Die Ermittlung fernerkundungsrelevanter inhärenter optischer Eigenschaften von Wasserinhaltsstoffen mit dem Verfahren der schrittweisen Abtrennung

Von REINHOLD RENNERT

Zusammenfassung

Fortschritte in der Entwicklung der optoelektronischen Sensortechnologie, insbesondere die Entwicklung von PDA- und CCD-Zeilen, eröffnen der Fernerkundung neue Möglichkeiten in der qualitativen und quantitativen Bestimmung von Wasserinhaltsstoffen. Ein Beispiel dafür ist die Anwendung des Reflektanzmodells von MOREL u. PRIEUR (1977) bei einer stark verbesserten radiometrischen Auflösung, die eine bessere Handhabung der Inversionsaufgabe ermöglicht. Dieses Modell erfordert Angaben über die inhärenten optischen Eigenschaften (IOP) aller der Fernerkundung zugänglichen Wasserinhaltsstoffe: Chlorophyll, Gelbstoffe und Schwebstoffe. Dazu ist ein analytisches Verfahren zur Messung von Absorptions-, Streu- und Rückstreukoeffizienten für jeden einzelnen der oben erwähnten Stoffe erforderlich.

Dieser Artikel beschreibt ein sehr einfaches Verfahren zur Auftrennung der Wasserinhaltsstoffe und der Messung ihrer IOP über das gesamte sichtbare Spektrum an einer Wasserprobe. Es basiert auf der photometrischen Extinktionsmessung, der Äquivalenz von Extinktion und Attenuation und der Additivität von Absorptions- und Streukoeffizienten zum Attenuationskoeffizienten. Die Messung der filtrierten Wasserprobe führt zum Absorptionskoeffizienten der gelösten Stoffe, der hauptsächlich auf die gelösten Organika zurückzuführen ist. Subtrahiert man diesen Wert vom Meßwert der unbehandelten Wasserprobe, so gelangt man zum Streukoeffizienten der suspendierten Bestandteile der Wasserprobe. Die Kombination von Filtration und Oxidation kann zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten der gelösten anorganischen Salze verwendet werden. Die Bestimmung der Chlorophyll-Absorption ist dagegen erst nach einer separaten Extraktion des Filterrückstandes mit Ethanol möglich. Die beispielhaft vorgestellten Meßergebnisse zeigen, daß die Methode selbst bei Verwendung sehr einfacher Meßinstrumente verläßliche Resultate liefert, die den grundsätzlichen Modellvorstellungen über die IOP der Einzelstoffe entsprechen.

Summary

Advances in optoelectronical sensor technology, especially the development of PDA- and CCD-lines, promise new feasibilities for remote sensing in qualitative and quantitative determination of water constituents. One example for new chances is the application of the reflectance model of MOREL u. PRIEUR (1977) with largely enhanced radiometric resolution and therefore a better handling of the INVERSION-procedure. This model requires input parameters of the inherent optical properties (IOP) of each single detectable water constituent: Chlorophyll, Yellow Substances and Suspended Matter. Also the linkage between the optical and the corresponding analytical parameters of each water constituent is very closely connected with the knowledge of the IOP. Therefore an analytical procedure for the measurement of absorption, scattering and backscattering coefficients is required for each substance mentioned above.

This paper presents a very simple procedure for the separation of the water constituents and the measurement of their IOP across the whole visible spectrum in a water sample. It is based on photometric measurement of extinction, the equivalence of attenuation and extinction, and the additivity of absorption and scattering in attenuation-coefficients. Measurement of the filtered water sample provide absorption coefficients of the solutes, mainly the dissolved organic substances. Measurement of the unfiltered water sample subtracted by the measurement of the filtered sample leads to the scattering coefficient of the suspended components. Combination of filtering and oxidation can be used for the determination of absorption coefficients of inorganic solutes. Chlorophyll-absorption has to be analyzed separately by extracting the filter residue with ethanol. The examples presented here give the evidence, that the method provides reliable results, even when instrumentation is very simple.

Inhalt

1.	Einleitung	28
2.	Grundüberlegungen	29
	Geräte	
4.	Das Verfahren der schrittweisen Abtrennung	32
5.	Vorstellung ausgewählter Messungen	33
6.	Diskussion	36
7.	Schriftenverzeichnis	37

