

# Entwicklung von Indizes zur Ableitung der Eisenkonzentration verockerter Fließgewässer mittels hyperspektraler VNIR- und SWIR-Daten

CHRISTOPH ULRICH<sup>1</sup>, LUTZ BANNEHR<sup>1</sup>, MICHAEL HUPFER<sup>2</sup> & MARTINA SCHULZE<sup>3</sup>

*Zusammenfassung: Durch Anhebung des Grundwassers im Lausitzer Braunkohlerevier gelangen Eisen(II), Sulfat und Säure in die umliegenden Oberflächengewässer. Das Eisen fällt in Gewässern mit neutralem pH-Wert flockenartig aus und bildet bei hohen Konzentrationen eine rotbraune Verfärbung. Zum Monitoring von Gewässern bieten sich u.a. Fernerkundungsverfahren an, um flächendeckend Informationen über den Ist-Zustand des Gewässers in Hinblick auf den Verockerungszustand zu erhalten. Zu diesem Zweck wurden zeitgleich zur Befliegung der Spree Gewässerproben erhoben. Die limnischen Parameter wurden mit den Spektraldaten korreliert. Zur quantitativen Bestimmung des Gesamteisengehalts zeigten die Ratios  $R_{RS(580)} / R_{RS(455)}$  und  $R_{RS(650)} / R_{RS(455)}$  die stärksten kausalen Zusammenhänge  $R^2 > 0,4$  auf. Korrelationen zwischen den Eisenparametern und dem spektralen SWIR-Bereich waren nicht vorhanden. Zukünftig werden weitere komplexe Modellierungsalgorithmen zur Eisenableitung herangezogen.*

## 1 Einleitung

Durch den intensiven Abbau von Rohstoffen im Bergbau erfolgt ein starker Eingriff in die Umwelt. Dabei werden neben der Förderung von Rohstoffen großen Mengen von Abraum und Abwässer erzeugt. Beim Tagebau, wie in der Untersuchungsregion Lausitzer Braunkohlerevier, wird zusätzlich der Grundwasserspiegel gesenkt (HÜTTL 1998). Bei diesem Prozess reagieren die im Boden befindliche Eisendisulfidminerale, Pyrit oder Markasit, mit Luftsauerstoff und Niederschlagswasser. Dies führt zum Zerfall der Minerale in Sulfat, Eisen(II)-Ionen und Wasserstoff (SÁNCHEZ 2008; SCHULTZE et al. 2010). Die Pyritverwitterung ist in Gl. 1 in Tab. 1 beschrieben (EDWARDS et al. 1999; MOSES et al. 1987; SCHULTZE et al. 2010). Mit der Verminderung der Tagebautätigkeiten im Lausitzer Braunkohlerevier begannen Anfang 1990 die Renaturierungsmaßnahmen, wodurch der Grundwasserspiegel in einigen Regionen wieder angehoben wurde. Die freigesetzten Stoffe in der Hydrosphäre gelangen über das Grundwasser in die umliegenden Oberflächengewässer (BILEK et al. 2016). Dort oxidieren die eigentragenden Eisen(II)-Ionen mit dem im Wasser befindlichen Sauerstoff zu Eisen(III)-Oxid (s. Gl. 2) (LUTHER 1987; SCHULTZE et al. 2010; SINGER & STUMM 1970). In Gewässern mit neutralem pH-Wert hydrolysiert es zu Eisen(III)-Hydroxid und flockt aus (s. Gl. 3), (GLEISNER & HERBERT 2002; SCHULTZE et al. 2010; SINGER & STUMM 1970). Bei einer niedrigen Eisen(III)-Konzentration ist dies kaum sichtbar. Ab einer Konzentration von ca. 2 mg/L führt die Ausfällung zu einer gelben bis rotbraunen Verfärbung des Gewässers. Dieser Prozess wird als Verockerung bezeichnet.

---

<sup>1</sup> Hochschule Anhalt, Institut für Geoinformation und Vermessung, Bauhausstraße 8, D-06846 Dessau-Roßlau, E-Mail: [christoph.ulrich, lutz.bannehr]@hs-anhalt.de

<sup>2</sup> Leibniz-Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei, Abteilung Chemische Analytik und Biogeochemie, Müggelseedamm 301, D-12587 Berlin, E-Mail: hupfer@igb-berlin.de

<sup>3</sup> Hochschule Anhalt, Angewandte Biowissenschaften und Prozesstechnik, Bernburger Straße 55 D-06366 Köthen, E-Mail: martina.schulze@hs-anhalt.de

Tab. 1: Reaktionsgleichungen der Pyritverwitterung.

$FeS_2 + \frac{7}{2}O_2 + H_2O \rightarrow Fe^{2+} + 2SO_4^{2-} + 2H^+$	Gl. 1
$Fe^{2+} + \frac{1}{4}O_2 + H^+ \rightarrow Fe^{3+} + \frac{1}{2}H_2O$	Gl. 2
$Fe^{3+} + 3H_2O \rightarrow Fe(OH)_3 \downarrow + 3H^+$	Gl. 3

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.

Aufgrund der räumlichen Ausbildung der Verockerung bieten sich Methoden der Fernerkundung zur flächenhaften Ableitung der Eisenkonzentration an. Zu diesem Zweck wurden Anfang September 2018 hyperspektrale Fernerkundungsdaten mit dem Gyrocopter der Hochschule Anhalt (HSA) und zeitgleich limnische In-situ Daten in Zusammenarbeit mit dem Leibniz Institut für Gewässerökologie und Binnenfischerei (IGB) erhoben. Wegen ihres großen Einflusses auf die Gewässerfärbung wurden die Gewässerproben auf folgende limnische Parameter untersucht: Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), gelöster organischer Kohlenstoff (engl. Dissolved organic Carbon (DOC)), Sulfat und Chlorophyll a (Chl-a)

## 2 Untersuchungsgebiet

Das Untersuchungsgebiet befindet sich südlich von Cottbus und erstreckt sich entlang des Flusses Spree von Spreewitz bis Neuhausen (siehe Abb. 1). In diesem Bereich weist die Spree eine starke Verockerung auf.

Der erhöhte Stoffeintrag in Folge des Grundwasserwiederanstieges führt zum:

- Anstieg der Sulfatkonzentration,
- Anstieg der Eisenkonzentration (Eisen(II), Eisen(III)),
- Senkung des pH-Wertes und
- Trübung des Gewässers durch Schlammablagung.

Nach UHLMANN et al. (2012) erfolgt ein hoher Eisen(II)-Eintrag durch das Grundwasser bei Ruhlmühle. Das Eisen(II)-Oxid fällt durch die Reaktion mit dem sauerstoffreichen Wasser und unter neutralen pH-Bedingungen als Eisen(III)-Hydroxid aus. Dies resultiert in einer ockerartigen Färbung der Spree. Durch die natürliche Selbstreinigung von Flüssen fällt das Eisen(III)-Hydroxid bei langsamen Fließgeschwindigkeiten aus und lagert sich an der Flussole bzw. am Boden der Talsperre Spremberg ab. Dadurch ist flussabwärts der Talsperre Spremberg eine natürliche Färbung der Spree zu beobachten.

