with cyanobacteria observations during 2010

Abbildung 50 – Räumliche Verteilung der Cyanobakteriensichtungen 2010 – Anzahl der Tage mit beobachteten Cyanobakterienblüten im Jahr 2010 (SMHI)

Das Phytoplanktonwachstum setzte im Jahr 2010 ähnlich früh ein wie im Vorjahr und in der südlichen Ostsee waren bereits im Januar Chlorophyllkonzentrationen von über 1 mg/l nachweisbar (Wasmund et al., 2011). Wie üblich waren Beginn und Höhepunkt der Frühjahrsblüte nach Osten hin verzögert festzustellen. Sie wurde dominiert von Kieselalgen, deren Blütehöhepunkt in Woche elf lag (MURSYS Jahresbericht 2010).

In der Gotlandsee wurden bereits ab dem 25. Juni 2010 erste Cyanobakterienfilamente gesichtet (Wasmund et al. 2011). In der zentralen Ostsee herrschten in den ersten Juliwochen hohe Temperaturen bei klarem, sonnigem Wetter. Zu dieser Zeit vollzog sich hier die Hauptphase der Sommerblüte mit einem Schwerpunkt in der südöstlichen Ostsee bis zum Finnischen Meerbusen. Eine Forschungsfahrt zwischen dem 28. Juni 2010 und dem 03. Juli 2010 wies nur vereinzelte Vorkommen von Aphanizomenon spp. nach, während zwischen dem 19. und 24. Juli 2010 in der südlichen Ostsee auch dichte Algenblüten, dominiert von Nodularia spumigena, an der Oberfläche beobachtet wurden. Überwiegend vereinzelte Vorkommen von Cyanobakterien wurden in der Bottensee erst in der zweiten Augusthälfte beobachtet (MURSYS Jahresbericht 2010).

Eine große Blüte wurde im Juli mittels Satellitendaten detektiert. Berichte über Ausmaße von 377.000 km<sup>2</sup> und einer Erstreckung von nördlich der Insel Rügen bis Finnland konnten sowohl auf der Monitoringfahrt des IOW als auch während der Forschungskampagne SYNTAX 2010 nicht bestätigt werden und beruhen mutmaßlich auf einer Fehlinterpretation von Satellitendaten (Wasmund et al. 2011). Jedoch wurde auch vom Finnischen Umweltinstitut SYKE ein Vorkommen von Blaualgen insbesondere im Finnischen Meerbusen bestätigt, dessen Ausdehnung und Konzentrationen über dem Durchschnitt der Jahre 1998 bis 2009 lag. In diesen Gebieten war dabei vor allem Aphanizomenon flos-aquae, in der südlichen und zentralen Ostsee die toxische Art Nodularia dominierend. Diese Blüten zerstreuten sich in Folge der Durchmischung, verursacht durch starken Wind zum Ende des Monats Juni (MUR-SYS Jahresbericht 2010).

Bezogen auf die Chlorophyllkonzentration lässt sich das Jahr 2010 als ein durchschnittliches Jahr beschreiben. Das frühe Einsetzen der Blüte folgt dem Trend der Vorjahre, der verzögerte Verlauf von West nach Ost bis zur Bottensee ist typisch und Folge der nach Norden hin verzögerten Zunahme der Lichtintensität sowie des Salinitätsgradienten.

### 7.2 Ship-of-opportunity-Projekt – Alg@line

Ein Ansatz, die Datenlage bezüglich Algenblüten und Cyanobakterien auf der offenen Ostsee zu verbessern, sind sogenannte Ferrybox-Systeme. Im Jahr 1993 wurde das finnische Algaline-Projekt zur Verbesserung der Überwachung der pelagialen Zone der Ostsee initiiert, dessen Schwerpunkt auf der Überwachung des Phytoplanktons und phototropher Bakterien liegt, welchen bei der, durch anthropogenen Nährstoffeintrag verursachten, Eutrophierung eine wesentliche Rolle zukommt (Lips et al. 2007).

Zum Einsatz kommen hierbei sogenannte *Ships-of-opportunity* (verschiedene Passagierfähren, Handelsschiffe und Fahrzeuge der Küstenwache), welche mit Ferrybox-Systemen ausgestattet sind. Daneben fließen auch Satellitendaten, Berichte der Küstenwache sowie von Seepfadfindern, Freiwilligen und der Öffentlichkeit mit ein.



Abbildung 51 – Routen der Alg@line-Schiffe und schematischer Aufbau des Messsystems aus Rantajärvi 2003, S. 11 und http://www.itameriportaali.fi/en/tietoa/algaline\_seuranta/algaline/en\_GB/menetelma/

Die Ferryboxen messen dabei in hoher zeitlicher Auflösung neben direkten Informationen über das Phytoplankton, wie die *In-vivo*-Fluoreszenz von Chlorophyll a sowie Phycocyanin und die Wassertrübung, weitere hydrographische Parameter wie Temperatur und Salinität. Hierzu wird durch eine Öffnung im Schiffsrumpf in etwa 5 m Wassertiefe während der Fahrt Meerwasser aufgenommen und durch ein Analysesystem mit Fluorometern gepumpt. Zusätzlich werden automatisch entnommene Wasserproben zur weiteren Analyse in Kühlbehältern aufbewahrt. Der schematische
Daten	Methode / Ort	Messgerät
Zeit und Position	GPS	
Salinität	Leitfähigkeit	
Temperatur	sowohl in der Blasenkammer als auch im Schlauch vor der Kammer (ΔT~0,5 °C)	Aanderaa 3444, 3210, 3315
<i>In-vivo</i> -Chl-a- Fluoreszenz	Ex 460±30 nm, Em 685±30 nm	Turner Designs SCUFA
In-vivo-Phycocyanin-	Ex 630±30 nm,	Turner Designs 10-AU mit
Fluoreszenz	Em 660, Ref >665 nm	Phycocyanin optical kit
Trübung		Turner Designs SCUFA

Aufbau des Messsystems ist auf der rechten Seite in Abbildung 51 dargestellt. Zum Einsatz kommen die folgenden Messgeräte:

Tabelle 9 – Gemessene Parameter und Messgeräte des Algaline-Projekts

Ziel ist es, die punktuelle Beprobung durch einzelne Stationen von Forschungskampagnen aufzuwerten, indem die räumlich-zeitliche Dimension der Planktongruppen besser berücksichtigt wird. Das Projekt soll dabei helfen, das Verständnis über die ökologischen Charakteristika und Artenzusammensetzung zu verbessern sowie zur Entwicklung von Frühwarnsystemen für potenziell gefährliche Planktonblüten beizutragen. Dabei haben die Daten sowohl einen Beitrag zur Validierung ökologischer und hydrodynamischer Modelle als auch als Referenz für optische Fernerkundungsmessungen (Heiskanen et al. 2005, S. 17) geleistet.

Zur Bestimmung der Phycocyaninfluoreszenz kommt ein Verfahren von Jukka Seppälä (2009) zum Einsatz. Beim Vergleich der Algaline-Daten mit den fernerkundlich gewonnenen Daten sind jedoch mehrere Faktoren zu beachten:

Zum einen zeichnen die Ferrybox-Systeme die Daten kontinuierlich über einen größeren zeitlichen und räumlichen Rahmen auf, wohingegen die Satellitenszene nur eine Momentaufnahme zum Zeitpunkt des Überfluges darstellt und etwa einen Zeitraum von zehn Minuten umfasst. Die zeitliche Komponente ist also nur für den Überflugszeitraum bzw. Aufnahmezeitraum den räumlichen Pixelwerten korrekt zugeordnet. Je größer die Abweichung zwischen Satellitenaufnahme und Zeitpunkt der Schiffsdurchfahrt ist, desto größer ist auch die Wahrscheinlichkeit, dass sich die Zusammensetzung der Wasserinhaltsstoffe an der entsprechenden Stelle verändert, zum Beispiel durch Oberflächenströmungen oder Durchmischung. Auch die Durchfahrt des Schiffes selbst verändert die Zusammensetzung, insbesondere bei dichten Oberflächenteppichen. Dabei werden teilweise Spuren der Schiffe sichtbar, die den Kondensstreifen von Flugzeugen in der Atmosphäre ähneln. Diese Veränderung ist angesichts der räumlichen Auflösung der MERIS-Daten von ca. 1 km im RR-Modus und 300 m im FR-Modus jedoch kaum relevant. Hinzu kommt, dass die Daten der Ferrybox-Systeme einer festen Wassertiefe von ca. 5 m zugeordnet sind, wohingegen Fernerkundungsdaten nur gemittelt Aussagen über die oberen Wasserschichten erlauben, wobei die Tiefe abhängig von der Sichttiefe des Gewässers ist. In der Ostsee ist eine Sichttiefe von weniger als 5 m nicht unüblich und Rückstreuung aus größeren Tiefen ist nur bei starker Einstrahlung und hohem Sonnenstand zu erreichen. Es kann daher geschehen, dass nah an der Oberfläche befindliche Blüten gar nicht oder nicht in entsprechender Dimension in den Ferrybox-Daten abgebildet werden, die jedoch auf den Satellitendaten deutlich wahrzunehmen sind. Im umgekehrten Fall können Akkumulationen von Cyanobakterien in größerer Wassertiefe deutlich in den Ferrybox-Daten erkennbar sein, im Satellitendatensatz jedoch nicht.

Auch die kleinräumig unterschiedliche Verteilung von Algenblüten (Patchiness) wirkt sich auf Ferrybox-Daten deutlich stärker aus als auf Fernerkundungsdaten, welche den Mittelwert eines Bodenpixels (z.B. 300x300m) darstellen. Das Schiff mit dem Ferrybox-System kann dagegen im Falle einer kleinräumigen Strukturierung einzelner Algenakkumulationen bei nur wenig veränderter Route sehr unterschiedliche Ergebnisse messen.

