

Atmosphärenkorrektur
über schwebstoffreichen
Küstengewässern für MERIS

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich
Geowissenschaften
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Kathrin Schiller
aus Berlin

Hamburg 2005

Als Dissertation angenommen vom Fachbereich Geowissenschaften
der Universität Hamburg auf Grund der Gutachten von

Prof. Dr. Hartmut Graßl
und Dr. Roland Doerffer.

Hamburg, den 26. Oktober 2005

Prof. Dr. Helmut Schleicher
(Dekan des Fachbereichs Geowissenschaften)

Kurzfassung

Zur Entwicklung einer Atmosphärenkorrektur über schwebstoffreichen Küstengewässern wurde die Methode der inversen Modellierung angewandt. Neuronale Netze, die das inverse Modell emulieren, wurden mit Daten, die Ergebnisse von Monte-Carlo Simulationen darstellen, trainiert. Das zu diesem Zwecke entwickelte Monte-Carlo-Programm beschreibt den Strahlungstransport im gekoppelten System Atmosphäre-Ozean und berücksichtigt die Polarisations-eigenschaften des Lichtes. Zusätzlich zu dem Netz, das zur Atmosphärenkorrektur verwendet wurde, konnte ein Neuronales Netz darauf trainiert werden, erstmals die Konzentrationen von Schweb- und Gelbstoff direkt aus MERIS-Daten abzuleiten. Beide Netze wurden anhand von *in situ* Daten validiert und liefern für schwebstoffreiche Typ-II Gewässer stabilere Ergebnisse als die operationell eingesetzte Methode. Für noch zu behebende Probleme der vorgestellten Methode wurden Lösungsvorschläge entwickelt.

Abstract

For the development of an atmospheric correction over coastal waters with a high load of suspended matter an inverse modelling technique was used. Neural Networks emulating the inverse model were trained with results of Monte-Carlo calculations. The designed Monte-Carlo program describes the radiative transfer in a coupled atmosphere-ocean system and takes into account the polarization properties of light. Additionally to the Neural Network for the atmospheric correction another one was trained in order to derive for the first time concentrations of suspended matter and yellow substance directly from MERIS-data. Both Networks were validated using *in situ* data. They turned out to be more stable over case-II waters with a high load of suspended matter than the operational algorithm. Remaining problems were discussed and possible solutions were presented.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Von Stokes Vektoren und Müller Matrizen	5
2.1	Der Stokes Vektor und die Poincaré Sphäre	6
2.1.1	Drehung des Koordinatensystems	9
2.2	Die Müller Matrix	11
3	In der Atmosphäre	14
3.1	Einleitendes	14
3.2	Rayleigh Streuung und das polarisierte Himmelslicht	16
3.3	Mie Streuung	19
3.4	Ozon	21
3.5	Kondensstreifen und dünne Zirren	22
4	An der Wasseroberfläche	23
4.1	Reflektion und Transmission an der Wasseroberfläche	23
4.1.1	Müller Matrizen für Reflektion und Transmission	25
4.1.2	Spezialfälle	26
4.2	Modellierung der Oberfläche nach Cox und Munk	28
5	Im Ozean	30
5.1	Einleitendes	30
5.2	Einstein–Smoluchowski Streuung	33
5.3	Petzold Streuung	33
6	Das Monte–Carlo–Programm	35
6.1	Einleitendes	35
6.2	Der Prozessierungszyklus eines Photons	37
6.2.1	Das Photon bewegen	40
6.2.2	Detektieren des Photons	41
6.2.3	Wechselwirkung des Photons mit einem Teilchen	43
6.2.4	Russisches Roulette und Bedeutungsprüfung	45
6.2.5	Beendigung eines Monte–Carlo–Laufes	46

6.3	In der Atmosphäre	48
6.3.1	Aerosole	48
6.3.2	Zirren	53
6.3.3	Höhenverteilung	54
6.4	An der Wasseroberfläche	56
6.4.1	Realisierung der rauen Wasseroberfläche	57
6.4.2	Position und Richtung des transmittierten und reflektierten Photons	58
6.5	Im Ozean	59
6.5.1	Biooptisches Modell	60
6.6	Validierung des Monte–Carlo Programmes	63
6.6.1	Vergleich mit Rechnungen, die die Polarisierung des Lichtes berücksichtigen	64
6.6.2	Kanonische Probleme	66
6.6.3	Messung der Polarisierung des Himmelslichtes	67
6.6.4	Realistischer Typ–II Ozean	70
6.7	Nachnutzbarkeit	70
7	Neuronale Netze	71
7.1	Einleitendes	71
7.2	<i>Feedforward Backpropagation</i> Neuronale Netze	73
7.2.1	Aufbau und Wirkungsweise eines Neuronalen Netzes	75
7.2.2	Training eines Neuronalen Netzes	77
7.3	Training der verschiedenen Netze	79
7.3.1	Atmosphärenkorrektur	81
7.3.2	Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen	83
7.3.3	Modellierung der rauen Wasseroberfläche	86
8	Anwendung der Neuronalen Netze	88
8.1	Die Korrekturschicht	91
8.2	Atmosphärenkorrektur	94
8.2.1	Validierung	96
8.3	Direkte Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe	108
8.3.1	Validierung	108
8.4	Anmerkungen zum Rechenzeitaufwand	115
9	Zusammenfassung	117
	Literaturverzeichnis	120

Kapitel 1

Einleitung

Im Jahre 1964 wurde auf einer internationalen Ozeanographie-Konferenz erstmals die Frage einer möglichen Beobachtung der Ozeane vom Kosmos aus diskutiert. Von Anfang an war dabei die Bestimmung der Farbe des Ozeans ein favorisiertes Ziel. Das Interesse an der Spektralcharakteristik des Wassers liegt darin begründet, dass sie durch die Konzentrationen der im Wasser enthaltenen Stoffe Chlorophyll, Schwebstoff und Gelbstoff bestimmt wird. Aus deren Konzentrationen und ihrer räumlichen und zeitlichen Veränderung können Schlüsse über biologische, ökologische und hydrologische Vorgänge gezogen werden, die zum Beispiel für die Prognose des Fischreichtums (und somit auch zur Definition von Fischfangquoten) und der Wasserqualität nützlich sind.

Der Vorteil der optischen Fernerkundung des Ozeans durch Satelliten liegt darin begründet, dass sie eine kontinuierliche und flächendeckende Beobachtung ermöglicht. Jedoch wird das gemessene Signal mit zunehmender Flughöhe des beobachtenden Sensors durch den Streulichtanteil der Atmosphäre immer größer und die Kontrastverhältnisse immer schlechter. Dieser Maskierungseffekt der Atmosphäre ist der größte Störeinfluss, der bei der Nutzung der optischen Fernerkundung zu überwinden ist. Er ist im Falle der Ozean-Fernerkundung besonders gravierend, da das Wasser nur wenige Prozent der einfallenden Strahlung reemittiert und das Nutzsignal somit (je nach Wellenlänge und Trübung) nur 5–15% des Gesamtsignals ausmacht. Aus diesem Grund ist das Problem der „Atmosphärenkorrektur“ — der quantitativen Bestimmung des wellenlängenabhängigen Streulichtanteils der Atmosphäre — ein wesentliches.

Im Jahre 1973 wurde das Programm für die Entwicklung des *Coastal Zone Color Scanner* (CZCS) gebilligt. Er war der erste Sensor, der speziell für eine quantitative Erfassung und Interpretation der Wasserfarbe aus dem Kosmos entwickelt wurde und in den Jahren 1978–86 auf dem Satelliten „Nimbus 7“ der NASA zum Einsatz kam. CZCS hatte vier Kanäle im sichtbaren Bereich des Spektrums. Das Verhältnis der in drei dieser Kanäle gemessenen Strahlung diente zur Bestimmung der Chlorophyll Konzentration im offenen Ozean.

Im offenen Ozean treten Schweb- und Gelbstoff nur in sehr geringen Konzentrationen auf (korreliert mit dem Chlorophyll-Pigment), so dass die Wasserfarbe durch die enthaltene Menge an Chlorophyll bestimmt wird (Typ-I Wasser). Für solch ein Was-

ser gilt, dass im nahen infraroten Spektralbereich (nahezu) keine Strahlung das Wasser verlässt (*black pixel assumption*). Somit muss alles Licht, das ein Sensor in diesem Bereich registriert atmosphärischen Ursprungs sein. Aus der Kenntnis des atmosphärischen Anteils im nahem Infraroten kann dann der entsprechende Anteil im Sichtbaren extrapoliert werden — das dann verbleibende Signal im Sichtbaren ist das gesuchte Signal. Da der CZCS keine zur Atmosphärenkorrektur nutzbaren Bänder im Infraroten hatte, konnte nur eine ungenaue Korrektur durchgeführt werden. Dies wirkte sich besonders dann aus, wenn neben dem Chlorophyll noch andere Inhaltsstoffe vorhanden waren (Typ-II Wasser), wie es besonders in Küstenregionen der Fall ist. Dennoch konnte ein auf inverser Modellierung basierender Algorithmus entwickelt werden, der sowohl die Wasserinhaltsstoffkonzentrationen als auch atmosphärische Parameter aus CZCS-Daten ableitet [1].

Die Auswertung von Fernerkundungsdaten über Typ-II Wasser ist sehr viel schwieriger als über Typ-I Wasser, da es außer dem atmosphärischen Anteil gilt, die Beeinflussung des Nutzsignals durch die verschiedenen Inhaltsstoffe zu separieren. Dieser Separierung kann eine sorgfältige Auswahl der auf einem Sensor verwendeten Spektralkanäle dienlich sein. So hat zum Beispiel der im Jahre 1997 von der NASA gestartete Nachfolgesensor für den CZCS, der *Sea Viewing Wide Field-of-View Sensor* (SeaWiFS) einen Kanal bei 412nm; bei dieser Wellenlänge ist die Absorption durch Gelbstoff besonders hoch.

Die besonderen Anforderungen, die an einen Sensor zu stellen sind, der für die optische Fernerkundung von Typ-II Gewässern ausgelegt ist, führten zur Entwicklung des *Medium Resolution Imaging Spectrometer* (MERIS) [2]. MERIS ist eines von zehn verschiedenen Instrumenten an Bord des europäischen Umweltsatelliten ENVISAT (*Environmental Satellite*); ENVISAT ist der größte Umweltsatellit, der je gebaut wurde. Seit seinem Start im Jahre 2002 fliegt er auf einer polaren, sonnensynchronen Umlaufbahn in 800km Höhe. Die gewonnenen Daten seiner verschiedenen Instrumente dienen zum Beispiel der Analyse der chemischen Zusammensetzung der Atmosphäre, der Bestimmung der Temperatur der Ozeane, der Wellenhöhen und -richtungen, der Windgeschwindigkeit, der Wachstumsphasen von Pflanzen aber auch dem Aufspüren von Waldbränden und Umweltverschmutzungen.

MERIS misst die von der Erde rückgestreute Strahlung in 15 Spektralbändern, deren genaue Position und Breite programmierbar ist, im sichtbaren und nahen infraroten Spektralbereich. Die maximale räumliche Auflösung beträgt 300m. Nach drei Tagen liegen MERIS-Daten für die gesamte Erdoberfläche vor. In unseren Breiten (50°–60° Nord) sind Daten an zwei von drei Tagen verfügbar.

Operationell kommen zwei verschiedene Atmosphärenkorrekturen für MERIS-Daten zum Einsatz — eine über Typ-I Wasser (die die oben genannte *black pixel assumption* ausnutzt) [3] und eine über Typ-II Wasser [4]. Über Typ-II Gewässern, ist die *black pixel assumption* unzulässig. Jedoch kann gezeigt werden, dass der Anteil der Strahlung im nahen Infraroten, der vom Wasser reemittiert wird, proportional zur Schwebstoffkonzentration im Wasser ist. Diesen Umstand nutzt auch die für MERIS-Daten eingesetzte Korrektur. Eine einfache Atmosphärenkorrektur (die nur Einfach-

Streuung berücksichtigt) bei diesen Wellenlängen dient einer ersten Schätzung der Schwebstoffkonzentration; der atmosphärische (genauer gesagt der durch Streuung an Aerosolen verursachte) Anteil wird hierbei durch Nachschlagetabellen approximiert. Dann wird iterativ ein System nicht-linearer Gleichungen gelöst, um diese Anfangsschätzungen zu verbessern. Anschließend wird die Typ-I Atmosphärenkorrektur verwendet, um den atmosphärische Anteil im Sichtbaren mittels Extrapolation aus dem im nahen Infraroten zu bestimmen.

Ähnliche Korrekturverfahren werden auch für SeaWiFS-Daten eingesetzt [5], [6]; bei einem anderen Ansatz werden die optischen Eigenschaften des Wassers und der Atmosphäre modelliert und das resultierende Satellitensignal berechnet. Durch Vergleich mit den Messdaten wird die Modellierung iterativ angepasst [7]. Für den Sensor COIS (*Coastal Ocean Imaging Spectrometer*) können die Kanäle mit Wellenlängen größer als 860nm dazu benutzt werden, die Aerosol Parameter abzuleiten [8]. Ein weiterer Ansatz zur Atmosphärenkorrektur ist der der inversen Modellierung [9], der auch in der vorliegenden Arbeit aufgegriffen wurde.

Ein Problem der operationell für MERIS eingesetzten Atmosphärenkorrektur ist, dass (besonders über Typ-II Gewässern) oftmals der atmosphärische Anteil überschätzt wird, was in negativen Strahldichten für die das Wasser verlassende Strahlung resultiert. Ein möglicher Grund kann die Verwendung des Einfach-Streu-Algorithmus in der Typ-II Atmosphärenkorrektur sein (in dem jegliche Kopplungen unberücksichtigt bleiben) aber auch die Extrapolation der Aerosolparameter vom infraroten in den sichtbaren Spektralbereich kann fehlerhaft sein, gerade dann, wenn auch absorbierende Aerosole vorhanden sind [10].

Die Grundidee des hier verwendeten Ansatzes ist folgende. Der Strahlungstransport im gekoppelten System Ozean-Atmosphäre wird möglichst genau modelliert (Vorwärtsmodell). Mit diesem Modell werden viele verschiedene Konfigurationen von Wasserinhaltsstoffen und Aerosolen simuliert, und das Signal, das MERIS für jede der Konfigurationen gemessen hätte, berechnet. Um dann aus den tatsächlich gemessenen Daten Rückschlüsse über die Wasserinhaltsstoffkonzentrationen beziehungsweise die Wasserreflektanz ziehen zu können, bedarf es eines inversen Modells.

Die mathematische Beschreibung des Strahlungstransportes erfolgt mittels einer Integro-Differentialgleichung. Um diese numerisch zu lösen, sind verschiedenste Methoden denkbar, so zum Beispiel die „Matrix-Operator-Methode“ (bei der die Atmosphäre und der Ozean in Schichten eingeteilt werden; in jeder Schicht wird die auf- und abwärtsgerichtete Strahldichte in linearer Abhängigkeit von der an der oberen und unteren Grenze einfallenden Strahlung berechnet), oder iterative Methoden wie die der sukzessiven Streuung (bei der die totale Strahlungsintensität aus der Summe aufeinander folgender Streuordnungen zusammengesetzt wird). In der vorliegenden Arbeit wurde die Monte-Carlo-Methode verwendet, bei der der Strahlungstransport als stochastischer Prozess betrachtet wird und die Wahrscheinlichkeiten für die Streuung und Absorption eines Photons¹ berechnet wird. Die Monte-Carlo Methode bietet den

¹In der vorliegenden Arbeit wird teilweise das Teilchenbild des Lichtes benutzt, um einige Aspekte

Vorteil, dass sich alle betrachteten Prozesse leicht einbeziehen lassen. Das entwickelte Monte-Carlo-Programm modelliert den Strahlungstransport im gekoppelten System Ozean-Atmosphäre und berücksichtigt — anders als bei allen operationell eingesetzten Verfahren — die Polarisationsseigenschaften des Lichtes.

Im nächsten Kapitel wird die hier verwendete mathematische Beschreibung der Polarisation, der sogenannte Stokes-Formalismus, eingeführt. Das nachfolgende Kapitel 3 behandelt alle in der Atmosphäre berücksichtigten Wechselwirkungen des Lichtes. Dazu gehören die Rayleigh-Streuung an Molekülen, die Mie-Streuung an Aerosolen und die Streuung an Zirren. Die Wechselwirkungen werden im Stokes-Formalismus beschrieben. Anschließend wird in Kapitel 4 die Wasseroberfläche behandelt. Dazu gehören neben der Herleitung der Beziehungen für die Reflektion und Transmission an der Grenzfläche auch die Beschreibung der Modellierung einer vom Wind aufgerauten Wasseroberfläche. In Kapitel 5 wird die Modellierung des Ozeans beschrieben. Dies beinhaltet die Einstein-Smoluchowski Streuung an reinem Wasser und die Petzold-Streuung an den Wasserinhaltsstoffen im Stokes-Formalismus. Schließlich folgt in Kapitel 6 die Beschreibung der Implementierung aller genannter Prozesse in das Monte-Carlo Programm; zusätzlich wird eine Einführung in die Methode gegeben. Beachtenswert ist, dass die vom Wind aufgeraute Wasseroberfläche, die üblicherweise durch rechenintensive Tabellen realisiert wird, durch einen neuen Ansatz, der auf der Verwendung eines Neuronalen Netzes beruht, erheblich beschleunigt werden konnte.

Das inverse Modell wird in der vorliegenden Arbeit durch die Verwendung Neuronaler Netze emuliert. Kapitel 7 beginnt mit einer Einleitung zum Thema inverse Modellierung und Neuronale Netze und beschreibt dann alle für die Arbeit verwendeten Neuronale Netze. Wesentlich ist dabei, dass außer einem Netz zur Atmosphärenkorrektur auch eines zur direkten Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen (von Schweb- und Gelbstoff) aus MERIS-Daten trainiert werden konnte. Es ist das erste Mal, dass solch ein operationell einsetzbares Ein-Schritt-Verfahren zur Anwendung kommt und ist möglich, da durch die Strahlungstransportrechnungen Kopplungen zwischen Atmosphäre und Ozean berücksichtigt werden. Ebenfalls erstmals wurde die volle spektrale Information genutzt, um die interessierenden Observablen zu berechnen — bei der Atmosphärenkorrektur wird somit die Extrapolation vom infraroten in den sichtbaren Spektralbereich vermieden. Neu ist auch, dass für die Fernerkundungsreflektanz des Wassers (dem Resultat der Atmosphärenkorrektur) die Kovarianzmatrix aus dem Fehlermodell für die von MERIS gemessenen Reflektanzen berechnet werden kann. In Kapitel 8 folgt die Validierung der Netze. Die Arbeit schließt mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse.

der Monte-Carlo Rechnungen zu verständlich zu machen. Alle Rechnungen erfolgen aber klassisch und nicht-relativistisch.

Kapitel 2

Von Stokes Vektoren und Müller Matrizen

Die Beschreibung der Polarisationsseigenschaften elektromagnetischer Strahlung in Form von Observablen (den sogenannten Stokes Parametern) wurde 1852 von George Gabriel Stokes¹ eingeführt [11], ursprünglich um eine adäquate mathematische Formulierung der experimentell hergeleiteten Fresnel Formeln (siehe Kapitel 4.1) zu finden [12]. Die Experimente wurden mit einer unpolarisierten Lichtquelle durchgeführt. Stokes konnte zeigen, dass die von ihm eingeführten Parameter auch zur Beschreibung von polarisiertem und teilweise polarisiertem Licht geeignet waren. Anders als seine Vorgänger beschrieb er die Strahlung nicht durch ihre Amplitude, die keine Observable ist, sondern durch Linearkombinationen zeitgemittelter Amplitudenquadrate – Observablen, die experimentell zugänglich sind.

Von diesem praktischen Nutzen abgesehen, erweisen sich die Stokes Parameter als leistungsfähiges Werkzeug, fasst man sie als Komponenten eines vierdimensionalen Vektors, dem Stokes Vektor, auf. Dann ergibt sich ein sehr einfacher Formalismus, in dem jede Form der Wechselwirkung elektromagnetische Strahlung, die beim Strahlungstransport (Streuung, Brechung, etc.) von Bedeutung ist, durch eine quadratische Matrix der Ordnung vier beschrieben wird, die zwischen dem einfallenden und ausfallendem Stokes Vektor vermittelt. Stokes Arbeit blieb jedoch zunächst weitgehend unbeachtet. Erst im Jahre 1929 benutzte Paul Soleillet [13] die Stokes Parameter zur Beschreibung teilweise polarisierten Lichtes und zur Entwicklung einer Strahlungstransportgleichung für polarisiertes Licht. Der eigentliche Durchbruch erfolgte in den Jahren 1944–48, in denen der indische Astrophysiker Chandrasekhar² eine Reihe von Veröffentlichungen [14] publizierte, die den Stokes–Formalismus nutzten und auf seine praktische Relevanz im Zusammenhang mit dem Strahlungstransport in stellaren Atmosphären hinwies. Im Jahr 1948 entwickelte dann Hans Müller [15] eine Beschreibung der Transformation von Stokes–Vektoren mittels der nach ihm benannten

¹George Gabriel Stokes 1819–1903

²Subrahmanyan Chandrasekhar 1910–1995

Müller–Matrizen, deren Anwendung bis heute sehr verbreitet ist.

Der Stokes Vektor ist immer bezüglich einer Referenzebene definiert (so meint zum Beispiel „parallel polarisiert“, dass der elektrische Feldvektor in der Referenzebene schwingt), üblicherweise der Meridianebene (die Photonflugrichtung ist ein Vektor, der in der Meridianebene liegt). Die Definition des Stokes Vektors, sowie eine geometrische Interpretation seiner einzelnen Komponenten findet sich im ersten Teil dieses Kapitels. Es wird ebenfalls gezeigt, wie ein Stokes Vektor von einer Referenzebene zu einer um einen Winkel σ zu ihr rotierten Ebene transformiert wird. Der praktische Nutzen solch einer Transformation zeigt sich im zweiten Teil dieses Kapitels, das sich den sogenannten Müller Matrizen widmet. Diese Matrizen beschreiben Wechselwirkungen eines Stokes Vektors mit einem Medium und sind bezüglich der Wechselwirkungsebene definiert. Dies bietet den großen Vorteil, dass die Müller Matrizen für makroskopisch isotrope und symmetrische Medien unabhängig von der jeweiligen Photonflugrichtung sind; bedeutet aber auch, dass der Stokes Vektor vor Anwendung der Müller Matrix in die Wechselwirkungsebene transformiert werden muss und nach erfolgter Wechselwirkung wieder bezüglich seiner neuen Meridianebene dargestellt werden muss.

2.1 Der Stokes Vektor und die Poincaré Sphäre

Ein Merkmal elektromagnetischer Strahlung ist ihre Polarisationsrichtung, die Schwingungsebene des elektrischen Feldes \vec{E} — das magnetische Feld schwingt senkrecht dazu und beide senkrecht zum Wellenvektor (siehe zum Beispiel [16]). Betrachtet man eine ebene, monochromatische elektromagnetische Welle $\vec{E}(t, \vec{r}) = \text{Re}(\vec{E}(\vec{k}) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)))^3$, so kann diese folglich als Superposition zweier beliebiger zueinander orthogonalen Komponenten ausgedrückt werden. Wählt man den Einheitsvektor \vec{e}_{\parallel} in der von der z -Achse eines rechtshändigen Koordinatensystems und der Fortpflanzungsrichtung \vec{k}/k der elektromagnetischen Welle aufgespannten Ebene (die Meridianebene) und \vec{e}_{\perp} (parallel zum Normalenvektor der Meridianebene) mit $\vec{e}_{\perp} \cdot \vec{e}_{\parallel} = 0$ und $\vec{e}_{\perp} \times \vec{e}_{\parallel} = \vec{k}/k$ (siehe Abb. 2.1), so gilt $\vec{E}(\vec{k}) = E_{\parallel} \vec{e}_{\parallel} + E_{\perp} \vec{e}_{\perp}$.

Mit

$$\begin{aligned} E_{\parallel} &\equiv a_{\parallel} \exp(-i\varphi_{\parallel}) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) \\ E_{\perp} &\equiv a_{\perp} \exp(-i\varphi_{\perp}) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)) \end{aligned}$$

lassen sich die Komponenten des Stokes Vektors definieren als

$$\begin{aligned} I &\equiv |E_{\parallel}|^2 + |E_{\perp}|^2 &= a_{\parallel}^2 + a_{\perp}^2 \\ Q &\equiv |E_{\parallel}|^2 - |E_{\perp}|^2 &= a_{\parallel}^2 - a_{\perp}^2 \end{aligned}$$

³Die Darstellung im \vec{k} -Raum (\vec{k} bezeichnet die Fortpflanzungsrichtung der Welle) geht durch Fouriertransformation aus der im Ortsraum \vec{r} hervor und wird in der vorliegenden Arbeit bevorzugt.

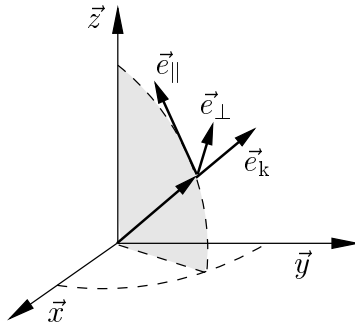


Abb. 2.1: Die Meridianebene wird durch die Fortpflanzungsrichtung \vec{k} einer elektromagnetischen Welle und der z -Achse eines rechtshändigen Koordinatensystems definiert. Die Bezeichnungen „parallel“ oder „senkrecht“ polarisiertes Licht beziehen sich auf diese Ebene. Die Darstellung des Stokes Vektors in seiner Meridianebene wird im Folgenden auch Darstellung im Eigensystem genannt.

$$\begin{aligned} U &\equiv E_{\parallel}E_{\perp}^* + E_{\parallel}^*E_{\perp} = 2a_{\parallel}a_{\perp} \cos(\varphi_{\parallel} - \varphi_{\perp}) \\ V &\equiv i(E_{\parallel}E_{\perp}^* - E_{\parallel}^*E_{\perp}) = 2a_{\parallel}a_{\perp} \sin(\varphi_{\parallel} - \varphi_{\perp}), \end{aligned} \quad (2.1)$$

mit

$$I^2 = Q^2 + U^2 + V^2.$$

Für quasi-monochromatisches Licht ist noch das zeitliche Mittel zu nehmen

$$\begin{aligned} I &= \langle |E_{\parallel}|^2 + |E_{\perp}|^2 \rangle \\ Q &= \langle |E_{\parallel}|^2 - |E_{\perp}|^2 \rangle \\ U &= \langle E_{\parallel}E_{\perp}^* + E_{\parallel}^*E_{\perp} \rangle \\ V &= i \langle E_{\parallel}E_{\perp}^* - E_{\parallel}^*E_{\perp} \rangle \end{aligned} \quad (2.2)$$

und es gilt die Ungleichung

$$I^2 \geq Q^2 + U^2 + V^2,$$

wobei das Gleichheitszeichen für vollständig polarisiertes Licht gültig ist.

Die Stokes Parameter haben die Einheit einer Energiestromdichte; der erste Parameter I ist proportional zur Gesamtintensität, die Parameter Q und U sind proportional zur Intensität linear polarisierten Lichtes und V proportional zur Intensität zirkular polarisierten Lichtes. Anschaulich wird dies, formt man Gleichung 2.1 gemäß

$$\tan(2\gamma) = \frac{U}{Q}, \quad \tan(2\eta) = \frac{V}{\sqrt{Q^2 + U^2}}, \quad c^2 = a_{\parallel}^2 + a_{\perp}^2$$

um, so folgt

$$\begin{aligned} I &= c^2 \\ Q &= c^2 \cos(2\eta) \cos(2\gamma) \\ U &= c^2 \cos(2\eta) \sin(2\gamma) \\ V &= c^2 \sin(2\eta). \end{aligned}$$

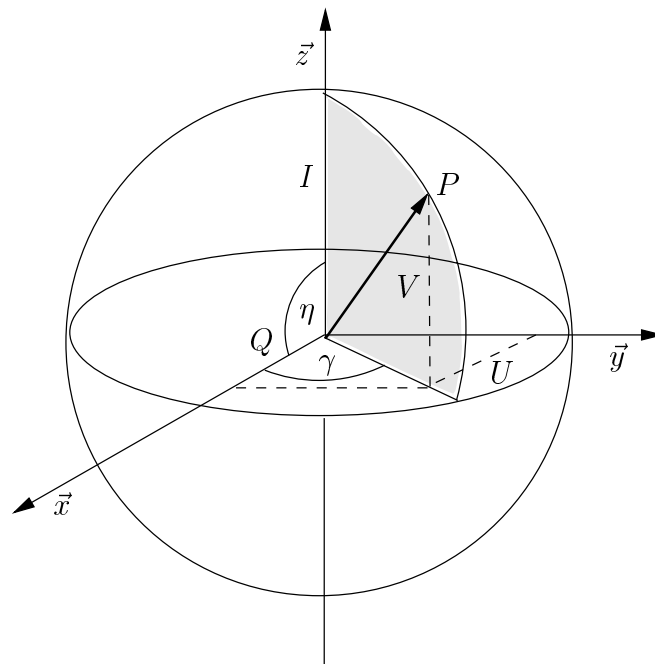


Abb. 2.2: Die Poincaré Sphäre liefert eine einfache geometrische Interpretation der einzelnen Komponenten des Stokes Vektors für vollständig polarisiertes Licht. Für teilweise polarisiertes Licht, (das man sich aus einem vollständig polarisiertem und einem unpolarisierten Anteil zusammengesetzt vorstellen kann,) gilt diese Visualisierung weiterhin, jedoch nur für den polarisierten Anteil.

Die Parameter Q , U und V können also als kartesische Koordinaten eines Punktes P auf einer Sphäre – der Poincaré Sphäre – vom Radius I aufgefasst werden dessen Kugelkoordinaten gerade 2γ und 2η sind (siehe Abbildung 2.2). Ein Punkt in der oberen Hemisphäre (η positiv) repräsentiert rechts-drehendes polarisiertes Licht (in der Optik spricht man von links- oder rechts-drehendem polarisiertem Licht, je nachdem wie sich der Feldvektor beim Betrachten gegen die Strahlrichtung dreht – gegen oder im Uhrzeigersinn), ein Punkt in der unteren Hemisphäre links-drehendes polarisiertes Licht. Lineare Polarisation tritt auf, wenn die Phasendifferenz $\varphi_{\parallel} - \varphi_{\perp}$ Null beziehungsweise ein Vielfaches von π ist. Dann ist auch V gleich Null – linear polarisiertes

Licht wird durch Punkte in der Äquatorialebene der Poincaré Sphäre beschrieben. Zirkulare Polarisation tritt auf, wenn $a_{\parallel} = a_{\perp}$ und $\varphi_{\parallel} - \varphi_{\perp} = \pm \frac{\pi}{2}$, also repräsentiert durch die beiden Pole. Elliptische Polarisation entspricht allen anderen Punkten der Sphäre (nach [17]).

Die Poincaré Sphäre liefert folglich eine einfache geometrische Visualisierung der Stokes Parameter, ist aber in dieser Form nur für vollständig polarisiertes Licht anwendbar. Teilweise polarisiertes Licht kann analog beschrieben werden; für den Anteil der Strahlung der vollständig polarisiert ist I_p gelten die bisherigen Betrachtungen. Weitere nützliche Parameter, die in enger Beziehung zum Stokes Vektor stehen, sind der Grad der Polarisation P , der Grad der linearen Polarisation P_1 und der Grad der zirkulären Polarisation P_z :

$$\begin{aligned} P &= \frac{\sqrt{Q^2 + U^2 + V^2}}{I} \\ P_1 &= \frac{\sqrt{Q^2 + U^2}}{I}, \\ P_z &= \frac{|V|}{I}. \end{aligned} \quad (2.3)$$

2.1.1 Drehung des Koordinatensystems

Wie bereits angedeutet, wird es des Öfteren erforderlich sein, den Stokes Vektor von einer Darstellung bezüglich der Vektoren $\vec{e}_{\perp}, \vec{e}_{\parallel}$ in eine zu transformieren, in der die Vektoren $\vec{e}'_{\perp}, \vec{e}'_{\parallel}$ durch eine Rotation (im mathematisch positiven Drehsinn) um einen Winkel σ aus den alten hervorgehen. Dies entspricht einer Transformation der Komponenten des elektrischen Feldes gemäß

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} E'_{\parallel} \\ E'_{\perp} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \sigma & \sin \sigma \\ -\sin \sigma & \cos \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{\parallel} \\ E_{\perp} \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} E_{\perp} \sin \sigma + E_{\parallel} \cos \sigma \\ E_{\perp} \cos \sigma - E_{\parallel} \sin \sigma \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Durch Einsetzen in die Definition des Stokes Vektors 2.1 folgt

$$\begin{aligned} I' &= I \\ Q' &= U \sin(2\sigma) + Q \cos(2\sigma) \\ U' &= U \cos(2\sigma) - Q \sin(2\sigma) \\ V' &= V, \end{aligned}$$

beziehungsweise

$$\begin{pmatrix} I' \\ Q' \\ U' \\ V' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2\sigma) & \sin(2\sigma) & 0 \\ 0 & -\sin(2\sigma) & \cos(2\sigma) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I \\ Q \\ U \\ V \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

Die Transformationsmatrix $\mathbf{L}(\sigma) \in \mathbf{SO}(4)$ in Gleichung 2.5 genügt dabei offensichtlich den Gruppenrelationen

$$\mathbf{L}(\sigma_1)\mathbf{L}(\sigma_2) = \mathbf{L}(\sigma_1 + \sigma_2) \quad \text{und} \quad \mathbf{L}^{-1}(\sigma) = \mathbf{L}^T(\sigma) = \mathbf{L}(-\sigma) = \mathbf{L}(\pi - \sigma).$$

Diese Art der Transformation wird zum Beispiel gebraucht, wenn es gilt die Streuung eines einfallenden Lichtstrahls an einem Teilchen zu beschreiben. Die eigentliche Wechselwirkung wird dann nämlich in der sogenannten Streu- oder Wechselwirkungsebene, die durch die Ausbreitungsrichtungen \vec{k}_e und \vec{k}_a des ein- beziehungsweise ausfallenden Stokes Vektors aufgespannt wird (siehe Abbildung 2.3).

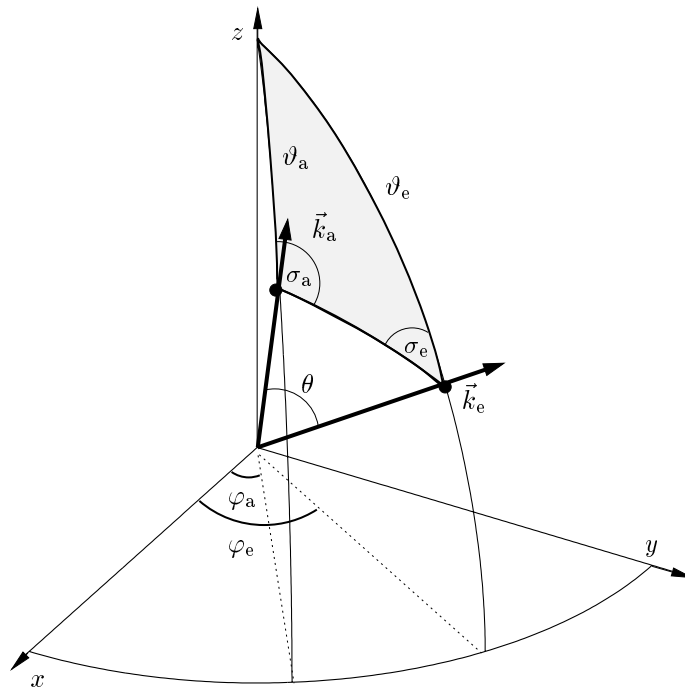


Abb. 2.3: Schematische Darstellung der Streuebene, die durch die Flugrichtungen des ein- beziehungsweise ausfallenden Photons aufgespannt wird. Die Richtungen sind durch die Polarkoordinaten ϑ, φ gegeben. Der Streuwinkel θ kann durch Richtungen mittels $\cos \theta = \cos \vartheta_a \cos \vartheta_e + \sin \vartheta_a \sin \vartheta_e \cos(\varphi_e - \varphi_a)$ ausgedrückt werden.

Die Winkel σ_e und σ_a im sphärischen Dreieck, dass auf der Einheitskugel durch die Durchstoßungspunkte der z -Achse und der beiden Vektoren \vec{k}_e und \vec{k}_a gebildet wird,

berechnen sich zu

$$\begin{aligned}\sigma_e &= \arccos\left(\frac{\cos \vartheta_a - \cos \vartheta_e \cos \theta}{\sin \vartheta_e \sin \theta}\right), \\ \sigma_a &= \arccos\left(\frac{\cos \vartheta_e - \cos \vartheta_a \cos \theta}{\sin \vartheta_a \sin \theta}\right),\end{aligned}\quad (2.6)$$

falls das Dreieck ein Eulersches⁴ ist, andernfalls sind die Ergänzungswinkel zu π zu nehmen. Sei die Streuung selbst durch eine Müller Matrix $\mathbf{M}(\theta)$ (siehe nachfolgender Abschnitt) bezüglich der Wechselwirkungsebene gegeben, so berechnet sich der Stokes Vektor \vec{S}_a des ausfallenden Lichtstrahls in seiner Meridianebene durch

$$\vec{S}_a = \mathbf{L}(-\sigma_a)\mathbf{M}(\theta)\mathbf{L}(-\sigma_e)\vec{S}_e. \quad (2.7)$$

Der große Vorteil dieser Transformation wird im nun Folgenden demonstriert.

2.2 Die Müller Matrix

Die Einführung des Stokes Vektors, als eine Matrixdarstellung der Stokes Komponenten, erweist sich von großem praktischen Nutzen, wenn es darum geht, Wechselwirkungen zu beschreiben. Wechselwirkungen, die in der vorliegenden Arbeit von Bedeutung sein werden, sind Streuprozesse und Reflektion und Transmission an einer Ebene. Aber auch Interaktionen mit optischen Elementen, wie zum Beispiel Polarisatoren, können mit dem gleichem Formalismus beschrieben werden. Im allgemeinsten hier betrachteten Fall sollen die Komponenten des Stokes Vektor nach erfolgter Wechselwirkung \vec{S}' eine Linearkombination der Komponenten des einfallenden Stokes Vektors \vec{S} bilden, oder mathematisch ausgedrückt:

$$\vec{S}' = \mathbf{L}(\sigma_2)\mathbf{M}\mathbf{L}(\sigma_1)\vec{S}.$$

Die Matrizen \mathbf{L} in obiger Gleichung sind dabei, die im vorigen Abschnitt eingeführten Transformationsmatrizen. Spannen die Vektoren \vec{k}' und \vec{k} des aus- beziehungsweise einfallenden Stokesvektors die sogenannte Wechselwirkungsebene auf (siehe Abschnitt 2.1.1), so wird deutlich, dass Gleichung 2.2 folgende Schritte impliziert: (1) Transformation des einfallenden Stokes Vektors von seiner Meridianebene in die Wechselwirkungsebene, (2) Transformation des einfallenden in den ausfallenden Stokes Vektor (*i.e.* die eigentliche Wechselwirkung) und (3) Transformation des ausfallenden Stokes Vektors von der Wechselwirkungsebene in seine Meridianebene. Die die Wechselwirkung beschreibende 4×4 Matrix \mathbf{M}^5 heißt auch Müller Matrix [15] (im

⁴Ein Kugeldreieck heißt Eulersch, falls seine Seiten (Großkreisbögen) und Winkel jeweils kleiner als π sind.

⁵Die Müller Matrizen sind eine vierdimensionale Matrixdarstellung der Lorentz-Gruppe. Die Stokes-Vektoren können auch als zeitartige Vektoren des Minkowski-Raumes interpretiert werden.

Fall von Streuung oft auch Streumatrix) nach Hans Müller, der sie um 1940 erstmals benutzte, um die Wirkungsweise von Polarisatoren zu beschreiben.

Die symbolische Matrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} ** & -* & /* & \circ* \\ *- & -- & /- & \circ- \\ */ & -/ & // & \circ/ \\ *\circ & -\circ & /\circ & \circ\circ \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

verdeutlicht die verschiedenen Messungen, die mit Polarisatoren nötig sind, um alle Matrixelemente eines optischen Elementes, eines streuenden oder brechenden Mediums zu ermitteln [18] und beschreibt somit die physikalische Bedeutung der Elemente einer Müller Matrix. Die Symbole *, -, /, \circ repräsentieren dabei unpolarisiertes, horizontal polarisiertes, linear polarisiertes in einer um 45° geneigten Ebene und linkshändig zirkular polarisiertes Licht. Um also beispielsweise das Element m_{21} eines Streuers zu messen, muss unpolarisiertes Licht eingestrahlt werden und der horizontal polarisierte Anteil des ausfallenden Lichtstrahls gemessen werden.

Neben den Müller Matrizen für die Reflektion und Brechung, die in Kapitel 4.1.1 hergeleitet werden, werden im Folgenden noch Müller Matrizen für verschiedene Streuer benötigt auf deren Herleitung jedoch verzichtet wird, da eine Einführung in die Streutheorie den Rahmen dieser Arbeit übersteigt. Die Grundidee ist die folgende: Fällt eine ebene elektromagnetische Welle auf ein Streuzentrum (eine Störung), so überlagert sich der ursprünglichen Welle eine auslaufende Kugelwelle, wobei es entscheidend auf die Streuamplitude⁶ ankommt. Durch eine Entwicklung der einlaufenden ebenen Welle nach Kugelwellen lassen sich dann Lösungen der radialen Wellengleichung für große Abstände r vom Streuzentrum darstellen⁷. In die Herleitung der Müller-Matrizen gehen dabei folgende Näherungen ein: die Streuzentren werden als kugelförmig angenommen (die einzige Ausnahme bildet die Streuung an Zirren), es wird klassisch, nicht-relativistisch gerechnet.

Im allgemeinen Fall sind die 16 Komponenten der Matrix voneinander unabhängig und jeweils eine reellwertige Funktion der Ausrichtung der Streuer bezüglich des ein- und ausfallenden Stokes Vektors. Fehlen jedoch externe Kräfte, die eine Ausrichtung der Streuteilchen in eine Vorzugsrichtung zur Folge hätten, so sind die Streuer zufällig verteilt. Besitzen die Teilchen überdies eine Symmetrieebene oder sind Teilchen und ihre gespiegelten Pendanten gleich häufig anzutreffen, reduziert sich die Anzahl der unabhängigen Komponenten der Müller Matrix. Beide Annahmen treffen auf die hier behandelten Arten von Streuern zu. Aus Symmetriegründen ist die Matrix für solch ein makroskopisch isotropes und symmetrisches Medium invariant in Bezug auf die Wahl

⁶Aus der Streuamplitude folgt der differentielle Wirkungsquerschnitt und sie hängt mit dem Streubeziehungsweise Übergangsoperator zusammen.

⁷In der Zerlegung der ebenen Welle $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ treten sphärischen Besselfunktionen $F_l(\rho)$ auf (mit $\rho \equiv kr$), die die Differentialgleichung $\left(\frac{d^2}{d\rho^2} + 1 - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right) F_l(\rho) = 0$ lösen.

der Streu- beziehungsweise Wechselwirkungsebene und hängt nur noch vom Streuwinkel θ zwischen einfallendem und ausfallendem Stokes Vektor ab [19]. Wie in [20] ausführlich hergeleitet wird, verbleiben nur 6 unabhängige Komponenten und die Matrix besitzt eine blockdiagonale Struktur:

$$\mathbf{M}(\theta) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{33} & m_{34} \\ 0 & 0 & -m_{34} & m_{44} \end{pmatrix}. \quad (2.9)$$

Handelt es sich zusätzlich um sphärische Streuer, als welche hier zum Beispiel Aerosole behandelt werden, gilt $m_{11} = m_{22}$ und $m_{33} = m_{44}$; die Anzahl der unabhängigen Komponenten beträgt dann also nur noch 4.

Von besonderer Bedeutung ist das Matrixelement m_{11} , das auch Phasenfunktion $p(\theta)$ genannt wird. Die Phasenfunktion ist eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und genügt der Normalisierungsbedingung

$$\int_{-1}^1 d \cos(\theta) p(\theta) = 1. \quad (2.10)$$

Die Wahrscheinlichkeit W für das Auftreten eines Streuwinkels zwischen ϑ und $\vartheta + \delta$ ist also durch

$$W = \int_{\vartheta}^{\vartheta+\delta} d \cos(\theta) p(\theta)$$

gegeben. Der Erwartungswert

$$\langle \cos(\theta) \rangle = \int_{-1}^1 d \cos(\theta) p(\theta) \cos(\theta)$$

heißt Asymmetrieparameter der Phasenfunktion und ist positiv für Teilchen, die hauptsächlich in Vorwärtsrichtung streuen, negativ für solche, die vorwiegend rückwärts streuen und gleich Null für isotrope Streuer.

Kapitel 3

In der Atmosphäre

In diesem Kapitel werden die in der Atmosphäre relevanten Streu- und Absorptionsprozesse behandelt. In der Einleitung werden die Hauptbestandteile der Atmosphäre genannt; ihre Extinktionseigenschaften im sichtbaren Bereich des Spektrums zeigen, welche Wechselwirkungen betrachtet werden müssen. Die nachfolgenden Abschnitte widmen sich den Besonderheiten eines jeden solchen Prozesses, namentlich Rayleigh- und Miestreuung und die Absorption durch Ozon. Im letzten Teil wird noch auf die Streuung an Zirruswolken eingegangen.

Die Modellierung der Atmosphäre im Monte-Carlo-Programm wird hier nicht beschrieben, sondern findet sich im Kapitel 6.3.

3.1 Einleitendes

Die Erdatmosphäre besteht hauptsächlich aus molekularem Stickstoff (78%¹) und molekularem Sauerstoff (21 %) und zu weit geringerem Anteil aus Argon (1%) und Kohlendioxid (0.03%). Zusätzlich enthält sie in stark variablen Konzentrationen Wasserdampf und Aerosole, wie zum Beispiel Staub oder Ruß. Durch die Gasmoleküle und Aerosole wird das für die optische Fernerkundung interessierende Licht im sichtbaren und nahen Infrarotbereich gestreut und absorbiert [21].

Während Absorptionsbanden hauptsächlich im Infraroten auftreten, dominiert die Streuung im sichtbaren Teil des Spektrums. Abbildung 3.1 zeigt die Extinktion durch die verschiedenen Inhaltsstoffe als Funktion der Wellenlänge. Miteingezeichnet sind die für die Modellierung benutzten Wellenlängen des MERIS-Detektors. Die Abbildung soll verdeutlichen, warum im Folgenden nur drei Arten von Wechselwirkungen in die Modellierung mit eingehen und in diesem Kapitel vorgestellt werden sollen: die Streuung an Gasmolekülen (Rayleigh-Streuung), die Streuung (Mie-Streuung) und Absorption an Aerosolen und die Absorption durch Ozon. Dabei wird jeweils auch auf historische Aspekte eingegangen werden und insbesondere der Zusammenhang mit

¹Die Prozentangaben beziehen sich auf das Volumen.

den augenscheinlichsten Merkmalen des Himmelslichtes, der Farbe und der Polarisation, verdeutlicht.

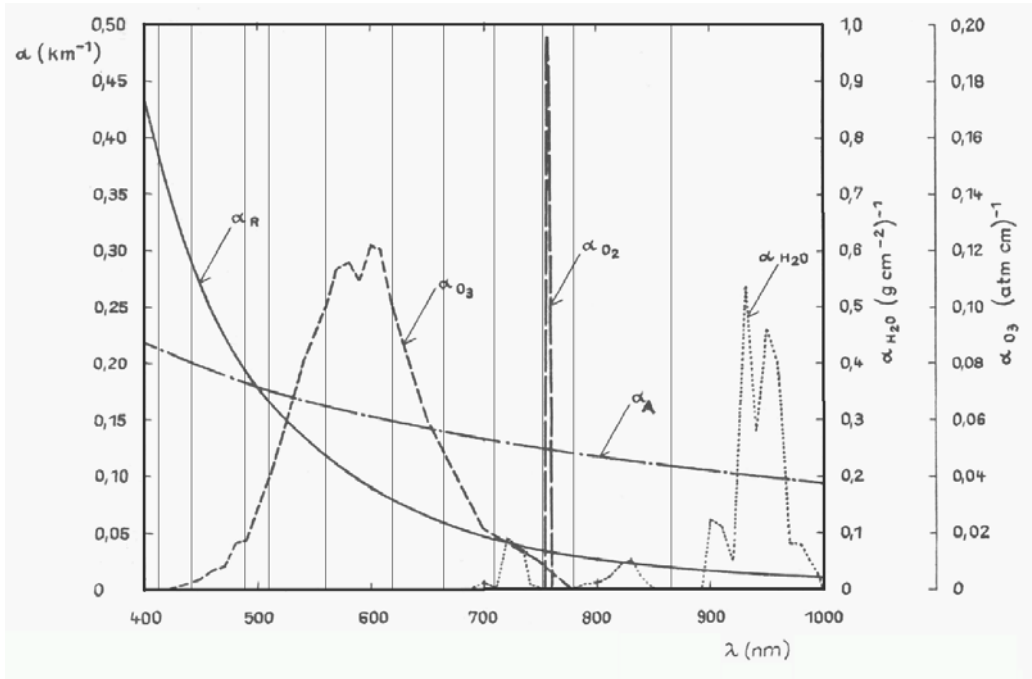


Abb. 3.1: Extinktionskoeffizienten α für Rayleigh- (α_{R}) und Aerosolstreuung (α_{A}) und Molekülabsorptionen im sichtbaren und nahen Infrarotbereich. Die Abbildung wurde [21] S.149 entnommen. Zusätzlich sind die Positionen der MERIS-Kanäle miteingezeichnet, die in der Modellierung berücksichtigt werden.

3.2 Rayleigh Streuung und das polarisierte Himmelslicht

Im Herbst 1870 gelang Lord Rayleigh² eine Theorie zu entwickeln, die alle wesentlichen Eigenschaften des Himmelslichtes erklären konnte. Neben dem Himmelsblau gehört dazu auch die Polarisation des Himmelslichtes, die 1809 von Arago³ entdeckt wurde. Er stellte deren ungleiche Verteilung am Himmel fest. Der größte Grad der Polarisation findet sich im rechten Winkel zur Sonne, wo auch die blaue Farbe am dunkelsten und intensivsten ist. Zur Sonne hin sinkt der Grad der Polarisation. Das Himmelslicht ist dabei tangential polarisiert; die Polarisationsrichtung an einem Himmelspunkt ist durch den Normalenvektor auf die Ebene, die durch einen Beobachter, die Sonne und diesen Punkt aufgespannt wird gegeben. Beispielhaft zeigt Abbildung 3.2(A) das Muster der Polarisation des Himmels am Mittag. Arago entdeckte auch, dass die Polarisation etwa 10° – 30° ⁴ über dem Gegenpunkt der Sonne verschwindet, im sogenannten Arago-Neutralpunkt. Noch zu seinen Lebzeiten entdeckte Jacques Babinet einen weiteren Neutralpunkt, der etwa 20° über der Sonne liegt. David Brewster folgerte, es müsse sich im gleichen Abstand unter der Sonne ein weitere Neutralpunkt befinden (siehe Abbildung 3.2(B)).

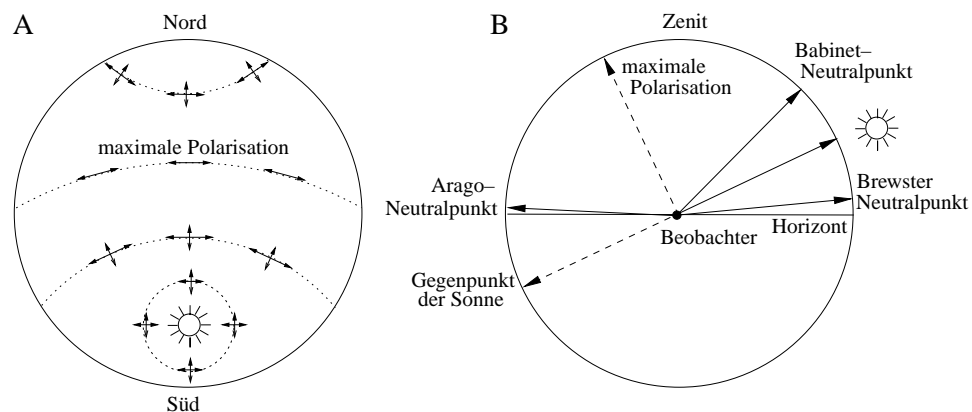


Abb. 3.2: Abbildungsteil (A) zeigt die Verteilung des Grades der Polarisation in der Himmelskuppel. Abbildungsteil (B) zeigt die Position der Neutralpunkte der Polarisation in der Hauptebene (der Meridianebene der Sonne).