1. Einleitung

Im Zuge der Entwicklung der Fernerkundung wurde klar, daß es möglich ist, im Wasser gelöste und suspendierte Stoffe zu erkennen. Wasser ist neben der Atmosphäre das einzige Umweltmedium, in das man mit Methoden der passiven Fernerkundung hineinschauen kann, so daß sich Aussagen über die Beschaffenheit des Wasservolumens ableiten lassen. Dies ist besonders interessant für die Erkundung und das Monitoring von Gewässergüte und damit verbundener Wasserqualitätsparameter in ihrer räumlichen Verteilung. Daraus entstand der Wunsch, die Stoffe, die der passiven Fernerkundung zugänglich sind, zu identifizieren, zu unterscheiden und in ihrer Konzentration zu bestimmen, kurz: der Wunsch nach einer qualitativen und quantitativen Analyse. Im wesentlichen geht es um die Substanzen Gelbstoffe, Schwebstoffe und Chlorophyll. Die genannten Ziele ließen sich bislang nur in sehr eingeschränkter Weise umsetzen. Die Gründe dafür sind vielfältig. Ein vollständiges und in sich geschlossenes Verfahren, welches nicht nur auf Korrelations- und Regressionsrechnung beruht, ist bislang nicht verfügbar. Hinzu kommt, daß die herkömmliche Sensorik über eine für diesen Zweck zu geringe spektrale Auflösung verfügt. Hier versprechen neue Entwicklungen in der Spektroskopie, insbesondere die CCD-Detektoren, und die weltweiten Planungen hinsichtlich zukünftiger satelliten- und flugzeuggestützter Fernerkundungsmissionen (ROSIS, MOS auf PRIRODA, MERIS auf ENVISAT) eine Weiterentwicklung der Fernerkundung von einer rein kartographischen Methode hin zu einer analytischen Methode im Sinne eines echten Umweltmonitorings. Jedoch hinken die Entwicklungen von Verfahren zur Datenauswertung und Interpretation noch ein gutes Stück hinterher. Die Einsicht in die Notwendigkeit verstärkter Forschung auf diesem Sektor führte zur Erarbeitung des hier vorgestellten Verfahrens als Teilelement eines umfassenden Verfahrens der Datenanalyse, welches dem Anspruch überregionaler Gültigkeit gerecht werden soll.

In einer vorausgegangenen Arbeit des Autors (RENNERT, 1997) wurde bereits ein Verfahren skizziert, welches im Gegensatz zu den einfachen regionalspezifischen Korrelationsmodellen eine universellere Gültigkeit beansprucht. Es beruht im wesentlichen auf dem Reflektanzmodell von MOREL u. PRIEUR (1977) und seiner Weiterentwicklung in GORDON u. MOREL (1983), SATHYENDRANATH et al. (1989) sowie weiterer Arbeiten und versucht, die einzelnen Teilelemente in einer Art und Weise anzuordnen und zu verknüpfen, daß ein in sich schlüssiges Verfahren vom ersten Schritt, der Messung, bis zum letzten Schritt, der Konzentrationsangabe der Einzelstoffe, entsteht. Ein auf universelle Verwendbarkeit abzielendes Modell muß aber auch Steuerungs- und Kontrollelemente beinhalten, die der konkreten Situation im Einzelfall gerecht werden.

In der genannten Arbeit des Autors wird aufgezeigt, wie die qualitative und quantitative Stoffbestimmung über die Simulation der spektralen Reflektanz und deren sukzessive Anpassung an eine spektral hochaufgelöste Reflektanzmessung erfolgen kann. Auf diese Weise fließen die eigentlichen Kerninformationen, nämlich die inhärenten optischen Eigenschaften (kurz IOP) der Einzelstoffe in adäquater Weise in das Modell ein.

Dabei handelt es sich im wesentlichen um die Absorptions-, Streu- und Rückstreukoeffizienten der einzelnen Wasserinhaltsstoffe. Zwar sind deren grundlegende Merkmale in ihrer spektralen Variation bekannt, aber ein für die routinemäßige Handhabung geeigneter Kenntnisstand ist noch nicht erreicht. Dies betrifft besonders die Schweb- und Gelbstoffe, die jeweils uneinheitliche Summenparameter darstellen und eine unüberschaubare Fülle von Ausprägungen hinsichtlich ihrer Zusammensetzung zulassen. Es bleibt ungeklärt, aus welchen Einzelsubstanzen sie bestehen und wie groß deren Anteile sind. Die Zusammensetzung dieser Stoffgruppen bestimmt jedoch im Einzelfall die ganz spezifische Ausprägung ihrer Absorptions- und Streueigenschaften. Gerade in diesem Punkt ist der derzeitige Kenntnisstand zu gering. DEKKER (1995) bestätigt die Notwendigkeit einer umfassenden Validierung und Verfeinerung der bisherigen Erkenntnisse auf diesem Gebiet.

Die Bestimmung der IOP der Einzelkomponenten ist eine zur Validierung des Reflektanzmodells unabdingbare Notwendigkeit. Eine solche Bestimmungsmöglichkeit sollte für jedes Gewässer und jede hydrologische Situation zur Verfügung stehen.