Des Weiteren handelt es sich bei den Algaline-Daten um Fluoreszenzmessungen. Wie die Satellitendaten sind dies physikalisch messbare optische Parameter, welche erst durch mathematische Auswerteverfahren in einen Kontext zu den biologischen Parametern gebracht werden. Beim Vergleich der reinen Messwerte (Absorption oder Fluoreszenz) muss man bedenken, dass es keine direkte Proportionalität zwischen diesen Parametern geben muss. Auch Tagesschwankungen der Fluoreszenzausbeute bei Phytoplankton sorgen für eine Unsicherheit bei der Validierung mittels Fluoreszenzdaten, allerdings treten diese Schwankungen stärker im Frühjahr zutage als in den Sommermonaten. Da die Uhrzeiten der Vergleichsdaten entsprechend der Satellitenüberflugszeiten gewählt wurden und somit immer auf dieselbe Tageszeit fallen, fällt dieser Umstand jedoch weniger ins Gewicht.

Im Folgenden werden verschiedene Transekte der Algaline-Daten mit ausgewerteten Satellitendaten des entwickelten Inversionsalgorithmus verglichen. Zum Zwecke der Validierung wurden lediglich Satellitendaten verwendet, die das Schiffstransekt beinhalten und nur zwei Stunden vor oder nach der Satellitenaufnahme erfasst wurden. Der MERIS-Überflug erfolgt jeweils am Vormittag gegen 10 Uhr MESZ und dauert für eine komplette Szene ca. zwölf Minuten.



Profile Plot for chl-a\_conc

Abbildung 52 – Vergleich von Chlorophyll-a-Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010 (blaue Linie)



Profile Plot for cya\_abs

Abbildung 53 – Vergleich der Wassertrübung aus Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Schwebstoffdaten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010 (blaue Linie)



Abbildung 54 – Vergleich von Phycocyanin aus Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010 (blaue Linie) in Bezug zur Analysekarte (oben)

Bei den verglichenen Szenen ist der gleichförmige Verlauf der Algaline-Messwerte und der abgeleiteten Werte aus Satellitendaten für Chlorophyll a (Abbildung 52), Phycocyanin (Abbildung 54) und Schwebstoffe (Abbildung 53) entlang des Transektes gut zu erkennen. Die Peaks der maximalen und minimalen Absorption bzw. Fluoreszenz sind einander sehr gut zuzuordnen und auch die generelle Abnahme bzw. Zunahme entlang der Nord-Süd-Richtung und damit der Temperatur- und Salinitätsgradienten wird im Verlauf deutlich. Die Peaks, bei Path-Pixel 380 und 390 (rote Linien in Abbildung 54) deuten auf Wolkenrandeffekte hin und wurden durch die Atmosphärenkorrektur mit dem Flag "out of range" gekennzeichnet. Ein Vergleich einzelner Messpunkte mit Satellitenpixeln in Streudiagrammen fällt aufgrund der beschriebenen räumlichen und zeitlichen Differenzen schwer, da aufgrund des Verdriftens eine eindeutige Zuordnung nicht exakt möglich ist.

Im Folgenden werden kleinere Transektausschnitte verglichen. Abgebildet sind nur die Daten, welche innerhalb der fünfzehn Minuten dauernden Aufzeichnung durch den Satellitensensor erhoben wurden. Der hellblau gezeichnete Schlauch um die Linie der Satellitendaten stellt die jeweiligen Nachbarpixel dar.



Profile Plot for chl-a\_conc

Abbildung 55 – Vergleich Chlorophyll-a-Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010 (blaue Linie) mit 15 Minuten Aufnahmedauer



Abbildung 56 – Vergleich Phycocyanin-Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010 (blaue Linie) mit 15 Minuten Aufnahmedauer

Neben Sommerszenen mit zu erwartendem Cyanobakterienvorkommen wurden auch Szenen aus Monaten mit geringerer Wassertemperatur betrachtet. In Abbildung 57 und Abbildung 58 sind Transektdaten und Satellitendaten vom 21. April 2010 einander gegenübergestellt. Die erhöhten Chlorophyll-a-Werte repräsentieren bereits das Frühjahrswachstum des Phytoplanktons. Phycocyanindaten werden im Algaline-Projekt nur für die Sommermonate erhoben.



Abbildung 57 – Vergleich Chlorophyll a aus Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 21.04.2010 (blaue Linie)



Profile Plot for spm\_scat

Abbildung 58 – Vergleich Sediment aus Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 21.04.2010 (blaue Linie)

#### 7.3 LUNG-Messnetz

Das Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie von Mecklenburg-Vorpommern unterhält ein umfassendes Netz aus Küstengewässer-Messstationen entlang der Ostseeküste sowie in den Buchten und Bodden (siehe Abbildung 59). Diese Stationen werden mehrmals im Jahr beprobt, wobei neben den Konzentrationen verschiedener Nährstoffe und Giftstoffe auch die Konzentration von Chlorophyll a sowie der Schwebstoffgehalt und die Wassertrübung im Labor bestimmt werden.



Abbildung 59 – Küstenmessstellen (dargestellt durch nummerierte, gelbe Rechtecke) des Landesamtes für Umwelt, Naturschutz und Geologie von Mecklenburg-Vorpommern

Da nicht für jeden Tag der *In-Situ*-Messungen Satellitenaufnahmen existieren oder Wolkenbedeckung eine Auswertung verhindert, stehen im Jahr 2010 für die 440 *In-Situ*-Messungen 80 korrespondierende Satellitendaten zur Verfügung. Die Auswertung zeigt eine gute Korrelation der Chlorophyll-a-Konzentrationswerte, die im Streudiagramm (Abbildung 60) dargestellt sind.



Abbildung 60 – Scatterplot der LUNG-Chl-a-Messwerte und der Chl-a-Werte aus Satellitendaten

Für den Vergleich der Schwebstoffresultate stehen von Seiten des Landesamtes zwei mögliche Parameter zur Verfügung. Das sind zum einen die Werte für die Konzentration der suspendierten Substanz, wobei ein Großteil der Werte lediglich mit >2 angegeben ist (Abbildung 61).



Abbildung 61 – Scatterplot der LUNG-Spm-Konzentration und der Spm-Streuung aus Satellitendaten

Zum anderen stehen die Werte der Wassertransparenz (Abbildung 62) zur Verfügung, ein Parameter dessen Wert mit zunehmender Schwebstoffstreuung abnimmt. Die Korrelation von SPM ist relativ gut, wohingegen die Korrelation mit der Wassertransparenz (WT) durch den Einfluss anderer Wasserinhaltsstoffe (vor allem Gelbstoff) eher geringer ist.



Abbildung 62 – Scatterplot der LUNG-Wassertransparenz und der Spm-Streuung aus Satellitendaten

Die Gelbstoffkonzentration wurde in den LUNG-Untersuchungen nicht analysiert. Ein Parameter, der mit der Konzentration gelöster organischer Substanz in Zusammenhang steht, ist die Konzentration gelösten organischen Kohlenstoffs (DOC). Ein Vergleich dieses Parameters mit der berechneten Gelbstoffabsorption aus MERIS-Daten ist in Abbildung 63 dargestellt.



Abbildung 63 – Scatterplot der LUNG-DOC (gelöster organischer Kohlenstoff) und die Gelbstoffwerte aus Satellitendaten

Aufgrund der Datenlage und um einen möglichst guten Vergleich von Gelbstoff durchzuführen, wurde ein Datensatz aus dem Jahre 2008 herangezogen. In diesem Jahr wurde vom Landesamt zusätzlich zu den biologischen Parametern die Extinktion bei 254 nm gemessen. Aufgrund der optischen Eigenschaften von Gelbstoff (siehe Kapitel 3) lassen sich diese Extinktionswerte über die Exponentialfunktion und den Slope-Faktor in die Absorption bei 440 nm umrechnen. Für die Messtage wurden MERIS-Aufnahmen in reduzierter Auflösung ausgewertet. In Abbildung 64 sind die aus der gemessenen Extinktion berechneten Absorptionswerte und die aus Satellitendaten abgeleiteten Werte gegenübergestellt. Die relativ geringe Korrelation bei geringen Absorptionswerten lässt sich durch die höhere Streuung erklären.



Abbildung 64 – Scatterplot der LUNG-Extinktion 254 umgerechnet in Absorption 440 gegen Gelbstoffabsorption aus Satellitendaten

#### 7.4 Messkampagne SYNTAX 2010

Zum Zwecke der Validierung und Optimierung des entwickelten Algorithmus wurden während einer internationalen Messkampagne in der Ostsee an 20 Beprobungsstellen in der offenen Ostsee, in Küstengewässern, in der Odermündung sowie im Ostsee-Archipel (Åland) optische Messungen durchgeführt. Die Messkampagne unter dem Namen SYNTAX 2010 fand vom 21. bis 30. Juli 2010 statt und wurde vom Finnischen Umweltinstitut SYKE sowie dem Marine Research Center (MRC) organisiert. Der leitende Wissenschaftler war Harri T. Kankaanpää vom FEI MRC (Cruise Report SYNTAX 2010). Ziel war es, an Bord des Forschungsschiffes R/V Aranda (Abbildung 65 – links) neue und herkömmliche Methoden zur Messung biologischer und optischer Wasserparameter an verschiedenen Messstationen anzuwenden, bzw. zu testen. Verschiedene optische Messgeräte zur Bestimmung der Überund Unterwasser-Radianz und -Irradianz wurden eingesetzt, um korrespondierend zu den aus Wasserproben ermittelten biologischen Parametern die optischen Eigenschaften an der Beprobungsstelle zu messen.