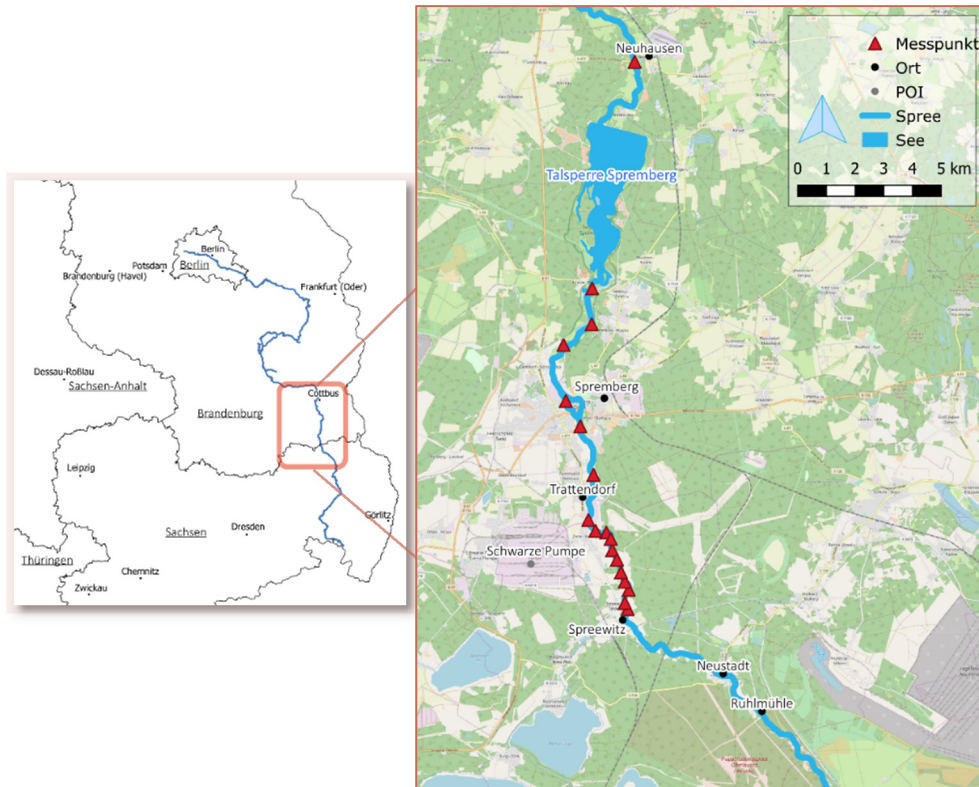


Abb. 1 Darstellung der Untersuchungsgebietes entlang der Spree von Neustadt bis Neuhausen. Eigene Darstellung; Datenquellen: BKG, OSM; Hintergrundkarte: OSM

### 3 Datenerhebung

Zur Erfassung der hyperspektralen Fernerkundungsdaten wurde der Gyrocopter der HSA genutzt. Für die Befliegung wurden als optischen Sensoren eine NIKON D800e, ein Hyperspektralsensor HySpex VNIR 1600 sowie ein HySpex SWIR 384 eingesetzt. Ein Trägheitsnavigationssystem (INS) diente zur hochgenauen Erfassung der Lage- und Positionsdaten. Die Sensorik wird automatisch über die Flugmanagementsoftware (FMS) Aviatix ausgelöst. Aus den RGB-Bildern wurde ein Near True-Orthophoto mit 6 cm Bodenpixelauflösung (engl. ground sampling distance (GSD)) mittels Structure from Motion-Algorithmen berechnet. Dieses diente als Basis für die Bestimmung der Boresight-Winkel für die Prozessierung der hyperspektralen Daten. Die Hyperspektraldaten wurden mit den Softwares PARGE und ATCOR rektifiziert, georeferenziert und atmosphärenkorrigiert. Um möglichst kleine aber signifikante spektrale Unterschiede zu detektieren wurde die spektrale Auflösung des HySpex VNIR auf 7,4 nm Bandbreite gesetzt. Aus dieser Bandbreite resultiert, dass im Spektralbereich von 400 -1.000 nm 80 Spektralkanäle aufgezeichnet werden können. Bei einer Flughöhe von 700 m beträgt die GSD 20 cm. Die Daten des HySpex SWIR besitzen eine spektrale Auslösung von 5,45 nm bei 288 Kanälen im Wellenlängenbereich von 1.000 - 2.500 nm. Die GSD des HySpex SWIR ist geringer als die vom HySpex VNIR 1600 und liegt bei 60 cm für eine Flughöhe von 700 m. Die hohe räumliche Auflösung bietet große Vorteile gegenüber räumlich gering aufgelösten Satellitendaten bei der Ableitung von Wasserinhaltsstoffen über Binnengewässer.

Der zweite Teil bestand aus der Erhebung sowie Analyse der Gewässerparameter nach den Analyseverfahren in Tab. 2. Die Gewässerproben wurden mittels eines 30 cm bzw. 50 cm langen LIMNOS Schöpfer erhoben. Dadurch besteht jede Probe aus einer Mischung der oberen

Wassersäule. Im Labor der HSA wurden die Gewässerparameter: Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III), Anionen, TOC und DOC bestimmt. Die Chl-a-Analyse erfolgte im Labor des IGB. Die Bestimmung des Gesamteisen wurde nach DIN 38406-1:1983-05 durchgeführt. Dazu wurden 200 ml der Mischprobe unfiltriert mit 2 ml 20% Schwefelsäure vor Ort stabilisiert und im Labor analysiert. Die Analyse zur Eisen(II)-Bestimmung erfolgte ebenfalls nach DIN 38406-1:1983-05. Dazu wurden 280 ml der Mischprobe mit 2,8 ml 20% Schwefelsäure vor Ort stabilisiert und luftblasenfrei in einer Glasflasche verschlossen. Die Bestimmung der Eisen(III)-Konzentration ergibt sich durch die Differenz aus dem Gesamteisen und der Eisen(II)-Konzentration. Zur Bestimmung der Anionen nach DIN EN ISO 10304-1 und DOC nach DIN ISO 1484 wurde die Mischprobe vor Ort mittels eines Spritzenfilters mit 0,45 µm Porenweite filtriert und im Labor analysiert. Die Bestimmung von TOC erfolgte mittels unfiltrierten Proben gemäß DIN ISO 1484. Die Gewässerproben zur Bestimmung der Chl-a-Konzentration wurden vor Ort unfiltriert in 1L-Gefäßen dunkel und kühl aufbewahrt. Im Labor erfolgte die Analyse mittels HPLC gemäß MEHNERT et al. (2012) und SHATWELL et al. (2012).

Tab. 2: Analyseverfahren zur Bestimmung der chemischen Gewässerparameter mit einem großen Einfluss auf die Gewässerfärbung.

Beschreibung	Verfahren
Bestimmung der Gesamteisen- und Eisen(II)-Konzentration	DIN 38406-1:1983-05
Bestimmung der Eisen(III)-Konzentration aus der Differenz aus den Konzentrationen von Gesamteisen und Eisen(II)	Differenzberechnung
Bestimmung der Anionen	DIN EN ISO 10304-1
Bestimmung von DOC und TOC als nicht ausblasbarer organischer Kohlenstoff (NPOC)	DIN ISO 1484
Bestimmung der Chlorophyll a - Konzentration	HPLC-Verfahren nach (MEHNERT et al. 2012; SHATWELL et al. 2012)