In seiner Arbeit betrachtete Rayleigh Teilchen, die viel kleiner sind, als die Wellenlänge des einfallenden Lichtes.

$$r \ll \lambda$$

Das Licht selbst beschrieb er als Transversalwelle. Zusammengefasst lauten seinen Ergebnisse wie folgt. Fällt ein Lichtstrahl einer Wellenlänge λ , der Intensität I und

²John William Strutt 1842–1919

³Domenique-François Arago 1786–1853

⁴In Abhängigkeit der Mehrfachstreuung.

dem Raumwinkel $d\omega$ auf ein Teilchen mit Polarisierbarkeit α , so wird Energie mit einer Rate von

$$\frac{128\pi^5}{3\lambda^4}\alpha^2 I d\omega \frac{3}{4}(1 + \cos^2\theta) \frac{d\omega'}{4\pi} \quad (3.1)$$

in den Raumwinkelbereich $d\omega'$ gestreut, wobei die ein- und ausfallenden Lichtstrahlen einen Winkel θ einschließen. Des weiteren zeigte er, dass das gestreute Licht teilweise polarisiert ist, wobei die Polarisationsrichtung senkrecht zur Streu- beziehungsweise Wechselwirkungsebene (siehe Kapitel 2.2) weist und dass sich die Intensitäten des gestreuten Lichtes in den Richtungen parallel und senkrecht zur Streuebene wie $\cos^2\theta : 1$ verhalten (nach [22]).

Aus Gleichung 3.1 folgt, dass kurzwelliges Licht sehr viel stärker gestreut wird als langwelliges (so enthält Streulicht an den Grenzen des sichtbaren Spektralbereichs beinahe zehn mal mehr Violett als Rot) und erklärt somit das Himmelsblau, sowie die Morgen- und Abendröte. Moderne Messungen ergeben eine leichte Abweichung vom λ^4 -Gesetz für die Erdatmosphäre

$$\lambda^{4.09},$$

die durch die Wellenlängenabhängigkeit des Brechungsindex entsteht [23].

Um die von Rayleigh entwickelte Theorie auf den Stokes-Formalismus anwenden zu können, stelle man sich die einfallende Welle zerlegt in ihre Komponenten parallel und senkrecht zur Einfallsebene vor. Die mathematische Formulierung der Rayleighschen Theorie besagt dann, dass sich die Komponenten des elektrischen Feldes der um einen Winkel θ gestreuten Welle wie folgt aus den Komponenten des elektrischen Feldes der einfallenden Welle berechnen lassen

$$\begin{aligned} E'_{\parallel} &= \sqrt{\frac{3}{4}\sigma} E_{\parallel} \cos\theta, \\ E'_{\perp} &= \sqrt{\frac{3}{4}\sigma} E_{\perp}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

mit dem Streukoeffizienten

$$\sigma = \frac{128\pi^5}{3\lambda^4}\alpha^2.$$

Daraus folgt nun die Müller-Matrix für Rayleigh-Streuung

$$\vec{S}' = \sigma d\omega' d\omega \mathbf{L}(-\sigma_1) \mathbf{M}_R(\theta) \mathbf{L}(-\sigma_2) \vec{S}$$

zu

$$\mathbf{M}_R(\theta) = \frac{3}{16\pi} \begin{pmatrix} +(1 + \cos^2\theta) & -(1 - \cos^2\theta) & 0 & 0 \\ -(1 - \cos^2\theta) & +(1 + \cos^2\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\cos\theta \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

Anfangs unpolarisiertes Licht wird durch eine Streuung um den Winkel θ also teilweise in Richtung senkrecht zur Streuebene polarisiert mit einem Grad der Polarisation von

$$P = \frac{1 - \cos^2\theta}{1 + \cos^2\theta}.$$

Die in 3.3 angegebene Müller–Matrix gilt für isotrope Teilchen; die Moleküle der Erdatmosphäre sind jedoch leicht anisotrop, so dass die Polarisierbarkeit α als ein Tensor behandelt werden muss [24]. Als Folge ist unpolarisiertes Licht, das um einen Winkel $\theta = 90^\circ$ gestreut wird, nicht vollständig polarisiert; der Grad der Polarisation beträgt

$$P(90^\circ) = \frac{1-d}{1+d} \approx 0.946$$

mit dem Depolarisationsfaktor $d = 0.0279$ [25]. Mit dem Kürzel $\gamma = \frac{d}{2-d}$ folgt die Müller–Matrix:

$$\mathbf{M}_R(\theta) = \frac{3}{16\pi(1+2\gamma)} \begin{pmatrix} 1+3\gamma+(1-\gamma)\cos^2\theta & -(1-\gamma)(1-\cos^2\theta) & 0 & 0 \\ -(1-\gamma)(1-\cos^2\theta) & +(1-\gamma)(1+\cos^2\theta) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2(1-\gamma)\cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2(1-3\gamma)\cos\theta \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Die Phasenfunktion p (das Matrixelement m_{11}) genügt der in Kapitel 2.2 angeführten Normalisierungsbedingung; es konnte hier auch eine analytische Lösung für die kumulierte Phasenfunktion $P(\theta)$ gefunden werden. Nach Integration über den Azimutwinkel ϕ gilt mit

$$\begin{aligned} p(\theta) &= \frac{3((1+3\gamma) + (1-\gamma)\cos^2\theta)}{8(1+2\gamma)}, & (3.5) \\ 1 &= \int_{-1}^1 d\cos(\theta) p(\theta), \\ P(\theta) &\equiv \int_{-1}^{\mu} d\cos(\theta) p(\theta), \\ P(\theta) &= \frac{(1-\gamma)}{8(1+2\gamma)} \cos^3\theta + \frac{3(1+3\gamma)}{8(1+2\gamma)} \cos\theta + \frac{3(1+3\gamma) + (1-\gamma)}{8(1-\gamma)}; \end{aligned}$$

aufgelöst nach $\cos\theta$ (nur eine der möglichen drei Lösungen [26] ist reell) folgt

$$\begin{aligned} \cos\theta &= u + v \quad \text{mit} & (3.6) \\ u &= \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{D}} \\ v &= -\frac{p}{3u} \quad \text{mit} \\ q &= \frac{3(1+3\gamma) - 8(1+2\gamma)P(\theta)}{(1-\gamma)} + 1 \\ p &= \frac{3(1+3\gamma)}{(1-\gamma)} \quad \text{und der Diskriminanten} \\ D &= \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2. \end{aligned}$$

3.3 Mie Streuung

Messungen des Grades der Polarisation des Himmelslicht ergeben einen Wert von etwa 70% des Streulichtes im 90° -Abstand zum einfallenden Lichtstrahl; Rayleighs Theorie sagte jedoch vollständige Polarisation voraus. Ohne dieser Diskrepanz in seinem Aufsatz genauer nachzugehen, führte Rayleigh drei mögliche Gründe dafür an: Mehrfachstreuung, eine Abweichung der Streukörper von der angenommenen Kugelgestalt und das Vorhandensein größerer Schwebeteilchen (Aerosole), die das Sonnenlicht nach anderen Regeln polarisieren müssten. Diese Teilchen seien zu groß, um von einer Lichtwelle gleichmäßig elektrisch polarisiert zu werden. Demzufolge können sie nicht wie ein Hertzscher Dipol strahlen.

Gustav Mie⁵ stellte 1908 eine Theorie auf, welche die Rayleigh-Streuung als Spezialfall enthielt und im Hinblick auf größere Streukörper erweiterte. Die Intensität des Mie-Streulichtes ist stark richtungsabhängig; bei zunehmender Teilchengröße überwiegt die Vorwärtsstreuung (siehe Abbildung 3.3). Die Polarisation des Streulichtes ist geringer als bei Rayleigh-Streuung und in unterschiedliche Richtungen ebenfalls sehr unterschiedlich. Im Vergleich zur Rayleigh-Streuung ist die Intensität des Streulichtes weniger wellenlängenabhängig.

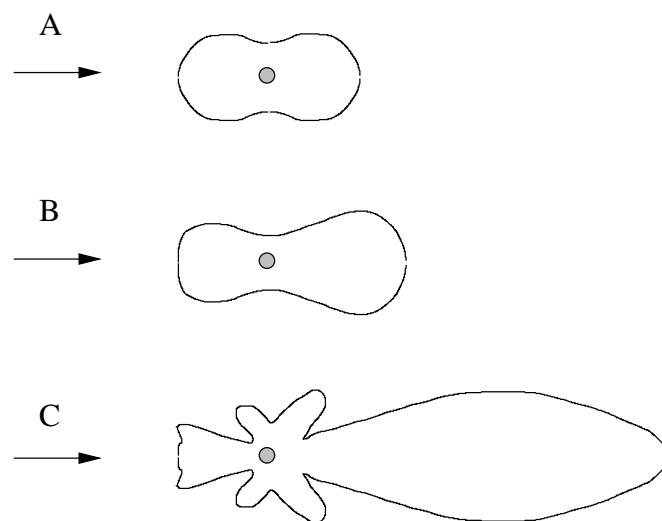


Abb. 3.3: Bei zunehmender Größe der Streukörper geht die Rayleigh-Streuung in die Mie-Streuung über. Sind die Durchmesser der Streuer kleiner als ein Zehntel der Wellenlänge, so gilt die Rayleigh-Theorie (A). Bei Teilchen mit Größen von etwa einem Viertel der Wellenlänge überwiegt die Vorwärtsstreuung (B). Ist die Teilchengröße größer als oder gleich der Wellenlänge treten zusätzlich Beugungsmuster auf (C).

⁵Gustav Mie 1868–1957

Bevor die Mie–Theorie näher behandelt wird, sollen zunächst die wichtigsten in der Atmosphäre vorkommenden Aerosoltypen vorgestellt werden. Als Aerosole werden alle festen und flüssigen Teilchen in der Atmosphäre im Größenbereich von $0.01\text{--}50\mu\text{m}$ bezeichnet, die keine Wolkentropfen oder Eiskristalle sind. Sie sind sowohl natürlicher als auch anthropogener Herkunft. Aerosole kommen bis in Mesosphärenhöhen vor und unterliegen vielfältigen chemischen und photochemischen Umwandlungen; sie werden aus der Atmosphäre ausgewaschen, regnen ab, wirken als Kondensationskeime und werden mit der atmosphärischen Zirkulation sowohl horizontal als auch vertikal transportiert.

Der dominierende Aerosoltyp in der Stratosphäre sind Tröpfchen von relativ stark konzentrierter Schwefelsäure, die durch photochemische Prozesse aus schwefelhaltigen Gasen (zum Beispiel aus Vulkanausbrüchen) entstehen. In der Troposphäre sind die Konzentrationen, Verteilungen und Größen der Aerosole regional verschieden; kurz vorgestellt seien jene, die auch im Modell (siehe Kapitel 6.3) berücksichtigt werden: urbane Aerosole, die vorwiegend aus Sulfaten, Nitraten, Kohlenwasserstoffen, Ruß und auch mineralogischem Material bestehen, kontinentale Aerosole (Sulfate und Staub) und maritime Aerosole (Seesalzspray) [21]. Die wichtigsten optischen Eigenschaften – Streukoeffizient, Einfachstreueralbedo und Asymmetriefaktor – zeigen signifikante Unterschiede für die vier vorgestellten Aerosoltypen und sind die Ursache für die unterschiedliche räumliche und zeitliche Wirkung der Aerosole auf die einfallende Sonnenstrahlung und somit auf die Strahlungsbilanz in der Atmosphäre [27].

Um die optische Wirkung der Aerosole quantitativ mittels Mie–Theorie bestimmen zu können, müssen die Größenverteilung dN/dr und der komplexe Brechungsindex $n(\lambda)$ (die Absorption wird hier nicht näher betrachtet, die Implementierung wird in Kapitel 6.3 beschrieben) bekannt sein. Die Streutheorie liefert dann die folgende Müller–Matrix für Mie–Streuung

$$\mathbf{M}_M(\theta) = \frac{3}{16\pi} \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{11} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{33} & m_{34} \\ 0 & 0 & -m_{34} & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

mit

$$\begin{aligned} m_{11} &= \frac{1}{2}(|A_1|^2 + |A_2|^2), \\ m_{22} &= \frac{1}{2}(|A_1|^2 - |A_2|^2), \\ m_{33} &= \frac{1}{2}(A_1 A_2^* + A_1^* A_2) = \operatorname{Re}(A_1 A_2^*), \\ m_{34} &= \frac{i}{2}(A_1 A_2^* - A_1^* A_2) = -\operatorname{Im}(A_1 A_2^*), \\ A_1 &= \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)}(a_n \pi_n + b_n \tau_n), \\ A_2 &= \sum_n \frac{2n+1}{n(n+1)}(a_n \tau_n + b_n \pi_n). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Die Funktionen π_n und τ_n hängen dabei mit den Legendre–Polynomen P_n zusammen

$$\pi_n = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{dP_n}{d\theta} \quad \text{und} \quad \tau_n = -\frac{d^2 P_n}{d\theta^2}.$$

In die Berechnung der Koeffizienten a_n und b_n gehen die Teilchengröße und ihr Brechungsindex⁶ ein [28]. Aus diesen Koeffizienten lassen sich außerdem die Wirkungsquerschnitte C der Streuung und Extinktion für eine gegebene Wellenzahl k berechnen

$$\begin{aligned} C_{\text{str}} &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\text{inf}} (2n+1) (|a_n|^2 + |b_n|^2), \\ C_{\text{ext}} &= \frac{2\pi}{k^2} \sum_{n=1}^{\text{inf}} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Die Berechnung der Müller–Matrizen sowie der Streu– und Extinktionskoeffizienten erfolgt numerisch mittels des Mie–Programmpakets der FU–Berlin⁷ dessen Kernroutine aus W.J. Wiscombes Algorithmus [29] entnommen ist.

3.4 Ozon

Ozon wirkt im sichtbaren und nahen infraroten Spektralbereich als reiner Absorber, seine Müller–Matrix ist also trivial. Das Ozon der Erdatmosphäre hat jedoch Einfluss auf die Himmelsfarbe. Während die Hartley⁸– und Huggins⁹–Absorptionsbanden im Ultravioletten das Aufspalten des Ozons in Sauerstoff bewirken, so erklären die Chappius¹⁰–Banden (zwischen 440 nm und 700 nm mit einem Maximum der Absorption bei 600 nm) die blaue Farbe des Ozons. Die Ozonschicht reicht zwar am Tageshimmel nicht aus, um einen wesentlichen Beitrag zum Himmelsblau zu liefern; in der Dämmerung hingegen wird das gesamte blaue Licht des Himmels durch das Ozon verursacht [30].

Die Einheit, in denen die Menge des in der Atmosphäre vorhandenen Ozons angegeben wird, heißt Dobson und wurde nach dem Pionier der Messtechnik für atmosphärisches Ozon benannt. 1924 entwickelte Dobson¹¹ in Oxford ein einfach zu bedienendes Ozon–Messgerät und baute ein weltweites Netz für die Beobachtung dieses Gases auf. Viele dieser Messstationen sind bis heute in Betrieb. Die Ozonmenge in Dobson ist die Schichtdicke, die die gesamte Menge an Ozon in der Atmosphäre einnimmt, drückte man sie in eine Schicht zusammen, in der Normalbedingungen herrschen. Ein Dobson entspricht einer Schichtdicke von einem Hundertstel Millimeter; der Mittelwert beträgt rund 340 Dobson.

⁶als Argumente für Riccati–Bessel–Funktionen

⁷entwickelt in der Arbeitsgruppe von J.Fischer

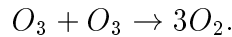
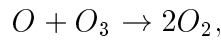
⁸Walter Hartley 1846–1913

⁹William Huggins 1824–1910

¹⁰James Chappius 1854–1930

¹¹Gordon Dobson 1889–1976

Ozon wird ständig in der oberen Atmosphäre als Verbindung von molekularem und atomarem¹² Sauerstoff gebildet. Das meiste Ozon wird über dem Äquator gebildet, da dort die eingestrahlte Menge an ultraviolettem Licht am größten ist. Von dort diffundiert es zu den Polen, wo es sich ansammelt. Das Ozon zerfällt wiederum ständig in molekularen Sauerstoff; die folgenden Reaktionen treten dabei auf



3.5 Kondensstreifen und dünne Zirren

Kondensstreifen entstehen in der oberen Troposphäre. Wasserdampf kondensiert an den Partikeln im Triebwerksstrahl zu kleinen Tröpfchen. Diese gefrieren in der kalten Luft und werden so zum sichtbaren Kondensstreifen. Ist die Luft dabei wärmer als minus 40 Grad oder ist die Luftfeuchtigkeit gering, verdampfen die Wolkenstreifen; das Flugzeug zieht nur eine kurze weiße Schleppe hinter sich her. In kalter und feuchter Luft werden die Kondensstreifen dagegen zu einem Problem; sie lösen sich nicht auf, sondern nehmen immer mehr Wasserdampf aus der Umgebung auf und wachsen – bis sie keine Streifen mehr sind, sondern dünne Zirruswolken. Der Luftverkehr über Mitteleuropa ist inzwischen so stark angewachsen, dass Kondensstreifen auf quasi jeder Satellitenaufnahme sichtbar sind.

Ein Ziel der vorliegenden Arbeit war, zumindest dünne Zirren unter Berücksichtigung ihrer Polarisationsseigenschaften in die Modellierung mit einzubeziehen; das heißt solche, die mit bloßem Auge kaum noch zu erkennen sind. Nach [31] liegt die Größenverteilung der Eispartikel in solchen Zirren im Bereich $[1\mu\text{m}, 10\mu\text{m}]$. Die Teilchen dürfen dabei als zufällig orientiert angenommen werden, eine Ausrichtung der Partikel nach einer Vorzugsrichtung tritt erst bei größeren Teilchen auf. Die Form der Partikel ist dabei hochgradig komplex. In [32] und [33] wird die Form durch triadische Koch-Funktion der Stufe zwei genähert. Die aus diesem Ansatz resultierende Müller-Matrix (vom Typ 2.9) wurde für die Simulationsrechnungen übernommen.

¹²Atomarer Sauerstoff entsteht in der oberen Atmosphäre durch ultraviolettes Licht mittels Photodissoziation aus molekularem Sauerstoff.

Kapitel 4

An der Wasseroberfläche

Die physikalischen Prozesse der Reflektion und Transmission an der Wasseroberfläche werden zunächst, ausgehend von den Maxwell-Gleichungen, anhand der Wellenamplituden beschrieben (die Herleitungen folgen [16]). Die resultierenden Fresnelschen Gleichungen werden benötigt, um die Müller-Matrizen für die genannten Prozesse herzuleiten; dabei gilt es zwei Spezialfälle gesondert zu betrachten: den senkrechten Einfall von Licht auf die Grenzfläche und die totale interne Reflektion.

Im zweiten Teil dieses Kapitels wird auf die Realisierung einer rauen Wasseroberfläche eingegangen, wobei der Oberflächenzustand durch die herrschende Windgeschwindigkeit charakterisiert sein soll. Nach wie vor gelten die hergeleiteten Beziehungen für die Transmission und Reflektion; die Grenzfläche besteht nun aus vielen differentiellen Flächenelementen mit verschiedenen Flächennormalen.

4.1 Reflektion und Transmission an der Wasseroberfläche

Trifft eine ebene elektromagnetische Welle $\vec{E}(t, \vec{r}) = \text{Re}(\vec{E}(\vec{k}) \exp(i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)))$ (siehe auch Abschnitt 2.1) auf die Grenzfläche zweier Isolatoren (hier Wasser und Luft), so tritt eine reflektierte Welle auf der selben Seite und eine transmittierte Welle auf der anderen Seite auf. Die Maxwellgleichungen (die an dieser Stelle nicht hergeleitet werden) liefern dabei die Grenzbedingungen:

$$\begin{aligned} \vec{n} \times (\vec{E}_e + \vec{E}_r - \vec{E}_t) &= \vec{0}, & \vec{n} \cdot (\vec{B}_e + \vec{B}_r - \vec{B}_t) &= 0, \\ \vec{n} \times (\vec{H}_e + \vec{H}_r - \vec{H}_t) &= \vec{0}, & \vec{n} \cdot (\vec{D}_e + \vec{D}_r - \vec{D}_t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Dabei stehen die Indizes e,r,t jeweils für die einfallende, reflektierte und transmittierte Komponente; \vec{E} bezeichnet die elektrische Feldstärke, \vec{D} die elektrische Flußdichte, \vec{B} die magnetische Flußdichte (Induktion) und \vec{H} die magnetische Feldstärke; \vec{n} repräsentiert den Normalenvektor der Grenzfläche. Aus Gleichung 4.1 folgt, dass alle drei Wellen die gleiche Kreisfrequenz ω haben. Die Wellenvektoren \vec{k} liegen alle in

der von \vec{n} und \vec{k}_e aufgespannten Einfallsebene (siehe Abbildung 4.1); nur so können die Funktionen $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ auf der Grenzfläche gleich sein. Betrachtet man einen Vektor \vec{t} in der Einfallsebene, so folgt des weiteren, dass die drei Wellenvektoren in ihrer Tangentialkomponente übereinstimmen müssen:

$$k_e \sin(\vartheta_e) = k_r \sin(\vartheta_r) = k_t \sin(\vartheta_t).$$

Mit $\omega = ck$ folgt noch $k_e = k_r$ und $k_t = c_e/c_t k_e$ und somit das Snellsche¹ Brechungsgesetz:

$$\sin \vartheta_e = \sin(\vartheta_r) \quad \text{und} \quad \frac{\sin(\vartheta_e)}{\sin(\vartheta_t)} = \frac{c_e}{c_t} = \frac{n_t}{n_e} \equiv n. \quad (4.2)$$

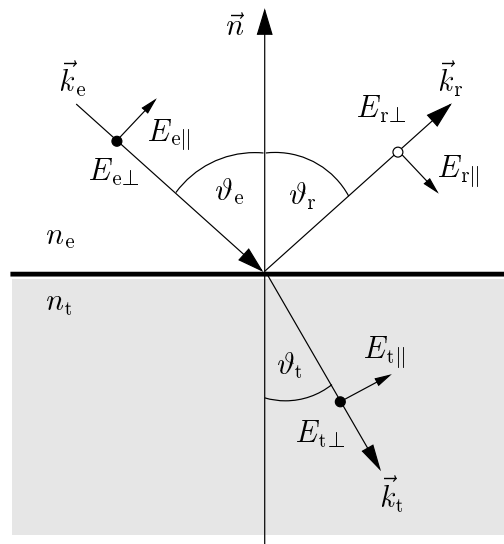


Abb. 4.1: Reflexion und Transmission an der Wasseroberfläche in der Einfallsebene: dargestellt sind die Wellenvektoren, sowie die Komponenten der elektrischen Feldstärke \vec{E} , die parallel zur Einfallsebene polarisierten Anteile E_{\parallel} liegen dabei in der Zeichenebene, die senkrechten Anteile E_{\perp} zeigen aus der Zeichenebene heraus (geschlossene Kreise) beziehungsweise in sie hinein (offener Kreis).

Die Beziehungen für die Feldamplituden lassen sich aus Gleichung 4.1 herleiten, indem man beispielsweise alle Felder durch $\vec{E}(\vec{k})$ ausdrückt ($\vec{D} = \epsilon \vec{E}$, $\vec{B} = \vec{k}/k \times \vec{E}/c$, $\vec{H} = \vec{k}/k \times \vec{E}/c\mu$); zerlegt man nun die drei \vec{E} -Vektoren in ihre senkrecht zur Einfallsebene polarisierten Komponenten E_{\perp} und ihre parallel zur Einfallsebene polarisierten Komponenten E_{\parallel} (siehe Abbildung 4.1), so folgen in der Näherung $\mu_e =$

¹Willibrord Snell van Rayen (1580 oder 1591 – 1626)

μ_t die Fresnelschen Gleichungen:

$$\begin{aligned} r_{\parallel} &\equiv \frac{E_{r\parallel}}{E_{e\parallel}} = \frac{\tan(\vartheta_e - \vartheta_t)}{\tan(\vartheta_e + \vartheta_t)}, & t_{\parallel} &\equiv \frac{E_{t\parallel}}{E_{e\parallel}} = \frac{2 \cos(\vartheta_e) \sin(\vartheta_t)}{\cos(\vartheta_e - \vartheta_t) \sin(\vartheta_e + \vartheta_t)}, \\ r_{\perp} &\equiv \frac{E_{r\perp}}{E_{e\perp}} = -\frac{\sin(\vartheta_e - \vartheta_t)}{\sin(\vartheta_e + \vartheta_t)}, & t_{\perp} &\equiv \frac{E_{t\perp}}{E_{e\perp}} = \frac{2 \cos(\vartheta_e) \sin(\vartheta_t)}{\sin(\vartheta_e + \vartheta_t)} \end{aligned} \quad (4.3)$$

(nach [16]).

4.1.1 Müller Matrizen für Reflektion und Transmission

Die Fresnelschen Gleichungen 4.3 sollen nun genutzt werden, um die Gleichungen für die Stokes Vektoren des reflektierten und des transmittierten Anteils herzuleiten. Dabei ist zu beachten, dass sich die Fresnelschen Gleichungen auf die Amplituden der Felder beziehen, die Komponenten des Stokes Vektors jedoch per Definition (siehe Kapitel 2.1) die gleiche Einheit haben, wie eine Energiestromdichte — betrachtet werden muss also die während einer Zeiteinheit durch eine in der Grenzfläche gelegene Fläche hindurchgestrahlte Energie (der Poynting Vektor): beim Übergang von einem Medium in das andere ändert sich sowohl die Fortpflanzungsgeschwindigkeit c als auch die Strahlweite F . Wie man aus geometrische Betrachtungen erkennen kann, gilt hierbei

$$\frac{F}{\cos(\vartheta_e)} = \frac{F'}{\cos(\vartheta_t)}.$$

Somit folgt für die Transmissionskoeffizienten T und die Reflektionskoeffizienten R :

$$\begin{aligned} R_{\parallel} &= r_{\parallel}^2, & T_{\parallel} &= n \frac{\cos(\vartheta_t)}{\cos(\vartheta_e)} t_{\parallel}^2, \\ R_{\perp} &= r_{\perp}^2, & T_{\perp} &= n \frac{\cos(\vartheta_t)}{\cos(\vartheta_e)} t_{\perp}^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Durch einsetzen lässt sich leicht verifizieren, dass somit für jede Komponente die Energie erhalten ist:

$$R_{\parallel} + T_{\parallel} = 1 \quad \text{und} \quad R_{\perp} + T_{\perp} = 1.$$

Die Müller Matrizen für die Reflektion \mathbf{R} und Transmission \mathbf{T} lauten dementsprechend

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(r_{\parallel}^2 + r_{\perp}^2) & \frac{1}{2}(r_{\parallel}^2 - r_{\perp}^2) & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(r_{\parallel}^2 - r_{\perp}^2) & \frac{1}{2}(r_{\parallel}^2 + r_{\perp}^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & r_{\parallel}r_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & r_{\parallel}r_{\perp} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{T} &= n \frac{\cos(\vartheta_t)}{\cos(\vartheta_e)} \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(t_{\parallel}^2 + t_{\perp}^2) & \frac{1}{2}(t_{\parallel}^2 - t_{\perp}^2) & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}(t_{\parallel}^2 - t_{\perp}^2) & \frac{1}{2}(t_{\parallel}^2 + t_{\perp}^2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t_{\parallel}t_{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t_{\parallel}t_{\perp} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Abschließend sei nochmals darauf hingewiesen, dass in obigen Betrachtungen die Stokes Vektoren der einfallenden, reflektierten und transmittierten Wellen bezüglich der Einfallsebene (das heißt die Indizes \perp und \parallel beziehen sich auf die Einfallsebene) dargestellt werden. Per Definition bezieht sich ein Stokes Vektor jedoch auf die Meridianebene des zugehörigen Photons (siehe Kapitel 2.1). Überschreitet ein Photon also die Grenzfläche zwischen Wasser und Luft, muss sein Stokes Vektor zunächst in die Einfallsebene transformiert werden, anschließend kann obiger Formalismus angewandt werden und abschließend werden die Stokes Vektoren des ursprünglichen und des reflektierten und transmittierten Photons wieder in ihr Eigensystem transformiert. Der Normalenvektor einer Meridianebene \vec{n}_{Mer} ergibt sich als Kreuzprodukt der Photonflugrichtung mit der z -Achse; der Normalenvektor \vec{n}_{Einf} auf die Einfallsebene als Kreuzprodukt der Richtung des einfallenden Photons mit der Normale der Grenzfläche. Die Winkel zwischen dem Normalenvektor auf Einfallsebene und den Normalenvektoren der Meridianebenen definieren die folgenden Rotationswinkel σ

$$\begin{aligned}\sigma_e &= \arccos(\vec{n}_{\text{Einf}} \cdot \vec{n}_{\text{Mer}}^e), \\ \sigma_r &= \arccos(\vec{n}_{\text{Einf}} \cdot \vec{n}_{\text{Mer}}^r), \\ \sigma_t &= \arccos(\vec{n}_{\text{Einf}} \cdot \vec{n}_{\text{Mer}}^t).\end{aligned}$$

Der Stokes Vektor des einfallenden Photons muss also zunächst in ein um den Winkel σ_e gedrehtes Koordinatensystem transformiert werden, die Rücktransformation der Stokes Vektoren des reflektierten und transmittierten Photons erfolgt mittels einer Rotation des Koordinatensystems um σ_r beziehungsweise σ_t . Die benötigten Transformationsmatrizen $\mathbf{L}(\sigma)$ wurden in Kapitel 2.1.1 eingeführt. Die Gleichungen

$$\begin{aligned}\vec{S}_r &= \mathbf{L}(\sigma_r)\mathbf{R}\mathbf{L}(\sigma_e), \\ \vec{S}_t &= \mathbf{L}(\sigma_t)\mathbf{T}\mathbf{L}(\sigma_e)\end{aligned}\tag{4.6}$$

definieren die Stokes Vektoren \vec{S} des reflektierten und transmittierten Anteils in ihrer jeweiligen Meridianebene.

4.1.2 Spezialfälle

Die Gleichungen für die Transmissions- und Reflektionskoeffizienten (siehe 4.3 und 4.5) sind entartet für den Fall des senkrechten Einfalls $\vartheta_e = \vartheta_t = 0$ der daher gesondert betrachtet werden muss. Entwickelt man die auftretenden trigonometrischen Funktionen in Potenzreihen und berücksichtigt dabei jeweils nur das erste Glied: $\sin(\vartheta) \approx \tan(\vartheta) \approx \vartheta$ und $\cos(\vartheta) \approx 1$, so folgt für senkrechten Einfall:

$$\mathbf{R} = \frac{(n-1)^2}{(n+1)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} = \frac{4n}{(n+1)^2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ein weiterer Fall, der separat betrachtet werden muss, ist die totale interne Reflexion, die beim Übergang vom optischen dichteren zum optisch dünneren Medium auftritt, wenn Licht unter einem Winkel größer oder gleich dem Grenzwinkel (der Einfallswinkel $\sin(\vartheta_e) = n$, für den der Transmissionswinkel $\pi/2$ beträgt) einfällt. Um die Müller Matrix für die totale Reflexion herzuleiten, werden die Reflektionskoeffizienten (siehe 4.3) wie folgt umgeformt (die bei der totalen internen Reflexion auftretende evaneszente transmittierte Welle wird hier nicht berücksichtigt, das heißt die Müller Matrix für die Transmission ist einfach die Nullmatrix):

$$\begin{aligned} r_{\parallel} &= \frac{\tan(\vartheta_e - \vartheta_t)}{\tan(\vartheta_e + \vartheta_t)} = \frac{\sin(\vartheta_e) \cos(\vartheta_e) - \sin(\vartheta_t) \cos(\vartheta_t)}{\sin(\vartheta_e) \cos(\vartheta_e) + \sin(\vartheta_t) \cos(\vartheta_t)} \\ &= \frac{n^2 \cos(\vartheta_e) - i\sqrt{\sin^2(\vartheta_e) - n^2}}{n^2 \cos(\vartheta_e) + i\sqrt{\sin^2(\vartheta_e) - n^2}} = \exp(-i\varphi_{\parallel}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

$$\begin{aligned} r_{\perp} &= -\frac{\sin(\vartheta_e - \vartheta_t)}{\sin(\vartheta_e + \vartheta_t)} = -\frac{\sin(\vartheta_e) \cos(\vartheta_t) - \cos(\vartheta_e) \sin(\vartheta_t)}{\sin(\vartheta_e) \cos(\vartheta_t) + \cos(\vartheta_e) \sin(\vartheta_t)} \\ &= \frac{\cos(\vartheta_e) - i\sqrt{\sin^2(\vartheta_e) - n^2}}{\cos(\vartheta_e) + i\sqrt{\sin^2(\vartheta_e) - n^2}} = \exp(-i\varphi_{\perp}). \end{aligned} \quad (4.8)$$

Setzt man nun $\delta \equiv \varphi_{\parallel} - \varphi_{\perp}$ so erhält man nach einigen Umformungen

$$\delta = 2 \arctan \left(\frac{\cos(\vartheta_e) \sqrt{\sin^2(\vartheta_e) - n^2}}{\sin^2(\vartheta_e)} \right); \quad (4.9)$$

berücksichtigt man noch $E_{r\parallel} = r_{\parallel} E_{e\parallel}$, $E_{r\perp} = r_{\perp} E_{e\perp}$ und die Definition des Stokes Vektors (siehe Kapitel 2.1) so ergibt sich die Müller Matrix für die totale interne Reflexion als

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos(\delta) & -\sin(\delta) \\ 0 & 0 & \sin(\delta) & \cos(\delta) \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

die reflektierte Welle besitzt also die gleiche Amplitude jedoch eine um den Winkel δ verschobene Phase gegenüber der einfallenden Welle. Dieser Phasensprung ist nach 4.9 für den Grenzwinkel, bei dem die totale Reflexion mit der gewöhnlichen zusammenfällt, gleich Null, wächst dann bis zu einem Maximum von $\pi - 4 \arctan(n)$, das für einen Einfallswinkel von $\vartheta_e = \arccos(\sqrt{\frac{1-n^2}{1+n^2}})$ erreicht wird und fällt dann wieder, bis er für die streifende Inzidenz den Wert Null erreicht.

4.2 Modellierung der Oberfläche nach Cox und Munk

Die von Cox und Munk aus Photographien der Meeresoberfläche [34] abgeleitete Wahrscheinlichkeitsverteilung für das Auftreten einer Flächennormalen \vec{n} , die einen Winkel ϑ_n mit der z -Achse einschließen [35], wird üblicherweise in der optischen Ozeanographie benutzt, um den Einfluss einer vom Wind aufgerauten Wasseroberfläche zu berücksichtigen

Die zugehörige Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p(\vartheta_n)$ lautet, vernachlässigt man die Abhängigkeit von der Windrichtung,:

$$p(\vartheta_n) d\vartheta_n = - \frac{2 \tan(\vartheta_n)}{\sigma^2 \cos^2(\vartheta_n)} \exp\left(-\frac{\tan^2(\vartheta_n)}{\sigma^2}\right) d\vartheta_n, \quad (4.11)$$

mit

$$\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} p(\vartheta_n) d\vartheta_n = 1 \quad \text{und} \quad p(\vartheta_n) \geq 0,$$

wobei σ wie folgt von der Windgeschwindigkeit v in m/s abhängt:

$$\sigma^2 = 0.003 + 0.00512 v \frac{s}{m}.$$

Die zugehörige kumulierte Verteilungsfunktion $P(\vartheta_n)$ konnte hier analytisch berechnet werden:

$$P(\vartheta_n) = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\vartheta_n} p(\tilde{\vartheta}_n) d\tilde{\vartheta}_n = \exp\left(-\frac{\tan^2(\vartheta_n)}{\sigma^2}\right).$$

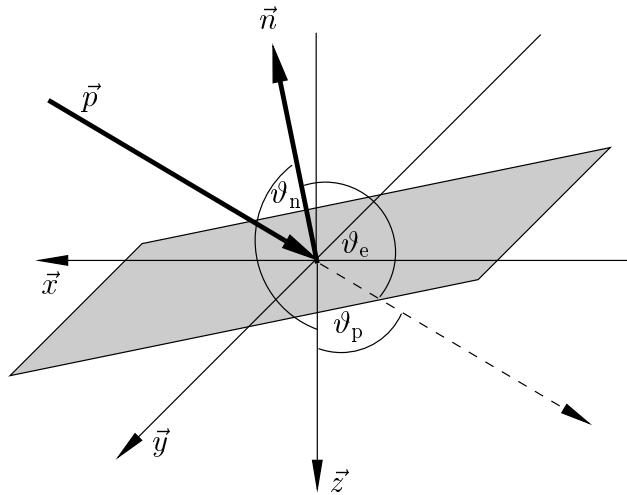


Abb. 4.2: Die Abbildung illustriert die relevanten Größen beim Auftreffen eines Photons unter dem Winkel ϑ_p auf eine Flächennormale, die den Winkel ϑ_n mit der z -Achse einschließt.

Ohne Modifikation lässt sich diese Verteilung allerdings nur für Photonen anwenden, die senkrecht (parallel zur z -Achse) auf die Wasseroberfläche treffen. Für Photonen, die unter einem Winkel $\vartheta_p \neq 0$ (die also nicht entlang der z -Achse fliegen) auftreffen, wird eine andere Verteilung von Flächennormalen, nämlich eine Projektion der ursprünglichen Cox–Munk Verteilung auf die Ebene senkrecht zur Einfallsrichtung des Photons wirksam.

Zur Herleitung dieser modifizierten Verteilung ([36] folgend) stelle man sich eine Wasseroberfläche vor, für die eine Cox–Munk–Verteilung der Wellennormalen vorliegt. Die Projektion einer Facette der Größe A dieser Wasseroberfläche auf die Horizontale (die xy -Ebene) ergibt sich als $\hat{A} = \frac{A}{\cos(\vartheta_n)}$. Die Normale auf die neue Facette \hat{A} zeigt in Richtung der negativen z -Achse ($\cos(\vartheta_e) = -\cos(\vartheta_p)$) und somit ergibt sich die Projektion von \hat{A} auf die Ebene senkrecht zur Einfallsrichtung des Photons als $\hat{\hat{A}} = \hat{A} \cos(\vartheta_e) = \frac{A \cos(\vartheta_e)}{\cos(\vartheta_n)}$. Da nun A beliebig war und (nach Voraussetzung) die Wahrscheinlichkeit eine bestimmte Flächennormale zu treffen gleich der Häufigkeit ($p(\vartheta_n)d\vartheta_n$) des Auftretens dieser Flächennormale ist, so ergibt sich $\frac{p(\vartheta_n) \cos(\vartheta_e)}{\cos(\vartheta_n)}$ als Projektion der ursprünglichen Cox–Munk–Verteilung auf die Ebene senkrecht zur Einfallsrichtung des Photons. Dabei gilt für den Einfallswinkel (siehe Abbildung 4.2)

$$\cos(\vartheta_e) = \vec{n} \cdot \vec{p} = \sin(\vartheta_n) \sin(\vartheta_p) \cos(\phi_n - \phi_p) + \cos(\vartheta_n) \cos(\vartheta_p). \quad (4.12)$$

Der Einfallswinkel ϑ_e soll per Definition $\in [\frac{\pi}{2}, \pi]$ sein, daher gibt es ab einem bestimmten Winkel ϑ_p , den die Photonflugrichtung mit der z -Achse einschließt, (der von der Windgeschwindigkeit abhängt,) ein kritisches $\phi_{\text{diff}} = \phi_n - \phi_p$. Dies beschränkt den Wertebereich von ϕ_{diff} vom Intervall $[0, 2\pi]$ auf das Intervall $[\phi_{\text{diff}}^{\text{krit}}, (2\pi - \phi_{\text{diff}}^{\text{krit}})]$. Bezeichnet G das Gebiet $G(\vartheta_n, \phi_{\text{diff}} : \vartheta_e \in [\frac{\pi}{2}, \pi])$ so folgt für die Normierungskonstante N :

$$N = \int \int_G \frac{p(\vartheta_n) \cos(\vartheta_e)}{\cos(\vartheta_n)} d\vartheta_n d\phi_{\text{diff}}.$$

Und es ergibt sich schließlich die bivariate Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$$\hat{p}(\vartheta_n, \phi_{\text{diff}}) d\vartheta_n d\phi_{\text{diff}} = \begin{cases} \frac{p(\vartheta_n) \cos(\vartheta_e)}{N \cos(\vartheta_n)} d\vartheta_n d\phi_{\text{diff}} & : \vartheta_e \in [\frac{\pi}{2}, \pi] \\ 0 & : \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.13)$$

Kapitel 5

Im Ozean

In diesem Kapitel werden die im Ozean relevanten Streu- und Absorptionsprozesse beschrieben. Die Einleitung gibt einen Überblick über die verschiedenen Wasserinhaltsstoffe, die Prozesse, die die Wasserfarbe beeinflussen und ob und in welcher Näherung sie hier behandelt werden. Es folgen die Müller–Matrizen für die Streuung der reinen Wassermoleküle (Einstein–Smoluchowski Streuung) und für die Streuung an Wasserinhaltsstoffen (Petzold–Streuung).

5.1 Einleitendes

Die Farbe des Ozeans wird bestimmt durch die Wechselwirkung des einfallenden Lichtes mit dem Wasser selbst und den im Wasser gelösten beziehungsweise suspendierten Substanzen. Der dabei zurück in die Atmosphäre gestreute Anteil lässt Rückschlüsse über die Wasserinhaltsstoffe zu. Eines der ersten Experimente hierzu wurde 1865 von Secchi¹ im Auftrag Papst Pius IX durchgeführt. Secchi beobachtete welche Variablen Einfluss auf die Sichtbarkeit einer weißen Scheibe unter Wasser haben. Noch heute wird die nach ihm benannte Secchi–Scheibe zur Bestimmung der euphotischen Tiefe von Gewässern genutzt.

Mit Entwicklung der Kolorimetrie und des 1931 eingeführten C.I.E.²–Farbstandards (nach dem jede Farbe als gewichtete Summe dreier künstlicher Grundfarben dargestellt werden kann) konnten Farbkoordinaten zur Darstellung verschiedener optischer Wasserklassen 1939 von Karl Kalle benutzt werden. Die erste Klassifikation verschiedener Wassertypen im Ozean erfolgte 1951 durch Nils Gunnar Jerlov. Er unterschied zunächst drei optische Grundtypen von Wasser; 1964 erweiterte er seine Klassifikation auf fünf Typen für den offenen Ozean und neun Typen für Küstengewässer. Seine Einteilung beruhte auf der spektralen Verteilung des Extinktionskoeffizienten, zu deren Bestimmung komplizierte und aufwendige Messungen durchzuführen sind. Die Einteilung stellte sich dadurch für die operative Nutzung als ungeeignet heraus und die

¹Angelo Secchi 1818 – 1878

²Commission Internationale de l’Eclairage

Farbe des Ozeans wurde nun zur Klassifikation herangezogen. Die oben erwähnte Methode der Farbbestimmung nach dem C.I.E.–Standard ist jedoch ebenfalls recht kompliziert und so wurde 1969 auf der Konferenz „*The Colour of the Sea*³“ eine zweikomponentige Farbklassifikation empfohlen. Dazu wurden der blaue (450 nm) und grüne (520 nm) Spektralbereich ausgewählt, da dieser zumindest in küstenfernen Gewässern die beste Zuordnung zu unterschiedlichen Chlorophyllkonzentrationen ermöglicht.

Basierend auf Kalles Untersuchungen zur Klassifizierung nach vielen verschiedenen Farben hat sich jedoch in den letzten Jahrzehnten die Unterscheidung nach zwei optischen Klassen, den Gewässern des Typs I und II⁴ durchgesetzt [37]. Unter Typ I–Gewässern sind solche einzuordnen, in denen das Phytoplankton die optischen Eigenschaften hauptsächlich bestimmt; die optischen Eigenschaften Typ II–Gewässer werden hingegen auch von anderen Substanzen bestimmt.

Nach diesem Exkurs über die Ozeanfarbe, soll nun von Wasserinhaltsstoffen, die die Spektralcharakteristik bestimmen, die Rede sein. Prinzipiell lassen sich drei Teilchenarten unterscheiden, die im Wasser absorbieren und / oder streuen: die Wassermoleküle selbst, gelöste und suspendierte Materialien. Die wesentlichen gelösten Materialien im Ozean sind Seesalz und Zerfallsprodukte organischer Materie⁵. Das Salz absorbiert nicht im relevanten Spektralbereich (sprich im Sichtbaren und nahen Infraroten); die Streuung jedoch ist für reines Seewasser um etwa 30% größer als für reines Wasser [38]. Die Wassermoleküle selbst verursachen eine geringe Absorption im kurzwelligen Bereich des sichtbaren Spektrums, die zum roten und nahen infraroten Bereich stark ansteigt (siehe Abschnitt 6.5). Die tiefblaue Farbe des klaren Ozeanwassers wird hauptsächlich durch stärkere Absorption des langwelligen und weitaus stärkere Streuung des kurzwelligen Spektrums an den Wassermolekülen erzeugt. Die ebenfalls an den Wassermolekülen auftretende Raman–Streuung bleibt hier unberücksichtigt. (Der Anteil der Raman–Streuung sinkt zwar mit zunehmender Chlorophyll– und Schwebstoffkonzentration, sollte aber, wie auch in [39] ausgeführt wird, in einer weiterführenden Arbeit modelliert werden.)

Hauptvertreter der Zerfallsprodukte organischer Materie sind die sogenannten Gelbstoffe; sie absorbieren stark im kurzwelligen Bereich des sichtbaren Spektrums. Die Absorption steigt zu kürzeren Wellenlängen nahezu exponentiell an, während sie für $\lambda > 650$ nm gegenüber der Absorption des reinen Wassers vernachlässigbar ist. Das Auftreten und die Konzentration von Gelbstoff kann an eine höhere Konzentration von Phytoplankton gekoppelt sein. Die Fluoreszenz durch Gelbstoff wird in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt. Einerseits kann die chemische Zusammensetzung der Gelbstoffe stark variieren, was eine Modellierung der Fluoreszenz erschwert zum anderen geht man davon aus, dass sie vernachlässigbar ist, sobald sich neben den Gelbstoffen noch Schwebstoffe im Wasser finden. Der Gelbstoff geht als reiner Absorber in die Modellierung ein.

³Die Farbe des Meeres

⁴Dem englischen entstammend, liest man auch häufig von *case I* und *II* Gewässern

⁵Im chemischen Sinne ist nur das Seesalz gelöst. Wasserinhaltsstoffe, die kleiner als $0.45\mu\text{m}$ sind, werden aber in der Ozeanographie ebenfalls als gelöst bezeichnet.

Schwebstoffe oder auch Seston sind suspendierte Materialien in der Form kleinster Partikel. Sie beeinflussen sowohl die Absorption als auch die Streuung und finden sich bevorzugt in den Mündungsgebieten von Flüssen. Im Folgenden sei hier Schwebstoff als Synonym für Detritus und mineralische Schwebstoffe zu verstehen, also den Anteil der Substanzen im Schwebstoff, der sich aus biologischen Zerfallsprodukten und Sedimenten zusammensetzt. Der Schwebstoffanteil wird in dieser Arbeit durch seine spektralen Streu- und Absorptionskoeffizienten modelliert.

Phytoplankton (das neben dem Zooplankton den lebenden Anteil der Schwebstoffe ausmacht) bezeichnet einzellige Pflanzen, deren Photosynthese der wichtigste Energieumwandlungsprozeß für das erste Glied der Nahrungskette im Ozean ist. Außerdem spielt das Phytoplankton auch im Kohlenstoffkreislauf eine bedeutende Rolle. Durch Phytoplankton im Meer wird im Jahr etwa die gleiche Menge Kohlenstoff gebunden wie an Land [40]. Unter dem Begriff Phytoplankton werden tausende verschiedener Arten zusammengefasst, deren Form, Größe und physiologische Eigenschaften variieren. Die vorliegende Arbeit kann diese Vielfalt nicht berücksichtigen. Die Veränderung der blauen in eine grüne Farbe bei den Küstengewässern ist das Ergebnis der Absorption durch das Chlorophyll-a, eines von vier Hauptpigmenten des Phytoplanktons. Je nach Art des Phytoplanktons (und seiner Pigmentzusammensetzung) und des Sedimentanteils kann aber auch eine braune bis rote Färbung des Wassers auftreten. Den wesentlichen Beitrag zur Absorption des Phytoplanktons verursachen die verschiedenen Farbpigmente, die entsprechend ihrer stark unterschiedlichen Molekülstruktur auch unterschiedliche Absorptionsspektren zeigen. So hat das Chlorophyll-a im sichtbaren Spektralbereich zwei bevorzugte Absorptionsbanden zwischen 400–500 nm und 600–700 nm. In Anlehnung an [41] werden in der vorliegenden Arbeit gemessene Absorptionsspektren von bei verschiedenen Validationsfahrten in der Deutschen Bucht genommenen Wasserproben benutzt, um dieser Vielfalt Rechnung zu tragen (siehe Kapitel 6.5). Das Chlorophyll hat bei ≈ 685 nm ein etwa 30 nm breites Fluoreszenzband in Form einer Gaußkurve. Der entsprechende MERIS-Kanal bei dieser Wellenlänge wurde explizit aus der Modellierung ausgenommen: die Fluoreszenz des Chlorophylls wird nicht berücksichtigt. Neben der Absorption, die sich aus den gemessenen Spektren und einer angenommenen Chlorophyll-a Konzentration ergibt, wird noch ein (rein) streuender Anteil in die Modellierung des Phytoplanktons aufgenommen. Dieser Anteil wird durch die Konzentration eines weißen Streuers — den *Coccolithalen* (Kalkflagellaten) die in der Nordsee regelmäßig vor Norwegen auftreten — bestimmt. Anders als die in der Nordsee dominierenden Arten *Diatomeen* (Kieselalgen, die vorwiegend im Frühjahr auftreten), *Dinoflagellaten* (Panzeralgen, die vorwiegend im Herbst auftreten) und der Schaumalge *Phaecystis* hat diese Art durch ihre Kalkschale ein komplett andersartiges spektrales Streuverhalten und wird aus diesem Grund separat berücksichtigt.

Zusammenfassend wird der Ozean in Anlehnung an [41] durch die Konzentrationen von Schweb- und Gelbstoff, Chlorophyll-a und *Coccolithalen* (als weißer Streuer) gekennzeichnet. Es werden zwei Arten von Wechselwirkungen modelliert: die Streuung und Absorption durch das Salzwasser und die Streuung und Absorption an den

(als ein Wechselwirkungspartner aufgefasster) eben genannten Inhaltsstoffen — die Konzentration der jeweiligen Inhaltsstoffe bestimmt die Quantität von Absorption und Streuung, nicht aber die Art der Streuung. Nicht berücksichtigt bleiben jegliche Arten inelastischer Prozesse, als da wären: die Raman–Streuung des Wassers und die Fluoreszenz von Gelbstoff und Chlorophyll–a. Auch wird angenommen, dass der Grund des Ozeans keine Auswirkung auf die Farbe des Ozeans hat. Eine mögliche Schaumbedeckung der Wasseroberfläche bleibt ebenfalls unberücksichtigt.

Die folgenden zwei Abschnitte widmen sich den Müller–Matrizen der genannten Streuprozesse; in Abschnitt 6.5 findet sich die Beschreibung der Implementierung des Ozean–Modells in das Monte–Carlo–Programm.

