TECHNISCHE UNIVERSITÄT DRESDEN

Hochschule Anhalt
Anhalt University of Applied Sciences

Fakultät Umweltwissenschaften
Fachrichtung Geowissenschaften
Institut für Photogrammetrie und Fernerkundung

Fachbereich Architektur, Facility Management und Geoinformation
Institut für Geoinformation und Vermessung

Entwicklung und Validierung einer Methodik zur Überwachung von verockerten Fließgewässern auf Basis von Hyperspektraldaten

Dissertation

Zur Erlangung des akademischen Grades

Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

vorgelegt von:

Christoph Ulrich, M. Eng.

geboren am 23.10.1988 in Berlin

Gutachter: Prof. Dr. habil. Hans-Gerd Maas
Technische Universität Dresden

Prof. Dr. Lutz Bannehr
Hochschule Anhalt

Dr. Dirk Jungmann
Technische Universität Dresden

Erklärung der Übereinstimmung mit dem Original

Die Übereinstimmung dieses Exemplars mit dem Original der Dissertation zum Thema:

„Entwicklung und Validierung flächendeckender Ableitungsmodelle zur Überwachung verockerter Fließgewässer aus hyperspektralen Fernerkundungsdaten“

wird hiermit bestätigt. Die Modifizierung des Titels erfolgte im Rahmen der Auflagen der Prüfungskommission.

Christoph Ulrich

Berlin, den 02.11.2020

Tag der Einreichung: 25.05.2020

Tag der Verteidigung: 07.09.2020

Danksagung

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeiten als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Geoinformatik und Vermessung an der Hochschule Anhalt. An dieser Stelle möchte ich mich bei allen danken, die mich in dieser Zeit unterstützt, fachlich begleitet und gefördert haben.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. habil. Hans-Gerd Maas für die Unterstützung, die wertvollen Anregungen und fachlichen Diskussionen, die maßgeblich zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben.
Weiterhin möchte ich mich herzlich bei Herrn Prof. Dr. Lutz Bannehr bedanken. Er hat mich in jeder Hinsicht unterstützt und mir viele Möglichkeiten eingeräumt, mich weiterzuentwickeln. Vielen Dank für die hilfreichen fachlichen Diskussionen und Anregungen, für Motivation und für zeitliche Freiräume, die ich zum Schreiben der Arbeit nutzen konnte. Des Weiteren möchte ich mich für die Möglichkeit bedanken, intensiv am Projekt des Forschungsgyrocopters mitgewirkt zu haben.
Weiterhin möchte ich mich bei Herrn Dr. Dirk Jungmann für die Übernahme der Gutachtertätigkeit und für seine Denkanstöße in den Diskussionen bedanken.

Außerdem geht mein Dank an Herrn Dr. Michael Hupfer vom Leibnitz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei für seine große Unterstützung in den vier durchgeführten Messkampagnen sowie für seine Empfehlungen. Ein großes Dankeschön gilt auch Frau Dr. Martina Schulze für die Unterstützung bei der Analyse der Gewässerproben in der Hochschule Anhalt sowie für ihre Hinweise. Weiterhin möchte ich mich bei der Firma Milan Geoservice GmbH für wichtige Hinweise zur Flugplanung bedanken.

Ebenso geht mein Dank an meine Kollegen am Institut für Geoinformation und Vermessung der Hochschule Anhalt, die mich jederzeit bei Problemen hilfsbereit unterstützt haben. Besonders bedanken möchte ich mich bei Peter Weise für seine Hilfe bei der Fertigstellung der Schwimmplattform für das Feldspektrometer. Weiterhin möchte ich mich auch bei Sophie Prokoph für die Unterstützung bei den Messkampagnen sowie der Prozessierung der Hyperspektraldaten bedanken. Ferner bedanke ich mich bei den Studenten, die mich bei diversen Feldkampagnen unterstützt haben.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Frau und meiner Tochter bedanken. Vielen Dank für eure große Gedulde, Unterstützung und Motivation.

Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der flächendeckenden Ableitung spezifischer Gewässerinhaltsstoffe verockerter Fließgewässer aus Daten eines airborne Hyperspektralsensors. In diesem Zusammenhang wird ein innovatives Verfahren vorgestellt, welches die spezifische Entwicklung und Validierung von Ableitungsmodellen mit Fokus auf den Gewässerinhaltsstoffen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beinhaltet. Im Rahmen der Arbeit wurden zwei Messkampagnen zur Erhebung der erforderlichen Gewässerproben und der Hyperspektraldaten am Fluss Spree südlich von Cottbus, Brandenburg, durchgeführt. Diese Daten bilden die Grundlage der Arbeit.

Die entwickelte Methode führt eine automatisierte Verknüpfung der In situ- und der Hyperspektraldaten durch. Dies ermöglicht die Extrahierung der Spektralinformation aus den Hyperspektraldaten an der Probenentnahmestelle. Anschließend werden diese auf spezifische Indizes reduziert, welche ein Kernstück der Vorgehensweise darstellen. Diesbezüglich ist es notwendig, dass die Indizes die charakteristischen Spektraleigenschaften der Gewässerinhaltsstoffe berücksichtigen.
Mittels der Regressionsanalyse werden für jeden Gewässerinhaltsstoff die zehn geeignetsten Indizes anhand des Bestimmtheitsmaßes zur Ableitung herangezogen und im Anschluss mittels der In situ-Daten validiert. Dies ermöglicht die Identifizierung des Regressionsmodells mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit, welches zur Erstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe verwendet wird.

Anhand der Verteilungskarten wird aufgezeigt, dass sich die aus airborne Hyperspektraldaten abgeleiteten Konzentrationen der Gewässerinhaltsstoffe zur Identifizierung von Stoffeinträgen durch Zuflüsse und resultierenden Strömungsänderungen eignen. Weiterhin ist die Konzentrationsbestimmung auch an Orten mit einem unwegsamen Gelände durchführbar, wodurch die aufgezeigte Vorgehensweise darüber hinaus für ein Monitoring verwendet werden kann.

Abstract

The present work deals with the area-wide derivation of the water constituents of ochred watercourses from data of an airborne hyperspectral sensor. In this context an innovative method is presented, which includes the specific development and validation of derivation models with focus on the water constituents total iron, ferrous iron, ferric iron and sulphate. Within the scope of the work, two measurement campaigns were carried out to collect the required water samples and hyperspectral data at the river Spree south of Cottbus, Brandenburg. These data are the basis of the thesis.

The developed method performs an automated combination of the in situ- and hyperspectral data. This enables the extraction of spectral information from the hyperspectral data at the sampling point. Subsequently, these information is reduced to specific indices, which are a core part of the procedure. In this respect, it is necessary that the indices consider the characteristic spectral properties of the water constituents.
By means of regression analysis, the ten most suitable indices for each water constituent are derived based on the coefficient of determination and subsequently validated using the in situ-data. This enables the identification of the regression model with the highest accuracy of derivation, which is used to create the distribution maps of the water constituents.

The distribution maps show that the concentrations of water constituents derived from airborne hyperspectral data are suitable for identifying substance inputs from inflows and resulting flow changes. Furthermore, the determination of concentrations can also be carried out in places with impassable terrain, which means that the procedure shown can also be used for monitoring.

Inhaltsverzeichnis

Erklärung der Übereinstimmung mit dem Original **2**

Danksagung **3**

Kurzfassung **4**

Abstract **5**

Inhaltsverzeichnis **6**

Abbildungsverzeichnis **8**

Tabellenverzeichnis **11**

Abkürzungsverzeichnis **14**

Symbolverzeichnis **16**

1. Einleitung **17**

1.1. Hintergrund und Motivation 17

1.2. Zielsetzung 21

1.3. Struktureller Aufbau und methodisches Vorgehen 23

2. Verfahrensüberblick **26**

2.1. Datenverknüpfung 26

2.2. Spektralindizes 27

2.3. Datenfilterung 27

2.4. Entwicklung der Regressionsmodelle 27

2.5. Ableitung und Validierung 28

3. Passive optische Gewässerfernerkundung **29**

3.1. Erfassung der zurückgestreuten Strahldichten 30

3.1.1. Strahlungsprozesse in der Atmosphäre 33

3.1.2. Strahlungsprozesse an der Gewässeroberfläche 35

3.1.3. Strahlungsprozesse im Gewässerkörper 37

3.2. Eigenschaften der Gewässerfärbung 41

3.2.1. Inhärente optische Gewässereigenschaften (IOP) 41

3.2.2. Scheinbare optische Gewässereigenschaften (AOP) 43

3.3. Methoden der Gewässerfernerkundung 43

3.3.1. Analytische Methode 43

3.3.2. Empirische Methode 44

3.3.3. Schlussfolgerung 45

4. Datenerfassung **46**

4.1. Untersuchungsgebiet 46

4.2. In situ–Daten ... 48
4.2.1. Messkampagne 2018 ... 50
4.2.2. Messkampagne 2019 ... 52
4.3. Fernerkundungsdaten ... 53
4.3.1. Gyrokopter als Trägerplattform ... 53
4.3.2. Sensorik ... 54

5. Erstellung der Spektralindizes ... 57
5.1. Spektralindizes der Literatur ... 57
5.2. Analyse spektraler In situ-Messungen ... 62
5.3. Analyse extrahierter Spektralinformationen ... 64

6. Ergebnisse und Diskussion ... 69
6.1. Validierung ... 69
6.2. Evaluierung ... 74
6.3. Horizontalverteilung der Gewässerinhaltsstoffe in dem Fluss Spree ... 83

7. Zusammenfassung und Ausblick ... 90

Literatur ... 95

I. Anlage ... 105
I.I. Zum Kapitel 4: Datenerfassung ... 105
I.II. Zum Kapitel 5: Spektralindizes ... 122
I.III. Zum Kapitel 6: Ergebnisse und Diskussion ... 128

II. Prozessierung der hyperspektralen Fernerkundungsdaten ... 170

III. Anlage: Daten zur Charakterisierung des Untersuchungsgebietes ... 175
III.I. pH-Wert ... 177
III.II. Bestimmung Sichttiefe ... 177
III.III. Spektrale In situ-Messungen ... 179
III.IV. Bathymetrische Vermessung ... 182
III.V. Vertikaler Eisengradient ... 183

IV. Anlage: Einfluss des Bergbaus auf die limnischen Lebensräume ... 186
IV.I. Prozesse während und nach dem Bergbau ... 186
IV.II. Limnische Lebensräume ... 188
IV.II.i. Grundwässer ... 188
IV.II.ii. Fließgewässer ... 189
IV.II.iii. Standgewässer ... 190

Abbildungsverzeichnis

***Abbildung 1-1**: Schematische Darstellung der Pyritverwitterung 18*

***Abbildung 1-2**: Arbeitsprogramm zur automatisierten Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe verockerter Fließgewässer 22*

***Abbildung 2-1**: Verfahren zur automatisierten Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe verockerter Gewässer 26*

***Abbildung 3-1**: Schematische Übersicht der messbaren Komponenten der zurückgestreuten Strahldichten 32*

***Abbildung 3-2**: Schematische Darstellung der Vorgehensweise zur Bildverarbeitung vor der Atmosphärenkorrektur 33*

***Abbildung 3-3**: Schematische Darstellung der Strahlungsprozesse an einem Partikel 34*

***Abbildung 3-4**: Interaktion der einfallenden Solarstrahlung (a) sowie Interaktion der rückgestreuten Strahlung (b) mit der Luft-Wasser – Grenzschicht 36*

***Abbildung 3-5**: Darstellung der Rückstreuung sowie der Absorption von reinem Wasser 38*

***Abbildung 3-6**: Simulationen des Spektralverlaufs mittels WASI bei variabler CDOM-Konzentration 39*

***Abbildung 3-7**: Simulationen des Spektralverlaufs mittels WASI bei variabler Chlorophyll a-Konzentration 40*

***Abbildung 3-8**: Simulationen des Spektralverlaufs mittels WASI bei variabler TSM-Konzentration 40*

***Abbildung 4-1**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang des Flusses Spree 48*

***Abbildung 4-2**: Abbildung des Forschungsgyrokopters der Hochschule Anhalt. 53*

***Abbildung 4-3**: Skizzierte Darstellung der erfassten Raumwinkel mit Richtungsangabe in Abhängigkeit zur IMU im Gyrokopter der Hochschule Anhalt. 54*

***Abbildung 5-1**: Darstellung von Spektren von Eisenhydroxide im Wellenlängenbereich von 400 bis 2.500 nm ... 58*

***Abbildung 5-2**: Schwimmende Plattform zur Messung der rückgestreuten und einfallenden Bestrahlungsstärke unterhalb der Gewässeroberfläche in zwei verschiedenen Tiefen. 63*

***Abbildung 5-3**: Darstellung der Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}) [%] kurz unter der Wasseroberfläche an fünf verschiedenen Messstellen vom 04.09.2018 ..... 64*

***Abbildung 5-4**: Darstellung der scheinbaren Reflektanz [%] im Wellenlängenbereich von 440 bis 1.400 nm entsprechend den Messstellen vom 04.09.2018 ..... 65*

***Abbildung 5-5**: Darstellung der scheinbaren Reflektanz [%] im Wellenlängenbereich von 440 bis 1.400 nm entsprechend den Messstellen vom 22.09.2019 ..... 67*

***Abbildung 6-1**: Anpassung der Vorgehensweise nach Kapitell 2 zur Durchführung der Kreuzvalidierung 75*

***Abbildung 6-2**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat am Beispiel von vier Orten anhand der Daten vom 04.09.2018 ..... 84*

***Abbildung 6-3**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat am Beispiel von vier Orten anhand der Daten vom 22.09.2019 ..... 87*

***Abbildung I-1**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Ruhlmühle bis Neuhausen (Spree) mit den Probenentnahmestellen (SP) vom 04.09.2018 und 22.09.2019. ..... 106*

***Abbildung I-2**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Neustadt bis Neuhausen (Spree) mit den Probenentnahmestellen (SP) vom 04.09.2018 ..... 108*

***Abbildung I-3**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Ruhlmühle bis Bräsinchen mit den Probenentnahmestellen (SP) vom 22.09.2019 ..... 109*
***Abbildung I-4**: Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 04.09.2018. Die Gewässerproben wurden im Labor der HSA analysiert 111*
***Abbildung I-5:** Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 04.09.2018. Die Gewässerproben wurden im Labor des IGB analysiert 113*
***Abbildung I-6**: Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 22.09.2019. Die Gewässerproben wurden im Labor der HSA analysiert 115*
***Abbildung I-7**: Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 22.09.2019. Die Gewässerproben wurden im Labor des IGB analysiert 117*
***Abbildung I-8**: Abdeckung des abgeleiteten True-Orthophotos mittels der RGB-Daten vom 04.09.2018..... 118*
***Abbildung I-9**: Abdeckung des abgeleiteten True-Orthophotos mittels der RGB-Daten vom 22.09.2019..... 119*
***Abbildung I-10**: Abdeckung der erfassten Daten des Sensors HySpex SWIR 384 vom 04.09.2018. ..... 120*
***Abbildung I-11**: Abdeckung der erfassten Daten des Sensors HySpex SWIR 384 vom 22.09.2019 ..... 121*
***Abbildung I-12**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat (s. Tabelle **6-1**). Die Analysen der Gewässerproben vom 04.09.2018 erfolgten im Labor der HSA. 132*
***Abbildung I-13**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe DOC, TOC und Chl-a nach Tabelle **I-10**. Die Analysen der Gewässerproben vom 04.09.2018 erfolgten in den Laboren der HSA 135*
***Abbildung I-14**: Darstellung der Streudiagramme der Messergebnisse der Labore HSA und IGB mit Angabe der linearen Regression, des Konfidenzintervalls 95 % sowie des Prognoseintervalls 95 %. Die Datenerfassung erfolgte am 22.09.2019 ..... 137*
***Abbildung I-15**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat nach Tabelle **6-3**. Die Analysen der Gewässerproben vom 22.09.2019 erfolgten im Labor der HSA 144*
***Abbildung I-16**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat nach Tabelle **6-4**. Die Analysen der Gewässerproben vom 22.09.2019 erfolgten im Labor des IGB 145*
***Abbildung I-17**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffen DOC, TOC und Chl-a nach Tabelle **I-14**. Die Probenanalysen vom 22.09.2019 erfolgten in den Laboren der HSA (DOC,TOC) und des IGB (Chl-a). 149*
***Abbildung I-18**: Abbildung des Untersuchungsgebietes mit Kennzeichnung der Gebiete zur detaillierten Darstellung der Ableitungsergebnisse der Messkampagne vom 04.09.2018 ..... 160*
***Abbildung I-19**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 04.09.2018 ..... 161*

***Abbildung I-20**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Mündung eines Industriekanals bei Zerre sowie der nördlichen Spitze der Spreeinsel in Spremberg vom 04.09.2018 ..... 162*

***Abbildung I-21**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 04.09.2018 ..... 163*

***Abbildung I-22**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Mündung des Industriekanals bei Zerre sowie die nördliche Spitze der Spreeinsel in Spremberg vom 04.09.2018. ..... 164*

***Abbildung I-23:** Abbildung des Untersuchungsgebietes mit Kennzeichnung der Gebiete zur detaillierten Darstellung der Ableitungsergebnisse zur Messkampagne vom 22.09.2019 ..... 165*

***Abbildung I-24**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 22.09.2019 ..... 166*

***Abbildung I-25**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Spree-Vorsperre Bühlow und der Talsperre Spremberg vom 22.09.2019 ..... 167*

***Abbildung I-26**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 22.09.2019 ..... 168*

***Abbildung I-27**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Spree-Vorsperre Bühlow und der Talsperre Spremberg vom 22.09.2019 ..... 169*

***Abbildung II-1**: Anwendung der erstellten Maske am Beispiel des Hyperspektralstreifens. 171*

***Abbildung II-2**: Spektralanalyse zur Identifizierung eines Schwellwertes zur Detektion von Schattenflächen ... 172*

***Abbildung II-3**: Spektralanalyse als Basis zur Entwicklung eines Index zur Detektion von Nachbarschaftseffekten auf der Gewässeroberfläche 173*

***Abbildung III-1**: Darstellung der Messstellen (SP) zur Erhebung der vor Ort-Parameter. 176*

***Abbildung III-2**: Darstellung der Ableitungsergebnisse der spektralen In situ-Messungen 181*

***Abbildung III-3**: Messverfahren zur Bestimmung eines vertikalen Eisengradienten in drei verschiedenen Messtiefen 184*

Tabellenverzeichnis

***Tabelle 3-1**: Zusammensetzung des Aerosol-Modells für urbane Gebiete 35*

***Tabelle 4-1**: Verfahren zur Bestimmung der chemischen Gewässerparameter im Labor der HSA mit Angabe der Messunsicherheit 49*

***Tabelle 4-2**: Verfahren zur Bestimmung der chemischen Gewässerparameter im Labor des IGB mit Angabe der Messunsicherheit 50*

***Tabelle 4-3**: Auflistung der im Labor der HSA bestimmten Gewässerproben vom 04.09.2018 ..... 51*

***Tabelle 4-4**: Auflistung der im Labor des IGB bestimmten Gewässerproben vom 04.09.2018 ..... 51*

***Tabelle 4-5**: Auflistung der im Labor der HSA bestimmten Gewässerproben vom 22.09.2019 ..... 52*

***Tabelle 4-6**: Auflistung der im Labor des IGB bestimmten Gewässerproben vom 22.09.2019 ..... 52*

***Tabelle 5-1**: Auflistung einer Auswahl einzelner Wellenlängen basierend auf den spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Wasserinhaltsstoffe sowie von Eisenoxiden 59*

***Tabelle 5-2**: Auflistung der gemessenen Konzentrationen der Messstellen in Abbildung 5-4 ..... 65*

***Tabelle 5-3**: Angabe des größten Bestimmtheitsmaßes (R^2) je Gewässerinhaltsstoff zu den einzelnen Wellenlängen aus Tabelle I-7 in Kapitel I.II 66*

***Tabelle 5-4**: Auflistung der gemessenen Konzentrationen der Messstellen in Abbildung 5-5 ..... 67*

***Tabelle 5-5**: Angabe des größten Bestimmtheitsmaßes (R^2) je Gewässerinhaltsstoff zu den einzelnen Wellenlängen aus Tabelle I-7 in Kapitel I.II 68*

***Tabelle 6-1**: Auflistung der Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den chemischen Daten der HSA vom 04.09.2018 ..... 70*

***Tabelle 6-2**: Ermittelte Messunsicherheit anhand der analytischen Ergebnisse der Labore der Messkampagne vom 22.09.2019 mittels der Probeentnahmestellen im Abdeckungsgebiet der Hyperspektraldaten 71*

***Tabelle 6-3**: Auflistung der Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den analytischen Ergebnissen der HSA vom 22.09.2019 ..... 72*

***Tabelle 6-4**: Auflistung der Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den chemischen Daten des IGB vom 22.09.2019 ..... 73*

***Tabelle 6-5**: Auflistung des Varianzkoeffizienten je Gewässerinhaltsstoff anhand der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Messkampagnen von 2018 und 2019 ..... 74*

***Tabelle 6-6**: Auflistung der p-Werte der Signifikanztests zwischen den analytischen Ergebnissen je Gewässerinhaltsstoff vom 04.09.2018 der HSA und vom 22.09.2019 der HSA und des IGB 76*

***Tabelle 6-7**: Auflistung der entwickelten Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit anhand der Daten von 18HSA zur Kreuzvalidierung mittels der In situ-Daten von 19HSA und 19IGB. 77*

***Tabelle 6-8**: Angabe der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit der Kreuzvalidierung. Die Modellentwicklung erfolgte anhand der Daten von 19HSA zur Kreuzvalidierung mittels der In situ-Daten von 18HSA und 19IGB 78*

***Tabelle 6-9**: Angabe der entwickelten Ableitungsmodelle anhand der Daten von 19IGB mit der höchsten Genauigkeit zur Kreuzvalidierung mittels der In situ-Daten der HSA von 2018 und 2019 ..... 79*
***Tabelle 6-10**: Zusammenfassung der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Eisen(II) vom 22.09.2019 ..... 81*
***Tabelle 6-11**: Überblick der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Sulfat vom 22.09.2019 ..... 81*
***Tabelle 6-12**: Übersicht der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Eisen(III) vom 22.09.2019 ..... 82*
***Tabelle 6-13**: Zusammenfassung der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Gesamteisen vom 22.09.2019 . 82*
***Tabelle 6-14**: Auflistung der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit anhand der Daten vom 04.09.2018 ..... 83*
***Tabelle 6-15**: Auflistung der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit anhand der Daten vom 22.09.2019 ..... 86*
***Tabelle 7-1**: Aufführung der verwendeten Spektralindizes zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe (WIS) mit Genauigkeitsangabe je Messkampagne 90*
***Tabelle I-1**: Koordinatenliste der Messstellen vom 04.09.2018 ..... 107*
***Tabelle I-2**: Koordinatenliste der Messstellen vom 22.09.2019 ..... 107*
***Tabelle I-3**: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 04.09.2018 im Labor der HSA 110*
***Tabelle I-4**: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 04.09.2018 im Labor des IGB 112*
***Tabelle I-5**: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 22.09.2019 im Labor der HSA 114*
***Tabelle I-6**: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 22.09.2019 im Labor des IGB 116*
***Tabelle I-7**: Auflistung einzelner Wellenlängen basierend auf der spektralen Ausprägung sowie den spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Wasserinhaltsstoffe. 123*
***Tabelle I-8**: Indizes zur Ableitung von Wasserinhaltsstoffen anhand der Literatur. 124*
***Tabelle I-9**: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat anhand der Daten vom 04.09.2018 ..... 129*
***Tabelle I-10**: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe DOC, TOC sowie Chl-a anhand der Daten vom 04.09.2018 ..... 133*
***Tabelle I-11**: Auflistung der berechneten relativen prozentualen Differenzen (RPD) zwischen den analytischen Ergebnissen der Labore vom 22.09.2019 je Probenentnahmestelle 136*
***Tabelle I-12**: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat anhand der Daten vom 22.09.2019 auf Basis der Analysen der HSA 138*
***Tabelle I-13**: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat anhand der Daten vom 22.09.2019 basierend auf den Analysen des IGB 141*
***Tabelle I-14**: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelleder Wasserinhaltsstoffe DOC, TOC sowie Chl-a anhand der Daten vom 22.09.2019 ..... 146*
***Tabelle I-15**: Angabe der Ergebnisse der Kreuzvalidierung der zehn ermittelten Ableitungsmodelle für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat basierend auf den analytischen Ergebnissen von18HSA. Die Validierung erfolgte mittels der Daten von 19HSA und 19IGB 150*
***Tabelle I-16**: Angabe der Ergebnisse der Kreuzvalidierung der zehn ermittelten Ableitungsmodelle für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) basierend auf den Daten von 19HSA. Die Validierung erfolgte mittels der analytischen Daten von 18HSA und 19IGB 154*

***Tabelle I-17**: Angabe der Ergebnisse der Kreuzvalidierung der zehn ermittelten Ableitungsmodelle für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat basierend auf den Daten von 19IGB. Die Validierung erfolgte Daten von 18HSA sowie 19HSA 157*

***Tabelle III-1**: Koordinatenliste der Messstellen vom 09.05.2018 ..... 175*

***Tabelle III-2**: Auflistung der gemessenen Sichttiefen und pH-Werte vom 09.05.2018 ..... 177*

***Tabelle III-3**: Auflistung der gemessenen Sichttiefen und pH-Werte vom 04.09.2018 ..... 178*

***Tabelle III-4**: Auflistung der gemessenen pH-Werte vom 22.09.2019..... 178*

***Tabelle III-5**: Auflistung der berechneten Signaltiefen ($Z_{90\%}$) sowie der gemessenen Sichttiefe mittels Secchi-Scheibe (Z_{SD}) vom 04.09.2018..... 180*

***Tabelle III-6**: Auflistung der gemessenen Sichttiefe, der Gewässertiefe sowie der Differenz beider Messungen vom 09.05.2018 ..... 182*

***Tabelle III-7**: Auflistung der gemessenen Sichttiefe, der Gewässertiefe sowie der Differenz beider Messungen vom 04.09.2018 ..... 183*

***Tabelle III-8**: Koordinatenliste und Messtiefen der Messstellen zur Bestimmung eines vertikalen Eisengradienten am 28.11.2019..... 184*

***Tabelle III-9**: Auflistung der Messergebnisse zur Bestimmung eines vertikalen Eisengradienten. 184*

Abkürzungsverzeichnis

AAS	Atomabsorptionsspektrometer
AMD	saures Grubenwasser
AOP	scheinbare optische Eigenschaften
APD	absolute prozentuale Differenz
BRICS	Brasilien, Russland, Indien, China und Südafrika
CDOM	Gelbstoffe, Yellow Stubstances
Chl-a	Chlorophyll a
CO_2	Kohlenstoffdioxid
DIN	Deutsches Institut für Normung
DN	Grauwert
DOC	gelöster organischer Kohlenstoff
DOM	gelöstes organisches Material
DSM	digitales Oberflächenmodell
Eisen(II)	Eisen, zweiwertig
Eisen(III)	Eisen, dreiwertig
Exp.	exponentiell
FMC	Forward Motion Compensation
GNSS	globale Navigationssatellitensysteme
GSD	räumliche Bodenpixelauflösung
HSA	Hochschule Anhalt
IGB	Leibnitz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei
IMU	inertiale Messeinheit
INS	Trägheitsnavigationssystem
IOCCG	International Ocean-Colour Coordinating Group
IOP	inhärente optische Eigenschaften
IR	Infrarotstrahlung
Lin.	linear
LMBV	Lausitzer und Mitteldeutsche Bergbau-Verwaltungsgesellschaft mbH
Log.	logarithmisch
N	Gesamtanzahl
N_C	Anzahl zur Modellkonstruktion
N_V	Anzahl zur Modellvalidierung
NDWI	Normalized Difference Water Index
POC	partikulärer organischer Kohlenstoff
POM	partikuläres organisches Material
Pot.	potenziell
Reg.	Regressionsart
RPD	relative prozentuale Differenz
Rt	Kanalverhältnis
RTE	Strahlungsübertragungsgleichung

Sauerstoff	O_2
SD	Standardabweichung
Slp	Steigung
SO_4^{2-}	Sulfat
SP	Probenentnahmestelle
TOC	gesamt organischer Kohlenstoff
TSM	Tripton, Schwebstoff
UAV	unbemanntes Luftfahrzeug
UWV	unbemanntes Wasserfahrzeug
VIS	sichtbare Strahlung
VNIR	sichtbarer- und naher Infrarotbereich
WASI	Water Colour Simulator
WIS	Gewässer- oder Wasserinhaltsstoff
WMS	Web Map Service
18HSA	Analytische Ergebnisse der HSA der Messkampagne vom 04.09.2018
18IGB	Analytische Ergebnisse des IGB der Messkampagne vom 04.09.2018
19HSA	Analytische Ergebnisse der HSA der Messkampagne vom 22.09.2019
19IGB	Analytische Ergebnisse des IGB der Messkampagne vom 22.09.2019

Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
a	m^{-1}	Absorptionskoeffizient
$aR_{RS}(\lambda)$	%	scheinbare Reflektanz
b	m^{-1}	Streukoeffizient
b_b	m^{-1}	Rückstreuungskoeffizient
c	m^{-1}	Dämpfungskoeffizient
Δr	m oder cm	Distanz
$E(\lambda)$	$W/(m^2*nm)$	Bestrahlungsstärke
E_d	$W/(m^2*nm)$	einfallende Bestrahlungsstärke
E_u	$W/(m^2*nm)$	rückgestreute Bestrahlungsstärke
g	sr^{-1}	Proportionalitätsfaktor
$I(\lambda)$		Strahlung, Intensität
K_d	m^{-1}	vertikaler Dämpfungskoeffizient
$L(\lambda)$	$W/(sr*m^2*nm)$	Strahldichte
L_d	$W/(sr*m^2*nm)$	einfallende Strahldichte
L_u	$W/(sr*m^2*nm)$	zurückgestreute Strahldichte
nRMSE		normalisierter RMSE
r	m oder cm	Radius
R		Korrelation
R^2		Bestimmtheitsmaß
$R(\lambda)$	%	Reflexionsgrad, Reflektanz
$R_E(\lambda)$	%	Irradiance Reflectance
$R_L(\lambda)$	%	Radiance Reflectance
$R_{RS}(\lambda)$	%	Remote Sensing Reflectance
$R_{SIR}(\lambda)$	%	Subsurface Irradiance Reflectance
RMSE		mittlerer quadratischer Fehler
rRMSE		relative RMSE
z	m oder cm	Tiefenangabe
$Z_{90\%}$	m	Signaltiefe
Z_{SD}	m^{-1}	Sichttiefe mittels Secchi-Scheibe
α		Signifikanzniveau
$\beta(\theta)$	m^{-1}	Volumen Streufunktion
θ	rad	Horizontalwinkel der L_d
λ	nm oder µm	Wellenlänge
φ	Rad	Azimuthalwinkel der L_d

1. Einleitung

Die Fernerkundung stellt ein berührungsloses sowie flächendeckendes Verfahren dar, wodurch es sich hervorragend für ein flächendeckendes Monitoring eignet (Gholizadeh et al. 2016; Ritchie et al. 2003). In dieser Arbeit werden Algorithmen zur automatisierten und flächendeckenden Ableitung von Gewässerinhaltsstoffen verockerter Fließgewässer mittels hyperspektralen Fernerkundungsdaten aus geringer Flughöhe entwickelt und validiert. Einleitend werden die Motivation, die Zielsetzung sowie der strukturelle Aufbau der Arbeit vorgestellt.

1.1. Hintergrund und Motivation

Durch den intensiven Abbau von Rohstoffen im Bergbauverfahren erfolgt ein großer Eingriff in die Natur. Dabei werden nicht nur die begehrten Rohstoffe gewonnen, sondern auch der Abraum gelagert sowie Abwässer in Absetzbecken gesammelt. Nicht selten kommt es vor, dass Niederschlagswasser mit dem Abraum reagiert und somit saure Grubenwässer (eng. Acid Mine Drainage (AMD)) entstehen (Wetzel 2001, S. 294). Diese können die Qualität des Grundwassers mindern. Weiterhin werden von Bergbauanlagen die vorhandenen Abwässer in die nahe gelegenen Oberflächengewässer geleitet. Infolgedessen können aufgrund geringer Umweltstandards schwerwiegende Auswirkungen für das örtliche Ökosystem auftreten (Rüttinger und Scholl 2017). Beim Tagebauverfahren, wie im Untersuchungsgebiet Lausitzer Braunkohlerevier (s. Kapitel 4.1), kann unter Umständen zusätzlich der Grundwasserspiegel gesenkt werden. In Regionen mit pyrit- oder markasithaltigen Böden kann dieser Prozess zum Zerfall der Eisen(II)-disulfide beitragen. Durch Kontakt mit Luftsauerstoff oder Wasser zerfallen diese Mineralien in Sulfat, Eisen(II)-Ionen und Wasserstoff (s. Gl. 1-1) (Sánchez 2008; Schultze et al. 2010).

$$FeS_2 + \frac{7}{2}O_2 + H_2O \rightarrow Fe^{2+} + 2SO_4^{2-} + 2H^+ \qquad \textbf{Gl. 1-1}$$

Mit Beendigung des Tagebaus folgt in der Regel die Renaturierung des Tagebaubereichs. Dazu wird der Abraum zur Schließung des Tagebaus genutzt und das Grundwasser steigt auf natürliche Weise an. In der Folge entstehen die sogenannten Tagebaurestseen mit einem niedrigen pH-Wert. Zusätzlich gelangen durch den Grundwasserwiederanstieg die freigesetzten Stoffe der Pyritverwitterung in der Hydrosphäre über Grundwasserleiter in die örtlichen Oberflächengewässer (Bilek et al. 2016). Dort oxidieren die eingetragenen Eisen(II)-

Ionen mit dem im Wasser befindlichen Sauerstoff (O_2) zu Eisen(III)-oxid (s. Gl. 1-2) (Luther 1987; Schultze et al. 2010; Singer und Stumm 1970).

$$Fe^{2+} + \frac{1}{4}O_2 + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + \frac{1}{2}H_2O \qquad \textbf{Gl. 1-2}$$

In Gewässern mit einem pH-Wert zwischen 5 und 8 hydrolysiert es zu Eisen(III)-hydroxid und flockt aus (s. Gl. 1-3) (Gleisner und Herbert 2002; Schultze et al. 2010; Singer und Stumm 1970; Wetzel 2001, S. 293).

$$Fe^{3+} + 3H_2O \rightarrow Fe(OH)_3 \downarrow + 3H^+ \qquad \textbf{Gl. 1-3}$$

Ab einer Eisen(III)-Konzentration von 2 bis 3 mg/L führt die Eisenausfällung zu einer gelben bis rotbraunen Verfärbung des Gewässers (s. Abbildung 1-1) (Uhlig et al. 2016; Uhlmann et al. 2013b). In der Folge kommt es zur verstärkten Trübung des Gewässers. Die Menge des eindringenden Sonnenlichtes verringert sich und die Lebensbedingungen für sedimentbewohnende Organismen nehmen durch die Eisenablagerungen ab. Als Folgeerscheinung reduziert sich die Biodiversität im Gewässer (Nixdorf et al. 2016).
In Abbildung 1-1 ist die Pyritverwitterung skizziert. Weiterhin ist die Ausfällung von Eisen(III)-hydroxid durch Schwertmannit dargestellt. Die resultierende Verockerung ist anhand des abgebildeten Flusses (Spree) deutlich zu erkennen.

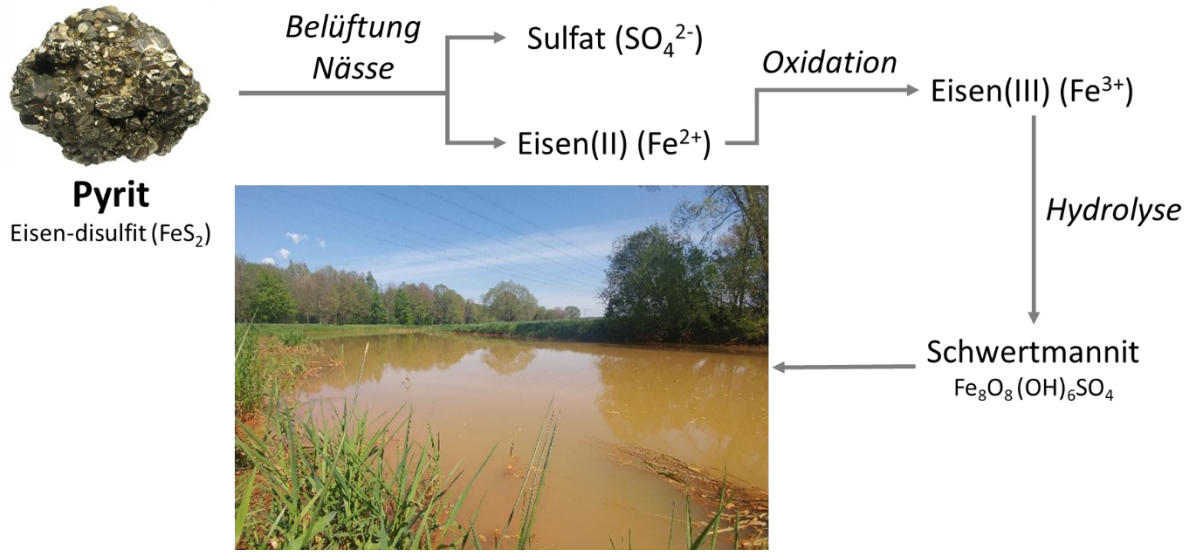

Abbildung 1-1: Schematische Darstellung der Pyritverwitterung vom Ausgangsstoff (Pyrit) bis zur Verockerung im Fließgewässer (Spree); Bildquelle Pyrit: Zander (2007)

Weitere Informationen bezüglich der Prozesse vor und während des Bergbaus sowie die Auswirkungen auf die limnischen Lebensräume Grundwasser, Fließgewässer und Standgewässer sind im Kapitel IV in der Anlage vorzufinden.

Eisen und dessen Verbindungsvarianten gehören zur Gruppe der Schwermetalle. Im Allgemeinen beinhaltet dessen Bestimmung in Gewässern mehrere Arbeitsschritte (Choe et al. 2008; Gholizadeh et al. 2016):

1. Systematisches Sammeln von Gewässerproben,
2. Laboranalysen und
3. Interpolation der punktuellen Ergebnisse.

Dies ist jedoch zeit- und kostenintensiv bei der Durchführung großer zeitlicher und räumlicher Studien (Ramadas und Samantaray 2018, S. 226). Eine Alternative liefern die Methoden der hyperspektralen Fernerkundung. Diese stellen räumliche und zeitliche Karten über spezifische Qualitätsparameter des Gewässers bereit. Weiterhin ermöglichen diese eine effektive sowie effiziente Überwachung eines bestimmten Gebietes sowie die Identifizierung und Quantifizierung von Wasserqualitätsparametern (Ritchie et al. 2003).

Zur Überwachung und Bewertung der Qualität von Binnengewässern zeigte die Fernerkundung in den letzten Jahrzehnten große Fortschritte (Gholizadeh et al. 2016; Ogashawara et al. 2017). Durch besserer computerbasierte Interpretationstechniken sowie spektral und räumlich hochauflösende Satelliten wurden zunehmend die Küstenzonen und Seen überwacht (Bukata et al. 1995; Kuhn et al. 2019). Aufgrund der geringen räumlichen Ausdehnung und der komplexen chemischen Zusammensetzung sind kleinere Fließgewässer in der Gewässerfernerkundung bislang weniger betrachtet worden (Kuhn et al. 2019). Der Schwerpunkt bisheriger Analysen hat auf sehr breiten Flüssen wie dem Mississippi, der Gironde oder dem Rhein bzw. auf Flussmündungen gelegen (Baschek et al. 2018; Doxaran et al. 2003; Knaeps et al. 2015; Olmanson et al. 2013). In diesem Zusammenhang konzentrierten sich die Untersuchungen auf die Ableitung von Konzentrationen von Schwebstoffen (eng. total suspended matter (TSM)). Jedoch besteht ein steigender Bedarf an regelmäßigem Monitoring von Binnen- sowie Küstengewässern aufgrund verschiedener nationaler und internationaler Richtlinien und Abkommen, wie z.B. der Europäischen Wasserrahmenrichtlinie (Giardino et al. 2019). Diese beinhaltet eine regelmäßige Berichterstattung der Gewässergüte sowie der Veränderungen (BMUB / UBA 2016). Dies bezieht auch verockerte Fließgewässer mit ein, wodurch ein Verfahren für ein flächendeckendes Monitoring zur Konzentrationsbestimmung von gelöstem und partikulärem Eisen sowie von Sulfat erforderlich wird.

Erste Verfahren zur Detektion von Eisen in Gewässern entstammen der Bildspektroskopie in den Neunzigerjahren des 20. Jahrhunderts. Anderson und Robbins (1998) führten Untersuchungen zur Bestimmung von AMDs mittels spektraler In situ-Daten durch. Zur Detektion von Eisenoxiden identifizierten sie den Wellenlängenbereich bei 650 nm. Williams et al. (2002) nutzten zur Visualisierung von AMDs die Wellenlängen 550, 650 und 750 nm, wodurch die AMDs gelbgrün im Multispektralbild erschienen. Denn aufgrund der Eisenausfällung weisen die Gewässer eine erhöhte Rückstreuung bei 650 und 750 nm auf.

Trotz erster Untersuchungen an AMDs konzentrierte sich die Forschung der Gewässerfernerkundung in den folgenden Jahren auf Tagebaurestseen (Gläßer et al. 2011; Schroeter und Gläßer 2011). Frauendorf (2002) führte die ersten umfassenden Analysen durch, wobei sich die Forschungen auf die Einteilung der einzelnen Seestadien basierend auf In situ-Daten stützten. Weiterhin bestimmte Frauendorf (2002) die Konzentration von gelöstem Eisen über ein geeignetes Regressionsmodell in Bezug zur Gelbstoffabsorption bei 440 nm. Kopačková und Hladíková (2014) bestimmten die Konzentrationen von gelöstem Eisen mittels der Methode des Linear Spectral Unmixing. Außerdem erfolgte eine vertiefte Forschung zur Eisendetektion in borealen Gewässern, denn aufgrund des Klimawandels gelangt zunehmend Eisen aus dem Boden in die Oberflächengewässer. Die entsprechenden Forschungen beziehen sich insbesondere auf die spektrale Trennung von gelöstem Eisen und gelöstem organischen Kohlenstoff (eng. dissolved organic carbon (DOC)) (Kutser et al. 2016; Maloney et al. 2005; Weyhenmeyer et al. 2014). Ulrich et al. (2016) führten Untersuchungen zur Detektion von Eisen(III) im Fluss Rio Doce in Brasilien mittels Daten des Fernerkundungssatelliten Landsat 8 durch. Der Grund der Untersuchung resultierte aus den gebrochenen Dämmen eines Absetzbeckens einer Eisenbergmine im November 2015. Die entstandene Schlammlawine ergoss sich in den nahe gelegnen Fluss Rio Doce. Über eine Strecke von 660 km transportierte der Fluss die Bergbauabfälle bis zum Atlantischen Ozean. Anschließend kam es zur Verockerung des Flusses und dessen Folgen. Aufgrund der großen Ausdehnung ist eine punktuelle In situ-Beprobung zur Dokumentation der Verockerung sowie der Entwicklung von Gegenmaßnahmen ungeeignet. Mittels flächendeckender Informationen können dagegen Ablagerungen von Eisen sowie Verdünnungsprozesse durch Zuflüsse identifiziert werden und zur schnelleren Abnahme der Verockerung beitragen bzw. diese sogar zurückhalten. Weiterhin haben die Untersuchungen von Ulrich et al. (2016) gezeigt, dass lange Streckenabschnitte des Flusses Rio Doce mittels des Satelliten nicht abbildbar waren.

Demzufolge ist die Erfassung hochauflösender multi- bzw. hyperspektraler Daten für weitere Forschungen notwendig.

1.2. Zielsetzung

Ziel dieser Arbeit ist die flächendeckende Ableitung spezifischer Inhaltsstoffe verockerter Fließgewässer. Dabei liegt der Fokus auf Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat. Da eine Verockerung bzw. Gewässer mit einem hohen Eisengehalt nur selten vorkommen und eine einzigartige chemische Zusammensetzung aufweisen, ist die Entwicklung geeigneter Ableitungsmodelle notwendig. Um dies zu erreichen, werden spezifische Regressionsmodelle zwischen den Hyperspektraldaten und den Inhaltsstoffen automatisiert entwickelt und validiert.

Weiterhin werden die Gewässerinhaltsstoffe gesamter und gelöster organischer Kohlenstoffe sowie von Chlorophyll a chemisch analysiert und mittels spezifischer Regressionsmodellen abgeleitet. Diese werden zur Erlangung weiterer Erkenntnisse über die Spektraleigenschaften des Flusses Spree im Untersuchungsgebiet sowie über die Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe herangezogen.

Die in dieser Arbeit vorgestellte Vorgehensweise kann in folgende vier Arbeitsschritte eingeteilt werden (s. Abbildung 1-2):

- Datenerfassung,
- Erstellung von Spektralindizes,
- Automatisierte Entwicklung der Ableitungsmodelle sowie
- Ergebnisse und Interpretation.

An zwei Messkampagnen, am 04.09.2018 und 22.09.2019, wurden die Daten erfasst. Dazu wurde eine systematische Erhebung der Gewässerproben mit anschließender chemischer Analyse in den Laboren der Hochschule Anhalt (HSA) und des Leibnitz-Instituts für Gewässerökologie und Binnenfischerei (IGB) durchgeführt. Zeitgleich zur Probenentnahme erfolgte die Erfassung der hyperspektralen Fernerkundungsdaten im Wellenlängenbereich von 400 bis 2.500 nm mittels des Gyrocopters der HSA aus geringer Flughöhe.

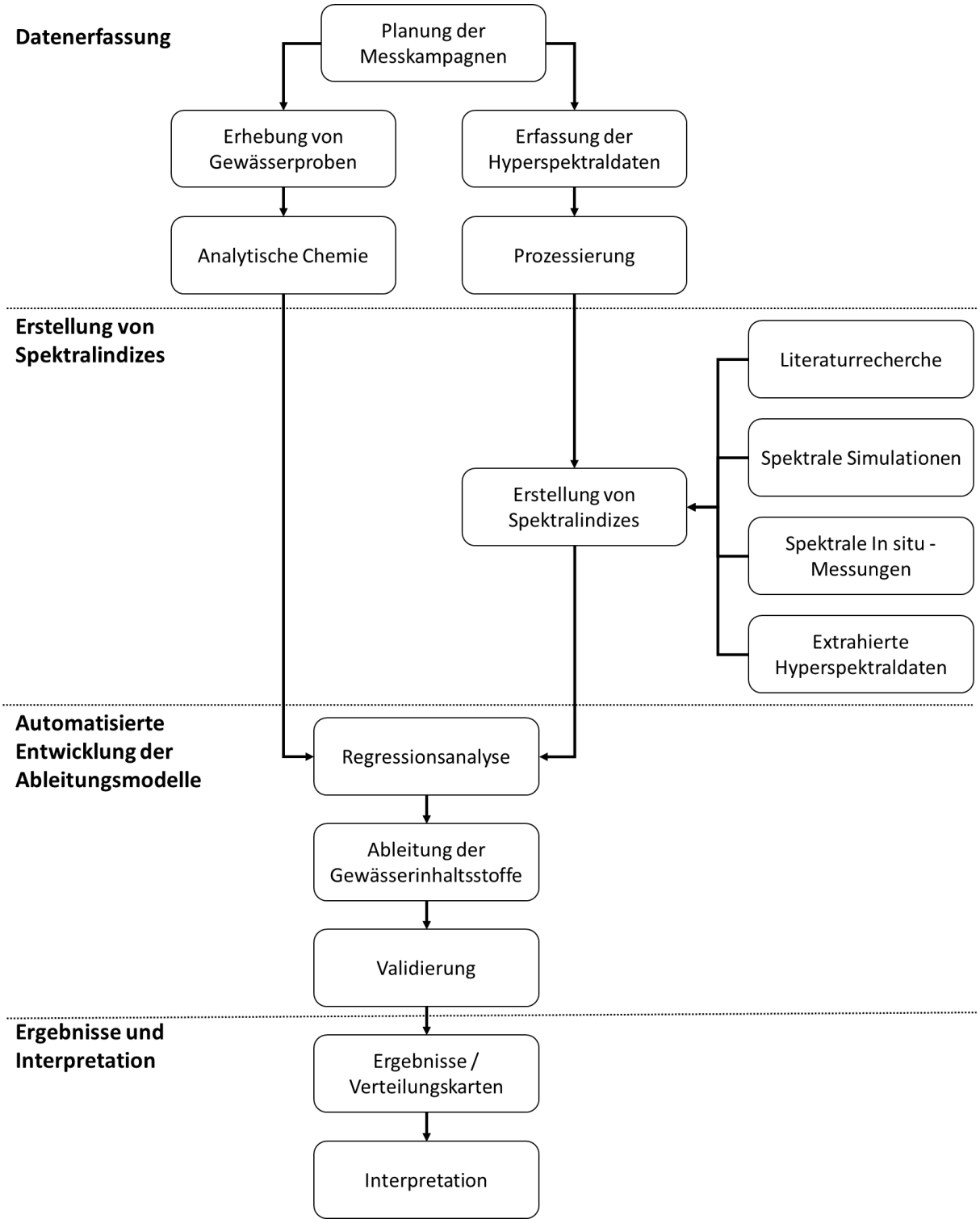

Abbildung 1-2: Arbeitsprogramm zur automatisierten Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe verockerter Fließgewässer. Das Schema ist in die vier Aufgabenbereiche Datenerfassung, Erstellung von Spektralindizes, automatisierte Entwicklung der Ableitungsmodelle sowie Ergebnisse und Interpretation untergliedert.

Die Erstellung spektraler Indizes repräsentiert einen zentralen Punkt dieser Arbeit. Bevor eine Regressionsanalyse zwischen den erhobenen Datensätzen durchgeführt werden kann, erfolgt eine Reduzierung der Hyperspektraldaten auf spezifische Indizes. Diese werden zum einen der Literatur entnommen, wie z.B. zur Detektion von Eisen in Böden sowie zur Ableitung von

hohen Schwebstoffkonzentrationen in Gewässern. Zum anderen werden diese durch Simulationen, spektralen In situ-Messungen und extrahierten Spektralinformation der erhobenen Hyperspektraldaten ermittelt. Anschließend werden die erstellten Spektralindizes in Beziehung mit den erhobenen chemischen Parametern gesetzt, um die spezifischen Regressionsmodelle zu entwickeln.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeit liegt in der automatisierten Entwicklung und Validierung von Ableitungsmodellen. Aufgrund der dargestellten Herangehensweise ist zum einen die Verwendung einer Vielzahl von Spektralindizes notwendig und zum anderen eine genaue Validierung. Denn die empirischen Ableitungsmodelle liefern zwar sehr schnell Ergebnisse über die horizontale Verteilung der Gewässerinhaltsstoffe, jedoch neigen diese zur Überspezialisierung, weshalb eine Validierung der Ableitungsergebnisse notwendig ist. Zur Ermittlung der Robustheit des entwickelten Verfahrens sowie der Ableitungsmodelle erfolgt anschließend eine Evaluierung mittels der Kreuzvalidierung.

Abschließend werden die erstellten Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe zur Interpretation herangezogen. Durch die Darstellung von Konzentrationsgradienten können lokale Änderungen durch zusätzliche Stoffeinträge identifiziert und visualisiert sowie aktuelle Maßnahmen gegen die Verockerung kontrolliert werden.

1.3. Struktureller Aufbau und methodisches Vorgehen

Entsprechend der genannten Zielstellung und des dazu notwendigen Aufgabenbereichs gliedert sich die Arbeit in folgende Abschnitte:

Kapitel 2 beschreibt das automatisierte Verfahren zur flächendeckenden Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe anhand von empirischen Ableitungsmodellen. In diesem Zusammenhang werden Ausgangsdaten sowie die einzelnen Arbeitspakete: Datenverknüpfung, Entwicklung der Spektralindizes, Datenfilterung, Regressionsanalyse, Ableitung und Validierung erläutert.

Kapitel 3 gibt einen Überblick über die passive optische Fernerkundung. Dies beinhaltet die Beschreibung der Einflussfaktoren auf die gemessene Strahlung sowie die Eigenschaften der Gewässerfärbung. Weiterhin werden die Methoden der Gewässerfernerkundung erläutert und die Einsatzmöglichkeiten für die aufgezeigte Vorgehensweise diskutiert.

Kapitel 4 befasst sich mit der Beschreibung des Untersuchungsgebietes sowie der Datenerfassung. Diesbezüglich werden neben den Ursachen für die Verockerung im Untersuchungsgebiet, Lausitzer Braunkohlerevier, auch die Gründe für den ausgewählten Streckenabschnitt des Flusses Spree dargelegt. Weiterhin werden die Methoden zur Erhebung der Gewässerproben und der Hyperspektraldaten erläutert sowie die Messergebnisse präsentiert.

Kapitel 5 beschreibt die Erstellung der Spektralindizes. Diese stellen die Basis der Ableitungsmodelle dar. Diesbezüglich werden einerseits Literaturrecherchen zur Identifizierung spezifischer Spektraleigenschaften von Eisen in Böden bzw. hohen Schwebstoffkonzentrationen im Gewässer durchgeführt. Andererseits erfolgen Spektralanalysen anhand von spektralen In situ-Messungen sowie extrahierten Spektren der Hyperspektraldaten zur Bestimmung weiterer spezifischer Indizes, welche eigens an das Untersuchungsgebiet angepasst werden und auf den Indizes der Literatur basieren.

Kapitel 6 präsentiert die georeferenzierten Verteilungskarten der abgeleiteten Gewässerinhaltsstoffe. Der Schwerpunkt der dargestellten Karten liegt auf den Inhaltsstoffen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat. Weiterhin erfolgt eine Analyse der ermittelten Genauigkeit im Vergleich zu den erhobenen In situ-Daten. Weiterhin werden Untersuchungen bezüglich der Übertragbarkeit der Ableitungsmodelle auf einen neuen Datensatz sowie der Verwendung von In situ-Daten zweier verschiedener Labore durchgeführt.

Kapitel 7 fasst die durchgeführten Arbeiten und die daraus gewonnenen Erkenntnisse zusammen. Weiterhin wird ein Ausblick für weitere Forschungsarbeiten gegeben.

Anlage: Die Anlage untergliedert sich in vier Teile. Der erste Teil beinhaltet detaillierte Abbildungen und Tabellen, welche zur Beschreibung des aufgezeigten Verfahrens nur in komprimierter bzw. verkürzter Form dargestellt sind.

Im zweiten Kapitel der Anlage werden die Arbeitsschritte zur Prozessierung der hyperspektralen Fernerkundungsdaten beschrieben. Diese beinhalten die Georeferenzierung, die Bildvorverarbeitung sowie die Atmosphärenkorrektur.

Im dritten Abschnitt werden weitere Messungen beschrieben, welche für ein besseres Verständnis über das Untersuchungsgebiet notwendig sind. Um den Lesefluss nicht zu beeinträchtigen, sind diese in der Anlage vorzufinden.

Das vierte Kapitel der Anlage gibt einen Überblick über die Entwicklungen des globalen Bergbaus sowie die Auswirkungen auf die limnischen Lebensräume Grundwasser, Fließgewässer und Standgewässer.

2. Verfahrensüberblick

Die automatisierte Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe basiert in der vorliegenden Arbeit auf empirischen Methoden (s. Kapitel 3.3.2). Aufgrund des komplexen Chemismus verockerter Gewässer sind relevante Parameter für einen analytischen Ansatz bisher unbekannt, z. B. das Absorptionsverhalten von Eisen(II) sowie die Rückstreuung der Eisen(III)-Komplexe.

Zur automatisierten Ableitung der Wasserinhaltsstoffe kann das Verfahren in sechs Arbeitspakete untergliedert werden: Datenverknüpfung, Entwicklung der Spektralindizes, Datenfilterung, Regressionsanalyse, Ableitung und Validierung (s. Abbildung 2-1). Diese werden nachfolgend erläutert. Die Ausgangsdaten bilden die prozessierten Hyperspektraldaten (s. Kapitel II (Anlage)) sowie die chemischen In situ-Daten je Labor der Hochschule Anhalt (HSA) bzw. des Leibnitz-Instituts für Gewässerökologie und Binnenfischerei (IGB) und Messkampagne. Die Entwicklung und Automatisierung des Verfahrens erfolgen in der freien Programmiersprache R Version 3.6.1 (05.07.2019).

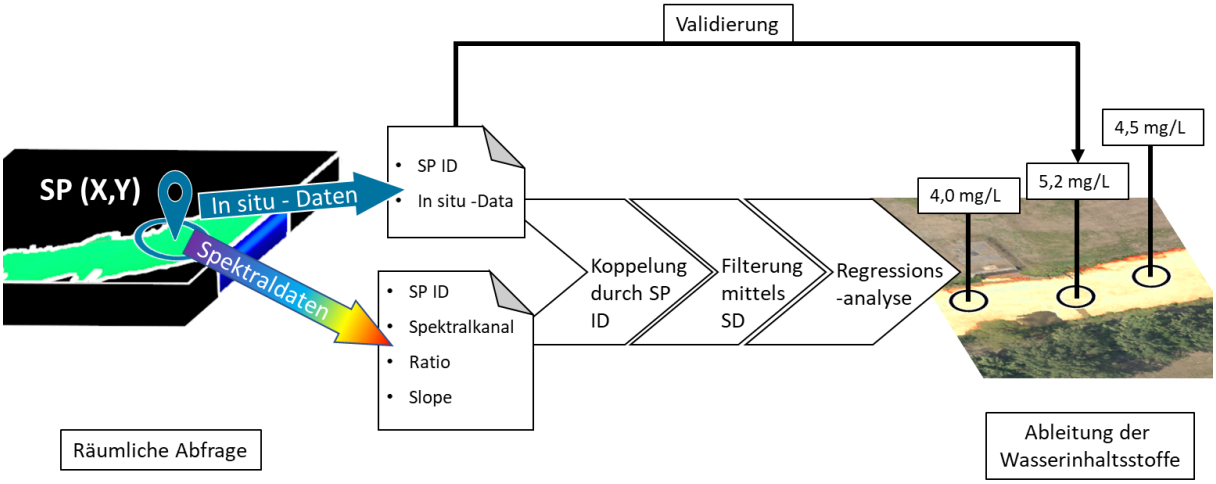

***Abbildung 2-1**: Verfahren zur automatisierten Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe verockerter Gewässer. Den Ausgangsdatensatz bilden die Hyperspektraldaten nach der Atmosphärenkorrektur gemäß Kapitel II (Anlage) sowie die chemischen In situ-Daten.*

Die Ausgangsdaten des aufgezeigten Verfahrens basieren auf den analytischen Ergebnissen (s. Kapitel 4.2) sowie den prozessierten hyperspektralen Fernerkundungsdaten nach Kapitel II (Anlage). Die Prozessierung beinhaltet eine Korrektur der atmosphärischen Einflüsse sowie eine Maskierung der Nachbarschaftseffekte und der Spiegelungen der Sonne auf der Gewässeroberfläche (s. Kapitel 3.1).

2.1. Datenverknüpfung

Wie in Abbildung 2-1 dargestellt, wurde eine Verknüpfung der Hyperspektraldaten mit den entsprechenden In situ-Daten durchgeführt. Dies erfolgte in zwei Schritten. Im ersten Schritt

wurde anhand der räumlichen Koordinaten (X, Y) der Probenentnahmestelle (SP) die Spektralinformation der Rasterdaten extrahiert. Im Anschluss wurden die spektralen und chemischen Daten in separaten Tabellen verwaltet. Die Tabelle der In situ-Daten enthält alle erfassten chemischen Informationen sowie die ID zur SP. Die zweite Tabelle enthält die erstellten Spektralindizes und ebenfalls die ID der SP. Im nachfolgenden Schritt wurden beide Tabellen mittels der SP ID verknüpft (s. Abbildung 2-1).

2.2. Spektralindizes

Die Spektralindizes stellen die Basis der empirischen Ableitungsmodelle dar. Diese sind der Literatur entnommen sowie anhand von spektralen In situ-Messungen und der extrahierten Spektralinformationen der Hyperspektraldaten hergeleitet. Der Schwerpunkt der Spektralanalyse lag dabei auf der Identifizierung der Spektraleigenschaften der Produkte der Pyritverwitterung. Eine detaillierte Beschreibung der Erstellung der Spektralindizes erfolgt in Kapitel 5.

2.3. Datenfilterung

Zur Eliminierung von Ausreißern erfolgte eine Filterung je Parameter anhand der 2,5-fachen Standardabweichung. Dies resultiert in einem höheren Bestimmtheitsmaß (R^2) und somit in einer höheren Ableitungsgenauigkeit. Ausreißer sind sowohl bei den chemischen als auch bei den spektralen Daten vorzufinden. Bezüglich der chemischen Daten ergaben sich Ausreißer durch eine starke Änderung des Chemismus sowie einer fehlerhaften Probenentnahme bzw. -analyse. In den Spektraldaten resultieren Ausreißer aus einer Über- bzw. Unterbelichtung, z.B. Spiegelungen, Schatten oder einer ungeeigneten Atmosphärenkorrektur. Aus diesem Grund ist eine entsprechende Vorverarbeitung der Hyperspektraldaten notwendig (s. Kapitel II (Anlage))

2.4. Entwicklung der Regressionsmodelle

Die Bestimmung geeigneter Regressionsmodelle erfolgte für jeden Wasserinhaltsstoff individuell. Dazu wurde jeder Spektralindex mit den Gewässerinhaltsstoffen in Beziehung gesetzt und auf die Regressionstypen linear, logarithmisch, potenziell und exponentiell untersucht. Der geeignetste Typ wurde anhand des R^2 ermittelt und mit den entsprechenden Regressionsparametern gespeichert. In der Folge ergab diese Vorgehensweise für jeden Wasserinhaltsstoff je Spektralindex ein spezifisches Regressionsmodell zur flächendeckenden

Ableitung. Gemäß dem allgemeinen Regressionsmodell in Gl. 3-11 nach IOCCG (2000, S. 57) (s. Kapitel 3.3.2) wurden vier verschiedene Modelltypen erstellt (s. Gl. 2-1 bis 2-4):

lineare Regression: $$\widehat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{\alpha} * \left(\frac{\boldsymbol{R_1}}{\boldsymbol{R_2}}\right) + \boldsymbol{\beta}$$ **Gl. 2-1**

logarithmische Regression: $$\widehat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{\alpha} * \boldsymbol{log}\left(\frac{\boldsymbol{R_1}}{\boldsymbol{R_2}}\right) + \beta$$ **Gl. 2-2**

exponentielle Regression: $$\widehat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{\beta} * \boldsymbol{e}^{\boldsymbol{\alpha} * \left(\frac{\boldsymbol{R_1}}{\boldsymbol{R_2}}\right)}$$ **Gl. 2-3**

potenzielle Regression: $$\widehat{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{\beta} * \left(\frac{\boldsymbol{R_1}}{\boldsymbol{R_2}}\right)^{\boldsymbol{\alpha}}$$ **Gl. 2-4**

$\widehat{\boldsymbol{p}}$: zu schätzender Parameter in quantitativer Einheit

$\frac{\boldsymbol{R_1}}{\boldsymbol{R_2}}$: Spektralindex

R_i: Spektralkanal (Reflektanz oder Strahldichte)

α, β: Regressionsparameter zwischen den spektralen und In situ-Daten

2.5. Ableitung und Validierung

Die flächendeckenden Ableitungen je Gewässerinhaltsstoff wurden nach den entwickelten Regressionsmodellen durchgeführt. Aufgrund der Überspezialisierung empirischer Verfahren erfolgte die Ableitung anhand von 10 verschiedenen Ableitungsmodellen basierend auf dem Bestimmtheitsmaß (R^2). Zur Ermittlung der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit erfolgte die Validierung anhand der erhobenen In situ-Daten. Dazu wurden der mittlere quadratische Fehler (RMSE) sowie der relative RMSE[1] (rRMSE) berechnet. Der rRMSE wurde gemäß Gl. 2-5 berechnet (Concha und Schott 2015; Gao et al. 2012; Wang und Lu 2010):

$$rRMSE\ [\%] = \frac{RMSE}{\overline{Obs}} * 100\% \quad \textbf{Gl. 2-5}$$

$\overline{Obs}$: Mittelwert der Beobachtungen

Die Ableitungsmodelle mit der geringsten Abweichung mittels des RMSE und rRMSE werden in Kapitel 6 präsentiert und diskutiert.