## 4 Aktive Gewässerinhaltsstoffe in der Fernerkundung

Nach HEEGE (2000) wird die Farbe eines Gewässers durch die optischen Eigenschaften der gelösten sowie partikulären Bestandteile bestimmt. Folglich beschreiben alle aktiven Gewässerinhaltsstoffe in Summe die Reflektanz ( $R_{RS}$ ) des Gewässers durch das spezifische Absorptions- sowie Rückstreuungsverhalten je Wellenlänge. Der relevante Spektralbereich zur Ableitung der aktiven Inhaltsstoffe liegt zwischen 400 - 1000 nm. Zur Gruppe der optisch aktiven Gewässerinhaltsstoffe gehören: Wasser, Gelbstoffe (engl. colored dissolved organic matter (CDOM)), Phytoplankton und Schwebstoffe (engl. total suspended matter (TSM)) (KIRK 2010; OGASHAWARA et al. 2017). Wasser absorbiert einen Großteil des eindringenden Sonnenlichtes. Das Rückstreuerverhalten von Wasser ist gering und nur im Wellenlängenbereich von 400 - 500 nm erhöht. Zur Gruppe des CDOM gehören die gelösten Substanzen im Gewässer. Diese absorbieren das Licht hauptsächlich im Wellenlängenbereich kleiner 500 nm (ASMALA et al. 2012; GITELSON 1992; KOPAČKOVÁ & HLADÍKOVÁ 2014). Häufig werden dem CDOM Huminstoffe und DOC zugeordnet. Die meisten Modelle zur Ableitung von CDOM basieren auf Wellenlängen zwischen 400 und 500 nm (KOPAČKOVÁ & HLADÍKOVÁ 2014). WEYHENMEYER et al. (2014) stellten fest, dass gelöstes Eisen wie DOC ebenfalls in Korrelation mit der Absorption bei 420 nm steht. Nach ASMALA et al. (2012) ist der Einfluss gelösten Eisens auf das Absorptionsverhalten des Gewässers ab 520 nm deutlich sichtbar und bei kürzeren Wellenlängen

vernachlässigbar. Phytoplankton gehört in der Gewässerfernerkundung zu den lebenden partikulären Materialien. Diese Gruppe besteht aus zahlreichen verschiedenen freischwebenden Algengruppen. Chl-a ist ein Schlüsselmolekül der photosynthetisch aktiven Organismen. Daher wird es oft als Indikator der Biomasseproduktion herangezogen. Zu den spektralen Merkmalen von Chl-a gehören einerseits ein geringer Reflektanzbereich zwischen 400 und 500 nm (GITELSON 1992) und andererseits ein Reflektanzmaximum bei 580 nm (DEKKER 1993; FRAUENDORF 2002; GITELSON 1992). Die nicht lebenden partikulären Materialien im Gewässer sind dem TSM zuordenbar. Dieser Gruppe gehören beispielweise abgestorbenes partikuläres organisches Material, kleine Sandpartikel und ausgefallene Eisenflocken an (FRAUENDORF 2002). Gewässer mit hoher TSM-Konzentration besitzen ein erhöhtes Rückstreuungsverhalten, wodurch die zumessende Reflektanz größer ist als bei natürlichen Gewässern. Dies haben ULRICH et al. (2018) anhand von Simulationen mittels des WATER COLOR SIMULATOR (WASI) im Wellenlängenbereich von 400 - 850 nm nachgewiesen. KNAEPS et al. (2012) haben anhand des Multispektrometers Ocean and Land Color Instrument (OLCI) am Bord des Sentinel 3 festgestellt, dass bei steigender TSM-Konzentration bis 402 mg/L zusätzliche Informationen des SWIR-Bereichs zu genauerer Modellierung beitragen. Gemäß HEEGE (2000) ist die Absorption elektromagnetischer Energie von Wasser auch bei hohen TSM-Konzentrationen ab 1.300 nm dominierend.

## 5 Eisen-Indizes

Zur Entwicklung von Eisen-Indizes wurden Ratios aus der Literatur herangezogen sowie eigene anhand von Spektralanalysen abgeleitet. ULRICH et al. (2016) konnten mittels Spektralindizes basierend auf Landsat 7 TM Eisen(III) im Rio Doce nach dem Bergbauunglück im November 2015 nachweisen. Zur Ableitung wurden die Kanäle  $TM_3$  (660 nm) /  $TM_1$  (485 nm) nach DURNING et al. (1998) genutzt. Aufgrund der hohen Trübung der Spree im Untersuchungsgebiet wurden zur Ableitung der Eisenkonzentration Indizes basierend auf sehr trüben Gewässern herangezogen. DOXARAN et al. (2002b) entwickelten empirische Modelle zur TSM-Bestimmung sehr trüber Gewässer mittels SPOT-HRV. Sie stellten fest, dass der Kanal  $XS_3$  (840 nm) sowie die Ratios aus  $XS_3/XS_1$  (545 nm) und  $XS_3/XS_2$  (645 nm) eine sehr hohe Korrelation mit der TSM-Konzentration in der Mündung des Gironde aufweisen. KNAEPS et al. (2015) führten ebenfalls Spektralanalysen zur Ableitung von TSM im Gironde durch. Hierbei nutzten sie die Spektralbereiche SWIR I (1.000 – 1.200 nm) sowie SWIR II (1.200 – 1.300 nm) zur Ableitung der Indizes. Für die Analysen der Spree wurden die Spektralkanäle zu entsprechenden Mittelwerten zusammengefasst.

Des Weiteren wurden die Spektren im Wellenlängenbereich von 415 - 1.315 nm mit den Daten an den Messstellen verglichen. Von 400 - 500 nm ist die Reflektanz aufgrund von Absorptionen durch CDOM und Chl-a gering (GITELSON 1992). Im Spektralbereich von 550 - 700 nm sind bei den Messstellen mit einer Gesamteisenkonzentration über 2 mg/L die meisten Maxima von über 6 % zu finden. Die Absorption durch Wasser ist zwischen 700 und 1.000 nm deutlich erkennbar. Jedoch steigt bei den Messstellen mit mindestens 2 mg/L Gesamteisen die Reflektanz von 1.000 - 1.315 nm stetig an. In Abb. 2 sind beispielhaft fünf Spektren mit angegebener Gesamteisenkonzentration im Spektralbereich von 415 - 1.315 nm dargestellt. Der Sprung bei

1.000 nm ergibt sich aus den Ungenauigkeiten der Kalibration der beiden Hyperspektralsensoren HySpex VNIR und HySpex SWIR. Im Wellenlängenbereich um 1.000 nm überlappen sich

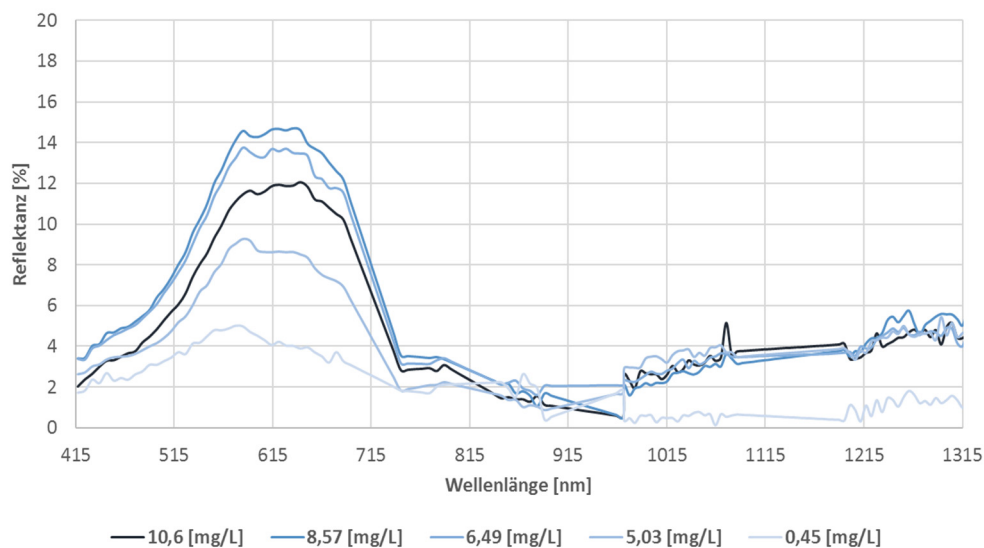


Abb. 2: Darstellung von fünf Spektren der Spree im Wellenlängenbereich von 415 bis 1.315 nm mit unterschiedlicher Gesamteisenkonzentration.