5.2 Einstein–Smoluchowski Streuung

Das reine Wasser zeigt im wesentlichen nur Absorption, die durch ihr Minimum bei 475 nm für die tiefblaue Farbe verantwortlich ist. Die Streuung des reinen Wassers ist wesentlich geringer. Diese Einstein–Smoluchowski–Streuung⁶ wird durch die in Abschnitt 3.2 angegebene Müller–Matrix für Rayleigh–Streuung beschrieben. Im Gegensatz zu Rayleigh wird nicht die Streuung an Teilchen betrachtet deren Größe viel kleiner als die Wellenlänge des eingestrahltten Lichtes ist; auftretende Dichtefluktuationen der Wassermoleküle erzeugen Fluktuationen des Brechungsindex des Wassers, die wiederum die Streuung verursachen [42]. Der Depolarisierungsfaktor d für die Streuung an Ozeanwasser beträgt $d = 0.09$

5.3 Petzold Streuung

Aus den Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe Schweb– und Gelbstoff, Chlorophyll und dem weißen Streuer folgen ein Gesamtstreu– (durch Schwebstoff und den weißen Streuer) und ein Gesamtabsorptionskoeffizient (durch Schweb– und Gelbstoff und Chlorophyll) (siehe Abschnitt 6.5). Die Müller Matrix für die Absorption ist trivial durch diese Koeffizienten bestimmt. Im folgenden soll die Müller–Matrix für die Streuung an den Wasserinhaltsstoffen beschrieben werden.

Im Jahr 1972 veröffentlichte Theodore James Petzold Messungen von Streufunktionen verschiedener Wasserkörper [43]. Die Messungen wurden im offenen Ozean, in Küstengewässer und in einem Hafenbecken durchgeführt. Die Form dieser drei verschiedenen Streufunktionen zeigt, trotz der sehr unterschiedlichen Streukoeffizienten, große Ähnlichkeit, so dass es nahe lag aus ihnen eine typische Phasenfunktion für die Streuung an den Wasserinhaltsstoffen abzuleiten, die noch heute vielfältig zur Anwendung kommt. Dazu wurde von den gemessenen Streufunktionen die Streufunktion des reinen Salzwassers abgezogen. Bestimmt man dann noch den Streukoeffizienten

⁶Albert Einstein 1879 – 1955

Marian von Smoluchowski 1872 – 1917

der Wasserinhaltsstoffe (indem man wiederum von den gemessenen Gesamtstreuoeffizienten jeweils den des reinen Salzwassers abzieht), so lassen sich auf diese Weise drei Phasenfunktionen für die Streuung an den Inhaltsstoffen berechnen, von denen dann noch der Mittelwert gebildet wurde [44]. Die zu dieser Phasenfunktion gehörige Streuung wird hier als Petzold–Streuung bezeichnet.

Spätere Messungen der übrigen Matrixelemente der Müller–Matrix, zeigten dass diese von der Form

$$\mathbf{M}_P(\theta) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} & 0 & 0 \\ m_{12} & m_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m_{33} \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

ist [45]. Es konnte gezeigt werden, dass die Matrixelemente in analytischer Form als Funktion des Streuwinkels θ angegeben werden können [46]:

$$\begin{aligned} m_{12}(\theta) &= - \frac{0.66 \sin^2(\theta)}{1 + 0.66 \cos^2(\theta)}, \\ m_{22}(\theta) &= \frac{0.66(1 + \cos^2(\theta - \theta_0))}{1 + 0.66 \cos^2(\theta - \theta_0)}, \\ m_{33}(\theta) &= \frac{2 \cdot 0.66 \cos(\theta)}{1 + 0.66 \cos^2(\theta)}, \end{aligned} \quad (5.2)$$

dabei entspricht der Faktor 0.66 dem Grad der Polarisation bei $\theta = 90^\circ$ für die Streuung von anfangs unpolarisiertem Licht an reinem Seewasser; der Winkel $\theta_0 = 0.25\text{rad}$ berücksichtigt die gemessene ([45]) Verschiebung des Minimums der Funktion $m_{22}(\theta)$ vom Wert $\theta = 90^\circ$.

Dies ist die Müller–Matrix, wie sie für die Streuung an den Inhaltsstoffen benutzt wird. Das m_{11} –Element (die Phasenfunktion) findet sich in tabellarischer Form in Kapitel 6.5.

Kapitel 6

Das Monte–Carlo–Programm

6.1 Einleitendes

Als Monte–Carlo–Methoden werden Methoden bezeichnet, die Probleme deterministischer oder stochastischer Natur mit Hilfe von Zufallszahlen lösen [47]. Ein historisches Beispiel für die Anwendung von Monte–Carlo–Methoden ist Buffons¹ Nadel. Eine Nadel der Länge l wird willkürlich auf eine Fläche mit gleich weit voneinander entfernten parallelen Geraden geworfen, mit einem Abstand l zwischen den Geraden. Man kann zeigen, dass die Häufigkeit $p = k/n$ für $k =$ Zahl der Ereignisse, in denen die Nadel eine der Geraden trifft, bei insgesamt n Versuchen im Mittel $2/\pi$ ist. Dieses Experiment rief seinerzeit viele Diskussionen zwischen Mathematikern hervor und brachte das Verständnis von Wahrscheinlichkeiten voran [48].

Ein weiteres frühes Anwendungsbeispiel ist die Entdeckung der t –Verteilung mittels mathematischer und empirischer Arbeiten mit Zufallszahlen durch Gosset² in der Guinness–Brauerei in Dublin. Er erfand den t –Test für kleine Stichprobenmengen zur Qualitätskontrolle während des Brauens.

Der wirkliche Nutzen der Monte–Carlo–Methode als wissenschaftliches Werkzeug stammt jedoch aus der Entwicklungszeit der Atombombe während des II. Weltkrieges. Dabei wurden direkte Simulationen der Neutronen–Diffusion in spaltbarem Material durchgeführt. Auf diese Zeit geht auch der Name Monte–Carlo zurück, der von Metropolis³ (inspiriert durch Ulams⁴ Interesse am Pokerspiel) kreiert wurde. Der Name bezieht sich auf die Ähnlichkeit solch statistischer Simulationen mit einem Glücksspiel und wurde nach der Hauptstadt Monacos, dem Zentrum des Spielens, benannt.

Ulam und von Neumann⁵ benutzten schon damals das sogenannte „Russische Roulette“ und die „*splitting*“-Methode. Eine systematische Entwicklung dieser Methoden

¹Graf Georges Louis Leclerc du Buffon 1701–1788

²William Sealey Gosset 1876–1937

³Nicholas Constantine Metropolis 1915–1999

⁴Stanislaw Marcin Ulam 1909–1984

⁵John von Neumann 1903–1957

folgte um 1948. Zur selben Zeit wurde die Monte-Carlo-Methode benutzt, um Eigenwerte der Schrödinger-Gleichung zu schätzen.

Die Grundidee der Monte-Carlo-Methode ist die Folgende: gegeben sei ein System (ein physikalisches oder mathematisches), das sich durch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen beschreiben lässt. Es werden nun zufällig Zahlen erzeugt, deren mittlere Verteilung eben diesen Wahrscheinlichkeitsdichten entspricht. Mit Hilfe dieser Zufallszahlen werden dann Schätzwerte für die interessierenden Observablen berechnet. Bei vielen Aufgaben, zu der auch die hier behandelte gehört, ist es weiterhin möglich zusätzlich zu den geschätzten Observablen eine Schätzung des statistischen Fehlers, der Varianz, mitzuberechnen. So ist es möglich abzuschätzen, wie viele Zufallszahlen nötig sind, um eine vorgegebene statistische Genauigkeit zu erreichen.

An dieser Stelle sei kurz beschrieben, wie man Zufallszahlen würfelt, deren Verteilung einer gegebenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion entspricht. Sei $p(x)$ solch eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion:

$$p(x) \geq 0 \quad \text{und} \quad \int_{-\infty}^{\infty} p(x) dx = 1.$$

Dann gilt für $\tilde{x} < \infty$ auch

$$r = \int_{-\infty}^{\tilde{x}} p(x) dx \quad \text{mit} \quad r \in [0, 1).$$

Ist nun r eine gleichverteilte Zufallszahl⁶ aus dem Intervall $[0, 1)$, so kann entweder analytisch oder numerisch nach dem zugehörigen \tilde{x} aufgelöst werden — per Definition sind dann die \hat{x} gemäß $p(x)$ verteilt. Handelt es sich bei der gegebenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion um eine bivariate Verteilung $p(x, y)$ kann dieses Schema nicht angewandt werden. Ist jedoch eine zweite Verteilung $\hat{p}(x, y)$ gegeben, die sich als Produkt zweier univariater Verteilungen schreiben lässt $\hat{p}(x, y) = g(x)h(y)$, so kann obiges Verfahren für diese univariaten Verteilungen genutzt werden. Für den Erwartungswert einer Funktion $f(x, y)$ bezüglich $p(x, y)$ gilt dann

$$\begin{aligned} \langle f(x, y) \rangle &= \int f(x, y) p(x, y) dx dy \\ \langle f(x, y) \rangle &= \int f(x, y) \frac{p(x, y)}{\hat{p}(x, y)} \hat{p}(x, y) dx dy. \end{aligned} \quad (6.1)$$

Der Strahlungstransport im gekoppelten System Atmosphäre-Ozean lässt sich mathematisch durch eine Integro-Differentialgleichung beschreiben. Im Jahre 1931 zeigte Kolmogorov⁷ die Verbindung zwischen Markov-Prozessen und einer bestimmten Klasse von Integro-Differentialgleichungen. Zu dieser Klasse gehört auch die Strahlungstransportgleichung [49].

⁶In fast jeder Programmiersprache sind bereits Algorithmen implementiert, die gleich- und normalverteilte Pseudozufallszahlen generieren.

⁷Andrei Nikolaevich Kolmogorov 1903–1987

Als einen stochastischen Prozess bezeichnet man eine zeitabhängige Zufallsvariable $X(t)$; die Zeit t kann dabei entweder kontinuierlich verlaufen oder diskretisiert sein. Im Folgenden sei die Zeit als diskretisiert vorausgesetzt. Betrachtet wird also eine Folge von Zufallsvariablen $X_{t_1}, \dots, X_{t_i}, \dots$. Eine Realisierung eines stochastischen Prozesses ist eine Trajektorie $x(t)$ im Falle kontinuierlicher Zeit, beziehungsweise eine Folge x_{t_1}, \dots im diskreten Fall. Die Dichtefunktionen $p_{t_i}(x)$ können für alle X_{t_i} verschieden sein. Sei

$$p_1(x, t_i) = p_{t_i}(x).$$

Ein stochastischer Prozess ist ein Markowscher, wenn

$$p_n(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1}; \dots; x_1, t_1) = p_2(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$$

gilt. Diese sogenannte Markow-Bedingung besagt, dass die Übergangswahrscheinlichkeit $p_2(x_n, t_n | x_{n-1}, t_{n-1})$ von x_{n-1} nach x_n im Zeitintervall t_{n-1} bis t_n unabhängig von der Vergangenheit ist, also unabhängig davon, auf welchem Wege der Zustand x_{n-1} eingenommen wurde. Ein Markow-Prozess dessen Übergangswahrscheinlichkeit nur von Zeitdifferenzen abhängt, heißt homogen oder stationär im weiteren Sinne. Hängt zusätzlich $p_1(x, t)$ nicht von der Zeit ab, so heißt der Prozess stationär oder präziser stationär im strengen Sinne. (Der Strahlungstransportgleichung entspricht ein solcher im strengen Sinne stationärer Markowscher-Prozess.) Ein Markow-Prozess lässt sich folglich vollständig durch die zwei Funktionen $p_1(x, t)$ und $p_2(x_2, t_2 | x_1, t_1)$ oder äquivalent durch $p_2(x_2, t_2; x_1, t_1)$ beschreiben (nach [50]).

Abschließend sollen nun noch kurz Vor- und Nachteile der Monte-Carlo-Methode diskutiert werden. Vorteile der Methode sind: sie ist leicht begreifbar und instruktiv. Sie ist des weiteren vielfältig anwendbar, leicht zu programmieren und eignet sich per Konstruktion zum Parallelisieren. Komplizierte dreidimensionale Randbedingungen können einfach implementiert werden. Andererseits kann sie sehr ineffizient sein, jedoch gibt es einige Möglichkeiten die Effizienz zu erhöhen (einige werden im folgenden Abschnitt 6.2 vorgestellt). Unvermeidbar ist auch der statistische Fehler der berechneten Observablen.

6.2 Der Prozessierungszyklus eines Photons

In diesem Abschnitt soll die Realisierung der Monte-Carlo-Methode zur Lösung der Strahlungstransportgleichung skizziert werden. Schon seit langem werden Monte-Carlo Rechnungen für dieses Problem herangezogen, so zum Beispiel in [51] und [52].

Für der vorliegenden Arbeit wurde in Anlehnung an [53] ein Monte-Carlo Programm geschrieben. Als wesentliche Neuerungen sind die objektorientierte Programmierweise, die Berücksichtigung der Polarisation und die Berücksichtigung der Kopplung zwischen Atmosphäre und Ozean zu nennen. Zusätzlich wurde es um die Methoden des Russischen Roulettes und der Bedeutungsprüfung (siehe Abschnitt 6.2.4) erweitert.

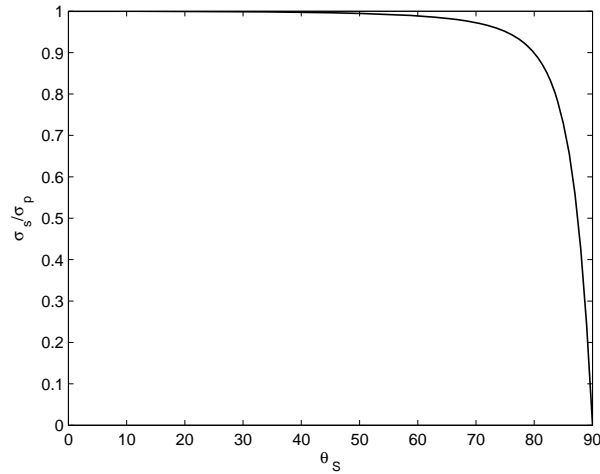


Abb. 6.1: Gezeigt ist das Verhältnis der direkten Wege in einem sphärischen σ_s und einem planparallelen σ_p Modell der Atmosphäre in Abhängigkeit des Sonnenzenitwinkels θ_s (in Grad).

Das Ablaufschema in diesem Monte-Carlo-Programm ist folgendes: Photonen werden entsprechend den Randbedingungen gestartet. Ihre räumliche Startposition $\vec{x} = (x, y, z)$ liegt außerhalb der Atmosphäre und ist durch die optische Dicke der Atmosphäre τ durch $\vec{x} = (0, 0, -(\tau + \epsilon))$ gegeben (positive Werte der z -Komponente des Ortes entsprechen also Positionen im Wasser, negative optische Dicken Positionen in der Atmosphäre). Die räumlichen Koordinaten werden folglich in einem rechtshändigen Koordinatensystem abgelesen, dessen z -Achse von der Atmosphäre hin zum Ozean zeigt.

Bei der Berechnung der Positionen wird von einem planparallelen System Atmosphäre-Ozean ausgegangen, das heißt die Krümmung der Erdoberfläche bleibt der Einfachheit halber unberücksichtigt. Bezeichnet σ_s die direkte Weglänge (in km) eines Photon, das mit einem Winkel θ_s in die 50 km dicke Atmosphäre eindringt in einem sphärischen Modell der Erde und analog σ_p den Weg in einer planparallelen Atmosphäre, so gilt

$$\sigma_s = R_1 \left(\sqrt{1 - \frac{R_0^2}{R_1^2} \sin^2(\theta_s)} - \frac{R_0}{R_1} \cos(\theta_s) \right),$$

$$\sigma_p = \frac{R_1 - R_0}{\cos(\theta_s)},$$

mit dem Erdradius $R_0 = 6370$ km und $R_1 = 6420$ km dem Radius der Erde mit einer 50 km dicken Atmosphäre.

Abbildung 6.1 zeigt das Verhältnis dieser beider Weglängen — die Vernachlässigung der Erdkrümmung ist für Sonnenstände bis $\theta_s = 60^\circ$ gerechtfertigt.

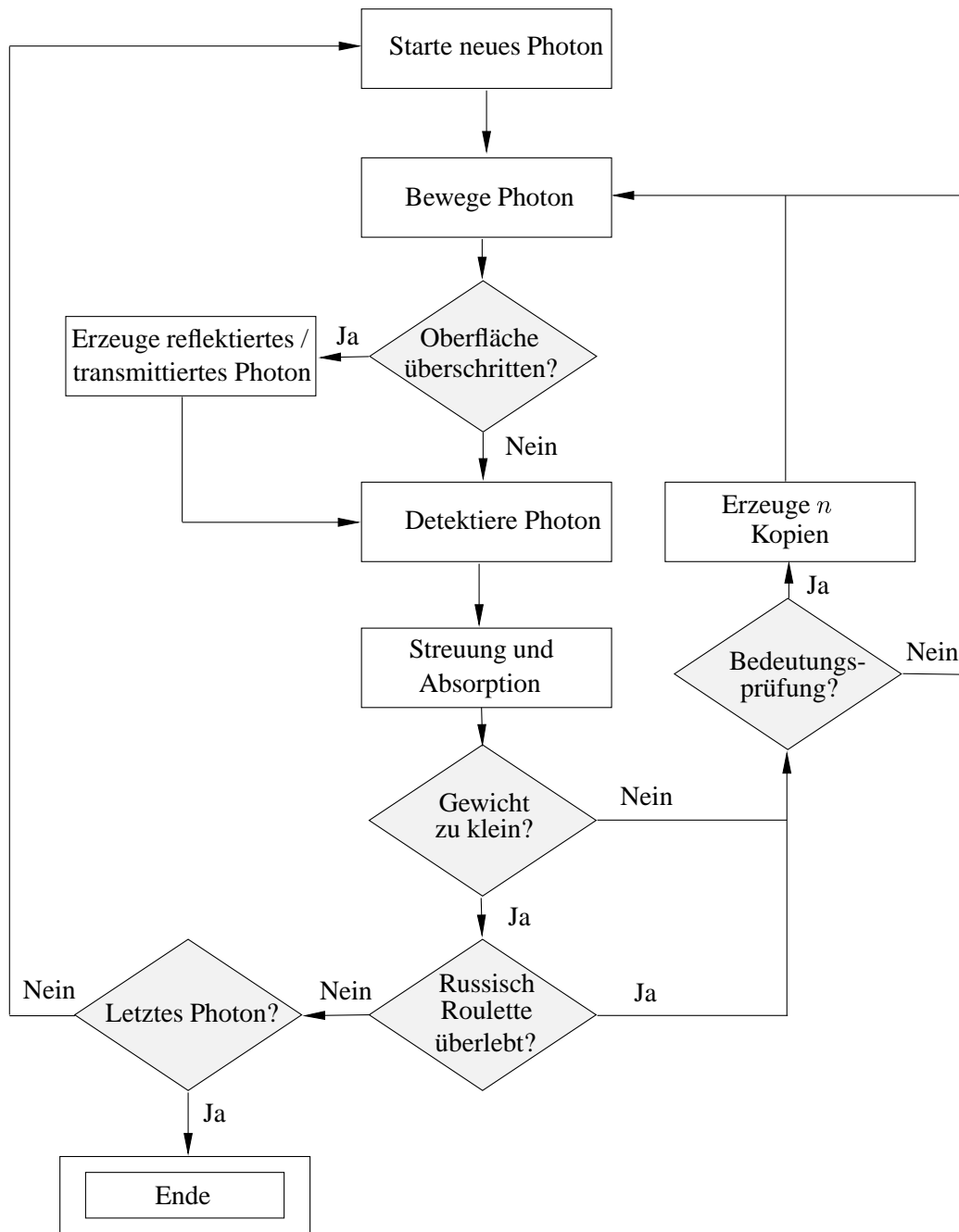


Abb. 6.2: Schematische Darstellung des Prozessierungszyklus eines Photons.

Die Flugrichtung \vec{r} der Photonen ergibt sich aus dem aktuellen Sonnenstand⁸ (in sphärischen Koordinaten gegeben durch (θ_S, ϕ_S)) als $\vec{r} = (r_x, r_y, r_z) = (\sin \theta_S \cos \phi_S, \sin \theta_S \sin \phi_S, \cos \theta_S)$. Der anfängliche Stokes- oder Gewichtsvektor $\vec{S} = (I, Q, U, V) = (S_1, S_2, S_3, S_4)$ entspricht dem unpolarisierten Lichtes $\vec{S} = (1, 0, 0, 0)$.

Aus der anfänglichen Flugrichtung der Photonen folgt, dass die Sonne als punktförmige Quelle modelliert wird. Die Sonne ist zwar von der Erde aus gesehen eine Scheibe mit Öffnungswinkel $\alpha \approx 0.27^\circ$, jedoch ist der effektive Öffnungswinkel noch kleiner, da die Verteilung der Strahlungsintensität keineswegs gleichmäßig über die Scheibe ist, sondern vielmehr zum Rand abgeschwächt ist (siehe [54]). Der kleine Öffnungswinkel und die Schwierigkeit Photonen anhand der gemessenen Intensitätsverteilung zu starten, rechtfertigen das Modell einer punktförmigen Quelle.

Nach dem Start eines Photons erfolgen nun zyklisch die folgenden Prozesse: das Photon wird räumlich um den Weg Δx bewegt, wird detektiert und wechselwirkt (Streuung und Absorption) anschließend mit einem der möglichen Partner (siehe Abbildung 6.2). Die Prozesse sollen nun im Detail besprochen werden.

6.2.1 Das Photon bewegen

Die räumlichen Koordinaten des Photons werden in Einheiten der optischen Dicke ausgedrückt. Das Photon wird nun wie folgt zum nächsten Wechselwirkungspunkt bewegt. Die Wahrscheinlichkeit, einer Wechselwirkung zwischen der optischen Dicke τ und $\tau + d\tau$ ist gegeben durch

$$p(\tau)d\tau = \exp(-\tau)d\tau$$

[49]. Daraus folgt (siehe Abschnitt 6.1)

$$r = \int_0^{\tau'} \exp(-\tau)d\tau = 1 - \exp(-\tau')$$

und

$$\tau' = -\ln(1 - r).$$

Ist nun r eine gleichverteilte Zufallszahl mit $0 \leq r < 1$, so folgt die neue Photonposition

$$\vec{x}' = \vec{x} + \tau' \vec{r}. \quad (6.2)$$

Tritt hierbei ein Vorzeichenwechsel in der z -Komponente der Photonposition auf, so hat das Photon die Grenzfläche zwischen der Atmosphäre und dem Ozean überschritten. In diesem Fall wird das ursprüngliche Photon vernichtet und statt seiner werden ein reflektiertes und ein transmittiertes Photon gestartet. Dieser Vorgang wird im Detail in Abschnitt 6.4 behandelt.

⁸Der Zenitwinkel des Sonnenstandes wurde während der Massenproduktion zwischen 10° und 50° variiert, der Azimutwinkel betrug stets 0° .

6.2.2 Detektieren des Photons

Vor der Wechselwirkung wird das Photon zunächst gegebenenfalls detektiert. Ein Detektor befindet sich dabei in einer vorgegeben optische Dicke in der Atmosphäre oder im Ozean und detektiert entweder nur Photonen, die aufwärts (Richtung Satellit, Sonne) oder abwärts fliegen. Nachdem das Photon bewegt wurde, wird überprüft, ob es dabei einen Detektor passierte, der auf Photonen der aktuellen Photonflugrichtung ausgerichtet ist. Ist dies der Fall, so werden allen Photoneigenschaften registriert, die benötigt werden, um nach Beendigung des Laufes die interessierenden Observablen berechnen zu können. Zu diesem Zwecke wird der Detektor, der eine halboffene zwei-

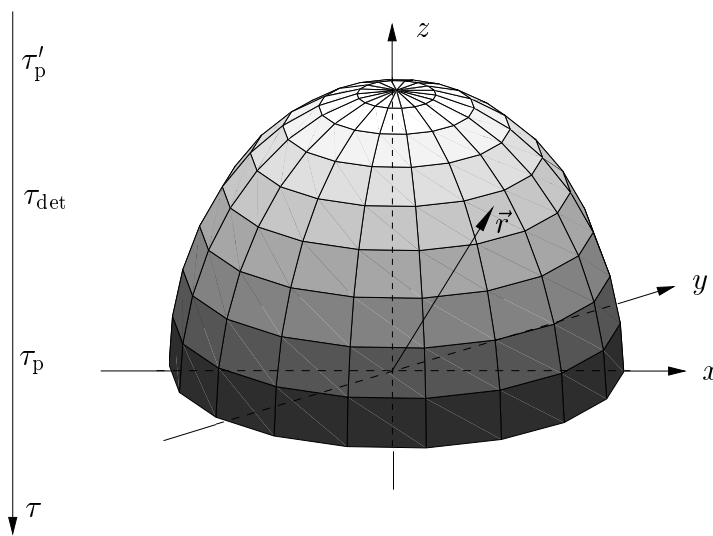


Abb. 6.3: Schematische Darstellung der Detektion eines Photons. Das Photon wurde im vorherigen Schritt von τ_p in Richtung \vec{r} nach τ_p' bewegt; zwischen diesen beiden Positionen befindet sich ein Detektor. Der Detektor in diesem Beispiel ist äquidistant in ϕ und θ unterteilt.

dimensionale Einheits-Halbkugel darstellt, in $p \times t$ Sektoren unterteilt, dabei ist p die Anzahl der Längskreise (äquidistant in ϕ) und t die Anzahl der Breitenkreise (dabei ist frei wählbar, ob diese äquidistant in θ oder in $\cos \theta$ angelegt werden); zusätzlich kann noch ein separater Polkappendetektor mit wählbarem Öffnungswinkel α angelegt sein. In Abhängigkeit der Photonflugrichtung \vec{r} wird der Sektor des Detektors ausgewählt, der den Durchstoßungspunkt des (Einheitsvektors) der Photonflugrichtung enthält (siehe Abbildung 6.3). Ein angesprochener Sektor addiert die folgenden Photoneigenschaften für eintreffende Photonen auf:

$$\sum_{j=1}^n S_j^i, \quad \sum_{j=1}^n S_j^{i^2}, \quad \sum_{j=1}^n \frac{S_j^i}{\cos \theta_p}, \quad \sum_{j=1}^n \left(\frac{S_j^i}{\cos \theta_p} \right)^2, \quad \text{mit } i = 1, 2, 3, 4.$$

Dabei läuft die Summation über die Anzahl der in einem Sektor detektierten Photonen n , die Komponenten S_i bezeichnen die vier Komponenten des Stokes- oder Gewichtsvektors und θ_p ist die z -Komponente der Flugrichtung des jeweils detektierten Photons. Nach Beendigung eines Laufes lassen sich damit folgende Größen berechnen [55] (hier nur beispielhaft angeführt für die erste Komponente des Stokes-Vektors, für die übrigen Komponenten gilt *mutatis mutandis*; der Grad der (linearen, zirkulären) Polarisation kann anschließend ebenfalls gemäß seiner Definition berechnet werden):

$$\begin{aligned}
 \text{Strahldichte } \left[\frac{W}{nm m^2 sr} \right] \quad L(\theta, \phi) &= \frac{E_d^S}{NA} \left(\sum_{j=1}^n \frac{S_j^1}{\cos \theta_p} \right) (\theta, \phi), \\
 \text{Strahlungsflussdichte } \left[\frac{W}{nm m^2} \right] \quad E &= \frac{E_d^S}{N} \sum_{\theta, \phi} \left(\sum_{j=1}^n S_j^1 \right) (\theta, \phi), \\
 \text{skalare Strahlungsflussdichte } \left[\frac{W}{nm m^2} \right] \quad E_0 &= \frac{E_d^S}{N} \sum_{\theta, \phi} \left(\sum_{j=1}^n \frac{S_j^1}{\cos \theta_p} \right) (\theta, \phi).
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

In obigen Gleichungen ist E_d^S die abwärtsgerichtete Strahlungsflussdichte, die von der Sonne kommt, N ist die Gesamtanzahl der gestarteten Photonen. Der Index j läuft wiederum über die Anzahl der in den jeweiligen Sektoren gelandeten Photonen, die Summation über θ, ϕ bei der Berechnung der Strahlungsflussdichten läuft dabei von t und p , sprich über alle Sektoren eines Detektors (per Definition handelt es sich also entweder um abwärts- oder um aufwärtsgerichtete Strahlungsflussdichten). Bei der Berechnung der richtungsabhängigen Strahldichten muss zusätzlich noch durch die SektorengroÙe A geteilt werden, dabei gilt $A = 2\pi(\cos \theta_{i-1} - \cos \theta_i)/p$ im Falle einer in θ äquidistanten Partitionierung (der Ausdruck vereinfacht sich zu $A = 2\pi/(pt)$ im Falle einer in $\cos \theta$ äquidistanten Partitionierung).

Wie schon in der Einleitung 6.1 angesprochen ist es ebenfalls möglich eine Schätzung der Varianz der Observablen zu berechnen. Sei O eine Observable, die sich aus den Summen von Gewichten (oder aus den Summen von Funktionen in den Gewichten) berechnet $O = \sum_{i=1}^n x_i$. Die Varianz dieser Summe σ_O^2 ist dann gegeben durch

$$\sigma_O^2 = \langle n \rangle \sigma_x^2 + \sigma_n \langle x \rangle^2$$

[56] ($\langle \rangle$ steht hier für den Erwartungswert einer GröÙe). Nimmt man nun für n eine Binomial-Verteilung mit kleiner Wahrscheinlichkeit an (was sicherlich für aus dem Wasser austretende StrahlgröÙen eine gerechtfertigte Annahme ist), so gilt $\langle n \rangle = n \approx \sigma_n$ und deshalb auch

$$\begin{aligned}
 \sigma_O^2 &= \langle n \rangle \sigma_x^2 + \sigma_n \langle x \rangle^2 \\
 &= n \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2 - \langle x \rangle^2 \right) + n \langle x \rangle^2 = \sum_{i=1}^n x_i^2 - n \langle x \rangle^2 + n \langle x \rangle^2 \\
 &= \sum_{i=1}^n x_i^2.
 \end{aligned}$$

Der statistische Fehler der Observablen O kann folglich durch $\sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ abgeschätzt werden.

6.2.3 Wechselwirkung des Photons mit einem Teilchen

Nachdem das Photon bewegt und detektiert wurde erfolgt anschließend eine Wechselwirkung. Abhängig von der aktuellen z -Komponente der Position des Photons wird zunächst einer der möglichen Wechselwirkungspartner ausgewählt. Im Monte-Carlo-Programm bestehen sowohl der Ozean als auch die Atmosphäre aus vertikalen Schichten gleicher Dicke (in [km]). Jede dieser Schichten ist durch ihre räumliche Position in Einheiten der optischen Dicke, die in dieser Schicht vertretenden Wechselwirkungspartner und deren Extinktionskoeffizienten gekennzeichnet. Die Extinktionskoeffizienten der i möglichen Wechselwirkungspartner werden wie folgt in einem Vektor angelegt

$$\vec{c} = \left[0, \frac{c_1}{c_{\max}}, \frac{c_1 + c_2}{c_{\max}}, \dots, 1 \right], \text{ mit } c_{\max} = \sum_{n=1}^i c_n.$$

Nun wird eine gleichverteilte Zufallszahl r mit $0 \leq r < 1$ gewürfelt und mittels eines binären Suchalgorithmus der zugehörige Wechselwirkungspartner ausgewählt. Nun folgen Absorption und Streuung an diesem Wechselwirkungspartner (handelt es sich um einen reinen Absorber, so wird eine triviale Streuung (Streuwinkel Null, keine Änderung des Gewichtsvektors) vorgenommen, im Falle eines reinen Streuers erfolgt eine Absorption mit einem Absorptionskoeffizient von Null). Um das Photon zu streuen, wird ein Streuwinkel $\theta \in [0, \pi]$ anhand der Phasenfunktion (dem m_{11} -Element der Müller-Matrix) gewürfelt. In einigen Fällen (Rayleigh- (siehe Abschnitt 3.2) und Henyey-Greenstein-Streuung) kann die Phasenfunktion analytisch integriert werden, bei anderen Streuern wird die kumulierte Phasenfunktion numerisch berechnet und eine gewürfelte gleichverteilte Zufallszahl benutzt, um einen Streuwinkel festzulegen (siehe Abschnitt 6.1); der azimutale Streuwinkel ϕ wird gleichverteilt aus dem Intervall $[0, 2\pi)$ gewürfelt. Zur Berechnung der Flugrichtung des gestreuten Photons, stelle man sich vor, dass die Richtung des einfallenden Photons mit der x -Achse eines Koordinatensystems K' zusammenfalle. Dazu müssen Vektoren des ursprüngliche Koordinatensystem K um einen Winkel ϕ in der xy -Ebene gedreht und anschließend um den Winkel $\frac{\pi}{2} - \theta$ in der xz -Ebene gedreht werden. Dies leistet die Transformationsmatrix **A**

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \begin{pmatrix} \sin \theta & 0 & \cos \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\cos \theta & 0 & \sin \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ -\cos \theta \cos \phi & -\cos \theta \sin \phi & \sin \theta \end{pmatrix} \end{aligned}$$

wobei noch $\cos(\frac{\pi}{2} - \theta) = -\sin(-\theta) = \sin \theta$ und $\sin(\frac{\pi}{2} - \theta) = \cos(-\theta) = \cos \theta$ ausgenutzt wurde. Im Koordinatensystem K' lautet die Flugrichtung des gestreuten Photons $\vec{r}'_a = (\cos \theta, \sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi)$. Mittels $\vec{r}_a = \mathbf{A}^T \vec{r}'_a$ folgt nach einigen Umformungen

$$\begin{pmatrix} r_{xa} \\ r_{ya} \\ r_{za} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_{xe} \cos \theta - \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-r_{ze}^2}} (r_{ye} \cos \phi + r_{xe} r_{ze} \sin \phi) \\ r_{ye} \cos \theta + \frac{\sin \theta}{\sqrt{1-r_{ze}^2}} (r_{xe} \cos \phi - r_{ye} r_{ze} \sin \phi) \\ r_{ze} \cos \theta + \sqrt{1-r_{ze}^2} \sin \theta \sin \phi \end{pmatrix}. \quad (6.4)$$

Das Würfeln eines Streuwinkels θ anhand der Phasenfunktion und das gleichverteilte Würfeln eines azimutalen Streuwinkels ϕ aus dem Intervall $[0, 2\pi)$ stellt eine Vereinfachung dar. Wird die Polarisation mitberücksichtigt, so muss Gleichung 2.7 herangezogen werden und folglich müssten die Winkel anhand der Funktion

$$p(\theta, \sigma_e) = m_{11}I + m_{12} (Q \cos(-2\sigma_e) + U \sin(-2\sigma_e)) + m_{13} (U \cos(-2\sigma_e) - Q \sin(-2\sigma_e)) + m_{14}V$$

beziehungsweise

$$p(\theta, \phi) = m_{11}I + m_{12} (Q \cos(-2 \arccos(\sin \phi) + U \sin(-2 \arccos(\sin \phi))) + m_{13} (U \cos(-2 \arccos(\sin \phi) - Q \sin(-2 \arccos(\sin \phi))) + m_{14}V, \quad (6.5)$$

gewürfelt werden. Zur Herleitung von Gleichung 6.5 wurde die Beziehung $\cos \sigma_e = \sin \phi$ ausgenutzt, die sich ergibt, wenn man nach Gleichung 6.4

$$\begin{aligned} \cos \theta_a &\equiv r_{za} = r_{ze} \cos \theta + \sqrt{1-r_{ze}^2} \sin \theta \sin \phi \\ &= \cos \vartheta_e \cos \theta + \sin \vartheta_e \sin \theta \sin \phi \end{aligned}$$

beachtet und diesen Ausdruck in die Definition für σ_e (siehe Gleichung 2.6) einsetzt. Gleichung 6.5 definiert eine bivariate Phasenfunktion in θ und φ ; dies verdeutlicht den Grund, warum die Polarisation mitberücksichtigt werden muss, um korrekte Lösungen der Strahlungstransportgleichung zu erhalten.

Unter Verwendung von Gleichung 6.1 folgt mit $p(x, y) = p(\theta, \phi)$ und $\hat{p}(x, y) = \hat{p}(\theta) = m_{11}$ der Gewichtsvektor des gestreuten Photons

$$\vec{S}_a = \mathbf{L}(-\sigma_a) \hat{\mathbf{M}}(\theta) \mathbf{L}(-\sigma_e) \vec{S}_e \quad (6.6)$$

wobei $\hat{\mathbf{M}} \equiv \frac{1}{m_{11}} \mathbf{M}$ auch als reduzierte Müller-Matrix bezeichnet wird.

Nach Würfeln des Streuwinkels θ wird die zugehörige reduzierte Müller-Matrix entweder analytisch berechnet (Petzold-, Rayleigh- oder Henyey-Greenstein-Streuung) oder in tabellierten Werten nachgeschlagen (für Mie- oder Zirus-Streuung). Die Berechnung der Drehwinkel σ_a und σ_e erfolgt anhand Gleichung 2.6.

Bei der Absorption erfolgt lediglich eine Änderung des Gewichtsvektors. Dieser wird mit der Einfach-Streu-Albedo $\omega_0 \equiv \frac{b}{c}$ (b ist der Streukoeffizient und c der Extinktionskoeffizient des Wechselwirkungspartners) multipliziert:

$$\vec{S}' = \omega_0 \vec{S}. \quad (6.7)$$

Das Photon wird also bei einer Absorption nicht vernichtet, sein Gewichtsvektor reduziert sich lediglich (wodurch die Effizienz der Monte-Carlo-Rechnungen erhöht wird). Die Vorgehensweise wird verständlich, interpretiert man das Photon nicht als ein Einzelnes sondern als ein Ensemble ununterscheidbarer Photonen.

6.2.4 Russisches Roulette und Bedeutungsprüfung

Nach erfolgter Wechselwirkung kann der Gewichtsvektor (genauer gesagt wird dessen erste Komponente (im Folgenden Gewicht) inspiziert) sehr klein geworden sein (beispielsweise durch mehrfache Absorption). Ab einer gewissen Gewichtsgröße macht es keinen Sinn mehr solche Photonen weiter zu verfolgen, da der Verwaltungsaufwand sehr hoch ist, die mögliche Änderungen an den Observablen durch dieses Photon jedoch nur noch geringfügig ist. Aus diesem Grund wird nach jeder Absorption überprüft, ob das Gewicht eine vorgegebene Schwelle s unterschritten hat; ist dies der Fall, so wird Russisches Roulette gespielt: Es wird eine gleichverteilte Zufallszahl r aus dem Intervall $[0, 1)$ gewürfelt. Ist $r > 1/x$ mit vorgegebenem, festem $x \in \mathbb{N}$ $x > 1$, wird das Photon terminiert, das heißt der Gewichtsvektor wird zum Nullvektor und das Photon wird nicht weiterverfolgt. Im Gegenzug wird im Falle $r \leq 1/x$ der Gewichtsvektor mit x multipliziert; eines von x Photonen „überlebt“ das Russische Roulette und hat anschließend einen um den Faktor x größeren Gewichtsvektor — die Gesamtenergie ist im Mittel erhalten. Der Schwellwert des Gewichtes kann dabei eine feste kleine Zahl sein oder, wie auch in diesem Monte-Carlo, vom Medium in dem sich die Photonen bewegen abhängen. In der vorliegenden Arbeit ist die kritische Observable die das Wasser verlassende Strahldichte. Darum wird das Russische Roulette so gespielt, dass die Photonen im Mittel fünf Streu- und Absorptionsvorgänge im Wasser überleben. Ist die Einfach-Streu-Albedo des Ozeans (reines Meerwasser und Konstituenten) ω_0 , so wird der Schwellwert s zu

$$s = \begin{cases} 0.05 & \text{für } \omega_0^5 > 0.05 \\ 0.00001 & \text{für } \omega_0^5 < 0.0001 \\ \omega_0^5 & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.8)$$

festgelegt. Der Wert von x wurde auf 10 gesetzt.

Ist das Photongewicht nach erfolgter Wechselwirkung (und möglicherweise erfolgtem Russischen Roulette) ein ausreichend großer Gewichtsvektor, um weiter verfolgt zu werden, so wird das Photon, bevor es im nächsten Schritt wieder bewegt wird, einer sogenannten Bedeutungsprüfung unterzogen⁹. Die Bedeutungsprüfung ist eine Methode, um die Effizienz eines Monte-Carlo-Laufes zu erhöhen. Gibt es in einem mit der

⁹in der englischsprachigen Literatur als *Importance Sampling* bezeichnet

Monte-Carlo-Methode lösbarem Problem eine Observable, die zwar von Interesse ist, zu deren Berechnung aber nur sehr wenige der gestarteten Photonen beitragen (wie hier die Observablen, die aus der das Wasser verlassenden Strahlung berechnet werden), so macht es Sinn, jene Photonen, die zur kritischen Observablen beitragen könnten, zu vervielfältigen. Darum wird nach jeder Wechselwirkung überprüft, ob das Photon ein solches ist, das sich im Wasser befindet und sich Richtung Grenzfläche bewegt. Ist diese Bedingung erstmals für ein Photon erfüllt, so werden n -Kopien (mit $n = 10$ im hier behandelten Problem) dieses Photons erzeugt, die in allen Eigenschaften dem Original entsprechen, nur der Gewichtsvektor wird aus Gründen der Energieerhaltung auf $\vec{g}' = \frac{1}{n}\vec{g}$ gesetzt. Anschließend wird das Original-Photon vernichtet. Die Bedeutungsprüfung wird für jedes Photon nur einmal angewendet. Die Methode erhöht die Wahrscheinlichkeit ein Photon, das zur kritischen Observablen beitragen könnte, zu detektieren.

6.2.5 Beendigung eines Monte-Carlo-Laufes

In einem Monte-Carlo-Lauf wird jeweils nur ein Photon gestartet (aus dem möglicherweise durch den Übergang von einem Medium in das andere oder durch Bedeutungsprüfung n Kopien entstehen) und so lange verfolgt, bis es terminiert wurde. Dies kann einerseits beim Russischen Roulette passieren oder nach dem Bewegen des Photons. Überschreitet die z -Komponente der Position eine der vorgegeben optischen Dicken der beiden Medien Atmosphäre oder Wasser (die optische Dicke der beiden Medien hängt von den Konzentrationen der in ihnen vorhandenen Konstituenten ab; auch das Wasser wird nicht als unendlich tief angenommen) so kann nach Definition keine weitere Wechselwirkung erfolgen; das Photon wird eventuell ein letztes mal detektiert und dann nicht weiter verfolgt. Erst dann wird das nächste Photon gestartet, bis zum schließlich letzten Photon.

Im Monte-Carlo-Programm sind bisher drei verschiedene Abbruchkriterien implementiert. Eine Möglichkeit ist einen Monte-Carlo-Lauf mit einer vorher angegebenen Anzahl N von Photonen, die gestartet werden sollen, durchzuführen. Soll für mehrere Wellenlängen gerechnet werden, so wird bei jeder der Wellenlängen diese feste Zahl von Photonen prozessiert. Die zweite Möglichkeit besteht darin eine Laufzeit t für das Programm vorzugeben. Für jede der n Wellenlängen steht dann die Zeit t/n zur Verfügung, um Photonen zu prozessieren. Diese beiden Möglichkeiten haben den Nachteil, dass sie nicht sensitiv bezüglich der optischen Eigenschaften der Medien, in denen sich die Photonen bewegen, sind und dass die Abbruchbedingungen für alle Wellenlängen gleich sind. Für die Atmosphärenkorrektur ist aber, wie schon erwähnt, die das Wasser verlassende Strahlung die kritische Observable. Diese Strahlung kann im kurzwelligen Bereich noch einen relativ großen Anteil ausmachen, im Roten und nahen Infraroten kann sie jedoch je nach Zusammensetzung des Wassers verschwindend klein sein. Aus diesem Grund wurde eine dritte Abbruchmöglichkeit implementiert: der Benutzer kann für jede Wellenlänge einen kritischen Detektor benennen (im hiesigen Beispiel einen, der Photonen detektiert, die gerade das Wasser

verlassen haben und sich nun in der Atmosphäre aufwärts bewegen) und einen minimal zu erreichenden relativen statistischen Fehler angeben, der sich auf die Nadir-Strahldichte (die sich wie oben angegeben, aus den in der Polkappe des kritischen Detektors registrierten Photonengewichten berechnen lässt) bezieht. Vor dem Start eines neuen Photons wird dann die bisher erreichte Nadir-Strahldichte und ihr zugehöriger Fehler berechnet und abhängig davon entschieden, ob weitere Photonen prozessiert werden müssen.

Dieses Schema ist sehr nützlich, ist die Zusammensetzung des Ozeans bekannt. Im Falle einer Massenproduktion, bei der das Programm nur einmal gestartet wird und dann N -Spektren berechnet werden sollen (die Zusammensetzung der Medien wird dann automatisch variiert, siehe 6.3.3 und 6.5), erweist sich auch dieses Schema als nicht praxistauglich, da die optischen Eigenschaften dem Nutzer vor dem Start unbekannt sind. Aus diesem Grunde wurde das letztgenannte Schema für den Fall der Massenproduktion leicht verändert (derzeit nur für simulierte MERIS-Daten implementiert). Wie gehabt wird für jede Wellenlänge ein kritischer Detektor angegeben. Die zu erreichende relative Genauigkeit wird jedoch vom Programm selbst bestimmt. Zunächst erfolgt eine Schätzung darüber, wie viele Photonen prozessiert werden sollen, bis die zu erreichende Genauigkeit abgeschätzt werden kann. Diese Schätzung nutzt, wie auch schon die Schwelle des Russischen Roulettes, die Einfachstreu-Albedo ω_0 des aktuellen Ozean. Es werden N Photonen prozessiert, mit

$$N = 1000000 \exp(\ln(0.01)\omega_0). \quad (6.9)$$

Wurden diese N Photonen prozessiert, wird die zu erreichende Genauigkeit abgeschätzt. Der kritische Detektor wird ausgelesen und die zugehörige Strahlungsflussdichte E berechnet. Der MERIS-Sensor selbst besitzt nun bei jeder Wellenlänge einen Schwellwert E_{\min} unterhalb derer eintreffende Strahlung keine Änderung des digitalisierten Wertes erfolgt. Im Monte-Carlo-Programm sollen nun solange Photonen bei ein und derselben Wellenlänge gestartet werden, bis keine Änderung des zugehörigen digitalisierten Wertes (würde es sich um wirkliche MERIS-Daten handeln) mehr zu erwarten ist. Dementsprechend wird der relative Fehler F_{rel} [%] mittels

$$F_{\text{rel}} = \begin{cases} 100E_{\min}/E; \\ 100 & \text{für } F_{\text{rel}} > 100 \\ 4 & \text{für } F_{\text{rel}} < 4 \end{cases} \quad (6.10)$$

abgeschätzt. Anschließend wird wie oben beschrieben fortgefahren.

6.3 In der Atmosphäre

Eine Atmosphäre besteht im Monte-Carlo-Programm aus fünfzig Schichten à 1km; jede dieser Schichten enthält einen oder mehrere der in Abschnitt 3 angeführten Wechselwirkungspartner. Der folgende Abschnitt befasst sich näher mit den Mie-Streuern, den Aerosolen. Es wird explizit angegeben welche Aerosol-Modelle implementiert wurden und wie sich für diese die Streu- und Extinktionskoeffizienten und die Müller-Matrizen numerisch berechnen lassen. Abschnitt 6.3.2 stellt diese Eigenschaften für Zirren vor. Schließlich folgt in 6.3.3 eine Beschreibung der Höhenverteilung der maximal möglichen Konzentrationen der Konstituenten der Atmosphäre und wie diese Konzentrationen bei einer Massenproduktion variiert werden.

6.3.1 Aerosole

Wie bereits in Kapitel 3.3 beschrieben, erfolgt die Berechnung der Elemente der Müller-Matrix und der Streu- und Extinktionsparameter für Mie-Streuer numerisch. Es folgen alle notwendigen Angaben, um diese Rechnungen nachzuvollziehen.

Als Grundbausteine der verwendetet Aerosole dienen die folgenden sieben¹⁰: *water-soluble* (wasserlöslich), *dust-like* (staubartig), *soot* (Ruß), *oceanic99* (ozeanisch mit einer relativen Luftfeuchte von 99%), *rural99* (ländlich mit einer relativen Luftfeuchte von 99%), *urban50* (städtisch mit einer relativen Luftfeuchte von 50%) und H_2SO_4 (75%-ige Schwefelsäure). Die Brechungsindizes und Größenverteilungen einiger dieser der Grundbausteine hängt stark von der relativen Luftfeuchte ab. Soweit nicht anders angegeben beziehen sie sich auf eine relative Luftfeuchte von $\leq 70\%$. Für die Berechnungen werden neben den Brechungsindizes die Größenverteilungen der Streuer benötigt; es wird angenommen, dass die hier aufgeführten Bausteine dabei einer der beiden Verteilungen

$$\begin{aligned} \text{Log-Normal-Verteilung: } n(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi} \exp(r_b)} \exp\left(-\frac{1}{2 \exp^2(r_b)} \ln^2\left(\frac{r}{r_0}\right)\right), \\ \text{Gamma-Verteilung: } n(r) &= r_0 r^{P_3} \exp(-r_b r^{P_4}) \end{aligned}$$

genügen. Tabelle 6.1 listet die Parameter der Verteilungen ([57], [58] und [25]) für genannte Bausteine auf; „rmax“ gibt die Obergrenze der Integration der Größenverteilungen und „step“ die Schrittweite der Integration. Die Brechungsindizes dieser Urkomponenten ([57], [58]) folgen in Tabelle 6.2 für einige Wellenlängen λ , die die MERIS-Wellenlängen umschließen (die Umrechnung auf die gewünschten MERIS-Wellenlängen erfolgt mittels linearer Interpolation): Aus obigen Angaben können nun die Streu- und Extinktionskoeffizienten sowie die Matrix-Elemente der Müller-Matrix für die Urkomponenten berechnet werden. Anschließend werden die eigentlich verwendeten

¹⁰die ursprünglichen englischen Namen werden hier beibehalten, da sie ausschließlich englischsprachiger Literatur entnommen wurden.

Tab. 6.1: Parameter zur Berechnung der Müller-Matrizen und Streu- und Extinktionskoeffizienten für verschiedene Aerosole

Komponente	Verteilung	r_0 [μm]	r_b [μm]	P_3	P_4	rmax [μm]	step [μm]
water sol.	Log-Normal	0.500E-02	2.990	0.00	0.00	20.0	0.002
dust-like	Log-Normal	0.500E-00	2.990	0.00	0.00	40.0	0.005
soot	Log-Normal	0.118E-01	2.000	0.00	0.00	30.0	0.005
oceanic99	Log-Normal	7.505E-01	2.512	0.00	0.00	50.0	0.002
rural99	Log-Normal	5.215E-02	2.239	0.00	0.00	50.0	0.002
urban50	Log-Normal	2.563E-02	2.239	0.00	0.00	50.0	0.002
H ₂ SO ₄	Gamma	0.324E-03	18.00	1.00	1.00	4.8	0.001

Tab. 6.2: Brechungsindizes der Aerosole als Funktion der Wellenlänge λ

λ [nm]	water sol.	soot
400.0	1.53+i5.00e-3	1.75+i0.460
450.0	1.53+i5.00e-3	1.75+i0.455
500.0	1.53+i5.00e-3	1.75+i0.450
550.0	1.53+i6.00e-3	1.75+i0.440
600.0	1.53+i6.00e-3	1.75+i0.435
650.0	1.53+i7.00e-3	1.75+i0.435
700.0	1.53+i7.00e-3	1.75+i0.430
750.0	1.53+i8.50e-3	1.75+i0.430
800.0	1.52+i1.00e-2	1.75+i0.430
900.0	1.52+i1.15e-2	1.75+i0.435

λ [nm]	dust-like	oceanic99	rural99	urban50	H ₂ SO ₄
400.0	1.53+i8e-3	1.341+i2.13e-9	1.348+i2.89e-4	1.557+i8.90e-2	1.440 1.00e-8
488.0	1.53+i8e-3	1.337+i1.15e-8	1.345+i2.89e-4	1.557+i8.80e-2	1.432 1.00e-8
514.5	1.53+i8e-3	1.336+i1.26e-8	1.344+i2.89e-4	1.557+i8.80e-2	1.431 1.00e-8
550.0	1.53+i8e-3	1.335+i2.84e-9	1.343+i3.23e-4	1.557+i8.66e-2	1.430 1.00e-8
632.8	1.53+i8e-3	1.334+i1.47e-8	1.342+i3.23e-4	1.557+i8.48e-2	1.429 1.47e-8
694.3	1.53+i8e-3	1.333+i3.12e-8	1.341+i3.57e-4	1.557+i8.53e-2	1.428 1.99e-8
860.0	1.52+i8e-3	1.330+i3.55e-7	1.338+i5.29e-4	1.549+i8.79e-2	1.425 1.79e-7
1060.0	1.52+i8e-3	1.327+i6.88e-6	1.335+i7.04e-4	1.549+i9.23e-2	1.420 1.50e-6

Aerosole aus diesen Grundbausteinen zusammengesetzt; dabei wurden nach [53] folgende Typen ausgewählt:

- stratosphärisches Aerosol: 100% H₂SO₄
- urbanes Aerosol: 100% urban50
- maritimes Aerosol: 99% rural99, 1% oceanic99 (Teilchenzahldichteanteile)
- kontinentales Aerosol: 29% water sol., 70% dust-like, 1% soot (Volumenanteile)

Die berechneten Koeffizienten sind dabei normiert bezüglich der Extinktion bei 550nm, das heißt ist das Extinktionsprofil bei dieser Normierungswellenlänge gegeben, können

die Profile bei anderen Wellenlängen berechnet werden. In den Abbildungen 6.4 und 6.5 werden für die oben definierten vier zusammengesetzten Aerosoltypen die unabgängigen Elemente der Müller-Matrix als Funktion des Streuwinkels θ für jeweils zwei Wellenlängen gezeigt. Die wellenlängenabhängigen Streu- und Extinktionskoeffizienten der zusammengesetzten Aerosoltypen werden in Abschnitt 6.3.3 aufgelistet (siehe Tabelle 6.5), ihre Höhenverteilung folgt in Tabelle 6.3. Die zwei bodennahen Aerosole entsprechen in ihren Brechungsindizes und Größenverteilungen relativen Luftfeuchten von 99% (maritimes Aerosol) und von 50% (urbanes Aerosol). Durch zufällige Auswahl der Konzentrationen dieser Aerosole aus einem vorgegebenen Bereich (siehe Abschnitt 6.3.3) werden in den Monte-Carlo Rechnungen auch Zwischenstufen zwischen dem maritimen, feuchten Aerosol mit niedrigem Ångström-Koeffizienten und dem urbanen, trockenen Aerosol mit hohem Ångström-Koeffizienten simuliert. Die zwei übrigen zusammengesetzten Aerosole, deren maximale Konzentration sehr viel geringer ist als die der bodennahen, entsprechen in ihren Eigenschaften relativen Luftfeuchten $\leq 70\%$.