2. Grundüberlegungen

Bei der Entwicklung des Verfahrens standen die Photometrie und das Lambert-Beersche Gesetz Pate. Es basiert auf dem Versuch, die Extinktion als entscheidende Meßgröße der Photometrie und die Reflektanz als entscheidende Meßgröße in der Fernerkundung auf eine gemeinsame Wurzel – die IOP – zurückzuführen und darüber zu verknüpfen. Ansatzpunkt ist die Äquivalenz von Attenuationskoeffizienten $c(\lambda)$ und Extinktionskoeffizienten $E(\lambda)$ nach Jerlov (1976):

$$c(\lambda) = E(\lambda)/d \tag{1}$$

Die Division durch die Schichtdicke d einer verwendeten Küvette ist notwendig, um den dimensionslosen Parameter "Extinktion" in den auf die Einheit [m^{-1}] normierten Attenuationskoeffizienten umzurechnen. Der allgemeine Attenuationskoeffizient $c(\lambda)$ ist ein Maß für die Lichtabschwächung beim Durchtritt eines Strahls durch eine Wassersäule von 1 m. Er läßt sich beschreiben als Summe aus Streukoeffizienten $b(\lambda)$ und Absorptionskoeffizienten $a(\lambda)$ (JERLOV, 1976).

$$c(\lambda) = a(\lambda) + b(\lambda) \tag{2}$$

Dies muß demnach in gleicher Weise für die in einer Küvette gemessene Extinktion gelten, auch wenn der Lichtweg darin in der Regel sehr viel kürzer ist. Die Additivität, die in Gl. (2) zum Ausdruck kommt, bedeutet anders herum, daß diese Parameter auch voneinander subtrahiert werden können, wenn es gelingt, streuende und absorbierende Komponenten in einer Wasserprobe voneinander zu trennen.

Die Reflektanz R(λ) als das Verhältnis von aufsteigender zur gesamten einfallenden Strahlung läßt sich nach MOREL u. PRIEUR (1977) auf die inhärenten optischen Eigenschaften Absorption a(λ) und Rückstreuung b $_b(\lambda)$ zurückführen. Die Rückstreuung ist der Anteil an der Gesamtstreuung, der in einem Winkel von 90° bis 180° zur einfallenden Strahlung zurückgeworfen wird. Der Zusammenhang läßt sich folgendermaßen formulieren:

$$R(\lambda) = 0.33 \cdot \frac{b_b(\lambda)}{a(\lambda)}$$
 (3)

Daraus wird ersichtlich, daß die Küvettenmessungen im Photometer und die Fernerkundungsmessungen von Schiff, Flugzeug oder Satellit über die Streu- und Absorptionseigenschaften des Wassers und seiner Inhaltsstoffe verknüpft werden können. Eine direkte Ableitung der Streu- und Absorptionskoeffizienten aus der Reflektanzmessung ist jedoch nicht möglich, sie sollen mit Hilfe der photometrischen Messungen näher bestimmt bzw. kontrolliert werden

Hinter der Entwicklung dieses Verfahrens steht die Absicht, eine Auftrennung des Extinktions-Signals hinsichtlich seiner Einzelkomponenten vorzunehmen und damit die Frage zu beantworten, welche spektralen Absorptions- bzw. Streueigenschaften der Gelbstoffe, Schwebstoffe und des Chlorophylls im Einzelfall vorliegen.

Folgende vereinfachende Annahme wird an dieser Stelle getroffen: gelösten Substanzen werden ausschließlich Absorptionseigenschaften zugesprochen, ungelösten partikulären Stoffen ausschließlich Streueigenschaften. In der Literatur wird diese Annahme implizit getroffen, ohne daß näher darüber reflektiert wird. Auch wenn sie als nicht absolut exakt anzusehen ist – beispielsweise durch die Vernachlässigung der sicherlich existierenden Absorptionseigenschaften der Schwebstoffe –, so stellt sie doch eine gute Annäherung an die Wirklichkeit dar, mit der gearbeitet werden kann.

Die photometrische Extinktionsmessung einer unbehandelten Wasserprobe, in der sowohl gelöste als auch partikuläre Substanzen vorkommen, erfaßt immer die Summe aus a(λ) und b(λ). In der filtrierten Wasserprobe kann die Extinktion als reine Absorption aufgefaßt werden. Durch Differenzbildung dieser beiden Meßgrößen läßt sich demzufolge die durch Schwebstoffe bzw. partikuläre Substanzen verursachte Streuung ermitteln.

Die nach der Filtration in der Probe verbleibenden gelösten Substanzen können hinsichtlich ihrer Absorptionseigenschaften in 3 Gruppen unterteilt werden:

- a) das Wasser selbst (Index w),
- b) die gelösten organischen Substanzen, in der Terminologie der Fernerkundung als "Gelbstoffe" bezeichnet (Index y), und
- c) die gelösten anorganischen Salze (Index m).

Alle 3 Komponenten sind wiederum additiv:

$$a_{ges}(\lambda) = a_{w}(\lambda) + a_{v}(\lambda) + a_{m}(\lambda)$$
(4)

Die Absorptions- und sehr schwachen Streueigenschaften des reinen Wassers werden bei der photometrischen Bestimmung dadurch eliminiert, daß jede Messung stets gegen eine mit aqua dest. gefüllte Referenzküvette abgeglichen wird. Von den verbleibenden Substanzen dominieren bei weitem die Gelbstoffe. Mineralische Salze tragen nur in untergeordneter Weise zur Absorption bei, und dies auch nur im kurzwelligen Spektralbereich unter 400 nm. Dennoch sind ihre Absorptionseigenschaften nicht gleich Null. BRICAUD, MOREL u. PRIEUR (1981) belegen dies durch Messung einer Wasserprobe nach Filtration und Oxidation der organischen Substanz. Solche Kontrollmessungen können auf einfache Weise in das Verfahren integriert werden. Beispiele werden in Kap. 5 "Vorstellung ausgewählter Messungen" gezeigt.