diese. Bei einem kalibrierten System können Unterschiede von bis zu 4 % vorkommen. Zu den Ratios der Literatur wurden basierend auf den Spektralverläufen weitere Ratios zur Ableitung von Eisen hergeleitet. Aufgrund der starken Steigung bieten sich die Ratios von  $R_{RS}(580) / R_{RS}(455)$  sowie  $R_{RS}(650) / R_{RS}(455)$  an. Weiterhin wurde ein Ratio von DOXARAN et al. (2002a) auf den Spektralverlauf angepasst  $R_{RS}(790) / R_{RS}(650)$ . Aufgrund der deutlichen Ausprägung wurde die Steigung zwischen  $R_{RS}(455) \rightarrow R_{RS}(580)$  sowie von  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  berechnet. Des Weiteren wurde untersucht, ob bestimmte Wellenlängen mit den Gewässerinhaltsstoffen der Spree im kausalen Zusammenhang stehen. Zu den gewählten Wellenlängen zählen: 417 nm, 455 nm, 520 nm, 580 nm, 650 nm, 790 nm, 1.100 nm und 1.250 nm.

## 6 Ergebnisse

In Tab. 3 ist ein Überblick über die erhobenen Gewässerparameter dargestellt. Im Mittel betrug die Konzentration des Gesamteisen 6,13 mg/L, von Eisen(II) 2,6 mg/L und von Eisen(III) 3,53 mg/L. Die höchsten Eisenkonzentrationen wurden bei der Mündung der Kleinen Spree in die Spree bei Spreewitz bestimmt. Die niedrigsten Eisenkonzentrationen befanden sich bei Neuhausen. Die Sulfatkonzentration liegt im Mittel bei 549 mg/L. Die Maximalkonzentration wurde in Höhe des Industriegebietes Schwarze Pumpe gemessen. Die niedrigsten Sulfatkonzentration wurden bei Spreewitz bestimmt. Die Gewässerproben bei Spreewitz zeigen die höchsten Konzentrationen von DOC mit 5 mg/L sowie TOC mit 5,90 mg/L auf. Die geringste gemessene DOC-Konzentration mit 2 mg/L befindet sich mittig zwischen Schwarze Pumpe und Trattendorf. Flussabwärts von Spremberg wurde die niedrigste TOC-Konzentration mit 3,60 mg/L bestimmt. Im Mittel betragen die Konzentrationen von DOC 3,13 mg/L und von TOC 4,50 mg/L im Untersuchungsgebiet zum Tag der Beprobung. Die Chl-a-Konzentration nimmt im Untersuchungsgebiet von Spreewitz bis zur Talsperre stetig ab. Bei Spreewitz beträgt die Chl-a-Konzentration 3,53 µg/L und beim Vorstaubecken der Talsperre Spremberg



noch 1,61 µg/L. Erst nach der Talsperre Spremberg bei Neuhausen stieg die Chl-a-Konzentration auf 18,66 µg/L an.

Tab. 3: Übersicht über die erhobenen Gewässerparameter im Untersuchungsgebiet.

	Gesamteisen [mg/L]	Eisen(II) [mg/L]	Eisen(III) [mg/L]	Sulfat [mg/L]	DOC [mg/L]	TOC [mg/L]	Chl-a [µg/L]
Mittelwert	6,13	2,60	3,53	549,25	3,13	4,50	3,90
Standardabweichung	2,94	2,01	1,09	50,58	0,74	0,67	4,53
Max	10,90	5,74	5,18	606,00	5,00	5,90	18,66
Min	0,45	0,01	0,43	471,00	2,00	3,60	1,61

Die analysierten Gewässerproben zeigen deutlich, dass südlich der Talsperre Spremberg eine hohe Eisen- und Sulfatkonzentration vorliegt. Erst nördlich der Talsperre Spremberg beträgt die Gesamteisenkonzentration weniger als 1 mg/L, wodurch diese eine wichtige Schlüsselposition für den Rückhalt der Eisenfrachten besitzt (BILEK & KOCH 2012). Weiterhin steigt die Chl-a -Konzentration erst nach der Talsperre Spremberg deutlich an.

Zur genauen Analyse wurden die erhobenen limnischen Daten innerhalb der 2,5fachen Standardabweichung herangezogen. Dadurch wird der Einfluss von Extremwerten auf das Bestimmtheitsmaß ( $R^2$ ) ausgeschlossen. Folglich erfolgt eine Reduzierung der Probenanzahl auf  $n = 15$ . Der kausale Zusammenhang von Gesamteisen zu Eisen(II) beträgt  $R^2 = 0,98$  und zu Eisen(III)  $R^2 = 0,84$ . Zwischen Eisen(II) und Eisen(III) beträgt die Korrelation  $R^2 = 0,71$ . Aufgrund des chemischen Zusammenhangs der drei Eisenkonzentrationen ist auch die Korrelation sehr stark. Die kausalen Zusammenhänge der TOC-Konzentration zum Gesamteisen mit  $R^2 = 0,63$  und zum Eisen(II) mit  $R^2 = 0,7$  sind stark ausgeprägt. Dagegen ist die Korrelationen von TOC zu Eisen(III) ( $R^2 = 0,37$ ) und zu Sulfat ( $R^2 = 0,34$ ) geringer. Die Sulfatkonzentration besitzt ebenfalls eine ausgeprägte Korrelation zum Gesamteisen ( $R^2 = 0,43$ ) sowie zu Eisen(II) ( $R^2 = 0,71$ ). Zwischen Sulfat und Eisen(III) beträgt die Korrelation  $R^2 = 0,32$  sowie zu TOC  $R^2 = 0,34$ . Korrelationen von Chl-a zum Gesamteisen ( $R^2 = 0,5$ ), zu Eisen(II) ( $R^2 = 0,54$ ) sowie zu Eisen(III) ( $R^2 = 0,56$ ) sind stark ausgeprägt.

Kausale Zusammenhänge zwischen den einzelnen Wellenlängen und den drei Eisentypen konnten nur bei  $R_{RS}(650)$  und  $R_{RS}(790)$  erkannt werden. Die anderen Gewässerparameter wiesen keine Korrelation  $R^2 \geq 0,25$  auf. Zur Wellenlänge  $R_{RS}(650)$  besitzt Eisen(II) die stärkste

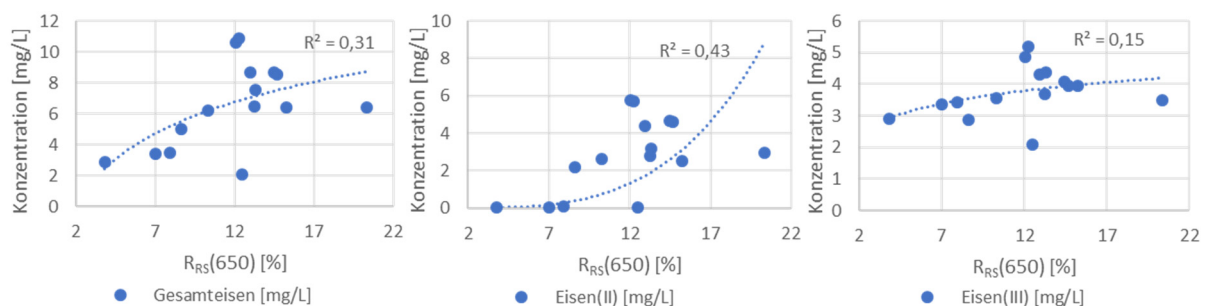


Abb. 3: Darstellung der Korrelation zwischen der Wellenlänge  $R_{RS}(650)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen(links), Eisen(II) (mittig) und Eisen(III) (rechts)