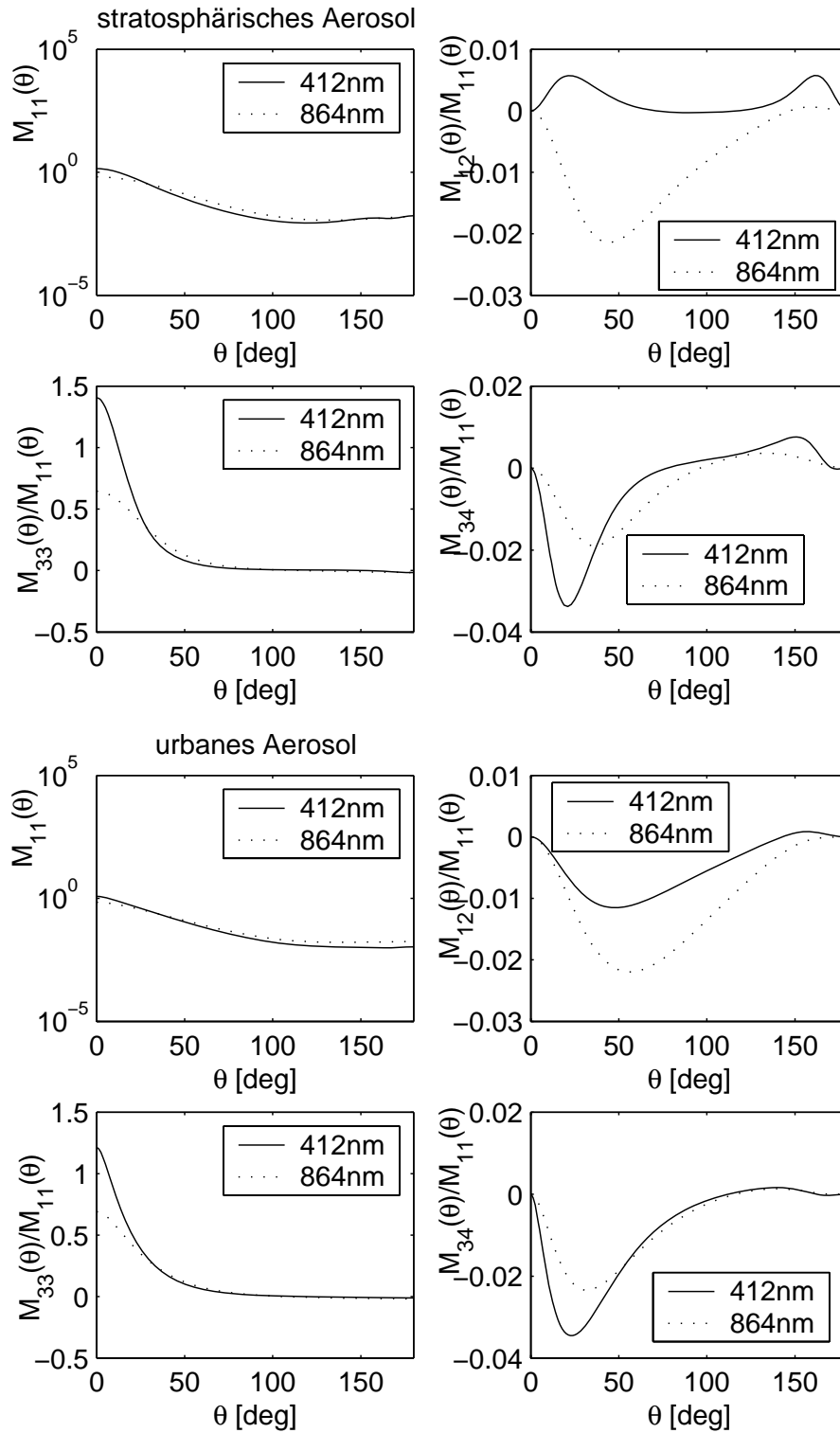


Abb. 6.4: Die Phasenfunktion M_{11} und die übrigen bezüglich der Phasenfunktion normalisierten Elemente der Müller-Matrix für Streuung an stratosphärischem und urbanem Aerosol als Funktion des Streuwinkels θ .

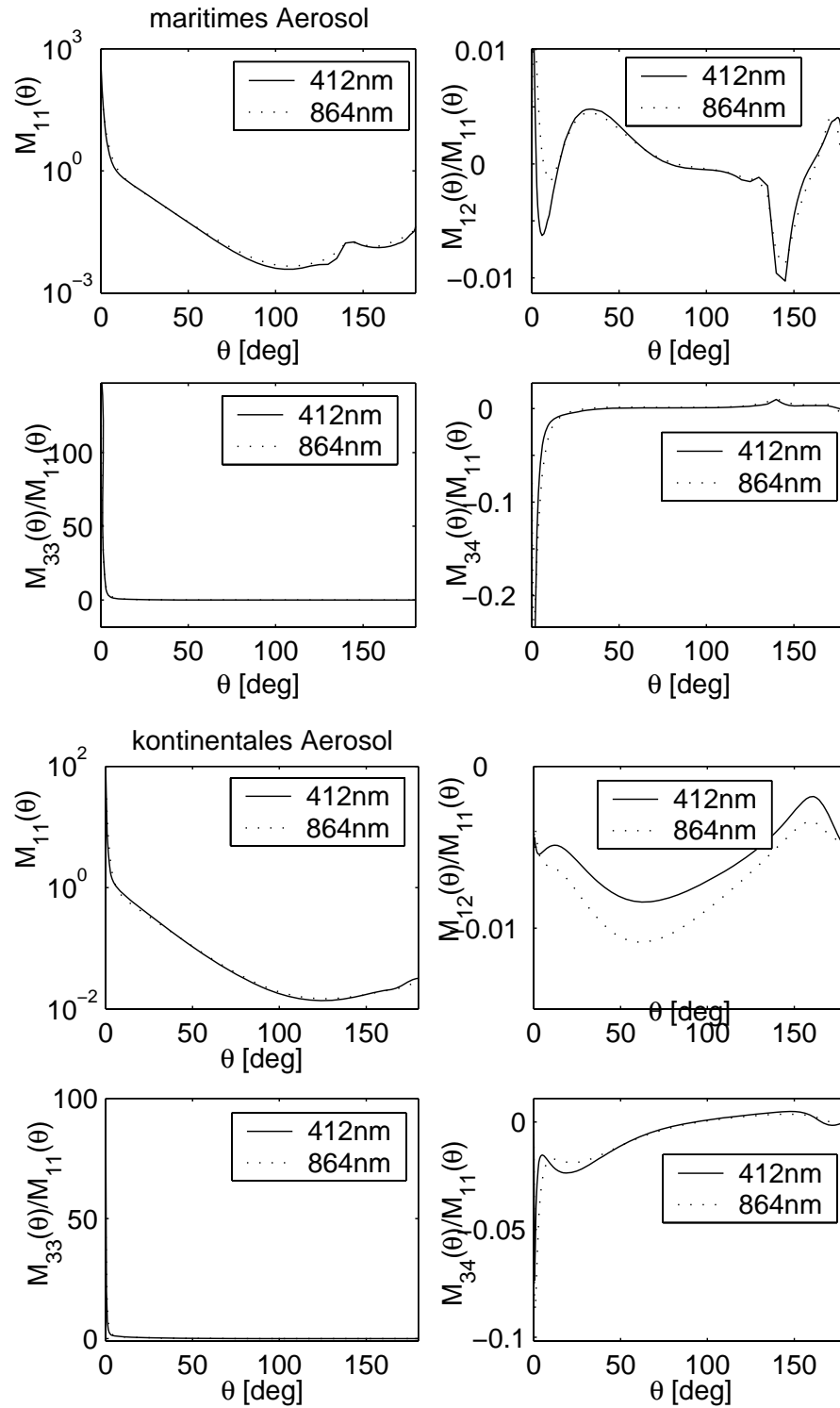


Abb. 6.5: Die Phasenfunktion M_{11} und die übrigen bezüglich der Phasenfunktion normalisierten Elemente der Müller-Matrix für Streuung an maritimem und kontinentalem Aerosol als Funktion des Streuwinkels θ .

6.3.2 Zirren

Die Streuung an Zirren wird, wie in Kapitel 3.5 bereits erwähnt, als Streuung an zufällig verteilten triadischen Koch-Funktion der Stufe zwei genähert. Die mittels eines *Ray-Tracing* Verfahrens, das außer Form und Größe der Streukörper auch ihre Brechungsindizes berücksichtigt, bestimmten Matrixelemente der Müller-Matrix [32], [33] wurden übernommen. Abbildung 6.6 zeigt die resultierende Phasenfunktion als Funktion des Streuwinkels θ . Die dargestellte Phasenfunktion berücksichtigt sowohl die Brechung als auch die Beugung an den Eiskristallen. Zusätzlich gezeigt werden die übrigen unabhängigen Matrixelemente; sie wurden bezüglich der Phasenfunktion normiert.

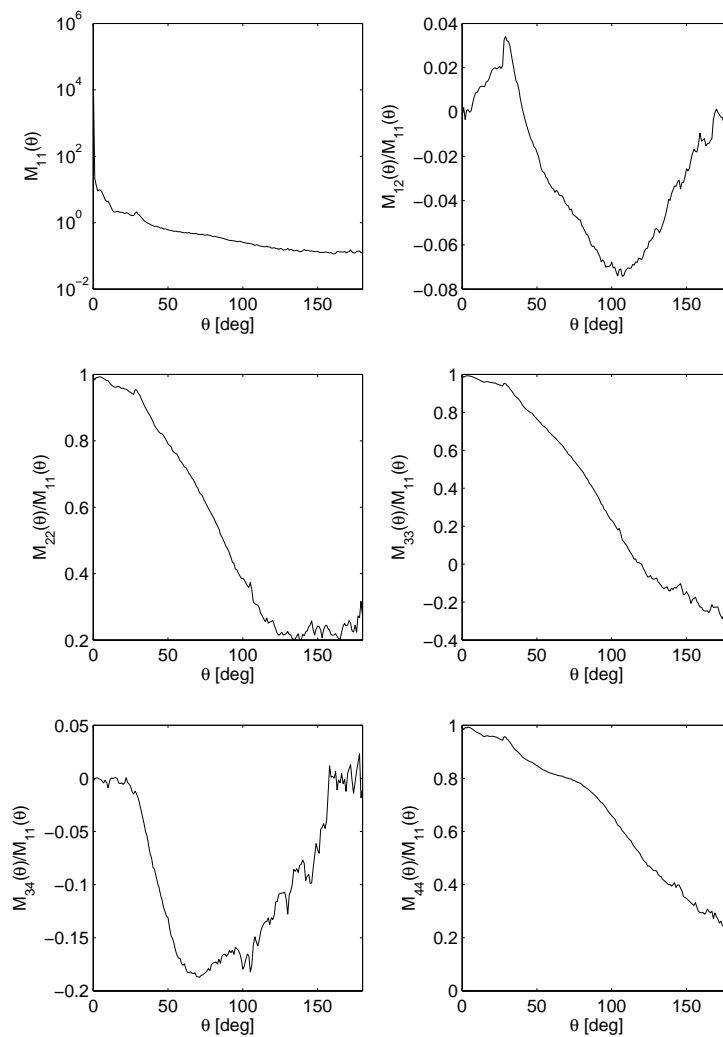


Abb. 6.6: Die Phasenfunktion M_{11} und die übrigen bezüglich der Phasenfunktion normierten Elemente der Müller-Matrix für Streuung an Zirren als Funktion des Streuwinkels θ .

Aus den Wirkungsquerschnitten der verschiedenen Prozesse folgen die Streu- und Extinktionskoeffizienten. Sie werden im folgenden Abschnitt in Tabelle 6.5 für die relevanten Wellenlängen angegeben. Absorption tritt erst für Wellenlängen größer 600 nm auf.

6.3.3 Höhenverteilung

Tabelle 6.3 zeigt die Höhenprofile aller Wechselwirkungspartner der Atmosphäre; für Ozon wird die äquivalente Dicke in cm/km angegeben, für alle anderen die Extinktion in 1/km für eine Wellenlänge von 550nm. Die Extinktionsprofile für Rayleigh-Streuung und Absorption durch Ozon sind [59] entnommen, das für Zirren aus [60], die übrigen entstammen [57].

Die angegebenen Höhenprofile beziehen sich auf die als maximal möglich angenommenen Konzentrationen von Aerosolen und Zirren (in Anlehnung an [53]). Die Profile für Rayleigh-Streuer und Ozon entsprechen denen einer Standard-Atmosphäre (normaler Luftdruck mit mittlerer Ozon-Konzentration). Bei der Massenproduktion von Spektren mit dem Monte-Carlo-Programm werden die Höhenverteilungen für Rayleigh-Streuer und unverändert bei jedem Spektrum übernommen (wie sich von MERIS gemessene Spektren, die möglicherweise nicht bei den angegebenen Normal-Bedingungen aufgenommen wurden, auf eine Standard Rayleigh-Atmosphäre mit mittlerem Ozon-Gehalt zurückrechnen lassen, wird in Abschnitt 8.1 behandelt) – somit können zwei freie Parameter in den Simulationen beseitigt werden. Für die vier Aerosole und die Zirren jedoch wird zu Beginn jedes Laufes (jedes neuen Spektrums) eine neue Konzentration gemäß $g_i = r$ mit einer gleichverteilten Zufallszahl $0 \leq r < 1$ gewürfelt. Mit den so bestimmten Gewichtungsfaktoren g_i wird dann das jeweils zugehörige Profil multipliziert.

Nun fehlt nur noch ein Schritt, um Wechselwirkungsprozesse in der Atmosphäre, wie im einleitenden Teil dieses Kapitels besprochen, durchführen zu können, nämlich die Umrechnung der Extinktions- und Streuprofile von der Normierungswellenlänge 550nm auf alle von MERIS gemessenen Wellenlängen: Um die Extinktions- (beziehungsweise Absorptions-) Profile für das Ozon bei allen gewünschten Wellenlängen zu erhalten, müssen noch die Extinktions- (Absorptions-)Koeffizienten bei diesen Wellenlängen bekannt sein. Tabelle 6.4 listet die aus [61] entnommenen Koeffizienten für einige Wellenlängen λ auf, die die MERIS-Wellenlängen umschließen; die Umrechnung auf MERIS-Wellenlängen erfolgt mittels linearer Interpolation.

Für Rayleigh-Streuung folgen die Extinktions- (beziehungsweise Streu-) Profile mittels der Formel

$$b(\lambda) = b(550 \text{ nm}) \left(\frac{\lambda[\text{nm}]}{550 \text{ nm}} \right)^{-4.09}.$$

Für die Aerosole und Zirren erfolgt die Umrechnung der Streu- und Extinktionsprofile aus den numerisch berechneten Streu- und Extinktionskoeffizienten ($b(\lambda)$ beziehungsweise $c(\lambda)$), die bezüglich der Extinktion bei 550 nm normiert wurden (siehe

Tab. 6.3: Höhenprofile der Wechselwirkungspartner in der Atmosphäre

km	Extinktion in 1/km bei 550nm						Ozon
	Zirren	strato. Aerosol	urbanes Aerosol	mari. Aerosol	kontinent. Aerosol	Rayleigh	äquiv. Dicke cm/km
1	–	–	0.15	0.1	–	1.110541e-2	3.410e-3
2	–	–	0.15	0.1	–	1.006780e-2	3.095e-3
3	–	–	–	–	0.0025	9.104078e-3	2.715e-3
4	–	–	–	–	0.0025	8.214039e-3	2.380e-3
5	–	–	–	–	0.0025	7.392173e-3	2.235e-3
6	–	–	–	–	0.0025	6.635002e-3	2.185e-3
7	–	–	–	–	0.0025	5.938984e-3	2.195e-3
8	0.03	–	–	–	0.0025	5.300630e-3	2.255e-3
9	0.03	–	–	–	0.0025	4.715876e-3	2.545e-3
10	0.03	–	–	–	0.0025	4.181814e-3	3.155e-3
11	–	–	–	–	0.0025	3.695856e-3	4.050e-3
12	–	–	–	–	0.0025	3.210340e-3	5.405e-3
13	–	2.18e-4	–	–	–	2.744262e-3	7.330e-3
14	–	2.18e-4	–	–	–	2.345345e-3	9.010e-3
15	–	2.18e-4	–	–	–	2.004854e-3	9.755e-3
16	–	2.18e-4	–	–	–	1.713349e-3	1.012e-2
17	–	2.18e-4	–	–	–	1.464413e-3	1.070e-2
18	–	2.18e-4	–	–	–	1.251915e-3	1.165e-2
19	–	2.18e-4	–	–	–	1.070290e-3	1.320e-2
20	–	2.18e-4	–	–	–	9.150397e-4	1.530e-2
21	–	1.9952e-4	–	–	–	7.807289e-4	1.740e-2
22	–	1.8104e-4	–	–	–	6.650719e-4	1.905e-2
23	–	1.6256e-4	–	–	–	5.669035e-4	1.975e-2
24	–	1.4408e-4	–	–	–	4.835314e-4	1.955e-2
25	–	1.2560e-4	–	–	–	4.127571e-4	1.865e-2
26	–	1.0712e-4	–	–	–	3.526217e-4	1.715e-2
27	–	8.8640e-5	–	–	–	3.014873e-4	1.520e-2
28	–	7.0160e-5	–	–	–	2.579437e-4	1.320e-2
29	–	5.1680e-5	–	–	–	2.208535e-4	1.150e-2
30	–	3.3200e-5	–	–	–	1.892577e-4	9.865e-3
31	–	2.45e-5	–	–	–	1.622587e-4	8.480e-3
32	–	2.45e-5	–	–	–	1.392136e-4	7.375e-3
33	–	2.45e-5	–	–	–	1.191865e-4	6.320e-3
34	–	2.45e-5	–	–	–	1.017963e-4	5.200e-3
35	–	2.45e-5	–	–	–	8.705372e-5	4.445e-3
36	–	8.0e-6	–	–	–	7.458402e-5	3.960e-3
37	–	8.0e-6	–	–	–	6.401803e-5	3.315e-3
38	–	8.0e-6	–	–	–	5.505073e-5	2.775e-3
39	–	8.0e-6	–	–	–	4.742215e-5	2.350e-3
40	–	8.0e-6	–	–	–	4.091794e-5	2.015e-3
41	–	4.02e-6	–	–	–	3.536328e-5	1.690e-3
42	–	4.02e-6	–	–	–	3.061343e-5	1.355e-3
43	–	4.02e-6	–	–	–	2.654833e-5	1.060e-3
44	–	4.02e-6	–	–	–	2.305756e-5	8.370e-4
45	–	4.02e-6	–	–	–	2.005726e-5	6.600e-4
46	–	2.1e-6	–	–	–	1.747111e-5	5.110e-4
47	–	2.1e-6	–	–	–	1.524082e-5	3.995e-4
48	–	2.1e-6	–	–	–	1.335767e-5	3.160e-4
49	–	2.1e-6	–	–	–	1.177261e-5	2.510e-4
50	–	2.1e-6	–	–	–	1.039769e-5	2.045e-4

Tabelle 6.5). Für die Aerosole folgen diese aus den Mie-Rechnungen, die für Zirren entstammen [31].

Tab. 6.4: Ozon Absorption nach Vigroux (1013 hPa, 18°C)

λ [nm]	400	450	500	550	600	650	700	800	900
a [1/cm]	0.0	0.0035	0.0345	0.092	0.132	0.062	0.023	0.01	0.0

Tab. 6.5: Normalisierte Streu- und Extinktionskoeffizienten der Aerosole und Zirren als Funktion der Wellenlänge λ

λ [nm]	Zirren		strato.		urban		maritim		kontinent.	
	$\frac{c(\lambda)}{c(550)}$	$\frac{b(\lambda)}{b(550)}$	$\frac{c(\lambda)}{c(550)}$	$\frac{b(\lambda)}{b(550)}$	$\frac{c(\lambda)}{c(550)}$	$\frac{b(\lambda)}{b(550)}$	$\frac{c(\lambda)}{c(550)}$	$\frac{b(\lambda)}{b(550)}$	$\frac{c(\lambda)}{c(550)}$	$\frac{b(\lambda)}{b(550)}$
412.33	1.00530	1.00530	1.3459	1.3459	1.3367	0.8886	1.0342	1.0336	1.3533	1.2136
442.27	1.00380	1.00380	1.2693	1.2693	1.2532	0.8326	1.0259	1.0253	1.2613	1.1300
489.67	1.00150	1.00150	1.1473	1.1473	1.1337	0.7499	1.0136	1.0131	1.1342	1.0143
509.62	1.00150	1.00150	1.0975	1.0975	1.0876	0.7176	1.0088	1.0084	1.0866	0.9706
559.49	1.00000	1.00000	0.9782	0.9782	0.9807	0.6468	0.9981	0.9976	0.9811	0.8694
619.37	0.99848	0.99847	0.8486	0.8486	0.8694	0.5712	0.9876	0.9871	0.8746	0.7713
664.31	0.99773	0.99771	0.7602	0.7602	0.7973	0.5197	0.9808	0.9804	0.8070	0.7070
708.06	0.99698	0.99694	0.6822	0.6822	0.7349	0.4741	0.9752	0.9748	0.7486	0.6534
753.11	0.99624	0.99618	0.6100	0.6100	0.6756	0.4303	0.9701	0.9697	0.6969	0.6015
778.15	0.99551	0.99542	0.5732	0.5732	0.6449	0.4074	0.9677	0.9673	0.6640	0.5689
864.62	0.99486	0.99466	0.4630	0.4630	0.5531	0.3393	0.9609	0.9605	0.5821	0.4904

6.4 An der Wasseroberfläche

In Kapitel 4 wurden die physikalischen Grundlagen der Transmission und Reflektion an einer vom Wind aufgerauten Wasseroberfläche hergeleitet. Hier folgt nun die Implementierung dieser Vorgänge im Monte-Carlo-Programm. Hat ein Photon die Grenzfläche zwischen Atmosphäre und Ozean überschritten, so wird zunächst eine Flächennormale gewürfelt; die Verteilung der Normalen wurde bereits im Abschnitt 4.2 beschrieben, es folgt in 6.4.1 die Umsetzung im Programm. Die Windgeschwindigkeit v (in [m/s]) kann vorab gewählt werden oder kann im Falle der Massenproduktion für jedes Spektrum gemäß $v = 8r$ mit r eine gleichverteilte Zufallszahl $0 \leq r < 1$ neu gewürfelt werden, das heißt während der Massenproduktion galt $v_{\max} < 8$ m/s.

Anschließend werden zwei neue Photonen, ein reflektiertes und ein transmittiertes, erzeugt, deren Stokes- oder Gewichtsvektoren sich, wie nachfolgend beschrieben wird, berechnen lassen. Zur Berechnung der zugehörigen Müller-Matrizen bedarf es nur noch der Kenntnis der wellenlängenabhängigen Brechungsindizes n . [25] folgend werden diese für die MERIS-Kanäle bei Wellenlängen λ in Tabelle 6.6 angegeben.

Tab. 6.6: Brechungsindex n des Wassers als Funktion der Wellenlänge λ

λ [nm]	n
412.33	1.349
442.27	1.347
489.67	1.344
509.62	1.343
559.49	1.341
619.37	1.339
664.31	1.338
708.06	1.337
753.11	1.336
778.15	1.336
864.62	1.334

In Abschnitt 6.4.2 erfolgt die Berechnung der Positionen und Flugrichtungen der beiden neu erzeugten Photonen; das ursprünglich einfallende Photon wird hernach vernichtet.

6.4.1 Realisierung der rauen Wasseroberfläche

Die im Abschnitt 4.2 hergeleitete bivariate Verteilungsfunktion $\hat{p}(\vartheta_n, \phi_{\text{diff}})$ (siehe Gleichung 4.13) kann direkt genutzt werden, um eine Flächennormale zu würfeln. Dies hat jedoch den Nachteil, dass \hat{p} nicht trivial integrierbar ist, somit numerisch nur durch Nachschlagetabellen realisiert werden kann, in die man Paare von ϑ_n und ϕ_{diff} schreibt mit ihrer zugehörigen Wahrscheinlichkeit – sprich durch Diskretisierung.

Für senkrecht einfallende Photonen hingegen kann die kumulierte Phasenfunktion $P(\vartheta_n)$ im Monte Carlo direkt genutzt werden, um analytisch einen Winkel ϑ_n der Normalen mit der z -Achse zu würfeln. (Der Winkel ϕ_{diff} wird hier einfach gleichverteilt auf dem Intervall $[0, 2\pi)$ gewürfelt, da die bivariate Verteilung $\frac{1}{2\pi} p(\vartheta_n)$, nicht explizit von ϕ_{diff} abhängt.) Bezeichnet $r \in (0, 1]$ eine gleichverteilte Zufallszahl, so gilt:

$$\begin{aligned}
 r &\equiv \int_{\frac{\pi}{2}}^{\vartheta_n} p(\hat{\vartheta}_n) d\hat{\vartheta}_n \\
 r &= \left[\exp \left(- \frac{\tan^2(\hat{\vartheta}_n)}{\sigma^2} \right) \right]_{\frac{\pi}{2}}^{\vartheta_n} = \exp \left(- \frac{\tan^2(\vartheta_n)}{\sigma^2} \right) \\
 \Rightarrow \vartheta_n &= \arctan \sqrt{-\sigma^2 \ln r}.
 \end{aligned}$$

Das Argument des Arkustangens ist dabei immer größer Null, das heißt, die Winkel ϑ_n liegen im Wertebereich $[0, \frac{\pi}{2})$. Für ruhige See ($\sigma = 0$) soll die Normale stets antiparallel zur z -Achse liegen, also $\vartheta_n \stackrel{!}{=} 0$ für $\sigma = 0$ gelten. Somit gilt:

$$\vartheta_n = \pi - \arctan \sqrt{-\sigma^2 \ln r}. \quad (6.11)$$

Dieses Schema kann nun gemäß 6.1 auch generell angewandt werden. Dabei ist jedoch zu beachten, dass Paare von gewürfelten Werten $(\vartheta_n, \phi_{\text{diff}})$, die zu einem unphysikalischen Einfallswinkel $\vartheta_e \geq \frac{\pi}{2}$ führen, *i.e.* $(\vartheta_n, \phi_{\text{diff}}) \notin G$ verworfen werden müssen und das Würfeln wiederholt werden muss, d.h. die Normierungskonstante M muss auf dem Gebiet G berechnet werden

$$M = \int \int_G p(\vartheta_n) d\vartheta_n d\phi_{\text{diff}}.$$

und gewürfelt wird anhand der Verteilung \hat{p}

$$\hat{p}(\vartheta_n) d\vartheta_n d\phi_{\text{diff}} = \begin{cases} \frac{p(\vartheta_n)}{M} d\vartheta_n d\phi_{\text{diff}} & : \vartheta_e \in [\frac{\pi}{2}, \pi] \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases} \quad (6.12)$$

Nachdem auf diese Weise eine Normale gewürfelt wurde, muss noch der Gewichtsvektor \vec{S} des beteiligten Photons gemäß Gleichung 6.1 geändert werden:

$$\begin{aligned} \vec{S}' &= \frac{\hat{p}(\vartheta_n, \phi_{\text{diff}})}{\hat{p}(\vartheta_n)} \vec{S} \\ &= \frac{M}{N} \frac{\cos(\vartheta_e)}{\cos(\vartheta_n)} \vec{S}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Der Faktor $\frac{\cos(\vartheta_e)}{\cos(\vartheta_n)}$ ist direkt verfügbar, nachdem eine Normale gewürfelt wurde; der Faktor $c = \frac{M}{N}$ jedoch, der von der z -Komponente der Photonflugrichtung ϑ_p abhängt, muss separat berechnet werden.

Entgegen den üblicherweise verwendeten Nachschlagetabellen wurde hier ein neuer Ansatz entwickelt: ein Neuronales Netz (siehe Kapitel 7) wurde darauf trainiert, zu gegebenem ϑ_p und gegebener Breite der Verteilung σ den Faktor $\frac{1}{c} \in [0, 1]$ zu berechnen. Eine detaillierte Beschreibung dieses Netzes findet sich in Kapitel 7.3.3.

6.4.2 Position und Richtung des transmittierten und reflektierten Photons

Nachdem die Gewichtsvektoren des reflektierten und transmittierten Photons berechnet wurden, fehlt nun noch die Herleitung der Positionen und Richtungen dieser beiden Photonen. Die Richtungen ergeben sich aus den physikalischen Betrachtungen in Kapitel 4. Sei wiederum $n \equiv \frac{n_t}{n_e}$ der Quotient der Brechungsindizes beim Übergang von einem Medium mit Brechungsindex n_e in eines mit dem Index n_t , so folgt aus dem Snellschen Brechungsgesetz 4.2:

$$\cos \vartheta_t = \sqrt{1 - \frac{1}{n^2} \sin^2 \vartheta_e} \quad (6.14)$$

Mit der Flächennormalen \vec{n} folgt dann

$$\begin{aligned} \vec{r}_t &= \frac{1}{n} (\vec{r}_e - \cos \vartheta_e \vec{n}) \mp \cos \vartheta_t \vec{n}, \\ \vec{r}_r &= \vec{r}_e - 2 \cos \vartheta_e \vec{n}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

Dabei gilt in der Gleichung für die Flugrichtung des transmittierten Photons das obige Vorzeichen für den Übergang von der Atmosphäre in den Ozean und das untere Vorzeichen für den umgekehrten Übergang.

Um die neuen Wechselwirkungspunkte zu bestimmen, wird berechnet, wo das transmittierte und reflektierte Photon gelandet wären, stünde ihnen jene freie Weglänge zur Verfügung, die dem Weg entspricht, den das einfallende Photon im neuen Medium noch zurückgelegt hatte, nachdem es die Grenzfläche passierte. Der im ursprünglichen Medium zurückgelegte Weg δ_e und der nach dem Passieren der Grenzfläche im neuen Medium zurückgelegte Weg δ_t berechnen sich aus der alten z_e^{alt} (vor dem Eindringen in das neue Medium) und der neuen z_e^{neu} z -Komponente der Position und aus der z -Komponente der Flugrichtung r_{ez} des einfallenden Photons zu:

$$\begin{aligned}\delta_e &= -\frac{z_e^{\text{alt}}}{r_{ez}}, \\ \delta_t &= \frac{z_e^{\text{neu}}}{r_{ez}}.\end{aligned}$$

Daraus folgen die Positionen des reflektierten und transmittierten Photons:

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} x_{tx} \\ x_{ty} \\ x_{tz} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_{ex}^{\text{alt}} + \delta_e r_{ex} + \delta_t r_{tx} \\ x_{ey}^{\text{alt}} + \delta_e r_{ey} + \delta_t r_{ty} \\ \delta_t r_{tz} \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} x_{rx} \\ x_{ry} \\ x_{rz} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} x_{ex}^{\text{alt}} + \delta_e r_{ex} + \delta_t r_{rx} \\ x_{ey}^{\text{alt}} + \delta_e r_{ey} + \delta_t r_{ry} \\ \delta_t r_{rz} \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (6.16)$$

6.5 Im Ozean

Ein Ozean besteht im Monte-Carlo-Programm aus einer homogenen Schicht, deren optische Dicke einer räumlichen Tiefe von 100 Meter entspricht. Mögliche Wechselwirkungspartner in dieser Schicht sind das reine Wasser und ein aus den Konstituenten Gelbstoff (reiner Absorber), Chlorophyll (reiner Streuer), Schwebstoff und einem weißen Streuer zusammengesetzter Partner. Die Auswahl eines Wechselwirkungspartners und die Wechselwirkung selbst erfolgt, wie in 6.2.3 beschrieben. Bei einer Streuung am reinen Wasser wird die Müller-Matrix für Rayleigh-Streuung mit einem Depolarisierungsfaktor von $d = 0.09$ und bei einer Streuung an den Konstituenten die in 5.3 angegebene Müller-Matrix für Petzold-Streuung verwendet. Der folgende Abschnitt beschreibt, wie im Monte-Carlo-Programm eine bestimmte Zusammensetzung an Konstituenten erfolgt und wie die wellenlängenabhängigen Streu- und Extinktionskoeffizienten berechnet werden.

6.5.1 Biooptisches Modell

Für die Wechselwirkung eines Photons mit einem der beiden möglichen Wechselwirkungspartner im Wasser werden noch die Streu- und Extinktionskoeffizienten benötigt; einerseits um die Absorption durchführen zu können und andererseits erfolgt ja die Auswahl eines Wechselwirkungspartners gemäß seines Anteils an der Gesamtextinktion. Die wellenlängenabhängigen Absorptionskoeffizienten a für das reine Wasser wurden aus [25] entnommen und werden in Tabelle 6.7 aufgelistet.

Die Berechnung der zugehörigen Streukoeffizienten b erfolgt gemäß [62]

$$b(\lambda) = 0.00288 \left(\frac{\lambda}{500.0} \right)^{-4.32}, \quad (6.17)$$

wobei die Wellenlänge λ in Nanometern einzusetzen ist.

Für die Konstituenten wird zunächst für jeden von ihnen eine gewisse Konzentration festgelegt. Dies kann einerseits mit fest vorgegebene Werten erfolgen oder aber, wie im Falle der Produktion von Spektren für das Training der Neuronalen Netze, die Konzentrationen werden gemäß eines im Folgenden vorgestellten biooptischen Modells für jeden Lauf neu gewürfelt. Das biooptische Modell entspricht jenem, das auch zur Erzeugung des Trainingsdatensatzes für das operationell eingesetzte Neuronale Netz zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen verwendet wurde [41]. Dadurch wird die Vergleichbarkeit des hier entwickelten und des operationellen Algorithmus (siehe Kapitel 8.3) sichergestellt.

Tab. 6.7: Absorptionskoeffizient a von Wassers als Funktion der Wellenlänge λ

λ [nm]	a [1/m]
412.33	4.597e-3
442.27	6.884e-3
489.67	1.492e-2
509.62	3.250e-2
559.49	6.167e-2
619.37	2.746e-1
664.31	4.263e-1
708.06	8.147e-1
753.11	2.298
778.15	2.710
864.62	4.605

Die Streu- und Extinktionskoeffizienten der Wasserinhaltsstoffe bei 442 nm sollen auch gewisse Maximal- und Minimalwerte nicht über- beziehungsweise nicht unterschreiten. Bezeichnen a_G , a_S und a_C die Absorptionskoeffizienten für Gelbstoff, Schwebstoff und Chlorophyll und b_S und b_W die Streukoeffizienten für Schwebstoff und den weißen Streuer jeweils bei 442 nm, soll gelten:

$$\begin{aligned}
\min(a_G) &= 0.005, \\
\max(a_G) &= 5.0, \\
\min(b_S) &= 0.005, \\
\max(b_S) &= 30.0, \\
\min(a_C) &= 0.001, \\
\max(a_C) &= 2.0, \\
\min(b_W) &= 0.005, \\
\max(b_W) &= 30.0.
\end{aligned}$$

Die Extinktionskoeffizienten der reinen Absorber Gelbstoff und Chlorophyll und des reinen weißen Streuers lassen sich dann mittels

$$\begin{aligned}
a_G &= \exp \left(\ln(\min(a_G)) + r \ln \left(\frac{\max(a_G)}{\min(a_G)} \right) \right), \\
a_C &= \exp \left(\ln(\min(a_C)) + r \ln \left(\frac{\max(a_C)}{\min(a_C)} \right) \right), \\
b_W &= \exp \left(\ln(\min(b_W)) + r \ln \left(\frac{\max(b_W)}{\min(b_W)} \right) \right)
\end{aligned}$$

würfeln. Dabei ist r eine gleichverteilte Zufallszahl mit $0 \leq r < 1$.

Für den Streukoeffizienten von Schwebstoff bei 442 nm wird die Hilfsgröße \tilde{b}_S gemäß

$$\tilde{b}_S = \begin{cases} \min(b_S) & \text{für } 0.25 a_C < \min(b_S) \\ 0.25 a_C & \text{sonst} \end{cases} \quad (6.18)$$

gesetzt; anschließend können auch der Streu- und Absorptionskoeffizient bei 442 nm für Schwebstoff berechnet werden:

$$\begin{aligned}
b_S &= \exp \left(\ln(\tilde{b}_S) + r \ln \left(\frac{\max(b_S)}{\tilde{b}_S} \right) \right), \\
a_S &= 0.1 b_S + 0.03 \rho b_S.
\end{aligned}$$

Dabei ist r wiederum eine gleichverteilte und ρ eine normalverteilte Zufallszahl mit Mittelwert $a = 0$ und Standardabweichung $\sigma = 1$.

Diese Koeffizienten bei 442 nm lassen sich auch direkt in Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe beziehungsweise im Falle von Gelbstoff in Absorption umrechnen. Dazu werden die empirischen Formeln

$$\begin{aligned}
\text{Chlorophyll [mg/m}^3\text{]} k_C &= 26.212 (a_C)^{0.77135} \frac{\text{mg}}{\text{m}^3}, \\
\text{Schwebstoff [g/m}^3\text{]} k_S &= 1.73 (b_S + b_W) \frac{\text{g}}{\text{m}^3}, \\
\text{Gelbstoff Absorption [1/m]} k_G &= (a_G + a_S) \frac{1}{\text{m}}
\end{aligned} \quad (6.19)$$

benutzt ([63]).

Zur Umrechnung der Koeffizienten bei 442 nm auf andere Wellenlängen werden spektrale Exponenten ε herangezogen, deren Mittelwerte und Standardabweichungen zu

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon(a_G) \rangle &= 0.014, \\ \langle \varepsilon(a_S) \rangle &= 0.008, \\ \langle \varepsilon(b_S) \rangle &= 0.4, \\ \sigma(\varepsilon(a_G)) &= 0.002, \\ \sigma(\varepsilon(a_S)) &= 0.005, \\ \sigma(\varepsilon(b_S)) &= 0.2.\end{aligned}$$

angenommen werden. Diese Daten, wie auch die unten angeführten Chlorophyll-Absorptionsspektren, basieren auf Analysen von Wasserproben aus der Nordsee, die zur Entwicklung des biooptischen Modells für die operationelle Ableitung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen [41] durchgeführt wurden. Die eigentlichen spektralen Exponenten werden daraus gemäß

$$\begin{aligned}\varepsilon(a_G) &= \langle \varepsilon(a_G) \rangle + \rho \sigma(\varepsilon(a_G)), \\ \varepsilon(a_S) &= \langle \varepsilon(a_S) \rangle + \rho \sigma(\varepsilon(a_S)), \\ \varepsilon(b_S) &= \langle \varepsilon(b_S) \rangle + \rho \sigma(\varepsilon(b_S))\end{aligned}$$

gewürfelt, dabei ist ρ wieder eine normalverteilte Zufallszahl. Damit erfolgt eine Umrechnung der Streu- und Absorptionskoeffizienten von 442 nm auf andere Wellenlängen λ (in nm):

$$\begin{aligned}a_G(\lambda) &= \exp(-\varepsilon(a_G)(\lambda - 442.0)), \\ a_S(\lambda) &= \exp(-\varepsilon(a_S)(\lambda - 442.0)), \\ b_S(\lambda) &= \left(\frac{\lambda}{442.0} \right)^{\varepsilon(b_S)}.\end{aligned}$$

Die Wellenlängenabhängigkeit des weißen Streuers ist trivial durch $b_W(\lambda) = 1$ gegeben. Für die Absorption durch Chlorophyll hingegen wird eine Datei, die 222 gemessene Absorptionsspektren (angegeben bei den MERIS-Wellenlängen) enthält, eingelesen und daraus zufällig ein Spektrum ausgewählt. Die Spektren wurden wie oben erwähnt während mehrerer Validationsfahrten in der Nordsee gemessen und umfassen somit ein breites Spektrum der dort auftretenden Phytoplanktonarten.

Der Streu- und Extinktionskoeffizient für die Gesamtheit der Konstituenten ergibt sich aus der Summe der Einzelkoeffizienten:

$$\begin{aligned}a(\lambda) &= a_G(\lambda) + a_S(\lambda) + a_C(\lambda) \\ b(\lambda) &= b_S(\lambda) + b_W(\lambda).\end{aligned}\tag{6.20}$$

Tab. 6.8: Petzold–Phasenfunktion $p(\theta)$ als Funktion des Streuwinkels θ

θ [°]	$p(\theta)$ [1/sr]	θ [°]	$p(\theta)$ [1/sr]	θ [°]	$p(\theta)$ [1/sr]
0.10000	1.76661e+3	7.9433	1.81927e+0	100.0	3.40405e-3
0.12589	1.29564e+3	10.00	1.15257e+0	105.0	3.11591e-3
0.15849	9.50172e+2	15.00	4.89344e-1	110.0	2.91222e-3
0.19953	6.99092e+2	20.00	2.44424e-1	115.0	2.79696e-3
0.25119	5.13687e+2	25.00	1.47151e-1	120.0	2.68568e-3
0.31623	3.76373e+2	30.00	8.60848e-2	125.0	2.57142e-3
0.39811	2.76318e+2	35.00	5.93075e-2	130.0	2.47603e-3
0.50119	2.18839e+2	40.00	4.20985e-2	135.0	2.37667e-3
0.63096	1.44369e+2	45.00	3.06722e-2	140.0	2.32898e-3
0.79433	1.02241e+2	50.00	2.27533e-2	145.0	2.31308e-3
1.0000	7.16082e+1	55.00	1.69904e-2	150.0	2.36475e-3
1.2589	4.95803e+1	60.00	1.31254e-2	155.0	2.50584e-3
1.5849	3.39511e+1	65.00	1.04625e-2	160.0	2.66183e-3
1.9953	2.28129e+1	70.00	8.48826e-3	165.0	2.83472e-3
2.5119	1.51622e+1	75.00	6.97601e-3	170.0	3.03046e-3
3.1623	1.00154e+1	80.00	5.84232e-3	175.0	3.09206e-3
3.9811	6.57957e+0	85.00	4.95306e-3	180.0	3.15366e-3
5.0119	4.29530e+0	90.00	4.29232e-3		
6.3096	2.80690e+0	95.00	3.78161e-3		

Werden nun die so zusammengesetzten Konstituenten als Wechselwirkungspartner ausgewählt, so erfolgt die Streuung gemäß der Petzold Müller–Matrix (siehe Abschnitt 5.3). Der Streuwinkel θ wird dabei anhand der kumulierten Petzold–Phasenfunktion gewürfelt. Die Petzold–Phasenfunktion ist in Tabelle 6.8 als Funktion des Streuwinkels θ angegeben. Daraus lässt sich die kumulierte Phasenfunktion durch Integration berechnen. Für Streuwinkel $\theta < 0.12589^\circ$ wurde dabei die Phasenfunktion durch den analytischen Ausdruck

$$p(\theta) = 1295.64 \left(\frac{0.12589}{\theta} \right)^{1.346}$$

genähert.

6.6 Validierung des Monte–Carlo Programmes

Das Monte–Carlo Programm wurde während seiner Entwicklungsphase immer wieder auf die Richtigkeit der berechneten Ergebnisse hin getestet. Dazu wurden verschiedene Publikationen über Strahlungstransportrechnungen im System Ozean–Atmosphäre (oder in einem Fall einer reinen Rayleigh–Atmosphäre) herangezogen; die jeweilige Konfiguration im eigenen Monte–Carlo Programm nachgebildet und die Resultate verglichen. Einige dieser Tests sollen nun kurz beschrieben werden.

6.6.1 Vergleich mit Rechnungen, die die Polarisation des Lichtes berücksichtigen

Ein wesentlicher Bestandteil des Programmes ist, dass die Polarisationseigenschaften des Lichtes berücksichtigt werden. Deshalb ist es besonders wichtig die richtige Implementierung des Stokes-Formalismus sicherzustellen. G. Kattawar¹¹ propagiert seit vielen Jahren die Wichtigkeit der Berücksichtigung der Polarisation in Strahlungstransportrechnungen; einige seiner Veröffentlichungen zu diesem Thema wurden als Tests für eigene Rechnungen benutzt.

In [64] wird eine einschichtige Rayleigh-Atmosphäre verschiedener optischer Dicke modelliert. Zwei verschiedenen Methoden werden benutzt und miteinander verglichen, um die Komponenten des Stokes-Vektor (I, Q, U) (die Komponente V ist per Definition gleich Null in einer reinen Rayleigh-Atmosphäre) und den Grad der Polarisation P zu berechnen. Dabei werden solche Photonen registriert, die sich in Richtung der Sonne bewegen und deren Azimutkomponente der Bewegungsrichtung in den Intervallen $[0^\circ, 30^\circ]$ beziehungsweise $[150^\circ, 180^\circ]$ liegt; der Detektor befindet sich an der Oberkante der Atmosphäre. Mit dem hier vorgestellten Monte-Carlo-Programm wurden entsprechende Rechnungen durchgeführt und die Ergebnisse in der gleichen Weise graphisch¹² dargestellt, wie in [64]; die Ergebnisse stimmen im Rahmen dessen, was eine augenscheinliche Begutachtung ermöglicht, überein. Abbildung 6.7 zeigt beispielhaft zwei Resultate der eigenen Modellierung.

Zwei planparallele Atmosphäre-Ozean-Systeme, die durch eine glatte Wasseroberfläche mit Brechungsindex $n = 1.338$ voneinander getrennt sind, wird in [65] untersucht. In dem einen System erfolgt nur Rayleigh-Streuung, in dem anderen nur Henyey-Greenstein-Streuung. Die optische Dicke der Atmosphäre ist in beiden Systemen $\tau = 0.15$, die des Ozeans in beiden Fällen $\tau = 1.0$. Der Sonnenstand beträgt entweder $\theta_s = 0^\circ$ oder $\theta_s = 60^\circ$. Berechnet wird die erste Komponente des Stokes-Vektors I , der Grad der Polarisation P und der Grad der zirkulären Polarisation P_z . Detektoren befinden sich dabei am Oberrand der Atmosphäre, kurz über beziehungsweise kurz unter der Wasseroberfläche und am Grunde des Ozeans. In [66] wird die glatte Wasseroberfläche im eben beschriebenen Rayleigh-System durch eine nach Cox und Munk modellierte Wasseroberfläche (siehe Kapitel 4.2 und 7.3.3) zu Windgeschwindigkeiten von $v = 0$ m/s beziehungsweise $v = 5$ m/s ersetzt. Zusätzlich wird die optische Dicke des Ozeans auf $\tau = 5.0$ erhöht mit einer Einfachstreu-Albedo von $\omega_0 = \{0.2, 0.8\}$. Die Systeme wurden mit dem Monte-Carlo-Programm nachmodelliert; die Resultate stimmen wiederum augenscheinlich überein.

¹¹George Kattawar arbeitet in der Abteilung für theoretische Physik an der Texas A&M Universität in Texas.

¹²Für die Vergleichsrechnungen, in denen die Polarisation berücksichtigt wird, liegen keine numerischen Resultate vor, sondern nur Graphiken aus Publikationen. In der Nachmodellierung wurden deshalb die Resultate jeweils so, wie in den angegebenen Referenzen, dargestellt und optisch verglichen.

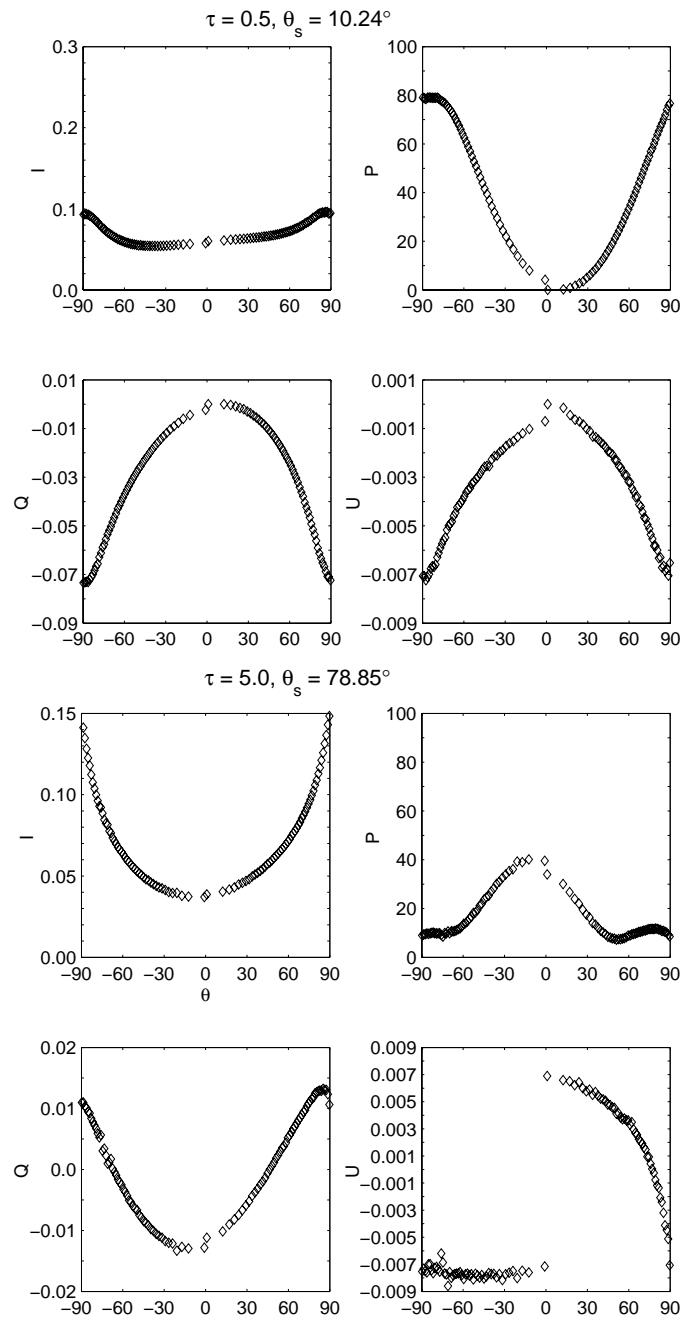


Abb. 6.7: Gezeigt werden die drei Komponenten des Stokes-Vektors (I, Q, U) und der Grad der Polarisation P für die in einer reinen Rayleigh-Atmosphäre gestreuten, zur Sonne hin gerichteten Photonen an der Oberkante der Atmosphäre in der Hauptebene (eigene Rechnungen). Die obere Bildhälfte bezieht sich auf Resultate in einer Atmosphäre mit einer Rayleigh optischen Dicke von $\tau = 0.5$ und einem Sonnenstand von $\theta_s = 10.24^\circ$; für die untere Bildhälfte gilt $\tau = 5.0$ und $\theta_s = 78.85^\circ$. Die Darstellungen folgen denen in [64].