Der Kampagnenplan (Abbildung 65 – rechts) schloss dabei verschiedene Messgebiete ein, die das breite Spektrum der in der Ostsee herrschenden Wasserinhaltsstoffsituationen widerspiegeln.

Im einzelnen waren dies folgende Regionen der Ostsee:

- die offene Ostsee um Gotland, häufig Entstehungsort f
  ür gro
  ße, von Cyanobakterien dominierte Sommerbl
  üten
- sedimentreiche Gewässer in der Odermündung
- gelbstoffreiche Gewässer nördlich der mittleren Ostsee um Åland
- von Blüten betroffene Gewässer in der südlichen Ostsee und im Golf von Finnland



Abbildung 65 – Forschungsschiff R/V Aranda und Route der Messkampagne SYNTAX 2010

Eigene Messungen wurden mit den Spektrometern der Abteilung Gewässerfernerkundung des Instituts für Methodik der Fernerkundung des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt durchgeführt. Zum Einsatz kamen das Überwasserspektrometer MCS-3, das über drei Sensorköpfe verfügt: zwei davon in Zenitrichtung zur Messung der abwärts gerichteten Irradianz E<sub>d</sub> sowie zur Messung der zenitalen Radianz  $L_z$  und ein Sensorkopf in Nadirrichtung  $L_w$  zur Messung der aus dem Wasser aufwärts gerichteten Radianz. Darüber hinaus wurde auch das Tauchspektrometer MMS-5 mit fünf Sensorköpfen eingesetzt (siehe Abbildung 66):

Sensorkopf	gemessener Parameter
Ed	abwärts gerichtete Irradianz
E0d	Halbraumstrahlung oberhalb des Horizonts
Eu	aufwärts gerichtete Irradianz
E0u	Halbraumstrahlung unterhalb des Horizonts
Lu	aufwärts gerichtete Radianz

Tabelle 10 – Sensorköpfe und Messparameter des Tauchspektrometers MM85



Abbildung 66 – DLR-Tauchspektrometer MMS5 – links: Aufrisszeichnung, rechts: im Einsatz

Aus diesen in unterschiedlichen Wassertiefen gemessenen Parametern können weitere Strahlungsparameter abgeleitet werden, unter anderem auch die Fernerkundungsreflektanz R<sub>RS</sub>, welche dem atmosphärenkorrigierten Satellitensignal entspricht. Die gemessenen Reflektanzspektren der Beprobungsstellen während der Messkampagne sind in Abbildung 67 dargestellt.



Abbildung 67 – Gemessene Reflektanzspektren (R<sub>RS</sub>=L<sub>u</sub>/E<sub>d</sub>) während der Messkampagne SYNTAX 2010

Ein Vergleich der gemessenen MMS-Reflektanzspektren mit Messungen, die mithilfe von RAMSES-Sensoren der Firma TriOS ebenfalls an Bord durchgeführt wurden, ergaben eine gute Übereinstimmung.

Die Beleuchtungssituation während der Messfahrt entsprach aufgrund der dichten Bewölkung nicht den Modellierungsbedingungen. Die gemessenen Spektren eignen sich daher nur bedingt zur Validierung des Fernerkundungsalgorithmus, da das Ostseemodell für direktes Sonnenlicht gültig ist. Auch führt die nur schwache Beleuchtung zu geringen Messsignalen, weshalb eine höhere Integrationszeit während der Messung nötig wurde. Daraus ergibt sich eine größere zeitliche Differenz zwischen der Messung der einzelnen Sensorköpfe, was bei wechselnder Beleuchtungsintensität während der Messung zu Problemen bei der Auswertung führt. Der überwiegende Teil der Messungen vor Ort fand unter diffuser Beleuchtung statt.

Die Ergebnisse für die Auswertung der Spektrometermessungen mit dem entwickelten Inversionsalgorithmus (NN) werden im Folgenden mit den im Labor ausgewerteten Chlorophyll-a-Konzentrationen (Abbildung 68), den Schwebstoffkonzentrationen (Abbildung 69) und schließlich den Gelbstoffkonzentrationen (Abbildung 70) verglichen. Die relativ geringen Korrelationen sind auf die bereits erwähnte Bewölkung während der Messkampagne zurückzuführen.



Abbildung 68 – Scatterplot der SYNTAX-Chl-a-Konzentration aus Labormessungen der Wasserproben und der Chl-a-Konzentration berechnet aus den Spektrometermessungen



Abbildung 69 – Scatterplot der SYNTAX-Spm-Konzentration aus Labormessungen der Wasserproben und der Sedimentstreuung berechnet aus den Spektrometermessungen



Abbildung 70 – Scatterplot der SYNTAX-Gelbstoffkonzentration aus Labormessungen der Wasserproben und der Gelbstoffabsorption berechnet aus den Spektrometermessungen

### 8 Bewertung und Ausblick

Der in dieser Arbeit entwickelte Algorithmus ist zur Erkennung und Quantifizierung oberflächennaher Vorkommen verschiedener Wasserinhaltsstoffe in der Ostsee mit ihren spezifischen Eigenschaften in Bezug auf Gelbstoff und Cyanobakterien gut geeignet. Neben den bereits durch existierende Algorithmen ableitbaren Wasserinhaltsstoffen Chlorophyll a, Schwebstoff und Gelbstoff ist die Phycocyaninabsorption, ermittelt aus MERIS-Satellitendaten, ein weiterer wichtiger Parameter zur Beobachtung der häufig von Cyanobakterien dominierten Sommerblüte und zur Überwachung der Gewässergüte der Ostsee.

Systembedingte Einschränkungen sollten bei der weiteren Analyse und Interpretation der gewonnenen Fernerkundungsresultate berücksichtigt werden. Aufgrund der geringen Zahl von Vergleichswerten und Validierungsdaten ist auch in Zukunft eine weitere Überprüfung des Verfahrens notwendig. Dies gilt ohnehin für jede Methode der Fernerkundung, da auch Veränderungen an dem Sensor, der Vorprozessierung oder den Beobachtungsobjekten, bspw. eine Veränderung der Artenzusammensetzung des Phytoplanktons, Auswirkungen auf die Resultate haben. Eine weitere Einschränkung ergibt sich aus der Tatsache, dass im Labor gemessene optische Eigenschaften nicht exakt denen der natürlich auftretenden Arten entsprechen müssen, da diese durch viele weitere Faktoren beeinflusst werden können. Diesem Problem wurde jedoch durch Anzucht verschiedener Phytoplanktonkulturen sowie Einbezug unterschiedlicher Umweltbedingungen während des Wachstums (Nährstoffe und Lichtverfügbarkeit) bereits bei der Analyse der optischen Eigenschaften Rechnung getragen.

Durch die mittlere räumliche Sensorauflösung kann der Algorithmus kleinräumige, dichte Oberflächenakkumulationen nicht explizit erkennen. Das als *Patchiness* bezeichnete Phänomen beschreibt die Verteilung kleiner, flickenartiger Verdichtungen von Oberflächenblüten oder große Konzentrationsunterschiede innerhalb einer Blüte. Dabei können zum Teil auch sehr dichte, schlammartige Anhäufungen von Cyanobakterienkulturen auftreten, welche aufgrund der hohen Reflektanz im nahen Infrarotbereich optische Eigenschaften aufweisen, die denen von Landpflanzen ähnlich sind. Bei einer Bodenauflösung von 300 m, wie sie der verwendete MERIS-Sensor bietet, werden solche Unterschiede nicht abgebildet. Ein Sensorbildpunkt gibt einen Mittelwert der von der beobachteten Gesamtfläche reflektierten Strahlung wie-

der. Dies ist jedoch eine generelle Eigenschaft der Satellitenfernerkundung, bei der in Bezug auf die Aufgabenstellung ein Kompromiss zwischen räumlicher Auflösung, spektraler Auflösung, dem Signal-Rausch-Abstand und der Schwadbreite gefunden werden muss. Eine spektral oder räumlich höhere Auflösung führt zu einer kleineren Gesamtaufnahmefläche und zu einem schlechteren Signal-Rausch-Verhältnis. Zudem sind Satelliten mit räumlich und spektral höherer Auflösung heute noch experimenteller Natur und bieten daher keine Möglichkeit zur operationellen Nutzung und zum regelmäßigen Monitoring von Gewässern. Solche Aufnahmen müssen geplant und im Voraus beantragt werden. Jedoch sind Versuche, mit neuen Sensoren eine bessere Qualität in der Erkennung und Quantifizierung von Wasserinhaltsstoffen zu erzielen, künftig von hohem Interesse, nicht zuletzt, weil auch die operationellen Sensoren im Zuge der technischen Weiterentwicklung verbessert werden. Vorstellbar ist die Nutzung hyperspektraler Daten für Beobachtungen besonderer Gewässersituationen mittels Monitoringdaten. Hier könnte eine kleinräumigere Beobachtung mit sowohl spektral als auch räumlich höher aufgelösten Daten erfolgen, um eine detailliertere Analyse zu ermöglichen.

Für das Monitoring der gesamten Ostsee sind die Sensorkonfigurationen des ME-RIS-Sensors und des Folgeinstruments OLCI gut geeignet. Der entwickelte Algorithmus ist zum Zeitpunkt der Erstellung der einzige Auswertealgorithmus für die beschriebenen vier Wasserinhaltsstoffe im Gebiet der Ostsee, die aufgrund der hohen Gelbstoffwerte und der hydrologischen Situation sowie der Artenkomposition zwischen Süß- und Salzwasserbereich ein in vielfacher Hinsicht besonderes Gewässer darstellt. Bisherige Ansätze konzentrierten sich auf die Ableitung einzelner Parameter, die meist durch Bandverhältnisse berechnet wurden.