Die Schwebstoffe werden als gewässeranalytischer Summenparameter ungeachtet ihrer Zusammensetzung bestimmt. Dies schließt ausdrücklich das Phytoplankton mit ein. Unberücksichtigt blieb dagegen bis zu diesem Punkt die Bestimmung des in den Algenzellen

eingeschlossenen Chlorophylls. Im Gegensatz zur Reflektanzmessung kommt es bei der Extinktionsmessung der unbehandelten Wasserprobe nicht zur Geltung. Seine Absorption muß in einem gesonderten Arbeitsschritt erfaßt werden. Dazu wird die Probe einer in der DIN-Norm 38412 – L16 (Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung) vorgeschriebenen Extraktion mit Ethanol unterzogen. Eine ausführliche Beschreibung dieses Verfahrens ist in NUSCH (1980) zu finden. Dieser filtrierte Extrakt zeigt bei Vorhandensein von Chlorophyll eine intensiv grüne Farbe, deren Spektralverlauf diesmal gegen Ethanol als Referenz gemessen wird.

Die Abhängigkeit des Attenuations- oder Extinktionskoeffizienten von der Wellenlänge ist im Hinblick auf die Verknüpfung mit Reflektanzdaten aus der Fernerkundung von besonderer Bedeutung, da auf diese Weise auch die spektralen Variationen der Streu- und Absorptionskoeffizienten bestimmt werden können. In diesem Zusammenhang ist zu berücksichtigen, daß die oben erwähnte Additivität der IOP aus verschiedenen Messungen natürlich nur bei identischen Wellenlängen Gültigkeit besitzt.

3. Geräte

Erforderlich ist ein Photometer mit freier und präziser Wahl der Wellenlänge im fernerkundungsrelevanten Bereich zwischen 400 und 800 nm. Dadurch scheiden Filterphotometer von vorneherein aus. Für die hier vorgestellten Untersuchungen wird ein einfaches Spektralphotometer HACH DR/2000 verwendet, dessen Prisma stufenlos gedreht werden kann, wodurch die freie Wahl von λ gegeben ist. Der Nachteil dieser Wellenlängenaufsplittung über ein Prisma liegt im hohen Zeitaufwand für die Aufnahme einer kompletten Attenuations-, Absorptions- oder Streukurve. Die einzelnen Wellenlängen müssen hintereinander durchgemessen werden, und jede Veränderung der Wellenlänge verlangt einen separaten Nullabgleich mit der Referenzküvette. Soll der hier anvisierte Spektralbereich von 400 bis 800 nm im 10-nm-Intervall abgedeckt werden, dann sind nicht nur 41 Einzelmessungen erforderlich, es müssen zusätzlich bei jeder Einzelmessung zweimal die Küvetten gewechselt werden, was insgesamt 82 Küvettenwechsel für 1 Gesamtspektrum ausmacht. Zur kompletten Messung einer Probe gehören die unbehandelte, die filtrierte und die oxidierte Probe sowie der Chlorophyll-Extrakt. Dies sind insgesamt 164 Einzelmessungen mit 328 Küvettenwechseln.

Eine zweite Schwierigkeit ergibt sich daraus, daß bei der Messung der unbehandelten Wasserprobe sichergestellt werden muß, daß die Schwebstoffe nicht auf dem Küvettengrund sedimentieren. Dazu wird die Küvette vor jedem Einsetzen in das Photometer geschwenkt. Da die Partikel diskret in der Probe verteilt sind, kommt es unvermeidlich zu gewissen Inhomogenitäten in der Schwebstoffverteilung. Darum wird bei zwei unterschiedlichen Messungen nie exakt dieselbe Situation erfaßt. Dies zieht eine gewisse Streubreite der Einzelmessungen in einem Gesamtspektrum nach sich und muß durch Anpassung einer geeigneten Modellkurve ausgeglichen werden.

Beide Probleme lassen sich vermeiden bei Verwendung eines CCD- oder PDA-Spektralphotometers. Diese besitzen die Eigenschaft, den gesamten Spektralbereich, für den das Gerät ausgelegt ist, in feinster Wellenlängenauflösung simultan mit einer Messung zu erfassen. Die Auflösung liegt im Bereich von 1–5 nm, z. T. noch darunter, was für den hier anvisierten Zweck völlig ausreichend ist. Auf diese Weise entfallen Küvettenwechsel vollständig, was eine enorme Zeitersparnis mit sich bringt. Einzelmessungen von Gesamtspektren können ohne großen Zeitaufwand mehrmals durchgeführt und gemittelt werden, was die Ergebnisse wesentlich sicherer macht. Und schließlich werden die spektralen Unterschiede der

Schwebstoffstreuung immer für ein und dieselbe Situation aufgezeichnet, was eine grundlegende Verbesserung darstellt. Da diese Geräte alle Vorteile auf ihrer Seite haben, werden sie für das hier beschriebene Verfahren als beste Lösung empfohlen. Es sollte aber nicht unbeachtet bleiben, daß das Verfahren auch mit sehr einfachen Geräten durchgeführt werden kann und dabei durchaus verläßliche Ergebnisse liefert.