6.6.2 Kanonische Probleme

Ein Vergleich von sieben verschiedenen Strahlungstransportrechnungen wird in [44] ausgewertet. Dabei wurden verschiedene Testprobleme separat berechnet und anschließend die Resultate von drei Größen (der nach unten gerichteten Strahlungsflussdichte E_d , der nach oben gerichteten skalaren Strahlungsflussdichte E_{0u} und der nach oben gerichteten Strahldichte L_u) in drei optischen Tiefen ($\tau = \{1, 5, 10\}$) verglichen. Einige dieser Probleme wurden auch mehrfach mit dem hier vorgestellten Monte-Carlo-Programm behandelt. Tabelle 6.9 listet die Resultate, wie in der Veröffentlichung (MGG) angegeben und wie sie mit dem Monte-Carlo-Programm (MC) berechnet, auf. Der Fehler auf die Monte-Carlo Größen wurde dabei wie oben (siehe 6.2.2) beschrieben berechnet; der zu den veröffentlichten Werten gehörige ist die Standardabweichung zum angegebenen Mittelwert.

Tab. 6.9: Resultate verschiedener eigener (MC) und veröffentlichter (MGG) Rechnungen zu den kanonischen Problemen II (keine Atmosphäre, glatte Wasseroberfläche, Petzold-Streuung im Wasser, Einfach-Streu-Albedo $\omega_0 = 0.9$ oder $\omega_0 = 0.2$, Sonnenstand $\theta_S = 60^\circ$), IV (wie Problem II mit $\omega_0 = 0.9$, jedoch um eine Rayleigh-streuende Atmosphäre erweitert) und V (wie Problem II mit $\omega_0 = 0.9$, jedoch mit einer vom Wind aufgerauten Wasseroberfläche und einem Sonnenstand von $\theta_S = 80^\circ$)

τ	$E_d [\frac{W}{m^2_{nm}}]$		$E_{0u} [\frac{W}{m^2_{nm}}]$		$L_u [\frac{W}{m^2_{nmstr}}]$	
	MGG	MC	MGG	MC	MGG	MC
Problem II $\omega_0 = 0.9$						
1	4.13e-1±4e-4	4.14e-1±6e-5	9.31e-2±2e-3	9.07e-2±5e-5	6.99e-3±4e-4	7.07e-3±1e-5
5	1.87e-1±9e-4	1.89e-1±6e-5	4.63e-2±8e-4	4.59e-2±5e-4	3.26e-3±2e-4	3.28e-3±1e-5
10	6.85e-2±7e-4	6.99e-2±4e-5	1.65e-2±2e-4	1.61e-2±5e-3	1.21e-3±1e-4	1.20e-3±7e-6
Problem II $\omega_0 = 0.2$						
1	1.62e-1±1e-6	1.62e-1±9e-7	9.66e-4±2e-5	9.40e-4±4e-7	5.47e-5±3e-6	6.23e-5±1e-7
5	2.27e-3±5e-6	2.29e-3±3e-7	1.37e-5±9e-7	1.28e-5±1e-7	6.24e-7±2e-7	8.22e-7±3e-8
10	1.30e-5±6e-7	1.32e-5±8e-8	7.28e-8±1e-8	5.53e-8±2e-8	4.02e-9±1e-9	6.98e-9±6e-9
Problem IV						
1	3.23e-1±3e-2	3.40e-1±7e-5	7.13e-2±7e-3	7.22e-2±5e-5	5.63e-3±6e-4	5.83e-3±1e-5
5	1.49e-1±1e-2	1.58e-1±6e-5	3.57e-2±3e-3	3.70e-2±4e-5	2.77e-3±4e-4	2.71e-3±1e-5
10	5.56e-2±4e-3	5.97e-2±4e-5	1.31e-2±1e-3	1.38e-2±3e-5	9.60e-4±1e-4	1.01e-3±7e-6
Problem V						
1	1.14e-1±1e-3	1.10e-1±2e-5	3.55e-2±7e-4	3.39e-2±2e-5	2.09e-3±7e-5	2.07e-3±1e-5
5	4.33e-2±4e-4	4.23e-2±2e-5	1.22e-2±3e-4	1.18e-2±1e-5	7.63e-4±3e-5	7.55e-4±1e-3
10	1.48e-2±1e-4	1.46e-2±1e-5	3.65e-3±7e-5	3.53e-3±7e-6	2.49e-4±6e-6	2.49e-4±7e-2

Die Monte-Carlo Größen liegen bis auf einige wenige Ausnahmen im Bereich von zwei Standardabweichungen σ vom angegebenen Mittelwert. Im Problem V beträgt die Abweichung von L_u für $\tau = \{1, 10\}$ 3σ ; bei diesem Problem ist aber auch die Varianz der Monte-Carlo Größen besonders groß. Insgesamt liegen 53% der berechneten

Größen innerhalb einer Standardabweichung und 86% innerhalb zweier Standardabweichungen (etwas weniger als man bei normalverteilten Werten erwarten würde).

6.6.3 Messung der Polarisation des Himmelslichtes

Ein weiterer Test bestand darin, die Polarisation des Himmelslichtes und die Stokes-Komponente Q selbst zu messen und anschließend mit einer Monte-Carlo-Simulation zu vergleichen. Der Versuchsaufbau bestand aus einem Photometer¹³, das auf einer Platte montiert wurde, deren Neigungswinkel θ_m variabel einstellbar war (siehe Abbildung 6.8). Vor das Photometer wurde ein linearer Polarisationsfilter¹⁴ angebracht. Der Filter konnte rotiert werden, seine Fassung wurde mit einer Gradeinteilung versehen. Wenn dabei die Nullmarkierung 0° senkrecht vom Photometer aus nach oben zeigte entsprach dies einer Durchlaßrichtung für parallel (bezüglich der Hauptebene) linear polarisiertes Licht.



Abb. 6.8: Die Abbildung zeigt das Photometer mit dem die Messungen durchgeführt wurden. Der Neigungswinkel des Photometers sowie die Durchlaßrichtung des linearen Polarisationsfilters, der vor dem Photometer angebracht ist, sind einstellbar. Die Stäbe dienen dazu, sicherzustellen, dass die Messungen in der Hauptebene durchgeführt werden.

Wie in [67] beschrieben wird kann mit solch einem Aufbau, bei Messung in der Hauptebene, der Stokes-Vektor des Himmelslichtes durch verschiedene Stellungen des Polarisationsfilters realisiert werden. Dabei gilt:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} (L(0^\circ) + L(45^\circ) + L(90^\circ) + L(135^\circ)), \\ Q &= L(0^\circ) - L(90^\circ), \\ U &= L(45^\circ) - L(135^\circ), \end{aligned}$$

mit $L(\varphi)$ der gemessenen Strahldichte bei einer Stellung des Filters mit φ der Gradanzeige nach oben.

¹³der Firma „TriOS“ mit einer spektralen Auflösung von 2 nm im sichtbaren Bereich

¹⁴der Firma „Schneider Kreuznach“

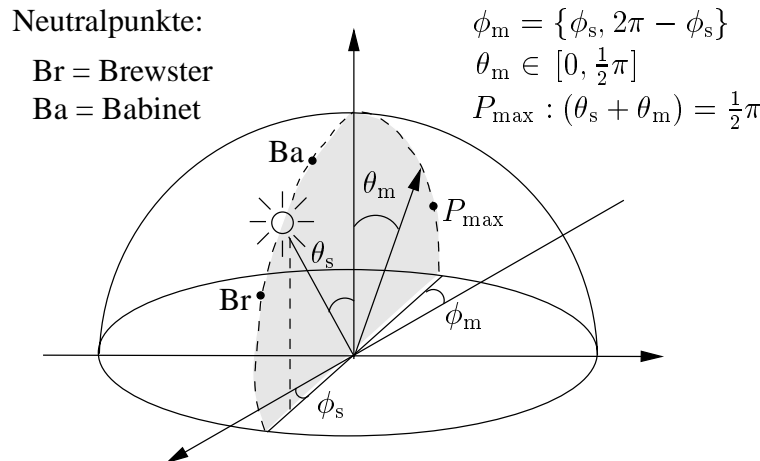


Abb. 6.9: Messung der Polarisation des Himmelslichtes in der Hauptebene. Der Winkel θ_m ist variierbar. Miteingezeichnet sind die zwei beobachtbaren Neutralpunkte (Br und Ba) und der Punkt der maximalen Polarisation P_{\max} .

Der minimale Anteil zirkulär polarisierten Himmelslichtes kann mit diesem Aufbau nicht gemessen werden und wird vernachlässigt. Zusätzlich gilt für Messungen in der Hauptebene $U = 0$ (siehe [67]). Zu Beginn einer jeden Messung wurde sichergestellt, dass sich die Apparatur in der Hauptebene befand. Zu diesem Zwecke wurde in einer Ecke der rechteckigen Platte ein senkrecht nach oben zeigender langer Stab angebracht (siehe Abbildung 6.8) und die Platte so lange rotiert, bis der von diesem Stab geworfene Schatten mit einer kantenparallelen Hilfslinie koinzidierte. Danach wurde ein Neigungswinkel θ_m der Platte eingestellt und anschließend die Strahldichte bei den vier Stellungen $\varphi = \{0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ\}$ des Filters gemessen. Abbildung 6.9 skizziert den Versuchsablauf.

Die optische Dicke des Aerosols am Messtag¹⁵, der Luftdruck und der Ozongehalt wurden von einer Station in Hamburg aufgenommen und zusammen mit dem aus Uhrzeit, Tag im Jahr und Ort der Messung berechneten Sonnenstand zur Modellierung mittels Monte-Carlo-Programm herangezogen. Die Messungen selbst wurden auf dem Gelände der GKSS an einem klaren Morgen durchgeführt. Der Untergrund war frisch aufgebaggerter Sand. Darum wurde im Monte-Carlo statt einer Wasseroberfläche ein Lambertscher-Reflektor der Reflektivität 0.1 verwendet. Abbildung 6.10 zeigt die Ergebnisse der Monte-Carlo-Simulation bei einigen Wellenlängen. Die Simulation und die Messung stimmen gut überein. Die Positionen der Neutralpunkte der Polarisation am Himmel fallen mit denen anderer Messungen zusammen (siehe auch Kapitel 3.2). Der Grad der Polarisation des Himmelslichtes in Abhängigkeit des Beobachtungswinkels und der Wellenlänge, wie er simuliert wurde, deckt sich gut mit dem

¹⁵Gemessen wird die optische Dicke der Aerosole der unteren Kilometer der Atmosphäre. Daher wurden nur die Konzentrationen der bodennahen maritimen und urbanen Aerosole angepasst; die stratosphärischen und kontinentalen Aerosole wurden mit ihrer maximalen Konzentration berücksichtigt.

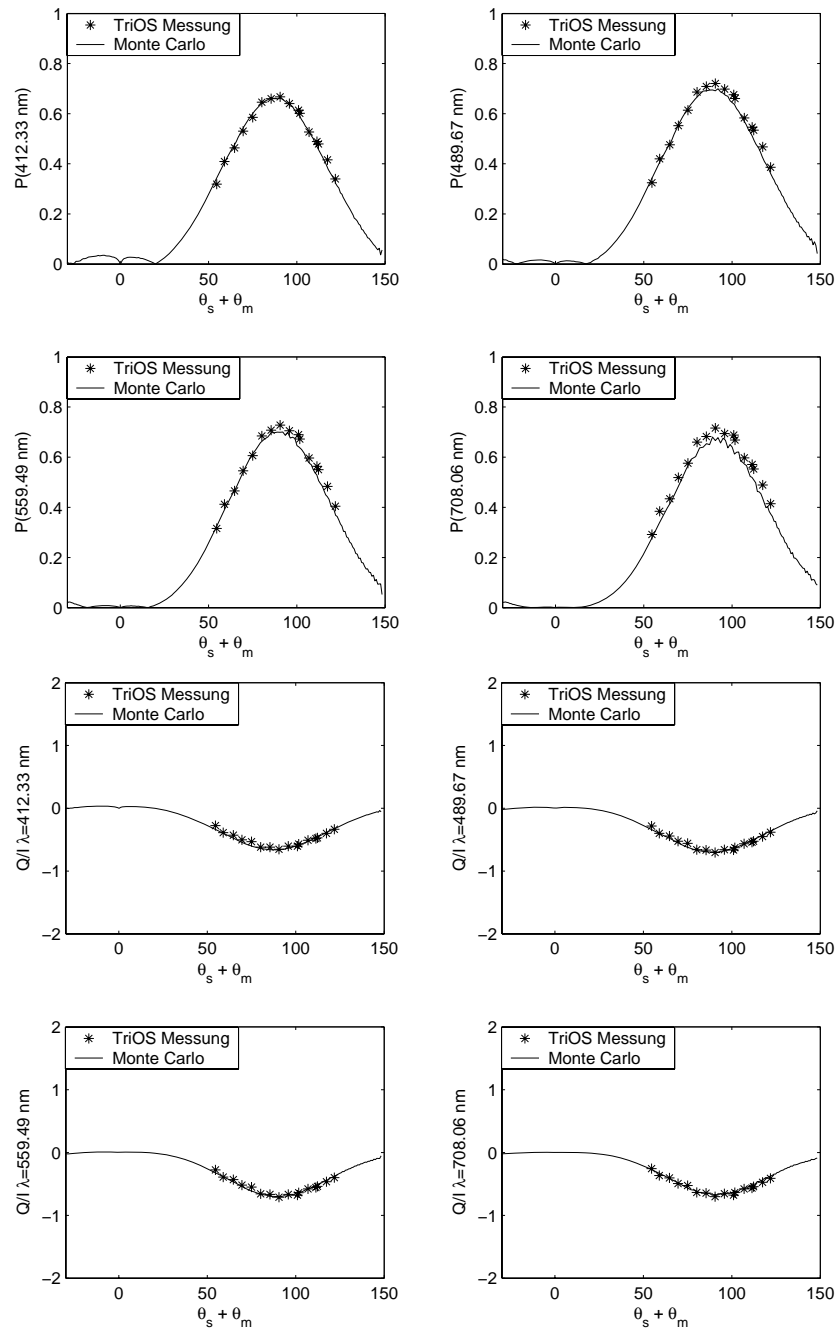


Abb. 6.10: Der obere Teil der Abbildung zeigt den Grad der Polarisation P in Abhängigkeit des Beobachtungswinkels θ_m . Die durchgezogene Linie entspricht den Monte-Carlo-Resultaten; die eingezeichneten Sterne kennzeichnen Messpunkte mit dem TriOS-Photometer. Gut zu erkennen sind für $\lambda = 412.33$ nm die zwei beobachtbaren Neutralpunkte und das Auftreten der maximalen Polarisation für $\theta_m + \theta_s = 90^\circ$. In gleicher Weise zeigen die unteren Abbildungen das Verhältnis der beiden Stokes-Komponenten Q/I .

gemessenen Wert. Dies lässt darauf schließen, dass die im Monte-Carlo Programm implementierten Aerosole zu einer realistischen Beschreibung der Polarisations-eigenschaften der Atmosphäre führen.

6.6.4 Realistischer Typ-II Ozean

Die bisherigen Testfälle beinhalteten zum Teil eine realistische Modellierung der Atmosphäre; der Ozean jedoch entsprach keinem Küstengewässer. In [68] werden verschiedene Testfälle zur Modellierung des offenen Ozeans aber auch von Küstengewässern beschrieben. Die vier Testfälle zum Küstengewässer wurden mit dem Monte-Carlo-Programm simuliert. Leider lagen keine Ergebnisse anderer Gruppen vor; so beschränkte sich der Vergleich auf zwei, in unserer Gruppe unabhängig voneinander gerechnete, Resultate. Diese stimmten jedoch mit ausreichender Genauigkeit überein.

6.7 Nachnutzbarkeit

Abschließend seien noch einige Worte über die weitere Nutzbarkeit des Monte-Carlo-Programmes in zukünftigen Anwendungen gemacht. Das Programm wurde in der Programmiersprache Java geschrieben. Dies hat den Nachteil, dass das Programm zirka zweimal langsamer arbeitet, als ein vergleichbares in C. Es bietet jedoch die großen Vorteile der Plattformunabhängigkeit und der Wiederverwendbarkeit. Aus der objektorientierten Programmierweise ergibt sich auf natürliche Weise ein gut strukturiertes Programm, das nur mit wenig Änderungsaufwand auch zum Lösen anderer Strahlungstransportprobleme herangezogen werden kann. Zu dem Programm wurde eine ausführliche `html`-Dokumentation geschrieben, die es nachfolgenden Nutzern ermöglichen soll, leicht eigene Modifikationen anzubringen.

Die Eingabedaten an das Programm werden in eine `ascii`-Datei, die Steuerdatei, geschrieben. Diese ist in verschiedenen Blöcke (Detektorenspezifikation, Wechselwirkungspartner in Atmosphäre und Ozean, Hilfsdaten, wie Sonnenstand, Windgeschwindigkeit, etc. und einem Block, der die Abbruchsbedingung festlegt, vorschreibt, ob die Polarisation mitberücksichtigt werden soll und ob die Initialisierung des Zufallszahlengenerators reproduzierbar sein soll) unterteilt. Um Nachfolgern die Arbeit mit dem Programm zu erleichtern, wurde eine graphische Benutzeroberfläche (ebenfalls in Java) programmiert, die es erlaubt eigene Steuerdateien interaktiv zu erzeugen oder bereits bestehende zu verändern. Dabei wird jeder zu erfolgende Eintrag in die Steuerblöcke erklärt.

Kapitel 7

Neuronale Netze

In Kapitel 6 wurde das Monte–Carlo–Programm vorgestellt, das zur numerischen Simulation des Vorwärtsmodells des Strahlungstransportes im gekoppelten System Atmosphäre–Ozean verwendet wird. „Vorwärts“ bezieht sich in diesem Zusammenhang auf das physikalische Prinzip von Ursache und Wirkung: das System wird durch die inhärenten optischen Eigenschaften der Wechselwirkungspartner, ihre räumliche Verteilung, sowie durch einige andere Parameter (Sonnenstand, Windstärke) festgelegt. In der Folge kann dann der Strahlungstransport in diesem System simuliert werden. Somit kann zum Beispiel die Strahldichte berechnet werden, die ein Satellit gegebener Position unter den simulierten Bedingungen gemessen hätte. Das inverse Problem – Rückschlüsse zu ziehen über das System selbst aus den Satellitendaten – soll nun hier behandelt werden.

Aus mathematischer Sicht ist das Vorwärtsmodell (hier das Monte–Carlo–Modell) eine Funktion. Existiert ein dazu inverses Modell, wovon im Folgenden ausgegangen wird, so handelt es sich wiederum um eine Funktion. Da sich das hier verwendete Vorwärtsmodell nicht trivial invertieren läßt, muß ein anderes Hilfsmittel herangezogen werden.

In der Einleitung werden kurz verschiedene mathematische Modelle angesprochen, die für die gestellte Aufgabe geeignet sind. Danach werden die hier benutzten *Feed-forward Backpropagation* Neuronale Netze, eine bestimmte Untermenge Neuronaler Netze, näher vorgestellt. Im letzten Teil des Kapitels werden die im Rahmen dieser Arbeit trainierten Netze beschrieben.

7.1 Einleitendes

Das Problem der inversen Modellierung soll hier zunächst in einem allgemeineren Kontext besprochen werden; Nachstehendes folgt [69]. Betrachtet wird ein System von Ein- und Ausgabe–Variablen. Ziel ist es, eine rechnerbasierte Beziehung $\vec{y}(\vec{x})$ zwischen den Eingabevariablen \vec{x} und den Ausgabevariablen \vec{y} herzustellen, die möglichst genau die „wahre“ Beziehung $\vec{y} \equiv \vec{f}(\vec{x})$ approximiert. Dabei sei unterstellt, dass die

gesuchte Beziehung nicht-trivial ist. Lässt sich die gesuchte Beziehung nicht durch die chemischen, physikalischen oder sonstige Gesetze, die dem System zugrunde liegen, herstellen, so bietet sich die Funktionenapproximation durch überwachtes Lernen an. Sie setzt die Existenz eines sogenannten Trainingsdatensatzes voraus, das heißt einer Menge von Eingabewerten mit zugehörigen Ausgabewerten:

$$\{\vec{y}_i, \vec{x}_i\}_1^N.$$

Die Eingabewerte dienen als Eingabevariablen eines künstlichen System (üblicherweise ein Computerprogramm), das Antworten $\{\vec{g}(\vec{x}_i)\}_1^N$ auf die Eingaben $\{\vec{x}_i\}_1^N$ gibt. Das künstliche System besitzt dabei die Eigenschaft, die Antwortfunktion $\vec{g}(\vec{x})$ iterativ so zu verändern, dass der Fehler $\{\vec{y}_i - \vec{g}(\vec{x}_i)\}_1^N$ minimiert wird („Lernen“). Nach Beendigung des Lernvorgangs kann das künstliche System anschließend benutzt werden, um Antworten auf beliebige Eingaben zu erzeugen, die jedoch durch den Eingabebereich während des Lernens abgedeckt sein müssen – das künstliche System kann interpolieren, Extrapolation zieht eine willkürliche Antwort nach sich.

In der Praxis ist es nötig, die Menge der Funktionen, die das künstliche System approximieren soll auf eine gewisse Untermenge der Menge aller Funktionen einzuschränken. Dies hängt mit der endlichen Größe des Trainingsdatensatzes zusammen. Hätte man einen unendlichen großen Datensatz und einen unendlichen schnellen Computer, ließe sich die Zielfunktion eindeutig (im Sinne von $g(x) = f(x)$) bestimmen. Bei einem Datensatz endlicher Länge hingegen gibt es eine große (oder unendliche) Anzahl von Funktionen, die die Datenpunkte interpolieren und den Fehler minimieren. Die im Folgenden vorgestellten Methoden des überwachten Lernens beinhalten alle eine (im- oder explizite) Einschränkung der Menge der Zielfunktionen. Jedoch sei darauf hingewiesen, dass dies keineswegs das Problem der Mehrdeutigkeit der Lösung behebt; es wird lediglich verschoben.

Ein anderes aus der Endlichkeit des Trainingsdatensatzes folgendes Problem ist der sogenannte Dimensionsfluch: Mag es bei Problemen mit niedrigdimensionalen Eingabewerten noch möglich sein, einen Trainingsdatensatz zu schaffen, der den Eingaberaum dicht abdeckt, so ist dies bei hochdimensionalen Eingabewerten unmöglich. Decken beispielsweise 100 Trainingspunkte einen eindimensionalen Eingaberaum dicht ab, so müsste ein entsprechend dichter Datensatz in zehn Dimensionen 10^{20} Punkte umfassen. Folglich ist der Eingaberaum in hochdimensionalen Problemen durch den Trainingsdatensatz nur sehr spärlich abgedeckt. Hinzukommt, dass der Abstand jeder zweier Punkte solch eines Datensatzes untereinander im Schnitt größer ist, als der Abstand eines der Punkte zu einer der Begrenzungen oder Ecken des Eingaberaumes. Wiederum kann die Einschränkung der Menge der Zielfunktionen helfen den Dimensionsfluch zu überwinden, nichtsdestotrotz ist es zumeist schwieriger eine hochdimensionale Funktion zu approximieren, da diese weitaus komplexer sein können als niedrigdimensionale.

Nahezu alle möglichen Methoden des überwachten Lernens finden auch in der optischen Gewässer-Fernerkundung ihre Anwendung. Allgemein kommen jedoch Neuronale Netze (üblicherweise *feedforward*) in der Fernerkundung immer häufiger zum

Einsatz; [70] zeigt dabei die Breite der Anwendungsmöglichkeiten. [71] diskutiert die Verwendungen Neuronaler Netze in der Vorwärts- und inversen Modellierung anhand von Beispielen aus dem Bereich der Fernerkundung. In [72], [73], [74], [75], [76], [77] und [9] werden *feedforward* Neuronale Netze zur Bestimmung von Wasserinhaltsstoffkonzentrationen aus Satellitendaten benutzt, wobei letztgenannter Algorithmus auch operationell zum Einsatz kommt und stetig weiterentwickelt wird [78]. Das gleiche Problem kann aber auch mit ganz anderen Methoden des überwachten Lernens gelöst werden, so zum Beispiel mit radialen Basis-Funktionen [79], mittels Tensor-Produkt-Methoden (in [80] wurden dabei Chebyshev-Polynome zur Produkttermentwicklung benutzt) oder aber auch mittels Genetischer Programmierung¹ wie in [81]. *Feedforward* Neuronale Netze werden auch zur Atmosphärenkorrektur genutzt [82], [83]; sogenannte Kohonen-Karten² dienen zur Aerosoltyp-Bestimmung [84].

Von den oben angesprochenen Methoden (und den zur gleichen Klasse gehörenden Entscheidungsbaum-Methoden) ist prinzipiell keine einer anderen grundsätzlich überlegen. In den Worten von J.H.Friedman [69] (Seite 45): „Die Interpretation eines Vergleiches der verschiedenen Methoden wird dadurch erschwert, dass es unmöglich ist, die Anwendung einer Methode von der fachlichen Kompetenz des Benutzers der Methode zu trennen. Der Autor der den Vergleich durchführt, kann über unterschiedliche Stärken, in seinen Fähigkeiten (und möglicherweise in seiner Motivation) die verschiedenen Methoden abzustimmen, verfügen.“ Unter Verwendung dieses Argumentes wurden in der vorliegenden Arbeit ausschließlich *feedforward backpropagation* Neuronale Netze benutzt, die nun detaillierter vorgestellt werden sollen.

7.2 *Feedforward Backpropagation* Neuronale Netze

Die Ära der Neuronalen Netze und der künstlichen Intelligenz begann im Jahre 1943 als Warren S. McCulloch und Walter Pitts zu verstehen versuchten, wie das Gehirn komplexe Muster aus der Verbindung vieler einfacher Basiszellen, den Neuronen, erzeugen kann. In ihrer Arbeit entwickelten sie ein formales Modell eines Neurons und zeigten, dass sich mit dem synaptischen Zusammenschluss vieler solcher synchron arbeitenden Neuronen im Prinzip jede berechenbare Funktion approximieren lässt. 15 Jahre später entwickelte Rosenblatt 1958 in seiner Arbeit über das Perzeptron eine neue Methode des überwachten Lernens. Das Perzeptron ist ein Neuron vom Typ, wie es McCulloch und Pitts vorschlugen, jedoch werden die Eingaben an das Neuron zunächst von einer Art Präprozessor bearbeitet, der das Vorhandensein bestimmter Eigenschaften der Eingabe detektiert. Das Perzeptron war zur Mustererkennung gedacht und der Präprozessor entsprach einem Muster-Detektor. Rosenblatt bewies außerdem das „Perzeptron Konvergenz Theorem“, das besagt, wenn eine Lösung der Musterer-

¹ Genetische Programmierung fällt wie auch die Neuronalen Netze unter den Oberbegriff *Soft Computing*; *Soft Computing*-Methoden verbreiten sich mit wachsender Rechnerkapazität zunehmend.

² Kohonen-Karten gehören nicht zur Klasse der *feedforward* Neuronale Netze sondern zu den selbstorganisierenden Karten.

kennung mittels Perzeptron möglich ist, also wenn die Muster-Klassen im Raum der Mustermerkmale linear separierbar sind, so wird diese Lösung in einer endlichen Zahl von Trainingsschritten gefunden.

Ein vorläufiges Ende der Forschung auf diesem Gebiet kam 1969 mit der Arbeit von Marvin Minsky und Seymour Papert, die zeigten, dass eine große Klasse von Problemen mit einschichtigen³ Perzeptronen nicht gelöst werden kann. Da ein einschichtiges Perzeptron den n -dimensionalen Eingaberaum durch eine $(n - 1)$ -dimensionale Hyperebene separiere, könnten mit ihm keine Probleme gelöst werden, die im Eingaberaum nicht linear separierbar sind. Zwar könne man zusätzliche Neuronenschichten einführen, jedoch wiesen Minsky und Papert auf das Fehlen eines effizienten Lernalgorithmus für diese Art von Netzen hin. Mitte der 1980er Jahre kam es zu einer Renaissance der technischen Neuronalen Netze. Einerseits aufgrund der Weiterentwicklung der vielschichtigen Neuronalen Netze (die zwischen der Ein- und Ausgabeschicht mindestens eine weitere „verborgene“ Schicht von Neuronen besitzen) und zum Anderen aufgrund der Entdeckung eines effizienten Trainingsalgorithmus, dem *backpropagation* Algorithmus durch David Rumelhart, Geoffrey Hinton und Ronald Williams im Jahre 1986 (nach [85]). Während der Trainingsphase wird die Eingabe durch das Neuronale Netz propagiert und die berechnete Ausgabe vom Zielwert (der im Trainingsatz als zur Eingabe gehöriger Ausgabewert vermerkt ist) subtrahiert. Dieser Fehler wird dann rückwärts durch das Netz bis hin zur Eingabeschicht propagiert (daher der Name); dabei werden Neuroneneigenschaften so verändert, dass die berechnete Ausgabe dem Zielwert näher kommt.

Weiterhin wurde bewiesen, dass ein Neuronales Netz, in dem der Ausgabewert eines Neurons durch eine nicht-lineare, beschränkte, monotone Funktion in den Eingabewerten berechnet wird (siehe dazu Abschnitt 7.2.1) und das mindestens eine verborgene Schicht besitzt, jede auf einem abgeschlossenen Intervall $[a, b]$ stetige Funktion $f(x)$ approximieren kann. Dieses Theorem kann als eine Erweiterung des Approximationssatzes von Weierstraß aufgefasst werden: Zu jeder im Intervall $[a, b]$ stetigen Funktion $f(x)$ und jeder reellen Zahl $\varepsilon > 0$ lässt sich eine Polynom $P(x)$ angeben, so dass $\|P(x) - f(x)\|_{C_{(a,b)}} < \varepsilon$ ist. (Die Menge der Polynome $P(x)$ liegt im Banachraum⁴ $C_{(a,b)}$ dicht.) (Diese Darstellung folgt [85].)

³Minsky und Papert beschränkten sich in ihrer Arbeit auf Netze, die aus mehreren Perzeptronen und einem abschließenden Neuron vom McCulloch- und Pitts-Typ, oder aber auch einschichtige Perzeptronen.

⁴Unter einem Banachraum versteht man einen normierten Raum, in dem jede Cauchyfolge konvergiert. Jeder endlichdimensionale normierte Raum ist ein Banachraum.

7.2.1 Aufbau und Wirkungsweise eines Neuronales Netzes

Feedforward Backpropagation Neuronale Netze⁵ bestehen aus einer Eingabeschicht einer Ausgabeschicht und einer oder mehrerer verborgener dazwischenliegender Schichten. Jede dieser Schichten besteht aus Neuronen; die Eingabeschicht besitzt soviele Neuronen, wie es Eingabewerte gibt, analog ist die Anzahl der Neuronen in der Ausgabeschicht durch die Anzahl der Ausgabewerte festgelegt, die Anzahl der Neuronen in der (den) verborgenen Schicht(en) ist problemspezifisch. Benachbarte Schichten sind direkt miteinander verbunden, dabei ist jedes Neuron einer Schicht mit jeweils jedem Neuron der dahinterliegenden Schicht verbunden. Abbildung 7.1 zeigt exemplarisch ein solches Netz.

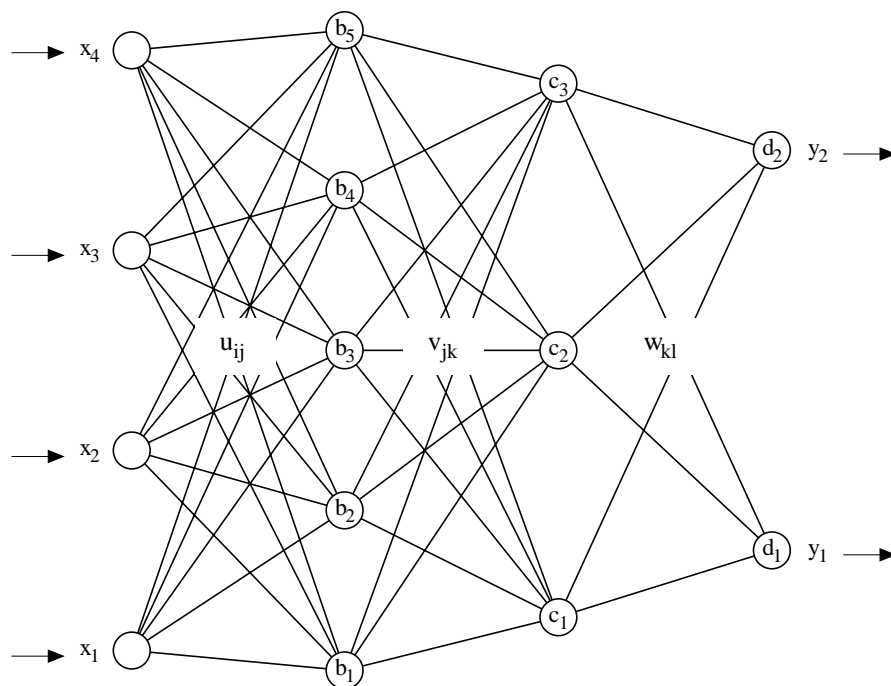


Abb. 7.1: Gezeigt wird ein Neuronales Netz mit vier Neuronen in der Eingabe- und zwei Neuronen in der Ausgabeschicht. Dazwischen liegen zwei verborgene Schichten mit fünf beziehungsweise drei Neuronen. Eine Netzarchitektur ist ein bestimmter Ansatz, der die Klasse von Funktionen, die mit dieser Architektur emuliert werden können, festlegt.

⁵Im Folgenden auch nur als Neuronale Netze bezeichnet, da hier nur diese eine Untermenge betrachtet wird.

Jedes Neuron berechnet einen Ausgabewert o_j gemäß

$$o_j = f(-b_j + \sum_i w_{ij} o_i) \quad (7.1)$$

der Summationsindex i läuft dabei über alle eintreffenden Signale der vorliegenden Schicht⁶; die i Faktoren w_{ij} werden als Gewichte (sie kennzeichnen die Stärke der Verbindung zweier Neuronen) und der Summand b_j als Versatz (im Englischen auch *bias*) des Neurons bezeichnet. Die Funktion f ist eine monoton steigende, nicht-lineare Funktion, die die reellen Zahlen auf das Intervall $[0, 1]$ abbildet – eine Sigmoidfunktion. Eine weitverbreitete Funktion, die auch in der vorliegenden Arbeit verwendet wurde, ist die logistische Funktion s (siehe Abbildung 7.2) mit

$$s(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)}. \quad (7.2)$$

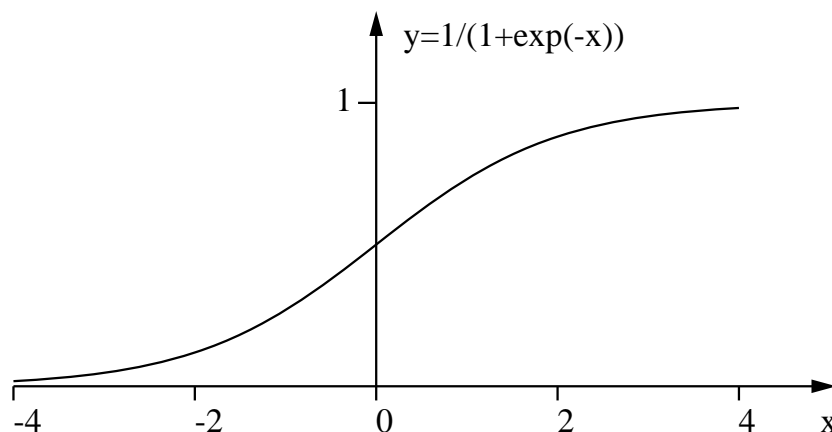


Abb. 7.2: Die logistische Funktion $s(x)$. Ihr asymptotischer Verlauf bewirkt, dass sich extremes Verhalten einzelner Neuronen nicht im ganzen Netz fortpflanzt. Eingabewerte $x \approx 0$ werden hingegen gut separiert.

Das Neuronale Netz arbeitet sequentiell: die Eingabewerte werden an die Neuronen der Eingabeschicht angelegt und an jeweils alle Neuronen der ersten verborgenen Schicht weitergeleitet, die wie oben angegeben ein Ausgabesignal errechnen. Der Vorgang setzt sich fort, bis die Ausgabeschicht erreicht wird und das Netz den zur Eingabe gehörenden Ausgabewert retourniert (daher *feedforward*). Dabei ist zu beachten, dass bei gegebener Netzarchitektur, die vom Neuronalen Netz emulierte nicht-lineare Abbildung des \mathbf{R}^n auf den \mathbf{R}^m zwingend einen Ansatz beinhaltet, in dem nur die Gewichte und Versätze der Neuronen freie Parameter darstellen. So realisieren die Aus-

⁶Neuronen der Eingabeschicht haben nur einen Eingabewert, der gleichzeitig auch Ausgabewert ist.

gabeneuronen des Neuronale Netz, das in Abbildung 7.1 gezeigt wird, die Funktion

$$y_l = s\left(-d_l + \sum_{k=1}^3 w_{kl} \cdot s\left(-c_k + \sum_{j=1}^5 v_{jk} \cdot s\left(-b_j + \sum_{i=1}^4 u_{ij}x_i\right)\right)\right), \quad (7.3)$$

mit $l = 1, 2$ und $y_l : \mathbf{R}^4 \rightarrow \mathbf{R}^1$.

Zur Bestimmung der freien Parameter (Versätze und Gewichte) werden zwei Mengen von Ein- und zugehörigen Ausgabevariablen benötigt: ein Trainings- und ein Test-Datensatz. Während des Lernens werden die freien Parameter, die anfangs einen willkürlichen Betrag haben, so geändert, dass die Fehlerfunktion (siehe unten) minimiert wird. Dabei wird das Netz immer wieder auf seine Generalisierungseigenschaften hin getestet. Dazu wird der Test-Datensatz verwendet, das heißt das Netz wird anhand von Eingabedaten getestet, die nicht im Trainings-Datensatz vorkamen. Damit kann sichergestellt werden, dass das Netz nicht übertrainiert wurde, also keine statistischen Schwankungen des Trainings-Datensatzes emuliert.

7.2.2 Training eines Neuronales Netzes

Es soll nun gezeigt werden, wie die Gewichte und Versätze der Neuronen der Ausgabeschicht (und darauf folgend auch für die Neuronen der inneren Schicht(en)) während der Trainingsphase angepasst werden, dabei wird [86] gefolgt. Um die Versätze nicht separat behandeln zu müssen wird die Nomenklatur

$$o_j = f\left(-b_j + \sum_{i=1}^n w_{ij} o_i\right) = f\left(\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i\right)$$

verwendet; die Versätze b_j werden also als Gewicht $-w_{0j}$ aufgefasst mit fester Eingabe $o_0 = 1$. Als Maß für die Leistungsfähigkeit eines Neuronales Netzes wird der quadratische Fehler über alle Paare von Ein- und Ausgabewerten des Trainingsdatensatzes betrachtet. Umfasst der Trainingsdatensatz N Punkte und die Ausgabeschicht n Neuronen, so bezeichnet

$$E = \sum_{p=1}^N E_p = \sum_{p=1}^N \sum_{j=1}^n \frac{1}{2} (t_j - o_j)^2 \quad (7.4)$$

die Fehlerfunktion, wobei t_j den gewünschten Ausgabewert repräsentiert. Durch das Verändern der Gewichte w_{ij} ändert sich der Ausgabewert der Neuronen der Ausgabeschicht und damit auch der gesamte Fehler E des Netzwerkes. Zur Minimierung des Fehlers wird das Gradientenabstiegsverfahren benutzt: der Fehlergradient eines Gewichtes gibt an, in welche Richtung und um welchen Betrag das Gewicht verändert werden muss. Der Betrag für die Gewichtsveränderung wird mit der Formel

$$\Delta w_{ij} = -\varepsilon \frac{\partial E_p}{\partial w_{ij}} \quad (7.5)$$

berechnet; die Schrittweite der Gewichtsänderung entgegen der Gradientenrichtung ist proportional zum sogenannten Lernfaktor ε^7 . Mit

$$\begin{aligned}\Delta w_{ij} &= -\varepsilon \frac{\partial E_p}{\partial w_{ij}} = -\varepsilon \frac{\partial E_p}{\partial (\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)} \frac{\partial (\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)}{\partial w_{ij}} \\ &= -\varepsilon \frac{\partial E_p}{\partial o_j} \frac{\partial o_j}{\partial (\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)} o_j \\ &= \varepsilon (t_j - o_j) \frac{\partial o_j}{\partial (\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)} o_j\end{aligned}$$

und

$$\frac{\partial o_j}{\partial (\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)} = \frac{\partial f(\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)}{\partial (\sum_{i=0}^n w_{ij} o_i)} = \frac{ds(x)}{dx}$$

folgt

$$\Delta w_{ij} = \varepsilon (t_j - o_j) o_j^2 (1 - o_j) = \varepsilon o_j \delta_j, \quad (7.6)$$

da die logistische Funktion $s(x)$ die Ableitung $\frac{ds(x)}{dx} = s(x)(1 - s(x))$ besitzt. Die Größe $\delta_j = (t_j - o_j) o_j (1 - o_j)$ wird auch als Fehlersignal des Neurons bezeichnet.

Gleichung 7.6 gilt für die Neuronen der Ausgangsschicht; für Neuronen der verborgenen Schichten ist kein Zielwert t_j vorgegeben, dieser muss durch einen äquivalenten Term ersetzt werden. Das Fehlersignal eines Neurons einer verborgenen Schicht berechnet sich rekursiv aus den Fehlersignalen δ_j von Neuronen der jeweils nachfolgenden Schicht; besteht die nachfolgende Schicht aus n Neuronen, so folgt unter Verwendung der Kettenregel:

$$\delta_i = \left(\sum_{j=0}^n w_{ij} \delta_j \right) o_i (1 - o_i). \quad (7.7)$$

Bei dem bisher geschilderten Lernvorgang kann es vorkommen, dass das Fehlersignal über das Minimum der Fehlerfunktion hinausläuft und im folgenden Lernzyklus eine Veränderung der Gewichte in die entgegengesetzte Richtung erforderlich ist. So kann es zu Oszillationen um das Minimum der Fehlerfunktion kommen, die sich aber durch Einbeziehung der Gewichtsänderungen $\Delta w_{ij}(t-1)$ des vorherigen Lernschrittes in die Berechnung der aktuellen Gewichtsänderung $\Delta w_{ij}(t)$ vermeiden lässt:

$$\Delta w_{ij}(t) = \varepsilon \alpha o_j \delta_j \Delta w_{ij}(t-1). \quad (7.8)$$

Der Faktor α heißt auch Trägheitsfaktor und definiert die Schrittweite mit der die Gewichtsänderungen des vorherigen Lernschrittes berücksichtigt werden.

⁷Das für das Training der in dieser Arbeit belehrten Netze benutzte Programm [87], ermöglicht es den Lern- und den weiter unten behandelten Trägheitsfaktor während des Lernens adaptiv zu verändern

7.3 Training der verschiedenen Netze

In diesem Kapitel soll nun die Architektur und das Lernverhalten der Neuronalen Netze beschrieben werden, die für die vorliegende Arbeit zur Anwendung kamen.

Das sind zum einen ein Neuronales Netz, das für die Atmosphärenkorrektur verwendet wird (Abschnitt 7.3.1) und eines, das für ein Ein-Schritt Verfahren zur direkten Ableitung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen als auch zur Bestimmung der optischen Dicke der Aerosole benutzt wird (Abschnitt 7.3.2). Zum anderen wurde ein Neuronales Netz trainiert, um die Realisierung einer rauen Wasseroberfläche im Monte-Carlo Programm selbst zu verwirklichen (Abschnitt 7.3.3).

An dieser Stelle folgt eine Beschreibung der Erzeugung des Trainingsdatensatzes für die Atmosphärenkorrektur und die Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen, da in beiden Fällen die gleichen Datensätze verwendet werden. Die Monte-Carlo Rechnungen simulieren den Strahlungstransport im gekoppelten System Atmosphäre-Ozean. Die Konzentration der verschiedenen Wechselwirkungspartner wird bei diesen Rechnungen variiert (siehe Kapitel 6) — lediglich die Ozon-Konzentration und die Konzentration des reinen Rayleigh-Streuers (die einem Standard-Luftdruck entspricht) in der Atmosphäre bleiben jeweils unverändert (im folgenden auch als Standard-Atmosphäre bezeichnet). (Weichen diese Konzentrationen in der Atmosphäre während der eigentliche Datennahme des Satelliten von diesen Werten ab, so kann mittels des in 8.1 beschriebenen Verfahren auf Standard-Bedingungen umgerechnet werden.) Auf diese Weise werden jeweils gut 10,000 Simulationen durchgeführt und die folgenden Observablen berechnet:

- die abwärtsgerichtete⁸ Strahlungsflussdichte an der Obergrenze der Standard-Atmosphäre $E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)$,
- die abwärtsgerichtete Strahlungsflussdichte kurz oberhalb der Wasseroberfläche $E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda)$,
- die aufwärtsgerichtete Strahldichte an der Obergrenze der Standard-Atmosphäre $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta, \phi, \lambda)$,
- die aufwärtsgerichtete Strahldichte der das Wasser verlassenden Strahlung kurz oberhalb der Wasseroberfläche $L_{\uparrow\text{W}}^{\text{JASS}}(\theta, \phi, \lambda)$,
- und die aufwärtsgerichtete Strahldichte der das Wasser verlassenden Strahlung an der Obergrenze der Standard-Atmosphäre $L_{\uparrow\text{W}}^{\text{TOSA}}(\theta, \phi, \lambda)$.

Die genannten Strahldichten werden dabei mit Detektoren berechnet, die in 36×18 Sektoren aufgeteilt werden: 36 Längenkreise (äquidistant in ϕ) und 18 Breitenkreise (äquidistant in θ). Die Simulationen werden für folgende elf Wellenlängen (in [nm])

⁸„Abwärtsgerichtet“ meint hier in Richtung von der Sonne zur Wasseroberfläche und dementsprechend meint „aufwärtsgerichtet“ in Richtung von der Wasseroberfläche zur Sonne.

durchgeführt: $\{412.33, 442.27, 489.67, 509.62, 559.49, 619.37, 664.31, 708.06, 753.11, 778.15, 864.62\}$ (jede dieser Wellenlängen entspricht einer Wellenlänge des MERIS-Detektors.) Zur Erzeugung des Trainingsdatensatzes werden anschließend für jede Simulation 10 verschiedene Satellitenpositionen (genauer gesagt verschiedene Meßrichtungen) $\theta_M \in [0^\circ, 45^\circ]$ und $\phi_M^9 \in [25^\circ, 180^\circ]$ gleichverteilt gewürfelt. Die Strahldichten $L_\uparrow(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ in Richtung des Satelliten werden dann mittels linearer Interpolation berechnet. Zusammen mit den Strahlungsflussdichten und einigen anderen Größen (zum Beispiel Sonnenstand, Streu- und Absorptionskoeffizienten der Wasserinhaltsstoffe) wird so ein Datensatz erzeugt, der gut 100,000 Trainingspunkte umfasst.

Die Monte-Carlo Rechnungen werden dabei zweimal durchgeführt: einmal mit Berücksichtigung der Polarisations-eigenschaften des Lichtes und einmal ohne. Dementsprechend werden auch jeweils zwei Neuronale Netze trainiert (jeweils mit identischer Architektur, gleichen Ein- und Ausgabewerten und gleicher Güte der Netze), um anschließend (in der Anwendungsphase) entscheiden zu können, welchen Einfluss die Berücksichtigung der Polarisation auf die jeweiligen Ergebnisse hat (siehe Kapitel 8). In den anschließenden Beschreibungen des Trainings der Netze wird nur noch auf die Simulation mit Berücksichtigung der Polarisation eingegangen.

Die Eingabedaten für die Netze zur Atmosphärenkorrektur und zur direkten Ableitung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen sind identisch und bestehen neben den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre in Richtung des Satelliten ($\rho^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) \equiv L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(\lambda)$) bei den oben angeführten elf Wellenlängen λ aus drei Eingabewerten, die die Geometriebeziehungen zwischen Sonne und Satellit festlegen¹⁰.

- Sonnenzenitwinkel $\theta_S \in [10^\circ, 60^\circ]$
- Zenitwinkel des Satelliten $\theta_M \in [0^\circ, 45^\circ]$
- Azimutdifferenz zwischen Sonne und Satellit $\phi_{\text{diff}} \in [25^\circ, 180^\circ]$
- $L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 412.33\text{nm})/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(412.33\text{nm}) \in [0.027180 \text{ sr}^{-1}, 0.309824 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 442.27\text{nm})/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(442.27\text{nm}) \in [0.025041 \text{ sr}^{-1}, 0.205215 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 489.67\text{nm})/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(489.67\text{nm}) \in [0.015996 \text{ sr}^{-1}, 0.300164 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 509.62\text{nm})/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(509.62\text{nm}) \in [0.011123 \text{ sr}^{-1}, 0.191056 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 559.49\text{nm})/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(559.49\text{nm}) \in [0.008315 \text{ sr}^{-1}, 0.273069 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_\uparrow^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 619.37\text{nm})/E_\downarrow^{\text{TOSA}}(619.37\text{nm}) \in [0.006924 \text{ sr}^{-1}, 0.231113 \text{ sr}^{-1}]$

⁹Da der Sonnenazimutwinkel $\phi_S = 0^\circ$ ist, ist ϕ_M gleichzeitig die Azimutdifferenz zwischen Sonne und Satellit.

¹⁰Die geforderten Ein- und Ausgabedaten, die dimensionsbehaftete physikalische Größen darstellen, werden zunächst auf das Intervall $[0,1]$ abgebildet. Das Netz selbst operiert dann mit diesen dimensionslosen Größen.

- $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 664.31\text{nm})/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(664.31\text{nm}) \in [0.003098 \text{ sr}^{-1}, 0.185007 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 708.06\text{nm})/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(708.06\text{nm}) \in [0.004893 \text{ sr}^{-1}, 0.102268 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 753.11\text{nm})/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(753.11\text{nm}) \in [0.003044 \text{ sr}^{-1}, 0.087673 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 778.15\text{nm})/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(778.15\text{nm}) \in [0.003159 \text{ sr}^{-1}, 0.086824 \text{ sr}^{-1}]$
- $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, 864.62\text{nm})/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(864.62\text{nm}) \in [0.001754 \text{ sr}^{-1}, 0.084663 \text{ sr}^{-1}]$

Zusammenfassend werden folgende vier Netze (mit gleichen Eingabewerten) zur Atmosphärenkorrektur beziehungsweise zur Ableitung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen trainiert:

Netzname	Eingabe	Ausgabe	Bemerkung
NNPol(Atm) NNUnpol(Atm)	$\theta_S, \theta_M, \phi_{\text{diff}}, \rho^{\text{TOSA}}$ $\theta_S, \theta_M, \phi_{\text{diff}}, \rho^{\text{TOSA}}$	ρ_W^{JASS} ρ_W^{JASS}	mit Polarisation ohne Polarisation
NNPol(Wasser) NNUnpol(Wasser)	$\theta_S, \theta_M, \phi_{\text{diff}}, \rho^{\text{TOSA}}$ $\theta_S, \theta_M, \phi_{\text{diff}}, \rho^{\text{TOSA}}$	$\ln(a_G + a_S), \ln(a_C),$ $\ln(b_S + b_W), \tau_A$ $\ln(a_G + a_S), \ln(a_C),$ $\ln(b_S + b_W), \tau_A$	mit Polarisation ohne Polarisation

7.3.1 Atmosphärenkorrektur

Für die Atmosphärenkorrektur wurde ein Neuronales Netz trainiert, um die Reflektanz der das Wasser verlassenden Strahlung in Richtung des Satelliten $\rho_W^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) \equiv L_{\uparrow W}^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)/E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda)$ abzuleiten. Die Ausgabeschicht enthält 11 Neuronen; je ein Neuron für die Reflektanz der das Wasser verlassenden Strahlung bei einer der oben angegeben elf Wellenlängen. Während der Trainingsphase wurden verschiedene Netzarchitekturen verwendet. Das beste der getesteten Neuronalen Netze besitzt zwei verborgene Schichten mit respektive 45 und 30 Neuronen. Von den insgesamt 120,390 Punkten des Trainingsdatensatzes wurden 115,015 zum Trainieren, die übrigen zum Testen verwendet. Es ergaben sich folgende Eigenschaften: die durchschnittliche Residuen betragen für die Trainingspunkte $428.98/115015 \approx 0.0037$ und für Testpunkte $20.53/5375 \approx 0.0038$, so dass sich der Quotient dieser Residuen (Training/Test) zu 0.9764 berechnet. In Abbildung 7.3 wird die Netzausgabe mit den Zielwerten für den Testdatensatzes für die kürzeste (412.33 nm), eine mittlere (619.37 nm) und die längste (864.62 nm) Wellenlänge verglichen.