[1] Wird auch als normalisierter RMSE (nRMSE) bezeichnet

3. Passive optische Gewässerfernerkundung

Mittels Fernerkundungsdaten können eine Vielzahl an physikalischen Größen in absoluten und quantitativen Einheiten gemessen werden, wie z.B. die Gewässerqualität, Bathymetrie oder Höhe der Gewässeroberfläche (Mertes et al. 2004, S. 345 f.). Als Gewässerqualität wird im Allgemeinen eine Beschreibung von Eigenschaften in Bezug auf die physikalischen, chemischen, thermalen und biologischen Eigenschaften bezeichnet (Ritchie et al. 2003). Zur Erfassung dieser Eigenschaften können sowohl aktive als auch passive Sensoren genutzt werden. Nachfolgend wird in dieser Arbeit ausschließlich Bezug auf die passive Fernerkundung genommen.

Mit Beginn der Fernerkundungssatelliten Ende 1960 rutschten die Binnengewässer zunehmend in den Fokus der passiven Fernerkundung (Mertes et al. 2004). Jedoch wurden aufgrund der geringen räumlichen Bodenpixelauflösung (eng. ground sampling distance (GSD)) hauptsächlich Gewässer mit einer Ausdehnung größer 100 km untersucht, kleinere wurden hingegen weniger betrachtet (Kuhn et al. 2019). Zu den mehrheitlich abgeleiteten aktiven Wasserinhaltsstoffen zählen die gelösten sowie partikulären, belebten und unbelebten, Bestandteile (Gholizadeh et al. 2016; Kuhn et al. 2019). Diese besitzen aufgrund der spezifischen Absorptions- und Rückstreuungskoeffizienten einen direkten Einfluss auf die Gewässerfärbung. Zur einfacheren Entwicklung von Modellen zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe erstellten Morel und Prieur (1977) ein Schema zur Einteilung der Gewässertypen anhand ihrer Farbe und somit ihrer Rückstreuung. Dazu definierten sie die Kategorien Case 1 und Case 2. Gewässer vom Typ Case 1 sind optisch stark durch das Phytoplankton geprägt, wodurch hauptsächlich die offenen Ozeane dieser Kategorie zuordenbar sind. Den Case 2–Gewässern sind mehrheitlich die Küsten- sowie Binnengewässer zuzuweisen. In diesen Gewässern variiert das Verhältnis zwischen den aktiven Inhaltsstoffen stark. Demnach ist keine Abhängigkeit zum Chl-a ersichtlich (Muller-Karger et al. 2005).

Nachfolgend werden die Methoden zur flächendeckenden Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe vorgestellt sowie die Eignung für das Untersuchungsgebiet dargelegt (s. Kapitel 3.3). Eine Korrektur der atmosphärischen Einflüsse (s. Kapitel 3.1.1) sowie die Berücksichtigung von Streuungen an der Gewässeroberfläche (s. Kapitel 3.1.2) sind Voraussetzung für eine genaue flächendeckende Ableitung. Denn ab einer Flughöhe von 20 km über dem offenen Ozean enthalten maximal 10 % der gemessenen Strahldichten Spektralinformationen aus dem Gewässerkörper. Die übrigen 90 % ergeben sich aus den

Streuprozessen in der Erdatmosphäre sowie der Streuung an der Gewässeroberfläche (Giardino et al. 2019; IOCCG 2010; Muller-Karger et al. 2005; Ramoelo et al. 2012). Demzufolge ist für eine zuverlässige Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe sowie für einen Vergleich von Fernerkundungsdaten eine Korrektur bzw. Berücksichtigung der Einflussfaktoren erforderlich.

Weiterhin sind Kenntnisse über die Spektraleigenschaften der aktiven Gewässerinhaltsstoffe (s. Kapitel 3.1.3) sowie der resultierenden optischen Gewässereigenschaften (s. Kapitel 3.2) erforderlich. Da im Untersuchungsgebiet eine einzigartige chemische Zusammensetzung vorliegt, wurden Simulationen der Irradiance Reflectance ($R_E(\lambda)$) unter Verwendung verschiedener Konzentrationen der aktiven Gewässerinhaltsstoffe mithilfe des Softwarepakets Water Colour Simulator (WASI) (Gege 2019) durchgeführt. Dadurch werden die Einflüsse der aktiven Gewässerinhaltsstoffe auf die rückgestreute Strahlung ($I(\lambda)$) verdeutlicht. Weiterhin können die Erkenntnisse zur Bildung von spezifischen Spektralindizes herangezogen werden (s. Kapitel 5).

Die optischen Gewässereigenschaften werden in inhärente und scheinbare optische Eigenschaften unterteilt. Beide sind zwar von den Spektraleigenschaften der aktiven Gewässerinhaltsstoffe abhängig, jedoch werden die scheinbaren optischen Eigenschaften zusätzlich vom Umgebungslicht beeinflusst.

Dementsprechend werden nachfolgend zunächst die einzelnen Faktoren beschrieben, bevor auf die Ableitungsmethoden in der Gewässerfernerkundung eingegangen wird.

3.1. Erfassung der zurückgestreuten Strahldichten

Zur Erfassung der zurückgestreuten (eng. upwelling) Strahldichten (L_U) mittels eines geeigneten Sensors werden im Allgemeinen zwei verschiedene Trägerplattformen genutzt: airborne (luftgestützt) und spaceborne (satellitengestützt) (Gholizadeh et al. 2016). Sensoren zum airborne Einsatz werden in Plattformen innerhalb der Erdatmosphäre installiert, z.B. in unbemannten Luftfahrzeugen (eng. unmanned aerial vehicle (UAV)), Gyrokoptern, Helikoptern oder Flugzeugen. Spaceborne Sensoren werden mittels eines Satelliten oder Raumfahrzeugs außerhalb der Erdatmosphäre getragen. Trotz der unterschiedlichen Trägerplattformen unterliegen die messbaren Strahldichten den gleichen physikalischen Einflüssen in der Atmosphäre, an der Wasseroberfläche sowie im Gewässerkörper. Zu den physikalischen Einflüssen zählen Absorption, Dämpfung, Streuung und Rückstreuung, welche

mittels der Strahlungstransportgleichung (eng. radiative transfer equation (RTE)) in Gl. 3-1 modelliert werden können (Bukata et al. 1995; Kirk 2011, S. 25):

$$\frac{\Delta L(\lambda,z,\theta,\varphi)}{\Delta r} = -c(\lambda,z)L(\lambda,z,\theta,\varphi) + L^*(\lambda,z,\theta,\varphi) \qquad \textbf{Gl. 3-1}$$

Die RTE beschreibt die Veränderung der Strahldichte (ΔL) eines Lichtstrahls der Wellenlänge (λ), der sich in einem Medium in der Tiefe (z) in Richtung der spezifischen Zenith (θ)- und Azimuth (φ)-Winkel über eine bestimmte Strecke (Δr) bewegt (Gege 2017, S. 32).
Der Dämpfungskoeffizient (eng. attenuation coefficient (c)) repräsentiert die Abnahme des Lichtstrahls entlang der Bewegungsrichtung im entsprechenden Medium. In der RTE wird der Dämpfungsverlust je Wellenlänge entlang der Bewegungsrichtung durch den Term $-c(\lambda,z)L(\lambda,z,\vartheta,\varphi)$ dargestellt (Bukata et al. 1995, S. 91). Die Zunahme der Strahldichte durch Streuung ist anhand des Terms $L^*(\lambda,z,\vartheta,\varphi)$ definiert. Dieser basiert auf der Volumenstreufunktion (sog. volume scattering function), welche jedes Volumenelement im Medium als Quelle der Streuung beschreibt (Bukata et al. 1995, S. 91; Kirk 2011, S. 25; Zaneveld 1995). Die RTE kann durch umfangreiche Modellierungen auf weitere Anwendungsfelder übertragen werden, sofern die räumliche Ausbreitung des Lichtfeldes, die Geometrie der Gewässeroberfläche und die optischen Eigenschaften aller absorbierenden und streuenden Elemente in der Atmosphäre sowie dem Gewässer bekannt sind (Gege 2017, S. 50; Gordon et al. 1975). In der vorliegenden Arbeit ist die RTE in das Modell zur Atmosphärenkorrektur integriert (s. Kapitell 3.1.1). Die Modellierung des Strahlungstransports an der Gewässeroberfläche sowie im Gewässerkörper sind nicht Bestandteil dieser Arbeit.
Wie in Abbildung 3-1 dargestellt, ist die zurückgestreute Strahldichte (L_u) eines Gewässers in vier einzelne Komponenten unterteilbar:

- $L_a(\lambda,\theta,\phi)$: rückgestreute Strahldichten in der Atmosphäre,
- $L_s(\lambda,\theta,\phi)$: rückgestreute Strahldichten an der Gewässeroberfläche,
- $L_V(\lambda,\theta,\phi)$: rückgestreute Strahldichten aus dem Gewässerkörper und
- $L_b(\lambda,\theta,\phi)$: rückgestreute Strahldichten vom Gewässerboden.

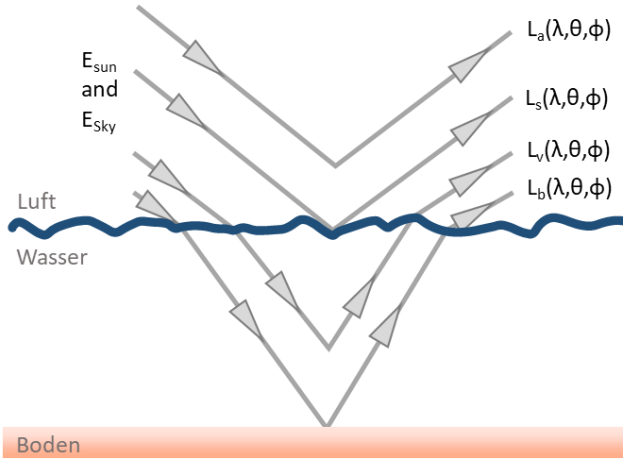

***Abbildung 3-1**: Schematische Übersicht der messbaren Komponenten der zurückgestreuten Strahldichten (Lu) am Sensorkopf in Anlehnung an Bukata et al. (1995, S. 32) mit Angabe der einfallenden Bestrahlungsstärken des Himmels (E_{sky}) und der Sonne (E_{sun}).*

Dies ergibt für die messbaren Strahldichten am Sensor (L_u) folgende Gl. 3-2 gemäß Bukata et al. (1995, S. 33):

$$L_u(\lambda,\theta,\varphi) = L_a(\lambda,\theta,\varphi) + L_s(\lambda,\theta,\varphi) + L_v(\lambda,\theta,\varphi) + L_b(\lambda,\theta,\varphi) \qquad \textbf{Gl. 3-2}$$

Um die spektralen Informationen des Gewässerkörpers $L_V(\lambda,\theta,\phi)$ zu erhalten, ist eine entsprechende Umstellung nach Gl. 3-3 erforderlich:

$$L_v(\lambda,\theta,\varphi) = L_u(\lambda,\theta,\varphi) - (L_a(\lambda,\theta,\varphi) + L_s(\lambda,\theta,\varphi) + L_b(\lambda,\theta,\varphi)) \qquad \textbf{Gl. 3-3}$$

Untersuchungen nach Kapitel III.IV (Anlage) haben ergeben, dass die Solarstrahlung aufgrund der hohen Trübung die Flusssohle nicht erreicht. Dadurch ist die Berücksichtigung $L_b(\lambda,\theta,\varphi)$ nicht notwendig. Unter der Annahme, dass die reflektierten Strahlungen an der Gewässeroberfläche $L_s(\lambda,\theta,\varphi)$ vernachlässigbar sind, so sind die rückgestreuten Strahldichten des Gewässerkörpers $L_v(\lambda,\theta,\varphi)$ nach Gl. 3-4 ermittelbar:

$$L_v(\lambda,\theta,\varphi) = L_u(\lambda,\theta,\varphi) - L_a(\lambda,\theta,\varphi) \qquad \textbf{Gl. 3-4}$$

Die atmosphärischen Einflüsse $L_a(\lambda,\theta,\varphi)$ werden durch Anwendung geeigneter Modelle korrigiert. Jedoch ist gemäß Moses et al. (2017, S. 77 ff) die Schätzung von $L_V(\lambda,\theta,\phi)$ eines Binnengewässers aufgrund folgender Ursachen weiterhin schwierig.

(1) Durch nahe gelegene terrestrische Quellen, die zur Luftverschmutzung beitragen, z.B. Tagebaue, Kraftwerke, Fahrzeuge, Pollenflug oder Staub, entsteht eine optisch heterogene Atmosphäre, welche schwierig zu modellieren ist.

(2) Weiterhin können Nachbarschaftseffekte durch Landpixel auftreten.

(3) Die Korrekturmodelle für Ozeane können nicht auf Binnengewässer übertragen werden, da durch eine höhere Schwebstoffkonzentration (eng. total suspended matter (TSM)) auch Streuungen im Wellenlängenbereich des nahen Infrarots (eng. infrared (IR)) stattfinden.

Kiselev et al. (2015) zeigten auf, dass durch die Nachbarschaftseffekte, z.B. den Uferbereich, die rückgestreute Strahldichte deutlich zunimmt. In der Folge kann dies zu einer Überkorrektur der atmosphärischen Effekte führen (Binding et al. 2011; Moses et al. 2017, S. 70), wodurch die Genauigkeit der Ableitungsmodelle gemindert wird (Mouw et al. 2015). Demgemäß erfolgte nach der Rektifizierung und Georeferenzierung der Hyperspektraldaten zunächst eine Datenverarbeitung. Im Anschluss erfolgte die Atmosphärenkorrektur (s. Abbildung 3-2).

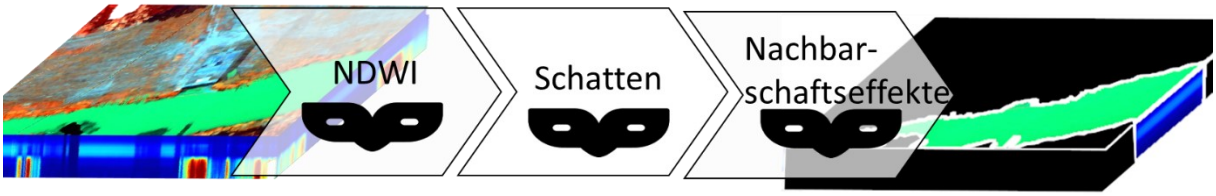

Abbildung 3-2: Schematische Darstellung der Vorgehensweise zur Bildverarbeitung vor der Atmosphärenkorrektur (s. Anlage II).

Wie in Abbildung 3-2 dargestellt ist, wurden mittels Masken alle Objekte sowie Effekte außerhalb des Gewässers ausgeblendet. Dies erfolgte in drei Schritten. Zuerst wurde das Gewässer mittels des Normalized Difference Water Index (NDWI) identifiziert. Anschließend wurden alle schattigen Bereiche durch Anwendung eines geeigneten Schwelwertes ausgeblendet. Im dritten Schritt wurden die Nachbarschaftseffekte eliminiert. Dies reduzierte weitere Einflussfaktoren auf die anschließende Atmosphärenkorrektur. Eine detaillierte Beschreibung bezüglich der Prozessierung der Hyperspektraldaten ist in Kapitel II (Anlage) vorzufinden.

3.1.1. Strahlungsprozesse in der Atmosphäre

In der passiven Fernerkundung dient die Sonne als Licht- bzw. Energiequelle. Diese emittiert elektromagnetische Energie (Bukata et al. 1995, S. 38), welche zunächst die Erdatmosphäre in Richtung der Erdoberfläche durchquert. Dort wird die Strahlung gestreut oder absorbiert. Die gestreute Strahlung durchdringt anschließend erneut die Atmosphäre, bevor diese vom Sensor erfasst wird. Während des Durchgangs durch die Atmosphäre ist die Strahlung jedes Mal den atmosphärischen Effekten durch Absorption und Streuung an Gasmolekülen sowie Partikeln ausgesetzt. In der Folge nimmt mit steigender Flughöhe der Einfluss der Atmosphäre

auf das reflektierte Signal zu (Hovis und Leung 1977). Aufgrund dessen ist eine Atmosphärenkorrektur der erfassten Strahlung zur Ableitung von Gewässerinhaltsstoffen erforderlich (Moses et al. 2017, S. 69).

Die Absorption der Strahlung durch Gase ist in der Atmosphäre stark von der Wellenlänge abhängig, wodurch erst ab 290 nm die Bestrahlungsstärke (eng. irradiance(E)) der Sonne an der Erdoberfläche gemessen werden kann. Die maximale Bestrahlungsstärke ist bei 473 nm erreicht und nimmt anschließend wieder ab (Bukata et al. 1995, S. 38). Zusätzlich kommt es zu deutlichen Absorptionen in der Erdatmosphäre durch Ozon, Wasserdampf und Kohlenstoffdioxid (Gast et al. 1965).

Gemäß Kirk (2011, S. 33) erfolgt eine Reduzierung der Bestrahlungsstärke zwischen 400 und 700 nm hauptsächlich durch die Streuung in der Atmosphäre, welche nach den Theorien von Rayleigh und Mie erfolgt. Gemäß der Theorie von Rayleigh werden die Wellenlängen proportional zur Partikelgröße von λ^{-4} in der Atmosphäre gestreut (Chandrasekhar 1950, S. 280; Maul 1985; Morel 1974, S. 3). Dadurch kommt es in erster Linie im kurzwelligen Wellenlängenbereich an sehr kleinen Partikeln zur Streuung. Aufgrund der Abhängigkeit zur Wellenlänge ist die Theorie von Rayleigh stark auf kleine Partikelgrößen beschränkt. Daher wird die Streuung des Lichtstrahls an Partikeln mit beliebiger Größe und Form durch die Mie-Theorie beschrieben (Lenoble 1993, S. 158). Demzufolge beinhaltet diese die Rayleigh-Theorie (Bass 1994). Weiterhin kommt es zur Beugung des Lichtstrahls an größeren Partikeln (s. Abbildung 3-3). Dabei wird ein Teil des Lichtes extern an der Partikeloberfläche reflektiert. Weiterhin durchquert ein Teil des Lichtstrahls das Partikel und wird gebeugt bzw. zunächst intern reflektiert und anschließend gebeugt (Kirk 2011, S. 100 ff.). Außerdem kann ein Teil der Strahlung vom Partikel absorbiert werden.

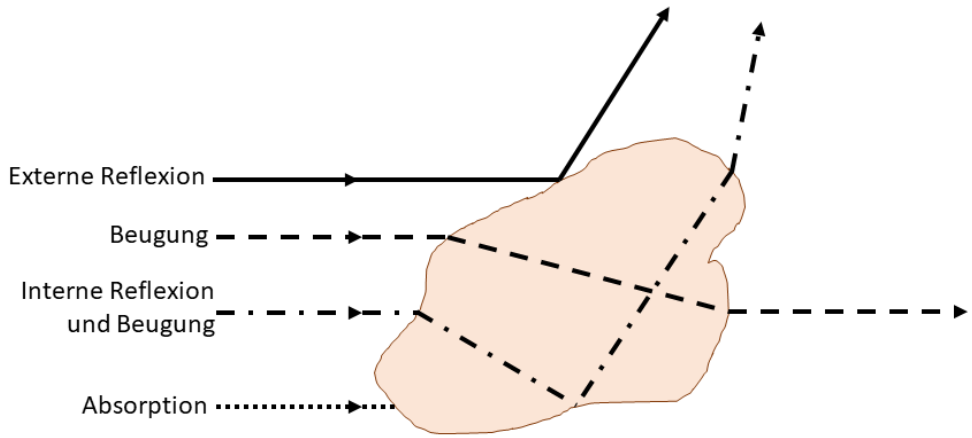

Abbildung 3-3: Schematische Darstellung der Strahlungsprozesse an einem Partikel in Anlehnung an (Kirk 2011, S. 102).

In der vorliegenden Arbeit wurde zur Atmosphärenkorrektur die Software ATCOR 4 Version 7.2 verwendet, welche die Korrekturmodelle durch Verwendung von MODTRAN®[2] 5-Code erstellt (Richter und Schläpfer 2019). Im MODTRAN®-Code ist die RTE (s. Gl. 3-1) für den Wellenlängenbereich von 0,2 bis 10.000 µm enthalten (Anderson et al. 2007). Weiterhin werden die Aerosol-Modelle in rurale, urbane, maritime und wüsten Gebiete unterschieden (Spectral Sciences Inc. (SSI) und Air Force Research Laboratory (AFRL) 2019). In der vorliegenden Arbeit ist für das Untersuchungsgebiet nur das Aerosol-Modell für urbane Gebiete aufgrund der örtlichen Industrie sowie den Tagebauen von Interesse (s. Tabelle 3-1). Denn gemäß der International Association of Meteorology and Atmospheric Physics - Radiation Commission (1986) werden im urbanen Aerosol-Modell industriell erzeugte Partikel am stärksten berücksichtig. Dagegen werden diese bei einem ruralen Modell nur mit 1 % einberechnet.

***Tabelle 3-1**: Zusammensetzung des Aerosol-Modells für urbane Gebiete gemäß* (International Association of Meteorology and Atmospheric Physics - Radiation Commission 1986).

Aerosol-Modell	Aerosolkomponenten	Aerosolpartikelvolumen [%]
Urban	Wasserlösliche Partikel	61
	Rußpartikel	22
	Staubpartikel	17

3.1.2. Strahlungsprozesse an der Gewässeroberfläche

Treffen die einfallenden (eng. downwelling) Strahldichten ($L_{da}(\lambda)$) auf die Grenzschicht zwischen Luft und Wasser, kommt es zur Streuung ($L_{ra}(\lambda)$) sowie zur Brechung ($L_{tw}(\lambda)$) (s. Abbildung 3-4). Aufgrund des Snelliuschen Brechungsgesetzes (s. Gl. 3-5) wird bei einer ruhigen Wasseroberfläche das einfallende Licht (θ_a) in einem Winkel von maximal $\theta_w = 48{,}8°$ im Gewässerkörper komprimiert (Bukata et al. 1995, S. 67; Gege 1994, S. 8).

$$n_a \, sin\theta_a = n_w \, sin\theta_w \qquad \textbf{Gl. 3-5}$$

n_a: Brechungsindex Luft 1

n_w: Brechungsindex Wasser 1,333

[2] Moderate Resolution Radiance and Transmittance

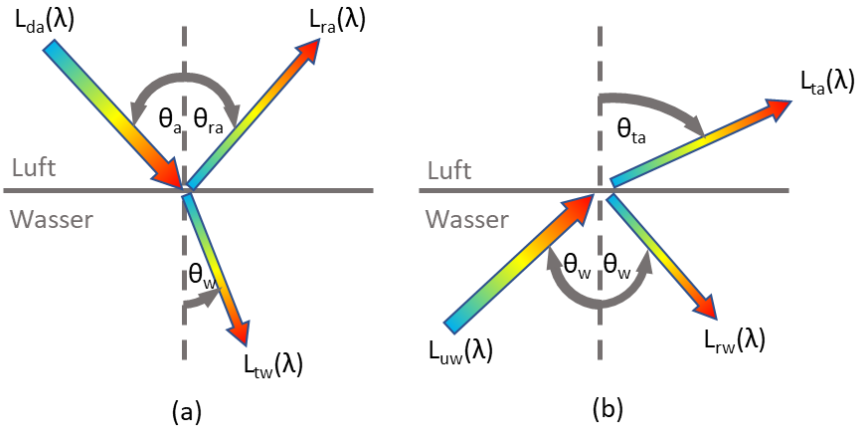

***Abbildung 3-4**: Interaktion der einfallenden Solarstrahlung (a) sowie Interaktion der rückgestreuten Strahlung (b) mit der Luft-Wasser – Grenzschicht in Anlehnung an* (Bukata et al. 1995).

Die eindringende Strahldichte (L_{tw}) interagiert mit den aktiven Gewässerinhaltsstoffen und gegebenenfalls mit dem Gewässerboden. Die zurückgestreuten Strahldichten ($L_{uw}(\lambda)$) unterliegen beim Transmittieren der Wasser-Luft-Grenzschicht ebenfalls dem Snelliuschen Brechungsgesetz. Dabei werden nur Strahldichten im Winkel von $\theta_w < 48{,}8°$ in Richtung des Gewässergrundes an der Grenzschicht gebrochen, welche die messbaren Strahldichten am Sensor ($L_{ta}(\lambda)$ ergeben. Strahldichten mit einem Winkel von $\theta_w > 48{,}8°$ zum Gewässerboden werden an der Grenzschicht zurück in den Gewässerkörper gestreut (Bukata et al. 1995, S. 71; Kirk 2011, S. 49).

Des Weiteren kommt es an der Gewässeroberfläche zum sogenannte sun glint. Dabei wird die Solarstrahlung an der Wasseroberfläche gespiegelt (Jackson und Alpers 2010). So können bei unruhigen Gewässern die Spiegelungen diffus erfolgen. Im Hyperspektralbild erscheinen die Einflüsse des sun glint als unnatürliche, helle Pixel bzw. führen in Extremfällen zur Sättigung des Sensors (Overstreet und Legleiter 2017). Gemäß Goodman et al. (2008) sind die Effekte des sun glint über geeignete Algorithmen korrigierbar. Speziell abbildende Spektrometer mit einer hohen räumlichen Auflösung sind vom sun glint-Effekt betroffen. Weitere Nachbarschaftseffekte können in Form von Schattenwurf oder Spiegelungen durch nachstehende Vegetation sowie Brücken auftreten. Insbesondere kleine Binnengewässer sind von diesem Problem betroffen, wodurch diese Flächen nur selten in der Gewässerfernerkundung in entsprechenden Verfahren berücksichtigt werden (Heege 2000, S. 19).

Aufgrund der geringen Breite der Spree mit ca. 30 m und zur Reduzierung von Nachbarschaftseffekten erfolgte die Erfassung der Hyperspektraldaten mit einer GSD von 23 cm. Die dadurch lokal auftretenden sun glint-Effekte wurden basierend auf der

vollständigen Sättigung des Sensors identifiziert und entsprechend maskiert (s. Kapitel II). Dadurch kann eine Fehlinterpretation der Verteilungskarten ausgeschlossen werden.

3.1.3. Strahlungsprozesse im Gewässerkörper

Nach Gl. 3-4 ergeben sich die messbaren Strahldichten des Gewässerkörpers aus der Differenz der zurückgestreuten Strahldichten des Gewässers sowie der Rückstreuung in der Atmosphäre. Durch Anwendung einer Atmosphärenkorrektur repräsentiert das verbliebende Signal die Reflektanz (eng. reflectance (R_{RS})) des Gewässerkörpers. Dieses setzt sich aus den spezifischen Absorptions- und Streueigenschaften der aktiven Inhaltsstoffe zusammen (Baschek et al. 2018, S. 9; Heege 2000, S. 15). Den aktiven Inhaltsstoffen sind Wasser, Gelbstoffe (eng. coloured dissolved organic matter (CDOM)), Phytoplankton und TSM zuordenbar (Giardino et al. 2012).

Nachfolgend werden die spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Gewässerinhaltsstoffe aufgezeigt. Weiterhin werden die Ergebnisse der vorwärtsgerichteten Modellierung der Irradiance Reflectance ($R_E(\lambda)$) mithilfe des Softwarepakets WASI (Gege 2019) anhand variabler Konzentrationen der aktiven Wasserinhaltsstoffe aufgezeigt. Dies ermöglicht die Identifizierung spezifischer Wellenlängen zur Erstellung von Spektralindizes (s. Kapitel 5) als Basis empirischer Ableitungsmodelle.

Reines Wasser absorbiert einen Großteil der eindringenden Solarstrahlung, jedoch nicht kontinuierlich. Gemäß Pope und Fry (1997) ist im Wellenlängenbereich von 400 bis 900 nm die Absorption durch Wasser a(420)[3] mit 0,0045 m^{-1} am geringsten. Danach nimmt diese stetig zu. Mittels des entwickelten Modells von Kou et al. (1993) kann der Absorptionskoeffizient im Wellenlängenbereich von 710 bis 2.500 nm präzise bestimmt werden. In Abbildung 3-5 ist deutlich zu erkennen, dass der Absorptionskoeffizient bis ca. 760 nm mit 2,86 m^{-1} erheblich zunimmt. Anschließend sinkt dieser auf a(810) = 2,19 m^{-1}. Bei Wellenlängen größer 820 nm steigt der Absorptionskoeffizient von Wasser stetig an, sodass dieser bei a(880) = 5,30 m^{-1} und bei a(950) = 29,74 m^{-1} beträgt.

Basierend auf Berechnungen von Morel (1974) entwickelte Frauendorf (2002, S. 40) ein Modell zur Bestimmung der Rückstreuung (b_b) von reinem Wasser:

$$b_b = \frac{0{,}00288 * \left(\frac{\lambda}{500}\right)^{-4{,}32}}{2} \text{ nach (Frauendorf 2002, S. 40)} \qquad \textbf{Gl. 3-6}$$

[3] Absorption bei der Wellenlänge 420 nm

In Abbildung 3-5 ist deutlich zu erkennen, dass die Rückstreuung bei 400 nm mit $b_b(400) = 0{,}0038\ m^{-1}$ im gewählten Wellenlängenbereich von 400 bis 900 nm am stärksten ist. Anschließend nimmt diese kontinuierlich ab.

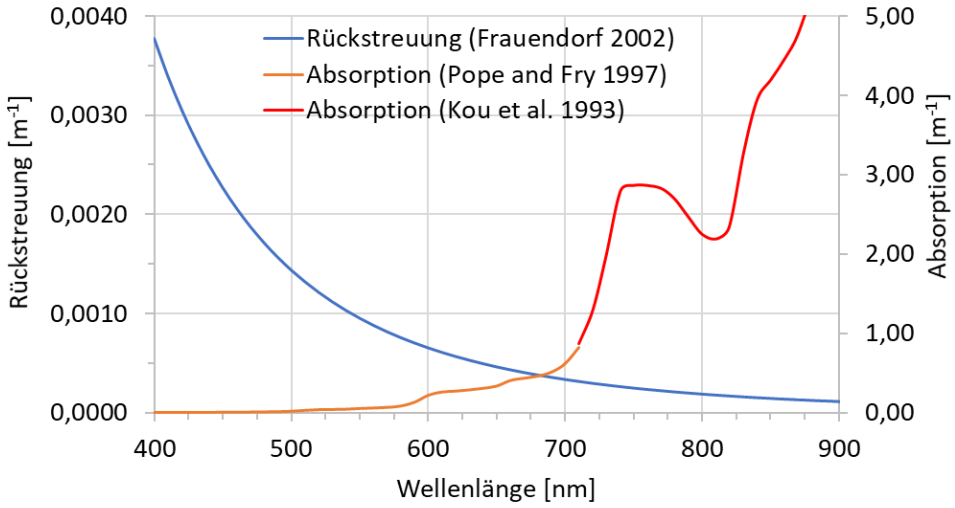

Abbildung 3-5: Darstellung der Rückstreuung sowie der Absorption von reinem Wasser in Anlehnung an Frauendorf (2002, S. 39).

CDOM bildet die Gruppe der löslichen Substanzen im Gewässer, welchen z. B. Huminstoffe und gelöster organischer Kohlenstoff (DOC) zugehörig sind. Gemäß Maul (1985, S. 278) weist CDOM im Wellenlängenbereich von 400 bis 500 nm ein sehr starkes Absorptionsverhalten auf, weshalb die meisten Modelle zur Ableitung von CDOM auf diesem Wellenlängenbereich basieren (Asmala et al. 2012; Gitelson 1992; Kopačková und Hladíková 2014). Von 500 bis 600 nm nimmt der Absorptionskoeffizient von CDOM weiter linear ab (Maul 1985, S. 278). Die Streuung von Licht ist bei CDOM im Vergleich zur Dämpfung vernachlässigbar (Bukata et al. 1995, S. 121).

Weyhenmeyer et al. (2014) beobachteten, dass gelöstes Eisen wie DOC ebenfalls eine Korrelation zur Absorption bei 420 nm aufweist. Gemäß Asmala et al. (2012) ist der Einfluss gelösten Eisens auf das Absorptionsverhalten des Gewässers ab 520 nm deutlich sichtbar. Bei kürzeren Wellenlängen ist die Absorption von gelöstem Eisen mit dem DOC identisch. Weiterhin zeigten die Untersuchungen von Kölling (2019) anhand der Gewässerproben der Messkampagne vom 22.09.2019 auf, dass gelöstes Sulfat ausschließlich im Wellenlängenbereich kleiner 400 nm aktiv ist. Dadurch ist Sulfat nicht direkt anhand einer bestimmten Wellenlänge zwischen 400 und 700 nm identifizierbar.

Weiterhin führten Ulrich et al. (2018) Simulationen der Irradiance Reflectance (R_E) mit verschiedenen CDOM-Stoffmengenkonzentrationen von 1 bis 30 m^{-1} in Abhängigkeit zu hohen sowie niedrigen TSM und Chlorophyll a (Chl-a)-Konzentrationen mittels WASI (Gege 2019)

durch. In Abbildung 3-6 ist deutlich zu erkennen, dass bei zunehmender CDOM-Konzentration die R_E bis ca. 600 nm stark absorbiert wird. Auf die R_E des Gewässerkörpers hat CDOM bei Wellenlängen größer als 600 nm geringen bzw. keinen Einfluss.

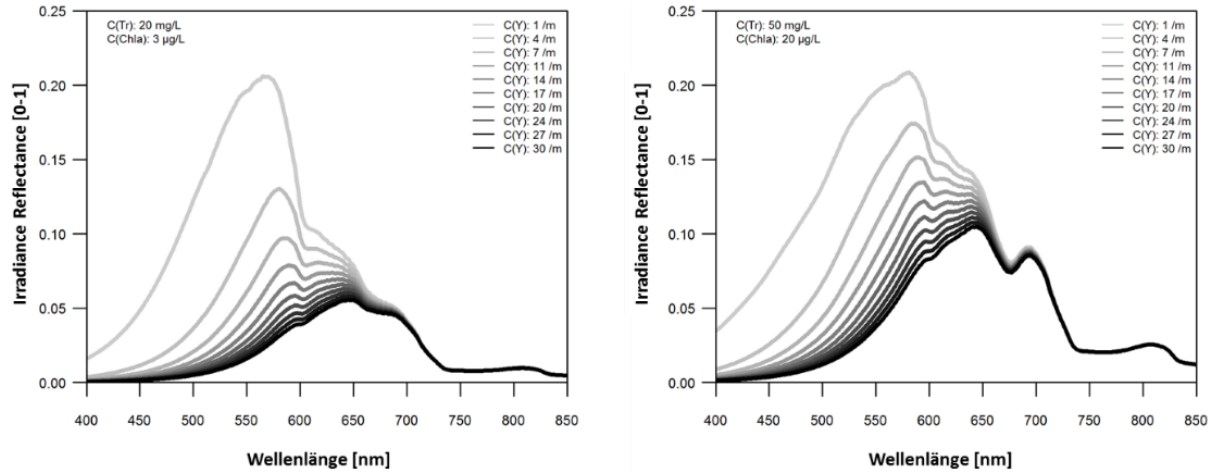

Abbildung 3-6: Simulationen des Spektralverlaufs mittels WASI (Gege 2019) *bei variabler CDOM-Konzentration (Y) und konstant niedrigerer (links) sowie hoher (rechts) Chlorophyll a (Chla)- und TSM (Tr)-Konzentration* (Ulrich et al. 2018).

Phytoplankton gehört in der Gewässerfernerkundung zu den belebten partikulären Bestandteilen. Diese Gruppe besteht aus zahlreichen verschiedenen freischwebenden Algengruppen. Chl-a stellt das Schlüsselmolekül zur Photosynthese dar. Aufgrund eindeutiger Absorptionsmerkmale wird es oft als Indikator der Biomasseproduktion herangezogen. So weist es größere Absorptionsmaxima in den Wellenlängenbereichen von 400 bis 500 nm sowie bei 675 nm auf (Bukata et al. 1995, S. 259; Dekker 1993; Gitelson 1992; Maul 1985, S. 278). Absorptionsminima sind bei 570 sowie bei 700 nm vorzufinden (Haardt und Maske 1987). Neben Chl-a können mittels der Fernerkundung auch Chlorophyll-b , -c, Phaeophytin a und Phycocyanin anhand der spezifischen Spektraleigenschaften abgeleitet werden (Bricaud et al. 2004; Bukata et al. 1995, S. 259; Gitelson 1992; Maul 1985, S. 278; Wetzel 2001, S. 67). In Abbildung 3-7 führten Ulrich et al. (2018) Simulationen der R_E bei variabler Chl-a-Konzentration und konstant niedrigerer (links) sowie hoher (rechts) TSM- und Gelbstoff-Konzentration durch. In beiden Abbildungen ist erkennbar, dass bei steigender Chl-a-Konzentration die R_E aufgrund des Absorptionsverhaltens des Phytoplanktons deutlich abnimmt (Mobley 1994, S. 99). Weiterhin sind die Absorptionsmerkmale zwischen 400 und 500 nm sowie bei 675 nm durch Minima deutlich erkennbar.

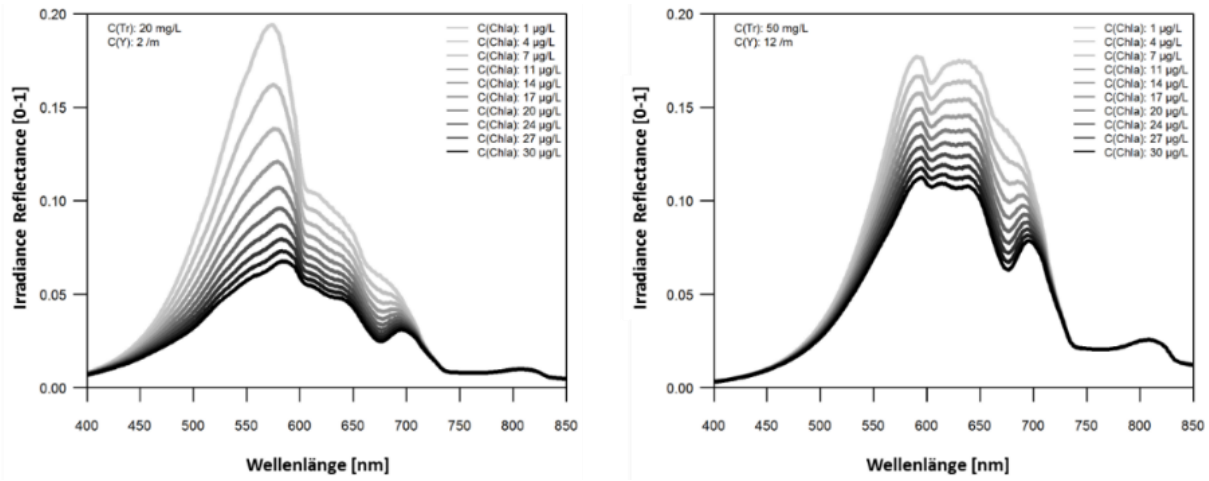

Abbildung 3-7: Simulationen des Spektralverlaufs mittels WASI (Gege 2019) *bei variabler Chlorophyll a-Konzentration (Chla) und konstant niedrigerer (links) sowie hoher (rechts) TSM (Tr)- und CDOM (Y)–Konzentration* (Ulrich et al. 2018).

Die unbelebten partikulären Materialien im Gewässer sind dem TSM zuordenbar. Dieser Gruppe gehören beispielsweise abgestorbenes partikuläres organisches Material, kleine Sandpartikel und Eisenflocken an (Frauendorf 2002, S. 46). Gewässer mit hoher TSM-Konzentration besitzen ein erhöhtes Rückstreuungsverhalten, wodurch die zu messende R_E größer ist als bei natürlichen Gewässern (Wetzel 2001, S. 65). Dies haben Ulrich et al. (2018) mittels Simulationen der R_E im Wellenlängenbereich von 400 - 850 nm ebenfalls beobachtet (s. Abbildung 3-8). Besonders auffallend ist die erhöhte Rückstreuung im Wellenlängenbereich bei 550 nm sowie ab 750 nm.

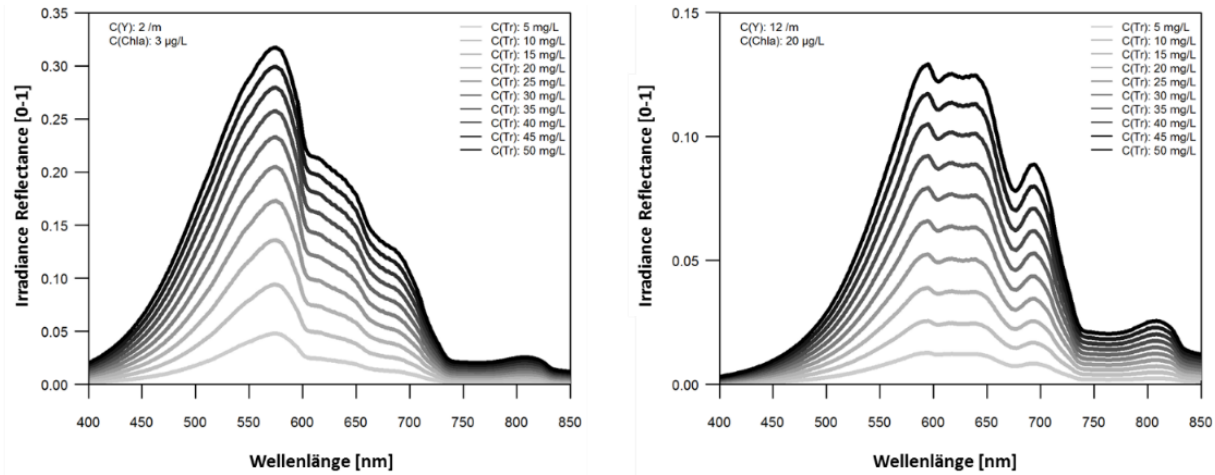

Abbildung 3-8: Simulationen des Spektralverlaufs mittels WASI (Gege 2019) *bei variabler TSM-Konzentration (Tr) und konstant niedrigerer (links) sowie hoher (rechts) Chlorophyll a (Chla)- und CDOM (Y)-Konzentration* (Ulrich et al. 2018).

Knaeps et al. (2012) haben anhand des Multispektrometers Ocean and Land Color Instrument (OLCI) an Bord des Sentinel 3 beobachtet, dass bei steigender TSM-Konzentration bis 402 mg/L die zusätzlichen Informationen des SWIR-Bereichs zu genaueren Ableitungsmodellen beitragen. Jedoch steigt ab ca. 720 nm „die Absorption von reinem

Wasser so stark an, dass selbst bei hohen Konzentrationen an Streuern bei 1300 nm […] kein Licht mehr aus dem Wasserkörper detektierbar ist“ (Heege 2000, S. 15).

3.2. Eigenschaften der Gewässerfärbung

Wie im Kapitel 3.1.3 beschrieben, ergeben sich die optischen Eigenschaften von Gewässern aus der Zusammensetzung der aktiven Gewässerinhaltsstoffe. Demzufolge stellt die messbare Strahlung die Summe der spezifischen Absorptions- und Streueigenschaften dieser dar. Weiterhin werden die optischen Eigenschaften von Gewässern in zwei Klassen unterschieden: inhärente und scheinbare (Mobley 1994, S. 61). Zu den inhärenten optischen Eigenschaften (eng. inherent optical properties (IOP)) zählen die Eigenschaften, welche sich durch das Medium, z.B. den Gewässerkörper, ergeben und unabhängig vom umgebenden Licht sind (Gordon et al. 1975; Kirk 2011, S. 14). Die scheinbaren optischen Eigenschaften (eng. apparent optical properties (AOP)) ergeben sich aus dem Medium sowie der geometrischen Struktur des umgebenden Lichtfeldes. Den Zusammenhang zwischen IOPs und AOPs stellte Mobley (1994, S. 143) mittels der RTE aus Gl. 3-1 dar. Im Nachfolgenden werden die IOPs sowie die AOPs genauer erläutert. Weiterhin wird der Einfluss der Pyritverwitterung auf die optischen Eigenschaften beschrieben.

3.2.1. Inhärente optische Gewässereigenschaften (IOP)

Die fundamentalen IOPs bilden der Absorptionskoeffizient und die Volumenstreufunktion (β(θ)) (Mobley 1994, S. 60). Letztere ist als Strahlungsintensität in eine bestimmte Richtung (ΔI(θ)) eines Volumenelementes (ΔV) definiert, welches durch einen parallelen Lichtstrahl (E) beleuchtet wird (s. Gl. 3-7):

$$\beta(\Theta) = \frac{\Delta I(\Theta)}{E * \Delta V} \text{ nach (Kirk 2011, S. 19)} \qquad \textbf{Gl. 3-7}$$

Wird β(θ) über alle Richtungen integriert, ergibt sich der Streukoeffizient (b) (Mobley 1994, S. 64). Dieser kann gemäß Kirk (2011, S. 20) in die Vor- und Rückwärtsstreuung unterschieden werden. Die Rückstreuung (b_b) steht im folgenden Verhältnis zum Streukoeffizient:

$$b_b = \frac{b_f}{b} \text{ nach (Kirk 2011, S. 20)} \qquad \textbf{Gl. 3-8}$$

b: Streukoeffizient

b_b: Rückwärtsstreuung

b_f: Vorwärtsstreuung

Zur genaueren Modellierung sollten die Absorptions- sowie Rückstreukoeffizienten der einzelnen Inhaltsstoffe ermittelt werden. Dies ist in den Gleichungen 3-9 und 3-10 nach Giardino et al. (2019) dargestellt:

$$a_{Total}(\lambda) = a_W(\lambda) + C_{Ph} * a_{Ph}(\lambda) + C_{CDOM} * a_{CDOM}(\lambda) + C_T * a_T(\lambda) \qquad \textbf{Gl. 3-9}$$

a_{Total}: Gesamte Absorption der Gewässerprobe

a_w: Absorption von Wasser

a_{Ph}: spezifischer Absorptionskoeffizient von Phytoplankton

a_{CDOM}: spezifischer Absorptionskoeffizient von CDOM

a_T: spezifischer Absorptionskoeffizient von Tripton

C_i: Konzentration des Wasserinhaltsstoffes

Zur Bestimmung des Absorptionskoeffizienten verockerter Gewässer müssen zusätzlich die Absorptionseigenschaften des gelösten Eisens sowie von Sulfat berücksichtigt werden. Wie bereits Weyhenmeyer et al. (2014) und Asmala et al. (2012) beobachteten, weist gelöstes Eisen eine Korrelation zum DOC in Bezug zur Absorption bei 420 nm auf. Weiterhin zeigte Kölling (2019) auf, dass gelöstes Sulfat ausschließlich im Wellenlängenbereich kleiner 400 nm aktiv ist. Demnach ist Sulfat nicht anhand der Absorptionen im Wellenlängenbereich von 400 bis 700 nm identifizierbar.

Zur Bestimmung des Rückstreukoeffizienten kann die Rückwärtsstreuung von CDOM vernachlässigt werden (s. Gl. 3-10):

$$b_b(\lambda) = b_W(\lambda) + C_{Ph} * b_{Ph}(\lambda) + C_T * b_T(\lambda) \qquad \textbf{Gl. 3-10}$$

b_{Total}: Gesamte Streuung der Gewässerprobe

b_w: Rückstreuungskoeffizient von Wasser

b_{Ph}: spezifischer Rückstreuungskoeffizient von Phytoplankton

b_T: spezifischer Rückstreuungskoeffizient von Tripton

C_i: Konzentration des Wasserinhaltsstoffes

Gemäß Frauendorf (2002, S. 46) sind die ausgeflockten Eisen(III)-Partikel dem TSM zuordenbar, weshalb diese in Gl. 3-10 zu integrieren sind. Aufgrund der geometrischen Variabilität der Eisenflocken sind zur Modellierung des Streuungskoeffizienten sowohl die Fluktuations- als auch die Mie-Theorie zu berücksichtigten.

3.2.2. Scheinbare optische Gewässereigenschaften (AOP)

AOPs sind von den optischen Eigenschaften des Gewässerkörpers, den Beleuchtungsbedingungen, dem Öffnungswinkel sowie der Orientierung des Sensors abhängig (Giardino et al. 2019; Krijgsman 1994, S. 25). Demnach sind den AOPs die Strahldichte (L), die Bestrahlungsstärke (E), der vertikale Dämpfungskoeffizient (K) sowie deren Ableitungen, z.B. Irradiance Reflectance (R_E), Radiance Reflectance (R_L), Remote Sensing Reflectance (R_{RS}), zuordenbar (Dekker et al. 2002a, S. 314 f. Mobley 1994, S. 68 f.).

Aufgrund der Verockerung und damit einhergehenden erhöhten TSM-Konzentration weisen die Strahldichte sowie die Bestrahlungsstärke eine höhere Reflexion im Wellenlängenbereich von 500 bis 700 nm auf. Hinzu kommt eine größere Absorption im Wellenlängenbereich von 400 bis 500 nm hinsichtlich einer höheren CDOM-Konzentration durch Eisen(II).

3.3. Methoden der Gewässerfernerkundung

Zur Ableitung von Konzentrationen der Wasserinhaltsstoffe von Binnengewässern mittels Fernerkundungsdaten werden analytische und empirische Methoden basierend auf dem Ansatz von Morel und Gordon (1980) genutzt und stetig dem technischen Fortschritt angepasst (Giardino et al. 2019). Im Vergleich zu Case 1-Gewässern weisen Case 2-Gewässer eine komplexere Zusammensetzung der Inhaltsstoffe auf. Dadurch können die entwickelten Algorithmen nicht von Gewässern des Typs Case 1 auf Case 2 übertragen werden (IOCCG 2000, S. 47; Mélin et al. 2011; Moore et al. 2014). Weiterhin ist aufgrund der höheren TSM-Konzentration bei Case 2-Gewässern auch der Wellenlängenbereich des nahen IR zu berücksichtigen (IOCCG 2000, S. 50). Nachfolgend werden die analytischen und empirischen Methoden sowie die Eignung für das Untersuchungsgebiet erläutert.

3.3.1. Analytische Methode

Analytische Modelle basieren entweder auf radiometrischen Größen bzw. den IOPs und AOPs (Ogashawara et al. 2017, S. 11). Zu den radiometrischen Größen zählen z.B. die Remote Sensing Reflectance ($R_{RS}(0^+)$) kurz über der Gewässeroberfläche oder die Subsurface Irradiance Reflectance ($R_E(0^-)$) knapp unter der Gewässeroberfläche. (Dekker et al. 2002b; Matthews 2011).

Weiterhin wird die analytische Herangehensweise in drei Arten von Algorithmen untergliedert: analytisch, semi-analytisch und quasi-analytisch. Alle drei Varianten haben gemeinsam, dass diese die spezifischen Absorptions- und Rückstreuungskoeffizienten des Gewässerkörpers mittels der RTE (s. Gl. 2-1) und geeigneter Modellen ableiten bzw. invers

(Defoin-Platel und Chami 2007; Lee et al. 2002; Mitchell et al. 2014; Ogashawara et al. 2017, S. 13). Allerdings werden nur bei einem reinen analytischen Ansatz die spezifischen Absorptions- und Rückstreuungskoeffizienten je Gewässerinhaltsstoff bestimmt (Dekker et al. 1995; Doerffer und Fischer 1994).

Voraussetzung zur Anwendung der analytischen Methode sind genaue Kenntnisse über die spezifischen optischen Eigenschaften der Gewässerinhaltsstoffe, der IOPs sowie des Strahlungstransports (Dekker et al. 1997; Heege 2000, S. 17; Matthews 2011; Rijkeboer et al. 1997). Da im Untersuchungsgebiet eine stetige Änderung des Chemismus temporär und lokal auftreten kann, ist zur präzisen Ableitung eine genaue Kenntnis über die spezifischen optischen Eigenschaften von Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat erforderlich (s. Kapitel 3.2.1). Des Weiteren sind spektrale In situ-Messungen an jedem Zufluss notwendig, damit der Algorithmus entsprechende Änderungen berücksichtigen kann. Weiterhin ist eine systematische Erfassung von Gewässerproben erforderlich.

3.3.2. Empirische Methode

Mittels empirischer Methoden werden häufig statistische Verbindungen zwischen den optischen Messungen und den Gewässerinhaltsstoffen hergestellt (Dekker 1993; Dörnhöfer und Oppelt 2016; Matthews 2011; Ritchie et al. 2003). Die Spektralmessungen können terrestrisch, airborne oder spaceborne zur Erfassung der Reflektanz oder Bestrahlungsstärke erfolgen (IOCCG 2000, S. 57). Die dazugehörigen In situ-Daten sind annähernd gleichzeitig zu erheben (Gege 2003; Matthews 2011).

Zur Ableitung des In situ-Parameters können als Index die Reflektanz-Werte einzelner Spektralkanäle, Kanalverhältnisse (Ratios) und Steigungsberechnungen (Slopes) verwendet werden (Giardino et al. 2019). Die Korrelation zwischen dem Index und dem In situ-Parameter wird anschließend in ein Regressionsmodell übertragen (Dörnhöfer und Oppelt 2016). Gemäß der International Ocean-Colour Coordinating Group (IOCCG) (2000, S. 57) ist das bekannteste Regressionsmodell der colour ratio (Gl. 3-11):

$$\hat{p} = \alpha \left(\frac{R_1}{R_2}\right)^{\beta} + \gamma \text{ gemäß (IOCCG 2000, S. 57)} \qquad \textbf{Gl. 3-11}$$

$\hat{p}$: zu schätzender Parameter in quantitativer Einheit

$\frac{R_1}{R_2}$: Spektralindex

R_i: Spektralkanal (Reflektanz oder Strahldichte)

α, β, γ: Regressionsparameter zwischen den spektralen und In situ-Daten

Basierend auf der Auswahl der Indizes wird die empirische Herangehensweise in die empirischen und semi-empirischen Algorithmen unterschieden. Bei einem empirischen Algorithmus basiert der ausgewählte Spektralindex auf einem statistischen Zusammenhang (Ogashawara et al. 2017, S. 12). Semi-empirische Algorithmen nutzen dagegen physikalische Annahmen basierend auf dem Spektralverlauf des Zielobjektes (Morel und Gordon 1980).
Weiterhin sind empirische Methoden einfach anzuwenden und ermöglichen schnelle flächendeckende Ergebnisse (Matthews 2011). Aufgrund wechselnder Zusammensetzung der Wasserinhaltsstoffe ist die Anwendung dieser Modelle oft temporal und lokal begrenzt (Dörnhöfer und Oppelt 2016; Giardino et al. 2019; Matthews 2011). Sofern die erhobenen In situ-Daten den notwendigen Messbereich abdecken, erzielen empirische Modelle stabile Ergebnisse (IOCCG 2000). Jedoch neigen diese Modelle zur Überspezialisierung, wodurch eine effiziente Anwendung auf ungesehene Daten nicht möglich ist (Defoin-Platel und Chami 2007). Aus diesem Grund sollten die erstellten Modelle nur auf Gewässer mit vergleichbaren Bedingungen angewendet werden (Ritchie et al. 2003).

3.3.3. Schlussfolgerung

Beide aufgezeigten Methoden zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe setzen die Erhebung von In situ-Daten voraus. Beim analytischen Ansatz ist zwar keine gleichzeitige Erfassung der In situ- und Fernerkundungsdaten notwendig (Dekker et al. 2002b), jedoch sind detaillierte Kenntnisse über den Strahlungstransport sowie den IOPs erforderlich (Matthews 2011). Aufgrund dessen wurde sich in der vorliegenden Arbeit für den empirischen Ansatz entschieden. Mittels einer automatisierten Vorgehensweise ist die Übertragbarkeit bestehender Modelle vernachlässigbar, da die datengetriebenen Algorithmen immer nach dem bestmöglichen kausalen Zusammenhang streben. Da dies zu einer Überspezialisierung führen kann, ist die Validierung mehrerer Ableitungsergebnisse notwendig (s. Kapitel 6.1).

4. Datenerfassung

Zur Entwicklung von Modellen zur flächendeckenden Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe sind eine systematische Erfassung und Verarbeitung der chemischen In situ- sowie hyperspektralen Fernerkundungsdaten erforderlich. Die Datenerhebung erfolgte in zwei Messkampagnen am 04.09.2018 und 22.09.2019. Beide wurden in Zusammenarbeit mit dem Leibnitz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei (IGB) durchgeführt. Wegen ihres großen Einflusses auf die Gewässerfärbung wurden die Gewässerproben auf Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat, gesamt organsicher Kohlenstoff (eng. total organic carbon (TOC)), DOC und Chl-a untersucht. Zeitgleich zur Probenentnahme erfolgte die Erfassung der hyperspektralen Fernerkundungsdaten im Wellenlängenbereich von 400 bis 2.500 nm mittels des Gyrocopters der Hochschule Anhalt (HSA). Entsprechende Übersichten über die Probenentnahmestellen (eng. sampling points (SP)) und die Abdeckungen der Fernerkundungsdaten sind in Anlage I vorzufinden.

Das Untersuchungsgebiet erstreckte sich entlang des Flusses Spree zwischen den Orten Ruhlmühle und Neuhausen (Spree) in der Braunkohlebergbauregion Lausitz (s. Abbildung 4-1). Der gewählte Streckenabschnitt zeichnet sich durch eine hohe Eisen- und Sulfatkonzentration aus.

4.1. Untersuchungsgebiet

Die Region Niederlausitz ist von anthropogenen Eingriffen geprägt. Bereits vor dem großflächigen Tagebau wurden Flussläufe verändert sowie Entwässerungsgräben für die extensive Landwirtschaft, Torfstiche und den Abbau von Raseneisenerz angelegt (Mutz et al. 2000; Uhlmann et al. 2013a). Durch den intensiven Abbau von Braunkohle mittels großer Förderbrücken kam es zur flächenhaften Grundwasserabsenkung von 30 bis 50 m (Benthaus und Totsche 2015).

Das Untersuchungsgebiet befindet sich südlich von Cottbus und erstreckt sich entlang des Flusses Spree von Ruhlmühle bis Neuhausen (s. Abbildung 4-1). In diesem Bereich weist die Spree eine starke Verockerung auf. Gemäß Uhlmann et al. (2012) ist ein hoher Eintrag durch das Grundwasser von Eisen(II)-Ionen bei Ruhlmühle vorzufinden. In der Folge kommt es:

- zum Anstieg der Sulfatkonzentration,
- zum Anstieg der Eisenkonzentration (Eisen(II), Eisen(III)),
- zur Senkung des pH-Wertes und

- zur Trübung des Gewässers durch Schlammbildung.

Wie in Kapitel 1.1 beschrieben, flocken die eingetragenen Eisen(II)-Ionen als Eisen(III)-hydroxid aufgrund des neutralen pH-Wertes (s. Kapitel III.I (Anlage)) im Untersuchungsgebiet aus. In Folge verockert das Gewässer. Allerdings tragen niedrige Durchflussmengen zur Selbstreinigung des Flusses bei. Dies führt zu Ablagerungen des Eisen(III)-hydroxids am Ufer der Spree bzw. in der Talsperre Spremberg, wodurch stromabwärts der Talsperre die Eisenkonzentration gering und die Verockerung nicht mehr ersichtlich ist.

In Abbildung 4-1 sind das Untersuchungsgebiet entlang der Spree sowie die Standorte der Probenentnahme (eng. sampling points (SP)) der Messkampagnen vom 04.09.2018 und 22.09.2019 dargestellt. Die Fließrichtung der Spree erfolgt im Untersuchungsgebiet von Süd nach Nord. Des Weiteren ist in Abbildung I-1 (Anlage I.I) das Untersuchungsgebiet detailliert dargestellt. In Abbildung I-2 (Anlage I.I) und Abbildung I-3 (Anlage I.I) sind die Probenentnahmestellen der Messkampagnen vom 04.09.2018 und 22.09.2019 gekennzeichnet. Zu den interessanten Orten mit starker Änderung des Chemismus der Spree zählen Ruhlmühle, Spreewitz, die Mündungen der Kanäle aus Richtung des Industrieparks Schwarze Pumpe, Wilhelmsthal (nördlich von Spremberg), die Spree-Vorsperre Bühlow sowie die Talsperre Spremberg.

Wie beschrieben, dringt bei Ruhlmühle eine hohe Konzentration von Eisen(II)-Ionen und Sulfat in die Spree. In der Folge nimmt die Verockerung des Flusses stromabwärts zu. Bei Spreewitz mündet der Fluss Kleine Spree in die Spree. Die Kleine Spree ist ebenfalls von einem hohen Stoffeintrag durch das Grundwasser betroffen (Benthaus und Totsche 2015), weshalb dieser ebenfalls hohe Konzentrationen von Eisen und Sulfat aufweist (Uhlmann et al. 2010). Südlich von Trattendorf befindet sich der Industriepark Schwarze Pumpe. Dieser entwässert über zwei Kanäle in die Spree und trägt zur Erhöhung der Sulfatkonzentration bei. Weiterhin befindet sich im Wilhelmsthal eine Konditionierungsanlage der Lausitzer und Mitteldeutschen Bergbau-Verwaltungsgesellschaft mbH (LMBV). Mittels dieser Anlage soll der Rückhalt der Eisenfrachten in der Spree-Vorsperre Bühlow erhöht werden (LMBV 2019). In der Talsperre Spremberg nimmt die Fließgeschwindigkeit der Spree ab. Dies trägt zur Ablagerung der Eisen(III)-hydroxid-Flocken sowie einer verminderten Trübung bei.

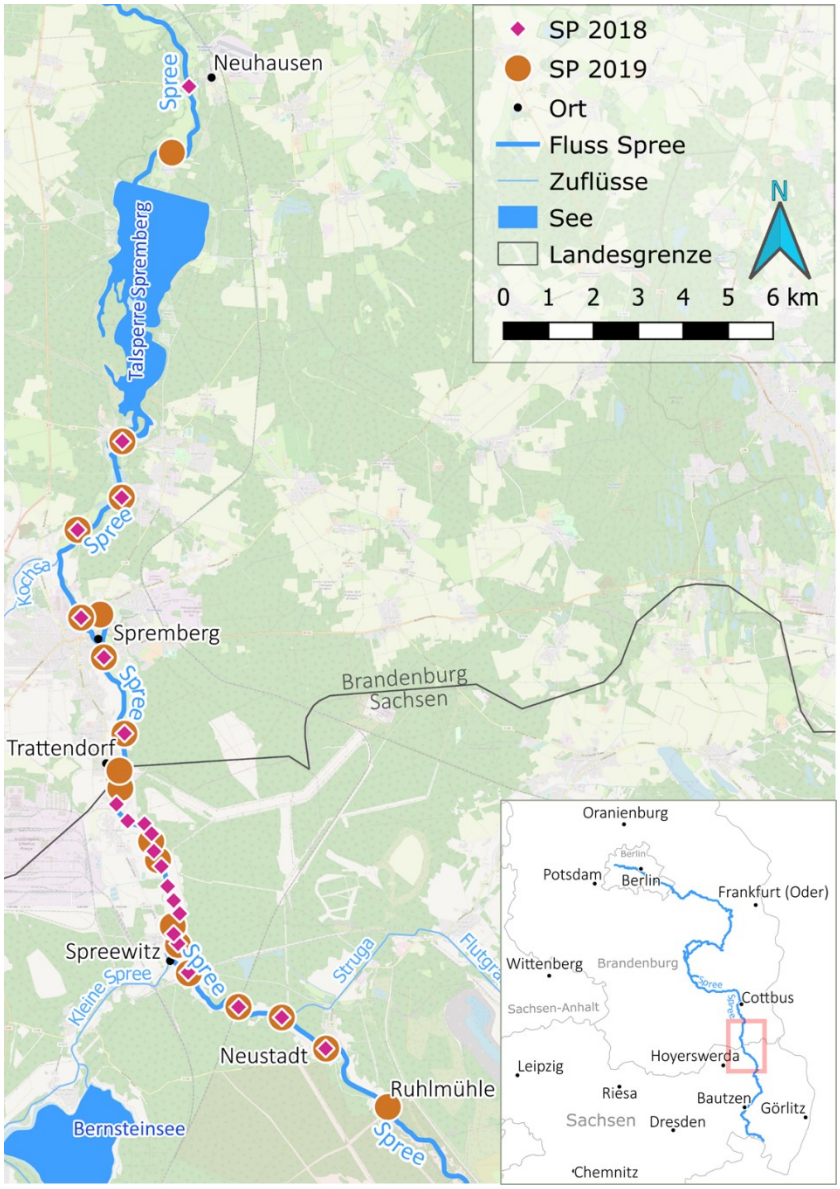

***Abbildung 4-1**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang des Flusses Spree, von Ruhlmühle bis Neuhausen (Spree), mit den Probenentnahmestellen (SP) von den Jahren 2018 und 2019. Weiterhin ist in der Übersichtskarte das Untersuchungsgebiet mit einem roten Rahmen markiert. Eine detaillierte Darstellung ist in Abbildung I-1 (Anlage I.I) vorzufinden.*
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

4.2. In situ–Daten

Die chemischen In situ–Daten dienen als Grundlage für die Regressionsmodelle zur flächendeckenden Ableitung der Wasserinhaltsstoffe mittels hyperspektraler Fernerkundungsdaten. Die Probenentnahme erfolgte in den Messkampagnen am 04.09.2018 und 22.09.2019 vom Ufer und von Brücken. Zusätzlich wurde am 04.09.2018 ein Boot zur Probenentnahme genutzt. Nachfolgend werden die Erfassungs-, Verarbeitungsmethoden

sowie die Messergebnisse bezüglich der Inhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat TOC, DOC und Chl-a erläutert.