Korrelation mit  $R^2 = 0,43$ . Eine logarithmische Korrelation weisen Gesamteisen mit  $R^2 = 0,31$  und Eisen(III) mit  $R^2 = 0,15$  zu  $R_{RS}(650)$  auf (s. Abb. 3)

In Abb. 4 sind die kausalen Zusammenhänge von  $R_{RS}(790)$  zum Gesamteisen ( $R^2 = 0,33$ ), zum Eisen(II) ( $R^2 = 0,37$ ) und zur Eisen(III)-Konzentration ( $R^2 = 0,19$ ) dargestellt.

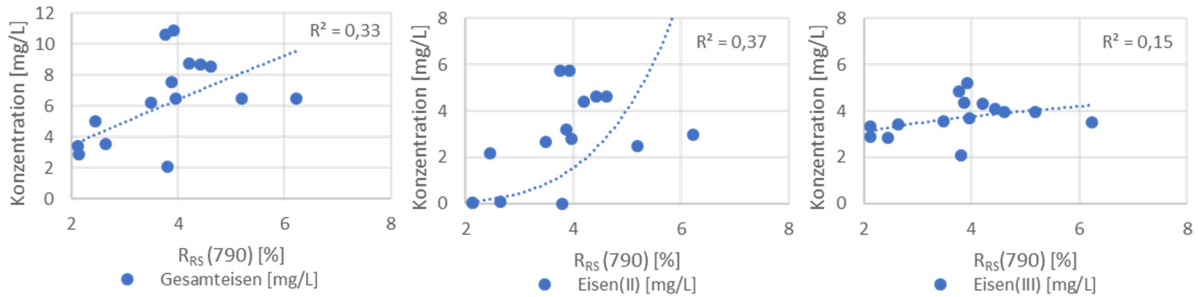


Abb. 4 Darstellung der Korrelation zwischen der Wellenlänge  $R_{RS}(650)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen(links), Eisen(II) (mittig) und Eisen(III) (rechts)

Die Eisen(II)-Konzentration weist weiterhin eine starke exponentielle Korrelation mit  $R^2 = 0,43$  zur Steigung  $R_{RS}(455) \rightarrow R_{RS}(580)$  auf. Auch der Gesamteisengehalt zeigt einen starken kausalen Zusammenhang mit  $R^2 = 0,33$  auf. Eisen(III) besitzt keine Korrelation mit  $R^2 = 0,13$  zur Steigung  $R_{RS}(455) \rightarrow R_{RS}(580)$  (s. Abb. 5).

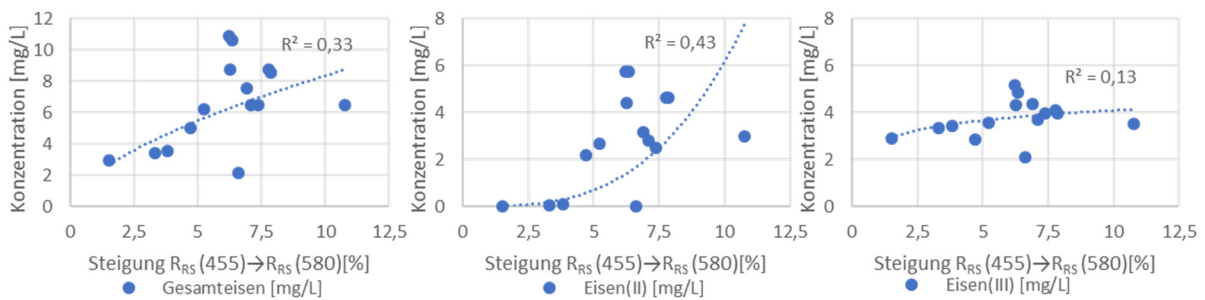


Abb. 5: Darstellung der Korrelation zwischen der Steigung  $R_{RS}(455) \rightarrow R_{RS}(580)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen(links), Eisen(II) (mittig) und Eisen(III) (rechts)

Zur Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  besitzt Eisen(II) die stärkste Korrelation mit  $R^2 = 0,5$ . Der exponentielle Zusammenhang zur Gesamteisenkonzentration beträgt  $R^2 = 0,43$  und zur Chl-a – Konzentration  $R^2 = 0,35$ . Zur Eisen(III)-Konzentration liegt eine niedrige lineare Korrelation mit  $R^2 = 0,2$  vor (s. Abb. 6).

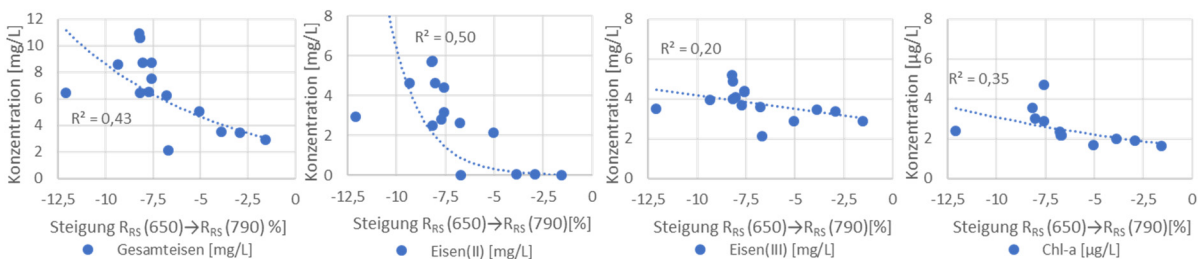


Abb. 6: Darstellung der Korrelation zwischen der Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und Chl-a

relation mit  $R^2 = 0,2$  vor (s. Abb. 6).

Weiterhin konnten starke Korrelationen zwischen einzelne Ratios im VNIR und den drei Eisenkonzentrationen, TOC und Chl-a identifiziert werden.

In Abb. 7 sind die Korrelationen zwischen dem Ratio  $R_{RS}(580) / R_{RS}(455)$  nach Gl. 4 und den Konzentrationen zum Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und TOC dargestellt.



$$Index = \frac{R_{RS}(580) - R_{RS}(455)}{R_{RS}(580) + R_{RS}(455)} \quad \text{Gl. 4}$$

Die stärkste lineare Korrelation mit  $R^2 = 0,44$  tritt beim Eisen(II) auf. Die Konzentrationen vom Gesamteisen ( $R^2 = 0,4$ ) und TOC ( $R^2 = 0,4$ ) besitzen ebenfalls einen starken kausalen Zusammenhang zum Ratio  $R_{RS}(580) / R_{RS}(455)$ . Die Korrelation zur Eisen(III)-Konzentration ( $R^2 = 0,25$ ) sowie zu den übrigen Gewässerparametern ist gering ausgeprägt.