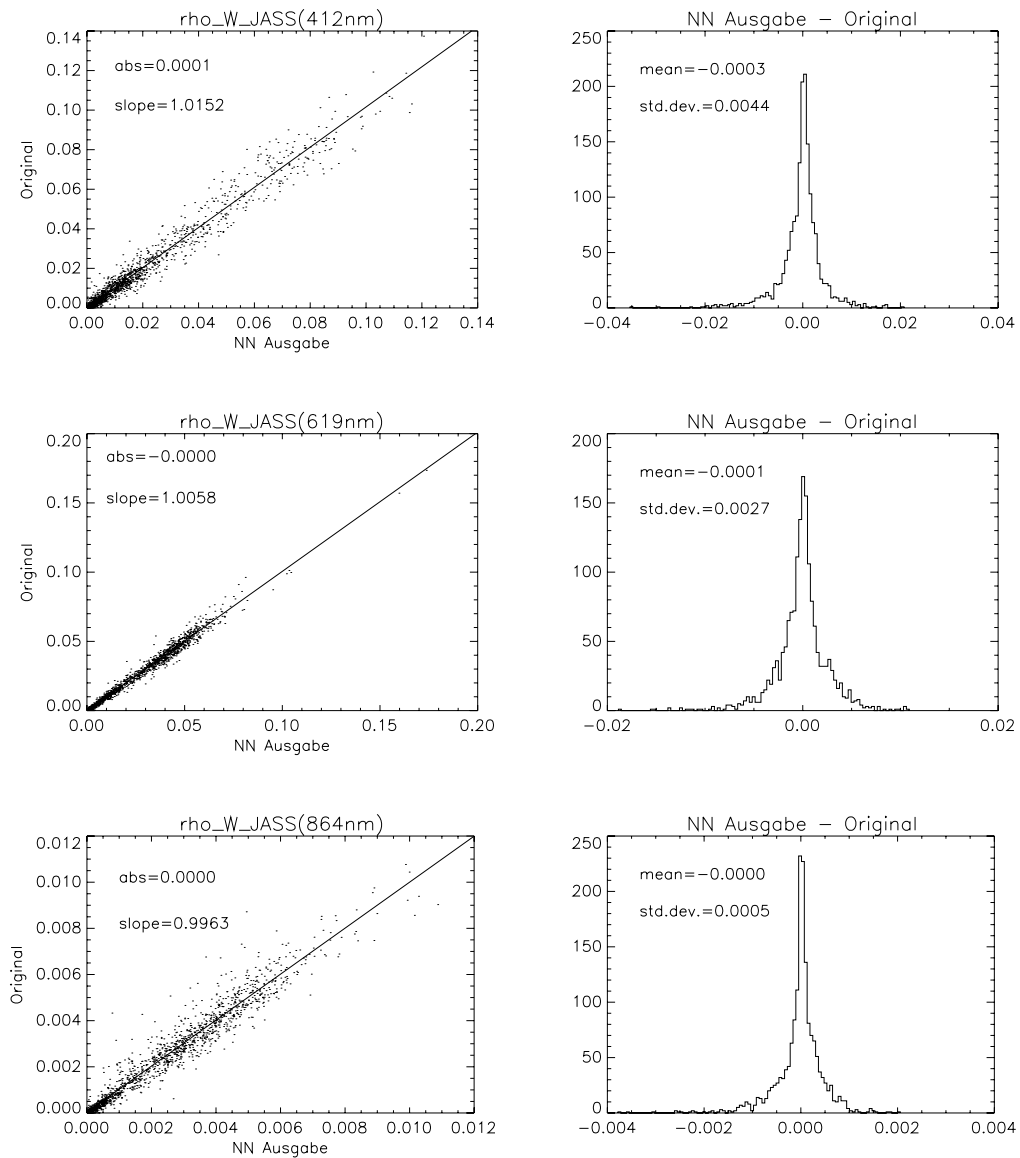


Abb. 7.3: Die Abbildung zeigt die Güte des für die Atmosphärenkorrektur trainierten Neuronalen Netzes für die Testpunkte. In den linken Teilen der Abbildung ist die Ausgabe des Neuronalen Netzes gegen die vorgegebene Zielausgabe aufgetragen ($\rho_W^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ in [1/sr] für $\lambda = \{412.33\text{nm}, 619.37\text{nm}, 864.62\text{nm}\}$). Die mit eingezeichneten Regressionsgeraden sind durch die Steigungen (*slope*) und die Schnittpunkte mit der *y*-Achse (*abs*) gegeben. Die rechten Teile zeigen die Häufigkeitsverteilungen der zugehörigen Abweichungen (Ausgabe des Netzes - Zielausgabe); die Mittelwerte sind mit *mean* bezeichnet und die Standardabweichungen mit *std.dev.*.

7.3.2 Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen

Zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen mittels des in Abschnitt 8.3 beschriebenen Ein-Schritt Verfahrens wurde ein Neuronales Netz darauf trainiert, die folgenden Ausgabedaten abzuleiten:

- der Logarithmus der Summe aus den Absorptionskoeffizienten (in [1/m]) für $\lambda = 442.27$ nm von Gelb- und Schwebstoff $\ln(a_G(442.27\text{nm}) + a_S(442.27\text{nm}))$,
- der Logarithmus des Absorptionskoeffizienten (in [1/m]) für $\lambda = 442.27$ nm von Chlorophyll-a $\ln(a_C(442.27\text{nm}))$,
- der Logarithmus der Summe aus den Streukoeffizienten (in [1/m]) für $\lambda = 442.27$ nm von Schwebstoff und dem weißen Streuer $\ln(b_S(442.27\text{nm}) + b_W(442.27\text{nm}))$.

Ein weiterer Ausgabewert dieses Netzes ist die (dimensionslose) optische Dicke der Aerosole τ_A bei $\lambda = 550\text{nm}$. Zwar wird diese Größe in den weiteren Rechnungen nicht benötigt, sie wurde aber in die Liste der Ausgabeparameter aufgenommen, da der systematische und statistische Fehler eines Neuronalen Netzes verkleinert werden, leitet man zusätzlich zu den interessierenden Parametern jene ab, die die Variabilität des Eingabe-Datensatzes verursachen [88].

Die Eingabewerte an dieses Neuronale Netz sind die gleichen, die auch für das Netz zur Atmosphärenkorrektur verwendet wurden. Die Datensätze für das Training und das Testen sind ebenfalls die dort angegebenen — lediglich die zu erlernenden Ausgabewerte sind andere. Wiederum wurden verschiedenste Netzarchitekturen durchprobiert. Anders als bei dem Netz zur Atmosphärenkorrektur sind hier zwei verborgene Schichten unzureichend. Als beste der getesteten Architekturen stellte sich jene heraus, die vier verborgene Schichten mit jeweils 20, 20, 15 und 10 Neuronen umfasste. Es ergaben sich durchschnittliche Residuen von $19057.84/115015 \approx 0.166$ für die Trainingspunkte und von $894.91/5375 \approx 0.166$ für Testpunkte; der Quotient dieser Residuen (Training/Test) beträgt 0.995217.

In Abbildung 7.4 werden die Ausgabewerte des Neuronalen Netzes zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen für den Testdatensatz mit den Zielwerten verglichen. Auffällig ist, dass die Bestimmung der Chlorophyll-a Absorption die größte Streuung aufweist. Eine mögliche Erklärung ist, dass sich eine Änderung der Chlorophyll-a Konzentration am geringsten in den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre widerspiegelt – ihre genaue Bestimmung somit am schwierigsten ist¹¹.

Eliminiert man jene Punkte des Trainingsdatensatzes, für die das Wasser durch die (Gelbstoff-) Absorption dominiert wurde, (und die somit den größten statistischen Fehler aufweisen) gelingt die Ableitung der Chlorophyll-a Absorption viel besser.

¹¹Dieses Problem haben zwar alle Verfahren zur Ableitung der Chlorophyll-a Konzentration, jedoch wird die das Wasser verlassende Strahlung zumeist nicht mit einem Monte-Carlo-Programm bestimmt, die einen vergleichsweise hohen statistischen Fehler in der Bestimmung dieser Größe beinhalteten.

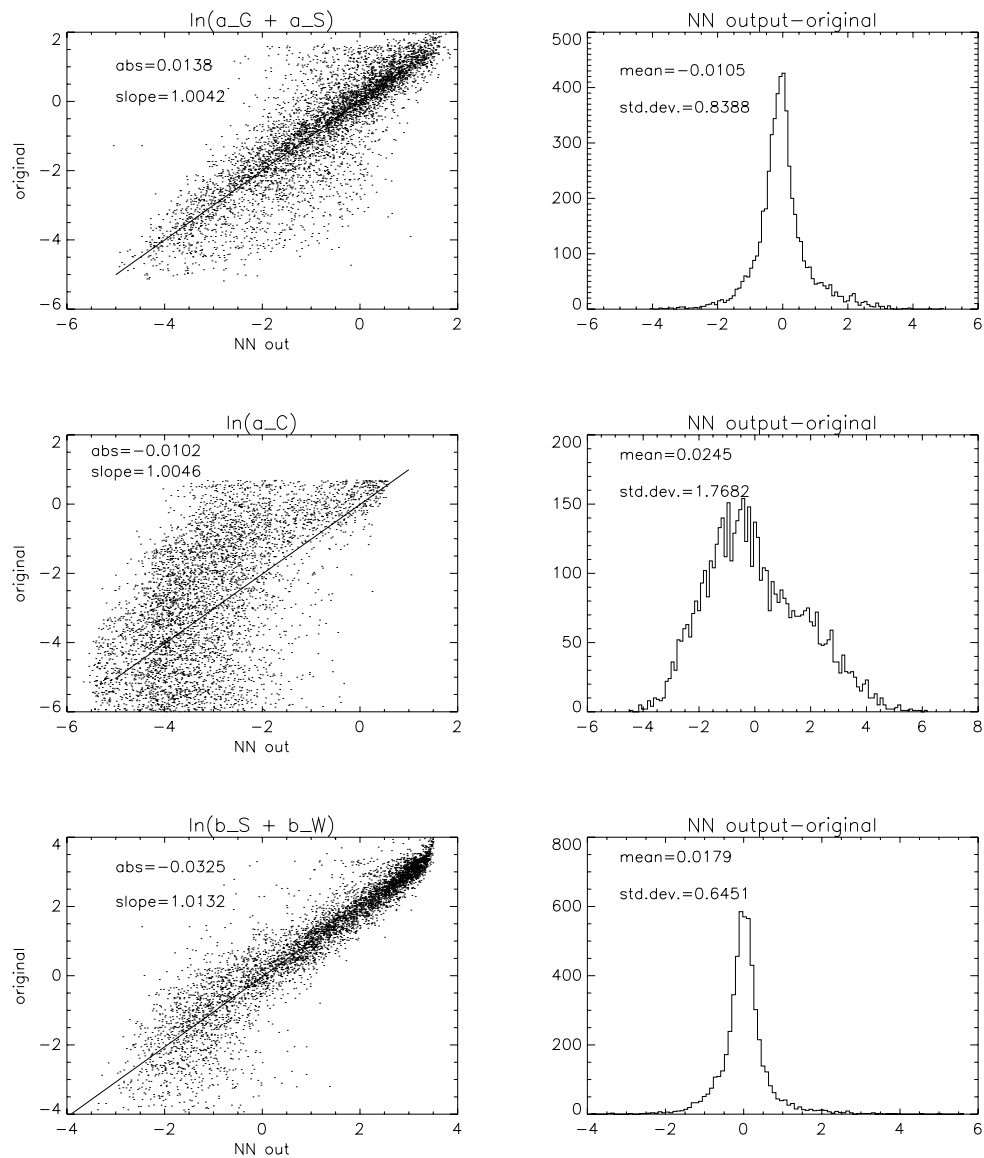


Abb. 7.4: Die Abbildung zeigt die Güte des für die Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen trainierten Neuronalen Netzes für die Testpunkte. In den linken Teilen der Abbildung ist die Ausgabe des Neuronalen Netzes gegen die vorgegebene Zielausgabe aufgetragen ($\ln(a_G + a_S)$, $\ln(a_C)$ und $\ln(b_S + b_W)$ jeweils in $[\ln(1/m)]$). Die mit eingezeichneten Regressionsgeraden sind durch die Steigungen (*slope*) und die Schnittpunkte mit der *y*-Achse (*abs*) gegeben. Die rechten Teile zeigen die Häufigkeitsverteilungen der zugehörigen Abweichungen (Ausgabe des Netzes - Zielausgabe); die Mittelwerte sind mit *mean* bezeichnet und die Standardabweichungen mit *std.dev.*.

Mit der Bedingung $a_C(442.27\text{nm}) > (a_G(442.27\text{nm}) + a_S(442.27\text{nm}))$ verbleiben 23,680 Punkte im Datensatz. Mit diesen Punkten wurde ein weiteres Netz mit vier verborgenen Schichten (mit je 7, 5, 4 und 3 Neuronen) darauf trainiert, aus den Eingabegrößen lediglich den Logarithmus des Absorptionskoeffizienten (in [1/m]) für $\lambda = 442.27\text{ nm}$ von Chlorophyll-a abzuleiten. In Abbildung 7.5 zeigt sich dann, dass die Streuung nun sehr viel geringer ausfällt.

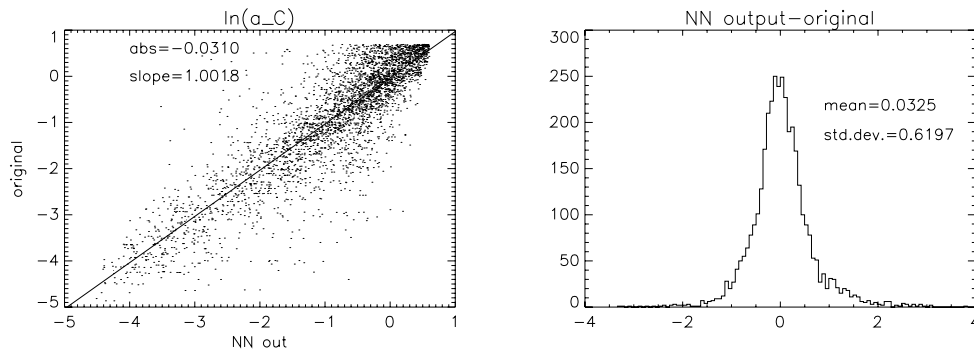


Abb. 7.5: Die Abbildung zeigt die Güte des (mit eingeschränktem Eingabedatensatz) trainierten Neuronalen Netzes zur Bestimmung der Chlorophyll-a Konzentration ($\ln(a_C)$ in $[\ln(1/m)]$) für die Testpunkte. Im Vergleich mit Abbildung 7.4 wird die Verbesserung im Lernverhalten sichtbar.

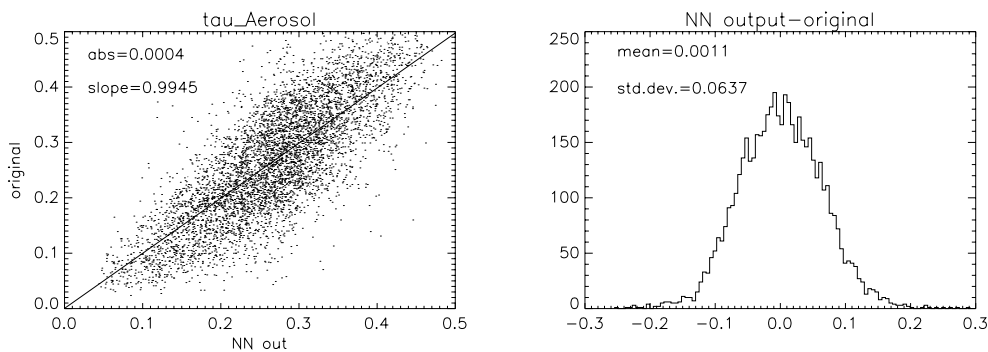


Abb. 7.6: Die Abbildung zeigt die Güte des trainierten Neuronalen Netzes für die Testpunkte bezüglich der Ableitung der optischen Dicke der Aerosole τ_A bei einer Wellenlänge von $\lambda = 550\text{nm}$. Im linken Teil der Abbildung ist die Ausgabe des Neuronalen Netzes gegen die vorgegebene Zielausgabe aufgetragen. Zusätzlich wurde die Regressionsgerade mit eingezeichnet; ihre Steigung ist mit *slope* bezeichnet und ihr Schnittpunkt mit der *y*-Achse mit *abs*. Der rechte Teil zeigt die zugehörigen Häufigkeitsverteilungen der Abweichungen (Ausgabe des Netzes - Zielausgabe); der Mittelwert beträgt 0.0011 und die Standardabweichung 0.0637.

In Abbildung 7.6 wird die optische Dicke der Aerosole, wie sie durch das Neuronale Netz berechnet wird, für den Testdatensatz mit den Zielwerten verglichen. Die Standardabweichung ist zwar mit ≈ 0.06 relativ groß, jedoch zeigt das Lernverhalten auch, dass es möglich ist, die optische Dicke der Aerosole abzuleiten.

7.3.3 Modellierung der rauen Wasseroberfläche

Zur Modellierung der rauen Wasseroberfläche wurde ein Neuronales Netz darauf trainiert, zu gegebenem ϑ_p und gegebener Breite der Verteilung σ den Faktor $\frac{1}{c} \in [0, 1]$ zu berechnen (siehe Abschnitt 6.4.1). Während der Trainingsphase wurde $\vartheta_p \in [0, \frac{\pi}{2})$ variiert und für σ wurde ein Wertebereich von $\sigma^2 \in [0, 0.0542]$ (oder, ausgedrückt durch die Windgeschwindigkeiten, von $v \in [-\frac{0.003}{0.00512} \frac{m}{s}, 10 \frac{m}{s}]$) abgedeckt. Es wurde jedoch festgestellt, dass für $\sigma^2 = 0$ (bzw. $\frac{1}{c} = \cos(\vartheta_p)$), also auf einem der Ränder des zweidimensionalen Eingaberaumes, die gelernte Ausgabe des Neuronales Netzes, insbesondere für Winkel $\vartheta_p \approx \frac{\pi}{2}$, von dem erwarteten Kosinus zu stark abwich. Darum wurden in den Trainingsdatensatz zusätzlich 60 Punkte aufgenommen mit $\sigma^2 = 0$ und $\vartheta_p \in [\frac{\pi}{2}, \frac{95\pi}{180})$. Dieser Ansatz, zusätzliche Punkte, die über den eigentlichen Wertebereich der zu emulierenden Funktion hinausgehen, dem Trainingsdatensatz zuzufügen, bietet sich immer dann an, wenn das Lernverhalten an den Rändern des Eingaberaumes verbessert werden soll.

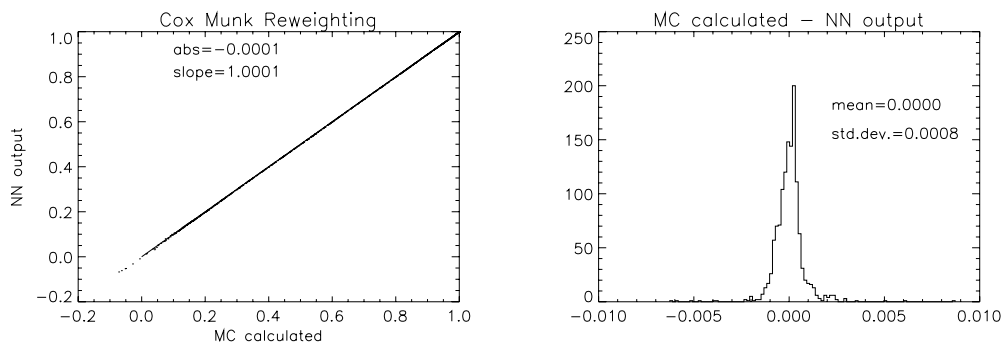


Abb. 7.7: Die Abbildung zeigt die Güte des trainierten Neuronales Netzes für die Testpunkte. Im linken Teil der Abbildung ist die Ausgabe des Neuronales Netzes gegen die vorgegebene Zielausgabe aufgetragen (die dimensionslose Größe $\frac{1}{c}$). Zusätzlich wurde die Regressionsgerade mit eingezeichnet; ihre Steigung ist mit *slope* bezeichnet und ihr Schnittpunkt mit der *y*-Achse mit *abs*. Der rechte Teil zeigt die Häufigkeitsverteilungen der zugehörigen Abweichungen (Zielausgabe - Ausgabe des Netzes); der Mittelwert beträgt Null und die Standardabweichung 0.0008.

Insgesamt wurden 10,300 Punkte zum Trainieren benutzt, wobei zu einem gleichverteilten gewürfelten σ aus obigem Wertebereich jeweils zehn Werte von ϑ_p gleichver-

teilt gewürfelt wurden und zu diesem Wertepaar der gewünschte Ausgabewert durch 1000 diskrete, im Kosinus gleichverteilte, Werte von Einfallswinkeln bestimmt wurde.

Während der Trainingsphase wurden verschiedene Netzarchitekturen verwendet. Das beste der getesteten Neuronalen Netze besitzt drei verborgene Schichten mit 5,3 und 2 Neuronen respektive. Von den 10,300 Punkten des Trainingsdatensatzes wurden 8,992 zum Trainieren, die übrigen zum Testen verwendet. Es ergaben sich die folgenden Eigenschaften: die durchschnittlichen Residuen betragen für die Trainingspunkte $0.006782/8992 \approx 7.54e - 7$ und für Testpunkte $0.000704/1308 \approx 5.38e - 7$, so dass sich der Quotient dieser Residuen (Training/Test) zu 1.400698 berechnet. Abbildung 7.7 verdeutlicht diese Daten anhand des Testdatensatzes.

Kapitel 8

Anwendung der Neuronalen Netze

In diesem Kapitel soll gezeigt werden, wie aus den von MERIS gemessenen Strahldichten die Reflektanz¹ der das Wasser verlassenden Strahlung (im folgenden auch kurz Wasser-Reflektanz) im sichtbaren und nahem infraroten Spektralbereich (Atmosphärenkorrektur) beziehungsweise die Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe mit Hilfe der Neuronalen Netze abgeleitet werden kann.

Das gemessene Satellitensignal ist die vom System Atmosphäre-Ozean in Richtung des Satelliten rückgestreute Strahlung. Aus diesem Signal gilt es für die Atmosphärenkorrektur den Anteil zu bestimmen, den die das Wasser verlassende Strahlung ausmacht. Die mit dem Monte-Carlo Programm zum Training des Neuronalen Netzes zur Atmosphärenkorrektur berechneten Daten beziehen sich auf eine Atmosphäre mit Standard-Luftdruck (also einem festen Anteil Rayleigh-Streuung in der Atmosphäre) und festem Ozon-Gehalt. In Abschnitt 8.1 wird beschrieben, wie die von MERIS gemessenen Spektren auf diese Standard-Bedingungen umgerechnet werden können. Der daran anschließende Abschnitt beschreibt das Verfahren zur Atmosphärenkorrektur und die Anwendung auf vom Satelliten gemessene Daten, für die zum Teil auch *in situ* Daten vorliegen.

Da die Daten, die zum Training der Neuronalen Netze verwendet werden, mit einem Monte-Carlo Programm berechnet werden, in dem das gekoppelte System Atmosphäre-Ozean simuliert wird, sollte es auch möglich sein, die Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe direkt aus den (auf die Standard-Atmosphäre umgerechneten) Satelliten-Daten abzuleiten. Das zu diesem Zwecke trainierte Neuronale Netz (siehe Kapitel 7.3.2) bestimmt aus den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre drei Größen, die mit den Streu- und Absorptionskoeffizienten bei 442 nm zusammenhängen. In Abschnitt 8.3 wird zunächst beschrieben, wie sich aus diesen Netz-Ausgabedaten empirisch die Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe ableiten lassen. Anschließend wird das Verfahren wiederum an Satelliten-Daten, zu denen zum Teil auch *in situ* Messungen vorliegen, validiert. Die prinzipielle Möglichkeit der direkten Bestimmung der

¹Der Begriff „Reflektanz“ wird hier als Synonym für die Fernerkundungs-Reflektanz – also das Verhältnis einer aufwärtsgerichteten Strahldichte zu einer einfallenden Strahlungsflussdichte – gebraucht.

Inhaltsstoff-Konzentrationen aus Satellitendaten wurde bereits 1994 gezeigt [1]. Jedoch existiert bislang kein operationell einsetzbares Ein-Schritt-Verfahrens über Typ-II Gewässern ([40], Seite 51).

Die *in situ* Daten, die zur Validierung herangezogen werden, wurden bei Validationsfahrten im Jahr 2003 mit dem Forschungsschiff „Heincke“ in der Deutschen Bucht, sowie in den Jahren 2002 und 2003 bei Messungen auf der Fähre „Wappen von Hamburg“ auf der Strecke Cuxhaven–Helgoland im Rahmen von Forschungsprojekten am GKSS-Forschungszentrums gewonnen. Auf beiden Schiffen wurden gemäß [89] sowohl Wasserproben zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen genommen, als auch Messungen der Wasser-Reflektanz durchgeführt.

Bei der Analyse der Wasserproben wird die Absorption durch Gelbstoff als die Summe der Absorption der durch einen Filter der Porengröße $0.22 \mu\text{m}$ gefilterten Probe und der Absorption der gebleichten Filtrerrückstände auf einem „Whatman GF/F“ Filter (Porengröße zwischen $0.4 \mu\text{m}$ und $0.7 \mu\text{m}$) bestimmt. Die Bestimmung Konzentration von Schwebstoff erfolgt durch Filtration der Probe durch einen „Whatman GF/F“ Filter bekannten Gewichtes, der mit destilliertem Wasser gespült und getrocknet und dann erneut gewogen wird. Der Chlorophyll-a Gehalt wird mittels HPLC (*High Performance Liquid Chromatography*) von in Aceton gelösten Filtrerrückständen („Whatman GF/F“ Filter) ermittelt.

Zur *in situ* Messung von Wasser-Reflektanzspektren werden ein Strahlungsflussdichte- und zwei Strahldichtesensoren der Firma „TriOS“ verwendet. Die drei Sensoren werden dabei so am Bug eines Schiffes angebracht, dass die Messungen möglichst nicht durch Sonnenreflex beeinflusst werden. Einer der Strahldichtesensoren misst die nach oben gerichtete Strahldichte $L_{\uparrow}^{\text{JASS}}$ (die sich aus der das Wasser verlassenden und der an der Wasseroberfläche reflektierten Strahlung zusammensetzt) unter einem Winkel von $\theta_{\text{M}} \approx 30^\circ$ während der andere Strahldichtesensor die unter diesem Winkel nach unten gerichtete (auf das Wasser auftreffende) Strahlung $L_{\downarrow}^{\text{JASS}}$ misst. Der Strahlungsflussdichtesensor misst das auf das Wasser auftreffende Licht $E_{\downarrow}^{\text{JASS}}$. Die Wasser-Reflektanz wird anschließend näherungsweise zu

$$\rho_{\text{W}}^{\text{JASS}} \approx \frac{L_{\uparrow}^{\text{JASS}} - 0.02L_{\downarrow}^{\text{JASS}}}{E_{\downarrow}^{\text{JASS}}}$$

berechnet.

Beim Vergleich der berechneten mit den gemessenen Reflektanzspektren ist zu beachten, dass teilweise erhebliche Unterschiede der Beobachtungsrichtungen vorliegen. In Abbildung 8.1² werden Wasserreflektanzspektren ein und desselben Wassers für verschiedene Beobachtungsrichtungen gezeigt — die Form der Spektren bleibt erhalten, die absoluten Werte hingegen differieren. Für die vorliegende Arbeit wurden ausschließlich Daten benutzt bei denen zwischen TriOS- und MERIS-Messung eine

²Zur Generierung der Abbildung wurde das operationell eingesetzte Neuronale Netz benutzt, das das Vorwärtsmodell emuliert.

maximale Differenz im Azimutwinkel der Messung von $\approx 50^\circ$ auftrat, so dass Abweichungen der Spektren um bis zu $\approx 11\%$ zu erwarten sind.

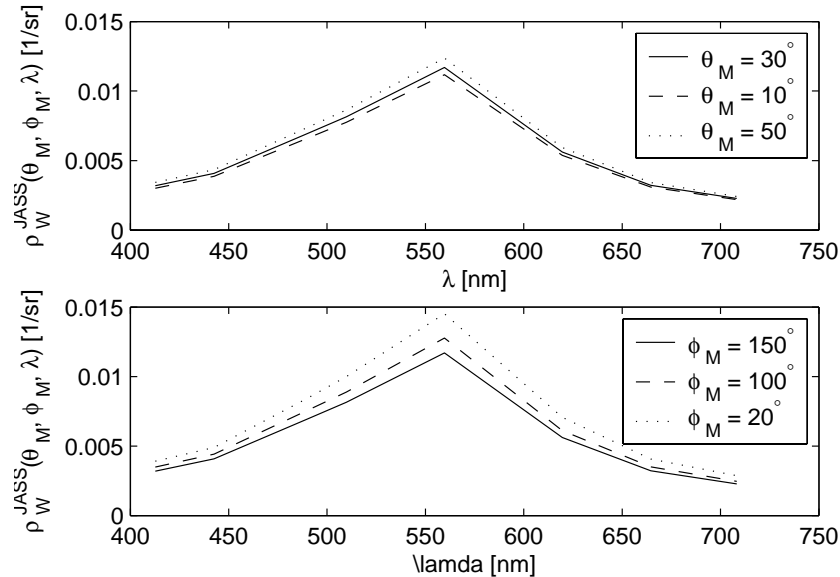


Abb. 8.1: Die Abbildung zeigt die berechnete Wasser-Reflektanz $\rho_W^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ für verschiedene Beobachtungswinkel als Funktion der Wellenlänge λ . Im oberen Teil wurde für die drei Spektren $\phi_M = 150^\circ$ gewählt und θ_M variiert, im unteren Teil hingegen ist $\theta_M = 30^\circ$ und ϕ_M variabel.

Die *in situ* Daten werden sowohl mit den operationell abgeleiteten Größen als auch mit den Ergebnissen der hier vorgestellten Algorithmen verglichen. Alle für die Validation verwendeten MERIS-Daten entsprechen der Prozessor-Version „MEGS 7.3“. Die wichtigsten Neuerungen dieser operationell eingesetzten Algorithmen sind zum einen die Berücksichtigung eines Aerosols mit großem Ångström-Koeffizienten³ in der Atmosphärenkorrektur. In früheren Versionen fehlte ein solches Aerosol und in Folge dessen wurde die Wasser-Reflektanz im Blauen in einigen Fällen überschätzt. Zum anderen wurden das operationell eingesetzte Neuronale Netz zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen leicht modifiziert: Da die durch die Atmosphärenkorrektur gewonnenen Wasser-Reflektanzen (die als Eingabe an das operationell eingesetzte Netz dienen) manchmal im kurzwelligen Spektralbereich negativ sind, werden diese Reflektanzen in den entsprechenden Kanälen auf einen positiven Minimalwert gesetzt, bevor sie an das entsprechend trainierte Neuronale Netz weitergeleitet werden. Das verwendete biooptische Modell stimmt weiterhin mit dem hier beschriebenen überein.

Für die Validation der Atmosphärenkorrektur und der direkten Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen wurden *in situ* Daten ausgewählt, die es erlauben

³Dieses wird aufgrund seines Rayleighartigen Streuverhaltens auch als blaues Aerosol bezeichnet.

Tab. 8.1: *in situ*- und MERIS-Daten

Schiff	Datum	MERIS-Szene	erwartete Güte	Anzahl Meßstationen
Heincke	23.04.2003	MER_RR_ $\frac{1}{2}$ PN0420030423_100602_000000902015_00423_05988_0000.N1	schlecht	1
Heincke	29.04.2003	MER_RR_ $\frac{1}{2}$ PN0420030429_101725_000000902016_00008_0674_0000.N1	gut	1
Wappen von Hamburg	03.09.2002	MER_RR_ $\frac{1}{2}$ PNACR20020903_095732_000001152009_00108_02667_0000.N1	gut	6
Wappen von Hamburg	06.08.2003	MER_RR_ $\frac{1}{2}$ PN04V20030806_100607_000000902018_00423_07491_0000.N1	mittel	6
Wappen von Hamburg	17.09.2003	MER_RR_ $\frac{1}{2}$ PPACR20030917_094620_000001072020_00022_08092_0000.N1	schlecht	6

sollen, den Gültigkeitsbereich der Verfahren zu erproben, das heißt solche, bei denen die Algorithmen gut funktionieren sollten, solche bei denen die Verfahren an ihre Grenzen stoßen und auch solche, bei denen ein Versagen der Schemata zu erwarten ist. Nachstehende Tabelle 8.1 listet die verwendeten *in situ* Daten auf.

8.1 Die Korrekturschicht

Die Monte-Carlo-Daten, die zum Training des Neuronalen Netzes zur Atmosphärenkorrektur erzeugt wurden, beziehen sich auf eine Atmosphäre mit einem Luftdruck am Boden von $p_0 = 1013.25\text{hPa}$ (Standard-Luftdruck) und einem Ozongehalt, der dem mittleren Gehalt von 340 Dobson entspricht. Diese Atmosphäre wird im folgenden als Standardatmosphäre bezeichnet. Das vom Satelliten gemessene Signal $L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\theta_M, \phi_M)$ ⁴ muss also, weicht der aktuelle Luftdruck vom Standardluftdruck ab, beziehungsweise weicht der aktuelle Ozongehalt vom mittleren ab⁵, korrigiert werden. Das im folgenden beschriebenen Verfahren folgt [53].

Zu diesem Zwecke stelle man sich eine zusätzliche Atmosphärenschicht über der Standardatmosphäre vor, deren Rayleigh optische Dicke τ_R durch die Abweichung des aktuellen Luftdruckes vom Standardluftdruck gegeben ist. Bezeichnet λ die Wellenlänge in μm und p den aktuellen Luftdruck in [hPa], so gilt nach [23]:

$$\tau_R(\lambda) = 0.008735 \rho_R \lambda^{-4.08}$$

$$\text{mit } \rho_R = \frac{p - 1013.25}{1013.25}.$$

Zusätzlich wird dieser Schicht Ozon, dessen Konzentration wiederum durch die Abweichung des aktuellen Ozongehaltes von 340 Dobson gegeben ist, zugeordnet.

⁴TOA steht für *top of atmosphere*, also das Signal am Oberrand der Atmosphäre; \uparrow steht für aufwärts — gemeint ist also die Strahldichte, des zum Satelliten hin gestreuten Lichtes.

⁵Der Luftdruck und Ozongehalt sind als zusätzliche Informationen zu den MERIS-Daten gegeben.

Bezeichnet C_{O_3} den aktuellen Ozongehalt in Dobson und $a_{O_3}(\lambda)$ die in 6.3.3 angegebenen Absorptionskoeffizienten für Ozon in 1/cm, so ergibt sich die Ozon optische Dicke τ_{O_3} dieser Schicht zu

$$\tau_{O_3}(\lambda) = a_{O_3}(\lambda) \left(\frac{C_{O_3} - 340}{1000} \right).$$

Diese Schicht wird im folgenden als Korrekturschicht bezeichnet. Das Korrekturverfahren besteht nun darin, das Satellitensignal $L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ ⁶ zu berechnen, das der Satellit am Oberrand der Standardatmosphäre gemessen hätte und es die Korrekturschicht nicht geben würde (siehe Abbildung 8.2).

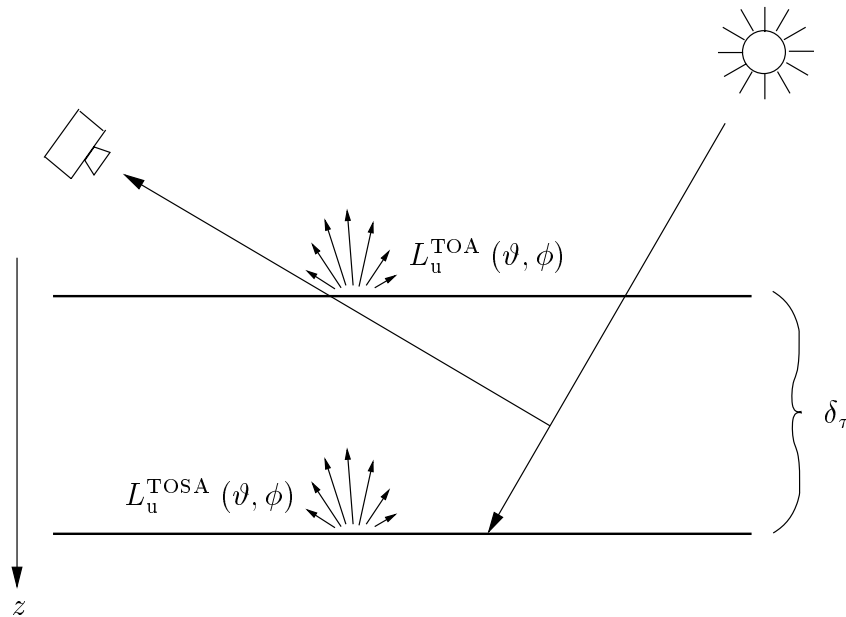


Abb. 8.2: Das am Oberrand der Atmosphäre vom Satelliten gemessene Signal kann man sich (vereinfacht) aus zwei Komponenten zusammengesetzt vorstellen. Die eine Komponente ist der transmittierte Anteil der am Oberrand der Standard–Atmosphäre nach oben gerichteten (diffusen) Strahlung. Der zweite Anteil entsteht durch die (Einfach–) Streuung in der Korrekturschicht der am Oberrand der Atmosphäre nach unten gerichteten Strahlung in Richtung des Satelliten.

Nimmt man an, dass die Korrekturschicht sehr dünn ist $\tau \ll 1$ und dass das vom Oberrand der Atmosphäre nach unten strahlende Licht in der Korrekturschicht genau einmal in Richtung des Satelliten gestreut wird, so gilt (nach [90], Seite 30 ff):

$$L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) = L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) T_{\uparrow R}^*(\lambda) T_{\uparrow O_3}(\lambda) +$$

⁶TOSA steht für *top of standard atmosphere*, also für das Signal am Oberrand der Standard–Atmosphäre.

$$E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda) T_{\uparrow \text{Oz}}(\lambda) T_{\downarrow \text{Oz}}(\lambda) \frac{p(\theta)}{2\pi} \frac{1 - T_{\uparrow \text{R}}(\lambda) T_{\downarrow \text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{M}} + \cos \theta_{\text{S}}}. \quad (8.1)$$

Dabei bezeichnen T und T^* die direkte beziehungsweise diffuse Transmissionen, mit

$$\begin{aligned} T_{\uparrow \text{Oz}}^*(\lambda) &\approx T_{\uparrow \text{Oz}}(\lambda) = \exp\left(-\frac{\tau_{\text{Oz}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{M}}}\right), \\ T_{\downarrow \text{Oz}}^*(\lambda) &\approx T_{\downarrow \text{Oz}}(\lambda) = \exp\left(-\frac{\tau_{\text{Oz}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{S}}}\right), \\ T_{\uparrow \text{R}}^*(\lambda) &\approx \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{M}}}\right), \\ T_{\downarrow \text{R}}^*(\lambda) &\approx \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{S}}}\right), \\ T_{\uparrow \text{R}}(\lambda) &= \exp\left(-\frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{M}}}\right), \\ T_{\downarrow \text{R}}(\lambda) &= \exp\left(-\frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{S}}}\right) \end{aligned} \quad (8.2)$$

und ϑ_{S} dem Sonnenzenitwinkel. Der Ausdruck $p(\theta)$ in Formel 8.1 steht für die Rayleigh-Phasenfunktion für eine Streuung in Richtung des Satelliten

$$\begin{aligned} p(\theta) &= \frac{3}{8} \frac{((1 + 3\gamma) + (1 - \gamma) \cos^2 \theta)}{(1 + 2\gamma)}, \\ \gamma &= \frac{d}{2 - d}, \quad d = 0.0279, \\ \cos \theta &= -(\sin \theta_{\text{M}} \sin \theta_{\text{S}} \cos(\phi_{\text{M}} - \phi_{\text{S}}) + \cos \theta_{\text{M}} \cos \theta_{\text{S}}). \end{aligned}$$

und die Strahlungsflussdichte $E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda)$ in selbigem Ausdruck ist durch die in den MERIS-Daten enthaltene Strahldichte $L_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\theta_{\text{S}}, \phi_{\text{S}}, \lambda)$

$$E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda) = L_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\theta_{\text{S}}, \phi_{\text{S}}, \lambda) \cos \theta_{\text{S}} \quad (8.3)$$

gegeben.

Berücksichtigt man nun $\tau \ll 1$ so lässt sich nähern

$$\begin{aligned} 1 - T_{\uparrow \text{R}}(\lambda) T_{\downarrow \text{R}}(\lambda) &= 1 - \exp\left(-\frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{M}}} - \frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{S}}}\right) \\ &\approx 1 - 1 + \tau_{\text{R}}(\lambda) \frac{\cos \theta_{\text{M}} + \cos \theta_{\text{S}}}{\cos \theta_{\text{M}} \cos \theta_{\text{S}}} \end{aligned}$$

setzt man diesen Ausdruck in 8.1 ein, so folgt

$$\begin{aligned} L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\theta_{\text{M}}, \phi_{\text{M}}, \lambda) &= L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_{\text{M}}, \phi_{\text{M}}, \lambda) T_{\uparrow \text{R}}^*(\lambda) T_{\uparrow \text{Oz}}(\lambda) + \\ &E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda) T_{\uparrow \text{Oz}}(\lambda) T_{\downarrow \text{Oz}}(\lambda) \frac{p(\theta)}{2\pi} \frac{\tau_{\text{R}}(\lambda)}{\cos \theta_{\text{M}} \cos \theta_{\text{S}}}, \end{aligned}$$

und schließlich

$$L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) = \frac{L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) - E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda) T_{\uparrow \text{Oz}}(\lambda) T_{\downarrow \text{Oz}}(\lambda) \frac{p(\theta)}{2\pi} \frac{\tau_R(\lambda)}{\cos \theta_M \cos \theta_S}}{T_{\uparrow R}^*(\lambda) T_{\uparrow \text{Oz}}(\lambda)}. \quad (8.4)$$

Für die Atmosphärenkorrektur wird nun die Reflektanz der Standard-Atmosphäre in Richtung des Satelliten benötigt werden. Mit der Definition

$$\rho^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) \equiv \frac{L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)}$$

folgt

$$\rho^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) = \frac{L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda) T_{\downarrow R}^*(\lambda) T_{\downarrow \text{Oz}}(\lambda)}. \quad (8.5)$$

8.2 Atmosphärenkorrektur

Nachdem aus dem vom Satelliten gemessenen Signal die Reflektanz der Standard-Atmosphäre berechnet wurde, kann nun das Neuronale Netz zur Atmosphärenkorrektur benutzt werden, um die Wasser-Reflektanz $\rho_W^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ ⁷ in Richtung des Satelliten im sichtbaren und nahen infraroten Spektralbereich zu bestimmen.

$$\begin{aligned} \rho_W^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) &\equiv \frac{L_{\uparrow W}^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda)} \\ &= \frac{L_{\uparrow W}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda) T_{\uparrow}^*(\lambda)} = \frac{L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) - L_{\uparrow \text{PG}}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda) T_{\uparrow}^*(\lambda)} \\ &= \frac{E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda) T_{\uparrow}^*(\lambda)} \left(\frac{L_{\uparrow}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)} - \frac{L_{\uparrow \text{PG}}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)}{E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)} \right) \\ &= \frac{1}{T_{\downarrow}^*(\lambda) T_{\uparrow}^*(\lambda)} \left(\rho^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) - \rho_{\text{PG}}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) \right) \quad (8.6) \end{aligned}$$

Der Index PG in Gleichung 8.6 steht für den Anteil der vom Satelliten gemessenen Strahlung, die nicht aus dem Wasser kommt, also für direkt reflektiertes Licht und in der Atmosphäre gestreutes Licht (von englisch *path* und *glint*). Die Verhältnisse $T_{\downarrow}^*(\lambda) = E_{\downarrow}^{\text{JASS}}(\lambda)/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)$ und $T_{\uparrow}^*(\lambda) = L_{\uparrow W}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)/L_{\uparrow W}^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ und die Reflektanz $\rho_{\text{PG}}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda) = L_{\uparrow \text{PG}}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)/E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda)$ sind die fehlenden Bestimmungsstücke in Gleichung 8.6.

Ursprünglich war angedacht, diese drei Größen durch ein Neuronales Netz im sichtbaren Spektralbereich aus den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre in Richtung des Satelliten im nahen Infraroten abzuleiten. Leider gelang dies nicht mit ausreichender Genauigkeit für die diffusen Transmissionen $T_{\uparrow}^*(\lambda) = L_{\uparrow W}^{\text{TOSA}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)/$

⁷JASS steht für *just above sea surface*, also für das Signal kurz über der Wasseroberfläche.

$L_{\uparrow W}^{\text{JASS}}(\theta_M, \phi_M, \lambda)$ beziehungsweise auch nicht für $T_{\uparrow}^*(\lambda) \approx E_{\uparrow W}^{\text{TOSA}}(\lambda)/E_{\uparrow W}^{\text{JASS}}(\lambda)$. (Die das Wasser verlassende Strahlung ist die Größe, die während der Monte–Carlo Simulationen den größten statistischen Fehler aufweist; das Verhältnis zweier solcher Größen ist daher unzureichend genau bestimmt. Eine Abschätzung der (gerichteten) Transmission $T_{\uparrow}^*(\lambda)$ aus der (ungerichteten) Transmission $T_{\downarrow}^*(\lambda)$ hingegen beinhaltet eine grobe Näherung, die eine ausreichend genaue Bestimmung der Wasser–Reflektanz nicht ermöglicht.) Nichtsdestotrotz sollte dieser Ansatz wieder aufgegriffen werden, sobald zukünftige Rechnerleistungen Monte–Carlo Simulationen mit weit höherer Statistik mit realistischem Zeitaufwand ermöglichen. Dieser Ansatz böte den Vorteil einer global anwendbaren Atmosphärenkorrektur, da die Wasserinhaltsstoffe im nahem infraroten Spektralbereich lediglich als Streuer implementiert sind – das heißt dort spielen lokal angepasste Charakteristika des biooptischen Modells, wie die Absorption durch Chlorophyll–a keine Rolle. Der entscheidende Nachteil ist aber, dass solch ein Korrekturverfahren global nicht so gut sein kann, wie ein regional angepasstes Verfahren. Sollen außer der Wasser–Reflektanz auch die Wasserinhaltsstoffkonzentrationen abgeleitet werden, so muss spätestens dann ein lokales biooptisches Modell implementiert werden — die Regionalisierung erfolgt also auf jeden Fall.

Stattdessen wurde folgender Ansatz verfolgt: ein Neuronales Netz wurde darauf trainiert aus den Reflektanzen der Standard–Atmosphäre im Sichtbaren und nahen Infraroten in Richtung des Satelliten die Wasser–Reflektanz im Sichtbaren und nahen Infraroten in Richtung des Satelliten zu bestimmen (siehe Abschnitt 7.3.1). Dieses Verfahren zur Atmosphärenkorrektur bietet den Vorteil lokal gut angepasst zu sein – aber auch den Nachteil, dass sowohl die Monte–Carlo–Simulationen als auch das Training des Neuronalen Netzes für andere Gewässer mit stark abweichenden optischen Eigenschaften wiederholt werden müssen.

Ein weiterer Vorteil den die direkte Ableitung der Wasser–Reflektanz aus der Reflektanz der Standardatmosphäre bietet, ist, dass aus der Kovarianzmatrix $C_{L_{\uparrow}^{\text{TOA}}}$ der vom Satelliten empfangen Strahldichten auch die Kovarianzmatrix $C_{\rho_W^{\text{JASS}}}$ der Wasser–Reflektanz berechnet werden kann. Für die von MERIS gemessenen Reflektanzen gibt es ein einfaches kein Streulicht berücksichtigendes Fehlermodell. Korrelationen zwischen den Fehlern der einzelnen Spektralbänder existieren in diesem Modell nicht, so dass die Kovarianzmatrix $C_{L_{\uparrow}^{\text{TOA}}}$ Diagonalgestalt hat [91]. Für gegebene Beobachtungsrichtung und Sonnenstand folgt aus Gleichung 8.4

$$\begin{aligned} \rho^{\text{TOSA}}(\lambda) &= t(\lambda)L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\lambda) + a(\lambda), \\ \text{mit } t(\lambda) &= \frac{1}{E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda) T_{\uparrow R}^*(\lambda) T_{\uparrow Oz}(\lambda)}, \\ \text{und } a(\lambda) &= \frac{E_{\downarrow}^{\text{TOA}}(\lambda) T_{\downarrow Oz}(\lambda) \frac{p(\theta)}{2\pi} \frac{\tau_R(\lambda)}{\cos \theta_M \cos \theta_S}}{E_{\downarrow}^{\text{TOSA}}(\lambda) T_{\uparrow R}^*(\lambda)}. \end{aligned}$$

Da MERIS die Strahldichten $L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\lambda)$ nur für endlich viele Wellenlänge misst, können

diese Strahldichten auch als Komponenten eines Vektor aufgefasst werden, mit

$$\rho_i^{\text{TOSA}} = \rho^{\text{TOSA}}(\lambda_i) = t_i L_{\uparrow i}^{\text{TOA}} + a_i = t(\lambda_i) L_{\uparrow}^{\text{TOA}}(\lambda_i) + a(\lambda_i);$$

die Reflektanzen der Standard–Atmosphäre gehen durch lineare Transformation aus den Strahldichten hervor

$$\rho^{\text{TOSA}} = \mathbf{T} \mathbf{L}_{\uparrow}^{\text{TOA}} + \mathbf{a}.$$

Wie man durch Einsetzen in die Definition der Kovarianzmatrix leicht nachrechnen kann, folgt daraus für die Kovarianzmatrix $\mathbf{C}_{\rho^{\text{TOSA}}}$ der Reflektanzen der Standard–Atmosphäre

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{\rho^{\text{TOSA}}} &= \mathbf{T} \mathbf{C}_{\mathbf{L}_{\uparrow}^{\text{TOA}}} \mathbf{T}^{\text{T}}, \\ C_{\rho^{\text{TOSA}}}^{ij} &= T^{ik} C_{L_{\uparrow}^{\text{TOA}}}^{kl} T^{jl} \\ &= \delta^{ik} T^{ik} C_{L_{\uparrow}^{\text{TOA}}}^{kl} \delta^{jl} T^{jl} \\ &= t_i t_j C_{L_{\uparrow}^{\text{TOA}}}^{ik}. \end{aligned}$$

Das in der vorliegenden Arbeit verwendete Programm für die Benutzung Neuronaler Netze, erlaubt es neben den Ausgabewerten y_j (in diesem Falle die Reflektanzen der das Wasser verlassenden Strahlung bei elf Wellenlängen) auch die Jacobi–Matrix $J_{ij} \equiv \frac{\partial y_j}{\partial x_i}$ bezüglich der Eingabewerte x_i (hier die entsprechenden Reflektanzen der Standard–Atmosphäre) auszulesen. Demnach kann schließlich die Kovarianzmatrix $\mathbf{C}_{\rho_{\text{W}}^{\text{JASS}}}$ zu

$$\mathbf{C}_{\rho_{\text{W}}^{\text{JASS}}} = \mathbf{J} \mathbf{C}_{\rho^{\text{TOSA}}} \mathbf{J}^{\text{T}} \quad (8.7)$$

berechnet werden, die für die Beurteilung der Werte der Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe wesentlich ist.