Die Erhebung sowie Analyse der chemischen Parameter erfolgten nach den Verfahren der Tabelle 4-1 und Tabelle 4-2. Die Gewässerproben wurden mittels eines 30 cm langen Schöpfers erhoben. Dadurch stellt jede Probe eine Mischung der oberen Wassersäule dar.

Im Labor des Fachbereichs Angewandte Biowissenschaften der HSA wurden die Gewässerparameter Gesamteisengehalt, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat, TOC und DOC für beide Messkampagnen bestimmt (s. Tabelle 4-1).

Tabelle 4-1: Verfahren zur Bestimmung der chemischen Gewässerparameter im Labor der HSA mit Angabe der Messunsicherheit.

Beschreibung	Verfahren	Messunsicherheit
Bestimmung der Gesamteisen- und Eisen(II)-Konzentration	DIN 38406-1:1983-05	5 %
Bestimmung der Eisen(III)-Konzentration	Differenz aus Gesamteisen und Eisen(II)	-
Bestimmung der Sulfatkonzentration	DIN EN ISO 10304-1	15 %
Bestimmung von DOC und TOC als nicht ausblasbarer organischer Kohlenstoff (NPOC)	DIN EN ISO 1484	2 %

Die Bestimmung des Gesamteisengehalts wurde gemäß DIN 38406-1:1983-05 durchgeführt. Dazu wurden 200 ml der Mischprobe unfiltriert mit 2 ml 20%iger Schwefelsäure vor Ort stabilisiert und im Labor analysiert. Die Analyse zur Eisen(II)-Bestimmung erfolgte ebenfalls nach DIN 38406-1:1983-05. Diesbezüglich erfolgte im Labor eine zusätzliche Filtration mittels eines Spritzenfilters mit 0,45 µm Porenweite. Die Eisen(III)-Konzentration ergab sich aus der Differenz der Gesamteisen- und Eisen(II)-Konzentration.

Zur Bestimmung der Sulfatkonzentration nach DIN EN ISO 10304-1 und DOC-Konzentration nach DIN EN ISO 1484 wurde die Mischprobe vor Ort mittels eines Spritzenfilters mit 0,45 µm Porenweite filtriert und im Labor analysiert. Die Bestimmung der TOC-Konzentration erfolgte mittels unfiltrierter Proben gemäß DIN EN ISO 1484.

Im Labor des IGB wurden für beide Messkampagnen die Konzentrationen von Gesamteisen, gelöstem Eisen(II) sowie Eisen(III), Sulfat und Chl-a analysiert. Im Jahr 2018 wurden zusätzlich die DOC- und TOC-Konzentrationen ermittelt (s. Tabelle 4-2).

Tabelle 4-2: Verfahren zur Bestimmung der chemischen Gewässerparameter im Labor des IGB mit Angabe der Messunsicherheit.

Beschreibung	Verfahren	Messunsicherheit
Bestimmung der Konzentrationen des Gesamteisen sowie Eisen(II)	DIN 38406	3 %
Bestimmung der gesamten Eisen(III)-Konzentration	Differenz aus Gesamteisen und Eisen(II)	-
Bestimmung der Sulfatkonzentration	DIN EN ISO 10304-1	3 %
Bestimmung der DOC- und TOC-Konzentration	DIN EN ISO 1484	3 %
Bestimmung der Chl-a-Konzentration	HPLC-Verfahren nach (Mehnert et al. 2012; Shatwell et al. 2012)	3 %

Die Bestimmung des Gesamteisengehalts wurde gemäß DIN 38406 mittels eines Atomabsorptionsspektrometers (AAS) durchgeführt. Dazu wurden 50 ml der Mischprobe unfiltriert mit 0,5 ml 20%iger Schwefelsäure vor Ort stabilisiert. Im Labor erfolgte zunächst die TP-Bestimmung mittels einer homogenisierten Probe in einem speziellen Aufschlussblock mit Schwefelsäure und Wasserstoffperoxid. Im Anschluss erfolgte die Gesamteisenbestimmung mittels AAS. Die Analyse zur Eisen(II)-Bestimmung wurde ebenfalls nach DIN 38406 durchgeführt. Dazu wurden vor Ort 2 ml der Mischprobe filtriert und mit 0,2 ml 20%iger Schwefelsäure vor Ort stabilisiert und luftblasenfrei in einem Mikroreaktionsgefäß verschlossen. Die Differenz aus dem Gesamteisengehalt und der Eisen(II)-Konzentration ergab die Eisen(III)-Konzentration.

Zur Bestimmung der Sulfatkonzentration nach DIN EN ISO 10304-1 und der DOC-Konzentration nach DIN EN ISO 1484 wurde die Mischprobe vor Ort mittels eines Spritzenfilters mit 0,45 µm Porenweite filtriert und im Labor analysiert. Die TOC-Bestimmung erfolgte anhand unfiltrierter Proben gemäß DIN ISO 1484. Die Gewässerproben zur Bestimmung der Chl-a-Konzentration wurden vor Ort unfiltriert in 1 L-Gefäßen dunkel und kühl aufbewahrt. Im Labor erfolgte die Analyse mittels HPLC gemäß Mehnert et al. (2012) und Shatwell et al. (2012).

4.2.1. Messkampagne 2018

Im Folgenden werden die analytischen Ergebnisse der Messkampagne vom 04.09.2018 beschrieben. Die Orte der Probenentnahmestellen sind der Abbildung I-2 (Anlage I.I) zu entnehmen. Die Koordinatenliste der Messstellen ist in Tabelle I-1 (Anlage I.I) vorzufinden. Alle Messergebnisse der Analytik der HSA sind in Tabelle I-3 (Anlage I.I) zu finden. In Tabelle

4-3 sind diese in verkürzter Form aufgelistet. Weiterhin ist Tabelle 4-3 eine unterschiedliche Probenanzahl zu entnehmen. Die geringe Anzahl der Inhaltsstoffe Eisen(II) und Eisen(III) resultieren aus einer fehlerhaften Probenerhebung an den Messstellen (SP) S20_2 und S20_4 zwischen Neustadt und Spreewitz (s. Tabelle I-3 Anlage I.I). In Abbildung I-4 (Anlage I.I) sind die Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff visualisiert.

Tabelle 4-3: Auflistung der im Labor der HSA bestimmten Gewässerproben vom 04.09.2018 unter Angabe der Probenanzahl, des Minimums, des Maximums, des Mittelwertes und der Standardabweichung (SD). Die entsprechenden Rohdaten sind Tabelle I-3 (Anlage I.I) zu entnehmen.

	Probenanzahl	Minimum	Maximum	Mittelwert	SD
Gesamteisen [mg/L]	18	0,45	11,10	6,54	3,03
Eisen(II) [mg/L]	16	0,01	5,74	2,60	2,01
Eisen(III) [mg/L]	16	0,43	5,18	3,53	1,09
Sulfat [mg/L]	18	461	606	540	54
DOC [mg/L]	18	2,00	5,00	3,20	0,73
TOC [mg/L]	18	3,60	5,90	4,46	0,64

Nachfolgend werden die analytischen Ergebnisse des IGB der Messkampagne vom 04.09.2018 aufgezeigt. Ein allgemeiner Überblick über die Messergebnisse ist in Tabelle 4-4 vorzufinden.

Tabelle 4-4: Auflistung der im Labor des IGB bestimmten Gewässerproben vom 04.09.2018 unter Angabe der Probenanzahl, des Minimums, des Maximums, des Mittelwertes und der Standardabweichung (SD). Die entsprechenden Rohdaten sind in Tabelle I-4 (Anlage I.I) zu finden.

	Probenanzahl	Minimum	Maximum	Mittelwert	SD
Gesamteisen [mg/L]	12	0,43	8,79	4,72	2,77
Eisen(II) [mg/L]	9	0,62	7,26	3,88	2,41
Eisen(III) [mg/L]	9	1,54	2,30	1,90	0,26
Sulfat [mg/L]	12	347	430	391	32
DOC [mg/L]	12	3,79	4,80	4,10	0,27
TOC [mg/L]	12	4,26	5,20	4,60	0,31
Chl-a. [µg/L]	17	1,61	18,66	3,79	3,84

In Tabelle 4-4 ist ebenfalls eine unterschiedliche Probenanzahl zu erkennen. Die geringe Anzahl der Inhaltsstoffe Eisen(II) und Eisen(III) resultieren aus den Proben, welche eine nicht messbare Konzentration aufzeigten. Die dazugehörigen Rohdaten sind in Tabelle I-4 (Anlage I.I) vorzufinden. In Abbildung I-5 (Anlage I.I) sind die Konzentrationsänderungen je Wasserinhaltsstoff visualisiert.

4.2.2. Messkampagne 2019

Im Folgenden wird auf die analysierten Gewässerinhaltsstoffe vom 22.09.2019 eingegangen. Die Orte der Probenentnahmen sind in Abbildung I-3 (Anlage I.I) dargestellt. Die dazugehörigen Koordinaten sind der Tabelle I-2 zu entnehmen.

Die Rohdaten der Analyseergebnisse der HSA sind in Tabelle I-5 (Anlage I.I) vorzufinden. Ein allgemeiner Überblick über die Messergebnisse ist in Tabelle 4-5 angegeben. Die geringere Anzahl von Eisen(II) und Eisen(III) resultieren aus den Gewässerproben, welche eine nicht messbare Konzentration aufweisen (s. in Tabelle I-5 (Anlage I.I)). Weiterhin sind die wichtigsten Konzentrationsänderungen in Abbildung I-6 (Anlage I.I) visualisiert.

Tabelle 4-5: Auflistung der im Labor der HSA bestimmten Gewässerproben vom 22.09.2019 unter Angabe der Probenanzahl, des Minimums (min), des Maximums, des Mittelwertes und der Standardabweichung (SD). Die entsprechenden Rohdaten sind in Tabelle I-5 (Anlage I.I) zu finden.

	Probenanzahl	Minimum	Maximum	Mittelwert	SD
Gesamteisen [mg/L]	19	0,13	8,43	5,19	2,18
Eisen(II) [mg/L]	18	0,15	5,55	2,31	1,69
Eisen(III) [mg/L]	18	0,28	5,05	3,16	1,20
Sulfat [mg/L]	19	340	710	414	78
DOC [mg/L]	19	3,80	4,70	4,27	0,24
TOC [mg/L]	19	4,40	10,60	6,58	1,94

Im Folgenden wird auf die analysierten Gewässerinhaltsstoffe des IGB der Messkampagne vom 22.09.2019 eingegangen (s. Tabelle 4-6). Die entsprechenden Rohdaten sind in Tabelle I-6 (Anlage I.I) zu finden. Weiterhin ist in Tabelle 4-6 eine unterschiedliche Probenanzahl zu erkennen. Die geringe Anzahl der Inhaltsstoffe von Eisen(II) und Eisen(III) ergeben sich aus den Proben, welche eine nicht messbare Konzentration aufweisen (s. Tabelle I-6 (Anlage I.I)). Die wichtigsten Konzentrationsänderungen sind in Abbildung I-7 (Anlage I.I) visualisiert.

Tabelle 4-6: Auflistung der im Labor des IGB bestimmten Gewässerproben vom 22.09.2019 unter Angabe der Probenanzahl, des Minimums (min), des Maximums, des Mittelwertes und der Standardabweichung (SD). Die entsprechenden Rohdaten sind in Tabelle I-6 (Anlage I.I) zu finden.

	Probenanzahl	Minimum	Maximum	Mittelwert	SD
Gesamteisen [mg/L]	19	0,60	7,00	3,74	1,74
Eisen(II) [mg/L]	16	0,04	5,28	2,37	1,68
Eisen(III) [mg/L]	16	0,61	2,89	1,75	0,62
Sulfat [mg/L]	19	336	436	397	31
Chl-a [mg/L]	19	6,15	12,31	8,54	2,05

4.3. Fernerkundungsdaten

Die Erfassung der Fernerkundungsdaten erfolgte mit dem Gyrokopter der HSA. Im Gyrokopter können bis zu drei Sensoren gleichzeitig installiert werden. Dazu stehen eine RGB-Kamera (Nikon D800e) und zwei Hyperspektralsensoren der Firma Norsk Elektro Optikk AS (NEO), HySpex VNIR 1600 und HySpex SWIR 384, zur Verfügung. Im Folgenden werden der Gyrokopter sowie die verwendete Sensorik genauer vorgestellt.

4.3.1. Gyrokopter als Trägerplattform

Zur Erhebung der Fernerkundungsdaten wurde als Sensorträger der Gyrokopter vom Typ Cavalon der HSA eingesetzt (s. Abbildung 4-2). Dieser zeichnet sich durch folgende Eigenschaften aus:

- stabile Fluglage auch bei Turbulenzen,
- langsame Fluggeschwindigkeit,
- Start- und Landestrecke erforderlich,
- hohe Wendigkeit,
- Autorotation des Rotors,
- geringe Anschaffungs- und Betriebskosten und
- zwei nebeneinander befindliche Sitzplätze (AutoGyro GmbH 2019).

Abbildung 4-2: Abbildung des Forschungsgyrokopters der Hochschule Anhalt.

Aufgrund der Autorotation wird nur der Propeller am Heck des Gyrocopters aktiv vom Motor angetrieben. Dieser dient ausschließlich der Vorwärtsbewegung des Gyrocopters. Der Rotor selbst wird durch den Fahrwind in Bewegung versetzt und bildet eine kreisförmige Tragfläche ab einer Drehzahl von ca. 400 U/min. Für Forschungsflüge wird der Co-Pilotensitz herausgenommen und durch die Sensorik ersetzt.

4.3.2. Sensorik

Die Befliegung des Untersuchungsgebietes erfolgte zeitgleich zur Erhebung der Gewässerproben am 04.09.2018 und 22.09.2019. Die Flughöhe beider Kampagnen betrug 600 m. Weiterhin wurden eine RGB-Kamera Nikon D800e, zwei Hyperspektralsensoren HySpex VNIR 1600 und HySpex SWIR 384 sowie ein Trägheitsnavigationssystem (eng. inertial navigation system (INS)) eingesetzt.

Das INS verknüpft die Daten der inertialen Messeinheit (eng. Inertial measurement unit (IMU)) iMAR-FSAS mit dem Empfänger für globale Navigationssatellitensysteme (eng. global navigation satellite system (GNSS)) AeroDidos. Die IMU iMAR-FSAS enthält drei faseroptische Kreisel zur Bestimmung der Raumwinkel: roll, pitch und heading (Bannehr et al. 2015). Diese drei Winkel sind zur präzisen Prozessierung der Hyperspektraldaten relevant und werden von der AeroDidos mit den GNSS-Daten (X, Y, Z) synchronisiert. Mit einer Aufnahmefrequenz von 200 Hz kann mittels der IMU-Daten die zurückgelegte Strecke des Gyrocopters zwischen zwei GNSS-Punkten interpoliert werden. Das INS erfasst während des gesamten Fluges alle GNSS- und IMU-Daten. In Abbildung 4-3 sind die Raumwinkel mit der entsprechenden Richtung in Abhängigkeit zur IMU anhand des Gyrocopters skizziert.

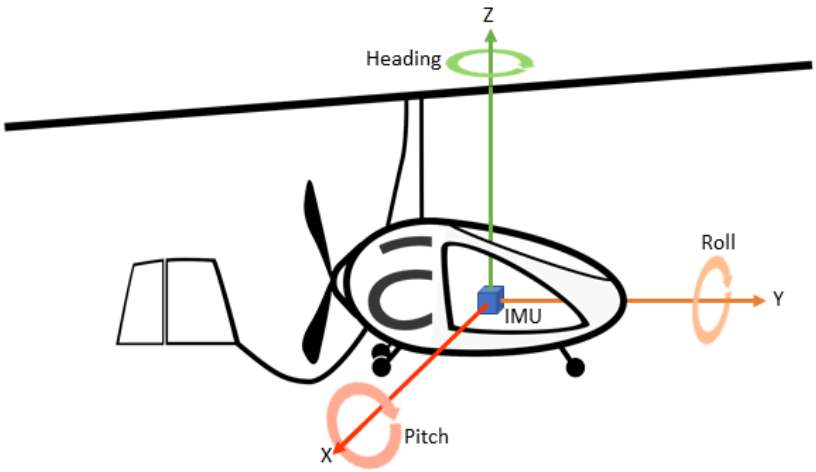

Abbildung 4-3: Skizzierte Darstellung der erfassten Raumwinkel (Roll, Pitch, Heading) mit Richtungsangabe (X, Y, Z) in Abhängigkeit zur IMU im Gyrokopter der Hochschule Anhalt.

Weiterhin führt das INS-System die Auslösung der genutzten Sensorik entsprechend der Flugplanung aus. Sowohl die RGB-Kamera als auch das Hyperspektralsystem senden unabhängig voneinander bei einer Auslösung ein Signal an das INS. Dieses wird vom INS als Aufnahme bzw. Auslösung (Event) interpretiert und gespeichert. In der Nachbereitung (eng. post-processing) können die einzelnen Events unabhängig voneinander verarbeitet werden. Im Post-Processing, mittels der Software Inertial Explorers Version 8.60, wurden die erfassten

INS-Daten mithilfe freier GNSS-Korrekturdaten prozessiert. Dadurch ist eine minimale Genauigkeit in der XY-Ebene von 3 m und in Z-Richtung von 4 m erreichbar (European Satellite Services Provider S.A.S 2020). Weiterhin wurde im Post-Processing die Trajektorie für die gesamte Flugbahn berechnet. Abschließend wurden zur weiteren Datenverarbeitung unter Berücksichtigung des spezifischen Lever-Arms die Sensor-Events exportiert.

Die Nikon D800e mit 36,3 Megapixeln ist eine Vollformatdigitalkamera mit einem Schlitzverschluss. Im Gyrokopter wird diese mit einem 50 mm Objektiv betrieben. Dies entspricht mit einem Öffnungswinkel (eng. field of view (FOV)) von 46,8°. Die Prozessierung der erfassten RGB-Daten erfolgte mittels Structure from Motion – Algorithmen (SfM). Dazu wurden die Event-Daten des Post-Processing mit den Bilddaten mittels der SfM-Software Agisoft MetaShape synchronisiert. Die Event-Daten beinhalteten die Positionsdaten (X, Y, Z) sowie den entsprechenden Bildnamen. Die Software leitete anhand der gegebenen Bilddaten ein True-Orthophoto sowie ein digitales Oberflächenmodell (eng. digital surface modell (DSM)) auf Basis des Geoidmodells EGM96 mit einer GSD von 22.361 m (ETRS 89-UTM33N) ab. Da das Kamerasystem keine Forward Motion Compensation (FMC) enthält, ist diese gemäß Bannehr et al. (2015) zusätzlich zu berücksichtigen.

Anhand der Daten vom 04.09.2018 wurde ein Near-True-Orthophoto erstellt, welches den Bereich zwischen Neustadt und nördlich von Spreewitz abdeckt. In Abbildung I-8 (Anlage I.I) ist die Abdeckung des Near-True-Orthophotos dargestellt. Die erfassten RGB-Aufnahmen vom 22.09.2019 wurden aufgrund der homogenen Wasseroberfläche der Talsperre Spremberg separiert. Dadurch wurden zwei zusammenhängende Abdeckungsgebiete südlich und nördlich der Talsperre Spremberg erstellt (s. Abbildung I-9 (Anlage I.I)). Da beide Messkampagnen die gleiche Flughöhe aufwiesen, sind die resultierenden GSD ebenfalls gleich. So beträgt die GSD des True-Orthophotos unter Berücksichtigung des FMC gemäß Bannehr et al. (2015) 11 cm und des DSM 22 cm.

Weiterhin wurden die Hyperspektralsensoren HySpex VNIR 1600 und HySpex SWIR 384 der Firma NEO verwendet. Der HySpex VNIR 1600 deckt einen Wellenlängenbereich von 400 bis 1.000 nm ab. Zur Befliegung wurden die Daten in 80 Spektralkanäle je Pixel mit einer Spektralauflösung von 7,4 nm gespeichert. Weiterhin wurden die Daten nach dem Pushbroom-Verfahren mit bis zu 160 fps erfasst. Zur Befliegung betrug der FOV 34°. Der Sensorchip des HySpex VNIR 1600 bestand aus einer Si CCD, welcher die Daten mit 12 bit auflöste.

Der Hyperspektralsensor HySpex SWIR 384 erfasst die elektromagnetische Energie im Wellenlängenbereich von 930 bis 2.500 nm ebenfalls nach dem Pushbroom-Verfahren mit 400 fps. Weiterhin speichert der Sensor 288 Spektralkanäle je Pixel mit einer Spektralauflösung von 5,45 nm ab. Der FOV betrug zur Messkampagne 32°. Des Weiteren löst der integrierte MCT Sensorchip die Daten mit 16 bit auf.

Eine ausführliche Beschreibung der Prozessierung der Hyperspektraldaten ist in Kapitel II (Anlage) vorzufinden. Nach der Prozessierung repräsentieren die Pixelwerte der Hyperspektraldaten gemäß Ray (1994) eine scheinbare Reflektanz (eng. apparent reflectance (aR_{RS})). Diese ist in den meisten Fällen äquivalent zur Remote Sensing Reflectance (R_{RS}). Allerdings wurden Schattenbereiche oder Nachbarschaftseffekte nicht korrigiert, weshalb diese vorher maskiert wurden. In Abbildung I-10 und Abbildung I-11 (Anlage I.I) ist die minimale Abdeckung der Hyperspektraldaten beispielhaft anhand der Daten des HySpex SWIR 384 dargestellt. Die Daten decken das Untersuchungsgebiet nördlich von Neustadt bis nördlich der Talsperre Spremberg ab. Für beide Messkampagnen beträgt die resultierende GSD 23 cm beim HySpex VNIR 1600 bzw. 66 cm beim HySpex SWIR 384.

5. Erstellung der Spektralindizes

Die verwendeten Spektralindizes wurden der Literatur entnommen sowie anhand von Simulationen, spektralen In situ-Messungen und extrahierten Spektralinformationen der Fernerkundungsdaten hergeleitet. Weiterhin bestehen diese aus Reflektanz-Werten einzelner Spektralkanäle, Kanalverhältnissen (engl. Ratios (Rt)) und Steigungsberechnungen (engl. Slope (Slp)). Die einzelnen Wellenlängen wurden aufgrund spezifischer Spektraleigenschaften als Index herangezogen.

Durch die hohe Trübung im Untersuchungsgebiet lag der Schwerpunkt der Auswahl auf den Spektraleigenschaften von Eisen und TSM. Basierend auf den Beobachtungen von Kölling (2019) ist Sulfat nicht direkt anhand einzelner Wellenlängen zwischen 400 und 700 nm identifizierbar (s. Kapitel 3.1.3 und 3.2.1). Des Weiteren tragen die gelösten und partikulären Eisenbestandteile in verockerten Fließgewässern zu weiteren spezifische Absorptions- sowie Rückstreuungseigenschaften bei.

5.1. Spektralindizes der Literatur

Die spezifischen Absorptionsbanden von zwei- und dreiwertigen Eisenverbindungen im Boden wurden intensiv untersucht (Bartholomeus et al. 2007; Goetz 1989; Hunt 1980; Hunt 1977; Hunt und Ashley 1979; Rossman 1975; Rowan et al. 1977; Sherman und Waite 1985; Velasco et al. 2005; Wickersheim und Lefever 1962), wodurch heute sehr viele Informationen bekannt sind. Rowan et al. (1977) fanden drei entscheidende Indikatoren zur Beschreibung von Eisenhydroxiden heraus. Aufgrund von Absorptionsbanden von Eisen erscheinen lokale Minima im visuellen Wellenlängenbereich bei 475, 900 und 2.200 nm (s. Abbildung 5-1). Letzteres ist jedoch nur bei Anwesenheit von Hydroxylgruppen sichtbar wie z. B. bei Goethit, Hematit und Jarosit (Hunt 1977). Ein breites Maximum befindet sich bei 1.600 nm (Rowan et al. 1977). So zeigen Eisen(II)-Verbindungen je nach Zusammensetzung und Molekulargeometrie im Wellenlängenbereich von 800 nm bis 1.200 nm (Cloutis et al. 2006; Hunt 1980) sowie bei 1.800 nm (Hunt 1977) ein breites Absorptionsband auf.

In Abbildung 5-1 sind die Spektren von fünf Eisenhydroxiden gemäß der Datengrundlage von Kokaly et al. (2017) dargestellt. Die gewählten Eisenhydroxide treten in verockerten Fließgewässern in Abhängigkeit zum pH-Wert auf. Die aktiven absorbierenden Wellenlängenbereiche von Eisen(III)-Verbindungen liegen bei 430 nm (Cloutis et al. 2006) sowie bei 840 nm (Hunt und Ashley 1979; Marusak et al. 1980). Die niedrigste Absorption ist je nach Eisen(III)-oxid bzw. -hydroxid im Wellenlängenbereich 600 nm bis 775 nm vorzufinden

(Marusak et al. 1980; Sherman und Waite 1985; Wickersheim und Lefever 1962). Dies ist in Abbildung 5-1 bei allen Eisen(III)-oxiden in Form eines Maximums der Reflektanz zuerkennen. Weiterhin weisen die Spektren bei den Wellenlängen 1.400 und 1.900 nm ein Minimum aufgrund von Wasserdampfabsorptionen in der Atmosphäre auf (Cloutis et al. 2006; Goetz 1989, S. 500; Hunt und Ashley 1979).

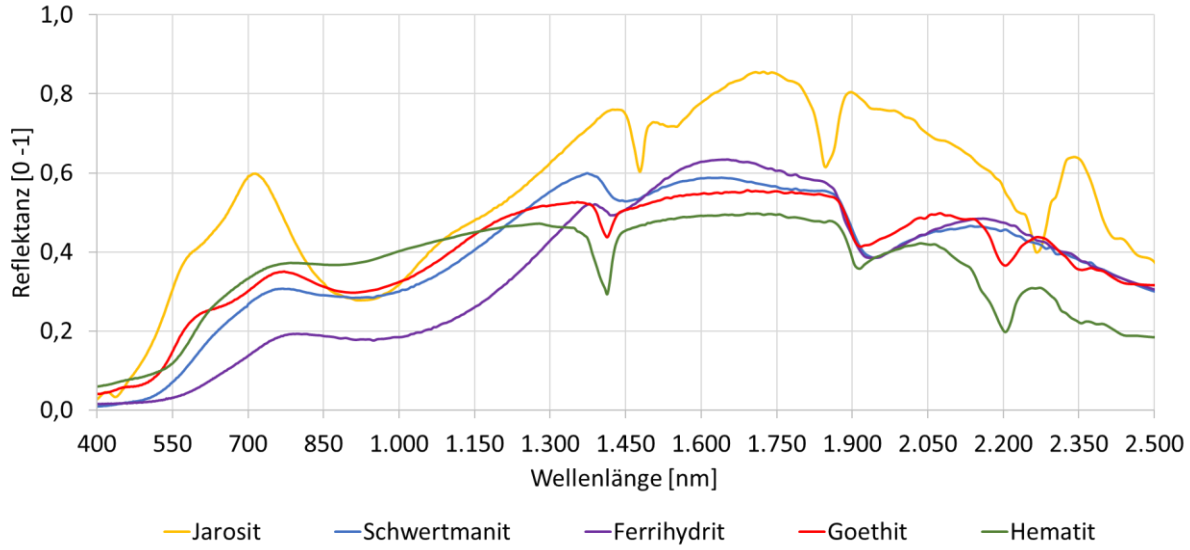

***Abbildung 5-1**: Darstellung von Spektren von Eisenhydroxide im Wellenlängenbereich von 400 bis 2.500 nm.*
Datenquelle (Kokaly et al. 2017)

Zur Ableitung von Eisenoxiden in Gewässern sind jedoch die spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Gewässerinhaltsstoffe zu berücksichtigen (s. Kapitel 3.1.3). Demzufolge könnte sich der verwendbare Spektralbereich auf die Wellenlängen zwischen 400 und 700 nm reduzieren, wodurch die Spektralinformationen größer 700 nm zur direkten Ableitung von Eisenkonzentrationen eingeschränkt werden. Weiterhin könnten die Absorptions- und Rückstreuungskoeffizienten punktuell verstärkt werden (Robinson et al. 1999; Weyhenmeyer et al. 2014; Williams et al. 2002).

In Tabelle 5-1 ist eine Auswahl einzelner Wellenlängen basierend auf den spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Gewässerinhaltsstoffe und den Eisenoxiden aufgelistet. Die vollständige Liste ist in Tabelle I-7 (Anlage) vorzufinden. Die aufgezeigten Wellenlängen wurden im vorgestellten Verfahren als Spektralindex verwendet (s. Kapitel 2).

Tabelle 5-1: Auflistung einer Auswahl einzelner Wellenlängen basierend auf den spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Wasserinhaltsstoffe sowie von Eisenoxiden. Die vollständige Auflistung ist in Tabelle I-7 (Anlage I.II) vorzufinden.

Wellenlänge	Beschreibung	Quelle
420 nm	Absorption von Eisen und DOC	Kölling (2019), Weyhenmeyer et al. (2014)
465 nm	Hohe Sensitivität für CDOM und Chl-a Absorption durch Eisenoxide	Gitelson et al. (1993), Rowan et al. (1977)
520 nm	Zunahme der Absorption von gelöstem Eisen	Asmala et al. (2012)
560 nm	Hohe Sensitivität von TSM	Gitelson et al. (1993)
580 nm	Geringe Absorption durch Chl-a Erhöhte Streuung durch TSM	Gitelson et al.(1993), Haardt und Maske (1987)
650 nm	Hohe Streuung aufgrund von Eisenflocken	Anderson und Robbins (1998), Williams et al. (2002)
706 nm	Streuung durch TSM	Dekker (1993, S. 135)
750 nm	Reflektanz ausschlich von TSM Wasser absorbiert zunehmend	Anderson und Robbins (1998), Rijkeboer et al. (1997), Williams et al. (2002)
800 nm	Geringe Absorption von Wasser Hohe Sensitivität mit TSM	Doxaran et al. (2002), Kou et al. (1993)
1.050 nm	Mittelwert der Reflektanz zwischen 1.000 und 1.100 nm	Knaeps et al. (2015)
1.250 nm	Mittelwert der Reflektanz zwischen 1.200 und 1.250 nm	Knaeps et al. (2015)

Weyhenmeyer et al. (2014) zeigten auf, dass der Absorptionskoeffizient eines Gewässers bei 420 nm deutlich von der Eisenkonzentration abhängt. Bereits Maloney et al. (2005) beobachteten, dass bis 1 mg/L Gesamteisengehalt das Absorptionsverhalten mit dem von DOC vergleichbar ist. Bei Zunahme des Gesamteisengehalts nimmt der spezifische Absorptionskoeffizient von DOC ab. So wies Gesamteisen ein Bestimmtheitsmaß (R^2) von 0,99 in Bezug zu a(320) auf (Maloney et al. 2005).

Weiterhin wies Kölling (2019) mittels der In situ–Daten vom 22.09.2019 eine Korrelation von Eisen(II) von $R^2 = 0{,}69$ in Bezug zur Absorption von deionisiertem Wasser bei 420 nm nach. Gemäß Gitelson et al. (1993) reagieren CDOM und Chl-a besonders sensitiv im Wellenlängenbereich von 450 bis 480 nm auf Konzentrationsveränderungen. Weiterhin beobachteten Rowan et al. (1977) im Wellenlängenbereich von 450 bis 500 nm eine Absorptionsbande von Eisenoxiden. Aufgrund dessen wurden die Spektralinformationen bei 465 nm herangezogen.

Untersuchungen von Asmala et al. (2012) stellten deutlich dar, dass ab 520 nm eine Trennung von DOC und Eisen(II) möglich ist. In der Folge ist der Einfluss von Eisen(II) bei CDOM-Messungen unterhalb von 520 nm vernachlässigbar (Asmala et al. 2012).

Bei 560 und 580 nm ist gemäß Gitelson et al. (1993) eine hohe Sensitivität zur TSM-Konzentration erkennbar. Kölling (2019) beobachtete ebenfalls eine Korrelation von $R^2 = 0,88$ bei 570 nm zwischen der Gesamteisenkonzentration und der Absorption von deioniesiertem Wasser. Bei 600 nm ist die Absorption durch Chl-a gering (Haardt und Maske 1987). Allerdings weist Chl-a bei 680 nm eine starke Sensitivität und Streuung auf (Gordon 1979; Haardt und Maske 1987).

Anderson und Robbins (1998) sowie Williams et al. (2002) beobachteten, dass aufgrund der hohen Rückstreuung die Wellenlängen 650 und 750 nm sehr geeignet zur Detektion von AMDs sind. Gemäß Dekker (1993, S. 135) enthält die Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}) bei 706 nm ausschließlich Information von TSM. Weiterhin nimmter ab 750 nm die Absorption durch Wasser ab und die Streuung aufgrund der vorhanden TSM-Konzentration zu (Rijkeboer et al. 1997). Wie im Kapitel 3.1.3 beschrieben, weist Wasser bei 810 nm eine geringe Absorption auf. Gleichfalls zeigten Doxaran et al. (2002) mittels Daten des Fernerkundungssatelliten SPOT auf, dass der Kanal XS3 (790-890 nm) eine Korrelation von $R^2 = 0,745$ für eine TSM-Konzentration zwischen 35 und 500 mg/L aufweist. Darauf basierend wurde die Spektralinformation bei 800 nm im Verfahren mit berücksichtigt. In Anlehnung an die Untersuchungen von Knaeps et al. (2015) wurden die Spektraldaten im Wellenlängenbereich von 1.000 bis 1.100 nm sowie von 1.200 bis 1.300 nm als Mittelwert zusammengefasst und ebenfalls als Index berücksichtigt. Weiterhin wiesen Knaeps et al. (2015) Korrelationen zu Wellenlängen bei 1071 nm mit $R^2 = 0,91$ und bei 1.240 nm mit $R^2 = 0,70$ anhand von TSM-Konzentrationen von 30 bis 1.400 mg/L nach.

Weiterhin wurden verschiedene Kanalverhältnisse (Ratios) zur Ableitung von Wasserinhaltsstoffen der Literatur entnommen. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Identifizierung von Eisen im Boden sowie der Bestimmung von TSM sowie der Trübung in Gewässern. Alle recherchierten Indizes sowie deren Varianten zur Ableitung von Wasserinhaltsstoffen sind in Tabelle I-8 (Anlage I.II) zu finden.

Ulrich et al. (2016) nutzten zur Detektion von Eisen(II) und Eisen(III) im Fluss Rio Doce verschiedene Spektralindizes. Die Untersuchungen zeigten auf, dass der Ratio (RT) in Gl. 5-1

gemäß Durning et al. (1998), Mwaniki et al. (2015) und van der Meer et al. (2014) am geeignetsten ist:

$$Eisen - Index = \frac{R_{RS}(650)}{R_{RS}(480)} \quad \textbf{Gl. 5-1}$$

$R_{RS}(650)$: Reflektanz der Wellenlänge 650 nm

650: Wellenlänge [nm]

Robinson et al. (1999) nutzten zur Ableitung von TSM ein exponentielles Modell bestehend aus den Wellenlängen 509 und 668 nm gemäß Gl. 5-2. Die Regressionskoeffizienten wurden durch In situ–Messungen ermittelt.

$$TSM\ [\frac{mg}{L}] = a\left(\frac{R_{RS}(509)}{R_{RS}(668)}\right)^b \quad \textbf{Gl. 5-2}$$

$R_{RS}(668)$: Reflektanz der Wellenlänge 668 nm

668: Wellenlänge [nm]

a, b: Regressionskoeffizienten zwischen 3,505 und -2,726

Gitelson et al. (1993) untersuchten die Ableitung von TSM im Konzentrationsbereich von 0,1 bis 66 mg/L mittels verschiedener Spektralindizes. Die größte Korrelation mit R = 0,93 wies der Spektralindex nach Gl. 5-3 auf:

$$TSM - Index = \frac{R_{RS}(560) - R_{RS}(520)}{R_{RS}(560) + R_{RS}(520)} \quad \textbf{Gl. 5-3}$$

$R_{RS}(560)$: Reflektanz der Wellenlänge 560 nm

560: Wellenlänge [nm]

Zur Ableitung der TSM-Konzentration sowie der Sichttiefe nutzte Frauendorf (2002, S. 160) den Index aus Gl. 5-4:

$$TSM - Index = \frac{R_{RS}(556) - R_{RS}(762)}{R_{RS}(647) - R_{RS}(762)} \quad \textbf{Gl. 5-4}$$

$R_{RS}(650)$: Reflektanz der Wellenlänge 650 nm

650: Wellenlänge [nm]

Anhand von In situ–Daten ermittelte Frauendorf (2002, S. 160) zur Ableitung von TSM verschiedene exponentielle Modelle (s. Gl. 5-5):

$$TSM\ [\frac{mg}{L}] = a\ e^{\,b\left(\frac{R_{RS}(556)-R_{RS}(762)}{R_{RS}(647)-R_{RS}(762)}\right)}$$ **Gl. 5-5**

a, b: Regressionskoeffizienten

Der Wertebereich des Regressionskoeffizienten a lag zwischen 0,11 und 1.055. Der Regressionskoeffizient b besaß einen Wertebereich von -2,89 bis 0,39. Weiterhin betrug R^2 zwischen 0,61 und 0,82.

Zur Ableitung der Sichttiefe wurden verschiedene Ableitungsmodelle von Frauendorf (2002, S. 160) genutzt. Die Regressionsparameter wiesen einen Wertebereich zwischen -350,54 und 439,12 auf. Die Korrelation der In situ– und Hyperspektraldaten hatte zwischen $0,65 < R^2 < 0,80$ betragen.

Weiterhin nutzen Eloheimo et al. (1998) zur Ableitung der TSM-Konzentration zwischen 2 und 12 mg/L ein lineares Regressionsmodell mit einer Korrelation von $R^2 = 0,92$ (s. Gl. 5-6).

$$TSM\ \left[\frac{mg}{L}\right] = -8{,}15 * \frac{L_u(562)-L_u(750)}{L_u(622)-L_u(750)} + 19{,}22$$ **Gl. 5-6**

$L_u(750)$: rückgestreute Strahldichte der Wellenlänge 750 nm

750: Wellenlänge [nm]

Des Weiteren benutzten Doxaran et al. (2002) zur Ableitung von TSM-Konzentrationen über 2.000 mg/L verschiedene Kanalkombinationen des Fernerkundungssatelliten SPOT. Die größte Korrelation mit $R^2 = 0,93$ zeigte das logarithmische Modell gemäß Gl. 5-7 auf:

$$TSM\ \left[\frac{mg}{L}\right] = 0{,}3193 * \ln\left(\frac{R_{RS}(840)}{R_{RS}(545)}\right) - 0{,}9614$$ gemäß Doxaran et al. (2002) **Gl. 5-7**

5.2. Analyse spektraler In situ-Messungen

Zur Entwicklung weiterer spezifischer Indizes wurden spektrale In situ–Messungen durchgeführt und mit den Simulationen der aktiven Gewässerinhaltsstoffe (s. Kapitel 3.1.3) verglichen. Die Erfassung spektraler In situ-Daten erfolgte im Rahmen der Messkampagne vom 04.09.2019 mittels des Spektrometers FLAME der Firma OceanOptics im Wellenlängenbereich von 400 bis 900 nm. Ziel war unter anderem die Erfassung der zurückgestreuten (E_u) und einfallenden Bestrahlungsstärke (E_d) unterhalb der Gewässeroberfläche zur Ableitung der Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}). Diesbezüglich wurde im Rahmen der Forschungsarbeit eine spezielle schwimmende Plattform entwickelt, auf der das Spektrometer installiert wurde (s. Abbildung 5-2). Die Plattform bestand aus drei schwimmenden Stützen aus Styropor, welche über eine Holzkonstruktion verbunden wurden.

Die Drehung des Sensorkopfes erfolgt über ein mechanisches System, wodurch die Messung der einfallenden und rückgestreuten Bestrahlungsstärke ermöglicht wurde. Eine detaillierte Beschreibung ist in Kapitel III.III der Anlage vorzufinden.

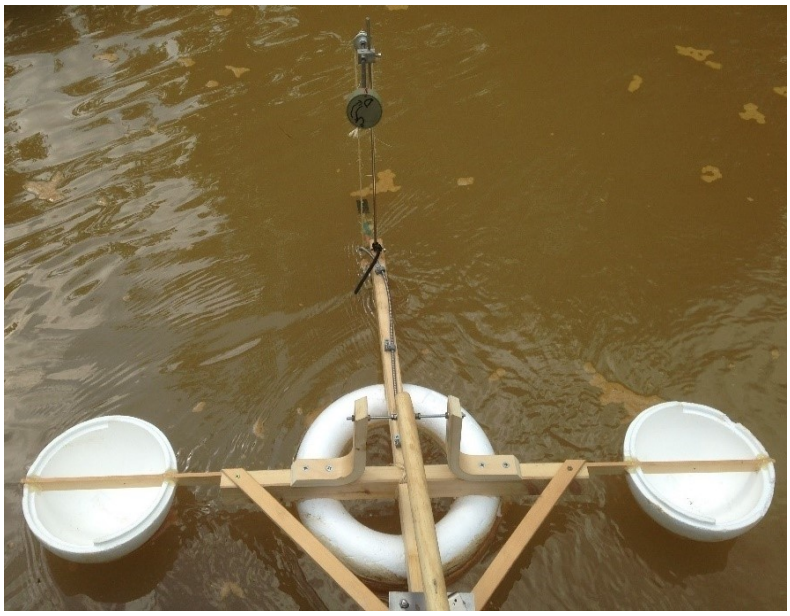

Abbildung 5-2: Schwimmende Plattform zur Messung der rückgestreuten und einfallenden Bestrahlungsstärke unterhalb der Gewässeroberfläche in zwei verschiedenen Tiefen.

Auf Grundlage der gemessenen einfallenden (E_d) und rückgestreuten Bestrahlungsstärke (E_u) wurde die Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}) unterhalb der Gewässeroberfläche gemäß Bukata et al. (1995) nach Gl. 5-8 abgeleitet. Die R_{SIR} ermöglicht direkte Rückschlüsse auf die Gewässerinhaltsstoffe.

$$R_{SIR} = \frac{E_d}{E_u} \qquad \textbf{Gl. 5-8}$$

In Abbildung 5-3 sind fünf Spektren im Wellenlängenbereich zwischen 450 und 800 nm abgebildet. In den Wellenlängenbereichen von 450 bis 475 nm sowie von 725 bis 800 nm ist das Rauschen des Messsignals zu erkennen.

Anhand der dargestellten Spektren sind die Absorptionen durch CDOM und Chl-a im Wellenlängenbereich von 440 bis 560 nm deutlich erkennbar (Gitelson 1992). Ebenfalls weist der Wellenlängenbereich größer 700 nm durch die Absorption von Wasser eine Abnahme auf. Allerdings ist im dazwischenliegenden Wellenlängenbereich eine deutlich erhöhte Rückstreuung zuerkennen. Insbesondere zeigt die R_{SIR} mindestens 15 % bei 650 nm auf. Nach Untersuchungen von Ulrich et al. (2018) weisen naturnahe Flüsse eine maximale R_{SIR} von 5 % bei 700 nm auf.

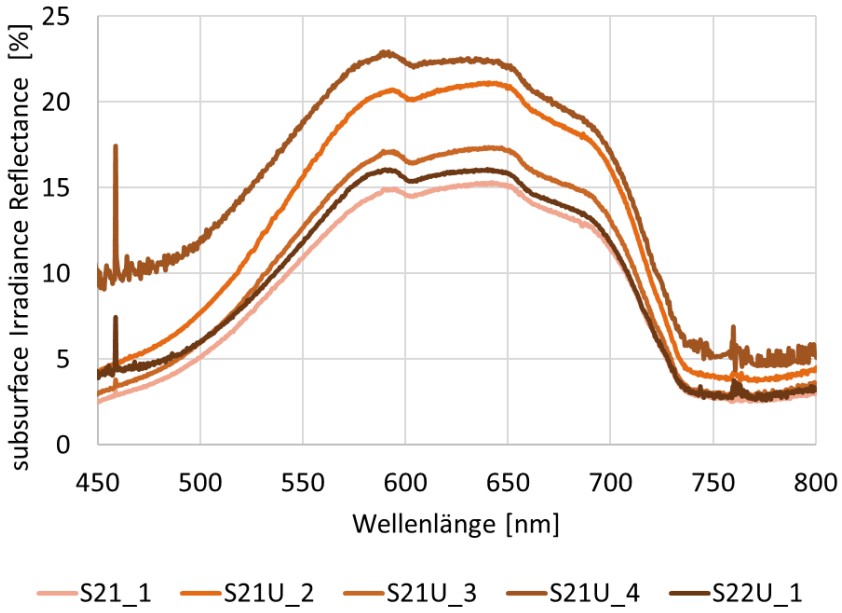

Abbildung 5-3: Darstellung der Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}) [%] kurz unter der Wasseroberfläche an fünf verschiedenen Messstellen vom 04.09.2018. Die entsprechenden Konzentrationsangaben von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sind in Tabelle I-3 und von Chl-a in Tabelle I-4 (Anlage I.II aufgelistet.

Weiterhin kann gemäß Anderson und Robbins (1998) die erhöhte Rückstreuung bei 650 nm auf die Anwesenheit der Eisenflocken zurückgeführt werden. Allerdings ist dies auch durch die Anwesenheit von Chl-a zu erkennen, wie die Simulationen im Kapitel 3.1.3 aufzeigten und anhand der Gewässerproben (s. Tabelle I-4 (Anlage I.II)) nachgewiesen wurde. Des Weiteren ist auch bei 580 nm eine erhöhte Rückstreuung zu erkennen. Gemäß Gitelson et al. (1993) weist nur TSM in diesem Wellenlängenbereich eine erhöhte Streuung auf. Dies wird auch durch die Simulationen bestätigt (s. Abbildung 3-8).

5.3. Analyse extrahierter Spektralinformationen

In Abbildung 5-4 und Abbildung 5-5 sind beispielhaft fünf extrahierte Spektren im Wellenlängenbereich von 440 bis 1.400 nm je Messkampagne dargestellt. Die Extrahierung der Spektralinformation der Rasterdaten erfolgte anhand der Koordinaten der Probenentnahmestellen. Die dazugehörigen Konzentrationen der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Chl-a sind in Tabelle 5-2 und Tabelle 5-4 vorzufinden.

In Abbildung 5-4 ist die scheinbare Reflektanz der Messkampagne vom 04.09.2018 abgebildet. Der Sprung im Überlappungsbereich der Hyperspektralsensoren HySpex VNIR und HySpex SWIR bei 1.000 nm ergab sich aus den Ungenauigkeiten der Kalibration, wodurch bei einem kalibrierten System Unterschiede von bis zu 4 % vorkommen können.

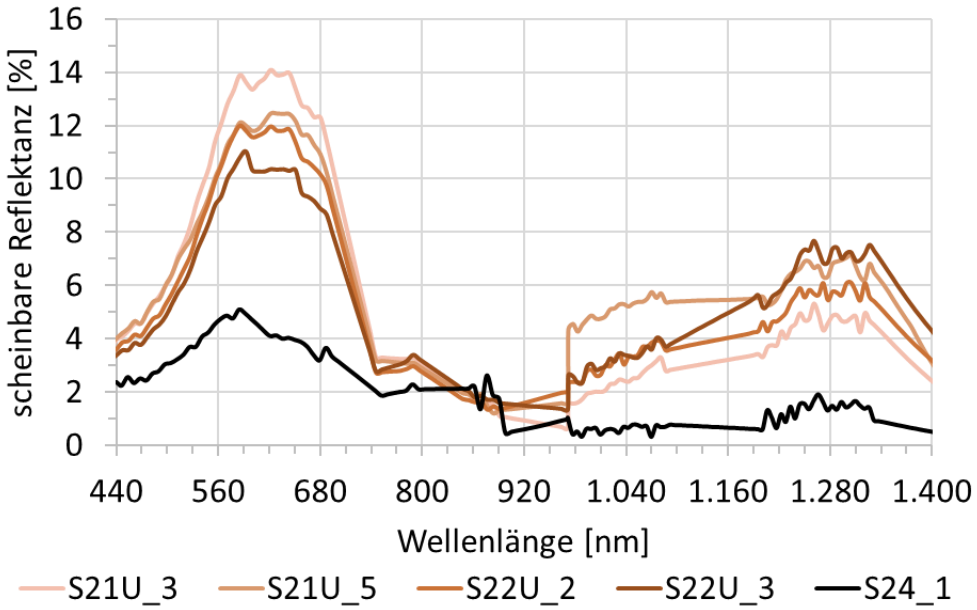

***Abbildung 5-4**: Darstellung der scheinbaren Reflektanz [%] im Wellenlängenbereich von 440 bis 1.400 nm entsprechend den Messstellen vom 04.09.2018. Die dazugehörigen Konzentrationsangaben von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Chl-a sind in Tabelle 5-2 zu finden.*

Im Wellenlängenbereich kleiner 500 nm ist aufgrund der Absorptionen durch CDOM und Chl-a die Reflektanz gering. Zwischen 560 und 700 nm ist bei den Messstellen mit einer Gesamteisenkonzentration über 3 mg/L ein breites Maximum von über 6 % zu finden, welches ebenfalls anhand der Simulationen (s. Abbildung 3-8) und der spektralen In situ-Messungen (s. Abbildung 5-3) zu erkennen ist. Weiterhin ist die anschließende Absorption durch Wasser zwischen 700 und 1.000 nm deutlich erkennbar. Anhand der Spektren der Messstellen mit mindestens 6 mg/L Gesamteisen weist die aR_{RS} zwischen 1.000 und 1.400 nm einen deutlichen Anstieg auf. Insbesondere bei 1.250 nm ist ein Maximum der Reflektanz vorzufinden.

In Tabelle 5-2 sind entsprechend den Messstellen in Abbildung 5-4 die Konzentrationsangaben der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat nach dem Labor der HSA angegeben. Die Bestimmung der Chl-a-Konzentration erfolgte im Labor des IGB.

***Tabelle 5-2**: Auflistung der gemessenen Konzentrationen der Messstellen in Abbildung 5-4. Die Bestimmung der Konzentrationen von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat erfolgte im Labor der HSA. Die Chl-a-Bestimmung erfolgte im IGB.*

SP ID	S21U_3	S21U_5	S22U_2	S22U_3	S24_1
Gesamteisen [mg/L]	8,71	8,73	6,49	6,22	0,45
Eisen(II) [mg/L]	4,64	4,41	2,80	2,65	0,02
Eisen(III) [mg/L]	4,07	4,32	3,69	3,57	0,43
Sulfat [mg/L]	471	489	588	588	557
Chl-a [µg/L]	3,00	2,88	1,69	2,14	18,66

In Abbildung 5-4 ist durch Hinzunahme der Konzentrationen in Tabelle 5-2 ein Zusammenhang des Wellenlängenbereichs von 560 bis 680 nm zu den Eisenkonzentrationen erkennbar. Der spektrale Einfluss von Chl-a bei 650 nm ist dagegen weniger ersichtlich. Aus diesem Grund wurde zusätzlich der kausale Zusammenhang zwischen den Gewässerinhaltsstoffen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat und Chl-a und den einzelnen Wellenlängen aus der Literatur (s. Tabelle I-7 in Kapitel I.II (Anlage)) herangezogen (s. Tabelle 5-3).

***Tabelle 5-3**: Angabe des größten Bestimmtheitsmaßes (R^2) je Gewässerinhaltsstoff zu den einzelnen Wellenlängen aus Tabelle I-7 in Kapitel I.II. Zu den Gewässerinhaltsstoffen zählen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat und Chl-a gemäß Tabelle 5-2. Als Grundlage dienen die Daten der Messkampagne vom 04.09.2018 sowie die analytischen Ergebnisse im Labor der HSA.*

Gewässerinhaltsstoff	Gesamteisen	Eisen(II)	Eisen(III)	Sulfat	Chl-a
Wellenlänge [nm]	770	685	770	770	706
Bestimmtheitsmaß (R^2)	0,35	0,27	0,35	0,27	0,51

Anhand von Tabelle 5-3 ist die stärkste Korrelation von Gesamteisen, Eisen(III) und Sulfat zum Wellenlängenbereich bei 770 nm zu erkennen. Dieser Bereich weist gemäß Doxaran et al. (2002) eine erhöhte Rückstreuung aufgrund von TSM auf. Weiterhin weist Eisen(II) eine Korrelation von $R^2 = 0,27$ zur Wellenlänge 685 nm auf. Diese Wellenlänge ist gemäß (Gordon 1979) der Fluoreszenz von Chl-a zuzuordnen. Außerdem weist Chl-a die stärkste Korrelation mit $R^2 = 0,51$ zur Wellenlänge bei 706 nm auf. Gemäß Dekker (1993, S. 135) ist diese jedoch durch Streuungen von TSM gekennzeichnet.

In Abbildung 5-5 sind fünf Spektren der Messstellen vom 22.09.2019 im Wellenlängenbereich von 440 bis 1.400 nm dargestellt. In Analogie zur Abbildung 5-4 weist der Bereich zwischen 560 und 680 nm eine erhöhte Reflektanz auf. Allerdings ist ab 1.000 nm kein Reflektanz-Wert größer 2 % ersichtlich.

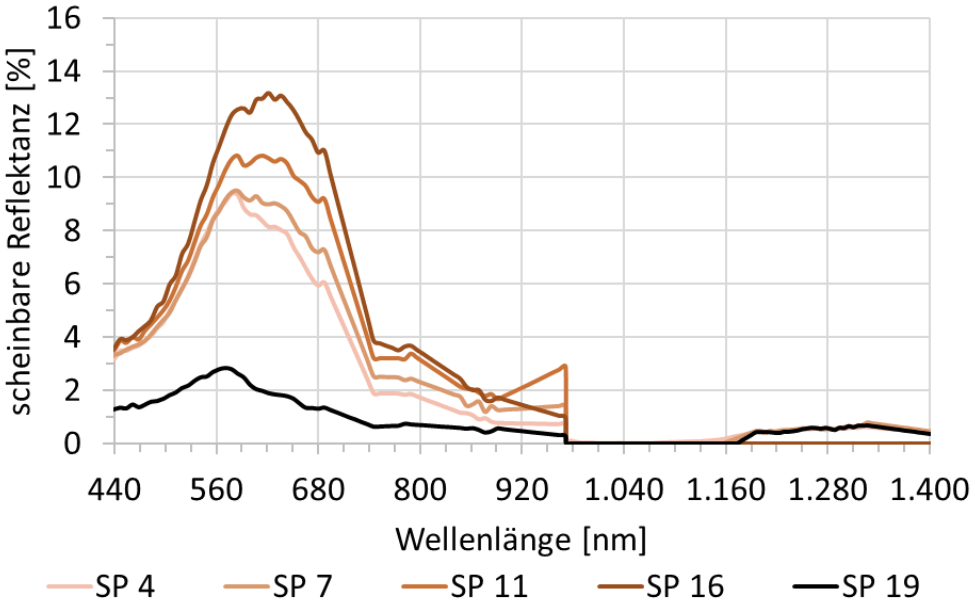

***Abbildung 5-5**: Darstellung der scheinbaren Reflektanz [%] im Wellenlängenbereich von 440 bis 1.400 nm entsprechend den Messstellen vom 22.09.2019. Die dazugehörigen Konzentrationsangaben von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Chl-a sind in Tabelle 5-4 zu finden.*

In Tabelle 5-4 sind die Konzentrationen von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat und Chl-a der Messstellen von Abbildung 5-5 angegeben.

***Tabelle 5-4**: Auflistung der gemessenen Konzentrationen der Messstellen in Abbildung 5-5. Die Bestimmung der gelisteten Konzentrationen erfolgte im Labor des IGB.*

SP ID	SP 4	SP 7	SP 11	SP 16	SP 19
Gesamteisen [mg/L]	5,70	7,00	3,90	3,20	0,60
Eisen(II) [mg/L]	4,53	5,28	1,89	0,31	<0,05
Eisen(III) [mg/L]	1,17	1,72	2,01	2,89	-
Sulfat [mg/L]	369	336	420	398	430
Chl-a [µg/L]	10,64	10,2	7,18	8,66	10,39

Anhand der Informationen von Abbildung 5-5 und Tabelle 5-4 ist deutlich zu erkennen, dass die Reflektanz im Wellenlängenbereich von 560 bis 700 nm mit zunehmender Eisen(III)-Konzentration ansteigt. Dies ist auch anhand der Korrelation von $R^2 = 0,78$ mit der Wellenlänge bei 675 nm zu erkennen (s. Tabelle 5-5). Weiterhin beträgt die Korrelation zur Wellenlänge 675 nm von Gesamteisen mit $R^2 = 0,61$ und Eisen(II) mit $R^2 = 0,66$. Der kausale Zusammenhang von Chl-a zu dieser Wellenlänge liegt bei $R^2 = 0,55$. Gemäß Haardt und Maske (1987) erfolgt bei 675 nm die maximale Absorption durch Chl-a. Dies ist auch anhand der Simulationen in Abbildung 3-7 und Abbildung 3-8 (s. Kapitel 3.1.3) ersichtlich. Allerdings ist der Wellenlängenbereich zwischen 650 und 706 nm zusätzlich von Streuungen durch TSM geprägt (Anderson und Robbins 1998; Dekker 1993, S. 135; Williams et al. 2002).

Tabelle 5-5: Angabe des größten Bestimmtheitsmaßes (R^2) je Gewässerinhaltsstoff zu den einzelnen Wellenlängen aus Tabelle I-7 in Kapitel I.II. Zu den Gewässerinhaltsstoffen zählen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat und Chl-a. Als Grundlage dienen die Daten der Messkampagne vom 22.09.2018 und die analytischen Ergebnisse des IGB.

Gewässerinhaltsstoff	Gesamteisen	Eisen(II)	Eisen(III)	Sulfat	Chl-a
Wellenlänge [nm]	675	675	675	675	675
Bestimmtheitsmaß (R^2)	0,61	0,66	0,78	0,28	0,55

Anhand der durchgeführten Spektralanalysen konnte aufgezeigt werden, dass die Rückstreuung des Gewässers in einem deutlichen Zusammenhang zur Eisen(III)-Konzentration steht. Dadurch ist die Identifizierung spezifischer Spektraleigenschaften der übrigen Gewässerinhaltsstoffe nur in geringem Maße möglich, da es unter Umständen zur Überlappung dieser kommen kann. Weiterhin sind einzelne aufgezeigte Wellenlängen bereits in Indizes der Literatur integriert, sodass bei der Entwicklung weiterer Indizes insbesondere der Wellenlängenbereich zwischen 400 und 500 nm sowie die Wellenlängen bei 580 nm und 650 nm berücksichtigt wurden. Die entwickelten Indizes weisen folgende Formen auf:

$$\boldsymbol{Rt - Index = \frac{R_{RS}(x_1) - R_{RS}(x_2)}{R_{RS}(x_1) + R_{RS}(x_2)}} \qquad \textbf{Gl. 5-9}$$

$$\boldsymbol{Rt - Index = \frac{R_{RS}(x_1) - R_{RS}(x_2)}{R_{RS}(x_3) + R_{RS}(x_2)}} \qquad \textbf{Gl. 5-10}$$

$$\boldsymbol{Rt - Index = \frac{R_{RS}(x_1) - R_{RS}(x_2)}{R_{RS}(x_3) - R_{RS}(x_2)}} \qquad \textbf{Gl. 5-11}$$

$$\boldsymbol{Slp - Index = \frac{R_{RS}(x_2) - R_{RS}(x_1)}{x_2 + x_1}} \qquad \textbf{Gl. 5-12}$$

$R_{RS}(x_i)$: Reflektanz der Wellenlänge x_i

x_i: Wellenlänge i

Der Ratio von Gl. 5-9 basiert auf den NDWI nach McFEETERS (1996) (Gl. II-1) und weist entsprechend einen Wertebereich zwischen -1 und 1 auf. Die Gleichungen 5-10 und 5-11 nutzen drei verschiedene Wellenlängen zur Bestimmung eines Indexwertes. Weiterhin wurden verschiedene Steigungen (Slp) nach Gl. 5-12 berechnet. Eine Auflistung aller erstellten Indizes ist im Kapitel I.II (Anlage) auf Seite 126 f. vorzufinden.

6. Ergebnisse und Diskussion

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Messkampagnen vom 04.09.2018 und 22.09.2019 präsentiert und diskutiert. Weiterhin werden Untersuchungen bezüglich der Genauigkeit der analytischen Ergebnisse sowie der entwickelten Ableitungsmodelle durchgeführt. In Kapitel 6.1 erfolgt die Validierung der einzelnen Messkampagnen anhand der entsprechenden In situ-Daten je Labor. Demzufolge werden gemäß der vorgestellten Vorgehensweise (s. Kapitel 2) die gleichen chemischen In situ-Daten zur Entwicklung und Validierung der Ableitungsalgorithmen herangezogen.

Die Evaluierung der entwickelten Ableitungsmodelle erfolgte mittels der Kreuzvalidierung (s. Kapitel 6.2). Ziel der Kreuzvalidierung ist die Prüfung der Übertragbarkeit der Regressionsalgorithmen und der Identifizierung von Abhängigkeiten.

Die Präsentation der Verteilungskarten der Wasserinhaltsstoffe erfolgt im Kapitel 6.3 anhand der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit je Messkampagne. Im Mittelpunkt der Untersuchungen stehen die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat. Auf die Inhaltsstoffe DOC, TOC und Chl-a wird Bezug genommen, jedoch werden diese nicht im Detail beschrieben. An entsprechender Stelle wird auf die Anlage verwiesen.

6.1. Validierung

Gemäß dem vorgestellten Verfahren (s. Kapitel 2) werden zur Entwicklung und Validierung die gleichen In situ-Daten verwendet, welche nachfolgend nach der Messkampagne und dem Labor unterschieden werden. Weiterhin kann die Messunsicherheit der In situ-Daten bestimmt werden, da die analytischen Verfahren der Labore sowie die Probeentnahmestellen der HSA und des IGB Überschneidungen aufweisen.

Gemäß Claustre et al. (2004) können die analytischen Messergebnisse anhand der relativen prozentualen Differenz (RPD) (Gl. 6-1) verglichen werden:

$$RPD = \mathbf{100} * \frac{P_i^j - \overline{P_i}}{\overline{P_i}} \qquad \textbf{Gl. 6-1}$$

i: Probenentnahmestelle

j: Labor

P: Beobachtung im Labor

$\overline{P}$: Mittelwert der Laborbeobachtungen

Gemäß McKee et al. (2014) ergibt sich die Messunsicherheit der chemischen Analyse anhand des größten RPD-Wertes innerhalb des Prognoseintervalls von 0,95 %. Die ermittelten

Messunsicherheiten werden anschließend mit den Genauigkeiten der Ableitungsmodelle verglichen. Nachfolgend werden die Validierungsergebnisse der Inhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beider Messkampagnen beschrieben.

Die ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von DOC, TOC sowie Chl-a der Messkampagne vom 04.09.2018 sind in Tabelle I-10 (Anlage I.III) aufgelistet. Die Regression zwischen dem Ableitungsmodell mit der höchsten Genauigkeit und den Inhaltsstoffen ist in Abbildung I-13 (Anlage I.III) abgebildet. Für die gemessenen Konzentrationen von DOC, TOC und Chl-a der Messkampagne vom 22.09.2019 sind die Regressionsmodelle in Tabelle I-14 (Anlage I.III) vorzufinden. Die Streudiagramme der Modelle mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit je Gewässerinhaltsstoff sind in Abbildung I-17 abgebildet.

Anhand der Messkampagne vom 04.09.2018 stehen 13 Gewässerproben der HSA bzw. sechs des IGB zur Entwicklung von Ableitungsmodellen zur Verfügung. Dies resultiert einerseits aus einer heterogenen Probenerfassung der Labore und andererseits aus einem hohen Bewölkungsgrad insbesondere im nördlichen Teil des Untersuchungsgebietes. Dadurch ist die Bestimmung der Messunsicherheiten zwischen den Laboren mittels der RPD nicht durchführbar. Dementsprechend ist auch ein Vergleich der ermittelten Genauigkeiten der Ableitungsmodelle nicht möglich. Aus diesem Grund erfolgte die Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den analytischen Ergebnissen der HSA. Die ermittelten Regressionsmodelle zur Ableitung der Inhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat mit der höchsten Genauigkeit sind in Tabelle 6-1 aufgeführt. Die dazugehörigen Regressionen sind in Abbildung I-12 abgebildet. Eine Auflistung aller entwickelten Regressionsmodelle ist in Tabelle I-9 (Anlage I.III) zu finden.

Tabelle 6-1: Auflistung der Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den chemischen Daten der HSA vom 04.09.2018. Dazu sind der Spektralindex, die Probenanzahl (N), das Bestimmtheitsmaß (R^2), die Regressionsart (Reg.), die Regressionsparameter α und ß, der RMSE und rRMSE je Wasserinhaltsstoff (WIS) aufgezeigt. Zu den Regressionsarten zählen exponentiell (Exp.) und logarithmisch (Log.).