Durch die Implementierung als Plug-in für die frei verfügbare Fernerkundungssoftware VISAT BEAM ist der Algorithmus leicht zugänglich und kann einfach auf MERIS-Daten angewendet werden. Hierzu müssen MERIS-Level-1-Daten mit der Case2Regional-Atmosphärenkorrektur verarbeitet werden, anschließend kann das Cyano-ANN-Plug-In ausgewählt werden, mittels dessen die Wasserinhaltsstoffparameter für Chlorophyll, Schwebstoff, Gelbstoff und Phycocyanin berechnet werden können.

Als weitere Forschungsfelder hinsichtlich marinen oder aquatischen Phytoplanktons ergeben sich Fragestellungen sowohl im Bereich der Sensorentwicklung als auch weiterer Phytoplanktongruppen oder Beobachtungsgebiete. Hyperspektralsensoren bieten mit ihrer Möglichkeit, annähernd kontinuierlich den Spektralverlauf der reflektierten Strahlung abzubilden, einen größeren Informationsumfang und lassen damit genauere Rückschlüsse auf die Abundanz bzw. Konzentration von Wasserinhaltsstoffen zu. Im Gegensatz zu den 15 Kanälen im sichtbaren und nahen Infrarotbereich bei MERIS bietet der EnMAP-Sensor bspw. 94 Kanäle im Bereich von 420-1000 nm. Damit können weitere Wellenlängen in die Berechnung einfließen, die neben den absoluten Absorptionsmaxima auch die Ermittlung des Anstiegs erlauben oder überlappende Wellenlängenbereiche zwischen einzelnen Peaks auflösen. Des Weiteren bieten die zusätzlichen Informationen eventuell die Möglichkeit, weitere Phytoplanktongruppen und -arten oder zusätzliche Wasserinhaltsstoffe zu ermitteln. Eine Verbesserung in der räumlichen Auflösung optischer Fernerkundungssensoren ermöglicht das genauere Abbilden kleinräumiger Strukturen oder kleinerer Binnengewässer. Die geplante Bodenauflösung des EnMap-Sensors liegt bei 30 m und löst damit zehnmal höher auf als die Full-Resolution-Daten des MERIS-Sensors. Nicht nur kleinräumigere Blütenstrukturen, sondern auch andere Beobachtungsgebiete rücken somit in den Fokus der Forschung. Die Uferbereiche von Küsten- wie Binnengewässern oder kleine Seen können damit genauer aufgenommen und kleinräumigere Verteilungsstrukturen ausgewertet werden. Aber auch mit MERIS-Daten ließen sich Untersuchungen im Bereich größerer Binnengewässer durchführen.

Im wissenschaftlichen Gesamtkontext lassen sich auch Fragestellungen in den vor- und nachgeschalteten Disziplinen ausmachen. Sowohl in der biologischen Forschung auf Zellebene, welche die grundlegenden, apriorischen Informationen bereitstellt, als auch im Maßstab des Gesamtökosystems und der Bewertung und Auswertung der fernerkundlich gewonnenen Daten stellen sich verschiedenartige Aufgaben, die zum Verständnis komplexer Ökosysteme beitragen.

Auf Seiten der biologischen Forschung zur Untersuchung von Phytoplankton wäre eine Erhöhung der Messgenauigkeit zum Streuverhalten der Cyanobakterien ein Schritt, die aktuellen Modelle zu verbessern. Geeignete Verfahren zur effektiven Quantifizierung von Phycobilipigmenten oder anderer Parameter zur Erfassung der Biomasse von Cyanobakterien wären wichtige Fortschritte auf diesem Sektor. Besonders im Hinblick auf die Validierung mit Fluoreszenzdaten bildet die Variabilität der Fluoreszenzausbeute ein Forschungsdesiderat, auch wenn diese im Frühjahr stärker zu beobachten ist als im Sommer.

Letztendlich leistet diese Arbeit mit dem entwickelten Algorithmus einen äußerst nützlichen Beitrag, um die eingangs erwähnte Qualitätssteigerung dieses wichtigen Natur- und Wirtschaftsraumes zu erreichen und zu kontrollieren. Sie ordnet sich zwischen den biologischen Details und den großräumigen Wirkkomplexen im gesamten Ostseeraum ein. Unter Berücksichtigung der genannten Einschränkungen und Hintergründe lassen sich somit schnell und einfach wesentliche Informationen zu ökologisch bedeutsamen Wasserparametern in der Ostsee ableiten, die dazu beitragen, das Ökosystem Ostsee besser zu verstehen.

### 9 Literaturverzeichnis

- AGUIRRE, Miguel et al. (2007): Sentinel-3 The Ocean and Medium-Resolution Land Mission for GMES Operational Services, in: *ESA Bulletin* 131 (2007), S. 24–29.
- ATKINSON, Peter M./TATNALL, Adrian R. L. (1997): Introduction Neural networks in remote sensing, in: *International Journal of Remote Sensing* 18 (1997), Heft 4, S. 699–709.
- BALD, Dirk/KRUIP, Jochen/RÖGNER, Matthias (1996): Supramolecular architecture of cyanobacterial thylakoid membranes: How is the phycobilisome connected with the photosystems?, in: *Photosynthesis Research* 49 (1996), S. 103–118.
- BACKHAUS, Klaus et al. (2003): *Multivariate Analysemethoden: Eine anwendungsorientierte Einführung*, Berlin <sup>10</sup>2003.
- BATHMANN, Ulrich (2009): LOHAFEX: Overview about the concept and first results of the Indian-German iron fertilization experiment, *32nd meeting of the London Convention and the London Protocol*, Rom 25. Mai 2009.
- BILL, Ralf (2010): Grundlagen der Geo-Informationssysteme, völlig neu bearbeitete Auflage, Berlin, Offenbach <sup>5</sup>2010.
- BINDING, Caren E. et al. (2010): An assessment of MERIS algal products during an intense bloom in Lake of the Woods, in: *Journal of Plankton Research* 33 (2010), Heft 5, S. 793–806.
- BONSDORFF, Erik/RÖNNBERG, Cecilia/AARNIO, Katri (2002): Some ecological properties in relation to eutrophication in the Baltic Sea, in: *Hydrobiologia* 475–476 (2002), Heft 1, S. 371–377.
- BRICAUD, Annick/MOREL, André/PRIEUR, Louis (1981): Absorption by dissolved organic matter of the sea (yellow substance) in the UV and visible domains, in: *Limnology and Oceanography* 26 (1981), Heft 1, S. 43–53.
- BUKATA, Robert P. et al. (1995): Optical Properties and Remote Sensing of Inland and Coastal Waters, CRC Press, Boca Raton 1995
- BULGARELLI, Barbara/KISSELEV, Viatcheslav. B/ROBERTI, Laura (1999): Radiative Transfer in the Atmosphere-Ocean System: The Finite-Element Method, in: *Applied Optics* 38 (1999), Heft 9, S. 1530–1542.
- CARMICHAEL, Wayne W. (1994): The toxins of cyanobacteria, in: *Scientific American* 270 (1994), Heft 1, S. 78–86.

- CHU, S P. (1942): The influence of the mineral composition of the medium on the growth of planktonic algae. Part I. Methods and culture media, in: *Journal of* Ecology 30, Heft 2, S. 284–325.
- CLARKE, George L./EWING, Gifford C./LORENZEN, Carl J. (1970): Spectra of backscattered light from the sea obtained from aircraft as a measure of chlorophyll concentration, in: *Science* 167 (1970), S. 1119–1121.
- DARECKI, Miroslaw/STRAMSKI, Dariusz (2004): An evaluation of MODIS and Sea-WiFS bio-optical algorithms in the Baltic Sea, in: *Remote Sensing of Environment* 89 (2004), S. 326–350.
- DEKKER, Arnold G. (1993): Detection of Optical Water Parameters for Eutrophic Lakes by High Resolution Remote Sensing, (Dissertation an der Vrije Univ. Amsterdam) Amsterdam 1993.
- DOERFFER, Roland/SCHILLER, Helmut (2007): The MERIS Case 2 water algorithm, in: *International Journal of Remote Sensing* 28 (2007), Heft 3–4. S. 517–535.
- DOERFFER, Roland (2011): Alternative Atmospheric Correction Procedure for Case 2 Water Remote Sensing using MERIS, ESA Dokument MERIS ATBD 2.25: Helmholtz-Zentrum Geesthacht 2001.
- EIS, Dieter et al. (2010): *Klimawandel und Gesundheit, Ein Sachstandsbericht*, (Robert Koch-Institut) Berlin 2010.
- ERHARDT, Manfred (1995): Organische Komponenten, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): Meereskunde der Ostsee, Berlin 1995, S. 108–112.
- FALKOWSKI, Paul G. et al. (2003): Phytoplankton and their role in primary, new, and export Production, in: Michael J. R. Fasham (Hrsg.): Ocean Biogeochemistry: The Role of the Ocean Carbon Cycle in Global Change, Berlin 2003, S. 99– 121.
- FELL, Frank/FISCHER, Jürgen (2001): Numerical simulation of the light field in the atmosphere-ocean system using the matrix-operator method, in: *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 69 (2001), Heft 3, S. 351– 388.
- FENNEL, Wolfgang (1995): Wasserhaushalt und Strömungen, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): *Meereskunde der Ostsee*, Berlin 1995, S. 56–67.
- FLEMING, Vivi/KAITALA, Seppo (2006): Phytoplankton spring bloom intensity index for the Baltic Sea estimated for the years 1992 to 2004, in: *Hydrobiologia* 554 (2006), Heft 1, S. 57–65.