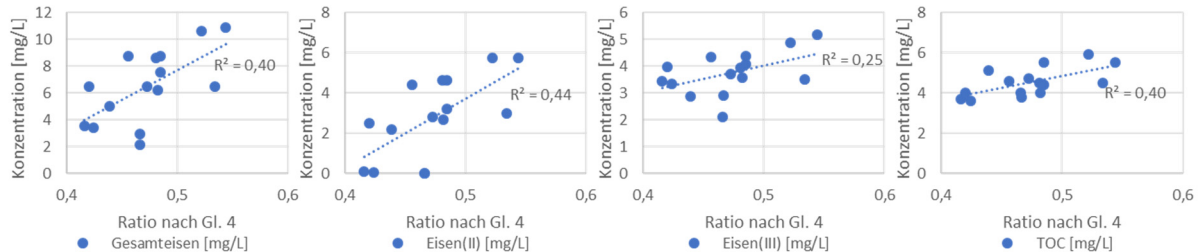


Abb. 7: Darstellung der Korrelation zwischen dem Ratio  $R_{RS}(580) / R_{RS}(455)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und TOC

Gemäß Gl. 5 wurde der Ratio  $R_{RS}(650) / R_{RS}(455)$  erstellt.

$$Index = \frac{R_{RS}(650) - R_{RS}(455)}{R_{RS}(650) + R_{RS}(455)} \quad \text{Gl. 5}$$

Mit  $R^2 = 0,43$  zeigt Eisen(II) den stärksten linearen Zusammenhang zum Ratio  $R_{RS}(650) / R_{RS}(455)$  gemäß Gl. 5 auf (s. Abb. 8). Die Korrelation zum Gesamteisen zeigt mit  $R^2 = 0,4$  eine starke Ausprägung. Im Vergleich zur Gl. 4 ist der lineare Zusammenhang zwischen TOC und dem Ratio aus Gl. 5 geringer mit  $R^2 = 0,36$ . Dagegen steigt die Korrelation des Eisen(III) auf  $R^2 = 0,27$  an.

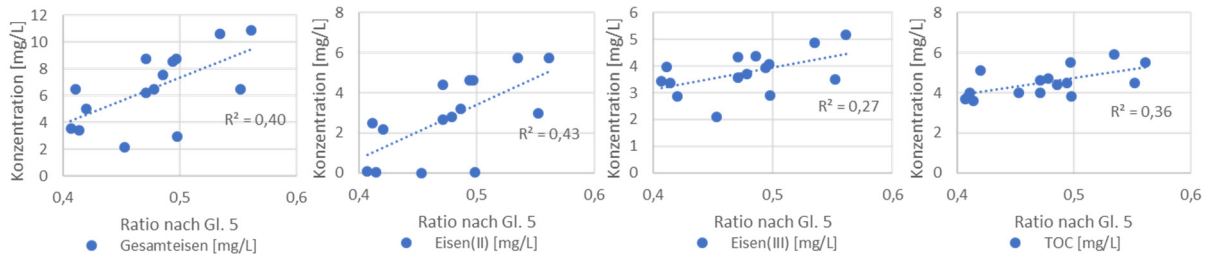


Abb. 8: Darstellung der Korrelation zwischen dem Ratio  $R_{RS}(650) / R_{RS}(455)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und TOC

Weiterhin zeigen die die Konzentration von Gesamteisen ( $R^2 = 0,37$ ), Eisen(II) ( $R^2 = 0,40$ ) und TOC ( $R^2 = 0,40$ ) große lineare Zusammenhänge zum Ratio  $R_{RS}(650) / R_{RS}(480)$  gemäß Gl. 6 auf. Die Korrelation vom Eisen(III) zum Ratio ist gering mit  $R^2 = 0,21$  ausgeprägt (s. Abb. 9).

$$Index = \frac{R_{RS}(650) - R_{RS}(480)}{R_{RS}(650) + R_{RS}(480)} \quad \text{Gl. 6}$$

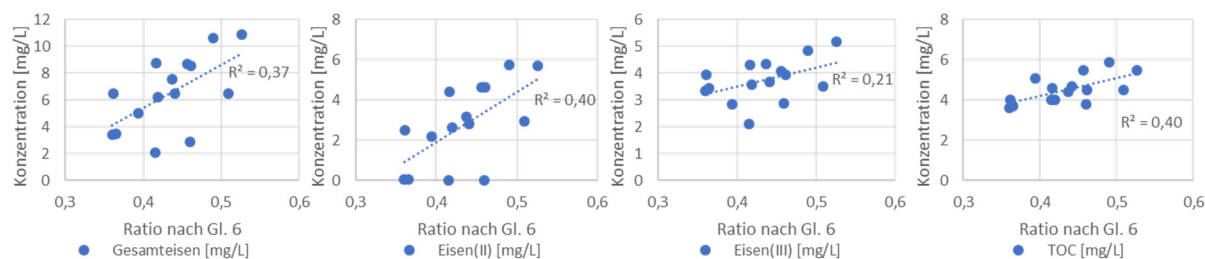


Abb. 9: Darstellung der Korrelation zwischen dem Ratio  $R_{RS}(650) / R_{RS}(480)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und TOC

Außerdem weist die Eisen(II)-Konzentration eine Korrelation ( $R^2 = 0,27$ ) zum Ratio  $R_{RS}(850) / R_{RS}(550)$  in Anlehnung an DOXARAN et al. (2002a) in Gl. 7 auf.

$$Index = \frac{R_{RS}(850) - R_{RS}(550)}{R_{RS}(850) + R_{RS}(550)} \quad \text{Gl. 7}$$

Stärker ist der exponentielle Zusammenhang zum Chl-a mit  $R^2 = 0,36$  ausgeprägt. Zum Gesamteisen ( $R^2 = 0,23$ ) besteht eine geringe und zum Eisen(III) ( $R^2 = 0,12$ ) keine Korrelation.

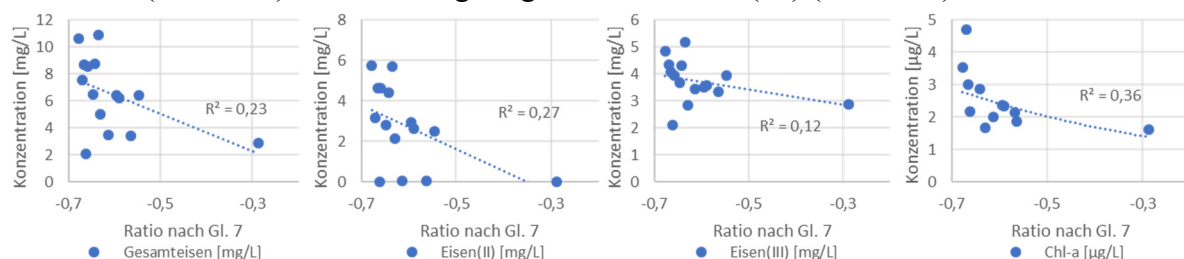


Abb. 10: Darstellung der Korrelation zwischen dem Ratio  $R_{RS}(850) / R_{RS}(550)$  zu den Konzentrationen des Gesamteisen, Eisen(II), Eisen(III) und TOC.

Aufgrund der starken Korrelationen wurden die Ratios nach Gl. 4 und 5 sowie die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  für die Mündung der Kleinen Spree bei Spreewitz berechnet. In diesem Bereich wurden die höchsten Eisenkonzentrationen gemessen. In Abb. 11 ist in (a) die Mündungsstelle durch das True-Orthophoto dargestellt. In (b) wurde der Index nach Gl. 4 und in (c) der Index nach Gl. 5 berechnet. Entsprechend der Korrelationen liegt der Wertebereich der Ratios in Abb. 11 (b) und (c) zwischen 0,4 (blau) und 0,6 (rot), wobei 0,4 auf eine niedrige und 0,6 auf eine hohe Eisenkonzentration hinweist. Weiterhin ist die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  in Abb. 11 (d) dargestellt. In Analogie zu den Ratios liegt der verwendete Wertebereich zwischen -2 (blau) und -9 (rot), wobei -2 für eine niedrige und -9 für eine hohe Konzentration steht.