WIS	Spektralindex	N	R^2	Reg.	α	β	RMSE	rRMSE
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,88	Log.	35,05	16,53	0,87	11,43 %
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,87	Log.	24,25	9,83	0,58	16,80 %
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,72	Log.	11,15	6,80	0,42	10,97 %
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,56	Exp.	-1,60	1862,43	39	7,26 %

In Tabelle 6-1 ist deutlich zu erkennen, dass die Ableitungsmodelle basierend auf dem Spektralindex R(701)/R(563) nach Gitelson et al. (1993) die höchste Genauigkeit aufweisen. Obwohl Gitelson et al. (1993) diesen Index zur Ableitung von Chl-a heranzogen, so weisen die einzelnen Wellenlängen auch eine Korrelation zur TSM-Konzentration auf (Dekker 1993, S. 135; Gitelson et al. 1993). Wie in Kapitel 5.3 beschrieben, weisen die ausgewählten Spektren weiterhin einen Zusammenhang zur Gesamteisen- bzw. Eisen(III)-Konzentration auf. Demzufolge wird die Gewässerfärbung hauptsächlich von der Eisenkonzentration geprägt. Die Verwendung eines einzelnen Spektralindex als Basis diverser Ableitungsmodelle ist durch die datengetriebene Bestimmung der spezifischen Regressionskoeffizienten nicht auszuschließen (Mouw et al. 2015).

Am 22.09.2019 erfolgte eine homogene Erfassung der In situ-Daten beider Labore, wodurch für einen Vergleich der Daten eine große Anzahl an Überschneidungen zur Verfügung stehen. Dies ermöglicht die Bestimmung der Messunsicherheit der In situ-Daten nach Gl. 6-1 (s. Tabelle 6-2). In Tabelle I-11 (Anlage I.III) sind die berechneten RPD-Werte je Messstelle im Abdeckungsgebiet der Hyperspektraldaten für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat aufgelistet, wodurch weitere Fehlereinflüsse reduziert werden. Weiterhin sind die resultierenden APD-Werte angegeben. Die ermittelten Prognoseintervalle 95 % je Gewässerinhaltsstoff sind in Abbildung I-14 (Anlage I.III) vorzufinden. Die Gewässerinhaltsstoffe DOC, TOC und Chl-a sind von dieser Analyse ausgenommen, da diese nicht in beiden Laboren bestimmt wurden.

Tabelle 6-2: Ermittelte Messunsicherheit anhand der analytischen Ergebnisse der Labore der Messkampagne vom 22.09.2019 mittels der Probeentnahmestellen im Abdeckungsgebiet der Hyperspektraldaten. Weiterhin ist die Anzahl der homologen Messungen angegeben.

Gewässerinhaltsstoff	Gesamteisen	Eisen(II)	Eisen(III)	Sulfat
Messunsicherheit [%]	± 13,18	± 51,62	± 14,50	± 2,70
Anzahl	15	13	13	14

Die ermittelte Messunsicherheit für Gesamteisen beträgt ± 13,18 % nach der beschriebenen Vorgehensweise. Obwohl die Probenahmestelle 4 außerhalb des Prognoseintervalls 95 % liegt (s. Abbildung I-14 (Anlage I.III)), weist diese keinen Einfluss auf die Messunsicherheit gemäß McKee et al. (2014) auf. Ein Grund dafür könnte die Verjüngung des Prognoseintervalls im Bereich des Mittelwertes sein (s. Abbildung I-14 (Anlage I.III)). Die Messunsicherheit für Eisen(III) beträgt ± 14,50 %. Die analysierten Eisen(II)-Konzentrationen weisen eine Messunsicherheit von ± 51,62 % auf. Die niedrigste Messunsicherheit zeigt die Sulfatkonzentration mit ± 2,70 % auf.

Nachfolgend stehen die Ableitungsergebnisse der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat je Labor im Fokus. Die ermittelten Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit sind in Tabelle 6-3 basierend auf den analytischen Ergebnissen der HSA angegeben. Die entsprechenden Streudiagramme sind in Abbildung I-15 (Anlage I.III) vorzufinden. Eine Auflistung aller ermittelten Regressionsmodelle ist in Tabelle I-12 (Anlage I.III) zu finden. Die Filterung mittels der 2,5-fachen Standardabweichung resultierte in einer geringeren Probenanzahl zur Ableitung der Sulfatkonzentration.

Tabelle 6-3: Auflistung der Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den analytischen Ergebnissen der HSA vom 22.09.2019. Dazu sind der Spektralindex, die Anzahl (N), das Bestimmtheitsmaß (R^2), die Regressionsart (Reg.), die Regressionsparameter α und β, der RMSE und rRMSE je Wasserinhaltsstoff (WIS) angegeben. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.) und potenziell (Pot.).

WIS	Spektralindex	N	R^2	Reg.	α	β	RMSE	rRMSE
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,54	Lin.	-43,48	25,91	1,05	17,70 %
Eisen(II) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(580)$	15	0,79	Exp.	-0,86	31,15	1,17	46,98 %
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	15	0,59	Exp.	-4,47	833,15	0,68	19,68 %
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(520)}{R(580)+R(520)}$	14	0,62	Pot.	1,00	1615,59	22	5,41 %

Die in Tabelle 6-3 gelisteten Spektralindizes basieren auf der Spektralanalyse in Kapitel 5.3, welche insbesondere den Absorptionsbereich von 400 bis 520 nm und die erhöhte Streuung im Wellenbereich von 560 bis 700 nm berücksichtigen.

Das Modell zur Ableitung von Eisen(II) weist mit einem RMSE von 1,17 mg/L eine höhere Genauigkeit um 9 % im Vergleich zur ermittelten Messunsicherheit in Tabelle 6-2 auf. In Bezug auf die Messunsicherheit für Gesamteisen zeigt das Ableitungsmodell eine geringere Genauigkeit mit 1,05 mg/L um 34 % auf. Die Genauigkeit des Modells zur Ableitung von Eisen(III) mit 0,68 mg/L ist um 35 % geringer. Die größte Abnahme der Genauigkeit weist das Modell zur Ableitung der Sulfatkonzentration mit 22 mg/L um 100 % auf.

In Tabelle 6-4 sind die ermittelten Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit basierend auf den analytischen Ergebnissen des IGB aufgelistet. Die entsprechenden Streudiagramme sind in Abbildung I-16 abgebildet (Anlage I.III). Eine Auflistung aller ermittelten Regressionsmodelle ist in Tabelle I-13 (Anlage I.III) zu finden.

Tabelle 6-4: Auflistung der Regressionsmodelle mit der höchsten Genauigkeit zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den chemischen Daten des IGB vom 22.09.2019. Dazu sind der Spektralindex, die Anzahl (N), das Bestimmtheitsmaß (R^2), die Regressionsart (Reg.), die Regressionsparameter α und ß, der RMSE und rRMSE je Wasserinhaltsstoff (WIS) aufgezeigt. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.) und potenziell (Pot.).

WIS	Spektralindex	N	R^2	Reg.	α	β	RMSE	rRMSE
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	15	0,64	Lin.	55,86	30,14	0,93	21,91 %
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	13	0,78	Lin.	-59,43	29,78	0,95	35,33 %
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,76	Exp.	2,81	0,24	0,22	11,86 %
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	15	0,53	Pot.	1,07	1033,46	21	5,31 %

Die meisten gelisteten Spektralindizes in Tabelle 6-4 basieren ebenfalls auf der Spektralanalyse in Kapitel 5.3. Die Ausnahme bildet das Ableitungsmodell von Eisen(III), welches auf einem Spektralindex von Gitelson et al. (1993) basiert, wie in Tabelle 6-1.

Verglichen mit den ermittelten Messunsicherheiten der chemischen Daten (s. Tabelle 6-2), weisen die Modelle zur Ableitung der Gesamteisen- und Sulfatkonzentrationen eine geringere Genauigkeit um 66 bzw. 97 % auf. Die Genauigkeiten der Regressionsmodelle zur Ableitung von Eisen(II) und Eisen(III) sind dagegen um 32 bzw. 18 % höher.

Anhand der durchgeführten Validierung konnte beobachtet werden, dass nur sieben von 21 durchgeführten Regressionsanalysen das höchste Bestimmtheitsmaß und auch die höchste Ableitungsgenauigkeit aufzeigten. Wobei bereits fünf dieser Regressionsmodelle auf dem Datensatz vom 04.09.2018 basieren, welcher aufgrund von Wolkenschatten nicht das gesamte Untersuchungsgebiet abdeckt. Dagegen wiesen ein Großteil der erstellten Regressionsmodelle mit dem höchsten Bestimmtheitsmaß nicht die höchste Genauigkeit auf (s. Kapitel I.III (Anlage)). Dies könnte mit der Neigung zur Überspezialisierung empirischer Modelle zusammenhängen (s. Kapitel 3.3.2).

Außerdem zeigte die durchgeführte Validierung, dass zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat vom 04.09.2018 die analytischen Ergebnisse der HSA am geeignetsten waren. Weiterhin zeigten die Messungen des IGB eine höhere absolute Ableitungsgenauigkeit bezüglich der Messkampagne vom 22.09.2019 auf. Basierend auf den jeweils ermittelten höchsten Ableitungsgenauigkeiten wurde der Varianzkoeffizient nach Gl. 6-2 gemäß Bendel et al. (1989) und Sheret (1984) berechnet (s. Tabelle 6-5):

$$Varianzkoeffizient\ [\%] = \frac{Standardabweichung}{Mittelwert} * 100 \qquad \textbf{Gl. 6-2}$$

Tabelle 6-5: Auflistung der Varianzkoeffizienten je Gewässerinhaltsstoff anhand der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Messkampagnen von 2018 und 2019.

Gewässerinhaltsstoff	Varianzkoeffizient [%]
Gesamteisen	3,33
Eisen(II)	24,18
Eisen(III)	31,25
Sulfat	30,00
DOC	50,00
TOC	60,18
Chl-a	21,74

Anhand von Tabelle 6-5 ist zu erkennen, dass die Ableitung von Gesamteisen den geringsten Varianzkoeffizienten mit 3,33 % aufwies. Dagegen zeigen die Varianzkoeffizienten von Eisen(II) mit 24,18 % und Eisen(III) mit 31,25 % eine größere Streuung anhand der durchgeführten Ableitungen auf. Weiterhin hat der Varianzkoeffizient 30 % bei Sulfat, 50 % bei DOC und 21,74 % bei Chl-a betragen. Die größte Streuung war anhand der Ableitung von TOC mit einem Varianzkoeffizienten von 60,18 % zu beobachten.

6.2. Evaluierung

Zur Evaluierung der erstellten Ableitungsmodelle wurde die Methode der Kreuzvalidierung verwendet. Diese dient der Bestimmung der Prognosefähigkeit eines Ableitungsmodells (Shao 1993), wodurch auch Rückschlüsse auf die Robustheit möglich sind. Dazu werden alle erfassten In situ-Daten (N) in zwei Gruppen unterteilt. Die erste Gruppe N_C wird zur Entwicklung der Modelle verwendet. Dabei wird das Modell bestmöglich an die Daten angepasst. Die zweite Gruppe N_V enthält In situ-Daten, welche zur Abschätzung der Prognosefähigkeit reserviert wurden. Gemäß Shao (1993) stehen die Datensätze im folgenden Zusammenhang:

$$N = N_C + N_V \qquad \textbf{Gl. 6-3}$$

N: Gesamtanzahl der In situ-Daten

N_C: Probenanzahl zur Modellentwicklung

N_V: Probenanzahl zur Modellvalidierung

Dementsprechend erfolgte zunächst die Anpassung der Vorgehensweise nach Kapitel 2 zur Durchführung der Kreuzvalidierung (s. Abbildung 6-1). Entsprechend der Gl. 6-3 wurden die Datensätze nach Entwicklung und Validierung getrennt.

Gemäß Ritchie et al. (2003) ist die Übertragung der Regressionsmodelle nur möglich, wenn die Gewässerinhaltsstoffe vergleichbar sind. Demnach ist die Evaluierung unabhängig von den Spektraldaten.

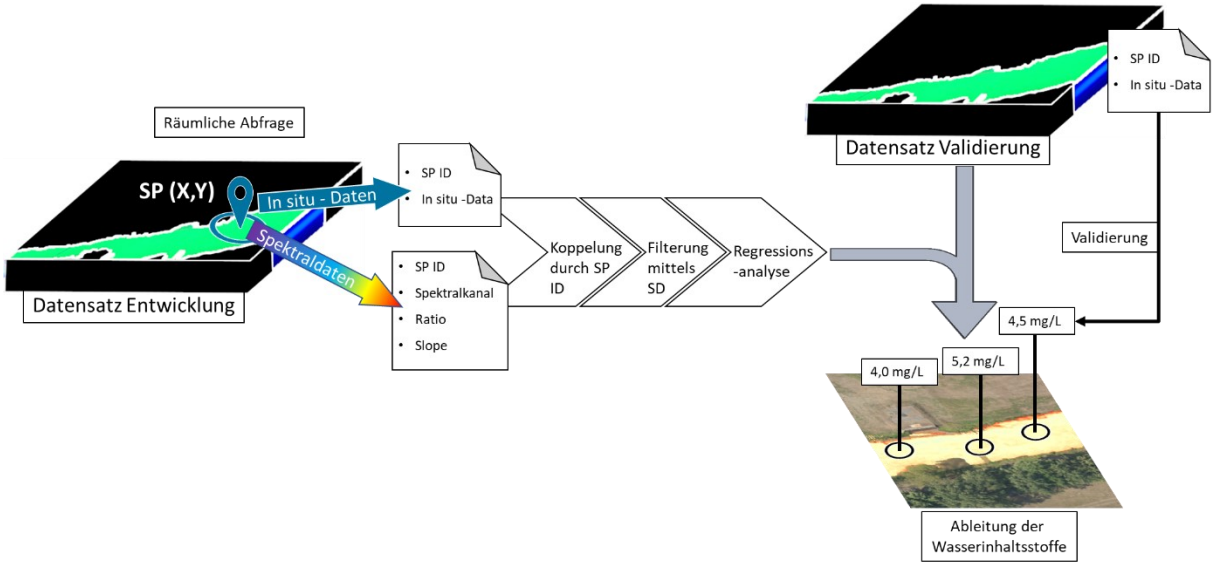

Abbildung 6-1: Anpassung der Vorgehensweise nach Kapitell 2 zur Durchführung der Kreuzvalidierung. Die Prozessierung beider hyperspektralen Rasterdaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

Die In situ-Daten können basierend auf Kapitel 6.1 mittels der zeitlichen Erfassung und des Analytiklabors in drei Gruppen unterteilt werden, wodurch eine Kreuzvalidierung anhand der analytischen Ergebnisse vom 04.09.2018 der HSA (18HSA) und vom 22.09.2019 beider Labore (19HSA und 19IGB) anwendbar sind.

Zur Prüfung der Vergleichbarkeit der Gewässerinhaltsstoffe wurde ein Signifikanztest auf Grundlage des Zweistrichproben-t-Tests respektive Welch-Test mit einem Signifikanzniveau von $\alpha = 0{,}05$ durchgeführt. Voraussetzung beider Verfahren sind eine Normalverteilung der Stichproben sowie die Varianzgleichheit. Sollte die Nullhypothese zutreffen, ist der p-Wert größer als das Signifikanzniveau. Bei einem kleineren p-Wert ist die Nullhypothese zu verwerfen und die Alternativhypothese anzunehmen. In Tabelle 6-6 sind die Ergebnisse des Signifikanztests angegeben. Dazu wurden nur die genannten Datensätze zur Evaluierung herangezogen. Weiterhin liegt der Schwerpunkt auf den Gewässerinhaltsstoffen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat.

Tabelle 6-6: Auflistung der p-Werte der Signifikanztests zwischen den analytischen Ergebnissen je Gewässerinhaltsstoff vom 04.09.2018 der HSA (18HSA) und vom 22.09.2019 der HSA (19HSA) und des IGB (19IGB).

Nullhypothese	Gewässerinhaltsstoff ist vergleichbar
Alternativhypothese	Gewässerinhaltsstoff ist nicht vergleichbar
Signifikanzniveau α	0,05

	p-Wert			
	Gesamteisen	**Eisen(II)**	**Eisen(III)**	**Sulfat**
18HSA – 19HSA	0,14	0,66	0,13	0,00
18HSA – 19IGB	0,00	0,73	0,00	0,00
19HSA – 19IGB	0,03	0,92	0,00	0,93

In Tabelle 6-6 weist nur Eisen(II) bei allen drei Signifikanztests einen p-Wert größer α auf. Demzufolge ist die Nullhypothese anzunehmen. Weiterhin weist der Test zwischen den Datensätzen von 18HSA und 19HSA Ähnlichkeiten zwischen den Gewässerinhaltsstoffen Gesamteisen und Eisen(III) auf. Bezüglich der Sulfatkonzentration sind die gemessenen Konzentrationen nur zwischen den analytischen Ergebnissen von 2019 vergleichbar. Demzufolge sollte die Übertragung der Regressionsmodelle von 18HSA zu 19HSA und invers hohe Ableitungsgenauigkeiten für die Inhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II) und Eisen(III) ergeben. Bei einer Kreuzvalidierung zwischen 18HSA und 19IGB ist nur bei der Ableitung von Eisen(II) eine hohe Genauigkeit zu erwarten. Weiterhin sollte nach Tabelle 6-6 eine Modellübertragung zwischen 19HSA und 19IGB nur bei Eisen(II) und Sulfat positiv verlaufen.

In Tabelle 6-7 sind die Ergebnisse der Kreuzvalidierung basierend auf den entwickelten Ableitungsalgorithmen von 18HSA angeführt. Die Validierung erfolgte anhand der analytischen Ergebnisse von 19HSA und 19IGB, wodurch die Validierung anhand der zeitlichen Differenz der Probenentnahme durchgeführt wurde. Weiterhin erfolgte die Genauigkeitsanalyse unter der Berücksichtigung der Verwendung gleicher analytischer Genauigkeiten des Labors der HSA sowie abweichender Genauigkeiten durch das Labor des IGB.

Die Validierungsdaten von 19HSA wiesen eine deutliche Abnahme der Ableitungsgenauigkeiten im Vergleich zur Tabelle 6-3 (Kapitel 6.1) auf. Die geringste Reduzierung um 9 % erfolgte anhand des Regressionsmodells zur Ableitung von Eisen(II). Die größte Abnahme mit 830 % hat das Ableitungsmodell von Sulfat betragen.

Anhand der Kreuzvalidierung mittels der analytischen Ergebnisse von 19IGB war ebenfalls eine deutliche Abnahme der Genauigkeit in Bezug zur Tabelle 6-4 (Kapitel 6.1) zu beobachten. Das Regressionsmodell zur Ableitung von Sulfat zeigte ebenfalls die größte Reduktion der

Genauigkeit um 824 % auf. Die geringste Genauigkeitsabnahme mit 242 % hat das Ableitungsmodell von Eisen(II) aufgezeigt.

Tabelle 6-7: Auflistung der entwickelten Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit anhand der Daten von 18HSA unter Angabe des Spektralindex, der Anzahl (N_C), des Bestimmtheitsmaßes (R^2) und der Regressionsart je Wasserinhaltsstoff (WIS). Zur Validierung wurden die Laborergebnisse von 19HSA und 19IGB herangezogen. Diesbezüglich sind die Anzahl (N_V), der RMSE und rRMSE angegeben. Eine detaillierte Übersicht aller Ergebnisse der Kreuzvalidierung ist in Tabelle I-15 (Anlage I.III) vorzufinden.

Modell	Entwicklung				Validierung		
Datensatz	18HSA				19HSA		
WIS	Spektralindex	N_C	R^2	Regressionsart	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,77	logarithmisch	15	3,70	62,27
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,79	logarithmisch	13	3,35	120,92
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,56	logarithmisch	13	0,75	21,49
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,56	logarithmisch	14	201	50,29
Modell	Entwicklung				Validierung		
Datensatz	18HSA				19IGB		
WIS	Spektralindex	N_C	R^2	Regressionsart	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,77	logarithmisch	15	3,84	90,10
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,79	logarithmisch	13	3,25	120,70
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	12	0,56	logarithmisch	13	1,07	57,21
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,56	logarithmisch	14	197	49,06

Die deutlich geringeren Ableitungsgenauigkeiten im Vergleich zum Kapitel 6.1 könnten in der geringeren Anzahl an verfügbaren Daten zur Entwicklung des Ableitungsmodells begründet sein. Denn gemäß der beschriebenen Prozessierung der Hyperspektraldaten (s. Kapitel 3.1 und II (Anlage)) wurden alle Schattenbereiche maskiert, welches auch die Wolkenschatten einschließen (s. Kapitel II (Anlage)). Demzufolge besteht die Möglichkeit, dass die verwendbaren Daten nicht den gesamten Wertebereich der chemischen und spektralen Daten abdecken und in einer geringeren Genauigkeit resultieren.

In Tabelle 6-8 sind die Ergebnisse der Kreuzvalidierung basierend auf den entwickelten Ableitungsalgorithmen von 19HSA aufgelistet. Die Validierung erfolgte anhand der analytischen Ergebnisse von 18HSA und 19IGB. Dadurch wurden einerseits die Transferierung

der Ableitungsmodelle anhand der zeitlichen Differenz der Probenanalyse innerhalb der analytischen Genauigkeit desselben Labors und andererseits ein direkter Vergleich der synchron erhobenen Gewässerproben anhand verschiedener Laborergebnisse durchgeführt.

Tabelle 6-8: Angabe der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit der Kreuzvalidierung. Die Modellentwicklung erfolgte anhand der Daten von 19HSA mit Angabe des Spektralindex, der Anzahl (N_C), des Bestimmtheitsmaßes (R^2) und der Regressionsart je Wasserinhaltsstoff (WIS). Zur Validierung wurden die Laborergebnisse von 18HSA und 19IGB herangezogen. Diesbezüglich sind die Anzahl (N_V), der RMSE und rRMSE angegeben. Eine Übersicht aller Ergebnisse der Kreuzvalidierung ist in Tabelle I-15 (Anlage I.III) vorzufinden.

Modell	Entwicklung				Validierung		
Datensatz	19HSA				18HSA		
WIS	Spektralindex	N_C	R^2	Regressionsart	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(455)+R(580)}$	15	0,48	linear	13	3,27	42,96
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	15	0,73	exponentiell	13	2,86	82,90
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.250)}{R(650)-R(1.250)}$	15	0,51	exponentiell	13	1,92	43,63
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(520)}{R(580)+R(520)}$	14	0,62	potenziell	13	134,82	25,01
Modell	Entwicklung				Validierung		
Datensatz	19HSA				19IGB		
WIS	Spektralindex	N_C	R^2	Regressionsart	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,54	linear	15	1,67	39,26
Eisen(II) [mg/L]	$R(694) \rightarrow R(716)$	15	0,79	exponentiell	13	1,20	44,56
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,54	exponentiell	13	0,61	32,87
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	14		potenziell	15	22,61	5,67

Die Validierung mittels der analytischen Ergebnisse von 18HSA wies eine deutliche Abnahme der Ableitungsgenauigkeit je Gewässerinhaltsstoff in Bezug zur Tabelle 6-1 (s. Kapitel 6.1) auf. Die größte Reduzierung der Genauigkeit um 393 % ist anhand des Regressionsmodells zur Ableitung der Eisen(II)-Konzentration zu beobachten. Die geringste Genauigkeitsabnahme um 244 % erfolgte anhand des Modells zur Bestimmung von Sulfat. Weiterhin wies die Kreuzvalidierung anhand von 18HSA mit Ausnahme der Eisen(III)-Ableitung eine höhere Genauigkeit als invers auf (s. Tabelle 6-8). Dies könnte mit der größeren Anzahl an Daten zur Entwicklung als zur Validierung der Ableitungsmodelle zusammenhängen.

Die Evaluierung anhand der Daten von 19IGB zeigte im Vergleich zur durchgeführten Validierung (Tabelle 6-4 (s. Kapitel 6.1)) ebenfalls eine Reduzierung auf. Die größte Abnahme mit 177 % war anhand des Ableitungsmodells von Eisen(III) zu beobachten. Weiterhin weist das Ableitungsmodell von Sulfat die niedrigste Genauigkeitsabnahme um 7 % auf. Aufgrund der synchronen Erfassung der In situ-Daten war anhand der analytischen Ergebnisse des IGB eine geringere Genauigkeitsabnahme bezüglich Kapitel 6.1 zu beobachten.

In Tabelle 6-9 sind die Ergebnisse der Kreuzvalidierung basierend auf den entwickelten Ableitungsalgorithmen von 19IGB aufgelistet. Zur Validierung wurden die analytischen Ergebnisse von 18HSA und 19HSA herangezogen.

Tabelle 6-9: Angabe der entwickelten Ableitungsmodelle anhand der Daten von 19IGB mit der höchsten Genauigkeit der Kreuzvalidierung. Dazu sind der Spektralindex, die Anzahl (N_C), das Bestimmtheitsmaß (R^2) und die Regressionsart angeführt. Die Laborergebnisse der HSA von 2018 und 2019 wurden zur Validierung herangezogen. Diesbezüglich sind die Anzahl (N_V), der RMSE und rRMSE je Wasserinhaltsstoff (WIS) angegeben. Eine Übersicht aller Ergebnisse der Kreuzvalidierung ist in Tabelle I-17 (Anlage I.III) vorzufinden.

Modell	Entwicklung				Validierung		
Datensatz	19IGB				18HSA		
WIS	Spektralindex	N_C	R^2	Regressionsart	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$R(694) - R(716)$	15	0,64	exponentiell	13	3,86	50,77 %
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650) - R(455)}{R(650) + R(455)}$	13	0,65	exponentiell	12	2,92	84,59
Eisen(III) [mg/L]	$R(675)$	13	0,78	linear	13	2,65	60,17
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580) - R(520)}{R(580) + R(520)}$	15	0,50	exponentiell	13	134,42	24,94
Modell	Entwicklung				Validierung		
Datensatz	19IGB				19HSA		
WIS	Spektralindex	N_C	R^2	Regressionsart	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455) - R(580)}{R(520) + R(580)}$	15	0,62	linear	15	1,67	28,13
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(455) - R(580)}{R(480) + R(580)}$	13	0,70	linear	15	1,07	42,94
Eisen(III) [mg/L]	$R(675)$	13	0,78	linear	15	1,69	48,92
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580) - R(480)}{R(580) + R(480)}$	15	0,53	potenziell	14	22,35	5,60

In Bezug auf die Ableitungsgenauigkeiten von 18HSA in Tabelle 6-1 (s. Kapitel 6.1) erfolgte eine deutliche Reduzierung anhand der durchgeführten Kreuzvalidierung. Die stärkste Abnahme

mit 448 % war anhand der Ableitung von Eisen(III) zu beobachten. Die Ableitung von Sulfat zeigte die geringste Reduzierung der Genauigkeit mit 244 % auf. Allerdings stiegen die Ableitungsgenauigkeiten im Vergleich zur Kreuzvalidierung in Tabelle 6-7 bis auf von Eisen(III) an.

Die Ergebnisse der Kreuzvalidierung mittels der Daten von 19HSA zeigten eine höhere Ableitungsgenauigkeit von Eisen(II) um 9 % im Vergleich zur Tabelle 6-3 (s. Kapitel 6.1) auf. Weiterhin erfolgte die größte Reduzierung der Genauigkeit um 149 % anhand der Ableitung von Eisen(III). Des Weiteren zeigte die Validierung der entwickelten Ableitungsmodelle mittels der Daten von 19HSA eine Steigerung der Genauigkeit bezüglich der Tabelle 6-8 auf. Die einzige Ausnahme bildete das Ableitungsmodell von Eisen(III).

Die durchgeführten Evaluierungen zeigten auf, dass eine Transferierung der Ableitungsalgorithmen auf einen anderen hyperspektralen Datensatz nur bedingt anwendbar ist. Gemäß den Signifikanztests in Tabelle 6-6 sind die Inhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II) und Eisen(III) und Sulfat basierend auf den Laboranalysen der HSA beider Messkampagnen zwar vergleichbar, jedoch waren deutliche Abnahmen der Ableitungsgenauigkeiten in Bezug zur Validierung mittels den Algorithmen zugehörigen In situ-Daten zu erkennen (s. Kapitel 6.1). In Analogie ist dies bei der Kreuzvalidierung der analytischen Ergebnisse der HSA von 2018 in Verbindung mit den Ergebnissen des IGB zu beobachten. Demzufolge ist anzunehmen, dass die Daten der Messkampagne vom 04.09.2018 aufgrund des geringen verwendbaren Abdeckungsgebietes der Hyperspektraldaten für eine Kreuzvalidierung nicht geeignet sind.

Die Evaluierung anhand der analytischen Ergebnisse beider Labore basierend auf der Probenentnahme vom 22.09.2019 zeigt ebenfalls mehrheitlich eine Reduzierung der Ableitungsgenauigkeiten auf, jedoch in einer geringeren Quantität. Eine Ausnahme bildet die Kreuzvalidierung von Eisen(II), welche eine Verbesserung um 9 % aufwies (s. Tabelle 6-9). In Tabelle 6-10 sind die ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Eisen(II) in Abhängigkeit der aufgezeigten Verfahren zur Entwicklung und Validierung der Regressionsmodelle aufgezeigt. Die Auflistung bezieht sich ausschließlich auf die erhobenen Daten vom 22.09.2019.

Tabelle 6-10: Zusammenfassung der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Eisen(II) in Abhängigkeit der aufgezeigten Verfahren zur Entwicklung und Validierung der Regressionsmodelle. Die verwendeten Daten wurden am 22.09.2019 erhoben.

Entwicklung	Validierung	Ableitungsgenauigkeit für Eisen(II)	
		RMSE [mg/L]	rRMSE [%]
19IGB	19IGB	0,95	35,33
19HSA	19HSA	1,17	46,98
19IGB	19HSA	1,07	42,94
19HSA	19IGB	1,20	44,56

Anhand der Genauigkeitsangaben in Tabelle 6-10 ist deutlich zu erkennen, dass die Entwicklung und Validierung des Regressionsmodells mittels der analytischen Ergebnisse des IGB die höchste absolute Genauigkeit mit 0,95 mg/L aufwies. Weiterhin ist in Tabelle 6-10 die Steigerung der Ableitungsgenauigkeit der Daten der HSA anhand der Kreuzvalidierung zu erkennen. Invers ist dies nicht zu beobachten. Eine präzise Beurteilung bezüglich der Robustheit der Ableitungsmodelle von Eisen(II) ist anhand der durchgeführten Untersuchungen nicht möglich.

Weiterhin sind in Tabelle 6-11 die Ergebnisse der Validierungen anhand der Sulfatkonzentrationen vom 22.09.2019 aufgelistet. Diesbezüglich ist eine hohe Robustheit der Ableitungsalgorithmen zu erkennen, da die ermittelten RMSE- und rRMSE-Werte nur im geringen Maß variieren. Allerdings sind die Ableitungsgenauigkeiten der Kreuzvalidierung weiterhin niedriger.

Tabelle 6-11: Überblick der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Sulfat in Abhängigkeit der aufgezeigten Verfahren zur Entwicklung und Validierung der Regressionsmodelle. Die verwendeten Daten wurden am 22.09.2019 erhoben.

Entwicklung	Validierung	Ableitungsgenauigkeit für Sulfat	
		RMSE [mg/L]	rRMSE [%]
19IGB	19IGB	21,18	5,31
19HSA	19HSA	21,57	5,41
19IGB	19HSA	22,35	5,60
19HSA	19IGB	22,61	5,67

Des Weiteren haben die Ergebnisse der Kreuzvalidierungen von Eisen(III) die größte Genauigkeitsabnahme aufgezeigt (s. Tabelle 6-12). Dies könnte in der analytischen Bestimmung von Eisen(III) begründet sein (s. Kapitel 4.2), wodurch Änderungen im Ableitungsalgorithmus zu erhöhten Ungenauigkeiten beitragen. Demnach ist von einer geringen Robustheit der Ableitungsmodelle von Eisen(III) auszugehen.

Tabelle 6-12: Übersicht der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Eisen(III) in Abhängigkeit der aufgezeigten Verfahren zur Entwicklung und Validierung der Regressionsmodelle. Die verwendeten Daten wurden am 22.09.2019 erhoben.

Entwicklung	Validierung	Ableitungsgenauigkeit für Eisen(III)	
		RMSE [mg/L]	rRMSE [%]
19IGB	19IGB	0,22	11,86
19HSA	19HSA	0,68	19,68
19IGB	19HSA	1,69	48,92
19HSA	19IGB	0,61	32,87

In Tabelle 6-13 sind die ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Gesamteisen anhand der analytischen Messergebnisse vom 22.09.2019 zusammengefasst.

Tabelle 6-13: Zusammenfassung der ermittelten Ableitungsgenauigkeiten von Gesamteisen in Abhängigkeit der aufgezeigten Verfahren zur Entwicklung und Validierung der Regressionsmodelle. Die verwendeten Daten wurden am 22.09.2019 erhoben.

Entwicklung	Validierung	Ableitungsgenauigkeit für Gesamteisen	
		RMSE [mg/L]	rRMSE [%]
19IGB	19IGB	0,93	21,91
19HSA	19HSA	1,05	17,70
19IGB	19HSA	1,67	28,13
19HSA	19IGB	1,67	39,26

Diesbezüglich ist die deutliche Abnahme der Ableitungsgenauigkeiten anhand der Kreuzvalidierungen zu erkennen. Demzufolge ist die Robustheit der spezifischen Regressionsmodelle als gering einzuschätzen. Weiterhin ist dadurch der deutliche Einfluss auf die Robustheit der Ableitungsmodelle von Eisen(III) zu erkennen, denn die Modelle zur Ableitung von Eisen(II) zeigten eine geringere Abnahme der Ableitungsgenauigkeit auf (s. Tabelle 6-10).

Unter Beachtung der durchgeführten Signifikanztests (Tabelle 6-6) wurden diese anhand der Daten der 22.09.2019 bestätigt. Gemäß den Tests sind nur die Konzentrationen von Eisen(II) und Sulfat vergleichbar. Dagegen weisen die analysierten Konzentrationen von Gesamteisen und Eisen(III) größere Unterschiede auf.

In Analogie zur durchgeführten Validierung (s. Kapitel 6.1) zeigten die Untersuchungen der Evaluierung ebenfalls mehrheitlich auf, dass ein hohes Bestimmtheitsmaß der Regressionsanalyse nicht zu einer hohen Ableitungsgenauigkeit beiträgt. Nur eine von 36 durchgeführten Kreuzvalidierungen wies eine Übereinstimmung auf.

6.3. Horizontalverteilung der Gewässerinhaltsstoffe in dem Fluss Spree

Nachfolgend werden die Verteilungskarten von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beider Messkampagnen basierend auf den Ergebnissen der durchgeführten Validierungen (s. Kapitel 6.1) beschrieben. Ein Verweis auf die Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a erfolgt im Text.

In Tabelle 6-14 sind die entwickelten empirischen Modelle mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit je Wasserinhaltsstoff der Messkampagne vom 04.09.2018 angegeben.

Tabelle 6-14: Auflistung der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit anhand der Daten vom 04.09.2018 unter Angabe des Wasserinhaltsstoffs (WIS), des Spektralindex, der Probenanzahl, des Bestimmtheitsmaßes (R^2), der Regression (Reg.), der Regressionsparameter α und β, des RMSE und des rRMSE. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.), logarithmisch (Log.) und potenziell (Pot.).

WIS	Spektralindex	N	R^2	Reg.	α	β	RMSE	rRMSE
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,88	Log.	35,05	16,53	0,87	11,43 %
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,87	Log.	24,25	9,83	0,58	16,80 %
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,72	Log.	11,15	6,80	0,42	10,97 %
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,56	Exp.	-1,60	1862,43	39,13	7,26 %
DOC [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	13	0,25	Pot.	1,51	9,10	0,69	21,45 %
TOC [mg/L]	$\frac{R(1.250)-R(850)}{R(1.250)+R(850)}$	13	0,48	Lin.	-3,47	3,50	0,45	9,54 %
Chl-a [µg/L]	$R(706)$	11	0,51	Pot.	1,39	0,00	0,63	22,20 %

Im Rahmen der Messkampagne wurden im Labor der HSA die Konzentrationen der Inhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat, DOC und TOC gemessen. Im Labor des IGB wurde die Chl-a-Konzentration bestimmt.

In Abbildung 6-2 sind die Ableitungsergebnisse für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den analytischen Ergebnissen der HSA im Rahmen der Messkampagne vom 04.09.2018 dargestellt. Die Ableitungsergebnisse von DOC, TOC und Chl-a sind in Abbildung I-21 und Abbildung I-22 (Anlage I.III) vorzufinden. In Abbildung I-18 (Anlage I.III) sind die Orte der ausgewählten Untersuchungsgebiete gekennzeichnet.

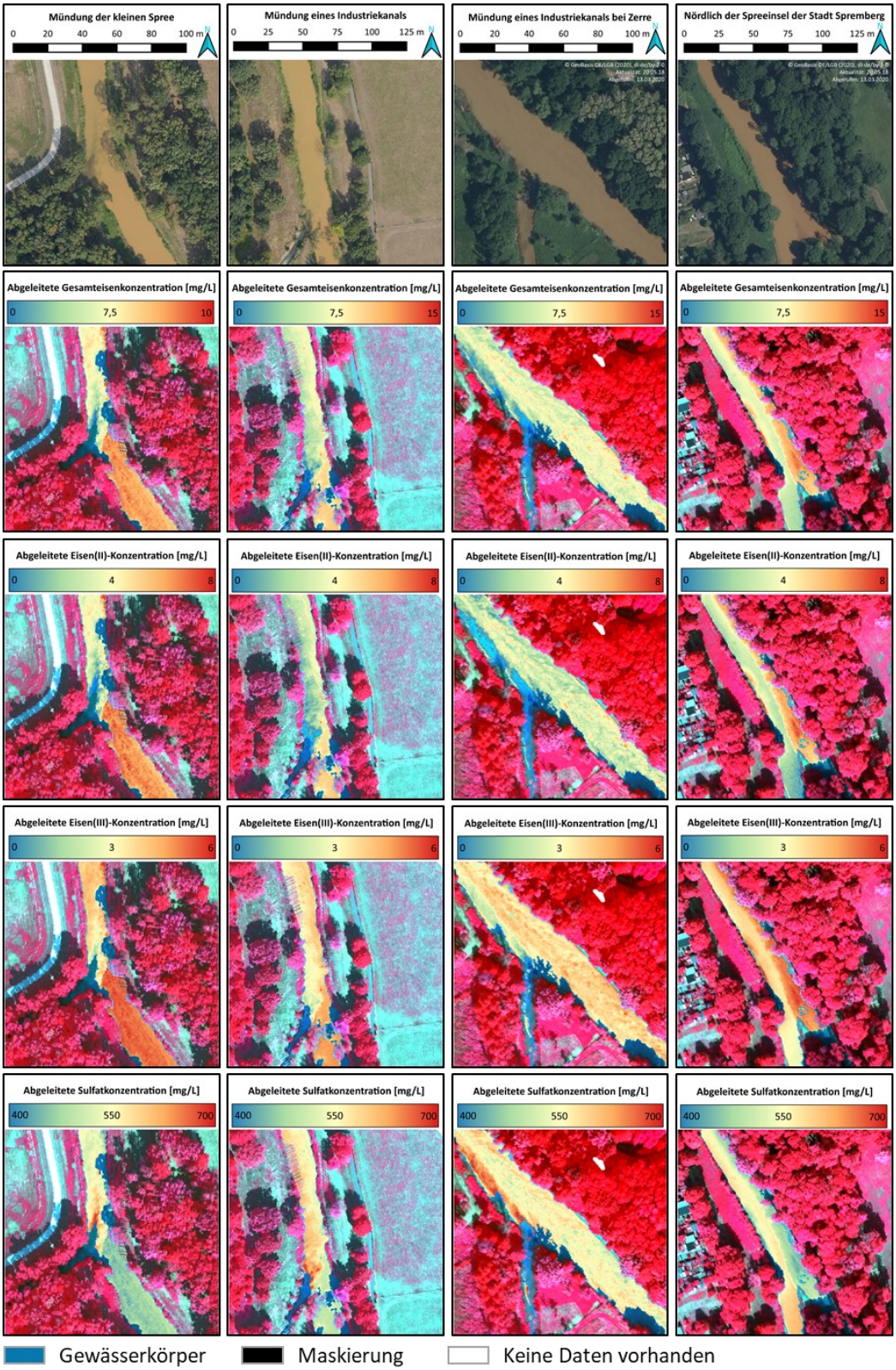

Abbildung 6-2: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat am Beispiel von vier Orten anhand der Daten vom 04.09.2018. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto, das digitale Orthophoto des WMS von Brandenburg (© GeoBasis-DE/LGB (2020), dl-de/by-2-0) sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Weiterhin sind die Ableitungsergebnisse in Abbildung I-19 und Abbildung I-20 (Anlage I.III) größer abgebildet. Die Maskierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

In der ersten Spalte von Abbildung 6-2 ist der Mündungsbereich der Kleinen Spree abgebildet. Dieser weist in den Ableitungsergebnissen einen starken Gradienten mit Ausnahme von TOC auf. Durch die auftretende Strömungsänderung ist eine deutliche Reduzierung der abgeleiteten Eisenkonzentrationen zu erkennen. Gleiches zeigen die Ableitungen von DOC und Chl-a in Abbildung I-21 (Anlage I.III). Nur die Ableitung von Sulfat stellt einen Konzentrationsanstieg im Mündungsbereich dar, welches anhand der In situ-Daten (s. Tabelle I-3) bestätigt wird.

Die zweite Spalte von Abbildung 6-2 stellt die Mündung eines Kanals aus Richtung des Industrieparks Schwarze Pumpe dar. Direkt im Mündungsbereich ist ebenfalls eine deutliche Abnahme der Konzentrationen von Gesamteisen, Eisen(II) und Eisen(III) zu erkennen. Weiterhin ist eine geänderte Strömung der Spree ersichtlich, wodurch eine erhöhte Eisen(III)-Konzentration am Ostufer zu erkennen ist. Gleiches weist auch die abgeleitete Chl-a-Konzentration auf. Weiterhin ist im Mündungsbereich des Industriekanals eine deutliche Zunahme der Sulfatkonzentration zu erkennen. Die Ableitungen der Konzentrationen von DOC und TOC weisen keine deutlichen Änderungen auf.

In der dritten Spalte von Abbildung 6-2 wird die Mündung eines weiteren Industriekanals bei Zerre visualisiert. Anhand der abgeleiteten Sulfatkonzentration ist ein deutlicher Eintrag im Mündungsbereich zu erkennen. Dies resultiert an derselben Uferseite in einer deutlich geringeren Konzentration von Gesamteisen, Eisen(II) und Eisen(III). Weiterhin ist eine geringere Chl-a-Konzentration in Abbildung I-22 zu erkennen. Anhand der Ableitungen von DOC und TOC sind keine Änderungen zu erkennen.

Die vierte Spalte in Abbildung 6-2 stellt die nördliche Spitze der Spreeinsel der Stadt Spremberg dar. Die abgeleiteten Eisenkonzentrationen zeigen eine deutlich höhere Konzentration anhand des östlichen Zustroms. Im gleichen Zustrom ist die Sulfatkonzentration jedoch gering. Weiterhin zeigen die Ableitungen von DOC, TOC und Chl-a keine deutlichen Unterschiede beider Zuflüsse auf.

Anhand der absoluten Ableitungsgenauigkeiten bezüglich der Messkampagne vom 22.09.2019 sind in Abhängigkeit zum Analytiklabor deutliche Unterschiede erkennbar (s. Tabelle 6-3 und Tabelle 6-4). Aus diesem Grund wurden die analytischen Messergebnisse des IGB als geeigneter zur Ableitung von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat betrachtet. Demzufolge basieren die Ableitungsmodelle von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Sulfat und

Chl-a in Tabelle 6-15 auf den Messergebnissen des IGB. Die verwendeten Konzentrationsangaben von DOC und TOC basieren auf den Messungen der HSA.

Tabelle 6-15: Auflistung der Ableitungsmodelle mit der höchsten Genauigkeit anhand der Daten vom 22.09.2019 unter Angabe des Wasserinhaltsstoffs (WIS), des Spektralindex, der Probenanzahl, des Bestimmtheitsmaßes (R^2), der Regressionsart (Reg.), der Regressionsparameter α und β, des RMSE und des rRMSE. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.), logarithmisch (Log.) und potenziell (Pot.).

WIS	Spektralindex	N	R^2	Reg.	α	β	RMSE	rRMSE
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	15	0,64	Lin.	55,86	30,14	0,93	21,91 %
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	13	0,78	Lin.	-59,43	29,78	0,95	35,33 %
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,76	Exp.	2,81	0,24	0,22	11,86 %
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	15	0,53	Pot.	1,07	1033,46	21,18	5,31 %
DOC [mg/L]	$R(750)$	15	0,02	Lin.	0,00	4,07	0,23	5,32 %
TOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	15	0,32	Lin.	24,49	-23,70	1,81	27,70 %
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	15	0,67	Log.	-26,30	-15,48	0,98	12,09 %

In Tabelle 6-3 sind die Ableitungsergebnisse für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat basierend auf den analytischen Ergebnissen des IGB im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 dargestellt. Die Ableitungsergebnisse von DOC, TOC und Chl-a sind in Abbildung I-26 und Abbildung I-27 (Anlage I.III) vorzufinden. In Abbildung I-23 (Anlage I.III) sind die Orte der ausgewählten Untersuchungsgebiete gekennzeichnet.

In Abbildung 6-3 ist anhand der Mündung der Kleinen Spree eine deutliche Zunahme der Gesamteisen- und Eisen(II)-Konzentration zu erkennen. Dagegen sind anhand der abgeleiteten Eisen(III)- und Sulfatkonzentration keine Erhöhungen zu erkennen. Im Fall von Eisen(III) könnte dies in einer geringen Sauerstoffsättigung beider Flüsse begründet sein (Uhlmann et al. 2012). Dadurch oxidierte nur ein geringer Anteil des vorhandenen Eisen(II). Des Weiteren weist die TOC-Konzentration im Mündungsbereich eine geringere Konzentration auf (s. Abbildung I-26 (Anlage I.III)). Die Konzentrationen von DOC und Chl-a zeigen keine Änderungen auf.

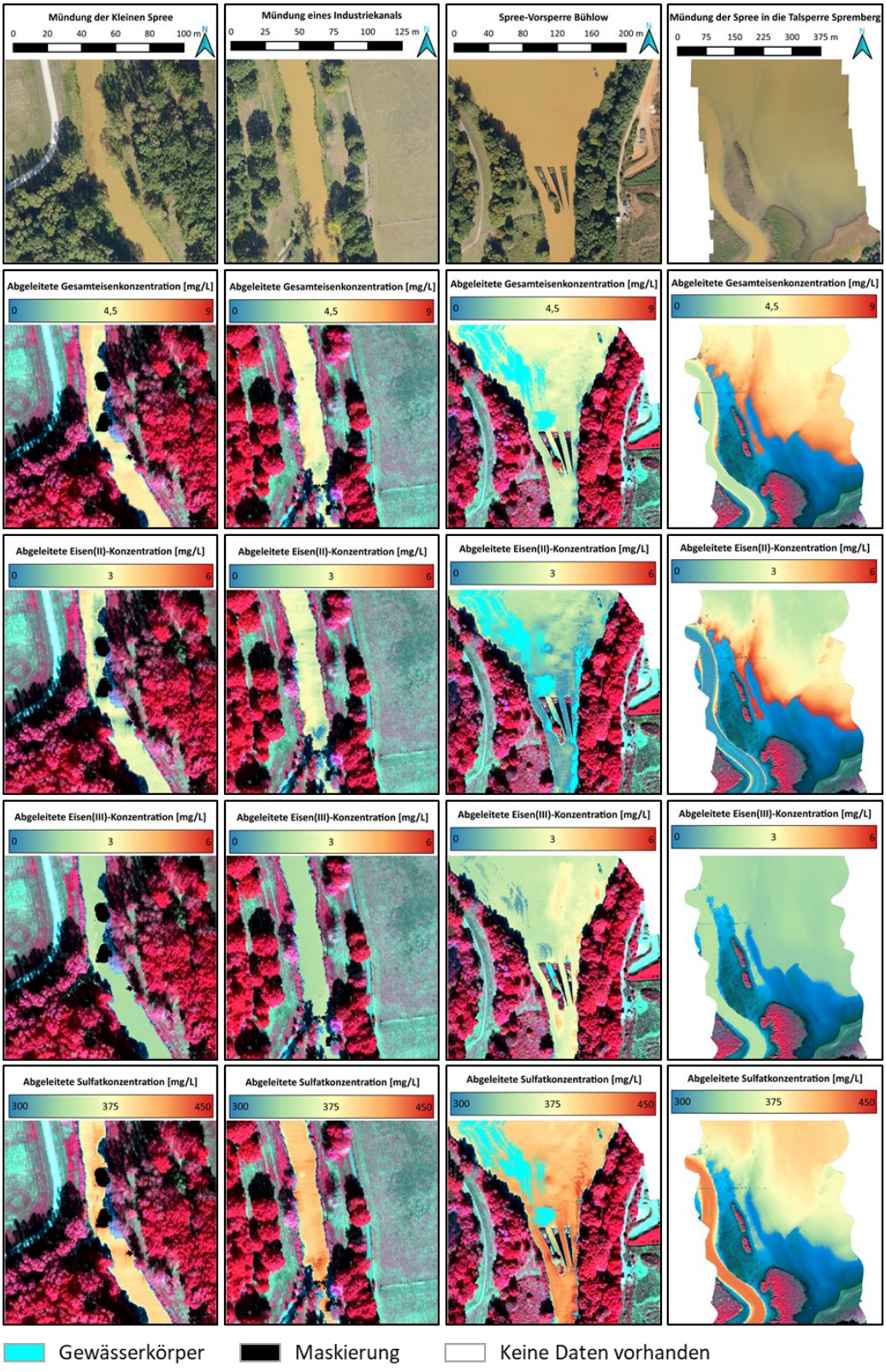

Abbildung 6-3: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat am Beispiel von vier Orten anhand der Daten vom 22.09.2019. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Weiterhin sind die Stellen ohne Spektralinformation weiß gekennzeichnet. Die Ableitungsergebnisse sind in Abbildung I-24 und Abbildung I-25 (Anlage I.III) größer abgebildet. Die Maskierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

Die zweite Spalte der Abbildung 6-3 stellt die Mündung eines Kanals aus Richtung des Industrieparks Schwarze Pumpe dar. Direkt im Mündungsbereich ist zunächst eine Reduzierung der Konzentrationen von Gesamteisen und Eisen(II) zu erkennen. Die abgeleiteten Konzentrationen von DOC und Eisen(III) weisen keine Änderungen auf. Weiterhin ist eine deutliche Steigung der Sulfatkonzentration zu erkennen, welche sich anschließend stromabwärts homogen verteilt. Des Weiteren zeigen die Konzentrationen von TOC und Chl-a eine Abnahme auf.

Aufgrund der Konditionierungsanlage der LMBV kommt es in der Spree-Vorsperre Bühlow zu starken Änderungen des Chemismus, weshalb der Algorithmus keine realen Werte ermitteln konnte. Deshalb ist der Gewässerkörper der Spree partiell in blau zu erkennen. Die abgeleitete Eisen(III)-Konzentration weist in der Vorsperre eine deutliche Konzentration am östlichen Ufer auf. Auf der Westseite der Vorsperre ist dagegen eine geringere Konzentration zu erkennen. Die abgeleitete Gesamteisenkonzentration stellt dies weniger deutlich dar. Weiterhin weist die Ableitung von Eisen(II) eine sehr niedrige Konzentration auf, was von den In situ-Daten in Tabelle I-6 (SP 17) bestätigt wird. Da die Behandlungsmaßnahmen der LMBV auf die Sulfatkonzentration keinen Einfluss haben, bleibt diese weiterhin hoch. In Folge der Behandlungsmaßnahmen der LMBV ist anhand der abgeleiteten TOC-Konzentration ein Anstieg auf der westlichen Uferseite zu erkennen (s. Abbildung I-27). Dies kann durch das Flockungsmittel der Konditionierungsanlage hervorgerufen werden. Beim Vergleich mit den Ableitungen der anderen Inhaltsstoffe führt genau dieser Bereich teilweise zu fehlerhaften Ableitungen. Weiterhin sind anhand der abgeleiteten Konzentrationen von Chl-a und DOC keine deutlichen Gradienten zu erkennen.

In der vierten Spalte ist die Mündung der Spree in die Talsperre Spremberg dargestellt. Die dargestellten Eisenkonzentrationen in der Spree sind nach den Behandlungsmaßnahmen der LMBV niedrig. Jedoch weist die Talsperre im südlichen Bereich eine hohe Gesamteisen- und Eisen(II)-Konzentration auf. Wie in Abbildung 6-3 dargestellt, nimmt die Eisen(II)-Konzentration schnell ab. Allerdings nimmt die Eisen(III)-Konzentration nicht im gleichen Maße zu, da die Eisenflocken aufgrund der geringen Fließgeschwindigkeit schneller absinken. Deshalb ist auch eine Abnahme des Gesamteisengehalts zu erkennen. Ein zusätzlicher Eintrag von Sulfat ist nicht erkennbar. Des Weiteren zeigen die Chl-a- sowie TOC-Konzentration in der Spree eine niedrige Konzentration auf. Dagegen wurde im südlichen Bereich der Talsperre

Spremberg eine erhöhte Konzentration detektiert. Die DOC-Konzentration weist keine Änderung im Mündungsbereich auf.

7. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wird ein innovatives Verfahren zur flächendeckenden Ableitung der Produkte der Pyritverwitterung in einem Fließgewässer aus airborne Hyperspektraldaten vorgestellt (s. Kapitel 2). Diesbezüglich lag der Fokus auf den Gewässerinhaltsstoffen Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat. Zur Durchführung des aufgezeigten Ansatzes im Untersuchungsgebiet wurden in zwei Messkampagnen die erforderlichen Gewässerproben und Hyperspektraldaten gleichzeitig erhoben (s. Kapitel 4). Mittels dieser Daten wurden spezifische Ableitungsmodelle entwickelt und validiert (s. Kapitel 6.1). Anhand der Ableitungen mit der höchsten Genauigkeit wurden georeferenzierte Verteilungskarten der Wasserinhaltsstoffe erstellt (s. Kapitel 6.3).

In Tabelle 7-1 sind die verwendeten Spektralindizes zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe unter Angabe der erreichten Genauigkeiten je Messkampagne aufgeführt.

Tabelle 7-1: Aufführung der verwendeten Spektralindizes zur Ableitung der Gewässerinhaltsstoffe (WIS) mit Genauigkeitsangabe (RMSE und rRMSE) je Messkampagne

WIS	Messkampagne 2018			Messkampagne 2019		
	Spektralindex	RMSE	rRMSE [%]	Spektralindex	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	0,87	11,43	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	0,93	21,91
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	0,58	16,80	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	0,95	35,33
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	0,42	10,97	$\frac{R(701)}{R(563)}$	0,22	11,86
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	39	7,26	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	21	5,31
DOC [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	0,69	21,45	$R(750)$	0,23	5,32
TOC [mg/L]	$\frac{R(1.250)-R(850)}{R(1.250)+R(850)}$	0,45	9,54	$\frac{R(417)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	1,81	27,70
Chl-a [µg/L]	$R(706)$	0,63	22,20	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	0,98	12,09

Anhand der aufgezeigten Genauigkeiten ist erkennbar, dass die Ableitungen der Eisenparameter mit unter 1 mg/L erfolgten. Die höchste Ableitungsgenauigkeit mit 0,22 mg/L (2019) wies das Modell von Eisen(III) auf. Weiterhin wurde in beiden Messkampagnen der Spektralindex R(701)/R(563) nach Gitelson et al. (1993) zur Ableitung von Eisen(III) verwendet. Trotz der geringen Robustheit der einzelnen Modelle (s. Kapitel 6.2) wiesen die

Ableitungsgenauigkeiten von Gesamteisen den geringsten Variationskoeffizienten mit 3,33 % auf (s. Tabelle 6-5 (s. Kapitel 6.1)). Die maximale Ableitungsgenauigkeit lag bei 0,87 mg/L. Weiterhin zeigte die Ableitung von Eisen(II) eine maximale Genauigkeit von 0,58 mg/L auf. Allerdings konnte weder zur Ableitung von Gesamteisen noch von Eisen(II) ein geeigneter Spektralindex beobachtet werden.

Die Ableitung von Sulfat zeigte eine maximale Ableitungsgenauigkeit von 21 mg/L auf. Da Sulfat im Wellenlängenbereich zwischen 400 und 2.500 nm keine Spektraleigenschaften aufweist, konnte kein geeigneter Index beobachtet werden.

Die Ableitungsgenauigkeit von DOC hatte ebenfalls unter 0,23 mg/L betragen. Der höchste Variationskoeffizient mit 60,18 % war anhand der Ableitungen von TOC zu beobachten (s. Tabelle 6-5 (s. Kapitel 6.1)). Die Ableitungsgenauigkeiten hatten 0,45 mg/L 2018 und 1,81 mg/L 2019 betragen. Des Weiteren konnte eine maximale Genauigkeit von 0,68 µg/L für die Ableitung von Chl-a nachgewiesen werden. Jedoch konnte kein spezifischer Index zur Ableitung von DOC, TOC und Chl-a ermittelt werden.

Das vorgestellte Verfahren ist in mehrere Arbeitsschritte unterteilt. Es beinhaltet die Erstellung von Spektralindizes, die Regression zwischen den Spektralindizes und den chemischen In situ-Parametern sowie die Entwicklung und Validierung der Ableitungsmodelle. Voraussetzung zur Anwendung des Verfahrens ist eine systematische sowie synchrone Erfassung der Gewässerinhaltsstoffe und der Hyperspektraldaten. Diesbezüglich sollten die Verfahren zur Bestimmung der Konzentrationen eine möglichst geringe Messunsicherheit aufweisen (s. Kapitel 4.2). Weiterhin ist eine präzise Prozessierung der Hyperspektraldaten erforderlich (s. Kapitel II (Anlage)), welche die atmosphärischen Einflüsse, die Nachbarschaftseffekte, Schatten und Spiegelungen auf der Gewässeroberfläche berücksichtigt. In Bezug darauf wurden in der vorliegenden Arbeit die Nachbarschaftseffekte, Schatten und Spiegelungen mittels geeigneter Methoden anhand der georeferenzierten und rektifizierten Hyperspektraldaten identifiziert und maskiert (s. Kapitel II (Anlage)). Zur Atmosphärenkorrektur wurde die Software ATCOR herangezogen (s. Kapitel 3.1.1).

Die verwendeten Spektralindizes bildeten die Basis der empirischen Ableitungsmodelle (s. Kapitel 3.3.2). Diese wurden der Literatur entnommen (s. Kapitel 5.1) sowie anhand von spektralen In situ-Messungen (s. Kapitel 5.2) und extrahierten Spektren der Hyperspektraldaten erstellt (s. Kapitel 5.3). Weiterhin wurden die spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Gewässerinhaltsstoffe (s. Kapitel 3.1.3) in der Entwicklung

der Spektralindizes berücksichtigt. Dies ermöglicht die Entwicklung robuster Regressionsmodelle.

Zur Durchführung der Regressionsanalyse erfolgte zunächst die Eliminierung von Messfehlern der In situ-Daten anhand der 2,5-fachen Standardabweichung. Weiterhin wurde die Regressionsanalyse auf einen linearen, logarithmischen, exponentiellen und potenziellen Zusammenhang geprüft. Die Auswahl erfolgte mithilfe des Bestimmtheitsmaßes. Anschließend erfolgte die Auswahl von zehn Regressionsmodellen je Wasserinhaltsstoff nach dem absteigenden Bestimmtheitsmaß. Diese wurden zur Validierung herangenzogen (s. Kapitel 2 und 6.1). Diesbezüglich wurde der RMSE und rRMSE ermittelt. Dies ermöglichte die Identifizierung des geeignetsten Ableitungsmodells, welches zur Erstellung der georeferenzierten Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe verwendet wurden (s. Kapitel 6.3).

Anhand der durchgeführten Validierungen konnte beobachtet werden, dass nur acht von 57 Regressionsmodellen mit dem höchsten Bestimmtheitsmaß auch die höchste Ableitungsgenauigkeit aufwiesen. Dagegen zeigten die Mehrheit der erstellten Modelle mit der höchsten Genauigkeit geringere Korrelationen auf (s. Kapitel 6). Dies könnte mit der Neigung zur Überspezialisierung empirischer Modelle zusammenhängen. Des Weiteren konnte mittels der Evaluierung nachgewiesen werden, dass die Ableitungsmodelle von Eisen(II) und Sulfat eine hohe Robustheit aufweisen. Weiterhin zeigte diese, dass die Ableitungsgenauigkeit stark von der Messunsicherheit der verwendeten Bestimmungsverfahren der Gewässerinhaltsstoffe abhängt.

Aufgrund der Berücksichtigung des RMSE und rRMSE zur Bestimmung eines geeigneten Regressionsmodells konnten mittels des vorgestellten Verfahrens präzise und flächendeckende Ableitungen durchgeführt werden. Für die Gewässerinhaltsstoffe Eisen(II) und Eisen(III) wurde sogar eine höhere Genauigkeit erreicht als die ermittelte Messunsicherheit (s. Kapitel 6.1).

Die erstellten Verteilungskarten haben verdeutlicht, dass eine flächendeckende Ableitung der Produkte der Pyritverwitterung in einem Fließgewässer durchführbar ist (s. Kapitel 6.3). Anhand der Verteilungskarten konnten die Zunahmen und Abnahmen der Konzentrationen sowie Konzentrationsänderungen durch Zuflüsse visualisiert werden. Gleichfalls wurden die

Grenzen der aufgezeigten Herangehensweise erkannt, z.B. bei einer starken Änderung des Chemismus.

Des Weiteren zeigten die Hyperspektralinformationen im Wellenlängenbereich zwischen 1.000 und 2.500 nm nur selten die höchste Ableitungsgenauigkeit auf. Weiterhin konnten nur Spektralinformationen anhand der Messkampagne vom 04.09.2018 beobachtet werden. Anhand der Daten vom 22.09.2019 konnten keine Rückstreuungen im Wellenlängenbereich des SWIR anhand des Gewässers beobachtet werden.

Weiterhin konnte aufgezeigt werden, dass die Anwendung empirischer Modelle in Verbindung mit der aufgezeigten Vorgehensweise zu präzisen Ableitungsergebnissen führt. Insbesondere für Gewässer mit einem spezifischen Chemismus, wie in der vorliegenden Arbeit, ist die Anwendung einer datengetriebenen Vorgehensweise von Vorteil, da unter Umständen für einen analytischen Ansatz (s. Kapitel 3.3.1) die spezifischen Absorptions- und Rückstreuungskoeffizienten nicht bekannt sind und entsprechend bestimmt werden müssen. Aufgrund dessen ist das entwickelte Verfahren auch auf andere Gewässer anwendbar, wie z.B. den Pyritgürtel im Süden der Iberischen Halbinsel, nach Dammbrüchen von Bergwerken oder Seen in der borealen Zone mit einer hohen Eisen(II)-Konzentration. Die Anwendung des aufgezeigten Verfahrens auf weitere Gewässer ist bei entsprechender Datengrundlage ebenfalls möglich.

Für zukünftige Untersuchungen ergeben sich aus der vorliegenden Arbeit verschiedene Ansätze. So sind weiterhin die spezifischen Absorptions- und Rückstreueigenschaften von Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat im Wellenlängenbereich von 400 bis 1.000 nm im Wasser unbekannt. Insbesondere die Spektraleigenschaften von Sulfat wären von Interesse, da die erhöhte Sulfatkonzentration von Spreewitz bis Berlin vielerorts den Trinkwassergrenzwert von 250 mg/L überschreitet (Gelbrecht et al. 2016). Somit wäre ein flächendeckender Ansatz für ein Monitoring der Sulfatkonzentration angebracht.

Weiterhin besteht ein großes Potenzial zur Erhöhung der Ableitungsgenauigkeit durch die Anwendung eines Atmosphärenkorrekturmodells, welches speziell für Binnengewässer entwickelt wurde. Dadurch könnten die Nachbarschaftseffekte und die Spiegelungen der Sonne auf der Gewässeroberfläche effektiver korrigiert werden.

Durch die Verwendung der Programmiersprache R zeigte sich, dass die Durchführung der Validierung nach der Ausgabe der Ableitungen sehr zeitintensiv ist. Daher ist bei zukünftigen

Projekten zu prüfen, ob eine Validierung bereits anhand der aufgestellten Regressionsmodelle durchführbar ist. Zudem würde dies den Verwaltungsaufwand der ausgegebenen Rasterdaten mindern.