- FOMFERRA, Norman/ BROCKMANN, Carsten (2005): BEAM The ENVISAT MERIS and AATSR Toolbox, *Proc. of the MERIS (A)ATSR Workshop*, Frascati (2005).
- FRAUENDORF, Judith (2002): Entwicklung und Anwendung von Fernerkundungsmethoden zur Ableitung von Wasserqualitätsparametern verschiedener Restseen des Braunkohlentagebaus in Mitteldeutschland, (Dissertation an der Universität Halle-Wittenberg) Halle 2002.
- GEGE, Peter (1994): Gewässeranalyse mit passiver Fernerkundung: Ein Modell zur Interpretation optischer Spektralmessungen, (Dissertation an der Universität Hamburg) Hamburg 1994.
- GEGE, Peter (2004): The Water Colour Simulator WASI: an integrating software tool for analysis and simulation of optical in situ spectra, in: *Computer & Geosciences* 30 (2004), Heft 5, S. 523-532.
- GERDES, Torben (2004): Die ökologische Charakteristik der Ostsee, Beitrag zum Mittelseminar *Die Ostseeregion im Wandel*, Kiel 2004.
- GERLACH, Sebastian A. (1995): Eutrophierung, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): *Meereskunde der Ostsee*, Berlin 1995, S. 275–282.
- GORDON, Howard R./Brown, Otis B./Jacobs, Michael M. (1975): Computed Relationships Between the Inherent and Apparent Optical Properties of a Flat Homogeneous Ocean, in: *Applied Optics* 14 (1975), Heft 2, S. 417–427.
- GORDON, Howard R./MOREL, André (1983): Remote Assessment of Ocean Color for Interpretation of Satellite Visible Imagery: A Review, in: *Lecture Notes on Coastal and Estuarine Studies* 4, Springer Verlag, New York (1983).
- GORDON, Howard R. et al. (1988): A semianalytic radiance model of ocean color, in: Journal of Geophysical Research 93 (1988), S. 10.909–10.924.
- HALTRIN, Vladimir I. (2002): One-Parameter two-term Heyney-Greenstein phase function for light scattering in seawater, in: *Applied Optics* 41 (2002), Heft 6, S. 1022–1028.
- HARFF, Jan/BJÖRCK, Svante/HOTH, Peter (2011): The Baltic Sea Basin: Introduction, in: Jan Harff et al. (Hrsg.): *The Baltic Sea Basin*, Berlin/Heidelberg 2011, S. 3-9.
- HEISKANEN, Anna-Stiina et al. (2005): Monitoring strategies for phytoplankton in the Baltic Sea coastal waters, European Commission, Institute for Environment and Sustainability Inland and Marine Waters, Joint Research Center, Technical Report, 21583 EN.

- HELCOM (2006): Eutrophication in the Baltic Sea Draft HELCOM Thematic Assessment in 2006, in: HELCOM Stakeholder Conference on the Baltic Sea Action Plan Helsinki, Finland, 7 March 2006.
- HEYNEY, Louis G./GREENSTEIN, Jesse L. (1941): Diffuse Radiation in the galaxy, in: *Astrophysical Journal* 93 (1941), S. 70–83.
- HITZFELD, Bettina C./HÖGER, Stefan J./DITRICH, Daniel R. (2000): Cyanobacterial Toxins: Removal during Drinking Water Treatment, and human Risk Assessment, in: *Environmental Toxicology* 2000, S. 113–122.
- JEFFERY, Shirley W./VESK, Maret (1997): Introduction to marine phytoplankton and their pigment signatures, in: Shirley W. Jeffrey/R. Fauzi C. Mantoura/Simon W. Wright (Hrsg.): *Phytoplankton pigments in oceanography*, Paris 1997.
- JONES, Eric et al. (2001): *SciPy: Open source scientific tools for Python*. Online verfügbar unter: http://www.scipy.org/ (Stand 23.09.2012).
- KABEL, Karoline et al. (2012): Impact of climate change on the Baltic Sea ecosystem over the past 1,000 years, in: *Nature Climate Change* 2 (2012), Heft 10, S 1-4.
- KAHRU, Mati/HORSTMANN, Ulrich/RUD, Ove (1994): Satellite detection of increased cyanobacterial blooms in the Baltic Sea: Natural fluctuation or ecosystem change?, in: *Ambio* 23 (1994), S. 469–472.
- KAHRU, Mati (1997): Using satellites to monitor large-scale environmental change: case study of cyanobacteria blooms in the Baltic Sea, in: Mati Kahru/Christopher W. Brown (Hrsg.): *Monitoring algal blooms: new techniques for detecting large-scale environmental change*. Springer-Verlag, Berlin, S. 43–61
- KAHRU, Mati/SAVCHUCK, Oleg P./ELMGREN, Ragnar (2007): Satellite measurements of cyanobacterial bloom frequency in the Baltic Sea: interannual and spatial variability, in: *Marine Ecology Progress Series* 343 (2007), S. 15–23.
- KARJALAINEN, Miina (2006): Fate and effects of Nodularia spumigena and its toxin, nodularin, in the Baltic Sea planktonic food webs, (Dissertation an der Universität Helsinki), Helsinki 2006.
- KIRK, John T.O. (1994): Light and Photosynthesis in Aquatic Ecosystems, Cambridge <sup>2</sup>1994.
- KÖSTER, Rolf (1995): Entstehung der Ostsee, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): Meereskunde der Ostsee, Berlin 1995, S. 12–17.

- KRATZER, Susanne/EBERT, Kerstin/SØRENSEN, Kai (2011): Monitoring the Biooptical State of the Baltic Sea Ecosystem with Remote Sensing and Autonomous In Situ Techniques, in: Jan Harff et al. (Hrsg.): *The Baltic Sea Basin*, Berlin/Heidelberg 2011, S. 407–435.
- KRAWCZYK, Harald/NEUMANN, Andreas/HETSCHER, Matthias (1999): Mathematical and physical background of principal component inversion, in: *Proceedings of the 3 rd International Workshop on MOS-IRS and Ocean Colour*, Berlin: Wissenschaft und Technik Verlag (1999), S. 83–92.
- KRAWCZYK, Harald et al. (2007): Regional products for the Baltic Sea using MERIS data, in: *International Journal of Remote Sensing* 28 (2007), Heft 3–4, S. 593-608.
- KROEGER, Vanessa (2007): Die ernährungsphysiologische Bedeutung von Algen für die Ernährung des Menschen und ihre Nutzung als Lebensmittel der Zukunft, (Diplomarbeit an der Fakultät Life Sciences Department Ökotrophologie der Hochschule für Angewandte Wissenschaften Hamburg), Hamburg 2007.
- KUTSER, Tiit (2004): Quantitative detection of chlorophyll in cyanobacterial blooms by satellite remote sensing, in: *Limnology and Oceanography* 49 (2004), Heft 6, S. 2179–2189.
- KUTSER, Tiit (2006): Monitoring cyanobacterial blooms by satellite remote sensing in: *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 67 (2006), Heft 1-2, S. 303–312.
- KUTSER, Tiit (2009): Passive optical remote sensing of cyanobacteria and other intense phytoplankton blooms in coastal and inland waters, in: *International Journal of Remote Sensing* 30 (2009), S. 4401–4425.
- KUTSER, Tiit/METSAMAA, Lisa/DEKKER, Arnold G. (2008): Influence of the vertical distribution of cyanobacteria in the water column on the remote sensing signal, in: *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 78 (2008), Heft 4, S. 649–654.
- LEPPÄRANTA, Matti/MYRBERG, Kai (2009): *Physical Oceanography of the Baltic Sea*, Berlin/*Heidelberg/New York 2009*.
- LE QUÉRÉ, Corinne et al. (2005): Ecosystem dynamics based on plankton functional types for global ocean biogeochemistry models, in: *Global Change Biology* (2005), Heft 11, S. 2016–2040.
- LEHTIMAKI Jaana et al. (1997): Growth, nitrogen fixation, and nodularin production by two Baltic Sea cyanobacteria, in: *Applied and Environmental Microbiology* 63 (1997), Heft 5, S. 1647–1656.

- LENZ, Jürgen (1995): Phytoplankton, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): *Meereskunde der Ostsee*, Berlin 1995, S. 138–150.
- LIPS, Inga et al. (2007): Use of Ferrybox Measurements for the Baltic Sea Environment Assessment, in: *Environmental Research, Engineering and Management* 3 (2007), Heft 41, S. 3–8.
- MATTHÄUS, Wolfgang (1995): Temperatur, Salzgehalt und Dichte, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): *Meereskunde der Ostsee*, Berlin 1995, S. 75–81.
- MAZUR-MARZEC, Hanna et al. (2006): Toxic Nodularia spumigena blooms in the coastal waters of the Gulf of Gdańsk: a ten-year survey, in: *Oceanologia* 48 (2006), Heft 2, S. 225–273.
- MOBLEY, Curtis D. (1989): A numerical model for the computation of radiance distributions in natural waters with wind-roughened surfaces, in: *Limnology and Oceanography* 34 (1989), Heft 8, S. 1473-1483.
- MOBLEY, Curtis D. et al. (1993): Comparison of numerical models for computing underwater light fields, in: *Applied Optics* 32, Heft 36, S. 7484–7504

MOBLEY, Curtis D. (1994): Light and Water, New York 1994.