Bei allen drei berechneten Ableitung ist deutlich die Strömungsänderung durch die Kleine Spree zu erkennen. Dabei kommt es zur Durchmischung beider Flüsse. Flussabwärts der Mündung befindet sich ein kleines Gefälle, welches zur weiteren Durchmischung sowie zur Beflüchtung der Spree beiträgt. Bei diesem Vorgang entsteht unter anderem auch schaum, welcher bei den berechneten Ratios durch einen sehr hohen Index gekennzeichnet wird. Bei der berechneten Steigung ist dieser kaum zu erkennen. Weiterhin weisen die Indizes eine starke Beeinflussung durch die Reflexionen von Vegetation auf. Nahe der Baumkronen sind hohe Eisenkonzentration dargestellt, welche bei der Steigungsberechnung nicht erkennbar sind. Weitere Analysen in einem Teilgebiet der Untersuchungsregion mit  $n = 11$  zeigten, dass die gemessene Sichttiefe [cm] mittels Secchi-Scheibe stark mit dem Index nach Gl. 4

( $R^2 = 0,54$ ) und Gl. 5 ( $R^2 = 0,49$ ) korreliert. Weiterhin besteht zwischen der Sichttiefe und dem Gesamteisen ( $R^2 = 0,66$ ) sowie zum Eisen(III) ( $R^2 = 0,53$ ) ein starker linearer Zusammenhang. Die gemessene Sichttiefe weist keine Korrelation zur Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  auf.

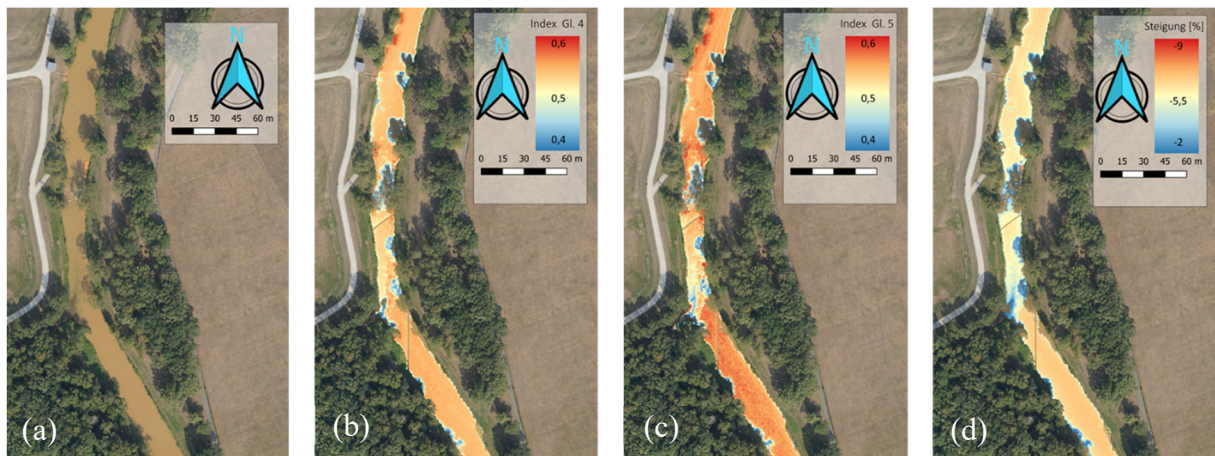


Abb. 11: Berechnung dreier Eisen-Ableitungen an der Mündung der Kleinen Spree (Spreewitz). In (a) ist das RGB-True-Orthophoto dargestellt. Weiterhin sind die Indizes nach Gl. 4 in (b) und nach Gl. 5 in (c) abgebildet. Die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  ist in (d) dargestellt

In Abb. 12 (a) ist die Spree anhand des Hyperspektralbildes bei Spremberg dargestellt. Bei Spremberg betragen die Konzentrationen von Gesamteisen 3,52 mg/L, von Eisen(II) 0,08 mg/L, von Eisen(III) 3,44 mg/L, von TOC 3,7 mg/L und von Chl-a 2  $\mu\text{g/L}$ . Im Vergleich zur Mündung der Kleinen Spree haben alle Konzentration bis auf die Sulfatkonzentration abgenommen. Die Sulfatkonzentration stieg auf 564 mg/L an. Der niedrigere Gesamteisengehalt ist anhand der Indizes nach Gl. 4 (b) und 5 (c) deutlich zu erkennen. Nur die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  in (d) zeigt eine Erhöhung an. Dies könnte an einem veränderten Verhältnis des Gesamteisen zum Chl-a resultieren, da auch Chl-a eine starke Korrelation zur Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  mit  $R^2 = 0,25$  besitzt.

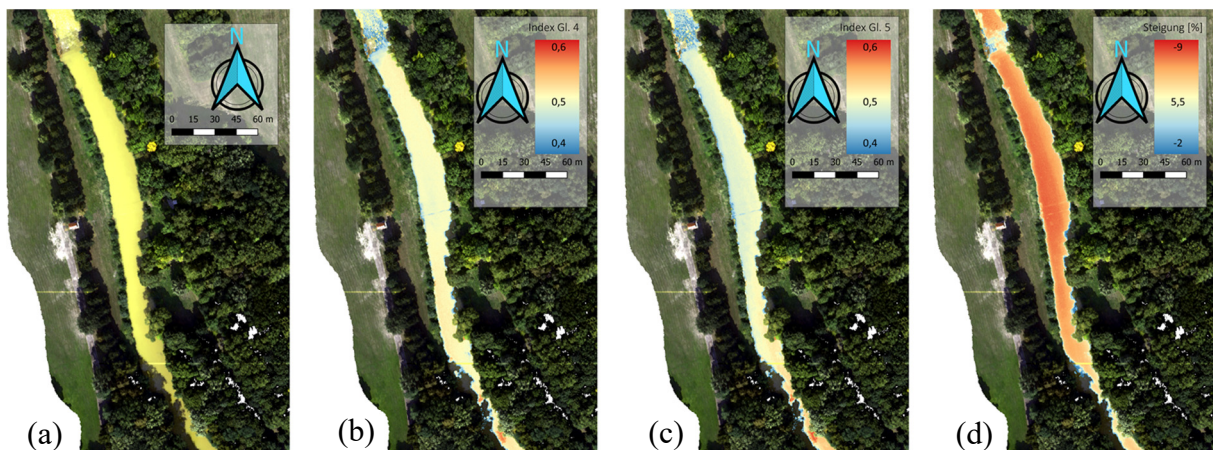


Abb. 12: Berechnung dreier Eisen-Ableitungen bei Spremberg. In (a) ist das Hyperspektralbild (RGB) dargestellt. Weiterhin sind die Indizes nach Gl. 4 in (b) und nach Gl. 5 in (c) abgebildet. Die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  ist in (d) dargestellt.