4. Das Verfahren der schrittweisen Abtrennung

Dieser Abschnitt gibt eine schematische Beschreibung der Abfolge der einzelnen Arbeitsschritte. Alle erforderlichen Extinktionsmessungen sind über den Spektralbereich von 400–800 nm in Intervallen von 10 nm oder kleiner durchzuführen. Die Proben sollten stets frisch verarbeitet werden.

1. Die unbehandelte Wasserprobe (Index u) mit all ihren Inhaltsstoffen wird gegen aqua dest. als Referenz gemessen. Die als äquivalent betrachtete Attenuation setzt sich aus den folgenden Bestandteilen zusammen:

$$c_{u}(\lambda) = a_{v}(\lambda) + a_{m}(\lambda) + b_{s}(\lambda)$$
(5)

a_v(λ) = Absorptionskoeffizient der Gelbstoffe (Index y)

 $a_m(\lambda)$ = Absorptionskoeffizient der mineralischen Salze (Index m)

 $b_s(\lambda)$ = Streukoeffizient der Schwebstoffe (Index s)

2. Ein Teil der entnommenen Probe wird durch einen feinporigen Filter filtriert und in gleicher Weise gemessen (Index f). Die Attenuation setzt sich in diesem Fall nur noch aus den absorbierenden Komponenten zusammen.

$$c_f(\lambda) = a_y(\lambda) + a_m(\lambda) \tag{6}$$

In guter Näherung gilt für 400-800 nm:

$$c_{f}(\lambda) = a_{v}(\lambda) \tag{7}$$

3. Optional ist folgender Schritt: An der filtrierten Probe wird eine vollständige Zerstörung der organischen Substanz mittels chemischer Oxidation (HNO₃/H₂O₂) oder UV-Bestrahlung durchgeführt (Index f+ox). Die Extinktion beruht danach ausschließlich auf der Absorption der mineralischen Substanzen:

$$c_{f+ox}(\lambda) = a_{m}(\lambda) \tag{8}$$

Allerdings ist, wie bereits erwähnt, $a_m(\lambda)$ im betrachteten Spektralbereich sehr klein und kann vernachlässigt werden. Dieser Zwischenschritt ist eine Kontrollmöglichkeit für den Fall, daß die hier getroffenen Annahmen nicht gegeben zu sein scheinen.

Die Berechnung von $a_v(\lambda)$ läßt sich dann folgendermaßen durchführen:

$$a_{v}(\lambda) = c_{f}(\lambda) - c_{f+ox}(\lambda) \tag{9}$$

4. Die Berechnung von $b_s(\lambda)$ erfolgt ungeachtet von Schritt 3 aus der Subtraktion der Gleichungen (5) und (6)

$$b_s(\lambda) = c_{ij}(\lambda) - c_f(\lambda) \tag{10}$$

5. Da die Chlorophyllabsorption erst in gelöster Form bestimmt werden kann, muß zunächst eine Extraktion des Filterrückstandes mit Ethanol erfolgen (NUSCH, 1980). Der filtrierte Extrakt wird anschließend gegen reines Ethanol in der Referenzküvette gemessen (Index extr.). Besonders charakteristisch für das Chlorophyll ist der steile und schmalbandige Absorptionspeak bei 675 nm. Um ihn korrekt zu erfassen, muß das Meßintervall zwischen 660 und 690 nm auf 5 nm (oder geringer) verkleinert werden. In diesem Fall gilt:

$$c_{\text{extr}}(\lambda) = a_{\text{chl}}(\lambda)$$
 (11)

6. Um die Ergebnisse vergleichbar zu machen, ist es notwendig, die Koeffizienten stets in der Einheit [m⁻¹] anzugeben, d. h. auf die Schichtdicke von 1 m umzurechnen.

5. Vorstellung ausgewählter Messungen

An dieser Stelle seien einige Messungen in Kürze vorgestellt, um das Verfahren näher zu illustrieren.

A-Gelbstoffabsorption:

Das Beispiel in Abb. 1 zeigt die Meßwerte (punktiert) und die daran angepaßte Modellkurve. Die spektrale Variation der Gelbstoffabsorption unterliegt einem exponentiellen Abfall mit steigender Wellenlänge. Die entsprechende Gleichung lautet:

$$a_{v}(\lambda) = a_{v}(\lambda_{0}) \cdot e^{-s \cdot (\lambda - \lambda_{0})}$$
(12)

Zur Anpassung werden die Meßwerte zunächst auf $a_y(\lambda_0=450~\text{nm})=1,000~\text{normiert}.$ Danach kann die Steigung S der Exponentialkurve auf einfache Weise gefittet werden. Anschließend wird die gesamte Kurve mit dem absoluten Meßwert bei $a_y(\lambda_0=450~\text{nm})$ multipliziert.