8.2.1 Validierung

Das eben beschriebene Verfahren zur Atmosphärenkorrektur soll validiert werden. Dazu werden zunächst MERIS–Szenen verwendet, zu denen gleichzeitig gewonnene *in situ* Daten vorliegen. So lassen sich die *in situ* gemessenen Daten mit denen vergleichen, die mit der operationellen Atmosphärenkorrektur beziehungsweise der hier beschriebenen Atmosphärenkorrektur berechnet werden. Da zwei verschiedene Neuronale Netze zur Atmosphärenkorrektur trainiert werden (eines, das mit Monte–Carlo–Daten trainiert wurde, in deren Berechnung die Polarisation des Lichtes unberücksichtigt bleibt und eines, das mit Daten trainiert wurde, in deren Berechnung die Polarisation berücksichtigt wurde, nach Abschnitt 7.3.1 im folgenden auch als NNPol und NNUnpol bezeichnet) kann somit auch entschieden werden, inwieweit die Berücksichtigung der Polarisation eine Rolle für die Atmosphärenkorrektur spielt.

Für das in einer reinen Rayleighstreuenden Atmosphäre rückgestreute Licht ergeben sich Unterschiede von bis zu $\approx 12\%$ durch die Vernachlässigung der Polarisation [92]. Eigene Monte–Carlo–Rechnungen für ein realistisches Atmosphäre–Ozean

System zeigen, dass die prozentualen Unterschiede in den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre zwischen 2 und 5% (im Blauen) und bis zu 2% (im Roten) betragen. Dabei werden die Reflektanzen durch die Vernachlässigung der Polarisation für typische Satellitenpositionen in der Deutschen Bucht unterschätzt; die zugehörigen Wasser-Reflektanzen werden in diesem Fall demnach überschätzt. Dieser Effekt sollte sich auch in der Validierung zeigen.

Des Weiteren wird eine Szene aus dem Mittelmeerraum ausgewählt, die zum Teil einen starken Sonnenreflex enthält. Anhand dieser Szene soll gezeigt werden, dass, anders als die operationell eingesetzte, die hier vorgestellte Atmosphärenkorrektur auch unter Einfluss des Sonnenreflexes sinnvolle Ergebnisse liefert. Zuletzt wird das Korrekturverfahren auf eine Szene angewendet, in der unterschiedlich stark ausgeprägte Zirren sichtbar sind. Dadurch soll der Gültigkeitsbereich der Korrektur in Anwesenheit von Zirren bestimmt werden.

Validierung mit *in situ* Daten

Zur Validierung mit *in situ* Daten werden die in Tabelle 8.1 angegebenen MERIS-Szenen verwendet und wie folgt vorgegangen: Aus den *Level-1B* Satellitendaten wird mittels oben beschriebenen Algorithmus die Wasser-Reflektanz in Richtung des Satelliten berechnet (mit den Neuronalen Netzen NNPol und NNUnpol) und mit den Schiffsmessungen sowie den *Level-2* Satellitendaten (die neben den Wasserinhaltsstoffkonzentrationen ebenfalls die Wasser-Reflektanz in Richtung des Satelliten enthalten) verglichen.

Für die Reflektanz-Messungen auf der Validationsfahrt mit dem Forschungsschiff „Heincke“ und den zugehörigen aus MERIS-Daten gewonnenen Reflektanzen sind die Spektren in Abbildung 8.3 dargestellt. Die MERIS-Überflüge fanden an den zwei ausgewählten Tagen jeweils ungefähr zwanzig Minuten nach den Schiffsmessungen statt.

Wie nicht anders zu erwarten war versagen alle Algorithmen zur Atmosphärenkorrektur bei den extremen Bedingungen (sehr hohe Schwebstoffkonzentrationen) im Weser-Mündungsgebiet vom 23. April. Für den 29. April hingegen stimmen die operationell eingesetzte und die mit dem NNPol emulierte Atmosphärenkorrektur befriedigend mit der *in situ* Messung überein.

Die nachfolgenden Abbildungen 8.4, 8.5 und 8.6 zeigen oben angeführte Spektren für die *in situ* Messungen auf der Fähre „Wappen von Hamburg“. Die Messungen an sechs Stationen erfolgten jeweils zwischen kurz nach neun Uhr UTC (an der ersten Station) und gegen halb elf Uhr UTC (an der letzten Station); die MERIS-Überflugzeit differieren und sind in der jeweiligen Abbildung vermerkt.

Zu den Daten vom 3. September 2002 ist zu bemerken, dass die mit der operationell eingesetzten Methode berechneten Reflektanzen an der 1. Station als ungültig im *Level 2*-Produkt markiert sind und somit nicht in den Vergleich mit einbezogen werden sollten. An den übrigen Stationen stimmen alle Algorithmen gut mit den *in situ* Daten überein. Für den 6. August 2003 wird an allen Stationen außer Station 5 wiederum die

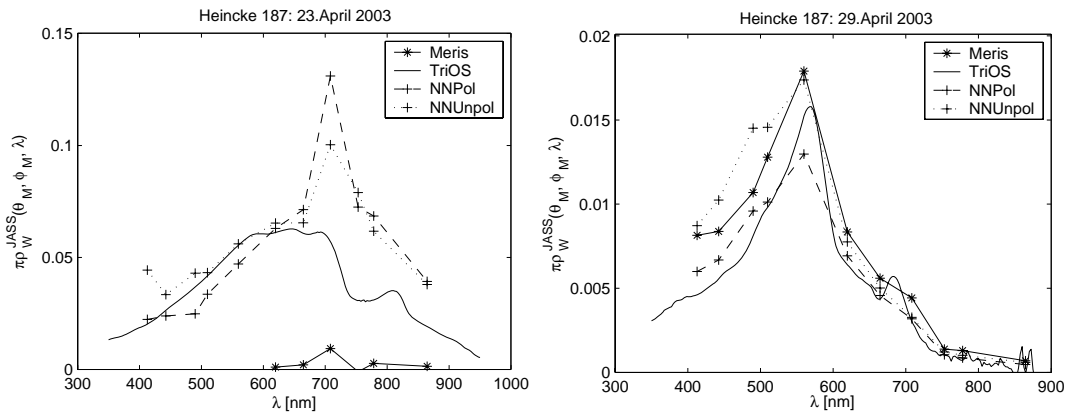


Abb. 8.3: Dargestellt sind die Reflektanzspektren, wie sie an Bord des Schiffes gemessen wurden, wie sie mit dem MERIS-Algorithmus und dem hier vorgestellten Algorithmus berechnet werden. Die Schiffsmessung vom 23. April fand in der Weser-Mündung statt; die vom 29. April in der offenen Nordsee (Breite: 53.648° Nord, Länge: 5.980° Ost).

operationell eingesetzte Atmosphärenkorrektur als ungültig markiert. Zusätzlich wird im *Level 2*-Produkt die Verwendung des blauen Aerosoltyps zur Atmosphärenkorrektur dieser Szene vermerkt. Das Fehlen eines solchen Aerosols im hier vorgeschlagenen Schema könnte die Abweichungen im Blauen zwischen der Atmosphärenkorrektur mit den Netzen und den *in situ* Daten an den Stationen 2 und 3 erklären. Am 17. September 2003 ist über den zu der Station 6 gehörigen MERIS-Pixeln eine Wolke sichtbar, deren Ausläufe auch die anderen Stationen beeinflussen (im *Level 2* Produkt als *ice haze* markiert). Obwohl als ungültig markiert liefert die operationell eingesetzte Methode gute Ergebnisse (von Station 1 und 6 abgesehen). Das hier vorgestellte Verfahren stimmt für die 1. Station gut mit den Schiffsmessungen überein, versagt jedoch an den Stationen 2, 4 und 5.

Allgemein ist bei den Vergleichen auffällig, dass die eigene Atmosphärenkorrektur in Küstennähe besser mit den Messungen übereinstimmt, als im offenen Ozean. Während die operationell eingesetzte Korrektur in Küstennähe oftmals versagt⁸, ist dies für die mit den Neuronalen Netzen bestimmten Reflektanzen nicht der Fall.

Zum Anderen weisen die Reflektanzspektren, die Ausgabewerte der beiden Neuronalen Netze (NNPol und NNUnpol) sind, teilweise erhebliche Unterschiede auf, wobei die Anwendung von NNPol besser mit den *in situ* Daten übereinstimmt.

Weiterhin fällt auf, dass das hier vorgestellte Korrekturverfahren im blauen Spektralbereich oftmals zu hohe Werte im Vergleich zu den *in situ* Daten liefert. Als Ursache hierfür sind zwei Gründe anzuführen. Zum einen umfasst der Datensatz, der zum

⁸Es ergeben sich dann nach der Atmosphärenkorrektur, die nicht für hohe Konzentrationen von Schwebstoff ausgelegt ist, negative Wasser-Reflektanzen. Der Nutzer der Daten wird explizit darauf hingewiesen, dass die Korrektur ungültig ist.

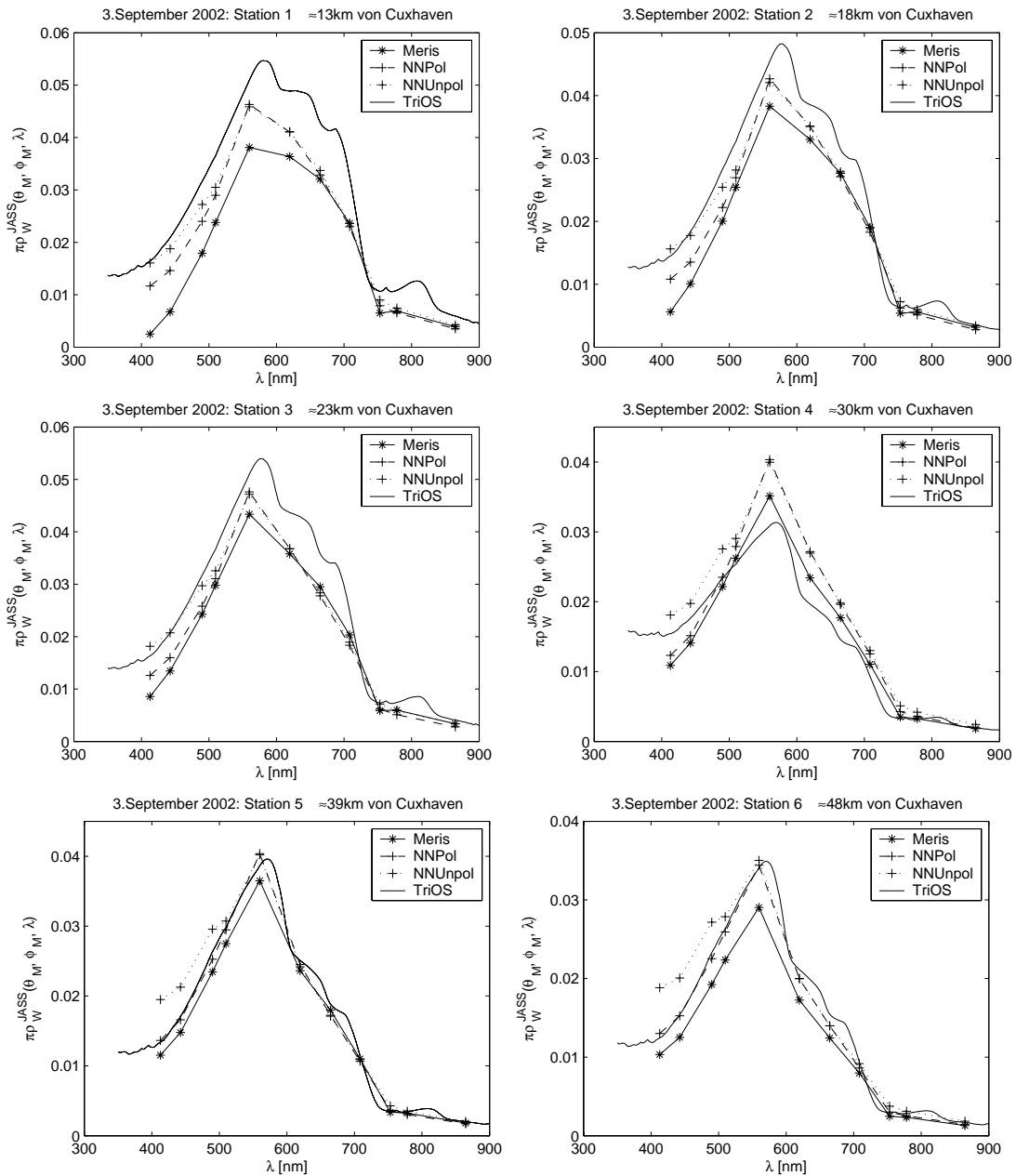


Abb. 8.4: „Wappen von Hamburg“ Fahrt vom 3. September 2002 (MERIS-Überflug um 9 : 03 Uhr UTC): gezeigt sind die TriOS-Reflektanzmessungen an den sechs Stationen jeweils zusammen mit den Ergebnissen der hier vorgestellten und der für MERIS operationell eingesetzten Atmosphärenkorrektur.

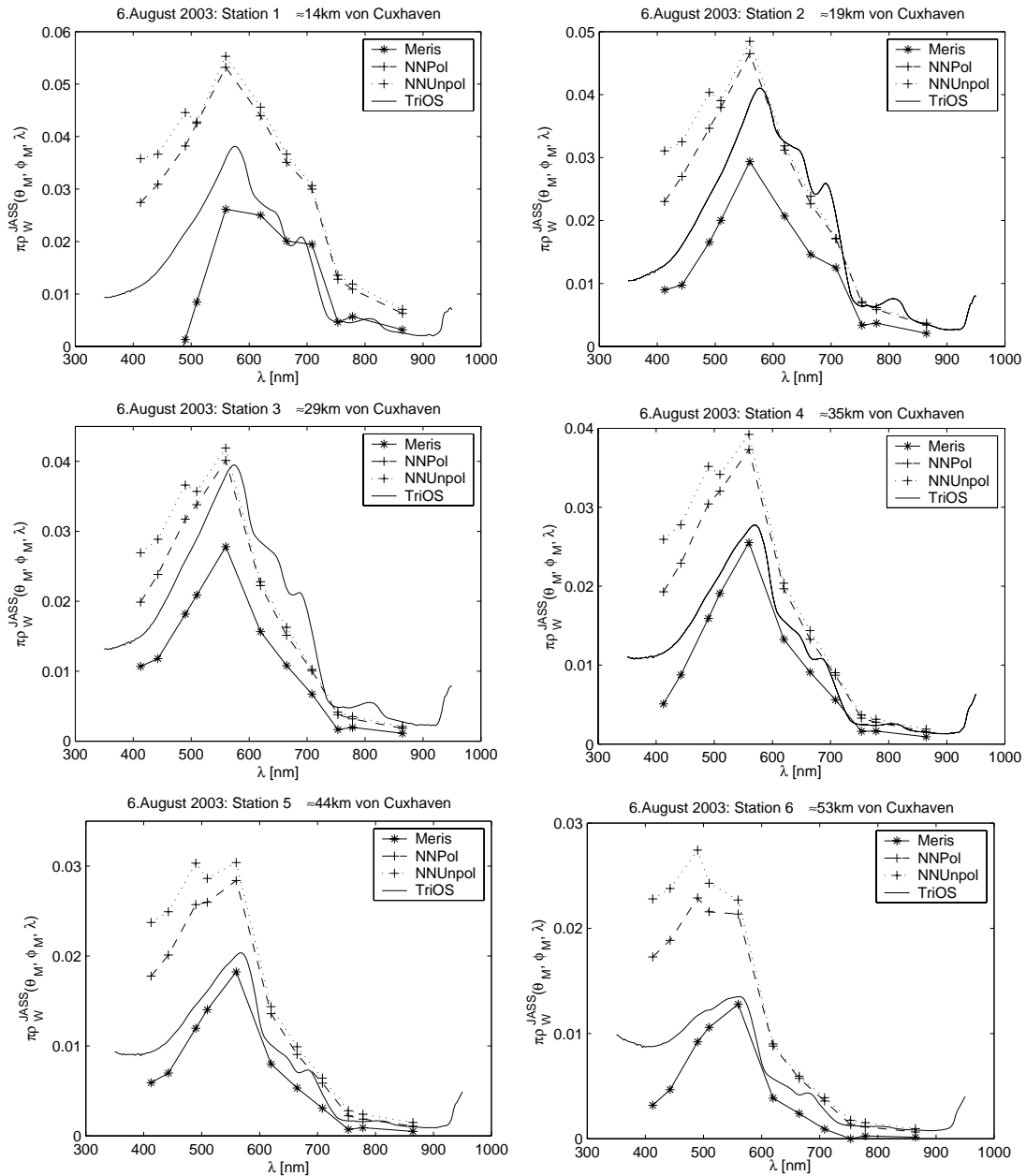


Abb. 8.5: „Wappen von Hamburg“ Fahrt vom 6. August 2003 (MERIS-Überflug um 10 : 06 Uhr UTC): gezeigt sind die TriOS-Reflektanzmessungen an den sechs Stationen jeweils zusammen mit den Ergebnissen der hier vorgestellten und der für MERIS operationell eingesetzten Atmosphärenkorrektur.

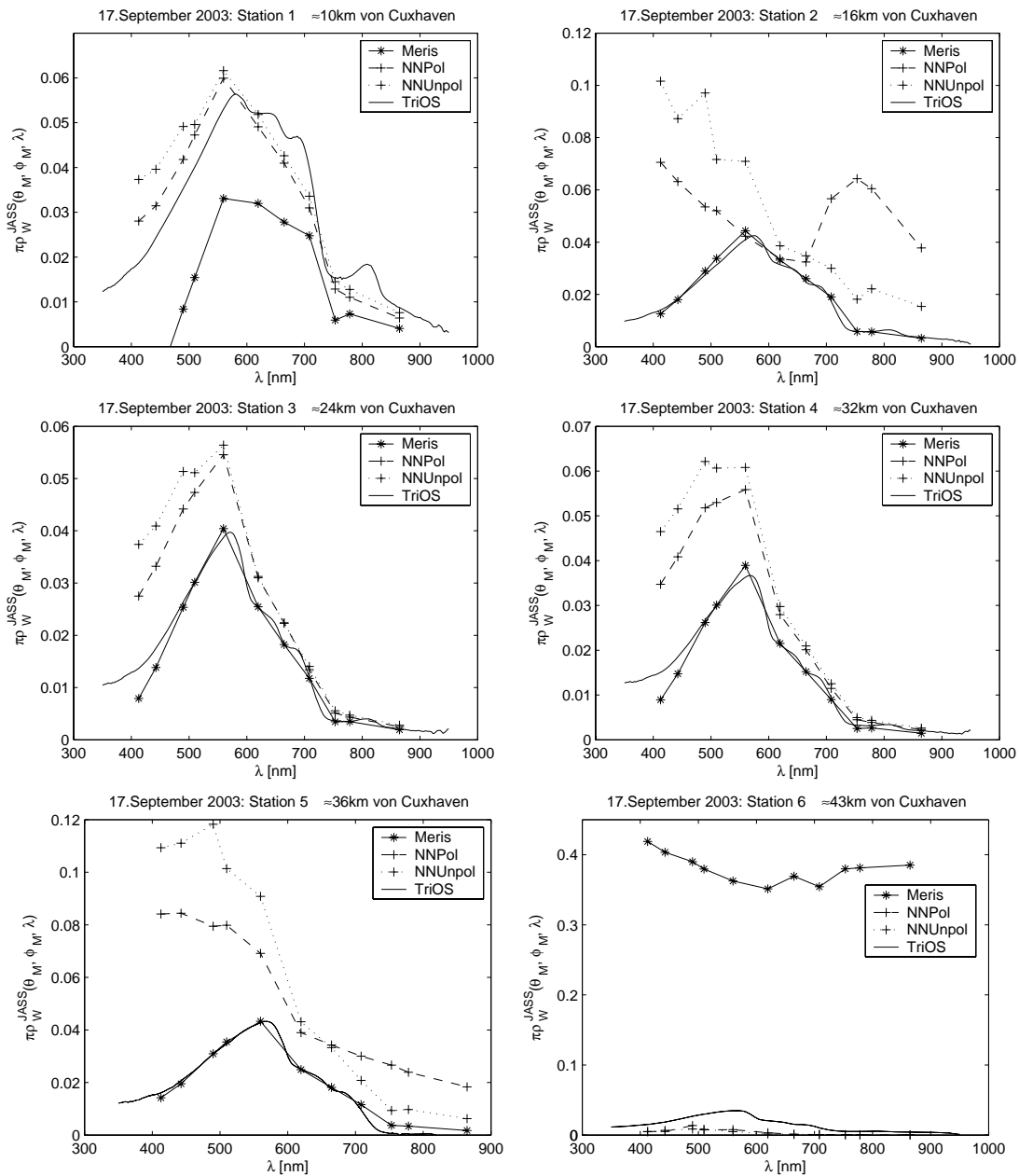


Abb. 8.6: „Wappen von Hamburg“ Fahrt vom 17. September 2003 (MERIS–Überflug um 9 : 46 Uhr UTC): gezeigt sind die TriOS–Reflektanzmessungen an den sechs Stationen jeweils zusammen mit den Ergebnissen der hier vorgestellten und der für MERIS operationell eingesetzten Atmosphärenkorrektur.

Training der Neuronalen Netze verwendet wurde, verschiedenste Zusammensetzungen der Atmosphäre bezüglich der in ihr enthaltenen Aerosole (besonders zu nennen ist hierbei das urbane Aerosol, da es als einziges bodennahes Aerosol stark absorbierend wirkt). Dies führt dazu, dass die Atmosphärenkorrektur mittels des Neuronalen Netzes dann besonders gut funktioniert, wenn die aktuelle Atmosphärenzusammensetzung der mittleren Zusammensetzung der Atmosphäre der Trainingsdaten entspricht.

Ein zweiter Grund für die im blauen Spektralbereich oftmals zu hohen Reflektanzwerte der das Wasser verlassenden Strahlung ist, dass die für die Simulation von MERIS-Daten verwendete Atmosphäre (siehe Abschnitt 6.3) nicht genügend kleine Aerosole enthielt. So ist der mittlere Ångström-Koeffizient $a \equiv \tau_A(\lambda = 440\text{nm}) / \tau_A(\lambda = 870\text{nm})$ der bodennahen Aerosole im Modell $a \approx 1.2$. Wie die neuesten Auswertungen der Daten der „Cimel“ Meßstation auf Helgoland ergaben, beträgt der dort gemessene Ångström-Koeffizient im Mittel $a \approx 1.7$ mit Maximalwerten von $a \approx 2.1$ [93]. Keines der hier verwendeten Aerosolmodelle liefert einen solch hohen Ångström-Koeffizienten, der einem Aerosol mit kleinen Partikeln und einer nahezu Rayleigh-artigen Streufunktion entspricht.

Zusammenfassend lässt sich aus den Vergleichen schlussfolgern, dass die hier vorgestellte Atmosphärenkorrektur in schwebstoffreichen Küstengewässern besser funktioniert, als die operationell eingesetzte aber dennoch teilweise (insbesondere im offenen Ozean) versagt. Als Grund für das Versagen kann ein dem Modell fehlender Aerosoltyp identifiziert werden. Grundsätzlich liefert jedoch jene Korrektur, die die Polarisation des Lichtes berücksichtigt bessere Ergebnisse. Die vorhergesagte Überschätzung der Wasser-Reflektanz (insbesondere im Blauen) bei Vernachlässigung der Polarisation zeigt sich tendenziell bestätigt. Im Anschluß soll nun ein Optimierungsverfahren vorgestellt werden, um die Korrektur weiter zu verbessern.

Optimierung des Korrekturverfahrens

Um den verschiedenen Aerosolzusammensetzungen der Atmosphäre Rechnung zu tragen, kann wie folgt vorgegangen werden: Der Trainingsdatensatz wird in n Untergruppen $A_k, k \in [1, n]$ eingeteilt; zum Beispiel eine, die Atmosphären mit geringer optischer Dicke des Aerosols, eine Gruppe für Atmosphären, die der mittleren optischen Dicke entsprechen und einer Gruppe, die besonders optisch dicke Atmosphären enthält. Für jede der gewählten Gruppen wird anschließend nach obigem Schema separat ein Neuronales Netz zur Atmosphärenkorrektur trainiert. Jedes der n Netze $NN(A_k)$ wird angewandt. Nun gilt es zu entscheiden, welches der Netze die aktuell beste Atmosphärenkorrektur liefert. Dazu werden ein Neuronales Netz $NNVorw$, das das Vorwärtsmodell für die Bestimmung der Wasserreflektanzen emuliert (Eingabe sind die drei Wasserinhaltsstoffkonzentrationen k_j , Ausgabe die Reflektanz der das Wasser verlassenden Strahlung) und ein dazu inverses Netz $NNInv$ benötigt. Mittels des inversen Netzes erfolgt eine erste Schätzung der Inhaltsstoffkonzentrationen $k_j(A_k)$, die als Eingabe für das Vorwärts-Netz $NNVorw$ dient. Dieses Netz liefert nun wieder ein Reflektanzspektrum $\tilde{\rho}_W^{JASS}(A_k)$, das möglicherweise erheblich von dem

ursprünglichen $\rho_{\text{W}}^{\text{JASS}}(A_k)$ abweicht. Die Summe der (gewichteten) Abstandsquadrate $\chi^2(A_k)$ (dem Quadrat des Mahalanobisabstandes) zwischen diesen beiden Reflektanzspektren entscheidet darüber, welches der n Netze das aktuell beste Reflektanzspektrum liefert, nämlich jenes mit dem kleinsten $\chi^2(A_k)$. Abbildung 8.7 skizziert die Optimierungsprozedur.

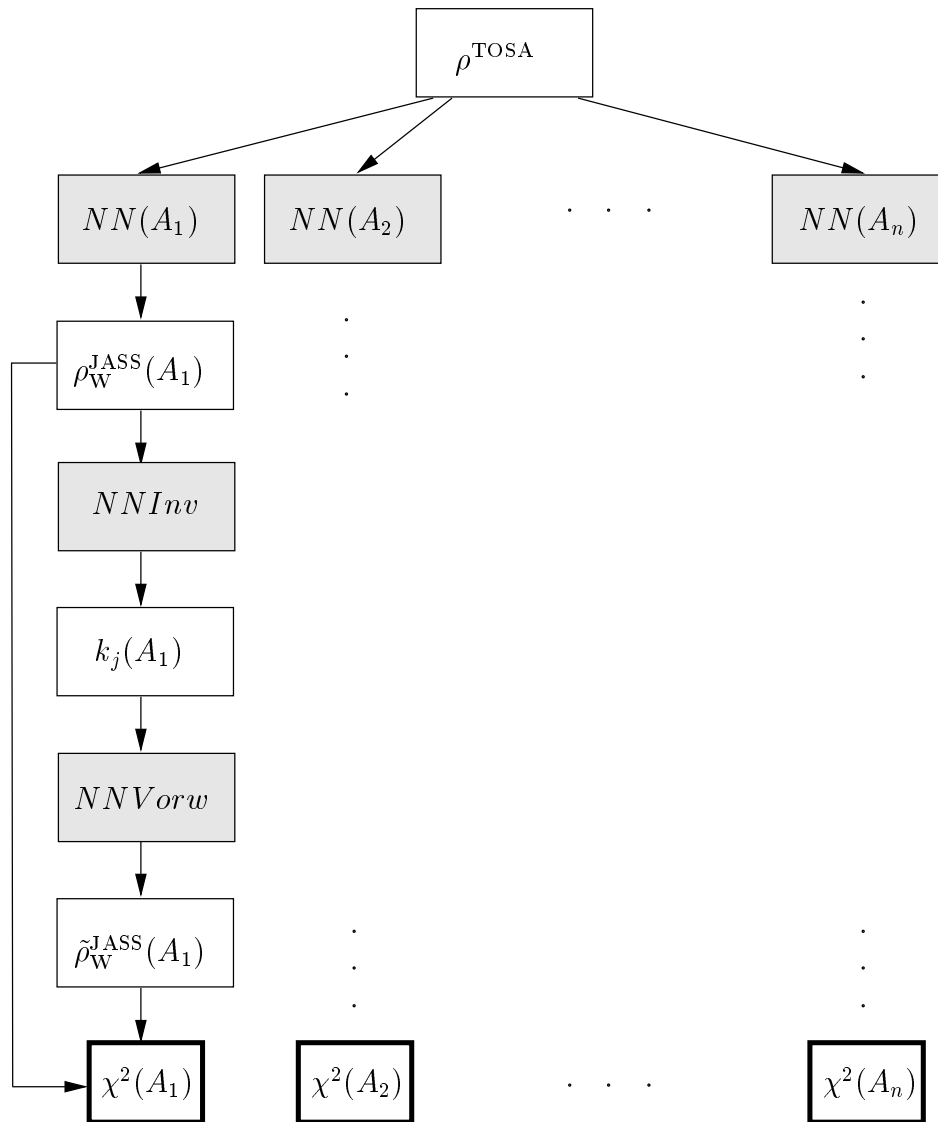


Abb. 8.7: Schematische Darstellung der Optimierungsprozedur zur Atmosphärenkorrektur.

Die Konzentrationen k_j und das Spektrum $\tilde{\rho}_{\text{W}}^{\text{JASS}}(A_k)$ können zusätzlich iterativ so aufeinander abgestimmt werden, dass das Abstandsquadrat $\chi^2(A_k)$ minimiert wird: Die Konzentrationen k_j werden gemäß des Abstandsquadrates (Quantität der Änderung) und der Kovarianzmatrix (Richtung der Änderung) verändert; die so bestimmten

Konzentrationen dienen wiederum als Eingabe an das Netz *NNVorw*, das ein neues Reflektanzspektrum ausgibt. Der Vergleich dieses Spektrums mit dem ursprünglichen gibt einen neuen Abstandsquadrat. Die Iteration wird abgebrochen, wenn keine nennenswerte Änderung des berechneten Abstandsquadrates $\chi^2(A_k)$ mehr auftritt (nach [78]).

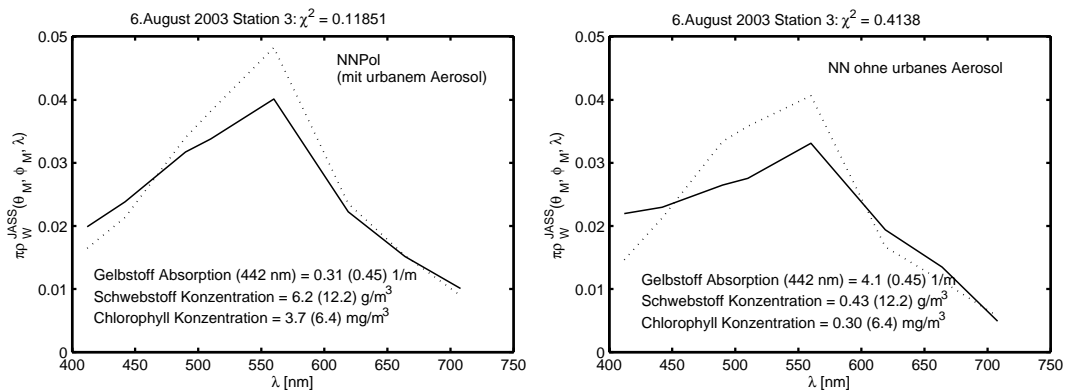


Abb. 8.8: Ergebnisse des Optimierungsverfahrens zur Bestimmung der Wasser–Reflektanz: Die linke Abbildung zeigt das Reflektanzspektrum, wie es von dem hier vorgestellten Neuronalen Netz NNPol berechnet wurde (durchgezogene Linie) und nach der Optimierung (gepunktete Linie). In der rechten Abbildung ist Gleiches für das Netz gezeigt, dessen Trainingsdaten kein urbanes Aerosol berücksichtigten. Mit angegeben sind jeweils die Summe der Abweichungsquadrate χ^2 beider Spektren, sowie die dem Optimierungsverfahren entnommenen Inhaltsstoffkonzentrationen (zum Vergleich wurde in Klammern die zugehörigen *in situ* Werte mit angegeben).

Das Verfahren wird beispielhaft für die Station 3 der „Wappen von Hamburg“ Fahrt vom 6. August 2003 (siehe Abbildung 8.5) erprobt. Dabei werden jene Wasser–Netze *NNInv* und *NNVorw* verwendet, die auch derzeit operationell für die Prozessierung der MERIS–Daten zur Anwendung kommen. Das Netz NNPol und ein Netz, das mit Monte–Carlo Daten trainiert wurde, die kein bodennahes absorbierendes Aerosol enthielten, werden für die Atmosphärenkorrektur verwendet. Die Ergebnisse des Optimierungsverfahrens sind in Abbildung 8.8 dargestellt. Für dieses Fallbeispiel ist die Abweichung der Reflektanzspektren vor und nach der Optimierung für das Neuronale Netz NNPol deutlich geringer als für jenes, das kein urbanes Aerosol berücksichtigt. Des Weiteren stimmen für das Netz NNPol auch die mit der Optimierung gewonnenen Inhaltsstoffkonzentrationen deutlich besser mit den *in situ* Daten überein.

Messung bei Sonnenreflex

Ein weiterer Vorteil der hier vorgestellten Atmosphärenkorrektur ist, dass sie auch dann anwendbar bleibt, wenn der Sonnenreflex in einer MERIS–Szene sichtbar ist (der Idee

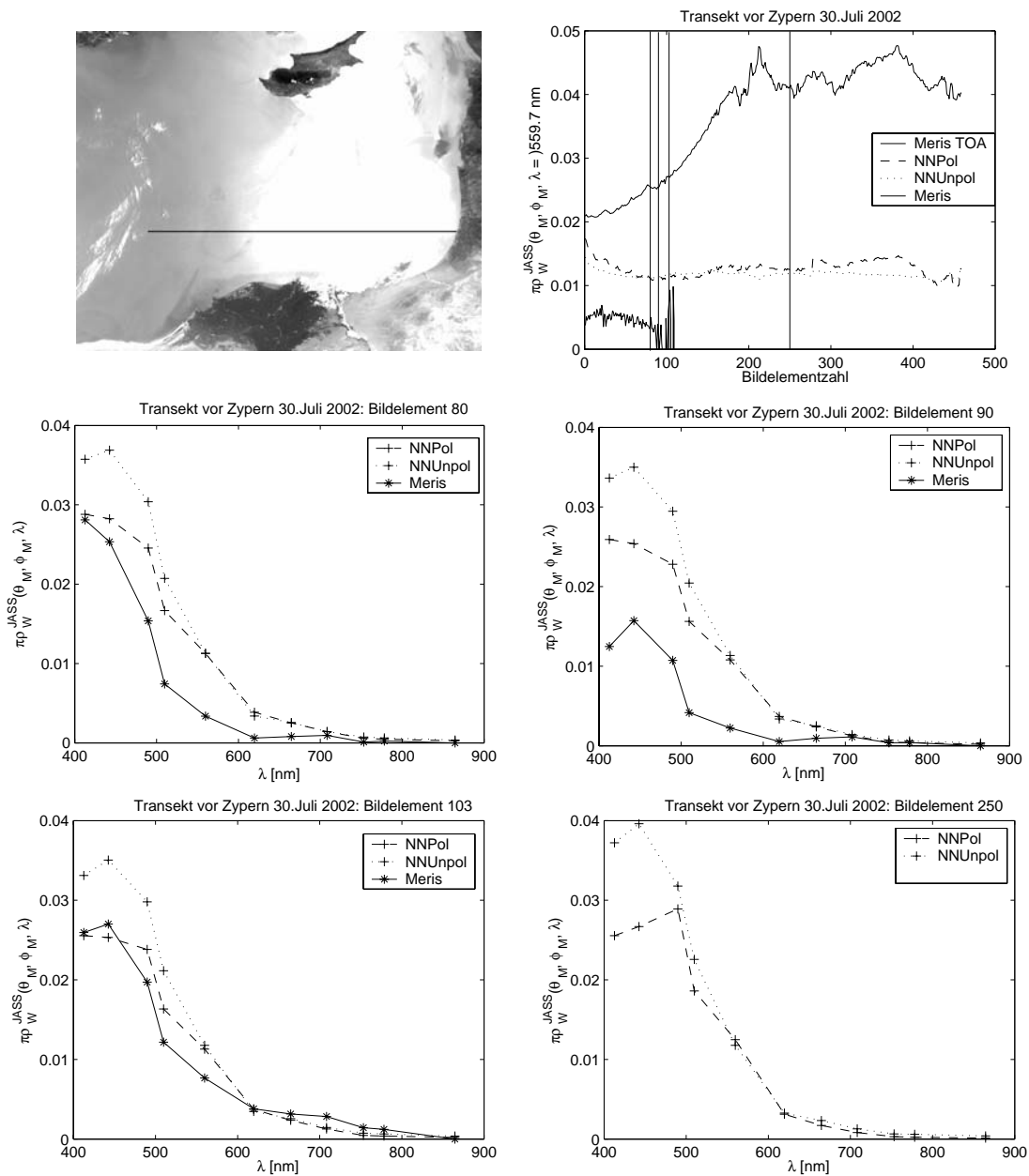


Abb. 8.9: Die erste Abbildung zeigt die ausgewählte MERIS-Szene (gut zu erkennen ist der Sonnenreflex) und den Schnitt, entlang dessen die Korrekturen durchgeführt wurde. Die nebenstehende Abbildung zeigt die Wasser-Reflektanz, wie sie vom MERIS-Algorithmus und den beiden Netzen entlang dieses Schnittes berechnet wurde, für die Wellenlänge $\lambda = 559.7\text{nm}$. Zusätzlich wurde die von MERIS in diesem Kanal gemessene Strahldichte (skaliert dargestellt) mit eingezeichnet, an deren Verlauf der zunehmende Einfluss des Sonnenreflexes gut erkennbar ist. Die drei folgenden Abbildung zeigen Reflektanzspektren für einzelne Bildelemente, für die der MERIS-Algorithmus noch anwendbar ist, während die letzte Abbildung ein stark durch den Sonnenreflex beeinflusstes Pixel zeigt.

von einer bei der GKSS entwickelten Atmosphärenkorrektur folgend [82], [53]). Dazu wurde ein Schnitt durch eine Szene⁹ aus dem Mittelmeerraum vom 30. Juli 2002 gelegt (im Sommer herrschen dort oligotrophe Bedingungen, so dass von einer homogenen Wasser–Reflektanz ausgegangen werden kann), der anfangs Bildelemente umfasst, die nicht vom Reflex beeinflusst sind und zu höheren Bildelementzahlen hin immer mehr davon enthält. Die Ergebnisse der Atmosphärenkorrektur entlang dieses Schnittes sind in Abbildung 8.9 dargestellt. Deutlich zu erkennen ist das Versagen der operationell eingesetzten Korrektur¹⁰ für Bildelementzahlen größer als 105, während die hier vorgestellte Korrektur entlang des gesamten Schnittes weitgehend vom Sonnenreflex unbeeinflusst bleibt. Für Bildelemente, die keinen Sonnenreflex enthalten, stimmen die MERIS–Reflektanzspektren der das Wasser verlassenden Strahlung recht gut mit den durch die Neuronale Netze abgeleiteten überein. Die Form der von den Netzen berechneten Spektren bleibt auch für Bildelemente mit starkem Sonnenreflex gleich.

Messung bei Zirren

Das Monte–Carlo Modell, das zur Erzeugung der Daten, mit denen die Neuronale Netze trainiert wurden, benutzt wurde, berücksichtigt auch dünne Zirren (siehe Abschnitte 3.5 und 6.3.2). Anhand einer Szene vor der Küste Spaniens¹¹, die viele Zirren unterschiedlicher optischer Dicke enthält, soll die Gültigkeit der Atmosphärenkorrektur unter diesen Bedingungen getestet werden. Durch die Szene wurde ein Schnitt gelegt, der einige unterschiedlich stark ausgeprägte Zirren kreuzt und durch einen möglichst homogenen Wasserkörper läuft.

Abbildung 8.10 zeigt die Resultate der operationellen und der durch die Neuronale Netze berechneten Atmosphärenkorrekturen entlang dieses Schnittes. Für das Bildelement, das keinen sichtbaren Zirkus enthält, stimmen das durch den operationellen Algorithmus und das durch das Neuronale Netz, das die Polarisation berücksichtigt, berechnete Wasserreflektanzspektrum gut überein. Die Reflektanzspektren, die durch die Neuronale Netze bestimmt werden, zeigen in Anwesenheit eines leichten Zirkus (Albedo zirka 0.02) keinen Unterschied zu denen ohne Zirkus. Für das MERIS–Reflektanzspektrum ergeben sich lediglich im blauen Spektralbereich kleine Abweichungen. Bei noch stärkeren Zirren (ab einer Albedo von zirka 0.03) stoßen alle Algorithmen an ihre Grenzen.

⁹MER_RR_1_2_PNACR20020730_082135_000001972008_00107_02165_0000.N1

¹⁰Die operationell eingesetzte Methode erlaubt keine Korrektur bei Sonnenreflex. Die zugehörigen Wasser–Reflektanzen sind dann negativ und als ungültig markiert.

¹¹MER_RR_1_2_PN01V20021007_103243_000000902010_00094_03154_0000_Spain.N1

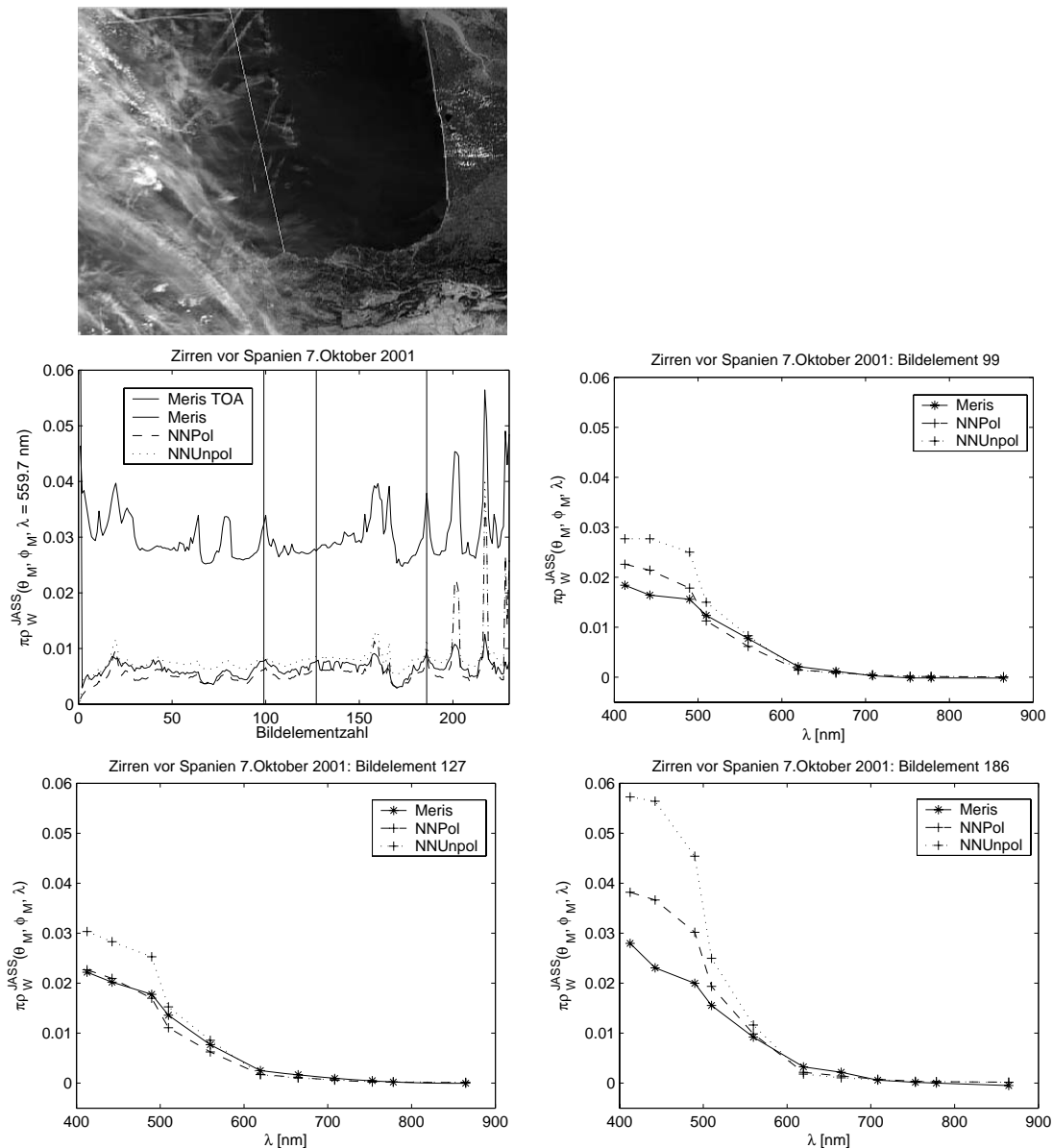


Abb. 8.10: Die erste Abbildung zeigt die MERIS Szene und den gewählten Schnitt, der einige Zirren kreuzt. Es folgt die Wasser-Reflektanz, wie sie vom MERIS-Algorithmus und den beiden Netzen entlang dieses Schnittes berechnet wurde, für die Wellenlänge $\lambda = 559.7 \text{ nm}$. Zusätzlich wurde die von MERIS in diesem Kanal gemessene Strahldichte (skaliert dargestellt, oberste Kurve) mit eingezeichnet, an deren Verlauf die Positionen der Zirren zu erkennen ist. Die folgenden drei Abbildungen zeigen Reflektanzspektren für einzelne Bildelemente (Bildelement 99: leichter Zirkus, Bildelement 127: kein sichtbarer Zirkus, Bildelement 186: stärkerer Zirkus).

8.3 Direkte Bestimmung der Wasserinhaltsstoffe

Das in Kapitel 7.3.2 beschriebene Neuronale Netz berechnet aus den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre die folgenden drei Größen (jeweils bei 442 nm): $\ln(a_G + a_S)$, $\ln(a_C)$ und $\ln(b_S + b_W)$ (siehe auch Kapitel 6.5). Diese Netz-Ausgabedaten können mittels der empirischen Formeln 6.19 auf die Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe k_C , k_S , k_G umgerechnet werden.

8.3.1 Validierung

Auf die in Tabelle 8.1 angeführten Satelliten-Szenen wurden auch die beiden Netze (eines, das mit Monte-Carlo-Daten trainiert wurde, in deren Berechnung die Polarisation des Lichtes unberücksichtigt bleibt und eines, das mit Daten trainiert wurde, in deren Berechnung die Polarisation berücksichtigt wurde, nach Abschnitt 7.3.1 im folgenden auch NNPol und NNUnpol) angewandt, die direkt aus den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre die Wasserinhaltsstoffkonzentrationen berechnen. Die *in situ* Bestimmungen der Konzentrationen beziehungsweise der Absorption durch Gelbstoff erfolgte dabei, wie in [89] gefordert (siehe dazu auch den einleitenden Teil dieses Kapitels).

Zusätzlich wurden die Neuronale Netze noch auf einen Schnitt durch eine Szene angewandt, in dem hohe Schwebstoffkonzentrationen zu erwarten sind.

Ein weiterer Ausgabewert des Neuronale Netzes zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen ist die optische Dicke der Aerosole bei einer Wellenlänge von 550nm (siehe Abschnitt 7.3.2). Diese Größe geht nicht in die Atmosphärenkorrektur oder in die Ableitung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen ein, jedoch wird exemplarisch gezeigt, dass eine Ableitung der optischen Eigenschaften der Aerosole möglich ist.

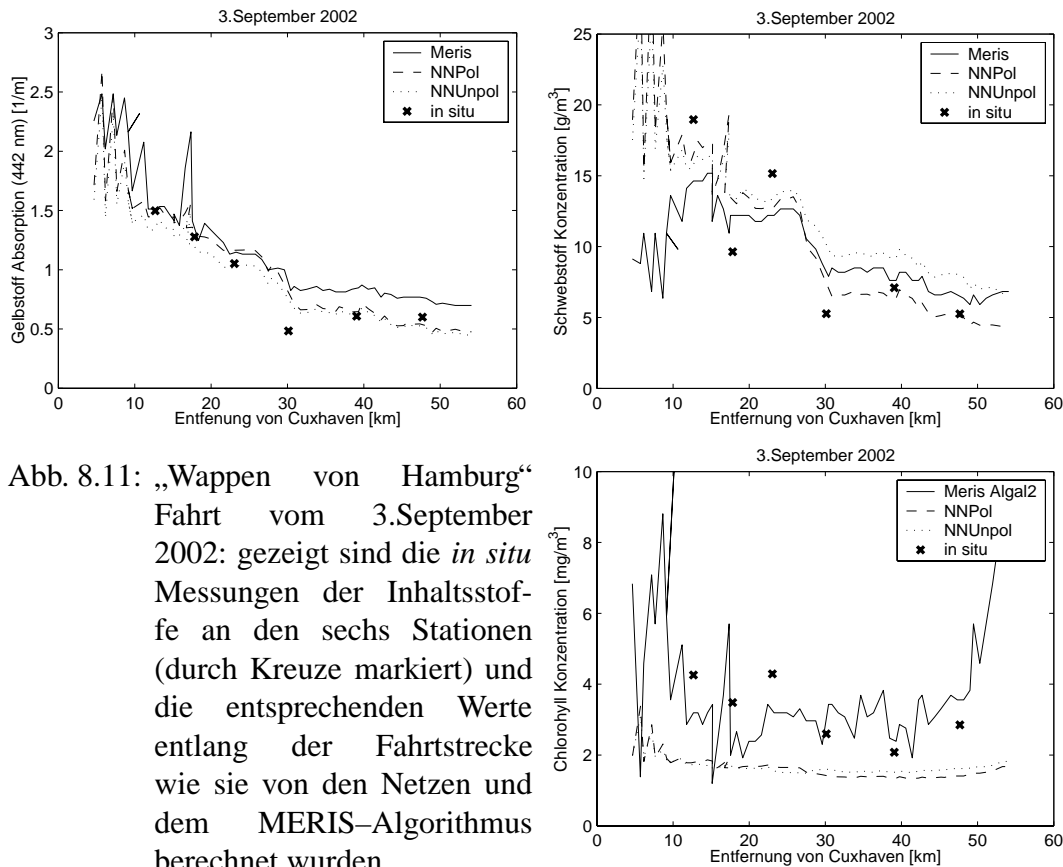
Validierung mit *in situ* Daten

In Tabelle 8.2 sind die Konzentrationen für die zwei *match up* Pixel der Validationsfahrt im Jahr 2003 mit dem Forschungsschiff „Heincke“ in der Deutschen Bucht, wie sie von den Netzen und dem operationellen MERIS-Algorithmus berechnet werden, zusammen mit den *in situ* Werten aufgelistet. (Der berechnete Wert, der jeweils am besten mit den gemessenen Daten übereinstimmt, ist fett dargestellt.) Für den 29. April liefern beide Neuronale Netze Konzentrationen, die sehr gut (und im Falle der Chlorophyll-a Konzentration sogar besser als MERIS) mit den *in situ* Daten übereinstimmen. Für den 23. April, an dem Wasserproben aus dem Weser-Mündungsgebiet genommen wurden und dementsprechend extrem hohe Konzentrationen von Schweb- und Gelbstoff vorliegen, kommt das Neuronale Netz, das die Polarisation berücksichtigt diesen Werten am nächsten – nur die Chlorophyll-a Konzentration wird von diesem Netz stark überschätzt. Die operationell bestimmten Konzentrationen sollten für diesen

Tag nicht in den Vergleich miteinbezogen werden, da ihnen eine als ungültig markierte Atmosphärenkorrektur zugrunde liegt.

Tab. 8.2: Ergebnisse für die Validationsfahrt mit dem Forschungsschiff „Heincke“

	23.April 2003			29.April 2003		
	$k_C [\frac{mg}{m^3}]$	$k_S [\frac{g}{m^3}]$	$k_G [\frac{1}{m}]$	$k_C [\frac{mg}{m^3}]$	$k_S [\frac{g}{m^3}]$	$k_G [\frac{1}{m}]$
<i>in situ</i>	3.6	100.2	1.1	3.6	3.5	0.2
NNPol	32.7	25.0	1.5	3.7	1.3	0.2
NNUnpol	2.6	12.0	5.2	2.8	1.9	0.2
MERIS	15.2	6.4	2.3	9.3	2.9	0.4



Die Abbildungen 8.11, 8.12 und 8.13 zeigen die Wasserinhaltsstoffkonzentrationen entlang der gesamten Strecke Cuxhaven–Helgoland, wie sie vom MERIS-Algorithmus und den beiden Neuronalen Netzen berechnet werden. Die sechs Stationen, an denen Wasserproben genommen und analysiert werden, sind markiert.