Literatur

Alikas, K. & Kratzer, S. (2017): Improved retrieval of Secchi depth for optically-complex waters using remote sensing data. Ecological Indicators **77**. S. 218–227.

Amelung, W., Blume, H.-P., Fleige, H., Horn, R., Kandeler, E., Kögel-Knabner, I., Kretzschmar, R., Stahr, K. & Wilke, B.-M. (2018): Lehrbuch der Bodenkunde / Scheffer-Schachtschabel. 16. Aufl. Springer Berlin Heidelberg Berlin, Heidelberg. . ISBN: 978-3-662-55870-6.

Anderson, G. P., Berk, A., Chetwynd, Jr., J. H., Harder, J., Fontenla, J. M., Shettle, E. P., Saunders, R., Snell, H. E., Pilewskie, P., Kindel, B. C., Gardner, J. A., Hoke, M. L., Felde, G. W., Lockwood, R. B. & Acharya, P. K. (2007): Using the MODTRAN5 radiative transfer algorithm with NASA satellite data: AIRS and SORCE. Algorithms and Technologies for Multispectral, Hyperspectral, and Ultraspectral Imagery XIII **6565**. S. 65651O.

Anderson, J. E. E. & Robbins, E. I. I. (1998): Spectral Reflectance and Detection of Iron-Oxide Precipitates Associated with Acidic Mine Drainage. Konferenzbeitrag, Photogrammctric Engineering & Remote Sensing. http://info.asprs.org/publications/pers/98journal/december/1998_dec_1201-1208.pdf.

Andruleit, H., Blumenberg, M., Kus, J., Meßner, J., Pein, M., Rebscher, D., Schamel, M., Schauer, M., Schmidt, M., Schmidt, S. & Goerne, G. von (2017): BGR Energiestudiue 2017 - Daten und Entwicklung der deutschen und globalen Energieversorgung. Hannover. .

Asmala, E., Stedmon, C. A. & Thomas, D. N. (2012): Linking CDOM spectral absorption to dissolved organic carbon concentrations and loadings in boreal estuaries. Estuarine, Coastal and Shelf Science **111**. S. 107–117.

AutoGyro GmbH (2019): Merkmale. https://www.auto-gyro.com/Tragschrauber/Merkmale/ (13.11.2019)

Bandini, F., Olesen, D., Jakobsen, J., Kittel, C. M. M., Wang, S., Garcia, M. & Bauer-Gottwein, P. (2018): Technical note: Bathymetry observations of inland water bodies using a tethered single-beam sonar controlled by an unmanned aerial vehicle. Hydrology and Earth System Sciences **22**. (Heft 8). S. 4165–4181.

Bannehr, L., Ulrich, C., Koppers, L. & Kirschke, T. (2015): Einsatzmöglichkeiten eines Gyrocopters im Bereich der Umweltforschung. Konferenzbeitrag, Oldenburger 3D-Tage 2015 Tagungsband. Oldenburg.

Bartholomeus, H., Epema, G. & Schaepman, M. (2007): Determining iron content in Mediterranean soils in partly vegetated areas, using spectral reflectance and imaging spectroscopy. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation **9**. (Heft 2). S. 194–203.

Baschek, B., Dörnhöfer, K., Fricke, K. & Oppelt, N. (2018): Grundlagen und Möglichkeiten der passiven Fernerkundung von Binnen- gewässern. In: Handbuch Angewandte Limnologie. Grundlagen - Gewässerbelastung - Restaurierung - Aquatische Ökotoxikologie - Bewertung - Gewässerschutz, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA Weinheim, Germany. Hrsg.: Calmano, W., Hupfer, M., Fische, H. & Klapper, H. S. 1–28.

Bass, M. (1994): Handbook of Optics: Fundamentals, techniques, and design. 2. Aufl. McGraw-Hill, ING. . ISBN: 9780070477407.

Bendel, R. B., Higgins, S. S., Teberg, J. E. & Pyke, D. A. (1989): Comparison of skewness coefficient, coefficient of variation, and Gini coefficient as inequality measures within populations. Oecologia **78**. (Heft 3). S. 394–400.

Benthaus, F. & Totsche, O. (2015): The Groundwater Raise in Lignite Mining Induced Areas in Lusetia – Actions taken to reduce the Follows Ups Auswirkungen des Grundwasserwiederanstiegs in den vom Braunkohlenbergbau beeinflussten Gebieten in der Lausitz und Maßnahmen zur Minderung. Mining Report **151**. (Heft 6). S. 522–530.

Bilek, F., Moritz, F. & Albinus, S. (2016): Iron-Hydroxide-Removal from Mining Affected Rivers.

https://www.imwa.info/docs/imwa_2016/IMWA2016_Bilek_152.pdf (29.03.2017)

Binding, C. E., Greenberg, T. A., Jerome, J. H., Bukata, R. P. & Letourneau, G. (2011): An assessment of MERIS algal products during an intense bloom in Lake of the Woods. Journal of Plankton Research **33**. (Heft 5). S. 793–806.

BMUB / UBA (2016): Die Wasserrahmenrichtlinie - Deutschlands Gewässer 2015. https://www.umweltbundesamt.de/sites/default/files/medien/1968/publikationen/final_broschure_wasserrahm_enrichtlinie_bf_112116.pdf (11.11.2019)

Bricaud, A., Claustre, H., Ras, J. & Oubelkheir, K. (2004): Natural variability of phytoplanktonic absorption in oceanic waters: Influence of the size structure of algal populations. Journal of Geophysical Research: Oceans **109**. (Heft 11). S. 1–12.

Brönmark, C. & Hansson, L. A. (2002): Environmental issues in lakes and ponds: Current state and perspectives. Environmental Conservation **29**. (Heft 3). S. 290–307.

Bukata, R. P., Jerome, J. H., Kondratyev, K. Y. & Pozdnyakov, D. V (1995): Optical Properties and Remote Sensing of Inland and Costal Water. CRC Press , Inc. Boca Raton. . ISBN: 0-8493-4754-8.

Chandrasekhar, S. (1950): Radiative transfer. 76. Band. Oxford University Press London. .

Choe, E., van der Meer, F., van Ruitenbeek, F., van der Werff, H., de Smeth, B. & Kim, K. W. (2008): Mapping of heavy metal pollution in stream sediments using combined geochemistry, field spectroscopy, and hyperspectral remote sensing: A case study of the Rodalquilar mining area, SE Spain. Remote Sensing of Environment **112**. (Heft 7). S. 3222–3233.

Claustre, H., Hooker, S. B., Van Heukelem, L., Berthon, J. F., Barlow, R., Ras, J., Sessions, H., Targa, C., Thomas, C. S., Van Der Linde, D. & Marty, J. C. (2004): An intercomparison of HPLC phytoplankton pigment methods using in situ samples: Application to remote sensing and database activities. Marine Chemistry **85**. (Heft 1–2). S. 41–61.

Cloutis, E. A., Hawthorne, F. C., Mertzman, S. A., Krenn, K., Craig, M. A., Marcino, D., Methot, M., Strong, J., Mustard, J. F., Blaney, D. L., Bell, J. F. & Vilas, F. (2006): Detection and discrimination of sulfate minerals using reflectance spectroscopy. Icarus **184**. (Heft 1). S. 121–157.

Concha, J. A. & Schott, J. R. (2015): Atmospheric correction for Landsat 8 over case 2 waters. (Heft 585). S. 96070R.

Defoin-Platel, M. & Chami, M. (2007): How ambiguous is the inverse problem of ocean color in coastal waters? Journal of Geophysical Research: Oceans **112**. (Heft 3). S. 1–16.

Dekker, A. G. (1993): Detection of optical water quality parameters for eutrophic waters by high resolution remote sensing. Dissertation, Free University.

Dekker, A. G., Brando, V. E., Anstee, J. M., Pinnel, N., Kutser, T., Hoogenboom, E. J., Peters, S., Pasterkamp, R., Vos, R., Olbert, C. & Malthus, T. J. M. (2002a): Imaging Spectrometry of Water. In: Imaging Spectrometry - Basic Principles and Prospective Applications, Dordrecht, the Netherlands. Hrsg.: van der Meer, F. D. & Jong, S. M. De. S. 307–359.

Dekker, A. G., Hoogenboom, H. J., Goddijn, L. M. & Malthus, T. J. M. (1997): The Relation between Inherent Optical Properties and Reflectance Spectra in Turbid Inland Waters. Remote Sensing Reviews **15**. (Heft 1–4). S. 59–74.

Dekker, A. G., Vos, R. J. & Peters, S. W. M. (2002b): Analytical algorithms for lake water tsm estimation for retrospective analyses of tm and spot sensor data. International Journal of Remote Sensing **23**. (Heft 1). S. 15–35.

Dekker, A. G. G., Malthus, T. J. J. & Hoogenboom, H. J. J. (1995): The Remote Sensing of Inland Water Quality. In: Advances in Environmental Remote Sensing1, John Wiley & Sons, Inc. West Sussex, England. Hrsg.: Danson, F. M. & Plummer, S. E. S. 123–142.

Department of Agriculture Environment and Conservation (2008): Mining and environmental impact guide. S. 1119.

Doerffer, R. & Fischer, J. (1994): 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 **99**. (Heft C4). S. 7457–7466.

Dörnhöfer, K. & Oppelt, N. (2016): Remote sensing for lake research and monitoring - Recent advances. Ecological Indicators **64**. S. 105–122.

Dörnhöfer, K. J. (2018): Assessing water colour of lakes with high and medium spatial resolution remote sensing data. Dissertation, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel.

Doxaran, D., Froidefond, J.-M. & Castaing, P. (2003): Remote-sensing reflectance of turbid sediment-dominated waters Reduction of sediment type variations and changing illumination conditions effects by use of reflectance ratios. Applied Optics **42**. (Heft 15). S. 2623.

Doxaran, D., Froidefond, J. M., Lavender, S. & Castaing, P. (2002): Spectral signature of highly turbid waters: Application with SPOT data to quantify suspended particulate matter concentrations. Remote Sensing of Environment **81**. (Heft 1). S. 149–161.

Durning, W. P., Polis, S. R., Frost, E. G. & Kaiser, J. V. (1998): Integrated Use of Remote Sensing and GIS for Mineral Exploration - Final Report. S. 25.

Echterhoff, J. (2015): Die gewässerchemischen und chemisch-physikalischen Prozesse einer Trinkwassertalsperre unter Berücksichtigung eines dynamisierten Talsperrenbetriebs. ENERWA **02**.

Eifler, D. (2005): Charakterisierung von Huminstoffen durch Fraktionierung und Metallgehaltsbestimmung mittels eines gekoppelten Systems Kapillarelektrophorese – induktiv gekoppeltes Plasma Massenspektrometer. Dissertation.

Eloheimo, K., Hannonen, T., Härmä, P., Pyhälahti, T., Koponen, S., Pulliainen, J., Servomaa, H. & Kutser, T. (1998): Coastal monitoring using satellite, airborne and in-situ Data in the archipelago of Baltic Sea. Konferenzbeitrag, 5th International Conference on Remote Sensing for Marine and Coastal Environments. San Diego, California.

European Environment Agency (2018): European waters - Assessment of status and pressures 2018. https://www.eea.europa.eu/publications/state-of-water/at_download/file (11.11.2019)

European Satellite Services Provider S.A.S (2020): About EGNOS |. https://egnos-user-support.essp-sas.eu/new_egnos_ops/services/about-os (21.01.2020)

Frauendorf, J. (2002): Entwicklung und Anwendung von Fernerkundungsmethoden zur Ableitung von Wasserqualitätsparametern verschiedener Restseen des Braunkohlentagebaus in Mitteldeutschland. Dissertation, Martin-Luther-Universität Halle-Wittenberg. 273 S.

Gao, H., Birkett, C. & Lettenmaier, D. P. (2012): Global monitoring of large reservoir storage from satellite remote sensing. Water Resources Research **48**. (Heft 9). S. 1–12.

Gast, R. R., Jursa, A. S., Castelli, J., Basu, S. & Aarons, J. (1965): Solar Electromagnetic Radiation. In: Handbook of Geophysics and space environments, McGraw-Hill Book Company, ING. New York [u.a.]. Hrsg.: Valley, S. L. S. 16-1-16–38.

Gege, P. (1994): Gewässeranalyse mit passiver Fernerkundung : Ein Modell zur Interpretation optischer Spektralmessungen. Dissertation, Universität Hamburg. 170 S.

Gege, P. (2003): Fernerkundung von Wasserinhaltsstoffen. Laufener Seminarbeiträge - Erfassung und Beurteilung von Seen und deren Einzugsgebieten mit Methoden der Fernerkundung. (Heft 2). S. 73–79.

Gege, P. (2017): Radiative Transfer Theory for Inland Waters. In: Bio-optical Modeling and Remote Sensing of Inland Waters, Elsevier Amsterdam, Netherlands. Hrsg.: Mishra, D. R., Ogashawara, I. & Gitelson, A. A. 1. Aufl. S. 25–67.

Gege, P. (2019): WASI (Water Colour Simulator). http://www.ioccg.org/data/software.html (12.09.2019)

Gelbrecht, J., Cabezas, A., Hupfer, M. & Zak, D. (2016): Sulfatbelastung der Spree - Ursachen, Wirkungen und aktuelle Erkenntnisse. https://www.igb-berlin.de/sites/default/files/media-files/download-files/IGB_Dossier_2016_Sulfat_END.pdf (13.02.2020)

Gholizadeh, M. H., Melesse, A. M. & Reddi, L. (2016): A comprehensive review on water quality parameters estimation using remote sensing techniques. Sensors (Switzerland) **16**. (Heft 8). S. 1298.

Giardino, C., Brando, V. E., Gege, P., Pinnel, N., Hochberg, E., Knaeps, E., Reusen, I., Doerffer, R., Bresciani, M., Braga, F., Foerster, S., Champollion, N. & Dekker, A. (2019): Imaging Spectrometry of Inland and Coastal Waters: State of the Art, Achievements and Perspectives. Surveys in Geophysics **40**. (Heft 3). S. 401–429.

Giardino, C., Candiani, G., Bresciani, M., Lee, Z., Gagliano, S. & Pepe, M. (2012): BOMBER: A tool for estimating water quality and bottom properties from remote sensing images. Computers and Geosciences **45**. S. 313–318.

Gitelson, A. (1992): The peak near 700 nm on radiance spectra of algae and water: relationships of its magnitude and position with chlorophyll concentration. International Journal of Remote Sensing **13**. (Heft 17). S. 3367–3373.

Gitelson, A., Garbuzov, G., Szilagyi, F., Mittenzwey, K.-H., Karnieli, A., Kaiser, A., A., K. & Kaiser, A. (1993): Quantitative remote sensing methods for real-time monitoring of inland waters quality. International Journal of Remote Sensing **14**. (Heft 7). S. 1269–1295.

Gläßer, C., Groth, D. & Frauendorf, J. (2011): Monitoring of hydrochemical parameters of lignite mining lakes in Central Germany using airborne hyperspectral casi-scanner data. International Journal of Coal Geology **86**. (Heft 1). S. 40–53.

Gleisner, M. & Herbert, R. B. (2002): Sulfide mineral oxidation in freshly processed tailings: batch experiments. Journal of Geochemical Exploration **76**. (Heft 3). S. 139–153.

Goetz, A. F. H. (1989): Spectral Remote Sensing in Geology. In: Theory and applications of optical remote sensing, Wiley New York [u.a.]. Hrsg.: Asrar, G. 1. Aufl. S. 491–526.

Goodman, J. A., Lee, Z. P. & Ustin, S. L. (2008): Influence of atmospheric and sea-surface corrections on retrieval of bottom depth and reflectance using a semi-analytical model: A case study in Kaneohe Bay, Hawaii. Applied Optics **47**. (Heft 28).

Gordon, H. R. (1979): Diffuse reflectance of the ocean: the theory of its augmentation by chlorophyll a fluorescence at 685 nm. Appl. Opt. **18**. (Heft 8). S. 1161–1166.

Gordon, H. R., Brown, O. B. & Jacobs, M. M. (1975): Computed Relationships Between the Inherent and Apparent Optical Properties of a Flat Homogeneous Ocean. Applied Optics **14**. (Heft 2). S. 417.

Haardt, H. & Maske, H. (1987): Specific in vivo absorption coefficient of chlorophyll a at 675 nm. Limnology and Oceanography **32**. (Heft 3). S. 608–619.

Hanson, P. C., Bade, D. L., Carpenter, S. R., Kratz, T. K. & May, N. (2007): Lake Metabolism : Relationships with Dissolved Organic Carbon and Phosphorus Lake metabolism : Relationships with dissolved organic carbon and phosphorus. Limnology And Oceanography **48**. (Heft 3). S. 1112–1119.

Heege, T. (2000): Flugzeuggestützte Fernerkundung von Wasserinhaltsstoffen am Bodensee.

Hovis, W. A. & Leung, K. C. (1977): Remote Sensing of Ocean Color. Optical Engineering **16**. (Heft 2).

Hunt, G. R. (1977): Spectral signatures of particulate minerals in the visible and near infrared. Geophysics **42**. (Heft 3). S. 501–513.

Hunt, G. R. (1980): Electromagnetic radiation: {The} communication link in remote sensing. Remote sensing in geology **2**. S. 5–45.

Hunt, G. R. & Ashley, R. P. (1979): Spectra of altered rocks in the visible and near infrared. Economic Geology **74**. (Heft 7). S. 1613–1629.

Hütter, L. A. (1990): Inhaltsstoffe natürlicher Wässer - deren mögliche Herkunft und Bedeutung. In: Wasser und Wasseruntersuchung, Otto Saale Verlag GmbH & Co und Verlag Sauerländer AG Frankfurt am Main und Aarau. 4. Aufl.

Hüttl, R. F. (1998): Ecology of post strip-mining landscapes in Lusatia, Germany. Environmental Science & Policy **1**. (Heft 2). S. 129–135.

International Association of Meteorology and Atmospheric Physics - Radiation Commission (1986): A PRELIMINARY CLOUDLESS STANDARD ATMOSPHERE FOR RADIATION COMPUTATION. https://library.wmo.int/doc_num.php?explnum_id=4988 (01.04.2020)

IOCCG (2000): Remote SensingofOcean Colour in Coastal, and Other Optically-Complex, Waters. 3. Band. Reports ofthe International Ocean-Colour Coordinating Group Dartmouth, Kanada. . ISBN: 978-1-896246-54-3.

IOCCG (2010): Atmospheric Correction for Remotely-Sensed Ocean-Colour Products. Wang, M. (ed). No. 10. Dartmouth, Canada. .

Jackson, C. R. & Alpers, W. (2010): The role of the critical angle in brightness reversals on sunglint images of the sea surface. Journal of Geophysical Research: Oceans **115**. (Heft 9). S. 1–15.

Kirk, J. T. O. (2003): The vertical attenuation of irradiance as a function of the optical properties of the water. Limnology and Oceanography **48**. (Heft 1). S. 9–17.

Kirk, J. T. O. (2011): Light and Phtosynthesis in Aquatic Ecosystems. 3. Aufl. Cambridge University Press Cambridge. . ISBN: 978-0-521-15175-7.

Kiselev, V., Bulgarelli, B. & Heege, T. (2015): Sensor independent adjacency correction algorithm for coastal and inland water systems. Remote Sensing of Environment **157**. S. 85–95.

Knaeps, E., Dogliotti, A. I., Raymaekers, D., Ruddick, K. & Sterckx, S. (2012): In situ evidence of non-zero reflectance in the OLCI 1020nm band for a turbid estuary. Remote Sensing of Environment **120**. S. 133–144.

Knaeps, E., Ruddick, K. G., Doxaran, D., Dogliotti, A. I., Nechad, B., Raymaekers, D. & Sterckx, S. (2015): A SWIR based algorithm to retrieve total suspended matter in extremely turbid waters. Remote Sensing of Environment **168**. S. 66–79.

Kokaly, R. F., Clark, R. N., Swayze, G. A., Livo, K. E., Hoefen, T. M., Pearson, N. C., Wise, R. A., Benzel, W. M., Lowers, H. A., Driscoll, R. L. & Klein, A. J. (2017): USGS Spectral Library Version 7: U.S. Geological Survey Data Series 1035. https://pubs.er.usgs.gov/publication/ds1035 (21.01.2020)

Kölling, S. (2019): Spektroskopische Untersuchung von Gewässerproben auf Gesetzmäßigkeiten bezüglich des Gehaltes an Gesamteisen und Sulfat. Köthen (Hochschule Anhalt) , studentische Projektarbeit (unveröffentlicht). .

Kopačková, V. & Hladíková, L. (2014): Applying spectral unmixing to determine surface water parameters in a mining environment. Remote Sensing **6**. (Heft 11). S. 11204–11224.

Kou, L., Labrie, D. & Chylek, P. (1993): Refractive indices of water and ice in the 065- to 25-µm spectral range. Applied Optics **32**. (Heft 19). S. 3531.

Krausmann, F., Gingrich, S., Eisenmenger, N., Erb, K. H., Haberl, H. & Fischer-Kowalski, M. (2009): Growth in global materials use, GDP and population during the 20th century. Ecological Economics **68**. (Heft 10). S. 2696–2705.

Krijgsman, J. (1994): Optical remote sensing of water quality parameters: {Interpretation} of reflectance spectra.

Kuhn, C., de Matos Valerio, A., Ward, N., Loken, L., Sawakuchi, H. O., Kampel, M., Richey, J., Stadler, P., Crawford, J., Striegl, R., Vermote, E., Pahlevan, N. & Butman, D. (2019): Performance of Landsat-8 and Sentinel-2 surface reflectance products for river remote sensing retrievals of chlorophyll-a and turbidity. Remote Sensing of Environment **224**. (Heft January). S. 104–118.

Kutser, T., Paavel, B., Verpoorter, C., Ligi, M., Soomets, T., Toming, K. & Casal, G. (2016): Remote sensing of black lakes and using 810 nm reflectance peak for retrieving water quality parameters of optically complex waters. Remote Sensing **8**. (Heft 6).

Lee, Z., Carder, K. L. & Arnone, R. A. (2002): Deriving inherent optical properties from water color: a multiband quasi-analytical algorithm for optically deep waters. Applied Optics **41**. (Heft 27). S. 5755.

Lee, Z. P., Du, K. P. & Arnone, R. (2005): A model for the diffuse attenuation coefficient of downwelling irradiance. Journal of Geophysical Research C: Oceans **110**. (Heft 2). S. 1–10.

Lee, Z. P., Shang, S., Hu, C., Du, K., Weidemann, A., Hou, W., Lin, J. & Lin, G. (2015): Secchi disk depth: A new theory and mechanistic model for underwater visibility. Remote Sensing of Environment **169**. S. 139–149.

Lenoble, J. (1993): Atmospheric radiative transfer. A. Deepak Publishing Hampton, USA. . ISBN: 9780937194218.

LMBV (2019): LMBV: Spree bei Wilhelmsthal bekommt wieder Kalk – Übergang in Spätsommer-Fahrweise. https://www.lmbv.de/index.php/pressemitteilung/lmbv-spree-bei-wilhelmsthal-bekommt-wieder-kalk-uebergang-in-spaetsommer-fahrweise-4576.html (28.10.2019)

Luther, G. W. (1987): Pyrite oxidation and reduction: Molecular orbital theory considerations. Geochimica et Cosmochimica Acta **51**. (Heft 12). S. 3193–3199.

Maloney, K. O., Morris, D. P., Moses, C. O. & Osburn, C. L. (2005): The role of iron and dissolved organic carbon in the absorption of ultraviolet radiation in humic lake water. Biogeochemistry **75**. (Heft 3). S. 393–407.

Marusak, L. A., Messier, R. & White, W. B. (1980): Optical absorption spectrum of hematite, aFe2O3 near IR to UV. Journal of Physics and Chemistry of Solids **41**. (Heft 9). S. 981–984.

Matthews, M. W. (2011): A current review of empirical procedures of remote sensing in Inland and near-coastal transitional waters. International Journal of Remote Sensing **32**. (Heft 21). S. 6855–6899.

Maul, G. A. (1985): Introduction to satellite oceanography. Springer Netherlands Dordrecht. . ISBN: 978-94-010-8740-7.

McFEETERS, S. K. (1996): The use of the Normalized Difference Water Index (NDWI) in the delineation of open water features. International Journal of Remote Sensing **17**. (Heft 7). S. 1425–1432.

McKee, D., Röttgers, R., Neukermans, G., Calzado, V. S., Trees, C., Ampolo-Rella, M., Neil, C. & Cunningham, A. (2014): Impact of measurement uncertainties on determination of chlorophyll-specific absorption coefficient for marine phytoplankton. Journal of Geophysical Research: Oceans **119**. (Heft 12). S. 9013–9025.

Mehnert, G., Rücker, J., Nicklisch, A., Leunert, F. & Wiedner, C. (2012): Effects of thermal acclimation and photoacclimation on lipo-philic pigments in an invasive and a native cyanobacterium of temperate regions. European Journal of Phycology **47**. (Heft 2). S. 182–192.

Mélin, F., Vantrepotte, V., Clerici, M., D'Alimonte, D., Zibordi, G., Berthon, J. F. & Canuti, E. (2011): Multi-sensor satellite time series of optical properties and chlorophyll-a concentration in the Adriatic Sea. Progress in Oceanography **91**. (Heft 3). S. 229–244.

Merkel, B. & Sperling, B. (1996): Hydrogeochemische Stoffsysteme - Teil 1. Dautscher Verband für Wasserwirtschaft und Kulturbau Bonn. . ISBN: 3-89554-029-3.

Mertes, L. A. K., Dekker, A. G., Brakenridge, G. R., Birkett, C. M. & Létourneau, G. (2004): Rivers and Lakes. In: Remote Sensing of Natural Resources, Management and Environment Monitoring: Manual of Remote Sensing, John Wiley & Sons, Inc. Hrsg.: Ustin, S. 3. Aufl. S. 345–400.

Mitchell, C., Cunningham, A. & McKee, D. (2014): Remote sensing of shelf sea optical properties: Evaluation of a quasi-analytical approach for the Irish Sea. Remote Sensing of Environment **143**. S. 142–153.

Mobley, C. D. (1994): Light and Water - Radiative Transfer in Natural Waters. Academic Press, Inc New York. . ISBN: 0-12-502750-8.

Moore, T. S., Dowell, M. D., Bradt, S. & Ruiz Verdu, A. (2014): An optical water type framework for selecting and blending retrievals from bio-optical algorithms in lakes and coastal waters. Remote Sensing of Environment **143**. S. 97–111.

Morel, A. (1974): Optical Properties of Pure Water and Pure Sea Water. In: Optical Aspects of Oceanography, Academic Press, Inc London. Hrsg.: Jerlov, N. G. & Nielsen, E. S. S. 1–24.

Morel, A. & Prieur, L. (1977): Analysis of variations in ocean color. Limnology and Oceanography **22**. (Heft 4). S. 709–722.

Morel, A. Y. & Gordon, H. R. (1980): Report of the working group on water color. Boundary-Layer Meteorology **18**. (Heft 3). S. 343–355.

Moses, W. J., Sterckx, S., Montes, M. J., De Keukelaere, L. & Knaeps, E. (2017): Atmospheric Correction for Inland Waters. In: Bio-optical Modeling and Remote Sensing of Inland Waters, Elsevier Amsterdam, Netherlands. Hrsg.: Mishra, D. R., Ogashawara, I. & Gitelson, A. A. S. 69–100.

Mouw, C. B., Greb, S., Aurin, D., DiGiacomo, P. M., Lee, Z., Twardowski, M., Binding, C., Hu, C., Ma, R., Moore, T., Moses, W. & Craig, S. E. (2015): Aquatic color radiometry remote sensing of coastal and inland waters: Challenges and recommendations for future satellite missions. Remote Sensing of Environment **160**. S. 15–30.

Muller-Karger, F. E., Hu, C., Andréfouët, S., Varela, R. & Thunell, R. (2005): THE COLOR OF THE COASTAL OCEAN AND APLLICATIONS IN THE SOLUTION OF RESEARCH AND MANAGEMENT PROBLEMS. In: Remote Sensing of Coastal Aquatic Environments - Technologies, Techniques and Applications, Springer Dordrecht, the Netherlands. Hrsg.: Miller, R. L., Castillo, C. E. Del & Mckee, B. A. S. 101–127.

Mutz, M., Pusch, M. & Siefert, J. (2000): Ausgewählte Aspekte der Morphologie und Ökologie von Fließgewässern der Bergbaufolgelandschaft. In: Naturschutz in Bergbaufolgelandschaften, Physica Verlag Heidelberg. Hrsg.: Wiegleb, G., Bröring, U., Mrzljak, J. & Schulz, F. S. 299–313.

Mwaniki, M. W., Moeller, M. S. & Schellmann, G. (2015): A comparison of Landsat 8 (OLI) and Landsat 7 (ETM+) in mapping geology and visualising lineaments: A case study of central region Kenya. ISPRS - International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences **XL-7/W3**. S. 897–903.

Navarro, L., Aravena, G., Engels, J. & Turner, J. (2019): Satellite bathymetry for the monitoring of supernatant water volumes within tailings storage facilities. In: Paste 2019, Australian Centre for Geomechanics, Perth Cape Town, South Africa. S. 205--217.

Nixdorf, B., Weyer, K. & Leßmann, D. (2016): Limnologie von Bergbauseen der Lausitz – Besiedlung und Bewertung. http://www.lanaplan.de/download/Nixdorf_et_al_2016.pdf (22.11.2019)

Ogashawara, I., Mishra, D. R. & Gitelson, A. A. (2017): Remote Sensing of Inland Waters: Background and Current State-of-the-Art. In: Bio-optical Modeling and Remote Sensing of Inland Waters, Elsevier Hrsg.: Mishra, D. R., Ogashawara, I. & Gitelson, A. A. S. 1–24.

Olmanson, L. G., Brezonik, P. L. & Bauer, M. E. (2013): Airborne hyperspectral remote sensing to assess spatial distribution of water quality characteristics in large rivers: The Mississippi River and its tributaries in Minnesota. Remote Sensing of Environment **130**. S. 254–265.

Overstreet, B. T. & Legleiter, C. J. (2017): Removing sun glint from optical remote sensing images of shallow rivers. Earth Surface Processes and Landforms **42**. (Heft 2). S. 318–333.

Pope, R. M. & Fry, E. S. (1997): Absorption spectrum (380–700 nm) of pure water. II. Integrating cavity measurements. Appl. Opt. **36**. (Heft 33). S. 8710-8723 ST-Absorption spectrum (380-700 nm).

Pott, R. & Remy, D. (2008): Gewässer des Binnenlandes. 2. Aufl. Eugen Ulmer KG Stuttgart. .

Ramadas, M. & Samantaray, A. K. (2018): Applications of Remote Sensing and GIS in Water Quality Monitoring and Remediation: A State-of-the-Art Review. In: Water Remediation, Springer Singapore Singapore. Hrsg.: Bhattacharya, S., Gupta, A. B., Gupta, A. & Pandey, A. S. 225–246.

Ramoelo, A., Skidmore, A. K., Cho, M. A., Schlerf, M., Mathieu, R. & Heitkönig, I. M. A. (2012): Regional estimation of savanna grass nitrogen using the red-edge band of the spaceborne rapideye sensor. International Journal of Applied Earth Observation and Geoinformation **19**. (Heft 1). S. 151–162.

Ray, T. W. (1994): A FAQ on Vegetation in Remote Sensing. Pasadena. . http://www.remote-sensing.info/wp-content/uploads/2012/07/A_FAQ_on_Vegetation_in_Remote_Sensing.pdf.

Richter, R. & Schläpfer, D. (2019): Atmospheric / Topographic Correction for Airborne Imagery. http://www.atcor.info/pdf/atcor4_manual.pdf (18.10.2019)

Rijkeboer, M., Dekker, A. G. & Gons, H. J. (1997): Subsurface irradiance reflectance spectra of inland waters differing in morphometry and hydrology. Aquatic Ecology **31**. (Heft 3). S. 313–323.

Ritchie, J. C., Zimba, P. V. & Everitt, J. H. (2003): Remote sensing techniques to assess water quality. Photogrammetric Engineering & Remote Sensing **69**. (Heft 6). S. 695–704.

Robinson, M. C., Morris, K. P. & Dyer, K. R. (1999): Deriving fluxes of suspended particulate matter in the Humber estuary, UK, using airborne remote sensing. Marine Pollution Bulletin **37**. (Heft 3–7). S. 155–163.

Rossman, G. R. (1975): Spectroscopic and Magnetic Studies of Ferric lron Hydroxy Sulfates : Intensificadion of Color in Ferric lron Clusters Bridged by a Single Hydroxide lon. American Mineralogist **60**. S. 698–704.

Rowan, L. C., Goetz, A. F. H. & Ashley, R. P. (1977): DISCRIMINATION OF HYDROTHERMALLY ALTERED AND UNALTERED ROCKS IN VISIBLE AND NEAR INFRARED MULTISPECTRAL IMAGES. GEOPHYSICS **42**. (Heft 3). S. 522–535.

Rüttinger, L. & Scholl, C. (2017): Verantwortungsvolle Rohstoffgewinnung? Herausforderungen , Perspektiven, Lösungsansätze. Dessau-Roßlau. .

Sánchez, J. (2008): Acid Mine Drainage in the Iberian Pyrite Belt : an Overview with Special Emphasis on Generation Mechanisms , Aqueous Composition and Associated Mineral Phases. Conferencia invitada: Sánchez España, Macla **10**. S. 34–43.

Sardemann, H., Eltner, A. & Maas, H.-G. (2018): ACQUISITION OF GEOMETRICAL DATA OF SMALL RIVERS WITH AN UNMANNED WATER VEHICLE. ISPRS - International Archives of the Photogrammetry, Remote Sensing and Spatial Information Sciences **XLII**–**2**. (Heft June). S. 1023–1027.

Schachtschabel, P., Blume, H.-P., Hartge, K. H. & Schwertmann, U. (1976): Lehrbuch der Bodenkunde / Scheffer-Schachtschabel. 9. Aufl. Ferdinand Enke Verlag Stuttgart, Germany. . ISBN: 3-432-84779-3.

Schaffartzik, A., Mayer, A., Eisenmenger, N. & Krausmann, F. (2016): Global patterns of metal extractivism, 1950-2010: Providing the bones for the industrial society's skeleton. Ecological Economics **122**. S. 101–110.

Schmidt, S. I. (2015): 1.2 Abiotik und Stoffumsätzer. In: Grundwassergeprägte Lebensräume, Schweizerbart Science Publishers Stuttgart, Germany. Hrsg.: Brendelberger, H., Martin, P., Brunk, M. & Hahn, H. J. S. 15–19.

Schmutz, S. (2003): Einfluss erhöhter Schwebstoffkonzentration und Trübe auf Fische. (Heft September). S. 80.

Schönborn, W. (1992): Fließgewässerbiologie. Gustav Fischer Verlag Jena. . ISBN: 3334603962.

Schroeter, L. & Gläßer, C. (2011): Analyses and monitoring of lignite mining lakes in Eastern Germany with spectral signatures of Landsat TM satellite data. International Journal of Coal Geology **86**. (Heft 1). S. 27–39.

Schultze, M., Pokrandt, K. H. & Hille, W. (2010): Pit lakes of the Central German lignite mining district: Creation, morphometry and water quality aspects. Limnologica **40**. (Heft 2). S. 148–155.

Shao, J. (1993): Linear Model Selection by Cross-validation. Journal of the American Statistical Association **88**. (Heft 422). S. 486–494.

Shatwell, T., Nicklisch, A. & Köhler, J. (2012): Temperature and photoperiod effects on phytoplankton growing under simulated mixed layer light fluctuations. Limnology and Oceanography **57**. (Heft 2). S. 541–553.

Sheret, M. (1984): The coefficient of variation: Weighting considerations. Social Indicators Research **15**. (Heft 3). S. 289–295.

Sherman, D. M. & Waite, T. D. (1985): Electronic spectra of Fe3+ oxides and oxide hydroxides in the near IR to near UV. American Mineralogist **70**. (Heft 11–12). S. 1262–1269.

Singer, P. C. & Stumm, W. (1970): Acidic Mine Drainage: The Rate-Determining Step. Science **167**. (Heft 3921). S. 1121–1123.

Spectral Sciences Inc. (SSI) & Air Force Research Laboratory (AFRL) (2019): Aerosol Model. http://modtran.spectral.com/modtran_home#help (24.11.2019)

Spengler, C. & Berkhoff, S. E. (2015): 1.1.2 Die Lebensbedingungen. In: Grundwassergeprägte Lebensräume, Schweizerbart Science Publishers Stuttgart, Germany. Hrsg.: Brendelberger, H., Martin, P., Brunk, M. & Hahn, H. J. S. 14–15.

Steffen, W., Broadgate, W., Deutsch, L., Gaffney, O. & Ludwig, C. (2015): The trajectory of the anthropocene: The great acceleration. Anthropocene Review **2**. (Heft 1). S. 81–98.

Stumpf, R. P. & Pennock, J. R. (1991): Remote estimation of the diffuse attenuation coefficient in a moderately turbid estuary. Remote Sensing of Environment **38**. (Heft 3). S. 183–191.

Thurman, E. M. (1985): Organic Geochemistry of Natural Waters. Springer Netherlands Dordrecht. .

Uhlig, U., Radigk, S., Uhlmann, W., Preuß, V. & Koch, T. (2016): Iron removal from the Spree River in the Bühlow pre-impoundment basin of the Spremberg reservoir. https://www.imwa.info/docs/imwa_2016/IMWA2016_Uhlig_75.pdf (13.02.2020)

Uhlmann, W., Theiss, S. & Fanke, C. (2010): Untersuchung der hydrochemischen und ökologischen Auswirkungen der Exfiltration von eisenhaltigem, saurem Grundwasser in die Kleine Spree (nördlich Speicher Burghammer) und in die Spree (Ruhlmühle) - Abschlussbericht Teil 1: Erkundung (Mai 2010). https://www.lmbv.de/files/LMBV/Dokumente/Wassermanagement/Verockerung der Spree/Studien/Studie-Eisenbelastung-Suedraum-Spree-2010.pdf (18.02.2020)

Uhlmann, W., Theiss, S., Nestler, W. & Claus, T. (2013a): Studie zu den Auswirkungen des Grundwasseranstiegs auf die Beschaffenheit der Oberflächengewässer in den Sanierungsgebieten B1 (Seese/Schlabendorf) und B2 (Greifenhain/Gräbendorf). Institut für Wasser und Boden Dr. Uhlmann Dresden. .

Uhlmann, W., Theiss, S., Nestler, W., Zimmermann, K. & Claus, T. (2012): Weiterführende Untersuchungen zu den hydrochemischen und ökologischen Auswirkungen der Exfiltration von eisenhaltigem, saurem Grundwasser in die Kleine Spree und in die Spree Projektphase 2: Präzisierung der Ursachen und Quellstärken für die hohe Eisenbel. https://www.braunespreewatch.de/images/studien/2012-09-30_Zweite Eisen-Studie_LMBV.pdf (27.02.2020)

Uhlmann, W., Theiss, S., Zimmermann, K., Nestler, W., Westphal, E. & Claus, T. (2013b): Fortführung der Studie zur Talsperre Spremberg - Abschlussbericht (Dezember 2013). https://docplayer.org/83470767-Fortfuehrung-der-studie-zur-talsperre-spremberg-abschlussbericht-dezember-2013.html (13.02.2020)

Ulrich, C., Bannehr, L. & Lausch, A. (2016): Ableitung von Eisen (II, III) oxid in Fließgewässern mittels Multispektraldaten. https://www.dgpf.de/src/tagung/jt2016/proceedings/papers/04_DLT2016_Ulrich_et_al.pdf (25.11.2016)

Ulrich, C., Schulze, M. & Bannehr, L. (2018): Spektrale In -Situ - Messungen als Basis für ein flächendeckendes Monitoring verockerter Gewässer. http://www.fghw.de/download/forumsbeitraege/39.18_Gesamt.pdf (17.02.2019)

UN DESA (Population Division) (2019): Weltbevölkerung von 1950 bis 2019 (in Milliarden). https://de.statista.com/statistik/daten/studie/1716/umfrage/entwicklung-der-weltbevoelkerung/ (02.12.2019)

van der Meer, F. D., van der Werff, H. M. A. A. & van Ruitenbeek, F. J. A. A. (2014): Potential of ESA's Sentinel-2 for geological applications. Remote Sensing of Environment **148**. S. 124–133.

Velasco, F., Alvaro, A., Suarez, S., Herrero, J. M. & Yusta, I. (2005): Mapping Fe-bearing hydrated sulphate minerals with short wave infrared (SWIR) spectral analysis at San Miguel mine

environment, Iberian Pyrite Belt (SW Spain). Journal of Geochemical Exploration **87**. (Heft 2). S. 45–72.

Vogelsang, D. (1998): Grundwasser. Springer Berlin Heidelberg. . ISBN: 978-3-642-64344-6.

Vouri, K.-M. (1995): Direct and indirect effects of iron on river ecosystems. Annales Zoologici Fennici **32**. (Heft 3). S. 317–329.

Wahlström, M., Kaartinen, T., Mäkinen, J., Punkkinen, H., Häkkinen, A., Mamelkina, M., Tuunila, R., Lamberg, P., Gonzales, M. S., Sandru, M., Johnsen, H., Andreassen, J.-P., Harðardóttir, V., Franzson, H., Sund, C. & Jansson, K. (2017): Water Conscious Mining (WASCIOUS). Nordic Council of Ministers Copenhagen. . ISBN: 9789289349628.

Wang, J. J. & Lu, X. X. (2010): Estimation of suspended sediment concentrations using Terra MODIS: An example from the Lower Yangtze River, China. Science of the Total Environment **408**. (Heft 5). S. 1131–1138.

Wetzel, R. G. (2001): Limnology: Lake and River Ecosystems. 3. Aufl. Academic Press, Elsevier San Diego [u.a.]. . ISBN: 978-0-12-744760-5.

Weyhenmeyer, G. A., Prairie, Y. T. & Tranvik, L. J. (2014): Browning of boreal freshwaters coupled to carbon-iron interactions along the aquatic continuum. PLoS ONE **9**. (Heft 2).

Wickersheim, K. A. & Lefever, R. A. (1962): Absorption spectra of ferric iron-containing oxides. The Journal of Chemical Physics **36**. (Heft 3). S. 844–850.

Williams, D. J., Bigham, J. M., Cravotta, C. A., Traina, S. J., Anderson, J. E. & Lyon, J. G. (2002): Assessing mine drainage pH from the color and spectral reflectance of chemical precipitates. Applied Geochemistry **17**. (Heft 10). S. 1273–1286.

Zander, J. (2007): File:Pyrite Fools Gold Macro 1.JPG. https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Pyrite_Fools_Gold_Macro_1.JPG (29.01.2020)

Zaneveld, J. R. V (1995): A theoretical derivation of the dependence of the remotely sensed reflectance of the ocean on the inherent optical properties. Journal of Geophysical Research **100**. (Heft C7). S. 13135.

I. Anlage

I.I. Zum Kapitel 4: Datenerfassung

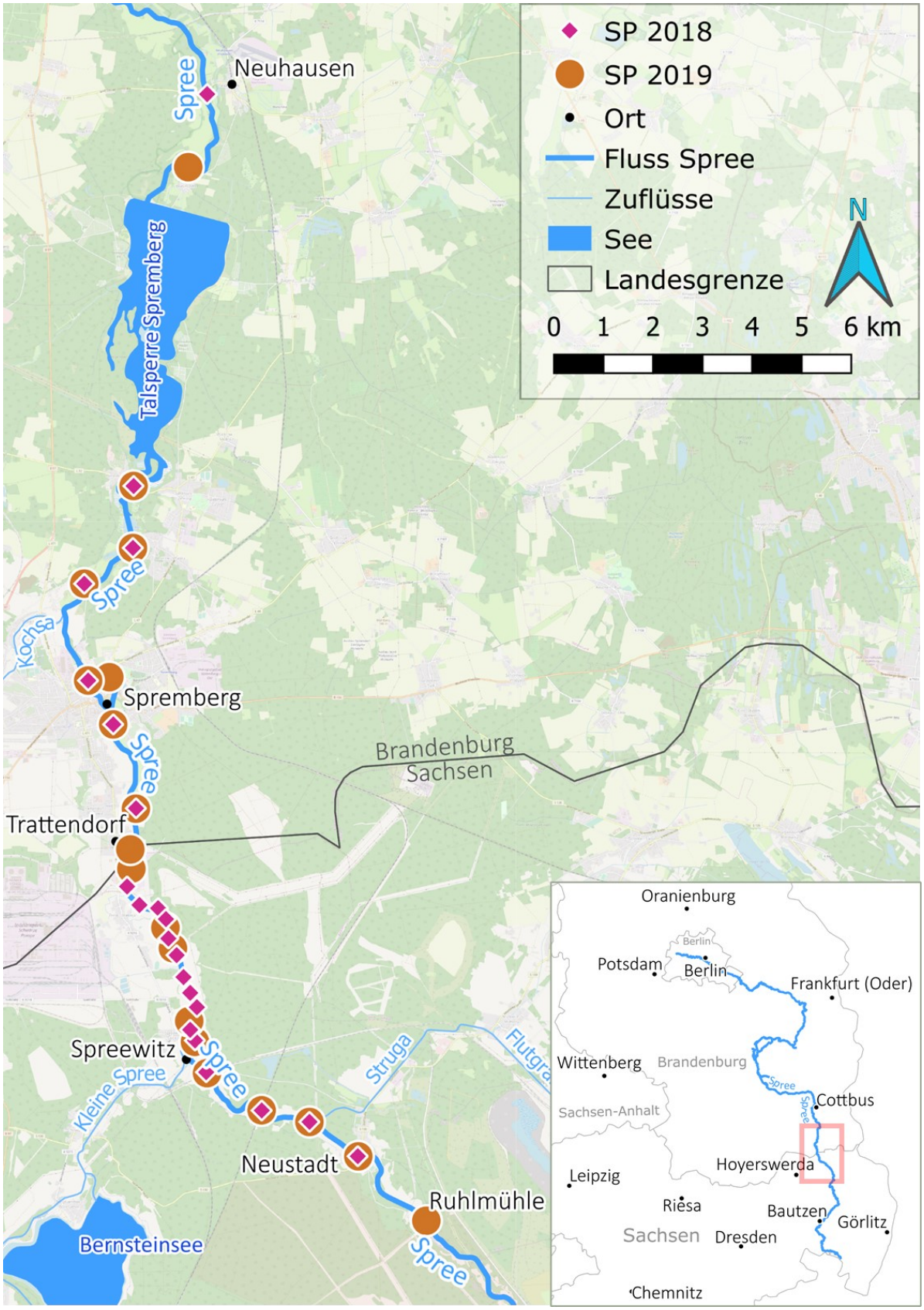

Abbildung I-1: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Ruhlmühle bis Neuhausen (Spree) mit den Probenentnahmestellen (SP) vom 04.09.2018 und 22.09.2019. In der Übersichtskarte ist das Untersuchungsgebiet mit einem roten Rahmen markiert.
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

Tabelle I-1: Koordinatenliste der Messstellen vom 04.09.2018.

SP ID	X	Y	SP ID	X	Y
S20_1	462059,20	5704083,00	**S22_2**	457125,50	5712787,49
S20_2	461084,10	5704775,50	**S22_3**	456618,50	5713671,80
S20_3	460120,80	5705005,30	**S22U_1**	458237,10	5708471,57
S20_4	458999,32	5705777,30	**S22U_2**	458187,36	5708862,95
S21_1	458774,37	5706416,16	**S22U_3**	458029,46	5709082,89
S21U_2	458676,98	5706631,39	**S22U_4**	457653,55	5709147,53
S21U_3	458812,20	5707085,77	**S22U_5**	457403,70	5709520,04
S21U_4	458677,15	5707375,87	**S23_1**	456540,00	5715622,70
S21U_5	458542,24	5707693,60	**S23_2**	457521,72	5716345,39
S21U_6	458403,69	5708135,95	**S23_3**	457535,66	5717593,30
S22_1	457584,072	5711096,01	**S24_1**	459019,20	5725492,90

Koordinatensystem: WGS 84 / UTM Zone 33N
EPSG:32633

Tabelle I-2: Koordinatenliste der Messstellen vom 22.09.2019.

SP ID	X	Y	SP ID	X	Y
1	463442,41	5702782,09	**11**	457420,64	5710163,18
2	462069,37	5704079,78	**12**	457580,93	5711088,3
3	461082,88	5704773,53	**13**	457124,47	5712787,23
4	460118,11	5705008,4	**14**	456618,48	5713671,5
5	459016,49	5705757,86	**15**	456951,25	5713718,56
6	458772,88	5706389,15	**16**	456538,49	5715625,24
7	458657,78	5706807,15	**17**	457523,17	5716344,44
8	458328,30	5708275,71	**18**	457535,46	5717593,52
9	458176,64	5708688,98	**19**	458637,93	5724020,79
10	457489,91	5709878,72	**-**	-	-

Koordinatensystem: WGS 84 / UTM Zone 33N
EPSG:32633

***Abbildung I-2**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Neustadt bis Neuhausen (Spree) mit den Probenentnahmestellen (SP) vom 04.09.2018. Die dazugehörige Koordinatenliste ist in Tabelle I-1 vorzufinden.*

Geodatenquellen: *© GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

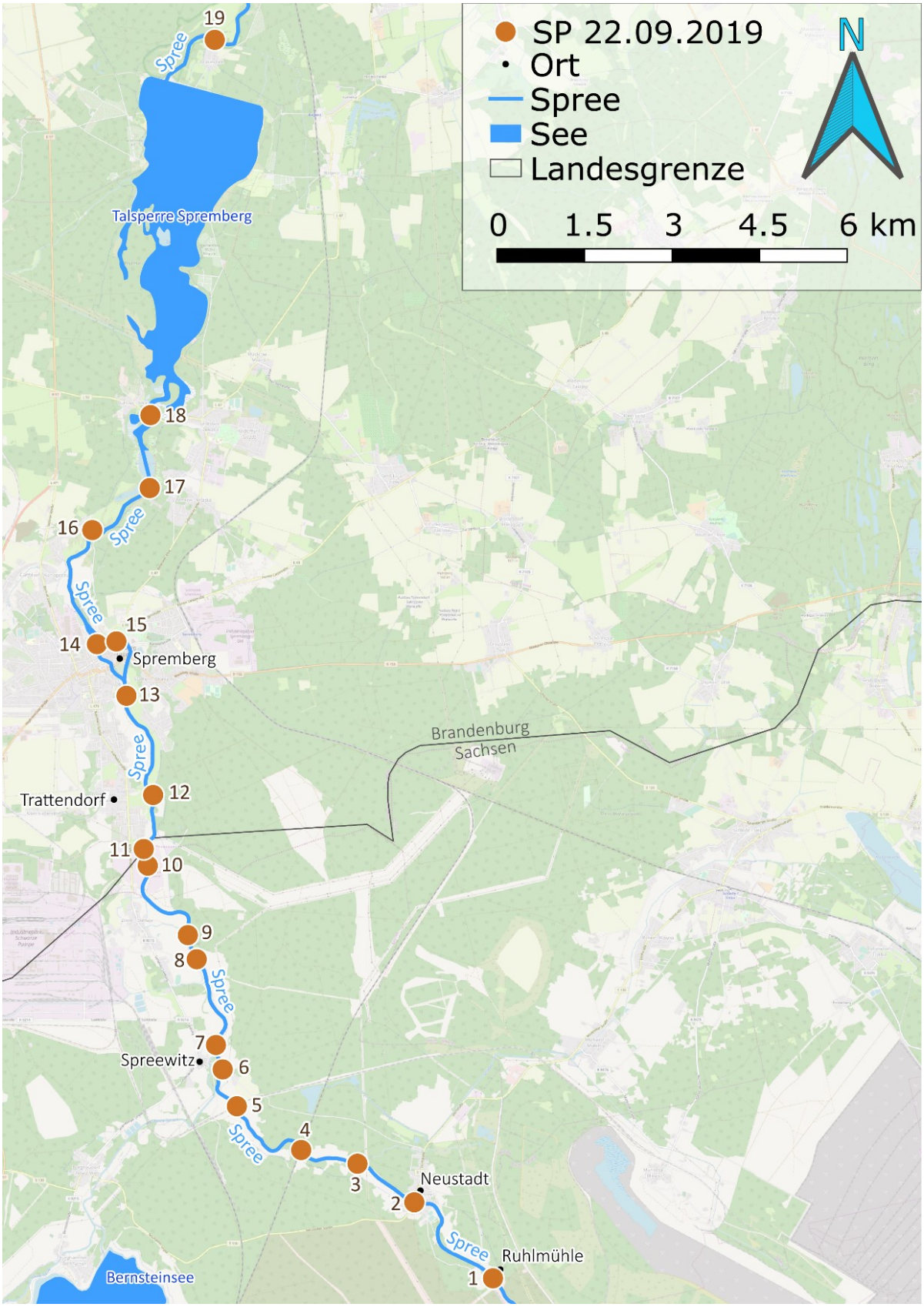

***Abbildung I-3**: Darstellung des Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Ruhlmühle bis Bräsinchen mit den Probenentnahmestellen (SP) vom 22.09.2019. Die dazugehörige Koordinatenliste ist in Tabelle I-2 vorzufinden.*

Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

Tabelle I-3: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 04.09.2018 im Labor der HSA

SP ID	Gesamteisen [mg/L]	Eisen(II) [mg/L]	Eisen(III) [mg/L]	Sulfat [mg/L]	DOC [mg/L]	TOC [mg/L]
S20_1		-	-	-	-	-
S20_2	8,45	0,13 *)	-	461	4,1	4,2
S20_3		-	-	-	-	-
S20_4	11,10	0,19 *)	-	473	3,4	4,0
S21_1	10,60	5,74	4,86	475	3,5	5,9
S21U_2	10,90	5,72	5,18	480	3,7	5,5
S21U_3	8,71	4,64	4,07	471	5,0	5,5
S21U_4	8,57	4,63	3,94	472	2,1	4,5
S21U_5	8,73	4,41	4,32	489	3,7	4,6
S21U_6	7,53	3,18	4,36	602	3,2	4,4
S22U_1	6,46	2,96	3,50	606	2,9	4,5
S22U_2	6,49	2,80	3,69	588	2,7	4,7
S22U_3	6,22	2,65	3,57	588	2,5	4,0
S22U_4	6,46	2,50	3,96	595	2,0	4,0
S22U_5	5,03	2,17	2,86	600	3,7	5,1
S22_1	-	-	-	-	-	-
S22_2	-	-	-	-	-	-
S22_3	3,52	0,08	3,44	564	3,3	3,7
S23_1	3,41	0,06	3,35	564	2,5	3,6
S23_2	2,91	0,02	2,89	569	3,4	3,8
S23_3	2,11	0,01	2,1	568	3,5	4,0
S24_1	0,45	0,02	0,43	557	2,4	4,2

*) keine Ansäuerung vor Ort

- kein Messwert

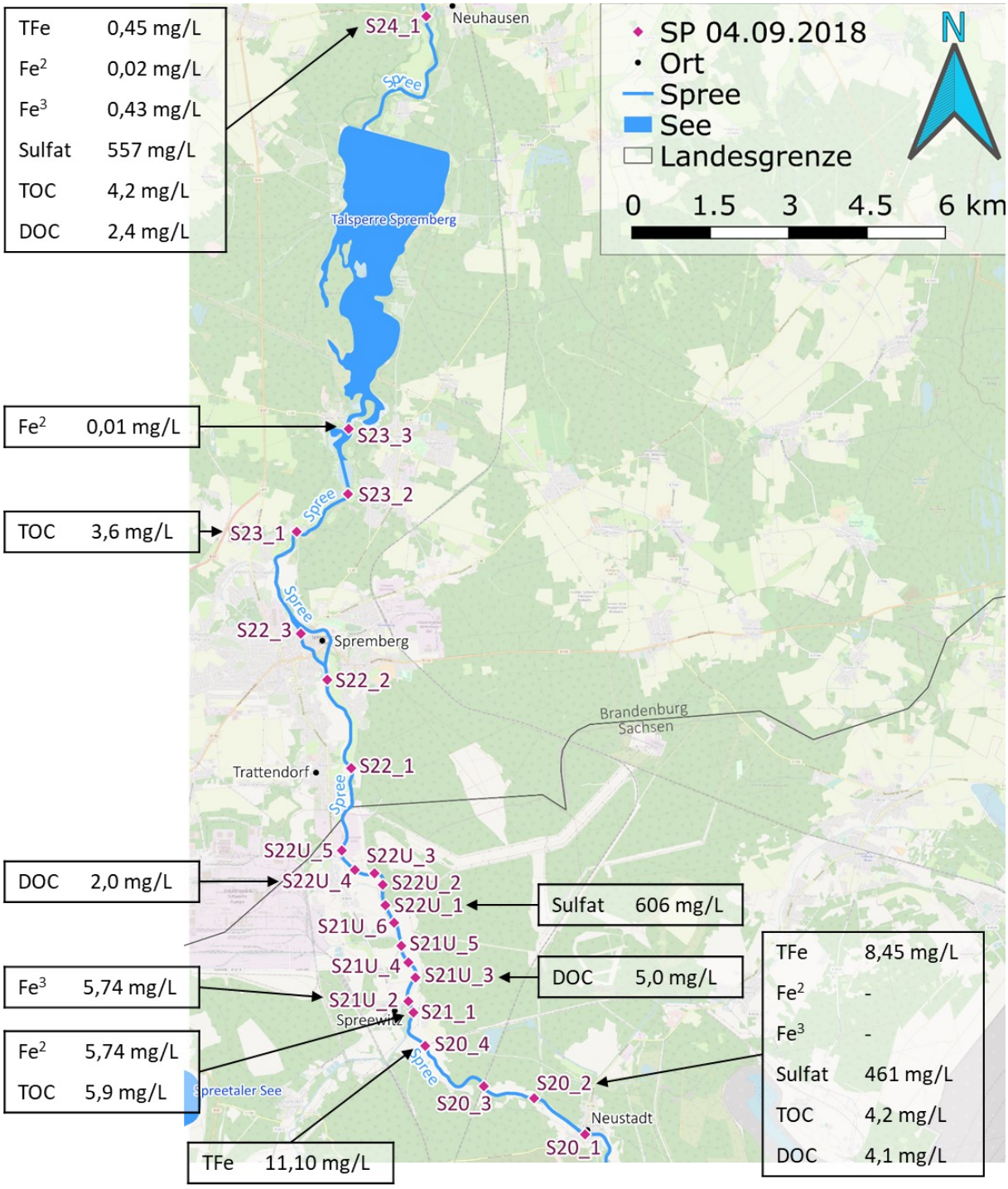

Abbildung I-4: Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 04.09.2018. Die Gewässerproben wurden im Labor der HSA analysiert. (TFe: Gesamteisen, Fe^2: Eisen(II), Fe^3: Eisen(III))
Geodatenquellen: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

Tabelle I-4: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 04.09.2018 im Labor des IGB.

SP ID	Gesamteisen [mg/L]	Eisen(II) [mg/L]	Eisen(III) [mg/L]	DOC [mg/L]	TOC [mg/L]	Sulfat [mg/L]	Chl-a [µg/L]
S20_1	4,63	2,64	1,99	4,48	5,08	347	4,70
S20_2	7,41	5,11	2,30	4,11	4,78	351	4,30
S20_3	8,75	6,74	2,01	3,79	4,83	357	3,29
S20_4	8,79	7,26	1,54	3,89	4,78	361	3,09
S21_1	8,09	6,40	1,69	3,84	4,28	356	3,53
S21U_2	-	-	-	-	-	-	-
S21U_3	-	-	-	-	-	-	3,00
S21U_4	-	-	-	-	-	-	-
S21U_5	-	-	-	-	-	-	2,88
S21U_6	-	-	-	-	-	-	4,70
S22U_1	4,83	3,28	1,55	3,99	4,40	430	2,38
S22U_2	-	-	-	-	-	-	-
S22U_3	-	-	-	-	-	-	2,35
S22U_4	-	-	-	-	-	-	-
S22U_5	-	-	-	-	-	-	1,69
S22_1	4,11	1,87	2,24	3,97	4,26	417	2,14
S22_2	-	-	-	-	-	-	-
S22_3	2,89	1,02	1,87	4,14	4,35	417	2,00
S23_1	2,49	0,62	1,87	4,07	4,43	417	1,88
S23_2	2,48	<0,05	-	4,04	4,36	418	1,61
S23_3	1,75	<0,05	-	4,02	4,46	417	2,17
S24_1	0,43	<0,05	-	4,80	5,20	410	18,66

- kein Messwert

< 0,05 kleiner als Bestimmungsgrenze

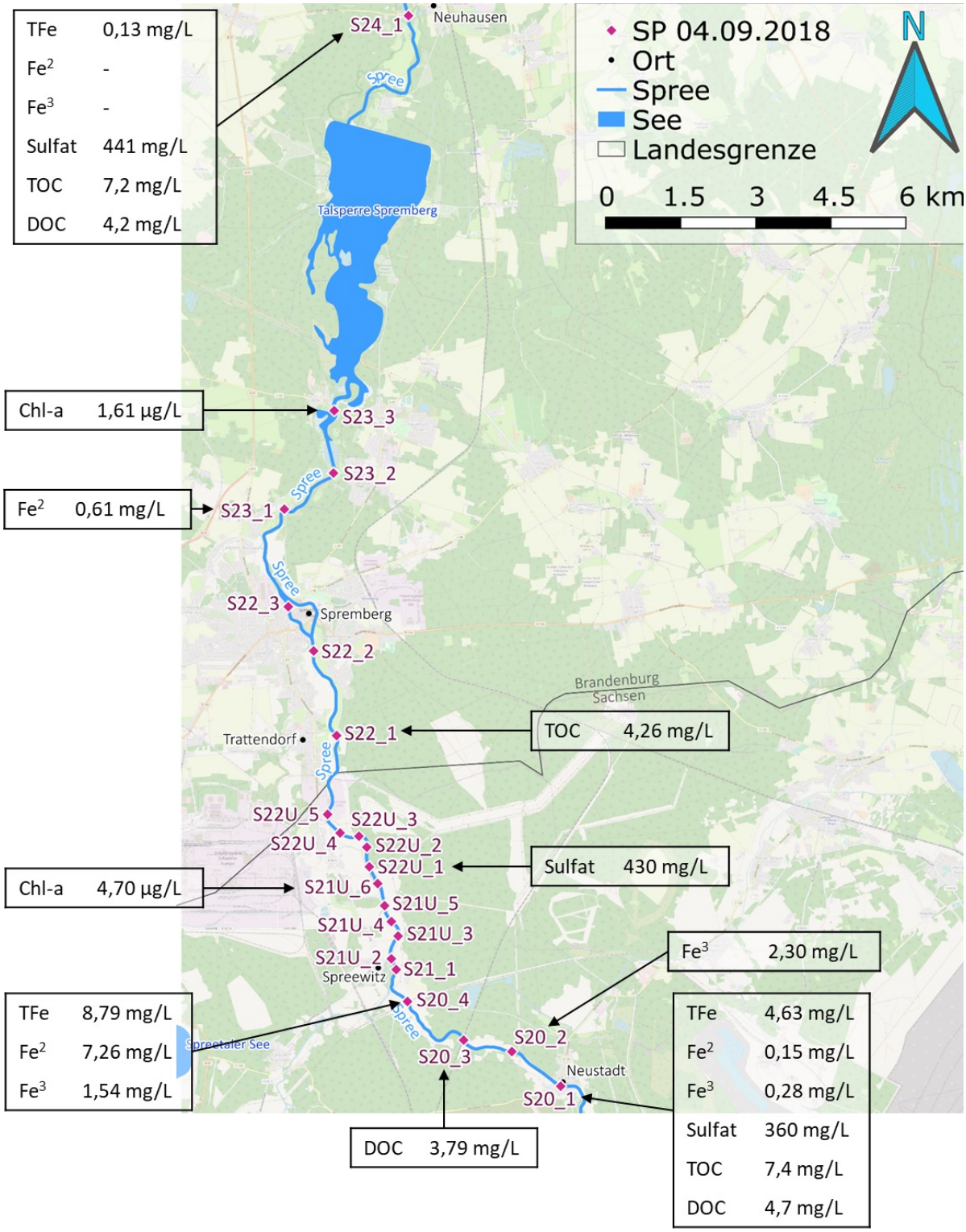

Abbildung I-5: *Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 04.09.2018. Die Gewässerproben wurden im Labor des IGB analysiert. (TFe: Gesamteisen, Fe^2: Eisen(II), Fe^3: Eisen(III))*
Geodatenquellen: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

Tabelle I-5: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 22.09.2019 im Labor der HSA.