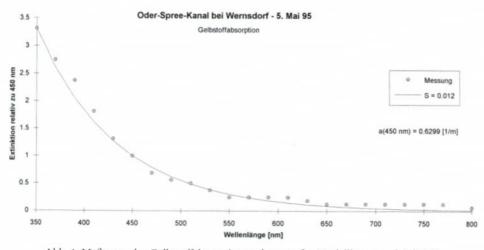


Abb. 1: Meßwerte der Gelbstoffabsorption und angepaßte Modellkurve nach Gl. (12)

B - Streuung des Schwebstoffes:

An diesem Beispiel (Abb. 2) wird deutlich, wie wichtig die Anpassung einer geeigneten Modellkurve an die Meßwerte ist. Letztere streuen aufgrund der oben erwähnten meßtechnischen Schwierigkeit sehr viel stärker als im Falle der Gelbstoffabsorption. Die entsprechende Modellkurve der allgemeinen Form

$$b_s(\lambda) = b_s(\lambda_0) \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_0}\right)^{-n}$$
 (13)

hat in diesem Fall ihren Fixpunkt bei λ_0 = 550 nm und wird an dieser Stelle auf den Wert 1,000 normiert. Die Steigung n der Potenzfunktion kann daraufhin wie im Fall –A– leicht angepaßt und anschließend durch Multiplikation aller Werte mit dem Meßwert bei λ_0 auf den realen Fall umgesetzt werden.

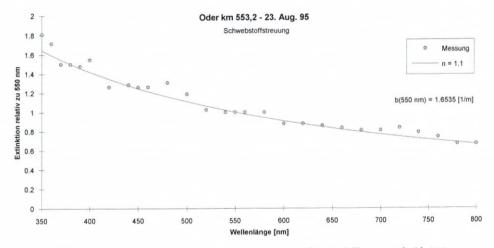


Abb. 2: Meßwerte der Schwebstoffstreuung und angepaßte Modellkurve nach Gl. (13)

C-Chlorophyllabsorption:

Die spektralen Absorptionseigenschaften dieses Farbpigments sind so charakteristisch, daß sie sich nicht mit einer einfachen Modellkurve beschreiben lassen. Da die Meßwerte sehr zuverlässig ermittelt werden können, werden sie direkt zu einer Spektralkurve verbunden. Eine Normierung auf eine bestimmte Wellenlänge ist somit nicht zwingend erforderlich. Sie muß dann eingeführt werden, wenn die Spektralkurven verschiedener Proben übereinandergelegt und verglichen werden sollen, wie in Abb. 3 geschehen. Die Normierung kann prinzipiell auf die Wellenlängen einer der beiden Absorptionsmaxima $\lambda_1=440$ nm oder $\lambda_2=675$ nm festgelegt werden. Sie wurde in diesem Fall auf 675 nm gesetzt, da (a) die photometrische Bestimmung der Chlorophyll-Konzentration nach DIN 38412 – L16 in unmittelbarer Nähe bei 665 nm erfolgt und (b) diese Absorptionsbande für die Interpretation der Fernerkundungsmessungen von ganz besonderer Bedeutung ist, da sie nur minimal von anderen Substanzen überlagert wird.

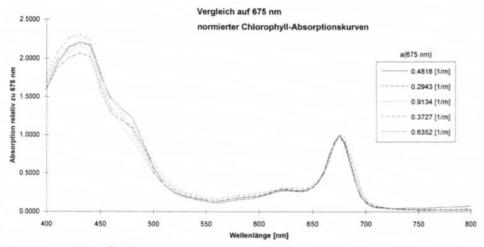


Abb. 3: Überlagerung verschiedener Absorptionsspektren des Chlorophyll

D-Absorption mineralischer Komponenten:

Um den Einfluß anorganischer Salze auf die Gesamtextinktion einer Wasserprobe zu demonstrieren, wurden einige Standardlösungen in Konzentrationen von 1 g/l in der oben beschriebenen Weise durchgemessen: Chlorid als NaCl, Phosphat als KH₂PO₄, Ammonium als NH₄Cl und Nitrat als NaNO₃. Schwankungen von ± 0.1 Extinktionseinheiten um den Nullwert (Abb. 4) beruhen auf Meßungenauigkeiten des Photometers.