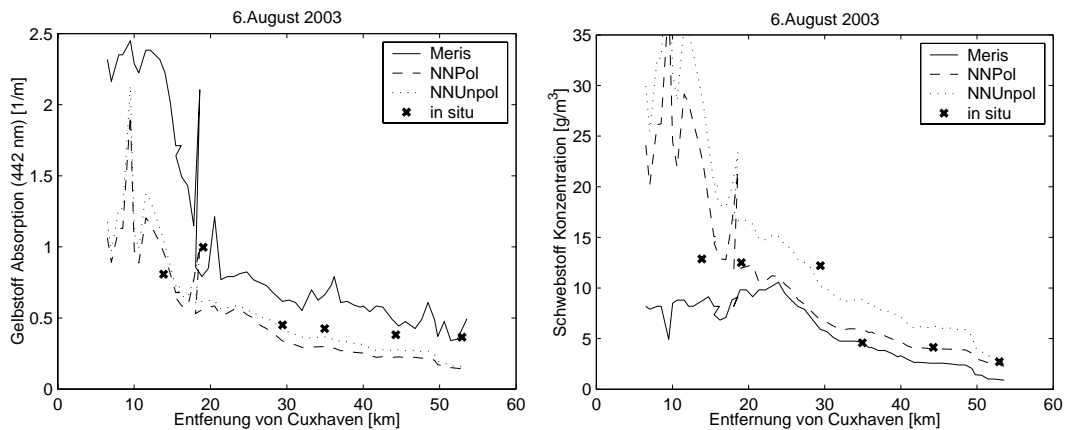


Abb. 8.12: „Wappen von Hamburg“ Fahrt vom 6. August 2003: gezeigt sind die *in situ* Messungen der Inhaltsstoffe an den sechs Stationen (durch Kreuze markiert) und die entsprechenden Werte entlang der Fahrtstrecke wie sie von den Netzen und dem MERIS-Algorithmus berechnet wurden.

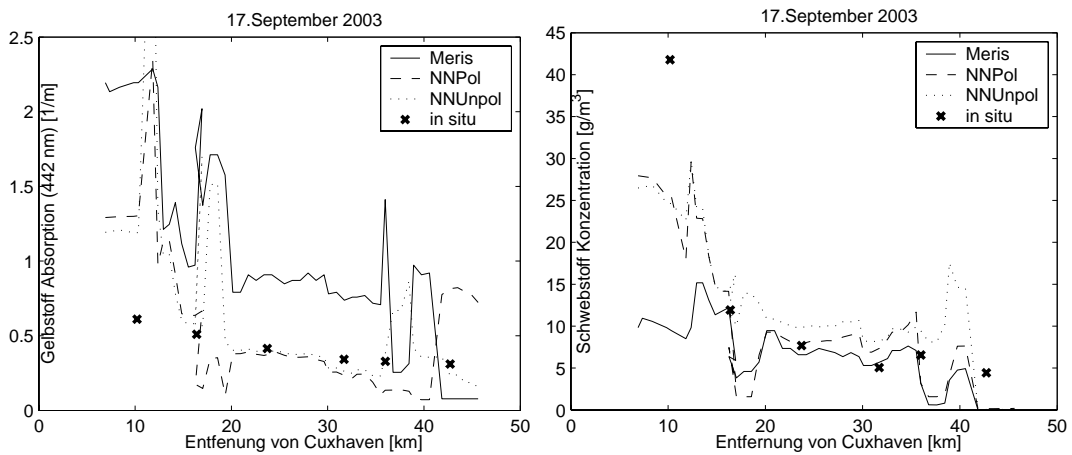
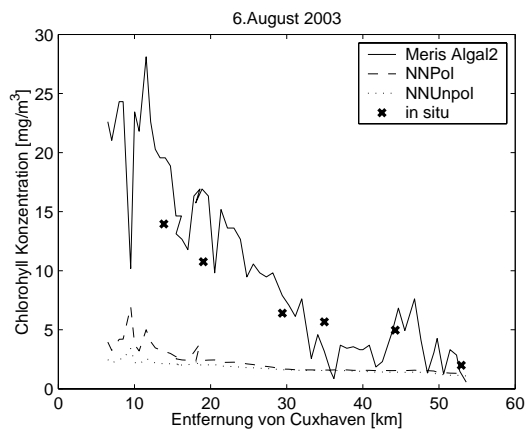
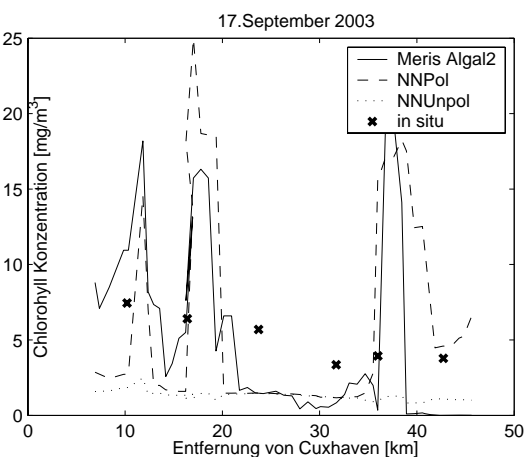
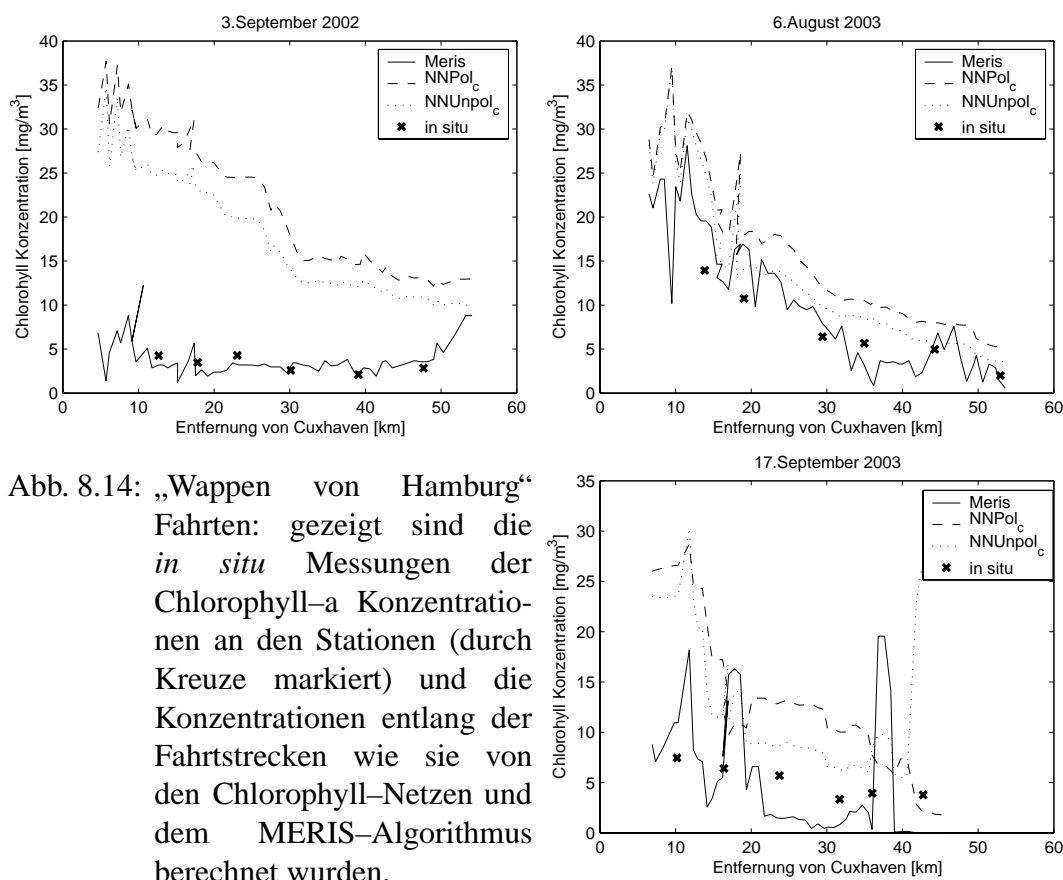


Abb. 8.13: „Wappen von Hamburg“ Fahrt vom 17. September 2003: gezeigt sind die *in situ* Messungen der Inhaltsstoffe an den sechs Stationen (durch Kreuze markiert) und die entsprechenden Werte entlang der Fahrtstrecke wie sie von den Neuronalen und dem MERIS-Algorithmus berechnet wurden.



Die Bestimmung der Schwebstoff-Konzentration und der Absorption durch Gelbstoff mittels der Neuronalen Netze, die diese direkt aus den Reflektanzen der Standardatmosphäre ableiten, führt zu einer guten Übereinstimmung mit den *in situ* Daten. Dies ist auch für extrem hohe Schweb- und Gelbstoffkonzentrationen, wie sie in Nähe zu Cuxhaven auftreten, der Fall. Der operationell eingesetzte Algorithmus hingegen zeigt keinen starken Anstieg der Schwebstoffkonzentration in Küstennähe. Jedoch sei darin erinnert, dass die operationell eingesetzte Atmosphärenkorrektur in allen ausgewählten Szenen in Küstennähe als ungünstig markiert ist. Die direkte Ableitung von Chlorophyll-a Konzentrationen durch diese Neuronalen Netze versagt, wie aber auch aus dem Training (siehe Abschnitt 7.3.2) nicht anders zu erwarten war.



In Abschnitt 7.3.2 wurde gezeigt, dass die Güte der Ableitung der Chlorophyll-a Konzentrationen durch die Neuronalen Netze verbessert werden kann, schränkt man den Trainingsdatensatz auf jene Situationen, in denen die Absorption im Wasser durch Chlorophyll-a dominiert wird, ein. Abbildung 8.14 zeigt die Ausgabewerte dieser Neuronalen Netze (NNPol_c und NNUnpol_c) für die „Wappen von Hamburg“ Fahrten. Für den 6. August und den 17. September stimmen die durch die Neuronalen Netze und die durch den operationellen Algorithmus bestimmten Werte ähnlich gut mit den *in situ* Daten überein. Dabei ist zu beachten, dass für Entfernungen zu Cuxhaven von

unter $\approx 20\text{km}$ die oben genannte Einschränkung bedingung verletzt wird; die Neuronale Netze extrapolieren. Aus gleichem Grund sind die gesamten Ausgabedaten der Neuronale Netze vom 3. September als ungültig anzusehen — entlang der gesamten Fahrtstrecke dominiert hier die Absorption durch Gelb- und Schwebstoff.

Zusammenfassend lassen sich aus den Vergleichen folgende Schlüsse ziehen: Die direkte Ableitung der Schweb- und Gelbstoffkonzentration mittels Neuronaler Netze gelang erstmals und ist dem operationell eingesetzten Algorithmus oftmals überlegen. Die hier vorgestellte Methode liefert auch in schwebstoffreichen Küstengewässern sehr gute Ergebnisse. Die Berücksichtigung der Polarisierung führt zu einer genaueren Übereinstimmung mit den *in situ* Daten. Die direkte Ableitung der Chlorophyll-a Konzentration gelingt bei geringen Gelbstoffkonzentrationen. Als Grund für das Versagen in anderen Fällen ist die unzureichende Genauigkeit der Berechnung der das Wasser verlassenden Strahlung in den Monte-Carlo Simulationen anzuführen und geht dort vermutlich mit einer schlechteren Invertierbarkeit des Modelles bezüglich der Chlorophyll-a Konzentrationen einher. Von allen Wasserinhaltsstoffen wirkt sich eine Änderung der Chlorophyll-a Konzentration am geringsten auf die Reflektanzen der Standard-Atmosphäre aus. Somit ist die Güte der Ableitung dieser Konzentration am stärksten an die Güte der Simulationen gebunden. Mit steigender Rechnerleistung sollten erheblich genauere Simulationen möglich sein, die die Chlorophyll-a Bestimmung erleichtern.

Das operationell eingesetzte Verfahren zur Bestimmung der Inhaltsstoffkonzentrationen bietet die Möglichkeit einer Überprüfung der Konzentrationen bezüglich ihres Anwendungsbereiches (*scope check*). Solch ein Verfahren ist hier nicht anwendbar. Jedoch kann ein Autoassoziatives Netz¹², das die Reflektanzen der Standard-Atmosphäre auf sich selbst abbildet, benutzt werden, um zu entscheiden, ob die Eingabedaten, innerhalb des Bereiches des Trainingsdatensatzes liegen.

Plausibilitätstest

Als ein letzter Plausibilitätstest wurde der Algorithmus noch auf einen Schnitt durch eine Szene angewandt, in dem hohe Schwebstoffkonzentrationen zu erwarten sind¹³. Der gewählte Schnitt läuft von der englischen Küste zum Seine-Mündungsgebiet (siehe Abbildung 8.15); die in dem dargestellten Ausschnitt sichtbare helle Färbung vor der englischen Küste ist nach Expertenmeinung kein atmosphärischer Effekt, sondern eine Schwebstofffahne. Der Vergleich der Anwendung der Neuronale Netze und des operationellen MERIS-Algorithmus zeigt gute Übereinstimmung für die Schwebstoffverteilung entlang des Schnittes. Die Absorption durch Gelbstoff divergiert in den absoluten Werten, die Form der Verteilung wird jedoch gleich abgeleitet. Lediglich

¹²Bei einem Autoassoziativen Netz stimmen die Ein- und Ausgabewerte überein. Es hat mindestens eine verborgene Schicht mit einer Anzahl von Neuronen, die kleiner als die Anzahl der Ein- beziehungsweise Ausgabeneuronen ist (einen sogenannten Flaschenhals).

¹³MER_RR_ $\frac{1}{2}$ PN03V20030418.110230.000002902015.00352.05917.0000.N1

bei den Chlorophyll-a Konzentrationen treten erhebliche Abweichungen zwischen den Methoden auf.

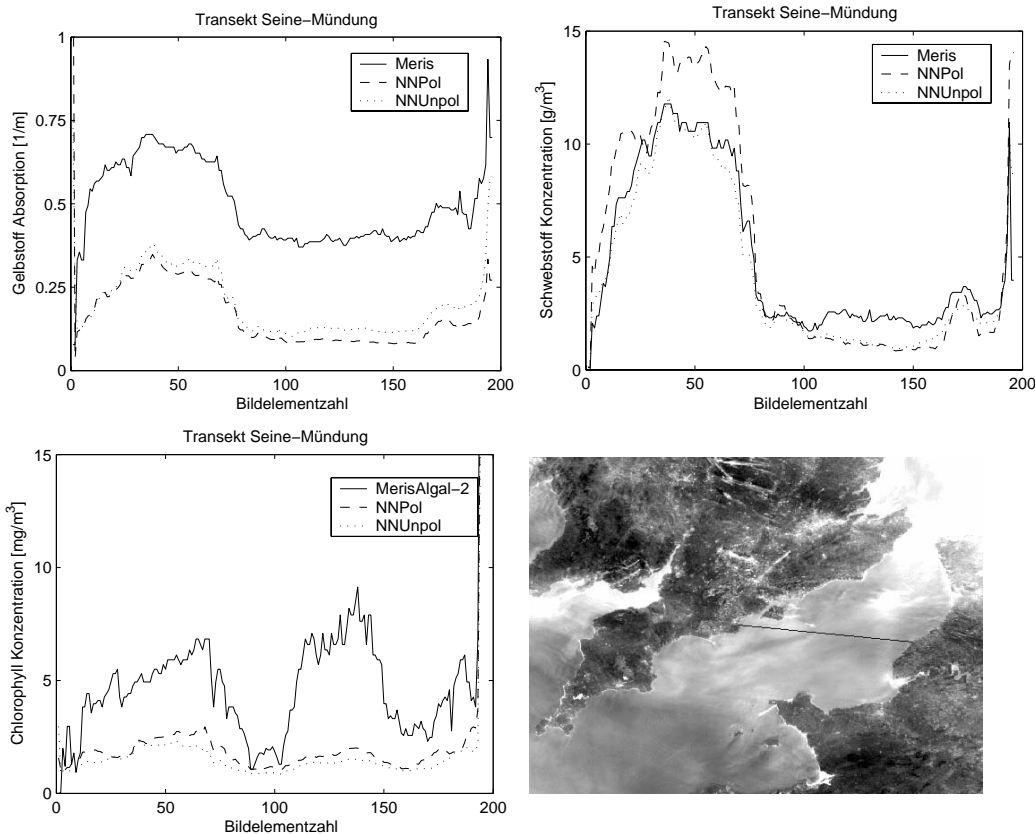


Abb. 8.15: Die ersten drei Abbildungen zeigen die Verteilungen der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen entlang eines Schnittes von der englischen Küste (Bildelement 0) zum Seine-Mündungsgebiet (Bildelement 200). Die letzte Abbildung zeigt die ausgewählte MERIS-Szene; mit eingezeichnet ist der Schnitt entlang dessen die Algorithmen angewandt wurden.

Die optische Dicke der Aerosole

Für zwei Szenen, auf die die Neuronalen Netze zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen angewandt und mit Messungen auf der Fähre „Wappen von Hamburg“ auf der Strecke Cuxhaven–Helgoland validiert wurden, liegen *in situ* Daten der wellenlängenabhängigen optischen Dicke der Aerosole von der Insel Helgoland vor¹⁴. Aus den zwei Szenen wurde jeweils das Helgoland nächstgelegene Bildelement benutzt,

¹⁴Auf Helgoland befindet sich ein Sonnenphotometer der Firma „Cimel“, das zum AERONET (Aerosol Robotic Network) der NASA gehört und von der GKSS betrieben wird.

um die optische Dicke der Aerosole bei einer Wellenlänge von 550nm mit den Neuronalen Netzen (NNPol und NNUnpol) abzuleiten. Die Resultate sind in Abbildung 8.16 dargestellt und stimmen gut mit den *in situ* Daten überein.

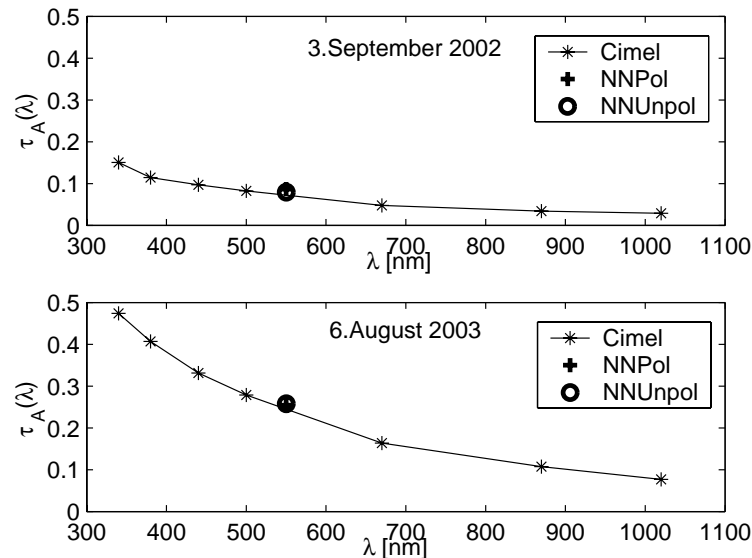


Abb. 8.16: Die Abbildung zeigt die gemessene optische Dicke der Aerosole $\tau_A(\lambda)$ auf der Insel Helgoland als Funktion der Wellenlänge λ (Cimel) und die durch die Neuronalen Netze (NNPol und NNUnpol) bestimmten Werte bei $\lambda = 550\text{nm}$.

Die Resultate legen nahe, in einer künftigen Version die Ableitung der optischen Dicke der Aerosole auf andere Wellenlängen auszudehnen, um so auch den Ångström-Koeffizienten bestimmen zu können. Diese Methode der Ableitung der optischen Eigenschaften der Aerosole mit Neuronalen Netzen, wurde bereits für SeaWiFS-Daten entwickelt und mit *in situ* Daten validiert [94]. Eine Ableitung mit ähnlicher Qualität sollte mit der Güte des hier vorgestellten Neuronalen Netzes (siehe Abbildung 7.6) möglich sein.

Zusätzlich wurden die Netze auf den Schnitt von der englischen Küste zum Seine-Mündungsgebiet angewendet (siehe auch Abbildung 8.15). Die Ergebnisse sind zusammen mit der operationell abgeleiteten optische Dicke der Aerosole (im Roten) in Abbildung 8.17 dargestellt. Die Resultate sind aufgrund der Wellenlängenunterschiede nur bedingt vergleichbar. Den Algorithmen ist jedoch gemein, dass die hohen Schwebstoffkonzentrationen an den Küsten die Ableitung der optischen Dicke der Aerosole beeinflusst. Entlang des restlichen Schnittes ist die mit den Netzen abgeleitete optische Dicke nahezu konstant, wohingegen der operationelle Algorithmus stärkere Schwankungen produziert.

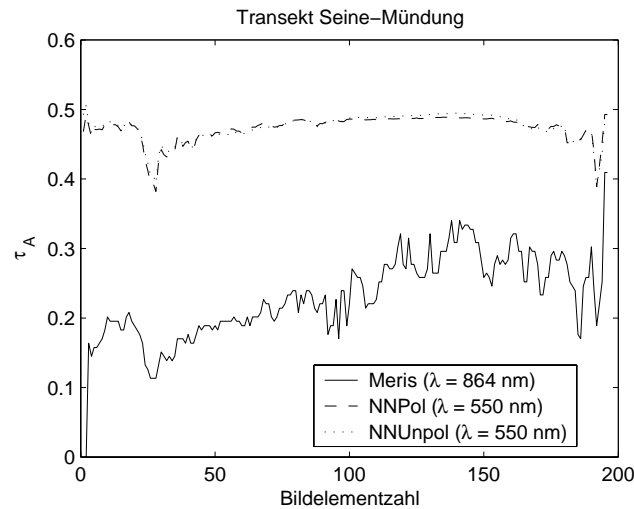


Abb. 8.17: Die Abbildung zeigt die optische Dicke der Aerosole entlang des Schnittes von der englischen Küste zum Seine-Mündungsgebiet. Dabei leitet der operationelle Algorithmus diesen Parameter bei einer Wellenlänge von $\lambda = 864.62\text{nm}$ ab, die Neuronalen Netze hingegen für $\lambda = 550\text{nm}$.

8.4 Anmerkungen zum Rechenzeitaufwand

Zur Erzeugung der in diesem Kapitel beschriebenen Resultate wurden die trainierten Neuronalen Netze auf *Level-1B* MERIS-Daten angewandt. Zu diesem Zwecke wurde in der Programmiersprache Java ein Prozessor entwickelt, der die Resultate in einem bestimmten Format — dem BEAM-DIMAP Format (*Basic ERS and ENVISAT (A)ATSR and MERIS Toolbox-Digital Image Map Format*)— erzeugt. Dies bietet den großen Vorteil, dass für die Resultate alle Werkzeuge des BEAM-Programmpaketes wie die bequeme Auswahl von einzelnen Bildelementen zur Verfügung stehen. Zu den Ausgabedaten gehören neben den Wasserreflektanzen, den Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe und der optischen Dicke der Aerosole auch die Markierungen der Bildelemente (zum Beispiel als Wasser-, Land- oder Wolkebildelement). Diese Markierungen wurden aus den *Level-1B* Daten übernommen. Der Prozessor selbst kann sowohl eigenständig oder aber auch über die Anwendungsprogrammierungsschnittstelle von BEAM genutzt werden.

Um den Rechenzeitaufwand des eigenen Prozessors¹⁵ mit dem des operationell eingesetzten *Level-2* Prozessors vergleichen zu können, wurde ein Szenenausschnitt gewählt, der nur Wasserbildelemente enthält. Dieser Szenenausschnitt (aus dem Atlantik) wurde bereits im Jahre 2003 mit dem (damaligen) operationellen Prozessor bei der Firma „Brockmann Consult“ aus Geesthacht verarbeitet. Die Informationen über

¹⁵Es wurde die Version, die die Polarisation berücksichtigt, verwendet; die Rechenzeit bleibt aber von der Berücksichtigung oder Nicht-Berücksichtigung der Polarisation unbeeinflusst.

den Rechenaufwand wurden gespeichert. Freundlicherweise wurde es gestattet diesen Szenenausschnitt nochmals auf dem gleichen Rechner mit dem hier vorgestellten Prozessor zu bearbeiten. Beim Vergleich der Rechenzeiten ist zum einen beachten, dass der operationelle Prozessor in C geschrieben ist und zum anderen, dass neben den Wasserreflektanzen und Wasserinhaltsstoffkonzentrationen noch dem *Level-2* Produkt spezifische (teilweise rechenintensive) Markierungen berechnet werden. Die Berechnungen der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen erfolgen auch operationell mittels Neuronaler Netze, die Atmosphärenkorrektur hingegen verwendet Nachschlagetabellen und beinhaltet ein Iterationsverfahren.

Es ergaben sich die folgende Ergebnisse. Um 100,000 Bildelemente zu bearbeiten, werden vom operationellen Prozessor ≈ 53 Sekunden benötigt gegenüber ≈ 39 Sekunden für den hier beschriebenen Prozessor. Hochgerechnet auf eine typische Szene in der Deutschen Bucht ist mit einem ungefähren Zeitaufwand von fünf beziehungsweise knapp vier Minuten zu rechnen.

Die Vergleichsrechnung erfolgte auf einem „Apple Power PC G5“ mit 1.5 GB RAM und einer CPU-Frequenz von 1.8 GHz.

Kapitel 9

Zusammenfassung

Der für die vorliegende Arbeit entwickelte Algorithmus zur Atmosphärenkorrektur (insbesondere über Typ-II Gewässern) berücksichtigt erstmals die Polarisations-eigenschaften des Lichtes (im Stokes-Formalismus) und liefert bei vielen Anwendungen, bei denen der operationell eingesetzte Algorithmus zum Teil versagt, sinnvolle Ergebnisse.

Zur Entwicklung des Algorithmus wurde ein Monte-Carlo Programm geschrieben, das die Strahlungstransportvorgänge im gekoppelten System Atmosphäre-Ozean realistisch simuliert. Die mit diesem Programm erzeugten Daten wurden anschließend benutzt, um Neuronale Netze zu trainieren, die aus den (auf eine sogenannte Standard-Atmosphäre umgerechneten) Satellitendaten die Wasser-Reflektanz ableiten. Dabei wurde eines der Netze mit Ergebnissen von Monte-Carlo Rechnungen trainiert, bei denen die Polarisations-eigenschaften des Lichtes berücksichtigt wurden und eines mit Ergebnissen von Monte-Carlo Rechnungen, in denen die Polarisation vernachlässigt wurde. Die Validierung beider Netze anhand von Vergleichen mit *in situ* Daten zeigt gute Resultate über schwebstoffreichen Küstengewässern. Weiterhin kann gezeigt werden, dass die Atmosphärenkorrektur auch für Bildelemente, die durch Sonnenreflex oder dünne Zirren beeinflusst sind, stabil arbeitet.

Die Validierung erlaubt allerdings keine eindeutige Aussage darüber, ob das Netz, das die Polarisation berücksichtigt dem anderen überlegen ist. Vernachlässigt man die Polarisations-eigenschaften des Lichtes zeigen Monte-Carlo Simulationen für typische Beobachtungsbedingungen in der Deutschen Bucht, dass die Reflektanzen der Standard-Atmosphäre zwischen 2 und 5% (im Blauen) und bis zu 2% (im Roten) unterschätzt und damit die Wasser-Reflektanzen überschätzt werden. Dieser Effekt zeigt sich tendenziell auch in den Ergebnissen der Validation, jedoch wird er durch andere im Modell verbleibende Fehlerquellen überdeckt. Als Hauptfehlerquelle werden die in die Modellierung einbezogenen Aerosole angesehen. Zum einen sollten die optischen Eigenschaften der bodennahen Aerosole in künftigen Versionen für verschiedene relative Luftfeuchtigkeiten simuliert werden. Zum anderen konnte ein in der Monte-Carlo Simulation fehlender Aerosoltyp identifiziert werden. Dieses neue Aerosol müsste aus deutlich kleineren Teilchen bestehen, als jene, die in den bisherigen

Aerosolen vorkommen und somit fast Rayleigh-artiges Streuverhalten zeigen. Da neben der Rayleigh-Streuung die Mie-Streuung an den Aerosolen den größten Einfluss auf den Grad der Polarisierung des Himmelslichtes haben, sollte sich durch eine realistischere Beschreibung ihrer Eigenschaften auch die Frage nach dem Einfluss der Polarisierung auf eine Atmosphärenkorrektur von Satellitendaten klarer beantworten lassen.

Die Validierung zeigt ebenfalls, dass die von den Neuronalen Netzen berechneten Wasser-Reflektanzspektren im blauen Spektralbereich oftmals über den gemessenen *in situ* Werten lagen. Als ein Grund dafür ist der fehlende Aerosoltyp anzusehen. Ein weiterer Grund für diese Spektralcharakteristik liegt darin begründet, dass die Neuronalen Netze den Einfluss der Aerosole im Mittel richtig emulieren; bei stark von den mittleren Aerosolcharakteristiken abweichenden Aerosolen führt dies zu einer Fehlableitung der Reflektanz der das Wasser verlassenden Strahlung. Zur Lösung dieses Problems wird folgender Ansatz vorgeschlagen. Man trainiere n Neuronale Netze, deren Trainingsdatensätze unterschiedliche Aerosolklassen abdecken. Ein Entscheidungsverfahren, das wiederum auf Neuronalen Netzen beruht, ermittelt dann, welches der n Netze das aktuell glaubwürdigste Wasserspektrum ableitete.

Der neue Ansatz, die Reflektanzen der das Wasser verlassenden Strahlung (für elf Wellenlängen vom sichtbaren bis in den nahen infraroten Spektralbereich) direkt aus den Reflektanzen der Standardatmosphäre bei diesen Wellenlängen abzuleiten (wodurch die sonst übliche Extrapolation vom infraroten in den sichtbaren Spektralbereich vermieden wird), beinhaltet zwar den Nachteil nicht global anwendbar zu sein (sondern nur über Gewässern, deren optischen Eigenschaften eine Untermenge des in das Monte-Carlo Programm eingearbeiteten biooptischen Modells sind) aber auch den Vorteil regional einer solch globalen Methode überlegen zu sein. Des Weiteren erlaubt dieser Ansatz erstmals eine vollständige Ableitung der Kovarianzmatrix der das Wasser verlassenden Strahlung aus dem Fehlermodell für die von MERIS gemessenen Reflektanzen.

Die hier vorgestellte Atmosphärenkorrektur und die operationell eingesetzte stimmen in der Schnittmenge ihren jeweiligen Gültigkeitsbereiche recht gut überein. Daher ist zu erwarten, dass die Ableitung der Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe Schweb- und Gelbstoff sowie Chlorophyll-*a* aus den hier berechneten Wasser-Reflektanzen mittels des operationell arbeitenden Neuronalen Netzes mit gleicher Güte erfolgt.

Erstmals wurde in dieser Arbeit alternativ ein (bezüglich der Rechenzeit) operationell einsetzbares Ein-Schritt-Verfahren zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen aus den Reflektanzen der Standard-Atmosphäre entwickelt. Das neue Verfahren beruht wiederum auf Neuronalen Netzen, die mit den aus den Monte-Carlo Rechnungen gewonnenen Daten trainiert wurden. Wie zuvor bei der Atmosphärenkorrektur wurden zwei Netze trainiert — eines mit Daten, in deren Erzeugung die Polarisierung berücksichtigt wurde und eines ohne deren Berücksichtigung. Aus der Validierung dieser Netze anhand von *in situ* Daten kann gefolgert werden, dass die so abgeleiteten Werte für Schweb- und Gelbstoff sehr gut mit den *in situ* Messungen übereinstimmen — auch in schwebstoffreichem Küstengewässer, für das das operatio-

nell eingesetzte Verfahren zum Teil versagt. Für diese beiden Inhaltsstoffe stimmen die mit dem Netz, das die Polarisation berücksichtigt, abgeleiteten Daten am besten mit den *in situ* Messungen überein.

Die Ableitung der Chlorophyll-*a* Konzentration mit dem neuen Ein-Schritt-Verfahren gelingt, wenn nur geringe Konzentrationen von Gelbstoff vorliegen. Das Versagen in anderen Fällen legt die Vermutung nahe, dass das zugrundeliegende Modell dort schlechter bezüglich der Chlorophyll-*a* Konzentration invertierbar ist und somit eine sehr viel genauere Berechnung der relevanten Größe (der das Wasser verlassenden Strahlung, die von allen simulierten Größen den größten relativen statistischen Fehler aufweist — insbesondere für hohe Absorptionen) erfordert. Mit steigender Rechnerleistung sollte die erheblich genauere Simulation vieler Spektren im gekoppelten System Atmosphäre-Ozean unter Berücksichtigung der Polarisation kein Problem mehr darstellen.

Um den systematischen und statistischen Fehler der Neuronalen Netze zur Ableitung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen zu minimieren, wurde die Liste der Ausgabewerte dieser Netze um die optische Dicke der Aerosole bei einer Wellenlänge erweitert. Beispielhaft wurde gezeigt, dass die abgeleiteten Werte gut mit *in situ* Daten übereinstimmen. Für eine künftige Version wäre es wünschenswert, die optische Dicke der Aerosole bei mindestens einer weiteren Wellenlänge zu bestimmen, um so auch den Ångström-Koeffizienten berechnen zu können.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Doerffer and J. Fischer. Concentrations of chlorophyll, suspended matter, and gelbstoff in case II waters derived from satellite coastal zone color scanner data with inverse modeling methods. *Journal of Geophysical Research C*, 99(C4):7457–7466, 1994.
- [2] R. Doerffer, K. Sørensen, and J. Aiken. MERIS potential for coastal zone applications. *International Journal of Remote Sensing*, 20(9):1809–1818, 1999.
- [3] D. Antoine and A. Morel. A multiple scattering algorithm for atmospheric correction of remotely sensed ocean colour (MERIS instrument): principle and implementation for atmospheres carrying various aerosols including absorbing ones. *International Journal of Remote Sensing*, 20(9):1875–1916, 1999.
- [4] F. Moore, G., J. Aiken, and S.J. Lavender. The atmospheric correction of water colour and the quantitative retrieval of suspended particulate matter in case II waters: application to MERIS. *International Journal of Remote Sensing*, 20(9):1713–1733, 1999.
- [5] G. Ruddick, K., F. Ovidio, and M. Rijkeboer. Atmospheric correction of SeaWiFS imagery for turbid coastal and inland waters. *Applied Optics*, 39(6):897–912, 2000.
- [6] J. Lavender, S., H. Pinkerton, M., G. Moore, J. Aiken, and D. Blondeau-Patissier. Modification to the atmospheric correction of SeaWiFS ocean colour images over turbid waters. *Continental Shelf Research*, 25:539–555, 2005.
- [7] E. Land, P. and D. Haigh, J. Atmospheric correction over case 2 waters with an iterative fitting algorithm. *Applied Optics*, 35(27):5443–5451, 1996.
- [8] B.-C. Gao, J. Montes, M., Z. Ahmad, and O. Davis, C. Atmospheric correction algorithm for hyperspectral remote sensing of ocean color from space. *Applied Optics*, 39(6):887–896, 2000.
- [9] H. Schiller and R. Doerffer. Neural network for emulation of an inverse model – operational derivation of case II water properties from MERIS data. *International Journal of Remote Sensing*, 20(9):1735–1746, 1999.

- [10] M. Chomko, R., R. Gordon, H., S. Maritorena, and A. Siegel, D. Simultaneous retrieval of oceanic and atmospheric parameters for ocean color imagery by spectral optimization: a validation. *Remote Sensing of Environment*, 84:208–220, 2003.
- [11] G. Stokes, G. On the composition and resolution of streams of polarized light from different sources. *Transactions of the Cambridge Philosophical Society*, 9:399–416, 1852. reprinted in *Mathematical and Physical Papers*, Vol.3, Cambridge University Press, London, 1901.
- [12] E. Collett. *Polarized Light – Fundamentals and Applications*. Marcel Dekker, Inc., New York, 1992.
- [13] P. Soleillet. Sur les paramètres caractérisant la polarisation partielle de la lumière dans les phénomènes de fluorescence. *Annales des Physique*, 12:23–86, 1929.
- [14] S. Chandrasekhar. On the radiative equilibrium of a stellar atmosphere. *Astrophysical Journal*, 99:180–190, 1944. Bis 1948 erschienen in der gleichen Zeitschrift 24 weitere Arbeiten zum gleichen Thema.
- [15] H. Müller. The foundation of optics. *Journal of the Optical Society of America*, 38:661, 1948.
- [16] A. Lindner. *Grundkurs Theoretische Physik*. Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1997.
- [17] A. Shurcliff, W. *Polarized Light*. Harvard University Press, 1962.
- [18] A. Kokhanovsky, A. *Polarization Optics of Random Media*. Springer Verlag, 2003.
- [19] I. Mishchenko, M., W. Hovenier, J., and D. Travis, L. *Light Scattering by Nonspherical Particles Theory, Measurements, and Applications*. Academic Press, 2000.
- [20] C. van de Hulst, H. *Light Scattering by Small Particles*. Dover Publications, Inc., New York, 1981.
- [21] G. Zimmermann. *Fernerkundung des Ozeans*. Akademie Verlag GmbH, Berlin, 1991.
- [22] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Dover Publications, Inc., New York, 1960.
- [23] M. Iqbal. *An Introduction to Solar Radiation*. Academic Press, 1983.
- [24] J. Lenoble. *Atmospheric Radiative Transfer*. A. Deepak Publishing, Hampton, Virginia, 1993.

- [25] F. Montagner (Herausg.). *Reference Model for MERIS Level 2 Processing*. ACRI, 4.1 edition. PO–TN–MEL–GS–0026.
- [26] N. Bronstein, I. and A. Semendjajew, K. *Taschenbuch der Mathematik*. B.G.Teubner Verlagsgesellschaft, 25 edition, 1991.
- [27] J. Kaufman, Y., D. Tanré, and O. Boucher. A satellite view of aerosols in the climate system. *Nature*, 419:215–223, 2002.
- [28] F. Bohren, C. and R. Huffmann, D. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley and Sons, Inc., 1983.
- [29] J. Wiscombe, W. Improved Mie scattering algorithms. *Applied Optics*, 19(9):1505–1509, 1980.
- [30] O. Hulbert, E. Explanation of the brightness and color of the sky, particularly the twilight sky. *Journal of the Optical Society of America*, 43:113–118, 1953.
- [31] A. Macke. private Mitteilung.
- [32] A. Macke. *Modellierung der optischen Eigenschaften von Cirruswolken*. Universität Hamburg, Fachbereich Geowissenschaften, 1994. Dissertation.
- [33] A. Macke. Single scattering properties of atmospheric ice crystals. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 53(19):2813–2825, 1996.
- [34] C. Cox and W. Munk. Measurement of the roughness of the sea surface from photographs of the sun’s glitter. *Journal of the Optical Society of America*, 44(11):838–850, 1954.
- [35] C. Cox and W. Munk. Statistics of the sea surface derived from sun glitter. *Journal of Marine Research*, 13:198–227, 1954.
- [36] N. Plass, G., W. Kattawar, G., and A. Guinn Jr., J. Radiative transfer in the earth’s atmosphere and ocean: influence of ocean waves. *Applied Optics*, 14(8):1924–1936, 1975.
- [37] R. Gordon, H. and Y. Morel, A. *Remote assessment of ocean color for interpretation of satellite visible imagery, A review. Lecture notes on Coastal and Estuarine Studies, 4*. Springer Verlag, 1983.
- [38] D. Mobley, C. *Light and Water, Radiative Transfer in Natural Waters*. Academic Press, 1994.
- [39] R. Gordon, H. Contribution of Raman scattering to water–leaving radiance: a reexamination. *Applied Optics*, 38(15):3166–3174, 1999.

- [40] Remote sensing of ocean colour in coastal, and other optically–complex waters. Reports of the International Ocean–Colour Coordinating Group, 2000. IOCCG Report Number 3.
- [41] R. Doerffer and H. Schiller. The MERIS case 2 water algorithm. eingereicht bei International Journal of Remote Sensing.
- [42] A. Einstein. Theorie der Opaleszenz von homogenen Flüssigkeiten und Flüssigkeitsgemischen in der Nähe des kritischen Zustandes. *Annales des Physique*, 33:1275–1298, 1910.
- [43] J Petzold, T. Volume scattering functions for selected ocean waters. SIO Reference Series 72-78, Scripps Institute of Oceanography, University of California, San Diego, Visibility Laboratory, 1972. 76 Seiten.
- [44] D. Mobley, C., B. Gentili, R. Gordon, H., Z. Jin, W. Kattawar, G., A. Morel, P. Reinersman, K. Stamnes, and H. Stavn, R. Comparison of numerical models for computing underwater light fields. *Applied Optics*, 32(36):7484–7504, 1993.
- [45] J. Voss, K. and S. Fry, E. Measurement of the Mueller matrix for ocean water. *Applied Optics*, 23(23):4427–4439, 1984.
- [46] A. Kokhanovsky, A. Parametrization of the Mueller matrix of oceanic waters. *Journal of Geophysical Research C*, 108(6), 2003.
- [47] R. Frühwirth and M. Regler. *Monte–Carlo–Methoden, Eine Einführung*. B.I.–Wissenschaftsverlag, 1983.
- [48] V. Blobel and E. Lohrmann. *Statistische und numerische Methoden der Datenanalyse*. Teubner Studienbücher, Stuttgart, 1998.
- [49] I. Marchuk, G., A. Mikhailov, G., A. Nazarialiev, M., A. Darbinjan, R., A. Darbinjan, R., A. Kargin, B., and S. Elepov, B. *The Monte Carlo Methods in Atmospheric Optics*. Springer–Verlag, 1980.
- [50] J. Honerkamp. *Stochastic Dynamical Systems, Concepts, Numerical Methods, Data Analysis*. VCH Publishers, Inc., 1994.
- [51] G. Kattawar and G. Plass. Radiative transfer in an atmosphere–ocean system. *Applied Optics*, 8(2):455–466, 1969.
- [52] H. Gordon and O. Brown. Irradiance reflectivity of a flat ocean as a function of its optical properties. *Applied Optics*, 12(7):1549–1551, 1973.
- [53] R. Doerffer and H. Schiller. *Determination of water constituents from water leaving radiance reflectance of the ocean colour sensor MOS using inverse Modelling, Part II, Atmospheric Correction ATBD*. GKSS. GKSS–GFE–MOS–ATBD01.

- [54] D. Walzel, M., W. Lipps, F., and L. Vant-Hull, L. A solar flux density calculation for a solar tower concentrator using a two-dimensional hermite function expansion. *Solar Energy*, 19(3):239–253, 1977.
- [55] K. Waters. *Monte-Carlo Modelling of the Open Ocean Light Field*. PhD thesis, University of California Santa Barbara, 1994.
- [56] B. Sund. *An Introduction to Non-Life Insurance Mathematics*. Verlag Versicherungswirtschaft, Karlsruhe, 1984.
- [57] A preliminary cloudless standard atmosphere for radiation computation. International Association for Meterology and Atmospheric Physics, 3 1986. World Climate Research Programme, WCP-112, WMO/TD-No.24.
- [58] P. Shettle, E. and W. Fenn, R. Models for the aerosols of the lower atmosphere and the effects of humidity variations on their optical properties. Environmental Research Papers, Hanscom, Massachusetts, 9 1979. AFGL-TR-79-0214.
- [59] L. Eltermann. UV, Visible, and IR attenuation for altitudes to 50 km. Office of Aerospace Research, Air Force Cambridge Research Laboratories, Hanscom, Massachusetts, 4 1968. Environmental Research Papers, No.285, AFCRL-68-0153.
- [60] R. Doerffer. private Mitteilung.
- [61] E. Vigroux. Contributions a l'étude experimentale de l'absorption de l'ozone. *Annales des Physique*, 8:709–762, 1953.
- [62] A. Morel. Optical properties of pure water and sea water. In G. Jerlov, N. and E. Steemann-Nielsen, editors, *Optical Aspects of Oceanography*, pages 1–24. Academic Press, 1974.
- [63] R. Doerffer, K. Heymann, and H. Schiller. Case 2 water algorithm for the medium resolution imaging spectrometer MERIS on ENVISAT. In *Proceedings of the ENVISAT Validation Workshop*, 2002.
- [64] W. Kattawar, G. and N. Adams, C. Stokes vector calculations of the submarine light field in an atmosphere-ocean with scattering according to a Rayleigh phase matrix: Effect of interface refractive index on radiance and polarization. *Limnology and Oceanography*, 34(8):1453–1472, 1989.
- [65] H. Tynes, H., W. Kattawar, G., P. Zege, E., L. Katsev, I., S. Prikhach, A., and I. Chaikovskaya, L. Monte Carlo and multicomponent approximation methods for vector radiative transfer by use of effective Mueller matrix calculations. *Applied Optics*, 40(3):400–412, 2001.

- [66] W. Kattawar, G. and N. Adams, C. Errors in radiance calculations induced by using scalar rather than Stokes vector theory in a realistic atmosphere–ocean system. In *Proceedings of SPIE Volume 1302: Ocean Optics X*, pages 2–12, 1990.
- [67] R.,L.,Jr. Lee. Digital imaging of clear–sky polarization. *Applied Optics*, 37(9):1465–1476, 1998.
- [68] ACRI. *Definition of test cases for comparison of water simulations*, 5 1999. PO–TN–MEL–GS–0031.
- [69] V. Cherkassky, H. Friedman, J., and H. Wechsler. *From Statistics to Neural Networks, Theory and Pattern Recognition Applications*. Springer–Verlag, 1993.
- [70] I. Kanellopoulos, G. Wilkinson, G., F. Roli, and J. Austin. *Neurocomputation in Remote Sensing Data Analysis*. Springer–Verlag, 1997.
- [71] M. Krasnopolsky, V. and H. Schiller. Some neural network applications in environmental sciences. part I: forward and inverse problems in geophysical remote measurements. *Neural Networks*, 16:321–334, 2003.
- [72] Y. Zhang, S. Koponen, S., T. Pullianen, J., and M.T. Hallikainen. Application of empirical neural networks to chlorophyll–a estimation in coastal waters using remote optosensors. *IEEE Sensors Journal*, 3(4):376–382, 2003.
- [73] D. Buckton and E. O’Mongain. The use of neural networks for the estimation of oceanic constituents based on the MERIS instrument. *International Journal of Remote Sensing*, 20(9):1841–1851, 1999.
- [74] A. Tananka, M. Kishino, R. Doerffer, H. Schiller, T. Oishi, and T. Kubota. Development of a neural network algorithm for retrieving concentrations of chlorophyll, suspended matter and yellow substance from radiance data of the Ocean Color and Temperature Scanner. *Journal of Oceanography*, 60:519–530, 2004.
- [75] A. Bailey, S. Ocean color model inversion using an artificial neural network. The Laboratory for Hydrospheric Processes, NASA, Goddard Space Flight Center.
- [76] D. d’Alimonte and G. Zibordi. Phytoplankton determination in an optically complex coastal region using a multilayer perceptron neural network. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 41(12):2861–2868, 2003.
- [77] B. Dzwonkowski and X.-H. Yan. Development and application of a neural network based ocean colour algorithm in coastal waters. *International Journal of Remote Sensing*, 26(6):1175–1200, 2005.
- [78] H. Schiller and R. Doerffer. Improved determination of coastal water constituent concentrations from MERIS data. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 43:1585–1591, 2005.

- [79] G. Corsini, M. Diani, R. Grasso, M. de Martino, P. Mantero, and B. Serpico, S. Radial basis function and multilayer perceptron neural networks for sea water optically active parameter estimation in case II waters: a comparison. *International Journal of Remote Sensing*, 24(20):3917–3932, 2003.
- [80] H. Schiller and R. Doerffer. A fast computational scheme for inverse modelling of multispectral radiances application for remote sensing of the ocean. *Applied Optics*, 32(18):3280–3285, 1993.
- [81] C. Fonlupt. Solving the ocean color problem using a genetic programming approach. *Applied Soft Computing*, 1:63–72, 2001.
- [82] R. Doerffer, H. Schiller, R. Garcia, J., and P. Regner. First test of a two-step neural network inverse modelling technique using MOS data. In *Proceedings of the 2nd International Workshop on MOS-IRS and Ocean Colour*. DLR Institute of Space Sensor Technology, Berlin, 1998.
- [83] T. Schröder, M. Schaale, F. Fell, and J. Fischer. Atmospheric correction algorithm for satellite data over case-I waters. Vorgelegt auf der Seventh International Conference on Remote Sensing for Marine and Coastal Environments, Miami, Florida, 20–22 Mai 2002.
- [84] A. Niang, L. Gross, S. Thiria, F. Badran, and C. Moulin. Automatic neural classification of ocean colour reflectance spectra at the top of the atmosphere with introduction of expert knowledge. *Remote Sensing of Environment*, 86:257–271, 2003.
- [85] S. Haykin. *Neural Networks, A Comprehensive Foundation*. Prentice-Hall, Inc., New Jersey, 1999.
- [86] M. Bishop, C. *Neural Networks for Pattern Recognition*. Clarendon Press, Oxford, 1995.
- [87] H. Schiller. Feedforward-backpropagation neural net program ffbp1.0. GKSS-Bericht 2000/37, ISSN 0344-9629.
- [88] M. Krasnopolsky, V., H. Gemmill, W., and C. Breaker, L. A multi-parameter empirical ocean algorithm for SSM/I retrievals. *Canadian Journal of Remote Sensing*, 25(5):486–503, 1999.
- [89] F. Montagner (Herausg.). *Protocols for the Validation of MERIS Water Products*. ESA, ACRI, GKSS. PO-TN-MEL-GS-0043.
- [90] E. Walker, R. *Marine Light Field Statistics*. John Wiley and Sons, Inc., 1994.

- [91] S. Delwart, J.-P. Hout, and C. Brockmann. Calibration and early results of MERIS on ENVISAT. In *Proceedings of the Envisat Calibration Review*. ESA, ESTEC, 2002.
- [92] N. Adams, C. and W. Kattawar, G. Solutions of the equations of radiative transfer by an invariant imbedding approach. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 10:341–356, 1970.
- [93] I. Behnert, V. Matthias, and R. Doerffer. Aerosol optical thickness and its spectral dependence derived from sunphotometer measurements over the southern North Sea coastal region. *Optica Pura y Aplicada*, 37(3):3254–3257, 2004.
- [94] C. Jamet, C. Moulin, and S. Thiria. Monitoring aerosol optical properties over the Mediterranean from SeaWiFS images using a neural network inversion. *Geophysical Research Letters*, 31, 2004. L13107.

Danksagung

Herrn Prof. Hartmut Graßl danke ich für die Gelegenheit, diese Arbeit unter seiner Betreuung durchzuführen.

Herrn Dr. Roland Doerffer danke ich für die Themenstellung zu meiner Arbeit, für die Möglichkeit, in seiner Arbeitsgruppe als Doktorand zu arbeiten und für seine hilfreichen Hinweise und Erläuterungen.

Herrn Prof. Helmut Schiller danke ich für die zahlreichen Diskussionen und Anregungen insbesondere bei Problemen der Programmierung.

Den Herren Peter-Rüdiger Kipp und Wolfgang Cordes gilt mein Dank für die Hilfe bei der Planung und der Durchführung der Polarisationsmessungen. Frau Kerstin Heymann und Herrn Dr. Rüdiger Röttgers danke ich für Erläuterungen zu den Meßprotokollen zur Bestimmung der Wasserinhaltsstoffkonzentrationen. Bei all meinen Kollegen möchte ich mich für die angenehme Arbeitsatmosphäre bedanken.

Bei den Mitarbeitern der Firma „Brockmann Consult“ möchte ich mich für die freundliche Unterstützung bei Fragen rund um BEAM bedanken.

Herrn Prof. Andreas Macke danke ich für die Bereitstellung der Müller-Matrix für die Streuung an Zirren.

Von ganzem Herzen danke ich meinen lieben Eltern für die stete Unterstützung, viel Verständnis und ihre (nahezu unerschöpfliche) Geduld.