SP ID	Gesamteisen [mg/L]	Eisen(II) [mg/L]	Eisen(III) [mg/L]	Sulfat [mg/L]	DOC [mg/L]	TOC [mg/L]
1	0,43	0,15	0,28	360	4,7	7,4
2	3,68	2,31	1,37	352	4,4	6,5
3	4,69	2,72	1,97	345	4,2	10,5
4	6,95	4,9	2,05	710	4,3	10,6
5	8,16	5,45	2,71	346	4,7	7,4
6	8,06	5,55	2,51	361	4,4	5,6
7	8,43	4,82	3,61	340	4,1	5,2
8	6,58	2,76	3,82	426	3,9	5,0
9	6,46	1,41	5,05	418	3,8	4,4
10	5,88	1,75	4,13	433	4,5	5,5
11	5,68	1,56	4,12	424	4,0	4,6
12	5,77	1,33	4,44	433	4,0	4,9
13	5,16	0,82	4,34	423	4,3	5,0
14	4,4	2,05	2,35	427	4,4	5,2
15	5,14	1,79	3,35	426	4,1	5,9
16	5,16	0,91	4,25	405	4,5	9,8
17	3,44	0,36	3,08	405	4,4	5,7
18	4,43	0,92	3,51	400	4,2	8,7
19	0,13	<0,1	-	441	4,2	7,2

- kein Messwert

< 0,1 kleiner als Bestimmungsgrenze

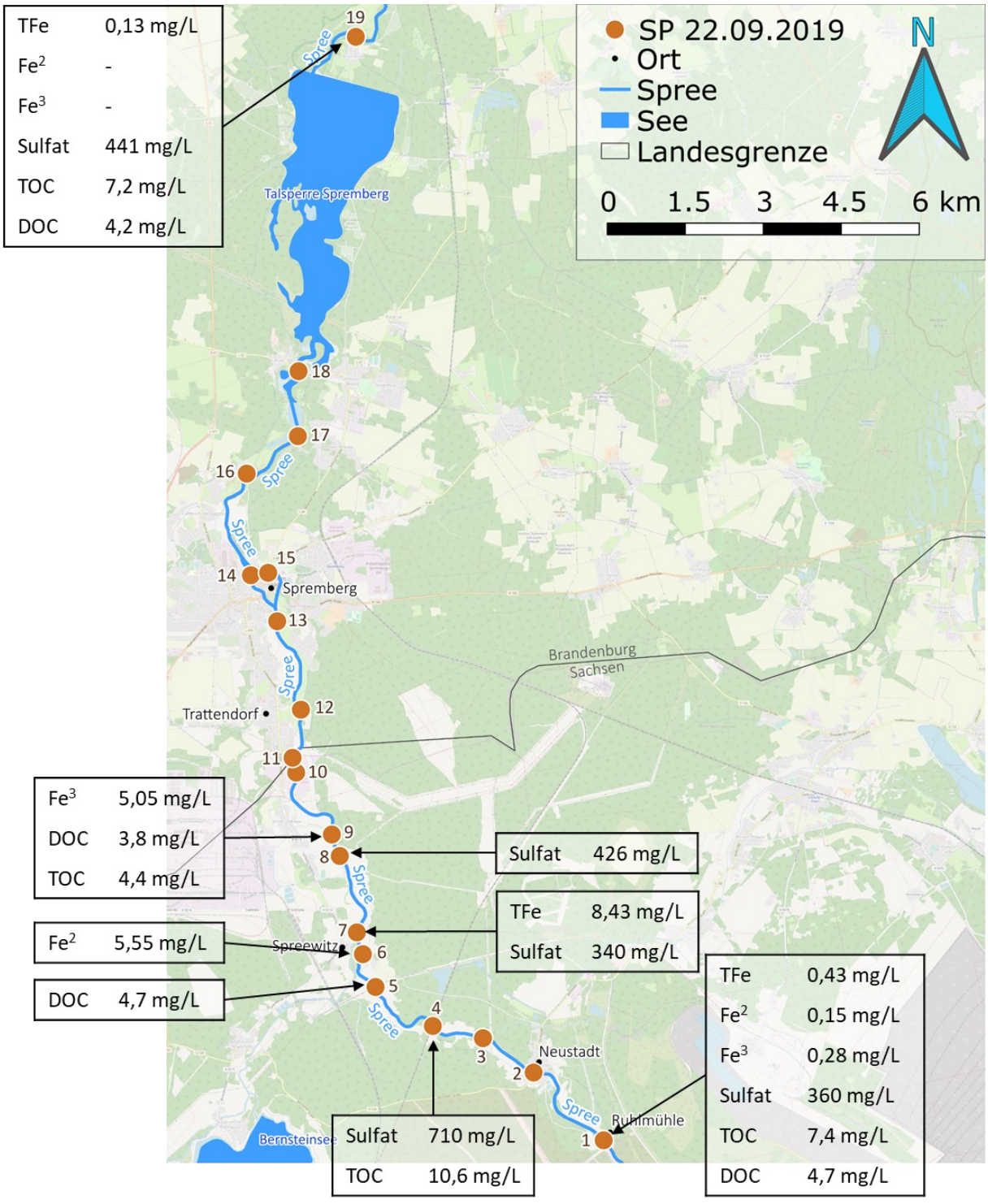

***Abbildung I-6**: Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 22.09.2019. Die Gewässerproben wurden im Labor der HSA analysiert. (TFe: Gesamteisen, Fe^2: Eisen(II), Fe^3: Eisen(III))*
Geodatenquellen: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

Tabelle I-6: Auflistung der analysierten Gewässerproben vom 22.09.2019 im Labor des IGB.

SP ID	Gesamteisen [mg/L]	Eisen(II) [mg/L]	Eisen(III) [mg/L]	Sulfat [mg/L]	Chl-a. [µg/L]
1	0,7	0,04	0,66	356	11,9
2	2,8	2,19	0,61	362	12,31
3	3,8	2,45	1,35	364	9,76
4	5,7	4,53	1,17	369	10,64
5	6,3	4,47	1,83	367	9,96
6	6,3	5,17	1,13	366	11,04
7	7,0	5,28	1,72	336	10,20
8	4,9	3,1	1,8	436	7,41
9	4,7	2,74	1,96	434	7,06
10	3,9	2,00	1,9	422	6,92
11	3,9	1,89	2,01	420	7,18
12	4,00	1,52	2,48	421	7,03
13	3,2	0,94	2,26	421	6,63
14	2,3	0,58	1,72	426	6,15
15	3,1	0,64	2,46	419	6,32
16	3,2	0,31	2,89	398	8,66
17	1,8	<0,05	-	399	6,43
18	2,9	<0,05	-	399	6,35
19	0,6	<0,05	-	430	10,39

- kein Messwert

< 0,05 kleiner als Bestimmungsgrenze

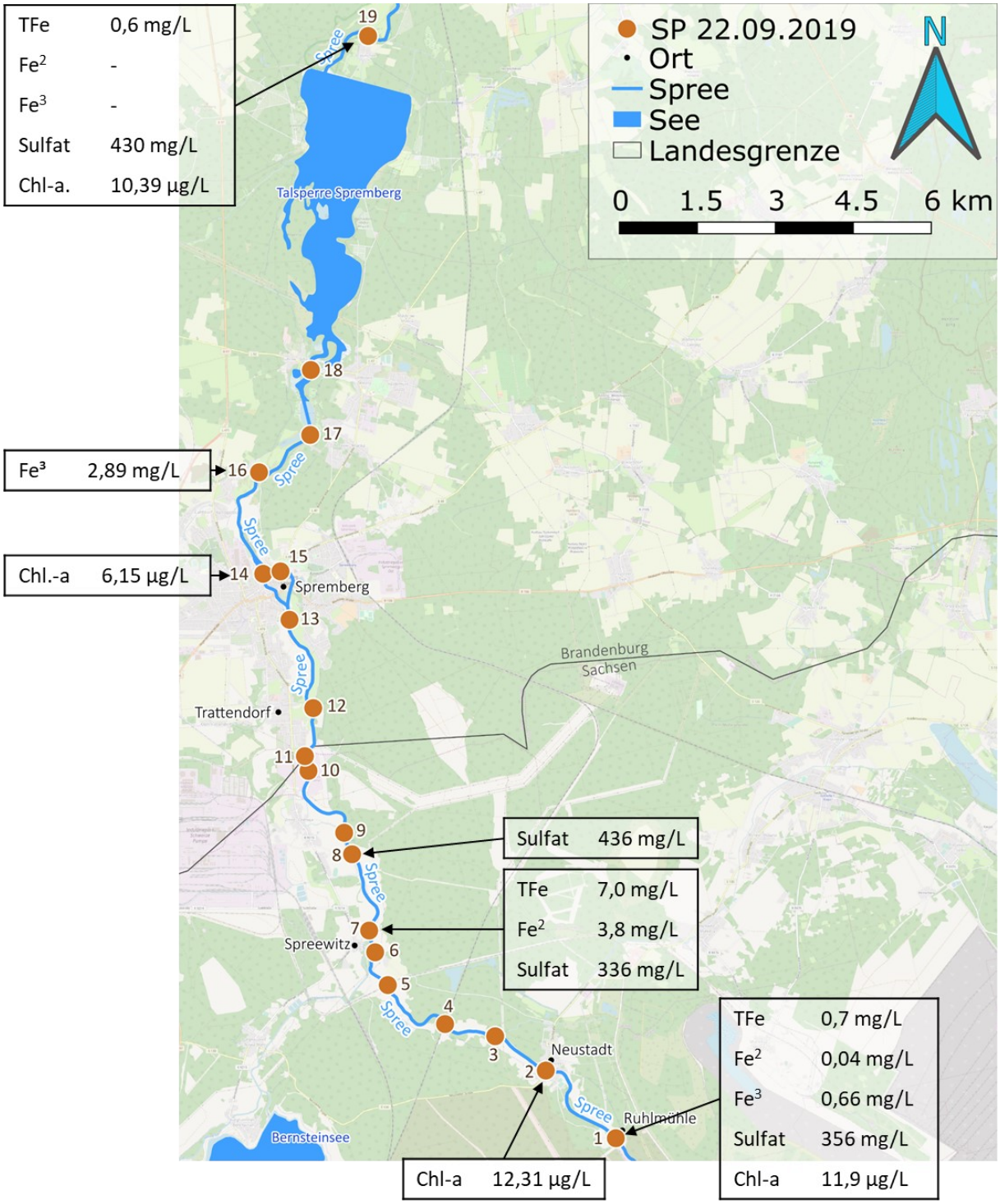

Abbildung I-7: Visualisierung der Konzentrationsänderungen je Gewässerinhaltsstoff zum Tag der Probenentnahmestellen am 22.09.2019. Die Gewässerproben wurden im Labor des IGB analysiert. (TFe: Gesamteisen, Fe^2: Eisen(II), Fe^3: Eisen(III))
Geodatenquellen: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

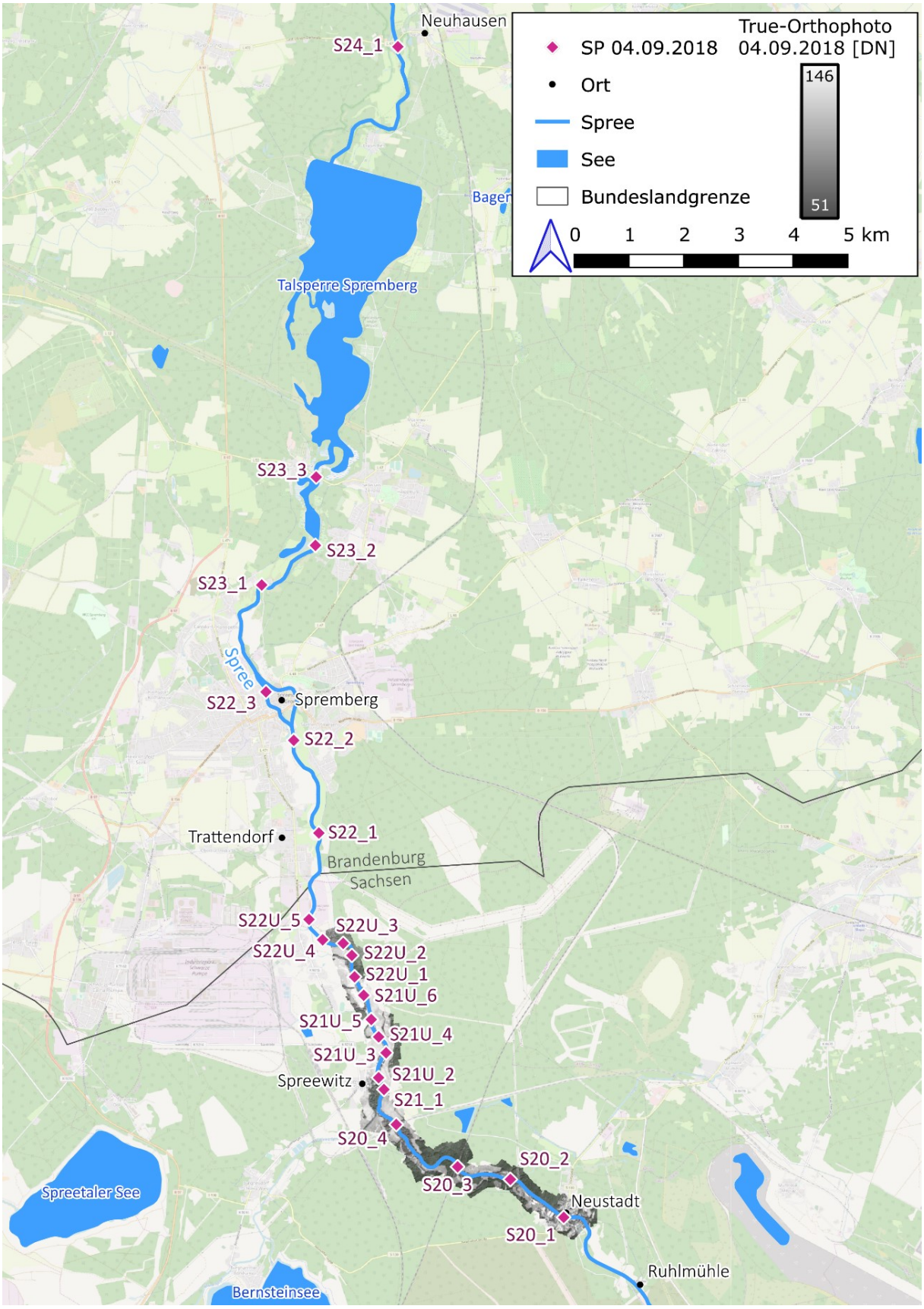

***Abbildung I-8**: Abdeckung des abgeleiteten True-Orthophotos mittels der RGB-Daten vom 04.09.2018 in Grauwertstufen [DN] (8-bit).*
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

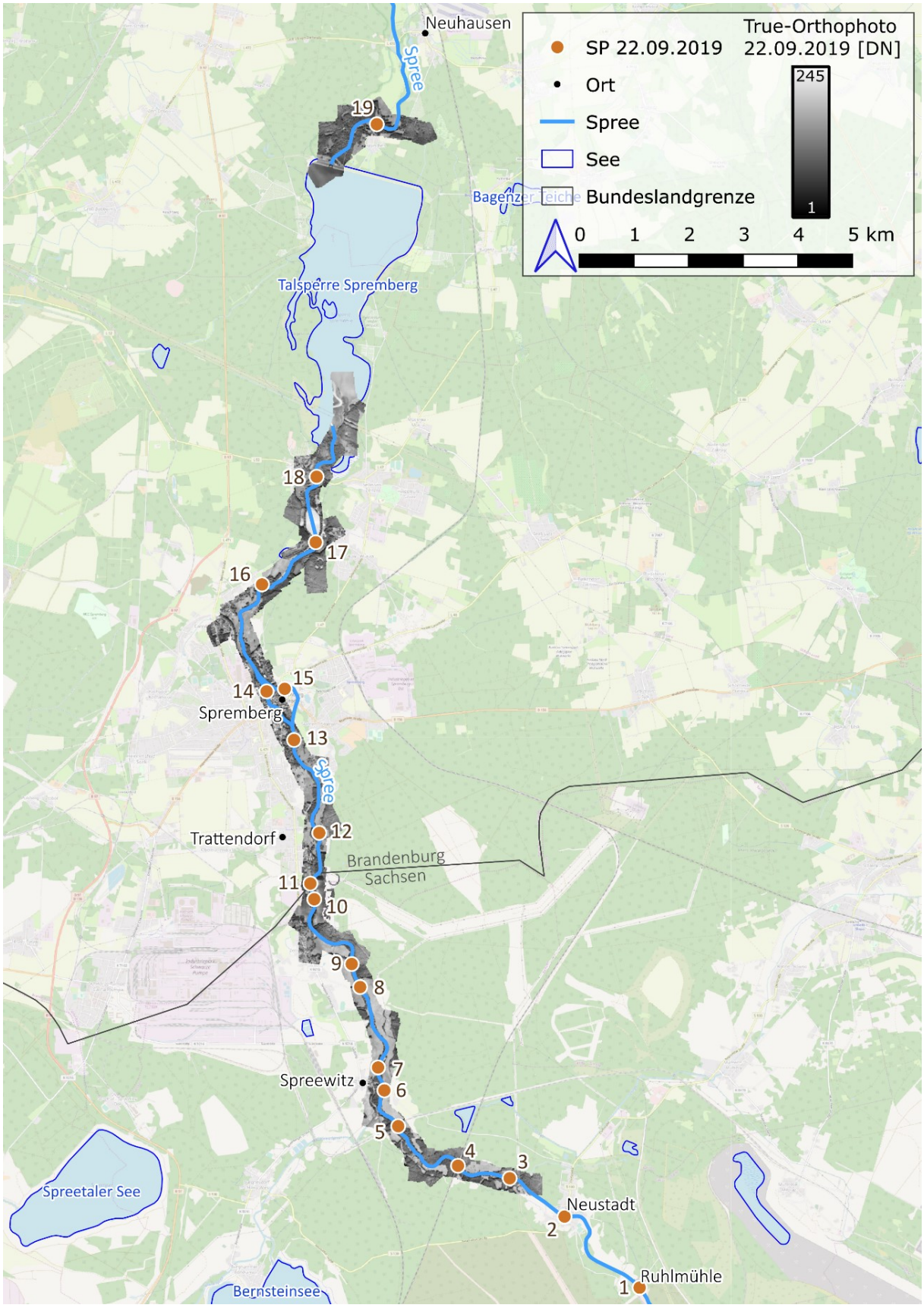

***Abbildung I-9**: Abdeckung des abgeleiteten True-Orthophotos mittels der RGB-Daten vom 22.09.2019 in Grauwertstufen [DN] (8-bit).*
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

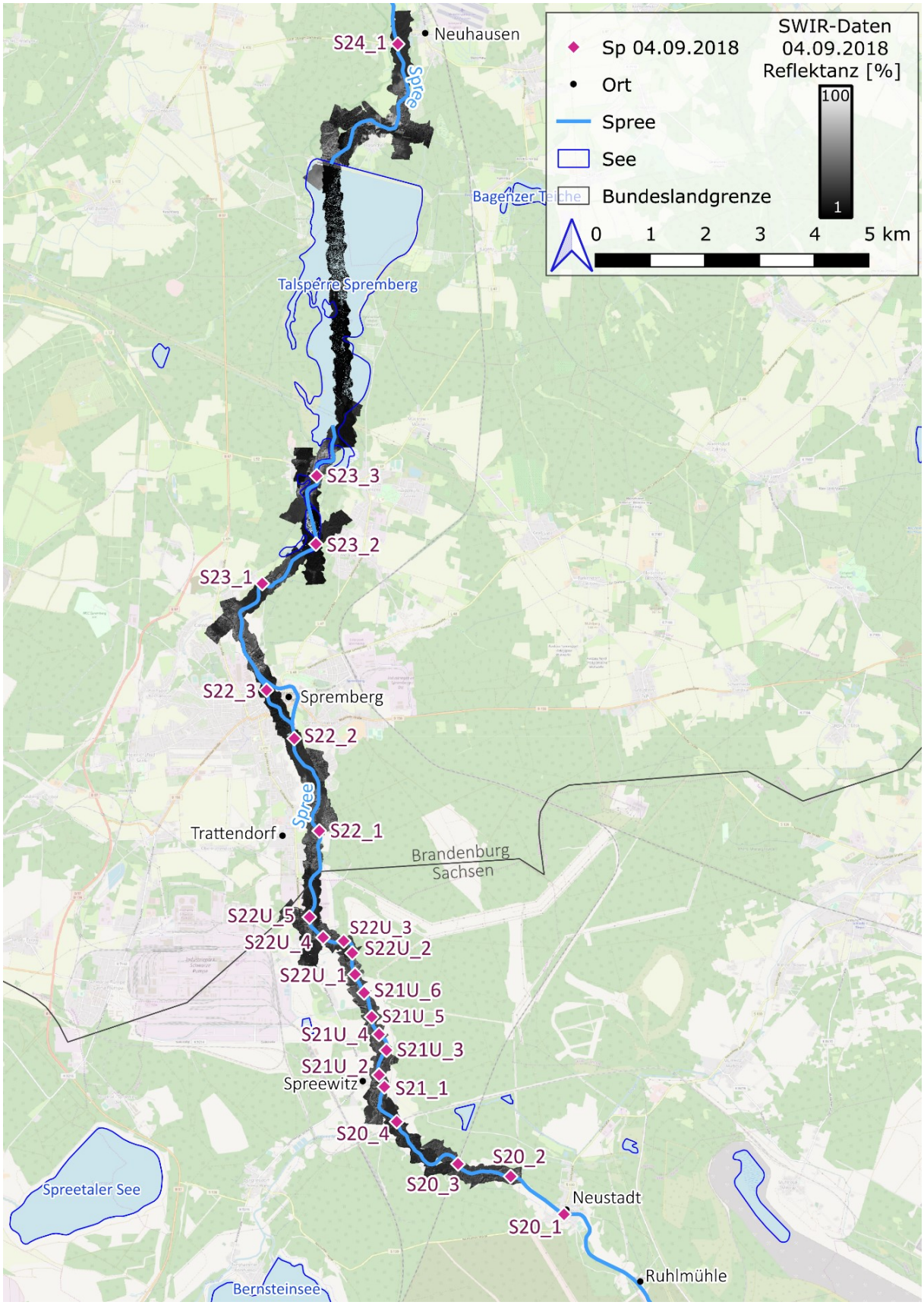

***Abbildung I-10**: Abdeckung der erfassten Daten des Sensors HySpex SWIR 384 vom 04.09.2018. Die dargestellten Streifen stellen einen Kanal in Reflektanz [%] dar.*
Geodatenquellen: *© GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

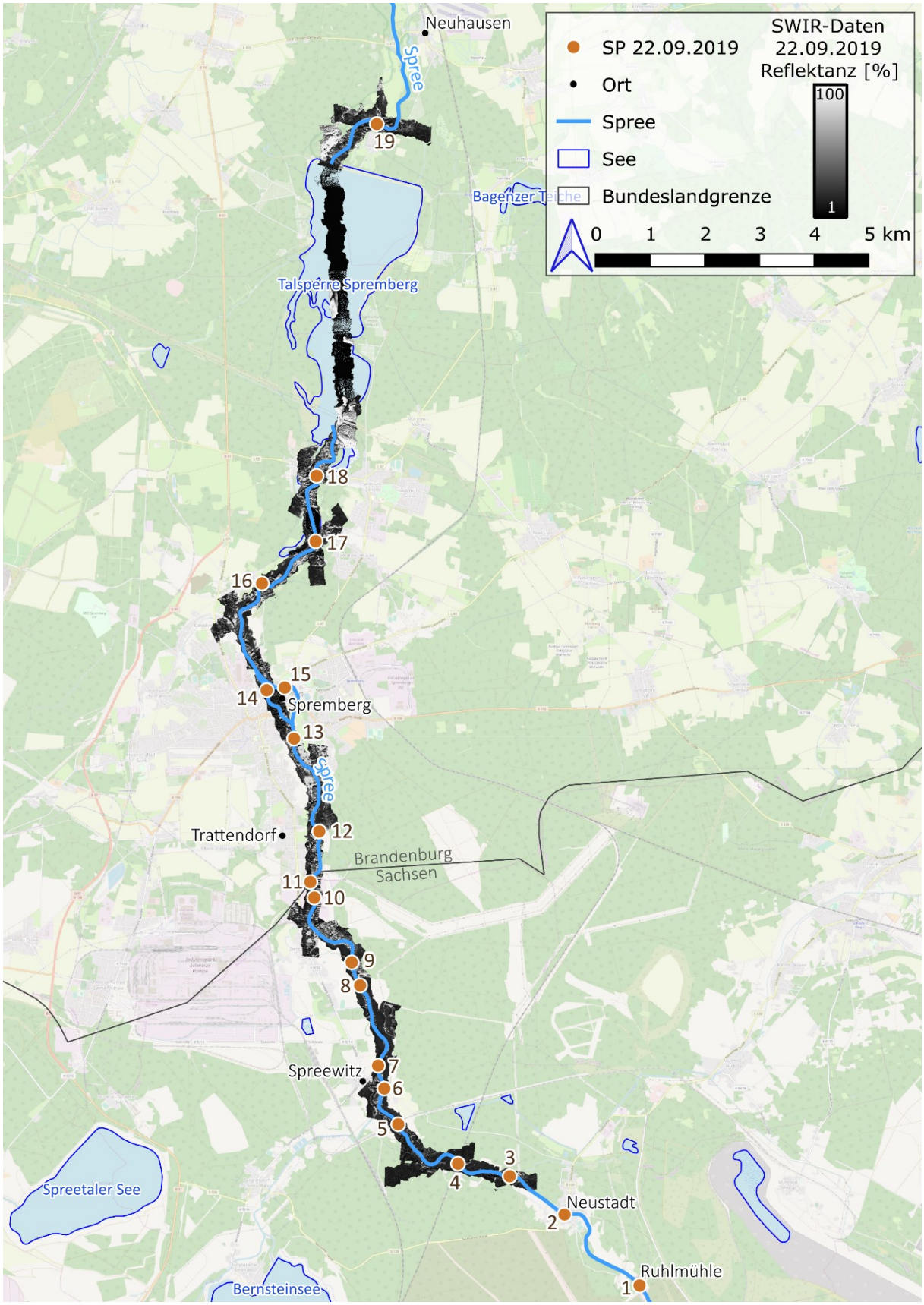

***Abbildung I-11**: Abdeckung der erfassten Daten des Sensors HySpex SWIR 384 vom 22.09.2019. Die dargestellten Streifen stellen einen Kanal in Reflektanz [%] dar.*
Geodatenquellen: *© GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

I.II. Zum Kapitel 5: Spektralindizes

Tabelle I-7: Auflistung einzelner Wellenlängen basierend auf der spektralen Ausprägung sowie den spezifischen Spektraleigenschaften der aktiven Wasserinhaltsstoffe.

Wellenlänge	Beschreibung	Quelle
420 nm	Korrelation von Eisen(II) und DOC	Weyhenmeyer et al. (2014)
465 nm	Hohe Sensitivität für CDOM und Chl-a Absorption durch Eisenoxide	Gitelson et al. (1993), Rowan et al. (1977)
520 nm	Zunahme der Absorption von gelöstem Eisen(II)	Asmala et al. (2012)
560 nm	Hohe Sensitivität von TSM	Gitelson et al. (1993)
580 nm	Geringe Absorption durch Chl-a Erhöhte Streuung durch TSM	Gitelson et al. (1993), Haardt und Maske (1987)
650 nm	Starke Streuung aufgrund der Eisenflocken	Anderson und Robbins (1998), Williams et al. (2002)
675 nm	Maximale Absorption durch Chl-a	Haardt und Maske (1987)
685 nm	Fluoreszenz von Chl-a.	Gordon (1979)
706 nm	Streuung durch TSM	Dekker (1993, S. 135)
750 nm	Reflektanz ausschlich von TSM Wasser absorbiert zunehmend	Anderson und Robbins (1998), Rijkeboer et al. (1997), Williams et al. (2002)
770 m,	Hohe Sensitivität mit TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
800 nm	Geringe Absorption von Wasser Hohe Sensitivität mit TSM	Doxaran et al. (2002); Kou et al. (1993)
1.050 nm	Mittelwert der Reflektanz zwischen 1.000 und 1.100 nm	Knaeps et al. (2015)
1.250 nm	Mittelwert der Reflektanz zwischen 1.200 und 1.250 nm	Knaeps et al. (2015)

Tabelle I-8: Indizes zur Ableitung von Wasserinhaltsstoffen anhand der Literatur.

Index	Beschreibung	Quelle
$\frac{\mathbf{R_{RS}(650)}}{\mathbf{R_{RS}(480)}}$	Darstellung von Eisen(III) im Boden mit Landsat TM	Durning et al. (1998), Mwaniki et al. (2015), van der Meer et al. (2014)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(650) - R_{RS}(480)}}{\mathbf{R_{RS}(650) + R_{RS}(480)}}$	Darstellung von Eisen(III) im Boden mit Landsat TM	Anlehnung an Durning et al. (1998), Mwaniki et al. (2015), van der Meer et al. (2014)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(840)}}{\mathbf{R_{RS}(645)}}$	Ableitung von TSM $R^2 = 0.91$	Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(840)}}{\mathbf{R_{RS}(545)}}$	Ableitung von TSM $R^2 = 0.93$	Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(790) - R_{RS}(580)}}{\mathbf{R_{RS}(790) + R_{RS}(580)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(840) - R_{RS}(645)}}{\mathbf{R_{RS}(840) + R_{RS}(645)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(840) - R_{RS}(580)}}{\mathbf{R_{RS}(840) + R_{RS}(580)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(840) - R_{RS}(545)}}{\mathbf{R_{RS}(840) + R_{RS}(545)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(790) - R_{RS}(520)}}{\mathbf{R_{RS}(790) + R_{RS}(520)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(840) - R_{RS}(520)}}{\mathbf{R_{RS}(840) + R_{RS}(520)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Doxaran et al. (2002)
$R_{RS}(694)$-$R_{RS}(716)$	Ableitung von TSM	Dekker 1(993, S. 135)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(560)}}{\mathbf{R_{RS}(520)}}$	Ableitung von TSM R = 0,87	Gitelson et al. (1993)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(560)}}{\mathbf{R_{RS}(620)}}$	Ableitung von TSM R = 0,83	Gitelson et al. (1993)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(560) - R_{RS}(520)}}{\mathbf{R_{RS}(560) + R_{RS}(520)}}$	Ableitung von TSM R = 0,93	Gitelson et al. (1993)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(560) - R_{RS}(620)}}{\mathbf{R_{RS}(560) + R_{RS}(620)}}$	Ableitung von TSM R = 0,91	Gitelson et al. (1993)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(700)}}{\mathbf{R_{RS}(560)}}$	Ableitung von Chl-a $0.77 < R < 0.98$	Gitelson et al. (1993)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(700)}}{\mathbf{R_{RS}(675)}}$	Ableitung von Chl-a $0.89 < R < 0.961$	Dekker (1993), Gitelson et al. (1993)

Index	Beschreibung	Quelle
$\frac{\mathbf{R_{RS}(700) - R_{RS}(675)}}{\mathbf{R_{RS}(700) + R_{RS}(675)}}$	Ableitung von Chl-a R > 0,96	Gitelson et al. (1993)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(509)}}{\mathbf{R_{RS}(668)}}$	Ableitung von TSM	Robinson et al. (1999)
$R_{RS}(636)$-$R_{RS}(750)$	Ableitung von TSM R^2 = 0,70	Frauendorf (2002, S. 135)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(556) - R_{RS}(750)}}{\mathbf{R_{RS}(647) + R_{RS}(750)}}$	Ableitung von TSM 0,61< R^2 < 0,82 und	Frauendorf (2002, S. 136)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(556) - R_{RS}(750)}}{\mathbf{R_{RS}(643) - R_{RS}(750)}}$	Ableitung von TSM	Frauendorf (2002, S. 136)
$R_{RS}(568)$-$R_{RS}(489)$	Ableitung der Sichttiefe R^2 = 0,80 und von CDOM R^2 >= 0,92	Frauendorf (2002, S. 109 u. 136)
$R_{RS}(556)$-$R_{RS}(750)$	Ableitung von CDOM R^2 = 0,72	Frauendorf (2002, S. 136)
$R_{RS}(500)$-$R_{RS}(624)$	Ableitung von Chl-a.	Frauendorf (2002, S. 118)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(562) - R_{RS}(750)}}{\mathbf{R_{RS}(622) - R_{RS}(750)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Eloheimo et al. (1998)
$\frac{\mathbf{R_{RS}(562) - R_{RS}(750)}}{\mathbf{R_{RS}(622) + R_{RS}(750)}}$	Ableitung von TSM	Anlehnung an Eloheimo et al. (1998)

R = Korrelationskoeffizient, R^2 = Bestimmtheitsmaß

Auflistung eigener Spektralindizes

Ratio (Rt)

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(455)-R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(455)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(480)-R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(480)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(520)-R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(520)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(455)-R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(455)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(480)-R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(480)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(520)-R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(417)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(520)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(480)-R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(480)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(520)-R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(520)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(480)-R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(480)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(520)-R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(455)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(520)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(480)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(520)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(480)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(520)-R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(480)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(520)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(480)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(520)-R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(417))/(R_{RS}(580)+R(417))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(455))/(R_{RS}(580)+R_{RS}(455))

Rt (R_{RS}(580)-$R_{RS(}$480))/(R_{RS}(580)+R_{RS}(480))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(520))/(R_{RS}(580)+R_{RS}(520))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(790))/(R_{RS}(650)-R_{RS}(790))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(790))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(790))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(417))/(R_{RS}(650)-R_{RS}(417))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(417))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(417))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(455))/(R_{RS}(650)-R_{RS}(455))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(455))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(455))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(850))/(R_{RS}(650)-R_{RS}(850))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(850))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(850))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(1050))/(R_{RS}(650)-R_{RS}(1050))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(1050))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(1050))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(1250))/(R_{RS}(650)-R_{RS}(1250))

Rt (R_{RS}(580)-R_{RS}(1250))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(1250))

Rt (R_{RS}(650)-R_{RS}(417))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(417))

Rt (R_{RS}(650)-R_{RS}(455))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(455))

Rt (R_{RS}(650)-R_{RS}(520))/(R_{RS}(650)+R_{RS}(520))

Rt (R_{RS}(850)-R_{RS}(580))/(R_{RS}(850)+R_{RS}(580))

Rt (R_{RS}(1050)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(1050)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(1050)-R_{RS}(850))/(R_{RS}(1050)+R_{RS}(850))

Rt (R_{RS}(1250)-R_{RS}(650))/(R_{RS}(1250)+R_{RS}(650))

Rt (R_{RS}(1250)-R_{RS}(850))/(R_{RS}(1250)+R_{RS}(850))

Slope (Slp)

Slp $R_{RS}(455) \rightarrow R_{RS}(580)$

Slp $R_{RS}(455) \rightarrow R_{RS}(650)$

Slp $R_{RS}(480) \rightarrow R_{RS}(580)$

Slp $R_{RS}(480) \rightarrow R_{RS}(650)$

Slp $R_{RS}(580) \rightarrow R_{RS}(790)$

Slp $R_{RS}(580) \rightarrow R_{RS}(850)$

Slp $R_{RS}(580) \rightarrow R_{RS}(1050)$

Slp $R_{RS}(580) \rightarrow R_{RS}(1250)$

Slp $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$

Slp $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(850)$

Slp $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(1050)$

Slp $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(1250)$

I.III. Zum Kapitel 6: Ergebnisse und Diskussion

Tabelle I-9: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat inklusive der Angaben zum verwendeten Spektralindex, zur Anzahl der Datenpaare, zum Bestimmtheitsmaß (R^2), zur Regressionsart, zu den Regressionsparameter α und β, zum RMSE und rRMSE. Die Wasserinhaltsstoffe wurden im Labor der HSA im Rahmen der Messkampagne vom 04.09.2018 bestimmt.

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)+R(750)}$	13	0,82	Linear	-44,38	27,31	1,51	19,84
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	13	0,80	Logarithmisch	-26,77	0,57	1,79	23,53
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)+R(750)}$	13	0,78	Linear	-46,14	29,61	1,46	19,15
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	13	0,81	Linear	-48,02	46,78	1,62	21,34
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,77	Logarithmisch	-32,05	7,07	1,50	19,66
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	13	0,83	Logarithmisch	-38,59	6,84	1,43	18,76
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	13	0,83	Logarithmisch	-35,24	6,86	1,41	18,56
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	13	0,83	Linear	-39,58	46,42	1,42	18,63
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	13	0,83	Logarithmisch	-43,46	6,80	1,41	18,57
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,88	Logarithmisch	35,05	16,53	0,87	11,43
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)+R(750)}$	12	0,82	Linear	-36,35	19,93	1,13	32,64
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	12	0,83	Linear	-33,78	31,21	1,08	31,27
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(563)-R(621)}{R(583)+R(621)}$	12	0,79	Linear	-80,48	-1,43	0,72	20,94

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,79	Logarithmisch	-21,47	3,24	0,93	26,89
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	12	0,85	Linear	-26,18	29,31	0,91	26,40
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	12	0,85	Linear	-23,88	27,03	0,90	25,99
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	12	0,85	Linear	-26,94	30,04	0,90	26,11
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	12	0,84	Linear	-29,99	33,10	0,90	26,16
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,87	Logarithmisch	24,25	9,83	0,58	16,80
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)+R(750)}$	12	0,79	Linear	-18,01	12,03	0,57	14,73
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	12	0,57	Linear	-10,19	11,82	0,67	17,26
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)+R(750)}$	12	0,78	Linear	-19,30	13,24	0,52	13,47
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	12	0,58	Linear	-14,21	15,54	0,63	16,32
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,56	Logarithmisch	-9,09	3,78	0,59	15,14
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	12	0,62	Linear	-11,26	14,99	0,57	14,67
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	12	0,63	Logarithmisch	-10,22	3,72	0,56	14,48

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	12	0,62	Linear	-11,62	15,34	0,56	14,58
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	12	0,62	Logarithmisch	-12,80	3,71	0,56	14,55
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,72	Logarithmisch	11,15	6,80	0,42	10,97
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	13	0,50	Potenziell	0,95	686,91	49	9,06
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	13	0,57	Potenziell	1,47	724,90	45	8,37
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)-R(621)}{R(583)+R(621)}$	13	0,54	Linear	2413,02	689,35	40	7,34
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,56	Logarithmisch	651,36	549,87	41	7,68
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	13	0,62	Potenziell	1,49	551,94	41	7,75
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	13	0,62	Potenziell	1,36	551,46	42	7,73
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	13	0,62	Potenziell	1,50	553,14	41	7,61
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	13	0,62	Potenziell	1,68	552,83	41	7,64
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)}{R(621)}$	13	0,55	Potenziell	2,29	713,16	40	7,46
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,56	Exponentiell	-1,60	1862,43	39	7,26

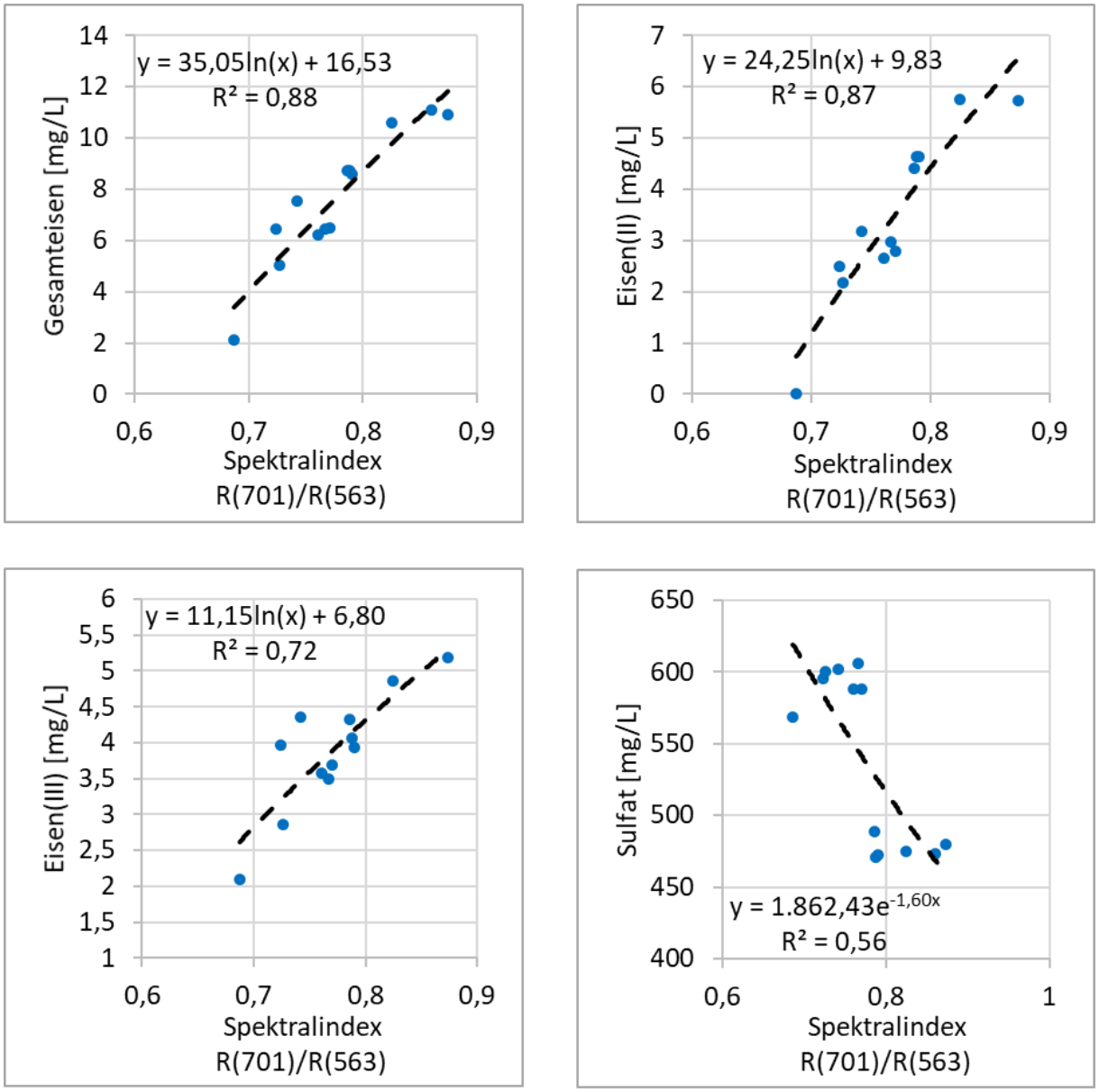

***Abbildung I-12**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat (s. Tabelle 6-1). Die Analysen der Gewässerproben vom 04.09.2018 erfolgten im Labor der HSA.*

Tabelle I-10: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe DOC, TOC sowie Chl-a inklusive der Angaben zum verwendeten Spektralindex, zur Anzahl der Datenpaare, zum Bestimmtheitsmaß (R^2), zur Regressionsart, zu den Regressionsparameter α und β, zum RMSE und rRMSE. Die Wasserinhaltsstoffe DOC und TOC wurden im Rahmen der Messkampagne vom 04.09.2018 im Labor der HSA bestimmt. Die Konzentrationsbestimmung von Chl-a erfolgte im Labor des IGB.

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
DOC [mg/L]	$R(1.250)$	13	0,23	Exponentiell	0,00	4,48	0,72	22,24
DOC [mg/L]	$R(417)$	13	0,25	Exponentiell	0,00	6,46	0,86	26,54
DOC [mg/L]	$R(455)$	13	0,18	Exponentiell	0,00	6,13	0,75	23,22
DOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(455)+R(650)}$	13	0,19	Linear	-10,44	-2,43	0,69	21,54
DOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(480)+R(650)}$	13	0,19	Linear	-10,60	-2,27	0,70	21,65
DOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)+R(650)}$	13	0,19	Linear	-8,45	-0,86	0,70	21,62
DOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(520)+R(650)}$	13	0,19	Linear	-10,18	-1,15	0,70	21,74
DOC [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.250)}{R(650)-R(1.250)}$	13	0,20	Exponentiell	-0,99	8,38	0,72	22,39
DOC [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	13	0,25	Potenziell	1,51	9,10	0,69	21,45
DOC [mg/L]	$\frac{R(650)-R(480)}{R(650)+R(480)}$	13	0,20	Potenziell	0,98	7,29	0,71	22,08
TOC [mg/L]	$R(1.250)$	13	0,47	Potenziell	-0,32	35,71	0,46	9,86
TOC [mg/L]	$\frac{R(1.250)-R(850)}{R(1.250)+R(850)}$	13	0,48	Linear	-3,47	3,50	0,45	9,54
TOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	13	0,40	Exponentiell	-0,94	19,45	0,60	12,91

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
TOC [mg/L]	$\frac{R(480)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	13	0,39	Exponentiell	-1,49	36,92	0,62	13,32
TOC [mg/L]	$\frac{R(563)-R(519)}{R(563)+R(519)}$	13	0,39	Exponentiell	-2,56	44,34	0,49	10,41
TOC [mg/L]	$\frac{R(650)-R(520)}{R(650)+R(520)}$	13	0,39	Potenziell	0,57	9,95	0,49	10,45
TOC [mg/L]	$R(636)-R(752)$	13	0,36	Linear	-9,13	2,16	0,50	10,71
TOC [mg/L]	$R(694)-R(716)$	13	0,45	Exponentiell	0,83	3,51	0,46	9,77
TOC [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,39	Linear	-21,79	3,31	0,49	19,41
TOC [mg/L]	$R(650) \rightarrow R(1.250)$	13	0,39	Linear	-1,07	3,58	0,52	11,13
Chl-a [µg/L]	$R(480)$	11	0,45	Potenziell	0,85	0,01	0,65	22,80
Chl-a [µg/L]	$R(520)$	11	0,43	Potenziell	1,01	0,00	0,66	23,16
Chl-a [µg/L]	$R(580)$	11	0,43	Potenziell	1,42	0,00	0,66	23,21
Chl-a [µg/L]	$R(650)$	11	0,46	Potenziell	1,35	0,00	0,65	22,99
Chl-a [µg/L]	$R(675)$	11	0,45	Potenziell	1,33	0,00	0,65	22,78
Chl-a [µg/L]	$R(685)$	11	0,49	Potenziell	1,43	0,00	0,66	23,27
Chl-a [µg/L]	$R(706)$	11	0,51	Potenziell	1,39	0,00	0,63	22,20
Chl-a [µg/L]	$R(750)$	11	0,46	Potenziell	0,97	0,01	0,67	23,78
Chl-a [µg/L]	$R(770)$	11	0,50	Potenziell	1,19	0,00	0,65	23,06
Chl-a [µg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	11	0,41	Potenziell	1,36	0,43	0,66	23,36

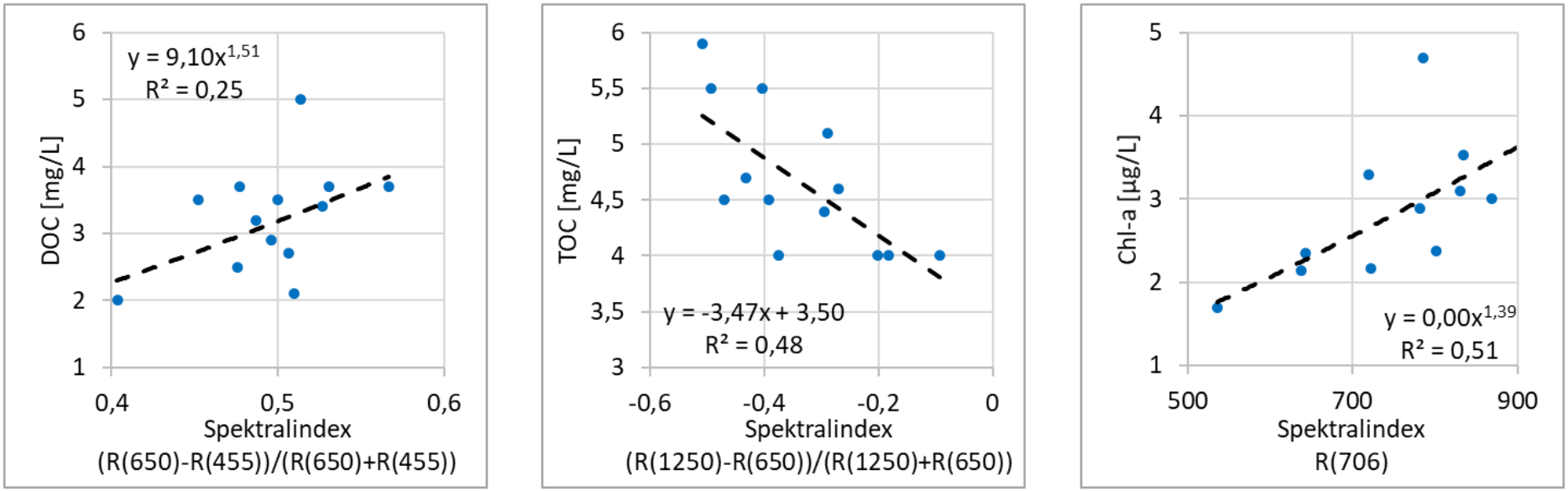

***Abbildung I-13**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe DOC, TOC und Chl-a nach Tabelle I-10. Die Analysen der Gewässerproben vom 04.09.2018 erfolgten in den Laboren der HSA (DOC, TOC) und des IGB (Chl-a).*

Tabelle I-11: Auflistung der berechneten relativen prozentualen Differenzen (RPD) zwischen den analytischen Ergebnissen der Labore vom 22.09.2019 je Probenentnahmestelle. Die RPD-Werte beziehen sich auf die Laborergebnisse der HSA. Weiterhin ist der APD-Wert angegeben. Die entsprechenden Rohdaten sind Tabelle I-5 (HSA) und Tabelle I-6 (IGB) (Anlage I.I) zu finden.

Proben ID 2019	Gesamteisen [%]	Eisen(II) [%]	Eisen(III) [%]	Sulfat [%]
3	10,48	5,22	18,67	-2,68
4	9,88	3,92	27,33	
5	12,86	9,88	19,38	-2,95
6	12,26	3,54	37,91	-0,69
7	9,27	-4,55	35,46	0,59
8	14,63	-5,80	35,94	-1,16
9	15,77	-32,05	44,08	-1,88
10	20,25	-6,67	36,98	1,29
11	18,58	-9,57	34,42	0,47
12	18,12	-6,67	28,32	1,41
13	23,44	-6,82	31,52	0,24
14	31,34	55,89	15,48	0,12
16	23,44	49,18	19,05	0,87
17	31,30			0,75
18	20,87			0,13
APD	18,17	4,27	29,58	-0,25

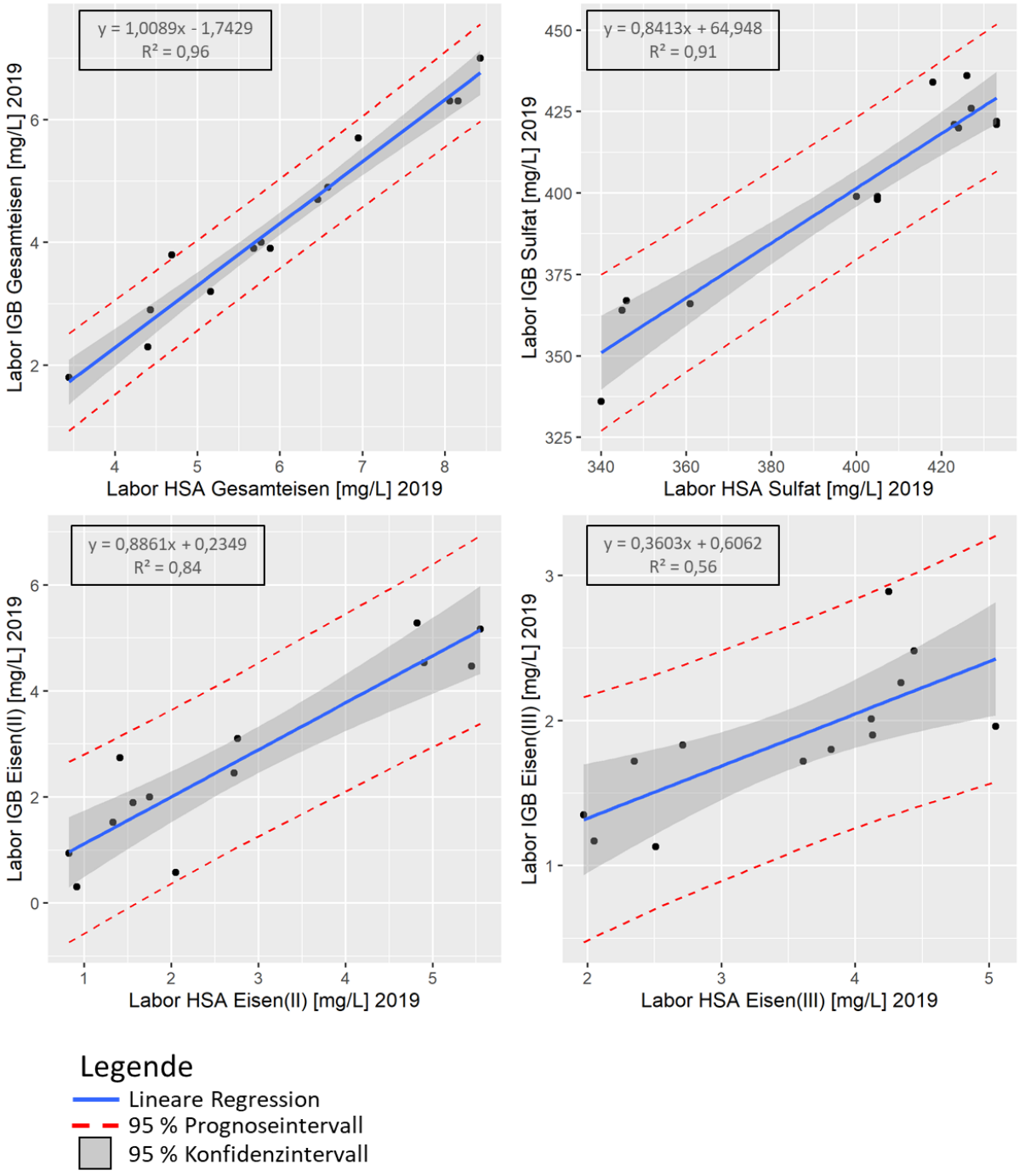

***Abbildung I-14**: Darstellung der Streudiagramme der Messergebnisse der Labore HSA und IGB mit Angabe der linearen Regression, des Konfidenzintervalls 95 % sowie des Prognoseintervalls 95 %. Die Datenerfassung erfolgte am 22.09.2019.*

Tabelle I-12: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat inklusive der Angaben zum verwendeten Spektralindex, zur Anzahl der Datenpaare, zum Bestimmtheitsmaß (R^2), zur Regressionsart, zu den Regressionsparameter α und β, zum RMSE und rRMSE. Die Wasserinhaltsstoffe wurden im Labor der HSA im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 bestimmt.

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$R(580)$	15	0,48	Exponentiell	0,00	23,95	1,13	18,98
Gesamteisen [mg/L]	$R(650)$	15	0,48	Exponentiell	0,00	18,45	1,11	18,63
Gesamteisen [mg/L]	$R(675)$	15	0,48	Exponentiell	0,00	13,84	1,13	18,94
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(455)+R(580)}$	15	0,48	Linear	38,93	26,58	1,08	18,09
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	15	0,50	Linear	47,88	28,13	1,05	17,70
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,54	Linear	-43,48	25,91	1,05	17,70
Gesamteisen [mg/L]	$R(636)-R(752)$	15	0,49	Exponentiell	0,00	16,74	7,17	120,45
Gesamteisen [mg/L]	$R(694)-R(716)$	15	0,51	Exponentiell	0,00	13,25	5,39	90,57
Gesamteisen [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(580)$	15	0,49	Exponentiell	-0,23	20,66	1,07	18,06
Gesamteisen [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	15	0,48	Exponentiell	-0,21	11,57	1,66	27,95
Eisen(II) [mg/L]	$R(650)$	15	0,73	Exponentiell	0,00	173,93	1,22	49,22
Eisen(II) [mg/L]	$R(675)$	15	0,80	Exponentiell	0,00	65,79	1,20	48,08
Eisen(II) [mg/L]	$R(685)$	15	0,76	Exponentiell	0,00	67,23	1,24	49,76
Eisen(II) [mg/L]	$R(706)$	15	0,74	Exponentiell	-0,01	69,04	1,25	50,35
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	15	0,73	Exponentiell	-12,07	465,41	1,34	57,85
Eisen(II) [mg/L]	$R(636)-R(752)$	15	0,73	Exponentiell	0,00	111,32	40,84	1642,01
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)}{R(480)}$	15	0,74	Exponentiell	-2,41	430,96	1,30	52,16
Eisen(II) [mg/L]	$R(694)-R(716)$	15	0,81	Exponentiell	0,00	50,99	21,02	845,22

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE[%]
Eisen(II) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(580)$	15	0,79	Exponentiell	-0,86	31,15	1,17	46,98
Eisen(II) [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(580)$	15	0,79	Exponentiell	-0,78	25,90	1,20	48,08
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,61	Potenziell	-8,25	311,90	1,10	31,77
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(455)-R(650)}$	15	0,49	Exponentiell	-9,74	151831,48	0,74	21,37
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	15	0,59	Exponentiell	-4,47	833,15	0,68	19,68
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	15	0,55	Exponentiell	-0,66	11,61	0,79	22,14
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(420)-R(580)}$	15	0,54	Exponentiell	-5,46	19246,47	1,32	38,16
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	15	0,64	Exponentiell	-9,30	111750,96	0,83	23,97
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	15	0,54	Exponentiell	-0,82	13,54	0,82	23,08
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(480)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	15	0,52	Exponentiell	-1,08	17,23	0,82	23,12
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.250)}{R(650)-R(1.250)}$	15	0,51	Exponentiell	-2,18	33,36	0,71	20,40
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(520)}{R(650)+R(520)}$	15	0,50	Potenziell	0,67	9,56	0,73	20,95
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	14	0,59	Logarithmisch	-984,39	937,95	41	10,36

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE[%]
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	14	0,56	Logarithmisch	-1113,89	910,29	54	13,57
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	14	0,64	Potenziell	-3,46	583,55	30	7,64
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	14	0,59	Linear	-1630,79	-209,28	27	6,81
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	14	0,62	Potenziell	1,39	1368,77	22	5,48
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(520)}{R(580)+R(520)}$	14	0,62	Potenziell	1,00	1615,59	22	5,41
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	14	0,56	Potenziell	0,59	628,46	23	5,83
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)-R(480)}{R(650)+R(480)}$	14	0,60	Potenziell	0,50	641,62	22	5,49
Sulfat [mg/L]	$R(509)-R(668)$	14	0,56	Linear	-439,78	299,36	22	5,63
Sulfat [mg/L]	$R(650)-R(480)$	14	0,58	Potenziell	0,57	248,10	23	5,73

Tabelle I-13: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat inklusive der Angaben zum verwendeten Spektralindex, zur Anzahl der Datenpaare, zum Bestimmtheitsmaß (R^2), zur Regressionsart, zu den Regressionsparameter α und β, zum RMSE und rRMSE. Die Wasserinhaltsstoffe wurden im Labor des IGB im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 bestimmt.