Einzig die Ammonium-Lösung zeigt einen signifikanten Ausschlag. Daraus läßt sich ableiten, daß anorganische Komponenten sehr wohl optische Eigenschaften besitzen können, die für die passive Fernerkundung relevant sind. Allerdings kommen sie kaum zur Geltung, da

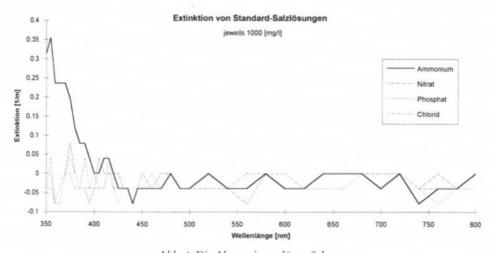


Abb. 4: Die Absorption gelöster Salze

- (a) ihre Absorption auf Wellenlängen < 400 nm beschränkt ist, die in der Regel von Fernerkundungssensoren nicht abgedeckt werden, und
- (b) derart hohe Konzentrationen wie in diesem Fall selbst in hypertrophen und stark belasteten Gewässern der absolute Ausnahmefall sind.

6. Diskussion

Das Verfahren ist in dieser Form sicher nicht frei von Ungenauigkeiten. Die getroffenen Vereinfachungen sind anhand von Detailuntersuchungen zu überprüfen. Kritische Anmerkungen und weitergehende Überlegungen zu einzelnen Punkten finden sich bei BRICAUD, MOREL u. PRIEUR (1981). Die grundlegende Bedeutung wird dadurch aber nicht in Frage gestellt. Die Lücke zwischen Fernerkundungsmessungen und allgemeinen gewässerökologischen Bestimmungen wird mit diesem Verfahren geschlossen.

Man verfügt auf diese Weise über elementare Parameter, die zur Simulation von Reflektanzspektren auf der Basis des Modells von MOREL u. PRIEUR (1977) sowie der Additivität der IOP nötig sind. Unter der Prämisse der im Abschnitt "Grundüberlegungen" getroffenen Vereinfachungen lautet diese Gleichung:

$$R(\lambda) = 0.33 \cdot \frac{b_{b, w}(\lambda) + b_{b, s}(\lambda)}{a_{w}(\lambda) + a_{v}(\lambda) + a_{chl}(\lambda)}$$
(14)

Die Rückstreu- und Absorptionskoeffizienten des reinen Wassers $b_{b,w}(\lambda)$ und $a_w(\lambda)$ sind Konstanten und in der Arbeit von SMITH u. BAKER (1981) tabelliert. Der in Gl. (14) einfließende Rückstreukoeffizient $b_{b,s}(\lambda)$ des Schwebstoffs muß aus dem Gesamtstreukoeffizienten $b_s(\lambda)$ abgeschätzt werden. Dazu wird auf eine Näherung von MOREL u. PRIEUR (1977) zurückgegriffen, die für das Verhältnis b_b/b im Falle partikulärer Streuung (Teilchendurchmesser >> Wellenlänge) Werte zwischen 0.5 und 3 %, im Mittel 1.2 %, angeben.

Die vorgestellten Meßergebnisse bestätigen in ihren Grundzügen die allgemeinen Vorstellungen über den Spektralverlauf der IOP der Einzelkomponenten. Durch die Vielzahl der bisher durchgeführten Messungen wird deutlich, daß ihr Spektralverlauf nicht starr und unveränderlich ist, sondern Variationen in einer gewissen Bandbreite unterliegt, was vermutlich auf die interne Zusammensetzung der Einzelkomponenten zurückzuführen ist. Aus diesem Grund ist es so wichtig, sie im Einzelfall spezifizieren und verifizieren zu können. Von der möglichst exakten Kenntnis der IOP hängt der Erfolg der Simulationen und damit der quantitativen Interpretation von Fernerkundungsdaten ab. Die starke Fixierung auf die IOP muß allerdings etwas relativiert werden, da zur Berechnung der realen Überwasser-Reflektanz weitere Angaben erforderlich sind:

Zum einen sind Korrekturterme für die durch die Grenzfläche Atmosphäre/Wasser hervorgerufenen Phänomene Refraktion und gerichtete Reflexion erforderlich. Zweitens ignoriert das allein auf die IOP aufbauende Reflektanzmodell die Fluoreszenz des Chlorophylls. Diese tritt bei allen Messungen im Bereich 685–705 nm sehr ausgeprägt in Erscheinung und ist direkt mit der Chlorophyll-Konzentration verknüpft. Dieses Handicap kehrt sich jedoch in sein Gegenteil um, da sich der Effekt der Chlorophyll-Fluoreszenz durch Vergleich zwischen Messung und Berechnung von R bei ansonsten zufriedenstellender Übereinstimmung herausfiltern läßt. Auf diese Weise können konzentrationsabhängige Fluoreszenzerscheinungen als Funktion der Wellenlänge in das Reflektanzmodell integriert werden. Sie müssen allerdings unter dem Aspekt regionale/überregionale Gültigkeit überprüft werden. Erste Ergebnisse dieser Simulationen werden in RENNERT (1997) vorgestellt.