## 7 Fazit und Ausblick

Die Folgen des offenen Tagebaus sind am Beispiel der Spree unmittelbar ersichtlich. In Folge der Grundwasseranhebung kam es zum erhöhten Eiseneintrag, wodurch es zur Verockerung im Bereich zwischen Spreewitz und der Talsperre Spremberg kam. Zur Ableitung der Konzentrationen des Gesamteisens, Eisen(II) und Eisen(III) wurden die erhobenen limnischen Daten mit den Spektraldaten im VNIR- und SWIR-Wellenlängenbereich korreliert. Dazu wurden für die Spektralbereich von 400 – 1.300 nm Ratios, Steigungen und spezifische Wellenlängen der Literatur entnommen sowie anhand des Spektralverlaufes abgeleitet. Zur Ableitung der Eisenkonzentrationen wurden die Ratios  $R_{RS}(580) / R_{RS}(455)$  (Gl. 4) und  $R_{RS}(650) / R_{RS}(455)$  (Gl. 5) sowie die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$  herangezogen. Zu allen drei Ableitungen zeigten die Konzentrationen des Gesamteisen und Eisen(II) Korrelationen  $R^2 > 0,4$  auf. Der kausale Zusammenhang zur Eisen(III)-Konzentration betrug  $0,2 < R^2 < 0,3$ .

Weiterhin beträgt die gemessene Sichttiefe mittels Secchi-Scheibe starke Korrelationen zu den Ratios  $R_{RS}(580) / R_{RS}(455)$  nach Gl. 4 ( $R^2 = 0,54$ ) und  $R_{RS}(650) / R_{RS}(455)$  nach Gl. 5 ( $R^2 = 0,49$ ) sowie zum Gesamteisengehalt ( $R^2 = 0,66$ ) und Eisen(III)-Konzentration ( $R^2 = 0,53$ ). Folglich ist mittels der Indizes der Ratios nach Gl. 4 und 5 die Veränderung bezüglich des Gesamteisengehalts erkennbar. Aufgrund des großen Einflusses von Chl-a auf die Steigung  $R_{RS}(650) \rightarrow R_{RS}(790)$ , war bei Spremberg keine Reduzierung der Eisenkonzentration erkennbar. Eine deutliche Ableitung von Eisen(II) und Eisen(III) konnte nicht ermittelt werden. Da es sich bei der Untersuchung um die Ableitung von Indizes handelt können keine Aussagen über die Konzentration der Parameter getroffen werden. Basierend auf den erlangten Erkenntnissen werden zukünftig komplexe Modellierungsalgorithmen zur Ableitung von Konzentrationsangabe anhand von Fernerkundungsdaten anstelle von Indizes herangezogen.

## 8 Literatur

- 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**,107-117.
- BILEK, F. & KOCH, C., 2012: Eisenretention in der Talsperre Spremberg. Dresden.
- BILEK, F., MORITZ, F. & ALBINUS, S., 2016: Iron-Hydroxide-Removal from Mining Affected Rivers. *Mining Meets Water – Conflicts and Solutions*, Leipzig, 151-158.
- DEKKER, A. G., 1993: Detection of optical water quality parameters for eutrophic waters by high resolution remote sensing. Amsterdam.
- DOXARAN, D. FROIDEFOND, J. M. & CASTAING, P., 2002a: A reflectance band ratio used to estimate suspended matter concentrations in sediment-dominated coastal waters. *International Journal of Remote Sensing*, **23**(23), 5079-5085.
- DOXARAN, D., FROIDEFOND, J. M., LAVENDER, S. & CASTAING, P., 2002b: Spectral signature of highly turbid waters: Application with SPOT data to quantify suspended particulate matter concentrations. *Remote Sensing of Environment*, **81**(1), 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, **25**.
- EDWARDS, K. J., GOEBEL, B. M., RODGERS, T. M., SCHRENK, M. O., GIHRING, T. M., CARDONA, M. M., HU, B., MCGUIRE, M. M., HAMERS, R. J. & PACE, N. R., 1999: Geomicrobiology of Pyrite (FeS<sub>2</sub>) Dissolution: Case Study at Iron Mountain, California.



Geomicrobiology Journal, **16**(2),155-179.

- FRAUENDORF, J., 2002: Entwicklung und Anwendung von Fernerkundungsmethoden zur Ableitung von Wasserqualitätsparametern verschiedener Restseen des Braunkohlentagebaus in Mitteldeutschland. Dissertation, Mathematisch-Naturwissenschaftlich-Technischen Fakultät der Universität Halle-Wittenberg, Halle (Saale). [https://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/02/02H226/of\\_index.htm](https://sundoc.bibliothek.uni-halle.de/diss-online/02/02H226/of_index.htm)
- 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**(17), 3367-3373.
- GLEISNER, M. & HERBERT, R. B., 2002: Sulfide mineral oxidation in freshly processed tailings: batch experiments. *Journal of Geochemical Exploration*, **76**(3), 139-153.
- HEEGE, T., 2000: Flugzeuggestützte Fernerkundung von Wasserinhaltsstoffen am Bodensee.
- HÜTTL, R. F., 1998: Ecology of post strip-mining landscapes in Lusatia, Germany. *Environmental Science & Policy*, **1**(2), 129-135.
- KIRK, J. T. O., 2010: *Light and Photosynthesis in Aquatic Ecosystems*. Canberra.
- 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**, 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**, 66-79.
- KOPAČKOVÁ, V. & HLADÍKOVÁ, L., 2014: Applying Spectral Unmixing to Determine Surface Water Parameters in a Mining Environment. *Remote Sensing*, **6**(11), 11204-11224.
- LUTHER, G. W. ,1987: Pyrite oxidation and reduction: Molecular orbital theory considerations. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **51**(12), 3193-3199.
- 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**(2),182-192.
- MOSES, C. O., NORDSTROM, D. K., HERMAN, J. S. & MILLS, A. L., 1987: Aqueous pyrite oxidation by dissolved oxygen and by ferric iron. *Geochimica et Cosmochimica Acta* **51**(6),1561-1571.
- OGASHAWARA, I., MISHRA, D. R. & GITELSON, A. A., 2017: Remote Sensing of Inland Waters: Background and Current State-of-the-Art. In: MISHRA, D. R., I. OGASHAWARA und A. A. GITELSON (Hrsg.), *Bio-optical Modeling and Remote Sensing of Inland Waters*, 1-20.
- 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. In:Conferencia invitada: Sánchez España, *Macla* **10**, 34-43.
- SCHULTZE, M., POKRANDT, K. H. & HILLE, W., 2010: Pit lakes of the Central German lignite mining district: Creation, morphometry and water quality aspects. *Limnologia* **40**(2), 148-155.
- SHATWELL, T., NICKLISCH, A. & KÖHLER, J., 2012: Temperature and photoperiod effects on phytoplankton growing under simulated mixed layer light fluctuations. *Limnology and Oceanography*, **57**(2), 541-553.
- SINGER, P. C. & STUMM, W., 1970: Acidic Mine Drainage: The Rate-Determining Step. *Science*, **167**(3921), 1121-1123.

- UHLMANN, W., THEISS, W., NESTLER, S., 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 Eisenbelastung. Dresden.
- ULRICH, C., BANNEHR, L. & LAUSCH, A., 2016: Ableitung von Eisen (II, III) oxid in Fließgewässern mittels Multispektraldaten. 36. Wissenschaftlich-Technische Jahrestagung der DGPF, Publikationen der Deutschen Gesellschaft für Photogrammetrie, Fernerkundung und Geoinformation e.V., Band **25**, 34-43.
- ULRICH, C., SCHULZE, M. & BANNEHR, L., 2018: Spektrale In -Situ - Messungen als Basis für ein flächendeckendes Monitoring verockerter Gewässer. Forum für Hydrologie und Wasserbewirtschaftung, Dresden, 39(18), 27-37.
- 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**(2).