- MOBLEY, Curtis D. et al. (2004): Optical Modeling of Ocean Waters: Is the Case 1 Case 2 Classification Still Useful?, in: *Oceanography* 17 (2004), Heft 2, S. 60-67.
- MOREL, André (1974): Optical properties of pure seawater, in: Nils G. Jerlov/E. Steemann Nielsen (Hrsg.): Optical aspects of oceanography, London/New York 1974, S. 1–24.
- MOREL, André/PRIEUR, Louis (1977): Analysis of variations in ocean color, in: *Lim*nology and Oceanography 22 (1977), Heft 4, S. 709–722.
- MOREL, André/GORDON, Howard R. (1980): Report of the working group on water color, in: *Boundary-Layer Meteorology* 18 (1980), Heft 3, S. 343–355.
- NAIR, Anitha et al. (2008) Remote sensing of phytoplankton functional types, in: *Remote Sensing of Environment* 112 (2008), Heft 8, S. 3366–3375.
- NASH, Stephen G. (1984): Solving nonlinear programming problems using truncated newton techniques, in: Paul T. Boggs/Richard H. Byrd/Robert B. Schnabel (Hrsg.): *Numerical optimization*, Philadelphia 1984, S. 119–136.
- NAUSCH, Günther et al. (2011): Hydrographisch-chemische Zustandseinschätzung der Ostsee 2010, in: *Meereswissenschaftliche Berichte* 84, hrsg. v. Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde, Warnemünde 2011. Online verfüg-

http://www.io-

bar

unter

warnemuende.de/tl\_files/forschung/meereswissenschaftliche-

berichte/mebe84\_2011-zustand-hc.pdf (Stand 22.09.2012).

- NELSON, David/Cox, Michael (2009): *Lehninger Biochemie*, Berlin/Heidelberg/New York 42009.
- NEUMANN, Andreas et al. (1998): Chlorophyll Concentration, Sediment Scattering and Gelbstoff Absorption from MERIS Normalized Water Leaving Reflectances Using Principal Component Inversion (PCI). MAPP-Algorithm Theoretical Basis Document (ATBD)-WC2. Online verfügbar unter: http://www.brockmann-consult.de/mapp/ATBD\_Pdf/03\_MAPP-ATBD-WC2-1.pdf (Stand 22.09.2012).
- OWEN, Tony (1996): Grundlagen der modernen UV-Vis-Spektroskopie: Ein Leitfaden, hrsg. von Hewlett Packard, Deutschland 1996.
- PAWLAK, Janet F./LAAMANEN, Maria/ANDERSEN, Jesper H. (2009): Eutrophication in the Baltic Sea – An integrated thematic assessment of the effects of nutrient enrichment in the Baltic Sea region – Executive Summary, in: *Baltic Sea Environment Proceedings* 115A, Helsinki Comission, Helsinki 2009.
- PEÑA-MARTINEZ, Ramon et al. (2003): Mapping of photosynthetic pigments in Spanish reservoirs, in: *Proceedings of the MERIS User Workshop*, 00–01 ESA, Frascati 2003.
- PETZOLD, Theodore J. (1972). Volume scattering functions for selected ocean waters, in: *Scripps Institution of Oceanography Report* 72–78, San Diego (1972). Online verfügbar unter: http://escholarship.org/uc/item/73p3r43q (Stand 22.09.2012).
- PLATT, Trevor/SATHYENDRANATH, Shubha/STUART, Venetia (2006): Why study biological oceanography?, in: *Aquabiology*, 28 (2006), S. 542–557
- PREISENDORFER, R. W. (1961): Application of radiative transfer theory to light measurements in the sea, in: Union Géod. Géophys. Inst. Monogr. 10, S. 11–30 1961.
- RANDOLPH, Kaylan et al. (2008): Hyperspectral remote sensing of cyanobacteria in turbid productive water using optically active pigments, chlorophyll a and phycocyanin, in: *Remote Sensing of Environment* 112 (2008), Heft 11, S. 4009-4019.

- RANTAJÄRVI, Eija (Hrsg.) (2003): Alg@line in 2003: 10 years of innovative plankton monitoring and research and operational information service in the Baltic Sea, (Meri Report Series of the Finnish Institute of Marine Research 48), Helsinki 2003.
- REINART, Anu /KUTSER; Tiit (2006): Comparison of different satellite sensors in detecting cyanobacterial bloom events in the Baltic Sea, in: *Remote Sensing of Environment* 102 (2006), Heft 1–2, S. 74–85.
- RHEINHEIMER, Gerhard (1995): Biologie und Ökologie, in: Gerhard Rheinheimer (Hrsg.): Meereskunde der Ostsee, Berlin 1995, S. 113–115.
- RUIZ-VERDU, Antonio (2008): An evaluation of algorithms for the remote sensing of cyanobacterial biomass, in: *Remote Sensing of Environment* 112 (2008), Heft 11, S. 3996–4008.
- SARADA, Ravi/PILLAI, Manoj G./RAVISHANKAR, Gokare A. (1999): Phycocyanin from Spirulina sp: influence of processing of biomass on phycocyanin yield, analysis of efficacy of extraction methods and stability studies on Phycocyanin, in: *Process Biochemistry* 34 (1999), S. 795–801.
- SATHYENDRANATH, Shubha et al. (2000): Colour of Case 2 Waters, in: IOCCG (2000). Remote Sensing of Ocean Colour in Coastal and Other Optically-Complex, Waters. Sathyendranath, S (Hrsg.) Reports of the International Ocean-Colour Coordinating Group No. 3, IOCCG, Dartmouth, Canada, S 23-46.
- SCHALLES, John F./YACOBI, Yosef. Z. (2000): Remote detection and seasonal patterns of phycocyanin, carotenoid and chlorophyll pigments in eutrophic waters. *Archiv für Hydrobiologie, Special Issues Advances in Limnology* 55 S. 153-168.
- SCHROEDER, Thomas et al. (2007) Atmospheric correction algorithm for MERIS above case-2 waters, in: *International Journal of Remote Sensing* 28 (2007), Heft 7, S. 1469–1486.
- SEPPÄLÄ, Jukka/YLÖSTALO, Pasi/KUOSA, Harri (2005): Spectral absorption and fluorescence characteristics of phytoplankton in different size fractions across a salinity gradient in the Baltic Sea, in: *International Journal of Remote Sensing* 26, Heft 2, S. 387–414.

- SEPPÄLÄ, Jukka et al. (2007): Ship-of-opportunity based phycocyanin fluorescence monitoring of the filamentous cyanobacteria bloom dynamics in the Baltic Sea, in: *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 73 (2007), S. 489–500.
- SEPPÄLÄ, Jukka (2009): *Fluorescence properties of Baltic Sea phytoplankton*, (Dissertation an der Universität Helsinki), Helsinki 2009.
- SIEGEL, Herbert et al. (2005): Ocean colour remote sensing relevant water constituents and optical properties of the Baltic Sea, in: *International Journal of Remote Sensing* 26 (2005) Heft 2, S. 315–330.
- SIEGEL, Herbert/GERTH, Monika (2008): Optical remote sensing applications in the Baltic Sea, in: Vittorio Barale/Martin Gade (Hrsg.): *Remote sensing of the European Seas*, Berlin 2008, S. 91–102.
- SIMIS, Stefan G. H./PETERS, Steef W. M./GONS, Herman J.: Remote sensing of the cyanobacterial pigment phycocyanin in turbid inland water, in: *Limnology and Oceanography* 50 (2005), Heft 1, S. 237–245.
- SIMIS, Stefan G. H. et al. (2007): Influence of phytoplankton pigment composition on remote sensing of cyanobacterial biomass, in: *Remote Sensing of Environment* 106 (2007), Heft 4, S. 414–427.
- SIMIS, Stefan G. H./KAUKO, Hanna M. (2012): In vivo mass-specific absorption spectra of phycobilipigments through selective bleaching, in: *Limnology and Oceanography: Methods* 10 (2012), S. 214–226.
- SIVONEN, Kaarina (1996) Cyanobacterial toxins and toxin production, in: *Phycologia*: 35, Heft 6, S. 12–24.

SIVONEN, Kaarina/JONES, Gary (1999): Cyanobacterial Toxins, in: Toxic Cyanobacteria in Water: A guide to their public health consequences, monitoring and management, hrsg. v. World Health Organization, London 1999. Online verfügbar unter http://www.who.int/water\_sanitation\_health/resourcesquality/toxcyanobacteria.

pdf (Stand 22.09.2012).

- SPOLAORE, Pauline et al. (2006): Commercial applications of microalgae, in: *Journal* of *Bioscience and Bioenginering* 101 (2006), Heft 2, S. 87–96.
- STANIER, Roger Y. (1971): Purification and properties of unicellular blue-green algae (order Chroococcales), in: *Bacterological Reviews* 35, Heft 2, S. 171–205.

- SUBRAMANIAM, Ajit et al. (1999): Bio-optical properties of the marine diazotrophic cyanobacteria Trichodesmium spp, I. Absorption and photosynthetic action spectra, in: *Limnology and Oceanography* 44 (1999), Heft 3, S. 608–617.
- VAN BUYNDER, Paul G. et al. (2001): Nodularin uptake by seafood during a cyanobacterial bloom, in: *Environmental Toxicology* 16 (2001), Heft 6, S. 468–471.
- VOIPIO, Aarno (Hrsg.) (1981): The Baltic Sea, (Elsevier Oceanography Series 30) Amsterdam 1981.
- WASMUND, Norbert (2005): Die Jahreszeiten im Meer: Über die Saisonalität des Algenwachstums, in: Ostseesplitter 2005: meereskundliche Geschichten aus der Ostsee, hrsg. v. Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde, Rostock 2005. Online verfügbar unter http://www2008.io-warnemuende.de/documents/ostseesplitter2005.pdf (Stand 22.09.2012).
- WASMUND, Norbert et al. (2011): Biologische Zustandseinschätzung der Ostsee im Jahre 2010 in: *Meereswissenschaftliche Berichte* 85 S. 3-87, hrsg. v. Leibniz-Institut für Ostseeforschung Warnemünde, Warnemünde 2011. Online verfügbar unter http://www.iowarnemuende.de/tl\_files/forschung/meereswissenschaftlicheberichte/mebe85 2011-zustand-bio-ost-und-nordsee.pdf (Stand 22.09.2012).
- WOJCIECHOWSKI, Marek: FFNET Feed-forward neural network for python (Technical University of Łodz, Poland) Łodz 2011. Online verfügbar unter: http://ffnet.sourceforge.net/ (Stand 22.09.2012).
- ZANEVELD, J. Roland V. (1974): New Developments of the Theory of Radiative Transfer in the Oceans, in: Nils G. Jerlov/E. Steeman Nielsen: *Optical Aspects* of Oceanography, London/New York 1974.
- ZIMMERMANN, Gerhard (1991): Fernerkundung des Ozeans: Probleme der Fernerkundung des Ozeans mit optischen Mitteln, Berlin 1991.