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$R(650)$	15	0,59	Exponentiell	0,00	27,74	1,05	24,69
Gesamteisen [mg/L]	$R(675)$	15	0,61	Exponentiell	0,00	17,56	1,06	24,91
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(455)+R(580)}$	15	0,59	Linear	44,68	27,93	0,99	23,24
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	15	0,64	Linear	55,86	30,14	0,93	21,91
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	15	0,62	Linear	63,53	30,39	1,03	24,13
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,70	Linear	-51,04	27,69	0,95	22,19
Gesamteisen [mg/L]	$R(636)-R(752)$	15	0,61	Exponentiell	0,00	23,53	11,28	264,89
Gesamteisen [mg/L]	$R(694)-R(716)$	15	0,64	Exponentiell	0,00	16,18	8,07	189,34
Gesamteisen [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	15	0,63	Exponentiell	-0,37	13,09	1,02	24,05
Gesamteisen [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(650)$	15	0,61	Exponentiell	-0,33	11,94	1,05	24,55
Eisen(II) [mg/L]	$R(675)$	13	0,66	Exponentiell	0,00	110,68	1,33	49,61
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	13	0,70	Linear	68,35	34,09	0,96	35,86
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	13	0,68	Linear	77,63	34,37	1,08	40,32
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	13	0,65	Linear	79,84	32,13	1,31	48,52
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	13	0,78	Linear	-59,43	29,78	0,95	35,33
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	13	0,68	Exponentiell	-33,00	1322857,03	1,22	45,26

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE[%]
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	13	0,65	Exponentiell	-12,86	638,99	1,47	58,04
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)}{R(480)}$	13	0,65	Exponentiell	-2,54	555,98	1,46	54,08
Eisen(II) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	13	0,70	Exponentiell	-1,03	48,29	1,33	49,41
Eisen(II) [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(650)$	13	0,69	Exponentiell	-0,90	36,06	1,37	51,06
Eisen(III) [mg/L]	$R(675)$	13	0,78	Linear	0,00	-0,60	0,61	32,73
Eisen(III) [mg/L]	$R(685)$	13	0,77	Linear	0,00	-0,63	0,66	35,35
Eisen(III) [mg/L]	$R(706)$	13	0,77	Linear	0,00	-0,64	0,62	33,42
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,77	Potenziell	-2,93	2,15	0,24	13,03
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.250)}{R(650)-R(1.250)}$	13	0,80	Potenziell	-2,80	2,17	0,27	14,53
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	13	0,76	Potenziell	-2,20	2,14	0,25	13,18
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	13	0,77	Potenziell	-2,45	2,15	0,24	13,12
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,76	Exponentiell	2,81	0,24	0,22	11,86
Eisen(III) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	13	0,76	Linear	0,61	-0,01	0,50	26,61
Eisen(III) [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(650)$	13	0,77	Linear	0,54	0,14	0,46	24,87
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,46	Logarithmisch	-738,84	805,02	35	8,80
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,47	Logarithmisch	-846,62	789,45	44	11,11
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(580)}$	15	0,45	Linear	-804,63	1300,23	28	7,04

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE[%]
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	15	0,51	Linear	-1271,66	-73,51	25	6,25
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)-R(519)}{R(563)+R(519)}$	15	0,47	Potenziell	0,97	1805,62	22	5,57
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,53	Potenziell	1,05	899,23	24	6,08
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	15	0,53	Potenziell	1,07	1033,46	21	5,31
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(520)}{R(580)+R(520)}$	15	0,50	Exponentiell	3,06	188,43	22	5,41
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)-R(480)}{R(650)+R(480)}$	15	0,44	Potenziell	0,34	551,90	23	5,69
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)}{R(519)}$	15	0,46	Exponentiell	1,43	44,29	23	5,65

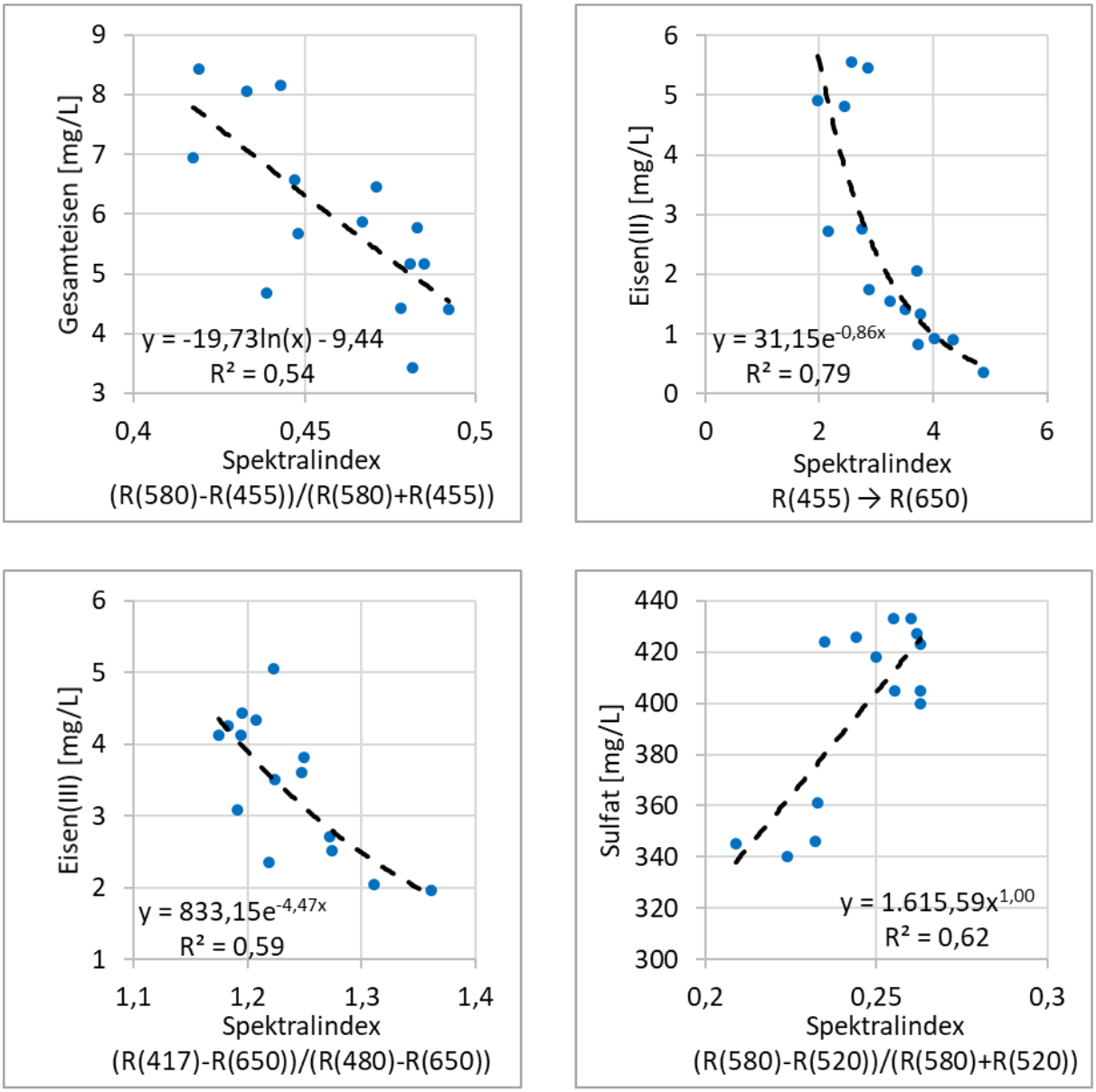

***Abbildung I-15**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat nach Tabelle 6-3. Die Analysen der Gewässerproben vom 22.09.2019 erfolgten im Labor der HSA.*

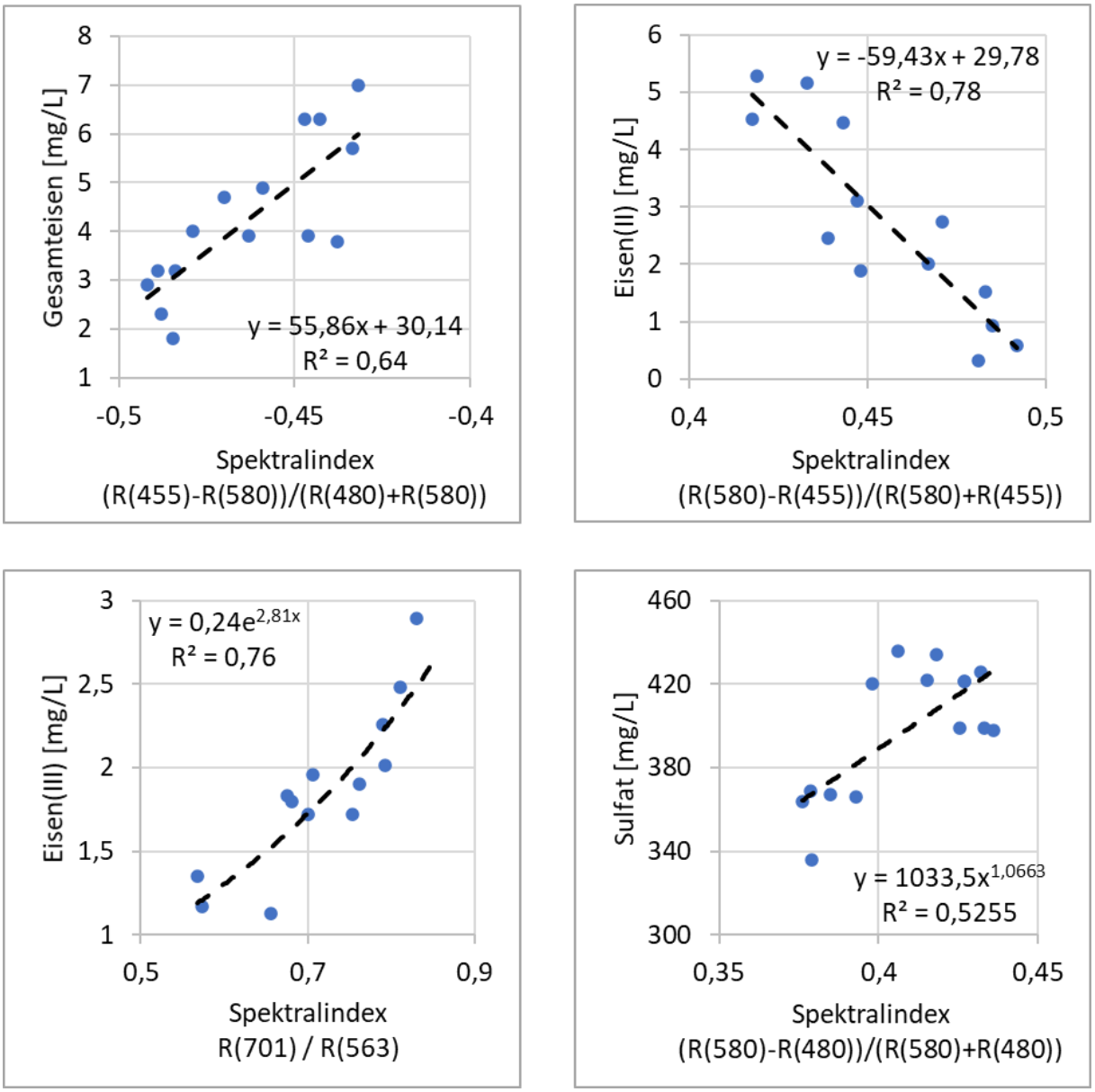

***Abbildung I-16**: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat nach Tabelle 6-4. Die Analysen der Gewässerproben vom 22.09.2019 erfolgten im Labor des IGB.*

Tabelle I-14: Auflistung der zehn ermittelten Regressionsmodelle der Wasserinhaltsstoffe DOC, TOC sowie Chl-a inklusive der Angaben zum verwendeten Spektralindex, zur Anzahl der Datenpaare, zum Bestimmtheitsmaß (R^2), zur Regressionsart, zu den Regressionsparameter α und β, zum RMSE. Die Wasserinhaltsstoffe DOC und TOC wurden im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 im Labor der HSA bestimmt. Die Konzentrationsbestimmung von Chl-a erfolgte im Labor des IGB.

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
DOC [mg/L]	$R(1050)$	14	0,02	Linear	0,00	4,22	0,24	5,64
DOC [mg/L]	$R(750)$	15	0,02	Linear	0,00	4,07	0,23	5,32
DOC [mg/L]	$R(770)$	15	0,02	Linear	0,00	4,08	0,23	5,33
DOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(480)-R(580)}$	15	0,08	Linear	4,44	-1,12	0,23	5,49
DOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)-R(580)}$	15	0,19	Exponentiell	3,08	0,14	0,29	6,73
DOC [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,03	Linear	-1,35	6,18	0,25	5,86
DOC [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1050)}{R(650)+R(1050)}$	15	0,02	Linear	-0,20	4,45	0,24	5,67
DOC [mg/L]	$\frac{R(701)-R(672)}{R(701)+R(672)}$	15	0,02	Linear	4,45	4,75	0,24	5,65
DOC [mg/L]	$\frac{R(790)-R(520)}{R(790)+R(520)}$	15	0,02	Linear	-0,61	4,50	0,24	5,65
DOC [mg/L]	$\frac{R(790)-R(580)}{R(790)+R(580)}$	15	0,02	Linear	0,82	4,74	0,24	5,65
TOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,34	Linear	26,22	-38,92	2,49	38,10
TOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	15	0,32	Linear	24,49	-23,70	1,81	27,70

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
TOC [mg/L]	$\frac{R(417)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	15	0,38	Linear	4,09	-1,22	1,94	31,12
TOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)-R(580)}$	15	0,30	Exponentiell	20,55	0,00	2,63	40,19
TOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,38	Linear	34,09	-47,57	3,08	47,07
TOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	15	0,41	Linear	55,47	-55,62	2,05	31,37
TOC [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	15	0,39	Linear	5,18	-2,35	2,02	32,29
TOC [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,29	Linear	39,17	-49,55	2,65	40,45
TOC [mg/L]	$\frac{R(480)-R(650)}{R(520)-R(650)}$	15	0,37	Linear	6,83	-3,88	1,98	31,67
TOC [mg/L]	$\frac{R(650)-R(520)}{R(520)+R(520)}$	15	0,30	Logarithmisch	-3,83	0,47	1,82	27,84
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	15	0,65	Linear	74,06	38,56	1,12	13,84
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)+R(650)}$	15	0,65	Linear	26,30	19,77	1,04	12,84
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	15	0,67	Linear	81,70	38,42	1,30	16,06
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(563)-R(519)}{R(563)+R(519)}$	15	0,65	Exponentiell	-14,39	166,97	1,02	12,57
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,72	Exponentiell	-7,05	201,69	1,09	13,48

Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	Anzahl	R^2	Regression	α	β	RMSE	rRMSE [%]
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	15	0,67	Logarithmisch	-26,30	-15,48	0,98	12,09
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(650)-R(417)}{R(650)+R(417)}$	15	0,65	Exponentiell	-2,96	37,05	1,00	12,34
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	15	0,66	Linear	-24,85	19,43	0,99	12,27
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(650)-R(480)}{R(650)+R(480)}$	15	0,65	Linear	-24,86	17,56	1,00	12,41
Chl-a [µg/L]	$\frac{R(563)}{R(519)}$	15	0,65	Linear	-37,01	65,03	1,01	12,49

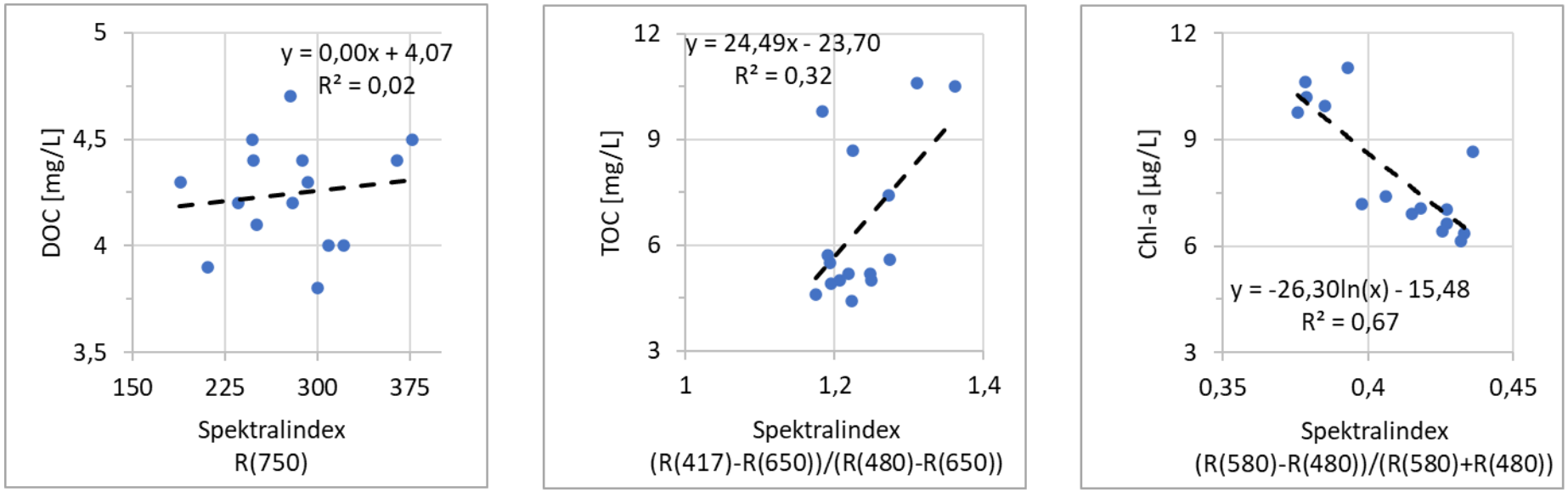

Abbildung I-17: Darstellung der spezifischen Regressionen der Spektralindizes mit der höchsten Ableitungsgenauigkeit der Gewässerinhaltsstoffen DOC, TOC und Chl-a nach Tabelle I-14. Die Probenanalysen vom 22.09.2019 erfolgten in den Laboren der HSA (DOC,TOC) und des IGB (Chl-a).

***Tabelle I-15**: Angabe der Ergebnisse der Kreuzvalidierung der zehn ermittelten Ableitungsmodelle für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat mit der Angabe des Spektralindex, Anzahl (N_C), dem Bestimmtheitsmaß (R^2), der Regressionsart (Reg.) sowie der Regressionsparameter α und β. Die Modelle basieren auf den analytischen Ergebnissen der HSA im Rahmen der Messkampagne vom 04.09.2018 (18HSA). Die Validierung erfolgte mittels der gemessenen Konzentrationen beider Labore im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 (19HSA, 19IGB) unter der Angabe der Anzahl (N_V) sowie dem jeweiligen RMSE und rRMSE. Die Validierungsergebnisse mittels der Parameter von 18HSA sind in Tabelle I-9 vorzufinden. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.), logarithmisch (Log.) und potenziell (Pot.).*

Modell	Entwicklung						Validierung				
Datensatz	18HSA							19HSA		19IGB	
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	RMSE	rRMSE [%]
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)+R(750)}$	13	0,82	Lin.	-44,38	27,31	15	4,44	74,56	4,48	105,28
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	13	0,80	Log.	-26,77	0,57	15	5,60	94,08	5,09	119,51
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)+R(750)}$	13	0,78	Lin.	-46,14	29,61	15	3,82	64,26	4,23	99,22
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	13	0,81	Lin.	-48,02	46,78	15	6,11	102,74	5,80	136,03
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,77	Log.	-32,05	7,07	15	3,70	62,27	3,84	90,10
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	13	0,83	Log.	-38,59	6,84	15	6,34	106,56	5,98	140,42
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	13	0,83	Log.	-35,24	6,86	15	6,37	107,09	6,02	141,23
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	13	0,83	Lin.	-39,58	46,42	15	6,26	105,26	5,91	138,78
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	13	0,83	Log.	-43,46	6,80	15	5,67	95,22	5,36	125,87
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,88	Log.	35,05	16,53	15	5,04	84,68	5,20	122,05

Modell	Entwicklung						Validierung				
Datensatz	18HSA							19HSA		19IGB	
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)+R(750)}$	12	0,82	Lin.	-36,35	19,93	13	4,54	163,71	4,45	165,37
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	12	0,81	Lin.	-24,17	22,30	13	5,70	205,69	5,60	208,18
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	12	0,83	Lin.	-33,78	31,21	13	5,30	191,21	159,23	193,54
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(563)-R(621)}{R(583)+R(621)}$	12	0,79	Lin.	-80,48	-1,43	13	4,61	166,34	4,53	168,34
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,79	Log.	-21,47	3,24	13	3,35	120,92	3,25	120,70
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	12	0,85	Lin.	-26,18	29,31	13	5,87	211,74	5,77	214,26
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	12	0,85	Lin.	-23,88	27,03	13	5,97	215,49	5,87	218,06
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	12	0,85	Lin.	-26,94	30,04	13	5,21	187,85	5,11	189,83
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	12	0,84	Lin.	-29,99	33,10	13	5,19	187,26	5,09	189,29
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,87	Log.	24,25	9,83	13	4,37	157,79	4,28	159,23
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)+R(750)}$	12	0,79	Lin.	-18,01	12,03	13	1,25	35,88	1,42	76,25
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	12	0,57	Lin.	-10,19	11,82	13	1,59	45,55	1,11	59,36
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)+R(750)}$	12	0,78	Lin.	-19,30	13,24	13	1,00	28,53	1,58	85,02

Modell	Entwicklung						Validierung				
Datensatz	18HSA							19HSA		19IGB	
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	12	0,58	Lin.	-14,21	15,54	13	1,37	39,26	1,21	65,11
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	12	0,56	Log.	-9,09	3,78	13	0,75	21,49	1,28	68,93
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	12	0,62	Lin.	-11,26	14,99	13	1,63	46,65	1,29	69,49
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	12	0,63	Log.	-10,22	3,72	13	1,40	40,02	1,14	61,37
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	12	0,62	Lin.	-11,62	15,34	13	1,39	39,75	1,14	61,32
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	12	0,62	Log.	-12,80	3,71	13	1,07	57,21	1,07	57,21
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	12	0,72	Log.	11,15	6,80	13	1,02	29,12	1,47	78,83
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(556)-R(750)}{R(647)-R(750)}$	13	0,50	Pot.	0,95	686,91	14	251	62,98	247	61,59
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(562)-R(750)}{R(622)-R(750)}$	13	0,57	Pot.	1,47	724,90	14	248	62,08	243	60,59
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)-R(621)}{R(583)+R(621)}$	13	0,54	Lin.	2413,02	689,35	14	219	54,92	214	53,45
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,56	Log.	651,36	549,87	14	201	50,29	197	49,06
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(417)}{R(650)-R(417)}$	13	0,62	Pot.	1,49	551,94	14	269	67,50	264	65,94
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(650)-R(455)}$	13	0,62	Pot.	1,36	551,46	14	271	67,80	265	66,24

Modell	Entwicklung						Validierung				
Datensatz	18HSA							19HSA		19IGB	
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	RMSE	rRMSE [%]
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	13	0,62	Pot.	1,50	553,14	14	254	63,55	249	62,06
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	13	0,62	Pot.	1,68	552,83	14	255	63,80	250	62,30
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)}{R(621)}$	13	0,55	Pot.	2,29	713,16	14	235	58,97	230	57,42
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,56	Exp.	-1,60	1862,43	14	202	50,73	197	49,27

Tabelle I-16: Angabe der Ergebnisse der Kreuzvalidierung der zehn ermittelten Ableitungsmodelle für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat mit der Angabe des Spektralindex, Anzahl (N_C), dem Bestimmtheitsmaß (R^2), der Regressionsart (Reg.) sowie der Regressionsparameter α und β. Die Modelle basieren auf den analytischen Ergebnissen der HSA im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 (19HSA). Die Validierung erfolgte mittels der analytischen Daten von 18HSA und 19IGB unter der Angabe der Anzahl (N_V) sowie dem jeweiligen RMSE und rRMSE. Die Validierungsergebnisse mittels der Parameter von 18HSA sind in Tabelle I-9 vorzufinden. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.), logarithmisch (Log.) und potenziell (Pot.).

Modell	**Entwicklung**						**Validierung**					
Datensatz	**19HSA**						**18HSA**			**19IGB**		
Gewässerinhaltsstoff	**Spektralindex**	**N_C**	**R^2**	**Reg.**	**α**	**β**	**N_V**	**RMSE**	**rRMSE [%]**	**N_V**	**RMSE**	**rRMSE [%]**
Gesamteisen [mg/L]	$R(580)$	15	0,48	Exp.	0,00	23,95	13	4,08	53,62	15	2,14	50,35
Gesamteisen [mg/L]	$R(650)$	15	0,48	Exp.	0,00	18,45	13	3,72	48,88	15	1,99	46,71
Gesamteisen [mg/L]	$R(675)$	15	0,48	Exp.	0,00	13,84	13	4,09	53,77	15	1,89	44,31
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(455)+R(580)}$	15	0,48	Lin.	38,93	26,58	13	3,27	42,96	15	2,20	51,54
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	15	0,50	Lin.	47,88	28,13	13	3,65	47,96	15	2,13	50,05
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,54	Lin.	-43,48	25,91	13	3,60	47,31	15	1,67	39,26
Gesamteisen [mg/L]	$R(636)-R(752)$	15	0,49	Exp.	0,00	16,74	13	5,32	69,91	15	8,84	207,46
Gesamteisen [mg/L]	$R(694)-R(716)$	15	0,51	Exp.	0,00	13,25	13	3,64	47,85	15	6,70	157,26
Gesamteisen [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(580)$	15	0,49	Exp.	-0,23	20,66	13	4,01	52,75	15	1,90	44,58
Gesamteisen [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	15	0,48	Exp.	-0,21	11,57	13	3,98	52,36	15	1,89	44,25
Eisen(II) [mg/L]	$R(650)$	15	0,73	Exp.	0,00	173,93	12	3,06	88,81	13	1,22	45,40
Eisen(II) [mg/L]	$R(675)$	15	0,80	Exp.	0,00	65,79	12	3,21	93,02	13	1,23	45,88
Eisen(II) [mg/L]	$R(685)$	15	0,76	Exp.	0,00	67,23	12	3,10	89,95	13	1,30	48,49
Eisen(II) [mg/L]	$R(706)$	15	0,74	Exp.	-0,01	69,04	15	3,15	91,43	13	1,29	47,84
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	15	0,73	Exp.	-12,07	465,41	15	2,86	82,90	13	1,43	53,19

Modell	Entwicklung						Validierung					
Datensatz	19HSA						18HSA			19IGB		
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(II) [mg/L]	$R(636) - R(752)$	15	0,73	Exp.	0,00	111,32	15	30,72	890,24	13	42,16	1566,93
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)}{R(480)}$	15	0,74	Exp.	-2,41	430,96	15	2,92	84,53	13	1,42	52,67
Eisen(II) [mg/L]	$R(694) - R(716)$	15	0,81	Exp.	0,00	50,99	15	14,81	429,15	13	21,67	805,34
Eisen(II) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(580)$	15	0,79	Exp.	-0,86	31,15	15	3,13	90,60	13	1,20	44,56
Eisen(II) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	15	0,79	Exp.	-0,78	25,90	15	3,13	90,62	13	1,25	46,50
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417) - R(580)}{R(520) - R(580)}$	15	0,61	Pot.	-8,25	311,90	13	9,67	219,27	13	0,80	42,71
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417) - R(650)}{R(455) - R(650)}$	15	0,49	Exp.	-9,74	151831,48	13	5,00	113,36	13	1,77	94,91
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417) - R(650)}{R(480) - R(650)}$	15	0,59	Exp.	-4,47	833,15	13	2,96	67,03	13	1,39	74,51
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(417) - R(650)}{R(520) - R(650)}$	15	0,55	Exp.	-0,66	11,61	13	2,07	46,87	13	1,26	67,73
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455) - R(580)}{R(520) - R(580)}$	15	0,54	Exp.	-5,46	19246,47	13	2,66	60,29	13	0,61	32,87
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455) - R(650)}{R(480) - R(650)}$	15	0,64	Exp.	-9,30	111750,96	13	2,41	54,68	13	1,09	58,46
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(455) - R(650)}{R(520) - R(650)}$	15	0,54	Exp.	-0,82	13,54	13	2,06	46,82	13	1,21	64,72
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(480) - R(650)}{R(520) - R(650)}$	15	0,52	Exp.	-1,08	17,23	13	2,05	46,42	13	1,22	65,63
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580) - R(1.250)}{R(650) - R(1.250)}$	15	0,51	Exp.	-2,18	33,36	13	1,92	43,63	13	1,28	68,52

Modell	Entwicklung						Validierung					
Datensatz	19HSA						18HSA			19IGB		
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(520)}{R(650)+R(520)}$	15	0,50	Pot.	0,67	9,56	13	1,99	45,07	13	1,48	79,48
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	14	0,59	Log.	-984,39	937,95	13	156	28,97	15	46	11,52
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	14	0,56	Log.	-1113,89	910,29	13	169	31,44	15	59	14,72
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(650)}$	14	0,64	Pot.	-3,46	583,55	13	153	28,42	15	36	9,07
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	14	0,59	Lin.	-1630,79	-209,28	13	153	28,44	15	30	7,48
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	14	0,62	Pot.	1,39	1368,77	13	143	26,26	15	23	5,67
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(520)}{R(580)+R(520)}$	14	0,62	Pot.	1,00	1615,59	13	135	25,01	15	23	5,80
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	14	0,56	Pot.	0,59	628,46	13	141	26,20	15	26	6,40
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)-R(480)}{R(650)+R(480)}$	14	0,60	Pot.	0,50	641,62	13	139	25,79	15	25	6,26
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(509)}{R(668)}$	14	0,56	Lin.	-439,78	299,36	13	136	25,28	15	25	6,36
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)}{R(480)}$	14	0,58	Pot.	0,57	248,10	13	136	25,19	15	25	6,36

Tabelle I-17: Angabe der Ergebnisse der Kreuzvalidierung der zehn ermittelten Ableitungsmodelle für die Gewässerinhaltsstoffe Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) sowie Sulfat mit der Angabe des Spektralindex, Anzahl (N_C), dem Bestimmtheitsmaß (R^2), der Regressionsart (Reg.) sowie der Regressionsparameter α und β. Die Modelle basieren auf den analytischen Ergebnissen des IGB im Rahmen der Messkampagne vom 22.09.2019 (19IGB). Die Validierung erfolgte mittels der gemessenen Konzentrationen von 18HSA sowie 19HSA unter der Angabe der Anzahl (N_V) sowie dem jeweiligen RMSE und rRMSE. Die Validierungsergebnisse mittels der Parameter von 19IGB sind in Tabelle I-13 vorzufinden. Zu den Regressionsarten zählen linear (Lin.), exponentiell (Exp.), logarithmisch (Log.) und potenziell (Pot.).

Modell	**Entwicklung**						**Validierung**					
Datensatz	**19IGB**						**18HSA**			**19HSA**		
Gewässerinhaltsstoff	**Spektralindex**	**N_C**	**R^2**	**Reg.**	**α**	**β**	**N_V**	**RMSE**	**rRMSE [%]**	**N_V**	**RMSE**	**rRMSE [%]**
Gesamteisen [mg/L]	$R(650)$	15	0,59	Exp.	0,00	27,74	13	5,07	66,63	15	2,04	34,25
Gesamteisen [mg/L]	$R(675)$	15	0,61	Exp.	0,00	17,56	13	5,59	73,46	15	2,16	36,36
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(455)+R(580)}$	15	0,59	Lin.	44,68	27,93	13	4,46	58,62	15	1,71	28,77
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	15	0,64	Lin.	55,86	30,14	13	5,03	66,10	15	1,75	29,47
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	15	0,62	Lin.	63,53	30,39	13	4,89	64,22	15	1,67	28,13
Gesamteisen [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,70	Lin.	-51,04	27,69	13	4,94	64,98	15	2,27	38,12
Gesamteisen [mg/L]	$R(636)-R(752)$	15	0,61	Exp.	0,00	23,53	13	6,97	91,62	15	9,61	161,52
Gesamteisen [mg/L]	$R(694)-R(716)$	15	0,64	Exp.	0,00	16,18	13	3,86	50,77	15	5,72	96,18
Gesamteisen [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	15	0,63	Exp.	-0,37	13,09	13	5,49	72,10	15	2,13	35,81
Gesamteisen [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(650)$	15	0,61	Exp.	-0,33	11,94	13	5,48	72,06	15	2,15	36,10
Eisen(II) [mg/L]	$R(675)$	13	0,66	Exp.	0,00	110,68	12	3,34	96,66	15	1,28	51,39
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(480)+R(580)}$	13	0,70	Lin.	68,35	34,09	12	3,42	99,19	15	1,07	42,94
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	13	0,68	Lin.	77,63	34,37	12	3,15	91,16	15	1,17	46,86

Modell	Entwicklung						Validierung					
Datensatz	19IGB						18HSA			19HSA		
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	N_V	N_V	N_V	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	13	0,65	Lin.	79,84	32,13	12	3,53	102,16	15	1,35	54,16
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	13	0,78	Lin.	-59,43	29,78	12	3,36	97,50	15	1,09	43,77
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	13	0,68	Exp.	-33,00	1322857,03	12	3,28	95,19	15	1,16	46,79
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)-R(455)}{R(650)+R(455)}$	13	0,65	Exp.	-12,86	638,99	12	2,92	84,59	15	1,39	56,02
Eisen(II) [mg/L]	$\frac{R(650)}{R(480)}$	13	0,65	Exp.	-2,54	555,98	12	2,96	85,89	15	1,35	54,37
Eisen(II) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	13	0,70	Exp.	-1,03	48,29	12	3,27	94,74	15	1,27	51,19
Eisen(II) [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(650)$	13	0,69	Exp.	-0,90	36,06	12	3,25	94,17	15	1,30	52,07
Eisen(III) [mg/L]	$R(675)$	13	0,78	Lin.	0,00	-0,60	13	2,65	60,17	15	1,69	48,92
Eisen(III) [mg/L]	$R(685)$	13	0,77	Lin.	0,00	-0,63	13	2,76	62,64	15	1,81	52,20
Eisen(III) [mg/L]	$R(706)$	13	0,77	Lin.	0,00	-0,64	13	2,70	61,28	15	1,71	49,48
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.050)}{R(650)-R(1.050)}$	13	0,77	Pot.	-2,93	2,15	13	2,90	65,76	15	1,80	51,98
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(1.250)}{R(650)-R(1.250)}$	13	0,80	Pot.	-2,80	2,17	13	2,90	65,85	15	1,80	52,07
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(790)}{R(650)-R(790)}$	13	0,76	Pot.	-2,20	2,14	13	2,94	66,68	15	1,81	52,20
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(580)-R(850)}{R(650)-R(850)}$	13	0,77	Pot.	-2,45	2,15	13	2,94	66,71	15	1,81	52,18
Eisen(III) [mg/L]	$\frac{R(701)}{R(563)}$	13	0,76	Exp.	2,81	0,24	13	2,88	65,29	15	1,74	50,24

Modell	Entwicklung						Validierung					
Datensatz	19IGB						18HSA			19HSA		
Gewässerinhaltsstoff	Spektralindex	N_C	R^2	Reg.	α	β	N_V	RMSE	rRMSE [%]	N_V	RMSE	rRMSE [%]
Eisen(III) [mg/L]	$R(455) \rightarrow R(650)$	13	0,76	Lin.	0,61	-0,01	13	2,70	61,35	15	1,71	49,31
Eisen(III) [mg/L]	$R(480) \rightarrow R(650)$	13	0,77	Lin.	0,54	0,14	13	2,70	61,36	15	1,70	49,23
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(417)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,46	Log.	-738,84	805,02	13	151	28,03	14	33	8,18
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(580)}{R(520)-R(580)}$	15	0,47	Log.	-846,62	789,45	13	163	30,16	14	42	10,47
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(455)-R(650)}{R(480)-R(580)}$	15	0,45	Lin.	-804,63	1300,23	13	150	27,90	14	25	6,34
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(480)-R(580)}{R(520)+R(580)}$	15	0,51	Lin.	-1271,66	-73,51	13	150	27,75	14	24	6,14
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)-R(519)}{R(563)+R(519)}$	15	0,47	Pot.	0,97	1805,62	13	142	26,40	14	24	5,97
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(455)}{R(580)+R(455)}$	15	0,53	Pot.	1,05	899,23	13	149	27,61	14	26	6,63
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(480)}{R(580)+R(480)}$	15	0,53	Pot.	1,07	1033,46	13	140	25,98	14	22	5,60
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(580)-R(520)}{R(580)+R(520)}$	15	0,50	Exp.	3,06	188,43	13	134	24,94	14	23	5,67
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(650)-R(480)}{R(650)+R(480)}$	15	0,44	Pot.	0,34	551,90	13	141	26,18	14	23	5,83
Sulfat [mg/L]	$\frac{R(563)}{R(519)}$	15	0,46	Exp.	1,43	44,29	13	144	26,71	14	24	6,05

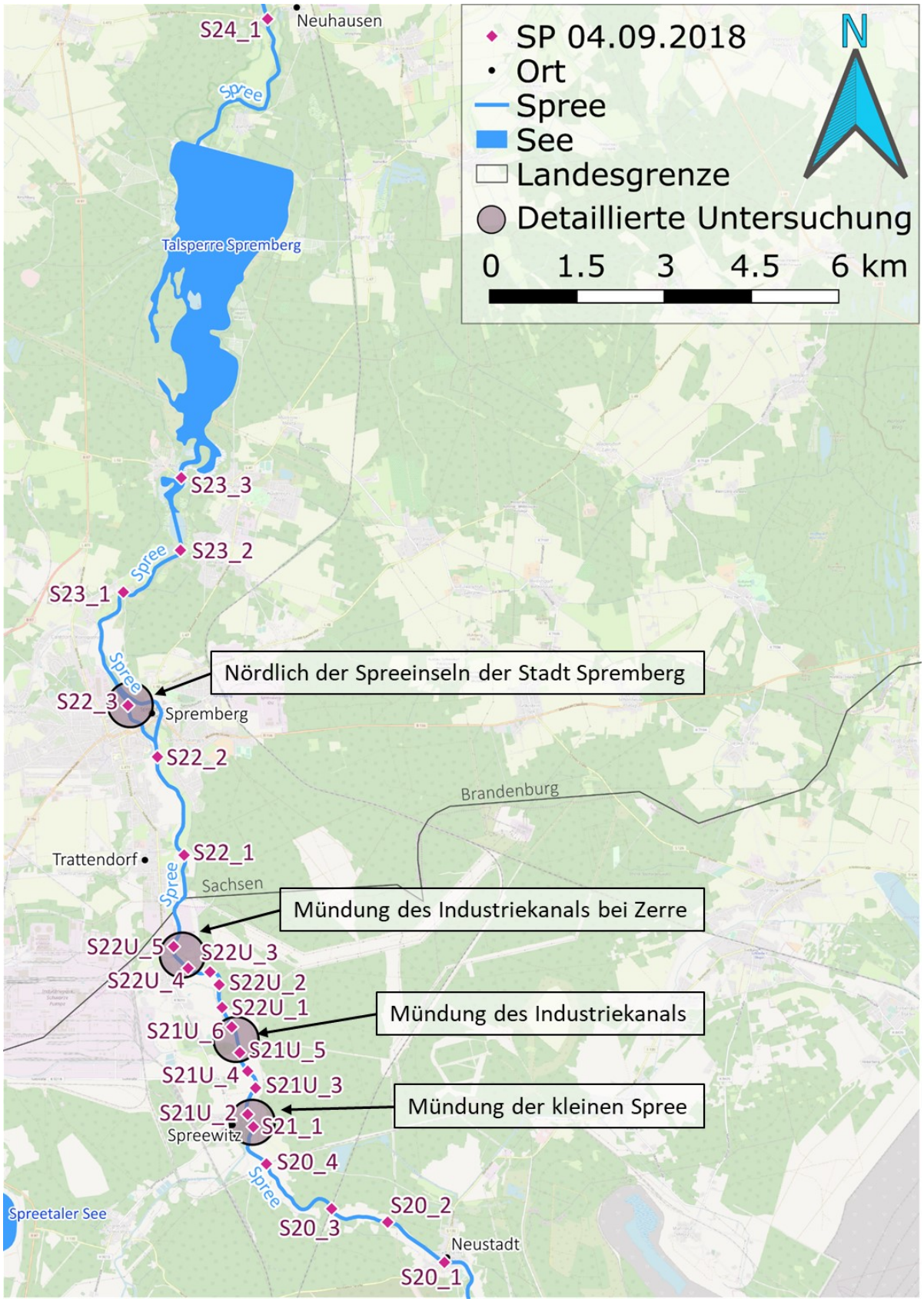

Abbildung I-18: Abbildung des Untersuchungsgebietes mit Kennzeichnung der Gebiete zur detaillierten Darstellung der Ableitungsergebnisse der Messkampagne vom 04.09.2018. Weiterhin sind die Probenentnahmestellen eingezeichnet.
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

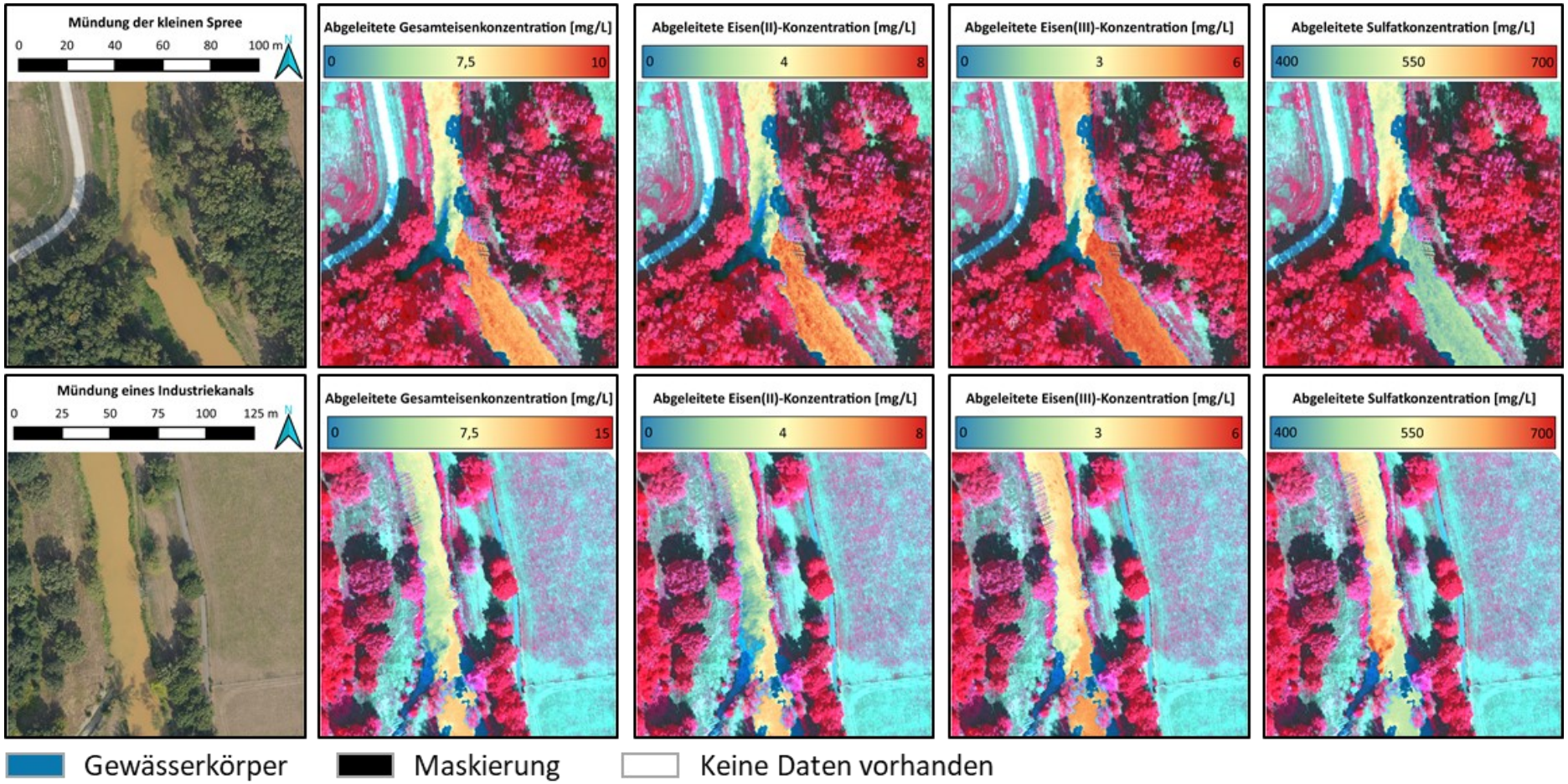

Abbildung I-19: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 04.09.2018. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-14 angegeben. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

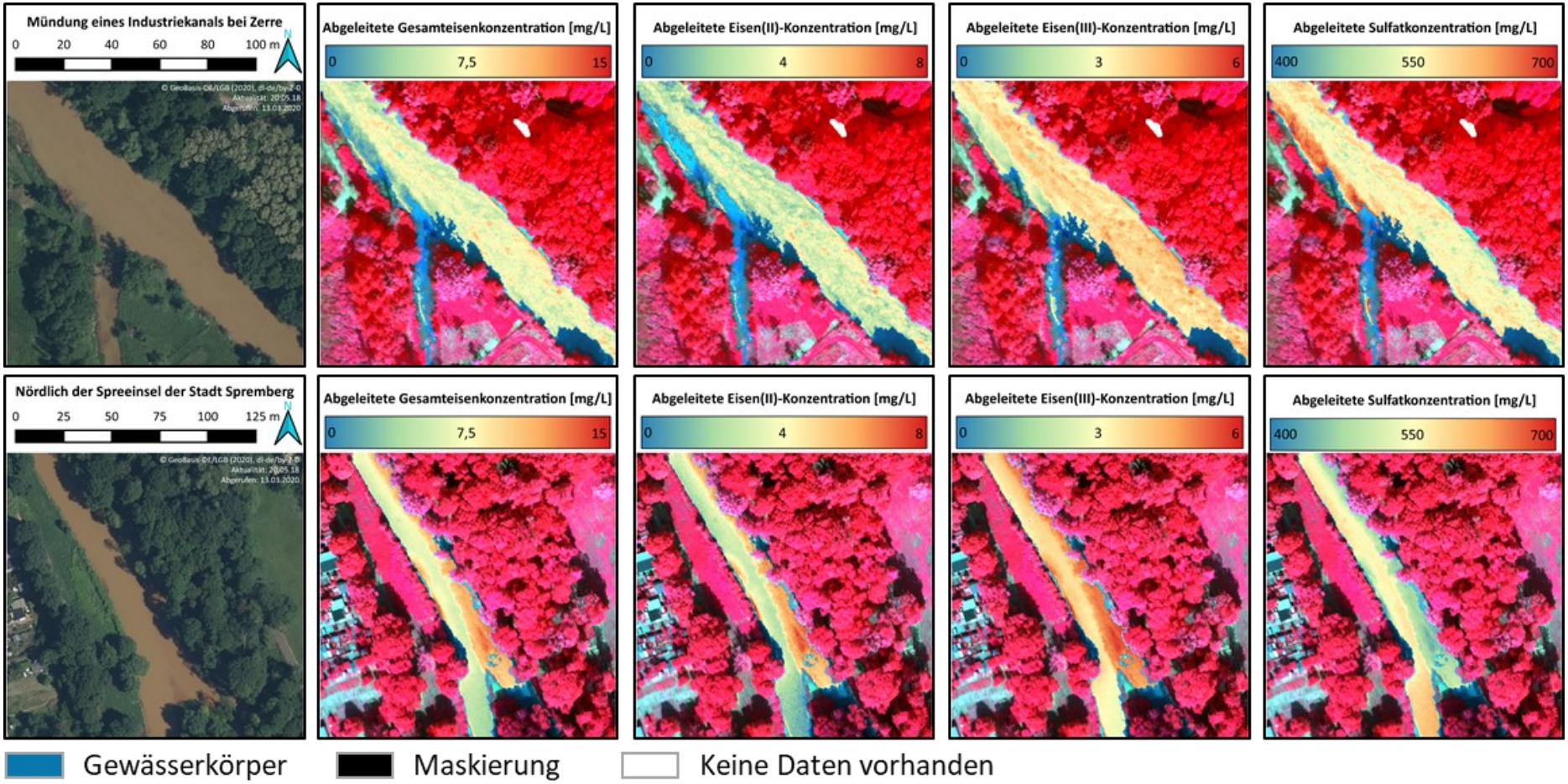

Abbildung I-20: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Mündung eines Industriekanals bei Zerre sowie der nördlichen Spitze der Spreeinsel in Spremberg vom 04.09.2018. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-14 angegeben. Im Hintergrund sind das digitale Orthophoto des WMS von Brandenburg (© GeoBasis-DE/LGB (2020), dl-de/by-2-0) sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

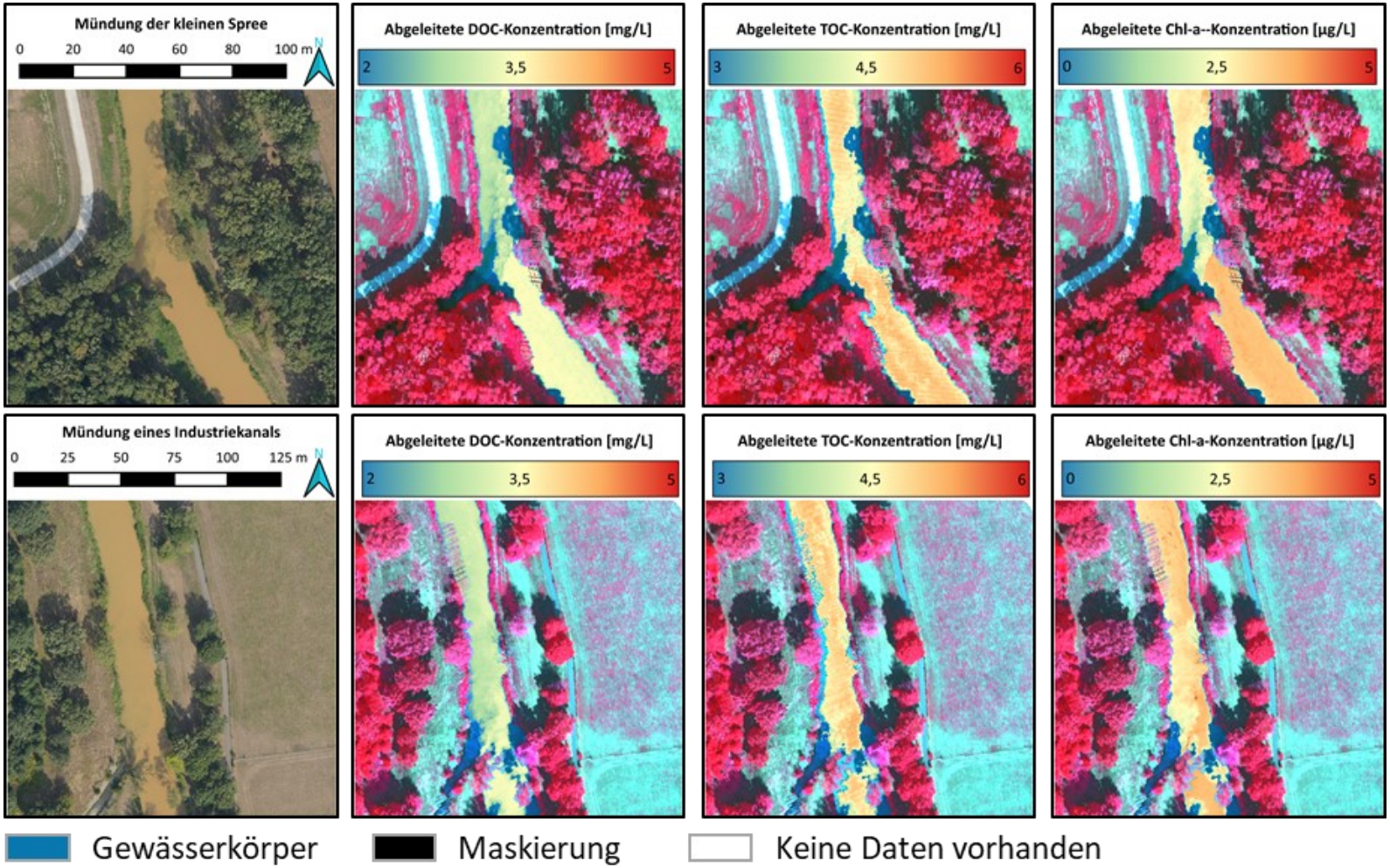

Abbildung I-21: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 04.09.2018. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-14 angegeben. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

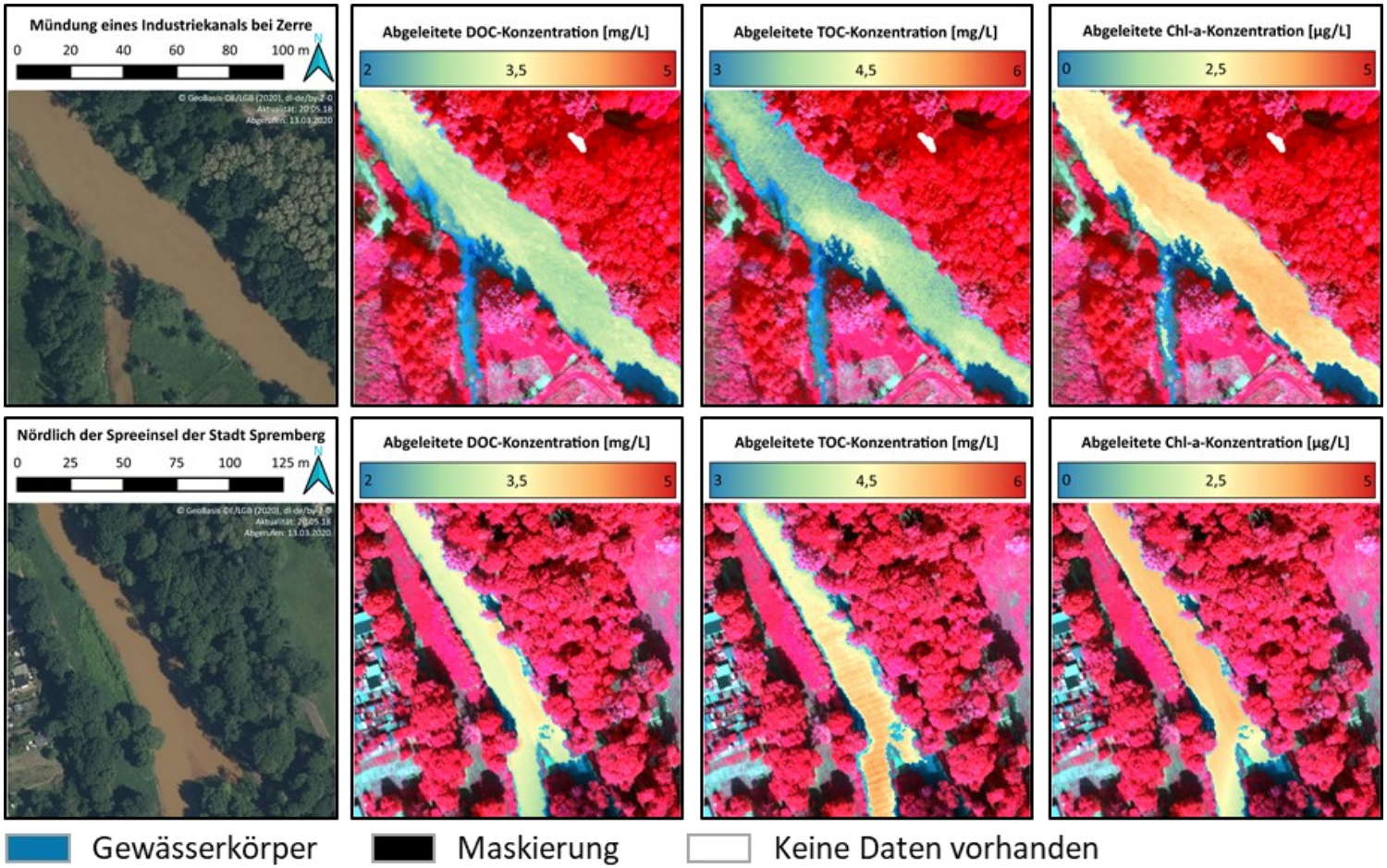

Abbildung I-22: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Mündung des Industriekanals bei Zerre sowie die nördliche Spitze der Spreeinsel in Spremberg vom 04.09.2018. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-14 angegeben. Im Hintergrund sind das digitale Orthophoto des WMS von Brandenburg (© GeoBasis-DE/LGB (2020), dl-de/by-2-0) sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

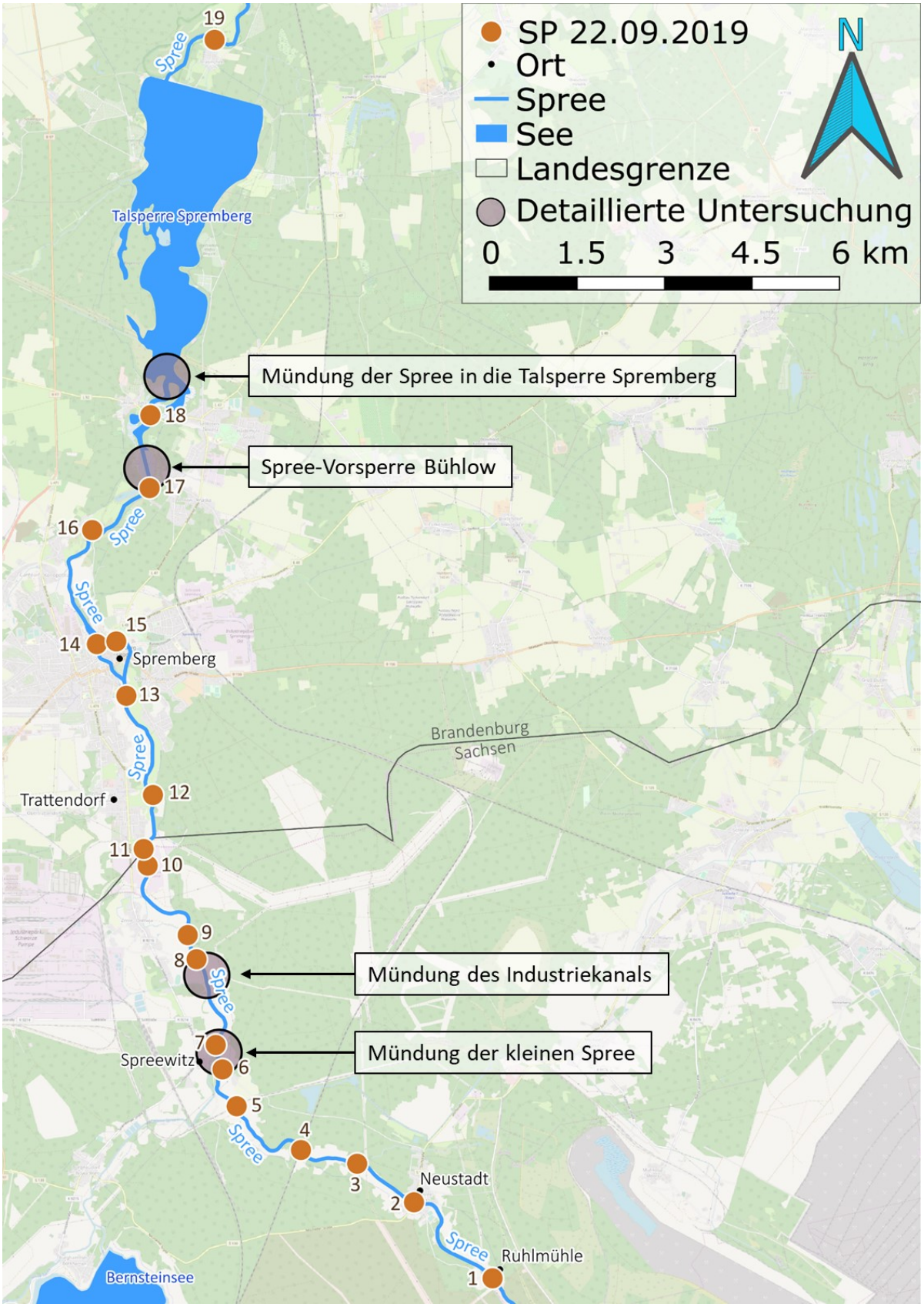

Abbildung I-23: *Abbildung des Untersuchungsgebietes mit Kennzeichnung der Gebiete zur detaillierten Darstellung der Ableitungsergebnisse zur Messkampagne vom 22.09.2019. Weiterhin sind die Probenentnahmestellen eingezeichnet.*
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

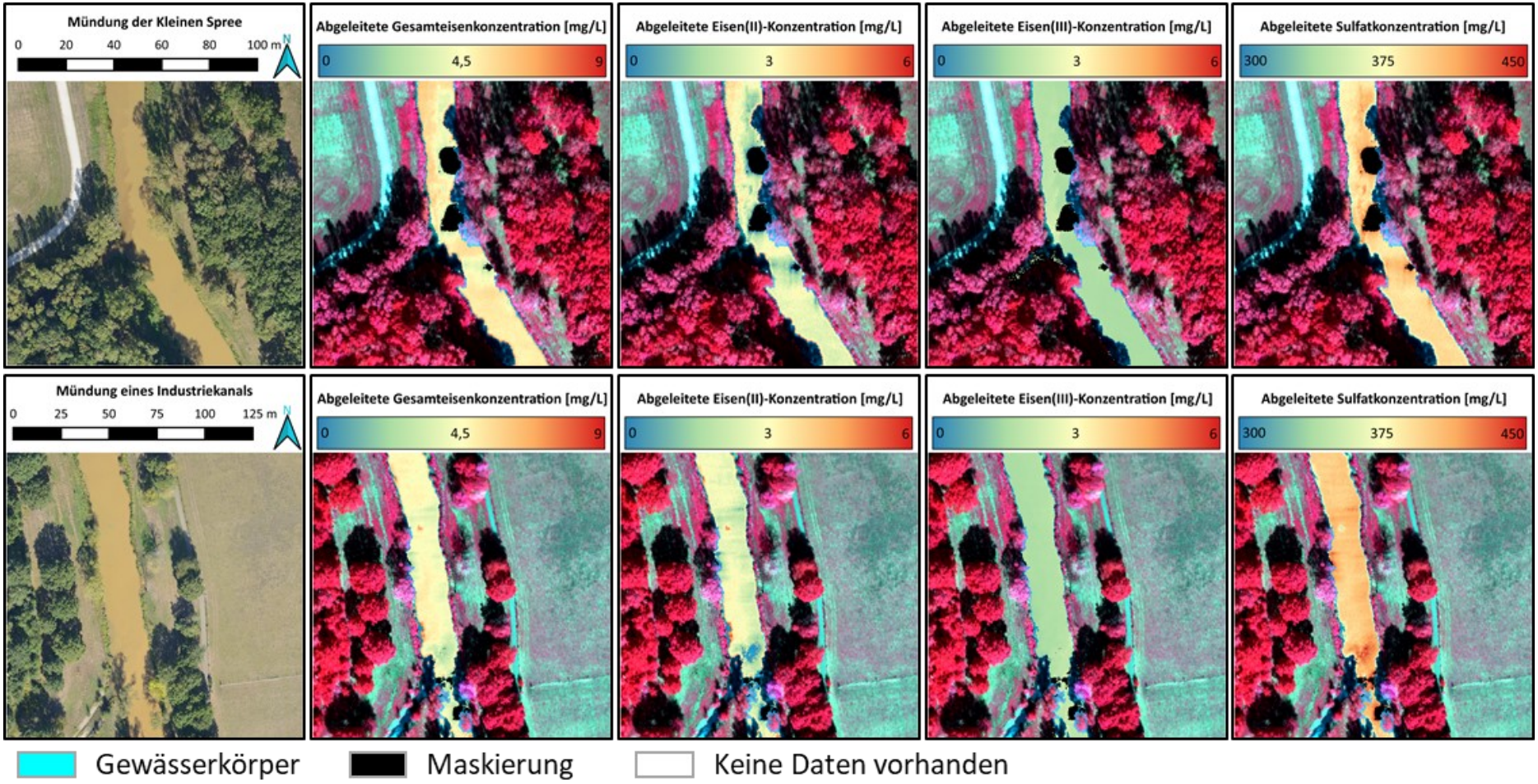

Abbildung I-24: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 22.09.2019. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-15 angegeben. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

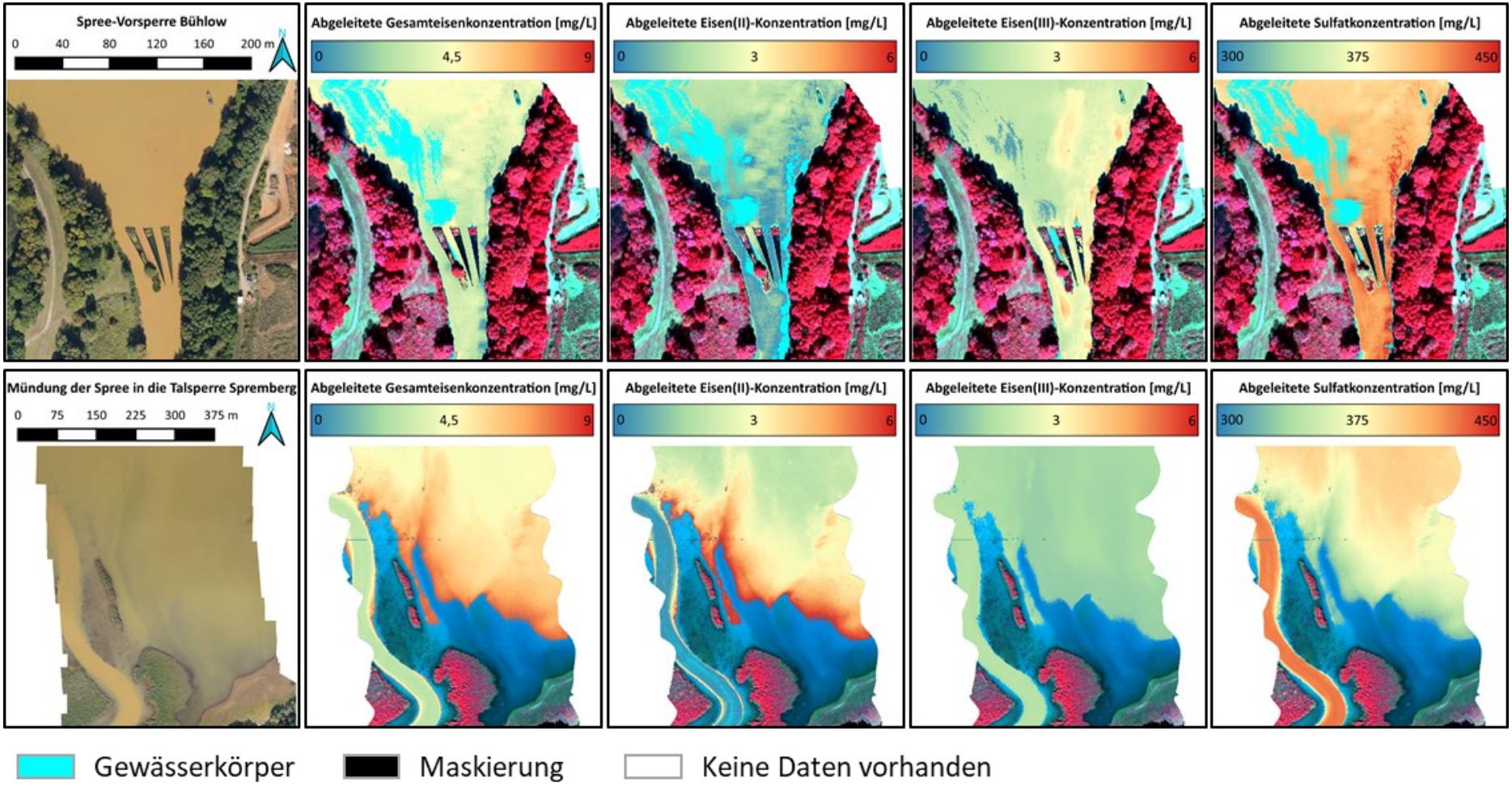

***Abbildung I-25**: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Sulfat beispielhaft anhand der Spree-Vorsperre Bühlow und der Talsperre Spremberg vom 22.09.2019. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-15 angegeben. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).*

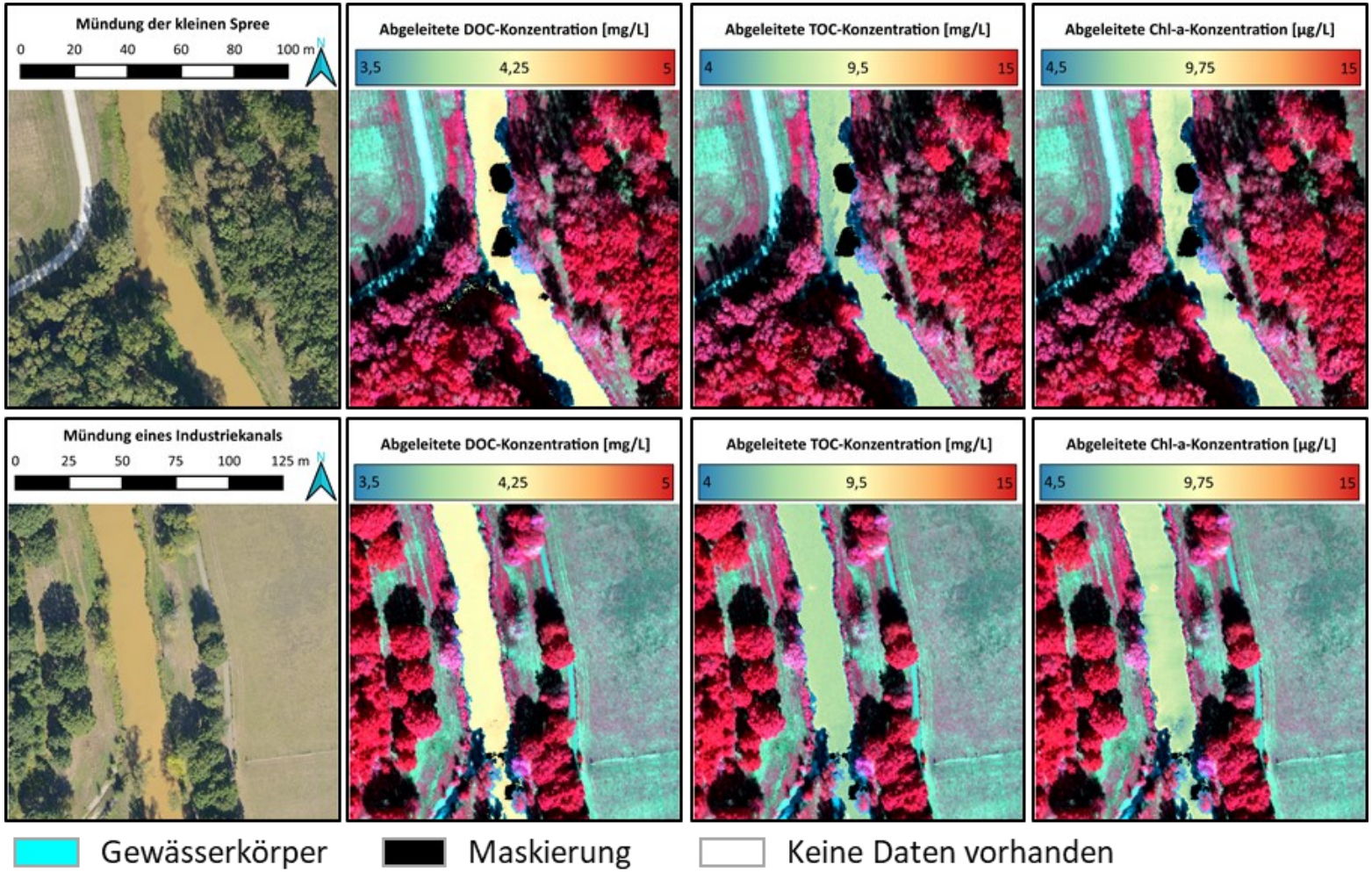

Abbildung I-26: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Mündung der Kleinen Spree sowie des Industriekanals vom 22.09.2019. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-15 angegeben. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle wird der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

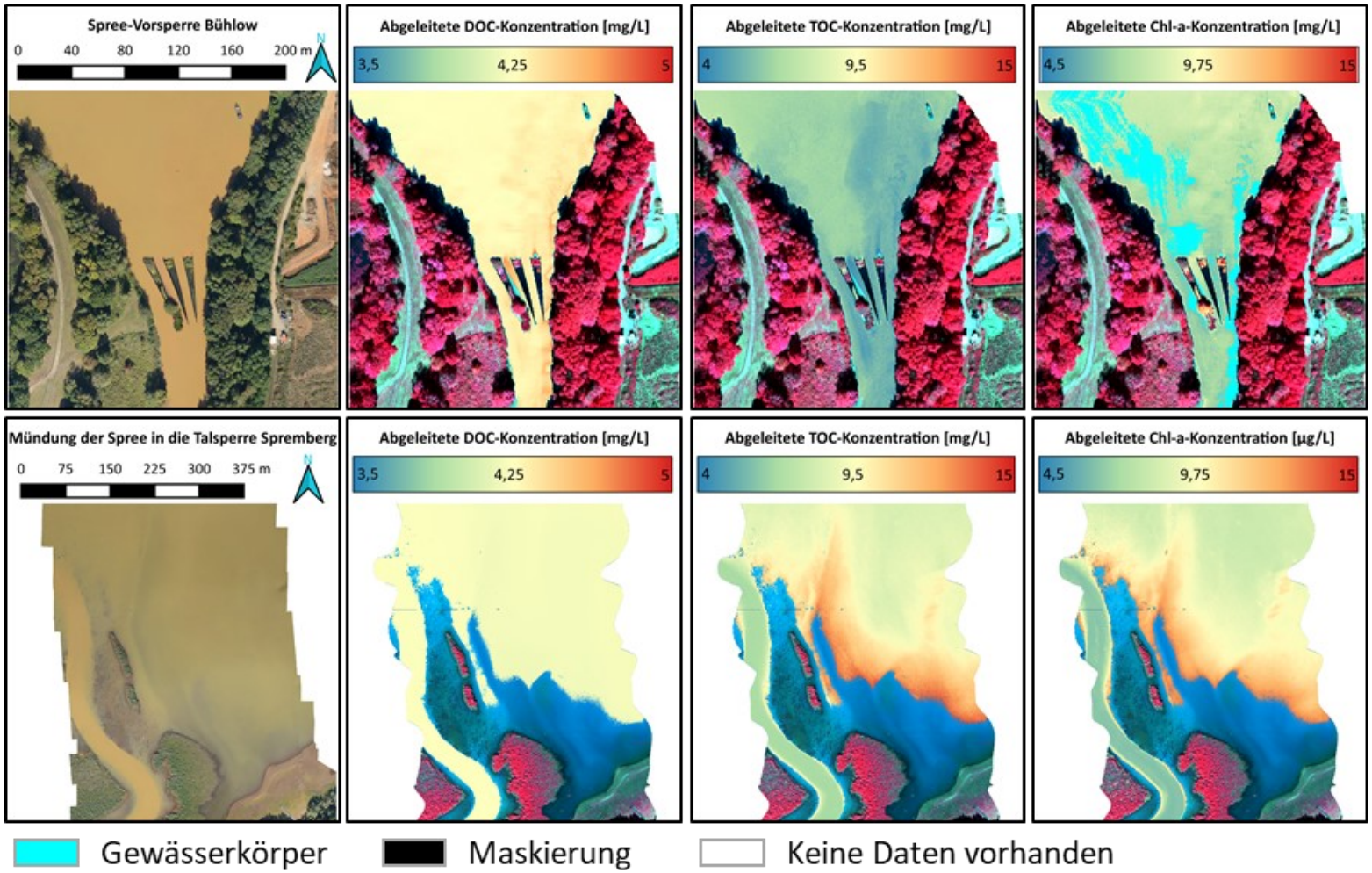

Abbildung I-27: Darstellung der Verteilungskarten der Gewässerinhaltsstoffe von DOC, TOC und Chl-a beispielhaft anhand der Spree-Vorsperre Bühlow und der Talsperre Spremberg vom 22.09.2019. Die verwendeten Ableitungsmodelle sind in Tabelle 6-15 angegeben. Im Hintergrund sind ein hochauflösendes True-Orthophoto sowie das Hyperspektralbild (780,680,580) abgebildet. Durch diese Kombination der Hyperspektralkanäle der Gewässerkörper blau dargestellt. Die Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte nach Kapitel II (Anlage).