Die IOP der Einzelkomponenten können nicht nur mit den Reflektanzmessungen, sondern auch mit den Parametern der Gewässergütebestimmungen verknüpft werden, indem direkte Korrelationen zwischen $a_y(\lambda)$ und CSB bzw. DOC, $b_s(\lambda)$ und den abfiltrierbaren Stoffen sowie $a_{\rm chl}(\lambda)$ und der Chlorophyll-Konzentration in [µg/l] gesucht werden. Es ist davon auszugehen, daß diese Zusammenhänge regionalspezifischen und auch saisonalen Schwankungen unterliegen, so daß Regressionen für jeden Einzelfall neu berechnet werden müssen. Auf diese Weise kann ein universell gültiges Verfahren zur Auswertung von Fernerkundungsdaten aufgebaut werden, in deren Mittelpunkt die IOP der Einzelstoffe stehen, ohne regionale und temporale Besonderheiten außer Acht zu lassen.

Ein großer Vorteil des Verfahrens ist seine Einfachheit. Es ist stets verfügbar und erfordert einen geringen instrumentellen und analytischen Aufwand. Nicht zufriedenstellend ist der Aspekt Zeitbedarf bei Verwendung einfacher Prismen-Spektralphotometer. Hier können lichtleitergekoppelte PDA- und CCD-Photometer ihre Vorteile ausspielen.

Der durch diese Photometer-Bauart erzielte Gewinn für das Verfahren der schrittweisen Abtrennung ist aber noch viel weitgehender. Es zeigt sich, daß für Transmissions-, Absorptions- und Streuungsmessungen von eutrophen Binnengewässern ganz andere Küvettenstärken gewählt werden müssen als im Fall oligotrophen Ozeanwassers. Sämtliche hier vorgestellten Messungen wurden mit einer 1"-Küvette durchgeführt und brachten stets signifikante Ergebnisse hervor. Die bisher zu diesem Thema veröffentlichten Arbeiten beschäftigen sich nahezu ausschließlich mit Ozeanwasser, das selbst im Sonderfall der Küstengewässer - vergleicht man mit den hier betrachteten Verhältnissen – relativ geringe Gehalte an fernerkundungsrelevanten Inhaltsstoffen aufweist. Entsprechend wurden dort Küvetten von 100 cm Schichtdicke und mehr (!) verwendet, z. B. bei BRICAUD, MOREL u. PRIEUR (1981). Dies zeigt, daß Standardphotometer für die Untersuchung eutropher Binnengewässer besser geeignet sind.

Die Wahl der Schichtdicke hat aber auch etwas mit der Sensitivität des Detektors zu tun. CCD-Zeilen haben neben den o. g. Eigenschaften den Vorteil, höchste Empfindlichkeit mit einem sehr weiten Dynamikbereich zu vereinen. Dies eröffnet auch für Proben aus oligotrophen Gewässern die Möglichkeit, mit herkömmlichen Küvettenstärken zu arbeiten. Darüber hinaus besteht durch eine Lichtleiterankopplung die Möglichkeit, Länge und Winkel des Lichtwegs im Zusammenspiel mit einer geeigneten Küvette individuell und sehr flexibel zu gestalten.

7. Schriftenverzeichnis

- BRICAUD, A., MOREL, A. u. PRIEUR, L.: Absorption by dissolved organic matter of the sea (yellow substance) in the UV and visible domains; Limnology and Oceanography, 26(1), 43–53, 1981.
- Dekker, A. G.: Remote Sensing for Water Quality Research and Development; The EARSel Newsletter, No. 23, 1995.
- Deutsche Einheitsverfahren zur Wasser-, Abwasser- und Schlammuntersuchung (DEV); Physikalische, chemische, biologische und bakteriologische Verfahren; Gruppe L: Testverfahren mit Wasserorganismen (DIN 38412). Hrsg.: Fachgruppe Wasserchemie in der Gesellschaft Deutscher Chemiker in Gemeinschaft mit dem Normenausschuß Wasserwesen (NAW) im DIN Deutsches Institut für Normung e.V. VCH Verlagsgesellschaft, Weilheim.
- GORDON, H. R. u. MOREL, A. Y.: Remote assessment of ocean color for interpretation of satellite visible imagery; Lecture Notes on Coastal and Estuarine Studies, 114 S. Springer-Verlag, New York, Berlin, Heidelberg, Tokio, 1983.
- JERLOV, N. E.: Marine Optics; Elsevier Oceanographic Series 14, Amsterdam, 1976.

- MOREL, A. u. PRIEUR, L.: Analysis of variations in ocean colour; Limnology and Oceanography, 22, 709–722, 1977.
- NUSCH, E. A.: Comparison of different methods for chlorophyll and phaeopigment determination; Arch. Hydrobiol. Beih. Ergebn. Limnol. 14, 14–36, 1980.
- RENNERT, R.: Monitoring von Gewässergüte mit Fernerkundungsmethoden; Zeitschrift f. Photogrammetrie und Fernerkundung 1/97, 1997.
- SATHYENDRANATH, S., PRIEUR, L. u. MOREL, A.: A three-component model of ocean colour and its application to remote sensing of phytoplankton pigments in coastal waters; International Journal of Remote Sensing; Vol. 10, No. 8, 1373–1394, 1989.
- SMITH, R. C. u. BAKER, K. S.: Optical properties of the clearest natural waters (200–800 nm); Applied Optics, Vol. 20, No. 2, 177–184, 1981.