- *MERIS Product Handbook*, Heft 2.1, hrsg. v. European Space Agency Issue, Paris 2006. Online verfügbar unter: http://envisat.esa.int/handbooks/meris/toc.htm (Stand 22.09.2012)
- MURSYS Jahresbericht 2010, hrsg. v. Bundesamt für Seeschiffahrt und Hydrographie, Hamburg 2010. Online verfügbar unter: http://www.bsh.de/de/Meeresdaten/Beobachtungen/MURSYS-Umweltreportsystem/PDF/mur 110 odi.pdf (Stand 22.09.2012)
- *The Earth Observation Handbook*, hrsg. v. Committee on Earth Observation Satellites u. European Space Agency. Online verfügbar unter: http://www.eohandbook.com (Stand 22.09.2012).

# 10 Abkürzungsverzeichnis

Kürzel	Erklärung
a	Absorptionskoeffizient [m <sup>-1</sup> ]
ANN	Künstliches Neuronales Netz (Artificial Neural Network)
b	Streukoeffizient [m <sup>-1</sup> ]
BOA	Unterrand der Atmosphäre (Bottom Of Atmosphere)
c	Attenuationskoeffizient [m <sup>-1</sup> ]
C2R	Case-2 Regional Prozessor
CDOM	Gelbstoff (Coloured Dissolved Organic Matter)
Chl-a	Chlorophyll-a
CZCS	Coastal Zone Color Scanner
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
DOC	Gelöster organischer Kohlenstoff (Dissolved Organic Carbon)
E <sub>0</sub>	Skalare Irradianz [W m <sup>-2</sup> ]
Ed	Abwärtsgerichtete (downwelling) Irradianz [W m <sup>-2</sup> ]
EG	Europäische Gemeinschaft
EnMAP	Environmental Mapping and Analysis Program
Envisat	Europäischer Umweltsatellit (Environmental Satellite)
EOS	Erdbeobachtung (Earth Observing System)
ESA	Europäische Weltraumorganisation (European Space Agency)
Eu	Aufwärtsgerichtete (upwelling) Irradianz [W m <sup>-2</sup> ]
FEI MRC	Finnish Environment Institute Marine Research Center
GMES	Globale Umwelt- und Sicherheitsüberwachung (Global Monitoring
	for Environment and Security)
HELCOM	Helsinki Commission
Ι	Strahlungsintensität [W sr <sup>-1</sup> ]
IOCCG	International Ocean Colour Coordinating Group
IOW	Leibnitz Institut für Ostseeforschung Warnemünde
L	Radianz [W m <sup>-2</sup> sr <sup>-1</sup> ]
LIDAR	Light detecting and ranging
LUNG	Landesamt für Umwelt, Naturschutz und Geologie
MERIS	Medium Resolution Imaging Spectrometer

MODIS	Moderate-resolution Imaging Spectroradiometer
MOS	Modularer Optoelektronischer Scanner
NASA	Nationale Raumfahrtbehörde der USA (National Aeronautics and
	Space Administration)
NIR	Naher-Infrarotbereich des Lichtspektrums
NRT	Near real-time – beinahe Echtzeit
РС	Phycocyanin
PCI	Hauptkomponenteninversion (Principle Component Inversion)
PE	Phycoerythrin
Q	Strahlungsenergie [J]
R	(Irradianz-) Reflektanz (E <sub>u</sub> /E <sub>d</sub> )
RADAR	Radio detecting and ranging
R <sub>RS</sub>	Fernerkundungsreflektanz (L <sub>u</sub> /E <sub>d</sub> )
SAR	Radar mit synthetischer Apertur (Synthetic Aperture Radar)
SeaWiFS	Sea-viewing Wide Field-of-view Sensor
SMHI	Schwedisches Meteorologisches Hydrologisches Institut
SPM	Schwebstoff (Suspended Matter)
SST	Meeresoberflächentemperatur (Sea Surface Temperature)
TOA	Oberrand der Atmosphäre (Top Of Atmosphere)
TSM	Schwebstoff (Total Suspended Matter)
UV	Ultraviolett
VIS	Visueller Bereich des Lichtspektrums
WRRL	Wasserrahmenrichtlinie
β	Streufunktion
9	Zenitwinkel [°]
λ	Wellenlänge [nm]
φ	Azimutwinkel [°]
Φ	Strahlungsfluss [J s <sup>-1</sup> oder W]
ω	Raumwinke [°]

# 11 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1 – Karte ausgewählter Belastungen der Ostsee (Quelle: HELCOM)6
Abbildung 2 – Schematischer Wasserhaushalt der Ostsee (nach Fennel 1995, S. 58).7
Abbildung 3 – Karte der anoxischen Gebiete in der Ostsee während der Jahre 2001–
2006 (Pawlak et al. 2009, S. 9)9
Abbildung 4 – Zusammenhang zwischen der Monatsmitteltemperatur der
Wasseroberfläche (SST) und den Cyanobakterienblüten – Die Pfeile markieren
Jahre ohne Beobachtung von Cyanobakterienblüten, die grüne Linie entspricht
dem 16°C-Schwellenwert. Aus Kabel et al. (2012)9
Abbildung 5 - Vereinfachte Darstellung der Nahrungskette in Gewässern12
Abbildung 6 – Cyanobakterienkolonien im Mikroskop (links) und an der
Wasseroberfläche (rechts)14
Abbildung 7 – Jahresgang der Einstrahlung, Primärproduktion, des Chlorophyll a-
Gehalts und der Wassertemperatur für das Jahr 1973–74 in der Kieler Bucht aus
Lenz (1995, S. 147)
Abbildung 8 – Schematische Darstellung der wichtigsten optisch aktiven
Wasserinhaltsstoffe und deren Auswirkung auf das Messsignal35
Abbildung 9 - Wasserabsorption nach Pope & Fry, 1997 (blau) und Wasserstreuung
nach Morel und Prieur, 1977 (violett-gestrichelt) in Abhängigkeit von der
Wellenlänge
$Abbildung \ 10-Gelbstoff absorption \ in \ Abhängigkeit \ von \ der \ Wellenlänge \ldots 38$
Abbildung 11 - Sedimentstreuung (orange) und Sedimentabsorption (hell-orange,
gestrichelt) in Abhängigkeit von der Wellenlänge
Abbildung 12 – Absorption des sichtbaren Lichts durch Photopigmente aus Nelson
und Cox (2009), S. 98741
Abbildung 13 - Chlorophylla-Absorption (grün) und -Streuung (lila-gestrichelt) in
Abhängigkeit von der Wellenlänge42
Abbildung 14 – Phycobilisom aus Nelson und Cox 2009, S. 98743
Abbildung 15 – Gemessene Absorptionsspektren verschiedener
Phytoplanktonkulturen51
Abbildung 16 – Phycocyaninspezifische Absorption von Nodularia (links) und
Aphanizomenon (rechts)

Abbildung 17 - Spezifische Absorptionsspektren verschiedener
Phytoplanktongruppen
Abbildung 18 – Ableitungsanalyse eines Cyanobakterienabsirotuibsspektrums (A0)
und Absorptionsbanden der wichtigsten Pigmente. Ableitungen erster (A1),
zweiter (A2) und vierter Ordnung (A4)
Abbildung 19 – Absorptionsspektren von Nodularia spp. und Aphanizomenon spp.
(dunkelblau) (Niklas Strömbeck (nicht veröffentlicht)) 55
Abbildung 20 – Absorptionsspektren von Nodularia spp. und Aphanizomenon spp.56
Abbildung 21 – Vergleich von Absorptionsspektren ( $a*_{Chl}$ und $a*_{PC}$ ), gewonnen
durch Subtraktion (blau und rot-gestrichelt) und Bleichung (violett-gepunktet,
türkis-gestrichelt)
Abbildung 22 – Prozesse des Strahlungstransfers (nach Kirk 1994, S. 24) 59
Abbildung 23 – Strahlungstransfer in der Atmosphäre
Abbildung 24 – Eingangsspektren des BalticCyano-Modells, Absorption von Wasser
(aw), Chlorophyll-a (acs), Phycocyanin (abs), Sediment (ass) und Gelbstoff
(ays) sowie Streuung von Wasser (bw), Chlorophyll a (bcs), Phycocyanin (bbs)
und Sediment (bss)
Abbildung 25 – Schematische Darstellung der Vorwärtsmodellierung
Abbildung 26 - Reflektanzspektren mit variierender Chlorophyll-a-Konzentration
$[mg/m^3]$ , Gelbstoffabsorption = 0,1 m <sup>-1</sup> , Sedimentstreuung = 0,1 m <sup>-1</sup> ,
Phycocyaninabsorption = $0,1 \text{ m}^{-1}$
Abbildung 27 – Reflektanzspektren mit variierender Chlorophyll-a-Konzentration
$[mg/m^3]$ , Gelbstoffabsorption = 0,5 m <sup>-1</sup> , Sedimentstreuung = 0,1 m <sup>-1</sup> ,
Phycocyaninabsorption = $0,1 \text{ m}^{-1}$
Abbildung 28 – Reflektanzspektren mit variierender Phycocyaninabsorption [m <sup>-1</sup> ],
Chlorophyll a = $1 \text{ mg/m}^3$ , Gelbstoffabsorption = 0,1 m <sup>-1</sup> , Sedimentstreuung =
0,1 m <sup>-1</sup>
Abbildung 29 – Reflektanzspektren mit variierender Phycocyaninabsorption [m <sup>-1</sup> ],
Chlorophyll a = 1 mg/m <sup>3</sup> , Gelbstoffabsorption = $0,1 \text{ m}^{-1}$ , Sedimentstreuung =
0,1 m <sup>-1</sup>
Abbildung 30 – Reflektanzspektren mit variierender Sedimentstreuung [m <sup>-1</sup> ],
Chlorophyll a = 1 mg/m <sup>3</sup> , Gelbstoffabsorption = $0,1 \text{ m}^{-1}$ ,
Phycocyaninabsorption = $0,1 \text{ m}^{-1}$