II. Prozessierung der hyperspektralen Fernerkundungsdaten

Zur Prozessierung der Hyperspektraldaten erfolgte die Umrechnung der Grauwerte (engl. digital numbers (DN)) in Strahldichten [W/(sr*m²*nm)]. Weiterhin waren die Informationen über die Trajektorie sowie der Events erforderlich.

Der Datensatz über die Trajektorie bestand aus der GPS-Wochensekunde, der Position (X, Y, Z) sowie den Raumwinkeln (Roll, Pitch, Heading). Zur präzisen Prozessierung der Hyperspektraldaten wurde die Trajektorie mit einer zeitlichen Differenz von 0,001 sec ausgegeben. Mittels spezieller Software der Firma NEO erfolgte die spezifische Berechnung der Trajektorie für jeden erfassten Hyperspektralstreifen. Zur Georeferenzierung sowie Rektifizierung der Hyperspektraldaten wurde die Software PARGE Version 3.3 verwendet. Weiterhin wurden zur Erhöhung der Lagegenauigkeit Ground Control Points (GCP) anhand des synchron erfassten True-Orthophotos erstellt. Die resultierende GSD betrag 23 cm beim HySpex VNIR 1600 bzw. 66 cm beim HySpex SWIR 384.

Aufgrund der Nachbarschaftseffekte (s. Kapitel 3.1) wurden anschließend die in der Nähe befindlichen Objekte mittels Masken ausgeblendet. Denn aufgrund der Flughöhe von 600 m und einem Öffnungswinkel (eng. field of view (FOV)) von 34° (HySpex VNIR 1600) respektive 32° (HySpex SWIR 384) wurden Objekte vom Sensor erfasst, die für die Untersuchungen nicht relevant sind, wie. z. B. Häuser, Felder oder Wiesen. Diese trugen zur Erhöhung der messbaren Strahldichten am Sensor bei, wodurch es zur Überkorrektur der atmosphärischen Einflüsse kommen kann. Weiterhin können am Ufer befindliche Objekte sowie die Sonne die rückgestreute Strahldichten der Gewässeroberfläche durch Spiegelungen, Schatten oder sun glint beeinflussen. Diese Bereiche wurden ebenfalls mittels einer Maske ausgeblendet. In der Folge enthält das resultierende Hyperspektralbild nur die Spektralinformationen des Flusses Spree.

In Abbildung II-1 ist die Anwendung der Masken dargestellt. Das abgebildete Gebiet befindet sich bei Trattendorf. Durch die Spiegelungen an den Solarpaneelen sind die Nachbarschaftseffekte deutlich erkennbar. Dies resultierte in einer veränderten Strahldichte am Sensor, welche durch Masken ausgeblendet wurde. Die Reduzierung der Information ist deutlich zu erkennen. Nachfolgend wird die Erstellung der Masken beschrieben.

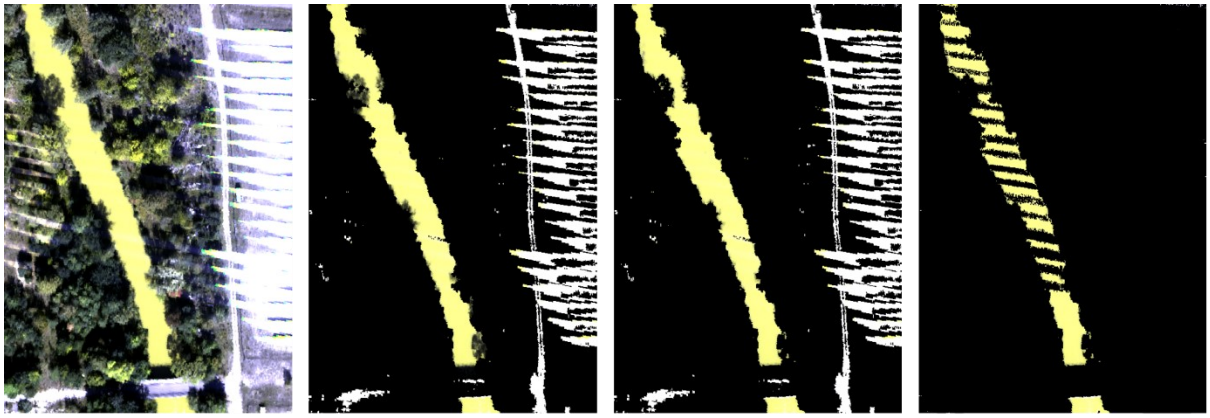

Abbildung II-1: Anwendung der erstellten Maske am Beispiel des Hyperspektralstreifens.

Im ersten Schritt erfolgte die Berechnung des Normalized Difference Water Index (NDWI) in Anlehnung an Gl. II-1 zur Identifizierung des Gewässers:

$$NDWI = \frac{Green-NIR}{Green+NIR}$$ (McFEETERS 1996) **Gl. II-1**

Gemäß McFEETERS (1996) beschreibt der grüne Kanal (Green) die maximale Rückstreuung eines Gewässers. Dementsprechend beschreibt der NIR-Kanal die minimale Rückstreuung. Bei Anwendung des NDWI auf das Untersuchungsobjekt erfolgte aufgrund der hohen Trübung eine Verschiebung des grünen Kanals. Denn wie in Abbildung II-2 zu erkennen ist, befindet sich die maximale Strahldichte von SP 4 und SP 5 im Wellenlängenbereich von 550 bis 650 nm. Weiterhin ist im Wellenlängenbereich des NIR, von 780 bis 1.400 nm, eine deutliche Abnahme der Strahldichte ersichtlich. Dementsprechend wurde die Bestimmung des NDWI nach Gl. II-1 adaptiert (Gl. II-2):

$$NDWI = \frac{L(629)-L(956)}{L(629)+L(956)}$$ in Anlehnung an (McFEETERS 1996) **Gl.II-2**

L(λ): rückgestreute Strahldichte

Mittels eines Schwellwertes wurde das resultierende Grauwertbild in eine Maske umgewandelt. Untersuchungen zeigten, dass ein geeigneter Schwellwert zwischen 0,2 und 0,5 betrug. Alle Grauwerte größer des Schwellwertes wurden dem Wert 1 zugeordnet. Die verbliebenen Werte erhielten den Wert 0. In der Folge enthalten die Rasterzellen der Maske die Werte 0 und 1. Der Wert 1 stellt das Gewässer dar.

Zur Detektion von schattigen Bereichen wurde zunächst anhand von einer Vielzahl an Spektren des Flusses Spree eine Spektralanalyse durchgeführt. In Abbildung **II-2**: Spektralanalyse zur Identifizierung eines Schwellwertes zur Detektion von Schattenflächen auf

dem Fluss Spree. Schattige Bereiche sind mit einer gestrichelten Linie dargestellt. Durchgezogene Linien stellen das Spektrum schattenfreier Bereich dar. ist dies beispielhaft anhand von fünf Spektren dargestellt. Die Spektren von SP 1, SP 2 und SP 3 wurden von schattigen Flächen extrahiert. Die Spektralverläufe von SP 4 und SP 5 stellen schattenfreie Orte dar.

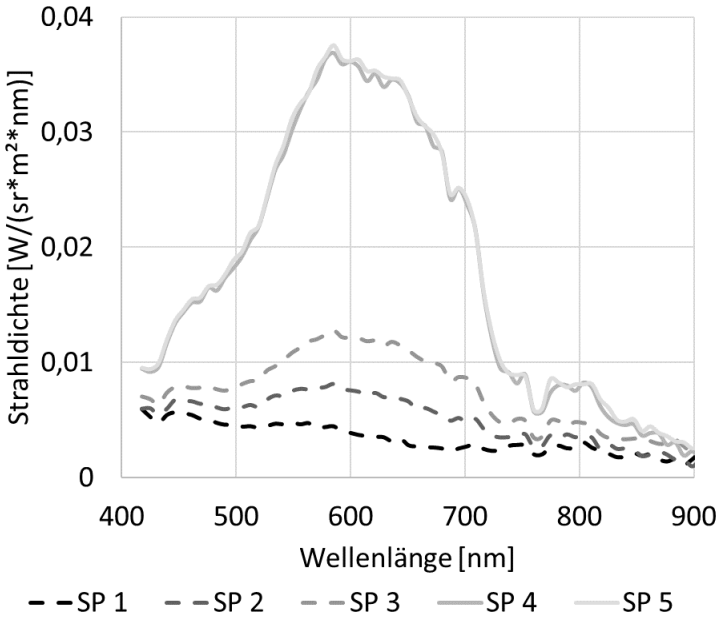

Abbildung II-2: Spektralanalyse zur Identifizierung eines Schwellwertes zur Detektion von Schattenflächen auf dem Fluss Spree. Schattige Bereiche sind mit einer gestrichelten Linie dargestellt. Durchgezogene Linien stellen das Spektrum schattenfreier Bereich dar.

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Spektren schattenfreier Bereiche eine deutlich höhere Strahldichte aufweisen. Weiterhin zeigen die Spektralverläufe der Messpunkte SP 1 bis SP 3 einen erheblichen Informationsverlust im Wellenlängenbereich von 500 bis 700 nm. Basierend auf der Spektralanalyse wurde der Schwellwert von 0,02 W/(sr*m²*nm) bei 580 nm gewählt. Alle Strahldichte-Werte, die kleiner sind, wurden den schattigen Bereichen zugeordnet. Demzufolge wurden die Pixel mit einem größeren Strahldichte-Wert den schattenfreien Flächen zugeteilt.

Im dritten Schritt wurde die Maskierung der Nachbarschaftseffekte durchgeführt. Dies erfolgte in zwei Schritten. Im ersten Schritt wurden die überbelichteten Pixel identifiziert und entsprechend maskiert. Im zweiten Schritt wurden die Einflüsse auf die Gewässeroberfläche lokalisiert. In Abbildung II-3 sind sechs Spektralverläufe abgebildet. Die Spektren von SP 1 bis SP 3 wurden von Bereichen mit Nachbarschaftseffekten extrahiert. Dagegen sind die Spektralverläufe von SP 4 bis SP 6 unverändert.

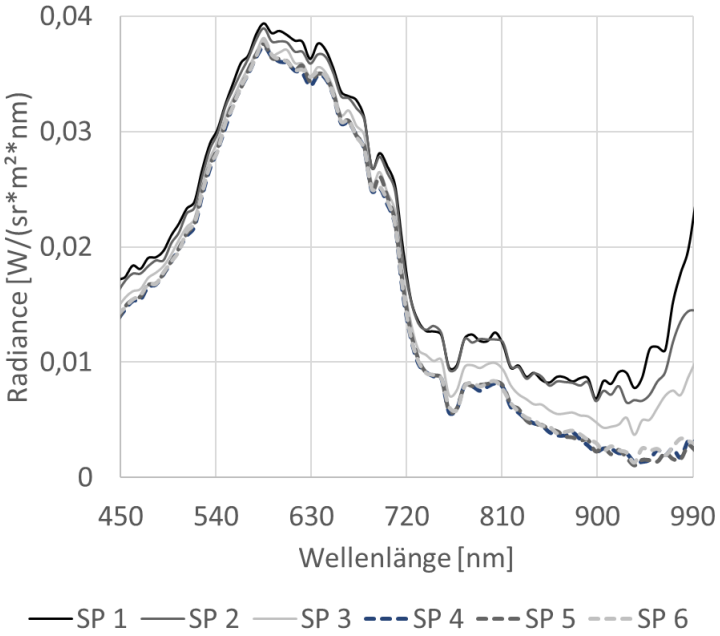

Abbildung II-3: Spektralanalyse als Basis zur Entwicklung eines Index zur Detektion von Nachbarschaftseffekten auf der Gewässeroberfläche. SP 1 bis SP 3 stellen die Spektralverläufe von Bereichen mit Nachbarschaftseffekten dar. SP 4 bis SP 6 repräsentieren unveränderte Bereiche des Gewässers.

Deutliche Unterschiede der Spektren sind bei den Wellenlängen größer 720 nm zu erkennen.

Darauf basierend wurde folgender Index (Gl. II-3) entwickelt:

$$\text{Index} = \frac{L(900) - L(977)}{L(900) + L(977)} \qquad \textbf{Gl.II-3}$$

L(λ): rückgestreute Strahldichte

Der geeignete Schwellwert betrug zwischen 0,05 und 0,15. Größere Indexwerte wurden den Bereichen mit Einflüssen durch Nachbarschaftseffekten zu geordnet.

Im direkten Anschluss erfolgte die Atmosphärenkorrektur mit der Software ATCOR Version 7.2, wodurch die Umrechnung der Pixelwerte von Strahldichten in Reflektanzen erfolgte. Zur Atmosphärenkorrektur wurde ein urbanes Modell aufgrund der Tagebautätigkeiten und des Industrieparks herangezogen

Weiterhin ist die Angabe der Sichtweite zur Atmosphärenkorrektur notwendig. Diese resultiert aus dem Bewölkungsgrad am Tag der Befliegung. Demzufolge wurde zur Prozessierung der Daten vom 04.09.2018[4] eine Sichtweite von 23 km und für die Daten vom 22.09.2019[5] eine Sichtweite von 35 km angegeben.

[4] https://www.timeanddate.de/wetter/@2830085/rueckblick?month=9&year=2018 (10.04.20)
[5] https://www.timeanddate.de/wetter/@2830085/rueckblick?month=9&year=2019 (10.04.20)

Abschließend ist zu beachten, dass die Pixelwerte der prozessierten Hyperspektralbilder gemäß Ray (1994) eine scheinbare Reflektanz (eng. apparent reflectance (aR_{RS})) repräsentieren. Denn mittels der durchgeführten Atmosphärenkorrektur werden die Schattenbereiche sowie die richtungsabhängigen Strahlungseffekte nicht berücksichtigt, z. B. sun glint oder Spieglungen von Solaranlagen. Allerdings ist die Anwendung der aR_{RS} in den meisten Fällen analog zur Remote Sensing Reflectance (R_{RS}).

III. Anlage: Daten zur Charakterisierung des Untersuchungsgebietes

Zur wissenschaftlichen Beurteilung und Interpretation der chemischen In situ-Daten (s. Kapitel 4.2) sowie der hyperspektralen Fernerkundungsdaten (s. Kapitel 4.3.2) erfolgte die Erfassung weiterer In situ-Parameter: der pH-Wert, die Sichttiefe, spektrale In situ-Messungen, die Bathymetrie und die eines vertikalen Eisengradienten. Aufgrund der geringen Anzahl an Messungen sind diese Parameter nicht zur flächendeckenden Ableitung geeignet. In Abbildung III-1 sind die Probeentnahmestellen der drei Messkampagnen dargestellt. Die dazugehörigen Koordinatenlisten sind in Tabelle III-1 (09.05.2018), Tabelle I-1 (04.09.2018) und Tabelle I-2 (22.09.2019) vorzufinden.

Tabelle III-1: Koordinatenliste der Messstellen vom 09.05.2018

SP ID	X	Y
SP 01	462079,15	5704076,49
SP 02	461239,66	5704739,00
SP 03	460263,32	5704868,69
SP 04	459609,54	5704996,25

Koordinatensystem: WGS 84 / UTM Zone 33N
EPSG:32633

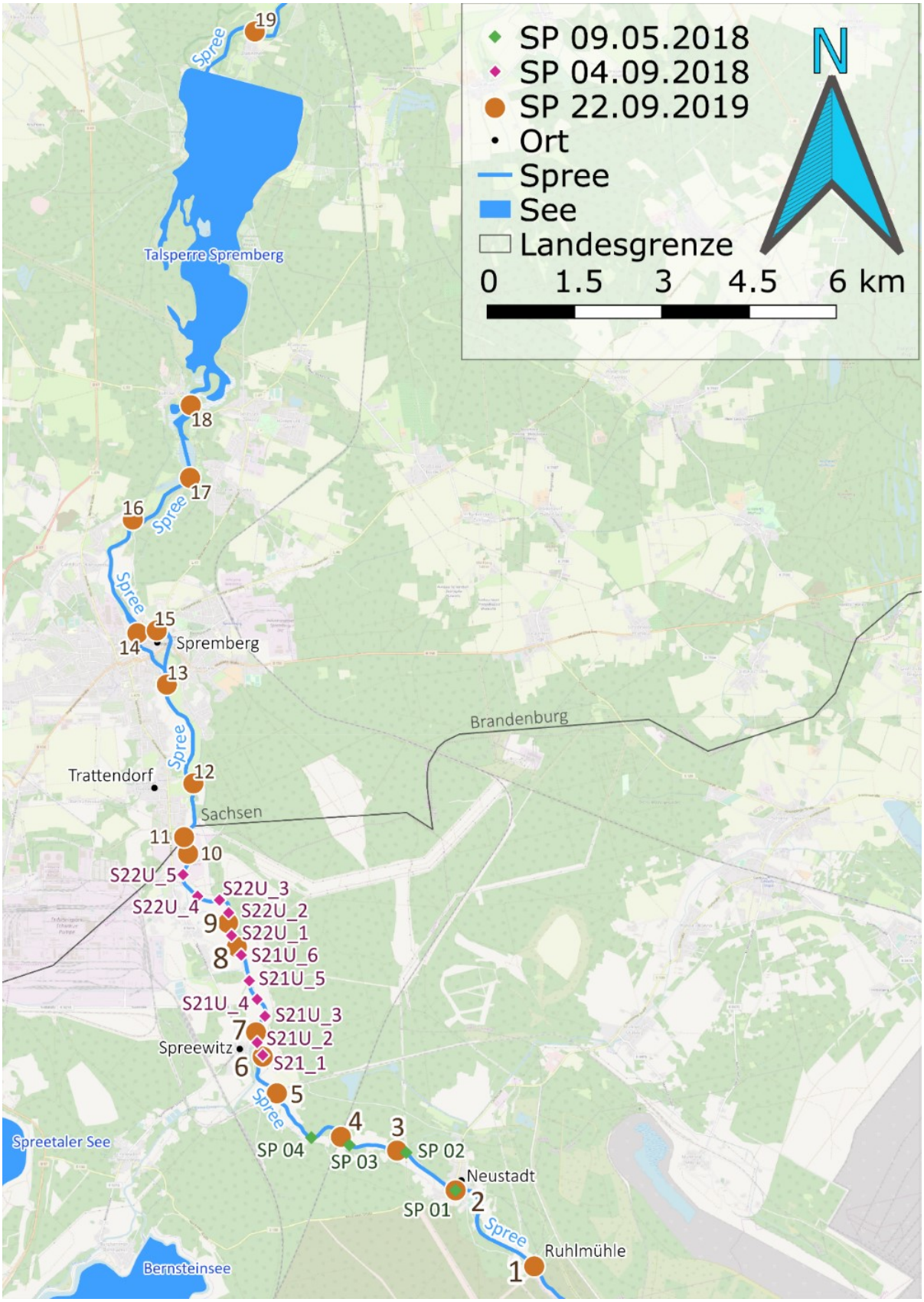

***Abbildung III-1**: Darstellung der Messstellen (SP) zur Erhebung der vor Ort-Parameter.*
Geodatenquellen*: © GeoBasis-DE / BKG <2017>, © OpenStreetMap-contributers*
Hintergrundkarte: © OpenStreetMap-contributors

III.I. pH-Wert

Der pH-Wert weist als Gewässerparameter einen großen Einfluss auf die chemischen sowie biologischen Prozesse im Gewässerkörper auf (Hütter 1990, S. 87). Dieser wurde in allen drei Messkampagnen, 09.05.2018, 04.09.2018 und 22.09.2019, mittels des Messgerätes ProfiLine pH 3110 erfasst. Die Messdaten sind in Tabelle III-2 bis Tabelle III-4 vorzufinden. Allerdings wurde nur am 22.09.2019 an allen Probenentnahmestellen der pH-Wert bestimmt. Weiterhin wiesen im Flussabschnitt von Neustadt bis Spreewitz die Messungen der ersten (09.05.2018) und der dritten Messkampagne (22.09.2019) einen tendenziell sinkenden pH-Wert von -7 % auf. Ein Vergleich der Messwerte der zweiten (04.09.2018) und dritten Messkampagnen ist aufgrund verschiedener Messstellen bei Spreewitz nicht möglich. Jedoch zeigten die pH-Werte vom 04.09.2018 einen Anstieg von 5 % für den Flussabschnitt zwischen Spreewitz und Trattendorf auf. Anhand der Messwerte vom 22.09.2019 ist ein deutlicher Anstieg des pH-Wertes zwischen Spreewitz bis Bräsinchen mit 19 % zu erkennen.

III.II. Bestimmung Sichttiefe

Die Bestimmung der Sichttiefe mittels einer Secchi-Scheibe (eng. Secchi-Disk) (Z_{SD}) stellt einen wichtigen Parameter dar und ist dementsprechend ein zentraler Punkt der Europäischen Wasserrahmenrichtlinie (Alikas und Kratzer 2017; European Environment Agency 2018). Weiterhin beschreibt die Z_{SD} eine quantitative Größe der Transparenz in vertikaler Richtung eines Gewässers (Lee et al. 2015). Diese gibt die Tiefe an, in der die Secchi-Scheibe vom Beobachter im Wasserkörper nicht mehr gesehen wird (Lee et al. 2015). Gemäß Gholizadeh et al. (2016) weist die Z_{SD} eine starke Korrelation zur TSM-Konzentration auf.

Im Flussabschnitt von Neustadt bis Spreewitz wurde am 09.05.2018 eine Sichttiefe zwischen 40 und 55 cm gemessen, wobei die Sichttiefe entsprechend der Fließrichtung um 38 % zunahm. Im Flussabschnitt der Spree von Spreewitz bis Trattendorf wurde am 04.09.2018 eine Zunahme der Sichttiefe um 100 % beobachtet. Der Wertebereich lag zwischen 45 und 90 cm.

Tabelle III-2: Auflistung der gemessenen Sichttiefen und pH-Werte vom 09.05.2018.

SP ID	Sichttiefe [cm]	pH-Wert
SP 01	40	7,38
SP 02	55	7,23
SP 03	50	6,98
SP 04	55	6,87

Tabelle III-3: Auflistung der gemessenen Sichttiefen und pH-Werte vom 04.09.2018

SP ID	Sichttiefe [cm]	pH-Wert
S21_1	45	6,63
S21U_2	55	6,85
S21U_3	65	6,8
S21U_4	65	6,858
S21U_5	70	6,818
S21U_6	75	6,9
S22U_1	70	6,91
S22U_2	70	7,09
S22U_3	62	6,98
S22U_4	80	6,907
S22U_5	90	6,958

Tabelle III-4: Auflistung der gemessenen pH-Werte vom 22.09.2019

SP ID	Sichttiefe [cm]
1	7,77
2	7,35
3	7,31
4	7,21
5	7,167
6	7,19
7	7,12
8	7,16
9	7,23
10	7,23
11	7,26
12	7,31
13	7,35
14	7,4
15	7,4
16	7,24
17	7,76
18	8,45
19	8,53

III.III. Spektrale In situ-Messungen

Wie in Kapitel 5.3 beschrieben, wurden spektrale In situ-Messungen mittels des Spektrometers FLAME der Firma OceanOptics im Wellenlängenbereich von 400 bis 900 nm durchgeführt. Dazu wurde das Spektrometer auf einer speziell entwickelten schwimmenden Plattform installiert. Ziel war die Ableitung der Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}), des vertikalen Dämpfungskoeffizienten (K_d) sowie die Bestimmung der Signaltiefe ($Z_{90\%}$).

Die Bestimmung von R_{SIR} erfolgte nach Gl. 5-8 (s. Kapitel 5.2). Diese ermöglicht direkte Rückschlüsse auf die Gewässerinhaltsstoffe. Der vertikale Dämpfungskoeffizient der einfallenden Bestrahlungsstärke (K_d) stellt einen wichtigen Parameter zur Bestimmung der Lichtintensität in bestimmter Tiefe (z) dar (Lee et al. 2005). Der K_d kann gemäß Kirk (2003) und Lee et al. (2005) nach Gl. II-11 ermittelt werden:

$$K_d(z_1 \leftrightarrow z_2) = \frac{1}{z_2 - z_1} \ln\left(\frac{E_d(z_1)}{E_d(z_2)}\right) \qquad \textbf{Gl. II-11}$$

K_d: vertikaler Dämpfungskoeffizient der einfallenden Bestrahlungsstärke

E_d: einfallende Bestrahlungsstärke

z_i: Messtiefe

„Unter der Annahme, dass die Rückstreuwahrscheinlichkeit in allen Wassertiefen gleich groß ist“ (Heege 2000, S. 69) und die erste Spektralmessung direkt unterhalb der Wasseroberfläche ($z_1 = 0$) erfolgte, kann im Anschluss die Tiefe ermittelt werden aus der 90 % des gemessenen Signals stammen ($Z_{90\%}$).

$$Z_{90\%} = \frac{1}{K_d} \ln\left(\frac{E_d(z_1)}{E_d(z_1)*0{,}1}\right) \qquad \textbf{Gl. II-12}$$

K_d: vertikaler Dämpfungskoeffizient der einfallenden Bestrahlungsstärke

E_d: einfallende Bestrahlungsstärke

z_1: Messtiefe = 0

$Z_{90\%}$: Tiefe von 90 % der rückgestreuten Strahlung

Am 04.09.2018 wurde an fünf Messstellen die rückgestreute (E_u) und einfallende (E_d) Bestrahlungsstärke knapp unter der Gewässeroberfläche sowie in 45 cm Tiefe gemessen. Die Ergebnisse der abgeleiteten R_{SIR} sind in Abbildung 5-3 (s. Kapitel 5.2) vorzufinden. Nachfolgend wird die Ableitung der Signaltiefe genauer erläutert.

Nach Stumpf und Pennock (1991) beträgt der K_d(490 nm) in trüben Gewässern zwischen 0,5 und 5 m^{-1}. Der Wertebereich von K_d(490 nm) hatte am Tag der Messung zwischen 3,94 und

5,32 m^{-1} betragen. Im Mittel lag dieser bei 4,63 m^{-1}. In der Folge ist auf dem Streckenabschnitt der Spree, von Spreewitz bis Trattendorf, basierend auf den K_d(490 nm)-Werten von einem trüben Gewässer auszugehen. Die abgeleiteten R_{SIR} und K_d je Messstelle sind in Abbildung III-2 abgebildet.

Unter der Annahme einer gleich großen Rückstreuwahrscheinlichkeit in allen Wassertiefen wurde anhand der ermittelten K_d-Werte die Signaltiefe ($Z_{90\%}$) gemäß Gl. II-12 berechnet. In Tabelle III-5 sind die $Z_{90\%}$ sowie die Sichttiefen (Z_{SD}) der fünf Messstellen aufgelistet.

Tabelle III-5*: Auflistung der berechneten Signaltiefen ($Z_{90\%}$) sowie der gemessenen Sichttiefe mittels Secchi-Scheibe (Z_{SD}) von fünf Messtellen vom 04.09.2018.*

Messtelle	S21_1	S21_U2	S21U_3	S21_U4	S22U_1
$Z_{90\%}$ (490) [cm]	51	43	58	47	51
Sichttiefe (Z_{SD}) [cm]	45	55	65	65	70

Zur Beurteilung der Genauigkeit der berechneten $Z_{90\%}$ untereinander sowie im Vergleich zur Sichttiefe Z_{SD} wurden der RMSE sowie der rRMSE berechnet.

Unter der Annahme, dass die gemessene Sichttiefe Z_{SD} fehlerfrei ist, wies die ermittelte $Z_{90\%}$(490) einen RMSE von 13,51 cm und einen rRMSE von 22,52 % auf. Aufgrund der geringen Anzahl an Daten ist jedoch keine belastbare Aussage möglich. Demzufolge ist anzunehmen, dass das erfasste Fernerkundungssignal in der Gewässertiefe der maximalen Sichttiefe (Z_{SD}) zurückgestreut wurde.

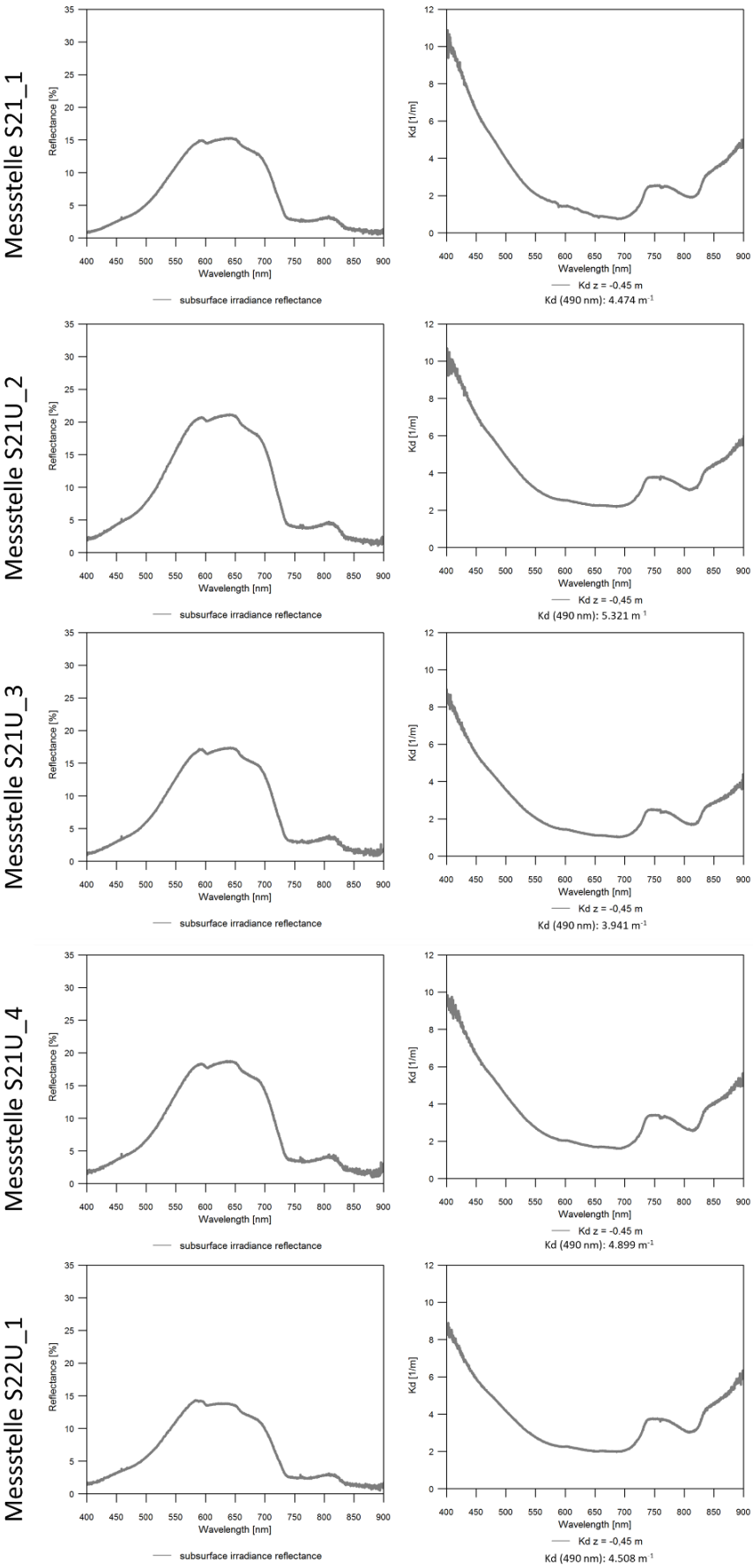

***Abbildung III-2**: Darstellung der Ableitungsergebnisse der spektralen In situ-Messungen; die Subsurface Irradiance Reflectance (R_{SIR}) und den vertikalen Dämpfungskoeffizienten ($K_{d,\ z\ =\ -45\ cm}$) bei 490 nm je Messstelle.*

III.IV. Bathymetrische Vermessung

Die Erstellung eines Tiefenprofils der Spree im Untersuchungsgebiet erfolgte im Mai und September 2018. Dieses diente der Differenzbestimmung zwischen der Sichttiefe mittels Secchi-Scheibe und der Flusssohle. Aufgrund der sehr hohen Trübung im Untersuchungsgebiet ist die Ableitung der Bathymetrie anhand der erfassten Hyperspektraldaten nicht möglich (Bandini et al. 2018; Navarro et al. 2019; Overstreet und Legleiter 2017). Daher wurde die Vermessung der Bathymetrie in Kooperation mit dem Institut für Photogrammetrie und Fernerkundung der TU Dresden mittels eines unbemannten Wasserfahrzeugs (eng. unmanned water vehicle (UWV)) durchgeführt. Das UWV wurde als Multisensorplattform umgerüstet (Sardemann et al. 2018). Zur Erfassung der Bathymetrie der Spree wurde der single-beam Echolotsensor EchoLogger ECT400 mit einer Ping-Rate von 5 Hz sowie einer zusätzlichen GNSS-Antenne genutzt. Der Echolotsensor speichert die Gewässertiefe direkt ab. Im Post-Processing werden anhand des Zeitstempels jeder Echolot-Messung die entsprechenden GNSS-Daten zugeordnet. Weiterhin wurden die Punktdaten in ein Raster mit einer Auflösung von 50 cm überführt. Demzufolge repräsentiert jede Rasterzelle einen Mittelwert aller enthaltenen Echolot-Messungen.

Die Erfassung der Gewässertiefe erfolgte in zwei Messkampagnen am 09.05. und 04.09.2018. Weiterhin wurde an vier Messpunkten die Sichttiefe erfasst. Am 09.05. wurde der Flussabschnitt von Neustadt (Spree) bis Spreewitz mit einem Boot vermessen. Die maximale erfasste Gewässertiefe hat 484 cm betragen. Zur besseren Einordnung der gemessenen Sichttiefe wurde die Differenz zwischen der Sichttiefe und der Gewässertiefe berechnet. Im Mittel lag am Tag der Messung die Differenz bei 66,5 cm. Die größte Differenz wurde am Messpunkt SP 02 mit 81 cm bestimmt. Der geringste Abstand mit 37 cm wurde am Standpunkt SP 03 gemessen (s. Tabelle III-6).

Tabelle III-6: Auflistung der gemessenen Sichttiefe, der Gewässertiefe sowie der Differenz beider Messungen vom 09.05.2018

Messstelle	Sichttiefe (Z_{SD}) [cm]	Gewässertiefe [cm]	Differenz [cm]
SP 01	40	111	71
SP 02	55	136	81
SP 03	50	87	37
SP 04	55	132	77

Am 04.09.2018 wurde der Flussabschnitt von Spreewitz bis Trattendorf befahren. Die maximale Gewässertiefe hatte 422 cm betragen. Weiterhin wurde an elf Messstellen eine

mittlere Differenz von 84,5 cm zwischen der Sichttiefe und der Gewässertiefe bestimmt. Der geringste Abstand wurde am Standpunkt S21U_5 mit 24 cm gemessen. Die maximale Differenz lag bei 132 cm am Messpunkt S22U_2 (s. Tabelle III-7)

Tabelle III-7: Auflistung der gemessenen Sichttiefe, der Gewässertiefe sowie der Differenz beider Messungen vom 04.09.2018

Messpunkt	Sichttiefe (Z_{SD}) [cm]	Gewässertiefe [cm]	Differenz [cm]
S21_1	45	138	93
S21U_2	55	102	47
S21U_3	65	119	54
S21U_4	65	137	72
S21U_5	70	94	24
S21U_6	75	190	115
S22U_1	70	154	84
S22U_2	70	202	132
S22U_3	62	156	94
S22U_4	80	210	130

Anhand der Messungen konnte eindeutig aufgezeigt werden, dass die ermittelten Sichttiefen (Z_{SD}) nicht mit der Gewässersohle identisch sind. Demzufolge resultiert das Fernerkundungssignal aus dem Gewässerkörper entsprechend der Sichttiefe (Z_{SD})

III.V. Vertikaler Eisengradient

Unter Berücksichtigung wachsender Eisen(III)-Flocken im Untersuchungsgebiet ist eine vertikale Zunahme der Eisen(III)-Konzentration mit zunehmender Messtiefe anzunehmen. Diesbezüglich wurden in Zusammenarbeit mit dem IGB die Konzentrationen von Gesamteisen, Eisen(II) und Eisen(III) in mindestens zwei unterschiedlichen Gewässertiefen nach den analytischen Methoden in Tabelle 4-2 bestimmt.

Je Messstelle wurden bis zu drei Gewässerproben je Inhaltsstoff gemäß Abbildung III-3 erfasst. Die erste Gewässerprobe wurde kurz unterhalb der Gewässeroberfläche entnommen. Die zweite Probenentnahme erfolgte auf dem Niveau der Sichttiefe (Z_{SD}). Die dritte Probe wurde kurz über der Gewässersohle entnommen. Abschließend wurden die relativen Änderungen der Eisenkonzentrationen je Messtiefe berechnet.

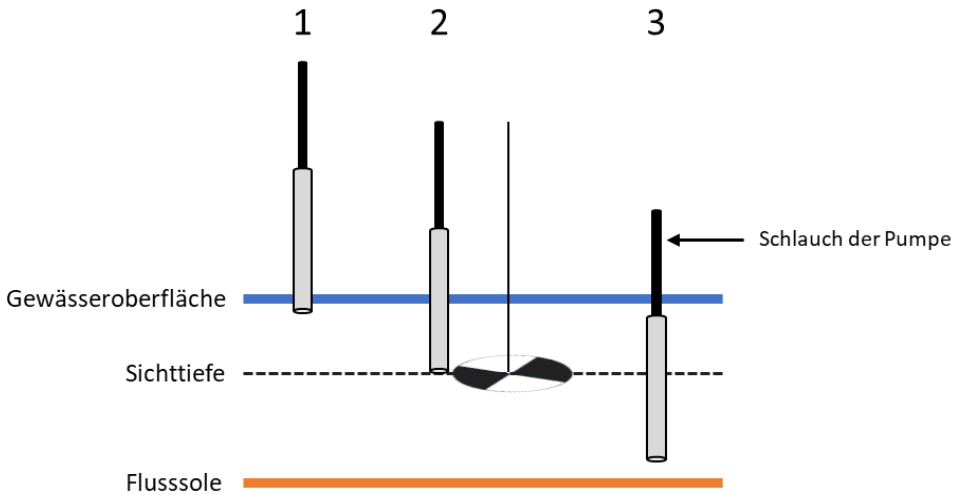

Abbildung III-3: Messverfahren zur Bestimmung eines vertikalen Eisengradienten in drei verschiedenen Messtiefen: 1) kurz unterhalb der Gewässeroberfläche, 2) auf Niveau der Sichttiefe (Z_{SD}) und 3) kurz über der Flusssohle.

Die Probenerfassung erfolgte am 28.11.2019 mittels dreier geeigneter Probenentnahmestellen. Eine Koordinatenliste mit Angabe der Messtiefe ist in Tabelle III-8 (Anlage III.V) vorzufinden.

Tabelle III-8: Koordinatenliste und Messtiefen der Messstellen zur Bestimmung eines vertikalen Eisengradienten am 28.11.2019

SP ID	X	Y	Sichttiefe [cm]	Gewässertiefe [cm]
SP 1	456672,516	5713462,04	gleich Gewässertiefe	25
SP 2	457084,152	5712974,07	58,5	100
SP 3	457562,078	5711632,96	14	90

Koordinatensystem: WGS 84 / UTM Zone 33N
EPSG: 32633

Am SP 1 wurden aufgrund einer geringen Gewässertiefe nur zwei Messungen erfasst: die erste an der Gewässeroberfläche, die zweite kurz über der Gewässersohle. An den Messstellen SP 2 und SP 3 konnten je Gewässerinhaltsstoff drei Proben erhoben werden. In Tabelle III-9 sind die Ergebnisse der chemischen Analytik je Messstelle aufgelistet.

Tabelle III-9: Auflistung der Messergebnisse zur Bestimmung eines vertikalen Eisengradienten.

Probe		Gesamteisen [mg/L]	Eisen(II) [mg/L]	Eisen(III) [mg/L]
SP 1	a	9,3	3,13	6,1
	b	11,0	3,12	7,9
SP 2	a	4,3	2,69	1,6
	b	4,3	2,63	1,6
	c	11,8	2,74	9,0
SP 3	a	33,5	1,28	32,2
	b	37,8	1,30	36,5
	c	42,8	1,31	41,4

Anhand der Messergebnisse ist deutlich zu erkennen, dass die Eisen(II)-Konzentration über alle Messtiefen nur gering variiert. Dagegen ist die vertikale Konzentrationszunahme von Gesamteisen und Eisen(III) deutlich erkennbar. Die Konzentrationsänderung von SP 1a zu SP 1b beträgt beim Gesamteisen 19 % und beim Eisen(III) 29 %. Am SP 2 sind zwischen den ersten beiden Messungen a und b nur geringe Konzentrationszunahmen zu erkennen, jedoch ist diese zur Gewässerprobe SP 2c umso größer. Die Konzentrationszunahme zwischen den Proben SP 2b und SP 2c beträgt beim Gesamteisen 176 % und beim Eisen(III) 458 %. An der dritten Messstelle (SP 3) ist ebenfalls ein deutlicher Anstieg der Gesamteisen- und Eisen(III)-Konzentration zu beobachten. Diese nimmt bereits bis zur Sichttiefe um jeweils 13 % zu. Bis kurz über der Gewässersohle nimmt die Konzentration von Gesamteisen um 13 % und von Eisen(III) um 14 % zu.

Aufgrund der geringen Datenmenge kann ein vertikaler Eisengradient nicht nachweislich bewiesen werden, jedoch sind Tendenzen zu erkennen. Dadurch ist von einer steigenden Gesamteisen- und Eisen(III)-Konzentration unterhalb der Sichttiefe auszugehen. Demnach kann im Untersuchungsgebiet nicht von einer gleich großen Rückstreuwahrscheinlichkeit in allen Wassertiefen ausgegangen werden.

IV. Anlage: Einfluss des Bergbaus auf die limnischen Lebensräume

Die Einflüsse der Verockerung auf limnische Lebensräume sind weltweit zu erkennen. Hauptursache sind meist anthropogene Störungen, z.B. Änderung der Erdschichten oder des Grundwasserspiegels. Diese Prozesse können die Pyritverwitterung im Boden begünstigen sowie zur Ausspülung derer Produkte beitragen. Im Folgenden werden die Prozesse während des Bergbaus und die Auswirkungen auf die relevanten limnischen Lebensräume sowie deren Gewässerinhaltsstoffe erläutert. Der Fokus liegt insbesondere auf der Pyritverwitterung.

IV.I. Prozesse während und nach dem Bergbau

In der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts kam es zur globalen Expansion des Bergbaus. Der Abbau von Metallen, Erzen und Kohle stellte und stellt heute wichtige strategische Ressourcen der Industrialisierung dar. Nach Schaffartzik et al. (2016) wurden im Jahr 2010 in Brasilien, Russland, Indien, China und Südafrika (sog. BRICS-Länder) 54 % der weltweit geförderten Metalle verbraucht. Weiterhin erfolgten 76 % der Metallförderung sowie 80 % der Eisenförderung in Australien, China, Indien und Brasilien. Noch Mitte des 20. Jahrhunderts wurden 86 % der weltweiten Erze in den Vereinigten Staaten von Amerika, Europa und der ehemaligen Sowjetunion abgebaut (Schaffartzik et al. 2016). Dies zeigt eine deutliche Verschiebung der Rohstoffgewinnung zu abgelegenen Regionen mit geringen Umweltstandards (Rüttinger und Scholl 2017). Dennoch ist die Expansion des Bergbaus seit 1950 nicht unbegründet. Denn seitdem hat sich die Erdbevölkerung nahezu verdreifacht (UN DESA (Population Division) 2019) sowie der Energiebedarf aufgrund steigender Lebensstandards deutlich erhöht (Andruleit et al. 2017; Krausmann et al. 2009; Steffen et al. 2015). Aufgrund des gestiegenen Energiebedarfs erfolgte ab Mitte des 20. Jahrhunderts eine Intensivierung der Kohleförderung. Dies resultierte in der Erschließung großer Kohlevorkommen sowie in technologischem Fortschritt. Zudem gewannen Metalle, wie z.B. Eisen und Aluminium, zunehmend an Bedeutung, sodass der Abbau sowie der Handel entsprechend wichtiger wurden (Krausmann et al. 2009).

Unabhängig der Art und Weise der Rohstoffförderung, Tage- oder Tiefbau, bleibt es immer ein erheblicher Eingriff in die Natur. Neben dem Abbau der Rohstoffe sind auch die Lagerung des Abraums sowie die Speicherung des Abwassers relevant (Department of Agriculture Environment and Conservation 2008). Denn bei unzureichender Lagerung entstehen AMDs, welche zu einer Kontamination des Grundwassers beitragen können (Rüttinger und Scholl 2017). Besonders schwerwiegende Folgen können beim Abbau von Sulfiderz auftreten. Durch

den Kontakt mit Luftsauerstoff können die Sulfide im Abraum zur Entstehung von AMDs beitragen, welche weitere Schwermetalle aus dem Abraum herauslösen können (Wahlström et al. 2017). In der Regel wird der Abraum auf einer entsprechenden Freifläche gelagert.

Gemäß Wahlström et al. (2017) erfolgt die traditionelle Behandlung der Bergbauabwässer meist mit Kalk in entsprechenden Absetzteichen. Dadurch soll die Verschmutzung der Umwelt durch den Abfluss der Bergbauabwässer reduziert werden. Jedoch entstehen durch diese Art der Behandlung große Mengen von chemisch stabilem Schlamm. Aufgrund der enthaltenen Schwermetalle ist dieser nicht einfach zu recyceln. Weiterhin stellen die Absetzteiche aufgrund von Sickerwasser bzw. durch Dammbrüche eine potenzielle Gefahr für die Umwelt und Menschen dar. Dass ein solches Szenario nicht unwahrscheinlich ist, konnte in Brasilien im November 2015 und im Januar 2019 beobachtet werden.

Befindet sich der Rohstoff relativ nahe der Oberfläche oder breitet sich dieser horizontal aus, wird das Tagebauverfahren zur Förderung genutzt (Department of Agriculture Environment and Conservation 2008). Dadurch kommt es zu einem erheblichen flächendeckenden Eingriff in die Natur. Befindet sich der zu fördernde Rohstoff unter dem Grundwasserspiegel, kann dieser gesenkt werden (Hüttl 1998). Jedoch reagieren die im Boden befindlichen Eisendisulfidminerale, Pyrit oder Markasit, aufgrund des gesenkten Grundwasserspiegels mit Luftsauerstoff und Niederschlagswasser. Dies führt zum Zerfall der Minerale in Sulfat, Eisen(II)-Ionen und Wasserstoff (s. Gl 1-1 bis 1-3 in Kapitel 1.1))

Mit Beendigung des Tagebaus folgt in der Regel die Renaturierung des Tagebaubereichs. Dazu wird der Abraum zur Schließung des Tagebaus genutzt. Dies resultiert in einer Durchmischung der Bodensubstrate aus quartären und tertiären Bodenschichten. In der Folge kommt es zur Versauerung der obersten Bodenschichten. Weiterhin werden durch den natürlichen Grundwasserwiederanstieg die Tagebaugruben zu sogenannten Tagebaurestseen mit einem niedrigen pH-Wert. Zusätzlich gelangen mithilfe des Grundwasserwiederanstieges die freigesetzten Stoffe in der Hydrosphäre über Grundwasserleiter in die örtlichen Oberflächengewässer (Bilek et al. 2016). Dort oxidieren die eingetragenen Eisen(II)-Ionen mit dem im Wasser befindlichen Sauerstoff (O_2) zu Eisen(III)-oxid (s. Gl. 1-2 (Kapitel 1.1)) (Luther 1987; Schultze et al. 2010; Singer und Stumm 1970). In Gewässern mit einem pH-Wert zwischen 5 und 8 hydrolysiert es zu Eisen(III)-hydroxid und flockt aus (s. Gl. 1-3 (Kapitel 1.1)) (Gleisner und Herbert 2002; Schultze et al. 2010; Singer und Stumm 1970; Wetzel 2001, S. 293). Gemäß Wetzel (2001, S. 293) ist die elektrische Ladung von Eisen(III)-hydroxid positiv,

wodurch es zur Bindung von DOC kommt. Demnach erfolgt eine Reduzierung der DOC-Konzentration.

Ab einer Eisen(III)-Konzentration von 2 bis 3 mg/L führt die Eisenausfällung zu einer gelben bis rotbraunen Verfärbung des Gewässers (Uhlig et al. 2016; Uhlmann et al. 2013b).

Durch den Verockerungsprozess kommt es zur verstärkten Trübung des Gewässers. Die Menge des eindringenden Sonnenlichtes verringert sich und die Lebensbedingungen für sedimentbewohnende Organismen nehmen durch die Eisenablagerungen ab. Als Folgeerscheinung reduziert sich die Biodiversität im Gewässer (Nixdorf et al. 2016).

IV.II. Limnische Lebensräume

In dieser Arbeit werden folgende limnische Lebensräume betrachtet: Grundwässer, Fließgewässer sowie Standgewässer. Diese Lebensräume bilden die Grundlage für verschiedenartige Ökosysteme mit einer hohen Biodiversität. Auch der Mensch ist in vielerlei Hinsicht von diesen abhängig, z.B. zur Trinkwasserversorgung, als Energiequelle, als Transportweg, zur Bewässerung oder auch zur Erholung (BMUB / UBA 2016; Brönmark und Hansson 2002). Aufgrund verschiedener anthropogener Einflüsse, z.B. Industrieabwässer, Bergbau oder Klimawandel, stehen diese Lebensräume jedoch unter großem Druck (BMUB / UBA 2016; Dörnhöfer 2018; Schmutz 2003).

IV.II.i. Grundwässer

Grundwässer als Lebensräume sind durch völlige Dunkelheit, konstante Temperaturen, Nähr- und Sauerstoffarmut gekennzeichnet (Spengler und Berkhoff 2015). Der Stoffeintrag in Grundwässer ist in der Regel aufgrund der Filterung der darüberliegenden Bodenschichten gering. Demzufolge ist die Konzentration von partikulärem organischen Material (POM) sehr niedrig. POM besteht aus abgestorbener Biomasse. Der DOC sowie das gelöste organische Material (DOM) stellen Abbauprodukte des POM dar (Schmidt 2015). Die DOC-Konzentration im Grundwasser beträgt im Durchschnitt zwischen 0,65 mg/L (Wetzel 2001, S. 733) und 0,7 mg/L (Thurman 1985). Aber diese kann durch industrielle Einflüsse auf bis zu 30 mg/L ansteigen. Außerdem können Grundwässer in sauerstoffhaltige und -freie Gewässer unterteilt werden. Zur Sauerstoffzehrung tragen neben anorganischen Substanzen vor allem die organischen Verbindungen bei. Diese wurden durch Sickerwasser eingetragen bzw. befinden sich nach Merkel und Sperling (1996) im Grundwasserleiter in Form von Erdöl, Torf oder Braunkohle. Weiterhin befinden sich im Grundwasser Kationen und Anionen in unterschiedlich hoher Konzentration sowie verschiedene anorganische Verbindungen

(Vogelsang 1998). Schwefel stellt in Form von Sulfat-Ionen einen geogenen Hauptbestandteil in Grundgewässern dar. Je nach Bodenart ist der natürliche Sulfatgehalt unterschiedlich hoch (Merkel und Sperling 1996). Durch anthropogene Einflüsse, z.B. Verbrennung von fossilen Brennstoffen, Auswaschung gedüngter Böden oder durch Sickerwasser von AMDs, kann die Sulfatkonzentration ansteigen.

Die meisten Eisenverbindungen sind im Grundwasser nur in geringem Maße mobil. Gerade im sauerstoffhaltigen Grundwasser sind in der Regel sehr geringe Eisenkonzentrationen zu messen (Merkel und Sperling 1996). Jedoch können durch menschliche Einflüsse, wie beispielsweise Grundwasserabsenkung in Bergbauregionen, sulfatsaure Bedingungen durch Pyritoxidation im Boden auftreten. Die Versauerung bzw. reduktiven Bedingungen in den Bodenpassagen ermöglichen den Transport von Eisen-Ionen in gelöster Form im Grundwasser (Merkel und Sperling 1996). Dadurch können die Eisenkonzentrationen im Grundwasser 1 bis 10 mg/L (Amelung et al. 2018, S. 434; Merkel und Sperling 1996; Schachtschabel et al. 1976, S. 259) aufweisen. Gemäß Wetzel (2001, S. 2) beträgt die Zeit zur Erneuerung des Grundwassers ca. 300 Jahre.

IV.II.ii. Fließgewässer

Fließgewässer bilden sich meist durch austretendes Grundwasser. Dies kann einerseits der Ursprung des neuen Flusses sein und andererseits tritt Grundwasser auch in ein bestehendes Fließgewässer ein (Schönborn 1992, S. 16 ff.). Dies erfolgt insbesondere dann, wenn der Wasserspiegel des Flusses unter dem der Grundwassersoberfläche liegt.

Die Zusammensetzung der Gewässerinhaltsstoffe eines Flusses werden nach Schönborn (1992, S. 17) im Wesentlichen durch den geologischen Untergrund der Einzugsgebiete bestimmt. Da Flüsse unterschiedliche geologische Regionen durchfließen, kommt es auch zu Änderungen des Chemismus (Wetzel 2001, S. 130). So gelangt zweiwertiges Eisen (Eisen(II)) geogenen Ursprungs, z.B. durch austretendes Grundwasser, in die Fließgewässer. Im Quellbereich können die Eisen(II)-Konzentrationen bis zu 10 mg/L betragen (Schönborn 1992, S. 39). Durch Sauerstoff im Wasser reagiert es zu Eisen(III)-hydroxid. Dieses ist unlöslich und fällt als Eisenocker aus. Bei diesem Verockerungsprozess sind aerobe Eisenbakterien beteiligt und er ist nur im Quellaustritt sowie in kleineren Bächen vorzufinden (Schönborn 1992, S. 39). Gemäß Wetzel (2001, S. 294) beträgt der mittlere Gesamteisengehalt weltweit 0,67 mg/L und in Europa 0,8 mg/L. Nach Untersuchungen von Uhlmann et al. (2012) weist der natürliche Gesamteisengehalt der Fließgewässer in der Lausitz zwischen 1 und 2 mg/L auf. Bei sauren

Böden sowie beim Torfabbau steigt der Eisengehalt auf ungefähr 3 mg/L an. Kommt es zusätzlich zur Trockenlegung bzw. zu Bergbauarbeiten können Gesamteisenkonzentrationen von bis zu 200 mg/L auftreten (Vouri 1995).

Sauerstoff gelangt mittels der Atmosphäre sowie der Photosynthese in das Gewässer. Weiterhin wird Stickstoff entweder aus der Luft absorbiert oder durch Niederschläge und Grundwasser in den Fluss eingetragen. Schwefel tritt in Oberflächengewässern in Form von Sulfat (SO_4^{2-}) auf. Dieses gelangt in das Fließgewässer mittels der Atmosphäre, dem Niederschlag sowie durch Lösungsvorgänge bei schwefelhaltigen Gesteinen. Im Durchschnitt beträgt die Sulfatkonzentration 10 bis 150 mg/L (Merkel und Sperling 1996).

Die Phosphorkonzentration ist in naturnahen Gewässern sehr gering (< 100 µg/L). Jedoch tragen z.B. Industrieabwässer zu einer starken Erhöhung der Phosphorkonzentrationen bei. Phosphat stellt einen wichtigen Nährstoff in aquatischen Lebensräumen dar und führt zu einer steigenden Konzentration der Biomasse (Merkel und Sperling 1996).

Zu den am stärksten verbreiteten löslichen organischen Verbindungen gehören die Huminstoffe. Diese natürlichen, biogenen sowie hochmolekularen organischen Substanzen besitzen eine gelbe bis schwarze Färbung (Eifler 2005). Huminstoffe können bis zu 50 % des DOC bilden. Die DOC-Konzentration von Fließgewässern kann je nach Klima, Vegetation, dem Flussbecken sowie den Jahreszeiten variieren. Dadurch können Fließgewässer in gemäßigten Klimazonen eine DOC-Konzentration von 2 bis 10 mg/L (Pott und Remy 2008; Thurman 1985) sowie im Mittel 3 bis 5 mg/L (Schönborn 1992, S. 244; Thurman 1985; Wetzel 2001, S. 733) aufweisen. Aufgrund der natürlichen Selbstreinigung von Flüssen beträgt die Zeit zur Erneuerung des Wasser je nach Größer des Einzugsgebietes zwischen 12 und 20 Tagen (Wetzel 2001, S. 2)

IV.II.iii. Standgewässer

In Still- oder Standgewässern stagniert das Wasser weitgehend und besitzt häufig keine Verbindung zum Meer. Weiterhin sind die Bewegungen des Wassers durch Wind, interne Strömungen sowie Zu- und Abflüssen im Gegensatz zu Fließgewässern als gering zu bezeichnen (Pott und Remy 2008). Zu den wichtigsten Formen der Stillgewässer gehören z.B. Seen, Sümpfe und Moore. In diesem Kapitel werden jedoch nur tiefe Seen betrachtet.

Der Stoffhaushalt eines Sees in Mitteleuropa besteht im Pelagial aus zwei konträren Schichten. In der oberen trophogenen Zone dominiert bei ausreichender Lichtversorgung die Primärproduktion durch Assimilation von Kohlenstoffdioxid (CO_2) und O_2-Abgabe des

Phytoplanktons gegenüber den O_2-zehrenden Prozessen der Konsumenten und Destruenten. Darunter folgt eine Kompensationsebene, welche je nach Wind, Temperatur und Wasserdichte unterschiedlich stark ausgeprägt ist. In dieser Schicht halten sich die Prozesse der Sauerstoffproduktion und -zehrung ungefähr die Waage. In Richtung des Gewässergrundes schließt sich die lichtlose und sauerstoffarme tropholytischen Zone an. Dort dominieren die O_2-verbrauchenden und CO_2-freisetzenden Prozesse (Hanson et al. 2007; Pott und Remy 2008).

Die DOC-Konzentration hängt bei Standgewässern vom Trophiegrad ab und kann dadurch stark variieren, von 1 mg/L bis 50 mg/L (Thurman 1985). Wie bei den Fließgewässern kann auch bei Standgewässern Eisen(II) über das Grundwasser eindringen. Dabei kommt es ebenfalls zur Oxidation zu Eisen(III) sowie zur Ausfällung von Eisen(III)-hydroxid, welches zur Wassertrübung führt (Pott und Remy 2008).

Des Weiteren tragen äußere Einflüsse, wie z.B. Wind und Temperatur, bei Seen zu saisonalen Zirkulations- und Stagnationsperioden bei. Während im Frühjahr und Herbst aufgrund von Ausgleichswinden der gesamte See in Zirkulation versetzt werden kann, können im Sommer und Winter Stagnationen auftreten (Echterhoff 2015). Weiterhin können Zuflüsse stabilisierend oder durchmischend wirken (Wetzel 2001, S. 17), wodurch die Zeit zur Erneuerung des Wassers in einem See nach Wetzel (2001, S. 2) zwischen einem und 100 Jahre betragen kann.