Abbildung 31 – Reflektanzspektren mit variierender Gelbstoffabsorption [m <sup>-1</sup> ],
Chlorophyll a = $1 \text{ mg/m}^3$ , Sedimentstreuung = 0,1 m <sup>-1</sup> , Phycocyaninabsorption
$= 0,1 \text{ m}^{-1}$
Abbildung 32 – Envisat Beleuchtungs- und Beobachtungsgeometrie (aus dem
"MERIS Product Handbook" der ESA, 2006, S. 46)
Abbildung 33 – Verarbeitungsstufen der Satellitendaten77
Abbildung 34 - Schematische Darstellung des neuronalen Netzes mit zwölf Eingabe-
Neuronen (1–12), einer versteckten Schicht mit 24 Neuronen (13–36) und 4
Ausgabe-Neuronen (37–40) sowie einem Bias-Neuron (0)
Abbildung 35 – Vergleich der erwarteten und der errechneten Werte für die
einzelnen Wasserinhaltsstoffparameter für 781.250 Testfälle87
Abbildung 36 – RGB-Komposit einer MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom
11.07.2010 – Ostsee
Abbildung 37 – Analysekarten für die Wasserinhaltsstoffe Chlorophyll a,
Phycocyanin, Schwebstoff und Gelbstoff, berechnet aus der MERIS-Reduced-
Resolution-Aufnahme vom 11.07.2010 – gesamte Ostsee
Abbildung 38 – RGB-Komposit einer MERIS-Full-Resolution-Aufnahme vom
19.07.2010 – Südliche Ostsee
Abbildung 39 – Analysekarte für Chlorophyll-a, berechnet aus der MERIS-Full-
Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee
Abbildung 40 – Analysekarte für Phycocyanin, berechnet aus der MERIS-Full-
Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee
Abbildung 41 – Analysekarte für Schwebstoff, berechnet aus der MERIS-Full-
Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee
Abbildung 42 – Analysekarte für Gelbstoff, berechnet aus der MERIS-Full-
Resolution-Aufnahme vom 19.07.2010 – südliche Ostsee
Abbildung 43 – RGB-Komposit einer MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom
15.03.2010 – Ostsee
Abbildung 44 – Analysekarten für die Wasserinhaltsstoffe Chlorophyll a und
Phycocyanin, berechnet aus der MERIS-Reduced-Resolution-Aufnahme vom
15.03.2010
Abbildung 45 – Histogramme der Chlorophyll-a- (oben) und Phycocyaninwerte
(unten) in den Satellitendaten der südlichen Ostsee vom 15.03.2010
Abbildung 46 – Tägliche Ausdehnung von Cyanobakterienblüten in der Ostsee 2010 (SMHI)
--
Abbildung 47 – Räumliche Verteilung der Cyanobakteriensichtungen 2010 (SMHI) 100
Abbildung 48 – Routen der Alg@line-Schiffe und schematischer Aufbau des
Messsystems aus Rantajärvi 2003, S. 11 und
http://www.itameriportaali.fi/en/tietoa/algaline_seuranta/algaline/en_GB/menet elma/
Abbildung 49 – Vergleich von Chlorophyll-a-Algaline-Transektdaten (rote Punkte)
mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010
(blaue Linie)
Abbildung 50 – Vergleich der Wassertrübung aus Algaline-Transektdaten (rote
Punkte) mit abgeleiteten Schwebstoffdaten aus der MERIS-Full-Resolution-
Szene vom 19.07.2010 (blaue Linie)
Abbildung 51 – Vergleich von Phycocyanin aus Algaline-Transektdaten (rote
Punkte) mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom
19.07.2010 (blaue Linie) in Bezug zur Analysekarte (oben)
Abbildung 52 – Vergleich Chlorophyll-a-Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit
abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010
(blaue Linie) mit 15 Minuten Aufnahmedauer
Abbildung 53 – Vergleich Phycocyanin-Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit
abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 19.07.2010
(blaue Linie) mit 15 Minuten Aufnahmedauer
Abbildung 54 – Vergleich Chlorophyll a aus Algaline-Transektdaten (rote Punkte)
mit abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 21.04.2010
(blaue Linie)
Abbildung 55 – Vergleich Sediment aus Algaline-Transektdaten (rote Punkte) mit
abgeleiteten Daten aus der MERIS-Full-Resolution-Szene vom 21.04.2010
(blaue Linie)
Abbildung 56 – Küstenmessstellen (dargestellt durch nummerierte, gelbe Rechtecke)
des Landesamtes für Umwelt, Naturschutz und Geologie von Mecklenburg-
Vorpommern
Abbildung 57 – Scatterplot der LUNG-Chl-a-Messwerte und der Chl-a-Werte aus
Satellitendaten

Abbildung 58 – Scatterplot der LUNG-Spm-Konzentration und der Spm-Streuung
aus Satellitendaten111
Abbildung 59 - Scatterplot der LUNG-Wassertransparenz und der Spm-Streuung aus
Satellitendaten
Abbildung 60 – Scatterplot der LUNG-DOC (gelöster organischer Kohlenstoff) und
die Gelbstoffwerte aus Satellitendaten112
Abbildung 61 – Scatterplot der LUNG-Extinktion 254 umgerechnet in Absorption
440 gegen Gelbstoffabsorption aus Satellitendaten113
Abbildung 62 – Forschungsschiff R/V Aranda und Route der Messkampagne
SYNTAX 2010114
Abbildung 63 – DLR-Tauchspektrometer MMS5 – links: Aufrisszeichnung, rechts:
im Einsatz
Abbildung 64 – Gemessene Reflektanzspektren ( $R_{RS}=L_u/E_d$ ) während der
Messkampagne SYNTAX 2010116
Abbildung 65 – Scatterplot der SYNTAX-Chl-a-Konzentration aus Labormessungen
der Wasserproben und der Chl-a-Konzentration berechnet aus den
Spektrometermessungen117
Abbildung 66 – Scatterplot der SYNTAX-Spm-Konzentration aus Labormessungen
der Wasserproben und der Sedimentstreuung berechnet aus den
Spektrometermessungen117
Abbildung 67 – Scatterplot der SYNTAX-Gelbstoffkonzentration aus
Labormessungen der Wasserproben und der Gelbstoffabsorption berechnet aus
den Spektrometermessungen

## 12 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1 – Eigenschaften der funktionalen Phytoplanktongruppen nach Nair et al.	
(2008, S. 3367)	12
Tabelle 2 – Übersicht über Art und Herkunft der für Laboruntersuchungen	
verwendeten Phytoplanktonkulturen	47
Tabelle 3 – Parameterwerte zur Simulation des Trainingsdatensatzes	67
Tabelle 4 – Technische Daten von Envisat und MERIS (CEOS EO Handbook –	
Update 2012)	72
Tabelle 5 - Kanäle zur Gewässerfernerkundung der Sensoren MERIS und MODIS	
und annähernde Farbwerte (Quelle: ESA, NASA)	75
Tabelle 6 – Parameterwerte zur Simulation des Testdatensatzes	85
Tabelle 7 – Parameter der Regressionsgeraden berechneter und erwarteter	
Ausgabedaten für den Trainingsdatensatz und den Testdatensatz	86
Tabelle 8 – Parameter der Regressionsgeraden für die Einzelkomponenten für	
781.250 Testfälle	87
Tabelle 9 – Gemessene Parameter und Messgeräte des Algaline-Projekts 1	03
Tabelle 10 – Sensorköpfe und Messparameter des Tauchspektrometers MMS5 1	15

## 13 Danksagung

Ich danke meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr. Konrad Miegel von der Universität Rostock für die Übernahme der Betreuung meiner Doktorarbeit sowie für den hilfreichen Gedankenaustausch und die Anregungen zur Gestaltung der Arbeit. Ebenso möchte ich den Gutachtern Prof. Dr. Ralf Bill von der Universität Rostock, Prof. Dr. Gunnar Nützmann vom Leibniz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei und Prof. Dr. Peter Reinartz vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt danken.

Mein herzlichster Dank gilt Dr. Andreas Neumann (†) für sein in mich gesetztes Vertrauen und seine stete Unterstützung. Sein früher Tod hinterlässt eine große Lücke. Aber auch Harald Krawczyk, der mich weiterhin fachlich betreut und beraten hat, Birgit Gerasch und den anderen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe Gewässerfernerkundung am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt, die immer ein offenes Ohr für Fragen hatten, sei an dieser Stelle mein ausdrücklicher Dank ausgesprochen.

Nicht zuletzt gilt mein Dank meiner Familie und meinen Freunden, die, wenngleich auch nicht fachlich, viel zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Gedankt sei auch den fleißigen Korrekturlesern für all ihre Mühe.

Schließlich möchte ich mich ganz herzlich bei meiner Freundin Janine bedanken. Sie hat mich nicht nur unermüdlich unterstützt und die Arbeit mehrfach Korrektur gelesen, sondern wusste mich auch in den richtigen Momenten zu motivieren und hat immer an mich geglaubt.